

**BAZI KRİSTALLERİN ELASTİK VE TİTREŞİM ÖZELLİKLERİNİN
VARSHNI POTANSİYEL FONKSİYONU İLE
İNCELENMESİ**

Mehmet Dinçer ŞAHMARAN

**YÜKSEK LİSANS TEZİ
FİZİK**

**GAZİ ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

**OCAK 2007
ANKARA**

**BAZI KRİSTALLERİN ELASTİK VE TİTREŞİM ÖZELLİKLERİNİN
VARSHNI POTANSİYEL FONKSİYONU İLE
İNCELENMESİ**

Mehmet Dinçer ŞAHMARAN

**YÜKSEK LİSANS TEZİ
FİZİK**

**GAZİ ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

**OCAK 2007
ANKARA**

Mehmet Dinçer ŞAHMARAN tarafından hazırlanan BAZI KRİSTALLERİN ELASTİK VE TİTREŞİM ÖZELLİKLERİNİN VARSHNI POTANSİYEL FONKSİYONU İLE İNCELENMESİ adlı bu tezin Yüksek Lisans tezi olarak uygun olduğunu onaylarım.

Yrd. Doç. Dr. Gökay UĞUR
Tez Yöneticisi

Bu çalışma, jürimiz tarafından oybirliği ile Fizik Anabilim Dalında Yüksek lisans tezi olarak kabul edilmiştir.

Başkan: : Prof. Dr. Kemal ÇOLAKOĞLU

Üye : Yrd. Doç. Dr. Gökay UĞUR

Üye : Prof. Dr. Bora ALKAN

Üye : Doç. Dr. Şemsettin ALTINDAL

Üye : Doç. Dr. Mehmet ÇAKMAK

Tarih : 31/01/2007

Bu tez, Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü tez yazım kurallarına uygundur.

TEZ BİLDİRİMİ

Tez içindeki bütün bilgilerin etik davranış ve akademik kurallar çerçevesinde elde edilerek sunulduğunu, ayrıca tez yazım kurallarına uygun olarak hazırlanan bu çalışmada orijinal olmayan her türlü kaynağa eksiksiz atıf yapıldığını bildiririm.

Mehmet Dinçer ŞAHMARAN

**BAZI KRİSTALLERİN ELASTİK VE TİTREŞİM ÖZELLİKLERİNİN
VARSHNI POTANSİYEL FONKSİYONU İLE İNCELENMESİ
(Yüksek Lisans Tezi)**

Mehmet Dinçer ŞAHMARAN

**GAZİ ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ
Ocak 2007**

ÖZET

Bu tezde, bazı fcc ve bcc metallerin örgü dinamiği Varshni Potansiyeli (VP) kullanılarak incelendi. İlk olarak; bazı fcc ve bcc metallerin Bulk modülünün basınçla değişiminin $\left(\frac{\partial B}{\partial P}\right)$, ikinci dereceden (c_{11}, c_{12}, c_{44}) ve üçüncü dereceden $(c_{111}, c_{112}, c_{123})$ elastik sabitleri gibi elastik özellikler, potansiyeli Girifalco-Weizer metoduna göre parametrize ederek incelendi. İkinci olarak; Ni ve Pd için VP'ni tanımlayan parametreler Halıcıoğlu ve Pamuk tarafından verilen metoda benzer bir yol takip edilerek hesaplandı. Ni-45%Pd alaşımının temel simetri yönleri boyunca fonon frekansları kuvvet sabitleri kullanılarak hesaplandı. Son olarak bazı metallerin VP'nin parametreleri Milstein tarafından tanımlanan metot takip edilerek belirlendi. Hesaplanan kuvvet sabitleri Ni'in fonon frekanslarının belirlenmesinde kullanıldı. Teorik sonuçlar, deneysel fonon dağılımları ile karşılaştırıldı.

Bilim Kodu :202.1.147
Anahtar Kelimeler :Elastik özellikler, fonon frekansları, ikinci ve üçüncü dereceden elastik sabitleri,
Sayfa Adedi : 57
Tez Yöneticisi :Yrd. Doç. Dr. Gökay UĞUR

**INVESTIGATION OF ELASTIC AND VIBRATIONAL PROPERTIES OF
SOME CRYSTAL WITH IN THE VARSHNI POTENTIAL FUNCTION**

(M.Sc. Thesis)

Mehmet Dinçer ŞAHMARAN

**GAZİ UNIVERSITY
INSTITUTE OF SCIENCE AND TECHNOLOGY**

January 2007

ABSTRACT

In this thesis, we have studied the lattice dynamics of some fcc and bcc metals by Varshni potentials (VP). Firstly, the elastic properties, such as the second-order (c_{11} , c_{12} , c_{44}), third-order elastic constants (c_{111} , c_{112} , c_{123}), the pressure derivatives of the bulk modulus $\left(\frac{\partial B}{\partial P}\right)$ for some fcc and bcc metals, the potential has been studied by parametrized according to Girifalco-Weizer methods. Secondly, the parameters defining the VP for Ni and Pd have been computed following a procedure similar to a method given by Hahcıoğlu and Pamuk. The phonon frequencies along the principal symmetry directions of Ni-45%Pd alloys have been calculated using the computed force constants. Finally, the parameters of the VP for some metals have been computed following the method defined by Milstein. The computed force constants have been used to calculate the phonon frequencies of Ni. The theoretical results have been compared to experimental phonon dispersion results.

Science Code : 202.1.147

**Key Words : Elastic properties, phonon frequencies, second and third-order
elastic constants**

Page Number : 57

Adviser : Asist. Prof. Dr. Gökay UĞUR

TEŞEKKÜR

Çalışmalarım boyunca değerli yardım ve katkılarıyla beni yönlendiren Hocam Yrd. Doç. Dr. Gökay UĞUR'a ayrıca manevi destekleriyle beni hiçbir zaman yalnız bırakmayan eşim ve oğluma teşekkürü bir borç bilirim.

DPT 2001 K 120590 kodlu ve "İleri Araştırma ve Eğitim Programları" başlıklı proje tarafından desteklenen bu tezin tamamlanmasında her türlü desteği veren proje yürütücüsü ve Fizik Bölüm Başkanı Sayın Prof. Dr. Süleyman ÖZÇELİK'e sonsuz teşekkür ederim.

İÇİNDEKİLER

	Sayfa
ÖZET	iv
ABSTRACT	v
TEŞEKKÜR	vi
İÇİNDEKİLER	vii
ÇİZELGELERİN LİSTESİ	ix
ŞEKİLLERİN LİSTESİ	xi
SİMGELER VE KISALTMALAR	xii
1. GİRİŞ	1
2. VARSHNI POTANSİYELİNİN GIRIFALCO METODU İLE PARAMETRİZE EDİLMESİ	3
2.1. Giriş	3
2.2. Potansiyel Parametrelerinin Hesaplanması	5
2.3. İkinci Dereceden Elastik Sabitleri	9
2.4. Üçüncü Dereceden Elastik Sabitleri	17
3. VARSHNI POTANSİYELİNİN TERMODİNAMİK KAVRAMLARLA PARAMETRİZE EDİLMESİ VE Ni-45%Pd ALAŞIMININ FONON FREKANSLARININ HESAPLANMASI	24
3.1. Giriş	24
3.2. Potansiyel Parametrelerinin Hesaplanması	24
3.3. İkinci Dereceden Elastik Sabitleri	29
3.4. Ni-45%Pd Alaşımının Fonon Frekanslarının Bulunması	29
4. VARSHNI POTANSİYELİNİN MILSTEIN METODU İLE PARAMETRİZE EDİLMESİ VE NİKEL'İN FONON FREKANSLARININ HESAPLANMASI	35

	Sayfa
4.1. Giriş	35
4.2. Potansiyel Parametrelerinin Hesaplanması.....	35
4.3. Nikel'in Fonon Frekanslarının Hesaplanması	37
5. SONUÇ VE ÖNERİLER	39
KAYNAKLAR.....	40
EKLER.....	43
EK-1. Bcc metaller için bilgisayar programları.....	44
EK-2. Fcc metaller için bilgisayar programları.....	51
ÖZGEÇMİŞ.....	57

ÇİZELGELERİN LİSTESİ

Çizelge	Sayfa
Çizelge 2.1. Bazı bcc metallerin örgü sabiti, bulk modülü ve kohesif enerjileri.....	7
Çizelge 2.2. Bazı fcc metallerin örgü sabiti, bulk modülü ve kohesif enerjileri.....	7
Çizelge 2.3. Bcc metallerin hesaplanan potansiyel parametreleri.....	8
Çizelge 2.4. Fcc metallerin hesaplanan potansiyel parametreleri.....	8
Çizelge 2.5. T=0 K’de bazı bcc metallerin c_{11} ve c_{12} değerleri (10^{11} dyn/cm ²).....	16
Çizelge 2.6. T=0 K’de bazı fcc metallerin c_{11} ve c_{12} değerleri (10^{11} dyn/cm ²).....	16
Çizelge 2.7. Bazı fcc ve bcc metallerin $c_{\alpha\beta\gamma}$ teorik ve deneysel değerleri.....	19
Çizelge 2.8. Fcc yapılarda komşu atom koordinatları.....	20
Çizelge 2.9. Bcc yapılarda komşu atom koordinatları.....	21
Çizelge 2.10. Bazı fcc ve bcc metallerin $\frac{\partial B}{\partial P}$ değerleri.....	22
Çizelge 3.1. T=298 K’de Ni ve Pd için potansiyel enerji fonksiyonunun hesaplanmasında kullanılan fiziksel sabitler.....	24
Çizelge 3.2. Ni ve Pd için T=298 K’de hesaplanan enerji değerleri.....	24
Çizelge 3.3. C_v ve $\left(\frac{\partial \phi(V)}{\partial V}\right)_p$ nin hesaplanan değerleri.....	25
Çizelge 3.4. Potansiyel parametreleri ve ikinci dereceden elastik sabitleri.....	28
Çizelge 3.5. Ni, Pd ve Ni-45%Pd alaşımı için radyal (α_i) ve açısall (β_i) kuvvet sabitleri	32
Çizelge 4.1. Parametrize işleminde kullanılan metallerin T=0 K’de örgü sabitleri, c_{11} , c_{12} , c_{11}/c_{12} değerleri.....	34
Çizelge 4.2. Milstein metodu için elde edilen potansiyel parametreleri.....	35

Çizelge	Sayfa
Çizelge 4.3. Nikel için radyal ve açısal kuvvet sabitleri.....	36

ŞEKİLLERİN LİSTESİ

Şekil	Sayfa
Şekil 3.1. Açısal kuvvet etkileşimleri.....	30
Şekil 3.1. Ni-45%Pd alaşımının $T=298\text{ K}$ ve $P=1\text{ atm}$ 'de fonon frekans eğrisi.....	33
Şekil 4.1. Nikel'in fonon frekans eğrisi	37

SİMGELER VE KISALTMALAR

Bu çalışmada kullanılmış bazı simgeler ve kısaltmalar, açıklamaları ile birlikte aşağıda verilmiştir.

Simgeler	Açıklama
$\phi(r)$	Etkileşim potansiyeli
r_{ij}	Konumları i ve j olan atomlar arasındaki mesafe
r_i	Denge mesafesi
β	Potansiyel sabiti
D_e	Ayrışma enerjisi
r_j	Her bir atomun orjine uzaklığı
a	Denge durumunda örgü sabitinin yarısı
B	Bulk modülü
$\frac{\partial B}{\partial P}$	Bulk modülünün basınçla değişimi
a_0	Örgü sabiti
c_{ij}	İkinci dereceden elastik sabitler
c_{ijk}	Üçüncü dereceden elastik sabitler
Kısaltmalar	Açıklama
DFT	Yoğunluk fonksiyonel teorisi
PEF	Potansiyel enerji fonksiyonu
VP	Varshni Potansiyeli

1. GİRİŞ

Yapısal ve dinamik özellikler örgü dinamiğinde hesaplanırken iki ayrı yaklaşımla incelenir. Bunlar kuantum mekaniksel yaklaşım ve alan kuvveti metotları olarak bilinir. Alan kuvveti metodu; daha çok moleküler biyoloji, DNA ve organik moleküllerin incelenmesinde kullanılmaktadır. 1970’li yıllardan sonra alan kuvveti metotları sıvıların dinamik davranışının simülasyonu ve makro moleküller için çok sık kullanılmaya başlandı [1,2].

Kuantum mekaniksel yaklaşım metodu termokimyasal, elektronik, optik ve manyetik özelliklerin araştırılmasında, alan kuvveti metoduna göre daha başarılıdır. Bu yaklaşım başlangıçta temel olarak yarı deneysel (semi-empirical) ve *ab-initio* metodu olmak üzere iki bölüme ayrılır. *Ab-initio* metodu yoğunluk fonksiyoneli teorisi (DFT) veya Hartree-Fock yaklaşımlarından birini kullanır. Bugüne kadar yapılan çalışmalar yoğunluk fonksiyoneli teorisinin, Hartree-Fock yaklaşımına göre daha güçlü bir metot olduğunu ortaya koymuştur [3].

Hartree varyasyonel metodunu kullanarak, çok-elektronlu sistemin Hamiltoniyen denklemini ifade etmiş ve çok-cisim dalga fonksiyonlarının formu hakkında bir varsayım yaparak çok-cisim dalga fonksiyonlarını tek elektron dalga fonksiyonlarının bir seti olarak üretmiştir [3]. Homojen, değişmeyen bir sistem içinde, bu dalga fonksiyonları basit düzlem dalgalar olarak alınabilir. Bu varsayımın yapılmasıyla değişim ilkelerini kullanmak mümkün olmaktadır. Toplam enerjiyi minimize eden parametreler aynı zamanda sistemin taban durum özelliklerini oldukça doğru bir şekilde açıklayan parametre değerlerinin bir setidir.

Hartree-Fock yaklaşımı ise anti-simetrik dalga fonksiyonlarını kullanarak tek-elektron dalga fonksiyonlarından, çok-elektron dalga fonksiyonunu Hartree teorisinden daha iyi ifade etmiştir [3]. Bu yaklaşımda dalga fonksiyonu, Hartree dalga fonksiyonundan daha karmaşıktır. Fakat bu fonksiyon Slater determinantı ile tanımlanabilir.

Yoğunluk fonksiyoneli teorisi; herhangi bir Schrödinger denkleminin çözümü dışında, temel durum özelliklerini açıklamak için teorik bir çerçevedir. Elektronların etkileştiği bir sistemde çok-cisimli dalga fonksiyonunun hesaplanması elektronların sayılarının az olmasıyla tanımlanabilir [4]. Çok-cisim dalga fonksiyonlarını hesaplamak oldukça zordur. Ancak bu zorluğu aşmanın bir yolu, tanımlanan nicelikleri elektron yoğunluğunun bir fonksiyonu olarak yazmaktır. DFT içinde genellikle Kohn-Sham denklemleri kullanılır [5]. Bu denklemler etkin bir potansiyel içinde hareket eden bağımsız parçacıkları açıklar. Bu şekilde DFT, Kohn-Sham elektronları denilen etkileşmeyen hayali bir sistem üzerinde etkileşen gerçek bir sistemin açıklanmasını sağlayan Kohn-Sham denklemlerini hesaba katar. Elektron-elektron etkileşmesi (Coulomb potansiyeli) bilinmesi nedeniyle çok-elektronlu kuantum mekaniksel sistemin Hamiltonyen operatörü, elektronların hareketiyle tanımlanan bir dış potansiyelle açıklanır. Problemin en temel yaklaşımı Schrödinger denkleminin tam olarak çözümünü elde etmektir. Yoğunluk fonksiyoneli teorisini kuran Hohenberg ve Kohn teoremi, temel durum elektron yoğunluğu ve dış potansiyel arasındaki ilişkiyi açıklar [6].

Bu tez çalışmasında kullanılan yarı deneysel metot üzerindeki teorik örgü dinamiği çalışmaları, bazı elementlerin elastik sabitleri ve öz ısılarının hesaplamaları ile başlamıştır [7,8]. Bu çalışmalarda genellikle kuvvet sabiti metotları kullanılmıştır. Bu metotlar arasında Merkezi İkili Etkileşim Potansiyeli, Genel Tensor Kuvveti, de Launay Açısal Kuvvet, Eksensel Simetrik ve Clark-Gazis-Wallis sayılabilir [9–12]. Ayrıca iyon-elektron etkileşmelerini de içine alan bir çok modele literatürde rastlanabilir [13-19].

Bu tez çalışmasında Varshni tarafından tanımlanan potansiyel kullanılarak; Girifalco, Milstein ve termodinamik metotlar kullanılarak bazı fcc ve bcc metallerin örgü dinamiği incelemeleri yapıldı [20-24].

2.VARSHNI POTANSİYELİNİN GIRIFALCO METODU İLE PARAMETRİZE EDİLMESİ

2.1. Giriş

Aralarında r kadar uzaklık bulunan iki atomun etkileşim enerjisi $\phi(r)$ ile gösterilir. $\phi(r)$ 'ye ikili etkileşim potansiyeli de denir. Kararlı kristallerde, $r = r_e$ 'de kuvvet minimum ve $-\partial\phi(r)/\partial r$ büyük mesafelerde çekici, küçük mesafelerde itici olmalıdır. Uzun mesafelerde çekici kuvvetin olması ise kristalin hacminin kendisini oluşturan atom veya iyonların hacminden büyük olmasından anlaşılır. Kristalin kohesif enerjisi sonlu bir değerde olduğundan, ikili etkileşim potansiyeli $\phi(r)$ 'nin r 'ye göre azalması r^{-3} 'den daha hızlı olmalıdır.

Bu çalışmada atomlar arası itici ve çekici etkileşmelerin üstel olarak değiştiği farzedilmiş ve

$$\phi(r_{ij}) = D_e \left[\left(\frac{r_e}{r_{ij}} \right)^2 \exp \left(2(-\beta(r_{ij}^2 - r_e^2)) \right) - 2 \left(\frac{r_e}{r_{ij}} \right) \exp(-\beta(r_{ij}^2 - r_e^2)) \right] \quad (2.1)$$

VP enerji fonksiyonu kullanılmıştır [20]. Burada r_{ij} ; konumları i ve j olan iki atom arasındaki mesafe, r_e ise denge mesafesidir. β birimi (cm^{-2}) olan potansiyel sabitidir. Potansiyelin $r_{ij} = r_e$ 'de değeri;

$$\phi(r_{ij} = r_e) = -D_e \quad (2.2)$$

olur. $-D_e$ 'ye ayrışma enerjisi denir. Sonuç olarak potansiyelde tayin edilmesi gereken üç parametre vardır. Bunlar sırası ile D_e , r_e ve β 'dir. Potansiyeldeki bu sabitleri bulmak için Girifalco Metodu izlenmiştir [21]. Potansiyeldeki parametrize

işlemleri kristaldeki atom koordinatları üzerinden yapılmış ve atom başına kohesif enerjisi:

$$\phi(r_{ij}) = \frac{D_e}{2} \left[\sum_{l_1} \sum_{l_2} \sum_{l_3} \left(\left(\frac{r_e}{r_j} \right)^2 \exp(-2\beta(r_j - r_e)^2) - 2 \left(\frac{r_e}{r_j} \right) \exp(-\beta(r_j^2 - r_e^2)) \right) \right] \quad (2.3)$$

dir. Buradaki toplam; kristaldeki bütün atomlar üzerindendir. $(1/2)$ katsayısı aynı ikili etkileşimleri tekrarlamamak için konulmuştur. Potansiyeldeki r_e/r_j terimi özellikle yakın komşuluklarda etkisini gösterir. r_j her bir atomun orjine uzaklığıdır. r_j atom koordinatları cinsinden:

$$r_j = (l_1^2 + l_2^2 + l_3^2)^{1/2} a = M_j a \quad (2.4)$$

şeklindedir. Burada $M_j = (l_1^2 + l_2^2 + l_3^2)^{1/2}$ 'dir. l_1, l_2, l_3 atomların örgüdeki koordinatları, a denge durumundaki örgü sabitinin yarısını ifade eder. Fcc yapılarda $l_1 + l_2 + l_3$ toplamı çift, bcc yapılarda ise l_1, l_2, l_3 değerlerinin ya hepsi çift ya da hepsi tek olmalıdır. Yalnız $l_1 = l_2 = l_3 = 0$ bu toplamların dışındadır. Potansiyelde $Q = \exp(\beta r_e^2)$ olmak üzere yeniden düzenlenirse,

$$\phi = \frac{D_e}{2} \left[\sum_{l_1} \sum_{l_2} \sum_{l_3} \left(\left(\frac{r_e}{r} \right)^2 Q^2 \exp(-2\beta r^2) - 2 \left(\frac{r_e}{r} \right) Q \exp(-\beta r^2) \right) \right] \quad (2.5)$$

şeklinde yazılabilir. $P=0$ atm'de kristalin titreşim enerjisi olmadığından kristalin iç enerjisi:

$$U(a_0) = \phi(a_0) \quad (2.6)$$

olarak alınır [21]. Burada $\phi(a_0)$; $T=0$ K'de ve $P=0$ atm'de kristalin kohesif enerjisidir. Kristalin atom başına kohesif enerjisi örgü koordinatları cinsinden:

$$\phi(a_0) = \frac{D_e}{2} \left[\sum_{l_1} \sum_{l_2} \sum_{l_3} \left(\left(\frac{r_e}{M_j a} \right)^2 Q^2 \exp(-2\beta(M_j a)^2) - 2 \left(\frac{r_e}{M_j a} \right) Q \exp(-\beta(M_j a)^2) \right) \right] \quad (2.7)$$

olarak verilir.

2.2. Potansiyel Parametrelerinin Hesaplanması

Kristal örgünün denge şartı:

$$(d\phi/da)_{a=a_0} = 0 \quad (2.8)$$

dan,

$$\begin{aligned} \left(\frac{d\phi}{da} \right)_{a=a_0} = & -\frac{D_e}{2} \sum_{l_1} \sum_{l_2} \sum_{l_3} \left(\frac{r_e}{a} \right)^2 Q^2 \left[\frac{(2M_j)^{-2}}{a} + 4\beta a \right] \exp(-2\beta(M_j a)^2) \\ & + \frac{D_e}{2} \sum_{l_1} \sum_{l_2} \sum_{l_3} \left(\frac{r_e}{a} \right) Q \left[2(M_j a)^{-1} + 4\beta M_j a \right] \exp(-\beta(M_j a)^2) = 0 \end{aligned} \quad (2.9)$$

elde edilir. $X = \left(\frac{r_e}{a_0} \right) \cdot Q$ olmak üzere,

$$X = \frac{\sum_{l_1} \sum_{l_2} \sum_{l_3} \left[(M_j a_0)^{-1} + 2\beta(M_j a_0) \right] \exp(-\beta(M_j a_0)^2)}{\sum_{l_1} \sum_{l_2} \sum_{l_3} \left[(M_j)^{-2} a_0^{-1} + 2\beta a_0 \right] \exp(-2\beta(M_j a_0)^2)} \quad (2.10)$$

elde edilir. X burada birimsiz bir sabittir. Böylece denge mesafesi r_e ve Q 'yu birbirine bağlayan bir bağıntı elde edilmiş olur.

$\beta a_0^2 = \alpha$ olmak üzere,

$$X = \sum_{l_1} \sum_{l_2} \sum_{l_3} \frac{\left[(M_j)^{-1} + 2\alpha M_j \right] \exp(-M_j^2 \alpha)}{\left[(M_j)^{-2} + 2\alpha \right] \exp(-2M_j^2 \alpha)} \quad (2.11)$$

bulunur. D_e ayrışma enerjisi ise, kristalin atom başına kohesif enerjisinden

$$D_e = \frac{2\phi(a_0)}{\sum_{l_1} \sum_{l_2} \sum_{l_3} \left[\frac{X^2}{M_j^2} \exp(-2\beta(M_j a_0)^2) - \frac{2X}{M_j} \exp(-2\beta(M_j a_0)^2) \right]} \quad (2.12)$$

hesaplanır. Böylece D_e ayrışma enerjisini X 'e ve β 'ya bağlayan bir bağıntı elde edilir. Üçüncü bağıntı ise;

$$B = \frac{1}{(9ca_0)} \left[\frac{d^2 \phi}{da^2} \right]_{(a=a_0)} \quad (2.13)$$

eşitliğinden elde edilir. Burada B ; T=0 K'de ve P=0 atm'deki bulk modülüdür ve c; bir sabit olup fcc'ler için 2, bcc'ler için 4'tür. Potansiyelimiz bağıntıya uygulanırsa;

$$B = \frac{D_e}{18ca_0} \left[\sum_{l_1} \sum_{l_2} \sum_{l_3} X^2 \exp(-2M_j^2 \alpha) \left(\frac{6}{M_j^2 a^2} + \frac{12\alpha}{a^2} + \frac{6M_j \alpha^2}{a^2} \right) - \sum_{l_1} \sum_{l_2} \sum_{l_3} X \exp(-M_j^2 \alpha) \left(\frac{4}{M_j^2 a^2} + \frac{4M_j \alpha}{a^2} + \frac{8XM_j^3 \alpha^2}{a^2} \right) \right] \quad (2.14)$$

elde edilir. Bulk modülü bağıntısından her bir metal için uygun α değeri bulunarak $\beta a_0^2 = \alpha$ bağıntısında β değerleri elde edilmiştir. Hesaplanan α değerlerinden ikinci olarak X değerleri hesaplanmış ve elde edilen X değerlerinden r_e değerlerine geçilmiştir. Son olarak X ve β değerleri Eş. 2.12'de yerine konarak D_e ayrışma

enerjileri hesaplanmıştır. Bu işlemler yapılırken kullanılan bulk modülü, kohesif enerji ve örgü sabitleri Çizelge 2.1 ve Çizelge 2.2’de verilmiştir. Hesaplamalar fcc metallerde 176 atom bcc metallerde ise 168 atom için yapılmış ve Basic dilinde yazılmış programlar kullanılmıştır. Bu programlar EK-1 ve EK-2’de verilmiştir.

Çizelge 2.1. Bazı bcc metallerin deneysel örgü sabiti, bulk modülü ve kohesif enerjileri [25]

Metalin Adı	Örgü Sabitleri (Å)	Bulk Modülü (10^{11} N/cm ²)	Kohesif Enerji (eV/atom)
Li	3,491	0,116	1,63
K	5,225	0,032	0,934
Rb	5,585	0,031	0,852
Cs	6,045	0,020	0,804
Na	4,225	0,068	1,113
Ta	3,300	2,000	8,100
V	3,030	1,619	5,310
Nb	3,300	1,702	7,570
Fe	2,870	1,683	4,280

Çizelge 2.2. Bazı fcc metallerin deneysel örgü sabiti, bulk modülü ve kohesif enerjileri [25]

Metalin Adı	Örgü Sabitleri (Å)	Bulk Modülü (10^{11} N/cm ²)	Kohesif Enerji (eV/atom)
Al	4,05	0,722	3,39
Ni	3,52	1,860	4,44
Ag	4,09	1,007	2,95
Cu	3,61	1,370	3,49
Au	4,08	1,732	3,81
Pd	3,89	1,808	3,89
Ca	5,58	0,152	1,84

Elde edilen β , D_e , r_e , X ve α parametreleri bcc ve fcc metaller için sırasıyla Çizelge 2.3 ve Çizelge 2.4'te verilmiştir.

Çizelge 2.3. Bcc metaller için hesaplanan potansiyel parametreleri

Metal Adı	X	D_e 10^{-12} (erg)	α	β 10^{14} (cm ⁻²)	r_e (Å)
Li	5,191656	0,0511531	0,04000	1,312866	5,805620
K	7,265618	0,1320797	0,24120	3,378320	5,926403
Rb	7,645618	0,1394526	0,30000	3,847113	5,814609
Cs	7,346077	0,1188584	0,25700	2,813199	6,576556
Na	7,140514	0,1405896	0,20750	4,509865	4,987737
Ta	8,761451	1,5628810	0,39450	14,49035	3,211947
V	8,573598	1,0044788	0,38186	16,63715	2,976030
Nb	8,381739	1,4026560	0,36800	13,51699	3,267211
Fe	8,979580	0,8410109	0,40822	19,82406	2,781840

Çizelge 2.4. Fcc metaller için hesaplanan potansiyel parametreleri

Metal Adı	X	D_e 10^{-12} (erg)	α	β 10^{14} (cm ⁻²)	r_e (Å)
Al	6,308116	0,5899505	0,527045	12,8527964	3,259769
Ni	7,094876	0,8658177	0,644779	20,7706001	2,712276
Ag	8,250062	0,6243804	0,763839	18,2648834	3,057896
Cu	7,141144	0,6828425	0,650430	19,9197650	2,777008
Au	10,32537	0,8702542	0,9142999	21,9699150	2,982804
Pd	9,283806	0,8632261	0,8456199	22,3530099	2,846634
Ca	6,335589	0,3230104	0,5321699	6,83662000	4,480552

Çizelge 2.3 ve Çizelge 2.4 incelenirse ayrışma enerjisi değerleri fcc metaller için büyük, bcc metaller de ise denge mesafeleri büyüktür. Bunun nedeni fcc metallerin bcc metallere göre daha sıkı paketli olmasıdır. β parametresi bulk modülü ile

doğrudan ilişkilidir. Bulk modülü büyük olan metallerde β parametresi daha büyüktür. Elde edilen değerler fcc ve bcc metallerin yapıları ile uyum içindedir. Bu değerler potansiyelin ikinci mertebeden elastik sabitleri, üçüncü dereceden elastik sabitleri ve bulk modülünün basınçla değişiminde kullanılmıştır.

2.3. İkinci Dereceden Elastik Sabitleri

İkili-etkileşim potansiyel fonksiyonlarının uygulanabildiği alanlardan birisi de kristallerin kararlılığının araştırılmasıdır. Kristal örgünün kararlı olup olmadığı Born'un kararlılık kriterine göre incelenebilmektedir. İkili-etkileşimlerin oluşturduğu merkezi kuvvetler için Born, yüzey merkezli kübik kristallerin tamamen kararlı ve basit kübik örgülerin kararsız olduğunu gösterdi [26].

Girifalco ve Weizer kübik metallerin kararlılığını klasik Morse potansiyeli ile incelediler [21]. Yaptıkları çalışmada, seçtikleri metallerin Born kararlılık kriterini sağladığını gösterdiler. Çalışmalarında ikinci dereceden elastik sabitlerini 10^3 atom için hesapladılar. Hesaplamalarda bütün metaller $c_{11} > c_{12} > 0$, $c_{11} + 2c_{12} > 0$, $c_{11} - c_{12} > 0$, $c_{44} > 0$ şartlarını sağladı.

Benzer bir çalışmayı Lincoln, Koliwad ve Ghate fcc metallerde 176 atom, bcc metallerde 168 atom için yaptılar. Onlar da kullandıkları metallerin $c_{11} > c_{12} > 0$ şartını sağladığını göstermişlerdir. Ayrıca bu grup, üçüncü dereceden elastik sabitlerini, ikinci dereceden elastik sabitlerinin basınçla değişimini ve bulk modülün basınçla değişimini hesaplamıştır [27].

İlk iki çalışma $T=0$ K'de yapılmıştır. Pamuk ve Halıcıoğlu ise $T=298$ K'de aynı tür çalışmayı 10^4 atom için termodinamik kavramlar kullanarak yaptılar. Onlar çalışmalarında titreşim enerjisini de kullandılar [24]. Kullandıkları bazı fcc ve bcc metallerin $T=298$ K'de Born kararlılık kriterini sağladığını gösterdiler.

Maddelerin esneklik özelliklerini ve ses dalgalarının bu maddeler içerisinde yayılmasını inceleyebilmek için Hooke yasasını ifade etmemiz gerekmektedir. σ_{ij} zor tensörü ve e_{kl} zorlanma tensörü, ikinci mertebeden tensörler olmak üzere Hooke yasası aşağıdaki şekilde ifade edilir:

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl} e_{kl} \quad (i, j, k, l = 1, 2, 3) \quad (2.15)$$

Burada C_{ijkl} , sertlik (esneklik) katsayısı adını alıp, 81 elemanlı dördüncü mertebeden bir tensördür. e_{kl} maddedeki zorlanmayı verir. e_{kl} tensörünün simetrik özelliğinden dolayı, sadece altı tane bağımsız elemanı vardır. Zor tensörü simetrik bir tensördür ($\sigma_{ij} = \sigma_{ji}$). Bu yüzden, bir noktadaki zor tensörü bağımsız altı bileşene indirgenir. Bu tensör, hacmi sıfıra giden birim kübün birim yüzeyine dik olarak etkiyen kuvvet terimleri cinsinden ifade edilebilir. Herhangi bir zor vektörünün bileşenlerinin altındaki indislerden ilki, o bileşenin bulunduğu düzleme dik olan eksen, ikinci indis ise zor bileşeninin doğrultusunun hangi eksene paralel olduğunu gösterir. Bu şartlar altında Eş. 2.15'den, σ_{ij} ve e_{kl} 'nin simetrisinden dolayı C_{ijkl} 'nin 81 bileşeni yerine en fazla 36 tane bağımsız esneklik sabiti elde edilir. Bu durumda esneklik sabitleri tensörü, çok daha kısa ve öz olan iki indisli bir gösterimle temsil edilir. Böylece C_{ijkl} ($i, j, k, l = 1, 2, 3$) tensörü C_{ij} ($i, j = 1, 2, \dots, 6$) matrisi ile ifade edilir. Ayrıca bu düzene göre σ_{ij} ve e_{kl} 'de matris gösterimine çevrilebilir;

$$\sigma_i = C_{ij} e_j \quad (i, j = 1, 2, \dots, 6) \quad (2.16)$$

Bu eşitlik Hooke yasasının matris temsilidir. Bir kristalin potansiyel enerjisi ϕ 'yi zorlanma tensörünün bileşenleri cinsinden Taylor serine açarsak,

$$\begin{aligned} \Delta\phi = \phi - \phi_0 = & \left(\frac{\partial\phi}{\partial e_{ij}} \right) \bigg|_0 e_{ij} + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2\phi}{\partial e_{ij} \partial e_{kl}} \right) \bigg|_0 e_{ij} e_{kl} \\ & + \frac{1}{6} \left(\frac{\partial^3\phi}{\partial e_{ij} \partial e_{kl} \partial e_{mn}} \right) \bigg|_0 e_{ij} e_{kl} e_{mn} + \dots \end{aligned} \quad (2.17)$$

ifadesini elde ederiz. Burada ϕ_0 , kristalin denge durumundaki potansiyel enerjisi ve $\Delta\phi$, denge durumu ile zorlanma olduğu durum arasındaki potansiyel enerji değişimidir. Denge durumu civarındaki zorlanmalarda, $\left(\frac{\partial\phi}{\partial e_{ij}}\right)\bigg|_0$ ifadesi ihmal edilebilir. Küçük yer değiştirmelerde ise $e_{ij} e_{kl} e_{mn}$ 'yi ihtiva eden ve daha yüksek dereceden terimler ihmal edilebilir. Denge durumu civarındaki yer değiştirmede $\Delta\phi$ pozitif olmalıdır. Bu durum, Eş. 2.17'in sağ tarafının mutlaka pozitif ve ikinci dereceden formda olmasını gerektirir. Buradan

$$\left(\frac{\partial^2\phi}{\partial e_{ij}\partial e_{kl}}\right)\bigg|_0 = \left(\frac{\partial^2\phi}{\partial e_{kl}\partial e_{ij}}\right)\bigg|_0 \quad (2.18)$$

sonucu elde edilir. σ_{ij} zorunun uygulanışı sırasında yapılan iş miktarı ΔW , zorlanma tensörü e_{ij} cinsinden

$$\Delta W = \frac{1}{2} \sigma_{ij} e_{ij} \quad (2.19)$$

şeklinde yazılabilir. Eğer zorlanma olayı adyabatik, izotermal ve tersinir olarak meydana gelirse, zorlanma sırasında yapılan ΔW işi sistemin serbest enerjisindeki $\Delta\phi$ değişimine eşit olur. Bu durumda,

$$\Delta W = \Delta\phi \quad (2.20)$$

$$\frac{1}{2} \sigma_{ij} e_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2\phi}{\partial e_{ij}\partial e_{kl}}\right)\bigg|_0 e_{ij} e_{kl} \quad (2.21)$$

$$\sigma_{ij} = \left(\frac{\partial^2\phi}{\partial e_{ij}\partial e_{kl}}\right)\bigg|_0 e_{kl} \quad (2.22)$$

sonucu elde edilir. Eş. 2.22 Hooke yasası ile karşılaştırarak ve Eş. 2.18'de göz önüne alarak,

$$C_{ijkl} = \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial e_{ij} \partial e_{kl}} \right) \bigg|_0 = C_{klij} \quad (2.23)$$

sonucu bulunur. Bu ifade, esneklik sabitleri ihtiva eden 15 tane başka eşitlik verir ve bağımsız esneklik sabitlerin maksimum sayısı 21'e indirgenmiş olur. Dikkat edilirse, esneklik sabitleri tensörü C_{ijkl} , kristalin potansiyel enerji fonksiyonuna bağlıdır ve Eş. 2.23 dördüncü mertebeden esneklik sabitleri verir. Taylor serisi açılımındaki üçüncü terim de, altıncı mertebeden esneklik sabitlerinin elde edilmesine sebebiyet verir ki bunlarda atomlar arasındaki kuvvetlerin anharmonik şeklinin ölçümelerini veya onların ideal Hooke yasasına uyan katılarda harmonik formdan olan sapmalarını verir.

Born'un kararlılık kriteri şöyledir: Bir kristal örgünün mekanik olarak kararlı olması için ikinci dereceden elastik sabitlerinin oluşturduğu matrisin birbirini izleyen determinantları pozitif olmalıdır.

Bir kristalin ikinci mertebeden elastik sabitlerinin oluşturduğu matris:

$$\begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} & c_{14} & c_{15} & c_{16} \\ c_{21} & c_{22} & c_{23} & c_{24} & c_{25} & c_{26} \\ c_{31} & c_{32} & c_{33} & c_{34} & c_{35} & c_{36} \\ c_{41} & c_{42} & c_{43} & c_{44} & c_{45} & c_{46} \\ c_{51} & c_{52} & c_{53} & c_{54} & c_{55} & c_{56} \\ c_{61} & c_{62} & c_{63} & c_{64} & c_{65} & c_{66} \end{pmatrix} \quad (2.24)$$

biçimindedir. Kübik kristallerde merkezi kuvvet etkileşimleri için elastik sabitleri sayısı üçe iner. Bunlar c_{11} , c_{12} ve c_{44} 'tür. Cauchy bağıntısı $c_{12} = c_{44}$ ifadesinden, bağımsız elastik sabiti sayısı ikiye iner. Matris ise:

$$\begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{12} & 0 & 0 & 0 \\ c_{12} & c_{11} & c_{12} & 0 & 0 & 0 \\ c_{12} & c_{12} & c_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c_{12} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_{12} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c_{12} \end{pmatrix} \quad (2.25)$$

biçimini alır. Matrisin birbirini izleyen determinantları ise c_{12} , c_{12}^2 , c_{12}^3 , $c_{11}c_{12}^3$, $c_{12}^3(c_{11}^2 - c_{12}^2)$, c_{12}^3 ve $(c_{11} - c_{12})^2(c_{11} + 2c_{12})$ 'dir. Birinci ve üçüncü terimlerin pozitif olması için $c_{12} > 0$ olmalıdır. Dördüncü terimin pozitif olması için $c_{11} - c_{12} > 0$ olmalıdır. Dolayısıyla Born'un kararlılık kriteri

$$c_{11} > 0, c_{12} > 0, c_{11} > c_{12} \quad (2.26)$$

olarak ifade edilir.

Bu çalışmada Eş. 2.1'deki potansiyel fonksiyonu için bazı fcc ve bcc metallerin Eş. 2.26'yı sağlayıp sağlamadıkları araştırılmıştır. Hesaplanan c_{11} , c_{12} değerleri deneysel değerlerle ve daha önce yapılan teorik çalışmalarla karşılaştırılmıştır.

Born, kübik kristaller için ikinci mertebe elastik sabitlerinin ikili-etkileşim potansiyellerine bağlı olarak:

$$c_{11} = \frac{2a^4}{V_0} \sum_{l_1} \sum_{l_2} \sum_{l_3} l_1^4 \frac{d^2\phi}{(dr^2)^2} \quad (2.27)$$

$$c_{12} = \frac{2a^4}{V_0} \sum_{l_1} \sum_{l_2} \sum_{l_3} l_1^2 l_2^2 \frac{d^2\phi}{(dr^2)^2} \quad (2.28)$$

şeklinde verilebileceğini gösterdi [26]. İfadelerdeki a ; örgü parametresinin yarısı, V_0 ; birim hücre hacmidir. Toplamlar, kristaldeki atomların koordinatları üzerindendir. Türevleri ise potansiyel fonksiyonunun r^2 'ye göre ikinci türevidir. r^2 'ye göre türevi r cinsinden ifade edersek;

$$\frac{d}{dr^2} \left(\frac{d\phi}{dr^2} \right) = \frac{dr}{dr^2} \frac{d}{dr} \left(\frac{dr}{dr^2} \frac{d\phi}{dr} \right) = \frac{1}{4r} \frac{d}{dr} \left(\frac{1}{r} \frac{d\phi}{dr} \right) \quad (2.29)$$

olur. Buradan c_{11} ve c_{12} ifadeleri,

$$c_{11} = \frac{a^4}{2V_0} \sum_{l_1} \sum_{l_2} \sum_{l_3} l_1^4 \frac{1}{r} \frac{d}{dr} \left(\frac{1}{r} \frac{d\phi}{dr} \right) \quad (2.30)$$

$$c_{12} = \frac{a^4}{2V_0} \sum_{l_1} \sum_{l_2} \sum_{l_3} l_1^2 l_2^2 \frac{1}{r} \frac{d}{dr} \left(\frac{1}{r} \frac{d\phi}{dr} \right) \quad (2.31)$$

elde edilir. Potansiyel fonksiyonunu bu ifadelere uygularsak;

$$\begin{aligned} \frac{d\phi}{dr} = & \left(2\beta D_e r_e Q + \frac{D_e r_e Q}{r^2} \right) \exp(-\beta r^2) + \\ & \left(-\frac{4\beta D_e r_e^2 Q^2}{r} - \frac{2D_e r_e^2 Q^2}{r^3} \right) \exp(-2\beta r^2) \end{aligned} \quad (2.32)$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{r} \frac{d\phi}{dr} = & \left(\frac{2\beta D_e r_e Q}{r} + \frac{D_e r_e Q}{r^3} \right) \exp(-\beta r^2) + \\ & \left(-\frac{4\beta D_e r_e^2 Q^2}{r^2} - \frac{2D_e r_e^2 Q^2}{r^4} \right) \exp(-2\beta r^2) \end{aligned} \quad (2.33)$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dr} \left(\frac{1}{r} \frac{d\phi}{dr} \right) &= 8D_e r_e^2 Q^2 \left(\frac{2\beta^2 r^4 + 2\beta r^2 + 1}{r^5} \right) \exp(-2\beta r^2) \\ &\quad - 2D_e r_e Q \left(\frac{4\beta^2 r^4 + 4\beta r^2 + 3}{r^4} \right) \exp(-\beta r^2) \end{aligned} \quad (2.34)$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{r} \frac{d\phi}{dr} \left(\frac{1}{r} \frac{d\phi}{dr} \right) &= 8D_e r_e^2 Q^2 \left(\frac{2\beta^2 r^4 + 2\beta r^2 + 1}{r^6} \right) \exp(-2\beta r^2) \\ &\quad - 2D_e r_e Q \left(\frac{4\beta^2 r^4 + 4\beta r^2 + 3}{r^5} \right) \exp(-\beta r^2) \end{aligned} \quad (2.35)$$

Eş. 2.7’de verilen potansiyelin türevleri alınınca c_{11} ve c_{12} ifadeleri atom koordinatları cinsinden,

$$\begin{aligned} c_{11} &= \frac{4a^4}{V_0} \sum_{l_1} \sum_{l_2} \sum_{l_3} l_1^4 D_e r_e^2 Q^2 \left(\frac{2\beta^2 r^4 + 2\beta r^2 + 1}{r^6} \right) \exp(-2\beta r^2) \\ &\quad - \frac{a^4}{V_0} \sum_{l_1} \sum_{l_2} \sum_{l_3} l_1^4 D_e r_e Q \left(\frac{4\beta^2 r^4 + 4\beta r^2 + 3}{r^5} \right) \exp(-\beta r^2) \end{aligned} \quad (2.36)$$

$$\begin{aligned} c_{12} &= \frac{4a^4}{V_0} \sum_{l_1} \sum_{l_2} \sum_{l_3} l_1^2 l_2^2 D_e r_e^2 Q^2 \left(\frac{2\beta^2 r^4 + 2\beta r^2 + 1}{r^6} \right) \exp(-2\beta r^2) \\ &\quad - \frac{a^4}{V_0} \sum_{l_1} \sum_{l_2} \sum_{l_3} l_1^2 l_2^2 D_e r_e Q \left(\frac{4\beta^2 r^4 + 4\beta r^2 + 3}{r^5} \right) \exp(-\beta r^2) \end{aligned} \quad (2.37)$$

elde edilir. Çizelge 2.3 ve Çizelge 2.4’te verilen potansiyel parametreleri kullanılarak Eş. 2.36 ve Eş. 2.37’den hesaplanan ikinci dereceden elastik sabitleri bcc metaller için Çizelge 2.5’te ve fcc metaller için Çizelge 2.6’da verilmiştir. Hesaplamalarda kullanılan programlar EK-1 ve EK-2’de verilmiştir.

Çizelge 2.5. T=0 K’de bazı bcc metallerin c_{11} ve c_{12} değerleri (10^{10} N/cm²)

Metal Adı	Bu Çalışma		Deneysel [28,29,30]		Teorik [21]	
	c_{11}	$c_{12} = c_{44}$	c_{11}	c_{12}	c_{11}	c_{12}
Li	0,1900	0,0770	0,1430	0,1200	--	--
K	0,0369	0,0295	0,0415	0,0340	0,0345	0,0282
Rb	0,0349	0,0290	0,0312	0,0262	0,0233	0,0187
Cs	0,0228	0,0185	0,0247	0,0206	0,0180	0,0146
Na	0,0807	0,0616	0,0816	0,0679	0,0712	0,0578
Ta	2,0870	1,8370	2,6090	1,5740	--	--
V	1,7890	1,5330	2,2800	1,1880	--	--
Nb	1,8880	1,6080	2,4600	1,3400	--	--
Fe	1,8430	1,6012	2,3300	1,3550	1,8586	1,6735

Çizelge 2.6. T=0 K’de bazı fcc metallerin c_{11} ve c_{12} değerleri (10^{10} N/cm²)

Metal Adı	Bu Çalışma		Deneysel [28,29,30]		Teorik [21]	
	c_{11}	$c_{12} = c_{44}$	c_{11}	c_{12}	c_{11}	c_{12}
Al	0,850	0,653	1,143	0,619	0,9396	0,6721
Cu	1,659	1,122	1,685	1,215	1,7424	1,2309
Ni	2,250	1,664	2,508	1,508	2,3292	1,6348
Au	2,221	1,496	2,016	1,697	--	--
Ag	1,249	0,886	1,240	0,936	1,3239	0,8959
Pd	1,953	1,394	2,341	1,761	--	--
Ca	0,187	0,137	0,278	0,182	0,2079	0,1509

2.4. Üçüncü Dereceden Elastik Sabitleri

Kübik kristallerde merkezi kuvvet etkileşimleri altında üçüncü dereceden altı tane elastik sabiti vardır. Bunlar c_{111} , c_{112} , c_{456} , c_{144} , c_{166} 'dır. Cauchy bağıntıları; $c_{112} = c_{166}$ ve $c_{123} = c_{456} = c_{144}$ kullanılırsa bağımsız üçüncü dereceden elastik sabiti sayısı üçe iner [26];

$$c_{111} = \frac{a^6}{2V_0} \sum_{l_1} \sum_{l_2} \sum_{l_3} l_1^6 D_1 D_1 D_1 \phi \quad (2.38)$$

$$c_{112} = \frac{a^6}{2V_0} \sum_{l_1} \sum_{l_2} \sum_{l_3} l_1^4 l_2^2 D_1 D_1 D_1 \phi \quad (2.39)$$

$$c_{123} = \frac{a^6}{2V_0} \sum_{l_1} \sum_{l_2} \sum_{l_3} l_1^2 l_2^2 l_3^2 D_1 D_1 D_1 \phi \quad (2.40)$$

Eşitliklerdeki D_1 operatörü

$$D_1 = \frac{1}{r} \frac{d}{dr} \quad (2.41)$$

biçimindedir. Eş. 2.35'e D_1 operatörü bir defa daha uygulanırsa;

$$\begin{aligned} D_1 D_1 D_1 \phi = & 2D_e r_e Q \frac{8\beta^3 r^6 + 12\beta^2 r^4 + 18\beta r^2 + 15}{r^7} \exp(-\beta r^2) \\ & - 16D_e r_e^2 Q \frac{4\beta^3 r^6 + 6\beta^2 r^4 + 6\beta r^2 + 3}{r^8} \exp(-2\beta r^2) \end{aligned} \quad (2.42)$$

elde edilir. Potansiyel fonksiyonu c_{111} , c_{112} ve c_{123} bağıntılarında yerine konursa eşitlikler:

$$\begin{aligned}
c_{111} = & \frac{a^6}{2V_0} \sum_{l_1} \sum_{l_2} \sum_{l_3} l_1^6 \left[2D_e r_e Q \frac{8\beta^3 r^6 + 12\beta^2 r^4 + 18\beta r^2 + 15}{r^7} \exp(-\beta r^2) \right] \\
& - \frac{a^6}{2V_0} \sum_{l_1} \sum_{l_2} \sum_{l_3} l_1^6 \left[16D_e r_e^2 Q \frac{4\beta^3 r^6 + 6\beta^2 r^4 + 6\beta r^2 + 3}{r^8} \exp(-2\beta r^2) \right]
\end{aligned} \quad (2.43)$$

$$\begin{aligned}
c_{112} = & \frac{a^6}{2V_0} \sum_{l_1} \sum_{l_2} \sum_{l_3} l_1^4 l_2^2 \left[2D_e r_e Q \frac{8\beta^3 r^6 + 12\beta^2 r^4 + 18\beta r^2 + 15}{r^7} \exp(-\beta r^2) \right] \\
& - \frac{a^6}{2V_0} \sum_{l_1} \sum_{l_2} \sum_{l_3} l_1^4 l_2^2 \left[16D_e r_e^2 Q \frac{4\beta^3 r^6 + 6\beta^2 r^4 + 6\beta r^2 + 3}{r^8} \exp(-2\beta r^2) \right]
\end{aligned} \quad (2.44)$$

$$\begin{aligned}
c_{123} = & \frac{a^6}{2V_0} \sum_{l_1} \sum_{l_2} \sum_{l_3} l_1^2 l_2^2 l_3^2 \left[2D_e r_e Q \frac{8\beta^3 r^6 + 12\beta^2 r^4 + 18\beta r^2 + 15}{r^7} \exp(-\beta r^2) \right] \\
& - \frac{a^6}{2V_0} \sum_{l_1} \sum_{l_2} \sum_{l_3} l_1^2 l_2^2 l_3^2 \left[16D_e r_e^2 Q \frac{4\beta^3 r^6 + 6\beta^2 r^4 + 6\beta r^2 + 3}{r^8} \exp(-2\beta r^2) \right]
\end{aligned} \quad (2.45)$$

bulunur. Burada $r = (l_1^2 + l_2^2 + l_3^2)^{1/2} a$ 'dır.

Bu çalışmada c_{111} , c_{112} ve c_{123} değerleri fcc metallerde 176 atom bcc metallerde 168 atom için hesaplanmıştır. Hesaplamalar Basic dilindeki programlar ile yapılmış olup Ek'te verilmiştir. Hesapladığımız c_{111} , c_{112} ve c_{123} değerleri ve deneysel değerler Çizelge 2.7'de verilmiştir. Çizelge 2.7'deki sonuçlar incelenirse, Gümüş için c_{111} ve c_{112} 'nin teorik ve deneysel değerler oldukça yakındır. Bununla beraber $c_{112} = c_{116}$ Cauchy bağıntısı için deneysel değerle uyumu oldukça zayıftır.

c_{123} deneysel değerleri fcc metallerde negatif iken teorik değerleri pozitif çıkmaktadır. Bunun nedeni Çizelge 2.8 incelenirse açık bir şekilde görülür. c_{123}

toplama katkının üçüncü komşuluk seti olan $[211]$ den gelir. Yani 78 atomdan sadece 24 atom toplama katkı verir. Diğer 54 atomun bu toplama katkısı sıfırdır.

c_{111} toplamı ise 74 atomun 58 tanesi katkıda bulunur. c_{112} toplamında bu sayı 40 tanedir. Bunun sonucu olarak $|c_{111}| > |c_{112}|$ dir. c_{111} ve c_{112} negatif değerler alır ve teori deney uyumu oldukça iyi olur.

Bcc metallerde c_{123} negatiftir. Çizelge 2.9'daki 88 atomdan c_{123} toplamına katkı veren 64 tanedir. Bcc metallerde c_{123} toplamına katkı en yakın komşu atom seti olan $[111]$ 'den başlar.

Çizelge 2.7. Bazı fcc ve bcc metallerin $c_{\alpha\beta\gamma}$ teorik, deneysel ve hesaplanan değerleri

$c_{\alpha\beta\gamma}$ (10^{12}dyn/cm^2)	Fe	Ni	Al	Ag	Cu	K	Na
Bu çalışma c_{111}	-21,183	-13,48	-4,944	-7,902	-9,969	-0,758	-1,778
Bu çalışma $c_{112} = c_{116}$	-5,473	-10,14	-3,708	-5,821	-7,493	-0,169	-0,393
Bu çalışma $c_{123} = c_{456}$	-7,379	1,372	0,638	5,751	0,999	-0,166	-0,345
Deneysel c_{111} Teorik[22,41-43]	-27,050	-23,70	-10,80	-8,430	12,710	-0,424	-0,928
Deneysel c_{112} [22,41,42,43]	-6,260	-14,75	-3,15	-5,290	-8,140	-0,088	-0,189
Deneysel c_{123} [22,41,42,43]	-5,750	-0,46	-036	1,890	-0,500	-0,101	-0,197
Deneysel c_{166} [22,43]	--	-8,67	--	-6,370	-7,800	--	--
Deneysel c_{456} [22,43]	--	-0,44	--	-0,830	-0,950	--	--
Deneysel c_{144} [22,43]	--	-2,15	--	0,560	-0,030	--	--

Çizelge 2.8. Fcc yapılarda komşu atom koordinatları

Komşu Atom Setleri	Atom Sayısı	Komşu Atomların Koordinatları
[110]	12	(110) $(\bar{1}10)$ $(1\bar{1}0)$ $(\bar{1}\bar{1}0)$ (101) $(\bar{1}01)$ $(10\bar{1})$ $(\bar{1}0\bar{1})$ (011) $(0\bar{1}1)$ $(01\bar{1})$ $(0\bar{1}\bar{1})$
[200]	6	(200) $(\bar{2}00)$ (020) $(0\bar{2}0)$ (002) $(00\bar{2})$
[211]	24	(211) $(\bar{2}11)$ $(2\bar{1}1)$ $(21\bar{2})$ $(\bar{2}11)$ $(2\bar{1}\bar{1})$ $(\bar{2}1\bar{1})$ $(\bar{2}\bar{1}\bar{1})$ (121) $(\bar{1}21)$ $(1\bar{2}1)$ $(12\bar{1})$ $(\bar{1}21)$ $(1\bar{2}\bar{1})$ $(\bar{1}2\bar{1})$ $(\bar{1}\bar{2}\bar{1})$ (112) $(\bar{1}12)$ $(1\bar{1}2)$ $(11\bar{2})$ $(\bar{1}\bar{1}2)$ $(\bar{1}1\bar{2})$ $(1\bar{1}\bar{2})$ $(\bar{1}\bar{1}\bar{2})$
[220]	12	(220) $(\bar{2}20)$ $(2\bar{2}0)$ $(\bar{2}\bar{2}0)$ (202) $(\bar{2}02)$ $(20\bar{2})$ $(\bar{2}0\bar{2})$ (022) $(0\bar{2}2)$ $(02\bar{2})$ $(0\bar{2}\bar{2})$
[310]	24	(310) $(\bar{3}10)$ $(3\bar{1}0)$ $(\bar{3}\bar{1}0)$ (130) $(\bar{1}30)$ $(1\bar{3}0)$ $(\bar{1}\bar{3}0)$ (103) $(\bar{1}03)$ $(10\bar{3})$ $(\bar{1}0\bar{3})$ (013) $(0\bar{1}3)$ $(01\bar{3})$ $(0\bar{1}\bar{3})$ (301) $(\bar{3}01)$ $(30\bar{1})$ $(\bar{3}0\bar{1})$

Çizelge 2.9. Bcc yapılarda komşu atom koordinatları

Komşu Atom Setleri	Atom Sayısı	Komşu Atomların Koordinatları
[111]	8	$(1\ 1\ 0)$ $(\bar{1}\ 1\ 0)$ $(1\ \bar{1}\ 0)$ $(\bar{1}\ \bar{1}\ 0)$ $(1\ 0\ 1)$ $(\bar{1}\ 0\ 1)$ $(1\ 0\ \bar{1})$ $(\bar{1}\ 0\ \bar{1})$ $(0\ 1\ 1)$ $(0\ \bar{1}\ 1)$ $(0\ 1\ \bar{1})$ $(0\ \bar{1}\ \bar{1})$
[200]	6	(200) $(\bar{2}00)$ (020) $(0\bar{2}0)$ (002) $(00\bar{2})$
[220]	12	(220) $(\bar{2}20)$ $(2\bar{2}0)$ $(\bar{2}\bar{2}0)$ (202) $(\bar{2}02)$ $(20\bar{2})$ $(\bar{2}0\bar{2})$ (022) $(0\bar{2}2)$ $(02\bar{2})$ $(0\bar{2}\bar{2})$
[311]	24	(311) $(\bar{3}11)$ $(3\ \bar{1}\ 1)$ $(3\bar{1}\bar{1})$ $(\bar{3}\bar{1}\bar{1})$ $(\bar{3}1\bar{1})$ $(\bar{3}\bar{1}1)$ $(\bar{3}11)$ (133) $(\bar{1}33)$ $(1\bar{3}3)$ $(13\bar{1})$ $(\bar{1}31)$ $(1\bar{3}\bar{1})$ $(\bar{1}3\bar{1})$ $(\bar{1}31)$ (113) $(\bar{1}13)$ $(1\bar{1}3)$ $(11\bar{3})$ $(\bar{1}13)$ $(3\bar{1}3)$ $(\bar{1}13)$ $(1\bar{1}3)$
[222]	8	(222) $(\bar{2}22)$ $(2\bar{2}2)$ $(\bar{2}\bar{2}2)$ $(22\bar{2})$ $(2\bar{2}\bar{2})$ $(\bar{2}2\bar{2})$ $(\bar{2}\bar{2}2)$
[400]	6	(400) $(\bar{4}00)$ (040) $(0\bar{4}0)$ (004) $(00\bar{4})$
[331]	24	(331) $(\bar{3}31)$ $(3\bar{3}1)$ $(33\bar{1})$ $(\bar{3}\bar{3}\bar{1})$ $(\bar{3}3\bar{1})$ $(\bar{3}\bar{3}1)$ $(\bar{3}31)$ (133) $(\bar{1}33)$ $(1\bar{3}3)$ $(13\bar{3})$ $(\bar{1}33)$ $(13\bar{3})$ $(\bar{1}3\bar{3})$ $(\bar{1}33)$ (313) $(\bar{3}13)$ $(3\bar{1}3)$ $(31\bar{3})$ $(\bar{3}13)$ $(3\bar{1}3)$ $(\bar{3}\bar{1}3)$ $(\bar{3}1\bar{3})$

İkinci ve üçüncü dereceden elastik sabitleri ile ikinci dereceden elastik sabitlerinin basınçla değişimleri kullanılarak bulk modülünün basınçla değişimi $\left(\frac{\partial B}{\partial P}\right)$ hesaplanabilir [26].

$$\frac{\partial c'_{11}}{\partial P} = - \left(\frac{2c_{11} + 2c_{12} + 2c_{111} + 2c_{112}}{c_{11} + 2c_{12}} \right) \quad (2.46)$$

$$\frac{\partial c'_{12}}{\partial P} = - \left(\frac{-c_{11} - c_{12} + 2c_{123} + 2c_{112}}{c_{11} + 2c_{12}} \right) \quad (2.47)$$

$$\frac{\partial B}{\partial P} = \frac{\left(\frac{\partial c'_{11}}{\partial P} + \frac{\partial c'_{12}}{\partial P} \right)}{3} \quad (2.48)$$

Buradaki $c'_{\alpha\beta}$ 'lar ikinci derece “etkin elastik sabitler” olup; kristal, hidrostatik basınca maruz kaldığında ilave (ek) streslerle infnifizimal (sonsuz küçük deęişim) strainleri (zorları) arasında ilişki kurmak için gerekli olmaktadır. Bağıntılardan hesaplanan deęerler Çizelge 2.10’da verilmiştir.

Çizelge 2.10. Bazı fcc ve bcc metallerin $\frac{\partial B}{\partial P}$ deęerleri

Metal Adı	$\frac{\partial B}{\partial P}$	$\frac{\partial B}{\partial P}$ [26]	
		Teorik	Deneysel
Al	2,56	4,34	4,97
Ag	4,13	5,09	5,44
Cu	4,28	4,62	5,44
K	3,78	4,04	3,97
Na	3,48	4,01	3,70

3. VARSHNI POTANSİYELİNİN TERMODİNAMİK KAVRAMLARLA PARAMETRİZE EDİLMESİ VE Ni-45%Pd ALAŞIMININ FONON FREKANSLARININ HESAPLANMASI

3.1 Giriş

Bu bölümde Ni ve Pd elementleri için $T=298$ K ve $P=1$ atm'de termodinamik kavramlarla Varshni Potansiyel Enerji Fonksiyonunun (PEF) parametreleri hesaplanmıştır. Elde edilen parametreler Ni ve Pd için ikinci dereceden elastik sabitlerinin ve Ni-45%Pd alaşımının temel simetri yönlerindeki frekanslarının hesaplanmasında kullanılmıştır [20,23,24].

3.2 Potansiyel Parametrelerinin Hesaplanması

Termodinamik kavramlarla parametrize metodunda kristalin toplam iç enerjisi, hem hacmin hem de sıcaklığın bir fonksiyonudur [23,24];

$$U = E_1 + \phi(V) \quad (3.1)$$

Burada E_1 ; titreşim enerjisidir. $\phi(V)$ ise $T=298$ K'de kristaldeki iyonların etkileşmesinden meydana gelen enerjidir. E_1 titreşim enerjisi Debye modeline göre;

$$E_1 = \frac{9}{8} R\theta_d + 9RT \left(\frac{T}{\theta_d} \right)^3 \int_0^{x_d} \frac{x^3}{e^x - 1} dx \quad (3.2)$$

olarak verilir. Bu eşitlikte θ_d ; debye sıcaklığı, R ; ideal gaz sabiti, T ; titreşim sıcaklığı, $x_d = \frac{\theta_d}{T}$ ve $x = \frac{\hbar\omega}{k_b T}$ dir. Hesaplamalarda kullanılan parametreler Çizelge

3.1'de verildi.

Çizelge 3.1. T=298 K’de Ni ve Pd için potansiyel enerji fonksiyonunun hesaplanmasında kullanılan fiziksel sabitler

	θ_d [31] (K)	V [32] $\left(\frac{\text{cm}^3}{\text{g.atom}}\right)$	ΔH [33] $\left(\frac{\text{kcal}}{\text{g.atom}}\right)$	C_p [33] $\left(\frac{\text{cal}}{\text{g.atom.K}}\right)$	α [34] (10^{-6}cm^{-3})	X [34] (10^{-6}atm^{-1})
Ni	425,5	6,59	102,67	6,23	37,5	0,528
Pd	271,5	8,89	84,33	6,21	34,8	0,522

$\phi(V)$ değerleri ise [23] ve [24]’deki metotlar takip edilerek entalpiden hesaplandı.

Entalpi genel olarak;

$$H = U + PV = \phi(V) + E_1 + PV \quad (3.3)$$

dir. İdeal gazların entalpisi $H_g = \frac{5RT}{2}$ dir. Eş. 3.3 $\Delta H = H_g - H$ üzere düzenlenirse,

$$\phi(V) = H - E_1 - PV = \frac{5RT}{2} - \Delta H - PV - E_1 \quad (3.4)$$

elde edilir. Burada P=1 atm olup sabittir. V ise bir molün hacmidir. Eş. 3.4’ten hesaplanan $\phi(V)$ değerleri Çizelge 3.2’de verildi.

Çizelge 3.2. Ni ve Pd için T=298 K’de hesaplanan enerji değerleri

Metal Adı	E_1 (kJ/mol)	$\phi(V)$ (kJ/mol)
Ni	8,1731	431,55031
Pd	7,7388	354,38094

Parametrize için gerekli olan diğer bir bağıntı;

$$\left(\frac{\partial\phi(V)}{\partial V}\right)_p = \frac{\alpha}{V}(TC_v - E_l) + P + \frac{C_p - C_v}{\alpha V} \quad (3.5)$$

dır. Eş. 3.5'deki C_v değerleri,

$$C_v = 9RT \left(\frac{T}{\theta_d}\right)^3 \int_0^{\theta_d} \frac{x^4 e^x}{(e^x - 1)^2} dx \quad (3.6)$$

bağıntısından hesaplandı ve bulunan $\left(\frac{\partial\phi(V)}{\partial V}\right)_p$ ve C_v değerleri Çizelge 3.3'de verildi.

Çizelge 3.3. C_v ve $\left(\frac{\partial\phi(V)}{\partial V}\right)_p$ 'nin hesaplanan değerleri

	a (10^{-10} m)	B (10^{11} Nm ⁻²)	C_v (Joule/mol.K)	$\left(\frac{\partial\phi(V)}{\partial V}\right)_p$ (10^{15} N/m ²)
Ni	3,52	1,860	22,57268	2,60566
Pd	3,89	1,808	23,93779	2,18373

Atom başına kohesif enerjisi verecek şekilde yazılan PEF Eş. 2.3'deki gibidir [20]. Hesaplamalarda atom-atom çiftleri arasındaki etkileşmeler 10. komşuluğa kadar genişletildi. D_e , β ve r_e potansiyel parametreleri;

$$\phi(r_{ij}) \Big|_{r_{ij}=a_0} = \phi(V) \quad (3.7)$$

$$\left(\frac{\partial \phi}{\partial V}\right)_p = \frac{N}{6V} \sum_j r_{ij} \left[\frac{d\phi}{dr_{ij}} \right]_p \quad (3.8)$$

$$\left. \frac{\partial^2 \phi(r_{ij})}{\partial r_{ij}^2} \right|_{r_{ij}=a_0} = 18a_0 B \quad (3.9)$$

eşitlikleri kullanılarak bulundu, Çizelge 3.4’de verildi. Burada Eş. 2.7, Eş. 3.8’de kullanılırsa

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial \phi}{\partial V}\right)_p &= \frac{1}{6V} \sum_j M_j a \left[-\frac{D_e}{2} \left(\frac{r_e}{a}\right)^2 Q \left[\frac{(2M_j)^{-2}}{a} + 4\beta a \right] \exp\left(-2\beta(M_j a)^2\right) \right] \\ &\quad + \frac{1}{6V} \sum_j M_j a \left[\frac{D_e}{2} \left(\frac{r_e}{a}\right) Q \left[(2M_j a)^{-1} + 4\beta M_j a \right] \exp\left(-\beta(M_j a)^2\right) \right] \end{aligned} \quad (3.10)$$

bulunur. $X = \left(\frac{r_e}{a}\right) Q$ olmak üzere

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial \phi}{\partial V}\right)_p &= \frac{1}{6V} \frac{D_e}{2} \sum_j M_j a X \left[-X \left[\frac{(2M_j)^{-2}}{a} + 4\beta a \right] \exp\left(-2\beta(M_j a)^2\right) \right] \\ &\quad + \frac{1}{6V} \frac{D_e}{2} \sum_j M_j a X \left[\left[(2M_j a)^{-1} + 4\beta M_j a \right] \exp\left(-\beta(M_j a)^2\right) \right] \end{aligned} \quad (3.11)$$

$\beta a^2 = \alpha$ olmak üzere

$$\begin{aligned}
\phi = & \frac{1}{6V} \frac{D_e}{2} X \sum_j M_j a \left[-X \left[\frac{(2M_j)^{-2}}{a} + 4\alpha a^{-1} \right] \exp(-2\alpha M_j^2) \right] \\
& + \frac{1}{6V} \frac{D_e}{2} X \sum_j M_j a \left[\left[(2M_j a)^{-1} + 4\alpha M_j a^{-1} \right] \exp(-\alpha M_j^2) \right]
\end{aligned} \tag{3.12}$$

$$\frac{D_e}{2} = \frac{\phi}{X \sum_j \left[\frac{X}{M_j^2} \exp(-2\alpha M_j^2) - \frac{2}{M_j} \exp(-\alpha M_j^2) \right]} \tag{3.13}$$

$$\begin{aligned}
P = & \frac{1}{6V} X \frac{\phi}{X \sum_j \left[\frac{X}{M_j^2} \exp(-2\alpha M_j^2) - \frac{2}{M_j} \exp(-\alpha M_j^2) \right]} \times \\
& \sum_j M_j \left[-X \left[(2M_j)^{-2} + 4\alpha \right] \exp(-2\alpha M_j^2) + \left[(2M_j)^{-1} + 4\alpha M_j \right] \exp(-\alpha M_j^2) \right]
\end{aligned} \tag{3.14}$$

$$\phi / 6V = \text{sabit}$$

$$\begin{aligned}
P \sum_j \left[\frac{X}{M_j^2} \exp(-2\alpha M_j^2) \right] + \text{sabit} \sum_j M_j X \left[(2M_j)^{-2} + 4\alpha \right] \exp(-2\alpha M_j^2) = \\
\sum_j \left[\frac{2P}{M_j} \exp(-\alpha M_j^2) \right] + \text{sabit} \sum_j \left[\left[(2M_j)^{-1} + 4\alpha M_j \right] \exp(-\alpha M_j^2) \right] M_j
\end{aligned} \tag{3.15}$$

$$X = \frac{\frac{2P}{M_j} \exp(-\alpha M_j^2) + \text{sabit} \left[M_j \left[(2M_j)^{-1} + 4\alpha M_j \right] \exp(-\alpha M_j^2) \right]}{\frac{P}{M_j^2} \exp(-2\alpha M_j^2) + \text{sabit} \left[M_j \left[(2M_j)^{-2} + 4\alpha \right] \exp(-2\alpha M_j^2) \right]} \tag{3.16}$$

$$X = \frac{\left[\frac{2P}{M_j} + \text{sabit} \left[2^{-1} + 4\alpha M_j^2 \right] \right] \exp(-\alpha M_j^2)}{\frac{P}{M_j^2} + \text{sabit} \left[M_j (2M_j)^{-2} + M_j 4\alpha M_j \right] \exp(-2\alpha M_j^2)} \quad (3.17)$$

3.3. İkinci Dereceden Elastik Sabitleri

İkinci dereceden elastik sabitleri ifadesi Eş. 2.30 ve Eş. 2.31'den hesaplanmıştır.

Hesaplanan c_{11} ve c_{12} değerleri Çizelge 3.4'de verildi.

Çizelge 3.4. Potansiyel parametreleri ve ikinci dereceden elastik sabitleri

	$\beta \cdot 10^{15}$ (cm ⁻²)	$r_e \cdot 10^{-8}$ (cm)	$D_e \cdot 10^{-13}$ (erg)	$c_{11} \cdot 10^{12}$ (dyn/cm ²) (Hesaplanan)	$c_{12} \cdot 10^{12}$ (dyn/cm ²) (Hesaplanan)	$c_{11} \cdot 10^{12}$ (dyn/cm ²) [29,30]	$c_{12} \cdot 10^{12}$ (dyn/cm ²) [29,30]
Ni	1,17437	2,63183	9,201758	2,29	1,73	2,46	1,50
Pd	0,96299	2,98899	7,943081	2,52	1,65	2,27	1,75

3.4. Ni-45%Pd Alaşımının Fonon Frekanslarının Bulunması

Harmonik ve adyabatik yaklaşımlarda kübik kristaller için fonon frekansları aşağıdaki determinant çözülerek bulunur:

$$\left| D - m\omega^2 I \right| = 0 \quad (3.18)$$

Burada D (3x3) mertebesinde dinamik matris, m iyonik kütle ve I birim matristir. Bu çalışmada kullanılan $D_{\alpha\beta}$ dinamik matrisinin diagonal ve diagonal olmayan elemanları Shyam ve arkadaşları tarafından bağıntılar kullanılarak hesaplandı [35]:

$$\begin{aligned}
D_{\alpha\alpha} = & 2(\alpha_1 + \beta_1)(2 - C_1C_2 - C_1C_3) + 4\beta_1(1 - C_2C_3) + 2(\alpha_2 - \beta_2)(1 - C_{21}) + \\
& 2\beta_2(3 - C_{21} - C_{22} - C_{23}) + \frac{4}{3}(\alpha_3 - \beta_3)(6 - C_1C_2C_{23} - C_1C_{22}C_3 - 4C_{21}C_2C_3) + \\
& 8\beta_3(3 - C_1C_2C_{23} - C_1C_{22}C_3 - C_{21}C_2C_3) + 2(\alpha_4 - \beta_4)(2 - C_{21}C_{22} - C_{21}C_{23}) + \\
& 4\beta_4(3 - C_{21}C_{22} - C_{21}C_{23} - C_{22}C_{23}) + \frac{18}{5}(\alpha_5 - \beta_5)(2 - C_{31}C_2 - C_{31}C_3) + \frac{2}{5}(\alpha_5 - \beta_5) \\
& (2 - C_1C_{32} - C_1C_{33}) + 4\beta_5(6 - C_{31}C_2 - C_{31}C_3 - C_1C_{32} - C_1C_{33} - C_{32}C_3 - C_2C_{33}) + \\
& \frac{8}{3}(\alpha_6 - \beta_6)(1 - C_{21}C_{22}C_{23}) + 8\beta_6(1 - C_{21}C_{22}C_{23}) + \frac{36}{7}(\alpha_7 - \beta_7)(2 - C_{31}C_{22}C_3 - \\
& C_{31}C_2C_{23}) + \frac{16}{7}(\alpha_7 - \beta_7)(2 - C_{21}C_{32}C_3 - C_{21}C_2C_{33}) + \frac{4}{7}(\alpha_7 - \beta_7)(2 - C_1C_{22}C_{33} - \\
& C_1C_{32}C_{23}) + 8\beta_7(6 - C_{31}C_{22}C_3 - C_{31}C_2C_{23} - C_{21}C_{32}C_3 - C_{21}C_2C_{33} - C_1C_{22}C_{33} - \\
& C_1C_{33}C_{21}) + 2(\alpha_8 - \beta_8)(1 - C_{41}) + 2\beta_8(3 - C_{41} - C_{42} - C_{43}) + \frac{4}{9}(\alpha_9 - \beta_9) \\
& (2 - C_1C_2C_{43} - C_1C_{42}C_3) + \frac{64}{9}(\alpha_9 - \beta_9)(1 - C_{41}C_2C_3) + 8\beta_9(3 - C_1C_2C_{43} - C_1C_{42}C_3 - \\
& C_{41}C_2C_3) + 2(\alpha_9 - \beta_9)(2 - C_{31}C_{32} - C_{31}C_{33}) + 4\beta_9(3 - C_{31}C_{32} - C_{31}C_{33} - C_{32}C_{33}) + \\
& \frac{4}{5}(\alpha_{10} - \beta_{10})(2 - C_{21}C_{42} - C_{21}C_{43}) + \frac{16}{5}(\alpha_{10} - \beta_{10})(2 - C_{41}C_{22} - C_{41}C_{23}) \\
& + 4\beta_{10}(6 - C_{21}C_{42} - C_{21}C_{43} - C_{41}C_{22} - C_{41}C_{23} - C_{22}C_{43} - C_{42}C_{23})
\end{aligned} \tag{3.19}$$

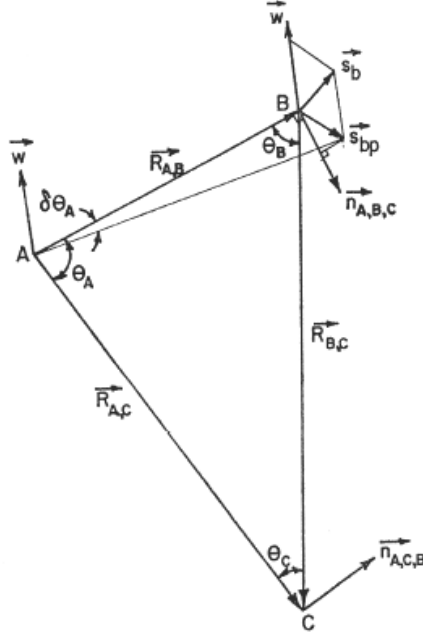
$$\begin{aligned}
D_{\alpha\beta} = & 2(\alpha_1 - \beta_1)S_1S_2 + \frac{4}{3}(\alpha_3 - \beta_3)(S_1S_2C_{23} + 2S_1S_{22}C_3 + 2S_{21}S_2C_3) + (\alpha_4 - \beta_4)S_{21}S_{22} + \\
& \frac{6}{5}(\alpha_5 - \beta_5)(S_{31}S_2 - S_1S_{32}) + \frac{8}{3}(\alpha_6 - \beta_6)S_{21}S_{22}C_{23} + \frac{24}{7}(\alpha_7 - \beta_7)(S_{31}S_{22}C_3 + S_{21}S_{32}C_3) + \\
& \frac{8}{7}(\alpha_7 - \beta_7)(S_{21}S_2C_{33} + S_{22}S_1C_{33}) + \frac{12}{7}(\alpha_7 - \beta_7)(S_1S_{32}C_{23} + S_2S_{31}C_{23}) + 2(\alpha_9 - \beta_9)S_{31}S_{32} + \\
& \frac{4}{9}(\alpha_9 - \beta_9)S_1S_2C_{43} + \frac{16}{9}(\alpha_9 - \beta_9)(S_{41}S_2C_3 + S_1S_{42}C_3) + \frac{8}{5}(\alpha_{10} - \beta_{10})(S_{21}S_{42} + S_{41}S_{22})
\end{aligned} \tag{3.20}$$

Burada $C_i = \cos(\pi a q_i)$, $S_i = \sin(\pi a q_i)$, $C_{2i} = \cos(2\pi a q_i)$, $S_{2i} = \sin(2\pi a q_i)$,
 $C_{3i} = \cos(3\pi a q_i)$, $S_{3i} = \sin(3\pi a q_i)$, $C_{4i} = \cos(4\pi a q_i)$, $S_{4i} = \sin(4\pi a q_i)$ ve $i=1, 2, 3$ 'dür. Eş. 3.19 ve Eş. 3.20'deki β_i açısal, α_i radyal kuvvet sabitleridir ve

$$\beta_i = \frac{1}{r_{ij}} \frac{\partial \phi(r_{ij})}{\partial r_{ij}} \tag{3.21}$$

$$\alpha_i = \frac{\partial^2 \phi(r_{ij})}{\partial r_{ij}^2} \quad (i=1,10) \quad (3.22)$$

ifadeleriyle tanımlanır [36]. Açısal kuvvet etkileşimlerini Yuen ve Varshni Şekil 3.1'e uygun biçimde tanımlamışlardır [44].



Şekil 3.1. Açısal kuvvet etkileşimleri

İlgilendiğimiz iki tür üçgen var: Birisi bir atomla biçimlenmiş ve diğer ikisi onun ilk komşularıdır. Bunlar 1. tip üçgenler olarak adlandırılır. Öteki atomla biçimlendirilen, birisi ilk diğeri ikinci komşudur. Bunlar 2. tür üçgenler olarak adlandırılır.

Üçgenin açılarının değişimi, bu atomların denge pozisyonlarının üçgenleriyle, bu atomların üçgenlerinin kendi denge pozisyonlarına projeksiyonlarıyla karşılaştırılmasıyla elde edilir. a , b ve c atomlarıyla oluşturulmuş üçgeni Şekil 3.1 dikkate alırsak. A , B ve C onların denge konumlarını gösterebilir. s_a , s_b ve s_c kendi küçük yer değiştirmesi olsun. $n_{A,B,C}$ A , B , C ve $R_{A,B}$ vektörüne dik yüzeyde birim vektör olarak tanımlansın. A 'daki θ_A açısına bakarsak; $n_{A,B,C}$ 'nin yönüyle uyumu için B atomuna $n_{A,B,C}$ uygulandığında θ_A açısını küçültür. Tanımdan $n_{A,B,C} = n_{B,A,C}$ dir. $R_{A,B}$

A' 'ya göre B 'nin pozisyon vektörüdür. w , A , B , C düzlemine dik $R_{A,C}$, $R_{A,B}$ yönlerinde normal vektörü gösterebilir ve w sağ el kuralını oluşturur. A , B , C düzleminde s_b yer değişiminin pozisyonu :

$$s_{bp} = (w \times s_b) \times w \quad (3.23)$$

s_b yer değişiminin küçük olduğundan s_b 'ye dönük θ_A açısındaki değişim:

$$-\frac{s_{bp} \cdot n_{A,B,C}}{R_{A,B}} = -\frac{s_b \cdot n_{A,B,C}}{R_{A,B}} \quad (3.24)$$

ile verilir. s_a , s_b ve s_c değişimine dönük olarak θ_A açısındaki değişim:

$$\frac{(s_a - s_b) \cdot n_{A,B,C}}{R_{A,B}} + \frac{(s_a - s_c) \cdot n_{A,C,B}}{R_{A,C}} \quad (3.25)$$

dir. $\delta\theta_A$ 'ya yönelik potansiyel enerji değişimi:

$$\frac{1}{2} K (\delta\theta_A)^2 \quad (3.26)$$

ile verilir. Burada K θ_A açısı ile birleşik açısal güç sabitidir [44].

Ni ve Pd elementleri için Eş. 3.21 ve Eş. 3.22'den 10. komşuluğa kadar kuvvet sabitleri ve Ni-45%Pd alaşımının kuvvet sabitleri Eş. 3.27 ve Eş. 3.28'deki lineer bağıntılar kullanılarak hesaplandı. Burada $x=0,45$ 'tir; alaşımdaki Pd konsantrasyonunu gösterir. Elementler ve alaşımın hesaplanan kuvvet sabitleri Çizelge 3.5'de verildi.

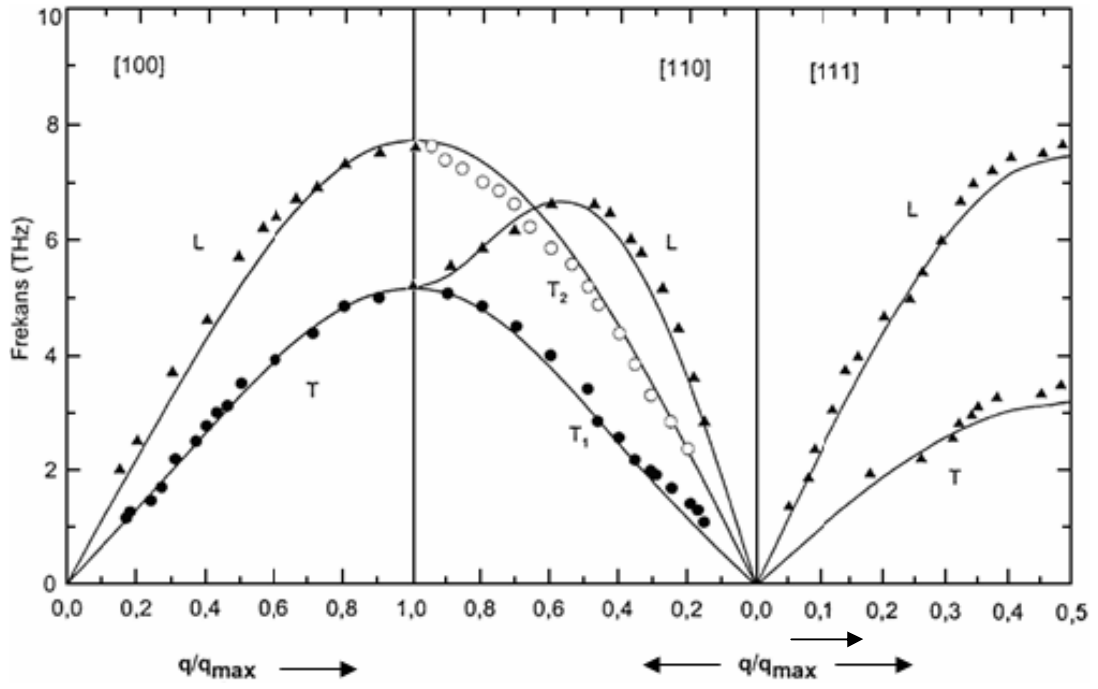
$$\beta_i(\text{Ni - Pd}) = (1 - x)\beta_i(\text{Ni}) + x\beta_i(\text{Pd}) \quad (3.27)$$

$$\alpha_i(\text{Ni-Pd}) = (1-x)\alpha_i(\text{Ni}) + x\alpha_i(\text{Pd}) \quad (3.28)$$

Çizelge 3.5. Ni, Pd ve Ni-45%Pd için radyal (α_i) ve açısal (β_i) kuvvet sabitleri

	α_i (10^{-3} Nm^{-1})			β_i (10^{-3} Nm^{-1})		
	Ni	Pd	Ni-45%Pd	Ni	Pd	Ni-45%Pd
1	41731,56	40067,04	40982,52	-1812,906	-2364,907	-2061,306
2	-3603,839	-2596,154	-3150,381	826,913	637,1617	741,5249
3	-1546,693	-1217,555	-1416,581	180,6938	142,939	163,7041
4	-429,3158	-340,4574	-389,3295	36,61489	29,0345	33,20375
5	-110,8032	-87,86654	-100,4817	7,544092	5,97697	6,838885
6	-27,93168	-22,12026	-25,31654	1,586738	1,25523	1,437563
7	-6,955881	-5,499903	-6,300691	0,339141	0,26785	0,307061
8	-1,717914	-1,356093	-1,555095	0,073361	0,05784	0,066378
9	-0,421586	-0,332241	-0,381381	0,016014	0,01260	0,014480
10	-0,102929	-0,080980	-0,093052	0,003520	0,00276	0,003178

Ni-45%Pd alaşıımı için temel simetri yönlerindeki fonon frekansları Eş. 3.19 ve Eş. 3.20'den hesaplandı. Şekil 3.2'de fonon frekans eğrileri verildi. Şekilden de açıkça görüldüğü gibi deneysel frekans değerleriyle hesaplanan frekans değerleri oldukça uyumludur.



Şekil 3.2. Ni-45%Pd alaşıımının $T=298$ K ve $P=1$ atm'de fonon frekans eğrisi. Sürekli çizgiler hesaplanan, (o,●,▲) sembolleri ise deneysel frekansları göstermektedir [37]

4. VARSHNI POTANSİYELİNİN MILSTEIN METODU İLE PARAMETRİZE EDİLMESİ VE NİKEL'İN FONON FREKANSLARININ HESAPLANMASI

4.1. Giriş

Born kararlılık kriterine göre bir kristalin kararlı olması için; ikinci mertebeden elastik sabitlerinin oranı $c_{11}/c_{12} > 1$ olmalıdır [26].

İlk olarak Milstein, 0 K'deki elastik sabitlerini ve örgü sabitlerini kullanarak klasik ve genelleştirilmiş Morse potansiyelini parametrize etti [22,38].

4.2. Potansiyel Parametrelerinin Hesaplanması

Bu bölümde Eş. 2.1'deki potansiyel Milstein formalizmi ile parametrize edilmiştir. Bulunan parametre değerleri ile Nikel için fonon frekansları hesaplanmıştır. Parametrize işleminde kullanılan c_{11} , c_{12} , c_{11}/c_{12} ve örgü sabitlerinin deneysel değerleri Çizelge 4.1'de verilmiştir.

Çizelge 4.1. Parametrize işleminde kullanılan metallerin T=0 K'de örgü sabitleri, c_{11} , c_{12} , c_{11}/c_{12} değerleri

Metal Adı	Örgü Sabitleri [26] (Å)	c_{11} [26,30] (10^{12} dyn/cm ²)	c_{12} [26,30] (10^{12} dyn/cm ²)	c_{11}/c_{12}
Al	4,050	1,143	0,619	1,847
Ni	3,524	2,612	1,508	1,732
Fe	2,870	2,330	1,355	1,719
Na	4,290	0,950	0,620	1,530

Potansiyeldeki β , α , D_e , r_e sabitleri elde edilirken Born'un kararlılık kriteri [26] kullanılmıştır. Atom veya iyonlardan oluşan bir örgünün dengede olma şartı;

$$\sum_{l_1} \sum_{l_2} \sum_{l_3} l_1^2 \phi'(r) = 0 \quad (4.1)$$

olarak verilir [26]. Burada $\phi'(r) = \frac{d\phi}{dr}$ 'dir.

Varshni potansiyelinin birinci türevi Eş. 4.1'de yerinde konulursa ve verilen herhangi bir α değerine karşılık gelen r_e değeri bulunur. c_{11}/c_{12} oranına karşılık gelen diğer parametre D_e Basic dilinde yazılan programlarda fit edilerek bulunmuştur. Programlar EK-1 ve EK-2'de verilmiştir.

Çizelge 4.2. Milstein metodu için elde edilen potansiyel parametreleri

Metal Adı	X	D_e $10^{-12}(\text{erg})$	α	β $10^{14}(\text{cm}^{-2})$	r_e (Å)
Al (fcc)	10,50467	0,14147	0,626700	15,29059	3,44884
Ni (fcc)	11,15424	0,28138	0,770003	24,80438	2,80232
Fe (bcc)	13,19358	0,20577	0,376990	18,30785	3,13420
Na (bcc)	13,77024	0,35827	0,461860	10,34944	4,29830

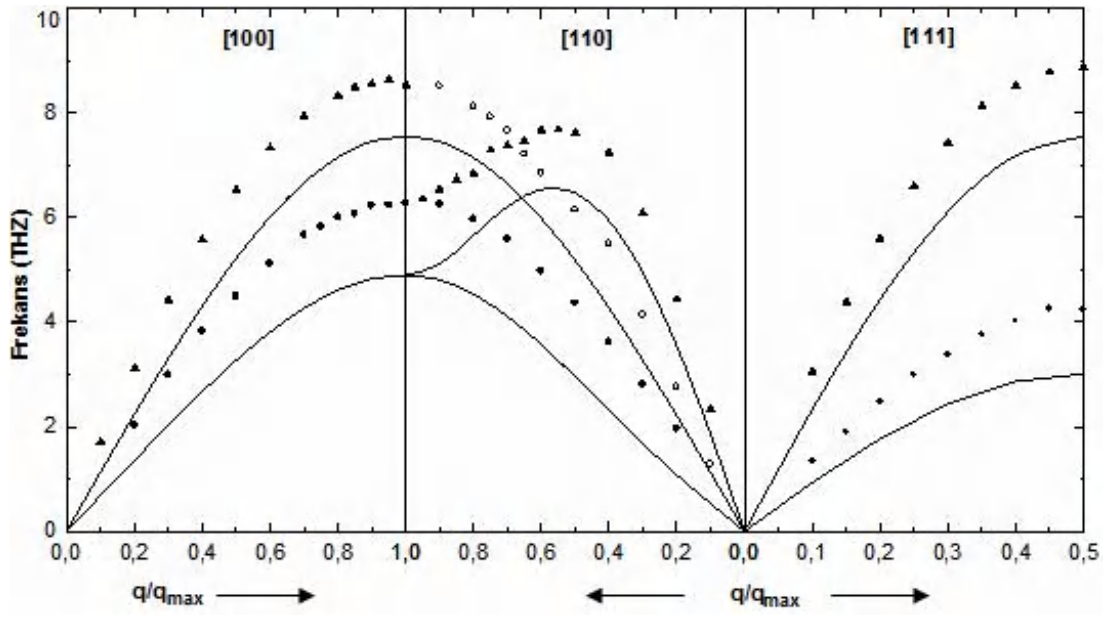
4.3. Nikel'in Fonon Frekanslarının Hesaplanması

Nikel için Çizelge 4.2'de verilen potansiyel parametreleri kullanılarak Eş. 3.21 ve Eş. 3.22'de tanımlanan radyal ve açısall kuvvet sabitleri hesaplandı ve değeri Çizelge 4.3'te verildi.

Çizelge 4.3. Nikel için radyal ve açısall kuvvet sabitleri

	α_i (Nm ⁻¹)	β_i (Nm ⁻¹)
1	29,29000	-2,16105
2	-1,22828	0,309305
3	-0,59367	0,066301
4	-0,15408	0,012468
5	-0,03673	0,002371
6	-0,00854	0,000460
7	-0,001960	9,06 x10 ⁻⁵
8	-0,000446	1,09 x10 ⁻⁵
9	-0,000101	3,64 x10 ⁻⁶
10	-2,275x10 ⁻⁵	7,37 x10 ⁻⁷

Nikel için Eş. 3.19 ve Eş. 3.20 bağıntıları kullanılarak temel simetri yönlerindeki fonon frekansları hesaplandı. Şekil 4.1'de fonon frekans eğrii verildi ve deneysel değeri ile karşılaştırıldı [40].



Şekil 4.1. Nikel'in fonon frekans eğrisi Sürekli çizgiler hesaplanan , (o,●,▲) sembolleri ise deneysel frekansları göstermektedir [40]

5. SONUÇ VE ÖNERİLER

Bu tez çalışmasında VP üç ayrı metotla parametrize edilmiştir. Elde edilen parametreler kullanılarak seçilen bazı kristallerin esneklik ve titreşim özellikleri incelendi.

Girifalco-Weizer metodu ile elde edilen potansiyel parametreleri, bazı bcc ve fcc metallerin ikinci ve üçüncü dereceden elastik sabitleri ile bulk modülünün basınçla değişimini hesaplamada kullanıldı. Hesaplanan bu değerler deneysel değerlerle birlikte Çizelge 2.5, Çizelge 2.7 ve Çizelge 2.10'da verilmişti.

Fonon frekansları, bir kristalin en önemli özelliklerinden birisidir. Bu özelliklerin incelenmesi elektron-fonon etkileşimi, ısı ısıtması ve termal iletkenlik gibi fiziksel olaylar için gereklidir.

Termodinamik kavramları kullanarak $T=298$ K ve $P=1$ atm'de Ni ve Pd için potansiyel parametreleri elde edildikten sonra bu metallerin ikinci dereceden elastik sabitleri ve Ni-45%Pd alaşımının temel simetri yönlerindeki fonon frekansları hesaplandı. Elde edilen fonon frekanslarının deneysel değerlerle oldukça uyumlu olduğu gözlemlendi. Bu uyumun hem parametrizasyonun oda sıcaklığında yapılabilmesinin hem de dinamik matris ifadesindeki kuvvet sabitlerinin onuncu komşuluğu kadar genişletilmesinin etkisi olduğu söylenebilir.

Son olarak Milstein metodu kullanılarak bazı fcc ve bcc metallerin potansiyel parametreleri bulundu. Ni için elde edilen potansiyel parametreleri ile radyal ve açısall kuvvet sabitleri hesaplandı. Sonra bu kuvvet sabitleri kullanılarak Ni için fonon frekansları hesaplandı. Hesaplanan fonon frekanslarının büyük dalga vektörlerinde deneyle çok uyuşmadığı gözlemlendi.

Yapılan tüm bu hesaplamalardan VP'nin termodinamik kavramlarla parametrize edildiğinde, katıların esneklik ve titreşim özelliklerinin incelemesinde başarılı sonuçlar verebileceği sonucuna varıldı.

KAYNAKLAR

1. Allen, M. P., Tildesley, D. J., "Computer Simulation of Liquids", **Clarendon Press**, Oxford Science Publications, 191-196 (1987).
2. Van Gunsteren, W. F. and Weiner, P. K., "Computer Simulation of Biomolecular Systems", **ESCOM**, Leiden, 76-82 (1989).
3. Haug, A., "Theoretical Solid State Physics", **Pergamon Press**, Oxford, 2: 24-65 (1972).
4. Kohn, W., "Electronic structure of matter-wave functions and density functionals", **Rev. Mod. Phys.**, 71: 1253 (1999).
5. Kohn, W. and Sham, L. J., "Self-consistent equations including exchange and correlation effects", **Phys. Rev.**, 140: A1133-1138 (1965).
6. Hohenberg, P. and Kohn, W., "Inhomogeneous electron gas", **Phys. Rev.**, 136: B864-871 (1964).
7. Blackman, M., "Contributions to the theory of the specific heat of crystals", **Proc. Roy. Soc. A**, 148: 365 (1935).
8. Fine, P. C., "The normal modes of vibration of a body-centered cubic lattice", **Phys. Rev.**, 56: 355-359 (1939).
9. Begbie, G. H. and Born, M., "Thermal scattering of X-rays by crystals. I: dynamical foundation", **Proc. R. Soc. London A**, 188: 179-188 (1946).
10. De Launay, J., "In Solid State Physics", F. Seitz and D. Turnbull, **Academic Press**, New York, 2: 219 (1954).
11. Lehman, G. W., Wolfram, T. and de Wames, R. E., "Axially symmetric model for lattice dynamics of metals with application to Cu, Al, and ZrH_2 ", **Phys. Rev.**, 128: 1593 (1962).
12. Clark, B. C., Gazis, D. C. and Wallis, R. F., "Frequency spectra of body-centered cubic lattices", **Phys. Rev.**, 134: A1486-1491 (1964).
13. Bhatia, A. B., "Vibration spectra and specific heats of cubic metals. I. theory and application to sodium", **Phys. Rev.**, 97: A363-371 (1955).
14. Sharma, P. K. and Joshi, S. K., "Test of a melting criterion for cubic metals", **J. Chem. Phys.**, 39: 26-33 (1963).
15. Krebs, K., "Dispersion curves and lattice frequency distribution of metals", **Phys. Rev.**, 138: A143-147 (1965).

16. Varshni, Y. P. and Yuen, P. S., "Angular forces in the lattice dynamics of face-centered cubic metals II", *Phys. Rev.*, 174: 766-769 (1968).
17. Bose, G., Gupta, H. C. and Triphatti, B. B., "Noncentral forces in the study of lattice dynamics of metals", *J. Phys. F.*, 2: 426-432 (1972).
18. Kambayashi, S. and Chihara, J., "Ab initio molecular dynamics for simple liquid metals based on the hypernetted-chain approximation", *Mol. Simul.*, 16: 31-46 (1996).
19. Harrison, W. A., "Pseudopotentials in the Theory of Metals", *Benjamin*, New York, 467-469 (1966).
20. Varshni, Y. P., "Comparative study of potential energy functions for diatomic molecules", *Rev. of Mod. Phys.*, India, 29: 664 (1957).
21. Girifalco, L. A. and Weizer, V. G., "Application of the Morse Potential Function to cubic metals", *Phys. Rev.*, 114: 687 (1959).
22. Milstein, F., "Applicability of exponentially attractive and repulsive interatomic potential functions in the description of cubic crystals", *Appl. Phys.*, 44: 3825 (1973).
23. Halicioğlu, T and Pound, G. M., "Calculation of potential energy parameters from crystalline state propertoies", *Phys. Stat. Sol. A*, 30: 619 (1975).
24. Pamuk, H. Ö, and Halicioğlu, T., "Evaluation of morse parameters for metals", *Phys. Stat. Sol. A*, 37: 69 (1976).
25. Kittel, C., "Introduction to Solid State Physics", John Wiley and Sons, *Inc.*, New York, 4: 38-150 (1971).
26. Born, M., and Kun, H., "Dynamical theory of crystal lattices", *Oxford University*, Oxford, 234 (1954).
27. Lincoln, R. C., Koliwad, K. M. and Ghate, P. B., "Morse-Potential evaluation of second and third order elastic constants of some cubic metals", *Phys. Rev.*, 157: 463 (1967).
28. Milstein, F., "Mechanical stability of crystal lattices", *Phys. Rev. B*, 2: 512 (1970).
29. Rayne, J. A., "Elastic Constants of Palladium from 4.2-300 K", *Phys. Rev.*, 118: 1545-1549 (1960).
30. Ghatak, A. K. and Kothari, L. S., "An introduction to lattice dynamics", *Advison-Wesley*, London, 13-112 (1972).

31. Ibers, J. A. and Hamilton, W. C., "International Tables for X-Ray Crystallography", *Kynock Pres*, Birmingham, 3 (1974).
32. Lyman, T., "Metals Handbook", *American Society for Metals*, Ohio, 843,846 (1948).
33. Hultgren, R., Orr, R. L., Anderson, P. D. and Kelley, K. K., "Selected Values of Thermodynamic Properties of Metals and Alloys", John Wiley and Sons, **Inc.**, New York, 153-157 (1963).
34. Landolt, H., Börnstein, R., "Numerical Data And Functional Relationships In Science and Technology", *Springer*, Verlag, 2: 378 (1961).
35. Shyam, R., Upadhyaya, S. C., Upadhyaya, J. C., "First-principles calculation of the lattice dynamics of the $\text{Co}_{0.92}\text{Fe}_{0.08}$ alloy", *Phys. Stat. Sol. B*, 161: 565 (1990).
36. Shyu, W., and Gaspari, G. D., "Screened interionic potential of the simple metals" *Phys. Rev.*, 170: 687-693 (1968).
37. Kamitakahara, W. A. and Brockhouse, B. N., "Vibrations of a mixed crystal: neutron scattering from $\text{Ni}_{55}\text{Pd}_{45}$ ", *Phys. Rev. B*, 10: 1200-1212 (1974).
38. Milstein, F., "Mechanical stability of crystal lattices", *Phys. Rev. B*, 2: 512 (1970).
39. Born, M., "On the stability of crystal lattices", *Proc. Cambridge Phil. Soc.*, 36: 160 (1940).
40. Birgeneau, R. J., Cordes J., Dolling, G. and Wood, A. D. B., "Normal modes of vibration in nickel", *Phys. Rev. A*, 136: 1359 (1964).
41. Kuchhal, P., "Pressure-volume calculation in bcc metals using Born stability criteria", *Pramana J. of Physics*, 53 (4): 783-794 (1999).
42. Lubarda, V. A., "New Estimates of the third-order elastic constants for isotropic aggregates of cubic crystals", *J. Mech. Phys. Solids.*, 45 (4): 471-491 (1997).
43. Sarma, V. P. and Reddy, P. J., "Third-order elastic constants of single crystal nickel at 80 K", *Physics Status Solidi A*, 16: 413-418 (1973).
44. Varshni, Y. P. and Yurn, P. S., "Angular forces in the lattice dynamics of face-centered cubic metals", *Phys. Rev. A*, 164 (3): 896-897 (1967).

EKLER

EK-1. Bcc metaller için bilgisayar programları

Bcc metallerde potansiyelin girifalco metodu ile parametrize edilmesi

```

1 CLS
2 REM bcc metallerde VARSHNI POTANSİYELİNİN PARAMETRIZE
EDİLMESİ
3 DEFDBL A-B
9 INPUT "Metalin adi=",METAL$
10 INPUT "cohesive enerjiyi giriniz=",COH
12 Q=(COH*1E+10)/(6.023E+23)
13 PRINT Q
20 INPUT "Alfa'nin BASLANGIC DEGERINI GIRINIZ=",ALFA
25 INPUT "Orgu Sabitini Giriniz=",ORGU
26 O=ORGU*.5
30 INPUT "BULK=",BULK
35 CLS
40 FOR T=1 TO 5000
50 Y=0:Z=0:W=0:P=0:R=0:U=0:X=0:AT=0
60 ALFA=ALFA+1E-08
70 FOR M1=1 TO 11
80 FOR M2=1 TO 11
90 FOR M3=1 TO 11
100 N1=M1-6
110 N2=M2-6
120 N3=M3-6
140 NN=N1+N2+N3
150 IF N1/2=N1\2 AND N2/2=N2\2 AND N3/2=N3\2 OR N1/2<>N1\2 AND
N2/2<>N2\2 AND N3
/2<>N3\2 THEN 160 ELSE 320
160 MJ=SQR(N1^2+N2^2+N3^2)
170 IF MJ^2<=30 AND MJ^2<>0 THEN 180 ELSE 320
180 H1=EXP(-ALFA*MJ^2)*(MJ^(-1)+2*ALFA*MJ)
190 Y=Y+H1
200 H2=EXP(-2*ALFA*MJ^2)*(2*ALFA+MJ^(-2))
202 Z=Z+H2
203 IF Z=0 THEN 220 ELSE 205
205 X= Y/Z
220 LOCATE 2,10:PRINT "X=",X
230 H3=EXP(-2*ALFA*MJ^2)*(MJ)^(-2)
240 W=W+H3
250 H4=2*EXP(-ALFA*MJ^2)*(MJ)^(-1)
260 R=R+H4
270 L=(W*X^2-R*X)
275 IF L=0 THEN 290 ELSE 285
285 D= (2*Q)/L

```

EK-1. (Devam) Bcc metaller için bilgisayar programları

```

290 SD=EXP(-2*ALFA*MJ^2)*(16*ALFA^2*MJ^2*O^(-2)+12*ALFA*O^(-
2)+6*MJ^(-2)*O^(-2))
300 P=P+SD
310 MC=EXP(-MJ^2*ALFA)*(8*ALFA^2*MJ^3+4*ALFA*MJ+4*MJ^(-
1))*O^(-2)
312 U=U+MC
314 RT=D*.5*(X^2*P-X*U):REM potansiyelin ikinci turevini degeri
316 K=(36*O)^(-1)*RT
317 AT=AT+1
318 LOCATE 10,20:PRINT "BULK=";K
319 LOCATE 18,22:PRINT "Alfa=",ALFA
320 NEXT M3
330 NEXT M2
340 NEXT M1
350 FARK=(K*1E-12)-BULK
355 PRINT "FARK=";FARK:PRINT AT
360 IF FARK>= -.0001 AND FARK<= .0001 THEN 371 ELSE 370
370 NEXT T
371 B=ALFA/O^2
375 PRINT "Metalin Adi=",METAL$
377 PRINT "b=",B
406 PRINT "alfa=",ALFA
420 PRINT "K=";K;"dyn/cm^2"
430 PRINT "D=";D;"erg"
435 PRINT "x=",X
440 END

```

Bcc metallerde girifalco metodu ile r_e 'nin elde edilmesi

```

2 REM bcc metallerde VARSHNI POTANSİYELİNİN PARAMETRİZE
EDİLMESİ
3 DEFDBL A-B, W-Z
9 INPUT "Metalin adi=",METAL$
20 INPUT "Alfa'nin DEGERINI GIRINIZ=",ALFA
21 INPUT "X=",X
25 INPUT "Orgu Sabitini Giriniz=",ORGU
26 O=ORGU*.5
30 INPUT "w=",W
35 CLS
40 FOR T=1 TO 5000
50 Y=0
60 W=W+1E-08
180 H1=EXP(ALFA*W^2)*W
182 Y=Y+H1

```

EK-1. (Devam) Bcc metalller için bilgisayar programları

```

318 LOCATE 10,20:PRINT "y=";Y
319 LOCATE 18,22:PRINT "w=",W
350 FARK=X-Y
355 PRINT "FARK=";FARK
360 IF FARK>=-.000001      AND FARK<=.000001      THEN 375 ELSE 370
370 NEXT T
375 PRINT "Metalin Adi=",METAL$
406 RO=W*O
420 PRINT "ro=",RO
440 END
Ok

```

Bcc metalller için ikinci derecen elastik sabitlerinin hesaplanması

```

80 INPUT "orgu sabiti=",ORG
82 INPUT "alfa=",ALFA
85 O=ORG/2
87 VB=ORG^3/2:PRINT VB
90 INPUT "ro=",RO
100 INPUT "B=";B
200 INPUT "d=";D
210 Q=EXP(B*RO^2)
215 S1=8*D*RO^2*Q^2
217 S2=D*RO*Q*2
300 FOR M1=1 TO 11
400 FOR M2=1 TO 11
500 FOR M3=1 TO 11
600 N1=M1-6
700 N2=M2-6
800 N3=M3-6
850 NN=N1+N2+N3
900 IF N1/2=N1\2 AND N2/2=N2\2 AND N3/2=N3\2 OR N1/2<>N1\2 AND
N2/2<>N2\2 AND N3/2<>N3\2 THEN 1000 ELSE 1200
1000 J=SQR(N1^2+N2^2+N3^2)
1006 IF J=0 THEN GOTO 1200 ELSE GOTO 1008
1008 IF J^2>=30 THEN GOTO 1200 ELSE GOTO 1010
1010 R=J*O
1020 H=N1^4*O^(-2)*(2*ALFA^2*J^(-2)+2*ALFA*J^(-4)+J^(-6))*EXP(-
2*ALFA*J^2)
1025 H1=N1^2*O^(-2)*(2*ALFA^2*J^(-2)+2*ALFA*J^(-4)+J^(-6))*EXP(-
2*ALFA*J^2)*N2^2
1030 X=X+H
1032 U=U+H1

```

EK-1. (Devam) Bcc metalller için bilgisayar programları

```

1040 G=N1^4*O^(-1)*(4*ALFA^2*J^(-1)+4*ALFA*J^(-3)+3*J^(-5))*EXP(-
ALFA*J^2)
1042 G1=N1^2*O^(-1)*(4*ALFA^2*J^(-1)+4*ALFA*J^(-3)+3*J^(-5))*EXP(-
ALFA*J^2)*N2^2
1044 Y=Y+G
1046 P=P+G1
1048 C11=(S1*X-S2*Y)*(2*VB)^(-1)
1050 C12=(S1*U-S2*P)*(2*VB)^(-1)
1069 AT=AT+1
1200 NEXT M3:NEXT M2:NEXT M1
1300 PRINT "c11=",C11
1303 PRINT "c12=",C12
1305 PRINT "at=";AT
1400 END
Ok

```

Bcc metalller için üçüncü dereceden elastik sabitlerinin hesaplanması

```

80 INPUT "orgu sabiti=",ORG
82 INPUT "alfa=",ALFA
85 O=ORG/2
87 VB=ORG^3/2:PRINT VB
90 INPUT "ro=",RO
100 INPUT "B=";B
200 INPUT "d=";D
210 Q=EXP(B*RO^2)
215 S1=2*D*RO*Q*O^(-1)
217 S2=16*D*RO^2*Q^2*O^(-2)
300 FOR M1=1 TO 13
400 FOR M2=1 TO 13
500 FOR M3=1 TO 13
600 N1=M1-7
700 N2=M2-7
800 N3=M3-7
900 IF N1/2=N1\2 AND N2/2=N2\2 AND N3/2=N3\2 OR N1/2<>N1\2 AND
N2/2<>N2\2 AND N3/2<>N3\2 THEN 1000 ELSE 1200
1000 J=SQR(N1^2+N2^2+N3^2)
1006 IF J=0 THEN GOTO 1200 ELSE GOTO 1008
1008 IF J^2>=19 THEN GOTO 1200 ELSE GOTO 1010
1010 R=J*O
1020 H=N1^6*(8*ALFA^3*J^(-1)+12*ALFA^2*J^(-3)+18*ALFA*J^(-5)+15*J^(-
7))*EXP(-ALFA*J^2)

```

EK-1. (Devam) Bcc metaller için bilgisayar programları

```

1025 H1=N1^6*(4*ALFA^3*J^(-2)+6*ALFA^2*J^(-4)+6*ALFA*J^(-6)+3*J^(-
8))*EXP(-2*ALFA*J^2)
1026 H2=N1^4*N2^2*(8*ALFA^3*J^(-1)+12*ALFA^2*J^(-3)+18*ALFA*J^(-
5)+15*J^(-7))*EXP(-ALFA*J^2)
1028 H3=N1^4*N2^2*(4*ALFA^3*J^(-2)+6*ALFA^2*J^(-4)+6*ALFA*J^(-
6)+3*J^(-8))*EXP(-
2*ALFA*J^2)
1030 X=X+H
1040 Y=Y+H1
1042 U=U+H2
1044 P=P+H3
1046 H4=N1^2*N2^2*N3^2*(8*ALFA^3*J^(-1)+12*ALFA^2*J^(-
3)+18*ALFA*J^(-5)+15*J^(-7
))*EXP(-ALFA*J^2)
1047 H5=N1^2*N2^2*N3^2*(4*ALFA^3*J^(-2)+6*ALFA^2*J^(-4)+6*ALFA*J^(-
6)+3*J^(-8))*
EXP(-2*ALFA*J^2)
1050 T=T+H4
1052 W=W+H5
1060 C111=(S1*X-S2*Y)*(2*VB)^(-1)
1062 C112=(S1*U-S2*P)*(2*VB)^(-1)
1064 C123=(S1*T-S2*W)*(2*VB)^(-1)
1069 AT=AT+1
1200 NEXT M3:NEXT M2:NEXT M1
1205 CLS
1300 LOCATE 4,10:PRINT "c111=",C111
1302 LOCATE 6,10:PRINT "c112=",C112
1305 LOCATE 8,10:PRINT "c123=",C123
1400 END

```

Bcc metaller için milstein metodu ile potansiyelin hesaplanması

```

1 CLS
100 OS=2.87E-08
200 C12=1.381E+12
300 C11=2.432E+12
400 INPUT "alfa=",A
500 O=OS/2
600 ORAN=C11/C12
700 FOR T=1 TO 5000
750 X=0 : Y=0 : Z=0 : W=0 : U=0 : P=0
800 LOCATE 12,18:PRINT "oran=",ORAN
850 A=A+.0001

```

EK-1. (Devam) Bcc metaller için bilgisayar programları

```

900 FOR I1=1 TO 11
1000 FOR I2=1 TO 11
1100 FOR I3=1 TO 11
1200 N1=I1-6
1300 N2=I2-6
1400 N3=I3-6
1500 NN=N1+N2+N3
1600 IF N1/2=N1\2 AND N2/2=N2\2 AND N3/2=N3\2 OR N1/2<>N1\2 AND
N2/2<>N2\2 AND N3/2<>N3\2 THEN 1700 ELSE 5000
1700 MI=SQR(N1^2+N2^2+N3^2)
1800 IF MI=0 THEN GOTO 5000 ELSE GOTO 1900
1900 IF MI^2>=30 THEN GOTO 5000 ELSE GOTO 2000
2000 H1=N1^2*EXP(-A*MI^2)*(MI^(-1)+2*A*MI)
2100 X=X+H1
2200 H2=N1^2*EXP(-2*A*MI^2)*(2*A+MI^(-2))
2300 Y=Y+H2
2400 IF Y=0 THEN GOTO 2600 ELSE GOTO 2500
2500 G=X/Y
2600 H3=N1^4*O^(-2)*(2*A^2*MI^(-2)+2*A*MI^(-4)+MI^(-6))*EXP(-
2*A*MI^2)
2700 Z=Z+H3
2800 H4=N1^2*O^(-2)*(2*A^2*MI^(-2)+2*A*MI^(-4)+MI^(-6))*EXP(-
2*A*MI^2)*N2^2
2900 W=W+H4
3000 H5=N1^4*O^(-1)*(4*A^2*MI^(-1)+4*A*MI^(-3)+3*MI^(-5))*EXP(-
A*MI^2)
3100 U=U+H5
3200 H6=N1^2*O^(-1)*(4*A^2*MI^(-1)+4*A*MI^(-3)+3*MI^(-5))*EXP(-
A*MI^2)*N2^2
3300 P=P+H6
3400 CC1=(Z*G*O*8-2*U)
3500 CC2=(W*G*O*8-2*P)
3600 IF CC2=0 THEN GOTO 3800 ELSE GOTO 3700
3700 CC=CC1/CC2
3800 LOCATE 15,22:PRINT "g=";G
3900 LOCATE 18,22:PRINT "c11/c12=";CC
4000 LOCATE 20,22:PRINT "alfa=";A
5000 NEXT I3:NEXT I2:NEXT I1
5100 FARK= CC-ORAN
5200 LOCATE 22,22:PRINT "fark=";FARK
5300 IF FARK>=-.0001 AND FARK<=.0001 THEN GOTO 6000 ELSE GOTO
5400
5400 NEXT T
6000 BETA=A/O^2

```

EK-1. (Devam) Bcc metalller için bilgisayar programları

```
6100 PRINT "beta=";BETA
6200 PRINT "x=";G
6300 PRINT "alfa=";A
6400 V=OS^3
6500 SABIT=G*O
6600 D=C11*(CC1*SABIT*V^(-1))^(-1)
6700 PRINT "D=";D
6900 END
Ok
```


EK-2. Fcc metaller için bilgisayar programları

Fcc metallerde potansiyelin girifalco metodu ile parametrize edilmesi

```

1 CLS
2 REM fcc metallerde VARSHNI POTANSİYELİNİN PARAMETRİZE EDİLMESİ
3 DEFDBL A-B
9 INPUT "Metalin adi=",METAL$
10 INPUT "COHESIVE ENERJİYİ KJ/MOL OLARAK GIRINIZ=",COH
12 Q=(COH*1E+10)/(6.023E+23)
13 PRINT Q
20 INPUT "Alfa'nin BASLANGIC DEĞERİNİ GIRINIZ=",ALFA
25 INPUT "Orgu Sabitini cm olarak giriniz=",ORGU
26 O=ORGU*.5
30 INPUT "BULK MODULUNU dyn/cm^2 OLARAK GIRINIZ=",BULK
35 CLS
40 FOR T=1 TO 5000
50 Y=0:Z=0:W=0:P=0:R=0:U=0:X=0
60 ALFA=ALFA-1E-08
70 FOR M1=1 TO 11
80 FOR M2=1 TO 11
90 FOR M3=1 TO 11
100 N1=M1-6
110 N2=M2-6
120 N3=M3-6
140 NN=N1+N2+N3
150 IF NN/2=NN\2 THEN 160 ELSE 320
160 MJ=SQR(N1^2+N2^2+N3^2)
170 IF MJ^2<19 AND MJ>0 THEN 180 ELSE 320
180 H1=EXP(-ALFA*MJ^2)*(MJ^(-1)+2*ALFA*MJ)
190 Y=Y+H1
200 H2=EXP(-2*ALFA*MJ^2)*(2*ALFA+MJ^(-2))
202 Z=Z+H2
203 IF Z=0 THEN 220 ELSE 205
205 X= Y/Z
220 LOCATE 2,10:PRINT "X=",X
230 H3=EXP(-2*ALFA*MJ^2)*(MJ)^(-2)
240 W=W+H3
250 H4=2*EXP(-ALFA*MJ^2)*(MJ)^(-1)
260 R=R+H4
270 L=(W*X^2-R*X)
275 IF L=0 THEN 290 ELSE 285
285 D= (2*Q)/L
290 SD=EXP(-2*ALFA*MJ^2)*(16*ALFA^2*MJ^2*O^(-2)+12*ALFA*O^(-2)+6*MJ^(-2)*O^(-2))
300 P=P+SD

```

EK-2. (Devam) Fcc metaller için bilgisayar programları

```

310 MC=EXP(-MJ^2*ALFA)*(8*ALFA^2*MJ^(3)+4*ALFA*MJ+4*MJ^(-
1))*O^(-2)
312 U=U+MC
314 RT=D*.5*(X^2*P-X*U):REM potansiyelin ikinci turevini degeri
316 K=(18*O)^(-1)*RT
318 LOCATE 10,20:PRINT "BULK=";K
319 LOCATE 18,22:PRINT "Alfa=",ALFA
320 NEXT M3
330 NEXT M2
340 NEXT M1
350 FARK=(K*1E-12)-BULK
355 PRINT "FARK=";FARK
360 IF FARK>= -.000001      AND FARK<= .000001      THEN 371 ELSE 370
370 NEXT T
371 B=ALFA/O^2
375 PRINT "Metalin Adi=",METAL$
377 PRINT "b=",B
406 PRINT "alfa=";ALFA
420 PRINT "K=";K;"dyn/cm^2"
430 PRINT "D=";D;"erg"
435 PRINT "x=",X
440 END

```

Fcc metallerde girifalco metodu ile r_e 'nin elde edilmesi

```

9 INPUT " Metalin adi=",METAL$
20 INPUT "Alfa'nin DEGERINI GIRINIZ=",ALFA
21 INPUT "X=",X
25 INPUT "Orgu Sabitini Giriniz=",ORGU
26 O=ORGU*.5
30 INPUT "w=",W
35 CLS
40 FOR T=1 TO 5000
50 Y=0
60 W=W+1E-08
180 H1=EXP(ALFA*W^2)*W
182 Y=Y+H1
318 LOCATE 10,20:PRINT "y=";Y
319 LOCATE 18,22:PRINT "w=",W
350 FARK=X-Y
355 PRINT "FARK=";FARK
360 IF FARK>= -.000001      AND FARK<= .000001      THEN 375 ELSE 370
370 NEXT T
375 PRINT "Metalin Adi=",METAL$

```

EK-2. (Devam) Fcc metalller için bilgisayar programları

```
406 RO=W*O
420 PRINT "ro=",RO
```

Fcc metalller için ikinci derecen elastik sabitlerinin hesaplanması

```
1 DEFDBL A-L,P-Z
80 INPUT "orgu sabiti=",ORG
82 INPUT "alfa=",ALFA
85 O=ORG/2
87 VB=ORG^3/4:PRINT VB
90 INPUT "ro=",RO
100 INPUT "B=";B
200 INPUT "d=";D
210 Q=EXP(B*RO^2)
215 S1=8*D*RO^2*Q^2
217 S2=D*RO*Q*2
300 FOR M1=1 TO 11
400 FOR M2=1 TO 11
500 FOR M3=1 TO 11
600 N1=M1-6
700 N2=M2-6
800 N3=M3-6
850 NN=N1+N2+N3
900 IF NN/2=INT(NN/2) THEN 1000 ELSE 1200
1000 J=SQR(N1^2+N2^2+N3^2)
1006 IF J=0 THEN GOTO 1200 ELSE GOTO 1008
1008 IF J^2>=19 THEN GOTO 1200 ELSE GOTO 1010
1010 R=J*O
1020 H=N1^4*O^(-2)*(2*ALFA^2*J^(-2)+2*ALFA*J^(-4)+J^(-6))*EXP(-
2*ALFA*J^2)
1025 H1=N1^2*O^(-2)*(2*ALFA^2*J^(-2)+2*ALFA*J^(-4)+J^(-6))*EXP(-
2*ALFA*J^2)*N2^2
1030 X=X+H
1032 U=U+H1
1040 G=N1^4*O^(-1)*(4*ALFA^2*J^(-1)+4*ALFA*J^(-3)+3*J^(-5))*EXP(-
ALFA*J^2)
1044 Y=Y+G
1046 G1=N1^2*O^(-1)*(4*ALFA^2*J^(-1)+4*ALFA*J^(-3)+3*J^(-5))*EXP(-
ALFA*J^2)*N2^2
1047 P=P+G1
1048 C11=(S1*X-S2*Y)*(2*VB)^(-1)
1050 C12=(S1*U-S2*P)*(2*VB)^(-1)
1069 AT=AT+1
1200 NEXT M3:NEXT M2:NEXT M1
1300 PRINT "c11=",C11
```

EK-2. (Devam) Fcc metalller için bilgisayar programları

```

1302 PRINT "c12=",C12
1305 PRINT "at=";AT
1400 END

```

Fcc metalller için üçüncü dereceden elastik sabitlerinin hesaplanması

```

80 INPUT "orgu sabiti=",ORG
82 INPUT "alfa=",ALFA
85 O=ORG/2
87 VB=ORG^3/4:PRINT VB
90 INPUT "ro=",RO
100 INPUT "B=";B
200 INPUT "d=";D
210 Q=EXP(B*RO^2)
215 S1=2*D*RO*Q*O^(-1)
217 S2=16*D*RO^2*Q^2*O^(-2)
300 FOR M1=1 TO 11
400 FOR M2=1 TO 11
500 FOR M3=1 TO 11
600 N1=M1-6
700 N2=M2-6
800 N3=M3-6
850 NN=N1+N2+N3
900 IF NN/2=INT(NN/2) THEN 1000 ELSE 1200
1000 J=SQR(N1^2+N2^2+N3^2)
1006 IF J=0 THEN GOTO 1200 ELSE GOTO 1008
1008 IF J^2>=19 THEN GOTO 1200 ELSE GOTO 1010
1010 R=J*O
1020 H=N1^6*(8*ALFA^3*J^(-1)+12*ALFA^2*J^(-3)+18*ALFA*J^(-5)+15*J^(-7))*EXP(-ALFA*J^2)
1025 H1=N1^6*(4*ALFA^3*J^(-2)+6*ALFA^2*J^(-4)+6*ALFA*J^(-6)+3*J^(-8))*EXP(-2*ALFA*J^2)
1026 H2=N1^4*N2^2*(8*ALFA^3*J^(-1)+12*ALFA^2*J^(-3)+18*ALFA*J^(-5)+15*J^(-7))*EXP(-ALFA*J^2)
1028 H3=N1^4*N2^2*(4*ALFA^3*J^(-2)+6*ALFA^2*J^(-4)+6*ALFA*J^(-6)+3*J^(-8))*EXP(-2*ALFA*J^2)
1030 X=X+H
1040 Y=Y+H1
1042 U=U+H2
1044 P=P+H3
1046 H4=N1^2*N2^2*N3^2*(8*ALFA^3*J^(-1)+12*ALFA^2*J^(-3)+18*ALFA*J^(-5)+15*J^(-7))*EXP(-ALFA*J^2)

```

EK-2. (Devam) Fcc metalller için bilgisayar programları

```

1047 H5=N1^2*N2^2*N3^2*(4*ALFA^3*J^(-2)+6*ALFA^2*J^(-4)+6*ALFA*J^(-6)+3*J^(-8))*
EXP(-2*ALFA*J^2)
1050 T=T+H4
1052 W=W+H5
1060 C111=(S1*X-S2*Y)*(2*VB)^(-1)
1062 C112=(S1*U-S2*P)*(2*VB)^(-1)
1064 C123=(S1*T-S2*W)*(2*VB)^(-1)
1069 AT=AT+1
1200 NEXT M3:NEXT M2:NEXT M1
1205 CLS
1300 LOCATE 4,10:PRINT "c111=",C111
1302 LOCATE 6,10:PRINT "c112=",C112
1305 LOCATE 8,10:PRINT "c123=",C123
1400 END
Ok

```

Fcc metalller için milstein metodu ile potansiyelin hesaplanması

```

1 CLS
100 OS=3.5238E-08
200 C12=1.508E+12
300 C11=2.612E+12
400 INPUT "alfa=",A
500 O=OS/2
600 ORAN=C11/C12
700 FOR T=1 TO 5000
750 X=0 : Y=0 : Z=0 : W=0 : U=0 : P=0
800 LOCATE 12,18:PRINT "oran=",ORAN
850 A=A+.0001
900 FOR I1=1 TO 11
1000 FOR I2=1 TO 11
1100 FOR I3=1 TO 11
1200 N1=I1-6
1300 N2=I2-6
1400 N3=I3-6
1500 NN=N1+N2+N3
1600 IF NN/2=INT(NN/2) THEN 1700 ELSE 5000
1700 MI=SQR(N1^2+N2^2+N3^2)
1800 IF MI=0 THEN GOTO 5000 ELSE GOTO 1900
1900 IF MI^2>=19 THEN GOTO 5000 ELSE GOTO 2000
2000 H1=N1^2*EXP(-A*MI^2)*(MI^(-1)+2*A*MI)
2100 X=X+H1
2200 H2=N1^2*EXP(-2*A*MI^2)*(2*A+MI^(-2))
2300 Y=Y+H2

```

EK-2. (Devam) Fcc metalller için bilgisayar programları

```

2400 IF Y=0 THEN GOTO 2600 ELSE GOTO 2500
2500 G=X/Y
2600 H3=N1^4*O^(-2)*(2*A^2*MI^(-2)+2*A*MI^(-4)+MI^(-6))*EXP(-
2*A*MI^2)
2700 Z=Z+H3
2800 H4=N1^2*O^(-2)*(2*A^2*MI^(-2)+2*A*MI^(-4)+MI^(-6))*EXP(-
2*A*MI^2)*N2^2
2900 W=W+H4
3000 H5=N1^4*O^(-1)*(4*A^2*MI^(-1)+4*A*MI^(-3)+3*MI^(-5))*EXP(-
A*MI^2)
3100 U=U+H5
3200 H6=N1^2*O^(-1)*(4*A^2*MI^(-1)+4*A*MI^(-3)+3*MI^(-5))*EXP(-
A*MI^2)*N2^2
3300 P=P+H6
3400 CC1=(Z*G*O*8-2*U)
3500 CC2=(W*G*O*8-2*P)
3600 IF CC2=0 THEN GOTO 3800 ELSE GOTO 3700
3700 CC=CC1/CC2
3800 LOCATE 15,22:PRINT "g=";G
3900 LOCATE 18,22:PRINT "c11/c12=";CC
4000 LOCATE 20,22:PRINT "alfa=";A
5000 NEXT I3:NEXT I2:NEXT I1
5100 FARK= CC-ORAN
5200 LOCATE 22,22:PRINT "fark=";FARK
5300 IF FARK>=-.0001 AND FARK<=.0001 THEN GOTO 6000 ELSE GOTO
5400 NEXT T
6000 BETA=A/O^2
6100 PRINT "beta=";BETA
6200 PRINT "x=";G
6300 PRINT "alfa=";A
6400 V=OS^3/2
6500 SABIT=G*O
6600 D=C11*(CC1*SABIT*V^(-1))^(-1)
6700 PRINT "D=";D
6900 END
Ok

```

ÖZGEÇMİŞ

Kişisel Bilgiler

Soyadı, adı : ŞAHMARAN, Mehmet Dinçer

Uyruğu : T.C.

Doğum tarihi ve yeri : 03.07.1979 Kilis

Medeni hali : Evli

Telefon : 0 (312) 8379740

e-mail : sahmaran06@mynet.com

Eğitim

Derece	Eğitim Birimi	Mezuniyet tarihi
Lisans	İnönü Üniversitesi/ Fizik Bölümü	1998
Lise	Kanuni Lisesi	1996

İş Deneyimi

Yıl	Yer	Görev
2000-2007	Milli Eğitim Bakanlığı	Öğretmen

Yabancı Dil

İngilizce

Hobiler

Bilgisayar, programcılık, izcilik

