

Fe_(1-x)Mn_x ALAŞIMININ FİZİKSEL
ÖZELLİKLERİNİN İNCELENMESİ

Nurcan Çevik

Yüksek Lisans Tezi

Fizik Anabilim Dalı

Temmuz - 2010

$Fe_{(1-x)}Mn_x$ ALAŞIMININ FİZİKSEL ÖZELLİKLERİNİN İNCELENMESİ

Nurcan Çevik

Dumlupınar Üniversitesi
Fen Bilimleri Enstitüsü
Lisansüstü Yönetmeliği Uyarınca
Fizik Anabilim Dalında
YÜKSEK LİSANS TEZİ
Olarak Hazırlanmıştır.

Danışmanı: Yrd. Doç. Dr. Hamza Yaşar Ocak

Temmuz - 2010

KABUL VE ONAY SAYFASI

Nurcan ÇEVİK' in YÜKSEK LİSANS TEZİ olarak hazırladığı “Fe_(1-x)Mn_x Alaşımının Fiziksel Özelliklerinin İncelenmesi” adlı bu çalışma, jürimizce lisans yönetmeliğinin ilgili maddeleri uyarınca değerlendirilerek kabul edilmiştir.

/ /2010

Üye : Doç. Dr. Rahmi ÜNAL

Üye : Yrd. Doç. Dr. Hamza Yaşar OCAK (Danışman)

Üye : Yrd. Doç. Dr. Ercan UÇGUN

Fen Bilimleri Enstitüsün Yönetim Kurulu'nun/...../2010 gün ve
sayılı kararıyla onaylanmıştır.

Prof. Dr. Atalay KÜÇÜKBURSA
Fen Bilimleri Enstitüsü Müdürü

Fe_(1-x)Mn_x ALAŞIMININ FİZİKSEL ÖZELLİKLERİNİN İNCELENMESİ

Nurcan ÇEVİK

Fizik Bölümü, Yüksek Lisans Tezi, 2010

Tez Danışmanı: Yrd.Doç. Dr. Hamza Yaşar Ocak

ÖZET

Kristal yapıya sahip maddelerin fiziksel özelliklerini incelemede birçok simülasyon programı kullanılmaktadır. Bu programlar ile maddelerin elektronik, optik, mekanik ve manyetik özellikleri hesaplanabilmektedir.

Bu çalışmada ilk olarak Fe ve TiC yapıları WIEN2k programı yardımıyla test edildi. Fe ve TiC yapılarına ait sonuçlar literatürdeki sonuçlarla karşılaştırıldı ve uyumlu olduğu görüldü. Daha sonra esas çalışma olan Fe_(1-x)Mn_x alaşımının bazı elektronik özellikleri incelendi. Alaşımın durum yoğunluğu (DOS), elektron yoğunluğu, toplam enerjisi, enerji band yapısı ve kararlılık durumlarına ait hesaplamalar yapıldı. Çalışmada Fe_(1-x)Mn_x alaşımının oranları değiştirilerek Fe-%12.5 Mn Fe-%25 Mn, Fe-%50 Mn yapılarına ait hesaplamalar tamamlandı ve yapılar kendi içlerinde karşılaştırılarak sonuçlar literatüre göre yorumlandı.

Anahtar Kelimeler: Durum yoğunluğu, elektron yoğunluğu, enerji bant yapısı, kararlılık durumları, Wien2k, FeMn alaşımı.

INVESTIGATION of PHYSICAL PROPERTIES of Fe_(1-x)Mn_x ALLOYS

Nurcan Çevik

Physics Department, M. S. Thesis, 2010

Thesis Supervisor: Asist. Prof. Yaşar Hamza Ocak

SUMMARY

There are many simulation programs which are used for the analysis of physical properties of the materials can be calculated with crystal structure. Electronic, optical, mechanical and magnetic properties of materials can be calculated with these programs.

The First of all Fe and TiC structures were tested with the help of WIEN2k program in this work. The results which belongs to Fe and TiC structures were compared with the results in literature and they were found to be compatible with the literature. Afterwards the same electronic properties of Fe_(1-x)Mn_x alloys were examined as the main part of this work. The density of states(DOS), density of electron, total energy, energy band structure and stability of alloys were calculated for the FeMn alloys. The constant of Fe_(1-x)Mn_x alloys were changed and the calculations of the structure for Fe-%12.5 Mn Fe-%25 Mn, Fe-%50 Mn were completed. The structures were compared with each other and explicated in accordance with the literature.

Keywords: Density of states, density of electron, energy band structure, stability, Wien2k, FeMn alloy.

TEŐEKKÜR

Çalıőmalarım süresince bilgi, öneri ve yardımlarını esirgemeyen çok deęerli hocalarım Sayın Yrd. Doç. Dr. H. Yaőar OCAK' a ve Sayın Yrd. Doç. Dr. Ercan UÇGUN'a, çalıőmalarımın her aőamasında maddi manevi desteęini esirgemeyen deęerli aileme ve çalıőmalarım süresince her zaman yardım ve desteęini aldıęım Sezin Çınar'a en içten duygularım ile teőekkür ederim.

İÇİNDEKİLER DİZİNİ

	<u>Sayfa</u>
ÖZET	iv
SUMMARY	v
ŞEKİLLER DİZİNİ.....	ix
ÇİZELGELER DİZİNİ	xi
SİMGELER VE KISALTMALAR DİZİNİ	xii
1. GİRİŞ	1
2. KRİSTAL YAPILAR.....	3
2.1. İki Boyutta Örgü Türleri.....	4
2.2. Üç Boyutta Örgü Türleri	5
2.3. Kübik Uzay Örgüleri.....	6
2.3.1. Basit Kübik Yapı (sc).....	6
2.3.2. Cisim Merkezli Kübik Örgü (bcc)	6
2.3.3. Yüzey Merkezli Kübik Örgü (fcc).....	7
2.5. Elmas/ Çinko-Sülfür Kristal Yapılar	8
3. ENERJİ BANT TEORİSİ	10
3.1. Yaklaşık Serbest Elektron Modeli	11
3.2. Katılardaki Enerji Bantları	13
3.2.1. Kristal Potansiyeli.....	13
3.2.2. Bloch Fonksiyonları.....	14
3.2.3. Kronig Penney Modeli.....	14
3.3. Bir Banttaki Yörünge Sayısı.....	16
3.4. Metaller ve Yalıtkanlar	17
4. KRİSTAL ÖRGÜLERİN MEKANİKSEL KARARLILIĞI.....	19
4.1. Mekaniksel Kararlılık.....	19
4.2. Born' un Kararlılık Kriterleri.....	19
4.3. İkinci Dereceden Elastik Sabitler	19

İÇİNDEKİLER DİZİNİ (devamı)

	<u>Sayfa</u>
5. WIEN2K PROGRAMININ TANITIMI	22
5.1. case.struct Dosyasının Oluşturulması.....	22
5.2. case.inst Dosyasının Oluşturulması.....	25
5.3. init_lapw Hesaplamaları.....	26
5.4. SCF Hesaplamaları.....	31
5.5. Hesaplamanın Özellikleri	32
5.5.1. Elektron Yoğunluğu	32
5.5.2. Durumlar Yoğunluğu (DOS).....	34
5.5.3. Bant Yapısı	35
5.5.4. Bant Karakter Çizimiyle Bant Yapısı.....	37
5.5.5. Hacim Grafiği Çizimi	38
5.5.6. Supercell (Süper Örgü)	38
6. TiC, bcc Fe, fcc Cu, supercell Cu, Fe-Mn, SUPERCELL Fe-Mn YAPILARININ WIEN2K PROGRAMI İLE TEST EDİLMESİ	40
6.1. TiC Yapısı İçin Elde Edilen Sonuçlar	40
6.2. bcc Fe Yapısı İçin Elde Edilen Sonuçlar	48
6.3. fcc Cu İçin Elde Edilen Sonuçlar	54
6.4. Supercell Cu İçin Elde Edilen Sonuçlar	56
7. Fe _(1-x) Mn _x ALAŞIMININ WIEN2K PROGRAMI İLE İNCELENMESİ.....	60
7.1. Fe-%12.5 Mn Alaşımı İçin Elde Edilen Sonuçlar	60
7.2. Fe-%25 Mn Alaşımı İçin Elde Edilen Sonuçlar	63
7.3. Fe-%50 Mn Alaşımı İçin Elde Edilen Sonuçlar	66
8. SONUÇLAR ve ÖNERİ	69
KAYNAKLAR.....	71

ŞEKİLLER DİZİNİ

<u>Sekil</u>	<u>Sayfa</u>
2.1 x, y, z koordinat eksenlerine sahip bir birim hücre.....	3
2.2 İki boyutta beş Bravais örgüsü.....	4
2.3 Basit kübik yapı	6
2.4 Cisim merkezli kübik örgü.....	6
2.5 Yüzey merkezli kübik örgü.....	7
2.6 Elmas kristal yapısı.....	8
2.7 Çinko Sülfür yapısı.....	8
3.1 Metal, yarıiletken ve yalıtkanlarda enerji bantlarındaki elektron doluluk şeması.....	10
3.2 (a)Serbest elektronda ε enerjisinin k dalga vektörüyle değişimi. (b)Örgü sabiti a olan tek atomlu doğrusal örgüde elektron enerjisinin dalga vektörüyle değişimi.....	12
3.3 Doğrusal örgüdeki iyon merkezlerinin etkisi altındaki bir elektronun potansiyel enerjisi	12
3.4 Kronig Penney Modeli.....	14
3.5 Dolu yörüngeler ve bant yapısına göre (a)Yalıtkan oluşumu (b) Bant örtüşmesi nedeniyle metal oluşumu (c) Elektron yoğunluğu nedeniyle metal oluşumu	18
5.1 Birim hücre içerisindeki atomik küreler	24
5.2 Çekirdek, yarı çekirdek, valans durumları	28
5.3 $u_l(r, E_l)$ enerjisi ve DOS'un şematik bağılılığı	30
5.4 Wien2k akış şeması.....	39
6.1 (a)Wien2k programı kullanma kılavuzunda verilen TiC elektron yoğunluğu grafiği (b)Wien2k programı yardımıyla çizilen TiC elektron yoğunluğu grafiği.....	41
6.2 (a)Wien2k programı kullanma kılavuzunda verilen TiC için toplam DOS grafiği (b) Wien2k programı yardımıyla çizilen TiC için toplam DOS grafiği.....	42
6.3 (a)Wien2k programı kullanma kılavuzunda verilen TiC için 2.atoma ait s-DOS grafiği (b) Wien2k programı yardımıyla çizilen TiC için 2.atoma ait s- DOS grafiği	43
6.4 (a)Wien2k programı kullanma kılavuzunda verilen TiC için 1.atoma ait d-DOS grafiği[31](b) Wien2k programı yardımıyla çizilen TiC için 1.atoma ait d- DOS grafiği	44
6.5(a)Wien2k programı kullanma kılavuzunda verilen TiC için 2.atoma ait p-DOS grafiği (b) Wien2k programı yardımıyla çizilen TiC için 2.atoma ait p- DOS grafiği.....	45
6.6 (a)Wien2k programı kullanma kılavuzunda verilen TiC için 1.atoma ait d-eg DOS grafiği(b) Wien2k programı yardımıyla çizilen TiC için 1.atoma ait d-eg DOS grafiği	46
6.7 (a)Wien2k programı kullanma kılavuzunda verilen TiC hacim grafiği (b) Wien2k programı yardımıyla çizilen TiC hacim grafiği	47

ŞEKİLLER DİZİNİ (Devamı)

<u>Sekil</u>	<u>Sayfa</u>
6.8 (a) Wien2k programını kullanım kılavuzunda verilen TiC yapısına ait bant yapısı grafiği (b) Wien2k programı yardımıyla çizilen TiC bant yapısı grafiği.....	48
6.9 (a) Wien2k programı yardımıyla çizilen bcc Fe için toplam DOS grafiği (b) bcc Fe için s-DOS grafiği (c) bcc Fe için p-DOS grafiği (d) bcc Fe için d-DOS grafiği (e) bcc Fe için f-DOS grafiği.....	52
6.10 Wien2k programı yardımıyla çizilen bcc Fe için elektron yoğunluğu grafiği.....	52
6.11 Wien2k programı yardımıyla çizilen bcc Fe için hacim grafiği.....	53
6.12 Wien2k programı yardımıyla çizilen bcc Fe için bant yapısı grafiği.....	53
6.13 Wien2k programı yardımıyla çizilen fcc Cu için toplam DOS grafiği.....	55
6.14 Wien2k programı yardımıyla çizilen fcc Cu için elektron yoğunluğu grafiği (2 boyutta)	55
6.15 Wien2k programı yardımıyla çizilen fcc Cu için elektron yoğunluğu grafiği.....	56
6.16 Wien2k programı yardımıyla çizilen supercell Cu için toplam DOS grafiği.....	58
6.17 Wien2k programı yardımıyla çizilen supercell Cu için elektron yoğunluğu grafiği.....	59
7.1 Fe-%12.5 Mn modeli	61
7.2 Wien2k programı yardımıyla çizilen Fe-%12.5 Mn alaşımına ait enerji hacim grafiği...	62
7.3 Fe-%25 Mn modeli.....	64
7.4 Wien2k programı yardımıyla çizilen Fe-%25 Mn Alaşımına ait enerji hacim grafiği.....	65
7.5 Fe-%25 Mn modeli	67
7.6 Wien2k programı yardımıyla elde edilen Fe-%50 Mn Alaşımına ait enerji hacim grafiği	68

ÇİZELGELER DİZİNİ

<u>Çizelge</u>	<u>Sayfa</u>
2.1 İki boyutta 5 örgü türü.....	5
2.2 Üç boyutta 14 örgü türü	5
2.3 Kübik örgü özellikleri	7
2.4 Çinko-Sülfit yapıda kristalleşen bazı yarıiletken malzemeler.....	9
5.1 Relativistik kuantum sayıları.....	26
8.1 Fe _(1-x) Mn _x alaşımına ait hesaplanan parametreler	70

SİMGELER VE KISALTMALAR DİZİNİ

<u>Kısaltma</u>	<u>Açıklama</u>
fcc	Yüzey merkezli kübik
DFT	Yoğunluk fonksiyonel teori
F-LAPW	Tam potansiyel arttırılmış düzlem dalgaları
GGA	Genelleştirilmiş gradyent yaklaşımı
MT	Muffin-tin
DOS	Durum yoğunluğu
\vec{r}	Yer vektörü
sc	Basit kübik
bcc	Cisim merkezli kübik
\vec{k}	Dalga vektörü
\vec{G}	Ters örgü vektörü
E_p	Elektron potansiyel enerjisi
$V(r)$	Kristal potansiyeli
NPT	Radikal ağ noktaları sayısı
RMT	Atomik küre yarıçapı
a.u.	Atomik birim
Z	Atom numarası
n	Kuantum sayısı
J	Orbital kuantum sayısı
K	Relativistik kuantum sayısı
V_{ec}	Değişen korelasyon potansiyeli
s,p,d,f	Bant isimleri
LDA	Yerel yoğunluk yaklaşımı
Ry	Rydberg
APW	Arttırılmış düzlem dalgaları
LAPW	Lineer arttırılmış düzlem dalgaları
V_e	Coulomb potansiyeli

SİMGELER VE KISALTMALAR DİZİNİ (devamı)

<u>Kısaltma</u>	<u>Açıklama</u>
V_{xc}	Değiş-tokuş potansiyeli
V_{tot}	Toplam potansiyel
eV	Elektronvolt
E_F	Fermi enerjisi
GPa	Giga Pascal

1. GİRİŞ

Fe-Mn alaşımları bir çok önemli özelliğe birden sahip olması dolayısı ile araştırılmaya değer bulunmuştur. Fe-Mn sistemleri (uzay grubu $Fm\bar{3}m$) fcc (yüzey merkezli kübik) yapıda kristalleşen alaşımlardan oluşur. Fe-Mn alaşımlarının magnetik özelliklerinin elastik özellikler üzerinde güçlü etkileri vardır. Bu alaşımların etkileyici bir özelliği de anormal magnetik özelliklerini, termal genleşmeyi, ısı kapasitesini ve elastik özelliklerini yükselten Invar-tipi (0-100°C sıcaklıklarda genleşmesi sıfır olan çeliklere invar çelikleri denilmektedir) davranışlarının olmasıdır [1].

Fe-Mn alaşımları düşük magnetik özellikleri olan, şekil alabilen, paslanmaz çelik gibi davranışı, pahalı olmayan sönüm maddesi olması yönüyle sanayide oldukça önemli yer tutar [2]. Yapısında Mn bulunan kararsız alaşımların birleşimleri oldukça dayanıklıdır. Bu alaşımlar zorlayıcı iş şartlarında aşınmaya karşı güçlü direnci ve diğer yapısal özellikleri olan ısıl direnci, korozyon direnci düşük, magnetik karakterinin olması gibi benzer niteliklere sahip oluşu ile de geniş kullanım alanları (madencilik, inşaat, otomotiv) sunmaktadır [3]. Cazip özellikleri nedeniyle bu alaşımların mekanik davranışları geliştirilmektedir [2].

Fe-Mn alaşımlarının incelenmesinde uzun mesafeli etkileşmelerin yetersiz olması nedeniyle özel tanımlı bir potansiyel fonksiyonu kullanılamamaktadır [4]. Bu nedenle bir çok simülasyon yöntemi uygulanmaktadır. Bu çalışmada da Wien2k programı kullanılmıştır. Wien2k programı kullanılarak metal ve alaşımlar için başarılı sonuçlar elde edilmektedir.

Wien2k programında yoğunluk fonksiyonel teori (DFT), tam potansiyel lineer arttırılmış düzlem dalgaları (F-LAPW), değiş tokuş korelasyon enerjisi için genel gradyent (GGA) yaklaşımı kullanılmaktadır [5-7].

Yoğunluk fonksiyonel teori metodu, Hohenberg ve Konh tarafından ortaya konulmuştur [5]. Bu metot çok atom içeren karmaşık bir sistemin elektronik yapısını incelemek için kullanılmaktadır. Bu teori elektron yoğunluğuna dayanır ve DFT metodu çok cisim probleminin çözümü için genel bir metottur [8]. F-LAPW metodu uzayı, Schrödinger denkleminin radyal çözümlerini içeren çekirdeğin etrafındaki küresel muffintinlerden (MT) oluşan iki bölgeye ayırır. MT' nin enerji türevleri, temel fonksiyonlar ve düzlem dalgaları içeren muffintinler arasındaki “ ara bölge ” olarak kullanılır. Çekirdek durumları tamamen rölativistik olarak, valans yarı-çekirdek durumları yarı-rölativistik olarak ele alınır. Bu metotta valans ve çekirdek durumları arasındaki fark sınır değerleri olarak alınır [9]. F-LAPW metodunda yük yoğunlukları, potansiyeller ve matris elemanları için hiçbir şekilde yaklaşım yapılmaz [10].

Genelleştirilmiş gradyent yaklaşımı (GGA) yoğunluk fonksiyonları için uygulanır ve iyon çekirdekleri dondurulur [1].

Bu programda Konh- Sham denklemlerinin çözümlerini geliştirmek için atomun yük yoğunluğu hesaplanır. Süperpozisyon ilkesi kullanılarak toplam yoğunluk, özdeğer ve özvektörler hesaplanır [9]. Kristal yapıların örgü parametreleri, atomların yerlerinin bilinmesi ile bu yapıların fiziksel özellikleri hakkında bilgi edinilir. Burada oldukça önemli olan, kristal yapıların örgü sabitleri arasındaki ilişkileri ve simetri gruplarını görüyor olabilmektir [11].

Belli araştırmacılar Jian-Tao Wang, Lei Zhou, Yoshiyuki Kawazoe $Fe_{(1-x)}Cu_{(x)}$ süper örgüsü için F-LAPW, GGA metodu ile alaşımın yapısını ve magnetik özelliklerini [12]; A.N.Timoshevskii, V. A. Timoshevskii, B. Z. Yanchitsky F-LAPW metodunu kullanarak Fe_8N , Fe_8C gibi fcc kübik yapıda olan Fe içeren alaşımlarda C ve N 'nin, elektronik yapı ve hiperfin etkileşmelerine olan etkisini [13]; G.Y.Guo, Y. K. Wang, Li-Shing Hsu, DFT, GGA metodu yardımıyla Ni_3Al , Ni_3Ga , Ni_3In alaşımlarının elektronik yapısı, mekanik ve magnetik özelliklerini[14]; H.Salehi, S.M. Hosseini, N.Shahtahmasebi F-LAPW, DFT, GGA yöntemiyle $BaTiO_3$ seramiğinin yapısal ve elektronik özellikleri üzerinde Nikelin etkisini [9]; Denis Music and Tetsuya Takahashi rastgele Fe-Mn alaşımlarının elastik özelliklerini DFT, GGA metodu yöntemleriyle araştırmışlardır [1]. Araştırmalar sonunda örgü sabitleri, bulk modülleri, durum yoğunlukları hesaplanmış ve enerji hacim grafikleri, durum yoğunluğu (DOS) grafikleri, elektron yoğunluğu grafikleri çizilmiştir. Bütün bu çalışmalarda teorik ve deneysel sonuçlar arasında iyi bir uyum olduğu görülmüştür [1,9,12,13,14]. Bu da kullanılan metodun güvenilir olması şeklinde literatürde ifade edilmektedir.

Bu çalışmada da öncelikle TiC ve Fe kristal yapıları çalışılıp literatürdeki sonuçlarla karşılaştırılacak ve $Fe_{(1-x)}Mn_x$ alaşımının fiziksel özellikleri ile ilgili elde edilen sonuçlar değerlendirilecektir.

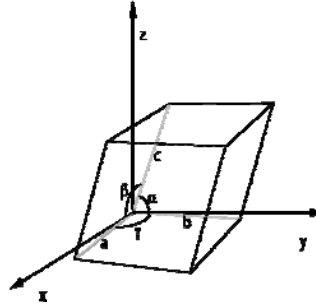
2. KRİSTAL YAPILAR

Katıhal fiziği katı yapıların özelliklerini açıklayan fiziğin önemli bir koludur. Başlıca konusu kristal yapılarıdır. Kristal yapıları katıların davranışını anlayabilmek için temel kristalografi bilgisinden yararlanır.

Kristal, periyodik olarak dizilmiş atom gruplarından oluşan üç boyutlu bir örgüdür. Örgünün düğüm noktalarında bulunan atom gruplarına baz denir. Bir bazdaki atom sayısı bir ya da daha fazla olabilir. Sembolik olarak,

$$\text{Örgü} + \text{Baz} = \text{Kristal Yapı}$$

olarak ifade edilir [15].



Şekil 2.1 x, y, z koordinat eksenlerine sahip bir birim hücre.

Kristalografik olarak x, y, z eksenleri boyunca olan en yakın örgü noktalarının mesafeleri ve doğrultuları üç tane \vec{a} , \vec{b} , ve \vec{c} örgü vektörleri tarafından belirlenir. Örgü a, b ve c' nin uzunlukları ile bunların arasındaki α , β ve γ açıları verilerek belirlenir [16].

Örgü noktalarının konumları,

$$\vec{r} = u\vec{a} + v\vec{b} + w\vec{c} \quad \text{vektör işaretleri} \quad (u, v, w \text{ tam sayı değerleri})$$

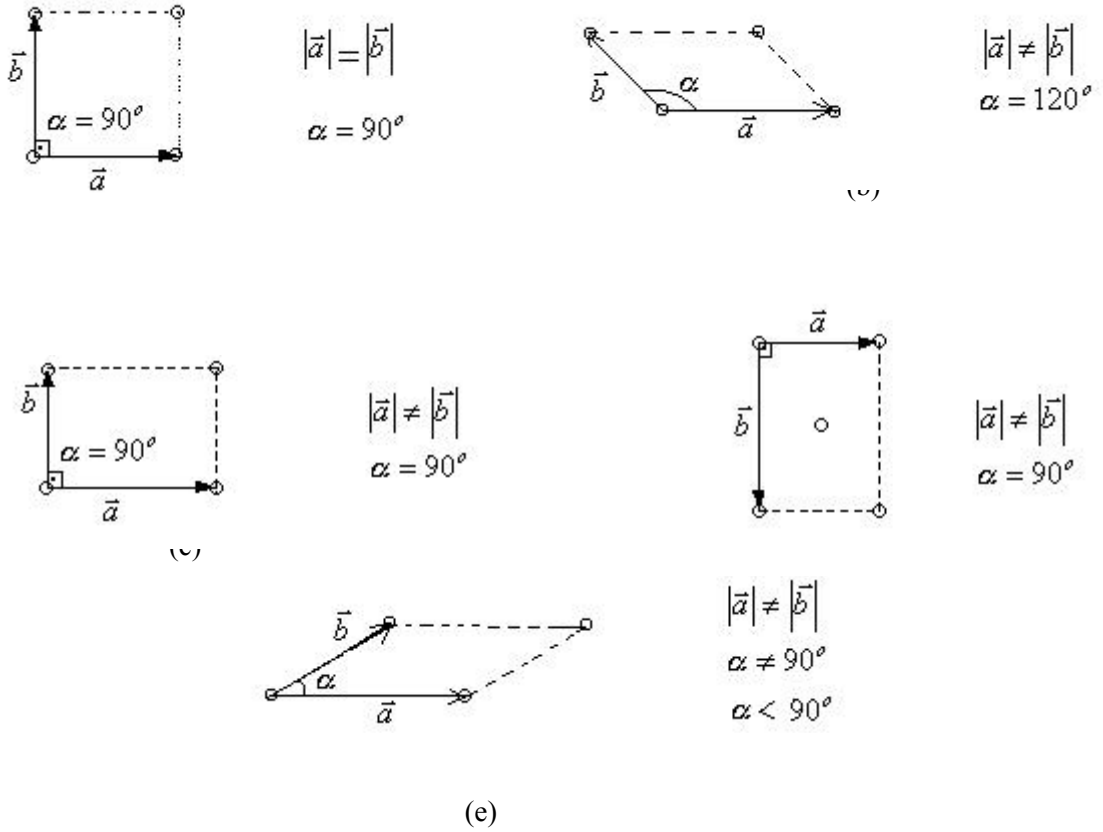
u, v, w tam sayıları her zaman bulunabiliyorsa \vec{a} , \vec{b} ve \vec{c} ilkel öteleme vektörü olarak tanımlanır. İlkel öteleme vektörü kristalin yapıtaşını oluşturan minimum hücreyi oluşturur [15].

Örgü öteleme operasyonu,

$$\vec{T} = u_1 \vec{a} + v_1 \vec{b} + w_1 \vec{c}$$

2.1. İki Boyutta Örgü Türleri

Düzlemde beş farklı Bravais örgü türü vardır. Bunlar kare örgü, altıgen örgü, dikdörtgen örgü, merkezli dikdörtgen örgü ve eğik örgüdür.



Şekil 2.2 İki Boyuttaki Beş Bravais Örgüsü (a) Kare örgü (b) Altıgen Örgü (c) Dikdörtgen Örgü (d) Merkezli Dikdörtgen Örgü (e) Eğik örgü

Çizelge 2.1 İki boyutta 5 örgü türü [15]

	Örgü sayısı	Birim hücre eksen ve açılarının özellikleri
Kare Örgü	1	$a = b$; $\alpha = 90^\circ$
Altıgen Örgü	1	$a = b$; $\alpha = 120^\circ$
Dikdörtgen Örgü	1	$a \neq b$; $\alpha = 90^\circ$
Merkezli Dikdörtgen Örgü	2	$a \neq b$; $\alpha = 90^\circ$

2.2. Üç Boyutta Örgü Türleri

Yedi farklı hücre türüne sahip sistemler halinde 14 farklı örgü türü vardır. Bunlar triklinik, monoklinik, ortarombik, tetragonal, kübik, trigonal ve altıgen örgülerdir. a , b , c ve α , β , γ 'ların hepsine birim hücre parametreleri denir.

Çizelge 2.2 Üç boyutta 14 örgü türü [15]

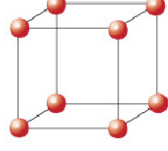
Sistem	Örgü sayısı	Birim hücre eksen ve açılardan özellikleri
Triklinik	1	$a \neq b \neq c ; \alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$
Monoklinik	2	$a \neq b \neq c ; \alpha = \beta \neq 90^\circ \neq \gamma$
Ortarombik	4	$a \neq b \neq c ; \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
Tetragonal	2	$a = b \neq c ; \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
Kübik	3	$a = b = c ; \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
Trigonal	1	$a = b = c ; \alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$ $\langle 120$
Altıgen	1	$a = b \neq c ; \alpha = \beta = 90^\circ$ $\gamma = 120^\circ$

2.3. Kübik Uzay Örgüleri

Kübik uzay örgüleri üç tanedir. Bunlar (sc) basit kübik, (bcc) cisim merkezli kübik, (fcc) yüzey merkezli kübik örgüleridir.

2.3.1 Basit Kübik Yapı (sc)

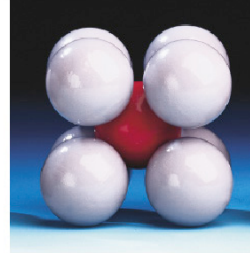
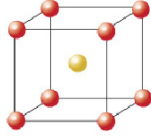
Basit kübik hücreler ilkel hücrelerdir. Noktasal simetri özelliği gösterirler. Örneğin Po basit kübik yapıdadır.



Şekil 2.3 Basit kübik yapı (sc)

2.3.2 Cisim Merkezli Kübik Örgü (bcc)

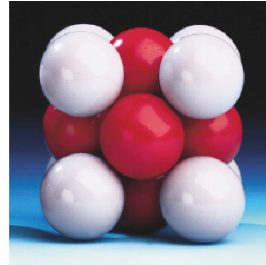
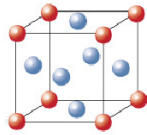
Cisim merkezli kübik hücrede atomlar birim hücrenin köşelerine ve hücrenin merkezine yerleşmiştir. Fe, Li ve K bu cisim merkezli hücreye örnektir.



Şekil 2.4 Cisim merkezli kübik örgü.

2.3.3. Yüzey Merkezli Kübik Örgü (fcc)

Yüzey merkezli kübik örgüde atomlar birim hücrenin köşelerine ve yüzeylerin merkezlerine yerleşmişlerdir. fcc yapıda olan kristallere Al, Ni, Au, Pb, Kr, Xe örnek teşkil eder.



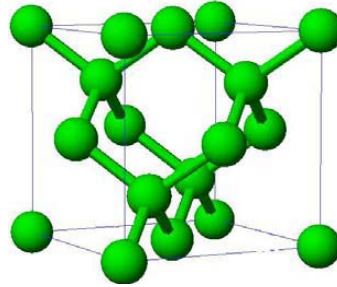
Şekil 2.5 Yüzey merkezli kübik örgü

Çizelge 2.3 Kübik örgü özellikleri [15]

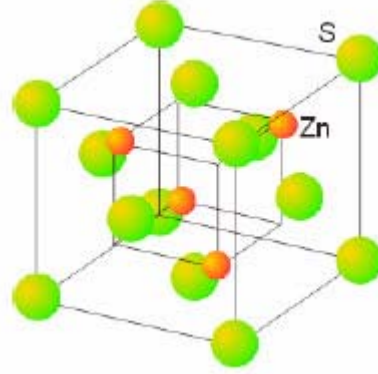
	Basit	Cisim merkezli	Yüzey merkezli
Standart hücre hacmi	a^3	a^3	a^3
Hücre başına atom sayısı	1	2	4
İlkel hücre hacmi	a^3	$a^3 / 2$	$a^3 / 4$
Enyakın komşu sayısı	6	8	12
En yakın komşu uzaklığı	a	$\frac{\sqrt{3}}{2}a$	$\frac{\sqrt{2}}{2}a$
Doluluk oranı	0.524	0.630	0.740

2.5. Elmas/Çinko-Sülfür Kristal Yapılar

Elmas başlangıç konumu (0,0,0) ve $(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$ olan iki fcc yapının iç içe geçirilmesiyle oluşur. Böylelikle ilkel küp 8 atom içerir. Her atom en yakın komşusuyla kovalent bağ yaparak dördü bağ yapısı gösterir. Her atomun en yakın komşu sayısı 4, ikinci en yakın komşu sayısı 12 dir. Karbon, Silisyum, Germanyum ve Kalay elmas yapıda kristalleşir. Örgü sabitleri sırasıyla $a=3.56, 5.43, 5.65, 6.46 \text{ \AA}$ dur. a , ilkel küpün kenar uzunluğudur [15].

**Şekil 2.6** Elmas kristal yapısı.

Çinko Sülfür yapısında atom yerleşimi, elmastaki karbon atomlarının eşit miktardaki Zn ve S atomları ile yer değiştirilmesi ile elde edilen yapıya benzer. Kübik Çinko Sülfür yapısı şekil 2.7 de görüldüğü gibi fcc örgülerin birine Zn atomları, diğerine S atomlarının yerleşmesiyle oluşur. Örgü yapısı fcc dir. İlkel hücre küp olup, Zn atomlarının koordinatları $000, 0 \frac{1}{2} \frac{1}{2}, \frac{1}{2} 0 \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \frac{1}{2} 0$ ve S atomlarının koordinatları $\frac{1}{4} \frac{1}{4} \frac{1}{4}, \frac{1}{4} \frac{3}{4} \frac{3}{4}, \frac{3}{4} \frac{1}{4} \frac{3}{4}, \frac{3}{4} \frac{3}{4} \frac{1}{4}$ 'dir [15].



Şekil 2.7 Çinko Sülfid yapı.

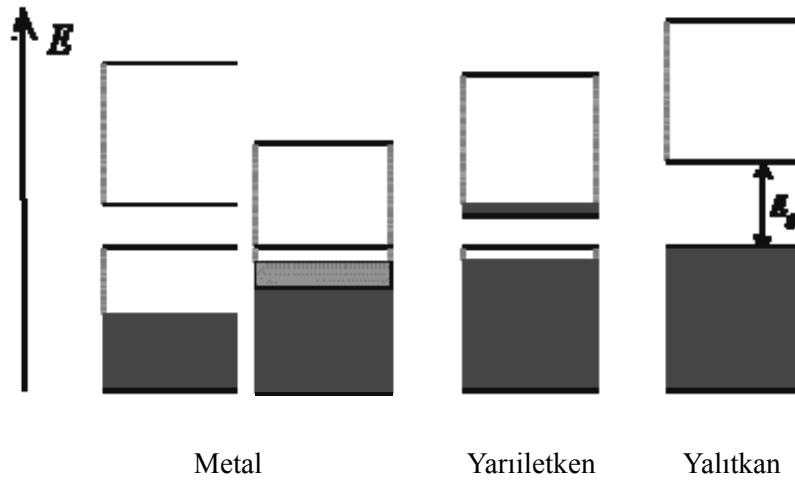
Birçok yarıiletken bu yapıda kristalleşir. Çizelge 2.4 de kübik Çinko Sülfid yapıda kristalleşen bazı yarıiletken malzemeler ve bu yarıiletkenlere ait örgü sabitleri verilmiştir.

Çizelge 2.4 Çinko Sülfid yapıda kristalleşen bazı yarıiletken malzemeler

Kristal	a(Å)	Kristal	A(Å)	Kristal	a(Å)
CuF	4.26	ZnSe	5.65	CuCl	5.41
SiC	4.35	GaAs	5.65	InSb	6.46
Zn	5.41	AlAs	5.66	GaP	5.45

3. ENERJİ BANT TEORİSİ

Çok sayıda atom katıyı meydana getirmek için bir araya geldiğinde her atomik seviye bant şekline gelir. Enerji seviyeleri birbirine yakın olur ve bu seviyeler enerji bandı olarak tanımlanır. Enerji aralıkları, iletkenlik elektronlarının kristal iyonları ile etkileşmesi sonucu oluşur ve elektron yörüngelerinin bulunmadığı yasak bölgeleri birbirinden ayırır [17].



Şekil 3.1 Metal, yarıiletken ve yalıtkanlarda enerji bantlarındaki elektron doluluk şeması.

Metaller yalıtkanlardan oldukça farklı özellikler gösterirler. Metallerin çok yüksek elektrik ve ısı özellikleri vardır. Bütün bu farklılıkları katı hal fiziğinde bulmak mümkündür. İlk teori Drude tarafından ortaya konulmuştur ve teori heyecan verici şekilde başarılı olmuştur. Ancak metallerin ısı özelliklerini anlamak için Drude' nin teorisi çok uygun değildir. Bununla beraber Drude' nin modelindeki sınırlamalar değerlendirildiğinde metaldeki elektronların (60.000 K sıcaklığına kadar olan) Newton Mekaniği yerine Schrödinger denkleminin uydukları görülmüştür.

Metaldeki elektronlar serbesttir denildiğinde arkalarında bıraktıkları iyon çekirdeklerinin elektrostatik potansiyelini hissetmezler anlamına gelir (elektronları metalde tutan ortalama potansiyel hariç). Drude' nin serbest elektron modelinde metalin elektronları bir araya getirildiğinde valans elektronları yarı bağımsız hale gelip metalin içerisinde serbestçe dolaşabilirler zannediliyordu. Drude, Maxwell gazlarının kinetik teorisini metal elektronlarının iletkenliğine uygulamıştır (Kuantum teorisi o zamanlar henüz doğmamıştır). Bu teoriye göre

yine zannediliyordu ki elektronlar düz çizgiler halinde hareket ederler, ta ki bir başka elektronla çarpışmaya ya da pozitif bir iyonla çarpışmaya kadar [11].

Sonuç olarak Drude' nin serbest elektron modeli metaller için ısı sığası, ısı iletkenlik, elektron iletkenliği, magnetik geçirgenlik ve elektrodinamiği ile ilgili konularda bilgi verebilmekte ancak, metal, yarımetal, yalıtkan ve yarıiletkenler arasındaki farkı açıklayamamaktadır. Bu nedenle yaklaşık serbest elektron modeli geliştirilmiştir.

3.1. Yaklaşık Serbest Elektron Modeli

Serbest elektron modelinde kristaldeki örgü iyonları, elektronlar arası Coloumb etkileşmesi ve örgü iyonları ile elektronlar arası etkileşmeler ihmal edilmiştir. Yaklaşık serbest elektron modelinde ise temelde elektronlar ve örgü iyonları arasındaki etkileşmeler vardır.

Yaklaşık serbest elektron teorisinde, örgüdeki (+) iyonlar ile elektronların zayıf etkileşmesi önemli sonuçlar meydana getirir. Bunlardan ilki ters örgü Brillouin bölgelerine ayrılabilir olmasıdır; diğeri ise sürekli olan enerji eğrisinin, enerji aralıklarıyla bölünmüş çok sayıda enerji bandı içermesidir. Kristalde ilerleyen bir dalga Bragg yansımaya uğrayacaktır. Brillouin bölgesi sınırlarında oluşan bu yansıma, kristalde enerji aralıkları oluşmasının temel nedenidir [15,18].

$$k \text{ dalga sayılı bir dalganın kırınımı için } (\vec{k} + \vec{G})^2 = k^2 \quad 3.1$$

$$k = \pm \frac{1}{2} G = \pm \frac{n\pi}{a} \quad 3.2$$

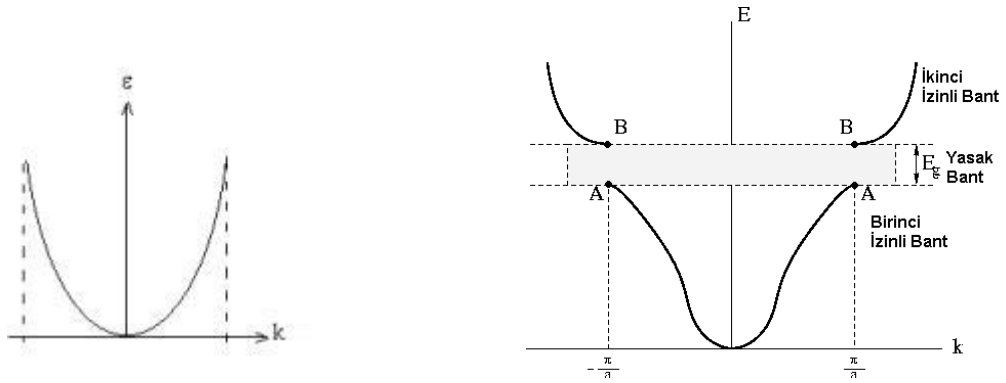
olur. Burada $G = \pm \frac{n\pi}{a}$ ters örgü vektörü ve n bir tam sayıdır. İlk yansımalar ve ilk enerji aralığı $k = \pm \pi / a$ da oluşur. k uzayında $-\pi/a$ ile $+\pi/a$ arasındaki bölgeye bu örgünün birinci Brillouin bölgesi denir. $k = \pm \pi / a$ Bragg koşulu sağlandığı zaman sağa ilerleyen bir dalga Bragg etkisiyle sola, sola ilerleyen dalga ise sağ yöne yansır.

e^{\pm} gibi ilerleyen iki dalga kullanarak durağan iki dalgayı şöyle kurabiliriz:

$$\Psi (+) = e^{i\pi x/a} + e^{-i\pi x/a} = 2i \cos \pi x / a$$

$$\Psi (-) = e^{i\pi x/a} - e^{-i\pi x/a} = 2i \sin \pi x / a \quad 3.3$$

Her ikisi de eşit miktarda sağa ve sola ilerleyen bileşenlere sahiptirler [15].

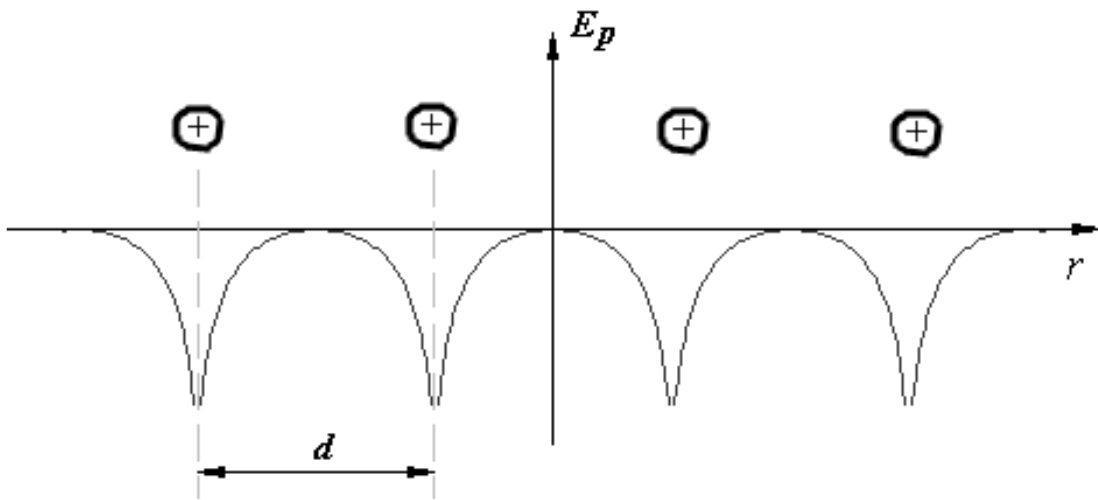


Şekil 3.2 (a) Serbest elektronda ε enerjisinin k dalga vektörüyle değişimi. (b) Örgü sabiti a olan tek atomlu doğrusal örgüde elektron enerjisinin dalga vektörüyle değişimi.

Şekilde gösterilen ΔE enerji aralığı $k = \pm \frac{\pi}{a}$ daki birinci Bragg yansıması ile ilişkilidir

[15].

Enerjinin aralığının kaynağı durağan $\Psi(+)$ ve $\Psi(-)$ dalgalarının elektronları farklı bölgelere topluyor olmasıdır. Böylelikle iki dalga farklı iki potansiyele sahip olur. Bu oluşan potansiyel fark da enerji aralığını oluşturur. Şekil 3.2 de görülen yasak bant bu enerji aralığıdır. Şekil 3.3 de doğrusal örgüdeki iyon merkezlerinin etkisi altındaki bir elektronun potansiyel enerji değişimi görülmektedir.



Şekil 3.3 Doğrusal örgüdeki iyon merkezlerinin etkisi altındaki bir elektronun potansiyel enerjisi [17]

3.2. Katılardaki Enerji Bantları

Kristaldeki elektronun davranışı Schrödinger dalga denkleminin çözümleri incelenerek bulunabilir.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\phi(r) + V(r)\Phi(r) = E\phi(r) \quad 3.4$$

Buradaki $V_{(r)}$ kristal potansiyelini ifade eder [18].

3.2.1. Kristal Potansiyeli

$V(r)$ kristal potansiyeli iki terimden oluşur.

$$V(r) = V_i(r) + V_e(r) \quad 3.5$$

$V_i(r)$ potansiyeli, örgüyü oluşturan iyon göbekleri ile iletim elektronunun etkileşmesinden; $V_e(r)$ potansiyeli, iletim elektronunun diğer iletim elektronlarıyla etkileşmesinden oluşur.

$V_e(r)$ potansiyelinin bulunmasında belli zorluklar vardır. Bu terim ancak verilen elektronla etkileşen diğer bütün elektron durumlarının bilinmesi durumunda hesaplanabilir. Bütün elektronların durumunu aynı anda düşünmek gerekmektedir. Bu ise çok cisim problemidir. Elektron, sabit hareket yaptığı için $V_e(r)$ kesin olarak periyodik değildir. Aynı zamanda elektron-elektron etkileşmesi zayıf olduğu için bu etkileşme ihmal edilebilir.

Kristal potansiyeli de,

$$V(r) = V_i(r) = \sum_j V_s(r - R_j) \quad 3.6$$

şeklinde ifade edilir.

$V(r)$ kristal potansiyeli kristal örgü ile aynı öteleme simetrisine sahiptir.

$V(r + R) = V(r)$ şartı sağlanır. R , örgü öteleme vektörüdür [18].

3.2.2. Bloch Fonksiyonları

Periyodik potansiyelde hareket eden bir parçacığın Schrödinger denklem çözümü:

$$\psi(x) = u_k(x)e^{\pm ikx} \quad 3.7$$

şeklinde Bloch teoremi olarak ispat edildi.

Buradaki $u_k(x)$ periyodik bir fonksiyondur. Bloch fonksiyonları, iyon merkezlerinin oluşturduğu potansiyelde serbest dolaşan elektronları temsil eder ve dalga paketleri şeklinde ifade edilir [17].

Bloch teoreminin kısmi ispatı:

$$P(x) = |\psi(x)|^2 = \psi^*(x)\psi(x)$$

$$P(x) = [u_k(x)e^{\pm ikx}]^* [u_k(x)e^{\pm ikx}]$$

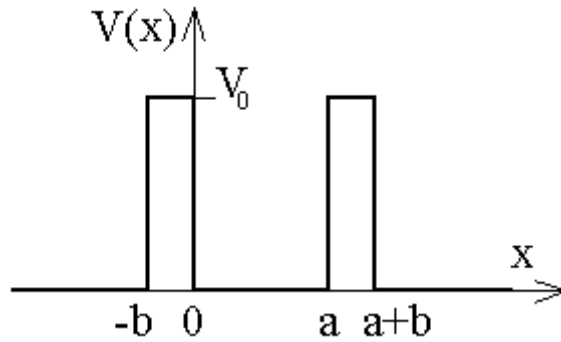
$$P(x) = u_k^*(x)u_k(x)e^{\pm ikx}e^{\pm ikx} = u_k^*(x)u_k(x)$$

$$P(x) = |u_k(x)|^2$$

$$P(x) = P(x+d) \quad 3.8$$

3.2.3. Kronnig Penney Modeli

Schrödinger denklemini çözebilmek için gerçek atomik potansiyel kesin olarak bilinmediği için, periyodik kristal potansiyeli yerine bir model kabul etmek gerekir. Bu model Kronnig ve Penney' in gerçekleştirdiği kare-kuyu modeli olarak bilinen bir modeldir [17,18].



Şekil 3.4 Kronnig Penney Modeli

Schrödinger dalga denklemi,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x)\psi = E\psi \quad 3.9$$

şeklindedir.

$0 < x < a$ bölgesinde $V_{(x)} = 0$ dir.

Öz fonksiyon,

$$\psi = Ae^{iKx} + Be^{-iKx} \quad 3.10$$

şeklinde sağa ve sola doğru ilerleyen düzlem dalgaların çizgisel bileşiminden oluşur. Elektronun enerjisi,

$$E = \frac{\hbar^2 K^2}{2m} \text{ dir.} \quad 3.11$$

$0 < x < a+b$ bölgesinde $V_{(x)} = V_0$ olduğundan,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + (V_0 - E)\psi = 0 \text{ olur.} \quad 3.12$$

Genel çözüm,

$$\psi = Ce^{Qx} + De^{-Qx} \quad 3.13$$

ve A, B, C, D sabitleri, ψ ve $\frac{d\psi}{dx}$, $x=0$ da sürekli olmalıdır.

$$A + B = C + D$$

$$iKA - iKB = QC - QD \text{ olur.} \quad 3.14$$

$x = a$ da süreklilik olması koşulundan,

$$Ae^{iKa} + Be^{-iKa} = Ce^{Qa} + De^{-Qa} \text{ ,}$$

$$iKAe^{iKa} - iKB^{-iKa} = QCe^{Qa} - QDe^{-Qa} \text{ olur.} \quad 3.15$$

Aralarında $e^{ik(a+b)}$ kadarlık faz farkı vardır. $x=a$ 'daki ψ ve $\frac{d\psi}{dx}$ değerleri $x=-b$ 'deki değerlere eşit olmalıdır. Bu durum,

$\psi_k(\vec{r}) = V_k(\vec{r})e^{i\vec{k}\vec{r}}$ eşitliğiyle verilen Bloch fonksiyonunun bir sonucudur. $x=a$ 'da yazılan

$$Ae^{iKa} + Be^{-iKa} = Ce^{Qa} + De^{-Qa} \text{ eşitliğin sol tarafına, } Ae^{[iKa-ik(a+b)]} + Be^{[-iKa-ik(a+b)]}$$

yazılır ve $iKa - iKb = Qc - Qd$ denkleminin sol tarafına benzer değişikliği yaparsak, $x=0$ ve $x=a$ için yazdığımız denklemler A, B, C, D katsayılarının determinantları sıfır olduğunda veya

$$[(Q^2 - K^2) / 2QK] \sinh Qb \sin Ka + \cosh Qb \cos Ka = \cos k(a+b) \quad 3.16$$

olduğunda çözüme sahiptir. Bu denklemi elde etmek oldukça uzun işlemleri gerektirir. Potansiyel engelleri çok dar ve sonsuz uzun olarak alınır; $b=0$ ve $V_0 = \infty$ olduğu limit durumunda,

$$P = Q^2ba / 2 \text{ ve yukarıda yazılan bağıntı,}$$

$$(P / Ka) \sin Ka + \cos Ka = \cos ka \quad 3.17$$

şeklini alır [17,18].

3.3. Bir Banttaki Yörünge Sayısı

Örgü sabiti a olan ilkel hücrelerden yapılmış L uzunluklu çizgisel bir kristal için,

$$\phi_k(x) = u_k(x)e^{ikx} \text{ dir.}$$

Birinci Brillouin bölgesindeki elektron \vec{k} dalga vektörünün izinli değerleri,

$$k = 0, \pm \frac{2\pi}{L}, \pm \frac{4\pi}{L}, \dots, \frac{N\pi}{L} \quad 3.18$$

şeklindedir.

$u_k(x)$ periyodik bir fonksiyon olduğundan $\phi_k(x) = u_k(x)e^{ikx}$ denkleminde $u_k(x+L) = u_k(x)$ şartı sağlanır.

Dizi bölge sınırına karşılık gelen $N\pi/L = \pi/a$ ' da kesilir.

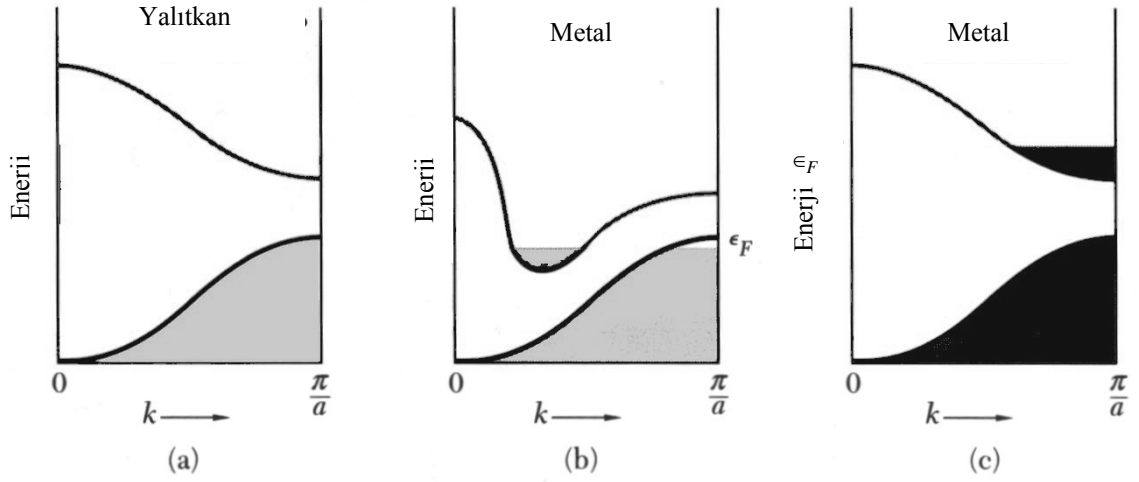
Birinci Brillouin bölgesindeki izinli noktaların sayısı N ' dir. N ilkel hücrelerin sayısıdır. Her bir ilkel hücre, her bir enerji bandına bağımsız k değeri ile katkıda bulunur. Elektron spininin iki bağımsız yönelimi olacağı düşünüldüğünde, her enerji bandında $2N$ tane yörünge bulunur.

İlkel birim hücrede bir değerlik elektronlu bir atom varsa, enerji bandının yarısı doldurulabilir. Her atom enerji bandına iki elektron verirse, bant tamamen dolar. Her ilkel hücrede bir değerlikli iki atom varsa, bant tamamen doldurulmuş olur [17,18].

3.4. Metaller ve Yalıtkanlar

Bantların doluluk durumlarına göre metallerle yalıtkanlar arasındaki farkı görebiliriz. Metalleri yalıtkanlardan ayıran en büyük özellik çok yüksek elektriksel iletkenliğe sahip olmalarıdır [11].

Değerlik elektronları bir ya da daha fazla bandı doldurur ve diğer bantlar boş kalırsa bu kristallerde akım oluşmaz. Dolu bant yüksek bir enerji bandından yasak enerji bandıyla ayrılır ve böylelikle elektronların toplam momentumu sürekli olarak değişmez. Kristal içerisindeki ilkel hücrede, değerlik elektronlarının sayısı çiftse kristal yalıtkanlıdır. Bu kurala uymayan bazı durumlar söz konusudur. İlkel hücrede değerlik elektronlarının sayısının çift olması halinde de, bantların enerjileri açısından birbirlerinin içerisine girip girmediğine bakılması gerekir. Bantlar üst üste binmişlerse, üst üste binen bantların bir bölümleri dolmuş iki bant gibi davranarak metal kristali oluşturabilir [18].



Şekil 3.5 Dolu yörüngeler ve bant yapısına göre (a)Yalıtkan oluşumu (b) Bant örtüşmesi nedeniyle metal oluşumu (c) Elektron yoğunluğu nedeniyle metal oluşumu [15]

Soy metaller, alkali metaller ilkel hücrelerinde bir değerli, k elektronuna sahip olduklarından metal olmak zorundadırlar. Toprak alkali metalleri ilkel hücrede iki değerlik elektronuna sahip olduğu için yalıtkan olabilir, ancak enerji bantları birbirlerinin içerisine girdiği için metal özellikte olup, iyi metal değildir.

Elmas, Silisyum ve Germanyum kristallerinde ilkel hücrede dört değerlik elektronu olan iki atom vardır, böylece sekiz tane değerlik elektronu bulunur. Bantlar birbirinin içerisine girmezler ve saf kristalleri mutlak sıfır sıcaklığında yalıtkan özelliktedirler [18].

4. KRİSTAL ÖRGÜLERİN MEKANİKSEL KARARLILIĞI

4.1.Mekaniksel Kararlılık

Max Born'un geliştirdiği teoriye göre bir kristal örgünün mekaniksel olarak kararlı olabilmesi için üzerine hiçbir dış kuvvetin uygulanmaması gerekir.

Milstein tarafından yapılan bir çalışmada ise kübik bir kristale Born kriterleri uygulandığında dış kuvvet altında kristalin tek çeşitliliğinin bozulduğu kabul edilmektedir. Milstein çalışmalarında Morse potansiyeli fonksiyonunu kullanarak ikinci dereceden elastik sabitlere göre mekaniksel kararlılık şartı $(c_{11} > c_{12})$ şartını inceleyerek, fcc metallerin sürekli kararlı, bcc metallerin ise c_{11}/c_{12} oranının en fazla 1.36 ve en az 1 olduğu bölge sınırlarında kararlı olabileceğini ifade etmiştir [19].

4.2. Born' un Kararlılık Kriterleri

Bu kriterler metallerin elastik sabitleri ve birim yüzeydeki enerji yoğunluklarına göre incelenir. Elastik sabitlere bağlı olarak kararlılık kriterleri:

- Kristalin elastik sabitleri daima pozitif olmalı,
- Denge durumunda Cauchy bağıntısı $(c_{12} = c_{44})$ sağlanmalı,
- $c_{11} > c_{12} > 0$ olmalı,
- $(c_{11}/c_{12}) > 1$ olmalıdır [19].

4.3.İkinci Dereceden Elastik Sabitler

İçinde yeterli sayıda ilkel birim hücre bulunacak kadar büyük, yüzeylerinde makroskobik işlemler yapabilecek kadar küçük olan ve sürekli atom oluşturan katı bir cisme dışarıdan kuvvet uygulandığında cismin şekli ve yapısı değişir. Esneklik sınırı denilen bir sınırın altında kaldığı sürece, dış kuvvet ortadan kalktığında cisim eski şekil ve yapısına döner.

Birim yüzey başına düşen kuvvete zor, birim uzunluk başına uzunluk değişimine ise zorlanma denir. Hook Yasası'na göre yeteri kadar küçük zorlanmalar için zor ile zorlanma

birbirleriyle doğru orantılıdır. Üç boyutlu uzayda zor S_{ij} , zorlanma E_{ij} tensörleri ile temsil edilir. Birbiri ile olan ilişkisi,

$$S_{ij} = C_{ijmn} E_{mn}, \quad (i, j, m, n = \text{tamsayı}) \quad 4.1$$

bağıntısı ile verilir [18].

Burada C_{ijmn} esneklik katsayıları tensörüdür.

Bir kristal örgünün C_{ij} elastik sabitine bağlı olarak,

$$E = \frac{1}{2} \sum_{i,j} N C_{ij} S_i S_j \quad 4.2$$

şeklinde tanımlanan bir enerjiye sahiptir [20].

İfadedeki S_i ve S_j enerjideki artmadan kaynaklanan küçük zorlardır. Kübik simetriye sahip bir kristal C_{11}, C_{12}, C_{44} olan birbirinden bağımsız üç esneklik sabitine sahiptir.

Merkezi etkileşmeler için $C_{11} = C_{44}$ Cauchy bağıntısını sağlar. C_{ij} matris açılımından

$$C_{12} > 0, \quad C_{11} > 0 \quad 4.3$$

$$(C_{11} + 2C_{12}) > 0, \quad (C_{11}^2 - C_{12}^2) > 0 \quad 4.4$$

bağıntıları elde edilir. 4.4 bağıntısından

$$C_{11} / C_{12} > 1 \quad 4.5$$

bağıntısı bulunur. 4.3, 4.4, 4.5 bağıntıları Born kriterleri olarak bilinir.

İkinci derece elastik sabitlerin potansiyel fonksiyona bağlı değişimi,

$$C_{11} = \frac{1}{8} n a_1 \sum_{L_{1,2,3}} L_1^4 \phi_{(r_j^2)}^{11} \quad 4.6$$

$$C_{12} = \frac{1}{8} n a_2 \sum_{L_{1,2,3}} L_1^2 \cdot L_2^2 \phi_{(r_j^2)}^{11} \quad 4.7$$

şeklinde verilir [18,19].

Ayrıca sabit basınç altında bulk modülü (hacim sabiti) elastik sabitlere bağlı olarak değerini veren ifade:

$$B = \frac{1}{3}(C_{11} + 2C_{12}) \quad 4.8$$

olarak tanımlanır [1].

5. WIEN2k PROGRAMININ TANITIMI

Birden çok atomdan oluşan kompleks sistemlerin elektronik özelliklerini inceleyebilmek için bilgisayar simülasyon programlarının kullanılması oldukça kolaylık sağlar. Bu şekilde mevcut birçok program vardır; WIEN2k bunlardan birisidir. WIEN2k programı, kristal yapıların örgü parametresi ve atomların yerlerinin bilinmesi halinde kristal yapının fiziksel özellikleri hakkındaki bilgilere ulaşmamızı sağlayan bir programdır. Programın içerdiği yaklaşık metot olarak, yoğunluk fonksiyonel teori (DFT), tam potansiyel lineer arttırılmış düzlem dalgaları (FLAPW) ve değiş tokuş korelasyon enerjisi için gradyent yaklaşımı (GGA) kullanılır. Yoğunluk fonksiyonel teori temelde elektron yoğunluğuna dayanır. DFT metodu kuantum çok cisim problemin çözümü için genel bir metottur [21].

WIEN2k programı yardımıyla kristal yapılara ait bazı fiziksel özellikler; durum yoğunluğu (DOS), elektron yoğunluğu, enerji hacim değişimi, bant yapısı, spin yoğunlukları, karalılık şartları, kuvvet, yapı optimizasyonu, fonon dispersiyonu, elektrik alan gradyentleri, manyetik özellikler, x-ışınları soğurma ve yayılım spektralleri, fermi yüzeyleri ve optiksel özellikleri incelenir.

5.1. case.struct Dosyasının Oluşturulması

Programın en başında yapı dosyası olan case.struct dosyası oluşturulur. Bu dosyanın tanımlanması için TiC alaşımını örnek alınacaktır.

```
file.case.struct:
TiC
F LATTICE,NONEQUIV. ATOMS: 2
MODE OF CALC=RELA unit=ang
8.442749 8.442749 8.442749 90.000000 90.000000 90.000000
ATOM= 1: X=0.00000000 Y=0.00000000 Z=0.00000000
MULT= 1 ISPLIT= 2
Ti NPT= 781 R0=0.00005000 RMT= 2.0000 Z: 22.0
LOCAL ROT MATRIX: 1.0000000 0.0000000 0.0000000
0.0000000 1.0000000 0.0000000
0.0000000 0.0000000 1.0000000
ATOM= 2: X=0.50000000 Y=0.50000000 Z=0.50000000
MULT= 1 ISPLIT= 2
C NPT= 781 R0=0.00010000 RMT= 1.9000 Z: 6.0
LOCAL ROT MATRIX: 1.0000000 0.0000000 0.0000000
```

```

0.0000000 1.0000000 0.0000000
0.0000000 0.0000000 1.0000000
48  NUMBER OF SYMMETRY OPERATIONS
1 0 0 0.0000000
0-1 0 0.0000000
0 0-1 0.0000000
1
1 0 0 0.0000000
0 0-1 0.0000000
0-1 0 0.0000000
2
-1 0 0 0.0000000
0-1 0 0.0000000
0 0-1 0.0000000
3
-1 0 0 0.0000000
0 0-1 0.0000000
0-1 0 0.0000000
.
.
.
-1 0 0 0.0000000
0 1 0 0.0000000
0 0 1 0.0000000
48

```

Birinci satır: Alaşımın adı

İkinci satır : Örgü tipi, NAT: Birim hücredeki eşdeğer olmayan atomların sayısı

Örgü tipi;

P: İlkel (primitive) örgü

F: Yüzey merkezli örgü

B: Cisim merkezli örgü

Üçüncü satır: Hesaplama modu;

RELA: Bütün relativistik çekirdek ve skaler relativistik valans.

NREL: Relativistik olmayan hesaplama.

Dördüncü satır: a, b, c, α, β, γ

a, b, c : Örgü parametreleri (atomik birimde) 1 a.u= 0.529177 Å

α, β, γ : Birim eksenler arasındaki açılar

Beşinci satır: Atom indeks, x, y, z

Eşdeğer olmayan atomun sayısını belirtir.

x, y, z : Atomların konumları

Altıncı satır : Multiplicity, isplit

multiplicity : Yapıda birbirine eş olan atomların sayısı

isplit : 2 d-elektronlarının e-g, 1-2g e.g. : kübik

8, 5 ve 6 seçeneklerini birleştirir.

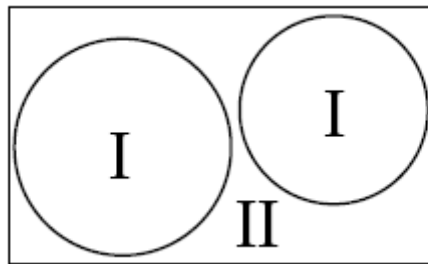
Yedinci satır: Atomun adı, NPT, RO, RMT, Z

NPT : Radikal ağ noktalar sayısı(781)

RO : İlk radikal ağ noktası(0.0005-0.00005 arasında)

RMT: Atomik küre çapı

Z : Atom numarası



Şekil.5.1 Birim hücre içerisindeki atomik küreler. Atomlar en fazla birbirine değebilir ancak birbirlerinin içinden geçemezler.

Sekiz-onuncu satır: LOCAL ROT MATRİX

Yerel dönme matrisi (ortogonal koordinat sisteminde)

Onbirinci satır: Uzay grubunun simetri işlemlerinin sayısı

Sıfır olarak bırakılırsa, simetri işlemleri genelde otomatik olarak oluşturur.

Oniki- ondördüncü satır: Matrix, tau

matrix: Simetri işlemi (uzay grup) matris gösterimi

tau: İlkel olmayan vektör geçişi

Onbeşinci satır: Simetri işleminin toplam sayısını belirtir.

5.2. case.inst Dosyasının Oluşturulması

Struct dosyası oluşturulduktan sonra ‘‘instgen_lapw’’ komutu girilerek case.inst dosyası oluşturulur. Bu dosyada orbitallerin ayrı ayrı durumları tanımlanır.

file.case.inst:

Ti

Ar 2 5

3, 2,2.0 N

3, 2,0.0 N

4,-1,1.0 N

4,-1,1.0 N

C

He 3 5

2,-1,1.0 N

2,-1,1.0 N

2, 1,1.0 N

2, 1,0.0 N

2,-2,1.0 N

2,-2,0.0 N

**** End of Input

**** End of Input

Oluşturulan TiC.inst dosyasında;

Birinci satır: Title, Watson

Title : İsim

Watson: Q-wat- yüküyle R-wat kürenin yarıçapı

İkinci satır: Config

config: Valans orbitallerinin numarası ve soy gazlara göre çekirdek durum konfigürasyonları

Üçüncü satır: n,kapa, occup plot

n : Kuantum numarası

kapa : Relativistik kuantum numarası

occup: İşgal etme sayısı (spin başına)

plot : P- ayrı ayrı orbitallerin yoğunluğu

N : Boş bir alanda ayrı ayrı orbitallerin yoğunluğunu muaf tutmak.

Kuantum numaralarının tanımlanması [22].

Spin kuantum sayısı= $s=+1$ veya $s=-1$

Orbital kuantum sayısı= $j=l+ s/2$

Relativistik kuantum sayısı= $K=- s(j+1/2)$

Çizelge 5.1 Relativistik kuantum sayıları [15]

	L	J=l +s/2		K		max. işgal sayısı	
		s=-1	s=+1	s=-1	s=+1	s=-1	s=+1
S	0		1/2		-1		2
P	1	1/2	3/2	1	-2	2	4
D	2	3/2	5/2	2	-3	4	6
F	3	5/2	7/2	3	-4	6	8

5.3. init_lapw Hesaplamaları

Bir sonraki komut olan “ init_lapw” girilerek hesaplamalar başlatılır ve sonraki adımlar otomatik olarak devam eder.

xnn: En yakın komşu atomlar uzaklığı hesaplanır. Genelde 2 değeri girilir. İkinci komşuluğa kadar gidilir.

case outputnn: Atomik küre yarıçaplarına bakılır.

x sgroup: case.struct dosyasından örgü tipi, örgü sabitleri, atom pozisyonları bilgilerini kullanır. Uzak gruplarını ve eşit olmayan durumların nokta gruplarını belirler.

case.outputsgroup: Uzak gruplarını gösterir.

TiC için:

-m -3m 41m -3 2/m Oh

-m -3m 41m -3 2/m Oh

-Uzak grubunun numarası ve adı: 225 (Fm-3m)

x symmetry: Bu program case.struct dosyasından, örgü tipi ve atomik konumları kullanılır. Uzak grup simetri işlemlerini meydana getirir.

case. outputs: Simetri operasyonları ile atomun nokta grup simetrisi kontrol edilir.

x lstart: Atomik yoğunlukları oluşturur.

Çekirdek durumları ile valans durumları birbirinden ayırmak için enerji ve değişken korelasyon potansiyel (Vec) gerekir.

Bunun içinXC- potansiyel:

05- LSDA [23].

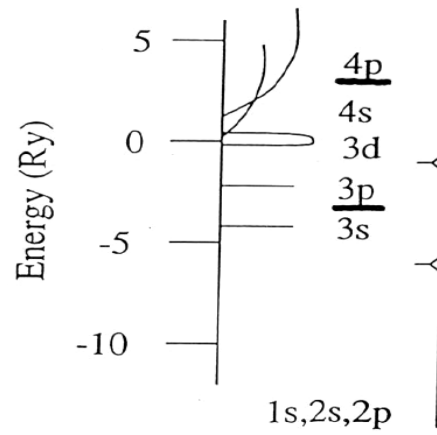
13-GGA [24].

14-GGA [25] olarak kullanılır. Genelde 13-GGA kullanılır. Daha sonra program valans durumlardan çekirdek durumları ayırmak için kesme enerjisini sorar. Genellikle -6.0 Ry (Raydberg) alınır. Bu enerji değerinin üstü yaklaşık olarak valans durumlarına karşılık gelir.

case.outputst: Uygun atomik konfigürasyonu belirtir.

Genel olarak elektronik durumlar çekirdek, yarı çekirdek ve valans durumları olmak üzere üçe ayrılır.

1. **Çekirdek Durumlar:** Atomik kürenin içerisine hapsedilmişlerdir. Enerjileri, Fermi enerjisinin 7-10 Ry altındadır.
2. **Yarı Çekirdek Durumlar:** Enerjileri, Fermi enerjisinin 1-7Ry arasındadır. Yükleri atomik kürenin içinde sınırlanmaz, bir kısmı kürenin dışına taşar.
3. **Valans Durumları:** Enerjisi en yüksek durumlardır. Atomik kürenin dışında azalan bir miktar yüke sahiptir.



Şekil 5.2 Çekirdek, yarı çekirdek, valans durumları [26]

case.in1_st: Buradaki en önemli parametreler RKMAX olup, baz fonksiyonlarının numaraları (matrislerin büyüklüğü) tanımlanır.

Genelde:

5-9 için APW

6-10 için LAPW alınması uygundur. Bu değerler değiştirilebilir.

```
file.in1_st
WHFFIL (WFPRI,SUPWF)
7.00 10 4(R-MT*K-MAX; MAX L IN WF, V-NMT
0.30 5 0 (GLOBAL E-PARAMETRELER WITH n OTHER CHOICE, global APW/ LAPW)
0 0.30 0.000 CONT 1
0 -4.35 0.005 STOP 1
1 -2.58 0.010 CONT 1
1 0.30 0.000 CONT 1
2 0.30 0.010 CONT 1
```


0.30 3 0 (GLOBAL E-PARAMETRELER WITH n OTHER CHOICE, global APW/ LAPW)
 0 -0.78 0.010 CONT 1
 0 0.30 0.000 CONT 1
 1 0.30 0.000 CONT 1
 K-VECTORS FROM UNIT:4 -7.0 1.5 emin/emax window

TİC.in1_st dosyasında:

Birinci satır: Switch

WFFIL: Standart seçenektir. case.vector dosyasında dalga fonksiyonunu yazar.

SUPWF: Durağan dalga fonksiyonunu hesaplar.

WFPRI: Özvektörleri yazar.

İkinci satır: rmax, lmax, Insmax

rmax: Rmt*Kmax matris büyüklüğü tanımlar. Rmt tüm atomik küre çaplarının en küçüğüdür ve Kmax kesme dalga fonksiyonudur. Bu değer genelde 5-9 arasında (APW+lo) veya 6-10 arasında (temel LAPW) değerlerinde olur. K²max pseudo-potansiyel hesaplamalarında kesme düzlem dalgalarında Ry parametrelerinde kullanılır.

lmax: Atomik kürelerin içinde parça dalgaları için L, 8-12 arasında maksimum değerini alır.

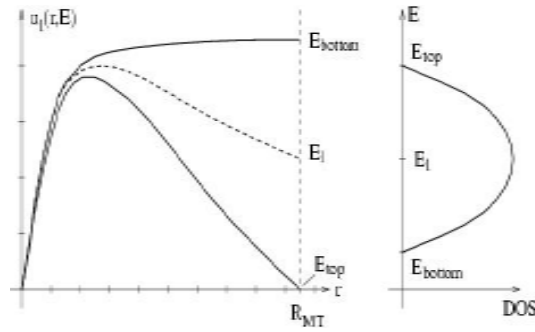
Insmax: Muffin-tin olmayan matris elemanlarının hesaplanmasında parça dalgalar için maksimum l değeri kullanılır.

Üçüncü satır: Entrial, ndiff, Napw

Entrial: Radyal Schrödinger denkleminin çözümünde,

$$A_{lm}^{\alpha, \vec{k} + \vec{K}} = \frac{4\pi i^l e^{i(\vec{k} + \vec{K}) \cdot \vec{r}_a}}{\sqrt{V} \bar{u}_l^{\alpha}(\bar{R}_\alpha, E)} J_l \left(\left| \vec{k} + \vec{K} \right| R_\alpha \right) Y_m^{l*}(\vec{k} + \vec{K})$$

$u_l(r, E_l)$ 'yi elde etmek için E_l 'nin varsayılan enerji değeri kullanılır.



Şekil 5.3 $u_l(r, E_l)$ enerjisi ve DOS'un şematik bağılılığı [27]

Bdiff: Hariç tutulacakların sayısı

Napw: Bu atomun tamamını kapsayan l değerlerinin hepsi için aşağıdaki durumlar söz konusudur.

LAPW temeli için 0

APW temeli için 1

Dördüncü satır: l, E^l , de, swicth, NAPWL

l, kısmi dalga

E^l , L=1 için E_l

de, de=0 enerji artışı

$E(l)$ varsayılan enerjinin üzerine yazıyor. $de \neq 0$ artışına göre bir rezonans enerjisi araştırır. $u_l(r, E)$ yarıçap doğrultusundaki fonksiyon muffin-tin yarıçapına kadar enerji ve RMT'yi değiştirir.

E_l enerjisinden başlayarak yukarıya ve aşağıya doğru "de" artışı kullanılarak $u_l(R_{MT}, E)$ 'nin nerelerde işaret değiştirdiği bulunur. İşaret değiştirme değeri olarak $E_{üst}$ 'ü belirtir. Eğim olarak E_{alt} 'i belirtir. Enerji bantlarının altında E_{alt} ve $E_{üst}$ bulunduğu takdirde E^l , bu ikisinin aritmetik ortalaması olarak alınarak deneme enerjisi ile değiştirilir. $E_{üst}$ ve $E_{alt} + 1$ ve $-10Ry$ tanımlıdır. E_{alt} ve $E_{üst}$ bulunamaz ise E_l başlangıç değeri olan -2.0 değerini kalır.

Switch: de $\neq 0$ olmadığı durumda anahtar kullanılır.

CONT: E_{alt} ve $E_{üst}$ bulunmuş olsa da işlem yapmaya devam eder.

STOP: Yarı-çekirdek durumları için yararlıdır.

NAPWL: 1 (l=0,1,2,3) değeri; APW yöntemi için 0, LAPW yöntemi için 1 alınır.

APW+ lo metodu, APW yöntemi ile kullanıldığında yakınsama olayı güç olan 3d gibi orbitallerin dalga fonksiyonlarını bulamada kullanılır.

Beşinci satır: unit-number, EMIN, EMAX

Unit-number: Brillouin bölgelerinde \vec{k} vektörlerinin hangi dosyadan okunacağını belirtir. 5 giriş dosyasının kendisinin olduğunu gösterir. Varsayılan değer 4 “case.klist” içerisindeki bilgilere karşılık gelir.

EMIN, EMAX: Özdeğerlerin araştırılacağı enerji aralığıdır. Verilen aralığın değerine göre bilgisayarın hesaplama süresi değişir. İşgal edilmemiş durumlar için durum yoğunluğu hesaplanırken enerji aralığı sınırlandırılabilir.

case.in2_st: Burada LM genişlemesi sınırlandırılabilir, GMAX değeri değiştirilebilir. Fermi enerjisini bulmak için farklı bir Brillouin bölgesi integrasyon metodu belirlenebilir.

case.inm_st : d ya da f elektronları yerleşmiş atomlar, manyetik sistemler için karıştırma faktörü 0.4’ ten daha düşük değerlerde alınabilir.

x kgen: Brillouin bölgesinde k noktalarının sayısı belirtilir. Hassas hesaplamalar için daha büyük sayılar verilir.

case.klist: k noktalarının sayısı kontrol edilerek birinci k noktası için enerji aralığı belirlenir.

x.dstart: SCF hesaplamaları için başlangıç yoğunluğunu üretir.

case.outputd: Gmax>Gmin gerekliliği bu dosyadan kontrol edilir.

Sonrasında spin-polarizasyon yapıp yapılmayacağı sorulur.

5.4. SCF Hesaplamaları

SCF (self-consistency cycle) hesaplamaları “run_lapw” komutuyla başlatılır ve hesaplamaları otomatik olarak yapar.

LAPW0: Coulomb (V_e) ve deęiş tokuş potansiyeli (V_{xc}) nin toplamı şeklinde toplam elektron yoğunluęunu giriş olarak alarak, toplam potansiyeli (V_{tot}) hesaplar.

Küreler içindeki Coulomb potansiyeli doğrudan sınır deęer probleminin çözümü için klasik Gren fonksiyonu metodundan elde edilir.

LAPW1: Özvektör ve özdeęerler meydana getirerek valans bantlarını hesaplar [28].

LAPW2: Özvektörden valans yoğunlukları hesaplanır.

LCORE: Çekirdek durumları ve yoğunlukları hesaplanır.

MIXER: Giriş ve çıkış yoğunlukları birleştirilerek yeni bir yoğunluk oluşturur.

Giriş yoğunluęuna yakın bir yoğunluk bulana kadar döngü devam eder. Döngü istedięimiz hassasiyete ulaştıracak şekilde devam ettirilir.

İşlemden girilen komut “run_lapw ec 0.0001” dir hesaplamadaki hassasiyet ec 0.0001’ki deęiştirmeler ile sağlanır.

5.5. Hesaplamanın Özellikleri

Bu başlık altında elektron yoğunluęu, durum yoğunluęu, bant yapısı ve hacim grafiklerinin nasıl çizildięi hakkında bilgi verilecektir.

5.5.1. Elektron Yoęunluęu

x_lapw2: Valans yoğunlukları 3s ve 3p’nin dışında hesaplanarak case.in5” dosyası oluşturulur.

```
file:case.in5
-1 -1 0 4      # x, y, z, divisor  of origin
-1 3 0 4      # x, y, z, divisor  of x-end
3 -1 0 4      # x, y, z, divisor  of y-end
3 2 3        # number of shells
100 100      # number of points in x and y dir, (ratio close to lenght ratio
RHO          # RHO|DIFF|OVER; ADD|SUB or blank
ANG VAL NODEBUG      # ANG|ATU; VAL|TOT; DEBUG|NODEBUG
NONORTHO     # optional: ORHO|NONORTHO plotting directions
```

TiC.in5 dosyasında:

Birinci satır: ix, iy, iz, idv

Düzlem ve çizimin parçası birim hücrede üç noktayla belirtilir: x, y ve orijin. Orijinin koordinatları belirtilir. $x=ix/idv$, $y=iy/idv$ örgü vektörlerinin birimindedir.

İkinci satır: ix, iy, iz, idv – x'in koordinatları

Üçüncü satır: ix, iy, iz, iv – y'nin koordinatları

x ve y'nin yönleri birbirine dik olmalıdır. Olmadığı takdirde NONORTHO (ortogonal olmayan=dik olmayan) seçeneği seçilir.

Dördüncü satır: nxsh, nysh, nzsh

En yakın komşu hücrelerin (x, y, z yönlerinde) sayısını belirtir. Burada atomik konumlar oluşturulur. Çizim büyük ise en yakın komşu hücrelerin sayılarını arttırmak gerekir, arttırılmadığı durumda bazı atomlar çizimin dışında kalır.

Beşinci satır: npx, npy

Çizimdeki ağ noktaları sayısını belirtir.

Altıncı satır: Switch

RHO: Yük veya potansiyel çizer. Atomik yoğunluk kullanmaz (düzenli durum).

DIFF: Yoğunluk farkını çizer.

OVER: Atomik yoğunlukların süper pozisyonu belirtir.

Yedinci satır: iunits, cnorm

iunits: ATU- yoğunluk (potansiyel) atomik birimlerde $e/a.u.^3$ ya da Ry

ANG: Yoğunluk $e/\text{Å}^3$ de (potansiyeller için bu seçenek kullanılmaz).

cnorm: VAL-case.clmval, r2v, vcoul dosyalar için kullanılır.

TOT: case.clmsum dosyaları için kullanılır.

Sekizinci satır:

ORTHO: Varsayılan yönlerin dik olmasını zorlar.

NONORTHO: Çizim programı dik olmayan eğrileri destekliyse bu seçenek kullanılır. Yönler keyfi olabilir.

x lapw5: Elektron yoğunluğunu hesaplar.

rhoplot: Hesap tamamlandıktan sonra bu komut girilerek elektron yoğunluğuna ait grafik çizilir.

5.5.2. Durumlar Yoğunluğu (DOS)

x lapw2-qtl: Kısmi yükler hesaplanır.

Bu hesaplamada “case.int” dosyası oluşturulur.

file:case.int:

```
TiC                      # Title
-0.50 0.00200 1.500 0.003 # EMIN, DE, EMAX for DOS, GAUSS-Broad
6                          # NUMBER OF DOS-CASES
0 1 tot                   # jatom, doscase,description
1 4 Ti-d
1 5 Ti-eg
1 6 Ti-t2g
2 2 C-s
2 3 C-p
```

TiC.int dosyasında:

Birinci satır: Element ya da bileşiğin adı

İkinci satır: e^{\min} , delta, e^{\max} , broad

e^{\min} : Enerji ağı R_y olarak belirtilir. Burada DOS hesaplanır. (e^{\min} , valans bandının en düşük seviyesinin biraz altındadır.)

delta: Enerji artışıdır.

e^{\max} : En yüksekte bulunan bandın en düşük enerjisini kontrol eder.

broad: Gauss genişleme faktörünü belirtir.

Üçüncü satır: ndos-DOS durumlarının sayısını belirtir.

Dördüncü satır: jatom, jcol, description

jatom: Hangi atom için DOS'un hesaplanacağını belirtir. 0- toplam DOS, $jatom=nat+1$, ara bölgedeki DOS durumları demektir. Burada "nat" eşdeğer olmayan atomlar sayısıdır.

jcol: Kullanılan QTL dosyasında uygun sütunu gösterir. 1 toplam, 2...S, 3...P demektir.

description: Durumların isimlerini belirtir.

x tetra: Durum yoğunluklarını hesaplar. Bu program tetrahedron metodunu kullanarak kısmi ve toplam DOS' ları hesaplar [29].

dosplot: Bu komutla DOS grafikleri çizilir.

5.5.3. Bant Yapısı

WIENROOT/SRC_templates/bcc.klist klasörü "case.in1" dosyasına eklenir.

x lapw1_band: Özdeğeri hesaplar. Bant yapısını hesaplamak için " case.insp" giriş dosyası oluşturulur.

```
file: case.insp
###Figure configuration
5.0  3.0          #paper ofset of plot
10.0 15.0        #xsize, ysize[cm]
1.0  4           #major ticks, minor ticks
1.0  1           # character height, font swicth
1.1  2  4        # line width, line swicth, color swicth
### Data configuration
-13.0 8.0 2      # enerji range,energy swicth(1: Ry, 2: eV)
1  0.73687      # Fermi swicth, Fermi-level (in Ry units)
1  999          # number of bands for heavier plotting 1,1
1  6  0.2       # j atom, jtape, size of heavier plotting
```

TiC.insp dosyasında:

Birinci satır: Şeklin tanıtılması

İkinci satır: xoffset, yoffset

xoffset: Çizimin orijininin x'e göre kaç cm ileride veya geride olduğunu belirtir.

yoffset: Çizimin orijininin y'e göre kaç cm ileride ya da geride olduğunu belirtir.

Üçüncü satır: xsize,ysize

xsize: x yönünün büyüklüğü (cm)

ysize: y yönünün büyüklüğü (cm)

Dördüncü satır: einer, mtick

einer: y eksenindeki enerji artışlarını belirtir.

mtick: y eksenindeki küçük bölmelerin sayısını verir.

Beşinci satır: charch, font

charch: İsimlendirmenin boyutu.

font: 0 yazı yok

1 Times ve Symbol fontları kullanılır.

2 Times, times- italik ve sembol kullanılır.

Altıncı satır: linew, ilin, icol

linew: Çizgi genişliğidir.

ilin: 0 açık ya da nokta daireler

1 çizgiler

2 çizgiler ve açık daireler

3 çizgiler ve dolu daireler

icol: Renkleri belirtir.

0 siyah çizer

1 tek renkle çizer

2 üç renkle çizer

3 çok renkle çizer

4 çok renkle çizer, her bir çizgi farklı renktedir.

Yedinci satır: Verilerin başladığını belirtir.

Sekizinci satır: e_{\min} , e_{\max} , iunits

e_{\min} : Çizimin minimum enerjisidir.

e_{\max} : Çizimin maksimum enerjisidir.

iunits: 1 enerjiler Ry cinsinden

2 enerjiler eV cinsinden

Dokuzuncu satır: iferm, efermi

iferm: 0 E_F 'yi çizmez

- 1 E_F düz çizgi olarak çizilir.
- 2 E_F noktalı çizgiler şeklinde çizilir.
- 3 E_F nokta nokta çizilir.

efermi: "case.scf" dosyasından E_F enerjisi alınarak yerine yazılır.

Onuncu satır: nband 1, nband 2 (Bantlar için en düşük ve en yüksek bant indeksidir.)

Onbirinci satır: jatom, jcol, jsize

jatom: "case.qtl" dosyası olduğunda bant karakteri çizilecek atomu belirler; noktalar uygun yarıçaplı dairelerle yer değiştirir. "case.qtl" yok ya da sıfır ise bant karakteri çizmez.

jsize: Bant karakterinde kullanılacak dairelerin yarıçaplarının boyut faktörünü gösterir.

x spaghetti: Özdeğerleri kullanarak enerji bant yapısı grafiğini çizer.

5.5.4. Bant Karakter Çizimiyle Bant Yapısı

x lapw1-bant: Özdeğerleri hesaplar.

x lapw2-bant-ctl: Kısmi yükleri hesaplar.

"case.insp" dosyasında karakter bentleri çiziminde:

jatom=1

jtype=... için hangi bant karakter yapısı çizilecek ise o karakter seçilir.

1- toplam, 2...S, 3...P, 4...d, 5...eg, 6...t2g

jsize=0.2

x spaghetti: Bant yapısı grafiği çizilir.

5.5.5. Hacim Grafiği Çizimi

init_elast: Bu komut girilerek hesaplamalar başlatılır. “case.struct” ve “case.inst” dosyalarının olması zorunludur.

elast_setup: Bu komut girilmeden önce “elast” klasörüne gidilir. Bu program “init.struct” ve “*.templ” dosyalarını kullanır ve giriş dosyalarını oluşturur.

ana_elast: Bütün sonuçlar “elast/result” klasöründe toplanır. Hesaplamalar “ana_elast” komutuyla “elast/result” klasörüne gidilerek çalıştırılır. Burada enerjiler hesaplanarak analizleri yapılır; elastik sabitleri ve basınç hesaplanarak hacim grafiği çizilir [8].

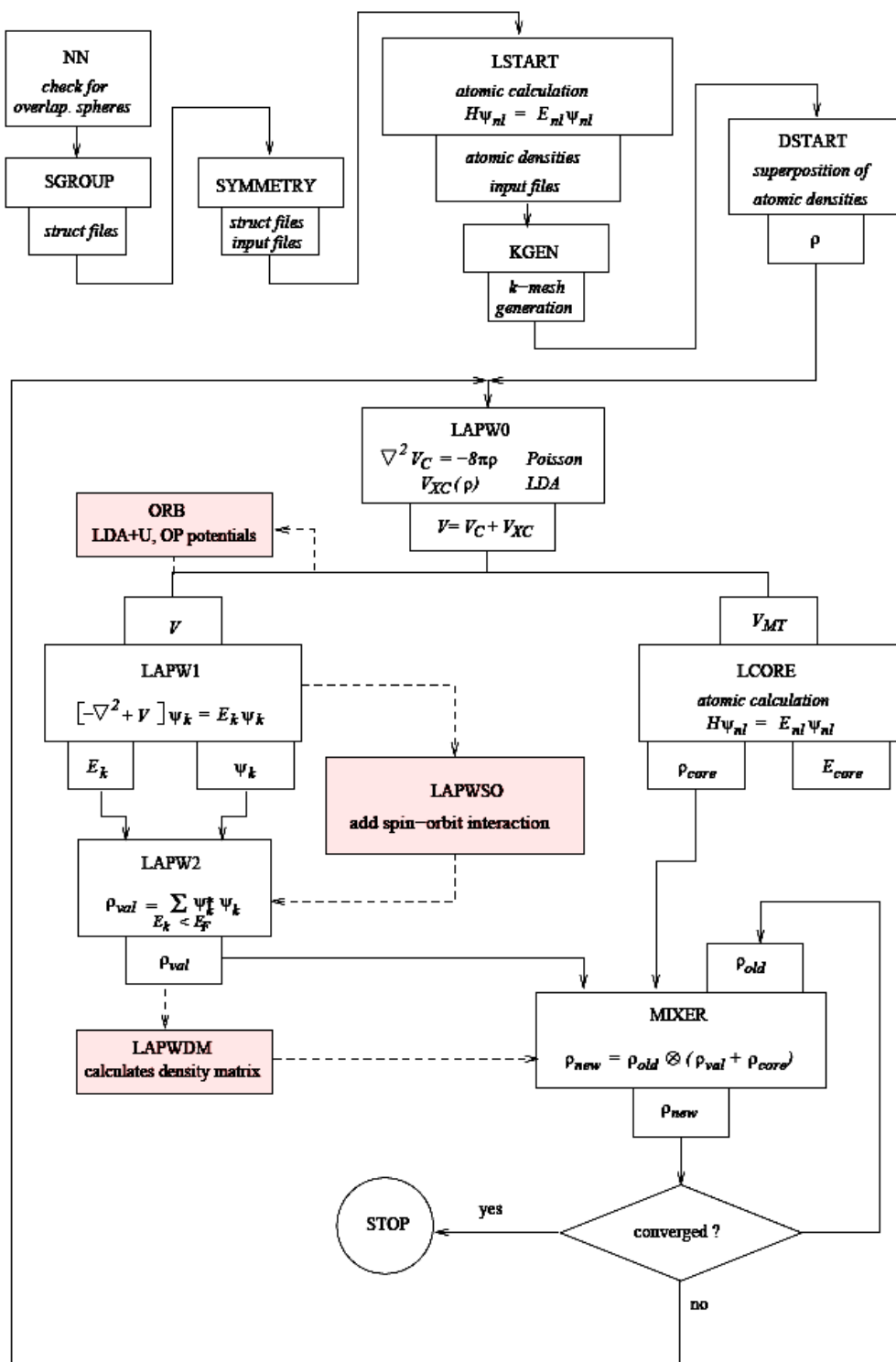
WIEN2k programı için hesaplamaların akış şeması şekil 4.4 de verilmiştir.

5.5.6. Supercell (Süper Örgü)

Bu program Wien2k struct dosyasını kullanarak supercell oluşturmada yardımcı olur.

Program supercell veya x supercell komutu girilerek başlatılır. Başlangıçta orijinal struct dosyasının adı ve x, y, z yönlerindeki hücre sayısı sorulur. x, y, z yönlerindeki hücre sayılarının tamamı değiştirilebilir. Örneğin $2 \times 2 \times 2$ girildiğinde örgü x, y ve z yönlerinde ikişer birim genişletilmiş olur.

Eğer simetrisi izin verirse atomların sayıları 2, 4, 8 faktörleriyle arttırılarak hedef örgü B, P ya da F merkezli örgülere çevrilebilir.



Şekil 5.4 Wien2k Akış Şeması [27]

6. TiC, bcc Fe, fcc Cu, supercell Cu, Fe-Mn, SUPERCELL Fe-Mn YAPILARININ WIEN2k PROGRAMI İLE TEST EDİLMESİ

Bu bölümde Wien2k programı kullanılarak TiC, bcc Fe, fcc Cu, supercell Fe yapılarına ait elde edilen sonuçların, Wien2k kılavuzundaki sonuçlarla karşılaştırılması yapılacaktır.

6.1. TiC Yapısı İçin Elde Edilen Sonuçlar

Öncelikle TiC yapı dosyası oluşturulur. TiC yapı dosyası oluşturulurken Wien2k kılavuzundaki bilgilerden yararlanılmıştır. Bu bilgiler:

Maddenin adı :TiC

Örgü Tipi : F

a=b=c : 4.328Å=8.727au

$\alpha=\beta=\gamma$: 90°

Atom 1 : Ti pozisyonu (0,0,0) ve RMT=2.0

Atom 2 : C pozisyonu (0.5, 0.5, 0.5.) ve RMT=1.9

Oluşturulan TiC struct dosyası aşağıdaki gibidir:

TiC

F LATTICE,NONEQUIV.ATOMS: 2 225 Fm-3m

MODE OF CALC=RELA unit=ang

8.442749 8.442749 8.442749 90.000000 90.000000 90.000000

ATOM 1: X=0.00000000 Y=0.00000000 Z=0.00000000

MULT= 1 ISPLIT= 2

Ti1 NPT= 781 R0=0.00005000 RMT= 1.67 Z: 22.0

LOCAL ROT MATRIX: 1.0000000 0.0000000 0.0000000

0.0000000 1.0000000 0.0000000

0.0000000 0.0000000 1.0000000

ATOM 2: X=0.50000000 Y=0.00000000 Z=0.00000000

MULT= 1 ISPLIT= 2

C 1 NPT= 781 R0=0.00010000 RMT= 1.48 Z: 6.0

LOCAL ROT MATRIX: 1.0000000 0.0000000 0.0000000

0.0000000 1.0000000 0.0000000

0.0000000 0.0000000 1.0000000

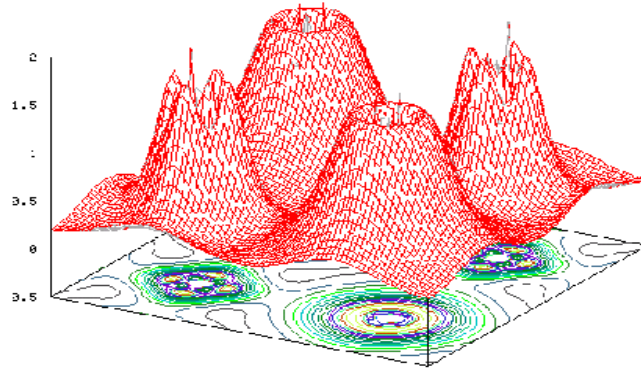
48 NUMBER OF SYMMETRY OPERATIONS

Daha sonra “instgen_lapw” komutu girilerek “TiC.inst” dosyası oluşturulur. “x lstart” komutunun çalıştırılması sırasında 13 GGA ve kesme enerjisi -6.0Ry olarak alınmıştır.

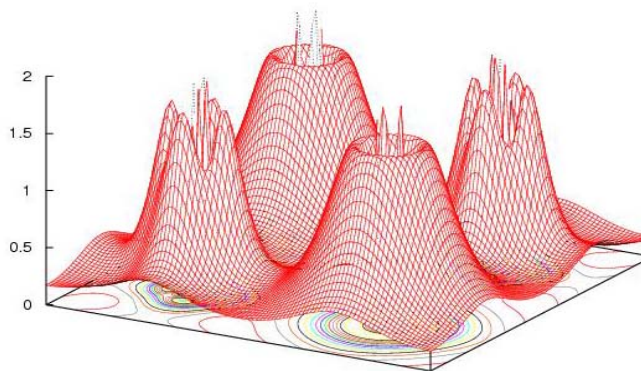
kgen,1000k noktası olarak alınmış ve “TiC.in1_st” dosyasında Emax değeri 2.5 olarak değiştirilmiştir.

Elektron grafiklerinin çizimi için “TiC.in5” dosyası oluşturuldu. Sınırlar $z_{\min} = 0$ ve $z_{\max} = 2$ olarak değiştirilmiştir.

TiC DOS grafiklerinin çizimi için, “TiC.int” dosyası oluşturulmuştur.

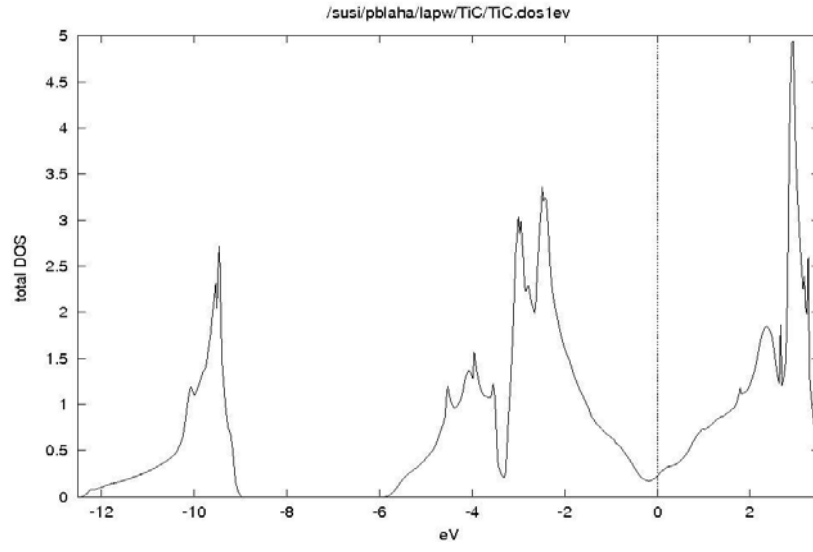


(a)

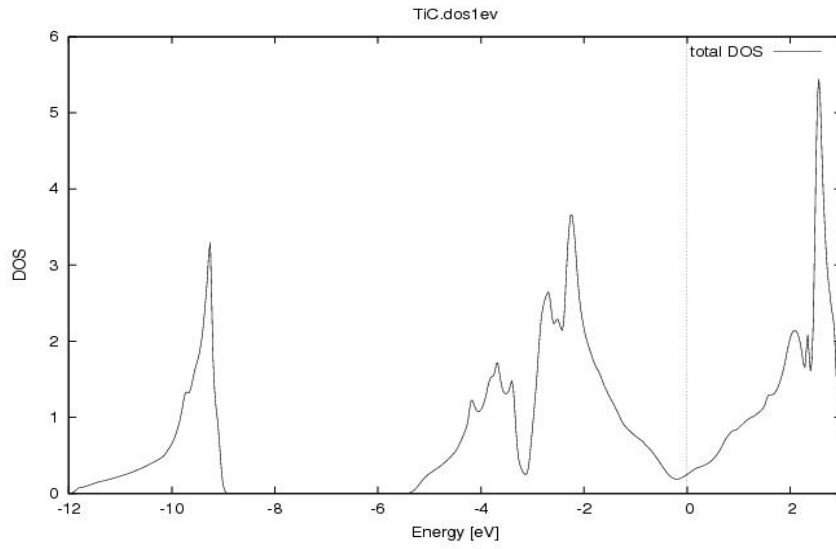


(b)

Şekil 6.1. (a)Wien2k programı kullanma kılavuzunda verilen TiC elektron yoğunluğu grafiği [27] (b)Wien2k programı yardımıyla çizilen TiC elektron yoğunluğu grafiği

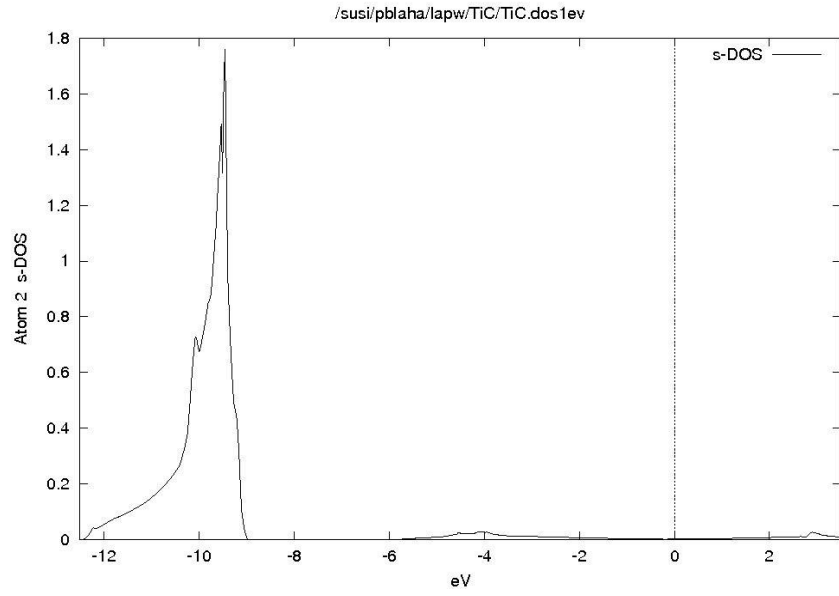


(a)

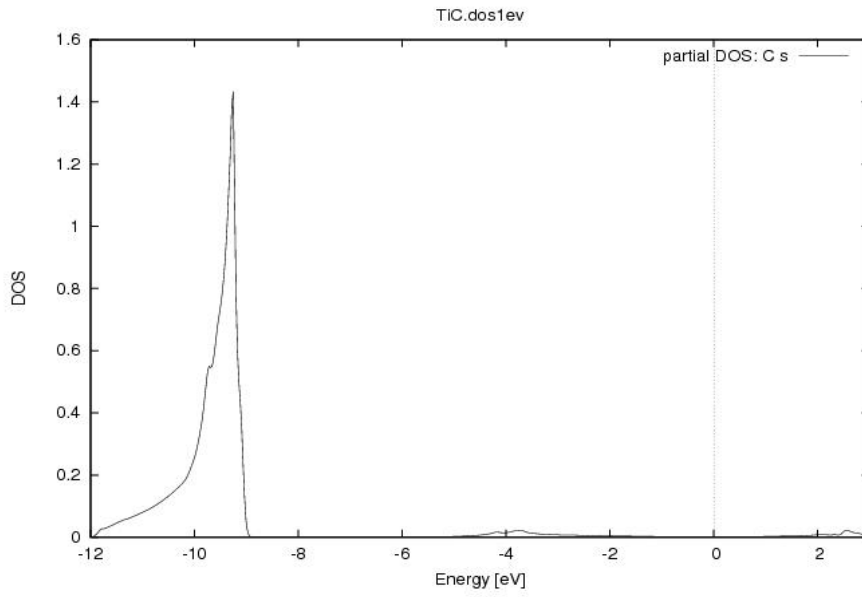


(b)

Şekil 6.2 (a)Wien2k programı kullanma kılavuzunda verilen TiC için toplam DOS grafiği [30](b) Wien2k programı yardımıyla çizilen TiC için toplam DOS grafiği

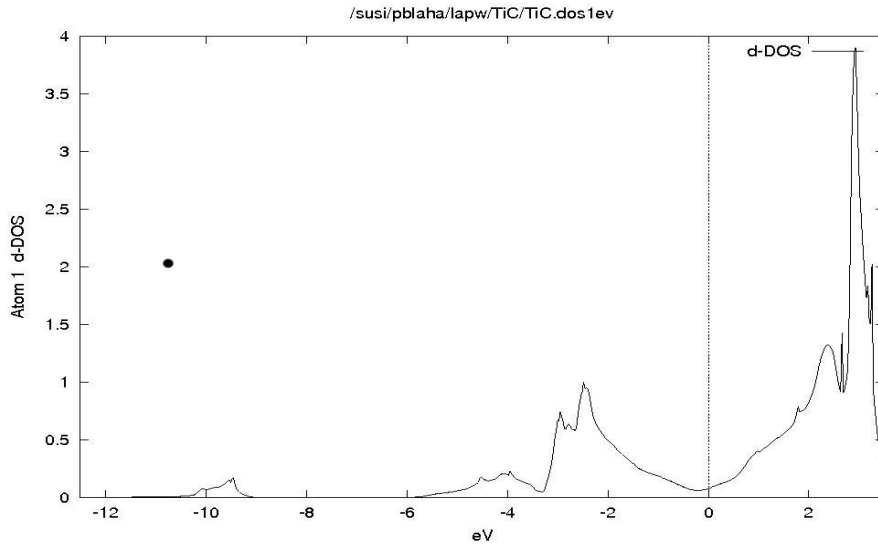


(a)

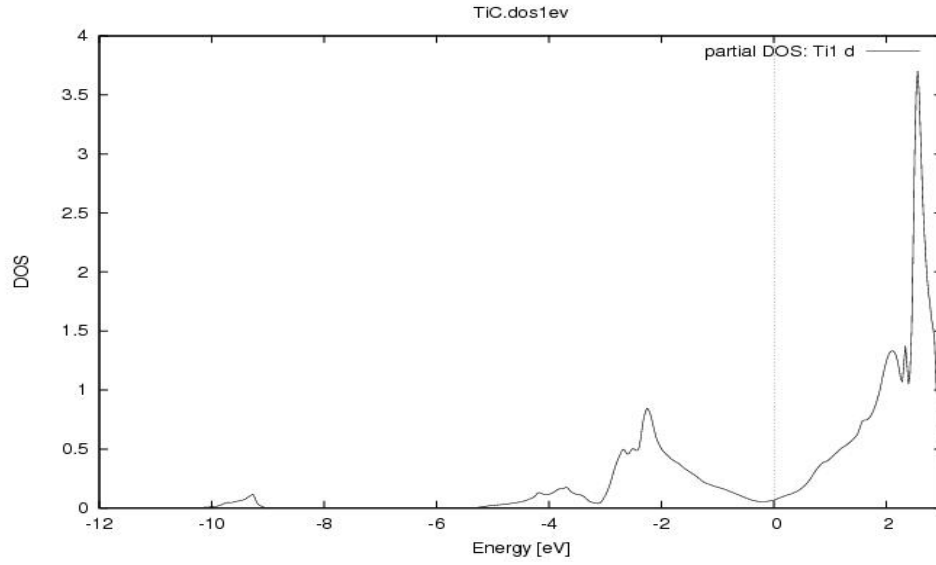


(b)

Şekil 6.3 (a)Wien2k programı kullanma kılavuzunda verilen TiC için 2.atoma ait s-DOS grafiği
[31] (b) Wien2k programı yardımıyla çizilen TiC için 2.atoma ait s- DOS grafiği

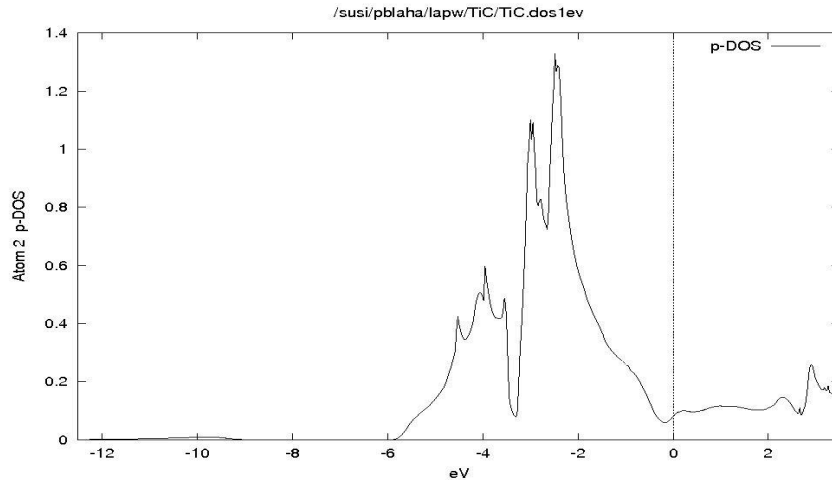


(a)

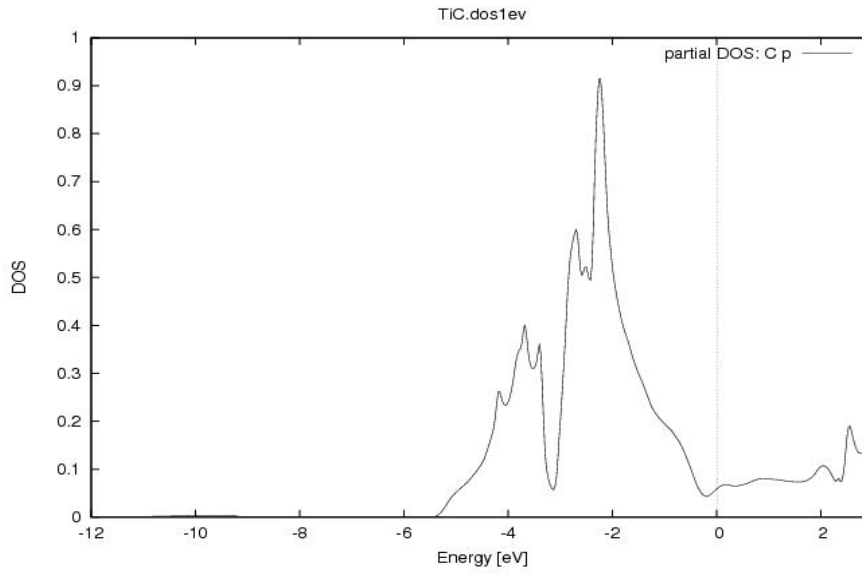


(b)

Şekil 6.4. (a)Wien2k programı kullanma kılavuzunda verilen TiC için 1.atoma ait d-DOS grafiği
[31](b) Wien2k programı yardımıyla çizilen TiC için 1.atoma ait d- DOS grafiği

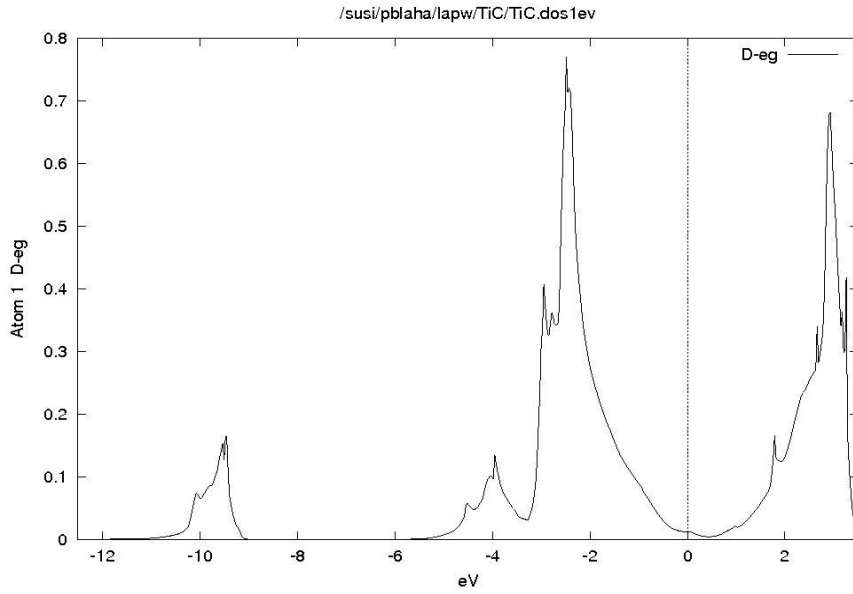


(a)

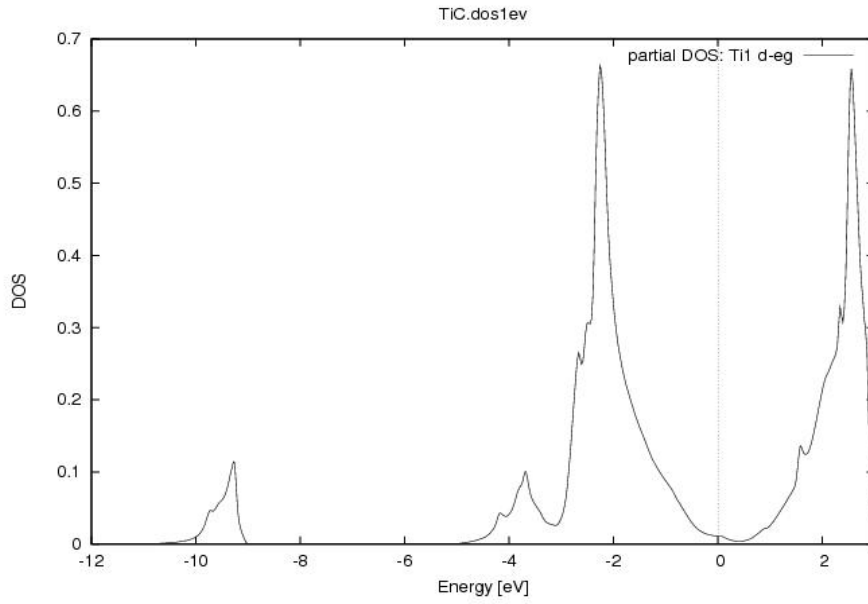


(b)

Şekil 6.5 (a)Wien2k programı kullanma kılavuzunda verilen TiC için 2.atoma ait p-DOS grafiği
 [31] (b) Wien2k programı yardımıyla çizilen TiC için 2.atoma ait p- DOS grafiği

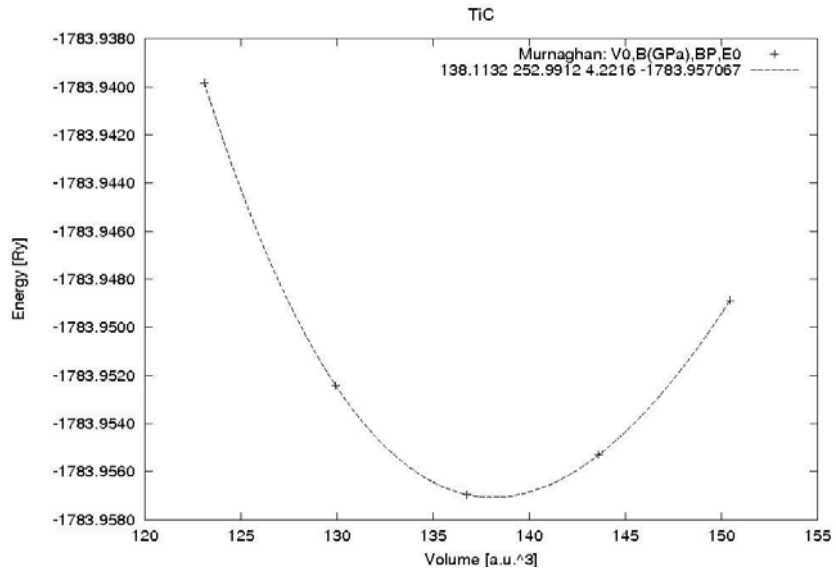


(a)

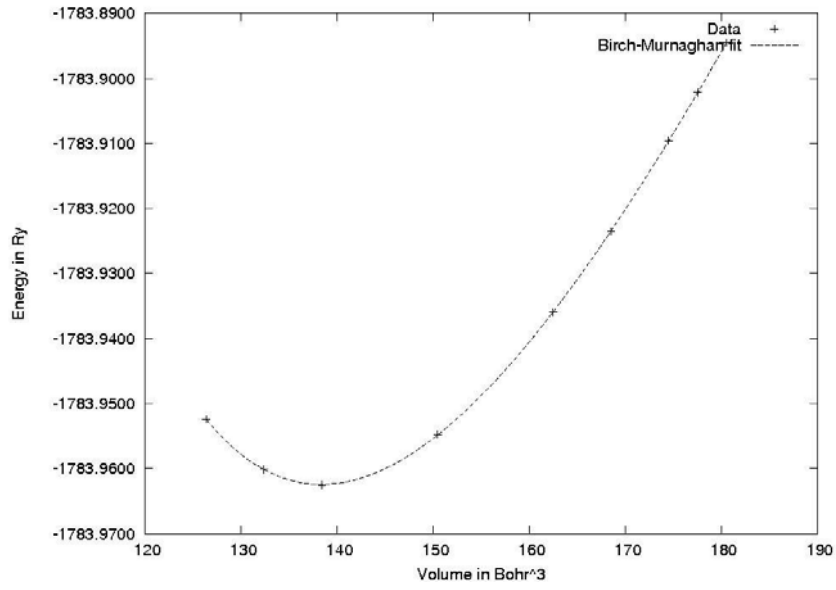


(b)

Şekil 6.6 (a)Wien2k programı kullanma kılavuzunda verilen TiC için 1.atoma ait d-eg DOS grafiği [31] (b) Wien2k programı yardımıyla çizilen TiC için 1.atoma ait d-eg DOS grafiği



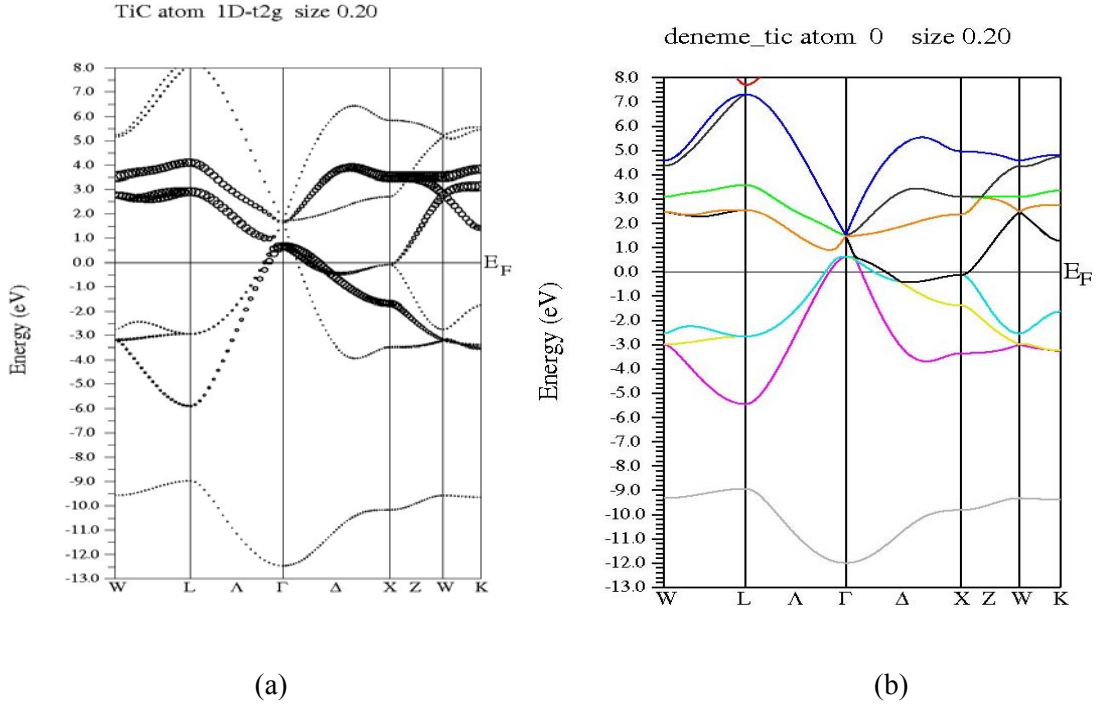
(a)



(b)

Şekil 6.7 (a) Wien2k programı kullanma kılavuzunda verilen TiC hacim grafiği (b) Wien2k programı yardımıyla çizilen TiC hacim grafiği

Bant yapısına ait çizilen grafik ve Wien2k kullanım klavuzunda verilen grafik aşağıda karşılaştırılmıştır.



Şekil 6.8 (a) Wien2k programını kullanım kılavuzunda verilen TiC yapısına ait bant yapısı grafiği [31] (b) Wien2k programı yardımıyla çizilen TiC bant yapısı grafiği.

6.2. bcc Fe Yapısı İçin Elde Edilen Sonuçlar

bcc Fe yapı dosyası oluşturmadan önce bazı bilgiler kullanılmıştır. Bu bilgiler:

Yapının adı: bcc Fe

Örgü tipi : B

$a=b=c$: $2.87\text{\AA}=5.78\text{au}$

$\alpha=\beta=\gamma$: 90°

Atom : Fe pozisyonu (0, 0, 0) ve RMT=2.2 şeklindedir.

Elde edilen bcc Fe struct dosyası:

Fe

B LATTICE,NONEQUIV.ATOMS: 1 229 Fm-3m

MODE OF CALC=RELA unit=ang

5.416900 5.416900 5.416900 90.000000 90.000000 90.000000

ATOM 1: X=0.00000000 Y=0.00000000 Z=0.00000000

MULT= 1 ISPLIT= 2

Fe NPT= 781 R0=0.00005000 RMT= 2.20 Z: 26.0

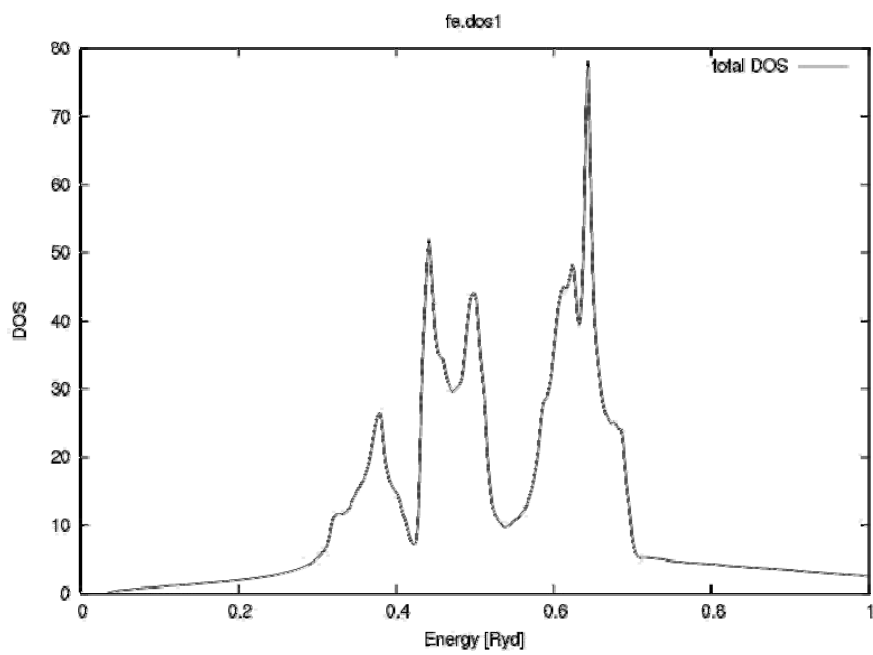
LOCAL ROT MATRIX: 1.0000000 0.0000000 0.0000000

0.0000000 1.0000000 0.0000000

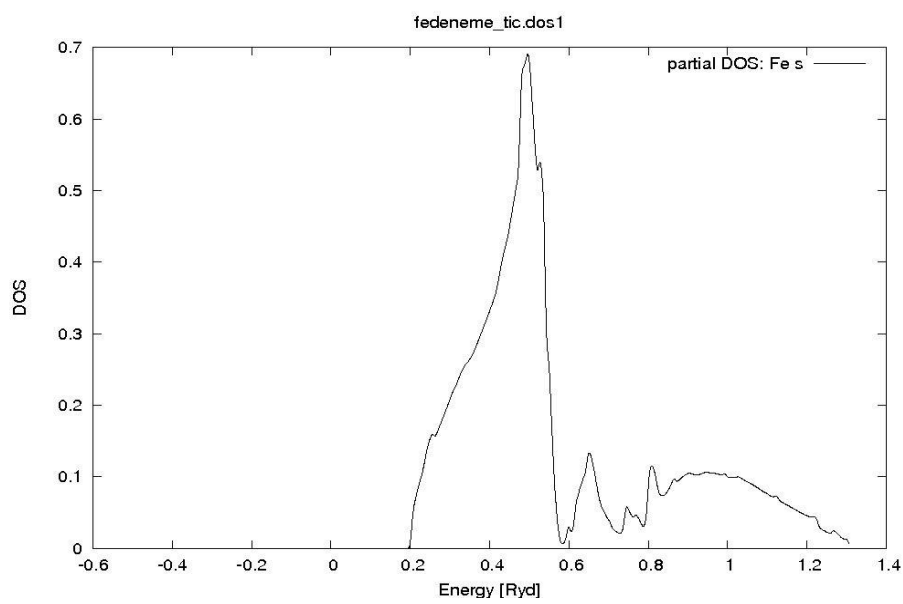
0.0000000 0.0000000 1.0000000

48 NUMBER OF SYMMETRY OPERATIONS

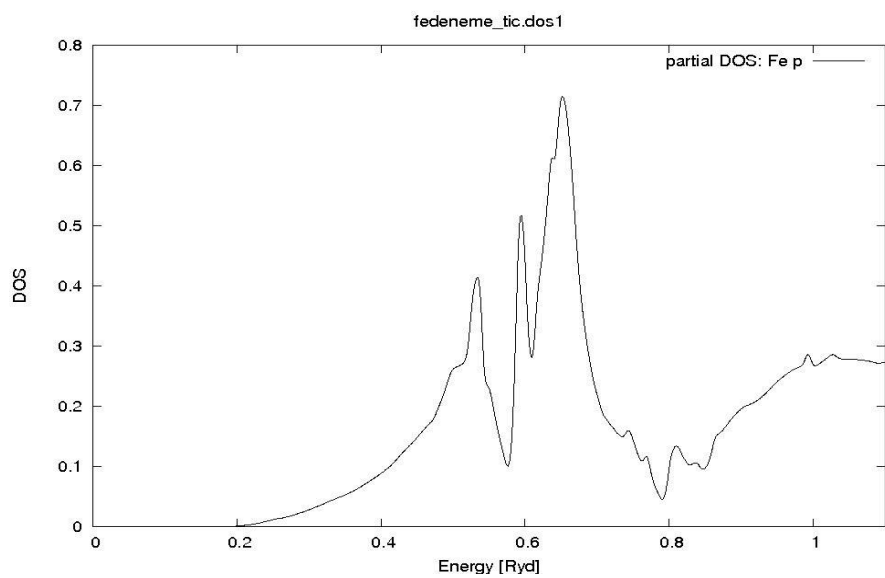
Program çalıştırılırken TiC yapısında olduğu gibi 13 GGA ve kesme enerjisi -6.0 Ry alınmıştır. kgen 1000 k noktası ve Emax=2.5 olarak alınmıştır. Hesaplamalar tamamlandıktan sonra elektron yoğunluğu, durum yoğunluğu(DOS), bant yapısı, enerji hacim grafikleri çizilmiştir ve elastik sabitler hesaplanmıştır.



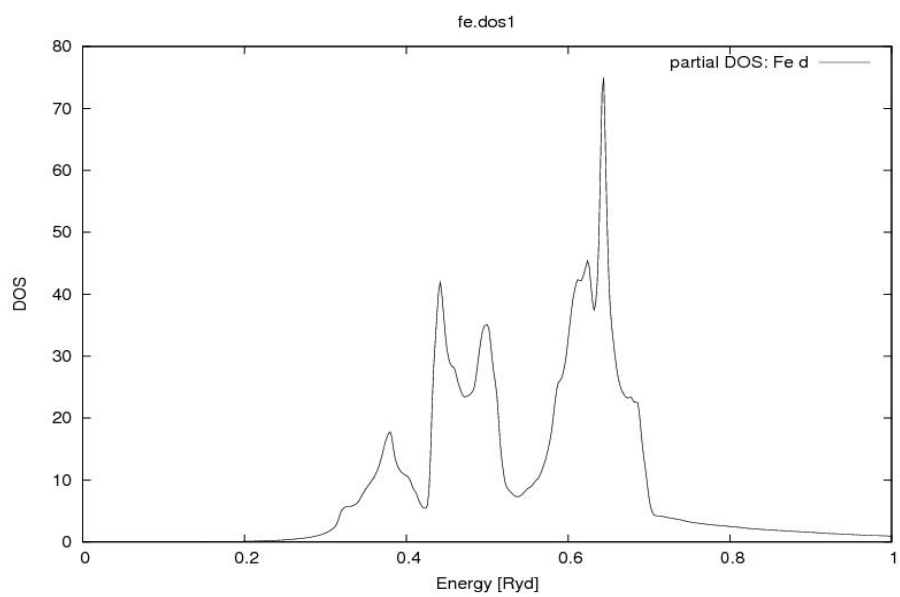
(a)



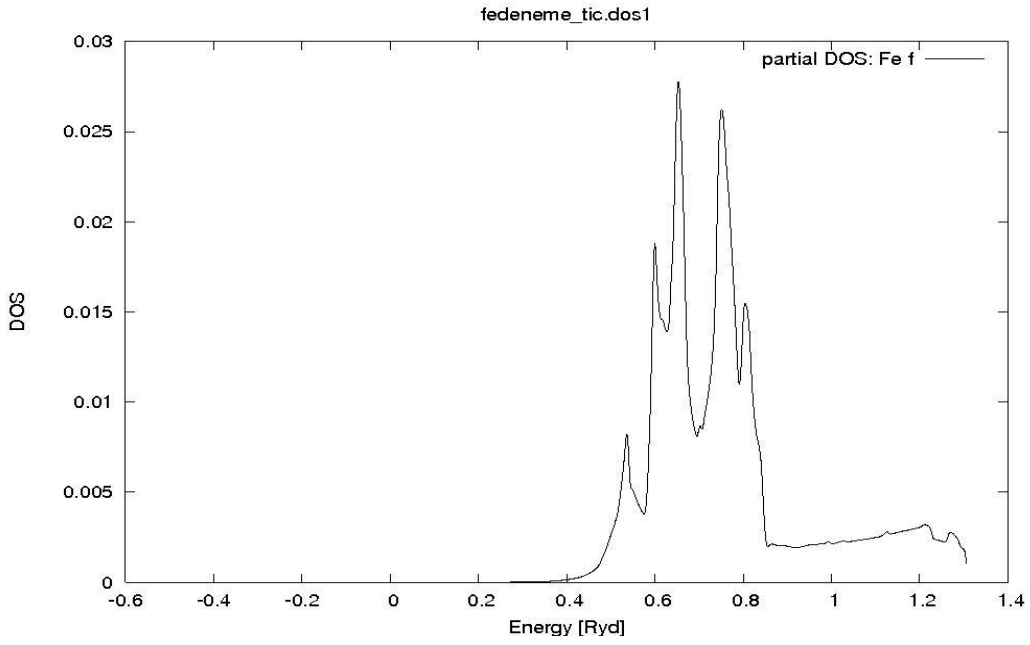
(b)



(c)

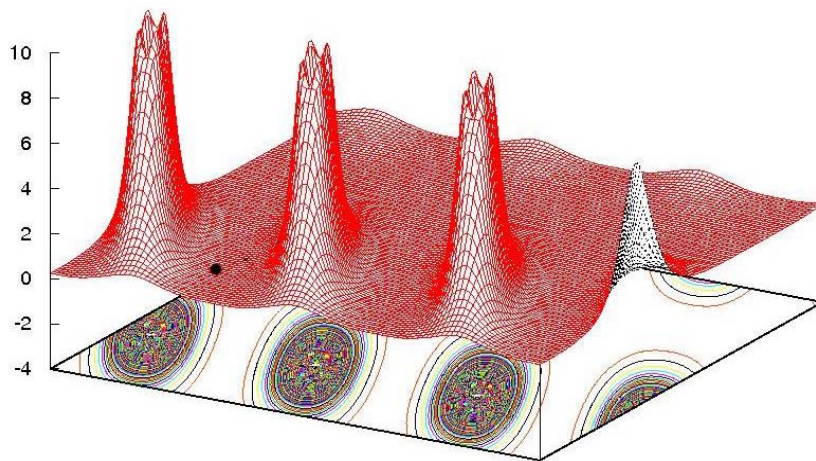


(d)

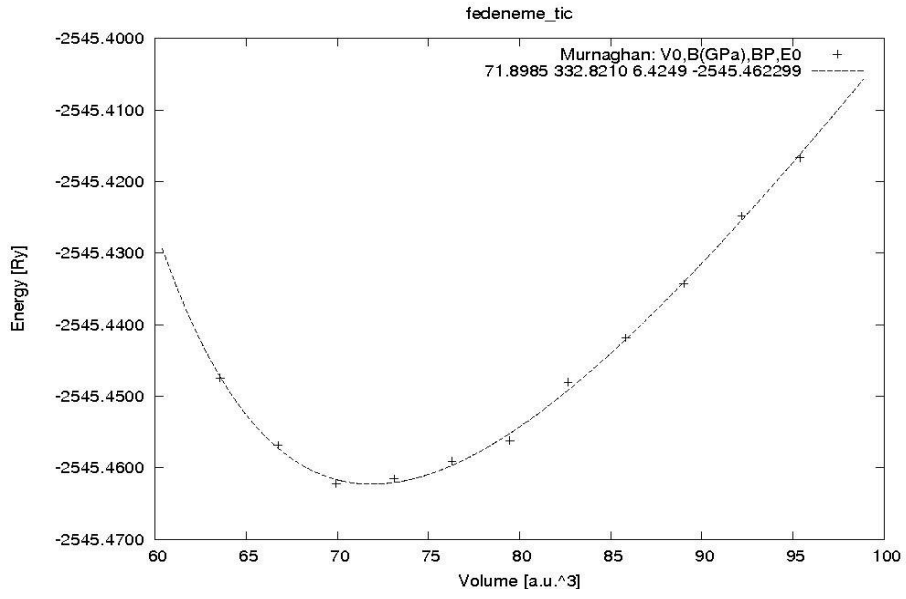


(e)

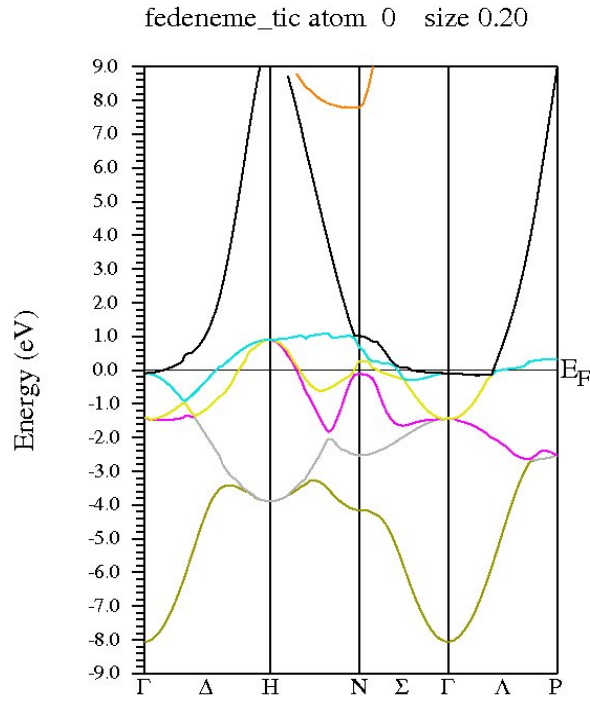
Şekil 6.9. (a) Wien2k programı yardımıyla çizilen bcc Fe için toplam DOS grafiği (b) bcc Fe için s-DOS grafiği (c) bcc Fe için p-DOS grafiği (d) bcc Fe için d-DOS grafiği (e) bcc Fe için f-DOS grafiği



Şekil 6.10. Wien2k programı yardımıyla çizilen bcc Fe için elektron yoğunluğu grafiği.



Şekil 6.11. Wien2k programı yardımıyla çizilen bcc Fe için hacim grafiği.



Şekil 6.12. Wien2k programı yardımıyla çizilen bcc Fe için bant yapısı grafiği.

6.3 fcc Cu İçin Elde Edilen Sonuçlar

fcc Cu yapı dosyası için kullanılan bilgiler:

Yapının adı: fcc Cu

Örgü tipi : F

a=b=c : 2.87Å=5.78au

$\alpha=\beta=\gamma$: 90°

Atom : Fe pozisyonu (0, 0, 0) ve RMT=1.80 şeklindedir.

Elde edilen fcc Cu struct dosyası:

fccCu

F LATTICE,NONEQUIV.ATOMS: 1 229 Fm-3m

MODE OF CALC=RELA unit=ang

6.83130 6.83130 6.83130 90.00000 90.00000 90.00000

ATOM 1: X=0.00000000 Y=0.00000000 Z=0.00000000

MULT= 1 ISPLIT= 2

Cu NPT= 781 R0=0.00005000 RMT= 1.80 Z: 29.0

LOCAL ROT MATRIX: 1.0000000 0.0000000 0.0000000

0.0000000 1.0000000 0.0000000

0.0000000 0.0000000 1.0000000

48 NUMBER OF SYMMETRY OPERATIONS

1 0 0 0.00000000

0-1 0 0.00000000

0 0-1 0.00000000

1

0-1 0 0.00000000

1 0 0 0.00000000

0 0-1 0.00000000

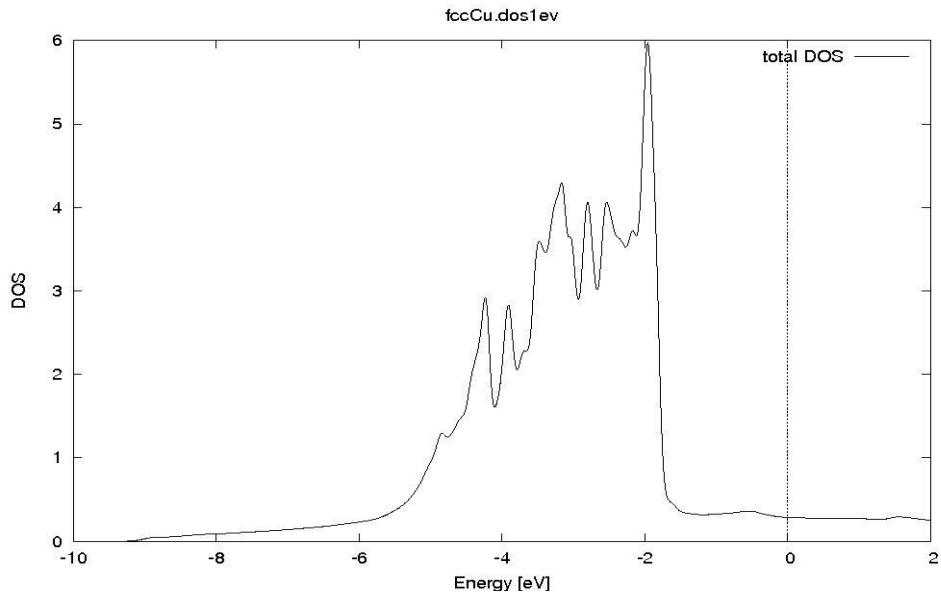
2

1 0 0 0.00000000

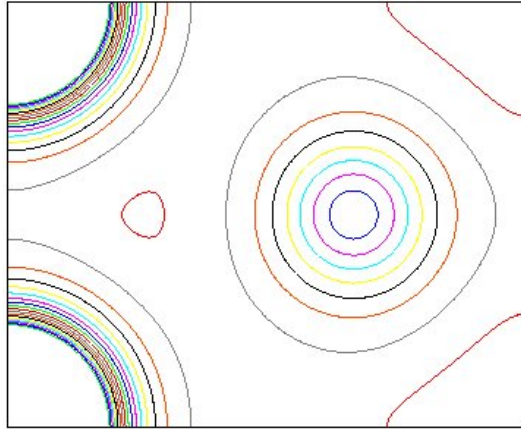
0 0-1 0.00000000

0-1 0 0.00000000

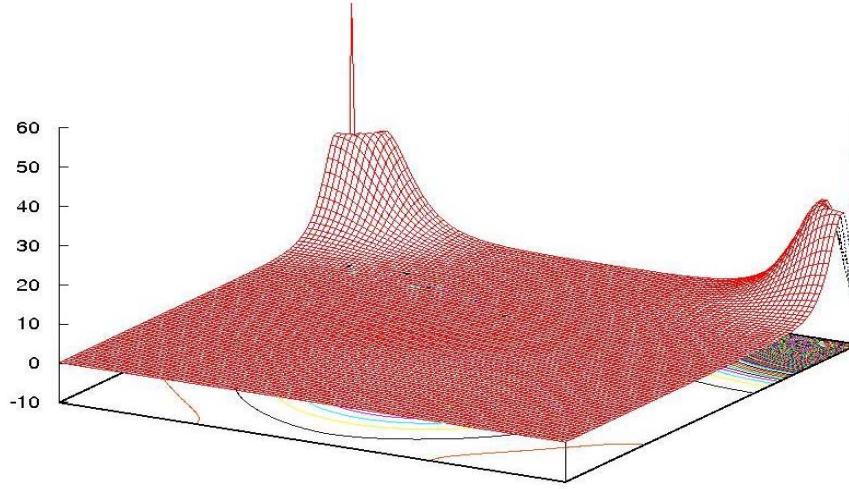
Program çalıştırılırken, 13 GGA ve kesme enerjisi -6.0 Ry, kgen noktası 1000 alınarak Emax=2.5Ry olarak değiştirilmiştir. Elde edilen sonuçlar ise aşağıda verilmiştir.



Şekil 6.13. Wien2k programı yardımıyla çizilen fcc Cu için toplam DOS grafiği.



Şekil 6.14. Wien2k programı yardımıyla çizilen fcc Cu için elektron yoğunluğu grafiği (2 boyutta).



Şekil 6.15. Wien2k programı yardımıyla çizilen fcc Cu için elektron yoğunluğu grafiği.

6.4 Supercell Cu İçin Elde Edilen Sonuçlar

Supercell Cu yapı dosyası fcc Cu struct dosyası kullanılarak elde edilir.

Elde edilen fcc Cu struct dosyası:

```

fccCu
F LATTICE,NONEQUIV. ATOMS 8
MODE OF CALC=RELA unit=ang
13.662600 13.662600 13.662600 90.000000 90.000000 90.000000
ATOM -1: X=0.00000000 Y=0.00000000 Z=0.00000000
      MULT= 1      ISPLIT= 8
Cu1   NPT= 781 R0=0.00005000 RMT= 1.80   Z: 29.0
LOCAL ROT MATRIX:  1.0000000 0.0000000 0.0000000
                   0.0000000 1.0000000 0.0000000
                   0.0000000 0.0000000 1.0000000
ATOM -2: X=0.50000000 Y=0.00000000 Z=0.00000000
      MULT= 1      ISPLIT= 8
Cu2   NPT= 781 R0=0.00005000 RMT= 1.80   Z: 29.0
LOCAL ROT MATRIX:  1.0000000 0.0000000 0.0000000
                   0.0000000 1.0000000 0.0000000
                   0.0000000 0.0000000 1.0000000
ATOM -3: X=0.25000000 Y=0.25000000 Z=0.00000000

```

```
MULT= 1    ISPLIT= 8
Cu3    NPT= 781 R0=0.00005000 RMT= 1.80    Z: 29.0
LOCAL ROT MATRIX:  1.0000000 0.0000000 0.0000000
                   0.0000000 1.0000000 0.0000000
                   0.0000000 0.0000000 1.0000000
ATOM -4: X=0.75000000 Y=0.25000000 Z=0.00000000
MULT= 1    ISPLIT= 8
Cu4    NPT= 781 R0=0.00005000 RMT= 1.80    Z: 29.0
LOCAL ROT MATRIX:  1.0000000 0.0000000 0.0000000
                   0.0000000 1.0000000 0.0000000
                   0.0000000 0.0000000 1.0000000
ATOM -5: X=0.25000000 Y=0.00000000 Z=0.25000000
MULT= 1    ISPLIT= 8
Cu5    NPT= 781 R0=0.00005000 RMT= 1.80    Z: 29.0
LOCAL ROT MATRIX:  1.0000000 0.0000000 0.0000000
                   0.0000000 1.0000000 0.0000000
                   0.0000000 0.0000000 1.0000000
ATOM -6: X=0.75000000 Y=0.00000000 Z=0.25000000
MULT= 1    ISPLIT= 8
Cu6    NPT= 781 R0=0.00005000 RMT= 1.80    Z: 29.0
LOCAL ROT MATRIX:  1.0000000 0.0000000 0.0000000
                   0.0000000 1.0000000 0.0000000
                   0.0000000 0.0000000 1.0000000

ATOM -7: X=0.00000000 Y=0.25000000 Z=0.25000000
MULT= 1    ISPLIT= 8
Cu7    NPT= 781 R0=0.00005000 RMT= 1.80    Z: 29.0
LOCAL ROT MATRIX:  1.0000000 0.0000000 0.0000000
                   0.0000000 1.0000000 0.0000000
                   0.0000000 0.0000000 1.0000000
ATOM -8: X=0.50000000 Y=0.25000000 Z=0.25000000
MULT= 1    ISPLIT= 8
Cu8    NPT= 781 R0=0.00005000 RMT= 1.80    Z: 29.0
LOCAL ROT MATRIX:  1.0000000 0.0000000 0.0000000
                   0.0000000 1.0000000 0.0000000
                   0.0000000 0.0000000 1.0000000

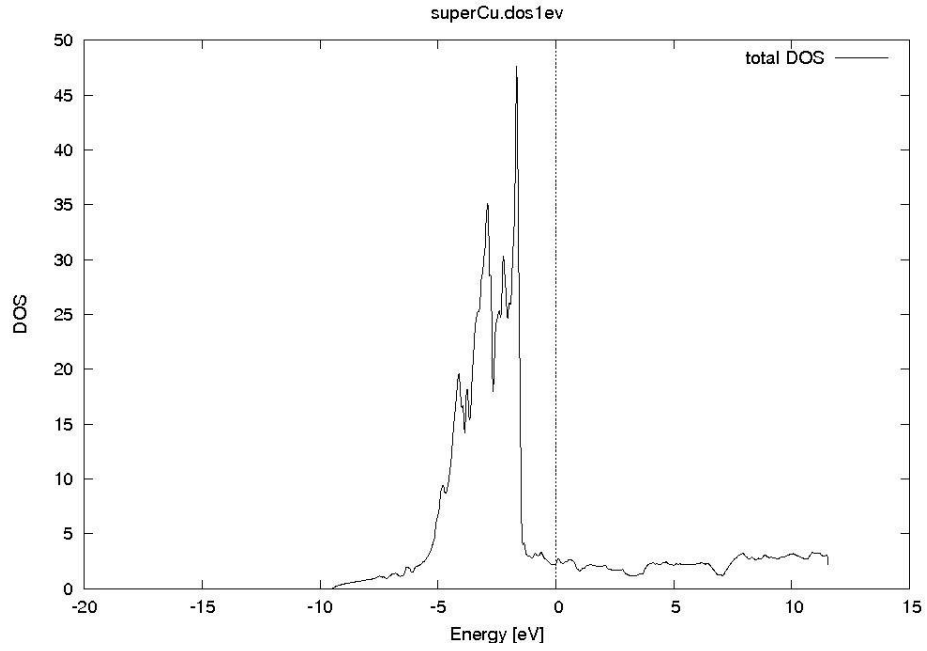
2    NUMBER OF SYMMETRY OPERATIONS
```

```

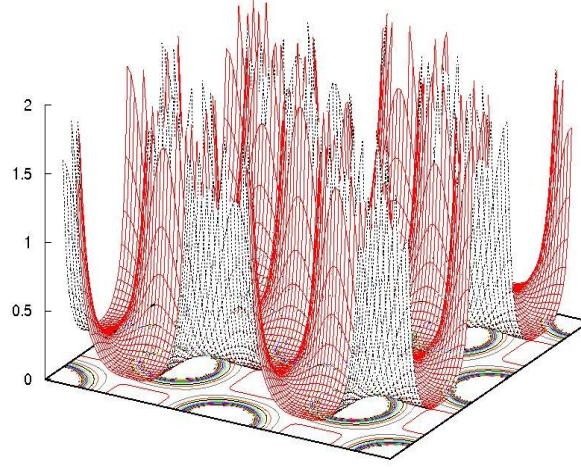
-1 0 0 0.00000000
0-1 0 0.00000000
0 0-1 0.00000000
    1
1 0 0 0.00000000
0 1 0 0.00000000
0 0 1 0.00000000
    2

```

Program çalıştırıldıktan sonra elde edilen sonuçlar aşağıda verilmiştir.



Şekil 6.16. Wien2k programı yardımıyla çizilen supercell Cu için toplam DOS grafiği.



Şekil 6.17. Wien2k programı yardımıyla çizilen supercell Cu için elektron yoğunluğu grafiği.

7. Fe_(1-x)Mn_x ALAŞIMININ WIEN2K PROGRAMI İLE İNCELENMESİ

FeMn alaşımları incelenirken FeMn alaşımında Mn atomunun oranı değiştirilerek belli sonuçlar elde edilmiştir. Fe-%12.5 Mn, Fe-%25 Mn ve Fe-%50 Mn alaşımlarına ait üç farklı program çalıştırılmıştır.

7.1 Fe-%12.5 Mn Alaşımı İçin Elde Edilen Sonuçlar

Yedi Fe atomu ve bir Mn atomundan oluşan sekiz atomlu Fe-Mn alaşımına ait struct dosyası aşağıda verilmiştir.

```

fcc FeMn
F LATTICE,NONEQUIV.ATOMS: 3225_Fm-3m
MODE OF CALC=RELA unit=bohr
 14.88895 14.88895 14.88895 90.00000 90.00000 90.00000
ATOM 1: X=0.00000000 Y=0.00000000 Z=0.00000000
      MULT= 1      ISPLIT= 2
Mn1   NPT= 781 R0=0.00005000 RMT= 2.50000 Z: 25.0
LOCAL ROT MATRIX: 1.0000000 0.0000000 0.0000000
                  0.0000000 1.0000000 0.0000000
                  0.0000000 0.0000000 1.0000000
ATOM 2: X=0.50000000 Y=0.00000000 Z=0.00000000
      MULT= 1      ISPLIT= 2
Fe1   NPT= 781 R0=0.00005000 RMT= 2.50000 Z: 26.0

```

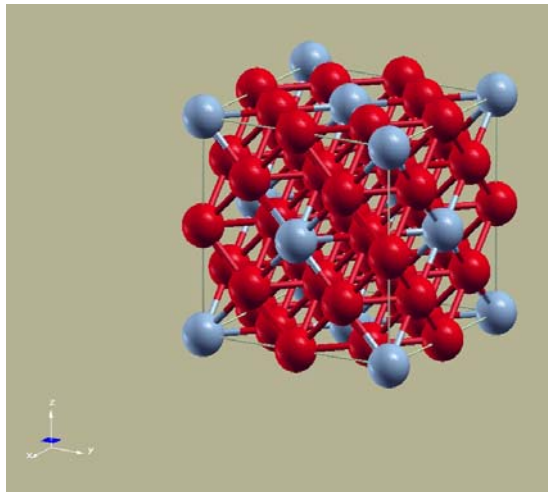


```

LOCAL ROT MATRIX:  1.0000000 0.0000000 0.0000000
                   0.0000000 1.0000000 0.0000000
                   0.0000000 0.0000000 1.0000000
ATOM -3: X=0.25000000 Y=0.00000000 Z=0.25000000
MULT= 6      ISPLIT= 8
-3: X=0.00000000 Y=-0.25000000 Z=0.25000000
-3: X=0.25000000 Y=0.00000000 Z=0.75000000
-3: X=-0.25000000 Y=0.25000000 Z=0.00000000
-3: X=0.00000000 Y=0.25000000 Z=0.75000000
-3: X=0.75000000 Y=0.25000000 Z=0.00000000
Fe2      NPT= 781 R0=0.00005000 RMT= 2.50000 Z: 26.0
LOCAL ROT MATRIX:  0.7071068 0.0000000 0.7071068
                   0.0000000 1.0000000 0.0000000
                   -0.7071068 0.0000000 0.7071068
48      NUMBER OF SYMMETRY OPERATIONS
1 0 0 0.00000000
0 1 0 0.00000000
0 0 1 0.00000000
1
-1 0 0 0.00000000
0 -1 0 0.00000000
0 0 1 0.00000000
2

```

Fe-%12.5 Mn yapısına ait Fe ve Mn atomlarının konumları şekil 7.1 de gösterilmiştir.

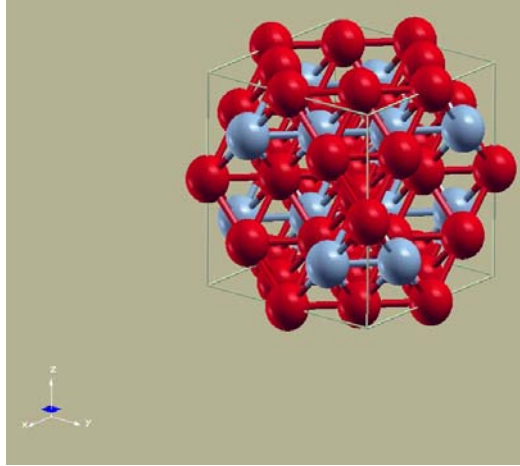


Şekil 7.1 Fe-%12.5 Mn modeli

ATOM -2: X=0.50000000 Y=0.00000000 Z=0.00000000
 MULT= 1 ISPLIT= 8
 Fe2 NPT= 781 R0=0.00005000 RMT= 1.79 Z: 26.0
 LOCAL ROT MATRIX: 0.0000000-0.7071068-0.7071068
 0.0000000-0.7071068 0.7071068
 -1.0000000 0.0000000 0.0000000
 ATOM -3: X=0.25000000 Y=0.25000000 Z=0.00000000
 MULT= 1 ISPLIT= 8
 Fe3 NPT= 781 R0=0.00005000 RMT= 1.79 Z: 26.0
 LOCAL ROT MATRIX: 0.0000000-0.7071068-0.7071068
 0.0000000-0.7071068 0.7071068
 -1.0000000 0.0000000 0.0000000
 ATOM -4: X=0.75000000 Y=0.25000000 Z=0.00000000
 MULT= 1 ISPLIT= 8
 Fe4 NPT= 781 R0=0.00005000 RMT= 1.79 Z: 26.0
 LOCAL ROT MATRIX: 0.0000000-0.7071068-0.7071068
 0.0000000-0.7071068 0.7071068
 -1.0000000 0.0000000 0.0000000
 ATOM -5: X=0.25000000 Y=0.00000000 Z=0.25000000
 MULT= 2 ISPLIT= 8
 -5: X=0.00000000 Y=0.25000000 Z=0.25000000
 Fe5 NPT= 781 R0=0.00005000 RMT= 1.79 Z: 26.0
 LOCAL ROT MATRIX: 1.0000000 0.0000000 0.0000000
 0.0000000 1.0000000 0.0000000
 0.0000000 0.0000000 1.0000000
 ATOM -6: X=0.75000000 Y=0.00000000 Z=0.25000000
 MULT= 2 ISPLIT= 8
 -6: X=0.50000000 Y=0.25000000 Z=0.25000000
 Mn6 NPT= 781 R0=0.00005000 RMT= 1.80 Z: 25.0
 LOCAL ROT MATRIX: 1.0000000 0.0000000 0.0000000
 0.0000000 1.0000000 0.0000000
 0.0000000 0.0000000 1.0000000
 2 NUMBER OF SYMMETRY OPERATIONS
 0 1 0 0.00000000
 1 0 0 0.00000000
 0 0 1 0.00000000
 1
 1 0 0 0.00000000

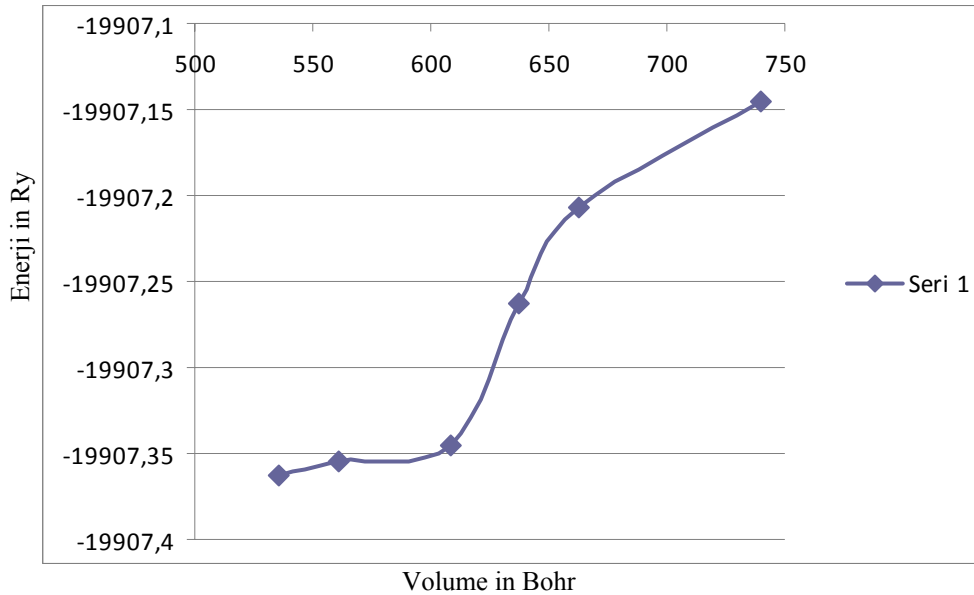
0 1 0 0.00000000
 0 0 1 0.00000002
 2

Fe-%25 Mn yapısına ait Fe ve Mn atomlarının konumları şekil 7.3 de gösterilmiştir.



Şekil 7.3 Fe-%25 Mn modeli.

Program çalıştırdıktan sonra elde edilen enerji hacim grafiği şekil 7.4 de verilmiştir.



Şekil 7.4 Wien2k programı yardımıyla çizilen Fe-%25 Mn Alaşımına ait enerji hacim grafiği.

Çizilen grafikten enerjinin minimum noktasının -19907,35 Ry ile -19907,40 Ry arasında olma ihtimali görülmektedir.

7.3. Fe-%50 Mn Alaşımı İçin Elde Edilen Sonuçlar

Dört Fe ve dört Mn atomundan oluşan Fe-Mn alaşımına ait struct yapısı aşağıdaki gibidir.

```

fccFeMn
F          6
          RELA
          13.662600 13.662600 13.662600 90.000000 90.000000 90.000000
ATOM -1: X=0.00100000 Y=0.00100000 Z=0.00100000
          MULT= 1      ISPLIT= 8
Fe1      NPT= 781 R0=0.00005000 RMT= 1.9100 Z: 26.0
LOCAL ROT MATRIX:  0.0000000-0.7071068-0.7071068
                   0.0000000-0.7071068 0.7071068
                   -1.0000000 0.0000000 0.0000000
ATOM -2: X=0.50000000 Y=0.00000000 Z=0.00000000
          MULT= 1      ISPLIT= 8
Fe2      NPT= 781 R0=0.00005000 RMT= 1.9100 Z: 26.0
LOCAL ROT MATRIX:  0.0000000-0.7071068-0.7071068
                   0.0000000-0.7071068 0.7071068
                   -1.0000000 0.0000000 0.0000000
ATOM -3: X=0.25000000 Y=0.25000000 Z=0.00000000
          MULT= 1      ISPLIT= 8
Fe3      NPT= 781 R0=0.00005000 RMT= 1.9100 Z: 26.0
LOCAL ROT MATRIX:  0.0000000-0.7071068-0.7071068
                   0.0000000-0.7071068 0.7071068
                   -1.0000000 0.0000000 0.0000000
ATOM -4: X=0.75000000 Y=0.25000000 Z=0.00000000
          MULT= 1      ISPLIT= 8
Fe4      NPT= 781 R0=0.00005000 RMT= 1.9100 Z: 26.0
LOCAL ROT MATRIX:  0.0000000-0.7071068-0.7071068
                   0.0000000-0.7071068 0.7071068
                   -1.0000000 0.0000000 0.0000000
ATOM -5: X=0.25000000 Y=0.00000000 Z=0.25000000
          MULT= 2      ISPLIT= 8

```

```

-5: X=0.00000000 Y=0.25000000 Z=0.25000000
Mn5   NPT= 781 R0=0.00005000 RMT=  1.9100  Z: 25.0
LOCAL ROT MATRIX:  1.0000000 0.0000000 0.0000000
                   0.0000000 1.0000000 0.0000000
                   0.0000000 0.0000000 1.0000000
ATOM -6: X=0.75000000 Y=0.00000000 Z=0.25000000
      MULT= 2      ISPLIT= 8
-6: X=0.50000000 Y=0.25000000 Z=0.25000000
Mn6   NPT= 781 R0=0.00005000 RMT=  1.9100  Z: 25.0
LOCAL ROT MATRIX:  1.0000000 0.0000000 0.0000000
                   0.0000000 1.0000000 0.0000000
                   0.0000000 0.0000000 1.0000000

```

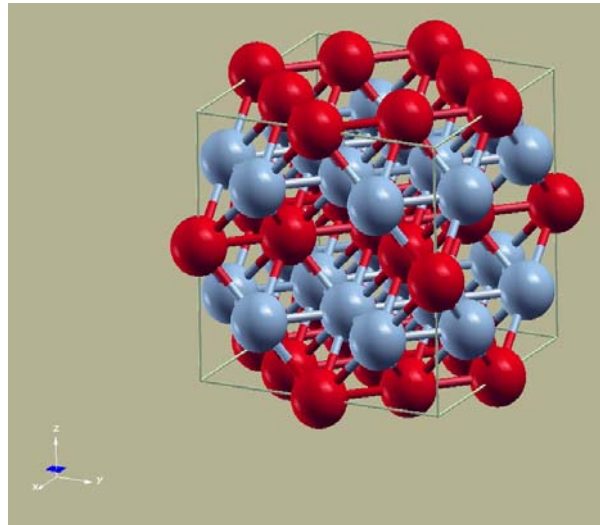
2 NUMBER OF SYMMETRY OPERATIONS

```

0 1 0 0.00000000
1 0 0 0.00000000
0 0 1 0.00000000
  1
1 0 0 0.00000000
0 1 0 0.00000000
0 0 1 0.00000000
  2

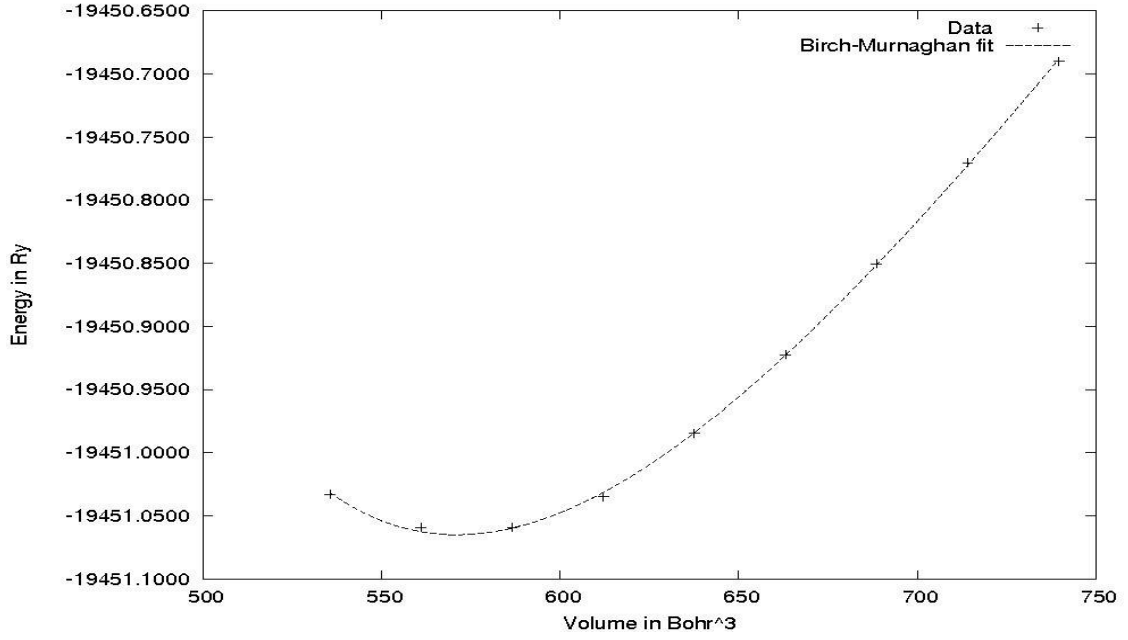
```

Fe-%50 Mn yapısına ait Fe ve Mn atomlarının konumları şekil 7.5 de gösterilmiştir.



Şekil 7.5 Fe-%50 Mn modeli.

Program çalıştırıldıktan sonra elde edilen enerji hacim grafiği şekil 7.6 da verilmiştir.



Şekil 7.6 Wien2k programı yardımıyla elde edilen Fe-%50 Mn Alaşımına ait enerji hacim grafiği.

Grafikten enerjinin minimum olduğu nokta görülmektedir ve bu nokta kararlılık noktasıdır. Enerjisinin minimum olduğu nokta ise yaklaşık olarak -19451.06 Ry' dir.

8. SONUÇ ve ÖNERİLER

1. Bu çalışmada öncelikle TiC ve Fe yapısı incelenerek, literatürdeki sonuçlarla karşılaştırılması yapıldı; programın doğruluğu test edilmiştir. Wien2k programı yardımıyla TiC ve Fe için yapılan bu çalışmanın literatürdeki sonuçlarla uyumlu olduğu (şekil 6.1- 6.12) görülmüştür. Daha sonra fcc Cu ve supercell Cu yapıları program yardımıyla çalışıldı (şekil 6.13 -6.17) elde edilmiştir.

2. Elde edilen durum yoğunluğu grafiklerinde (DOS) (şekil 6.2-6.6, şekil 6.9, şekil 6.13, şekil 6.14) Fermi enerji düzeyleri gösterilmiştir. DOS grafikleri valans elektronlarının dağılımını ve iletme olan katkılarına anlatır. DOS grafiklerine bakılarak elementlerin metal ya da ametal oldukları anlaşılır. DOS grafiklerinin bitişik olması elementin metal olduğunu gösterir. Yarı metallerde ise DOS grafiği bant aralığına ayrılır.

3. Kristal yapıların elektron yoğunluğunu veren (şekil 6.1, şekil 6.10, şekil 6.14, şekil 6.15-6.17) grafikler incelendi. Kristaller için çizilen elektron yoğunluğu grafikleri kristaldeki valans elektronlarının dağılımını gösterir. Çizilen bu grafiklerin tabanındaki halkalar elektron dağılımını göstermektedir. Koyu renkli halkaların olduğu bölgeler elektron yoğunluğunun daha fazla olduğunu gösterir. Açık renkli halkalar ise atomlar arasındaki valans elektronlarının yoğunluğunu vermektedir.

4. Enerji bant yapısı (şekil 6.8, şekil 6.12) verilmiştir. Atomlar birbirlerine yaklaşırken atom çekirdekleri ve elektronlar arasındaki etkileşmeden kaynaklı enerji düzeyleri ayrışarak enerji bantları oluşur. Serbest atomun belirli kuantum sayılı enerji düzeyleri kristalde enerji bandı olarak genişler. Enerji bant yapılarındaki parabolik bantlar DOS grafiklerinde küçük pikleri, düzleşen bantlar ise büyük pikleri gösterir.

5. Kristal yapıların (şekil 6.7, şekil 6.11), enerji hacim grafikleri gösterilmiştir. Enerji-hacim grafiği bir sistemdeki, denge durumunu açıklamaktadır. Dengedeki sistem için, potansiyel enerjinin o sistemde en minimum olduğu durumdur diyebiliriz. Potansiyel enerjinin minimum olduğu nokta kristalin kararlılık noktası olup, kristalin sabit hacmine karşılık gelir.

6. $Fe_{(1-x)}Mn_x$ alaşımına ait enerji hacim hesaplamalarında sadece $x=0.50$ için enerjinin minimum olduğu görüldü, $x=0.125$ ve $x=0.25$ yapıları için bu minimum nokta gözlemlenemedi.

7. İkinci dereceden elastik sabitler incelendiğinde, $x=0.50$ için Born kararlılık kriterlerinin sağlandığı, diğer yapılar için ise Born' un kararlılık kriterlerinin sağlanmadığı görüldü.

8. Fe_(1-x)Mn_x çalışmasında x=0.125, x=0.25, x=0.50 değerleri içinden x=0.50 için alaşımın kararlılık kriterlerine uygunluğu ve enerjisinin minimum noktası görüldü. Diğer iki değer için ise yeniden hesaplama uzun zaman alacağından tekrarlanamadı. Ancak bu, iki alaşımın mutlak anlamda kararsız olduğu anlamına gelmez. Aynı program iki parametre için yeniden test edilerek kararlılık değerleri hesaplanabilir.

9. Fe_(1-x)Mn_x alaşımına ait elde edilen sonuçlar çizelge 8.1 de verilmiştir.

Çizelge 8.1. Fe_(1-x)Mn_x alaşımına ait hesaplanan parametreler.

Yapılar	Fe-%12.5 Mn	Fe-%25 Mn	Fe-%50 Mn
Elastik sabitler (GPa)	c ₁₁ =-137.314331	c ₁₁ =-182.882556	c ₁₁ =455.481554
	c ₁₂ =72.999112	c ₁₂ =60.317113	c ₁₂ =74.006491
	c ₄₄ =109.181823	c ₄₄ =382.926005	c ₄₄ =101.332005
Bulk modülü (GPa)	2.895	-20.749	201.165

KAYNAKLAR DİZİNİ

- [1] Denis Music and Tetsuya Takahashi, Physics letters 91. 191904 (2007), Elastic properties of Fe-Mn random alloys studied by ab initio calculations.
- [2] O. Şahin. and N. UÇAR, 2006, "Creep Behaviour of Fe-Mn Binary alloys", C. Phys. Lett. 23, 11.
- [3] Bogachev N., Egolaev V.F., 1973, Structure and properties of Iron Manganes alloys. Metallurgia, Moscow.
- [4] Yaşa, F. ,1996, Rastgele Değişen Bazı Fiziksel Olayların 3 Boyutlu Monte Carlo Yöntemi İlw Modellenmesi, 86 s.
- [5] Hohenberg P., and Kohn, W., 1964 Phys. Rev. 136, 13864 p
- [6] Singh, D.J 1994 , Planewaves Pseudopotentials and the LAP-W Method Kluwer Dordrecht.
- [7] Perdew, J. P., Burke, S. And Ernzerhof, M., 1996, Physics. Rev. Let. 77, 3865 p.
- [8] Cottenier, S., 2002, Density Functional Theory and the Family of (L) APW Methods: a step-by-step introduction , Katholieke Uni.
- [9] H. Salehi, S.M. Hosseini, N. Shahtahmasebi, Ceramics International 30 (2004) 81-85, The effects of Ni on structural and elektronik properties of BaTiO₃ ceramic.
- [10] C. Y. Geng, C.Y. Wang, T. Yu, Acta Materialia 52 (2004) 5427-5433, Site preferans and allaoying effect of platinum group metals in γ -Ni₃Al
- [11] Adrian P. Sutton Electronic Structure of Materials, 1993, Oxford Science Publications
- [12] Jian-Tao Wang, Lei Zhou and Yoshiyuki Kawazoe, 1999, Ab initio studies on the structural and magnetic properties of FeCu superlattices.
- [13] A. N. Timoshevskii , V. A. Timoshevskii and B. Z. Yanchitsky, Condensed Matter 13 (2001) 1051-1061, The influence of Carbon and Nitrogen on the electronic structure and hyperfine interactions in face-centered- cubic iron- based alloys.
- [14] G.Y. Guo, Y.K. Wang, Li-Shing Hsu, Journal of Magnetism and Magnetic Materials 239 (2002) 91-93, First-principles and experimental studies of the electronic structures and magnetism in Ni₃Al, Ni₃Ga, Ni₃In.
- [15] Kittel., C., 1996, Katihal Fiziğine Giriş, (Çev: B. Karaoğlu), İstanbul.
- [16] Hook, J. R., Hall H. E., 1996, Katihal Fiziği (Çev: Köksal F., Altunbaş M., Dinçer M., Başaran E.).

KAYNAKLAR DİZİNİ (devamı)

- [17] Durlu, Tahsin Nuri, 1996, Katıhal Fiziğine Giriş, Ankara.
- [18] Dikici Mustafa, Katıhal Fiziğine Giriş, 1993, Ondokuz Mayıs Üni. Samsun.
- [19] H. Yaşar Ocak, 1995, $Fe_{(1-x)}Al_x$ ($x=0.0, 0.25, 0.30$) Sistemlerinin Mekaniksel Kararlılığı, Gazi Üni., Yüksek Lisans Tezi.
- [20] Milstein, F., Mechanical Stability of Crystal with Two- body Interactions. Phys.Rev.B., 2, 512, (1970).
- [21] Schwarz, K. and Blaha, P., 2003, Computational Materials Science 28, 259 p.
- [22] Liberman, D., Weber, J. T., and Cromer, D.T., 1965, Physics Rev.137A, 27 p
- [23] Perdew, J.P. and Wang, Y., 1992, Physics Rev. B.45, 13244 p.
- [24] Perdew, J.P., Burke, S. and Ernzerhof, M., 1996, Phys. Rev. Let. 77, 3865 p.
- [25] Perdew, J. P., Chevary, J. A., Vasko, S. H., and Fiolhais, C., 1992, Phys. Rev. B 46, 6671 p.
- [26] Schwarz, K., 2003, DFT and the concepts of the APW+ lo method, 9 th Wien2k Workshop, Vienna Uni. of Tenchnology, Austria.
- [27] Blaha,P. ,Schwarz, K. ,Madsen, G. ,Kvasnicka D. and Luitz, J. ,2001, WIEN2k: An Augmented Wave Plus Local Orbitals Program for Calculation Crystal Properties, Vienna Universty of Technology, Avustria
- [28] Koelling D. D. and Arbman, G. D., 1975, J. Phys.F 5, 2041 p.
- [29] Blöchl, P. E., Jepsen, O. and Andersen, O. K., 1994, Phys. Rev B 49, 16223 p.
- [30] Rudman P. S., 1960, Acta Met. 8, 321
- [31] B. I. Min , T. Oguchi, H. J. F. Jensen et al., 1986, 54, 57, 1091.