

45528

**$\text{Fe}_{(1-x)}\text{-Al}_{(x)}$ ($x = 0.0, 0.25, 0.30$)
SİSTEMLERİNİN MEKANİKSEL KARARLILIĞI**

**YÜKSEK LİSANS TEZİ
(FİZİK)**

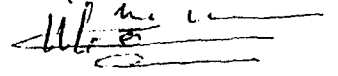
**Hamza Yaşar OCAK
ŞUBAT 1995**

**GAZİ ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

Bu tezin Yüksek Lisans tezi olarak uygun olduğunu onaylarım.

Danışman

Doç.Dr.İrfan AKGÜN



Sınav Jürisi

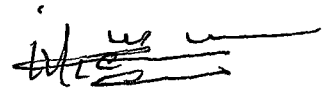
Başkan : Doç.Dr. Kemal ÇOLAKOĞLU



Üye : Doç.Dr. Mehmet ZENGİN



Üye : Doç.Dr. İrfan Akgün



Bu tez Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Tez Yazım
Esaslarına uygundur.



Fe_(1-x)-Al_(x) (x = 0.0, 0.25, 0.30)
SİSTEMLERİNİN MEKANİKSEL KARARLILIĞI

YÜKSEK LİSANS TEZİ

Hamza Yaşar OCAK
GAZİ ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ
ŞUBAT 1995

ÖZ

Max BORN tarafından geliştirilen kararlılık kriterleri sırasıyla bcc, disorder ve DO₃ fazlardaki Fe_(1-x)-Al_(x) (x = 0.0, 0.25, 0.30) sistemlerinin mekaniksel kararlılığını incelemek için uygulandı. Atomlar arasındaki etkileşimler için genelleştirilmiş Morse ve modifiye Morse potansiyel enerji fonksiyonları ayrı ayrı kullanıldı. Bu fonksiyonların ifadeleri,

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

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

şeklinde verilmiştir. Böylece bu merkezi atomik potansiyeller Fe_(1-x)-Al_(x) sistemlerinin mekaniksel kararlılığı için test edildi. Bu kristal örgüler için potansiyel parametreleri Akgün modeli ve Girifalco-Weizer metodu kullanılarak hesaplandı. Bir eksen doğrultusunda uygulanan kuvvet nedeni ile homojen olarak deforme edilen bu sistemlerin enerjileri, enerji yoğunlukları, elastik sabitleri ve zorlar hesaplandı. Son olarak sistemlerin kararlılık şartları hesaplanan nümerik değerlerden belirlendi. Modifiye Morse potansiyeli kararlılık kriterlerini sağlamaz iken m=2 için tanımlanan Genelleştirilmiş Morse potansiyelinin BORN kriterlerini sağladığı görüldü.

Bilim Kodu : 404.051

Anahtar Kelimeler : İki cisim etkileşmesi, enerji, zorlar, enerji

yoğunluğu, elastik sabitler ve mekaniksel kararlılık.

Sayfa Adedi : 86

Tez Yöneticisi : Doç.Dr.İrfan AKGÜN

**MECANICAL STABILITY
OF Fe_(1-x)-Al_(x) (x = 0.0, 0.25, 0.30) SYSTEMS**

(M.Sc. Thesis)

**Hamza Yaşar OCAK
GAZİ UNIVERSITY
INSTITUTE OF SCIENCE AND TECHNOLOGY
FEBRUARY 1995**

ABSTRACT

The stability criteria developed by Max BORN have been applied to the study of the mechanical stability for Fe_(1-x)-Al_(x) systems (x = 0.0, 0.25, 0.30) in bcc, disorder and DO₃ phases, respectively. For the interactions between the atoms, the generalised Morse and Modified Morse potential energy functions given below have been used separately.

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

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

Therefore, these pair interatomic potentials have been tested for the mechanical stability for Fe_(1-x)-Al_(x) systems. For the crystal lattices the potential parameters have been computed using Akgün model and Girifalco-Weizer method. Energies, energy densities, elastic constants and stresses of these systems which deformed homogeneously by a force acting in the direction of one axis, have been also calculated. Finally, the equilibrium conditions have been determined from the computed numerical values. While the modified Morse potential doesn't satisfy the stability criteria, it is seen that the Morse potential defined for m=2 satisfies the BORN criteria.

Science Code :4040501

Key Words :Two-body interactions, energy, stress, density of energy, elastic constants and mechanical stability

Page number :86

Adviser : Doç.Dr. İrfan AKGÜN

TEŞEKKÜR

Çalışmalarım süresince karşılaştığım bütün zorlukların çözümlenmesinde hiç bir zaman yakın ilgi ve yardımlarını esirgemeyen değerli hocam Sayın; Doç.Dr. İrfan AKGÜN'e şükranlarımı sunarım.

Yine çalışmalarım boyunca ilgisini esirgemeyen ve beni teşvik eden değerli hocam Sayın Prof.Dr. Kemal ÇOLAKOĞLU'na teşekkürlerimi sunarım.

Ayrıca Bilgisayar konularında yardımlarını esirgemeyen başta kıymetli arkadaşım Sayın Arş.Grv. Gökay UĞUR ve yardımlarını gördüğüm bütün arkadaşlara da teşekkür ederim.

TABLOLARIN LİSTESİ

<u>Tablo</u>	<u>Sayfa</u>
1. Fe-Al Sistemlerinin Hesaplanan Etkileşim Parametreleri.....	22
2. Fe-Al Sistemleri İçin Giriş Verileri.....	39
3. Fe-Al Sistemleri İçin Genelleştirilmiş Morse Potansiyel Parametrelerinin Hesaplanan Değerleri.....	40
4. Fe-Al Sistemleri İçin Modifiye Morse Potansiyel Parametrelerinin Hesaplanan Değerleri.....	41
5. Fe İçin Genelleştirilmiş Morse Potansiyel Fonksiyonu Kullanılarak Hesaplanan a_2 , E ve σ Değerleri	45
6. Fe İçin Hesaplanan B_{ij} ve Kararlılık Sonuçları.....	46
7. Fe İçin Genelleştirilmiş Morse Potansiyel Fonksiyonu Kullanılarak Hesaplanan C_{11}/C_{12} Oranı	46
8. Fe İçin Modifiye Morse Potansiyelinde Hesaplanan Enerji, zor ve a_2 Değerleri.....	50
9. Fe İçin Modifiye Morse Potansiyeline Göre B_{ij} , K_1 ve K_2 Sonuçları	51
10. Fe İçin Modifiye Morse'dan Hesaplanan C_{11}/C_{12} Oranları.....	52
11. Alaşımın Disorder Yapısı İçin Genelleştirilmiş Morse'dan Hesaplanan E, σ , ve a_2 Sonuçları	56
12. Alaşımın Disorder Yapısı İçin Genelleştirilmiş Morse'dan Hesaplanan B_{ij} , K_1 ve K_2 Sonuçları.....	57
13. Disorder yapı için Genelleştirilmiş Morse'dan Bulunan C_{11}/C_{12} Değerleri	58
14. Modifiye Morse Kullanılarak Alaşımın Disorder Yapısı İçin Hesaplanan Enerji, Zor ve a_2 Değerleri	62

15. Modifiye Morse Kullanılarak Alařımın Disorder Yapısı İçin Hesaplanan B_{ij} , K_1 , ve K_2 Sonuçları.....	63
16. Modifiye Morse Kullanılarak Disorder Yapı İçin Hesaplanan C_{11}/C_{12} Oranları.....	64
17. Alařımın DO_3 Yapısı İçin Genelleřtirilmiř Morse'dan Hesaplanan Enerji, Zor ve a_2 Parametreleri.....	68
18. Alařımın DO_3 Yapısı İçin Genelleřtirilmiř Morse'dan Hesaplanan B_{ij} , K_1 ve K_2 Sonuçları	69
19. Alařımın DO_3 Yapısı İçin Genelleřtirilmiř Morse'dan Hesaplanan C_{11}/C_{12} Sonuçları	70
20. Alařımın DO_3 Yapısı İçin Modifiye Morse'dan Hesaplanan Enerji, Zor ve a_2 Parametreleri.....	74
21. Alařımın DO_3 Yapısı İçin Modifiye Morse'dan Hesaplanan B_{ij} , K_1 ve K_2 Sonuçları	75
22. Alařımın DO_3 Yapısı İçin Hesaplanan C_{11}/C_{12} Sonuçları.....	76

ŞEKİLLERİN LİSTESİ

<u>Sekil</u>	<u>Sayfa</u>
1. Fe-Al Alaşımının Atomik Yapısı	2
2. Sıcaklık ve %Al Oranına Göre Faz Yapıları.....	4
3. Al Oranına Göre Örgü Parametresi ve Elastik Sabitler	5
4. Kübik Kristal Örgü Yapıları	11
5. bcc Yapının Dış Kuvvet Altında Değişimi	12
6. Fe İçin Milstein' in Kararlılık Sonuçları.....	42
7. Fe İçin $m=1.5$ da Genelleştirilmiş Morse'dan Hesaplanan Eğriler	47
8. Fe İçin $m=2.5$ da Genelleştirilmiş Morse'dan Hesaplanan Eğriler	48
9. Fe İçin $m=1.5$ da Modifiye Morse'dan Hesaplanan Eğriler	52
10. Fe için $m=2.0$ da Modifiye Morse'dan Hesaplanan Eğriler	53
11. Fe için $m=2.5$ da Modifiye Morse'dan Hesaplanan Eğriler	54
12. Genelleştirilmiş Morse'dan $m=1.5$ da Alaşımın Disorder Yapısı İçin Hesaplanan Eğriler	58
13. Genelleştirilmiş Morse'dan $m=2.0$ da Alaşımın Disorder Yapısı İçin Hesaplanan Eğriler	59
14. Genelleştirilmiş Morse'dan $m=2.5$ da Alaşımın Disorder Yapısı İçin Hesaplanan Eğriler.....	60
15. Modifiye Morse'dan $m=1.5$ da Alaşımın Disorder Yapısı İçin Hesaplanan Eğriler.....	64
16. Modifiye Morse'dan $m=2.0$ da Alaşımın Disorder Yapısı İçin Hesaplanan Eğriler:.....	65
17. Modifiye Morse'dan $m=2.5$ da Alaşımın Disorder Yapısı İçin Hesaplanan Eğriler.....	66
18. Genelleştirilmiş Morse'dan $m=1.5$ da Alaşımın DO_3 Yapısı İçin Hesaplanan Eğriler.....	70
19. Genelleştirilmiş Morse'dan $m=2.0$ da Alaşımın DO_3 Yapısı İçin Hesaplanan Eğriler.....	71

20. Genelleştirilmiş Morse'dan $m=2.5$ da Alaşımın DO_3 Yapısı İçin Hesaplanan Eğriler.....	72
21. Modifiye Morse'dan $m=1.5$ da Alaşımın DO_3 Yapısı İçin Hesaplanan Eğriler.....	76
22. Modifiye Morse'dan $m=2.0$ da Alaşımın DO_3 Yapısı İçin Hesaplanan Eğriler.....	77
23 Modifiye Morse'dan $m=2.5$ da Alaşımın DO_3 Yapısı İçin Hesaplanan Eğriler.....	78



İÇİNDEKİLER

	<u>Sayfa</u>
ÖZ	i
ABSTRACT	ii
Teşekkür	iii
Tabloların Listesi.....	iv
Şekillerin Listesi.....	vi

GİRİŞ

BÖLÜM 1

KÜBİK KRİSTAL ÖRGÜLERİN MEKANİKSEL KARARLILIĞI

1.1 Mekaniksel Kararlılık	7
1.2. Born Kararlılık Kriterleri	8
1.3. Kristal Örgünün Etkileşme Enerjisi	9
1.4. Kristal Örgü Üzerindeki Zor	15
1.5. Fe-Al Alaşımında Atomik Etkileşimler.....	19
1.6. Yüzey Birimi Başına Enerji Yoğunluğu.....	22
1.7. İkinci Dereceden Elastik Sabitler.....	27

BÖLÜM II

İKİ CİSİM MERKEZİ ETKİLEŞME POTANSİYELLERİ

2.1. Genelleştirilmiş Morse Potansiyeli	32
2.2. Modifiye Morse Potansiyeli	35
2.3. $Fe_{(1-x)}-Al_{(x)}$ Sistemleri için Potansiyeli Tanımlayan Parametrelerin Hesabı	37

BÖLÜM III

$\text{Fe}_{(1-x)}\text{-Al}_{(x)}$ SİSTEMLERİNDE KARARLILIK HESABI

3.1. Fe İçin Milstein'in Kararlılık Sonuçları.....	42
3.2. Fe'de Kararlılık Hesabı	43
3.2.1. Genelleştirilmiş Morse Potansiyeline Göre.....	43
3.2.2. Modifiye Morse Potansiyeline Göre.....	48
3.3. Fe -25% Al Alaşımı İçin Kararlılık Hesabı	55
3.3.1 Genelleştirilmiş Morse Potansiyeline Göre.....	55
3.3.2. Modifiye Morse Potansiyeline Göre.....	61
3.4. Fe -30% Al Alaşımı İçin Kararlılık Hesabı	67
3.4.1. Genelleştirilmiş Morse Potansiyeline Göre.....	67
3.4.2. Modifiye Morse Potansiyeline göre	73

BÖLÜM IV.

SONUÇ VE TARTIŞMA	80
KAYNAKLAR.....	84
ÖZGEÇMİŞ	86

GİRİŞ

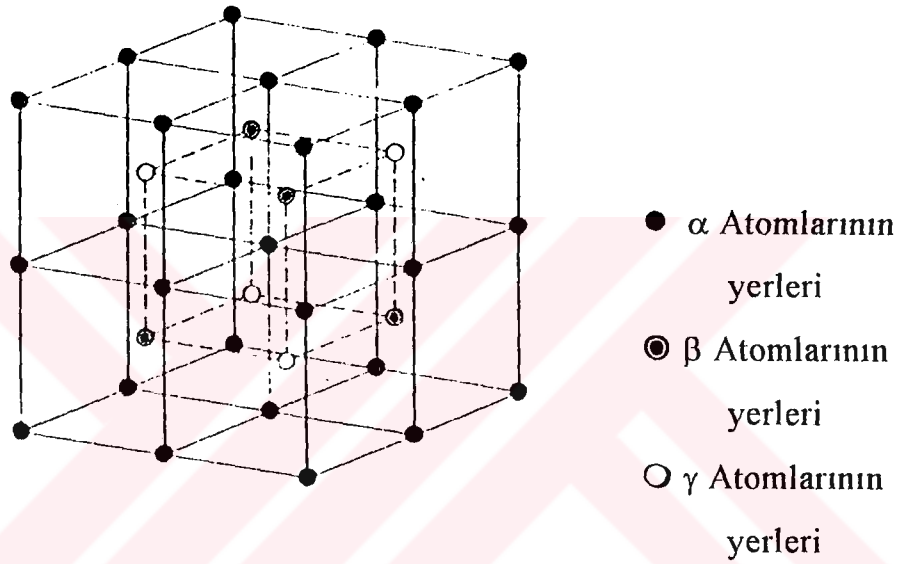
Son zamanlarda katıların elastik, elektriksel ve mekaniksel özelliklerinin yarıdeneysel potansiyel enerji fonksiyonları ile incelenmesi birçok araştırmacının konusu olmuş ve halen bu konular üzerindeki çalışmalar ilgiyle devam etmektedir. Konunun genişliği nedeniyle bu çalışmada yalnız katıların mekaniksel kararlılığı üzerinde durulacaktır. Klasik Morse potansiyel enerji fonksiyonu kullanılarak bazı fcc ve bcc metallerin mekaniksel kararlılığı Milstein [2-4], Singh [6] ve Najafabadi [5] tarafından ayrı ayrı incelenmiştir. Bu yazarlar Mie [10], Johnson [22] ve Born-Mayer [11] gibi potansiyel enerji fonksiyonları kullanılarak bazı fcc ve bcc metaller için bulunan mekaniksel kararlılık sonuçlarının klasik Morse kullanılarak bulunan sonuçlardan bunların daha iyi olmadığını belirtmişlerdir. Bugüne kadar yapılan çalışmalar her potansiyelin katıların mekaniksel kararlılığını açıklamada başarılı olamayacağını gösteriyor. O halde tanımlanan potansiyellerin denenmesi gerekmektedir. Ayrıca yaptığımız literatür araştırmasına göre alaşımların mekaniksel kararlılığı üzerine bugüne kadar hiçbir çalışmanın yapılmamış olması da çok ilginçtir. Bu nedenle bu çalışmanın konusu $Fe_{(1-x)}-Al_{(x)}$ sistemleri olacaktır. Çünkü bu sistemler sanayide ve endüstride aranan bir tür çeliktir.

Yine bu çelikler çok karmaşık yapılarda kararlı olduklarından teorik olarak çalışılması diğer alaşımlara nazaran oldukça zordur.

$Fe_{(1-x)}-Al_{(x)}$ alaşımı üzerine ilk çalışma 1932 yılında Bradley ve Jay [16] tarafından yapıldı. Bu çalışma da, alaşımın faz-yapısı x-ışınları metoduyla incelenerek $x > 0.19$ için bcc dısorder, DO_3 ve B_2 türünde üç ayrı yapı belirlendi. Daha sonraki çalışmalarda [25], bu yapılar $Fe_3Al(DO_3)$ ve $FeAl(B_2)$ olarak tanımlandı. Ayrıca bu çalışmalarda, alaşımdaki Al

miktarının ve sıcaklığının alaşımın mekaniksel özelliklerini çok etkilediğinde vurgulanmıştır. yine $x = 0.25$ için oda sıcaklığındaki Fe-Al sisteminde $DO_3 \rightarrow B_2$ dönüşümünün gerçekleştiği belirtilmektedir [28].

Rudman [8] tarafından yapılan çalışmalarda Fe-Al sistemindeki atomlar arası etkileşim sistematığı Şekil 1'de verildiği gibidir.



Şekil 1. $Fe_{(1-x)}Al_x$ Sisteminin Atomik Yapısı [8].

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

$DO_3 \rightarrow B_2$ dönüşümünde ise

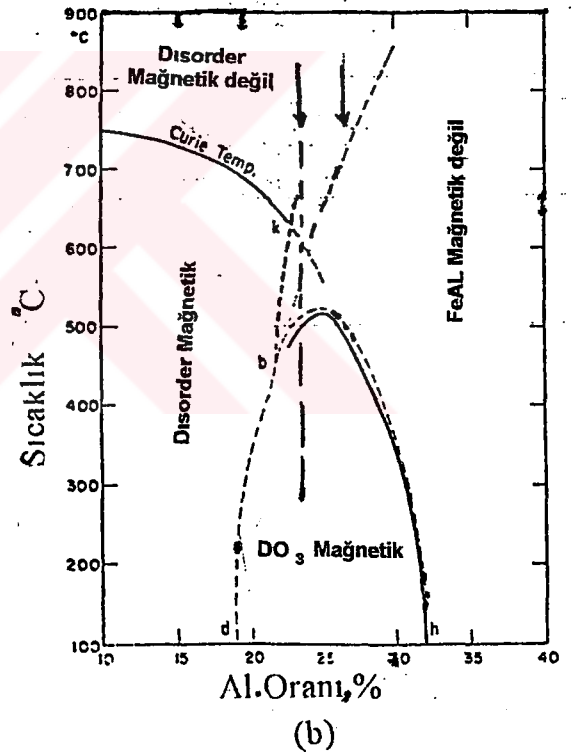
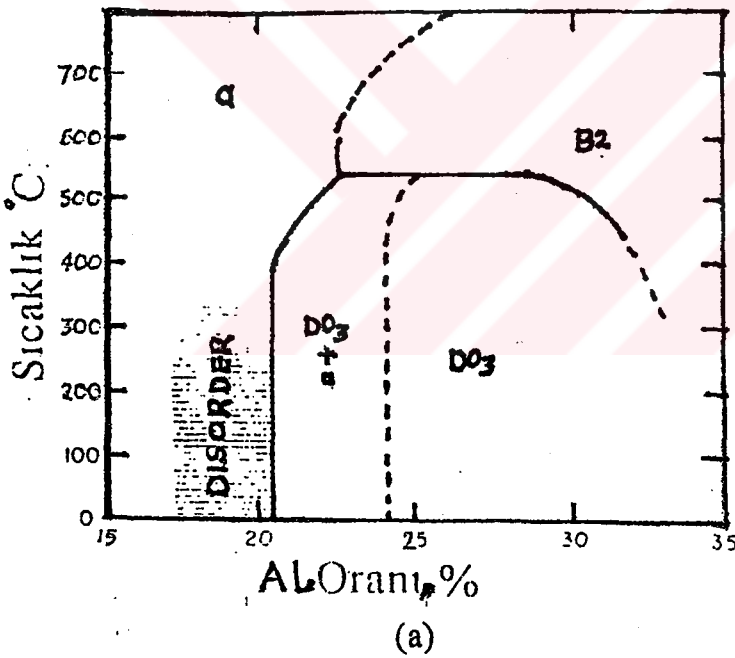
$$[\alpha] \neq [\beta] \neq [\gamma], \quad [\alpha] \neq [\beta] = [\gamma] \text{ olur.}$$

Dönüşümler esnasında α 'nın durumu için bilinen numune disorder yapı için basit kübik örgüdür. Teorik açıklamalar bu değişmezliğin $[\alpha]$ için $x > 0,25$ te sağlandığını gösterir [28].

Prakash [28] tarafından yapılan bir çalışmada, Fe-Al sistemi DO_3 yapıda iken her bir Al atomunun yalnız en yakın komşuluklardaki Fe atomlarıyla etkileştiği B_2 yapısında ise Fe ve Al atomlarının rastgele dizildiği belirtilmiştir. Fe-Al sisteminin yapısını inceleyen A. Taylor ve Jones [17]'un çalışmasında; Al oranı % 18.75 den fazla ise kübün merkezinde Fe atomlarının bulunduğu, köşelerini ise Fe ve Al atomlarının kendiliklerinden sırayla paylaştıkları belirtilir. Taylor, Fe-Al sisteminin üç farklı faz halini alaşım içerisindeki Al oranına bağlı olduğunu belirterek %18,75 den %34'e kadar ki aralıkta üç faz yapısına rastlandığını, %34'den sonra ise B_2 yapı ile DO_3 yapı yavaş yavaş birleşerek tek bir yapıya dönüşüp, sonuçta (DO_3+B_2) ve disorder yapılarının oluştuğunu ifade etmiştir.

Alaşım %0,0 dan %18.75 Al oranına ulaşınca kadar (Disoder+ DO_3) ve B_2 yapı gözlenir. Alaşım (DO_3+B_2) yapıya ulaşınca Al atomları merkezde Fe atomları da köşelerde yer alan bir bcc yapı gözlenir. Al oranı %25'den az ise kristal yapıdaki atomik dağılım tamamen düzensiz bir yapıya sahiptir. Her bir faz durumunda atomik etkileşimler birbirinden farklıdır. Meydana gelen üç farklı yapı alaşımı oluşturan metallerin manyetik özelliğine de bağlıdır [8]. Alaşımlar için aynı tür etkileşimlerde (Fe-Fe ve Al-Al) için N atom sayısı olmak üzere $N_\alpha = N_\beta = N_\gamma = N$ katkısı gelirken farklı etkileşimlerde $N_\alpha = 2N_\beta = 2N_\gamma = N/2$ olmaktadır [16]. Alaşım katkısı için tarif edilen "S" parametreleri disoder yapı için sıfır, düzenli yapılar için bire eşittir.

$S=2 ([\alpha]-x) + ([\beta]-x)-([\gamma]-x)$ olarak tarif edilir. Rudman bu çalışmasında her komşuluk etkileşiminin farklı olduğunu ve üçüncü komşuluktan sonraki etkileşimlerin de bir sonraki komşuluğun etkileşimi bir öncekine göre ihmal edilmez [8]. Benzer çalışma yapan H.J. Leamy [9-16] de ikinci komşuluğa kadar inceleme yapmış; faz yapılarının mekaniksel özelliklerinin birbirinden farklı olduğunu, elastik sabitlerin farklı fazlarda birbirine eşit kabul edilemeyeceğini açıklamıştır. Bu faz değişimlerinde doğrudan gözlene bilen alaşımın %21.6 Al oranından %23,9 Al' a dek DO_3 küresel yapının disorder faz ile dengede olması ve metalurjik açıdan oldukça öneme sahip olan basamaklar halinde fazlara ayrılmış olmasıdır. Bu yapı doğrusal bir kristal yapıya sahiptir [16]

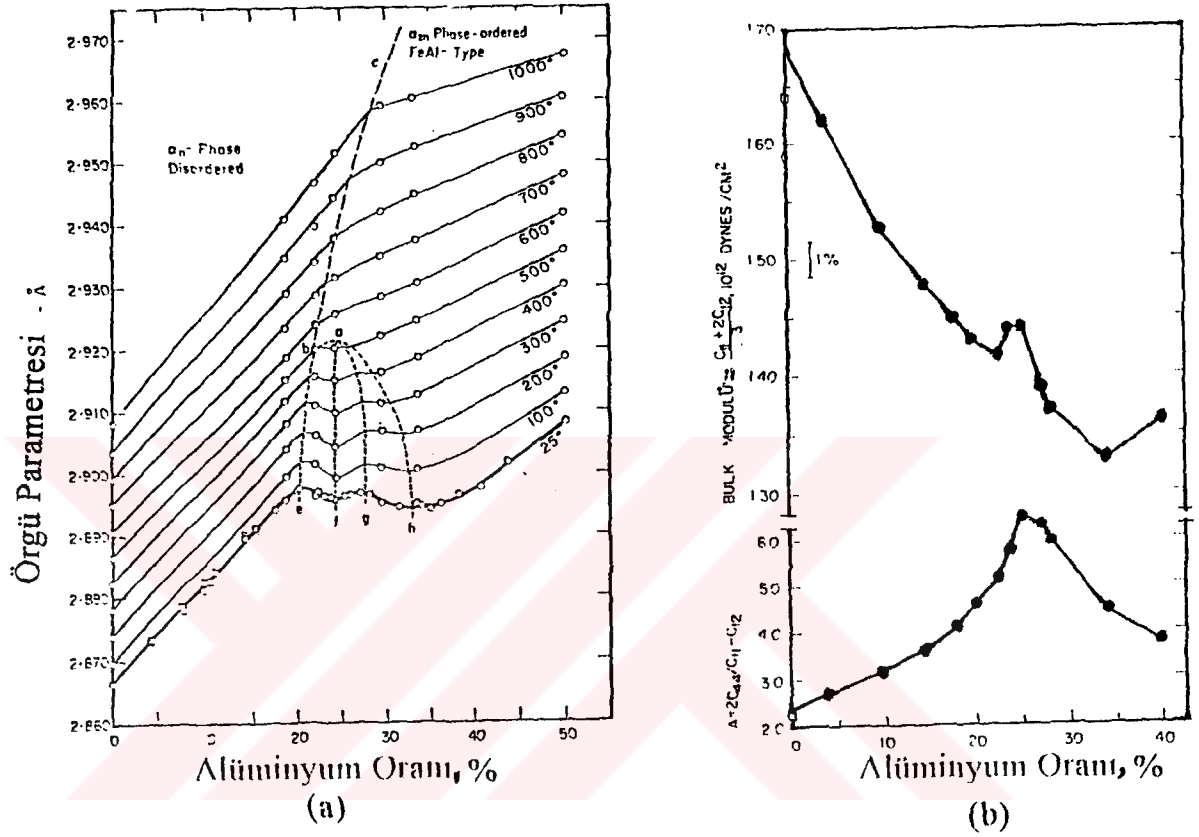


Şekil 2. (a) Sıcaklık ve Al Oranına Göre Faz Diyagramı [8]

(b) Sıcaklık ve Al Oranına Göre Mağnetik Faz Yapı [8].

Şekil 2'deki gibi faz yapılarının sıcaklıkla değişimi ve mağnetik özellikleri görülmektedir. [9]. Üç bağımsız fazda tek kristalli elastik sabitlerin birbirinin aynı olmadıkları belirtilmiş, dış mağnetik alanda

$(\alpha \rightarrow \beta)$ dönüşümü x ışını difraksiyonunda da ikinci faz dönüşümü (DO_3+B_2) 'de gözlenmiştir [9].



Şekil 3 (a): Alüminyum Oranına Göre Örgü Parametresi

(b): Alüminyum Oranına Göre Mekaniksel Sabitleri.

Şekil 3 (a)'da örgü parametresine göre Al oranının değişimi Şekil 3 (b)'de ise de Al oranına göre Bulk modülü değişimleri görülmektedir [9-17]. Aynı orandaki Al'de yüksek sıcaklıkta örgü sabitinin yüksek, düşük sıcaklıklarda düşük örgü sabiti ölçülmüştür [17]. Alaşımardaki dönüşüm esnasında basınç uygulandığında geçişlerin normal olmadığı belirtilmiştir. Sabit sıcaklıkta basınç altında örgü sabitinin arttığı belirtilmiştir.

$\text{Fe}_{(1-x)}\text{-Al}_{(x)}$ alaşımlarının faz yapısı üzerine Leamy [9] tarafından yapılan bir çalışmada

$x = 0.1875 - 0.25$ arasında alaşım disorder

$x = 0.25 - 0.34$ arasında " DO_3

$x = 0.34 - 0.5$ arasında " B_2

yapıları'da gözlemlendiği belirtilmiştir.

Bu çalışmada yukarıda belirtildiği gibi kompleks yapılara sahip $\text{Fe}_{(1-x)}\text{-Al}_{(x)}$ sisteminin mekaniksel kararlılığı;

$x = 0$ için bcc Fe

$x = 0.25$ için disorder Fe- 25% Al

$x = 0.30$ için DO_3 Fe- 30% Al

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

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

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

potansiyel enerji fonksiyonları kullanılacaktır.

Her numune için enerji, zor ve elastik sabitlerin değerleri her potansiyel için $m=1.5$, 2.0 ; 2.5 değerleri kullanılarak yapılacaktır.

BÖLÜM 1

Kübik Kristal Örgülerin Mekaniksel Kararlılığı

1.1. Mekaniksel Kararlılık

Metallerin mekaniksel kararlılıkları üzerine yapılan çalışmaların önemli bir kısmını Max Born'un teorisi oluşturur. Born'a göre bir kristal örgünün mekaniksel olarak kararlı olabilmesi için üzerine hiç bir dış kuvvetin uygulanmaması gerekir. Born bir kristali termodinamiksel şartlar altında inceleyerek genel bir sonuca ulaşmıştı [1]. Bu sonuçlardan birisi tek kristal örgülü bir yapı kendiliğinden küçük deformelere uğrasa dahi termodinamiksel şartlarda mekaniksel olarak kararlıdır.

Born, kübik kristaller için teorisini oluştururken atomlar arasında yalnız merkezi etkileşimleri dikkate almıştır. Bu nedenle kübik kristallerde mekaniksel kararlılık için gerekli matematiksel ifadelerde iyon-iyon etkileşimleri dikkate alınmaktadır. Born'un matematiksel ifadeleri ilk defa kübik bir örgü için Mısra tarafından uygulandı. Mısra, iki-cisim etkileşmesi için Mie-tipi bir potansiyel fonksiyon kullanarak fcc ve bcc metallerin mekaniksel kararlılığını inceledi. Bu çalışmada bcc kristallerin ancak $n > 5$ için mekaniksel kararlılık göstereceği vurgulandı mie potansiyel için erişim parametresidir [2,3,4].

Milstein [2] tarafından yapılan çalışmada kübik bir kristale Born kararlılık kriterleri uygulanırken dış kuvvet altında kristalin tek çeşitliliğinin bozulduğu kabul edilir. Çalışmalarında genel Morse potansiyeli fonksiyonunu kullanan Milstein ikinci dereceden elastik sabitlere göre mekaniksel kararlılık ($C_{11} > C_{12}$) şartında inceleyerek; fcc metallerin sürekli

kararlı, buna karşılık bcc metalleri için C_{11}/C_{12} oranının maksimum 1.36 ve minimum 1 olduğu bölge sınırlarında bu yapının kararlı olabileceği vurgulandı.

Najafabadi ve Kalonji [5] Lennard-Jones, Johnson 1 ve Klasik Morse potansiyel enerji fonksiyonlarını kullanarak Fe, Cu, Ni ve Ag elementlerinin mekaniksel kararlılığını incelediler. Sonuçta; Lennard-Jones potansiyelinin fcc örgüler için kararlı yapıları Johnson 1 ve Klasik Morse potansiyelerinin ise bcc kristaller için kararlı yapıları daha iyi tanımlayabilceği belirtildi. Ayrıca bu araştırmacılar her merkezi-etkileşmeli potansiyelin materyallerin mekaniksel kararlılığına uygulanması gerektiğini önemle vurguladılar.

1.2. Born Kararlılık Kriterleri

Born kararlılık kriterleri metallerin elastik sabitleri ve birim yüzeydeki enerji yoğunluklarına bağlı olarak incelenir [2,3,4]. İkinci dereceden elastik sabitlere bağlı olarak kararlılık kriterleri:

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

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

- B_{ij} 'lerin herbiri pozitif olmaktadır.
- $(B_{12}-B_{23}) > 0$ olmaktadır.
- $B_{11}(B_{22} + B_{23}) - 2B_{12}^2 > 0$ olmaktadır.

- d. Kristalin denge halinde kristal simetrisi nedeniyle $B_{11}=B_{22}$ ve $B_{12}=B_{23}$ olmaktadır.
- e. Simetriden dolayı B_{11} ve B_{23} deki azalmaya karşılık örgü parametrelerine bağlı olarak B_{22} ve B_{12} değerleri artmaktadır.
- f. Kararlılık Sınırları b ve c şartları arasındaki alandır. Born kararlılık kriterleri birçok araştırmacı tarafından metallere uygulanmıştır [4,6,7]. Sonuçların fcc kristaller için çok iyi olduğu not edilirken bcc ve sc yapılar için kısmen iyi olduğu belirtilmektedir.

1.3. Kristal Örgünün Etkileşme Enerjisi

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

$$E_{(n_0)} = \frac{1}{2} n \sum_{\ell_1 \ell_2 \ell_3} \phi(r_j) \quad (1)$$

şeklinde tanımlanır. Burada n birim hücredeki atom sayısı ve $\phi(r_j)$ iki cisim etkileşme potansiyel enerji fonksiyonudur. Giriş bölümünde bahsedildiği gibi alaşımlar üzerinde mekaniksel kararlılık çalışmaları örgünün toplam etkileşme enerjisi Rudman [8] tarafından tanımlanan hesaplanma yöntemine göre çalışıldı. Bu modelde, A ve B alaşımı oluşturan elementler olmak üzere en yakın komşuluklar için etkileşme enerjileri

$$V_1 = E_{AB} - \frac{E_{AA} + E_{BB}}{2} \quad (2)$$

$$V_2 = E'_{AB} - \frac{E'_{AA} + E'_{BB}}{2} \quad (3)$$

$$V_3 = E''_{AB} - \frac{E''_{AA} + E''_{BB}}{2} \quad (4)$$

şeklinde verilmiştir.

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

$$E_1 = 4n \left[(1-x)E_{AA} - xE_{BB} + \left(2x(1-x) + \frac{1}{2}S_{11}^2 \right) V_1 \right] \quad (5)$$

$$E_2 = 3n \left[(1-x)E'_{AA} - xE'_{BB} + \left(2x(1-x) + \frac{1}{4}(S_{31}^2 - 2S_{11}^2) \right) V_2 \right] \quad (6)$$

$$E_3 = 6n \left[(1-x)E''_{AA} - xE''_{BB} + \left(2x(1-x) + \frac{1}{4}(S_{31}^2 + 2S_{11}^2) \right) V_3 \right] \quad (7)$$

verilir. E_1 , S_{31} 'den bağımsızdır. Sij parametreleri daha geniş olarak bu bölümde açıklanacaktır. Ayrıca Leamy [9] DO_3 yapıya ait yukarıdaki eşitlikleri kullanarak enerjiyi

$$E(r_j) = \frac{1}{2} n \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^2 qNi\phi(r_j) \quad (8)$$

şeklinde genel bir bağlantıyla tanımlanmıştır. Eşitlik (8)'deki qNi alaşım katkısıdır. Sonuçta birinci ve ikinci komşuluk enerjileri potansiyel fonksiyona bağlı olarak;

$$\left. \begin{matrix} E_{NN} \\ E_{NNN} \end{matrix} \right\} = \left[\frac{\phi_{ALAL} + \phi_{FeFe}}{2} - \phi_{FeAL} \right]_{r(1,2)} \quad (9)$$

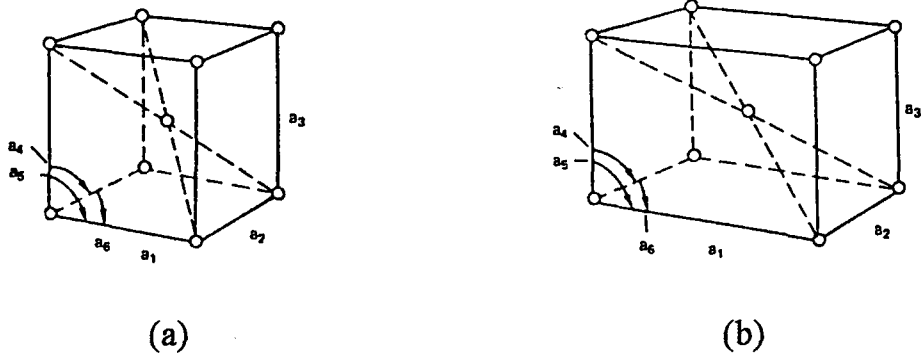
ifadesiyle verilir. Rudman [8] ve Leamy [9] tarafından tanımlanan enerji bağıntıları ayrıntılarıyla çıkarılabilir.

Kristal örgü üzerindeki çok küçük deformeler, enerjinin birer fonksiyonu olarak ortaya çıkar. Zira örgü kendisini sürekli kararlı yapıda tutmak isteyeceğinden bu deformelere karşı yapılan bir iş vardır.

Bu iş kristal örgünün üzerinde birbirinden bağımsız altı değişkene bağlıdır. Kübik örgünün hacmi üzerinden birim hücre başına yapılan toplam iş

$$E(a_1^k, a_2^k, a_3^k, a_4^k, a_5^k, a_6^k) = E(a_i^k) \quad (10)$$

olarak tanımlanır. Buradan (a_i^k) kübün altı bağımsız değişkenini herhangi bir k düzeyinde temsil eder, ($i= 1, 2, \dots, 6$). a_1, a_2, a_3 örgü parametreleri, a_4, a_5, a_6 ise düzlemler arasındaki açılardır.



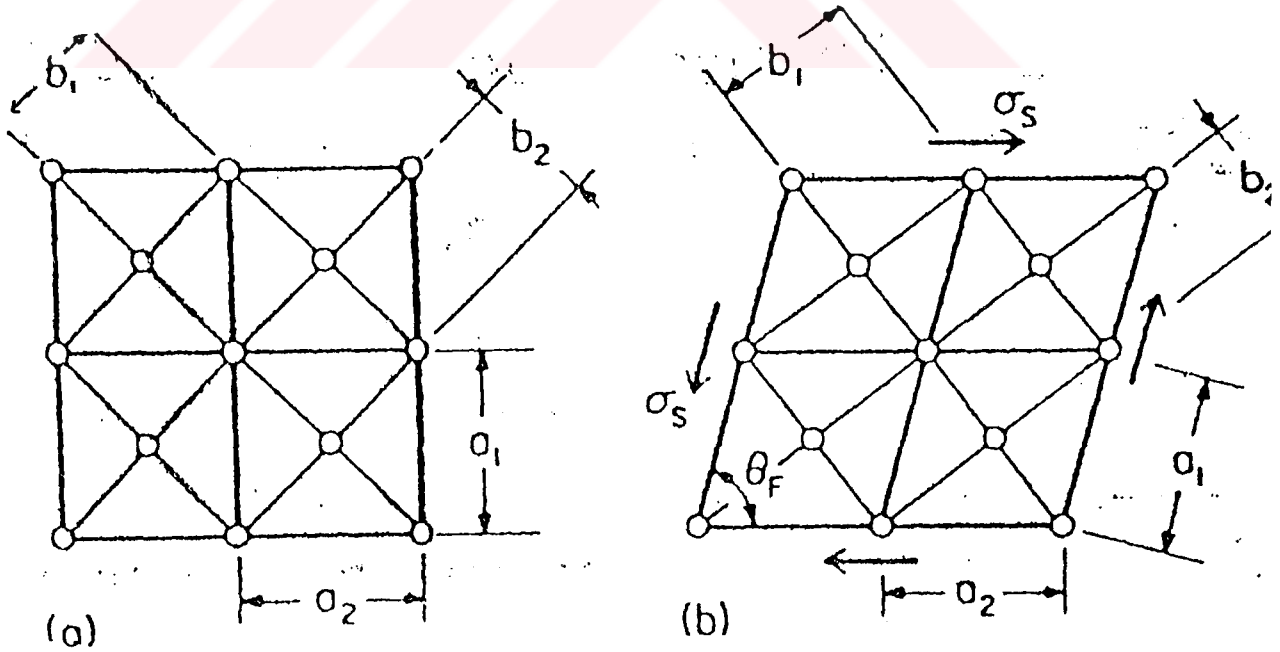
Şekil 4. Kübik Kristal Örgü Yapıları

(a) Zor sıfır iken, (b) Zor sıfırdan Farklı İken

Şekil 4'de bcc yapıya sahip birim hücreler görülmektedir. Şekil 4(a) birim hücrenin kararlı hali olup $a_1 = a_2 = a_3 = a_0$ ve $a_4 = a_5 = a_6 = \frac{\pi}{2}$ dir.

Şekil 4(b)'de birim hücre iç etkileşimlerden dolayı küçük deformelere uğramıştır. Bu durumda $a_1 \neq a_2 = a_3$ ve yüzeyler arasındaki açılarda $a_4 = a_5 = a_6 = \frac{\pi}{2}$ dir Uygulanan zor artırılırsa kristalin yapısı deforme olur ve birim hücrenin boyutlarında $(a_i - a_i^0)$ değişimi olur. Bu değişim a_1 değeri ile karşılaştırıldığında çok küçüktür ($a_i = a_0$ denge hali). Kristal örgünün a_1 boyutundaki değişim nedeniyle $a_2 = a_3$ boyutlarının küçüldüğü dolayısıyla düzlemler arasındaki açılarında değiştiği Milstein [7] tarafından belirtildi. İki yüzey arasındaki bu açı değişiminin fcc ve bcc yapılar için $\Delta\theta = 7,6^\circ$ olduğu belirtildi. Birçok araştırmacı [4, 5, 9] çalışmalarında uygulanan zor'un etkisini yalnız [100] doğrultusunda aldıklarından açı değişimlerini dikkate almamışlardır.

Kristal örgünün dış kuvvet altındaki değişimi de Şekil 5 de verilmiştir.



Şekil 5. bcc Yapının Dış Kuvvet Altındaki Değişimi.

(a) $f_{dış} = 0$ iken $a_1 = a_2$ ve $\theta = 90^\circ$ (b) $f_{dış} \neq 0$ iken $a_1 \neq a_2$ ve $\theta_F = 82,4^\circ$

Şekil 5'de gösterilen b_1 ve b_2 boyutları Drechsler [10] tarafından hesaplanmış, r_0 denge mesafesi r_1 enyakın komşu uzaklığı ve herhangi bir noktanın uzaklığı r olmak üzere $(r/r_0) = (r/r_1) (r_1/r_0)$ olarak oranlandırılıp, bu sınır bir dış kuvvet altında $b_i = \frac{r_i}{r_1} (i=1,2,3)$ şeklinde tarif edilmiştir.

Buna göre bcc yapılar için $b_1=1$, $b_2 = \frac{2}{\sqrt{2}}$ ve $b_3 = \sqrt{\frac{8}{3}}$ olarak verilmektedir. Bu mesafeler kristale uygulanan basınç ve sıcaklığa göre değişmektedir. fcc yapılar için $\frac{r_0}{r_1} = \sqrt{2}$ ve bcc yapılar için $\frac{r_0}{r_1} = \sqrt{3}$ olarak tarif edilir. Belirli bir "p" basıncı altındaki uzama λ ve örgünün hacmide V olmak üzere basınç

$P(\lambda) = \frac{1}{3V\lambda} \sum \delta_i^2 \phi'(r) = 0$ ifadesiyle verilir. Kübik yapılar için $\lambda=1$ dir [7]. Burada $\delta_i = a_i m_i (i=1,2,3)$ ve $m_i =$ Koordinat eksenini, $a_i =$ örgü sabiti, $A = \alpha a_i / 2$ olmak üzere fcc yapılar için $\alpha r_1 = A\sqrt{2}$, bcc yapılar için $\alpha r_1 = \sqrt{3}$ ve sc yapılar için $\alpha r_1 = 2A$ olarak bulunur [11]. $\alpha =$ Potansiyelin sertlik parametresidir. bcc yapı için, $r_1 = \frac{a_0}{2} \sqrt{3}$ bulunur. Herbir a_1 artışına karşılık gelen a_2 değeri $r = \left\{ L_1^2 a_1^2 + a_2^2 (L_2^2 + L_3^2) \right\}^{1/2}$ ifadesi kullanılarak iterasyon metodu ile bulunur.

Kristal örgü eğer herhangi bir a_i^k düzeyinde dengede ise, atomların iç etkileşme potansiyel enerjileri karşılıklı olarak uygulanan kuvvetlerin eşitliğini zorunlu kılar [4]. Örgünün a_i^k düzeyine etki eden net kuvvet,

$$F_i^k = (\partial E / \partial a_i) a_i^k, \quad i = 1, 2, \dots, 6 \quad (11)$$

olarak yazılır. Eğer örgü üzerindeki çok küçük deformeler dikkate alınırsa yapılan iş,

$$\Delta W = \sum_{i=1}^6 F_i^k \Delta a_i^k \quad (12)$$

dir [2]. Kristal örgü üzerinde atomları a_i^k düzeyinden a_i^ℓ düzeyine hareket ettirmek için pozitif enerjiye ihtiyaç vardır. Bu enerji, iki düzey arasındaki etkileşme potansiyel enerji farkı ile örgünün çevresi üzerinde yapılan işe eşittir. Yani örgü üzerinde dış kuvvetlerin yaptığı iş negatiftir [4, 6, 12].

Bu enerji farkı Taylor serisine açılırsa,

$$\begin{aligned} E(a_i^l) - E(a_i^k) &= \sum_{i=1}^6 \left(\frac{\partial E}{\partial a_i} \right)_{(a_i^k)} (a_i^l - a_i^k) \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{i=1}^6 \sum_{j=1}^6 \left(\frac{\partial^2 E}{\partial a_i \partial a_j} \right)_{(a_i^k)} (a_i^l - a_i^k) (a_j^l - a_j^k) \end{aligned} \quad (13)$$

olur. bu seri $(a_j^\ell - a_j^k)$ değişiminin küçüklüğünden dolayı ikinci terimden sonrası ihmal edilir. Yani a_i^k düzeyinde tarif edilen F_i^k kuvveti için bu $(a_j^\ell - a_j^k)$ ve $(a_j^\ell - a_j^k)$ değişimlerine gerek olmayıp; burada yapılan iş a_i^k Düzeyinden a_i^ℓ düzeyine giderken dış kuvvetlerin yaptığı iştir. Böylece harcanacak pozitif bir enerjiye ihtiyaç vardır ki bu da (13) eşitliğinin ikinci teriminin yalnız ve yalnız pozitif olmasını gerektirir [2,4]. İkinci terimin ilk ifadesi bu enerji yoğunluğunu tanımlar.

Kristal örgü bir a_i^s düzeyinde bulunduğu iç etkileşmelerden dolayı F_i^s kuvvetleri oluşur. Örgü üzerinde küçük deformeler bu kuvvetten doğar. Bu durumda a_i^k düzeyindeki enerji etkileşimini veren eşitlik (13),

$$E_{a_i^k} = E_{a_i^s} + \sum_{j=1}^6 F_{ij}^s (a_i^k - a_i^s) + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^6 \sum_{j=1}^6 B_{ij}^s (a_i^k - a_i^s) (a_j^k - a_j^s) \quad (14)$$

şeklinde yazılabilir.

Bu eşitliklerin daha uygun sonuçları vermesi, kullanılan potansiyel fonksiyonuna ve parametre sonuçlarına bağlıdır [13].

Bir kristal örgünün etkileşme enerjisinin bağlı olduğu r_j vektörü

$$\vec{r}_j = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^3 L_i a_i \hat{a}_i \quad (15)$$

ifadesiyle tanımlandığından

$$(r_j)^2 = \frac{1}{4} \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 L_i L_j a_i a_j \hat{a}_i \hat{a}_j \quad (16)$$

olur. Burada $\hat{a}_i$ ve $\hat{a}_j$ birim hücrenin vektörleridir.

1.4. Kristal Örgü Üzerindeki Zor

Örgü üzerindeki zor uygulanan kuvvete bağlıdır. Denge konumunda $F_i^o=0$ olduğundan zor'da sıfırdır. Kararlı bir kristal örgünün simetrisi herhangi bir dış kuvvetin etkisinde bozulur. Bu bozulma örgünün çok küçük olan örgü üzerinde büyük deformeler oluşturur [4]. Kristal örgüye [100] doğrultusunda uygulanan kuvvet nedeniyle a_1 parametresindeki, değişime karşılık a_2 ve a_3 parametrelerinde birbirlerine eşit ve zıt yönde değişimler olur. Bir noka için toplam değişim sıfır olacağından değişim esnasında örgü kararsız fakat değişim bittiğinde kararlıdır [7, 4]. Dış kuvvetlerin etkisi altında da bcc yapı için $a_2 = a_3 = \frac{a_1}{\sqrt{2}}$ eşitliği tarif edilir [7].

Mükemmel bir kristal örgü teorik olarak kararlıdır. Kristal örgüde kendiliğinden oluşan iç kuvvetler de dikkate alınırsa örgüye uygulanan toplam kuvvet

$$F_i^k = F_i^s + \sum_{j=1}^6 B_{ij}^s (a_j^k - a_j^s), \quad (i = 1, \dots, 6) \quad (17)$$

olur. Burada a_i^s düzeyinde etken olan F_i^s kuvvetleri a_i^k düzeyindeki F_i^k kuvvetleriyle dengededir [2]. Bu kuvvetlerin etkisinde $a_1 = a_2 \neq a_3$ ve $a_4 = a_5 = a_6 = \frac{\pi}{2}$ olduğundan [2,6] örgü tetragonal yapıya sahip olur. Herhangi bir a_i düzeyi için $i \neq 1$, iken $\left(\frac{\partial E}{\partial a_i} \right) = 0$ olurken a_1 boyutu için

$$\left(\frac{\partial E}{\partial a_1} \right)_{a_i^k} = F_1^k \quad (18)$$

olur. a_2 ve a_3 boyutlarında ise yine

$$\left(\frac{\partial E}{\partial a_2} \right)_{a_i^k} = \left(\frac{\partial E}{\partial a_3} \right)_{a_i^k} = 0 \quad (19)$$

dır. (18) eşitliğinden

$$F_1^k = F_1^s + B_{11}^s (a_1^k - a_1^s) + 2B_{12}^s (a_2^k - a_2^s) \quad (20)$$

$$F_2^k = F_2^s + B_{12}^s (a_1^k - a_1^s) + (B_{22}^s + B_{23}^s) (a_2^k - a_2^s) \quad (21)$$

$$F_1^k = F_1^s + \left[B_{11}^s - 2(B_{12}^s)^2 / (B_{22}^s + B_{23}^s) \right] (a_1^k - a_1^s) \quad (22)$$

bulunur. Denge durumunda $a_1^s = a_2^s = a_0$ ve $F_i^s = 0$ olduğundan a_2^k 'nın değeri $F_2^k = 0$ şartından hesaplanır. Böylece (23) eşitliğinde kararlılığın sınır şartlarından birisini oluşturur. a_2^k lar belirtildiği gibi iterasyon yöntemiyle her defasında ayrı ayrı hesaplanır. F_1^k kuvveti enerjinin r_j 'ye göre birinci türevinden;

$$F_1^k = \frac{\partial E}{\partial a_i} = \frac{1}{2} n \sum_{l_1 l_2 l_3} \frac{\partial \phi(r_j)}{\partial r^2} \frac{\partial r^2}{\partial a_i} \quad (23)$$

elde edilir (16) eşitliği yeniden düzenlenirse,

$$r^2 = \frac{1}{4} \left[L_1^2 a_1^2 + L_2^2 a_2^2 + L_3^2 a_3^2 + 2L_1 L_2 a_1 a_2 \cos a_6 \right. \\ \left. + 2L_1 L_3 a_1 a_3 \cos a_5 + 2L_2 L_3 a_2 a_3 \cos a_4 \right] \quad (24)$$

olur. (24) eşitliğinin a_1 'e göre türevi alınarak

$$\frac{\partial r^2}{\partial a_1} = \frac{1}{2} \ell_1^2 a_1 \quad (25)$$

bulunan bu sonuç eşitlik (23)'de yerine yazılırsa F_i^k kuvvetleri

$$F_1^k = \frac{1}{4} n a_1 \sum_{l_1 l_2 l_3} L_1^2 \frac{\partial \phi}{\partial r^2} \quad (26)$$

$$\text{ve} \quad F_2^k = \frac{1}{4} n a_2 \sum_{l_1 l_2 l_3} L_2^2 \frac{\partial \phi}{\partial r^2} = 0 \quad (27)$$

şeklinde bulunur.

Alaşımlar için (26) eşitliği, önceki açıklamalar ışığında

$$F_1^k = \frac{1}{4} n a_1 \sum_{l_1 l_2 l_3} q N_l L_l^2 \frac{\partial \phi}{\partial r^2} \quad (28)$$

şeklinde yazılabilir.

Bu kuvvetler birim hücrenin düzlemi üzerine etki eden normal zorları oluşturduklarından a_1 boyutunda etki eden F_1 kuvveti nedeniyle a_2 ve a_3 'e bağlı olarak oluşan zor,

$$\sigma_1^k = \frac{F_i^k}{a_2^k a_3^k} \quad (29)$$

ifadesiyle tanımlanır. $a_2=a_3$ olduğundan,

$$\sigma_1^k = \frac{F_i^k}{(a_2^k)^2} \quad (30)$$

olur. $F_2^k=0$ olduğundan $\sigma_2^k = 0$ olacaktır.

Genel olarak zor,

$$\sigma_i^k = \frac{1}{a_1^k a_2^k a_3^k} \left(\frac{\partial E}{\partial a_i} \right)_{(a_i^k)}, \quad i=4,5,6 \quad (31)$$

ifadesiyle verilir. Burada $i=6$ ise a_6 açısı a_1 ve a_2 arasındaki açı olup, σ_6^k normal düzlem üzerinde a_2 'den a_1 'e doğru oluşan kesme zorudur. Bu şartlar altında F_i^k kuvveti kristal yapıyı iç ve dış kuvvetlere karşı dengede tutar. Buna göre kristal yapı ancak belli şartlar altında kararlılık gösterebilir. Aynı anda sistemin örgüsündeki toplam enerji de minimum olmak zorundadır [2,15].

Merkezi deformelerden dolayı atomların çevrelerinde istenmeyen zorlar oluşur ki bunlar ideal kristal simetrisini bozar. Bu olgular tek yapıllı kristallerde başarıyla uygulanmıştır [9, 16].

1.5. Fe-Al Alaşımında Atomik Etkileşimler

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

$$x = 0.25 \text{ disorder yapı için } [\alpha] = [\beta] = [\gamma] \quad (32)$$

$$0.34 < x < 0.5 \text{ arasında B}_2 \text{ yapı için } [\alpha] \neq [\beta] \neq [\gamma] \quad (32)$$

fakat

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

$$0.25 < x < 0.34 \text{ arasında DO}_3 \text{ için } [\alpha] \neq [\beta] \neq [\gamma] \text{ olur} \quad (32)$$

fakat

$$x \rightarrow 0.25 \text{ ve } T \rightarrow 0 \text{ ise } [\alpha] \rightarrow [\beta] \rightarrow 0 \text{ ve } [\gamma] \rightarrow 1 \quad (32)$$

olur.

α , β , γ atomlarının sayısı $N_\alpha, N_\beta, N_\gamma$ olmak üzere herbirinin atom sayısı $N = N_\alpha = N_\beta = N_\gamma$ olur. Bu sayı aynı zamanda aynı tür atomlar arasındaki etkileşme sayısını gösterir. Farklı iki atom arasındaki etkileşme sayısı ise

$$N_\alpha = 2N_\beta = 2N_\gamma = \frac{1}{2}N \text{ dir [8]. Kristal örgüdeki atomların}$$

etkileşmelerini yapılarına bağlı olarak tanımlayan S parametresi

$$S = 2([\alpha] - x) + ([\beta] - x) + ([\gamma] - x) \quad (33)$$

şeklinde tanımlanır [8, 16]. $S=1$ ise düzenli (DO₃ ve B₂), $S=0$ ise düzensiz yapıyı (disorder) tanımlar. Eşitlik (33)'de eşitlik (32) bağıntıları kullanılarak Fe_(1-x)-Al_(x) sistemi içindeki aynı atomlar arasındaki etkileşimler

$$S_{11} = 2(x - [\alpha]) \quad (34)$$

ifadesi, farklı türdeki atomlar için,

$$S_{31} = 2([\alpha] + [\gamma] - 2x) \quad (35)$$

eşitliği bulunur. $0.25 < x < 0.5$ aralığındaki maksimum order yapının Fe-Al alaşımında Al atomlarının α örgüsü üzerinde olmadığı, yine DO_3 yapıdaki Al atomlarının α örgüsü üzerinde olmayıp, her iki durumda da Al atomlarının γ örgüsü üzerinde olduğu bilinir [17]. Bu şartlar altında S'nin alabileceği maksimum değerler aşağıdaki gibidir [8, 16].

B_2	$(x < 0.5)$	yapı için	$S_{11} = 2x, S_{31} = 0$
DO_3	$(x < 0.25)$	" "	$S_{11} = 2x, S_{31} = 4x$

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

Burada $S_{11}=S_{NN}$ ve $S_{31}=S_{NNN}$ eşitlikler tanımlanarak Rudman [8] gösterimine göre birinci ve ikinci enyakın komşuluklardaki Fe-Fe, Al-Al, ve Fe-Al etkileşimlerinin katkıları

$$N_{FeFe}^{NN} = \frac{1}{4}[(2x-2)^2 - S_{NN}^2] \quad (34)$$

$$N_{FeFe}^{NNN} = \frac{1}{8}[2S_{NNN}^2 - S_{NNN}^2 + 8x^2 - 16x + 8] \quad (35)$$

$$N_{AlAl}^{NN} = \frac{1}{2}[4x^2 - S_{NN}^2] \quad (36)$$

$$N_{AlAl}^{NNN} = \frac{1}{8}[2S_{NNN}^2 - S_{NNN}^2 - 8x^2] \quad (37)$$

$$N_{FeAl}^{NN} = \frac{1}{2} [S_{NN}^2 - 4x^2 + 4x] \quad (38)$$

$$N_{FeAl}^{NNN} = \frac{1}{4} [S_{NNN}^2 - 2S_{NN}^2 - 8x^2 + 8x] \quad (39)$$

şeklinde verilmiştir [8,16]. Yukarıdaki eşitliklerdeki NN ve NNN yazımları birinci ve ikinci komşulukları gösterir. Fe-Al sisteminin ikinci komşuluğa kadar olan toplam enerjisi

$$E(r_j) = \frac{1}{2} \left[8N_{FeFe}^{NN} \phi_{FeFe}(r) + 8N_{AlAl}^{NN} \phi_{AlAl}(r) + 4N_{FeAl}^{NN} \phi_{FeAl}(r) \right] \\ + 6N_{FeFe}^{NNN} \phi(r) + 6N_{AlAl}^{NNN} \phi_{AlAl}(r) + 3N_{FeAl}^{NNN} \phi_{FeAl}(r) \quad (40)$$

olup bu ifade qNi alaşım katkısı cinsinden

$$E(r) = \frac{1}{2} n \sum_{i=1} \sum_{j=1} qNi \phi(r) \quad (41)$$

şeklinde yazılır [9].

Alaşımdaki qNi katkılarının hesaplanmasında belirgin hususlardan biriside Fe-Fe ve Al-Al etkileşimlerin katkılarının aynı komşuluklar için Fe-Al etkileşim katkılarından küçük olmasıdır. Bu durumda katkı payının büyük kısmı farklı türdeki atomların etkileşimlerinden gelmektedir. Etkileşimlerdeki potansiyel fonksiyon aynı olduğu için enerji (41) bağıntısını açık yazacak olursak N_1 , N_2 1. ve 2. komşuluklardaki atom sayısı olmak üzere

$$E = \frac{1}{2} n \phi \left(r_j \right) \left[N_1 \left(N_{FeFe}^{NN} + N_{AlAl}^{NN} + \frac{1}{2} N_{FeAl}^{NN} \right) + N_2 \left(N_{FeFe}^{NNN} + N_{AlAl}^{NNN} + \frac{1}{2} N_{FeAl}^{NNN} \right) \right] \quad (42)$$

eşitliği yazılabilir.

Yukarıdaki (42) eşitliğindeki etkileşim parametreleri (N ve S'ler) Disorder ve DO₃ faz yapıları için ayrı ayrı hesaplandı, eşitlik (34-39)'dan hesaplanan değerler Tablo 1'de verildi.

Tablo 1. Fe-Al Sistemlerinin Hesaplanan Etkileşim Parametreleri

Sistem	X	s_{NN}	s_{NNN}	N_{FeFe}^{NN}	N_{AlAl}^{NN}	N_{FeAl}^{NN}	N_{FeFe}^{NNN}	N_{AlAl}^{NNN}	N_{FeAl}^{NNN}
Disorder	0,25	0	0	0,5625	0,0625	0,375	0,5625	0,0625	0,375
DO3	0,3	0,6	0,8	0,34	0	0,6	0,56	0,1	0,4

Tablo 1'deki değerleri Bölüm 2'deki enerji, zor, elastik sabitler ve yüzey birimi başına enerji yoğunluklarının hesabında kullanılacaktır.

1.6. Yüzey Birimi Başına Enerji Yoğunluğu $[B_{ij}(\text{erg/cm}^2)]$

Bir kristal örgünün ikinci dereceden elastik sabitleri (C_{ij}) birim yüzeye etki eden kuvvet olarak tanımlanır. $B_{ij}=C_{ij} \cdot a_i$ olup [4] B_{ij} 'ler enerji yoğunluğu ya da uzunluk birimi başına kuvvet (dyn/cm) olarak tanımlanır[2]. Yüzey birimi başına enerji yoğunluğu olarak tanımlanan B_{ij} ifadeleri

$$B_{ij}^k = \left(\frac{\partial^2 E}{\partial a_i \partial a_j} \right)_{a_i^k} \quad (43)$$

bağıntısıyla verilir [2,4,6]. B_{ij}^k lar enerjinin pozitif olan fonksiyonlarıdır. B_{ij} değerleri uygun enerji aralıklarında a_i parametresine bağlı olarak hesaplanıp Born kararlılık kriterlerinin sağlanıp sağlanmadığı araştırılır.

Eşitlik (43)'de verilen notasyonlardan a_i^k mevcut kristal örgünün altı eksenenden birisine karşılık gelir. Kristalde ki atomların a_i^k dan a_i^l ye hareket ettiği kabul edilerek $(a_i^l - a_i^k)$ değişimi bütün B_{ij} 'leri pozitif yapacak şekilde örgünün kararlı hali için B_{ij} matrisi

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

şeklinde yazılabilir [2,4,12,18]. eğer B_{ij} 'ler a_i^k konumlarında pozitif değilse a_i^l konumlarında iç ve dış kuvvetler denge halinde değildir. Örgüdeki dış kuvvetler $(\partial E / \partial a_i) a_i^k$ ifadesiyle iç kuvvetler ise $(\partial E / \partial a_i) a_i^l$ değerinde kararlılığını araştırmak istersek her bir a_i için B_{ij} matrisinin determinantlarının ve F_i^k dış kuvvet değerlerini hesaplamamız gerekir. Kristal örgünün kararlı olabilmesi için hesaplanan B_{ij} değerleri kesim 1.2'deki Born kriterlerini sağlaması gerekir. Ayrıca kristal örgü kriterlerinin yeterince açıklanamamasının bir nedeni de kullanılan potansiyel fonksiyonlarıdır [6]. Bu nedenle her bilinmeyen potansiyelin kararlılık hesaplarında denenmesi gerekir. Eğer örgü a_i durumunda kararlı ise kristal yüzeyine etkiyen bileşke kuvvet $F_i^0 = 0$ olmalıdır. Bu işlemler belirli bir a_i^k konumundaki B_{ij}^k değerine kadar tekrar edilirse kararlılık kriterlerinin değişimleri ayrı ayrı hesaplanmalıdır. Merkezi kuvvet etkileşmeli kübik kristallerdeki simetri nedeniyle B_{ij} değerleri arasında,

$$B_{ij}=B_{ji}, B_{ij}=0 \text{ (} j=4,5,6 \text{ ve } i \neq j \text{)}; B_{22}=B_{33}; B_{55}=B_{66} \quad (45)$$

eşitlikleri sağlanır. Eşilik (45) nedeniyle

$$\frac{\partial^2 E}{\partial a_i \partial a_j} = \frac{\partial^2 E}{\partial a_i \partial (-a_j)} \quad (j=4,5,6 \text{ ve } i \neq j); \quad (46)$$

olacağından $[B_{ij}]$ matrisi

$$[B_{ij}] = \begin{bmatrix} B_{11} & B_{12} & B_{12} & 0 & 0 & 0 \\ B_{12} & B_{22} & B_{23} & 0 & 0 & 0 \\ B_{12} & B_{23} & B_{22} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & B_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & B_{55} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & B_{66} \end{bmatrix} \quad (47)$$

şeklinde yazılabilir. Bu matrisin açılımından;

$$B_{55} > 0, B_{44} > 0, B_{22} > 0, \quad (48)$$

Born kararlılık kriterlerinin sağlandığı görülür. Born kararlılık kriterlerinin diğer şartlarını bulabilmek için;

$$\begin{vmatrix} B_{22} & B_{23} \\ B_{23} & B_{22} \end{vmatrix} > 0 \quad (49)$$

determinantının çözümü gerekir. Çözüm ise, $B_{22}^2 - B_{23}^2 > 0$ veya $(B_{22} - B_{23})(B_{22} + B_{23}) > 0$ şeklindedir.

Bu ifadenin ilk kısmı kararlılık için önemlidir. Çünkü B_{22} ve B_{23} 'lerin farklarının sıfırdan büyük olması Born kararlılık kriterlerindendir [2,4,5,6].

Eşitlik (47) ile tanımlanan matrisin kalan kısmı

$$\begin{vmatrix} B_{11} & B_{12} & B_{22} \\ B_{12} & B_{22} & B_{23} \\ B_{12} & B_{23} & B_{22} \end{vmatrix} > 0 \quad (50)$$

determinantı ile yazılarak

$$\left[B_{11} \left(B_{22}^2 - B_{23}^2 \right) - B_{22} \left(B_{12} B_{22} - B_{12} B_{23} \right) - B_{12} \left(B_{12} B_{22} - B_{12} B_{23} \right) \right] > 0$$

ifadesi bulunabilir. Bu ifade düzenlenerek, $B_{11} \left(B_{22}^2 - B_{23}^2 \right) > 2B_{12}^2 (B_{22} - B_{23})$ bağıntısı yazılabilir. Eşitliğin sadeleştirilmesiyle

$$\left[B_{11} (B_{22} + B_{23}) - 2 \left(B_{12}^2 \right) \right] > 0 \quad (51)$$

şeklindeki Born kriteri bulunur. Böylece B_{ij} enerji yoğunluklarına bağlı olarak Born kriterleri şu şekilde özetlenebilir:

a) B_{11} , B_{12} , B_{22} , B_{23} , B_{33} , B_{44} , B_{55} ve B_{66} ifadeleri pozitif değerlere sahip olmalıdır.

b) $(B_{22} - B_{23}) > 0$ olmalıdır. Bu sonuç kararlılığın bir a_i^s den a_i^f 'ye giderken ki başlangıç sınırını tanımlar.

c) $\left[B_{11} (B_{22} + B_{23}) - 2B_{12}^2 \right] > 0$ şartı ise kristal örgünün mekaniksel kararlılığının üst sınırını bulmamıza yardımcı olur. Bu şartları sağlayıp

sağlamadığı bilinmeyen ikili etkileşim potansiyelini inceleyebilmek için enerji yoğunluğu ifadesinin potansiyele bağlı olarak tanımlanması gerekir.

$$B_{ij}^k = \frac{\partial^2 E}{\partial a_i \partial a_j} = \frac{1}{2} n \sum_{\ell_1 \ell_2 \ell_3} \left[\frac{\partial^2 \phi}{(\partial r^2)^2} \cdot \frac{\partial r^2}{\partial a_i} \cdot \frac{\partial r^2}{\partial a_j} + \frac{\partial \phi}{\partial r^2} \cdot \frac{\partial^2 r^2}{\partial a_i \partial a_j} \right] \quad (52)$$

Bu eşitlikteki r ifadesi eşitlik (24)'de verilmiştir. Eşitlik (52)'deki ifadeler aşağıdaki gibidir:

$$\frac{\partial r^2}{\partial a_1} = \frac{1}{2} \left[L_1^2 a_1 + L_1 L_2 a_2 \cos a_6 + L_1 L_3 a_3 \cos a_5 \right] \quad (53)$$

$$\frac{\partial r^2}{\partial a_2} = \frac{1}{2} \left[L_2^2 a_2 + L_1 L_2 a_1 \cos a_6 + L_2 L_3 a_3 \cos a_4 \right] \quad (54)$$

$$\frac{\partial r^2}{\partial a_3} = \frac{1}{2} \left[L_3^2 a_3 + L_1 L_3 a_1 \cos a_5 + L_2 L_3 a_2 \cos a_4 \right] \quad (55)$$

$$\frac{\partial r^2}{\partial a_i} = \frac{1}{2} L_i^2 (i = 1, 2, 3) \quad (56)$$

$$\frac{\partial^2 r^2}{\partial a_1 \partial a_2} = \frac{1}{2} L_1 L_2 \cos a_6 \quad (57)$$

$$\frac{\partial^2 r^2}{\partial a_2 \partial a_3} = \frac{1}{2} L_2 L_3 \cos a_4 \quad (58)$$

$$\frac{\partial^2 r^2}{\partial a_1 \partial a_3} = \frac{1}{2} L_1 L_3 \cos a_5 \quad (59)$$

$$\frac{\partial^2 r^2}{\partial a_i \partial a_j} = \frac{1}{2} L_i L_j (i = 1, 2, 3) \quad (60)$$

Kübik kristallere [100] doğrultusunda bir dış kuvvet uygulanırsa $a_2=a_3$ ve $a_4=a_5=a_6=\frac{\pi}{2}$ olur, [2, 4, 5, 6]. Bu durumda $\sin a_4 = \sin a_5 = \sin a_6 = 1$ ve $\cos a_4 = \cos a_5 = \cos a_6 = 0$ alınır. Bu şartlar dikkate alınarak yukarıdaki (52) eşitliği ile tanımlanan B_{ij} ifadesinden $i, j=1$ için

$$B_{11} = \frac{1}{8} n a_1^2 \sum_{l_1 l_2 l_3} L_1^4 \cdot \phi_{(r^2)}^{11} + \frac{1}{4} n \sum_{l_1 l_2 l_3} L_1^2 \phi^1(r^2) \quad (61)$$

olarak bulunur. Aynı şekilde

$$B_{22} = \frac{1}{8} a_2^2 \sum_{l_1 l_2 l_3} L_2^4 \cdot \phi_{(r^2)}^{11} + \frac{1}{4} n \sum_{l_1 l_2 l_3} L_2^2 \phi^1(r^2) \quad (62)$$

$$B_{12} = \frac{1}{8} n a_1 a_2 \sum_{l_1 l_2 l_3} L_1^2 L_2^2 \cdot \phi_{(r^2)}^{11} \quad (63)$$

$$B_{23} = \frac{1}{8} n a_2 a_3 \sum_{l_1 l_2 l_3} L_2^2 L_3^2 \cdot \phi_{(r^2)}^{11} \quad (64)$$

sonuçları yazılabilir. Merkezi kuvvet etkileşimleri için yukarıda yazılan eşitliklerden faydalanılarak,

$$B_{44} = a_2^2 B_{23}, \quad B_{55} = a_1 a_2 B_{12} \quad (65)$$

bağıntıları gösterilebilir.

1.7. İkinci Dereceden Elastik Sabitler

Born-Haung [15] kararlılık kriterlerinden birisi de kristallerin ikinci dereceden elastik sabitleri üzerinedir. Bir kristal örgünün etkileşme enerjisi C_{ij} elastik sabitlerine bağlı olarak,

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

ifadesiyle tanımlanır [4]. Burada S_i ve S_j enerjideki artma nedeniyle oluşan küçük zorlardır. Kübik simetrlili kristaller için üç bağımsız elastik sabiti (C_{11} , C_{12} , C_{44}) vardır. Ayrıca merkezi etkileşimler için $C_{11}=C_{44}$ Cauchy bağıntısı sağlandığından C_{ij} matrisi

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

şeklinde yazılır. Bu matrisin açılımından

$$C_{12} > 0, C_{12}^3 > 0, C_{11} > 0 \quad (66)$$

$$\begin{vmatrix} C_{11} & C_{12} \\ C_{12} & C_{11} \end{vmatrix} > 0, \quad (C_{11}^2 - C_{12}^2) > 0 \quad (67)$$

bağıntıları bulunur. Eşitlik (67) şartından,

$$C_{11}/C_{12} > 1 \quad (68)$$

olması gerektiği bulunabilir. Yukarıdaki (66, 67, 68) eşitlikleri Born kriterleri olarak bilinmektedir. Ayrıca matrisin geri kalan kısmından da

$$\begin{vmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} \\ C_{12} & C_{12} & C_{12} \\ C_{12} & C_{12} & C_{12} \end{vmatrix} > 0, \quad (C_{11} + 2C_{12}) > 0 \quad (69)$$

şartı bulunur. Elastik sabitlerle ilgili Born kriterlerinin kullanılan potansiyelleri sağlayıp sağlamadığı C_{ij} 'ler ile potansiyeller arasındaki bağıntılar [4, 15].

$$C_{11} = \frac{1}{8} n a_1 \sum_{l=1,2,3} L_l^4 \cdot \phi_{(r_j^2)}^{11} \quad (70)$$

$$C_{12} = \frac{1}{8} n a_2 \sum_{l=1,2,3} L_l^2 \cdot L_2^2 \phi_{(r_j^2)}^{11} \quad (71)$$

kullanılarak görülür. Bu bağıntılar modifiye ve genelleştirilmiş Morse potansiyellerine göre ayrı ayrı tanımlanacaktır.

1.7.a. Modifiye Potansiyeli

Merkezi etkileşmeli iki-cisim modifiye potansiyeli [12]

$$\phi_{(r_j)} = \frac{D}{(m-1)} r_j^{-1} \left[e^{-m\alpha(r_j-r_0)} - m e^{-\alpha(r_j-r_0)} \right] \quad (72)$$

ifadesiyle tanımlanmıştır. Potansiyel parametreleri Bölüm II'de açıklanacaktır.

Eşitlik (70) ve (71) deki $\phi_{(r_j^2)}^*$

$$\frac{\partial^2 \phi}{(\partial r^2)^2} = \phi_{(r^2)}^{**}; \text{ olup bu ifadeler şu şekilde oluşturulabilir.}$$

$$\frac{d\phi}{dr} = \frac{D}{(m-1)} \left[r_j^{-2} \left[m\beta e^{-\alpha r_j} - \beta^m e^{-m\alpha r_j} \right] \right. \\ \left. + r_j^{-1} \left[m\alpha\beta e^{-\alpha r_j} - m\alpha\beta^m e^{-m\alpha r_j} \right] \right] \quad (73)$$

$$\frac{1}{r} \left(\frac{d\phi}{dr} \right) = \frac{D}{(m-1)} \left[r_j^{-3} \left(m\beta e^{-\alpha r_j} - \beta^m e^{-m\alpha r_j} \right) \right. \\ \left. + r_j^{-2} \left(m\alpha\beta e^{-\alpha r_j} - m\alpha\beta^m e^{-m\alpha r_j} \right) \right] \quad (74)$$

$$\frac{d}{dr} \left[\frac{1}{r} \left(\frac{d\phi}{dr} \right) \right] = \frac{D}{(m-1)} \left[3r_j^{-4} \left(\beta^m e^{-m\alpha r_j} - m\beta e^{-\alpha r_j} \right) \right. \\ + r_j^{-3} \left(m\alpha\beta^m e^{-m\alpha r_j} - m\alpha\beta e^{-\alpha r_j} \right) \\ + 2r_j^{-3} \left(m\alpha\beta^m e^{-m\alpha r_j} - m\alpha\beta e^{-\alpha r_j} \right) \\ \left. + r_j^{-2} \left(m^2\alpha^2\beta^m e^{-m\alpha r_j} - m\alpha^2\beta e^{-\alpha r_j} \right) \right] \quad (75)$$

$$\frac{d^2\phi}{(dr^2)^2} = \frac{D}{(m-1)} \left[3r_j^{-5} \left(\beta^m e^{-m\alpha r_j} - m\beta e^{-\alpha r_j} \right) \right. \\ + 3r_j^{-4} \left(m\alpha\beta^m e^{-m\alpha r_j} - m\alpha\beta e^{-\alpha r_j} \right) \\ \left. + r_j^{-3} \left(m^2\alpha^2\beta^m e^{-m\alpha r_j} - m\alpha^2\beta e^{-\alpha r_j} \right) \right] \quad (76)$$

1.7.b. Genelleştirilmiş Morse Potansiyeli

Genelleştirilmiş morse potansiyel fonksiyonu [19, 20, 21, 22]

$$\phi_{(r_i)} = \frac{D}{(m-1)} \left[e^{-m\alpha(r_j-r_0)} - m e^{-\alpha(r_j-r_0)} \right] \quad (77)$$

olduğundan B_{ij} ve C_{ij} deki türevler aşağıda gösterilmiştir.

$$\frac{d\phi}{dr} = \frac{D}{(m-1)} \left[m\alpha\beta e^{-\alpha r_j} - m\alpha\beta^m e^{-m\alpha r_j} \right] \quad (78)$$

$$\frac{1}{r} \left(\frac{d\phi}{dr} \right) = \frac{D}{(m-1)} \left[\beta e^{-\alpha r_j} - \beta^m e^{-m\alpha r_j} \right] \frac{m\alpha}{r} \quad (79)$$

$$\frac{d}{dr} \left[\frac{1}{r} \left(\frac{d\phi}{dr} \right) \right] = \frac{D}{(m-1)} \frac{m\alpha}{r} \left[\left(\frac{1}{r} + m\alpha \right) \beta^m e^{-m\alpha r_j} - \left(\frac{1}{r} + \alpha \right) \beta e^{-\alpha r_j} \right] \quad (80)$$

$$\frac{d^2 \phi}{dr^2} = \frac{D}{(m-1)} \frac{m\alpha}{r} \left[\left(\frac{1}{r} + m\alpha \right) \beta^m e^{-m\alpha r_j} - \left(\frac{1}{r} + \alpha \right) \beta e^{-\alpha r_j} \right] \quad (81)$$

Burada $\beta = e^{\alpha r_0}$ ve r_j 'de (24) eşitliği ile tarif edilmiştir. Bu ifadedeki a_1 değerlerine karşılık a_2 parametresinin değeri $F_2^k = 0$ şartından bulunur.

$$F_2^k = \frac{1}{4} a_2 \sum_{l=1,2,3} L_2^2 \phi' \left(r^2 \right) = 0 \quad (82)$$

ifadesindeki $\phi' \left(r^2 \right)$ her potansiyel fonksiyonu için ayrı ayrı hesaplanacaktır.

Genelleştirilmiş Morse potansiyel fonksiyonu kullanılarak

$$\sum_{l=1,2,3} L_2^2 \left[\frac{m\alpha}{r_j} \left(\beta e^{-\alpha r_j} - \beta^m e^{-m\alpha r_j} \right) \right] = 0 \quad (83)$$

eşitliği ve modifiye Morse için ise,

$$\sum_{l=1,2,3} L_2^2 \left[r_j^{-3} \left(m\beta e^{-\alpha r_j} - \beta^m e^{-m\alpha r_j} \right) + r_j^{-2} \left(m\alpha e^{-\alpha r_j} - m\alpha\beta^m e^{-m\alpha r_j} \right) \right] = 0 \quad (84)$$

eşitliği bulunur. Bu eşitliklerden her bir m değeri için a_1 parametresine göre değişen a_2 değerleri Bölüm III'de bulunacaktır.

BÖLÜM 2

MERKEZİ ETKİLEŞMELİ İKİ-CİSİM POTANSİYELLERİ

2. 1. Genelleştirilmiş Morse Potansiyeli

$\text{Fe}_{(1-x)}\text{-Al}_{(x)}$ sistemindeki toplam etkileşme enerjisi için yalnız iyon-iyon etkileşimleri ele alınacaktır. bcc disorder ve DO_3 yapıdaki kristal örgüler için atomlar arasındaki merkezi etkileşmeler önce genelleştirilmiş Morse fonksiyonu ile tanımlanacaktır [2]. Morse potansiyel fonksiyonu eşitlik (77) den,

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

dir. Burada r_j atomlar arasındaki mesafe D =ayrışma enerjisi, α = sertlik parametresi ve r_0 denge konumudur. Bilinen kristal örgüleri en iyi tanımlayan genelleştirilmiş Morse potansiyel parametreleri Akgün modeli kullanılarak Grrifalco-Weizer [13,23] metoduna göre parametrize edilecektir. Bu metoda göre önce potansiyelin kristaldeki atom başına ikili-etkileşim enerjisini verecek şekilde yazılması gerekir.

$$\phi(r_j) = \frac{1}{2} \frac{D}{(m-1)} \sum_{j=1}^N \left[\beta^m e^{-m\alpha r_j} - m\beta e^{-\alpha r_j} \right] \quad (85)$$

Buradaki toplam krsitalin bütün atomları üzerindendir. r_j her bir atomun orijine uzaklığıdır. Kübik yapılar için r_j atom koordinatları cinsinden

$$r_j = (l_1^2 + l_2^2 + l_3^2) a = M_j a \quad (86)$$

şeklinde verilir. Burada L_1, L_2, L_3 atomların örgüdeki koordinatları, "a" ise örgü parametresidir. L_1, L_2, L_3 değerleri için basit kübik yapılarda bir kısıtlama yoktur. fcc yapılar için $L_1+L_2+L_3$ toplamı çift, bcc yapılarda ise L_1, L_2, L_3 değerlerinin ya hepsi çift ya da hepsi tek olmalıdır. $\beta = e^{\alpha r_0}$ olarak tanımlanır.

Eşitlik (85) Girifalco-Weizar metoduna göre $a_0 = \frac{a}{2}$ denge değerinde;

$$\phi(a_0) = -\epsilon_c \quad (87)$$

$$B = \frac{1}{9ca_0} \left(\frac{d^2\phi}{da^2} \right)_{a=a_0} \quad (88)$$

$$\left(\frac{d\phi}{da} \right)_{a=a_0} = 0 \quad (89)$$

eşitliklerini sağlamalıdır. Burada B=bulk modülü ve bcc yapılar için $c=4$ 'dür [24]. Bu şartlara göre

$$\left(\frac{d\phi}{da} \right)_{a=a_0} = \frac{D}{2(m-1)} \sum_{l_{1,2,3}} \left[m\beta m_j \alpha e^{-\alpha a_0 m_j} - m m_j \alpha \beta^m e^{-m m_j \alpha a_0} \right] = 0 \quad (90)$$

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

$$\beta = \left[\frac{\sum_{l_{1,2,3}} e^{-m_j a_0}}{\sum_{l_{1,2,3}} e^{-m m_j \alpha a_0}} \right]^{(m-1)^{-1}} \quad (91)$$

şeklinde yazılabilir. $\beta = e^{\alpha r_0}$ olduğundan her iki tarafın "e" tabanına göre logaritması alınır ve düzenleme yapılırsa, r_0 denge mesafesi

$$r_0 = \frac{1}{\alpha} \ln \left(\left[\frac{\sum_{\ell_{1,2,3}} e^{-m_j \alpha a_0}}{\sum_{\ell_{1,2,3}} e^{-m_j \alpha a_0}} \right]^{(m-1)^{-1}} \right) \quad (92)$$

olur. Burada αa_0 çarpımı birimsiz olduğundan parametrize işleminde kolaylık sağlar. Böylece bilinmeyen sayısı α ve D olmak üzere ikiye indirgenir. D ayrışma enerjisi birinci şarttan; eşitlik (85);

$$D = \phi(a_0) 2(m-1) \left[\sum_{\ell_{1,2,3}} \left(\beta^{-m_j m \alpha a_0} - m \beta e^{-m_j \alpha a_0} \right) \right]^{-1} \quad (93)$$

şeklinde düzenlenir.

α sertlik parametresi ise bulk modülü kullanılarak bulunabilir. Bulk modülü kristal yapının sertliğinin bir ölçüsüdür. Aynı zamanda birim hücrenin hacminin bir dv değişimine karşılık enerjide termodinamik özdeşlikten dolayı bir değişime eşlik eder [24]. Bu değişim

$$B = -V \frac{dp}{dv} = V \cdot \frac{d^2 E}{dv^2} = \frac{1}{9ca_0} \left(\frac{d^2 \phi}{da^2} \right)_{a=a_0} \quad (94)$$

olarak tarif edilir [25]. Hacim modülü, kristalin sertliğinin ya da verilen bir bozulmayı oluşturmak için gerekli enerjinin bir ölçüsüdür. Hacim modülü ne kadar büyükse kristal o kadar serttir [26]. Eşitlik (94)'de

$V=ca^3$ 'tür (fcc'lerde $c = 2$, bcc'lerde $c = 4$ 'tür). Eşitlik (85)'in " a_0 " ya göre ikinci türevi alınırsa,

$$\frac{d^2\phi}{da^2} = \frac{D}{2(m-1)} \sum_{\ell=1,2,3} \left[mm_j^2 \alpha^2 \left(\beta^m e^{2-mm_j\alpha a_0} - \beta e^{-m_j\alpha a_0} \right) \right] \quad (95)$$

$$B = \frac{1}{36a_0} \frac{D}{2(m-1)} \sum_{\ell=1,2,3} mm_j^2 \alpha^2 \left(\beta^m e^{-mm_j\alpha a_0} - \beta e^{-m_j\alpha a_0} \right) \quad (96)$$

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

2.2. Modifiye Morse Potansiyeli

Son zamanlarda Singh ve Rathore [12] tarafından tanımlanan modifiye Morse potansiyeli yalnız fcc Fe'in fonon dispersiyonu için uygulandı. Bu potansiyel $\beta = e^{\alpha r_0}$ dönüşümü ile eşitlik (72)

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

olarak tekrar yazılabilir. Bugüne kadar mekaniksel kararlılık hesaplarında hiç denenmeyen bu potansiyel $Fe_{(1-x)}-Al_{(x)}$ sistemlerinin mekaniksel kararlılığı için ilk defa test edilecektir. Bu potansiyelin parametreleri yine Girifalco-Weizer metoduna göre parametrize edilecektir. Atom başına etkileşim enerjisi

$$\phi = \frac{D}{2(m-1)} \sum_{j=1}^N r_j^{-1} \left(\beta^m e^{-m\alpha r_j} - m\beta e^{-\alpha r_j} \right) \quad (97)$$

şeklinde olup burada $r_j = m_j a$ alınarak

$$\phi = \frac{D}{2(m-1)} \sum_{j=1}^N r_j^{-1} \left[\beta^m e^{-m m_j \alpha a} - m \beta e^{-m_j \alpha a} \right] \quad (98)$$

eşitliği bulunur. $a_0 = \frac{a}{2}$ denge durumunda bu eşitlik Girifalco-Weizer şartlarına uygulanarak

$$\left(\frac{d\phi}{da} \right)_{a=a_0} = \frac{D}{2(m-1)} \sum_{\ell_1 \ell_2 \ell_3} \left[m(m_j^{-1} a_0^{-2} + \alpha a_0^{-1}) \beta e^{-m_j \alpha a_0} - (m_j^{-1} a_0^{-2} + m \alpha a_0^{-1}) \beta^{m_j \alpha a_0} \right] = 0 \quad (99)$$

olup buradan,

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

bulunur $\beta = e^{\alpha r_0}$ olduğundan her iki tarafın "e" tabanına göre logaritması alınır ve r_0 'a göre yeniden düzenlenirse

$$r_0 = \frac{1}{\alpha} \ln \left\{ \frac{m \sum_{\ell_{1,2,3}} (m_j + \alpha a_0) e^{-m_j \alpha a_0}}{\sum_{\ell_{1,2,3}} e^{-m_j \alpha a_0} (m_j + m \alpha a_0)} \right\}^{(m-1)^{-1}} \quad (100)$$

eşitliği bulunur. Ayrışma enerjisi ise

$$D = \phi_{(a_0)} 2(m-1) \left[\sum_{\ell_{1,2,3}} (m_j a_0)^{-1} \left(\beta^m e^{-m_j \alpha a_0} - m \beta e^{-m_j \alpha a_0} \right) \right]^{-1} \quad (101)$$

olur. Eşitlik (72)'nin a 'ya göre ikinci türevi, alınarak $a=a_0$ daki değeri,

$$\begin{aligned} \frac{d^2\phi}{da^2} = & \frac{D}{2(m-1)} \sum_{\ell_1 \ell_2 \ell_3} \left[(m_j a_0)^{-1} \left(\beta^m e^{-mm_j \alpha a_0} - m \beta e^{-m_j \alpha a_0} \right) \right. \\ & + \frac{D}{2(m-1)} \sum_{\ell_1 \ell_2 \ell_3} \left[\beta^m e^{-mm_j \alpha a_0} \left(2\alpha a_0^{-2} + m^2 \alpha^2 m_j a_0^{-1} \right) \right. \\ & \left. \left. - \beta e^{-m_j \alpha a_0} \left(2m \alpha a_0^{-2} + m \alpha^2 m_j a_0^{-1} \right) \right] \right] \end{aligned} \quad (102)$$

olup, Bulk modülü;

$$\begin{aligned} B = & \frac{2\phi(a_0)}{36a_0^3} + \frac{D}{18c(m-1)a_0^4} \sum_{\ell_1 \ell_2 \ell_3} \left[\beta^m e^{-mm_j \alpha a_0} \left(2m(\alpha a_0) + m^2(\alpha a_0)^2 m_j \right) \right] \\ & - \beta e^{-m_j \alpha a_0} \left(2m(\alpha a_0) + mm_j(\alpha a_0)^2 \right) \end{aligned} \quad (103)$$

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

2.3. $Fe_{(1-x)}-Al_{(x)}$ Sistemleri İçin Potansiyelleri Tanımlayan Parametrelerin Hesabı

$Fe_{(1-x)}-Al_{(x)}$ sistemi $x=0$ için saf Fe elementini, $x=0.25$ için disorder yapıdaki Fe-25%Al alaşımını ve $x=0.30$ için DO_3 yapıdaki Fe-30%Al alaşımını tanımlar. Bilindiği gibi oda sıcaklığında Fe bcc yapıda iken Al fcc yapıya sahiptir [27].

bcc Fe elementini tanımlayan genelleştirilmiş Morse ve modifiye Morse potansiyel parametrelerinin (α , r_0 , D) değerlerini Girifalco ve Weizer [2-13-28] metoduna göre bulabilmek için kohesive enerjiyi, bulk modülü ve

örgü sabiti gibi parametrelerin deneysel değerlerinin bilinmesi gerekir. Fe için bu verileri literatürlerde bulmak mümkündür ve bu değerler Tablo 2'de verildi. Fakat Fe-25% Al ve Fe 30%Al alaşımları için yalnız örgü sabitlerinin deneysel değerleri literatürlerde mevcut iken kohesive enerjilerinin ve bulk modüllerinin değerleri deneysel olarak ölçülemediğinden literatürde mevcut değildir. Bu nedenle $\text{Fe}_{(1-x)}\text{-Al}_{(x)}$ ($x = 0.25$; $x = 0.30$) alaşımları için potansiyelleri tanımlayan parametrelerin değerleri Akgün [23] modeline göre bulunabilir. Model Fe-Ni [23] ve Fe-Pd [29] alaşımları için Akgün tarafından başarıyla uygulanmıştır. Bu modele göre alaşımların kohesive enerjileri (ϵ_c) ve bulk modülleri (B) hesaplanarak potansiyel parametreleri doğrudan alaşımlar için hesaplanabilir. O da sıcaklığında bcc Fe ve fcc Al elementlerinin kohesive enerjilerinden, alaşımların kohesive enerjisi lineer bağıntıdan faydalanarak bulundu. Bu bağıntı,

$$\epsilon_c \left[\text{Fe}_{(1-x)} - \text{Al}_{(x)} \right] = (1-x)\epsilon_{c\text{Fe}} + x\epsilon_{c\text{Al}}$$

alaşımlarının kohesive enerjilerini verir. Alaşımlar için bulk modülü (B) alaşımların ikinci dereceden elastik sabitlerinin (C_{11} , C_{12}) deneysel değerlerinden bulunabileceği gibi yine lineer bir bağıntıdan da bulunabilir. Burada alaşımlar için C_{ij} 'nin deneysel değerleri bilindiğinden bulk modülü $B = \frac{1}{3}(C_{11} + 2C_{12})$ bağıntısından [16, 30, 31] hesaplandı. Böylece $\text{Fe}_{(1-x)}\text{-Al}_{(x)}$ ($x=0.25, 0.30$) sistemleri için parametrize hesaplarında ϵ_c , B ve a parametrelerinin değerleri Tablo 2'de görülebilir.

Tablo2. $Fe_{(1-x)}-Al_{(x)}$ Sistemleri İçin Giriş Verileri, B ve C_{ij} (dyn/cm²) Birimindedir.

Sistem	$a(A^0)$	$E_c \times 10^{-12}$	$B \times 10^{12}$	$C_{11} \times 10^{12}$	$C_{12} \times 10^{12}$	Ref.
Fe	2,87	-6,848	1,683	2,432	1,381	[1 3]
Al	4,05	-5,43	0,722	1,143	0,619	[1 3]
Fe-25%Al	2,8964	-6,492	1,4417	1,7113	1,307	[1 6]
Fe-30%Al	2,8971	-6,2408	1,3726	1,665	1,226	[1 6]

Tablo 2'deki veriler kullanılarak bcc Fe ve $Fe_{(1-x)}-Al_{(x)}$ alaşımları için Girifalco—Weizer şartlarına göre genelleştirilmiş Morse potansiyel parametrelerinin hesaplanan değerleri Tablo 3'de ve modifiye Morse potansiyel parametrelerinin hesaplanan değerleri ise Tablo 4'de verildi. Hesaplamalarda atomlar arasındaki etkileşmeler bcc yapının 10. komşuluğuna kadar genişletildi.

Tablo 3. $\text{Fe}_{(1-x)}\text{-Al}_{(x)}$ Sistemleri İçin Genelleştirilmiş Morse,
Potansiyel Parametrelerinin Hesaplanan Değerleri

Sistem	m	α ($\text{\AA}^{-1}$)	r_0 ($\text{\AA}$)	$D \times 10^{-12}$ (erg)	β
Fe	1,25	2,8641	2,5681	10,4895	1504,71
	1,5	2,0140	2,6592	8,7705	211,77
	2,0	1,3855	2,8475	6,6832	51,95
	2,5	1,0822	3,048	5,2933	27,086
	3,0	1,0022	3,1245	4,5238	22,90
Fe-25%Al	1,25	2,7331	2,6005	9,7742	1222,71
	1,5	1,9196	2,7060	8,0605	180,305
	2,0	1,3268	2,9228	6,0432	46,94
	2,5	1,024	3,1473	4,7232	25,093
	3,0	0,9045	3,3642	2,6875	20,96
Fe-30%Al	1,25	2,6873	2,6057	9,5572	1087,944
	1,5	1,8853	2,7168	7,8343	167,67
	2,0	1,2525	2,9626	5,8105	44,84
	2,5	1,0003	3,1855	4,5213	24,104
	3,0	0,8887	3,3972	2,5714	20,47

Tablo 4. $\text{Fe}_{(1-x)}\text{-Al}_{(x)}$ Sistemleri İçin Modifiye Morse Potansiyel Parametrelerinin Hesaplanan Değerleri

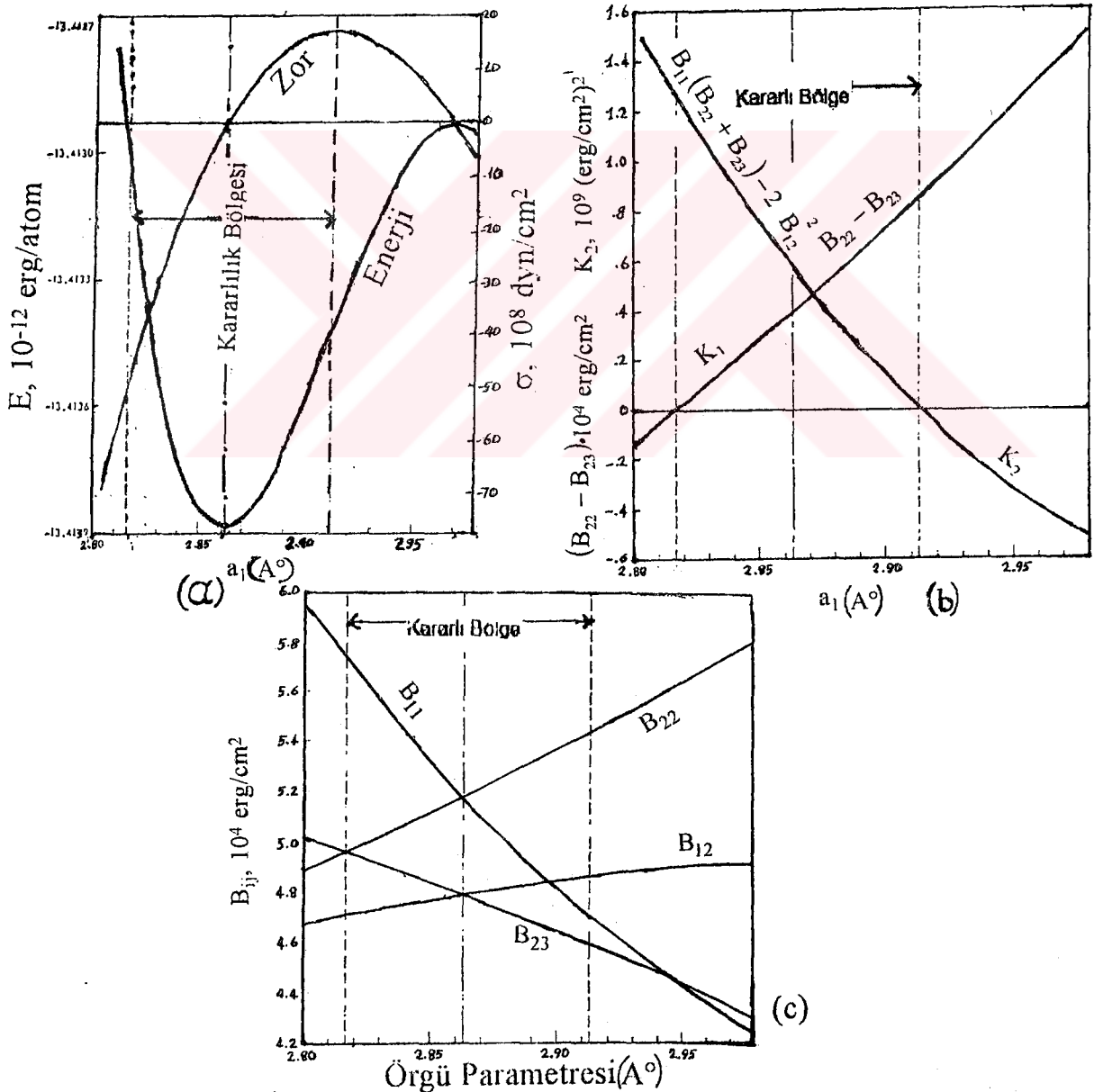
Sistem	m	α ($\text{\AA}^0$) ⁻¹	r_0 ($\text{\AA}^0$)	$D \times 10^{-20}$ (ergxcm)	β
Fe	1,25	1,3982	2,97185	2,02315	62,756
	1,5	1,29149	2,9837	1,9706	47,1593
	2,0	1,08885	3,0074	1,8655	26,434
	2,5	0,94574	3,0321	1,7528	17,5838
	3,0	0,83885	3,0542	1,6477	12,961
Fe-25%Al	1,25	1,295066	3,06175	1,87622	52,7188
	1,5	1,20008	3,07577	1,82431	40,1912
	2,0	1,010107	3,102785	1,71985	22,9689
	2,5	0,875675	3,12972	1,6115	15,4962
	3,0	0,77606	3,15231	1,5121	11,5512
Fe-30%Al	1,25	1,28192	3,11392	1,8233	54,153
	1,5	1,15705	3,12503	1,78366	37,188
	2,0	0,92216	3,15366	1,67823	21,453
	2,5	0,84213	3,18163	1,5705	14,576
	3,0	0,74615	3,2048	1,47285	10,9282

BÖLÜM 3

Fe_(1-x)-Al_(x) Sistemlerinde Kararlılık Hesabı

3.1. Fe İçin Milstein'in Kararlılık Sonuçları

bcc Fe elementinin mekaniksel kararlılığı Milstein [4] tarafından Klasik Morse potansiyeli kullanılarak incelendi. 2000 atom içerilerek hesaplanan Born kriterleri ile ilgili eğriler Şekil (6)'da verildi.



Şekil 6. Fe İçin Milstein'in Kararlılık Sonuçları a) Enerji ve Zor Eğrileri
b) Kararlılık Sınırları c) B_{ij} Eğrileri.

Bu şekillerden görüldüğü gibi klasik Morse, Fe in kararlılık hesaplarında başarılı olmuştur. Şekil 6(b)'ye göre kararlılık bölgesi $a_1=2.8166 \text{ Å}$ ile $a_1=2.9128 \text{ Å}$ a_0 denge durumunda zorun sıfır olduğu ve enerjisinin minimum olduğu Şekil 6(a) da görülmektedir. Ayrıca a_0 denge durumunda $B_{11}=B_{22}>0$ ve $B_{12}=B_{23}>0$ Born kriterlerinin sağlandığı Şekil 6(c)'den görülmektedir.

Milstein tarafından yapılan bu çalışma $\text{Fe}_{(1-x)}\text{-Al}_{(x)}$ sistemlerindeki çalışmalarımıza baz oluşturacaktır. Bu sistemlere ilk defa uygulanan genelleştirilmiş Morse ve modifiye Morse potansiyellerinin başarılı olup olmadığı Milstein sonuçlarına göre yorumlanacaktır.

3.2. Fe'de Kararlılık Hesabı

3.2.1. Genelleştirilmiş Morse Potansiyeline Göre

Bölüm 2'de verilen kararlılık eşitlikleri genelleştirilmiş Morse potansiyel fonksiyonu kullanılarak aşağıdaki gibi düzenlenecektir.

$$E = \frac{D}{2(m-1)} n \sum_j \left(\beta^m e^{-m\alpha r_j} - m\beta e^{-\alpha r_j} \right) \quad (104)$$

$$\sigma = \frac{D}{4(m-1)} \frac{a_1}{a_2^2} n \sum_j L_1^2 \frac{m\alpha}{r_j} \left(\beta e^{-\alpha r_j} - \beta^m e^{-m\alpha r_j} \right) \quad (105)$$

$$C_{11} = \frac{D}{8(m-1)} a_1 n \sum_j L_1^4 \frac{m\alpha}{r_j^2} \left[\left(\frac{1}{r_j} + m\alpha \right) \beta^m e^{-m\alpha r_j} - \left(\frac{1}{r_j} + \alpha \right) \beta e^{-\alpha r_j} \right] \quad (106)$$

$$C_{12} = \frac{D}{8(m-1)} a_2 n \sum_j L_1^2 L_2^2 \frac{m\alpha}{r_j^2} \left[\left(\frac{1}{r_j} + m\alpha \right) \beta^m e^{-m\alpha r_j} - \left(\frac{1}{r_j} + \alpha \right) \beta e^{-\alpha r_j} \right] \quad (107)$$

$$B_{11} = \frac{D}{8(m-1)} a_1^2 n \sum_j L_1^4 \frac{m\alpha}{r_j^2} \left[\left(\frac{1}{r_j} + m\alpha \right) \beta^m e^{-m\alpha r_j} - \left(\frac{1}{r_j} + m\alpha \right) \beta^m e^{-m\alpha r_j} \right. \\ \left. - \left(\frac{1}{r_j} + \alpha \right) \beta e^{-\alpha r_j} \right] + \frac{D}{4(m-1)} n \sum_j L_1^2 \frac{m\alpha}{r_j} \left(\beta e^{-\alpha r_j} - \beta^m e^{-m\alpha r_j} \right) \quad (108)$$

$$B_{22} = \frac{D}{8(m-1)} a_2^2 n \sum_j L_2^4 \frac{m\alpha}{r_j^2} \left[\left(\frac{1}{r_j} + m\alpha \right) \beta^m e^{-m\alpha r_j} - \left(\frac{1}{r_j} + m\alpha \right) \beta^m e^{-m\alpha r_j} \right. \\ \left. - \left(\frac{1}{r_j} + \alpha \right) \beta e^{-\alpha r_j} \right] + \frac{D}{4(m-1)} n \sum_j L_2^2 \frac{m\alpha}{r_j} \left(\beta e^{-\alpha r_j} - \beta^m e^{-m\alpha r_j} \right) \quad (109)$$

$$B_{12} = \frac{D}{8(m-1)} a_1 a_2 n \sum_j L_1^2 L_2^2 \frac{m\alpha}{r_j^2} \left[\left(\frac{1}{r_j} + m\alpha \right) \beta^m e^{-m\alpha r_j} \right. \\ \left. - \left(\frac{1}{r_j} + m\alpha \right) \beta^m e^{-m\alpha r_j} - \left(\frac{1}{r_j} + \alpha \right) \beta e^{-\alpha r_j} \right] \quad (110)$$

$$B_{23} = \frac{D}{8(m-1)} a_2 a_3 n \sum_j L_2^2 L_3^2 \frac{m\alpha}{r_j^2} \left[\left(\frac{1}{r_j} + m\alpha \right) \beta^m e^{-m\alpha r_j} - \left(\frac{1}{r_j} + \alpha \right) \beta e^{-\alpha r_j} \right] \quad (111)$$

Hesaplamalar bcc örgüde 10. komşuluğa kadar $m=1,5$ ve $m=2,5$ için ayrı ayrı yapıldı. Bulunan sonuçlar Tablo 5, 6, 7'de verildi. Ayrıca burada;

$$K_1 = B_{22} - B_{23} \quad (112)$$

$$K_2 = B_{11} (B_{22} + B_{23}) - 2B_{12}^2 \quad (113)$$

kısaltmaları yapıldı.

Tablo 5. Fe için Genelleştirilmiş Morse Potansiyel Fonksiyonu

Kullanılarak Hesaplanan a_2 , E ve σ değerleri. a_1 , a_2 (Å°),

E (erg/at) ve σ (dyn/cm²) birimindedir.

m = 1,5				m = 2,5		
a_1	a_2	$E \times 10^{-12}$	$\sigma \times 10^8$	a_2	$E \times 10^{-12}$	$\sigma \times 10^8$
2,64	2,9345	-13,6833	-74,31	-		-
2,68	2,9157	-13,6935	-23,63	-	-	-
2,72	2,8966	-13,6954	3,61	-	-	-
2,76	2,8771	-13,6924	11,05	-	-	-
2,80	2,8575	-13,6889	15,05	-	-	-
2,82	2,76	-13,6877	12,15	3,008	-12,79433	-18,57
2,84	2,8377	-13,6868	8,14	2,999	-12,79804	-14,31
2,86	2,8277	-13,6875	2,23	2,9899	-12,8008	-10,61
2,88	2,8177	-13,6856	-1,711	2,9807	-12,80191	-8,96
2,90	2,8077	-13,6917	-4,71	2,9715	-12,8042	-4,74
2,92	2,7973	-13,6868	-8,8513	2,9623	-12,8049	-2,51
2,94		-	-	2,9529	-12,8053	-0,68
2,98		-	-	2,9343	-12,80504	1,84
3,02	-	-	-	2,9156	-12,8039	3,12
3,06	-	-	-	2,8968	-12,80252	3,33
3,10	-	-	-	2,8781	-12,80123	2,71
3,14	-	-	-	2,8595	-12,8014	1,45

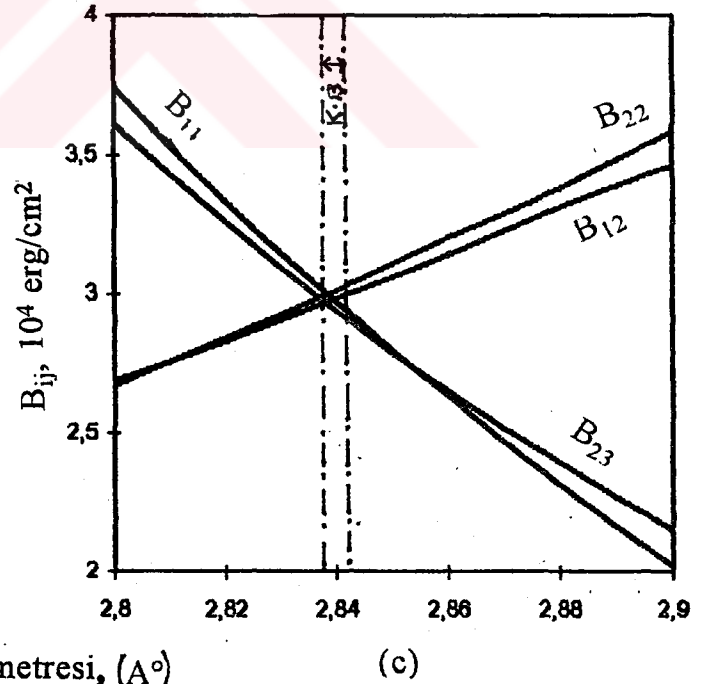
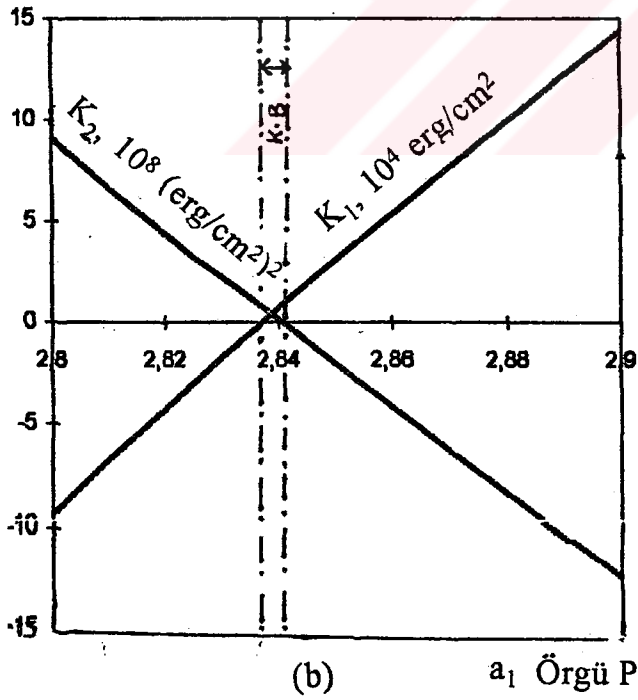
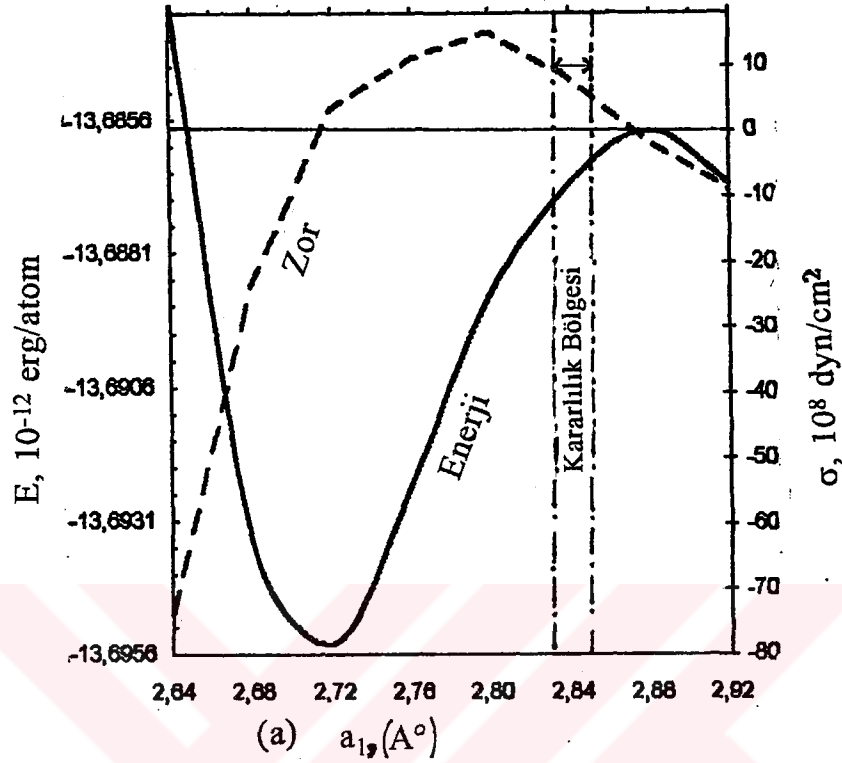
Tablo 6. Fe İçin Hesaplanan Bij ve Kararlılık sonuçları $B_{ij} \times 10^4$
(erg/cm²), $K_1 \times 10^4$ (erg/cm²) ve $K_2 \times 10^8$ (erg/cm²)²
birimindedir.

m	a ₁	B ₁₁	B ₂₂	B ₁₂	B ₂₃	K ₁	K ₂
1,5	2,80	3,74	2,67	2,64	3,61	-9,492	9,05
	2,82	3,33	2,84	2,83	3,26	-4,308	4,34
	2,84	2,97	3,01	2,98	2,94	0,635	0,1
	2,86	2,63	3,20	3,14	2,65	5,35	-4,2
	2,88	2,31	3,38	3,31	2,39	9,95	-8,5
	2,90	2,02	3,58	3,46	2,15	14,36	-12,63
2,5	2,86	2,73	1,51	1,31	2,28	-7,71	7,01
	2,88	2,51	1,58	1,35	2,09	-5,95	5,57
	2,90	2,31	1,65	1,41	1,92	-2,72	4,26
	2,92	2,1	1,72	1,47	1,77	-0,44	3,05
	2,94	1,92	1,81	1,53	1,62	1,86	1,9
	2,96	1,73	1,84	1,61	1,51	3,98	0,82
	2,98	1,59	1,97	1,66	1,36	6,04	-0,25
	3,00	1,44	2,06	1,72	1,24	8,1	-1,25

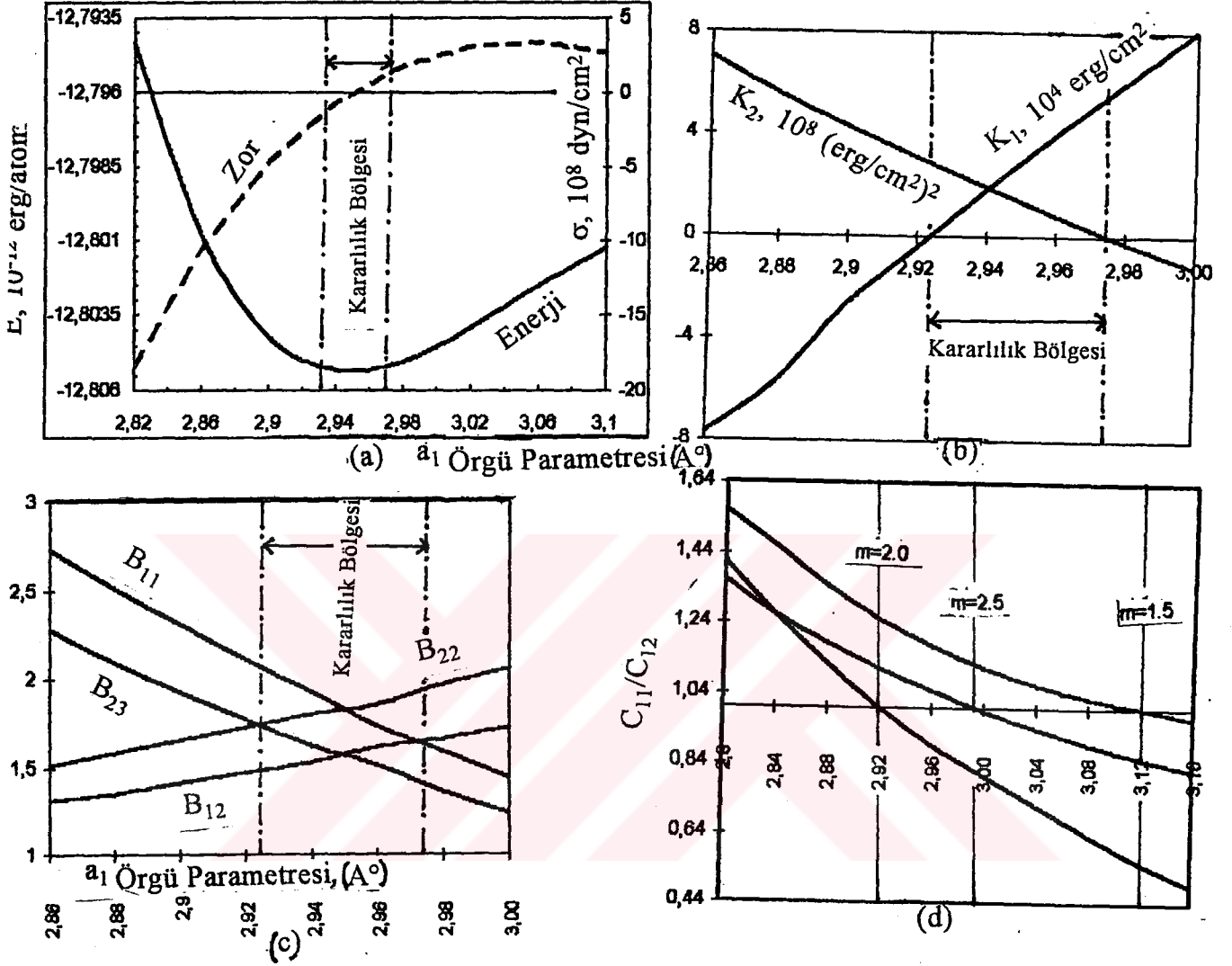
Tablo 7. Fe İçin Genelleştirilmiş Morse fonksiyonu Kullanılarak
Hesaplanan C_{11}/C_{12} Oranı

a ₁ (Å°)	m = 1,5 C ₁₁ /C ₁₂	m = 2,0 C ₁₁ /C ₁₂	m = 2,5 C ₁₁ /C ₁₂
2,80	1,562	1,3629	1,4196
2,84	1,458	1,1821	1,123
2,88	1,343	1,0468	0,8925
2,92	1,249	0,971	0,723
2,96	1,174	0,8577	0,557
3,00	1,114	0,794	0,473
3,08	1,028	0,73	0,430
3,16	0,97	0,662	0,375

Hesaplanan E , σ , B_{ij} , K_1 , K_2 ve C_{11}/C_{12} değerleri kullanılarak a_1 örgü parametresine göre değişimleri Şekil 7 ve 8'de verildi.



Şekil 7. Fe İçin $m=1.5$ da Genelleştirilmiş Morse'dan Hesaplanan Eğriler. a) $m=1.5$ İçin Enerji ve Zor Eğrileri
b) $m=1.5$ İçin K_1 ve K_2 Kararlılık Eğrileri. c) $m=1.5$ İçin B_{ij} eğrileri



Şekil 8. Fe İçin $m=2.5$ da Genelleştirilmiş Morse'dan

Hesaplanan Eğriler. a) Enerji Zor Eğrileri. b) K_1 , K_2 Kararlılık

Sınırları. c) B_{ij} Eğrileri. d) C_{11}/C_{12} 'nin $m=1.5, 2.0, 2.5$ İçin

Sonuçları.

3.2.2. Modifiye Morse Potansiyeli'ne Göre Hesaplama

Bu potansiyel kullanılarak $m=1.5, 2.0, 2.5$ için hesaplamalar ayrı ayrı yapıldı. Modifiye Morse potansiyellerini içeren eşitlikler

$$E = \frac{1}{2} \frac{D}{(m-1)} n \sum_j r_j^{-1} \left(\beta^m e^{-m\alpha r_j} - m\beta e^{-\alpha r_j} \right) \quad (114)$$

$$\sigma = \frac{Da_1}{4(m-1)a_2^2} n \sum_j L_i^2 r_j^{-2} \left[m\beta r_j^{-1} e^{-\alpha r_j} - \beta^m r_j^{-1} e^{-m\alpha r_j} \right] \quad (115)$$

$$C_{ij} = \frac{D}{8(m-1)} a_i n \sum_j L_i^2 L_j^2 r_j^{-3} \left[3r_j^{-2} \beta^m e^{-m\alpha r_j} - 3r_j^{-2} m\beta e^{-\alpha r_j} \right. \\ \left. + 3r_j^{-1} \beta^m m\alpha e^{-m\alpha r_j} - 3r_j^{-1} m\alpha \beta e^{-\alpha r_j} \right. \\ \left. + m^2 \alpha^2 \beta^m e^{-m\alpha r_j} - m\alpha^2 \beta e^{-\alpha r_j} \right] \quad (116)$$

$$B_{ij} = \frac{D}{8(m-1)} a_i a_j \sum_{\ell_1 \ell_2 \ell_3} L_1^2 L_j^2 r_j^{-3} \left[3\beta^m r_j^{-2} e^{-m\alpha r_j} - 3r_j^{-2} m\beta e^{-\alpha r_j} \right. \\ \left. + 3r_j^{-1} m\beta^m \alpha e^{-m\alpha r_j} - 3r_j^{-1} m\alpha \beta e^{-\alpha r_j} + m^2 \alpha^2 \beta^m e^{-m\alpha r_j} \right. \\ \left. - m\alpha^2 \beta e^{-\alpha r_j} \right] + \frac{D}{4(m-1)} n \sum_{\ell_{1,2,3}} L_i^2 r_j^{-1} e^{-\alpha r_j} - \beta^m r_j^{-1} e^{-m\alpha r_j} \\ \left. + m\alpha \beta e^{-\alpha r_j} - m\alpha \beta e^{-m\alpha r_j} \right] \quad (117)$$

olur. Bütün bu eşitliklerden yapılan hesaplamaların sonuçları Tablo (8-10)'da verildi.

Tablo 8. Fe İçin Modifiye Morse Potansiyelinde Hesaplanan Enerji,
Zor ve a_2 Değerleri. Burada a_1 ve a_2 (Å°), $E \times 10^{-12}$ (erg/at) ve
 $\sigma \times 10^8$ (dyn/cm²) Birimindedir.

m = 1,5				m = 2,0			m = 2,5		
a_1	a_2	E	σ	a_2	E	σ	a_2	E	σ
2,68	-	-	-	-	-	-	3,1142	-136846	-
2,72	-	-	-	3,1165	-13,5008	...	3,1031	-13,6856	-103,52
2,76	-	-	-	3,0975	-13,5118	-86,11	3,0857	-13,6888	-73,46
2,78	3,0781	-13,4778		-	-	-	-	-	-
2,80	-	-	-	3,0861	-13,5226	-55,05	3,0678	-13,6871	-49,12
2,82	3,0694	-13,4876	-48,15	-	-	-	-	-	-
2,84	-	-	-	3,0666	-13,5248	-30,15	3,0497	-13,6844	-30,08
2,86	3,051	-13,4901	-30,11	-	-	-	-	-	-
2,88	-	-	-	3,0484	-13,5208	-12,08	3,0311	-13,6808	-17,11
2,90	3,0326	-13,4889	-17,13	-	-	-	-	-	-
2,92	-	-	-	3,02979	-13,5148	-5,11	3,0122	-13,6771	-7,05
2,94	3,014	-13,482	-7,05	-	-	-	-	-	-
2,96	-	-	-	3,011	-13,5108	-1,21	2,9931	-13,6739	-1,51
2,98	2,9945	-13,4775	-1,01	-	-	-	-	-	-
3,00	-	-	-	2,9921	-13,5051	0,61	2,9740	-13,6711	1,31
3,02	2,976	-13,4735	2,42	-	-	-	-	-	-
3,04	-	-	-	2,9728	-13,5030	2,81	2,95439	-13,6712	2,51
3,06	2,9569	-13,4715	4,41	-	-	-	-	-	-
3,08	-	-	-	2,9536	-13,5021	1,11	2,9347	-13,6721	-0,23
3,1	2,9374	-13,4705	3,61	-	-	-	-	-	-
3,12	-	-	-	2,9344	-13,5027	-1,51	-	-	-
3,14	2,9182	-13,471	1,81	-	-	-	-	-	-
3,18	2,8991	-13,472	-1,62	-	-	-	-	-	-

Tablo 9. Fe İçin Modifive Morse Potansiyeline Göre B_{ij} , K_1 ve K_2 Sonuçları :

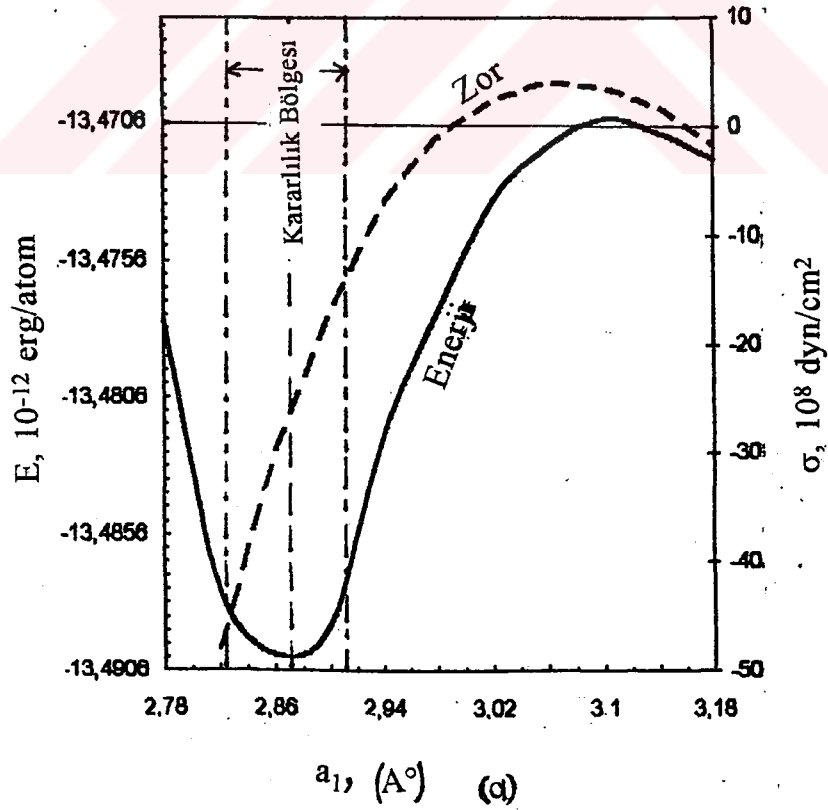
$B_{ij} \times 10^4$ (erg/cm²), $K_1 \times 10^4$ (erg/cm²) ve $K_2 \times 10^9$ (erg/cm²)²

Birimindedir.

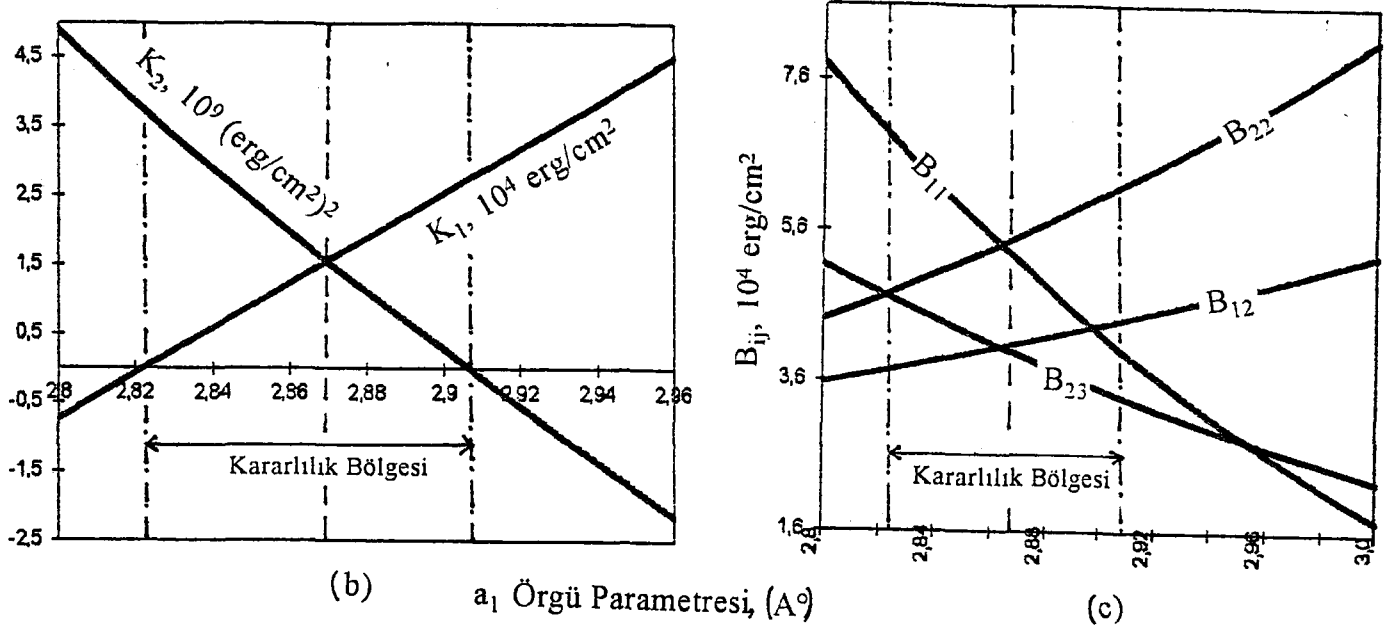
m=1,5	a_i	B_{11}	B_{12}	B_{23}	K_1	K_2
2,80	7,81	4,42	3,58	5,15	-0,73	4,9
2,82	6,99	4,71	3,72	4,77	-0,06	3,86
2,84	6,23	5,03	3,87	4,43	0,60	2,89
2,86	5,52	5,36	4,03	4,1	1,5	1,97
2,88	4,86	5,7	4,19	3,79	1,91	1,1
2,90	4,24	6,06	4,35	3,5	2,56	0,27
2,9	3,67	6,44	4,53	3,23	3,21	-0,55
2,94	3,14	6,84	4,71	2,97	3,86	-1,35
2,96	2,65	7,25	4,89	2,73	4,53	-2,15
2,98	2,19	7,69	5,09	2,51	5,19	-2,96
3,00	1,77	8,16	5,3	2,29	5,86	-3,77
m=2						
2,80	7,6	4,16	3,51	5,19	-0,97	4,59
2,82	6,76	4,46	3,65	4,79	-0,28	3,55
2,84	5,99	4,77	3,87	4,38	0,39	2,58
2,86	5,27	5,11	3,96	4,04	1,06	1,67
2,88	4,6	5,46	4,13	3,72	1,73	0,81
2,90	3,98	5,82	4,3	3,42	2,4	-0,02
2,9	3,4	6,2	4,48	3,14	3,06	-0,84
2,94	2,87	6,61	4,67	2,88	3,73	-1,64
2,96	2,38	7,03	4,86	2,63	4,4	-2,44
2,98	1,92	7,47	5,07	2,40	5,07	-3,24
3,00	1,5	7,95	5,28	2,18	5,76	-4,06
m=2,5						
2,80	7,29	3,85	3,4	5,05	-1,2	418
2,82	6,45	4,15	3,55	4,66	-0,5	3,16
2,84	5,68	4,47	3,71	4,29	0,17	2,22
2,86	4,96	4,8	3,87	3,95	0,85	1,34
2,88	4,29	5,15	4,04	3,62	1,52	0,5
2,90	3,68	5,51	4,21	3,32	2,19	-0,3
2,9	3,1	5,9	4,40	3,03	2,86	-1,1
2,94	2,58	6,3	4,59	2,76	3,53	-1,87
2,96	2,09	6,72	4,79	2,52	4,20	-2,65
2,98	1,64	7,17	5,01	2,28	4,88	-3,45
3,00	1,22	7,64	5,22	2,06	5,57	-4,26

Tablo 10. Fe için Modifiye Morse'dan Hesaplanan Oranları.

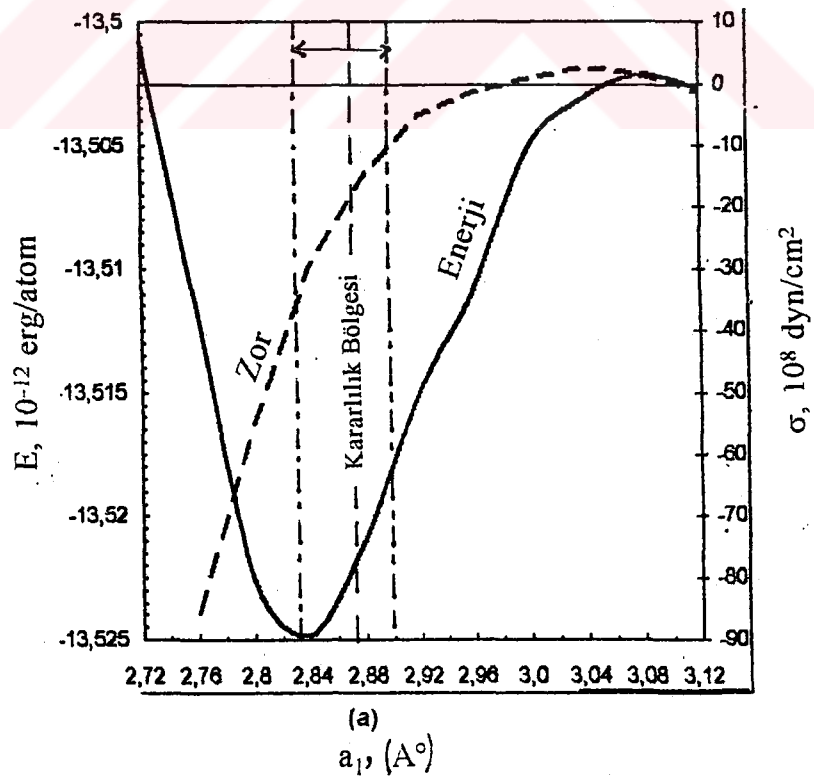
$a_1(\text{\AA})$	m=1,5 C_{11}/C_{12}	m=2,0 C_{11}/C_{12}	m=2,5 C_{11}/C_{12}
2,80	1,252	1,256	1,263
2,82	1,21	1,221	1,225
2,84	1,172	1,179	1,185
2,86	1,13	1,139	1,143
2,88	1,08	1,095	1,099
2,90	1,038	1,046	1,052
2,92	0,988	0,999	1,003
2,94	0,94	0,954	0,95
2,96	0,88	0,891	0,89
2,98	0,82	0,831	0,836
3,00	0,76	0,768	0,77



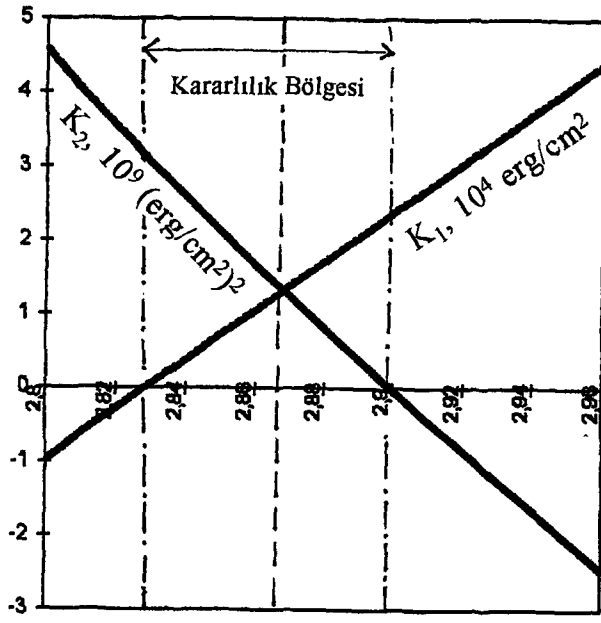
Şekil 9. Fe için m=1.5 da Modifiye Morse'dan Hesaplanan Eğriler.
a) Enerji ve Zor Eğrileri.



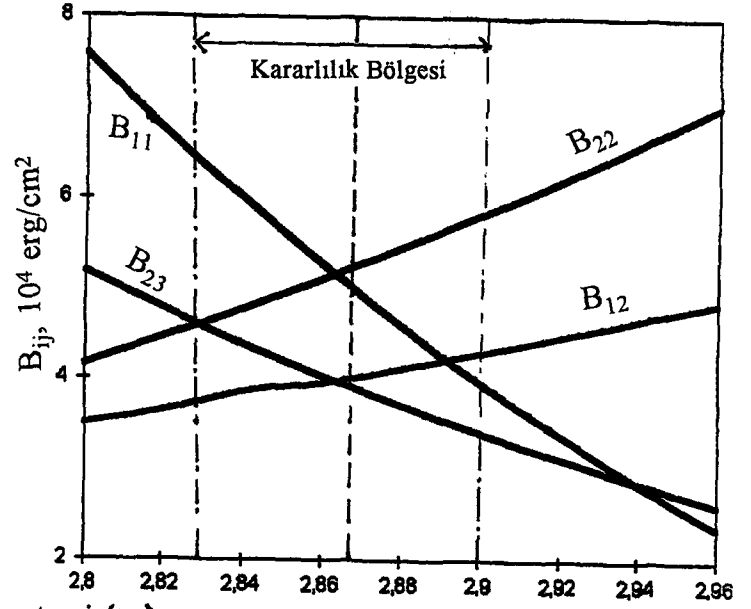
Şekil 9. (devam) b) K_1 ve K_2 Kararlılık Sınırları. c) B_{ij} Eğrileri.



Şekil 10. Fe için $m=2.0$ da Modifiye Morse'dan Hesaplanan Eğriler.
a) Enerji ve Zor Eğrileri.

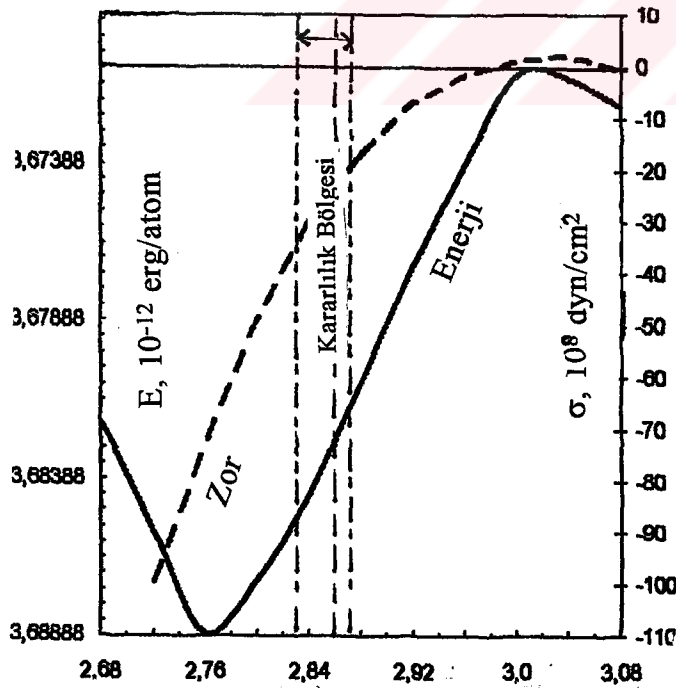


(b) a_1 Örgü Parametresi, (A°)



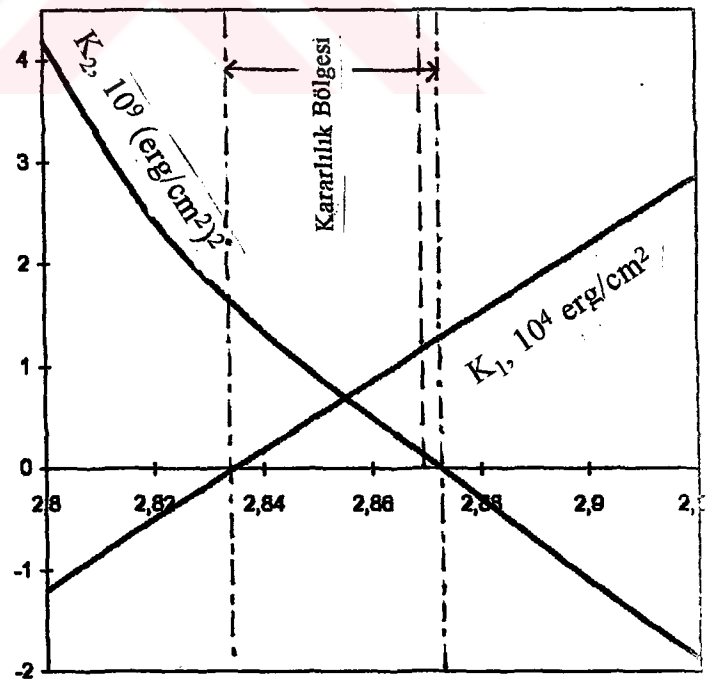
(c)

Şekil 10. (devam) b) K_1 ve K_2 Kararlılık Sınırları. c) B_{ij} Eğrileri.



(a)

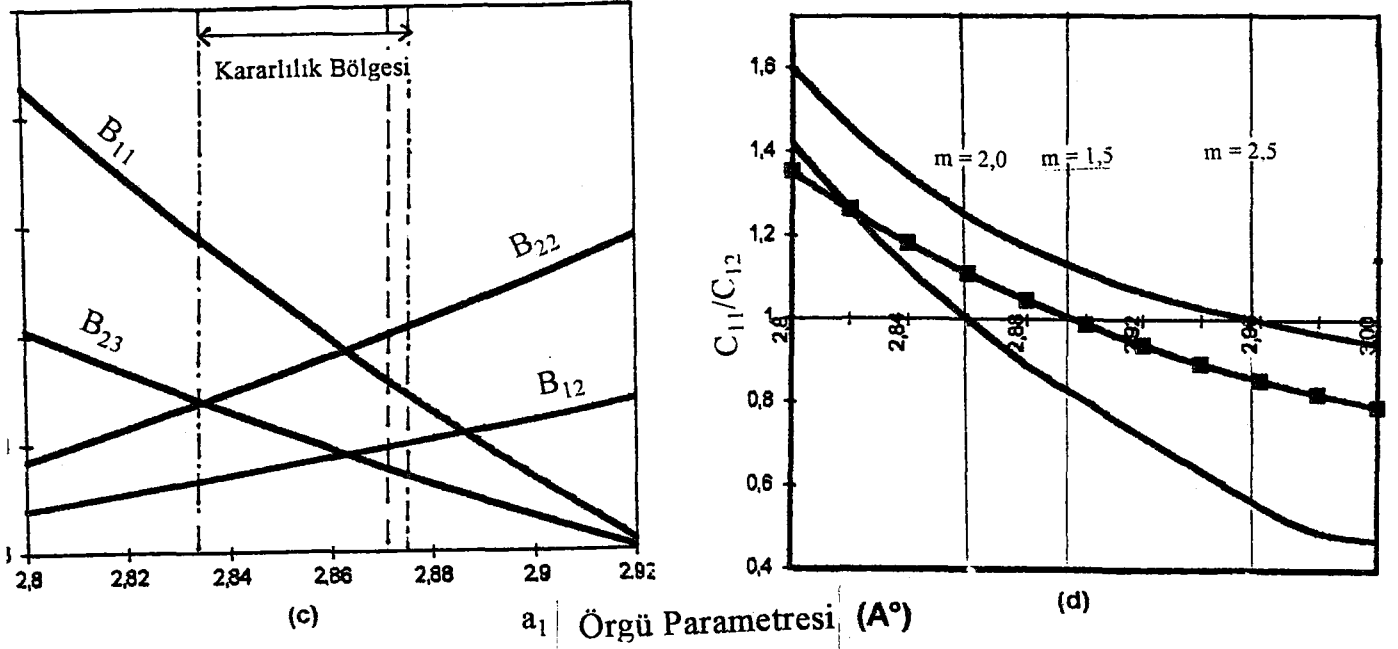
a_1 Örgü Parametresi, (A°)



(b)

Şekil 11. Fe için $m=2.5$ da Modifiye Morse'dan Hesaplanan Eğriler.

a) Enerji ve Zor Eğrisi. b) K_1 ve K_2 Kararlılık Sınırları.



Şekil 11. (devam) c) B_{ij} eğrileri. d) C_{11}/C_{12} Kararlılık Sınırları.

Genelleştirilmiş Morse potansiyel fonksiyonunun $m=2$ özel formu Fe için Kararlılık bölgesini tanımladığı görülmektedir. Bu Milstein'in Klasik Morse sonuçlarıdır. Şekil (7 ve 8) beklenen sonuçları vermemektedir. Ayrıca Şekil (9-11)'den görüldüğü gibi Modifiye Morse potansiyelinin $m=1.5, 2.0, 2.5$ özel formlarının bcc Fe'de kararlılık bölgesinin tanımlamamaktadır. C_{11}/C_{12} oranının Morse potansiyel fonksiyonu için $m=2$ 'de hesaplanan değeri beklenen değerdir.

3.3. Fe- 25%Al Alaşımı İçin Kararlılık Hesabı

3.3.1. Genelleştirilmiş Morse Potansiyeline Göre

25%Al miktarında alaşım Disorder yapıda [9] kararlı olup örgü parametresi $a_0 = 2.8964 \text{ Å}$ dur. Bu örgü sabiti için bcc yapıda alaşımların Bölüm I'de verilen formülleri kullanılarak bulunan sonuçlar Tablo (11-13)'de verildi.

Tablo 11. Alaşımın Disorder Yapısı İçin Genelleştirilmiş Morse'dan Hesaplanan E , σ ve a_2 Sonuçları. $E \times 10^{-11}$ (erg/at) ve $\sigma \times 10^8$ (dyn/cm²)
 a_1 ve a_2 (Å°).

m = 1,5				m = 2,0			m = 2,5		
a_1	a_2	E	σ	a_2	E	σ	a_2	E	σ
2,78	2,90789	-6,47971	-72,46	-	-	-	-	-	-
2,80	2,39819	-6,4804	-44,51	-	-	-	-	-	-
2,82	2,8884	-6,48086	-23,72	2,9435	-6,3228	-60,07	-	-	-
2,84	2,8786	-6,48106	-9,47	2,9342	-6,32304	-40,59	-	-	-
2,86	2,86879	-6,48114	-1,17	2,9250	-6,3236	-24,47	-	-	-
2,88	2,85889	-6,48111	1,71	2,9155	-6,32389	-11,48	-	-	-
2,90	2,84889	-6,4811	-0,21	2,9061	-6,324	1,46	-	-	-
2,92	2,8391	6,48113	-6,51	2,8966	-6,3239	5,94	3,0344	-5,9285	-81,03
2,94	2,82919	6,48127	-16,51	2,8872	-6,3282	10,90	3,0254	-5,9227	-55,15
2,96	2,81927	-6,48155	-29,05	2,8776	-6,3236	13,62	3,0163	-5,9297	-33,07
2,98	2,8094	-6,182	-45,11	2,8681	-6,3233	14,32	3,0071	-5,93005	14,44
3,00	-			2,8585	-6,3231	13,26	2,9979	-5,93011	1,02
3,02	-			2,8990	-6,3229	10,67	2,9887	-5,93004	13,45
3,04	-			2,8395	-6,3228	6,65	2,9795	-5,92984	23,24
3,06	-			2,8301	-6,3227	1,47	2,9705	-5,92954	30,47
3,08	-			2,8205	-6,3228	-4,68	2,96098	-5,92916	35,44
3,1	-			2,8110	-6,32288	-11,6	2,9517	-5,92877	38,44
3,12	-			-	-	-	2,9425	-5,92834	39,59
3,16	-			-	-	-	2,9240	-5,9275	37,34
3,20	-			-	-	-	2,9057	-5,92677	30,36
3,24	-			-	-	-	2,8875	-5,92685	20,22
3,28	-			-	-	-	2,8696	-5,92705	8,41
-	-			-	-	-	-	-	-

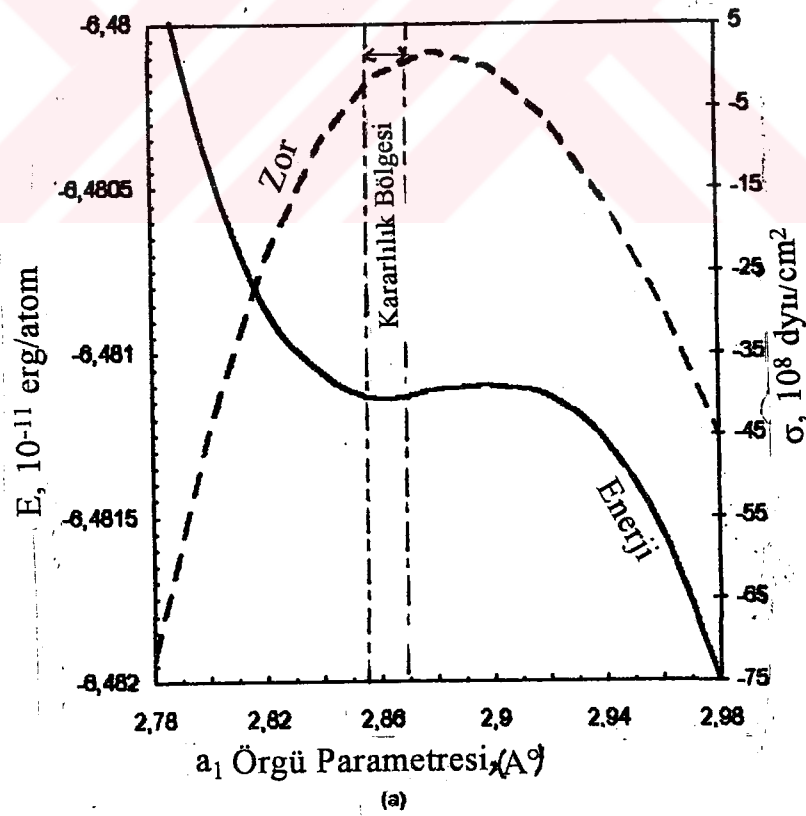
Tablo 12. Alaşımın Disorder Yapısı İçin Genelleştirilmiş Morse'dan Hesaplanan

B_{ij} (erg/cm²)², K_1 (erg/cm²), K_2 (erg/cm²)² Sonuçları.

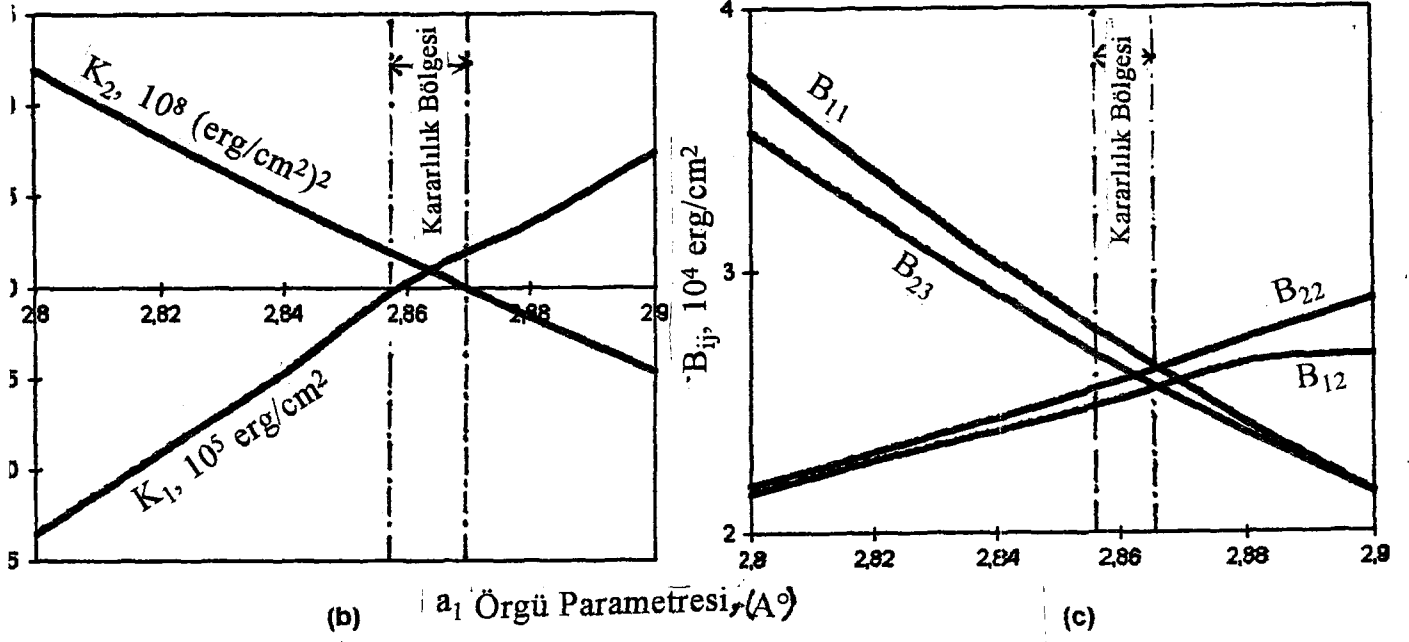
m	a_1 (A°)	$B_{11} \times 10^4$	$B_{22} \times 10^4$	$B_{12} \times 10^4$	$B_{23} \times 10^4$	$K_1 \times 10^5$	$K_2 \times 10^8$
1,5	2,80	3,75	2,18	2,15	3,53	-13,5	11,98
	2,82	3,38	2,31	2,28	3,21	-8,93	8,22
	2,84	3,03	2,44	2,39	2,91	-4,61	4,76
	2,86	2,72	2,58	2,51	2,63	0,34	1,51
	2,88	2,42	2,74	2,65	2,38	3,57	-1,61
	2,90	2,15	2,89	2,68	2,25	7,44	-4,62
	a_1 (A°)	$B_{11} \times 10^4$	$B_{22} \times 10^4$	$B_{12} \times 10^4$	$B_{23} \times 10^4$	$K_1 \times 10^4$	$K_2 \times 10^9$
2,0	2,80	5,877	4,136	3,899	4,383	-0,25	1,967
	2,84	5,278	4,271	3,963	4,261	0,01	1,362
	2,88	4,784	4,442	4,021	4,134	0,288	0,861
	2,92	4,381	4,59	4,073	4,00	0,586	0,447
	2,96	4,06	4,775	4,116	3,868	0,406	0,127
	3,00	3,8	4,976	4,152	3,728	1,25	-0,138
	3,04	3,605	5,197	4,179	3,584	1,613	-0,328
	a_1 (A°)	$B_{11} \times 10^4$	$B_{22} \times 10^4$	$B_{12} \times 10^4$	$B_{23} \times 10^4$	$K_1 \times 10^3$	$K_2 \times 10^8$
2,5	2,80	3,59	1,06	0,9	2,97	-19,21	12,89
	2,84	3,09	1,13	0,97	2,53	-13,85	9,51
	2,88	2,64	1,26	1,05	2,16	-9,02	6,82
	2,92	2,25	1,37	1,14	1,83	-4,66	4,63
	2,96	1,41	1,48	1,23	1,55	-0,694	2,778
	3,00	1,62	1,62	1,33	1,32	2,96	1,16
	3,04	1,33	1,75	1,43	1,11	6,38	-0,32
	3,08	1,09	1,91	1,56	0,93	9,6	-1,73

Tablo 13. Disorder Yapı İçin Genelleştirilmiş Morse'dan Bulunan C_{11}/C_{12} Değerleri.

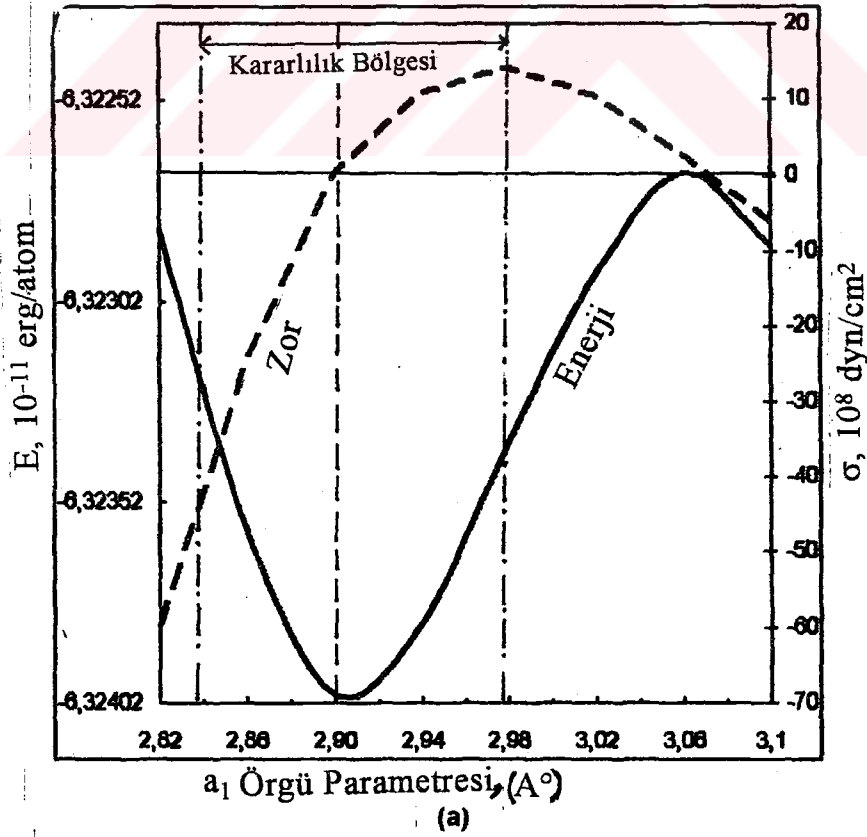
$a_1(\text{\AA})$	$m=1,5$ C_{11}/C_{12}	$m=2,0$ C_{11}/C_{12}	$m=2,5$ C_{11}/C_{12}
2,84	1,609	1,3765	1,63
2,86	1,53	1,2859	1,45
2,88	1,472	1,2048	1,29
2,90	1,425	1,1328	1,247
2,92	1,36	1,0675	1,021
2,94	1,305	1,0098	0,908
2,96	1,268	0,96	0,808
2,98	1,21	0,912	0,72
3,00	1,194	0,8722	0,642



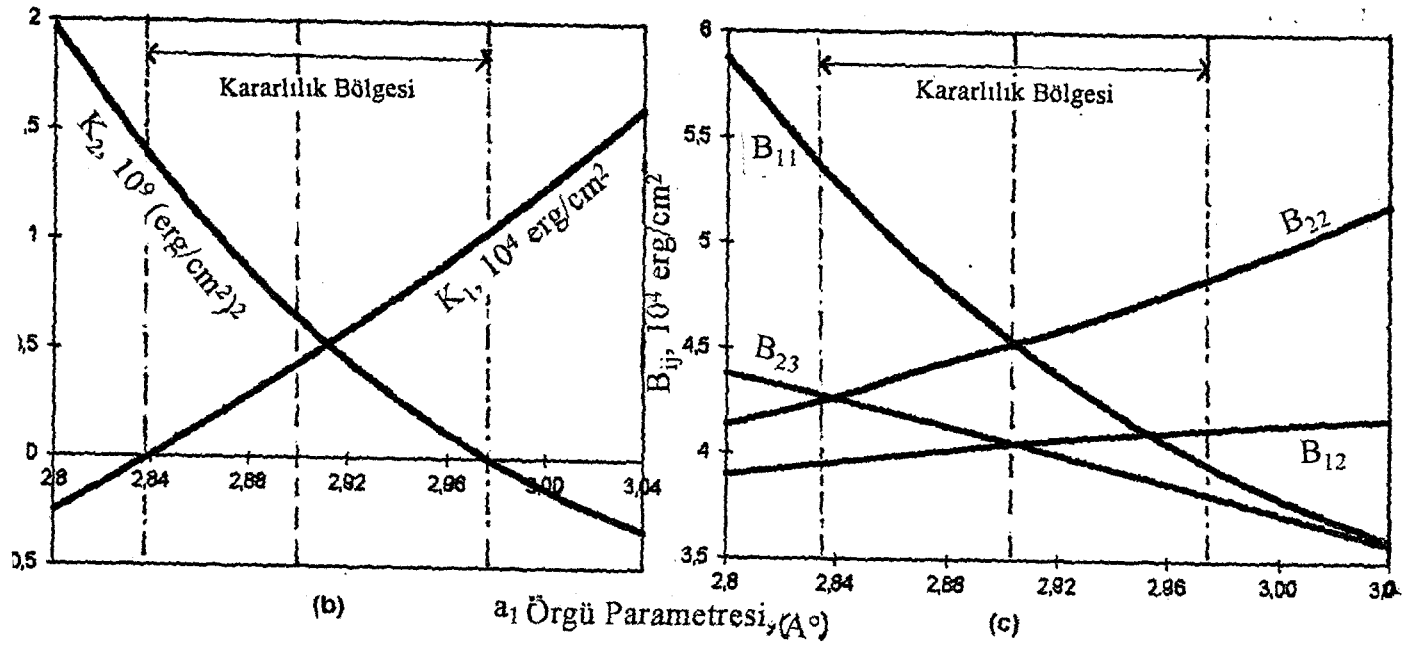
Şekil 12. Genelleştirilmiş Morse'dan $m=1,5$ da Alaşımın Disorder Yapısı İçin Hesaplanan Eğriler. a) Enerji ve Zor Eğrileri.



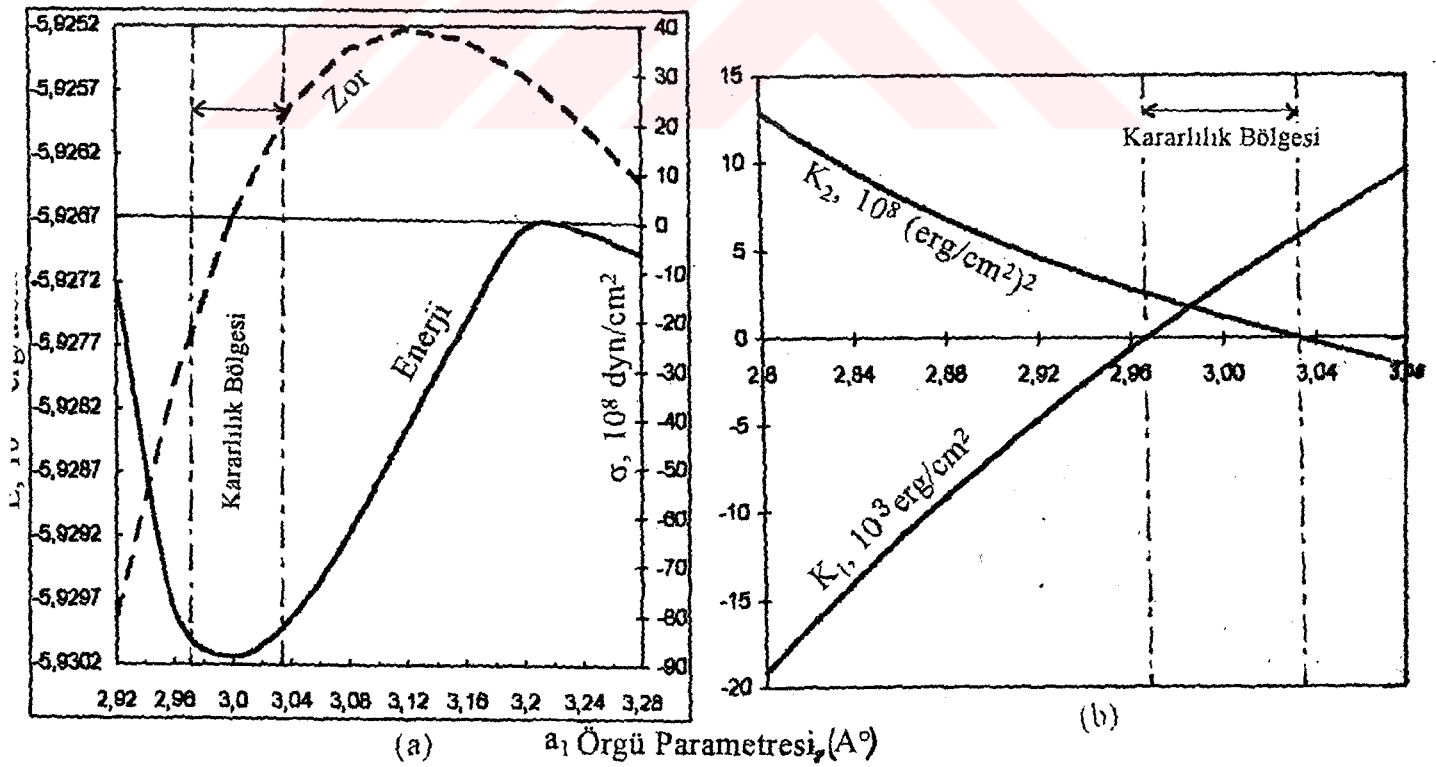
Şekil 12. (devam) b) K_1 ve K_2 Kararlılık Eğrileri; c) B_{ij} Eğrileri.



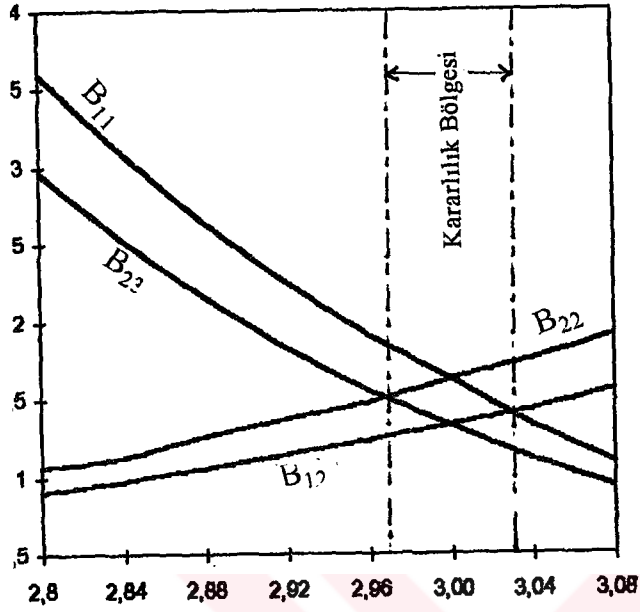
Şekil 13. Genelleştirilmiş Morse'dan $m=2.0$ da Alaşımın Disorder Yapısı İçin Hesaplanan Eğriler a) Enerji ve Zor Eğrileri.



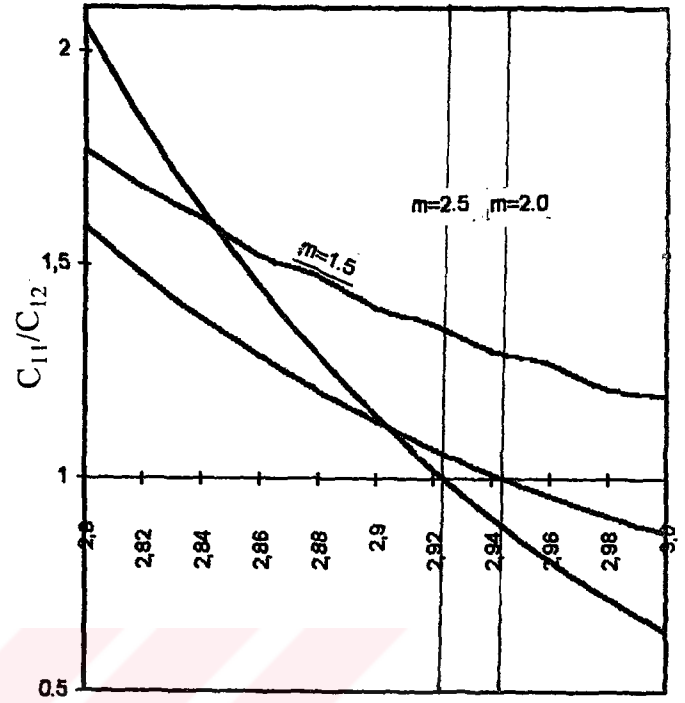
Şekil 13. (devam) b) K_1 ve K_2 Kararlılık Sınırları. c) B_{ij} Eğrileri.



Şekil 14. Genelleştirilmiş Morse'dan $m=2.5$ da Alaşımın Disorder Yapısı İçin Hesaplanan Eğriler. a) Enerji ve Zor Grafikleri. b) K_1 ve K_2 Kararlılık Sınırları.



(c)



(d)

Şekil 14. (devam) c) B_{ij} Eğrileri, d) C_{11}/C_{12} Kararlılık Eğrileri

3.3.2. Modifiye Morse Potansiyel Fonksiyonuna Göre

Bu potansiyel fonksiyonunu içeren eşitlikler (114-117)'de 10. komşuluğa kadar alaşımın etkileşimleri dikkate alınarak yapılan hesaplamalara ait sonuçlar Tablo (14-16)'da verildi.

Tablo 14.Modifiye Morse Kullanılarak Alaşımın Disorder Yapısı İçin
Hesaplanan Enerji Zor ve a_2 Değerleri $\text{Ex}10^{-11}$ (erg/at) ve
 $\sigma \times 10^9$ (dyn/cm²) a_1 ve a_2 ($\text{\AA}^\circ$) birimindedir.

a_1	$m = 1,5$			$m = 2,0$			$m = 2,5$		
	a_2	E	σ	a_2	E	σ	a_2	E	σ
2,70	-	-	-	3,1602	-6,556	-67,6	3,1454	-6,682	-62,62
2,74	-	-	-	3,1437	-6,5612	-22,11	3,1288	-6,6547	-23,22
2,78	3,1580	-6,475	-80,13	3,1268	-6,5624	-11,08	3,1117	-6,6554	-8,75
2,82	3,1280	-6,4821	-35,55	3,1096	-6,5618	-5,13	3,0941	-6,6543	-2,31
2,86	3,1106	-6,4828	-22,12	3,0917	-6,5605	-2,44	3,0761	-6,6526	+2,51
2,90	3,0928	-6,4804	-14,16	3,0737	-6,5585	+2,22	3,0578	-6,6506	+4,88
2,94	3,0746	-6,4784	-8,11	3,0552	-6,5565	+3,81	3,0392	-6,6485	+4,00
2,98	3,0562	-6,4762	-3,60	3,0365	-6,5545	2,88	3,0204	-6,6466	0,185
3,02	3,0379	-6,4742	-0,5	3,0175	-6,5529	1,75	3,0013	-6,6452	1,11
3,06	3,0189	-6,4724	1,32	2,9984	-6,5517	1,12	2,9819	-6,6445	0,61
3,10	2,9999	-6,4713	2,51	2,979	-6,5514	0,51	2,9627	-6,6444	0,15
3,14	2,9761	-6,471	1,52	2,9591	-6,5518	-0,42	2,953	-6,6450	-0,55
3,18	2,9531	-6,4716	-0,78	-	-	-	-	-	-

Tablo 15. Modifiye Morse Kullanılarak Alaşımın Disorder Yapısı İçin

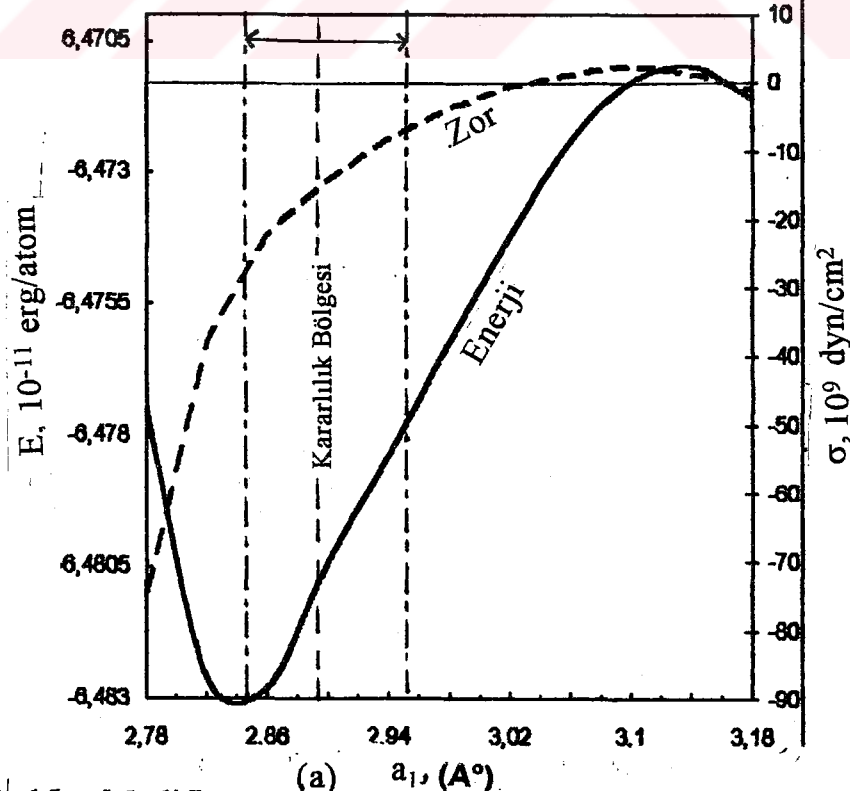
Hesaplanan; $B_{ij} \times 10^4 (\text{erg/cm}^2)$, $K_1 \times 10^4 (\text{erg/cm}^2)$,

$K_2 \times 10^9 \times (\text{erg/cm}^2)$; Sonuçları

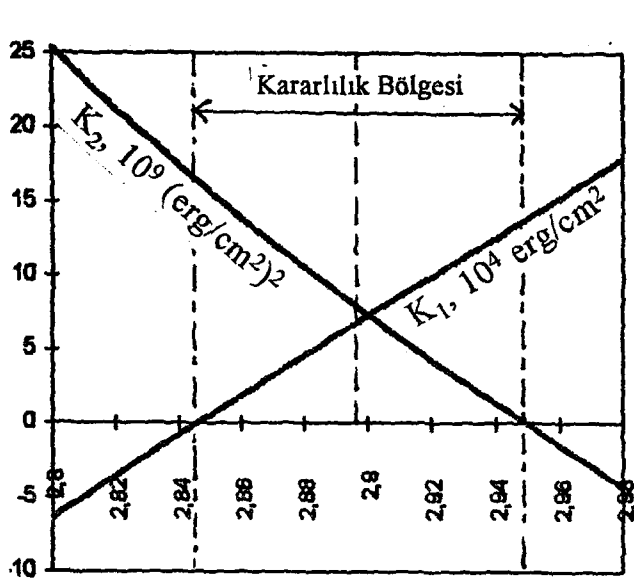
m=1.5	a_1	B_{11}	B_{12}	B_{23}	K_1	K_2
2,80	4,10	1,79	1,44	2,42	-6,34	25,35
2,82	3,63	1,90	1,50	2,26	-3,56	21,2
2,84	3,27	2,02	1,55	2,10	-0,82	17,4
2,86	2,94	2,15	1,61	1,96	1,89	13,8
2,88	2,64	2,28	1,66	1,83	4,58	10,5
2,90	2,35	2,42	1,73	1,69	7,25	7,35
2,9	2,08	2,56	1,80	1,57	9,90	4,3
2,94	1,83	2,72	1,86	1,46	12,55	1,4
2,96	1,6	2,87	1,93	1,35	15,25	1,5
2,98	1,4	3,04	2,01	1,25	17,90	4,3
3,00	1,18	3,22	2,1	1,15	20,65	-7,05
m=2						
2,80	3,84	1,63	1,38	2,28	-7,57	23,1
2,82	3,46	1,74	1,44	2,22	-4,76	9,1
2,84	3,10	1,86	1,49	2,06	-1,94	15,4
2,86	2,78	1,98	1,55	1,92	0,74	12,00
2,88	2,46	2,12	1,62	1,77	3,45	8,80
2,90	2,18	2,26	1,67	1,64	6,1	5,75
2,9	1,92	2,4	1,74	1,52	8,8	2,8
2,94	1,66	2,55	1,81	1,40	11,5	0,5
2,96	1,44	2,72	1,88	1,29	14,15	-2,7
2,98	1,22	2,88	1,96	1,19	16,85	-5,4
3,00	1,02	3,05	2,04	1,09	19,60	-8,1
m=2.5						
2,80	3,74	1,52	1,34	2,36	-8,47	10,8
2,82	3,34	1,62	1,39	2,19	-5,62	8,87
2,84	2,99	1,74	1,45	2,03	-2,82	7,07
2,86	2,66	1,87	1,51	1,88	-0,07	5,4
2,88	2,35	2,09	1,58	1,74	2,66	3,84
2,90	2,07	2,14	1,64	1,6	5,37	2,36
2,9	1,8	2,28	1,71	1,48	8,07	0,95
2,94	1,55	2,43	1,77	1,36	10,7	-4,14
2,96	1,32	2,59	1,85	1,25	13,4	-7,11
2,98	1,11	2,76	1,93	1,15	16,0	-9,85
3,00	0,91	2,93	2,00	1,05	18,8	-12,5

Tablo 16. Modifiye Morse Kullanılarak Disorder Yapı İçin
Hesaplanan C_{11}/C_{12} Oranları

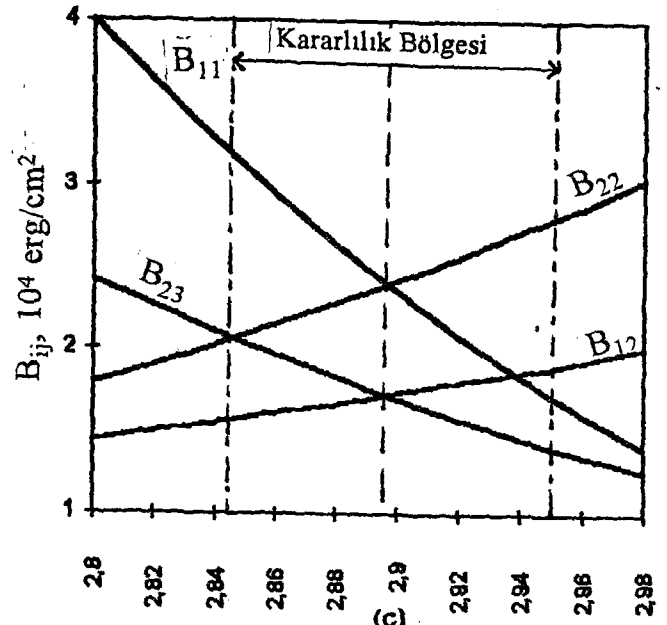
	m=1.5	m=2.0	m=2.5
$a_1(\text{\AA}^\circ)$	C_{11}/C_{12}	C_{11}/C_{12}	C_{11}/C_{12}
2,80	1,328	1,329	1,341
2,82	1,281	1,292	1,292
2,84	1,242	1,254	1,272
2,86	1,202	1,214	1,226
2,88	1,159	1,172	1,184
2,90	1,115	1,128	1,148
2,92	1,07	1,083	1,09
2,94	1,02	1,034	1,04
2,96	0,968	0,983	0,99
2,98	0,914	0,928	0,94
3,00	0,857	0,871	0,886



Şekil 15. Modifiye Morse'dan $m=1.5$ da Alaşımın Disorder Yapısı İçin Hesaplanan Eğriler. a) Enerji ve Zor Eğrileri



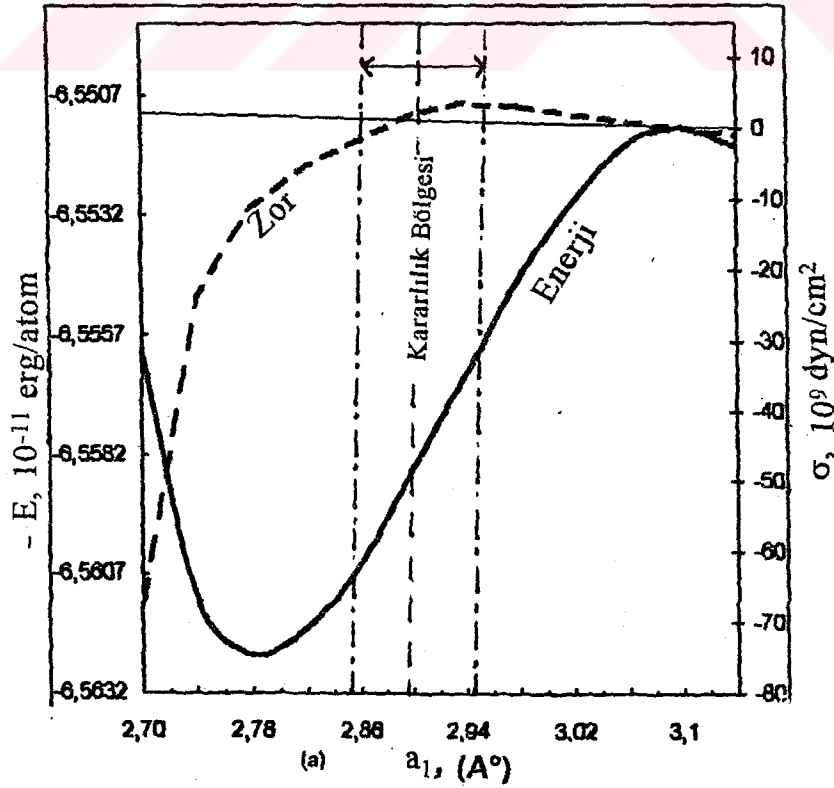
(b)



(c)

a_1 Örgü Parametresi (Å)

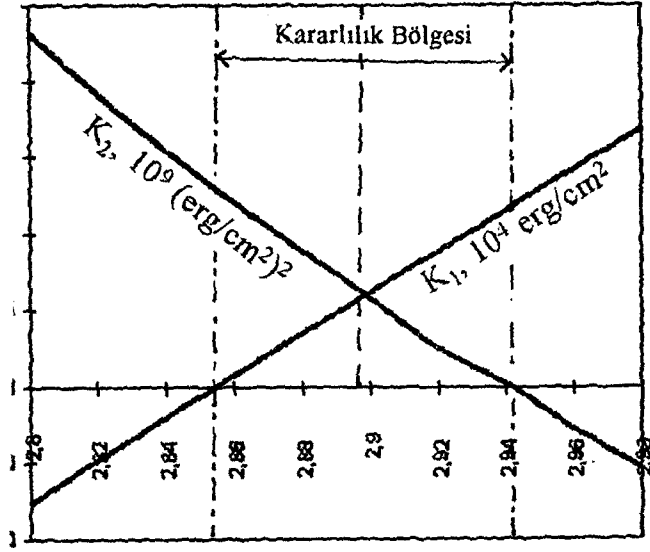
Şekil 15. (devam) b) K_1 ve K_2 Kararlılık Sınırları. c) B_{ij} Eğrileri



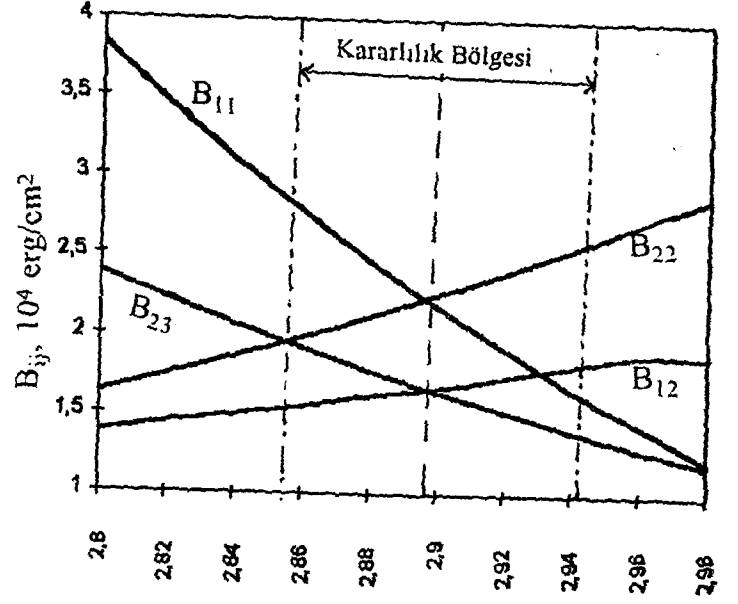
(a)

$a_1, (\text{Å})$

Şekil 16. Modifiye Morse'dan $m=2.0$ da Alaşımın Disorder Yapısı İçin Hesaplanan Eğriler. a) Enerji ve Zor Eğrisi

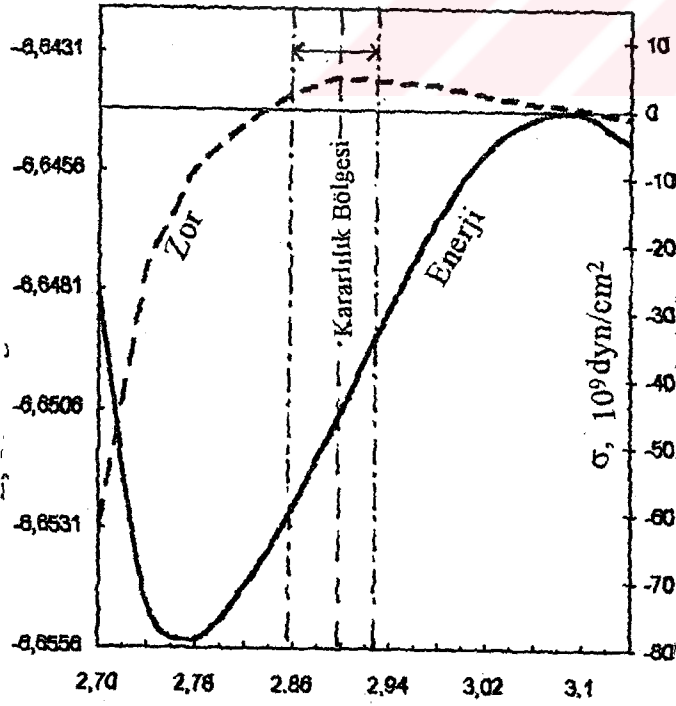


(b) a_1 Örgü Parametresi (Å)

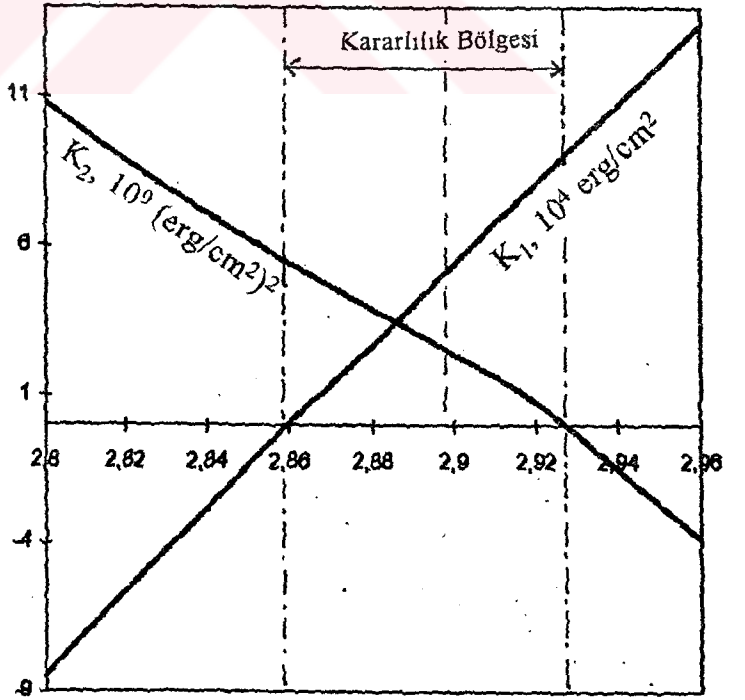


(c)

Şekil 16. (devam) b) K_1 ve K_2 Kararlılık Sınırları. c) B_{ii} Diyagramları.

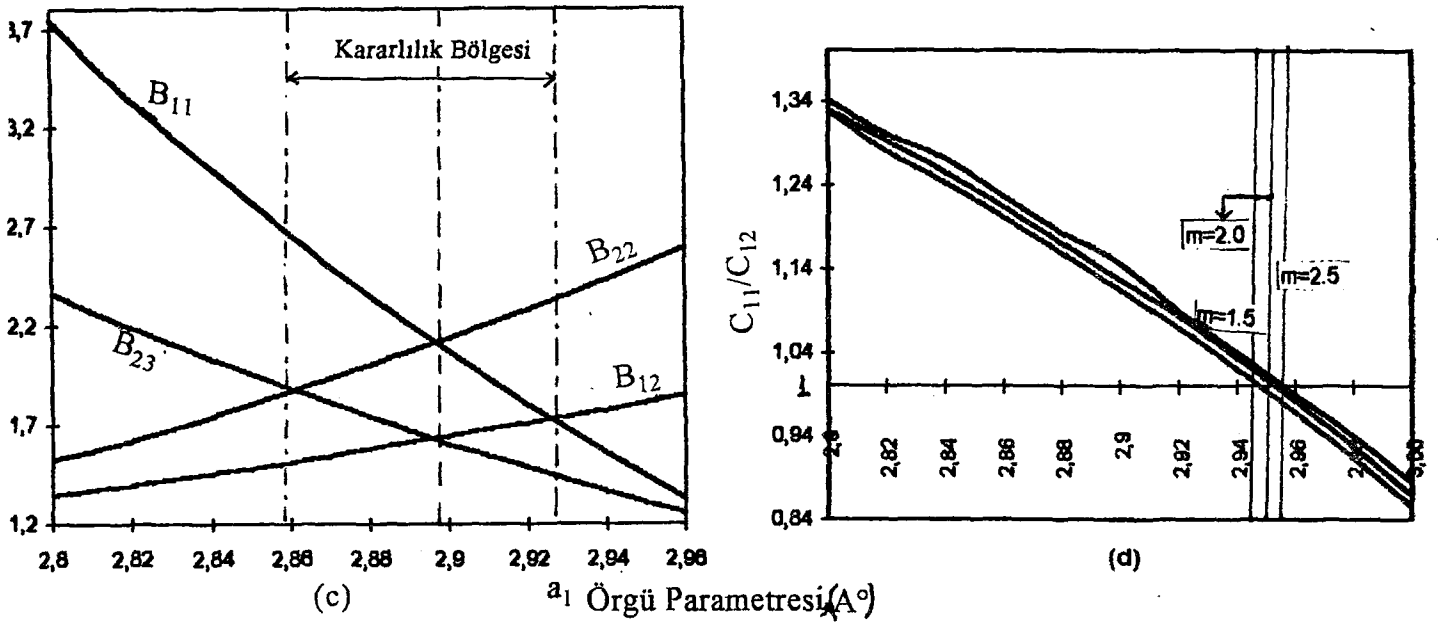


(a) a_1 Örgü Parametresi (Å)



(b)

Şekil 17. Modifiye Morse'dan $m=2.5$ da Alaşımın Disorder Yapısı İçin Hesaplanan Eğriler. a) Enerji Zor Eğrileri. b) K_1 ve K_2 Kararlılık sınırları



Şekil 17. (devam) c) B_{ij} Eğrileri. d) C_{11}/C_{12} Kararlılık Sınırları.

Genelleştirilmiş Morse'un $m=2$ özel formu için hesaplanan sonuçların Millstein'in Fe için hesapladığı sonuçlarla uyum içerisinde. $m=1,5$, $2,5$ için kararlılık sonuçlarının uyumsuz olduğu şekil (13, 14) den görülmektedir. Ayrıca Şekil (15-17)'den görüldüğü gibi Modifie Morse potansiyel fonksiyonunun $m=1,5$, $2,0$, $2,5$ özel formlarının bcc Disorder da kararlılık bölgesini tanımlayamamaktadır. Sonuç olarak Genelleştirilmiş Morse'un $m=2$ formu beklenen değerdir Şekil 13. Morse potansiyelinden hesaplanan $m=2,0$ özel formu için C_{11}/C_{12} oranı K_2 kararlılık sınır değeriyle uyum içindedir.

3.4. Fe-30% Al Alaşımı İçin Kararlılık Hesabı

3.4.1. Genelleştirilmiş Morse Potansiyeline Göre

30 %Al miktarında alaşım DO_3 yapıda kararlıdır [9]. Örgü sabiti $a_0 = 28971 A^\circ$ dur. Bu örgü için bcc yapıda alaşımların Bölüm 1'de verilen formülleri kullanılarak bulunan sonuçlar Tablo (17-19)'da verildi.

Tablo 17. Alaşımın DO₃ Yapısı İçin Genelleştirilmiş Morse'dan Hesaplanan Enerji, Zor ve a₂ Parametreleri. Ex10⁻¹¹ (erg/at), σx 10⁸(dyn/cm²), a₁ ve a₂(Å)

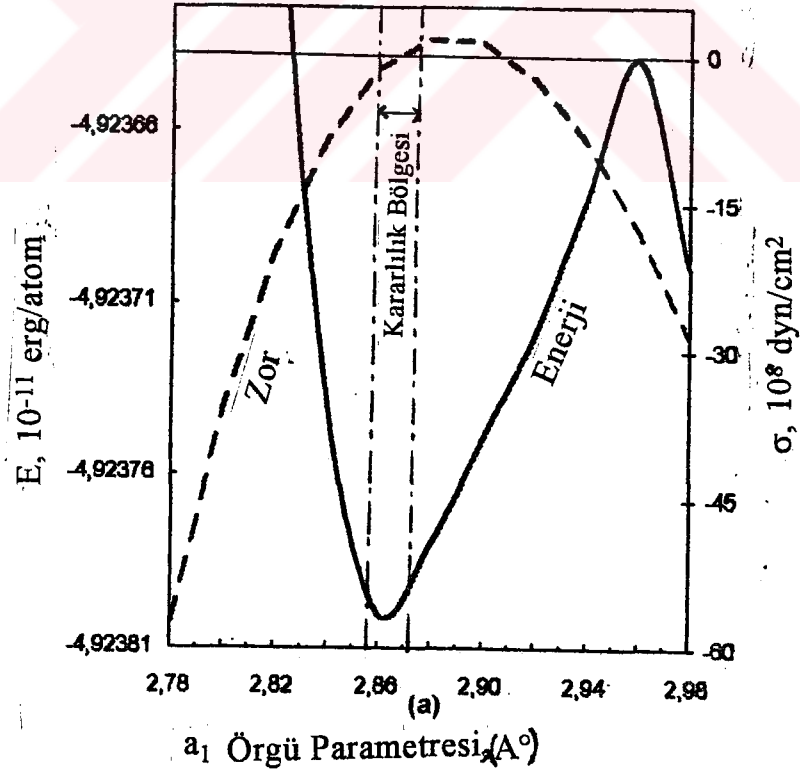
a ₁	m = 1,5			m = 2,0			m = 2,5		
	a ₂	E	σ	a ₂	E	σ	a ₂	E	σ
2,78	2,9078	-4,92316	-57,73	2,92686	-4,98522	-68,05	-	-	-
2,80	2,8982	-4,92321	-36,16	-	-	-	-	-	-
2,82	2,8886	-4,92357	-19,85	2,9154	-4,98596	-35,91	-	-	-
2,84	2,8788	-4,92374	-8,32	-	-	-	-	-	-
2,86	2,869	-4,9238	-1,142	2,9062	-4,98673	-10,93	-	-	-
2,88	2,8592	-4,92378	1,93	-	-	-	-	-	-
2,90	2,8494	-4,92375	1,47	2,8784	-4,9868	3,3	3,0609	4,52776	-50,28
2,92	2,8394	-4,42372	-2,21	-	-	-	-	-	-
2,94	2,8296	-4,92368	-8,61	2,8596	-4,98646	14,13	3,0431	-4,32995	-27,29
2,96	2,8197	-4,92364	-17,62	-	-	-	-	-	-
2,98	2,8098	-4,92367	-28,63	2,8408	-4,98599	16,85	3,0251	4,53038	-9,99
3,02	-	-	-	2,8221	-4,98543	14,63	3,0068	4,53053	2,41
3,06	-	-	-	2,8033	-4,98505	8,72	2,9885	4,53023	10,63
3,1	-	-	-	2,7802	-4,98504	-1,8	2,9702	-4,52965	15,31
3,14	-	-	-	2,7619	-4,9851	-8,85	2,9518	-4,52892	17,71
3,18	-	-	-	-	-	-	2,9335	4,52818	16,75
3,22	-	-	-	-	-	-	2,9154	4,52814	14,65

Tablo 18. Alaşımın DO₃ Yapısı İçin Genelleştirilmiş Morse'dan Hesaplanan;
 B_{ij} , $10^4(\text{erg/cm}^2)$; K_1 , $10^4(\text{erg/cm}^2)$; K_2 , $10^8(\text{erg/cm}^2)^2$; Sonuçları.

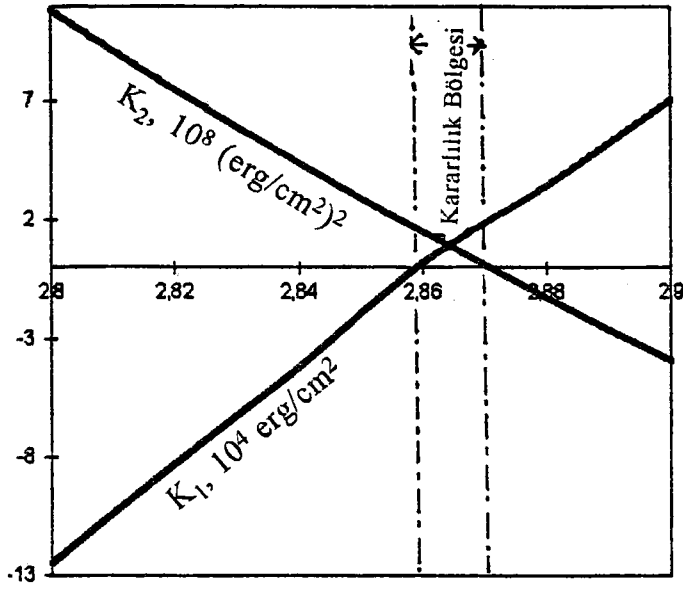
a_1						
$m=1,5$	B_{11}	B_{22}	B_{12}	B_{23}	K_1	K_2
2,80	3,577	2,09	2,066	3,34	-12,5	10,88
2,82	3,229	2,21	2,17	3,035	-8,22	7,53
2,84	2,905	2,342	2,278	2,755	-4,13	4,43
2,86	2,605	2,477	2,391	2,499	0,226	1,528
2,88	2,326	2,61	2,51	2,265	3,5	-1,242
2,90	2,06	2,71	2,633	2,05	7,11	-3,92
$m=2$						
2,78	5,78	3,99	3,99	4,2	-0,109	1,898
2,82	5,21	4,123	4,123	4,07	0,14	1,352
2,86	4,72	4,27	4,27	3,953	0,416	0,895
2,90	3,45	4,43	4,43	3,82	0,707	0,518
2,94	3,92	4,61	4,61	3,69	1,018	0,213
2,98	3,77	4,81	4,81	3,55	1,35	-0,025
3,02	3,57	5,01	5,01	3,41	1,7	
$m=2,5$						
2,96	1,883	1,367	1,367	1,522	-1,55	2,94
2,08	1,732	1,42	1,42	1,412	-0,51	2,27
3,00	1,589	1,48	1,48	1,292	1,89	1,5
3,02	1,456	1,54	1,34	1,19	3,53	0,82
3,04	1,33	1,606	1,606	1,09	5,1	0,182
3,06	1,22	1,668	1,668	1,007	6,607	-0,43
3,08	1,102	1,736	1,736	0,926	8,1	-1,04

Tablo 19. Alaşımın DO₃ Yapısı İçin Genelleştirilmiş Morse'dan Hesaplanan C₁₁/C₁₂ Sonuçları

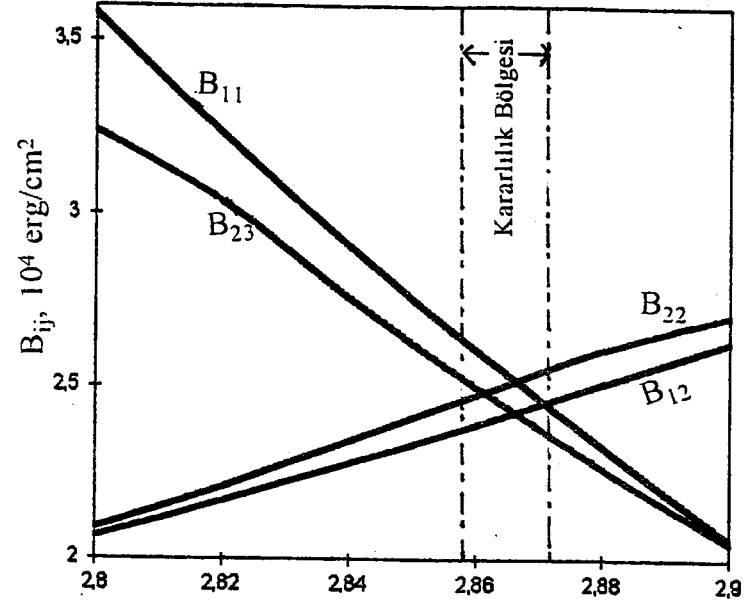
	m=1,5	m=2,0	m=2,5
a ₁ (Å°)	C ₁₁ /C ₁₂	C ₁₁ /C ₁₂	C ₁₁ /C ₁₂
2,82	1,77	1,408	1,636
2,86	1,52	1,231	1,337
2,90	1,33	1,089	1,06
2,94	1,29	0,976	0,84
2,98	1,21	0,886	0,67
3,02	1,145	0,822	0,58
3,06	1,10	0,791	0,52
3,1	1,05	0,75	0,50



Şekil 18. Genelleştirilmiş Morse'dan m=1.5 da Alaşımın DO₃ Yapısı İçin Hesaplanan Eğriler a) Enerji ve Zor Eğrileri

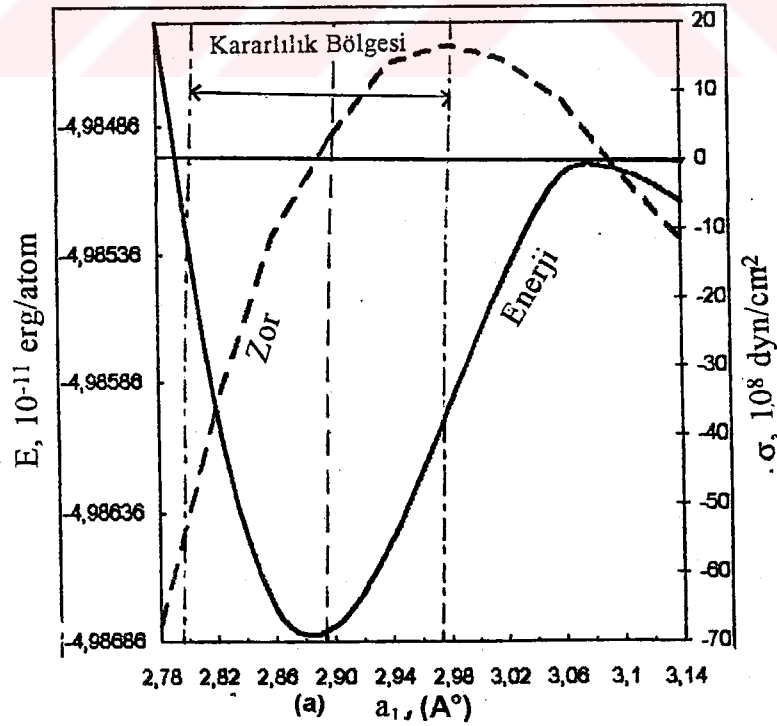


(b) a_1 Örgü Parametresi, (Å°)

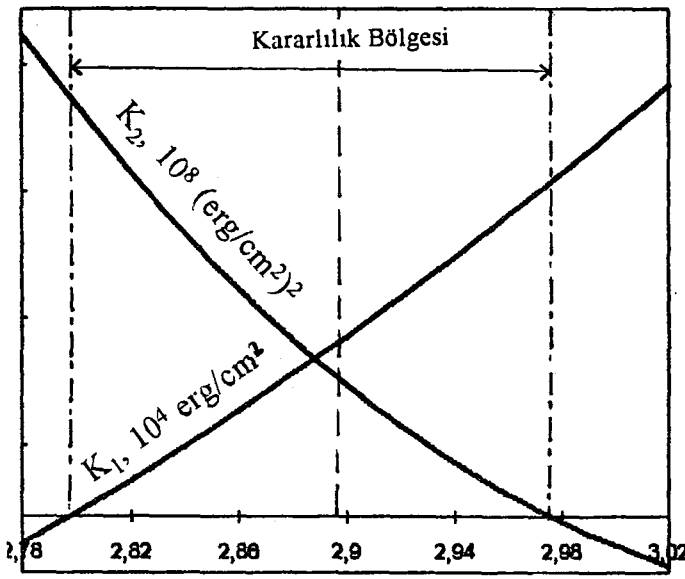


(c)

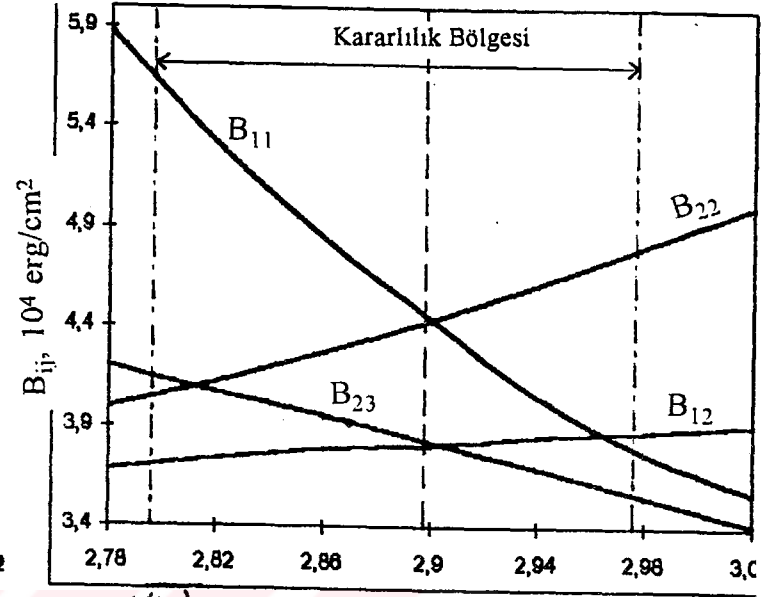
Şekil 18. (devam) b) K_1 ve K_2 Kararlılık sınırları c) B_{ij} Eğrileri



Şekil 19. Genelleştirilmiş Morse'dan $m=2.0$ da Alaşımın DO_3 Yapısı İçin Hesaplanan Eğriler. a) Enerji ve Zor Grafikleri.

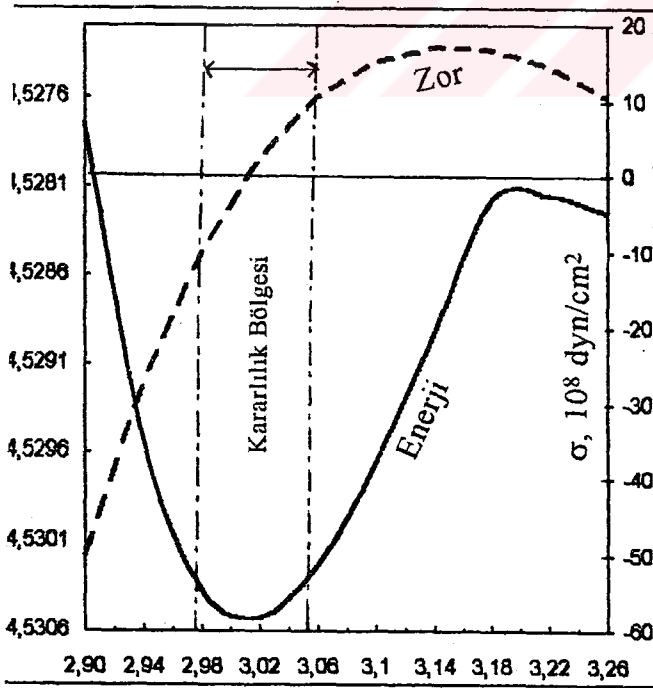


(b)

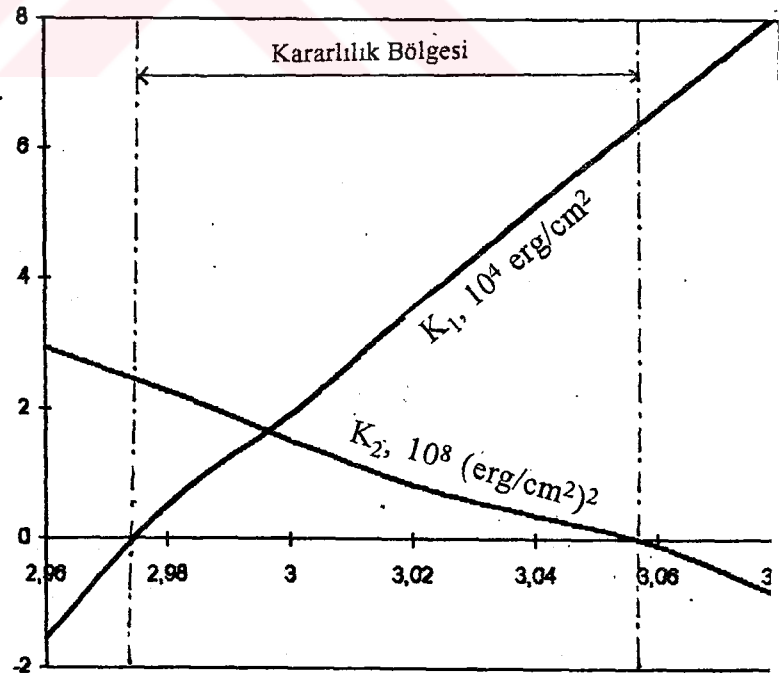


(c)

Şekil 19. (devam) b) K_1 ve K_2 Kararlılık Sınırları, c) B_{ij} Eğrileri

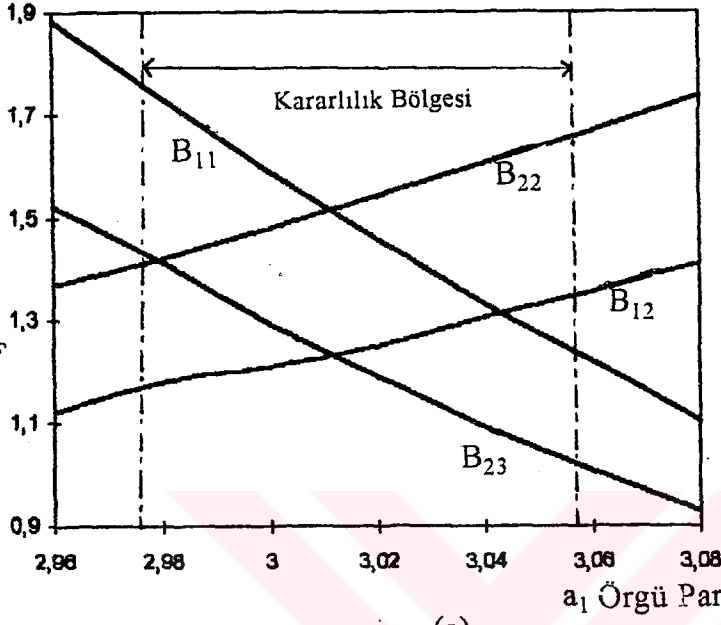


(a)

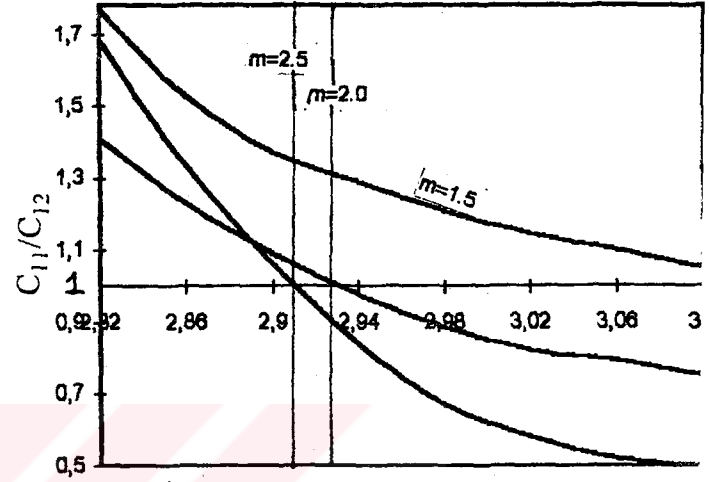


(b)

Şekil 20. Genelleştirilmiş Morse'dan $m=2.5$ da Alaşımın DO_3 Yapısı İçin Hesaplanan Eğriler, a) Enerji ve Zor Grafikleri, b) K_1 ve K_2 Kararlılık sınırları



(c)



(d)

Şekil 20. (devam) c) B_{ij} Eğrileri. d) C_{11}/C_{12} Kararlılık Sonuçları.

III.4.2. Modifiye Morse Potansiyeline Göre

DO_3 için modifiye Morse potansiyel fonksiyonuna göre hesaplanan kararlılık sonuçları Tablo (20-22)'de verildi.

Tablo 20. Alaşımın DO₃ Yapısı İçin Modifiye Morse'dan Hesaplanan Enerji, Zor ve a_2 , $[E \times 10^{-11} \text{ (erg/át)}, \sigma \times 10^9 \text{ (dyn/cm}^2\text{)}, a_1 \text{ ve } a_2 \text{ (A}^\circ\text{)}]$ Parametreleri

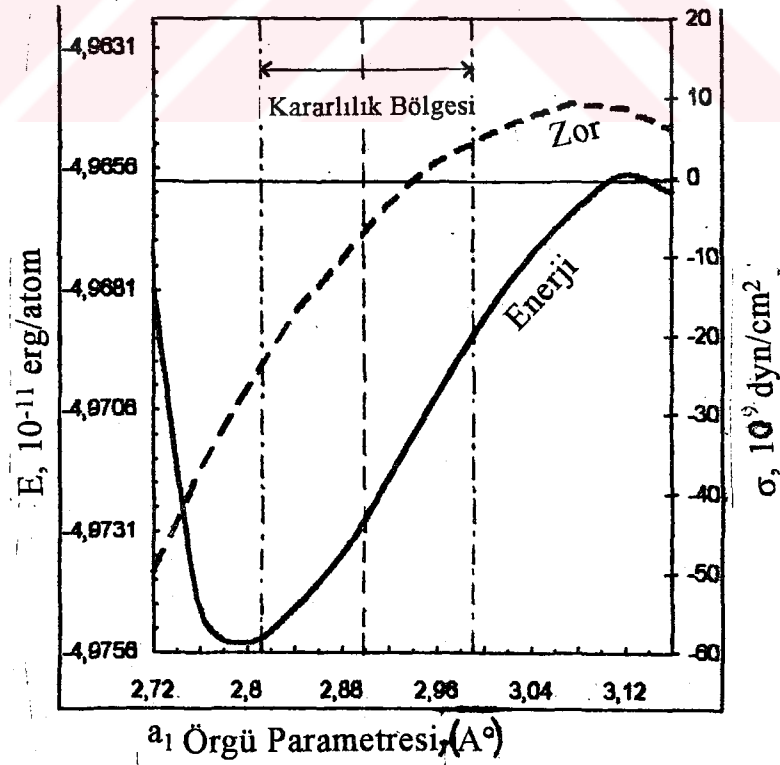
a_1	$m = 1,5$			$m = 2,0$			$m = 2,5$		
	a_2	E	σ	a_2	E	σ	a_2	E	σ
2,70	-	-	-	3,1892	-5,0685	-53,33	3,1718	-4,9232	-57,19
2,72	3,2885	-4,9681	-50,11	-	-	-	-	-	-
2,74	-	-	-	3,1732	-5,0744	-39,11	-	-	-
2,76	3,2726	-4,9747	-37,12	-	-	-	3,1474	-4,92994	-38,25
2,78	-	-	-	3,1566	-5,0752	-29,05	-	-	-
2,80	3,2562	-4,9754	-27,55	-	-	-	-	-	-
2,82	-	-	-	3,1397	-20747	-221,21	3,1218	-4,9311	-23,91
2,84	3,2392	-4,9747	-17,22	-	-	-	-	-	-
2,86	-	-	-	3,1224	-5,0738	-13,05	-	-	-
2,88	3,2219	-4,9736	-10,55	-	-	-	3,0954	-4,92992	-13,42
2,90	-	-	-	3,1047	-5,072	-9,11	-	-	-
2,92	3,2042	-4,972	-3,22	-	-	-	-	-	-
2,94	-	-	-	3,0865	-5,07	-5,21	3,0681	-4,92765	-6,11
2,96	3,1861	-4,9703	1,88	-	-	-	-	-	-
2,98	-	-	-	3,0681	-5,0686	-2,02	-	-	-
3,00	3,1677	-49687	5,22	-	-	-	3,0402	-4,92504	-1,39
3,02	-	-	-	3,0495	-5,0672	-0,20	-	-	-
3,04	3,1490	-4,9674	7,88	-	-	-	-	-	-
3,06	-	-	-	3,0305	-5,0662	0,8	3,0117	-4,92274	1,23
3,08	3,1301	-4,9664	10,5	-	-	-	-	-	-
3,1	-	-	-	3,0115	-5,0657	1,26	-	-	-
3,12	3,111	-4,9657	8,21	-	-	-	2,9833	-4,92105	2,26
3,14	-	-	-	2,9923	-5,0662	1,05	-	-	-
3,16	3,0917	-4,9661	6,11	-	-	-	-	-	-
3,18	-	-	-	-	-	-	2,9554	-4,2016	2,13
3,24	-	-	-	-	-	-	2,9277	-4,9201	1,23
3,30	-	-	-	-	-	-	2,9004	-4,92077	-0,8

Tablo 21. Alaşımın DO₃ Yapısı İçin Modifive Morse'dan Hesaplanan B_{ij} ,
K₁ ve K₂ Sonuçları. B_{ij} x10⁵ (erg/cm²), K₁x10⁴ (erg/cm²)
ve K₂x10¹⁰ (erg/cm²) birimindedir.

a ₁ m=1,5	B ₁₁	B ₁₂	B ₂₂	B ₂₃	K ₁	K ₂
2,80	4,612	2,89	1,486	2,394	-2,05	16,72
2,82	4,198	2,313	1,535	2,244	0,7	14,14
2,84	3,812	2,444	1,586	2,102	3,42	12,31
2,86	3,453	2,58	1,638	1,97	6,11	10,31
2,88	3,118	2,723	1,694	1,843	8,79	8,52
2,90	2,806	2,872	1,75	1,725	11,47	6,81
2,9	2,516	3,029	1,81	1,614	14,15	5,13
2,94	2,216	3,193	1,872	1,51	16,84	3,6
2,96	1,995	3,365	1,936	1,41	19,55	2,02
2,98	1,762	3,545	2,003	1,316	22,28	0,54
3,00	1,545	3,734	2,074	1,229	25,05	-0,9
m=2						
2,80	2,83	1,31	0,99	1,65	-3,37	6,38
2,82	2,57	1,39	1,03	1,54	-1,52	5,40
2,84	2,33	1,47	1,07	1,44	0,32	4,50
2,86	2,10	1,56	1,11	1,35	2,13	3,67
2,88	1,89	1,65	1,15	1,25	3,94	2,88
2,90	1,7	1,74	1,18	1,17	5,74	2,14
2,9	1,52	1,84	1,23	1,08	7,52	1,42
2,94	1,35	1,94	1,27	1,02	9,32	0,73
2,96	1,18	2,05	1,2	0,94	11,1	0063
2,98	1,04	2,16	1,37	0,87	12,90	-0,59
3,00	0,90	2,28	1,42	0,81	14,80	-1,25
m=2,5						
2,80	2,73	1,22	0,96	1,63	-4,13	5,92
2,82	2,47	1,29	0,99	1,52	-2,25	4,97
2,84	2,23	1,37	1,04	1,42	-0,39	4,10
2,86	2,01	1,46	1,07	1,32	1,41	3,27
2,88	1,80	1,55	1,11	1,22	3,26	2,52
2,90	1,60	1,65	1,16	1,14	5,07	1,79
2,9	1,42	1,74	1,20	1,06	6,87	1,10
2,94	1,25	1,85	1,25	0,98	8,68	0,43
2,96	1,10	1,95	1,29	0,91	10,4	-0,22
2,98	0,95	2,06	1,34	0,84	12,3	-0,86
3,00	0,81	2,18	1,39	0,77	14,1	-1,5

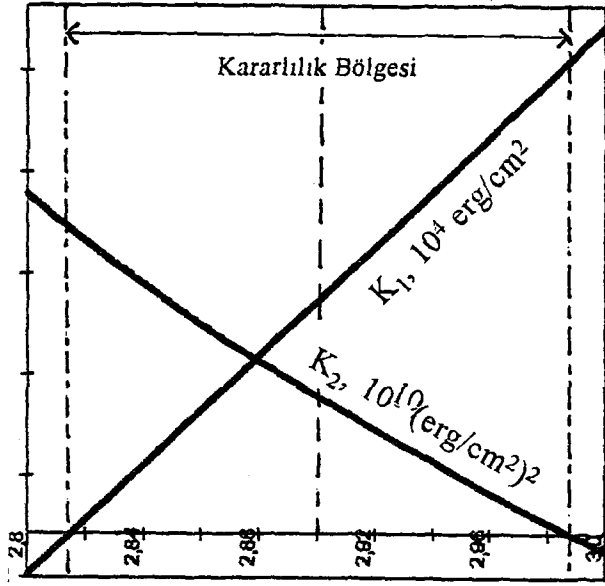
Tablo 22. Alaşımın DO₃ Yapısı İçin Hesaplanan C₁₁/C₁₂ Sonuçları

	m=1,5	m=2,0	m=2,5
a ₁ (Å°)	C ₁₁ /C ₁₂	C ₁₁ /C ₁₂	C ₁₁ /C ₁₂
2,80	1,346	1,35	1,366
2,82	1,309	1,314	1,33
2,84	1,271	1,275	1,292
2,86	1,231	1,236	1,253
2,88	1,19	1,194	1,212
2,90	1,147	1,151	1,269
2,92	1,101	1,106	1,125
2,94	1,054	1,05	1,078
2,96	1,004	1,008	1,028
2,98	0,951	0,956	0,976
3,00	0,896	0,900	0,921

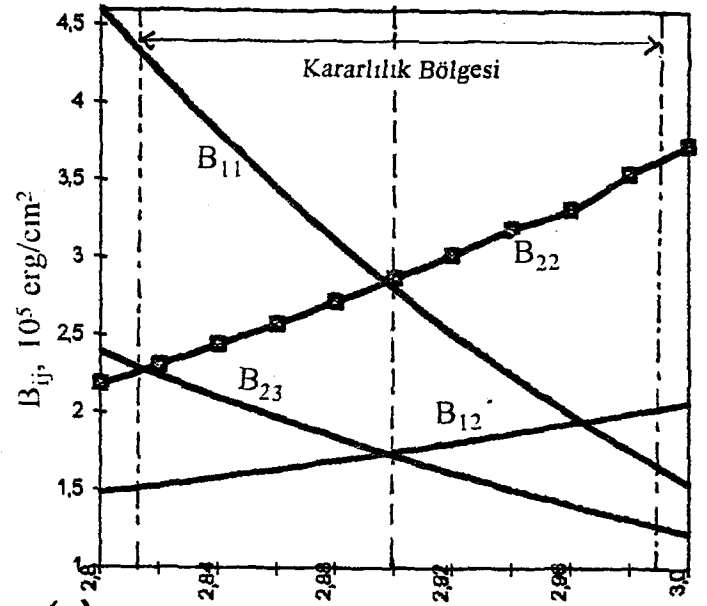


(a)

Şekil 21. Modifiye Morse'dan m=1.5 da Alaşımın DO₃ Yapısı İçin Hesaplanan Eğriler. a) Enerji ve Zor Grafikleri.

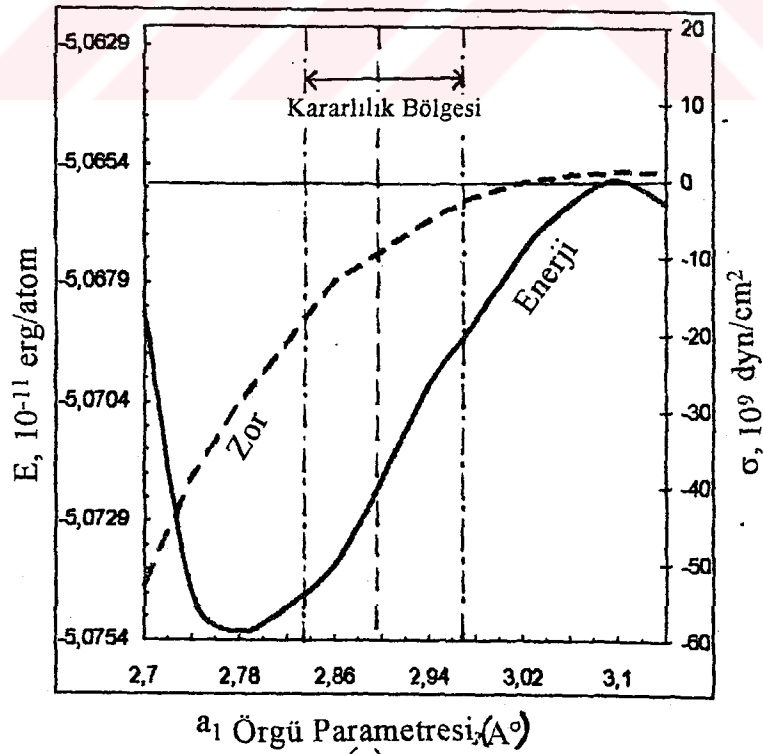


(b)



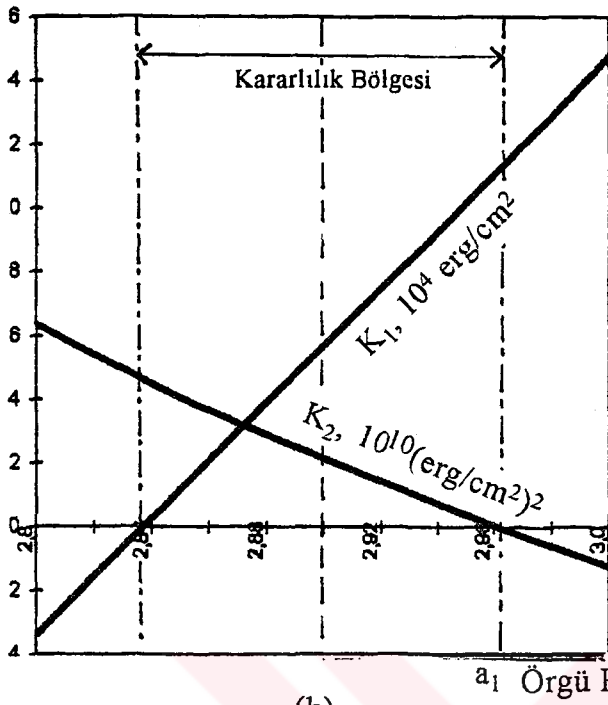
(c)

Şekil 21. (devam) b) K_1 ve K_2 Kararlılık sınırları. c) B_{ij} Eğrileri.

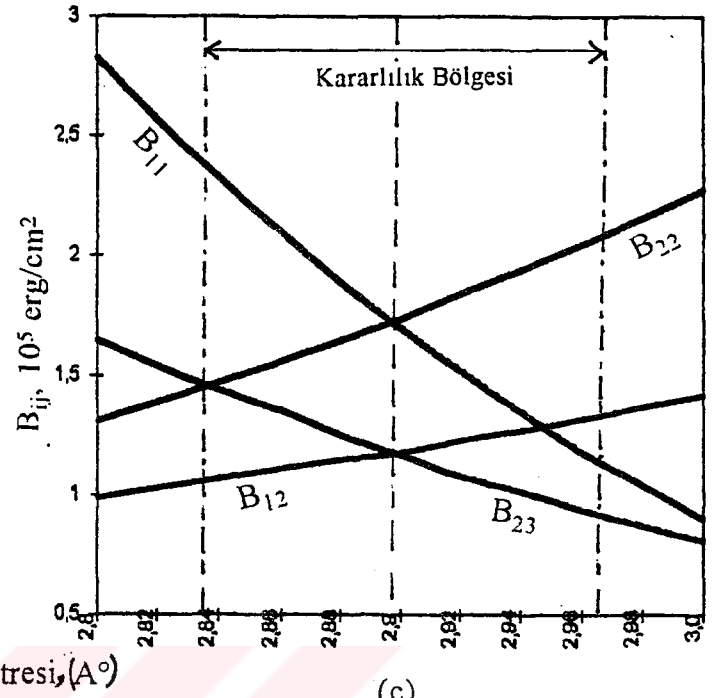


(a)

Şekil 22. Modifiye Morse'dan $m=2.0$ da Alaşımın DO_3 Yapısı İçin Hesaplanan Eğriler. a) Enerji, Zor Eğrileri

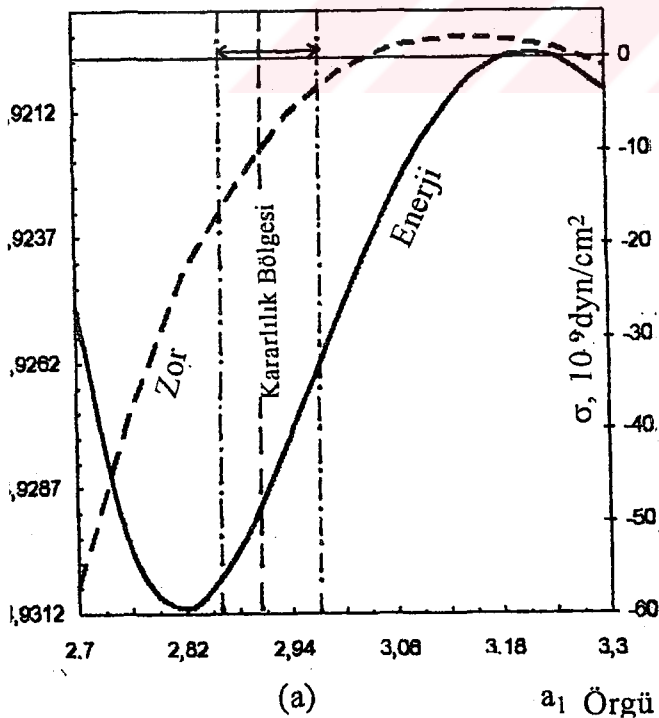


(b)

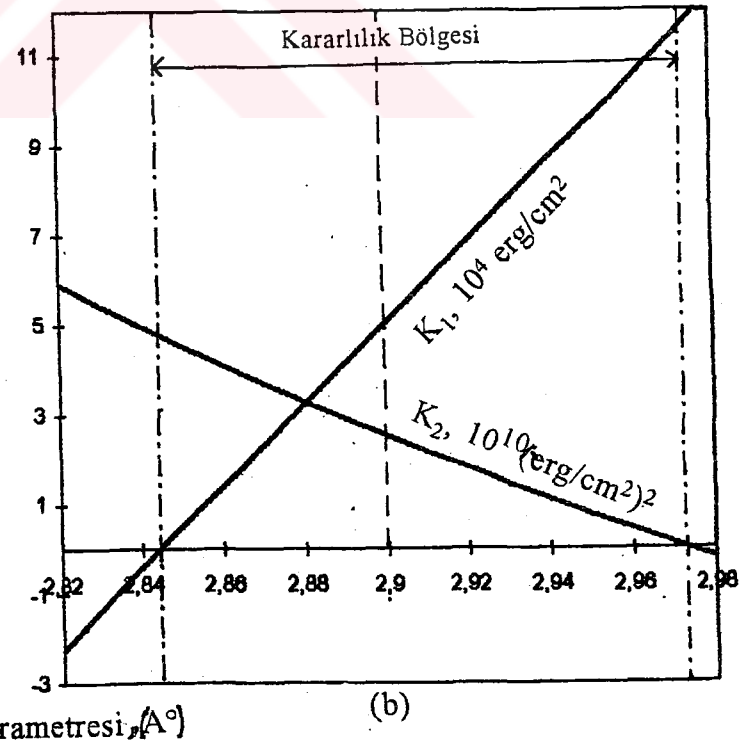


(c)

Şekil 22. (devam) b) K_1 ve K_2 Sınırları c) B_{ij} eğrileri



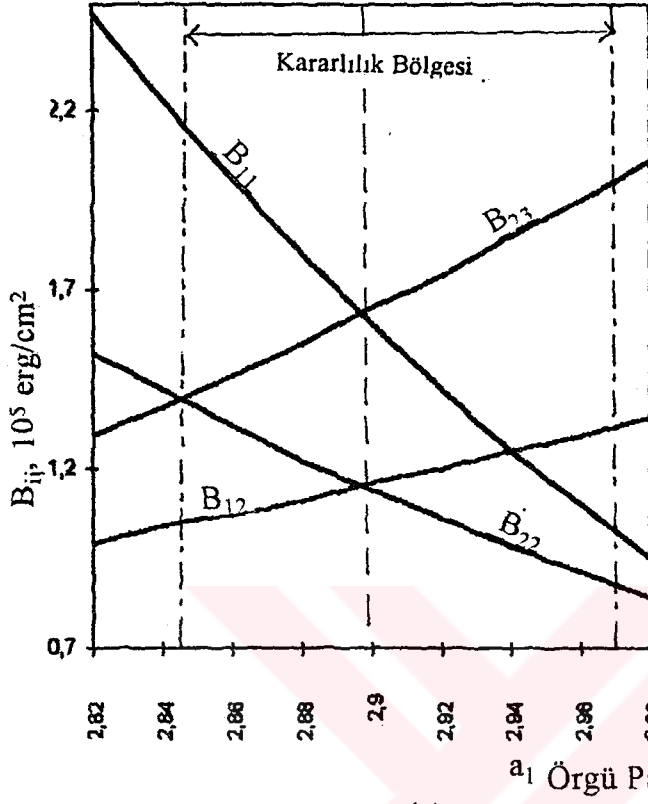
(a)



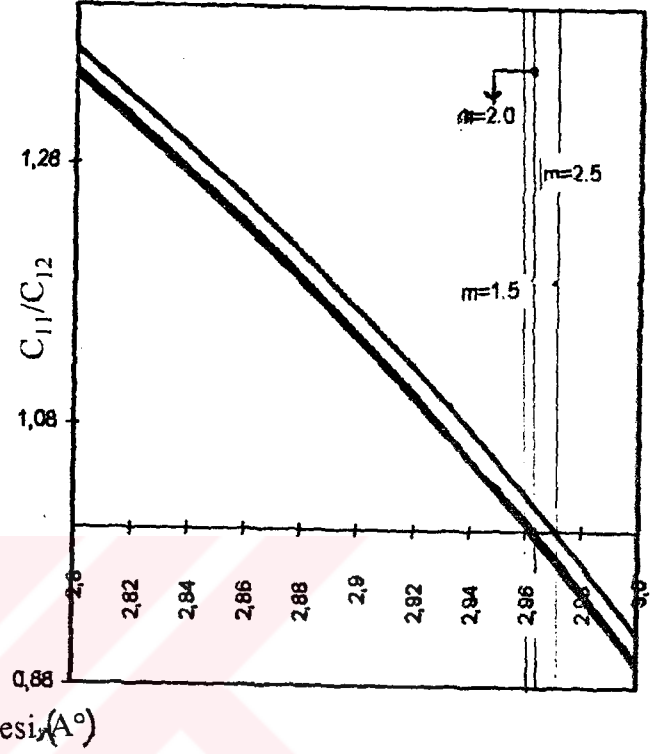
(b)

Şekil 23. Modifiye Morse'dan $m=2.5$ da Alaşımın DO Yapısı İçin

Hesaplanan Eğriler. a) Enerji ve Zor Eğrileri. b) K_1 ve K_2 Kararlılık Eğrileri



(c)



(d)

Şekil 23. (devam) c) B_{ij} Eğrileri. d) C_{11}/C_{12} Kararlılık Sınırları.

DO_3 yapının sonuçlarına baktığımızda Şekil (18-20)'den sade Şekil (19)'un kararlılık sınırlarını iyi tanımladığı görülür. Bu yapı için de genelleştirilmiş Morse potansiyel fonksiyonundan hesaplanan $m=2$ özel formu beklendiği gibi kararlılık şartlarını açıklamaktadır. Buna göre $m=2$ formu genelleştirilmiş Morse 'ta kararlılık bölgesini en iyi şekilde tanımlamaktadır. Bu yapı için de C_{11}/C_{12} , $m=2.0$ özel formunda Morse potansiyeli sonucunda uygun olduğu görüldü.

BÖLÜM 4

SONUÇ VE TARTIŞMA

Bu çalışmada, $\text{Fe}_{(1-x)}\text{-Al}_{(x)}$ sistemlerinin $x=0$; 0,25 ve 0,30 değerleri için ayrı ayrı mekaniksel kararlılığı incelendi. Yani $x = 0$ için bcc yapıdaki; Fe'in, $x = 0,25$ için disorder yapıdaki Fe-Al'un ve $x= 0,30$ için DO_3 yapının kristal yapı kararlılıkları Born [1-14] kriterlerine ve Milstein [2-4] tanımlarına göre incelendi. Bölüm III de açıklanan matematiksel hesaplama metodları hem genelleştirilmiş Morse [13] hem de modifiye Morse [12] potansiyel enerji fonksiyonlarına ayrı ayrı uygulandı. Bu iki cisim merkezi etkileşme potansiyelleri her üç kristal örgü (Fe, disorder ve DO_3) için ayrı ayrı parametrize edildi. Bu kristal örgüleri en iyi tanımlayan potansiyel parametrelerini bulabilmek için Girifalco ve Weizer [13] metoduna göre Akgün [23] modeli uygulandı.

Kristal örgülere genelleştirilmiş Morse potansiyeli $m=1,5$, 2.0 ve 2.5 değerleri için uygulayarak:

a) bcc yapıdaki Fe için bulunan enerji ve zor eğrileri Şekil 7 ve Şekil 8'de B_{ij} enerji yoğunlukları da Şekil 7c ve Şekil 8c'de C_{11}/C_{12} elastik sabit oranları da Şekil 8d' de verildi.

b) Disorder yapı için hesaplanan enerji ve zor eğrileri Şekil 12a, 13a, 14a'da, B_{ij} ve C_{11}/C_{12} eğrileride Şekil 12c, 13c, 14c, 14d'de verildi.

c) DO_3 yapıdaki enerji zor eğrileri Şekil 18a, 19a, 20a da B_{ij} ve C_{11}/C_{12} eğrileride Şekil 18c, 19c, 20c ve 20 d'de verildi.

Modifiye Morse potansiyel enerji fonksiyonu yine $m=1.5, 2.0, 2.5$ deęerleri iin uygulanarak :

a) bcc Fe iin bulunan eęriler ekil (7,8,10,11)'de

b) Disorder yapı iin bulunan eęrileri ekil (15,16,17)'de

c) DO_3 yapı iin bulunan eęrilerde ekil (21, 22, 23)'de verildi.

Bu ekiller Born kriterlerine gre yorumlanarak iki-cisim merkezi etkileşmeli potansiyellerin, Fe ve Fe-bazlı alaşımlarda mekaniksel kararlılıęı incelemekte bařarılı olup olmadıkları sonucunu grlebilir.

Giriř blmnde, bazı fcc ve bcc metallerin mekaniksel kararlılıęının incelendięini fakat alaşımlarda hi alıřılmadıęı belirtilmiřtir. bcc Fe iin Milstein [2] tarafından Born kriterlerini klasik Morse potansiyel enerji fonksiyonu kullanılarak hesaplandı ve sonuda bu potansiyelin bařarılı olduęu not edildi.

Bu alıřmanın, $Fe_{(1-x)}-Al_{(x)}$ sistemi zerindeki alıřmalarımıza ışık tutacaęına inanarak bulduęumuz deęerler zerindeki deęerlendirmemizi Milstein [4] tarafından yapılan alıřmalara gre; fcc rglerde C_{11}/C_{12} oranı 1.4 ile 2.00 arasında oluřurken, bcc rgler iin bu oran maksimum 1.36 olabilmektedir. Born [14] kriterlerine gre ise $r=r_0$ denge durumunda kristal rgnn enerjisi minimum ve uygulanan zor da sıfır olmalıdır. Kristale dıřarıdan [100] doęrultusunda uygulanan kuvvet nedeni ile rg parametresinin deęiřtięi ve buna baęlı olarak da enerji ve zorun arttıęı grlmektedir.

Kararlı bölgenin üst sınırında $C_{11}=C_{12}$ olurken enerji ve zor eğrilerinde ikinci bir dönüm noktası gözlenmektedir. Yine denge durumunda $B_{11}>B_{23}$ iken a_1 örgü parametresindeki artışa karşılık B_{11} deki azalma daha hızlı olduğundan belirli bir yerde $B_{22}>B_{11}$ olmaktadır.

bcc Fe için genelleştirilmiş Morse potansiyelini kullanarak bulduğumuz sonuçlar Şekil (6) ile aynıdır. Yine bcc Fe için modifiye Morse potansiyeli kullanılarak $m = 1.5, 2.0, 2.5$ değerleri için bulunan Şekil (9,10,11) daki sonuçlar ise iyi değildir. $Fe_{(1-x)}-Al_{(x)}$ sisteminin Disorder ve DO_3 yapıları için ayrı ayrı bulunan Şekil (12, 13, 14, 18, 19 ve 20)'deki sonuçlardan yalnız genelleştirilmiş Morse potansiyelinin $m=2$ değerine göre bulunan sonuçları daha iyidir. Yine Disorder ve DO_3 yapıları için Modifiye Morse potansiyeline göre bulunan sonuçlar ise oldukça kötüdür. Genelleştirilmiş Morse potansiyel parametrelerinin $m=2$ değeri için hesaplanan değerleri kullanarak Fe-Al alaşımının Disorder ve DO_3 yapılarına ait elde edilen enerji ve zor eğrilerinin Fe için bulunmuş olan eğrilere benzediği görüldü. Bu benzerlik, Fe üzerindeki Milstein'in çalışmasını baz olarak $Fe_{(1-x)}-Al_{(x)}$ alaşımı üzerinde mekaniksel kararlılığın incelenebileceği başlangıç düşüncemizi doğrulamaktadır. Yine disorder, DO_3 ve Fe için Morse potansiyelinde hesaplanan $m = 2.0$ özel formunda C_{11}/C_{12} kararlılık sınırlarının, aynı potansiyeldeki özelform da elde edilen K_2 kararlılık sınırlarıyla yaklaşık olarak uyum içindedir.

Najafabadi ve Kalonji [5] Lennard-Jones, Johnson I Klasik Morse potansiyel enerji fonksiyonlarını kullanarak Fe, Cu, Ni ve Ag elementlerinin mekaniksel kararlılığını incelediler. Sonuç da: Lennard-Jones potansiyelinin fcc örgüler için kararlı yapıları, Johnson ve Klasik Morse potansiyellerinin ise bcc kristaller için kararlı yapıları daha iyi tanımlayabileceği belirtildi. Ayrıca bu araştırmacılar her merkezi-

etkileşmeli potansiyellerin materyallerin mekaniksel kararlılığına uygulanması gerektiğini önemle vurguladılar. Bu nedenle bu çalışmanın amacı ise, son zamanlarda tanımlanan ve hiç uygulanmayan modifiye Morse potansiyeli [12] ile gerçekleştirilmiş, Morse potansiyelinin m parametresine bağlı ($m=1.25; 1.5; 2.0; 2.5; 3.0$ ve 3.5) altı değişik halinin bcc metal ve alaşımlara uygulanmasıdır. $m= 1.25; 3.0$ ve 3.5 değerleri için bulunan sonuçlar diğer değerlerine göre çok iyi olmadığından ve aşırı tekrardan kaçınmak için tez içerisinde verilmesi Şekil (13a, 19a)'dan görüldüğü gibi, bu çalışma Morse potansiyel enerji fonksiyonunun bcc Fe'de olduğu gibi $Fe_{(1-x)}-Al_{(x)}$ alaşım sisteminin disorder ve DO_3 yapılarının kararlılığını açıklamada başarılı olduğunu fakat modifiye Morse potansiyelinin bcc Fe ve Fe-bazı alaşımlarının mekaniksel kararlılığını açıklamada başarısız olduğunu açıkça göstermektedir.

KAYNAKLAR

1. Born M., Proc. Cambridge Phil. Soc. 36,160 (1940)
2. Milstein F., Physical Rev. B, 2,512 (1970)
3. Misra P., Proc. Cambridge Phil. Soc. 36, 173 (1940)
4. Milstein F. Physical Rev. B ,3, 1130 (1971)
5. Najafabadi R. and G. Kalonji; Acta Met. 36.,917 (1988)
6. Singh G., Phys. Stat. Sol 161, 145 (1990)
7. Milstein F. The National Science Found DMR 78-06865. pp. 417-452.
8. Rudman P.S. , Acta Met. 8,321 (1960)
9. Leamy H.J. ; Acta Met. 15,1839 (1967)
10. Drechsles M. and Nicholas J.F., J. Phys. Chem. Solids, 28,2597,(1967)
11. Doyama M. and Cotterill R.M.J., Physical Rev,145, 145 (1966)
12. Singh G. and Rathore R.P.S. Phys. Stat Sol. B.170, 443 (1992)
13. Girifalco L.A. and Weizer V.G., Phys. Rev. 114, 687 (1959)
14. Born M., and Furth R., Proc. Cambridge Phil. Soc. 36,454 (1940)
15. Born M. and Kun H., "Dynamical Theory of Crystal Lattices", Oxford University, Oxford, 1954
16. Leamy H.J "et al"., Acta Met. 15,1827 (1967)
17. Taylor A. and Jones R.M., J. Phys. Chem. Solids 6,16, (1958)
18. Hildebrand F.B., "Methods of Applied Mathematics" Prence-Hall, Znglewood Cliffs, 1952
19. Marschall J. and Milstein F., J. Phy. F: Met. Phys 18,1913 (1988)
20. Drechsler M. and Nicholas J.F., J. Phys. Chem Solids, 28, 2609 (1967)
21. Miller K.M. and Bristowe P.D., Phys. Stat Sol B 86,93 (1978)
22. Johnson R.A., Physical Rev 133,1329 (1964)
23. Akgün İ. J. Mater sci Lett, 13, 56 (1994)
24. Kittel C., "Quantum Theory of Soldis", J. Wiley, New York 1963

25. Kittel C., "Introduction to Solid State Physics", J.Wiley and Sons, Newyork 1968.
26. Lincoln P.C. and Kolmad K.M., Phys. Rev. 157, 463 (1967)
27. Najafabadi R. and Sidney.Y., Scripta Metal. 17, 1119 (1983)
28. Prakash U., "et al" ISIJ Review, 31,1113 (1991)
29. Akgün İ.and Uğur G. Phy Rev. B. 51,3458 (1995)
30. Miyazaki T and Koyama.T., Mater.Scienceand Eng.,A136,151.(1991)
31. Barcelo G.N. and CrockerA.G; Colloque C4, 12,179 (1982):

ÖZGEÇMİŞ

1961 yılında Erzurum-Narman-Kamışözü köyünde doğdu. İlkokulu köyünde, ortaokulu Narmanda, lise ve üniversite öğrenimini de Erzurumda tamamladı. 1986-1993 yılları arasında öğretmenlik yaptı. 1991-1992 öğretim yılında Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Anabilim Dalında Yüksek Lisans programına girdi. Halen Dumlupınar Üniversitesi Fen-Edebiyat Fakültesinde öğretim görevlisi olarak çalışmaktadır.





E K L E R

```

1 GENEL MORSE POTANSIYELINEGRE G-W MET. PARAMETRIZE
10 Q=-1.77E-12
20 INPUT "A=";A
21 YY=2
25 L=2.145E-08
28 V=(L)^3/2
30 FOR T=1 TO 5000
40 A=A+.0001
41 X=0;Y=0;W=0;Z=0;E=0;P=0
50 FOR M1=1 TO 11
60 FOR M2=1 TO 11
70 FOR M3=1 TO 11
80 N1=M1-6
90 N2=M2-6
100 N3=M3-6
110 IF N1/2=INT(N1/2) AND N2/2=INT(N2/2) AND N3/2=INT(N3/2) OR N1/2<>
ND N2/2<>INT(N2/2) AND N3/2<>INT(N3/2) THEN GOTO 130 ELSE GOTO
130 NNN=SQR(N1^2+N2^2+N3^2)
140 IF NNN<>0 AND NNN^2<27 THEN GOTO 150 ELSE GOTO 310
150 J=YY*((1/NNN)+A)*EXP(-NNN*YY*A)
160 X=X+J
170 G=((1/NNN)+YY*A)*EXP(-YY*NNN*A)
180 Y=Y+G
190 B=(X/Y)^(1/(YY-1))
200 S=(B^YY*EXP(-YY*NNN*A))/(NNN*(L/2))
205 F=(YY*B*EXP(-NNN*A))/(NNN*(L/2))
210 W=W+S
215 P=P+F
216 U=(W-P)
220 D=(2*Q*(YY-1))/U
230 H1=(Q/(18*(L/2)^3))
231 H2=(D/(72*(YY-1)*(L/2)^4))
235 H=H1+H2
240 T=B^YY*(2*A*YY+YY^2*A^2*NNN)*EXP(-NNN*YY*A)
242 Z=Z+T
246 C=(2*YY*A+YY*A^2*NNN)*B*EXP(-NNN*A)
247 E=E+C
248 RRT=(Z-E)
250 K=RRT*H
310 NEXT M3
320 NEXT M2
330 NEXT M1
331 O=K*1E-12
332 FARK=O-6.800001E-02
334 PRINT "FARK=";FARK
335 PRINT "a=";A
336 IF FARK>=-.0001 AND FARK<=.0001 THEN GOTO 350 ELSE GOTO 340
340 NEXT T
350 PRINT "A=";A
352 PRINT "B=";B
354 PRINT "D=";D
356 PRINT "K=";K
360 END

```

```

5 INPUT "METAL ADI=", METALS
10 Q=-1.777E-12
12 IF Q>0 THEN 13 ELSE 15
13 PRINT "baglanma enerjisinin (-) işaretini unuttunuz"
14 GOTO 10
15 M=2
20 O=2.145E-08
25 INPUT "Alfa*Örgü sabitinin Yarısını ilk değerini Giriniz=",A
30 BULK=6.8E+10
35 CLS
40 FOR T=1 TO 5000
50 X=0:Y=0:Z=0:W=0:P=0:R=0:J=0:U=0
60 A=A+.000001
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<>N
/2<>N3\2 THEN 160 ELSE 320
160 MJ=SQR(N1^2+N2^2+N3^2)
170 IF MJ^2<=27 AND MJ<>0 THEN 180 ELSE 320
180 H1=EXP(-A*MJ)*((MJ)^(-1)+A)
190 X=X+H1*M
200 H2=EXP(-M*A*MJ)*((MJ)^(-1)+M*A))
202 Y=Y+H2
205 G= X/Y
210 REM Beta Parametresinin Hesaplanması.....
220 B=(G)^(1/(M-1))
230 H3=EXP(-M*MJ*A)*(MJ*O)^(-1)
240 W=W+H3
250 H4=EXP(-MJ*A)*(MJ*O)^(-1)
260 R=R+H4
270 L=(B^M*W-B*M*R)
280 V=2*(M-1)*Q
282 REM "D" Parametresinin Hesaplanması.....
285 D= V/L
290 SD=EXP(-M*A*MJ)*(2*M*A+M^2*A^2*MJ)
300 P=P+SD
310 MC=EXP(-MJ*A)*(2*M*A+M*A^2*MJ)
312 U=U+MC
314 RT=D*(72*(M-1)*O^4)^(-1)
316 K=Q*(18*O^3)^(-1)+(B^M*P-B*U)*RT
317 LOCATE 4,20 :PRINT "HESAPLAMA ISLEMI DEVAM EDIYOR....."
318 LOCATE 10,20:PRINT "BULK=";K
319 LOCATE 18,22:PRINT "a=";A
320 NEXT M3
330 NEXT M2
340 NEXT M1
350 FARK=(K*1E-10)-BULK*1E-10
355 PRINT "FARK=";FARK
360 IF FARK>=-.0001 AND FARK<=.0001 THEN 375 ELSE 370
370 NEXT T
375 PRINT "METAL=",METAL$
380 PRINT "A=";A
385 PRINT "A=";A
390 PRINT "B=";B
395 PRINT "B=";B
397 C=LOG(B)
400 REM Alfa Parametresinin Hesabı.....
402 ALFA=A/O
404 PRINT "alfa=";ALFA;"(cm)^(-1)"
405 REM Denge Mesafesinin Hesaplanması.....

```

```
407 RO=C/ALFA
410 PRINT "RO=";RO;"cm"
430 PRINT "D=";D;"erg/cm"
440 GOSUB 500
444 LOCATE 8,20:PRINT "Metalin Adi=",METAL$
446 LOCATE 10,20:PRINT "Alfa =",ALFA
448 LOCATE 12,20:PRINT "Ro=",RO;"cm"
450 LOCATE 14,20:PRINT "D=";D;"erg/cm"
460 LOCATE 16,20:PRINT "Beta=";B
470 END
500 CLS
570 LOCATE 5,10:PRINT CHR$(201);STRING$(59,205);CHR$(187)
580 FOR I=6 TO 19
590 LOCATE I,10:PRINT CHR$(186): LOCATE I,70:PRINT CHR$(186)
600 NEXT I
610 LOCATE 20,10:PRINT CHR$(200);STRING$(59,205);CHR$(188)
620 RETURN
```



C ITERASYON YONTEMI ILE KOK BULMA
c Modifiye Morse Potansiyeli

```
REAL R,NI,N,ALPHA,LC  
REAL L,NN,N1,N2,N3,C  
open(1,file='yas.dat')
```

```
print*, 'a1 degerini giriniz'  
read(*,*) a1
```

c Metal icin giris parametreleri

```
alfa=1.29498e8  
ro=2.976e-8  
d=1.9706e-20  
sm=1.5  
sabit=d/(sm-1)
```

```
PRINT*, 'taranacak bolgenin altini'  
READ(*,*)cc  
PRINT *, 'ust sinirini giriniz'  
READ(*,*)CC1  
print*, 'tahmini a2 artis miktarini giriniz'  
read(*,*)CC2  
DO 100 AJ=CC,CC1,CC2
```

```
SUM=0.
```

```
A2=AJ
```

```
DO 2 I1=1,21
```

```
N1=I1-11
```

```
DO 3 I2=1,21
```

```
N2=I2-11
```

```
DO 4 I3=1,21
```

```
N3=I3-11
```

```
if(n1/2.eq.int(n1/2).and.n2/2.eq.int(n2/2).and.n3/2.eq.int(n3/  
*GOTO 8
```

```
if(n1/2.ne.int(n1/2).and.n2/2.ne.int(n2/2).and.n3/2.ne.int(n3/  
*goto 8
```

```
goto 4
```

B $R=0.5*(\text{SQRT}(a1^{**2}*n1^{**2}+a2^{**2}*(N2^{**2}+N3^{**2})))$

```
IF(R.EQ.0.OR.R.GE.34.) GOTO 4
```

C Boyutan gelen carpanlar

```
X=1E-8
```

```
Y=1E+0
```

```
hm=exp(-sm*alfa*(r*x-ro))
```

```
hn=exp(-alfa*(r*x-ro))
```

```
hn1=hn*((sm/r)+sm*alfa)
```

```
hm1=hm*((1/r)+sm*alfa)
```

```
hk=(hn1-hm1)*(1/r**2)
```

```
h=hk*n2**2
```

```
SUM=SUM+H
```

4 CONTINUE

3 CONTINUE

2 CONTINUE

```
WRITE(*,*)A2,SUM
```

```
if(SUM.ge.0) goto 101
```

100 CONTINUE

```

101  write (*,*) 'a2=?', a2, 'sigma=', sum
      sum1=0.
      sum2=0.
      sum3=0.
      do 5 j1=1,21
        n1=j1-11
        do 6 j2=1,21
          n2=j2-11
          do 7 j3=1,21
            n3=j3-11
            if(n1/2.eq.int(n1/2).and.n2/2.eq.int(n2/2).and.n3/2.eq.int(n3/2)
            *goto 9
            if(n1/2.ne.int(n1/2).and.n2/2.ne.int(n2/2).and.n3/2.eq.int(n3/2)
            *goto 9
            goto 7
9      r=.5*(sqrt(a1**2*n1**2+a2**2*(n2**2+n3**2)))

      if(r.eq.0) goto 7
      ha=exp(-sm*alfa*(r*x-ro))
      hb=exp(-alfa*(r*x-ro))
      h1=(ha-sm*hb)/r
      sum1=sum1+h1
      hmb=(1/r**3)*(sm*hb-ha)
      hnb=(sm*alfa/r**2)*(hb-ha)
      hk1=(hmb+hnb)
      h2=(hk1*n1**2)
      sum2= sum2+h2
      h3=(n2**2*hk1)
      sum3=sum3+h3
7      continue
6      continue
5      continue
      e=sabit*sum1/x
      write(*,*) 'a1=', a1, 'Enerji=', e
      write(1,*) a1, e
      s1=sabit*a1*y*sum2/(a2**2*x**3)
      s2=sabit*y*sum3/a1*x**3
      write(*,*) 'a1=', .1, 's1=', s1
      write(1,*) a1, s1
      write(*,*) 'a1=', a1, 's2=', s2
      write(1,*) a1, s2
      end

```

```

C      a2 r2=0 icin iterasyon yontemiyle bulunmustur
C      elastik modullerden C11/C12 kararlilik orani
C      DOUBLE PRECISION(A-H,O-Z)
      REAL R,NI,N,ALPHA,LC
      REAL L,NN,N1,N2,N3,C
      open(1,file='yas.dat')
      print*, 'a1 degerini giriniz'
      read(*,*) a1

C
C      Metal icin giris parametreleri
      m=2
      alfa=1.3885e+8
      ro=2.845e-8
      d=6.678e-13
      sabit=d/(m-1)

C
      PRINT*, 'taranacak bolgenin altini'
      READ(*,*)cc
      PRINT *, 'ust sinirini giriniz'
      READ(*,*)CC1
      print*, 'tahmini a2 artis miktarini giriniz'
      read(*,*)CC2
C      a1=a1+0.00
      DO 100 AJ=CC,CC1,CC2
      SUM=0.
      A2=AJ
      DO 2 I1=1,11
      N1=I1-6
      DO 3 I2=1,11
      N2=I2-6
      DO 4 I3=1,11
      N3=I3-6
      IF (N1/2.EQ. INT (N1/2).AND.N2/2.EQ. INT (N2/2).AND.N3/2.EQ. INT (N3/2)
      *GOTO 8
      IF (N1/2.NE. INT (N1/2).AND.N2/2.NE. INT (N2/2).AND.N3/2.NE. INT (N3/2)
      *GOTO 8
      GOTO 4
B      R=0.5*(SQRT(a1**2*n1**2+a2**2*(N2**2+N3**2)))
      IF(R.EQ.0.OR.R.GE.34.) GOTO 4

C      Boyutan gelen carpanlar

      X=1E-8
      Y=1E+8

      h=Y*((exp(-alfa*(r*X-ro))-exp(-m*alfa*(r*X-ro)))/R)*N2**2

      SUM=SUM+H
4      CONTINUE
3      CONTINUE
2      CONTINUE
      WRITE(*,*)a1,A2,SUM
      if(sum.ge.0) goto 101

100 CONTINUE
101 write (*,*) 'a2=?',a2,'siqma=',sum
      sum1=0.
      sum2=0.
      sum3=0.
      sum4=0.
      do 5 j1=1,11
      n1=j1-6

```

```

do 6 j2=1,11
n2=j2-6
do 7 j3=1,11
n3=j3-6
IF (N1/2.EQ. INT (N1/2) .AND. N2/2.EQ. INT (N2/2) .AND. N3/2.EQ. INT (N3/2) )
*GOTO 9
IF (N1/2.NE. INT (N1/2) .AND. N2/2.NE. INT (N2/2) .AND. N3/2.NE. INT (N3/2) )
*GOTO 9
goto 7
9 r=.5*(sqrt(a1**2*n1**2+a2**2*(n2**2+n3**2)))
if(r.eq.0) goto 7
cc=-(alfa*(r*x-ro))
h1=exp(cc)
h2=(alfa+y/(2*r))*h1**m-(alfa/2+y/(2*r))*h1
h3=(alfa*y**2/r**2)*h2
h4=n1**4*h3
sum1=sum1+h4
h5=n1**2*n2**2*h3
sum2=sum2+h5
h6=n2**4*h3
sum3=sum3+h6
h7=n2**2*n3**2*h3
sum4=sum4+h7
7 continue
6 continue
5 continue
ao=2.87E-08
c11=ao/2*sum1*sabit
c12=ao/2*sum2*sabit
c22=ao/2*sum3*sabit
c23=ao/2*sum4*sabit
ca=c11/c12
cb=c22+c23-2*(c12**2)/c11
write(*,*)'c11=',c11 , 'ca=',ca, 'c12=',c12 , 'cb=',cb
end

```

```

C      a2 σ2=0 için iterasyon yöntemiyle bulunmustur
C      enerji yoğunluklarından kararlılığın bulunması
C      DOUBLE PRECISION(A-H,0-Z)
      REAL R,NI,N,ALPHA,LC
      REAL L,NN,N1,N2,N3,C
      open(1,file='yas.dat')
      print*,'a1 degerini giriniz'
      read(*,*) a1

C
C
C      metal için giriş parametreleri
      yy=2
      alfa=1.3885e+8
      ro=2.8450e-8
      d=6.683e-13
      sabit=(d/(yy-1))*1e-16

C      PRINT*,'taranacak bolgenin altini'
      READ(*,*)cc
      PRINT *,'ust sinirini giriniz'

      READ(*,*)CC1
      print*,'tahmini a2 artis miktarini giriniz'
      read(*,*)CC2
C      a1=a1+0.00
      DO 100 AJ=CC,CC1,CC2
      SUM=0.
      A2=AJ
      DO 2 I1=1,11
      N1=I1-6
      DO 3 I2=1,11
      N2=I2-6
      DO 4 I3=1,11
      N3=I3-6
      IF (N1/2.EQ.INT(N1/2).AND.N2/2.EQ.INT(N2/2).AND.N3/2.EQ.INT(N3/2))
      *GOTO 8
      IF (N1/2.NE.INT(N1/2).AND.N2/2.NE.INT(N2/2).AND.N3/2.NE.INT(N3/2))
      *GOTO 8
      GOTO 4
B      R=0.5*(SQRT(a1**2*n1**2+a2**2*(N2**2+N3**2)))
      IF(R.EQ.0.OR.R.GE.34.) GOTO 4

C      Boyutan gelen carpanlar

      X=1E-8
      Y=1E+8

      h=Y*((exp(-alfa*(r*X-ro))-exp(-yy*alfa*(r*X-ro)))/R)*N2**2

      SUM=SUM+H
4      CONTINUE
3      CONTINUE
2      CONTINUE
      WRITE(*,*)a1,A2,SUM
      if(sum.ge.0) goto 101

100 CONTINUE
101 write (*,*)'a2=?',a2,'sigma=',sum
      sum1=0.
      sum2=0.
      sum3=0.
      sum4=0.
      sum5=0.
      sum6=0.

```

```

do 5 j1=1,11
n1=j1-6
do 6 j2=1,11
n2=j2-6
do 7 j3=1,11
n3=j3-6
IF (N1/2.EQ. INT(N1/2).AND.N2/2.EQ. INT(N2/2).AND.N3/2.EQ. INT(N3/2))
*GOTO 9
IF (N1/2.NE. INT(N1/2).AND.N2/2.NE. INT(N2/2).AND.N3/2.NE. INT(N3/2))
*GOTO 9
goto 7
9 r=.5*(sqrt(a1**2*n1**2+a2**2*(n2**2+n3**2)))
if(r.eq.0) goto 7

cc=-(alfa*(r*x-ro))
h1=exp(cc)
h2=(yy*alfa/(x*r))*h1**yy-(alfa+1/(x*r))*h1
h3=(yy*alfa*y**2/r**2)*h2
h4=n1**4*h3
sum1=sum1+h4
h5=n1**2*n2**2*h3
sum2=sum2+h5
h6=n1**4*h3
sum3=sum3+h6
h7=n2**2*n3**2*h3
sum4=sum4+h7
T=(Y*yy*alfa/r)*(h1-h1**yy)
t1=t*n1**2
t2=t*n2**2
sum5=sum5+t1
sum6=sum6+t2

7 continue
6 continue
5 continue
ao=2.87E-08
b11=(.25*sum1*a1**2+.5*sum5)*sabir
b12=.25*sum2*a1*a2*sabit
b22=(.25*sum3*a2**2+.5*sum6)*sabir
b23=.25*sum4*a2**2*sabit
k1=b22-b23
k2=b11*(b22+b23)-2*(b12**2)
write(*,*)'b11=',b11 , 'b12=',b12, 'b22=',b22 , 'b23=',b23
write(*,*)'k1=',k1 , 'k2=',k2
end

```