

Fe-%30 Al ALAŞIMININ
WIEN2k İLE İNCELENMESİ

Süleyman BAŞER

Yüksek Lisans Tezi

Fizik Anabilim Dalı

Eylül - 2008

**Fe-%30 Al ALAŞIMININ
WIEN2k İLE İNCELENMESİ**

Süleyman BAŞER

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

Danışman : Yrd. Doç. Dr. H.Yaşar OCAK

Eylül - 2008

KABUL VE ONAY SAYFASI

Süleyman BAŞER'in YÜKSEK LİSANS tezi olarak hazırladığı "Fe-%30 Al Alaşımının WIEN2k ile İncelenmesi" başlıklı bu çalışma, jürimizce lisans yönetmeliğinin ilgili maddeleri uyarınca değerlendirilerek kabul edilmiştir.

/ /

Üye : Yrd. Doç. Dr. H. Yaşar OCAK

Üye : Yrd. Doç. Dr. Ercan UÇGUN

Üye : Yrd. Doç. Dr. Ali ÇETİN

Fen Bilimleri Enstitüsü Yönetim Kurulu'nun / / gün ve sayılı kararı ile onaylanmıştır.

Prof. Dr. M. Sabri ÖZYURT
Fen Bilimleri Enstitüsü Müdürü

Fe-%30 Al ALAŞIMININ WIEN2k İLE İNCELENMESİ

Süleyman BAŞER

Fizik Bölümü, Yüksek Lisans Tezi, 2008

Tez Danışmanı: Yrd.Doç.Dr. H. Yaşar OCAK

ÖZET

FeAl, Fe₂Al₂, Fe₄Al₄, ve Fe₃Al₁ alaşımının enerji band yapısı, durum yoğunluğu (DOS), elektron yoğunluğu ve kararlılık durumu Wien2k programı ile ayrı ayrı incelendi. Bu çalışma yapılmadan önce TiC ve Fe için test edilerek, sonuçların literatürdeki sonuçlarla uyumlu olduğu görüldü. FeAl alaşımına ait yukarıdaki işlemler basit FeAl yapı ve Fe₂Al₂, Fe₄Al₄, Fe₃Al₁ alaşımlarında supercell kristal yapı için ayrı ayrı hesaplandı. Sonuçlar kendi içerisinde mukayeseli olarak karşılaştırılıp yorumlandı.

Anahtar Kelimeler: Band yapısı, Durum yoğunluğu, Elektron yoğunluğu, FeAl alaşımı, Kararlılık, Wien2k

EXAMINING OF Fe-%30 Al ALLOYS USING WIEN2k PROGRAM

Süleyman BAŞER

Physics Department, M. S. Thesis, 2008
Thesis Supervisor: Asist. Prof. H. Yaşar OCAK

SUMMARY

Structure of energy bands, density of states(DOS), density of electron, stability of alloy and of Fe-Al, Fe₂-Al₂, Fe₄-Al₄ and Fe₃-Al₁ alloys examined by using Wien2k program. Before having started to study and examine of this work, program was tested for results of TiC and Fe. The results obtained from the test applied to TiC and Fe are shown. That it was appropriate with the results of those encountered in literature. We followed the procedure belong to FeAl structure for supercell Fe-Al, Fe₂-Al₂, Fe₄-Al₄ and Fe₃-Al₁ and basic FeAl. The results taken from this work were compared.

Keywords: Structure of bands, Density of states, Density of electron, FeAl alloy, Stability, Wien2k.

TEŐEKKÜR

Yüksek lisans tez çalışmam süresince, yardımlarını, destek ve önerilerini değerli bilgileri doğrultusunda benden esirgemeyen çok değerli hocalarım Sayın Yrd. Doç. Dr. H. Yaşar OCAK ve Sayın Yrd. Doç. Dr. Ercan UÇGUN Beyfendiler'e şükranlarımı sunarım.

Ayrıca çalışmalarım süresince benden maddi ve manevi desteklerini esirgemeyen aileme teşekkürü bir borç bilirim.

İÇİNDEKİLER

	<u>Sayfa</u>
ÖZET	iv
SUMMARY	v
ŞEKİLLER DİZİNİ	viii
ÇİZELGELER DİZİNİ	xi
SİMGELER VE KISALTMALAR DİZİNİ	xii
1. GİRİŞ	1
2. WIEN2k PROGRAMININ TANITIMI	21
2.1. case.struct ve case.inst dosyalarının oluşturulması	21
2.2. init_lapw hesaplamaları	27
2.3. SCF Hesaplamaları	32
2.4. Hesaplama Özellikleri	33
2.4.1. Elektron yoğunluğu	33
2.4.2. Durum yoğunluğu (DOS)	35
2.4.3. Band yapısı	36
2.4.4. Band karakter çizimiyle band yapısı	38
2.4.5. Hacim grafiği çizimi	39
2.4.6. Süper örgünün oluşturulması	39
3. TiC, bcc Fe, BASİT FeAl , SUPERCELL Fe ₂ Al ₂ ve Fe ₄ Al ₄ YAPILARININ WIEN2K PROGRAMI İLE TEST EDİLMESİ	41
3.1. TiC (NaCl) Yapısı	41
3.2. bcc Fe yapısı	53
3.3. Basit FeAl yapısı	64
3.4. Supercell Fe ₂ Al ₂ Yapısı	72
3.5. 8 atomlu bcc Fe ₄ Al ₄ Yapısı	77
4. Fe %30 Al ALAŞIMININ WIEN2K PROGRAMI İLE İNCELENMESİ.....	80
SONUÇ	87
KAYNAKLAR DİZİNİ	89

ŞEKİLLER DİZİNİ

<u>Sekil</u>	<u>Sayfa</u>
1.1. Şematik yarıiletken DOS grafiği.....	3
1.2. Şematik metal DOS grafiği.....	3
1.3. Üç boyutlu serbest elektron gazında tek parçacık durum yoğunluğunun enerjiyle değişimi.....	4
1.4. Metal, yarı iletlen ve yalıtkanlarda enerji bantlarındaki elektron doluluk şeması	4
1.5. Brillouin bölgeler a) basit kübik (sc), b) fcc kübik, c) bcc kübik örgü. Brillouin bölgesinin yüksek simetri noktaları ve yüksek simetri yönleri	5
1.6. Yüksek kristal simetrisi yönleri boyunca bccFe (spin yukarı) için E(k) band yapısı...	6
1.7. V, Cr, Fe, Ni, Cu 3d geçiş metalleri bant yapıları.....	6
1.8. a) bcc örgüsünün Brillouin bölgesi, b) bcc yapıdaki Fe için elektronik band yapısı, c) elektronik durum yoğunluğu	7
1.9. Silisyum için band yapısı	8
1.10. Silisyum için DOS grafiği.....	9
1.11. TiC için enerji hacim grafiği.....	9
1.12. Homojen bir zor etkisinde kalan bir küpün yüzeyleri üzerindeki kuvvetler	12
1.13. Homojen bir zor etkisi altındaki birim küpün $0x_2$ ve $0x_3$ eksenlerine dik yüzeyler üzerindeki kuvvetler. $0x_1$ ekseni şekil düzlemine diktir	13
1.14. Homojen olmayan zor bileşenleri	14
1.15. Lineer ve lineer olmayan zorlanma eğrileri	17
2.1. Kübik uzay örgüleri	22
2.2. Kübik birim hücre	24
2.3. Birim Hücre içindeki atomik küreler	25
2.4. Çekirdek, yarı çekirdek ve valans durumları	29
2.5. $u_\ell(r, E_\ell)$ enerjisi ve DOS'un şematik bağılılığı.....	30
2.6. FeAl için a) kübik birim hücre b) $1 \times 1 \times 2$ 'lik süper örgü yapısı.....	39
2.7. WIEN2k Programının akış şeması	40
3.1. TiC için elektron yoğunluğu	43
3.2. TiC için toplam DOS grafikleri.....	45
3.3. TiC için C-s DOS grafiği	46
3.4. TiC için için C-p DOS grafiği.....	47
3.5. TiC için için Ti-d DOS grafiği	48
3.6. TiC için için Ti-eg DOS grafiği	49

ŞEKİLLER DİZİNİ (devamı)

<u>Sekil</u>	<u>Sayfa</u>
3.7. TiC için için Ti-t2g DOS grafiği	50
3.8. TiC band yapısı	51
3.9. TiC için enerji-hacim grafiği.....	52
3.10. bcc Fe toplam DOS grafiği	55
3.11. bcc Fe p-DOS grafiği	56
3.12. bcc Fe s-DOS grafiği.....	57
3.13. bcc Fe d-DOS grafiği	58
3.14. bcc Fe f-DOS grafiği	59
3.15. bcc Fe p-DOS grafiği	60
3.16. bcc Fe Toplam DOS grafiği	61
3.17. bccFe için elektron yoğunluğu grafiği	62
3.18. bccFe için elde edilen band yapısı grafiği.....	63
3.19. bccFe için elde edilen enerji-hacim grafiği	63
3.20. Basit FeAl yapısı	65
3.21. FeAl için elektron yoğunluğu grafiği	66
3.22. FeAl için DOS grafiği	67
3.23. FeAl için toplam DOS grafiği	68
3.24. FeAl için band grafiği	70
3.25. FeAl için enerji-hacim grafiği	71
3.26. Supercell Fe ₂ Al ₂ yapısı	74
3.27. Supercell Fe ₂ Al ₂ için elektron yoğunluğu grafiği.....	75
3.28. Supercell Fe ₂ Al ₂ için toplam DOS grafiği	76
3.29. Supercell Fe ₂ Al ₂ için band grafiği.....	76
3.30. 8 Atomlu bcc Fe ₄ Al ₄ yapısı	79
3.31. bcc Fe ₄ Al ₄ için hacim grafiği.....	79
4.1. Fe ₃ Al yapısı.....	82
4.2. Fe ₃ Al için elektron yoğunluğu grafiği	82
4.3. Fe ₃ Al için toplam DOS grafiği	83
4.4. Fe ₃ Al için partial DOS: Fe1 pz grafiği	83
4.5. Fe ₃ Al için partial DOS: Fe1 px+py grafiği.....	84
4.6. Fe ₃ Al için partial DOS: Fe1 d grafiği.....	85

ŞEKİLLER DİZİNİ (devamı)

<u>Sekil</u>	<u>Sayfa</u>
4.7. Fe ₃ Al için partial DOS: Fe2 s grafiđi	85
4.8. Fe ₃ Al için partial DOS: Fe2 p grafiđi	85
4.9. Fe ₃ Al için enerji- hacim grafiđi	86

ÇİZELGELER DİZİNİ

<u>Çizelge</u>	<u>Sayfa</u>
1.1 İndis deęiřtirme tablosu	19
2.1 Kbik rglerin zellikleri.....	23
2.2 Relativistik kuantum sayıları.....	27
5.1 İncelenen Fe-Al sistemlerine ait elde edilen parametreler	88

SİMGELER ve KISALTMALAR DİZİNİ

<u>Kısaltma</u>	<u>Açıklama</u>
\hat{H}	Çok parçacık sistemi Hamiltonyeni
u_ℓ^α	Dalga fonksiyonu radyal kısmı
\vec{k}	Dalga vektörü
ℓ	Elektron yörüngeleri
Y_m^l	Küresel harmonikler
ρ	Taban durum elektron yoğunluğu
\hat{H}_{sp}	Tek parçacık Hamiltonyeni
\vec{K}	Ters örgü vektörü
\vec{r}, \mathbf{r}	Yer vektörü
$\Delta, G, \Sigma, \Delta$	Yüksek simetri yönleri
a_{fcc}	fcc yapının örgü parametresi
APW	Arttırılmış düzlem dalgaları
DFT	Yoğunluk fonksiyon teorisi
\bar{e}	Elektron
E_F	Fermi Enerji
eV	Elektronvolt
$E_{vdış}$	Taban durumu toplam enerji fonksiyonu
E_{xc}	Değiş-tokuş ve karşılıklı etkileşme enerji
F_{HK}	Hohenberg – Kohn fonksiyonu
GGA	Genelleştirilmiş gradyant yaklaşımı
HF	Hartree – Fock
KS	Kohn-Sham
LAPW	Lineer arttırılmış düzlem dalgaları
LDA	Yerel yoğunluk yaklaşımı
LMTO	Lineer muffin-tin orbital
M_e	Elektronların kütlesi
M_i	Çekirdeklerin kütlesi

SİMGELER ve KISALTMALAR DİZİNİ (devamı)

<u>Kısaltma</u>	<u>Açıklama</u>
\emptyset_i	Tek parçacık dalga fonksiyonu
RMT	Muffin-Tin yarıçapı
R_y	Ryberg
s, p, d	Bant isimleri
T	Sıcaklık
T, H, N, P	Brillouin bölgeler
V	İlkel hücre hacmi
V_{xc}	Değiş-tokuş ve Karşılıklı etkileşme enerji fonksiyoneli
DOS	Density of states
GPa	Giga pascal
bct	Cisim merkezli tetragonal yapı
OC	Optik iletkenlik Spektrumu
LDA	Lokal spin yoğunluk yaklaşımı
B2	Basit Yapı

1. GİRİŞ

Katıhal fiziğinde kristal yapıların fiziksel özelliklerinin incelenmesi çok önemli bir yere sahiptir. Katıların elastik, elektriksel ve mekaniksel özelliklerinin yarı deneysel potansiyel enerji fonksiyonları ile incelenmesi birçok araştırmacının konusu olmuş ve halen bu konular üzerindeki çalışmalar ilgiyle devam etmektedir.

Fe-Al alaşımının fiziksel özellikleri çeşitli potansiyel fonksiyonlar kullanılarak ayrı ayrı hesaplanmıştır. Bunların içinde öne çıkan çalışma; klasik Morse potansiyel enerji fonksiyonu olup, bazı fcc ve bcc kristal yapıların fiziksel özellikleri birçok araştırmacı tarafından [1, 2, 3, 4] ayrı ayrı incelenmiştir. Bazı araştırmacılar da Mie [5], Johnson [6] ve Born-Mayer [7] gibi, potansiyel enerji fonksiyonları kullanarak bazı fcc ve bcc metaller ve alaşımların fiziksel özelliklerinin Morse potansiyel fonksiyonundan bulunan sonuçlardan daha iyi olmadığını belirtmişlerdir. Bugüne kadar yapılan çalışmalar da her potansiyel fonksiyonun katıların fiziksel özelliklerini açıklamada başarılı olamayacağını göstermiştir. O halde tanımlanan potansiyellerin daha çok denenmesi gerekmektedir. Ayrıca yaptığımız literatür araştırmasına göre Fe-Al alaşımlarının fiziksel özelliklerinin incelenmesinde özel bir potansiyel fonksiyonu kullanılmadığı da anlaşılmıştır.

Bunun nedeni potansiyel fonksiyonların uzun mesafeli etkileşimlerde yetersiz kalması ve bunun yerine yeni birçok simülasyon yöntemi başarıyla uygulanmaktadır [8]. Bundan dolayı bizde bu çalışmada yeni bir çalışma yöntemi olan Wien2k programını tercih ettik [9]. Wien2k programı kullanılarak özgün metal ve alaşımlar için oldukça başarılı sonuçlar elde edilmektedir [10, 11]. Bizim çalışacağımız Fe-Al sistemi üzerinde de deneysel ve teorik birçok çalışma söz konusudur [10, 12].

$Fe_{(1-x)}-Al_{(x)}$ alaşımı üzerine ilk çalışma 1932 yılında Bradley ve Jay [13] tarafından yapıldı. Bu çalışmada, alaşımın faz yapısı x-ışınları metodu ile incelenerek $x>0.19$ için bcc disorder, DO_3 ve B_2 türünde üç ayrı yapı belirlendi. Daha sonraki çalışmalarda [14], bu yapılar $Fe_3Al(DO_3)$ ve $Fe-Al(B_2)$ olarak tanımlanır. Ayrıca bu çalışmalarda, alaşımdaki Al miktarının ve sıcaklığının alaşımın mekaniksel özelliklerini çok etkilediği de vurgulanmıştır. Yine $x=0.25$ için oda sıcaklığındaki Fe-Al sisteminde DO_3 gerçekleştiği belirtilmektedir.

Prakash [15] tarafından yapılan bir çalışmada, Fe-Al sistemi DO_3 yapıda iken her bir Al atomunun yalnız en yakın komşuluklardaki Fe atomlarıyla etkileştiği B_2 yapısında ise Fe ve Al atomlarının rast gele dizildiği belirtilmiştir. Fe-Al sisteminin yapısını inceleyen A. Taylor ve Jones [16]'un çalışmasında; Al oranı % 18.75 den fazla ise küpün merkezinde Fe atomlarının

bulunduğu, köşelerini ise Fe ve Al atomlarının kendiliklerinden sırayla paylaştıkları belirtilir. Taylor, Fe-Al sisteminin üç farklı faz halini alaşım içerisindeki Al oranına bağlı olduğunu belirterek % 18,75'den % 34'e kadar ki aralıkta üç faz yapısına rastlandığını, % 34'ten sonra ise B₂ yapı ile DO₃ yapı yavaş yavaş birleşerek tek bir yapıya dönüşüp, sonuçta (DO₃+B₂) ve disorder yapılarının oluştuğunu ifade etmiştir.

Alaşım % 0,0'dan % 18,75 Al oranına ulaşıncaya kadar (Disorder+DO₃) ve B₂ yapı gözlenir. Alaşım (DO₃+B₂) yapıya ulaşıncaya Al atomları merkezde, Fe atomları da köşelerde yer alan bir bcc yapı 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 [17]. Rudman bu çalışmada her komşuluk etkileşiminin farklı olduğunu ve üçüncü komşuluktan sonraki etkileşimlerinde bir sonraki komşuluğun etkileşimi bir öncekine göre ihmal edilemez.[17]. Benzer çalışma yapan H. J. Leamy [18, 13] de ikinci komşuluğa kadar inceleme yapmış; faz yapılarının mekaniksel özelliklerinin birbirinden farklı olduğunu, elastik sabitlerin farklı fazlarda eşit kabul edilemeyeceğini açıklamıştır.

Bu faz değişimlerinde doğrudan gözlenebilen alaşımın %21,6 Al oranından % 23,9 Al'a dek DO₃ küresel yapının disorder faz ile dengede olması ve metalurjik açıdan oldukça öneme sahip olan basamaklar halinde fazlara ayrılmış olmasıdır. Bu yapı doğrusal bir kristal yapıya sahiptir [13].

Yapılan çalışmalarda aynı orandaki Al'de yüksek sıcaklıkta örgü sabitinin yüksek, düşük sıcaklıklarda düşük örgü sabiti görülmüştür [16]. Alaşımlardaki dönüşüm esnasında basınç uygulandığında geçişlerin normal olmadığı belirtilmiştir. Sabit sıcaklıkta basınç altında örgü sabitinin arttığı belirtilmiştir.

Fe_(1-x)-Al_(x) alaşımlarının faz yapısı üzerine Leamy [18] tarafından yapılan bir çalışmada;

$x = 0,1875-0,25$ arasında alaşım disorder

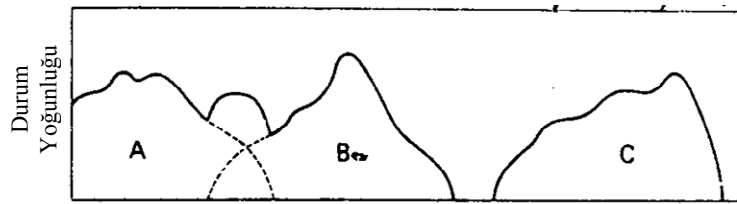
$x = 0,25-0,34$ arasında alaşım DO₃

$x = 0,34-0,5$ arasında alaşım B₂

şeklinde gözlemlendiği belirtilmiştir.

Wien2k programı ile Fe-Al alaşımları üzerinde de birçok çalışma yapılmıştır. [19, 20] Bu anlamda inceleyeceğimiz önemli fiziksel özelliklerden bazıları; elektron yoğunluğu, durum yoğunluğu (Density of states: DOS), bant yapısı ve enerji-hacim değişimidir. Bu özellikler incelenirken çok çeşitli modellerden yararlanılmıştır.

Wien2k programı, her türlü kristal yapıların, örgü parametresi ve atomların yerlerinin bilinmesi ile kristal yapının fiziksel özellikleri hakkında gerekli bilgileri kısa zamanda elde etmemize olanak sağlar.



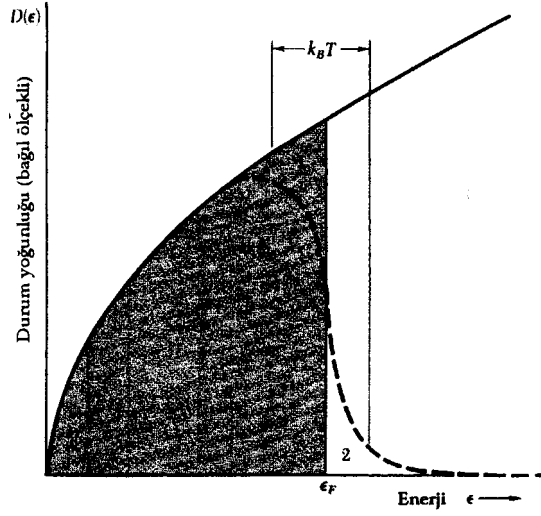
Şekil 1.1 Şematik yarıiletken DOS grafiği [21].

Kristal yapıların incelenmesinde Wien2k programı yoğunluk fonksiyonel (fonksiyonun fonksiyonu) teori (DFT) [22], Tam Potansiyel Lineer Arttırılmış Düzlem Dalgaları (FLAPW) [23] ve değiş-tokuş korelasyon enerjisi (EXC) için [24] genel grandyent yaklaşımı (GGA) kullanılmıştır

Bir n bandın en yüksek enerji durumları takip eden n+1 bandının en düşük enerji durumlarının üstüne gelebilir. Şekil 1.1.de A ve B bandı üst üste binmiş ki bunlara valans bandı denir, C bandı ise, iletim bandı, B'den ayrıdır. Bu enerji aralığıdır. Bu enerji aralığı yarıiletkenlerde yasak bölge olup, Fermi enerjisinin tanımlandığı bölgedir. Metallerde ise bütün bandlar üst üste biner (Şekil 1.2.) [21].

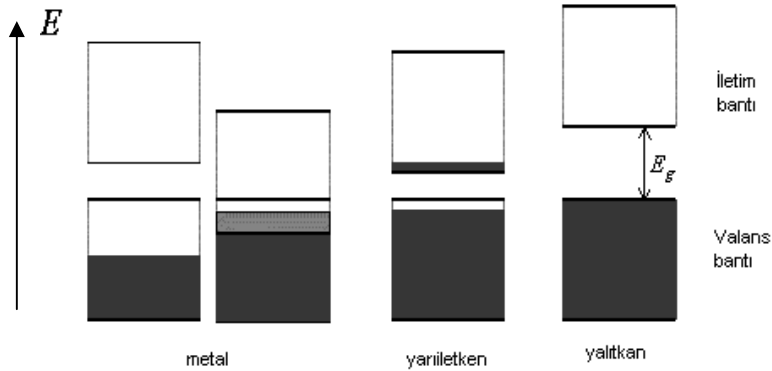


Şekil 1.2 Şematik metal DOS grafiği [21].



Şekil 1.3 Üç boyutlu serbest elektron gazında tek parçacık durum yoğunluğunun enerjiyle değişimi [25].

Bir katıda elektron dağılımı $n(E)dE$ ile belirlenir. $T = 0$ 'da enerji sınırına kadar yörüngeler doludur. E_F 'den yukarısı ise boştur. Şekil 1.3'de taralı bölge mutlak sıfırdaki dolu olan yörüngeleri gösterir. Sıcaklık 0 'dan T 'ye değişirken, ısıl olarak uyarılan elektronlar 1.bölgeden 2.bölgeye geçerler [25].



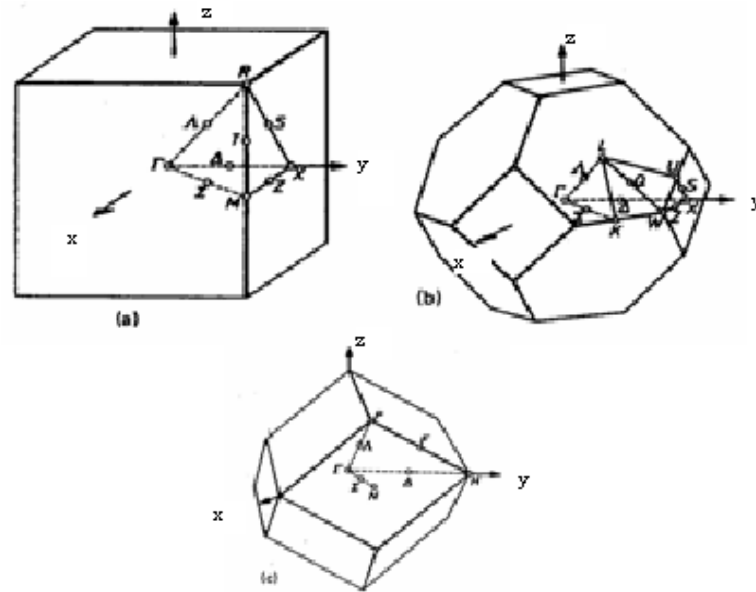
Şekil 1.4 Metal, yarı iletken ve yalıtkanlarda enerji bantlarındaki elektron doluluk şeması

Şekil 1.4. te taralı alanlar elektronların doldurduğu kısımlardır. Enerji bantları tamamen dolu veya tamamen boş ise kristal, bir yalıtkan gibi davranır. Çünkü elektronlar bir elektrik alanında hareket edemezler. Bir veya daha çok bant yarı dolu (örneğin % 10 veya % 90 oranında)

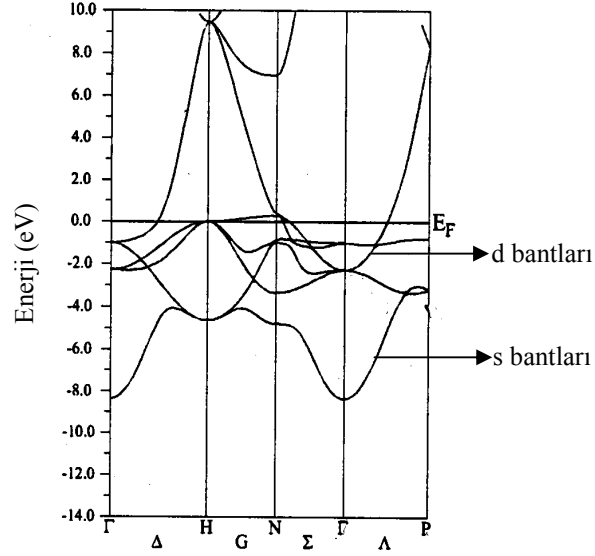
ise kristal, bir metal gibi davranır. Bir veya daha çok bant zayıf oranlarda dolu ise kristal, bir yarıiletken olur [25].

Atomlar birbirine yaklaşırken atom çekirdekleri ile \bar{e} 'lar arasındaki Coulomb etkileşmesi, enerji düzeylerinin ayrışmasına ve enerji bantları oluşturmasına yol açar. Serbest atomun belirli kuantum sayılı her bir enerji düzeyi, kristalde ayrı bir enerji bandı olarak genişler. Bant genişliği komşu atomlar arasındaki örtüşme etkisinin derecesiyle orantılıdır [25].

Ayrıca serbest atomun $\ell=1,2,\dots$ kuantum sayılı p,d durumlarına karşılık gelen enerji bantları oluşur. Bununla beraber katlı durumlar (enerji bantlarının üst üste binmesi) içinde farklı enerji bantları oluşur. Her biri dalga vektörünün geniş aralığında farklı enerjiye sahip olan enerji bantları, Brillouin bölgesindeki bazı \vec{k} değerlerinde birbirini örtebilirler [25].

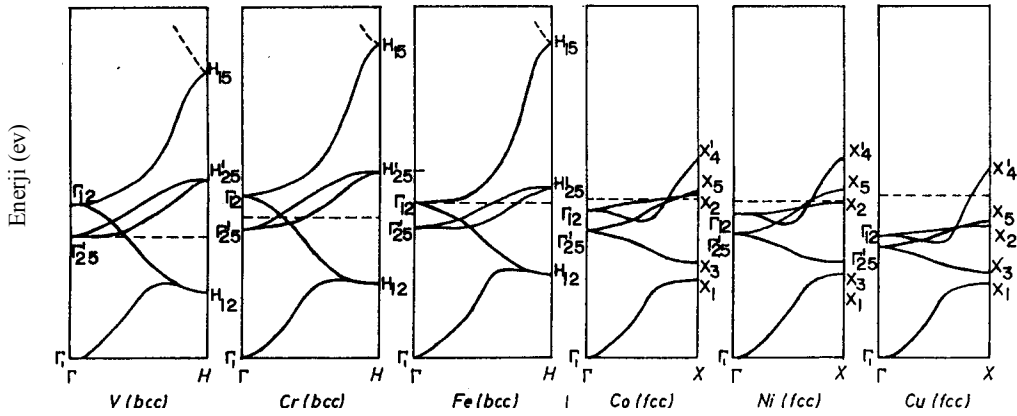


Şekil 1.5 Brillouin bölgeler a) basit kübik (sc), b) fcc örgü, c) bcc örgü. Brillouin bölgesinin yüksek simetri noktaları ve yüksek simetri yönleri [21]



Şekil 1.6 Yüksek kristal simetrisi yönleri boyunca bccFe (spin yukarı) için $E(k)$ band yapısı [26].

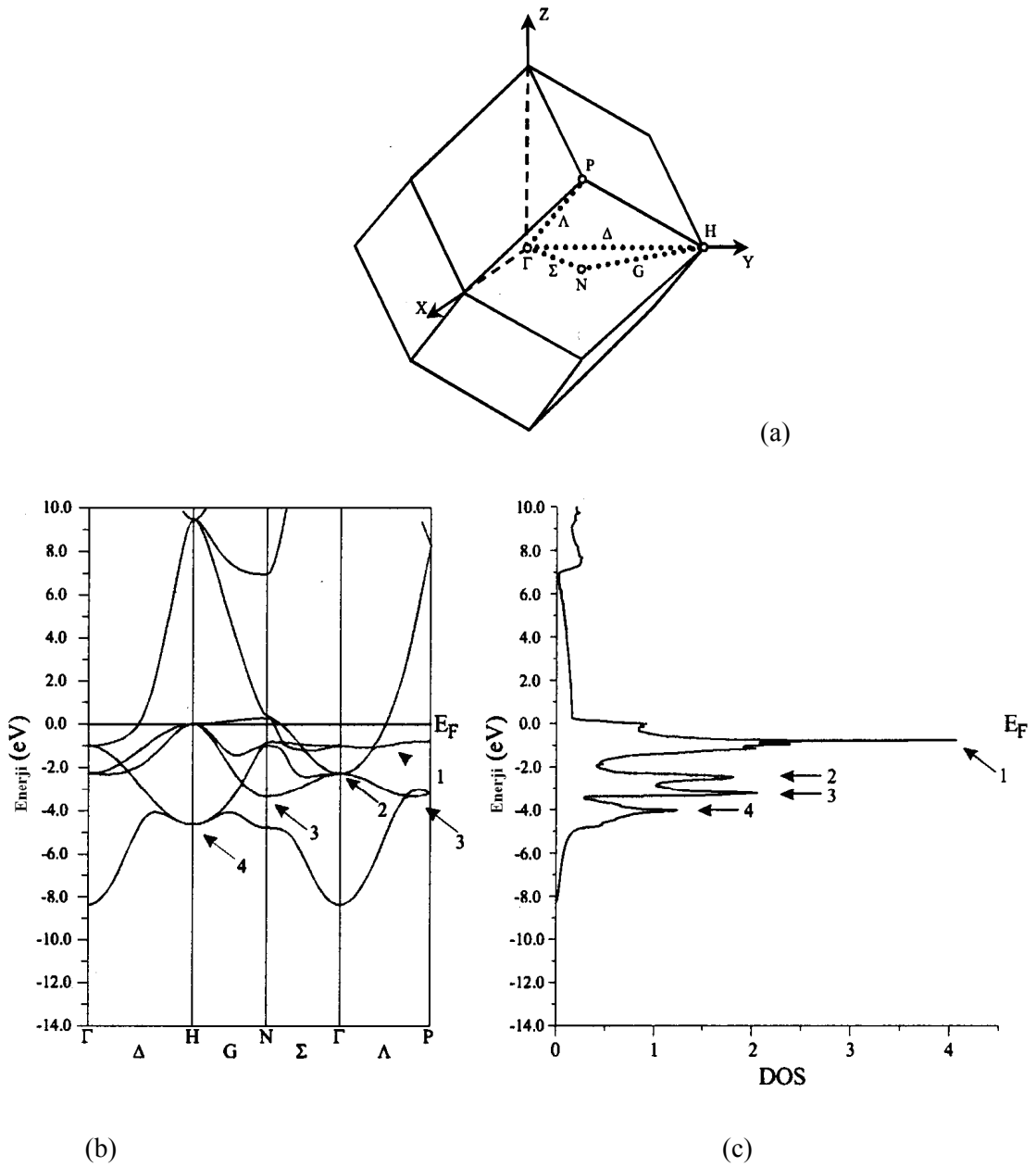
Şekil 1.6. da ise Brillouin bölgesi merkezi olan Γ ' dan başlayarak E_F enerjisine doğru çıkalım. E_F enerji yüzeyi, mutlak sıfırda dolu yörüngelerle boş yörüngeleri ayıran sınır olarak tanımlanır. İlk bant $4s \bar{e}$ 'lar bantı olup parabolik şeklindedir. d bandı ise oldukça geniş yassı bantlardan oluştuğu görülmektedir. En üstteki d bantlarının maksimumu Fermi enerjisinin biraz altındadır. Bu küçük enerji aralıkları (düşük dağılım) d elektronlarının kuvvetli yerelleşmesi özelliğinden kaynaklanır [27].



Şekil 1.7 V, Cr, Fe, Ni, Cu 3d geçiş metalleri bant yapıları [22]

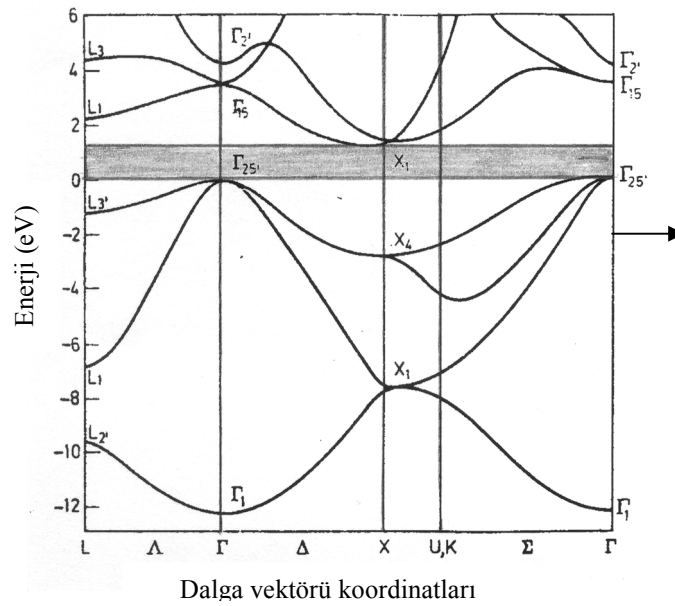
Şekil 1.7'de görüldüğü gibi, 3d elementleri için aynı kristal yapıları için aynı kristal yapıları bant yapıları birbirine çok benzerdir. Γ 'den yukarıya çıkıldıkça d bandlarının enerjisi azalmaktadır ve aynı zamanda d bantları küçülerek daralmaktadır [28].

Yapılan araştırmalarda bant yapıları ile elektronik durum yoğunluğu grafikleri arasında bir uyumun olduğu görülmüştür, şekil 1.8.[26]

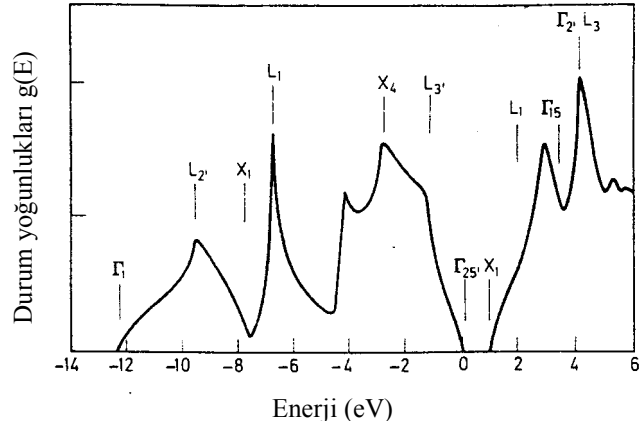


Şekil 1.8 a) bcc örgüsünün Brillouin bölgesi, b) bcc yapıdaki Fe için elektronik band yapısı, c) elektronik durum yoğunluğu[26].

Şekil 1.8.a'da bcc örgüsünün dört yüksek simetri noktalarıyla birinci Brillouin bölgeleri: Γ , H, N, ve P gösterilmiştir. Bu noktaların birleştirilmesiyle Δ , G, Σ ve Λ 'ın Brillouin bölgeleri yolları tanımlanmış olur. Şekil 1.8.b yol boyunca \vec{k} vektörlerine karşı gelen özdeğerleri gösterirken, şekil 1.8.c'de ise aynı yapılar için DOS grafiği öyle bir şekilde çizilir ki, enerji ölçeği, bant yapısı çizgisinin enerji ölçeğiyle denk olur. DOS'daki pikler bir çok \vec{k} vektörünün aynı özdeğerlere sahip olduğu anlamına gelir. Eğer bu yola bağlı olan (aynı özdeğerler) Brillouin bölgesinin alanından geçerse bir pikin DOS'ta olduğu aynı enerjilerde nispeten düz çizgi şeklinde görürüz. Yani DOS'taki yüksek piklerde enerji bantları düzleşirken, kısa piklerde parabolik olur. (Şekil 1.8.b) Şekildeki dört pik bant yapısı ile yakından alakalıdır [26].

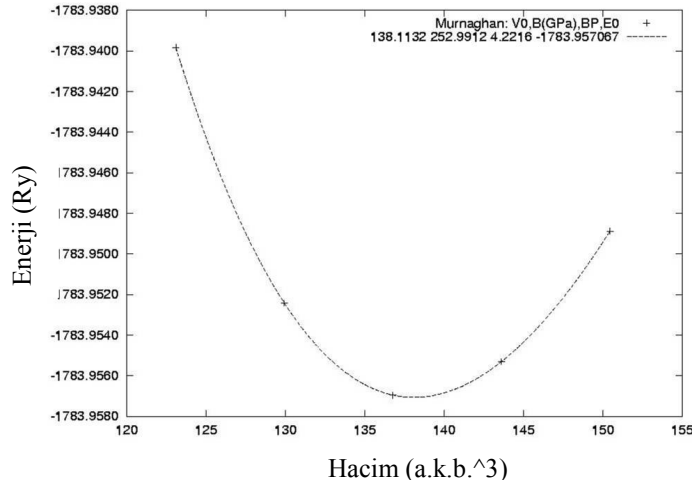


Şekil 1.9 Silisyum için band yapısı [29]



Şekil 1.10 Silisyum için DOS grafiği [30]

Yukarıdaki DOS ve bant yapıları grafiklerine bakılarak elementlerin metal yada yarımetal olduklarını anlayabiliriz. Metallerde DOS grafikleri bitişik olur. Fakat yarımetallerde DOS grafiği bant aralığında ayrılır. Bant yapısı grafiklerinde de aynı şekilde yarımetallerde bant aralığı ayrılır.



Şekil 1.11 TiC için enerji hacim grafiği[30]

Şekil 1.11; bir sistemdeki denge durumunu açıklar. Dengedeki sistem için $\sum F_{(\rho)} = 0$

olacağından, $\frac{\partial V_{(\rho)}}{\partial \rho} = 0$ dır. Bu ise potansiyel enerjinin o sistemde en minimum olduğu durumdur. Potansiyel enerjinin minimum olduğu nokta küresel simetrik harekette ρ_0 kararlılık noktasına karşılıktır. Ayrıca, potansiyel enerjinin minimum olduğu nokta, sistemin kristal

yapısına ait sabit hacmine de karşılık olduğundan, kristal örgünün örgü parametreleri de elde edilebilir. Bu örgü parametresi ile deneysel örgü parametresi birbirine ne kadar yakın ise kullanılan metodun da aynı oranda güvenilir olduğu ifade edilir. Tüm merkezi etkileşmeler için potansiyel eğrileri bir noktadan döner. Enerji belli oranda yükselir ve tekrar bir minimumdan geçmek üzere azalmaya başlar ki, ikinci minimumda sistem farklı bir kristal yapıya geçmiştir. Her iki minimum noktaları enerji ve hacim karşılıkları birbirlerinden farklıdır [31].

Katı bir cismin uygulanan kuvvete karşı gösterdiği tepki mekanik davranış olarak tanımlanır. Bu davranış biçimi mekanik özellikleri belirler. Mekanik özellikler farklı zorlanmalar altında oluşan gerilme ve şekil değiştirmelerini ölçerek ve gözleyerek saptanır. Cisimler artan dış zorlanmalar altında önce şekil değiştirir, sonra dayanımını yitirerek kırılır. Düşük gerilmeler altındaki şekil değişimleri *elastik* yani tersinirdir. Gerilme belli bir sınırı aşarsa plastik yani kalıcı şekil değiştirme oluşur. Elastik şekil değiştirmeye karşı direnç veya sertlik malzemenin esneklik modülü ile belirlenir. Malzemenin içyapısında kalıcı değişim veya kırılma oluşturan herhangi bir gerilme sınırı *mukavemet* olarak tanımlanır. Bazı mekanik özellikler içyapıya bağlı değildir. Esneklik modülü bu tür bir özellik olup, atomlar arası bağlar tarafından belirlenir ve içyapıya duyarlı değildir. Diğer taraftan, malzemenin plastik şekil değiştirme yeteneğini temsil eden esneklik ile mukavemet ve sertlik gibi sınır gerilmelerle ilgili özellikler iç yapıya büyük ölçüde bağlıdır[32].

Mekanik özelliklerin kaynağı atomlar arası bağ kuvvetleri olmakla beraber içyapıya ve çevre koşullarına büyük ölçüde bağlı olduklarından aralarında doğrudan bir bağ kurmak olanaksızdır.

Şekil değiştirme sürecinde atomların nasıl davrandıklarını ve içyapıda ne gibi değişikliklerin olduğunu bilmek gerekir. İçyapıyı değiştiren etkenler özellikleri de değiştirir. Bu etkenler ve uygulama yöntemleri iyi bilinirse içyapıda gerekli değişiklikler yapılarak özellikler uygulama amacına göre ayarlanabilir. Ancak bu ayarlamalar doğal olarak sınırlıdır ve bu sınırların uygulayıcı tarafından bilinmesi gerekir[32].

Cisimlerin mekanik özellikleri iki ayrı aşamada incelenebilir. Birinci aşamada bunların birer sürekli atom olduğu varsayılır. Bu sürekli atomların uygulanan dış kuvvetlere karşı tepkisi gözlemlenerek deneysel olarak saptanabilir. Bu aşamada atomların nasıl davrandıkları ve içyapılarında meydana gelen değişiklikler göz önüne alınmaksızın uygulanan gerilmeye karşı meydana gelen şekil değişiklikleri ölçülür. Böylece belirli şartlar altında elde edilen gerilme-şekil değiştirme bağıntıları malzemenin mekanik davranışları ile ilgili faydalı bilgiler verir. İkinci aşamada, şekil değiştirme ve kırılma süreçlerinde atomların nasıl davrandığı, içyapıda

nasıl deęişikliklerin oluřtuęu, içyapılarla mekanik özellikler arasındaki ilişkiler, başka bir deęişle şekil deęiřtirme ve kırılmanın mekanizmaları ele alınır[32].

Bozulmamış bir cisim içindeki atomların düzenleniři termal denge durumunda meydana gelir. Bu durumda, cismin bütün kısımları mekanik dengededir. Bu, eęer cismin herhangi bir kısmı ele alınırsa, o parçacık üzerine etki eden kuvvetlerin bileřkesinin sıfır olduęu anlamına gelir.

Bozulma meydana geldięinde, moleküllerin düzenleniři deęiřir ve cisim denge haline geri dönmeye çalıřır. Bu yüzden, bozulmuş cismin içinde, cismi denge durumuna getirmeye çalıřan kuvvetler ortaya çıkar. Cisim bozulduęu zaman ortaya çıkan bu kuvvetler iç zoru oluřtururlar[33].

Dıř kuvvetlerin etkisi altında kalan cisim, içindeki bölgeleri komřu alan bölgeler üzerine kuvvet uygulayan cisimin, zorlanmış durumda olduęu söylenir. Zorlanmış durumdaki bir hacim elemanı üzerine iki cins kuvvet etki eder. Bunlardan biri, büyüklüęü incelenen hacim elemanındaki madde miktarı ile orantılı olan cisim(veya hacim) kuvvetidir. Bu tip kuvvetlere yerçekimi kuvveti örnek olarak gösterilebilir. İkincisi, incelenen hacim elemanını saran madde tarafından o cisme uygulanan yüzey kuvvetidir. Bu kuvvet, hacim elemanının yüzeyinin alanı ile orantılıdır. Yukarıdaki ifadelerden *zor* için, birim alan başına yüzey kuvvetidir, denilebilir.

Ortamı içinde veya sınır yüzeyinde bir δs yüzey elemanı alınırsa, bu yüzey elemanına etki eden kuvvet $K\delta s$ kadar olur. Kuvvet fonksiyonları sürekli kabul edildięinden,

$$\lim_{\delta s \rightarrow 0} \frac{K\delta s}{\delta s} = T(x_1, x_2, x_3) \quad 1.1$$

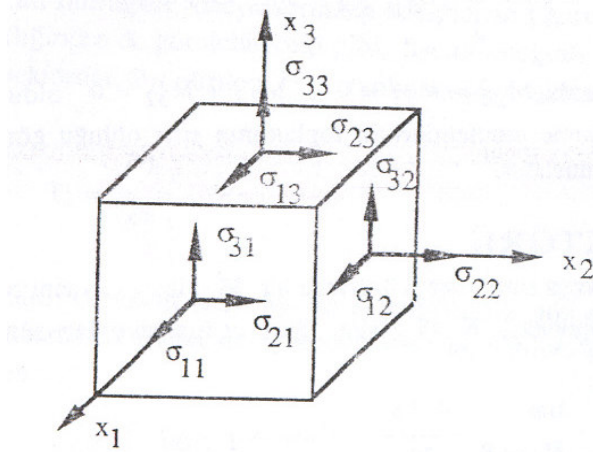
olur. Burada, T vektörü, yüzeyin birim alanı başına (x_i) noktasına etki eden yüzey kuvvetidir ve zor vektörü olarak adlandırılır[33].

Eęer δs yüzey elemanı ortamın iç kısmında ise, δs elemanının bir yanı pozitif dięer yanı negatif olur. Bu durumda pozitif kısmın negatif kısma uyguladıęı kuvvet $K\delta s$ 'dir. Eęer δs yüzey elemanı pozitif yana doęru yönelmiş birim uzunluklu bir normal vektörü çizilirse, bu normal vektörünün negatif tarafında kalan maddelerin pozitif taraftakine $-K\delta s$ kuvveti uygulaması beklenir. Bu Newton'un üçüncü hareket yasaının bir sonucudur.

Ortamın herhangi bir noktasındaki zorun durumu, zor tensörü bileřenleri olarak bilinen dokuz nicelikle tam olarak tayin edilebilir. Zor tensörü simetrik olduęundan, bu tensörün bağımsız elemanlarının sayısı altıya düşer.

Zor, homojen zor ve homojen olmayan zor olarak iki kısımda incelenebilir.

Homojen Zor: Bu durum, zorun cisim içinde homojen olduğu, cismin tamamen istatistiksel dengede olduğu ve cisim kuvvetlerinin ve denge momentlerinin olmadığı sınırlanmalarda geçerlidir.[33] Termodinamik hesaplamalar için, kristalin homojen ve anizotropik elastikiyette olduğu düşünülür. Kristal yüzeyindeki birim alana uygulanan zor ve bunun sunucundaki zorlanmalar homojendir. Tercihli olarak uygulanan başlangıç zoru ile uyumlu, tercihli başlangıç yapısından kısmi sınırlı zorlanma sonucunda yeni bir konfigürasyon oluşur. Bu tip zorlanmaların ek zorların uygulanması ile elde edildiği düşünülür [34].



Şekil 1.12 Homojen bir zor etkisinde kalan bir küpün yüzeyleri üzerindeki kuvvetler[33].

Cismin içinde, şekil 1.12 'deki gibi yüzeyleri $0x_1, 0x_2, 0x_3$ eksenlerine paralel olacak şekilde birim küp seçilirse, bu birim küpün dışındaki madde tarafında küpün içindeki maddelere uygulanan kuvvetler küpün yüzeyleri aracılığı ile iletilecektir. Her yüzeyden geçen kuvvet 3 bileşene ayrılabilir. Eksenlerin pozitif uçları tarafında bulunan üç yüzey düşünülürse, $0x_i$ ye dik küb yüzeyine $0x_i$ doğrultusundaki kuvvet bileşenleri σ_{ij} ile gösterilir ve bu kristalde net bir tork olmadığında simetrik olarak alınır.[33, 34]. Böylece zor tensörü tanımlanmış olur. σ_{ij} 'nin işaret seçimi alışlagelmiş yöntemlere göredir; pozitif basınç kristalin içine doğru iken pozitif zor dışı doğrudur[34].

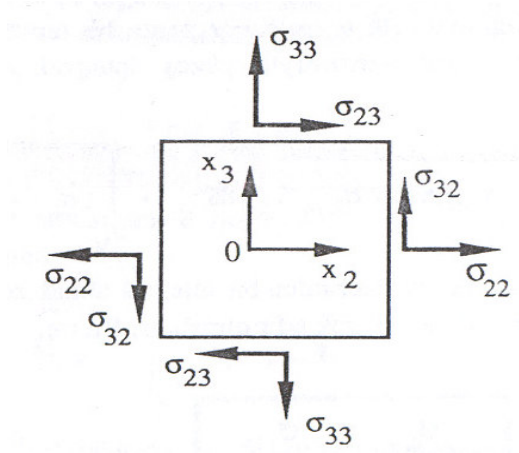
Zor homojen zor olmadığından, birim küpün karşılıklı iki yüzeyi üzerine etki eden kuvvetler büyüklük olarak eşit fakat zıt yönlüdürler[33]. Elastik sabitler, durum fonksiyonlarının çoklu zorlanma türevleridirler, aynı zamanda zorlanmalar simetrik olduğundan,

elastik sabitler tamamen Voigt simetrisine uyarlar. Voigt simetrisinin anlamı elastik sabitlerin, zorlanmaya bağlı olan i, j indislerinin yer değiştirmesinde, değişiklik olmamasıdır[34].

$\sigma_{11}, \sigma_{22}, \sigma_{33}$; zorun dik bileşenleridir.

$\sigma_{12}, \sigma_{21}, \sigma_{23}$; zorun kesme bileşenleridir.

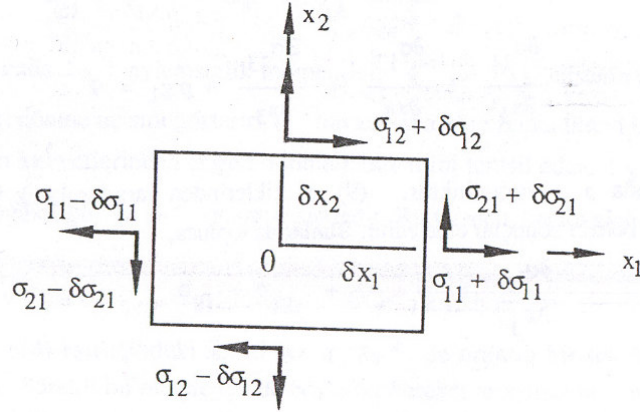
Yukarıda tanımlanan işaret seçimine göre, $\sigma_{11}, \sigma_{22}, \sigma_{33}$ bileşeninin pozitif değeri *germe zoru*, negatif değeri sıkıştırma zoru olarak adlandırılır.



Şekil 1.13 Homojen bir zor etkisi altındaki birim küpün $0x_2$ ve $0x_3$ eksenlerine dik yüzeyler üzerindeki kuvvetler. $0x_1$ eksenini şekil düzlemine diktir.

Homojen Olmayan Zor; Zor homojen olmadığında, yani cisim statiksel olarak dengede olmadığında cisim kuvvetleri varken de zor tensörü simetriktir.

Bu durumda zor bileşenleri, homojen zorda olduğu gibi tanımlanır fakat zorun noktadan noktaya değiştiği kabul edilir.



Şekil 1.14 Homojen olmayan zor bileşenleri

Zor tensörü ile rankı iki olan diğer tensörler arasındaki fark şöyle tanımlanabilir; kristal içinde belirli yönelimlere sahip olan, manyetik alınganlık gibi, kuadratiklerle temsil edilen kristal özelliklerini ölçen tensörler, kristal simetrisine uymalıdır. Bunlar madde tensörleri olarak adlandırılırlar. Zorlanma tensöründe olduğu gibi, zor tensörleride kristal içinde herhangi bir yönelime sahip olabilirler. Cam gibi izotropik cisimlerde olduğu gibi izotropik olmayan cisimlerde de zor tensörü ifade edilebilir. Zor tensörü, bir kristal özelliğini temsil etmez fakat kristale etki eden kuvvetleri temsil eder. Bu tip tensörlere alan tensörleri denilir.

Katı cisimlerin veya katı içindeki kısımların kinematik ve dinamik davranışlarını ifade etmek için; denge, cisim kuvveti, yüzey kuvveti, dış kuvvet, bozulma, zorlanma ve hareket denklemleri gibi kavramlar türetilmiştir.

Katı cisimler kesin manada sert olmadıkları için, uygun kuvvetlerin etkisi altında bu maddelerin hem büyüklükleri hem de şekilleri değişir. Bu büyüklük ve şekildeki değişim ortadan kalksa bile cisim eski şekline dönemez. Cismin eski haline dönebildiği olaylarda vardır. İlk duruma geri dönebilme özelliğine esneklik denir. Büyüklük ve şekildeki meydana gelen değişiklikler *bozulma* olarak tanımlanır. Bozulma halinde, zorlanma terimi ile ifade edilir.

Şekil ve büyüklük değişimi büyük olduğunda, dış kuvvetler ortadan kalksa bile, cisim eski haline dönemez. Böyle durumlara plastik bozulma denilir.

Cismin durumunu tam olarak bilebilmek için, cismin yapısının yanında iç düzeninin de bilinmesi gerekir. Zorlanmamış durum seçildiğinde, cismin iç düzenlenişi biliniyor kabul edilir. Genel olarak bozulmanın yavaş işlediği ve bu sayede cismin termodinamik dengeye sahip

olduğu kabul edilir. Bu durumda, küçük bozulmalar için olayın termodinamik olarak tersinir olduğu söylenebilir.

Bozulmamış bir cisim alalım. Bozulma u_i yer değiştirme vektörüne küçük bir δu_i değişimi meydana getirmiş olsun. Şimdi iç zor tarafından δu_i değişimi meydana getirilirken yapılan işi hesaplayalım; birim hacim elemanın

$$F_i = \frac{\partial \sigma_{i,j}}{\partial x_j} = \sigma_{i,j} \quad 1.2$$

kuvvetinin etkisi altında, δu_i kadarlık bir yer değişiminin sonucu, yani, iç zor tarafından yapılan iş;

$$\partial R = \sigma_{i,j} \delta u_i \quad 1.3$$

Ve dV hacim elemanı tarafından yapılan iş ise, $\partial R dV = \sigma_{i,j} \delta u_i dV$ olur. Bütün cisim için yapılan iş ise;

$$\int_V \partial R dV = \int_V \frac{\partial \sigma_{i,j}}{\partial x_j} \delta u_i dV \quad 1.4$$

olur. Green teoremi kullanılarak ve σ_{ij} 'nin simetrisinden faydalanılarak, ϵ_{ij} , zorlanma tensörü cinsinden birim hacim başına yapılan iş;

$$\partial R = -\sigma_{i,j} \delta \epsilon_{i,j} \quad 1.5$$

olarak bulunur. bu ϵ_{ij} zorlanma tensörü bileşenlerindeki değişim cinsinden, σ_{ij} iç zoru tarafından yapılan birim hacim başına işi verir. δR ifadesi enerji yoğunluğu olarak tanımlanır.

Zor etkisinde kalan bir boyutlu katı cisim uzar ya da kısalır. Zor, esneklik sınırı değerinden daha küçük olduğunda, 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 Galileo tarafından incelenmiştir. Galileo'dan kırk yıl kadar sonra ise Hooke bu konu üzerinde çalışmış ve şimdi kendi adı ile anılan esneklik yasalarını ortaya koymuştur.

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

$$\varepsilon = S\sigma \quad \text{veya} \quad \sigma = C\varepsilon \quad 1.6$$

eşitlikleri ile bağlıdır. Burada, C, sertlik sabiti veya Young Modülü olarak, S ise *esneklik sabiti* olarak adlandırılmaktadır. 1.6 eşitliğinden;

$$C = 1/S \quad 1.7$$

olduğu görülür. Bu ifade sertlik ve esneklik sabitleri arasındaki zıtlığı açıkça göstermektedir.

Bir kristaldeki atomları bir arada tutan bağ kuvvetleri; iyonik, kovalent, metalik veya Van Der Walls türündedir. Bu bağ kuvvetlerinin hepsi, atomlar veya iyonlar arasındaki uzun mesafeli elektrostatik çekim kuvvetlerinden oluşurlar. Kristaldeki elektron bulutlarının üst üste gelmemesini, kısa mesafeli itici bulutlar sağlar. İki atom merkezini arasındaki doğal r_0 mesafesi için bu kuvvetler birbirlerini dengeler ve net kuvvet sıfır olur. Net kuvvet, potansiyel enerjinin negatif gradyentidir, zor etkisinin olmadığı durumda $r=r_0$ 'dır.

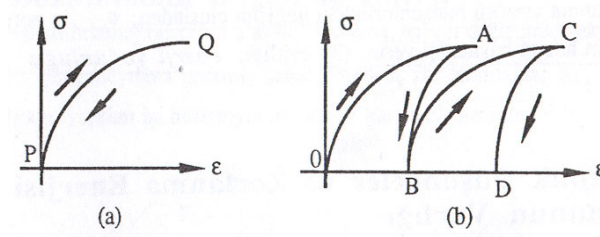
Bir boyutlu kristalde r ekseninde boyunca bir F kuvveti uygulanır ve bu kuvvet etkisi altında atomlar arası uzaklığın $u=r-r_0$ kadar değiştiği düşünülürse, kristalin V potansiyel enerjisi fonksiyonunu $r-r_0$ civarında Taylor serisine açılarak görülebilir.

$$V(r) = V(r_0) + u \left(\frac{dV_r}{dr} \right)_{r=r_0} + \frac{u^2}{2!} \left(\frac{d^2V_r}{dr^2} \right)_{r=r_0} \quad 1.8$$

Burada $\left(\frac{dV_r}{dr} \right)_{r=r_0}$, V(r) potansiyel enerjisinin $r-r_0$ 'daki eğimidir ve değeri sıfırdır. Küçük yer değiştirmeler için (1.8) serisinde u^2 den sonraki ifadeler ihmal edilebilir. Böylece;

$$V(r) = V_0 + \frac{u^2}{2} \left(\frac{d^2V}{dr^2} \right)_{r=r_0} \quad 1.9$$

bulunur. Bu ifadeden de görüldüğü gibi F kuvveti, meydana gelen u değişimi ile doğru orantılıdır. Buna Hooke Yasası denir.



Şekil 1.15 Lineer ve lineer olmayan zorlanma eğrileri

Şekil 1.15.a 'da lineer olmayan zorlanma eğrisi gösterilmiştir. Bu tip zorlanma eğrisi veren madde için, zorun uygulanması ve kaldırılması aşamalarında aynı PQ eğrisi çizilir. Bu tip eğriler veren zorlanmalar için, zor ortadan kalktığında zorlanma ortadan kalkar, yani, cisim eski haline geri döner. Bu zorlanmalar esnek zorlanmalardır. $\sigma = f(\epsilon)$ zoru, ϵ zorlanmasının tek-değerli ve lineer olmayan bir fonksiyonudur.

Şekil 1.15.b 'de AO eğrisi cismin zorlanması halini, AB eğrisi ise zorun kaldırılması halini temsil eder. Zorun yüklenmesi ve kaldırılması sonucu geriye BO ile gösterilen plastik zorlanma kalır. Plastik zorlanmada $\sigma = f(\epsilon)$ ifadesi tek değerli değildir. Zor uygulanması ve kaldırılması tekrarlanırsa şekil 1.15.b 'deki dişli eğri elde edilir ve madde eski haline dönemez.

Bu sürekli ortamlardaki zor durumu σ_{ij} zor tensörü ve zorlanma durumu ϵ_{ij} zorlanma tensörü ile daha kolay anlatılabilir. Esnek ortam sabit oda sıcaklığında tutulduğunda;

$$\sigma_{ij} = F_{ij}(\epsilon_{11}, \epsilon_{22}, \dots, \epsilon_{12}) \quad (i, j = 1, 2, 3) \quad 1.10$$

Analitik fonksiyonun varlığı ve ϵ_{ij} 'nin sıfır olması durumunda σ_{ij} 'lerin de sıfır olduğu kabul edilirse, F_{ij} , fonksiyonu tek boyut için ϵ_{ij} 'ler cinsinden Taylor serisine açılırsa;

$$\begin{aligned} \sigma_{ij} &= C_{ijmn} \epsilon_{mn} \\ \epsilon_{ij} &= S_{ijmn} \sigma_{mn} \quad (i, j, m, n = 1, 2, 3) \end{aligned} \quad 1.11$$

elde edilir. C_{ijmn} sertlik katsayısı, S_{ijmn} esneklik katsayılarıdır. Bu katsayılar cismin içinde noktadan noktaya değişir ve bunlar *esneklik katsayıları* olarak adlandırılırlar.

Zor ve zorlanmayı birbirine bağlayan 81 katsayı vardır. Bunların sayısı değişik zor durumları dikkate alınarak 81 katsayının bağımsız olanları azaltılabilir.

$$\begin{aligned}
\sigma_{ij} &= C_{ijmn} \epsilon_{mn} \\
\sigma_{ij} &= C_{ijm1} \epsilon_{m1} + C_{ijm2} \epsilon_{m2} + C_{ijm3} \epsilon_{m3} + \\
\sigma_{ij} &= C_{ij11} \epsilon_{11} + C_{ij12} \epsilon_{12} + C_{ij13} \epsilon_{13} + \\
&\quad C_{ij21} \epsilon_{21} + C_{ij22} \epsilon_{22} + C_{ij23} \epsilon_{23} + \\
&\quad C_{ij31} \epsilon_{31} + C_{ij32} \epsilon_{32} + C_{ij33} \epsilon_{33}
\end{aligned} \tag{1.12}$$

$$\begin{aligned}
\epsilon_{ij} &= S_{ijmn} \sigma_{mn} \\
\epsilon_{ij} &= S_{ijm1} \sigma_{m1} + S_{ijm2} \sigma_{m2} + S_{ijm3} \sigma_{m3} + \\
\epsilon_{ij} &= S_{ij11} \sigma_{11} + S_{ij12} \sigma_{12} + S_{ij13} \sigma_{13} + \\
&\quad S_{ij21} \sigma_{21} + S_{ij22} \sigma_{22} + S_{ij23} \sigma_{23} + \\
&\quad S_{ij31} \sigma_{31} + S_{ij32} \sigma_{32} + S_{ij33} \sigma_{33}
\end{aligned} \tag{1.13}$$

Örneğin; σ_{12} zorunun tek başına bir kristale uygulanması dengelenmemiş dönme momentini ortaya çıkarır, bu yüzden sistemin dengede kalabilmesi için σ_{12} zoru ; σ_{21} zoru ile birlikte bulunmalıdır. 1.13 denkleminde

$$\epsilon_{ij} = S_{ij12} \sigma_{12} + S_{ij21} \sigma_{21} = (S_{ij12} + S_{ij21}) \sigma_{12} \tag{1.14}$$

elde edilir. S_{ij12} ve S_{ij21} katsayılarının birlikte bulunması gerekir. Bunların ayrı ayrı ele alınabileceği bir deney tasarlamak imkânsızdır ve bu katsayılar birbirlerine eşit olarak kabul edilir.

$$S_{ijmn} = S_{ijnm} \tag{1.15}$$

Aynı durum;

$$C_{ijmn} = C_{ijnm} \tag{1.16}$$

İçin de geçerlidir. Böylece 81 katsayıdan yalnızca 36 tane bağımsız katsayı kalır.

ϵ_{ij} ve σ_{ij} 'ler açık biçimde $\sigma_{11}, \sigma_{22}, \dots, \sigma_{33}$ veya $\epsilon_{11}, \epsilon_{22}, \dots, \epsilon_{33}$ gibi yazılırsa, zor ve zorlanma bileşenlerini birbirlerine bağlayan dokuzar adet lineer eşitlik elde edilir.

$$\begin{aligned}
\sigma_{11} = & C_{1111}\epsilon_{11} + C_{1122}\epsilon_{22} + C_{1133}\epsilon_{33} + \\
& C_{1123}\epsilon_{23} + C_{1132}\epsilon_{32} + C_{1113}\epsilon_{13} + \\
& C_{1131}\epsilon_{31} + C_{1112}\epsilon_{12} + C_{1221}\epsilon_{21}
\end{aligned}
\tag{1.17}$$

$$\begin{aligned}
\epsilon_{11} = & S_{1111}\sigma_{11} + S_{1122}\sigma_{22} + S_{1133}\sigma_{33} + \\
& S_{1123}\sigma_{23} + S_{1132}\sigma_{32} + S_{1113}\sigma_{13} + \\
& S_{1131}\sigma_{31} + S_{1112}\sigma_{12} + S_{1221}\sigma_{21}
\end{aligned}
\tag{1.18}$$

eşitliklerinden yararlanıp, i ve j, m ve n katsayıları için aşağıdaki eşitliklerden yararlanıp

Çizelge 1.1 İndis değiştirme tablosu

Tensör Gösterimi	11	22	33	23 ve 32	31 ve 13	21 ve 12
Matris Gösterimi	1	2	3	4	5	6

σ_{ij} ve ϵ_{ij} 'nin matrisin gösterimi yapılabilir.

$$\begin{bmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{33} \\ \sigma_{32} \\ \sigma_{31} \\ \sigma_{21} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} C_{11} & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & C_{16} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ C_{61} & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & C_{66} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \epsilon_{11} \\ \epsilon_{11} \\ \epsilon_{33} \\ 2\epsilon_{32} \\ 2\epsilon_{31} \\ 2\epsilon_{21} \end{bmatrix}
\tag{1.19}$$

Zorlanma tensörü simetrik olduğundan burada bazı terimler tekrarlanmıştır. C ve S 'nin simetri özelliğinden yararlanılarak 6x6 'lık esneklik ve sertlik matrisleri elde edilir.

$$\begin{bmatrix} \sigma_1 \\ \sigma_2 \\ \sigma_3 \\ \sigma_4 \\ \sigma_5 \\ \sigma_6 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} C_{11} & \dots & \dots & \dots & \dots & C_{16} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ C_{61} & \dots & \dots & \dots & \dots & C_{66} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \epsilon_1 \\ \epsilon_2 \\ \epsilon_3 \\ \epsilon_4 \\ \epsilon_5 \\ \epsilon_6 \end{bmatrix} \quad 1.20$$

$$\begin{bmatrix} \epsilon_1 \\ \epsilon_2 \\ \epsilon_3 \\ \epsilon_4 \\ \epsilon_5 \\ \epsilon_6 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} S_{11} & \dots & \dots & \dots & \dots & S_{16} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ S_{61} & \dots & \dots & \dots & \dots & S_{66} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sigma_1 \\ \sigma_2 \\ \sigma_3 \\ \sigma_4 \\ \sigma_5 \\ \sigma_6 \end{bmatrix} \quad 1.21$$

Yukarda bahsedilen simetri özelliklerinden yararlanılarak kübik sistemler için aşağıdaki sertlik katsayıları matrisi elde edilir. Kübik kristaller dört 3-kat ve üç 4-kat dönme simetrisine sahiptirler.

$$(C_{ij}) = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{12} & C_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} \end{bmatrix} \quad 1.22$$

Burada bağımsız sertlik katsayılarının sayısı 3 'e iner ve 1.15 eşitliğindeki sertlik katsayıları matrisinin x_2 eksenini etrafında 4 kat dönme simetrisini de sağlar.

Bu çalışmada Wien2k bilgisayar programının kristal yapıların özelliklerinin hesaplanması için kullanımı test edilecek, daha sonra da FeAl alaşımı için elde edilen deneysel sonuçlar baz alınarak bazı fiziksel ve mekanik özellikler incelenecektir.

2. WIEN2k PROGRAMININ TANITIMI

Kompleks sistemler için bilgisayar simülasyonuna ihtiyaç duyulur. Katıların yapısı klasik mekanikten kuantum mekaniğine kadar çeşitli metotlar kullanılarak incelenir. Bu amaçla günümüzde bir çok simülasyon metodları kullanılmaktadır, bunlardan biri de çok atom içeren karmaşık bir sistemin elektronik yapısını incelemeye genel olarak yoğunluk fonksiyonel teoriyi kullanan WIEN2k programıdır. Yoğunluk fonksiyonel teorisi dalga fonksiyonundan ziyade elektron yoğunluğuna dayanır. Ayrıca elektron yoğunluğunu değiş-tokuş ve korelasyon potansiyelini de işleme dahil eder [35].

Öncelikle ideal bir kristalin birim hücresi tanımlanır. Bir birim hücredeki özellikler bilinerek periyodik sınır şartları da kullanılarak sonsuz bir kristal tanımlanır. Kristalin öteleme ve nokta grubu simetri işlemide dahil edilerek, ideal kristal yapının bozulmaması ve işlemlerin basitleşmesi sağlanır [35].

Wien2k programı kristal yapıların; elektron yoğunluğu, durum yoğunlukları, band yapıları, spin yoğunlukları, toplam enerji, kuvvet, kararlılık şartları, yapı optimizasyonu, fonon dispersiyonu, elektrik alan gradyentleri, manyetik özellikler, mekanik özellikler, x-ışınları soğurma ve yayılım spektralleri, fermi yüzeyleri ve optiksel özelliklerini inceler.

2.1. case.struct ve case.inst dosyalarının oluşturulması

Programın başlangıcında yapı dosyasının (case.struct) oluşturulması gerekir. Bu dosyanın oluşturulmasını tanımlayacağız.

TiC alaşımı bir model olmak üzere:

```

.....file:case.struct.....
TiC 1
F LATTICE,NONEQUIV. ATOMS: 2 2
MODE OF CALC=RELA unit=bohr 3
8.442749 8.442749 8.442749 90.000000 90.000000 90.000000 4
ATOM 1: X=0.00000000 Y=0.00000000 Z=0.00000000 5
MULT= 1 ISPLIT= 2 6
Ti NPT= 781 R0=0.00005000 RMT= 2.0000 Z: 22.0 7
LOCAL ROT MATRIX: 1.0000000 0.0000000 0.0000000 8
0.0000000 1.0000000 0.0000000 9
0.0000000 0.0000000 1.0000000 10
ATOM 2: X=0.50000000 Y=0.50000000 Z=0.50000000
MULT= 1 ISPLIT= 2
C NPT= 781 R0=0.00010000 RMT= 1.9000 Z: 6.0
LOCAL ROT MATRIX: 1.0000000 0.0000000 0.0000000
0.0000000 1.0000000 0.0000000
0.0000000 0.0000000 1.0000000
48 NUMBER OF SYMMETRY OPERATIONS 11

```

```

1 0 0 0.000000
0-1 0 0.000000
0 0-1 0.000000
  1
1 0 0 0.000000
0 0-1 0.000000
0-1 0 0.000000
  2
-1 0 0 0.000000
0-1 0 0.000000
0 0-1 0.000000
  .
  .
-1 0 0 0.000000
0 1 0 0.000000
0 0 1 0.000000
  48

```

```

12
13
14
15

```

Dosyanın Tanıtımı

1.sıra : alaşım adı

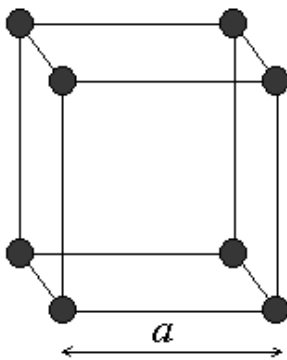
2.sıra : örgü tipi, NAT

Örgü Tipi

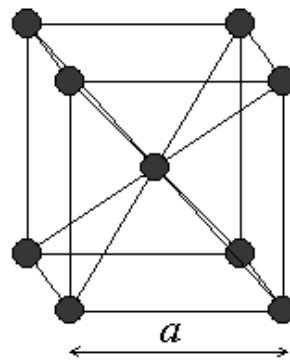
P – İlkel (primitive) örgü

F – Yüzey merkezli örgü

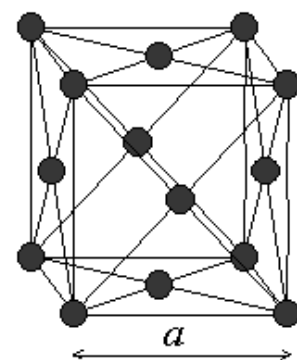
B – Cisim merkezli örgü



Basit kübik (sc)



Cisim merkezli kübik (bcc)



Yüzey merkezli kübik (fcc)

Şekil 2.1 Kübik uzay örgüleri [25]

Yukarıdaki şekilde en doğal olarak bulunun hücreler gösterilmiştir. Bunlar arasında sadece basit kübik (sc) olan ilkel hücredir.

Kübik sistemde üç örgü bulunur. Basit kübik (sc) örgü, cisim merkezli kübik (bcc) örgü ve yüzey merkezli kübik (fcc) örgü. Bu üç kübik örgünün özellikleri çizelgede gösterilmiştir.

Çizelge 2.1 Kübik örgülerin özellikleri [25]

	Basit	Cisim merkezli	Yüzey merkezli
Standart hücre hacmi	a^3	a^3	a^3
Hücre başına örgü noktası	1	2	4
İlkel hücre hacmi	a^3	$a^3/2$	$a^3/4$
Birim hacimde örgü nokta sayısı	$1/a^3$	$2/a^3$	$4/a^3$
En yakın komşu sayısı	6	8	12
En yakın komşu uzaklığı	a	$\sqrt{3}a/2 = 0,866 a$	$a/\sqrt{2} = 0,707 a$
İkincil Komşu sayısı	12	6	6
İkincil komşu uzaklığı	$\sqrt{2}a$	a	a

Bir hücredeki bir noktanın konumu;

$$\vec{r}_j = x_j \vec{a}_1 + y_j \vec{a}_2 + z_j \vec{a}_3 \quad (j=1,2,3,\dots,s)$$

denklemleriyle atomik x,y,z koordinatlarıyla belirlenir. Burada, örgü noktası olarak seçtiğimiz orijini uygun şekilde yönlendirirsek $0 \leq x_i, y_j, z_j \leq 1$ olur.

Burada her koordinat hücrenin bir köşesinden seçilen orjine göre a_1, a_2, a_3 eksen uzunluklarının birer kesridir. Örneğin, bir hücrenin cisim merkezinin koordinatları $1/2, 1/2, 1/2$ olur. Yüzey merkezlerinin koordinatları, $1/2, 1/2, 0, 0, 1/2, 1/2, 1/2, 0, 1/2$, sayılabilir.

Basit kristal yapılarda fcc uzay örgüsüne NaCl yapısı ve bcc uzay örgüsüne de Fe'in yapısı örnek verilebilir.

NaCl kristal yapısında, uzay örgüsü fcc olup hücre bazı 000 da bir Cl⁻ iyonu ve $1/2, 1/2, 1/2$ de bir Na⁺ iyonundan oluşur.

Her ilkel örgü dört NaCl birimi olup atomların konumları şöyledir:

Cl:	000	1/2 1/2 0	1/2 0 1/2	0 1/2 1/2
Na:	1/2 1/2 1/2	0 0 1/2	0 1/2 0	1/2 0 0

Fe'in atomik yapısında ise merkezdeki atomun konumu $(1/2, 1/2, 1/2)$ ve diğerleri de kübün köşelerinde yer alır [25].

NAT – Birim hücredeki eşdeğer olmayan atomlar sayısı.

3.sıra : Hesaplama modu;

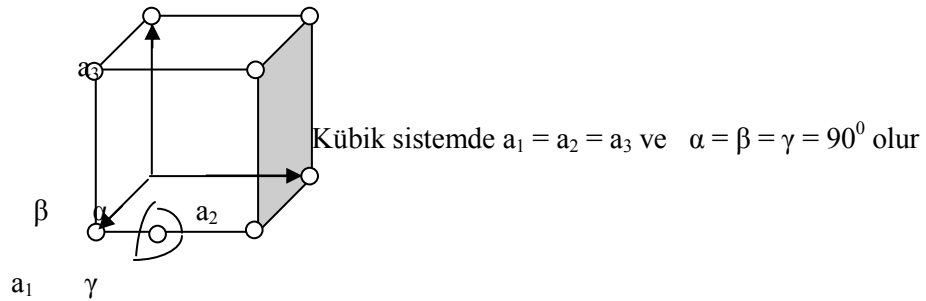
RELA – Bütün Relativistik çekirdek ve skaler relativistik valans

NREL – Relativistik olmayan hesaplama

4.sıra : a, b, c, α , β , γ

a, b, c – Örgü temel vektörleri (atomik birimde) (1 a.k.b. = 0.529177 Å)

α , β , γ – Örgü temel vektörleri arasındaki açılar.



Şekil 2.2 Kübik birim hücre

5.sıra : Atom – indeks, x, y, z

Atom – indeks – Eşdeğer olmayan atomun sayısı

x, y, z – Atomların konumlarını belirtir.

6.sıra : multiplicity, isplit

multiplicity – yapıda birbirine eş olan atomların sayısı

isplit – 2 d – elektronların e-g, t-2g e.g. : kübik

8 5 ve 6 seçeneklerini birleştirir.

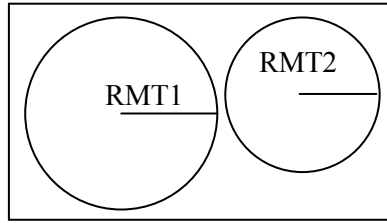
7.sıra : Atom ismi, NPT, RO, RMT, Z

Atom ismi – Periyodik cetveldeki atomun simgesi

NPT – Radial ağ noktalar sayısı (381) LDA hesaplamaları için iyi bir ağ verir.

RO – ilk radial ağ noktası (tipik bir şekilde 0.0005 ve 0.00005 arasında)

RMT – Atomik küre yarıçapı



Şekil 2.3 Birim Hücre içindeki atomik küreler

Atomlar en fazla birbirine değebilir. Fakat birbirinin içine geçemez.

Z – Atom numarası

8.– 10. sıra : Yerel dönme matris (her zaman ortogonal koordinat sisteminde)

11. sıra : Uzay gurubunun simetri işlemlerinin sayısı. Sıfır olarak bırakılırsa, simetri işlemleri genelde otomatik olarak oluşturur.

12. – 14. sıra : matrix, tau

matrix – simetri işlemi (uzay grup) matris gösterimi.

tau : ilkel olmayan vektör geçişi

15. sıra : simetri işleminin indeks sayısını belirtir.

Daha sonra “instgen_lapw” komutuyla otomatik olarak “case.inst” dosyası oluşur. Bu dosyada orbitallerin ayrı ayrı durumları tanımlanır.

```

.....file:case.inst.....
Ti                               1
Ar 2 5                           2
3, 2,2.0 N                       3
3, 2,0.0 N
4,-1,1.0 N
4,-1,1.0 N
C
He 3 5
2,-1,1.0 N
2,-1,1.0 N
2, 1,1.0 N
2, 1,0.0 N
2,-2,1.0 N
2,-2,0.0 N
****
****   END of input (instgen_lapw)
.....

```

Dosyanın Tanıtımı

1. sıra : title, Watson

title – isim

watson – Q – wat yüküyle R – wat kürenin yarıçapı (watson'a göre)

2. sıra : config

config – valans orbitallerinin (spinsiz) numarası ve soy gazı (He, Ne, Ar, Kr, Xe, Rn) göre çekirdek durum konfigürasyonu belirtir.

3. sıra : n, kappa, occup, plot

n – kuantum numarası

kappa – relativistik kuantum numarası

occup – işgal etme sayısı (spin başına)

plot – P – ayrı ayrı orbitalin yoğunluğunu belirtir.

N – bir boş alanda ayrı ayrı orbitalin yoğunluğunu muaf tutmak.

Kuantum numaralarının tanımlanması [36]

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

Orbital kuantum sayısı = $j = \ell + s/2$

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

Çizelge 2.2 Relativistik kuantum sayıları

		$j = \ell + s/2$		K		max.işgal sayısı	
	ℓ	$s = -1$	$s = +1$	$s = -1$	$s = +1$	$s = -1$	$s = +1$
s	0		1/2		-1		2
p	1	1/2	3/2	1	-2	2	4
d	2	3/2	5/2	2	-3	4	6
f	3	5/2	7/2	3	4	6	8

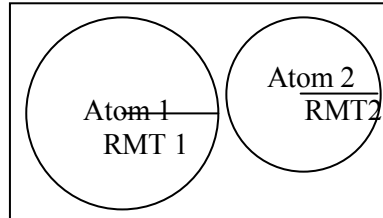
Ayrıca Fe için konfigürasyon 1S, 2S, 2P*2P, 3S, 3P*3P, 3d, 4S olup, burada “*” farklı relativistik kuantum sayılarını gösterir.

2.2. init_lapw hesaplamaları

Daha sonra “init_lapw” komutu çalıştırıldığında hesaplama başlar ve tüm adımlar otomatik olarak oluşur.

x nn : en yakın komşu atomlar arası uzaklığı hesaplar. Genelde 2 değeri girilerek 2. komşuluğa kadar gidilir.

case.outputnn : atomik küre yarıçaplarına (RMT) bakılır.



Bu atomik küreler en fazla birbirine değebilir. Fakat birbiri içine giremez. Aksi halde program hata verir.

x sgroup : bu program case.struct dosyasından (örgü tipi, örgü sabitleri, atom pozisyonlarını) kullanır. Aynı zamanda uzay gruplarını ve eşit olmayan durumların nokta gruplarını belirler.

case.outputsgroup : uzay gruplarını gösterir. Örneğin TiC için, nokta grupları;

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

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

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

x symmetry : Bu program “case.struct” dosyasından; örgü tipini ve atomik konumları kullanır. Genel bir şekilde uzay grup simetri işlemlerini meydana getirir.

case.outputs : simetri operasyonları ve atomun nokta grup simetrisi kontrol edilir.

x lstart : Atomik yoğunlukları meydana getirir.

Çekirdek durumlardan valans durumları ayırmak için bir enerji ve değişken korelasyon potansiyel (Vec) gerekir. Bunun için XC – potansiyel,

05 – LSDA, [37]

13 – GGA, [24]

14 – GGA, [38]

Genelde 13 (GGA, Perdew ve arkadaşları 96) kullanılması tavsiye edilir.

Ek olarak program valans durumlardan çekirdek durumları ayırmak için kesme enerjisini sorar. Bunun içinde genelde -6.0 Ry (Rydberg) iyi bir seçenektir. Yani bu enerjinin üstü yaklaşık olarak valans durumlarına karşılık gelir.

case.outputst : uygun atomik konfigürasyonu belirtir.

Genelde elektronik durumlar 3 tipe ayrılır. Bunlar çekirdek, yarı-çekirdek ve valans durumlarıdır.

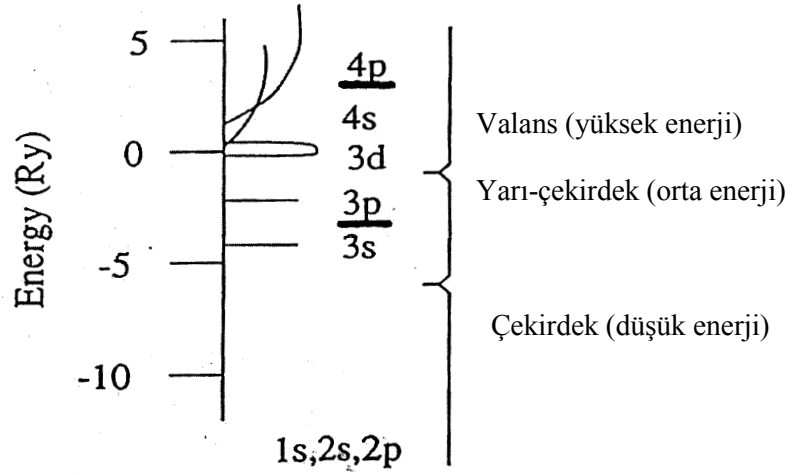
Örneğin : Titanyum için atomik durumlar: çekirdek (1S, 2S, 2P), yarı çekirdek (3S, 3P) ve valans (3d, 4S,4P).

1. Çekirdek durumlar :atomik kürenin içerisinde tamamen hapis edilmişlerdir. Enerjileri Fermi enerjisinin 7 – 10 Ry altındadır.

2. Yarı – çekirdek durumlar :Enerjileri Fermi enerjisinin 1 – 7 Ry arasındadır. Bu yükler atomik kürenin içinde tamamen sınırlanmaz bir kısmı kürenin dışına taşar.

3. Valans durumları : Enerji olarak en yüksek (işgal edilmiş) durumlarıdır. Atomik kürenin dışında azalan bir miktar yüke sahiptirler.

Örnek : Ti için



Şekil 2.4 Çekirdek, yarı çekirdek ve valans durumları [39]

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

5 – 9 arasında APW

6 – 10 arasında LAPW

genelde uygundur. Biz değiştirebiliriz. APW veya LAPW (yani 1 veya 0 CONT/STOP). Daha zor orbitaller için (3d, 4f) APW yakınsaması yapılır.

```

.....file:case.in1_st.....
WFFIL      (WFPRI, SUPWF)                                1
  7.00   10   4 (R-MT*K-MAX; MAX L IN WF, V-NMT)         2
  0.30   5   0 (GLOBAL E-PARAMETER WITH n OTHER CHOICES, global APW/LAPW) 3
  0  0.30   0.000 CONT 1                                  4
  0 -4.35   0.005 STOP 1
  1 -2.58   0.010 CONT 1
  1  0.30   0.000 CONT 1
  2  0.30   0.010 CONT 1
  0.30   3   0 (GLOBAL E-PARAMETER WITH n OTHER CHOICES, global APW/LAPW)
  0 -0.78   0.010 CONT 1
  0  0.30   0.000 CONT 1
  1  0.30   0.000 CONT 1
K-VECTORS FROM UNIT:4 -7.0   1.5   emin/emax window      5
.....

```

Dosyanın Tanıtımı

1. sıra : switch

WFFIL – standart seçenektir. case.vector dosyasında dalga fonksiyonunu yazar.

SUPWF – Durağan dalga fonksiyonunu hesaplar. (yalnız özdeğerleri çok hızlı test eder.)

WFPRI – özvektörleri yazar.

2. sıra : rkmax, lmax, lsmx

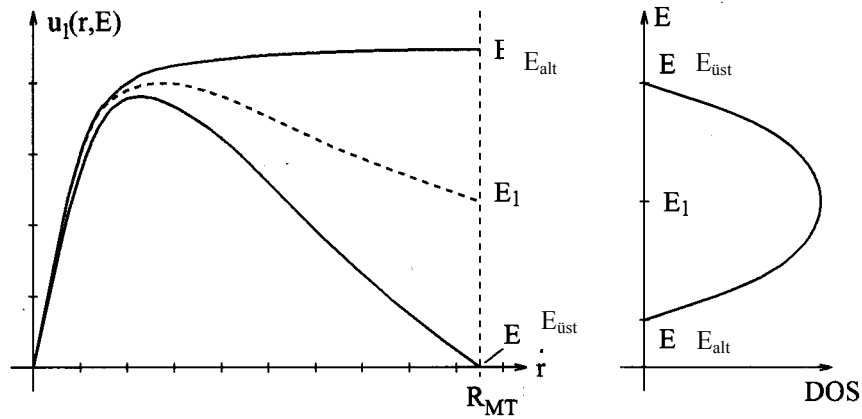
rkmax – $R_{mt} * K_{max}$ matris büyüklüğü (yakınsama) tanımlar. Burada K_{max} kesme dalga fonksiyonu, R_{mt} tüm atomik küre çapının en küçüğüdür. Genellikle bu değer 5 ve 9 arasında (APW + lo) veya 6 -10 arasında (temel LAPW) değerlerinde olmalıdır. (K^2_{max} pseudo-potansiyel hesaplamalarında R_y parametrelerinde kesme düzlem dalgalarında kullanılır.)

lmax – Atomik kürelerin içinde parça dalgaları için L değeri maksimum alınır. (8 ve 12 arasında olmalıdır.)

lsmx – parça dalgalar için maksimum l değeri muffin-tin olmayan matris elemanlarının hesaplanmasında kullanılır. (lsmx = 4 tam iyidir.)

3. sıra : Entrial, ndiff, Napw

Entrial – Radyal Schrödinger denkleminin çözümünde (2.51) yapıldığı gibi $u_\ell(r, E_\ell)$, yi elde etmek için E_ℓ 'nin varsayılan enerji değeri kullanılır.



Şekil 2.5 $u_\ell(r, E_\ell)$ enerjisi ve DOS'un şematik bağıllığı [40]

n diff – Hariç tutulacakların sayısı

Napw – Bu atomun tümünü kapsayan ℓ değerlerinin hepsi için aşağıdaki durum kullanılır.

LAPW temeli için 0

APW temeli için 1

4. sıra : ℓ , E_ℓ , de, switch, NAPWL

ℓ kısmi dalğanın ℓ

E_ℓ L = 1 için E_ℓ

de de = 0 Enerji artışı

Bu $E(\ell)$ varsayılan enerjinin üzerine yazıyor. de $\neq 0$: artış miktarına göre bir rezonans enerjisi araştırır. $u_\ell(r, E)$ yarıçap doğrultusundaki fonksiyon muffin–tin yarıçapına kadar enerji ve RMT’yi değiştirir. Tipik bir durum şematik olarak şekil 3.5. de gösterilmektedir.

Enerji bandlarının altında E_{alt} u sıfır eğime sahiptir (Bağlanma durumu). Fakat bandların üstünde sıfır değere sahiptir (Bağlanmama durumu). E_ℓ enerjisinden başlayıp, yukarıya ve aşağıya doğru “de” artışı kullanılarak nerelerde $u_\ell(R_{MT}, E)$ nin işaret değiştirdiği bulunur. İşaret değiştirme değer olarak $E_{üst}$ ’ü belirler. Eğim olarak ta E_{alt} ’ı belirtir. Her ikisi de bulunursa E_ℓ , bunların aritmetik ortalaması olarak alınır ve deneme enerjisi ile değiştirilir. Eğer, E_{alt} ve $E_{üst}$ bulunmazsa E_ℓ özel değerinde kalır. $E_{üst}$ ve E_{alt} +1 ve -10Ry sınırları içinde tanımlıdır. E_{alt} ve $E_{üst}$ ’ün bulunamaması durumunda onların başlangıç değeri olan -2.00 alınır.

Switch – Sadece de $\neq 0$ değil ise anahtar kullanılır.

CONT – $E_{üst}$ yahut E_{alt} her ikisini de bulsa bile işlem yapmaya devam eder.

STOP – Her ikisini bulsa da işlemi durdurur. (Yarı – çekirdek durumları için özellikle yararlıdır.)

NAPWL – Bu atomun bu ℓ ($\ell = 0,1,2,3$) değeri; APW – yöntemi için 0, LAPW – yöntemi için de 1 kullanılır. APW + lo metodu, APW kullanıldığında yakınsama olayı güçlükle gerçekleşen 3d gibi orbitallerin dalga fonksiyonlarını bulmada kullanılır.

5. sıra : unit – number, EMİN, EMAX

unit – number – Brillouin bölgelerinde \vec{k} vektörlerini hangi dosyadan okunacağını belirtir. 5 giriş dosyasının kendisi olduğunu gösterir. Varsayılan değer 4 “case.klist” içerisindeki bilgilere karşılık gelir.

EMİN, EMAX – Özdeğerlerin araştırılacağı enerji aralığını gösterir. Bu aralık kısa tutulursa bilgisayarın hesaplama süresi kısalmır. Yalnız işgal edilmemiş durumlar için DOS hesaplanırken enerji aralığı sınırlanabilir.

case.in2_st : Burada LM genişlemesi sınırlanabilir (biraz hızlandırmak için). GMAX değeri değiştirilebilir. (15-24 değerleri önerilir) yada Fermi enerjisini bulmak için farklı bir Brillouin bölgesi integrasyon metodu belirlenebilir.

case.inm_st : “Güç yakınsayan sistemler için” (d yada f elektronları yerleşmiş atomlar, manyetik sistemler) karıştırma faktörü 0.4’ten daha düşük değerlerde alınabilir.

x kgen : Brillouin bölgesinde k – ağı meydana getirir. Bütün Brillouin bölgesinde k noktalarının sayısı belirtilmeli (TiC ile karşılaştırma için 1000 kullanılır). Daha iyi hesaplamalar için daha büyük sayılar verilebilir.

case.klist : Brillouin bölgesindeki k noktalarının sayısı kontrol edilir ve birinci k noktası için enerji aralığı belirlenir.

x dstart : SCF döngüsü için başlangıç yoğunluğu üretir.

case.outputd : $G_{MAX} > G_{MIN}$ dan büyük olması gerekir. Bu dosyadan kontrol edilir.

Daha sonra spin – polarizyon yapıp yapılmayacağı sorulur.

2.3. SCF Hesaplamaları

SCF (self – consistency cycle) için “run_lapw” komutu yazılır ve çalıştırılır. Program aşağıdaki hesaplamaları otomatik olarak yapar.

LAPWO : Yoğunluktan potansiyeli oluşturur. Coulomb (V_c) ve değiş tokuş potansiyeli (V_{xc}) nin toplamı şeklinde toplam elektron yoğunluğunu giriş olarak alıp, toplam V_{tot} hesaplar.

Küreler içinde Coulomb potansiyeli doğrudan sınır değeri probleminin çözümü için klasik Green fonksiyonu metodundan elde edilir.

LAPW1 : Valans bandlarını hesaplar (özvektör ve özdeğerler meydana getirir). Hamiltonyen ve üst üste binme matrisi [41] oluşturur.

LAPW2 : Özvektörden valans yoğunlukları hesaplar.

LCORE : Çekirdek durumları ve yoğunlukları hesaplar.

MIXER : Giriş ve çıkış yük yoğunluklarını birleştirip yeni bir yoğunluk oluşturur.

Bu SCF işlemi giriş yoğunluğuna yakın bir yoğunluk bulana kadar döngü devam eder. Bu döngü yakınlığı istediğimiz hassasiyete ulaştıracak seviyeye kadar devam ettirilir.

Yukarıdaki işlem “run_lapw -cc 0.0001” komutuyla gerçekleştirilir. Burada hesaplamanın hassasiyeti -cc 0.0001’de oynama ile sağlanır.

2.4. Hesaplama Özellikleri

Bu kısımda elektron yoğunluğu, durum yoğunlukları (DOS), band yapıları ve hacim grafiklerinin nasıl çizdirildiği hakkında bilgi verilecek.

2.4.1. Elektron yoğunluğu

x lapw2: Valans yoğunluklarını 3S ve 3P’nin dışında tekrar hesaplar.

“case.in5” dosyası bu hesaplamada oluşturulur.

```

.....file:case.in5.....
-1 -1 0 4          1
-1  3 0 4          2
 3 -1 0 4          3
 3  2 3            4
100 100            5
RHO                6
ANG VAL NODEBUG    7
NONORTHO           8
.....
```

Dosyanın tanıtımı

1. sıra: ix, iy, iz, idv – Düzlem ve çizimin parçası birim hücrede üç noktayla belirtilir (x, y ve orjin). İlk sırada orjinin koordinatları belirtilir. Burada $x = ix/idv$ ve $y = iy/idv$ örgü vektörlerinin birimindedir.

2. sıra: ix, iy, iz, idv – x'in koordinatları

3. sıra: ix, iy, iz, idv – y'nin kordinatları (x ve y yönleri birbirine dik olmalıdır. Diğer türlü NONORTHO (ortogonal olmayan = dik olmayan) seçeneği tercih edilir)

4. sıra: nxsh, nysh, nzsh – En yakın komşu hücrelerin (x, y, z yönlerinde) sayısını belirtir. Burada atomik konumlar oluşturulur. (Çizim büyükse bu sayıları arttırmak gerekir. Aksi takdirde bazı atomlar çizimin dışında kalır.)

5. sıra: npx, npy, - Çizimdeki ağ noktaları sayısını belirtir.

6. sıra: switch

RHO – Yük (veya potansiyel) çizer. Atomik yoğunluk kullanmaz (Düzenli durum).

DIFF – Yoğunluk farkını çizer.

OVER – Atomik yoğunlukların süper pozisyonu belirtir.

7. sıra: iunits, cnorm

iunits – ATU – yoğunluk (potansiyel) atomik birimlerde $e/a.u^3$ (veya Ry)

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

cnorm – VAL – case.clmval, r2v, vcoul dosyalar için kullanılır.

TOT – case.clmsum dosyalar için kullanır.

8. sıra: ORTHO – (varsayılan) Yönlerin dik olmasını zorlar.

NONORTHO – Yönler keyfi olabilir. Çizim programı dik olmayan eğrileri destekliyse bu seçenek kullanılır (örneğin XCYSDENS).

x lapw5: Elektron yoğunluğunu hesaplar.

Bu işlemden sonra “rhoplot” komutu ile elektron yoğunluğu grafiği çizdirilir.

2.4.2. Durum yoğunluğu (DOS)

x lapw2 –qtl : Kısmi yükleri hesaplar.

“case.int” dosyası bu hesaplamada oluşturulur.

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

Dosyanın tanıtımı

1. sıra : Element veya bileşik adı

2. sıra : e_{\min} , delta, e_{\max} , broad

e_{\min} – Enerji ağı (Ry’de) belirtir. Burada DOS hesaplar. (e_{\min} valans bandının en düşük seviyesinin birazcık altında olmalıdır).

delta – Enerji artışıdır.

e_{\max} – En yüksek bandın en düşük enerjisini kontrol eder (case.qtl). Bu iki değer minimum alınır.

broad – Gaus genişleme faktörünü belirtir.

3. sıra : ndos – DOS durumlarının sayısını belirtir.

4. sıra : jatom, jcol, description

jatom – Hangi atom için DOS’un hesaplanacağını belirtir. 0 – toplam DOS, jatom = nat + 1 ara bölgedeki DOS durumları demektir. Burada “nat” eşedeğer olmayan atomlar sayısıdır.

jcol – Kullanılan QTL dosyasındaki uygun sütunu belirtir. 1 toplam, 2...S, 3...P, demektir.

description - Durumların isimleri

x tetra : Durum yoğunluklarını hesaplar. Bu program tetrahedron metodunu kullanarak [40] kısmi ve toplam DOS' ları hesaplar.

dosplot : Bu komutla DOS grafikleri çizdirilir.

2.4.3. Band yapısı

WIENROOT/SRC_templates /bcc.klist klasörünü “case.in1” dosyası altına eklenir.

x lapw1 –band : Özdeğeri hesaplar.

“case.insp” dosyası bant yapısını hesaplamak için oluşturulan giriş dosyasıdır.

```

.....file:case.insp.....
### Figure configuration                                     1
5.0 3.0           # paper offset of plot                    2
10.0 15.0         # xsize, ysize [cm]                      3
1.0 4             # major ticks, minor ticks              4
1.0 1             # character height, font switch          5
1.1 2 4          # line width, line switch, color switch  6
### Data configuration                                     7
-13.0 8.0 2       # energy range, energy switch (1:Ry, 2:eV) 8
1 0.73687         # Fermi switch, Fermi-level (in Ry units)  9
1 999            # number of bands for heavier plotting 1,1 10
1 6 0.2          # jatom, jtape, size of heavier plotting  11

```

Dosyanın tanıtımı

1. sıra : Şekilin tanıtılması

2. sıra : xoffset, yoffset

xoffset – Çizimin orjininin x'e göre kaç cm ileride veya geride olduğunu belirtir.

yoffset – çizimin orjininin y'e göre kaç cm ileride veya geride olduğunu belirtir.

3. sıra : xsize, ysize

xsize – x yönünün (cm) de büyüklüğü

ysize – y yönünün (cm) de büyüklüğü

4. sıra : eincr, mtick

eincr – y ekseninde enerji artışlarını gösterir (büyük bölmeler).

mtick – y eksenindeki küçük bölmelerin sayısı

5. sıra : charh, font

charh – İsimlendirmenin boyutu

font – 0 Yazı yok

1 Times ve Symbol fontları kullanılır.

2 Times, times – italic ve sembol kullanılır.

6. sıra : linew, ilin, icol

linew – Çizgi genişliğidir.

İlin – 0 olursa açık yada nokta daireler.

1 Çizgiler

2 Çizgiler ve açık daireler.

3 Çizgiler ve dolu daireler.

icol – Renkleri belirtir.

0 Siyah çizer.

1 Tek renkle çizer.

2 Üç renkli çizer.

3 Çok renkle çizer.

4 Çok renkle çizer, her bir çizgi farklı bir renk gösterir.

7. sıra : Verilerin başladığını belirtir.

8. sıra : e_{\min} , e_{\max} , iunits

e_{\min} – çizimin minimum enerjisi

e_{\max} – çizimin maksimum enerjisi

iunits – 1 enerjiler Ry cinsinden

2 enerjiler eV cinsinden (EF enerjisi ile ilgili olarak)

9. sıra : iferm, efermi

iferm – 0 – EF’yi çizmez.

iferm – 1 – EF düz çizgi şeklinde çizilir.

iferm – 2 – EF noktalı çizgi çizilir.

iferm – 3 – EF nokta nokta çizilir.

efermi – “case.scf” dosyasından EF enerjisi alınarak yerine yazılır.

10. sıra : nband1, nband2 – bandlar için en düşük ve en yüksek band indeksidir.

11. sıra : jatom, jcol, jsize

jatom – “case.qtl” dosyası mevcutsa jatom band karakteri çizilecek atomu belirler, (noktalar uygun yarıçaplı dairelerle yer değiştirir). “case.qtl” yok, yada sıfır ise band karakteri çizmez.

jcol – “case.qtl” dosyasında hangi sütunun kullanıldığını belirtir. (1 toplam, 2-S, 3-P..) Bununla ilgili bilgiler “case.qtl” dosyasının başlangıç satırında bulunur.

jsize – Band karakterinde kullanılacak dairelerin yarıçaplarının boyut faktörünü gösterir.

x spaghetti : Bu komut özdeğerleri kullanarak enerji band yapısı grafiğini çizer.

2.4.4. Band karakter çizimiyle band yapısı

x lapw1 –band : Özdeğerleri hesaplar.

x lapw2 –band –qtl : Kısmi yükleri hesaplar.

“case.insp” dosyasında karakter bandlarının çizimi için

jatom = 1 jtype = jsize = 0.2

Burada jtype hangi band karakter yapısını çizilecek ise o karakter yazılır.

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

x spaghetti: Komutuyla band yapısı grafiği çizdirilir.

2.4.5. Hacim grafiği çizimi

init_elast : Bu komut bütün hesaplamaları hazırlar. Bu dosyanın çalışması için “case.struct” ve “case.inst” dosyaları olması gerekir.

elast_setup : Bu komut çalıştırılmadan önce “elast” klasörüne gidilir. Bu program “init.struct” ve “*.templ” dosyalarını kullanarak hesaplamalar için bütün giriş dosyalarını meydana getirir.

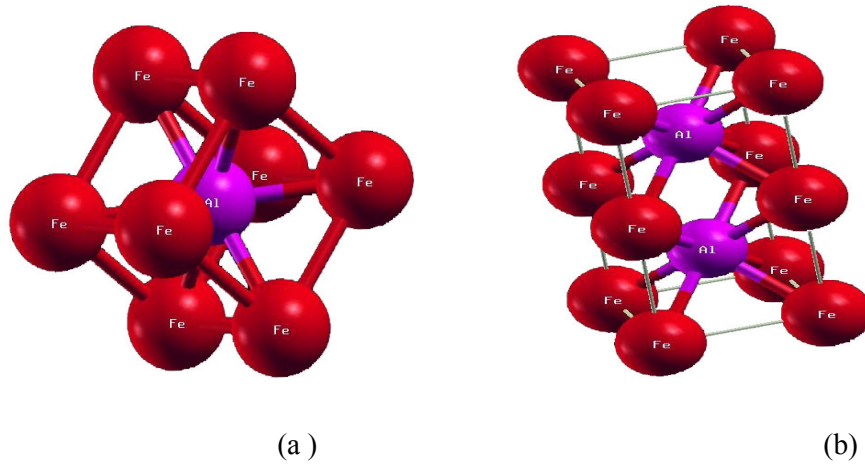
ana_elast : Hesaplamalar yapıldıktan sonra normalde bütün sonuçlar “elast/result” klasöründe saklanır, “elast/result” klasörüne girilir ve “ana_elast” komutu çalıştırılır. Bu komutla toplam enerjiler hesaplanarak analiz edilir. Ayrıca elastik sabitler ve basınç hesaplanarak sonuçların grafiği çizilir [26]. Wien2k programındaki hesaplamaların akış şeması şekil 3.7 de gösterilmektedir.

2.4.6. Süper örgünün oluşturulması

Bu program kullanılan Wien2k struct dosyasından supercell üretmede kullanılır. Orijinal struct dosyasının adı yazıldıktan sonra x, y, z yönlerindeki hücre sayısı girilir.

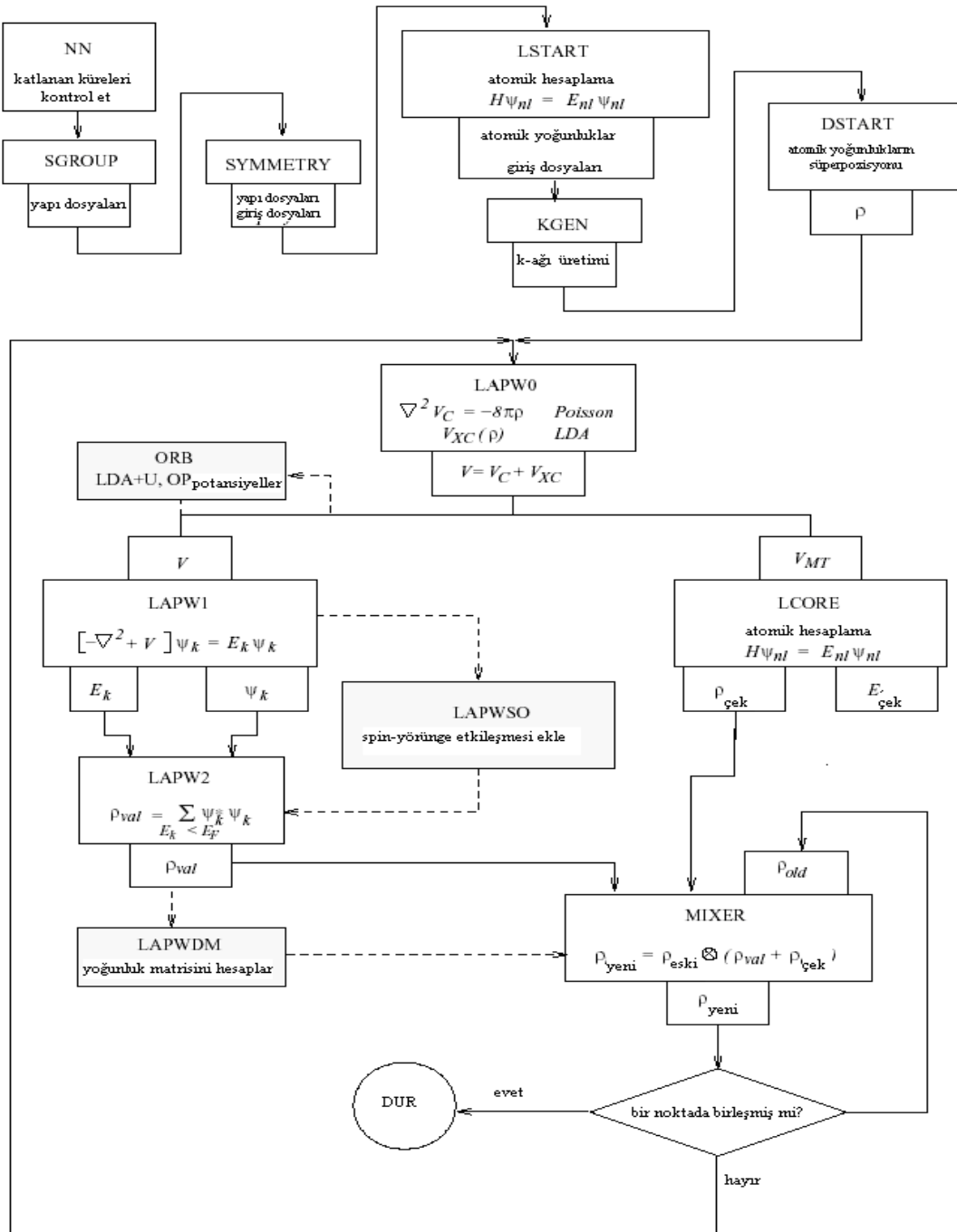
Eğer simetri izin verirse, hedef örgüyü; 2, 4, 6,... faktörleri yardımı ile bu supercelldeki hücre sayısını sağlayan P, B ve F merkezli örgülere çevirir.

Orijinal struct dosyasını süper örgü yapmak için **supercell** veya **x supercell** komutu kullanılır. Bu komuttan sonra dosyanın adı girilip x, y, z yönleri için örneğin; 1x1x2 değerleri girilirse, örgü x yönünde 1 birim, y yönünde 1 birim ve z yönünde ise 2 birim genişletilmiş olur.



Şekil 2.6 FeAl için a) kübik birim hücre b) 1x1x2 'lik süper örgü yapısı

(XCRYSDEN ile çizildi) [42]



Şekil 2.7 WIEN2k Programının akış şeması

3. TiC, bcc Fe, BASİT FeAl , SUPERCELL Fe₂Al₂ ve Fe₄Al₄ YAPILARININ WIEN2K PROGRAMI İLE TEST EDİLMESİ

Bu bölümde TiC, basit yapı FeAl ve supercell yapı FeAl yapılarına ait daha önceden elde edilmiş sonuçlar WIEN2k programı yardımıyla test edilmiştir.

3.1. TiC (NaCl) Yapısı

Burada önemli olan TiC yapı dosyasının oluşturulmasıdır. Wien2k programının kullanım kılavuzundaki TiC yapısına ait temel bilgiler:

Maddenin adı	:TiC
Örgü tipi	:NaCl
a=b=c	:4.4676 Å =8.4427 au
$\alpha = \beta = \gamma$:90°
Atom 1	:Ti pozisyonu (0, 0, 0) ve RMT=1.67
Atom 2	:C pozisyonu (0.5, 0, 0) ve RMT =1.48

Bu bilgilerden yararlanılarak “TiC.struct” yapı dosyası oluşturuldu. (Bkz. 2.1) Daha sonra “intsngen_lapw” komutuyla “TiC.inst” dosyası otomatik oluşur. Bundan sonra bölüm.2’de tanımlanan program akışına göre işleme devam edilir.

Burada “x lstart” komutunun çalışması esnasında 13 GGA ve kesme enerjisi –6.0 Ry alındı [24].

kgen, 1000 k noktası alınır. “TiC.inl_st” dosyasında Emax değeri 1.5’den 2.0 Ry olarak değiştirildi..

```

.....file:TiC.in1_st.....
WFFIL (WFPRI, SUPWF
7.00 10 4 (R-MT*K-MAX; MAX L IN WF, V-
0.30 5 0 (GLOBAL E-PARAMETER WITH n OTHER CHOICES, global APW/LAPW)
0 0.30 0.000 CONT 1

0 -4.35 0.005 STOP 1
1 -2.58 0.010 CONT 1
1 0.30 0.000 CONT 1
2 0.30 0.010 CONT 1
0.30 3 0 (GLOBAL E-PARAMETER WITH n OTHER CHOICES, global APW/LAPW)
0 -0.78 0.010 CONT 1
0 0.30 0.000 CONT 1
1 0.30 0.000 CONT 1
K-VECTORS FROM UNIT:4 -7.0 2.0 emin/emax

```

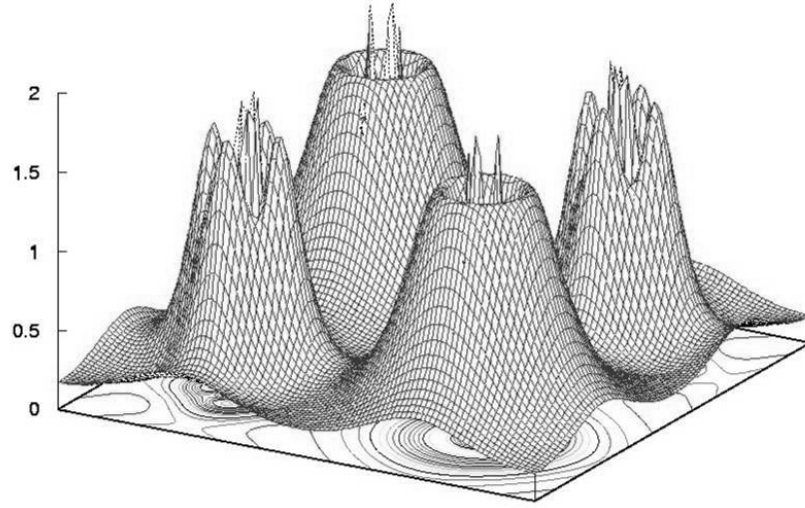
Elektron yoğunluğu grafiği için “TiC.in5” dosyası oluşturuldu ve sınırlar zmin=0 ve zmax=2 alındı.

```

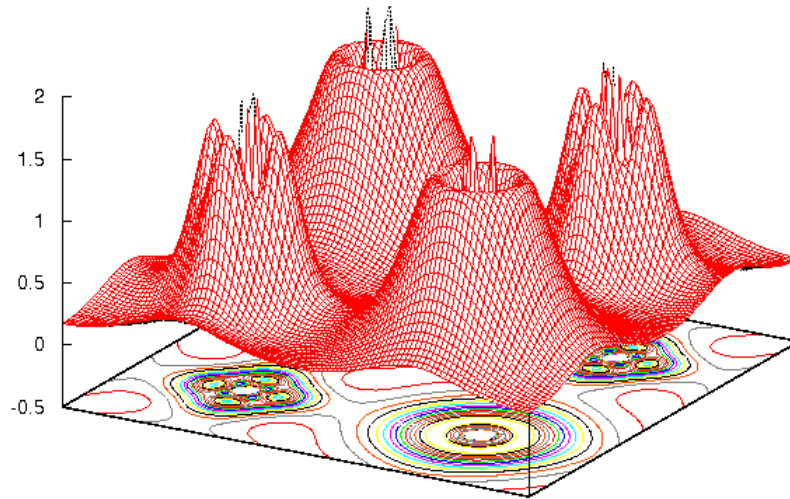
.....file:TiC.in5.....
-1 -1 0 4
-1 3 0 4
3 -1 0 4
3 2 3
100 100
RHO
ANG VAL NODEBUG
NONORTHO

```

Elde edilen tüm sonuçların wien2k kullanım kılavuzundaki sonuçlar ile karşılaştırılması neticesinde [1], sonuçların son derece uyumlu olduğu görülmüştür.



(a) Orijinal[43]



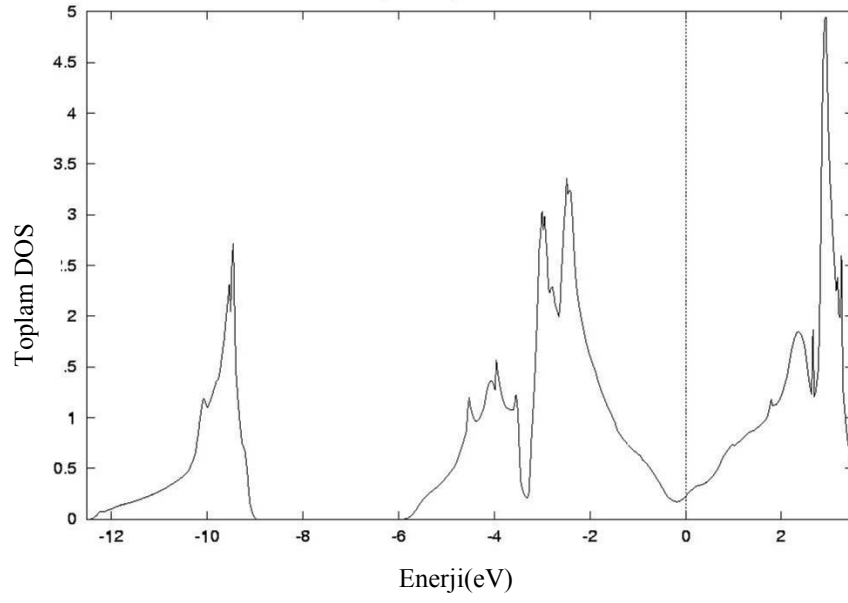
b) Elde edilen

Şekil 3.1 TiC için elektron yoğunluğu

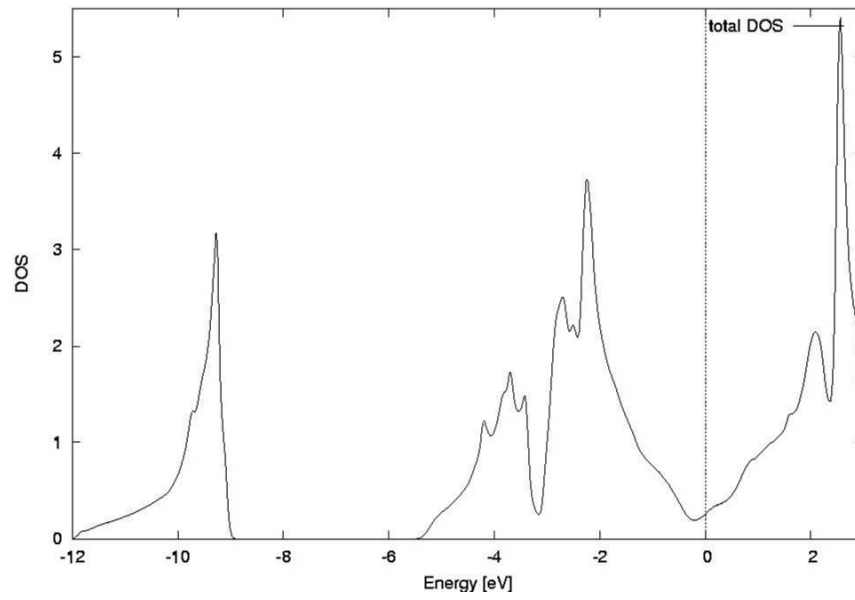
TiC DOS grafikleri için, "TiC.int" dosyası oluşturulur.

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

Grafikler herbir durum için ayrı ayrı elde edildi.

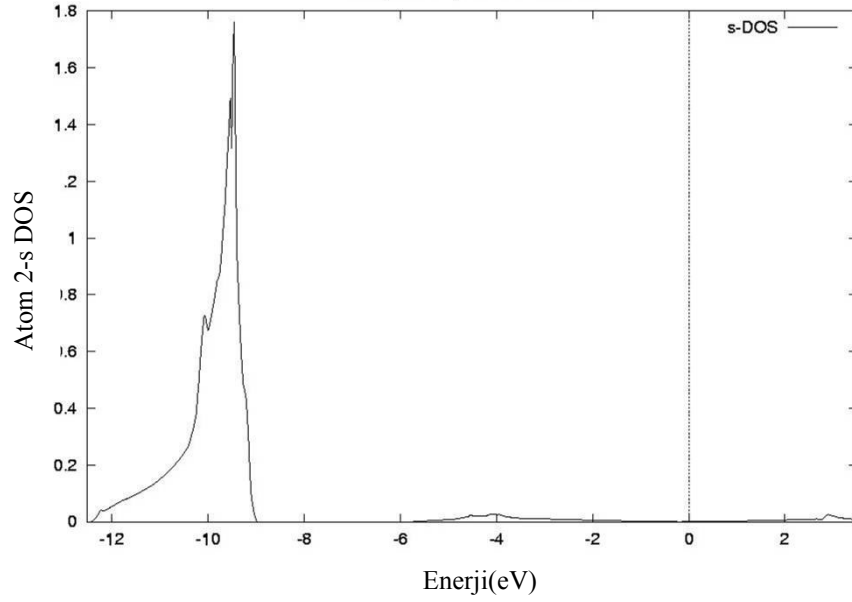


a) Orijinal[43]

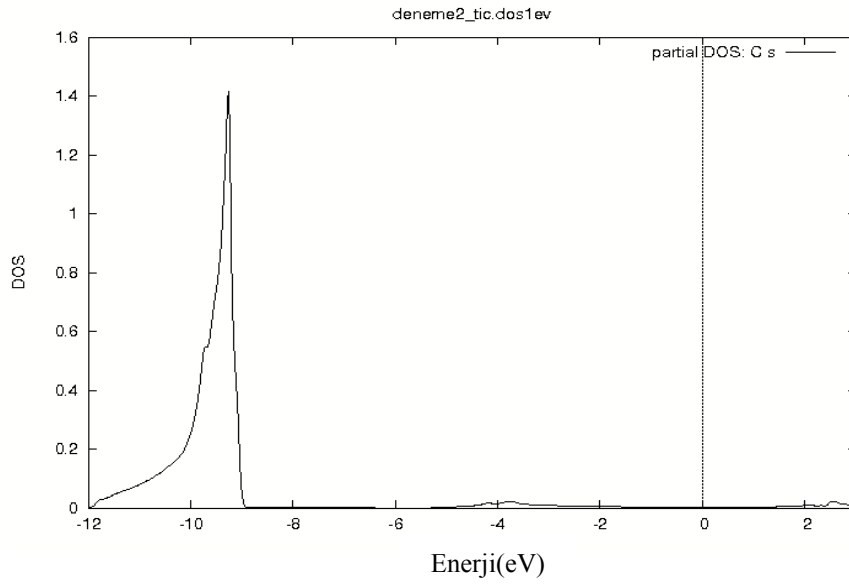


b) Elde edilen

Şekil 3.2 TiC için toplam DOS grafikleri

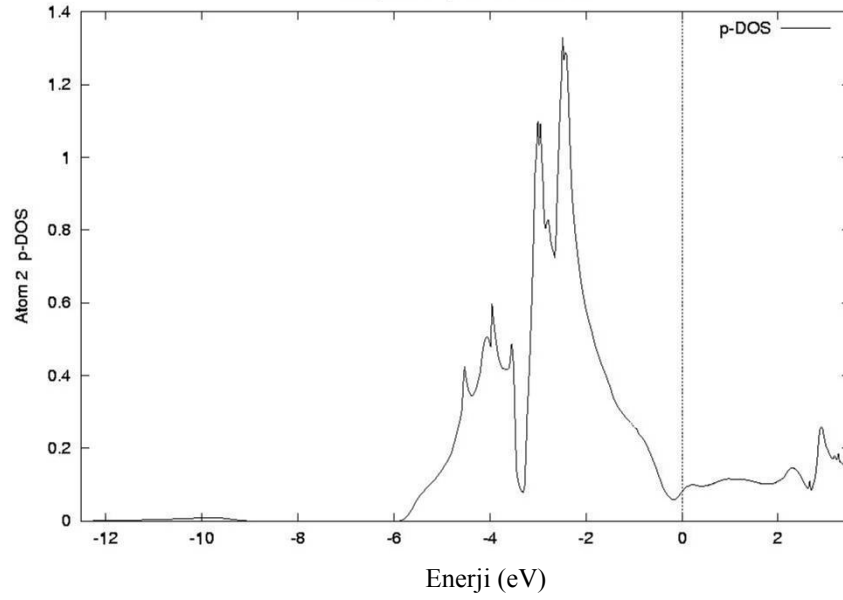


a) Orijinal[43]

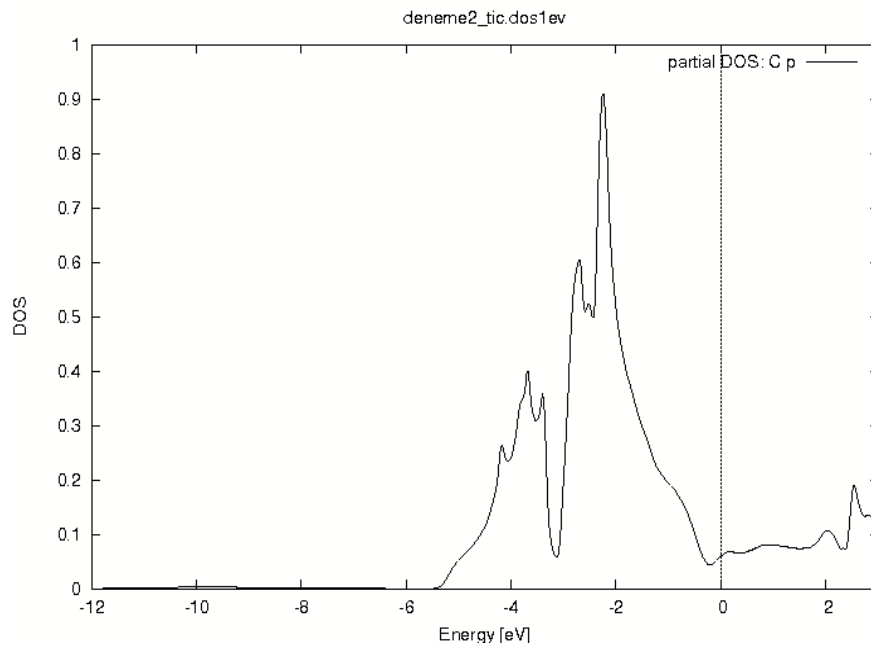


b) Elde edilen

Şekil 3.3 TiC için C-s DOS grafiği

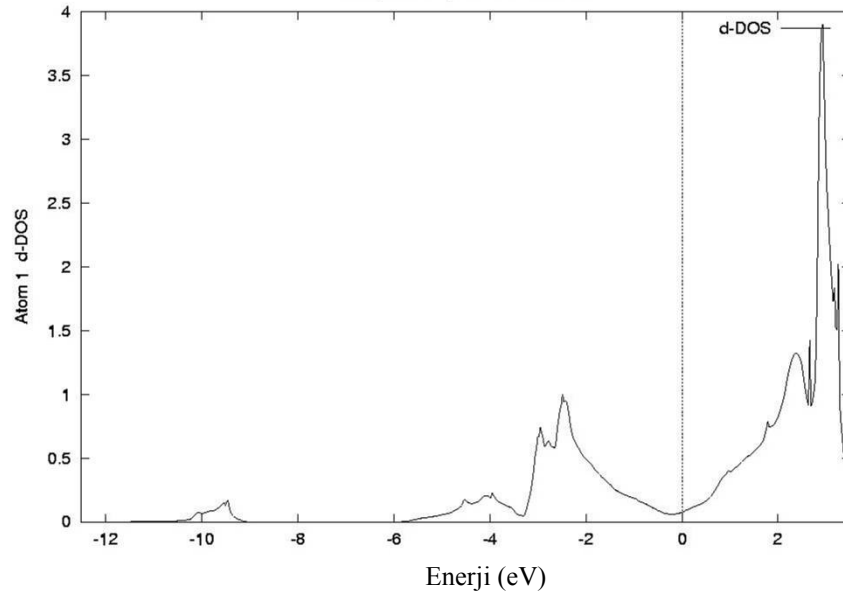


a) Orijinal[43]

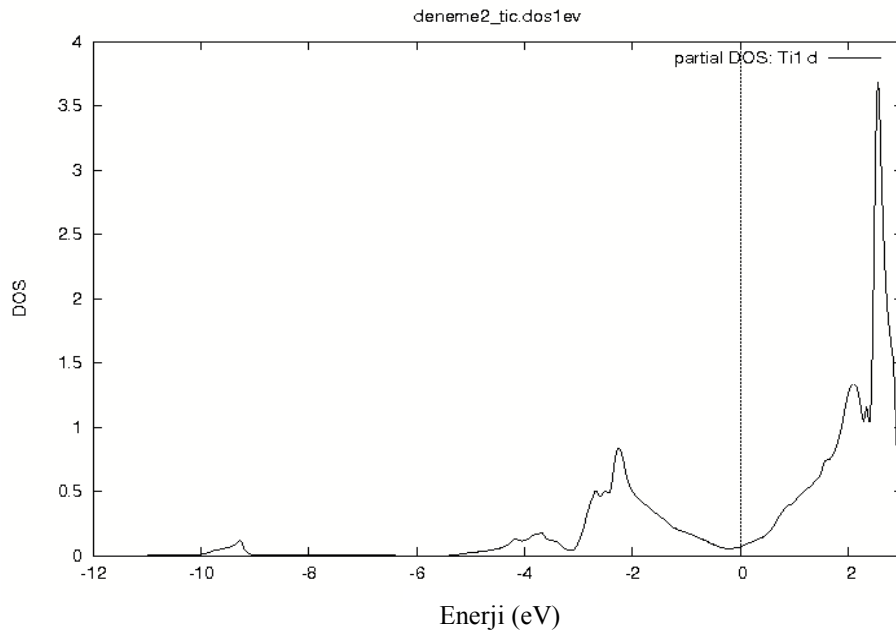


b) Elde edilen

Şekil 3.4 TiC için için C-p DOS grafiği

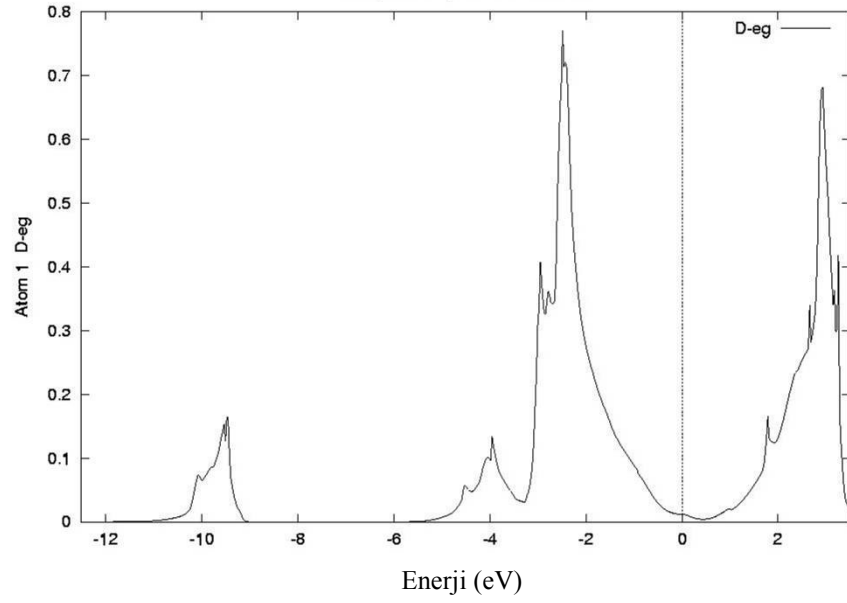


a) Orijinal[43]

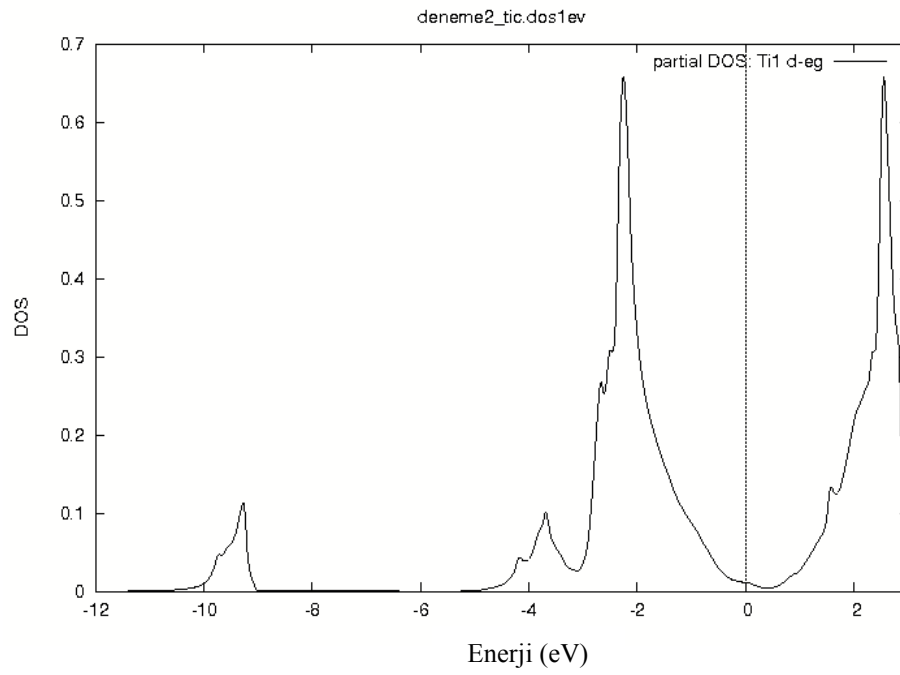


b) Elde edilen

Şekil 3.5 TiC için için Ti-d DOS grafiği

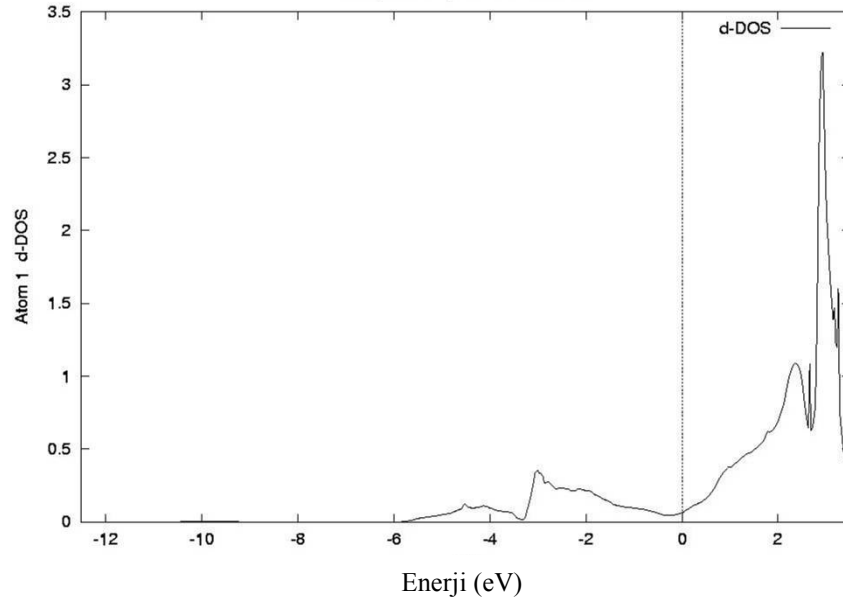


a) Orijinal[43]

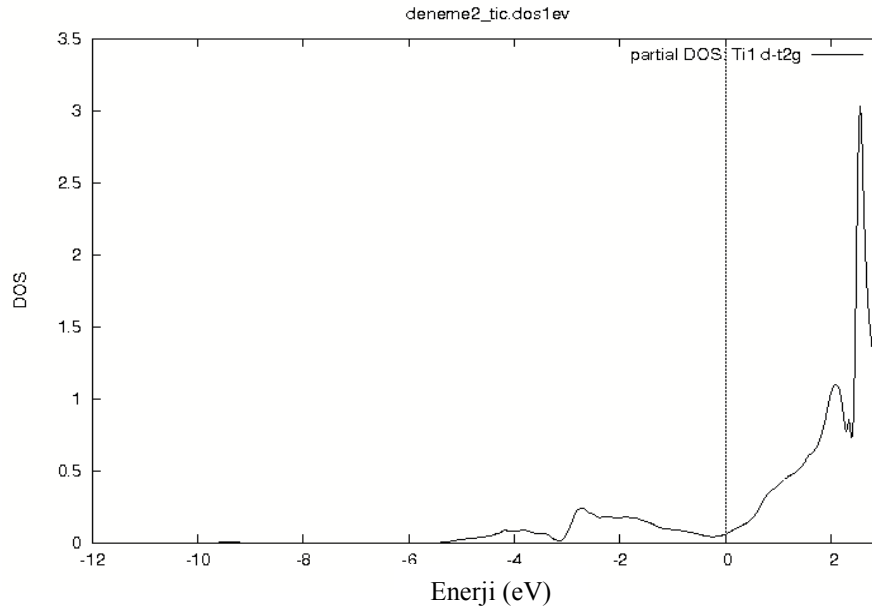


b) Elde edilen

Şekil 3.6 TiC için için Ti-eg DOS grafiği



a) Orijinal[43]



b) Elde edilen

Şekil 3.7 TiC için için Ti-t2g DOS grafiği

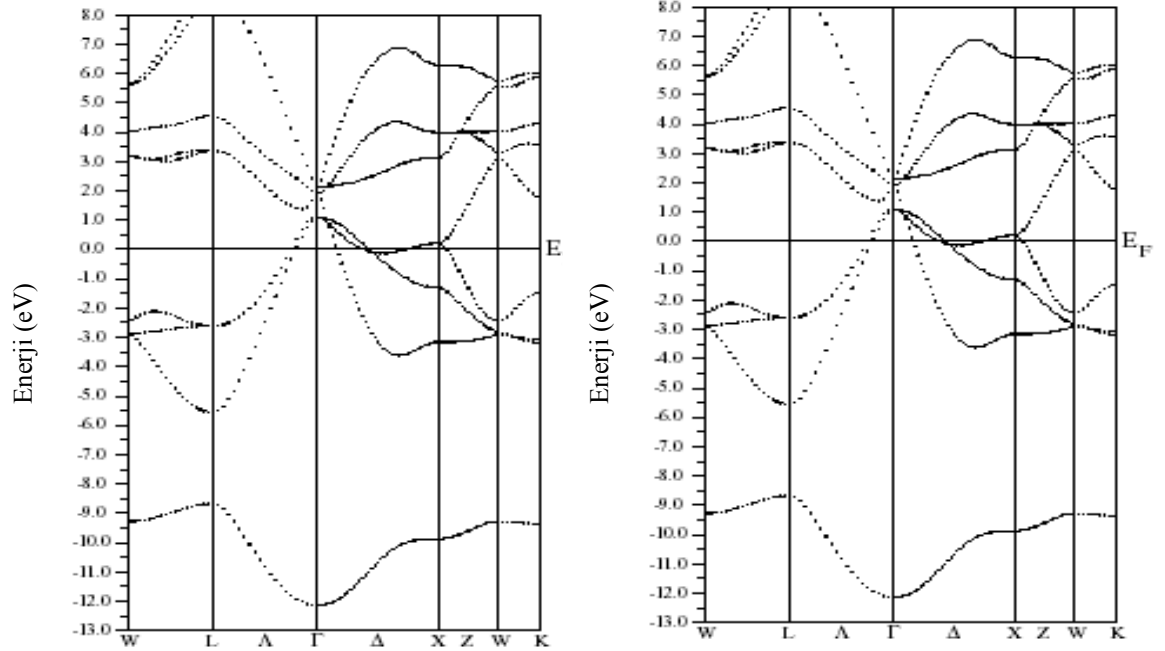
Band yapısı grafiği için, “TiC.insp” dosyası aşağıdaki biçimde düzenlendi.

```

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

```

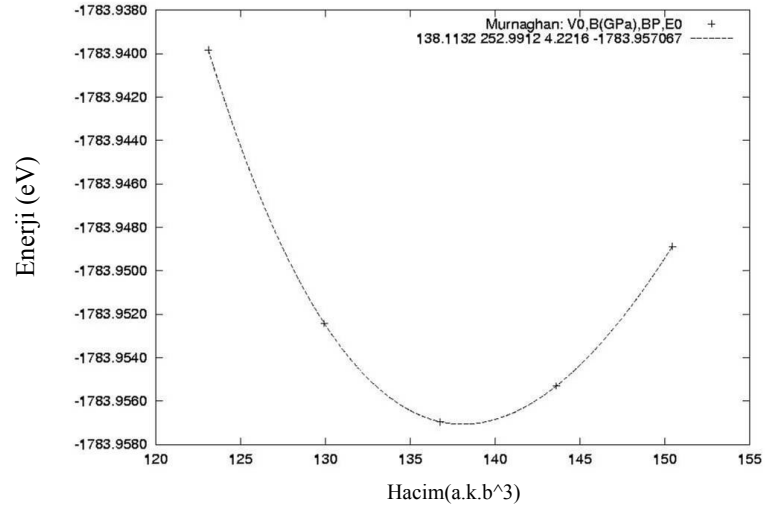
Grafiklerin enerjileri -13 ile 8 eV aralığında çizilerek orijinali ile karşılaştırıldı.



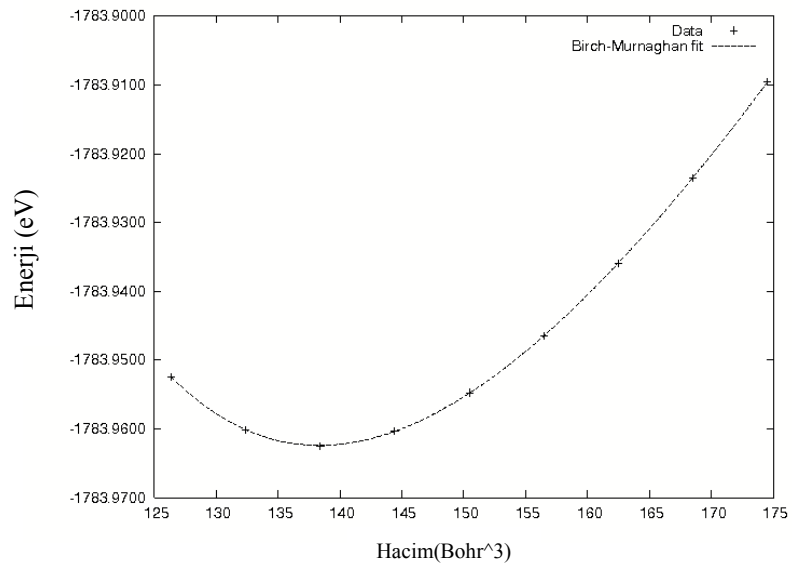
a) Orijinal[43]

b) Elde edilen

Şekil 3.8 TiC band yapısı



a) Orijinal[43]



b) Elde edilen

Şekil 3.9 TiC için enerji-hacim grafiği

3.2. bcc Fe yapısı

bcc Fe “bccFe.struct” dosyasını oluşturmak için aşağıdaki bilgileri kullanırız [26].

Yapının adı	:bcc Fe
Örgü tipi	:B
a=b=c	:2.86 Å =5.4169au
$\alpha = \beta = \gamma$:90°
Atom	:Fe pozisyonu (0, 0, 0) ve RMT=1.75

Manyetik olmayan bcc Fe (örgü tipi: B) konumu (0,0,0) ve uzay grubu $Im\bar{3}m$ (atom numarası:229)’dur. Deneysel örgü sabiti a=5.4169 au muffin-tin yarıçapı RMT= 1.75 au olur.

Bu verilere göre “bccFe.struct” oluşturulur. Aşağıdaki gibidir.

```

.....Fe.struct.....
Fe
B LATTICE,NONEQUIV.ATOMS: 1
MODE OF CALC=RELA unit=bohr
 5.416900 5.416900 5.416900 90.000000 90.000000 90.000000
ATOM 1: X=0.00000000 Y=0.00000000 Z=0.00000000
      MULT= 1      ISPLIT= 2
Fe      NPT= 781 R0=0.00005000 RMT= 1.7500 Z: 26.0
LOCAL ROT MATRIX:  1.0000000 0.0000000 0.0000000
                   0.0000000 1.0000000 0.0000000
                   0.0000000 0.0000000 1.0000000
48  NUMBER OF SYMMETRY OPERATIONS
1 0 0 0.00000000
0-1 0 0.00000000
0 0-1 0.00000000
  1
0-1 0 0.00000000
1 0 0 0.00000000
0 0-1 0.00000000
  2
.
.

```

```

-1 0 0 0.00000000
0 1 0 0.00000000
0 0 1 0.00000000
48

```

.....

“instgen lapw” komutuyla “bccFe.inst” dosyası otomatik olarak oluşur. TiC dosyasındaki işlemler aynı sırayla takip edilir.

TiC yapısında olduğu gibi x start 13 GGA [24] ve kesme enerjisi -6.0 Ry değerleri alındı. kgen’de ise 500 k noktası (Brillouin bölgesi 20) ve karıştırıcı faktör 0.10 (case.inm) olarak alındı.

```

.....file:bccFe.in1_st.....
WFFIL (WFPRI, SUPWF
7.00 10 4 (R-MT*K-MAX; MAX L IN WF, V-
0.30 4 0 (GLOBAL E-PARAMETER WITH n OTHER CHOICES, global APW/LAPW)
1 0.30 0.000 CONT 0

0 -3.97 0.005 STOP 0
2 0.30 0.010 CONT 0
0 0.30 0.000 CONT 0
K-VECTORS FROM UNIT:4 -7.0 2.5 emin/emax window

```

.....

Bu dosyada Emax’sı 1.5’den 2.5 ve LAPW metodunu seçtik. Bu hesaplamalardan sonra “bccFe.int” dosyası oluşturulur.

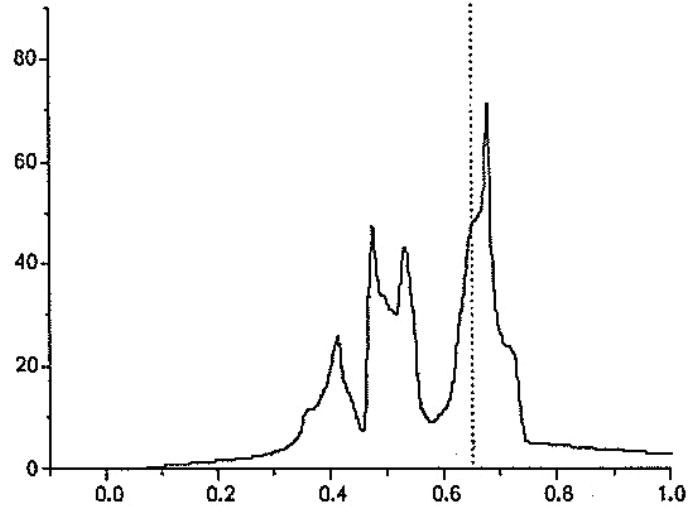
```

.....file:bccFe.int.....
bccFe # Title
-0.50 0.001 3.000 0.003 # EMIN,DE,EMAX for DOS,GAUSS-Broad
7 # NUMBER OF DOS-CASES
0 1 cryst-tot
1 1 Fe-tot
1 2 Fe-s
1 3 Fe-p
1 4 Fe-d
1 7 Fe-f
2 1 Inter

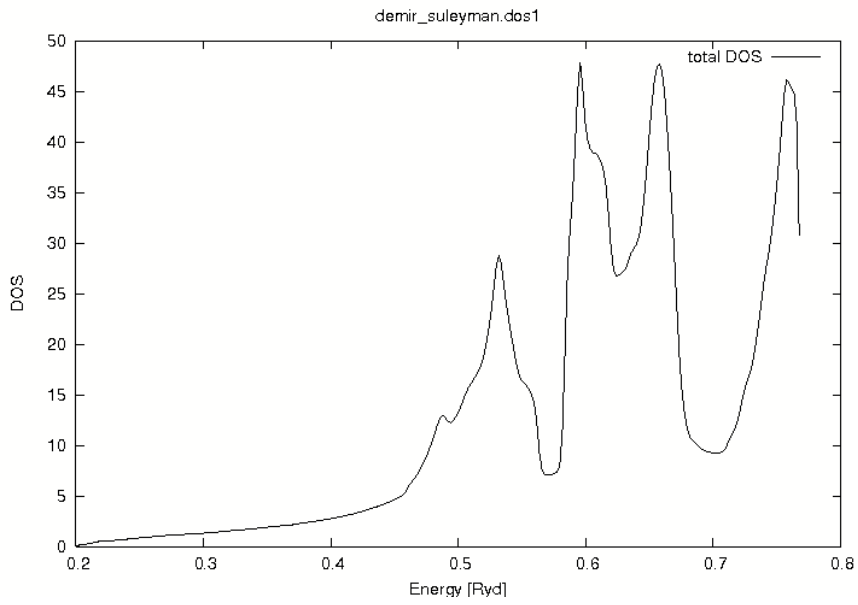
```

.....

Bu işlemlerden yararlanarak durum yoğunluğu (DOS) , elektron yoğunluğu ,bant yapısı ve enerji-hacim grafikleri çizildi. Bütün bunlara spin-polarize dahil edilmedi.

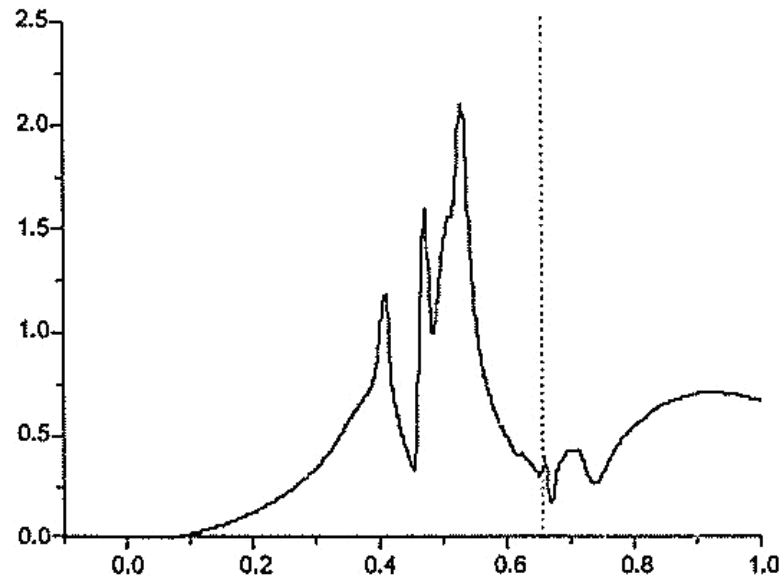


Orijinal

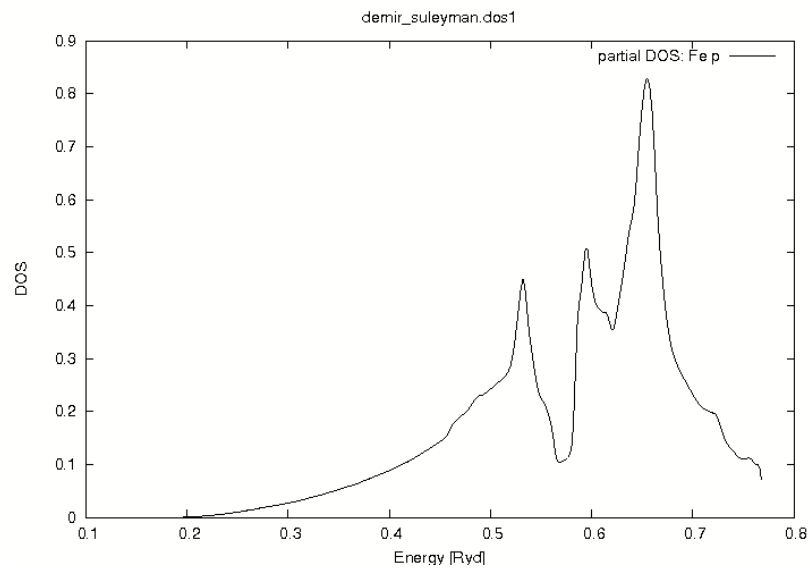


Elde Edilen

Şekil 3.10 bcc Fe toplam DOS grafiği

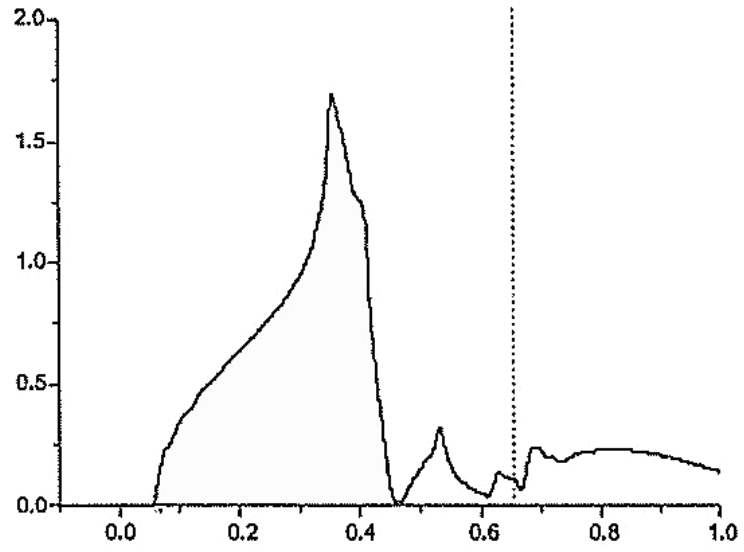


Orijinal

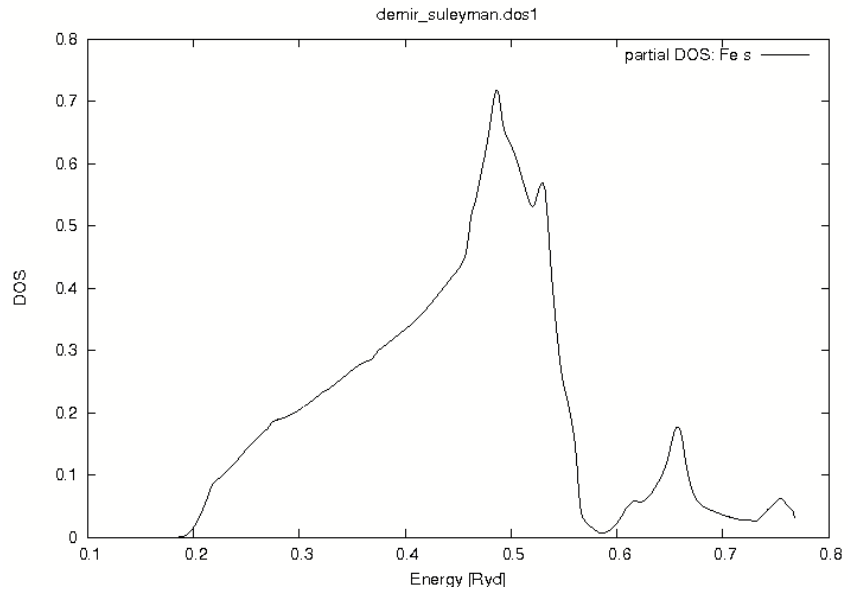


Elde Edilen

Şekil 3.11 bcc Fe p-DOS grafiği

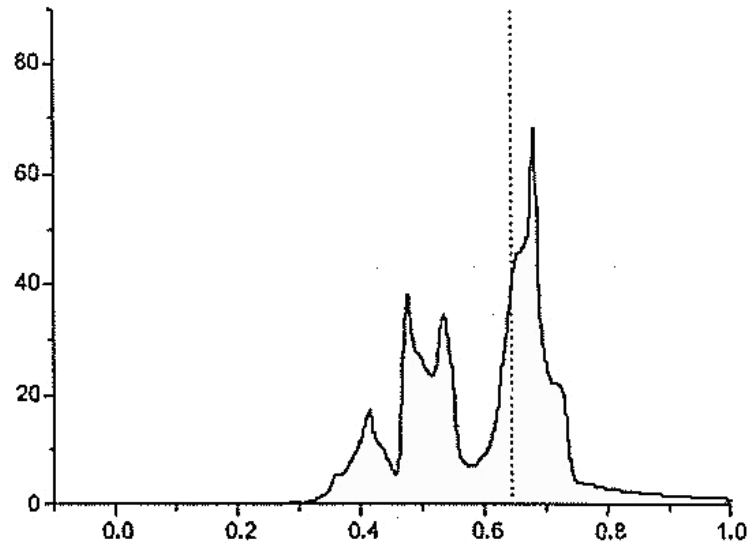


Orijinal

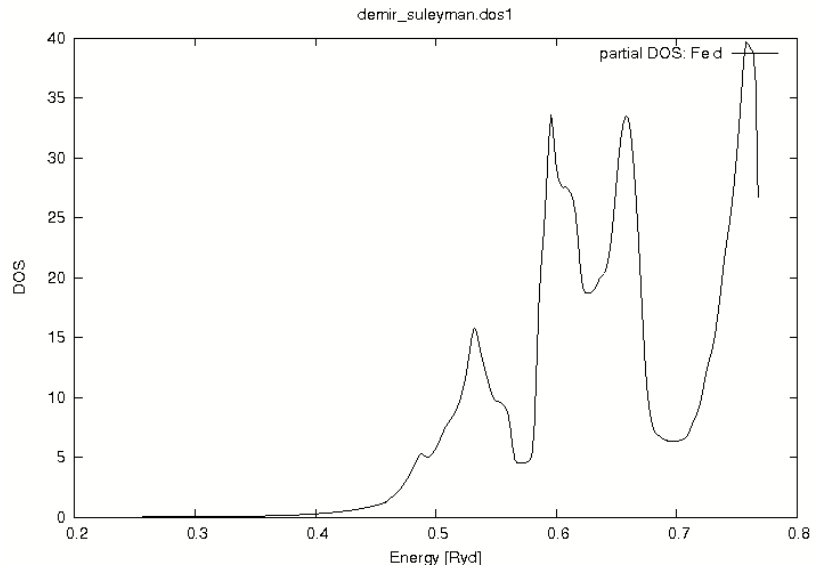


Elde Edilen

Şekil 3.12 bcc Fe s-DOS grafiği

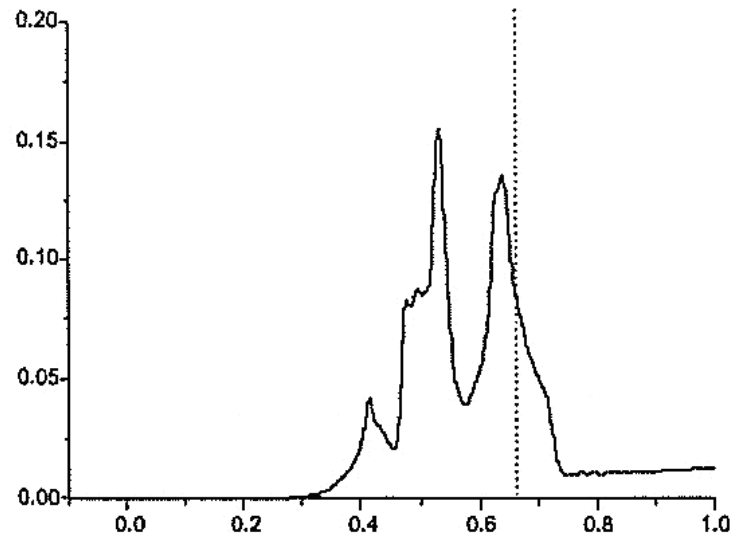


Orijinal

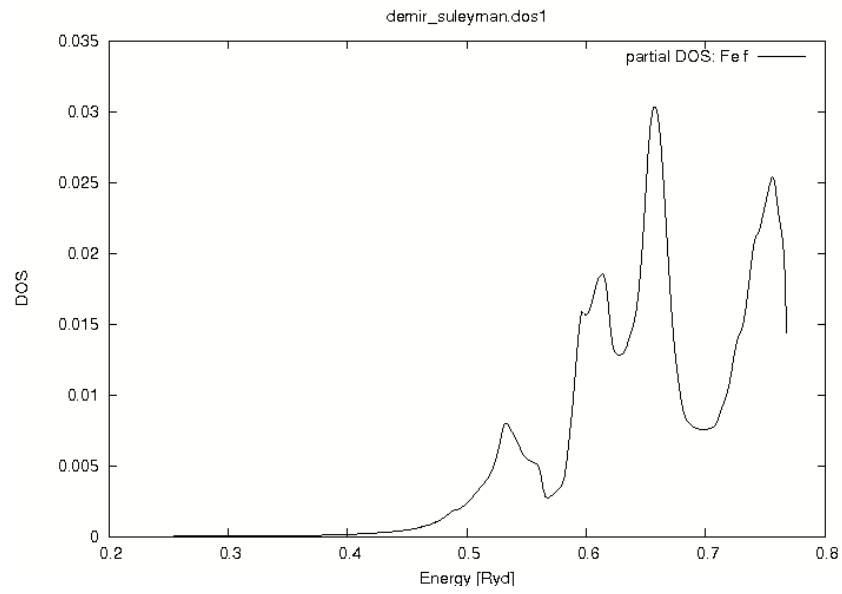


Elde Edilen

Şekil 3.13 bcc Fe d-DOS grafiği

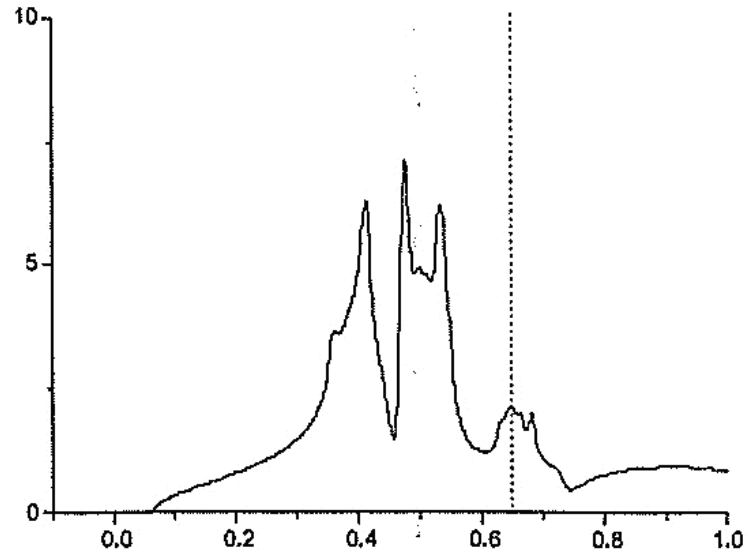


Orijinal

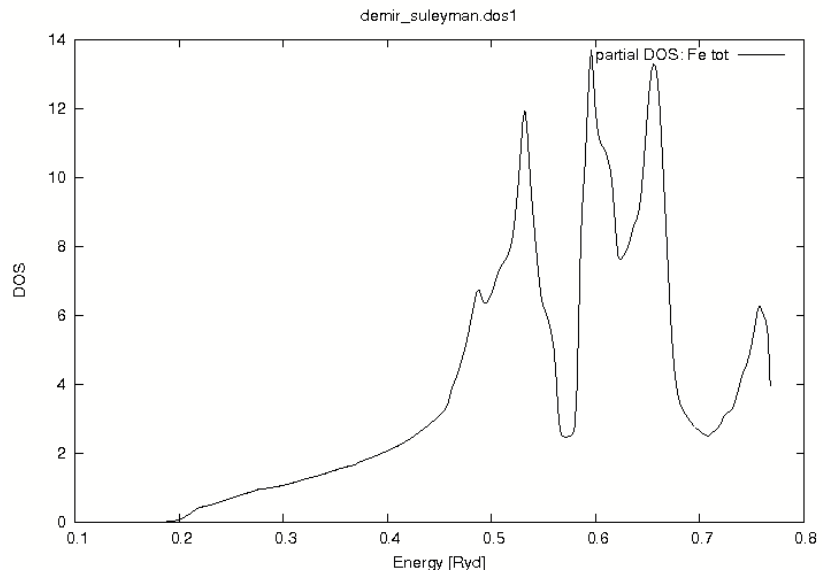


Elde Edilen

Şekil 3.14 bcc Fe f-DOS grafiği

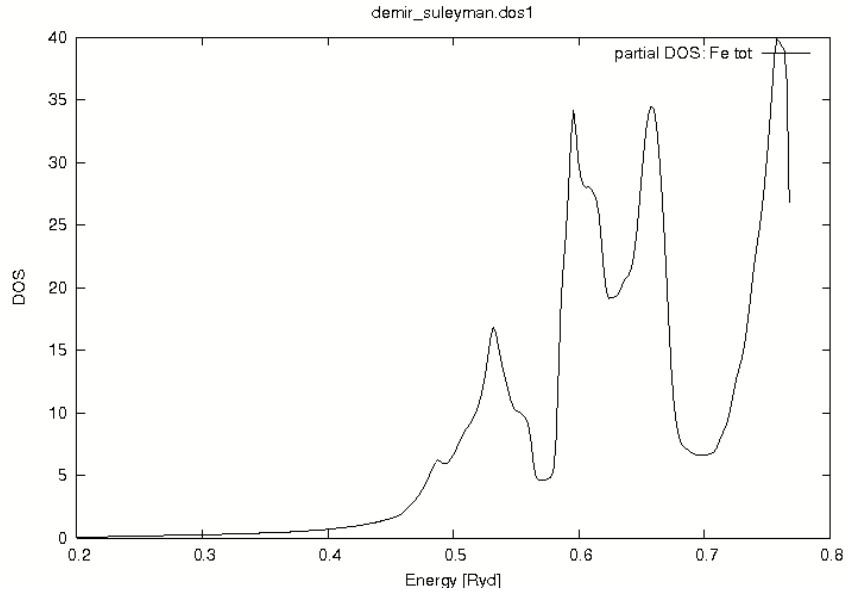


Orijinal



Elde Edilen

Şekil 3.15 bcc Fe p-DOS grafiği



Şekil 3.16 bcc Fe Toplam DOS grafiği

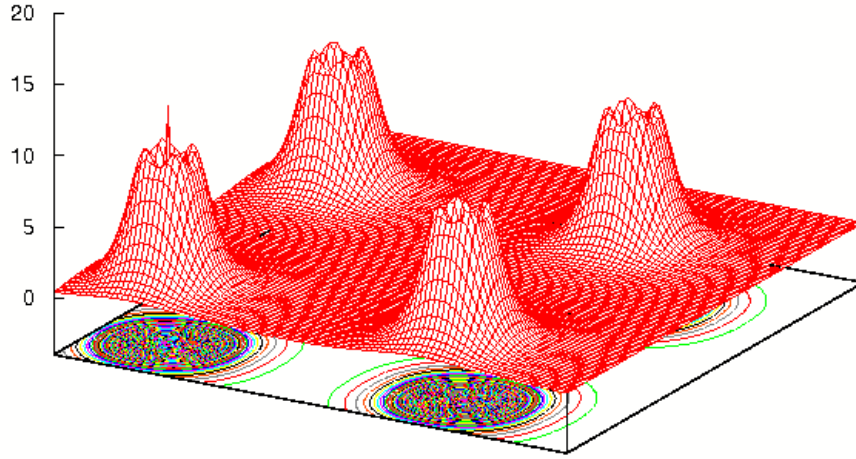
Elektron yoğunluğu grafiği için “bccFe.in5” dosyası oluşturuldu ve sınırlar zmin=0 ve zmax=200 alındı.

```

.....file:bccFe.in5.....
-6 -1 0 4
-1 3 0 4
 6 -1 0 4
 3 2 3
100 100
RHO
ANG VAL NODEBUG
NONORTHO
.....

```

Bu “bccFe.in5” dosyası yardımıyla oluşturulan elektron yoğunluğu grafiği;



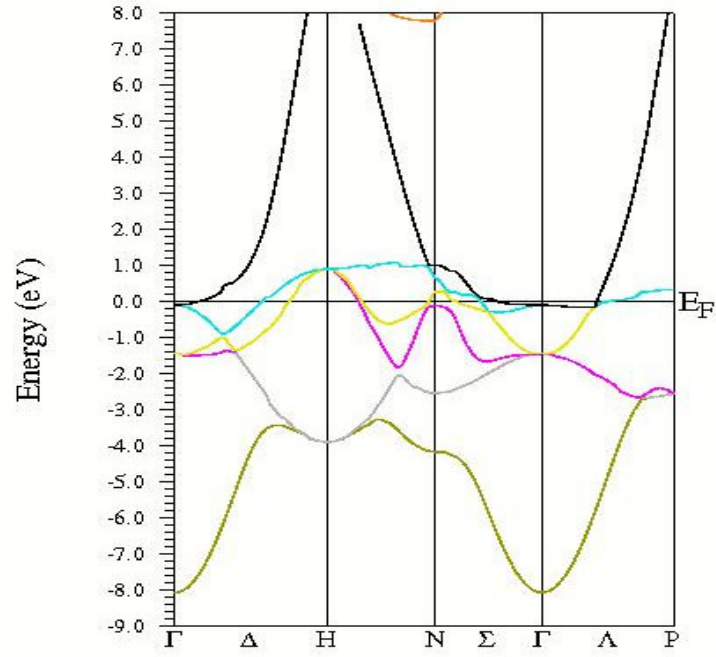
Şekil 3.17 bccFe için elektron yoğunluğu grafiği

Band yapısı grafiği için, “bccFe.insp” dosyası aşağıdaki biçimde düzenlendi.

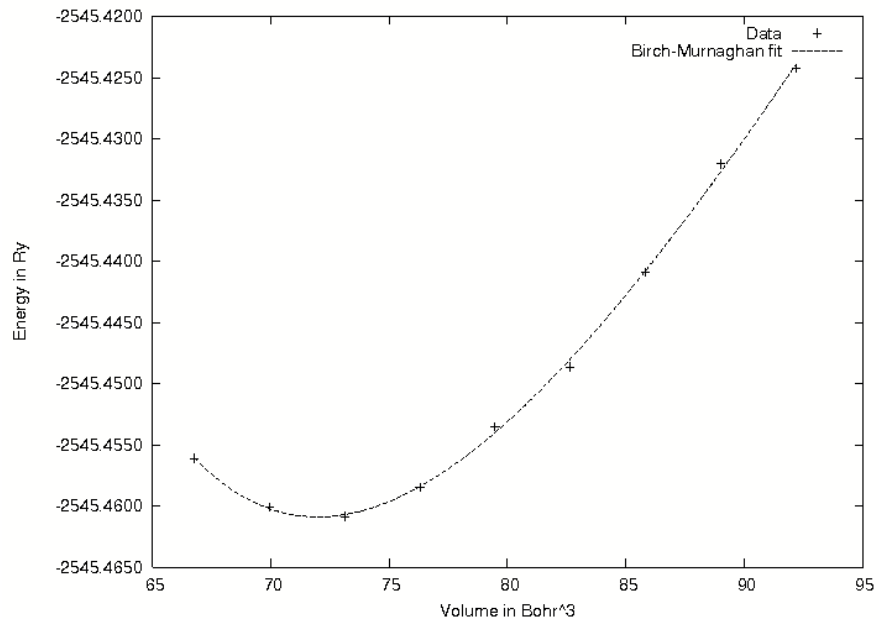
```

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

```



Şekil 3.18 bccFe için elde edilen band yapısı grafiği



Şekil 3.19 bccFe için elde edilen enerji-hacim grafiği

3.3. Basit FeAl yapısı

Burada önemli olan FeAl yapı dosyasının oluşturulmasıdır.

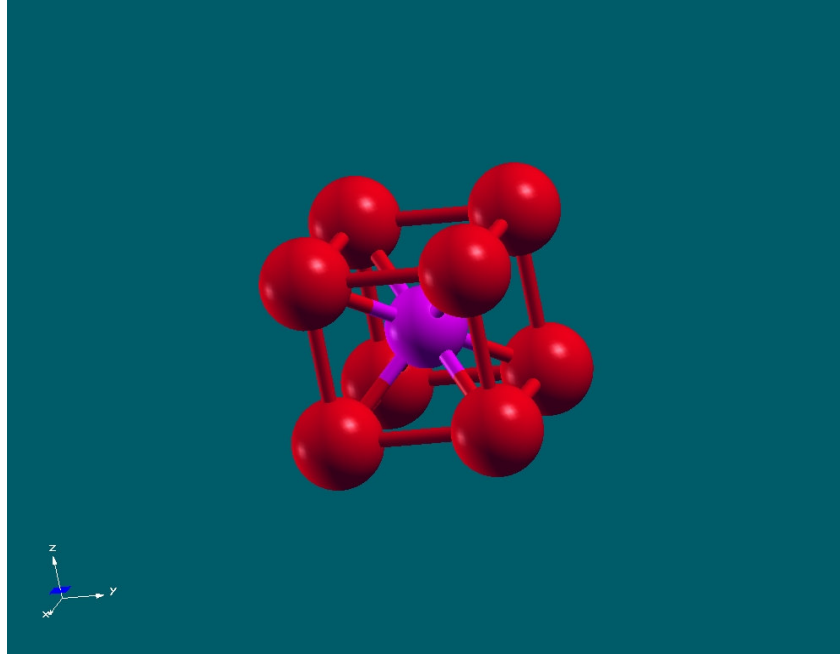
Maddenin adı	:FeAl
Örgü tipi	:P(Basit Kübik Örgü)
a=b=c	: 2.8575 Å = 5.40 au
$\alpha = \beta = \gamma$:90°
Atom 1	:Fe pozisyonu (0, 0, 0) ve RMT=1.85
Atom 2	:Al pozisyonu (0.5, 0.5, 0.5) ve RMT =1.64

Bu bilgilerden yararlanılarak “FeAl.struct” yapı dosyası oluşturulur ve aşağıdaki gibidir.

```

.....FeAl.....
FeAl
P LATTICE,NONEQUIV.ATOMS: 2 _Fm-3m
MODE OF CALC=RELA unit=ang
5.40000 5.40000 5.40000 90.00000 90.00000 90.00000
ATOM 1: X=0.00000000 Y=0.00000000 Z=0.00000000
MULT= 1 ISPLIT= 2
Fe1 NPT= 781 R0=0.00005000 RMT= 1.85 Z: 26.0
LOCAL ROT MATRIX: 1.0000000 0.0000000 0.0000000
0.0000000 1.0000000 0.0000000
0.0000000 0.0000000 1.0000000
ATOM 2: X=0.50000000 Y=0.50000000 Z=0.50000000
MULT= 1 ISPLIT= 2
Al1 NPT= 781 R0=0.00010000 RMT= 1.64 Z: 13.0
LOCAL ROT MATRIX: 1.0000000 0.0000000 0.0000000
0.0000000 1.0000000 0.0000000
0.0000000 0.0000000 1.0000000
48 NUMBER OF SYMMETRY OPERATIONS
.....

```



Şekil 3.20 Basit FeAl yapısı

Daha sonra “`intsngen_lapw`” komutuyla “`FeAl.inst`” dosyası otomatik oluşur. Bundan sonra bölüm.2’de tanımlanan program akışına göre işleme devam edilir.

Burada “`x lstart`” komutunun çalışması esnasında 13 GGA ve kesme enerjisi -6.0 Ry alındı [24] ve kgen, 1000 k noktası alınır.

```

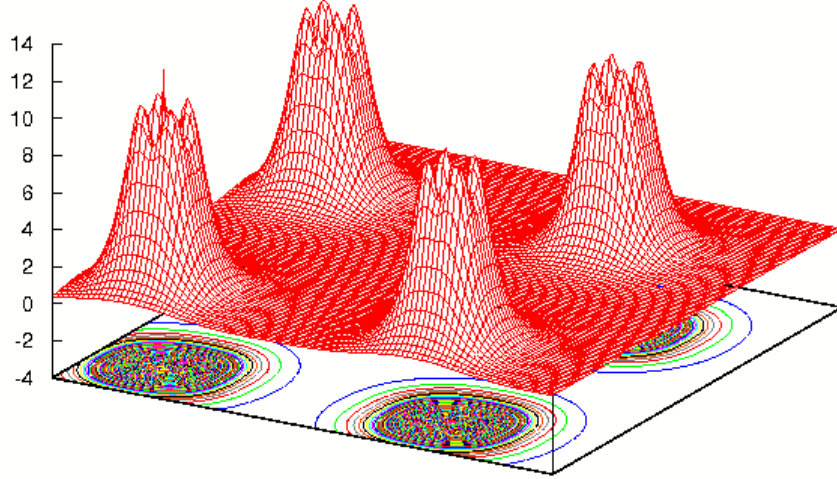
.....FeAl.in1.....
WFFIL (WFPI, SUPWF)
7.00 10 4 (R-MT*K-MAX; MAX L IN WF, V-NMT)
0.30 4 0 (GLOBAL E-PARAMETER WITH n OTHER CHOICES, global APW/LAPW)
1 0.30 0.000 CONT 0
1 -3.97 0.005 STOP 0
2 0.30 0.010 CONT 0
0 0.30 0.000 CONT 0
0.30 3 0 (GLOBAL E-PARAMETER WITH n OTHER CHOICES, global APW/LAPW)
1 0.30 0.000 CONT 0
1 -4.80 0.005 STOP 0
0 0.30 0.000 CONT 0
K-VECTORS FROM UNIT:4 -9.0 2.5 emin/emax window

```

.....,

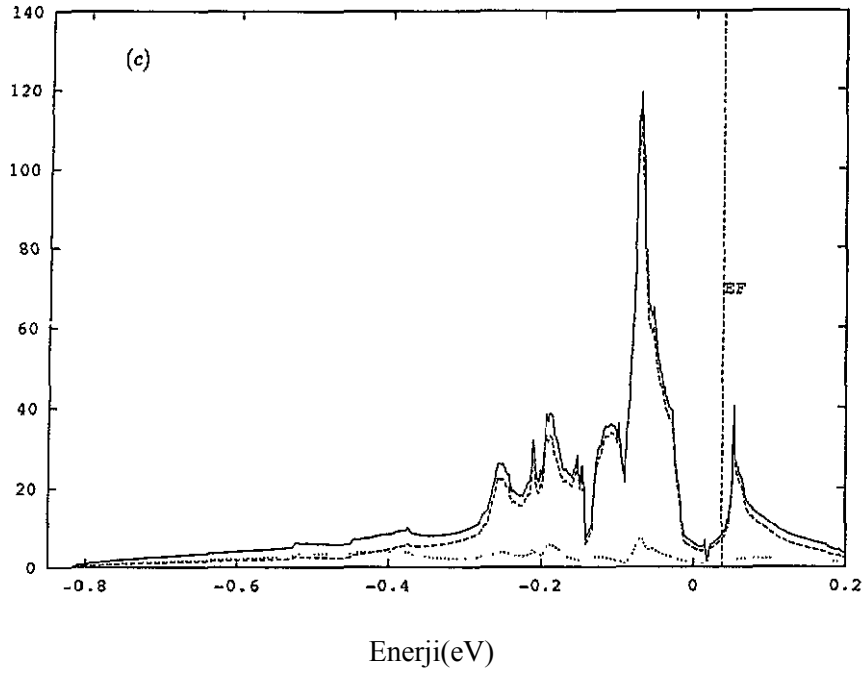
Elektron yoğunluęu grafięi için "FeAl.in5" dosyası oluřturuldu ve sınırlar zmin=0 ve zmax=2 alındı.

```
.....FeAl.in5.....  
  
-1 -1 0 4  
-1 3 0 4  
3 -1 0 4  
3 2 3  
100 100  
RHO  
ANG VAL NODEBUG  
NONORTHO  
.....
```

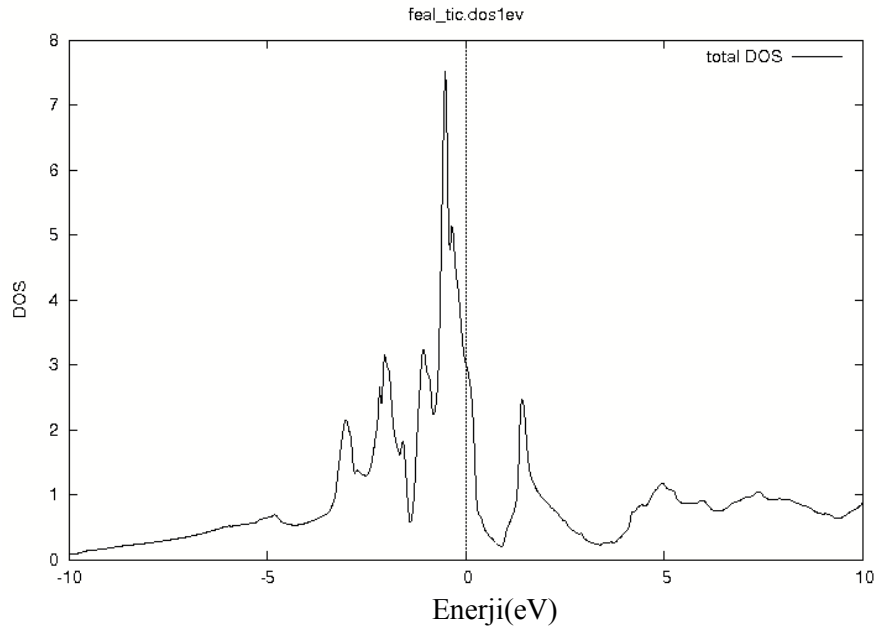


řekil 3.21 FeAl için elektron yoğunluęu grafięi

Bu iřlemlerden yararlanılarak, int dosyası yardımıyla durum yoğunluęu (DOS) grafikleri çizildi.

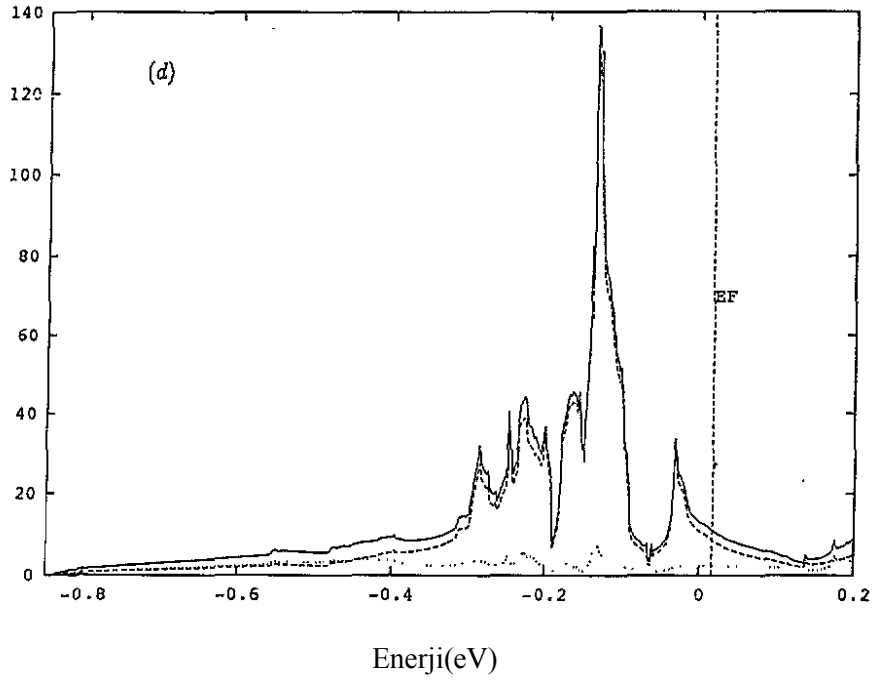


Orijinal

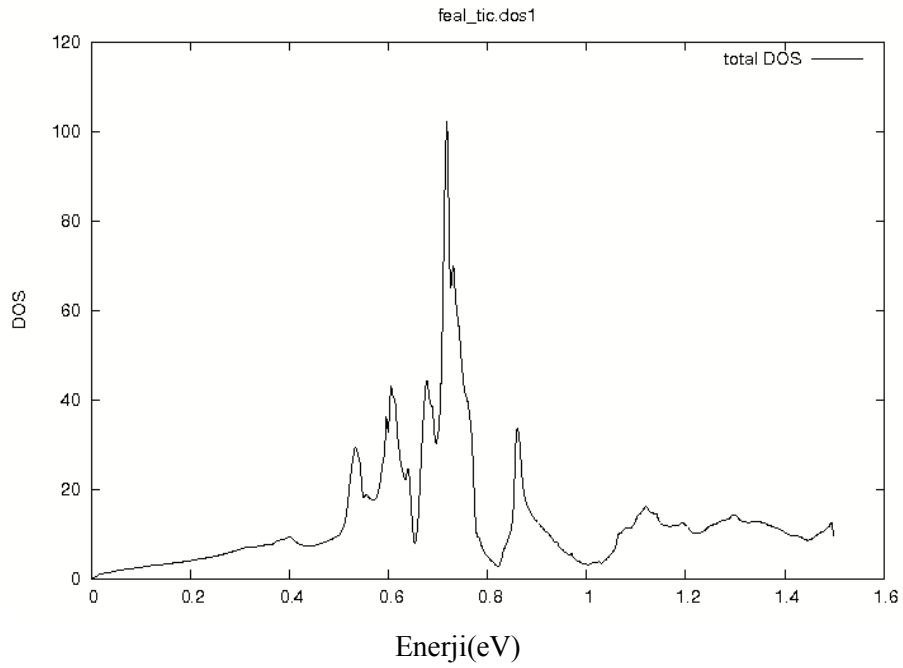


Elde edilen

Şekil 3.22 FeAl için DOS grafiği



Orijinal



Elde edilen

Şekil 3.23 FeAl için toplam DOS grafiği

Band yapısı grafiği için, “FeAl.insp” dosyası aşağıdaki biçimde düzenlendi.

```

.....FeAl.insp.....
### Figure configuration
5.0 3.0          # paper offset of plot
10.0 15.0       # xsize,ysize [cm]
1.0 4           # major ticks, minor ticks
1.0 1          # character height, font switch
1.1 1 4        # line width, line switch, color switch
### Data configuration
-14.0 8.0 2     # energy range, energy switch (1:Ry, 2:eV)
1 0.79314      # Fermi switch, Fermi-level (in Ry units)
1 999          # number of bands for heavier plotting 1,1
0 1 0.2        # jatom, jtype, size of heavier plotting

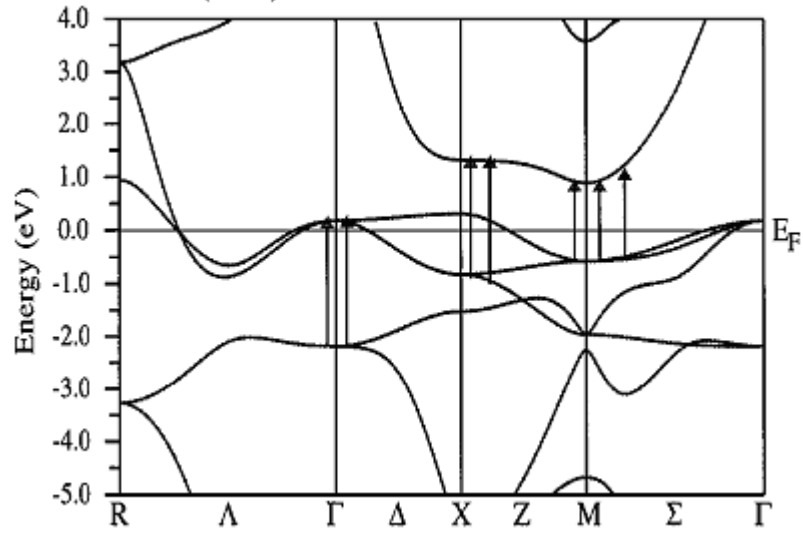
Fermi switch:
0...no line
1...solid line
2...dashed line
3...dotted line

Line switch:
0...dots
1...lines
2...lines and open circle
3...lines and filled circles

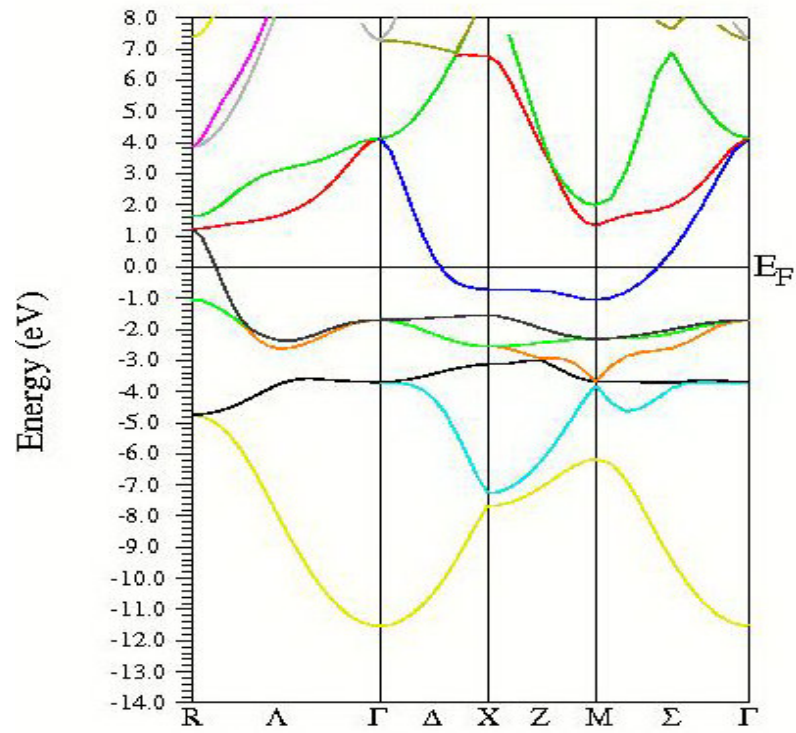
Color switch (re-define your colors in defines.f)
0...black
1...one-color plot
2...three-color plot
3...multi-color plot
4...multi-color plot, one color for each irr. representations

Font switch:
0...no text
1...Times and Symbol
2...Times, Symbol, and Times-Italic
3...Helvetica, Symbol, and Helvetica-Italic
4...(include your own fonts in defines.f)
.....

```

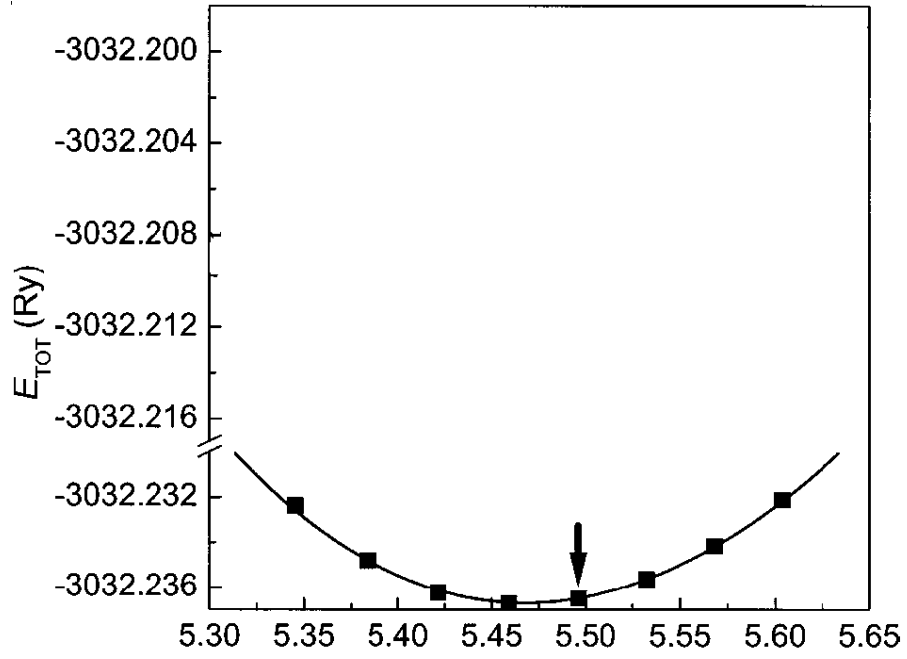


Orjinal

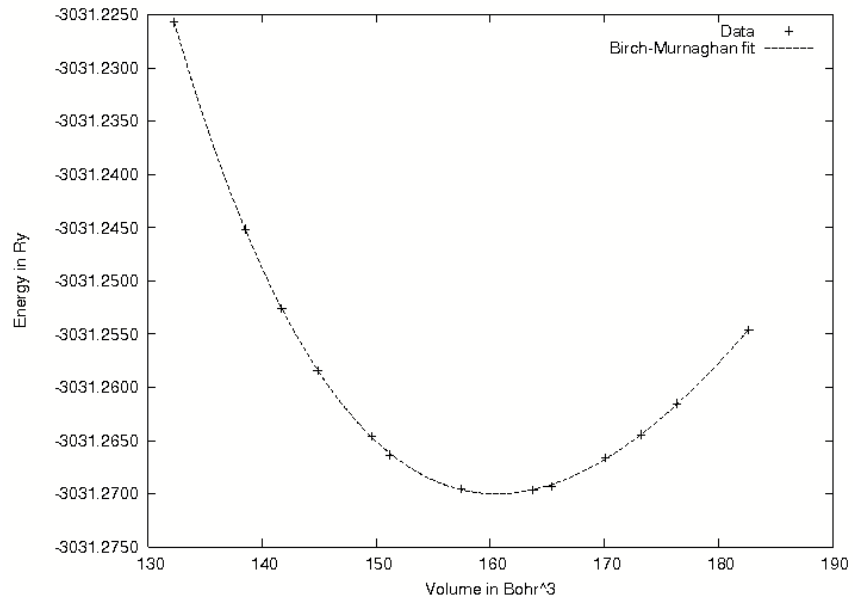


Elde edilen

Şekil 3.24 FeAl için band grafiği



Orjinal



Elde edilen

Şekil 3.25 FeAl için enerji-hacim grafiği

Şekil 4.28 deki orijinal hacim grafiğindeki sayısal değer a.u. cinsindedir. Elde ettiğimiz hacim grafiği ise a.u.³ dur. Dolayısıyla basit FeAl alaşımı için elde edilen değer (a.u.³)^{1/3} alındığında orijinal veriye eşit yaklaşık bir sonuç elde edilir. Buna göre;

$$(a.u.^3)^{1/3} = (157)^{1/3}$$

$$a.u. = 5.3946$$

$$5.3946 \approx 5.40 \quad \text{olarak kabul edilebilir.}$$

3.4. Supercell Fe₂Al₂ Yapısı

Supercell Fe₂Al₂ yapısına ait temel bilgiler;

Maddenin adı : Fe₂Al₂

Örgü tipi :P(Basit Kübik Örgü)

a=b : 2.7196 Å =5.13935 au

c :6.3095 Å=11.93328 au

$\alpha = \beta = \gamma$:90°

Atom 1 :Fe pozisyonu (0, 0, 0) ve RMT=1.85

Atom 2 :Fe pozisyonu (0, 0, 0.5) ve RMT =1.85

Atom 3 :Al pozisyonu (0.5, 0.5, 0.25) ve RMT=1.64

Atom 4 :Al pozisyonu (0.5, 0.5, 0.75) ve RMT=1.64

Örgüyü supercell yapmak için Bölüm 2.4.6 daki yol izlenir ve bu bilgilerden yararlanılarak “Fe₂Al₂.struct” yapı dosyası oluşturulur

```

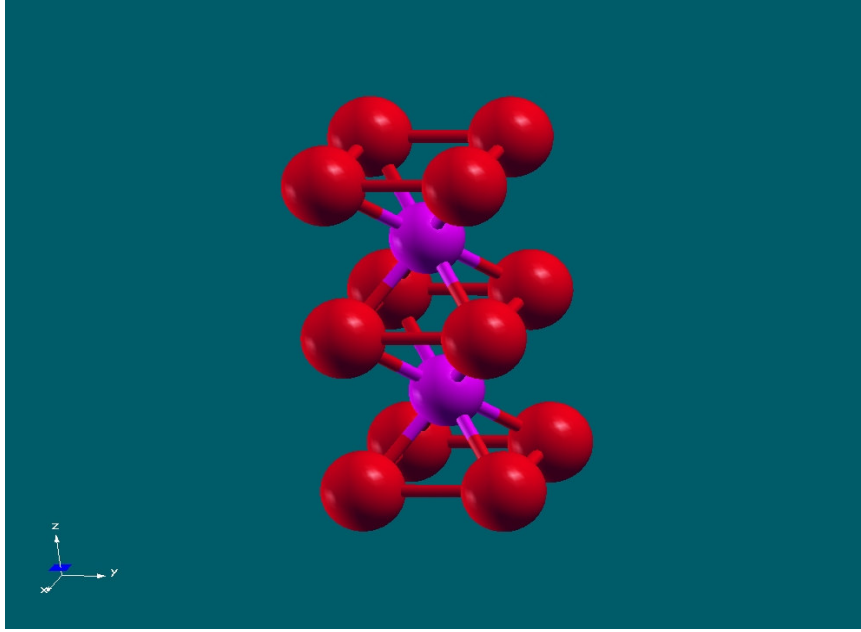
.....Fe2Al2.....
P LATTICE,NONEQUIV. ATOMS 4
MODE OF CALC=RELA unit=ang
5.13935 5.13935 11.92328 90.00000 90.00000 90.00000
ATOM -1: X=0.00000000 Y=0.00000000 Z=0.00000000
MULT= 1 ISPLIT=-2
Fe1 NPT= 781 R0=0.00005000 RMT= 1.85 Z: 26.0
LOCAL ROT MATRIX: 1.0000000 0.0000000 0.0000000
0.0000000 1.0000000 0.0000000

```

```

0.0000000 0.0000000 1.0000000
ATOM -2: X=0.0000000 Y=0.0000000 Z=0.5000000
MULT= 1 ISPLIT=-2
Fe2 NPT= 781 R0=0.00005000 RMT= 1.85 Z: 26.0
LOCAL ROT MATRIX: 1.0000000 0.0000000 0.0000000
0.0000000 1.0000000 0.0000000
0.0000000 0.0000000 1.0000000
ATOM -3: X=0.5000000 Y=0.5000000 Z=0.2500000
MULT= 1 ISPLIT=-2
Al1 NPT= 781 R0=0.00010000 RMT= 1.64 Z: 13.0
LOCAL ROT MATRIX: 1.0000000 0.0000000 0.0000000
0.0000000 1.0000000 0.0000000
0.0000000 0.0000000 1.0000000
ATOM -4: X=0.5000000 Y=0.5000000 Z=0.7500000
MULT= 1 ISPLIT=-2
Al2 NPT= 781 R0=0.00010000 RMT= 1.64 Z: 13.0
LOCAL ROT MATRIX: 1.0000000 0.0000000 0.0000000
0.0000000 1.0000000 0.0000000
0.0000000 0.0000000 1.0000000
8 NUMBER OF SYMMETRY OPERATIONS
-1 0 0 0.00000000
0-1 0 0.00000000
0 0 1 0.00000000
1
-1 0 0 0.00000000
0 1 0 0.00000000
0 0 1 0.00000000
2
0-1 0 0.00000000
-1 0 0 0.00000000
0 0 1 0.00000000
.
.
.
1 0 0 0.00000000
0 1 0 0.00000000
0 0 1 0.00000000
8
.....

```



Şekil 3.26 Supercell Fe_2Al_2 yapısı

Daha sonra “`intsngen_lapw`” komutuyla “`Fe2Al2.inst`” dosyası otomatik oluşur. Bundan sonra bölüm.2’de tanımlanan program akışına göre işleme devam edilir.

Diğerlerinde olduğu gibi “`x lstart`” komutunun çalışması esnasında 13 GGA ve kesme enerjisi -6.0 Ry alındı [24] ve kgen, 1000 k noktası alınır.

```

.....SupercellFeAl.in1.....
WFFIL (WFPRI, SUPWF)
7.00 10 4 (R-MT*K-MAX; MAX L IN WF, V-NMT)
0.30 4 0 (GLOBAL E-PARAMETER WITH n OTHER CHOICES, global APW/LAPW)
1 0.30 0.000 CONT 0
1 -3.97 0.005 STOP 0
2 0.30 0.010 CONT 0
0 0.30 0.000 CONT 0
0.30 4 0 (GLOBAL E-PARAMETER WITH n OTHER CHOICES, global APW/LAPW)
1 0.30 0.000 CONT 0
1 -3.97 0.005 STOP 0
2 0.30 0.010 CONT 0
0 0.30 0.000 CONT 0
0.30 3 0 (GLOBAL E-PARAMETER WITH n OTHER CHOICES, global APW/LAPW)
1 0.30 0.000 CONT 0

```

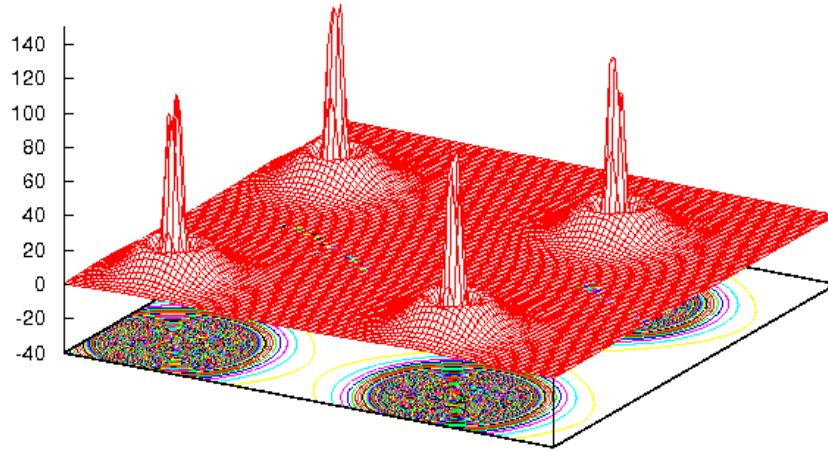
```

1 -4.80 0.005 STOP 0
0 0.30 0.000 CONT 0
0.30 3 0 (GLOBAL E-PARAMETER WITH n OTHER CHOICES, global APW/LAPW)
1 0.30 0.000 CONT 0
1 -4.80 0.005 STOP 0
0 0.30 0.000 CONT 0
K-VECTORS FROM UNIT:4 -9.0 2.5 emin/emax window

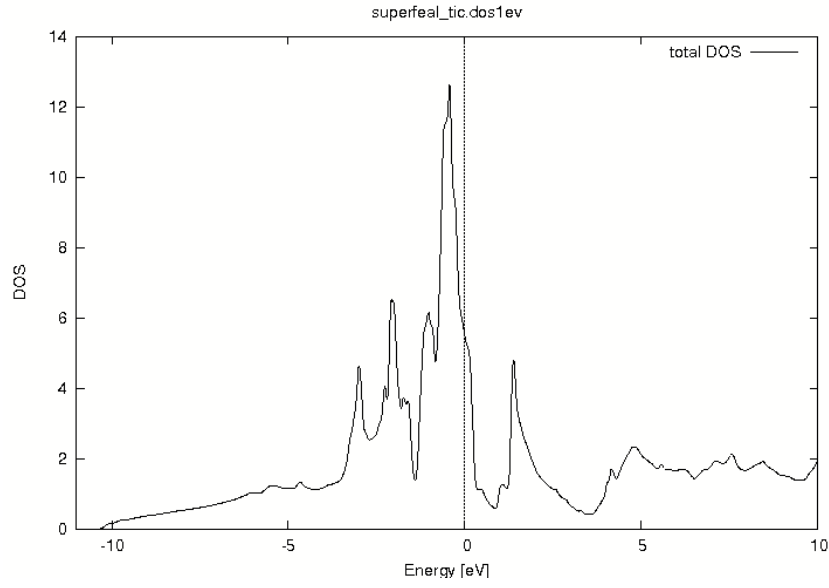
```

.....

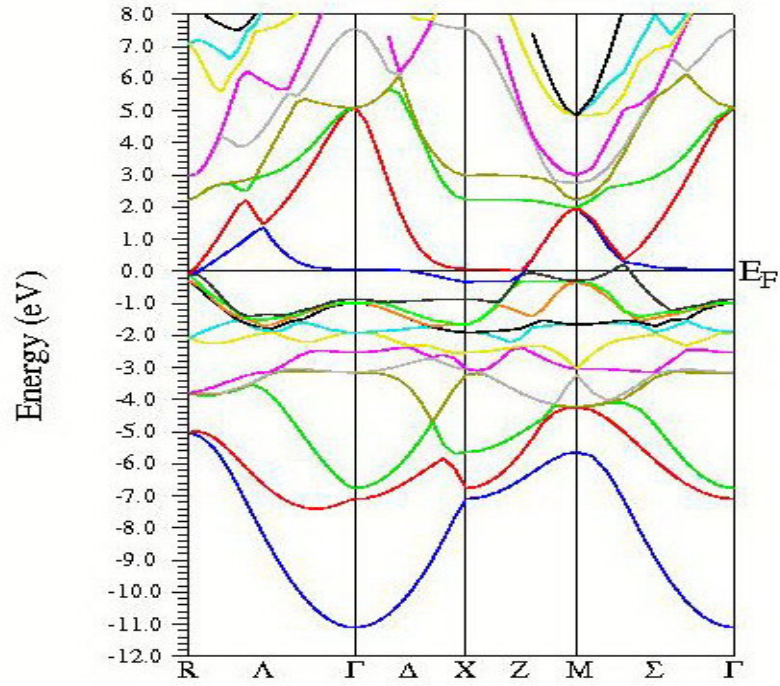
Bu hesaplamalardan sonra durum yoğunluğu(dos), band yapısı ve hacim grafikleri çizildi ve elde edilen sonuçlar verildi.



Şekil 3.27 Supercell Fe_2Al_2 için elektron yoğunluğu grafiği



Şekil 3.28 Supercell Fe_2Al_2 için toplam DOS grafiği



Şekil 3.29 Supercell Fe_2Al_2 için band grafiği

3.5. 8 atomlu bcc Fe₄Al₄ Yapısı

Burada önemli olan basit Fe₄Al₄ yapı dosyasının oluşturulmasıdır. Fe₄Al₄ yapısına ait temel bilgiler:

Maddenin adı	:bcc Fe ₄ Al ₄
Örgü tipi	:B
a=b=c	:5.7151 Å =10.80 au
$\alpha = \beta = \gamma$:90°
Atom 1	:Fe pozisyonu (0, 0, 0) ve RMT=1.85
Atom 2	:Al pozisyonu (0.25, 0.25, 0.25) ve RMT =1.64
Atom 3	:Fe pozisyonu (0.5, 0, 0) ve RMT =1.85

Bu bilgilerden yararlanılarak “Fe₄Al₄.struct” yapı dosyası oluşturulur.

```

..... Fe4Al4.struct.....
B LATTICE,NONEQUIV.ATOMS: 3229_Im-3m
MODE OF CALC=RELA unit=bohr
10.800000 10.800000 10.800000 90.000000 90.000000 90.000000
ATOM 1: X=0.00000000 Y=0.00000000 Z=0.00000000
MULT= 1 ISPLIT= 2
Fe1 NPT= 781 R0=0.00010000 RMT= 1.85 Z: 26.0
LOCAL ROT MATRIX: 1.0000000 0.0000000 0.0000000
0.0000000 1.0000000 0.0000000
0.0000000 0.0000000 1.0000000
ATOM -2: X=0.25000000 Y=0.25000000 Z=0.25000000
MULT= 4 ISPLIT= 4
-2: X=0.75000000 Y=0.25000000 Z=0.25000000
-2: X=0.75000000 Y=0.75000000 Z=0.25000000
-2: X=0.25000000 Y=0.75000000 Z=0.25000000
Al1 NPT= 781 R0=0.00010000 RMT= 1.64 Z: 13.0
LOCAL ROT MATRIX: 0.4082483-0.7071068 0.5773503
0.4082483 0.7071068 0.5773503
-0.8164966 0.0000000 0.5773503
ATOM -3: X=0.50000000 Y=0.00000000 Z=0.00000000
MULT= 3 ISPLIT=-2

```

-3: X=0.00000000 Y=0.50000000 Z=0.00000000

-3: X=0.00000000 Y=0.00000000 Z=0.50000000

Fe2 NPT= 781 R0=0.00010000 RMT= 1.85 Z: 26.0

LOCAL ROT MATRIX: 0.0000000 0.0000000 1.0000000

0.0000000 1.0000000 0.0000000

-1.0000000 0.0000000 0.0000000

48 NUMBER OF SYMMETRY OPERATIONS

1 0 0 0.00000000

0-1 0 0.00000000

0 0-1 0.00000000

1

0-1 0 0.00000000

1 0 0 0.00000000

0 0-1 0.00000000

2

1 0 0 0.00000000

0 0-1 0.00000000

0-1 0 0.00000000

.

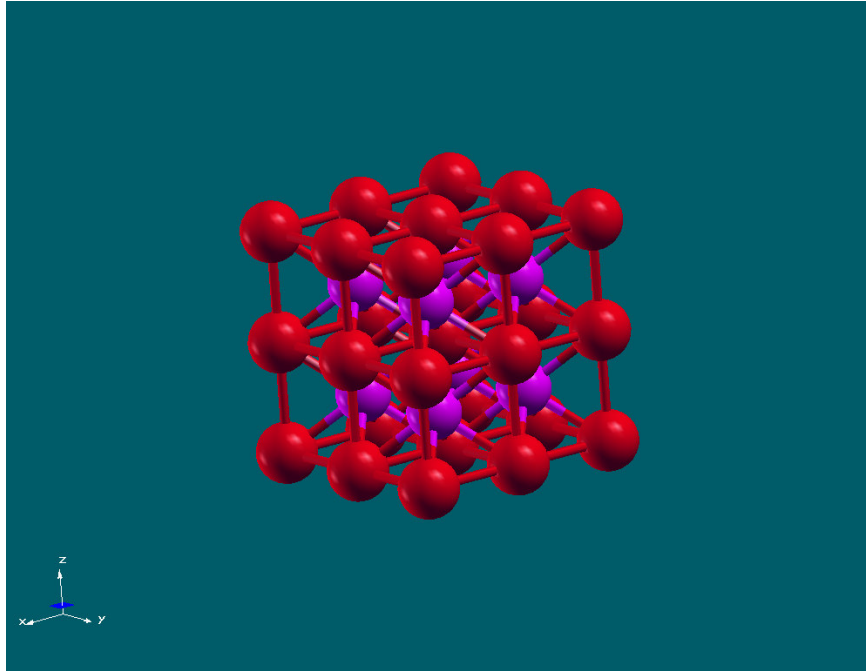
.

-1 0 0 0.00000000

0 1 0 0.00000000

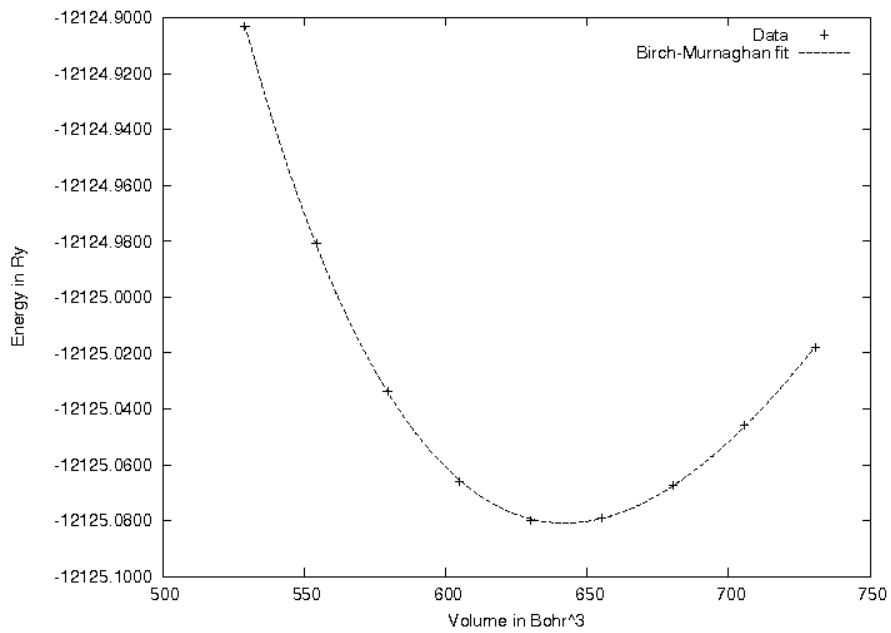
0 0 1 0.00000000

48



Şekil 3.30 8 Atomlu bcc Fe_4Al_4 yapısı

Daha sonra “intsgen_lapw” komutuyla “ Fe_4Al_4 .inst” dosyası otomatik oluşur. Bundan sonra bölüm.2’de tanımlanan program akışına göre işleme devam edilir.



Şekil 3.31 bcc Fe_4Al_4 için hacim grafiği

4. Fe %30 Al ALAŞIMININ WIEN2K PROGRAMI İLE İNCELENMESİ

Burada önemli olan Fe₃Al yapı dosyasının oluşturulmasıdır. Fe₃Al yapısına ait temel bilgiler:

Maddenin adı	:Fe ₃ Al
Örgü tipi	:P(Basit Kübik Örgü)
a=b	:2.719 Å = 5.13935 au
c	:6.3095 Å = 11.0439 au
$\alpha = \beta = \gamma$:90°
Atom 1	:Fe pozisyonu (0, 0, 0) ve RMT=1.74
Atom 2	:Fe pozisyonu (0, 0, 0.5) ve RMT =1.74
Atom 3	:Fe pozisyonu (0.5, 0.5, 0.25) ve RMT=1.74
Atom 4	:Al pozisyonu (0.5, 0.5, 0.75) ve RMT=1.64

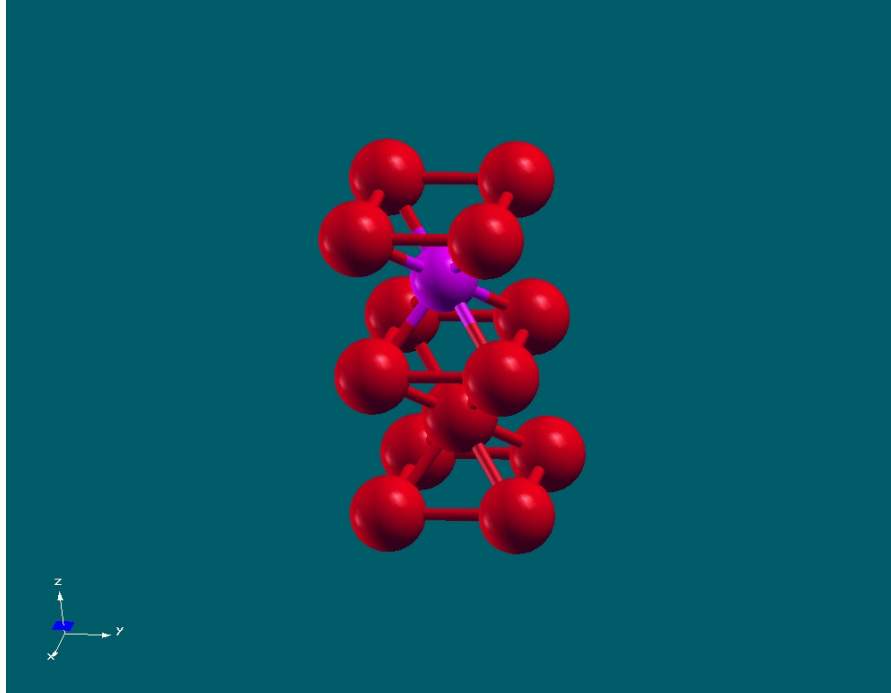
Bu bilgilerden yararlanılarak “Fe₃Al.struct” yapı dosyası oluşturulur.

```

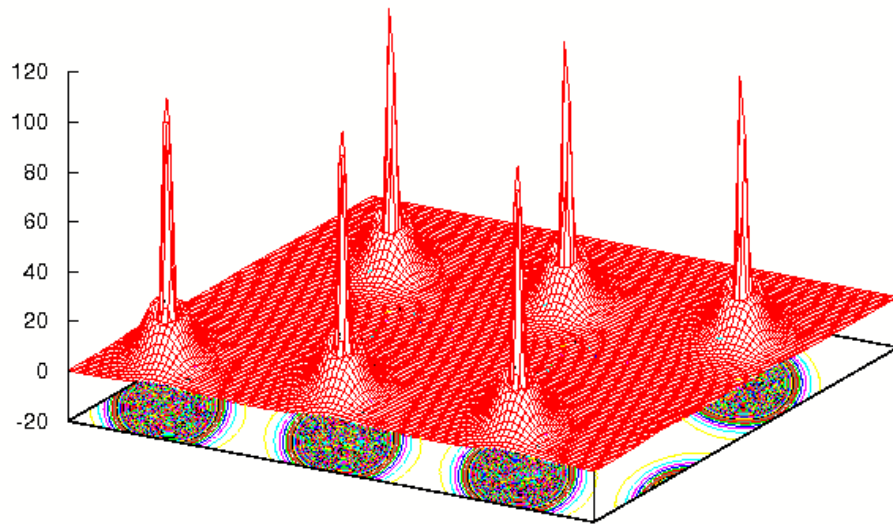
..... Fe3Al.struct.....
Fe3Al
P LATTICE,NONEQUIV. ATOMS 4
MODE OF CALC=RELA unit=ang
  5.13935  5.13935 11.92328  90.00000  90.00000  90.00000
ATOM -1: X=0.00000000 Y=0.00000000 Z=0.00000000
      MULT= 1      ISPLIT=-2
Fe1   NPT= 781 R0=0.00005000 RMT=  1.74   Z: 26.0
LOCAL ROT MATRIX:  1.0000000  0.0000000  0.0000000
                   0.0000000  1.0000000  0.0000000
                   0.0000000  0.0000000  1.0000000
ATOM -2: X=0.00000000 Y=0.00000000 Z=0.50000000
      MULT= 1      ISPLIT=-2
Fe2   NPT= 781 R0=0.00005000 RMT=  1.74   Z: 26.0
LOCAL ROT MATRIX:  1.0000000  0.0000000  0.0000000
                   0.0000000  1.0000000  0.0000000
                   0.0000000  0.0000000  1.0000000

```

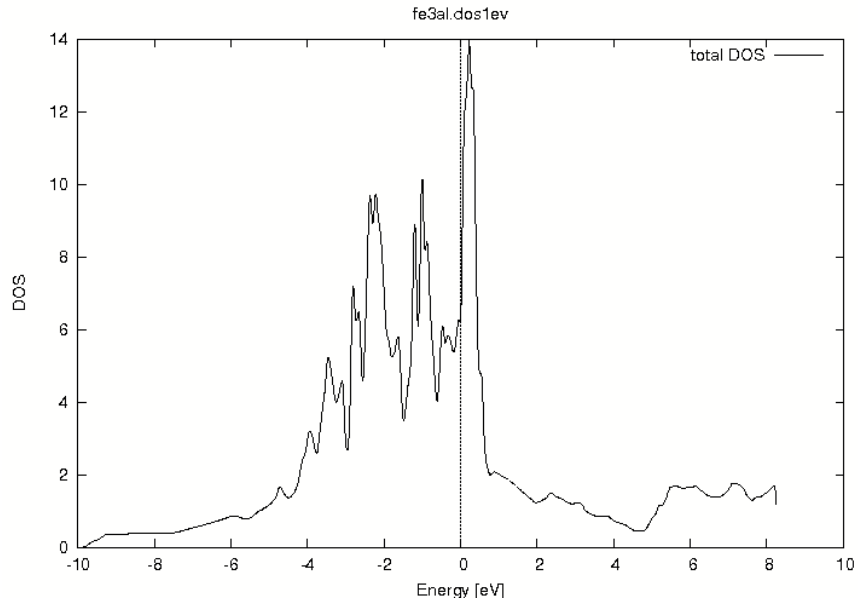
ATOM -3: X=0.50000000 Y=0.50000000 Z=0.25000000
MULT= 1 ISPLIT=-2
Fe3 NPT= 781 R0=0.00010000 RMT= 1.74 Z: 26.0
LOCAL ROT MATRIX: 1.0000000 0.0000000 0.0000000
0.0000000 1.0000000 0.0000000
0.0000000 0.0000000 1.0000000
ATOM -4: X=0.50000000 Y=0.50000000 Z=0.75000000
MULT= 1 ISPLIT=-2
Al1 NPT= 781 R0=0.00010000 RMT= 1.64 Z: 13.0
LOCAL ROT MATRIX: 1.0000000 0.0000000 0.0000000
0.0000000 1.0000000 0.0000000
0.0000000 0.0000000 1.0000000
8 NUMBER OF SYMMETRY OPERATIONS
-1 0 0 0.00000000
0 -1 0 0.00000000
0 0 1 0.00000000
1
-1 0 0 0.00000000
0 1 0 0.00000000
0 0 1 0.00000000
.
.
.
1 0 0 0.00000000
0 1 0 0.00000000
0 0 1 0.00000000
8



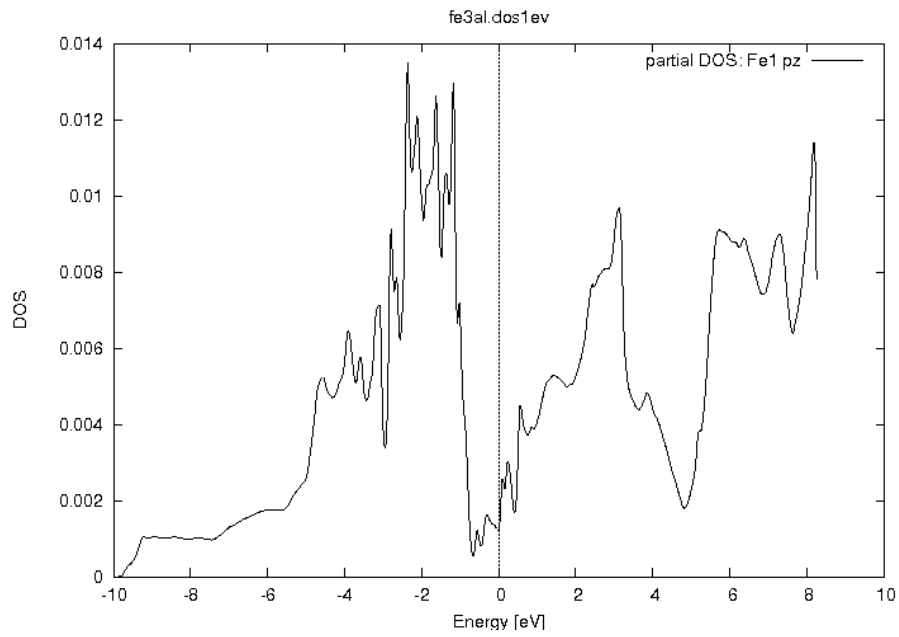
Şekil 4.1 Fe₃Al yapısı



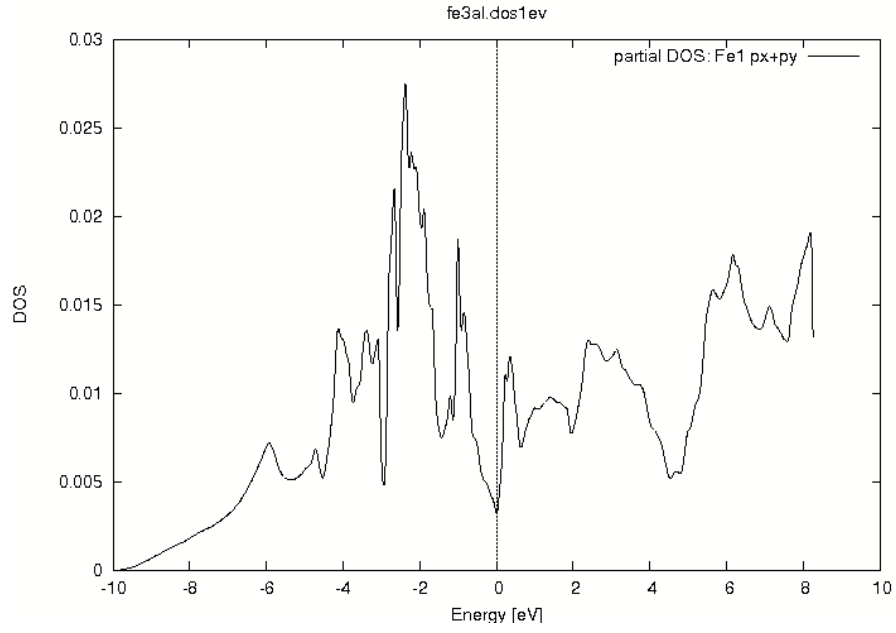
Şekil 4.2 Fe₃Al için elektron yoğunluğu grafiği



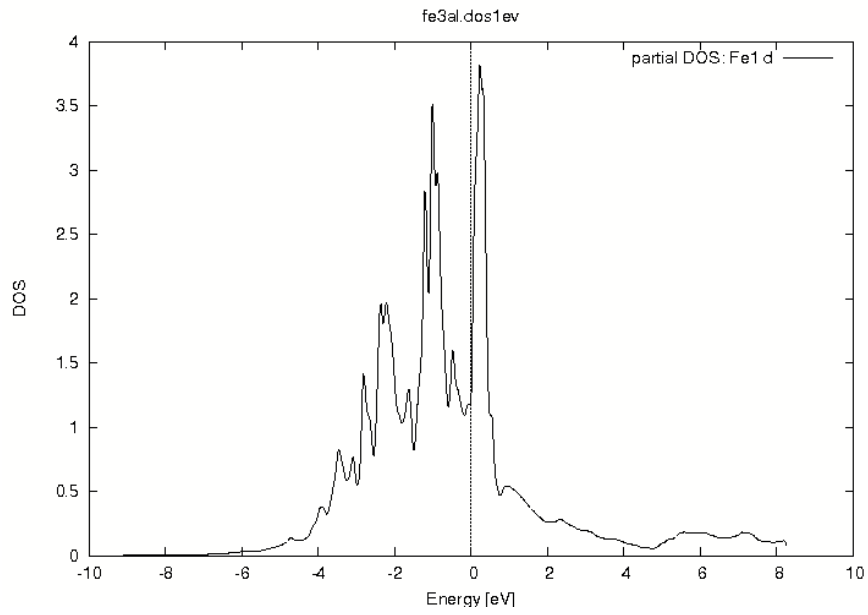
Şekil 4.3 Fe₃Al için toplam DOS grafiği



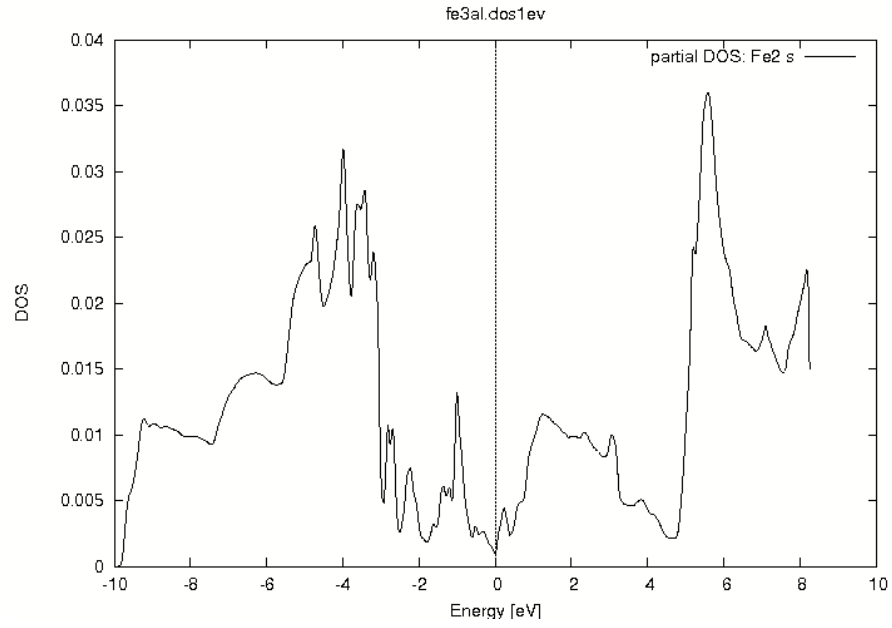
Şekil 4.4 Fe₃Al için partial DOS: Fe1 pz grafiği



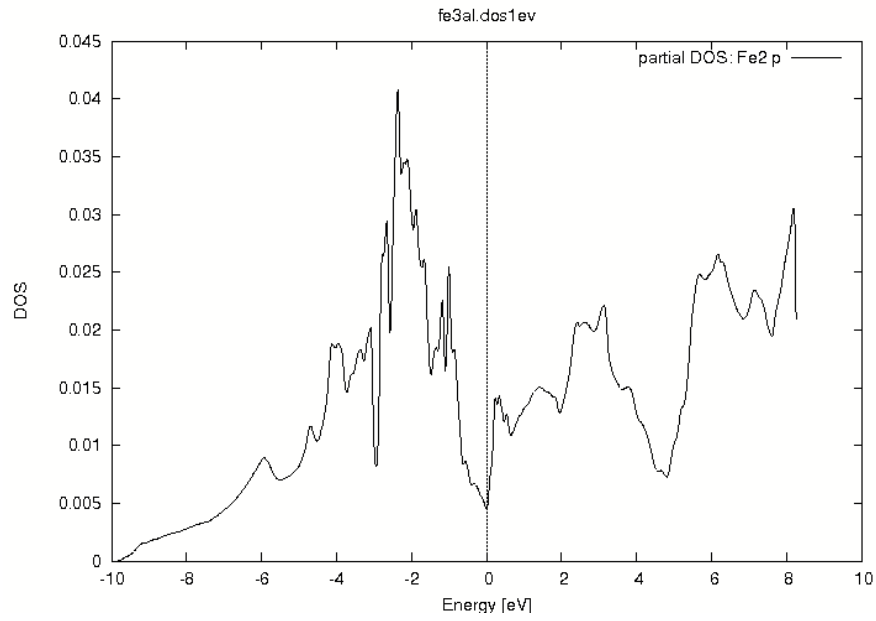
Şekil 4.5 Fe_3Al için partial DOS: Fe1 px+py grafiği



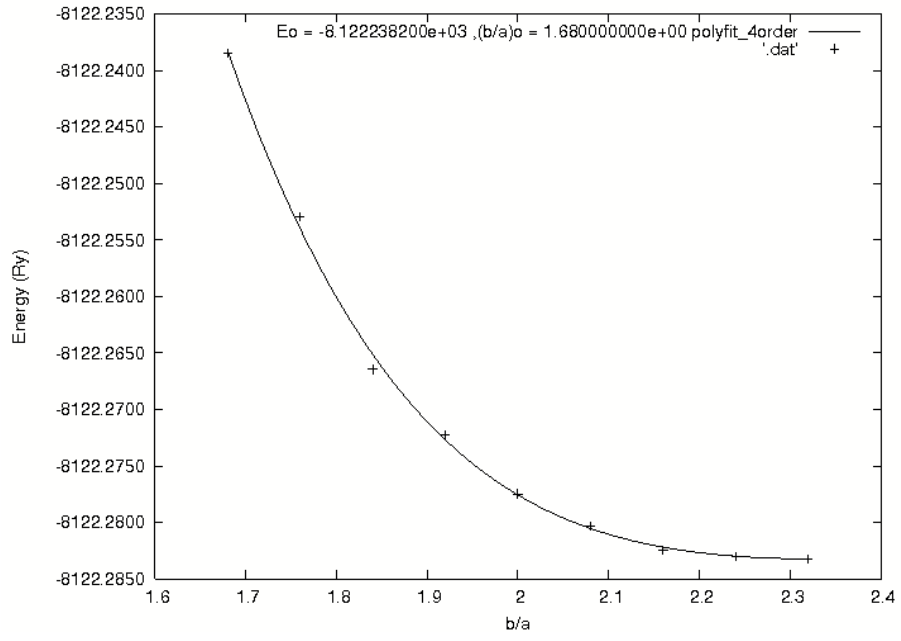
Şekil 4.6 Fe_3Al için partial DOS: Fe1 d grafiği



Şekil 4.7 Fe₃Al için partial DOS: Fe2 s grafiği



Şekil 4.8 Fe₃Al için partial DOS: Fe2 p grafiği



Şekil 4.9 Fe₃Al için enerji- hacim grafiği

5. SONUÇ

Bu çalışmada öncelikle TİC ve Fe için elektron yoğunluğu, durum yoğunluğu, band yapısı ve kararlılık durumları ayrı ayrı çalışılarak literatürdeki sonuçlarıyla test edilmek suretiyle, programın doğru kullanıldığı anlaşılmıştır.

FeAl ve supercell Fe₂Al₂ alaşımlarının örgü parametreleri kullanılarak her iki yapı ayrı ayrı yapıldı. Bu yapılara ait elektron yoğunluğu, band yapısı, durum yoğunluğu ve kararlılık durumları hesaplandı. Çalışmaların sonuçları basit FeAl yapı için şekil 3.20-3.25, supercell Fe₂Al₂ için şekil 3.26-3.29, 8 atomlu bcc Fe₄Al₄ yapısı için de 3.30-3.31; ve Fe₃Al yapıya ait sonuçlar da şekil 4.1-4.9' da verildi.

FeAl, supercell Fe₂Al₂ ve Fe₃Al kristal için de ilk olarak elektron yoğunlukları incelendi (şekil 3.21, 3.27, 4.2). Bu grafikler valans elektronlarının dağılımını göstermektedir. Grafiklerdeki koniler elektronların yoğun olduğu bölgeyi, koni uçları arasındaki yüzey ise atomlar arasındaki elektron yoğunluğunun bir göstergesidir. Bu yüzeydeki elektronlar iletim elektronları olarak da bilinmektedir. Supercell Fe₂Al₂ kristal yapıda iletim elektron yoğunluğunun basit FeAl yapıya oranla küçük de olsa daha yoğun olduğu görülmektedir.

Durum yoğunluğu (DOS) grafiklerde (3.22, 3.28, 4.3); kesikli doğru ile Fermi enerji düzeyi gösterilmektedir. Her pikin maksimum değeri ile minimum değeri arasındaki enerji “k_BT” ye eşittir. Bu grafiklerden valans elektronlarının dağılımını ve iletme olan katkılarını anlarız. İletime en büyük katkı 3d orbitallerinden gelir. Bu üç farklı kristal yapının elde edilen grafikleri incelendiğinde görülecektir ki; Fermi enerji değeri basit yapıda çok farklıdır. Ayrıca basit FeAl yapıda maksimum ve minimum pik aralığı daha küçük olduğundan “k_BT” enerjisi daha düşüktür. Bu enerjinin en büyük değerinin supercell Fe₂Al₂ yapıda olduğu görülmektedir. Enerji aralıklarının hemen hemen aynı olup, farklı enerji seviyesinde olmaları da atomik dağılımın farklılığına ve örgü yapısına bağlı olduğu şeklinde açıklanır.

Enerji band yapılarında ise, (3.24, 3.29), basit yapılarda Fermi enerji düzeyinde enerji bandlarının çok yoğunlaşmaması yasak enerji aralığının küçük de olsa var olduğunu, buna karşılık supercell yapıda enerji bandlarının Fermi düzeyinde çok yoğunlaşmış olduğu görülmektedir. Buna bağlı olarak da supercell örgünün yasak bölge enerji aralığı yoktur, denilebilir. Yani iletim elektronlarının baskınlığı söz konusudur. Bu band yapılarında Γ ’dan başlayarak yukarı çıktığında ilk band s olup, parabol şeklindedir. Sonraki band ise d olup, düzleşen eğriler küçülerek daralır ki enerjileri de çok küçüktür. Bunun nedeni ise d bandındaki elektronların kuvvetli etkileşimleridir. Bu d bandları Fermi enerji seviyesinde

yoğunlaşırlar. Bu grafiklerden basit yapıların iletkenliğinin çok düşük olduğu da anlaşılmaktadır. Çünkü E_F düzeyinde boşluk daha büyüktür. Ayrıca bu band yapılarındaki parabolik bandlar DOS grafiklerindeki küçük pikleri (s orbitali), düzleşen bandlar ise yüksek pikleri(d orbitali), göstermektedir.

Bütün yapılara ait enerji-hacim grafikleri de ayrı ayrı incelendi (3.19, 3.25, 3.31, 4.9). Enerjinin minimum olduğu nokta kristalin denge, diğer bir ifadeyle kararlılık noktasıdır. Bu minimum nokta incelendiğinde FeAl alaşımının basit ve supercell yapılarının denge noktasının farklı enerji ve hacimde olduğu görülmektedir. Yapılara ait bazı deneysel sonuçlar çizelge 5.1 de verilmiştir.

Çizelge 5.1 İncelenen Fe-Al sistemlerine ait elde edilen parametreler

Kristal yapı	Deneysel a_0 (au)	Hesaplanan a_0 (au)	C_{11} (au)	C_{12} (au)	C_{44} (au)	B (au)
TiC	8.442749	8.4034	0.019482	0.007679	0.007575	0.011613
bcc Fe	5.4169	4.29	-0.034052	0.035797	-0.012400	0.012514
FeAl Basit Kübik	5.40	5.39	0.024163	0.008622	0.007420	0.013802
Fe ₂ Al ₂ Supercell	5.13935	-----	-----	-----	-----	-----
bcc Fe ₄ Al ₄	5.7151	6.8035	0.022003	0.009956	0.014050	0.013972
Fe ₃ Al Basit Kübik	5.13935	-----	-----	-----	-----	-----

KAYNAKLAR DİZİNİ

- [1] Milstein F., Physical Rev. B. 2, 512 (1970).
- [2] Milstein F., Physical Rev. B. 3, 1130 (1971).
- [3] Singh G., Phys. Stat. Sol 161, 145 (1990).
- [4] Najafabadi R. And G. Kalonji; Acta. Met. 36., 917 (1988).
- [5] Drechsles M. and Nicholas J. F., J. Phys. Chem. Solids, 28, 2597, (1967).
- [6] Jhonson R.A., Physical Rev. 133, 1329 (1964).
- [7] Doyama M. and Cotterill R. M. J., Physical Rev. 145, 145 (1966).
- [8] Yaşa, F., 1996, Rasgele Değişen Bazı Fiziksel Olayların 3 Boyutlu Monte Carlo Yöntemi İle Modellenmesi, Kahramanmaraş Sütçü İmam Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, 86 s.
- [9] Blaha, P., Schwarz, K., Madsen, G., Kvasnicka, D., Luitz, J., 2001, Wien2k An Augmented PlaneWave Plus Local Orbitals Program for Calculating Crystal Properties Vienna University of Technology Inst. of Physical and Theoretical Chemistry, 197 s.
- [10] Masaoki Oku, Naoya Masahashi, Shuji Honada, Kazuaki Wagatsum, Journal of Alloy and Compounds 413(2006) 239-243.
- [11] Joo Yull Rhee, Current Applied Physics 6 (2006)852-855.
- [12] Rablo G. Gonzales-Ormano and Helena M. Petrilli, Claudio G. Schön, Pergaman 26 573-582;(2002).
- [13] Leamy H. J. “et al”., Acta Met. 15, 1827 (1967).
- [14] Kittel C., “Introduction to Solid State Physics”, J. Wiley and Sons, Newyork 1968.
- [15] Prakash U., “et al” ISIJ Review, 31,1113 (1991).
- [16] Taylor A. and Jones R. M., J. Phys. Chem. Solids 6,16, (1958).
- [17] Rudman P.S., Acta Met. 8,321 (1960).
- [18] Leamy H. J.; Acta Met. 15,1839 (1967).
- [19] D. Fuks, A. Strutz, A. Kiv, Intermetalics 14 (2006) 1245-1251.
- [20] A. Kellou, T. Grosdidier, H. Aurog, Intermetallies 14(2006) 142-148.
- [21] Madelung, D., 1978, Introduction to Solid State Theory, New York.
- [22] Hohenberg, P., and Kohn, W., 1964 Phys. Rev. 136, p 13864

KAYNAKLAR DİZİNİ (devam)

- [23] Singh, D. J., 1994, Planewaves, Pseudopotentials and the LAPW Method, Kluwer, Dordrecht.
- [24] Perdew, J. P., Burke, S. and Ernzerhof, M., 1996, Phys. Rev. Let. 77, 3865 p.
- [25] Kittel., C., 1996, Katihal Fiziğine Giriş, (Çev: B. Karaoğlu), İstanbul.
- [26] Schwarz, K., 2003, DFT and the Concepts of the APW+lo method, 9 Th Wien2k Workshop, Vienna Univ. of Technology, Austria.
- [27] Ibach, H. and Lüth, H., 1990, Solid State Physics, An Introduction to Theory and Experiment, Springer – Verlag.
- [28] Alonso, J., and March, N. H., 1989, Electrons in Metals and Alloys, Academic Press, London.
- [29] Chelikowsky, J. R. and Cohen, M. L., 1976, Phys. Rev. B 14, 556 p
- [30] Chelikowsky, J., Chadi, D. J., and Cohen, M. L., 1973, Phys. Rev. B 8, 2786 p.
- [31] Wallace and Duane. C., 1972, Thermodynamics of Crystals, New York, Wiley.
- [32] Onaran K., 1991, Malzeme Bilimi, İstanbul.
- [33] Dikici M., 1993, Kristallerin Esneklik Özellikleri, Ondokuz Mayıs Üni. Yayınları, s.72.
- [34] Duane C. Wallace, 1998, Thermodynamics of Crystals, New York.
- [35] Schwarz, K. and Blaha, P., 2003, Computational Materials Science 28, 259 p.
- [36] Liberman, D., Weber, J. T., and Cromer, D. T., 1965, Phys. Rev. 137A, 27 p.
- [37] Perdew, J. P. and Wang, Y., 1992, Phys. Rev. B 45, 13244 p.
- [38] Perdew, J.P., Chevary, J.A., Vosko, S.H., and Fiolhais, C., 1992, Phys. Rev. B 46, 6671 p.
- [39] Schwarz, K., 2003, DFT and the Concepts of the APW+lo method, 9 Th Wien2k Workshop, Vienna Univ. of Technology, Austria.
- [40] Blaha, P., Schwarz, K., Madsen, G., Kvasnicka D. and Luitz, J., 2001, WIEN2k: An Augmented Wave Plus Local Orbitals Program for Calculating Crystal Properties, Vienna University of Technology, Austria.
- [41] Koelling, D. D. and Arberman, G. D., 1975, J. Phys. F 5, 2041 p.
- [42] A. Kokalj J. Mol Graphics Modelung 1999 Vol 17 176-179.
- [43] B. I. Min , T. Oguchi , H. J. F. Jensen , and A. J. Freeman , J. Magn. Magn Mater 54-57 , 1091 (1986).