

Fe-Al ALAŞIMLARININ İKİNCİ DERECE
ELASTİK SABİTLERİNİN İNCELENMESİ

Esmâ ŞAKRAK

Yüksek Lisans Tezi

Fizik Anabilim Dalı

Haziran - 2009

**Fe-Al ALAŞIMLARININ İKİNCİ DERECE ELASTİK SABİTLERİNİN
İNCELENMESİ**

Esmâ ŞAKRAK

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

Danışman : Yrd. Doç. Dr. Ercan UÇGUN

Haziran - 2009

KABUL ve ONAY SAYFASI

Esmâ ŞAKRAK'ın YÜKSEK LİSANS tezi olarak hazırladığı Fe-Al ALAŞIMLARININ İKİNCİ DERECE ELASTİK SABİTLERİNİN İNCELENMESİ başlıklı bu çalışma, jürimizce lisansüstü yönetmeliğin ilgili maddeleri uyarınca değerlendirilerek kabul edilmiştir.

...../...../2009

Üye : Yrd. Doç. Dr. Ercan UÇGUN

Üye : Yrd. Doç. Dr. Hamza Yaşar OCAK

Üye : Yrd. Doç. Dr. Ali ÇETİN

Fen Bilimleri Enstitüsün Yönetim Kurulu'nun/...../2009 gün ve sayılı kararıyla onaylanmıştır.

Prof. Dr. Atalay KÜÇÜKBURSA
Fen Bilimleri Enstitüsü Müdürü

Fe-Al ALAŞIMLARININ İKİNCİ DERECE ELASTİK SABİTLERİNİN İNCELENMESİ

Esmâ ŞAKRAK

Fizik Bölümü, Yüksek Lisans Tezi, 2009

Tez Danışmanı: Yrd. Doç. Dr. Ercan UÇGUN

ÖZET

Max BORN tarafından geliştirilen kararlılık kriterleri, sırasıyla bcc, disorder ve DO₃ fazlardaki Fe_(1-x)-Al_(x) (x=0.00, x=0.25, x=0.30) sistemlerinin ikinci derece elastik sabitlerini incelemek için uygulandı. Atomlar arasındaki etkileşmeler içinde, genelleştirilmiş Morse ve modifiye Morse potansiyel enerji fonksiyonları ayrı ayrı kullanıldı. Bu fonksiyonların ifadeleri,

$$\phi_{(r_j)} = \frac{D}{(m-1)} \left(e^{-m\alpha(r_j-r_0)} - m e^{-\alpha(r_j-r_0)} \right)$$

$$\phi_{(r_j)} = \frac{D}{(m-1)} r_j^{-1} \left(e^{-m\alpha(r_j-r_0)} - m e^{-\alpha(r_j-r_0)} \right)$$

şeklinde tanımlıdır. Bu merkezi atomik potansiyeller, Fe_(1-x)-Al_(x) sistemlerinin ikinci derece elastik sabitleri için ayrı ayrı test edildi. Bir eksen etrafında uygulanan kuvvet nedeni ile homojen olarak deforme edilen bu sistemlerin ikinci derece elastik sabitleri hesaplandı. Sistemlerin kararlılık şartları hesaplanan nümerik değerlerden belirlendi. Modifiye Morse potansiyeli Kararlılık kriterlerini sağlamaz iken m=2 için tanımlanan genelleştirilmiş Morse potansiyelinin Born kriterlerini sağladığı görüldü.

Anahtar Kelimeler: Elastik sabitler, İki cisim etkileşmesi, Mekaniksel Kararlılık, Zorlar.

EXAMINATION OF SECOND ORDER ELASTIC CONSTANTS FOR Fe-Al ALLOYS

Esma ŞAKRAK

Physics Department, M.S.Thesis, 2009

Thesis Supervisor: Assist. Prof. Ercan UÇGUN

SUMMARY

The stability criteria developed by Max BORN have been applied to the study of the second order elastic constants for $\text{Fe}_{(1-x)}\text{-Al}_{(x)}$ ($x=0.00$, $x=0.25$, $x=0.30$) in bcc, disorder and DO_3 phases, respectively. For the interactions between the atoms, the generalised Morse and Modified Morse potential energy functions have been used separately. These functions are given below:

$$\phi_{(r_j)} = \frac{D}{(m-1)} \left(e^{-m\alpha(r_j-r_0)} - m e^{-\alpha(r_j-r_0)} \right)$$

$$\phi_{(r_j)} = \frac{D}{(m-1)} r_j^{-1} \left(e^{-m\alpha(r_j-r_0)} - m e^{-\alpha(r_j-r_0)} \right)$$

Therefore, these pair interatomic potentials have been tested for the second order elastic constants for $\text{Fe}_{(1-x)}\text{-Al}_{(x)}$ systems. Second order elastic constants in the direction of one axis, have been also calculated. Finally, the equilibrium conditions have been determined from the computed numerical values. While the modified Morse potential don't satisfy the stability criteria, it is seen that Morse potential defined for $m=2$ satisfies the BORN criteria.

Key Words: Elastic Constants, Two-Body Interactions, Mechanical Stability, Stres.

TEŐEKKÜR

Yüksek lisans tez çalışmam süresince karşılaştığım zorlukların çözümlenmesinde değerli bilgi, yakın ilgi ve yardımlarını esirgemeyen danışman hocam Sayın Yrd. Doç. Dr. Ercan UÇGUN ve Sayın Yrd. Doç. Dr. Hamza Yaşar OCAK hocama şükranlarımı sunarım.

Ayrıca bilgisayar konularında yardımını esirgemeyen kıymetli eşim Tamer KIPÇAK'a ve maddi manevi yardımlarını esirgemeyen aileme teşekkürü borç bilirim.

İÇİNDEKİLER

	<u>Sayfa</u>
ÖZET	iv
SUMMARY	v
ÇİZELGELER LİSTESİ	ix
ŞEKİLLER LİSTESİ	x
GİRİŞ	1
1. MERKEZİ ETKİLEŞİM POTANSİYELLERİ	4
1.1. Kristal Potansiyeli	4
1.2. Morse Potansiyel Fonksiyonu Ve Parametrize Yöntemi	4
1.3. Modifiye Morse Potansiyel Fonksiyonu Ve Parametrize Yöntemi	6
2. MEKANİKSEL KARARLILIK	9
2.1. Kararlılık	9
2.2. Born Kararlılık Kriterleri	9
2.3. Kristal Örgünün Etkileşme Enerjisi	10
2.4. Fe-Al Alaşımında Atomik Etkileşmeler	12
3. ELASTİK SABİTLER	15
3.1. Hooke Yasası	15
3.1.1. Bir Boyutlu Hooke Yasası	15
3.1.2. Genelleştirilmiş Hooke Yasası	16
3.2. Zor – Zorlanma	17
3.3. Zorlar Ve Elastik Sabitler	19
3.4. İkinci Derece Elastik Sabitler	23
3.5. Hacim Modülü	25
4. Fe _(1-x) -Al _(x) SİSTEMLERİNDE KARARLILIK HESABI	26
4.1. Değerler Tablosu	26
4.2. Fe'de Kararlılık Hesabı	28
4.2.1. Genelleştirilmiş Morse Potansiyeli Kullanılarak Elde Edilen Sonuçlar	28
4.2.2. Modifiye Morse Potansiyeli Kullanılarak Elde Edilen Sonuçlar	33

İÇİNDEKİLER DİZİNİ (Devamı)

	<u>Sayfa</u>
4.3. Fe-25%Al Alaşımı İçin Kararlılık Hesabı	38
4.3.1. Genelleştirilmiş Morse Potansiyeli Kullanılarak Elde Edilen Sonuçlar	38
4.3.2. Modifiye Morse Potansiyeli Kullanılarak Elde Edilen Sonuçlar	43
4.4. Fe-30%Al Alaşımı İçin Kararlılık Hesabı	48
4.4.1. Genelleştirilmiş Morse Potansiyeli Kullanılarak Elde Edilen Sonuçlar	48
4.4.2. Modifiye Morse Potansiyeli Kullanılarak Elde Edilen Sonuçlar	53
5. SONUÇ VE TARTIŞMA	58
KAYNAKLAR	60
EKLER	62
EK.1. Fe İÇİN HESAPLANAN SONUÇLAR	62
Ek.1.1. Genelleştirilmiş Morse Potansiyeli Kullanılarak Elde Edilen Şekiller.....	62
Ek.1.2. Modifiye Morse Potansiyeli Kullanılarak Elde Edilen Şekiller	67
EK.2. FE-25%AL ALAŞIMI İÇİN HESAPLANAN SONUÇLAR	82
Ek.2.1. Genelleştirilmiş Morse Potansiyeli Kullanılarak Elde Edilen Şekiller.....	82
Ek.2.2. Modifiye Morse Potansiyeli Kullanılarak Elde Edilen Şekiller	82
Ek.3. Fe-30%Al ALAŞIMI İÇİN HESAPLANAN SONUÇLAR.....	102
Ek.3.1. Genelleştirilmiş Morse Potansiyeli Kullanılarak Elde Edilen Şekiller.....	102
Ek.3.2. Modifiye Morse Potansiyeli Kullanılarak Elde Edilen Şekiller	107

ÇİZELGELER LİSTESİ

<u>Çizelge</u>	<u>Sayfa</u>
2.1. Fe-Al sisteminin hesaplanan etkileşim parametreleri	14
4.1. Fe _(1-x) -Al _(x) Sistemleri için geliştirilmiş Morse, Potansiyel parametrelerinin değerleri	26
4.2. Fe _(1-x) -Al _(x) Sistemleri için Modifiye Morse, Potansiyel parametrelerinin değerleri	27
5.1. Morse Potansiyel Fonksiyonu kullanılarak denge durumunda hesaplanan sonuçlar	58
5.2 Modifiye Potansiyel Fonksiyonu kullanılarak denge durumunda hesaplanan sonuçlar .	59

ŞEKİLLER DİZİNİ

<u>Sekil</u>	<u>Sayfa</u>
1. Fe _(1-x) Al _(x) Sisteminin Atomik Yapısı	
4.1. Fe için Genelleştirilmiş Morse Potansiyel fonksiyonu kullanılarak m=1.25, m=1.5, m=2.0, m=2.5, m=3.0 için hesaplanan C ₁₁ (erg/cm ²)-a ₁ (A ^o) eğrileri.....	28
4.2. Fe için Genelleştirilmiş Morse Potansiyel fonksiyonu kullanılarak m=1.25, m=1.5, m=2.0, m=2.5, m=3.0 için hesaplanan C ₁₂ (erg/cm ²)-a ₁ (A ^o) eğrileri.....	29
4.3. Fe için Genelleştirilmiş Morse Potansiyel fonksiyonu kullanılarak m=1.25, m=1.5, m=2.0, m=2.5, m=3.0 için hesaplanan C ₁₁ /C ₁₂ -a ₁ (A ^o) eğrileri.....	30
4.4. Fe için Genelleştirilmiş Morse Potansiyel fonksiyonu kullanılarak m=1.25, m=1.5, m=2.0, m=2.5, m=3.0 için hesaplanan Hacim-a ₁ (A ^o) eğrileri.	31
4.5. Fe için Genelleştirilmiş Morse Potansiyel fonksiyonu kullanılarak m=1.25, m=1.5, m=2.0, m=2.5, m=3.0 için hesaplanan a ₁ (erg/cm ²)-a ₂ (A ^o) eğrileri.....	32
4.6. Fe için Modifiye Morse Potansiyel fonksiyonu kullanılarak m=1.25, m=1.5, m=2.0, m=2.5, m=3.0 için hesaplanan C ₁₁ (erg/cm ²)-a ₁ (A ^o) eğrileri.....	33
4.7. Fe için Modifiye Morse Potansiyel fonksiyonu kullanılarak m=1.25, m=1.5, m=2.0, m=2.5, m=3.0 için hesaplanan C ₁₂ (erg/cm ²)-a ₁ (A ^o) eğrileri.....	34
4.8. Fe için Modifiye Morse Potansiyel fonksiyonu kullanılarak m=1.25, m=1.5, m=2.0, m=2.5, m=3.0 için hesaplanan C ₁₁ /C ₁₂ -a ₁ (A ^o) eğrileri.	35
4.9. Fe için Modifiye Morse Potansiyel fonksiyonu kullanılarak m=1.25, m=1.5, m=2.0, m=2.5, m=3.0 için hesaplanan Hacim-a ₁ (A ^o) eğrileri.	36
4.10. Fe için Modifiye Morse Potansiyel fonksiyonu kullanılarak m=1.25, m=1.5, m=2.0, m=2.5, m=3.0 için hesaplanan a ₁ (A ^o)-a ₂ (A ^o) eğrileri.....	37
4.11. Fe-25%Al için Genelleştirilmiş Morse Potansiyel fonksiyonu kullanılarak m=1.25, m=1.5, m=2.0, m=2.5, m=3.0 için hesaplanan C ₁₁ (erg/cm ²)-a ₁ (A ^o) eğrileri.....	38
4.12. Fe-25%Al için Genelleştirilmiş Morse Potansiyel fonksiyonu kullanılarak m=1.25, m=1.5, m=2.0, m=2.5, m=3.0 için hesaplanan C ₁₂ (erg/cm ²)-a ₁ (A ^o) eğrileri.....	39
4.13. Fe-25%Al için Genelleştirilmiş Morse Potansiyel fonksiyonu kullanılarak m=1.25, m=1.5, m=2.0, m=2.5, m=3.0 için hesaplanan C ₁₁ /C ₁₂ -a ₁ (A ^o) eğrileri.	40
4.14. Fe-25%Al için Genelleştirilmiş Morse Potansiyel fonksiyonu kullanılarak m=1.25, m=1.5, m=2.0, m=2.5, m=3.0 için hesaplanan Hacim-a ₁ (A ^o) eğrileri.....	41
4.15. Fe-25%Al için Genelleştirilmiş Morse Potansiyel fonksiyonu kullanılarak m=1.25, m=1.5, m=2.0, m=2.5, m=3.0 için hesaplanan a ₁ -a ₂ (A ^o) eğrileri.....	42

ŞEKİLLER DİZİNİ (devamı)

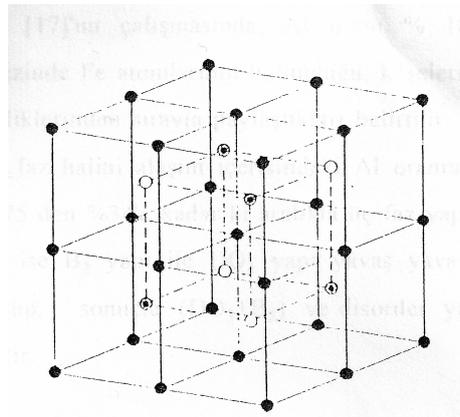
<u>Sekil</u>	<u>Sayfa</u>
4.16. Fe-25%Al için Modifiye Morse Potansiyel fonksiyonu kullanılarak $m=1.25, m=1.5, m=2.0, m=2.5, m=3.0$ için hesaplanan $C_{11}(\text{erg/cm}^2)$ - $a_1 (A^\circ)$ eğrileri.	43
4.17. Fe-25%Al için Modifiye Morse Potansiyel fonksiyonu kullanılarak $m=1.25, m=1.5, m=2.0, m=2.5, m=3.0$ için hesaplanan $C_{12}(\text{erg/cm}^2)$ - $a_1 (A^\circ)$ eğrileri.	44
4.18. Fe-25%Al için Modifiye Morse Potansiyel fonksiyonu kullanılarak $m=1.25, m=1.5, m=2.0, m=2.5, m=3.0$ için hesaplanan C_{11}/C_{12} - $a_1 (A^\circ)$ eğrileri.	45
4.19. Fe-25%Al için Modifiye Morse Potansiyel fonksiyonu kullanılarak $m=1.25, m=1.5, m=2.0, m=2.5, m=3.0$ için hesaplanan Hacim (B)- $a_1 (A^\circ)$ eğrileri.	46
4.20. Fe-25%Al için Modifiye Morse Potansiyel fonksiyonu kullanılarak $m=1.25, m=1.5, m=2.0, m=2.5, m=3.0$ için hesaplanan $a_2 (A^\circ) - a_1 (A^\circ)$ eğrileri.	47
4.21. Fe-30%Al için Genelleştirilmiş Morse Potansiyel fonksiyonu kullanılarak $m=1.25, m=1.5, m=2.0, m=2.5, m=3.0$ için hesaplanan $C_{11}(\text{erg/cm}^2)$ - $a_1 (A^\circ)$ eğrileri.	48
4.22. Fe-30%Al için Genelleştirilmiş Morse Potansiyel fonksiyonu kullanılarak $m=1.25, m=1.5, m=2.0, m=2.5, m=3.0$ için hesaplanan $C_{12}(\text{erg/cm}^2)$ - $a_1 (A^\circ)$ eğrileri.	49
4.23. Fe-30%Al için Genelleştirilmiş Morse Potansiyel fonksiyonu kullanılarak $m=1.25, m=1.5, m=2.0, m=2.5, m=3.0$ için hesaplanan C_{11}/C_{12} - $a_1 (A^\circ)$ eğrileri.	50
4.24. Fe-30%Al için Genelleştirilmiş Morse Potansiyel fonksiyonu kullanılarak $m=1.25, m=1.5, m=2.0, m=2.5, m=3.0$ için hesaplanan Hacim (B) - $a_1 (A^\circ)$ eğrileri.	51
4.25. Fe-30%Al için Genelleştirilmiş Morse Potansiyel fonksiyonu kullanılarak $m=1.25, m=1.5, m=2.0, m=2.5, m=3.0$ için hesaplanan $a_2 (A^\circ) - a_1 (A^\circ)$ eğrileri.	52
4.26. Fe-30%Al için Modifiye Morse Potansiyel fonksiyonu kullanılarak $m=1.25, m=1.5, m=2.0, m=2.5, m=3.0$ için hesaplanan $C_{11}(\text{erg/cm}^2)$ - $a_1 (A^\circ)$ eğrileri.	53
4.27. Fe-30%Al için Modifiye Morse Potansiyel fonksiyonu kullanılarak $m=1.25, m=1.5, m=2.0, m=2.5, m=3.0$ için hesaplanan $C_{12}(\text{erg/cm}^2)$ - $a_1 (A^\circ)$ eğrileri.	54
4.28. Fe-30%Al için Modifiye Morse Potansiyel fonksiyonu kullanılarak $m=1.25, m=1.5, m=2.0, m=2.5, m=3.0$ için hesaplanan C_{11}/C_{12} - $a_1 (A^\circ)$ eğrileri.	55
4.29. Fe-30%Al için Modifiye Morse Potansiyel fonksiyonu kullanılarak $m=1.25, m=1.5, m=2.0, m=2.5, m=3.0$ için hesaplanan Hacim (B)- $a_1 (A^\circ)$ eğrileri.	56
4.30. Fe-30%Al için Modifiye Morse Potansiyel fonksiyonu kullanılarak $m=1.25, m=1.5, m=2.0, m=2.5, m=3.0$ için hesaplanan $a_2 (A^\circ) - a_1 (A^\circ)$ eğrileri.	57

GİRİŞ

Katıları ve mekaniksel özelliklerinin yarı deneysel potansiyel enerji fonksiyonları ile incelenmesini ele alacağız. Konunun genişliği nedeniyle bu çalışmada yalnız mekaniksel kararlılık üzerinde durulacaktır. Klasik morse potansiyel enerji fonksiyonu kullanılarak bazı fcc ve bcc metallerin mekaniksel kararlılığı Milstein [1], Singh [2] ve Najafabadi [3] tarafından ayrı ayrı incelenmiştir. Bu araştırmacılar: Mie [4], Johnson [5] ve Born-Mayer [6] potansiyel enerji fonksiyonu kullanılarak bazı fcc (yüzey merkezli kübik) ve bcc (cisim merkezli kübik) metaller için bulunan mekaniksel Kararlılık sonuçlarının klasik Morse potansiyel fonksiyonu kullanılarak bulunan sonuçlardan bunların daha iyi olmadığını belirtmişlerdir. Bu çalışmanın konusu $Fe_{(1-x)} - Al_{(x)}$ sistemleri olacaktır ($x=0.25$; $x=0.30$). Çünkü bu sistemler sanayide ve endüstride aranan bir tür çeliktir. Bu çelikler çok karmaşık yapılarda kararlı olduklarından teorik olarak çalışılması diğer alaşımlara nazaran oldukça zordur.

Fe – Al alaşımları üzerine ilk çalışma 1932 yılında Beradley ve Jay [7] tarafından yapıldı. Bu çalışma da, alaşımın faz yapısı x-ışınları metoduyla incelenerek $x>0.19$ için bcc disorder, DO_3 ve B_2 türünde üç ayrı yapı belirlendi. Daha sonraki çalışmalarda [8], bu yapılar $Fe_3Al(DO_3)$ ve $FeAl(B_2)$ olarak tanımlandı. Ayrıca bu çalışmalarda, alaşımdaki Al oranının ve sıcaklığının alaşımın mekaniksel özelliklerini çok etkilediği de vurgulanmıştır. Yine $x=0.25$ için oda sıcaklığındaki Fe-Al sisteminde $DO_3 \rightarrow B_2$ dönüşümünün gerçekleştiği belirtilmektedir [9].

Rudman [10] tarafından yapılan çalışmalarda Fe-Al sistemindeki atomlar arası etkileşim sistematiği Şekil 1’de verildiği gibidir.



● α Atomların yerleri ⊙ β Atomların yerleri ○ γ Atomların yerleri

Şekil 1. $Fe_{(1-x)}Al_{(x)}$ Sisteminin Atomik Yapısı [10].

Bu şekilde FeAl yapısının β ve γ atomları birbirinin aynısıdır. DO_3 yapı için ise α ve β , Fe atomlarını temsil ederken Al atomlarını da γ gösterir. Disorder yapı için α ve β ve γ birbirlerinin aynısıdır. X alaşım içindeki Al miktarı olmak üzere Disorder yapı için $[\alpha]=[\beta]=[\gamma]=x$ B_2 yapı için $[\alpha]\neq[\beta]=[\gamma]$; $T\rightarrow 0$ ve $x=0,5$ için $[\alpha]\rightarrow 0$ ise $[\beta]=[\gamma]\rightarrow 1$ dir. DO_3 yapı için $[\alpha]\neq[\beta]\neq[\gamma]$; $x\rightarrow 0,25$ ve $T\rightarrow 0$ için $[\alpha]\rightarrow[\beta]\rightarrow 0$ ve $[\gamma]\rightarrow 1$ dir.

$DO_3\rightarrow B_2$ dönüşümünde ise

$[\alpha]\neq[\beta]\neq[\gamma]$, $[\alpha]\neq[\beta]=[\gamma]$ olur.

Dönüşümler esnasında α 'nın durumu için bilinen numune disorder yapı için basit kübik örgüdür. Teorik açıklamalar bu değişmezliğin $[\alpha]$ için $x>0,25$ te sağlandığını gösterir [11].

Prakash [11] tarafından yapılan bir çalışmada, Fe-Al sistemi DO_3 yapıda iken her bir Al atomunun yalnız en yakın komşuluklardaki rastgele dizildiği belirtilmiştir. Fe-Al sisteminin yapısını inceleyen A.Taylor ve Jones [12]'un çalışmasında; Al oranı %18.75 den fazla ise kübün merkezinde Fe atomlarının, köşelerinde ise Fe ve Al atomlarının sıralandıkları belirtilmiştir. Fe-Al sisteminin üç farklı faz halinin alaşım içerisindeki Al oranına bağlı olduğunu belirterek, %18,75 den %34'e kadar ki aralıkta üç faz yapısına rastlanılırken, %34'den sonra ise B_2 yapı ile DO_3 yapı yavaş yavaş birleşerek tek bir yapıya dönüşüp, sonuçta (DO_3+B_2) ve disorder yapılarının oluştuğunu ifade etmiştir [13].

Alaşım, %0,0 dan %18,75 Al oranına ulaşıncaya kadar (Disorder+ DO_3) ve B_2 yapı gözlenir. Alaşım (DO_3+B_2) yapıya ulaşıncaya Al atomları merkezde Fe atomları da köşelerde yeralan bcc yapıda gözlenir. Al oranı %25 den az ise kristal yapıdaki atomik dağılım tamamen düzensiz bir yapıya sahiptir. Her bir faz durumunda atomik etkileşimler birbirinden farklıdır. Meydana gelen üç farklı yapı alaşımı oluşturan metallerin manyetik özelliğine de bağlıdır [10]. Alaşım için aynı tür etkileşimlerde (Fe-Fe ve Al-Al) için N atom sayısı olmak üzere $N_\alpha=N_\beta=N_\gamma=N$ katkısı gelirken farklı etkileşimlerde $N_\alpha=2N_\gamma=N/2$ olmaktadır [7].

$Fe_{(1-x)}-Al_{(x)}$ alaşımlarının faz yapısı üzerine Leamy [13] tarafından yapılan bir çalışmada da

$x = 0.1875 - 0.25$ arasında alaşım disorder

$x = 0.25 - 0.34$ arasında alaşım DO_3

$x = 0.34 - 0.5$ arasında alaşım B_2

yapıları gözleendiği belirtilmiştir.

Bu çalışmada yukarıda belirtildiği gibi kompleks yapılara sahip $Fe_{(1-x)}-Al_{(x)}$ sisteminin ikinci derece elastik sabitler,

$x = 0$ için bcc Fe

$x = 0.25$ için disorder Fe-%25 Al

$x = 0.30$ için DO₃ Fe-%30 Al

yapılarında incelenecektir. Ayrıca atomlar arasındaki merkezi etkileşimleri tanımlamak için, bugüne kadar alışımaların mekaniksel kararlığında hiç denenmeyen genelleştirilmiş Morse ve modifiye Morse

$$\phi(r_j) = \frac{D}{2(m-1)} \left[e^{-m\alpha(r_j-r_0)} - me^{-\alpha(r_j-r_0)} \right]$$

$$\phi(r_j) = \frac{D}{2(m-1)} r_j^{-1} \left[e^{-m\alpha(r_j-r_0)} - me^{-\alpha(r_j-r_0)} \right]$$

potansiyel enerji fonksiyonları kullanılacaktır.

Her iki durum için elastik sabitlerin değerleri her potansiyel sabiti için ($m=1.5, 2.0, 2.5, 3.0$) ayrı ayrı hesaplanacaktır.

1. MERKEZİ ETKİLEŞİM POTANSİYELLERİ

1.1. Kristal Potansiyeli

Kristallere dışarıdan uygulanan kuvvetlere bağlı olarak iyonların veya atomların sonlu dizilişlerindeki etkileşimler göz önüne alınır ve toplam potansiyel enerji bu atomik dizilişlerin yapısının bir fonksiyonu olarak çalışılır. Bir kristalin bir doğrultudaki titreşim enerjisi iç potansiyel enerjisi ile kıyaslandığında çok küçük olduğu bilinir. Kristal potansiyeli serbest Gibbs enerjisinin ya da iç potansiyel enerjinin farklı yaklaşımından türetilir. Buradaki uygulamada potansiyel T ve S'den bağımsızdır. Bundan dolayı elastik sabitler sadece kristalin atomik yapısına bağlıdır.

1.2. Morse Potansiyel Fonksiyonu ve Parametre Yöntemi

$Fe_{(1-x)}-Al_{(x)}$ sistemindeki toplam etkileşme enerjisi için yalnız atomik etkileşimler ele alınacaktır. bcc disorder ve DO_3 yapıdaki kristal örgüler için atomlar arasındaki merkezi etkileşimler önce genelleştirilmiş Morse potansiyel fonksiyonu ile tanımlanacaktır [14]. Morse potansiyel fonksiyonu,

$$\phi_{(r_j)} = \frac{D}{(m-1)} \left[\beta^m e^{-m\alpha r_j} - m\beta e^{-\alpha r_j} \right] \quad 1.1$$

dir. Burada r_j atomlar arasındaki mesafe, D ayrışma enerjisi, α sertlik parametresi ve r_0 denge uzaklığıdır. Bilinen kristal örgüleri en iyi tanımlayan genelleştirilmiş Morse potansiyel parametreleri Akgün modeli [15] ve Girifalco-Weizer [16] metoduna göre parametrize edilmiştir [9]. Bu metoda göre önce potansiyelin kristaldeki atom başına ikili etkileşim enerjisini verecek şekilde yazılması gerekir.

$$\phi_{(r_j)} = \frac{1}{2} \frac{D}{(m-1)} \sum_{j=1}^N \left[\beta^m e^{-m\alpha r_j} - m\beta e^{-\alpha r_j} \right] \quad 1.2$$

Buradaki toplam, kristalin bütün atomları üzerindedir. r_j her bir atomun orjine uzaklığıdır. Kübik yapılar için r_j atom koordinatları cinsinden

$$r_j^2 = (L_1^2 + L_2^2 + L_3^2)a^2 = M_j a \quad 1.3$$

şeklinde verilir. Burada L_1, L_2, L_3 atomların örgüdeki koordinatları (Miller İndisleri), "a" ise örgü parametresidir. L_1, L_2, L_3 değerleri için basit kübik yapılarda bir kısıtlama yoktur. fcc

yapılar için $L_1+L_2+L_3$ toplamı çift, bcc yapılarda ise L_1, L_2, L_3 , değerlerinin ya hepsi çift ya da hepsi tek olmalıdır. $\beta = e^{\alpha r_0}$ olarak tanımlanır.

Eşitlik (1.2) Girifalco-Weizar metoduna göre $a_0 = \frac{a}{2}$ denge değerinde ;

$$\phi_{(a_0)} = -\epsilon_c \quad 1.4$$

$$B = \frac{1}{9ca_0} \left(\frac{d^2\phi}{da^2} \right)_{a=0} \quad 1.5$$

$$\left(\frac{d\phi}{da} \right)_{a=a_0} = 0 \quad 1.6$$

eşitliklerini sağlamalıdır. Burada B, hacim modülü, bcc yapılar için $c=2$ 'dir [17]. Buna göre yukarıdaki türev verdiği denge konumu için;

$$\left(\frac{d\phi}{da} \right)_{a=a_0} = \frac{D}{2(m-1)} \sum_{1,2,3} \left[m\beta m_j \alpha e^{-\alpha a_0 m_j} - m m_j \alpha \beta^m e^{-m m_j \alpha a_0} \right] = 0 \quad 1.7,$$

olur. Buradan β 'yı çekip r_0 'ı α 'ya bağlayan bağıntı

$$\beta = \left[\frac{\sum_{1,2,3} e^{-m_j a_0}}{\sum_{1,2,3} e^{-m m_j \alpha a_0}} \right]^{(m-1)^{-1}} \quad 1.8.$$

$$\beta = e^{\alpha r_0}$$

şeklinde yazılabilir. olduğundan her iki tarafın "e" tabanına göre logaritması alınır ve düzenleme yapılırsa, r_0 denge mesafesi

$$r_0 = \frac{1}{\alpha} \ln \left(\left[\frac{\sum_{1,2,3} e^{-m_j \alpha a_0}}{\sum_{\ell 1,2,3} e^{-m_j \alpha a_0}} \right]^{(m-1)^{-1}} \right) \quad 1.9.$$

olur. Burada αa_0 çarpımı birimsiz olduğundan parametrize işlemi kolaylık sağlar. Böylece bilinmeyen sayısı α ve D olmak üzere ikiye indirgenir. D ayrışma enerjisi birinci şarttan; eşitlik (1.2);

$$D = \phi_{(a_0)} 2(m-1) \left[\sum_{\ell=1,2,3} \left(\beta^{-m_j m \alpha a_0} - m \beta e^{-m_j \alpha a_0} \right) \right]^{-1} \quad 1.10.$$

şeklinde düzenlenir.

α sertlik parametresi ise hacim modülü kullanılarak bulunabilir. Hacim modülü kristal yapının sertliğinin bir ölçüsüdür. Aynı zamanda birim hücrenin hacminin bir dv değişimine karşılık enerjide termodinamik özdeşlikten dolayı bir değişime eşlik eder [18]. Bu değişim

$$B = -V \frac{dp}{dv} = V \cdot \frac{d^2 E}{dv^2} = \frac{1}{9ca_0} \left(\frac{d^2 \phi}{da^2} \right)_{a=a_0} \quad 1.11.$$

olarak tarif edilir [8]. Hacim modülü, kristalin sertliğinin ya da verilen bir bozulmayı oluşturmak için gerekli enerjinin bir ölçüsüdür. Hacim modülü ne kadar büyükse kristal o kadar serttir [19]. Eşitlik (1.11)'de $V=ca_3$ 'tür. (fcc'lerde $c = 4$, bcc'lerde $c = 2$ 'dir). Eşitlik (1.2) in " a_0 " ya göre ikinci türevi alınırsa,

$$\frac{d^2 \phi}{da^2} = \frac{D}{2(m-1)} \sum_{\ell=1,2,3} \left[mm_j^2 \alpha^2 \left(\beta^m m e^{2-mm_j \alpha a_0} - \beta e^{-m_j \alpha a_0} \right) \right] \quad 1.12.$$

$$B = \frac{1}{36a_0} \frac{D}{2(m-1)} \sum_{\ell=1,2,3} mm_j^2 \alpha^2 \left(\beta^m m e^{-mm_j \alpha a_0} - \beta e^{-m_j \alpha a_0} \right)$$

1.13

eşitliği bulunur. Belirlenen kristal örgüler için bu hesaplamalar bcc yapının 10. komşuluğuna kadar genişletilecektir.

1.3. Modifiye Morse Potansiyel Fonksiyonu ve Parametrize Yöntemi

Son zamanlarda Singh ve Rathore [20] tarafından tanımlanan modifiye Morse potansiyeli yalnız fcc Fe'nin fonon dispersiyonu için uygulandı. Bu potansiyel $\beta = e^{\alpha r_0}$

dönüşümü ile;

$$\phi_{(r_j)} = \frac{D}{(m-1)} r_j^{-1} \left[\beta^m e^{-m \alpha r_j} - m \beta e^{-\alpha r_j} \right]$$

olarak tekrar yazılabilir. Bugüne kadar mekaniksel Kararlılık hesaplarında hiç denenmeyen bu potansiyel Fe(1-x)-Al(x) sistemlerinin elastik sabitlerinin hesaplanmasında test edilecektir. Bu

potansiyelin parametreleri Girifalco-Weizer metoduna göre Akgün modeli de uygulanarak parametrize edilmiştir [9]. Atom başına etkileşim enerjisi;

$$\phi = \frac{D}{2(m-1)} \sum_{j=1}^N r_j^{-1} (\beta^m e^{-m\alpha r_j} - m\beta e^{-\alpha r_j}) \quad 1.14$$

şeklinde olup burada $r_j = m_j a$ alınarak;

$$\phi = \frac{D}{2(m-1)} \sum_{j=1}^N r_j^{-1} [\beta^m e^{-m m_j \alpha a} - m\beta e^{-m_j \alpha a}] \quad 1.15$$

eşitliği bulunur. $a_0 = \frac{a}{2}$ denge durumunda bu eşitlik Girifalco-Weizer metoduna göre;

$$\left(\frac{d\phi}{da} \right)_{a=a_0} = \frac{D}{2(m-1)} \sum_{\ell,1,2,3} [m(m_j^{-1} a_0^{-2} + \alpha a_0^{-1}) \beta e^{-m_j \alpha a_0} - (m_j^{-1} a_0^{-2} + m \alpha a_0^{-1}) \beta^m e^{-m_j \alpha a_0}] = 0 \quad 1.16.$$

olup buradan,

$$\beta = \left[\frac{m \sum_{\ell,1,2,3} e^{-m_j \alpha a_0} (m_j + \alpha a_0)}{m \sum_{\ell,1,2,3} e^{-m_j m \alpha a_0} (m_j + m \alpha a_0)} \right]^{(m-1)^{-1}}$$

bulunur $\beta = e \alpha r_0$ olduğundan her iki tarafın “e” tabanına göre logaritması alınır ve r_0 'a göre yeniden düzenlenirse

$$r_0 = \left\{ \frac{\left[m \sum_{\ell,1,2,3} (m_j + \alpha a_0) e^{-m_j \alpha a_0} \right]}{\left[\sum_{\ell,1,2,3} e^{-m_j m \alpha a_0} (m_j + m \alpha a_0) \right]} \right\}^{(m-1)^{-1}} \quad 1.17.$$

eşitliği bulunur. Ayrışma enerjisi ise

$$D = \phi_{(a_0)} 2(m-1) \left[\sum_{\ell,1,2,3} (m_j a_0)^{-1} (\beta^m e^{-m_j \alpha a_0} - m\beta^m e^{-m_j \alpha a_0}) \right]^{-1} \quad 1.18.$$

olur. Buradan a'ya göre ikinci türevi alınarak $a=a_0$ daki değeri,

$$\begin{aligned}
\frac{d^2\phi}{da^2} &= \frac{D}{2(m-1)} \sum_{\ell_1\ell_2\ell_3} [(m_j a_0)^{-1} (\beta^m e^{-mm_j\alpha a_0} - m\beta e^{-m_j\alpha a_0}) \\
&+ \frac{D}{2(m-1)} \sum_{\ell_1\ell_2\ell_3} [\beta^m e^{-mm_j\alpha a_0} (2\alpha a_0^{-2} + m^2\alpha^2 m_j a_0^{-1}) \\
&- \beta e^{-m_j\alpha a_0} (2m\alpha a_0^{-2} + m\alpha^2 m_j a_0^{-1})]
\end{aligned} \tag{1.19}$$

olup, Hacim modülü;

$$\begin{aligned}
B &= \frac{2\phi(a_0)}{36a_0^3} + \frac{D}{18c(m-1)a_0^4} \sum_{\ell_1\ell_2\ell_3} [\beta^m e^{-mm_j\alpha a_0} (2m(\alpha a_0) + m^2(\alpha a_0)^2 m_j) \\
&- \beta e^{-m_j\alpha a_0} (2m(\alpha a_0) + m m_j (\alpha a_0)^2)]
\end{aligned} \tag{1.20}$$

şeklinde düzenlenir. Belirlenen kristal örgüler içinde bu hesaplamalar da bcc yapının 10. komşuluğuna kadar genişletilecektir.

2. MEKANİKSEL KARARLILIK

2.1. Kararlılık

Metallerin mekaniksel Kararlılıkları üzerine yapılan çalışmaların önemli bir kısmını Max Born'un teorisi oluşturur. Born'a göre bir kristal örgünün mekaniksel olarak kararlı olabilmesi için üzerine hiç bir dış kuvvetin uygulanmaması gerekir. Born bir kristali termodinamiksel şartlar altında inceleyerek genel bir sonuca ulaşmıştı [21]. Bu sonuçlardan birisi, tek bir kristal örgü kendiliğinden küçük bir deformeye uğrarsa da termodinamiksel şartlarda mekaniksel olarak kararlılığı bozulmaz.

Born, kübik kristaller için teorisini oluştururken atomlar arasında yalnız merkezi etkileşimleri dikkate almıştır. Bu nedenle kübik kristallerde mekaniksel Kararlılık için gerekli matematiksel ifadelerde atom-atom etkileşimleri dikkate alınmaktadır. Born'un matematiksel ifadeleri ilk defa kübik bir örgü için Misra tarafından uygulandı. Misra, iki-cisim etkileşmesi için Mie-tipi bir potansiyel fonksiyon kullanarak fcc ve bcc metallerin mekaniksel kararlılığını inceledi. Bu çalışmada bcc kristallerin ancak $n > 5$ için mekaniksel Kararlılık göstereceği vurgulanmıştır [14, 22, 1].

Milstein [14] tarafından yapılan çalışmada kübik bir kristale Born Kararlılık kriterleri uygulanırken dış kuvvet altında kristalin tek çeşitliliğinin bozulduğu kabul edilir. Çalışmalarında genel Morse potansiyeli fonksiyonunu kullanan Milstein ikinci dereceden elastik sabitlere göre mekaniksel Kararlılık ($C_{11} > C_{12}$) şartında inceleyerek; fcc metallerin sürekli kararlı, buna karşılık bcc metalleri için C_{11}/C_{12} oranının maksimum 1.36 ve minimum 1 olduğu bölge sınırlarında bu yapının kararlı olabileceği vurgulandı.

Najafabadi ve Kalonji [3] Lennard-Jones, Johnson 1 ve Klasik Morse potansiyel enerji fonksiyonlarını kullanarak Fe, Cu, Ni ve Ag elementlerinin mekaniksel kararlılığını incelediler. Sonuçta; Lennard-Jones potansiyelinin fcc örgüler için kararlı yapıları Johnson 1 ve Klasik Morse potansiyelerinin ise bcc kristaller için kararlı yapıları daha iyi tanımlayabileceği belirtildi. Ayrıca bu araştırmacılar her merkezi-etkileşmeli potansiyelin materyallerin mekaniksel kararlılığına uygulanması gerektiğini önemle vurguladılar.

2.2. Born Kararlılık Kriterleri

Born kararlılık kriterleri metallerin ikinci derece elastik sabitleri ve birim yüzeydeki enerji yoğunluklarına bağlı olarak incelenir [14, 22, 1]. İkinci dereceden elastik sabitlere bağlı olarak Kararlılık kriterleri:

- a. Kristalin elastik sabitleri daima pozitif olmalı
- b. Kristalin denge halinde Cauchy bağıntısı ($C_{12}=C_{44}$) sağlanmalı
- c. $C_{11} > C_{12} > 0$ olmalı.
- d. $(C_{11}/C_{12}) > 1$ olmalıdır.

Yüzey birimi başına enerji olarak tarif edilen B_{ij} -ler cinsinden Kararlılık şartları ise;

- a. B_{ij} 'lerin herbiri pozitif olmaktadır.
- b. $(B_{12}-B_{23}) > 0$ olmaktadır.
- c. $B_{11}(B_{22}+B_{23})-2B_{12} > 0$ olmaktadır.
- d. Kristalin denge halinde kristal simetrisi nedeniyle $B_{11}=B_{22}$ ve $B_{12}=B_{23}$ olmaktadır.
- e. Simetriden dolayı B_{11} ve B_{23} deki azalmaya karşılık örgü parametrelerine bağlı olarak B_{22} ve B_{12} değerleri artmaktadır.

f. Kararlılık Sınırları b ve c şartları arasındaki alandır. Born Kararlılık kriterleri birçok araştırmacı tarafından metallere uygulanmıştır [1, 2, 23].

Sonuçların fcc kristaller için çok iyi olduğu not edilirken bcc ve sc yapılar için kısmen iyi olduğu belirtilmektedir.

2.3. Kristal Örgünün Etkileşme Enerjisi

Bugüne kadar metaller üzerinde yapılan Kararlılık çalışmalarında kristal örgünün toplam etkileşme enerjisi yalnız iki cisim etkileşmelerine göre tanımlanmıştır. Atomlar arası iyon-iyon etkileşmeleri dikkate alınarak örgünün etkileşme enerjisi,

$$E_{(a0)} = \frac{1}{2} n \sum_{i_1 i_2 i_3} \phi(r_j) \quad 2.1.$$

şeklinde tanımlanır. Burada n birim hücredeki atom sayısı olup fcc yapıdaki için 4, bcc yapıdaki için 2 dir. $\phi(r_j)$ ise iki cisim etkileşme potansiyel enerji fonksiyonudur. Giriş bölümünde bahsedildiği gibi alaşımlar üzerinde mekaniksel Kararlılık çalışmaları örgünün toplam etkileşme enerjisi Rudman [10] tarafından tanımlanan hesaplanma yöntemine göre yapılır.

Bu modelde, A ve B alařımı oluřturan elementler olmak üzere en yakın komřuluklar için etkileřme enerjileri

$$V_1 = E_{AB} - \frac{E_{AA} + E_{BB}}{2} \quad 2.2.$$

$$V_2 = E'_{AB} - \frac{E'_{AA} + E'_{BB}}{2} \quad 2.3.$$

$$V_3 = E''_{AB} - \frac{E''_{AA} + E''_{BB}}{2} \quad 2.4.$$

řeklinde verilmiřtir.

Burada E_{AB} , E''_{AB} sırasıyla 1., 2. ve 3. komřulukları farklı atomlar arasındaki etkileřim enerjileridir. Buna göre her komřuluğun enerjisi birbirinden bağımsız olarak;

$$E_1 = 4n \left[(1-x)E_{AA} - xE_{BB} + \left(2x(1-x) + \frac{1}{2}S_{11}^2 \right) V_1 \right] \quad 2.5.$$

$$E_2 = 3n \left[(1-x)E'_{AA} - xE'_{BB} + \left(2x(1-x) + \frac{1}{4}(S_{31}^2 - 2S_{11}^2) \right) V_2 \right] \quad 2.6.$$

$$E_3 = 6n \left[(1-x)E''_{AA} - xE''_{BB} + \left(2x(1-x) + \frac{1}{4}(S_{31}^2 + 2S_{11}^2) \right) V_3 \right] \quad 2.7.$$

verilir. E_1 , S_{31} 'den bağımsızdır. S_{ij} parametreleri daha geniř olarak bu bölümde açıklanacaktır. Ayrıca Leamy [13] DO_3 yapıya ait yukarıdaki eřitlikleri kullanarak enerjiiyi

$$E_{(r_j)} = \frac{1}{2}n \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^2 qNi\phi_{(r_j)} \quad 2.8.$$

řeklinde genel bir bağılantıya tanımlanmıřtır. Eřitlik (2.8)'deki qNi alařım katkısıdır. Sonuçta birinci ve ikinci komřuluk enerjileri potansiyel fonksiyona bağılı olarak;

$$\left. \begin{matrix} E_{NN} \\ E_{NNN} \end{matrix} \right\} = \left[\frac{\phi_{AlAl} + \phi_{FeFe}}{2} - \phi_{FeAl} \right]_{r(1,2)} \quad 2.9$$

ifadesiyle verilir. Rudman [10] ve Leamy [13] tarafından tanımlanan enerji bağıntıları ayrıntılarıyla çıkarılabilir.

2.4. Fe-Al Alaşımında Atomik Etkileşimler

Fe-Al alaşımının disorder, DO₃ ve B₂ yapıları farklı alüminyum oranlarından oluşmaktadır. Şekil 1’de verilen Fe_(1-x)-Al_(x) alaşımının atomik yapısına göre α, β ve γ atomları arasındaki bağıntılar;

$$X=0.25 \text{ disorder yapı için } [\alpha]=[\beta]=[\gamma] \quad 2.10$$

$$0.34 < x < 0.5 \text{ arasında B}_2 \text{ yapı için } [\alpha] \neq [\beta] \neq [\gamma] \quad 2.11$$

$$x=0.5 \text{ ve } T \rightarrow 0 \text{ iken } [\beta]=[\gamma]=1 \text{ ve } [\alpha] \rightarrow 0$$

$$0.25 < x < 0.34 \text{ arasında DO}_3 \text{ için } [\alpha] \neq [\beta] \neq [\gamma] \quad 2.12$$

$$x \rightarrow 0.25 \text{ ve } T \rightarrow 0 \text{ ise } [\alpha] \rightarrow [\beta] \rightarrow 0 \text{ ve } [\gamma] \rightarrow 1 \quad 2.13$$

olur.

α, β, γ atomlarının sayısı N_α, N_β, N_γ olmak üzere her birinin atom sayısı N=N_α=N_β=N_γ olur. Bu sayı aynı zamanda aynı tür atomlar arasındaki etkileşme sayısını gösterir. Farklı iki atom arasındaki etkileşme sayısı ise;

$$N_{\alpha} = 2N_{\beta} = 2N_{\gamma} = \frac{1}{2}N \quad \text{dir [10]. Kristal örgüdeki atomların etkileşimlerini yapılarına}$$

bağlı olarak tanımlayan S parametresi

$$S = 2([\alpha] - x) + ([\beta] - x) + ([\gamma] - x) \quad 2.14$$

şeklinde tanımlanır [10, 7]. S=1 ise düzenli (DO₃ ve B₂), S=0 ise düzensiz yapıyı (disorder) tanımlar. Eşitlik (2.14)’de eşitlik (2.13) bağıntıları kullanılarak Fe_(1-x)-Al_(x) sistemi içindeki aynı atomlar arasındaki etkileşimler

$$S_{11} = 2(x - [\alpha]) \quad 2.15$$

ifadesi, farklı türdeki atomlar için,

$$S_{31} = 2([\alpha] + [\gamma] - 2x) \quad 2.16$$

eşitliği bulunur. 0.25 < x < 0.5 aralığındaki maksimum disorder yapının Fe-Al alaşımında Al atomlarının α örgüsü üzerinde olmayıp, her iki durumda da Al atomlarının γ örgüsü üzerinde

olduğu bilinir [12]. Bu şartlar altında S'nin alabileceği maksimum değerler aşağıdaki gibidir [10, 7].

$$B_2 \quad (x < 0.5) \text{ yapı için}; \quad S_{11} = 2x, S_{31} = 0$$

$$DO_3 \quad (x < 0.25) \quad \text{yapı için}; \quad S_{11} = 2x, S_{31} = 4x$$

$$DO_3 \quad (x < 0.25) \text{ için } S_{31} = (1-4x), \text{ disorder yapıda ise } S_{11} = S_{31} = 0 \text{ dir.}$$

Burada $S_{11} = S_{NN}$ ve $S_{31} = S_{NNN}$ eşitlikler tanımlanarak Rudman [10] gösterimine göre birinci ve ikinci en yakın komşuluklardaki Fe-Fe, Al-Al ve Fe-Al etkileşimlerinin katkıları

$$N_{FeFe}^{NN} = \frac{1}{4} [(2x - 2)^2 - S_{NN}^2] \quad 2.17$$

$$N_{FeFe}^{NNN} = \frac{1}{8} [2S_{NNN}^2 - S_{NNN}^2 + 8x^2 - 16x + 8] \quad 2.18$$

$$N_{AlAl}^{NN} = \frac{1}{2} [4x^2 - S_{NN}^2] \quad 2.19$$

$$N_{AlAl}^{NNN} = \frac{1}{8} [2S_{NNN}^2 - S_{NNN}^2 - 8x^2] \quad 2.20$$

$$N_{FeAl}^{NN} = \frac{1}{2} [S_{NN}^2 - 4x^2 + 4x] \quad 2.21$$

$$N_{FeAl}^{NNN} = \frac{1}{4} [S_{NNN}^2 - 2S_{NN}^2 - 8x^2 + 8x] \quad 2.22$$

şeklinde verilmiştir [10, 7]. Yukarıdaki eşitliklerdeki NN ve NNN yazılımları birinci ve ikinci komşulukları gösterir. Buna göre Fe-Al sisteminin ikinci komşuluğa kadar olan toplam enerjisi

$$E_{(r)} = \frac{1}{2} \left[8N_{FeFe}^{NN} \phi_{FeFe}(r) + 8N_{AlAl}^{NN} \phi_{AlAl}(r) + 4N_{FeAl}^{NN} \phi_{FeAl}(r) \right] + 6N_{FeFe}^{NNN} \phi(r) + 6N_{AlAl}^{NNN} \phi_{AlAl}(r) + 3N_{FeAl}^{NNN} \phi_{FeAl}(r) \quad 2.23$$

olup bu ifade qNi alaşım katkısı cinsinden,

$$E_{(r)} = \frac{1}{2} n \sum_{i=1} \sum_{j=1} qNi \phi_{(r)} \quad 2.24$$

şeklinde yazılır [13].

Alaşımdaki qNi katkılarının hesaplanmasında belirgin hususlardan birisi de Fe-Fe ve Al-Al etkileşimlerin katkılarının aynı komşuluklar için Fe-Al etkileşim katkılarından küçük olmasıdır. Bu kurumda katkı payının büyük kısmı farklı türdeki atomların etkileşimlerinden gelmektedir. Etkileşimlerdeki potansiyel fonksiyon aynı olduğu için enerji (2.24) bağıntısını açık yazacak olursak N_1 , N_2 1. ve 2. komşulardaki atom sayısı olmak üzere,

$$E = \frac{1}{2} n \phi_{(r_j)} \left[N_1 \left(N_{FeFe}^{NN} + N_{AlAl}^{NNN} + \frac{1}{2} N_{FeAl}^{NN} \right) + N_2 \left(N_{FeFe}^{NNN} + N_{AlAl}^{NNN} + \frac{1}{2} N_{FeAl}^{NNN} \right) \right] \quad (2.25)$$

eşitliği yazılabilir.

Yukarıdaki (2.25) eşitliğindeki etkileşim parametreleri (N ve S'ler) Disorder ve DO₃ faz yapıları ayrı ayrı hesaplandı. Eşitlik (2.17-2.22)'dan hesaplanan değerler Tablo 1'de verildi.

Çizelge 2.1. Fe-Al Sisteminin Hesaplanan Etkileşim Parametreleri [9]

Sistem	x	S _{NN}	S _{NNN}	N_{FeFe}^{NN}	N_{AlAl}^{NN}	N_{FeAl}^{NN}	N_{FeFe}^{NNN}	N_{AlAl}^{NNN}	N_{FeAl}^{NNN}
Disorder	0,25	0	0	0,5625	0,0625	0,375	0,5625	0,0625	0,375
DO ₃	0,3	0,6	0,8	0,34	0	0,6	0,56	0,1	0,4

Bu çizelgedeki değerler ikinci derece elastik sabitlerin hesaplanması ve buna bağlı olarak Hacim sabitlerinin hesaplanmasında kullanılacaktır.

3. ELASTİK SABİTLER

3.1. Hooke Yasası

3.1.1. Bir Boyutlu Hooke Yasası

Zor etkisinde kalan bir boyutlu katı cisim uzar veya kısalır. Zor, esneklik sınırı denilen bir değerden daha küçük olduğunda; zorlanma tersinirdir. Yani, zor ortadan kalktığında, cisim eski şekline döner. Yeteri kadar küçük zorlar için, zorlanmanın büyüklüğü, uygulanan zorun büyüklüğü ile doğru orantılıdır. Katı cisimlerin bu özelliği ilk olarak 1638 yılında Galileo tarafından ele alındı. Galileo'nun elinde, o zaman için, ne deneysel sonuçlar ne de yararlanabileceği teorik bir çalışma vardı. Galileo'dan yaklaşık kırk yıl sonra, 1676 yılında, Robert Hooke bu konuyu ciddi bir şekilde ele aldı ve bugün onun adı ile anılan esneklik yasasını ortaya koydu [24].

Hooke yasasına göre, izotropik bir tele tek eksenli bir σ germe zoru uygulanırsa, tel doğrultusunda boyuna ϵ zorlanması meydana gelir. Bu iki nicelik birbirlerine,

$$\epsilon = S \sigma \quad \text{veya} \quad \sigma = C \epsilon \quad 3.1$$

eşitlikleri ile bağlıdır. Burada S ve C sabitlerdir. C ye Amerikalı yazarlar sertlik (stiffness) sabiti, İngiliz yazarlar ise Young Modülü veya sadece modül demektedirler. S ye Amerikalı yazarlar yumuşaklık (Compliance) sabiti, İngiliz yazarlar ise sadece sabit demektedirler [24]. (3.1) eşitliklerinden,

$$C = \frac{1}{S}$$

olduğu görülür. Bu da, sertlik ve yumuşaklık deyimleri arasındaki zıtlığı açıkça göstermektedir.

Küçük zorlanmalar için kristallerde zor ile zorlanma arasındaki bağımlılığın lineer oluşu, basit bir tartışma ile açıklanabilir. Bir kristaldeki atomik birimleri bir arada tutan bağ kuvvetleri; iyonik, metalik, kovalent veya van der Waals türündendir. Bu bağ kuvvetlerinin hepsi, atomlar veya iyonlar arasındaki uzun mesafeli elektrostatik çekim kuvvetlerinden oluşurlar. Kristallerdeki elektron bulutların üst üste gelmesi ise kısa mesafeli itici kuvvetler tarafından engellenir. İki atomun merkezleri arasındaki doğal bir r_0 uzaklığı için, bu kuvvetler birbirlerini dengeler ve net kuvvet sıfır olur [24].

Net kuvvet, potansiyel enerjinin negatif gradyenti olduğundan, zor etkisi olmadığı zaman, atomlar arası $r=r_0$ uzaklığında minimum olan bir $V(r)$ potansiyel enerji fonksiyonu bulunmalıdır.

Şimdi bir boyutlu kristale r eksenine doğrultusunda bir F kuvvetinin uygulandığını ve bu kuvvetin etkisi altında atomlar arası uzaklığın $u=r-r_0$ kadar değiştiğini kabul edelim. Bu durumda, kristalin V potansiyel enerjisi, u ya bağlı olarak değişir. Bu değişimin nasıl olduğunu görebilmek için, $V(r)$ potansiyel enerji fonksiyonu $r=r_0$ noktası civarında Taylor serisine açalım ve bu seride $r-r_0=u$ ifadesini kullanalım. Bu yapıldığında,

$$V(r) = V(r_0) + u \left(\frac{dV(r)}{dr} \right)_{r=r_0} + \frac{u^2}{2!} \left(\frac{d^2V(r)}{dr^2} \right)_{r=r_0} + \dots \quad 3.2$$

ifadesi elde edilir [25]. Burada, $\left(\frac{dV(r)}{dr} \right)_{r=r_0}$ terimi $V(r)$ potansiyel enerji eğrisinin $r=r_0$ daki teğetinin eğimi olduğundan sıfırdır. Yine, küçük yer değiştirmeler için (3.2) serisindeki u^2 den daha büyük dereceli terimler ihmal edilebilir. Böylece (3.2) eşitliğinden,

$$V(r) = V(r_0) + \frac{u^2}{2} \left(\frac{d^2V(r)}{dr^2} \right)_{r=r_0}$$

bulunur. Bu da,

$$F = -\frac{dV(r)}{dr} = -\left(\frac{d^2V(r)}{dr^2} \right)_{r=r_0} u \quad 3.3$$

ifadesini verir. Bu ifadeye göre, uygulanan F kuvvetinin, meydana gelen u değişimi ile doğru orantılı olduğu görülür. Bu ise, Hooke yasasıdır.

Hooke yasasının doğal bir genelleştirilmesi olarak, üst üste binme prensibinin kullanılabilmesi ve ortamın her noktasındaki ϵ_{ij} zorlanma bileşenlerinin σ_{ij} zor bileşenlerine lineer olarak bağlanabileceği kabul edilir. Böyle bir genelleştirme, ilk olarak 1829 yılında Cauchy tarafından yapılmıştır [24].

3.1.2. Genelleştirilmiş Hooke Yasası

Esnek ortam sabit sıcaklıkta tutulduğunda; σ_{ij} ile ϵ_{ij} tensörleri arasında bire bir

$$\sigma_{ij} = F_{ij} (\epsilon_{11}, \epsilon_{22}, \dots, \epsilon_{12}), (i,j=1,2,3) \quad 3.4$$

analitik fonksiyonunun var olduğunu ve ϵ_{ij} zorlanma bileşenlerinin hepsi sıfır olduğunda, σ_{ij} nin de sıfır olduğunu kabul edelim. Son kabul, başlangıçta zorlanmamış durumdaki cismin içinde zorun da olmadığını sağlama bağlar. (3.4) eşitliğindeki F_{ij} fonksiyonu, bir boyutlu hal için (3.2) ve (3.3) eşitliklerinde yapıldığı gibi, ϵ_{ij} ler cinsinden Taylor serisine açılır ve sadece lineer terimler alıkonursa,

$$\sigma_{ij} = C_{ijmn} \epsilon_{mn}, (i, j, m, n = 1,2,3) \quad 3.5$$

elde edilir [24]. Yine,

$$\epsilon_{ij} = S_{ijmn} \sigma_{mn}, (i, j, m, n = 1,2,3) \quad 3.6$$

olur.(3.5) eşitliğindeki C_{ijmn} sertlik katsayısı ve (3.6) eşitliğindeki S_{ijmn} yumuşaklık katsayısıdır. Bu katsayılar, genel olarak cismin içinde noktadan noktaya değişir. Bu katsayılara esneklik katsayıları da denir. Eğer bu katsayılar cisim içinde sabit ise, o zaman ortamın homojen olduğu söylenir [24].

3.2. Zor – Zorlanma

Temel denge termodinamiklikleri anizotropik zor ve zorlanmaların durumuna genelleştirilebilir. Termodinamik hesaplamalar için, kristalin anizotropik elastik bir ortam olduğu düşünülmelidir. Uygulanan zorlar düzgün ve tanımlanan kristal yüzeyinde sabit olursa zorlanma sonuçları da izotropik, yani kristal içinde düzgün olur. Rastgele uygulanan ilk zordan (rastgele bir ilk konfigürasyondan) yeni son bir konfigürasyondan sonlu bir zorlanma düşünülecek olursa; Kütlelin küçük bir elementinin konumunu ilk konfigürasyonda \vec{X} ile ve son konfigürasyonda da \vec{x} ile gösterilsin.

Homojen zorlanmalar için \vec{x} ve \vec{X} vektörleri

$$x_i = \sum_j \alpha_{ij} X_j \quad 3.7$$

eşitliğine göre lineer bir dönüşümle birbirine bağlıdır. Burada i, j indisleri kartezyen koordinatları gösterir ve x, y, z yada 1, 2, 3 değerlerini alır.

Ters dönüşüm ise

$$X_i = \sum_j \xi_{ij} X_j \quad 3.8$$

olur. Açıkça α ve ξ matrisleri birbirinin tersidir :

$$\sum_j \alpha_{ij} \xi_{jk} = \delta_{ik} \quad 3.9$$

dönüşümünün tanımından

$$\begin{aligned} \alpha_{ij} &= \frac{\partial X_i}{\partial X_j} \\ \xi_{ij} &= \frac{\partial X_i}{\partial x_j} \end{aligned} \quad 3.10$$

yazılabilir. Homojen zorlanmalar için α_{ij} ve ξ_{ij} sabitlerdir yani kristaldeki yerleşimden bağımsızdır.

\bar{X} den \bar{x} 'e zorlanmada yer değiştirme \vec{u} ise

$$u_i = x_i - X_i \quad 3.11$$

ile tanımlanır. Yer değiştirme gradyenti

$$u_{ij} = \frac{\partial u_i}{\partial X_j} \quad 3.12$$

olup, (3.11)'in X_j 'ye göre diferansiyelidir. (3.12) ile (3.10)'ün karşılaştırılması yer değiştirme gradyentleri ve dönüşüm katsayıları arasındaki bağıntıya götürür :

$$\alpha_{ij} = \delta_{ij} + U_{ij} \quad 3.13$$

U_{ij} homojen zorlanma için sabittir.

\bar{X} den \bar{x} e zorlanmanın diğer ölçümü kristaldeki kütlelerin her iki elementi arasındaki mesafenin değişimidir.

(3.7) ve (3.13) den

$$\sum_i x_i^2 = \sum_{ijk} \alpha_{iy} \alpha_{ik} X_j X_k = \sum_i X_i^2 + 2 \sum_{ij} \eta_{ij} X_i X_j \quad 3.14$$

olur, burada η_{ij} Lagrangian Zorlanma parametreleri olup

$$\eta_{ij} = \frac{1}{2} (u_{ij} + u_{ji} + \sum_k u_{ki} u_{kj}) \quad 3.15$$

dir. (3.14) deki \vec{x} 'nin uzunluğunu hesaplamada koordinatların merkezi rastgele olduğu için, sonuç ilk konfigürasyonda $\Delta\vec{X}$ nün ve son konfigürasyonda $\Delta\vec{x}$ nün terimlerinde yorumlanabilir ve kristaldeki kütlenin iki elementi arasında

$$|\Delta\vec{x}|^2 - |\Delta\vec{X}|^2 = 2 \sum_{ij} \eta_{ij} \Delta X_i \Delta X_j \quad 3.16$$

bağıntısı yazılabilir. η_{ij} nin simetrik olduğu yeri $\eta_{ij} = \eta_{ji}$ olduğu (3.15)'dan görülür ve (3.13) nin eklenmesi ile

$$\eta_{ij} = \frac{1}{2} \left(\sum_k \alpha_{ki} \alpha_{kj} - \delta_{ij} \right) \quad 3.17$$

olur. Kristalin son konfigürasyonu ilk konfigürasyon veya α_{ij} dönüşüm katsayıları yada U_{ij} yer değiştirme gradyentleri terimlerinde tayin edilebilir. Lagrangian zorlanmaları (η_{ij}) kristal dönmeleri hakkında bilgi içermediği için tam bir tanım vermez [24].

3.3. Zorlar ve Elastik Sabitler

Uygulanan zorlar tekrar τ_{ij} tensörü ile gösterilsin. Birinci ve ikinci termodinamik kanunlarının bileşmesinden $dU = TdS - dW$ bulunur. Bu bağıntıyı incelemek için konfigürasyonun \vec{X} den $\vec{X} + \Delta\vec{X}$ 'e değişiminde uygulamak, zorlara karşı kristal tarafından yapılan dW işinin hesaplanması gerekmektedir. Basınç-hacim durumunda $dW = P.dV$ 'dir.

\vec{X} konfigürasyonunda kristal yüzeyi \vec{S} ve yüzey elementi $d\vec{S}$ olsun. Uygulanan zor nedeniyle $d\vec{S}$ deki kuvvetin i bileşeni

$$f_i = \sum_j \tau_{ij} dS_j \quad 3.18$$

dir. $\Delta \vec{X}$ zorlanmasına karşı yer değiştirme gradyentleri ΔU_{ij} olsun. \vec{S} yönünde $d\vec{S}$ nin yer değiştirmesi

$$\Delta X_i = \sum_k \Delta u_{ik} X_k \quad 3.19$$

olur. $d\vec{S}$ ye uygulanan zora karşı kristal tarafından yapılan iş

$$-\sum_i f_i \Delta X_i = -\sum_{ijk} \tau_{ij} dS_j \Delta U_{ik} X_k \quad 3.20$$

olur. Kristal tarafından yapılan iş ise \vec{S} yüzeyi üzerinden bu ifadenin integralidir. Bu yüzey integrali Gauss teoremi ile bir hacim integraline dönüştürülerek incelenebilir :

$$\Delta W = -\int_S \sum_{ijk} \tau_{ij} \Delta U_{ik} X_k dS_j = -\int_V \tau_{ij} \Delta U_{ij} dV = -\sum_{ij} \tau_{ij} \Delta U_{ij} V(\vec{X}) \quad 3.21$$

τ_{ij} ve ΔU_{ij} sabitlerdir. τ_{ij} ve ΔU_{ij} nin asimetrik kısmı (3.21) deki \sum_{ij} ye katkıda bulunmadığı için ΔU_{ij} (3.15)'a göre $\Delta \eta_{ij}$ ile yer değiştirebilir. Bu durumda (3.21) diferansiyel şekilde yazılabilir;

$$dW = -V \sum_{ij} \tau_{ij} d\eta_{ij} \quad 3.22$$

Böylece Zor-Zorlanma değişkenleri için birinci ve ikinci termodinamik kanunlarının bileşimi

$$dU = Tds + V \sum_{ij} \tau_{ij} d\eta_{ij} \quad 3.23$$

olur.

$F=U-TS$ olup F 'nin diferansiyeli

$$dF = -SdT + V \sum_{ij} \tau_{ij} d\eta_{ij} \quad 3.24$$

olur. Bu durumda U , konfigürasyon (\vec{x}) ve entropi (S) nin F ise konfigürasyon ve sıcaklığın bir fonksiyonu olarak düşünülebilir.

$$\begin{aligned} U &= U(\vec{x}, S) \\ F &= F(\vec{x}, T) \end{aligned} \quad 3.25$$

Eğer uygulanan zorlar sistemi ve kristali birlikte ötelirse U ve F hal fonksiyonlarının değişmediği hatırlatılmalıdır. Bu durumda fonksiyonel bağımlılıklar

$$\begin{aligned} U(\vec{x}, S) &= U(\vec{X}, \eta_{ij}, S) \\ F(\vec{x}, T) &= F(\vec{X}, \eta_{ij}, T) \end{aligned} \quad 3.26$$

yazılabilir, burada η_{ij} terimi \vec{X} den \vec{x} e Lagrangian zorlanma parametreleridir. Bağımlı değişkenler için ifadeler ; (3.23)'den

$$\tau_{ij} = V^{-1} \left(\frac{\partial U}{\partial \eta_{ij}} \right)_{S\eta} \quad 3.27$$

$$T = \left(\frac{\partial U}{\partial S} \right)_{\eta} \quad 3.28$$

ve (3.24)'den

$$\tau_{ij} = V^{-1} \left(\frac{\partial F}{\partial \eta_{ij}} \right)_{T\eta} \quad 3.29$$

$$S = - \left(\frac{\partial F}{\partial T} \right)_{\eta} \quad 3.30$$

η ' gösterimi bütün diğer η_{kl} 'ların η_{ij} 'ye göre diferansiyelde sabit tutulduğu anlamındadır ve η gösterimi ise bütün η_{ij} 'lerin sabit tutulduğu anlamındadır. Zorlar için eşitlikler \vec{X} ilk konfigürasyonunda yani $\eta_{ij}=0$ da incelenecektir. Yani zorlanma ile zorların değişimi hesaplamak için biri (3.27) yada (3.29) den $e_{ij}(\vec{X} + \Delta\vec{X}) - \tau_{ij}(\vec{X})$ farkını hesaplamalıdır. Daha genel bir tanım ise rastgele bir son konfigürasyonda (\vec{X}) incelenen zorlara götürür :

$$\tau_{ij}(\vec{X}) = V(\vec{x})^{-1} \sum_{kl} \alpha_{ik} \alpha_{jl} \left(\frac{\partial U}{\partial \eta_{kl}} \right)_{S\eta} \quad 3.31$$

$$V(\bar{\mathbf{X}})^{-1} \sum_{\text{kL}} \alpha_{\text{ik}} \alpha_{\text{jL}} \left(\frac{\partial F}{\partial \eta_{\text{kL}}} \right)_{\text{T}\eta'} \quad 3.32$$

burada $\bar{\mathbf{X}}$ den $\bar{\mathbf{x}}$ e zorlanmalar α_{ij} ve η_{ij} ile ölçülür. Sağ taraftaki fonksiyonlar ise $\bar{\mathbf{x}}$ de incelenir. S ve T için sabit hacim altında sabit bir konfigürasyonda yer değiştirmeler incelenebilmektedir. Eğer zorlar bir izotropik basınç ise örneğin $\tau_{ij} = P\delta_{ij}$ olabilir. Böylece (3.27) ve (3.32) eşitlikleri denge şartları olarak düşünülebilir. Çünkü bu eşitlikler dengedeki kristale etkiyen anizotropik kuvvetleri belirler.

İkinci, üçüncü ve daha yüksek mertebeli elastik sabitler, hal fonksiyonlarının ikinci, üçüncü ve daha yüksek mertebeli zorlanma türevleri olarak tanımlanır. İkinci, üçüncü ve dördüncü mertebeden adyabatik elastik sabitler [24];

$$C_{\text{ijkL}}^{\text{S}} = V^{-1} \left(\frac{\partial^2 U}{\partial \eta_{ij} \partial \eta_{\text{kL}}} \right)_{\text{S}\eta'} \quad 3.33$$

$$C_{\text{ijkLmn}}^{\text{S}} = V^{-1} \left(\frac{\partial^3 U}{\partial \eta_{ij} \partial \eta_{\text{kL}} \partial \eta_{mn}} \right)_{\text{S}\eta'} \quad 3.34$$

$$C_{\text{ijkLmnpq}}^{\text{S}} = V^{-1} \left(\frac{\partial^4 U}{\partial \eta_{ij} \partial \eta_{\text{kL}} \partial \eta_{mn} \partial \eta_{pq}} \right)_{\text{S}\eta'} \quad 3.35$$

ve izotermal elastik sabitler ise

$$C_{\text{ijkL}}^{\text{T}} = V^{-1} \left(\frac{\partial^2 F}{\partial \eta_{ij} \partial \eta_{\text{kL}}} \right)_{\text{T}\eta'} \quad 3.36$$

$$C_{\text{ijkLmn}}^{\text{T}} = V^{-1} \left(\frac{\partial^3 F}{\partial \eta_{ij} \partial \eta_{\text{kL}} \partial \eta_{mn}} \right)_{\text{T}\eta'} \quad 3.37$$

$$C_{\text{ijkLmnpq}}^{\text{T}} = V^{-1} \left(\frac{\partial^4 F}{\partial \eta_{ij} \partial \eta_{\text{kL}} \partial \eta_{mn} \partial \eta_{pq}} \right)_{\text{T}\eta'} \quad 3.38$$

elastik sabitler, η_{ij} zorlanmalarının $\bar{\mathbf{X}}$ den ölçüldüğü ve türevlerin $\bar{\mathbf{X}}$ de yeni $\eta_{ij} = 0$ da incelendiği rastgele bir $\bar{\mathbf{X}}$ konfigürasyonunda tanımlanır.

(3.26)'ye göre U ve F, η_{ij} zorlanmalarının güçlerinde genişletilebilir :

$$U(\bar{X}, \eta_{ij}, S) = U(\bar{X}, S) + V \sum_{ij} \tau_{ij} \eta_{ij} + \frac{1}{2} V \sum_{ijkl} C_{ijkl}^S \eta_{ij} \eta_{kl} + \dots \quad 3.39$$

$$F(\bar{X}, \eta_{ij}, T) = F(\bar{X}, T) + V \sum_{ij} \tau_{ij} \eta_{ij} + \frac{1}{2} V \sum_{ijkl} C_{ijkl}^T \eta_{ij} \eta_{kl} + \dots \quad 3.40$$

η_{ij} zorlanmaları simetrik olduğu için elastik sabitler tam bir Voigt simetrisine sahiptir. Voigt simetri, elastik sabitlerin i ve j indislerinin iç değişimi altında sabit olduğu anlamındadır. Ayrıca elastik sabitler ij ve kl çiftlerinin değişimi altında da sabittir. Örneğin, ya adyabatik yada izotermal sabitler [24],

$$C_{ijkl} = C_{jikl} = C_{klij} = \dots \quad 3.41$$

Böylece ij indis çiftlerinin tek bir α indisi ile yer değiştirdiği Voigt gösterim metoduna göre

$$\tau_i = 11 \quad 22 \quad 33 \quad 32 \quad \text{yada} \quad 23 \quad 31 \quad \text{yada} \quad 13 \quad 21 \quad 12 \quad 3.42$$

$$\alpha = 1 \quad 2 \quad 3 \quad 4 \quad 5 .$$

Voigt notasyonunda, adyabatik yada izotermal elastik sabitler tamamen simetriktir :

$$\begin{aligned} C_{\alpha\beta} &= C_{\beta\alpha} \\ C_{\alpha\beta\gamma} &= C_{\alpha\gamma\beta} = C_{\gamma\alpha\beta} = \dots \\ C_{\alpha\beta\gamma\delta} &= C_{\alpha\delta\beta\gamma} = C_{\beta\alpha\delta\gamma} = \dots \end{aligned} \quad 3.43$$

3.4. İkinci Dereceden Elastik Sabitler

Born-Haug [25] kriterlerinden birisi de kristallerin ikinci dereceden elastik sabitleri üzerindedir. Bir kristal örgünün etkileşme enerjisi C_{ij} elastik sabitlerine bağlı olarak,

$$W = \frac{1}{2} \sum_{ij} C_{ij} S_i S_j$$

ifadesiyle tanımlanır [1]. Burada S_i ve S_j enerjideki artma nedeniyle oluşan küçük zorlardır. Kübik simetriden kristaller için üç bağımsız elastik sabiti (C_{11} , C_{12} , C_{44}) vardır. Ayrıca merkezi etkileşimler için $C_{11}=C_{44}$ Cauchy bağıntısı sağlandığından C_{ij} matrisi

$$[C_{ij}] = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{12} & C_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{12} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{12} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{12} \end{bmatrix}$$

şeklinde yazılır. Bu matrisin açılımından

$$C_{12} > 0, C_{11} > 0 \quad 3.44$$

$$\begin{vmatrix} C_{11} & C_{12} \\ C_{12} & C_{11} \end{vmatrix} > 0, \quad (C_{11}^2 - C_{12}^2) \quad 3.45$$

bağıntıları bulunur. Eşitlik (3.45) şartından,

$$C_{11}/C_{12} > 1 \quad 3.46$$

olması gerektiği bulunabilir. Yukarıdaki (3.44, 3.45, 3.46) eşitlikleri Born kriterleri olarak bilinmektedir. Ayrıca matrisin geri kalan kısmından da

$$\begin{vmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} \\ C_{12} & C_{12} & C_{12} \\ C_{12} & C_{12} & C_{12} \end{vmatrix} > 0, (C_{11} + 2C_{12}) > 0 \quad 3.47$$

şartı bulunur. İkinci derece elastik sabitler, Born Kararlılık ilkesinin kullanılan, potansiyellere bağlı olarak [1, 25].

$$C_{11} = \frac{1}{8} n a_1 \sum_{L_{1,2,3}} L_1^4 \phi_{(r_j^2)}^{11} \cdot q \cdot N_i \quad 3.48$$

$$C_{12} = \frac{1}{8} n a_2 \sum_{L_{1,2,3}} L_1^2 \cdot L_2^2 \phi_{(r_j^2)}^{11} \cdot q N_i \quad 3.49$$

kullanılarak görülür. Buradan L_i , Miller İndisleri ($j=1,2,3$), ϕ potansiyel fonksiyon ve qN 'de alaşım katlarıdır.

3.5. Hacim Modülü

Eğer izotropik olmayan bir madde, p hidrostatik basıncının etkisinde kalırsa; o zaman,

$$\sigma_{k1} = -p\delta_{k1}$$

ve

$$\varepsilon_{ij} = S_{ijk1}\sigma_{k1} = -p\delta_{k1}S_{ijk1} = -pS_{ijkk}$$

olur. Hacim değişimini veren değişim ise,

$$\begin{aligned}\Delta = \varepsilon_{ii} &= -pS_{iikk} & 3.50 \\ &= -p[S_{11} + S_{22} + S_{33} + 2(S_{12} + S_{23} + S_{31})]\end{aligned}$$

dır. Bu ise, yumuşaklık katsayıları matrisinin sol üst köşesindeki 9 elemanın toplamıdır. Kübik kristaller için,

$$\Delta = -3(S_{11} + 2S_{12})p$$

elde edilir. Bu ifade izotropik kristaller için de geçerlidir. Hacim modülü, sıkışma halinde genel olarak

$$B = \frac{P}{-\Delta} = \frac{p}{pS_{iikk}} = \frac{1}{S_{11} + S_{22} + S_{33} + 2(S_{12} + S_{23} + S_{31})}$$

dır. Bu eşitlikten kübik ve izotropik kristaller için,

$$B = \frac{1}{3(S_{11} + 2S_{12})} = \frac{E}{3(1-2\nu)} = \frac{1}{3}(C_{11} + C_{12})$$

bulunur [24].

4. Fe_(1-x)-Al_(x) SİSTEMLERİNDE KARARLILIK HESABI

İkinci derece elastik sabitlere bağlı kararlılık eşitlikleri genelleştirilmiş Morse potansiyel fonksiyonu ve Modifiye Morse potansiyel fonksiyonu kullanılarak hesaplandı. Bu hesaplamalar potansiyel parametresinin m=1.25, m=1.5, m=2.0, m=2.5, m=3.0 değerleri için ayrı ayrı yapıldı. Elde edilen hesaplama sonuçları eklerde detaylı olarak verilmiş olup, hesaplamalardan elde edilen sonuçlar şekiller halinde bu bölümde verildi.

4.1. Değerler Tablosu

Çizelge 4.1. Fe_(1-x)-Al_(x) Sistemleri için genelleştirilmiş Morse, Potansiyel parametrelerinin hesaplanan değerleri [9]

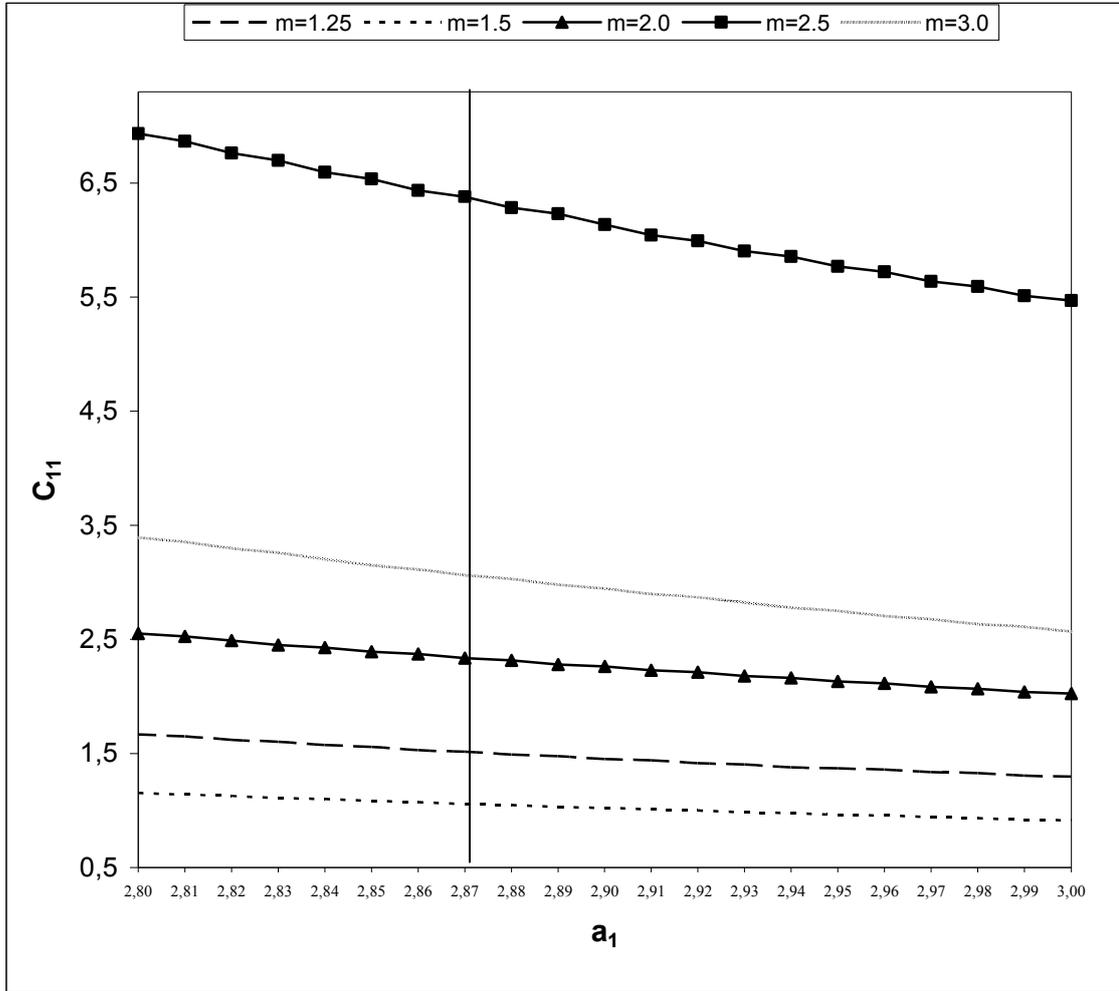
Sistem	m	α (A°) ⁻¹	r ₀ (A°)	Dx10 ⁻¹² (erg)	β
Fe	1.25	2.8641	2.5681	10.4895	1504.71
	1.5	2.0140	2.6592	8.7705	211.77
	2.0	1.3855	2.8475	6.6832	51.95
	2.5	1.0822	3.048	5.2933	27.086
	3.0	1.0022	3.1245	4.5238	22.90
Fe-25%Al	1.25	2.7331	2.6005	9.7742	1222.71
	1.5	1.9196	2.7060	8.0605	180.305
	2.0	1.3268	2.9228	6.0432	46.94
	2.5	1.024	3.1473	4.7232	25.093
	3.0	0.9045	3.3642	2.6875	20.96
Fe-30%Al	1.25	2.6873	2.6057	9.5572	1087,944
	1.5	1.8853	2.7168	7.8343	167.67
	2.0	1.2525	2.9626	5.8105	44.84
	2.5	1.0003	3.1855	4.5213	24.104
	3.0	0.8887	3.3972	2.5714	20.47

Çizelge 4.2. $Fe_{(1-x)}Al_{(x)}$ Sistemleri için Modifiye Morse potansiyel parametrelerinin değerleri [9]

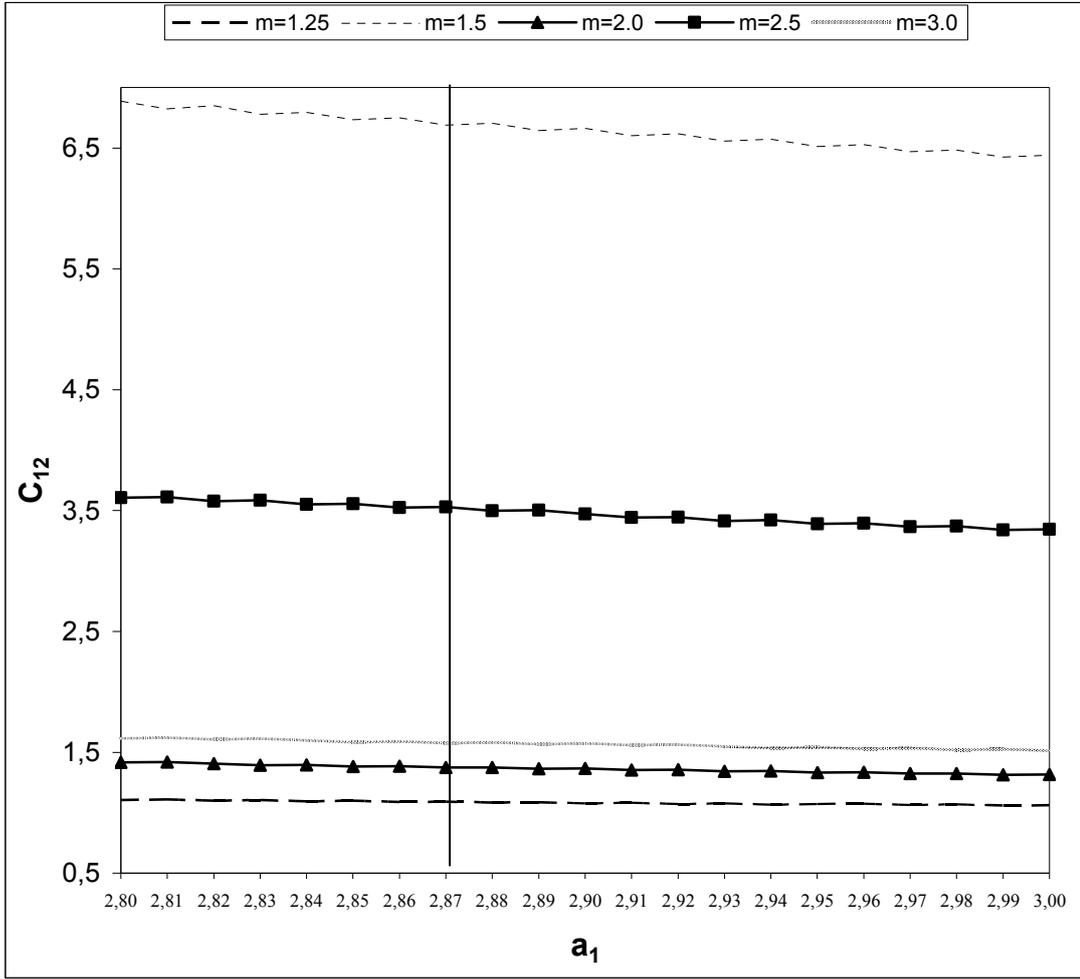
Sistem	m	α (Å°) ⁻¹	r_0 (Å°)	$D \times 10^{-12}$ (erg)	β
Fe	1.25	1.3982	2.97185	2.02315	62.756
	1.5	1.29149	2.9837	1.9706	47.1593
	2.0	1.08885	3.0074	1.8655	26.434
	2.5	0.94574	3.0321	1.7528	17.5838
	3.0	0.83885	3.0542	1.6477	12.961
Fe-25%Al	1.25	1.295066	3.06175	1.87622	52.7188
	1.5	1.20008	3.07577	1.82431	40.1912
	2.0	1.010107	3.102785	1.71985	22.9689
	2.5	0.875675	3.12972	1.6115	15.4962
	3.0	0.77606	3.15231	1.5121	11.5512
Fe-30%Al	1.25	1.28192	3.11392	1.8233	54.153
	1.5	1.15705	3.12503	1.78366	37.188
	2.0	0.92216	3.15366	1.67823	21.453
	2.5	0.84216	3.18163	1.5705	14.576
	3.0	0.74615	3.2048	1.47285	10.9282

4.2. Fe'de Kararlılık Hesabı

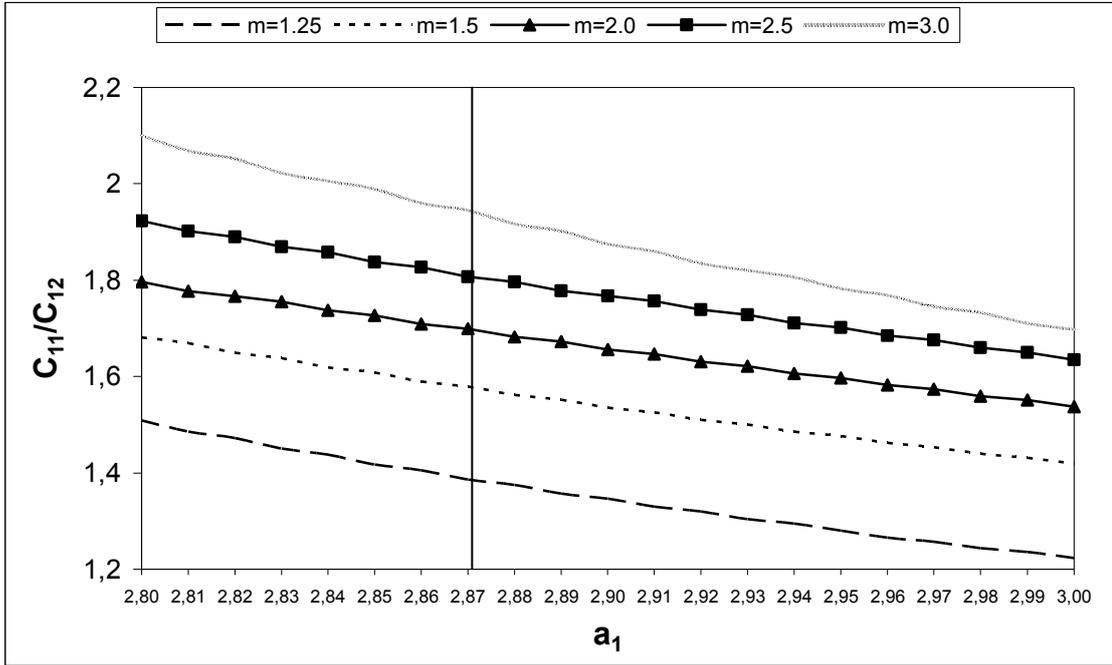
4.2.1. Genelleştirilmiş Morse Potansiyeli Kullanılarak Elde Edilen Sonuçlar



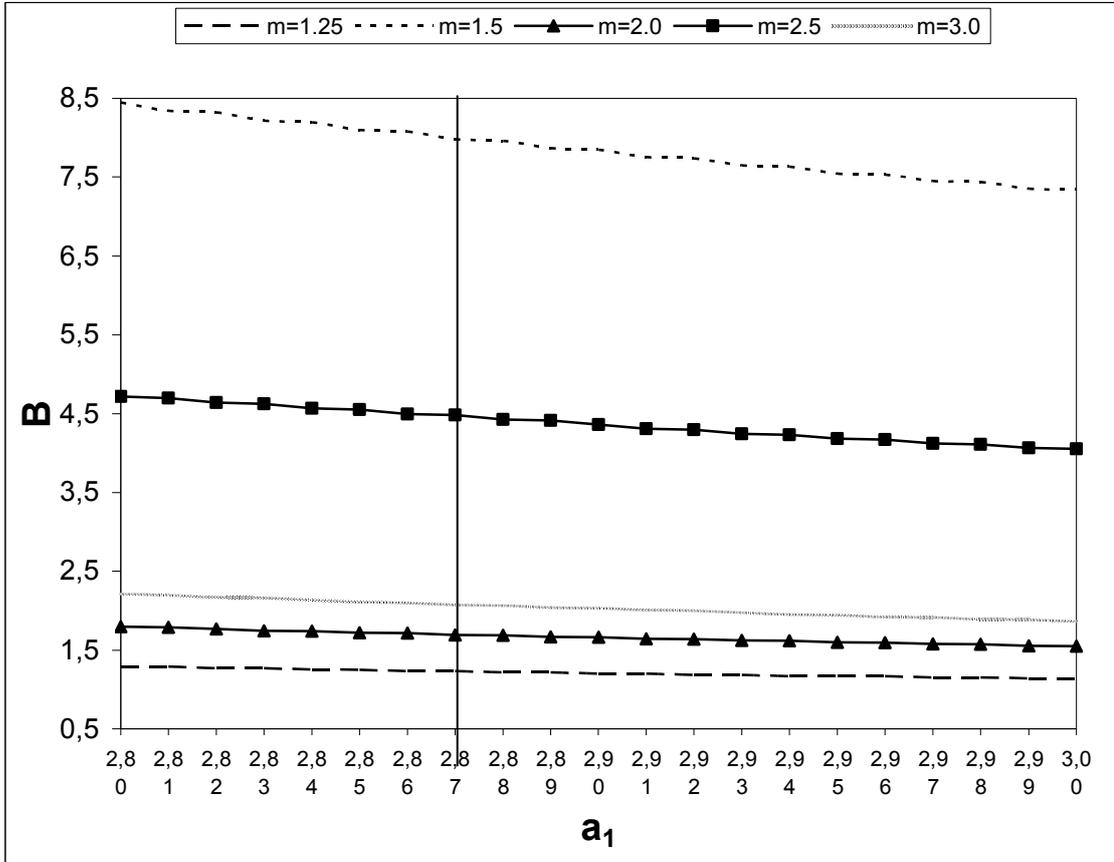
Şekil 4.1. Fe için Genelleştirilmiş Morse Potansiyel fonksiyonu kullanılarak $m=1.25$, $m=1.5$, $m=2.0$, $m=2.5$, $m=3.0$ için hesaplanan C_{11} (erg/cm²)- a_1 (A°) eğrileri.



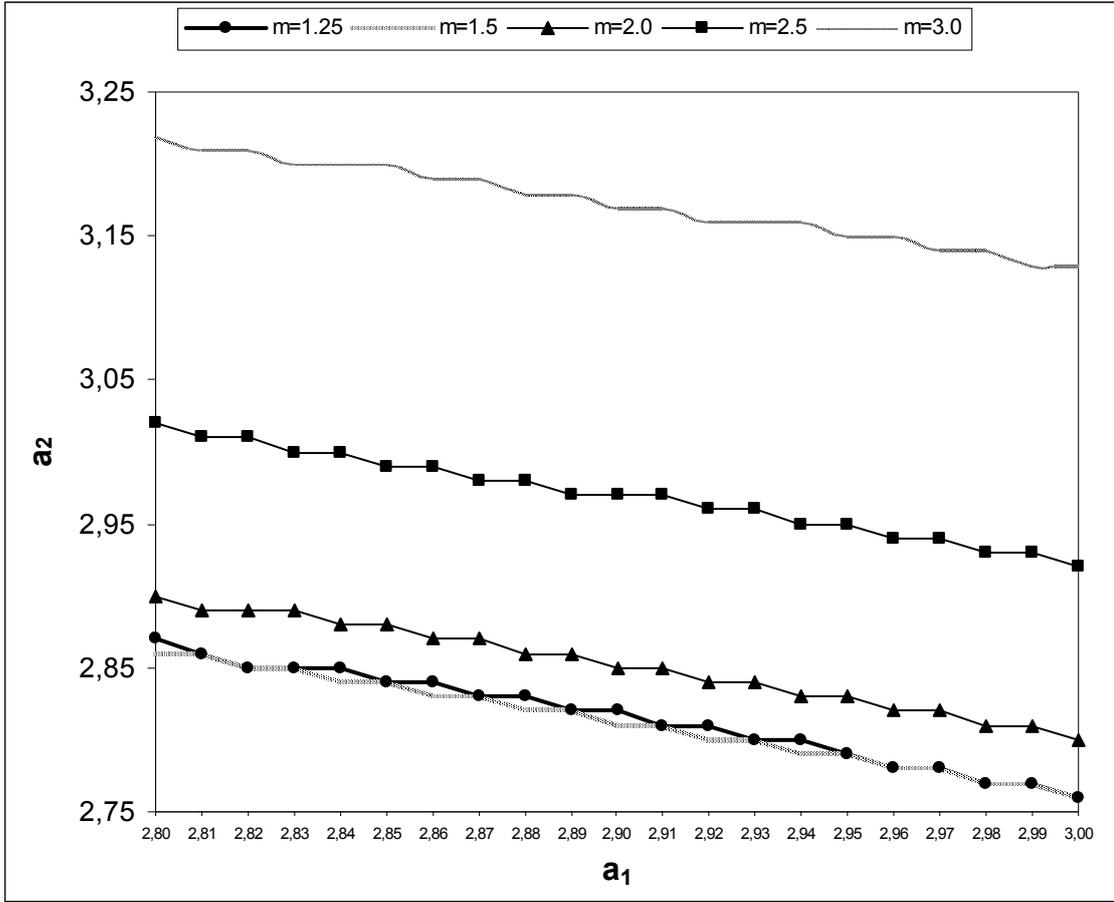
Şekil 4.2. Fe için Genelleştirilmiş Morse Potansiyel fonksiyonu kullanılarak $m=1.25$, $m=1.5$, $m=2.0$, $m=2.5$, $m=3.0$ için hesaplanan C_{12} (erg/cm²)- a_1 (A°) eğrileri.



Şekil 4.3. Fe için Genelleştirilmiş Morse Potansiyel fonksiyonu kullanılarak $m=1.25$, $m=1.5$, $m=2.0$, $m=2.5$, $m=3.0$ için hesaplanan $C_{11}/C_{12}-a_1(A^\circ)$ eğrileri.

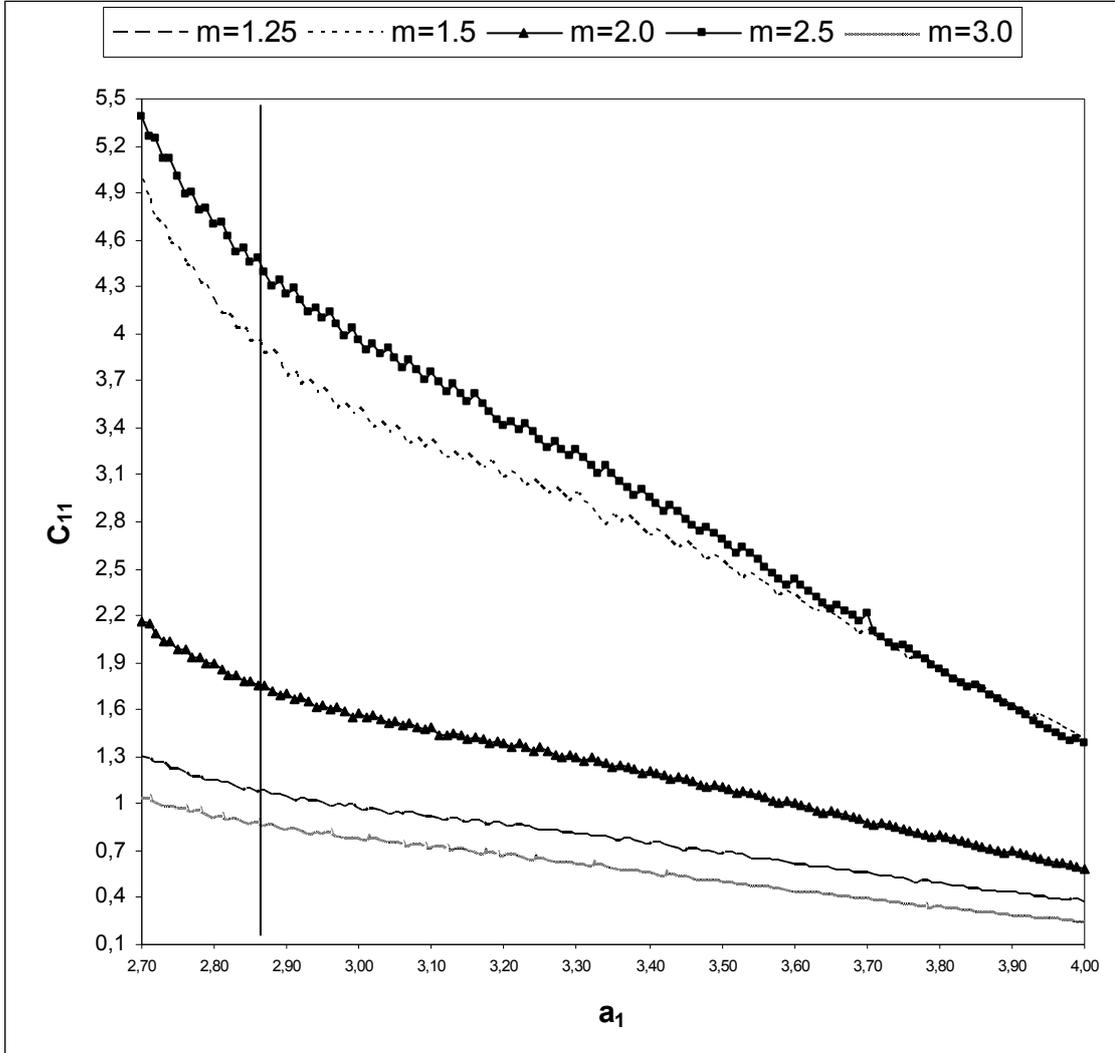


Şekil 4.4. Fe için Genelleştirilmiş Morse Potansiyel fonksiyonu kullanılarak $m=1.25$, $m=1.5$, $m=2.0$, $m=2.5$, $m=3.0$ için hesaplanan Hacim- $a_1(A^\circ)$ eğrileri.

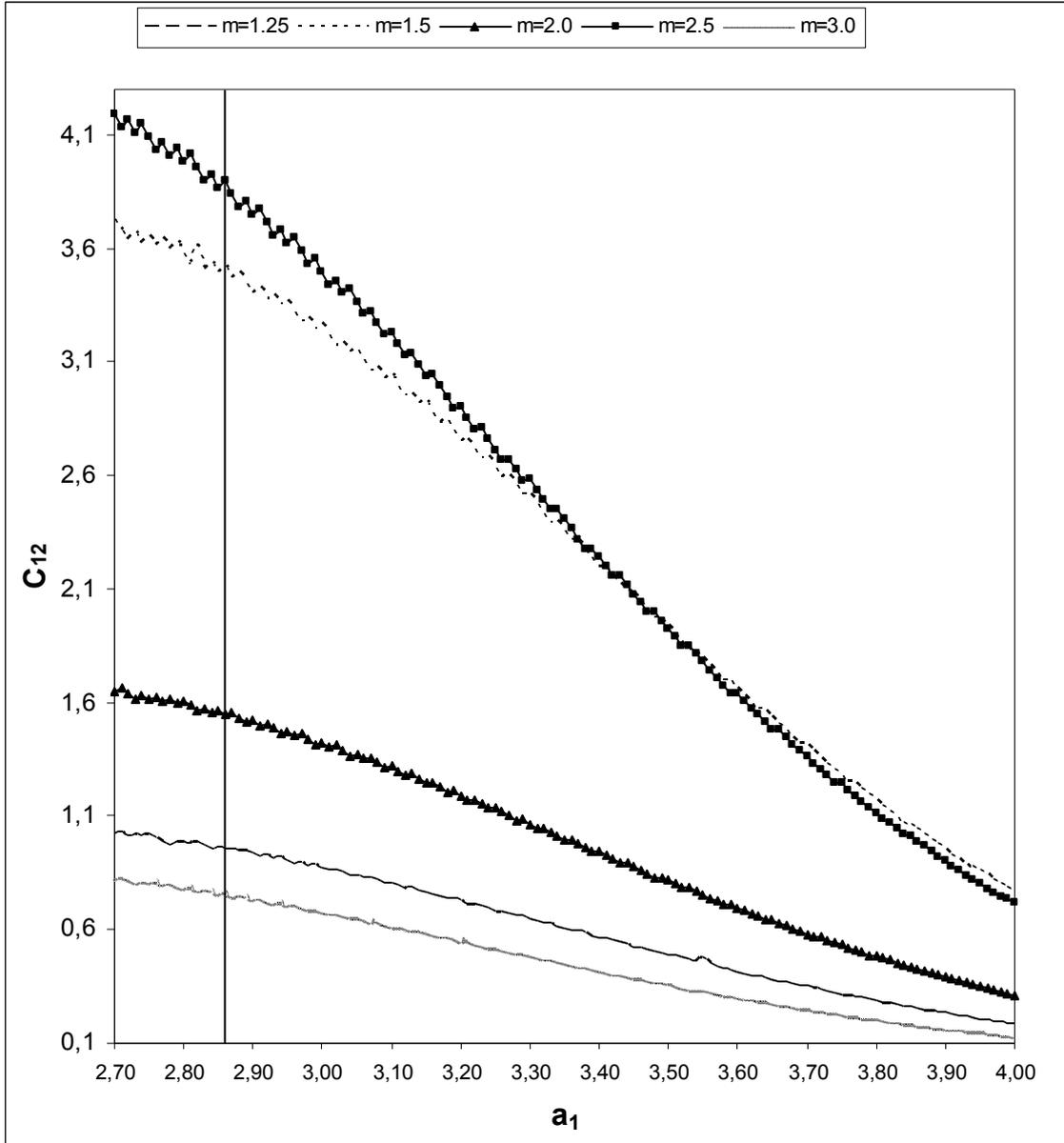


Şekil 4.5. Fe için Genelleştirilmiş Morse Potansiyel fonksiyonu kullanılarak $m=1.25$, $m=1.5$, $m=2.0$, $m=2.5$, $m=3.0$ için hesaplanan a_1 (erg/cm²)- a_2 (A°) eğrileri.

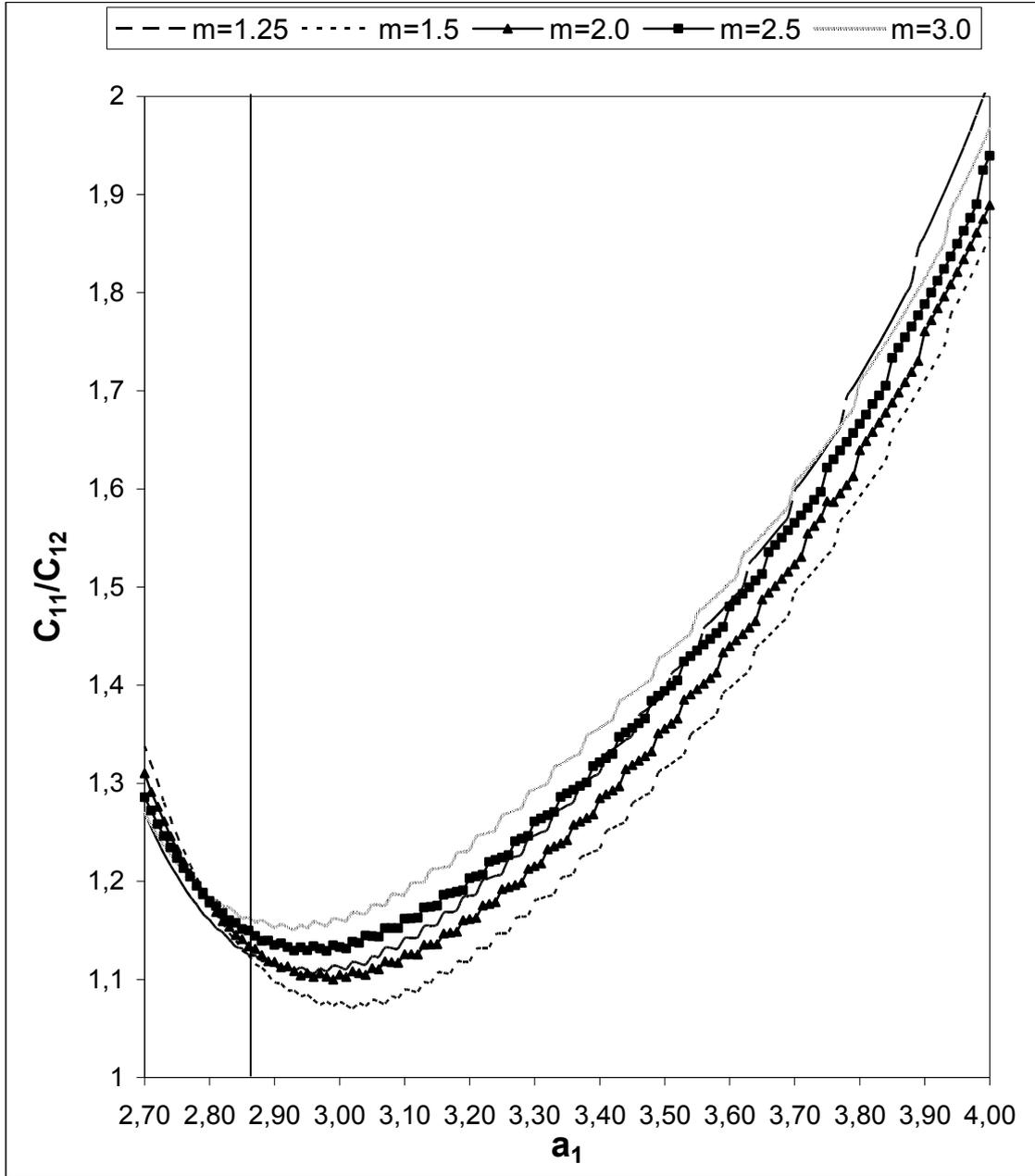
4.2.2. Modifiye Morse Potansiyeli Kullanılarak Elde Edilen Sonular



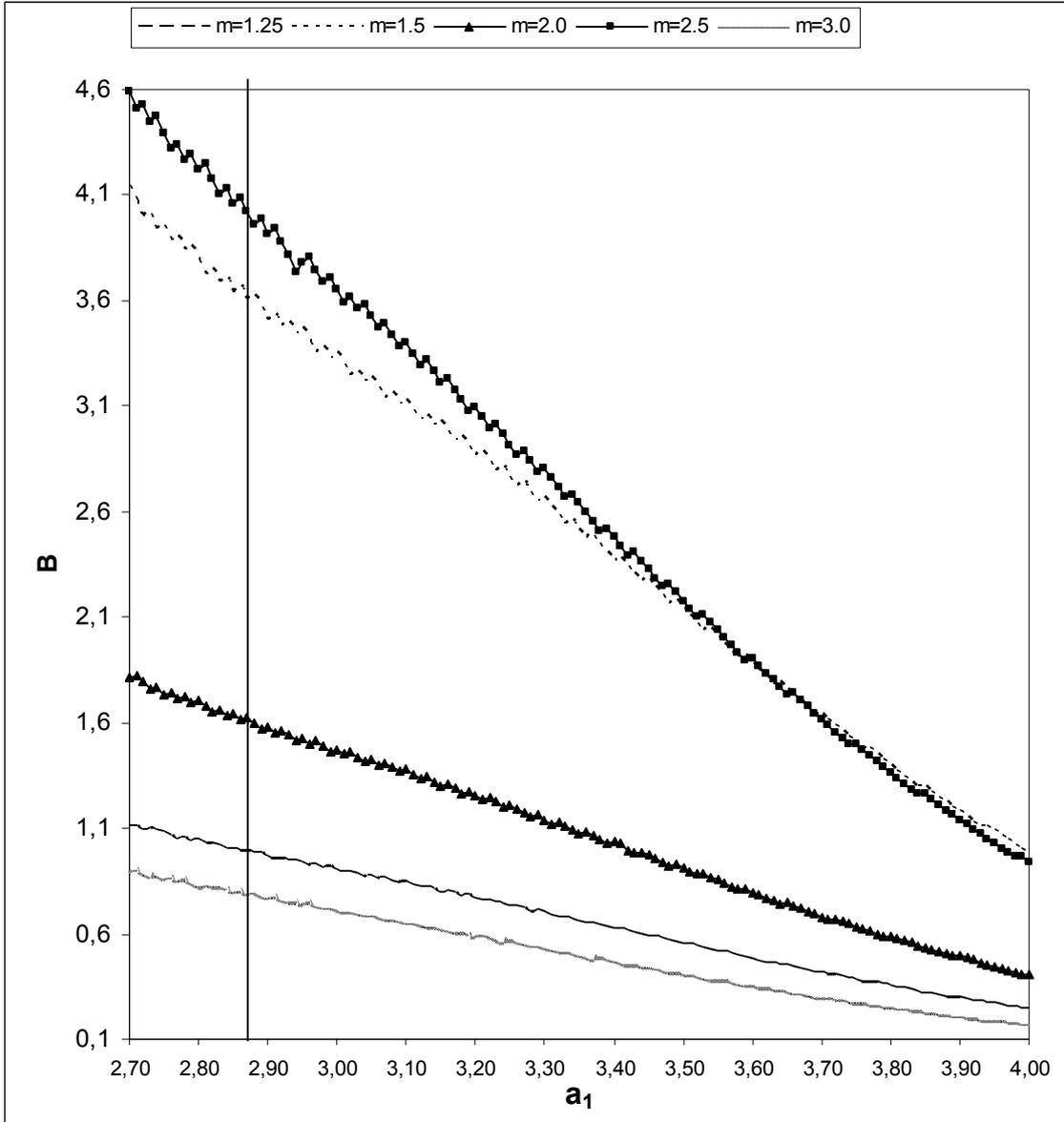
Şekil 4.6. Fe için Modifiye Morse Potansiyel fonksiyonu kullanılarak $m=1.25$, $m=1.5$, $m=2.0$, $m=2.5$, $m=3.0$ için hesaplanan C_{11} (erg/cm²)- a_1 (A°) eğrileri.



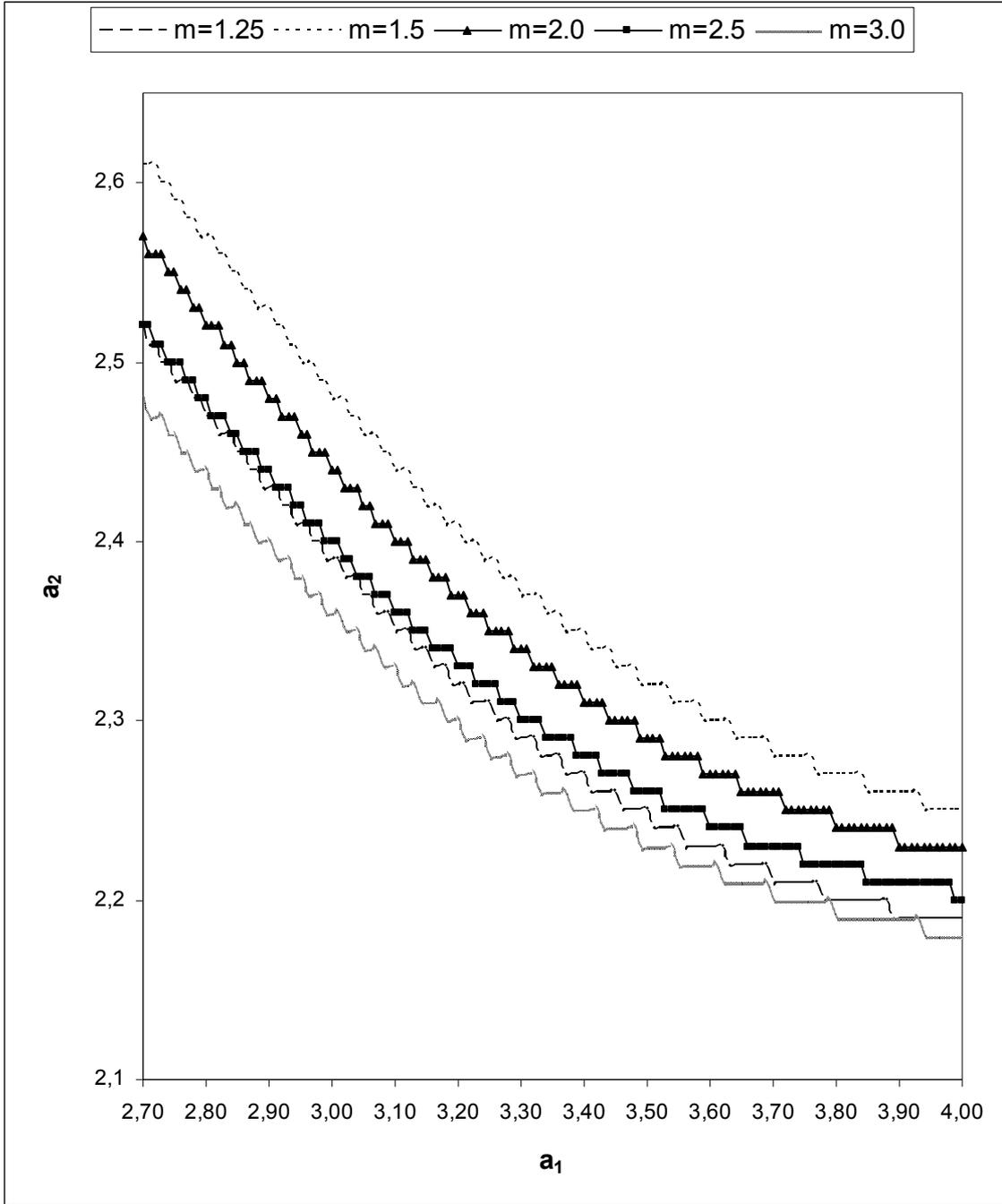
Şekil 4.7. Fe için Modifiye Morse Potansiyel fonksiyonu kullanılarak $m=1.25$, $m=1.5$, $m=2.0$, $m=2.5$, $m=3.0$ için hesaplanan C_{12} (erg/cm²)- a_1 (A°) eğrileri.



Şekil 4.8. Fe için Modifiye Morse Potansiyel fonksiyonu kullanılarak $m=1.25$, $m=1.5$, $m=2.0$, $m=2.5$, $m=3.0$ için hesaplanan $C_{11}/C_{12} - a_1$ (Å°) eğrileri.



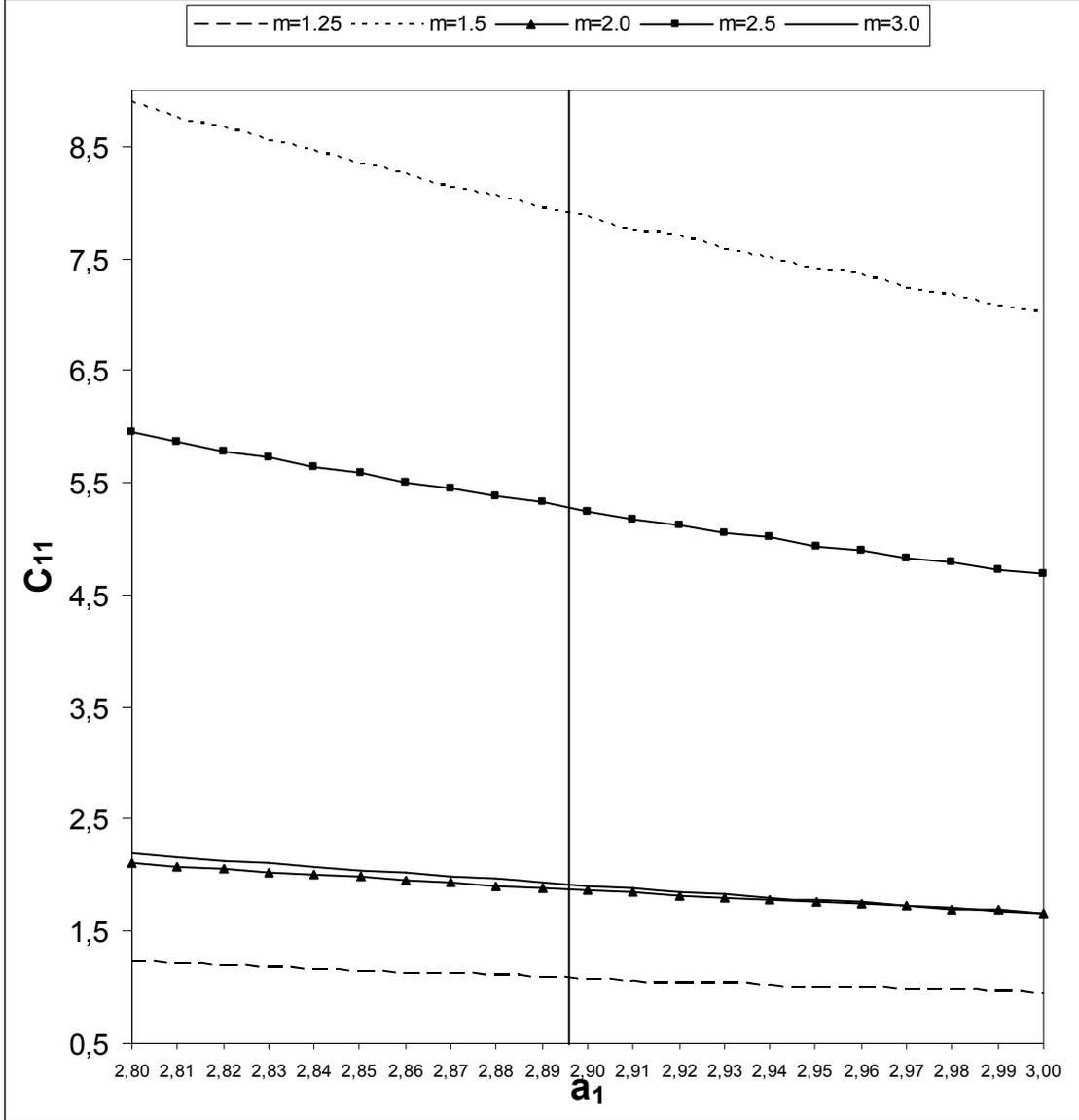
Şekil 4.9. Fe için Modifiye Morse Potansiyel fonksiyonu kullanılarak $m=1.25$, $m=1.5$, $m=2.0$, $m=2.5$, $m=3.0$ için hesaplanan Hacim - a_1 (Å^3) eğrileri.



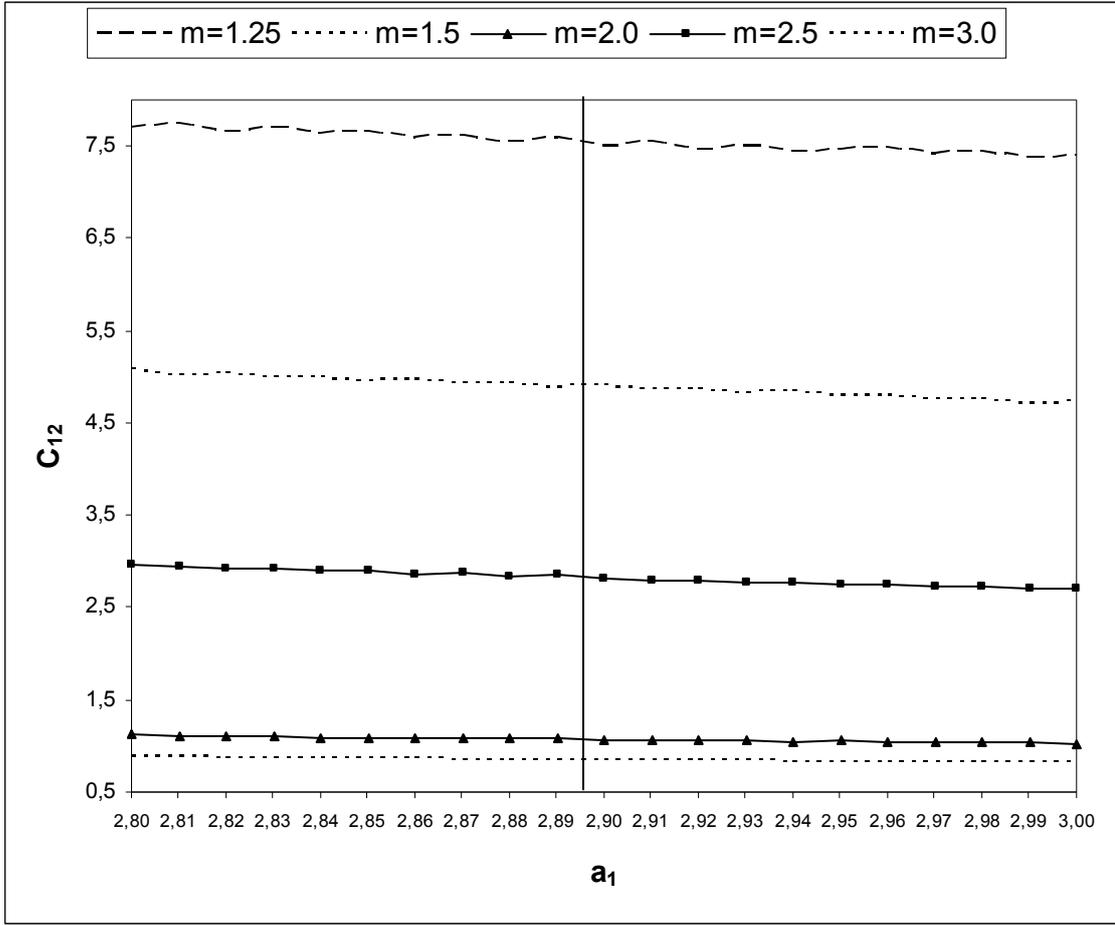
Şekil 4.10. Fe için Modifiye Morse Potansiyel fonksiyonu kullanılarak $m=1.25$, $m=1.5$, $m=2.0$, $m=2.5$, $m=3.0$ için hesaplanan a_1 (Å°)- a_2 (Å°) eğrileri.

4.3. Fe-25%Al Alaşımı İçin Kararlılık Hesabı

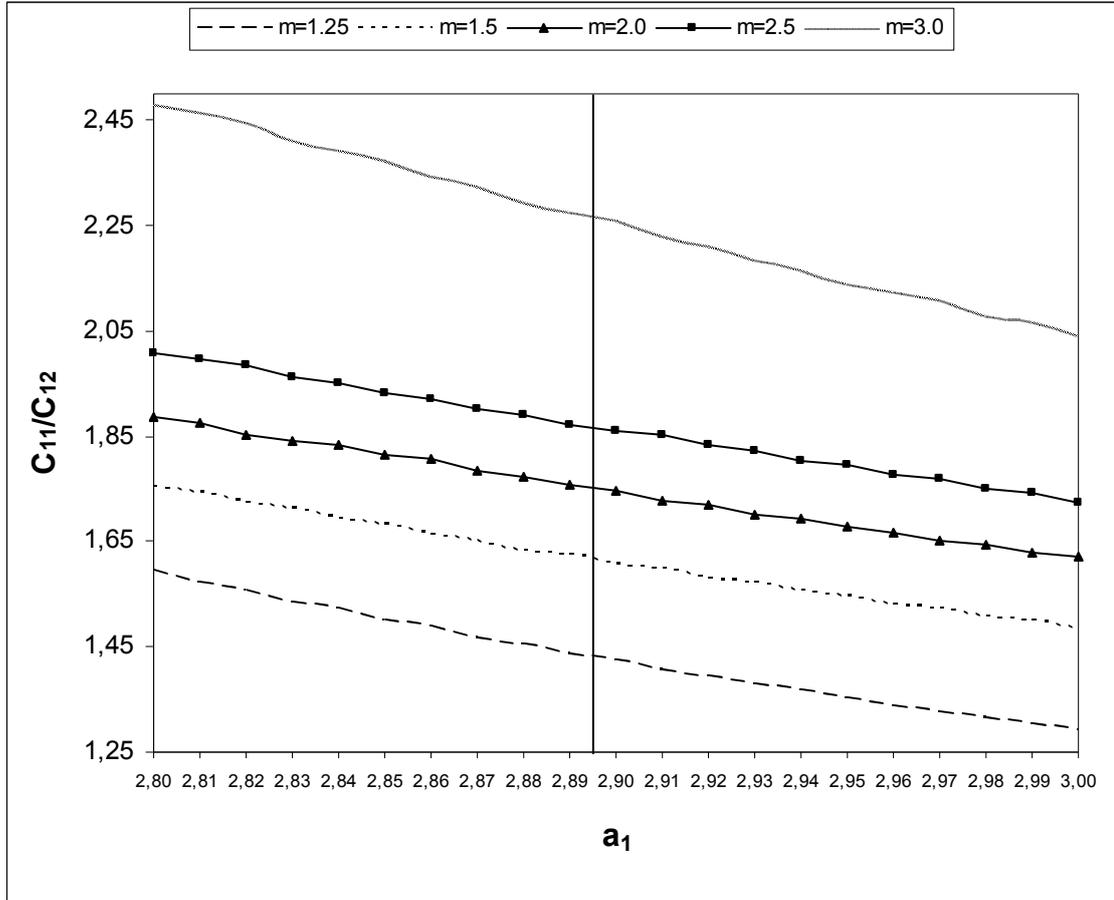
4.3.1. Genelleştirilmiş Morse Potansiyeli Kullanılarak Elde Edilen Sonuçlar



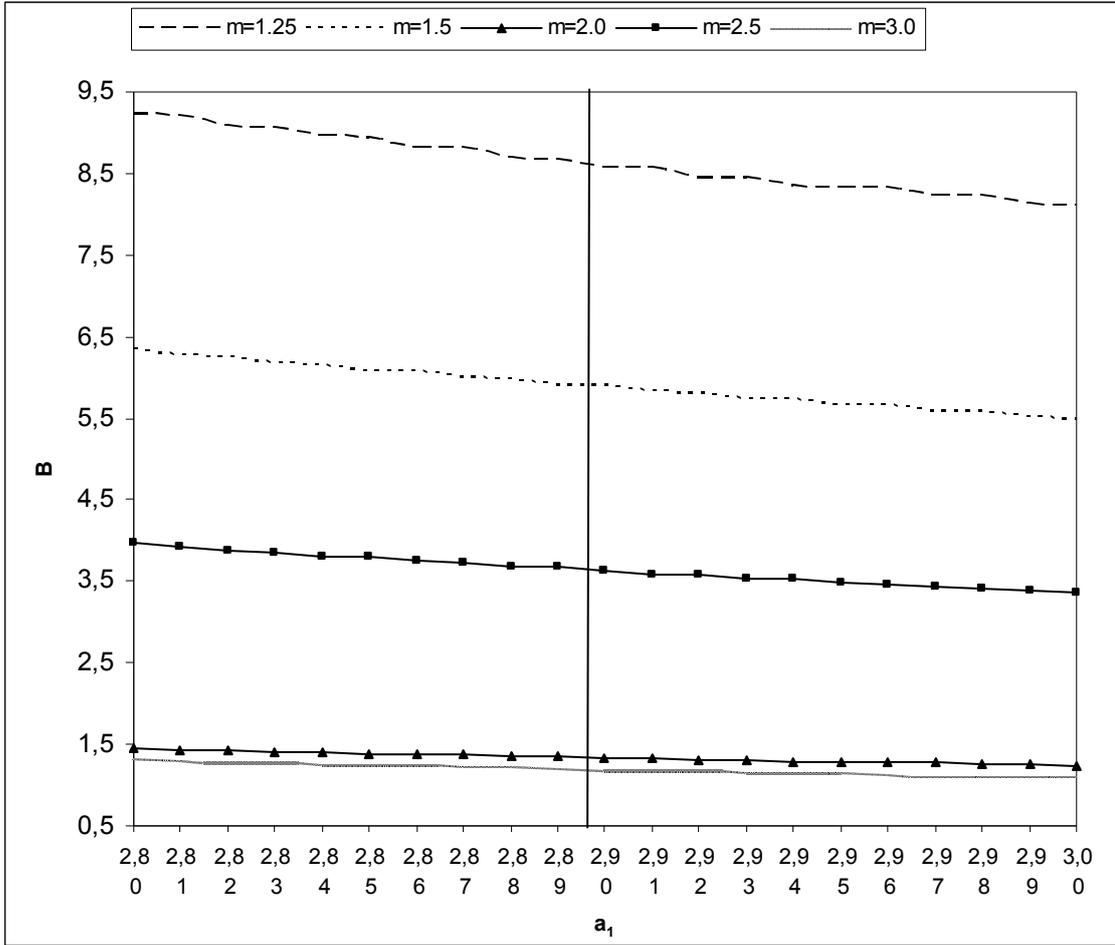
Şekil 4.11. Fe-25%Al için Genelleştirilmiş Morse Potansiyel fonksiyonu kullanılarak $m=1.25$, $m=1.5$, $m=2.0$, $m=2.5$, $m=3.0$ için hesaplanan $C_{11}(\text{erg/cm}^2)$ - a_1 (A°) eğrileri.



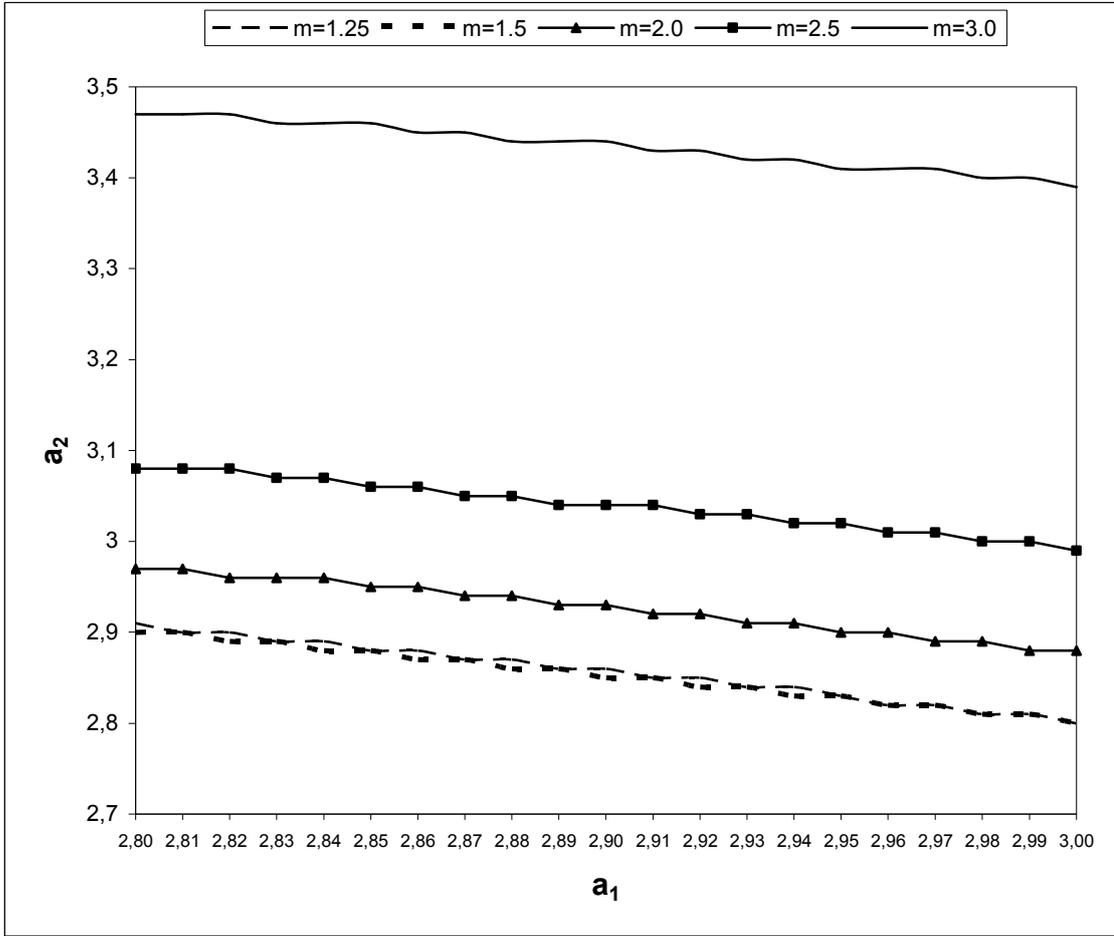
Şekil 4.12. Fe-25%Al için Genelleştirilmiş Morse Potansiyel fonksiyonu kullanılarak $m=1.25$, $m=1.5$, $m=2.0$, $m=2.5$, $m=3.0$ için hesaplanan $C_{12}(\text{erg/cm}^2)$ - a_1 (Å^0) eğrileri.



Şekil 4.13. Fe-25%Al için Genelleştirilmiş Morse Potansiyel fonksiyonu kullanılarak $m=1.25$, $m=1.5$, $m=2.0$, $m=2.5$, $m=3.0$ için hesaplanan $C_{11}/C_{12}-a_1$ (Å^0) eğrileri.

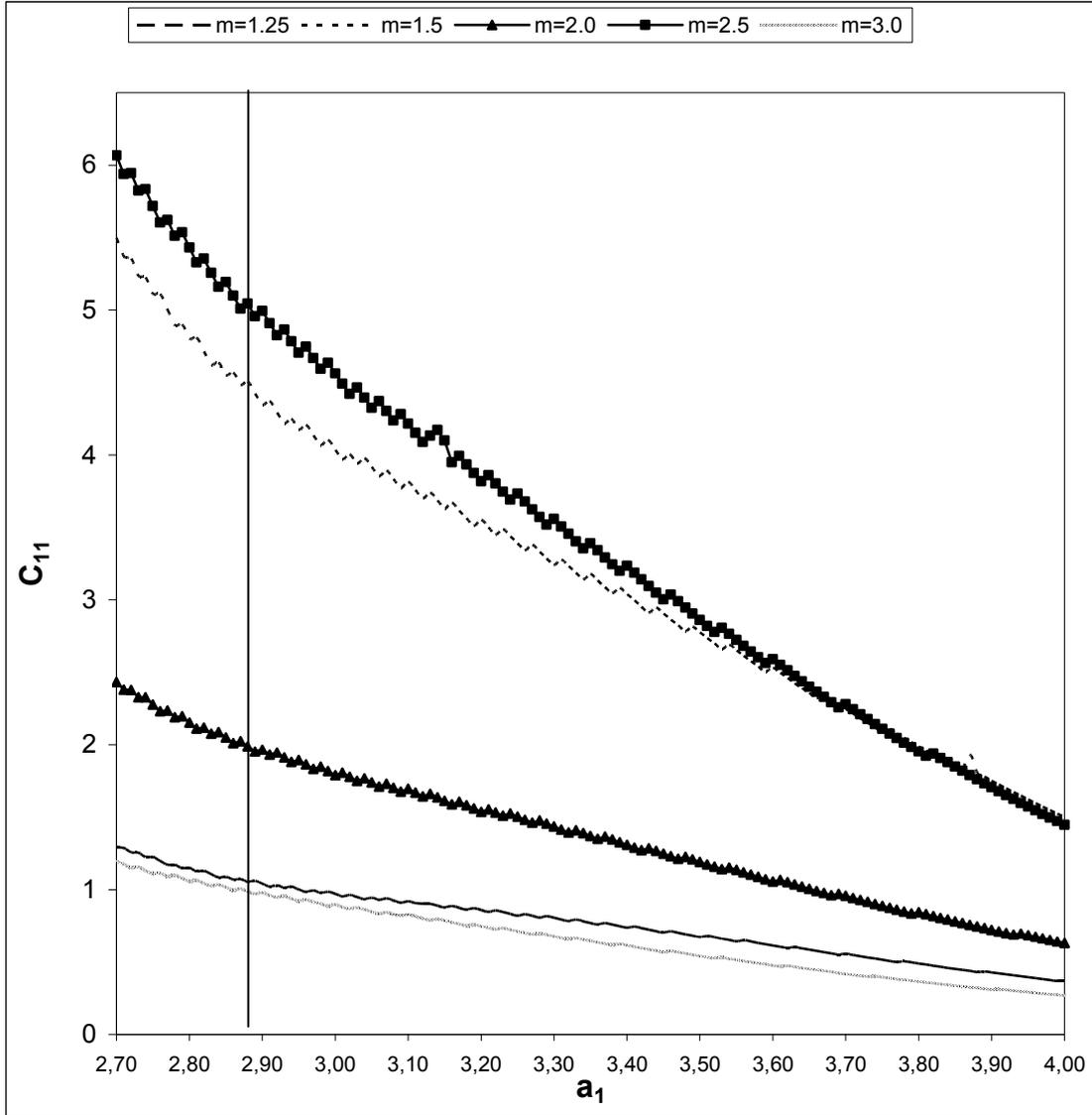


Şekil 4.14. Fe-25%Al için Genelleştirilmiş Morse Potansiyel fonksiyonu kullanılarak $m=1.25$, $m=1.5$, $m=2.0$, $m=2.5$, $m=3.0$ için hesaplanan Hacim- a_1 (A°) eğrileri.

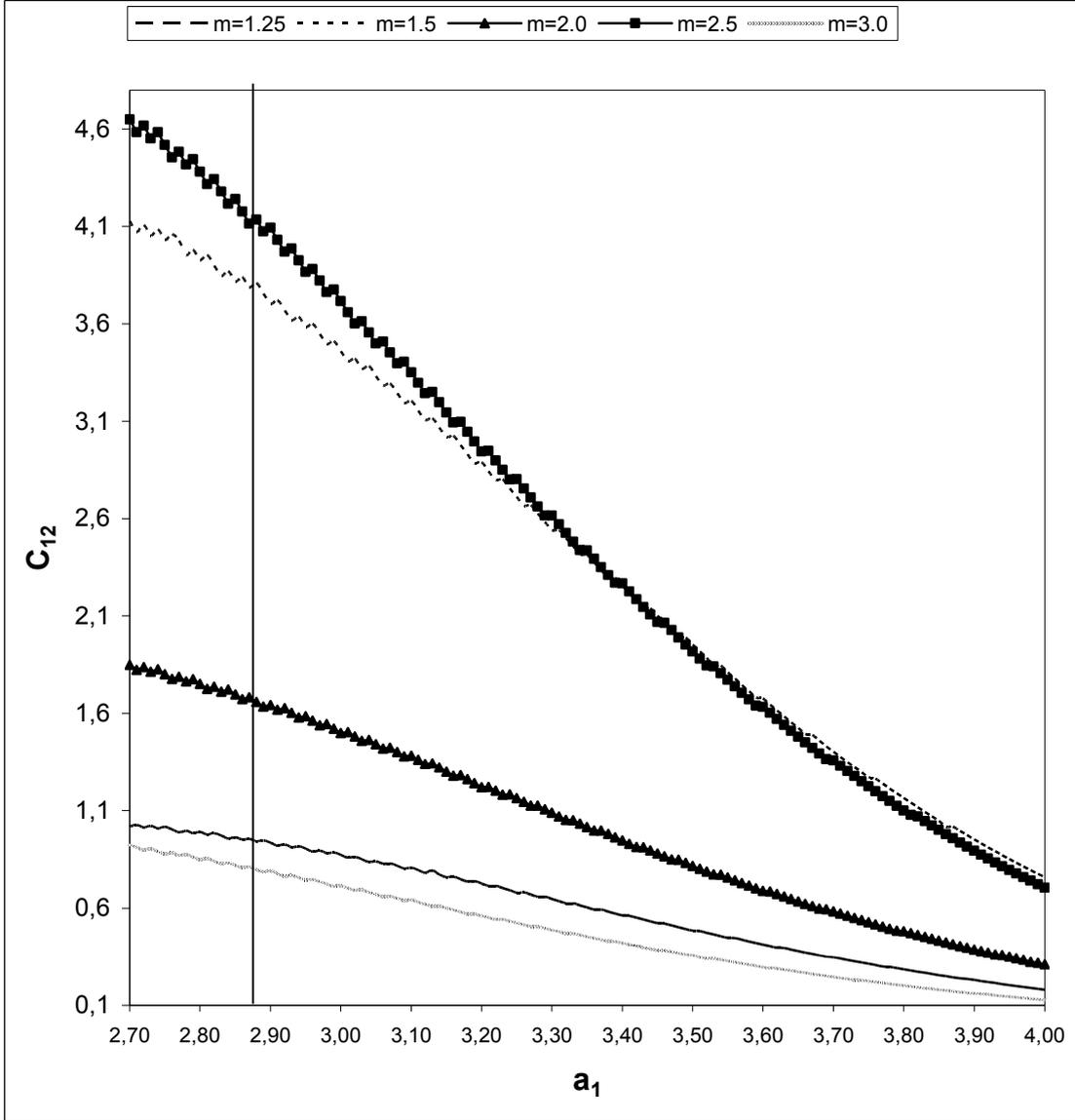


Şekil 4.15. Fe-25%Al için Genelleştirilmiş Morse Potansiyel fonksiyonu kullanılarak $m=1.25$, $m=1.5$, $m=2.0$, $m=2.5$, $m=3.0$ için hesaplanan a_1 - a_2 (A°) eğrileri.

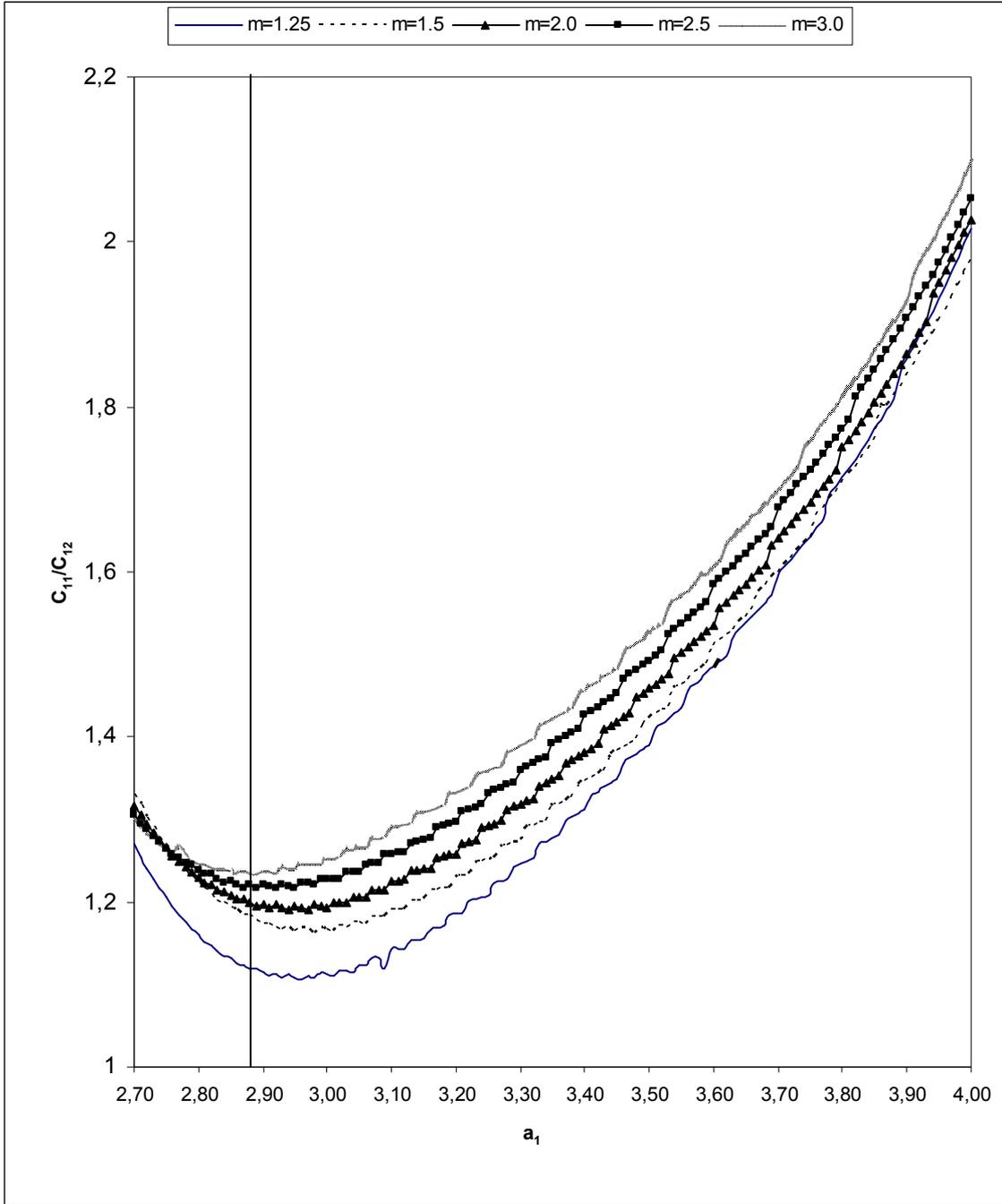
4.3.2. Modifiye Morse Potansiyeli Kullanılarak Elde Edilen Sonuçlar



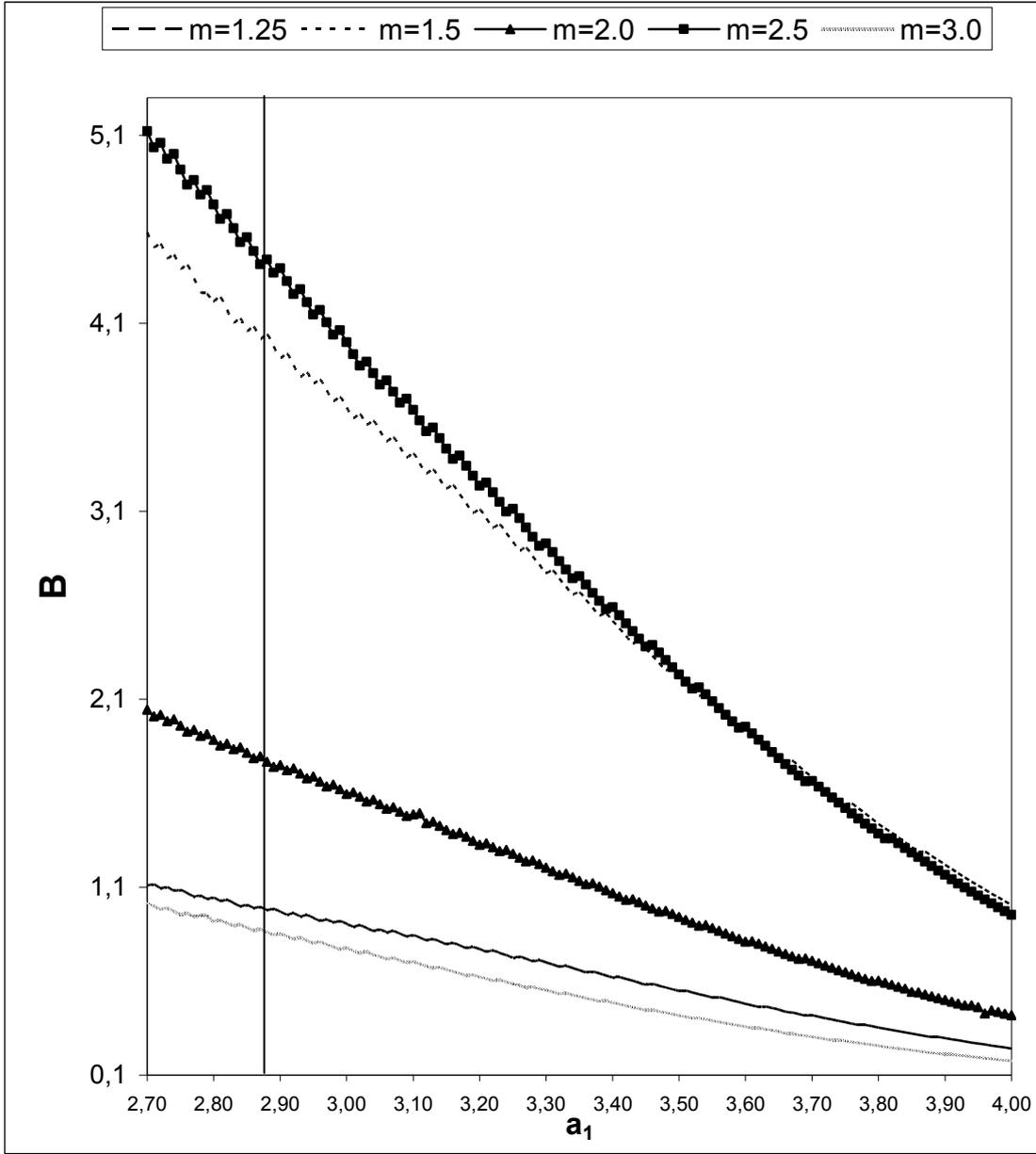
Şekil 4.16. Fe-25%Al için Modifiye Morse Potansiyel fonksiyonu kullanılarak $m=1.25$, $m=1.5$, $m=2.0$, $m=2.5$, $m=3.0$ için hesaplanan $C_{11}(\text{erg/cm}^2)$ - a_1 (Å) eğrileri.



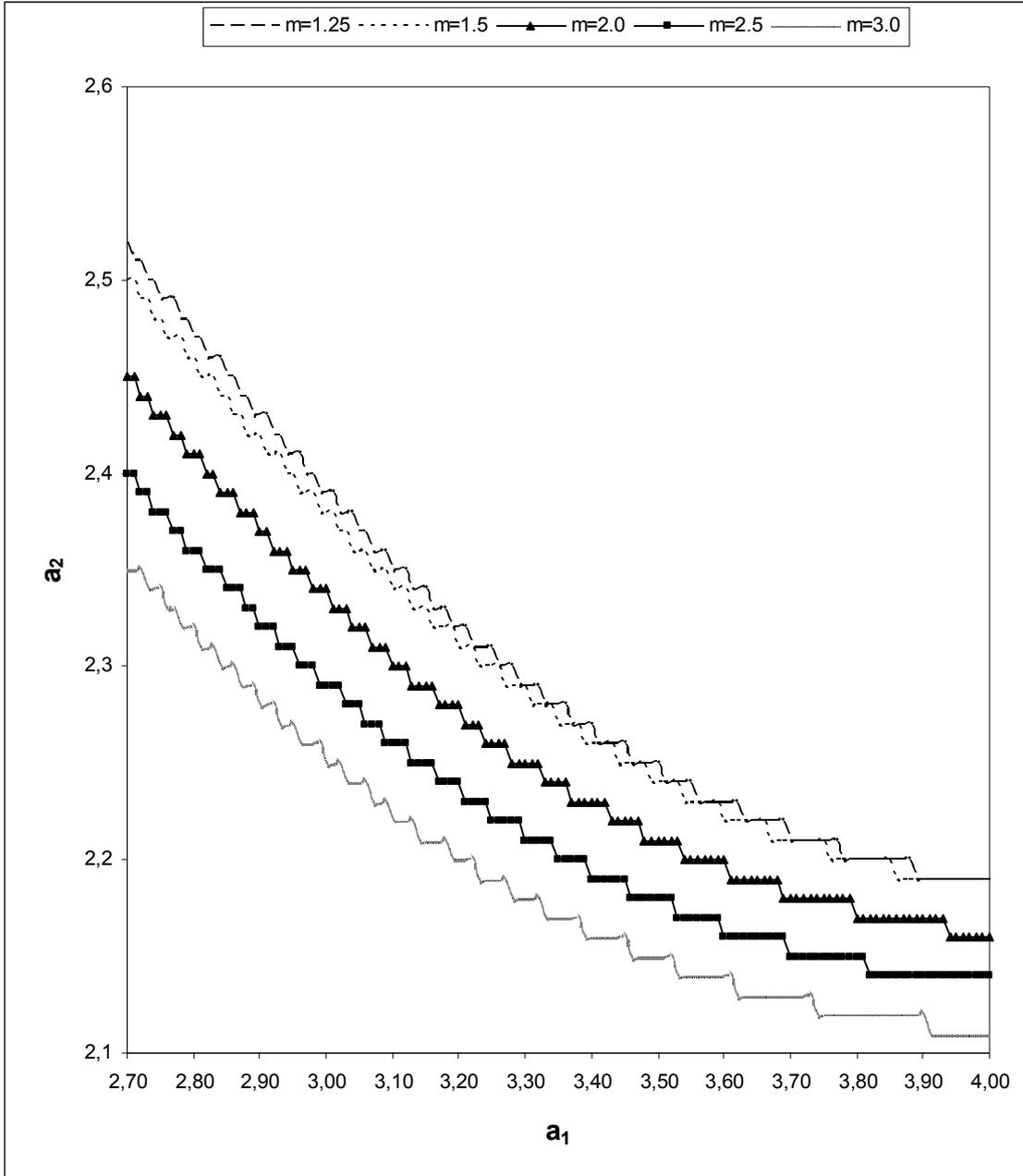
Şekil 4.17. Fe-25%Al için Modifiye Morse Potansiyel fonksiyonu kullanılarak $m=1.25$, $m=1.5$, $m=2.0$, $m=2.5$, $m=3.0$ için hesaplanan $C_{12}(\text{erg/cm}^2)$ - a_1 (Å°) eğrileri.



Şekil 4.18. Fe-25%Al için Modifiye Morse Potansiyel fonksiyonu kullanılarak $m=1.25$, $m=1.5$, $m=2.0$, $m=2.5$, $m=3.0$ için hesaplanan C_{11}/C_{12} - a_1 (Å) eğrileri.



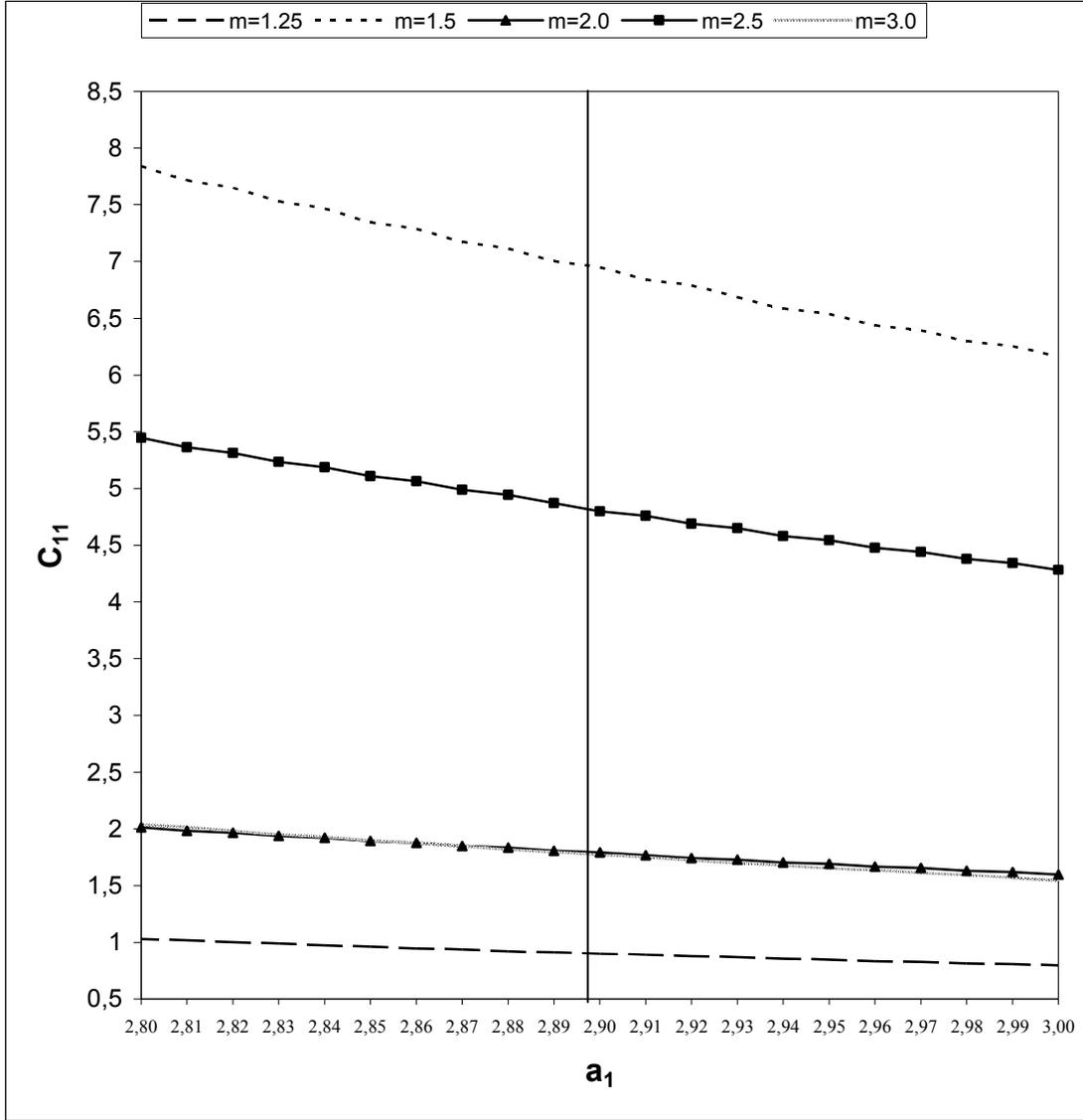
Şekil 4.19. Fe-25%Al için Modifiye Morse Potansiyel fonksiyonu kullanılarak $m=1.25$, $m=1.5$, $m=2.0$, $m=2.5$, $m=3.0$ için hesaplanan Hacim (B) - a_1 (Å) eğrileri.



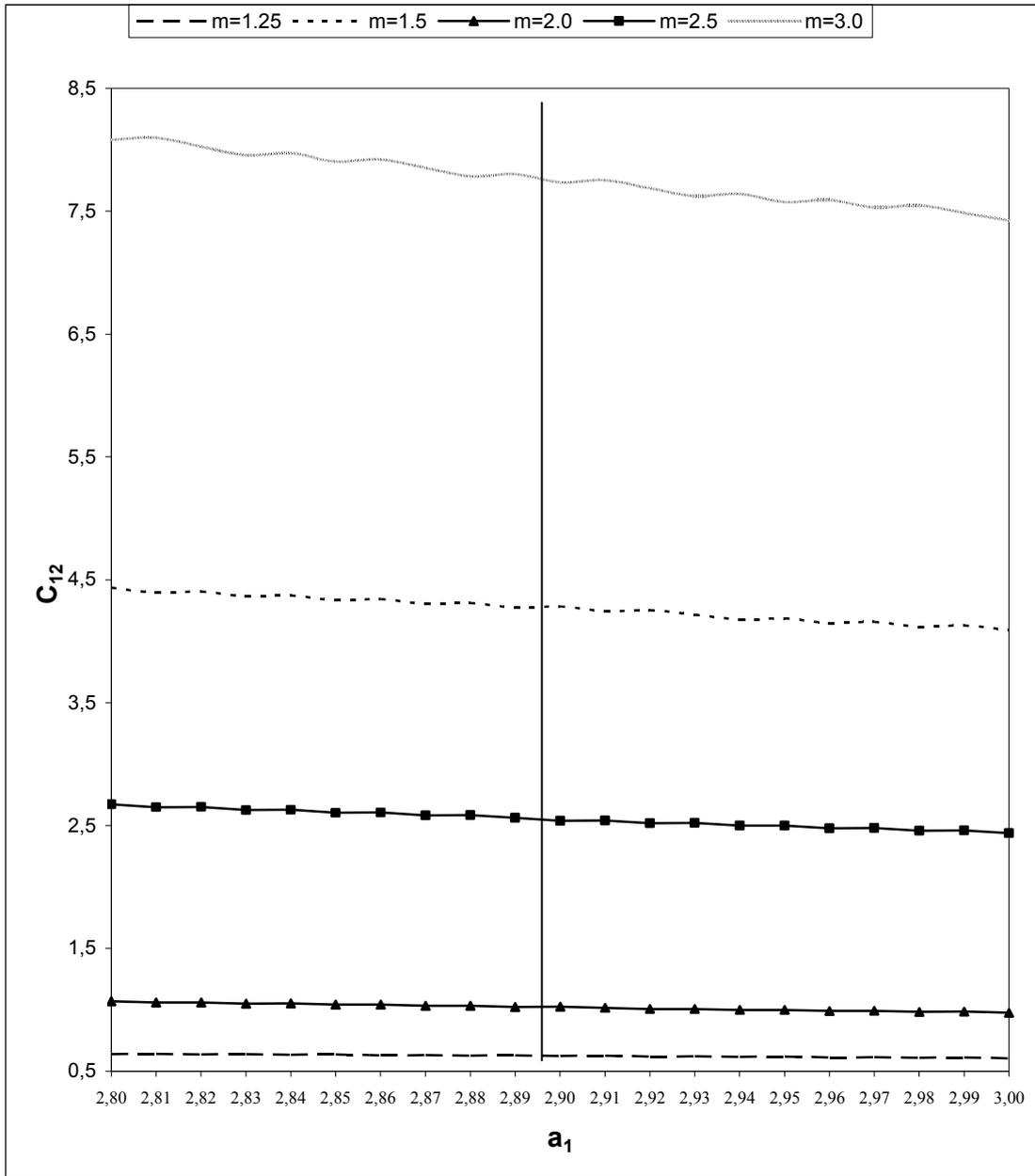
Şekil 4.20. Fe-25%Al için Modifiye Morse Potansiyel fonksiyonu kullanılarak $m=1.25$, $m=1.5$, $m=2.0$, $m=2.5$, $m=3.0$ için hesaplanan a_2 (Å°) - a_1 (Å°) eğrileri.

4.4. Fe-30%Al Alaşımı İçin Kararlılık Hesabı

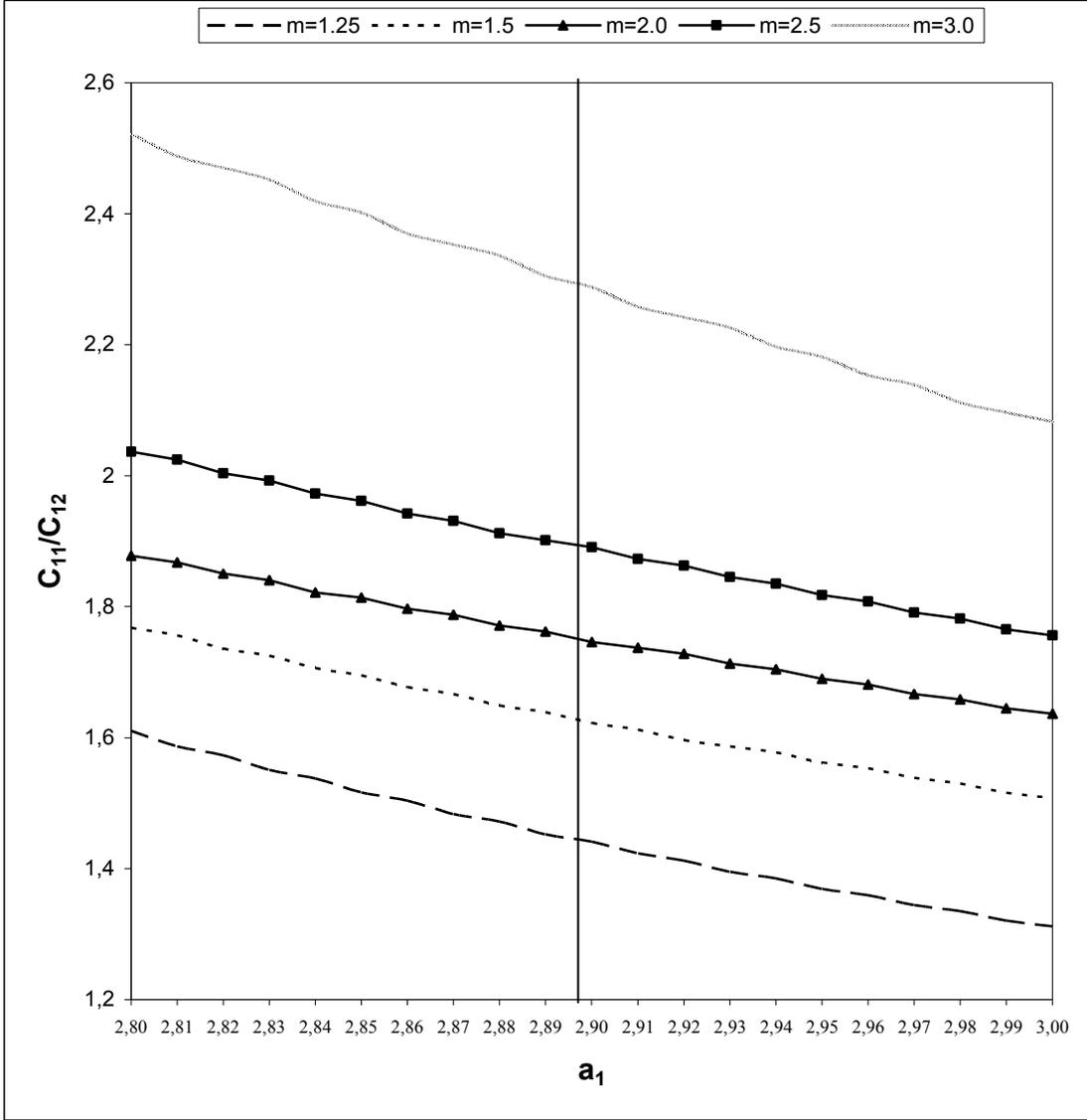
4.4.1. Genelleştirilmiş Morse Potansiyeli Kullanılarak Elde Edilen Sonuçlar



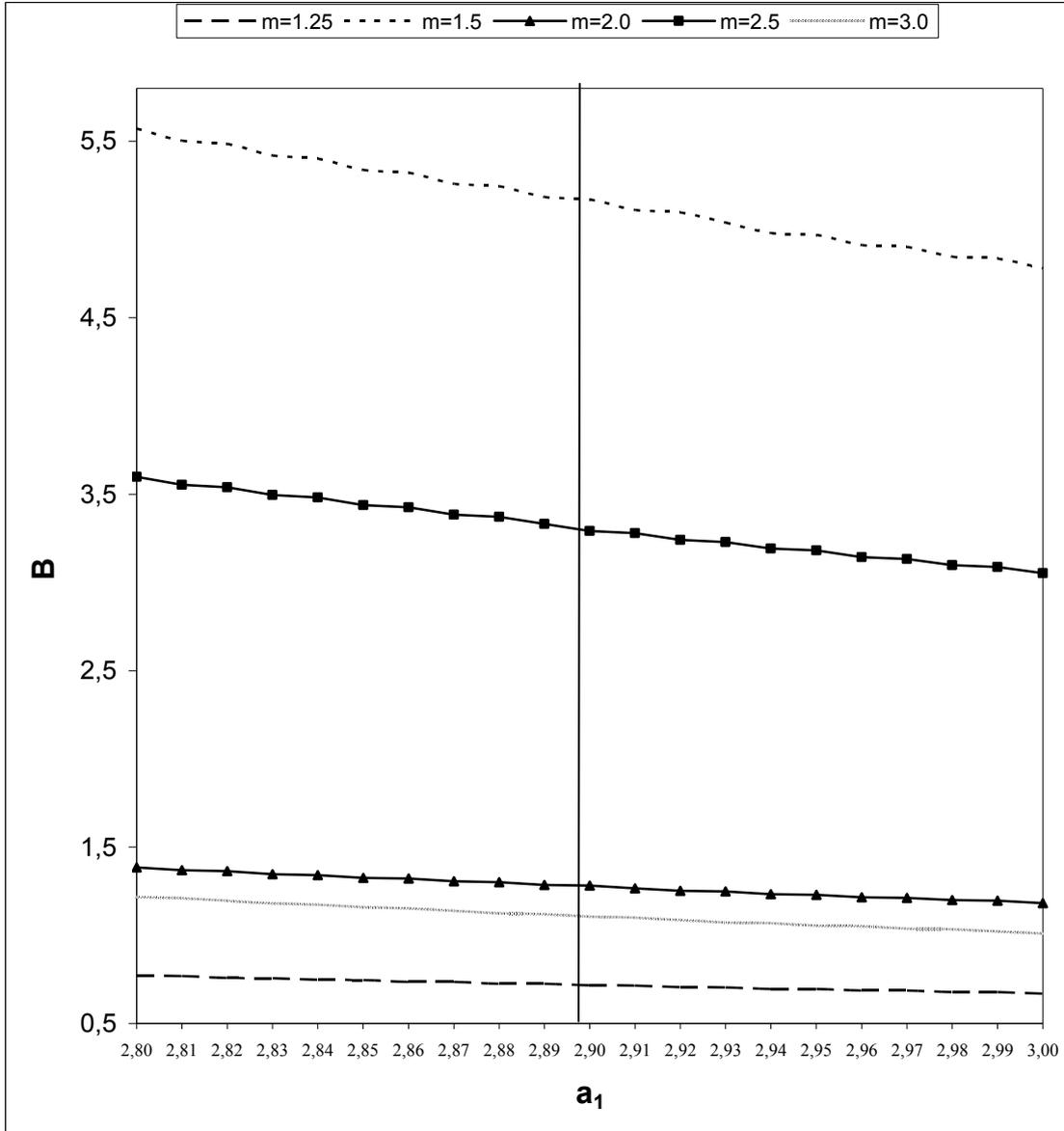
Şekil 4.21. Fe-30%Al için Genelleştirilmiş Morse Potansiyel fonksiyonu kullanılarak $m=1.25$, $m=1.5$, $m=2.0$, $m=2.5$, $m=3.0$ için hesaplanan C_{11} (erg/cm²)- a_1 (A°) eğrileri.



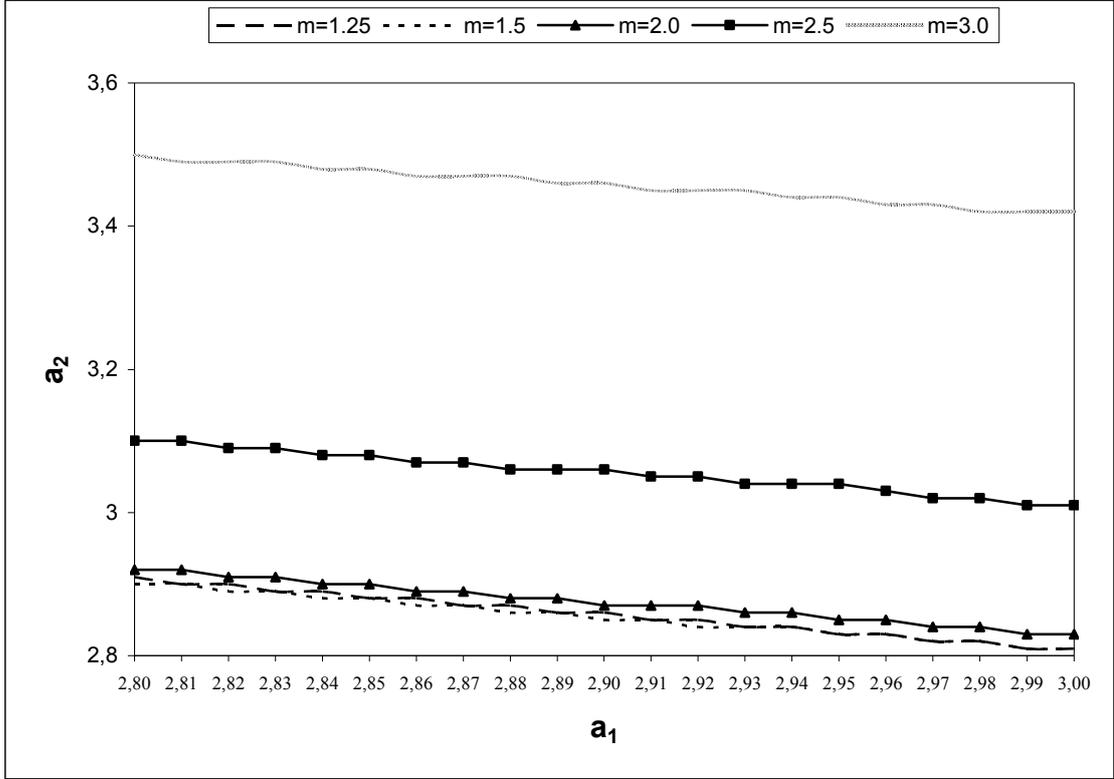
Şekil 4.22. Fe-30%Al için Genelleştirilmiş Morse Potansiyel fonksiyonu kullanılarak $m=1.25$, $m=1.5$, $m=2.0$, $m=2.5$, $m=3.0$ için hesaplanan C_{12} (erg/cm²)- a_1 (A°) eğrileri.



Şekil 4.23. Fe-30%Al için Genelleştirilmiş Morse Potansiyel fonksiyonu kullanılarak $m=1.25$, $m=1.5$, $m=2.0$, $m=2.5$, $m=3.0$ için hesaplanan C_{11}/C_{12} - a_1 (Å°) eğrileri.

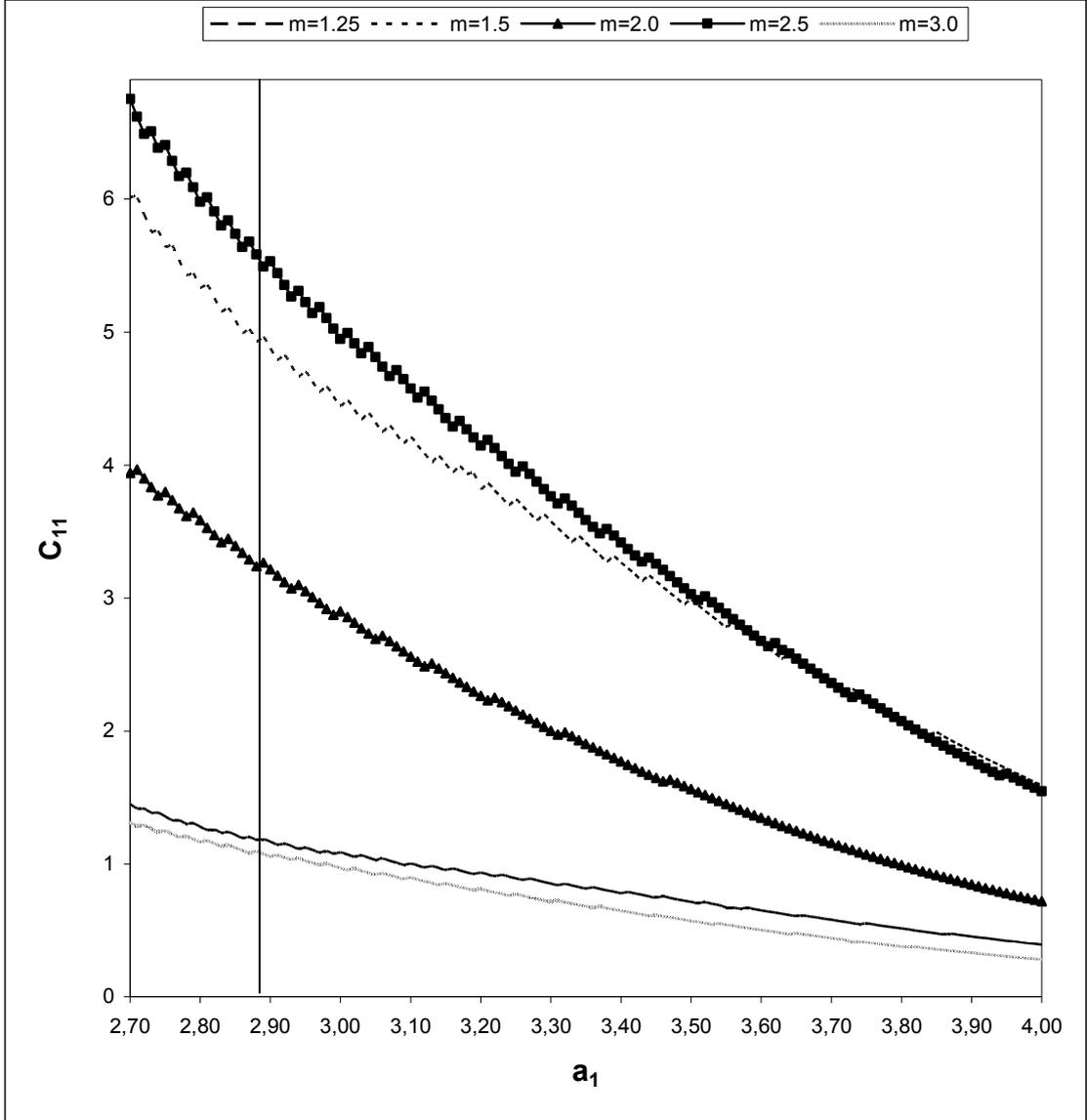


Şekil 4.24. Fe-30%Al için Genelleştirilmiş Morse Potansiyel fonksiyonu kullanılarak $m=1.25$, $m=1.5$, $m=2.0$, $m=2.5$, $m=3.0$ için hesaplanan Hacim (B) - a_1 (Å) eğrileri.

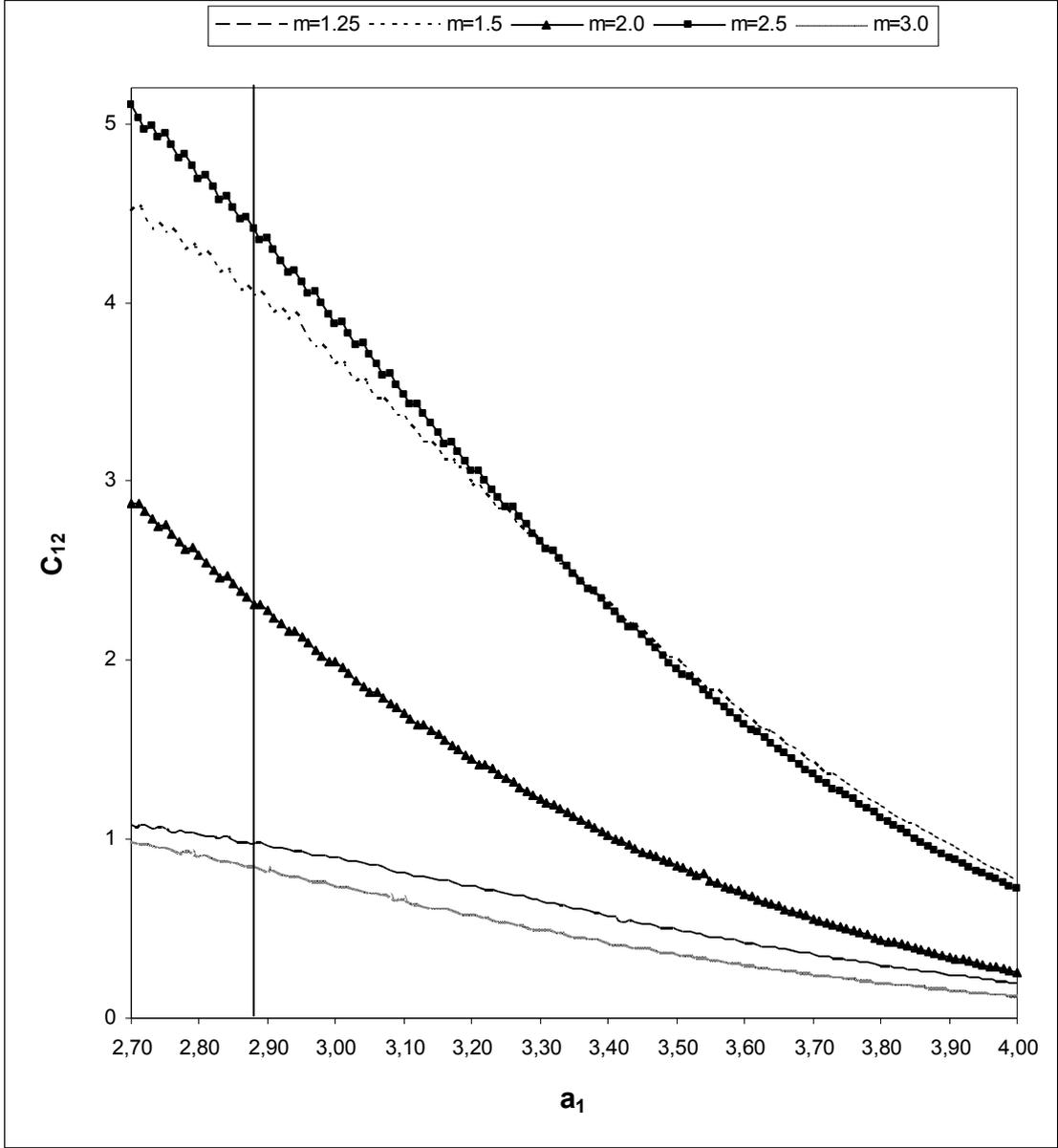


Şekil 4.25. Fe-30%Al için Genelleştirilmiş Morse Potansiyel fonksiyonu kullanılarak $m=1.25$, $m=1.5$, $m=2.0$, $m=2.5$, $m=3.0$ için hesaplanan a_2 (A°) - a_1 (A°) eğrileri.

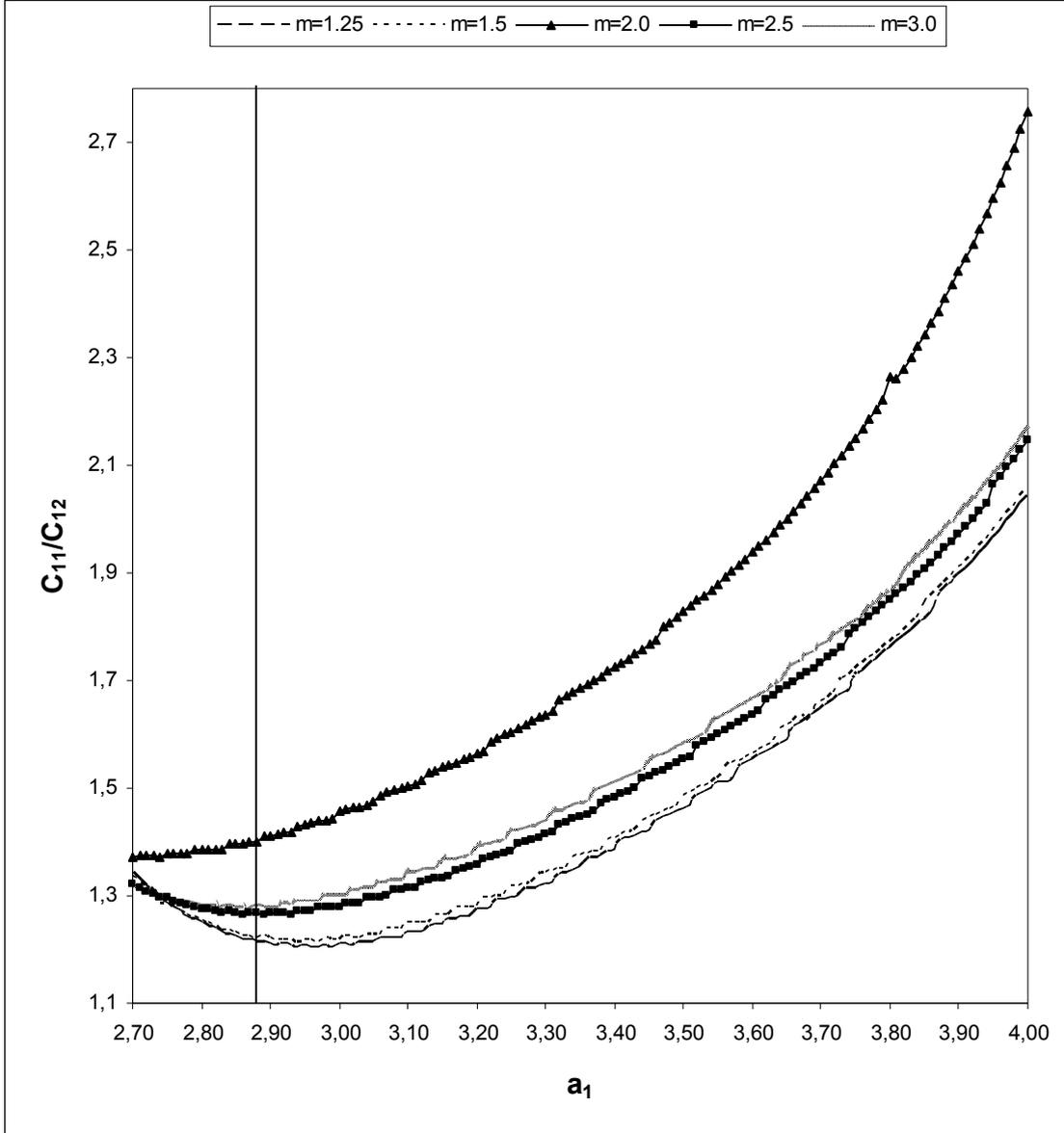
4.4.2. Modifiye Morse Potansiyeli Kullanılarak Elde Edilen Sonuçlar



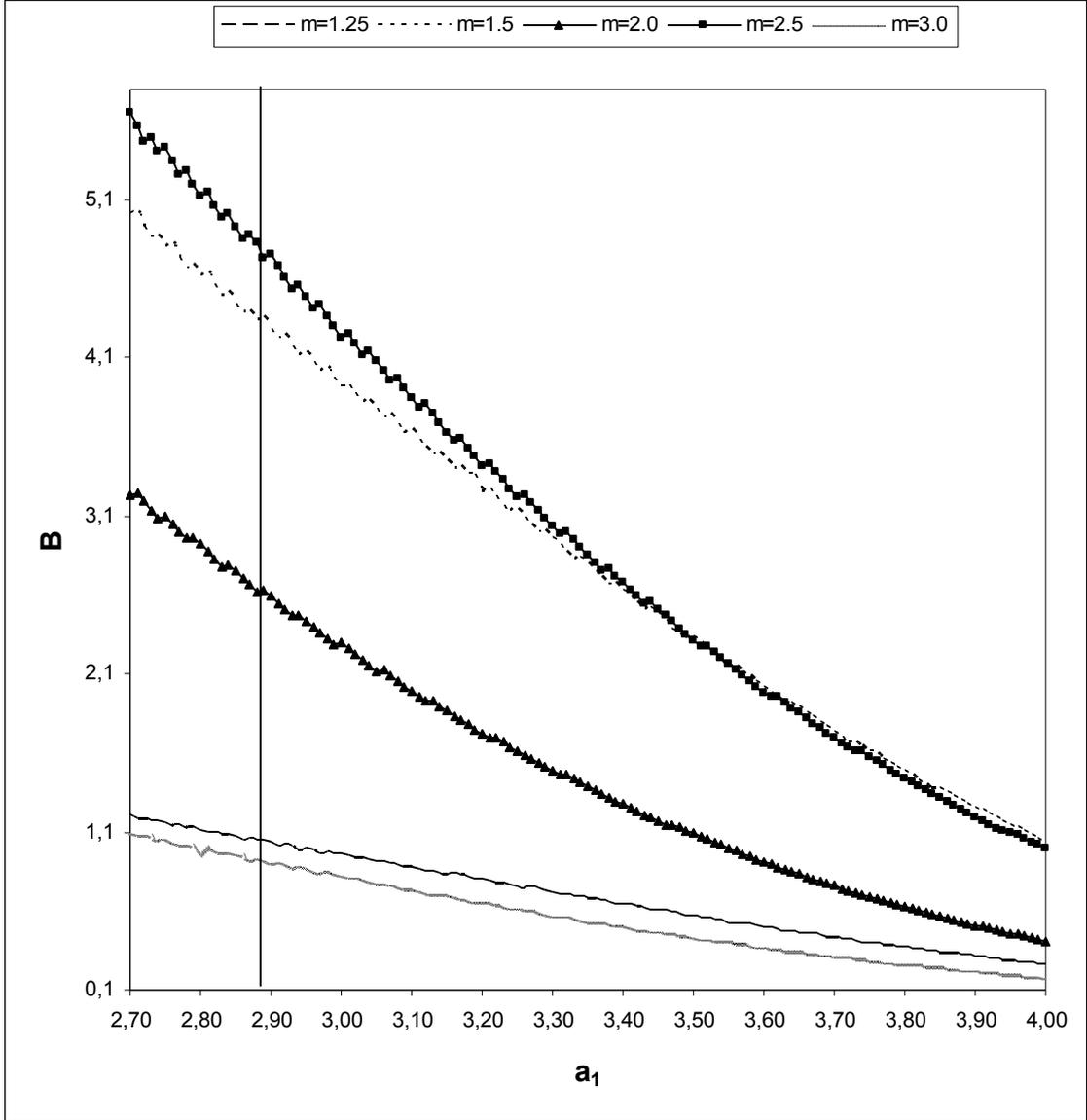
Şekil 4.26. Fe-30%Al için Modifiye Morse Potansiyel fonksiyonu kullanılarak $m=1.25$, $m=1.5$, $m=2.0$, $m=2.5$, $m=3.0$ için hesaplanan $C_{11}(\text{erg/cm}^2)$ - a_1 (Å) eğrileri.



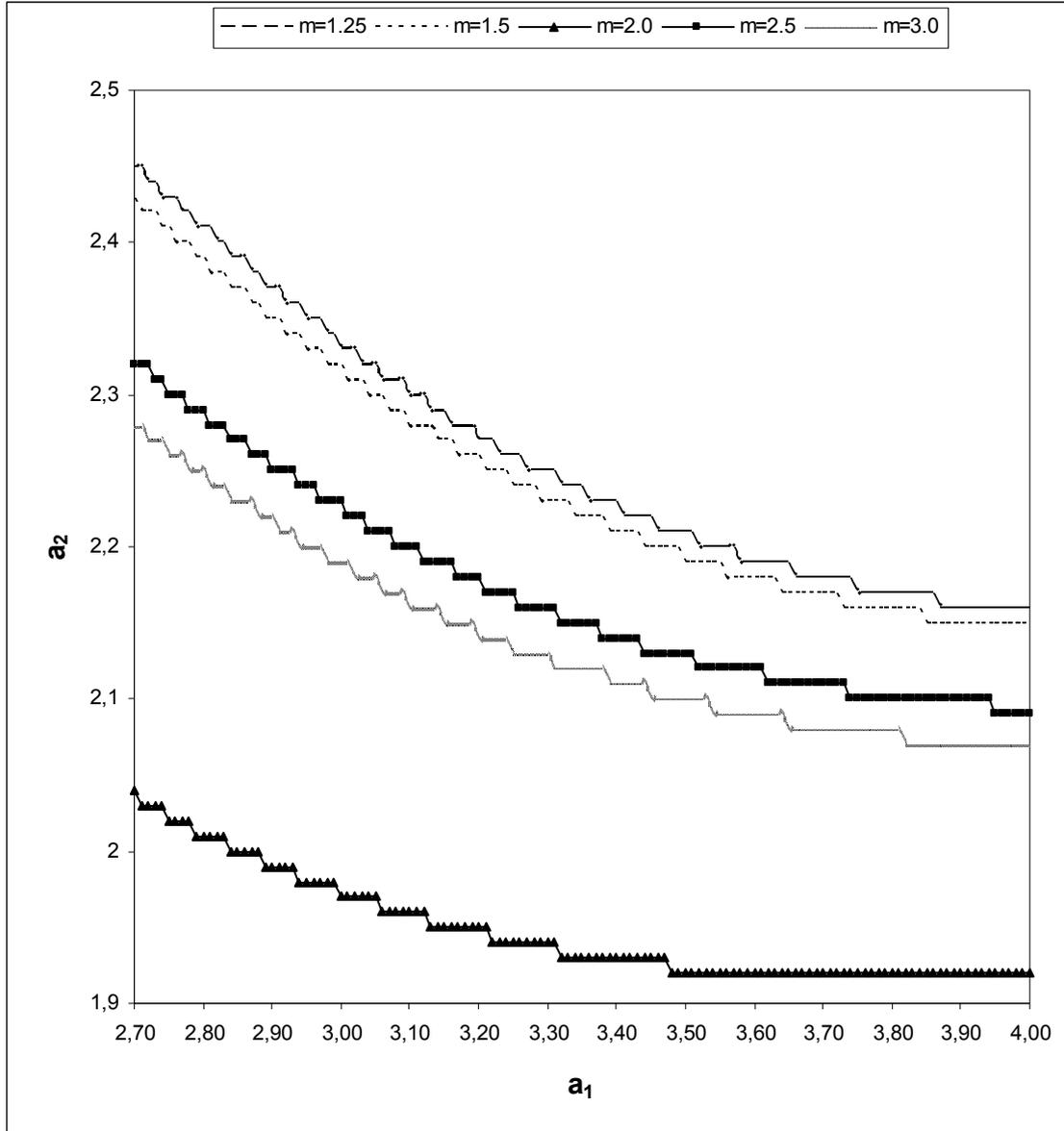
Şekil 4.27. Fe-30%Al için Modifiye Morse Potansiyel fonksiyonu kullanılarak $m=1.25$, $m=1.5$, $m=2.0$, $m=2.5$, $m=3.0$ için hesaplanan $C_{12}(\text{erg/cm}^2)$ - a_1 (Å) eğrileri.



Şekil 4.28. Fe-30%Al için Modifiye Morse Potansiyel fonksiyonu kullanılarak $m=1.25$, $m=1.5$, $m=2.0$, $m=2.5$, $m=3.0$ için hesaplanan $C_{11}/C_{12}-a_1$ (Å^0) eğrileri.



Şekil 4.29. Fe-30%Al için Modifiye Morse Potansiyel fonksiyonu kullanılarak $m=1.25$, $m=1.5$, $m=2.0$, $m=2.5$, $m=3.0$ için hesaplanan Hacim (B)- a_1 (Å°) eğrileri.



Şekil 4.30. Fe-30%Al için Modifiye Morse Potansiyel fonksiyonu kullanılarak $m=1.25$, $m=1.5$, $m=2.0$, $m=2.5$, $m=3.0$ için hesaplanan a_2 (Å°) - a_1 (Å°) eğrileri.

5. SONUÇ VE TARTIŞMA

Bu çalışma, $Fe_{(1-x)}-Al_{(x)}$ sistemi için potansiyel fonksiyonların “m” potansiyel test parametresi baz alınarak yapıldı. Öncelikle ikinci derece elastik sabitler bulunarak, Max Born esaslarına göre mekaniksel Kararlılıklar incelendi. Bu maksatla fortran dilinde yazılım programı kullanıldı. Program, temel sabit verilerinden sonra kristalin örgü parametresine göre çalıştırıldı. Elde edilen sonuçlar dördüncü bölümde grafikler halinde ayrıntılı olarak verildi. Dört ayrı grup halinde, her iki potansiyel fonksiyon kullanılarak bulunan sonuçlar tasnif edildi. Buna göre:

Fe, Fe-%25Al ve Fe-%30Al, bcc yapıları için öncelikle her iki potansiyel içinde ikinci derece elastik sabitlerin örgü parametresine göre değişimleri incelendi. Morse potansiyel fonksiyonuna göre ki dağılımlarda C_{ij} değişimleri çok az değişken, modifiye morse potansiyel fonksiyonunda C_{ij} 'lerdeki değişimler oldukça değişkenlik gösterdi. Sonuçlar denge durumu için test edildiğinde $m=2$ 'de, morse potansiyel fonksiyonu her üç yapı için de uygun sonuçlar vermesine rağmen modifiye morse potansiyel fonksiyonunun $m=2$ değerindeki sonuçlarda oldukça sapma görüldü.

Bulunan sonuçlar Fe, Fe-%25Al ve Fe-%30Al kristal yapılarının denge durumundaki C_{ij} parametrelerinin deneysel değerleri ile karşılaştırıldı. Bu karşılaştırmalar aşağıdaki çizelgelerde ayrı ayrı görülmektedir.

Çizelge 5.1. Morse potansiyel fonksiyonu kullanılarak denge durumları hesaplanan sonuçlar.

	m	TEORİK			DENEY			
		C_{11}	C_{12}	B	C_{11}	C_{12}	B	a_0
Fe	1.25	1.5176	1.0944	1.2355	2.432	1.381	1.683	2.87
	1.50	1.0564	6.684	7.980				
	2.0	2.335	1.374	1.6945				
	2.5	6.39	3.524	4.479				
	3.0	3.0645	1.576	2.0722				
Fe-%25Al	1.25	1.0750	7.5293	8.6078	1.7113	1.307	1.4417	2.8964
	1.50	7.9012	4.9072	5.8996				
	2.0	1.8755	1.0704	1.3399				
	2.5	5.2987	2.8298	3.6428				
	3.0	1.9196	0.8447	1.1979				
Fe-%30Al	1.25	0.9025	0.6232	0.7192	1.665	1.226	1.3726	2.8971
	1.50	6.9821	4.2967	5.1792				
	2.0	1.7991	1.0269	1.2853				
	2.5	4.8123	2.5577	3.3146				
	3.0	1.7832	7.7785	1.1039				

Çizelge 5.2. Modifiye Morse potansiyel fonksiyonu kullanılarak denge durumları hesaplanan sonuçlar.

	m	TEORİK			DENEY			
		C ₁₁	C ₁₂	B	C ₁₁	C ₁₂	B	a ₀
Fe	1.25	1.0745	0.9556	0.9952	2.432	1.381	1.683	2.87
	1.50	3.8753	3.4726	3.6068				
	2.0	1.7587	1.5547	1.6220				
	2.5	4.3909	3.8370	4.0216				
	3.0	0.8665	0.7479	0.7874				
Fe-%25Al	1.25	1.0492	0.9388	0.9712	1.7113	1.307	1.4417	2.8964
	1.50	4.3876	3.7285	3.9423				
	2.0	1.8563	1.6497	1.7382				
	2.5	4.9426	4.0524	4.3529				
	3.0	0.9753	0.7798	0.8465				
Fe-%30Al	1.25	1.1732	0.9698	1.0393	1.665	1.226	1.3726	2.8971
	1.50	4.8335	4.0196	4.3287				
	2.0	3.2393	2.2987	2.6003				
	2.5	5.5011	4.3275	4.7466				
	3.0	1.0636	0.8618	0.9094				

Yukarıdaki çizelgelerden anlaşıldığı gibi Morse potansiyel fonksiyonu m=2 için hesaplanan parametreleri deneysel sonuçları oldukça uyumluyken diğer m değerleri için bir uygunluk söz konusu değildir. Ayrıca Modifiye Morse potansiyel fonksiyonu için m değerlerinde sapmalar olduğu gözlemlendi.

KAYNAKLAR

- [1] Milstein F. Physical Rev.B .3. 1130 (1971)
- [2] Singh G., Phvs. Stat. Sol 161, 145 (1990)
- [3] Najafabadi R. and G. Kalonji; Acta.Met. 36.,917 (1988)
- [4] Drechsles M.and Nicholas J.F.,J.Phvs,Chem.Solids,28,2597,(1967)
- [5] Johnson R.A.,Physical Rev 133,1329 (1964)
- [6] Doyama M. And Cotterill R.M.J.,Physical Rev,145,145 (1966)
- [7] Leamy H.J "et al" .. Ata Met. 15,1827 (1967)
- [8] Kittel C, Introduction to Solid State Physics ., J.Wiley and Sons, Newyork 1968
- [9] Dr. Hamza Yařar OCAK, Fe_(1-x)-Al_(x) Sistemlerinin Mekaniksel Kararlılıđı, (Yüksek Lisans Tezi Gazi Üniversitesi Fen Edebiyat Fak. 1995)
- [10] Rudman P.S. . Acta Met. 8,321 (1960)
- [11] Prakash U., ‘et al’ ISIJ Review ,31,1113 (1991)
- [12] Taylor A. and Jones R.M.. J.Phvs. Chem .Solids 6,16, (1958)
- [13] Leamy H.J. ; Acta Met. 15,1839 (1967)
- [14] Milstein F., Physical Rev.B. 2,512 (1970)
- [15] Akgün İ.J. Mater sci Lett,13,56 (1994)
- [16] Girifalco L.A. and Weizer V.G., Phvs.Rev. 114, 687 (1959)
- [17] Prof. Dr. Sacit TAMEROĐLU, Elastisite Teorisi 1991
- [18] Kittel C, "Ouantum Theory of Soldis". J.Wilev.New York 1963

KAYNAKLAR DİZİNİ (Devamı)

- [19] Lincoln P.C. and Kolmad K.M., Phys,Rev,157,463 (1967)
- [20] Singh G. and Rathore R.P.S. Phvs. Stat Sol. B.170, 443 (1992)
- [21] Born M., Proc.Cambridge Phil.Soc. 36,160 (1940)
- [22] Mısra P., Proc. Cambridge. Phil.Soc. 36, 173 (1940)
- [23] Milstein F. The National Science Found DMR 78-06865. pp. 417-452.
- [24] Doc. Dr. Mustafa DİKİCİ, Kristallerin Esneklik Özellikleri, (1993)
- [25] Born M. and Kun H., "Dynamical Theory of Crystal Lattices",Oxford

EKLER**EK.1. Fe İÇİN HESAPLANAN SONUÇLAR****Ek.1.1. Genelleştirilmiş Morse Potansiyeli Kullanılarak Elde Edilen Şekiller**

1. Fe için genelleştirilmiş Morse Potansiyeli kullanılarak $m=1.25$ Değeri için hesaplanan a_1 , a_2 (A°) örgü parametreleri, C_{11} , C_{12} Kararlılıkları, C_{11}/C_{12} oranı ve Hacim modülü (B) değerleri.

a_1	C_{11}	C_{12}	C_{11}/C_{12}	B	a_2
2,80	1,66814917	1,10566063	1,50873524	1,29315681	2,87
2,81	1,65043104	1,11087796	1,48569969	1,29072899	2,86
2,82	1,62028316	1,10043237	1,47240594	1,27371597	2,82
2,83	1,60380366	1,10551754	1,45072656	1,27161292	2,85
2,84	1,57489096	1,09509395	1,4381332	1,25502628	2,85
2,85	1,55958811	1,10004634	1,41774765	1,25322693	2,84
2,86	1,53185035	1,08964596	1,40582392	1,23704842	2,84
2,87	1,51766422	1,09446447	1,3866729	1,23553105	2,83
2,88	1,49104206	1,08408646	1,37539035	1,21973833	2,83
2,89	1,47791598	1,08877148	1,35741614	1,21848631	2,82
2,90	1,45235484	1,078416	1,34674823	1,20306228	2,82
2,91	1,44023375	1,08296678	1,32989653	1,20205577	2,81
2,92	1,41568017	1,07263461	1,31981587	1,18698313	2,81
2,93	1,40451171	1,07705126	1,30403423	1,18620474	2,8
2,94	1,38091466	1,06674259	1,29451535	1,17146661	2,8
2,95	1,37064819	1,07102459	1,27975418	1,17089912	2,79
2,96	1,36085749	1,07524078	1,26563046	1,17044635	2,78
2,97	1,33854757	1,06488893	1,25698327	1,15610848	2,78
2,98	1,32958662	1,06896975	1,24380192	1,15584204	2,77
2,99	1,30811662	1,0586439	1,2356531	1,14180148	2,77
3,00	1,29994101	1,0625907	1,22336946	1,14170747	2,76

2. Fe için genelleştirilmiş Morse Potansiyeli kullanılarak $m=1.5$ Değeri için hesaplanan a_1 , a_2 (A°) örgü parametreleri, C_{11} , C_{12} Kararlılıkları, C_{11}/C_{12} oranı ve Hacim modülü (B) değerleri.

a_1	C_{11}	C_{12}	C_{11}/C_{12}	B	a_2
2,80	1,15715704	6,88552678	1,68056428	8,44754131	2,86
2,81	1,13851993	6,82276477	1,66870758	8,34357628	2,86
2,82	1,12801321	6,84906842	1,64906842	8,32024781	2,85
2,83	1,11000789	6,77808136	1,63764321	8,21874721	2,85
2,84	1,10005448	6,79529877	1,61884639	8,19704745	2,84
2,85	1,08265557	6,73358901	1,60784326	8,09791124	2,84
2,86	1,07323291	6,75047546	1,5898627	8,07776001	2,83
2,87	1,05641631	6,68926647	1,57927078	7,98089867	2,83
2,88	1,04750234	6,70581409	1,5620808	7,9622172	2,82
2,89	1,03124477	6,64508999	1,55188985	7,86754255	2,82
2,90	1,02281905	6,66129012	1,5354669	7,85025692	2,81
2,91	1,00709817	6,60103852	1,52566625	7,75768625	2,81
2,92	0,999140105	6,6168883	1,50998485	7,74172588	2,8
2,93	0,983934501	6,55709699	1,5005642	7,65117967	2,8
2,94	0,976424316	6,572589995	1,48560054	7,63647435	2,79
2,95	0,961713106	6,51324516	1,47654983	7,54787379	2,79
2,96	0,954632314	6,52838392	1,46227968	7,53436366	2,78
2,97	0,940395611	6,46947598	1,45358853	7,44763603	2,78
2,98	0,933725484	6,48425278	1,43998933	7,43525346	2,77
2,99	0,919944229	6,4257725	1,431164768	7,3503291	2,77
3,00	0,913667574	6,44019103	1,41869638	7,33901927	2,76

3. Fe için genelleştirilmiş Morse Potansiyeli kullanılarak $m=2.0$ Değeri için hesaplanan a_1 , a_2 (A°) örgü parametreleri, C_{11} , C_{12} Kararlılıkları, C_{11}/C_{12} oranı ve Hacim modülü (B) değerleri.

a_1	C_{11}	C_{12}	C_{11}/C_{12}	B	a_2
2,80	2,5495724	1,41891278	1,79684927	1,79579932	2,9
2,81	2,5266578	1,42133373	1,77766684	1,7897751	2,89
2,82	2,48775873	1,40812048	1,76672293	1,76799989	2,89
2,83	2,44958119	1,39506991	1,75588418	1,74657367	2,89
2,84	2,42822897	1,3974805	1,73757628	1,74106332	2,88
2,85	2,39125504	1,38458185	1,72705936	1,72013958	2,88
2,86	2,3708962	1,38698357	1,70939026	1,71495444	2,87
2,87	2,33508062	1,3742316	1,69919002	1,6945146	2,87
2,88	2,3156783	1,37662324	1,68214384	1,68964159	2,86
2,89	2,28097781	1,3641315	1,672255	1,66966804	2,86
2,90	2,2624954	1,36639111	1,6558183	1,66509254	2,85
2,91	2,22886875	1,35391857	1,64623545	1,64556863	2,85
2,92	2,21127082	1,35628138	1,63039238	1,64127786	2,84
2,93	2,17867762	1,3439417	1,62111021	1,62218701	2,84
2,94	2,16193032	1,34628821	1,6058451	1,61816892	2,83
2,95	2,13033226	1,33407718	1,59685833	1,59949554	2,83
2,96	2,11440246	1,33640525	1,58215665	1,59573765	2,82
2,97	2,08376252	1,3243198	1,57345871	1,57746737	2,82
2,98	2,0686185	1,32662793	1,5593057	1,57395812	2,81
2,99	2,03890058	1,3146637	1,55089137	1,55607599	2,81
3,00	2,02451182	1,31695138	1,5372715	1,55280486	2,80

4. Fe için genelleştirilmiş Morse Potansiyeli kullanılarak $m=2.5$ Değeri için hesaplanan a_1 , a_2 (A^0) örgü parametreleri, C_{11} , C_{12} Kararlılıkları, C_{11}/C_{12} oranı ve Hacim modülü (B) değerleri.

a_1	C_{11}	C_{12}	C_{11}/C_{12}	B	a_2
2,80	6,93390925	3,60586068	1,92295539	4,7152102	3,02
2,81	6,86827294	3,61157803	1,90173264	4,697149	3,01
2,82	6,76228312	3,57815434	1,88988022	4,6395306	3,01
2,83	6,69949495	3,58390839	1,8693265	4,62243725	3,00
2,84	6,59682933	3,55089874	1,85779145	4,56620893	3,00
2,85	6,53678401	3,55667123	1,8378938	4,55004216	2,99
2,86	6,43732174	3,52406989	1,82667255	4,4951538	2,99
2,87	6,37992164	3,52985234	1,80741884	4,47987544	2,98
2,88	6,28354482	3,49764489	1,79650737	4,426278	2,98
2,89	6,22869161	3,50342942	1,77788414	4,41185015	2,97
2,90	6,13529174	3,4716011	1,76728016	4,35949798	2,97
2,91	6,04357541	3,4415455	1,75677439	4,3079615	2,97
2,92	5,99235869	3,44591981	1,73897218	4,29473277	2,96
2,93	5,9034512	3,41483108	1,72876815	4,24437112	2,96
2,94	5,8545529	3,42058163	1,71156649	4,23190539	2,95
2,95	5,7683532	3,38984041	1,70165926	4,18267804	2,95
2,96	5,72168565	3,39556985	1,68504431	4,1704178	2,94
2,97	5,63809611	3,36516453	1,67542955	4,12280839	2,94
2,98	5,59357829	3,37086911	1,65938757	4,11177217	2,93
2,99	5,51250343	3,34078823	1,65006072	4,06469329	2,93
3,00	5,47005413	3,34646196	1,63457031	4,05432602	2,92

5. Fe için genelleştirilmiş Morse Potansiyeli kullanılarak $m=3.0$ Değeri için hesaplanan a_1 , a_2 (A^0) örgü parametreleri, C_{11} , C_{12} Kararlılıkları, C_{11}/C_{12} oranı ve Hacim modülü (B) değerleri.

a_1	C_{11}	C_{12}	C_{11}/C_{12}	B	a_2
2,80	3,39504081	1,6160665	2,10080514	2,20905794	3,22
2,81	3,35502301	1,62131303	2,06932465	2,19921636	3,21
2,82	3,29833548	1,60722586	2,05219164	2,17092907	3,21
2,83	3,26017884	1,6124218	2,02191439	2,16167414	3,2
2,84	3,20547106	1,59845775	2,00535238	2,13412885	3,2
2,85	3,15181906	1,58464652	1,98897295	2,10703737	3,2
2,86	3,11630143	1,58975152	1,96024435	2,09860149	3,19
2,87	3,0645148	1,57605426	1,94442215	2,07220777	3,19
2,88	3,0306854	1,58109756	1,91682382	2,06429352	3,18
2,89	2,98069356	1,56751027	1,90154643	2,03857137	3,18
2,90	2,9484908	1,57248907	1,87504693	2,03115632	3,17
2,91	2,90022468	1,55900655	1,86030307	2,00607926	3,17
2,92	2,86958581	1,56391722	1,83487066	1,99914008	3,16
2,93	2,82297878	1,55053482	1,820645842	1,9746828	3,16
2,94	2,77726369	1,53729125	1,80659566	1,9506154	3,16
2,95	2,74883311	1,54209009	1,7825373	1,94433776	3,15
2,96	2,70468116	1,52894093	1,76898996	1,92085434	3,15
2,97	2,67766696	1,53366415	1,74592786	1,91499842	3,14
2,98	2,63501759	1,5206057	1,73287368	1,89207633	3,14
2,99	2,60936574	1,52525213	1,71077666	1,88662333	3,13
3,00	2,56816079	1,51228121	1,6982032	1,86424107	3,13

Ek.1.2. Modifiye Morse Potansiyeli Kullanılarak Elde Edilen Şekiller

6. Fe için Modifiye Morse Potansiyeli kullanılarak $m=1.25$ Değeri için hesaplanan a_1 , a_2 (A^0) örgü parametreleri, C_{11} , C_{12} Kararlılıkları, C_{11}/C_{12} oranı ve Hacim modülü (B) değerleri.

a_1	C_{11}	C_{12}	C_{11}/C_{12}	B	a_2
2,70	1,29235475	1,0178084	1,26974267	1,10932385	2,52
2,71	1,28802332	1,02687576	1,25431271	1,11392495	2,51
2,72	1,25748455	1,01329722	1,24098293	1,094693	2,51
2,73	1,25501054	1,02197825	1,22802079	1,09965568	2,5
2,74	1,22610055	1,00832626	1,21597602	1,0891769	2,5
2,75	1,22532374	1,01662363	1,20528748	1,08619034	2,49
2,76	1,1979046	1,00290706	1,19443232	1,06790624	2,49
2,77	1,17132244	0,989330978	1,18395407	1,0499948	2,49
2,78	1,17261456	0,97047268	1,17608723	1,0555697	2,48
2,79	1,14733701	0,983417667	1,16668334	1,03805745	2,48
2,80	1,14997473	0,990760104	1,16069947	1,04383165	2,47
2,81	1,12588701	0,977084199	1,15229272	1,02668514	2,47
2,82	1,12974687	0,984057544	1,1480496	1,03262065	2,46
2,83	1,1067412	0,97034117	1,14056915	1,01580785	2,46
2,84	1,0843897	0,95677375	1,13338153	0,9993124	2,46
2,85	1,08968639	0,963200721	1,13131808	1,00536261	2,45
2,86	1,06827849	0,949604677	1,1249718	0,89162613	2,45
2,87	1,07452407	0,955673854	1,12436274	0,995290592	2,44
2,88	1,05397208	0,942056004	1,11879981	0,979361362	2,44
2,89	1,06106917	0,947771591	1,11954102	0,985537452	2,43
2,90	1,04129529	0,934140042	1,11471005	0,969858458	2,43
2,91	1,02203595	0,920662026	1,11010982	0,954453335	2,43
2,92	1,03008303	0,92586788	1,11255941	0,960606262	2,42
2,93	1,01149635	0,912385853	1,10862783	0,945422684	2,42
2,94	1,02018427	0,917251904	1,11221821	0,951562692	2,41
2,95	1,00220329	0,903771105	1,10891274	0,936581834	2,41
2,96	0,98466175	0,89044818	1,10580466	0,921852703	2,41
2,97	0,994023587	0,894831408	1,11085013	0,927895468	2,4
2,98	0,977004211	0,881520011	1,10831768	0,913348078	2,4
2,99	0,986832985	0,885579232	1,11433619	0,919330483	2,39
3,00	0,970281087	0,872284273	1,11234504	0,904949878	2,39
3,01	0,95410649	0,859149581	1,1105243	0,890801884	2,39
3,02	0,964383234	0,862754408	1,11779578	0,896630684	2,38
3,03	0,948607636	0,849644623	1,11647577	0,882632294	2,38
3,04	0,933176333	0,836694683	1,11531285	0,868855233	2,38
3,05	0,943787257	0,839862461	1,12374026	0,87450406	2,37
3,06	0,928696241	0,826946544	1,12304265	0,86086311	2,37
3,07	0,9395548	0,82981523	1,13224579	0,866395087	2,36
3,08	0,924766362	0,816938902	1,13198963	0,852881388	2,36

3,09	0,910277138	0,804222712	1,13187196	0,839574187	2,36
3,10	0,921305202	0,806682715	1,14209117	0,844890211	2,35
3,11	0,907070633	0,794013455	1,14238698	0,831699181	2,35
3,12	0,893112785	0,781504378	1,14281226	0,818707181	2,35
3,13	0,904229548	0,783573737	1,15398144	0,823792341	2,34
3,14	0,890484867	0,771118536	1,15479634	0,810907313	2,34
3,15	0,876994885	0,758821423	1,1557329	0,798212577	2,34
3,16	0,888130056	0,70517919	1,16779636	0,803055298	2,33
3,17	0,874816903	0,74828114	1,1691019	0,790459728	2,33
3,18	0,861739955	0,736201241	1,17052228	0,778047479	2,33
3,19	0,872833069	0,737543392	1,18343284	0,782639951	2,32
3,20	0,85990166	0,725529872	1,18520504	0,770320468	2,32
3,21	0,84719305	0,713673852	1,18708714	0,758180252	2,32
3,22	0,858187194	0,714676687	1,2008048	0,762513523	2,31
3,23	0,845594706	0,70289087	1,20302417	0,750458815	2,31
3,24	0,833212111	0,691261868	1,20534945	0,738578616	2,31
3,25	0,821032845	0,679787004	1,20777955	0,726868951	2,31
3,26	0,831772232	0,680389846	1,2224936	0,730850641	2,3
3,27	0,819680337	0,668991574	1,22524763	0,719221162	2,3
3,28	0,807780747	0,657746577	1,22810331	0,707757967	2,3
3,29	0,818326177	0,658050064	1,24356219	0,711475435	2,29
3,30	0,806494275	0,64688563	1,24673395	0,700088512	2,29
3,31	0,79484413	0,635872668	1,25000518	0,688863155	2,29
3,32	0,783371563	0,625009358	1,25337573	0,67779676	2,29
3,33	0,793566893	0,6249664	1,26977529	0,681166564	2,28
3,34	0,782142655	0,614188838	1,27345632	0,670173444	2,28
3,35	0,770887022	0,603559018	1,27723553	0,65933502	2,28
3,36	0,759796169	0,593075094	1,28111293	0,648648786	2,28
3,37	0,769600979	0,592712179	1,29843962	0,651675113	2,27
3,38	0,758543458	0,582318624	1,30262614	0,641060235	2,27
3,39	0,747643156	0,572068926	1,30691097	0,630593669	2,27
3,40	0,736897983	0,561962155	1,31129468	0,620274097	2,27
3,41	0,746284786	0,56130689	1,3295486	0,622966189	2,26
3,42	0,735560372	0,551293622	1,3342443	0,612715872	2,26
3,43	0,724983476	0,541420319	1,33904002	0,602608038	2,26
3,44	0,714553288	0,53168676	1,34393658	0,59264227	2,26
3,45	0,704265895	0,522090438	1,34893467	0,58281559	2,26
3,46	0,713080214	0,521125588	1,36834619	0,585110463	2,25
3,47	0,702801602	0,511624965	1,37366558	0,575350511	2,25
3,48	0,69266056	0,502259322	1,37908951	0,565726401	2,25
3,49	0,682655759	0,493027787	1,38461924	0,556237111	2,25
3,50	0,672784287	0,483928516	1,39025551	0,54688044	2,25
3,51	0,681014269	0,482691505	1,41086856	0,548799093	2,24
3,52	0,671143442	0,473689389	1,41684289	0,539507407	2,24
3,53	0,61401967	0,46481732	1,42292883	0,530345536	2,24
3,54	0,651787593	0,456073663	1,42912789	0,521311639	2,24

3,55	0,642297957	0,47456658	1,43544173	0,512403757	2,24
3,56	0,649942402	0,445982546	1,45732699	0,513969165	2,23
3,57	0,640449183	0,437464241	1,46400351	0,505125888	2,23
3,58	0,631077361	0,429070309	1,47080175	0,496405993	2,23
3,59	0,62182596	0,420799808	1,47772396	0,487808525	2,23
3,60	0,612692935	0,412651056	1,48477249	0,479331682	2,23
3,61	0,6036763	0,404622476	1,4919495	0,47097375	2,23
3,62	0,594773292	0,396711878	1,49925759	0,462732349	2,23
3,63	0,601590626	0,394989372	1,52305522	0,463856457	2,22
3,64	0,592680445	0,387176837	1,53077454	0,45567804	2,22
3,65	0,583882305	0,379480598	1,53863546	0,4476145	2,22
3,66	0,575194413	0,371899066	1,54664119	0,439664181	2,22
3,67	0,566617022	0,364431897	1,55479536	0,431826939	2,22
3,68	0,55814543	0,357075752	1,5631009	0,424098978	2,22
3,69	0,59781102	0,349830955	1,57156219	0,416481004	2,22
3,70	0,555806146	0,347911525	1,59755026	0,417209732	2,21
3,71	0,547432302	0,340762249	1,6064934	0,409652267	2,21
3,72	0,539162814	0,333721449	1,61560731	0,402201904	2,21
3,73	0,530996884	0,326788086	1,62489671	0,394857685	2,21
3,74	0,522932176	0,319960237	1,63436614	0,38761755	2,21
3,75	0,514966399	0,313235926	1,64402087	0,380479417	2,21
3,76	0,507100622	0,306615241	1,65386633	0,373443702	2,21
3,77	0,499331852	0,300095789	1,66390823	0,36650781	2,21
3,78	0,504504698	0,298016951	1,69287249	0,3668462	2,2
3,79	0,496728978	0,291590719	1,70351436	0,359970138	2,2
3,80	0,489048827	0,285263517	1,71437565	0,353191953	2,2
3,81	0,481463661	0,279034395	1,72546349	0,346510817	2,2
3,82	0,473971558	0,272901633	1,73678535	0,339924941	2,2
3,83	0,466572665	0,266864697	1,74834915	0,33343402	2,2
3,84	0,459265013	0,260921855	1,76016307	0,327036241	2,2
3,85	0,452048213	0,255072237	1,77223605	0,320730895	2,2
3,86	0,444919432	0,249313677	1,78457691	0,314515596	2,2
3,87	0,437879075	0,243645759	1,79719556	0,308390197	2,2
3,88	0,43092524	0,238066787	1,8101023	0,302352938	2,2
3,89	0,43504065	0,235873052	1,84438393	0,302262189	2,19
3,90	0,428083168	0,230381226	1,85815127	0,296281873	2,19
3,91	0,421212058	0,224976697	1,8722475	0,290388484	2,19
3,92	0,414426196	0,219658214	1,88668654	0,284580875	2,19
3,93	0,407723641	0,214424173	1,9014817	0,278857329	2,19
3,94	0,401104738	0,209274118	1,91664761	0,273217658	2,19
3,95	0,394567799	0,204206513	1,93219988	0,267660275	2,19
3,96	0,388111118	0,199219815	1,9481552	0,262183583	2,19
3,97	0,381735008	0,194313622	1,96453035	0,256787417	2,19
3,98	0,375437785	0,189486383	1,9813444	0,251470184	2,19
3,99	0,39219149	0,184737366	1,99861651	0,246231293	2,19
4,00	0,363077522	0,180065095	2,01635815	0,241069237	2,19

7. Fe için Modifiye Morse Potansiyeli kullanılarak $m=1.5$ Değeri için hesaplanan a_1 , a_2 (A°) örgü parametreleri, C_{11} , C_{12} Kararlılıkları, C_{11}/C_{12} oranı ve Hacim modülü (B) değerleri.

a_1	C_{11}	C_{12}	C_{11}/C_{12}	B	a_2
2,70	4,98953274	3,73087264	1,33736346	4,15042601	2,61
2,71	4,85757862	3,68299938	1,31891921	4,07452579	2,61
2,72	4,73007428	3,63558009	1,30105077	4,00041149	2,61
2,73	4,7016003	3,67194915	1,28040997	4,0151662	2,6
2,74	4,58158827	3,62417305	1,26417481	3,94331146	2,6
2,75	4,56097095	3,65918168	1,24644561	3,9597781	2,59
2,76	4,44782335	3,61107564	1,23171703	3,88999154	2,59
2,77	4,43440788	3,64473478	1,21666133	3,90795914	2,58
2,78	4,32754676	3,59632969	1,20332315	3,84006872	2,58
2,79	4,32071021	3,62863715	1,19072534	3,85932817	2,57
2,80	4,21959596	3,57995946	1,17867143	3,79317163	2,57
2,81	4,1266204	3,53177342	1,16702335	3,72840295	2,57
2,82	4,12290857	3,6200395	1,15746884	3,74897215	2,56
2,83	4,03000462	3,51358551	1,14697781	3,68572521	2,56
2,84	4,03649795	3,54250286	1,13944804	3,70716789	2,55
2,85	3,94818167	3,49387774	1,13002857	3,64531238	2,55
2,86	3,95944287	3,52149172	1,12436524	3,66747544	2,54
2,87	3,87530702	3,47268541	1,11593956	3,60689261	2,54
2,88	3,89088507	3,49900196	1,11199854	3,62962966	2,53
2,89	3,81055574	3,45004423	1,10449475	3,57021474	2,53
2,90	3,73253327	3,4016186	1,09728253	3,51192349	2,53
2,91	3,75317677	3,42599587	1,0954995	3,53505617	2,52
2,92	3,67846234	3,37745602	1,0891222	3,47779146	2,52
2,93	3,70246028	3,40057702	1,08877413	3,50120477	2,51
2,94	3,63074099	3,35194292	1,08317507	3,44487561	2,51
2,95	3,65775233	3,3738251	1,08415588	3,46846751	2,5
2,96	3,58875367	3,32512978	1,07928228	3,41300441	2,5
2,97	3,52156485	3,27698329	1,07463619	3,35851048	2,5
2,98	3,55190499	3,29704496	1,07729953	3,3819983	2,49
2,99	3,48705897	3,24886746	1,07331524	3,32826463	2,49
3,00	3,5196606	3,26773088	1,07709623	3,35170745	2,48
3,01	3,45693568	3,21955385	1,07373128	3,29868113	2,48
3,02	3,39574396	3,1719331	1,07055977	3,24653672	2,48
3,03	3,4307012	3,18907176	1,07576795	3,2696149	2,47
3,04	3,37131859	3,1414752	1,07316416	3,21808966	2,47
3,05	3,40792018	3,15746742	1,07932078	3,24095167	2,46
3,06	3,35016301	3,10992099	1,0772502	3,19000166	2,46
3,07	3,29372612	3,06294448	1,07534634	3,13987169	2,46
3,08	3,33187631	3,07730426	1,08272567	3,16216161	2,45
3,09	3,27681687	3,0304038	1,08131361	3,11254149	2,45

3,10	3,31609566	3,04366659	1,08950687	3,13447628	2,44
3,11	3,26227284	2,99687088	1,08855969	3,0853382	2,44
3,12	3,20958277	2,95064398	1,0877567	3,03695691	2,44
3,13	3,24975624	2,96237517	1,09701036	3,05816886	2,43
3,14	3,19810358	2,9162768	1,09663924	3,01021906	2,43
3,15	3,23897349	2,92695787	1,10660065	3,03096308	2,42
3,16	3,18824113	2,88101131	1,10663957	2,98342125	2,42
3,17	3,13850032	2,83563813	1,10680566	2,93659219	2,42
3,18	3,17972898	2,84488462	1,11770051	2,95649941	2,41
3,19	3,13075025	2,79968477	1,11825098	2,91003992	2,41
3,20	3,0826912	2,75505876	1,11892031	2,86426958	2,41
3,21	3,12401801	2,76293258	1,13068919	2,88329439	2,4
3,22	3,07658789	2,71850393	1,13172097	2,83786525	2,4
3,23	3,0300103	2,67464501	1,13286447	2,7931001	2,4
3,24	3,07120225	2,68120364	1,14545654	2,81120318	2,39
3,25	3,02513874	2,63756474	1,14694388	2,76675608	2,39
3,26	2,979874	2,59449457	1,14853738	2,72295438	2,39
3,27	3,02072592	2,59979459	1,16190946	2,7410504	2,38
3,28	2,97587108	2,5569619	1,16383083	2,6965983	2,38
3,29	2,93176828	2,51469645	1,16585375	2,65372039	2,38
3,30	2,97211216	2,51880056	1,17997122	2,66990442	2,37
3,31	2,92833017	2,47678905	1,18230907	2,62730275	2,37
3,32	2,88525426	2,43533879	1,18474451	2,58531061	2,37
3,33	2,84286193	2,39444025	1,1872762	2,54391415	2,37
3,34	2,77211361	2,39712745	1,20231972	2,5587895	2,36
3,35	2,83995342	2,35650532	1,20515468	2,51765469	2,36
3,36	2,7984471	2,31643484	1,20808367	2,4771056	2,36
3,37	2,83688136	2,31805761	1,22381832	2,49099886	2,35
3,38	2,79554525	2,27827717	1,22704352	2,45069986	2,35
3,39	2,75483023	2,23904197	1,23036114	2,41097139	2,35
3,40	2,71471277	2,20033922	1,23377011	2,37179707	2,35
3,41	2,75175505	2,20072876	1,25038356	2,38440419	2,34
3,42	2,71175401	2,16233726	1,25408467	2,34547617	2,34
3,43	2,67232675	2,12447423	1,25787675	2,30709173	2,34
3,44	2,63346468	2,0871364	1,26175974	2,26924682	2,34
3,45	2,66899134	2,08638463	1,27924224	2,28058686	2,33
3,46	2,63019295	2,04936802	1,2834166	2,24297633	2,33
3,47	2,5919362	2,01286906	1,28768247	2,20589144	2,33
3,48	2,55421396	1,97688438	1,29204013	2,16932757	2,33
3,49	2,58814635	1,97508818	1,31039534	2,1794409	2,32
3,50	2,55044662	1,93943298	1,31504756	2,1431042	2,32
3,51	2,5132613	1,90428387	1,31979341	2,10727634	2,32
3,52	2,47657681	1,86963242	1,324633	2,07194722	2,32
3,53	2,44038665	1,83547447	1,3295672	2,03711187	2,32
3,54	2,47217118	1,83257053	1,3490183	2,04577075	2,31
3,55	2,43597403	1,79875252	1,35425747	2,01115969	2,31

3,56	2,40025948	1,76542275	1,35959474	1,97703499	2,31
3,57	2,36501105	1,73257013	1,36503049	1,94338377	2,31
3,58	2,33022815	1,70019363	1,37056634	1,91020513	2,31
3,59	2,35983974	1,69631073	1,39116006	1,91748707	2,3
3,60	2,32502699	1,66427896	1,39701759	1,8845283	2,3
3,61	2,2906669	1,63271504	1,40298021	1,85203233	2,3
3,62	2,25674792	1,60161045	1,40904919	1,81998961	2,3
3,63	2,2232658	1,57096151	1,41522614	1,78839627	2,3
3,64	2,25071407	1,56622118	1,43703462	1,79438548	2,29
3,65	2,21718995	1,53592029	1,44355795	1,76301018	2,29
3,66	2,18409622	1,50606919	1,45019647	1,7320782	2,29
3,67	2,15142213	1,47665954	1,45695204	1,7015804	2,29
3,68	2,11916142	1,44768559	1,46382711	1,67151087	2,29
3,69	2,08730712	1,4191416	1,47082372	1,64186344	2,29
3,70	2,11216887	1,4135725	1,49420626	1,64643796	2,28
3,71	2,08027233	1,38537944	1,50159031	1,6170104	2,28
3,72	2,04877452	1,35760791	1,5091062	1,58799678	2,28
3,73	2,01767248	1,33025459	1,51675664	1,55939388	2,28
3,74	1,98695715	1,30331184	1,5245447	1,53119361	2,28
3,75	1,95662898	1,27677793	1,53247401	1,50339495	2,28
3,76	1,92667623	1,25064361	1,54054778	1,47598782	2,28
3,77	1,94862581	1,24433191	1,56600163	1,47909654	2,27
3,78	1,91863342	1,21854356	1,57453003	1,45190684	2,27
3,79	1,88901026	1,19314666	1,58321715	1,42510119	2,27
3,80	1,85975758	1,1681396	1,59206791	1,39867893	2,27
3,81	1,83086647	1,14351506	1,60108645	1,3726322	2,27
3,82	1,8023355	1,11926974	1,61027806	1,34695833	2,27
3,83	1,77415644	1,09539679	1,6196473	1,32165001	2,27
3,84	1,74632741	1,07189272	1,6291998	1,29670428	2,27
3,85	1,76515695	1,06497115	1,65746926	1,29836642	2,26
3,86	1,73729187	1,04179941	1,66758769	1,27363023	2,26
3,87	1,70977525	1,01899035	1,67791113	1,24925199	2,26
3,88	1,68259649	0,996535353	1,68844636	1,2252224	2,26
3,89	1,65575729	0,974433161	1,69920047	1,2015412	2,26
3,90	1,62924996	0,952676968	1,7101809	1,1782013	2,26
3,91	1,6030703	0,931262109	1,72139539	1,15519817	2,26
3,92	1,57721652	0,910185123	1,73285245	1,13252892	2,26
3,93	1,55168227	0,889440254	1,74456043	1,11018759	2,26
3,94	1,56731008	0,882073106	1,77684827	1,11048543	2,25
3,95	1,54175487	0,861645383	1,78931484	1,08834855	2,25
3,96	1,51652066	0,841544807	1,80206763	1,06653676	2,25
3,97	1,49159826	0,821763823	1,81511794	1,04504197	2,25
3,98	1,46698663	0,802299428	1,82847772	1,02386183	2,25
3,99	1,44268163	0,783147101	1,84215919	1,00299194	2,25
4,00	1,41867914	0,76430228	1,85617547	0,9824279	2,25

8. Fe için Modifiye Morse Potansiyeli kullanılarak $m=2.0$ Değeri için hesaplanan a_1 , a_2 (A°) örgü parametreleri, C_{11} , C_{12} Kararlılıkları, C_{11}/C_{12} oranı ve Hacim modülü (B) değerleri.

a_1	C_{11}	C_{12}	C_{11}/C_{12}	B	a_2
2,70	2,15702058	1,64650967	1,31005643	1,81667998	2,57
2,71	2,1463988	1,66260296	1,290987	1,82386824	2,56
2,72	2,09298936	1,64034316	1,27594604	1,79122523	2,56
2,73	2,04133176	1,61830988	1,26139733	1,75931717	2,56
2,74	2,03532627	1,63343723	1,24603886	1,76740025	2,55
2,75	1,98652428	1,61128107	1,23288501	1,73636214	2,55
2,76	1,98348241	1,62580862	1,21999748	1,745003321	2,54
2,77	1,93728829	1,60354127	1,20813123	1,71479028	2,54
2,78	1,93694623	1,61747056	1,1975156	1,72396245	2,53
2,79	1,89313288	1,59510569	1,18683852	1,69444809	2,53
2,80	1,89524726	1,60844043	1,17831361	1,70404271	2,52
2,81	1,85360383	1,5859897	1,16873636	1,67519441	2,52
2,82	1,81321646	1,56378259	1,15950675	1,64692721	2,52
2,83	1,81828047	1,57620907	1,15357823	1,65689954	2,51
2,84	1,77978302	1,55393338	1,14534062	1,62921659	2,51
2,85	1,78677723	1,56578402	1,14113901	1,63944842	2,5
2,86	1,74999515	1,54344898	1,13382119	1,6122977	2,5
2,87	1,7587291	1,5547267	1,13121432	1,6227275	2,49
2,88	1,723508	1,53234763	1,12475	1,59606775	2,49
2,89	1,68926937	1,51022459	1,11855507	1,56990619	2,49
2,90	1,70000096	1,52064567	1,1179468	1,58043076	2,48
2,91	1,66710979	1,49849081	1,11252587	1,5546971	2,48
2,92	1,67917638	1,50835993	1,11324648	1,56529875	2,47
2,93	1,64750848	1,48618783	1,10854662	1,53996138	2,47
2,94	1,61666748	1,4642756	1,10407322	1,51507289	2,47
2,95	1,63019575	1,47332865	1,10647122	1,52561768	2,46
2,96	1,60040633	1,45141248	1,10265438	1,5010771	2,46
2,97	1,61492931	1,4599319	1,10616756	1,5115977	2,45
2,98	1,58609153	1,43802608	1,10296437	1,48738123	2,45
2,99	1,55795477	1,41638261	1,09995333	1,46357333	2,45
3,00	1,57350089	1,42412934	1,10488623	1,47391986	2,44
3,01	1,54617497	1,4025067	1,10243678	1,45039613	2,44
3,02	1,56243833	1,40974313	1,1083242	1,46064153	2,43
3,03	1,53584092	1,38815292	1,10639174	1,43738225	2,43
3,04	1,50984755	1,36683063	1,10463397	1,41450293	2,43
3,05	1,52677436	1,37333813	1,11172503	1,42448354	2,42
3,06	1,50139813	1,35205966	1,11045257	1,40183915	2,42
3,07	1,5188086	1,35807753	1,11835191	1,41165455	2,41
3,08	1,49398613	1,33685575	1,11753728	1,38923254	2,41
3,09	1,46968551	1,31590244	1,1168651	1,36716346	2,41

3,10	1,48746582	1,3212356	1,12581421	1,37664568	2,4
3,11	1,43662789	1,30034765	1,1255666	1,3547744	2,4
3,12	1,4402718	1,27972866	1,12545092	1,33324304	2,4
3,13	1,54827791	1,28440561	1,1353718	1,34236304	2,39
3,14	1,43531143	1,26386531	1,13565221	1,32101402	2,39
3,15	1,41278719	1,24359035	1,13605513	1,29998929	2,39
3,16	1,43089132	1,24763785	1,14688034	1,30872234	2,38
3,17	1,40869139	1,2274526	1,14765441	1,28786553	2,38
3,18	1,38690092	1,20753063	1,14854306	1,26732072	2,38
3,19	1,40499478	1,21097828	1,16021468	1,27565044	2,37
3,20	1,38347202	1,19115629	1,16145297	1,25526154	2,37
3,21	1,3623324	1,17159709	1,1627994	1,23517553	2,37
3,22	1,3803176	1,1744707	1,1752678	1,24308633	2,36
3,23	1,3593951	1,15501951	1,17694558	1,22314471	2,36
3,24	1,33883226	1,1358302	1,17872571	1,20349755	2,36
3,25	1,35662329	1,13815521	1,19194928	1,2109779	2,35
3,26	1,33623616	1,11908291	1,19404572	1,19146733	2,35
3,27	1,31618686	1,10026978	1,19624013	1,17224214	2,35
3,28	1,29646611	1,08171259	1,19853103	1,1532971	2,35
3,29	1,31380239	1,08338507	1,21268275	1,16019084	2,34
3,30	1,29421165	1,06495355	1,21527521	1,14137291	2,34
3,31	1,27493286	1,04677655	1,21796086	1,12282865	2,34
3,32	1,29192981	1,04796379	1,23280005	1,1292858	2,33
3,33	1,27275092	1,02991858	1,23577818	1,1108627	2,33
3,34	1,25386765	1,01212473	1,23884697	1,0927057	2,33
3,35	1,23527323	0,994579113	1,242006	1,07481048	2,33
3,36	1,25166791	0,995196834	1,25770889	1,08068719	2,32
3,37	1,23314437	0,977791291	1,26115295	1,06290898	2,32
3,38	1,21489586	0,960630568	1,26468583	1,04538567	2,32
3,39	1,19691601	0,943711631	1,26830694	1,02811309	2,32
3,40	1,21265294	0,943805326	1,28485495	1,0334212	2,31
3,41	1,19472215	0,927033648	1,28875813	1,08875813	2,31
3,42	1,17704657	0,910499026	1,29274885	0,999348208	2,31
3,43	1,15962662	0,894202191	1,2968282	0,982677	2,31
3,44	1,1746667	0,893816275	1,31421493	0,987433082	2,3
3,45	1,15727319	0,87766906	1,31857581	0,97080437	2,3
3,46	1,14012386	0,861754766	1,32302588	0,954544463	2,3
3,47	1,12321541	0,846071597	1,32756544	0,938452868	2,3
3,48	1,10654325	0,830616544	1,33219505	0,922592113	2,3
3,49	1,12063428	0,829717534	1,35062143	0,926689783	2,29
3,50	1,10397146	0,817715463	1,3555384	0,91093412	2,29
3,51	1,08753713	0,799337736	1,36054772	0,895404201	2,29
3,52	1,07132674	0,784481379	1,36564968	0,880096501	2,29
3,53	1,08467443	0,783191282	1,38494191	0,883685666	2,28
3,54	1,06846461	0,768491158	1,3903408	0,86848231	2,28
3,55	1,05248421	0,754009684	1,39583647	0,853497861	2,28

3,56	1,03669904	0,739743927	1,4014296	0,838728963	2,28
3,57	1,02113207	0,725688859	1,40712104	0,824169928	2,28
3,58	1,00577292	0,711843782	1,41291242	0,809820162	2,28
3,59	1,01794305	0,710095371	1,43353004	0,812711262	2,27
3,60	1,00257856	0,696408942	1,43964057	0,798465483	2,27
3,61	0,987415229	0,682927605	1,44585637	0,784423479	2,27
3,62	0,972451275	0,669649505	1,45217949	0,770583428	2,27
3,63	0,957683445	0,656571974	1,45861152	0,756942464	2,27
3,64	0,943108646	0,643692265	1,46515464	0,743497725	2,27
3,65	0,954131213	0,641559377	1,4872064	0,745749989	2,26
3,66	0,93954651	0,628837351	1,49410099	0,732407071	2,26
3,67	0,925150764	0,616309253	1,50111451	0,719256423	2,26
3,68	0,910942617	0,603973336	1,50824972	0,70629643	2,26
3,69	0,896919048	0,59182693	1,51550902	0,693524302	2,26
3,70	0,883074273	0,579865606	1,52289473	0,680935162	2,26
3,71	0,869410097	0,568089537	1,53041033	0,668529724	2,26
3,72	0,879137706	0,565608608	1,55432165	0,670118308	2,25
3,73	0,865462498	0,553987008	1,56224331	0,657812171	2,25
3,74	0,851964655	0,542546702	1,57030658	0,645686019	2,25
3,75	0,838638739	0,531283479	1,58751462	0,633735232	2,25
3,76	0,825483855	0,520195732	1,58687164	0,621958439	2,25
3,77	0,812498651	0,509281733	1,59538149	0,610354039	2,25
3,78	0,79967969	0,498538371	1,60404843	0,59891881	2,25
3,79	0,787025614	0,487963889	1,61287676	0,58765113	2,25
3,80	0,795365917	0,485193888	1,63927439	0,588584564	2,24
3,81	0,782704132	0,474769123	1,64859949	0,577414126	2,24
3,82	0,770205134	0,464509597	1,65810381	0,566408109	2,24
3,83	0,757865264	0,454412081	1,66779295	0,555563142	2,24
3,84	0,745684842	0,444475788	1,67767258	0,544878806	2,24
3,85	0,733659346	0,434697016	1,68774875	0,534351126	2,24
3,86	0,721787899	0,42507427	1,69802773	0,523978813	2,24
3,87	0,710069585	0,415605909	1,70851658	0,513760468	2,24
3,88	0,698499974	0,406288445	1,71922186	0,503692288	2,24
3,89	0,687079506	0,397120999	1,73015154	0,493773834	2,24
3,90	0,693851739	0,394130919	1,76046005	0,494037859	2,23
3,91	0,682430724	0,385105213	1,77206306	0,484213717	2,23
3,92	0,671156014	0,376225357	1,7839202	0,474535576	2,23
3,93	0,660026641	0,367489791	1,79604075	0,465002074	2,23
3,94	0,649039756	0,358895891	1,80843462	0,455610512	2,23
3,95	0,638195731	0,350442826	1,82111227	0,446360461	2,23
3,96	0,627490421	0,342127255	1,83408487	0,43724831	2,23
3,97	0,616923286	0,333947874	1,84736402	0,428273011	2,23
3,98	0,606492447	0,32590264	1,86096205	0,419432576	2,23
3,99	0,596196292	0,317989655	1,8748921	0,410725201	2,23
4,00	0,586034093	0,310207541	1,88916778	0,402149725	2,23

9. Fe için Modifiye Morse Potansiyeli kullanılarak $m=2.5$ Değeri için hesaplanan a_1 , a_2 (A°) örgü parametreleri, C_{11} , C_{12} Kararlılıkları, C_{11}/C_{12} oranı ve Hacim modülü (B) değerleri.

a_1	C_{11}	C_{12}	C_{11}/C_{12}	B	a_2
2,70	5,38606382	4,18915448	1,28571621	4,58812426	2,52
2,71	5,25611151	4,13119963	1,27229753	4,50617145	2,52
2,72	5,24591802	4,16906366	1,25829645	4,52801512	2,51
2,73	5,12295041	4,1108448	1,2462038	4,44821334	2,51
2,74	5,11991558	4,14718284	1,23455265	4,47142709	2,5
2,75	5,00331076	4,08872969	1,22368343	4,39359005	2,5
2,76	4,89032833	4,0309297	1,2132011	4,31739591	2,5
2,77	4,89597887	4,06489879	1,20445284	4,34192548	2,49
2,78	4,78853809	4,00690937	1,19507023	4,26745228	2,49
2,79	4,79982208	4,03939126	1,18825382	4,2928682	2,48
2,80	4,69741898	3,98124147	1,17988799	4,21996731	2,48
2,81	4,71379491	4,0122477	1,17485142	4,24609677	2,47
2,82	4,61596607	3,95396647	1,16742671	4,174633	2,47
2,83	4,52095496	3,89637059	1,16029902	4,10456538	2,47
2,84	4,5432623	3,92513566	1,15747905	4,13117787	2,46
2,85	4,45221562	3,8674509	1,15120159	4,06237247	2,46
2,86	4,47844368	3,89478593	1,14985618	4,08933851	2,45
2,87	4,39099022	3,83704481	1,14436772	4,02169328	2,45
2,88	4,30589289	3,7799931	1,13912721	3,95529306	2,45
2,89	4,33650983	3,80518961	1,13963042	3,98229635	2,44
2,90	4,25451578	3,74812174	1,13510608	3,91691975	2,44
2,91	4,28808677	3,77193819	1,13683909	3,94398772	2,43
2,92	4,20888966	3,71488089	1,13298105	3,87955048	2,43
2,93	4,13168947	3,65852478	1,1293321	3,81624634	2,43
2,94	4,16839099	3,68031333	1,13261851	3,73261851	2,42
2,95	4,09359764	3,62401001	1,1295768	3,78053922	2,42
2,96	4,13244861	3,64446714	1,13389652	3,80712763	2,41
2,97	4,05981233	3,58823743	1,13142244	3,74542907	2,41
2,98	3,98887733	3,53271313	1,12912574	3,68476786	2,41
2,99	4,02982915	3,55125474	1,13476206	3,71077955	2,4
3,00	3,96073969	3,49584355	1,1329854	3,65080893	2,4
3,01	3,89320092	3,44113555	1,13137099	3,59182401	2,4
3,02	3,93574395	3,45783639	1,13821	3,61713891	2,39
3,03	3,86976939	3,40326996	1,13707359	3,55876944	2,39
3,04	3,91348006	3,41873957	1,1447143	3,58365307	2,38
3,05	3,84890283	3,36434237	1,14402828	3,52586252	2,38
3,06	3,78567259	3,31065321	1,14348207	3,46899301	2,38
3,07	3,83023569	3,3243954	1,15216009	3,49300883	2,37
3,08	3,76817966	3,27090187	1,15203079	3,43666113	2,37
3,09	3,70737402	3,21812006	1,15203098	3,38120471	2,37

3,10	3,75241798	3,23020012	1,16166734	3,40427274	2,36
3,11	3,69259691	3,17764266	1,16205543	3,34929407	2,36
3,12	3,63392096	3,12578305	1,1625634	3,29516236	2,36
3,13	3,67914162	3,13628234	1,17309006	3,31723543	2,35
3,14	3,62128637	3,08467421	1,17396073	3,26354493	2,35
3,15	3,56450975	3,03377014	1,17494391	3,21068335	2,35
3,16	3,60961732	3,04274826	1,18630167	3,23170461	2,34
3,17	3,55351554	2,99211724	1,18762577	3,17925001	2,34
3,18	3,498414	2,9421794	1,1890553	3,12759093	2,34
3,19	3,44429028	2,89293021	1,19058879	3,0767169	2,34
3,20	3,40962652	2,90007814	1,20294666	3,0962652	2,33
3,21	3,43503343	2,85112689	1,20479856	3,04576234	2,33
3,22	3,3823392	2,8028528	1,20674878	2,99601493	2,33
3,23	3,42609446	2,80865378	1,2198351	3,01446734	2,32
3,24	3,37382638	2,76070325	1,22208947	2,96507763	2,32
3,25	3,32242098	2,71342588	1,2243771	2,91642425	2,32
3,26	3,27185656	2,66681308	1,22687885	2,86849424	2,32
3,27	3,31434259	2,67100579	1,24085938	2,88545139	2,31
3,28	3,26409104	2,62473257	1,24358995	2,83785206	2,31
3,29	3,2146412	2,57911937	1,2464104	2,79095998	2,31
3,30	3,25619232	2,58212166	1,26105302	2,80681188	2,3
3,31	3,20699044	2,53686618	1,26415436	2,76024093	2,3
3,32	3,15855003	2,4922614	1,267343	2,71435761	2,3
3,33	3,11085318	2,44829871	1,27061831	2,6691502	2,3
3,34	3,1508007	2,44990295	1,28609204	2,68353554	2,29
3,35	3,10328105	2,40631364	1,28964113	2,63863611	2,29
3,36	3,05647714	2,36336051	1,29327588	2,59439939	2,29
3,37	3,01036326	2,32102846	1,29699541	2,55080673	2,29
3,38	2,96493949	2,27931933	1,30080039	2,50785938	2,29
3,39	3,00260836	2,27941375	1,3172722	2,52047862	2,28
3,40	2,95729356	2,2380893	1,32134744	2,47782405	2,28
3,41	2,91263258	2,19737145	1,32550761	2,43579183	2,28
3,42	2,86862127	2,15725826	1,32975329	2,39437927	2,28
3,43	2,9044769	2,15620714	1,34703056	2,40563039	2,27
3,44	2,86054065	2,11649231	1,35154786	2,36450843	2,27
3,45	2,81722217	2,07736577	1,35615125	2,32398457	2,27
3,46	2,77451826	2,03882557	1,36084141	2,28405647	2,27
3,47	2,73241294	2,00086103	1,36561855	2,24471167	2,27
3,48	2,76585343	1,99859684	1,38389763	2,25434903	2,26
3,49	2,72379238	1,96103925	1,38895353	2,21529029	2,26
3,50	2,68230744	1,92404401	1,3940988	2,17679849	2,26
3,51	2,64140088	1,88761182	1,39933478	2,13887484	2,26
3,52	2,60105836	1,85173226	1,40466223	2,10150763	2,26
3,53	2,63207998	1,84840444	1,42397406	2,10962962	2,25
3,54	2,59175474	1,81293207	1,42959286	2,07253962	2,25
3,55	2,55197851	1,77800174	1,43530709	2,035994	2,25

3,56	2,512746	1,74360865	1,44111811	1,99998777	2,25
3,57	2,47404398	1,70974256	1,44702719	1,9645097	2,25
3,58	2,43586781	1,67639894	1,45303588	1,92955523	2,25
3,59	2,39820844	1,64357019	1,45914574	1,89511627	2,25
3,60	2,42580341	1,639099107	1,47996866	1,90132852	2,24
3,61	2,38814246	1,60666387	1,48639831	1,86715673	2,24
3,62	2,35099099	1,57474365	1,49293568	1,83349277	2,24
3,63	2,31433702	1,54332078	1,49958263	1,80032619	2,24
3,64	2,27816932	1,51238601	1,50634118	1,76764712	2,24
3,65	2,24248724	1,48193692	1,5132137	1,73545369	2,24
3,66	2,26730329	1,47661699	1,53547149	1,74017909	2,23
3,67	2,231623	1,44656874	1,54270098	1,70825349	2,23
3,68	2,19641558	1,41699342	1,55005348	1,6768008	2,23
3,69	2,16167785	1,38788659	1,55753206	1,64581707	2,23
3,70	2,212740232	1,35924151	1,56513931	1,61529512	2,23
3,71	2,09357924	1,33104946	1,57287863	1,58522605	2,23
3,72	2,06020509	1,303306	1,58075317	1,55560569	2,23
3,73	2,02727647	1,27600663	1,5887664	1,52642991	2,23
3,74	1,99478073	1,2491411	1,59692186	1,49768765	2,23
3,75	2,01563574	1,24297431	1,621623	1,50052812	2,22
3,76	1,98314533	1,21649243	1,63021593	1,4720434	2,22
3,77	1,95108758	1,19043832	1,6389657	1,44398807	2,22
3,78	1,91945282	1,16480363	1,64787675	1,41635336	2,22
3,79	1,88823545	1,13958235	1,65695393	1,38913338	2,22
3,80	1,85743553	1,11477214	1,66620196	1,36232661	2,22
3,81	1,82704157	1,09036339	1,6756263	1,33592278	2,22
3,82	1,79704762	1,06635013	1,68623223	1,30991596	2,22
3,83	1,76745433	1,0427302	1,69502556	1,28430491	2,22
3,84	1,73825321	1,01949595	1,70501237	1,25908171	2,22
3,85	1,75516942	1,01272721	1,73311174	1,26020795	2,21
3,86	1,72598263	0,9898513	1,74367871	1,23522841	2,21
3,87	1,69718618	0,967353512	1,75446324	1,21063107	2,21
3,88	1,66877439	0,945227944	1,76547298	1,18641009	2,21
3,89	1,64073632	0,923465951	1,77671555	1,16255607	2,21
3,90	1,61307577	0,902066892	1,78819973	1,13906985	2,21
3,91	1,58578219	0,881022117	1,79993459	1,11594214	2,21
3,92	1,55885037	0,860326532	1,81192875	1,09316781	2,21
3,93	1,53228096	0,839977713	1,8241924	1,07074546	2,21
3,94	1,50606396	0,819967548	1,83673605	1,04866635	2,21
3,95	1,48019781	0,800292677	1,8495706	1,02692772	2,21
3,96	1,45467719	0,780947691	1,86270759	1,00552419	2,21
3,97	1,42949801	0,761927867	1,87615924	0,984451249	2,21
3,98	1,40465577	0,743228185	1,88993878	0,963704046	2,21
3,99	1,41690851	0,736123151	1,92482536	0,963051603	2,2
4,00	1,39210484	0,717745068	1,93955334	0,942531658	2,2

10. Fe için Modifiye Morse Potansiyeli kullanılarak $m=3.0$ Değeri için hesaplanan a_1 , a_2 (A°) örgü parametreleri, C_{11} , C_{12} Kararlılıkları, C_{11}/C_{12} oranı ve Hacim modülü (B) değerleri.

a_1	C_{11}	C_{12}	C_{11}/C_{12}	B	a_2
2,70	1,04378398	0,822398904	1,26919427	0,896193928	2,48
2,71	1,04325668	0,829725964	1,25735089	0,900902869	2,47
2,72	1,0194939	0,817773618	1,24667007	0,885013711	2,47
2,73	0,996470468	0,805960292	1,23637663	0,869463684	2,47
2,74	0,997680897	0,812810565	1,22744578	0,874434009	2,46
2,75	0,97577558	0,800963522	1,21825221	0,859234208	2,46
2,76	0,978112263	0,807516541	1,21125972	0,864381782	2,45
2,77	0,957224239	0,795643759	1,20308144	0,849503919	2,45
2,78	0,960575314	0,801900678	1,19787318	0,854792223	2,44
2,79	0,940609926	0,790007917	1,19063354	0,840208587	2,44
2,80	0,921216476	0,778258269	1,18368993	0,825911005	2,44
2,81	0,925744807	0,784065313	1,18069859	0,831291811	2,43
2,82	0,907149554	0,772304104	1,17460149	0,817252587	2,43
2,83	0,912452865	0,777823224	1,17308514	0,822699771	2,42
2,84	0,894579495	0,766056078	1,16777286	0,808897217	2,42
2,85	0,87718667	0,754434683	1,16270724	0,795352012	2,42
2,86	0,883354165	0,759524699	1,16303547	0,800801188	2,41
2,87	0,866583133	0,747905311	1,15868028	0,787464585	2,41
2,88	0,873332133	0,752719573	1,16023572	0,79292376	2,4
2,89	0,857121433	0,741107537	1,15654125	0,779778836	2,4
2,90	0,841316936	0,729642346	1,15305388	0,766867209	2,4
2,91	0,848676094	0,734049971	1,15615575	0,772258679	2,39
2,92	0,833351958	0,722599633	1,15326928	0,759517075	2,39
2,93	0,818398174	0,711297606	1,15057069	0,746997795	2,39
2,94	0,826238852	0,715311913	1,15507492	0,75228756	2,38
2,95	0,811694455	0,704030884	1,1529245	0,739918741	2,38
2,96	0,819875097	0,707787875	1,15836273	0,745150282	2,37
2,97	0,805698177	0,696533783	1,1567252	0,732921914	2,37
2,98	0,791840628	0,68542921	1,15524786	0,720899683	2,37
2,99	0,725983925	0,688815845	1,16187816	0,725983925	2,36
3,00	0,786774634	0,677744773	1,16087156	0,71408806	2,36
3,01	0,773519066	0,666820428	1,16001105	0,702386641	2,36
3,02	0,782209452	0,669852886	1,1677332	0,707305075	2,35
3,03	0,769217987	0,658968303	1,1673065	0,695718198	2,35
3,04	0,756495149	0,648231206	1,1670144	0,684319187	2,35
3,05	0,765317022	0,65092359	1,17574019	0,689054734	2,34
3,06	0,752816639	0,640232141	1,17584949	0,677760307	2,34
3,07	0,740563108	0,629686097	1,17608299	0,666645101	2,34
3,08	0,749447033	0,632052471	1,18573547	0,671183991	2,33
3,09	0,737380084	0,621557648	1,18634223	0,660165127	2,33
3,10	0,725543913	0,611208544	1,18706442	0,649320334	2,33

3,11	0,734430587	0,613263643	1,19757725	0,653652625	2,32
3,12	0,722749106	0,60297014	1,19864825	0,642896462	2,32
3,13	0,711281229	0,59282008	1,19982648	0,632307129	2,32
3,14	0,720120215	0,594579209	1,21114261	0,636426211	2,31
3,15	0,708780611	0,584489632	1,21264873	0,625919959	2,31
3,16	0,697641944	0,5745427	1,21425604	0,615575781	2,31
3,17	0,686699851	0,564737412	1,2159631	0,605391558	2,31
3,18	0,695354736	0,566137451	1,22824366	0,609209879	2,3
3,19	0,68451153	0,556397272	1,2302568	0,599102025	2,3
3,20	0,673852061	0,546796231	1,23236413	0,589148174	2,3
3,21	0,682368063	0,547933677	1,24534792	0,592745139	2,29
3,22	0,671789479	0,538401894	1,24774724	0,582864422	2,29
3,23	0,661385387	0,529008145	1,25023668	0,573133893	2,29
3,24	0,651151478	0,519750642	1,25281515	0,563550921	2,29
3,25	0,659392129	0,520575115	1,26666087	0,566847453	2,28
3,26	0,64921923	0,511390526	1,26951751	0,557333427	2,28
3,27	0,639207877	0,502340244	1,27246002	0,547962788	2,28
3,28	0,629355292	0,493423197	1,27548785	0,538733896	2,28
3,29	0,63728525	0,493959583	1,29015667	0,541734805	2,27
3,30	0,627478035	0,485118598	1,29345285	0,532571744	2,27
3,31	0,617821324	0,476408146	1,29683199	0,523545872	2,27
3,32	0,60831389	0,46782781	1,30029442	0,514656503	2,27
3,33	0,61590658	0,468099833	1,31575903	0,517368749	2,26
3,34	0,606432287	0,459598217	1,31948355	0,508542907	2,26
3,35	0,59710007	0,451223925	1,32328992	0,499849307	2,26
3,36	0,587907882	0,442975874	1,32717811	0,491286543	2,26
3,37	0,578851973	0,434851741	1,33114788	0,482851819	2,26
3,38	0,585975122	0,434838264	1,34757028	0,485217216	2,25
3,39	0,576941842	0,426795212	1,35180017	0,476844088	2,25
3,40	0,568040764	0,418874512	1,35611203	0,468596596	2,25
3,41	0,559268403	0,411073859	1,36050588	0,46047204	2,25
3,42	0,550624068	0,4033928	1,36498239	0,45246989	2,25
3,43	0,557267349	0,403127545	1,38235989	0,45450748	2,24
3,44	0,548637661	0,395528666	1,38709962	0,446564998	2,24
3,45	0,54013105	0,388046589	1,3919232	0,43874141	2,24
3,46	0,531745285	0,380679661	1,39683135	0,431034869	2,24
3,47	0,523479067	0,373426848	1,40182494	0,423444254	2,24
3,48	0,515330206	0,36628652	1,40690465	0,415967749	2,24
3,49	0,521384767	0,365771261	1,4254394	0,41764243	2,23
3,50	0,513244105	0,358713046	1,43079297	0,410223399	2,23
3,51	0,505217706	0,351765117	1,43623595	0,40291598	2,23
3,52	0,497303511	0,344925885	1,44176918	0,395718427	2,23
3,53	0,489500473	0,338194323	1,44739411	0,388629706	2,23
3,54	0,481805836	0,331568371	1,45311157	0,381647526	2,23
3,55	0,48728418	0,330842108	1,47286022	0,382989465	2,22
3,56	0,479595207	0,324298117	1,47887139	0,376063814	2,22

3,57	0,472012196	0,317857538	1,48498034	0,369242424	2,22
3,58	0,46453492	0,311519832	1,49118891	0,362524861	2,22
3,59	0,457160192	0,305282556	1,49749858	0,355908434	2,22
3,60	0,449887122	0,299144735	1,50391122	0,349392197	2,22
3,61	0,442714119	0,29310493	1,51042877	0,342974659	2,22
3,62	0,447542531	0,292186161	1,53170338	0,343971618	2,21
3,63	0,440374072	0,286226766	1,53854958	0,337609201	2,21
3,64	0,433303726	0,2803632	1,54550856	0,331343375	2,21
3,65	0,426330707	0,274594508	1,55258279	0,325173241	2,21
3,66	0,419452812	0,268918845	1,5597747	0,319096834	2,21
3,67	0,412669295	0,263335246	1,5670872	0,313113262	2,21
3,68	0,405978074	0,257841982	1,57452278	0,30722068	2,21
3,69	0,399379099	0,25243848	1,58208486	0,301418686	2,21
3,70	0,403512029	0,251357345	1,60533216	0,302075573	2,2
3,71	0,396917494	0,246030982	1,61328257	0,296326486	2,2
3,72	0,39041304	0,240791883	1,62137127	0,290665602	2,2
3,73	0,383998046	0,235639167	1,62960195	0,285092127	2,2
3,74	0,377669857	0,230570736	1,63797828	0,279603776	2,2
3,75	0,37142853	0,22558606	1,64650453	0,274200241	2,2
3,76	0,365272818	0,220683976	1,65518505	0,268880256	2,2
3,77	0,35920082	0,215862771	1,66402395	0,263642121	2,2
3,78	0,353211472	0,211121301	1,67302622	0,258484691	2,2
3,79	0,347304701	0,206459012	1,68219686	0,253407575	2,2
3,80	0,3506533	0,205248795	1,70843049	0,253716963	2,19
3,81	0,344752992	0,200658727	1,71810615	0,248690148	2,19
3,82	0,338933543	0,196145543	1,72796964	0,243741543	2,19
3,83	0,333194434	0,191708385	1,73802745	0,238870401	2,19
3,84	0,327533361	0,187345444	1,7482857	0,23407475	2,19
3,85	0,32195043	0,183056257	1,7587513	0,229354315	2,19
3,86	0,316443986	0,178839354	1,7694315	0,224707565	2,19
3,87	0,311013539	0,174693924	1,78033403	0,220133796	2,19
3,88	0,305657501	0,170618604	1,79146643	0,215631569	2,19
3,89	0,30037541	0,166612592	1,80283738	0,211200198	2,19
3,90	0,295165751	0,162674521	1,81445594	0,206838264	2,19
3,91	0,290028006	0,158803656	1,82633078	0,202545106	2,19
3,92	0,284961303	0,154998957	1,8384724	0,198319739	2,19
3,93	0,279964112	0,151259127	1,8508907	0,194160789	2,19
3,94	0,282387452	0,149971735	1,88293782	0,194110307	2,18
3,95	0,27740133	0,146296638	1,89615656	0,189998202	2,18
3,96	0,272484339	0,142684898	1,90969291	0,185951379	2,18
3,97	0,267635598	0,139135562	1,92355997	0,181968907	2,18
3,98	0,26285465	0,135647898	1,93777164	0,178050149	2,18
3,99	0,25813966	0,132220439	1,95234309	0,174193513	2,18
4,00	0,253491174	0,128852997	1,9672897	0,170399056	2,18

EK.2. FE-25%AL ALAŞIMI İÇİN HESAPLANAN SONUÇLAR

Ek.2.1. Genelleştirilmiş Morse Potansiyeli Kullanılarak Elde Edilen Şekiller

11. Fe-25%Al için Genelleştirilmiş Morse Potansiyeli kullanılarak $m=1.25$ Değeri için hesaplanan a_1 , a_2 (A°) örgü parametreleri, C_{11} , C_{12} Kararlılıkları, C_{11}/C_{12} oranı ve Hacim modülü (B) değerleri.

a_1	C_{11}	C_{12}	C_{11}/C_{12}	B	a_2
2,80	1,22851996	7,70201152	1,59606377	9,22974087	2,91
2,81	1,21521377	7,73547523	1,57096201	9,20769606	2,9
2,82	1,193748951	7,66470308	1,55712425	9,0881004	2,9
2,83	1,18102994	7,69727886	1,53432741	9,06835236	2,89
2,84	1,16016095	7,62683808	1,52115587	8,9517619	2,89
2,85	1,14850817	7,65871459	1,49960958	8,93417031	2,88
2,86	1,1284549	7,58839902	1,48707902	8,82044901	2,88
2,87	1,11757049	7,61946602	1,46673072	8,80487898	2,87
2,88	1,09829488	7,54937463	1,4548157	8,69389934	2,87
2,89	1,08814276	7,57963418	1,43561382	8,68023197	2,86
2,90	1,06960895	7,50975842	1,42429209	8,57186878	2,86
2,91	1,06015365	7,53920285	1,40618799	8,55998075	2,85
2,92	1,04232696	7,46954815	1,39543509	8,45412197	2,85
2,93	1,03353436	7,49817104	1,37838195	8,44389523	2,84
2,94	1,01638151	7,42873598	1,36817557	8,34042901	2,84
2,95	1,00821919	7,45653728	1,35212788	8,3317555	2,83
2,96	1,00038637	7,48393484	1,33671176	8,32391113	2,82
2,97	0,984145187	7,41430434	1,32736012	8,2233535	2,82
2,98	0,976895896	7,44087404	1,31287788	8,21690235	2,81
2,99	0,961251277	7,37146432	1,30401673	8,11848047	2,81
3,00	0,954556427	7,39721286	1,29042715	8,11333	2,8

12. Fe-25%Al için Genelleştirilmiş Morse Potansiyeli kullanılarak $m=1.5$ Değeri için hesaplanan a_1 , a_2 (A°) örgü parametreleri, C_{11} , C_{12} Kararlılıkları, C_{11}/C_{12} oranı ve Hacim modülü (B) değerleri.

a_1	C_{11}	C_{12}	C_{11}/C_{12}	B	a_2
2,80	8,90010637	5,07406421	1,75403897	6,34941159	2,9
2,81	8,75948275	5,02782943	1,74219966	6,27171387	2,9
2,82	8,67868685	5,03894869	1,72232094	6,25219475	2,89
2,83	8,5426727	4,99317897	1,71086852	6,17634355	2,89
2,84	8,46582758	5,00415366	1,69176012	6,15814496	2,88
2,85	8,33424648	4,95883172	1,6806875	6,08396997	2,88
2,86	8,2611958	4,96965103	1,66232916	6,06683262	2,87
2,87	8,13387714	4,92476143	1,65162866	5,99446667	2,87
2,88	8,06447553	4,93542271	1,63399895	5,97844032	2,86
2,89	7,94125629	4,89095192	1,62366272	5,90772004	2,86
2,90	7,87536068	4,90144367	1,60674308	5,89274934	2,85
2,91	7,75608475	4,85738924	1,59676327	5,82361441	2,85
2,92	7,6935561	4,86769815	1,5805327	5,8096508	2,84
2,93	7,57807102	4,82402649	1,57090162	5,74204133	2,84
2,94	7,51877662	4,83416996	1,55533973	5,72903884	2,83
2,95	7,40693727	4,79087909	1,54604972	5,66289849	2,83
2,96	7,35074684	4,80084103	1,53113732	5,65080963	2,82
2,97	7,24241386	4,75792342	1,52217958	5,5860869	2,82
2,98	7,18920246	4,76769975	1,50789749	5,57486732	2,81
2,99	7,08423921	4,72514261	1,49926464	5,5115081	2,81
3,00	7,03388718	4,73473337	1,48559309	5,50111797	2,8

13. Fe-25%Al için Genelleştirilmiş Morse Potansiyeli kullanılarak $m=2.0$ Değeri için hesaplanan a_1 , a_2 (A°) örgü parametreleri, C_{11} , C_{12} Kararlılıkları, C_{11}/C_{12} oranı ve Hacim modülü (B) değerleri.

a_1	C_{11}	C_{12}	C_{11}/C_{12}	B	a_2
2,80	2,11341191	1,12129213	1,88480045	1,45199872	2,97
2,81	2,08102574	1,11080696	1,87343599	1,43421322	2,97
2,82	2,06216802	1,11239572	1,85380793	1,42898649	2,96
2,83	2,03079005	1,10204856	1,84274099	1,41162905	2,96
2,84	1,99998404	1,09183185	1,83176928	1,39454925	2,96
2,85	1,98234677	1,09343672	1,81295062	1,38974007	2,95
2,86	1,95249249	1,0833503	1,80833503	1,37306436	2,95
2,87	1,93562989	1,08496358	1,78405059	1,36851901	2,94
2,88	1,90669253	1,07500304	1,77366245	1,35223287	2,94
2,89	1,89057643	1,07662296	1,75602463	1,34794078	2,93
2,90	1,86252303	1,06678331	1,74592443	1,33202988	2,93
2,91	1,84712539	1,06840767	1,72885822	1,32798024	2,92
2,92	1,81992384	1,05868495	1,71904185	1,31243121	2,92
2,93	1,80521814	1,06031147	1,70253571	1,30861369	2,91
2,94	1,77883778	1,05070267	1,69299824	1,29341437	2,91
2,95	1,76479816	1,05232931	1,67703983	1,28981893	2,9
2,96	1,73920909	1,0428306	1,6677772	1,27495676	2,9
2,97	1,72581128	1,04445626	1,65235381	1,2715746	2,89
2,98	1,70098433	1,03506346	1,64336237	1,25703708	2,89
2,99	1,68820427	1,03668674	1,62846134	1,25385925	2,88
3,00	1,66411186	1,02739671	1,61973641	1,2396351	2,88

14. Fe-25%Al için Genelleştirilmiş Morse Potansiyeli kullanılarak $m=2.5$ Değeri için hesaplanan a_1 , a_2 (A°) örgü parametreleri, C_{11} , C_{12} Kararlılıkları, C_{11}/C_{12} oranı ve Hacim modülü (B) değerleri.

a_1	C_{11}	C_{12}	C_{11}/C_{12}	B	a_2
2,80	5,96084442	2,96934536	2,0074608	3,96651172	3,08
2,81	5,87010042	2,94135314	1,99571427	3,91760223	3,08
2,82	5,78098595	2,91372872	1,98405085	3,86948113	3,08
2,83	5,72752553	2,91709704	1,96343332	3,85390653	3,07
2,84	5,64113128	2,88986712	1,95203829	3,80695517	3,07
2,85	5,58985886	2,89331105	1,93199375	3,79216032	3,06
2,86	5,50608849	2,8664612	1,92086622	3,74633696	3,06
2,87	5,45692618	2,86997208	1,90138651	3,73229011	3,05
2,88	5,37568618	2,84348945	1,8905244	3,68755503	3,05
2,89	5,32855865	2,8475906	1,87160103	3,67422559	3,04
2,90	5,24976144	2,82093082	1,86100325	3,63051403	3,04
2,91	5,17235436	2,79512946	1,8504883	3,58753776	3,04
2,92	5,12815419	2,79876552	1,832291	3,57522841	3,03
2,93	5,05305671	2,77329869	1,8220384	3,53321803	3,03
2,94	5,01071302	2,77697621	1,80437737	3,52155514	3,02
2,95	4,93784237	2,75183221	1,79438352	3,48050226	3,02
2,96	4,89728962	2,75554562	1,77724861	3,46946029	3,01
2,97	4,82656861	2,73071348	1,76751191	3,42933186	3,01
2,98	4,78774328	2,73445777	1,75089312	3,41888627	3
2,99	4,71909579	2,70992755	1,74141032	3,37965029	3
3,00	4,68193663	2,71369778	1,72529774	3,36977739	2,99

15. Fe-25%Al için Genelleştirilmiş Morse Potansiyeli kullanılarak $m=3.0$ Değeri için hesaplanan a_1 , a_2 (A°) örgü parametreleri, C_{11} , C_{12} Kararlılıkları, C_{11}/C_{12} oranı ve Hacim modülü (B) değerleri.

a_1	C_{11}	C_{12}	C_{11}/C_{12}	B	a_2
2,80	2,20317109	0,887459284	2,4825602	1,32602989	3,47
2,81	2,16763921	0,879699706	2,46406723	1,30901288	3,47
2,82	2,13274701	0,872038182	2,4457037	1,29227446	3,47
2,83	2,10793749	0,87408221	2,41160095	1,2853673	3,46
2,84	2,07417047	0,66518616	2,39368253	1,26906923	3,46
2,85	2,04100958	0,859048378	2,37589597	1,25303545	3,46
2,86	2,0176663	0,861100843	2,34312429	1,24662266	3,45
2,87	1,98557093	0,853721714	2,32578239	1,23100479	3,45
2,88	1,96316277	0,855777975	2,29400946	1,22490624	3,44
2,89	1,93509608	0,848486175	2,27710967	1,20968948	3,44
2,90	1,90158448	0,841280942	2,26034418	1,19471546	3,44
2,91	1,88051929	0,843335382	2,22985936	1,18906335	3,43
2,92	1,85098204	0,836211888	2,21353232	1,1744686	3,43
2,93	1,8307744	0,838263216	2,18400899	1,16910028	3,42
2,94	1,80217792	0,831217877	2,16811738	1,15487123	3,42
2,95	1,78279909	0,833264085	2,1395367	1,14977575	3,41
2,96	1,75511096	0,826293836	2,12407607	1,13589954	3,41
2,97	1,727914	0,819402501	2,10874875	1,1222396	3,41
2,98	1,70972105	0,821434092	2,08138555	1,11752974	3,4
2,99	1,68338442	0,814612915	2,06648384	1,10420342	3,4
3,00	1,6659506	0,816633597	2,04002212	1,09973927	3,39

Ek.2.2. Modifiye Morse Potansiyeli Kullanılarak Elde Edilen Şekiller

16. Fe-25%Al için Modifiye Morse Potansiyeli kullanılarak $m=1.25$ Değeri için hesaplanan a_1 , a_2 (A°) örgü parametreleri, C_{11} , C_{12} Kararlılıkları, C_{11}/C_{12} oranı ve Hacim modülü (B) değerleri.

a_1	C_{11}	C_{12}	C_{11}/C_{12}	B	a_2
2,70	1,29235475	1,0178084	1,26974267	1,10932385	2,52
2,71	1,28802332	1,02687576	1,25431271	1,11392495	2,51
2,72	1,25748455	1,01329722	1,24098293	1,094693	2,51
2,73	1,25501054	1,02197825	1,22802079	1,09965568	2,5
2,74	1,22410055	1,00832626	1,21597602	1,08091769	2,5
2,75	1,22532374	1,01662363	1,20528748	1,08619034	2,49
2,76	1,1979046	1,00290706	1,19443232	1,06790624	2,49
2,77	1,17132244	0,989330978	1,18395407	1,0499948	2,49
2,78	1,17261456	0,997047268	1,17608723	1,0555697	2,48
2,79	1,14733701	0,983417667	1,16668334	1,03805745	2,48
2,80	1,14997473	0,990760104	1,16069947	1,04383165	2,47
2,81	1,12588701	0,977084199	1,15229272	1,02668514	2,47
2,82	1,12974687	0,984057544	1,1480496	1,03262065	2,46
2,83	1,1067412	0,97034117	1,14056915	1,01580875	2,46
2,84	1,0843897	0,95677375	1,13338153	0,9993124	2,46
2,85	1,08968639	0,963200721	1,13131808	1,00536261	2,45
2,86	1,06827849	0,949604677	1,1249718	0,989162613	2,45
2,87	1,07452407	0,955673854	1,12436274	0,995290592	2,44
2,88	1,05397208	0,942056004	1,11879981	0,979361362	2,44
2,89	1,06106917	0,947771591	1,11954102	0,985537452	2,43
2,90	1,04129529	0,934140042	1,11471005	0,969858458	2,43
2,91	1,02203595	0,920662026	1,11010982	0,954453335	2,43
2,92	1,03008303	0,92586788	1,11255941	0,960606262	2,42
2,93	1,01149635	0,912385883	1,10862783	0,945422684	2,42
2,94	1,02018427	0,917251904	1,11221821	0,951562692	2,41
2,95	1,00220329	0,903771105	1,10891274	0,936581834	2,41
2,96	0,98466175	0,89044818	1,10580466	0,921852703	2,41
2,97	0,994023587	0,894831408	1,11085013	0,927895468	2,4
2,98	0,977004211	0,881520011	1,10831768	0,913348078	2,4
2,99	0,986832985	0,885579232	1,11433619	0,919330483	2,39
3,00	0,970281087	0,872284273	1,11234504	0,904949878	2,39
3,01	0,95410649	0,859149581	1,1105243	0,890801884	2,39
3,02	0,964383234	0,862754408	1,11779578	0,896630684	2,38
3,03	0,948607636	0,849644623	1,11647577	0,882632294	2,38
3,04	0,933176333	0,836694683	1,11531285	0,868855233	2,38
3,05	0,943787257	0,839862461	1,12374026	0,87450406	2,37
3,06	0,928696241	0,826946544	1,12304265	0,86086311	2,37
3,07	0,9395548	0,82981523	1,13224579	0,866395087	2,36
3,08	0,924766362	0,816938902	1,13198963	0,852881388	2,36
3,09	0,910277138	0,804222721	1,1187196	0,839574187	2,36

3,10	0,921305202	0,806682715	1,14209117	0,844890211	2,35
3,11	0,907070733	0,794013455	1,14238698	0,831699181	2,35
3,12	0,903112785	0,781504378	1,14281226	0,818707181	2,35
3,13	0,904229548	0,793573737	1,15398144	0,823792341	2,34
3,14	0,890484867	0,771118536	1,15479634	0,810907313	2,34
3,15	0,876994885	0,758821423	1,1557329	0,798212577	2,34
3,16	0,888130056	0,760517919	1,16779636	0,803055298	2,33
3,17	0,874816903	0,74828114	1,1691019	0,790459728	2,33
3,18	0,861739955	0,736201241	1,17052228	0,778047479	2,33
3,19	0,872833069	0,737543392	1,18343284	0,782639951	2,32
3,20	0,85990166	0,725529872	1,18520504	0,770320468	2,32
3,21	0,84719305	0,713673852	1,18708714	0,758180252	2,32
3,22	0,858187194	0,714676687	1,2008048	0,762513523	2,31
3,23	0,845594706	0,70289087	1,20302417	0,750458815	2,31
3,24	0,833212111	0,691261868	1,20534945	0,738578616	2,31
3,25	0,821032845	0,679787004	1,20777955	0,726868951	2,31
3,26	0,831772232	0,680389846	1,2224939	0,730850641	2,3
3,27	0,819680337	0,668991574	1,22524763	0,719221162	2,3
3,28	0,807780747	0,657746577	1,22810331	0,707757967	2,3
3,29	0,818326177	0,658050064	1,24356219	0,711475435	2,29
3,30	0,806494275	0,64688563	1,24673395	0,700088512	2,29
3,31	0,79487413	0,635872668	1,25000518	0,688863155	2,29
3,32	0,783371563	0,625009358	1,25337573	0,67779676	2,29
3,33	0,793566893	0,6249664	1,269777529	0,681166564	2,28
3,34	0,782142655	0,614188838	1,27345632	0,670173444	2,28
3,35	0,770887022	0,603559018	1,27723553	0,65933502	2,28
3,36	0,759796166	0,59307509	1,28111293	0,648658786	2,28
3,37	0,769600979	0,592712179	1,29843962	0,651675113	2,27
3,38	0,758543458	0,582318624	1,30262614	0,641060235	2,27
3,39	0,747643156	0,572068926	1,30691097	0,630593669	2,27
3,40	0,736897983	0,561962155	1,31129468	0,620274097	2,27
3,41	0,746284786	0,56130689	1,3295486	0,622966189	2,26
3,42	0,735560372	0,551293622	1,3342443	0,612715872	2,26
3,43	0,724983476	0,541420319	1,33904002	0,602608038	2,26
3,44	0,714553288	0,53168676	1,34393658	0,59264227	2,26
3,45	0,704265895	0,522090438	1,34893467	0,58281559	2,26
3,46	0,713080214	0,521125588	1,36834619	0,585110463	2,25
3,47	0,702801602	0,511624965	1,37366558	0,575350511	2,25
3,48	0,69266056	0,502259322	1,37908951	0,565726401	5,25
3,49	0,682655759	0,493027787	1,38461924	0,556237111	2,25
3,50	0,672784287	0,483928516	1,39025551	0,54688044	2,25
3,51	0,681014269	0,482691505	1,41086856	0,548799093	2,24
3,52	0,671143442	0,473689389	1,41684289	0,539507407	2,24
3,53	0,661401967	0,46481732	1,42292883	0,530344554	2,24
3,54	0,651787593	0,456073663	1,42912789	0,521311639	2,24
3,55	0,642297957	0,447456658	1,43544173	0,512403757	2,24

3,56	0,649942402	0,445982546	1,45732699	0,513969165	2,23
3,57	0,640449183	0,437464241	1,46400351	0,505125888	2,23
3,58	0,631077361	0,429070309	1,47080175	0,496405993	2,23
3,59	0,62182596	0,420799808	1,47772396	0,487808525	2,23
3,60	0,612692935	0,412651056	1,48477249	0,479331682	2,23
3,61	0,6036763	0,404622476	1,4919495	0,47097375	2,23
3,62	0,594773282	0,396711878	1,49925759	0,462732349	2,23
3,63	0,601590626	0,394989372	1,52305522	0,463856457	2,22
3,64	0,592680445	0,387176837	1,53077454	0,45567804	2,22
3,65	0,583882305	0,379480598	1,53863546	0,4476145	2,22
3,66	0,575194413	0,371899066	1,54664119	0,436334181	2,22
3,67	0,666617022	0,364431897	1,55479536	0,431826939	2,22
3,68	0,55814543	0,357075752	1,5631009	0,424098978	2,22
3,69	0,549781102	0,349830955	1,57156219	0,416481004	2,22
3,70	0,555806146	0,347911525	1,59755026	0,417209732	2,21
3,71	0,547432302	0,340762249	1,6064934	0,409652267	2,21
3,72	0,539162814	0,333721449	1,61560731	0,402201904	2,21
3,73	0,530996884	0,326788086	1,62489671	0,394857685	2,21
3,74	0,522932176	0,319960237	1,63436614	0,38761755	2,21
3,75	0,514966399	0,313235926	1,64402087	0,380479417	2,21
3,76	0,507100622	0,306615241	1,65386633	0,373443702	2,21
3,77	0,499331852	0,300095789	1,66390823	0,36650781	2,21
3,78	0,504504698	0,298016951	1,69287249	0,3668462	2,2
3,79	0,496728987	0,291590719	1,7031436	0,359970138	2,2
3,80	0,489048827	0,285263517	1,71437565	0,353191953	2,2
3,81	0,481463661	0,279034395	1,72546349	0,346510817	2,2
3,82	0,473871558	0,272901633	1,73678535	0,339924941	2,2
3,83	0,466572665	0,266864697	1,74834915	0,33343402	2,2
3,84	0,459265013	0,260921855	1,76016307	0,327036241	2,2
3,85	0,452048213	0,255072237	1,77223605	0,320730895	2,2
3,86	0,444919432	0,249313677	1,78457691	0,314515596	2,2
3,87	0,437879075	0,243645759	1,79719556	0,308390197	2,2
3,88	0,43092524	0,238066787	1,8101023	0,302352938	2,2
3,89	0,435040465	0,235873052	1,84438393	0,302262189	2,19
3,90	0,428083168	0,230381226	1,85815127	0,296281873	2,19
3,91	0,421212058	0,224976697	1,8722475	0,290388484	2,19
3,92	0,414426196	0,219658214	1,88668654	0,284580875	2,19
3,93	0,407723641	0,214424173	1,9014817	0,278857329	2,19
3,94	0,401104738	0,209274118	1,91664761	0,273217658	2,19
3,95	0,394567799	0,204206513	1,93219988	0,267660275	2,19
3,96	0,388111118	0,199219815	1,9481552	0,262183583	2,19
3,97	0,381735008	0,194313622	1,96450335	0,256787417	2,19
3,98	0,375437785	0,189486383	1,9813444	0,251470184	2,19
3,99	0,369219149	0,184737366	1,99861651	0,246231293	2,19
4,00	0,368307752	0,180065095	2,01636815	0,241069237	2,19

17. Fe-25%Al için Modifiye Morse Potansiyeli kullanılarak $m=1.5$ Değeri için hesaplanan a_1 , a_2 (A°) örgü parametreleri, C_{11} , C_{12} Kararlılıkları, C_{11}/C_{12} oranı ve Hacim modülü (B) değerleri.

a_1	C_{11}	C_{12}	C_{11}/C_{12}	B	a_2
2,7	5,49669386	4,12637591	1,33208752	4,58314856	2,5
2,71	5,37048024	4,07292717	1,31857998	4,50544486	2,5
2,72	5,35477679	4,10594367	1,30415252	4,52222138	2,49
2,73	5,23513232	4,05224462	1,29190925	4,44654052	2,49
2,74	5,22618808	4,08379628	1,27973771	4,46459355	2,48
2,75	5,11257234	4,02987907	1,26866644	4,39077683	2,48
2,76	5,1098143	4,05998201	1,25858053	4,40992611	2,47
2,77	5,00171896	4,02586806	1,24859803	4,33781836	2,47
2,78	4,89677907	3,95232277	1,23896234	4,26714153	2,47
2,79	4,90156963	3,98025602	1,23147094	4,25736056	2,46
2,8	4,80147706	3,92655398	1,22282212	4,21819501	2,46
2,81	4,81119046	3,95308309	1,21707294	4,23911888	2,45
2,82	4,71553423	3,89925506	1,20934234	4,17134812	2,45
2,83	4,62253753	3,84601166	1,20190419	4,10485362	2,45
2,84	4,63810812	3,87046196	1,1983345	4,12634401	2,44
2,85	4,54899003	3,81712583	1,19173183	4,06108067	2,44
2,86	4,56842487	3,84022019	1,18962576	4,08265508	2,43
2,87	4,4828509	3,7868217	1,183803	4,01883143	2,43
2,88	4,50576296	3,80857192	1,18305839	4,04096893	2,42
2,89	4,42341484	3,75513589	1,17796399	3,97789554	2,42
2,9	4,34317839	3,70230418	1,17310145	3,91592891	2,42
2,91	4,37005242	3,72212016	1,17407613	3,93809758	2,41
2,92	4,29262686	3,66928652	1,16988053	3,87706663	2,41
2,93	4,21711515	3,61705722	1,16589672	3,81707653	2,41
2,94	4,24728635	3,63500473	1,16844039	3,8390986	2,4
2,95	4,17421719	3,58280763	1,16506875	3,77994415	2,4
2,96	4,20662811	3,59950598	1,16866818	3,80188002	2,39
2,97	4,13577211	3,54736415	1,16587188	3,74350013	2,39
2,98	4,06655863	3,4958356	1,16325797	3,68607661	2,39
2,99	4,10129987	3,51076893	1,16820559	3,70761258	2,38
3	4,03400023	3,45932756	1,16612265	3,65088512	2,38
3,01	3,96820011	3,40849779	1,16420792	3,59506523	2,38
3,02	4,00479526	3,42174117	1,1703969	3,61609253	2,37
3,03	3,94064527	3,3710289	1,16897404	3,56090102	2,37
3,04	3,9785428	3,38311395	1,17600023	3,58159023	2,36
3,05	3,91588261	3,33254448	1,17504286	3,52699052	2,36
3,06	3,85452192	3,28259773	1,17423272	3,47323246	2,36
3,07	3,89356546	3,29309077	1,1823438	3,493249	2,35
3,08	3,83347672	3,24330059	1,18196776	3,44002597	2,35
3,09	3,77459466	3,19412801	1,1817293	3,38761689	2,35

3,1	3,81442884	3,20311374	1,19085026	3,40688544	2,34
3,11	3,75662682	3,15412997	1,19101839	3,35496225	2,34
3,12	3,69993932	3,10575972	1,191311538	3,30381959	2,34
3,13	3,74025422	3,1132963	1,20138074	3,32228228	2,33
3,14	3,68448385	3,06513993	1,20206057	3,2715879	2,33
3,15	3,62975121	3,01759611	1,20286184	3,22164781	2,33
3,16	3,67027002	3,02374648	1,21381539	3,23925433	2,32
3,17	3,61631255	2,9764403	1,21497903	3,18973105	2,32
3,18	3,56331535	2,92973747	1,21625756	3,1409301	2,32
3,19	3,51125631	2,88363497	1,21764937	3,09284208	2,32
3,2	3,55145821	2,88812854	1,22967457	3,10923843	2,31
3,21	3,50001862	2,84229042	1,23140781	3,06153316	2,31
3,22	3,44945063	2,7970428	1,23324914	3,01451208	2,31
3,23	3,48936253	2,80030769	1,24606397	3,02999264	2,3
3,24	3,43930668	2,75534113	1,24823262	2,98332965	2,3
3,25	3,39007823	2,71096609	1,25050558	2,9373368	2,3
3,26	3,34164603	2,66716862	1,25288143	2,89199443	2,3
3,27	3,38071622	2,66898577	1,26666701	2,90622925	2,29
3,28	3,33268639	2,62549168	1,26935705	2,86122325	2,29
3,29	3,28541632	2,58257532	1,27214734	2,81685565	2,29
3,3	3,23888254	2,54022635	1,27503698	2,77311175	2,29
3,31	3,27689156	2,54070831	1,28975513	2,78610273	2,28
3,32	3,23066622	2,49867909	1,29294964	2,7426748	2,28
3,33	3,18514246	2,45721346	1,29624166	2,69985646	2,28
3,34	3,14030387	2,41630451	1,29963058	2,65763763	2,28
3,35	3,17707252	2,41555494	1,31525575	2,66939413	2,27
3,36	3,13246217	2,37497706	1,31864418	2,62747209	2,27
3,37	3,08850783	2,33495136	1,32272898	2,58613685	2,27
3,38	3,04519525	2,29547115	1,32661012	2,54537919	2,27
3,39	3,08058658	2,29359225	1,34312739	2,55592369	2,26
3,4	3,037446	2,25445847	1,34730626	2,51545431	2,26
3,41	2,9949142	2,215859	1,35158158	2,47554406	2,26
3,42	2,95298735	2,17779336	1,35595388	2,43619136	2,26
3,43	2,91164386	2,14024886	1,36042304	2,39738053	2,26
3,44	2,94509441	2,13717286	1,37803285	2,40648005	2,25
3,45	2,90386345	2,09998349	1,38280299	2,36794348	2,25
3,46	2,8632009	2,06331269	1,38767183	2,32994209	2,25
3,47	2,82309596	2,02715427	1,39263992	2,29246817	2,25
3,48	2,78353333	1,99149858	1,39770791	2,25551016	2,25
3,49	2,81495952	1,9873651	1,41642797	2,2632299	2,24
3,5	2,77546594	1,95207067	1,42180608	2,22653576	2,24
3,51	2,73649988	1,91727346	1,427872	2,19034894	2,24
3,52	2,69805564	1,88296975	1,43287253	2,15466504	2,24
3,53	2,66011938	1,84915056	1,43856289	2,1194735	2,24
3,54	2,68947783	1,84408817	1,45843235	2,12588472	2,23
3,55	2,65157982	1,81063394	1,46444831	2,09094923	2,23

3,56	2,61417812	1,77765809	1,47057419	2,0564981	2,23
3,57	2,57726438	1,74515465	1,4781146	2,02252456	2,23
3,58	2,54082584	1,71311475	1,4831615	1,98921845	2,23
3,59	2,50485818	1,68153498	1,48962597	1,95597605	2,23
3,6	2,53169329	1,67557339	1,51094145	1,96064669	2,22
3,61	2,49574277	1,64435998	1,51775937	1,92815425	2,22
3,62	2,46025043	1,61359783	1,52469865	1,89581536	2,22
3,63	2,42521325	1,58328357	1,53176178	1,8639268	2,22
3,64	2,39061934	1,5534087	1,53895066	1,83247891	2,22
3,65	2,35646182	1,52396762	1,54626765	1,80146569	2,22
3,66	2,32273361	1,49495451	1,55371525	1,77088087	2,22
3,67	2,34667285	1,48818259	1,57687159	1,77434601	2,21
3,68	2,31294846	1,45953186	1,5847194	1,74400406	2,21
3,69	2,27965106	1,43130476	1,59270836	1,71408686	2,21
3,7	2,2467669	1,40349153	1,60084108	1,68458332	2,21
3,71	2,2142931	1,37608855	1,60912108	1,65549007	2,21
3,72	2,18222383	1,34909059	1,61755174	1,62680167	2,21
3,73	2,15055595	1,32249394	1,62613672	1,59851461	2,21
3,74	2,11928018	1,29629139	1,63487947	1,57062098	2,21
3,75	2,08838757	1,27047559	1,6437841	1,54311291	2,21
3,76	2,10877804	1,26299305	1,66966717	1,54492138	2,2
3,77	2,07788608	1,23752837	1,67906137	1,5176476	2,2
3,78	2,04737397	1,21244425	1,68863349	1,49075416	2,2
3,79	2,01724214	1,18773901	1,69838838	1,46424005	2,2
3,8	1,98747911	1,16340397	1,70833104	1,43509568	2,2
3,81	1,95808247	1,1394357	1,71846684	1,41231795	2,2
3,82	1,9290446	1,11582777	1,72880139	1,38690005	2,2
3,83	1,90036602	1,09257838	1,73934068	1,36184093	2,2
3,84	1,87203903	1,0696811	1,75009079	1,33713374	2,2
3,85	1,84406186	1,04713273	1,76105838	1,31277577	2,2
3,86	1,83287297	1,01693826	1,80234439	1,2889165	2,19
3,87	1,93287297	1,01693826	1,80234439	1,2889165	2,19
3,88	1,80523874	0,995059744	1,81420136	1,26511941	2,19
3,89	1,77794456	0,973517437	1,82630993	1,24168981	2,19
3,9	1,75098308	0,952304997	1,83867887	1,21853102	2,19
3,91	1,72435235	0,931419608	1,85131636	1,19573052	2,19
3,92	1,69804872	0,910856705	1,86423255	1,17325404	2,19
3,93	1,67206454	0,890610252	1,87743688	1,15109501	2,19
3,94	1,64640117	0,870678753	1,89093988	1,12925289	2,19
3,95	1,62105189	0,851056428	1,90475254	1,10772158	2,19
3,96	1,59601011	0,831737529	1,91888673	1,08649505	2,19
3,97	1,57127699	0,812720716	1,93335418	1,06557281	2,19
3,98	1,54684591	0,794000171	1,94816824	1,04494875	2,19
3,99	1,52271565	0,775573282	1,96334207	1,02462074	2,19
4	1,49888008	0,757434521	1,97889063	1,00458304	2,19

18. Fe-25%Al için Modifiye Morse Potansiyeli kullanılarak $m=2.0$ Değeri için hesaplanan a_1 , a_2 (A°) örgü parametreleri, C_{11} , C_{12} Kararlılıkları, C_{11}/C_{12} oranı ve Hacim modülü (B) değerleri.

a_1	C_{11}	C_{12}	C_{11}/C_{12}	B	a_2
2,7	2,43358418	1,84893923	1,3164192	2,04362088	2,45
2,71	2,38015117	1,82376979	1,30507215	2,00923025	2,45
2,72	2,37787296	1,83764817	1,29397618	2,0177231	2,44
2,73	2,32705127	1,81269973	1,28374889	1,98415025	2,44
2,74	2,32741617	1,82593079	1,27464644	1,99309258	2,43
2,75	2,27898614	1,80091769	1,26545825	1,96027384	2,43
2,76	2,23195459	1,77618355	1,25660132	1,92810723	2,43
2,77	2,23551486	1,7884435	1,2499779	1,93746729	2,42
2,78	2,19057412	1,76365761	1,24206315	1,90596312	2,42
2,79	2,19622082	1,77529072	1,23710488	1,91560076	2,41
2,8	2,15319621	1,75047158	1,23006636	1,88471312	2,41
2,81	2,11134569	1,72593292	1,22330693	1,85440384	2,41
2,82	2,11945063	1,73664136	1,22043082	1,86424445	2,4
2,83	2,0782721	1,71208383	1,21446862	1,83447992	2,4
2,84	2,08899689	1,72218564	1,2129917	1,84445605	2,39
2,85	2,05034094	1,69762055	1,2077734	1,81516401	2,39
2,86	2,01268115	1,67334121	1,20279184	1,78645452	2,39
2,87	2,02425313	1,6825661	1,20307493	1,7964618	2,38
2,88	1,98791831	1,65829507	1,19877237	1,76816949	2,38
2,89	1,95248921	1,63431153	1,19468607	1,74037075	2,38
2,9	1,96559576	1,64268767	1,19657303	1,7503237	2,37
2,91	1,93131843	1,61872762	1,19310896	1,72292456	2,37
2,92	1,94546401	1,62654005	1,19607508	1,73284803	2,36
2,93	1,91223059	1,60261395	1,19319477	1,7058195	2,36
2,94	1,87977151	1,57897676	1,19049979	1,67924168	2,36
2,95	1,89500407	1,58599159	1,19483866	1,68899575	2,35
2,96	1,86344795	1,5624026	1,19268104	1,66275105	2,35
2,97	1,83259865	1,53910142	1,19069389	1,63693383	2,35
2,98	1,84869079	1,54534882	1,19629353	1,64646281	2,34
2,99	1,81862315	1,52211138	1,19480294	1,62094863	2,34
3	1,78920208	1,49916021	1,19346956	1,59584084	2,34
3,01	1,80595461	1,50467215	1,2002313	1,60509964	2,33
3,02	1,77720376	1,48179565	1,1993582	1,58026502	2,33
3,03	1,74905148	1,4592076	1,19863101	1,55582223	2,33
3,04	1,76628583	1,46401383	1,206468	1,56477116	2,32
3,05	1,73870584	1,4415107	1,20616923	1,54057574	2,32
3,06	1,71167704	1,41929392	1,20600604	1,51675496	2,32
3,07	1,72923753	1,42342574	1,21484211	1,525363	2,31
3,08	1,70269789	1,40130557	1,21507966	1,50176968	2,31
3,09	1,6766679	1,37946938	1,21544409	1,47853555	2,31

3,1	1,69441737	1,38295771	1,22521272	1,48677759	2,3
3,11	1,66880578	1,36120377	1,2259362	1,49375577	2,3
3,12	1,64366716	1,33978535	1,2268138	1,44107928	2,3
3,13	1,66148459	1,34266046	1,237457	1,44893517	2,29
3,14	1,63669671	1,321331	1,23867275	1,42645291	2,29
3,15	1,61235355	1,30028367	1,24000138	1,40430669	2,29
3,16	1,58844047	1,27951338	1,24144107	1,38248908	2,29
3,17	1,60608663	1,28165369	1,2531362	1,389798	2,28
3,18	1,58245541	1,26101103	1,25491005	1,36815916	2,28
3,19	1,55922637	1,24064238	1,25678954	1,34683704	2,28
3,2	1,53639187	1,22054615	1,25877809	1,32582806	2,28
3,21	1,55373127	1,22200814	1,27145738	1,33258252	2,27
3,22	1,53111904	1,20204818	1,27375846	1,31173847	2,27
3,23	1,50887759	1,18235732	1,2761604	1,29119741	2,27
3,24	1,52596946	1,1833119	1,28957501	1,29753109	2,26
3,25	1,50391371	1,16376521	1,29228275	1,27714804	2,26
3,26	1,48220753	1,14448414	1,29508787	1,2570586	2,26
3,27	1,46084505	1,12546697	1,29799016	1,23725966	2,26
3,28	1,47744196	1,12583213	1,31231106	1,24303541	2,25
3,29	1,45622155	1,10696447	1,31550884	1,22338349	2,25
3,3	1,43532904	1,08835851	1,31880169	1,20401535	2,25
3,31	1,41475271	1,07000804	1,32218886	1,18492293	2,25
3,32	1,39448738	1,0519113	1,32567012	1,16610333	2,25
3,33	1,41031444	1,05163851	1,3410639	1,17119715	2,24
3,34	1,39015227	1,03369808	1,34483395	1,15251614	2,24
3,35	1,37029074	1,01601037	1,34869759	1,13410383	2,24
3,36	1,35071723	0,998568034	1,35265419	1,1159511	2,24
3,37	1,36590888	0,997810615	1,36890595	1,12051004	2,23
3,38	1,34641552	0,980530787	1,37314966	1,10249236	2,23
3,39	1,32720205	0,963495129	1,37748703	1,08473077	2,23
3,4	1,30826251	0,946700376	1,38191823	1,06822109	2,23
3,41	1,2895914	0,930143566	1,38644339	1,04995951	2,23
3,42	1,27118326	0,91382152	1,39106295	1,0329421	2,23
3,43	1,2852821	0,912480208	1,40855888	1,0367475	2,22
3,44	1,26692494	0,896322622	1,41346978	1,01985673	2,22
3,45	1,24882107	0,880395872	1,41847675	1,00320427	2,22
3,46	1,23096945	0,86499292	1,42358096	0,986789344	2,22
3,47	1,21336126	0,849227466	1,4287824	0,970605396	2,22
3,48	1,22654925	0,847446404	1,44734728	0,973914018	2,21
3,49	1,20897555	0,832140778	1,45284978	0,957752368	2,21
3,5	1,19163939	0,817056999	1,45845319	0,941917795	2,21
3,51	1,17453825	0,802193297	1,46415864	0,92630828	2,21
3,52	1,15766603	0,787545549	1,46996708	0,910919044	2,21
3,53	1,14101882	0,773110908	1,47587986	0,895746878	2,21
3,54	1,1530862	0,770900595	1,49576509	0,898295796	2,2
3,55	1,13646115	0,756632764	1,50199833	0,883242226	2,2

3,56	1,1200564	0,74257503	1,50834105	0,868402155	2,2
3,57	1,10386655	0,728723457	1,51479487	0,853771155	2,2
3,58	1,08788962	0,715076375	1,52136144	0,839347457	2,2
3,59	1,07212381	0,701632035	1,52804284	0,825129293	2,2
3,6	1,05656206	0,688385564	1,53484052	0,811111062	2,2
3,61	1,06733659	0,685784568	1,556373	0,812968574	2,19
3,62	1,05178861	0,672702927	1,56352614	0,799064822	2,19
3,63	1,03644177	0,659816155	1,57080388	0,785358028	2,19
3,64	1,02129425	0,647122606	1,57820827	0,771846486	2,19
3,65	1,00634302	0,634619588	1,58574213	0,758527397	2,19
3,66	0,991583399	0,622303529	1,59340796	0,745396819	2,19
3,67	0,977013923	0,610172841	1,60120847	0,732453202	2,19
3,68	0,962631706	0,598224901	1,60914693	0,719693836	2,19
3,69	0,971989969	0,595294301	1,63278897	0,720859524	2,18
3,7	0,957615851	0,583505548	1,64114267	0,708208982	2,18
3,71	0,943426669	0,571896471	1,6496459	0,69573987	2,18
3,72	0,929418319	0,560463745	1,6583023	0,683448603	2,18
3,73	0,915588133	0,549204876	1,66711581	0,671332628	2,18
3,74	0,901934778	0,538119301	1,67609014	0,65939046	2,18
3,75	0,888454343	0,527200797	1,68522951	0,647618646	2,18
3,76	0,875144346	0,51644997	1,69453848	0,636014762	2,18
3,77	0,862005008	0,505865093	1,70402153	0,624578398	2,18
3,78	0,849031282	0,49442263	1,7136836	0,61330527	2,18
3,79	0,836220806	0,485179291	1,72352947	0,602193129	2,18
3,8	0,84379097	0,481980463	1,75067463	0,60283965	2,17
3,81	0,830990489	0,471867982	1,76106564	0,591575484	2,17
3,82	0,818351852	0,461912316	1,7716606	0,580725495	2,17
3,83	0,805874333	0,52112052	1,78246594	0,570032812	2,17
3,84	0,793554193	0,442464168	1,79348804	0,559494176	2,17
3,85	0,781389413	0,4329651	1,80473407	0,541907478	2,17
3,86	0,769377839	0,423617021	1,81621087	0,538870627	2,17
3,87	0,757518586	0,414414198	1,82792624	0,528782327	2,17
3,88	0,745809783	0,405356036	1,83988819	0,518840618	2,17
3,89	0,734249162	0,396440386	1,85210485	0,509043311	2,17
3,9	0,722833645	0,387664583	1,8645852	0,499387604	2,17
3,91	0,711562481	0,379027284	1,87733842	0,48987235	2,17
3,92	0,700433891	0,370526538	1,89037442	0,480495656	2,17
3,93	0,689445763	0,362160351	1,90370304	0,471255489	2,17
3,94	0,695060819	0,35882291	1,93705806	0,470902216	2,16
3,95	0,684085936	0,350591659	1,95123277	0,461756418	2,16
3,96	0,673250924	0,342492224	1,96574076	0,42745124	2,16
3,97	0,66255281	0,334522078	1,98059516	0,443865656	2,16
3,98	0,651989995	0,322679388	1,99581002	0,435116257	2,16
3,99	0,641561615	0,31896285	2,01139918	0,426495771	2,16
4	0,631266108	0,311370674	2,02737816	0,418002486	2,16

19. Fe-25%Al için Modifiye Morse Potansiyeli kullanılarak $m=2.5$ Değeri için hesaplanan a_1 , a_2 (A°) örgü parametreleri, C_{11} , C_{12} Kararlılıkları, C_{11}/C_{12} oranı ve Hacim modülü (B) değerleri.

a_1	C_{11}	C_{12}	C_{11}/C_{12}	B	a_2
2,7	6,06799826	4,65029845	1,30486211	5,12286505	2,4
2,71	5,94009545	4,58532398	1,29545818	5,03691447	2,4
2,72	5,94522903	4,61814638	1,28736262	5,06050726	2,39
2,73	5,82313766	4,55306204	1,27894977	4,97642058	2,39
2,74	5,83401179	4,58426568	1,27261642	5,00084772	2,38
2,75	5,71723023	4,51910721	1,26512383	4,91848155	2,38
2,76	5,60368497	4,4547063	1,25792467	4,83769919	2,38
2,77	5,62135061	4,48349995	1,25378626	4,8627835	2,37
2,78	5,51244244	4,41906767	1,24742205	4,78352593	2,37
2,79	5,53456953	4,44629901	1,24475873	4,80905585	2,36
2,8	5,42987793	4,38185883	1,23917226	4,73119853	2,36
2,81	5,32793681	4,31819972	1,23383288	4,65477875	2,36
2,82	5,35516732	4,34313894	1,23301773	4,68048173	2,35
2,83	5,25689013	4,27950726	1,22838678	4,60530155	2,35
2,84	5,16110441	4,21665478	1,22398078	4,53147132	2,35
2,85	5,19258985	4,23938542	1,22484496	4,55712023	2,34
2,86	5,09999327	4,17660509	1,22108582	4,48440115	2,34
2,87	5,00965205	4,11459583	1,21753199	4,41294791	2,34
2,88	5,04463951	4,13520194	1,21992579	4,4383478	2,33
2,89	4,95706993	4,07330803	1,21686417	4,36789533	2,33
2,9	4,99443977	4,09249945	1,22038862	4,39314622	2,32
2,91	4,90937247	4,03074162	1,21798243	4,32361857	2,32
2,92	4,82624666	3,9697613	1,21575236	4,25525642	2,32
2,93	4,86601813	3,98695069	1,22048616	4,27997317	2,31
2,94	4,78505999	3,92614685	1,21876745	4,21245123	2,31
2,95	4,70587691	3,86611568	1,21721058	4,14603609	2,31
2,96	4,74750698	3,88138653	1,22314718	4,17009335	2,3
2,97	4,67018587	3,82156013	1,22206264	4,10443538	2,3
2,98	4,59450619	3,76251088	1,22112768	4,03984265	2,3
2,99	4,63751583	3,77594622	1,22817317	4,06313609	2,29
3	4,56342869	3,71712817	1,2276759	3,99922835	2,29
3,01	4,49085407	3,65908114	1,22731743	3,93633879	2,29
3,02	4,41973935	3,60179127	1,2270948	3,87444063	2,29
3,03	4,46360856	3,61297684	1,23543791	3,89652075	2,28
3,04	4,3937953	3,55595492	1,23561614	3,83523505	2,28
3,05	4,32533811	3,49968811	1,23592102	3,77490477	2,28
3,06	4,36969581	3,50923096	1,2452004	3,79605258	2,27
3,07	4,30234987	3,45325964	1,24588079	3,73628972	2,27
3,08	4,23626169	3,39803554	1,24667963	3,67744425	2,27
3,09	4,28078918	3,40600991	1,25683404	3,697603	2,26

3,1	4,21564725	3,35110709	1,25798643	3,63928715	2,26
3,11	4,15168349	3,29694777	1,25925061	3,58185968	2,26
3,12	4,08886658	3,24352296	1,26062514	3,52530417	2,26
3,13	4,13294632	3,24961694	1,27182569	3,54406006	2,25
3,14	4,17088764	3,19653746	1,2735304	3,48798752	2,25
3,15	4,0989646	3,14417952	1,27533954	3,43275183	2,25
3,16	3,9499624	3,09254642	1,27725242	3,37835174	2,25
3,17	3,99324166	3,09690256	1,28943084	3,39568226	2,24
3,18	3,93390647	3,04563222	1,29165512	3,34172364	2,24
3,19	3,87556036	2,99507333	1,29397846	3,28856901	2,24
3,2	3,81817798	2,9452166	1,29639972	3,23620373	2,24
3,21	3,86037097	2,9479714	1,30950082	3,25210459	2,23
3,22	3,80346754	2,8985002	1,31221917	3,20015598	2,23
3,23	3,74747642	2,84972178	1,31503238	3,14897333	2,23
3,24	3,69237985	2,80163048	1,31793963	3,09854694	2,23
3,25	3,7332583	2,80291357	1,33192059	3,11302848	2,22
3,26	3,67853879	2,75522387	1,3351143	3,06299551	2,22
3,27	3,62466469	2,70820777	1,33839978	3,01369341	2,22
3,28	3,57162187	2,66185998	1,34177676	2,96511394	2,22
3,29	3,51939661	2,61617523	1,34524498	2,91724903	2,22
3,3	3,55827033	2,61586941	1,36026298	2,93000305	2,21
3,31	3,5063209	2,57059798	1,36400982	2,88250562	2,21
3,32	3,45514708	2,52597547	1,36784665	2,83569934	2,21
3,33	3,40473273	2,48199343	1,37177347	2,7895732	2,21
3,34	3,3550671	2,43864687	1,37579046	2,74412028	2,21
3,35	3,3917772	2,43693583	1,39182048	2,75521629	2,2
3,36	3,34231689	2,39401422	1,39611359	2,71011474	2,2
3,37	3,29357262	2,35171698	1,40049702	2,66566886	2,2
3,38	3,24552787	2,31003257	1,40497061	2,62186434	2,2
3,39	3,19817829	2,26895919	1,4095354	2,57869889	2,2
3,4	3,2326228	2,26600931	1,42657084	2,5882138	2,19
3,41	3,18542136	2,2253663	1,4314144	2,54538465	2,19
3,42	3,13888978	2,18532316	1,43635039	2,5031787	2,19
3,43	3,09301054	2,14586851	1,44137934	2,46158252	2,19
3,44	3,0477713	2,10699466	1,44650168	2,42058687	2,19
3,45	3,00316956	2,06869931	1,45171874	2,38018939	2,19
3,46	3,03478173	2,064527	1,46996466	2,38784524	2,18
3,47	2,99027986	2,02666157	1,47547075	2,34786766	2,18
3,48	2,94639114	1,98936069	1,48107437	2,30837084	2,18
3,49	2,9031087	1,9526932	1,48677659	2,26944912	2,18
3,5	2,8604179	1,91642705	1,49257854	2,23109067	2,18
3,51	2,81830814	1,88077623	1,49848137	2,19328687	2,18
3,52	2,77677336	1,8456621	1,50448631	2,15603252	2,18
3,53	2,80507571	1,84036003	1,52419943	2,16193193	2,17
3,54	2,76361285	1,80567384	1,53051608	2,12498684	2,17
3,55	2,72270604	1,77151082	1,53694011	2,08857589	2,17

3,56	2,6823499	1,73786593	1,54347343	2,05269392	2,17
3,57	2,64253544	1,70473219	1,55011764	2,01733327	2,17
3,58	2,60325789	1,67210477	1,55687486	1,98248915	2,17
3,59	2,5645	1,63997158	1,56374661	1,94814772	2,17
3,6	2,58961589	1,6337741	1,58505138	1,95238803	2,16
3,61	2,55091383	1,6020609	1,5922702	1,9184521	2,16
3,62	2,51272786	1,57083595	1,59961189	1,88479992	2,16
3,63	2,47504576	1,54009002	1,60707863	1,85174193	2,16
3,64	2,43786428	1,50981881	1,61467341	1,8191673	2,16
3,65	2,40117479	1,48001528	1,62239866	1,78706845	2,16
3,66	2,36496645	1,45067074	1,63025722	1,75543598	2,16
3,67	2,32923572	1,42178081	1,63825233	1,72426578	2,16
3,68	2,29397862	1,39334107	1,646387	1,69355359	2,16
3,69	2,25918106	1,36534094	1,65466441	1,66328764	2,16
3,7	2,28000916	1,35831827	1,67855297	1,66554856	2,15
3,71	2,24525989	1,3307172	1,68725548	1,63556476	2,15
3,72	2,21096496	1,30354751	1,69611384	1,60601999	2,15
3,73	2,17712126	1,27680494	1,70513223	1,57691038	2,15
3,74	2,14371888	1,25048154	1,7143147	1,54822732	2,15
3,75	2,11075505	1,22457303	1,72366613	1,51996704	2,15
3,76	2,07821978	1,19907158	1,73319076	1,49212098	2,15
3,77	2,04611346	1,173975	1,74289355	1,46468782	2,15
3,78	2,01442416	1,14927378	1,75278005	1,43765724	2,15
3,79	1,98315165	1,12496577	1,7628551	1,41102773	2,15
3,8	1,95228693	1,10104335	1,7731245	1,38479121	2,15
3,81	1,92182148	1,07749923	1,7835943	1,35893998	2,15
3,82	1,9381027	1,06993786	1,81141614	1,35932614	2,14
3,83	1,90768887	1,04676094	1,82246853	1,33373691	2,14
3,84	1,87767121	1,02395466	1,83374448	1,30852685	2,14
3,85	1,84804703	1,0015152	1,8452511	1,28369248	2,14
3,86	1,81881147	0,979437315	1,8569963	1,2592287	2,14
3,87	1,78995574	0,957713781	1,86898818	1,23512777	2,14
3,88	1,76147802	0,936341212	1,88123517	1,21138681	2,14
3,89	1,73337284	0,915314318	1,89374602	1,18800049	2,14
3,9	1,70563545	0,894628013	1,90653034	1,16496383	2,14
3,91	1,67825805	0,874275765	1,91959804	1,14226986	2,14
3,92	1,65124126	0,854255609	1,93295923	1,11991749	2,14
3,93	1,62458041	0,83456264	1,94662489	1,0979019	2,14
3,94	1,5982652	0,815188975	1,86060699	1,07621438	2,14
3,95	1,5722651	0,796132901	1,97491714	1,05485411	2,14
3,96	1,54666697	0,777388161	1,98956846	1,03381443	2,14
3,97	1,52137513	0,758951586	2,00457467	1,01309277	2,14
3,98	1,49641342	0,740817164	2,01994971	0,992682582	2,14
3,99	1,47178039	0,722981724	2,03570899	0,972581281	2,14
4	1,44746827	0,705439539	2,05186864	0,952782782	2,14

20. Fe-25%Al için Modifiye Morse Potansiyeli kullanılarak $m=3.0$ Değeri için hesaplanan a_1 , a_2 (A°) örgü parametreleri, C_{11} , C_{12} Kararlılıkları, C_{11}/C_{12} oranı ve Hacim modülü (B) değerleri.

a_1	C_{11}	C_{12}	C_{11}/C_{12}	B	a_2
2,7	1,20054562	0,924897439	1,29803108	1,01678017	2,35
2,71	1,17618065	0,911498019	1,29038202	0,999725563	2,35
2,72	1,1524972	0,898259908	1,2830331	0,983005672	2,35
2,73	1,15579169	0,904219121	1,2782208	0,988076645	2,34
2,74	1,13308006	0,890978123	1,27172602	0,97167877	2,34
2,75	1,11098373	0,877899292	1,26550248	0,955594106	2,34
2,76	1,11547344	0,883382737	1,2627295	0,960746306	2,33
2,77	1,09422359	0,870309464	1,26728104	0,944947505	2,33
2,78	1,09950401	0,875485727	1,25587885	0,950158488	2,32
2,79	1,07902321	0,862423684	1,2511521	0,94623525	2,32
2,8	1,0590635	0,849524632	1,24665425	0,91937092	2,32
2,81	1,06522605	0,854251728	1,24696973	0,924576501	2,31
2,82	1,04596414	0,841371892	1,2431294	0,909559307	2,31
2,83	1,02711747	0,828656463	1,23949733	0,894810133	2,31
2,84	1,03400215	0,832949379	1,24137454	0,899966969	2,3
2,85	1,01576288	0,820259681	1,23834306	0,885427415	2,3
2,86	0,997956052	0,807733506	1,23550162	0,871141021	2,3
2,87	1,00542523	0,811610536	1,23880258	0,876215433	2,29
2,88	0,988118648	0,799118406	1,23651094	0,862118487	2,29
2,89	0,971205653	0,786787704	1,23439353	0,848260354	2,29
2,9	0,979135028	0,79026483	1,23899608	0,853221563	2,28
2,91	0,962654107	0,777975112	1,23738419	0,839534777	2,28
2,92	0,946534332	0,765846654	1,23593193	0,82607588	2,28
2,93	0,954815454	0,768940904	1,241728	0,830899088	2,27
2,94	0,93906794	0,756859977	1,24074197	0,817595965	2,27
2,95	0,923652045	0,744938968	1,23990298	0,804509993	2,27
2,96	0,93218946	0,74766716	1,24679738	0,809174593	2,26
2,97	0,9170923	0,735798915	1,24638985	0,796230044	2,26
2,98	0,902303168	0,724091062	1,24611836	0,783495097	2,26
2,99	0,88781053	0,712539821	1,24598023	0,770963391	2,26
3	0,896495802	0,714819592	1,25415679	0,775378328	2,25
3,01	0,882263703	0,703328163	1,25441259	0,762973343	2,25
3,02	0,868327272	0,691992688	1,25479255	0,750764216	2,25
3,03	0,877071629	0,693944683	1,26389271	0,754986999	2,24
3,04	0,863337945	0,682674398	1,26464087	0,74289558	2,24
3,05	0,849861612	0,671559182	1,26550516	0,730993326	2,24
3,06	0,836635518	0,660597137	1,26648382	0,719276598	2,24
3,07	0,845357386	0,662154368	1,2766772	0,723222041	2,23
3,08	0,832310071	0,651261667	1,27799641	0,711611135	2,23
3,09	0,819497633	0,640521132	1,27942326	0,700179966	2,23

3,1	0,828170729	0,641787933	1,29041181	0,703915532	2,22
3,11	0,815511547	0,631122154	1,29216118	0,692585285	2,22
3,12	0,803071331	0,620605675	1,29401223	0,68142756	2,22
3,13	0,790845566	0,610237435	1,2959637	0,670440145	2,22
3,14	0,799341439	0,611159734	1,3079092	0,673886969	2,21
3,15	0,787238782	0,600870268	1,31016431	0,662993106	2,21
3,16	0,775338205	0,590726923	1,31251544	0,652264017	2,21
3,17	0,763635976	0,580728615	1,31496185	0,641697735	2,21
3,18	0,752127111	0,570873389	1,31750249	0,631291296	2,21
3,19	0,760294609	0,571417144	1,33054218	0,634376299	2,2
3,2	0,748877375	0,56164313	1,33336871	0,624054545	2,2
3,21	0,737644572	0,5520108	1,33628649	0,613888724	2,2
3,22	0,726590744	0,542517496	1,33929458	0,603875245	2,2
3,23	0,734477207	0,542777625	1,35318254	0,606677486	2,19
3,24	0,723496262	0,533368431	1,35646622	0,596744374	2,19
3,25	0,712687834	0,524097436	1,35983843	0,586960902	2,19
3,26	0,702046122	0,514961432	1,36329845	0,577322995	2,19
3,27	0,691568427	0,505959256	1,36684608	0,56782898	2,19
3,28	0,699037174	0,505913546	1,38173247	0,570288089	2,18
3,29	0,688614729	0,496998026	1,38554822	0,56087026	2,18
3,3	0,678349334	0,488214055	1,38945065	0,551592482	2,18
3,31	0,668238639	0,479560487	1,39343974	0,542453204	2,18
3,32	0,658278496	0,471034878	1,3975154	0,533449417	2,18
3,33	0,665303417	0,4707167	1,41337492	0,535580939	2,17
3,34	0,655385599	0,462282602	1,41771634	0,526650268	2,17
3,35	0,645613517	0,453971754	1,42214469	0,517852341	2,17
3,36	0,635983425	0,445784821	1,42666012	0,509184356	2,17
3,37	0,62649425	0,437721254	1,43126303	0,500645586	2,17
3,38	0,617142478	0,429778788	1,43595379	0,492233351	2,17
3,39	0,623602901	0,429195026	1,45295929	0,493997651	2,16
3,4	0,614281331	0,421341003	1,45791966	0,485654446	2,16
3,41	0,605093373	0,41360627	1,46296953	0,477435305	2,16
3,42	0,596035786	0,405988586	1,46810971	0,469337652	2,16
3,43	0,587107024	0,398486884	1,4733409	0,461360624	2,16
3,44	0,578304724	0,391099507	1,4786639	0,453501246	2,16
3,45	0,569625771	0,383824311	1,48407945	0,445758131	2,16
3,46	0,575420599	0,38299073	1,50244002	0,44713402	2,15
3,47	0,566764019	0,375803628	1,50813877	0,439457092	2,15
3,48	0,558228113	0,368726895	1,51393381	0,431893968	2,15
3,49	0,549811647	0,361759513	1,519826377	0,424443557	2,15
3,5	0,541511691	0,35899349	1,52581765	0,417103463	2,15
3,51	0,533327129	0,348145408	1,53190913	0,409872648	2,15
3,52	0,525255146	0,341495665	1,53810195	0,402748825	2,15
3,53	0,530404638	0,340462346	1,55789515	0,403776443	2,14
3,54	0,522350216	0,333898996	1,56439589	0,396716069	2,14
3,55	0,514405682	0,327437579	1,5710038	0,38976028	2,14

3,56	0,506569954	0,321077055	1,57772082	0,382908022	2,14
3,57	0,498842165	0,314816455	1,5845921	0,376158359	2,14
3,58	0,491219724	0,308653857	1,59749064	0,369509146	2,14
3,59	0,483700967	0,302587844	1,59854725	0,362958885	2,14
3,6	0,476284302	0,296616998	1,60572154	0,356506099	2,14
3,61	0,468968779	0,290740381	1,61301563	0,350149847	2,14
3,62	0,473331716	0,289528956	1,63483378	0,350796543	2,13
3,63	0,466029752	0,283734355	1,64248616	0,344499487	2,13
3,64	0,458827611	0,278032192	1,65026793	0,338297332	2,13
3,65	0,451722405	0,272420263	1,6581821	0,332187644	2,13
3,66	0,444713288	0,266897983	1,66623135	0,321669552	2,13
3,67	0,437799577	0,261463516	1,67441938	0,320242203	2,13
3,68	0,430979071	0,256116049	1,68274918	0,314403723	2,13
3,69	0,424250438	0,250854018	1,69122441	0,30865824	2,13
3,7	0,417612352	0,245676164	1,69984888	0,302988227	2,13
3,71	0,411064051	0,240581603	1,70862629	0,297409086	2,13
3,72	0,404604255	0,235569097	1,71756084	0,29191415	2,13
3,73	0,398231021	0,230637064	1,72665665	0,286501717	2,13
3,74	0,401652776	0,229289132	1,75173054	0,28674348	2,12
3,75	0,395292473	0,224432532	1,76129757	0,281385846	2,12
3,76	0,389018522	0,21965509	1,7710426	0,276109567	2,12
3,77	0,382828478	0,214954937	1,78097086	0,270912784	2,12
3,78	0,376722384	0,2103316	1,7910879	0,265795195	2,12
3,79	0,370698393	0,205783574	1,80139933	0,26075518	2,12
3,8	0,364755331	0,201309722	1,81191116	0,255791591	2,12
3,81	0,358892712	0,196909271	1,82262983	0,250903752	2,12
3,82	0,353108784	0,192580777	1,83356195	0,246090113	2,12
3,83	0,347402523	0,188323187	1,84471455	0,241349633	2,12
3,84	0,34177333	0,184135698	1,8560949	0,236681575	2,12
3,85	0,336220154	0,180017275	1,8677105	0,232084901	2,12
3,86	0,330741971	0,175966861	1,87956965	0,227558564	2,12
3,87	0,32533771	0,171983426	1,89168059	0,223101521	2,12
3,88	0,32005842	0,168065658	1,90405254	0,218712386	2,12
3,89	0,31474594	0,164212855	1,91669488	0,21439055	2,12
3,9	0,309557497	0,160424312	1,92961712	0,210135373	2,12
3,91	0,311888541	0,159018332	1,96133702	0,209975069	2,11
3,92	0,306714706	0,155294671	1,97504979	0,205768016	2,11
3,93	0,301610767	0,151633243	1,98908076	0,201625751	2,11
3,94	0,296576375	0,148033377	2,00344261	0,19754771	2,11
3,95	0,29161007	0,144493832	2,01814847	0,193532557	2,11
3,96	0,286711287	0,141013968	2,03321196	0,189579741	2,11
3,97	0,2818788	0,137592602	2,04864793	0,185688001	2,11
3,98	0,27711263	0,134229331	2,06447152	0,181857097	2,11
3,99	0,272410958	0,130922775	2,08069955	0,178085503	2,11
4	0,267773378	0,127672297	2,09734911	0,174372657	2,11

Ek.3. Fe-30%Al ALAŞIMI İÇİN HESAPLANAN SONUÇLAR

Ek.3.1. Genelleştirilmiş Morse Potansiyeli Kullanılarak Elde Edilen Şekiller

21. Fe-30%Al için Genelleştirilmiş Morse Potansiyeli kullanılarak $m=1.25$ Değeri için hesaplanan a_1 , a_2 (A°) örgü parametreleri, C_{11} , C_{12} Kararlılıkları, C_{11}/C_{12} oranı ve Hacim modülü (B) değerleri.

a_1	C_{11}	C_{12}	C_{11}/C_{12}	B	a_2
2,80	1,03054853	0,639819357	1,6106867	0,770062415	2,91
2,81	1,01951237	0,642473442	1,58685528	0,768153086	2,9
2,82	1,00151409	0,63662683	1,57315719	0,75825592	2,9
2,83	0,991162064	0,639219081	1,55058272	0,756533409	2,89
2,84	0,973859557	0,633394649	1,53752419	0,746882965	2,89
2,85	0,964160202	0,635924093	1,51615611	0,745336129	2,88
2,86	0,947522046	0,630121188	1,50371399	0,735921474	2,88
2,87	0,93844484	0,632586965	1,48350328	0,73453959	2,87
2,88	0,922440665	0,626805362	1,47165407	0,725350463	2,87
2,89	0,913957084	0,629207615	1,45255248	0,724124105	2,86
2,90	0,898558307	0,623446493	1,44127574	0,71510431	2,86
2,91	0,890640214	0,625784569	1,42323774	0,714069784	2,85
2,92	0,875819135	0,620044233	1,41251073	0,705302534	2,85
2,93	0,868439423	0,62317586	1,39549234	0,704358198	2,84
2,94	0,854169465	0,616597807	1,38529436	0,69578836	2,84
2,95	0,847302375	0,618806414	1,36925274	0,694971734	2,83
2,96	0,83355786	0,613106881	1,35956371	0,686590543	2,83
2,97	0,827178838	0,615251134	1,34445723	0,685893702	2,82
2,98	0,813935072	0,60957131	1,33525817	0,677692564	2,82
2,99	0,808020058	0,611650983	1,32104759	0,677107341	2,81
3,00	0,795253943	0,605991445	1,31231876	0,669078944	2,81

22. Fe-30%Al için Genelleştirilmiş Morse Potansiyeli kullanılarak $m=1.5$ Değeri için hesaplanan a_1 , a_2 (A°) örgü parametreleri, C_{11} , C_{12} Kararlılıkları, C_{11}/C_{12} oranı ve Hacim modülü (B) değerleri.

a_1	C_{11}	C_{12}	C_{11}/C_{12}	B	a_2
2,80	7,84214859	4,43675689	1,76754075	5,57188746	2,9
2,81	7,71935188	4,39617102	1,7559262	5,50389797	2,9
2,82	7,64902022	4,40516808	1,7363742	5,48645213	2,89
2,83	7,53019501	4,36501434	1,72512492	5,42007456	2,89
2,84	7,46322961	4,37391668	1,70630356	5,40368766	2,88
2,85	7,34822553	4,33417901	1,69541348	5,33886119	2,88
2,86	7,2844945	4,34297681	1,67730449	5,32348271	2,87
2,87	7,17316602	4,30364083	1,66676689	5,26014923	2,87
2,88	7,11254721	4,31233135	1,64935081	5,24573664	2,86
2,89	7,00475532	4,27338423	1,63915879	5,18384126	2,86
2,90	6,94712816	4,28195711	1,6224189	5,17034746	2,85
2,91	6,84273987	4,24338716	1,61256553	5,10983806	2,85
2,92	6,78798729	4,25183902	1,59648266	5,09722178	2,84
2,93	6,68687263	4,21363348	1,58696115	5,03804653	2,84
2,94	6,58761261	4,17585233	1,57754922	4,97977243	2,84
2,95	6,53691827	4,1841093	1,56232015	4,96837896	2,83
2,96	6,44074258	4,14667423	1,55323091	4,91139368	2,83
2,97	6,39264822	4,15480143	1,53861702	4,90075036	2,82
2,98	6,29943917	4,11770056	1,52984392	4,84494676	2,82
2,99	6,25384091	4,1256941	1,51582758	4,83507637	2,81
3,00	6,16348647	4,0889209	1,50736361	4,78044276	2,81

23. Fe-30%Al için Genelleştirilmiş Morse Potansiyeli kullanılarak $m=2.0$ Değeri için hesaplanan a_1 , a_2 (A°) örgü parametreleri, C_{11} , C_{12} Kararlılıkları, C_{11}/C_{12} oranı ve Hacim modülü (B) değerleri.

a_1	C_{11}	C_{12}	C_{11}/C_{12}	B	a_2
2,80	2,0125179	1,07163912	1,877981	1,38526538	2,92
2,81	1,98234425	1,06129271	1,86785817	1,36830989	2,92
2,82	1,96546671	1,06230031	1,85019875	1,36335578	2,91
2,83	1,93620394	1,05210653	1,84031169	1,34680566	2,91
2,84	1,9200332	1,05315223	1,8212979	1,34211255	2,9
2,85	1,89164781	1,04310528	1,81347737	1,32595279	2,9
2,86	1,87615775	1,04418615	1,79676561	1,32151001	2,89
2,87	1,84861828	1,03428127	1,7873458	1,30572694	2,89
2,88	1,83378406	1,03539511	1,77109593	1,30152476	2,88
2,89	1,80705903	1,02562715	1,76190639	1,28610444	2,88
2,90	1,79285732	1,02677164	1,74611107	1,28213354	2,87
2,91	1,76691885	1,01713655	1,73715009	1,26706398	2,87
2,92	1,74143778	1,00762271	1,72826372	1,25222773	2,87
2,93	1,7281442	1,00880224	1,71306539	1,24858289	2,86
2,94	1,70340605	0,999414247	1,70440441	1,23407818	2,86
2,95	1,69068708	1,00061894	1,6896413	1,23064165	2,85
2,96	1,66666474	0,991352329	1,68120324	1,21645647	2,85
2,97	1,65449961	0,992580754	1,6668665	1,21322037	2,84
2,98	1,6311673	0,983431755	1,65864819	1,1993436	2,84
2,99	1,61953574	0,984682572	1,64472876	1,19630029	2,83
3,00	1,59686932	0,975647356	1,63672797	1,18272134	2,83

24. Fe-30%Al için Genelleştirilmiş Morse Potansiyeli kullanılarak $m=2.5$ Değeri için hesaplanan a_1 , a_2 (A°) örgü parametreleri, C_{11} , C_{12} Kararlılıkları, C_{11}/C_{12} oranı ve Hacim modülü (B) değerleri.

a_1	C_{11}	C_{12}	C_{11}/C_{12}	B	a_2
2,80	5,44537724	2,67448358	2,0364811	3,5981148	3,1
2,81	5,36302565	2,64904341	2,02451407	3,55370416	3,1
2,82	5,31349148	2,65151302	2,00394697	3,53883917	3,09
2,83	5,23363466	2,62645553	1,99266068	3,49551524	3,09
2,84	5,18608011	2,62901902	1,97262936	3,48137272	3,08
2,85	5,10862836	2,60433088	1,96158959	3,43909671	3,08
2,86	5,06298458	2,60698111	1,94208718	3,42564893	3,07
2,87	4,9878547	2,58265007	1,93129327	3,38438495	3,07
2,88	4,94405186	2,58537884	1,91231234	3,37160318	3,06
2,89	4,87116148	2,56139072	1,90176432	3,33131431	3,06
2,90	4,79955215	2,53771019	1,89129246	3,29165751	3,06
2,91	4,75840715	2,54053537	1,87299386	3,27982597	3,05
2,92	4,68891575	2,51717867	1,86276636	3,24109103	3,05
2,93	4,64945389	2,52006624	1,84497289	3,22986212	3,04
2,94	4,58200709	2,4978788	1,83498788	3,19201775	3,04
2,95	4,54416809	2,49996621	1,8176918	3,18136684	3,04
2,96	4,47869308	2,47722617	1,80794678	3,14438181	3,03
2,97	4,44242019	2,48021921	1,79114014	3,1342862	3,02
2,98	4,3788501	2,45777251	1,78163361	3,0981317	3,02
2,99	4,34408697	2,46081025	1,76530757	3,08856915	3,01
3,00	4,28235515	2,43864695	1,75603736	3,05321635	3,01

25. Fe-30%Al için Genelleştirilmiş Morse Potansiyeli kullanılarak $m=3.0$ Değeri için hesaplanan a_1 , a_2 (A°) örgü parametreleri, C_{11} , C_{12} Kararlılıkları, C_{11}/C_{12} oranı ve Hacim modülü (B) değerleri.

a_1	C_{11}	C_{12}	C_{11}/C_{12}	B	a_2
2,80	2,03855011	8,08054559	2,52278771	1,21821974	3,5
2,81	2,01489021	8,09738379	2,48832247	1,21145565	3,49
2,82	1,98281618	8,02637155	2,47037676	1,19603016	3,49
2,83	1,95131344	7,95626666	2,45254909	1,18085559	3,49
2,84	1,92902005	7,97331201	2,419346	1,17456082	3,48
2,85	1,89851848	7,9041337	2,40193113	1,15978174	3,48
2,86	1,87709568	7,92129445	2,369683	1,15378486	3,47
2,87	1,84756101	7,85300792	2,35267941	1,13938753	3,47
2,88	1,8185488	7,78556148	2,3357966	1,12522037	3,47
2,89	1,79837769	7,80282097	2,30477887	1,11964729	3,46
2,90	1,77028242	7,73620486	2,28830861	1,10584113	3,46
2,91	1,75090975	7,7535107	2,25821543	1,1005373	3,45
2,92	1,72369896	7,68769194	2,24215405	1,08707912	3,45
2,93	1,69696745	7,62265401	2,22621603	1,07383275	3,45
2,94	1,67874179	7,63997035	2,19731453	1,06891195	3,44
2,95	1,65284901	7,5756796	2,18178315	1,05599498	3,44
2,96	1,63535589	7,59298228	2,15377283	1,05131745	3,43
2,97	1,61027282	7,52940741	2,13864483	1,0387181	3,43
2,98	1,59348771	7,54667962	2,11150836	1,03427454	3,42
2,99	1,56918677	7,48379204	2,09678029	1,02198172	3,42
3,00	1,54531074	7,42161301	2,08217639	1,00987778	3,42

Ek.3.2. Modifiye Morse Potansiyeli Kullanılarak Elde Edilen Şekiller

26. Fe-30%Al için Modifiye Morse Potansiyeli kullanılarak $m=1.25$ Değeri için hesaplanan a_1 , a_2 (A°) örgü parametreleri, C_{11} , C_{12} Kararlılıkları, C_{11}/C_{12} oranı ve Hacim modülü (B) değerleri.

a_1	C_{11}	C_{12}	C_{11}/C_{12}	B	a_2
2,70	1,44828746	1,07980281	1,34125179	1,20263103	2,45
2,71	1,41695546	1,06582067	1,32945016	1,1828656	2,45
2,72	1,41442009	1,07350752	1,31756887	1,18714504	2,44
2,73	1,3841894	1,05947609	1,30689023	1,16785704	2,44
2,74	1,38364182	1,06679011	1,29701411	1,17240734	2,43
2,75	1,35524734	1,05271743	1,28737998	1,15356073	2,43
2,76	1,32766316	1,03879493	1,27808013	1,13508434	2,43
2,77	1,32859094	1,04555622	1,27070254	1,13990112	2,42
2,78	1,30224265	1,03159966	1,26235274	1,12181399	2,42
2,79	1,30441314	1,03800035	1,25665962	1,12680462	2,41
2,80	1,27920127	1,02402021	1,24919534	1,10908056	2,41
2,81	1,25467186	1,0101911	1,24201432	1,09168472	2,41
2,82	1,25832787	1,01606583	1,23843143	1,09681984	2,4
2,83	1,2347953	1,0022125	1,23205859	1,07974593	2,4
2,84	1,23942778	1,0077474	1,22989925	1,0849742	2,39
2,85	1,21680634	0,93893653	1,22428223	1,06819788	2,39
2,86	1,19476541	0,980194111	1,21890694	1,05171788	2,39
2,87	1,20053325	0,985221738	1,21854117	1,05699224	2,38
2,88	1,17928954	0,971521976	1,21385782	1,04077783	2,38
2,89	1,18581188	0,976215371	1,21470314	1,04608087	2,37
2,90	1,16529725	0,962522697	1,21066989	1,03011421	2,37
2,91	1,14527897	0,948986693	1,20684408	1,01441745	2,37
2,92	1,15264422	0,953208476	1,20922573	1,01968706	2,36
2,93	1,13326031	0,939686762	1,20599796	1,00421128	2,36
2,94	1,11432865	0,926321378	1,20296117	0,988990467	2,36
2,95	1,12238957	0,930090027	1,20675369	0,994189874	2,35
2,96	1,10400999	0,916747021	1,20426897	0,979168012	2,35
2,97	1,08604335	0,903559897	1,20196055	0,964387716	2,35
2,98	1,09466719	0,90689258	1,20705276	0,969484117	2,34
2,99	1,07718146	0,893736686	1,20525595	0,954884944	2,34
3,00	1,08619515	0,896771356	1,2112284	0,959912621	2,33
3,01	1,0691433	0,883650894	1,20991594	0,945481697	2,33
3,02	1,05245048	0,870687633	1,20875782	0,931275249	2,33
3,03	1,06183413	0,873314635	1,21586664	0,936154467	2,32
3,04	1,04551779	0,860395095	1,2151601	0,922102659	2,32
3,05	1,02953159	0,84763176	1,21459771	0,908265038	2,32
3,06	1,03918906	0,849869109	1,22276365	0,912975758	2,31
3,07	1,02352603	0,837155117	1,22262411	0,899278754	2,31
3,08	1,00816893	0,824597418	1,22261955	0,88578792	2,31

3,09	0,99310876	0,812194216	1,22274788	0,872499064	2,31
3,10	1,00293452	0,813959806	1,23216713	0,876951376	2,3
3,11	0,98813932	0,801613827	1,23268747	0,863788992	2,3
3,12	0,973619273	0,78942117	1,23333312	0,850820538	2,3
3,13	0,983539044	0,790838523	1,24366608	0,85507203	2,29
3,14	0,969243187	0,778706927	1,24468289	0,842219014	2,29
3,15	0,955205512	0,766729236	1,24581856	0,829554661	2,29
3,16	0,965155872	0,767815326	1,25701564	0,833595508	2,28
3,17	0,951308948	0,755904424	1,258850458	0,821039143	2,28
3,18	0,937703052	0,744145551	1,26010705	0,808664718	2,28
3,19	0,924329986	0,732536477	1,2618211	0,796467646	2,28
3,20	0,934182255	0,733229086	1,27406601	0,800213476	2,27
3,21	0,920964812	0,721693833	1,27611567	0,788117493	2,27
3,22	0,907965594	0,710306568	1,27827284	0,77619291	2,27
3,23	0,917729969	0,710705342	1,2912946	0,779713551	2,26
3,24	0,904861009	0,699395629	1,29377561	0,767884089	2,26
3,25	0,892198488	0,688233081	1,29636095	0,75622155	2,26
3,26	0,879737146	0,677215973	1,29904961	0,74472303	2,26
3,27	0,889282422	0,677274016	1,31303195	0,747943485	2,25
3,28	0,876924069	0,666338641	1,31603364	0,736533784	2,25
3,29	0,864755766	0,655546856	1,31913647	0,725283159	2,25
3,30	0,852775525	0,644898679	1,32234032	0,714190961	2,25
3,31	0,840976508	0,634390673	1,3256445	0,703252618	2,25
3,32	0,850147078	0,634078108	1,34076081	0,706101098	2,24
3,33	0,838424695	0,623656101	1,34437023	0,695245632	2,24
3,34	0,826874152	0,613372258	1,34807882	0,684539556	2,24
3,35	0,815495285	0,603227413	1,35188698	0,67398337	2,24
3,36	0,824348852	0,602633902	1,36790985	0,676538885	2,23
3,37	0,813026891	0,592576425	1,37202031	0,666059914	2,23
3,38	0,801867488	0,582655058	1,3762302	0,65575868	2,23
3,39	0,79086726	0,572868144	1,38053978	0,645534516	2,23
3,40	0,780022709	0,563213933	1,38494924	0,635483525	2,23
3,41	0,788417924	0,62321854	1,40207591	0,637687211	2,22
3,42	0,777614346	0,5275794	1,40679001	0,627710075	2,22
3,43	0,766961127	0,543325447	1,41160538	0,617870674	2,22
3,44	0,756454101	0,534021926	1,41652255	0,608165984	2,22
3,45	0,746090338	0,524845835	1,42154189	0,598594002	2,22
3,46	0,754002263	0,523691081	1,43978443	0,600461475	2,21
3,47	0,743667673	0,514607436	1,44511645	0,590960848	2,21
3,48	0,733473266	0,505650455	1,45055395	0,581591392	2,21
3,49	0,723414076	0,496817123	1,45609731	0,572349441	2,21
3,50	0,713488672	0,488106542	1,46174782	0,563233919	2,21
3,51	0,703695589	0,479517847	1,46750656	0,554243761	2,21
3,52	0,710996311	0,478104186	1,48711585	0,555734894	2,2
3,53	0,701221048	0,469608179	1,4932045	0,546812469	2,2
3,54	0,691573861	0,461231835	1,49940617	0,53801511	2,2

3,55	0,672652419	0,444830699	1,51215377	0,520771272	2,2
3,56	0,672652419	0,44830699	1,51215377	0,520771272	2,2
3,57	0,663373834	0,436802868	1,512870302	0,512326523	2,2
3,58	0,670063949	0,435173353	1,53976328	0,513470218	2,19
3,59	0,660796702	0,427238455	1,54666953	0,505091204	2,19
3,60	0,651648328	0,41941707	1,55370006	0,496827489	2,19
3,61	0,642616038	0,411707082	1,56085738	0,48867634	2,19
3,62	0,63369764	0,404107056	1,56814297	0,480637251	2,19
3,63	0,624891489	0,396615529	1,57555981	0,472707516	2,19
3,64	0,616196545	0,389231681	1,58310995	0,464886635	2,19
3,65	0,607611093	0,381954071	1,59079622	0,457173078	2,19
3,66	0,613493221	0,380116147	1,61396253	0,457908505	2,18
3,67	0,604912676	0,37292894	1,62205882	0,450256852	2,18
3,68	0,596439944	0,365846375	1,63030164	0,442710898	2,18
3,69	0,588071492	0,358865952	1,63869403	0,435267799	2,18
3,70	0,579806702	0,351986887	1,6472395	0,427926825	2,18
3,71	0,571644757	0,345208313	1,65594146	0,420687128	2,18
3,72	0,563583295	0,338528402	1,66480358	0,4135467	2,18
3,73	0,555620811	0,33194581	1,67382987	0,406504144	2,18
3,74	0,547756573	0,325459753	1,68302399	0,399558693	2,18
3,75	0,552778587	0,323459913	1,70895547	0,399899471	2,17
3,76	0,544916819	0,317060875	1,71865046	0,393041286	2,17
3,77	0,5371523	0,310756775	1,72852965	0,38622195	2,17
3,78	0,529482004	0,30454538	1,73859505	0,379524255	2,17
3,79	0,521905362	0,298425896	1,74886083	0,372919051	2,17
3,80	0,514420986	0,292397058	1,7593234	0,366405034	2,17
3,81	0,507027671	0,286457674	1,76999158	0,359981006	2,17
3,82	0,499724023	0,280606506	1,78087112	0,353645678	2,17
3,83	0,492509713	0,274842842	1,79196849	0,347398466	2,17
3,84	0,485382567	0,269165001	1,80329004	0,341237523	2,17
3,85	0,478341475	0,263571817	1,81484303	0,335161703	2,17
3,86	0,471385229	0,258062192	1,82663421	0,329169871	2,17
3,87	0,475368588	0,255950344	1,8572688	0,329089759	2,16
3,88	0,468416778	0,250522637	1,8697583	0,323154017	2,16
3,89	0,461548556	0,245176521	1,88251531	0,317300533	2,16
3,90	0,454763448	0,29911289	1,89554835	0,311528676	2,16
3,91	0,448060515	0,23472586	1,90886728	0,305837412	2,16
3,92	0,441438447	0,229619056	1,92248176	0,30022552	2,16
3,93	0,434896308	0,224589843	1,93640239	0,294691998	2,16
3,94	0,428433012	0,219637145	1,95064005	0,289235767	2,16
3,95	0,422047565	0,214759912	1,96520645	0,283855796	2,16
3,96	0,415739603	0,209957466	1,98011345	0,275851512	2,16
3,97	0,40950743	0,205228393	1,99537415	0,273321406	2,16
3,98	0,403350189	0,200571704	2,01100246	0,268164532	2,16
3,99	0,397267428	0,195986716	2,02701201	0,263080287	2,16
4,00	0,391258314	0,191472463	2,0434182	0,258067746	2,16

27. Fe-30%Al için Modifiye Morse Potansiyeli kullanılarak $m=1.5$ Değeri için hesaplanan a_1 , a_2 (A°) örgü parametreleri, C_{11} , C_{12} Kararlılıkları, C_{11}/C_{12} oranı ve Hacim modülü (B) değerleri.

a_1	C_{11}	C_{12}	C_{11}/C_{12}	B	a_2
2,70	6,01698222	4,50335945	1,3361097	5,00790037	2,43
2,71	6,00808973	4,53536146	1,32472126	5,02627089	2,42
2,72	5,8825141	4,47537578	1,31441791	4,94442189	2,42
2,73	5,76056588	4,41603267	1,30446632	4,8642104	2,42
2,74	5,76031086	4,44567392	1,26571151	4,88388623	2,41
2,75	5,64396762	4,38619221	1,28675793	4,80545068	2,41
2,76	5,64933047	4,41430331	1,2797785	4,82597903	2,4
2,77	5,53812371	4,35471023	1,27175482	4,74918139	2,4
2,78	5,42996817	4,29576336	1,2640287	4,67383163	2,4
2,79	5,44208702	4,32162554	1,25926852	4,6951127	2,39
2,80	5,33845064	4,26261279	1,2523893	4,62122541	2,39
2,81	5,3550026	4,28699983	1,24912592	4,64300076	2,38
2,82	5,25548603	4,22793712	1,24303789	4,57045342	2,38
2,83	5,15857351	4,1695445	1,23720313	4,49922084	2,38
2,84	5,18030555	4,19179255	1,23582107	4,52129688	2,37
2,85	5,08700718	4,13339339	1,23070966	4,4526465	2,37
2,86	4,99606331	4,07565824	1,2258298	4,38245993	2,37
2,87	5,02218059	4,09584558	1,22616454	4,40462391	2,36
2,88	4,93439551	4,03814064	1,22194741	4,33689226	2,36
2,89	4,9634455	4,05695242	1,22344188	4,35911678	2,35
2,90	4,87854189	3,99930274	1,21984811	4,29238246	2,35
2,91	4,79565636	3,94232642	1,2164534	4,22676973	2,35
2,92	4,82792372	3,95919629	1,21942015	4,2487721	2,34
2,93	4,74754665	3,90230963	1,21659917	4,1840553	2,34
2,94	4,66901639	3,94609877	1,21396165	4,12040464	2,34
2,95	4,70390763	3,86109982	1,2182818	4,14203576	2,33
2,96	4,62755823	3,80501164	1,21617453	4,07919384	2,33
2,97	4,5528916	3,74959156	1,21423668	4,01735824	2,33
2,98	4,58988377	3,76280095	1,21980509	4,03849522	2,32
2,99	4,51710804	3,70753473	1,21835893	3,9773925	2,32
3,00	4,44588108	3,65293801	1,21706995	3,91725237	2,32
3,01	4,48450912	3,66443251	1,22379362	3,93779138	2,31
3,02	4,41491862	3,61001961	1,2229625	3,87831928	2,31
3,03	4,34675087	3,55627163	1,22227752	3,81976471	2,31
3,04	4,38659497	3,56612218	1,23007422	3,83961311	2,3
3,05	4,31983927	3,51258637	1,22981724	3,78167067	2,3
3,06	4,25440197	3,45971527	1,22969714	3,72461084	2,3
3,07	4,2950967	3,46799698	1,23849494	3,74369688	2,29
3,08	4,2308683	3,41536019	1,2387766	3,68719622	2,29
3,09	4,16785933	3,36338278	1,23918674	3,63154163	2,29

3,10	4,20908031	3,37016926	1,24892253	3,64980628	2,28
3,11	4,14710853	3,31845146	1,24971197	3,59467048	2,28
3,12	4,08627359	3,26739121	1,25062268	3,540352	2,28
3,13	4,02654289	3,21698057	1,25165285	3,48683468	2,28
3,14	4,06778587	3,22197748	1,2625122	3,50391361	2,27
3,15	4,00889596	3,1718513	1,2638978	3,45086618	2,27
3,16	3,95103707	3,12236842	1,26539746	3,39859131	2,27
3,17	3,99220776	3,12603804	1,27708227	3,4146128	2,26
3,18	3,93506372	3,07686109	1,278921	3,36292863	2,26
3,19	3,9350372	3,07686109	1,27892147	3,36292863	2,26
3,20	3,82365226	2,98041631	1,28292556	3,26149496	2,26
3,21	3,86420748	2,98252443	1,29561637	3,27641878	2,25
3,22	3,80954301	2,93494228	1,29799589	3,22647586	2,25
3,23	3,75577185	2,88798891	1,30048001	3,17724989	2,25
3,24	3,70286531	2,84165316	1,3030673	3,12872387	2,25
3,25	3,74252272	2,84231479	1,31671648	3,1423841	2,24
3,26	3,69007059	2,79632243	1,31961556	3,09423848	2,24
3,27	3,63844091	2,75094333	1,32261572	3,04677586	2,24
3,28	3,58760836	2,7061663	1,32571615	2,99998032	2,24
3,29	3,62615459	2,70550245	1,34028878	3,0123865	2,23
3,30	3,57568451	2,6610876	1,3436929	2,96595324	2,23
3,31	3,52597558	2,61726998	1,34719597	2,92017184	2,23
3,32	3,47700482	2,57403888	1,35079732	2,87502753	2,23
3,33	3,42877123	2,53139701	1,35449762	2,83052175	2,23
3,34	3,46558439	2,52930799	1,37017098	2,84140012	2,22
3,35	3,4176112	2,48703652	1,37417009	2,79722808	2,22
3,36	3,37033073	2,44533898	1,37826729	2,75366956	2,22
3,37	3,32373772	2,40421444	1,38246309	2,7107222	2,22
3,38	3,27780754	2,36364931	1,38675713	2,66836872	2,22
3,39	3,31272259	2,36029965	1,40351781	2,67777396	2,21
3,40	3,26698358	2,32011689	1,40811163	2,63573912	2,21
3,41	3,22188471	2,2804877	1,41280513	2,5942867	2,21
3,42	3,17741759	2,24140827	1,41759876	2,55341138	2,21
3,43	3,13356471	2,20286853	1,42249284	2,51310059	2,21
3,44	3,16647272	2,19840995	1,44034679	2,52109754	2,2
3,45	3,12275494	2,16025837	1,44554697	2,48109056	2,2
3,46	3,07963269	2,12264019	1,45085008	2,44163769	2,2
3,47	3,03709486	2,08554857	1,45625707	2,38554857	2,2
3,48	2,99513046	2,04897679	1,46176886	2,36436135	2,2
3,49	2,95372781	2,0129179	1,46738613	2,32652121	2,2
3,50	2,98409825	2,00736847	1,48657224	2,33294506	2,19
3,51	2,94278586	1,9717013	1,49251099	2,29539615	2,19
3,52	2,90201767	1,936537985	1,49855967	2,25836452	2,19
3,53	2,86178349	1,90187176	1,50471948	2,22184234	2,19
3,54	2,82208241	1,86770157	1,51099215	2,18582852	2,19
3,55	2,78289641	1,83401547	1,51737892	2,15030912	2,19

3,56	2,8107204	1,82755145	1,5379706	2,15527443	2,18
3,57	2,77159141	1,79425505	1,54470314	2,12003384	2,18
3,58	2,73297144	1,76143865	1,55155642	2,08528291	2,18
3,59	2,69484316	1,72909092	1,55853179	2,05100833	2,18
3,60	2,65720698	1,69721058	1,56563187	2,01720938	2,18
3,61	2,62005056	1,66578896	1,57285864	1,98387616	2,18
3,62	2,58336585	1,63482007	1,58021418	1,951002	2,18
3,63	2,54714899	1,60430012	1,58770106	1,91858307	2,18
3,64	2,57160803	1,59695383	1,61032084	1,92183856	2,17
3,65	2,53542368	1,56681501	1,61820232	1,88968456	2,17
3,66	2,4996961	1,53711601	1,62622475	1,85797604	2,17
3,67	2,46441868	1,50785093	1,63439146	1,82670685	2,17
3,68	2,42958336	1,47901381	1,62470499	1,79587032	2,17
3,69	2,3951841	1,45059912	1,65116886	1,76546078	2,17
3,70	2,36121388	1,42260091	1,65978657	1,7354719	2,17
3,71	2,32766603	1,39501358	1,66856156	1,70589773	2,17
3,72	2,29453823	1,36783386	1,67749775	1,67673532	2,17
3,73	2,31541264	1,35979845	1,70276165	1,67833651	2,16
3,74	2,28230873	1,33298705	1,71217623	1,64942761	2,16
3,75	2,24961324	1,30657231	1,72176712	1,6091928	2,16
3,76	2,21731924	1,28054871	1,73153838	1,59280556	2,16
3,77	2,18542881	1,25491485	1,74149569	1,56508617	2,16
3,78	2,15392844	1,22966156	1,7516433	1,53775052	2,16
3,79	2,12242807	1,20478736	1,76198685	1,51079807	2,16
3,80	2,09209007	1,18028349	1,77253184	1,48421902	2,16
3,81	2,06173775	1,1561465	1,78328417	1,45801025	2,16
3,82	2,03176095	1,13237339	1,79425	1,43216925	2,16
3,83	2,00215057	1,10895719	1,8054354	1,40668832	2,16
3,84	1,97290198	1,08589312	1,8168473	1,381562743	2,16
3,85	1,98945192	1,07737627	1,84657113	1,38140149	2,15
3,86	1,96022754	1,05465458	1,85864413	1,35651223	2,15
3,87	1,93135948	1,03227687	1,87097041	1,33197108	2,15
3,88	1,90284826	1,01024154	1,88355774	1,30777711	2,15
3,89	1,87468361	0,988540542	1,8964155	1,28392157	2,15
3,90	1,84686358	0,967170895	1,90955248	1,26040179	2,15
3,91	1,81938384	0,946128025	1,92297848	1,2372133	2,15
3,92	1,7922397	0,925407409	1,93670343	1,21435151	2,15
3,93	1,76542677	0,905004387	1,95073836	1,19181185	2,15
3,94	1,7389406	0,884914705	1,96509402	1,16959	2,15
3,95	1,71277739	0,865133882	1,97978304	1,14768172	2,15
3,96	1,6869352	0,84659144	1,99481695	1,12608449	2,15
3,97	1,66140985	0,826486178	2,01020887	1,10479407	2,15
3,98	1,63619484	0,807609217	2,02597346	1,08380443	2,15
3,99	1,61128606	0,789024314	2,04212472	1,06311156	2,15
4,00	1,58668219	0,770728603	2,05867823	1,04271313	2,15

28. Fe-30%Al için Modifiye Morse Potansiyeli kullanılarak $m=2.0$ Değeri için hesaplanan a_1 , a_2 (A°) örgü parametreleri, C_{11} , C_{12} Kararlılıkları, C_{11}/C_{12} oranı ve Hacim modülü değerleri.

a_1	C_{11}	C_{12}	C_{11}/C_{12}	B	a_2
2,70	3,94142432	2,87340315	1,37169207	3,22941021	2,04
2,71	3,96526734	2,88148487	1,37611944	3,24275469	2,03
2,72	3,89959545	2,8364291	1,37482564	3,19081788	2,03
2,73	3,83535445	2,79199368	1,37369739	3,13978061	2,03
2,74	3,77249776	2,74816843	1,37273164	3,08961154	2,03
2,75	3,79776753	2,75466909	1,37866561	3,10236857	2,02
2,76	3,73635861	2,71111103	1,3781651	3,05286022	2,02
2,77	3,67623125	2,66815783	1,37781626	3,0041823	2,02
2,78	3,61734584	2,62580019	1,37761657	2,95631541	2,02
2,79	3,64350992	2,63084529	1,38491987	2,96840017	2,01
2,80	3,58583275	2,58877292	1,38514766	2,9211262	2,01
2,81	3,52930957	2,5472904	1,3855152	2,87463012	2,01
2,82	3,47390577	2,50638825	1,38602061	2,82889409	2,01
2,83	3,419593	2,46606157	1,38566165	2,78390538	2,01
2,84	3,44612952	2,46950052	1,39547633	2,79504352	2
2,85	3,39278064	2,42947571	1,39650733	2,75057735	2
2,86	3,34044344	2,39001435	1,39766669	2,70682405	2
2,87	3,28909837	2,35111463	1,39895279	2,66377588	2
2,88	3,23871792	2,31276898	1,40036378	2,62141862	2
2,89	3,26510729	2,31477493	1,41055065	2,63155238	1,99
2,90	3,21549204	2,27674176	1,41232181	2,58965852	1,99
2,91	3,16677956	2,23925334	1,41421228	2,54842875	1,99
2,92	3,11894208	2,20229926	1,416220083	2,50784686	1,99
2,93	3,0719645	2,16587744	1,41834641	2,46790646	1,99
2,94	3,09781939	2,16662123	1,42979278	2,47702062	1,98
2,95	3,05145209	2,13052297	1,43225496	2,43749934	1,98
2,96	3,00588908	2,09494485	1,43482969	2,39859293	1,98
2,97	2,96111936	2,05988538	1,43751657	2,36029671	1,98
2,98	2,91711024	2,02532893	1,44031431	2,32258937	1,98
2,99	2,87385465	1,99127624	1,44322249	2,28546904	1,98
3,00	2,8986166	1,99074258	1,45604792	2,29336725	1,97
3,01	2,85582529	1,95701912	1,45927307	2,25662118	1,97
3,02	2,8137437	1,92378763	1,46260619	2,22043965	1,97
3,03	2,77235806	1,89104353	1,46604667	2,18481504	1,97
3,04	2,73165176	1,85878007	1,46959385	2,1497373	1,97
3,05	2,69160973	1,82699031	1,47324795	2,11519678	1,97
3,06	2,71499731	1,82537237	1,48736628	2,12191401	1,96
3,07	2,67531024	1,79391399	1,49132582	2,08771274	1,96
3,08	2,63625459	1,76291998	1,49539095	2,05403151	1,96
3,09	2,59781587	1,73238373	1,49956146	2,02086111	1,96

3,10	2,5599841	1,70230076	1,50383773	1,98819521	1,96
3,11	2,52274256	1,67266259	1,50821964	1,95602258	1,96
3,12	2,48608122	1,64346478	1,51270733	1,92433693	1,96
3,13	2,50762252	1,64083522	1,52825981	1,92976432	1,95
3,14	2,4712264	1,61196786	1,53304942	1,89838737	1,95
3,15	2,43538216	1,58352966	1,5379454	1,8674805	1,95
3,16	2,4000849	1,55551846	1,54294852	1,83704061	1,95
3,17	2,36532356	1,52792815	1,54805941	1,80705996	1,95
3,18	2,33108345	1,50075075	1,55327821	1,77752832	1,95
3,19	2,29735735	1,47398206	1,55860604	1,74844049	1,95
3,20	2,264413159	1,44761423	1,56404348	1,71978668	1,95
3,21	2,23139895	1,42164349	1,56959109	1,69156198	1,95
3,22	2,25038372	1,41805238	1,58695387	1,69549616	1,94
3,23	2,21783252	1,39239947	1,59281339	1,66754382	1,94
3,24	2,18575984	1,36713661	1,59878671	1,64001102	1,94
3,25	2,15415616	1,34225807	1,6048748	1,61289077	1,94
3,26	2,12300629	1,31775459	1,61107866	1,58617182	1,94
3,27	2,09231057	1,29362603	1,61739987	1,55985421	1,94
3,28	2,06205443	1,26986334	1,62383964	1,53392704	1,94
3,29	2,03223282	1,24646295	1,63039969	1,50838624	1,94
3,30	2,0028374	1,22341946	1,63708152	1,48322544	1,94
3,31	1,97385744	1,20072606	1,64388656	1,45843652	1,94
3,32	1,99002778	1,19639893	1,66334802	1,46094188	1,93
3,33	1,96117807	1,17400833	1,67049758	1,43639824	1,93
3,34	1,93273639	1,15196268	1,67777691	1,41222058	1,93
3,35	1,90469567	1,13025694	1,6851882	1,38840318	1,93
3,36	1,87704618	1,10888462	1,69243353	1,36493847	1,93
3,37	1,84978071	1,08784045	1,70041545	1,34182053	1,93
3,38	1,82289794	1,06712288	1,70823621	1,3190479	1,93
3,39	1,79638875	1,04672553	1,71619847	1,29661327	1,93
3,40	1,77024411	1,02664205	1,72430509	1,2745094	1,93
3,41	1,74446275	1,00687083	1,73255863	1,25273481	1,93
3,42	1,71903599	0,987405589	1,74096239	1,23128239	1,93
3,43	1,69395804	0,968241977	1,74951931	1,21014733	1,93
3,44	1,66922541	0,94937686	1,75823267	1,18932638	1,93
3,45	1,64482969	0,930804347	1,76710572	1,16881279	1,93
3,46	1,62076787	0,912521488	1,77614214	1,14860361	1,93
3,47	1,63304778	0,907618199	1,79926734	1,14942806	1,93
3,48	1,60907335	0,889604647	1,80875106	1,12942755	1,92
3,49	1,58542466	0,871873371	1,81841161	1,1097238	1,92
3,50	1,56209655	0,854420205	1,82825329	1,09031232	1,92
3,51	1,53908383	0,837240826	1,83828091	1,07118849	1,92
3,52	1,51638388	0,820332485	1,84849913	1,05234962	1,92
3,53	1,49398925	0,803689829	1,85891273	1,03378964	1,92
3,54	1,47189526	0,878308819	1,86952722	1,0155043	1,92
3,55	1,45009932	0,771186694	1,88034795	0,997490902	1,92

3,56	1,42859702	0,755319699	1,8913806	0,979745473	1,92
3,57	1,40738347	0,739703763	1,90263122	0,962263666	1,92
3,58	1,38645239	0,724334231	1,91410585	0,945040283	1,92
3,59	1,36580155	0,709208397	1,92581131	0,928072783	1,92
3,60	1,34542851	0,69432356	1,93775437	0,911358544	1,92
3,61	1,32532507	0,679674043	1,94994215	0,89489105	1,92
3,62	1,30549139	0,665258496	1,96238214	0,878669461	1,92
3,63	1,28592108	0,651072178	1,97508222	0,86268848	1,92
3,64	1,26661231	0,637112719	1,98805058	0,846945917	1,92
3,65	1,24755933	0,623375585	2,00129642	0,831436833	1,92
3,66	1,2287583	0,60985761	2,01482819	0,816157842	1,92
3,67	1,21020928	0,596557311	2,02865551	0,801107966	1,92
3,68	1,19190479	0,583469428	2,04278877	0,786281216	1,92
3,69	1,17384139	0,570590907	2,05723817	0,771674403	1,92
3,70	1,15601903	0,557920236	2,07201488	0,7572865	1,92
3,71	1,13843257	0,54545346	2,08713053	0,743113163	1,92
3,72	1,1210784	0,533187454	2,10259711	0,729151103	1,92
3,73	1,10395337	0,521119165	2,11842787	0,715397232	1,92
3,74	1,08705413	0,509245665	2,13463601	0,70184888	1,92
3,75	1,07037911	0,49756466	2,1512362	0,68850281	1,92
3,76	1,05392348	0,486072593	2,16824296	0,675356221	1,92
3,77	1,03768418	0,474766512	2,18567266	0,662405736	1,92
3,78	1,02165989	0,463644402	2,20354195	0,649649564	1,92
3,79	1,00584731	0,452703529	2,22186762	0,63708479	1,92
3,80	0,990084144	0,380959726	2,26466319	0,63425363	1,92
3,81	0,974844366	0,431353367	2,25996698	0,612517034	1,92
3,82	0,959648142	0,420938687	2,27978129	0,600508505	1,92
3,83	0,944652118	0,410694492	2,300134	0,588680367	1,92
3,84	0,929855272	0,400618793	2,32104756	0,577030953	1,92
3,85	0,915251512	0,390707532	2,34254893	0,565555526	1,92
3,86	0,90084144	0,380959726	2,36466319	0,55425363	1,92
3,87	0,886619243	0,371371356	2,38741957	0,543120652	1,92
3,88	0,872586851	0,36194219	2,41084582	0,532157077	1,92
3,89	0,858737318	0,352667675	2,43497598	0,521357556	1,92
3,90	0,845072395	0,343547423	2,45984204	0,510722414	1,92
3,91	0,831586773	0,334577868	2,48548052	0,500247503	1,92
3,92	0,818277958	0,325756564	2,51193084	0,489930362	1,92
3,93	0,805145099	0,317082	2,53923307	0,4797697	1,92
3,94	0,792185614	0,308551839	2,56743119	0,469763097	1,92
3,95	0,779397374	0,300163945	2,59657226	0,459908422	1,92
3,96	0,766777845	0,291916016	2,62670701	0,450203292	1,92
3,97	0,754324978	0,283806058	2,65788893	0,440645698	1,92
3,98	0,742036401	0,275831819	2,69017695	0,431233346	1,92
3,99	0,72991003	0,267991264	2,72363367	0,421964186	1,92
4,00	0,717944792	0,260282913	2,75832471	0,412836873	1,92

29. Fe-30%Al için Modifiye Morse Potansiyeli kullanılarak $m=2.5$ Değeri için hesaplanan a_1 , a_2 (A°) örgü parametreleri, C_{11} , C_{12} Kararlılıkları, C_{11}/C_{12} oranı ve Hacim modülü (B) değerleri.

a_1	C_{11}	C_{12}	C_{11}/C_{12}	B	a_2
2,70	6,75500165	5,1066061	1,32279669	5,65607128	2,32
2,71	6,62253937	5,03413285	1,31552734	5,56360169	2,32
2,72	6,49367759	4,96252648	1,30854266	5,47291018	2,32
2,73	6,51063205	4,99194693	1,30422701	5,49817531	2,31
2,74	6,38688777	4,92036081	1,29805273	5,40920313	2,31
2,75	6,40866479	4,94809434	1,29517838	5,43495116	2,3
2,76	6,28959299	4,87655906	1,28976045	5,34757037	2,3
2,77	6,17357458	4,80589388	1,28458404	5,26178745	2,3
2,78	6,200889	4,83117456	1,28351583	5,28774604	2,29
2,79	6,08895311	4,76060271	1,27902988	5,20338617	2,29
2,80	5,97979587	4,69090311	1,27476431	5,12053403	2,29
2,81	6,01173175	4,71381874	1,27534215	5,14645641	2,28
2,82	5,90613629	4,64425303	1,27170855	5,06488079	2,28
2,83	5,80306842	4,57555456	1,26827652	4,98472585	2,28
2,84	5,83881676	4,59619892	1,27035772	5,01040486	2,27
2,85	5,73885184	4,52767339	1,2675057	4,93139954	2,27
2,86	5,64119241	4,46000935	1,26483861	4,85373724	2,27
2,87	5,68003628	4,47847636	1,26829661	4,87899637	2,26
2,88	5,58507426	4,4110227	1,26616312	4,8237322	2,26
2,89	5,49222888	4,34443008	1,26420009	4,72702968	2,26
2,90	5,53353297	4,36081201	1,26892261	4,75171899	2,25
2,91	5,44302346	4,29445923	1,26745259	4,67731397	2,25
2,92	5,35446256	4,22896638	1,26613978	4,60413177	2,25
2,93	5,26778255	4,16431785	1,2649809	4,53213942	2,25
2,94	5,3111187	4,17813029	1,27117115	4,55579309	2,24
2,95	5,22636656	4,11375769	1,27046058	4,48462709	2,24
2,96	5,14336784	4,05023696	1,26989307	4,41461392	2,24
2,97	5,18795904	4,06217134	1,27713939	4,43743391	2,23
2,98	5,10662643	3,99895766	1,27698937	4,36818058	2,23
2,99	5,02690118	3,9365775	1,27697249	4,30001873	2,23
3,00	4,94873647	3,87502073	1,27708645	4,23292598	2,23
3,01	4,99405199	3,88468878	1,28557325	4,25447652	2,22
3,02	4,91726081	3,82347415	1,28607142	4,1880697	2,22
3,03	4,84192445	3,76307879	1,28669228	4,12269401	2,22
3,04	4,8876185	3,77108198	1,29607856	4,14326082	2,21
3,05	4,81346409	3,71105537	1,2970607	4,0785249	2,21
3,06	4,74065839	3,6518335	1,29815842	4,01477513	2,21
3,07	4,66918334	3,59342051	1,29937015	3,95200812	2,21
3,08	4,71463735	3,5994312	1,30982774	3,97116786	2,2
3,09	4,64412053	3,54140878	1,31137658	3,90897936	2,2

3,10	4,57484328	3,48417836	1,3130336	3,84773334	2,2
3,11	4,50677291	3,4277317	1,31479745	3,78741211	2,2
3,12	4,55158615	3,43191258	1,32625352	3,8051371	2,19
3,13	4,48429993	3,37588082	1,3833478	3,74535386	2,19
3,14	4,41814842	3,32062192	1,33051836	3,68646409	2,19
3,15	4,35310884	3,26613053	1,33280308	3,62845664	2,19
3,16	4,28914751	3,21239229	1,33518796	3,5713107	2,19
3,17	4,33254116	3,21456485	1,34778465	3,58722362	2,18
3,18	4,26918135	3,16125881	1,35046879	3,53056632	2,18
3,19	4,2068528	3,10870307	1,35325012	3,47475298	2,18
3,20	4,1455244	3,05688396	1,3561275	3,41976411	2,18
3,21	4,18763624	3,05754517	1,36960732	3,43424219	2,17
3,22	4,12679444	3,00617358	1,37277317	3,37971386	2,17
3,23	4,06690757	2,95553075	1,37603291	3,32598969	2,17
3,24	4,00794841	2,90560321	1,37938601	3,27305161	2,17
3,25	3,94990216	2,85638551	1,38283231	3,22089106	2,17
3,26	3,99002517	2,85542466	1,39734913	3,23362483	2,16
3,27	3,93235479	2,8066687	1,40107551	3,1818974	2,16
3,28	3,87555489	2,75861033	1,40489392	3,13092518	2,16
3,29	3,81961263	2,71124421	1,40880434	3,08070035	2,16
3,30	3,76449862	2,66455367	1,41280645	3,03120199	2,16
3,31	3,71020635	2,61853678	1,4169006	2,98242664	2,16
3,32	3,74762229	2,61594165	1,43260928	2,99316853	2,15
3,33	3,69360525	2,57039384	1,43698028	2,94479765	2,15
3,34	3,64037647	2,5255074	1,4414436	2,89713042	2,15
3,35	3,58791513	2,48127022	1,44599935	2,85015186	2,15
3,36	3,53621606	2,4376801	1,45064813	2,80385875	2,15
3,37	3,48525874	2,39472487	1,45539005	2,75823616	2,15
3,38	3,51984351	2,39074263	1,47228039	2,76710959	2,14
3,39	3,46908564	2,34825619	1,47730288	2,72186601	2,14
3,40	3,41904817	2,30639558	1,48242054	2,67727977	2,14
3,41	3,36971298	2,26514929	1,48763395	2,63333718	2,14
3,42	3,32107114	2,22451199	1,49294369	2,59003171	2,14
3,43	3,27310538	2,1844721	1,49835074	2,54734986	2,14
3,44	3,30482871	2,17933027	1,51644235	2,55449642	2,13
3,45	3,2570194	2,13976156	1,52214128	2,51218084	2,13
3,46	3,20986448	2,10077818	1,5279407	2,47047361	2,13
3,47	3,16336665	2,06238077	1,5338422	2,42937606	2,13
3,48	3,11750028	2,02455264	1,5398465	2,38886852	2,13
3,49	3,07226396	1,98729158	1,5459553	2,34894904	2,13
3,50	3,02764142	1,95058676	1,55216957	2,30960498	2,13
3,51	2,98363168	1,91443581	1,55849137	2,27083443	2,13
3,52	3,01152357	1,90814481	1,57824687	2,27593773	2,12
3,53	2,9676176	1,87244713	1,58488726	2,23750396	2,12
3,54	2,9243037	1,73728882	1,59164073	2,19962711	2,12
3,55	2,88157171	1,80266218	1,59850899	2,16229869	2,12

3,56	2,83943648	1,76856233	1,60549415	2,12551371	2,12
3,57	2,79782449	1,7349794	1,6125981	2,08926109	2,12
3,58	2,75678638	1,70190589	1,61982304	2,05353272	2,12
3,59	2,71629729	1,66933697	1,62717135	2,01832374	2,12
3,60	2,67634468	1,6372633	1,63464525	1,98362376	2,12
3,61	2,63692372	1,60568015	1,6422472	1,949428	2,12
3,62	2,66027763	1,59842279	1,66431412	1,95237441	2,11
3,63	2,6093568	1,5672712	1,67229237	1,91849269	2,11
3,64	2,58211785	1,53660108	1,68040872	1,88510667	2,11
3,65	2,54381225	1,50640336	1,68866607	1,85220633	2,11
3,66	2,50601066	1,476671	1,6970677	1,81978422	2,11
3,67	2,46870576	1,44739761	1,70561685	1,78783366	2,11
3,68	2,43189012	1,4185764	1,71431734	1,75634764	2,11
3,69	2,39555982	1,39020312	1,72317252	1,72532202	2,11
3,70	2,35970777	1,3622711	1,73218662	1,69474999	2,11
3,71	2,32432325	1,33477212	1,74136335	1,6646225	2,11
3,72	2,28939939	1,30769986	1,75070708	1,63493304	2,11
3,73	2,25493614	1,28105204	1,76022212	1,60568008	2,11
3,74	2,27340611	1,27313929	1,78566959	1,60656156	2,1
3,75	2,23901245	1,24688941	1,79567845	1,57759709	2,1
3,76	2,2050679	1,22105176	1,80587587	1,54905714	2,1
3,77	2,17156947	1,19562214	1,81626736	1,52093792	2,1
3,78	2,13850399	1,17059083	1,82685866	1,49322855	2,1
3,79	2,10587208	1,14595569	1,83765576	1,46592782	2,1
3,80	2,07366748	1,12171096	1,84866473	1,4390298	2,1
3,81	2,04188096	1,09784915	1,85989211	1,41252642	2,1
3,82	2,01050677	1,07436461	1,87134493	1,386412	2,1
3,83	1,97954545	1,05125528	1,8830302	1,36068534	2,1
3,84	1,94898492	1,02851215	1,89495566	1,33533641	2,1
3,85	1,91882295	1,00613175	1,90712892	1,31036215	2,1
3,86	1,88905057	0,984106808	1,91955849	1,28575473	2,1
3,87	1,85966887	0,96243552	1,93225294	1,2615133	2,1
3,88	1,83066929	0,941110993	1,94522145	1,23763043	2,1
3,89	1,80204697	0,92018136	1,95847394	1,21410108	2,1
3,90	1,77379643	0,899481961	1,97202001	1,19092012	2,1
3,91	1,74591558	0,879168857	1,98587059	1,16808443	2,1
3,92	1,7183966	0,859182518	2,00003674	1,14558721	2,1
3,93	1,6912348	0,839518037	2,01453063	1,12342363	2,1
3,94	1,66442783	0,820172121	2,02936406	1,10159069	2,1
3,95	1,67601794	0,812069777	2,06388415	1,1000525	2,09
3,96	1,64928526	0,793053714	2,079664	1,07846423	2,09
3,97	1,62290525	0,774349111	2,09583149	1,05720116	2,09
3,98	1,59686787	0,75594843	2,11240319	1,03625491	2,09
3,99	1,57117106	0,737848609	2,12939489	1,01562276	2,09
4,00	1,54581062	0,720044988	2,14682506	0,9953002	2,09

30. Fe-30%Al için Modifiye Morse Potansiyeli kullanılarak $m=3.0$ Değeri için hesaplanan a_1 , a_2 (A°) örgü parametreleri, C_{11} , C_{12} Kararlılıkları, C_{11}/C_{12} oranı ve Hacim modülü (B) değerleri.

a_1	C_{11}	C_{12}	C_{11}/C_{12}	B	a_2
2,70	1,31062323	0,992603715	1,32038921	1,09861022	2,28
2,71	1,28551625	0,978065863	1,31434528	1,08054933	2,28
2,72	1,28994877	0,983657172	1,31138044	1,08575437	2,27
2,73	1,26577899	0,969136238	1,30608984	1,06801716	2,27
2,74	1,2422281	0,954796744	1,30103932	1,0506072	2,27
2,75	1,24774996	0,959897098	1,29987888	1,05584805	2,26
2,76	1,22501836	0,945584154	1,2955149	1,03872889	2,26
2,77	1,2028498	0,931452776	1,2913696	1,02191845	2,26
2,78	1,20927604	0,936079994	1,29185118	1,02714534	2,25
2,79	1,1878201	0,921982018	1,28833326	1,01059471	2,25
2,80	1,16687784	0,90806553	1,28501502	0,94336302	2,25
2,81	1,17404603	0,912238702	1,28699432	0,99950781	2,24
2,82	1,15372405	0,89863333	1,28425104	0,98348357	2,24
2,83	1,13387072	0,884668129	1,28169048	0,967735658	2,24
2,84	1,14163701	0,888406235	1,2850394	0,972816495	2,23
2,85	1,12232118	0,874758313	1,28300717	0,95727927	2,23
2,86	1,10343725	0,861291325	1,28114288	0,942006633	2,23
2,87	1,08496874	0,848000854	1,27944298	0,92699015	2,23
2,88	1,0932536	0,851198279	1,28437008	0,931883386	2,22
2,89	1,07523236	0,937964766	1,28314746	0,917053965	2,22
2,90	1,05759292	0,824906176	1,28207662	0,902468424	2,22
2,91	1,0662067	0,827713298	1,2813528	0,907211099	2,21
2,92	1,04895326	0,814717007	1,28750628	0,892795758	2,21
2,93	1,03205432	0,801895952	1,28701774	0,878615407	2,21
2,94	1,04090213	0,804331048	1,29412153	0,883188074	2,2
2,95	1,0243357	0,791577351	1,29404371	0,869163466	2,2
2,96	1,00809852	0,778997963	1,29409648	0,855364815	2,2
2,97	0,992179727	0,766589661	1,29427747	0,84178635	2,2
2,98	1,00114394	0,768570685	1,3260489	0,846095101	2,19
2,99	0,985499555	0,756236589	1,30316302	0,832657578	2,19
3,00	0,970152394	0,744072528	1,30384117	0,819432483	2,19
3,01	0,955092713	0,732075359	1,30463715	0,806414477	2,19
3,02	0,964063701	0,733637997	1,31408638	0,810446565	2,18
3,03	0,949230169	0,72172112	1,31523125	0,79755747	2,18
3,04	0,934664986	0,70996895	1,31648713	0,784867629	2,18
3,05	0,920363567	0,698381259	1,31785261	0,772375362	2,18
3,06	0,929249091	0,699557806	1,32833782	0,776121568	2,17
3,07	0,915131353	0,688053961	1,33002847	0,763746425	2,17
3,08	0,901260959	0,676712264	1,331823	0,751561829	2,17
3,09	0,887631596	0,665530589	1,33372021	0,739564258	2,17
3,10	0,896355054	0,666350945	1,34516963	0,743018981	2,16
3,11	0,882876722	0,655257916	1,34737284	0,731130852	2,16
3,12	0,869624194	0,644321658	1,34967401	0,719422503	2,16
3,13	0,856594324	0,633541784	1,35207234	0,707892631	2,16
3,14	0,843781756	0,622916193	1,35456706	0,696538047	2,16
3,15	0,852189651	0,623348288	1,36711637	0,699628743	2,15
3,16	0,839493826	0,612814257	1,36989931	0,688374114	2,15
3,17	0,827002692	0,602431251	1,37277522	0,677288398	2,15
3,18	0,814713778	0,592198793	1,37574373	0,66370455	2,15
3,19	0,802621177	0,58211408	1,37880392	0,655616446	2,15
3,20	0,810650508	0,582201127	1,39238911	0,65835092	2,14
3,21	0,798648111	0,57221017	1,39572513	0,647689483	2,14

3,22	0,78683376	0,562365147	1,399151	0,637188018	2,14
3,23	0,775203379	0,552664116	1,40266639	0,62684387	2,14
3,24	0,763751744	0,543104343	1,40627074	0,616653476	2,14
3,25	0,771360714	0,542887844	1,42084728	0,619045467	2,13
3,26	0,75997995	0,533424011	1,42472017	0,608942657	2,13
3,27	0,748771347	0,52099601	1,42868139	0,598990183	2,13
3,28	0,73773246	0,514913431	1,43273105	0,589186441	2,13
3,29	0,726858597	0,505862832	1,43686895	0,579528087	2,13
3,30	0,716147521	0,496946658	1,44109536	0,570013612	2,13
3,31	0,723199255	0,496425588	1,45681301	0,572016811	2,12
3,32	0,712540483	0,487605389	1,4613056	0,562583754	2,12
3,33	0,702039234	0,478917634	1,46588721	0,553291501	2,12
3,34	0,691690494	0,47035923	1,47055793	0,544136318	2,12
3,35	0,681492244	0,461928914	1,47531844	0,53511669	2,12
3,36	0,671442613	0,453625584	1,48016919	0,52623126	2,12
3,37	0,677924261	0,452848972	1,49702065	0,527874068	2,12
3,38	0,667914742	0,444641567	1,50214194	0,519065956	2,12
3,39	0,65804792	0,436557921	1,50735536	0,51038792	2,11
3,40	0,648322124	0,42859691	1,51266168	0,504838648	2,11
3,41	0,638734734	0,420756743	1,51806179	0,493416073	2,11
3,42	0,629283189	0,413035719	1,52355634	0,485118209	2,11
3,43	0,619896509	0,40543213	1,52914641	0,476943115	2,11
3,44	0,610778006	0,397944301	1,5348329	0,468888869	2,11
3,45	0,616487383	0,3969109	1,55321353	0,470103061	2,1
3,46	0,607333035	0,389517116	1,55918783	0,462121527	2,1
3,47	0,598300584	0,382236554	1,5652626	0,454257898	2,1
3,48	0,589396028	0,375067632	1,57143933	0,44651043	2,1
3,49	0,580615279	0,368009241	1,57771929	0,438877921	2,1
3,50	0,571956308	0,361059802	1,58410409	0,431358637	2,1
3,51	0,563417013	0,351217706	1,59059529	0,423950808	2,1
3,52	0,55499546	0,347481425	1,59719462	0,416652771	2,1
3,53	0,54668962	0,340849417	1,60390364	0,409462818	2,1
3,54	0,55156943	0,339609064	1,62413047	0,410262519	2,09
3,55	0,543286502	0,333066892	1,63116334	0,403140095	2,09
3,56	0,535116542	0,326626577	1,63831292	0,396123232	2,09
3,57	0,527057705	0,320286636	1,64558132	0,389210326	2,09
3,58	0,519109111	0,314046078	1,65297116	0,382400422	2,09
3,59	0,511269004	0,30790346	1,66048476	0,375691975	2,09
3,60	0,503535517	0,301857253	1,66812463	0,369083341	2,09
3,61	0,495907171	0,295906138	1,67589349	0,362573149	2,09
3,62	0,488381466	0,290048248	1,68379388	0,356159321	2,09
3,63	0,480958349	0,284283058	1,6918291	0,349841488	2,09
3,64	0,473634792	0,278608387	1,70000191	0,343617189	2,09
3,65	0,477586887	0,277211402	1,72282555	0,34400323	2,08
3,66	0,470282659	0,271620367	1,73139689	0,337841131	2,08
3,67	0,46307741	0,266118402	1,74011795	0,331771405	2,08
3,68	0,455968954	0,260703817	1,74899224	0,325792196	2,08
3,69	0,448956562	0,25537569	1,75802388	0,319902647	2,08
3,70	0,44203877	0,250132719	1,7670169	0,314101403	2,08
3,71	0,4352142	0,24497364	1,77657563	0,30838716	2,08
3,72	0,428480838	0,239896853	1,78610446	0,302758181	2,08
3,73	0,412838635	0,234901838	1,79580815	0,297214103	2,08
3,74	0,415284993	0,22998666	1,80569166	0,291752771	2,08
3,75	0,408819857	0,225150821	1,81576001	0,286373833	2,08
3,76	0,402441974	0,220392789	1,82601878	0,281075651	2,08
3,77	0,396148314	0,215711412	1,8364736	0,275857046	2,08
3,78	0,38994002	0,21110587	1,84713016	0,270717253	2,08

3,79	0,383814709	0,206574694	1,85799481	0,265654699	2,08
3,80	0,377771772	0,202117078	1,86907398	0,260668643	2,08
3,81	0,371809487	0,197731598	1,88034767	0,255757561	2,08
3,82	0,374555067	0,196247028	1,90858976	0,255683041	2,07
3,83	0,368610917	0,191933693	1,92051178	0,250826101	2,07
3,84	0,362746659	0,187690865	1,93268148	0,246042796	2,07
3,85	0,356961189	0,183517532	1,94510674	0,241332085	2,07
3,86	0,351254032	0,179412884	1,957779714	0,236693266	2,07
3,87	0,345622867	0,175375283	1,97076157	0,232124478	2,07
3,88	0,340067818	0,171404323	1,98400957	0,227625488	2,07
3,89	0,334587368	0,16749872	1,9975518	0,223194936	2,07
3,90	0,329180868	0,163657694	2,01139567	0,218832085	2,07
3,91	0,323846925	0,159880039	2,02556195	0,214535668	2,07
3,92	0,318584438	0,156164756	2,04005338	0,21031465	2,07
3,93	0,31339304	0,152511183	2,05488563	0,206138469	2,07
3,94	0,308271708	0,14891837	2,07007173	0,20203615	2,07
3,95	0,303219509	0,145385376	2,08562593	0,197969754	2,07
3,96	0,298235503	0,141911299	2,10156277	0,194019367	2,07
3,97	0,293318766	0,138495217	2,11789816	0,190103067	2,07
3,98	0,288467945	0,135136004	2,13464907	0,186246651	2,07
3,99	0,283683059	0,131833275	2,151832	0,182449869	2,07
4,00	0,278962786	0,128585917	2,16946609	0,17871154	2,07

ÖZGEÇMİŞ

1979 Yılında Kütahya-Tavşanlı-Tepecik Beldesinde doğdu. İlkokul öğrenimini Tepecik Beldesinde, lise öğrenimini Tavşanlı'da, üniversite öğrenimini ise Kütahya Dumlupınar Üniversitesi Fen Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümünde tamamladı (2001). 2003/2008 yıllarında öğretmenlik yaptı. 2006 Yılında Dumlupınar Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Anabilim Dalında Yüksek Lisans programına girdi. Halen öğretmenlik yapmaktadır.