

**Fe BAZLI ALAŞIMLARIN MEKANİK, MANYETİK
VE ELEKTRİK ÖZELLİKLERİNİN
İNCELENMESİ**

Mustafa Menderes Alyörük

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

Danışman : Yrd. Doç. Dr.H. Yaşar OCAK

Haziran - 2005

KABUL VE ONAY SAYFASI

Adı Mendireci A. Yılmaz'nın YÜKSEK LİSANS/~~DOKTÖR~~A tezi olarak hazırladığı Fen Bilimleri Enstitüsü'ne Meleman ve Halek Özlü başlıklı bu çalışma, jürimizce lisansüstü yönetmeliğin ilgili maddeleri uyarınca değerlendirilerek kabul edilmiştir

12.10.2005

Üye : Prof. Dr. Hüseyin Tazancı

Üye Yrd. Doç. Dr. Cengiz YENİKAYA

Üye : Yrd. Doç. Dr. H. Y. OCAK

Fen Bilimleri Enstitüsü'nün Yönetim Kurulu'nun 15.10.2005 gün ve 14 sayılı kararıyla onaylanmıştır.

M. Sabri ÖZYURT
Prof. Dr. M. Sabri ÖZYURT

Fen Bilimleri Enstitüsü Müdürü

Fe BAZLI ALAŞIMLARIN MEKANİK, MANYETİK VE ELEKTRİK ÖZELLİKLERİNİN İNCELENMESİ

Mustafa Menderes ALYÖRÜK

Fizik Bölümü, Yüksek Lisans Tezi, 2005

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

ÖZET

Fe-%9 Mn alaşımının enerji band yapısı, durum yoğunluğu(DOS), elektron yoğunluğu, kararlılık durumu ve elastik sabitleri Wien2k programı ile incelendi. Bu çalışma yapılmadan önce TiC ve FeAg için test edilerek, sonuçların literatürdeki sonuçlarla uyumlu olduğu görüldü. FeMn alaşımına ait yukarıdaki işlemler austenite fazdaki I. ve IV. tip numuneler için ayrı ayrı yapıldı. Elde edilen sonuçlar karşılaştırıldı.

Anahtar Kelimeler: Band yapısı, Durum yoğunluğu, Elastik sabitler, Elektron yoğunluğu, FeMn alaşımı, Kararlılık, Wien2k

EXAMINING OF MECHANICAL, MAGNETIC AND ELECTRICAL PROPERTIES OF Fe BASE ALLOYS

Mustafa Menderes ALYÖRÜK

Physics Department, M. S. Thesis, 2005

Thesis Supervisor: Asist. Prof. H.Y. OCAK

SUMMARY

Structure of energy bands, density of states(DOS), density of electron, stability of alloy and elasticity constants of Fe-%9 Mn alloys examined by using Wien2k program. Before having started to study and examine of this work, program was tested for results of TiC and FeAg. The results obtained from the test applied to TiC and FeAg showed. That it was appropriate with the results of those in literature. Process above, that is related to FeMn was tested and applied for austenite phase of I. and IV. kind patterns seperately. The results taken from this work were compared.

Keywords: Density of states, Density of electron, Elasticity constants, FeMn alloy, Stability, Structure of bands, Wien2k.

TEŐEKKÜR

Yüksek lisans tez çalışmam süresince karşılaştığım zorlukların çözümlenmesinde değerli bilgileri ve tecrübeleri ile yardımlarını esirgemeyen hocalarım Sayın Yrd. Doç. Dr. Hamza Yaşar OCAK ve Sayın Yrd. Doç. Dr. Ercan UÇGUN'a şükranlarımı sunarım.

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



İÇİNDEKİLER

	<u>Sayfa</u>
ÖZET	iv
SUMMARY	v
ŞEKİLLER DİZİNİ	ix
ÇİZELGELER DİZİNİ	xiv
SİMGELER VE KISALTMALAR DİZİNİ	xv
1. GİRİŞ	1
2. KUANTUM ÇOK CİSİM PROBLEMİNİ ÇÖZÜM YÖNTEMİ: YOĞUNLUK FONKSİYON TEORİSİ.....	28
2.1. Seviye 1: Born-Oppenheimer Yaklaşımı.....	29
2.2. Seviye 2: Yoğunluk Fonksiyon Teorisi.....	31
2.2.1. Hohenberg ve Kohn Teoremleri.....	32
2.2.2. Kohn-Sham Denklemleri.....	36
2.2.3. Değiş-tokuş-karşılıklı etkileşme fonksiyonu.....	41
2.2.4. Seviye 3: Denklemlerin Çözümü.....	44
2.2.4.1. Özdeğer ve özvektörlerin bulunması.....	46
2.3. APW, LAPW ve APW+lo Metodları.....	50
2.3.1. APW Metodu.....	50
2.3.2. LAPW Metodu.....	54
2.3.3. Lineerleştirmenin alternatif bir yolu APW+lo.....	56
3. WIEN2K PROGRAMININ TANITIMI.....	58
3.1. case.struct ve case.intst dosyalarının oluşturulması.....	58
3.2. init_lapw hesaplamaları.....	65
3.3. SCF Hesaplamaları.....	72
3.4. Hesaplama Özellikleri.....	73

İÇİNDEKİLER (devam)

	<u>Sayfa</u>
3.4.1. Elektron yoğunluğu.....	73
3.4.2. Durum yoğunluğu (DOS).....	75
3.4.3. Bant yapısı.....	76
3.4.4. Bant karakter çizimiyle bant yapısı.....	79
3.4.5. Hacim grafiği çizimi.....	79
3.4.6. Süper örgünün oluşturulması.....	80
4. TiC, NONMANYETİK ve FERROMANYETİK FeAg YAPILARININ WIEN2K PROGRAMI İLE TEST EDİLMESİ.....	82
4.1. NaCl Yapısı.....	82
4.2. Manyetik olmayan FeAg yapısı.....	93
4.3. Ferromanyetik FeAg yapısı.....	100
5. Fe-%9Mn ALAŞIMINDA WIEN2k PROGRAMININ KULLANILMASI.....	109
5.1. Fe-%9Mn alaşımına ait I. numune için.....	110
5.1.1. Manyetik olmayan fcc faz için (austenite).....	110
5.1.2. Ferromanyetik fcc faz için (austenite).....	119
5.2. Fe-%9Mn alaşımına ait IV. numune için.....	129
5.2.1. Manyetik olmayan fcc faz için (austenite).....	129
5.2.2. Ferromanyetik fcc faz için (austenite).....	138
6. SONUÇ.....	148
KAYNAKLAR DİZİNİ	152

ŞEKİLLER DİZİNİ

<u>Şekil</u>	<u>Sayfa</u>
Şekil 1.1 Şematik yarıiletken DOS grafiği.....	1
Şekil 1.2 Şematik metal DOS grafiği.....	2
Şekil 1.3 Üç boyutlu serbest elektron gazında tek parçacık durum yoğunluğunun enerjiyle eğişi.....	2
Şekil 1.4 Metal, yarıiletken ve yalıtkanlarda enerji bantlarındaki elektron doluluk şeması....	3
Şekil 1.5 Brillouin bölgesinin çok önemli noktaları ve simetri çizgileri.....	4
Şekil 1.6 Yüksek kristal simetrisi yönleri boyunca bccFe (spin yukarı) için band yapısı....	4
Şekil 1.7 V, Cr, Fe, Ni, Cu 3d geçiş metalleri bant yapıları.....	5
Şekil 1.8 bcc Fe (spin yukarı) için DOS, bant yapısı ve bcc örgüsünün Brillouin bölgeleri...	6
Şekil 1.9 Silisyum için band yapısı.....	7
Şekil 1.10 Silisyum için DOS grafiği.....	8
Şekil 1.11 Enerji hacim grafiği.....	8
Şekil 1.12 Ferromanyetik maddede spinlerin yönelişi.....	10
Şekil 1.13 Maddede domainlerin yönelimi.....	11
Şekil 1.14 0 K ve T K'de doyum manyetizasyonu.....	11
Şekil 1.15 Demirdeki ferromanyetizmanın basitleştirilmiş band çizimi.....	12
Şekil 1.16 Kendiliğinden manyetizasyonun oluşumu.....	13
Şekil 1.17 Ferromanyetik maddede histerisiz eğrisi.....	14
Şekil 1.18 Homojen bir zor etkisinde kalan bir küpün yüzeyleri üzerindeki kuvvetler.	18
Şekil 1.19 Homojen bir zor etkisi altındaki birim küpün yüzeylerine uygulanan kuvvetler..	19
Şekil 1.20 Homojen olmayan zor bileşenleri.....	19
Şekil 1.21 Lineer ve lineer olmayan zorlanma eğrileri.....	23
Şekil 2.1 Çekirdekler ve elektronlar arasındaki etkileşimler.....	28
Şekil 2.2 Hatree-Fock ya da Kohn-Sham denklemlerinin çözümünde kendi içinde tutarlı olan yöntemde ki n tekrarlama için akış şeması.....	40
Şekil 2.3 LDA Teoreminin şekille ifadesi.....	43
Şekil 2.4 İki eş olmayan atomların durumu ile birim hücredeki muffin-tin ve arasındaki bölgeler.....	51

ŞEKİLLER DİZİNİ (Devamı)

<u>Sekil</u>	<u>Sayfa</u>
Şekil 2.5 APW metodunun akış şeması.....	53
Şekil.2.6 Ce için APW temel fonksiyonunun ℓ – oluşumunun u_ℓ^α radyal kısmı.....	55
Şekil.2.7 Şekil.2.6'daki aynı k noktasında K vektöründe ve aynı enerjilerde elde edilen Ce için LAPW temel fonksiyonlarının ℓ – oluşumlarınınca $R_{\ell m}^{LAPW}$ radyal kısmı ...	56
Şekil 3.1 Kübik uzay örgüleri.....	60
Şekil 3.2 Kübik birim hücre.....	62
Şekil.3.3 Birim hücre içindeki atomik küreler.....	63
Şekil 3.4 Çekirdek, yarı çekirdek ve valans durumları.....	68
Şekil 3.5 $u_\ell(r, E_\ell)$ enerjisi ve DOS'un şematik bağılılığı.....	70
Şekil 3.6 FeAg için kübik birim hücre ve 2x2x2 'lik süper örgü yapı.....	80
Şekil 3.7 WIEN2k Programının akış şeması.....	81
Şekil 4.1 TiC için elektron yoğunluğu.....	84
Şekil 4.2 TiC için toplam DOS grafikleri.....	85
Şekil 4.3 TiC için C-s DOS grafiği.....	86
Şekil 4.4 TiC için için C-p DOS grafiği.....	87
Şekil 4.5 TiC için için Ti-d DOS grafiği.....	88
Şekil 4.6 TiC için için Ti-eg DOS grafiği.....	89
Şekil 4.7 TiC için için Ti-t2g DOS grafiği.....	90
Şekil 4.8 TiC band yapısı.....	91
Şekil 4.9 TiC için enerji-hacim grafiği.....	92
Şekil 4.10 FeAg-nonmanyetik tot-DOS grafiği.....	96
Şekil 4.11 FeAg-nonmanyetik Fe1-DOS pz grafiği.....	96
Şekil 4.12 FeAg-nonmanyetik Fe1-DOS px+py grafiği.....	97
Şekil 4.13 FeAg-nonmanyetik Fe1-DOS d grafiği.....	97
Şekil 4.14 FeAg-nonmanyetik Fe1-DOS s grafiği.....	98
Şekil 4.15 FeAg-nonmanyetik Fe1-DOS p grafiği.....	98

ŞEKİLLER DİZİNİ (Devamı)

<u>Şekil</u>	<u>Sayfa</u>
Şekil 4.16 FeAg-nonmanyetik için elektron yoğunluğu grafiği.....	99
Şekil 4.17 FeAg-nonmanyetik için band yapısı grafiği.....	99
Şekil 4.18 Ferromanyetik FeAg için toplam-DOS grafikleri.....	101
Şekil 4.19 Ferromanyetik FeAg için Fe1DOS pz grafikleri.....	102
Şekil 4.20 Ferromanyetik FeAg için Fe1 DOS px+py grafikleri.....	103
Şekil 4.21 Ferromanyetik FeAg için Fe1 DOS d grafikleri.....	104
Şekil 4.22 Ferromanyetik FeAg için Fe DOS s grafikleri.....	105
Şekil 4.23 Ferromanyetik FeAg için Fe DOS p grafikleri.....	106
Şekil 4.24 Ferromanyetik FeAg için elektron yoğunluğu grafikleri.....	107
Şekil 4.25 Ferromanyetik FeAg için band yapısı.....	107
Şekil 4.26 Ferromanyetik FeAg için enerji-hacim grafiği.....	108
Şekil 4.27 Ferromanyetik FeAg için rombohedral enerji-zorlanma grafiği.....	108
Şekil 4.28 Ferromanyetik FeAg için tetragonal enerji-zorlanma grafiği.....	108
Şekil 5.1 I.tip nonmanyetik FeMn için elektron yoğunluğu grafiği.....	113
Şekil 5.2 FeMn-nonmanyetik tot-DOS grafiği.....	114
Şekil 5.3 FeMn-nonmanyetik Mn1 DOS pz grafiği.....	114
Şekil 5.4 FeMn-nonmanyetik Mn1 DOS px+py grafiği.....	115
Şekil 5.5 FeMn-nonmanyetik Mn1 DOS d grafiği.....	115
Şekil 5.6 FeMn-nonmanyetik Mn DOS s grafiği.....	116
Şekil 5.7 FeMn-nonmanyetik Mn DOS p grafiği.....	116
Şekil 5.8 I.tip nonmanyetik FeMn için band yapısı.....	117
Şekil 5.9 I. tip numune için enerji-hacim grafiği.....	118
Şekil 5.10 I. tip numune için rombohedral enerji-zorlanma grafiği.....	118
Şekil 5.11 I. tip numune için tetragonal enerji-zorlanma grafiği.....	119

ŞEKİLLER DİZİNİ (Devamı)

<u>Şekil</u>	<u>Sayfa</u>
Şekil 5.12 I. tip Ferromanyetik FeMn için spin-yukarı elektron yoğunluğu grafiği.....	120
Şekil 5.13 I. tip Ferromanyetik FeMn için spin-aşağı elektron yoğunluğu grafiği.....	120
Şekil 5.14 I. tip Ferromanyetik FeMn için toplam-DOS grafikleri.....	121
Şekil 5.15 I. tip Ferromanyetik FeMn için Mn1 DOS-pz grafikleri.....	122
Şekil 5.16 I. tip Ferromanyetik FeMn için Mn1 DOS-px+py grafikleri.....	123
Şekil 5.17 I. tip Ferromanyetik FeMn için Mn1 DOS-d grafikleri.....	124
Şekil 5.18 I. tip Ferromanyetik FeMn için Mn DOS-s grafikleri.....	125
Şekil 5.19 I. tip Ferromanyetik FeMn için Mn DOS-p grafikleri.....	126
Şekil 5.20 I. tip Ferromanyetik FeMn için band yapısı grafiği.....	127
Şekil 5.21 I. tip Ferromanyetik FeMn için enerji-hacim grafiği.....	128
Şekil 5.22 I. tip Ferromanyetik FeMn için tetragonal enerji-zorlanma grafiği.....	128
Şekil 5.23 IV. Tip nonmanyetik FeMn için elektron yoğunluğu grafiği.....	132
Şekil 5.24 FeMn-nonmanyetik tot-DOS grafiği.....	133
Şekil 5.25 FeMn-nonmanyetik Mn1 DOS pz grafiği.....	133
Şekil 5.26 FeMn-nonmanyetik2 Mn1 DOS px+py grafiği.....	134
Şekil 5.27 FeMn-nonmanyetik2 Mn1 DOS d grafiği.....	134
Şekil 5.28 FeMn-nonmanyetik2 Mn DOS s grafiği.....	135
Şekil 5.29 FeMn-nonmanyetik2 Mn DOS p grafiği.....	135
Şekil 5.30 IV. Tip nonmanyetik FeMn için band yapısı grafiği.....	136
Şekil 5.31 IV. Tip nonmanyetik FeMn için enerji-hacim grafiği.....	137
Şekil 5.32 IV. Tip nonmanyetik FeMn için rombohedral enerji-zorlanma grafiği.....	137
Şekil 5.33 IV. Tip nonmanyetik FeMn için tetragonal enerji-zorlanma grafiği.....	138
Şekil 5.34 IV. Tip Ferromanyetik FeMn için spin-yukarı elektron yoğunluğu grafiği.....	139
Şekil 5.35 IV. Tip Ferromanyetik FeMn için spin-aşağı elektron yoğunluğu grafiği.....	139
Şekil 5.36 VI. tip Ferromanyetik FeMn için toplam-DOS grafikleri.....	140
Şekil 5.37 VI. tip Ferromanyetik FeMn için toplam Mn1 DOS-pz grafikleri.....	141

ŞEKİLLER DİZİNİ (Devamı)

<u>Şekil</u>	<u>Sayfa</u>
Şekil 5.38 VI. tip Ferromanyetik FeMn için toplam Mn1 DOS- $px+py$ grafikleri.....	142
Şekil 5.39 VI. tip Ferromanyetik FeMn için toplam Mn1 DOS-d grafikleri.....	143
Şekil 5.40 VI. tip Ferromanyetik FeMn için toplam Mn DOS-s grafikleri.....	144
Şekil 5.41 VI. tip Ferromanyetik FeMn için toplam Mn DOS-p grafikleri.....	145
Şekil 5.42 VI. tip Ferromanyetik FeMn için band yapısı grafiği.....	146
Şekil 5.43 VI. Tip ferromanyetik FeMn için enerji-hacim grafiği.....	147
Şekil 5.44 IV. Tip Ferromanyetik FeMn için tetragonal enerji-zorlanma grafiği.....	147



ÇİZELGELER DİZİNİ

<u>Çizelge</u>	<u>Sayfa</u>
1.1 İndis deęiřtirme tablosu.....	25
3.1 Kbik rglerin zellikleri.....	60
3.2 Relativistik kuantum sayıları.....	65
5.1 Fe-%9Mn alařımına ait numunelerin zellikleri ve bunlara ait fcc yapıların rg parametreleri.....	109
6.1 rg parametrelerinin karřılařtırılması.....	150
6.2 Elastik sabitlerin karřılařtırılması.....	150
6.3 Bulk modl, tetragonal ve rombohedral zorlanmaların karřılařtırılması.....	151



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
\hat{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)

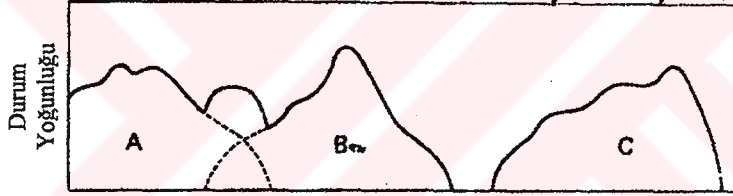
<u>Kısaltma</u>	<u>Açıklama</u>
ϕ_i	Tek parçacık dalga fonksiyonu
RMT	Muffin Tin yarıçapı
R_y	Ryberg
s, p, d	Bant isimleri
T	Sıcaklık
T, H, N, P	Brillouin bölgeler
V	İlkel hücre hacmi
V_{xc}	Değiş-tokuş ve Karşılıklı etkileşme enerji fonksiyoneli
DOS	Density of states
GPa	Giga pascal
bct	Cisim merkezli tetragonal yapı

1. GİRİŞ

Katıhal fiziğinde kristal yapıların fiziksel özelliklerinin incelenmesi çok önemli bir yere sahiptir. Bu fiziksel özelliklerden; elektron yoğunluğu, durum yoğunluğu (Density of states: DOS), bant yapısı ve enerji – hacim değişimi veya denge durumunda katılar için çok önemlidir. Bu özellikleri teorik olarak incelemede çok çeşitli bilgisayar programları kullanılmaktadır. Wien2k programı da katıların fiziksel özelliklerini incelemede dünyada çeşitli araştırma grupları tarafından kullanılmaktadır [1].

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

Enerji



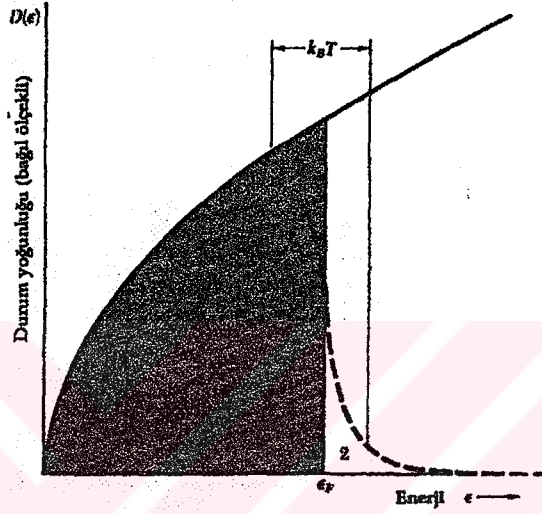
Şekil 1.1 Şematik yarıiletken DOS grafiği [5].

Kristal yapıların incelenmesinde Wien2k programı yoğunluk fonksiyonel (fonksiyonun fonksiyonu) teori (DFT) [2], Tam Potansiyel Lineer Arttırılmış Düzlem Dalgaları (FLAPW) [3] ve değiş-tokuş korelasyon enerjisi (EXC) için [4] genel gradyent yaklaşımı (GGA) kullanılmıştır

Bir n bandın en yüksek enerji durumları takip eden $n+1$ bandının en düşük enerji durumlarının üstüne gelebilir. Şekil 1.1.de A ve B bandı üst üste binmiş ki bunlara valans bandı denir, C bandı ise, iletim bandı, B'den ayrıdır. Bu enerji aralığıdır. Bu enerji aralığı yarıiletkenlerde yasak bölge olup, Fermi enerjisinin tanımlandığı bölgedir. Metallerde ise bütün bandlar üst üste biner (Şekil 1.2.) [5].

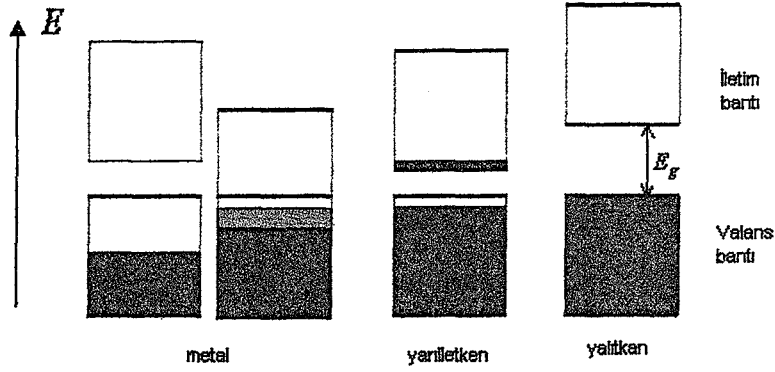


Şekil 1.2 Şematik metal DOS grafiği [5].



Şekil 1.3 Üç boyutlu serbest elektron gazında tek parçacık durum yoğunluğunun enerjisiyle değişimi [6].

Bir katıda elektron dağılımı $n(E)dE$ ile belirlenir. $T = 0$ 'da enerji sınırına kadar yörüngeler doludur. E_F 'den yukarısı ise boştur. Şekil 1.3'de taralı bölge mutlak sıfırdaki dolu olan yörüngeleri gösterir. Sıcaklık 0 'dan T 'ye değişirken, ısısal olarak uyarılan elektronlar 1.bölgeden 2.bölgeye geçerler [6].

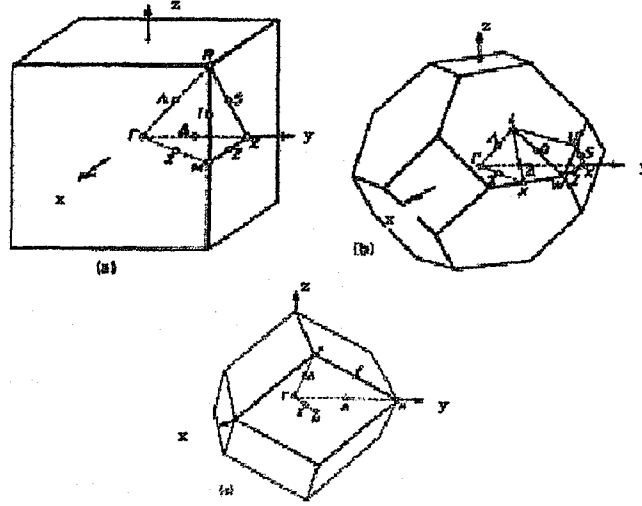


Şekil 1.4 Metal, yarıiletken ve yalıtkanlarda enerji bantlarındaki elektron doluluk şeması

Şekil 1.4. te taralı alanlar elektronların doldurduğu kısımlardır. Enerji bantları tamamen dolu veya tamamen boş ise kristal, bir yalıtkan gibi davranır. Çünkü elektronlar bir elektrik alanda hareket edemezler. Bir veya daha çok bant yarı dolu (örneğin % 10 veya % 90 oranında) ise kristal, bir metal gibi davranır. Bir veya daha çok bant zayıf oranlarda dolu ise kristal, bir yarıiletken olur [6].

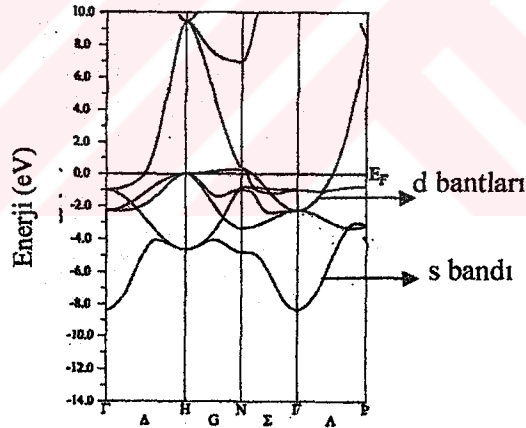
Atomlar birbirine yaklaşırken atom çekirdekleri ile e^- 'ler arasındaki Coulomb etkileşmesi, enerji düzeylerinin ayrışmasına ve enerji bantları oluşturmaya yol açar. Serbest atomun belirli kuantum sayılı her bir enerji düzeyi, kristalde ayrı bir enerji bandı olarak genişler. Bant genişliği komşu atomlar arasındaki örtüşme etkisinin derecesiyle orantılıdır [6].

Ayrıca serbest atomun $\ell=1,2,\dots$ kuantum sayılı p,d durumlarına karşılık gelen enerji bantları oluşur. Bununla beraber katlı durumlar (enerji bantlarının üst üste binmesi) içinde farklı enerji bantları oluşur. Her biri dalga vektörünün geniş aralığında farklı enerjiye sahip olan enerji bantları, Brillouin bölgesindeki bazı \vec{k} değerlerinde birbirini örtebilirler [6].



Şekil 1.5 Brillouin bölgeler a) basit kübik (sc), b) fcc kübik, c) bcc kübik örgü.

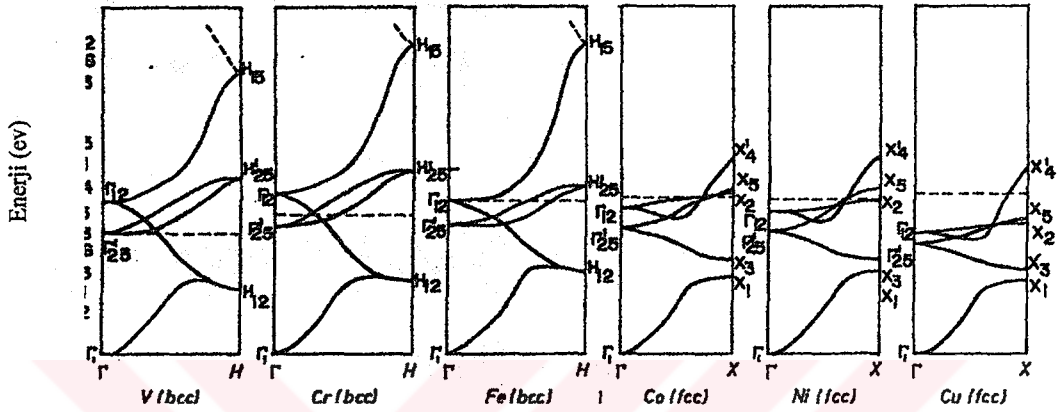
Brillouin bölgesinin yüksek simetri noktaları ve yüksek simetri yönleri [5]



Şekil 1.6 Yüksek kristal simetrisi yönleri boyunca bccFe (spin yukarı) için E(k) band yapısı [7].

Şekil 1.6. da ise Brillouin bölgesi merkezi olan Γ ' dan başlayarak E_F enerjisine doğru çıkalım. E_F enerji yüzeyi, mutlak sıfırda dolu yörüngelerle boş yörüngeleri ayıran sınır olarak

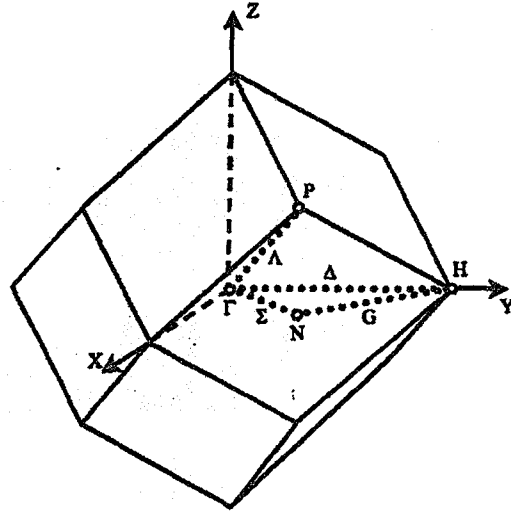
tanımlanır. İlk bant $4s \bar{e}$ 'lar bantı olup parabolik şeklindedir. d bandı ise oldukça geniş yassı bantlardan oluştuğu görülmektedir. En üstteki d bantlarının maksimumu Fermi enerjisinin biraz altındadır. Bu küçük enerji aralıkları (düşük dağılım) d elektronlarının kuvvetli yerleşmesi özelliğinden kaynaklanır [8].



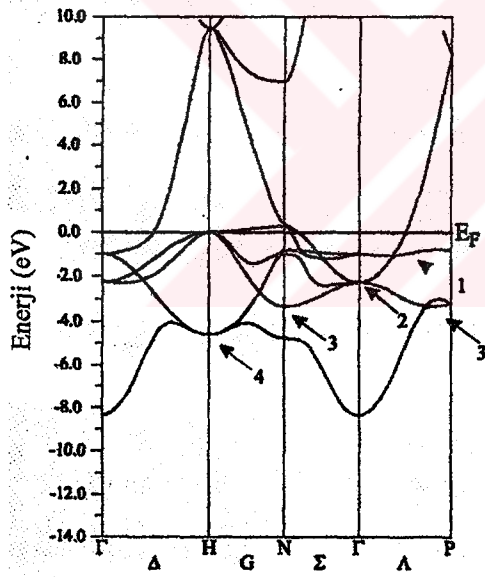
Şekil 1.7 V, Cr, Fe, Ni, Cu 3d geçiş metalleri bant yapıları [2]

Şekil 1.7'de görüldüğü gibi, 3d elementleri için aynı kristal yapılı metallerin bant yapıları birbirine çok benzerdir. Γ 'den yukarıya çıkıldıkça d bantlarının enerjisi azalmaktadır ve aynı zamanda d bantları küçülerek daralmaktadır [9].

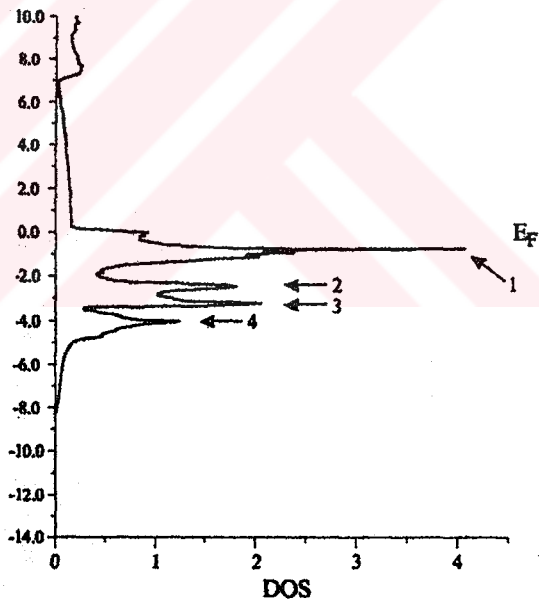
Yapılan araştırmalarda bant yapıları ile elektronik durum yoğunluğu grafikleri arasında bir uyumun olduğu görülmüştür, şekil 1.8.[7]



(a)



(b)



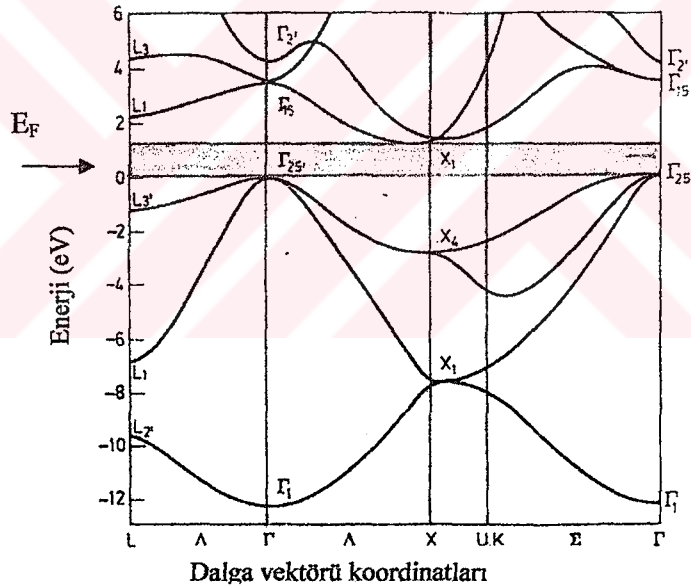
(c)

Şekil 1.8 a) bcc örgüsünün Brillouin bölgesi, b) bcc yapıdaki Fe için elektronik band yapısı, c) elektronik durum yoğunluğu[7].

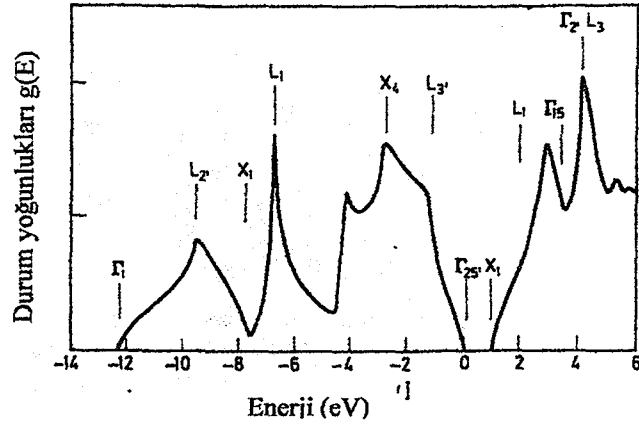
Şekil 1.8.a'da bcc örgüsünün dört yüksek simetri noktalarıyla birinci Brillouin bölgeleri: Γ , H, N, ve P gösterilmiştir. Bu noktaların birleştirilmesiyle Δ , G, Σ ve Λ 'ın Brillouin bölgeleri yolları tanımlanmış olur.

Şekil 1.8.b'de yol boyunca \vec{k} vektörlerine karşı gelen özdeğerler çizilmiştir.

Şekil 1.8.c'de ise aynı yapılar için DOS grafiği öyle bir şekilde çizilir ki, enerji ölçeği, bant yapısı çizgisinin enerji ölçeğiyle denk olsun. DOS'daki pikler bir çok \vec{k} vektörünün aynı özdeğerlere sahip olduğu anlamına gelir. Eğer bu yola bağlı olan (aynı özdeğerler) Brillouin bölgesinin alanından geçerse bir pikin DOS'ta olduğu aynı enerjilerde nispeten düz çizgi şeklinde görürüz. Yani DOS'taki yüksek piklerde enerji bantları düzleşirken, kısa piklerde parabolik olur. (Şekil 1.8.b) Şekildeki dört pik bant yapısı ile yakından alakalıdır [7].

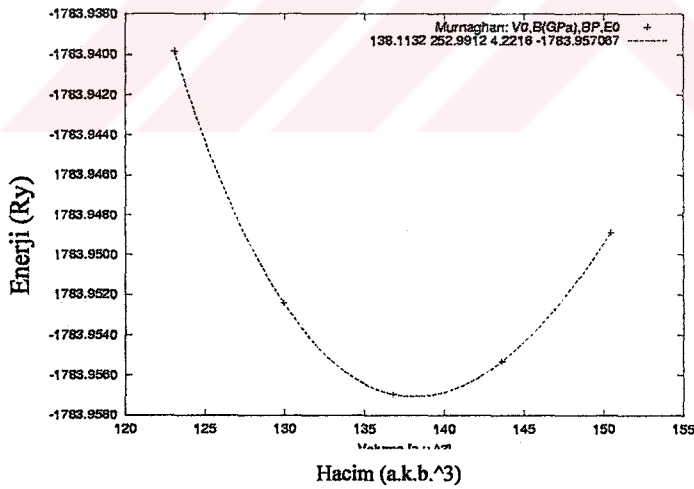


Şekil 1.9 Dalgı vektörü koordinatları



Şekil 1.10 Silisyum için DOS grafiği [11]

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



Şekil 1.11 TiC için enerji hacim grafiği

Şekil 1.11; bir sistemdeki denge durumunu açıklar. Dengedeki sistem için $\sum F_{(p)} = 0$ olacağından, $\frac{\partial V_{(p)}}{\partial \rho} = 0$ dir. Bu ise potansiyel enerjinin o sistemde en minimum olduğu

durumdur. Potansiyel enerjinin minimum olduğu nokta küresel simetrik harekette ρ_0 kararlılık noktasına karşılıktır. Ayrıca, potansiyel enerjinin minimum olduğu nokta, sistemin kristal yapısına ait sabit hacmine de karşılık olduğundan, kristal örgünün örgü parametreleri de elde edilebilir. Bu örgü parametresi ile deneysel örgü parametresi birbirine ne kadar yakın ise kullanılan metodun da aynı oranda güvenilir olduğu ifade edilir. Tüm merkezi etkileşmeler için potansiyel eğrileri bir noktadan döner. Enerji belli oranda yükselir ve tekrar bir minimumdan geçmek üzere azalmaya başlar ki, ikinci minimumda sistem farklı bir kristal yapıya geçmiştir. Her iki minimum noktaları enerji ve hacim karşılıkları birbirlerinden farklıdır [12].

Kristal yapıların manyetik özellikleri de, araştırmacıların ilgi alanlarını oluşturur. Maddelerin yapısı ve aralarındaki etkileşmeyi vermesi bakımından manyetik özellikler son zamanlarda özel çalışma konusu olmuştur. Alçak sıcaklıklarda, pek çok paramanyetik malzemenin manyetik alan uygulandığında sınırlı bir mıknatıslanmaya sahip oldukları bilinir. Bu kendiliğinden mıknatıslanma, sürekli dipol momentlerin yönelmesinden kaynaklanır ve her bir dipolün diğer dipollerin yöneldikleri doğrultudan haberdar olduklarını gösterir. Bu haberdar olma, momentler arası etkileşmeden ortaya çıkar. Dipollerin yöneldiği bu duruma geçiş katıları içinde düzenin derecesindeki artışı ve bu nedenle entropide azalmayı temsil eder. Maddelerin manyetik özelliklerinin belirlenmesinde duygunluk(alınganlık) kavramının önemli rolü vardır. Maddeler duygunluğun işaret ve büyüklüğüne bağlı olarak üç manyetik gruba ayrılırlar.

- Paramanyetik Maddeler: Duygunluğun pozitif yani dipol moment alanına paralel ve aynı yönlü olan maddelere paramanyetik maddeler olarak adlandırılırlar. Paramanyetik maddelerin en iyi bilinen örnekleri, geçiş metallerinin iyonları ve nadir toprak elementlerinin iyonlarıdır. Bunlar paramanyetik özellikten sorumlu tam dolu olmayan atomik kabuğa sahiptirler.
- Diamanyetik Maddeler: Duygunluğu negatif yani; dipol moment ile manyetik alanın birbirlerine zıt yönde oldukları maddelere diamanyetik maddeler denilir. İyonik ve kovalent kristaller diamanyetik özellik gösterirler. Bu maddeler tamamlanmamış kabuklu atom ve iyonlara sahip olup, bunların diamanyetik özellikleri manyetik alanın yörüngesel hareketi bozmasından kaynaklanır.
- Ferromanyetik Maddeler: Bütün momentlerin ani mıknatıslanmaya ile eşit olarak katkı gösterdikleri en basit manyetik düzen şeklidir[13]. Bu maddelerin manyetik

duygunluđu çok büyük olabilir, yaklaşık 10^5 cm^{-3} , ve bu maddeler belli bir sıcaklıđın altında hemen manyetize olabilirler. En iyi bilinen ferromanyetik maddeler Fe, Ni, Co'dur. Bunların dıřında diđer bazı elementler ve geçiř metalleri ve nadir toprak elementlerinin alařımları da ferromanyetik özellik gösterirler. Gd, Dy nadir toprak elementleri ve yalıtkan geçiř metal oksidi CrO_2 uygun kořullarda ferromanyetik olurlar. Bir ferromagnet, manyetik alan yokluđunda bile kalıcı manyetik momente sahiptir. Kalıcı manyetik momentin varlıđı elektron spinleri ve manyetik momentlerin bir düzene sahip olduklarını akla getirir. Őekil 1 de gösterilen spin düzenleri kalıcı manyetik momentleri akla getirirler.[6]



Őekil 1.12 Ferromanyetik maddede spinlerin yöneliři

Ferromanyetizm; kristal içindeki moleküler manyetik momentlerin belli bir oranının tercihli bir dođrultuda yönelmesidir. Bu olay *3d* ve *4f* kabukları dolu olmayan geçiř ve nadir toprak elementlerinde sınırlanmıřtır. Ferromanyetizm ancak belirli bir sıcaklıđın altında görülebilir. Bu sıcaklıđa ferromanyetik geçiř sıcaklıđı yada kısaca Curie sıcaklıđı denilir. Bu sıcaklık maddeye bađlı olup 1000 K seviyesindedir. Pek çok ferromagnet 1000 K mertebesindeki sıcaklıklarda, kendiliđinden mıknatıslanma sađlayarak çok daha kuvvetli bir etkileřmeye iřaret ederler. Yegane olasılık, etkileřmenin, elektronların birbirleri ile ve katıdaki çekirdeklerle elektrostatik etkileřmelerinden ortaya çıkmasıdır. Deđiř-tokuř, iki elektronun elektrostatik etkileřme enerjisinin manyetik momentlerinin bađlı yönelime bađlı olabilecekleri bir mekanizma sađlar[13].



Şekil 1.13 (a) Genelde bir metalde domainler maddenin manyetize olmasını engeller. (b) Dışarıdan uygulanan manyetik alan altında domainlerin yönelişi.

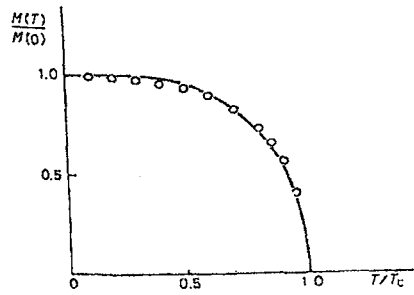
Bir maddenin duygunluğu;

$$\chi = \frac{C}{T - T_f}$$

1.1

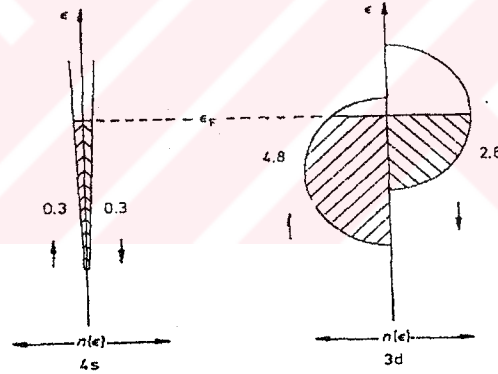
bağıntısı ile verilir. Buna Curie-Weiss Kanunu denilir. T_f Curie sıcaklığı, C ise Curie sabitidir.

$T < T_f$ sıcaklık bölgelerinde kendiliğinden manyetizasyonun yerini *doym manyetizasyonu* alır. Bu manyetizasyon sıcaklık düştükçe artar ve 0 K 'de maksimum değerini alır.



Şekil 1.14 0 K ve T K'de doym manyetizasyonu(koyu çizgi) Weiss yasası ile elde edilmiştir.[13]

Şekil 1.14'te Ni için ani mıknatıslanmanın sıcaklığa bağlılığı, teorik olarak tahmin edilen değerle karşılaştırılmaktadır. Nitel uyuşma olmasına karşın, küçük fakat önemli ayrılıklar vardır. Buradan da açıkça görüldüğü üzere, sıcaklık düşürüldükçe daha çok dipol manyetizasyon içinde yönelecektir. Ferromanyetizm metal ve yalıtkanlarda görülür, bu tip maddeler ferromanyetik maddeler olarak adlandırılırlar. İyi uyuşma nadir toprak ferromagnetleri Gd ve Dy için elde edilmektedir, ancak uyuşma geçiş elementleri olan Fe, Ni ve Co için zayıftır. Geçiş metallere paramanyetik tuzları için durumun aksine, metallere kendileri için uyuşma, yörüngesel açısal momentumun söndürüldüğü varsayılarak geliştirilemez. Bu metallerdeki 3d elektronları atomlara yerleşik olmaktan çok hareketli elektron durumları bandını işgal ettiği biçimde tanımlanırlar. Kendiliğinden mıknatıslanma bu durumda ortaya çıkar, çünkü moleküller Şekil 1.15 te gösterildikleri gibi yukarı ve aşağı spinli bandların bağlı bir yer değiştirmesine neden olur. Bu şekil demir için 2,2 Bohr magneton doyma mıknatıslanmasının böyle bir mıknatıslanmada nasıl üretildiğini de açıklar.



Şekil 1.15 Demirdeki ferromanyetizmanın basitleştirilmiş band çizimi [13]

Ferromanyetik bölgede momentler kendiliklerinden manyetize olurlar. Bu durum ise bir iç manyetik alanın varlığında oluşur. Weiss teorisine uygun olarak bu alanın manyetizasyon ile orantılı olduğu düşünülebilir[13].

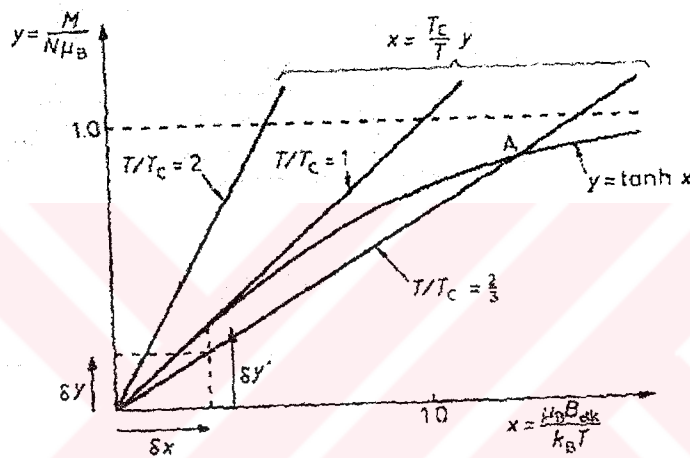
$$M = (kT / \mu_0 g \mu_B \lambda M) \cdot \chi$$

1.2

ve

$$M = Ng\mu_B \tanh(x) \quad 1.3$$

Bağıntılarından M , x 'e karşı grafiğe aktarılıp bunların kesim noktası bulunarak çözülür. Şekil 1.16 daki eğri (1.2)'e, doğrularda (1.3) bağıntısına karşılıktır. Bu doğrular farklı sıcaklıklar için çizilmiştir. Belli bir sıcaklığın altında bu eğriler birbirlerini, kendiliğinden manyetizasyonun olduğu bir A noktasında keserler. Böylece (1.2) de verilen manyetik alan ferromanyetizme götürür. Diğer kesim noktası ise orijinde olup, manyetize olmayan durumu gösterir.



Şekil 1.16 Kendiliğinden manyetizasyonun oluşumu

Moleküler alanın fiziksel orijini, komşu momentlerin etkileşmesidir. Etkileşme bunların spinlerine bağlıdır. İki moment arasındaki etkileşme enerjisi;

$$V_{ex} = -J\vec{s}_1\vec{s}_2 \quad 1.4$$

olarak verilir. Burada J' değiş-tokuş sabiti, \vec{s}_1 ve \vec{s}_2 de spinlerdir. V_{ex} enerjisi ise, *değiş-tokuş* enerjisi olarak bilinir. Yukarıdaki etkileşmenin ferromanyetizme götürmesi için J' 'nün pozitif olması gerekir. Çünkü $\vec{s} = -\vec{s}_2$ yani spinler antiparalel ise enerji $J's^2$, $\vec{s} = \vec{s}_2$ yani spinler

$$E = \mu_0 \oint HdM$$

1.5

Kristal yapıların ferromanyetik ve manyetik özellikleri hakkında birçok bilim adamı çalışmıştır. Ding-Sheng Wang (Cr, Mn, Fe)\Ni alaşımlarının manyetik özelliklerini incelemiştir. Bu maddeleri seçmesinin nedeni fcc yapıdaki Ag, Au soy metallerinin (001) yüzeyi ile ilgili deneysel çalışmalarda iyi epitaksiye müsaade etmesidir, çünkü Cr ve Fe gibi birçok geçiş metali ile örgü $\sqrt{2}$ faktörü ile uyumludur[41]. Ding-Sheng Wang ferromanyetikler grubundan olan FeAu'nun ferromanyetikler grubundan olan $L1_0$ tetragonal yapısı üzerinde çalışmışlardır[41]. S.L. Quin ve P.M. Marcus tetragonal Fe ve Mn'nin sabit V hacmindeki toplam enerjilerini c/a 'nın bir fonksiyonu olarak incelemişlerdir[43]. Eitel L. Peltzer ve Blancha FeCr'un nonmanyetik, ferromanyetik ve antiferromanyetik durumlardaki band yapısını, durum yoğunlunu c/a 'nın fonksiyonu olarak incelemişlerdir [44]. S.E.Kulkova ve arkadaşları, Fe bazlı ferromanyetik ve paramanyetik geçiş metal alaşımlarının özelliklerini incelemişlerdir[45]. G.Y. Guo ve arkadaşları ise Ni bazlı alaşımların manyetik özellikleri üzerinde incelemeler yapmışlardır[46]. G.Y. Guo ve H.H. Wang aynı zamanda sıkı paketli Cr filmlerin fiziksel özelliklerini ve faz stabilitelerini incelemişlerdir[47]. Bu çalışmaların tümünde full-potansiyel lineer genişletilmiş düzlem dalga yöntemi ve kristal yapı olarak $L1_0$ kullanılmıştır.

Katı bir cismin uygulanan kuvvete karşı gösterdiği tepki mekanik davranış olarak tanımlanır. Bu davranış biçimi mekanik özellikleri belirler. Mekanik özellikler farklı zorlanmalar altında oluşan gerilme ve şekil değiştirmelerini ölçerek ve gözleyerek saptanır. Cisimler artan dış zorlanmalar altında önce şekil değiştirir, sonra dayanımını yitirerek kırılır. Düşük gerilmeler altındaki şekil değişimleri *elastik* yani tersinirdir. Gerilme belli bir sınırı aşarsa plastik yani kalıcı şekil değiştirme oluşur. Elastik şekil değiştirmeye karşı direnç veya sertlik malzemenin esneklik modülü ile belirlenir. Malzemenin içyapısında kalıcı değişim veya kırılma oluşturan herhangi bir gerilme sınırı *mukavemet* olarak tanımlanır. Bazı mekanik özellikler içyapıya bağlı değildir. Esneklik modülü bu tür bir özellik olup, atomlar arası bağlar tarafından belirlenir ve içyapıya duyarlı değildir. Diğer taraftan, malzemenin plastik şekil değiştirme yeteneğini temsil eden esneklik ile mukavemet ve sertlik gibi sınır gerilmelerle ilgili özellikler iç yapıya büyük ölçüde bağlıdır[14].

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

Şekil değiştirme sürecinde atomların nasıl davrandıklarını ve içyapıda ne gibi değişikliklerin olduğunu bilmek gerekir. İçyapıyı değiştiren etkenler özellikleri de değiştirir. Bu etkenler ve uygulama yöntemleri iyi bilinirse içyapıda gerekli değişiklikler yapılarak özellikler uygulama amacına göre ayarlanabilir. Ancak bu ayarlamalar doğal olarak sınırlıdır ve bu sınırların uygulayıcı tarafından bilinmesi gerekir[14].

Cisimlerin mekanik özellikleri iki ayrı aşamada incelenebilir. Birinci aşamada bunların birer sürekli atom olduğu varsayılır. Bu sürekli atomların uygulanan dış kuvvetlere karşı tepkisi gözlemlenerek deneysel olarak saptanabilir. Bu aşamada atomların nasıl davrandıkları ve içyapılarında meydana gelen değişiklikler göz önüne alınmaksızın uygulanan gerilmeye karşı meydana gelen şekil değişiklikleri ölçülür. Böylece belirli şartlar altında elde edilen gerilme-şekil değiştirme bağıntıları malzemenin mekanik davranışları ile ilgili faydalı bilgiler verir. İkinci aşamada, şekil değiştirme ve kırılma süreçlerinde atomların nasıl davrandığı, içyapıda nasıl değişikliklerin oluştuğu, içyapılarla mekanik özellikler arasındaki ilişkiler, başka bir deyişle şekil değiştirme ve kırılmanın mekanizmaları ele alınır[14].

Bozulmamış bir cisim içindeki atomların düzenlenişi termal denge durumunda meydana gelir. Bu durumda, cismin bütün kısımları mekanik dengededir. Bu, eğer cismin herhangi bir kısmı ele alınır, o parçacık üzerine teki eden kuvvetlerin bileşkesinin sıfır olduğu anlamına gelir.

Bozulma meydana geldiğinde, moleküllerin düzenlenişi değişir ve cisim denge haline geri dönmeye çalışır. Bu yüzden, bozulmuş cismin içinde, cismi denge durumuna getirmeye çalışan kuvvetler ortaya çıkar. Cisim bozulduğu zaman ortaya çıkan bu kuvvetler iç zoru oluştururlar[15].

Dış kuvvetlerin etkisi altında kalan cisim, içindeki bölgeleri komşu alan bölgeler üzerine kuvvet uygulayan cisimin, zorlanmış durumda olduğu söylenir. Zorlanmış durumdaki bir hacim elemanı üzerine iki cins kuvvet etki eder. Bunaradan biri, büyüklüğü incelenen hacim

elemanındaki madde miktarı ile orantılı olan cisim(veya hacim) kuvvetidir. Bu tip kuvvetlere yerçekimi kuvveti örnek olarak gösterilebilir. İkincisi, incelenen hacim elemanını saran madde tarafından o cisme uygulanan yüzey kuvvetidir. Bu kuvvet, hacim elemanının yüzeyinin alanı ile orantılıdır. Yukarıdaki ifadelerden *zor* için, birim alan başına yüzey kuvvetidir, denilebilir.

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

$$\lim_{\delta s \rightarrow 0} \frac{K\delta s}{\delta s} = T(x_1, x_2, x_3) \quad 1.6$$

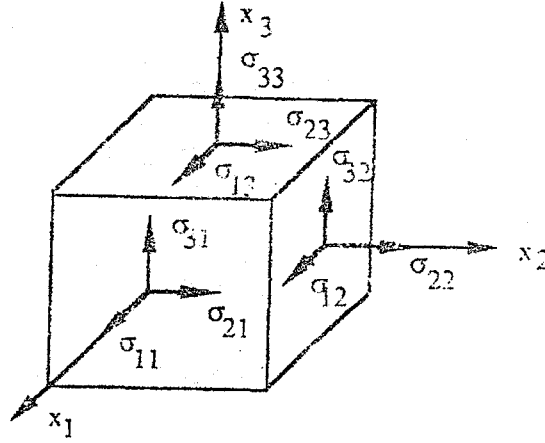
olur. Burada, T vektörü, yüzeyin birim alanı başına (x_i) noktasına etki eden yüzey kuvvetidir ve *zor* vektörü olarak adlandırılır[15].

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

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

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

Homojen Zor: Bu durum, *zorun* cisim içinde homojen olduğu, cismin tamamen istatistiksel dengede olduğu ve cisim kuvvetlerinin ve denge momentlerinin olmadığı sınırlanmalarda geçerlidir.[15] Termodinamik hesaplamalar için, kristalin homojen ve anizotropik elastikiyette olduğu düşünülür. Kristal yüzeyindeki birim alana uygulanan *zor* ve bunun sunucundaki *zorlanmalar* homojendir. Tercihli olarak uygulanan başlangıç *zoru* ile uyumlu, tercihli başlangıç yapısından kısmi sınırlı *zorlanma* sonucunda yeni bir konfigürasyon oluşur. Bu tip *zorlanmaların* ek *zorların* uygulanması ile elde edildiği düşünülür.[16]



Şekil 1.18 Homojen bir zor etkisinde kalan bir küpün yüzeyleri üzerindeki kuvvetler[15].

Cismin içinde, şekil 1.18 'deki gibi yüzeyleri $0x_1, 0x_2, 0x_3$ eksenlerine paralel olacak şekilde birim küp seçilirse, bu birim küpün dışındaki madde tarafında küpün içindeki maddelere uygulanan kuvvetler küpün yüzeyleri aracılığı ile iletilecektir. Her yüzeyden geçen kuvvet 3 bileşene ayrılabilir. Eksenlerin pozitif uçları tarafında bulunan üç yüzey düşünülürse, $0x_j$ ye dik küb yüzeyine $0x_i$ doğrultusundaki kuvvet bileşenleri σ_{ij} ile gösterilir ve bu kristalde net bir tork olmadığında simetrik olarak alınır.[15, 16]. Böylece zor tensörü tanımlanmış olur. σ_{ij} 'nin işaret seçimi alışılmış yöntemlere göre; pozitif basınç kristalin içine doğru iken pozitif zor dışı doğrudur[16].

Zor homojen zor olmadığından, birim küpün karşılıklı iki yüzeyi üzerine etki eden kuvvetler büyüklük olarak eşit fakat zıt yönlüdürler[15]. Elastik sabitler, durum fonksiyonlarının çoklu zorlanma türevleridirler, aynı zamanda zorlanmalar simetrik olduğundan, elastik sabitler tamamen Voigt simetrisine uyarlar. Voigt simetrisinin anlamı elastik sabitlerin, zorlanmaya bağlı olan i, j indislerinin yer değiştirmesinde, değişiklik olmamasıdır[16].

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

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

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

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

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

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

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

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

$$F_i = \frac{\partial \sigma_{i,j}}{\partial x_j} = \sigma_{i,j} \quad 1.7$$

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

$$\partial R = \sigma_{i,j} \delta u_i \quad 1.8$$

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

$$\int_V \partial R dV = \int_V \frac{\partial \sigma_{i,j}}{\partial x_j} \delta u_i dV \quad 1.9$$

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

$$\partial R = -\sigma_{i,j} \delta \varepsilon_{i,j} \quad 1.10$$

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

Zor etkisinde kalan bir boyutlu katı cisim uzar ya da kısalır. Zor, esneklik sınırı deęerinden daha küçük olduğunda, yani, zor ortadan kalktığında cisim eski şekline döner. Yeteri kadar küçük zorlar için zorlanmanın büyüklüğü uygulanan zorun büyüklüğü ile doğru orantılıdır. Katı cisimlerin bu özelliği ilk olarak Galileo tarafından incelenmiştir. Galileo'dan kırk yıl kadar sonra ise Hooke bu konu üzerinde çalışmış ve şimdi kendi adı ile anılan esneklik yasalarını ortaya koymuştur.

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

$$\varepsilon = S\sigma \quad \text{veya} \quad \sigma = C\varepsilon \quad 1.11$$

eşitlikleri ile bağlıdır. Burada, C, sertlik sabiti veya Young Modülü olarak, S ise *esneklik sabiti* olarak adlandırılmaktadır. 1.11 eşitliğinden;

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

1.12

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

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

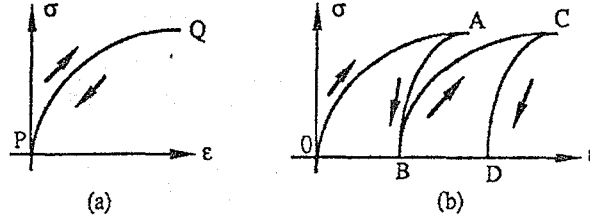
Bir boyutlu kristalde r eksenini boyunca bir F kuvveti uygulanır ve bu kuvvet etkisi altında atomlar arası uzaklığın $u=r-r_0$ kadar değiştiği düşünülürse, kristalin V potansiyel enerjisi fonksiyonunu $r-r_0$ civarında Taylor serisine açılarak görülebilir.

$$V(r) = V(r_0) + u \left(\frac{dV_r}{dr} \right)_{r=r_0} + \frac{u^2}{2!} \left(\frac{d^2V_r}{dr^2} \right)_{r=r_0} \quad 1.13$$

Burada $\left(\frac{dV_r}{dr} \right)_{r=r_0}$, $V(r)$ potansiyel enerjisinin $r-r_0$ 'daki eğimidir ve değeri sıfırdır. Küçük yer değiştirmeler için (10) serisinde u^2 den sonraki ifadeler ihmal edilebilir. Böylece;

$$V(r) = V_0 + \frac{u^2}{2} \left(\frac{d^2V}{dr^2} \right)_{r=r_0} \quad 1.14$$

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



Şekil 1.21 Linear ve lineer olmayan zorlanma eğrileri

Şekil 1.19.a 'da lineer olmayan zorlanma eğrisi gösterilmiştir. Bu tip zorlanma eğrisi veren madde için, zorun uygulanması ve kaldırılması aşamalarında aynı PQ eğrisi çizilir. Bu tip eğriler veren zorlanmalar için, zor ortadan kalktığında zorlanma ortadan kalkar, yani, cisim eski haline geri döner. Bu zorlanmalar esnek zorlanmalardır. $\sigma = f(\epsilon)$ zoru, ϵ zorlanmasının tek değerli ve lineer olmayan bir fonksiyonudur.

Şekil 1.19.b 'de AO eğrisi cismin zorlanması halini, AB eğrisi ise zorun kaldırılması halini temsil eder. Zorun yüklenmesi ve kaldırılması sonucu geriye BO ile gösterilen plastik zorlanma kalır. Plastik zorlanmada $\sigma = f(\epsilon)$ ifadesi tek değerli değildir. Zor uygulanması ve kaldırılması tekrarlanırsa şekil 1.b 'deki dişli eğri elde edilir ve madde eski haline dönemez.

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

$$\sigma_{ij} = F_{ij}(\epsilon_{11}, \epsilon_{22}, \dots, \epsilon_{12}) \quad (i, j = 1, 2, 3) \quad 1.15$$

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

$$\begin{aligned} \sigma_{ij} &= C_{ijmn} \epsilon_{mn} \\ \epsilon_{ij} &= S_{ijmn} \sigma_{mn} \quad (i, j, m, n = 1, 2, 3) \end{aligned} \quad 1.16$$

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

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

$$\begin{aligned}
 \sigma_{ij} &= C_{ijmn} \varepsilon_{mn} \\
 \sigma_{ij} &= C_{ijm1} \varepsilon_{m1} + C_{ijm2} \varepsilon_{m2} + C_{ijm3} \varepsilon_{m3} + \\
 \sigma_{ij} &= C_{ij11} \varepsilon_{11} + C_{ij12} \varepsilon_{12} + C_{ij13} \varepsilon_{13} + \\
 &C_{ij21} \varepsilon_{21} + C_{ij22} \varepsilon_{22} + C_{ij23} \varepsilon_{23} + \\
 &C_{ij31} \varepsilon_{31} + C_{ij32} \varepsilon_{32} + C_{ij33} \varepsilon_{33}
 \end{aligned} \tag{1.17}$$

$$\begin{aligned}
 \varepsilon_{ij} &= S_{ijmn} \sigma_{mn} \\
 \varepsilon_{ij} &= S_{ijm1} \sigma_{m1} + S_{ijm2} \sigma_{m2} + S_{ijm3} \sigma_{m3} + \\
 \varepsilon_{ij} &= S_{ij11} \sigma_{11} + S_{ij12} \sigma_{12} + S_{ij13} \sigma_{13} + \\
 &S_{ij21} \sigma_{21} + S_{ij22} \sigma_{22} + S_{ij23} \sigma_{23} + \\
 &S_{ij31} \sigma_{31} + S_{ij32} \sigma_{32} + S_{ij33} \sigma_{33}
 \end{aligned} \tag{1.18}$$

Örneğin; σ_{12} zorunun tek başına bir kristale uygulanması dengelenmemiş dönme momentini ortaya çıkarır, bu yüzden sistemin dengede kalabilmesi için σ_{12} zoru ; σ_{21} zoru ile birlikte bulunmalıdır. 1.18 denkleminde

$$\varepsilon_{ij} = S_{ij12} \sigma_{12} + S_{ij21} \sigma_{21} = (S_{ij12} + S_{ij21}) \sigma_{12} \tag{1.19}$$

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

$$S_{ijmn} = S_{ijnm} \tag{1.20}$$

Aynı durum;

$$C_{ijmn} = C_{ijnm} \quad 1.21$$

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

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

$$\begin{aligned} \sigma_{11} = & C_{1111}\varepsilon_{11} + C_{1122}\varepsilon_{22} + C_{1133}\varepsilon_{33} + \\ & C_{1123}\varepsilon_{23} + C_{1132}\varepsilon_{32} + C_{1113}\varepsilon_{13} + \\ & C_{1131}\varepsilon_{31} + C_{1112}\varepsilon_{12} + C_{1221}\varepsilon_{21} \end{aligned} \quad 1.22$$

$$\begin{aligned} \varepsilon_{11} = & S_{1111}\sigma_{11} + S_{1122}\sigma_{22} + S_{1133}\sigma_{33} + \\ & S_{1123}\sigma_{23} + S_{1132}\sigma_{32} + S_{1113}\sigma_{13} + \\ & S_{1131}\sigma_{31} + S_{1112}\sigma_{12} + S_{1221}\sigma_{21} \end{aligned} \quad 1.23$$

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

Çizelge 1.1 İndis değiştirme tablosu

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

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

$$\begin{bmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{33} \\ \sigma_{32} \\ \sigma_{31} \\ \sigma_{21} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} C_{11} & \dots & \dots & \dots & \dots & C_{16} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ C_{61} & \dots & \dots & \dots & \dots & C_{66} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \varepsilon_{11} \\ \varepsilon_{11} \\ \varepsilon_{33} \\ 2\varepsilon_{32} \\ 2\varepsilon_{31} \\ 2\varepsilon_{21} \end{bmatrix} \quad 1.24$$

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

$$\begin{bmatrix} \sigma_1 \\ \sigma_2 \\ \sigma_3 \\ \sigma_4 \\ \sigma_5 \\ \sigma_6 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} C_{11} & \dots & \dots & \dots & \dots & C_{16} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ C_{61} & \dots & \dots & \dots & \dots & C_{66} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \varepsilon_3 \\ \varepsilon_4 \\ \varepsilon_5 \\ \varepsilon_6 \end{bmatrix} \quad 1.25$$

$$\begin{bmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \varepsilon_3 \\ \varepsilon_4 \\ \varepsilon_5 \\ \varepsilon_6 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} S_{11} & \dots & \dots & \dots & \dots & S_{16} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ S_{61} & \dots & \dots & \dots & \dots & S_{66} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sigma_1 \\ \sigma_2 \\ \sigma_3 \\ \sigma_4 \\ \sigma_5 \\ \sigma_6 \end{bmatrix} \quad 1.26$$

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

$$(C_{ij}) = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{12} & C_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} \end{bmatrix} \quad 1.27$$

Burada bağımsız sertlik katsayılarının sayısı 3 'e iner ve 1.20 eşitliğindeki sertlik katsayıları matrisinin x_2 ekseninde 4 kat dönme simetrisini de sağlar.

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

2. KUANTUM ÇOK CİSİM PROBLEMİNİ ÇÖZÜM YÖNTEMİ: YOĞUNLUK

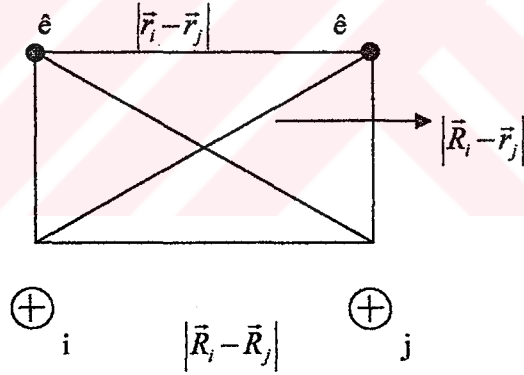
FONKSİYON TEORİSİ

Bir katı, ağır pozitif yüklü parçacıkların (çekirdekler) ve hafif negatif yüklü parçacıkların (elektronlar) bir topluluğudur. Eğer N tane çekirdek varsa, elektromanyetik olarak etkileşen $N + ZN$ tane parçacık problemi ile ilgilenilir [7]. Bu ise bir “çok cisim problemi” ve bu parçacıklar çok hafif olduklarından Kuantum mekaniğine ihtiyaç duyulur. Yani bir “kuantum çok cisim problemi”. Bu sistemin çok-parçacık Hamiltonyeni aşağıdaki gibidir.

$$\hat{H} = \hat{T}_N(R) + \hat{T}_e(r) + \hat{V}_{eN}(r, R) + \hat{V}_{ee}(r) + \hat{V}_{NN}(R)$$

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2} \sum_i \frac{\nabla_{\vec{R}_i}^2}{M_i} - \frac{\hbar^2}{2} \sum_i \frac{\nabla_{\vec{r}_i}^2}{m_e}$$

2.1.



Şekil 2.1 Çekirdekler ve elektronlar arasındaki etkileşimler

M_i kütlesine sahip çekirdekler \vec{R}_i ve m_e kütlesine sahip elektronlar da \vec{r}_i yer vektörü ile tanımlanır. İlk terim çekirdekler için ikinci terim elektronlar için kinetik enerji operatörüdür. Son üç terim elektronlar ve çekirdekler arasındaki, elektronlar ve diğer elektronlar arasındaki, çekirdekler ve diğer çekirdekler arasındaki Coulomb etkileşmesini tanımlar. Bu problemin bu şekliyle çözümü oldukça uzun zaman alacağından, çeşitli yaklaşımlar

geliştirilmiştir. Yapılan çalışmalarda kabul edilebilir yaklaşık öz durumları bulabilmek için üç farklı seviyede yaklaşım yapılmıştır [7].

2.1. Seviye 1: Born-Oppenheimer Yaklaşımı

Hamiltonyen iki veya daha fazla terime ayrılabilirdiğinden, bu yaklaşım; toplam özfonksiyonlara ayrılan Hamiltonyenin bireysel özfonksiyonlarının sonuçları olup, toplam özdeğerler de ayrılan Hamiltonyen terimlerinin bireysel özdeğerlerinin toplamıdır [17]. Genelleştirilmiş ilk koordinat için q_1 ve diğer koordinat için q_2 denirse;

$$\hat{H} = \hat{H}_1(q_1) + \hat{H}_2(q_2)$$

olur. Schrödinger eşitliği ise;

$$\hat{H}\psi(q_1, q_2) = E\psi(q_1, q_2)$$

dir. Buna göre bilinen toplam dalga fonksiyonu;

$$\psi(q_1, q_2) = \psi_1(q_1)\psi_2(q_2)$$

şeklinde yazılır. Burada $\psi_1(q_1)$ ve $\psi_2(q_2)$ \hat{H}_1 ve \hat{H}_2 'nin özfonksiyonlarıdır. E_1 ve E_2 ise özdeğerleridir. Buna göre;

$$\begin{aligned} \hat{H}\psi(q_1, q_2) &= (\hat{H}_1 + \hat{H}_2)\psi_1(q_1)\psi_2(q_2) \\ &= \hat{H}_1\psi_1(q_1)\psi_2(q_2) + \hat{H}_2\psi_1(q_1)\psi_2(q_2) \\ &= E_1\psi_1(q_1)\psi_2(q_2) + E_2\psi_1(q_1)\psi_2(q_2) \\ &= (E_1 + E_2)\psi_1(q_1)\psi_2(q_2) \\ &= E\psi(q_1, q_2) \end{aligned}$$

eşitliği elde edilir.

Böylece \hat{H} 'nin özfonksiyonları \hat{H}_1 ve \hat{H}_2 'nin özfonksiyonlarının sonuçlarıdır. Özdeğerlerde \hat{H}_1 ve \hat{H}_2 'nin özdeğerlerinin toplamıdır. Relativistik olmayan Hamiltonyen sabit olduğu için, elektronik (elektron-elektron etkileşmesi) ve nükleer (çekirdek-çekirdek etkileşmesi) etkileşmelerin toplam dalga fonksiyonunu aşağıdaki gibi yazılır [17].

$$\psi(r, R) = \psi_e(r)\psi_N(R)$$

Burada bütün elektronik etkileşmeler r , bütün nükleer etkileşmeler de R ile gösterilir. Bu Born-Oppenheimer yaklaşımı olup, bu yaklaşıma göre Hamiltonyen denklemi, başta tanımlandığı gibi;

$$\hat{H} = \hat{T}_N(R) + \hat{T}_e(r) + \hat{V}_{ee}(r) + \hat{V}_{eN}(r, R) + \hat{V}_{NN}(R) \quad 2.2$$

şeklinde yazılır [18].

Çekirdekler çok daha ağır parçacıklar olmaları nedeni ile elektronlardan çok daha yavaştır. Elektron ve çekirdek kütle oranı $\left(\frac{m}{M_A} \approx \frac{1}{10000}\right)$ olduğundan çekirdekler sabit konumlarında “dondurabilir”, yani çekirdeğin konumu eylemsiz referans sistemi olarak kabul edilir. Elektronların da bunlarla bir anlık dengede oldukları var sayılır. Çekirdek durgun olduğundan kinetik enerji sıfırdır. Bu durumda;

$$\hat{H}_{el} = \hat{T}_e(r) + \hat{V}_{eN}(r; R) + \hat{V}_{NN}(R) + \hat{V}_{ee}(r) \quad 2.3$$

ve Schrödinger denklemi de;

$$\hat{H}_{el}\phi_e(r; R) = E_{el}\phi_e(r; R) \quad 2.4$$

şeklinde yazılır.

Bu “sabitlenmiş-çekirdek” Schrödinger eşitliğidir. Yukarıdaki eşitlikte $\hat{V}_{NN}(R)$ genellikle ihmal edilir. Böylece eşitlik sadece R parametresine bağlı olur. Çünkü etkileşme

sürecinde R sabit olduğundan $\hat{V}_{NN}(R)$ sabit olur. Bu durumda özdeğerler de sabit bir oranda değişir.

Bu kabullere göre eşitlikler;

$$\hat{H}_e = \hat{T}_e(r) + \hat{V}_{ee}(r) + \hat{V}_{eN}(r; R) \quad 2.5$$

$$\hat{H}_e \phi_e(r; R) = E_e \phi_e(r; R) \quad 2.6$$

olur [18]. Burada $\hat{T}_e(r)$ elektronların kinetik enerjisi, $\hat{V}_{ee}(r)$ $\hat{e}-\hat{e}$ etkileşmesinden dolayı potansiyel enerji ve $\hat{V}_{eN}(r; R)$ elektronlar ile çekirdekler arasındaki potansiyel enerjidir.

Bu yaklaşımlarla görüyoruz ki çok cisim probleminde sadece elektronlar rol oynarlar. Çekirdekler bu durumda etkisiz olup, ancak belirli bir pozitif yük kaynağına indirgenirler. Yani elektron bulutuna sadece “dış etki” olurlar. Bu yaklaşıma göre birbiriyle etkileşen ve çekirdeklerin potansiyelinde hareket eden “NZ” tane negatif parçacıklar topluluğu vardır.

Born-Oppenheimer yaklaşımının (2.1) eşitliğinden şu sonuç anlaşılır: Çekirdek hareket etmediğinden, kinetik enerjileri sıfır olur ve kinetik enerji terimi yok olur. \hat{V}_{NN} terimi ise bir sabite indirgenir. Sonuçta elimizde elektron gazının kinetik enerjisi, $\bar{e}-\bar{e}$ etkileşiminden dolayı potansiyel enerji ve çekirdeğin potansiyelinde hareket eden elektronların potansiyel enerjisi kalır. Burada dikkat edilmesi gerekir ki (2.5) denklemini kinetik ve $\bar{e}-\bar{e}$ terimlerine bağlı olarak sadece çok elektron sistemi ile ilgilenildiğini gösterir [7].

2.2. Seviye 2: Yoğunluk Fonksiyonel Teori

Bu teorinin tarihi 20. yüzyılın ilk otuzlu yıllarına kadar gider. DFT metodu, Hohenberg ve Kohn tarafından ortaya konulmuş iki teorem yardımıyla 1964 yılında kurulmuştur [2].

Birinci seviye yaklaşımından (Born-Oppenheimer) elde ettiğimiz kuantum çok cisim problemi ilk orijinal halinden oldukça basittir. Fakat hala çözülmesi oldukça zordur. Denklem (2.5)'i daha incelenebilir formda bir yaklaşıma indirgeyecek çeşitli metotlar vardır. Bunların en

önemlisi Hartree-Fock (HF) metodudur [19]. Bu metot, atomlar ve moleküller için daha kullanışlıdır. Bu nedenle daha çok kuantum kimyasında kullanılmaktadır. Bununla beraber, bu metot katılar için daha az doğru sonuç vermektedir. Bu nedenle, HF metodu ile katı sistemler için işlem yapılmaz. Bu çok daha kapsamlı ve daha uygun bir metot olan Yoğunluk Fonksiyonel Teorisinin (DFT) tanımlanması ile aşılmıştır [2 ve 20]. HF metodu gibi, DFT metoduda kuantum çok cisim problemini çözmek için genel bir metottur, bu metod aynı zamanda katıların özdeğer ve özfonksiyonlarının elde edilmesinde de kullanılır. Bu durum aynı zamanda çok cisim probleminin çözümü için büyük bir özelliktir. Yöntem en düşük seviye yaklaşıklıklarında kayda değer doğruluklar gösterir ve kısa süreli değişken yoğunluklar altındaki birçok problemde başarıyla kullanılır [21]. DFT metodu HF metodunda olduğu gibi sadece elektron gazına değil, aynı zamanda nükleer modeller oluşturmak için proton-nötron gazına da uygulanabilir [7].

2.2.1. Hohenberg ve Kohn Teoremleri

Gren fonksiyonunun self-enerji formülasyonu çok farklı sistemlerde etkileşen parçacıkların fizikinin tanımlanmasında etkileşen parçacıkların fizikinin tanımlanmasında kullanılabilirler. Bu özelliğinden dolayı birçok durum için uygun olmayabilir. İterasyon işlemleri birçok yönde doğru sonuca ulaşmak için kullanılmalıdır, çünkü hangi yönde uygulanmasının doğru olduğu kesin değildir. Bu yüzden üzerinde çalışılan sistemlerin fiziksel özelliklerinin ya da kullanışlı bir alternatif bakış açısının getirilmesi için farklı yöntemler geliştirilmiştir. Bunlardan biri de Hohenberg-Kohn Teoremidir[21].

Birinci teorem: Yoğunluk fonksiyonel teorisidir. Bu teori Hohenberg tarafında geliştirilmiştir, Kohn ve Sham da benzer tekniği değişken olduğu düşünülen elektron yoğunluğunda sistemin taban durum özelliklerini bulmak için kullanırlar[21]. Hohenberg ve Kohn, $\rho(\vec{r})$ taban durumu yoğunluğunun değişken olduğunu, aynı zamanda da çok-elektron sisteminin (atom, molekül ve katı) taban durum yoğunluğu $\rho(\vec{r})$ ile dış potansiyel $V_{dış}$ arasında bire-bir uyumun olduğunu gösterdiler.

Karşılıklı Coulomb ve yoğunluk $\rho(r)$ etkisi altında hareket eden ve geniş bir hacimde hapsedilmiş birçok elektron dikkate alınır. Hamiltonyen denklemi de

$$H = T + V + V_{dış} \quad 2.7$$

olarak tanımlanır[2].

Kolaylık olsun diye dejenere durumlar dikkate alınmayacağı için ψ taban durumu dalga fonksiyonu olmak üzere taban durumu yoğunluğu;

$$\rho(\vec{r}) \equiv (\psi, \psi^*(r)\psi(r)\psi) \quad 2.8$$

şeklinde tanımlıdır [2]. Yoğunluk bazı iç potansiyellere bağlıdır. Bunun tersine, aynı $\rho(r)$ için etkisi olan bazı dış potansiyelleri de hesaba katarak, dış fonksiyonun yoğunluğunun birim fonksiyonu olduğunun gösterilmesi kolaylaşır. Bu taban durum enerjisinin minimum olmasına yol açar[21]. Farklı bir taban durumu yoğunluğu farklı bir ψ' dalga fonksiyonu ile tanımlanır. Eğer bu iki durum arasındaki yoğunluk farkı, $\rho'(r) - \rho(r) = \text{sabit}$ değilse farklı bir Schrödinger eşitliği sağlanıncaya kadar ψ' , ψ dalga fonksiyonunu karşılamıyor demektir.

Hamiltonyen ve taban durumu enerjileri arasındaki eşitlik;

$$E' = (\psi', H'\psi') < (\psi, H'\psi) = (\psi, (H + V' - V)\psi) \quad 2.9$$

dir. İki durum arasındaki enerji ilişkisi de;

$$E' < E + \int [(v'(r) - v(r))\rho(r)]dr \quad 2.10$$

yazılır. Değiş-tokuş etkisi dikkate alınarak benzer eşitlik,

$$E < E' + \int [(v(r) - v'(r))\rho(r)]dr \quad 2.11$$

yazılır. 2.10 ve 2.11 eşitlikler taraf tarafa toplanırsa,

$$E + E' < E + E' \quad 2.12$$

sonucuna ulaşılır ki sistemin Hamiltonyeni bir sabit olur. Böylece v_{du} potansiyeli sadece $\rho(r)$ 'nin fonksiyoneliidir [2].

Buradan anlaşılmalıdır ki belirli birçok-elektron sistemi (2.5) Hamiltonyeni ile verilen tek bir dış potansiyeye sahiptir. Dikkat etmek gerekir ki, yoğunluk fonksiyonel teorisi taban durumlara uygulanır. Bu da genelleştirilmiş durumların beklenen durum özelliklerini kolayca verir[21]. Schrödinger denklemleri de, tek bir taban durumuna ait çok parçacık dalga fonksiyonunu verir. Bu dalga fonksiyonuna karşılık gelen elektron yoğunluğu kolaylıkla bulunur. Böylece, dış potansiyel kendisine karşılık gelen çok iyi tanımlanmış tek bir taban durumu yoğunluğuna dönüşür. Araştırmalar göstermektedir ki, yoğunluk fonksiyonu dalga fonksiyonundan daha az bilgi içermektedir. Eğer bu iddia doğruysa, tek bir dış potansiyeli bulmak mümkün olmayabilir. Sadece taban durumu yoğunluğu verilmiş ise, Hohenberg ve Kohn'un ilk teoremi tam olarak bunun mümkün olduğunu söyler. Bu da gösteriyor ki, yoğunluk fonksiyonu da en azından dalga fonksiyonunun sahip olduğu içeriğe sahiptir. Yani, bir atom, molekül ya da katı hakkında muhtemel tüm etkileşimler bilinir. Bundan dolayı gözlenebilir tüm nicelikler sadece yoğunluğun fonksiyonu şeklinde yazılabilir [7].

İkinci Teorem: Değişim Prensibi

Taban durumu toplam enerji fonksiyonu;

$$E_{V_{ds}}[\rho] = \underbrace{\langle \psi | \hat{T} + \hat{V} | \psi \rangle}_{F_{HK}[\rho]} + \langle \psi | \hat{V}_{ds} | \psi \rangle \quad 2.13$$

$$E_{V_{ds}}[\rho] = F_{HK}[\rho] + \int \rho(\vec{r}) V_{ds}(\vec{r}) d\vec{r} \quad 2.14$$

şeklinde tanımlıdır.

Açıkça $\rho(r)$ doğru değeri için $E_{V_{dış}}[\rho]$ taban durumu enerjisine eşittir. Burada ki Hohenberg-Kohn yoğunluk fonksiyonu $F_{HK}[\rho]$ herhangi birçok elektron sistemi için geneldir.

Bir N parçacıklı sistem için $\hat{\rho}(\vec{r})$ yoğunluk operatörü aşağıdaki gibi tanımlanır.

$$\hat{\rho}(\vec{r}) = \sum_{i=1}^N \rho(\vec{r}_i - \vec{r}) \quad 2.15$$

Bunun çok cisim dalga fonksiyonu ψ için çözümü yoğunluğu verir.

$$\begin{aligned} \rho(\vec{r}) &= \langle \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) | \hat{\rho}(\vec{r}) | \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) \rangle \\ &= \langle \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) | \sum_{i=1}^N \delta(\vec{r}_i - \vec{r}) | \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) \rangle \\ &= \sum_{i=1}^N \int \psi^*(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_i \equiv \vec{r}, \dots, \vec{r}_N) \\ &\quad \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_i \equiv \vec{r}, \dots, \vec{r}_N) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \dots d\vec{r}_N \end{aligned} \quad 2.16$$

Taban durumu yoğunluğunun bilindiği kabul edilirse, dış potansiyelden toplam enerjiye katkı tam olarak hesaplanabilir. F_{HK} fonksiyonu için tam bir ifade bilinmesine rağmen yine de F_{HK} çekirdekler ve konumları hakkında yeterli içeriğe sahip olmadığından, herhangi bir çok-elektron sistemi için genel bir fonksiyon olarak kabul edilir. Bunun anlamı prensipte $F_{HK}[\rho]$ için tasarlanan her bir atom, molekül ya da katı için kullanılabilecek bir ifade olmasıdır [7].

İkinci teorem, taban durumu yoğunluğunu bulmak için Rayleigh-Ritz'in değişim prensibini [2] kullanmayı mümkün kılar. Sonsuz sayıda ihtimal yoğunluklarının içinden $E_{V_{dış}}[\rho]$ 'yu minimum yapan bir tanesi de dış potansiyel $V_{dış}(\vec{r})$ 'ye karşılık gelen taban durumu yoğunluğudur.

Enerji fonksiyonu $E_{V_{dış}}[\rho]$ 'nin anlamı şudur: katı için belirli bir $V_{dış}$ potansiyele karşılık gelen $\rho(r)$ yoğunluğu hesaplandığında, taban durumu enerjisini verir.

$E_{V_{dış}}[\rho]$ 'yu kararlı yapan ve taban durumu yoğunluğundan farklı herhangi bir $\rho_i(\vec{r})$ yoğunluğu, bir uyarılmış durum yoğunluğu olup, uyarılmış durum enerjisi de $E_i = E_{V_{dış}[\rho=\rho_i]}$ dir. Bu yerde de $E_{V_{dış}}[\rho]$, tüm uyarılmış durum yoğunluklarında kararlı olmaz. Eğer $\rho_j(\vec{r})$ böyle bir yoğunluk $E_j = E_{V_{dış}[\rho=\rho_j]}$ ise E_j ' uyarılmış durum enerjisine göre daha düşüktür [7].

2.2.2. Kohn-Sham Denklemleri

Kinetik enerjinin toplam enerjiye katkısı oldukça büyüktür. Bu yüzden Thomas-Fermi-Wezsacker modelinin kinetik enerjisinde %1'lik bir hata dahi DFT'nin yararlı bir biçimde kullanılmasını engeller. Bu yüzden DFT'nin kullanımından Kohn-Sham denklemleri bulunana kadar kaçınıldı[22]. 1965 yılında yayınlanan Kohn-Sham denklemleri DFT'yi pratik bir sonuca dönüştürdüler [20]. Bu denklemler taban durumu yoğunluğunu elde etmede pratik bir kullanışa sahiptirler. Sırasıyla tam ve Hartree-Fock Hamiltonyenlerine karşılık gelen $E_e[\rho]$ ve $E_{HF}[\rho]$ toplam enerji fonksiyonlarıdır. (Bu kademedен sonra kolaylık olması için kare parantezler kaldırılır) [7].

Buna göre;

$$E_e = T + V \quad 2.17$$

$$E_{HF} = T_0 + \underbrace{(V_H + V_x)}_V \quad 2.18$$

şeklindedir.

Buradaki T kinetik enerji, $V \bar{e} - \bar{e}$ etkileşimine ait potansiyel enerji fonksiyonelleri, T_0 etkileşmeyen \bar{e} gazının kinetik enerji fonksiyoneli, V_H Hartree katkısı ve V_x 'de değiş-tokuş katkısıdır. Denklem (2.17)'den (2.18)'i çıkartıldığında, karşılıklı etkileşme fonksiyoneli

$$V_c = T - T_0 \quad 2.19$$

olarak elde edilir. Toplam enerjiye deęiş-tokuşun katkısı Hartree-Fock çözümünde bulunan fakat Hartree çözümünde bulunmayan katkı olarak tanımlanır [7].

Açıktır ki bu deęiş-tokuş katkısı;

$$E_H = T_0 + V_H \quad 2.20$$

şeklinde verilen Hartree fonksiyonu için,

$$V_x = V - V_H \quad 2.21$$

olarak tanımlanır. Bu bilgilere göre, Hohenberg-Kohn fonksiyoneli aşağıdaki gibi yeniden düzenlenebilir.

$$\begin{aligned} F_{HK} &= T + V + T_0 - T_0 = T_0 + V + \underbrace{(T - T_0)}_{V_c} \\ &= T_0 + V + V_c + V_H - V_H = T_0 + V_H + V_c + \underbrace{(V - V_c)}_{V_x} = T_0 + V_H + \underbrace{(V_x + V_c)}_{V_{xc}} \end{aligned} \quad 2.22$$

Burada V_{xc} deęiş-tokuş-korelasyon enerji fonksiyonelidir. Bu fonksiyonelin katkılarının zorluklar içerip içermedięi tam olarak bilinemez. Biran için V_{xc} 'nin bilindięi kabul edilirse, açık bir şekilde taban durumu enerji fonksiyonu aşağıdaki gibi yazılabilir.

$$E_{V_{dis}}[\rho] = \underbrace{T_0[\rho] + V_H[\rho] + V_{xc}[\rho]}_{F_{HK}} + \int \rho(\vec{r}) V_{dis}(\vec{r}) d\vec{r} \quad 2.23$$

Kohn ve Sham göstermiştir ki çok elektron problemini kendisiyle uyumlu tek elektron probleminin eşlenik takımıyla deęiştirebilmek mümkündür [20].

Toplam enerji fonksiyonu birkaç terimin toplamıdır. Durgun bir potansiyelde etkileşen homojen olmayan \bar{e} gazının taban durumu enerjisi;

$$E_{V_{du}}[\rho] = \int V_{du}(r)\rho(r)dr + \frac{1}{2} \iint \frac{\rho(r)\rho(r')}{|r-r'|} drdr' + T_0[\rho] + E_{xc}[\rho] \quad 2.24$$

olarak yazılabilir [20].

Burada $T_0[\rho]$, $\rho(r)$ yoğunluklu etkileşmeyen elektron sisteminin kinetik enerji ve $E_{xc}[\rho]$ da ρ yoğunluklu homojen \bar{e} gazının \bar{e} başına değiş-tokuş ve korelasyon enerjisidir. Keyfi bir $\rho(r)$ için $E_{xc}[\rho]$ basit ve tam bir sonuç vermez. Buna karşılık eğer $\rho(r)$ yeterli bir şekilde yavaşça değişiyorsa

$$E_{xc}[\rho] = \int \rho(r) \epsilon_{xc}[\rho(r)] dr \quad 2.25$$

eşitliği yazılabilir.

Kohn ve Sham teoremine göre, eşitlik (2.25) de, incelenen sistemlerdeki değiş-tokuş korelasyon etkilerini uygun bir gösterimini içerir [20].

Taban durumu yoğunluğunu bulmak için 2.23. bağıntısı iki dış potansiyele konu olacak şekilde etkileşmeyen klasik elektron gazının bir enerji fonksiyoneli şeklinde yorumlanabilir. Bu dış potansiyellerden biri çekirdekten, bir diğeri ise değiş-tokuş ve korelasyon etkilerinden kaynaklanır [7]. Kohn-Sham Hamiltonyeni;

$$\hat{H}_{ks} = \hat{T}_0 + \hat{V}_H + \hat{V}_{du} + \hat{V}_{xc} \quad 2.26$$

$$\hat{H}_{ks} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_i^2 + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int \frac{\rho(r')}{|\vec{r}-\vec{r}'|} d\vec{r}' + \int \rho(r) V_{du}(r) dr + V_{xc} \quad 2.27$$

şeklindedir. Burada değiş-tokuş ve korelasyon potansiyeli

$$\hat{V}_{xc} = \frac{\delta V_{xc}[\rho]}{\delta \rho}$$

şeklinde fonksiyonel türev olarak verilmektedir. Kohn-Sham teoremi bir N-elektronlu sistemin tam taban durumu yoğunluğu $\rho(\vec{r})$,

$$\rho(\vec{r}) = \sum_{i=1}^N \phi_i(\vec{r}) \phi_i^*(\vec{r}) \quad 2.28$$

olmak üzere yeniden düzenlenebilir. Burada $\phi_i(\vec{r})$ tek-parçacık dalga fonksiyonları Kohn-Sham denkleminin N tane en düşük enerji çözümleri olmak üzere, K-S teoremi

$$\hat{H}_{ks} \phi_i = \varepsilon_i \phi_i \quad 2.29$$

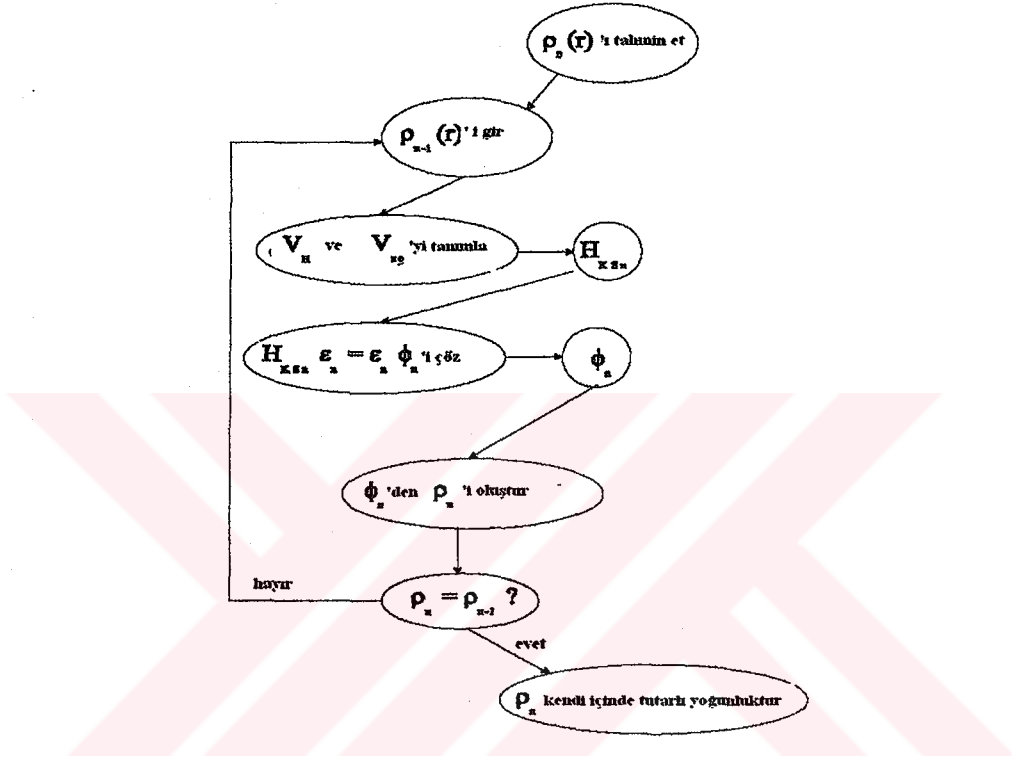
şeklinde yazılabilir [7].

Taban durumu yoğunluğunu bulmak için, Schrödinger denkleminde benzer ancak etkileşmeyen tek-parçacık denklemlerinin çözümleri kullanılabilir. Bilinen çözümler $\bar{e} - \bar{e}$ etkileşmesinden dolayı n. mertebeden diferansiyel denkleme götürürken, bu çözüm oldukça uzun süre alır.

Burada dikkat edilmesi gereken nokta, ϕ_i tek-parçacık dalga fonksiyonları, \bar{e} 'nin dalga fonksiyonları değildir. Bunlar doğrudan fiziksel bir anlamı olmayan matematiksel parçacıkları tanımlamaktadır. Bu yöntem "sanki parçacıkların" hepsinin üzerinden hesaplanan yoğunluğun, doğrudan \bar{e} yoğunluğuna ulaşılmasını sağlar.

V_H Hartree operatörü ve V_{xc} değiş-tokuş ve korelasyon operatörünün her ikisi de $\rho(\vec{r})$ yoğunluğuna bağlıdır. Diğer bir deyişle araştırılacak ϕ_i 'ye de bağlıdır. Bunun anlamı kendi kendine tutarlı bir problem ile ilgileniliyor demektir. Çözümler (ϕ_i) orijinal denklemi (H_{ks} deki V_H ve V_{xc}) ye göre belirlenir ve denklem, çözümü bilinmeden önce yazılamaz ve çözülemez. Bundan kurtulmak için tekrar eden bir işlem gerekir [7].

Hartree-Fock teorisinde olduğu gibi, Kohn-Sham denklemleri taban durum üzerinden orbitallerin genişletilmesi ile çözülür. DFT'nin en büyük avantajı, uygulanırken alışıla gelmiş benzer gösterimlerden daha az taban durum tanımlamasına gereksinim duyulmasıdır.



Şekil 2.2 Hartree-Fock ya da Kohn-Sham denklemlerinin çözümünde kendi içinde tutarlı olanyöntemde ki n tekrarlama için akış şeması

Yukarıdaki şekil 2.1.e göre:

- i. ρ_0 başlangıç yoğunluğu tahmin edilir ve bundan H_{ks1} hamiltonyeni elde edilir.
- ii. Özdeğer problemi çözülür ve ρ_1 yoğunluğunun türetebileceği ϕ_1 elde edilir.
(Büyük bir olasılıkla ρ_0 , ρ_1 'den farklı olacaktır.)
- iii. ρ_1 , H_{ks2} 'yi elde etmede kullanılır ve bundan da ρ_2 elde edilir;

- iv. v.b işlem bu şekilde devam edebilir ve bu yolla H_{ksf} 'den meydana gelen bir ρ_f yoğunluğuna yakınsanır ki bu son yoğunluk ta Hamiltonyen'e uygundur.
- v. Son yoğunluk Hamiltonyende kullanılır.

2.2.3. Değiş-tokuş karşılıklı etkileşme fonksiyonu

Yukarıda tanımlanan Kohn-Sham işleminde, Born-Oppenheimer yaklaşımından farklı olarak başka hiç bir yaklaşım yapılmamıştır. Yukarıdaki yaklaşımlarda değiş-tokuş korelasyon fonksiyoneli ihmal edilmiştir. Bu yaklaşımda değiş-tokuş korelasyon fonksiyonu teoriye dahil edilecektir.

Kohn-Sham teorisi kinetik enerjinin kimyasal doğrulukta hesaplanmasına olanak sağlar, ve tüm ihtiyaç duyulan doğru değiş-tokuş korelasyon enerjisidir. Değiş-tokuş korelasyon enerjisinin en basit biçimi Dirac değiş-tokuş terimidir[22]

(2.29) eşitlik sisteminin bütün çözümlerinin elektron yük yoğunluğunun bir fonksiyonu olduğu görülür. Bu denklemin çözümünü, örneğin Hartree-Fock eşitliğini, daha kolay hale getiren etkin potansiyelin yer vektörüne bağlı olmasıdır. Bu yüzden Hartree yaklaşımında olduğu gibi fazla karmaşıklık yoktur. Ancak, bu sadece değiş-tokuş korelasyon enerjisi yerel yük yoğunluğunun bir fonksiyonu olarak tanımlandığında doğru olur. Bu şekilde bir metod yerel yoğunluk yaklaşımı (LDA) olarak bilinir [23]. LDA'da, bir elektron sisteminin değiş-tokuş korelasyon enerjisi, elektron gazında r noktasında elektron başına karşılıklı etkileşme enerjisi varsayılarak oluşturulur. Değiş-tokuş korelasyon enerji fonksiyoneli aşağıdaki gibi tanımlanır.

$$E_{xc}^{LDA} = \int \rho(\vec{r}) \epsilon_{xc}[\rho(\vec{r})] d\vec{r} \quad 2.30$$

Burada ϵ_{xc} , r noktasında aynı elektron yoğunluğuna sahip olan homojen elektron gazında elektron başına değiş-tokuş-korelasyon enerjisine eşittir. Bu durumda karşılık gelen değiş-tokuş korelasyon potansiyel:

$$V_{xc}^{LDA}(r) = \frac{\delta E_{xc}^{LDA}}{\delta \rho(r)} = \epsilon_{xc}[\rho(r)] + \rho(r) \frac{\partial \epsilon_{xc}(\rho)}{\partial \rho} \quad 2.31$$

Kohn-Sham orbital denklemleri:

$$\left[\frac{1}{2} \nabla^2 + V_{du}(r) + \int \frac{\rho(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d\vec{r}' + V_{xc}^{LDA}(r) \right] \phi_i = \epsilon_i \phi_i \quad 2.32$$

2.32 denkleminin çözümü Kohn-Sham yerel yoğunluk yaklaşımı (KS-LDA) tanımlar. Buda literatürde temelde basitçe LDA metodu olarak bilinir.

$\epsilon_{xc}(\rho)$ fonksiyonu değiş-tokuş ve korelasyon olarak ikiye bölünebilir:

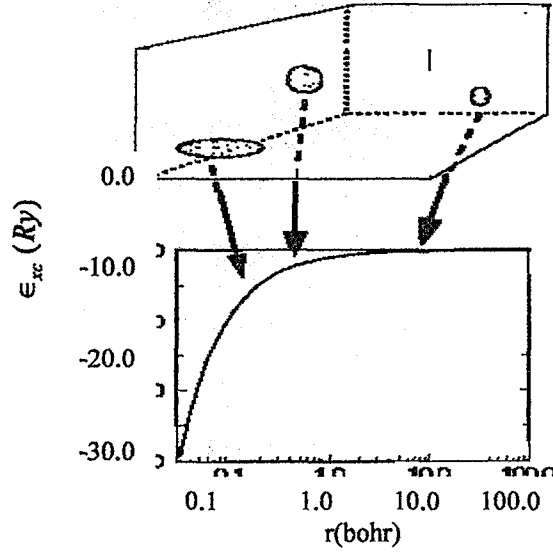
$$\epsilon_{xc}(\rho) = \epsilon_x(\rho) + \epsilon_c(\rho) \quad 2.33$$

Değiş tokuş kısmı zaten biliniyor. Buda Dirac değiş-tokuş enerji fonksiyoneli ile aşağıdaki gibi verilir [24].

$$\epsilon_{xc}(\rho) = -C_x \rho(r)^{1/3}, C_x = \frac{3}{4} \left(\frac{3}{\pi} \right)^{1/3} \quad 2.34$$

Burada homojen elektron gazı için $\epsilon_{xc}(\rho)$ sayısal olarak bilinmektedir.

Bu teoremin anlamı ise; belirli bir $\rho(\vec{r})$ yoğunluğuna bağlı olarak değiş-tokuş (ϵ_x) korelasyon (ϵ_c) enerjisi, madde sabit yoğunluklu sonsuz küçük hacimlere bölünerek bulunabilir. Bu şekilde her bir hacim, toplam değiş-tokuş-korelasyon enerjisine eşit miktarda katkıda bulunur ki, bu ise orijinal maddenin bu hacimde sahip olduğu yoğunluğun sabit olmasıdır.



Şekil 2.3 LDA Teoreminin şekille ifadesi. (Yatay eksen homojen elektron gazının yoğunluğunu, dikey eksen ise homojen elektron gazının değiş tokuş-karşılıklı etkileşmeenerjisini gösterir)[25]

Maddenin her bir sonsuz küçük hacmi değiş tokuş-korelasyon enerjisine aynı sonsuz küçük hacmi işgal eden ve bu hacimdeki orijinal maddenin yük yoğunluğu gibi aynı (toplam) yük yoğunluğuna sahip bir homojen elektron gazının katkısına eşit miktarda katkıda bulunur. Yani her bir sonsuz küçük hacimde gelen katkılar birbirine eşittir [25].

Hiçbir teori E_{xc} 'nin bu formda olmasını doğrudan sağlamaz. Bu sadece kabul edilebilir bir tahmindir. Bu düzenleme ile LDA'nın yavaş değişen yoğunluklu sistemler için daha iyi performans göstermesi beklenir. Fakat oldukça sürpriz bir şekilde diğer birçok (gerçek) durumlarda da çok hassas olduğu görülmüştür [7].

LDA'yı daha da iyileştirmek için atılacak bir sonraki adım, her bir sonsuz küçük hacmin değiş-tokuş-korelasyonuna katkısını sadece bu hacimdeki yerel yoğunluğa bağımlı kılmak değil, aynı zamanda komşu hacimlerdeki yoğunluklara da bağımlı kılmaktır. Diğer bir deyişle, yoğunluğun gradyenti rol oynayacaktır. Bu nedenle bu yaklaşım Genelleştirilmiş Gradyent Yaklaşımı (GGA) adını almaktadır [26].

2.2.4. Seviye 3: Denklemlerin Çözümü

2.27 eşitliği seviye 2'deki yaklaşımda olduğu gibi ister HF ya da isterse de DFT kullanıldığında, aşağıdaki şekilde sonsuz sayıda tek-elektron denklemlerine dönüştürülür. (m , denklemlerdeki dereceyi temsil eden bir tamsayıdır) [7].

$$\left(\underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_m^2 + \frac{e^2}{4\pi \epsilon_0} \int \frac{\rho(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d\vec{r}' + V_\alpha + V_{di}}_{\hat{H}_{sp}} \right) \phi_m(\vec{r}) = \epsilon_m \phi_m(\vec{r}) \quad 2.35$$

\hat{H}_{sp} tek-parçacık hamiltonyeni olarak adlandırılır. HF için, V_α değiş-tokuş operatörüdür. ϕ_m ' ler HF için bir-elektron (ya da parçacık) orbitalleridir. Değiş-tokuş etkileri tam olarak işleme sokulmasına rağmen korelasyon etkileri hiç dahil edilmemiştir. Bu etkiler ise sadece HF-metodu ile yapılan çalışmalarda ilave edilir [7].

V_α ; DFT, L(S)DA, GGA ve diğer yaklaşımlar için de değiş-tokuş korelasyon operatörüdür. Değiş-tokuş ve korelasyonun her ikisinde de işleme sokulmuş ancak ϕ_m ' ler yaklaşık olarak matematiksel tek parçacık orbitalleri olarak tanımlanmıştır [7].

Hartree-Fock ve Kohn-Sham denklemleri arasındaki benzerliğin anlamı, aynı matematiksel yöntemlerin bunları çözmeye kullanılmasıdır. Birçok metotta "çözümün" verilen ϕ_p^b temel seti ile ϕ_m 'yi ifade etmede ihtiyacımız olan C_p^m katsayılarını bulmaktır. C_p^m , sonsuz set katsayısıdır.

$$\phi_m = \sum_{p=1}^p C_p^m \phi_p^b \quad 2.36$$

ϕ_m dalga fonksiyonları sonsuz boyutlu bir fonksiyon uzayına aittir ve P bu nedenle prensipte sonsuzdur. Pratikte, temel fonksiyonlar ancak sınırlı sayıda kullanılır. Böyle bir sınırlı değer, tam olarak ϕ_m 'yi tanımlayacaktır.

Seçilen bir temel seviyeye sahip olduğunda (aynı zamanda p için sonlu bir değer için) denklem (2.35) bir özdeğer problemi gibi ele alınarak çözülebilir [7].

Buna göre verilen herhangi bir m için, denklem (2.36) denklem (2.35)'de yerine koyulur ve $\langle \phi_i | (i = 1, \dots, p)$ ile soldan çarpılırsa;

$$\langle \phi_i | \hat{H}_{sp} | \phi_j \rangle - \varepsilon_m \langle \phi_i | \phi_j \rangle = 0$$

$$\phi_i = \sum_{p=1}^p C_p^m \phi_p^b \quad \text{olduğundan,}$$

$$\sum_{p=1}^p C_p^m (\langle \phi_i^b | \hat{H}_{sp} | \phi_j^b \rangle - \varepsilon_m \langle \phi_i^b | \phi_j^b \rangle) = 0 \text{ şeklinde karakteristik denklem elde edilir.}$$

Bu denklemi matris şeklinde aşağıdaki gibidir:

$$\begin{bmatrix} \dots & \dots & \dots \\ \vdots & \langle \phi_i^b | \hat{H}_{sp} | \phi_j^b \rangle - \varepsilon_m \langle \phi_i^b | \phi_j^b \rangle & \vdots \\ \dots & \dots & \dots \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_1^m \\ \vdots \\ C_p^m \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} \quad 2.37$$

Bu matris seti temel durumlardaki tek parçacık Hamiltonyeninin matris elemanlarından ve S_{ij} üst üste binmiş matris elemanlarından meydana gelir. Aynı zamanda bu matrisin temel seti ortonormal ise üst üste binmiş matris bir birim matrisdir. Hamiltonyen matrisinin köşegenleştirilmesi, p özdeğerlerini ve tanımlanan seviyedeki p özfonksiyonlarının herbirisini ifade eden p katsayılarını verir. (Eğer daha fazla özfonksiyon gerekliyse, p artırılmalıdır). Daha fazla p özfonksiyonları daha iyi bir yaklaşım demektir. Ancak denklem (2.37)'deki matrisin köşegenleştirilmesi ve özdeğer problemlerinin çözümü de çok fazla zaman alır.

Bu zorluğun aşılması için m 'nin (n, \vec{k}) kuantum sayılarına karşılık geldiği, her bir \vec{k} dalga fonksiyonu için farklı bir temel kullanılmasının mümkün ve avantajlı olduğu bilinmektedir. Bu durumda p 'nin boyutu oldukça küçülür.

Eğer temel fonksiyonlar ϕ_m 'ye çok benzerse, dalga fonksiyonunu hassas bir şekilde tanımlamada bunların çok azına ihtiyaç duyulacaktır ve bu durumda p ve matris boyutu küçük olacaktır. Böyle bir temel set "etkin" olarak adlandırılır. Bununla beraber, böyle bir problemi çözmeye başlamadan önce problemin genel çözümünün hemen hemen bilindiği kabul edilir. Bu nedenle böyle bir temel set çok genel olamaz. Ancak bazı özel problemler için çok çabuk çözüm verebilir. Bu durumda birçok özfonksiyonlar tam doğru olarak tanımlanamaz. Diğer bir durumda ise, p ihtiyaçtan çok daha fazladır. Bu nedenle p 'nin sınırlandırılması yaklaşık olarak bulunan özfonksiyonların kabul edilemez olacağı sonucunu verir. Bu yaklaşımlar temel fonksiyondan çok fazla özellik taşırlar ve bu nedenle böyle setler "tarafı" olarak adlandırılır. Bütün bu yaklaşımlara rağmen teorik katıhal fiziğinde aynı anda etkili ve tarafsız bir temel set bulunabilir [7].

2.2.4.1. Özdeğerler ve Özvektörlerin Bulunması

(\vec{e}_1, \vec{e}_2) baz grubuyla vektör uzayını inceleyelim. (R^n , kolaylık için $n=2$ alalım.)

Bu vektör uzayının ortogonal olması şart değildir. Bu baz ile ilgili olarak her \vec{x} vektörü (x_1, x_2) gibi iki notasyon ile tanımlanabilir. \hat{H} 'nin yanında \vec{x} 'i kullanabilmek için bir operatör belirlenir. Yani eşitlik bir $\vec{y} = (y_1, y_2)$ vektörüne denkleştirilebilir.

$$\hat{H} \vec{x} = \vec{y}$$

2.38

Herhangi bir vektör için \hat{H} dönüşümü altında \vec{x} 'in bütün baz vektörleri bulunabilir. Yani kendisi ile paralel:

$$\hat{H} \vec{x} = \lambda \vec{x} \quad 2.39$$

denklemini yazılır. Bu durumda kullanılan baz vektörleri yeniden yazılır ve (x_1, x_2) için çözüm aranır.

$$\hat{H}(x_1 \vec{e}_1 + x_2 \vec{e}_2) = \lambda(x_1 \vec{e}_1 + x_2 \vec{e}_2) \quad 2.40$$

bu eşitlik sırasıyla \vec{e}_1 ve \vec{e}_2 ile çarpılıp yeniden yazılabilir.

$$x_1 \vec{e}_1 \cdot (\hat{H} \vec{e}_1) + x_2 \vec{e}_1 \cdot (\hat{H} \vec{e}_2) = \lambda(x_1 \vec{e}_1 \cdot \vec{e}_1 + x_2 \vec{e}_1 \cdot \vec{e}_2) \quad 2.41$$

$$x_1 \vec{e}_2 \cdot (\hat{H} \vec{e}_1) + x_2 \vec{e}_2 \cdot (\hat{H} \vec{e}_2) = \lambda(x_1 \vec{e}_2 \cdot \vec{e}_1 + x_2 \vec{e}_2 \cdot \vec{e}_2) \quad 2.42$$

Eşitlik (2.39) ve (2.40) matris notasyonunda aşağıdaki gibi düzenlenir.

$$\begin{bmatrix} \vec{e}_1 \cdot (\hat{H} \vec{e}_1) & \vec{e}_1 \cdot (\hat{H} \vec{e}_2) \\ \vec{e}_2 \cdot (\hat{H} \vec{e}_1) & \vec{e}_2 \cdot (\hat{H} \vec{e}_2) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} - \lambda \begin{bmatrix} \vec{e}_1 \cdot \vec{e}_1 & \vec{e}_1 \cdot \vec{e}_2 \\ \vec{e}_2 \cdot \vec{e}_1 & \vec{e}_2 \cdot \vec{e}_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad 2.43$$

Bu matris $H \vec{x} = \vec{y}$ şeklinde ifade edilebilir ise aşağıdaki formatta yazılır.

$$\begin{bmatrix} H_{11} & H_{12} \\ H_{21} & H_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \end{bmatrix} \quad 2.44$$

Burada H_{ij} ler bilinmektedir. Her bir \vec{x} vektörü için \hat{H} 'nin etkileri matris çarpımı tarafından bulunabilir.

İkinci matrisin elemanları (S_{ij}) sadece baz vektörleri tarafından tanımlanmaktadır. Bu matrise üst üste bindirme matrisi (overlap) denir. Bu notasyon ile (x_1, x_2) notasyonları bulunur.

$$\begin{bmatrix} H_{11} - \lambda S_{11} & H_{12} - \lambda S_{12} \\ H_{21} - \lambda S_{21} & H_{22} - \lambda S_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad 2.45$$

λ parametresi hariç sol taraftaki matris tümüyle bilinmektedir. λ 'nın her bir değeri için, eşitlik (2.45) x_1 ve x_2 için çözülebilir. λ 'nın bütün değerleri için, matrisin determinanı sıfırdan farklı olacak, o zaman (2.45) eşitliği bir tek çözüme sahip olur ki, bu da $(0,0)$ 'dır. Bu vektör orijinal \vec{x} ile paraleldir. Fakat daha önemli olan farklı ilginç çözümlerin bulunabilir olmasıdır. Yalnız λ 'nın bu değerleri için gözlenen determinant aşağıdaki gibi olur. Çünkü ortogonal bir matris için $\det B = |H - \lambda S| = 0$ dir [27].

$$\begin{vmatrix} H_{11} - \lambda S_{11} & H_{12} - \lambda S_{12} \\ H_{21} - \lambda S_{21} & H_{22} - \lambda S_{22} \end{vmatrix} = 0 \quad 2.46$$

Yukarıdaki denkleme \hat{H} 'nin karakteristik eşitliği denir. $\det B = |H - \lambda S| = 0$ denkleminin özdeğer probleminin anlamlı çözümleri olması için, sağlanması gereken denklemin özdeğer problemine karakteristik denklem denir. Karakteristik eşitliğin köklerine \hat{H} 'nin özdeğerleri denir. Eğer $\lambda = \lambda_1$ ise, $[H - \lambda_1 S][x] = [0]$ denklemini sonsuz sayıda çözüme sahiptir. Gerçekten $(x_1 = a, x_2 = b)$ bir çözüm ise (β_a, β_b) de bir çözümdür. β , herhangi bir gerçek sayıdır. Bu çözüm metodu bizim baştaki ihtiyacımızı giderir. \hat{H} , eğer \vec{x} ile paralel bir \vec{x} vektörüne dönüşürse $\beta \vec{x}$ de aynı işlemi yapar. Bundan dolayı, n farklı özdeğerlerine ait olan birim vektörler vektör uzayı için ortonormal bazlar $\begin{pmatrix} \rightarrow \lambda_1 & \rightarrow \lambda_2 \\ e_1 & e_2 \end{pmatrix}$ gibi alınabilir. Ortonormal baz, bir vektör uzayının $\{x_1, x_2, \dots, x_n\}$ vektörden oluşan bazı olup, hepsi birbirine ortogonal

olan ve normları da bir olan vektörlere denir. Ortogonal ise, iki vektörün skaler çarpımının sıfır olmasıdır [27].

\hat{H} operatörünün matris gösterimi için; (2.41) eşitliğine göre, matris elemanları,

$$\begin{aligned} H_{ij} &= e_i \cdot (\hat{H} e_j) \\ &= e_i \cdot (\lambda_j e_j) = \lambda_j \delta_{ij} \end{aligned} \quad 2.47$$

yazılabilir. Bu da köşegen üzerinde özdeğerler bulunan bir köşegen matristir.

$$[H] = \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{bmatrix} \quad 2.48$$

Yeni bir bazda bu operatörün özvektörlerini ve özdeğerlerini bulmak için; yukarıda tanımlanan aynı yöntem kullanılır. Açıkça önceki gibi (1,0) ve (0,1) özvektörleri ile, önceki gibi λ_1 ve λ_2 değerleri bulunur ki, yani eski vektörler, şimdiki baz vektörlerdir. Bu özdeğer ve özvektörler \hat{H} operatörün esas özelliklerini içerir.

Başlangıçta esas alınan ortonormallik ise, sonuçta ortaya çıkan üst üste bindirme matrisi birim matris olur. Bu ise (2.43) eşitliğinin çözümünü kolaylaştırır.

Karakteristik eşitliğin iki kökü birbirine uygun olabilir. Bu durumda, özdeğer bir çizgi vektörü yerine düzlem özvektör oluşturur ve bu düzlemde iki karşılıklı dikey baz vektörleri seçilir. Ancak onlar diğerlerinin özvektörleri ile farklı özdeğerlere sahiptir.

Bu sonuç sonsuz boyutun vektör uzaylarına da genişletilebilir (Yani fonksiyon uzaylarında ki parçacık dalga fonksiyonları tanımlanabilir).

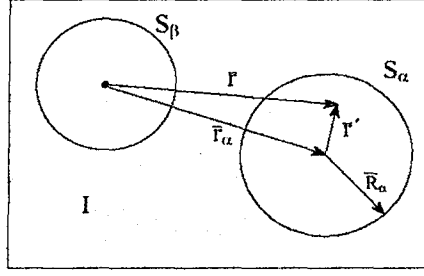
2.3. APW, LAPW ve APW+lo Metodları

Slater 1937'de bu yöntemi ilk olarak önerdiğinde, APW ve onun devamı olan yöntemler [3,28] yoğunluk fonksiyonel teorisi kullanılarak yapılan elektronik yapı çeşitlerinin çözümünde oldukça yaygındı [2,20]. Bu yaygın kullanımın sebebi genel potansiyelin lineerleştirilmiş şeklini kullanan APW metodu ile sözde potansiyel düzlem dalga yaklaşımından daha az sayıda temel seti kullanır. Fakat yine de bu temel set sayısı, lineer muffin-tin orbital (LMTO) metodu ya da Gaussiyen orbital tekniklerinden daha fazladır.

Yıllar boyunca, APW yönteminde bazı değişiklikler olmuştur. Örneğin tam potansiyel terimin eklenmesi ve atomik kuvvetlerin işin içine katılması gibi [29,30]. Şüphesiz ki tek önemli nokta Andersen tarafından önerilen APW metodunun [31] lineerleştirilmesidir. Aynı zamanda, E. Sjöstedt ve arkadaşları da orjinal APW metodunu lineerleştirmiştir [32] ve yakınsaklık durumu sonuçları Andersen'in önerdiği lineer arttırılmış düzlem dalgaları (LAPW) metodundaki sonuçlara benzerlik gösterir.

2.3.1. APW Metodu

Çekirdekten uzaklaştıkça elektronların serbestlik dereceleri değişir. Serbest elektronlar düzlem dalgalarıyla tanımlanırlar. (Düzlem dalgalar sıfır potansiyel ile Hamiltonyenin özfonksiyonlarıdır.) Çekirdek yakınlarında elektronlar serbest atomdakine benzer şekilde hareket ederler ve benzer atomik fonksiyonlarla etkili bir şekilde tanımlanabilirler. Bundan dolayı uzay iki bölgeye bölünmüştür. Her bir atom etrafında R_α yarıçaplı küre çizilir. Bu küre S_α ile gösterilir. Etkileşmenin olduğu ikinci küre ise S_β dir. Bu tip küreler muffin-tin küresi (MT) olarak adlandırılır. Küreler tarafından doldurulan uzaya muffin-tin bölgesi denilir. Küreler dışında kalan boş alan, I ile gösterilir ve ara bölge olarak tanımlanır [7].



Şekil 2.4 İki eş olmayan atomların durumu ile birim hücredeki muffin-tin ve arasındaki bölgeler[7]

APW metoduna göre; $\psi_{\vec{k}}^n$ dalga vektörünün açılımı aşağıdaki gibi tanımlanır.

$$\psi_{\vec{k}}^n(\vec{r}) = \sum_{\vec{K}} C_{\vec{K}}^{n,\vec{k}} e^{i(\vec{k}+\vec{K})\vec{r}}$$

$$\phi_{\vec{k}}^{\vec{K}}(\vec{r}, E) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i(\vec{k}+\vec{K})\vec{r}} & \vec{r} \in I \\ \sum_{\ell,m} A_{\ell m}^{\alpha,\vec{k}+\vec{K}} u_{\ell}^{\alpha}(r', E) Y_m^{\ell}(\hat{r}') & \vec{r} \in S_{\alpha} (MT) \end{cases} \quad 2.49$$

\vec{k}, \vec{K} ve \vec{r} sembolleri sırasıyla dalga vektörü, ters örgü vektörü ve atomlar arasındaki uzaklıktır. V birim hücre hacmidir. APW temel yapısının düzlem dalga takımında olduğu gibi \vec{k} - ya bağımlı olduğuna dikkat edilmelidir. Küreler içindeki durum ise $\vec{r}' = \vec{r} - \vec{r}_{\alpha}$ tarafından her bir kürenin merkezine göre tanımlıdır. (Şekil 3.1) $A_{\ell m}^{\alpha,\vec{k}+\vec{K}}$ kuantum sayılarına bağlı olarak hesaplanan enerji boyutunda parametredir. u_{ℓ}^{α} 'ler E enerjili α serbest atom için Schödinger denkleminin radyal kısmının çözümleridir. $Y_m^{\ell}(\hat{r}')$ küresel harmoniklerdir.

Özfonksiyon sürekli değil ise kinetik enerjisi tam olarak tanımlanamaz. Böyle bir durum asla oluşmaz ve kürenin dışındaki düzlem dalganın kürenin yüzeyinin tamamı boyunca kürenin içindeki fonksiyonla uyuşması gerekir. Burada sorun düzlem dalganın titreşmesi ve kendiliğinden oluşmuş tek bir doğrultusunun olmasıdır. Bu nedenle bunun küresel harmoniklere

sahip bir fonksiyonla uyuşması için α atomu küresinin merkezi etrafında küresel harmoniklere sahip bir düzlem dalga oluşturulur:

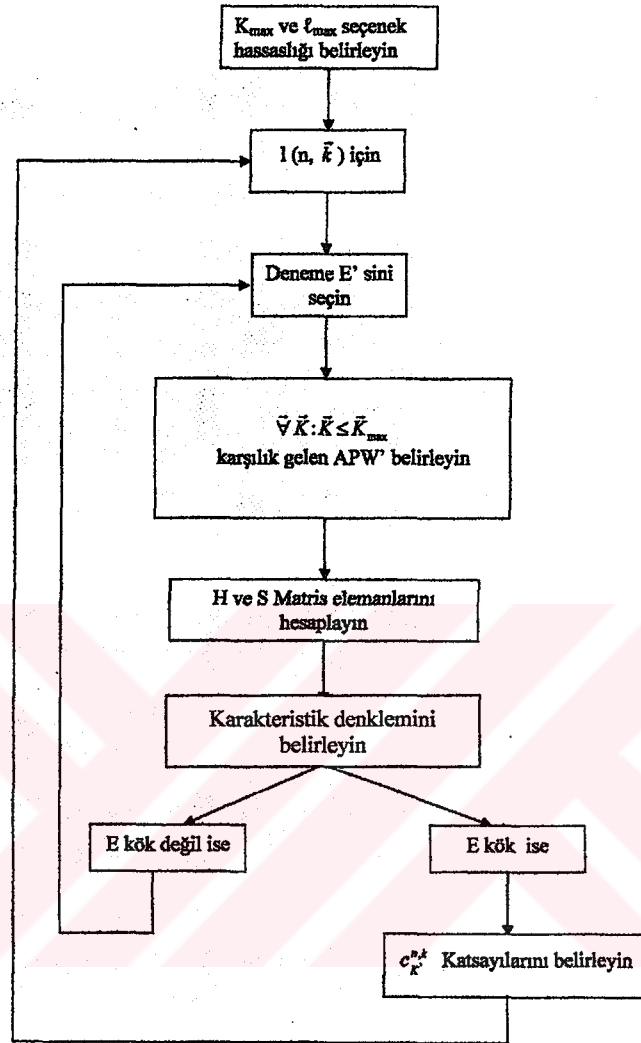
$$\frac{1}{\sqrt{V}} e^{i(\vec{k}+\vec{K})\cdot\vec{r}} = \frac{4\pi}{\sqrt{V}} e^{i(\vec{k}+\vec{K})\cdot\vec{r}_\alpha} \sum_{\ell,m} i^\ell J_\ell(\|\vec{k}+\vec{K}\|\vec{r}) Y_m^{\ell*}(\vec{k}+\vec{K}) Y_m^\ell(\vec{r}') \quad 2.50$$

Pratik hesaplamalarda ℓm üzerinden yapılan toplamlar sonludur. $A_{\ell m}^{\alpha, \vec{k}+\vec{K}}$ sabitleri MT kürelerinde $J_\ell(\vec{k}+\vec{K})R_\alpha$ Bessel fonksiyonlarının düzlem dalgalara genişletilmesiyle bulunur. Burada, $\vec{r}' = R_\alpha$ küre sınırlarında temel fonksiyonların sürekli olması gerektiğinden;

$$A_{\ell m}^{\alpha, \vec{k}+\vec{K}} = \frac{4\pi i^\ell e^{i(\vec{k}+\vec{K})\cdot\vec{r}_\alpha}}{\sqrt{V} \bar{u}_\ell^\alpha(\vec{R}_\alpha, E)} J_\ell(\|\vec{k}+\vec{K}\|R_\alpha) Y_m^{\ell*}(\vec{k}+\vec{K}) \quad 2.51$$

dir. Bu, $A_{\ell m}^{\alpha, \vec{k}+\vec{K}}$ 'yi tanımlar. Fakat E hala tanımlı değildir.

İlk bakışta, APW temel seti kullanılabilecekmış gibi görünse de, ancak yukarıda incelenen özfonksiyonların genişletilmesinde ki, $C_{\vec{k}}^{n, \vec{k}}$ sabitlerinin hesaplanmasında olduğu gibi düzlem dalga temel setlerinin bulunması metodu ile aynı yöntem takip edilir. Ancak bunlar da problemin çözümü için yetersizdir. Çünkü henüz E parametresi tanımlanmamıştır. Sonuçta dalga fonksiyonunun $\psi_{\vec{k}}^n(\vec{r})$, öz durumunu doğrudan APW ile tanımlamak için, E'yi $\epsilon_{\vec{k}}^n$ özdeğer (veya band enerjisine) eşitlemek gerekir. Bu sonuç problemin çözümü için oldukça önemlidir. Çözüm için tahmin edilen $\epsilon_{\vec{k}}^n$ değeriyle başlanılır ve bu E olarak alınır. Şimdi APW'leri tanımlayabilir ve Hamiltonyen matris elemanlarıyla üst üste binmiş matrisi (APW'ler ortogonal değil) oluşturabiliriz. Karakteristik eşitliğin tanımından (bkz. denklem 2.46) ve tahmini $\epsilon_{\vec{k}}^n$ nın bunun kökü olmayacağı anlaşıldığından ikinci tahmin yapılır. Bu yeni kabul edilen E'ye göre APW'ler yeniden tanımlanarak tüm matris elemanlarına benzer şekilde, kök bulma algoritmaları da kullanılarak tahmini kök $-\epsilon_{\vec{k}}^{n=1}$ bulunana kadar işleme devam edilir. Bundan sonraki tüm işlemler $\epsilon_{\vec{k}}^{(n=2)}$ üzerinden başlar ve benzer şekilde devam eder. (APW yönteminin akış şeması köklerin elde edilmesi şekil 2.4 de verildi).



Şekil 2.5 APW metodunun akış şeması

Pratikte, APW metodu için düzlem dalgalar eşik dalga sayısı olan $K_{\max} \approx 3,5 au^{-1}$ yaklaşık olarak alınırken, temel setin boyutu $P=131$ dir. Düzlem dalgalar için $K_{\max} \approx 5,5 au^{-1}$, $P=270$ dir [7].

2.3.2. LAPW Metodu

APW yöntemindeki problem $u_\ell^\alpha(r', E)$ 'nin incelenen öz durumunun $E = \epsilon_k^n$ bilinmeyen özenerjisinde oluşturulmak zorunda olmasıdır. Bilinen niceliklerden $u_\ell^\alpha(r', \epsilon_k^n)$ ifadesini oluşturabilmeyi bize LAPW metodu sağlar. u_ℓ^α 'yı E_0 enerjisinde hesaplırsak, bundan çok farklı olmayan enerjiler için Taylor açılımını yapabiliriz [7].

$$u_\ell^\alpha(r', \epsilon_k^n) = u_\ell^\alpha(r', E_0) + (E_0 - \epsilon_k^n) \underbrace{\frac{\partial u_\ell^\alpha(r', E)}{\partial E} \Big|_{E=E_0}}_{u_\ell^\alpha(r', E_0)} + O(E_0 - \epsilon_k^n)^2 \quad 2.52$$

Büyük oranda p -elektron bandını (orbital) ($\ell=1$) gösteren ψ_k^n öz durumunu tanımlanmaya çalışılmıştır [7]. Bunun anlamı Taylor açılımını yaptığımız LAPW' ta $A_{(\ell=1)m}^{\alpha, \vec{k}+\vec{k}}$ teriminin büyümesidir. Bu durumda denklem (2.52) $O(E_0 - \epsilon_k^n)^2$ terimi oldukça küçük olduğundan ihmal edilir ve sadece lineer terimler kalır. Bu yüzden E_0 'ı p -bandının yakınında seçmek avantajlıdır. Aynı şeyi fiziksel önemi olan tüm $\ell(s-p, d$ - ve f -bantları, yani $\ell=3$ 'e kadar) değerleri ve her bir atom için tekrarlanabilir. Sonuç olarak, tek bir genel E_0 seçilmez, fakat $\ell=3$ 'e kadar E_ℓ^α bir seti seçilebilir. Daha yüksek ℓ için sabit bir değer alınabilir. Andersen [31] Koelling ve Arbman [33] aynı yöndeki çalışmalarını enerjiden bağımsız LAPW yöntemiyle sonuçlandırmışlardır. Buna göre LAPW'nin son tanımı aşağıdaki gibidir [32].

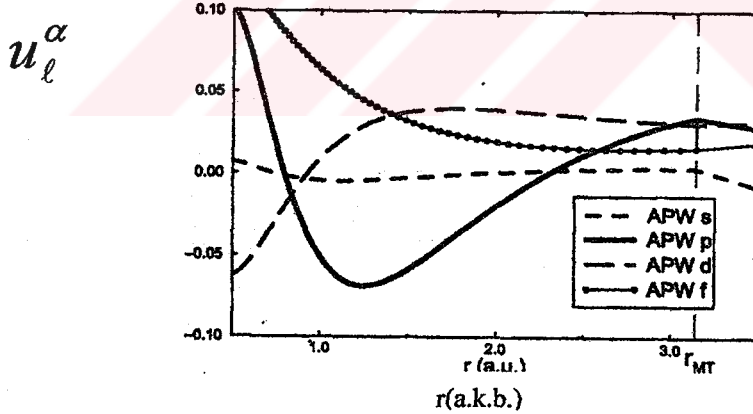
$$\phi_{\vec{k}}^{\vec{k}}(\vec{r}) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i(\vec{k}+\vec{k})\cdot\vec{r}} & \vec{r} \in I \\ \sum_{\ell, m} \underbrace{\left(A_{\ell m}^{\alpha, \vec{k}+\vec{k}} u_\ell^\alpha(r', E_\ell^\alpha) + B_{\ell m}^{\alpha, \vec{k}+\vec{k}} \hat{u}_\ell^\alpha(r', E_\ell^\alpha) \right)}_{R_m^{LAPW}} Y_m^\ell(\hat{r}') & \vec{r} \in S_\alpha \end{cases} \quad 2.53$$

u_ℓ^α radyal fonksiyonların öz türevleridir. $A_{\ell m}^{\alpha, \bar{k}+\bar{k}}$ ve $B_{\ell m}^{\alpha, \bar{k}+\bar{k}}$ sabitleri özfonksiyonun sürekli olarak türevlerinden elde edilir [32].

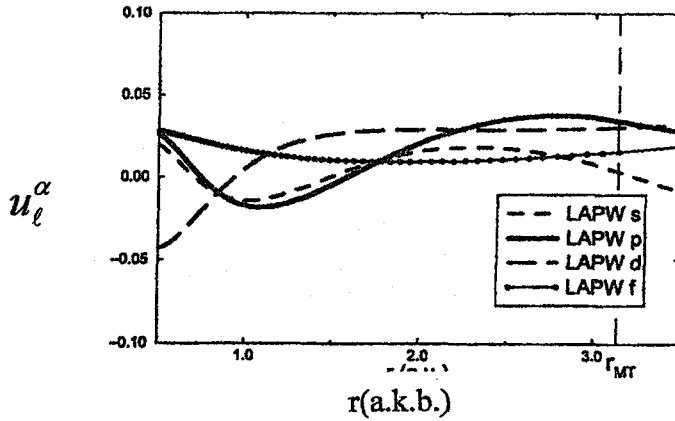
$$R_L^{LAPW}(r) = A_{\ell m}^{\alpha, \bar{k}+\bar{k}} u_\ell^\alpha(r', E_\ell^\alpha) + B_{\ell m}^{\alpha, \bar{k}+\bar{k}} \dot{u}_\ell^\alpha(r', E_\ell^\alpha), \quad \dot{u}_\ell^\alpha \equiv \frac{\partial u_\ell^\alpha}{\partial E}$$

E_ℓ^α 'nın sabitlenmesinden sonra, temel fonksiyonların tümü bir kerede hesaplanabilir. Aynı işlem daha önce düzlem dalga temel setinde tanımlandığı gibi burada da uygulanabilir. Köşegenleştirme bu \bar{k} değeri için farklı p – band enerjilerine sebebiyet verir [7].

Düzlem dalga temel seti ile karşılaştırıldığında LAPW temel seti daha küçük olduğu sonucuna ulaşılabilir. İhtiyaç olan K_{\max} , istenilen hassasiğe bağlı olarak $K_{\max} = \frac{7.5 \leftrightarrow 9.0}{R_\alpha^{\min}} \approx 4au^{-1}$ 'a dönüşür. Bu düzlem dalgalarındaki $P \approx 270$ 'e karşılık temel set boyutunun $P \approx 195$ olmasına yol açar [7].



Şekil.2.6 Ce için APW temel fonksiyonunun ℓ – oluşumunun u_ℓ^α radyal kısmı. $k = 2\pi/a$ (0.101,0.208,0.107), $K = 2\pi/a(1,1,1)$. Radyal çözümler s orbitali için $E_\ell^\alpha = 0.3 Ry$ 'den diğerleri için $E_\ell^\alpha = 0.5 Ry$ 'den hesaplandı. [32].



Şekil.2.7 Şekil.2.6'daki aynı k noktasında K vektöründe ve aynı enerjilerde elde edilen C_e için LAPW temel fonksiyonlarının ℓ - oluşumlarınınca $R_{\ell m}^{LAPW}$ radyal kısmı. [32].

MT bölgesinde LAPW ve APW temel fonksiyonlarının ℓ ($\ell = 0,1,2,3$) yeniden oluşumlarının karşılaştırılması şekil 2.5 ve şekil 2.6'da görülmektedir. Şekillerden; (2.53) denklemindeki $R_{\ell m}^{LAPW}(r)$ lineer kombinasyonu APW'de kullanılan $u_{\ell}^{\alpha}(r', E_{\ell}^{\alpha})$ orijinal çözümlerinden farklı olduğu anlaşılır [32]. Şekil 2.6.da APW metodu ile çizilen eğrilerde, p bandı eğrisinin minimum noktası sistemin bu noktada dengede yani kararlı durumda olduğunu gösterir. Şekil 2.7.de LAPW metodu ile çizilen eğrilerde ise; s ve p bantlarının kararlı bir durumda olduğu görülür.

2.3.3. Lineerleştirmenin alternatif bir yolu APW+lo

APW ve LAPW yöntemlerinin avantajlarını birleştirmek mümkündür. Örneğin, APW temel fonksiyonlarından başka düzlem dalgaya ihtiyaç duymayan enerjiden bağımsız temelin bulunmasıdır [32].

Tek başına enerjiden bağımsız APW temel yapısı, belirlenen enerji parametreleri yakınında ki çözümlerde yeterli esnekliği sağlamaz. Değişken serbestlik, $\ell \leq 3$ gibi fiziksel önemi olan ℓ kuantum sayılı orbitalleri için bölgesel orbitaller oluşturan temel yapının

kullanımıyla getirilebilir [34]. Yerel orbitaller APW temel yapısına extra durum getirmezler ve ara bölgedeki düzlem dalga sayıları bu yüzden etkilenmezler.

Yerel orbitaller ilk olarak Singh tarafından yarı-çekirdek durumları için LAPW yönteminde kullanıldı [34]. Bunlar MT kürelerinin içinde $\ell \leq 3$ olarak tanımlıdır [32].

$$\phi_{\ell m}^{lo}(\vec{r}) = \begin{cases} 0 & \vec{r} \in I \\ R_{\ell m}^{lo}(r') Y_m^\ell(\hat{r}') & \vec{r} \in S_\alpha (MT) \end{cases} \quad 2.54$$

Sjöstedt ve arkadaşları çalışmasında [32], $R_{\ell m}^{lo}(r') = A_{\ell m}^{lo} u_\ell^\alpha(r', E_\ell^\alpha) + B_{\ell m}^{lo} \dot{u}_\ell^\alpha(r', E_\ell^\alpha)$ olarak daha basitlik için tüm temel fonksiyonlarda E_ℓ^α lineerleştirdiler (doğrultma). Bunun nedeni yerel orbitaller için lineerleşmiş enerjisinin yavaşça değişiminden hesaplamaların etkilememesidir. Dahası, lineerizasyon enerjisi $u_\ell(S_\alpha, E_\ell^\alpha)$ veya $\dot{u}_\ell(S_\alpha, E_\ell^\alpha)$ 'lerin sıfıra eşit ise temel fonksiyonların çiftlenmeyecek şekilde seçilebilir. $B_{\ell m}^{lo}$ MT sınırında $\phi_{\ell m}^{lo} = 0$ kullanılarak tanımlanırken, $A_{\ell m}^{lo}$, 1 alınır.

3. WIEN2K PROGRAMININ TANITIMI

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

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

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

3.1. case.struct ve case.inst dosyalarının oluşturulması

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

TiC alaşımı bir model olmak üzere:

```

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

```

```

ATOM 2: X=0.50000000 Y=0.50000000 Z=0.50000000
      MULT= 1      ISPLIT= 2
C      NPT= 781 R0=0.00010000 RMT= 1.9000      Z: 6.0
LOCAL ROT MATRIX: 1.0000000 0.0000000 0.0000000
                   0.0000000 1.0000000 0.0000000
                   0.0000000 0.0000000 1.0000000
48  NUMBER OF SYMMETRY OPERATIONS      11
1 0 0 0.0000000      12
0-1 0 0.0000000      13
0 0-1 0.0000000      14
1      15
1 0 0 0.0000000
0 0-1 0.0000000
0-1 0 0.0000000
2
-1 0 0 0.0000000
0-1 0 0.0000000
0 0-1 0.0000000
.
-1 0 0 0.0000000
0 1 0 0.0000000
0 0 1 0.0000000
48

```

Dosyanın Tanıtımı

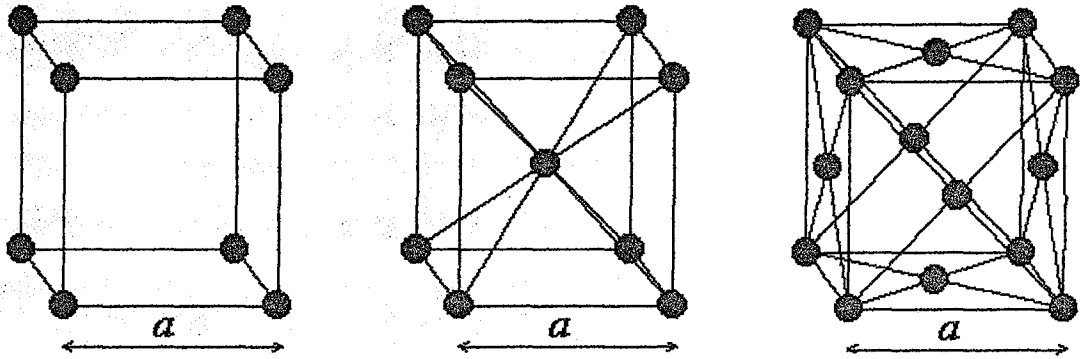
1. sıra : alaşım adı
2. sıra : örgü tipi, NAT

Örgü Tipi

P – İlkel (primitive) örgü

F – Yüzey merkezli örgü

B – Cisim merkezli örgü



Basit kübik (sc)

Cisim merkezli kübik (bcc)

Yüzey merkezli kübik (fcc)

Şekil 3.1 Kübik uzay örgüleri [6]

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

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

Çizelge 3.1 Kübik örgülerin özellikleri [6]

	Basit	Cisim merkezli	Yüzey merkezli
Standart hücre hacmi	a^3	a^3	a^3
Hücre başına örgü noktası	1	2	4
İlkel hücre hacmi	a^3	$a^3/2$	$a^3/4$
Birim hacimde örgü nokta sayısı	$1/a^3$	$2/a^3$	$4/a^3$
En yakın komşu sayısı	6	8	12
En yakın komşu uzaklığı	a	$\sqrt{3}a/2 = 0,866a$	$a/\sqrt{2} = 0,707a$
İkincil Komşu sayısı	12	6	6
İkincil komşu uzaklığı	$\sqrt{2}a$	a	a
Doluluk oranı	$\pi/6 = 0,524$	$\sqrt{3}\pi/8 = 0,680$	$\sqrt{2}\pi/6 = 0,740$

Bir hücredeki bir noktanın konumu;

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

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

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

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

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

Her ilkel örgü dört NaCl birimi olup atomların konumları şöyledir:

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

Fe'in atomik yapısında ise merkezdeki atomun konumu $(1/2, 1/2, 1/2)$ ve diğerleri de kübün köşelerinde yer alır [6].

NAT – Birim hücredeki eşdeğer olmayan atomlar sayısı.

3. sıra : Hesaplama modu;

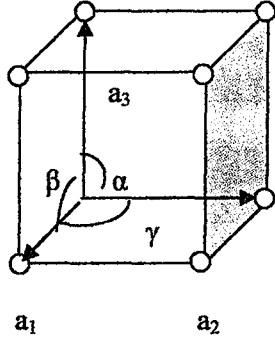
RELA – Bütün Relativistik çekirdek ve skaler relativistik valans

NREL – Relativistik olmayan hesaplama

4. sıra : $a, b, c, \alpha, \beta, \gamma$

a, b, c – Örgü temel vektörleri (atomik birimde) ($1 \text{ a.k.b.} = 0.529177 \text{ \AA}$)

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



Kübik sistemde $a_1 = a_2 = a_3$ ve $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ olur.

Şekil 3.2 Kübik birim hücre

5. sıra : Atom – indeks, x, y, z

Atom – indeks – Eşdeğer olmayan atomun sayısı

x, y, z – Atomların konumlarını belirtir.

6. sıra : multiplicity, isplit

multiplicity – yapıda birbirine eş olan atomların sayısı

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

8 5 ve 6 seçeneklerini birleştirir.

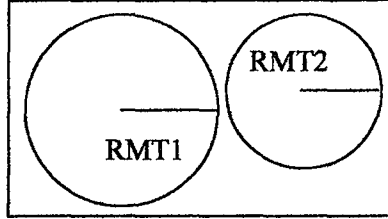
7. sıra : Atom ismi, NPT, RO, RMT, Z

Atom ismi – Periyodik cetveldeki atomun simgesi

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

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

RMT – Atomik küre yarıçapı



Şekil 3.3 Birim Hücre içindeki atomik küreler

Atomlar en fazla birbirine değebilir. Fakat birbirinin içine geçemez.

Z – Atom numarası

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

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

12. – 14. sıra : matrix, tau

matrix – simetri işlemi (uzay grup) matris gösterimi.

tau : ilkel olmayan vektör geçişi

15. sıra : simetri işleminin indeks sayısını belirtir.

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

```

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

```

Dosyanın Tanıtımı

1. sıra : title, Watson

title – isim

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

2. sıra : config

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

3. sıra : n, kappa, occup, plot

n – kuantum numarası

kappa – relativistik kuantum numarası

occup – işgal etme sayısı (spin başına)

plot – P – ayrı ayrı orbitalin yoğunluğunu belirtir.

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

Kuantum numaralarının tanımlanması [36]

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

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

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

Çizelge 3.2 Relativistik kuantum sayıları

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

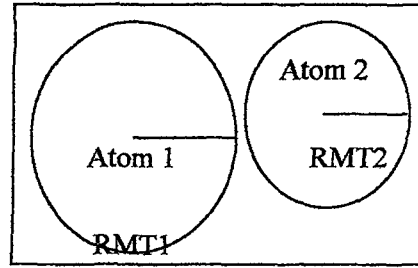
Ayrıca Fe için konfigürasyon 1S, 2S, 2P*2P, 3S, 3P*3P, 3d, 4S olup, burada “ * ” farklı relativistik kuantum sayılarını gösterir.

3.2. init_lapw hesaplamaları

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

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

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



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

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

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

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

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

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

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

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

x lstart : Atomik yoğunlukları meydana getirir.

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

05 – LSDA, [37]

13 – GGA, [4]

14 – GGA, [38]

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

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

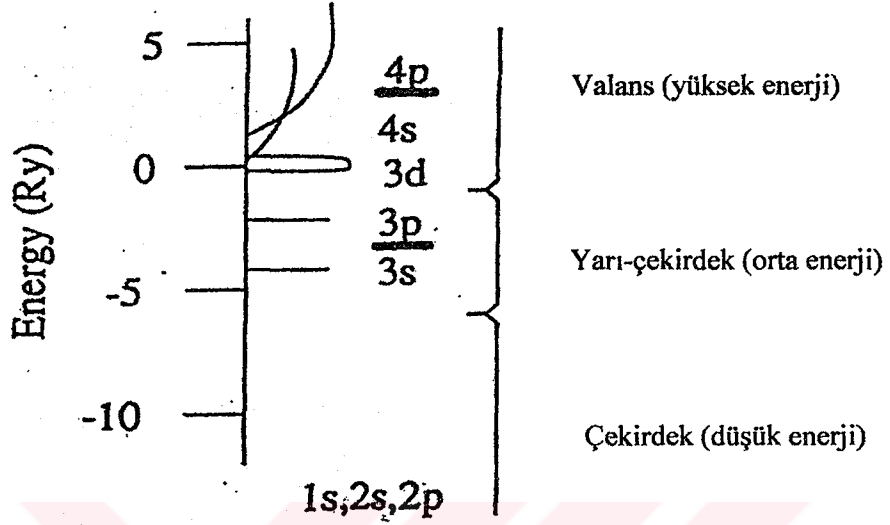
case.outputst : uygun atomik konfigürasyonu belirtir.

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

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

- 1. Çekirdek durumlar** :atomik kürenin içerisinde tamamen hapis edilmişlerdir. Enerjileri Fermi enerjisinin 7 – 10 Ry altındadır.
- 2. Yarı – çekirdek durumlar** :Enerjileri Fermi enerjisinin 1 – 7 Ry arasındadır. Bu yükler atomik kürenin içinde tamamen sınırlanmaz bir kısmı kürenin dışına taşar.
- 3. Valans durumları** : Enerji olarak en yüksek (işgal edilmiş) durumlarıdır. Atomik kürenin dışında azalan bir miktar yüke sahiptirler.

Örnek : Ti için



Şekil 3.4 Çekirdek, yarı çekirdek ve valans durumları [39]

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

5 – 9 arasında APW

6 – 10 arasında LAPW

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

```

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

```

0 -0.78 0.010 CONT 1
 0 0.30 0.000 CONT 1
 1 0.30 0.000 CONT 1

K-VECTORS FROM UNIT:4 -7.0 1.5 emin/emax window

5

Dosyanın Tanıtımı

1. sıra : switch

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

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

WFPRI – özvektörleri yazar.

2. sıra : rkmax, lmax, insmax

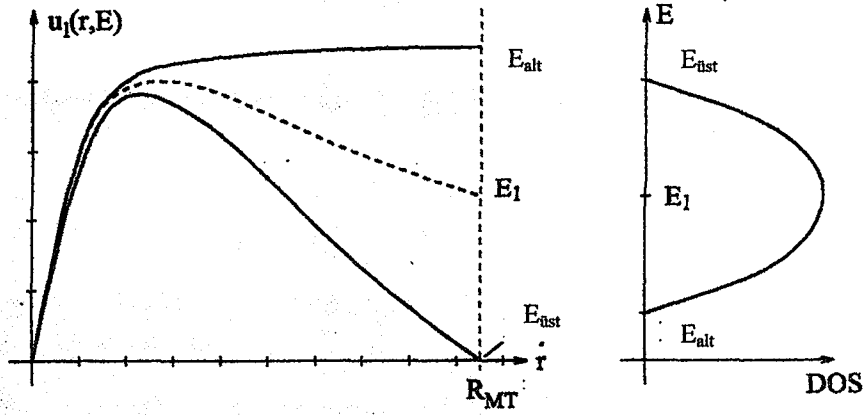
rkmax – $R_{mt} * K_{max}$ matris büyüklüğü (yakınsama) tanımlar. Burada K_{max} kesme dalga fonksiyonu, R_{mt} tüm atomik küre çapının en küçüğüdür. Genellikle bu değer 5 ve 9 arasında ($APW + l_0$) veya 6 -10 arasında (temel LAPW) değerlerinde olmalıdır. (K^2_{max} pseudo-potansiyel hesaplamalarında R_y parametrelerinde kesme düzlem dalgalarında kullanılır.)

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

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

3. sıra : Entrial, ndiff, Napw

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



Şekil 3.5 $u_l(r, E)$ enerjisi ve DOS'un şematik bağılılığı [1]

n_{diff} – Hariç tutulacakların sayısı

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

LAPW temeli için 0

APW temeli için 1

4. sıra : ℓ , $E\ell$, de, switch, NAPWL

ℓ kısmi dalğanın 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. $u_l(r, E)$ yarıçap doğrultusundaki fonksiyon muffin-tin yarıçapına kadar enerji ve RMT'yi değiştirir. Tipik bir durum şematik olarak şekil 3.5. de gösterilmektedir.

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

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

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

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

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

5. sıra : unit – number, EMİN, EMAX

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

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

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

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

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

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

x dstart : SCF döngüsü için başlangıç yoğunluğu üretir.

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

Daha sonra spin – polarizyon yapıp yapılmayacağı sorulur.

3.3. SCF Hesaplamaları

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

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

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

LAPW1 : Valans bandlarını hesaplar (özvektör ve özdeğerler meydana getirir). Hamiltonyen ve üst üste binme matrisi [33] oluşturur.

LAPW2 : Özvektörden valans yoğunlukları hesaplar.

LCORE : Çekirdek durumları ve yoğunlukları hesaplar.

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

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

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

3.4. Hesaplama Özellikleri

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

3.4.1. Elektron yoğunluğu

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

“case.in5” dosyası bu hesaplamada oluşturulur.

```

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

```

Dosyanın tanıtımı

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

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

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

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

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

6. sıra: switch

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

DIFF – Yoğunluk farkını çizer.

OVER – Atomik yoğunlukların süper pozisyonu belirtir.

7. sıra: iunits, cnorm

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

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

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

TOT – case.clmsum dosyalar için kullanır.

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

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

x lapw5: Elektron yoğunluğunu hesaplar.

Bu işlemden sonra "rhoplot" komutu ile elektron yoğunluğu grafiği çizdirilir.

3.4.2. Durum yoğunluğu (DOS)

x lapw2 -qtl : Kısmi yükleri hesaplar.

“case.int” dosyası bu hesaplamada oluşturulur.

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

1. sıra : Element veya bileşik adı
2. sıra : e_{min} , delta, e_{max} , broad

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

delta – Enerji artışıdır.

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

broad – Gaus genişleme faktörünü belirtir.

3. sıra : ndos – DOS durumlarının sayısını belirtir.
4. sıra : jatom, jcol, description

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

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

description - Durumların isimleri

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

dosplot : Bu komutla DOS grafikleri çizdirilir.

3.4.3. Band yapısı

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

x lapw1 –band : Özdeğeri hesaplar.

"case.insp" dosyası bant yapısını hesaplamak için oluşturulan giriş dosyasıdır.

```

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

```

Dosyanın tanıtımı

1. sıra : Şekilin tanıtılması
2. sıra : xoffset, yoffset

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

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

3. sıra : xsize, ysize

xsize – x yönünün (cm) de büyüklüğü

ysize – y yönünün (cm) de büyüklüğü

4. sıra : eincr, mtick

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

mtick – y eksenindeki küçük bölmelerin sayısı

5. sıra : charh, font

charh – İsimlendirmenin boyutu

font – 0 Yazı yok

1 Times ve Symbol fontları kullanılır.

2 Times, times – italic ve sembol kullanılır.

6. sıra : linew, ilin, icol

linew – Çizgi genişliğidir.

İlin – 0 olursa açık yada nokta daireler.

1 Çizgiler

2 Çizgiler ve açık daireler.

3 Çizgiler ve dolu daireler.

icol – Renkleri belirtir.

0 Siyah çizer.

1 Tek renkle çizer.

2 Üç renkli çizer.

3 Çok renkle çizer.

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

7. sıra : Verilerin başladığını belirtir.

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

e_{\min} – çizimin minimum enerjisi

e_{\max} – çizimin maksimum enerjisi

iunits – 1 enerjiler Ry cinsinden

2 enerjiler eV cinsinden (EF enerjisi ile ilgili olarak)

9. sıra : iferm, efermi

iferm – 0 – EF'yi çizmez.

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.

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

11. sıra : jatom, jcol, jsize

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

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

jsize – Band karakterinde kullanılacak dairelerin yarıçaplarının boyut faktörünü gösterir.

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

3.4.4. Band karakter çizimiyle band yapısı

x lapw1 –band : Özdeğerleri hesaplar.

x lapw2 –band –qtl : Kısmi yükleri hesaplar.

“case.insp” dosyasında karakter bandlarının çizimi için

jatom = 1 **jtype =** **jsize = 0.2**

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

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

x spaghetti: Komutuyla band yapısı grafiği çizdirilir.

3.4.5. Hacim grafiği çizimi

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

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

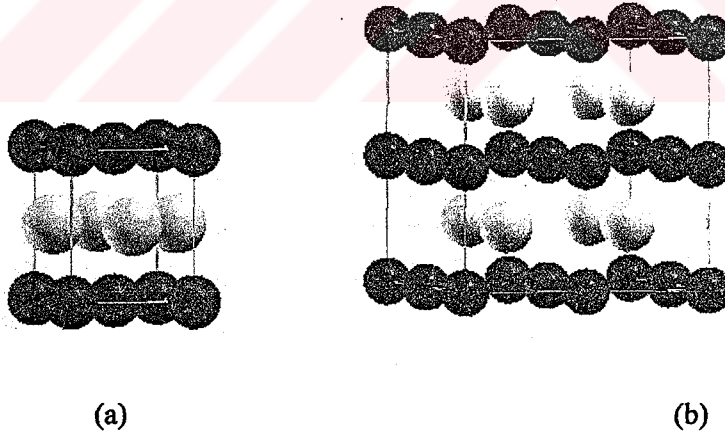
ana_elast : Hesaplamalar yapıldıktan sonra normalde bütün sonuçlar “elast/result” dosyasında saklanır, “elast/result” dosyasına girilir ve “ana_elast” komutu çalıştırılır. Bu komutla toplam enerjiler hesaplanarak analiz edilir. Ayrıca elastik sabitler ve basınç hesaplanarak sonuçların grafiği çizilir [7]. Wien2k programındaki hesaplamaların akış şeması şekil 3.6 de gösterilmektedir.

3.4.6. Süper örgünün oluşturulması

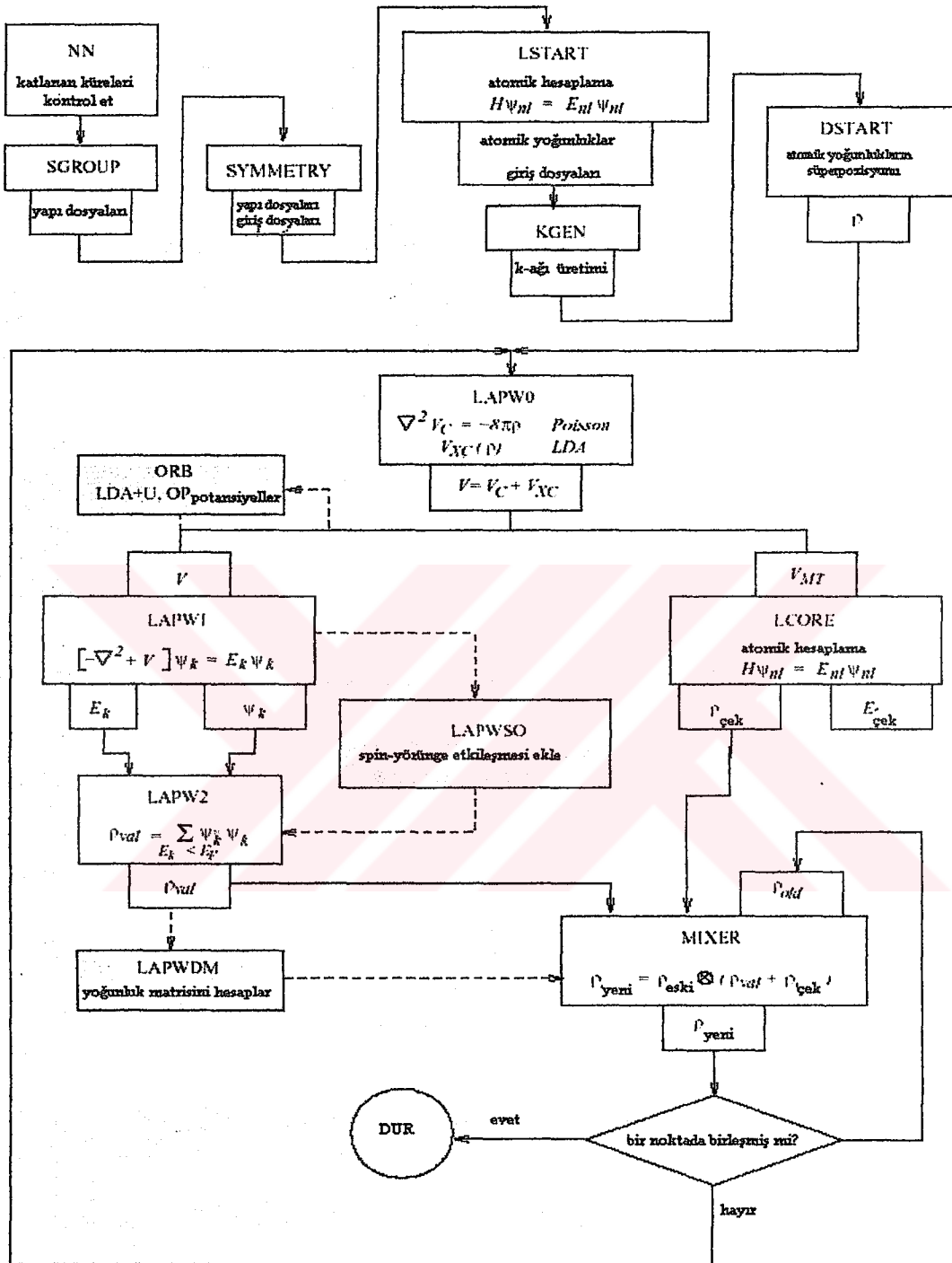
Bu program kullanılan Wien2k struct dosyasından supercell üretmede kullanılır. Orijinal struct dosyasının adı yazıldıktan sonra x, y, z yönlerindeki hücre sayısı girilir.

Eğer simeri izin verirse, hedef örgütyü; 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; 2x2x2 değerleri girilirse, x, y, z yönlerinde örgü 2 birim genişletilmiş olur.



Şekil 3.6 FeAg için a) kübik birim hücre b) 2x2x2 'lik süper örgü yapısı



Şekil 3.7 WIEN2k Programının akış şeması

4. TiC, MANYETİK OLMAYAN FeAg ve FERROMANYETİK FeAg YAPILARININ WIEN2K PROGRAMI İLE TEST EDİLMESİ

Bu bölümde TiC nonmanyetik FeAg ve ferromanyetik FeAg yapılarına ait daha önceden elde edilmiş sonuçlar WIEN2k programı yardımıyla test edilmiştir.

4.1. NaCl Yapısı

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

Maddenin adı	:TiC
Örgü tipi	:NaCl
a=b=c	:4.328 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

Bu bilgilerden yararlanılarak “TiC.struct” yapı dosyası oluşturuldu. (Bkz. 3.1) Daha sonra “intngen_lapw” komutuyla “TiC.inst” dosyası otomatik oluşur. Bundan sonra bölüm.3’de tanımlanan program akışına göre işleme devam edildi.

Burada “x lstart” komutunun çalışması esnasında 13 GGA ve kesme enerjisi –6.0 Ry alındı [4].

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

```

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

```

```

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

```

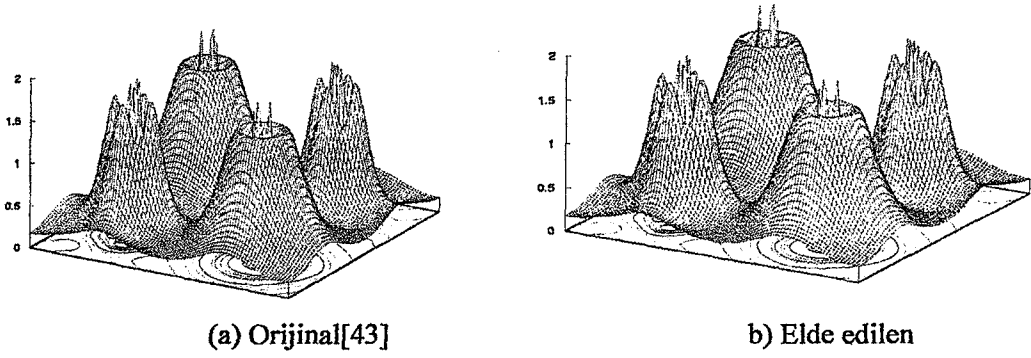
Elektron yoğunluğu grafiği için "TiC.in5" dosyası oluşturuldu ve sınırlar zmin=0 ve zmax=2 alındı.

```

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

```

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



Şekil 4.1 TiC için elektron yoğunluğu

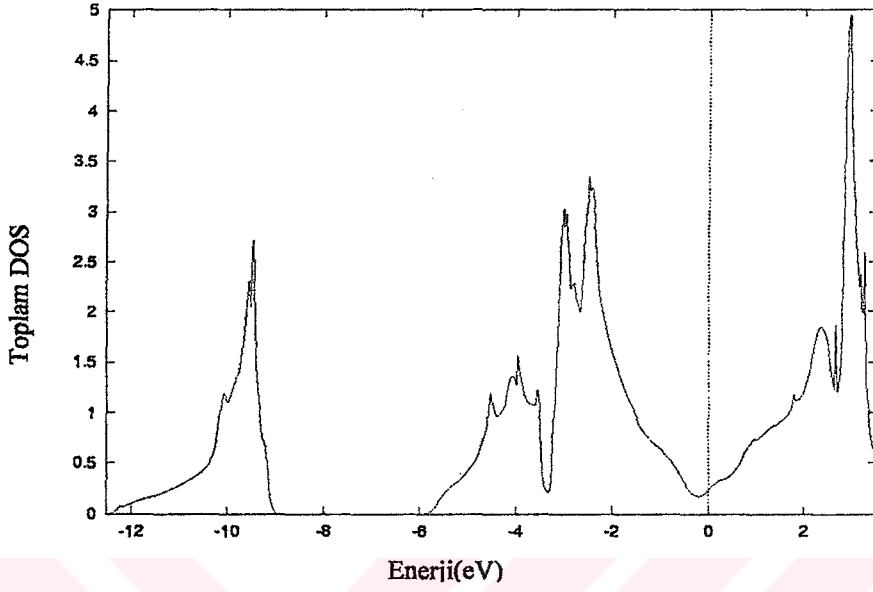
TiC DOS grafikleri için, "TiC.int" dosyası oluşturulur.

```

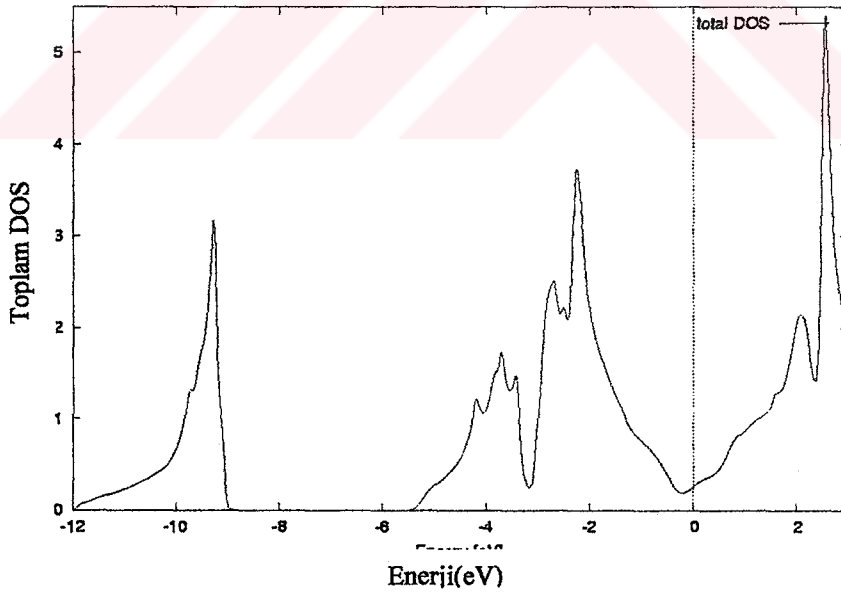
.....file:TiC.int.....
TiC                                     # Title
-0.50  0.00200  1.500  0.003          # EMIN,DE,EMAX for DOS,GAUSS-Broad
6                                           # NUMBER OF DOS-CASES
0  1  tot                               # jatom, doscase, description
1  4  Ti-d
1  5  Ti-eg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

```

Grafikler herbir durum için ayrı ayrı elde edildi.

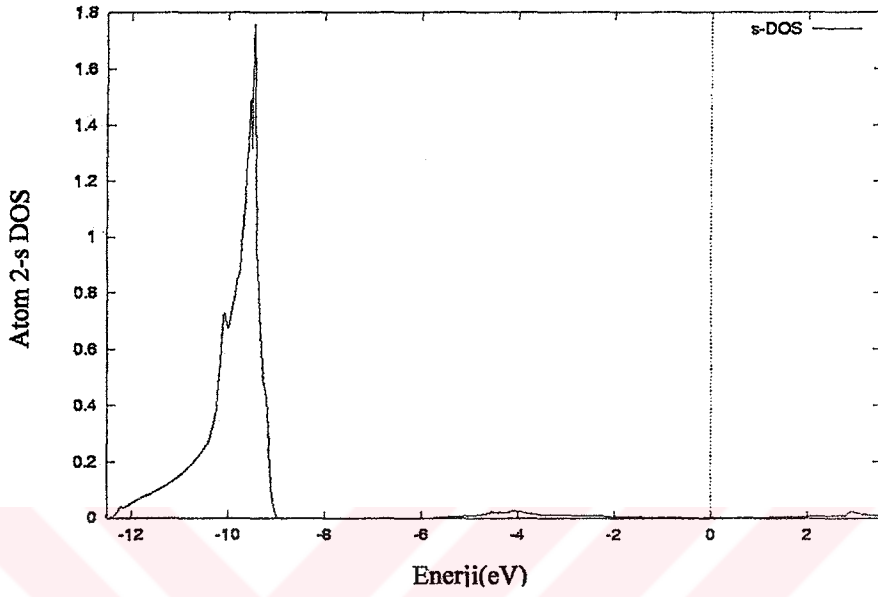


a) Orijinal[43]

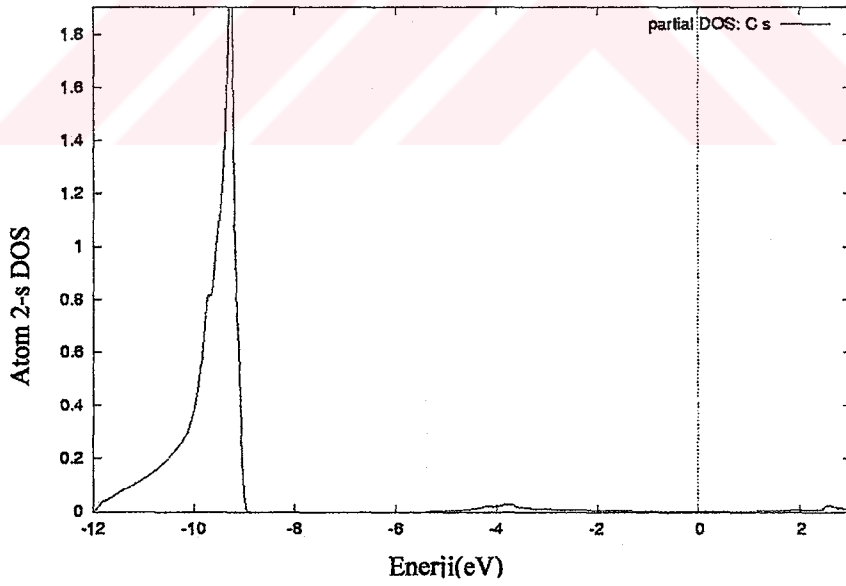


b) Elde edilen

Şekil 4.2 TiC için toplam DOS grafikleri

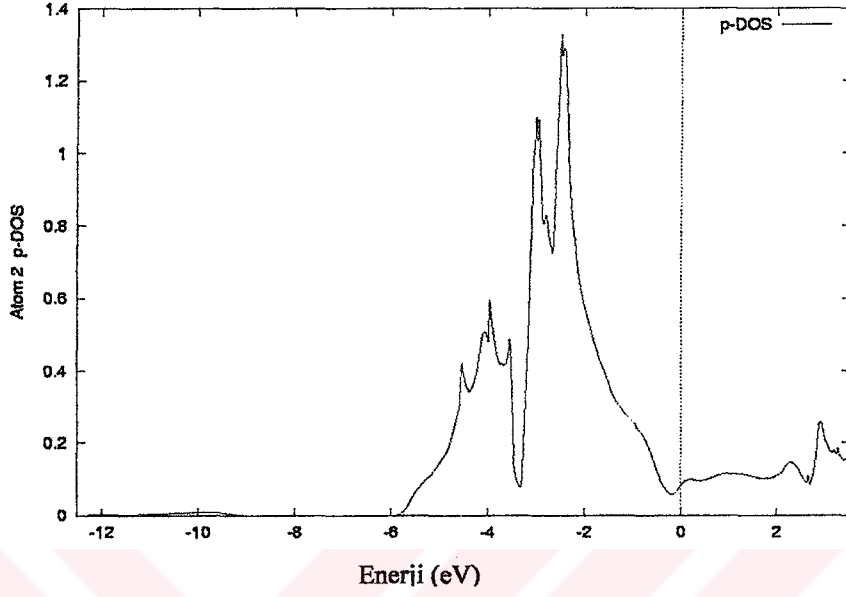


a) Orijinal[43]

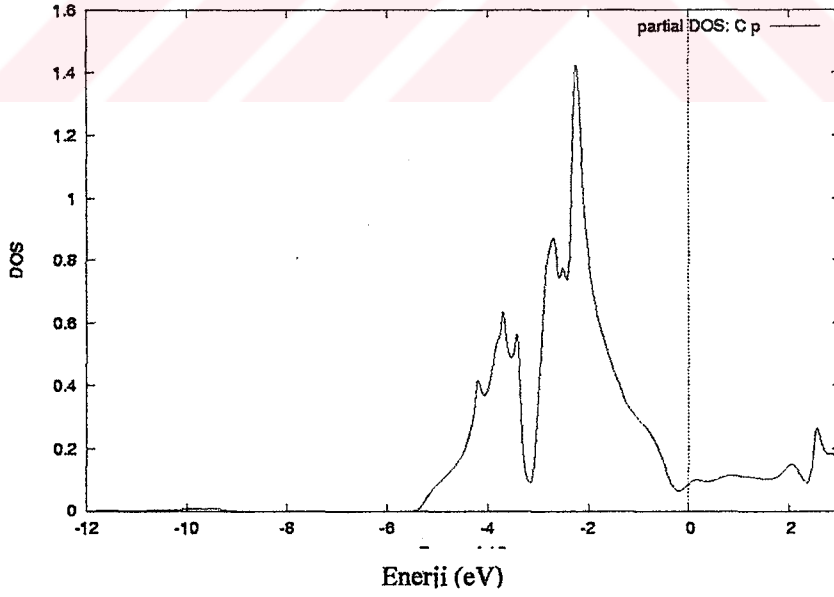


b) Elde edilen

Şekil 4.3 TiC için C-s DOS grafiği

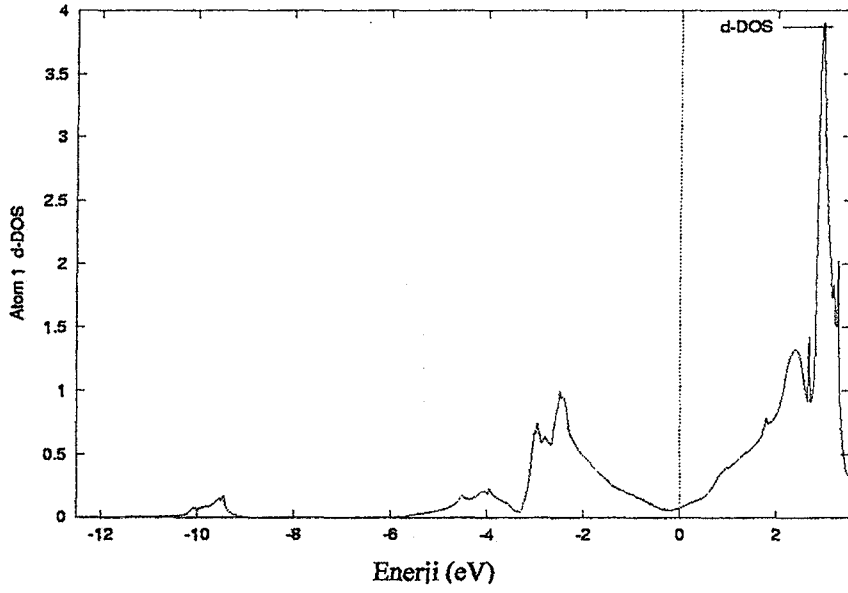


a) Orijinal[43]

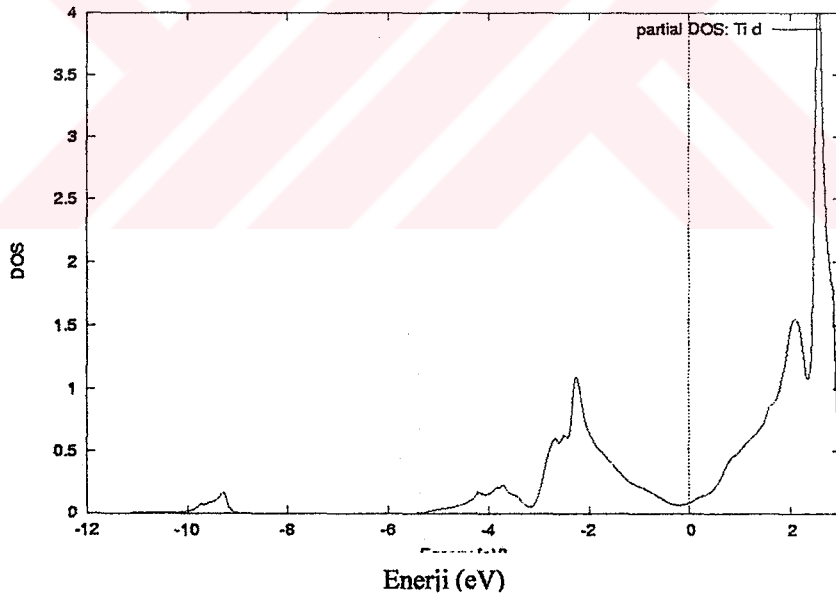


b) Elde edilen

Şekil 4.4 TiC için için C-p DOS grafiği

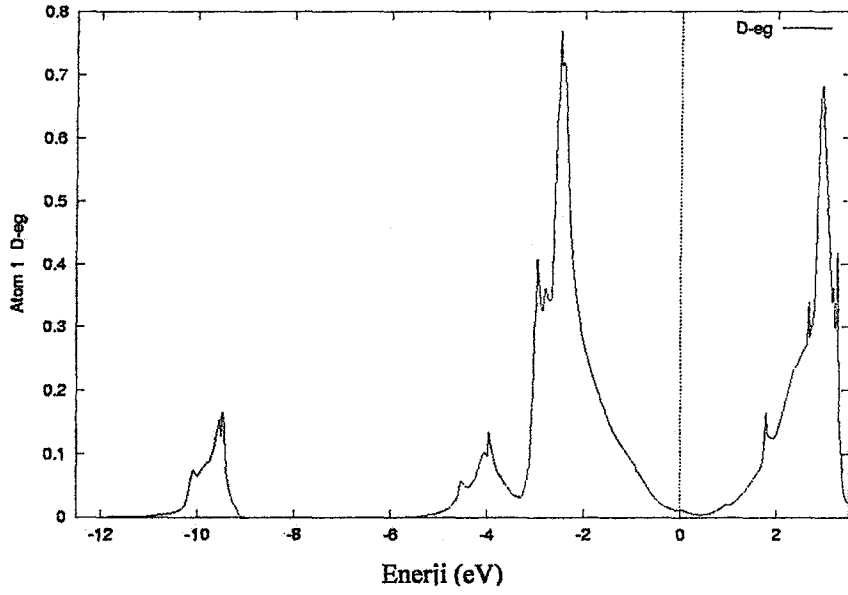


a) Orijinal[43]

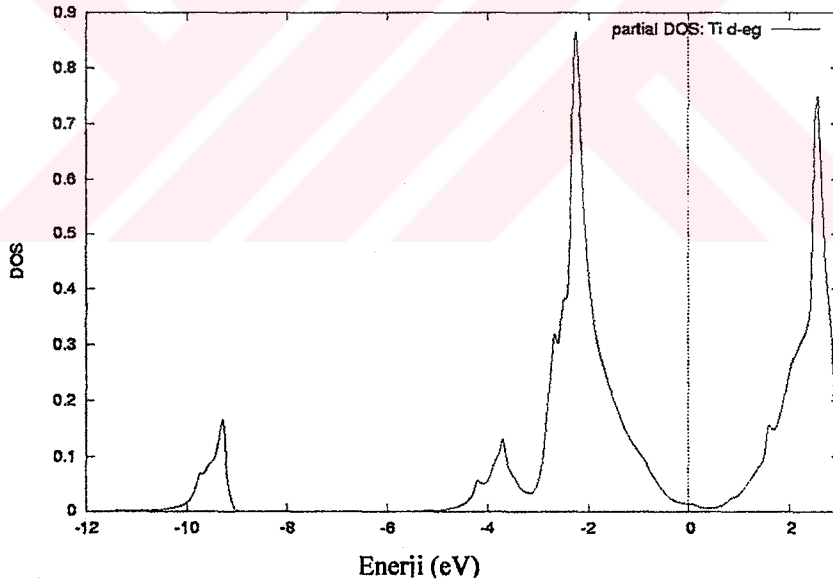


b) Elde edilen

Şekil 4.5 TiC için için Ti-d DOS grafiği

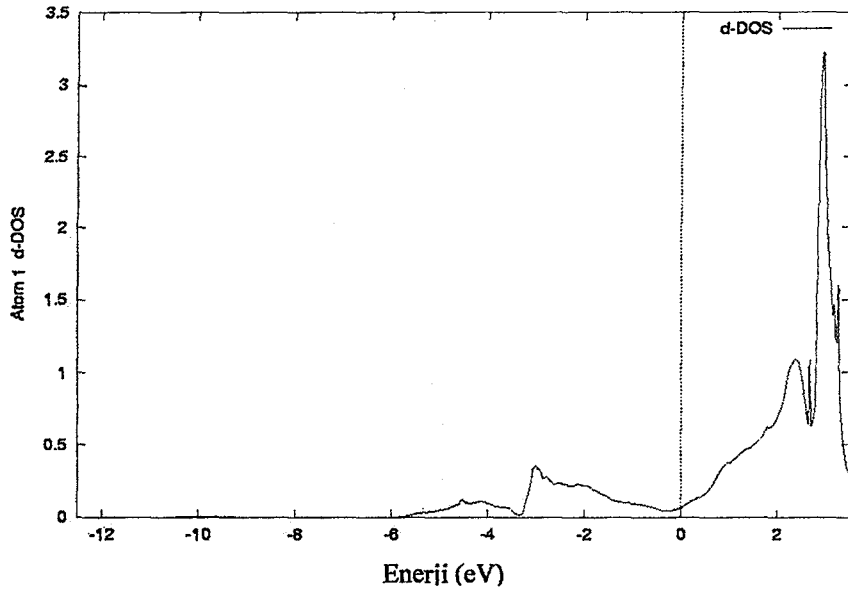


a) Orijinal[43]

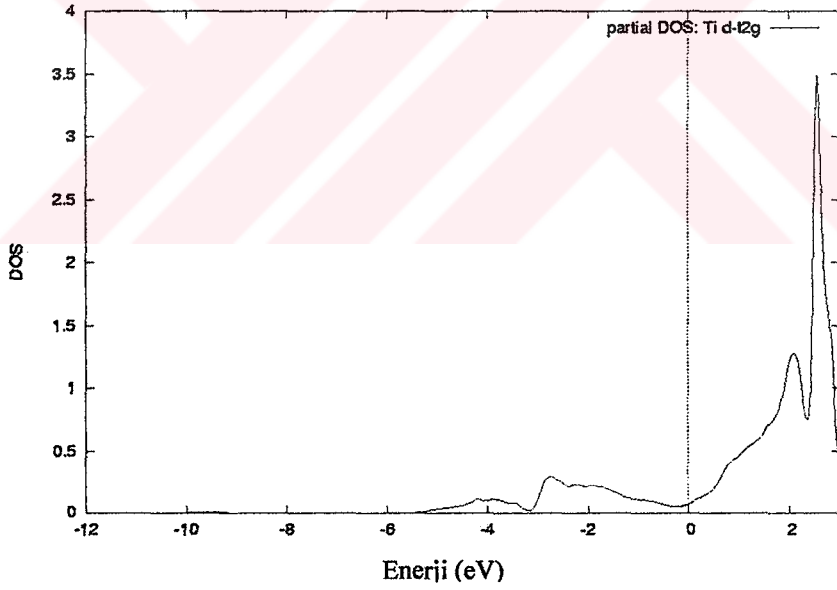


b) Elde edilen

Şekil 4.6 TiC için için Ti-eg DOS grafiği



a) Orijinal[43]



b) Elde edilen

Şekil 4.7 TiC için için Ti-t2g DOS grafiği

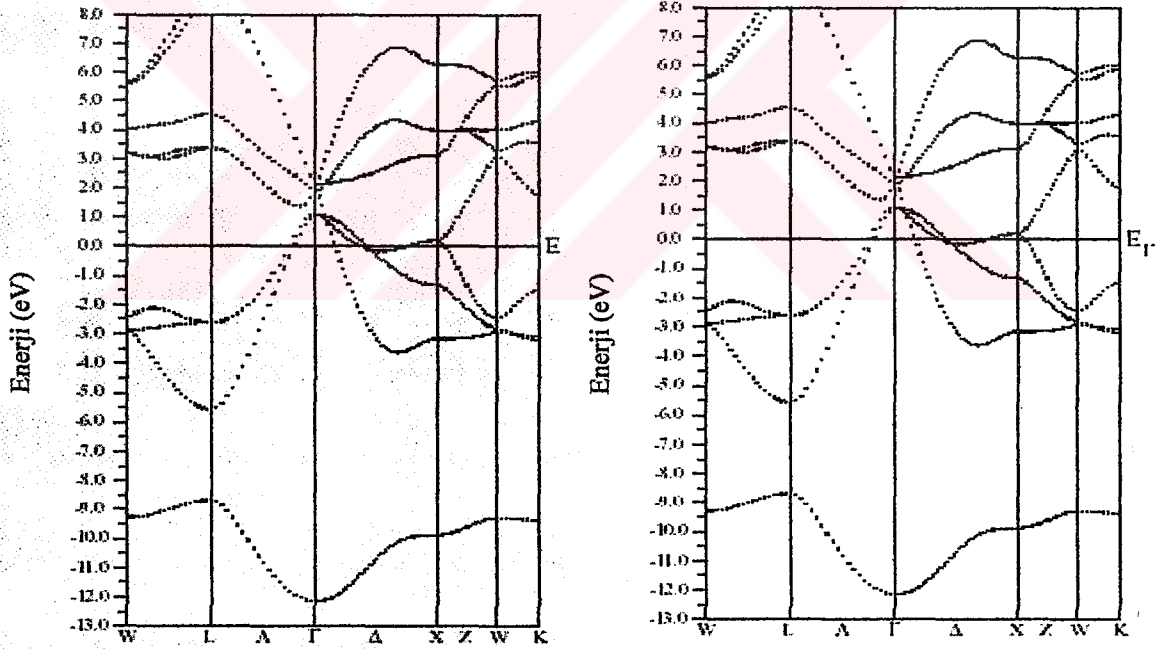
Band yapısı grafiği için, "TiC.insp" dosyası aşağıdaki biçimde düzenlendi.

```

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

```

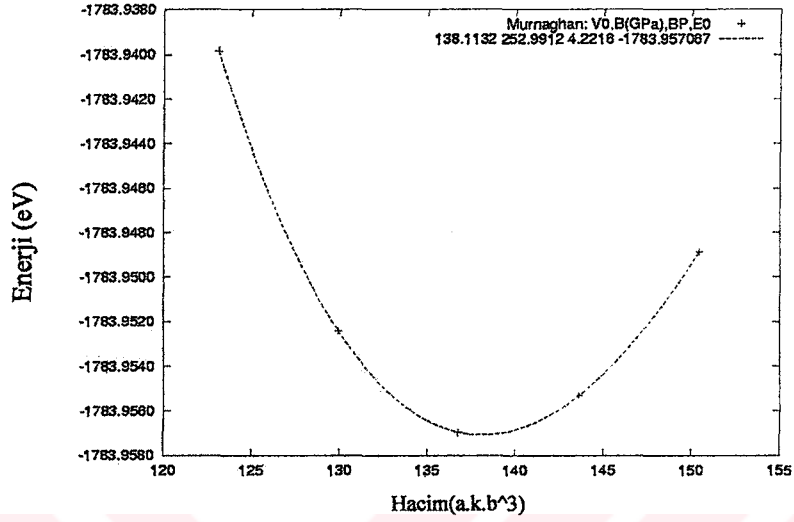
Grafiklerin enerjileri -13 ile 8 ev aralığında çizilerek orijinali ile karşılaştırıldı.



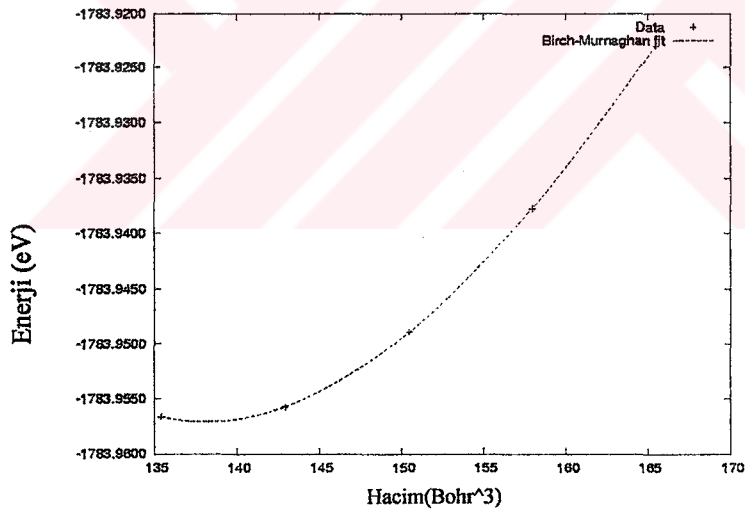
a) Orijinal[43]

b) Elde edilen

Şekil 4.8 TiC band yapısı



a) Orijinal[43]



b) Elde edilen

Şekil 4.9 TiC için enerji-hacim grafiği

4.2. Manyetik Olmayan (nonmanyetik) FeAg Yapısı

Burada ilk olarak struct dosyası oluşturulur. Bunun için aşağıdaki bilgilerden yararlanılır[41].

Maddenin adı	:FeAg
Örgü tipi	:bct
a=b	:3.97 Å =7.770037 au
c=	:7.046186 au
$\alpha = \beta = \gamma$:90°
Atom 1	:Fe pozisyonu (0, 0, 0) ve RMT=2.0
Atom 2	:Fe pozisyonu (0.5, 0.5, 0.5) ve RMT =2.0
Atom 3	:Ag pozisyonu (0.5, 0, 0.5) ve RMT=2.0

Bu bilgilerle FeAg.struct dosyası oluşturulur(Bkz 3.1).Burada $a=3.97 \text{ Å}$ 'da sabitlendi ve c örgü parametresi ise c/a oranından hesaplandı[41]. Örgüyü süper örgü yapmak için Bölüm 3.4.6 daki yol izlenir ve struct dosyası aşağıdaki şekle dönüşür.

Maddenin adı	:FeAg
Örgü tipi	:bct
a=b	:16.097563 au
c=	:15.881847 au
$\alpha = \beta = \gamma$:90°
Atom 1	:Fe pozisyonu (0, 0, 0) ve RMT=2.0
Atom 2	:Fe pozisyonu (0, 0.5, 0) ve RMT =2.0
Atom 3	:Fe pozisyonu (0.5, 0, 0) ve RMT=2.0
Atom 4	:Fe pozisyonu (0, 0, 0.5) ve RMT=2.0
Atom 5	:Fe pozisyonu (0.5, 0, 0.5) (0, 0.5, 0.5), MULT=2 ve RMT=2.0
Atom 6	:Fe pozisyonu (0.5, 0.5, 0.5) ve RMT=2.0
Atom 7	:Fe pozisyonu (0.25, 0.25, 0.25) (0.75, 0.25, 0.25)

(0.25, 0.75, 0.25)

(0.75, 0.75, 0.25)

(0.25, 0.25, 0.75)

(0.75, 0.25, 0.75)

(0.25, 0.75, 0.75)

(0.75, 0.75, 0.75) MULT=8 ve RMT=2.0

Atom 8 :Ag RMT=2.0

Manyetik olmayan FeAg 'nin örgü tipi tetragonal, uzay grubu P4/mmm(L1₀)numarası 123 tür. Bundan sonra "instgen_lapw" komutu ile "nonmanyetikFeAg.inst" dosyası otomatik olarak oluşturularak bölüm 3'te anlatılan işlemler sırası ile yapıldı.

TiC 'da olduğu gibi lstart 13 GGA ve kesme enerjisi -6.0 Ry değeri alındı. RMTK_{max}=8.0 değeri yerine işlemlerin kısa zaman alması için 0.5ve kgen'de ise 500 k noktası(20 Brillouin bölgesi) alındı[41].

```
.....nonmanyetikFeAg.in1_st.....
WFFIL (WFPRI, SUPWF)
5.00 10 4 (R-MT*K-MAX; MAX L IN WF, V-NMT
0.30 4 0 (GLOBAL E-PARAMETER WITH n OTHER CHOICES, global APW/LAPW)
1 0.30 0.000 CONT 0
1 -3.97 0.005 STOP 0
2 0.30 0.010 CONT 0
0 0.30 0.000 CONT 0
0.30 4 0 (GLOBAL E-PARAMETER WITH n OTHER CHOICES, global APW/LAPW)
1 0.30 0.000 CONT 0
1 -3.97 0.005 STOP 0
2 0.30 0.010 CONT 0
0 0.30 0.000 CONT 0
0.30 4 0 (GLOBAL E-PARAMETER WITH n OTHER CHOICES, global APW/LAPW)
1 0.30 0.000 CONT 0
1 -3.97 0.005 STOP 0
2 0.30 0.010 CONT 0
0 0.30 0.000 CONT 0
0.30 4 0 (GLOBAL E-PARAMETER WITH n OTHER CHOICES, global APW/LAPW)
1 0.30 0.000 CONT 0
1 -3.97 0.005 STOP 0
2 0.30 0.010 CONT 0
0 0.30 0.000 CONT 0
```

```

0 0.30 0.000 CONT 0
0.30 4 0 (GLOBAL E-PARAMETER WITH n OTHER CHOICES, global APW/LAPW)
1 0.30 0.000 CONT 0
1 -3.97 0.005 STOP 0
2 0.30 0.010 CONT 0
0 0.30 0.000 CONT 0
0.30 4 0 (GLOBAL E-PARAMETER WITH n OTHER CHOICES, global APW/LAPW)
1 0.30 0.000 CONT 0
1 -3.88 0.005 STOP 0
2 0.30 0.010 CONT 0
0 0.30 0.000 CONT 0
K-VECTORS FROM UNIT:4 -7.0 2.5 emin/emax window

```

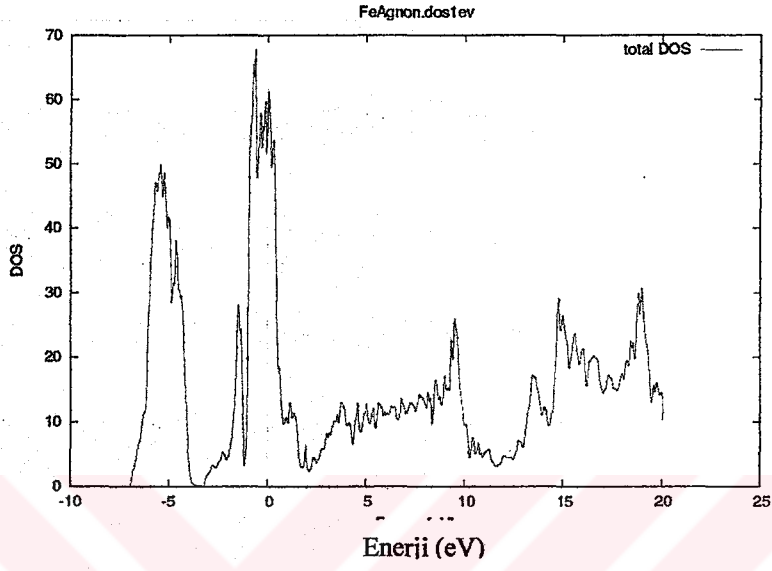
Bu dosyada Emax'ı 1.5 yerine 2.5 aldık ve LAPW metodunu seçtik. Bu hesaplamalardan sonra "nonmanyetikFeAg.int" dosyası oluşturulur.

```

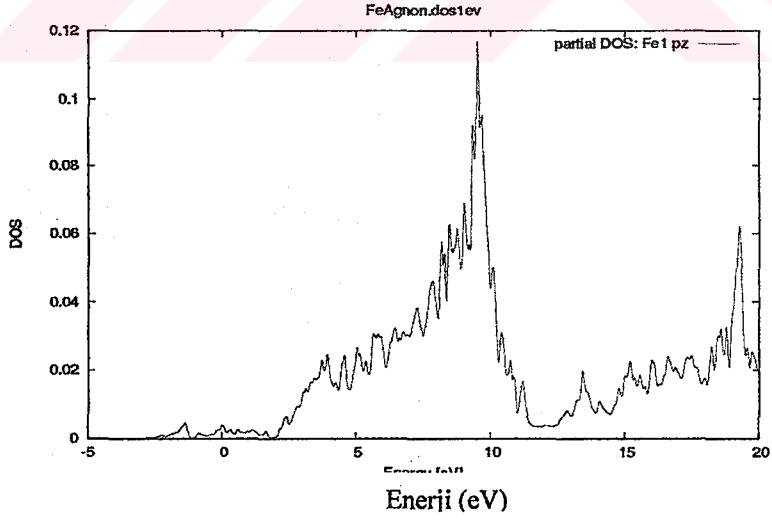
.....nonmanyetikFeAg.int.....
FeAg
-0.50 0.00200 1.500 0.003 # EMIN,DE,EMAX, GAUSS-Broadening(>de)
6 # NUMBER OF DOS-CASES specified below
0 1 tot # atom, case=column in qtl header,labe
1 4 Fe-d
1 5 Fe-eg
1 6 Fe-t2g
2 2 Ag-s
2 3 Ag-p

```

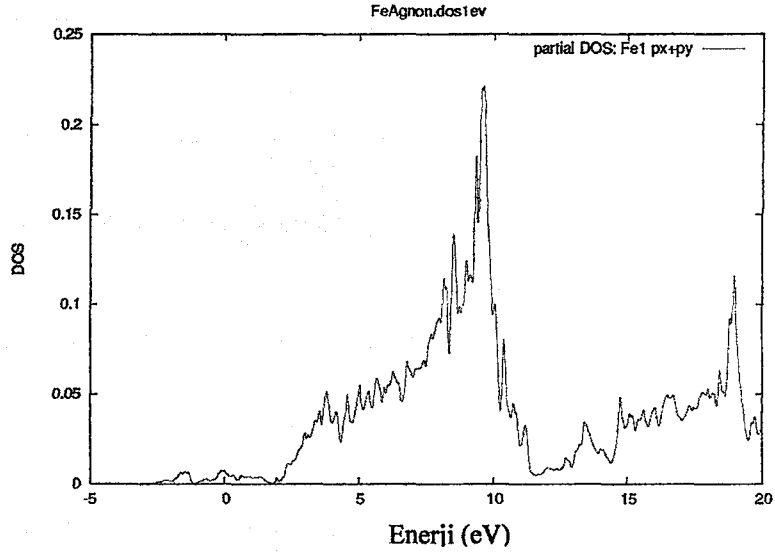
Bu hesaplamalardan sonra durum yoğunluğu (DOS), band yapısı ve hacim grafikleri çizildi ve önceki çalışmalarla tutarlı sonuçlar alındı.



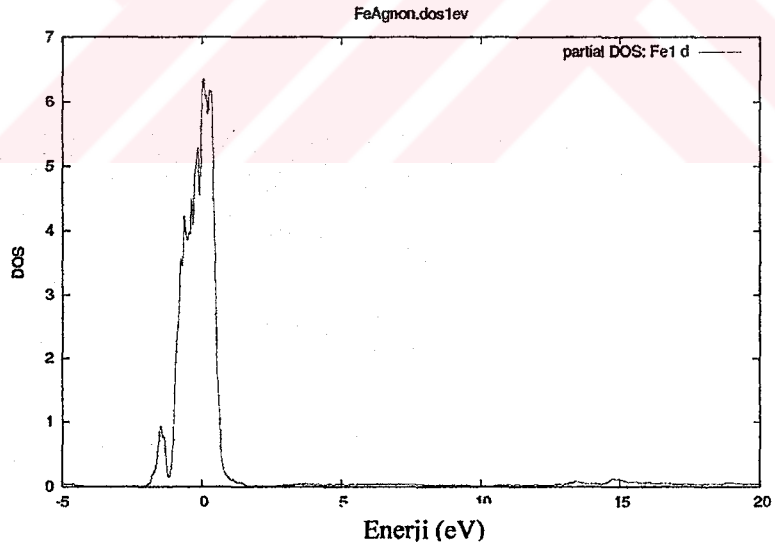
Şekil 4.10 FeAg-nonmanyetik toplam-DOS grafiği



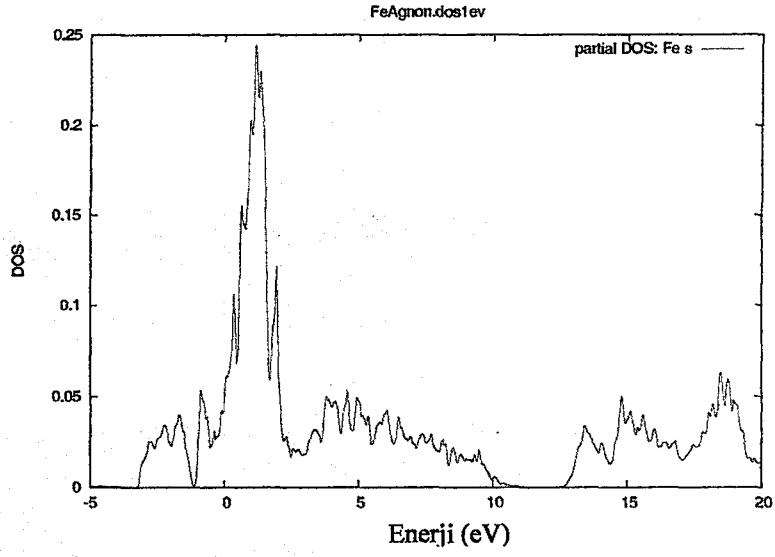
Şekil 4.11 FeAg-nonmanyetik Fe1-DOS pz grafiği



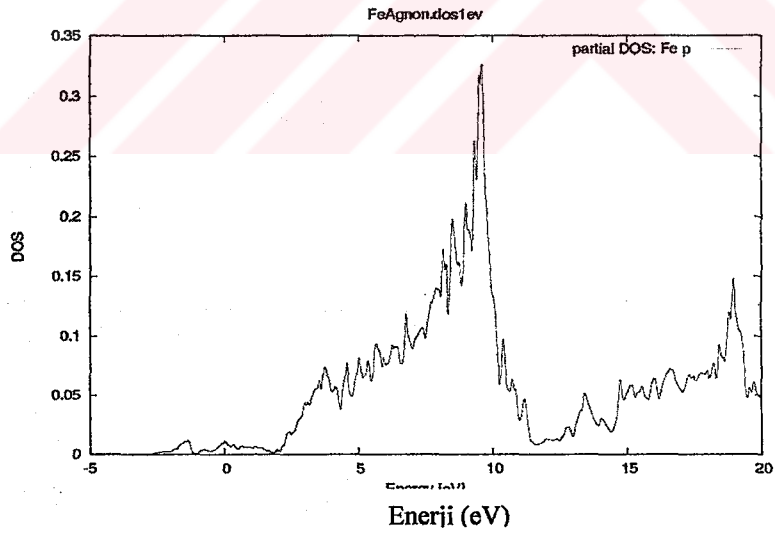
Şekil 4.12 FeAg-nonmanyetik Fe1-DOS px+py grafiği



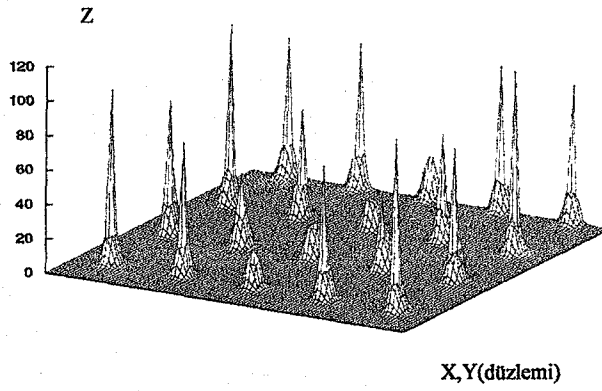
Şekil 4.13 FeAg-nonmanyetik Fe1-DOS d grafiği



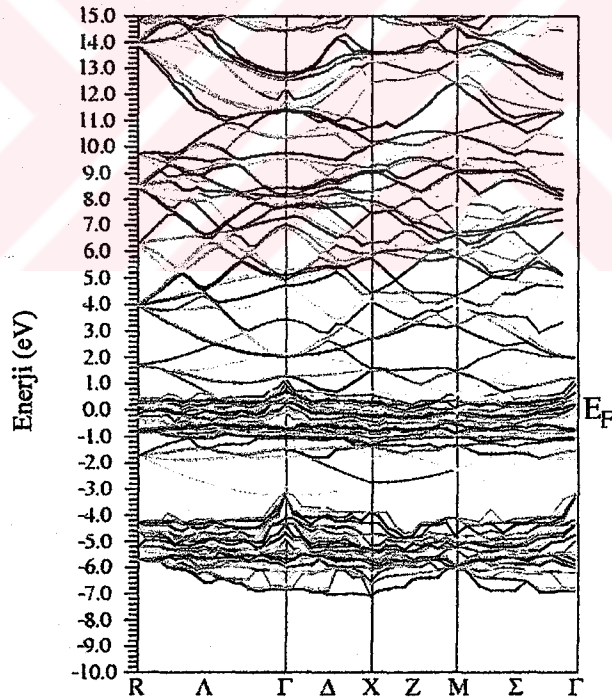
Şekil 4.14 FeAg-nonmagnetik Fe1-DOS s grafiği



Şekil 4.15 FeAg-nonmagnetik Fe1-DOS p grafiği



Şekil 4.16 FeAg-nonmanyetik için elektron yoğunluğu grafiği



Şekil 4.17 FeAg-nonmanyetik için band yapısı grafiği

4.3. Ferromanyetik FeAg Yapısı

Ferromanyetik FeAg için uygulamayaparken manyetik sistemler için özel bir hesaplama olan "spin-polarizasyon" yöntemi uygulanır. Bu hesaplamada elektronlar spin aşağı ve spin yukarı alınarak yapılır. Ferromanyetik FeAg yapısı için nonmanyetik FeAg'nin struct dosyası kullanılır. Wien2k programı "runsp_lapw" komutu ile aşağıdaki işlemleri otomatik olarak yapar.

LAPWO-(Potansiyel) Yoğunluktan potansiyel üretir.

LAPW1-up (Bandlar) Elektronların spin-yukarı için valans bandlarını hesaplar.

LAPW1-dn (Bandlar) Elektronların spin-aşağı için valans bandlarını hesaplar.

LAPW2-up (RHO) Elektronların spin-yukarı için valans yoğunluklarını hesaplar.

LAPW2-dn (RHO) Elektronların spin-aşağı için valans yoğunluklarını hesaplar.

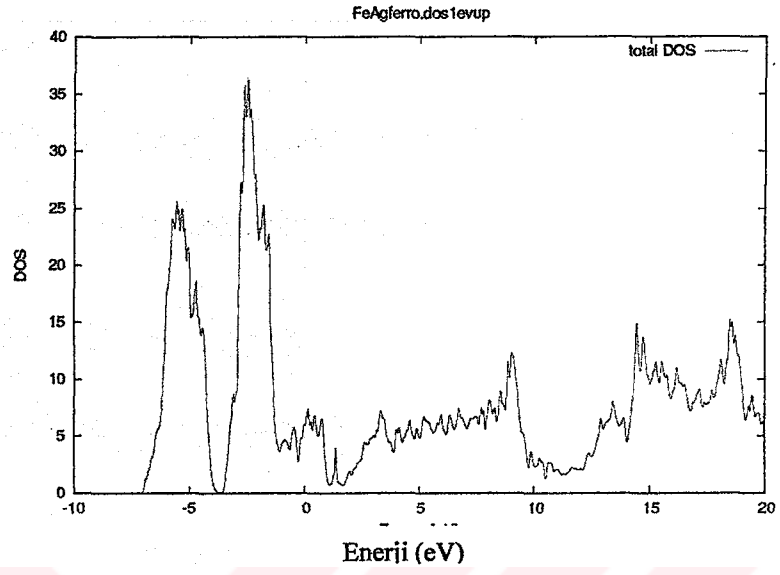
LCORE-up Elektronların spin-yukarı için yoğunlukları ve çekirdek durumlarını hesaplar.

LCORE-dn Elektronların spin-aşağı için yoğunlukları ve çekirdek durumlarını hesaplar.

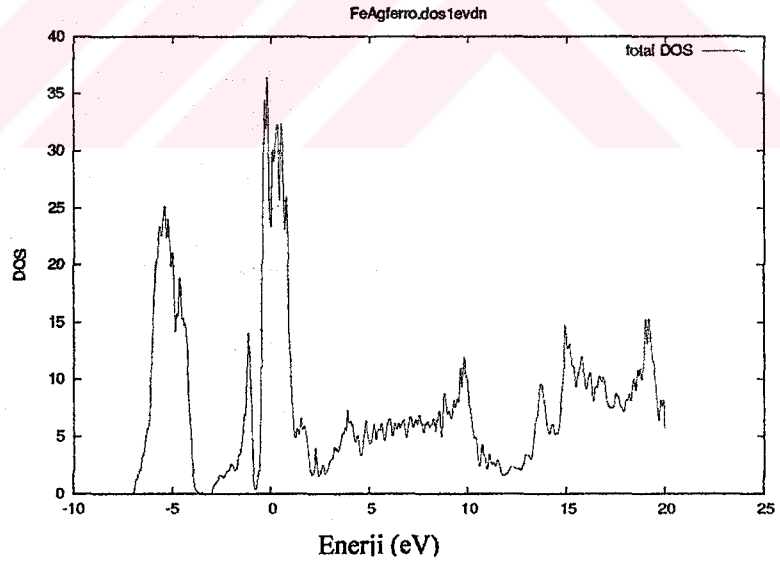
MIXER Giriş ve çıkış yoğunluklarını karıştırır.

Bu işlem bittikten sonra DOS, band yapısı ve elektron yoğunluğu grafiklerini elde etmek için bölüm 4.2 deki yöntemler izlenir. Bu yapı için de 4.2 deki "int" dosyası kullanılır ancak "insp" dosyasının da sadece fermi enerjisi değiştirilir. Burada kullanılan fermi enerjisi programın yapılan işlemler sonucunda otomatik olarak oluşturduğu "scf" dosyasından alınır.

Bu yapıda spin polarize özelliğinden yararlandığı için her DOS ve elektron yoğunluğu grafikleri için spin-up ve spin-down olmak üzere önceki verilerle uyumlu ikişer grafik eldedilir[41]. Enerji-hacim, rombohedral ve tetragonal enerji-zorlanma grafiklerini elde etmek için bölüm 3.4.5'te belirtilen yol izlendi.

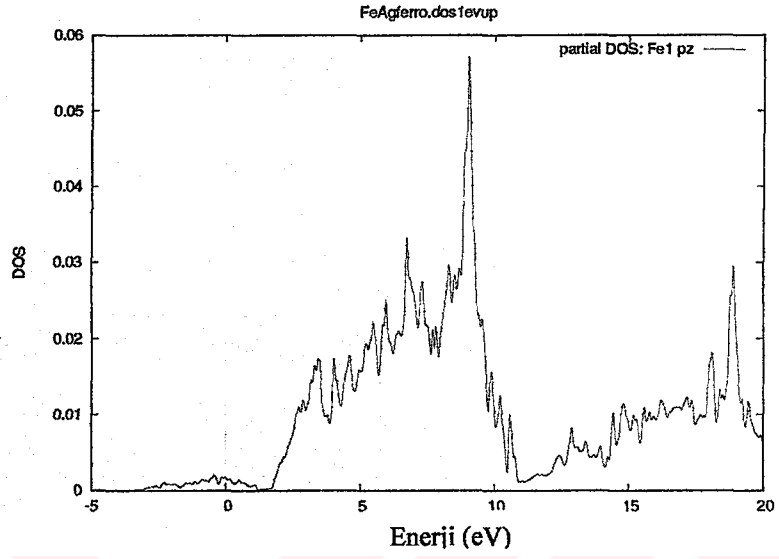


a) spin-yukarı

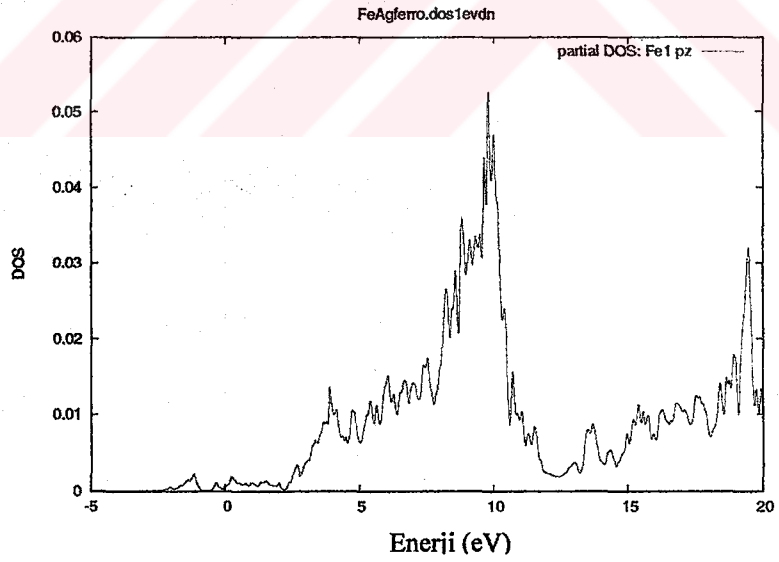


b) spin-aşağı

Şekil 4.18 Ferromanyetik FeAg için toplam-DOS grafikleri

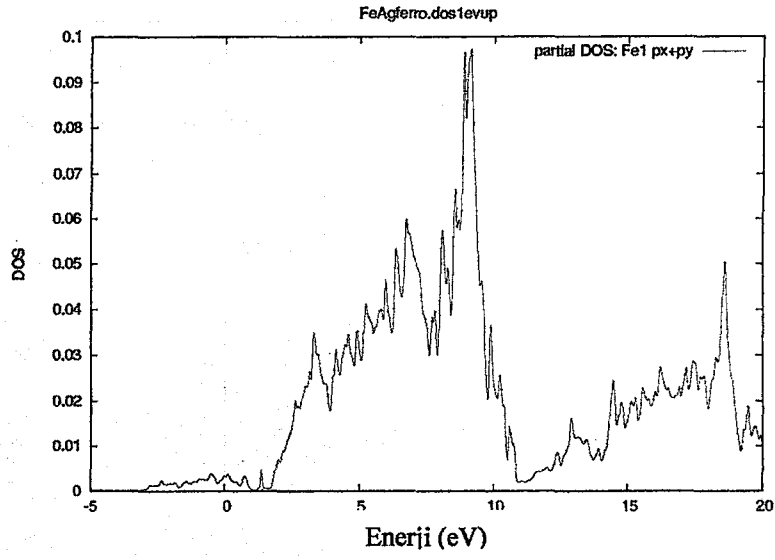


a) spin-yukarı

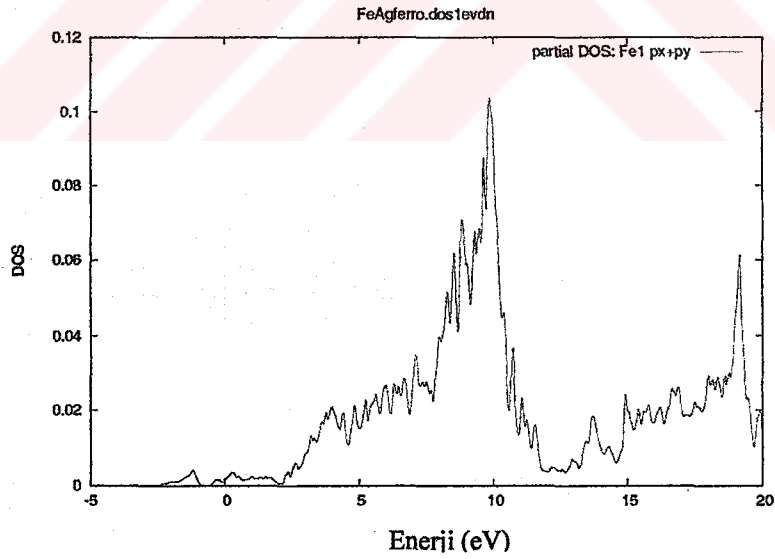


b) spin-aşağı

Şekil 4.19 Ferromanyetik FeAg için Fe1 DOS pz grafikleri

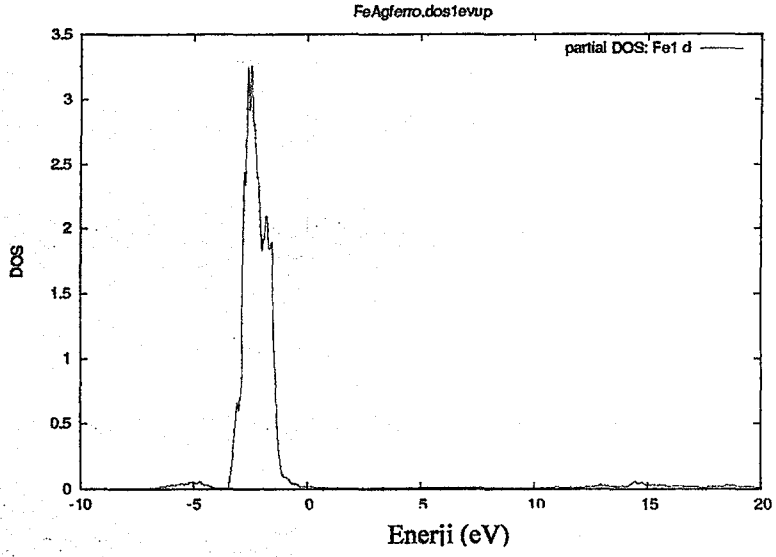


a) spin-yukarı

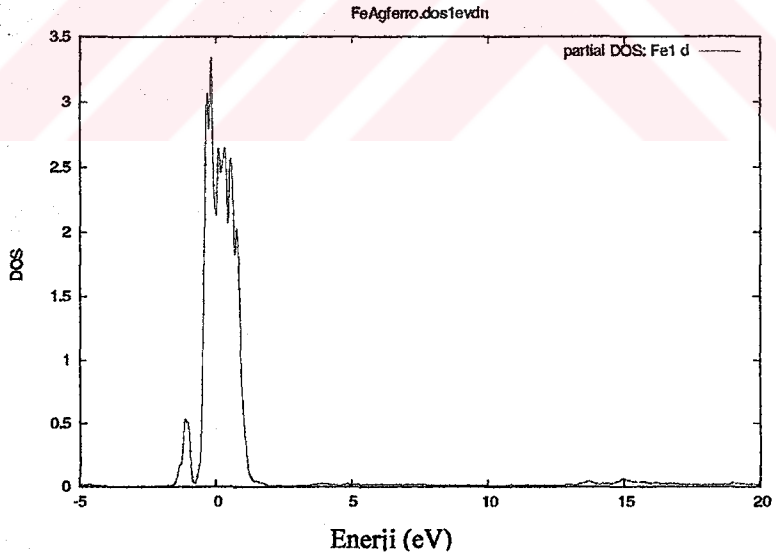


b) spin-aşağı

Şekil 4.20 Ferromanyetik FeAg için Fe1 DOS px+py grafikleri

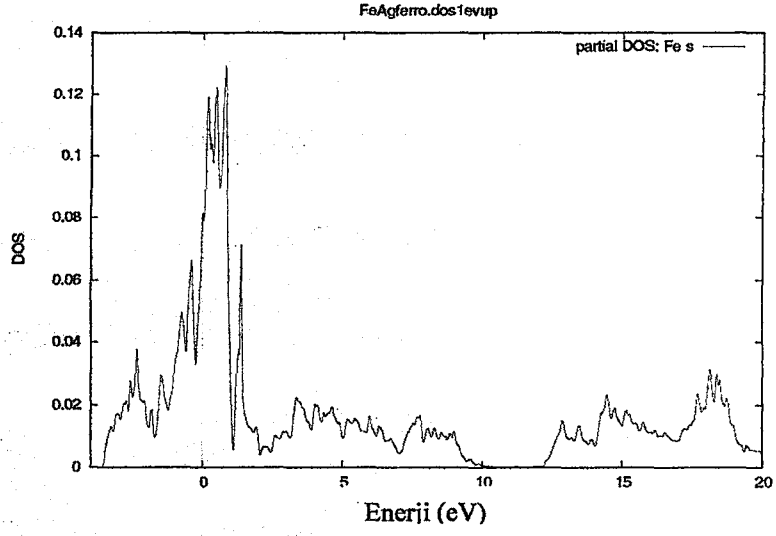


a) spin-yukarı

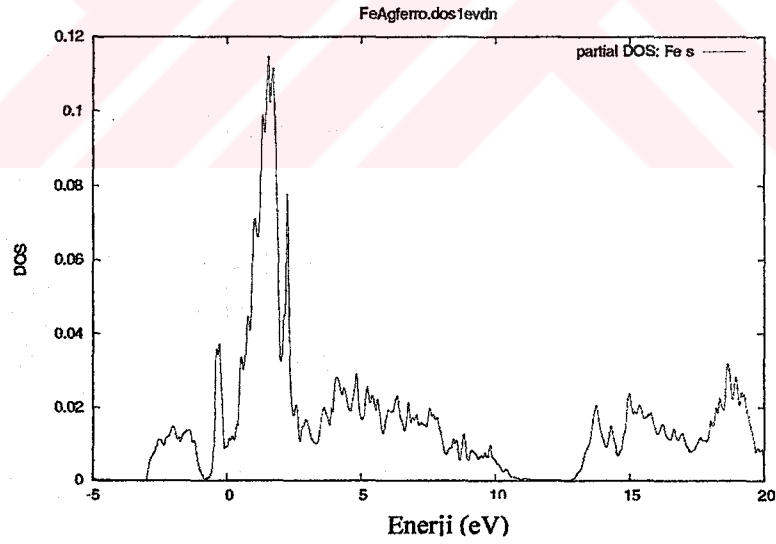


b) spin-aşağı

Şekil 4.21 Ferromanyetik FeAg için Fe1 DOS d grafikleri

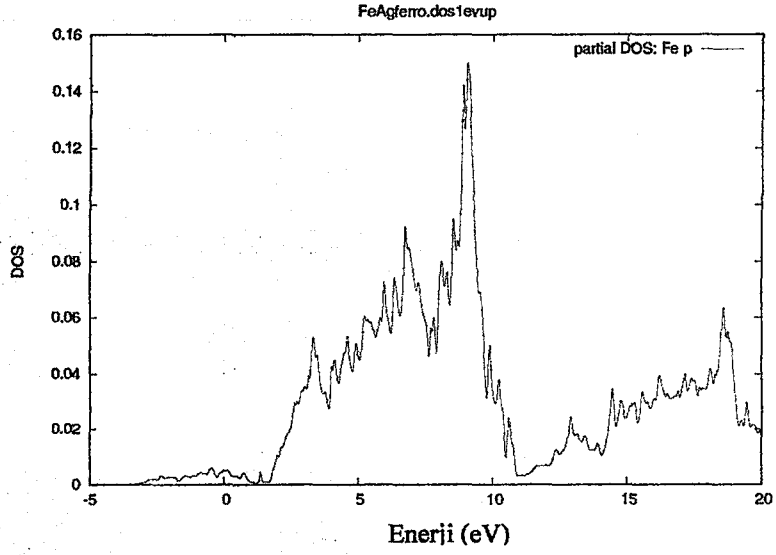


a) spin-yukarı

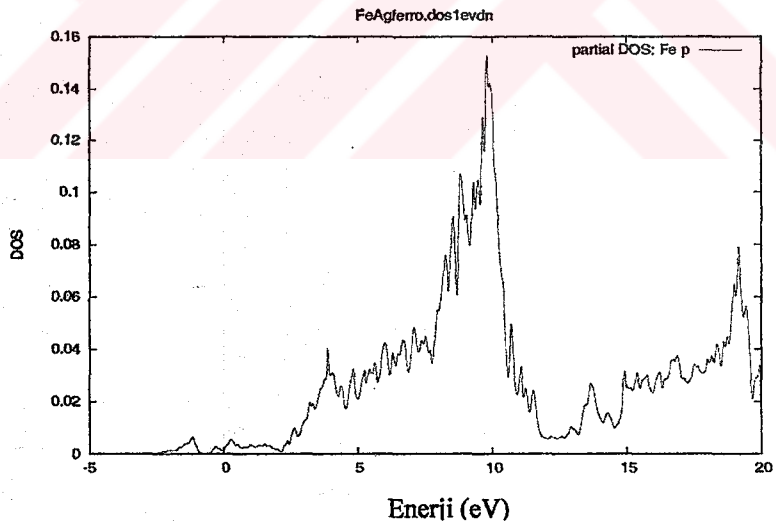


b) spin-aşağı

Şekil 4.22 Ferromanyetik FeAg için Fe DOS s grafikleri

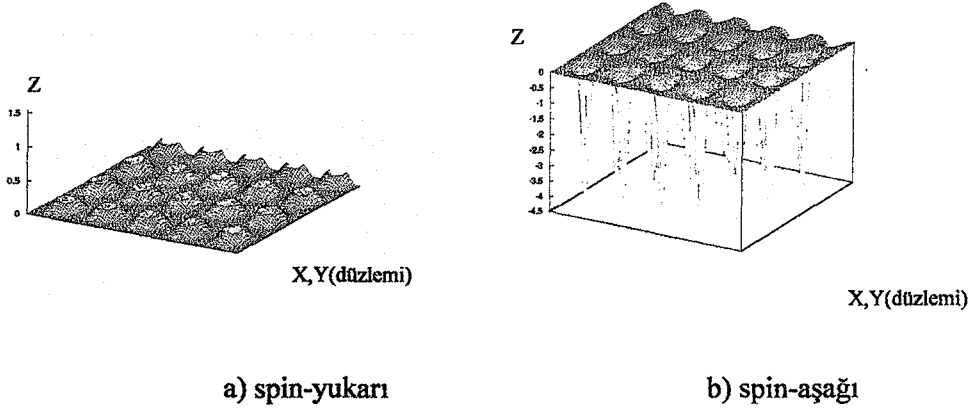


a) spin-yukarı

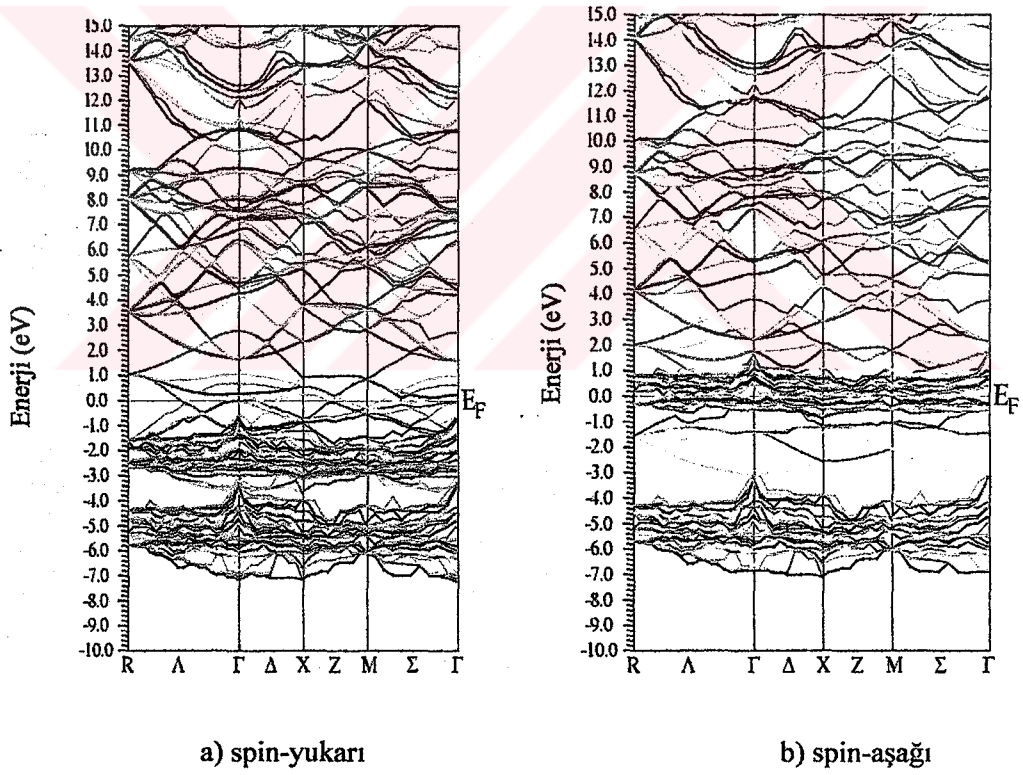


b) spin-aşağı

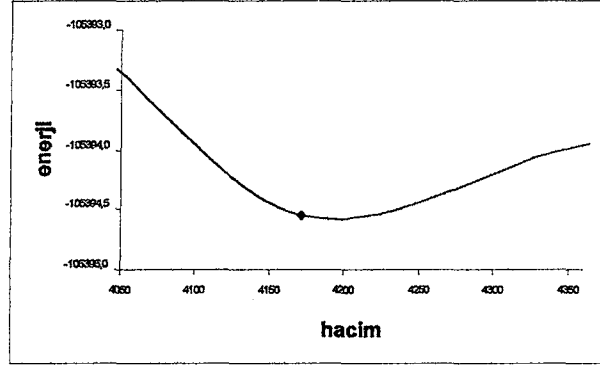
Şekil 4.23 Ferromanyetik FeAg için Fe DOS p grafikleri



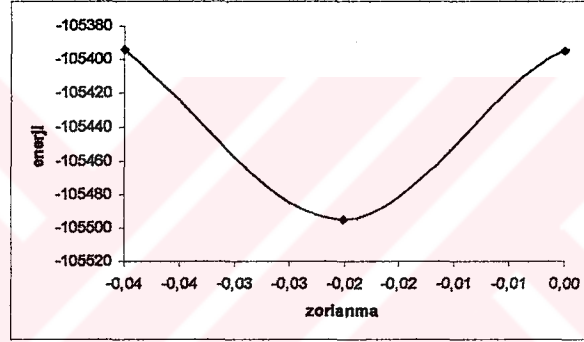
Şekil 4.24 Ferromanyetik FeAg için elektron yoğunluğu grafikleri



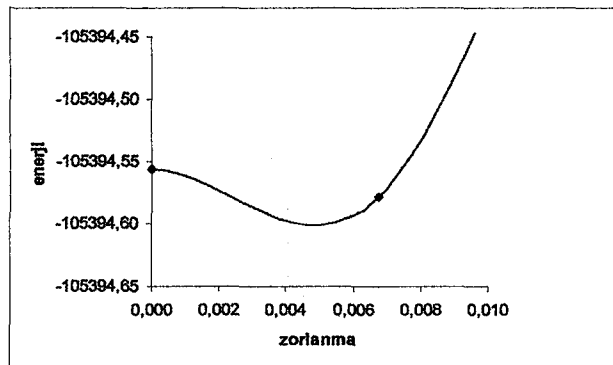
Şekil 4.25 Ferromanyetik FeAg için band yapısı



Şekil 4.26 Ferromanyetik FeAg için enerji-hacim grafiği



Şekil 4.27 Ferromanyetik FeAg için rombohedral enerji-zorlanma grafiği



Şekil 4.28 Ferromanyetik FeAg için tetragonal enerji-zorlanma grafiği

5. Fe-%9Mn ALAŞIMINDA WIEN2k PROGRAMININ KULLANILMASI

Fe-%9Mn alaşımını incelemek için gerekli olan örgü parametreleri deneysel sonuçlardan alınmıştır [42].

Fe-%9Mn alaşımı Gebze'deki TÜBİTAK Marmara Araştırma Merkezinin (MAM) malzeme bölümündeki alaşım hazırlama laboratuvarlarında hazırlanmıştır. 1000° C de 16 saat süreyle ısıtılarak tutularak homojenleştirme yapılmıştır. Numuneler İZOMET tipi kesicide elmas çarklar kullanılarak düşük hızda ve değişik büyüklüklerde kesilmiştir. Deformasyon işlemi İnstron cihazı ile 2 mm/dak. hız ile gerçekleştirilmiştir. Numuneler çizelge 5.1 de verilen fiziksel etkilere tabi tutulmuştur [42].

FeMn alaşımı geniş d bandları için ferromanyetik özellik gösterir [41]. Fe-%9 Mn alaşımının fcc fazına austenite denir[42]. Bu tür alaşımların bir özelliği de dış kuvvete bağlı olarak faz dönüşümü gösterebilmeleridir. Bu maksatla çalışılmış olan alaşımın sıvı azot ve oda sıcaklığındaki $L1_0$ yapısındaki nonmanyetik ve ferromanyetik Fe-%9 alaşımlarına ait elektron yoğunluğu, durum yoğunluğu (DOS), bant yapıları, manyetik ve mekanik özellikleri, tanıtılan WIEN2k programı ile ayrı ayrı elde edilecektir. Manyetik özellikleri incelemek için tetragonal $L1_0$ yapısının bölgesel spin yoğunluk-fonksiyonel teorisinde LAPW yöntemi kullanıldı[41].

Çizelge 5.1 Fe-% 9Mn alaşımına ait numunelerin özellikleri ve bunlara ait fcc yapıların örgü parametreleri [42].

Numune	Numunenin Fiziksel Özellikleri	$a_{fcc}(\text{Å})$
I	Sıvı azotta bekletilen normal numune	3.758
IV	Oda sıcaklığında % 27 deformasyon uygulanan numune	3.738

5.1. Fe-%9 Mn Alaşımına Ait I. Numune için

5.1.1. Manyetik Olmayan (nonmanyetik) fcc Faz için (Austanite)

Aşağıdaki bilgilerden yararlanılarak Fe-%9Mn alaşımının I. numunesine ait struct dosyası bölüm oluşturulur. Bu dosya oluşturulurken, Fe-Mn alaşımının simetri grupları özenle incelenip, atomik koordinatları belirlenmiştir.

Maddenin adı :FeMn
 Örgü Tipi :bct
 a=b :3.758 Å =7.1015 au
 c :6,9594 au
 $\alpha = \beta = \gamma$:90°

Atom 1 :Fe pozisyon (0, 0, 0) ve RMT=2.0

Atom 2 :Mn pozisyon (0.5, 0.5, 0.5) ve RMT=2.0

Struct dosyası oluşturulduktan sonra bölüm 3'te belirtilen süper örgü yapma işlemleri struct dosyasına uygulanır. Sonuçta elde edilen struct dosyası aşağıdaki şekildedir. Örgü tetragonal L1₀ yapısına dönüşmüştür.

```
.....nonFeMn.struct.....
FeMn
P          7
      RELA
13.419895 13.419895 13.151497 90.000000 90.000000 90.000000
ATOM -1: X=0.00000000 Y=0.00000000 Z=0.00000000
      MULT= 1      ISPLIT=-2
Mn1     NPT= 781 R0=0.00005000 RMT= 2.0000 Z: 25.0
LOCAL ROT MATRIX: 1.0000000 0.0000000 0.0000000
                   0.0000000 1.0000000 0.0000000
                   0.0000000 0.0000000 1.0000000
ATOM -2: X=0.50000000 Y=0.00000000 Z=0.00000000
      MULT= 2      ISPLIT= 8
      -2: X=0.00000000 Y=0.50000000 Z=0.00000000
Mn      NPT= 781 R0=0.00005000 RMT= 2.0000 Z: 25.0
LOCAL ROT MATRIX: 1.0000000 0.0000000 0.0000000
                   0.0000000 1.0000000 0.0000000
                   0.0000000 0.0000000 1.0000000
ATOM -3: X=0.50000000 Y=0.50000000 Z=0.00000000
      MULT= 1      ISPLIT=-2
```

Mn NPT= 781 R0=0.00005000 RMT= 2.0000 Z: 25.0
 LOCAL ROT MATRIX: 1.0000000 0.0000000 0.0000000
 0.0000000 1.0000000 0.0000000
 0.0000000 0.0000000 1.0000000

ATOM -4: X=0.00000000 Y=0.00000000 Z=0.50000000
 MULT= 1 ISPLIT=-2

Mn NPT= 781 R0=0.00005000 RMT= 2.0000 Z: 25.0
 LOCAL ROT MATRIX: 1.0000000 0.0000000 0.0000000
 0.0000000 1.0000000 0.0000000
 0.0000000 0.0000000 1.0000000

ATOM -5: X=0.50000000 Y=0.00000000 Z=0.50000000
 MULT= 2 ISPLIT= 8

-5: X=0.00000000 Y=0.50000000 Z=0.50000000

Mn NPT= 781 R0=0.00005000 RMT= 2.0000 Z: 25.0
 LOCAL ROT MATRIX: 1.0000000 0.0000000 0.0000000
 0.0000000 1.0000000 0.0000000
 0.0000000 0.0000000 1.0000000

ATOM -6: X=0.50000000 Y=0.50000000 Z=0.50000000
 MULT= 1 ISPLIT=-2

Mn NPT= 781 R0=0.00005000 RMT= 2.0000 Z: 25.0
 LOCAL ROT MATRIX: 1.0000000 0.0000000 0.0000000
 0.0000000 1.0000000 0.0000000
 0.0000000 0.0000000 1.0000000

ATOM -7: X=0.25000000 Y=0.25000000 Z=0.25000000
 MULT= 8 ISPLIT= 8

-7: X=0.75000000 Y=0.25000000 Z=0.25000000

-7: X=0.25000000 Y=0.75000000 Z=0.25000000

-7: X=0.75000000 Y=0.75000000 Z=0.25000000

-7: X=0.25000000 Y=0.25000000 Z=0.75000000

-7: X=0.75000000 Y=0.25000000 Z=0.75000000

-7: X=0.25000000 Y=0.75000000 Z=0.75000000

-7: X=0.75000000 Y=0.75000000 Z=0.75000000

Fe NPT= 781 R0=0.00010000 RMT= 2.0000 Z: 26.0
 LOCAL ROT MATRIX: 0.0000000-0.7071068-0.7071068
 0.0000000-0.7071068 0.7071068
 1.0000000 0.0000000 0.0000000

.....

Bundan sonraki işlemler Bölüm 3'teki sıra ile takip edilir ancak kgen değeri (Brillouin bölgesindeki k noktaları sayısı) işlemlerin fazla zaman almaması için 500 ve "FeMnon.in1_st" dosyasındaki RMT*KMAX=500 ve EMAX=2.5 alınır.

.....FeMn.in1.....

WFFIL (WFPRI, SUPWF)
 5.00 10 4 (R-MT*K-MAX; MAX L IN WF, V-NMT
 0.30 4 0 (GLOBAL E-PARAMETER WITH n OTHER CHOICES, global APW/LAPW)
 1 0.30 0.000 CONT 0
 1 -3.79 0.005 STOP 0
 2 0.30 0.010 CONT 0
 0 0.30 0.000 CONT 0

```

0.30 4 0 (GLOBAL E-PARAMETER WITH n OTHER CHOICES, global APW/LAPW)
1 0.30 0.000 CONT 0
1 -3.79 0.005 STOP 0
2 0.30 0.010 CONT 0
0 0.30 0.000 CONT 0
0.30 4 0 (GLOBAL E-PARAMETER WITH n OTHER CHOICES, global APW/LAPW)
1 0.30 0.000 CONT 0
1 -3.79 0.005 STOP 0
2 0.30 0.010 CONT 0
0 0.30 0.000 CONT 0
0.30 4 0 (GLOBAL E-PARAMETER WITH n OTHER CHOICES, global APW/LAPW)
1 0.30 0.000 CONT 0
1 -3.79 0.005 STOP 0
2 0.30 0.010 CONT 0
0 0.30 0.000 CONT 0
0.30 4 0 (GLOBAL E-PARAMETER WITH n OTHER CHOICES, global APW/LAPW)
1 0.30 0.000 CONT 0
1 -3.79 0.005 STOP 0
2 0.30 0.010 CONT 0
0 0.30 0.000 CONT 0
0.30 4 0 (GLOBAL E-PARAMETER WITH n OTHER CHOICES, global APW/LAPW)
1 0.30 0.000 CONT 0
1 -3.79 0.005 STOP 0
2 0.30 0.010 CONT 0
0 0.30 0.000 CONT 0
0.30 4 0 (GLOBAL E-PARAMETER WITH n OTHER CHOICES, global APW/LAPW)
1 0.30 0.000 CONT 0
1 -3.97 0.005 STOP 0
2 0.30 0.010 CONT 0
0 0.30 0.000 CONT 0
K-VECTORS FROM UNIT:4 -7.0 2.5 emin/emax window

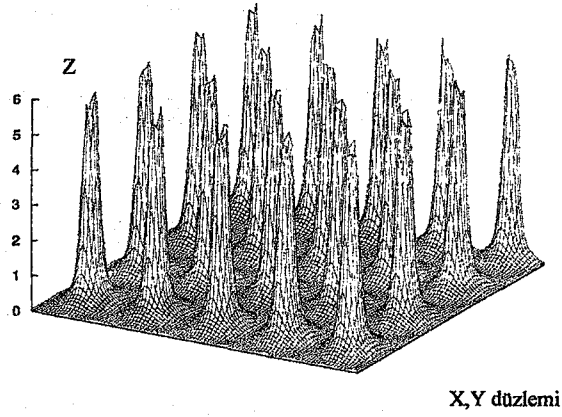
```

Elektron yoğunluğu için "FeMnnon.in5" dosyası oluşturulur ve bu dosyaya göre elektron yoğunluğu çizilir.

```

.....FeMnnon.in5.....
-1 -1 0 4
-1 6 0 4
9 -1 0 4
3 2 3
100 100
RHO
ANG VAL NODEBUG
NONORTHO

```



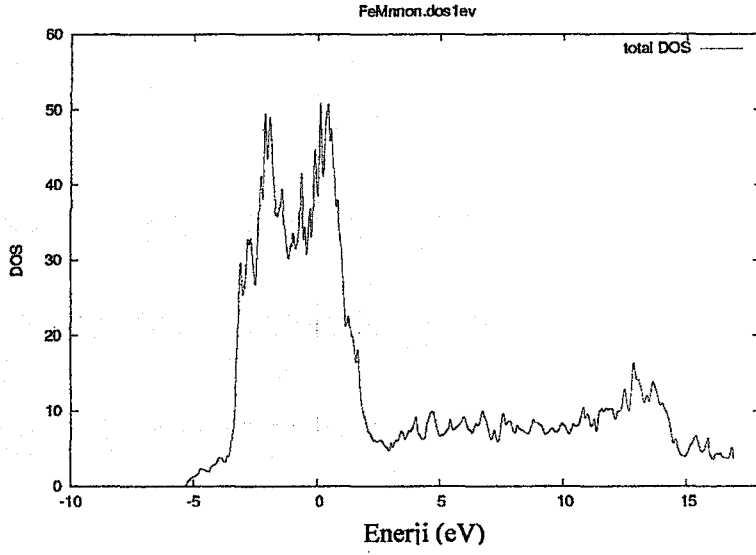
Şekil 5.1 I-tip nonmanyetik FeMn için elektron yoğunluğu grafiği

DOS grafikleri için "FeMnnon.int" dosyası aşağıdaki gibidir.

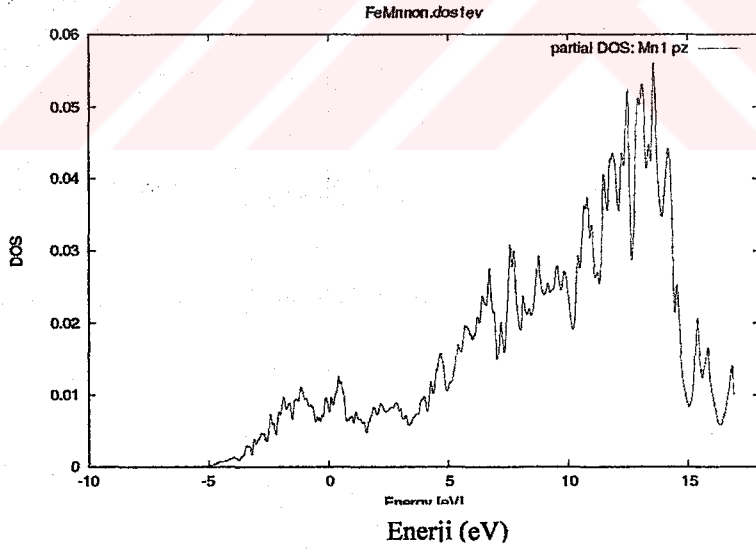
```

.....FeMnnon.int.....
FeMn
-0.50  0.00200  1.500 0.003
  6
  0  1  tot
  1  4  Fe-d
  1  5  Fe-eg
  1  6  Fe-t2g
  2  2  Ag-s
  2  3  Ag-p
.....

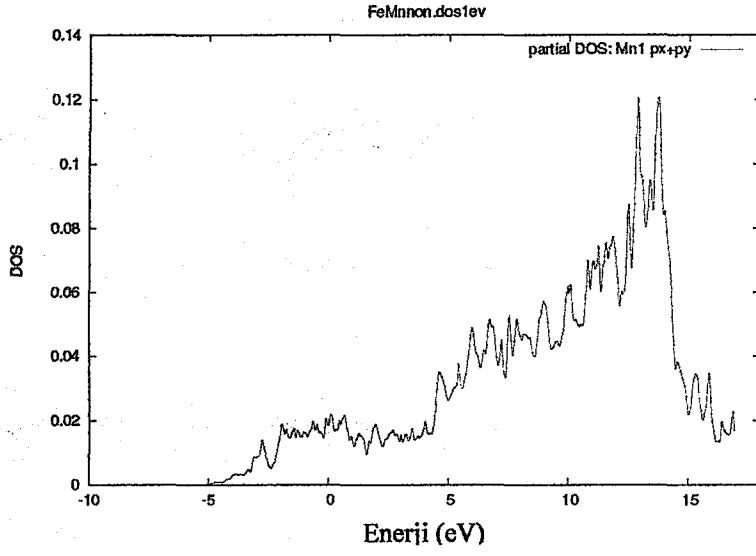
```

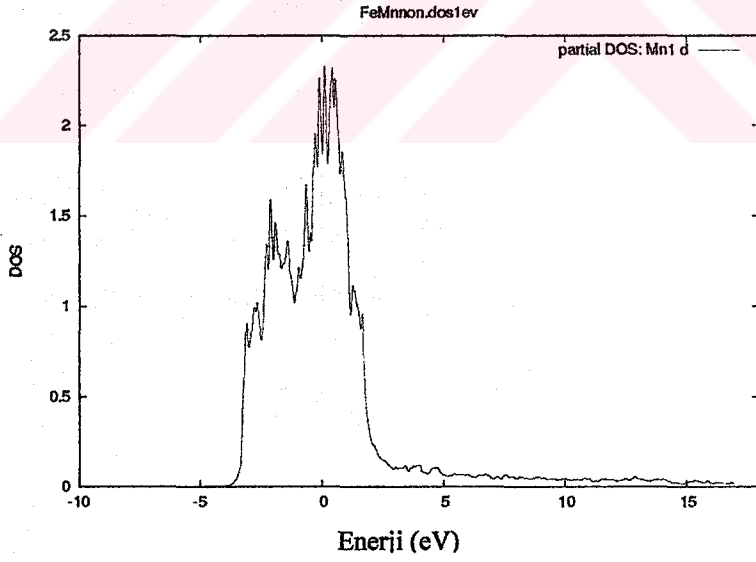
Şekil 5.2 FeMn-nonmanyetik toplam-DOS grafiği



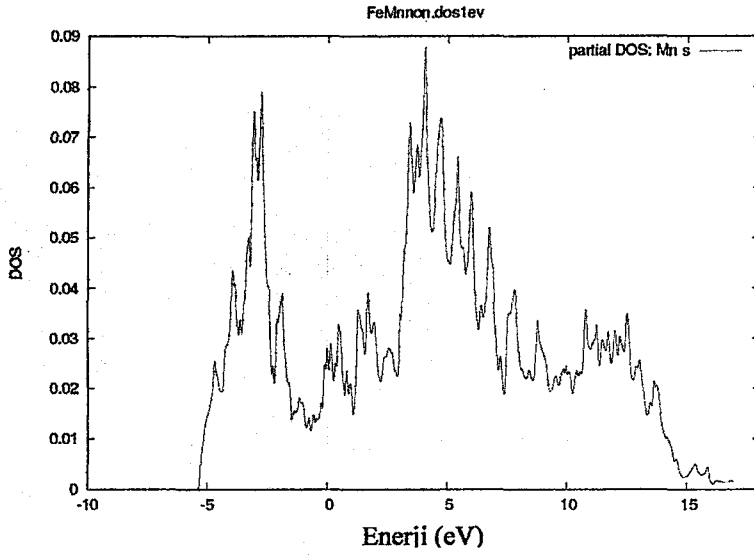
Şekil 5.3 FeMn-nonmanyetik Mn1 DOS pz grafiği



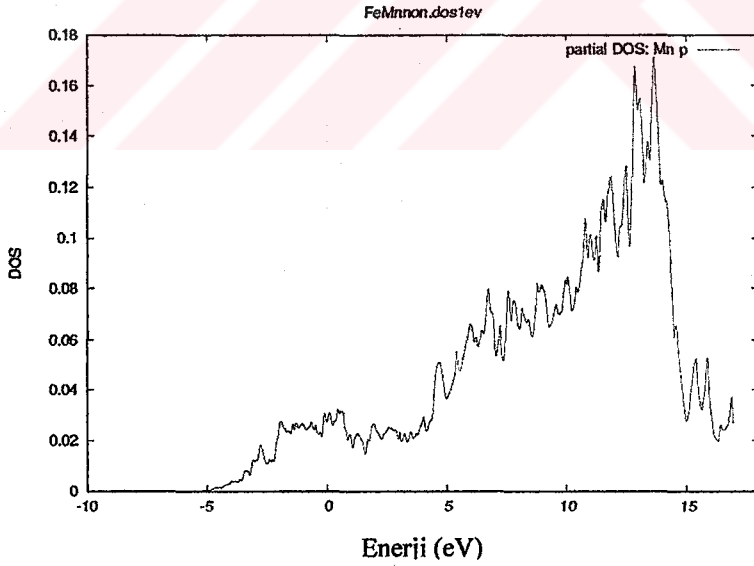
Şekil 5.4 FeMn-nonmanyetik Mn1 DOS px+py grafiği



Şekil 5.5 FeMn-nonmanyetik Mn1 DOS d grafiği



Şekil 5.6 FeMn-nonmanyetik Mn DOS s grafiği



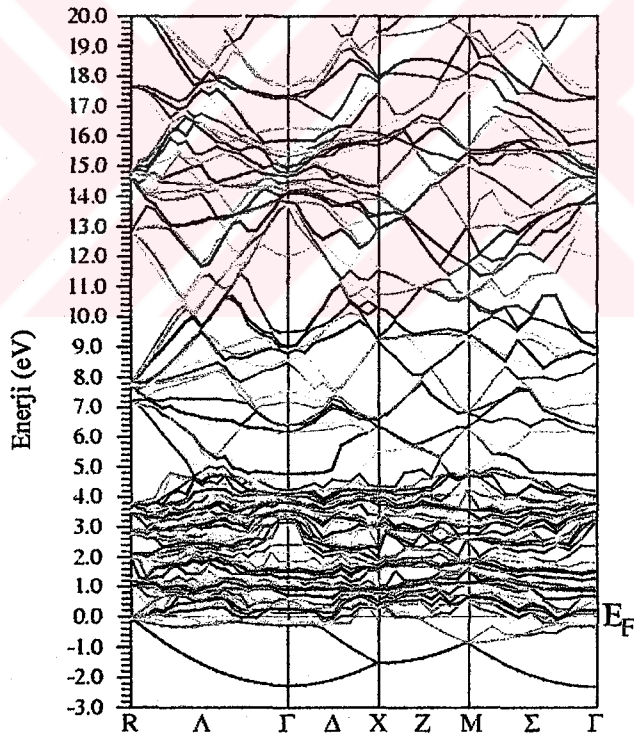
Şekil 5.7 FeMn-nonmanyetik Mn DOS p grafiği

Band yapısını elde etmek için “FeMnnon.insp” dosyası oluşturulur ve band yapısı grafiği elde edilir. Burada gerekli olan fermi enerjisi değeri program tarafından otomatik olarak oluşturulan”case.scf” dosyasından alınır ve band yapısı grafiği aşağıdaki gibi elde edilir.

```

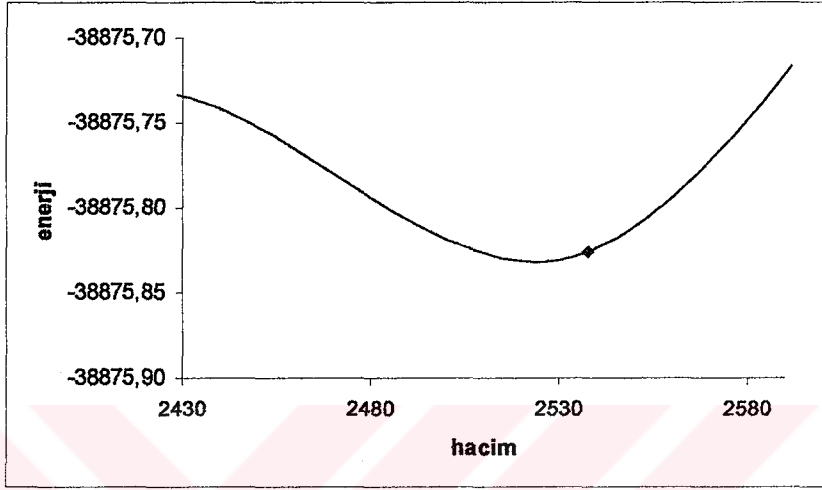
.....FeMnnon.insp.....
###figure configuration
5.0 3.0
10.0 15.0
1.0 4
1.0 1
1.1 2 4
### data configuration
-3.0 20.0 2
1 0.025309
1 999
0 1 0.02
.....

```

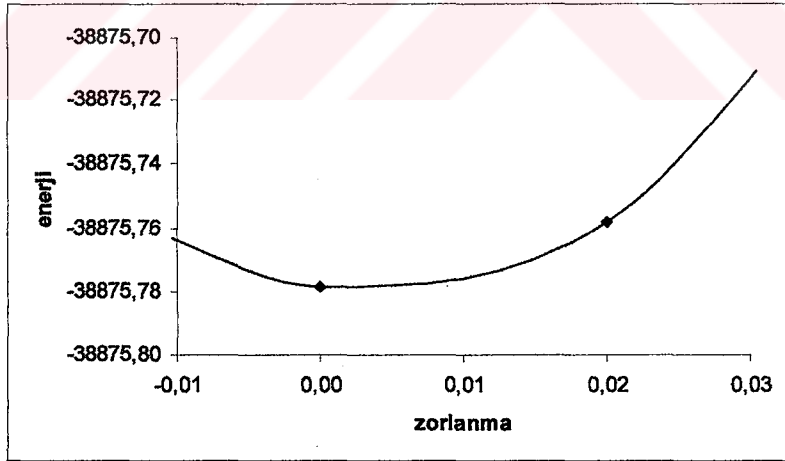


Şekil 5.8 I.tip nonmanyetik FeMn için band yapısı

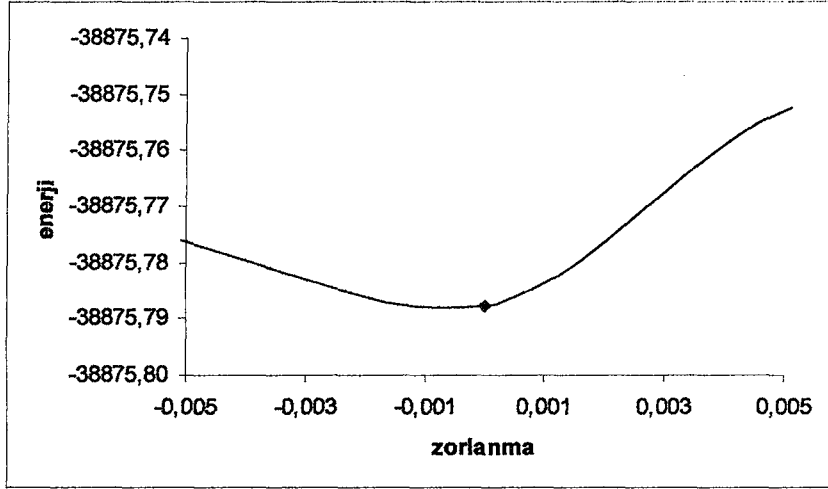
Numune için enerji-hacim grafiğini, tetragonal ve rombohedral yapılarıdaki enerji-zorlanma grafiklerini elde etmek için Bölüm 3.4.5'te belirtilen yol izlenir ve grafikleri aşağıdaki gibi elde edilir.



Şekil 5.9 I. tip numune için enerji-hacim grafiği



Şekil 5.10 I. tip numune için rombohedral enerji-zorlanma grafiği

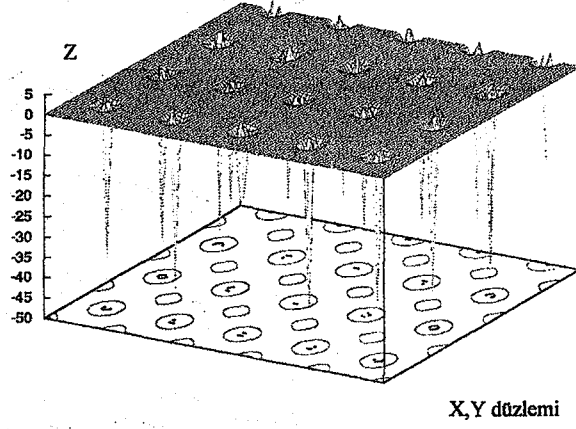


Şekil 5.11 I. tip numune için tetragonal enerji-zorlanma grafiği

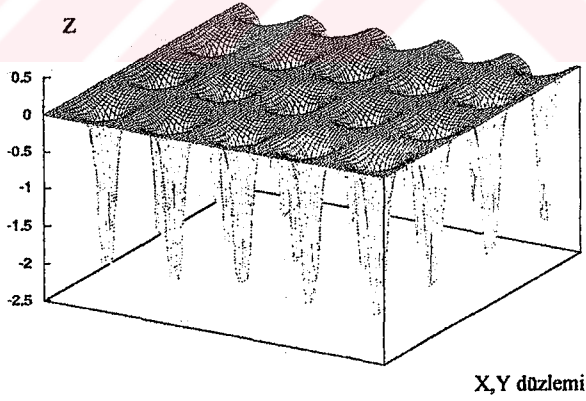
5.1.2. Ferromanyetik fcc Faz için (Austanite)

Bu uygulama için Bölüm 5.1.1’de kullanılan struct dosyası kullanılır. Bundan sonraki işlemler Bölüm 3’teki sıra ile takip edilir ancak kgen değeri (Brillouin bölgesindeki k noktaları sayısı) işlemlerin fazla zaman almaması için 500 ve “FeMnferro.int_st” dosyasındaki $RMT * KMAX = 500$ ve $EMAX = 2.5$ alınır. Ancak “run_lapw” yerine “runsp_lapw” kullanılarak spin polarize uygulanır.

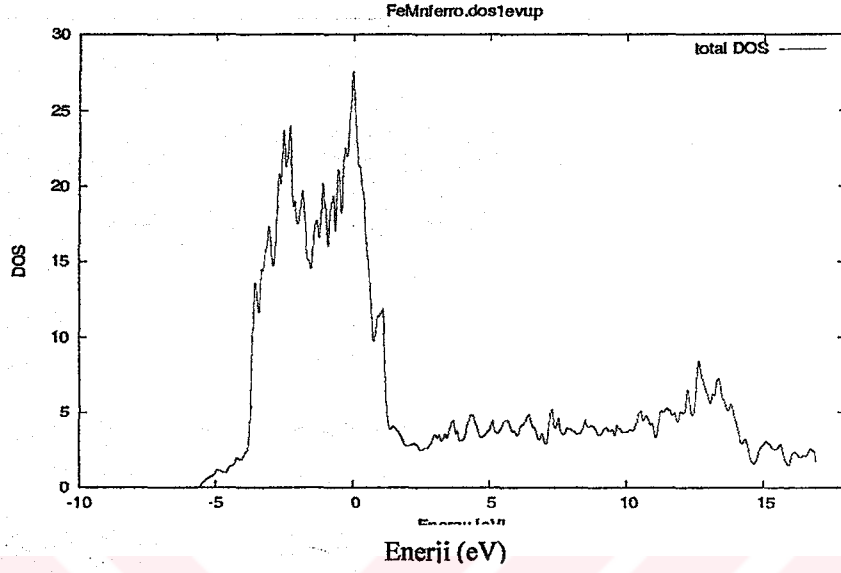
İşlemler Bölüm 3’teki sıra ile takip edildikten sonra elektron yoğunluğu ve DOS grafikleri aşağıdaki gibi elde edilir.



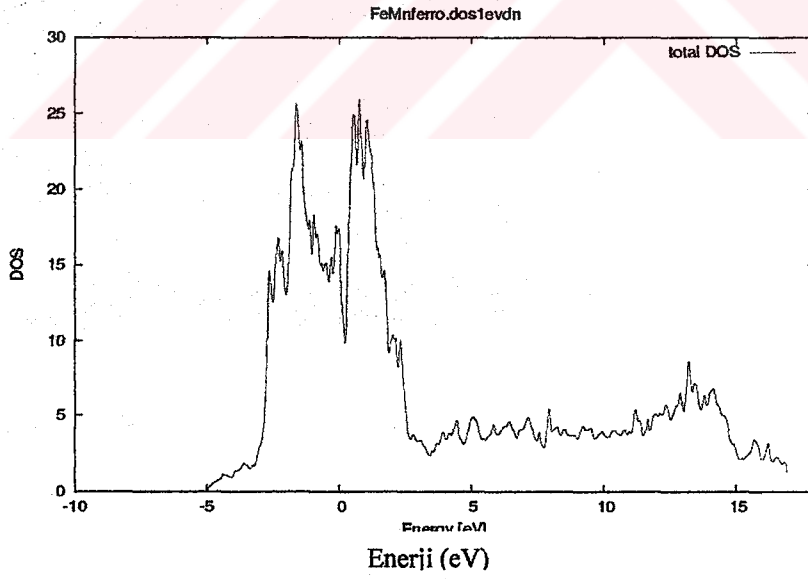
Şekil 5.12 I. tip Ferromanyetik FeMn için spin-yukarı elektron yoğunluğu grafiği



Şekil 5.13 I. tip Ferromanyetik FeMn için spin-aşağı elektron yoğunluğu grafiği

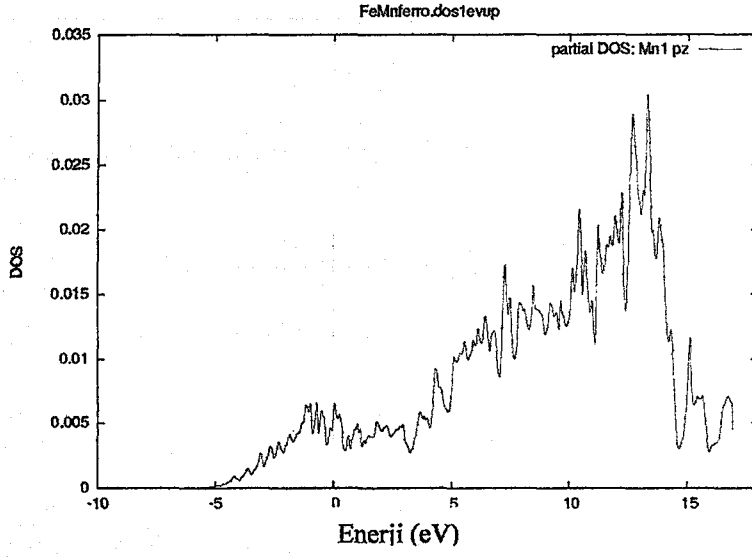


a) spin-yukarı

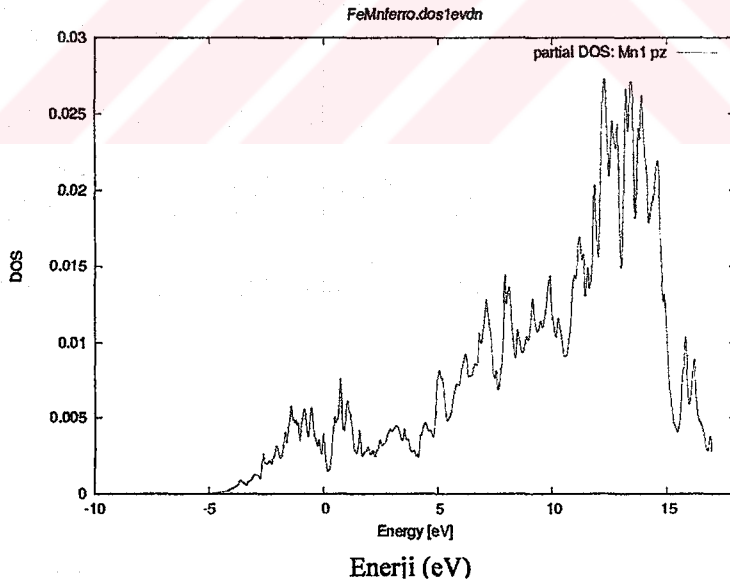


a) spin-aşağı

Şekil 5.14 I. tip Ferromanyetik FeMn için toplam-DOS grafikleri

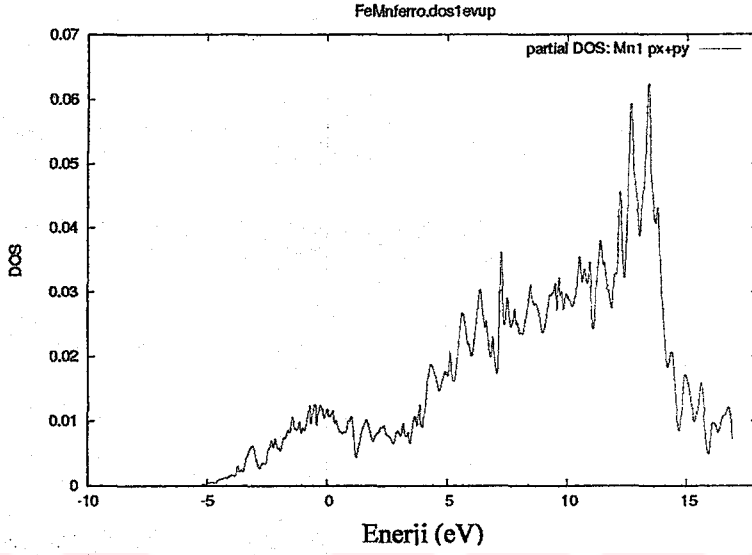


a) spin-yukarı

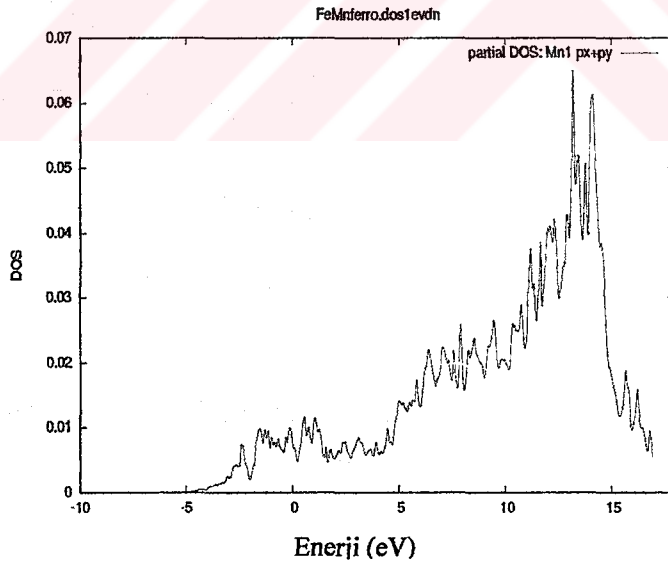


b) spin-aşağı

Şekil 5.15 I. tip Ferromanyetik FeMn için Mn1 DOS-pz grafikleri

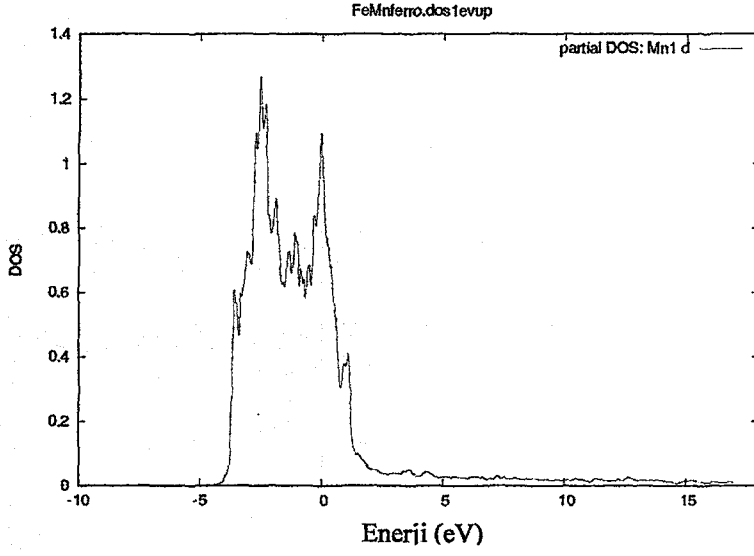


a) spin-yukarı

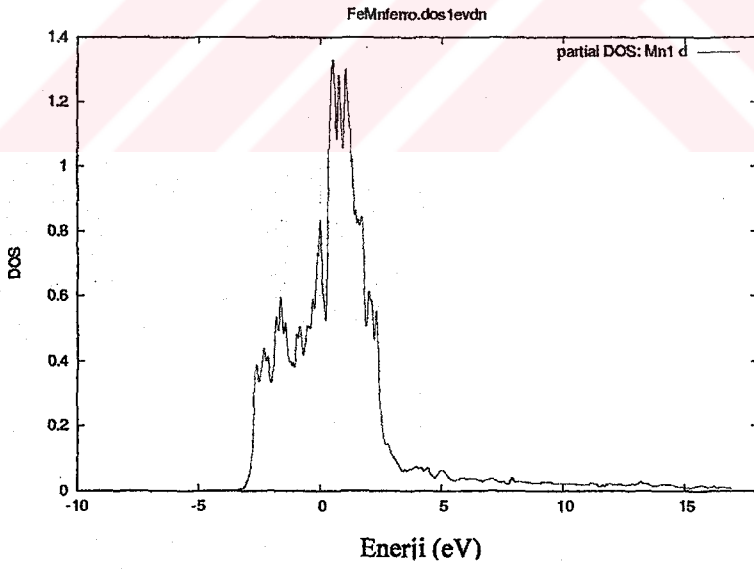


b) spin-aşağı

Şekil 5.16 I. tip Ferromanyetik FeMn için Mn1 DOS-px+py grafikleri

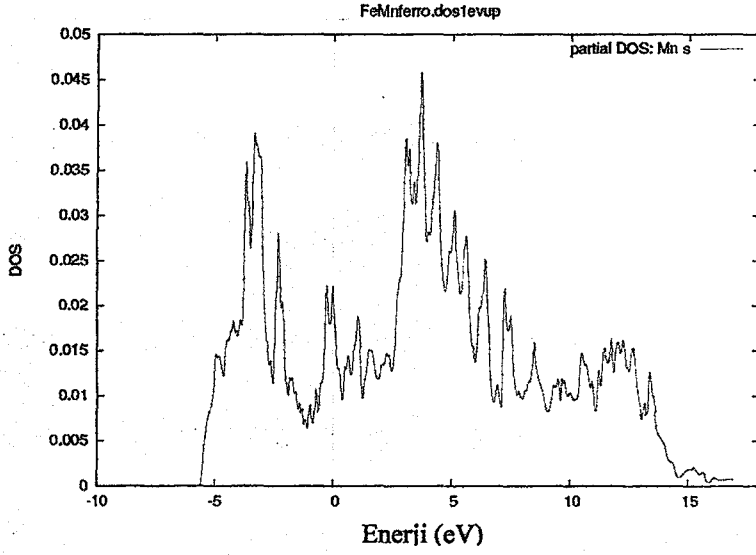


a) spin-yukarı

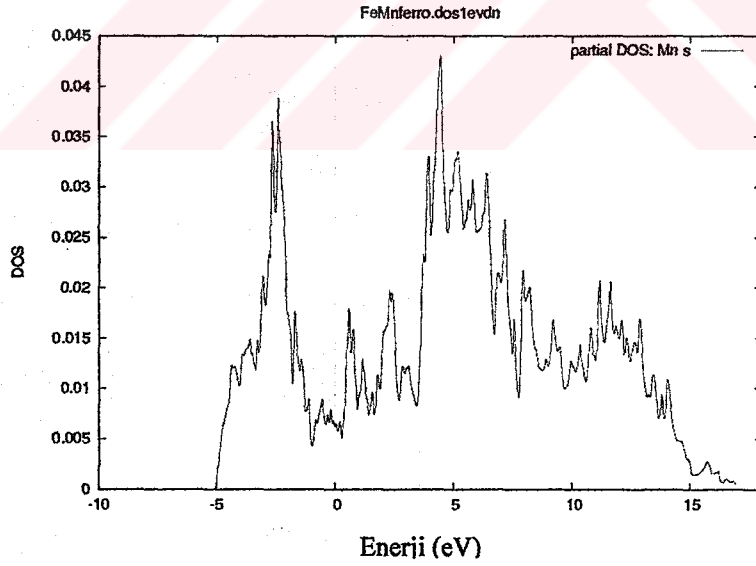


b) spin-aşağı

Şekil 5.17 I. tip Ferromanyetik FeMn için Mn1 DOS-d grafikleri

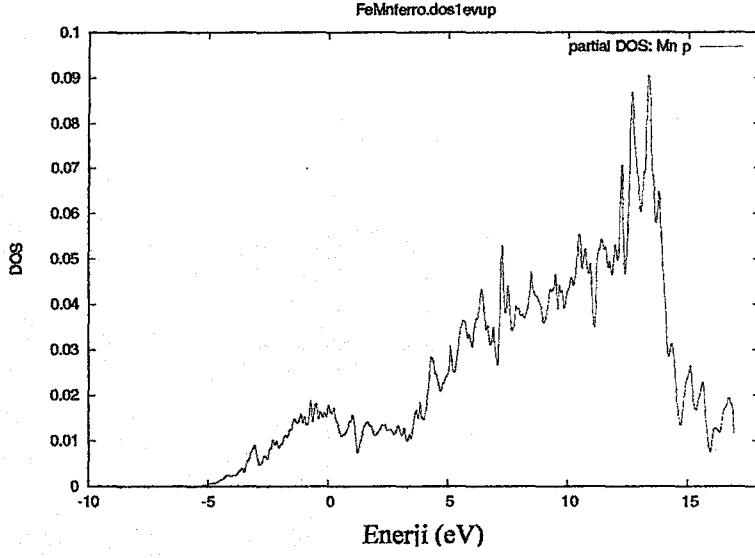


a) spin-yukarı

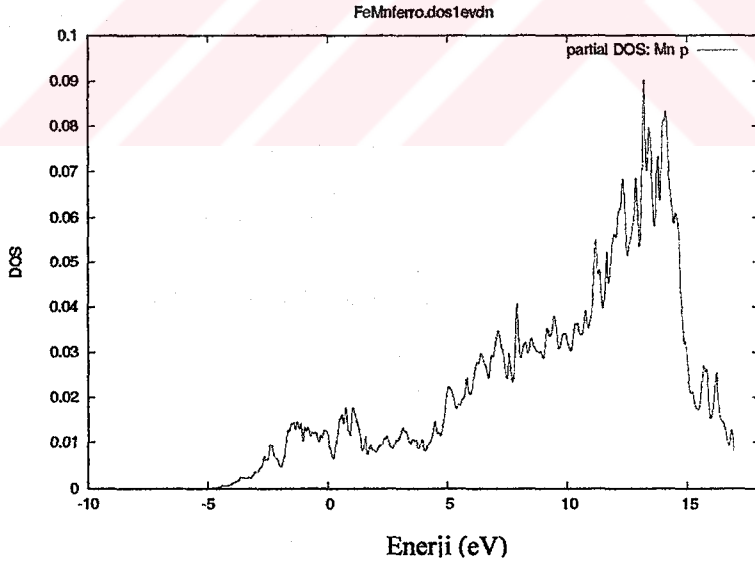


b) spin-aşağı

Şekil 5.18 I. tip Ferromanyetik FeMn için Mn DOS-s grafikleri



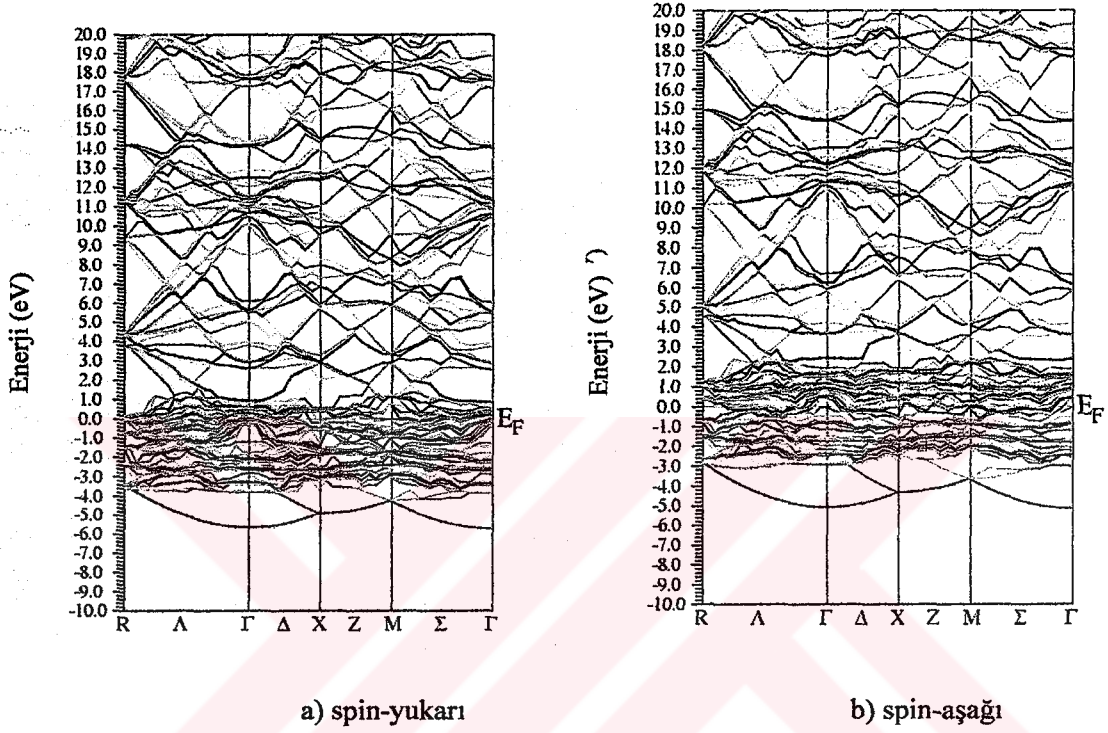
a) spin-yukarı



b) spin-aşağı

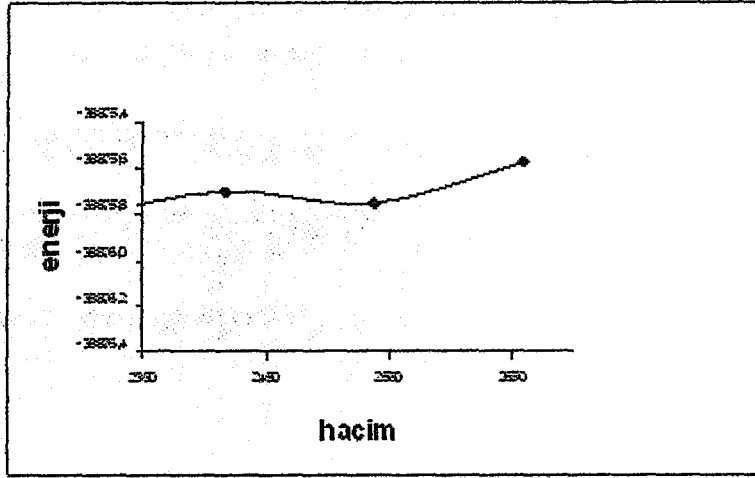
Şekil 5.19 I. tip Ferromanyetik FeMn için Mn DOS-p grafikleri

Band yapısını elde etmek için “FeMnferro.insp” dosyası oluşturulur, buradaki fermi enerjisi değeri programın otomatik olarak oluşturduğu “case.scf” dosyasından alınır ve band yapısı grafiği aşağıdaki biçimde elde edilir.

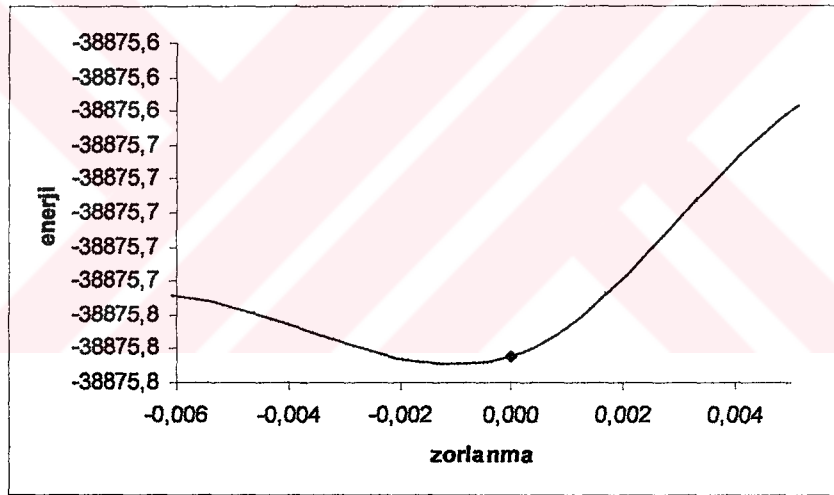


Şekil 5.20 I. tip Ferromanyetik FeMn için band yapısı grafiği

Numune için enerji-hacim grafiğini, tetragonal ve rombohedral yapılarıdaki enerji-zorlanma grafiklerini elde etmek için Bölüm 3.4.5’te belirtilen yol izlenir ve grafikleri aşağıdaki gibi elde edilir



Şekil 5.21 I. tip Ferromanyetik FeMn için enerji-hacim grafiği



Şekil 5.22 I. tip Ferromanyetik FeMn için tetragonal enerji-zorlanma grafiği

5.2. Fe-%9 Mn Alaşımına Ait IV. Numune için

5.2.1. Manyetik Olmayan(nonmanyetik) fcc Faz için (Austanite)

Aşağıdaki bilgilerden yararlanılarak Fe-%9Mn alaşımının IV. numunesine ait struct dosyası oluşturulur. Bu dosya oluşturulurken, FeMn alaşımının simetri grupları özenle incelenip, atomik koordinatları belirlenmiştir.

Maddenin adı :FeMn
 Örgü Tipi :bcc
 a=b :3.738 Å =7.06379 au
 c :6,5433 au
 $\alpha = \beta = \gamma$:90°

Atom 1 :Fe pozisyon (0.5, 0.5, 0.5) ve RMT=2.0

Atom 2 :Mn pozisyon (0, 0, 0) ve RMT=2.0

Struct dosyası oluşturulduktan sonra bölüm 3'te belirtilen süper örgü yapma işlemleri struct dosyasına uygulanır. Sonuçta elde edilen struct dosyası aşağıdaki şekildedir.

```
.....FeMnnon2.struct.....
FeMn
P 7
  RELA
  13.348650 13.348650 12.365095 90.000000 90.000000 90.000000
  ATOM -1: X=0.00000000 Y=0.00000000 Z=0.00000000
  MULT= 1 ISPLIT=-2
  Mn1 NPT= 781 R0=0.00005000 RMT= 2.0000 Z: 25.0
  LOCAL ROT MATRIX: 1.0000000 0.0000000 0.0000000
  0.0000000 1.0000000 0.0000000
  0.0000000 0.0000000 1.0000000
  ATOM -2: X=0.50000000 Y=0.00000000 Z=0.00000000
  MULT= 2 ISPLIT= 8
  -2: X=0.00000000 Y=0.50000000 Z=0.00000000
  Mn NPT= 781 R0=0.00005000 RMT= 2.0000 Z: 25.0
  LOCAL ROT MATRIX: 1.0000000 0.0000000 0.0000000
  0.0000000 1.0000000 0.0000000
  0.0000000 0.0000000 1.0000000
  ATOM -3: X=0.50000000 Y=0.50000000 Z=0.00000000
  MULT= 1 ISPLIT=-2
```



```

Mn  NPT= 781 R0=0.00005000 RMT= 2.0000 Z: 25.0
LOCAL ROT MATRIX:  1.0000000 0.0000000 0.0000000
                   0.0000000 1.0000000 0.0000000
                   0.0000000 0.0000000 1.0000000
ATOM -4: X=0.00000000 Y=0.00000000 Z=0.50000000
      MULT= 1      ISPLIT=-2
Mn  NPT= 781 R0=0.00005000 RMT= 2.0000 Z: 25.0
LOCAL ROT MATRIX:  1.0000000 0.0000000 0.0000000
                   0.0000000 1.0000000 0.0000000
                   0.0000000 0.0000000 1.0000000
ATOM -5: X=0.50000000 Y=0.00000000 Z=0.50000000
      MULT= 2      ISPLIT= 8
      -5: X=0.00000000 Y=0.50000000 Z=0.50000000
Mn  NPT= 781 R0=0.00005000 RMT= 2.0000 Z: 25.0
LOCAL ROT MATRIX:  1.0000000 0.0000000 0.0000000
                   0.0000000 1.0000000 0.0000000
                   0.0000000 0.0000000 1.0000000
ATOM -6: X=0.50000000 Y=0.50000000 Z=0.50000000
      MULT= 1      ISPLIT=-2
Mn  NPT= 781 R0=0.00005000 RMT= 2.0000 Z: 25.0
LOCAL ROT MATRIX:  1.0000000 0.0000000 0.0000000
                   0.0000000 1.0000000 0.0000000
                   0.0000000 0.0000000 1.0000000
ATOM -7: X=0.25000000 Y=0.25000000 Z=0.25000000
      MULT= 8      ISPLIT= 8
      -7: X=0.75000000 Y=0.25000000 Z=0.25000000
      -7: X=0.25000000 Y=0.75000000 Z=0.25000000
      -7: X=0.75000000 Y=0.75000000 Z=0.25000000
      -7: X=0.25000000 Y=0.25000000 Z=0.75000000
      -7: X=0.75000000 Y=0.25000000 Z=0.75000000
      -7: X=0.25000000 Y=0.75000000 Z=0.75000000
Fe  NPT= 781 R0=0.00010000 RMT= 2.0000 Z: 26.0
LOCAL ROT MATRIX:  0.0000000-0.7071068-0.7071068
                   0.0000000-0.7071068 0.7071068
                   -1.0000000 0.0000000 0.0000000

```

.....

Bundan sonraki işlemler Bölüm 3'teki sıra ile takip edilir ancak kgen değeri (Brillouin bölgesindeki k noktaları sayısı) işlemlerin fazla zaman almaması için 500 ve "FeMnnon2.in1_st" dosyasındaki $RMT * KMAX = 500$ ve $EMAX = 2.5$ alınır.

```

..... FeMnnon2.in1_st.....
WFFIL (WFPRI, SUPWF)
5.00 10 4 (R-MT*K-MAX; MAX L IN WF, V-NMT)
0.30 4 0 (GLOBAL E-PARAMETER WITH n OTHER CHOICES, global APW/LAPW)
1 0.30 0.000 CONT 0
1 -3.79 0.005 STOP 0
2 0.30 0.010 CONT 0
0 0.30 0.000 CONT 0

```

```

0.30 4 0 (GLOBAL E-PARAMETER WITH n OTHER CHOICES, global APW/LAPW)
1 0.30 0.000 CONT 0
1 -3.79 0.005 STOP 0
2 0.30 0.010 CONT 0
0 0.30 0.000 CONT 0
0.30 4 0 (GLOBAL E-PARAMETER WITH n OTHER CHOICES, global APW/LAPW)
1 0.30 0.000 CONT 0
1 -3.79 0.005 STOP 0
2 0.30 0.010 CONT 0
0 0.30 0.000 CONT 0
0.30 4 0 (GLOBAL E-PARAMETER WITH n OTHER CHOICES, global APW/LAPW)
1 0.30 0.000 CONT 0
1 -3.79 0.005 STOP 0
2 0.30 0.010 CONT 0
0 0.30 0.000 CONT 0
0.30 4 0 (GLOBAL E-PARAMETER WITH n OTHER CHOICES, global APW/LAPW)
1 0.30 0.000 CONT 0
1 -3.79 0.005 STOP 0
2 0.30 0.010 CONT 0
0 0.30 0.000 CONT 0
0.30 4 0 (GLOBAL E-PARAMETER WITH n OTHER CHOICES, global APW/LAPW)
1 0.30 0.000 CONT 0
1 -3.97 0.005 STOP 0
2 0.30 0.010 CONT 0
0 0.30 0.000 CONT 0
K-VECTORS FROM UNIT:4 -7.0 2.5 emin/emax window

```

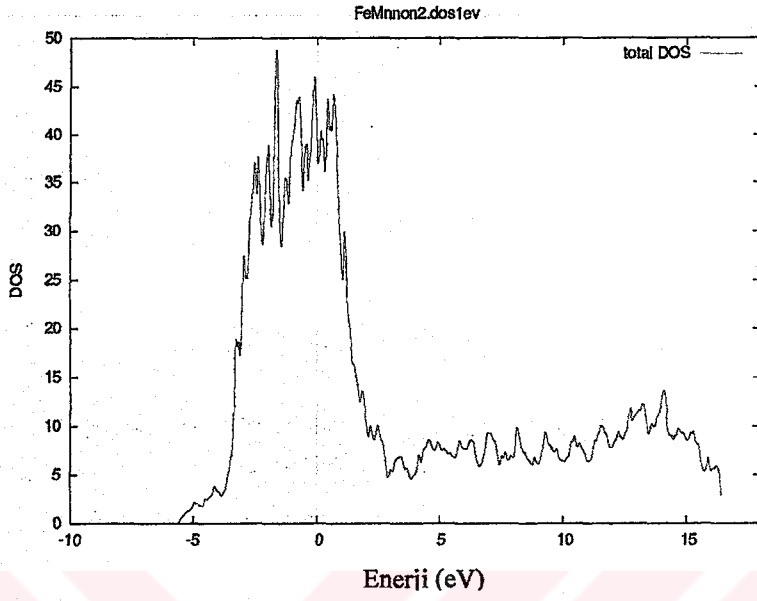
.....

Elektron yoğunluğu için "FeMnnon.in5" dosyası oluşturulur ve bu dosyaya göre elektron yoğunluğu çizilir.

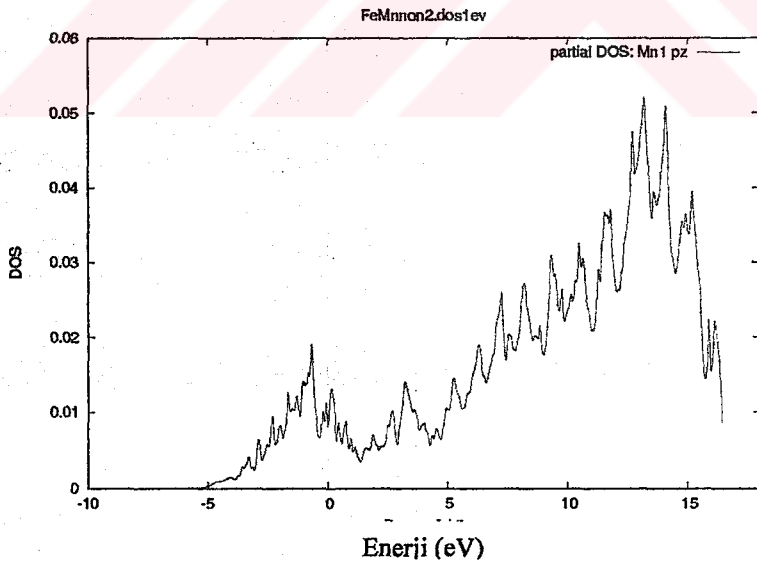
```

.....FeMnnon.in5.....
-1 -1 0 4
-1 6 0 4
9 -1 0 4
3 2 3
100 100
RHO
.....

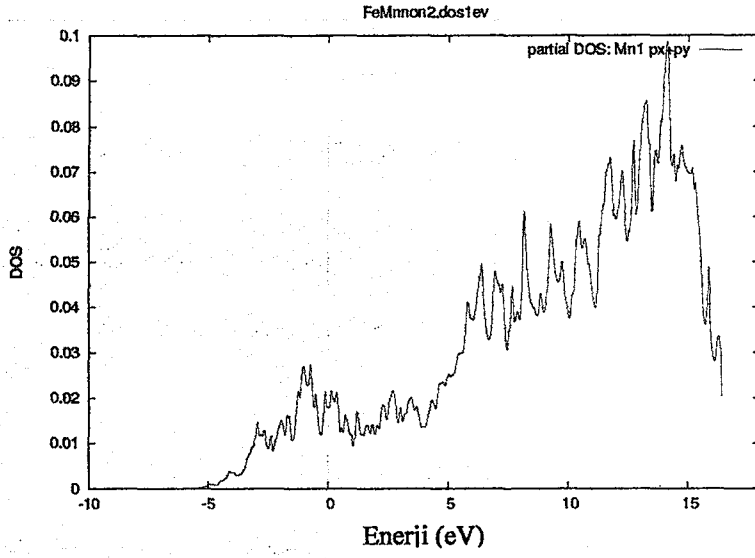
```



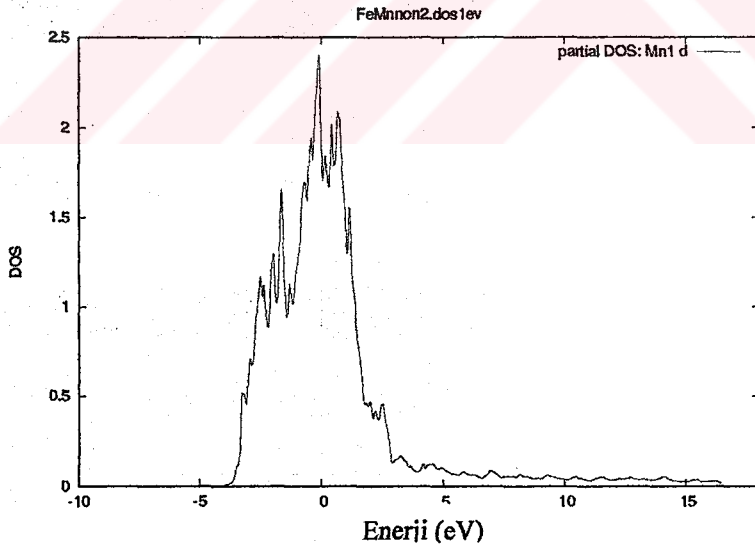
Şekil 5.24 FeMn-nonmanyetik toplam-DOS grafiği



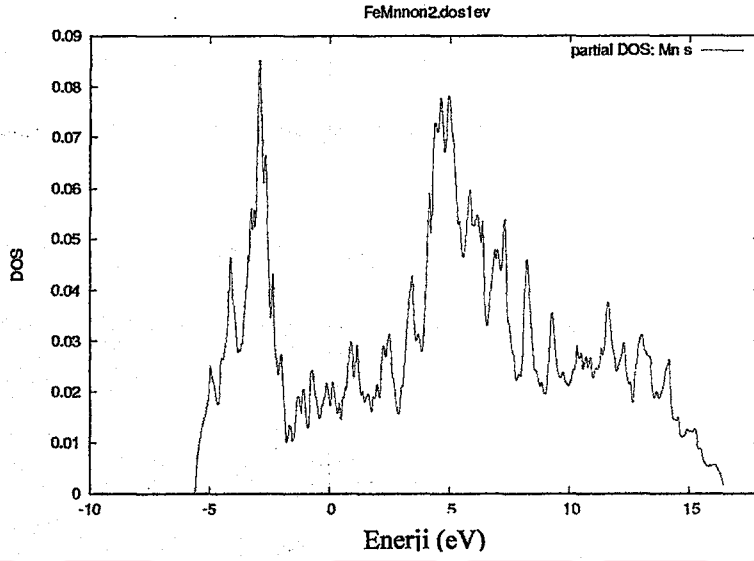
Şekil 5.25 FeMn-nonmanyetik Mn1 DOS pz grafiği



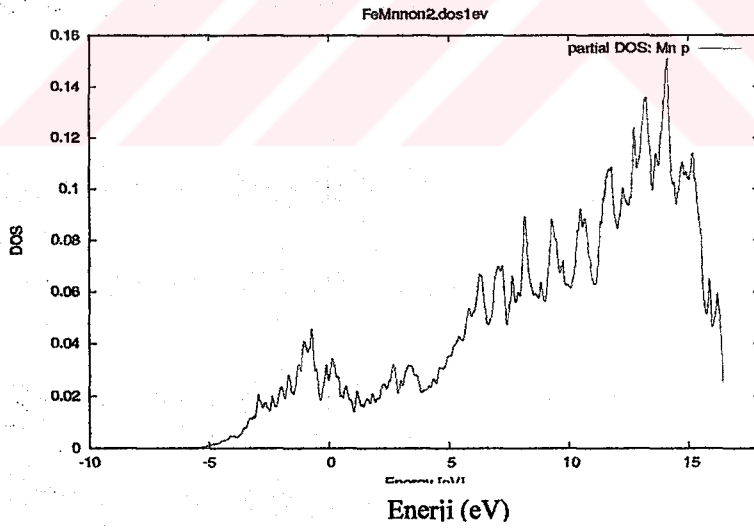
Şekil 5.26 FeMn-nonmanyetik2 Mn1 DOS px+py grafiği



Şekil 5.27 FeMn-nonmanyetik2 Mn1 DOS d grafiği



Şekil 5.28 FeMn-nonmanyetik2 Mn DOS s grafiği



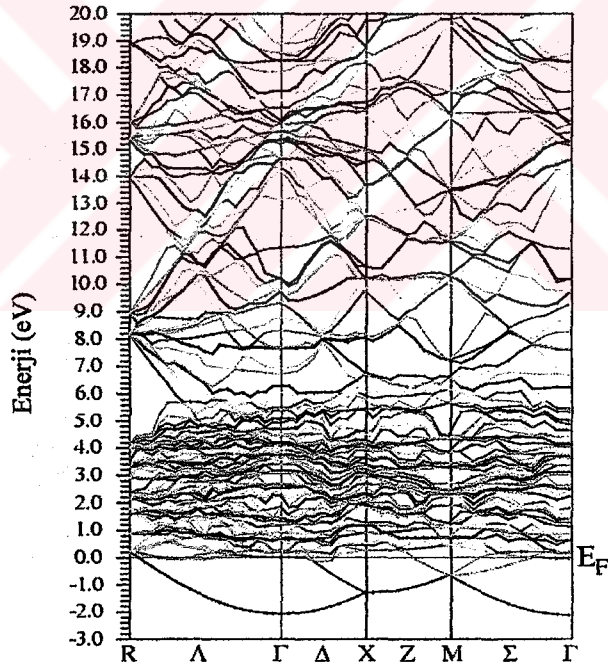
Şekil 5.29 FeMn-nonmanyetik2 Mn DOS p grafiği

Band yapısı için “FeMnnon2.insp” dosyası oluşturulur ve band yapısı grafiği elde edilir. Bu dosya için gerekli olan fermi enerjisi değeri program tarafından otomatik olarak oluşturulan “case.scf” dosyasından alınır. Band yapısı grafiği aşağıdaki gibi elde edilir.

```

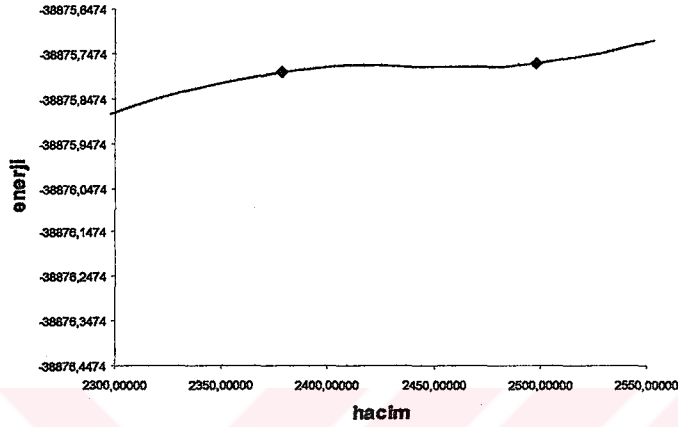
..... FeMnnon2.insp.....
###figure configuration
5.0 3.0
10.0 15.0
1.0 4
1.0 1
1.1 2 4
### data configuration
-10.0 15.0 2
1 0.028984
1 999
0 1 0.02
.....

```

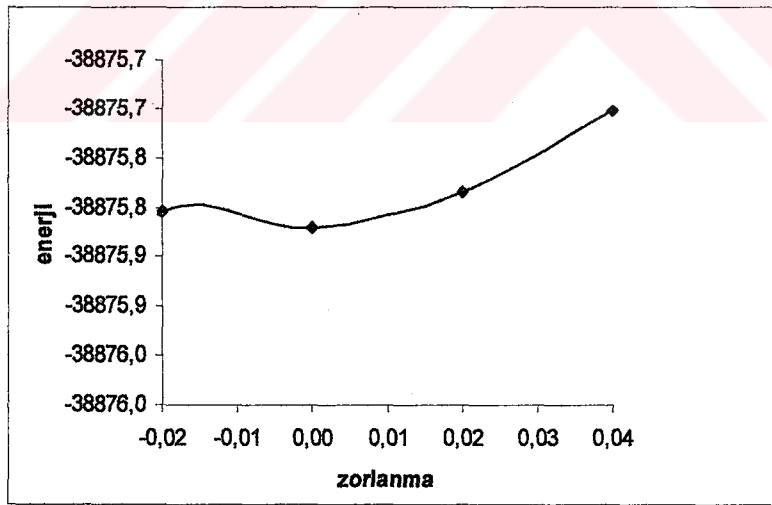


Şekil 5.30 IV. Tip nonmanyetik FeMn için band yapısı grafiği

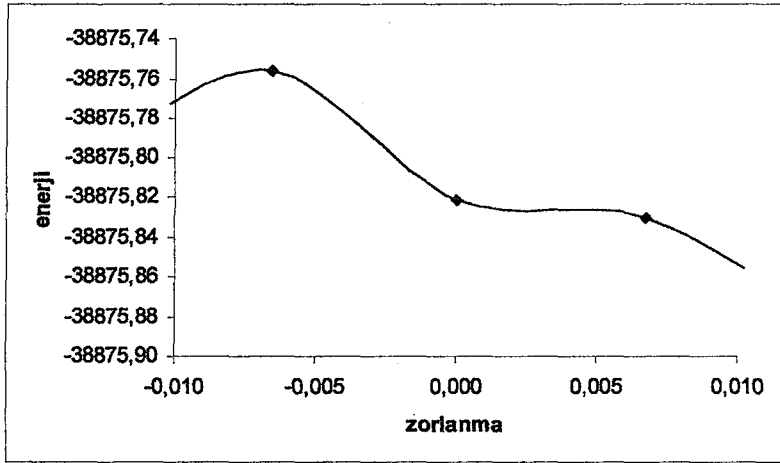
Numune için enerji-hacim grafiğini, tetragonal ve rombohedral yapılardaki enerji-zorlanma grafiklerini elde etmek için Bölüm 3.4.5'te belirtilen yol izlenir ve grafikleri aşağıdaki gibi elde edilir.



Şekil 5.31 IV. Tip nonmanyetik FeMn için enerji-hacim grafiği



Şekil 5.32 IV. Tip nonmanyetik FeMn için rombohedral enerji-zorlanma grafiği

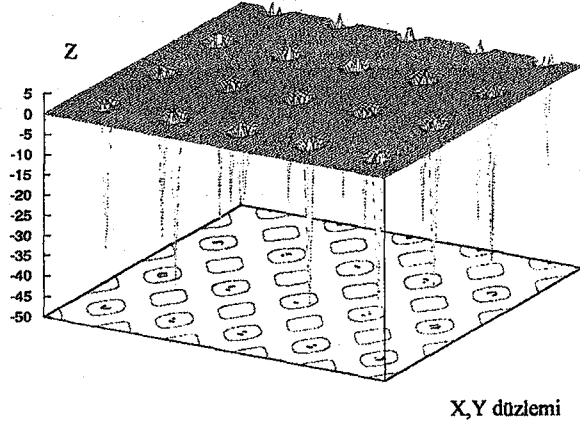


Şekil 5.33 IV. Tip nonmanyetik FeMn için tetragonal enerji-zorlanma grafiği

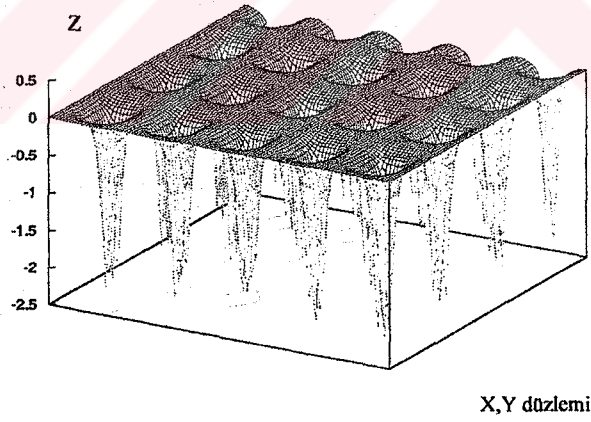
5.2.2. Ferromanyetik fcc Faz için

Bu uygulama için Bölüm 5.1.1’de kullanılan struct dosyası kullanılır. Bundan sonraki işlemler Bölüm 3’teki sıra ile takip edilir ancak kgen değeri (Brillouin bölgesindeki k noktaları sayısı) işlemlerin fazla zaman almaması için 500 ve “FeMnferro.int_st” dosyasındaki $RMT * KMAX = 500$ ve $EMAX = 2.5$ alınır. Ancak “run_lapw” yerine “runsp_lapw” kullanılarak spin polarize uygulanır.

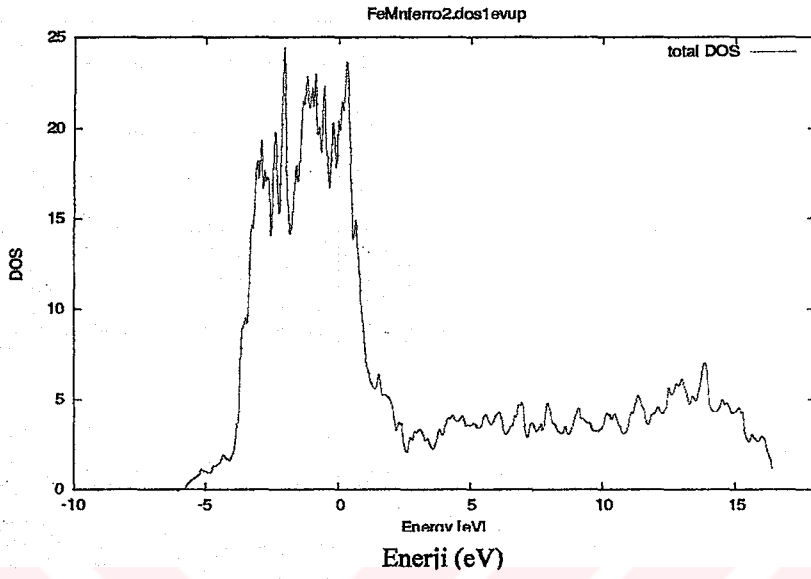
İşlemler Bölüm 3’teki sıra ile takip edildikten sonra elektron yoğunluğu ve DOS grafikleri aşağıdaki gibi elde edilir.



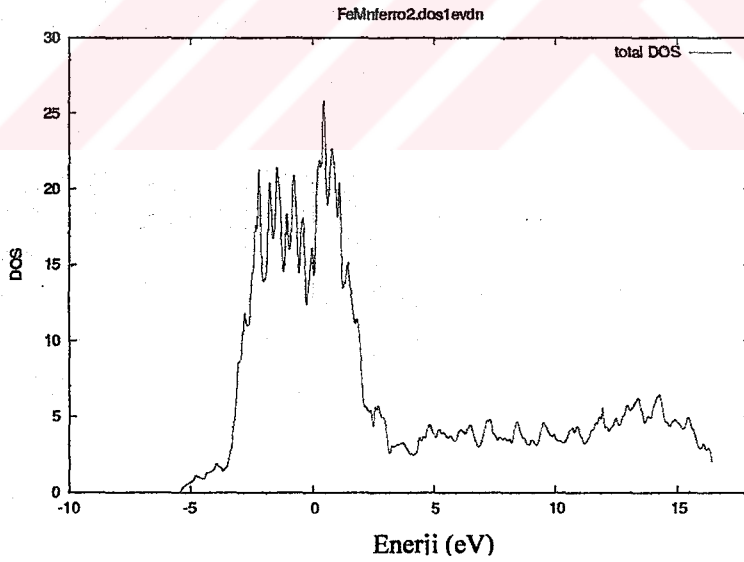
Şekil 5.34 IV. Tip Ferromanyetik FeMn için spin-yukarı elektron yoğunluğu grafiği



Şekil 5.35 IV. Tip Ferromanyetik FeMn için spin-aşağı elektron yoğunluğu grafiği

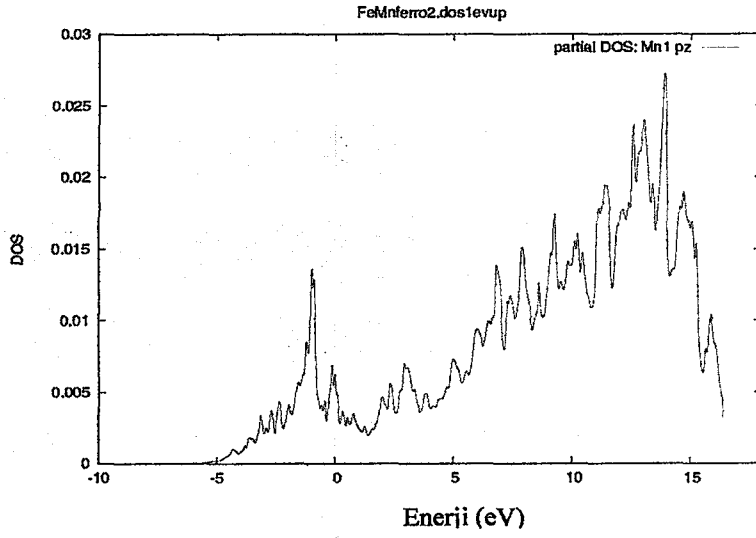


a) spin-yukarı

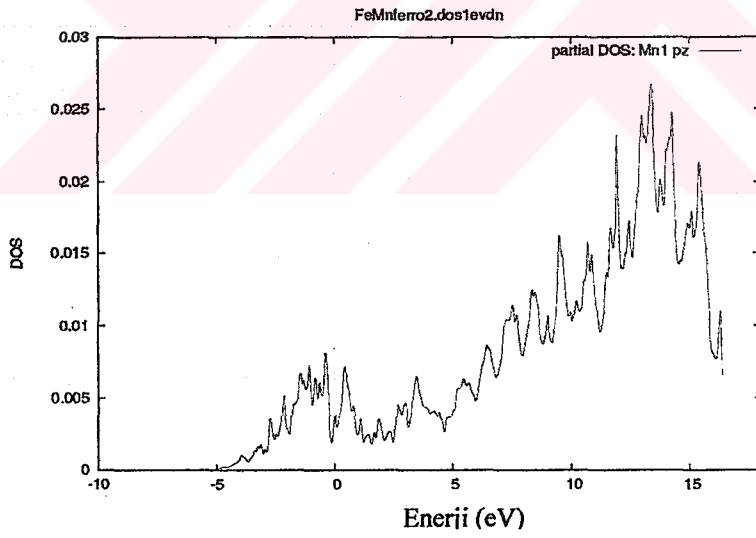


b) spin-aşağı

Şekil 5.36 VI. tip Ferromanyetik FeMn için toplam-DOS grafikleri

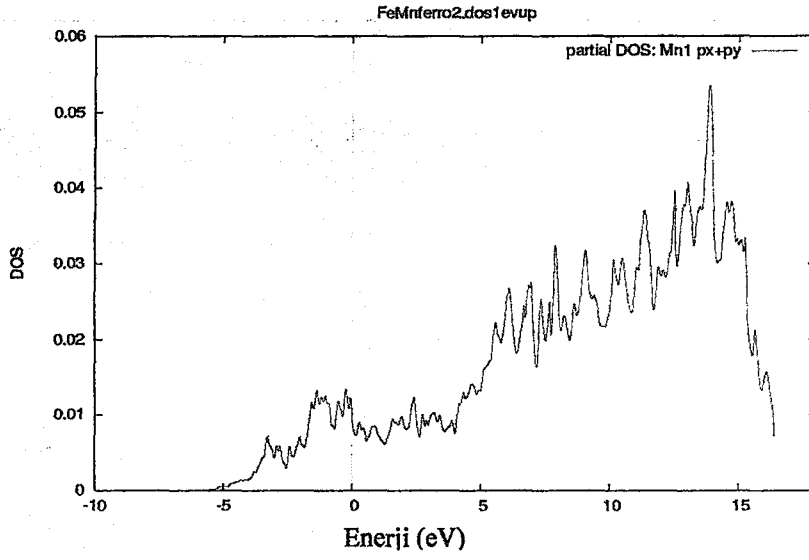


a) spin-yukarı

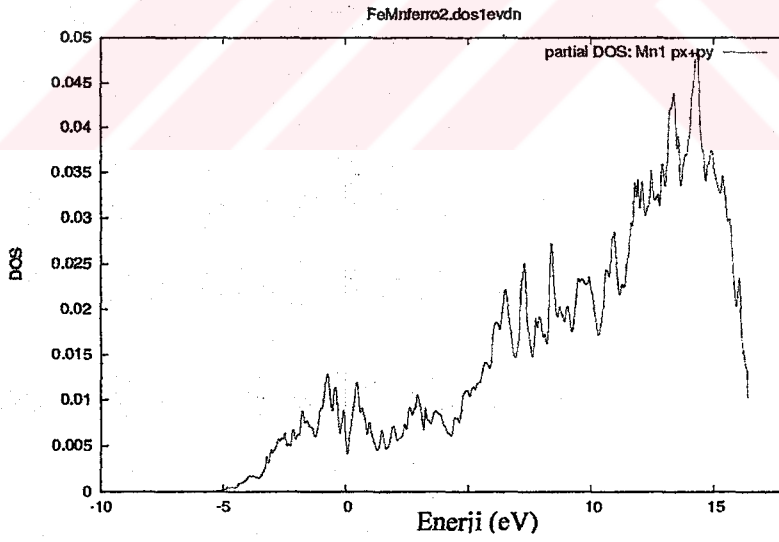


b) spin-aşağı

Şekil 5.37 VI. tip Ferromanyetik FeMn için toplam Mn1 DOS-pz grafikleri

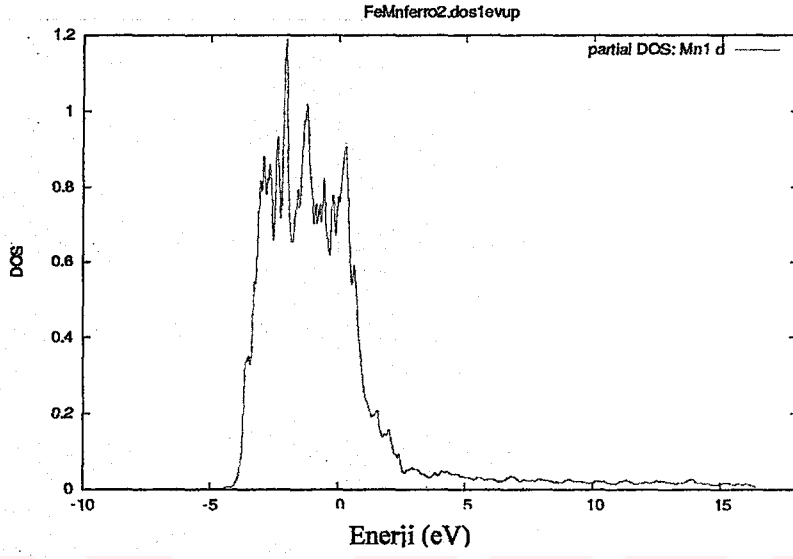


a) spin-yukarı

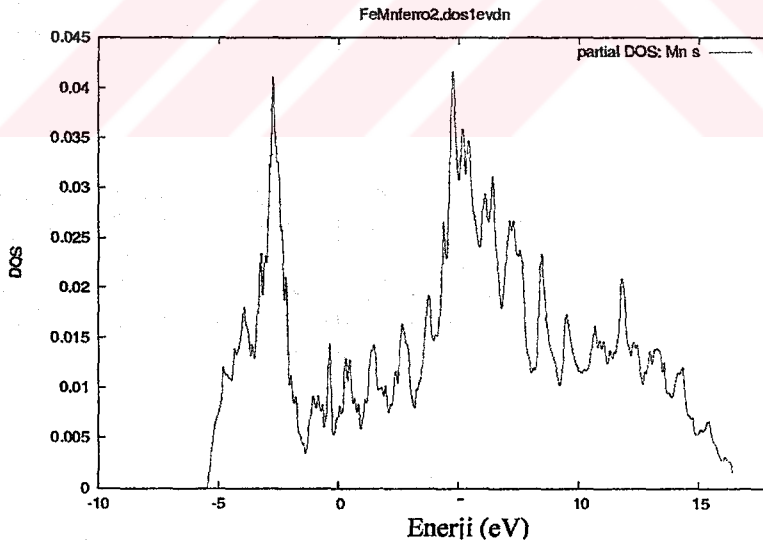


b) spin-aşağı

Şekil 5.38 VI. tip Ferromanyetik FeMn için toplam Mn l DOS-px+py grafikleri

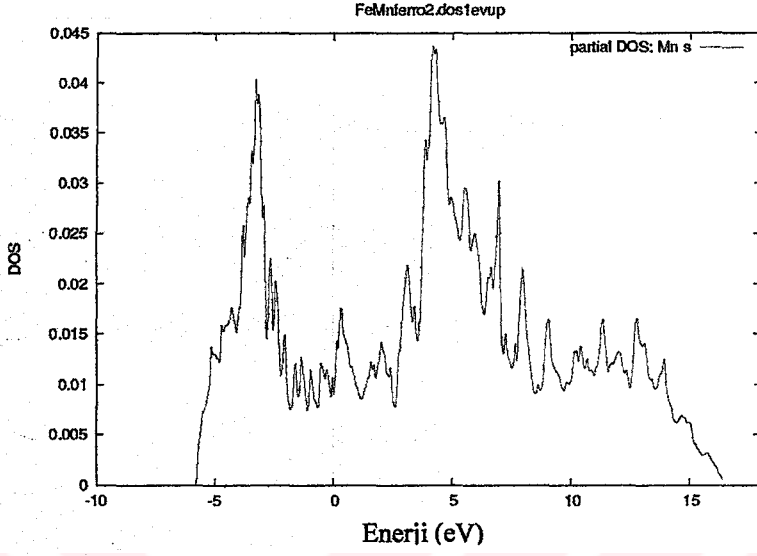


a) spin-yukarı

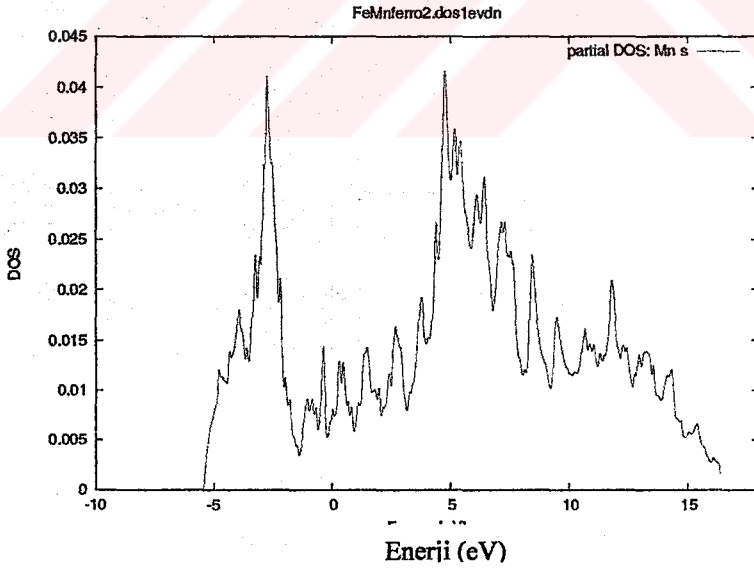


b) spin-aşağı

Şekil 5.39 VI. tip Ferromanyetik FeMn için toplam Mn1 DOS-d grafikleri

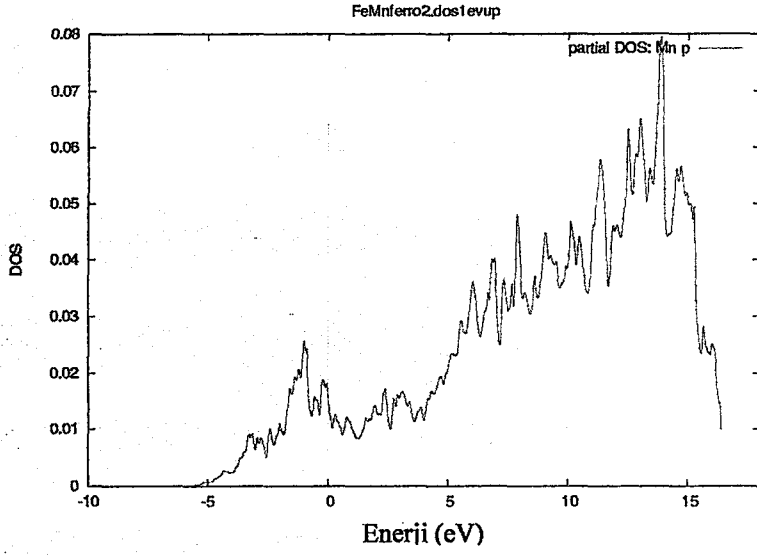


a) spin-yukarı

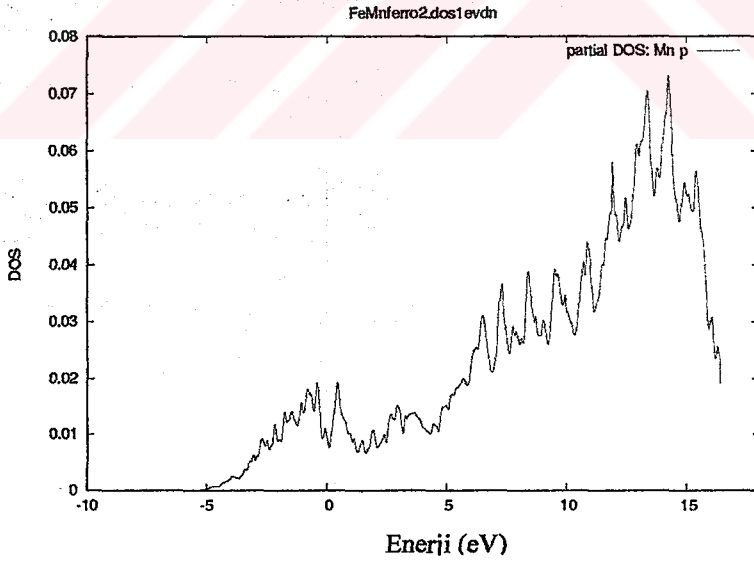


b) spin-aşağı

Şekil 5.40 VI. tip Ferromanyetik FeMn için toplam Mn DOS-s grafikleri



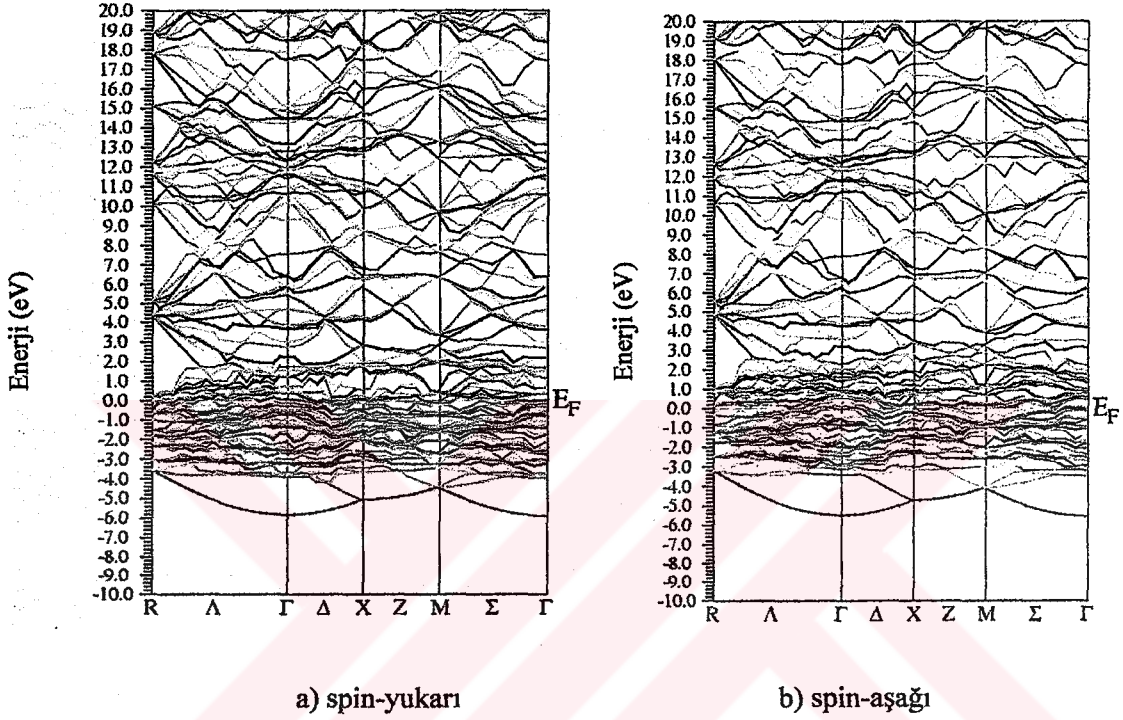
a) spin-yukarı



b) spin-aşağı

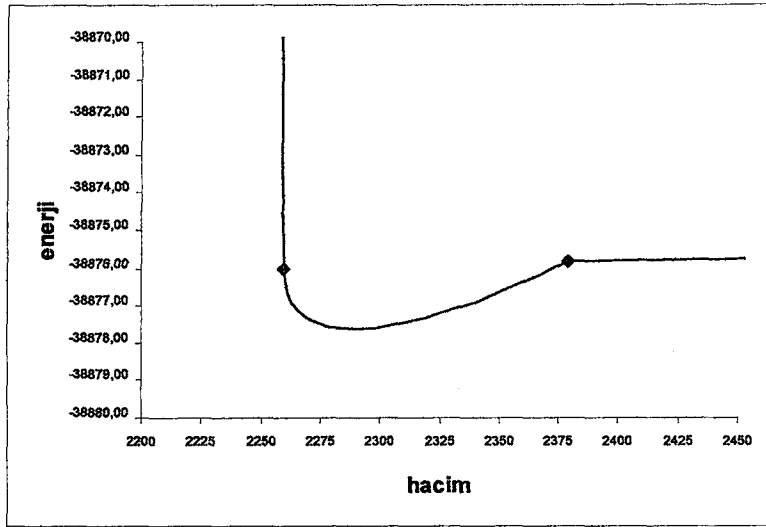
Şekil 5.41 VI. tip Ferromanyetik FeMn için toplam Mn DOS-p grafikleri

Band yapısını elde etmek için “FeMnferro.insp” dosyası oluşturulur, buradaki fermi enerjisi değeri programın otomatik olarak oluşturduğu “case.scf” dosyasından alınır ve band yapısı grafiği aşağıdaki biçimde elde edilir.

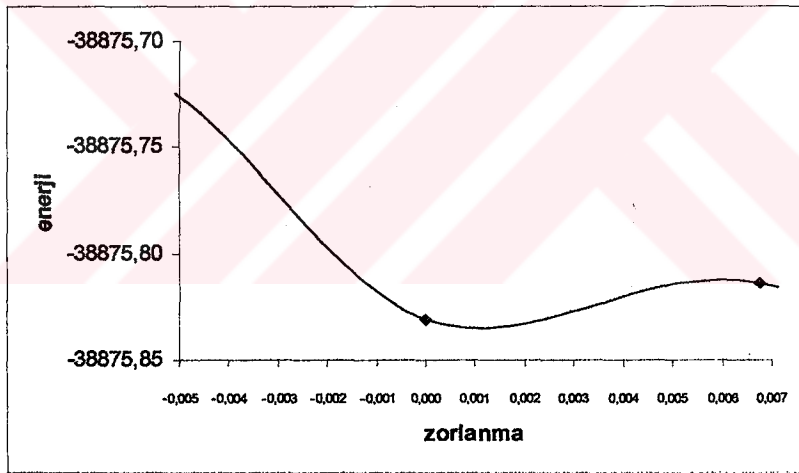


Şekil 5.42 VI. tip Ferromanyetik FeMn için band yapısı grafiği

Numune için enerji-hacim grafiğini, tetragonal ve rombohedral yapılarıdaki enerji-zorlanma grafiklerini elde etmek için Bölüm 3.4.5’te belirtilen yol izlenir ve grafikleri aşağıdaki gibi elde edilir



Şekil 5.43 VI. Tip ferromanyetik FeMn için enerji-hacim grafiği



Şekil 5.44 IV. Tip Ferromanyetik FeMn için tetragonal enerji-zorlanma grafiği

6. SONUÇ

Bu çalışmada Wien2k programı ile fcc TiC ve tetragonal $L1_0$ yapıdaki FeAg'nin manyetik (ferromanyetik) ve manyetik olmayan (nonmanyetik) durumlarındaki kristal yapıları için elektron yoğunluğu, durum yoğunluğu (DOS), bant yapıları, kararlılık durum grafikleri ve elastik sabitleri elde edildi. Daha sonra bu program ile I. ve IV. tip fcc Fe-%9 Mn (austenite) alaşımın bazı fiziksel ve manyetik özellikleri incelendi.

I ve IV numunelerine ait; $a_{fcc}^0=3.758 \text{ \AA}$ ve $a_{fcc}^0=3.738 \text{ \AA}$ deneysel örgü parametreleri kullanılarak süper örgü yapı oluşturuldu ve bu yapının, elektron yoğunluğu, DOS, bant yapısı, enerji hacim grafiği, tetragonal ve rombohedral enerji hacim grafikleri Wien2k programı ile elde edildi. I. ve IV. numunede deneysel örgü parametrelerinin birbirlerine çok yakın olmasından dolayı sonuçların birbirlerine oldukça yakın olduğu görüldü.

Bu çalışmada I. ve IV. tip Fe-%9 Mn alaşımları karşılaştırıldığında; ilk olarak her iki durum için manyetik olmayan ve ferromanyetik durumlara ait elektron yoğunluğu grafikleri (Şekil 5.1, Şekil 5.12, Şekil 5.13, Şekil 5.23, Şekil 5.34, Şekil 5.35) incelendi. Şekillerde valans elektronlarının dağılımı gösterilmektedir. Şekillerdeki koni biçimlerinin uç kısımları elektronların yoğun olduğu bölgeleri, iki koni arasında kalan kısımlar ise atomlar arasındaki elektronları göstermektedir. Bu koniler arasında kalan bölge aynı zamanda iletim elektron bulutu olarak da bilinmektedir. I. ve IV. numunenin manyetik olmayan ve ferromanyetik durumlarının elektron yoğunlukları kendi aralarında birbirlerine benzerdir.

Durum yoğunluğu (DOS) grafiklerine göre (Şekil 5.2, Şekil 5.3, Şekil 5.4, Şekil 5.5, Şekil 5.6, Şekil 5.7, Şekil 5.8, Şekil 5.14 Şekil 5.15, Şekil 5.16, Şekil 5.17, Şekil 5.18, Şekil 5.19, Şekil 5.20, Şekil 5.21, Şekil 5.22, Şekil 5.24, Şekil 5.25, Şekil 5.26, Şekil 5.27, Şekil 5.28, Şekil 5.29, Şekil 5.36, Şekil 5.37, Şekil 5.38, Şekil 5.39, Şekil 5.40, Şekil 5.41), bu grafikler ferromanyetik durumlar için aşağı ve yukarı durumlar olarak ayrı ayrı incelenmiştir. Grafiklerde kesikli doğru ile gösterilen sınır Fermi düzeyidir. Her pikin maksimum değeri ile minimum değeri arasındaki enerji " $k_B T$ " ile tanımlanır. Bu grafikler valans elektronlarının dağılımını ve iletme olan katkılarını anlamamıza yardımcı olurlar. İletime en büyük katkı 3d orbitallerindeki elektronlardan gelmektedir. I. ve IV. numunenin manyetik olmayan ve ferromanyetik yapılarının DOS grafikleri incelendiğinde görülecektir ki, piklerin boyutları

hemen hemen aynı olmasına rağmen, enerji aralıkları farklıdır. Bu farkların dış fiziksel etkenlerden kaynaklandığı düşünülebilir. Yani dış kuvvetler kristal yapının enerji seviyesinde bir değişim meydana getirirken, elektronik yapısında herhangi bir değişim meydana getirmemiştir.

Band yapısı grafiklerinde ise (Şekil 5.8, Şekil 5.20, Şekil 5.30, Şekil 5.42), I. ve IV. durumun manyetik olmayan ve ferromanyetik durumların enerji bandlarının birbiri içine girdiği yani yasak enerji aralığı olmadığı görülmektedir. DOS grafiklerine göre bu durumun gözlenmesi beklenen bir olgudur. Band yapısı grafiğinde Γ 'dan başlayarak yukarı doğru çıkıldığında ilk band parabol şeklindeki "s" bandıdır. "d" bandları ise küçülerek daralır ve enerjileri azalır. Küçük enerji aralıklarının sebebi "d" bandı elektronlarının kuvvetli etkileşimleridir. "d" bandları E_f seviyesi civarında yoğunlaşmaktadır. Band yapısı grafiklerinden de görüldüğü üzere I. ve IV. tip numunelerin manyetik olmayan ve ferromanyetik yapıları fermi enerjisi düzeyinde iletim ve valans elektronları arasında bir boşluğun olmamasından dolayı iletkenlik özelliği göstermektedir[2, 25 ve 43].

Band yapısı grafiklerinde parabolik bandlar DOS grafiğindeki küçük pikleri (s orbitalleri), düzleşen bandlar DOS grafiğindeki yüksek pikleri(d orbitalleri) göstermektedir.

Numunelerin manyetik olmayan ve ferromanyetik süper örgü yapılarının enerji-hacim, enerji- zorlanma grafikleri(Şekil 5.9, Şekil 5.10, Şekil 5.11, Şekil 5.21, Şekil 5.22, Şekil 5.31, Şekil 5.32, Şekil 5.33, Şekil 5.43, Şekil 5.44) incelendi. Bu grafiklerde enerjinin minimum olduğu nokta sistemin kristal yapısının kararlı olduğu hacme karşılık gelir ve örgü parametreleri elde edilebilir. Aynı zamanda numunenin elastik sabitleri program tarafında otomatik olarak hesaplanmış ve Hacim modülü, tetragonal ve rombohedral zorlanma değerleri elde edildi ve bu değerler aşağıdaki şekilde karşılaştırıldı. Enerji-zor grafiklerinin dönüm noktaları denge noktasına karşılıktır. Bu durum Şekil 5.10, Şekil 5.11, Şekil 5.22, Şekil 5.32, Şekil 5.33, Şekil 5.44'te görülmektedir.

Çizelge 6.1 Örgü parametrelerinin karşılaştırılması

Numune	a (deney)	a (teorik)	c (deney)	c (teorik)
I. tip numune	7,1015	6,1195	6,9594	5,6686
IV. tip numune	7,0638	6,0870	6,5433	5,6385

$$* 1 \text{ a.u.} = 0,529177 \text{ \AA}$$

Çizelge 6.2 Elastik sabitlerin karşılaştırılması

Numune	C ₁₁		C ₁₂		C ₄₄	
	a. u	GPa	a. u	GPa	a. u	GPa
I. tip nonmanyetik FeMn	0,073375	1079,386393	-0,03614	-531,65761	0,0387	569,300815
IV. tip nonmanyetik FeMn	0,069068	1016,033141	-0,05733	-843,39938	0,066307	975,415757
I. tip ferromanyetik FeMn	0,268604	395,298945	-0,152038	-2236,55529	0,008868	130,45291
IV. tip ferromanyetik FeMn	0,183097	2693,35687	-0,118201	-1738,73671	0,024452	359,68892

Çizelge 6.3 Hacim modülü, tetragonal ve rombohedral zorlanmaların karşılaştırılması

Numune	Hacim modülü		Tetragonal zorlanma		Rombohedral zorlanma	
	$(C_{11}+2C_{12})/3$		$(C_{11}-C_{12})$		$C_{11}+2C_{12}+2C_{44}$	
	a.u	GPa	a. u	GPa	a. u	GPa
I. tip manyetik olmayan FeMn	0,000364	5,357	0,109516	1611,044	0,155894	2293,274
IV. tip manyetik olmayan FeMn	-0,015199	-223,589	0,126402	1859,433	0,219632	3230,897
I. tip ferromanyetik FeMn	-0,011824	-173,937	0,420642	6187,854	-0,01770	- 260,4552
IV. tip ferromanyetik FeMn	-0,017768	-261,382	0,301298	4432,248	-0,00440	- 64,73871

*1GPa≈ 14710 a.u

KAYNAKLAR DİZİNİ

- [1] Sherrill, C. D., 1995, An Introduction to configuration Theory, http://zopyros.ccqc.uga.edu/lec_top/ci/
- [2] Ashcroft, N.W. and Mermin, N.D., 1976, *Solid State Physics*, Holt, Rinehar.
- [3] Kohn, W. and Sham, L. J., 1965, *Phys. Rev* 140, A1133
- [4] John J. Inkson, 1984, *Many-Body Theory of Solids*, U.S.A..
- [5] Wensauer A., Rössler U., 2003, *Phys. Rev. B* (cond-mat/0307529).
- [6] Jones, R. O. and Gunnarson, D., 1989, *Rev. Mod. Phys.* 61, 689 p.
- [7] Parr, R.G. and Yang, W., 1989, *Density Functional Theory of Atoms and Molecules*, Oxford University Press, New York.
- [8] Fuchs, M., 1999, ICTP atölye çalışmalarındaki ders notları.
- [10] Perdew, J. P. and Wang, Y., 1991, *Phys. Rev. B* 45, 8244 p.
- [11] Rızaoğlu, E. Ve Sünel, N., 2002, *Klasik Mekanik*, Ankara.
- [12] Slater, J. C., 1937, *Phys. Rev.* 51, 151 p.
- [13] Hamann, D. R., 1979, *Phys. Rev. Lett.* 42, 662 p.
- [14] Wimmer, E., Krakauer, H., Weinert, M., Freeman, A. J., 1981, *Phys. Rev. B* 24, 864 p.
- [15] Andersen, O. K., 1975, *Phys. Rev. B* 12, 3060 p.
- [16] Sjöstedt, E., Nordström, L. and Singh, D. J., 2000, *Solid State Communications* 114, 15-20 p.
- [17] Koelling, D. D. and Arbman, G. D., 1975, *J. Phys. F* 5, 2041 p.
- [18] Singh, D. J., 1991, *Phys. Rev. B* 43, 6388 p.
- [19] Schwarz, K. and Blaha, P., 2003, *Computational Materials Science* 28, 259 p.
- [20] Liberman, D., Weber, J. T., and Cromer, D. T., 1965, *Phys. Rev.* 137A, 27 p.
- [21] Perdew, J. P. and Wang, Y., 1992, *Phys. Rev. B* 45, 13244 p.
- [22] Perdew, J.P., Chevary, J.A., Vosko, S.H., and Fiolhais, C., 1992, *Phys. Rev. B* 46, 6671p.

KAYNAKLAR DİZİNİ(devamı)

- [23] Schwarz, K., 2003, DFT and the Concepts of the APW+lo method, 9 Th Wien2k Workshop, Vienna Üniv. of Technology, Austria.
- [24] Blöchl, P.E., Jepsen, O. and Andersen, O. K., 1994, *Phy. Rev. B* 49, 16223 p.
- [25] Ding-Sheng Wang,, 1998, *Phys. Rev. B* 59,6974 p.
- [26] Çalık, A. E. ve Ocak, H.Y., 2003, Dumlupınar Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Dergisi sayı:4, Kütahya, 105 s.
- [27] S.L. Qiu, P.M. Marcus, 1999, *Phys. Rev. B* 60,14533 p.
- [28] A.I. Licchtenstein, V.I. Anisimov, J. Zaanen,1995, *Phys. Rev. B* 52, 5467 p.
- [29] S.E. Kulkova, D.V. Valujski, Jai Sam Kim, Geunsik Lee and Y.M. Koo,2001, *Science Direct-Physica B* 322, 236 p.
- [30] G.y. Guo, Y.K. Wang, Li-Shing Hsu, 2002, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* 239, 91 p.
- [31] Wimmer, E., Krakauer, H., Weinert, M., Freeman, A. J., 1981, *Phys. Rev. B* 24, 864 p.
- [32] Andersen, O. K., 1975, *Phys. Rev. B* 12, 3060 p.
- [33] Sjöstedt, E., Nordström, L. and Singh, D. J., 2000, *Solid State Communications* 114, 15-20 p.
- [34] Koelling, D. D. and Arbman, G. D., 1975, *J. Phys. F* 5, 2041 p.
- [35] Singh, D. J., 1991, *Phys. Rev. B* 43, 6388 p.
- [36] Schwarz, K. and Blaha, P., 2003, *Computational Materials Science* 28, 259 p.
- [37] Liberman, D., Weber, J. T., and Cromer, D. T., 1965, *Phys. Rev.* 137A, 27 p.
- [38] Perdew, J. P. and Wang, Y., 1992, *Phys. Rev. B* 45, 13244 p.
- [39] Perdew, J.P., Chevary, J.A., Vosko, S.H., and Fiolhais, C., 1992, *Phys. Rev. B* 46, 6671p.
- [40] Schwarz, K., 2003, DFT and the Concepts of the APW+lo method, 9 Th Wien2k Workshop, Vienna Üniv. of Technology, Austria.
- [41] Blöchl, P.E., Jepsen, O. and Andersen, O. K., 1994, *Phy. Rev. B* 49, 16223 p.

KAYNAKLAR DİZİNİ(devamı)

- [42] Ding-Sheng Wang,, 1998, Phys. Rev. B 59,6974 p.
- [43] Wien2k Users Guide, November 2001, Peter Blaha, Karlheinz Schwarz, Georg Madsen, Dieter Kvasnicka, Joachim Luitz, Vienna University of Technology Inst.of Physical and Theoretical Chemistry Getreidemarkt 9/156, A-1060 Vienna/Austria
- [44] S.L. Qiu, P.M. Marcus, 1999, Phys. Rev. B 60,14533 p.
- [45] A.I. Licchtenstein, V.I. Anisimov, J. Zaanen,1995, Phys. Rev. B 52, 5467 p.
- [46] S.E. Kulkova, D.V. Valujski, Jai Sam Kim, Geunsik Lee and Y.M. Koo,2001, Science Direct-Physica B 322, 236 p.
- [47] G.y. Guo, Y.K. Wang, Li-Shing Hsu, 2002, Journal of Magnetism and Magnetic Materials 239, 91 p.
- [48] G.Y. Guo and H.H. Wang, 2000, Phys. Rev. B 62, 5136 p.