

Fe-%5 Al ALAŞIMININ
WIEN2k İLE İNCELENMESİ

Mehmet TORTOP

Yüksek Lisans Tezi

Fizik Anabilim Dalı

Haziran - 2008

**Fe-%5 Al ALAŞIMININ
WIEN2k İLE İNCELENMESİ**

Mehmet TORTOP

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

Danışman : Yrd. Doç. Dr. Ercan UÇGUN

Haziran - 2008

KABUL VE ONAY SAYFASI

Mehmet TORTOP'un YÜKSEK LİSANS tezi olarak hazırladığı "Fe-%5 Al Alaşımının WIEN2k ile İncelenmesi" başlıklı bu çalışma, jürimizce lisans yönetmeliğinin ilgili maddeleri uyarınca değerlendirilerek kabul edilmiştir.

/ /

Üye : Yrd. Doç. Dr. Ercan UÇGUN (Danışman)

Üye : Yrd. Doç. H. Yaşar OCAK

Üye : Yrd. Doç. Dr. Ömer ÖZBAŞ

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

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

Fe-%5 Al ALAŞIMININ WIEN2k İLE İNCELENMESİ

Mehmet TORTOP

Fizik Bölümü, Yüksek Lisans Tezi, 2008

Tez Danışmanı: Yrd.Doç.Dr. Ercan UÇGUN

ÖZET

FeAl, Fe₂Al₂, Fe₄Al₄, ve Fe₁₅Al₁ 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, Fe₁₅Al₁ alaşımlarında supercell kristal yapı için ayrı ayrı hesaplandı. Sonuçlar kendi içerisinde mukayeseli olarak karşılaştırılıp yorumlandı.

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

**EXAMINING OF Fe-%5 Al ALLOYS
USING WIEN2k PROGRAM**

Mehmet TORTOP

Physics Department, M. S. Thesis, 2008

Thesis Supervisor: Asist. Prof. Ercan UÇGUN

SUMMARY

Structure of energy bands, density of states(DOS), density of electron, stability of alloy and of Fe-Al, Fe₂-Al₂, Fe₄-Al₄ and Fe₁₅-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 Fe₁₅-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. Ercan UÇGUN ve Sayın Yrd. Doç. Dr. H. Yaşar OCAK 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	ix
ÇİZELGELER DİZİNİ	xii
SİMGELER VE KISALTMALAR DİZİNİ	xiii
1. GİRİŞ.....	1
2. KRİSTAL YAPILARIN TEORİSİ.....	4
2.1. Tipik Kristal Yapılar.....	7
2.1.1. Cisim Merkezli Kübik (bcc) Yapı.....	7
2.1.2. Kübik Sıkı Paket (ccp) Yapı [Yüzey Merkezli Kübik Yapı].....	11
2.1.3. Elmas Ve Çinko Sülfür (ZnS) Yapıları.....	12
2.1.4. Sodyum Klarür (NaCl) Yapısı.....	13
2.1.5. Sezyum Kalrür (CsCl) Yapısı	14
3. ENERJİ BANTLARI.....	15
3.1. Yarı Serbest Elektron Modeli	16
3.1.1. Enerji Aralığının Kaynağı.....	18
3.1.2. Enerji Aralığının Büyüklüğü.....	20
3.2. Boş Örgü Yaklaşıklığı.....	22
3.3. Bir Banttaki Yörünge Sayısı	23
3.3.1. Metaller ve Yalıtkanlar	24
4. WIEN2K PROGRAMININ TANITIMI	26
4.1. case.struct ve case.inst Dosyalarının Oluşturulması.....	26
4.2. init_lapw Hesaplamaları.....	30
4.3. case.in1_st Dosyasının Tanıtımı.....	33
4.4. SCF Hesaplamaları	36
4.5. Hesaplama Özellikleri	37
4.5.1. Elektron Yoğunluğu	37
4.5.2. Durum Yoğunluğu.....	38

İÇİNDEKİLER (devam)

	<u>Sayfa</u>
4.5.3. Bant Yapısı.....	40
4.5.4. Bant Karakter Çizimiyle Bant Yapısı.....	42
4.5.5. Hacim Grafiği Çizimi.....	43
4.5.6. Süper Örgünün Oluşturulması.....	43
5. TiC, bcc Fe, FeAl ve SUPERCELL FeAl YAPILARININ WIEN2K PROGRAMI İLE TEST EDİLMESİ.....	46
5.1. TiC İçin Elde Edilen Sonuçların Karşılaştırılması.....	46
5.2. BCC Fe İçin Wien2k Programının Çalıştırılması Sonucunda Elde Edilen Sonuçlar.	57
5.3. Fe-Al İçin Wien2k Programının Çalıştırılması Sonucunda Elde Edilen Sonuçlar ...	64
5.4. Supercell Fe-Al İçin Wien2k Programının Çalıştırılması Sonucunda Elde Edilen Sonuçlar.....	68
5.5. Dört Fe Dört Al Atomundan Oluşan Fe-Al Alaşımı İçin Wien2k Programının Çalıştırılması Sonucunda Elde Edilen Sonuçlar.....	74
6. Fe- %5 Al ALAŞIMININ WIEN2K PROGRAMI İLE İNCELENMESİ.....	82
7. SONUÇ.....	87
KAYNAKLAR DİZİNİ.....	89

ŞEKİLLER DİZİNİ

<u>Sekil</u>	<u>Sayfa</u>
2.1 İki boyutta beş Bravais Örgüsü	4
2.2 Üç Boyutta 14 Bravais Örgüsü	5
2.3 Üç boyutta birim hücre	6
2.4 (a) fcc yapının birim ve ilkel hücresi (b) fcc yapının Wigner Seitz Hücresi	7
2.5 Cisim merkezli kübik yapı (bcc)	8
2.6 Yüzey merkezli kübik yapı (fcc).....	8
2.7 A konumlarını işgal eden bir sıkı-paket küreler katmanı. Bitişik katmanlar B veya C konumlarını işgal eder.....	9
2.8 (a) ABAB sıralaması (b) Altıgen yapının sıkı paket birim hücresi	9
2.9 (a) İlkel Birim hücreli sıkı-paketli altıgen yapı (b) Sıkı paketli altıgen yapının (hcp) ilkel birim hücrelerinin görünüşü. $1/2$, z eksenini boyunca c örgü	10
2.10 Altıgen birim hücre.....	10
2.11 Atomların ABCABC... sıralamasına karşılık gelen sıkı paket katmanı (111) düzleminde. Yüzey merkezli yapı, yüzey merkezli kristal örgüsü ile uyumludur....	11
2.12 Elmas kristal yapısı ve dördü bağ düzeni.....	12
2.13 (Üstten Görünüm) Çinko sülfür yapısının kübik hücresindeki atom konumlarının küpün taban yüzeyi üzerindeki izdüşümleri. Kesirli sayılar her atomun taban düzleminde yüksekliğini, küpün bir kenarı cinsinden gösterir.....	12
2.14 Üç boyutlu NaCl örgüsünün ilkel hücresi	13
2.15 Sezyum klorür kristal yapısı. Uzay örgüsü basit kübik olup hücre bazı 000 da bir Cs^+ iyonu ve $1/2$ $1/2$ $1/2$ da bir Cl^- iyonundan oluşur	14
3.1 Yalıtkan, metal, yarı metal ve yarı iletkenlerde izinli enerji bantlarındaki elektron doluluk şeması.....	15
3.2 (a) Serbest elektronda \mathcal{E} enerjisinin k dalga vektörü ile değişimi. (b) Örgü sabiti a olan tek atomlu doğrusal örgüde elektron enerjisinin dalga vektörü ile değişimi.....	17
3.3 (a) Kristalde hareket eden bir elektron için E ile k arasındaki bağıntı (b) ve karşıt gelen enerji bantları.....	18
3.4 (a) Doğrusal bir örgüdeki iyon merkezlerinin etkisi altındaki bir iletkenlik elektronunun potansiyel enerjisi. (b) $ \psi(-) ^2 \propto \sin^2 \pi x/a$, $ \psi(+) ^2 \propto \cos^2 \pi x/a$ ve ilerleyen bir dalga için örgüdeki ρ olasılık yoğunluğu.....	21
3.5 Dolu yörüngeler ve bant yapısına göre (a) Yalıtkan oluşumu, (b) Bant örtüşmesi nedeni ile metal oluşması, (c) Elektron yoğunluğu nedeni ile metal oluşması.....	24
4.1 Birim hücre içindeki atomik küreler. Atomlar en fazla birbirlerine değebilirler ancak birbirlerinin içine geçmezler.....	28
4.2 Çekirdek, yarı çekirdek ve valans durumları.....	32
4.3 $u_l(r, E_l)$ enerjisi ve DOS'un şematik bağıllığı.....	34

ŞEKİLLER DİZİNİ (devamı)

<u>Sekil</u>	<u>Sayfa</u>
4.4 Fe-Al için (a) Kübik birim hücre (b) $1 \times 1 \times 2$ 'lik süper örgü yapısı (XCRYSDEN ile çizildi).....	44
4.5 Wien2k programının akış şeması	45
5.1 (a) Programın kullanma kılavuzunda yer alan TiC a ait elektron yoğunluğu grafiği (b) Program çalıştırılarak elde edilen TiC için elektron yoğunluğu grafiği.....	48
5.2 (a) Programın kullanma kılavuzunda yer alan TiC a ait toplam DOS grafiği (b) Program çalıştırılarak elde edilen TiC için toplam DOS grafiği.....	49
5.3 (a) Programın kullanma kılavuzunda yer alan TiC'da 1. atoma ait d-DOS grafiği (b) Program çalıştırılarak elde edilen TiC'da 1. atoma ait d-DOS grafiği	50
5.4 (a) Programın kullanma kılavuzunda yer alan TiC'da 2. atoma ait s-DOS grafiği (b) Program çalıştırılarak elde edilen TiC'da 2. atoma ait s-DOS grafiği.....	51
5.5 (a) Programın kullanma kılavuzunda yer alan TiC'da 1. atoma ait eg-DOS grafiği (b) Program çalıştırılarak elde edilen TiC'da 1. atoma ait eg-DOS grafiği.....	52
5.6 (a) Programın kullanma kılavuzunda yer alan TiC'da 2. atoma ait p-DOS grafiği (b) Program çalıştırılarak elde edilen TiC'da 2. atoma ait p-DOS grafiği.....	53
5.7 (a) Programın kullanma kılavuzunda yer alan TiC'da 1. atoma ait d-eg grafiği (b) Program çalıştırılarak elde edilen TiC'da 1. atoma ait d-eg grafiği.....	54
5.8 (a) Wien2k programın kullanma kılavuzunda TiC için verilen bant yapısı grafiği (b) Program w2web arayüzü üzerinden çalıştırılarak elde edilen TiC bant yapısı grafiği.....	55
5.9 (a) Wien2k programının kullanma kılavuzunda TiC için verilen hacim grafiği (b) Program çalıştırılarak elde edilen hacim grafiği.....	56
5.10 (a) bcc Fe toplam DOS grafiği (b) bcc Fe tot-Dos grafiği (c) bcc Fe s-DOS grafiği (d) bcc demir için Fe-p DOS grafiği (e) bcc Fe için Fe-d grafiği (f) bcc Fe için Fe-f grafiği.....	61
5.11 bcc Fe için elde edilen elektron yoğunluğu grafiği.....	62
5.12 bcc Fe için elde edilen hacim grafiği.....	62
5.13 bcc Fe için bant yapısı grafiği	63
5.14 bcc Fe için birim hücre (XCRYSDEN ile çizildi).....	63
5.15 Fe-Al alaşımı için Wien2k programı kullanılarak elde edilen elektron yoğunluğu grafiği.....	65
5.16 Fe-Al alaşımı için Wien2k programı kullanılarak elde edilen toplam DOS grafiği.....	66
5.17 Fe-Al alaşımı için Wien2k programı kullanılarak elde edilen hacim grafiği.....	66
5.18 Fe-Al alaşımının Wien2k programı kullanılarak elde edilen bant yapısı.....	67
5.19 Fe-Al alaşımın XCRYSDEN programı kullanılarak çizdirilen birim hücresi.....	67
5.20 Supercell Fe-Al alaşımının Wien2k programı kullanılarak elde edilen elektron yoğunluğu grafiği.....	70
5.21 Supercell Fe-Al alaşımının Wien2k programı kullanılarak elde edilen total DOS Grafiği.....	70

ŞEKİLLER DİZİNİ (devamı)

<u>Sekil</u>	<u>Sayfa</u>
5.22 Supercell Fe-Al alaşımının Wien2k programı kullanılarak elde edilen DOS Fe1 pz grafiği.....	71
5.23 Supercell Fe-Al alaşımının Wien2k programı ile elde edilen DOS Fe1 px+py grafiği..	71
5.24 Supercell Fe-Al alaşımının Wien2k programı kullanılarak elde edilen DOS Fe1 d grafiği.....	72
5.25 Supercell Fe-Al alaşımının Wien2k programı kullanılarak elde edilen DOS Fe2 s grafiği.....	72
5.26 Supercell Fe-Al alaşımının Wien2k programı ile elde edilen DOS Fe2 p grafiği.....	73
5.27 Supercell Fe-Al alaşımının XCRYSDEN programı ile elde edilen birim hücresi.....	73
5.28 Supercell Fe-Al alaşımının Wien2k programı kullanılarak elde edilen bant yapısı grafiği	74
5.29 Sekiz atomlu bcc Fe-Al alaşımı için Wien2k programı kullanılarak elde edilen elektron yoğunluğu grafiği.....	77
5.30 Sekiz atomlu bcc Fe-Al alaşımı için Wien2k programı kullanılarak elde edilen toplam-Dos grafiği.....	77
5.31 Sekiz atomlu bcc Fe-Al alaşımı için Wien2k programı kullanılarak elde edilen Dos Fe 1 d grafiği.....	78
5.32 Sekiz atomlu bcc Fe-Al alaşımı için Wien2k programı kullanılarak elde edilen Dos Fe 1-eg grafiği.....	78
5.33 Sekiz atomlu bcc Fe-Al alaşımı için Wien2k ile elde edilen Dos Fe 1 d-t2g grafiği.....	79
5.34 Sekiz atomlu bcc Fe-Al alaşımı için Wien2k ile elde edilen Dos Al 1 s grafiği.....	79
5.35 Sekiz atomlu bcc Fe-Al alaşımı için Wien2k ile elde edilen Dos Al 1 p grafiği.....	80
5.36 Sekiz atomlu bcc Fe-Al alaşımı için Wien2k ile elde edilen hacim grafiği.....	80
5.37 Sekiz atomlu bcc Fe-Al alaşımı için Wien2k ile elde edilen bant yapısı grafiği.....	81
5.38 Sekiz atomlu bcc Fe-Al alaşımı XCRYSDEN programı ile çizdirilen birim hücresi....	81
6.1 On altı atomlu bcc Fe-Al alaşımı için Wien2k ile elde edilen Toplam Dos grafiği.....	85
6.2 Onaltı atomlu bcc Fe-Al alaşımı için Wien2k programı ile elde edilen Bant grafiği...	85
6.3 Onaltı atomlu bcc Fe-Al alaşımı XCRYSDEN programı kullanılarak çizdirilen birim hücresi.....	86

ÇİZELGELER DİZİNİ

<u>Çizelge</u>	<u>Sayfa</u>
2.1 Kübik yapılar için genel kullanım.....	6
2.2 Bravais Örgü sisteminin özellikleri.....	6
3.1 Boş örgü yaklaşıklığı.....	23
4.1 Relativistik kuantum sayıları	30
7.1 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	Rydberg
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

1 GİRİŞ

Fe-Al alaşımları hem deneysel olarak hem de teorik olarak çok geniş çalışmalara konu olmaktadır. Bu alaşımlar yüksek sıcaklığa dayanımlı olduklarından, yüksek sıcaklık ile çalışılması gereken ortamlarda sıklıkla kullanılmaktadırlar [1, 2, 3]. Aynı zamanda bu alaşımlar manyetik malzemeler için de önemlidir.

Son zamanlarda katıların elastik, elektriksel ve mekaniksel özelliklerinin yarı deneysel potansiyel enerji fonksiyonları ile incelenmesi bir çok 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 [4, 5, 6, 7] ayrı ayrı incelenmiştir. Bazı araştırmacılar da Mie [8], Johnson [9] ve Born-Mayer [10] 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 [11]. Bundan dolayı biz de bu çalışmada yeni bir çalışma yöntemi olan Wien2k programını tercih ettik [12]. Wien2k programı kullanılarak özgün metal ve alaşımlar için oldukça başarılı sonuçlar elde edilmektedir [13, 14]. Bizim çalışacağımız Fe-Al sistemi üzerinde de deneysel ve teorik birçok çalışma söz konusudur [13, 15].

$Fe_{(1-x)}-Al_{(x)}$ alaşımı üzerine ilk çalışma 1932 yılında Bradley ve Jay [16] 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 [17], 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 [18] 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 [19]'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 B_2 yapı ile DO_3 yapı yavaş yavaş birleşerek tek bir yapıya dönüşüp, sonuçta (DO_3+B_2) ve disorder yapılarının oluştuğunu ifade etmiştir.

Alaşım % 0,0'dan % 18,75 Al oranına ulaşıncaya kadar (Disorder+ DO_3) ve B_2 yapı gözlenir. Alaşım (DO_3+B_2) yapıya ulaşıncaya Al atomları merkezde, Fe atomları da köşelerde 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 [20]. Rudman bu çalışmada her komşuluk etkileşiminin farklı olduğunu ve üçüncü komşuluktan sonraki etkileşimlerinde bir sonraki komşuluğun etkileşimi bir öncekine göre ihmal edilemez [20]. Benzer çalışma yapan H. J. Leamy [21, 16] 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 DO_3 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 [16].

Yapılan çalışmalarda aynı orandaki Al'de yüksek sıcaklıkta örgü sabitinin yüksek, düşük sıcaklıklarda düşük olduğu görülmüştür [19]. 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 [21] tarafından yapılan bir çalışmada;

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

$x = 0,25-0,34$ arasında alaşım DO_3

$x = 0,34-0,5$ arasında alařım B_2

řeklinde gzlendiđi belirtilmiřtir.

Wien2k programı ile Fe-Al alařımları zerinde de birok alıřma yapılmıřtır [22, 23]. Bu anlamda inceleyeceđimiz nemli fiziksel zelliklerden bazıları; elektron yođunluđu, durum yođunluđu (Density of states: DOS), bant yapısı ve enerji-hacim deđiřimidir. Bu zellikler incelenirken ok eřitli modellerden yararlanılmıřtır.

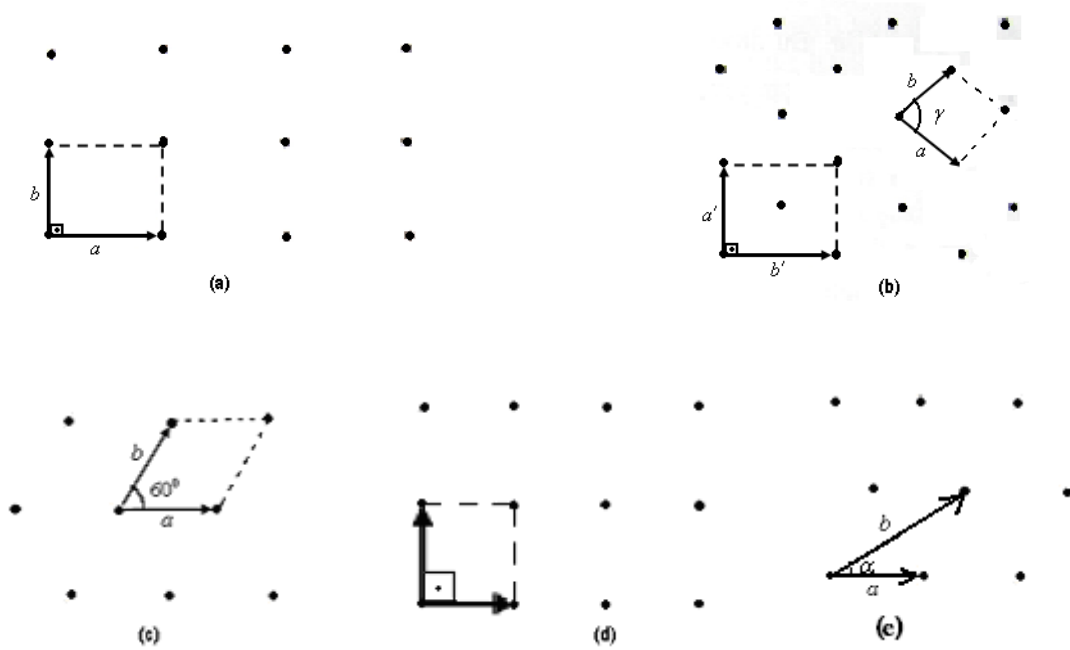
2. KRİSTAL YAPILARIN TEORİSİ

Kristal yapılar uygulanabilir simetri işlemlerine bağlı olarak türlerine göre sınıflandırılırlar. Simetri işlemleri gayet iyi bir şekilde Grup Teori yöntemleriyle incelenebilir.

Örgü, üç boyutta periyodik olarak dizilmiş sonsuz noktalar topluluğudur. Her noktanın çevresi geometrik olarak bakıldığında özdeşdir yani mükemmel öteleme simetrisine sahiptir. Bu sayede örgüdeki bütün noktalar \vec{a} , \vec{b} ve \vec{c} birim vektörleri ile tanımlanabilir.

$$\vec{R} = u\vec{a} + v\vec{b} + w\vec{c} \quad (u, v, w \text{ tam sayılardır})$$

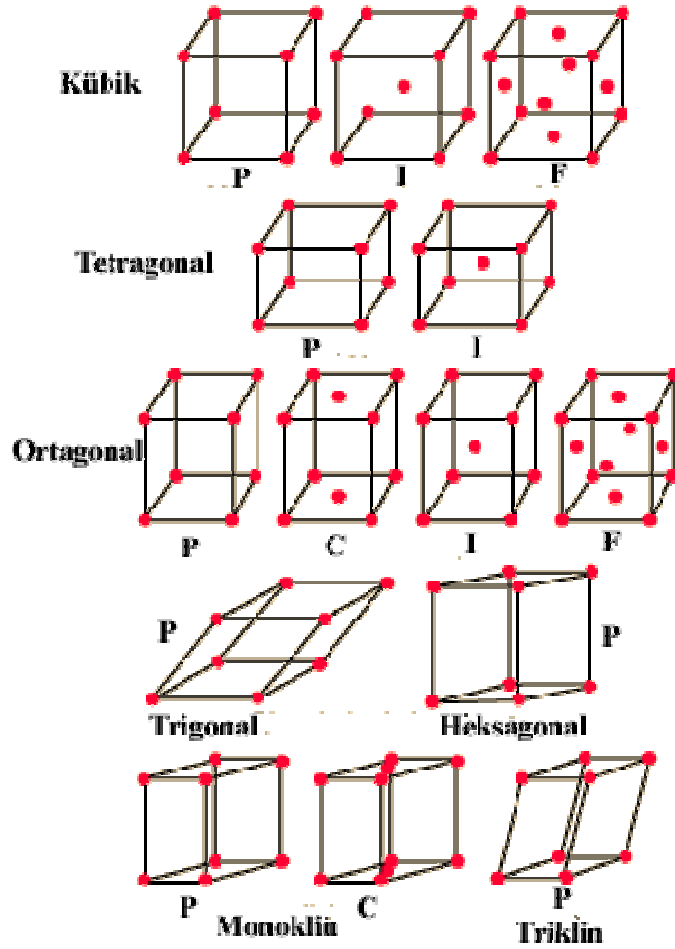
Bir katı cismin kristal yapıda olması için kesinlikle öteleme simetrisine sahip olması gerekir. Doğada simetri işlemlerinin getirdiği kısıtlamalar nedeni ile Bravais örgüleri olarak adlandırılan iki boyutta beş ve üç boyutta on dört örgü tipi bulunmaktadır [26].



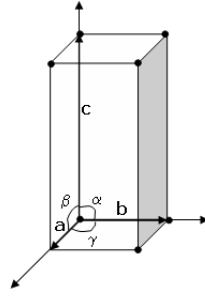
Şekil 2.1 İki boyutta beş Bravais Örgüsü (a) Dikdörtgen örgü ($\gamma = 90^\circ$) (b) Merkezli dikdörtgen örgü ($a = b$). Bu örgü, a' ve b' ile tanımlanan ilkel olmayan birim hücreli yüzey merkezli dikdörtgen örgüye eşdeğerdir. (c) Altıgen örgü ($a = b, \gamma = 60^\circ$) (d) Kare örgü ($a = b, \gamma = 90^\circ$) (e) Eğik örgü ($a \neq b, \alpha \neq 90^\circ$) [24].

Birim hücre, şekil 2.1 de gösterilen \vec{a} ve \vec{b} vektörleri ile oluşturulan kapalı alanlar birim hücre, \vec{a} ve \vec{b} vektörleri birim hücre vektörleri olarak adlandırılır. γ ise \vec{a} ve \vec{b} vektörleri arasındaki açıdır. Üç boyutta ise \vec{c} birim vektörü de göz önüne alınmalıdır [26].

İlkel hücre, en küçük hacimli ve tek örgü noktası içeren hücredir. Bir örgüdeki bütün mümkün ilkel hücreler aynı hacme sahiptir. İki boyutlu örgü tiplerinde gösterilen kare, dikdörtgen, altıgen ve eğik örgüler ilkel hücre, merkezli dikdörtgen örgü ise ilkel hücre değildir. Çünkü iki örgü noktası içermektedir [26].



Şekil 2.2 Üç Boyutta 14 Bravais Örgüsü [25].



Şekil 2.3 Üç boyutta birim hücre [24].

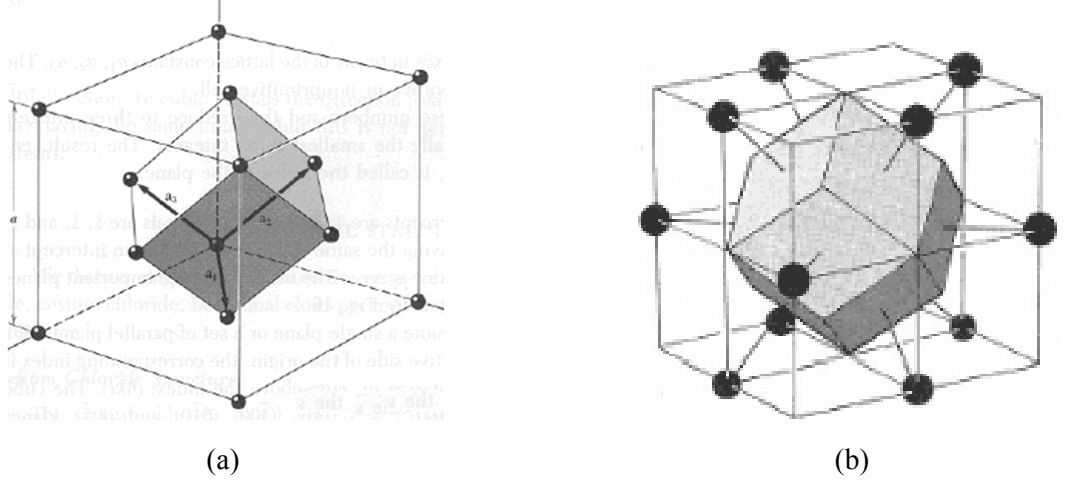
Çizelge 2.1 Kübik yapılar için genel kullanım [25].

Kübik Yapılar İçin Genel Kullanım	
P	Primitif (sc-simple cubic)
B	Cisim merkezli (bcc-body centered cubic)
F	Yüzey merkezli (fcc-face centered cubic)

Çizelge 2.2 Bravais Örgü sistemin özellikleri [25].

SİSTEM	BRAVAIS ÖRGÜ SAYISI	ÖRGÜ SEMBOLÜ	EKSENLER VE AÇILAR	BİRİM HÜCREYE AİT ÖRGÜ SAYISI
TRİKLİNİK	1	P	$a \neq b \neq c$ $\alpha \neq \beta \neq \gamma$	1
MONOKLİNİK	2	P,C	$a \neq b \neq c$ $\alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$	1 (P) 2 (C)
ORTOROMBİK	4	P,C,I,F	$a \neq b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	1 (P) 2 (C,I) 4 (F)
TETRAGONAL	2	P,I	$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	1 (P) 2 (I)
KÜBİK	3	P,I,F	$a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	1 (P) 2 (I) 4 (F)
TRİGONAL	1	P	$a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma < 120^\circ, \neq 90^\circ$	1
HEKSAGONAL	1	P	$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$	1

Üç boyutlu durumda basit kübik yapının (sc) birim hücresinin aynı zamanda ilkel olduğu aşikardır. Ancak yüzey merkezli kübik (fcc) yapı göz önüne alındığında durum farklıdır. Yani; bu yapının birim hücresi ilkel değildir (şekil 2.4.a).



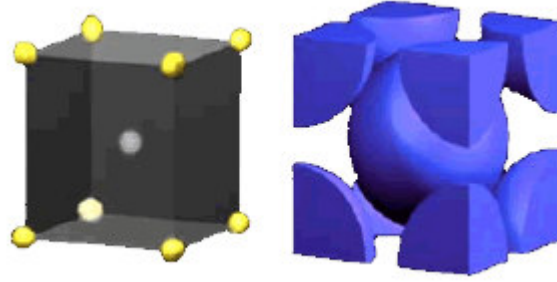
Şekil 2.4 (a) fcc yapının birim ve ilkel hücresi (b) fcc yapının Wigner Seitz Hücresi [26].

2.1. Tipik Kristal Yapılar

Bravais örgüleri, kristal yapının adeta iskeletidir. Metalik kristallerin ve alaşımlarının pek çoğunun yapısı doğrudan Bravais örgüleriyle belirlenebilir [26].

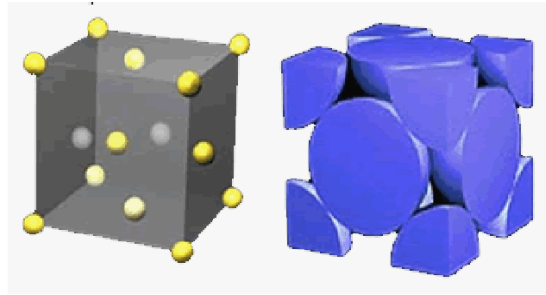
2.1.1. Cisim Merkezli Kübik (bcc) Yapı

Cisim merkezli kübik örgünün her bir örgü noktasına atomların yerleşmesi ile oluşur. Na, Li, K, Ba, Cs bcc yapıda olan metallere örnektir.



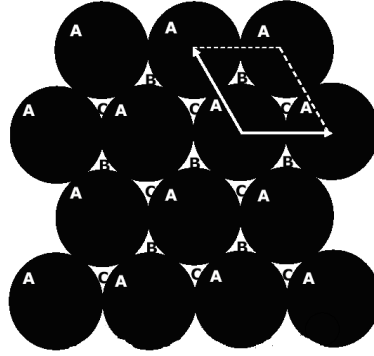
Şekil 2.5 Cisim merkezli kübik (bcc) yapı [26].

Yüzey merkezli kübik örgünün her bir örgü noktasına atomların yerleşmesi ile oluşur. Cu, Ca, Ag, Au fcc yapıdaki metallerden bazılarıdır.

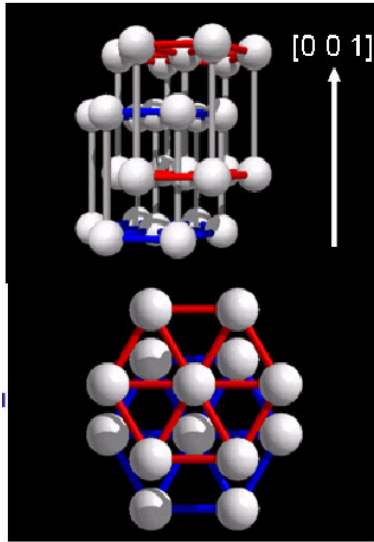


Şekil 2.6 Yüzey merkezli kübik yapı (fcc) [26].

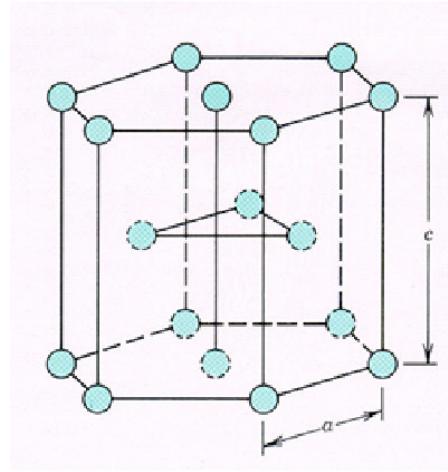
Kristali oluşturan atomlar, birbirini çeken sert küreler olarak düşünülürse, altıgen simetrikli sıkı paketlenmiş düzlemler oluşur. Bu durumda atomlar enerjiyi minimum yapacak şekilde olabildiğince birbirlerine yaklaşırlar. İki boyutta A pozisyonlarında olan atomların diziliminin üzerine, ikinci katmanda B pozisyonlarına ve üçüncü katmanda da yine A katmanlarına atomlar yerleşirse, Altıgen Sıkı Paketli (hcp) Yapı oluşur (ABAB... sıralaması) [26].



Şekil 2.7 A konumlarını işgal eden bir sıkı-paket küreler katmanı. Bitişik katmanlar B veya C konumlarını işgal eder [24].



(a)



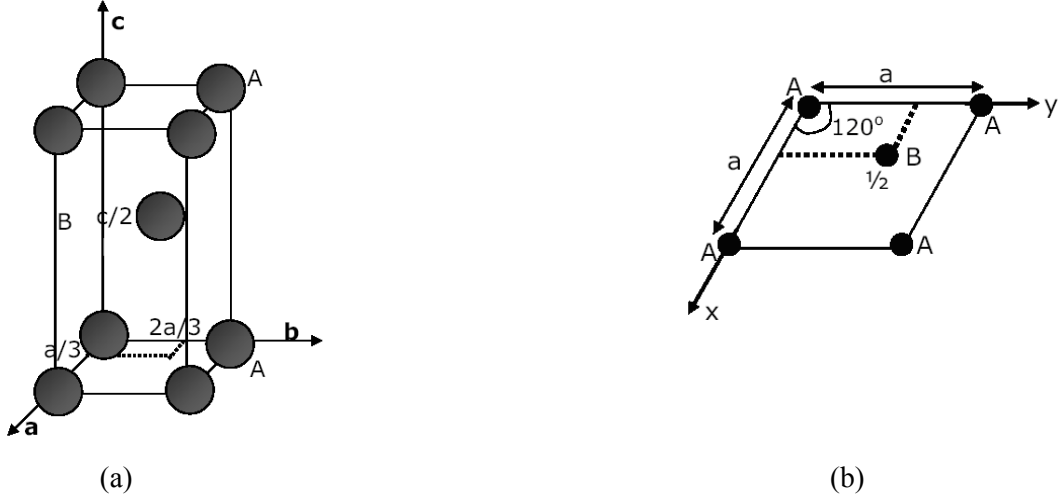
(b)

Şekil 2.8 (a) ABAB sıralaması (b) Altıgen yapının sıkı paket birim hücresi [26].

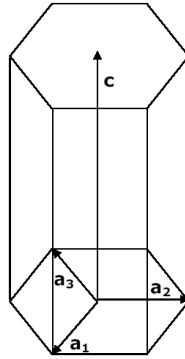
Altıgen sıkı paketli yapıda A düzlemindeki atomların tümü özdeş çevreye sahiptir. B düzlemindekilerin çevresi ise A düzlemindekilerden farklıdır. Bu yapının baz atomları (000) ve B düzleminde $\left(\frac{1}{3} \frac{2}{3} \frac{1}{2}\right)$ 'dedir. Sert kürelerden oluşmuş ideal sıkı paketli altıgen yapı için

$\frac{c}{a} = \sqrt{\frac{8}{3}}$ 'dür. Atomlar sert küreler olmadığı için altıgen sıkı paket yapılarda c/a değeri ideal

değerden küçük sapmalar gösterir. Ti, Zn, Cd gibi kristaller altıgen sıkı paketli yapıdadır.



Şekil 2.9 (a) İlkel Birim hücreli sıkı-paketli altıgen yapı (b) Sıkı paketli altıgen yapının (hcp) ilkel birim hücrelerinin görünüşü. $1/2$, z eksenı boyunca c örgü vektörünün yarısıdır [26].



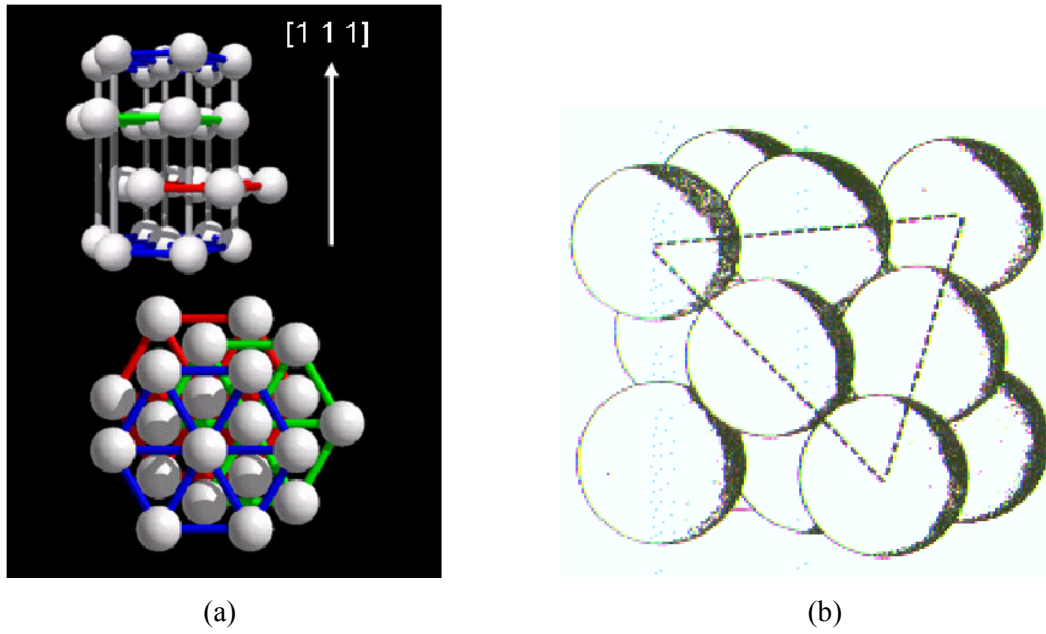
Şekil 2.10 Altıgen birim hücre. [26].

Altıgen sıkı paketli yapıda Miller indisleri dört indislidir ve Miller-Bravais indisleri olarak adlandırılırlar.

$$a_3 = -(a_1 + a_2) \text{ ve } i = -(h + k)$$

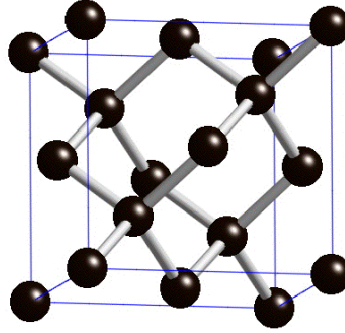
2.1.2. Kübik Sıkı Paket (ccp) Yapı [Yüzey Merkezli Kübik Yapı]

Eğer atomların dizilimi ABCABCA... şeklinde ise, oluşan yapı kübik sıkı paket yapı (ccp) ya da yüzey merkezli kübik yapı (fcc) olarak adlandırılır. Atomlar birim hücrenin köşeleri ve yüzey merkezlerine yerleşmiştir [26].



Şekil 2.11. Atomların ABCABC... sıralamasına karşılık gelen sıkı paket katmanı (111) düzleminde. Yüzey merkezli yapı, yüzey merkezli kristal örgüsü ile uyumludur [26].

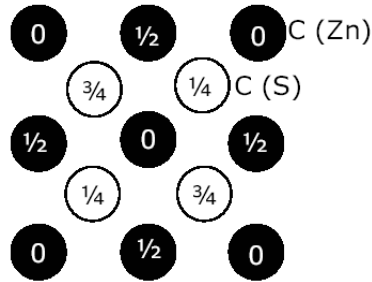
2.1.3. Elmas Ve Çinko Sülfür (ZnS) Yapıları



Şekil 2.12 Elmas kristal yapısı ve dörtlü bağ düzeni [26].

Elmas C atomlarının oluşturduğu bazı atomları 000 ve $\frac{111}{444}$ 'de olan fcc yapıda bir kristaldir.

IV. grup elementlerinden Si ve Ge elmas yapısındadır. Birim hücre 8 atom içerir. Atomlar arasındaki bağ kovalent bağlıdır. İç kısımda kalan atomlarda bir fcc örgüsünde bulunurlar. İç kısımdaki atomlar $[111]$ doğrultusunda birim hücrenin dörtte biri kadar yer değiştirmiş bir fcc yapı oluştururlar [26].



Şekil 2.13 (Üstten Görünüm) Çinko sülfür yapısının kübik hücresindeki atom konumlarının küpün taban yüzeyi üzerindeki izdüşümleri. Kesirli sayılar her atomun taban düzleminden yüksekliğini, küpün bir kenarı cinsinden gösterir [26].

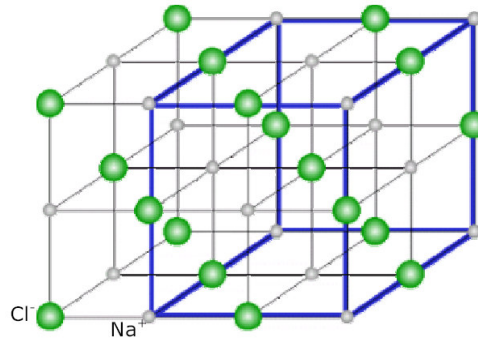
ZnS yapı da elmas yapıyla atomların yerleşimi bakımından aynıdır, tek fark elmastaki bir tür karbon atomlarının çinko atomları ile diğer tür karbon atomlarının da sülfür atomlarıyla yer

değiştirmiş olmasıdır. Birim hücrede 4 ZnS molekülü oluşur. III-V grubu bileşiklerinden GaAs, InSb, InP bu yapıdaki yarıiletken bileşiklerdendir [26].

2.1.4 Sodyum Klorür (NaCl) Yapısı

NaCl eşit sayıda Na ve Cl iyonları içerir. Tüm Na^+ iyonları kristal içinde özdeş çevreye sahiptirler. Bu yapı katyon (Na^+) etrafında sıkıca bağlanmış ve daha büyük olan anyonların sayılarıyla belirlenir. NaCl için bu sayı 6'dır. Yapı iç içe geçmiş fcc'dir. Her birim hücrede 4 NaCl vardır. İlkel hücresindeki iyonların konumları şöyledir [26].

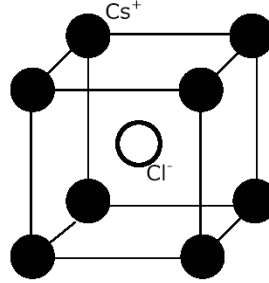
Cl:	0 0 0	$\frac{1}{2} \frac{1}{2} 0$	$\frac{1}{2} 0 \frac{1}{2}$	$0 \frac{1}{2} \frac{1}{2}$
Na:	$\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}$	$0 0 \frac{1}{2}$	$0 \frac{1}{2} 0$	$\frac{1}{2} 0 0$



Şekil 2.14 Üç boyutlu NaCl örgüsünün ilkel hücresi [26].

MnO, NaCl, MgO bu yapıdaki kristallere örnektir. (111) düzlemleri tümüyle Na^+ iyonları içerir. Cl^- iyonları ise (111) düzlemleri arasındaki orta noktalardan geçen paralel düzlemler üzerinde bulunurlar. Bu nedenle inorganik kristallerde kristal bir tek dev molekül olarak dikkate alınır [26].

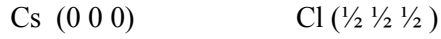
2.1.5 Sezyum Klorür (CsCl) Yapısı



Şekil 2.15 Sezyum klorür kristal yapısı. Uzay örgüsü basit kübik olup hücre başı 000 da bir Cs⁺ iyonu ve $\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}$ da bir Cl⁻ iyonundan oluşur [26].

CsCl yapısı eşit sayıda anyon ve katyon içeren iyonik bir katıdır. Kübik birim hücrenin köşelerinde Cs⁺ ve uzay merkezinde Cl⁻ bulunur. Birim hücre 1 CsCl içerir. Yapı basit kübiktir.

Yapının baz atomları:



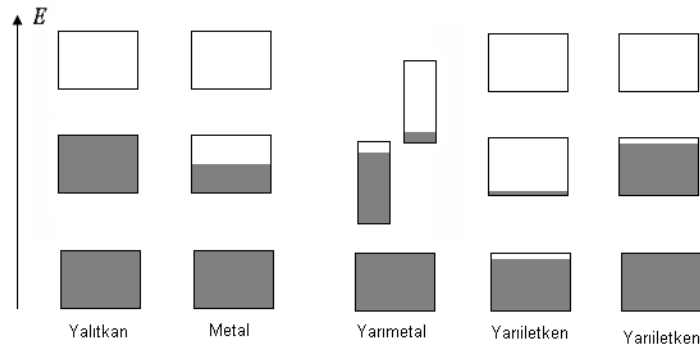
Katyonun en yakın komşu sayısı 8'dir. Bu nedenle her katyonun çevresinde sıkıca bağlı 8 tane iyon olduğunda yapının gerçekleşmesi olasıdır [26].

3. ENERJİ BANTLARI

Serbest elektron modeli, metallerin pek çok özelliğini açıklamakta oldukça başarılı olmasına rağmen, bazı malzemelerin metal, bazı malzemelerin de yalıtkan oluşlarını açıklayamaz. Ayrıca bazı metallerin, içlerinde hareketli ve pozitif yüklü parçacıkların varlığını gösteren Hall Katsayısına niçin sahip oldukları sorusuna yanıt veremez.

İyi bir iletkenle iyi bir yalıtkan arasında, 1 K sıcaklıkta özdirenç bakımından oldukça büyük bir fark vardır.

Her katı elektron içerir, fakat uygulanan bir elektrik alanda elektronların davranışları çok önemlidir. Kristaldeki elektronlar, elektron yörüngelerinin bulunmadığı enerji bölgeleri ayrılmış enerji bantlarında bulunurlar. Bant aralıkları denilen bu bölge iletkenlik elektronlarının kristal iyonları ile etkileşmesi sonucu oluşur [26].



Şekil 3.1 Yalıtkan, metal, yarı metal ve yarı iletkenlerde izinli enerji bantlarındaki elektron doluluk şeması [26].

Şekil 3.1 deki taralı alanlar elektronların doldurduğu kısımlardır. Elektron bantları tamamen boş veya tamamen dolu ise kristal bir yalıtkan gibi davranır. Çünkü elektronlar bir elektrik alanda hareket edemezler. Bir veya daha çok bant yarı dolu ise kristal bir metal gibi davranır. Bir veya daha çok bant az oranda dolu ise kristal yarıiletken veya yarı metal olur.

İletken ve yalıtkan arasındaki farkı anlamak için serbest elektron modeli geliştirilerek yarı serbest elektron modeli ortaya konmuştur. Ayrıca kristaldeki periyodik örgü yapısı da göz

önüne alınır. Bu durumda ortaya çıkan en önemli durum, bant aralıklarının oluşabileceği kavramıdır.

Uygulanan bir elektrik veya manyetik alanda elektronlar, etkin bir m^* kütesine sahipmiş gibi davranırlar. Bu etkin kütle, serbest bir elektronun kütesinden daha büyük, daha küçük veya negatif olabilir. Ayrıca, uygulanan bir elektromanyetik alanda elektronlar pozitif veya negatif yüklere sahipmiş gibi davranabilirler. Bu olay Hall Katsayısının negatif veya pozitif değer almasını açıklamaktadır [26].

3.1 Yarı Serbest Elektron Modeli

Serbest elektron modelinde bir elektronun alabileceği enerji değerleri sıfırdan sonsuza kadar değişebilmektedir. Yani serbest bir elektronun enerjisi;

$$\mathcal{E}_k = \frac{\hbar^2}{2m} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) \quad 3.1$$

$$k_x, k_y, k_z = 0; \quad \pm \frac{2\pi}{L}; \pm \frac{4\pi}{L}; \dots \quad 3.2$$

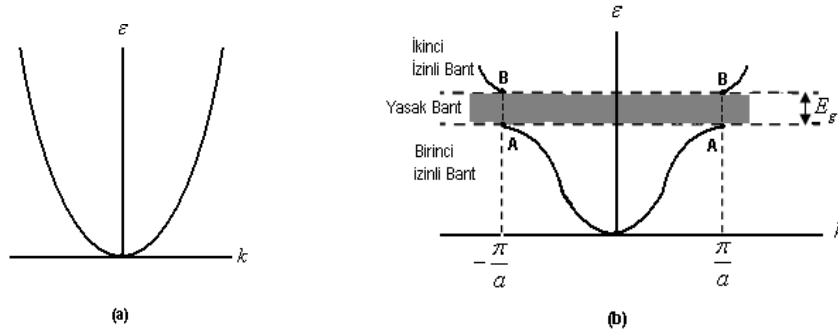
değerini alır. Serbest elektronun dalga fonksiyonu ise;

$$\psi_k(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \quad 3.3$$

Şeklinde $\vec{p} = \hbar\vec{k}$ momentumuna sahip ilerleyen bir dalga yapısına sahiptir.

Yarı serbest elektron modeli ise bir kristalin bant yapısı, bant elektronları ile periyodik iyon potansiyelleri arasındaki zayıf etkileşme ile açıklanabilmektedir.

Bir kristalde enerji aralıklarının oluşmasının nedeni, kristalde elektron dalgalarının Bragg yansımalarına uymalarıdır. Bu enerji aralıkları bir katının iletken ya da yalıtkan olmasının en önemli sebebidir [26].



Şekil 3.2 (a) Serbest elektronda ε enerjisinin k dalga vektörü ile değişimi. (b) Örgü sabiti a olan tek atomlu doğrusal örgüde elektron enerjisinin dalga vektörü ile değişimi [26].

Enerji aralıklarının varlığını, örgü sabiti a olan çizgisel bir kristal yapı modeli ile açıklamak mümkündür. Serbest bir elektron için ε enerjisinin k 'ya göre değişimi bir parabol şeklindedir. Yaklaşık serbest elektron durumunu düşünürsek, \vec{k} dalga vektörlü bir dalganın kırınımı için Bragg şartı; $(\vec{k} + \vec{G})^2 = k^2$ şeklindedir ve tek boyut için; n bir tam sayı ve bir ters örgü vektörünün büyüklüğü $G = \frac{2\pi n}{a}$ olmak üzere;

$$k = \pm \frac{1}{2} G = \pm \frac{n\pi}{a} \quad 3.4$$

olur. Böylece, birinci yansıma ve birinci enerji aralığının $k = \pm\pi/a$ 'dan ortaya çıkacağı görülür. Diğer enerji aralıkları da n sayısının daha üst değerleri için bulunur. $-\pi/a$ ile $+\pi/a$ arasındaki bölgeye birinci Brillouin bölgesi denir. Böylece ortaya çıkan enerji aralığının, enerjinin k 'ya göre değiştiği eğrideki gösterimi Şekil 3.2 (b)'de gösterilmiştir.

Elektronun değişik şekillerde davrandığı k 'nın kritik değerlerini genel olarak dağılımı için de Bragg Kanununu kullanılır. Yansıyan dalgalar birbirini kuvvetlendirerek yapıcı bir girişim oluşturuyorlarsa, Bragg koşulu; $\pm n\pi/a$ şeklinde olur. ($n=1,2,3,\dots$) yansıyan dalganın $e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$ formunda olduğu bilindiğinden;

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

ve

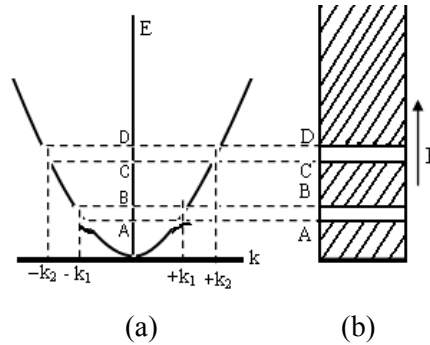
3.5

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

şeklinde iki duran dalga ortaya çıkar. Elde edilen bu sonuca göre, elektron sürekli olarak bir yere yansıtıldığı veya bir yerden yansiyarak geldiği için örgü içerisindeki toplam hızı sıfır olur. Ayrıca örgü içerisinde elektron yoğunluğunun değiştiği sonucu da elde edilir [26].

3.1.1 Enerji Aralığının Kaynağı

Elde edilen 3.5 denklemlerindeki sin ve cos'lü terimler, elektronun örgü içerisindeki yoğunluğunun periyodik değişimi için iki ayrı şekil olduğunu gösterir. Böyle bir değişimde, sin fonksiyonunun sahip olduğu yerlerde cos fonksiyonu maksimum gösterir veya tersi olur. Bunun sonucunda da, periyodik alan elektronları o şekilde etkiler ki, k 'nın her kritik değerinde, serbest elektron seviyesi iki ayrı düzeye bölünür. Şekil 3.3'te bu düzeyler A ve B ile gösterilmektedir. A ve B aralığında elektron için hareket söz konusu değildir ve bu bölgeye yasaklanmış bölge denir. A ve B aralığındaki enerji aralığı potansiyelin periyodik kısmının genliğine bağlıdır ve U potansiyeli sabit olunca ortadan kalkar.



Şekil 3.3 (a) Kristalde hareket eden bir elektron için E ile k arasındaki bağıntı (b) ve karşıt gelen enerji bantları [25].

Şekil 3.3'te, E ile k arasındaki parabolün k 'nın bir çok değeri için sürekli olarak devam ettiğini ancak bazı kritik k değerleri için de kesiklikler olduğu görülmektedir. Böylece, kristalde hareket eden elektron için, belirli yasaklanmış bölgeler olduğu söylenebilir. Bu yüzden,

elektron dalga sayısını aşağıdan başlayarak arttırılırsa, A seviyesine gelene kadar enerji sürekli artar. Bu noktadan sonra artış B'ye gelene kadar sürekli bir enerji sıçraması gösterir. k 'nın daha yüksek değerleri için ise, bu şekilde süreklilik ve kesiklilik yine vardır. Böylece enerji spektrumu, izinli ve izinli olmayan bantlara ayrılmış olur [25].

İletkenlerde izinli bantlar iletim bandı olarak adlandırılır. Başka bir tanımla, izinli bölgelere Brillouin Bölgeleri'de diyebiliriz. Her bir Brillouin Bölgesinde, enerji düzeyleri birbirine yakın olarak yerleştirilmiştir. Bu şekilde yarı sürekli bir spektrum gösterirler. Birinci Brillouin Bölgesi Birinci süreksizliğe kadar bütün düzeyleri içerir, ikinci Brillouin Bölgesi ise birinci ve ikinci süreksizlikler arasındaki düzeyleri kapsar, durum böylece devam eder.

Şekil 3.3 te serbest elektron yaklaşımı ile elde edilen daha önceki sürekli parabolün yalnızca k 'nın belli değerlerinde değil, komşu değerlerinde de süreksizlik gösterdiğini ortaya koyar. Bunun nedeni şu şekilde açıklanır. k kritik değeri yakınında, komşu örgü dizilerinden saçılan dalgalar yaklaşık olarak aynı fazdadır ve yapıcı bir girişim oluştururlar. Yalnızca, uzak dizilerden gelerek yansıyan dalgalar aynı fazdadır ve söndürücü girişim yaparlar. k 'ya yakın bir k_1 değeri düşünelim; karşılık gelen kritik dalga boyu $2d$ olacaktır. Aralarında m uzaklığı olan atomlar arasındaki yol farkı $2md$ olur. k , 2π aralığındaki dalga boyu sayısı olduğundan, bu yol farkı için $k(2md/2\pi)$ şeklinde ortaya çıkar. k 'nın k_1 'e tam eşit olduğu durumlarda bu değer m 'dir. Ancak k , k_1 'den farklı olunca, dalga boylarının gerçek sayısı m 'den $\pm 1/2$ kadar farklı olacaktır. Böylece;

$$kmd/\pi = m \pm 1/2$$

veya

$$k = \frac{\pi}{d} \left(1 \pm \frac{1}{2m}\right) = k_1 \left(1 \pm \frac{1}{2m}\right) \quad 3.6$$

olur. Verilen herhangi bir k değeri için, birlikte yansıma oluşturan atom sıralarının sayısı olan m 'nin etkisini gösterir. k ile k_1 birbirine yakınsa, denklem 3.6'daki m 'ye bağlı terim büyür ve yansıyan ışın şiddetlenir. m 'nin çok büyük olduğu durumlarda, yansıyan ışının şiddeti, gelen ışıninkine yaklaşır, bu durumda elektron, serbest bulunduğu durumdan değişik bir hıza ve enerjiye kavuşur. Hızı yansılardan dolayı azalmıştır; enerjisi de, dalga fonksiyonu duran dalga özelliğini aldığından, değişmiştir. Kuvvetli bir saçılan dalga oluşturabilmek için gerekli atom sıralarının sayısı, atomlarının tek tek saçılma özelliklerine bağlıdır. Yani, burada ışın içine potansiyelin periyodik bölümünün genliği girer. Bu genliği arttırmak yalnızca AB aralığını

büyütmez, k 'nın kritik değerleri etrafındaki değişim aralığını da genişletir. Sonuçta E, k eğrisi serbest elektron durumundaki parabol şeklinden ayrılır [25].

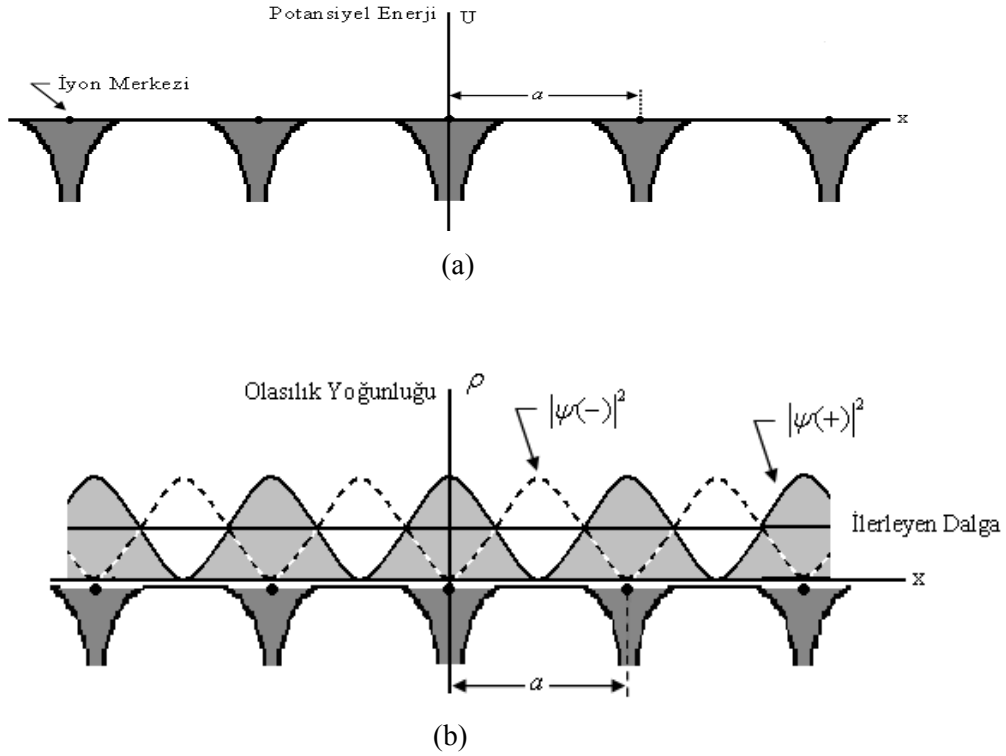
3.1.2 Enerji Aralığının Büyüklüğü

Durağan $\psi(+)$ ve $\psi(-)$ dalgaları elektronların farklı bölgelerde yığılmalarına yol açar. Sonuçta iki dalga farklı potansiyel enerjiye sahiptir. Bu temel düşünce enerji aralıklarının varlıklarını ortaya koymak için yeterlidir. Bir parçacığın olasılık yoğunluğu $\rho = \psi^* \psi = |\psi|^2$ ile verilir. İlerleyen bir dalga için $\rho = e^{-ikx} e^{+ikx} = 1$ olacağından yük yoğunluğu düzgün dağılmış olur. Düzlem dalgaların lineer toplamında yük yoğunluğu düzgün olmaz. Denklem 3.5'deki $\psi(+)$ durağan dalgasını ele alırsak;

$$\rho(+) = |\psi(+)|^2 \propto \cos^2 \pi x / a \quad 3.7$$

olur. Şekil 3.4'de görüldüğü gibi elektron yığılması $x=0, a, 2a, \dots$ noktalarındaki iyonlar üzerinde oluşur ve buralarda potansiyel enerji en düşük değerdedir. Buralar elektronlar için potansiyel çukurlarıdır. Çekirdek durumundaki elektronlar burada hapis olurlar.

Tek atomlu çizgisel bir örgü için, pozitif iyon şeklindekilerin alanında bulunan iletim elektronlarının elektrostatik potansiyel enerjilerinin değişimi şekil 3.4 (a)'da görülmektedir. İyon merkezleri net pozitif yük taşırlar, çünkü bir metalde atomların valans elektronları serbest hale geçip iletkenlik bandını oluştururlar. Pozitif bir iyonun oluşturduğu alanda bir elektronun potansiyel enerjisi negatif olacağından elektron iyon etkileşmesi çekicidir [25].



Şekil 3.4 (a) Doğrusal bir örgüdeki iyon merkezlerinin etkisi altındaki bir iletkenlik elektronunun potansiyel enerjisi. **(b)** $|\psi(-)|^2 \propto \sin^2 \pi x / a$, $|\psi(+)|^2 \propto \cos^2 \pi x / a$ ve ilerleyen bir dalga için örgüdeki ρ olasılık yoğunluğu [25].

Diğer durağan dalga $\psi(-)$ için olasılık yoğunluğu;

$$\rho(-) = |\psi(-)|^2 \propto \sin^2 \frac{\pi x}{a} \quad 3.8$$

olur ve elektronlar iyon merkezinden uzakta bulunur. Dikkate alınan üç yük dağılımı için, potansiyel enerjinin ortalama değerleri düşürülürse; $\rho(+)$ 'nin potansiyel enerjisinin ilerleyen dalganınkinden küçük, $\rho(-)$ 'nin potansiyel enerjisinin de ilerleyen dalganınkinden büyük olması gerekir. $\rho(+)$ ve $\rho(-)$ dağılımlarının enerjileri arasındaki fark E_g ise, genişliği E_g olan enerji aralığı oluşur. Şekil 3.2'de enerji aralığının hemen altındaki A noktasında dalga fonksiyonu $\psi(+)$, hemen üstündeki B noktasında ise $\psi(-)$ olur.

Birim uzunluk için normalize edildiklerinde bölge sınırında dalga fonksiyonları;

$$\sqrt{2} \cos \pi x / a \quad \text{ve} \quad \sqrt{2} \sin \pi x / a \quad 3.9$$

şeklindedir. Kristalin potansiyelini,

$$U(x) = U \cos \frac{2\pi x}{a} \quad 3.10$$

olarak yazacak olursak, iki durum arasında birinci dereceden enerji farkı;

$$E_g = \int_0^1 dx U(x) \left[|\psi(+)|^2 - |\psi(-)|^2 \right] = 2 \int dx U \cos \frac{2\pi x}{a} \left(\cos^2 \frac{\pi x}{a} - \sin^2 \frac{\pi x}{a} \right) = U \quad 3.11$$

olur. Ortaya çıkan fark, kristal potansiyelinin Fourier bileşenin genliğine eşittir [25].

3.2 Boş Örgü Yaklaşıklığı

Gerçek kristallerin bant yapıları genellikle birinci Brillouin bölgesinde enerjinin dalga vektörüne bağımlılığını gösteren grafikler olarak verilir. Dalga vektörü birinci bölgenin dışında ise, uygun bir ters örgü vektörü çıkartılarak tekrar birinci bölgeye taşınırlar. Böyle bir öteleme her zaman bulunabilir.

Bant enerjileri, serbest elektronun enerjisi olan $\varepsilon = \hbar^2 k^2 / 2m$ değerine yaklaşık olarak eşitse, hesapları başlatmadan önce serbest elektronun enerjisini birinci bölgeye taşımak yerinde olur. Öyle bir \vec{G} arıyoruz ki, birinci bölgede bir \vec{k}' vektörü;

$$\vec{k}' + \vec{G} = \vec{k} \quad 3.12$$

bağıntısını sağlasın. Burada \vec{k} serbest elektronun boş örgüdeki dalga vektörü olup üzerinde hiçbir sınırlama yoktur.

$$\varepsilon(k_x, k_y, k_z) = (\hbar^2 / 2m)(\vec{k} + \vec{G})^2 = (\hbar^2 / 2m) \left[(k_x + G_x)^2 + (k_y + G_y)^2 + (k_z + G_z)^2 \right] \quad 3.13$$

Burada \vec{k} birinci Brillouin bölgesinde olur ve \vec{G} buna uygun ters örgü noktalarının her biri olabilir.

Basit kübik örgünün alçak enerjili serbest elektron bantlarını ele alalım. Enerjiyi [100] yönünde \vec{k} 'nin fonksiyonu olarak gördüğümüzü varsayalım. $\hbar^2 / 2m = 1$ alalım.

Çizelge 3.1’de boş örgü yaklaşıklığında birkaç enerji bandı, birinci Brillouin bölgedeki $\vec{k} = 0$ yönünde $\varepsilon(000)$ ve k_x yönünde $\varepsilon(k_x, 00)$ olarak gösterilmiştir [26].

Çizelge 3.1 Boş örgü yaklaşıklığı [26].

Bant	$Ga/2\pi$	$\varepsilon(000)$	$\varepsilon(k_x, 000)$
1	000	0	k_x^2
2,3	100, $\bar{1}00$	$(2\pi/a)^2$	$(k_x \pm 2\pi/a)^2$
4,5,6,7	010, $0\bar{1}0$, 001, $00\bar{1}$	$(2\pi/a)^2$	$k_x^2 + (2\pi/a)^2$
8,9,10,11	110, 101, $1\bar{1}0$, $10\bar{1}$	$2(2\pi/a)^2$	$(k_x + 2\pi/a)^2 + (2\pi/a)^2$
12,13,14,15	$\bar{1}10$, $\bar{1}01$, $\bar{1}\bar{1}0$, $\bar{1}0\bar{1}$	$2(2\pi/a)^2$	$(k_x - 2\pi/a)^2 + (2\pi/a)^2$
16,17,18,19	011, $0\bar{1}\bar{1}$, $01\bar{1}$, $0\bar{1}\bar{1}$	$2(2\pi/a)^2$	$k_x^2 + 2(2\pi/a)^2$

3.3. Bir Banttaki Yörünge Sayısı

Bir bant içerisinde bulunan yörüngelerin sayısını bulabilmek için, önce örgü sabiti a olan basit hücrelerden yapılmış çizgisel bir kristal düşünelim. Sonra var olan durum sayısını bulabilmek amacı ile, kristal boyunca dalga fonksiyonlarına periyodik sınır koşullarını uygulayalım. \vec{k} elektron dalga vektörünün, birinci Brillouin bölgesindeki izinli değerleri;

$$k = 0; \pm \frac{2\pi}{L}; \pm \frac{4\pi}{L}; \dots; \pm \frac{N\pi}{L} \quad 3.14$$

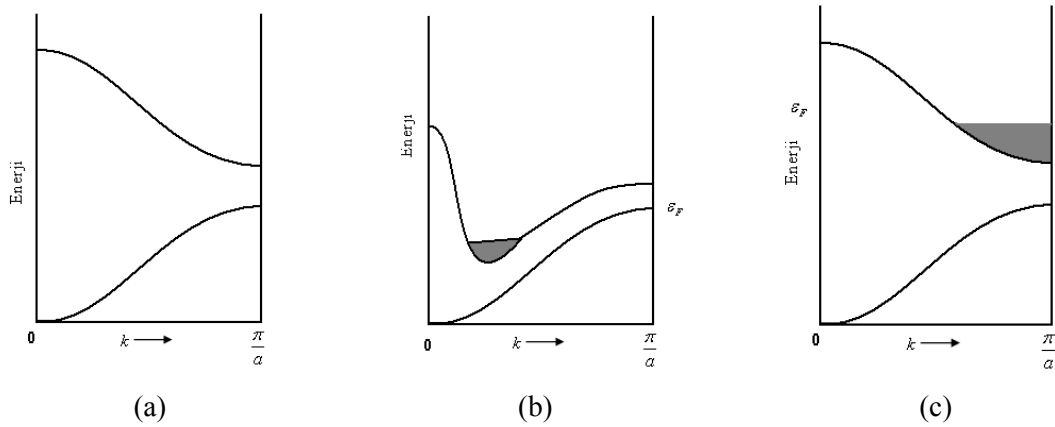
Şeklinde olacaktır. Bu seriyi $N\pi/L = \pi/a$ olan bölge sınırında keselim. $-N\pi/L = -\pi/a$ olan nokta, bir ters örgü vektörü ile π/a noktasına geçeceğinden, ele alınmaz. Toplam nokta sayısı N , yani ilkel hücre sayısına eşit olur.

Her ilkel hücre her enerji bandına bağımsız tek bir \vec{k} değeri ile katkıda bulunur. Bu sonuç üç boyutta da geçerlidir. Elektron spininin iki değeri için düşünülecek olursa, her bir enerji bandında $2N$ tane bağımsız yörünge olması gerektiği sonucu kolayca çıkarılabilir. Buradan görülür ki, ilkel hücrede bir tek atom varsa ve bu atom tek bir bağlanma elektronu veriyorsa, bandın ancak yarısı elektronlarla doldurulmuş olacaktır. Atom iki elektron verirse,

bant tümü ile doldurulur. Aynı şekilde, ilkel hücrede iki atom varsa ve bu atomlar birer elektron veriyorsa bant yine tümü ile doldurulmuş olacaktır [26].

3.3.1. Metaller ve Yalıtkanlar

Bantların doluluk durumlarına göre metallerle yalıtkanlar arasında ayırımı ortaya koyabiliriz. Değerlik elektronları, bir veya daha çok bantı tamamen dolduruyorsa ve diğer bantlar tümü ile boş kalıyorsa, bu kristaller yalıtkan olacaktır. Bir dış elektrik alan bu yalıtıkanda elektrik akımına yol açamaz. Burada elektrik alanın, elektronik yapıyı bozacak kadar kuvvetli olmadığını varsayıyoruz. Dolu bir bant sonraki boş banttan yeterli bir enerji aralığı ile ayrılmış ise, elektronların toplam momentumunu sürekli bir şekilde değiştirme olanağı yoktur ve elektrik alan uygulandığında hiçbir değişiklik olmaz. Bu durum, elektrik alanında \vec{k} 'nin düzgün olarak artabildiği serbest elektron durumundan çok farklıdır.



Şekil 3.5 Dolu yörüngeler ve bant yapısına göre **(a)** Yalıtkan oluşumu, **(b)** Bant örtüşmesi nedeni ile metal oluşması, **(c)** Elektron yoğunluğu nedeni ile metal oluşması [26].

Bir kristal içerisindeki ilkel hücrede, değerlik elektronlarının sayısı çift ise, bu kristal bir yalıtıktır. Ancak bu kuralın istisnai durumları da vardır. Atomun iç yörüngelerindeki sıkı bağlanmış elektronları göz önüne alırsak, bant teorisi uygulanamaz. Kristalde ilkel hücre başına iki valans elektronu olduğu durumda, bantların birbirini örtüp örtmediğine bakmak gerekir. Bant enerjileri birbirini örtüyorsa, tamamen dolu bir bant ve dolayısı ile yalıtkan oluşumu yerine, kısmen dolu iki bant ve dolayısıyla metal yapı elde edilir (şekil 3.5).

Alkali metaller ve soy metaller ilkel hücre başına bir valans elektronu içerirler ve metal olurlar. Toprak alkali metallerinde ilkel hücre başına iki valans elektronu bulunur; ancak bant enerjileri birbirini örttüğü için metal, ama iyi olmayan metal olurlar. Elmas, silisyum ve germanyumun dört valanslı iki elektronu, yani ilkel hücre başına sekiz valans elektronu bulunur. Ayrıca bantlar birbirini örtmediği için, mutlak sıfırda bu kristaller yalıtkan olur [26].

4. WIEN2K PROGRAMININ TANITIMI

Karmaşık yapıya sahip sistemler için bilgisayar simülasyon programlarının kullanılması oldukça kolaylık sağlamaktadır. Bu amaçla kullanılacak pek çok program mevcuttur. Birden çok atom kullanan karmaşık bir sistemin elektronik özelliklerinin incelenmesinde yoğunluk fonksiyonel teoriyi kullanan Wien2k programı bu programlardan birisidir. Yoğunluk fonksiyonel teorisi, dalga fonksiyonundan ziyade, elektron yoğunluğuna dayanır. Aynı zamanda elektron yoğunluğunu değiş-tokuş ve korelasyon potansiyelini de işleme sokar [27].

Önce ideal kristalin birim hücresi belirlenir. Bir birim hücredeki özellikler bilinerek periyodik sınır koşulları da kullanılarak sonsuz bir kristal tanımlanır. Kristalin öteleme ve nokta grubu simetri işlemi de eklenerek, ideal kristalin yapısının bozulmaması ve işlemlerin basitleştirilmesi sağlanır [27].

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

4.1 case.struct ve case.inst Dosyalarının Oluşturulması

Program çalıştırılmaya başlandığında; ilk önce yapıya ait struct dosyasının oluşturulması gerekir. Bu dosyanın oluşturulması TiC için aşağıdaki gibidir.

TiC

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

MODE OF CALC=RELA unit=ang

8.442749 8.442749 8.442749 90.000000 90.000000 90.000000

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

MULT= 1 ISPLIT= 2

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

LOCAL ROT MATRIX: 1.0000000 0.0000000 0.0000000

0.0000000 1.0000000 0.0000000

0.0000000 0.0000000 1.0000000

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

MULT= 1 ISPLIT= 2

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

LOCAL ROT MATRIX: 1.0000000 0.0000000 0.0000000

0.0000000 1.0000000 0.0000000

0.0000000 0.0000000 1.0000000

Elde edilen struct dosyasında;

Birinci satırda; Alaşımın adı,

İkinci satırda; Örgü tipi, NAT-Birim hücredeki eşdeğer olmayan atomların sayısı.

Örgü Tipi

P: İlkel (primitive-sc) örgü

F: Yüzey merkezli (fcc) örgü

B: Cisim merkezli (bcc) örgü

Üçüncü satırda; Hesaplama modu,

RELA: Bütün relativistik çekirdek ve skaler relativistik valans.

NREL: Relativistik olmayan hesaplama

Dördüncü satırda; a, b, c, α , β , γ

a, b, c: Örgü temel vektörleri (atomik birimde) (1 a.k.b.=0,529177 $^{\circ}$ A)

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

Beşinci satırda: Atom-indeks, x, y, z.

Atom-indeks: Eşdeğer olmayan atomun sayısı

x, y, z: Atomların konumlarını belirtir.

Altıncı satırda: Multiplicity, isplit.

Multiplicity: Yapıda birbirine eş olan atomların sayısı.

Isplit: 2 d-elektronların e-g, t-2g e.g. (kübik)

8, 5 ve 6 seçenlerini birleştirir.

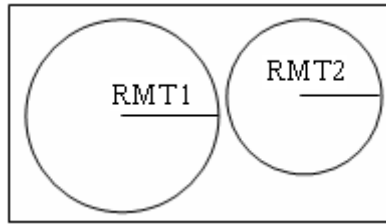
Yedinci satır: Atom ismi, NPT, RO, RMT, Z

Atom ismi: Periyodik cetveldeki atomun simgesi

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

RO: İlk radial ağ noktası (tipik bir şekilde 0.0005 ve 0.00005 arasında değişir.)

RMT: Atomik küre yarıçapı.



Şekil 4.1 Birim hücre içindeki atomik küreler. Atomlar en fazla birbirlerine değebilirler ancak birbirlerinin içine geçmezler.

Z: Atom numarası.

Onuncu satır: Yerel dönme matrisi (Her zaman ortogonal koordinat sisteminde).

On birinci satır: Uzay grubunun işlemlerinin sayısı. Sıfır olarak bakılırsa, simetri işlemleri genelde otomatik olarak oluşturulur.

On ikinci-on dördüncü satır: Matrix, tau.

Matrix: Simetri işlemi (uzay grup) matris gösterimi.

Tau: İlkel olmayan vektör geçişi.

On beşinci satır: Simetri işleminin indeks sayısını belirtir.

Bundan sonraki adım “instgen_lapw” komutu ile “case.inst” dosyasının oluşturulmasıdır. Bu komutla program dosyayı otomatik olarak oluşturur. 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)

```

Elde edilen “case.inst” dosyasında;

Birinci satırda; Title, Watson.

Title: İsim

Watson: Q-wat yüküyle, R-wat kürenin yarıçapı (Watson’a göre).

İkinci satırda: n, kapa, occup, plot.

n: Kuantum numarası.

Kapa: Relativistik kuantum numarası.

Occup: İşgal etme sayısı.

Plot: (P) Ayrı ayrı orbital yoğunluğunu gösterir.

N: Bir boş alanda ayrı ayrı orbitalin yoğunluğunu muaf tutmak.

Kuantum numaraların tanımlanması [28].

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

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

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

Çizelge 4.1 Relativistik kuantum sayıları [26].

		$j = \ell + s/2$		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.

4.2. init_lapw Hesaplamaları

Program ilerlemesinde bundan sonraki adım, “init_lapw” komutunun verilmesidir. Komut verildikten sonra hesaplamalar başlar ve daha sonraki adımlar otomatik olarak ilerler.

x nn: En yakın komşu atomlar arası uzaklığı hesaplar. Genelde 2 değeri girilir ve ikinci komşuluğa kadar gidilir.

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

Bu atomik küreler en fazla birbirine değebilir. Ancak birbirinin içine geçemezler. Aksi bir durumda program hata verir.

X group: Bu program case.struct dosyasından bazı bilgileri kullanır (örgü tipi, örgü sabitleri, atom pozisyonları). Aynı zamanda uzay gruplarını ve eşit olmayan durumların nokta gruplarını belirler.

Case.outputsgroup: Uzay gruplarını gösterir. TiC için nokta grupları örneği aşağıdaki gibidir.

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

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

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

x symmetry: Program “case.struct” dosyasından, örgü tipini ve atomik konumları kullanır. Genel bir şekilde uzay grup simetri şekillerini 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, [29]

13-GGA [30]

14-GGA [31]

seçeneklerinden biri kullanılır. Ancak genellikle 13 kullanılır. Ayrıca ek olarak program valans durumlardan çekirdek durumları ayırmak için kesme enerjisini sorar. Bunun içinde genelde -6.0 Ry (Raydberg) seçilir. Bu durumda bu enerji değerinin üstü yaklaşık olarak valans durumlarına karşılık gelir.

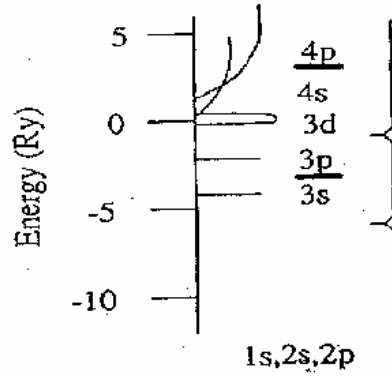
Case.outputst: Uygun atomik konfigürasyonu belirtir. Genelde elektronik durumlar üç tipe ayrılır. Bunlar çekirdek, yarı çekirdek ve valans durumlarıdır.

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 Enerjilerinin 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) durumlardır. Atomik kürenin dışında azalan bir miktar yüke sahiptirler.



Şekil 4.2 Çekirdek, yarı çekirdek ve valans durumları [32].

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

5 – 9 arasında APW

6 – 10 arasında LAPW,

alınması, genelde uygun olur. Bu değerleri 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

4.3. case.in1_st Dosyasının Tanıtımı

Birinci satır: switch

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

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

WFPRI: Özvektörleri yazar.

İkinci satır: rkmax, imax, insmax.

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

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

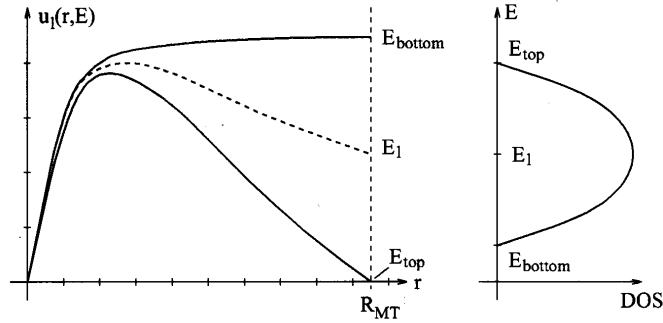
Insmax – Parça dalgalar için maksimum 1 değeri muffin–tin olmayan matris elemanlarının hesaplanmasında kullanılır (Insmax = 4 tam iyidir).

Üçüncü satır: Entrial, ndiff, Napw

Entrial: Radyal Schrödinger denkleminin çözümünde,

$$A_{\ell m}^{\alpha, \vec{k} + \vec{K}} = \frac{4\pi \bar{u}_\ell^\alpha e^{i(\vec{k} + \vec{K}) \cdot \vec{r}_\alpha}}{\sqrt{V \bar{u}_\ell^\alpha(\vec{R}_\alpha, E)}} J_\ell \left(\left| \vec{k} + \vec{K} \right| R_\alpha \right) Y_m^{\ell*}(\vec{k} + \vec{K}) \quad 4.1$$

$u_\ell(r, E_\ell)$ 'yi elde etmek için E_ℓ 'nin varsayılan enerji değeri kullanılır.



Şekil 4.3 $u_\ell(r, E_\ell)$ enerjisi ve DOS'un şematik bağılılığı [33].

B diff: Hariç tutulacakların sayısı.

Napw: Bu atomun bütününe kapsayan ℓ değerlerinin hepsi için aşağıdaki durum kullanılır.

LAPW temeli için 0

APW temeli için 1

Dördüncü satır: ℓ , $E\ell$, de, switch, NAPWL

ℓ kısmi dalga için ℓ

$E\ell$ $L = 1$ 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 3.2 de gösterilmektedir.

Enerji bantlarının altında E_{alt} U sıfır eğime sahiptir (bağlanma durumu). Fakat bantların 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 da 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 – $E_{üst}$ veya 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.

Beşinci satır: 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 sistemleri için” (d yada f elektronları yerelleşmiş 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.

4.4. SCF Hesaplamaları

SCF (self-consistency cycle) için “run_lapw” komutu ile program çalıştırılır. Bundan sonra program aşağıdaki adımları takip ederek gerekli hesaplamaları 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 problemin çözümü için klasik Green fonksiyonu metodundan elde edilir.

LAPW1: Valans bantlarını hesaplar (özvektör ve özdeğerler oluşturur). Hamiltonyen ve üst üste binme matrisi oluşturur. [34]

LAPW2: Özvektörlerden valans yoğunlukları hesaplar.

LCORE: Çekirdek durumları ve yoğunlukları hesaplar.

MİXER: 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 ulaşınca kadar devam ettirilir.

Bu işlem “run_lapw –ec 0.00001” komutu verilerek gerçekleştirilir. Hesaplama hassasiyeti –ec 0.00001’de değiştirmeler yapılarak gerçekleştirilir.

4.5 Hesaplama Özellikleri

Bu kısımda elektron yoğunluğu, durum yoğunlukları (DOS), bant yapıları ve hacim grafiklerinin nasıl elde edildikleri anlatılacak.

4.5.1 Elektron Yoğunluğu

x lapw2: Valans yoğunluklarını 3S ve 3P'nin dışında tekrar hesaplar. "case.in5" dosyası bu hesaplama işlemi sırasında 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

Birinci satır: ix , iy , iz , idv : Düzlem ve çizimin parçası birim hücrede üç noktayla belirtilir (x , y ve orijin). İlk sırada orijinin koordinatları belirtilir. Burada $x=ix/idv$ ve $y = iy/idv$ örgü vektörlerinin birimindedir.

İkinci satır: ix , iy , iz , $idv - x$ 'in koordinatları.

Üçüncü satır: ix , iy , iz , $idv - y$ 'nin koordinatları (x ve y yönleri birbirine dik olmalıdır). Diğer türlü NONORTHO (ortogonal olmayan = dik olmayan) seçeneği tercih edilir).

Dördüncü satır: 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).

Beşinci satır: npx, npy. Çizimdeki ağ noktaları sayısını belirtir.

Altıncı satır: switch

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

DIFF – Yoğunluk farkını çizer.

OVER – Atomik yoğunlukların süper pozisyonu belirtir.

Yedinci satır: iunits, cnorm

iunits: ATU – yoğunluk (potansiyel) atomik birimlerde e/a.u³ (veya Ry).

ANG: Yoğunluk e/Å³ de (potansiyeller için bu seçenek kullanılmaz).

Cnorm: VAL – case.clmval, r2v, vcoul dosyalar için kullanılır.

TOT: case.clmsum dosyalar için kullanır.

Sekizinci satır: ORTHO: (varsayılan) Yönlerin dik olmasını zorlar.

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

x lapw5: Elektron yoğunluğunu hesaplar. Bu komut çalıştırıldıktan sonra “rhoplot” komutu verilerek elektron yoğunluğu grafiği çizdirilir.

4.5.2 Durum Yoğunluğu

x lapw2 –qtl: Kısmi yükleri hesaplar. ”case.int” dosyası bu hesaplamada oluşur.

		file:case.int		
TiC		# Title	1	
-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

Birinci satır: Element yada bileşik adı.

İkinci satır: e_{\min} , delta, e_{\max} , broad

e_{\min} : Enerji ağı (Ry)'de belirtir. Burada DOS hesaplanır (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

Üçüncü satır: ndos-DOS durumlarının sayısını belirtir.

Dördüncü satır: jatom, jcol, description

Jatom: Hangi atom için DOS'un hesaplanacağını belirtir. 0 – toplam DOS, jatom = nat + 1 ara bölgedeki DOS durumları demektir. Burada “nat” 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 [35] kısmi ve toplam DOS' ları hesaplar.

dosplot: Bu komutla DOS grafikleri çizdirilir.

4.5.3. Bant Yapısı

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

X lapw –bant: Öz değerleri hesaplar. “case.insp” dosyası bant yapısını hesaplamak için kullanılır.

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

Dosyaların Tanıtımı:

Birinci satır: Şeklin tanıtılması

İkinci satır: xoffset, yoffset

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

yoffset: Çizimin orijininin y’e göre kaç cm ileride veya geride olduğunu belirtir.

Üçüncü satır: xsize, ysize.

xsize: x yönünün (cm) de büyüklüğü.

ysize: y yönünün (cm) de büyüklüğü.

Dördüncü satır: eincr, mtick

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

mtick: y eksenindeki küçük bölmelerin sayısı.

Beşinci satır: charh, font

charh: İsimlendirmenin boyutu.

font: 0 Yazı yok.

1 Times ve Symbol fontları kullanılır.

2 Times, times – italic ve sembol kullanılır.

Altıncı satır: linewidth, ilin, icol.

linewidth: 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.

Yedinci satır: Verilerin başladığını belirtir.

Sekizinci satır: 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)

Dokuzuncu satır: iferm, efermi

iferm – 0 – EF’yi çizmez.

1 – EF düz çizgi şeklinde çizilir.

2 – EF noktalı çizgi çizilir.

3 – EF nokta nokta çizilir.

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

Onuncu satır: nbant1, nbant2 – bantlar için en düşük ve en yüksek bant indeksidir.

On birinci satır: jatom, jcol, jsize

jatom: “case.qtl” dosyası mevcutsa jatom bant karakteri çizilecek atomu belirler (noktalar uygun yarıçaplı dairelerle yer değiştirir). “case.qtl” yok, yada sıfır ise bant 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: Bant karakterinde kullanılacak dairelerin yarıçaplarının boyut faktörünü gösterir.

x spaghetti: Bu komut öz değerleri kullanarak enerji bant yapısı grafiğini çizer.

4.5.4. Bant Karakter Çizimiyle Bant Yapısı

x lapw1 –bant: Özdeğerleri hesaplar.

x lapw2 –bant –qtl: Kısmi yükleri hesaplar.

“case.insp” dosyasında karakter bantlarının çizimi için

jatom = 1 jtype = jsize = 0.2

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

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

x spaghetti: Komutuyla bant yapısı grafiği çizdirilir.

4.5.5. 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.

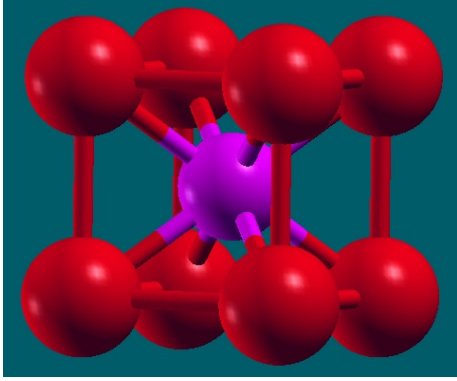
ana_elast: Hesaplamalar yapıldıktan sonra normalde bütün sonuçlar “elast/result” klasöründe saklanır, “elast/result” klasörüne girilir ve “ana_elast” komutu çalıştırılır. Bu komutla toplam enerjiler hesaplanarak analiz edilir. Ayrıca elastik sabitler ve basınç hesaplanarak sonuçların grafiği çizilir [36]. Wien2k programındaki hesaplamaların akış şeması şekil 3.4 de gösterilmektedir.

4.5.6. Süper Örgünün Oluşturulması

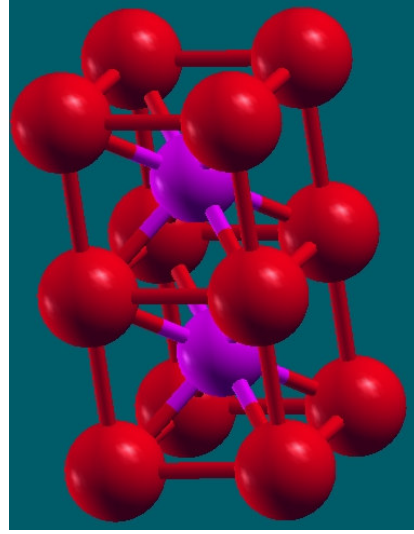
Bu program kullanılan Wien2k Struct dosyasından supercell üretmede de kullanılır. Orijinal struct dosyasının adı yazıldıktan sonra x, y, z yönlerindeki hücre sayısı girilir.

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.

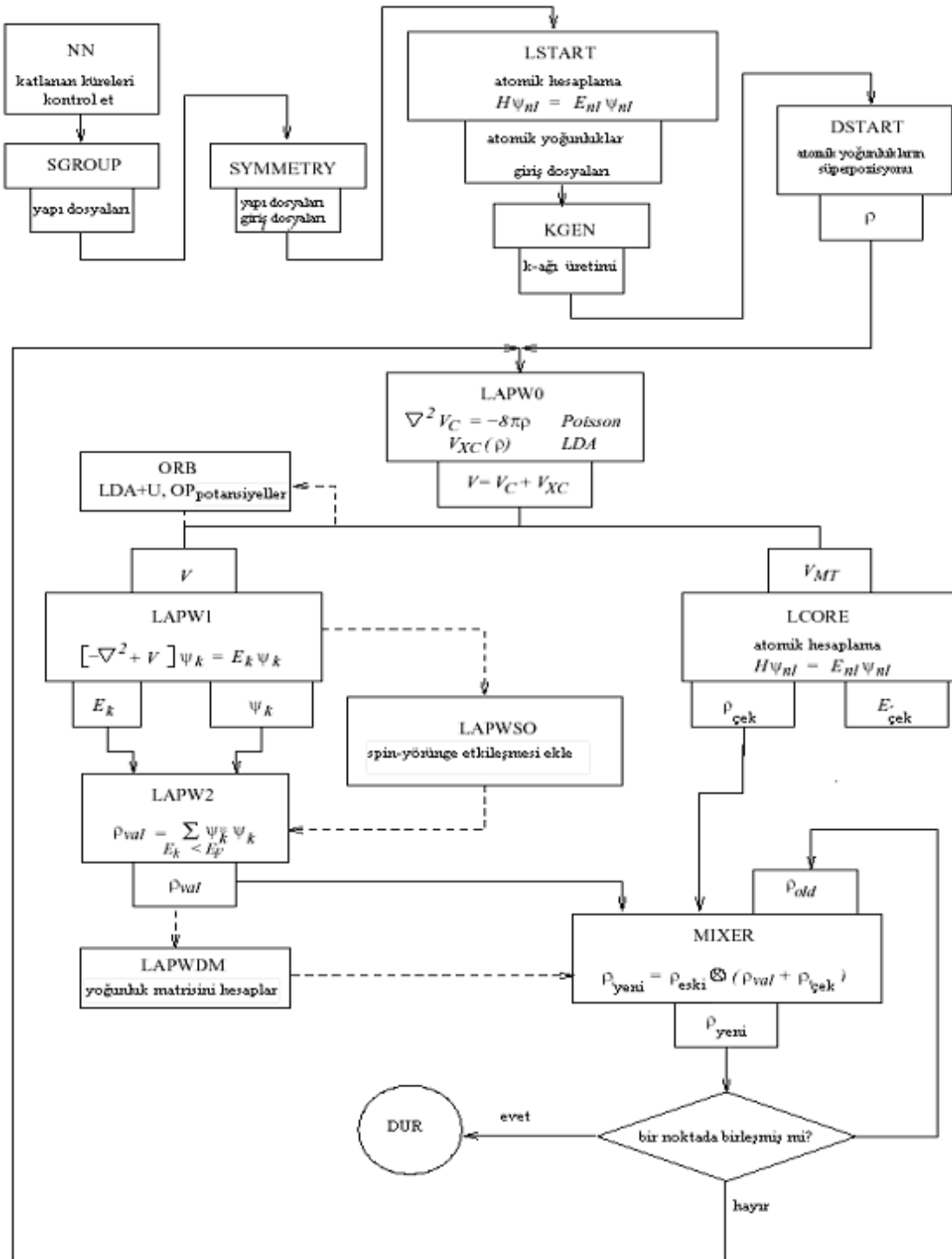


(a)



(b)

Şekil 4.4 Fe-Al için (a) Kübik birim hücre (b) $1 \times 1 \times 2$ 'lik süper örgü yapısı (XCRYSDEN ile çizildi) [37].



Şekil 4.5 Wien2k programının akış şeması [12].

5. TiC, bcc Fe, Fe-Al ve SUPERCELL Fe-Al YAPILARININ WIEN2K PROGRAMI İLE TEST EDİLMESİ

Yapılan çalışmada Wien2k programı kullanılarak TiC, Fe, Fe-Al ve supercell Fe-Al alaşımlarının yapısal özellikleri incelenmiştir. Elde edilen sonuçlar daha önceden yapılan çalışma sonuçları ile karşılaştırılmıştır.

5.1 TiC İçin Elde Edilen Sonuçların Karşılaştırılması

İlk önce TiC yapısının oluşturulması gereklidir. Bunun için Wien2k programının kullanma kılavuzundaki aşağıdaki bilgilerden yararlanılmış ve struct dosyası oluşturulmuştur.

Maddenin adı	:TiC
Örgü tipi	:NaCl
a=b=c	:4.328 Å =8.727 au
$\alpha = \beta = \gamma$:90°
Atom 1	:Ti pozisyonu (0, 0, 0) ve RMT=2.0
Atom 2	:C pozisyonu (0.5, 0.5, 0.5) ve RMT =1.9

Elde edilen struct dosyası aşağıdaki gibidir.

TiC

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

MODE OF CALC=RELA unit=ang

8.442749 8.442749 8.442749 90.000000 90.000000 90.000000

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

MULT= 1 ISPLIT= 2

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

LOCAL ROT MATRIX: 1.0000000 0.0000000 0.0000000

0.0000000 1.0000000 0.0000000

0.0000000 0.0000000 1.0000000

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

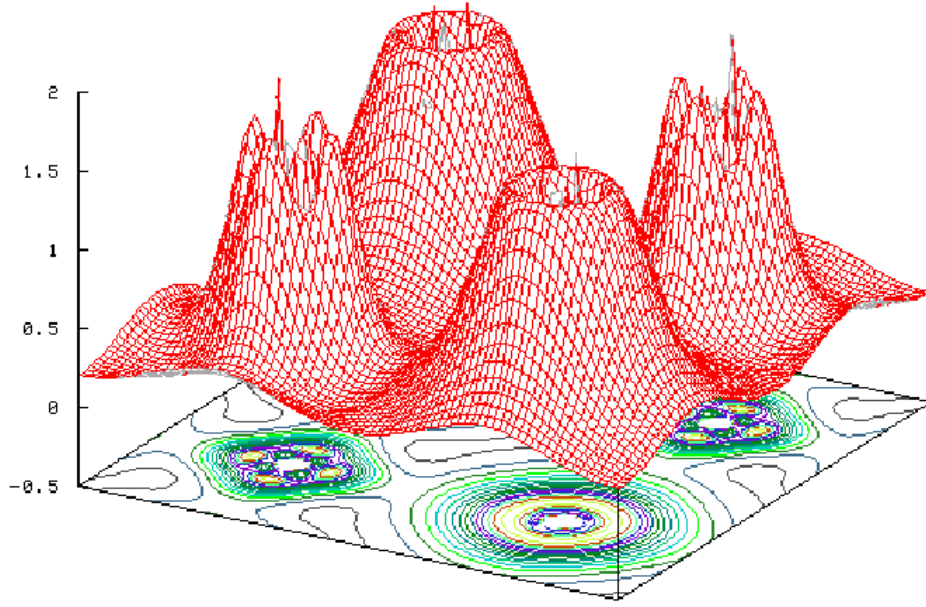
MULT= 1 ISPLIT= 2

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

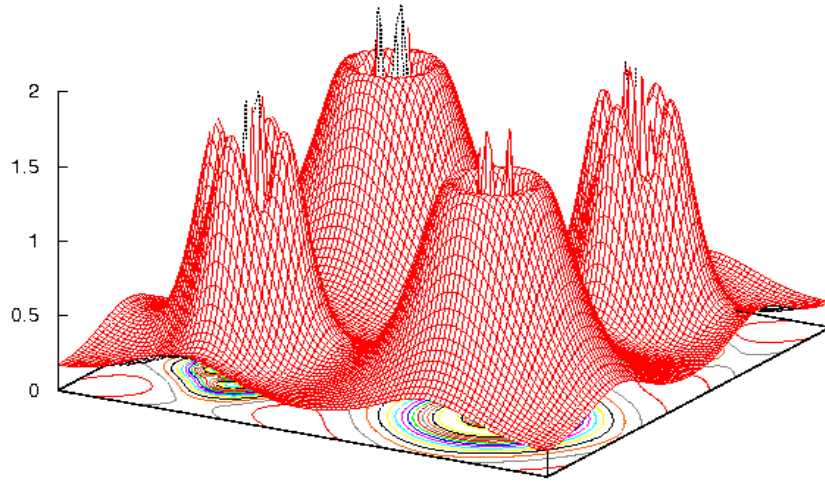
LOCAL ROT MATRIX: 1.0000000 0.0000000 0.0000000

Bundan sonra Bölüm 4'te anlatıldığı gibi işlem adımları takip edilerek program çalıştırıldı. Ancak program çalıştırılırken, 13 GGA ve kesme enerjisi -6.0 Ry alındı. Ayrıca kgen 1000 k noktası alınmış ve Emax değeri 2,5 Ry olarak değiştirilmiştir.

Program kullanma kılavuzundaki adımlar takip edilerek çalıştırıldığında aşağıdaki sonuçlara ulaşılmıştır. Şimdi bu sonuçları kılavuzdaki sonuçlarla kıyaslayalım.

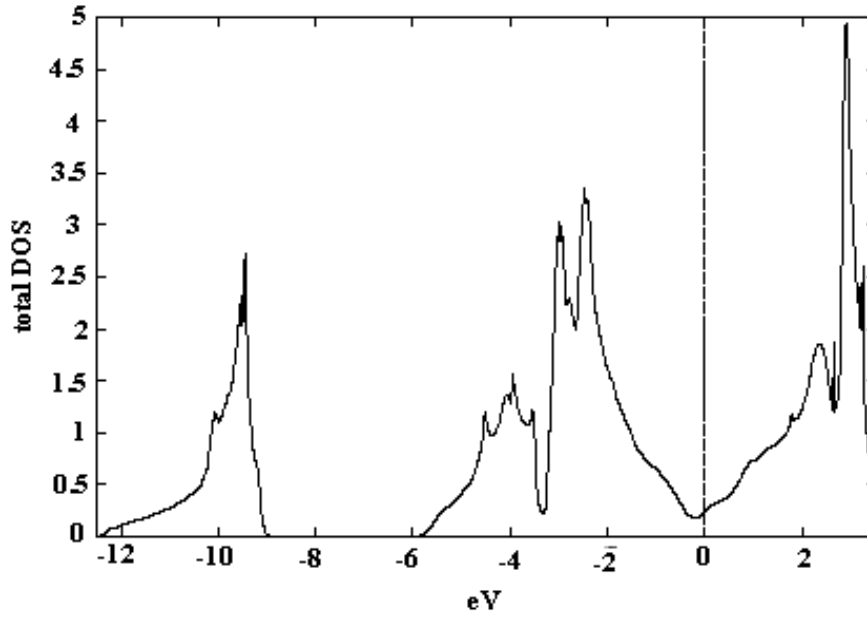


(a)

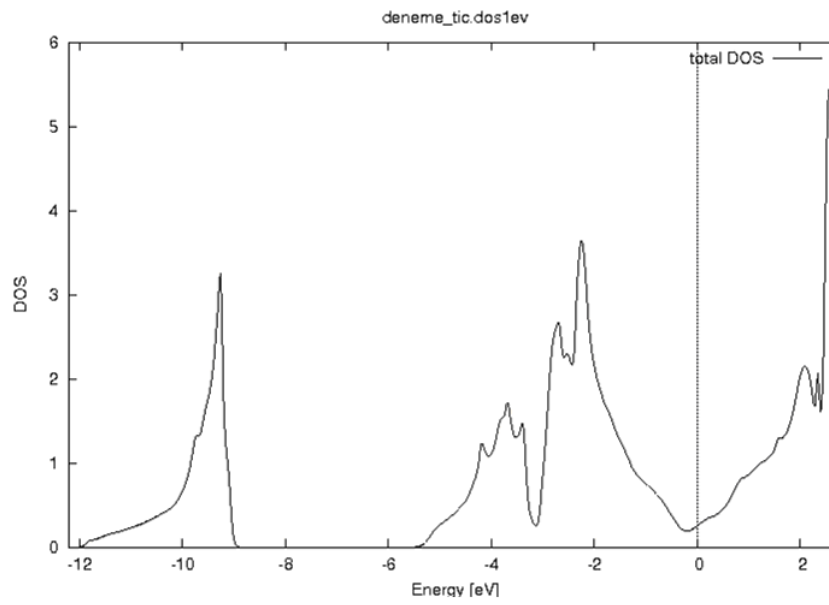


(b)

Şekil 5.1 (a) Programın kullanma kılavuzunda yer alan TiC a ait elektron yoğunluğu grafiği [15]. **(b)** Program çalıştırılarak elde edilen TiC için elektron yoğunluğu grafiği.



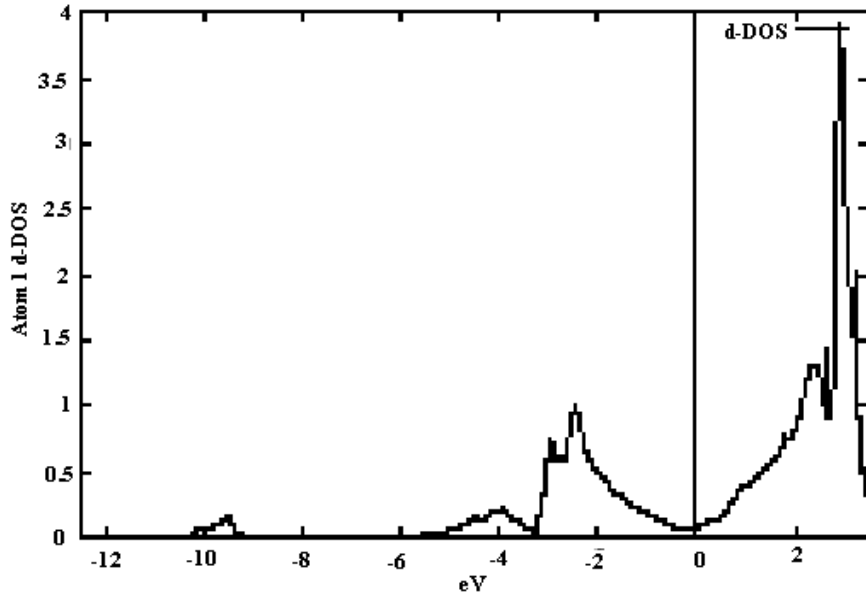
(a)



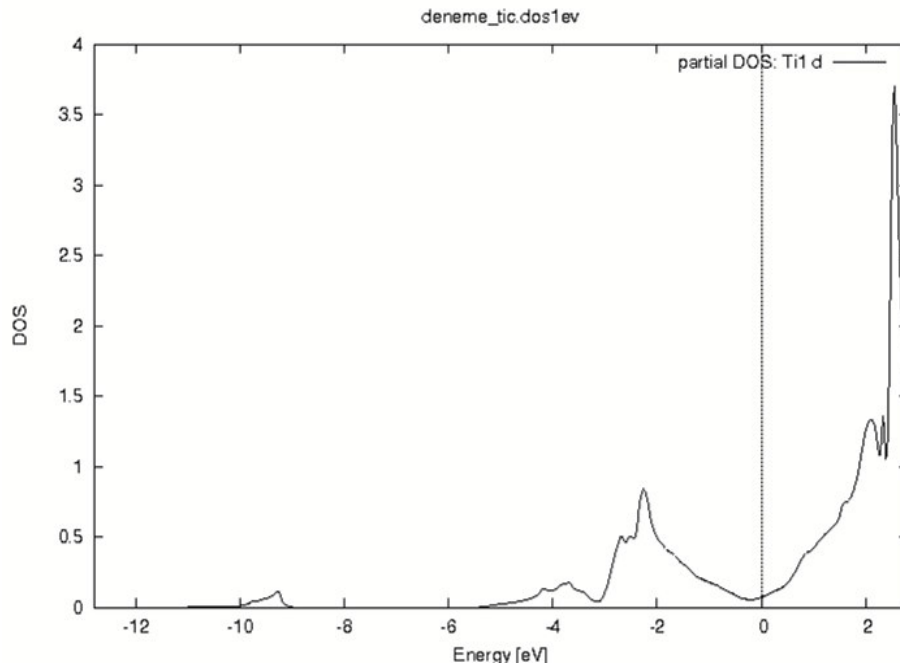
(b)

Şekil 5.2 (a) Programın kullanma kılavuzunda yer alan TiC a ait toplam DOS grafiği [20].

(b) Program çalıştırılarak elde edilen TiC için toplam DOS grafiği.



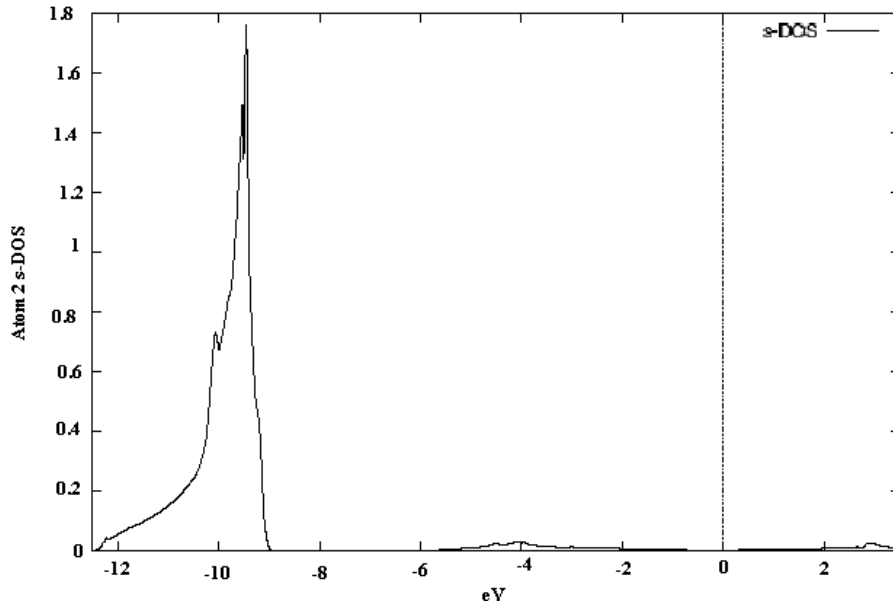
(a)



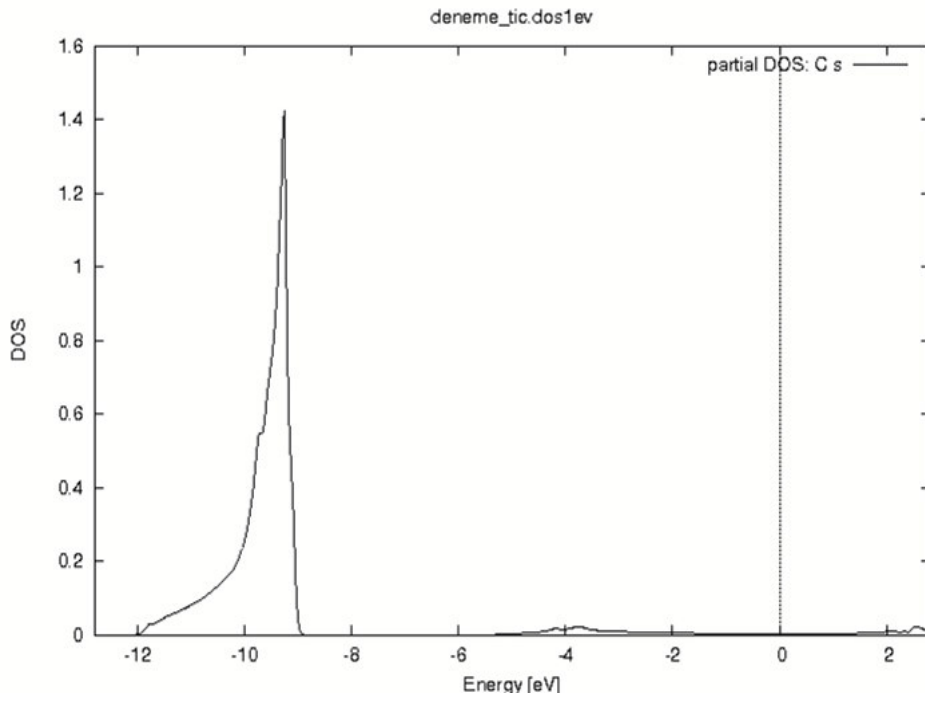
(b)

Şekil 5.3 (a) Programın kullanma kılavuzunda yer alan TiC'da 1. atoma ait d-DOS grafiği [38].

(b) Program çalıştırılarak elde edilen TiC'da 1. atoma ait d-DOS grafiği.



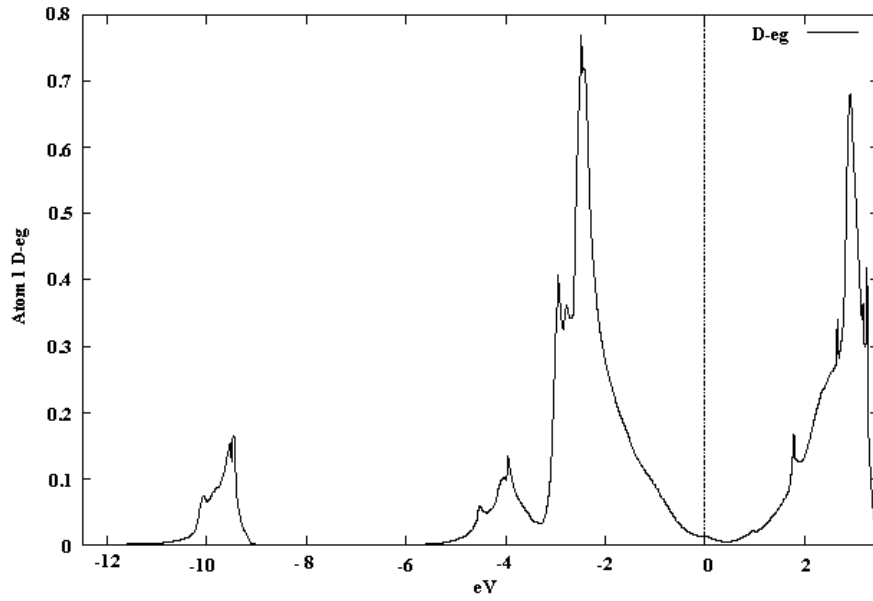
(a)



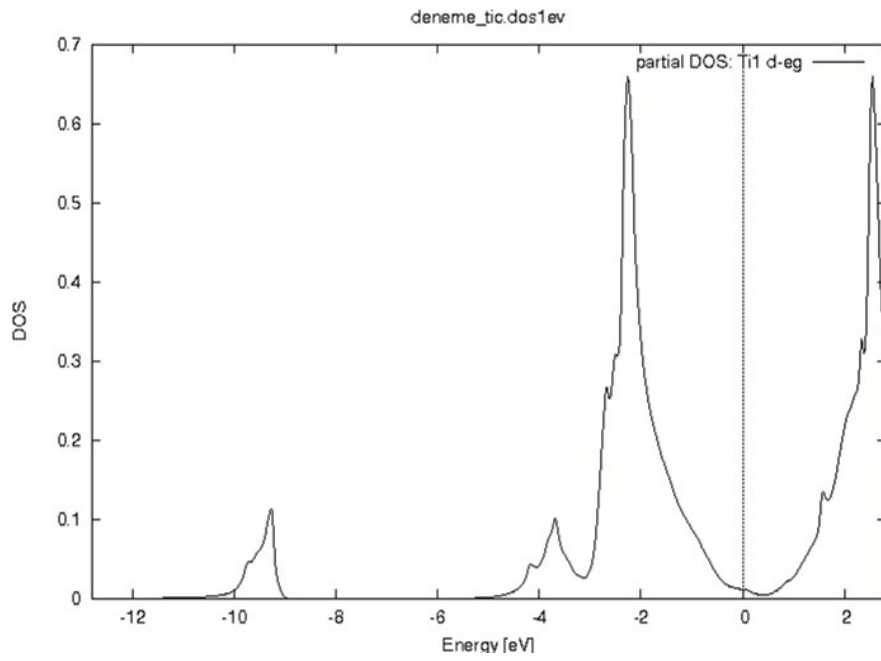
(b)

Şekil 5.4 (a) Programın kullanma kılavuzunda yer alan TiC'da 2. atoma ait s-DOS grafiği [38].

(b) Program çalıştırılarak elde edilen TiC'da 2. atoma ait s-DOS grafiği.

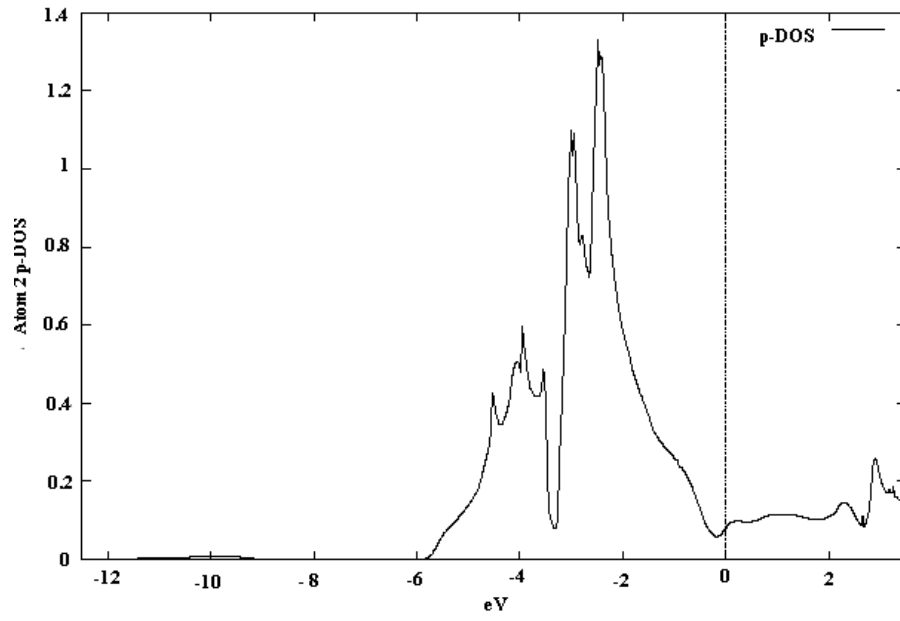


(a)

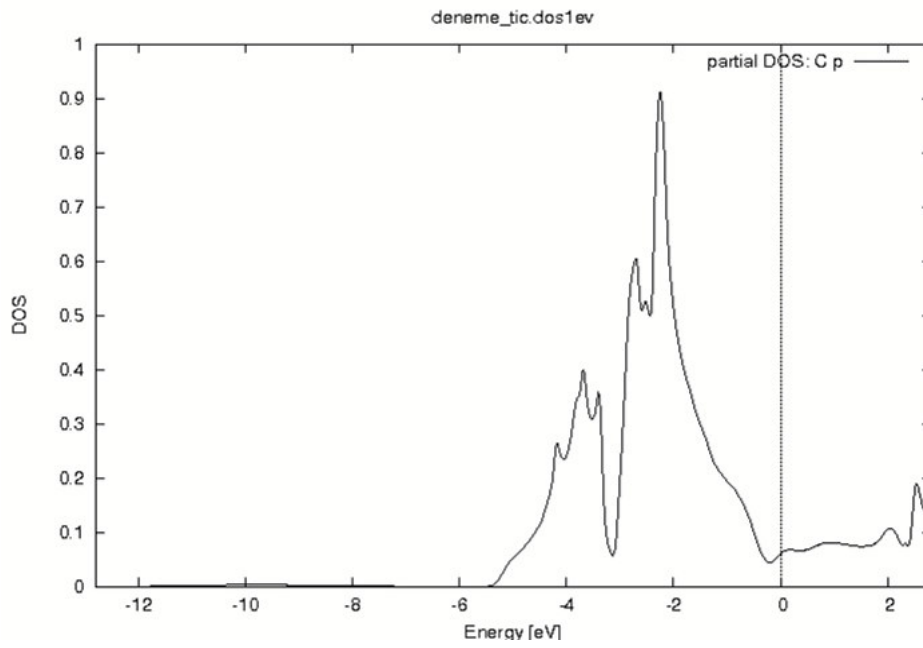


(b)

Şekil 5.5 (a) Programın kullanma kılavuzunda yer alan TiC'da 1. atoma ait eg-DOS grafiği [38]. **(b)** Program çalıştırılarak elde edilen TiC'da 1. atoma ait eg-DOS grafiği.



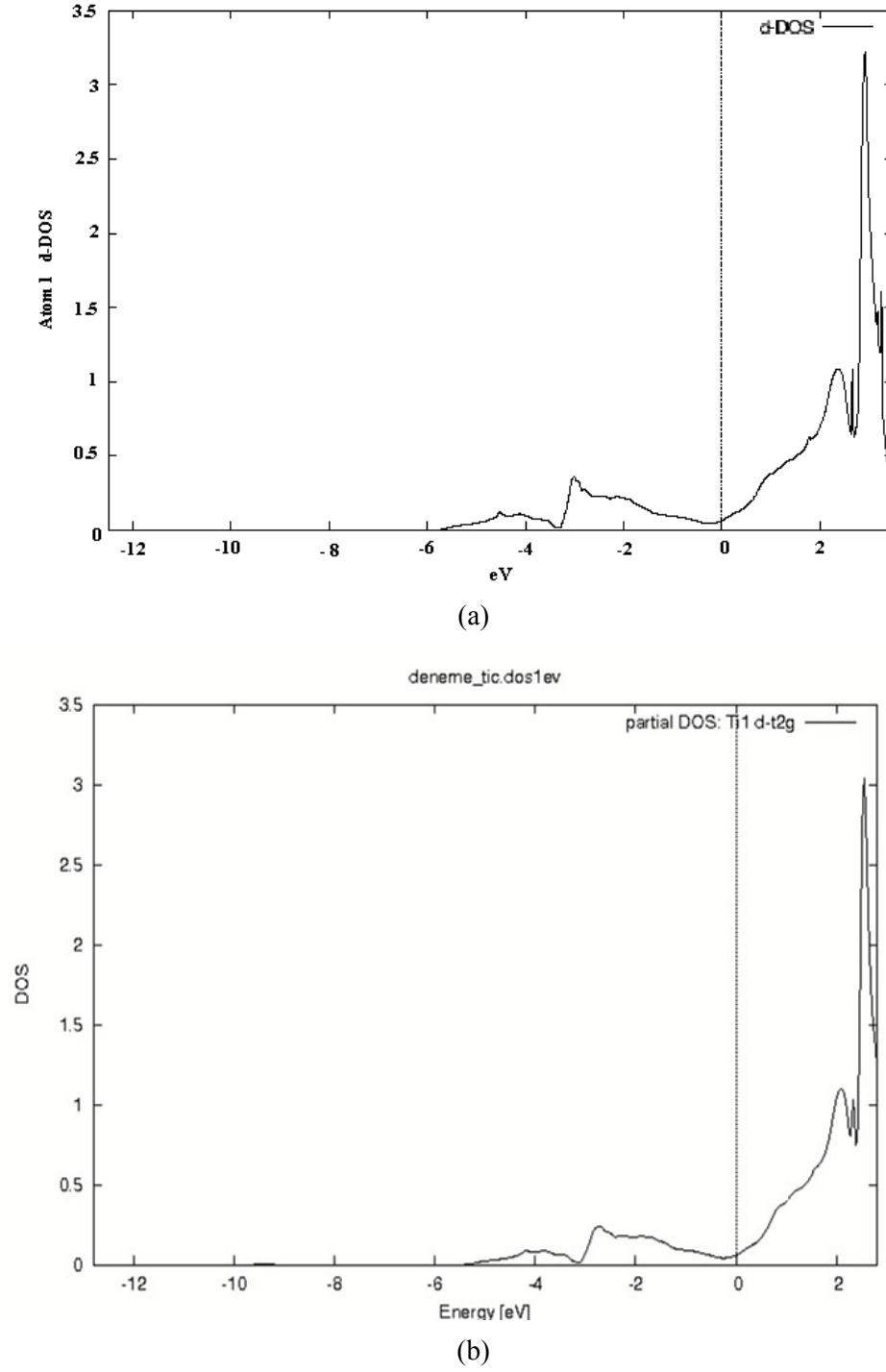
(a)



(b)

Şekil 5.6 (a) Programın kullanma kılavuzunda yer alan TiC'da 2. atoma ait p-DOS grafiği [38].

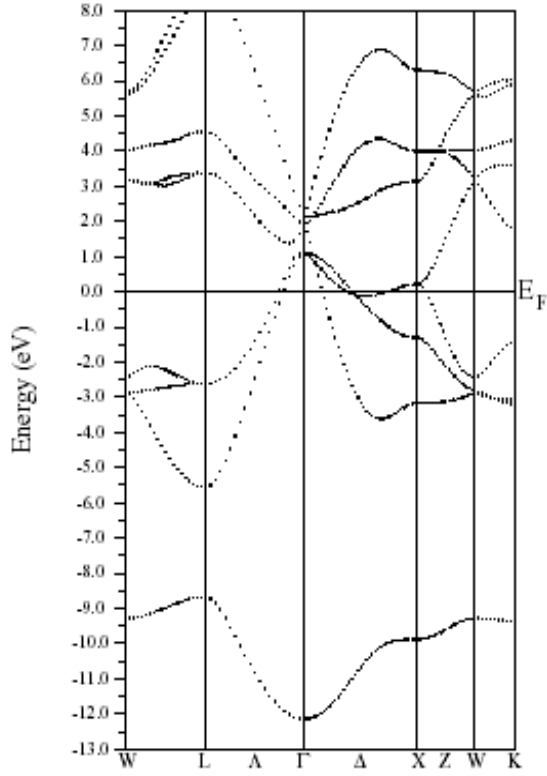
(b) Program çalıştırılarak elde edilen TiC'da 2. atoma ait p-DOS grafiği.



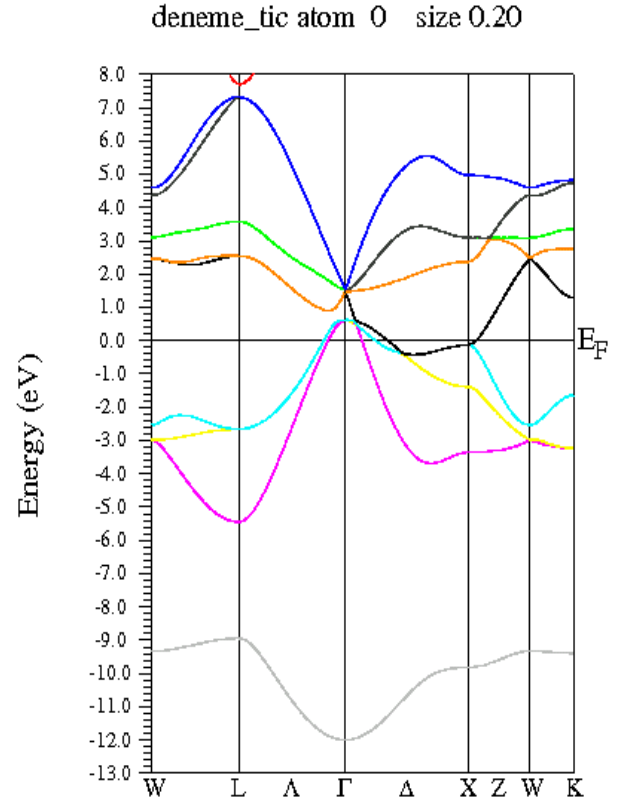
Şekil 5.7 (a) Programın kullanma kılavuzunda yer alan TiC'da 1. atoma ait d-eg grafiği [38].

(b) Program çalıştırılarak elde edilen TiC'da 1. atoma ait d-eg grafiği.

TiC için bant yapısı grafiği w2web ara yüzü üzerinden Wien2k programı çalıştırılarak çizilmiştir. Burada elde edilen grafik ve kullanma kılavuzundaki grafik aşağıdaki gibi karşılaştırılabilir.



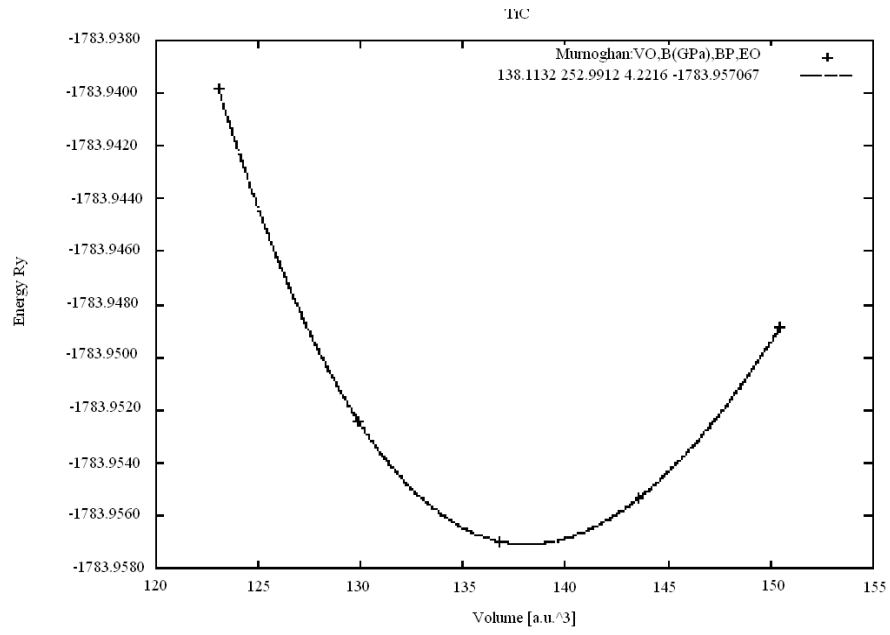
(a)



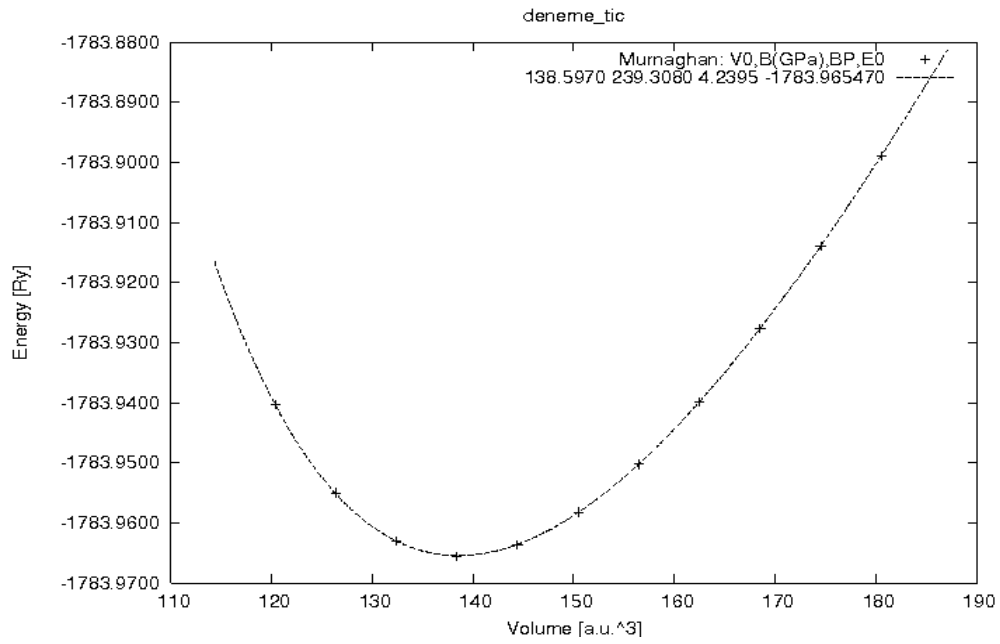
(b)

Şekil 5.8 (a) Wien2k programın kullanma kılavuzunda TiC için verilen bant yapısı grafiği [38].

(b) Program w2web ara yüzü üzerinden çalıştırılarak elde edilen TiC bant yapısı grafiği.



(a)



(b)

Şekil 5.9 (a) Wien2k programının kullanma kılavuzunda TiC için verilen hacim grafiği
(b) Program çalıştırılarak elde edilen hacim grafiği.

5.2 BCC Fe İçin Wien2k Programının Çalıştırılması Sonucunda Elde Edilen Sonuçlar

Bu uygulama için önce struct dosyası oluşturulmuştur. Bunun için aşağıdaki bilgiler kullanılmıştır.

Yapının adı: bcc Fe

Örgü tipi : B

a=b=c : 2.87 Å =5.78 au

$\alpha = \beta = \gamma : 90^\circ$

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

Bu veriler kullanılarak elde edilen struct yapısı aşağıdaki gibidir.

Fe

B LATTICE,NONEQUIV.ATOMS: 1

MODE OF CALC=RELA unit=bohr

5.75632 5.75632 5.75632 90.00000 90.00000 90.00000

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

MULT= 1 ISPLIT= 2

Fe NPT= 781 R0=0.00005000 RMT= 1.75 Z: 26.0

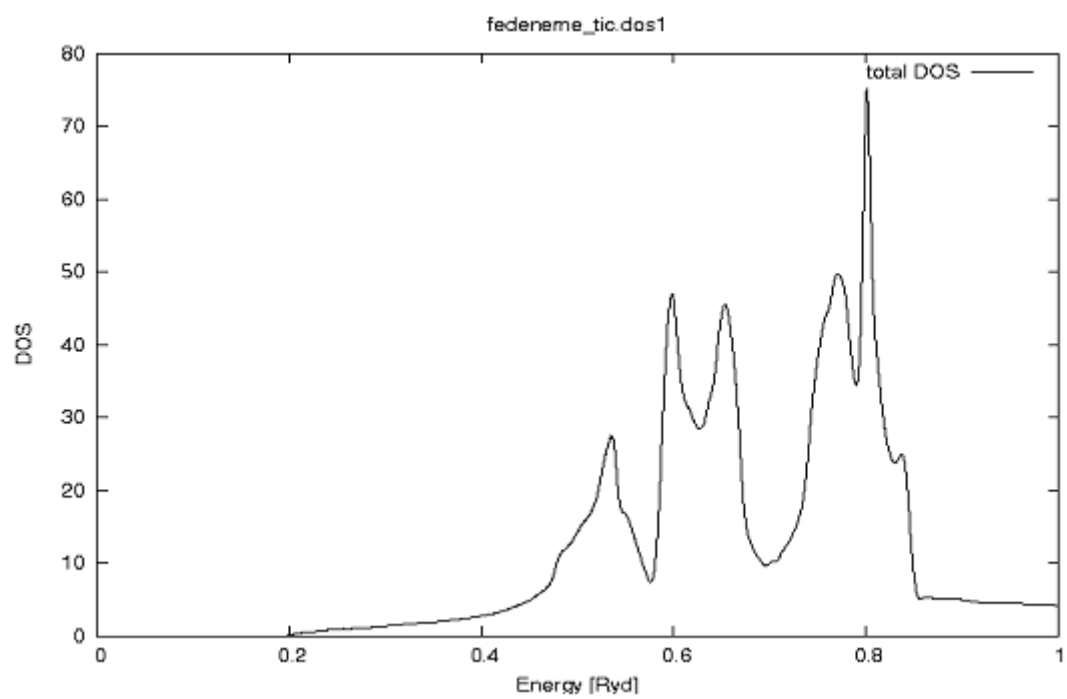
LOCAL ROT MATRIX: 1.0000000 0.0000000 0.0000000

0.0000000 1.0000000 0.0000000

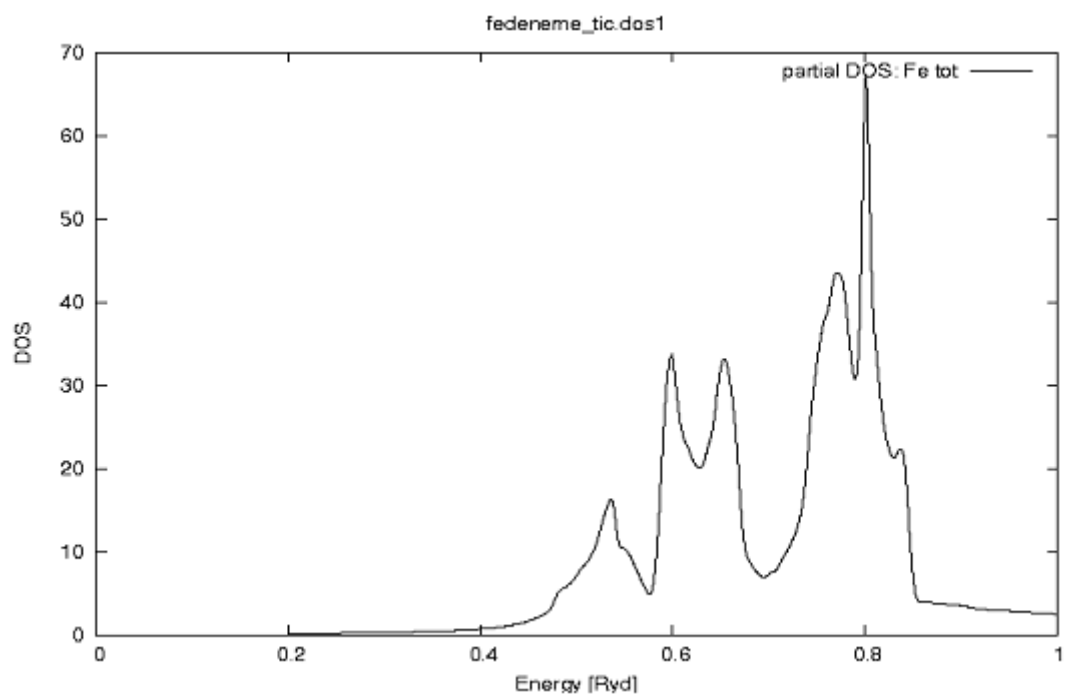
0.0000000 0.0000000 1.0000000

48 NUMBER OF SYMMETRY OPERATIONS

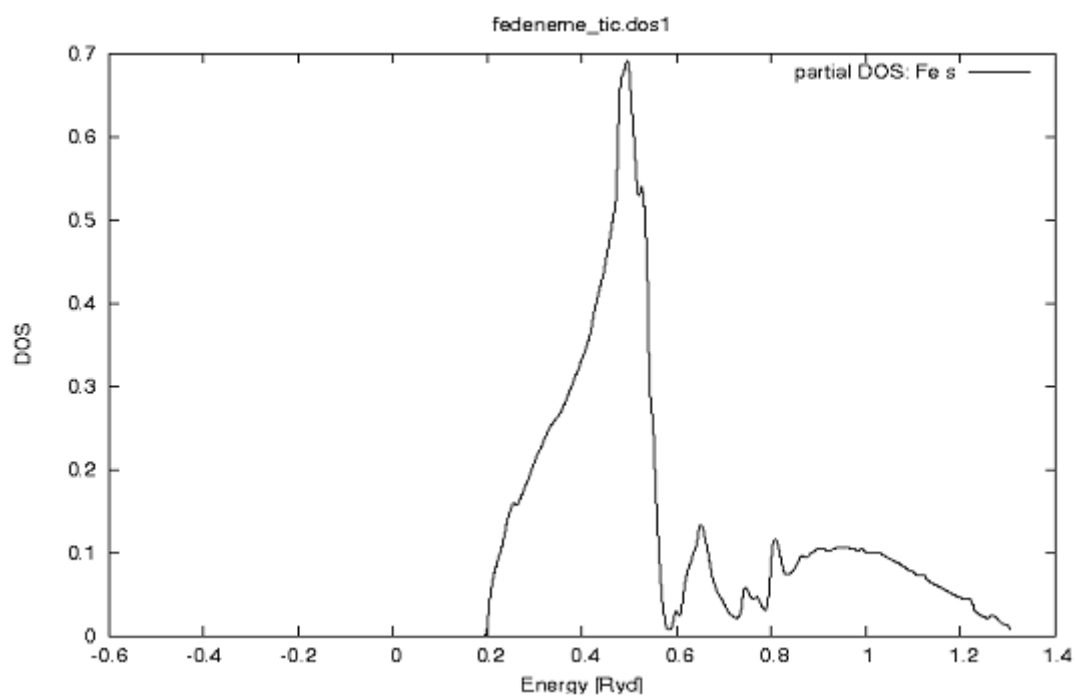
Bundan sonra Bölüm 4'te anlatıldığı gibi program çalıştırılmıştır. Ancak program çalıştırılırken, 13 GGA ve kesme enerjisi -6.0 Ry alındı. Ayrıca kgen 1000 k noktası alınmış ve Emax değeri 2,5 Ry olarak değiştirilmiştir. Bu işlemlerden sonra durum yoğunluğu (DOS), elektron yoğunluğu, bant yapısı, enerji-hacim grafikleri çizdirilerek elastik sabitler hesaplanmıştır. Elde edilen sonuçlar ise aşağıda verilmiştir.



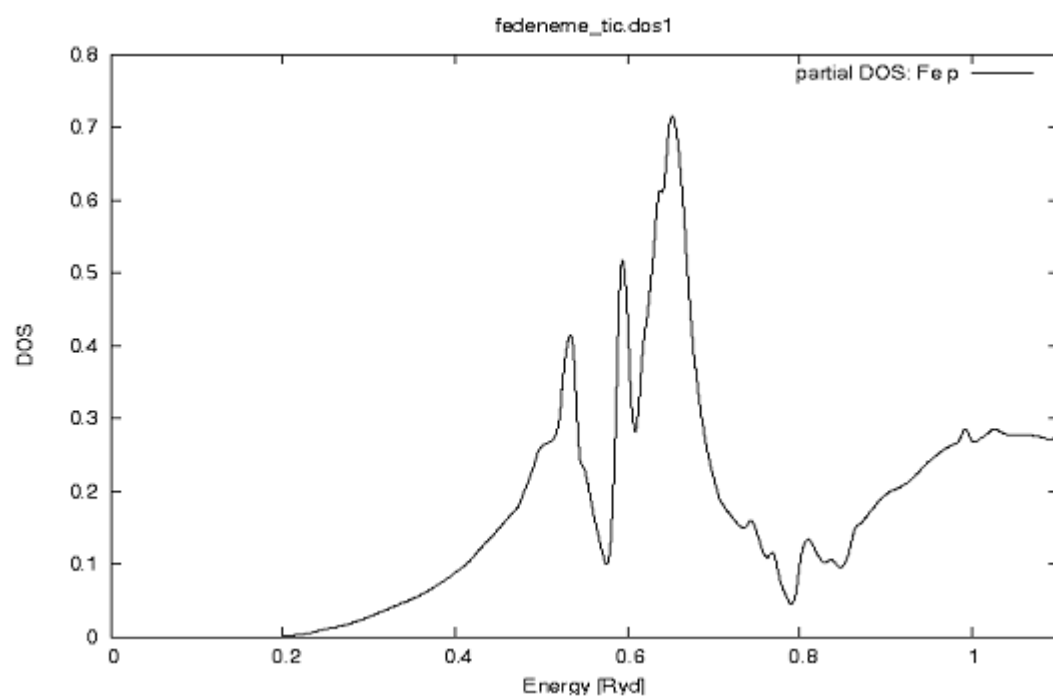
(a)



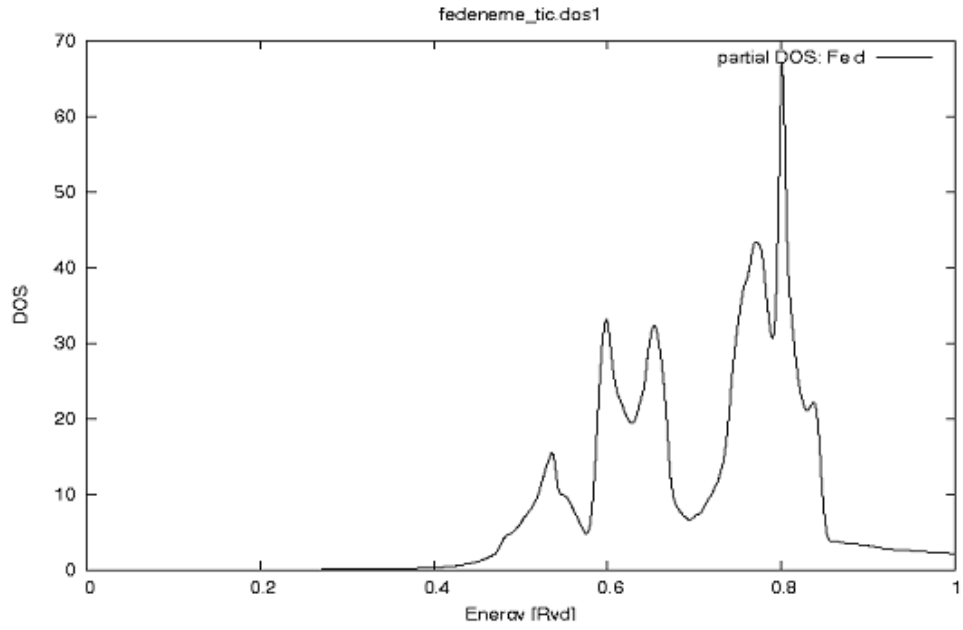
(b)



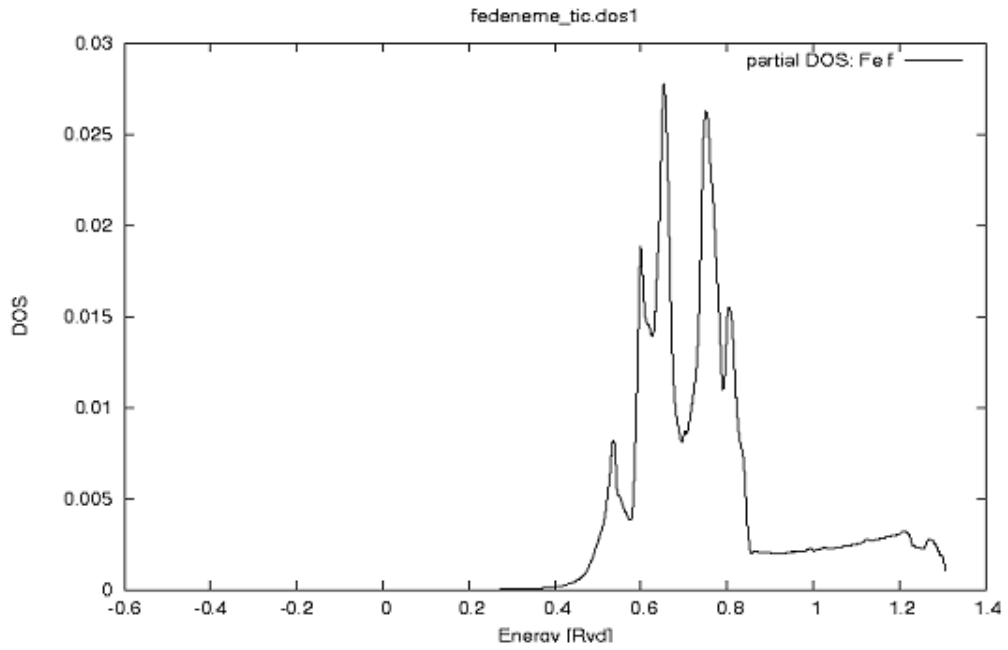
(c)



(d)

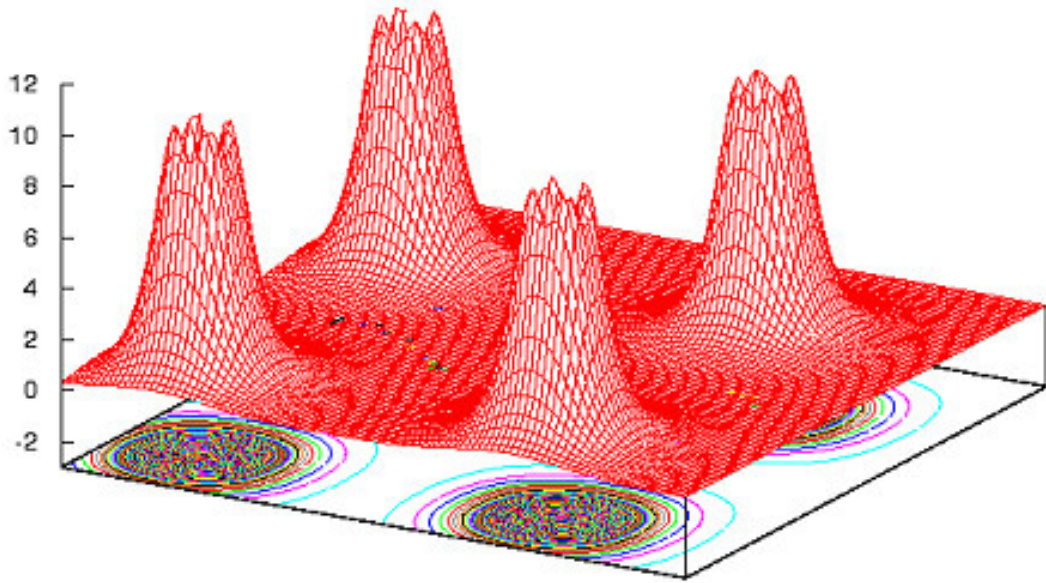


(e)

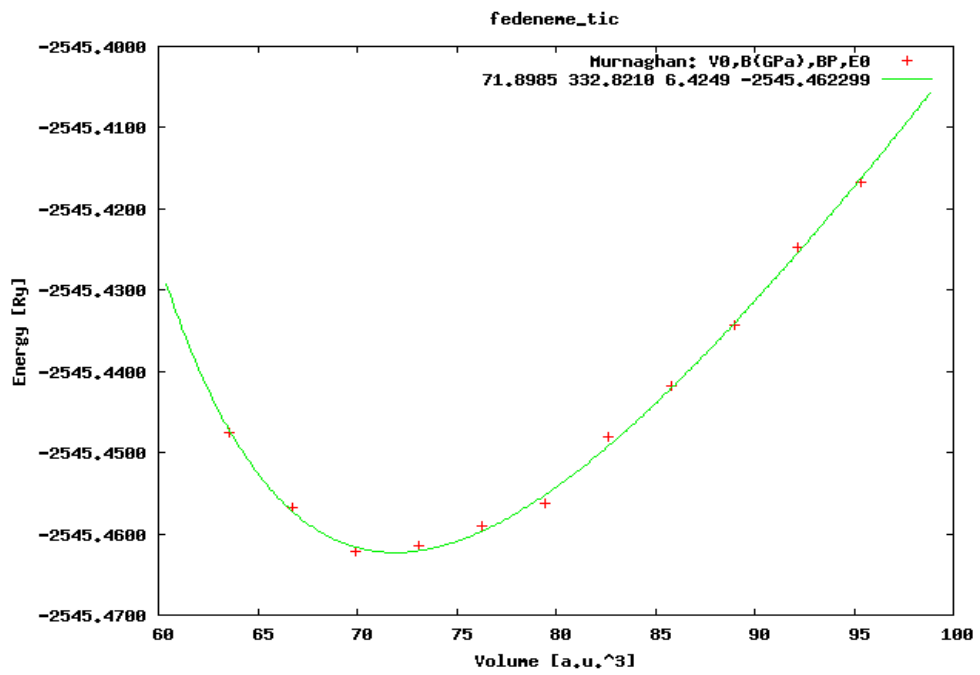


(f)

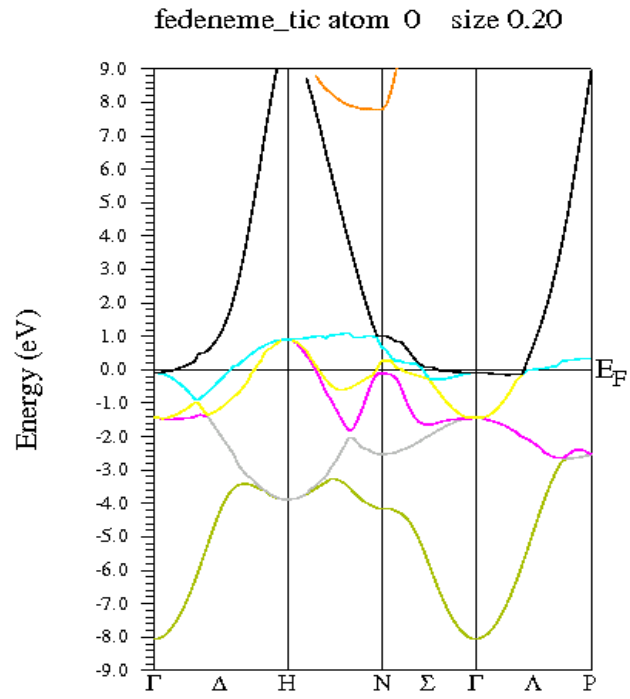
Şekil 5.10 (a) bcc Fe toplam DOS grafiği (b) bcc Fe tot-Dos grafiği (c) bcc Fe s-DOS grafiği (d) bcc demir için Fe-p DOS grafiği (e) bcc Fe için Fe-d grafiği (f) bcc Fe için Fe-f grafiği.



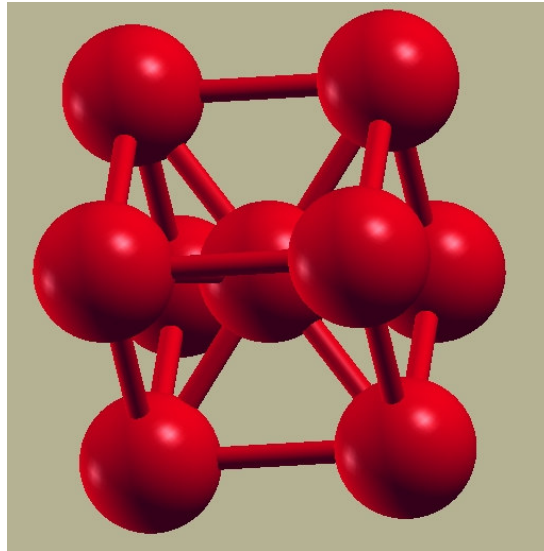
Şekil 5.11 bcc Fe için elde edilen elektron yoğunluğu grafiği.



Şekil 5.12 bcc Fe için elde edilen hacim grafiği.



Şekil 5.13 bcc Fe için bant yapısı grafiği.



Şekil 5.14 bcc Fe için birim hücre (XCRYSDEN ile çizildi).

5.3 Fe-Al İin Wien2k Programının alıřtırılması Sonucunda Elde Edilen Sonular

Bu uygulama iin struct dosyası ařađıdaki gibi oluřturulmuřtur. Bundan sonra struct dosyası kullanılmıř ve Blm 4'te anlatılan standart adımlar takip edilerek program alıřtırılmıřtır.

Fe-Al

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

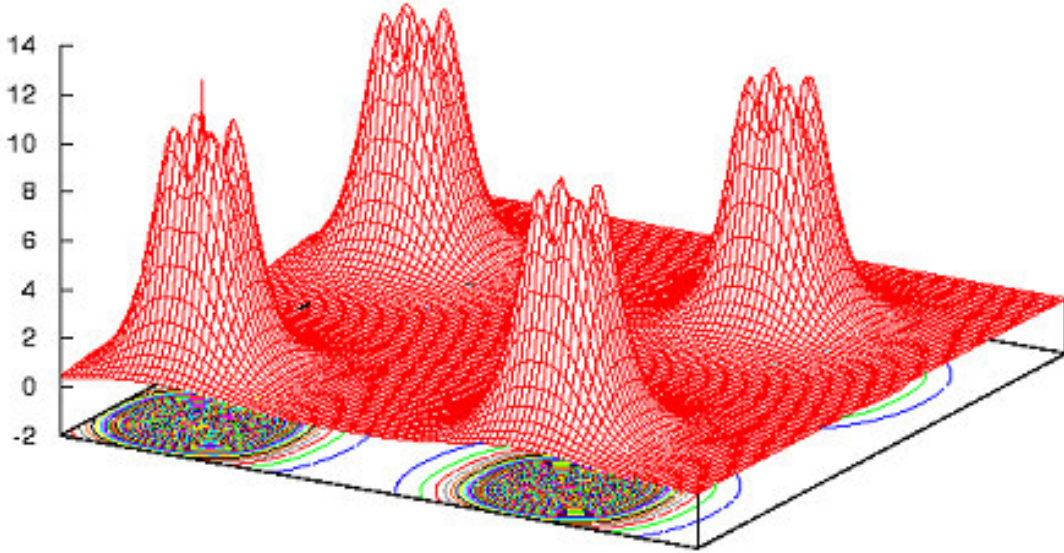
LOCAL ROT MATRIX: 1.0000000 0.0000000 0.0000000

0.0000000 1.0000000 0.0000000

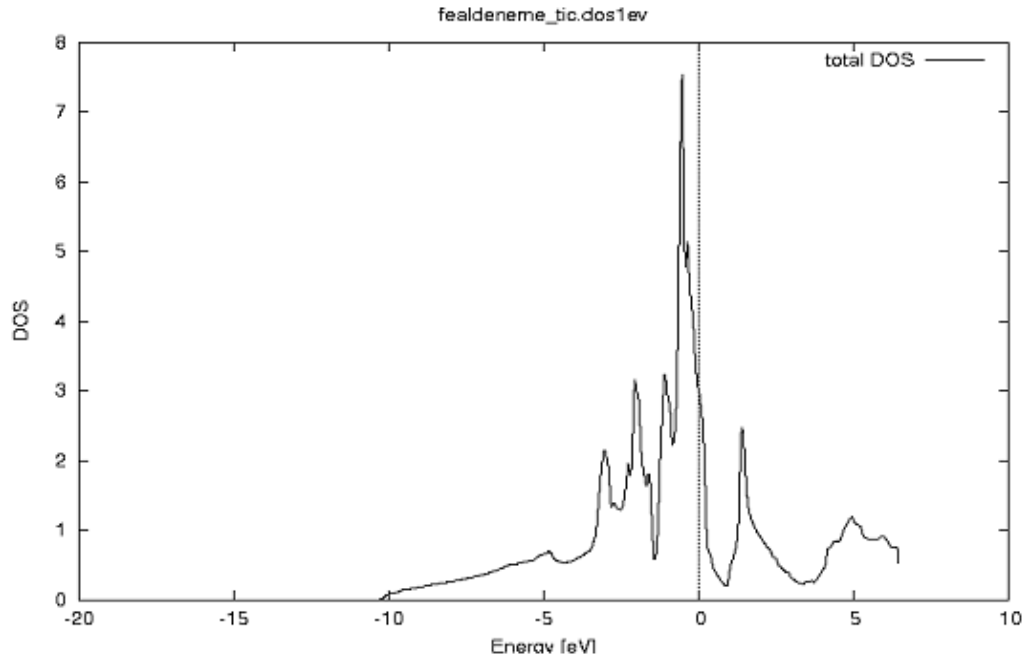
0.0000000 0.0000000 1.0000000

48 NUMBER OF SYMMETRY OPERATIONS

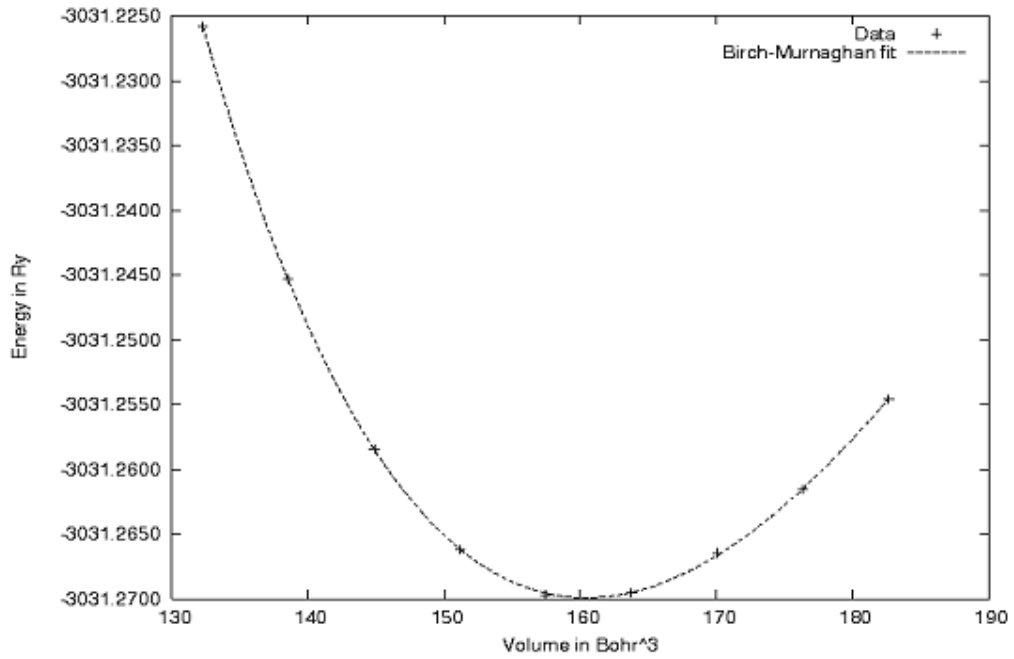
Struct dosyası kullanılarak programın çalıştırılması ile elde edilen elektron yoğunluğu, durum yoğunluğu (DOS), hacim ve bant yapısı ile ilgili grafikler aşağıdaki gibidir.



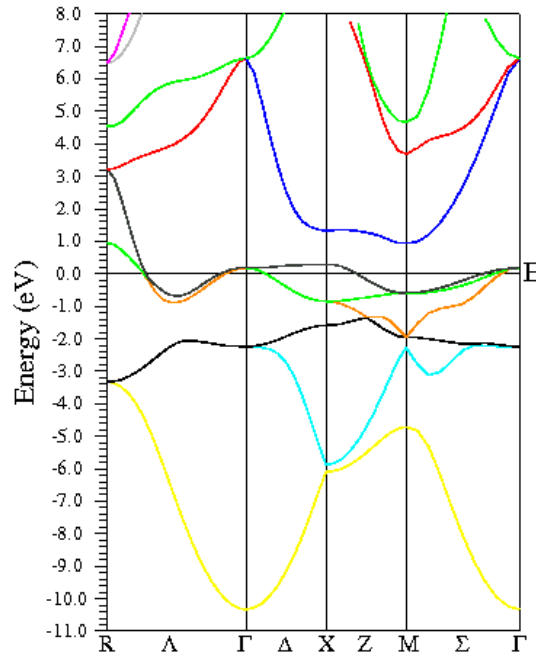
Şekil 5.15 Fe-Al alaşımı için Wien2k programı kullanılarak elde edilen elektron yoğunluğu grafiği.



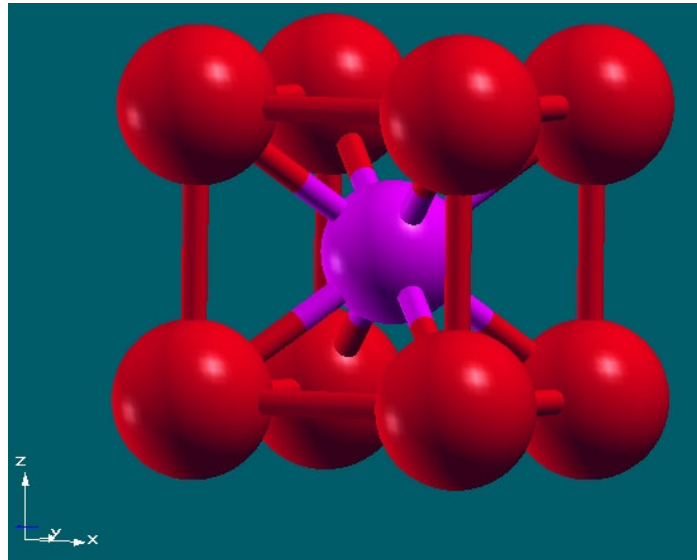
Şekil 5.16 Fe-Al alaşımı için Wien2k programı kullanılarak elde edilen toplam DOS grafiği.



Şekil 5.17 Fe-Al alaşımı için Wien2k programı kullanılarak elde edilen hacim grafiği.



Şekil 5.18 Fe-Al alaşımının Wien2k programı kullanılarak elde edilen bant yapısı.



Şekil 5.19 Fe-Al alaşımının XCRYSDEN programı kullanılarak çizdirilen birim hücresi.

5.4 Supercell Fe-Al İin Wien2k Programının alıřtırılması Sonucunda Elde Edilen Sonular

İki demir iki alüminyum atomundan oluřan supercell durumu iin struct yapısı oluřturulur. Bunu iin Bölüm 4'deki adımlar takip edilir. Supercell Fe-Al yapısının struct dosyası, Fe-Al yapısının struct dosyası kullanılarak elde edilir. Ařağıda elde edilen struct dosyası bulunmaktadır.

Fe-Al

P LATTICE,NONEQUIV. ATOMS 4

MODE OF CALC=RELA unit=ang

5.400000 5.400000 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=0.00005000 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=0.00000000 Y=0.00000000 Z=0.50000000

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=0.50000000 Y=0.50000000 Z=0.25000000

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=0.50000000 Y=0.50000000 Z=0.75000000

MULT= 1 ISPLIT=-2

A12 NPT= 781 R0=0.00010000 RMT= 1.64 Z: 13.0

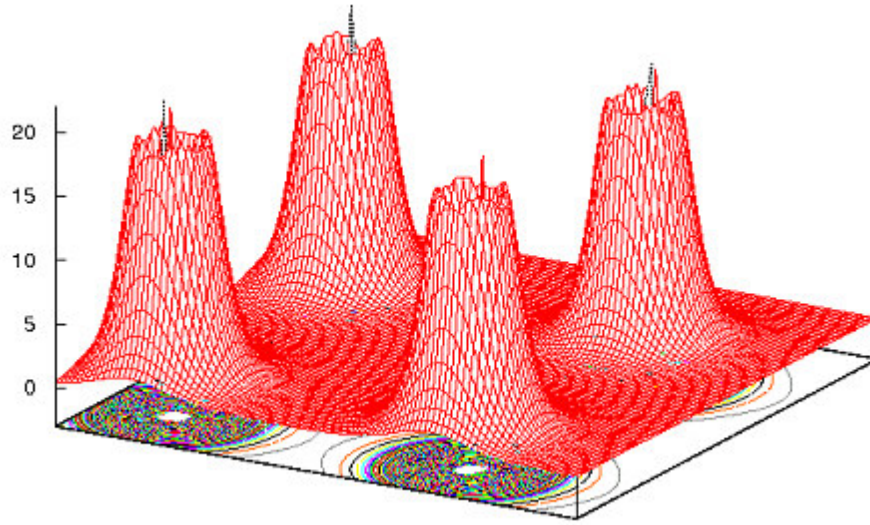
LOCAL ROT MATRIX: 1.0000000 0.0000000 0.0000000

0.0000000 1.0000000 0.0000000

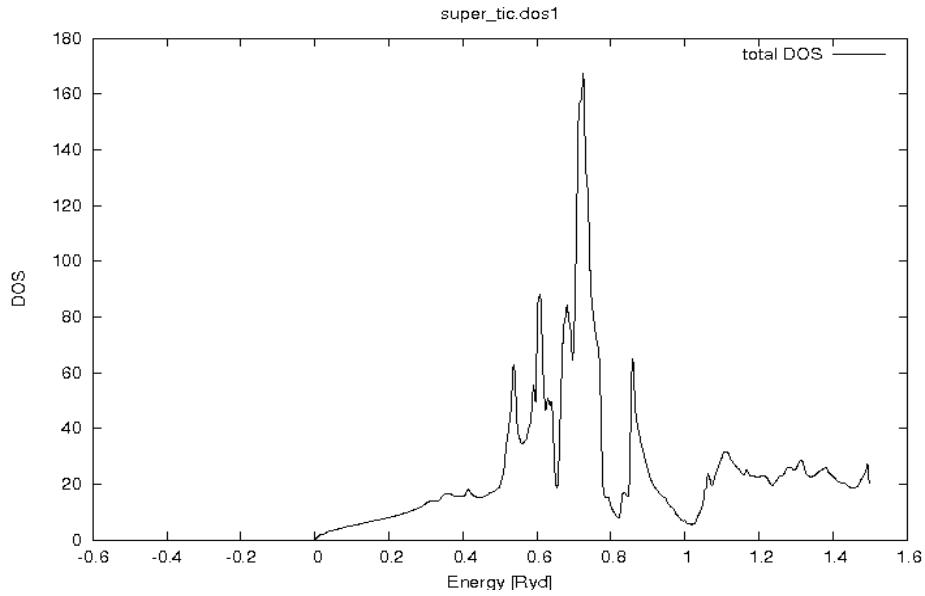
0.0000000 0.0000000 1.0000000

8 NUMBER OF SYMMETRY OPERATIONS

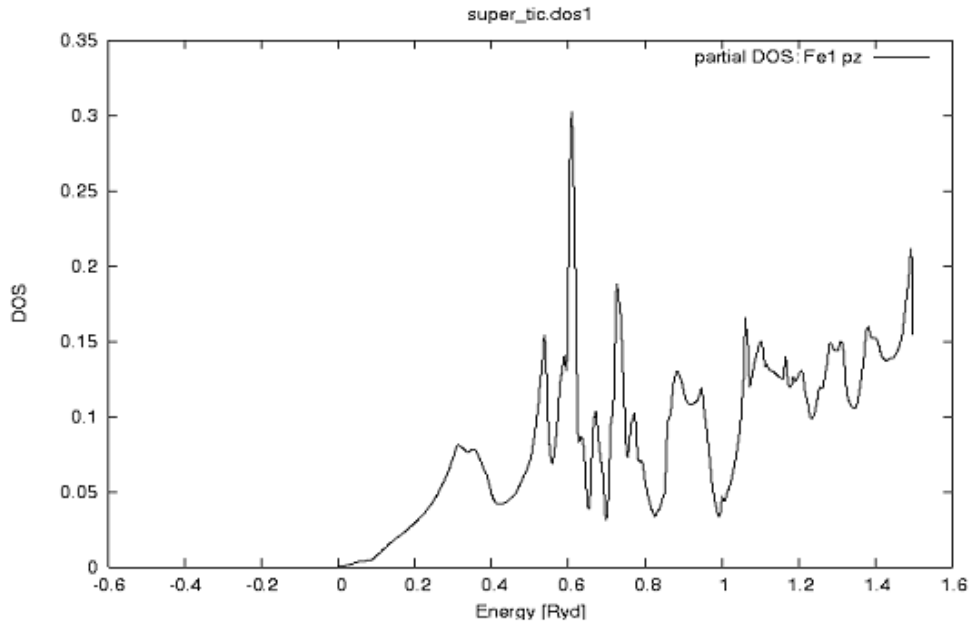
Program bundan sonra olağan şekilde çalıştırılmış ve aşağıda gösterilen elektron yoğunluğu, durum yoğunluğu (DOS), bant yapısı grafikleri elde edilmiştir.



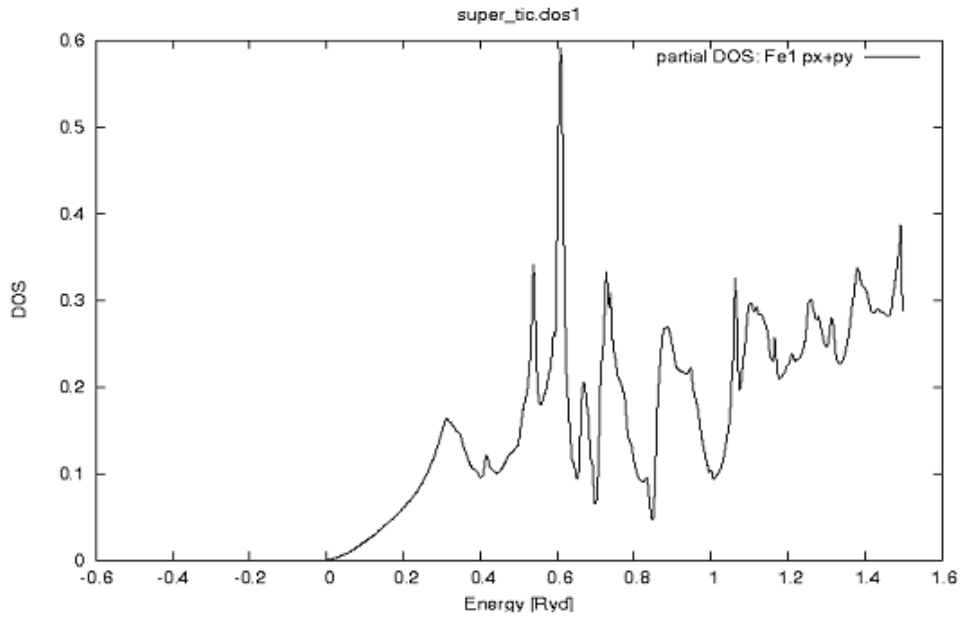
Şekil 5.20 Supercell Fe-Al alaşımının Wien2k programı kullanılarak elde edilen elektron yoğunluğu grafiği.



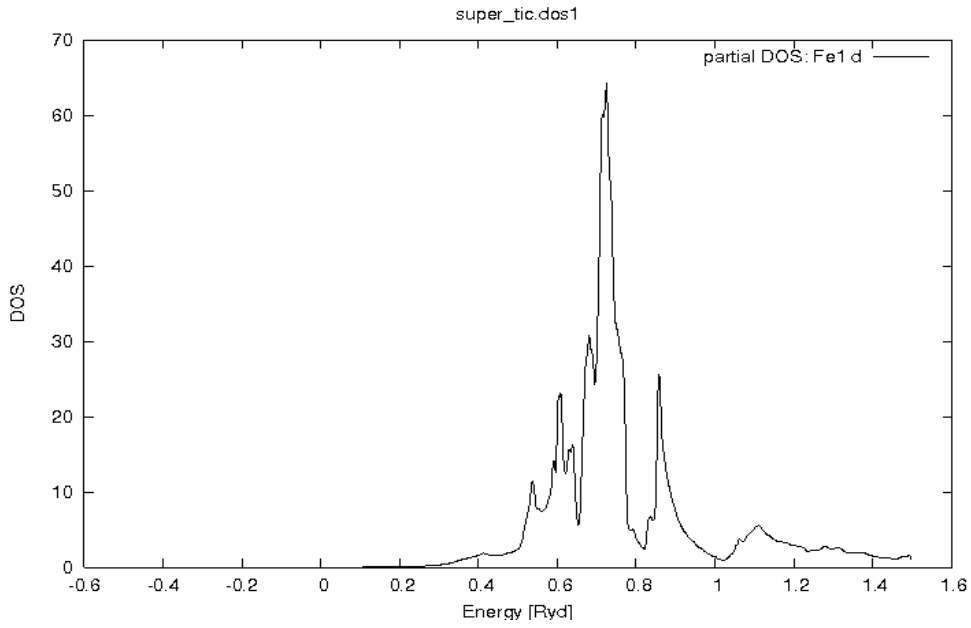
Şekil 5.21 Supercell Fe-Al alaşımının Wien2k programı kullanılarak elde edilen total DOS grafiği.



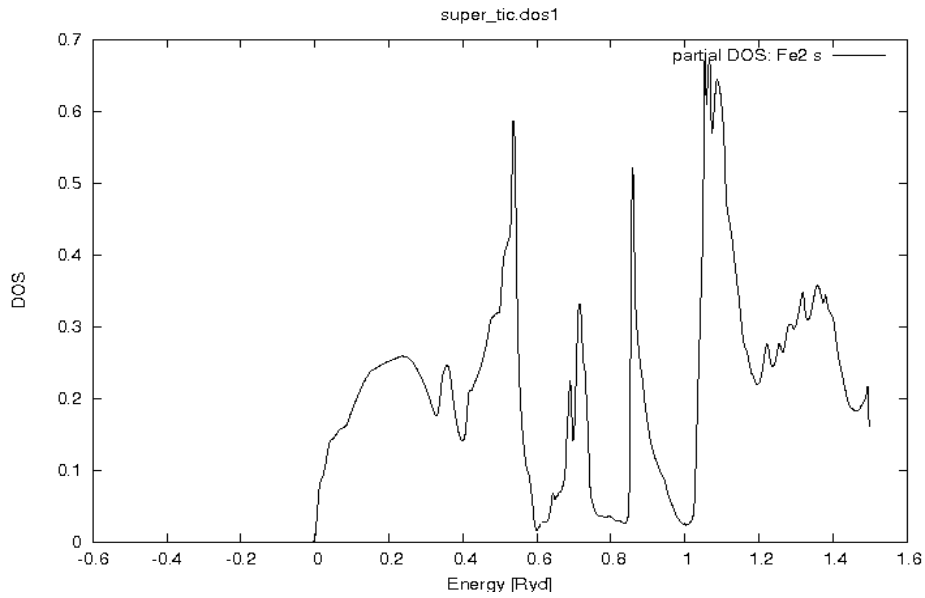
Şekil 5.22 Supercell Fe-Al alaşımının Wien2k programı kullanılarak elde edilen DOS Fe1 pz grafiği.



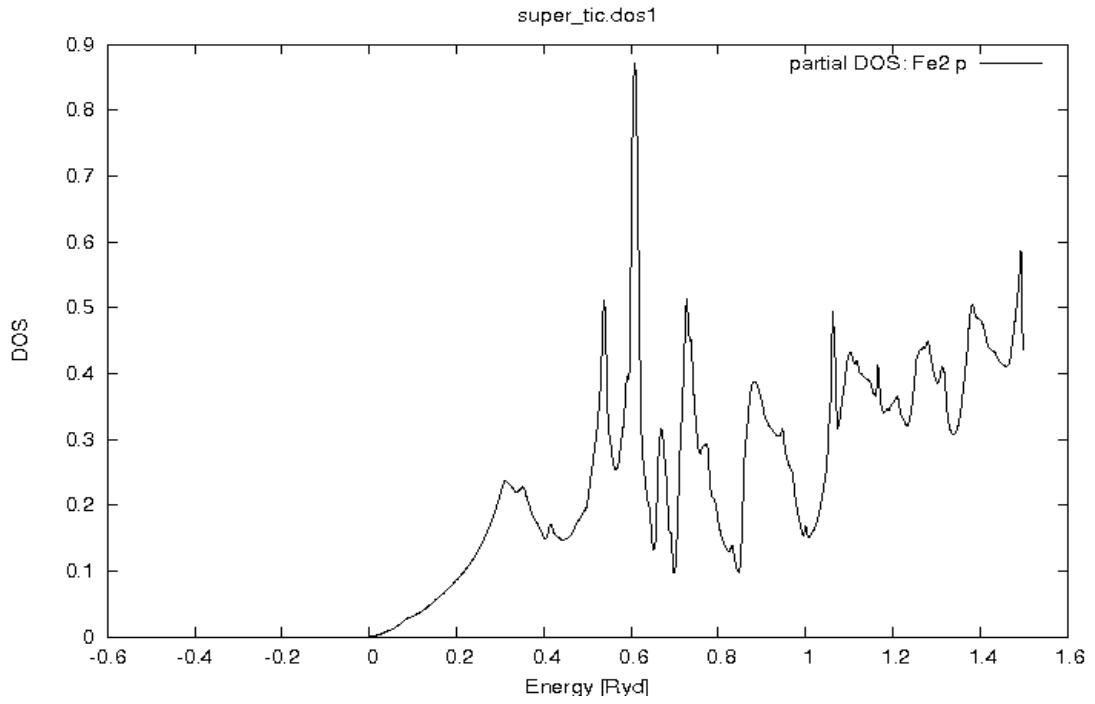
Şekil 5.23 Supercell Fe-Al alaşımının Wien2k programı ile elde edilen DOS Fe1 px+py grafiği.



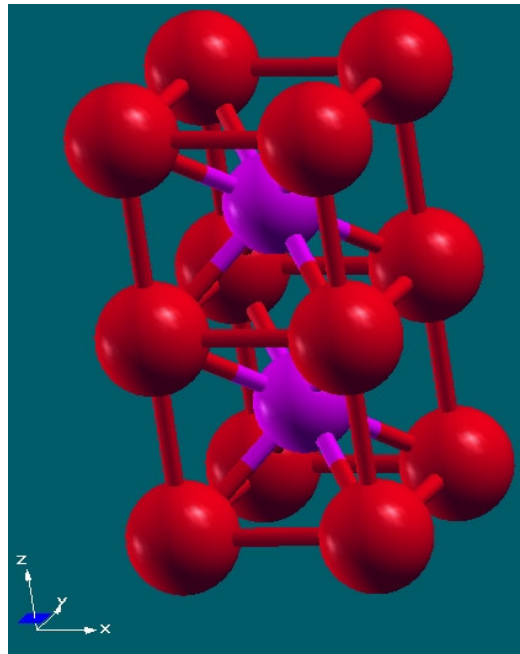
Şekil 5.24 Supercell Fe-Al alaşımının Wien2k programı kullanılarak elde edilen DOS Fe1 d grafiği.



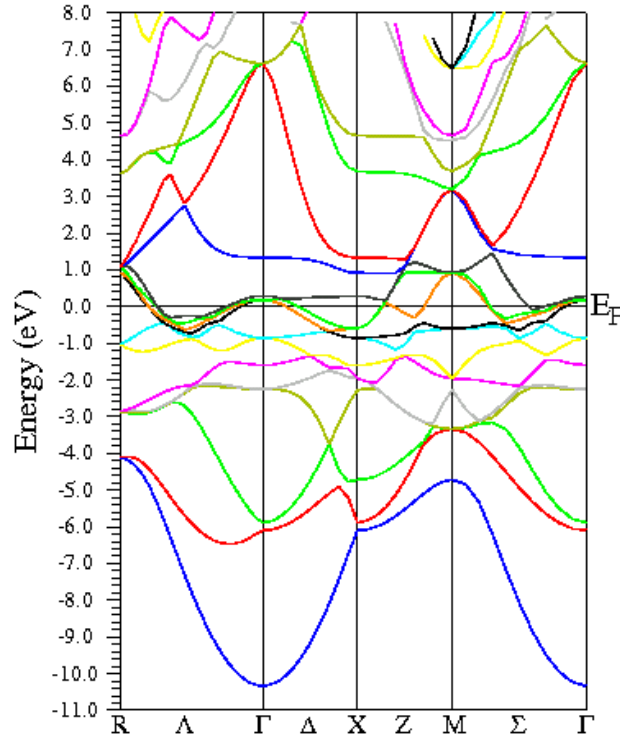
Şekil 5.25 Supercell Fe-Al alaşımının Wien2k programı kullanılarak elde edilen DOS Fe2 s grafiği.



Şekil 5.26 Supercell Fe-Al alaşımının Wien2k programı ile elde edilen DOS Fe2 p grafiği.



Şekil 5.27 Supercell Fe-Al alaşımının XCRYSDEN programı ile elde edilen birim hücresi.



Şekil 5.28 Supercell Fe-Al alaşımının Wien2k programı kullanılarak elde edilen bant yapısı grafiği.

5.5. Dört Fe Dört Al Atomundan Oluşan Fe-Al Alaşımı İçin Wien2k Programının Çalıştırılması Sonucunda Elde Edilen Sonuçlar

Dört demir dört alüminyum atomundan oluşan Fe-Al yapısı için struct yapısı oluşturulur. Bunun için Bölüm 4'deki adımlar takip edilir. Aşağıda elde edilen struct dosyası bulunmaktadır.

bcc Fe-Al

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

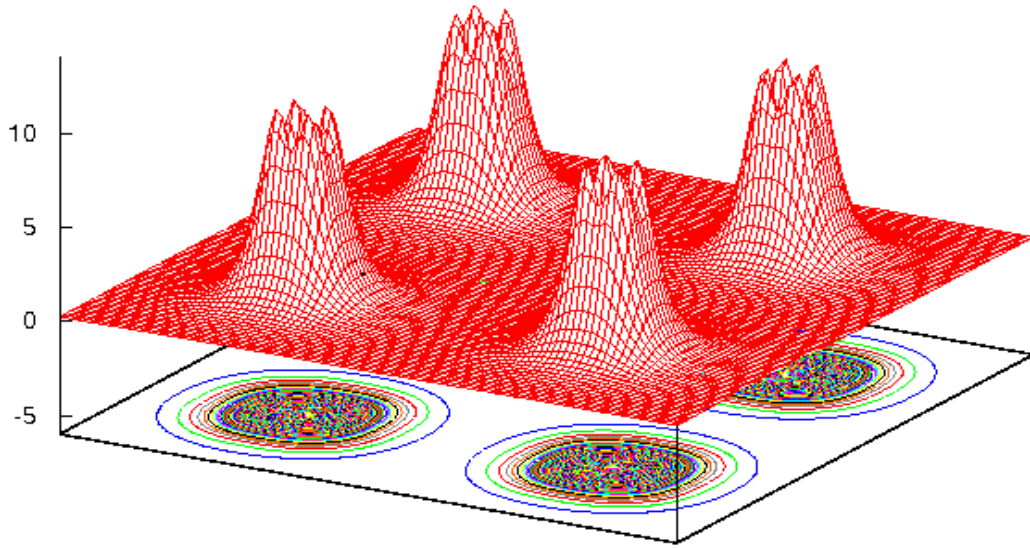
LOCAL ROT MATRIX: 0.0000000 0.0000000 1.0000000

0.0000000 1.0000000 0.0000000

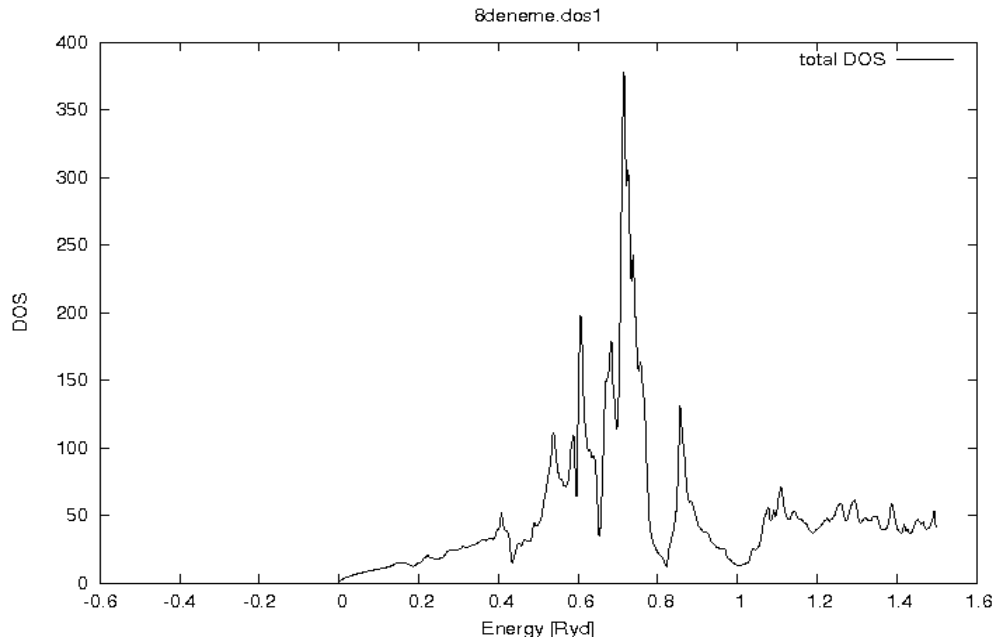
-1.0000000 0.0000000 0.0000000

48 NUMBER OF SYMMETRY OPERATIONS

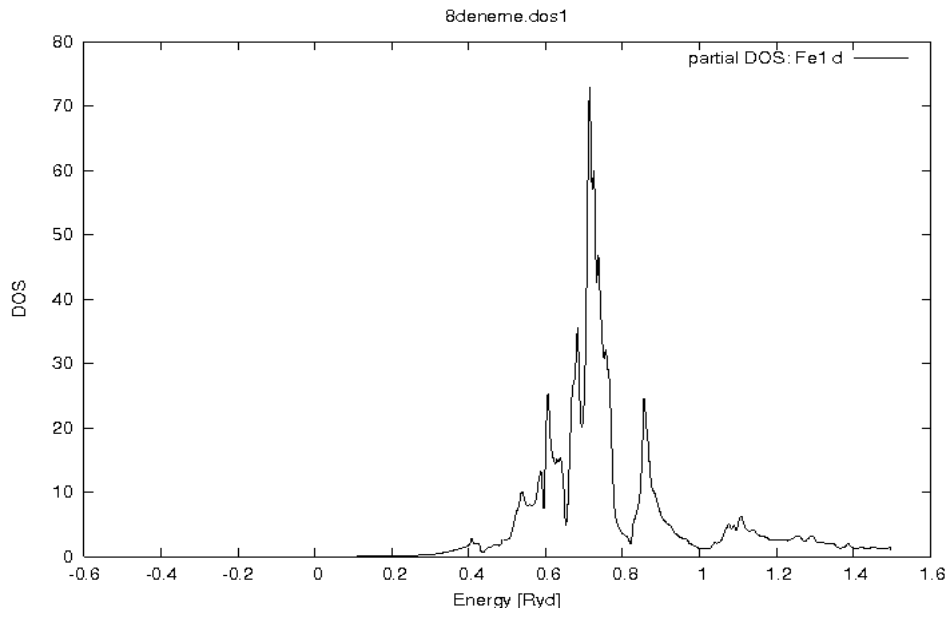
Struct dosyası oluřturulduktan sonra, Bölüm 4'te anlatılan adımlara uygun olarak program alıřtırıldı. Böylece elde edilen elektron yoğunluęu, durum yoğunluęu (DOS), hacim ve bant yapısı grafikleri ile XCRYSDEN programı kullanılarak elde edilen birim örgü hücresi ařaęıdaki verilmiřtir.



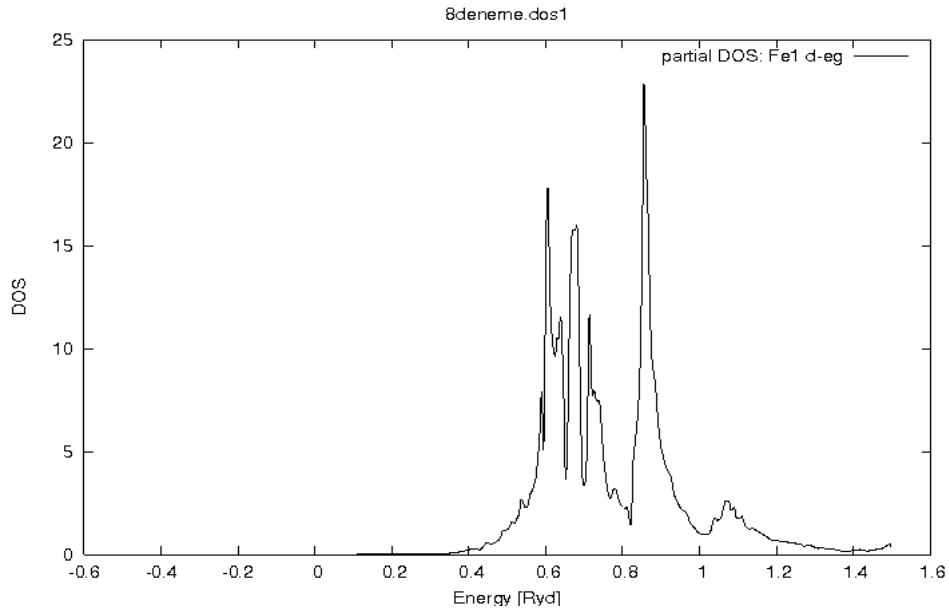
Şekil 5.29 Sekiz atomlu bcc Fe-Al alaşımı için Wien2k programı kullanılarak elde edilen elektron yoğunluğu grafiği.



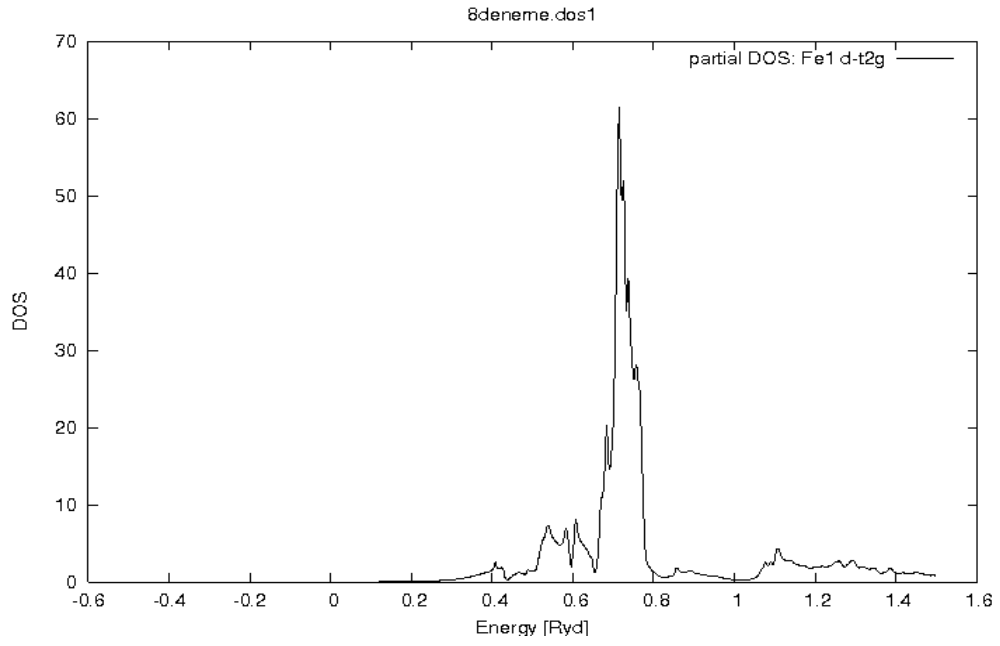
Şekil 5.30 Sekiz atomlu bcc Fe-Al alaşımı için Wien2k programı kullanılarak elde edilen toplam-Dos grafiği.



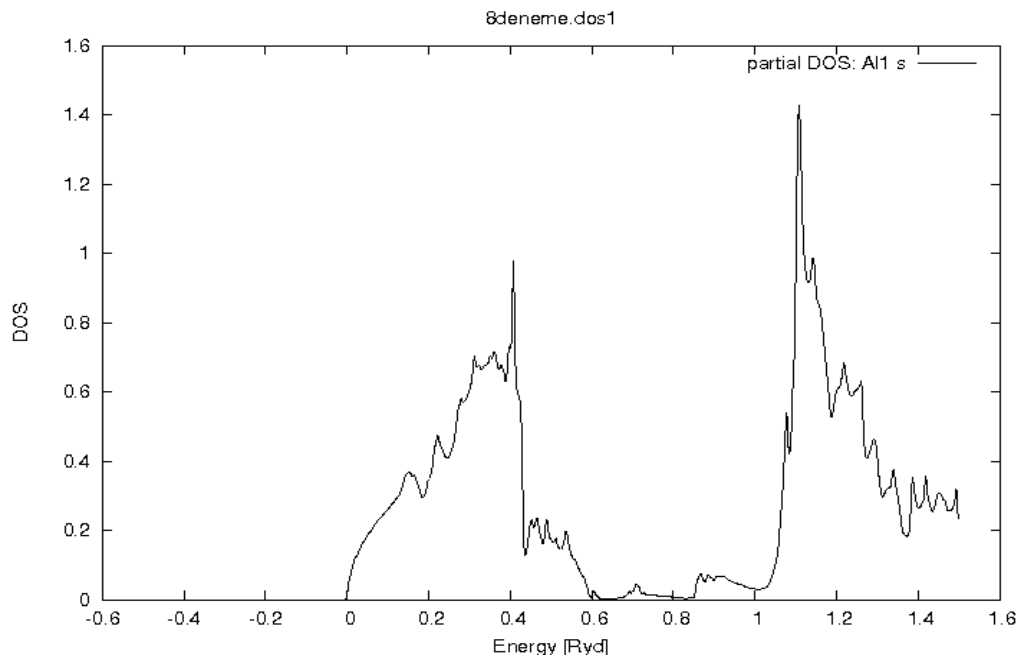
Şekil 5.31 Sekiz atomlu bcc Fe-Al alaşımı için Wien2k programı kullanılarak elde edilen Dos Fe 1 d grafiği.



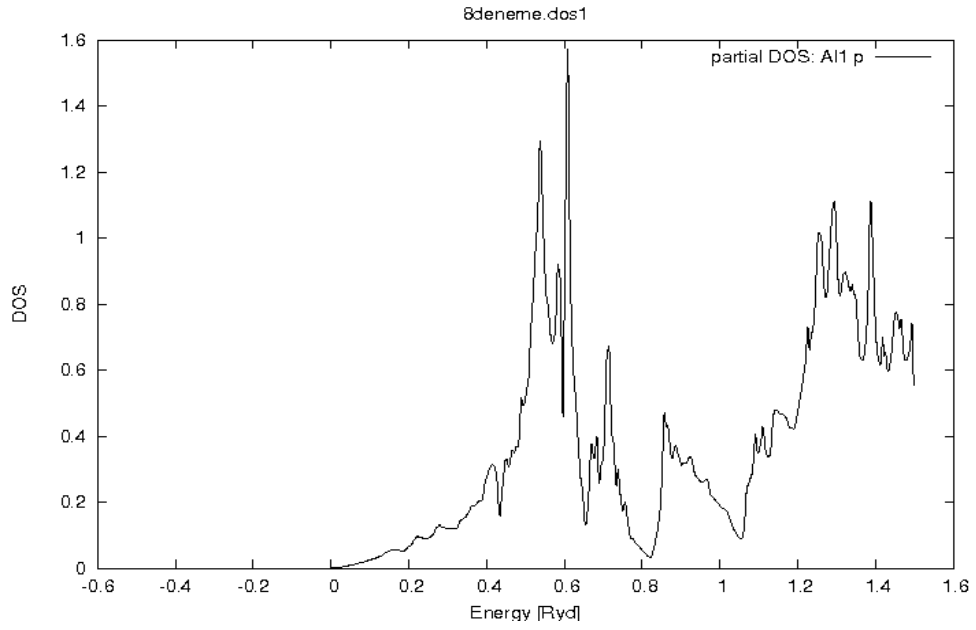
Şekil 5.32 Sekiz atomlu bcc Fe-Al alaşımı için Wien2k programı kullanılarak elde edilen Dos Fe 1-eg grafiği.



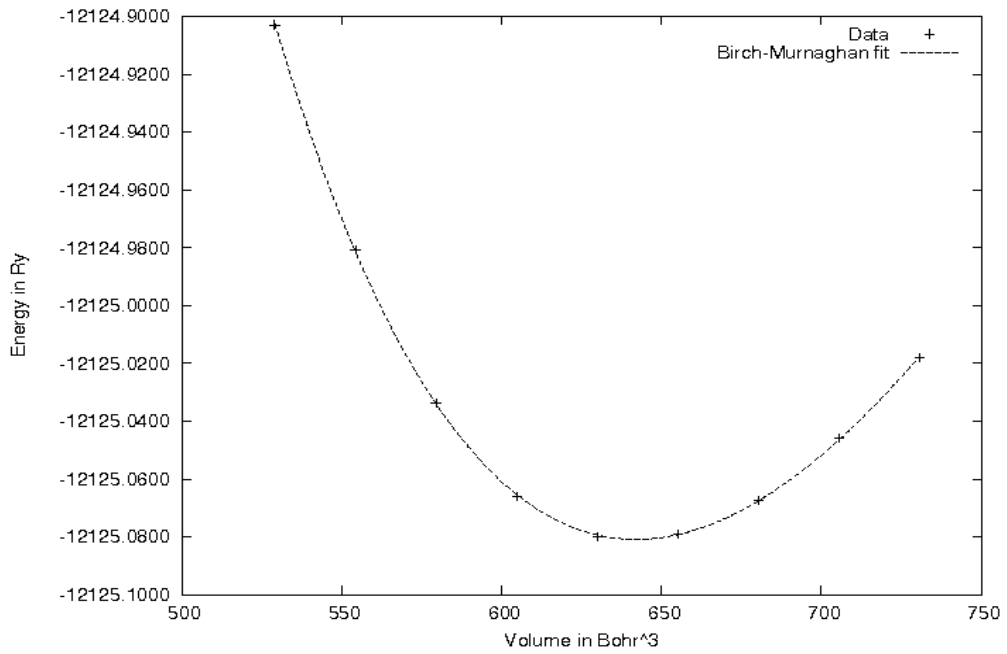
Şekil 5.33 Sekiz atomlu bcc Fe-Al alaşımı için Wien2k ile elde edilen Dos Fe 1 d-t2g grafiği.



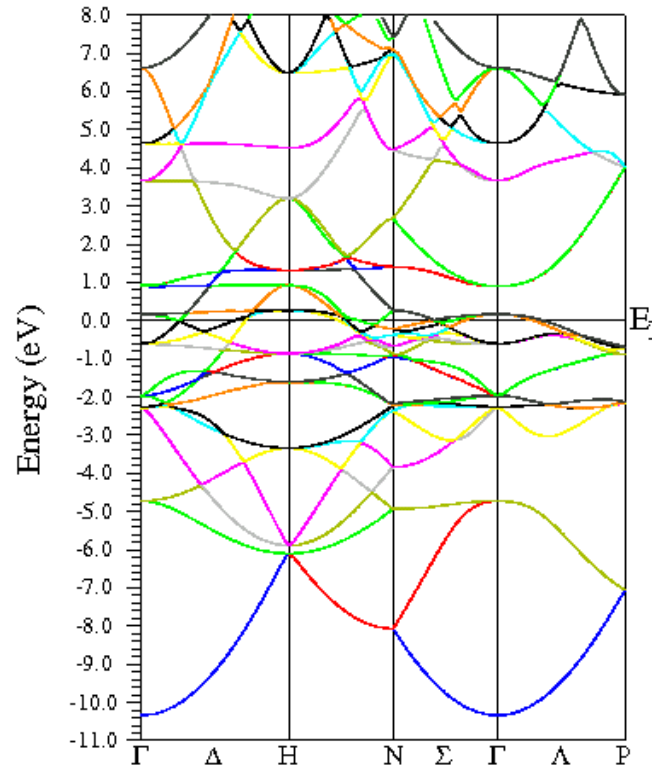
Şekil 5.34 Sekiz atomlu bcc Fe-Al alaşımı için Wien2k ile elde edilen Dos Al 1 s grafiği.



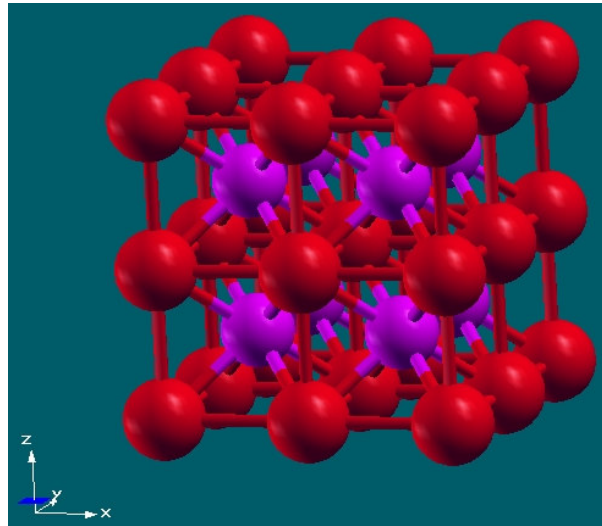
Şekil 5.35 Sekiz atomlu bcc Fe-Al alaşımı için Wien2k ile elde edilen Dos Al 1 p grafiği.



Şekil 5.36 Sekiz atomlu bcc Fe-Al alaşımı için Wien2k ile elde edilen hacim grafiği.



Şekil 5.37 Sekiz atomlu bcc Fe-Al alaşımı için Wien2k ile elde edilen bant yapısı grafiği.



Şekil 5.38 Sekiz atomlu bcc Fe-Al alaşımı XCRYSDEN programı ile çizdirilen birim hücresi.

6. Fe -%5 Al ALAŞIMININ WIEN2K PROGRAMI İLE İNCELENMESİ

Fe-Al alaşımını Wien2k programında çalışmak için öncelikle yapı dosyasının oluşturulması gerekir. Bu amaçla 16 atomlu süper örgü kullanılır. Dolayısıyla alaşımdaki elementlerin oranı yaklaşık % 6 olur.

Çalıştığımız yapıyı Wien2k programında yaklaşık olarak temsil edebilmek için bir Al'a karşılık 15 tane Fe'den oluşan aşağıdaki struct dosyasını oluşturduk.

```
P          5

      RELA

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=0.00005000 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=0.50000000 Y=0.00000000 Z=0.00000000

      MULT= 3      ISPLIT=-2

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

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

Fe2    NPT= 781 R0=0.00005000 RMT=  1.74   Z: 26.0

LOCAL ROT MATRIX:  0.0000000 0.0000000 1.0000000
                   0.0000000 1.0000000 0.0000000
                   -1.0000000 0.0000000 0.0000000

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


MULT= 3 ISPLIT=-2

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

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

Fe3 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 4: X=0.50000000 Y=0.50000000 Z=0.50000000

MULT= 1 ISPLIT= 2

Al4 NPT= 781 R0=0.00005000 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 -5: X=0.25000000 Y=0.25000000 Z=0.25000000

MULT= 8 ISPLIT= 4

-5: X=0.75000000 Y=0.25000000 Z=0.25000000

-5: X=0.25000000 Y=0.75000000 Z=0.25000000

-5: X=0.75000000 Y=0.75000000 Z=0.25000000

-5: X=0.25000000 Y=0.25000000 Z=0.75000000

-5: X=0.75000000 Y=0.25000000 Z=0.75000000

-5: X=0.25000000 Y=0.75000000 Z=0.75000000

-5: X=0.75000000 Y=0.75000000 Z=0.75000000

Fe5 NPT= 781 R0=0.00005000 RMT= 1.74 Z: 26.0

LOCAL ROT MATRIX: 0.4082483-0.7071068 0.5773503

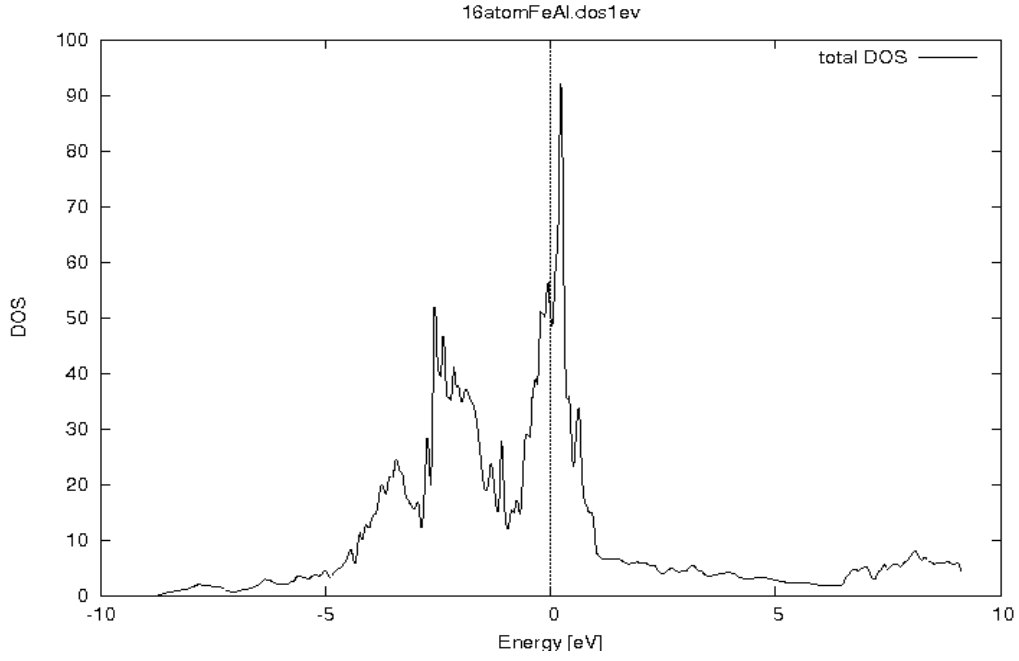
0.4082483 0.7071068 0.5773503

-0.8164966 0.0000000 0.5773503

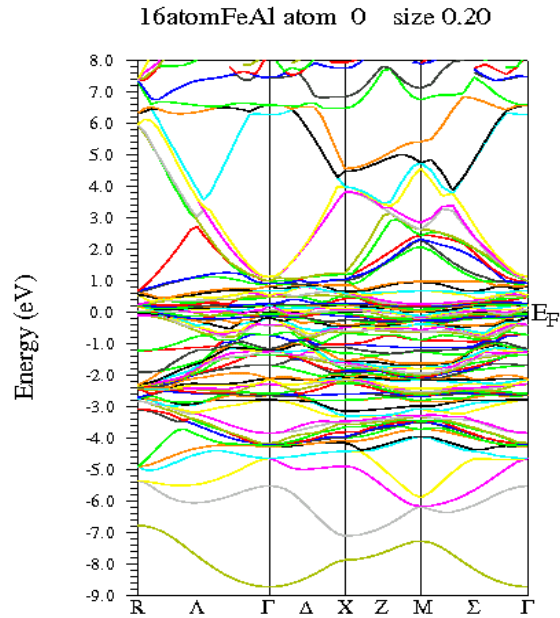
48 NUMBER OF SYMMETRY OPERATIONS

RMT deęerleri Fe için 1,74; AL için 1,64 olarak belirlendi. Örgü sabiti $5,4 \text{ \AA}$ olarak alındı. 56 tane özel K noktası kuruldu. runlapw'ın çalışması sırasında enerji hassaslığı 10^{-4} Ry alındı. Bu yapı için uzay gurubu $221(P_m - 3m)$ şeklinde kullanılmıştır.

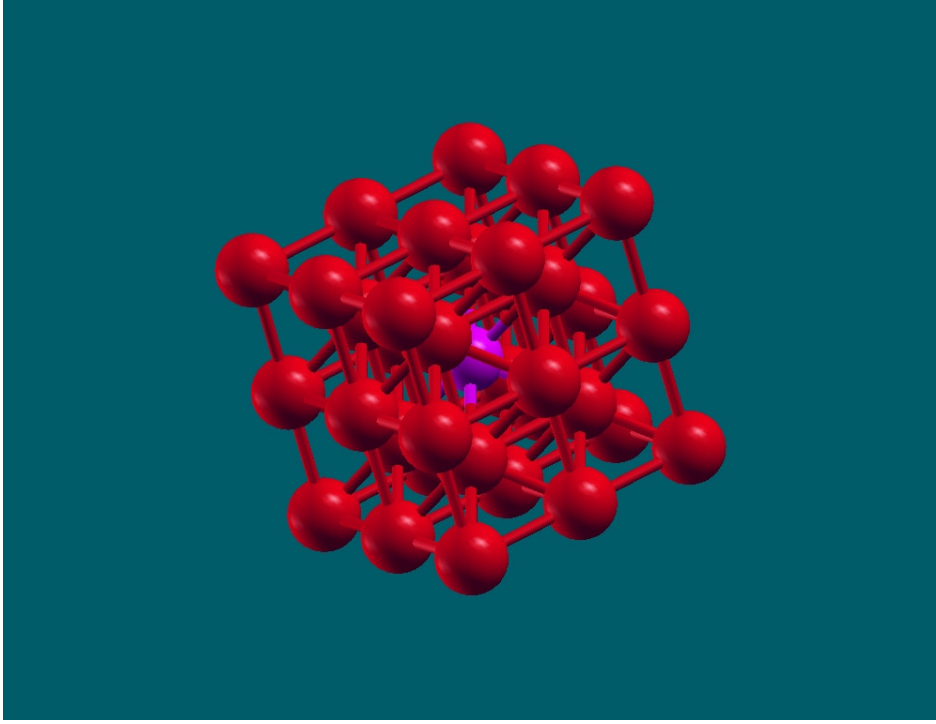
Buna göre programın çalıştırılmasından sonra aşağıdaki grafikler elde edilmiştir.



Şekil 6.1 On altı atomlu bcc Fe-Al alaşımı için Wien2k ile elde edilen Toplam Dos grafiği.



Şekil 6.2 On altı atomlu bcc Fe-Al alaşımı için Wien2k programı ile elde edilen Bant grafiği.



Şekil 6.3 Onaltı atomlu bcc Fe-Al alaşımı XCRYSDEN programı kullanılarak çizdirilen birim hücresi.

7. SONUÇ

Yapılan bu çalışmada öncelikle TiC ve Fe için elde edilen sonuçlar, literatürdeki sonuçlarla kıyaslanarak programın doğru çalıştırılıp, çalıştırılmadığı test edilmiştir. Buna göre elde edilen sonuçların literatürdeki benzer sonuçlarla benzer olduğu şekil 5.1-5.14 görülmüştür. Bundan sonra program Fe-Al, süpercell Fe-Al, Fe₄-Al₄ ve Fe₁₅-Al₁ için çalıştırılmış şekil 5.15-5.38 ile şekil 6.1-6.4 elde edilmiştir.

Her kristal için ilk önce elektron yoğunluğu (şekil 5.1, 5.11, 5.15, 5.20, 5.29) incelendi. Her hangi bir kristal için elektron yoğunluğu grafiği valans elektronların dağılımını göstermektedir. Buna göre grafiklerdeki koniler elektronların yoğun olduğu bölgeyi, koninin eteklerindeki yüzey ise atomlar arasındaki elektron yoğunluğunu göstermektedir. Etek yüzeylerindeki bu elektronlar iletim elektronları olarak da adlandırılmaktadır.

Durum yoğunluğu grafikleri (DOS) ise (şekil 5.2-5.7; şekil 5.10; şekil 5.16; şekil 5.21-5.26; şekil 5.30; şekil 5.35; şekil 6.1) Fermi enerji düzeyi gösterilmektedir. Her pikin maksimum ve minimum arasındaki değer “ $k_B T$ ” ye eşittir. DOS grafikleri valans elektronlarının dağılımı ve iletme olan katkıları hakkında bilgi vermektedir. İletime en büyük katkı 3d orbitalinden gelir.

Enerji bant yapıları (şekil 5.8; şekil 5.13; şekil 5.18) Fermi enerji düzeyinde enerji bantlarının çok yoğunlaşmaması yasak enerji aralığının azda olsa var olduğunu gösterir. Ancak süpercell yapıda enerji bantlarının Fermi düzeylerinin çok yoğunlaşmış (şekil 5.28; şekil 5.37; şekil 6.2) oldukları görülmektedir. Süpercell örgünün yasak bölge enerji aralığı yoktur, denilebilir. İletim elektronlarının baskınlığı söz konusudur. Bu bant yapılarında Γ ’dan başlayarak yukarı çıktığında ilk bant s olup, parabol şeklindedir. Sonraki bant ise d olup, düzleşen eğriler küçülerek daralırlar ki enerjileri de çok küçüktür. Bunun nedeni ise d bandındaki elektronların kuvvetli etkileşimleridir. Bu d bantları Fermi enerji seviyesinde yoğunlaşırlar. Bu grafiklerden basit yapıların iletkenliğinin çok düşük olduğu da anlaşılmaktadır. Çünkü E_F düzeyinde boşluk daha büyüktür. Ayrıca bu bant yapılarındaki parabolik bantlar DOS grafiklerindeki küçük pikleri (s orbitali), düzleşen bantlar ise yüksek pikleri(d orbitali), göstermektedir.

Üzerinde Wien2k programı ile çalışma yapılan bütün yapılarda (şekil 5.9; şekil 5.12; şekil 5.17; şekil 5.36; şekil 6.4), enerji hacim grafiği de çizdirilerek incelendi. Enerji hacim grafiğinde, grafik eğrisinin minimum olduğu nokta kristalin denge (kararlılık) noktasıdır.

İncelenen bütün Fe-Al sistemlerinde bu minimum noktasının değişik olduğu görülmektedir. Bu sonuçlar çizelge 7.1 de verilmiştir.

Çizelge 7.1 İncelenen Fe-Al sistemlerine ait elde edilen parametreler.

Yapılar		Fe-Al (P)	Fe ₂ Al ₂ (P)	Fe ₄ Al ₄ (B)	Fe ₁₅ -Al ₁ (P)
Örgü Sabitleri	DeneySEL	2,857556 Å ⁰	2,857556 Å ⁰	5,715112 Å ⁰	5,715112 Å ⁰
	Hesaplanan	2,857558 Å ⁰	-----	5,715124 Å ⁰	5,584320 Å ⁰
C11		285,721642 GPa	-----	324,527462 GPa	-466,115659 GPa
C12		159,616454 GPa	-----	146,193015 GPa	514,071242 GPa
C44		94,120385 GPa	-----	199,584455 GPa	291,438836 GPa
Bulk Modülü		201,652 GPa	-----	205,638 GPa	187,342 GPa

KAYNAKLAR DİZİNİ

- [1] C. G. Mc Kamey, J. H. Devan, P. F. Tortorelli, V. K. Sika, J. Mater Res. 6 (1991) 1779.
- [2] P. Tomaszewicz, G. R. Wallwork, Oxid, Met. 19 (1983) 165.
- [3] C-H, Xu, W. Goo, M. Hyland, H. Gong, Corros. Sci. 43 (2001) 1891.
- [4] Milstein F., Physical Rev. B. 2, 512 (1970).
- [5] Milstein F., Physical Rev. B. 3, 1130 (1971).
- [6] Singh G., Phys. Stat. Sol 161, 145 (1990).
- [7] Najafabadi R. And G. Kalonji; Acta. Met. 36., 917 (1988).
- [8] Drechsles M. and Nicholas J. F., J. Phys. Chem. Solids, 28, 2597, (1967).
- [9] Jhonson R.A., Physical Rev. 133, 1329 (1964).
- [10] Doyama M. and Cotterill R. M. J., Physical Rev. 145, 145 (1966).
- [11] Yaşa, F., 1996, Rasgele Değişen Bazı Fiziksel Olayların 3 Boyutlu Monte Carlo Yöntemi İle Modellenmesi, Kahramanmaraş Sütçü İmam Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, 86 s.
- [12] 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.
- [13] Masaoki Oku, Naoya Masahashi, Shuji Honada, Kazuaki Wagatsum, Journal of Alloys and Compounds 413(2006) 239-243.
- [14] Joo Yull Rhee, Current Applied Physics 6 (2006)852-855.
- [15] Rablo G. Gonzales-Ormano and Helena M. Petrilli, Claudio G. Schön, Pergaman 26 573-582;(2002).
- [16] Leamy H. J. “et al”., Acta Met. 15, 1827 (1967).
- [17] Kittel C., “Introduction to Solid State Physics”, J. Wiley and Sons, Newyork 1968.
- [18] Prakash U., “et al” ISIJ Review, 31,1113 (1991).
- [19] Taylor A. and Jones R. M., J. Phys. Chem. Solids 6,16, (1958).
- [20] Rudman P.S., Acta Met. 8,321 (1960).

KAYNAKLAR DİZİNİ (devam)

- [21] Leamy H. J.; Acta Met. 15,1839 (1967).
- [22] D. Fuks, A. Strutz, A. Kiv, Intermetalics 14 (2006) 1245-1251.
- [23] A. Kellou, T. Grosdidier, H. Aurog, Intermetallies 14(2006) 142-148.
- [24] Hook, J. R., Hall H. E., 1996 Katıhal Fiziği (Çev: Köksal F., Altunbaş M., Dinçer M., Başaran E.).
- [25] Durlu, Tahsin Nuri, 1996, Katıhal Fiziğine Giriş, Ankara.
- [26] Kittel., C., 1996, Katıhal Fiziğine Giriş, (Çev: B. Karaoğlu), İstanbul.
- [27] Schwarz, K. and Blaha, P., 2003, Computational Materials Science 28, 259 p.
- [28] Liberman, D., Weber, J. T., and Cromer, D. T., 1965, Phys. Rev. 137A, 27 p.
- [29] Perdew, J. P. and Wang, Y., 1992, Phys. Rev. B 45, 13244 p.
- [30] Perdew, J. P., Burke, S. and Ernzerhof, M., 1996, Phys. Rev. Let. 77, 3865 p.
- [31] Perdew, J.P., Chevary, J.A., Vosko, S.H., and Fiolhais, C., 1992, Phys. Rev. B 46, 6671 p.
- [32] Schwarz, K., 2003, DFT and the Concepts of the APW+lo method, 9 Th Wien2k Workshop, Vienna Univ. of Technology, Austria.
- [33] 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.
- [34] Koelling, D. D. and Arbman, G. D., 1975, J. Phys. F 5, 2041 p.
- [35] Blöchl, P.E., Jepsen, O. and Andersen, O. K., 1994, Phy. Rev. B 49, 16223 p.
- [36] Cottenier, S., 2002, Density Functional Theory and the Family of (L) APW Methods: a step – by – step introduction, Katholieke Univ.
- [37] A. Kokalj J. Mol Graphics Modelung 1999 Vol 17 176-179.
- [38] B. I. Min , T. Oguchi , H. J. F. Jensen , and A. J. Freeman , J. Magn. Magn Mater 54-57 , 1091 (1986).