

**METAL YÜZEYLERDE ATOM – ATOM  
ÇARPIŞMALARI SİMÜLASYONLARI**

**YÜKSEK LİSANS TEZİ**

**Mücahit ÇETİN**

**DANIŞMAN**

**Yrd. Doç. Dr. Bekir ORUNCAK**

**İKİNCİ DANIŞMAN**

**Yrd. Doç. Dr. İsmail H. SARPÜN**

**FİZİK ANABİLİM DALI**

**HAZİRAN 2009**

**AFYON KOCATEPE ÜNİVERSİTESİ  
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

**METAL YÜZEYLERDE ATOM - ATOM  
ÇARPIŞMALARI SİMÜLASYONLARI**

**YÜKSEK LİSANS TEZİ**

**Mücahit ÇETİN**

**DANIŞMAN**

**Yrd. Doç. Dr. Bekir ORUNCAK**

**İKİNCİ DANIŞMAN**

**Yrd. Doç. Dr. İsmail H. SARPÜN**

**FİZİK ANABİLİM DALI**

**HAZİRAN 2009**

## ONAY SAYFASI

Yrd. Doç. Dr. Bekir ORUNCAK ve Yrd. Doç. Dr. İsmail H. SARPÜN  
danışmanlığında,  
Mücahit ÇETİN tarafından hazırlanan  
Metal Yüzeylerde Atom – Atom Çarpışmaları Simülasyonları  
başlıklı bu çalışma lisansüstü eğitim ve öğretim yönetmeliğinin ilgili maddeleri  
uyarınca  
...../06/2009  
tarihinde aşağıdaki jüri tarafından  
Fizik Anabilim Dalında  
Yüksek lisans tezi olarak oybirliği/oy çokluğu ile kabul edilmiştir.

	Ünvanı, Adı, SOYADI,	İmza
Başkan	Prof. Dr. Gediz AKDENİZ	
Üye	Yrd. Doç. Dr. Bekir ORUNCAK	
Üye	Yrd. Doç. Dr. İsmail H. SARPÜN	

Afyon Kocatepe Üniversitesi  
Fen Bilimleri Enstitüsü Yönetim Kurulu'nun  
...../...../2009 tarih ve  
..... sayılı kararıyla onaylanmıştır.

Doç. Dr. Zehra Bozkurt  
Enstitü Müdürü

## ÖZET

Yüksek Lisans Tezi

METAL YÜZEYLERDE ATOM – ATOM ÇARPIŞMALARI SİMÜLASYONLARI

Mücahit ÇETİN

Afyon Kocatepe Üniversitesi

Fen Bilimleri Enstitüsü

Fizik Anabilim Dalı

Danışman: Yrd. Doç. Dr. Bekir ORUNCAK

İkinci Danışman: Yrd. Doç. Dr. İsmail H. SARPÜN

Bu çalışmada bir moleküler dinamik simülasyon programı olan *Kalypso* yazılım paketi incelenmiştir. Atomlar arasındaki etkileşimleri belirleyen atomlar arası potansiyeller araştırılmıştır. Maddelerin yüzey ve kristal yapılarının incelenmesini sağlayan çarpışma iyon saçılma spektroskopisi (ICISS) tekniği hakkında bilgi verilmiştir. *Kalypso* kullanılarak literatürde yer alan ICISS deneylerinin simülasyonu gerçekleştirilmiştir. Bununla birlikte, yazılım paketinin sağladığı ZBL (Ziegler - Biersack - Littmark), ML (Molière - Linhard) ve MF (Molière - Firsov) itici Coulomb potansiyellerinin her biri için tekrarlanan simülasyonlar sonunda ZBL modeli ile deneysel sonuçlara en yakın sonuçlar alınmıştır. Yüzey atomlarında meydana gelen durulma etkisinin *Kalypso* ile gerçekleştirilen simülasyonlara etkisi incelenmiş ve elde edilen sonuçlar verilmiştir.

**2009, 124 sayfa**

**Anahtar Kelimeler:** atomlar arası potansiyeller, atomik çarpışmalar, moleküler dinamik, iyon saçılma spektroskopisi, atomik çarpışma simülasyonları

## ABSTRACT

Ms. Sc. Thesis

SIMULATIONS OF ATOM-ATOM COLLISIONS IN METALLIC SURFACES

Mücahit ÇETİN

Afyon Kocatepe University

Graduate School of Natural and Applied Sciences

Department of Physics

Supervisor: Assist. Prof. Dr. Bekir ORUNCAK

Co – Supervisor: Assist. Prof. Dr. İsmail H. SARPÜN

A molecular dynamics simulation software called *Kalypso* has been presented. The interatomic potentials which determine the interactions between atoms are analyzed. A brief information about the experimental technique called impact-collision ion scattering spectroscopy (ICISS) method has been given. The simulations of three ICISS experiments those are found by literature search are performed by means of *Kalypso*. At the end of the simulations carried out for each repulsive Coulombic potential models ZBL (Ziegler - Biersack - Littmark), ML (Molière - Linhard) and MF (Molière - Firsov) provided by the simulation software pack, results which are mostly in accordance with the experimental results have been obtained with ZBL model. The effect of relaxation occurred in surface atoms to simulations performed by *Kalypso* has been examined and the results are reported.

**2009, 124 pages**

**Keywords:** interatomic potentials, atomic collisions, molecular dynamics, ion scattering spectroscopy, atomic collision simulations

## TEŐEKKÜR

Tez konusunun Őekillenmesinde ve tezin oluŐturulmasında bųyųk katkıları olan Afyon Kocatepe Ūniversitesi Fen Edebiyat Fakųltesi Őđretim Ūyeleri Yrd. Doç. Dr. Bekir ORUNCAK ve Yrd. Doç. Dr. İsmail H. SARPŪN'e, yardım ve katkıları dolayısıyla Prof. Dr. Marcus KAROLEWSKI'ye, tez jųrisi ųyeleri olarak tez alıŐmasının deđerlendirilmesinde emeđi geen deđerli jųri ųyelerine ve Őđrenim hayatımın her aŐamasında destekleriyle yanımda olan aileme teŐekkųr ederim.

Mųcahit ETİN

# İÇİNDEKİLER

	Sayfa
ÖZET .....	i
ABSTRACT .....	ii
TEŞEKKÜR .....	iii
İÇİNDEKİLER .....	iv
SİMGELER VE KISALTMALAR DİZİNİ .....	vi
ŞEKİLLER DİZİNİ .....	viii
ÇİZELGELER DİZİNİ .....	xii
1. GİRİŞ .....	1
2. KALYPSO PROGRAMININ TANITIMI .....	4
2.1. Spider .....	5
2.1.1. Hedef ve projectile dosyaları .....	6
2.1.2. Run dosyası .....	11
2.1.3. Model dosyası .....	15
2.1.4. Impact dosyası .....	19
2.1.5. İnelastik dosyası .....	24
2.1.6. Ek özellikler .....	28
2.2. Kalypso .....	28
2.3. Winnow .....	33
3. TEORİK MODELLER .....	36
3.1. Atomlar Arası Potansiyeller .....	36
3.1.1. Perdelenmiş Coulomb potansiyeli .....	37
3.1.2. Sıkı-bağ potansiyeli .....	42
3.1.3. Anahtarlama fonksiyonları .....	47
3.1.4. Potansiyel hesaplamaları .....	54
3.2. Isısal Titreşimler .....	56
3.3. Elektron Durdurma Etkisi .....	58
3.3.1. Lindhard-Schiott-Scharff (LSS) modeli .....	59
3.3.2. Oen-Robinson (OR) modeli .....	60
3.3.3. Shapiro-Tombrello (ST) modeli .....	61
3.3.4. Sıcaklık kontrolü .....	63
3.3.5. Görüntü potansiyel etkileri .....	64
3.3.6. Örgü yapı titreşimleri .....	64
3.4. Temel algoritma .....	65
4. UYGULAMALAR .....	67
4.1. Paladyum (111) Yüzeyinden Neon İyonları Saçılması .....	70

4.1.1. Simülasyon projesinin hazırlanması .....	70
4.1.2. Simülasyonun çalıştırılması .....	82
4.1.3. Sonuçların elde edilmesi ve değerlendirilmesi.....	84
4.2. Paladyum (110) Yüzeyinden Neon İyonları Saçılması .....	91
4.2.1. Simülasyon projesinin hazırlanması .....	92
4.2.2. Simülasyonun çalıştırılması .....	96
4.2.3. Sonuçların elde edilmesi ve değerlendirilmesi.....	96
4.3. Potasyum Bromür (100) Yüzeyinden Neon İyonları Saçılması.....	104
4.3.1. Simülasyon projesinin hazırlanması .....	104
4.3.2. Simülasyonun çalıştırılması .....	110
4.3.3 Sonuçların elde edilmesi ve değerlendirilmesi .....	110
5. SONUÇ VE DEĞERLENDİRME.....	121
KAYNAKLAR.....	123
ÖZGEÇMİŞ.....	xii



## SİMGELER VE KISALTMALAR DİZİNİ

### 1. Simgeler

$F$	Kuvvet
$m$	Kütle
$a$	İvme
$R_c$	Potansiyel kesme uzaklığı
$R_T$	Sıra test sabiti
$t_0$	Başlangıç zaman adımı
$v_0$	Projectile atomunun ilk hızı
$Z$	Atom numarası
$\epsilon_0$	Elektrik sabiti
$e$	Elektrik yükü
$b, c, A, \xi, p, q$	Sıkı-bağ potansiyeli parametreleri
$R_1, R_2$	Çekirdek anahtarlama fonksiyonu kesme uzaklığının alt ve üst sınırı
$\phi$	Azimut açısı
$\varphi$	Yükseklik açısı
$a_U$	ZBL perdeleme mesafesi
$a_F$	MF perdeleme mesafesi
$a_L$	ML perdeleme mesafesi
$\chi(r)$	Perdeleme fonksiyonu
$V(r)$	Potansiyel fonksiyonu
$S(r)$	Anahtarlama fonksiyonu
$U_S$	Sistemin potansiyel enerjisi
$V(z)$	Görüntü potansiyeli fonksiyonu
$k$	Boltzmann sabiti
$T$	Sıcaklık
$\Theta_D$	Debye sıcaklığı
$K$	Kelvin
$J$	Joule
$^\circ$	Derece

## 2. Kısaltmalar

MD	Moleküler dinamik
MC	Monte – Carlo
ZBL	Ziegler – Biersack – Littmark
MF	Molière – Firsov
ML	Molière – Linhard
TB	Sıkı - bağ potansiyeli (Tight – Binding Potential)
TRG	Hedef (Target)
PRJ	Projectile
RUN	Run
MDL	Model
IMP	Impact
INL	İnelastik (İnelastik)
SNK	Çıktı dosyası (Snook output file)
ISS	İyon saçılma spektroskopisi
LEIS	Düşük enerjili iyon saçılma (Low Energy Ion Scattering)
ICISS	Çarpışma potansiyel enerjisi (Impact-Collision Ion Scattering Spectroscopy )
akb	Atomik kütle birimi
BÇB	Birincil çarpma bölgesi

## ŞEKİLLER DİZİNİ

	Sayfa No	
Şekil 2.1	Kalypso yazılım paketinin işleyiş biçimi.	5
Şekil 2.2	Spider programının arayüzü.	7
Şekil 2.3	Hedef dosyası için gerekli verilerin girilmesini sağlayan pencere.	7
Şekil 2.4	Oluşturulmuş bir hedef dosyasının görüntülediği Visualiser penceresi.	10
Şekil 2.5	Projectile atomunun tanımlandığı pencere.	10
Şekil 2.6	RUN dosyasının oluşturulduğu pencerenin (a) birinci (b) ikinci sayfası.	12
Şekil 3.1	Anahtarlama fonksiyonunun $a$ gösterge parametresinin farklı değerleri için grafiği.	50
Şekil 3.2	Çekici bölgede yer alan iki Cu atomu arasındaki etkileşmeyi temsil eden bileşik ZBL-TB potansiyeli.	51
Şekil 3.3	İtici bölgede yer alan iki Cu atomu arasındaki etkileşmeyi temsil eden bileşik ZBL-TB potansiyeli.	52
Şekil 3.4	Bir Cu(100) yüzeyi ile yüzeyin üst yapısına yaklaşan bir Cu atomunun etkileşmesi için bileşik ZBL-TB potansiyelinin çekici kısmı.	53
Şekil 3.5	Bir Cu(100) yüzeyine boş yapıyla yaklaşan bir Cu atomu arasındaki etkileşme için bileşik ZBL-TB potansiyelinin çekici kısmı.	54
Şekil 4.1	ICISS metodunda önemli yeri olan gölgeleme ve engelleme etkilerinin şematik gösterimi.	68
Şekil 4.2	Yüzey ve alt-yüzey ilişkisi bir şiddet - gelme açısı grafiği çizilerek görülebilir.	69
Şekil 4.3	Hedef yüzeyin oluşturulduğu pencere ve Pd(111) yüzeyini oluşturmak için girilen veriler.	71
Şekil 4.4	Pd (111) yüzeyi temsil eden Ne – Pd(111).trg dosyasının görünüşü.	72
Şekil 4.5	Simülasyonda kullanılacak olan Pd(111) yüzeyinin son şekli.	73
Şekil 4.6	Projectile atomunu temsil eden Ne – Pd (111).prj dosyasının oluşturulduğu pencere.	73

Şekil 4.7	Simülasyonun işleyiş biçimini belirleyen Ne – Pd (111).run dosyasının (a) birinci, (b) ikinci sayfası.	75
Şekil 4.8	Ne – Pd (111).mdl dosyası arayüzünün (a) birinci, (b) ikinci ve (c) üçüncü sayfası.	79
Şekil 4.9	Fcc (111) yapısındaki bir yüzey için birincil çarpma bölgesi.	80
Şekil 4.10	IMP dosyasının düzenlendiği pencere.	81
Şekil 4.11	Simülasyonda kullanılan IMP dosyasında tanımlı birincil çarpma bölgesinin görünümü.	82
Şekil 4.12	Kalypso programında simülasyon projesinin çalıştırıldığı ekran.	83
Şekil 4.13	Çalıştırılan simülasyonun $xz$ ve $xy$ düzlemlerinden görüntüsü.	83
Şekil 4.14	Winnow programının filtreleme penceresi.	85
Şekil 4.15	Winnow programının spektrum oluşturma penceresi.	86
Şekil 4.16	Simülasyonu yapılan deneysel çalışmanın sonucunda elde edilen şiddet - azimut açısı grafiği.	86
Şekil 4.17	ZBL potansiyeli ile gerçekleştirilen simülasyonun azimutal spektrumu.	87
Şekil 4.18	ZBL potansiyeli ile gerçekleştirilen simülasyon sonuçları ve deneysel sonuçların azimut açısı ile normalize edilmiş şiddet ilişkisi.	88
Şekil 4.19	Molière – Linhard potansiyeli kullanılarak gerçekleştirilen simülasyonun azimutal spektrumu.	88
Şekil 4.20	Molière – Linhard potansiyeli kullanılarak gerçekleştirilen simülasyon sonuçları ile deneysel sonuçların azimut açısı ile normalize edilmiş şiddet ilişkisi.	89
Şekil 4.21	Molière – Firsov potansiyeli kullanılarak gerçekleştirilen simülasyonun azimutal spektrumu.	90
Şekil 4.22	Molière – Firsov potansiyeli kullanılarak gerçekleştirilen simülasyon sonuçları ile deneysel sonuçların karşılaştırılması.	90
Şekil 4.23	Paladyum (110) hedef örgüsünün oluşturulduğu pencere.	93
Şekil 4.24	Pd (110) hedef örgüsünün simülasyon projesinde kullanılan son hali.	93

Şekil 4.25	Simülasyonun işleyişini belirleyen RUN dosyasının düzenlendiği pencerenin ilk sayfası ve oluşturulan RUN dosyasına girilen değerler.	95
Şekil 4.26	IMP dosyasının düzenlendiği pencere ve simülasyon için girilen değerler.	96
Şekil 4.27	Pd (110) yüzey üzerine gelen ve yüzeyden saçılan atomlar ve atomların geliş ve saçılma açılarının şematik gösterimi.	97
Şekil 4.28	315 derecelik bir azimutal geliş açısı ile hedef örgüye yaklaşan iyonlar için simetri eksenini.	98
Şekil 4.29	Pd(110) yüzeyinden saçılan $Ne^+$ iyonlarının kinetik enerji spektrumu.	99
Şekil 4.30	Saçılma deneylerindeki bazı verilerin hesaplanmasını sağlayan Scattering Relations aracı.	100
Şekil 4.31	Pd (110) yüzey üzerine $Ne^+$ iyonları gönderilerek yapılan deneysel çalışmanın ve bu deneyin ACOCT programı ile simüle edilmesiyle elde edilen normalize edilmiş şiddet-geliş açısı grafikleri.	101
Şekil 4.32	Pd (110) yüzey üzerine gönderilen atomlar için normalize edilmiş şiddet - geliş açısı grafiği.	101
Şekil 4.33	Aynı deneyin Kalypso ve ACOCT simülasyon programları ile elde edilen şiddet – geliş açısı grafikleri.	102
Şekil 4.34	Kalypso ile elde edilen sonuçlar ve deneysel sonuçların karşılaştırılması.	103
Şekil 4.35	KBr (100) hedef örgüsünün oluşturulduğu TRG dosyası penceresi.	105
Şekil 4.36	Durulma etkisini içeren TRG dosyasının xz-düzleminde görünümü.	106
Şekil 4.37	KBr simülasyonunda kullanılan MDL dosyasının (a) birinci, (b) ikinci, (c) üçüncü sayfası.	109
Şekil 4.38	45 derecelik azimutal geliş açısı ile hedef yaklaşan atomlar için geri saçılan atomların gözleneceği simetri eksenini.	111
Şekil 4.39	KBr simülasyonunda durulma uygulanan ve uygulanmayan durumlar ve [110] azimutal geliş doğrultusu için kinetik enerji spektrumu.	112

Şekil 4.40	Sırasıyla Ne - K ve Ne - Br çarpışmaları için enerji hesaplamalarının yapıldığı Scattering Relations aracı pencereleri.	113
Şekil 4.41	KBr simülasyonlarında [110] azimutal geliş doğrultusu ve durulma uygulanan ve uygulanmayan durumlar için şiddet – geliş açısı grafikleri.	114
Şekil 4.42	Hedef örgüye [110] azimutal geliş doğrultusu ile gelen atomlar için durulma etkisinin uygulandığı simülasyon sonuçları ve deneysel sonuçlar.	115
Şekil 4.43	Hedef örgüye [110] azimutal geliş doğrultusu ile gelen atomlar için durulma etkisinin uygulanmadığı simülasyon sonuçları ve deneysel sonuçlar.	115
Şekil 4.44	KBr simülasyonunda durulma uygulanan ve uygulanmayan durumlar ve [210] azimutal geliş doğrultusu için kinetik enerji spektrumu.	117
Şekil 4.45	KBr simülasyonlarında [210] azimutal geliş doğrultusu ve durulma uygulanan ve uygulanmayan durumlar için şiddet – geliş açısı grafikleri.	118
Şekil 4.46	Hedef örgüye [210] azimutal geliş doğrultusu ile gelen atomlar için durulma etkisinin uygulanmadığı simülasyon sonuçları ve deneysel sonuçlar.	119
Şekil 4.47	Hedef örgüye [210] azimutal geliş doğrultusu ile gelen atomlar için durulma etkisinin uygulandığı simülasyon sonuçları ve deneysel sonuçlar.	119

## ÇİZELGELER DİZİNİ

	Sayfa No
Çizelge 2.1 Kalypso simülasyon paketinin sistem gereksinimleri ve özellikleri	4
Çizelge 2.2 Kalypso programının tercih etiketleri	9
Çizelge 2.3 fcc ve altıgen örgüler: normal olmayan geliş açısı	24
Çizelge 2.4 fcc ve altıgen örgüler: normal geliş açısı	24
Çizelge 2.5 bcc örgü için normal olmayan geliş açısı	24
Çizelge 2.6 bcc örgü için normal geliş açısı	24
Çizelge 2.7 Kaya tuzu (NaCl) örgü: normal olmayan geliş açısı	24
Çizelge 2.8 Kaya tuzu (NaCl) örgü: normal geliş açısı	25
Çizelge 3.1 Perdelenmiş Coulomb potansiyelleri için nümerik katsayılar	44
Çizelge 3.2 fcc metaller için sıkı-bağ potansiyellerinin parametreleri	47
Çizelge 3.3 bcc metaller için sıkı-bağ potansiyellerinin parametreleri	47
Çizelge 3.4 Bir fcc kristali için koordinasyon kabuğu yarıçapları	60
Çizelge 3.5 fcc metalleri için deneysel enerji değerlerinin Çizelge 3.2'deki sıkı-bağ potansiyeli parametreleri kullanılarak hesaplanan değerlerle karşılaştırılması	60

## 1. GİRİŞ

Bilgisayarların bilimsel çalışmalardaki kullanım alanları, deneysel çalışmaların zorluğu ve artan ekonomik giderler gibi sebeplerden dolayı her geçen gün genişlemekte ve önemlerini giderek arttırmaktadır. Metal malzemelerin bazı yapısal özelliklerinin bilgisayar ortamında oluşturulan modellerle simülasyonları ve bu yolla yapılan bilgisayar deneyleri, bu malzemeler üzerine yapılan araştırmalara farklı boyutlar kazandırmaktadır. Maddelerin fiziksel özelliklerini belirleme amacıyla yapılan çalışmalarda bu tür simülasyonların kullanımı sayesinde teorik modeller ile laboratuvar ortamında yapılan deneylerin karşılaştırılması yapılabilmektedir. Bu yönüyle bilgisayar simülasyonları teori ve deney arasında bir köprü görevi görmektedir. Farklı teorik modellemelerin doğrulukları deneysel sonuçlarla yapılan karşılaştırmalar yardımıyla sınanabilmektedir. Böylece deneysel sonuçlarla uyum sağlayan modellerin ileri uygulamaları sayesinde de kısıtlı laboratuvar imkânlarının ötesine geçilmesi mümkün olmaktadır.

Bilgisayar ortamında fiziksel deneylerin simülasyonlarını gerçekleştirmek için geliştirilmiş iki ana simülasyon tekniği bulunmaktadır. Bunlar Monte – Carlo ve moleküler dinamik teknikleridir. Moleküler dinamik tekniği, Monte – Carlo tekniğine göre sistemin dinamik özellikleri hakkında sağladığı bilgiler bakımından daha üstün bir tekniktir (Allen 2004). Monte – Carlo tekniği var olan formüllerin rastgele sayı seçimleri ile çok sayıda çözümünün yapıldığı bir istatistik metot iken moleküler dinamik tekniği klasik mekanik yasalarını esas alır.  $N$  atomlu bir sistemde bulunan  $i$ . atom için Newton'un hareket yasası,

$$\vec{F}_i = m_i \cdot \vec{a}_i \quad (1.1)$$

biçiminde yazılabilir. Burada  $m_i$ ,  $i$ . atomun kütlesi,  $\vec{a}_i = d^2\vec{r}_i/dt^2$  ivmesi ve  $\vec{F}_i$ , diğer atomlarla girdiği etkileşmeler dolayısıyla  $i$ . atomun üzerine etkiyen kuvvettir. Klasik mekanik yasaları çerçevesinde başlangıç konum ve hızları sisteme girilerek sonraki durumları zaman evrimi ile belirlenir. Yani atomlar bilgisayar içinde sanal olarak hareket eder, çarpışır veya titreşir.



Bu tez çalışmasında atom-atom çarpışmalarının simülasyonunda moleküler dinamik simülasyonları için hazırlanmış olan Kalypso 2.11 yazılım paketi kullanılmıştır. *Kalypso* 2.11 yazılım paketi simüle edilecek deneyin koşullarının düzenlendiği girdi dosyalarını oluşturan *Spider*, oluşturulan girdi dosyalarını kullanarak simülasyonu gerçekleştiren *Kalypso* ve simülasyon sonuçlarının yer aldığı çıktı dosyalarındaki verilerin işlenmesine yarayan *Winnow* programlarını içermektedir. *Kalypso* yazılım paketinde, moleküler dinamik simülasyonları için çekici çok-cisimli sıkı-bağ potansiyel yaklaşımı ve itici Coulomb potansiyel yaklaşımlarını kullanmakta olup istenildiği takdirde diğer potansiyel yaklaşımları kullanılabilir. Program itici Coulomb potansiyel modelini olarak Ziegler-Biersack-Littmark (ZBL), Molière-Linhard (ML) ve Molière-Firsov (MF) yaklaşımlarını kullanmaktadır. Tez çalışmasının ikinci bölümü *Kalypso* yazılım paketinin özelliklerinin açıklandığı ve paketin içerdiği programlarla bir simülasyon projesinin ne şekilde oluşturulup sonuçlandırılacağı açıklanmıştır. Bu bölümde geniş ölçüde programın yazarı olan Marcus Karolewski'nin (2005) hazırladığı kılavuzdan faydalanılmıştır.

Tez çalışmasının üçüncü bölümü *Kalypso* programının kullandığı teorik modeller için ayrılmıştır. İlk olarak programın atomlar arasındaki etkileşimleri tanımlamak için kullandığı bileşik potansiyel tanımına yer verilmiştir. Bileşik potansiyel tanımı itici ve çekici etkileşimleri açıklamak üzere iki kısımdan oluşmaktadır. Burada *Kalypso*'nun kullandığı itici Coulomb potansiyeli yaklaşımları ile çekici sıkı-bağ potansiyeli yaklaşımı anlatılmıştır. Yine bu bölümde *Kalypso*'nun ısısal etkileşimler ve inelastik etkileri için sağladığı modellere yer verilmiştir.

Dördüncü bölüm *Kalypso* simülasyon paketi kullanılarak gerçekleştirilen bazı uygulamaları içermektedir. Simülasyonu yapılan çalışmalar düşük enerjili iyon saçılma deneyleridir. Bölümün başlangıcında düşük enerjili iyon saçılma deneyleri hakkında bilgi verilmiştir. Bu bölümde simülasyonu yapılan çalışmalar deneysel sonuçlarla karşılaştırılmış ve sonuçlar üzerinde fikir yürütülmüştür. Bu bölümde yer alan uygulamaların ilkinde paladyum (111) üzerine yapılan bir deneysel çalışma simüle edilmiştir. Uygulamada *Kalypso* programının sağladığı üç farklı potansiyel modeli için deney tekrarlanmış ve sonuçlar birbirleri ile ve deneysel sonuçlarla karşılaştırılmıştır.

İkinci uygulamada paladyum (110) üzerine yapılmış olan deneysel bir çalışma ile başka bir moleküler dinamik simülasyon programı olan ACOCT ile yapılan bir çalışmanın *Kalypso* ile gerçekleştirilen simülasyonuna yer verilmiş ve sonuçlar birbirleri ile karşılaştırılmıştır. Üçüncü uygulamada ise iki atomlu bir bileşik olan potasyum bromür kristali üzerine yapılan bir deneyin simülasyonu ve elde edilen sonuçların deneysel çalışmanın sonuçları ile karşılaştırılması yer almaktadır.

Son olarak sonuç ve değerlendirme bölümünde yapılan çalışma hakkındaki yorum ve değerlendirmelere yer verilmiştir.

## 2. KALYPSO PROGRAMININ TANITIMI

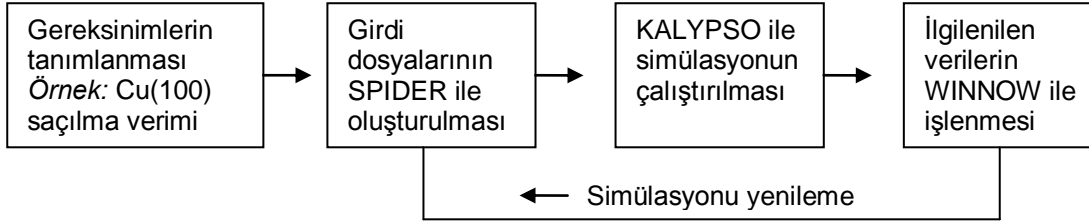
*Kalypso*, metalik kristallerdeki atomik çarpışmaların moleküler dinamik (MD) simülasyonları için Marcus Karolewski tarafından geliştirilmiş bir yazılım paketidir. Paket; fcc (face centered cubic, yüzey merkezli kübik) metaller, hcp (hexagonal closed packet, altıgen sıkı paket yapı) metaller ve bcc (body centered cubic, cisim merkezli kübik) metallerin moleküler özelliklerini tanımlayabilen merkez simetrik çok cisimli sıkı-bağ potansiyellerini kullanır. Ancak bu potansiyeller Si ya da GaAs gibi yarıiletkenlerin veya MgO gibi iyonik maddelerin yapısal özelliklerinin modellenmesi için uygun olmayabilirler (Karolewski 2001). Bununla birlikte itici herhangi ikili bileşik madde için kısa mesafede etkili olan itici potansiyeller *Kalypso* tarafından doğru biçimde simüle edilebilirler. Bu *Kalypso* programının enerjik iyon saçılma simülasyonlarında da kullanılabileceği anlamına gelir.

Programın kullandığı çok cisimli potansiyeller bölüm 3.1’de ayrıntılarıyla açıklanmıştır. *Kalypso*’da gerçekleştirilecek simülasyonlarda sistemler metal atomlarından (bir veya iki tipte) ve tercihe bağlı olarak bir soygaz atomundan oluşur. Çizelge 2.1’de programın sistem gereksinimleri, temel özellikleri ve sınırlamaları gösterilmiştir.

**Çizelge 2.1.** *Kalypso* simülasyon paketinin sistem gereksinimleri ve özellikleri (Karolewski 2005).

Özellik	Kapasite
İşletim Sistemi	32-bit Windows (95/98/2000/NT/XP vb.)
Donanım (önerilen)	PC: 3 GHz CPU, 1GB RAM
Donanım (asgari)	PC: 500 MHz CPU, 128 MB RAM
Projectile (isteğe bağlı)	Soygaz atom, metal atom ya da metal küme (cluster) Ar, Cu, CuNi vb.
Hedef	Tek metal ya da iki metalden oluşan kristal, (x,y) periyodik sınır koşulları dahil ya da değil
Azami elverişli sistem büyüklüğü	$10^4$ - $10^5$ atom (RAM, CPU hızı ve simülasyon amacına bağlı olarak)
İzin verilen sistem büyüklüğü	$10^6$
Enerji aralığı	$10^{-1}$ - $10^4$ eV
Atomlar arası potansiyeller	Bileşik perdelenmiş Coulomb potansiyelleri + Sıkı-bağ potansiyelleri (Kesme bölgesinde anahtarlama fonksiyonları ile birlikte)
İnelastik etkiler	Lokal ve lokal olmayan elektron durdurma (LSS, OR, ST), sıcaklık, örgü yapı titreşimleri
Tipik zaman aralığı	$10^1$ - $10^5$ fs

*Kalypso* yazılım paketi, bir simülasyonun gerçekleştirilebilmesi için ihtiyaç duyulan verilerin çeşitli girdi dosyaları ile sisteme girilmesini sağlayan *Spider*, girdi dosyalarıyla belirlenen şartlar altında simülasyonu gerçekleştiren *Kalypso* ve simülasyondan elde edilen verileri değerlendirmede kullanılan *Winnow* programlarını içerir. Genel anlamda *Kalypso* yazılım paketinin işleyiş biçimi Şekil 2.1’de verilmiştir.



**Şekil 2.1.** *Kalypso* yazılım paketinin işleyiş biçimi (Karolewski 2005).

*Kalypso* yazılım paketi ile gerçekleştirilecek tüm simülasyonlarda, öncelikle *Spider* programı ile simülasyonun koşulları oluşturulur. Burada, simülasyonu yapılan ortam, simülasyonun başlangıç ve bitiş koşulları ile ilgili bilgiler girdi dosyalarına kaydedilir.

*Spider* ile kaydedilen girdi dosyaları *Kalypso* programı tarafından değerlendirilerek simülasyon çalıştırılır. *Kalypso* programı simülasyonun gerçekleştirilmesi ve sonuçları ile ilgili bilgilerini çıktı dosyalarına kaydeder.

*Winnow* ise *Kalypso*'nun ürettiği çıktı dosyalarındaki verileri işlemede kullanılır. *Winnow* programı bu çıktı dosyalarındaki verileri bilimsel anlamda kullanılacak biçime dönüştürebilir, grafik çizimleri ve çeşitli hesaplamalar yapma gibi işlevler görür. Ayrıca *Kalypso*'nun ürettiği çıktı dosyalarının başka veri işleme programları tarafından da kullanılabilmesini sağlayan format dönüşümlerini sağlar. Bu programların kullanılması, işlevleri ve özellikleri bu bölümün ilerleyen kısımlarında anlatılmıştır.

## 2.1. *Spider*

Bir simülasyon için gerekli veriler;

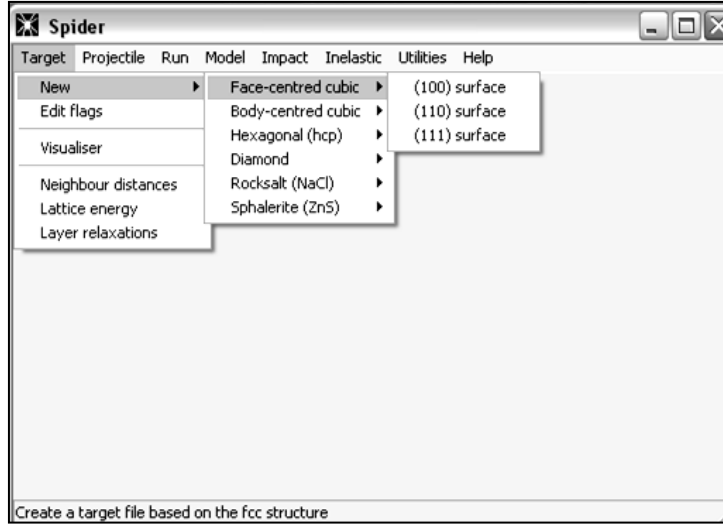
- Hedef yüzeyde bulunan ve hedef yüzeye gönderilen (*projectile*) atomların başlangıç konumları ve hızları (ısısal etkilerde dâhil),
- Atomlar arası potansiyelleri tanımlayan parametreler ve elastik olmayan prosesler,
- Simülasyonun çalışma ve sonlanma biçimini belirleyen parametre ve koşullardır.

*Spider* bu verilerin sisteme girilmesini çeşitli girdi (\*.trg, \*.prj, \*.run, \*.mdl, \*.imp ve \*.inl uzantılı) dosyalarının oluşturulmasıyla sağlar.

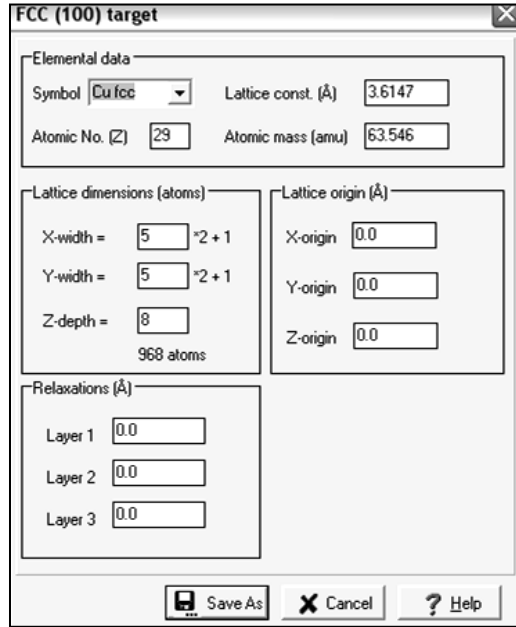
### 2.1.1. Hedef ve projectile dosyaları

Hedef dosyası, atomik çarpışma deneylerindeki hedef yüzeylere ait parametrelerinin yer aldığı \*.trg uzantılı dosyadır. Hedef dosyası, *Spider* programıyla aşama aşama oluşturulabileceği gibi, dosya formatı anlaşıldığında herhangi bir metin düzenleyici ile de oluşturulabilir. Oluşturulan \*.trg uzantılı hedef dosyasında, z-doğrultusu yüzey normaline karşılık gelir. Pozitif z-yönü yüzeyden dışarı doğru yönelirken negatif z-yönü de yüzeyin içine doğru yönelmiştir. Bir hedef dosyasındaki koordinatlar, hedef atomlarının laboratuvar koordinat sistemindeki konumlarını belirtmektedir. Isısal titreşim etkileri uygulanmadıkça hedef atomları simülasyon başlangıcında durgundurlar.

*Spider* ile bir hedef dosyası oluşturmak istenildiğinde ilk olarak *Spider* arayüzünde *Target* sekmesi seçilir ve açılan menüde oluşturulmak istenen kristal örgü yapısı tıklanır. Örneğin fcc yapısında (100) yönelimli bir hedef yüzey için *Target/New/Face-Centered Cubic/(100) surface* yolu izlenmelidir. (*Target/New/Face-Centered Cubic/(100) surface* gösterimi; menü çubuğundan *Target* butonunun seçilmesi ve ardından açılan alt menülerde, sırasıyla *New*, *Face-Centered Cubic*, *(100) surface* komutların seçilmesi anlamına gelmektedir.) *Spider* programının arayüzü Şekil 2.2'de verilmiştir. *Spider* programının çalıştırılmasıyla ekrana gelen ve Şekil 2.2'de gösterilen bu ilk arayüzde oluşturulmak istenen hedef yüzeyin özelliklerine göre tercih yapıldıktan sonra bir açılır pencere ile karşılaşılır. Bu pencere Şekil 2.3'te gösterilmiştir.



Şekil 2.2. Spider programının arayüzü.



Şekil 2.3. Hedef dosyası için gerekli verilerin girilmesini sağlayan pencere.

Hedef yüzeyle ilgili verilerin girilecek olan pencerede (Şekil 2.3) *Elemental Data* başlığı altındaki kutuda yüzeyin oluşturulacağı atom cinsi seçilir. Burada seçilen atom ve örgü yapısı ile ilgili örgü sabiti (Angström cinsinden,  $1\text{Å}=10^{-10}\text{ m}$ ), kütlesi (atomik kütle birimi cinsinden,  $1\text{ akb}=1.66053886 \times 10^{-27}\text{ kg}$ ) ve atom numarası otomatik olarak girilir. Eğer yüzeyin oluşturulacağı atom tipi açılan menüde bulunmuyorsa, atom ve ilgili bilgilerin bir metin düzenleyici yardımıyla, elle girilmesi gerekmektedir. Hedef yüzeyi oluşturan atomla ilgili bilgilerin girilmesinin ardından, hedefteki örgünün

boyutları ve örgü merkezi de aynı pencereden girilir. Örgü merkezi, varsayılan olarak orijinde (0,0,0) alınmıştır. Ancak istenildiği takdirde gerekli değişiklikleri yapmak mümkündür.

Yukarıda açıklanan adımların tamamlanması ve gerekli verilerin \*.trg uzantılı bir dosyaya kaydedilmesiyle hedef dosyasının oluşturulması tamamlanır. Oluşturulan bu dosyanın yapısı bir metin düzenleyici yardımıyla da incelenebilir. Örnek bir hedef dosyasının yapısı aşağıdaki biçimdedir:

0.00000	0.00000	0.00000	28	58.71000	0	Ni	fcc
12.45922	12.45922	0.00000	28	58.71000	0	Ni	fcc
12.45922	9.96738	0.00000	28	58.71000	0	Ni	fcc

Burada 1, 2 ve 3. sütunlarda atomların  $x$ ,  $y$ ,  $z$  koordinatları Angström cinsinden yer almaktadır. Dördüncü sütunda atom numarası, 5. sütunda ise atom kütlesi atomik kütle birimi cinsinden yer almaktadır. Altıncı sütun tercih etiketini, 7. sütun atomun kimyasal sembolünü ve 8. sütun örgü yapısını belirtir. Ancak 7. ve 8. sütunlardaki bilgiler *Kalypso* tarafından dikkate alınmaz. Bu sütunlar hedef dosyasının elle düzenlenmesi gereken durumlarda kolaylık oluşturması için bulunmaktadır.

TRG dosyasının yapısında 6. sütunda bulunan tercih etiketleri, oluşturulan hedef örgüdeki atomların, simülasyonun çalıştırılması sırasındaki davranışları ve özelliklerini varsayılanın dışında düzenlenmesine yarar. Bu tercih etiketleri şu şekilde açıklanabilir:

**ofUseImagePotential:** Görüntü potansiyel etkilerinin uygulanacağı simülasyonlarda ilgili hedef ve projectile atomları için seçilmelidir.

**ofNoCool:** Bu etiketin seçili olduğu atomlar hedef örgünün sıcaklığı hesabına katılmazlar.

**ofSprungAtom:** Örgü yapı titreşimlerinin uygulandığı simülasyonlarda bu etikete sahip olan atomlar örgü yapı titreşimlerinden etkilenir.

**ofFixedAtom:** Bu etiket, seçildiği atomun hız ve konum bilgilerinin güncellenmesini önler. Böylece atom sonsuz kütleyle sahip bir parçacık gibi davranır.

**ofEdgeAtom:** Bu etiket simülasyon süresince etkisizdir. Sadece hedef örgüdeki sınır atomlarının belirlenmesini ve simülasyonun çıktı dosyalarında filtreleme işleminin kolaylaşmasını sağlar.

**ofRecorded:** Bu etiket RUN dosyasında “çalıştırma başına birden çok kayıt yapma” seçeneğinin işaretlenmesi ile ilgilidir.

**ofPreImplant:** Bu etiket örgü içinde var olan bir projectile soygaz atomu içeren bir hedefin simülasyonunda kullanılır. Etiket bu soygaz atomunun ya da atomlarının simülasyon başlangıcındaki konumunu tanımlar. Bu etiketler ve kodları Çizelge 2.2’de verilmiştir.

**Çizelge 2.2.** *Kalypso* programının tercih etiketleri (Karolewski 2005).

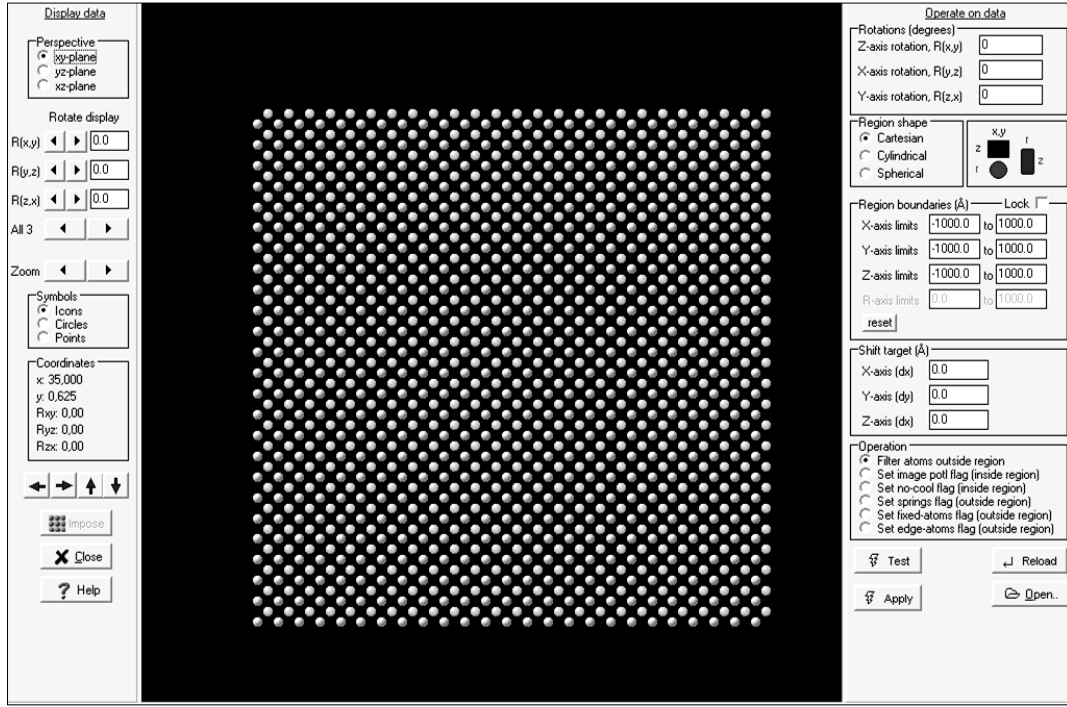
Etiket	Ondalık değer	İlgili Parçacık
<i>ofUseImagePotential</i>	1	Tüm parçacıklar
<i>ofNoCool</i>	2	Tüm parçacıklar
<i>ofSprungAtom</i>	4	Hedef parçacıklar
<i>ofFixedAtom</i>	8	Tüm parçacıklar
<i>ofEdgeAtom</i>	16	Tüm parçacıklar
<i>ofRecord</i>	32	Tüm parçacıklar
<i>ofPreImplant</i>	256	Projectile atomları

Tercih etiketleri, dosyaya elle girilebileceği gibi *Spider*’in görüntüleyici ekranından da girilebilir. Bunun için *Spider* arayüzünde *Target/Visualiser* yolu izlenir ve kayıtlı bir TRG dosyası açılarak dosyanın grafiksel biçimi görülür. Bu pencere Şekil 2.4’te gösterilmiştir. Bu pencerede atomların tercih etiketlerinin girilmesinin yanında hedef örgüsünün konumu, yönelimi gibi özellikleri de düzenlenebilir.

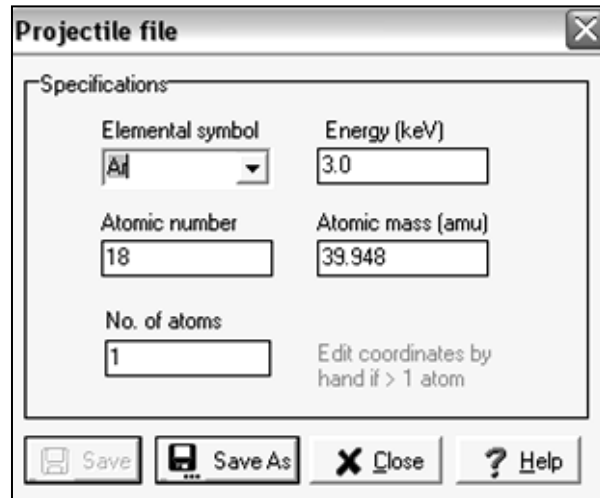
Hedef dosyasının ilk sırasında yer alan atoma referans atomu denir. Gerek hedef dosyasında gerekse hedef yüzeye gönderilecek olan projectile dosyasında yer alan tüm atomların konumları bu referans atomuna göre belirlenir. Bir zorunluluk olmamakla birlikte referans atomunun orijinde (0,0,0) seçilmesi işlemleri kolaylaştıracaktır. Hedef dosyanın birinci atomun ardından gelen atomların sırası simülasyona etki etmeyecektir.



Yukarıda bahsedilen adımlar izlenerek oluşturulan hedef örgüsü ile birlikte simülasyonda kullanılacak projectile atomu da *Spider* programının *Projectile/New* yolu izlenerek açılacak pencerede (Şekil 2.5) tanımlanır. Burada projectile atomunun cinsi, atom numarası, atom kütlesi, simülasyon başlangıcındaki kinetik enerjisi bilgilerinin \*.prj uzantılı bir dosyaya kaydedilmesi sağlanır.



Şekil 2.4. Oluşturulmuş bir hedef dosyasının görüntülediği *Visualiser* penceresi.



Şekil 2.5. Projectile atomunun tanımlandığı pencere.

Projectile atomunun kinetik enerjisi keV cinsinden girilmelidir. *Kalypso* programı  $10^{-1}$  ila  $10^4$  eV enerji aralığındaki projectile atomları için uygundur. Simülasyonda kullanılacak projectile atomlarının sayısı da bu pencereden girilir. Ancak simülasyonda birden fazla projectile atomu kullanılacak ise bu atomların koordinatlarının elle girilmesi gerekmektedir. Bu da PRJ dosyasının bir metin düzenleyici ile açılmasıyla gerçekleştirilebilir. Simülasyonda bir tek projectile atomu kullanılacaksa varsayılan olarak bu atomun koordinatları (0,0,0) olarak verilir. Ancak bu da istenirse kullanıcı tarafından düzenlenebilecek bir özelliktir.

Hedef örgü ve projectile atomları ile ilgili parametrelerin bazıları da Run ve Model dosyalarında tanımlanacaktır. Bu özellikler Run dosyasının ele alındığı bölümde anlatılacaktır.

### 2.1.2. Run dosyası

*Kalypso* yazılım paketinin bir simülasyonu çalıştırırken ihtiyaç duyduğu verilerden bir kısmı da \*.run uzantılı dosyalarda tutulur. Genel anlamda simülasyonun çalışma biçiminin şekillendirildiği RUN dosyasında, parçacık koordinatları, potansiyeller veya inelastik enerji kayıpları dışında kalan bilgiler yer alır. Bu dosya *Spider* programının ana menüsünden *Run/New* yolu izlenerek açılan pencere yardımı ile oluşturulur. RUN dosyası için açılan pencere Şekil 2.6'da gösterildiği gibi iki sayfadan oluşur.

Şekil 2.6 (a)'da gösterilen RUN dosyası pencerelerinin birinci sayfasındaki seçenekler kısaca şu şekilde açıklanabilir:

- **Genel Tanımlama:** Bu bölümdeki seçeneklerde simülasyonun hedef atomlar arasındaki etkileşimleri dikkate almaması tercih edilebilir. Simülasyonun çoklu-çarpışma (*multi-impact*) modunda çalışması seçilebilir. Çoklu çarpışma modunda çalıştırılan bir simülasyonda hedef yüzey her adımda yenilenmez, önceki adımdan kaldığı biçimde sonraki adımda devam eder. Bu modda çalışabilmek için çarpışma sayısı ile projectile atomu sayısının çarpımı kadar benzer (*replica*) atomun sisteme girilmesi gerekir ve bu değer genel tanımlama bölümünde girilir.

**Run file**

Page 1 | Page 2

**General specifications**

Random number seed: 1723983

Ignore interactions between target atoms

Multiple-impact simulation

No. of replica atoms: 0 = N(proj. atoms)xN(impacts)

**Periodic boundaries**

Use periodic (x, y) boundaries

Period, Lx (Å): 0.00

Period, Ly (Å): 0.00

Boundaries extend from -Lx/2 to Lx/2, and -Ly/2 to Ly/2

**Projectile initialisation**

Altitudinal angle (°) ( $\theta$ ): 90.0

Azimuthal angle (°) ( $\phi$ ): 0.00

Values < 0.0 have a special meaning (see Help)

Randomly rotate projectile (for clusters only)

**Projectile mode**

Impinging

Recoiling

Mixed

**Termination criteria**

Termination time, minimum (fs): 0.00

Termination time, maximum (fs): 2000.0

Termination energy (eV): 0.00

Perform energy tests on projectile only

Projectile z(min), z(max) (Å) [no effect if = 0]: 0.0 0.0

**Output**

**When to write output**

At start of each run (t = 0)

At end of each run

Periodically during each run...

Period (timesteps):

Do not write more than one record per run for any atom

Output log of inelastic events

**Which atoms to write output for**

All atoms in system

Projectile atom #1 only

All particles with KE > 10 eV

All ejected atoms with rz > 5 Å

Ejected projectile atom #1 with rz > 5 Å

Atoms that satisfy the output condition specified below

**Output condition**

[ (e > 20.0) & (vz > 0.0) & (z > 5.0e-10) ] outgoing particles with KE > 20 eV

**Meaning of tag fields in output records (advanced option)**

Normal [proj. alt. phi; target. bx, by]

Inverted [proj. bx, by; target. alt. phi]

Caloric data [bx = T, by = U(T)]

Custom [proj. bx, by; target. rx, ry]

Save Save As Close Help

(a)

**Run file**

Page 1 | Page 2

**Thermal vibrations**

Apply vibrational displacements

Apply thermal velocities

Lattice vibrational temperature (K): 300.0

Location of surface/bulk boundary (on z-axis) (Å): 0.00

Do not apply y-axis vibrational displacements (e.g. for 2D simulations)

**Mean square vibrational displacements, <x2> (type 0 atoms)**

Bulk (Å<sup>2</sup>): 0.0

Surface perpendicular (Å<sup>2</sup>): 0.0

Surface parallel (Å<sup>2</sup>): 0.0

Calculate

**Mean square vibrational displacements, <x2> (type 1 atoms)**

Bulk (Å<sup>2</sup>): 0.0

Surface perpendicular (Å<sup>2</sup>): 0.0

Surface parallel (Å<sup>2</sup>): 0.0

Calculate

**Neighbour lists and timestep**

**Range search**

Brute force (faster for very small targets)

Cell-index (normal choice)

Cell-index search cell size (Å): 5.0

Range test constant: 1.0

Maximum number of partners: 100

Neighbour update period (timesteps): 10

Time to start timestep updates (fs): 10.0

Fixed timestep

Initial timestep (fs): 0.04

For optimum performance:

Cellsize = 1.05 \* [ Rc + v0 \* t0 \* Rtest \* (N-1) ]

where:

Rc = potential cut-off (model file)

v0 = incident speed of projectile (based on energy specified in projectile file)

t0 = initial timestep (this box)

N = neighbour update period (this box)

Rtest = range test constant (this box)

Save Save As Close Help

(b)

Şekil 2.6. RUN dosyasının oluşturulduğu pencerenin (a) birinci (b) ikinci sayfası.

- **Periyodik Sınırlar:** Simülasyonda hedef yüzeye periyodik sınır koşulları uygulanacak ise bu bölümde belirtilir. Uygulanacak periyodik hücrenin  $x$  ve  $y$  uzunlukları Å cinsinden girilir. Periyodik sınır koşullarının seçilmemesi durumunda hedef serbest sınırlı kabul edilir.
- **Projectile Kurulumu:** Burada projectile atomunun hedefe göre olan konumu, çarpma ve davranış biçimi belirlenir. Projectile atomunun simülasyondaki çarpışma modu da, vurma (*impinging*), geri tepme (*recoiling*) ya da karışık (*mixed*) olarak bu bölümde seçilir. Bu modlar impact dosyasının ayrıntılarıyla açıklandığı bölüm 2.1.6'da anlatılmıştır.
- **Sonlandırma Kriterleri:** Simülasyon sırasındaki her bir adımın ne zaman ve ne şekilde sonlandırılacağı bu bölümde belirlenir. Her bir adım için gerekli en kısa ve en uzun sonlandırma süresi, simülasyonun sürdürülmesi için sistemin sahip olması gereken minimum kinetik enerji değeri, projectile atomunun  $z$ -koordinatı boyunca olması gereken maksimum ve minimum değerler bu bölümde girilir.
- **Çıktı:** *Kalypso* programının simülasyonun sonuçlarını kaydedeceği \*.snk uzantılı dosyanın biçimi ve bu dosyada yer alacak bilgiler bu bölümde belirlenebilir. Burada çıktının, simülasyondaki tüm atomları hakkındaki bilgileri içermesi tercih edilebileceği gibi sadece ilgilenilen koşullara sahip atomlar hakkında bilgileri içermesi seçilebilir. Bu tercih simülasyon süresini kısıltacaktır. *Kalypso* programının \*.snk uzantılı çıktı dosyasında şu bilgiler yer alacaktır:
  - ti**, simülasyonun başlangıcından itibaren geçen süre;
  - rw**, projectile ve hedef dosyalarında tanımlı parçacık konumuna bağlı olan bir gösterge;
  - rn**, verinin hangi simülasyon adımına ait olduğunu gösteren sayı;
  - ui**, programın çıktı rutini çağrıldıkça artan bir diğer gösterge, genellikle (ancak her zaman değil) **rn**'ye eşittir ve *Winnow* tarafından çeşitli işlemlerde kullanılır;
  - rx, ry, rz, vx, vy, vz**, parçacığın konum ve hız bileşenleri;
  - ms**, parçacık kütlesi;
  - fl**; parçacık tercih etiketi;
  - bx, by**, kullanıcının tercihinine göre; projectile ile ilgili açı değerleri, ısısal veri gibi bilgiler.

Şekil 2.6 (b)'de gösterilen RUN dosyasının ikinci sayfasındaki bölümler şunlardır:

- **Isısal Titreşimler:** Gerçek örgülerdeki atomlar ısısal titreşimler sonucu ideal konumlarından ayrılırlar. Genellikle bu atomların titreşimsel yer değiştirmelerinin doğurduğu etkilerin simülasyonlara yansıtılması istenir. Bununla birlikte, belirli sıcaklıklarda ısısal titreşimlerden kaynaklanan kinetik enerjinin hesaplanması gerekebilir. *Kalypso* ısısal titreşimleri ve ısısal hızları ayrı ayrı hesaplayabilir. Bunun için kullanılan teorik bilgiler 3. bölümde verilmiştir.
- **Komşu listesi ve Zaman adımı:** Bir parçacığın komşu listesi, parçacığın bir sonraki liste güncellemesinden (normalde her  $\sim 10$  zaman adımı gerçekleştirilir) önceki periyotta etkileşmeye girebileceği sistemdeki diğer parçacıkların bir listesidir. Bu bölümdeki seçenekler şunlardır:

**Sıra-arama Metodu:** Serbest sınırlara sahip olan hedefler için *Kalypso*, **Brute-Force** ve **Cell-Index** olmak üzere iki sıra-arama metodu sunar:

**Brute-Force Metodu:** küçük simülasyon sistemlerinde (1000 atomdan daha az) görece daha hızlı çalışabilir. 1000 atomdan fazla parçacık içeren simülasyonlarda ise **Cell-Index** seçeneği tercih edilmelidir. Her iki metotta da sonuçlar özdeş olmalıdır. Periyodik koşulların uygulandığı sistemlerde ise **Brute-Force** metodu seçilmelidir.

**Cell-Index arama boyutu:** Cell-Index araması için kullanılan bir parametredir. Burada amaçlanan; kendisine komşu olan atomlarla, komşu listesinin bir sonraki güncellenmesinden önce etkileşebilecek bir atomu içeren bir hücrenin boyutunu seçmektir. İdeal bir hücre boyutu ( $x$ ),  $x = 1,05(R_c + v_0 t_0 R_T [N - 1])$  bağıntısıyla hesaplanabilir. Bu bağıntıda  $R_c$ , potansiyel kesme uzaklığı,  $v_0$  projectile atomunun hızı,  $t_0$  başlangıç zaman adımı,  $R_T$  sıra test sabiti ve  $N$  komşu güncelleme periyodudur (güncellemeler arasındaki zaman adımları).

**Sıra testi sabiti:** Bu parametre ( $R_T$ ) 0.7 ile 2.0 arasında bir değer almalıdır.  $\Delta r = v t R_T [N - 1]$  niceliği  $v$  hızında bir atomun  $[N - 1]$  zaman adımı ( $t$ ) sonrasında alabileceği yolun bir tahminidir.

**Maksimum ortak sayısı:** Bu parametre komşu listesi için ne kadar hafıza ayrılacağını belirler. Belirlenen ortak sayısı simülasyonun çalışma hızını etkilemez.

**Komşu güncelleme periyodu:** Bu parametre komşu listesinin hangi sıklıkta güncelleneceğini belirler. Sıklıkla kullanılan değerler 8-12 arasındadır.

**Zaman adımı güncelleme süresi:** Pek çok *Kalypso* simülasyonunda atom hızları azaldıkça zaman adımı artar. Başlangıç zaman adımı denem yanılma yöntemi ile enerjinin korunumu sağlanacak biçimde ayarlanır. Tavsiye edilen değer 10 fs civarındadır.

**Sabit zaman adımı:** Bu seçim yapıldığında zaman adımı simülasyon boyunca değişmeyecektir. Bu durum simülasyonu yavaşlatır. Ancak özellikle sabit zaman aralıklarında iyon saçılma eğrileri elde edilmek istendiğinde bu seçenek gereklidir.

**Başlangıç zaman adımı:** Bu seçenek simülasyonun başında kullanılacak zaman adımını belirler. Yaklaşık olarak bu değer, projectile atomunun 0.05–0.1 Å mesafesini alması için gerekli zaman kadar olmalıdır. Ayrıca enerji korunumunun tatmin edici boyutta (%0.5'ten daha iyi) olması göz önünde tutulmalıdır.

### 2.1.3. Model dosyası

Simülasyonlarda kullanılacak atomlar arası potansiyeller hakkındaki verilerinin kaydedildiği \*.mdl uzantılı dosyalardır. Model dosyasını düzenlemek için *Spider* programının arayüzünde *Model/New* komutları uygulanmalıdır. Bu dosya için *Spider* programında üç sayfalık bir pencere açılır.

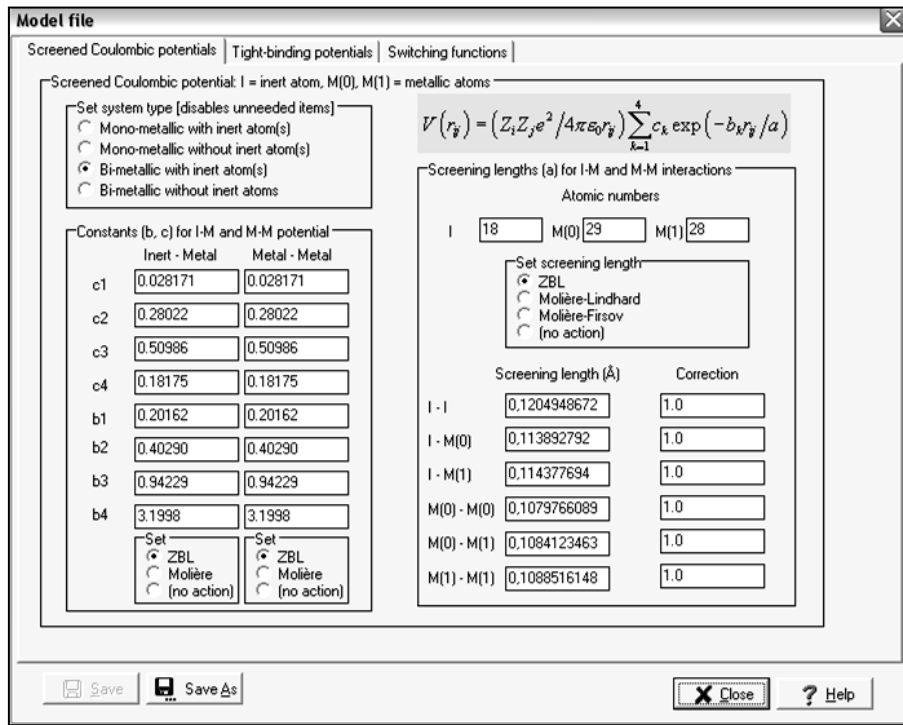
*Kalypso*'nun gerçekleştireceği simülasyonlarda en çok iki farklı metal atomu ve isteğe bağlı olarak bir soygaz atomu bulunabilmektedir. MDL dosyası arayüzünde bu atomlar için **M** ya da birden fazla metal atomu için **M(0)** ve **M(1)** simgeleri kullanılır. Simülasyonun bir soygaz atomu içermesi durumunda ise soygaz atomu için **I** simgeleri kullanılır. M(0), M(1) ve I için seçilen elementlerin atom numaraları ilgili kutulara girilir. Atomlar arası potansiyeller ile ilgili parametreler de M(0)-M(0), I-I vb. biçimlerde tanımlanır. MDL dosyasının düzenlendiği *Spider* programının penceresi

Şekil 2.7’de görüldüğü gibi üç sayfadan oluşur. Birinci sayfada Coulomb potansiyeli, ikinci sayfada sıkı-bağ potansiyeli ve üçüncü sayfada bu iki bileşenden oluşan bileşik potansiyelin etkileşme biçiminin düzenlendiği anahtarlama fonksiyonu ile ilgili bilgiler girilir.

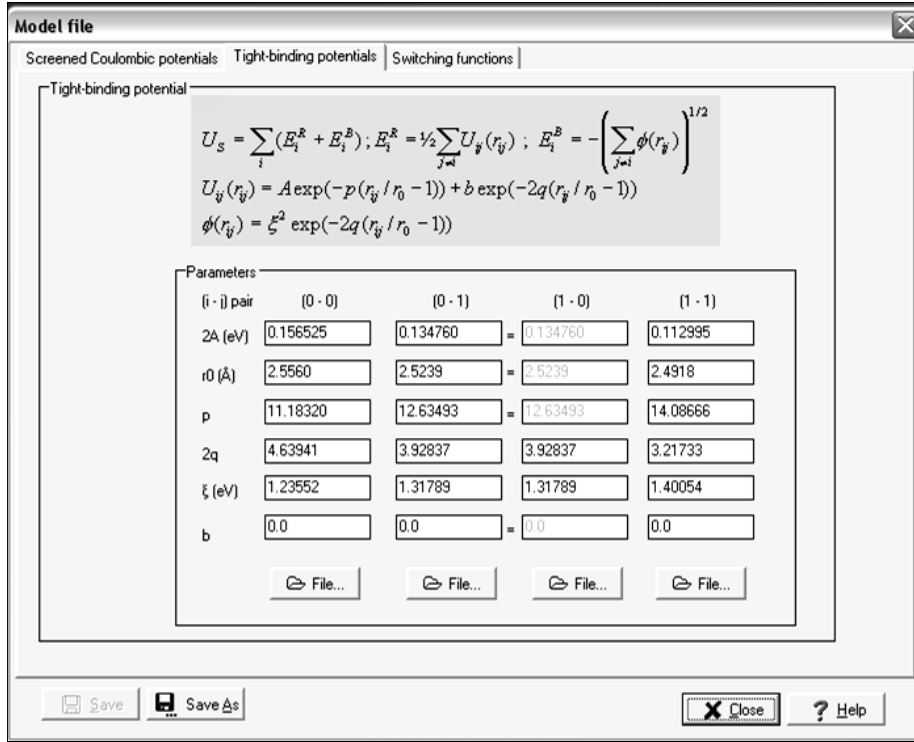
Perdelenmiş Coulomb potansiyeline ayrılan MDL dosyası ilk sayfasında ilk olarak sistemin tipine ilişkin bir seçim yapılır. Burada sistemin hangi tür atom ya da atomlardan oluştuğu ilgili seçeneğin seçilmesiyle belirtilir. Bu seçimin yapılmasından sonra gerek duyulmayan verilere ayrılan diyalog kutuları varsa bu kutular otomatik olarak etkisizleşir. Daha önce de belirtildiği gibi *Kalypso* simülasyonlarında en çok iki farklı atom tipi ve bir de soygaz atomu bulunabilir.

Daha sonraki bölümde, I-M ve M-M atomları arasındaki potansiyel için  $b$  ve  $c$  sabitleri girilir. Bu sabitler aşağıdaki itici potansiyel eşitliğinde yer alan sabitlerdir.

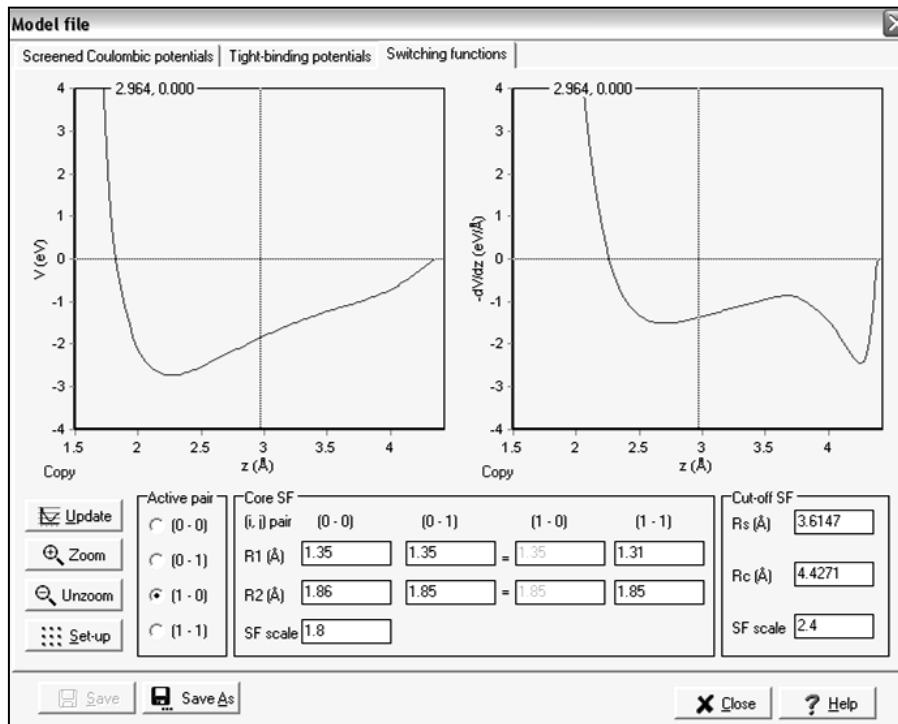
$$V(r_{ij}) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{ij}} \sum_{k=1}^N c_k \exp(-b_k r_{ij} / a) \quad (2.1)$$



(a)



(b)



(c)

Şekil 2.7. Model dosyası arayüzünün (a) birinci, (b) ikinci, (c) üçüncü sayfası.



Sistemin tipi seçilip I, M(0) ve M(1) için ayrılan kutulara sistemde yer alan elementlerin atom numaraları girildiğinde bu sabitler varsayılan olarak ZBL potansiyeline göre sistem tarafından girilir. *Kalypso* programı perdelenmiş Coulomb potansiyeli için üç farklı seçenek sunar: Ziegler-Biersack-Littmark (ZBL), Molière-Linhard (ML) ve Molière-Firsov (MF). Bu modeller hakkında ayrıntılı bilgi bölüm 3.1’de verilmiştir.

Örneğin sistem bir metal ve bir soygaz atomundan oluşturulacaksa soygaz elementinin atom numarası I diyalog kutusuna, metal elementin atom numarası M diyalog kutusuna girilir ve  $b$ ,  $c$  sabitleri ile ilgili gerekli bilgiler varsayılan olarak ZBL potansiyeli otomatik olarak girilir. Simülasyonda diğer potansiyellerden biri kullanılacaksa gerekli seçim yapılır ve yeni parametreler yine otomatik olarak ilgili diyalog kutularına girilir. I-M ve M-M çiftleri için ayrı potansiyeller seçilebilir ancak sistemdeki tüm M-M atomları arasındaki potansiyel aynı olmalıdır.

Perdelenmiş Coulomb potansiyellerinin düzenlendiği ilk sayfada son olarak perdeleme uzunlukları girilir. Burada da sistemde kullanılacak elementlerin atom numaralarının ve potansiyel modelinin seçiminden sonra uzunluklar otomatik olarak belirlenir. Otomatik olarak belirlenen bu uzunluklar için bazı düzeltme sabitleri de bu bölümde girilir.

MDL dosyasının düzenlendiği pencerenin ikinci sayfası sıkı-bağ potansiyeli ile ilgilidir. Bir önceki sayfada yapılan sistemin tipi seçimine göre burada gerekli parametrelerin girileceği diyalog kutuları etkin diğerleri ise etkisiz konumdadırlar. Sıkı-bağ potansiyelleri hakkında ayrıntılı bilgi 3. bölümde verilecektir. Bu sayfada,

$$U_{ij}(r_{ij}) = A \exp(-p(r_{ij}/r_0 - 1)) \quad (2.2)$$

$$\phi(r_{ij}) = \xi^2 \exp(-2q(r_{ij}/r_0 - 1)) \quad (2.3)$$

eşitliklerindeki  $2A$ ,  $\xi$ ,  $p$ ,  $2q$ ,  $r_0$  parametreleri girilecektir. Ayrıca diyalog kutuları arasında görülen  $b$  parametresi standart sıkı-bağ potansiyellerinde kullanılmadığından 0,0 olarak girilmelidir. Pek çok element için bu parametreler, *Spider* programının yardım (*Help*) dosyasında verilmektedir. Bununla birlikte *Kalypso* yazılım paketinin *Kalypso 2.11\Kalypso21\bin* dizininde bulunan *potentials.dat* dosyası,

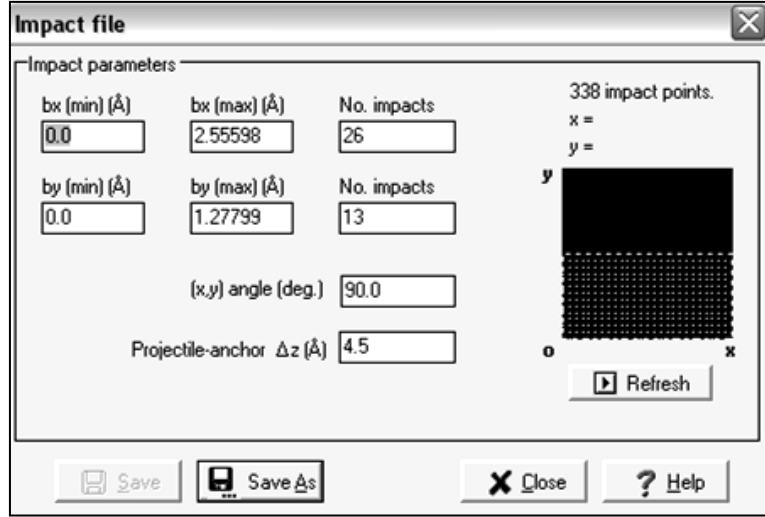
MDL dosyasının ikinci sayfasındaki ilgili diyalog kutusundan seçilerek de gerekli parametreler girilebilir.

MDL dosyasının düzenlendiği penceredeki son sayfada ise anahtarlama fonksiyonları ile ilgili parametreler düzenlenir. Perdelenmiş Coulomb potansiyeli ve sıkı-bağ potansiyellerinden oluşan bileşik potansiyelin oluşmasını ve işleyişini belirleyen anahtarlama fonksiyonları hakkında ayrıntılı bilgiler 3. bölümde verilmiştir. Kullanıcının bu sayfada girmesi gereken parametreler, *çekirdek* anahtarlama fonksiyonunun alt ve üst sınırları ( $R_1$ ,  $R_2$ ) ve *kesme* anahtarlama fonksiyonunun alt ve üst sınırlarıdır ( $R_s$ ,  $R_c$  - burada  $R_c$  potansiyel kesme uzaklığı olmak üzere). Potansiyel ve kuvvet fonksiyonları sayfada yer alan grafiklerle (güncelle butonuna basarak) eş zamanlı olarak görüntülenebilir. Bu değerler girilirken  $R_1 < R_2$ ,  $R_s < R_c$  ve  $R_2 < R_s$  koşullarının sağlanmasına dikkat edilmelidir.

#### 2.1.4. Impact dosyası

Simülasyonda kullanılan projectile atomunun hedef yüzey ile etkileşme biçimi \*.imp uzantılı çarpışma/impact dosyasında belirlenir. Impact dosyasını düzenlemek için *Spider* programının ara yüzünden *Impact/New* komutları seçilmelidir. Bu komutlar seçildiğinde açılacak olan pencere Şekil 2.8'de gösterilmiştir.

IMP dosyası, kartezyen koordinatların ( $b_x$ ,  $b_y$ ,  $b_z$ ) Å cinsinden verildiği dizilerden oluşur. İlk dizideki  $z$  koordinatı ( $b_z$ ) projectile atomunun  $z$  koordinatında, hedef örgüdeki referans atomuna göre dikey konumunu verir.  $x$  ve  $y$  koordinatlarının ( $b_x$ ,  $b_y$ ) bölüm 2.1.2'de anlatılan projectile modu seçimine bağlıdır.



Şekil 2.8. Impact dosyasının düzenlendiği pencere.

**Impinging** (çarpma) modunda  $(b_x, b_y)$  projectile atomunun  $(x, y)$  çarpma parametrelerini gösterir. **Recoiling** (geri saçılma) ve **mixed** (karışık) modda ise  $(b_x, b_y)$  projectile atomunun başlangıç  $(x, y)$  koordinatlarını gösterir. Bu modlar Şekil 2.9'da gösterilmiştir.

**Impinging** (vurma/çarpma) modu, hedef örgüye hedefin dışından yaklaşan projectile atomlarının kullanıldığı durumu tanımlar. Bu modda püskürtme (*sputtering*), iyon saçılma (*ion-scattering*) veya ince film kaplama simülasyonları yapılır.

**Recoiling** (geri tepme) modunda hedef örgünün içindeki bir projectile atomunun  $+z$  yönünde hareket etmesi söz konusudur. Örneğin geri tepen projectile atomlarının ya da dışarı atma (*desorption*) simülasyonları bu modda yapılır.

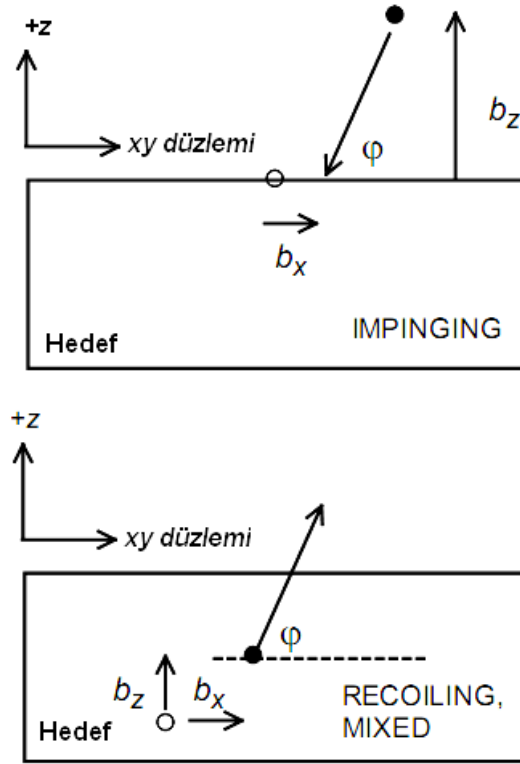
Karışık (**mixed**) modda ise projectile başlangıçta hedef örgünün içindedir ve farklı yönlere hareket eder. Bu mod Doppler ile oluşturulan gama ışını yansıma simülasyonlarında kullanılabilir.

IMP dosyasının ilk satırı şu şekildedir:

```

bx    by    bz    x1    x2    y1    y2    aç1  Nx Ny  bz
0.000 0.000 4.5000 0.0000 2.5560 0.0000 1.2778 90.0 13 8 4.50

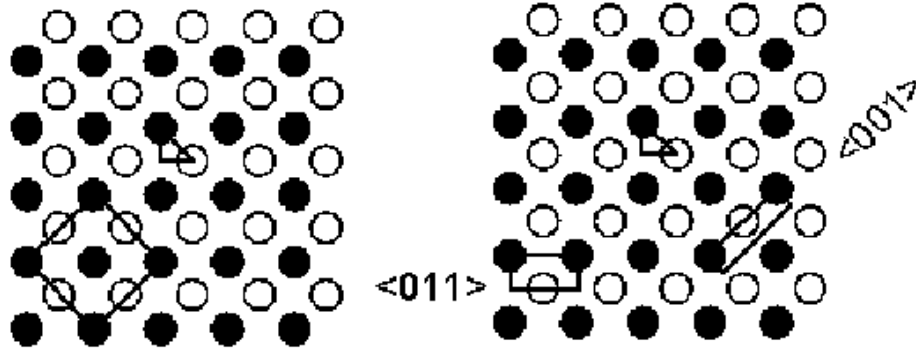
```



**Şekil 2.9.** Projectile atomu modlarına göre IMP dosyasının anlamı (o= referans atomu, •= projectile atomu,  $\phi$  = azimut açısı,  $\phi$  = yükseklik açısı) (Karolewski 2005).

Burada ilk üç sütun yukarıda anlatılan ( $b_x$ ,  $b_y$ ,  $b_z$ ) koordinatlarıdır. Daha sonra gelen beş sütunda ise IMP dosyası için açılan pencereden girilen bilgiler yer alır. Son üç sütun ise *Spider* programının kullandığı bilgileri içerir. Bir simülasyonun çalışması için IMP dosyasında, ilk üç sütunundaki bilgilerin verilmesi yeterlidir. Nitekim IMP dosyasının ilk satırından sonraki satırlar yalnızca bu bilgileri içerir.

IMP dosyası hedef yüzey üzerinde istatistiksel bir temsili noktalar kümesi tanımlamalıdır. Bu noktalar birincil çarpma bölgesi (BÇB) olarak adlandırılan ve indirgenemeyen bir simetriye sahip olan bir bölgeyi temsil etmelidir. Bu bölge hem yüzey simetrisine hem de çarpışma geometrisine bağlıdır. Örnek bir hedef örgü için birincil çarpma bölgesi Şekil 2.10'da gösterilmiştir.



**Şekil 2.10.** fcc(100) yüzeyi için birincil çarpma bölgeleri (normal ve eğik geliş açısı (●= yüzey tabakası atomları, ○= ikinci tabaka atomları) (Karolewski 2005).

Şekil 2.10'da *Spider* tarafından oluşturulan fcc(100) yapısında bir hedef örgü görülmektedir. Soldaki şekilde hedefe normal doğrultuda ( $\phi = 90^\circ$ ) yaklaşan bir projectile için belirlenen BÇB küçük üçgenle belirtilmiştir. Alt kısımdaki karesel bölge ise bulk kristalografik birim hücre görülmektedir. Normal doğrultuda olmayan projectile doğrultusunda BÇB azimut açısına ( $\phi$ ) bağlıdır. Şekil 2.10'un sağ tarafı ise normal olmayan ve  $\langle 011 \rangle$  ve  $\langle 001 \rangle$  azimutal geliş yönlerindeki geliş açısını göstermektedir. Her iki durum için de BÇB alanı aynı büyüklüktedir ancak şekilleri farklıdır.

Bir IMP dosyası oluşturmak için iki aşama vardır. Öncelikle ilgilenilen deneysel sistem ve düzenek için bir BÇB tanımlanmalıdır. Daha sonra *Spider* tarafından bu BÇB'nin ne şekilde oluşturulacağına karar verilmelidir. Bunun için Şekil 2.8'de gösterilen IMP dosyası penceresindeki parametrelerin girilmesinde programın kullanıcı kılavuzunda yer alan çizelgelerden yararlanır. Bu çizelgeler genelde kullanılan örgü tiplerinde normal ve normal olmayan projectile geliş açıları için *Spider*'a girilecek parametrelerin ne olması gerektiğini gösterir. Bu çizelgeler Çizelge 2.3, Çizelge 2.4, Çizelge 2.5, Çizelge 2.6, Çizelge 2.7 ve Çizelge 2.8'de gösterilmiştir.

**Çizelge 2.3.** fcc ve altıgen örgüler: Normal olmayan projectile geliş açısı<sup>a</sup> (Karolewski 2005).

Yüzey	$\phi$	$R_{xy}$	$b_x$ (min)	$b_x$ (max)	$b_y$ (min)	$b_y$ (max)	(x, y) açılı
(100)	<110>	R00	0.0	$d_0$	0.0	$d_0/2,0$	90
(100)	<100>	R45	0.0	$a/2,0$	0.0	$a/2,0$	90
(110)	<100>	R00	0.0	$a$	0.0	$d_0/2,0$	90
(110)	<110>	R90	0.0	$d_0$	0.0	$a/2,0$	90

<sup>a</sup>  $d_0 = a/\sqrt{2}$  ve  $a$  : örgü sabiti

**Çizelge 2.4.** fcc ve altıgen örgüler: Normal projectile geliş açısı<sup>a</sup> (Karolewski 2005).

Yüzey	$\phi$	$R_{xy}$	$b_x$ (min)	$b_x$ (max)	$b_y$ (min)	$b_y$ (max)	(x, y) açılı
(100)	N/A	R00	0.0	$d_0/2,0$	0.0	$d_0/2,0$	45
(110)	N/A	R00	0.0	$a/2,0$	0.0	$a/2,0$	35.2644

<sup>a</sup>  $d_0 = a/\sqrt{2}$  ve  $a$  : örgü sabiti

**Çizelge 2.5.** bcc örgü için Normal olmayan geliş açısı<sup>a</sup> (Karolewski 2005).

Yüzey	$\phi$	$R_{xy}$	$b_x$ (min)	$b_x$ (max)	$b_y$ (min)	$b_y$ (max)	(x, y) açılı
(100)	<100>	R00	0.0	$a$	0.0	$0,5a$	90
(100)	<110>	R45	0.0	$\sqrt{2} \times a$	0.0	$a/(2\sqrt{2})$	90
(110)	<110>	R00	0.0	$a/\sqrt{2}$	0.0	$0,5a$	90
(110)	<100>	R90	0.0	$0,5a$	0.0	$a/\sqrt{2}$	90

<sup>a</sup>  $a$  : bcc örgü sabiti

**Çizelge 2.6.** bcc örgü: Normal geliş açısı<sup>a</sup> (Karolewski 2005).

Yüzey	$\phi$	$R_{xy}$	$b_x$ (min)	$b_x$ (max)	$b_y$ (min)	$b_y$ (max)	(x, y) açılı
(100)	N/A	R00	0.0	$a/2,0$	0.0	$a/2,0$	45
(110)	N/A	R00	0.0	$a/(2\sqrt{2})$	0.0	$a/2,0$	90

<sup>a</sup>  $a$  : bcc örgü sabiti

**Çizelge 2.7.** Kaya tuzu (NaCl) örgü: Normal olmayan geliş açısı<sup>a</sup> (Karolewski 2005).

Yüzey	$\phi$	$R_{xy}$	$b_x$ (min)	$b_x$ (max)	$b_y$ (min)	$b_y$ (max)	(x, y) açılı
(100)	<100>	R00	0.0	$a$	0.0	$a/4,0$	90
(100)	<110>	R45	0.0	$a/\sqrt{2}$	0.0	$a/(2\sqrt{2})$	90

<sup>a</sup>  $a$  : bcc örgü sabiti

**Çizelge 2.8.** Kaya tuzu (NaCl) örgü: Normal geliş açısı<sup>a</sup> (Karolewski 2005).

Yüzey	$\phi$	$R_{xy}$	$b_x$ (min)	$b_x$ (max)	$b_y$ (min)	$b_y$ (max)	$(x, y)$ açısı
(100)	N/A	R45	0.0	$d/2,0$	0.0	$d/2,0$	45

<sup>a</sup>  $a$  kaya tuzu örgü sabiti,  $d = a/2,0$

Çizelgelerde yer alan kısaltmalar ve anlamları şöyle açıklanabilir:

- N/A: uygulanmaz (gereksiz parametre)
- $a$  : birim hücre örgü sabiti
- $d_0, d$  : Açıklamalar her çizelge için ayrı ayrı verilmiştir.
- $\phi$  : Projectile azimut açısı
- $R_{xy}$  : *Spider* ile oluşturulan hedef yüzeyin belirlenen eksen doğrultusu ile aynı hizaya gelmesi için uygulanması gereken dönme açısı. Çizelgeler projectile için azimut açısının RUN dosyasında sıfır olarak girildiğini varsayar.
- $b_x$  (min) ve diğerleri: IMP dosyası penceresinde girilecek parametreler
- $(x, y)$  açısı : Impact dosyasındaki bir diğer parametre
- Normal geliş açısı:  $\phi = 90^\circ$  ; Normal olmayan geliş açısı:  $\phi \neq 90^\circ$

IMP dosyası oluşturulurken yukarıda verilen çizelgelerden yararlanılabileceği gibi kullanıcı kılavuzunda açıklanan örneklerden de yararlanılabilir. Ayrıca yazılım paketi içinde *Kalypso 2.11\Kalypso21\examples\projects* dizininde yer alan, çeşitli durumlar için oluşturulmuş örnek simülasyon sistemleri ve beraberindeki açıklamalardan da faydalanılabilir.

### 2.1.5. İnelastik dosyası

Parçacıklar değerlik ya da çekirdek elektronlarının uyarılması veya örgü titreşimleri ile enerji kaybedebilir. Bu enerji kayıplarına inelastik kayıplar denir. Elektron durdurma etkisi terimi de bu tür enerji kayıplarını tanımlamak için kullanılır. Bu tür enerji kaybı süreci özellikleri \*.inl uzantılı inelastik dosyasına kaydedilir. Bu dosyanın kullanımı tercihe bağlıdır. Yani kullanıcı simülasyonda elektron durdurma etkilerinin yer almasını tercih etmezse bu dosyayı oluşturmadan da simülasyonu çalıştırabilir. İnelastik dosyası

yukarıda söz edilen enerji transfer etkilerinin yanı sıra sıcaklık kontrolü (ısıtma ve soğutma), görüntü potansiyel etkileri (*image potential*) ve örgü yapı titreşimleri etkilerini de simülasyona dâhil edebilir.

*Spider* programından INL dosyasına ulaşmak için *Inelastic/New* komutları seçilir. İnelastik dosyasının oluşturulduğu pencere iki sayfadan oluşur. Bu sayfalar Şekil 2.11’de görülmektedir.

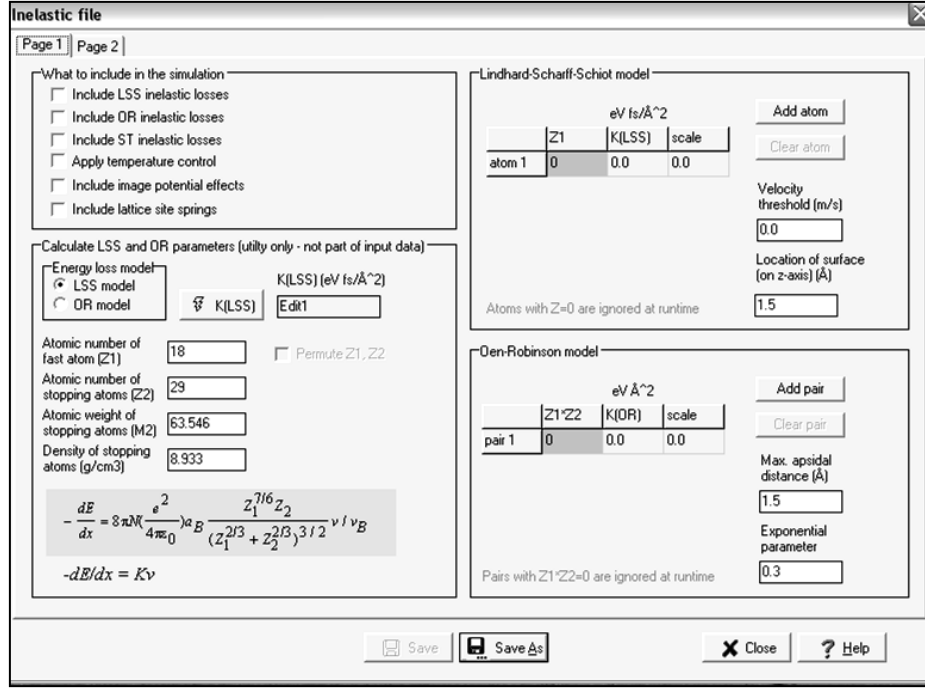
*Kalypso* elektron durdurma etkilerinin modellemesini üç ayrı modelin bir kombinasyonu yoluyla gerçekleştirir:

- Lindhard-Schiott-Scharff (LSS) modeli
- Oen-Robinson (OR) modeli
- Shapiro-Tombrello (ST) modeli

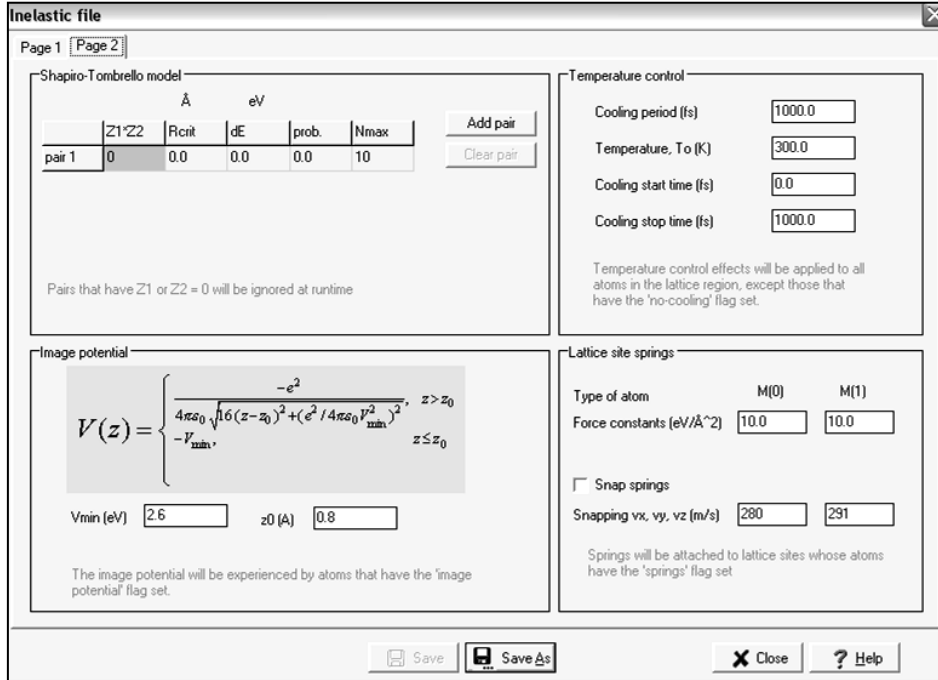
Bu enerji transfer modelleri tek tek de kullanılabilir. Ayrıca kullanıcının belirleyeceği herhangi bir ağırlıklı kombinasyonla da modelleme gerçekleştirilebilir. Bu teorik modeller ile ilgili ayrıntılı bilgiler bölüm 3.1’de yer almaktadır.

INL dosyasının ilk sayfasında simülasyonda kullanılacak elektron durdurma etkileri ile ilgili tercihlerin girileceği bir bölüm yer alır. Burada yukarıda söz edilen modellerden biri veya birkaç tanesi tercih edilebilir. Modellemelerde kullanılacak parametrelerin girileceği diyalog kutuları bu bölümde yapılan tercihe göre etkin ya da etkisiz hale getirilir. Yine aynı sayfada LSS ve OR modellerinin hesaplanmasını sağlayan bir başka bölüm yer alır. Bu hesaplamaların yapılması için kullanıcının, ilgili atomların numarasını, kütlelerini ( $akb$ ) ve durdurucu atomların yoğunluğunu ( $g/cm^3$ ) girmesi gerekir. LSS ve OR modellerinin parametreleri de INL dosyasının ilk sayfasında girilir.





(a)



(b)

Şekil 2.11. INL dosyası penceresinin (a) birinci, (b) ikinci sayfası.

LSS modeli için INL dosyasının Şekil 2.11 (a)'da gösterilen arayüzüne girilmesi gereken parametreler şunlardır:

- **Z<sub>1</sub>**: hareketli projectile atomunun ya da hedef tarafından durdurulan hedef atomunun atom numarası (bu değer sadece bir kayıt olarak kullanılır).
- **K(LSS)**: Z<sub>1</sub> atom numaralı bir atom için hedef materyalin durdurma gücünü yansıtan bir katsayı (birim: eV fs Å<sup>-2</sup>). K çeşitli başka parametrelere bağlıdır ve en kolay şekilde arayüzdeki *Compute K(LSS)*, **K(OR)** aracı kullanılarak hesaplanabilir.
- **Scale**: Simülasyonun çalışması sırasında K(LSS) orantılanmasına yarayan bir değer.
- **Velocity Threshold**: bu parametre durdurulan parçacık için altında LSS enerji kaybının ihmal edilebileceği bir hız eşiği (m s<sup>-1</sup>) belirler. Başka bir deyişle kayıplar yavaş hareket eden örgü atomlarına uygulanmaz.
- **Location of Surface**: LSS kayıpları sadece z-koordinatı burada tanımlanan (nükleer konumları değil yüzey elektron yoğunluğu ile vakum arasındaki sınırı yansıması gereken, başka bir deyişle tabakalar arasındaki mesafenin yarı kadar) değerinin altında parçacıklara uygulanacaktır.

OR modeli için INL dosyasının Şekil 2.11 (a)'da gösterilen arayüzüne girilmesi gereken parametreler şunlardır:

- **Z<sub>1</sub>\*Z<sub>2</sub>**: bu sayı ikili bir çarpışmanın içindeki atom çiftinin atom numaraları çarpımıdır (bu değer sadece bir kayıt olarak kullanılır).
- **K(OR)**: bir ikili çarpışmanın enerji kaybı ya da elektronik durdurma etkisini yansıtan bir katsayı (birim: eV Å<sup>2</sup>) K çeşitli başka parametrelere de bağlıdır.
- **Maximum apsidal distance**: bu parametre (maksimum değeri 3 Å) üstünde OR enerji kayıplarının ihmal edildiği bir maksimum apsis uzaklığı belirler. Başka bir deyişle kayıplar sadece buradaki değerden daha yakın temaslar içeren çarpışmalar için hesaplanacaktır. Bu parametre, *F(OR)* bu mesafede hesaplandığında toplam elektronik durdurmaya ihmal edilebilir bir katkı yapacak şekilde seçilmelidir.

INL dosyasını ikinci sayfasında ise ST modelinin parametreleri ilgili atom çiftleri için girilir. Ayrıca görüntü potansiyel etkileri, sıcaklık kontrolü ve örgü yapı titreşimlerinin bilgileri de INL dosyasının ikinci sayfasından girilir.

ST modeli için INL dosyasının Şekil 2.11 (b)'de gösterilen arayüzüne girilmesi gereken parametreler şunlardır:

- $Z_1*Z_2$ : bu sayı ikili bir çarpışmanın içindeki atom çiftinin atom numaraları çarpımıdır (bu değer sadece bir kayıt olarak kullanılır).
- $R_{crit}$ : düzey atlama geçişinin uyarılması için kritik uzaklık (Å)
- $dE$ : geçişten kaynaklanan inelastik kayıp (denklem (3.51)'deki  $\Delta E$ ) (birim: eV)
- $Prob$ : geçiş olasılığı (denklem (3.51)'deki  $p$ )
- $N_{max}$ : geçiş sırasında yükseltgenebilecek elektronların maksimum sayısı

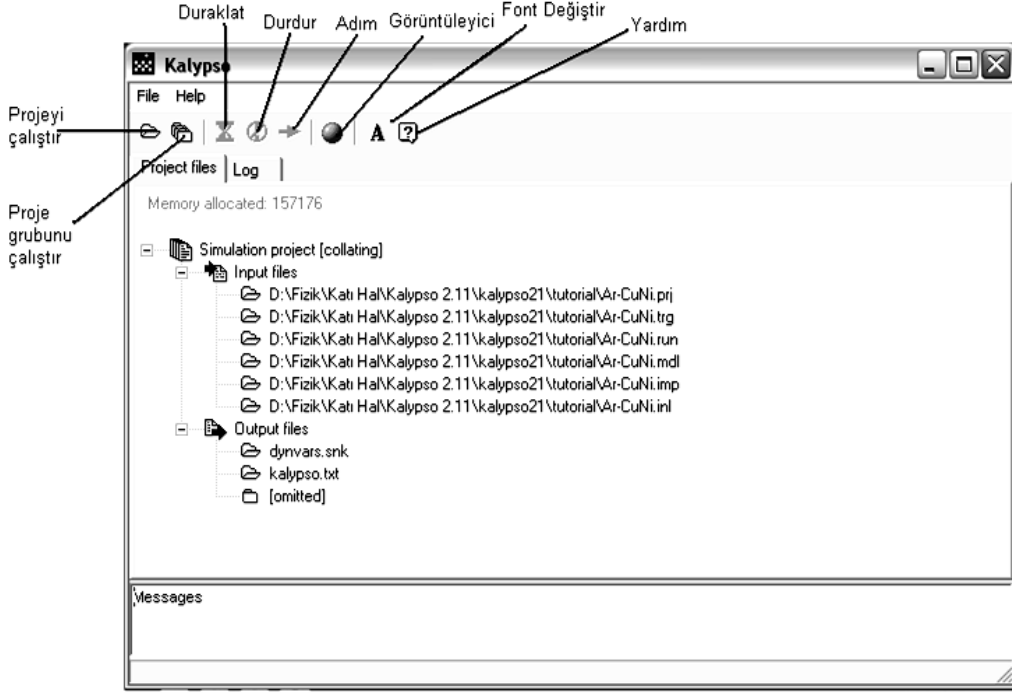
### 2.1.6. Ek özellikler

*Spider* programı girdi dosyası oluşturma işlevinin yanı sıra bazı faydalı işlevleri de sağlar. Bunlar; birden fazla simülasyonun çalıştırılmasını sağlayan grup simülasyon projesi oluşturma (*Batch File Project*), kütlesi ve enerjisi girilen bir atomun hızın hesaplama (*Velocity Calculator*), Miller indislerinin girilmesi ile kutupsal eksenlerin hesaplanması (*Crystal Axes*), perdelenmiş Coulomb potansiyel değerlerinin hesaplanması (*Screened Coulomb Potentials*) ve girdi dosyalarının açılmasında kullanılacak bir metin düzenleyicidir (*Editor*). Bu özelliklerin kullanılabilmesi için *Spider* ana penceresinde *Utilities*|*İşlev* komutunun seçilmesi gerekir.

### 2.2. *Kalypso*

*Kalypso* programı, *Kalypso* yazılım paketinin simülasyon ögesidir. *Spider* programı tarafından önceki bölümde anlatılan biçimde oluşturulan veri dosyalarını kullanarak simülasyonu gerçekleştirir. *Kalypso* programının arayüzü ve *Kalypso* penceresindeki kısayol simgelerinin işlevleri Şekil 2.12'de verilmiştir.

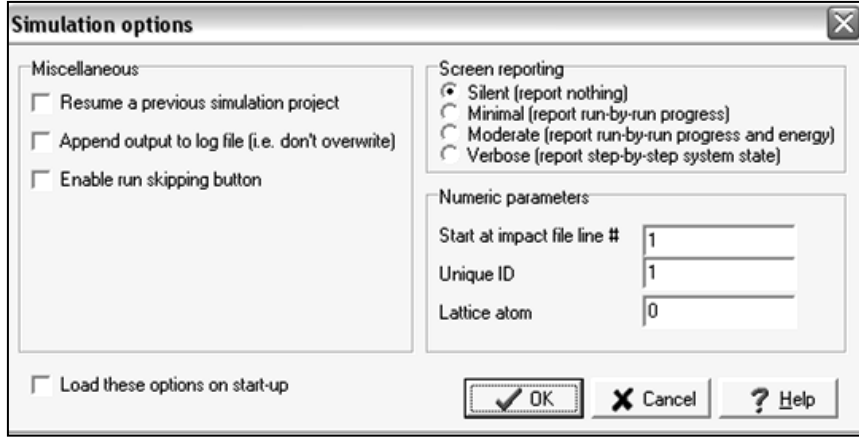
*Kalypso* ile bir simülasyonun çalıştırılmasından önce ihtiyaç duyulan tercihlerin yapılması gerekir. Tercihleri belirleyebilmek için *File/Options* komutları seçilir. Açılan pencere Şekil 2.13'te gösterilmiştir.



Şekil 2.12. Kalypso programının arayüzü ve araç çubuğu öğeleri.

Simülasyon tercihleri penceresinde ilk olarak önceki simülasyonu devam ettirme tercihi ile karşılaşılır. Eğer bir simülasyon projesi çalıştırılmış ve duraklatılmışsa bu seçeneğin seçilmesiyle, simülasyonun kaldığı yerden devam etmesi sağlanır. Duraklatılmış bir simülasyonun devam ettirilebilmesi için simülasyon projesinin \*.snk uzantılı çıktı dosyasının korunmuş ve Kalypso proje penceresinde bu dosyanın yolunun belirtilmiş olması gerekir.

Kalypso programının seçeneklerinden bir diğeri; çıktı dosyasının kayıt (Log) dosyasına eklenmesi seçeneğidir. Kayıt dosyası simülasyonun çalıştırılması sırasında ekranda beliren anlatımın kaydedildiği bir dosyadır. Bu seçeneğin işaretlenmesi durumunda Kalypso programının \*.snk uzantılı çıktı dosyası kayıt dosyası ile birleştirilir. Başka bir deyişle SNK dosyası, kayıt dosyasındaki bilgileri de içerir. Simülasyon tercihlerinden biri de adım atlama tuşunun etkinleştirilmesi seçeneğidir. Bu seçenek tercih edildiğinde simülasyonun tümünü sonlandırmaya gerek duymadan adımlardan birine son verilebilir.

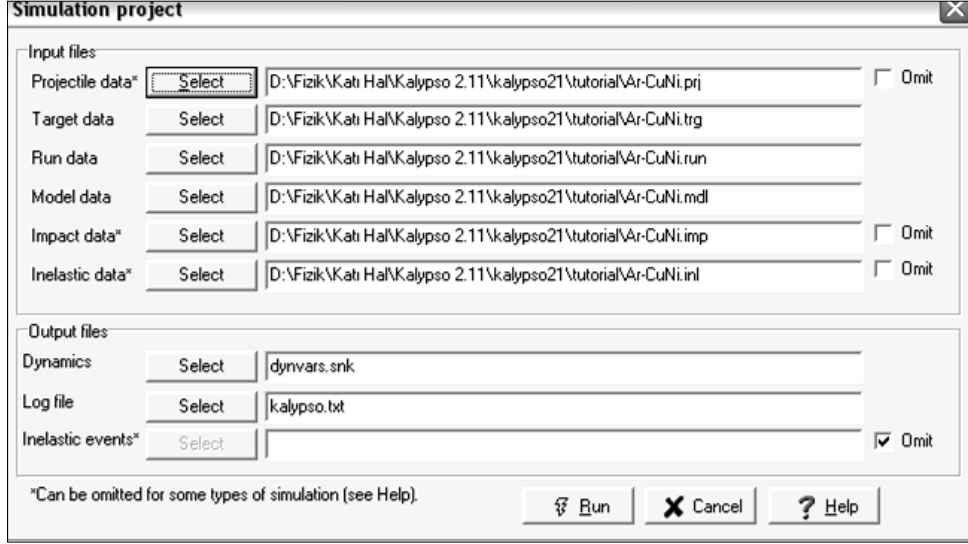


Şekil 2.13. Kalypso programı tercihlerinin belirlendiği pencere.

Şekil 2.13'te verilen penceredeki tercihlerin bir bölümü ekranda simülasyonun akışının anlatımı ile ilgilidir. Burada dört seçenek söz konusudur. *Silent* modunda, program ekranında hiçbir anlatım yapılmaz. Bu seçenek simülasyonun daha kısa sürede tamamlanmasına katkı sağlar. *Silent* modu, az sayıda parçacık içeren simülasyonlar için uygulanabilir. *Minimal* ve *Moderate* modlarında simülasyonlar daha yavaş çalıştırılır. Bu modlar örneğin püskürtme (*sputtering*) simülasyonları için uygundur. *Verbose* mod ise en yavaş moddur ve programda hata ayıklama amacıyla kullanılabilir. Bu seçeneklerle birlikte Impact dosyasında başlanacak satırın (*Start at Impact file line no. #*), *Unique ID* ve örgü atomu (*Lattice atom*) için değerlerin girileceği bir diyalog kutusu yine Şekil 2.13'te gösterilen pencerede yer almaktadır. Impact dosyasında başlanacak satır seçeneğinde varsayılan değer 1'dir. Ancak bazı satırların atlanması isteniyorsa başlangıç satırının numarası buraya girilir. Eğer duraklatılmış bir simülasyon devam ettirilecekse bu değer Kalypso tarafından otomatik olarak düzenlenir. *Unique ID* için girilen değer Kalypso'nun bu değerden başlayarak simülasyonu çalıştırmasını sağlar. Varsayılan değer *Unique ID* seçeneği için de 1'dir ve önceki simülasyonun devamı isteniyorsa Kalypso bu değeri otomatik olarak atar. Örgü atomu değeri 0 girildiğinde bu değer bir etkisi olmaz. Bir başka değer atanıyorsa çıktı dosyasındaki enerji bilgilendirmesi belirlenmiş örgü atomu için geçerli olacaktır. Örneğin 1 değeri hedef dosyasının ilk sırasındaki atoma karşılık gelir.

*Spider* tarafından hazırlanmış simülasyon projesi girdi dosyalarını Kalypso tarafından çalıştırmak için öncelikle *File/Simulation Project* yolunun izlenmesi ve açılan

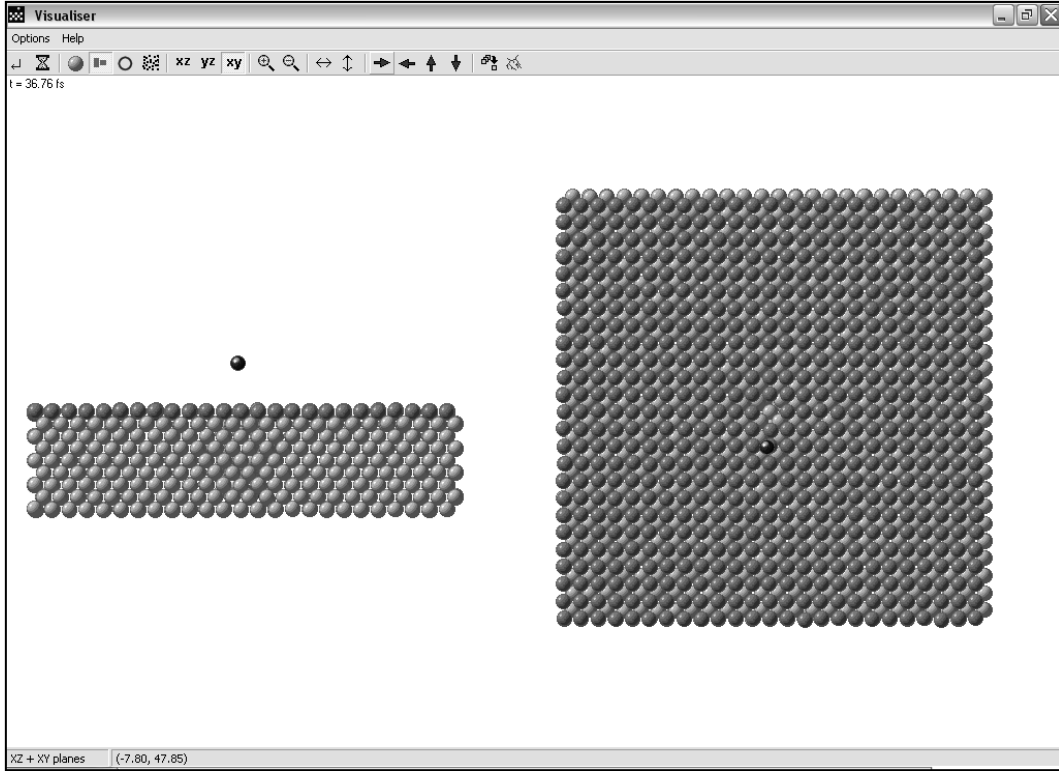
pencerede girdi dosyalarının dizininin belirtilmesi gerekir. İzlenen bu yol sonrasında açılan pencere Şekil 2.14'te görülmektedir.



Şekil 2.14. Simülasyon projesi penceresi.

Şekil 2.14'te görülen pencere ile simülasyon projesinin girdi dosyaları seçildikten sonra çalıştır (*Run*) komutu ile simülasyon başlatılır. Çalıştırılmaya başlanan simülasyon projesi, Şekil 2.12'de gösterilen *Kalypso* ana penceresindeki araç çubuğu kullanılarak durdurulabilir ya da daha sonra devam ettirmek üzere duraklatılabilir. Simülasyon tercihlerinde ilgili seçenek etkinleştirilmişse adımların atlanması sağlanabilir. Görüntüleyici (*Visualizer*) açılırsa simülasyonun bir grafik animasyonu da ekranda görülebilir. Görüntüleyici penceresi Şekil 2.15'te görülmektedir.

Eğer *Kalypso* ile bir grup simülasyon projesi çalıştırmak istenirse, *Kalypso* ana penceresinde *File/Batch Project* komutları seçilir. Bu seçim yapıldığında *Kalypso*, *Spider* tarafından oluşturulan \*.bdf uzantılı grup simülasyon projesinin belirtilmesini ister.



**Şekil 2.15.** *Kalypso* simülasyon programının grafik görüntüleyicisi.

*Kalypso* programı bir simülasyon projesini çalıştırırken bazı bilgileri ekrana yazdırır. Ekrana bilgi aktarılması ve hangi bilgilere yer verilmesi ile ilgili kullanıcının belirlediği tercihlere göre *Kalypso* simülasyon süreci hakkında bilgi verir.

*Kalypso* ile bir simülasyon projesi çalıştırılırken şu noktalara dikkat edilmelidir:

- İnelastik dosyası etkisizleştirilmiş halde enerjinin korunumu kontrol edilmelidir.
- *Kalypso* LSS, OR, ST ve örgü yapı titreşimi modelleri ile ilgili enerji kayıplarının kayıtlarını tutar. Bu konuda LSS ve örgü yapı titreşimleri modellerinde oldukça başarılıdır. Fakat ST ve OR modelleri önemli enerji kayıplarına (birkaç eV) sebep olabilir.
- *Kalypso* sıcaklık kontrolü ya da görüntü potansiyeli modellerinde enerji kayıplarının kaydını tutmaz. Bu modeller seçildiğinde enerji kayıpları beklenenin üzerinde olabilir. Bu normal bir durumdur. Özellikle soğutma işleminin amacı zaten sistemden enerji çıkarmaktır.

- **Verbose** modu her zaman adımı için enerji vb. değerleri rapor eder. Bu modun ciddi simülasyon projelerinde kullanılmaması (çok yavaş olduğundan) sadece hata ayıklama için kullanılması önerilir.
- OR ve ST inelastik enerji kayıp modelleri oldukça zaman alır ve simülasyonun çalışma süresini %5-10 oranında arttırır. Mümkün olduğu kadar LSS modelinin kullanılması önerilir.

### 2.3. *Winnow*

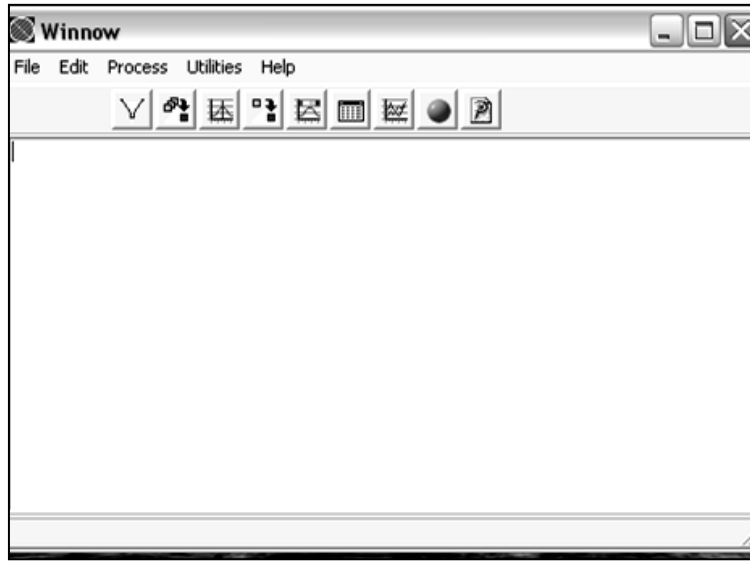
*Winnow* programı *Kalypso* programının simülasyonu gerçekleştirerek oluşturduğu \*.snk uzantılı çıktı dosyasındaki verileri işlemede kullanılır. Bölüm 2.1.2’de de söz edildiği gibi bir simülasyonun sonuçlarının yer aldığı SNK dosyasında şu bilgiler yer alır:

- ti**, simülasyonun başlangıcından itibaren geçen süre;
- rw**, projectile ve hedef dosyalarında tanımlı parçacık konumuna bağlı olan bir göstere;
- rn**, verinin hangi simülasyon adımına ait olduğunu gösteren sayı;
- ui**, programın çıktı rutini çağrıldıkça artan bir diğer gösterge, genellikle (ancak her zaman değil) **rn**’ye eşittir ve *Winnow* tarafından çeşitli işlemlerde kullanılır;
- rx, ry, rz, vx, vy, vz**, parçacığın konum ve hız bileşenleri;
- ms**, parçacık kütlesi;
- fl**; parçacık tercih etiketi;
- bx, by**, kullanıcının tercihi göre; projectile ile ilgili açı değerleri, ısısal veri gibi bilgiler.

*Winnow* programı bu bilgilerin yer aldığı SNK dosyasından kullanıcının ihtiyaçlarına göre bilgilerin elde edilmesini sağlar. Bu işlemin iki aşaması vardır. İlk aşamada dosyada ilgilenilmeyen tüm bilgilerin ayıklanır. Örneğin sadece saçılmış parçacıklar ya da hızlı parçacıklarla ilgilenilecekse diğer verilerin filtrelenmesi sağlanır. İkinci aşama ise gerekli bilgilerin veri işleme düzenine çevrilmesidir. Yani saçılan parçacıkların enerjiler veya projectile aralığının belirlenmesi gibi sorgulamaların yapılmasının sağlanmasıdır.

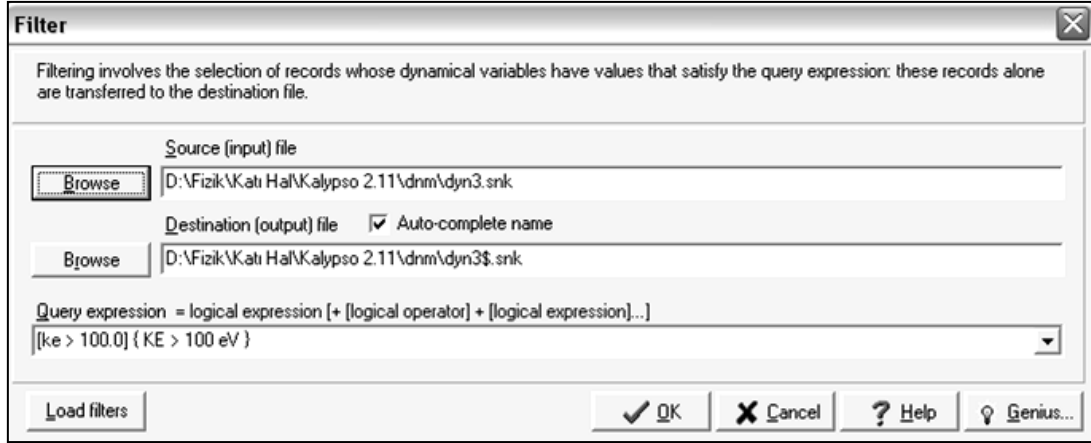


*Winnow* programı ile veri işlemede bir sorgu dili kullanılır. Bu sorgu dili *Kalypso* yazılım paketindeki kullanıcı kılavuzunda verilmiştir. Ayrıca programın sağladığı *Genius* aracı sayesinde bu dil öğrenilmeden de pek çok işlemin yapılması mümkündür. Kullanıcı kendi ihtiyaçlarına göre *Genius* aracını geliştirebilir. Bununla birlikte *Winnow* SNK dosyasını bir metin dosyasına dönüştürme özelliğine de sahiptir. Böylece *Kalypso*'nun çıktı dosyası *Winnow* dışındaki veri işleme ya da veri tabanı programları (SPSS, Excel, dBase vb.) ile de değerlendirilebilir. *Winnow* programının ana penceresi Şekil 2.16'da verilmiştir.

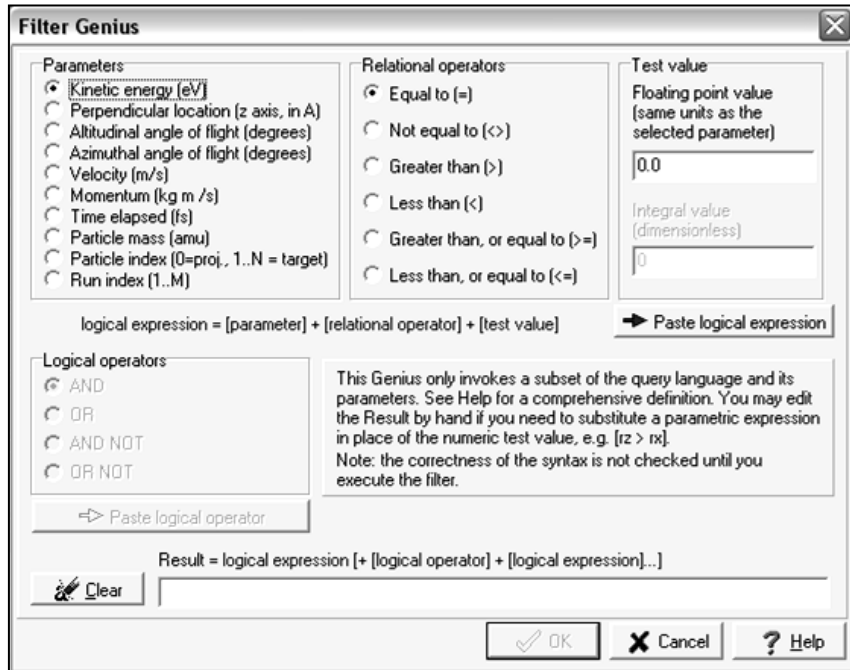


**Şekil 2.16.** *Winnow* programı arayüzü.

*Winnow* programı SNK dosyalarındaki verileri *Filter* fonksiyonu ile filtreler. Bu fonksiyonun kullanılabilmesi için öncelikle *File/Open* komutları ile ilgilenilen SNK dosyası açılır. Daha sonra *Process/Filter (SNK → SNK)* komutları seçilir. Açılan pencerede filtrelenmek istenen dosya belirlenir ve oluşturulacak yeni dosya kaydedilir. Filtreleme komutu seçildiğinde açılacak olan *Winnow* penceresi Şekil 2.17'de gösterilmiştir. Bu pencerenin sağ alt köşesinde bulunan *Genius* komutu seçildiğinde sorgu oluşturma penceresi açılır. *Genius* aracının sorgu oluşturma penceresi Şekil 2.18'de verilmiştir.



Şekil 2.17. Winnow programının filtreleme fonksiyonu penceresi.



Şekil 2.18. Genius sorgu oluşturma penceresi.

Genius aracı yardımıyla oluşturulan sorgular, Winnow programının filtreleme, grafik çizme, normalizasyon, sütunların formatlanması, karşılaştırma yapma, ortalama belirleme gibi işlemleri gerçekleştirmesi için kullanılabilir. Winnow programının sorgu dili iyi anlaşıldığında kullanıcının kendi sorgularını oluşturması da mümkündür. Kalypso yazılım paketinin içinde yer alan kılavuzda Winnow sorgu dili hakkında daha geniş bilgi verilmiştir.

### 3. TEORİK MODELLER

Bir simülasyonun esas unsuru, fiziksel sistem için oluşturulan bir modeldir. Bir moleküler dinamik simülasyonu için modelleme, bir potansiyel seçimine karşılık gelir. Bu potansiyel, birden fazla atom içeren bir sistemin potansiyel enerjisini temsil eden, sistemdeki atomların konumlarına bağlı olan bir  $V(r_1, \dots, r_N)$  fonksiyonudur. Atomlar arasındaki etkileşmeyi sağlayan kuvvetler bu  $V(r_1, \dots, r_N)$  potansiyel fonksiyonundan türetilir:

$$\vec{F}_i = -\vec{\nabla}_{r_i} V(r_1, \dots, r_N) \quad (3.1)$$

Böyle bir  $V$  potansiyel fonksiyonu için en basit seçim, fonksiyonu ikili etkileşmelerin bir toplamı olarak yazmaktır:

$$V(r_1, \dots, r_N) = \sum_i \sum_{j>i} \phi(|r_i - r_j|) \quad (3.2)$$

İkinci toplamdaki  $j > i$  koşulu, her bir çiftin yalnız bir kez hesaba katılmasını sağlama amaçlıdır. Bu alanda yapılan çalışmaların ilk dönemlerinde pek çok potansiyel böyle ikili etkileşmelerle oluşturulmuştur. Ancak daha sonra metaller, yarı-iletkenler gibi karmaşık yapılar için iki cisim yaklaşımının oldukça yetersiz olduğu kabul edilmiş ve çeşitli çok cisim potansiyelleri kullanılmaya başlanmıştır (Ercolessi 1997).

#### 3.1. Atomlar Arası Potansiyeller

İki parçacıktan oluşan bir sistemin potansiyel enerjisinin parçacıklar arası uzaklıkla değişme şekli; hem bir atom topluluğunun denge özelliklerini hem de enerjik parçacıkların durağan atomlardan oluşan bir örgü ile etkileşim biçimini belirler. Hemen bütün fiziksel olgular, doğrudan ya da dolaylı olarak atomlar arasındaki kuvvetlerle ilişkilendirilebilir.

Bu tez çalışmasında kullanılan *Kalypso* simülasyon paketi, bu modelleme için bileşik potansiyellerden yararlanmaktadır. Bu potansiyeller, çekirdekler arasındaki kısa mesafelerde itici bir perdelenmiş Coulomb potansiyeli ( $V_c$ ) ile kimyasal bağ uzunlukları ile kıyaslanabilecek çekirdekler arası mesafelerde çekici bir çok-cisimli sıkı-bağ

potansiyelinden ( $V_a$ ) oluşur. Bir  $r_1 < r < r_2$  bölgesine uygulanan potansiyelin itici ve çekici kısımları bir  $S(r)$  interpolasyon fonksiyonu ile birleştirilir:

$$V(r) = V_c(r)S(r) + V_a(r)(1 - S(r)) \quad (3.3)$$

ve  $S(r)$  fonksiyonu şu özelliklere sahiptir:  $S(r_1) = 1$ ,  $S(r_2) = 0$  ve  $S'(r_1) = S'(r_2) = 0$ . Bütün potansiyeller başka bir ara-değer fonksiyonu yoluyla seçilen bir kesme mesafesinde yumuşak bir şekilde sonlandırılır.

### 3.1.1. Perdelenmiş Coulomb potansiyeli

Enerji yüklü bir iyon ile bir katı içindeki atomların etkileşmesi incelenirken öncelikle çarpışmanın limitleri göz önüne alınmalıdır.  $M_1$  ve  $M_2$  kütleli,  $Z_1$  ve  $Z_2$  atom numaralı ve birbirlerinden bir  $r$  uzaklığı ile ayrılmış olan iki atom ele alındığında kuvvet, bir  $V(r)$  potansiyel enerjisi ile tanımlanır. Bu iki atom arasındaki aralık için iki önemli referans noktası vardır: atomik elektron kabukları arasındaki mesafenin boyutlarını veren hidrojen atomunun Bohr yarıçapı  $a_0 = 0,053$  nm; ve kristaldeki iki komşu atom arasındaki mesafe olan  $r_0$  (yaklaşık 0.25 nm).

$r \gg r_0$  durumu için, elektronlar ayırık atomların enerji düzeylerinde toplanacaklardır ve Pauli dışarlama ilkesi gereğince her enerji düzeyinin bulunduracağı elektronların bir maksimum sayısı vardır. İç kabuklara karşılık gelen alt düzeyler tamamen doldurulacak ve sadece valans kabuğunda boşluklar kalacaktır. İki atom birlikte düşünüldüğünde, değerlik kabukları üst üste gelecek ve kimyasal bağ oluşturacak biçimde çekici etkileşmeler gerçekleşecektir.

Bir diğer uç durum olan  $r \ll a_0$  durumunda ise çekirdekler sistemdeki yüklü parçacıkların en yakın çifti haline geleceklerdir. Bu durumda çekirdeklerin Coulomb potansiyelleri,  $V(r)$  içindeki diğer bütün terimlerden daha ağırlıklı olacaktır. Böylece,

$$V(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} \quad (3.4)$$

ifadesi elde edilir ( $e^2 = 1,44$  eVnm olmak üzere).

Bununla birlikte,  $a_0 < r \leq r_0$  koşulunu sağlayan ara bölgede ise etkileşme iki atom arasındaki bir itici kuvvet bir pozitif potansiyel enerji ortaya çıkarır. Bu potansiyelin esas unsurları;

- i) Pozitif yüklü çekirdekler arasındaki elektrostatik itme,
- ii) Yakın elektronları Pauli dışarlama ilkesini ihlal etmeden bir arada tutabilmek için gereken enerjideki artıştır.

Pauli dışarlama ilkesi gereğince aynı konumda iki elektron bulunamayacağından iki atomdaki elektronların üst üste gelmesi, bazı elektronların daha üst, atomik yapının boş seviyelerine çıkmasını sağlar. Bu proses için gerekli enerji, atomlar birbirlerine yaklaştıkça artar, çünkü orbital elektronlarının pek çoğu etkileşmiş olur.

Ara uzaklıklarda, en içteki elektron kabuklarının uzay yüklerinden çekirdek yüklerinin elektrostatik perdelemesinden kaynaklanan Coulomb potansiyelinde bir düşüş gözlenir. Böylece bir perdelenmiş Coulomb potansiyeli ortaya çıkar. Bu potansiyel genel olarak,

$$V(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} \chi(r) \quad (3.5)$$

biçiminde ifade edilir. Burada  $\chi(r)$ , perdeleme fonksiyonudur ve bir  $r$  yarıçapında, gerçek atomik potansiyelin Coulomb potansiyeline oranı olarak,

$$\chi(r) \equiv \frac{V(r)}{Z_1 Z_2 e^2 / r} \quad (3.6)$$

biçiminde tanımlanır.

İdeal durumda  $\chi(r)$ ; Coulomb potansiyelini, iyon ve atom arasındaki etkileşmeyi bütün ayrılık mesafelerinde tanımlayacak, uygun bir şekilde oluşmasını sağlar. Uzun uzaklıklar için  $\chi(r)$  sifıra yakın olma eğilimindedir. Çok kısa uzaklıklar için ise bire yakın bir değer alır. Bu özellikler tek bir atomlar arası potansiyel enerji fonksiyonunun, bütün bir çarpışma sürecini tanımlamasına izin verir (Nastasi et al. 1996).

*Kalypso* programı perdelenmiş Coulomb potansiyeli olarak, ZBL veya Molière potansiyellerini kullanır. Atom numaraları  $Z_1$  ve  $Z_2$  olan iki etkileşen atom için perdelenmiş Coulomb potansiyeli,

$$V(r_{ij}) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{ij}} \sum_{k=1}^N c_k \exp(-b_k r_{ij}/a) \quad (3.7)$$

şeklindedir. Burada  $N$ , Molière potansiyeli için 3, ZBL potansiyeli için 4 ve Bohr potansiyeli için 1 değerini alır.  $c_k$  ve  $b_k$  parametreleri çeşitli potansiyeller için farklı biçimlerde tanımlanır.  $a$  parametresi perdeleme uzaklığı olarak bilinir ve farklı formlarda tanımlanır.  $r_{ij}$  ise  $i$  ve  $j$  atomlarının çekirdekler arası mesafesidir.

Atomlar arasındaki etkileşmelerde iki elektronun etkileşmesi için Coulomb potansiyelleri kullanılır. Ancak gerçek durum bundan farklıdır. Ortamda bulunan çok sayıdaki elektron, iki elektronun etkileşmesine bir perdeleme (*screening*) uygular ve gerçekte iki elektron arasındaki etkileşme salt Coulomb potansiyeli durumundan çok daha zayıftır (Nayak 2004). Bu yüzden MD simülasyonlarda perdelenmiş Coulomb potansiyelleri (*screened Coulombic potentials*) kullanılır.

### 3.1.1.1. Evrensel potansiyel – ZBL

Atomlar arasındaki potansiyeli kesin bir biçimde verebilen bir analitik fonksiyon bulmak için Ziegler, Biersack, ve Littmark (1985), Wilson *et al.* (1977) çalışmasını, 261 atom çiftinin katı-hal atomlar arası potansiyellerinin ayrıntılı hesaplamalarını yaparak genişlettiler. Atomlar arası potansiyeli hesaplamakta kullandıkları modelde her atom küresel simetrik bir yük dağılımına sahip kabul edildi. Toplam etkileşme potansiyel enerjisi,

$$V = V_{nm} + V_{en} + V_{ee} + V_k + V_a \quad (3.8)$$

olarak alındı. Burada

$V_{nm}$ , çekirdekler arasındaki elektrostatik potansiyel enerji;

$V_{ee}$ , iki elektron dağılımı arasındaki saf elektrostatik etkileşme enerjisi;

$V_{en}$ , her çekirdek ve diğer elektron dağılımı arasındaki etkileşme enerjisi;

$V_k$ , Pauli dışarlama ilkesi gereğince üst üste gelme bölgesinde kalan elektronların kinetik enerjisindeki artış;  
 $V_a$ , bu elektronların değişim enerjilerindeki artıştır.

Coulomb etkileşmesi,

$$V_c(r) = V_{nm} + V_{en} + V_{ee} \quad (3.9)$$

biçiminde alınmıştır. Hesaplanan toplam etkileşme potansiyeli, evrensel (ZBL) perdeleme fonksiyonunu bulmak için denklem (3.6) ile birlikte kullanıldığında,

$$\chi_U = 0.1818e^{-3.2x} + 0.5099e^{-0.9423x} + 0.2802e^{-0.4028x} + 0.02817e^{-0.2016} \quad (3.10)$$

eşitliği elde edilir. Burada indirgenmiş uzaklık  $x$ ,

$$x = \frac{r}{a_U} \quad (3.11)$$

ve evrensel (ZBL) perdeleme uzaklığı  $a_U$  da,

$$a_U = \frac{0.8854a_0}{(Z_1^{0.23} + Z_2^{0.23})} \quad (3.12)$$

biçiminde tanımlanır. Burada  $a_0$ , Bohr yarıçapı olup 0.0529 nm'dir. *Kalypso* programındaki hesaplamalarda bu değer,

$$a_U = \frac{0.4685}{(Z_1^{0.23} + Z_2^{0.23})} \quad (3.13)$$

biçiminde kullanılır (Nastasi et. al. 1996).

### 3.1.1.2. Molière-Linhard ve Molière-Firsov

Perdelenmiş Coulomb potansiyeli için başka modeller de vardır. Klasik atomlar arası potansiyel oluşturmak için geleneksel yaklaşım; basit atomik potansiyelleri kullanıp,  $a$  perdeleme uzaklığı tanımını iki atom potansiyelini hesaplamak için tanımını düzeltmektir. Atomlar arası potansiyellerdeki indirgenmiş  $x = r/a$  koordinatını belirlemede kullanılan perdeleme uzaklığı, hesaplanmaktan ziyade önerilmiştir. Bohr,

$$a_B = \frac{a_0}{(Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{1/2}} \quad (3.14)$$

biçiminde bir perdeleme uzaklığı önermiştir. Burada  $Z_1$  ve  $Z_2$  iki atomun atom numaralarıdır. Firsov, atomlar arası potansiyelin en iyi,

$$a_F = \frac{0.8853a_0}{(Z_1^{1/2} + Z_2^{1/2})^{2/3}} \quad (3.15)$$

biçimindeki bir perdeleme uzaklığı ile tanımlanabileceğini öne sürmüştür. Burada 0.8853 değeri Thomas-Fermi atomundan elde edilmiştir. *Kalypso* programında, Molière-Firsov potansiyeli,

$$a_F = \frac{0.4685}{(Z_1^{1/2} + Z_2^{1/2})^{2/3}} \quad (3.16)$$

biçiminde kullanılır. Linhard ise,

$$a_L = \frac{0.8853a_0}{(Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{1/2}} \quad (3.17)$$

biçiminde bir perdeleme uzaklığı önermiştir. Bu form da *Kalypso* programında,

$$a_L = \frac{0.4685}{(Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{1/2}} \quad (3.18)$$

biçiminde yer alır (Nastasi et. al. 1996).

Bu potansiyeller arasında belirgin bir fark yoktur. Potansiyeller arasında hangisinin daha kesin bir sonuç vereceği ile ilgili kesin bir yargıya varmak da mümkün değildir. Bununla birlikte perdeleme uzaklığı, genellikle deneysel verilere fit etme parametresi olarak kullanılır. Önerilen  $\chi$  fonksiyonun formları,

$$x^{1/2} \frac{d^2 \chi}{dx^2} = \chi^{3/2} \quad (3.19)$$

biçiminde ifade edilebilecek olan Thomas-Fermi eşitliğinin bir çözümüdür. Molière ve ZBL potansiyelleri için  $\chi$  fonksiyonu,

$$\chi(x) = \sum_{i=1}^4 a_i \exp(-b_i x) \quad (3.20)$$

formunu alır. Bütün durumlarda  $\chi$  fonksiyonu Thomas-Fermi eşitliğinin nümerik çözümüne fit edilir. Bu fit etme parametrelerinin bazıları Çizelge 3.1'de verilmektedir. Atomik çarpışma çalışmalarında en çok kullanılan potansiyel, deneysel sonuçlarla diğerlerine göre daha iyi uyum sağlayan ZBL potansiyelidir (Bonny and Malerba 2005).



**Çizelge 3.1** Perdelenmiş Coulomb potansiyelleri için nümerik katsayılar (Bonny and Malerba 2005).

	<b>a<sub>1</sub></b>	<b>a<sub>2</sub></b>	<b>a<sub>3</sub></b>	<b>a<sub>4</sub></b>	<b>b<sub>1</sub></b>	<b>b<sub>2</sub></b>	<b>b<sub>3</sub></b>	<b>b<sub>4</sub></b>
<b>Molière</b>	0.35	0.55	0.1	0	0.3	1.2	6.0	0
<b>ZBL</b>	0.1818	0.5099	0.2802	0.02813	0.27854	0.63717	1.91926	0

Projectile atomu olarak bir soygaz atomu (Ar gibi) seçildiğinde, perdelenmiş Coulomb potansiyeli, *Kalypso* tarafından bütün projectile-hedef atom ayrışmalarında kullanılır. Bu durumda kesme uzaklığında ( $r_c$ ), potansiyelin etkisinin kesilmesinde kullanılan bir anahtarlama fonksiyonu uygulanmaz. Bunun yerine potansiyelin tümü bir  $V(r_c)$  miktarınca azaltılır, böylece  $r_c$ 'deki süreksizlik ortadan kaldırılır; perdelenmiş Coulomb potansiyel fonksiyonu  $V(r)$ 'nin yerini  $V(r)-V(r_c)$  ifadesi alır. Bu düzeltmenin birincil amacı enerji hesabının kolaylaştırmaktır. Potansiyelin  $r_c$  noktasındaki türevindeki süreksizlik için bir düzeltme yapılmaz. Yapılan düzeltmeler küçüktür. Örneğin bir Ar-Cu sistemi için  $r_c = 4\text{Å}$  seçildiğinde  $V(r_c) < 0.01$  eV civarındadır.

### 3.1.2. Sıkı-bağ potansiyeli

*Kalypso* programında çekici potansiyel olarak kullanılan potansiyeller, üstel fonksiyonlar olan sıkı-bağ potansiyelleridir (TB; *tight-binding potentials*). Sıkı-bağ potansiyelleri, ikili etkileşme bileşenlerine ayrılamayan çok-cisimli potansiyellerdir. Potansiyeller bir kesme uzaklığı (fcc metaller için genellikle ikinci koordinasyon kabuğunun üstünde) ile kullanılır. Sıkı-bağ potansiyelinin çekici kısmı, Morse potansiyeli benzeri terimlerin bir toplamının lineer olmayan bir (karekök) fonksiyonudur.

Second-moment yaklaşımındaki metalik birleşmenin sıkı-bağ modelinin altında yatan kabuller ilk olarak Cleri ve Rosato (1993) tarafından açıklanmıştır. Bu yaklaşımın içinde sistemin bant enerjisi durum yoğunluğunun ikinci momentinin karekökü ile orantılıdır.

Sıkı-bağ potansiyellerinin en çok dolu ya da doluya yakın  $d$ -bantları olan fcc geçiş metalleri için işe yaraması beklenir. Bununla birlikte, farklı kristal yapılarının uygun bağıl kararlılıklarını öngöremeseler de diğer metal türleri için de kullanılmıştır (Karolewski 2001).

*Kalypso*'da bir element için sistemin potansiyel enerjisi  $U_S$ , şu şekilde verilir:

$$U_S = \sum_i (E_i^R + E_i^B) \quad (3.21)$$

Burada  $E_i^R$  ve  $E_i^B$ , sırasıyla, bir itici çekirdek etkileşmesini ve  $i$ . atomun bant enerjisini temsil eder. Bu denklemde  $E_i^R$  bir itici çift/ikili potansiyeldir:

$$E_i^R = \frac{1}{2} \sum_{j \neq i} U_{ij}(r_{ij}) \quad (3.22)$$

$$U_{ij}(r_{ij}) = A' \exp(-p(r_{ij}/r_0 - 1)) \quad (3.23)$$

Aslında *Kalypso* itici potansiyel için çok daha genel bir forma izin verir:

$$U_{ij}(r_{ij}) = A \{ \exp(-p(r_{ij}/r_0 - 1)) - b \exp(-2q(r_{ij}/r_0 - 1)) \} \quad (3.24)$$

Eğer  $b < 0$  ve  $\xi = 0$  ise Morse potansiyeli benzeri bir potansiyel ortaya çıkar. Yine de pek çok kullanıcı  $b = 0.0$  olarak alır. Eğer başka bir biçimde alınması gerekiyorsa şuna dikkat edilmelidir: Eğer  $(i, j)$  etkileşmesinde  $b \neq 0$  ise *Kalypso* aynı etkileşmenin  $q$  parametresinin değerini her iki tür için de  $q_{ij} = q_{ji}$  biçiminde simetrik kabul eder.

Denklem (3.21)'deki  $E_i^B$  ise kohesif bant enerjisi terimidir:

$$E_i^B = - \left( \sum_{j \neq i} \phi(r_{ij}) \right)^{1/2}, \quad \phi(r_{ij}) = \xi^2 \exp(-2q(r_{ij}/r_0 - 1)). \quad (3.25)$$

Denklem (3.23)'ten (3.25)'e kadar olan bu eşitliklerdeki  $r_{ij}$ ,  $i$  ve  $j$  atomları arasındaki mesafe ve  $A'$ ,  $\xi$ ,  $p$ ,  $q$ ,  $r_0$  da bu atomlar arasındaki ilişkiyi belirleyen ayarlanabilir parametrelerdir. Literatürde yer alan pek çok sıkı-bağ potansiyeli itici fonksiyonlar için denklem (3.21)'nin yerine diğer fonksiyonlar için kullanılanlardan farklı olarak daha statik olan çift toplam gösterimi kullanır:

$$E_i^R = \sum_{j \neq i} U_{ij}(r_{ij}); U_{ij}(r_{ij}) = A \exp(-p(r_{ij}/r_0 - 1)) \quad (3.26)$$

Bu iki toplam ifadesi arasındaki karışıklığı gidermek amacıyla *Kalypso* parametreleri, literatürdeki sıkı-bağ gösterimini denklem (3.26) kullanarak sınıflandırır. Ancak denklem (3.26)'da verilen  $A$  değerinde değil  $2A$  ( $=A$  denklem (3.23)'te) değerinde girdiler biçiminde olmasını gerektirir. Örneğin Cleri ve Rosato (1993) Cu için  $A = 0.0855$  eV bulmuşlardır (5. komşulukta kesme). Bu potansiyelin *Kalypso*'da kullanılması için  $2A = 0.17100$  eV parametresi girilmelidir. Benzer şekilde  $q$  parametresi de  $2q$  olarak girilmelidir.

Uzunluk gösterge parametresi  $r_0$ , örgüdeki en yakın komşu uzaklığının genelliği kaybolmadan belirlenebilir. Sıkı-bağ potansiyelinin geriye kalan parametreleri ( $A, \xi, p, q$ ) her element için örgü sabitleri, kohesif enerji  $E_c$ , elastik sabitler ( $C_{11}, C_{12}, C_{44}$ ) ve  $E_V$  boşluk oluşum enerjisi kullanılarak belirlenir. Elastik sabitlerin ve boşluk oluşum enerjilerinin deneysel değerlerindeki belirsizlikler %10-20 düzeyindedir. Geriye kalan özellikler eşit ağırlıkta kullanılırken örgü sabiti ve kohesif enerji tam olarak (pratikte, katsayıların yuvarlanmasından, %0.02'ye kadar) belirlenmiştir. Belirleme işlemi genetik algoritma ve *downhill simplex* yöntemlerinin bir kombinasyonu kullanılarak yürütülmüştür. Belirleme işlemi için kullanılan kesme uzaklığı ( $r_{cut}$ ) fcc elementler için ikinci ve üçüncü komşu uzaklıkları arasında ve bcc elementler için üçüncü ve dördüncü komşu uzaklıkları arasında seçilmiştir.

Çeşitli fcc ve bcc yapıları için Karolewski tarafından belirlenen sıkı-bağ potansiyel parametreleri Çizelge 3.2 (Potansiyeller ikinci ve üçüncü komşu uzaklıkları arasında bir bölgede ( $\sqrt{2}r_0 < R_c < \sqrt{2}r_0$ ) kesilmelidir. Bütün potansiyeller için  $b$  parametresi 0.0'dır.) ve Çizelge 3.3'te (Potansiyeller üçüncü ve dördüncü komşu uzaklıkları arasında bir bölgede ( $\sqrt{8/3}r_0 < R_c < \sqrt{11/3}r_0$ ) kesilmelidir. Bütün potansiyeller için  $b$  parametresi 0.0'dır) gösterilmiştir.

**Çizelge 3.2.** fcc metaller için sıkı-bağ (TB) potansiyellerinin parametreleri (Karolewski 2001).

Z	Element	2A (eV)	$r_0$ (Å)	$p$	$2q$	$\xi$ (eV)
13	Al	0.320456	2.8634	7.568129	5.491184	1.507384
20	Ca	0.098483	3.9471	11.21150	5.368150	0.684202
30	Sr	0.051467	4.3027	12.34058	3.620951	0.555708
28	Ni	0.112995	2.4918	14.08666	3.587386	1.400543
29	Cu	0.156525	2.5560	11.18320	4.639412	1.235524
45	Rh	0.217164	2.6901	14.13154	5.110908	1.977562
46	Ag	0.162518	2.889	11.55970	5.663298	1.108113
79	Au	0.386964	2.8838	10.43418	7.894370	1.758066
77	Ir	0.428119	2.7145	12.89860	6.908174	2.708201
82	Pb	0.170293	3.5003	10.06662	6.712517	0.869929
78	Pt	0.581228	2.7746	10.14231	7.575668	2.671486
46	Pd	0.244689	2.7511	11.32250	6.139402	1.519346
90	Th	0.239961	3.5951	9.834413	3.594461	2.093744

**Çizelge 3.3.** bcc metaller için sıkı-bağ (TB) potansiyellerinin parametreleri (Karolewski 2005).

Z	Element	2A(eV)	$r_0$ (Å)	$p$	$2q$	$\xi$ (eV)
3	Li	0.097512	3.0391	6.367465	2.793757	0.572925
11	Na	0.070641	3.7158	7.853638	3.495437	0.408306
19	K	0.046017	4.6073	9.309300	3.228612	0.316985
37	Rb	0.058311	4.9363	8.153151	3.846991	0.323340
55	Cs	0.053956	5.3174	8.411957	3.886624	0.303616
56	Ba	0.079934	4.3466	10.18347	3.013993	0.616739
23	V	0.514348	2.6223	6.854340	4.377272	2.312561
41	Nb	0.909163	2.6033	5.270157	4.110446	3.630224
73	Ta	0.656266	2.8601	8.276389	4.474236	3.300764
24	Cr	0.081360	2.4981	13.18516	1.798556	1.101227
42	Mo	0.408696	2.7253	10.01545	4.102271	2.509715
74	W	0.498072	2.741	10.37148	3.983120	3.205477
26	Fe	0.236898	2.4824	10.76133	4.075708	1.541808

Sıkı-bağ potansiyeli formalizmi bimetalik sistemleri tanımlamak için genişletilebilir. Bir bimetalik sistem için fit etme parametreleri, bu elementlerin tek tek kendi parametreleri üzerinden elde edilemez. Bununla birlikte Finnis-Sinclair potansiyelleri için kullanılan yaklaşık bir kombinasyon kuralı belirli parametremelerin yokluğunda faydalı olabilir. Bu kural potansiyel parametrelerinin, sırasıyla elementlerin terimlerinin ( $AA, BB$ ) geometrik ortalamalarına karşılık gelen heteronükleer etkileşme terimleri ( $A$  ve  $B$  elementleri arasındaki etkileşme için  $AB$ ) olacak şekilde seçilmesini gerektirir:

$$\phi^{AB}(r_{ij}) = [\phi^{AA}(r_{ij})\phi^{BB}(r_{ij})]^{1/2}$$

$$U^{AB} = [U^{AA}(r_{ij})U^{BB}(r_{ij})]^{1/2} \quad (3.27)$$

Bu yaklaşımın doğruluğu uygun termodinamik ölçümler kullanılarak her durum için ayrı ayrı değerlendirilmelidir (Karolewski 2005). *Kalypso* programının yazarı bimetalik sistemlerin parametrelerini elde etmek için aşağıdaki (yaklaşık) geometrik ortalama şemasını kullanmıştır:

$$\begin{aligned} A_{AB} &= A_{BA} = \sqrt{A_{AA}A_{BB}}; \xi_{AB} = \xi_{BA} = \sqrt{\xi_{AA}\xi_{BB}}; \\ p_{AB} &= p_{BA} = (p_{AA} + p_{BB})/2; q_{AB} = q_{BA} = (q_{AA} + q_{BB})/2 \\ 2r_{0AB} &= (2p_{AB})/(p_{AA}/r_{0AA} + p_{BB}/r_{0BB}) + (2q_{AB})/(q_{AA}/r_{0AA} + q_{BB}/r_{0BB}) \end{aligned} \quad (3.28)$$

$r_{0AB}$  gösterimi karmaşıktır, çünkü bu parametre için bir değer belirlemek için tek bir yol yoktur. Denklem (3.28)'de iki yöntemin bir ortalaması kullanılmıştır ancak başka yöntemler de bulunabilir. Düzenli ya da geçici bir alaşım için örgü sabiti bilinebilir (ya da örgü sabiti gibi alaşım özelliklerinin bileşimin lineer ara-değerinden tahmin edilebileceğini ileri süren Vegard kuralı kullanılabilir). Böylece  $r_{0AB}$  değeri istenilen örgü sabitini türetmek üzere seçilebilir.

Denklem (3.28)'deki eşitlikler ile gösterilen şema *A-B* etkileşmelerinin enerjik olarak *A-A* ve *B-B* etkileşmelerinin arasında bir ara değerde olduğu kabulüne dayanmaktadır. Geometrik ortalamalar kabulü en çok, seyreltilmiş *A*'nın bulk *B* içinde çözeltisinin ısısının, seyreltilmiş *B*'nin bulk *A* içindeki çözeltisinin ısı ile benzer büyüklükte ancak zıt işaretli olduğu sistemler için yararlıdır. Bununla birlikte, bu kabulün tümüyle yetersiz olduğu durumlar da vardır. Bu gibi durumlarda (genellikle *ab initio* hesaplamalar ile elde edilen) yapısal ve enerjik verilerin bir veritabanına fit edilerek bir potansiyel türetilmelidir. Geçiş metalleri örgü noktalarında geçiş metali safsızlıkları için yüzey ayrılma enerjilerinin faydalı bir veritabanı *Kalypso* programının eklerindeki kullanıcı kılavuzunda yer almaktadır.

*Kalypso* programında kullanılan sıkı-bağ potansiyelleri literatürde kullanılanlardan daha esnektir. Çünkü  $q_{AB} = q_{BA}$  ve  $\xi_{AB} = \xi_{BA}$  koşulları zorlanmamıştır (yani potansiyelin çekici kısmını tanımlayan parametreler atomların karşılıklı değişimi dolayısıyla simetrik olmak zorunda değildirler). Bir istisna olarak eğer  $b \neq 0.0$  ise (nadiren)  $q$  çapraz

terimleri simetrik olmalıdır ( $q_{AB} = q_{BA}$ ). Bu sınırlama *Kalypso*'da uygulanan potansiyel hesaplama usulünden kaynaklanır. Bimetalik sistemlerde potansiyellerin kesinliğini arttırabilen bu esneklikten dolayı *Kalypso*'nun kullandığı sıkı-bağ potansiyelleri bir karekök yerleştirme fonksiyonuna sahip olan yerleşen atom metodu (*EAM: Embedded atom method*) potansiyelleri olarak da tanımlanabilir. Hesaplama verimliliği nedenlerinden ötürü *Kalypso* programının gerektirdiği çiftlenimli potansiyel parametrelerinin ( $2A, p$ ) simetrik olması gerekir. Bu durumun potansiyellerin genelliğinde herhangi bir kayba yol açmadığı gösterilebilir (potansiyel teorisi dilinde bu durum büyük bir ölçü dönüşümüne eşdeğerdir).

### 3.1.3. Anahtarlama fonksiyonları

*Kalypso* programında itici ve çekici potansiyeller kısa uzaklıklarda anahtarlama fonksiyonları yardımıyla birbirlerine eklenirler. İtici ve çekici potansiyellerin bileşik bir potansiyel olarak kullanılmasına yarayan bu fonksiyonlar *çekirdek* anahtarlama fonksiyonlarıdır.

Hesaplamanın kolaylaşması açısından potansiyellerdeki terimler bir  $r_c$  kesme uzaklığına kadar değerlendirilir. Ancak potansiyelin nüfuz aralığının  $r_c$  kadar olduğunu söylemek doğru olmaz. Bir çok cisim potansiyeli için bir  $i$  atomu üzerine etki eden kuvvet, hem  $i$  hem de onun komşularıyla ilgili atomların hepsine bağlıdır.  $i$  atomunun bir komşu atomuyla etkileşen her atom,  $i$  atomu üzerine etkileyen kuvveti etkiler. Yani potansiyelin nüfuz aralığı  $2r_c$ 'dir.

Çekici bir atomlar arası potansiyelin parametrelerinin özel bir kesme uzaklığı kabulü ile fit edildiğini bilmek önemlidir. Örneğin bir potansiyel üçüncü ve daha üst koordinasyon kabuklarını dışarıda bırakan bir kesme uzaklığı kullanılarak belirlenmiş olabilir. Bu durumda bu potansiyeli kullanan simülasyonun da üçüncü ve daha üst kabukları dışarıda bırakan bir  $r_c$  kesme uzaklığı olması gerekir. Başka bir deyişle  $r_c$  ikinci ve üçüncü kabuklar arasında bir yerde olmalıdır. fcc metaller için  $r_c$  kesme uzaklığını üçüncü kabuğun hemen 0.1 Å altında seçilmesi iyi bir tercih olacaktır (Karolewski

2005). Eğer  $r_c$  üçüncü kabukla tam olarak kesişirse, bu kabuktaki bazı atomlar potansiyelin nüfuz aralığı içinde, termal yer değiştirmeler ( $\sim 0.1 \text{ \AA}$ ) nedeniyle sonlu sıcaklıkta konumlanacaktır, ayrıca yüzey durulma (*relaxation*) parametreleri de etkilenebilecektir. Cisim merkezli kübik yapıdaki (bcc) metaller için  $r_c$  uzaklığını kabukların ortasında almak hedef kararlılığını arttırabilir. İki atomdan oluşan bimetalik sistemler için genel bir çözüm yoktur.

*Kalypso* programında kullanılan  $S(r)$  anahtarlama fonksiyonu,  $S(r_1)=1$ ,  $S(r_2)=0$ , ve  $S'(r_1)=S'(r_2)=0$  koşullarını sağlar. Buradaki  $r_1$  ve  $r_2$  parametreleri ( $r_2 > r_1$ ), anahtarlama fonksiyonlarının uygulanma bölgesini tanımlar.  $r_1$  ve  $r_2$  değerleri, denge durumundaki katının madde özelliklerini (örneğin kohesif enerjisini) etkilemeyecek biçimde seçilir. Bu durum, kararlı hedef örgüdeki atomların hiçbirinin, anahtarlama fonksiyonu tarafından değiştirilen potansiyelin bir bölgesinde yer almamasını gerektirir.

*Çekirdek* ve *kesme* anahtarlama fonksiyonları, kullanıcı tarafından (bileşik potansiyelin düzgünlüğünü arttırmak amacıyla) değiştirilebilecek bir skala parametresi  $a$  ile benzer fonksiyonel formlara sahiptir. *Çekirdek* anahtarlama fonksiyonu bölgesinde toplam  $V$  potansiyeli,

$$V(r) = V_c(r)S(r) + V_a(r)(1 - S(r)) \quad (3.29)$$

biçiminde ifade edilir. Buna karşılık gelen kuvvet fonksiyonu,

$$-F(r) = V_c'(r)S(r) + V_c(r)S'(r) + V_a'(r)(1 - S(r)) - V_a(r)S'(r) \quad (3.30)$$

şeklindedir. *Kesme* anahtarlama fonksiyonu bölgesinde toplam  $V$  potansiyeli ve buna karşılık gelen kuvvet fonksiyonu,

$$V(r) = V_a(r)S(r) \quad (3.31)$$

$$-F(r) = V_a'(r)S(r) + V_a(r)S'(r) \quad (3.32)$$

biçimindedir.

*Çekirdek* anahtarlama fonksiyonu için  $r_2$ , en yakın komşu uzaklığından daha küçük bir değer almak zorundadır;  $r_1$  ise perdelenmiş Coulomb potansiyeli ile uyumu sağlamak

için seçilir. *Kesme* anahtarlama fonksiyonu için  $r_2$ ,  $r_c$  kesme uzaklığına eşit olmalıdır;  $r_1$  ise dış kabuk yarıçapından daha büyük bir değer almak zorundadır. *Çekirdek* ve *kesme* anahtarlama fonksiyonları bölgeleri üst üste gelmemelidir. Bu sınırlamalardan ayrı olarak anahtarlama fonksiyonu bölgeleri kullanıcı tarafından sezgisel olarak seçilir.

İdeal olarak, anahtarlama fonksiyonlarının uygulandığı bölgelerin uzunlukları ( $r_2 - r_1$ ), mümkün olduğu kadar kısa tutulmalıdır. Bununla birlikte, *kesme* anahtarlama fonksiyonunun uzunluğu çok kısa ise bu durum potansiyel enerjinin hızlıca değişmesine yol açar ve kuvvet fonksiyonunda mümkün olan her yerde engellenmesi gereken fiziksel olmayan bir minimumun ortaya çıkmasını sağlayabilir. Kuvvet fonksiyonunun tercihen anahtarlama fonksiyonu bölgesinde bir minimuma sahip olmaması gerekir ancak üçüncü komşu kesme uzaklıkları için bu durum, sıkı-bağ potansiyeli fonksiyonel formu kullanılarak, nadiren gerçekleşebilir.

*Kalypso* tarafından kullanılan anahtarlama fonksiyonu, gösterge parametresi  $a$  ile birlikte Bazant tarafından ileri sürülen fonksiyona benzer olarak;

$$S(r) = \exp\left(a(1 - x^{-3})\right); \text{ ve } x = \frac{(r - r_1)}{(r_2 - r_1)}; r_2 > r_1 \quad (3.33)$$

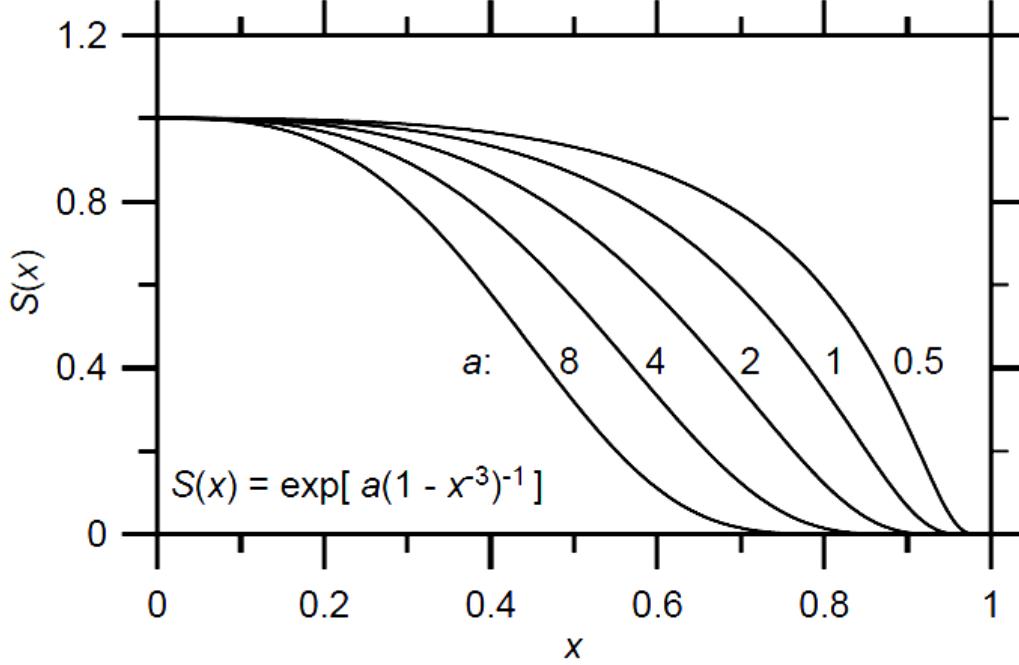
biçimindedir (Bazant 1997). Polinom yapısındaki anahtarlama fonksiyonlarından farklı olarak Bazant'ın anahtarlama fonksiyonu sahte maksimum ve minimum üretmezler. Bazant'ın fonksiyonu, kesme uzaklığının ( $r_1$ ) altında iki sürekli türeve sahiptir ve dış kesme uzaklığında düzgündür:

$$S'(r) = \frac{dS}{dr} = -3ax^{-4}(1 - x^{-3})^{-2}(r_2 - r_1)\exp\left(a(1 - x^{-3})^{-1}\right) \quad (3.34)$$

Şekil 3.1' de anahtarlama fonksiyonunun değişik  $a$  gösterge parametresi değerleri için çizilmiş bir grafik yer almaktadır. Şekil 3.2'de ise potansiyelin çekici bölgesindeki Cu-Cu etkileşmesi için bileşik potansiyel ve kuvvet fonksiyonları gösterilmiştir. Potansiyel Cu örgüsünün ilk iki kabuğuna göre belirlenmiştir. Dolayısıyla kesme uzaklığı 3. kabuğun altında olmalı (kesme uzaklığının, 3. kabukla titreşimsel yer değiştirmeler ve yüzey durulma etkilerinden doğabilecek olan etkileşmeleri saf dışı bırakmak amacıyla,

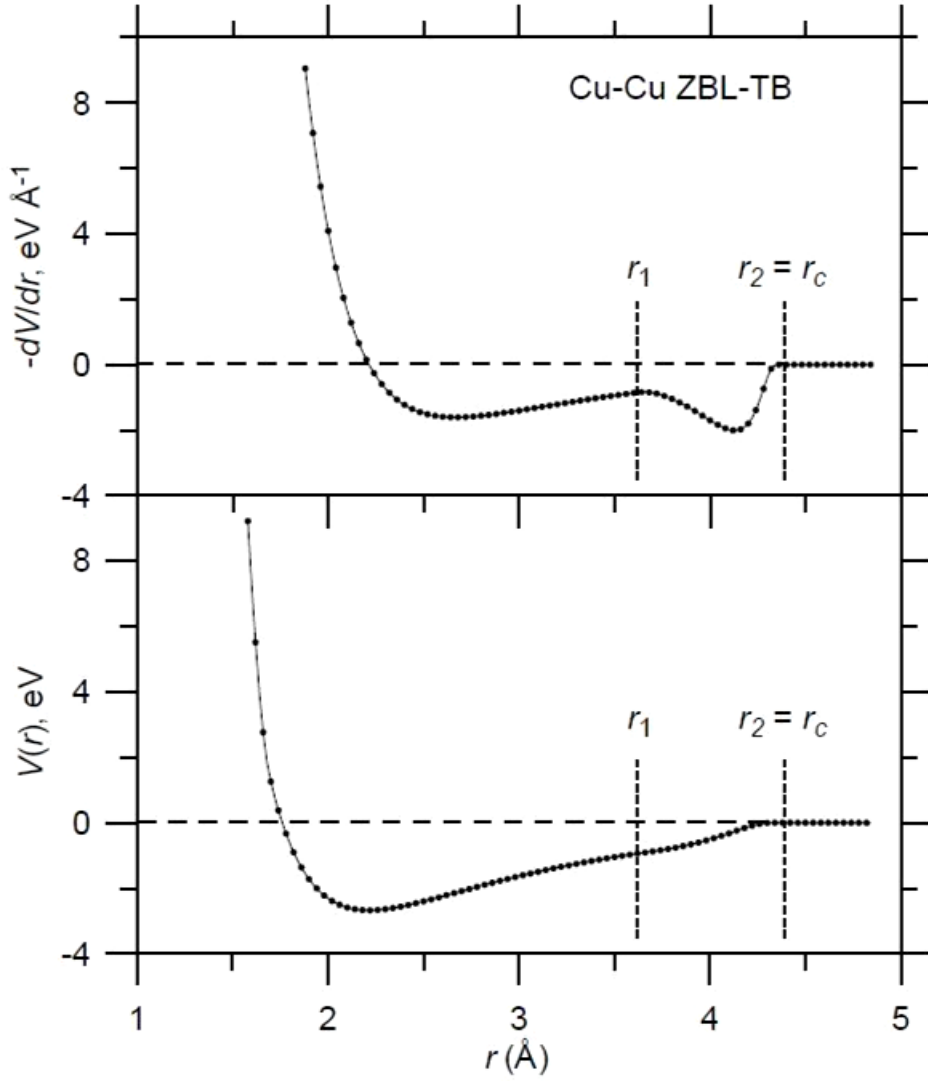


kabuğun 0.1 Å kadar altında seçilmesi en uygun olan durumdur) yani *kesme* anahtarlama fonksiyonu 2. kabuğun üstünde uygulanmalıdır.



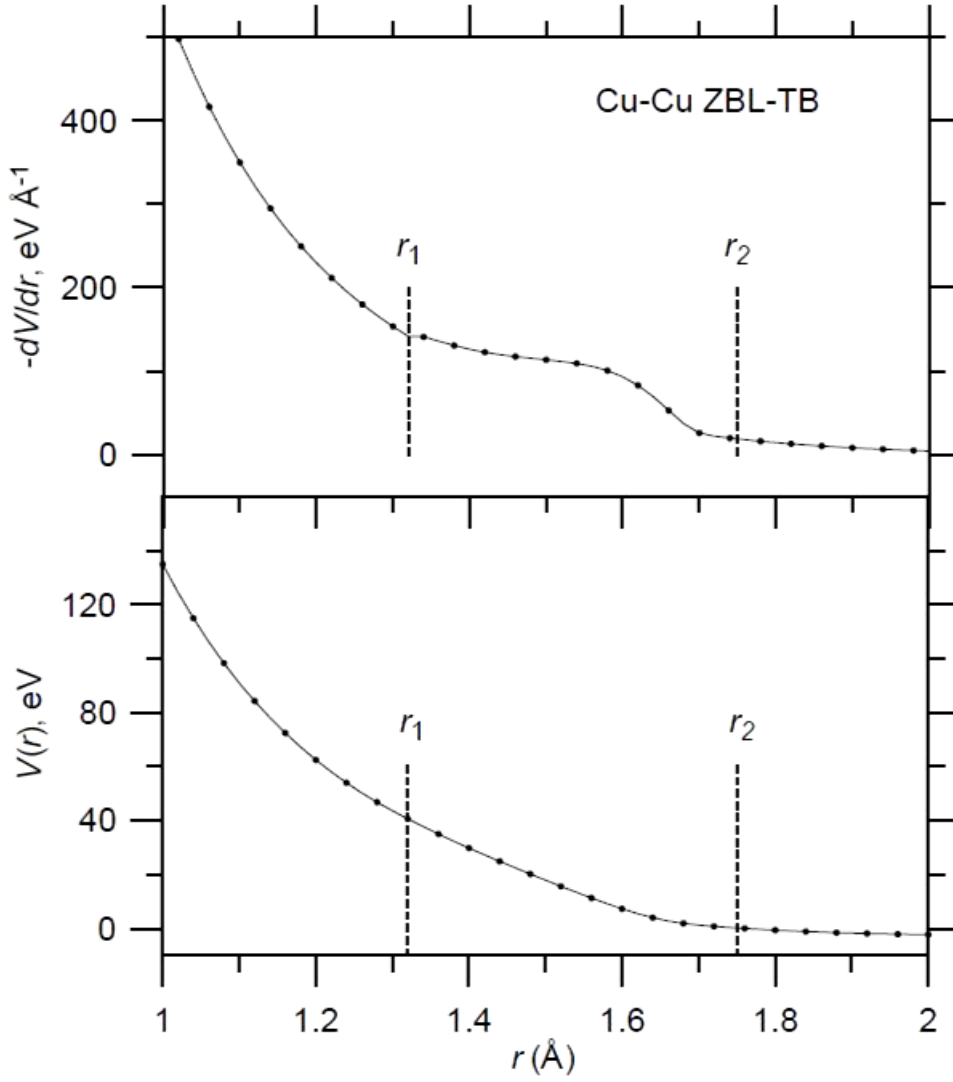
**Şekil 3.1.** Anahtarlama fonksiyonunun  $a$  gösterge parametresinin farklı değerleri için grafiği (Karolewski 2005).

Kesmenin 3. kabuğun altında uygulanması anahtarlama fonksiyonu bölgesindeki kuvvet fonksiyonunda büyük bir ‘bel verme’ (*bulge*) meydana getirmektedir. Bu ‘bel vermenin’ nedeni, her kesme işleminin kuvvet eğrisinin altında kalan alanı (bu alan sıfır potansiyel konumundan  $r_1$  konumuna gidebilmek için yapılan işi verir) koruma zorunluluğu düşünüldüğünde anlaşılabilir. Bu nedenle anahtarlama fonksiyonu bölgesi ne kadar kısa ise kuvvet fonksiyonu eğrisindeki ‘bel vermenin’ büyüklüğü o kadar belirgin olacaktır. Şekil 3.2’deki ‘bel vermenin’ düz ve simetrik şekli dikkat çekicidir ve *kesme* anahtarlama fonksiyonu bölgesi ( $r_1$  ve  $r_2$  ya da 3.62 – 4.39 Å arası) belirtilmiştir (bu örnekte  $a=4$ ). Polinom biçiminde bir anahtarlama fonksiyonu çok daha keskin eğim değişiklikleri (ve muhtemel titreşimler) meydana getirecektir.



**Şekil 3.2.** Çekici bölgede yer alan iki Cu atomu arasındaki etkileşmeyi temsil eden bileşik ZBL-TB potansiyeli (Karolewski 2005).

‘Bel vermenin’ genliği kuvvetteki artışı gösterir. Şekil 3.2’de gösterildiği gibi bir anahtarlama fonksiyonunun kullanımı kesme sınırları içinde, prensipte/esas olarak istenmeyen büyük bir kuvvet oluşturur. ‘Bel verme’, bir anahtarlama fonksiyonu değişikliği ile şekli değiştirilebilmesine rağmen giderilemez (şekilde gösterilen ‘bel verme’ anahtarlama fonksiyonu parametresi  $a$ ’nın yaklaşık olarak optimal bir düzeltmesini temsil eder). Büyük bir kesme uzaklığı olan bir potansiyelin kullanımı ‘bel vermeyi’ azaltacaktır ancak bu durum hesaplama verimliliği açısından uygun bir durum değildir.

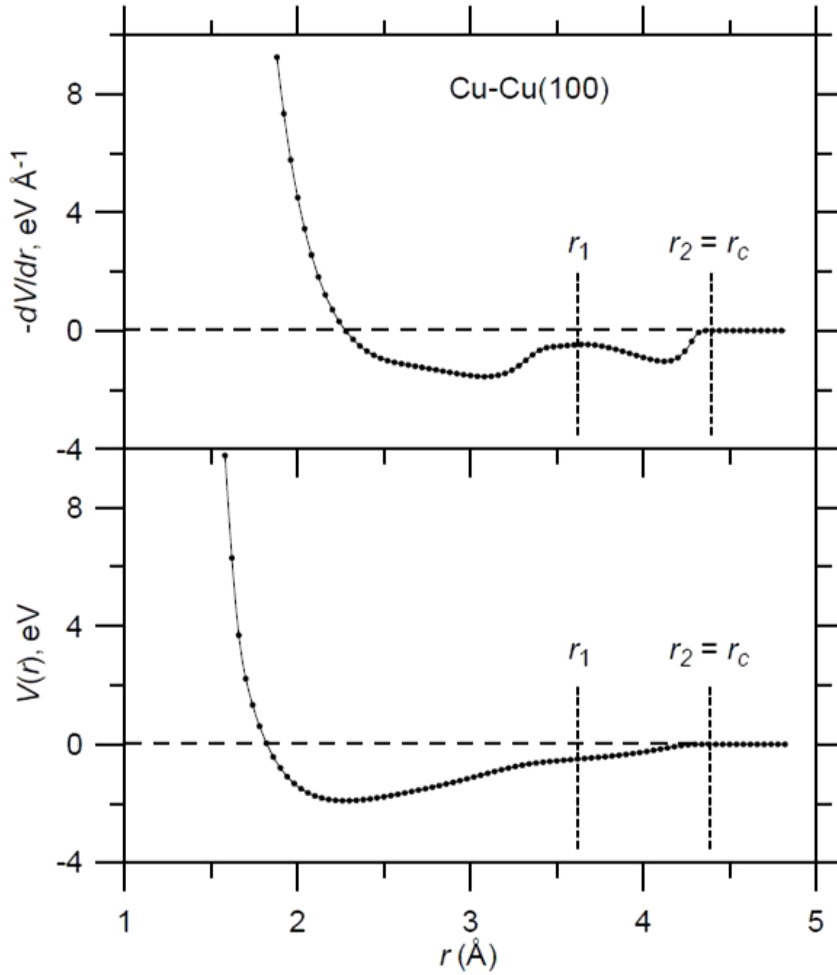


**Şekil 3.3** İtici bölgede yer alan iki Cu atomu arasındaki etkileşmeyi temsil eden bileşik ZBL-TB potansiyeli (Karolewski 2005).

Şekil 3.3 Cu-Cu potansiyelinin *çekirdek* anahtarlama fonksiyonundaki kuvvet fonksiyonunu göstermektedir (*Çekirdek* anahtarlama fonksiyonu bölgesi ( $r_1$  ve  $r_2$  ya da 1.32 – 1.75 Å arası) belirtilmiştir (bu örnekte  $a=4$ )). Bu örnekte kuvvet eğrisi, eğride bir ekstremum değil de bir kıvrılma meydana getiren bir ‘bel verme’ ortaya koyar. Bu bölgede anahtarlama fonksiyonunun fit edilmesi kesme bölgesinden daha kolaydır. Anahtarlama fonksiyonunun uygulandığı bölgedeki genişliği arttırarak ‘bel verme’ istenilen düzeye indirilebilir. Anahtarlama fonksiyonunu, potansiyelinin ( $V < 0$ ) perdelenmiş Coulomb potansiyelinin doğru olmadığı bilinen sıkı-bağ çekici kısmında uygulanmasından kaçınmak doğru bir yaklaşım olacaktır. Anahtarlama fonksiyonu

bölgesinin boyutlarını makul bir genişlikte tutarken eğimin bel vermesi ya da düzgün değişmesi düşüncesiyle ‘bel vermenin’ maksimumu ya da minimumu giderilmek/yok edilmek istenir.

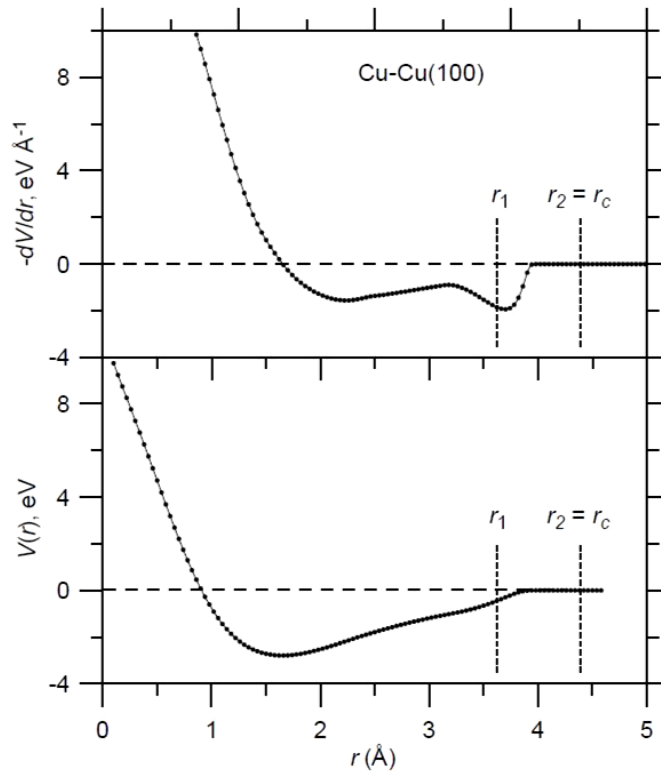
Şekil 3.4 ve 3.5 bir Cu(100) yüzeyine yaklaşan bir Cu atomu için potansiyel ve kuvvet fonksiyonlarını göstermektedir. Bu şekillerde potansiyel kuyuları diatomik durumlar için olandan daha sığdır çünkü yüzey atom bağları zaten oldukça düzenlidir. Kuvvet eğrileri iki kabuk (her biri ‘bel vermelerden’ birine katkı veren) ile eşzamanlı etkileşimlerden nedeniyle bir topak görünümüne sahiptirler.



**Şekil 3.4.** Bir Cu(100) yüzeyi ile yüzeyin üst yapısına yaklaşan bir Cu atomunun etkileşmesi için bileşik ZBL-TB potansiyelinin çekici kısmı (Karolewski 2005).

Günümüzde literatürde kullanılan yöntem interpolasyon fonksiyonlarını iki atomlu moleküller için potansiyel eğrilerini kullanarak belirlemektir. Şekil 3.4 ( $r$ , Cu(100))

yüzey tabakasından Cu atomuna olan dikey uzaklıktır.) ve Şekil 3.5'te ( $r$ , Cu(100) yüzey tabakasından Cu atomuna olan dikey uzaklıktır (örgü atomu yüzeyin yaklaşık 1.81 Å kadar altında bulunmaktadır)) gösterildiği gibi potansiyel katı halde bir yapıya uygulandığında sonuçta karşımıza çıkan kuvvet fonksiyonlarının şekilleri (a) kesme etkilerinden dolayı; (b) çok-cisim potansiyellerinin doğal çevresel bağımlılıklarından dolayı oldukça farklı olabilir. Bir kural olarak herhangi bir atomun bağ mertebesi ( $N$ ) büyüdükçe herhangi bir özel atomla etkileşmesi zayıflar. Bu durum potansiyelin çekici çok-cisim kısmının  $N^{1/2}$  ile orantılı biçimde artarken çekici çiftlenimli kısmının  $N$  ile orantılı biçimde (daha hızlı biçimde) artmasından kaynaklanır.



**Şekil 3.5.** Bir Cu(100) yüzeyine boş yapıyla yaklaşan bir Cu atomu arasındaki etkileşme için bileşik ZBL-TB potansiyelinin çekici kısmı (Karolewski 2005).

### 3.1.4. Potansiyel hesaplamaları

Bağlanma enerjisinin hesaplanması bir TB potansiyelinin faydalı bir gözden geçirmesidir. Bir örnek olarak Çizelge 3.2'de verilen parametrelerden Ag için öngörülen kohesif enerji aşağıda hesaplanmıştır.

Bir fcc metalin bir  $r_0$  uzaklığında 12, bir  $\sqrt{2}r_0$  uzaklığında 6 komşusu vardır. Potansiyel üçüncü kabuğun altında kesildiği içinden diğer etkileşimler göz önüne alınmayacaktır. Kohesif enerji örgüdeki bütün bulk atomlar için aynıdır.

Denklem (3.4) ve (3.5)'ten  $i$ . bulk atomun potansiyel enerjisinin itici kısmı,

$$\begin{aligned} E_i^R &= \frac{1}{2} \sum_{j \neq i} U_{ij}(r_{ij}) = A \sum_{j \neq i} \exp(-p(r_{ij}/r_0 - 1)) \\ &= A[12 + 6 \exp(-p(\sqrt{2} - 1))] \end{aligned} \quad (3.35)$$

biçimindedir. Denklem (3.34) ve (3.35)'ten  $i$ . atomun bant enerjisi,

$$\begin{aligned} E_i^B &= -\left( \sum_{j \neq i} \phi(r_{ij}) \right)^{1/2} = -\xi \left( \sum_{j \neq i} \exp(-2q[r_{ij}/r_0 - 1]) \right)^{1/2} \\ &= -\xi(12 + \exp(-2q[\sqrt{2} - 1]))^{1/2} \end{aligned} \quad (3.36)$$

şeklinde bulunur. Çizelge 3.2'deki değerler kullanıldığında  $E_i^R = 0,9785$ ,  $E_i^B = -3,9294$  ve  $E_c = -2,9509$  sonuçları elde edilir. Fit etmek için kullanılan  $E_c$  değeri 2.95 eV idi; aradaki 0.0009 eV'luk fark fit etme ve yuvarlama hatalarından kaynaklanır (Karolewski 2005).

Karşılaşılan her yeni potansiyelin özellikleri bu şekilde bir testle incelenmelidir. Yayınlanmış potansiyel parametreleri, sadece literatürdeki 4 ya da 5 önemli rakam alıntılanarak ve fit etme verisi deneysel belirsizlik (elastik sabitler, (boşluk doldurma enerjileri: %10; kohesif enerjiler %0.5) söz konusu olarak belirlenmiş parametrelerdir.

Çizelge 3.4 fcc metalleri için hesaplanan  $E_c$  değerleri ile deneysel değerleri kıyaslamaktadır. İki değerler kümesi de 1 meV ya da daha iyi bir aralık içinde uyuşmaktadır. Cu için hesaplanan -3.48956 eV'luk kohesif enerji potansiyel parametrelerinin yuvarlanmadan elde edilen 3.49009 eV değeri ile kıyaslanabilir. Cu atomu için denge örgü parametresi, parametrelerin yuvarlanmasının ardından  $10^{-5}$  Å'den daha az değişmiştir.

**Çizelge 3.4.** Bir fcc kristali için koordinasyon kabuğu yarıçapları (Karolewski 2005).

Kabuk (s)	Kabuk yarıçapı ( $R_s$ )	Atom sayısı
1	$a/\sqrt{2}$	12
2	$a$	6
3	$a\sqrt{1.5}$	24
4	$a\sqrt{2}$	12
5	$a\sqrt{2.5}$	24

**Çizelge 3.5.** fcc metalleri için deneysel kohesif enerji değerlerinin Çizelge 3.2'deki TB potansiyeli parametreleri kullanılarak hesaplanan değerlerle karşılaştırması (Karolewski 2005).

	$E_c(\text{deney.})$	$E_c(\text{hesap.})$		$E_c(\text{deney.})$	$E_c(\text{hesap.})$		$E_c(\text{deney.})$	$E_c(\text{hesap.})$
<b>Al</b>	-3.39	-3.39014	<b>Rh</b>	-5.75	-5.74871	<b>Au</b>	-3.81	-3.81042
<b>Ca</b>	-1.84	-1.84018	<b>Pd</b>	-3.89	-3.89113	<b>Pb</b>	-2.03	-2.03069
<b>Ni</b>	-4.44	-4.43959	<b>Ag</b>	-2.95	-2.95095	<b>Th</b>	-6.20	-6.19872
<b>Cu</b>	-3.49	-3.48956	<b>Ir</b>	-6.94	-6.93931			
<b>Sr</b>	-1.72	-1.72023	<b>Pt</b>	-5.84	-5.84084			

### 3.2. Isısal Titreşimler

Gerçek örgülerdeki atomlar ısısal titreşimlerin bir sonucu olarak ideal örgü konumlarından ayrılırlar. Bu yüzden simülasyonların titreşimsel atomik yer değiştirmeleri de içermesi istenebilir. Daha az yaygın olarak belli bir sıcaklıkta ısısal titreşimlerden doğan ilgili kinetik enerjinin hesaplanması gerekebilir.

Titreşimsel yer değiştirmeler ve ısısal hızlar *Kalypso* tarafından ayrı ayrı ele alınır. Bu etkenlerin bir simülasyonda yer alabilmesi için kullanıcının bölüm 2.1.2'de ayrıntılarıyla verilen RUN dosyasında gerekli seçimleri yapması gerekir.

Şekil 2.6 (b)'de gösterilen RUN dosyası arayüzünden girilen *örgü titreşimsel sıcaklığı* parametresi (sadece hedef atomlarına) uygulanacak ısısal hızları,

$$\left\langle \frac{1}{2} m v_x^2 \right\rangle = \frac{kT}{2} \quad (3.37)$$

bağıntısına göre (y ve z boyutları için de benzer bağıntılar ile) belirler. Isısal hızlar hedefin net momentumu her boyut için sıfır olacak şekilde uygulanır.

Örgü titreşimsel yer değiştirmelerinin uygulanması için kullanıcının her hedef atomu için uygun titreşimsel yer değiştirmelerin karelerinin ortalaması  $\langle \sigma^2 \rangle$  değerlerini girmesi gerekir. Bu değerler literatür değerlerinden doğrudan girilebileceği gibi Debye sıcaklık verisinden hesaplanarak da girilebilir.

Debye teorisine göre, tek atom cinsinden oluşan bir katıdaki atomların izotropik ısısal titreşim genliğinin karesinin ortalaması  $\langle r^2 \rangle$ ,

$$\langle r^2 \rangle = 9\hbar^2 T / (Mk\Theta_D^2) \cdot [\phi(\Theta_D/T) + \Theta_D/4T] \quad (3.39)$$

ifadesi ile verilir. Burada  $\Theta_D$  Debye sıcaklığı,  $k$  Boltzmann sabiti,  $T$  mutlak sıcaklık ve  $M$  de katıdaki atomların kütesidir.  $x = \Theta_D/T$  olmak üzere  $\phi(x)$  fonksiyonu,

$$\phi(x) = (1/x) \cdot \int_0^x \frac{y dy}{(e^y - 1)} \quad (3.40)$$

olarak verilir.

Denklem (3.40) bir izotropik osilatörün genliğinin karesinin ortalaması ile ilgilidir. Tek bir doğrultudaki ( $x$ ,  $y$  veya  $z$ ) titreşimler için denklem (3.39)'un sağ tarafı 3 ile bölünmelidir.

$$\langle x^2 \rangle = \langle y^2 \rangle = \langle z^2 \rangle = 3\hbar T / (Mk\Theta_D^2) \cdot [\phi(x)(\Theta_D/T) + \Theta_D/4T] \quad (3.41)$$

Bu kartezyen genlikler *Spider* tarafından hesaplanan ve *Kalypso* tarafından kullanılan niceliklerdir. Eğer fiziksel sabitleri yerine koyar ( $\hbar = 1.054572 \times 10^{-34}$  J s;  $k = 1.380650 \times 10^{-23}$  J K<sup>-1</sup>; 1 amu =  $1.660539 \times 10^{-27}$  kg.),  $M$  için atomik kütle birimini (akb) kullanır ve  $x = \Theta_D/T$  değişikliğini yaparsak denklem (3.41),

$$\langle x^2 \rangle = 145.53 / (M\Theta_D) \cdot [\phi(x)/x + 1/4] \text{Å}^2 \quad (3.42)$$

ifadesine dönüşür.

*Spider* denklem (3.42)'yi, kullanıcı tarafından girilen  $T$  ve  $\Theta_D$  değerlerinden ve aşağıda verilen  $\phi(x)$  yaklaşımından yola çıkarak bulk ve yüzey atomları için  $\langle x^2 \rangle$ 'yi hesaplamakta kullanır. Bu tek yönlü  $\langle x^2 \rangle$  değerleri *Kalypso* tarafından MDL dosyasından okunur.



Titreşimsel düzeltme amaçları için bir hedef atomu; eğer hedef dosyası  $z$ -koordinatı,  $z[n]$ , onu RUN dosyası arayüzünde kullanıcı tarafından girilen yüzey/bulk sınırı konumunun (*location of the surface/bulk boundary*) üzerinde konumlandırılırsa bir ‘yüzey atomu’ olarak değerlendirilir.

Denklem (3.41) ve (3.42)’de görülen  $\phi(x)$  fonksiyonu aşağıdaki yaklaşım ile hesaplanabilir:

$$\phi(x) = (1/x) \cdot \int_0^x \frac{y dy}{(e^y - 1)} = 1 - \frac{x}{4} + \frac{x^2}{36} - \frac{x^4}{3600} + \dots \quad (3.43)$$

$x$  için benzer bir yaklaşım *Kalypso* tarafından; 0’dan 3.0’a, başka bir deyişle  $T = 0.33\Theta_D$ ’den sonsuza aralığında kullanılır. Burada  $x = \Theta_D/T$  olduğu hatırlanmalıdır.  $T = 0.33\Theta_D$  için  $\phi(x) = 0.48$ ,  $T = \infty$  için  $\phi(x) = 1.0$ ’dir.  $T \rightarrow 0$  iken  $\phi(x) \rightarrow 0$  olur.  $x > 3.0$  değerleri için aşağıdaki (düşük sıcaklık) yaklaşımı kullanılır.

$$\phi(x) = \left[ \pi^2/6 - (x+1) \cdot \exp(-x) - (x/2 + 1/4) \cdot \exp(-2x) - \dots \right] / x \quad (3.44)$$

$x \gg 1$  için  $\phi(x)/x$  oldukça küçüktür ve örgü titreşimleri sıfır noktası seviyelerine yaklaşır.

### 3.3. Elektron Durdurma Etkisi

Enerji yüklü parçacıklar valans ya da çekirdek elektronlarının uyarılması veya örgü titreşimleri yüzünden enerji kaybedebilir. Bu tür enerji kayıplarını tanımlamak için elektron durdurma terimi kullanılır. Bu etkilerin simülasyonda yer alması isteniyorsa INL dosyası düzenlenmelidir. Enerji kayıplarının simülasyonlarda yer alabilmesi için farklı modeller bulunmaktadır. Bu modellerin hangilerinin, ne biçimde simülasyona etkiyeceği yine INL dosyası ile belirlenir.

*Spider* programı ile bir INL dosyasının nasıl düzenlendiği bölüm 2.1.5’te açıklanmıştır. Enerji kaybı modelleri ile ilgili parametreler ve INL dosyaları hakkındaki bilgiler yine

bölüm 2.1.5'te verilmiştir. *Kalypso* simülasyon paketinin enerji kayıpları için kullandığı teorik modeller aşağıda açıklanmaktadır.

### 3.3.1. Lindhard-Schiott-Scharff (LSS) modeli

LSS modeli, ( $Z_1$  atom numaralı) bir parçacığın ( $Z_2$  atom numaralı) bir ortamda  $dx$  miktarı bir hareketinden doğan  $dE$  elektronik enerji kaybının parçacığın hızıyla ( $v$ ) orantılı olduğunu ileri sürer:

$$-\frac{dE}{dx} = 8\pi N \left( \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right) \cdot a_B \frac{Z_1^{7/6} Z_2}{(Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{3/2}} v/v_B \quad (3.45)$$

Burada  $N$  ortamın atomik yoğunluğu (atom/m<sup>3</sup>),  $a_B$  Bohr yarıçapı ve  $v_B (=c/137)$  Bohr hızıdır. Dolayısıyla yukarıdaki eşitlik,  $K(LSS)$  (eV fs Å<sup>-2</sup>)  $Z_1$  ve  $Z_2$ 'ye bağlı bir sabit olmak üzere şu biçimde yazılabilir:

$$-\frac{dE}{dx} = K(LSS) \cdot v \quad (3.46)$$

Böylece LSS modeli hedefi akışkan bir ortam olarak görür ve bu ortamın içinden kaynaklanan sürekli, sürtünme benzeri bir elektronik enerji kaybı süreci/prosesi olarak tanımlar. LSS enerji kaybı algoritmasında çizgisel ve açıl momentum korunmaz.

LSS modeline göre bir hesaplamayı kabaca örneklemek için 5 keV enerjili (hızı  $\sim 1.6$  Å fs<sup>-1</sup>), yaklaşık 10 eV fs Å<sup>-2</sup>'lik bir  $K(LSS)$  değeri ile karakterize edilen bir hedef içinde bir  $\Delta l = 1$  Å mesafesinde hareket eden bir Ar atomunu ele alınırsa öngörülen ortalama enerji kaybı  $\Delta E$  yaklaşık olarak  $K(LSS) \times \Delta l \times v = 16$  eV civarındadır.

*Spider* yukarıda verilen  $K(LSS)$  tanımının keyfi bir faktörle orantılanmasına izin verir (örneğin eğer inelastik kayıpları LSS ve OR modelleri arasında eşit olarak paylaşmak istendiğinde bir 0.5 faktörü uygun olacaktır).  $dE$  bir atomun  $dx$  yer değiştirmesinin hesaplandığı her bir adımda hesaplanır.

Karışık bir hedef madde için (örneğin bir Cu-Ni alaşımı)  $Z_2$  değerinin doğru seçimi, kullanıcının, hedefin 'etkin' atom numarası hakkındaki fiziksel sezgisinin rehberlik edeceği dikkatli bir düşünmeyi gerektirir. Örneğin bir  $Ni_{0.95}Cu_{0.05}$  alaşımı için  $Z_2=28$  seçilmelidir.

### 3.3.2. Oen-Robinson (OR) modeli

OR modeli, en yakın yaklaşımın (apsis mesafesi)  $R_0$  olduğu, tek bir yalıtılmış ikili atomik çarpışmadan kaynaklanan  $\Delta E$  enerji kaybını,

$$-\Delta E = 8\pi \left( \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right) \cdot a_0 \frac{Z_1^{7/6} Z_2}{(Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{3/2}} v/v_B \frac{(c/a)^2}{2\pi} e^{-(c/a)R_0} \quad (3.47)$$

olarak öngörür. Bu eşitlikte  $c$  bir sabit terim (normalde  $c=0.3$ 'tür ancak *Spider* ile keyfi olarak belirlenebilir) ve  $a$  düzeltilmemiş ML perdeleme uzaklığıdır.  $Z_1$  projectile türlerinin atom numarası,  $Z_2$  hedef atomu türlerinin atom numarasıdır. (Kullanıcının isteğine bağlı olarak çarpışmada yer alan iki atomun rolleri *Spider* ile değiştirilebilir) *Kalypso*'da da uygulandığı gibi denklem (3.47)'deki  $v$  terimi çarpışan parçacıkların sonsuz ayrılıktaki bağıl hızını ( $|\vec{v}_1 - \vec{v}_2|$ ) temsil eder ve şu şekilde hesaplanır:

$$v = \sqrt{\frac{1}{2} \mu \cdot v(t)^2 + V(r(t))} \quad (3.48)$$

Burada  $v(t)$  ve  $V(r(t))$  sırasıyla bir  $t$  anında bağıl hızın büyüklüğünü ve aynı  $t$  anındaki potansiyel enerjiyi temsil eder (*Kalypso* tarafından kullanılan  $t$  apsis noktasına karşılık gelir);  $\mu$  sistemin indirgenmiş kütesidir.

OR modeli, her atom için her zaman adımında (küçük) enerji kayıplarını içeren LSS modelinin tersine, yakın temas başına bir (büyük) enerji kaybı olayı meydana geleceğini varsayar. Denklem (3.47),

$$-\Delta E_{OR} = 8\pi \left( \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right) a_B \frac{Z_1^{7/6} Z_2}{(Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{3/2}} \cdot F_{OR} \cdot v/v_B \quad (3.49)$$

biçiminde yazıldığında (3.45) ve (3.47) eşitlikleri arasındaki bağlantı ortaya çıkar:

$$-\Delta E_{OR} = K(OR) \cdot F_{OR} \cdot v \quad (3.50)$$

burada  $F_{OR}$  *Spider* tarafından kullanılan ‘Oen-Robinson’ faktörüdür.  $K(OR)$  belli bir çift için bir sabittir. (3.47) ve (3.49) eşitliklerinde bir atomik yoğunluk ( $N$ ) teriminin bulunmadığına dikkat edilmelidir.  $K(OR)$ ,  $K(LSS)$ ’den farklı fiziksel boyutlara sahiptir. (3.47), (3.49) ve (3.50) eşitliklerinde tanımlanan enerji kaybının büyüklüğünü düzenlemek için bir skala faktörü isteğe bağlı olarak *Spider*’de girilebilir.

LSS modelinin tersine OR modeli her yakın temas ile bir tek kayıp olayını bağdaştırdığından kesikli bir enerji kaybı karakterine sahiptir. OR modelini uygulamanın bir sorunu ikili temaslar ile benzeşemeyen çarpışma olaylarını kapsayabilecek bir teknik bulmaktır. *Kalypso* bu sorunu, kullanıcının (sezgisel olarak)  $R_0$  (en yakın yaklaşım) üzerinde bir  $R_{MAX}$  üst sınırı koymasını isteyerek alt eder. Böylece OR enerji kaybı, çarpışan atomlar bir  $R_{MAX}$  mesafesi içinde yaklaşmadıkça hesaplanmaz. Genellikle  $R_{MAX}$ , 1-2 Å mertebesinde olacaktır. ( $R_{MAX}$ , örgünün en yakın komşu uzaklığının yarısı kadar seçilebilir) OR enerji kaybı algoritması çizgisel momentumu korur ancak açısal momentumu korumaz.

### 3.3.3. Shapiro-Tombrello (ST) modeli

ST modeli çarpışma ile oluşan merkezi elektron seviye geçiş etkilerini bir klasik dinamik saçılma modeline dâhil etmeye dayanır. Modelin temel sakıncası parametrelerin (aşağıda açıklanan  $p$ ,  $R_C$ ,  $\Delta E$ ) doğru seçimi üzerindeki belirsizliktir.

ST modelinin altında yatan fikir şöyle özetlenebilir. Eğer çarpışan bir atom çifti bir kritik  $R_C$  mesafesinden daha yakın bir şekilde yaklaşırsa bir inelastik (iç kabuk elektron seviye geçişi) geçiş meydana gelebilir. Bu enerji kaybı iç kabuktan  $N_{MAX}$  elektrona kadarını kapsayabilir. Yükseltgenen her elektron için bir miktar  $\Delta E$  inelastik enerjisi kaybolur (böylece mümkün olan en yüksek enerji kaybı  $\Delta E * N_{MAX}$  kadardır). Yükseltgenme için düşünülen elektronların sayısı ( $N$ ) çarpışan çift için  $R_C$  mesafesinin geçildiği anda mevcut olan bağıl radyal kinetik enerjiye ( $K_R = (1/2)\mu v_R^2$ )

bağlıdır; başka bir deyişle  $N$  sayısı  $K_R \geq N\Delta E$  koşulu ile uyum içinde olmalıdır. Sonuç olarak  $N$  elektronun her biri için bir  $p$  olasılık faktörü, elektronun gerçekte yükseltgenip yükseltgenmediğini belirlemek için gelişigüzel bir sayı ile kıyaslanır (örneğin  $p = 0.5$  ise yalnızca  $\sim N/2$  elektron yükseltgenecektir).

Özel bir çarpışma düzenlemesi için hesaplanan toplam enerji kaybı ( $\Delta E_T$ ), bu şekilde çok sayıda çarpışma düzenlemesi için ortalama enerji kaybı

$$\langle \Delta E_T \rangle = Np\Delta E \quad (3.51)$$

iken;

$$\Delta E_T \leq N\Delta E \quad (3.52)$$

$$\Delta E_T = k\Delta E \quad (k=1, 2, \dots, N \text{ olmak üzere}) \quad (3.53)$$

koşullarını sağlar (eşitlik  $p = 1$  olduğu  $\Delta E_T = N\Delta E$  durumunda uygulanır).

Hem ST hem de OR modelleri için inelastik enerji kaybı düzeltmeleri çarpışmanın apsisinde uygulanır. Apsiste radyal kinetik enerji sıfıra eşittir. Enerji kaybı düzeltmesi, etkileşen atomların potansiyel enerjisi bir  $\Delta V$  miktarı değiştirecek ve bu  $\Delta V$  de  $\Delta E_T$  'ye eşit olacak şekilde indirgenerek uygulanır, bu durum etkileşen atomların bir  $\Delta r$  mesafesindeki merkezlerini birleştiren bir çizgi boyunca anlık olarak dönüşümüne yol açar.  $\Delta r$  dönüşüm mesafesi ST modeli tarafından  $\Delta r = \Delta V/F(r)$  bağıntısı yoluyla hesaplanır, burada  $F(r)$  apsis noktasındaki kuvvettir. Bu hesaplama, eğer potansiyel ayrılıkla ( $r$ ) lineer olarak azalıyorsa kesin olacaktır.

*Kalypso* da benzer bir yöntem kullanır ancak yöntemi hem apsis hem de ilk hesaplanan yer değiştirmede iki kez uygular. Ek olarak, formülün ilk uygulaması  $r$  arttıkça kuvvetin hızlı düşüşünü telafi etmek için sezgisel olarak 1.2'lik bir düzeltme faktörü kullanır. *Kalypso* tarafından kullanılan bu prosedür tipik olarak  $\Delta r$  doğru yer değiştirmesinin  $\sim 10^{-4}$  Å veya daha düşük olarak hesaplamasına yol açar, fakat bu büyüklükteki bir itici potansiyelin yapısı enerji hesaplamalarında  $\sim 1$  eV bir hataya yola açar. Bu yüzden simülasyonun parametrelerinin başlangıçta ST ve OR kayıp etkileri etkinleştirilmeden test edilmesi önemlidir. Bu test integrasyon hatasının doğru bir

tahminini verir. Daha sonra gelen enerji korunumundaki hatalar inelastik kayıp hesap hatalarına bağlanabilir. ST enerji kaybı algoritması çizgisel momentumu korur ancak açısal momentumu korumaz.

### 3.3.4. Sıcaklık kontrolü

*Kalypso* hedefin belli bir sıcaklığa ( $T$ ) kadar soğutulmasına ya da ısıtılmasına, veya belli bir ( $T$ ) sıcaklığında tutulmasına imkan tanır. Bu özellik bazı simülasyonlar, özellikle düşük enerji bombardımanı içerenler için oldukça yararlı olabilir. Kullanıcının istenen  $T_0$  sıcaklığını, soğutma ya da ısıtma periyodunu (bir zaman sabiti) ( $\tau$ ) ve sıcaklık düzeltmelerinin uygulanacağı periyodun zaman aralığı (başlangıç ve bitiş) girmesi gerekir. Bu veriler şekil 2.11 (b)'de gösterilen INL dosyası arayüzünden girilecektir. Sıcaklık düzeltmesinden etkilenecek her parçacığın hareket denklemi şu şekilde yazılır:

$$m \frac{d^2 \vec{r}}{dt^2} = F(\vec{r}) - \frac{m}{2\tau} (1 - T_0/T) \frac{d\vec{r}}{dt} \quad (3.54)$$

Burada  $m$  parçacığın kütlesi ve  $\vec{F}(r)$  potansiyelden kaynaklanan kuvvettir.  $T > T_0$  için, kinetik enerji sistemden silinir. Ani sıcaklık, ortalama parçacık kinetik enerjilerinden  $\langle KE \rangle = 3/2kT$  bağıntısıyla hesaplanır.

Eğer ani örgü sıcaklığı mutlak sıfır ( $T = 0^\circ$ ) ise, denklem (3.54) uygulanamaz ve bu zaman adımı için düzeltme atlanır. (bu durum örneğin durgun bir örgü üzerine kurulu bir simülasyonun ilk tekrarlama sırasında ortaya çıkabilir.) bu yüzden kayıtlarda örgü sıcaklığı  $0^\circ K$  olarak görülmez.

Sıcaklık kontrolü algoritması enerjiyi ya da momentumu korumaz. Bu algoritma, püskürtme dolayısıyla sistemden büyük miktarda enerji çıkışı varsa ya da sert enerjik çarpışmalar meydana geliyorsa iyi sonuçlar vermez, çünkü bu durumlarda kinetik enerji ara ara absorbe edilir ve salınır. Bu gibi durumlarda sıcaklık artması ya da titreşimler beklenebilir. Yine de denge konumuna yakın yalıtılmış bir sistem için sıcaklık dalgalanması  $1^\circ K$  mertebesindedir.

### 3.3.5. Görüntü potansiyel etkileri

*Kalypso*'da görüntü potansiyeli  $V(z)$  için uygulanan model

$$V(z) = \begin{cases} \frac{-e^2}{4\pi\epsilon_0 \sqrt{16(z-z_0)^2 + (e^2/4\pi\epsilon_0 V_{\min}^2)}}, & z > z_0 \\ -V_{\min}, & z \leq z_0 \end{cases} \quad (3.55)$$

şeklinde yazılabilir.  $z_0$  ve  $V_{\min}$  parametreleri kullanıcı tarafından girilir. Görüntü potansiyeli etkileri sadece `ofUseImagePotential` etiketine sahip olan parçacıklar için uygulanır (tercih etiketleri, bölüm 2.1.1'de açıklanmıştır).

Bir görüntü potansiyeli kullanmak için en önemli sebep *projectile* hareketini değiştirmektir. Bu durumda PRJ dosyası açılıp aşağıda gösterildiği gibi etiket (*flag*) alanına 1'i eklenmelidir:

```
0.0 0.0 0.0 2 4.0026 0 98195.04398 He  
[Spider tarafından oluşturulan 200 eV He Projectile atomu]
```

```
0.0 0.0 0.0 2 4.0026 1 98195.04398 He  
[görüntü potansiyeli uygulanacak 200 eV He Projectile atomu]
```

### 3.3.6. Örgü yapı titreşimleri

Bu modelde bir hedef atomu örgüsüne kuvvet sabiti kullanıcı tarafından girilen bir esneklikteki bir yay ile bağlıdır. Yani eğer atom bir yer değiştirme yaparsa örgü yapısına geri dönmek isteyecektir. Bu etkinin simülasyonda yer alması isteniyorsa parçacığın etiketi `ofSprungAtom` olarak ayarlanmalıdır. (tercih etiketleri, bölüm 2.1.1'de açıklanmıştır) Böyle bir 'esneklik' kullanılmasının sebebi, hedef örgünün sınırlarındaki kararlılığın arttırılmasıdır. Örneğin yeniden yapılanmanın önlenmesi için kullanılabilir.

Atomların esnekliğini, aşağıdaki koşulların herhangi bir kartezyen doğrultuda ( $x$ ,  $y$  veya  $z$ -ekseni) sağlanması halinde etkisizleştiren bir seçenek sunulmuştur: örgü konumu atomun geçerli konumu ve TRG dosyasındaki yeri arasında konumlandırılır ve atom

belirlenen eşik değeri aşan bir süratle örgü konumu boyunca geriye doğru hareket etmektedir. Örneğin örgü konumu  $z = 20 \text{ \AA}$ 'de konumlandırıldığı varsayıldığında atom  $z = 21 \text{ \AA}$ 'de konumlandırılır. Eğer  $v_z$  eşik değerin üzerinde bir büyüklükle negatifse esneklik yok sayılacaktır (ancak tersi durumda yok sayılmayacaktır). Bu hızlı bir atomun esnekliği altındaki bir örgü içine çarpmasını önler. Bir esneklik yok sayıldığında enerji korunmaz.

### 3.4. Temel algoritma

Klasik hareket denklemleri *Kalypso* tarafından sonlu fark 'hız Verlet' integrasyon algoritması kullanılarak hesaplanır:

$$\vec{r}_{n+1} = \vec{r}_n + \vec{v}_n \Delta t + \frac{1}{2} \vec{F}_n \Delta t^2 / m \quad (3.56)$$

$$\vec{v}_{n+1} = \vec{v}_n + \frac{1}{2} [\vec{F}_{n+1} + \vec{F}_n] \Delta t / m \quad (3.57)$$

Bu eşitliklerde yer alan  $\vec{r}_n$ ,  $\vec{v}_n$ ,  $\vec{F}_n$  sembolleri sırasıyla: n. zaman adımındaki konum, hız, toplam kuvvet vektörleri ve  $\Delta t$  geçerli zaman adımının büyüklüğüdür (Ercollesi 1997). Bir simülasyon projesinin integrasyonunun doğruluğu kullanıcının bölüm 2.1.2'de anlatılan RUN dosyasında girdiği zaman adımına bağlıdır.

Bir integrasyon algoritmasının doğruluğunun en iyi teminatı enerji korunumunun doğruluğudur. Potansiyel enerji (PE) ve kinetik enerjinin (KE) toplamı olan sistemin toplam enerjisi, herhangi bir anda parçacıkların geçerli konumlarından hesaplanabilir. Bu değer  $\Delta E$  enerji hatasını veren simülasyonun başlangıcında hesaplanan ve  $\Delta E$  enerji hatasını veren enerji ile kıyaslanabilir. *Kalypso* enerji korunumunu (yüzde olarak, %) belirtmek için  $\Delta E / (KE + |PE|)$  bağıntısını kullanır. İntegrasyon hatalarından ayrı olarak küçük enerji uyuşmazlıkları ortaya çıkabilir çünkü *Kalypso* inelastik enerji kayıplarını yeterli duyarlılıkla izlemekte başarısız olabilir. (Simülasyonu bunlardan arındırmak için bütün inelastik etkiler etkisizken çalıştırılmalıdır.)

(3.56) ve (3.57) eşitliklerinde görülen kuvvetler doğrudan analitik potansiyel fonksiyonlarından hesaplanması gerekmez. *Kalypso*'da çekici potansiyel içeren



kuvvetler bir düzeltme çizelgesinden yararlanılarak hesaplanır. Sistemdeki parçacıkların büyük kısmı herhangi bir anda uzun menzilli kuvvetlerle etkileşir, yani bir düzeltme çizelgesinin kullanımı kuvvet hesaplamalarını önemli ölçüde hızlandırır. Bununla birlikte sistem enerjisi analitik olarak hesaplanır.

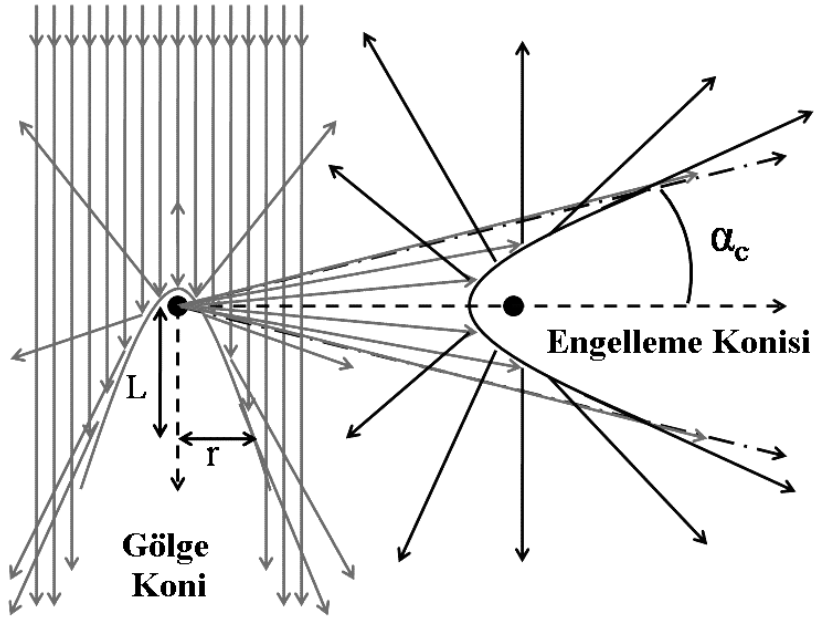
#### 4. UYGULAMALAR

Bu bölümde, daha önceki bölümlerde işleyiş biçimi ve teorik temelleri ayrıntıları ile anlatılan *Kalypso* simülasyon paketi ile literatürde bulunan bazı deneysel çalışmalar modellenerek kristal yüzeylerde meydana gelen atom – atom çarpışmaları incelenmiştir. Elde edilen sonuçlar deneysel verilerle kıyaslanmıştır.

İlk uygulamada *Kalypso*'nun sağladığı potansiyel modellerinin incelenmesi amacıyla aynı çalışma farklı potansiyel modelleri için tekrarlanmıştır. Daha sonraki çalışmada yüzeydeki durulma (*relaxation*) etkisinin görülmesi için aynı deney hem durulma etkisinin dâhil edildiği hem de bu etkinin yok sayıldığı projelerle tekrarlanmıştır. Elde edilen sonuçlar aynı yapı üzerine gerçekleştirilmiş bir deneyin sonuçları ile kıyaslanmıştır.

Simüle edilen deneysel çalışmalar çarpışma iyon saçılma spektroskopisi (ICISS; *Impact-Collision Ion-Scattering Spectroscopy*) metodu ile gerçekleştirilen iyon saçılma spektroskopisi (ISS) ya da düşük enerjili iyon spektroskopisi (LEIS; low-energy ion spectroscopy) deneyleridir. ISS deneyleri, maddelerin yüzeylerinin kimyasal ve yapısal özelliklerini tanımlamak için kullanılan bir tekniktir. Bunun için yüzeye doğru bir iyon demeti yöneltilir ve yüzey iyonları ile etkileşen iyonların konumları, hızları ve enerjileri gözlemlenir. Elde edilen veriler ile incelenen maddenin atomlarının yüzey örgüsündeki görelî konumları ve bu atomların element yapısı gibi özellikleri hakkında bilgi edinilebilir. Bu tekniğin düşük enerjili iyon spektroskopisi olarak da adlandırılmasının sebebi yüzeye gönderilen iyonların sahip oldukları enerjilerin 0.1 eV – 10 keV mertebesindeki değerlerde olmasıdır.

ICISS metodu gölgeleme ve engelleme etkilerinin yardımıyla yüzeyin ilk tabakalarındaki atomlar arası boşluklar hakkında duyarlı belirlemeler yapılmasını sağlar. Gölgeleme ve engelleme kavramları Şekil 4.1'de yer alan şematik gösterimdeki gibi betimlenebilir.



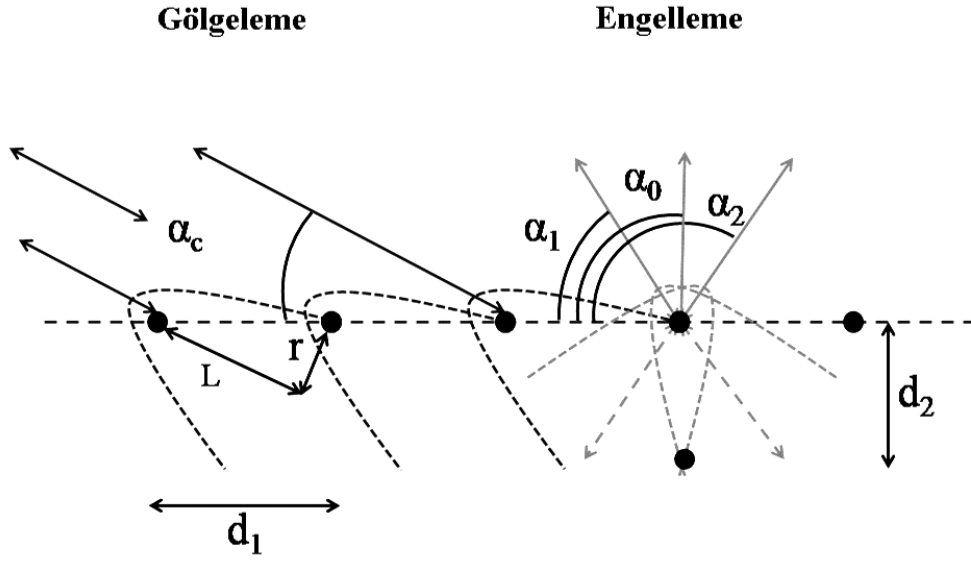
**Şekil 4.1.** ICISS metodunda önemli yeri olan gölgeleme ve engelleme etkilerinin şematik gösterimi.

Şekil 4.1’de gösterildiği gibi, bir iyon akışı bir saçılma merkezine paralel olarak yaklaştığında her bir iyon itici Coulomb kuvveti gereğince saçılır. Bu etkiye gölgeleme etkisi denir. Basit bir Coulomb itme modelinde saçılma merkezinin arkasında gölgeleme etkisi sonucu oluşan bu ‘yasak’ boşluk, saçılma merkezinden bir  $L$  uzaklığında,

$$r = 2 \sqrt{\frac{Z_1 Z_2 e^2 L}{E_0}} \quad (4.1)$$

yarıçaplı bir paraboloid şeklini alır ve bu şekle gölge koni denir. İyon akışı yoğunluğu bu paraboloidin sınırları yakınında artar.

Engelleme etkisi, saçılan iyonlarla komşu saçılma merkezi arasındaki ilişkileri kapsar ve gölgeleme etkisi ile yakından ilişkilidir. Dolayısıyla bu etki en azından iki saçılma merkezinin varlığını gerektirir. Şekil 4.1’de gösterildiği gibi ilk çekirdekten saçılan iyonlar sapma yollarından giderek ikinci çekirdek ile etkileşirler. Bu etkileşme  $\alpha_c$  kritik açısının altındaki açılarda ilk çekirdekten saçılan iyonların çıkışının engellendiği, engelleme konisi denilen ikinci bir gölge koni oluşturur.



**Şekil 4.2.** Yüzey ve alt-yüzey ilişkisi bir şiddet-gelme açısı  $\alpha$  grafiği çizilerek görülebilir.

ICISS metodunda yüksek bir geliş açısı ile ölçümlere başlanarak değişen geliş açılarında taramalar yapılır ve şiddetin piki ve minimumu gözlenir. Saçılan iyonlar her bir atomun arkasında düşük geliş açılarında geri saçılmayı önleyen gölge konileri oluşturur. Bu koniler her biri bitişikteki atomun üzerinden geçecek şekilde sıralandıklarında saçılma şiddetinde bir pik gözlenir. Başka bir deyişle geliş açısı bir atomun gölge konisinin sınırları komşu atomun merkezinden geçecek şekilde bir büyüklüğe eriştiğinde geri saçılma şiddetinde, gelen iyonların gölge koni sınırları etrafında odaklanmasından doğan ani bir artış gözlenir. Atomlar arası boşlukları bilinen bir numune üzerinde bu tür bir analiz yapıldığında gölge koninin ebatlarının belirlenmesine imkân verir. Şekil 4.2'deki gösterimler dikkate alındığında gölge koninin yarıçapı,

$$r = d \sin \alpha_c \quad (4.2)$$

ve yüksekliği,

$$L = d \cos \alpha_c \quad (4.3)$$

olarak verilir. Gölge koninin ebatları biliniyorsa yüzey atomları arasındaki atomlar arası aralıklar, yüzeyle alt-yüzey atomları arasındaki aralıklar ve doğrultular bir saçılma şiddeti-geliş açısı grafiğinde ortaya çıkan pik ve 'vadi' yapısından hesaplanabilir.

#### 4.1. Paladyum (111) Yüzeyinden Neon İyonları Saçılması

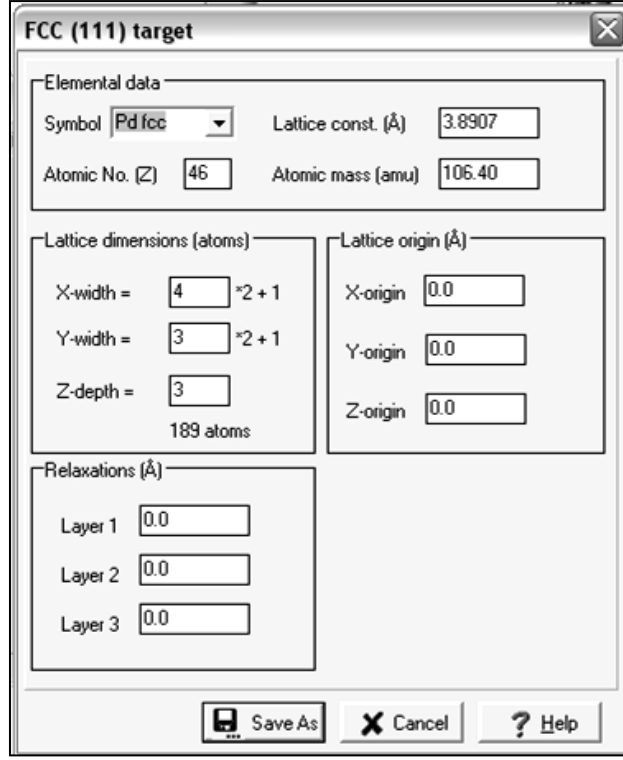
Bu uygulamada yüzey merkezli kübik örgüye sahip olan paladyum (111)'in yüzey yapısının incelenmesi amacıyla yapılan bir deneysel çalışma simüle edilmiştir. Simülasyonu gerçekleştirilen deney, Innsbrück Üniversitesi Fiziksel Kimya Enstitüsü'nde; Werner Stadlmayr, Simon Penner, Bernhard Klötzer ve Norbert Memmel tarafından gerçekleştirilmiştir ve çalışma Surface Science dergisinde “Growth, thermal stability and structure of ultrathin Zn-layers on Pd(111)” başlıklı bir makalede, 2009 yılında yayınlanmıştır (Stadlmayer et. al. 2009). Çalışmada Pd(111) yüzeyi, üzerine 5 keV enerjili Ne<sup>+</sup> iyonları gönderilerek ICISS metodu ile incelenmiştir.

Deneyde Ne<sup>+</sup> iyonları, yüzey normali etrafında dönmekte olan paladyum (111) yüzeyi üzerine  $xy$ -düzlemi ile 9 derecelik bir  $\varphi$  yükseklik açısı yapacak biçimde gönderilmiştir. Bu projectile atomlarının saçılmalarının çarpışma sonrası azimut açısına bağlılığı azimutal ICISS taraması yapılarak incelenmiştir. Bu deneyin simülasyonlarının gerçekleştirilmesi ve sonuçlarının incelenmesi ilerleyen bölümlerde verilmektedir.

##### 4.1.1. Simülasyon projesinin hazırlanması

Fcc yapıya sahip olan Pd(111) hedef yüzeyini oluşturmak için ilk olarak *Spider* programında *Target/New/Face-Centered Cubic/(111) surface* yolu izlenerek *Spider* programının hedef yüzey oluşturma penceresine ulaşılmalıdır. Bu komutların izlenmesi ile açılacak olan pencere Şekil 4.3'te gösterilmiştir.

Açılan bu pencerede ilk olarak hedef örgüyü oluşturan atomun sembolü, örgü sabiti, atom numarası ve atomik kütlesi *Elemental Data* başlığı altına girilir. Daha sonra oluşturulacak olan örgünün boyutları, yani  $x$ ,  $y$  ve  $z$ -eksenleri üzerinde bulunacak olan atom sayıları *Lattice Dimensions* başlığı altında girilir. Burada, girilecek olan  $x$  ve  $y$  değerlerinin her iki eksenin hem pozitif hem de negatif bölgelerinde simetrik olarak yer alacak olmasına dikkat edilmelidir. Yani *X-Width* için 4 değeri girildiğinde  $x$ -ekseni üzerinde yer alacak toplam atom sayısı ( $-x$  ve  $+x$  yönlerinde dörder atom ve  $x = 0$  noktasında bir atom olmak üzere) 9 olacaktır.

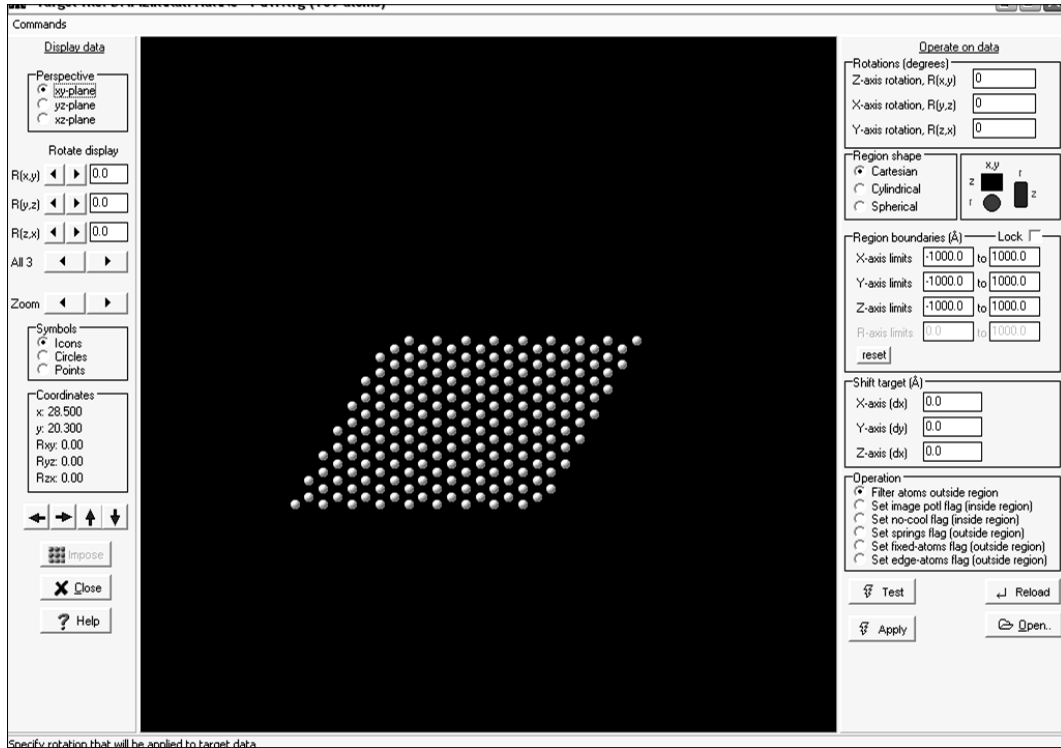


**Şekil 4.3.** Hedef yüzeyin oluşturulduğu pencere ve Pd(111) yüzeyini oluşturmak için girilen veriler.

Deneyde hedef örgüdeki atomların kendi aralarındaki etkileşimler dikkate alınmayacak, sadece gönderilen projectile atomları ve hedef yüzey atomları arasındaki etkileşimler hesaba katılacaktır. Ayrıca periyodik sınır koşulları uygulanarak sonsuz bir yüzey etkisi oluşturulacaktır. Bir iyon saçılma spektroskopisi deneyi için kullanılacak hedef yüzeydeki atom sayısı  $10^1$  mertebesinde olmalıdır (Karolewski 2005). Bu sebeplerle kullanılacak olan Pd(111) hedefinin boyutları belirlenirken *X-width* için 4, *Y-width* için 3 ve *Z-width* için de 3 değerleri kullanılmıştır. Yani *x*-ekseni boyunca 9, *y*-ekseni boyunca 7 ve *z*-ekseninde 3 atom yer alacaktır.

Örgünün orijini olarak (0,0,0) noktası alındığından *Lattice Origin* başlığı altında varsayılan olarak gelen değerler üzerinde bir değişiklik yapılmamıştır. Benzer şekilde örgü atomları üzerinde durulma etkileri kullanılmadığından *Relaxations* başlığı altındaki değerler de varsayılan değerler olan sıfır olarak bırakılmıştır.

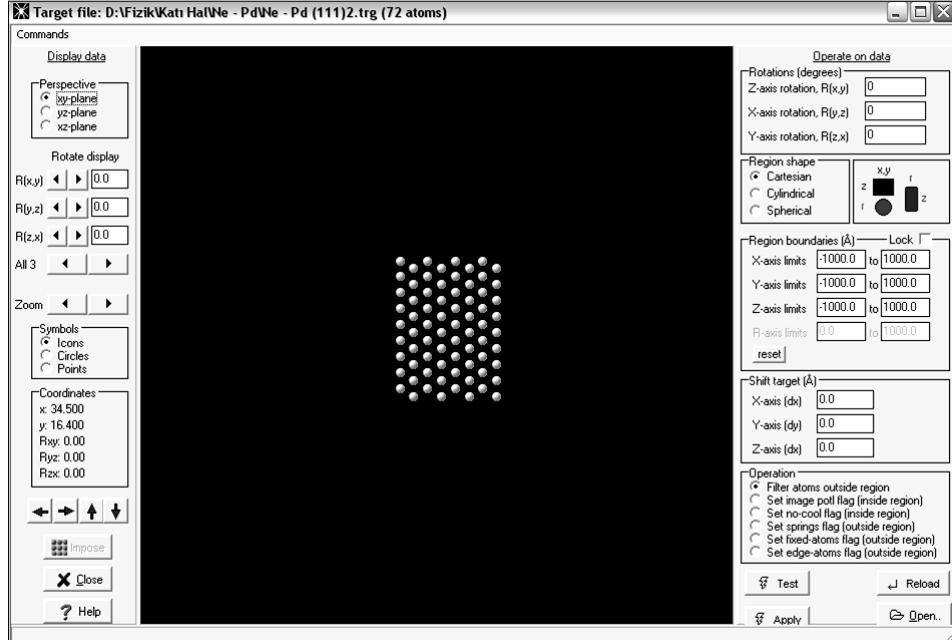
Gerekli veriler yukarıda anlatıldığı biçimde girildikten sonra hedef yüzeyin özelliklerinin kaydedileceği TRG uzantılı dosya *Save As* butonu tıklanıp örneğin *Ne – Pd (111).trg* adıyla kaydedilir. Oluşturulan bu dosya *Spider* programında *Target/Visualizer* yolu izlenilerek açılan pencerede seçilerek görüntülenebilir. Yukarıdaki işlemler ile oluşturulan TRG dosyasının temsil ettiği hedef yüzey Şekil 4.4'te gösterilmiştir. Burada yüzeyin *xy*-düzlemine bakıldığı ve *z*-ekseni boyunca yer alan üç tabakanın üst üste görüldüğüne dikkat edilmelidir.



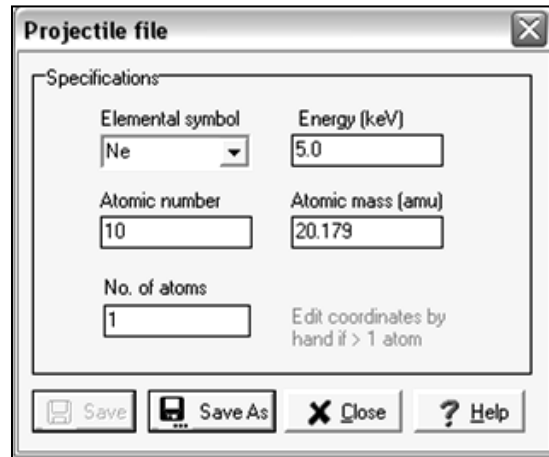
Şekil 4.4. Pd (111) yüzeyi temsil eden *Ne – Pd(111).trg* dosyasının görünüşü.

*Ne – Pd(111).trg* dosyası bu haliyle 189 atom içermektedir. Ancak simülasyonda *x*- ve *y*-eksenlerinde periyodik sınır koşulları uygulanacağından bu yüzeyin *x*- ve *y*-eksenlerinden eşit uzaklıkta bulunan atomlardan bir taraftakilerin silinmesi gerekmektedir. Çünkü periyodik koşullarla oluşturulacak sonsuz örgü üzerinde bir konumda birden çok atomun bulunmaması gerekmektedir. Bunun için görüntüleme penceresinde örgünün Simülasyonda kullanılacak olan bölge bilgisayarın faresi yardımıyla seçilip *Operations* başlığı altındaki *Filter atoms outside region* seçeneği ile bu bölgenin dışında kalan atomlar devre dışı bırakılmıştır. Bu şekilde oluşan yeni dosya

72 atomdan oluşmaktadır ve bu dosyanın görünümü Şekil 4.5’te yer almaktadır. Burada z-eksenindeki üç tabakanın üst üste görüldüğüne dikkat edilmelidir.



Şekil 4.5. Simülasyonda kullanılacak olan Pd(111) yüzeyinin son şekli.



Şekil 4.6. Projectile atomunu temsil eden Ne – Pd (111).prj dosyasının oluşturulduğu pencere.

Hedef yüzeyin oluşturulmasının ardından bu yüzeye gönderilecek olan projectile atomunun temsil edileceği PRJ dosyası *Spider* programında *Projectile/New* yolu izlenerek açılan pencere yardımı ile oluşturulur. Bu pencere ve bu pencerede girilen değerler Şekil 4.6’da verilmiştir. Bu pencerede kullanılacak projectile atomunun

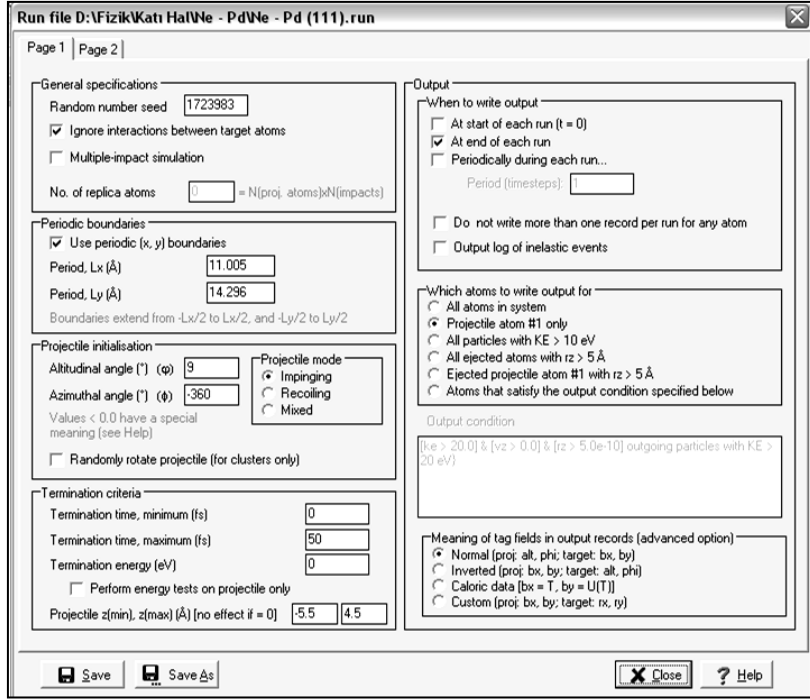


sembolü olan Ne, başlangıçta sahip olacağı kinetik enerji değeri olan 5.0 keV değeri, atom numarası, atomik kütlesi ve projectile yapısında yer alan atom sayısı girilmiştir. Bu bilgilerin girilmesinin ardından *Save As* butonu tıklanarak dosya Ne - Pd (111) .prj adıyla kaydedilir.

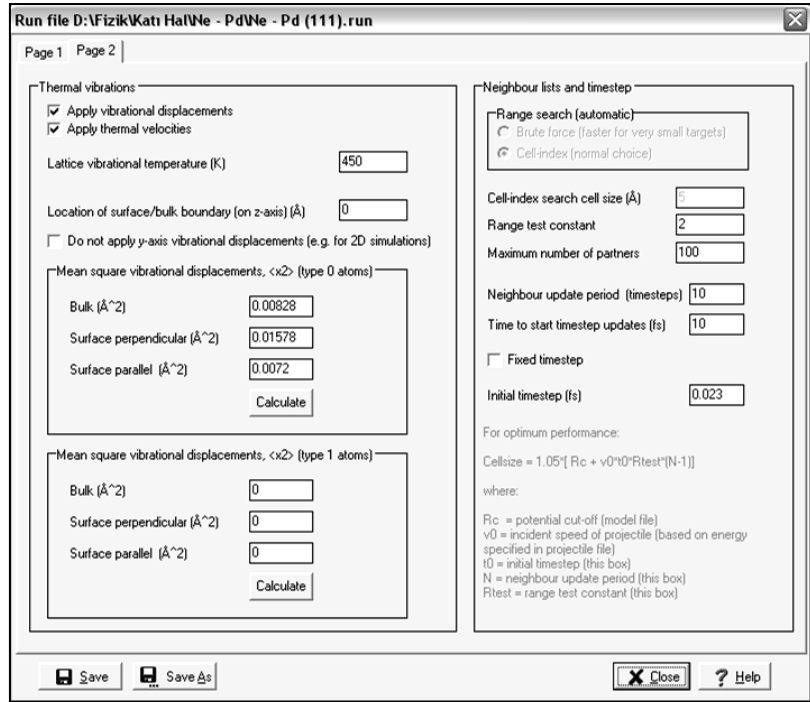
Simülasyonda yer alan hedef örgüsünün ve projectile atomunun sırasıyla Ne - Pd (111).trg ve Ne - Pd (111).prj dosyaları ile tanımlanmasının ardından simülasyonun işleyiş biçiminin belirleneceği RUN dosyası oluşturulur. Bu dosyanın düzenlenebilmesi için *Spider* programında *Run/New* yolunun izlenmesiyle açılan pencerede gerekli bilgiler girilir. Bu pencere ve simülasyonda kullanılan bilgiler Şekil 4.7 (a) ve Şekil 4.7 (b)'de gösterilmiştir.

Bir ISS simülasyonunda hedef örgüsündeki atomların kendi aralarındaki etkileşmeleri dikkate alınmayacağından *General Specifications* başlığı altında *Ignore interactions between target atoms* seçeneği seçilir.

Periyodik sınır koşullarının uygulanacağı  $L_x$  ve  $L_y$  periyotları ilgili kutulara yazılır. Burada  $x$ -eksenindeki periyodik sınırların  $-L_x/2$ 'den  $L_x/2$ 'ye ve  $y$ -eksenindeki periyodik sınırların  $-L_y/2$ 'den  $L_y/2$ 'ye uzandığına dikkat edilmelidir. Örneğin  $x = -2d$ 'den  $x = 2d$ 'ye uzanması istenen bir  $L_x$  periyodu,  $L_x = 4d$  olacak şekilde belirlenmelidir. Buradaki  $d$ , ilgili ekseninde yer alan iki atom arasındaki mesafedir. Bu çalışmada periyodik sınır koşullarının uygulanacağı hedef yüzey dikkate alınarak  $L_x$  ve  $L_y$  periyotları  $L_x = 4 \times d_x = 4 \times 2.75114 \cong 11.005$  ve  $L_y = 6 \times d_y = 6 \times 2.38256 \cong 14.296$  olarak belirlenmişlerdir.



(a)



(b)

Şekil 4.7. Simülasyonun işleyiş biçimini belirleyen Ne – Pd (111).run dosyasının (a) birinci, (b) ikinci sayfası.

Projectile atomunun hedef yüzeye göre olan konumu ve hedef yüzeye geliş biçimi *Projectile Installation* başlığı altında belirlenir. Bu çalışmada projectile atomunun,  $xy$ -

düzlemi ile yaptığı açı olan 9 derecelik  $\phi$  yükseklik açısı değeri, *altitudinal angle* diyalog kutusuna girilir. Gelen parçacığın  $x$ -ekseni ile  $xy$ -düzleminde yapacağı  $\phi$  azimut açısı ise *azimuthal angle* diyalog kutusuna 360 derece olarak girilir. Buradaki eksi işareti, parçacığın azimut açısının 0'dan 360 dereceye kadar gelişigüzel değerler alacağı anlamına gelir. Referans alınan deneysel çalışmada hedef örgü, yüzey normali etrafında döndürüldüğü için böyle bir yol izlenmiştir.

Simülasyonda bir adımın hangi koşullar altında sona erdirileceği *Termination Criteria* başlığı altında belirlenir. Burada bir adımın gerçekleşmesi için öngörülen azami süre  $50fs = 50 \times 10^{-15} s$  değeri *Termination time, maximum* diyalog kutusuna girilir. Projectile atomunun  $z$ -ekseninde ulaşabileceği en alt ve üst değerler olarak belirlenen  $-5.5 \text{ \AA}$  ve  $4.5 \text{ \AA}$  değerleri sırasıyla *Projectile z(min), z(max)* diyalog kutularına girilir. Bunun anlamı, projectile atomu  $z$ -ekseninde  $-5.5 \text{ \AA}$ 'den daha aşağıya indiğinde veya  $4.5 \text{ \AA}$ 'den yukarı çıktığında ya da simülasyonun bir adımını  $50fs$ 'den fazla sürdürdüğünde o simülasyon adımının sona erdirilecek olmasıdır.

Simülasyon sonuçlarının kaydedilme biçimi *Output* başlığı altında belirlenir. Burada simülasyon adımının tamamlandıktan sonra *Kalypso*'nun çıktı dosyası olan SNK dosyasına kaydedilmesi için *When to write output* başlığında *At the end of each run* seçeneği seçilir. Bir ISS deneyinde sadece projectile atomları ile ilgilendiğimiz için sadece bu atom hakkındaki verilerin kaydedilmesi yeterlidir. Bunun için *Which atoms to write output for* başlığı altında *Projectile atom #1 only* seçeneği tercih edilir. *Meaning of tag fields in output records* başlığında varsayılan olarak seçilmiş olan Normal seçeneği seçili bırakılır. Böylece SNK dosyasındaki  $bx$  ve  $by$  sütunlarında atomun çarpışmadan önceki yükseklik ve azimutal açıları;  $alt$  ve  $phi$  sütunlarında ise atomun çarpışmadan sonraki yükseklik ve azimut açıları yazılı olacaktır.

Isısal titreşimlerin simülasyonda yer alması için RUN dosyasının düzenlendiği pencerenin ikinci sayfasında *Apply vibrational displacements* ve *Apply thermal velocities* seçenekleri seçilir. Deneysel çalışmanın gerçekleştirildiği  $450 \text{ K}$  sıcaklık değeri *Lattice vibrational temperature* diyalog kutusuna yazılır. Simülasyonda kullandığımız hedef örgü tek cins atomdan oluştuğu için yalnızca *Mean square*

*vibrational displacements (type 0 atoms)* başlığına veri girilecektir. Bu başlık altında *Calculate* butonu tıklanılarak açılan küçük pencereye hedefi oluşturan paladyum atomunun atomik kütlesi 106.40 akb, örgü sıcaklığı  $450^{\circ}K$ , Bulk Debye sıcaklığı  $105^{\circ}K$  (Eckstein 1991), yüzey dik Debye sıcaklığı  $198^{\circ}K$  ve yüzeye paralel Debye sıcaklığı  $294^{\circ}K$  (Jackson 1974) olarak girilir. *Spider* bu verileri kullanarak titreşimsel yer deęiřtirmelerin kara kök deęerlerini hesaplar.

*Neighbour lists and timestep* başlığı altındaki seçeneklerin büyük bir kısmı simülasyonda periyodik sınır koşullarının uygulanmasından dolayı kendiliğinden seçilir. Burada girilecek başlangıç zaman adımı deęeri yaklaşık olarak projectile atomunun  $0.5\text{Å}$  mesafesini alma süresi kadar olmalıdır. Bu deęer *Spider* programında *Utilities/Velocity Calculator* yolu izlendiğinde açılan pencereye projectile atomunun başlangıç kinetik enerjisi ve atomik kütlesi girildiğinde öğrenilebilir. 5 keV enerjili ve 20.18 akb kütleli Ne atomu için bu deęer yaklaşık olarak  $0.023\text{ fs}$ 'dir ve RUN dosyası ikinci sayfasında *initial timestep* diyalog kutusuna girilir.

Yukarıda anlatılan biçimde düzenlenen ve Şekil 2.7 (a) ile Şekil 2.7 (b)'de gösterilen RUN dosyası örneğın Ne – Pd (111).run adıyla kaydedilir.

Simülasyonda yer alan atomların etkileşme biçimlerini belirleyen ve bölüm 3.1.1 ve 3.1.2'de anlatılan atomlar arası potansiyellerle ilgili düzenlemeler MDL dosyasında yapılacaktır. MDL dosyasını düzenleyebilmek için *Spider* programında *Model/New* yolu izlenerek açılan pencereye ulaşmak gerekir. Bu yolla açılan ve üç sayfadan oluşan MDL dosyası penceresi ve burada girilen deęerler Şekil 4.8 (a), Şekil 4.8 (b) ve Şekil 4.9 (c)'de gösterilmiştir.

MDL dosyası arayüzünün ilk sayfasında ilk olarak *Set system type* başlığı altında simüle edilecek sistemde bir soygaz atomu olan neon ve bir Metal atomu olan paladyum yer aldığından *Mono-metallic with inert atoms* seçeneęi seçilir. Bu seçimin yapılmasıyla ilgili olmayan diyalog kutuları kendiliğinden etkisizleşir. *Screening Lengths for I-M and M-M interactions* başlığı altında *I* diyalog kutusuna soygaz atomu neonun atom numarası olan 10, *M* diyalog kutusuna bir metal atomu olan paladyum'un atom

numarası olan 46 yazılır. *Set screening Length* ve *Constants for I-M and M-M potential* başlıkları altında simülasyonun kullanacağı potansiyel modeli seçilir.

Bu çalışmada potansiyel modellerinin üçü de ayrı ayrı seçilerek farklı dosya adlarıyla kaydedilmişlerdir. Farklı potansiyel seçimlerinin yapıldığı her MDL dosyası için simülasyon tekrarlanarak potansiyel modellerinin karşılaştırılması yapılmıştır. Potansiyel seçimlerinin yapılmasıyla denklem (3.7)'de yer alan ifadedeki parametreler kendiliğinden girilmiş olur.

MDL dosyası arayüzünün ikinci sayfasındaki sıkı-bağ potansiyelleri ile ilgili parametreler, bir ISS simülasyonunun yapılacağı bu çalışmada hedef örgüdeki atomların kendi aralarındaki etkileşmeler ihmal edildiği için önemsizdir.

Model file D:\Fizik\Katı Hal\Ne - Pd\Ne - Pd.mdl

Screened Coulombic potentials | Tight-binding potentials | Switching functions

Screened Coulombic potential: I = inert atom, M(0), M(1) = metallic atoms

Set system type [disables unneeded items]

- Mono-metallic with inert atom(s)
- Mono-metallic without inert atom(s)
- Bi-metallic with inert atom(s)
- Bi-metallic without inert atoms

Constants (b, c) for I-M and M-M potential

	Inert - Metal	Metal - Metal
c1	0.028171	0.028171
c2	0.28022	0.28022
c3	0.50986	0.50986
c4	0.18175	0.18175
b1	0.20162	0.20162
b2	0.4029	0.4029
b3	0.94229	0.94229
b4	3.1998	3.1998

Set screening length

- ZBL
- Molière-Lindhard
- Molière-Firsov
- (no action)

Screening lengths (a) for I-M and M-M interactions

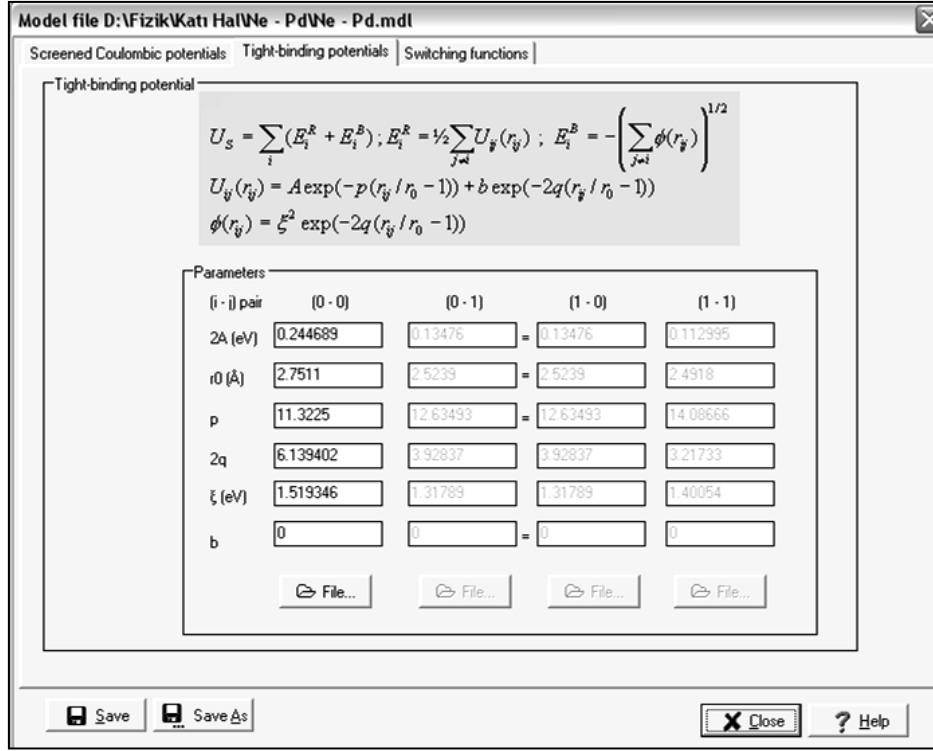
Atomic numbers

I: 10 M(0): 46 M(1): 28

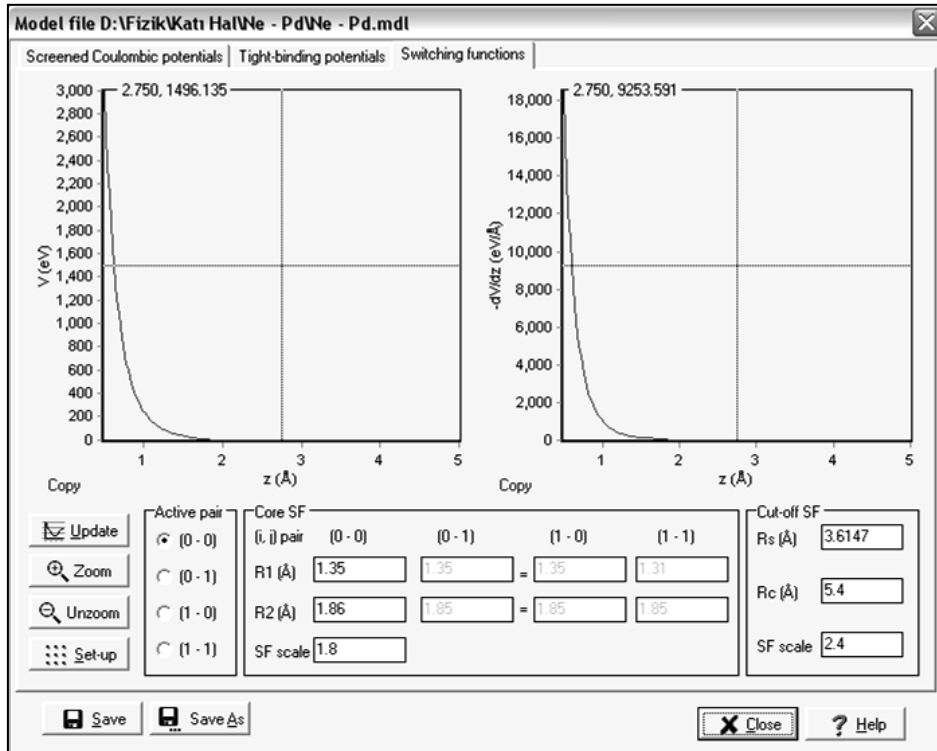
	Screening length (Å)	Correction
I - I	0.137937142	1
I - M(0)	0.113975158	1
I - M(1)	0.121680427	1
M(0) - M(0)	0.09710619166	1
M(0) - M(1)	0.1026439925	1
M(1) - M(1)	0.1088516148	1

Save Save As Close Help

(a)



(b)



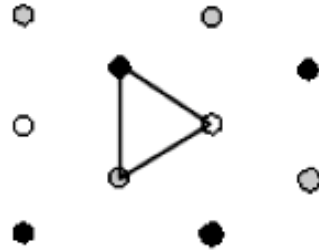
(c)

Şekil 4.8. Ne – Pd (111).mdl dosyası arayüzünün (a) birinci, (b) ikinci ve (c) üçüncü sayfası.

Şekil 4.8 (c)'de yer gösterilen MDL dosyası arayüzünün üçüncü ve son sayfasında anahtarlama fonksiyonu için girilmesi gereken parametreler belirlenir. Bölüm 3.1.3'te ayrıntılarıyla anlatılan bu parametreler Şekil 4.8 (c)'de yer aldığı biçimde girilir. Burada kesme uzunluğu  $R_c$  için  $5.6\text{\AA}$  değeri seçilmiştir.

MDL dosyası ile düzenlenen potansiyel seçimleri ve ilgili bütün parametreler girildikten sonra *Save As* butonu kullanılarak örneğin *Ne – Pd (111).mdl* adıyla kaydedilir.

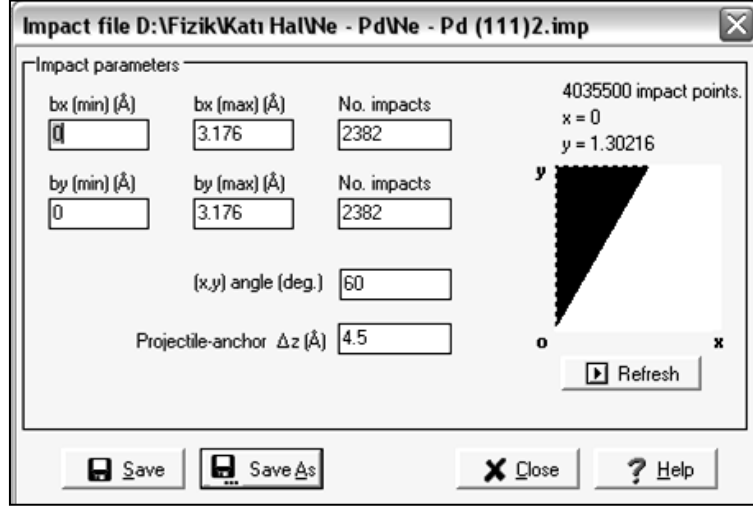
Hedef örgü ile hedefe gönderilen parçacığın çarpışma biçimleri ve simülasyonda gerçekleşecek olan toplam çarpışma sayısı IMP dosyası ile düzenlenir. Yüzey merkezli kübik yapıdaki Pd(111) örgüsünün birincil çarpışma bölgesi yüzey üzerindeki üçgensel bir bölgedir ve bu bölge Şekil 4.9'da gösterilmiştir. Ancak parçacık hedef örgüye normal geliş açısıyla değil de keyfi bir açıyla geliyorsa birincil çarpma bölgesinin Şekil 4.9'da gösterilen bölgeden daha geniş olması gerekmektedir (Karolewski 2005).



**Şekil 4.9.** Fcc (111) yapısındaki bir yüzey için birincil çarpma bölgesi. Birinci, ikinci ve üçüncü tabaka atomları sırasıyla beyaz, gri ve siyah sembollerle gösterilmiştir (Karolewski 2005)

IMP dosyasını oluşturabilmek için *Spider* programında *Impact/New* yolu izlenerek *Impact* dosyası arayüzüne ulaşılır. *Impact* dosyasının düzenlendiği pencere ve girilen değerler Şekil 4.10'da gösterilmiştir. Fcc (111) yapısındaki bir örgü için bir IMP dosyası oluşturulması birkaç aşamada gerçekleşir. Şekil 4.10'da gösterilen IMP dosyası arayüzünde  $bx$  ve  $by$  diyalog kutularına  $3.176\text{\AA}$  değeri girilir. Bu değer Pd(111) örgüsündeki en yakın komşu uzaklığı olan  $d_{NN}$ 'in 2 katının  $\sqrt{3}$ 'e bölünmesiyle elde edilir.  $(x,y)$  *angle* diyalog kutusuna 60 derece ve *projectile* atomu ile hedef arası mesafe ise *Projectile – Anchor* ( $\Delta z$ ) diyalog kutusuna  $4.5\text{\AA}$  olarak girilir. *No. Of impacts*

diyalog kutularına ise 2382 değeri girilir. Bu dosya örneğin Ne – Pd (111).imp adıyla kaydedilir. Kaydedilen IMP dosyası bu haliyle 4035500 çarpışma içermektedir.



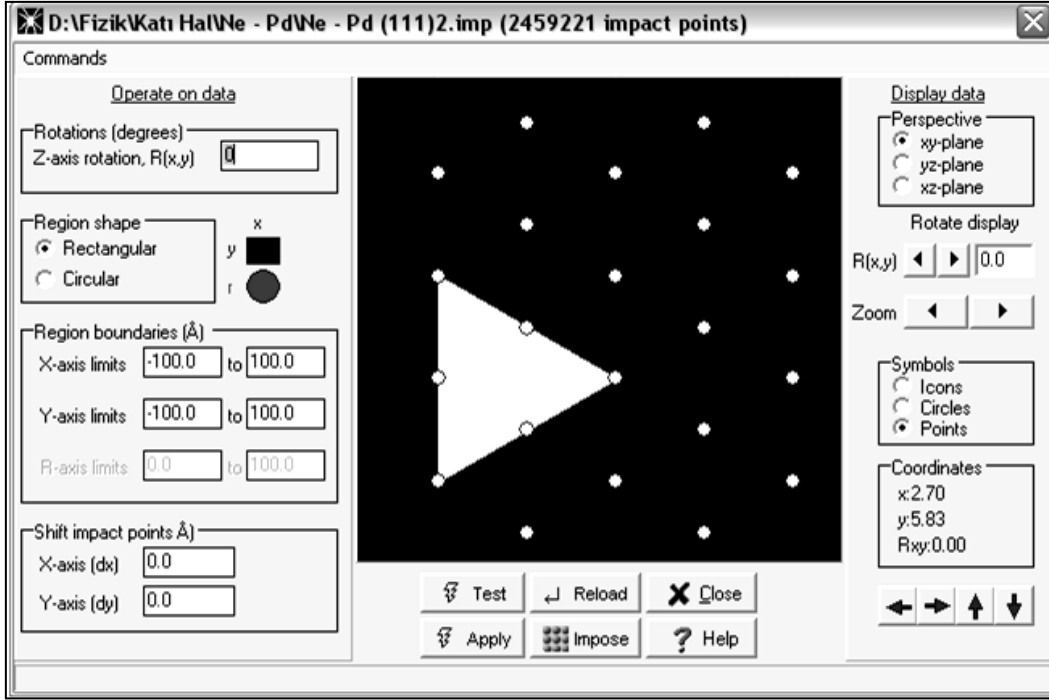
Şekil 4.10. IMP dosyasının düzenlendiği pencere.

Kaydedilen bu dosya *Spider* programında *Impact/Visualiser* yolu izlenerek görüntülenir. Açılan bu pencerede önce *Z-axis rotation* diyalog kutusuna -60 derece ve *Region boundaries* başlığı altında *Y-axis limits* diyalog kutusunda varsayılan olarak yazılı olan 100.0 yerine örgünün en yakın komşu uzaklığı olan 2.75114Å değeri girilir. *Apply* butonuna tıklanarak bu dosya farklı bir adla kaydedilir.

Kaydedilen bu yeni dosya yine *Impact/Visualizer* yolu izlenerek görüntülenir. Bu kez *Z-axis rotation* diyalog kutusuna -30 derece ve *Y-axis limits* diyalog kutusuna yeniden varsayılan değer olan 100.0 girilir. Tekrar *Apply* butonuna basılır ve bu dosya kaydedilir. Simülasyonda kullanılacak olan üçgensel bölge bu yolla tanımlanmış olur. IMP dosyasının son hali ve bu dosyada tanımlana üçgensel birincil çarpma bölgesinin hedef yüze ile birlikte görüntülediği pencere Şekil 4.11’de gösterilmektedir.

Bir ISS simülasyonunda toplam verinin ancak % 0.1 kadarı sonuçlara katkı verebilir. Dolayısıyla bu tür bir simülasyonda anlamlı sonuçlar elde edebilmek için gerçekleştirilmesi gereken çarpışma sayısı  $10^6$  mertebesinde olmalıdır. Dosyanın simülasyon projesinde kullanılacak son hali ile 2459221 çarpışmanın gerçekleşmesi sağlanacaktır.



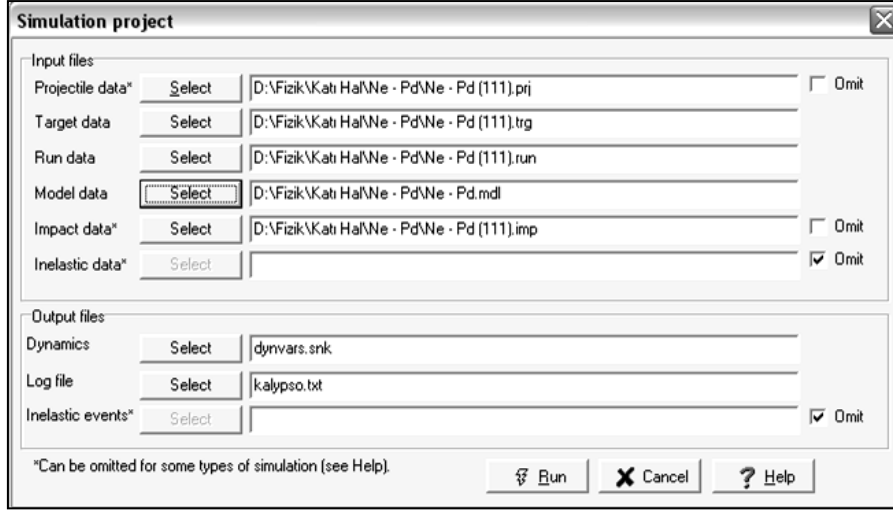


**Şekil 4.11.** Simülasyonda kullanılan IMP dosyasında tanımlı birincil çarpma bölgesinin görünümü. z-ekseni boyunca yer alan üç tabakanın üst üste görüldüğüne dikkat edilmelidir.

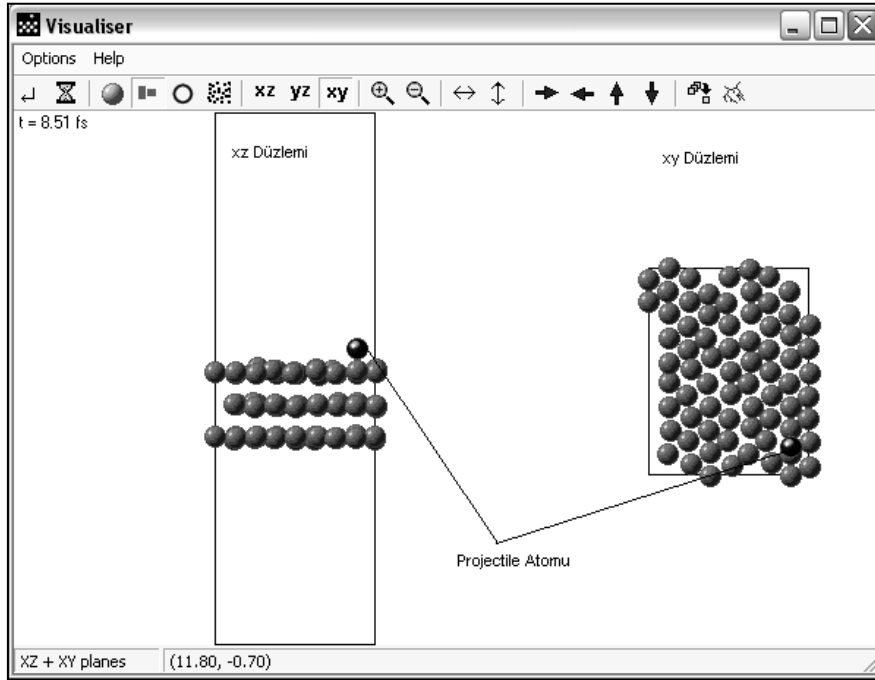
Yapılan deneyde inelastik etkiler göz önüne alınmadığı için inelastik dosyası oluşturulmamıştır

#### 4.1.2. Simülasyonun çalıştırılması

*Spider* programı kullanılarak oluşturulan ve deney şartlarını tanımlayan dosyalar *Kalypso* programı tarafından simülasyonun gerçekleştirilmesinde kullanılır. Girdi dosyalarını *Kalypso* programı ile çalıştırmak için *Kalypso* arayüzünde *File/Simulation Project* yolu izlenir. Bu yolun izlenmesiyle açılan pencerede her bir dosya, ilgili diyalog kutusunda *Select* butonu tıklanarak açılan pencerede bilgisayarda bulunduğu klasörden seçilir. Simülasyonda Inelastic dosyası yer almadığı için *Inelastic Data* ve *Inelastic Events* satırlarındaki *Omit* seçeneği seçilerek bu dosyanın yok sayılması sağlanır. Programın çıktı dosyalarını nereye kaydedeceği de bu ekranda belirlenir. Bu seçimlerin yapıldığı pencere Şekil 4.12’de gösterilmiştir. Bu ekranda *Run* butonuna basılmasıyla birlikte simülasyon çalışmaya başlar.



Şekil 4.12. Kalypso programında simülasyon projesinin çalıştırıldığı ekran.



Şekil 4.13. Çalıştırılan simülasyonun xz ve xy-düzlemlerinden görüntüsü.

Simülasyonun tamamlanması 2.4 GHz işlemcili bir bilgisayarda yaklaşık dokuz saat sürmektedir. Simülasyonun çalışması grafik olarak Kalypso programının görüntüleme aracı kullanılarak görüntülenebilir. Simülasyonun çalışmasına ait bir görüntü Şekil 4.13'te gösterilmektedir.

### 4.1.3. Sonuçların elde edilmesi ve değerlendirilmesi

Simülasyon projesinin *Kalypso* tarafından çalıştırılması tamamlandıktan sonra sıra SNK uzantılı çıktı dosyalarında yer alan bilgilerin değerlendirilmesi işlemine gelir. Sonuçların değerlendirilmesi *Kalypso* yazılım paketinin bir parçası olan *Winnow* programı kullanılarak yapılır.

Simüle edilen deneysel çalışmada azimutal bir ICISS taraması yapılmıştır. Bu amaçla yüzey normali eksen kabul edilerek hedef örgüsü döndürülmüş ve hedef yüzeye, yüzeye 9 derecelik bir  $\phi_i$  açısı yapacak şekilde gönderilen 5 keV enerjili  $\text{Ne}^+$  iyonlarının atomik çarpışmaları gözlenmiştir. Bu deneyin simüle edilebilmesi içinse projectile parçacıklarının azimut açısı 0'dan 360 dereceye kadar değişken alınmıştır.

Azimutal bir taramanın sonuçlarını elde edebilmek için öncelikle çarpışmadan sonra yüzeye yaptığı  $\phi_s$  yükseklik açısı, 9 derece civarında olan atomlar göz önüne alınmalıdır. Bunun için  $\phi_s < 10.0$  ve  $\phi_s > 8.0$  koşulları ile bir filtreleme yapılması gerekir. Bu koşullar *Winnow* sorgu dilinde,

[alt > 8.] & [alt < 10.]

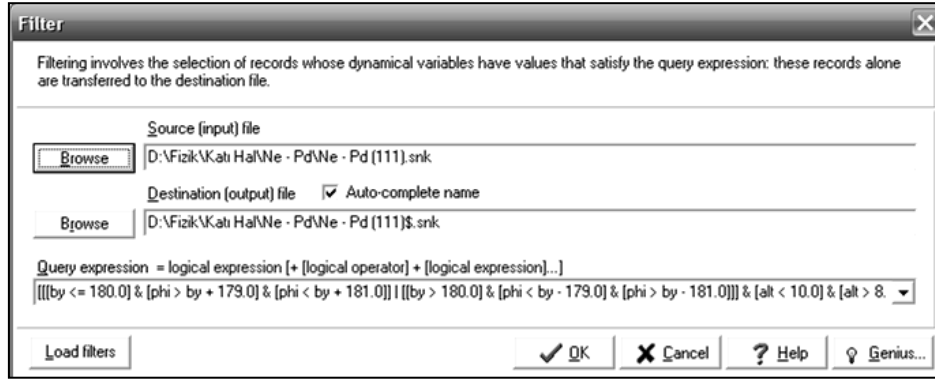
biçiminde ifade edilebilir.

Hedef örgü üzerine 0°'den 360°'ye kadar gelişigüzel azimut açılarıyla gönderilen projectile atomlarının çarpışma sonrası azimut açıları  $\phi_s$ 'nin, gelme azimut açıları  $\phi_i$ 'nin  $x$ -eksenine göre simetrisinde olmaları gerekir. Bu yüzden 180° ve daha küçük bir azimut açısıyla hedef yüzeye gelen parçacıklar için  $\phi_s > \phi_i + 179$  ve  $\phi_s < \phi_i + 181$  koşulları sağlanmalıdır. 180 dereceden daha büyük bir azimut açısı ile hedef örgüye gelen projectile atomları için ise  $\phi_s > \phi_i - 179$  ve  $\phi_s < \phi_i - 181$  koşulları aranmalıdır. Bu şartlar *Winnow* programının sorgu dilinde birleştirilerek yazıldığında,

[[[by <= 180.0] & [phi > by + 179.0] & [phi < by + 181.0]] | [[by > 180.0] & [phi < by - 179.0] & [phi > by - 181.0]]] & [alt < 10.0] & [alt > 8.0]

filtreleme ifadesi elde edilmiş olur.

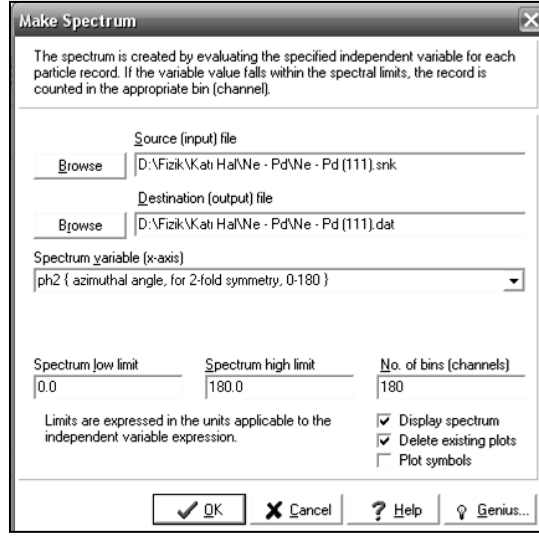
Bu ifade ile SNK dosyasının filtrelenmesi için *Winnow* programında *Process / Filter* yolu izlenerek filtreleme penceresi açılır. Bu pencere Şekil 4.14'te gösterilmiştir. Açılan pencerede ilgili SNK dosyası *Browse* butonu yardımı ile seçilir. *Query expression* bölümüne kullanılacak filtreleme ifadesi girilir ve OK butonu ile filtreleme işlemi gerçekleştirilir.



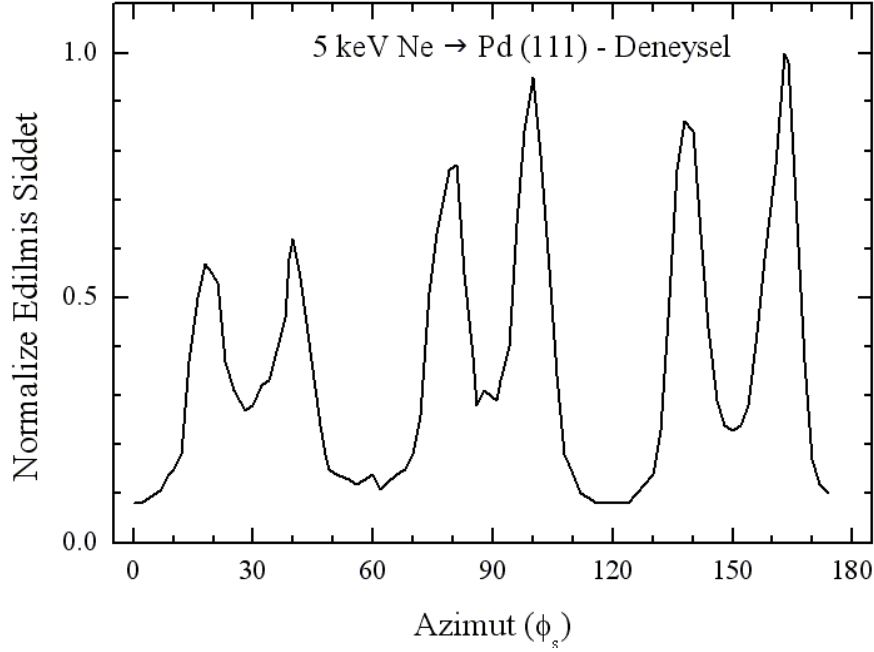
Şekil 4.14. *Winnow* programının filtreleme penceresi.

Filtreleme sonrası oluşan yeni dosyada parçacıkların azimutal spektrumunun elde edilmesi için *Winnow* programında *Process/Spectrum* yolu izlenerek spektrum arayüzüne ulaşılır. Spektrum arayüzü Şekil 4.15'te gösterilmiştir. Bu pencerede filtrelenmiş dosya *Browse* butonu yardımıyla açılan pencerede bulunarak seçilir. Spektrumun *x*-ekseni, yani değişkeni olan ifade *Spectrum Variable* bölümünden *ph2 {azimuthal angle, for 2-fold symmetry, 0-180}* seçeneği seçilir. Spektrumun alt limiti 0 derece *Spectrum low limit*, üst limiti 180 derece ise *Spectrum high limit* diyalog kutularına girilir. Bu seçimin yapılması ile *Winnow* ilgilenilen dosyanın *x*-eksenine göre simetrik olarak azimut açısı için 0'dan 180'e kadar değişen bir spektrum çizer ve bu grafiğin verilerini aynı adlı fakat \*.dat uzantılı bir dosyaya kaydeder. Bu DAT dosyası Origin, Excel, SPSS vb. daha gelişmiş programlarla da incelenebilir ve işlenebilir.

Simülasyonu gerçekleştirilen deneysel çalışmanın sonuçları ile bu çalışmada ZBL, Molière – Linhard ve Molière – Firsov potansiyelleri için ayrı ayrı gerçekleştirilen simülasyonların sonuçları aşağıda grafiklerle karşılaştırılmıştır. Deneysel çalışmanın sonuçları Şekil 4.16'da verilmiştir.

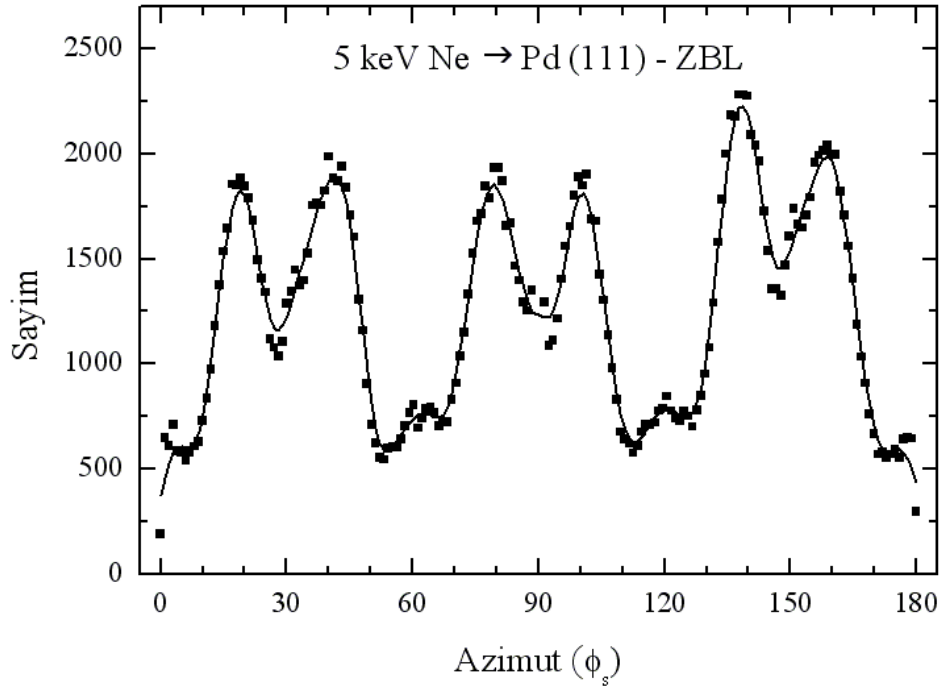


Şekil 4.15. Winnow programının spektrum oluşturma penceresi.



Şekil 4.16. Simülasyonu yapılan deneysel çalışmanın sonucunda elde edilen şiddet - azimut açısı grafiği.

Şekil 4.16’da gösterilen sonuçlar incelendiğinde Pd(111) hedef örgüsündeki atomların en yakın komşu ya da en yakın ikinci komşu atom doğrultularında birbirlerini tamamen ya da kısmen gölgeledikleri görülmektedir. Bu durum azimutal taramada  $\phi_s = 0^\circ, 60^\circ, 120^\circ$  ve  $\phi_s = 30^\circ, 90^\circ, 150^\circ$  azimut açılarındaki şiddet düşüşlerini meydana getirmiştir.

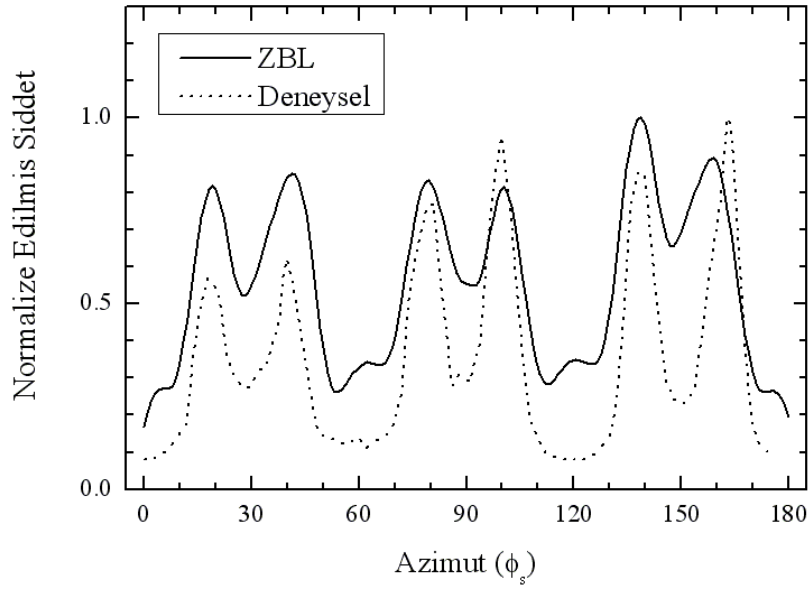


**Şekil 4.17.** ZBL potansiyeli ile gerçekleştirilen simülasyonun azimutal spektrumu.

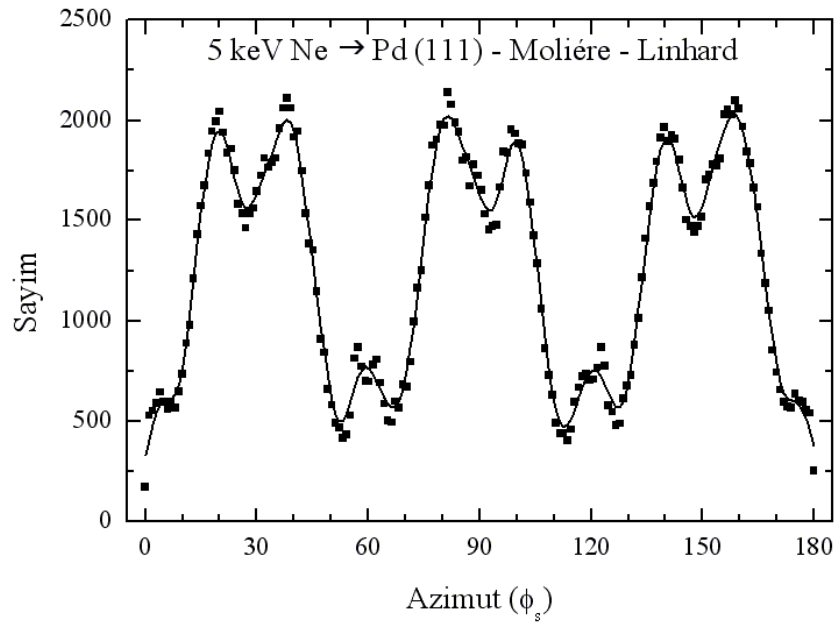
ZBL potansiyeli için elde edilen azimutal spektrum Şekil 4.17’de gösterilmiştir. ZBL potansiyeli ile çalıştırılan simülasyon ile deneysel sonuçlar ise Şekil 4.18’de karşılaştırılmıştır. ZBL potansiyeli ile elde edilen sonuçlar deneysel sonuçlarla bir arada değerlendirildiğinde pik noktalarının yaklaşık olarak aynı açı değerlerinde olduğu ancak özellikle  $\phi_s$  azimut açısı  $0^\circ$ ’den  $60^\circ$ ’ye kadar olan aralıkta şiddet değerleri açısından önemli farklılıklar olduğu görülmektedir.

Bununla birlikte  $\phi_s = 0^\circ, 60^\circ, 120^\circ$ ’de ya da  $\phi_s = 30^\circ, 90^\circ, 150^\circ$ ’deki minimum noktaları da deneysel sonuçlarla uyum içindedir. Ancak bu minimum değerleri için de şiddet farklılıkları söz konusudur. Genel olarak pik noktalarının uyum içinde olduğu görülmektedir; deneysel çalışmada  $\phi_s = 163^\circ$ ’de görülen son pik değeri simülasyonda  $\phi_s = 159^\circ$ ’de ortaya çıkmaktadır.

Molière – Linhard potansiyeli ile elde edilen sonuçlar ve deneysel sonuçlarla karşılaştırılmaları sırasıyla Şekil 4.19 ve Şekil 4.20’de yer almaktadır.



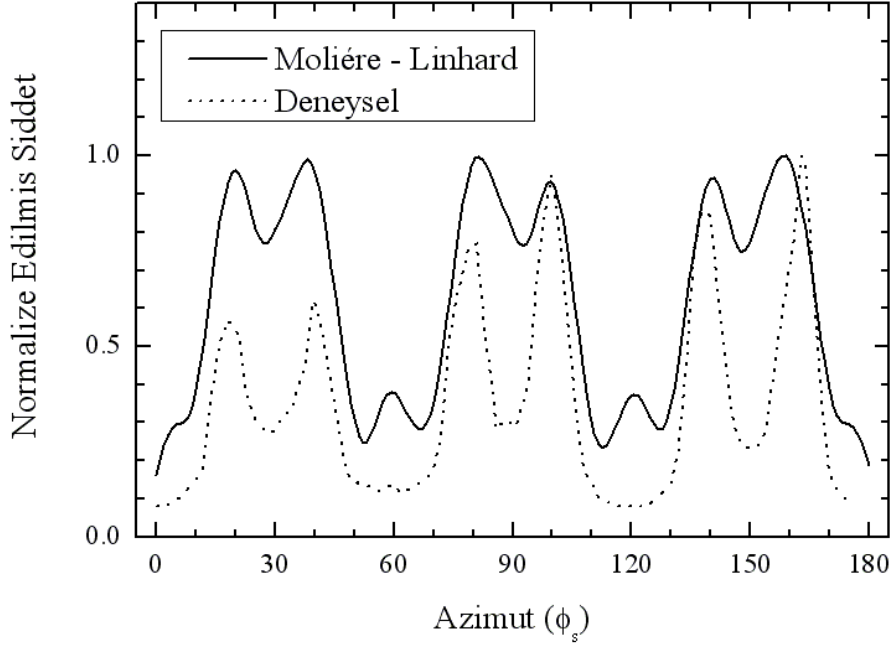
**Şekil 4.18.** ZBL potansiyeli ile gerçekleştirilen simülasyon sonuçları ve deneysel sonuçların azimut açısı ile normalize edilmiş şiddet ilişkisi.



**Şekil 4.19.** Molière – Linhard potansiyeli kullanılarak gerçekleştirilen simülasyonun azimutal spektrumu.

Bu grafiklerde ZBL potansiyeli ile elde edilen sonuçlarda olduğu gibi minimum ve maksimum noktaların açı değerleri deneysel çalışmalarla yaklaşık olarak uyum içindedir. Ancak şiddet değerleri açısından bir takım farklılıklar gözlenmektedir. Deneysel sonuçlarda  $\phi_s = 30^\circ, 90^\circ, 150^\circ$ 'de görülen minimum şiddet büyüklüğü

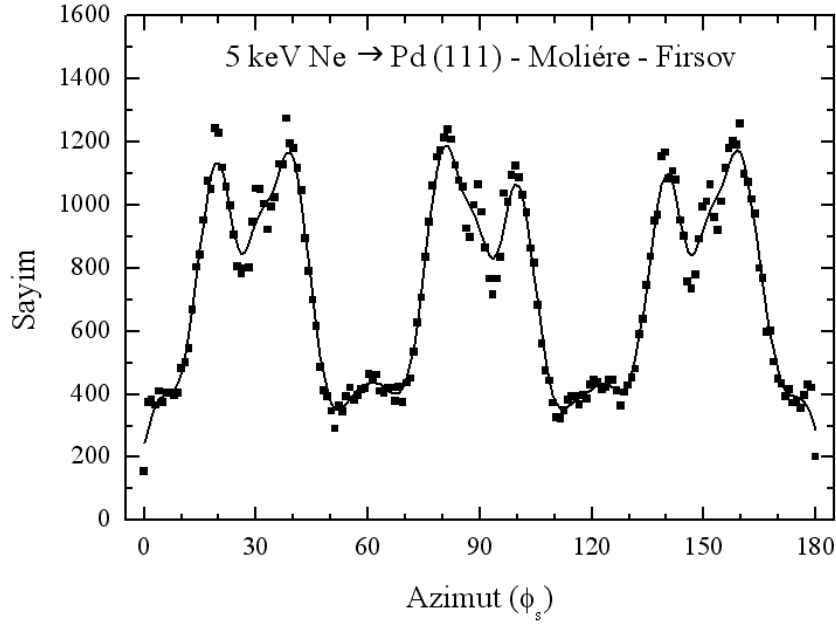
değerlerinin Şekil 4.19’da gösterilen sonuçlarda, daha yüksek değerlerde olduğu görülmektedir. Ayrıca yine bu minimum noktalarının azimut açısı değerlerinde de birkaç derecelik sapmalar söz konusu olduğu görülmektedir.



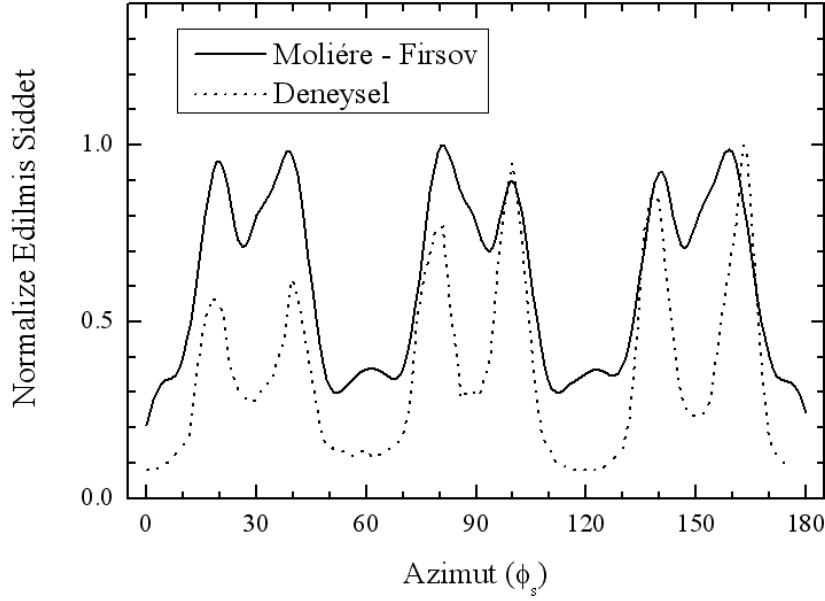
**Şekil 4.20.** Molière – Linhard potansiyeli kullanılarak gerçekleştirilen simülasyon sonuçları ile deneysel sonuçların azimut açısı ile normalize edilmiş şiddet ilişkisi.

Molière – Firsov potansiyeli ile elde ilen sonuçlar Şekil 4.21’de, bu sonuçların deneysel sonuçlarla karşılaştırılması Şekil 4.22’de gösterilmiştir. Bu şekillerde yer alan şiddet – azimut grafikleri dikkatle incelendiğinde; Molière – Firsov potansiyeli ile gerçekleştirilen simülasyon deneyinde pik noktalarının yaklaşık olarak deneysel sonuçlarla uyum içinde olmasının yanında minimum noktalarının hem deneysel sonuçlarla hem de diğer potansiyel modelleri ile elde edilen sonuçlarla birkaç derecelik farklılıklar gösterdiği görülmektedir. Deneysel sonuçlarda  $\phi_s = 30^\circ, 90^\circ, 150^\circ$  açı değerlerinde görülen minimum noktaları ise deneysel sonuçlara göre Molière – Linhard potansiyelinde olduğu gibi yüksek değerlerdedir.





**Şekil 4.21.** Molière – Firsov potansiyeli kullanılarak gerçekleştirilen simülasyonun azimutal spektrumu.



**Şekil 4.22.** Molière – Firsov potansiyeli kullanılarak gerçekleştirilen simülasyon sonuçları ile deneysel sonuçların karşılaştırılması.

Her üç potansiyel modeli ile elde edilen sonuçları bir arada değerlendirilirse genel olarak pik ve minimum noktalarının deneysel sonuçlardaki azimut açısı değerleri ile uyum içinde olduğu söylenebilir. Potansiyeller arasında bir kıyaslamada deneysel sonuçlar ile en iyi uyumun ZBL potansiyelleri ile elde edildiği görülmektedir. Ancak bu

noktada simülasyonda kullanılan üç modelinde düzeltme katsayıları uygulanmadan kullanıldıklarına dikkat edilmelidir. Daha uzun zaman harcanarak farklı düzeltme katsayılarının uygulanması ile deneysel sonuçlarla daha uyumlu sonuçlara ulaşılabileceği söylenebilir.

Şiddet değerlerinin deneysel sonuçlarla farklılıklar gösterdiği görülmektedir. Bu durumun potansiyel modellerden öte deneyin gerçekleştirilme biçimi ile ilgili olduğu söylenebilir. Deneysel çalışmada hedef örgü döndürülürken atomların gönderildiği tabanca sabit durmaktadır. Ancak gerçekleştirilen simülasyon çalışmasında yüzey sabit tutulup gönderilen atomların değişken açılarda yüzeye çarpması sağlanmıştır. Ayrıca deneysel çalışmada hedef örgüde çok sayıda atom bulunurken simülasyonda hesaplama zamanı gibi kısıtlamalar sebebi ile daha az sayıda atom ile periyodik sınır koşulları uygulanarak sonsuz bir hedef örgüsü oluşturulmaya çalışılmıştır. Özellikle z-ekseninde yer alan tabakaların sayısının arttırılması ile deneysel sonuçlara daha yakın sonuçların elde edilebileceği düşünülebilir.

#### **4.2. Paladyum (110) Yüzeyinden Neon İyonları Saçılması**

Bu tez çalışmasında yer alan ikinci uygulama paladyum (110) yapısındaki hedef örgü üzerine  $[1\bar{1}2]$  azimutal geliş doğrultusu ile gönderilen 2.08 keV enerjili neon iyonlarının saçılması üzerinedir. Bu uygulamada değişken geliş açılarna sahip olan  $Ne^+$  iyonlarının Pd(110) yüzeyden saçılması incelendiği deneysel çalışma simüle edilmiş ve elde edilen sonuçlar hem deneysel verilerle hem de ACOCT adlı bir başka simülasyon programı ile elde edilen sonuçlarla karşılaştırılmıştır. ACOCT programı Yamamura ve Takeuchi tarafından geliştirilen bir moleküler dinamik simülasyon programı kodudur (Yamamura and Takeuchi 1987). Simülasyonu yapılan deneysel çalışma Speller, Parascandola ve Heiland tarafından Osnabrück Üniversitesi'nde gerçekleştirilmiş ve "Structural parameters of Pd(110) and Pt(110)-(1 × 2) in the temperature range 300–900 K studied by low-energy ion scattering" adlı bir makale olarak Surface Science dergisinde 1997 yılında yayınlanmıştır (Speller et. al 1997). ACOCT simülasyon programı ile elde edilen sonuçlar ise Takeuchi ve Yamamura tarafından yapılan

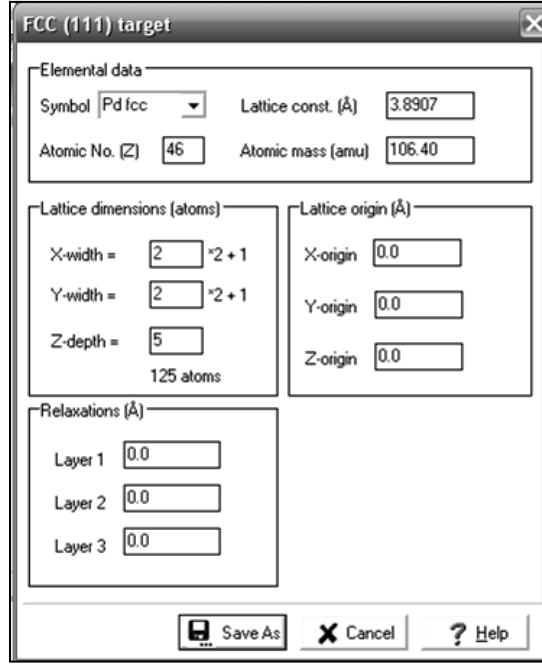
çalışmanın sonucu olarak “*Structure analysis of Pd(110) surface by computer simulation of NICISS*” adlı bir makale olarak Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B dergisinde 2001 yılında yayınlanmıştır (Takeuchi and Yamamura 2001).

#### 4.2.1. Simülasyon projesinin hazırlanması

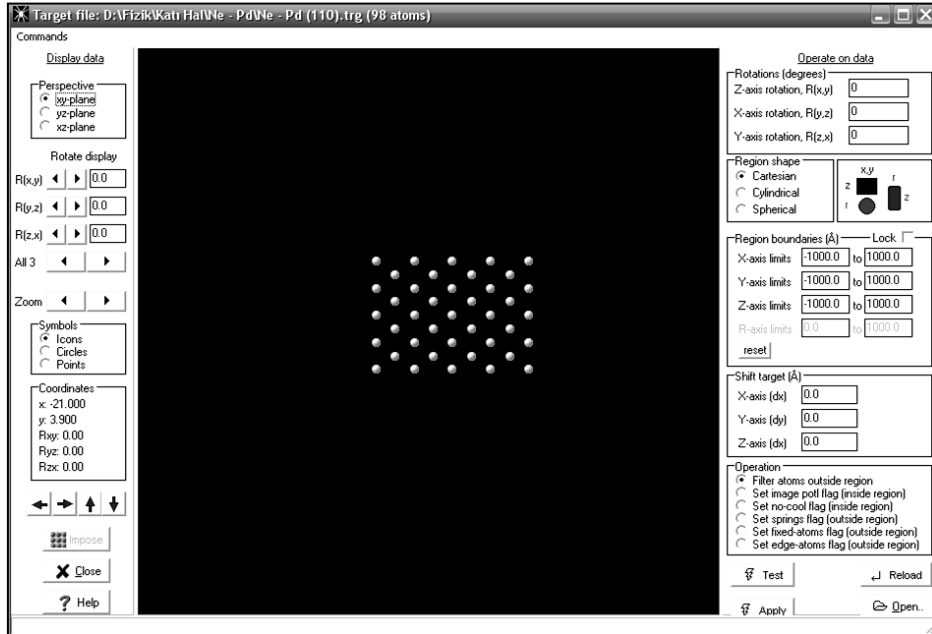
Simüle edilecek deneysel çalışmada kullanılan yüzey merkezli kübik örgüye sahip olan paladyum (110) hedef örgüsünü oluşturabilmek için *Spider* programında *Target/New/Face-centered cubic/(110) surface* yolu izlenerek TRG dosyası arayüzüne ulaşılır. Bu yolun izlenmesiyle ulaşılan TRG dosyası ve girilen değerler Şekil 4.23'te gösterilmiştir.

Hedef örgünün oluşturulacağı pencerede Şekil 4.23'te gösterildiği gibi  $x$ -ekseninde yer alacak atom sayısı için *X-width* kutusuna 2,  $y$ -ekseninde yer alacak atom sayısı için *Y-width* kutusuna 2 ve  $z$ -ekseninde yer alacak atom sayısı için *Z-width* kutusuna 5 sayıları girilir. Önceki bölümde de belirtildiği gibi  $x$  ve  $y$ -eksenlerinde girilen sayının iki katından bir fazla atom ilgili ekseninde yer alacaktır. Böylece, oluşturulan hedef örgüde  $x$ ,  $y$  ve  $z$ -eksenlerinde 5'er atom olmak üzere toplam 125 atom bulunacaktır.

*Elemental Data* başlığı altında Pd atom sembolü seçilerek TRG dosyası kaydedilir. Kaydedilen TRG dosyası *Spider* programının görüntüleme aracı ile görüntülenebilir. Simülasyonda periyodik sınır koşulları uygulanacağı için örgünün  $-x$  ve  $-y$  yönlerindeki birer sıra atomu önceki bölümde anlatılan sebeplerle silinir. Böylece TRG dosyası son halini almış olur. Simülasyonda kullanılacak TRG dosyasının görüntüsü Şekil 4.24'te verilmiştir. Bu şekilde  $z$ -eksenindeki tabakaların üst üste görüldüğüne dikkat edilmelidir. Pd (110) hedef örgüsünü tanımlayan TRG dosyasının son halinde toplam 98 atom bulunacaktır.



Şekil 4.23. Paladyum (110) hedef örgüsünün oluşturulduğu pencere.



Şekil 4.24. Pd (110) hedef örgüsünün simülasyon projesinde kullanılacak son hali.

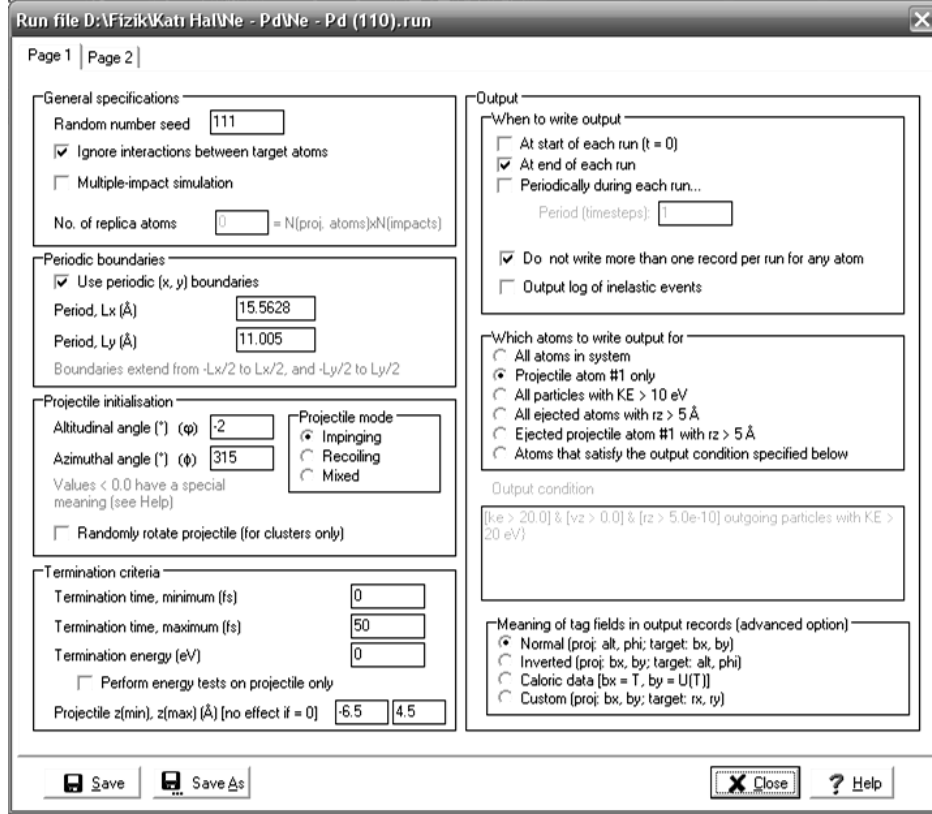
Hedef örgü üzerine gönderilecek olan neon iyonları PRJ dosyası arayüzünde tanımlanır. PRJ penceresinde *Elemental Data* başlığı altında Ne sembolü seçilir ve *Energy (keV)* diyalog kutusuna deneysel çalışmada kullanılan 2.08 değeri girilir.

Simülasyonun işleyişini belirleyecek olan RUN dosyasında *Periodic boundaries* başlığı altında *Use periodic boundaries* seçimi yapılarak simülasyonda periyodik sınır koşullarının uygulanacağı  $L_x$  ve  $L_y$  değerleri girilir. Bu simülasyonda önceki bölümlerde açıklandığı gibi  $L_x$  için  $L_x = 4 \times d_x = 4 \times 3.89 \cong 15.563$  ve  $L_y$  için  $L_y = 4 \times d_y = 4 \times 2.75114 \cong 11.005$  değerleri girilir.

Deneysel çalışmada Ne iyonları  $[1\bar{1}2]$  azimutal geliş doğrultusuyla ve rastgele geliş açıları ile gönderilmiştir. Bu durumun simüle edilebilmesi için *Projectile initialization* başlığı altında *Altitudinal Angle* diyalog kutusuna  $-2^\circ$ , *Azimuthal Angle* diyalog kutusuna ise  $315^\circ$  değerleri girilir. Buradaki eksi işareti projectile atomunun geliş açısının,  $2^\circ$ 'den  $90^\circ$ 'ye kadar rastgele değerler alacağı anlamına gelir.

Bir ISS simülasyonunda sadece saçılan atomlar ile ilgilenildiği için *Which atoms to write output for* başlığı altında yer alan *Projectile atom only* seçeneği tercih edilir. Simülasyonda kullanılacak olan RUN dosyasının ilk sayfası ve bu sayfada girilen değerler Şekil 4.25'te gösterilmiştir.

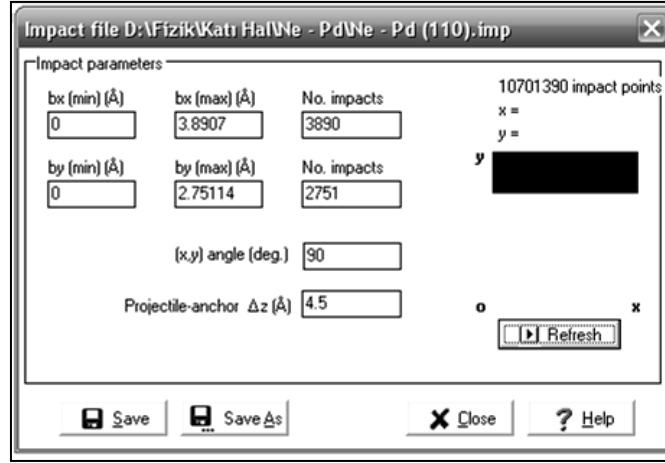
RUN dosyasının ikinci sayfasında simülasyonun gerçekleştirileceği sıcaklık olan  $430^\circ K$  değeri *Thermal Vibrations* başlığı altında girilir. Paladyum için kullanılacak olan bulk Debye sıcaklık değeri  $274^\circ K$ , yüzeye dik Debye sıcaklığı  $191^\circ K$  ve yüzeye paralel Debye sıcaklığı  $227,5^\circ K$  değerleri *Mean square vibrational displacements* başlığı altındaki *Calculate* butonu tıklanarak açılan pencereye girilir. Simülasyonun başlangıç zaman adımı *Neighbour List* başlığı altındaki *initial timestep* kutusuna  $0.036 fs$  olarak girilir. Bu değer yaklaşık olarak  $2.08 keV$  enerjili bir Ne iyonunun  $0.05\text{\AA}$  mesafesini alma süresi kadardır.



Şekil 4.25. Simülasyonun işleyişini belirleyen RUN dosyasının düzenlendiği pencerenin ilk sayfası ve oluşturulan RUN dosyasına girilen değerler.

Simülasyonda gerçekleşen atomik çarpışmaları belirleyen potansiyel parametrelerinin girildiği MDL dosyasında neon ve paladyum atomları için geçerli olan parametreler daha önceki uygulamada yer alan ve bölüm 4.1.1.'de açıklanan MDL dosyası ile hemen hemen aynıdır. Önceki çalışmada deneysel sonuçlarla en iyi uyumun gözlendiği ZBL potansiyeli bu uygulama için de seçilir. Sadece MDL dosyasının üçüncü sayfasındaki anahtarlar fonksiyonları parametrelerinde birkaç değişiklik yapılması gerekmektedir. Burada *Cut-off SF* başlığı altında  $R_s$  parametresi için  $3.7\text{Å}$ ,  $R_c$  parametresi için  $5.6\text{Å}$  değerleri girilir.

Hedef örgü üzerine gönderilecek olan atomların hedef yüzeydeki atomlar ile çarpışma biçimini belirleyen IMP dosyası *Spider* programında *Impact/New* yolu izlenerek açılan pencerede düzenlenir. Bu pencere ve simülasyon için girilmesi gereken değerler Şekil 4.26'da gösterilmiştir.



Şekil 4.26. IMP dosyasının düzenlendiği pencere ve simülasyon için girilen değerler.

Bu simülasyon projesinde birincil çarpma bölgesi olarak bul birim hücrenin bir yüzü belirlenmiştir. Bunun için  $bx$  kutusuna paladyum atomunun örgü sabiti olan 3.8907 Å ve  $by$  kutusuna  $y$ -ekseninde atomlar arasındaki mesafe olan 2.75114 Å değeri girilir. Çarpışma sayıları olarak *No. Impacts* kutularına 3890 ve 3751 sayıları girilir. Bu da simülasyonun 10701390 çarpışma içereceği anlamına gelir.

Bu çalışmada inelastik etkiler göz ardı edildiğinden bir INL dosyası oluşturulmamıştır.

#### 4.2.2. Simülasyonun çalıştırılması

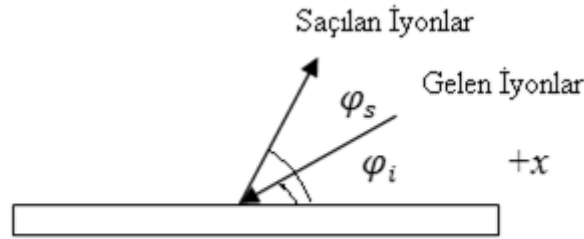
*Spider* ile hazırlanan girdi dosyalarının *Kalypso* ile çalıştırılması için *Kalypso* programında *File/Simulation Project* yolu izlenir ve açılan ekranda *Spider* programı ile oluşturulmuş olan girdi dosyaları seçilerek *Run* komutu verilir. Bu komutun verilmesi ile simülasyon çalışmaya başlar. Yaklaşık olarak  $10^7$  mertebesinde çarpışmanın gerçekleştiği böyle bir simülasyonun tamamlanması 18 saat kadar sürmektedir.

#### 4.2.3. Sonuçların elde edilmesi ve değerlendirilmesi

Simülasyonun tamamlanmasının ardından *Kalypso* programının oluşturduğu SNK dosyalarında yer alan verilerin işlenmesi için *Winnow* programı açılır. *Winnow*

programında *Process/Filter* yolu izlenerek açılan pencerede simülasyon sonucunda elde edilen verilerin filtrelenmesi işlemi gerçekleştirilecektir.

Deneysel çalışmanın gerçekleştirildiği saçılma açısı  $\theta_s = 165^\circ$  olarak verilmiştir. Bu durumda geri saçılan atomlar için geliş açıları  $\varphi_i$  ile çarpışma sonrası yükseklik açıları  $\varphi_s$  arasındaki fark  $15^\circ$  civarında olmalıdır. Yüzeiden geri saçılan atomlar için Şekil 4.27’de şematik bir gösterim yer almaktadır.



**Şekil 4.27.** Pd (110) yüzey üzerine gelen ve yüzeyden saçılan atomlar ve atomların geliş ve saçılma açılarının şematik gösterimi.

Şekil 4.27’den de görüleceği gibi  $165 \pm 2$  derecelik bir saçılma açısında gerçekleşen bir deney için geri saçılan atomlar için, çarpışma sonrası yükseklik açıları  $\varphi_s$  ile çarpışma öncesi geliş yükseklik açıları  $\varphi_i$  arasında,

$$|\varphi_s - \varphi_i| < 17 \quad (4.4)$$

ve

$$|\varphi_s - \varphi_i| > 13 \quad (4.5)$$

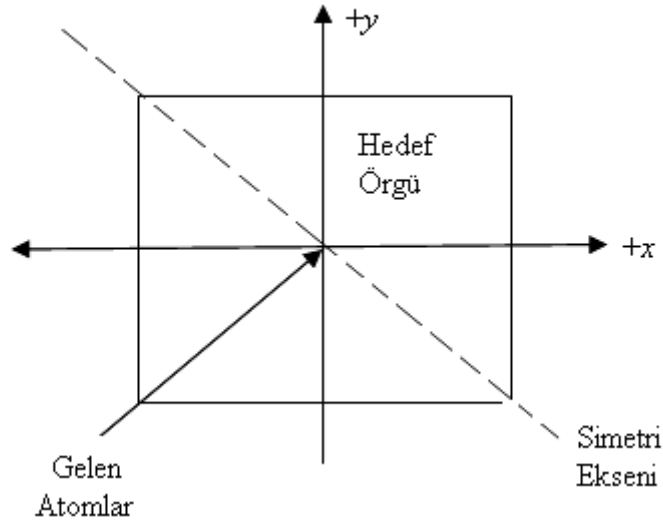
ifadeleri yazılabilir. Bu ifadeler *Winnow* programının sorgu dilinde,

$$[\text{abs}(\text{alt-bx}) < 17.0] \ \& \ [\text{abs}(\text{alt-bx}) > 13.0]$$

biçiminde ifade edilir.

Hedef örgüye  $315^\circ$ ’lik bir azimut açısı ile gelen iyonlar arasından  $\theta_s = 165.0^\circ$ ’lik saçılma açısı ile geri saçılanlar dikkate alınmalıdır (Niehus et. al. 1993). Bunun için projectile atomlarının azimutal geliş açılarına dik olacak biçimde çizilecek bir simetri ekseninden geriye doğru saçılan atomlar ile ilgilenilir. Bu durumu açıklayan bir gösterim Şekil 4.28’de verilmiştir.





**Şekil 4.28.** 315 derecelik bir azimutal geliş açısı ile hedef örgüye yaklaşan iyonlar için simetri eksenini.

Şekil 4.28'den de görüleceği gibi geri saçılan atomların çarpışma sonrası azimut açıları  $\phi_s$ ,  $225^\circ$ 'den  $360^\circ$ 'ye veya  $0^\circ$ 'den  $45^\circ$ 'ye kadar olan değerler alabilir. Bu koşulları Winnow sorgu dilinde yazılırsa;

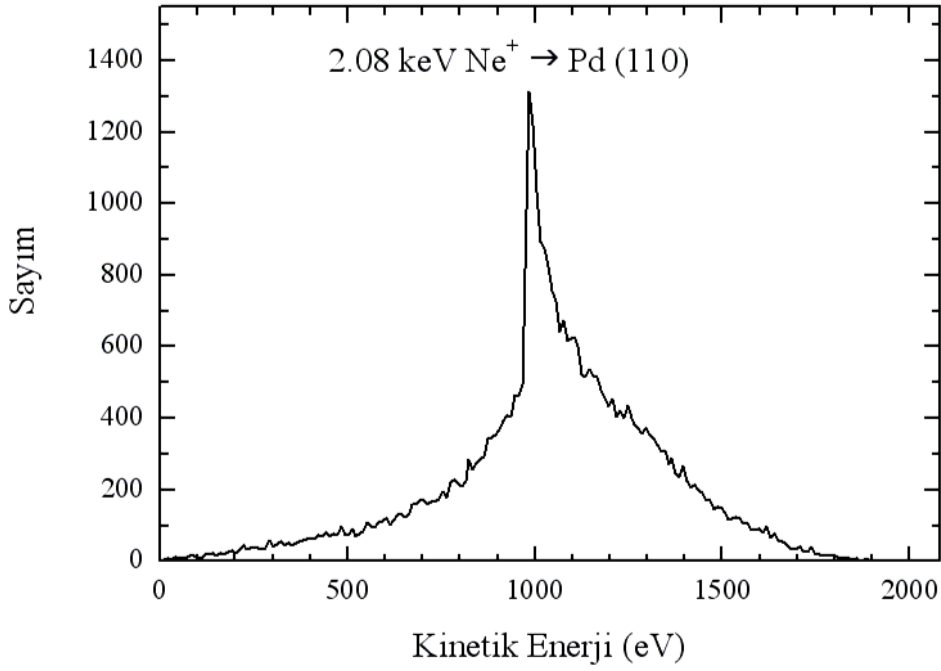
$$[\text{phi} > 225.0] \mid [\text{phi} < 45.0]$$

ifadesi elde edilir. Bu koşullar bir arada,

$$[[\text{phi} > 225.0] \mid [\text{phi} < 45.0]] \ \& \ [\text{abs}(\text{alt-bx}) < 17.0] \ \& \ [\text{abs}(\text{alt-bx}) > 13.0]$$

biçiminde yazılabilir. Bu koşullar ilgili SNK doyasının seçili olduğu Winnow programının filtreleme ekranında *Query expression* başlığı altında yazılıp filtreleme işlemi gerçekleştirildiğinde oluşan yeni dosya toplam verilerin ancak % 0.4 kadarını bulundurmaktadır.

Yukarıda anlatılan saçılma koşullarını sağlayan atomlar için bir kinetik enerji spektrumu çizmek için Winnow programında *Process/Spectrum* yolu izlenerek açılacak olan pencerede filtreleme sonu oluşan yeni dosya seçilir. Spektrumun alt limiti olarak 0. üst limit olarak başlangıç kinetik enerjisi olan 2080 eV değeri girilir. Oluşan spektrum Şekil 4.29'da verilmiştir.

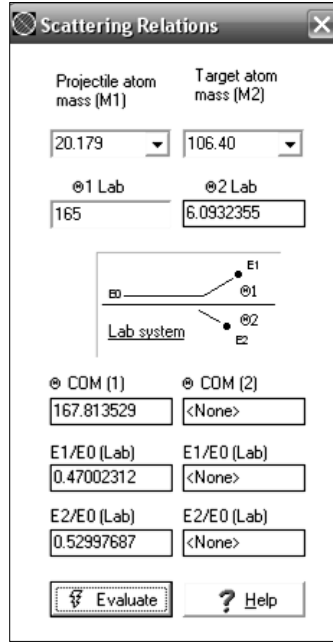


**Şekil 4.29.** Pd(110) yüzeyinden saçılan Ne<sup>+</sup> iyonlarının kinetik enerji spektrumu.

Şekil 4.29 dikkatle incelendiğinde saçılan Ne<sup>+</sup> iyonlarının kinetik enerji spektrumunun pik noktası 984.73 eV olduğu görülür.

Deneysel çalışmada birbirleriyle çarpışan neon ve paladyum atomlarının 165°'lik saçılma açısıyla kafa kafaya çarpıştıklarındaki enerji aktarımı oranı *Winnow* programında *Utilities* sekmesi altında bulunan *Scattering Relations* aracı ile hesaplanabilir. Bu araç için açılan pencere Şekil 4.30'da gösterilmiştir.

Şekil 4.30'da görülen pencerede *Projectile atom mass* kutusuna simülasyonda kullanılan Ne atomunun 20.179 akb ve *Target atom mass* kutusuna da paladyum atomunun kütlesi olan 106.40 akb değerleri girilir. Deneyin gerçekleştirildiği 165 derecelik saçılma açısı  $\Theta_1$  *Lab* kutusuna yazılır. *Evaluate* butonuna basıldığında projectile atomunun çarpışma öncesindeki enerjisinin çarpışma öncesindeki enerjisine oranı yaklaşık olarak 0.47 olarak hesaplanır.



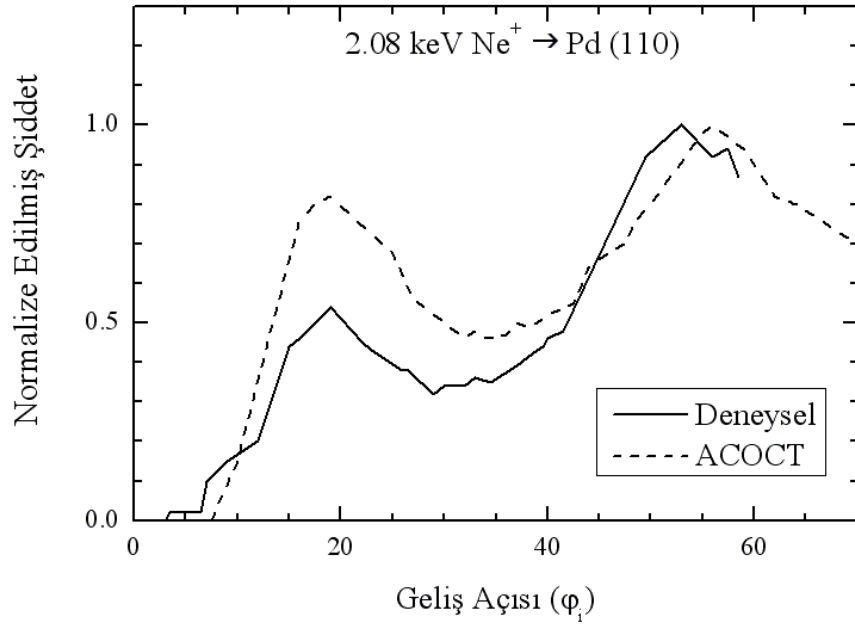
**Şekil 4.30.** Saçılma deneylerindeki bazı verilerin hesaplanmasını sağlayan *Scattering Relations* aracı.

Simülasyonda elde edilen 984.73 eV'luk pik değeri başlangıç enerjisi 2080 eV'a oranlandığında yaklaşık olarak 0.47 oranı elde edilir. Buna göre bundan sonraki aşamada enerji değeri 984.73 eV civarında olan atomlar dikkate alınacaktır. Bunun için *Winnow* ile ikinci bir filtreleme işlemi,

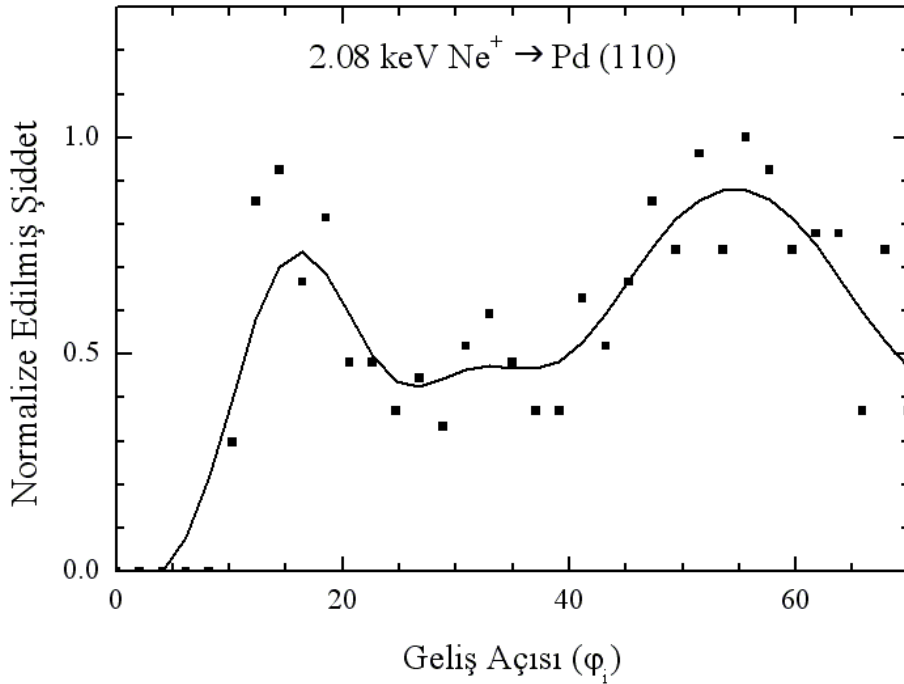
$$[ke > 982.0] \ \& \ [ke < 987.0]$$

koşulları ile yapılır. Bu işlemle saçılan iyonlar arasından kinetik enerjisi 982 ile 987 eV arasında değişenler ayrı bir dosyada toplanmış olur.

Simülasyonu yapılan deneysel çalışma sonucu elde edilen şiddet-geliş açısı grafiği ve ACOCT ile gerçekleştirilen simülasyon ile elde edilen şiddet - geliş açısı grafiği Şekil 4.31'de görülmektedir. Bu grafik incelendiğinde ACOCT kodu ile yapılan simülasyon çalışmasında deneysel sonuçlarda  $\varphi_i = 19^\circ$ 'de görülen ilk pik noktasının yine  $\varphi_i = 19^\circ$ 'de görüldüğü; deneysel çalışmada  $\varphi_i = 53^\circ$ 'de görülen ikinci pik noktasının da ACOCT simülasyonunda  $\varphi_i = 56^\circ$ 'de görüldüğü görülmektedir.



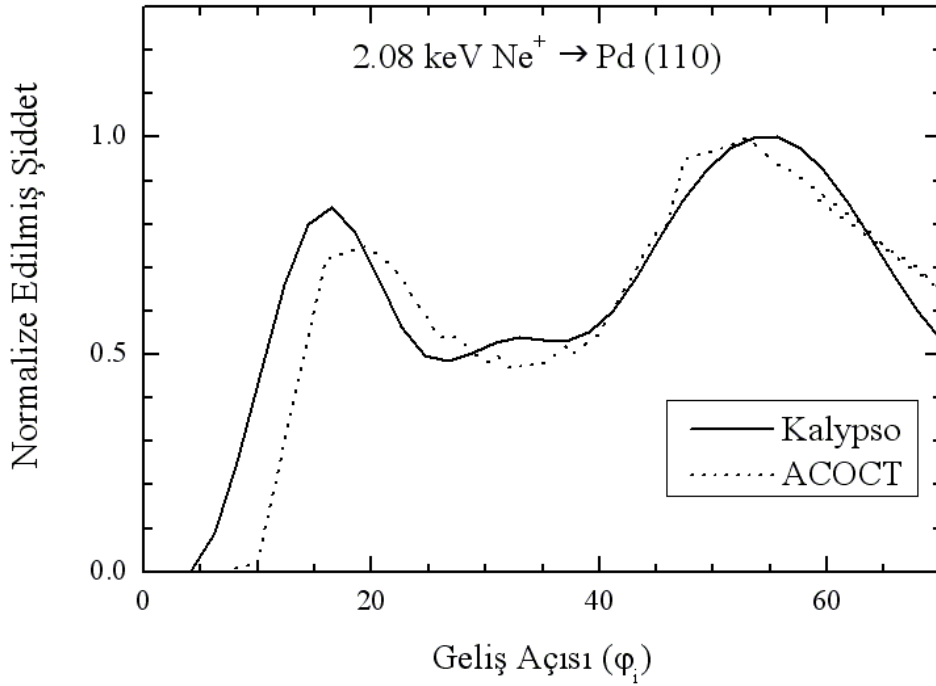
**Şekil 4.31.** Pd (110) yüzey üzerine Ne<sup>+</sup> iyonları gönderilerek yapılan deneysel çalışmanın ve bu deneyin ACOCT programı ile simüle edilmesiyle elde edilen normalize edilmiş şiddet-geliş açısı grafikleri.



**Şekil 4.32.** Pd (110) yüzey üzerine gönderilen atomlar için normalize edilmiş şiddet - geliş açısı grafiği.

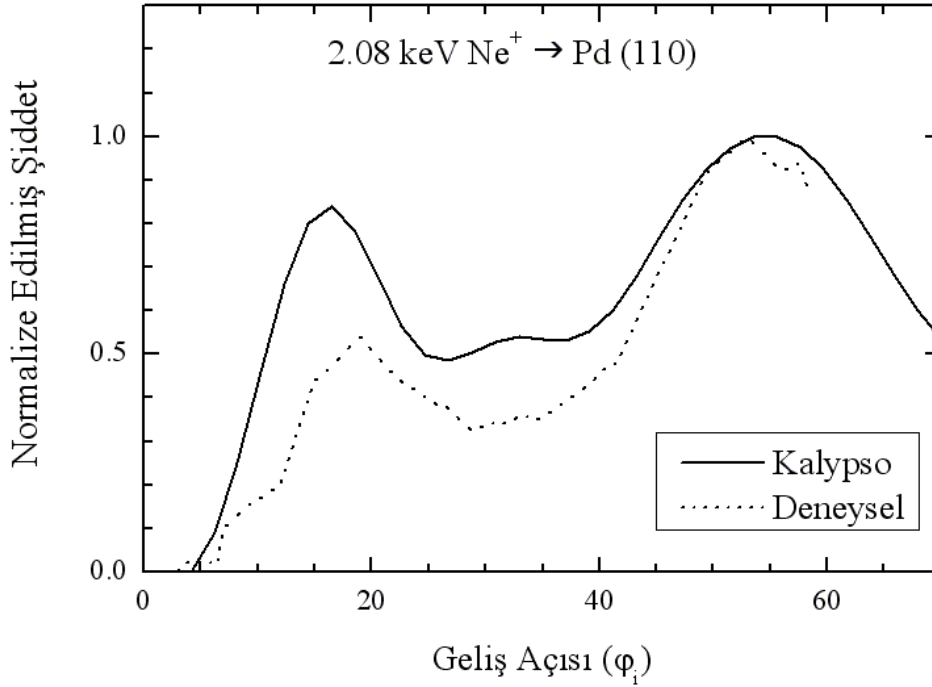
Enerjisi simülasyonda elde edilen 984.73 eV'luk pik değeri civarındaki parçacıklar için bir şiddet – geliş açısı grafiği ise Şekil 4.32'de görülmektedir.

Bu tez çalışması için *Kalypso* programı ile gerçekleştirilen simülasyon ile elde edilen sonuçlar ile ACOCT programının sonuçları Şekil 4.33'te yer alan grafikte kıyaslanmıştır. Bu grafikte de görüldüğü gibi *Kalypso* ile elde edilen grafikte ilk pik noktası  $\varphi_i = 16,5^\circ$ 'de, ACOCT simülasyonunda  $\varphi_i = 56^\circ$ 'de görülen ikinci pik noktası  $\varphi_i = 55^\circ$ 'de görülmektedir. Her iki program ile gerçekleştirilen simülasyonlarda da şiddet büyüklüklerinin yaklaşık olarak aynı olduğu söylenebilir. Bununla birlikte *Kalypso* sonuçlarında ilk pik için şiddet büyüklüğü ACOCT sonuçlarına göre biraz daha yüksektir.



**Şekil 4.33.** Aynı deneyin *Kalypso* ve ACOCT simülasyon programları ile elde edilen şiddet – geliş açısı grafikleri.

*Kalypso* programı ile elde edilen sonuçlar ile deneysel çalışmanın sonucunda çizilen şiddet – geliş açısı grafiği Şekil 4.34'te birlikte gösterilmiştir. Bu tez çalışması için gerçekleştirilen simülasyon sonuçları ve deneysel sonuçlar birlikte değerlendirildiğinde; genel anlamda bir benzerlik görülmekle birlikte pik noktalarının birkaç derecelik sapmalar gösterdiği ve şiddet büyüklükleri anlamında da uyumsuzluklar olduğu söylenebilir.



**Şekil 4.34** Kalypso ile elde edilen sonuçlar ve deneysel sonuçların karşılaştırılması

Simülasyonun düzeltilmesiz olarak kullanılan potansiyel modeli için deneme yanılma yöntemi ile uygun düzeltme katsayıları bulunarak deneysel sonuçlarla daha uyumlu sonuçların alınması beklenebilir. Ayrıca deneyde kullanılan hedef yüzey ve doğrultusu hakkında ayrıntılı bilgi sahibi olunması halinde daha gerçekçi bir hedef örgü düzenlenebilir.

Deneysel çalışma ve simülasyonlardan elde edilen sonuçlar üzerinde genel bir değerlendirme yapılacak olursa şiddet – geliş açısı grafiklerinde görülen pik noktalarına karşılık gelen geliş açısı değerlerinde oluşan gölge koniler etrafında bir odaklanma meydana geldiği söylenebilir. Geliş açısı değerlerine bakıldığında ve hedefteki paladyum (110) örgüsünün yüzey merkezli kübik yapısı göz önüne alındığında şiddet – geliş açısı grafiklerinde görülen ilk pik noktasının ağırlıklı olarak ilk tabakada yer alan atomlardan, ikinci pik noktasının ise yine ağırlıklı olarak ikinci tabakada yer alan atomlardan saçılan iyonları ifade ettiği düşünülebilir.

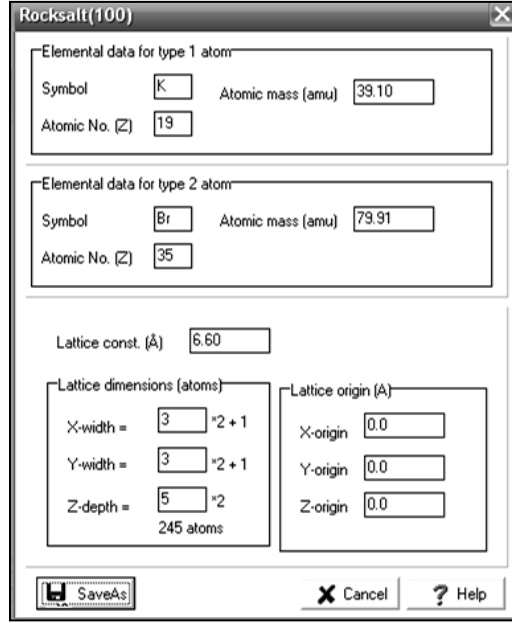
### 4.3. Potasyum Bromür (100) Yüzeyinden Neon İyonları Saçılması

Bu tez çalışmasında yer alan üçüncü uygulama potasyum bromür üzerine iki farklı azimutal geliş doğrultusundan gönderilen Ne iyonlarının (100) yüzeyinden saçılması gözlemlendiği bir deneysel çalışma simüle edilmiştir. Simülasyonu yapılan deneysel çalışma Andreas Losch ve Horst Niehus tarafından Berlin Humbolt Üniversitesi Fizik Enstitüsü'nde gerçekleştirilmiş ve 1999 yılında Surface Science dergisinde “*Structure analysis of the KBr(100) surface: An investigation with a new method for surface analysis of insulators*” başlıklı makalede yayınlanmıştır. Çalışmada KBr (100) üzerine [110] ve [210] azimutal geliş doğrultularından 3 keV enerjili Ne iyonları gönderilmiştir (Losch and Niehus 1999). Yapılan saçılma deneylerinin sonunda saçılan atomlar için şiddet – geliş açısı grafikleri çizilmiştir. Losch ve Niehus deneysel çalışmalarını FAN adlı bir moleküler dinamik simülasyon programında simüle etmiştir. Gerçekleştirdikleri simülasyonda KBr(100) hedef örgüsünün ilk tabakasında bulunan potasyum atomları için 0.5 Å, brom atomları için ise 0.3 Å içeri yönde durulma (*relaxation*) uygulayarak deneysel sonuçlarla en uyumlu sonuçları elde etmiştir.

Bu tez çalışmasında deney önce durulma etkisi olmadan simüle edilmiş, sonra da durulma etkisi de sisteme dâhil edilerek simülasyonlar tekrarlanmıştır. Durulma etkisini içeren ve içermeyen simülasyonların sonuçları kendi aralarında karşılaştırıldığı gibi deneysel sonuçlarla olan uyum ya da uyumsuzlukları incelenmiştir.

#### 4.3.1. Simülasyon projesinin hazırlanması

Simülasyonda yer alacak KBr (100) hedef örgüsü *Spider* programında *Target/New/Rocksalt (NaCl)/(100) surface* yolu izlenerek açılan pencerede düzenlenir. Bu yol izlendiğinde açılan pencere ve oluşturulan KBr (100) örgüsü için girilen parametreler Şekil 4.35'te gösterilmiştir.



Şekil 4.35. KBr (100) hedef örgüsünün oluşturulduğu TRG dosyası penceresi.

Şekil 4.35'te gösterilen pencerede *Elemental data for type 1 atom* başlığı altında potasyum atomunun atom numarası olan 19, atom kütlesi 39.10 akb değerleri girilir. Aynı pencerede *Elemental data for type 2 atom* başlığı altına brom atomunun atom numarası 35 ve atom kütlesi 79.91 akb değerleri girilir. KBr kristalinin örgü sabiti olan  $6.6\text{\AA}$  değeri *Lattice const.* diyalog kutusuna girilir. *Save As* butonu tıklanarak kaydedilen bu TRG dosyası durulma etkisi içermeyen bir yüzeyi temsil eder. Dosya bu haliyle 245 atomlu bir hedef örgü tanımlamaktadır.

Durulma etkisini içeren bir hedef dosyası oluşturmak için yukarıda anlatılan biçimde oluşturulmuş olan ve durulma etkisi içermeyen TRG dosyası bir metin düzenleyici yardımı ile açılır. Açılan bu dosyanın üçüncü sütununda atomların *z*-eksenindeki konumu, dördüncü sütununda ise ilgili atomun atom numarası yer alır. *z*-eksenindeki konumu için 0.0000 yazan atomlar birinci tabaka atomlardır. Metin düzenleyicisinin *Değiştir* fonksiyonu kullanılarak durulma etkisi simülasyona dahil edilebilir. Bunun için *Değiştir* için açılan küçük pencerede *Aranan* kutusuna

```
0.00000 19 39.10000 0 K
```

ifadesi girilir. Potasyum için kullanılacak olan durulma etkisi olan içeri yönde  $0.5\text{\AA}$  değeri *Yeni değer* kutusuna,

```
-0.50000 19 39.10000 0 K
```



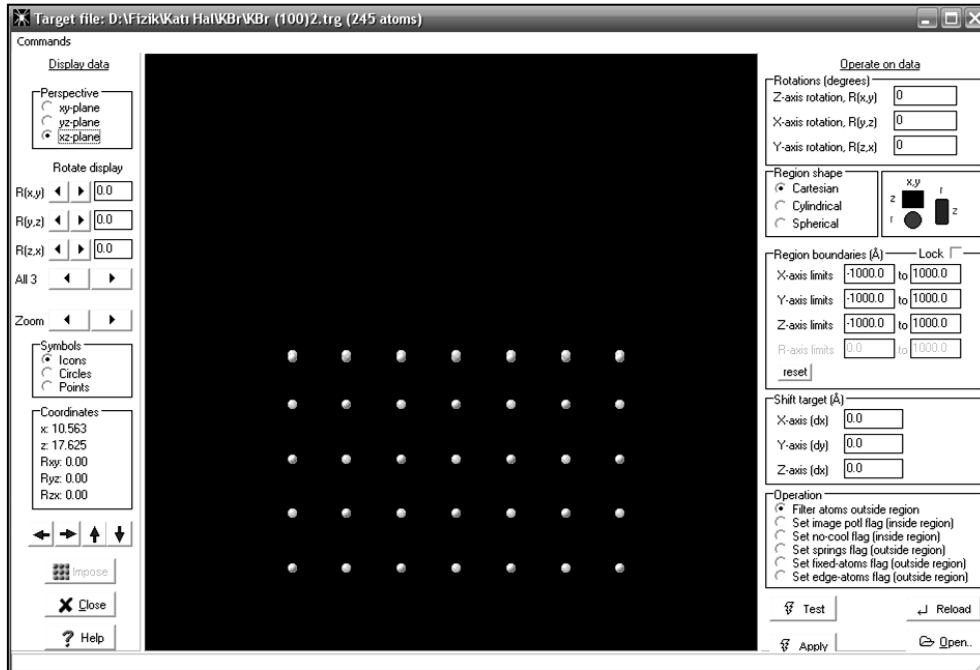
olarak girilir. Benzer şekilde brom için uygulanacak olan  $0.3\text{\AA}$  durulma için *Aranan* kutusuna,

0.00000 35 79.91000 0 Br

ifadesi, *Yeni Değer* kutusuna ise,

-0.30000 35 79.91000 0 Br

ifadesi girilir. Bu şekilde durulma etkisini içeren TRG dosyası farklı bir adla kaydedilir. Bu çalışma da her iki TRG dosyası için simülasyonlar tekrarlanacak ve durulma etkisinin ISS simülasyonuna etkileri gözlenecektir. Durulma etkisini içeren yeni dosya Spider programının görüntüleme aracı ile görüntülenebilir. Durulma etkisini içeren TRG dosyası Şekil 4.36'da gösterilmiştir.



Şekil 4.36. Durulma etkisini içeren TRG dosyasının  $xz$ -düzleminde görünümü.

Şekil 4.36 dikkatle incelendiğinde farklı durulmalar uygulanan potasyum ve brom atomlarının ilk tabakada yani yüzeyde bir buruşukluk (*rumpling*) meydana getirdikleri görülür. Simülasyonda uygulanacak olan periyodik sınır koşulları uygulanacağından daha önceki bölümlerde de değinildiği gibi  $xy$ -düzleminde görüntülenen KBr yüzeyinde  $-x$  ve  $-y$  yönlerindeki birer sıra atom silinir. Simülasyonda yer alacak olan dosyanın son hali 180 atom içermektedir. Bu simülasyon projesinde durulma etkisini içeren ve içermeyen olmak üzere iki farklı TRG dosyası yer almaktadır.

Simülasyonda yer alacak Ne iyonları için PRJ dosyasının düzenlendiği ekranda *Elemental Symbol* başlığı altında Ne sembolü seçilir ve *Energy* diyalog kutusuna 3 keV girilir.

Bu simülasyon projesinde iki farklı azimutal geliş doğrultusu için iki farklı RUN dosyası düzenlenmiştir. Her iki dosyada da hedef atomların kendi aralarındaki etkileşmelerin yok sayılması için *Ignore interactions between target atoms* seçeneği işaretlenir. İki dosyada da periyodik sınır koşulları için girilecek olan  $L_x$  ve  $L_y$  parametreleri için  $L_x = L_y = 6 \times d = 6 \times 3.3 = 19.8$  değerleri girilir. KBr(100) örgüsünde atomlar arası mesafe hem  $x$  hem de  $y$ -eksenleri için 3.3 Å'dür. Simülasyondaki adımların hangi şartlarla sonlandırılacağı belirlendiği *Termination criteria* başlığı altında; iyonların  $z$ -ekseninde ulaşabilecekleri en alt nokta için  $z_{min}$  kutusuna 16.5 Å, en üst nokta için ise  $z_{max}$  kutusuna (bu tez çalışmasındaki bütün uygulamalarda olduğu gibi) 4.5 Å ve simülasyon adımının maksimum süresi için *Termination, maximum time* kutusuna 50 fs değerleri girilir.

Her iki dosyada da *Altitudinal angle* diyalog kutusuna -2 değeri girilir. Böylece yüzeye gönderilen iyonların yükseklik geliş açısı -2'den 90 dereceye kadar rastgele değerler olacaktır. Simülasyonun gerçekleştiği sıcaklık değeri için 300° K değeri *Lattice vibrational temperature* kutusunu girilir. Başlangıç zaman adımı olarak bir Ne atomunun 0.05 Å mesafesini kat etmesi için gerekli olan 0.03 fs değeri RUN dosyasının düzenlendiği pencerenin ikinci sayfasındaki *initial timestep* kutusuna girilir. İki dosya arasındaki tek farklılık [110] azimutal geliş doğrultusu için *Azimuthal angle* kutusuna 45°, [210] azimutal geliş doğrultusu için ise 26.565° değerlerinin girilmesidir.

Simülasyonda kullanılacak potansiyel modelinin seçildiği ve potansiyellerin uygulanması ile ilgili parametrelerin girildiği MDL dosyası Şekil 4.37 (a),(b) ve (c)'de gösterilmiştir. Gerçekleştirilecek olan simülasyon çalışmasında iki atomdan oluşan bir kristal ve bir soygaz atomu yer aldığından MDL dosyası birinci sayfasındaki *Set system type* başlığı altındaki *Bi-metallic with inert atoms* seçeneği seçilir. *Screening lengths for I – M and M – M interactions* başlığı altında  $I$  kutusuna neonun atom numarası olan 10,

$M(0)$  kutusuna potasyumun atom numarası olan 19,  $M(1)$  kutusuna ise bromun atom numarası olan 35 sayıları girilir.

*Set screening length* başlığı altında simülasyonda kullanılacak potansiyel modeli olan ZBL seçilir ve *Constants for I – M and M – M potential* başlığı altında da ZBL seçimleri yapılır.

ISS simülasyonlarında hedef atomların kendi aralarındaki etkileşmeleri ihmal edildiğinden MDL dosyasının ikinci sayfasında yer alan sıkı-bağ potansiyeli parametrelerinin simülasyona bir etkisi olmayacaktır.

Anahtarlama fonksiyonları parametrelerinin girileceği MDL dosyası üçünü sayfasında kesme uzaklığı olarak  $R_c$  kutusuna 6.7 Å değeri girilir.  $R_c$  kesme uzunluğunun KBr kristalinin örgü sabiti 6.60 Å değerinden büyük olarak seçilmiştir.

Model file D:\Fizik\Katı Hal\KBr\KBr (100).mdl

Screened Coulombic potentials | Tight-binding potentials | Switching functions

Screened Coulombic potential: I = inert atom, M(0), M(1) = metallic atoms

Set system type [disables unneeded items]

- Mono-metallic with inert atom(s)
- Mono-metallic without inert atom(s)
- Bi-metallic with inert atom(s)
- Bi-metallic without inert atoms

Constants (b, c) for I-M and M-M potential

	Inert - Metal	Metal - Metal
c1	0.028171	0.028171
c2	0.28022	0.28022
c3	0.50986	0.50986
c4	0.18175	0.18175
b1	0.20162	0.20162
b2	0.40290	0.40290
b3	0.94229	0.94229
b4	3.1998	3.1998

Set screening length

- ZBL
- Molière-Lindhard
- Molière-Firsov
- (no action)

Screening lengths (a) for I-M and M-M interactions

Atomic numbers

I: 10 M(0): 19 M(1): 35

	Screening length (Å)	Correction
I - I	0.137937142	1
I - M(0)	0.1277740115	1
I - M(1)	0.1182012041	1
M(0) - M(0)	0.1190057362	1
M(0) - M(1)	0.1106587706	1
M(1) - M(1)	0.1034059606	1

Set

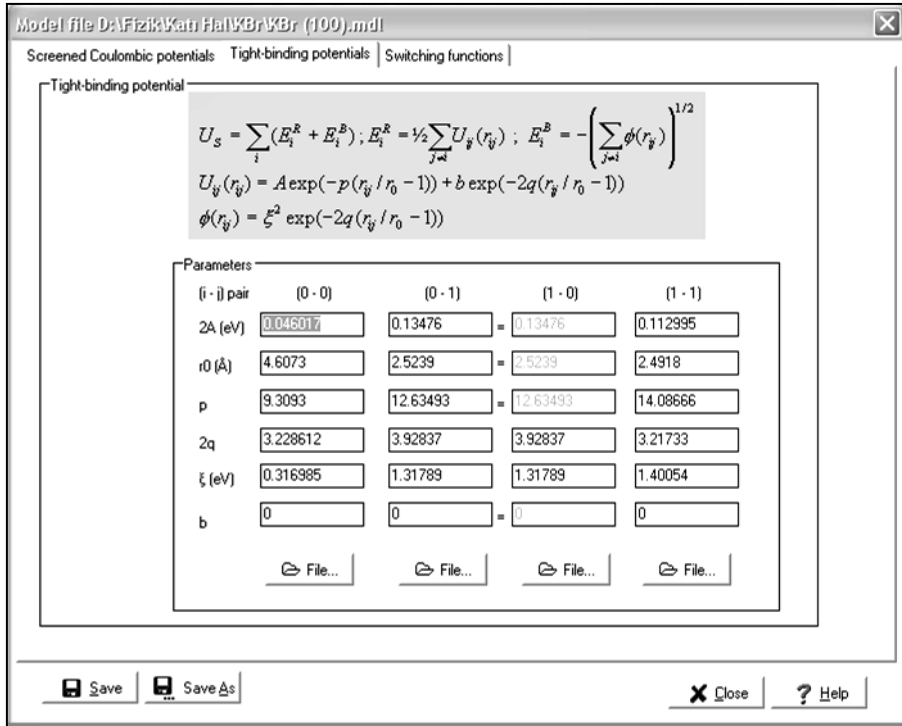
- ZBL
- Molière
- (no action)

Set

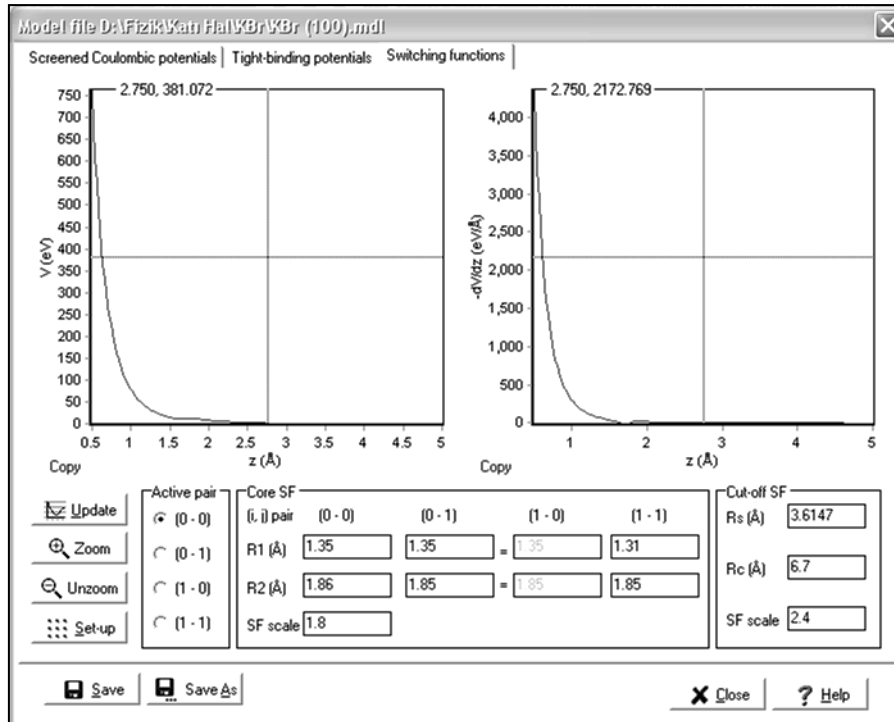
- ZBL
- Molière
- (no action)

Save Save As Close Help

(a)



(b)



(c)

Şekil 4.37. KBr simülasyonunda kullanılan MDL dosyasının (a) birinci, (b) ikinci, (c) üçüncü sayfası.

Simülasyonda gerçekleşecek olan çarpışmanın biçimini belirleyen IMP dosyası bu simülasyonda iki farklı azimutal geliş doğrultusu için ayrı ayrı düzenlenmiştir. [110] geliş doğrultusu için Çizelge 2.7'den yararlanılarak *bx* kutusuna 4.667 ve *by* kutusuna 2.333 değerleri girilir. Çizelge 2.7 sıfır derecelik azimutal geliş açısı için hedef yüzeyin yüzey normali etrafında 45 derece döndürülmesini öngörür. Ancak bu çalışmada periyodik sınır koşulları uygulandığından hedef yüzey döndürülmemiş RUN dosyasında *Azimuthal Angle* kutusuna 45 derece girilerek atomların 45 °'lik azimut açısıyla hedefe çarpmaları sağlanmıştır. IMP dosyasının da bu tercihlerle uyumlu olabilmesi için *Spider* programında *Impact/Visualizer* yolu ile ulaşılan pencerede *Z-axis rotation* kutusuna 45 değeri girilerek Çizelge 2.7 ile tanımlanan birincil çarpma bölgesinin *z*-ekseni etrafında 45 derece döndürülmesi sağlanır. [210] azimutal geliş yönü için birincil çarpma bölgesi bulk birim hücrenin bir yüzü olarak seçilir (Karolewski 2005). Dolayısıyla bu geliş doğrultusu için hazırlanan IMP dosyasında *bx* ve *by* için KBr kristal örgüsündeki atomlar arası mesafe olan 3.3 Å değeri girilir. Her iki geliş doğrultusu için de 10<sup>6</sup> mertebesinde çarpışma gerçekleştirecek şekilde *No. Impacts* kutusuna girişler yapılır.

Simülasyon inelastik etkileri içermediğinden inelastik dosyası hazırlanmamıştır.

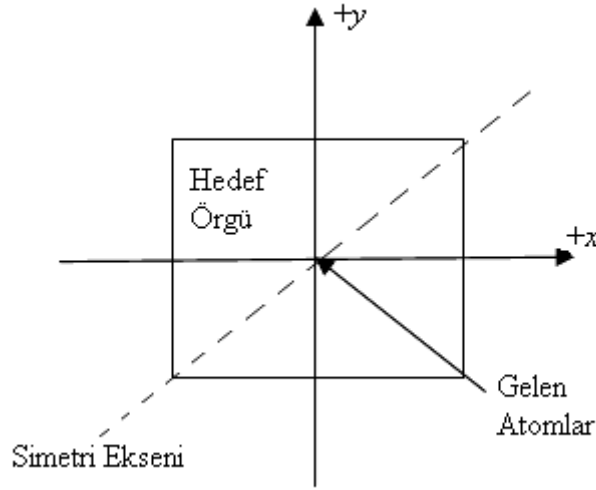
#### 4.3.2. Simülasyonun çalıştırılması

Durulma etkisinin uygulanmadığı hedef yüzeyi tanımlayan TRG dosyası ile her iki azimutal geliş açısı için düzenlenmiş olan RUN ve IMP dosyaları ayrı ayrı kullanılarak iki simülasyon gerçekleştirilir. Benzer şekilde durulma etkisinin bulunduğu TRG dosyası ile birlikte ilgili PRJ, RUN, MDL ve IMP dosyaları seçilerek iki ayrı azimutal geliş açısı için deney tekrarlanır. Bu şekilde toplam dört simülasyon gerçekleştirilmiş olur.

#### 4.3.3 Sonuçların elde edilmesi ve değerlendirilmesi

*Kalypso* tarafından gerçekleştirilen dört simülasyondan sonra oluşan dört ayrı SNK dosyasında buluna veriler *Winnow* ile işlenir.

İlk olarak Ne atomlarının [110] azimutal doğrultusu ile hedefe gönderildiği dosyalar değerlendirilmiştir. Hedef örgüye  $45^\circ$ 'lik bir azimut açısı ile gelen iyonlar arasında geri saçılan atomlar dikkate alınmalıdır. Bunun için projectile atomlarının azimutal geliş açılarına dik olacak biçimde çizilecek bir simetri ekseninden geriye doğru saçılan atomlar ile ilgilenilir. Bu durumu anlatan bir gösterim Şekil 4.38'de görülmektedir.



**Şekil 4.38.** 45 derecelik azimutal geliş açısı ile hedef yaklaşan atomlar için geri saçılan atomların gözleneceği simetri eksenini.

Azimutal geliş açısı  $\phi_i$ ,  $45^\circ$  olan bir iyon demeti için çarpışma sonrası azimut açısı  $\phi_s$ , 135 dereceden küçük veya 315 dereceden büyük olan atomlar geri saçılan atomlar olarak dikkate alınır. SNK dosyalarında bu şartları taşıyan atomları belirlemek için *Winnow* sorgu dilinde,

$$[\phi < 135.0] \mid [\phi > 315.0]$$

ifadesi ile bir filtreleme yapılmalıdır. Deneysel çalışma  $\theta_s = 177^\circ$ 'lik bir saçılma açısı ile gerçekleştirilmiştir. Buna göre saçılan atomların hedef yüzeye çarpmadan önceki geliş yükseklik açıları  $\phi_i$  ile çarpışmadan sonraki yükseklik açıları  $\phi_s$  arasındaki açı  $3^\circ$  civarında olmalıdır. Bu koşul *Winnow* sorgu dilinde  $\pm 2^\circ$ 'lik bir aralık için,

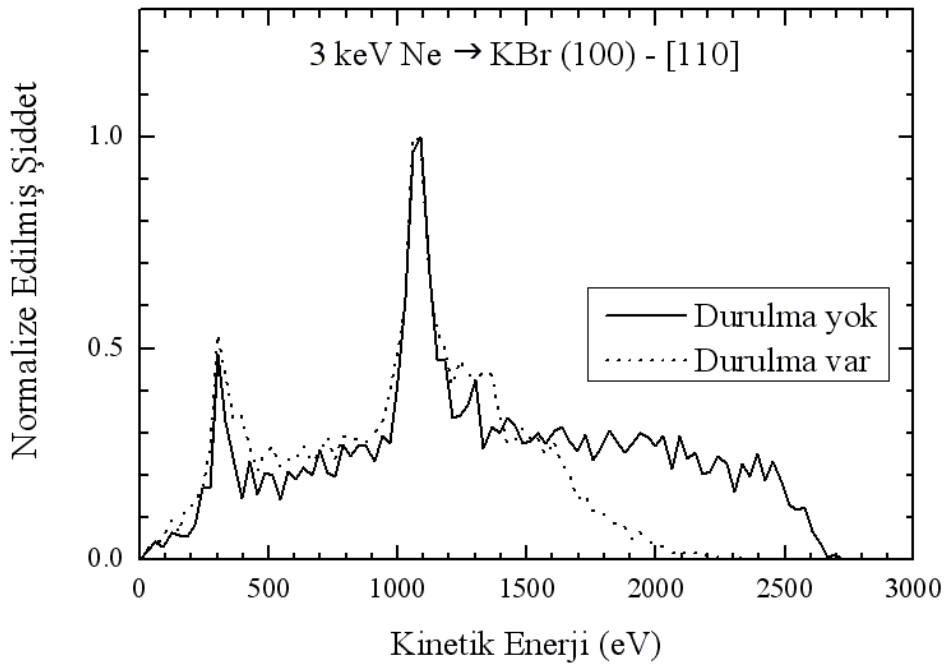
$$[\text{abs}(\text{alt} - \text{bx}) < 5.0] \ \& \ [\text{abs}(\text{alt} - \text{bx}) > 1.0]$$

biçiminde ifade edilebilir. Bu iki koşul bir arada,

$$[[\phi < 135.0] \mid [\phi > 315.0]] \ \& \ [[\text{abs}(\text{alt} - \text{bx}) < 5.0] \ \& \ [\text{abs}(\text{alt} - \text{bx}) > 1.0]]$$

biçiminde yazılır. Bu koşullar ile yapılan filtreleme ile yeni bir SNK dosyası oluşmuş olur. Hem durulma etkisini içeren hem de içermeyen simülasyonlar için aynı filtreleme yapılır.

Yukarıda anlatılan saçılma koşullarını sağlayan atomları için bir kinetik enerji spektrumu alt sınırı 0, üst sınırı (hedefe gönderilen neon atomlarının başlangıç enerji değeri olan 3000 eV) girilerek çıkarılır. Ortaya çıkan spektrum Şekil 4.39’da gösterilmiştir.

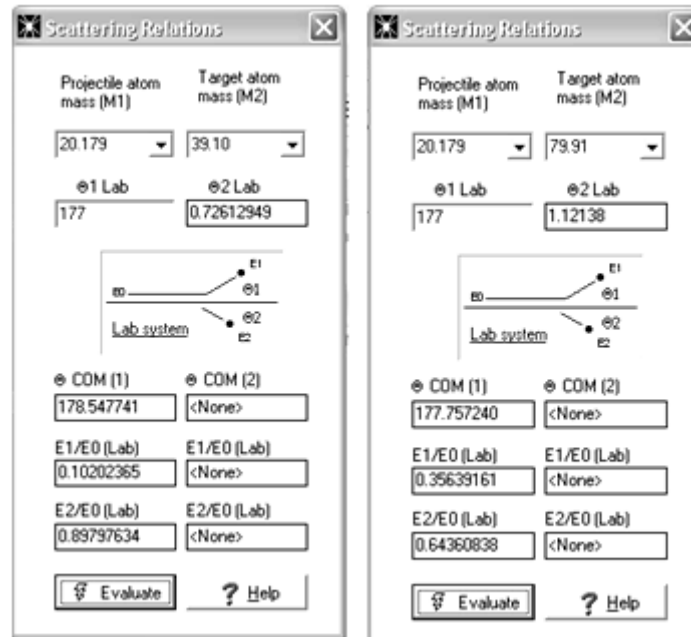


**Şekil 4.39.** KBr simülasyonunda durulma uygulanan ve uygulanmayan durumlar ve [110] azimutal geliş doğrultusu için kinetik enerji spektrumu.

Şekil 4.39’da verilen grafik incelendiğinde daha önceki uygulamada yer alan Şekil 4.29’da verilen kinetik enerji spektrumundan farklı olarak iki pik noktası görülür. Bu farklılığın sebebi neon atomlarının hedef yüzeyde bulunan iki farklı atomdan saçılarak farklı kütlelere sahip olan potasyum ve brom atomları ile çarpışmalarında farklı oranda enerji kaybetmeleridir. Grafikte ayrıca durulma etkisini içeren hedef ile çarpışan neon atomlarının durulma etkisinin uygulanmadığı simülasyondaki neon atomlarına göre daha çok sayıda kafa kafaya çarpışma gerçekleştirdiği söylenebilir.

*Winnow* programının saçılma deneylerindeki enerji aktarımının hesaplanmasını sağlayan *Scattering Relations* aracında çarpışmada yer alan hedef ve projectile atomlarının atom numaraları ve kütleleri ile saçılmanın gerçekleştiği saçılma açısı olan  $\theta_s = 177^\circ$  değerleri girilir. Bu işlemlerin ardından Ne – K çarpışmasının ardından Ne atomunun enerjisinin çarpışma öncesindeki enerjisine oranı için yaklaşık olarak 0.10 ve Ne – Br çarpışması içinde yaklaşık olarak 0.35 değerleri bulunmuştur. Yani başlangıçta 3 keV enerjiye sahip olan neon atomu, çarpışma öncesinde durağan halde bulunan ve görece daha hafif olan potasyum atomuna daha fazla enerji aktarmaktadır. Bu işlemlerin yapıldığı *Scattering Relations* aracı pencereleri Şekil 4.40’ta gösterilmiştir.

Şekil 2.39’da verilen kinetik enerji spektrumu incelendiğinde ilk pik noktasının iki simülasyon için de 303.03 eV değerinde olduğu görülmektedir. İkinci pik noktası ise durulma uygulanan simülasyon için 1060.60 eV, durulma uygulanmayan simülasyon içinse 1090.90 eV değerlerinde görülmektedir. Bu değerler başlangıç enerji değerleri olan 3000 eV ile oranlandığında *Scattering Relations* aracı ile hesaplanan değerlere oldukça yakın olan sonuçlar elde edilir. Bundan sonraki adımda durulma uygulanan simülasyon için çarpışma sonrası kinetik enerjisi 303.03 eV ve 1090.90 eV civarında olan atomlar dikkate alınacaktır.



**Şekil 4.40.** Sırasıyla Ne – K ve Ne – Br çarpışmaları için enerji hesaplamalarının yapıldığı *Scattering Relations* aracı pencereleri.



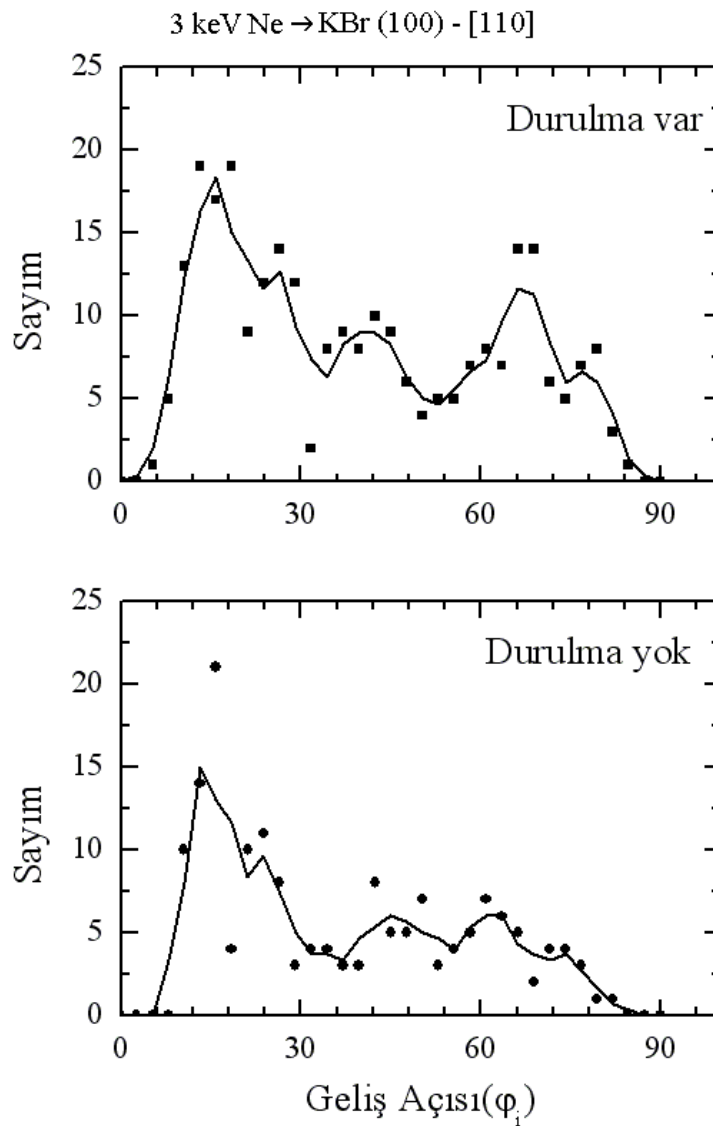
Durulma etkisinin uygulanmadığı simülasyon için çarpışma sonrası kinetik enerjisi 303.03 eV ve 1060.90 eV civarında olan atomlar dikkate alınacaktır. Bu koşullar *Winnow* sorgu dilinde durulmanın uygulandığı durum için,

$$[[ke < 310.0] \& [ke > 298.0]] \mid [[ke < 1070.0] \& [ke > 1056.0]]$$

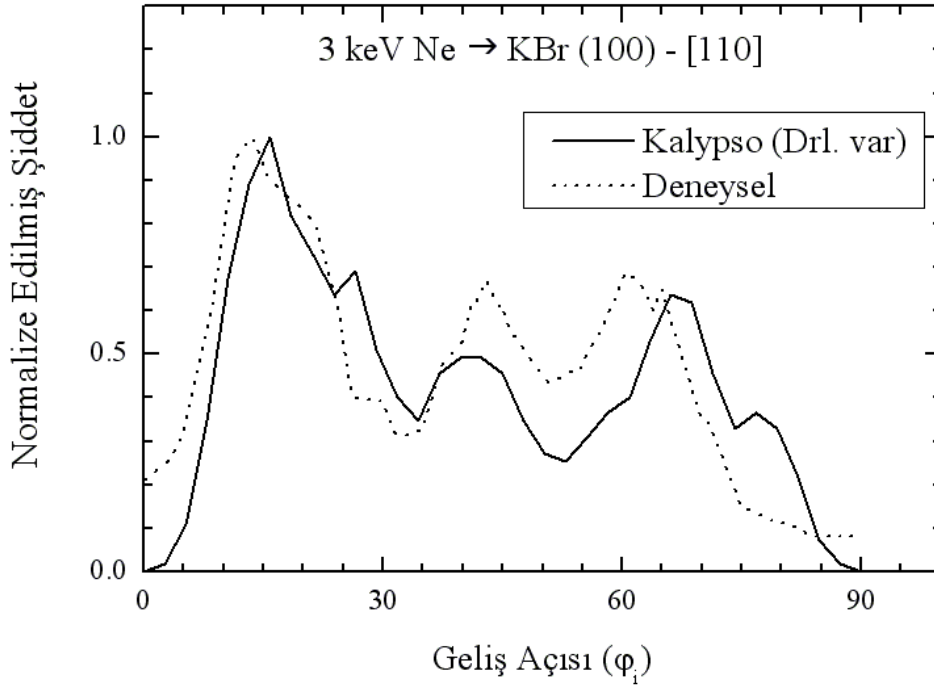
ve durulmanın uygulanmadığı durum için,

$$[[ke < 310.0] \& [ke > 298.0]] \mid [[ke < 1100.0] \& [ke > 1086.0]]$$

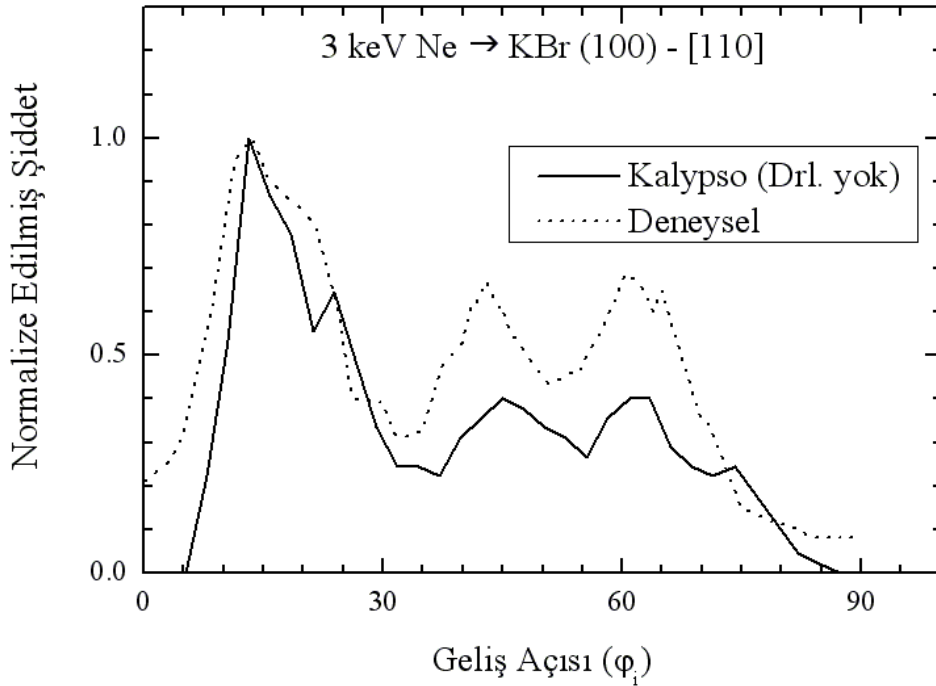
ifadeleri ile filtrelemeler yapılır. Bu işlemlerin ardından iki durum için çizilen şiddet – geliş açısı grafikleri Şekil 4.41’de verilmiştir.



**Şekil 4.41.** KBr simülasyonlarında [110] azimutal geliş doğrultusu ve durulma uygulanan ve uygulanmayan durumlar için şiddet – geliş açısı grafikleri.



**Şekil 4.42.** Hedef örgüye [110] azimutal geliş doğrultusu ile gelen atomlar için durulma etkisinin uygulandığı simülasyon sonuçları ve deneysel sonuçlar.



**Şekil 4.43.** Hedef örgüye [110] azimutal geliş doğrultusu ile gelen atomlar için durulma etkisinin uygulanmadığı simülasyon sonuçları ve deneysel sonuçlar.

Simülasyonlarda elde edilen sonuçların deneysel sonuçlarla karşılaştırıldığı grafikler Şekil 4.42 ve Şekil 4.43'te verilmiştir. KBr (100) hedef örgüsü üzerine [110] azimutal geliş doğrultusu için gerçekleştirilen simülasyon sonuçlarını yansıtan Şekil 4.41, Şekil 4.42 ve Şekil 4.43 birlikte değerlendirildiğinde, durulma etkisini içeren simülasyonların deneysel sonuçlara göre pik ve minimum noktaları bakımından birkaç derecelik sapmalardan söz edilebilir.

Bu grafiklerde şiddet büyüklüğü açısından ise büyük bir farklılık olmadığı söylenebilir. Durulma etkisini içermeyen simülasyon sonuçlarının ise deneysel sonuçlara göre pik ve minimum noktaların uyumu açısından durulma içeren simülasyondan daha başarılı olduğu yorumu yapılabilir. Ancak durulma etkisini içermeyen simülasyon sonuçları ile deneysel sonuçlar arasında durulma içeren simülasyona göre daha büyük şiddet büyüklüğü farkı gözlenmektedir.

KBr (100) hedef örgüsü üzerine [210] azimutal geliş doğrultusu için yapılan simülasyon için yukarıdaki sürece benzer bir süreç izlenir. 26.565 derecelik azimutal geliş açısına dik olan bir simetri ekseni çizilirse bu yönden gelen atomların geri saçılmış olarak nitelendirilmeleri için 116.565 dereceden daha küçük ya da 296.565 dereceden daha büyük bir azimut açısı ile saçılmış olmaları gerekir. Bu koşullar *Winnow* sorgu dilinde yazılırsa,

$$[\text{phi} < 116.565] \mid [\text{phi} > 296.565]$$

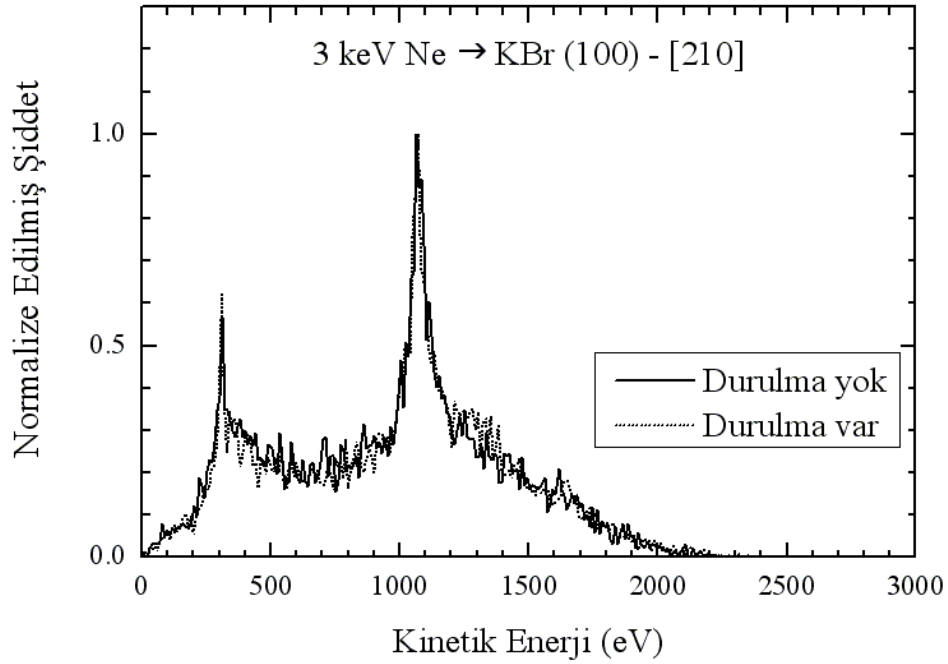
filtreleme ifadesine ulaşılır. Bu koşul yukarıda anlatılan,

$$[\text{abs}(\text{alt} - \text{bx}) < 5.0] \ \& \ [\text{abs}(\text{alt} - \text{bx}) > 1.0]$$

koşulu ile birleştirildiğinde,

$$[[\text{phi} < 116.565] \mid [\text{phi} > 296.565]] \ \& \ [\text{abs}(\text{alt} - \text{bx}) < 5.0] \ \& \ [\text{abs}(\text{alt} - \text{bx}) > 1.0]$$

ifadesine ulaşılır. Bu koşullar ile yapılan filtrelemenin ardından oluşan dosyalar için oluşturulan kinetik enerji spektrumu Şekil 4.44'te gösterilmiştir.



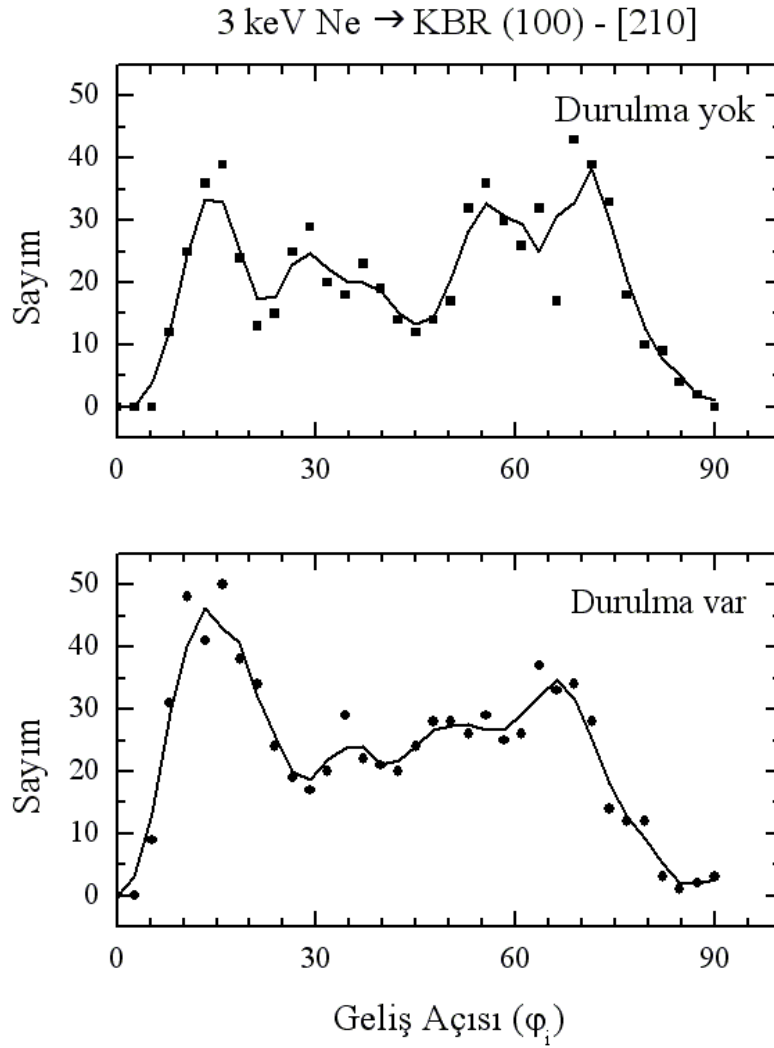
**Şekil 4.44.** KBr simülasyonunda durulma uygulanan ve uygulanmayan durumlar ve [210] azimutal geliş doğrultusu için kinetik enerji spektrumu.

Şekil 4.44'te yer alan grafik dikkatle incelendiğinde spektrumda yer alan ilk pik noktasının her iki durum için de 311.04 eV değerinde olduğu görülür. İkinci pik noktası ise durulma etkisi uygulanan simülasyon için 1063.54 eV, durulma etkisinin uygulanmadığı simülasyonda için 1073.58 eV değerlerinde görülmektedir. Bu değerler projectile atomunun başlangıç enerjisi olan 3000 eV enerji değerine oranlandığında *Scattering Relations* aracı ile hesaplanan oranlara oldukça yakın sonuçlar elde edilir. Bundan sonraki aşamada enerjisi spektrumun pik değerleri civarında olan atomlar dikkate alınacaktır. Bu koşullar *Winnow* sorgu dilinde,

`[[ke > 308.0] & [ke < 318.0]] | [[ke > 1060.0] & [ke < 1080.0]]`

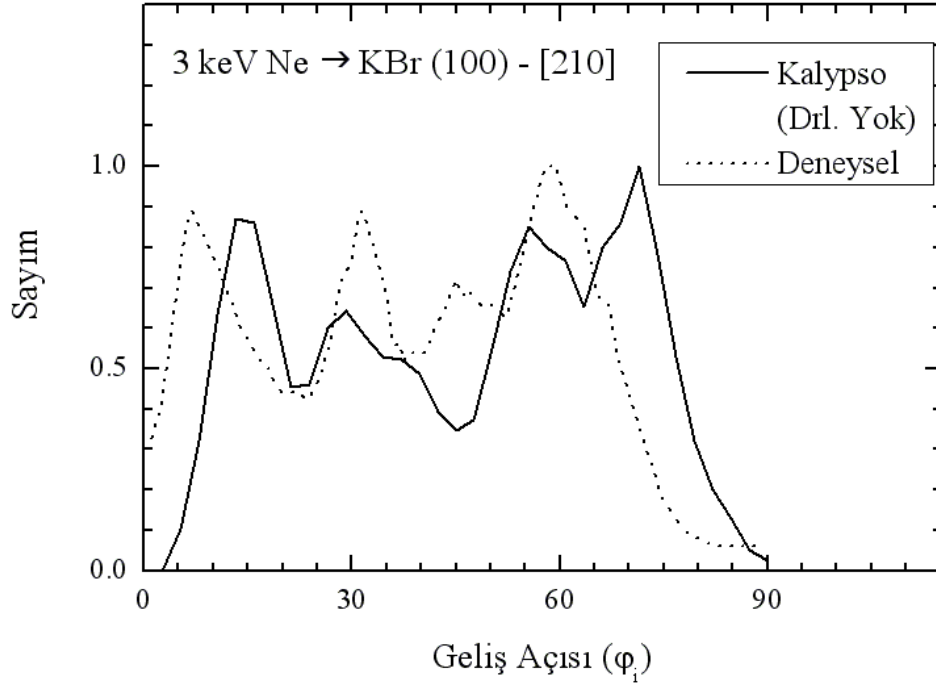
biçiminde ifade edilebilir.

Yukarıda anlatılan koşulları sağlayan parçacıklar için çizilen sayım – geliş açısı grafikleri Şekil 4.45'te gösterilmiştir.

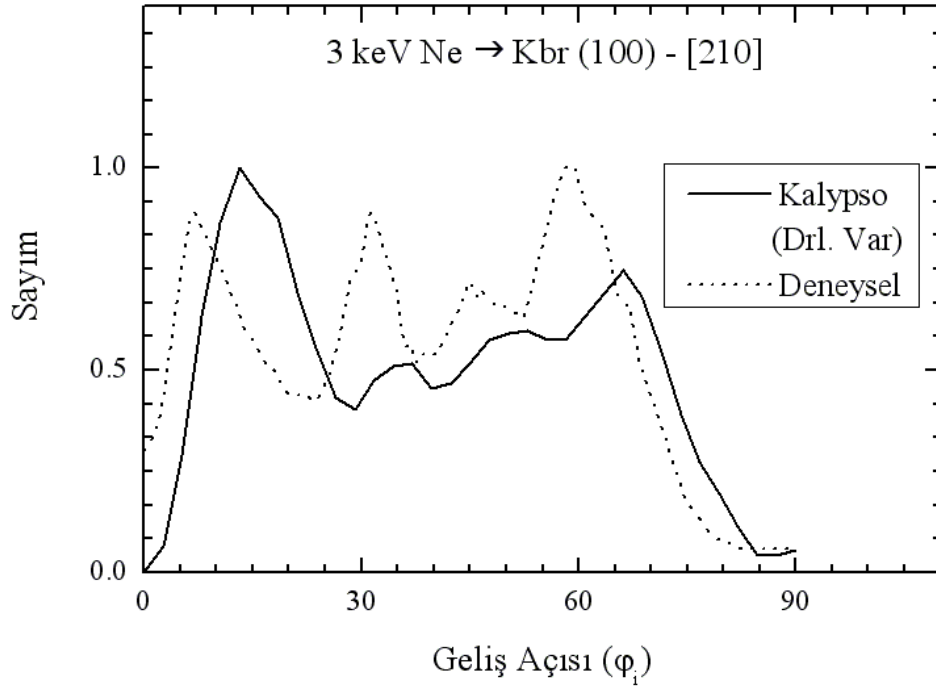


**Şekil 4.45.** KBr simülasyonlarında [210] azimutal geliş doğrultusu ve durulma uygulanan ve uygulanmayan durumlar için şiddet – geliş açısı grafikleri.

Şekil 4.45'te verilen grafikler incelendiğinde durulma etkisinin uygulanmadığı simülasyonda pik ve minimum noktalarının diğer duruma göre daha belirgin olduğu göze çarpmaktadır. Simülasyon sonuçlarının deneysel sonuçlarla karşılaştırılması Şekil 4.46 ve 4.47'de yer almaktadır.



**Şekil 4.46.** Hedef örgüye [210] azimutal geliş doğrultusu ile gelen atomlar için durulma etkisinin uygulanmadığı simülasyon sonuçları ve deneysel sonuçlar.



**Şekil 4.47.** Hedef örgüye [210] azimutal geliş doğrultusu ile gelen atomlar için durulma etkisinin uygulandığı simülasyon sonuçları ve deneysel sonuçlar.

Şekil 4.46 ve Şekil 4.47’de yer alan deneysel sonuçlar ile simülasyon sonuçlarının karşılaştırıldığı grafikler incelendiğinde; şaşırtıcı biçimde durulma etkisinin uygulanmadığı simülasyon sonuçlarının diğer simülasyonun sonuçlarına göre deneysel sonuçlarla daha iyi bir uyum içinde olduğu söylenebilir. Her iki grafikte yer alan pik ve minimum noktaları sayısı deneysel sonuçlarla uyum içinde olmakla birlikte her iki grafikte de pik ve minimum noktalarına karşılık gelen geliş açısı değerlerinde deneysel sonuçlara göre sapmalar gözlenmektedir.

Durulma etkisinin uygulanmadığı simülasyon sonuçları, Şekil 4.46’dan da görülebileceği gibi şiddet büyüklükleri açısından deneysel sonuçlarla benzerlik taşımaktadır. Durulma etkisinin uygulandığı simülasyon sonuçlarında ise pik ve minimum noktaları arasındaki fark hem deneysel sonuçlara hem de durulma etkisi uygulanmayan sonuçlara göre daha az belirgindir. Bu durumun sebebi deneyde kullanılan yüzey koşullarının simülasyonda tam olarak oluşturulamaması olabilir.

Ayrıca durulma etkilerinin *Kalypso* programında doğru biçimde tanımlanamamış olması, Niehus’un (1999) çalışmasında FAN simülasyon programı için belirledikleri durulma miktarlarının *Kalypso*’da uygun sonuçlar vermediği söylenebilir. Daha uzun zaman alacak çalışmalarla *Kalypso* için deneysel sonuçlar ile daha uyumlu sonuçların alınabileceği durulma miktarları belirlenebilir.

Bu çalışmada da daha önceki çalışmalarda olduğu gibi potansiyel modelleri düzeltme katsayısı uygulanmadan simülasyonda yer almıştır. Yapılacak çok sayıda deneme ile deneysel sonuçlarla daha iyi uyum sağlayacak sonuçların elde edilmesi beklenebilir.

Bu deneyin bir diğer simülasyonunu ACOCT programı ile gerçekleştiren Takeuchi çalışmasında (2001) simülasyonu farklı Debye sıcaklıkları için de tekrarlayarak deneysel sonuçlarla iyi uyum sağlayan sonuçlar almıştır.

## 5. SONUÇ VE DEĞERLENDİRME

Bu çalışmada metal yüzeylerde meydana gelen ve atomik düzeyde gerçekleşen çarpışmaların modellenmesini sağlayan moleküler dinamik tekniğine değinilerek bir moleküler dinamik simülasyon yazılım paketi olan *Kalypso* ele alınmıştır.

Yazılım paketinin özellikleri ve işlevleri hakkında ayrıntılı bilgi verilmiş ve yazılımın temelini oluşturan teorik modeller hakkında gerekli literatür araştırması yapılarak çalışmanın ilgili kısımlarında sunulmuştur. Genelde moleküler dinamik simülasyonları, özelde de *Kalypso* moleküler dinamik simülasyon yazılım paketinin kullanım alanlarına değinilerek özellikle *Kalypso* hakkında ayrıntılı bir Türkçe kaynak oluşturulmuştur.

Yazılım paketinin özellikleri literatür araştırması ile ulaşılan deneysel çalışmaların simüle edilmesi ve elde edilen sonuçların karşılaştırılması ile uygulamalı olarak incelenmiştir. Her uygulama için simülasyonun girdi dosyalarının oluşturulması ve sonuçların elde edilmesi ayrıntılı olarak anlatılmıştır. Uygulamalardan önce bu uygulamalarda simüle edilen LEIS deneylerinin bir türevi olan ICISS hakkında teorik bilgilere yer verilmiştir.

Bu uygulamaların birincisinde, atomlar arası etkileşmeyi tanımlayan bileşik potansiyelin itici kısmını oluşturan Coulomb potansiyeli için *Kalypso*'nun sağladığı ZBL, Molière – Linhard ve Molière – Firsov modelleri incelenmiştir. Üç farklı potansiyel modeli çalıştırılan simülasyon ile elde edilen sonuçlar simüle edilen deneysel çalışmanın sonuçları ile karşılaştırılmıştır. Burada ZBL potansiyeli ile deneysel sonuçlara en yakın sonuçlara ulaşıldığı görülmüştür. Bu simülasyonda hedef yüzey olarak kullanılan paladyum (111) örgüsünde atomların buldukları konumların yapılan ICISS taramasında gösterdiği gölgeleme ve engelleme etkileri gözlenmiştir.

Bu çalışmada yer verilen ikinci uygulamada *Kalypso* simülasyon programı deneysel bir çalışmanın simüle edilmesi konusunda bir başka moleküler dinamik programı olan ACOCT programı ile karşılaştırılmıştır. Bu uygulamada *Kalypso* ile yapılan simülasyon ile hem deneysel hem de ACOCT simülasyonu ile elde edilen sonuçlara yakın sonuçlar



elde edilmiştir. Dolayısıyla *Kalypso* ile gerçekleştirilen simülasyonların hem deneysel çalışmalarla hem de farklı modellemelerle gerçekleştirilen simülasyonlar ile genel bir uyum içinde olduğu söylenebilir.

Diğer uygulamada ise iki cins atomdan oluşan bir kristal olan KBr (100) yüzey üzerinden neon iyonları saçılması simülasyonu gerçekleştirilmiştir. Bu çalışmada simülasyonlar yüzeydeki ilk tabaka atomları için durulma etkisi uygulanarak ve uygulanmadan tekrarlanmıştır. Uygulanan durulma miktarlarının simülasyon sonuçlarında önemli bir etken olmadığı görülmüştür. Bu çalışmanın sonuçları incelendiğinde durulma etkisi üzerinde özel olarak çalışılması ve çok sayıda deneme yapılarak deneysel sonuçlarla daha iyi uyum sağlayacak uygun durulma değerlerine ulaşılabileceği söylenebilir.

## KAYNAKLAR

- Allen M. P., 2004, "Introduction to Molecular Dynamics Simulation", NIC Series Vol. 33, John von Neumann Institute for Computing, Computational Soft Matter: From Synthetic Polymers to Proteins, Lecture Notes, pp 1- 28.
- Bazant M. Z., 1997, "Interatomic Forces in Covalent Solids", Harvard University, Cambridge-Massachusetts, USA.
- Bonny G., Malerba L., 2005, "Overview of Interatomic Potentials", Open Report of the Belgian Nuclear Search Center, SCK•CEN-BLG-1022, Belgium.
- Cleri F., Rosato V., 1993, "Tight-binding Potentials for Transition Metals and Alloys", Physical Review B, Vol. 48, Nr. 1, pp. 22-33.
- Eckstein W., 1991, "Computer Simulation of Ion-Surface Interactions", Springer Verlag, Berlin.
- Ercolessi F., 1997, "A Molecular Dynamics Primer", International School for Advanced Studies (SISSA-ISAS), Trieste, Italy.
- Jackson D. P., 1974, "Approximate calculation of surface Debye temperatures" Surface Science, Issue 2, Vol. 43, pp 431-440.
- Karolewski M. A., 2001, "Tight-Binding Potentials for Sputtering Simulations With Fcc And Bcc Metals", Radiation Effects & Defects in Solids, Vol. 153, pp. 239-235.
- Karolewski M., 2005, "*Kalypso*: Software for Simulation of Atomic Collisions at Surfaces Version 2.1 User Guide", Department of Chemistry, University of Brunei Darussalam, Brunei, Borneo.
- Losch A., Niehus H. , 1999, "Structure analysis of the KBr(100) surface: An investigation with a new method for surface analysis of insulators", Surface Science, Vol. 420, Issues 2-3, pp 148-156.
- Nastasi M., Mayer J. W. and Hirvonen J. K., 1996, "Ion-Solid Interactions Fundamentals and Applications", Chapter 2 of Interatomic Potentials, Cambridge University Pres, Cambridge, 24-26 p., 32-36p.
- Nayak C., 2004, "Quantum Condensed Matter Physics – Lecture Notes", Chapter 12 of Electrons and Coulomb Interactions, 225p.
- Niehus H., Heiland W., Taglauer, 1993, "Low-energy ion scattering at surfaces", Surface Science Reports 17, pp 213,303.

- Speller S., Parascandola S., Heiland W., 1997, "Structural parameters of Pd(110) and Pt(110)-(1 × 2) in the temperature range 300–900 K studied by low-energy ion scattering", Surface Science, Vol. 383, pp. 131-136.
- Stadlmayr W., Penner S., Klötzer B., Memmel N, 2009, "Growth, thermal stability and structure of ultrathin Zn-layers on Pd(1 1 1)", Surface Science, Vol. 603, Issue 1, pp 251-225.
- Takeuchi W., Yamamura Y. , 2001, "Structure analysis of Pd(110) surface by computer simulation of NICISS", Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B, Vol. 173, pp 344-350.
- Takeuchi W. Yamamura Y. , 2001, "Structure Analysis of Insulator KBr(100) surface by three-dimensional computer simulation of NICASS", Nuclear Instruments and Methods in Physics B, Vol. 184, pp 544-554.
- Wilson W. D., Haggmark L. G., Biersack J. P., 1977, "Calculations of Nuclear Stopping, Rayes and Stragglng in the Low-Energy Region", Phys. Rev. B 15, pp 2458-2468.
- Yamamura Y., Takeuchi W., 1987, "Monocrystal sputtering by the computer simulation code acot", Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms, Vol. 29, Issue 3, pp. 461-470.
- Ziegler, J. F., Biersack J. P, Littmark U., 1985, "The Stopping and Range of Ions in Solids", Pergamon Press, New York.

### **İnternet Kaynakları**

[http://en.wikipedia.org/wiki/Low-energy\\_ion\\_scattering](http://en.wikipedia.org/wiki/Low-energy_ion_scattering)

### **Erişim Tarihi**

06.05.2009.

## ÖZGEÇMİŞ

Adı Soyadı: Mücahit Çetin

Doğum Yeri: Elazığ

Doğum Tarihi: 03.10.1982

Medeni Hali: Bekâr

Eğitim Durumu (Kurum ve Yıl):

Lise: Afyon Kocatepe Anadolu Lisesi, 2000

Lisans: Ankara Üniversitesi Fen Fakültesi Fizik Bölümü, 2006

Çalıştığı Kurum/ Kurumlar ve Yıl

Yayınlar (SCI ve diğer)

Diğer Konular