

**EMBEDDED-ATOM MODELİ İLE YAPISAL FAZ DÖNÜŞÜMLERİ  
VE ELASTİK KARARLILIK**

**Rahime YİĞİTER**

**YÜKSEK LİSANS TEZİ  
FİZİK**

**GAZİ ÜNİVERSİTESİ  
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

**HAZİRAN 2007  
ANKARA**

Rahime YİĞİTER tarafından hazırlanan EMBEDDED-ATOM MODELİ İLE YAPISAL FAZ DÖNÜŞÜMLERİ VE ELASTİK KARARLILIK adlı bu tezin Yüksek Lisans tezi olarak uygun olduğunu onaylarım.

Yrd. Doç. Dr. Yasemin ÇİFTÇİ  
Tez Yöneticisi

Bu çalışma, jürimiz tarafından oy birliği / oy çokluğu ile Fizik Anabilim Dalında Yüksek lisans tezi olarak kabul edilmiştir.

Başkan : Prof. Dr. Kemal ÇOLAKOĞLU

Üye : Prof. Dr. Mehmet ÇİVİ

Üye : Prof. Dr. Bora ALKAN

Üye : Doç. Dr. Şemsettin ALTINDAL

Üye : Yrd.Doç.Dr.Yasemin ÇİFTÇİ

Tarih : 27/ 06 / 2007

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

## **TEZ BİLDİRİMİ**

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

Rahime YİĞİTER

**EMBEDDED-ATOM MODELİ İLE YAPISAL FAZ DÖNÜŞÜMLERİ  
VE ELASTİK KARARLILIK  
(Yüksek Lisans Tezi)**

**Rahime YİĞİTER**

**GAZİ ÜNİVERSİTESİ  
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

**Haziran 2007**

**ÖZET**

Embedded Atom Metodu (EAM) tipli çok cisim etkileşmeli potansiyel enerji fonksiyonu kullanılarak bazı f.c.c. kristallerin (Ir, Rh, Sr, Ca ve Pb) elastik ve mekanik özellikleri incelendi. EAM potansiyel modeli kullanılarak kararlılık ve faz geçişi hesabı yapıldı. Burada enerji, zor ve elastik modüllerinin  $a_1$  ile değişimleri incelenerek bu eğrilerden sıfır zordaki f.c.c. ve b.c.c. faza karşılık gelen örgü sabitleri, atomik hacim, kohesif enerji, enerji farkları ( $E_{fcc} - E_{bcc}$ ) hesaplandı ve kararlılık bölgeleri belirlendi. Dördüncü bölümde EAM ile üçüncü- merteye elastik sabitleri hesaplandı. Beşinci bölümde basınç- hacim davranışı incelendi ve deneysel verilerle kıyaslandı.

**Bilim Kodu** : 404.05.01  
**Anahtar Kelimeler** : Embedded Atom Metodu (EAM), Elastik Sabitleri, Kararlılık, Faz Geçişi  
**Sayfa Adedi** : 56  
**Tez Yöneticisi** : Yrd.Doç.Dr. Yasemin ÇİFTÇİ

**STRUCTURAL PHASE TRANSITIONS AND ELASTIC STABILITY  
WITH EMBEDDED ATOM METHOD**

**(M.Sc. Thesis)**

**Rahime YİĞİTER**

**GAZİ UNIVERSITY  
INSTITUTE OF SCIENCE AND TECHNOLOGY**

**June 2007**

**ABSTRACT**

In this study, the elastic and mechanic properties of the some f.c.c. crystals (Ir, Sr, Rh, Ca, Pb) by using many body potential energy function in the framework of Embedded Atom Method (EAM). The calculations of stability and phase transitions are worked out by using EAM potential model. In this section, the variation of energy, stress and elastic moduli with respect to the lattice parameter ( $a_1$ ) are studied. By means of the obtained curves, the lattice parameters, atomic volume, cohesive energy and the difference of energies ( $E_{fcc} - E_{bcc}$ ) are computed and regions of stability are studied. In section four, the third order elastic constants based on the EAM model are computed. In section five, pressure-volume behaviours are studied and the obtained results are compared with experimental data.

**Science Code : 404.05.01**

**Key Words : Embedded Atom Method(EAM), Elastic Constants, Stability,  
Phase Transition,**

**Page Number: 56**

**Adviser : Asist. Prof.Dr. Yasemin ÇİFTÇİ**

## TEŞEKKÜR

Çalışmalarım boyunca değerli yardımlarını eksik etmeyen tez danışmanım Yrd.Doc.Dr. Yasemin ÇİFTCİ hocama en kalbi duygularıyla teşekkür eder, saygılarımı sunarım. Ayrıca beni bu çalışmaya teşvik eden değerli hocam Prof Dr. Kemal ÇOLAKOĞLU'na da teşekkürü bir borç bilirim.

## İÇİNDEKİLER

	<b>Sayfa</b>
ÖZET.....	iv
ABSTRACT.....	v
TEŞEKKÜR.....	vi
İÇİNDEKİLER.....	vii
ÇİZELGELERİN LİSTESİ.....	viii
ŞEKİLLERİN LİSTESİ.....	iv
SİMGELER VE KISALTMALAR.....	x
1. GİRİŞ.....	1
2. TEORİKSEL KARARLILIK.....	5
2.1. Genel Teori.....	5
2.2. Tek Eksenli Kuvvet Durumu.....	11
2.3. Atomlar Arası İkili-Etkileşim Modelindeki Nümeriksel Hesaplamalar.....	16
3. EMBEDDED ATOM TEORİSİ İLE YAPISAL FAZ DÖNÜŞÜMLERİ VE ELASTİK KARARLILIK.....	20
3.1. Embedded Atom Metodu.....	20
3.2. Potansiyel Formu.....	22
3.3. Elastik Kararlılık için Born Kriterleri.....	28
4. EMBEDDED ATOM METODUNA GÖRE ÜÇÜNCÜ MERTEBEDEN ELASTİK SABİTLERİ.....	44
5. BASINÇ- HACİM DAVRANIŞI.....	47
6. SONUÇ VE TARTIŞMA.....	51
KAYNAKLAR.....	53
ÖZGEÇMİŞ.....	56

**ÇİZELGELERİN LİSTESİ**

<b>Çizelge</b>	<b>Sayfa</b>
Çizelge 3.1. Fit işleminde kullanılan metal özellikleri ve parametrize sonuçları (üst sıra hesaplanan, alttaki deneysel değerdir).....	25
Çizelge 3.2. EAM ile b.c.c ve f.c.c. fazdaki teorik örgü sabiti, atomik hacim, enerji ve enerji farkları.....	36
Çizelge 3.3. EAM ile sıkışma ve gerilme durumunda, kararsızlığın başlangıç noktasındaki $a_1$ , $a_2$ ( $= a_3$ ) hücre uzunluklarının değeri (MKB) ve bu noktalardaki $\sigma_1$ zor değerleri (teorik kararlılık).....	41
Çizelge 4.1. Bazı f.c.c. metaller için EAM ile üçüncü mertebe elastik sabitleri.....	46



## ŞEKİLLERİN LİSTESİ

Şekil	Sayfa
Şekil 2.1. Bcc ve fcc kristalleri için uygun birim hücreler.....	5
Şekil 3.1. a) EAM için iki cisim potansiyeli b) EAM için Embedding Enerji.....	27
Şekil 3.2. Ir için komşuluk mesafesinin fonksiyonu olarak toplam enerji.....	28
Şekil 3.3. a) Ca için $a_1$ 'in fonksiyonu olarak toplam enerjinin değişimi.....	31
b) Ca için $a_1$ 'in fonksiyonu olarak zorun değişimi.....	32
Şekil 3.4. a) Ir için $a_1$ 'in fonksiyonu olarak toplam enerjinin değişimi.....	32
b) Ir için $a_1$ 'in fonksiyonu olarak zorun değişimi.....	33
Şekil 3.5. a) Pb için $a_1$ 'in fonksiyonu olarak toplam enerjinin değişimi.....	33
b) Pb için $a_1$ 'in fonksiyonu olarak zorun değişimi.....	34
Şekil 3.6. a) Sr için $a_1$ 'in fonksiyonu olarak toplam enerjinin değişimi.....	34
b) Sr için $a_1$ 'in fonksiyonu olarak zorun değişimi.....	35
Şekil 3.7. a) Rh için $a_1$ 'in fonksiyonu olarak toplam enerjinin değişimi.....	35
b) Rh için $a_1$ 'in fonksiyonu olarak zorun değişimi.....	36
Şekil 3.8. Keyfi birimlerde Ca için $C_{ij}$ elastik modüllerinin $a_1$ ile değişimi.....	39
Şekil 3.9. Keyfi birimlerde Ir için $C_{ij}$ elastik modüllerinin $a_1$ ile değişimi.....	39
Şekil 3.10. Keyfi birimlerde Pb için $C_{ij}$ elastik modüllerinin $a_1$ ile değişimi.....	40
Şekil 3.11. Keyfi birimlerde Sr için $C_{ij}$ elastik modüllerinin $a_1$ ile değişimi.....	40
Şekil 3.12. Keyfi birimlerde Rh için $C_{ij}$ elastik modüllerinin $a_1$ ile değişimi.....	41
Şekil 5.1. Ca için basınç- hacim değişimi.....	49
Şekil 5.2. Sr için basınç- hacim değişimi.....	49
Şekil 5.3. Pb için basınç- hacim değişimi.....	50

## SİMGELER VE KISALTMALAR

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

<b>Simgeler</b>	<b>Açıklama</b>
$a_0$	Denge durumundaki örgü sabiti
$\hat{d}_i$	$a_i$ hücre kenarı yönündeki birim vektörü
$B_m$	Bulk modülü
$C_{nn}$	Elastik sabiti
$E_c$	Kohesif enerji
$E_{FER}$	Fermi enerjisi
$E_{lat}$	Örgü enerjisi
$E_{TOT}$	Örgünün toplam enerjisi
$E_V^f$	Boşluk oluşum enerjisi
$E)_{\{a_i^k\}}$	Birim hücre başına potansiyel enerji
$F_i^K$	Genelleştirilmiş kuvvet
$F(\rho)$	Embedding fonksiyonu
$f_e$	Ayar çarpanı
$f(r)$	Atomik elektron yoğunluğu
$k_F$	Elektron gazının dalga vektörü
$n_a$	Serbest atomun yoğunluğu
$n_i$	Elektron yoğunluğu
$\eta$	Ortalama faz değişimi

<b>Simgeler</b>	<b>Açıklama</b>
<b>P</b>	Basınç
<b>R</b>	Atomların buldukları yerin koordinatları
$\hat{r}_{ij}$	i. ve j. atomları arasındaki vektörün birim vektörü
<b>V</b>	Atomik hacim
$\phi(r)$	İkili etkileşim potansiyeli
$\varepsilon$	Bağlanma enerjisi
$\sigma$	Zor
$\Omega_0$	Denge durumundaki hacim
$\rho(r_{ij})$	j. atomun 1 atomu konumunda oluşturduğu yoğunluk fonksiyonu
$\rho$	Çokluk elektron yoğunluğu

<b>Kısaltmalar</b>	<b>Açıklama</b>
<b>FCC</b>	Yüzey merkezli kübik yapı
<b>BCC</b>	Cisim merkezli kübik yapı
<b>EAM</b>	Embedded atom metodu
<b>MD</b>	Moleküler dinamik metod
<b>LDA</b>	Bölgesel elektron yoğunluğu yaklaşımı
<b>PT</b>	Sanki potansiyel teorisi

## 1.GİRİŞ

Newton mekaniği, herhangi bir fiziksel sistemin zamana bağlı gelişimini incelemeye imkan vermesine rağmen, kuantum mekaniksel etkileri incelemek için uygun değildir, fakat çok küçük parçacıklar için yüksek dereceden diferansiyel denklemin anlık çözümleri yardımıyla kuantum etkileri hesaplanabilir. İstatiksel mekaniğin ortaya çıkması ile kompleks sistemlerin bazı fiziksel özelliklerinin ortalama değerleri bilgisayarlar yardımıyla hesaplanabilmiştir.

Modern çalışmalarda metalik sistemler içindeki gerçek kusurların (taneciğe bağlı bozulma, yüksek sıralama ve yüzeysel kusurlar...vb) gösterilmesine gerek duyulması sonucu metallere uygun doğru ve basit bazı yaklaşımlar geliştirilmiştir. Birkaç yıl önceye kadar ortak yaklaşımlarla atomlar arası etkileşmeler, ikili etkileşim potansiyeli metodundan yararlanılarak yapılmaktaydı. İkili etkileşim potansiyeli tasarımdan yararlanılarak yapılan hesaplamalarda temel düzenlemedeki bağ uzunluğu etkileri nedeniyle birçok fiziksel nicelik ihmal edilmekteydi. Son zamanlarda bundan farklı olarak, bu teorik alışmalarla uygulamalı olarak, metallere uygun yaklaşımların kullanılması sonucu, hesaplamalar yapılmıştır.

Daw ve Baskes, metalik sistemlerin enerjilerinin hesaplanması için yeni bir çalışma yapmışlardır [1,2]. Bu çalışmada; metalik sistemlerin yapı ve enerjileri ile ilgili hesaplamalarda Schrödinger denkleminin, elektrostatik etkileşme potansiyeli ve yoğunluk fonksiyonu yardımıyla çözümünü yapmışlar ve deneysel sonuçlara yaklaşmışlardır. Metallere ve Alaşımlara uygulanabilen bu metod “Embedded Atom Metodu” (EAM) olarak adlandırılır. Bu yaklaşım metodu ile metalik sistemlerde toplam enerjinin elde edilmesi; embedding atom için bölgesel elektron yoğunluğunun elde edilmesi yardımıyla, sistemdeki atomların durgun oldukları düşünülerek toplam enerjinin hesaplanması ilkesine dayanır.

Elektrostatik etkileşmeleri de ilave ederek metalik sistemlerin toplam enerjisi için:

$$E_{TOT} = \sum_i F_i(\rho_{h,i}) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \phi_{ij}(R_{ij}) \quad (1.1)$$

şeklinde yazdıkları ifadeyi kullanmışlardır.

Embedded Atom Metodu ile yapılan hesaplamalarda ilk olarak Fridel, bakır ve hidrojeninden hazırladığı eriyiğe “jellium” adını vermiş, bu maddenin yoğunluğu daha sonraki çalışmalarda safsızlığın oluşturulmasında öncü olmuştur [3].

Pusca, Nieminen, Manninen, metalik sistemlerin belli bir bölgesindeki elektronların yoğunluğunu esas alarak “Bölgesel Elektron Yoğunluğu Yaklaşımı (Local Density Approximation(LDA))” olarak adlandırılan bir metodla jellium’daki safsızlığın dışında çalışmalar yapmışlardır [4].

Norskov ve Long metalik sistemlerde metal atomlarının perdelenme etkisi nedeniyle, metal içerisindeki atomik yapının ayrıntılarından dolayı yakın çevrelerinde hissedilmediklerini öne sürerek “ Etkin Ortam Teorisi Yaklaşımı (The Effective Medium Theory (EMT))” olarak adlandırılan metodu kullanarak ergime ısını açıklamışlar, kırılmalara ait safsızlıkları ve Hartree Potansiyeli kullanarak metalik sistemlerin taban durum özelliklerini belirlemişlerdir [5].

Stot ve Zaremba, iyon çekirdeklerindeki farklı değişim ve karşılıklı ilişki etkilerini göstermek için elektron gazı etkileşmelerini kolayca açıklayarak, Fermi yüzeyindeki bir elektron için Schrödinger eşitliğinde bağımsız elektron yaklaşımını doğrulayarak uygun bir potansiyel elde etmişlerdir [6]. “Sanki Atom Teorisi” olarak adlandırılan bu metodla, metalik sistemlerin bağlanma enerjilerini ve embedding enerjisiyi (gömülme enerjisini) açık bir ifade ile göstermişlerdir.

Daw ve Baskes, metalik sistemlerin bağlanma enerjileri hakkında görüşler ileri sürerek yapmış oldukları çalışmalarda embedding enerjisiyi de içerisine alan, elektrostatik etkileşmeleri ilave etmişlerdir [1,2].

Embedded Atom Metodu ile; fononlar, sıvı metallere, kristal kusurları, alaşımlar, kristallerin yüzey yapıları, yüzey fononları, yüzey tabakalarındaki düzensiz geçişler, alaşımların yüzey tabakaları gibi konularda çalışmalar yapılmıştır.

İdeal kristallerin sonlu zorlanma altındaki teorik mekaniksel davranışının tahmini, uzun zamandır ilginç konular arasında olmuştur. Born, küçük ve homojen deformasyon altında kristal örgünün mekaniksel olarak kararlı kalması ile ilgili şartları inceleyerek “Born kararlılık kriterleri” olarak bilinen matematiksel ifadeler geliştirdi [7]. Misra, kübik kristallerin mekaniksel kararlılığı için, iki-cisim etkileşimli potansiyelin özel bir formunu (Mie potansiyeli) kullanmıştır [8]. Daha sonra Milstein ve arkadaşları, Morse potansiyeli ile kübik kristallerin kararlılığı için aynı kriterleri kullandılar [9,10,11]. Bu konuda çalışan Born ve başka birçok araştırmacı, kristal kararlılığının önemini vurguladılar.

İkili-etkileşim potansiyelleri, katıların bulk ve kusur (defect) özelliklerini incelerken yaygın olarak kullanılmıştır. Bununla birlikte, ikili-etkileşim potansiyel modeli, gerçek metallerdeki serbest elektron enerjisini temsil etmediğinden boşluk-oluşturma enerjisi (vacancy formation energy) ve elastik sabitlerinin iyi sonuç vermesi de beklenmez. Ayrıca bir kusur olan hacim-belirsizliği de ikili etkileşim potansiyelleri ile incelenemez [12,13]. O halde, ikili-etkileşim potansiyellerinin bu eksikliklerini azaltan fakat “first-principles” tekniklerden daha etkili olan yeni bir metot ilk kez Daw-Baskes tarafından önerildi [12]. Temel fikir yoğunluk-fonksiyoneli teori (density-functional theory) sine dayanır [14]. Bu teoriye göre, örgüye küçük bir safsızlık atomu yerleştirmek için gerekli enerji, elektron yoğunluğunun orijinini düşünmeksizin, yalnızca örgünün belirli bir kenarındaki elektron yoğunluğu ile belirlenebilir. Daw ve Baskes bu modelde toplam enerjii, “embedding enerji” ve ikili etkileşim potansiyelinin toplamı olarak alır. Embedding enerji ve ikili etkileşim potansiyeli, deneysel verilere fit ederek elde edilir. Bu metot basit olmasına karşın yüzey, kusur, safsızlık, esneklik gibi metal ve alaşımların birçok özelliğini doğru bir şekilde tahmin eder [12]. Uzun-erişimli ve tamamen analitik embedded atom metodu (EAM), kararlılık ve faz geçişleri hesaplarında kullanıldı. Bu modelde elektron-yoğunluk fonksiyonu olarak exponansiyel olarak azalan bir fonksiyon

seçildi. İki-cisim potansiyeli, Extended Generalized Exponential Potential (E.G.E.P.) fonksiyonuna benzer bir şekilde EAM için modifiye edilerek bu çalışmada kullanıldı. Embedding enerji için, Banerjea ve Smith tarafından önerilen biçim benimsendi [15]. Bu modelin potansiyel parametreleri, saf metalin temel bulk özelliklerine (örgü sabiti, kohesif enerji, elastik sabitleri ve boşluk-oluşturma enerjisi) fit ederek belirlenir. Burada Embedded-atom potansiyeli, tek eksenli [100] yükün sebep olduğu zorlanma altında hipotetik Ir, Rh, Sr, Ca ve Pb' nin elastik ve teorik kararlılığını hesaplamak için kullanıldı.

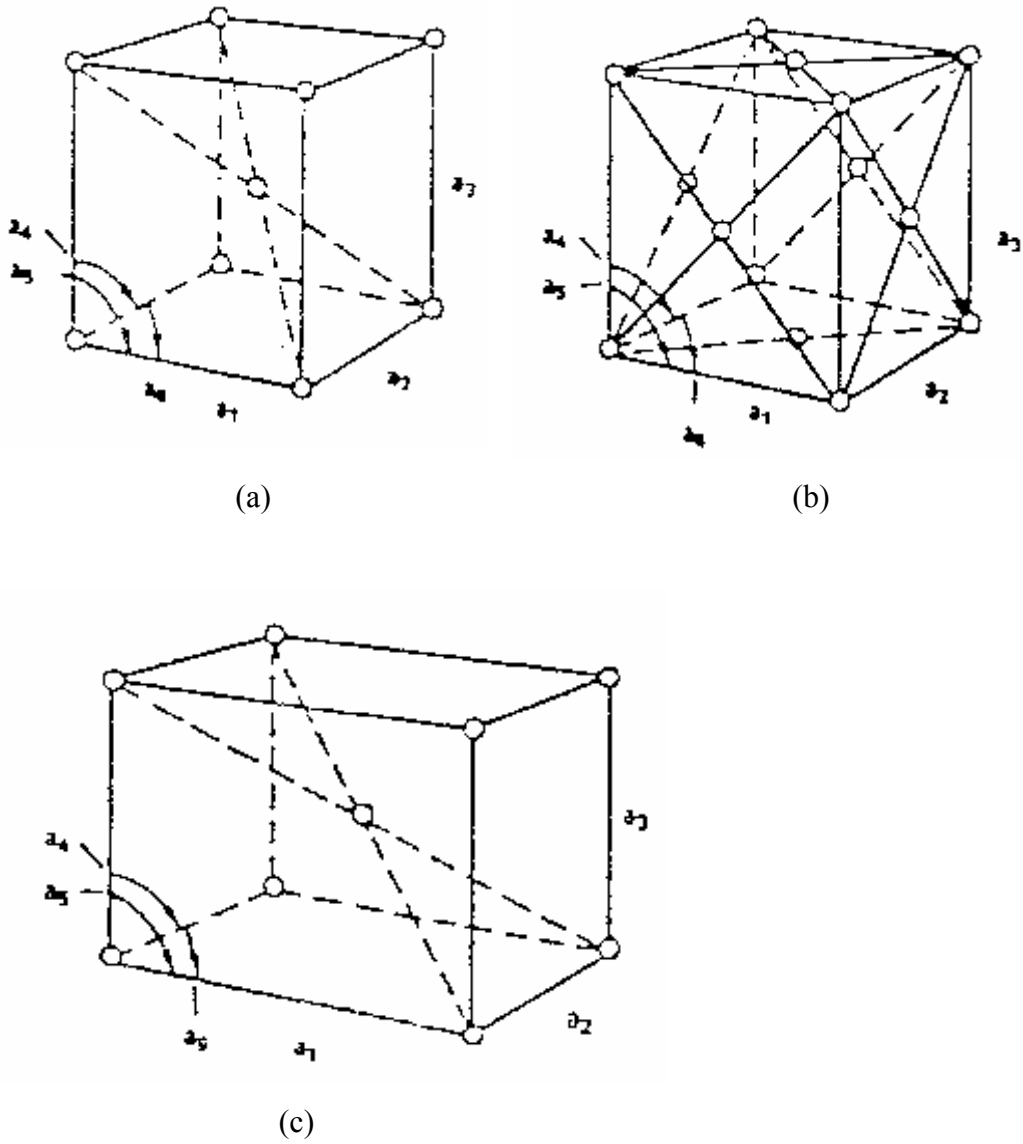
Bu çalışmanın ilk aşamasında (2. bölümde) metalik sistemlerin teoriksel kararlılığı hakkında bilgi verildi. 3. Bölüm; EAM potansiyeli ile yapılan teorik kararlılık ve faz geçişleri konusuna ayrılmıştır. Bu bölümün esası, belli bir  $a_1$  (hücre uzunluğu) değeri için sıfır zoru sağlayan  $a_2$  parametresini bulmaya ve bu sonuçları kullanarak  $E$  (iç enerji),  $\sigma_l$  (zor) ve  $B_{ij}$  (elastik modüllerini) 'nin hesaplanmasına dayanmaktadır. Hesaplar, iterasyon yöntemi ile yapılmış ve Ir, Rh, Sr, Ca ve Pb metallerinin ilgili grafikleri çizilmiştir. Zor eğrilerinden  $\sigma_l$  ( zor ) in  $a_1$  eksenini kestiği yere karşılık gelen  $a_1$  değerinden bu metallerin f.c.c ve b.c.c fazda iken örgü sabitleri ve bu fazlara karşılık gelen enerji ve birim hücre hacimleri tablo halinde verilmiştir.  $B_{ij}$  elastik modülleri yardımı ile Born kriterlerini sağlayan kararlılık bölgeleri (MKB) belirlendi.

4. Bölümde EAM modeline göre f.c.c. metallerinin üçüncü-mertebeden elastik sabitleri hesaplandı. 5. Bölümde EAM potansiyeli ile basınç-hacim ilişkisi deneysel değerlerle birlikte verildi ve yorumlandı.

## 2. TEORİKSEL KARARLILIK

### 2.1.Genel Teori

Dış kuvvetin uygulamasıyla homojen şekilde deforme olan basit kübik kristal için iç enerji, birim hücre başına iç enerji ile ifade edilebilir. Birim hücre başına enerji, sırasıyla birim hücreyi tanımlayan altı bağımsız değişkenin fonksiyonu olarak gösterilebilir.



Şekil 2.1. Bcc ve fcc kristalleri için uygun birim hücreler

a) Bcc kristali b) Fcc kristali c)  $a_1$  eksenine dik zor uygulanmış bcc kristali



$a_i$ ,  $i=1,2,\dots,6$  birim hücreyi tanımlar, "0" üst indisi; zorun yokluğunda örgü parametrelerinin değerini göstermek için kullanılır. Bu nedenle sıfır zor durumunda küp kenarları  $a_1^0 = a_2^0 = a_3^0 = a_0$  ve bu kenarlar arasındaki açılar  $a_4^0 = a_5^0 = a_6^0 = \frac{\pi}{2}$  dir. Kristale zor uygulandığında örgü deforme olacaktır ve her  $a_i^0$ ,  $a_i$ 'ye dönüşecektir. Burada birçok genel durumda kenarlar  $a_1 \neq a_2 \neq a_3$  ve bu kenarlar arasındaki açılar

$$a_4 \neq a_5 \neq a_6 \neq \frac{\pi}{2} \text{ dir.}$$

İdeal bir kristalin yeterince bozulmasına sebep olan zor için kristal deformasyonu (ve bu nedenle birim hücrenin deformasyonu)  $\{a_i - a_i^0\}$ , genelde  $a_i^0$  ile kıyaslanmayacak kadar küçüktür ve geniş bir deformasyonla ilgili uygun bir ifade kullanmak gerekecektir. Aşağıdaki notasyon birim hücre başına enerjiyi ifade etmek için kullanılır:

$$E(a_1^K, a_2^K, a_3^K, a_4^K, a_5^K, a_6^K) = E_{\{a_i^K\}} \quad (2.1)$$

Yani  $E_{\{a_i^K\}}$ ;  $\{a_i^K\}$ ,  $i=1,2,3,\dots,6$  örgü parametrelerinin özel grubu için değerlendirilen birim hücre başına potansiyel enerjidir.

$\{a_i^K\}$  durumunda örgünün dengede olması için atomların karşılıklı potansiyel enerjisinden kaynaklanan iç kuvvet ve dış kuvvetler arasındaki kuvvetin dengede olması gerekir.  $\{a_i^K\}$  durumunda örgü üzerinde  $F_i^K$  kuvveti ile temsil edilen "genelleştirilmiş kuvvet":

$$F_i^K = \left( \frac{\partial E}{\partial a_i} \right)_{\{a_i^K\}} \quad i=1,2,\dots,6 \quad (2.2)$$

dir.

Burada  $F_i^K$ ,  $\{a_i^K\}$  durumunda örgünün küçük bir deformasyonu için yapılan iştir.

$\delta W = \sum_{i=1}^6 F_i^K \delta a_i^K$ . Bu nedenle örneğin;  $a_b^K$  kenarı  $\delta a_b^K$  küçük bir miktar kadar uzatılırsa işin artımı,

$$\delta W = F_b \delta a_b \quad (2.3)$$

olur. Açıkça bu,  $a_b$  yönünde  $\delta a_b$  mesafesini geri kalan  $a_c$  ve  $a_d$  kenarlarıyla sınırlanmış birim hücrenin yüzeyine hareket etmek için gerekli iştir. Böylece  $F_b, a_b$  ye paralel yönde  $a_c$  ve  $a_d$  ile tanımlanan birim hücrenin yüzeyine etki eden kuvvete eşittir.  $\delta a_b$ 'nin ( $a_b$  denge değerine göre ölçülen deformasyonu) yukarıdaki gösterimde küçük olduğu görülmektedir. Bunun yanı sıra;  $(a_b - a_b^0)$  deformasyonu veya  $\{a_i - a_i^0\}$  deformasyonları (yani  $F_i^0 = 0 \quad i=1,2,\dots,6$  durumunda örgü parametrelerinin denge değerine göre ölçülen  $a_b$  ve diğer  $a_i$ ) keyfi şekilde büyük olabilir.

Birim hücrenin kenarlarının  $a_i \quad i=1,2,3$  ortogonal olduğu özel durum için  $F_b, a_c$  ve  $a_d$  ( $a_b$ 'ye dikey düzlem) iki kenarı ile tanımlanan düzlem üzerinde temsil edilen

normal zora bağıntılı olabilir.  $\sigma_b = \frac{F_b}{a_c - a_d}$  Burada b,c,d ; 1,2,3'ün

permütasyonudur. Bu nedenle kuvvetin denge şartı altında hücre kenarları birbirine dik olduğu zaman birim hücrenin yüzü üzerindeki normal zor

$$\sigma_b^K = \frac{1}{a_c^K a_d^K} \left( \frac{\partial E}{\partial a_b} \right)_{\{a_i^K\}} \quad (2.4)$$

Burada b,c,d ; 1,2,3'ün permütasyonudur.

Eş. 2.4; küp kenarlarını ortagonallikten hafif hareket ettiren normal zor  $\sigma_b^K$  'yı hala temsil eder. Birim hücrenin gerilmesi,  $E$  'nin türevi ile şu şekilde de gösterilir:

$$\sigma_i^K = \frac{1}{(a_1^K a_2^K a_3^K)} \left( \frac{\partial E}{\partial a_i} \right)_{\{a_i^K\}} \quad i=4,5,6 \quad (2.5)$$

Eş. 1.2; iç ve dış kuvvete uygun olarak örgünün dengede olması için gerekli şartları verir. Bununla birlikte örgünün kararlı dengede olması için ek sınırlamalar vardır. Dış bir kuvvet uygulandığında örgüyü içeren sistemin toplam enerjisi minimumda olmalıdır. Diğer bir söyleyişle;  $\{a_i^K\}$  altı bileşenleriyle belirlenen örgünün durumu kararlı denge durumundan birinde ise  $\{a_i^K\}$  durumundan herhangi bir  $\{a_i^l\}$  durumuna gitmek için pozitif bir enerji harcaması gerekir.  $\{a_i^l\}$  ve  $\{a_i^K\}$  durumları arasındaki iç potansiyel enerjideki fark Taylor serisi açılımı ile ilgili aşağıdaki şekilde ifade edilebilir:

$$E)_{(a_i^l)} - E)_{\{a_i^K\}} = \sum_{i=1}^6 \left( \frac{\partial E}{\partial a_i} \right)_{\{a_i^K\}} (a_i^l - a_i^K) + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^6 \sum_{j=1}^6 \left( \frac{\partial^2 E}{\partial a_i \partial a_j} \right)_{\{a_i^K\}} (a_i^l - a_i^K) (a_j^l - a_j^K) \quad (2.6)$$

$\{a_i^l - a_i^K\}$  Deformasyonları küçük alındığından ikinci mertebeden sonraki terimler ihmal edilir. Ne  $\{a_i^l - a_i^0\}$ , ne de  $\{a_i^K - a_i^0\}$  yeterince küçük değildir. Dengenin tanımlanması ile ilgili  $\{a_i^K\}$  durumunda örgü üzerine etkiyen genelleştirilmiş kuvvet

$\left( \frac{\partial E}{\partial a_i} \right)_{\{a_i^K\}}$  olmalıdır. Bu yüzden Eş. 2.6'nın sağ tarafındaki ilk terim;  $\{a_i^K\}$

durumundan  $\{a_i^l\}$  durumuna gitmede dış kuvvet tarafından yapılan işe aynı şekilde eşit olduğu görülür. Eş. 2.6'nın sağ tarafındaki ikinci terim pozitifdir ve uygunluk için

$$\left( \frac{\partial E}{\partial a_i \partial a_j} \right)_{\{a_i^K\}} = B_{ij}^K \quad (2.7)$$

alabiliriz.

Herhangi bir  $\{a_i^l - a_i^K\}$  deformasyonu için cebirsel teoreme göre Eş. 2.6'daki çift toplam pozitif olacaktır [16]. Bu durum ancak  $[B_{ij}^K]$  determinantın tümü pozitifse geçerlidir. Böylece kararlı denge oluşması için gerekli şart, ardarda gelen matrislerin determinantlarının hepsinin pozitif olmasıdır.

$$[B_{ij}^K]^K = \begin{bmatrix} B_{11} & B_{12} & B_{13} & B_{14} & B_{15} & B_{16} & \dots & B_{1K} \\ B_{21} & B_{22} & B_{23} & B_{24} & B_{25} & B_{26} & \dots & B_{2K} \\ B_{31} & B_{32} & B_{33} & B_{34} & B_{35} & B_{36} & \dots & B_{3K} \\ B_{41} & B_{42} & B_{43} & B_{44} & B_{45} & B_{46} & \dots & B_{4K} \\ B_{51} & B_{52} & B_{53} & B_{54} & B_{55} & B_{56} & \dots & B_{5K} \\ B_{61} & B_{62} & B_{63} & B_{64} & B_{65} & B_{66} & \dots & B_{6K} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ B_{K1} & B_{K2} & B_{K3} & B_{K4} & B_{K5} & B_{K6} & \dots & B_{KK} \end{bmatrix} \quad (2.8)$$

(Uygunluk için  $[B_{ij}^K] = [B_{ij}]^K$  notasyonu kullanılır)

Eğer bu temel minorların hepsi pozitif değilse bu durumda  $\{a_i^K\}$  için kuvvetler dengede demektir. Böylece  $\{a_i^l\}$  için statik bir durum bulunmaktadır. Bu durumda  $\{a_i^l\}$  biçim değiştirir. Ancak  $\{a_i^l\}$  için kuvvetlerin dengesi bulunmayacaktır. Çünkü dış kuvvet  $F_i^K, (\partial E / \partial a_i)_{\{a_i^K\}}$  ya eşitlenmiştir. Halbuki içteki kuvvetler  $(\partial E / \partial a_i)_{\{a_i^l\}}$  ye eşit olmalı. Dengesiz iç ve dış kuvvetlerin etkisinden dolayı kristal yapı kırılacaktır.

Yukarıda bulunan formaliteyi bir kristalde uyguladığımızda ilerlemek için bir yolumuz da keyfi değişik  $\{a_i\}$  setleri seçmektir [11].  $\{a_i\}$  leri sayabilmek,  $B_{ij}$ ' yi bulabilmek,  $B_{ij}$ ' nin temel determinantlarını denemek (ve her bir  $\{a_i\}$  seti için) ve diğerlerinin dengede olup olmadığını denetlemek için Eş. 2.2'deki dış  $F_i$  kuvvetleri uygulanmalıdır. Eğer bu şekilde ilerlersek bir yüzeyin altı boyutlu bir  $a_i$  boşluğunda kristalin kırılmasını denetleyebiliriz. Bu yüzey öyle bir şekilde yapılacaktır ki belli bir

$a_i$  değeri yüzeyin bir tarafında bulunacak, diğeri ise dengede olacaktır. Bu durumda bir  $a_i$  seti (yüzeyi geçtiği an )kristal kırılır.

Gerçekte bilgisayar kullandığımız halde bile böyle bir yüzeyi denetlemek için yapılan hesaplamalar gerçekten büyüktür. Bundan dolayı bu yüzeyde bazı noktaları bulmak çok dikkat çekicidir. Bu noktalar bir eğrinin üzerinden, yada bir yol üzerinden seçilebilir. Altı boyuttaki bir boşluktaki  $a_i$  , ki bu eğri dengeli taraftan dengesiz tarafa kırılış noktasından geçer.  $\{a_i^F\}$  setinde kullanacağımız yol ;  $a_i$  yolunu izleyerek direk sınırlamalar koyarak (örnek, hidrostatik basınç bir kristale uygulandığında  $a_1 = a_2 = a_3$  ve  $a_4 = a_5 = a_6 = \frac{\pi}{2}$  sınırlamaları koyarak bir yol bulunabilir ) , yada kullandığımız  $F_i$  kuvvetlerini uygulayabiliriz. İki durumda da çıkan  $\{a_i^F\}$  seti ki onda denge kriteri aşmıştır.  $\{a_i\}$  'lerin setleri belli bir yol üzerinde yer alan denge kriterlerini denetleyerek bulunur (onlar belirli zorlamalara maruz kalırlar ).

$a_i$  üzerine doğrudan kısıtlamaları yerleştirmek kolaydır, çünkü  $\{a_i\}$  seti bir kere belirlenince  $F_i$  ve  $B_{ij}$  Eş. 2.2 ve 2.7'den hesaplanabilir. Bununla birlikte fiziksel bir görüş açısından  $F_i$  üzerine kısıtlamaları yerleştirmek daha kullanışlıdır. Verilen bir  $F_i^s$  kuvvet seti için “başlangıç set”:  $\{a_i^s\}$  bilinirse  $\{a_i\}$  aşağıda sunulan iterasyon işlemini kullanarak bulunabilir. (Uygun bir “başlangıç set” bütün  $F_i = 0$  için  $\{a_i^0\}$  setidir.)  $\{a_i^s\}$  Değerlerinin seti kullanılarak  $B_{ij}$  Eş. 2.7'den hesaplanır.

$$E)_{\{a_i^K\}} = E)_{\{a_i^s\}} + \sum_{i=1}^6 F_i^s \cdot (a_i^K - a_i^s) + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^6 \sum_{j=1}^6 B_{ij}^s (a_i^K - a_i^s)(a_j^K - a_j^s) \quad (2.9)$$

$\{a_i^K\}$  'ya göre türevi alınırsa;

$$F_i^K = \left( \frac{\partial E}{\partial a_i} \right)_{\{a_i^K\}} = F_i^s + \frac{1}{2} \left( \sum_{j=1}^6 B_{ij}^s (a_j^K - a_j^s) + \sum_{j=1}^6 B_{ji}^s (a_j^K - a_j^s) \right) \quad (2.10)$$

$B_{ij} = B_{ji}$  olduğundan

$$F_i^K = F_i^s + \sum_{j=1}^6 B_{ij}^s (a_j^K - a_j^s) \quad i=1,2,\dots,6 \quad (2.11)$$

Böylece denge kuvvetleri uygulanmış  $\{a_i^s\}$  durumu verilmiş oldu. Artık genel bir sorun olan alttaki  $\{a_i^K\}$  durumu denge kuvvetleri  $F_i^K$  nın Eş. 2.11’de lineer sisteme indirgenerek bulunabilir.

$\{a_i^K\}$  bulunduktan sonra  $B_{ij}^K$  hesaplanabilir.  $\{a_i^K\}$  durumunda olmak için yeni bir başlangıç noktası alınır ve yeni denge durumunu belirlemek için işlem tekrar edilir. Yukarıdaki işlem  $B_{ij}^F$  bulunana kadar (ki kararlılık kriterleri bozulur) tekrar edilir. Elbette ki herhangi bir başarılı iterasyon için  $\{a_i^l - a_i^K\}$   $\{a_i^K\}$  ‘ya göre küçük olmalıdır. Bununla birlikte  $\{a_i^F - a_i^s\}$  birkaç iterasyondan sonra nispeten büyük olabilir.

## 2.2. Tek Eksenli Kuvvet Durumu

Şimdi, yukarıdaki formalizmin özel bir uygulaması olarak,  $a_1$  kenarına paralel, küp yüzüne düşey uygulanmış tek eksenli bir kuvvet ile bir kübik kristal düşünelim. Uygulamalı kesme zorun yokluğunda  $a_4, a_5$  ve  $a_6$  bileşenleri başlangıçtaki  $\frac{\pi}{2}$  değerini koruyacaklardır. Bir gerilme kuvveti uygulandığında  $a_1$  kenarı uzayacak,  $a_2$  ve  $a_3$  kenarları kısalmaktadır; simetriden dolayı  $a_2 = a_3$  bağıntısının ettirileceği görülür. (Deforme olmuş kristal tetragonal simetriye sahip olacaktır.)

$\{a_i^K\}$  Denge durumunda kuvvetin denge şartı sağlanmalıdır.

$$\left(\frac{\partial E}{\partial a_i}\right)_{\{a_i^K\}} = 0 \quad i \neq 1 \quad (2.12)$$

$$\left(\frac{\partial E}{\partial a_1}\right)_{\{a_i^K\}} = F_1^K \quad (2.13)$$

Burada;

$$a_2^K = a_3^K \quad (2.14)$$

$$a_4^K = a_5^K = a_6^K = \frac{\pi}{2} \quad (2.15)$$

$F_1^K$  uygulanmış kuvvettir ve  $a_1$  yönündeki normal zor basitçe

$$\sigma_1^K = \frac{F_1^K}{(a_2^K)^2} \quad (2.16)$$

olur.

Kristal yapının simetrisinin sonucu olarak Eş .2.12'de özetlenen ifade  $i=4,5,6$  için de

aynı şekilde sağlanır. Çünkü  $\frac{\partial E}{\partial a_4} = \frac{\partial E}{\partial(-a_4)}$  v.b. ve  $i=2$  ve  $i=3$  için bu eşitlikler

birbiriyle aynıdır. Bundan dolayı, Eş. 2.12:

$$\left(\frac{\partial E}{\partial a_2}\right)_{\{a_i^K\}} = 0 \quad (2.17)$$

ile sağlanacaktır. Bu nedenle bu durumda  $\{a_i^K\}$  denge durumunu bulma problemi Eş. 2.13 ve Eş. 2.17'den  $a_1^K$  ve  $a_2^K$  yi belirlemeye indirgenir. Bundan başka, kristalin özel simetrisi bu durumda ayrıca  $[B_{ij}]$  matrisini oldukça basitleştirir ve aşağıdaki ilişkiler görülür:

$$B_{ij} = B_{ji} \quad (2.18)$$

$$B_{ij} = 0 \quad \text{ise} \quad j=4,5,6 \quad \text{ve} \quad (i \neq j) \quad (2.19)$$

$$B_{22} = B_{23} \quad \text{ve} \quad B_{55} = B_{66} \quad (2.20)$$

Örnek olarak (2.19) eşitliği

$$\frac{\partial^2 E}{\partial a_i \partial a_j} = \frac{\partial^2 E}{\partial a_i \partial (-a_j)} \quad , \quad j=4,5,6 \quad \text{ve} \quad i \neq j \quad (2.21)$$

den gösterilebilir.  $[B_{ij}]$  matrisi şu hali alır:

$$[B_{ij}] = \begin{bmatrix} B_{11} & B_{12} & B_{12} & 0 & 0 & 0 \\ B_{12} & B_{22} & B_{23} & 0 & 0 & 0 \\ B_{12} & B_{23} & B_{22} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & B_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & B_{55} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & B_{55} \end{bmatrix} \quad (2.22)$$

Eğer şu şartlar sağlanırsa yukarıdaki matrisin determinantın temel elemanları pozitif olacaktır.



$$B_{55} > 0 \quad (2.23)$$

$$B_{44} > 0 \quad (2.24)$$

$$B_{22} > 0 \quad (2.25)$$

$$\begin{vmatrix} B_{22} & B_{23} \\ B_{23} & B_{22} \end{vmatrix} > 0 \quad (2.26)$$

$$\begin{vmatrix} B_{11} & B_{12} & B_{12} \\ B_{12} & B_{22} & B_{23} \\ B_{12} & B_{23} & B_{22} \end{vmatrix} > 0 \quad (2.27)$$

Bundan daha ilerideki sadeleştirme, yukarıdaki ilişkilerden merkezi ikili kuvvetlerin yaklaşıklıkla ile ortaya çıkar. Bu yaklaşıklık  $B_{12}^K$  ve  $B_{23}^K$  nın  $(a_1^K a_2^K)^{-1} B_{55}^K$  ve  $(a_2^K a_3^K)^{-1} B_{44}^K$  ya sırasıyla eşit olduğu andır.( Eş. 2.56 ve Eş. 2.57 görüleceği gibi) . Böylece; Eş. 2.23 ve Eş. 2.24 bağıntıları;

$$B_{12} > 0 \quad (2.28)$$

$$B_{23} > 0 \quad (2.29)$$

olur.

Eş. 2.25, Eş. 2.26 ve Eş. 2.29 bağıntılarından;

$$B_{22} - B_{23} > 0 \quad (2.30)$$

ve Eş. 2.27'den;

$$B_{11}(B_{22} + B_{23}) - 2(B_{12})^2 > 0 \quad (2.31)$$

bulunur.

Eş. 2.28- Eş. 2.31 Born kriteri ile ilgili örgünün kararlı denge durumunda olması için gerekli ve yeterli şartlardır. Eş. 2.11'den;

$$F_1^K = F_1^s + B_{11}^s(a_1^K - a_1^s) + 2B_{12}^s(a_2^K - a_2^s) \quad (2.32)$$

ve

$$F_2^K = 0 = B_{12}^s(a_1^K - a_1^s) + (B_{22}^s + B_{23}^s)(a_2^K - a_2^s) \quad (2.33)$$

eşitliğinden

$$a_2^K - a_2^s = -\left[B_{12}^s / (B_{22}^s + B_{23}^s)\right](a_1^K - a_1^s) \quad (2.34)$$

Eş. 2.34'ü Eş. 2.32'de yerine koyarsak;

$$F_1^K = F_1^s + \left[B_{11}^s - 2(B_{12}^s)^2 / (B_{22}^s + B_{23}^s)\right](a_1^K - a_1^s) \quad (2.35)$$

bulunur.

Bütün  $F_i^s = 0$  için  $a_1^s = a_2^s = a^0$  örgü parametrelerinin değerlerini bilmekle iterasyon işlemine başlanabilir.  $B_{ij}^s$ 'nin değerlerini hesapladıktan sonra,  $a_1$  örgü sabiti  $(a_1^K - a_1^s)$  kadarlık küçük miktar artırılır.  $a_2^K$ 'nin değeri ( $F_2^K = 0$  için) Eş. 2.34'den bulunur;  $F_1^K$  değeri  $(a_1^K - a_1^s)$  nin artırılmasındaki sonuçlar) Eş. 2.35'den

belirlenebilir veya Eş. 2.2'den doğrudan hesaplanabilir. Örgü parametresinin bu yeni değerleri için  $B_{ij}^K$  hesaplanır ve  $a_1$ 'in  $a_1^L - a_1^K$  kadarlık başka bir artımı için işlem tekrar edilir. Bu denge bağıntılarından biri bozuluncaya kadar devam ettirilir. Kristalin teoriksel kararlılığı (zor)  $F_1^F / (a_2^F)^2$  ve teoriksel max. zorlanma  $(a_1^F - a_1^0) / a_1^0$  dır.

### 2.3 Atomlar Arası İkili-Etkileşim Modelindeki Nümeriksel Hesaplamalar

Daha önceki bahsimizde  $\{a_i\}$  örgüsünün denge durumunu bulmak için bir genel  $F_i$  kuvvetinin bulunduğu ortamda detayıyla anlatıldı. Bir  $\{a_i\}$  örgü parametreleri için  $F_i$ , Eş. 2.2 ve  $B_{ij}$ , Eş. 2.7'den bu bölümde hesaplanabilir. Bu değerlerin belli bir kübik kristal modeli için, atomların çift etkileşim halinde oldukları anlatıldı. Daha önce de anlattığımız gibi bu model birçok yazar tarafından kullanıldı. Temel tahmin iki atom arası  $\phi(r_{ij})$  potansiyel enerji fonksiyonunu atomlar arası  $r_{ij}$  uzaklığının fonksiyonu olarak yazılabilmektedir. Eğer gerçek değeri gösterecekse her  $[\phi]$  potansiyel fonksiyonu bu şartı bulundurmaya zorundadır. Bu da Girifalco ve Weizer tarafından ayrıntılarıyla anlatılmıştır.[11]

Çift etkileşimli modelde, örgünün birim hücrelerinin enerjisi;

$$E)_{\{a_i\}} = \frac{1}{2} n \sum_j \phi[r_j)_{\{a_i\}}] \quad (2.36)$$

dir. Burada  $n$ ; birim hücrenin atom sayısıdır ve  $r_j$ , orijin olarak seçilen j. atoma örgüde keyfi bir atomdan olan uzaklıktır. Toplam örgü parametrelerinin  $\{a_i\}$  özel seti için hesaplanır ve j indeksi kristaldeki bütün atomlar üzerindedir.

Düzgün bir deformasyona maruz kalan bcc veya fcc kristalde, kristaldeki orijinden j. atoma uzanan  $\vec{r}_j$  vektörü

$$\vec{r}_j = \vec{r}_{l_1 l_2 l_3} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^3 l_i a_i \hat{a}_i \quad (2.37)$$

$$(r_{l_1 l_2 l_3})^2 = \frac{1}{4} \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 l_i l_j a_i a_j \hat{a}_i \cdot \hat{a}_j \quad (2.38)$$

$\hat{a}_i$ ;  $a_i$  hücre kenarı yönündeki birim vektördür ve  $l_i$  tam sayıdır. Bcc kristali için  $l_1, l_2, l_3$  'ün ya hepsi tek ya da hepsi çifttir. Fcc örgü için  $l_1 + l_2 + l_3$  toplamı çifttir. Bu rotasyonda Eş. 2.36;

$$E)_{\{a_i\}} = \frac{1}{2} n \sum_{l_1} \sum_{l_2} \sum_{l_3} \phi(r_{l_1 l_2 l_3})_{\{a_i\}} \quad (2.39)$$

olur ve bu eşitliği diferansiyellersek

$$F_i = \frac{1}{2} n \sum_{l_1} \sum_{l_2} \sum_{l_3} \frac{\partial \phi(r)}{\partial r^2} \cdot \frac{\partial r^2}{\partial a_i} = \frac{\partial E}{\partial a_i} \quad (2.40)$$

$$B_{ij} = \frac{\partial^2 E}{\partial a_i \partial a_j} = \frac{1}{2} n \sum_{l_1} \sum_{l_2} \sum_{l_3} \left[ \frac{\partial^2 \phi(r)}{(\partial r^2)^2} \frac{\partial r^2}{\partial a_i} \cdot \frac{\partial r^2}{\partial a_j} + \frac{\partial \phi(r)}{\partial r^2} \cdot \frac{\partial^2 r^2}{\partial a_i \partial a_j} \right] \quad (2.41)$$

$r$  ise  $(r_{l_1 l_2 l_3})_{\{a_i\}}$  ortalaması alınarak, türevler ise bir  $\{a_i\}$  seti ve  $\frac{\partial \phi}{\partial r^2}$  ve  $\frac{\partial^2 \phi}{(\partial r^2)^2}$  direk

iki cismin belli olan potansiyel fonksiyonları kullanılarak bulunmuştur.  $\frac{\partial r^2}{\partial a_j}$  ve

$\frac{\partial^2 r^2}{\partial a_i \partial a_j}$  ifadeleri Eş. 2.38 'de türevi alınarak bulunuyor. Bunlar kullanılarak şu şekli

alır:

$$r^2 = \frac{1}{4} \left[ l_1^2 a_1^2 + 2l_1 l_2 a_1 a_2 \cos a_6 + 2l_1 l_3 a_1 a_3 \cos a_5 + l_2^2 a_2^2 + 2l_2 l_3 a_2 a_3 \cos a_4 + l_3^2 a_3^2 \right] \quad (2.42)$$

Böylece örnek olarak Eş. 2.40 ve Eş. 2.41'deki türev ifadeleri şunlardır:

$$\frac{\partial r^2}{\partial a_1} = \frac{1}{2} \left[ l_1^2 a_1 + l_1 l_2 a_2 \cos a_6 + l_1 l_3 a_3 \cos a_5 \right] \quad (2.43)$$

$$\frac{\partial r^2}{\partial a_4} = -\frac{1}{2} l_2 l_3 a_2 a_3 \sin a_4 \quad (2.44)$$

$$\frac{\partial^2 r^2}{\partial a_1^2} = \frac{1}{2} l_1^2 \quad (2.45)$$

$$\frac{\partial^2 r^2}{\partial a_4^2} = -\frac{1}{2} l_2 l_3 a_2 a_3 \cos a_4 \quad (2.46)$$

$$\frac{\partial^2 r^2}{\partial a_1 \partial a_2} = \frac{1}{2} l_1 l_2 \cos a_6 \quad (2.47)$$

$$\frac{\partial^2 r^2}{\partial a_1 \partial a_5} = -\frac{1}{2} l_1 l_3 a_3 \sin a_5 \quad (2.48)$$

$$\frac{\partial^2 r^2}{\partial a_1 \partial a_4} = 0 \quad (2.49)$$

$$\frac{\partial^2 r^2}{\partial a_4 \partial a_5} = 0 \quad (2.50)$$

$a_1$  eksenine paralel uygulamalı tek eksenli gerilme zorunun özel durumu için ( $a_2 = a_3$  ve  $a_4 = a_5 = a_6 = \frac{\pi}{2}$ ) yukarıdaki eşitlikte cosinüsler sıfırdır ve sinüsler birdir. Bu durumda  $F_i$  ve  $B_{ij}$ ;

$$F_i = \frac{1}{4} n a_i \sum_{l_1 l_2 l_3} l_1^2 \frac{\partial \phi}{\partial r^2} \quad , \quad i=1,2,3 \quad (2.51)$$

$$B_{11} = \frac{1}{8} n a_1^2 \sum_{l_1 l_2 l_3} l_1^4 \frac{\partial^2 \phi}{(\partial r^2)^2} + \frac{1}{4} n \sum_{l_1 l_2 l_3} l_1^2 \frac{\partial \phi}{\partial r^2} \quad (2.52)$$

$$B_{12} = \frac{1}{8} n a_1 a_2 \sum_{l_1 l_2 l_3} l_1^2 l_2^2 \frac{\partial^2 \phi}{(\partial r^2)^2} \quad (2.53)$$

$$B_{44} = \frac{1}{8} n (a_2 a_3)^2 \sum_{l_1 l_2 l_3} l_2^2 l_3^2 \frac{\partial^2 \phi(r)}{(\partial r^2)^2} \quad (2.54)$$

Yukarıdaki eşitliklerde alt indisleri değiştirerek  $B_{ij}$  ler bulunabilir. Örneğin,  $B_{22}$  'yi bulmak için Eş. 2.52'de  $a_1$  ve  $l_1$  ;  $a_2$  ve  $l_2$  ile değiştirilir. Eş. 2.53'de  $B_{23}$  için  $a_1$  ve  $l_1$  ;  $a_3$  ve  $l_3$  ile değiştirilir; ve  $B_{55} = B_{66}$  ise Eş. 2.54'de  $a_3$  ve  $l_3$  ,  $a_1$  ve  $l_1$  ile değiştirilir. Merkezi ikili etkileşim kuvvetlerinin kullanılması sonucu

$$B_{44} = a_2 a_3 B_{23} \quad (2.55)$$

$$B_{55} = a_1 a_2 B_{12} \quad (2.56)$$

bulunur. Bu da ardı ardına örgü toplamlarına kıyaslanarak ispatlanabilir. Herhangi bir örgü toplama  $l_1$  'i içeren denklemin üssü bir tek sayı olduğunda denklem sifira eşit

oluyor. Böylece terimler bunun gibi  $F_6 = -n a_1 a_2 \sum_{l_1 l_2 l_3} l_2 l_3 \frac{\partial \phi}{\partial r^2} = 0$  olur [11].

### 3. EMBEDDED- ATOM METOD İLE YAPISAL FAZ DÖNÜŞÜMLERİ VE ELASTİK KARARLILIK

#### 3.1.Embedded – Atom Metodu

Metalik sistemler için, bulk termodinamik verilere deneysel olarak fit edilerek ya da pseudopotansiyel teorileri kullanarak türetilen ikili etkileşim potansiyellerini kullanmak geleneksel bir yaklaşımdır. Fakat basit iki cisim potansiyelleri yetersizdir. Çünkü boşluk oluşturma enerjisi (unrelaxed vacancy formation energy) kohesif enerji ile aynıdır ve Cauchy basıncı  $C_{12} - C_{44}$  sıfırdır (yani  $C_{12} = C_{44}$ ). Bu şartların hiçbiri gerçek katılarda geçerli değildir. Bu yetersizlik sistemin hacmine bağlı bir enerji terimi eklenmesiyle düzeltilebilir. Metal, elektron gazı ile etkileşen iyon olarak görülebildiği için, hacme bağlı enerji terimi fiziksel bir temele sahip olur. Böylece elektron yoğunluğu, kristalin hacmine bağlı olur.

Embedded – atom metodu (EAM) olarak adlandırılan yeni bir metot, Sandia Ulusal laboratuvarında çalışan araştırmacılar tarafından geliştirildi [13,17]. EAM, Stott ve Zaremba tarafından türetilen “density-functional theory” yaklaşımlarına dayanır [6]. Bu teoriye göre, örgüye küçük bir safsızlık atomu yerleştirmek için gerekli enerji, yalnızca örgünün belirli bir kenarındaki elektron yoğunluğunun fonksiyonu olarak alınır. Puska ve arkadaşları bu fonksiyonu, sabit elektron yoğunluğu formülünü kullanarak birçok hafif atom için hesapladılar [14]. Daw ve Baskes bu fikri iki-cisim merkezi etkileşme potansiyelini dahil ederek, atomik konumlarda değişimlere izin veren genel örgü modeline genişlettiler. Model, deneysel verilerle oldukça uyum göstermektedir.

*Embedded Atom Metodu (EAM):* Metalik sistemlerinin toplam enerjilerinin hesaplanmasında, ikili etkileşim potansiyeli ve yoğunluk fonksiyonunun işlemlere katılması nedeniyle önemli bir metottur. Embedded Atom Metodu (EAM) açıklamak için metalik sistemlerde, bir atomun enerjisini, içerisinde bulunduğu elektron gazına bağlı olarak, embedding enerjiden başlamak gerekir.

Modelin sonuçlarının elde edilmesinde daha çok atomlar arası potansiyelden yararlanılarak hesaplamalar yapılmakta, model alaşımlara uygulandığında birçok atom etkileşimleri toplam enerji ifadesinin elde edilmesinde önemli olmaktadır.

Atomların dinamiğini inceleme, birçok fiziksel özelliklerin açıklanmasında, anlaşılmayan konuların belirlenmesi için bir çözüm yolu olmakta ve kristal yapının yeniden düzenlenmesinin metodlara bağlanması nedeniyle önem taşımaktadır.

Klasik fizik tanımına göre özellikle yüksek sıcaklıklarda atomların hareketlerinin Newton'un hareket denklemlerine uygun olduğu, fiziksel olarak tanımlanamayan niceliklerin açıklanmasında, mevcut problemin elde edilen sonuçlarından; atomlar arası etkileşimleri ve kuvvetlerin etkili olduğu andaki birkaç zamanı tayin edebilme gibi işlemleri yapabiliriz.

Toplam enerji, maddelerin yoğunlaştırılması ile (katı veya sıvı) atomik dizilişlerin her biri için ayrı ayrı hesaplanabilir, bunun için Schrödinger hareket denklemleri kullanılır.

Atom çekirdeği ve elektronlar arasında bilinen bir elektrostatik etkileşmeyi, yüzey potansiyel enerjisini, atomlardaki genişleme (evolution) zamanını belirleyerek, Newton'un hareket denklemleri ile çözmek görünüşte zor bir problemdir, toplam enerjiyi;

i - Elektron – Elektron etkileşmesi

ii - Bölgesel elektron yoğunluğu yaklaşımı (LDA)

iii – Yoğunluk fonksiyoneli

teorilerinden birisini kullanarak hesaplamak mümkündür.

Genel olarak ikili etkileşim potansiyelini kullanarak atomlar arası etkileşimleri tanımlamak uygun olmaktadır. Metalik sistemler için ikili etkileşim potansiyeli sanki potansiyel teorisinden “Pseudopotential Theory (PT)” yararlanılarak bulunur.



Yarı iletkenlerde ve metallerin atomlar arası etkileşmelerinde birçok yeni metod geliştirilmiş, genel olarak bu metodların tümü birçok atom etkileşmeleri üzerine kurulmuştur.

### 3.2. Potansiyel Formu

Gerçekte EAM, toplam enerjiye N-cisim etkileşmelerinin sonsuz serisini dahil eder. EAM modelinde, N atomlu bir sistemin toplam etkileşme enerjisi, çevre atomların oluşturduğu homojen elektron gazının içine bu N atomu gömmek için gerekli enerji ile, iki- cisim etkileşmelerinin toplamı olarak tanımlanır. Böylece bu toplam enerji,

$$E_{top} = \sum_i F_i(\rho_i) + \sum_{i>j} \phi(r_{ij}) \quad (3.1)$$

Olarak ifade edilebilir [18]. Burada,  $E_{top}$ , toplam iç enerjidir.  $\rho_i$  bütün diğer atomlarla ilgili  $i$ . atomdaki çokluk(host) elektron yoğunluğudur.  $f(r_{ij})$  merkezden olan uzaklığın fonksiyonu olarak  $j$ . atomun elektron yoğunluğudur.  $r_{ij}$ ,  $i$  ve  $j$  atom çiftleri arasındaki uzaklıktır.  $\phi(r_{ij})$ ,  $i$  ve  $j$  atomları arasındaki merkezi iki- cisim potansiyelidir. Böylece çokluk elektron yoğunluğu, lineer üst-üste binme ilkesine, ayrı ayrı atomların elektron yoğunluklarının toplamı olarak yazılabilir. Yani,

$$\rho_i = \sum_{j(\neq i)} f(r_{ij}) \quad (3.2)$$

dir.  $F_i(\rho_i)$ ,  $\rho_i$  elektron yoğunluğundaki  $i$ . atomu yerleştirmek için gerekli embedding enerjidir. Embedding enerji, bir atom ile bütün diğer atomlar tarafından oluşturulan lokal elektron gazının etkileşmesini temsil ettiği için katının kohesif enerjisidir. Örgü hesaplarında EAM kullanmak için  $f$ ,  $F$ , ve  $\phi$  fonksiyonları her atom için belirlenmesi gerekir. Atomik elektron yoğunlukları, kuantum mekanik yaklaşımlar içeren Hartree-Fock teorisine göre;

$$\rho_k^a(r) = \left[ \sum_i C_{ki} \frac{(2\zeta_{ki})^{(n_{ki}+1/2)}}{[(2n_{ki})!]} r^{n_{ki}-1} e^{-\zeta_{ki}r} \right]^2 / 4\pi \quad (3.3)$$

yazılır [19]. Burada  $k = s, p, d \dots$  şeklinde elektronik kabukları temsil eder.  $n$  ve  $n_s$  sırasıyla valans elektronu sayısı ve dış kabuktaki  $s$  elektronları sayısı olmak üzere, atomik elektron yoğunluğu:

$$\rho^a(r) = n_s \rho_s^a(r) + (n - n_s) \rho_k^a(r) \quad k=d,p\dots \quad (3.4)$$

şeklinde ifade edilir.[19]

Embedding fonksiyonu  $F(\rho)$ , saf metallerde kullanıldığı gibi alaşımlarda da atomların enerjisini hesaplamak için ilke olarak kullanılabilir. Fakat bu durumda embedding enerji, yalnızca denge durumundan ziyade çokluk elektron yoğunluğunun geniş bir bölgesi üzerinden belirlenmelidir.

Banerjea ve Smith, çokluk elektron yoğunluğunu temsil etmek için basit exponansiyel fonksiyon kullandılar [15]. J. Cai ve Y.Y. Ye atomik elektron yoğunluğunu aşağıdaki exponansiyel formda kullandı [20]:

$$f(r) = f_e[-\alpha(r - r_e)] \quad (3.5)$$

Burada  $f_e$  ayar (sacaling) sabiti,  $r_e$  denge durumunda en yakın komşu uzaklığı ve  $\alpha$  belirlenmesi gereken ayarlanabilir bir parametredir. Bu modelde embedding fonksiyonu, pozitif bir eğime sahip olacak şekilde elde seçilmelidir. Bu çalışmada embedding fonksiyonu olarak, Banerjea ve Smith tarafından önerilen aşağıdaki fonksiyon alındı [15].

$$F(\rho) = -F_0 \left[ 1 - \ln \left( \frac{\rho}{\rho_e} \right) \right] \left( \frac{\rho}{\rho_e} \right)^n + D_2 \left( \frac{\rho}{\rho_e} \right) \quad (3.6)$$

Fakat, Banerjea ve Smith 'in önerdiği  $F(\rho)$  formülüne J. Cai ve Y.Y. Ye tarafından lineer bir terim (Eş. 3.6'in solundaki ikinci terim) eklendi [20]. Bu çalışmada kohesif enerjiye uzun-erişimli katkıyı dahil eden basit ve tamamen analitik EAM tipi potansiyel modeli kullanılmıştır.

Bu çalışmada, EAM modelindeki ikili- etkileşim potansiyeli olarak E.G.E.P. fonksiyonuna benzeyen aşağıdaki fonksiyonu kullandık.

$$\phi(r) = \frac{D_1}{(m-1)} \left[ \frac{e^{-m\beta\left(\frac{r}{r_e}\right)}}{\left(\beta\frac{r}{r_e}\right)^n} - m\left(\beta\frac{r}{r_e}\right)^n e^{-\beta\left(\frac{r}{r_e}\right)} \right] \quad (3.7)$$

Böylece, denge durumundan uzaktaki özellikleri daha iyi tanımlayan bir EAM fonksiyon setini elde ettiğimize inanıyoruz. Eş. 3.6'e geri dönersek,  $\rho_e$  denge durumundaki çokluk elektron yoğunluğunu temsil eder.  $F_0$  ve  $n$  iki sabittir.  $F_0 = E_c - E_v^f$  ve  $n=0.5$  alındı. Burada  $E_c$  kohesif enerji,  $E_v^f$  boşluk oluşturma enerjisi (vacancy formation enerjisi) dir.  $F_0$  ve  $n$ 'nin bu seçimi herhangi bir fiziksel düşünceye göre değil uygunluk için kullanılmıştır. Geriye kalan  $D_1, D_2, \alpha, \beta$  ve Eş. 3.5' deki  $f_e$  parametresi saf elementler için belirlenmesi gereken 5 tane parametredir. Yalnızca Eş. 3.6'da görünen elektron yoğunlukları oranından dolayı  $f_e$  ayar çarpanı saf elementler için modelden elenir. Genelliği bozmadan, saf metaller için  $f_e$  1 olarak alınabilir. Fakat alaşım sistemleri için  $f_e$ , alaşımın özellikleri ile belirlenmelidir.

Artık  $F(\rho)$ ,  $f(r)$  ve  $\phi(r)$ 'nin özelleştirilmiş fonksiyonel biçimlerine sahibiz. Şimdi parametrelerin belirlenmesi için fit metodunu kullanabiliriz.  $D_1, D_2, \alpha$  ve  $\beta$  parametreleri, hesaplanan ve deneysel termodinamik data arasındaki standart sapma (root-square deviation)  $\chi_{rms}$ 'i minimum yaparak belirlenir.

Ir, Rh, Sr, Ca ve Pb metalleri için deneysel veri, üç elastik sabitleri ( $C_{11}, C_{12}$  ve  $C_{44}$ ), boşluk oluşturma enerjisi ( $E_v^f$ ), denge örgü sabiti ( $a_0$ ) ve kohesif enerji ( $E_c$ )'den

ibarettir. Fit işleminde ve EAM ile yaptığımız kararlılık hesaplarında  $r_{kes}=1.65a_o$  olarak alındı. Parametrize edilen kullanılan deneysel verilerle birlikte fit sonuçları ve potansiyel parametreleri Çizelge 3.1.'de verildi.

Çizelge 3.1. Fit işleminde kullanılan metal özellikleri ve parametrize sonuçları  
<sup>a</sup>:[31], <sup>b</sup>:[32], <sup>c</sup>:[33], <sup>d</sup>:[34], <sup>e</sup>:[35].

	Ir	Sr	Ca	Pb	Rh
	( $m=2,n=0$ )	( $m=5,n=0.1$ )	( $m=6,n=0.2$ )	( $m=6,n=0.2$ )	( $m=5,n=0.2$ )
$a_o(A^0)$	3,840 3,839 <sup>a</sup>	6,050 6,085 <sup>a</sup>	5,517 5,582 <sup>a</sup>	4,899 4,950 <sup>a</sup>	3,746 3,804 <sup>a</sup>
$E_c(eV)$	6,936 6,94 <sup>a</sup>	1,70 1,72 <sup>a</sup>	1,82 1,84 <sup>a</sup>	2,029 2,030 <sup>a</sup>	5,76 5,75 <sup>a</sup>
$C_{11}(\text{erg/cm}^3)$	599,38 599,41 <sup>b</sup>	15,28 15,3 <sup>b</sup>	0,280 0,278 <sup>b</sup>	0,494 0,488 <sup>b</sup>	422,0 422,0 <sup>b</sup>
$C_{12}(\text{erg/cm}^3)$	255,87 255,82 <sup>b</sup>	10,32 10,3 <sup>b</sup>	0,178 0,182 <sup>b</sup>	0,405 0,414 <sup>b</sup>	191,94 192,0 <sup>b</sup>
$C_{44}(\text{erg/cm}^3)$	268,76 268,80 <sup>b</sup>	9,95 9,9 <sup>b</sup>	0,158 0,163 <sup>b</sup>	0,148 0,148 <sup>b</sup>	194,16 194,0 <sup>b</sup>
$E_v^f (eV)$	1,794 1,80 <sup>c</sup>	0,662 0,66 <sup>d</sup>	0,615 0,61 <sup>e</sup>	0,595 0,580 <sup>d</sup>	1,905 1,90 <sup>d</sup>
Potansiyel Parametreleri					
$\alpha(A^0)^{-1}$	1,10075	0,96799	0,95468	3,41539	1,53740
$\beta$	8,43940	3,20567	3,21758	3,16860	4,15840

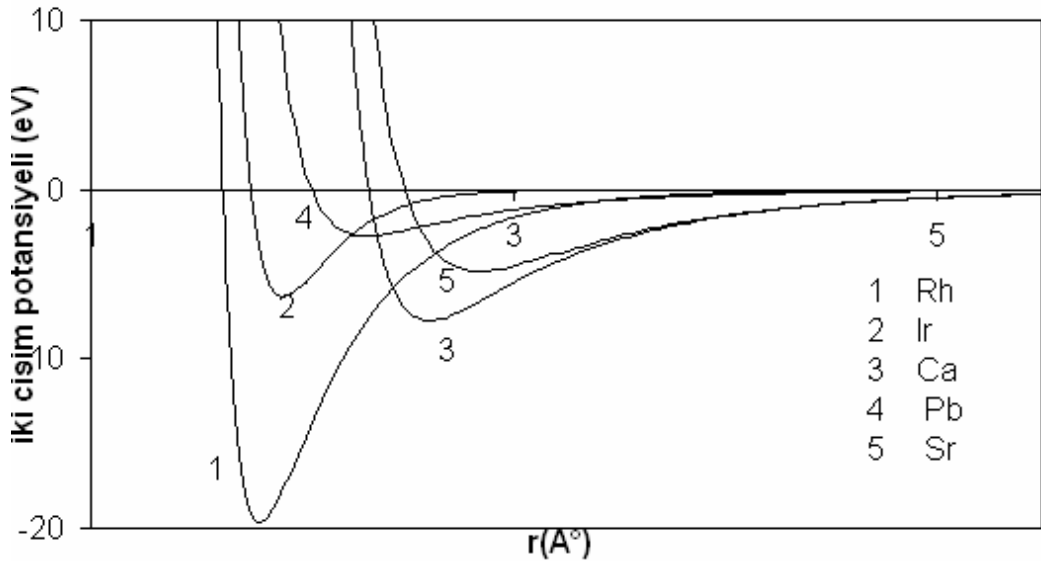
Çizelge 3.1. (Devam) Fit işleminde kullanılan metal özellikleri ve parametrize sonuçları <sup>a</sup>:[31], <sup>b</sup>:[32], <sup>c</sup>:[33], <sup>d</sup>:[34], <sup>e</sup>:[35].

$D_1(eV)$	0,31644	0,12554	0,17342	0,06053	0,49840
$D_2(eV)$	0,17470	0,67880	1,50171	0,16358	3,61190

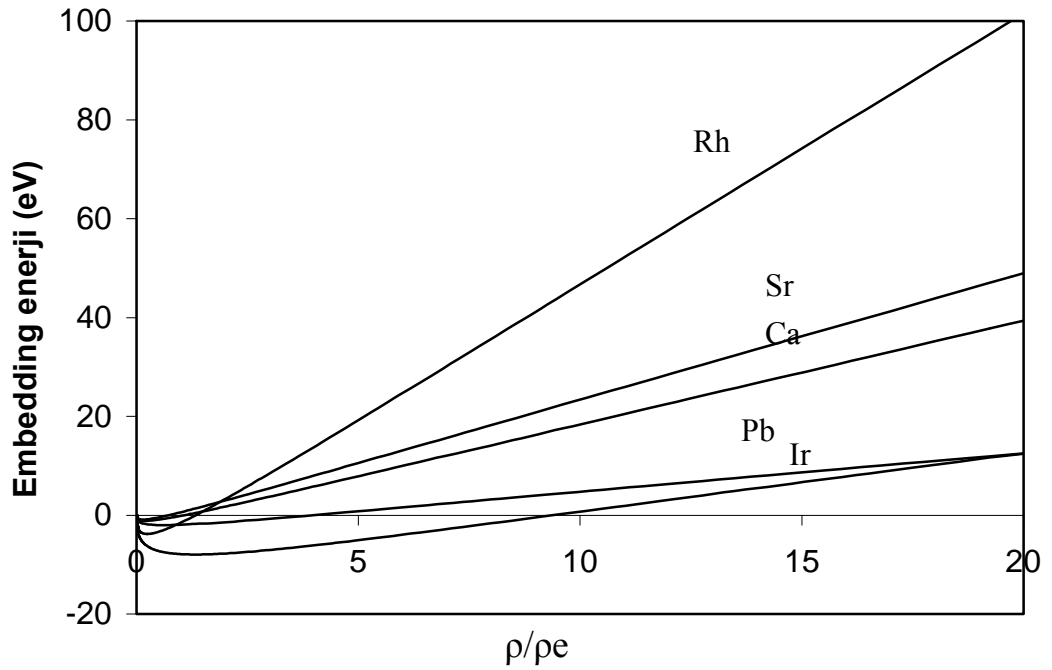
Çizelge 3.1.'den görüldüğü gibi örgü sabiti ve kohesif enerji için uyum çok iyidir. Deneysel değerler ve hesaplanan sonuçlar bütün metaller için tamamen uyumludur. Boşluk oluşturma enerjisi ( $E_v^f$ ) için de uyum oldukça iyidir.

Çalıştığımız 5 tane fcc metal için (Ir, Sr, Ca, Rh ve Pb) Şekil 3.1.a'da embedded atom potansiyelindeki ikili etkileşim potansiyeli  $\phi(r)$ 'nin  $r/r_e$  ile değişimleri gösterilmiştir. Şekil 3.1.(b), embedding enerjinin  $\rho/\rho_e$  ile değişimini göstermektedir. Şekilde görüldüğü gibi, iki-cisim potansiyeli uzun erişim etkileşmelerini içerir ve bu modelde embedding enerjinin biçiminin genel karakteri “first principles” hesaplarında olan ile aynıdır [6,14]. Öyle ki, embedding enerjide bir minimum gözlenir ve daha sonra çokluk elektron yoğunluğu  $\rho$  ile monoton olarak artar. Diğer bir söyleyişle embedding enerji, mevcut potansiyel modelinde beklenildiği gibi pozitif bir eğime sahiptir.

Baskes yöne bağlı ilişkiyi (açısal kuvvet) dahil etmek için en-yakın komşuluk EAM modelini genişletti, fakat model oldukça karmaşıktır [26]. Bu modelde EAM modeli basittir ve uzun- erişimli kuvveti de içerir.



(a)

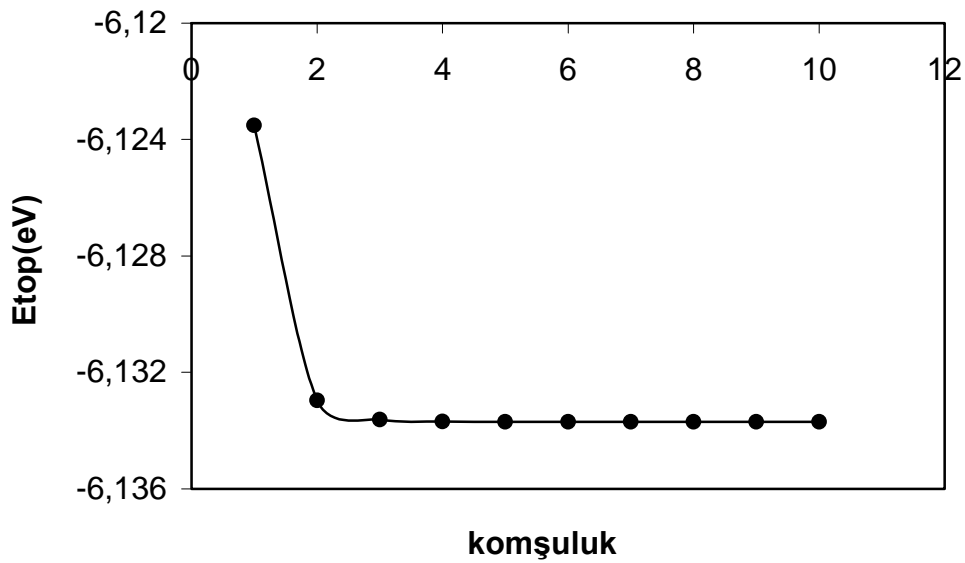


(b)

Şekil 3.1. a) EAM için iki cisim potansiyeli. b)EAM için Embedding Enerji

Genellikle, bilgisayar simülasyonlarında, atomik koordinatlara göre potansiyel fonksiyonu ve birinci türevi sistemin bütün geometrisinde sürekli olmalıdır. Bu durum, atomik elektron yoğunluğu  $f(r)$ , ikili etkileşim potansiyeli  $\phi(r)$  ve bunların

birinci türevleri olan  $f'(r)$  ve  $\phi'(r)$  nin kesilme (cutoff) fonksiyonu kullanarak bu uzaklıkta, düzgün bir şekilde sifira gitmesi sağlanarak elde edilir. Biz yalnızca uzun-erişim etkileşmelerini düşündük. Beşinci ve altıncı komşulukların arasına düşen  $r_{kes}=1.65a_o$ 'ı kesilme mesafesi olarak alındığında, 5 metal için de beşinci komşuluktaki enerjinin toplam enerjiye oranı %0,05 'den daha küçüktür. Böylece biz %0.05 lik hata içinde potansiyelin düzgün bir şekilde sifira gittiğine inanıyoruz.



Şekil 3.2. Ir için komşuluk mesafesinin fonksiyonu olarak toplam enerji

Ir'un toplam enerjisi, en yakın komşuluk mesafesinin fonksiyonu olarak Şekil 3.2.'de görüldüğü gibi toplam enerji beşinci komşuluktan itibaren sabitleşmektedir.

### 3.3 Elastik Kararlılık İçin Born Kriterleri

Kristalin termodinamik olarak kararlı olması için gerekli şartlar, kristalin keyfi fakat küçük homojen deformasyon altında mekaniksel olarak (veya elastik olarak) kararlı olmasıdır. Bu şartlar Born kriterleri olarak bilinir [7]. Bu kriterler kullanılarak, kübik örgünün teoriksel kararlılığı ve elastik kararsızlığı (instability) incelenebilir.

Bilindiği gibi [100] yönünde bir dış kuvvetin uygulanması ile kübik örgü homojen şekilde deforme olduğu zaman, kararlılık  $\{a_i, i=1,2,\dots,6\}$  değişkenleri ile belirlenir. Burada  $a_1, a_2, a_3$  kübik örgünün birim hücresinin üç kenarının uzunluğu,  $a_4, a_5$  ve  $a_6$  ise bu kenarlar arasındaki açıdır. Elastik kararlılık için gerekli şartlar

$$\begin{aligned} C_{55} > 0, \quad C_{44} > 0, \quad C_{22} > 0 \\ C_{22}^2 - C_{23}^2 > 0, \quad C_{11}(C_{22} + C_{23}) - 2C_{12}^2 > 0 \end{aligned} \quad (3.8)$$

olarak yazılabilir. Burada  $C_{ij}$  elastik sabitlerini temsil eder. Born ve Milstein elastik sabitlerini ikili etkileşim potansiyeli ile tanımladılar [7,9,11]. Bu çalışmada, atomlar arasındaki etkileşme için EAM potansiyelini kullanıyoruz.

$a_i$  boyunca uygulanan stres:

$$\sigma_i = \frac{n}{a_j a_k} \frac{\partial E}{\partial a_i} = \frac{a_i}{V} \frac{\partial E}{\partial a_i} \quad i = 1,2,3 \quad (i \neq j \neq k) \quad (3.9)$$

dir [27]. Burada  $n$ , birim hücre başına atom sayısıdır ve b.c.c. için 2, f.c.c. için 4 tür.  $V$  atom başına son durumdaki hacimdir. EAM'de,  $E$  toplam enerji Eş. 3.1. olmak üzere

$$\frac{\partial E}{\partial a_i} = F' \sum f' \frac{\partial r^2}{\partial a_i} + \frac{1}{2} \sum \phi' \frac{\partial r^2}{\partial a_i} \quad (3.10)$$

dir. Burada,  $F' = \frac{dF}{d\rho}$ ,  $f' = \frac{df}{dr^2}$ ,  $\phi' = \frac{d\phi}{dr^2}$  ve  $\frac{d}{dr^2} = \left(\frac{1}{2r}\right) \frac{d}{dr}$  alınmıştır.

Orijindeki atom ve l. atomunu birbirine bağlayan vektör;

$$\vec{r}_i = \frac{1}{2}(l_1 \vec{a}_1 + l_2 \vec{a}_2 + l_3 \vec{a}_3) \quad (3.11)$$



olarak yazılabilir. Burada  $l_1$ ,  $l_2$  ve  $l_3$  atom koordinatlarıdır. Yük altındaki kristal için birim hücrenin kenarlarını belirleyen vektör  $a_1$ ,  $a_2$  ve  $a_3$  aynı zamanda kristal yapıyı belirler. Pratikte bilgisayar algoritması  $l_1$ ,  $l_2$  ve  $l_3$  'ün setini uygun yapı ve yükleme modu altında seçer. [100] yükü altında f.c.c. kristal için  $l_1+l_2+l_3$  toplamı çifttir. Eş. 3.11 den,

$$r^2 = \frac{1}{4}(l_1^2 a_1^2 + l_2^2 a_2^2 + l_3^2 a_3^2 + 2l_2 l_3 a_2 a_3 \cos a_4 + 2l_1 l_3 a_1 a_3 \cos a_5 + 2l_1 l_2 a_1 a_2 \cos a_6) \quad (3.1)$$

yazılabilir. Böylece  $i=1, 2$  veya  $3$  için,  $\frac{\partial r^2}{\partial a_i} = \frac{1}{2} a_i l_i^2$  ve  $a_4=a_5=a_6=90^\circ$  olduğundan

$$\frac{\partial E}{\partial a_i} = \frac{a_i}{2} F' \sum f' l_i^2 + \frac{a_i}{4} \sum \phi' l_i^2 \quad (3.13)$$

olur. Buradan zor (stress)

$$\sigma_i = \frac{n a_i}{2 a_j a_k} \left\{ F' \sum l_i^2 f' + \frac{1}{2} \sum l_i^2 \phi' \right\} \quad (3.14)$$

olur.  $a_1$  boyunca uygulanan zor ise

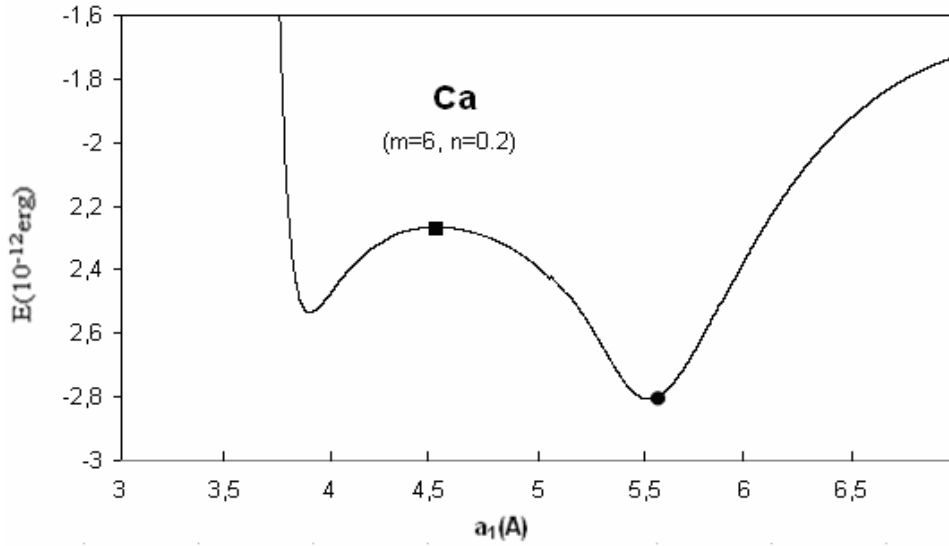
$$\sigma_1 = \frac{n a_1}{2 a_2 a_3} \left\{ F' \sum l_1^2 f' + \frac{1}{2} \sum l_1^2 \phi' \right\} \quad (3.15)$$

dir. Böylece  $\sigma_1$  zoru Eş. 3.15'den faydalanarak hesaplanır. Yüklemenin her aşamasında ( yani örgü parametresinin seçilen her değeri için) iterasyon süreci,  $a_2$  ve  $a_3$ 'ün değerini belirlemek için kullanılır ve gerekli sayısal doğruluk sınırı içinde,

$$\frac{\partial E}{\partial a_2} = \frac{\partial E}{\partial a_3} = 0 \quad \text{şartı sağlanarak bulunur. Bu şekilde hesaplanan örgü}$$

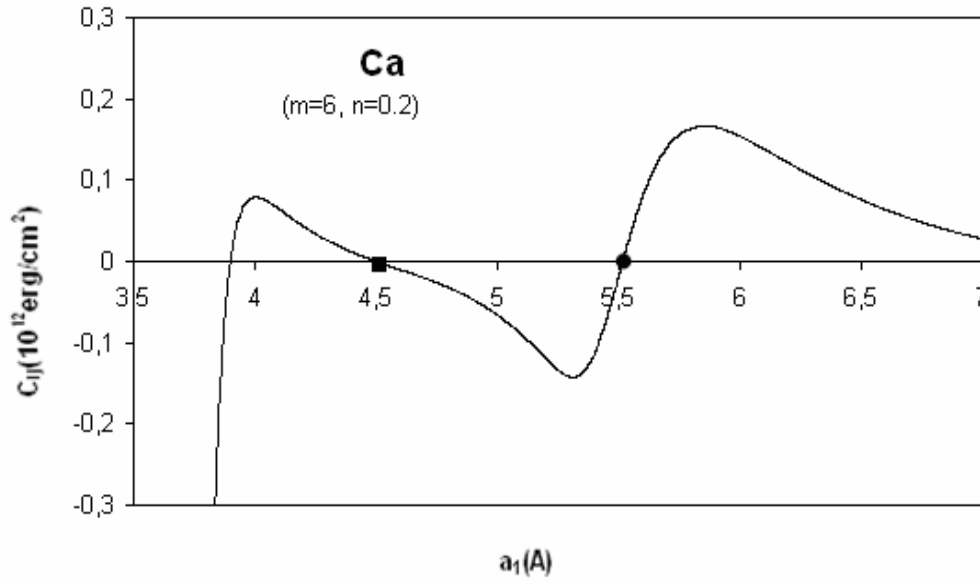
parametrelerinin değerleri kullanılarak  $a_1$  örgü parametresinin fonksiyonu olarak Eş.

3.1'den toplam enerji, Eş.3.15'den zor hesaplandı ve Şekil 3.3. – Şekil 3.7. arasında gösterildi. Bu hesaplamalarda enerji ve ilk iki türevi sürekli olmalıdır, öyleki kesilme( cut-off) mesafesi  $r_{kes}$ 'de bunların değerleri sıfır olmalıdır veya en azından sıfıra yaklaşmalıdır. Bu bölümde uzun-erişimli kuvvet düşünüldüğü için, bu şartlar sağlanır. Enerji eğrileri, daire ve kare ile belirlenmiş noktalara sahiptir. Daire ile gösterilen nokta ilk minimuma karşılık gelir, kare ile gösterilen nokta ise, ikinci mertebe türevin  $a_1$ 'e göre işaret değiştirdiği büküm noktasındaki enerjiye karşılık gelir. Daire ile gösterilen nokta f.c.c. yapının başlangıç denge durumunu, kare ise, stres uygulanmamış durumda b.c.c. fazı gösterir. Çünkü bu durumda  $a_1 = (a_2=a_3) / \sqrt{2}$  dir (Bilindiği gibi kristal b.c.c. durumda olduğu zaman f.c.t. tanımındaki örgü parametresi  $a_1=a_2/\sqrt{2}$  bağıntısını sağlar). Aynı faz değişiklikleri stres eğrilerinde de kare ve daire ile gösterilmiştir. Hesapladığımız bütün metaller için enerji eğrilerinden görüleceği gibi, f.c.c. faz kararlı olarak tahmin edilir. Buna rağmen b.c.c. faz kararsız (unstable) olmaktadır.



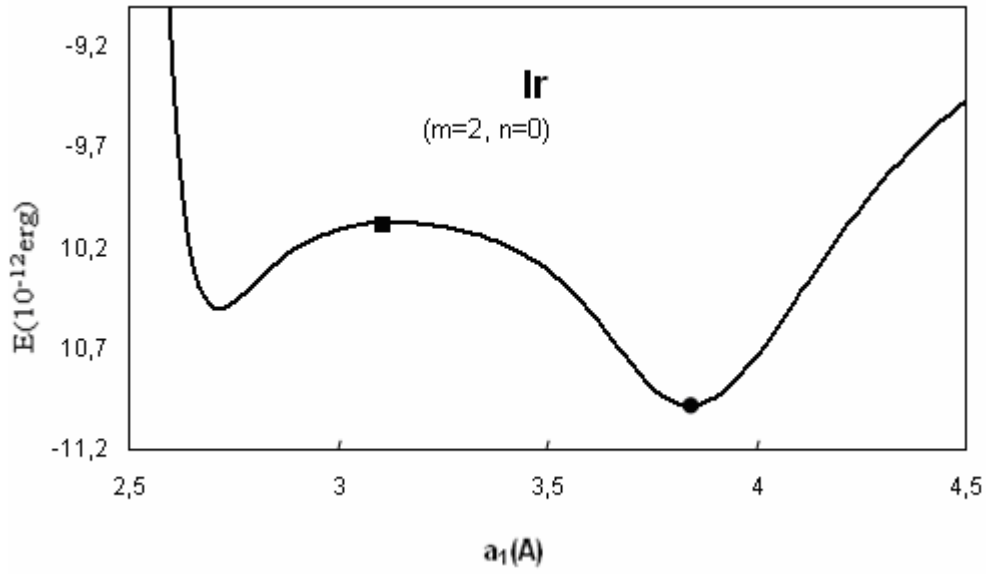
(a)

Şekil 3.3. a) Ca için  $a_1$  'in fonksiyonu olarak toplam enerjinin değişimi. b) Ca için  $a_1$  'in fonksiyonu olarak zorun değişimi



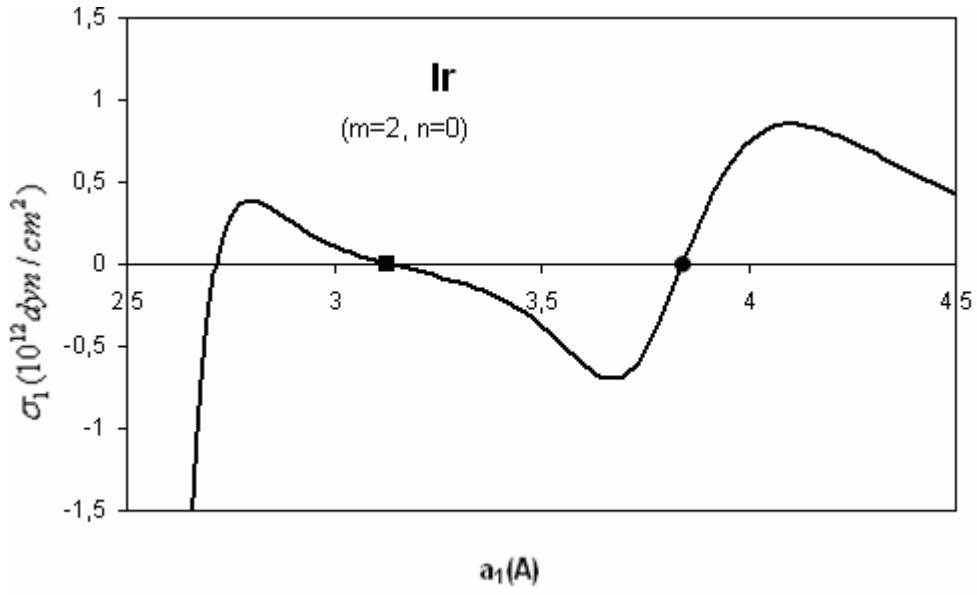
(b)

Şekil 3.3. (Devam) a) Ca için  $a_1$  'in fonksiyonu olarak toplam enerjinin değişimi. b) Ca için  $a_1$  'in fonksiyonu olarak zorun değişimi



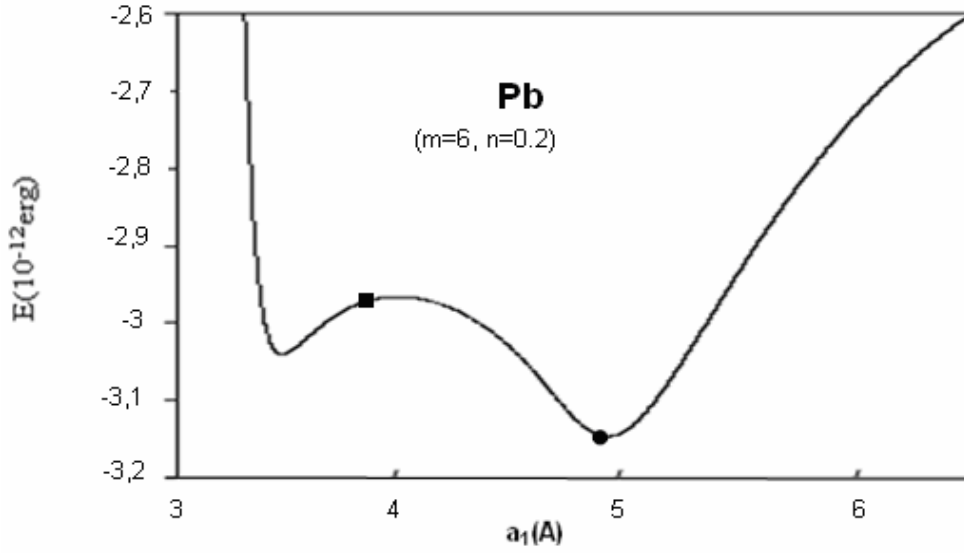
(a)

Şekil 3.4. a) Ir için  $a_1$  'in fonksiyonu olarak toplam enerjinin değişimi. b) Ir için  $a_1$  'in fonksiyonu olarak zorun değişimi



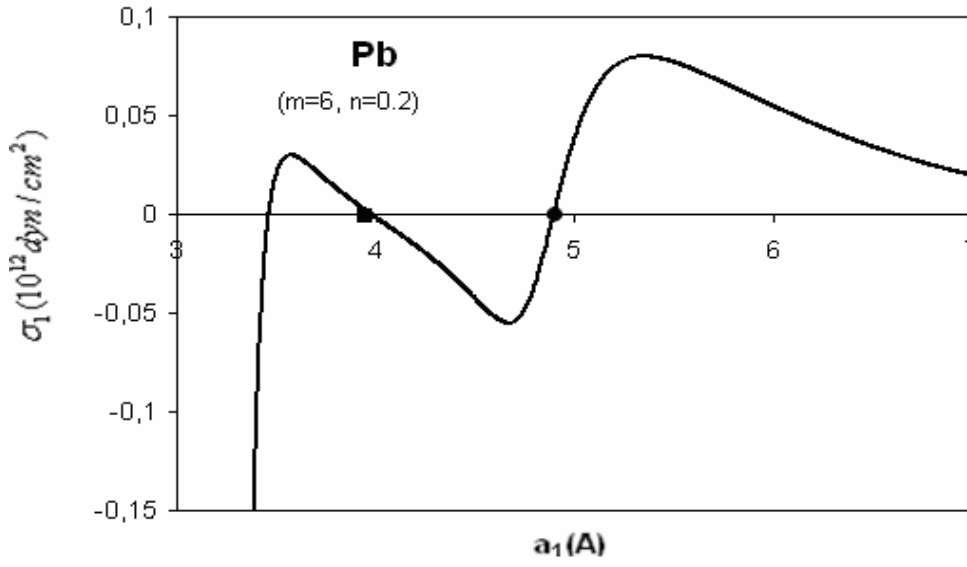
(b)

Şekil 3.4. (Devam) a) Ir için  $a_1$  'in fonksiyonu olarak toplam enerjinin değişimi. b) Ir için  $a_1$  'in fonksiyonu olarak zorun değişimi



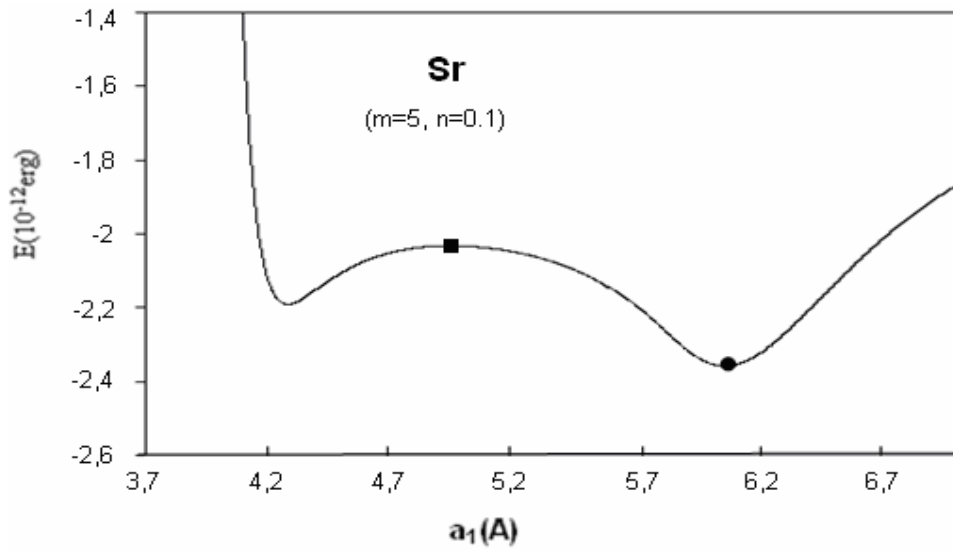
(a)

Şekil 3.5. a) Pb için  $a_1$  'in fonksiyonu olarak toplam enerjinin değişimi. b) Pb için  $a_1$  'in fonksiyonu olarak zorun değişimi



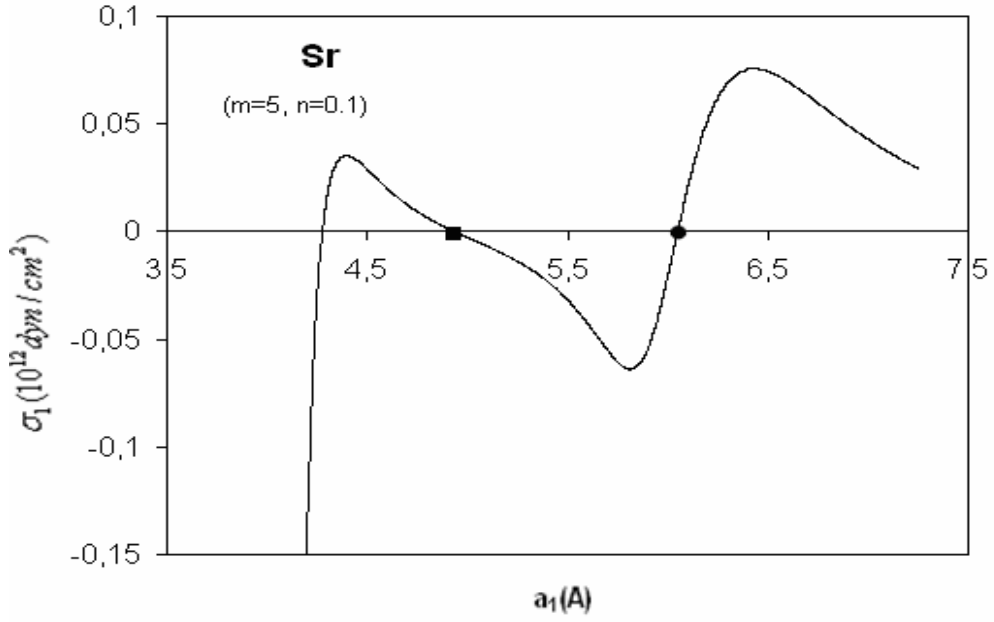
(b)

Şekil 3.5. (Devam) a) Pb için  $a_1$  'in fonksiyonu olarak toplam enerjinin değişimi. b) Pb için  $a_1$  'in fonksiyonu olarak zorun değişimi



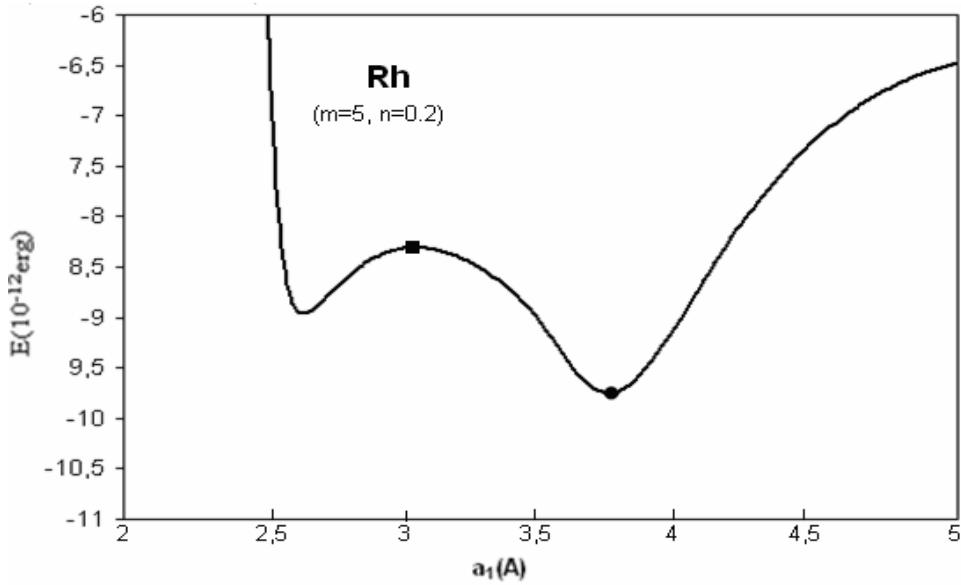
(a)

Şekil 3.6. a) Sr için  $a_1$  'in fonksiyonu olarak toplam enerjinin değişimi. b) Sr için  $a_1$  'in fonksiyonu olarak zorun değişimi



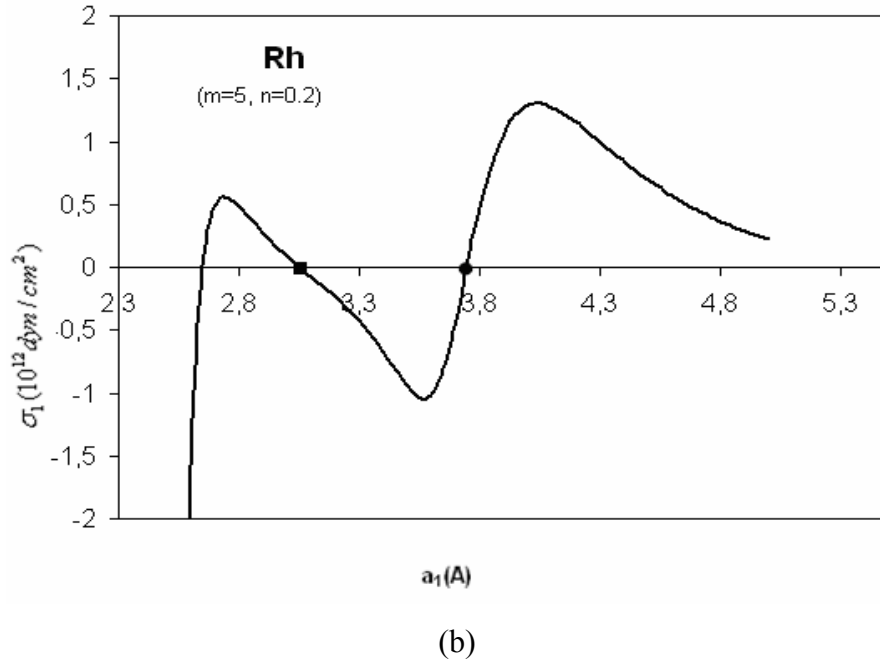
(b)

Şekil 3.6. (Devam) a) Sr için  $a_1$  'in fonksiyonu olarak toplam enerjinin değişimi. b) Sr için  $a_1$  'in fonksiyonu olarak zorun değişimi



(a)

Şekil 3.7. a) Rh için  $a_1$  'in fonksiyonu olarak toplam enerjinin değişimi. b) Rh için  $a_1$  'in fonksiyonu olarak zorun değişimi



Şekil 3.7. (Devam) a) Rh için  $a_1$  'in fonksiyonu olarak toplam enerjinin değişimi.  
b) Rh için  $a_1$  'in fonksiyonu olarak zorun değişimi

Şekil 3.3-Şekil 3.7.b'de gösterilen zor eğrilerinden zorun ilk olarak pozitiften negatife geçtiği yerden  $\sigma_1$ 'in sıfır olduğu (kare ile gösterilen nokta)  $a_1$  değeri  $a_{bcc}$ , ikinci kez negatiften pozitifte geçtiği yerden  $\sigma_1$ 'in sıfır olduğu  $a_1$  değeri (daire ile gösterilen nokta)  $a_{fcc}$  olarak hesaplanmıştır.  $a_{bcc}$  ve  $a_{fcc}$  ye karşılık gelen birim hücre hacimleri  $V_{bcc}$  ve  $V_{fcc}$  ve enerji değerleri  $E_{bcc}$  ve  $E_{fcc}$  hesaplandı. Ayrıca f.c.c. ve b.c.c. fazdaki enerjiler arasındaki fark  $E_{fcc}-E_{bcc}$  hesaplandı ve sonuçlar Çizelge 3.2.'de gösterildi. Çizelgede \* ile gösterilen üçüncü bölümde deneysel değerleri göstermektedir. Çizelge 3.2.'den görüldüğü gibi EAM modelinden hesapladığımız  $a_{fcc}$  örgü sabiti ve  $E_{fcc}$  enerji ifadesi, deneysel değerlerle yaklaşık aynı çıkmıştır. Bu uyum, embedded-atom metodunun çok cisim etkileşmelerini hesaba katmasından kaynaklanmaktadır.

Çizelge 3.2. EAM ile b.c.c. ve f.c.c. fazdaki teorik örgü sabiti, atomik hacim, enerji ve enerji farkları (\*:Deney [28], [29], [31] )

Metal	$a_{bcc}$ ( $\text{A}^0$ )	$V_{bcc}$ ( $\text{A}^0$ ) <sup>3</sup>	$E_{bcc}$ ( $10^{-12}$ erg)	$a_{fcc}$ ( $\text{A}^0$ )	$V_{fcc}$ ( $\text{A}^0$ ) <sup>3</sup>	$E_{fcc}$ ( $10^{-12}$ erg)	$E_{fcc}-E_{bcc}$ ( $10^{-12}$ erg)
-------	-------------------------------	--	--------------------------------	-------------------------------	--	--------------------------------	--

Çizelge 3.2. (Devam) EAM ile b.c.c. ve f.c.c. fazdaki teorik örgü sabiti, atomik hacim, enerji ve enerji farkları (\*:Deney [28], [29], [31])

Ir	3,1313	15,3512	-10,0747	3,8401 3,8389*	14,1568	-10,9826 -11,104*	-0,9079
Sr	4,9333	60,0319	-2,0322	6,0500 6,0849*	55,3612	-2,3586 -2,752*	-0,3264
Ca	4,4996	45,5503	-2,2659	5,5171 5,5820*	41,9829	-2,8072 -2,944*	-0,5413
Pb	3,9777	31,4677	-2,9663	4,8999 4,9500*	29,4104	-3,1469 -3,248*	-0,1806
Rh	3,0509	14,1988	-8,3137	3,7461 3,8044*	13,1425	-9,7524 -9,200*	-1,4387

B.c.c. fazın kararlı olup olmadığını görmek için, elastik modüllerinin  $a_l$ 'in fonksiyonu olarak grafiği çizilir, kararlılık kriterlerinin sağlandığı bölgede b.c.c. fazdaki örgü sabitinin olup olmadığına bakılır. Elastik modülü kararlılık kriterlerinin özünü oluşturur. Yük altındaki potansiyel için elastik modülü, geometrik parametreler veya zorlanma (strain) değişkenleri  $q_r$ 'nin uygun seçimine göre iç enerji'nin ikinci türevi ile tanımlanır:

$$C_{rs} = \frac{\partial^2 E}{\partial q_r \partial q_s} \quad (3.16)$$

Buradan EAM için  $C_{ij}$ 'ler daha açıkça

$$C_{ij} = \frac{\partial^2 E}{\partial a_i \partial a_j} = (F'' \sum f' \frac{\partial r^2}{\partial a_i}) (\sum f' \frac{\partial r^2}{\partial a_j}) + F' \sum f'' \frac{\partial r^2}{\partial a_i} \frac{\partial r^2}{\partial a_j} + F' \sum f' \frac{\partial^2 r^2}{\partial a_i \partial a_j} + \frac{1}{2} \sum \phi'' \frac{\partial r^2}{\partial a_i} \frac{\partial r^2}{\partial a_j} + \frac{1}{2} \sum \phi' \frac{\partial^2 r^2}{\partial a_i \partial a_j} \quad (3.17)$$



şeklinde yazılabilir. Buna göre Eş. 3.17 ve Eş. 3.12'ye göre  $C_{ij}$  modülleri,

$$C_{11} = \frac{1}{4}a_1^2 F''(\sum l_1^2 f')(\sum l_1^2 f') + \frac{1}{4}a_1^2 F' \sum l_1^4 f'' + \frac{1}{2}F' \sum l_1^2 f' + \frac{1}{8}a_1^2 \sum l_1^4 \phi'' + \frac{1}{4} \sum l_1^2 \phi' \quad (3.18)$$

$$C_{22} = \frac{1}{4}a_2^2 F''(\sum l_2^2 f')(\sum l_2^2 f') + \frac{1}{4}a_2^2 F' \sum l_2^4 f'' + \frac{1}{2}F' \sum l_2^2 f' + \frac{1}{8}a_2^2 \sum l_2^4 \phi'' + \frac{1}{4} \sum l_2^2 \phi' \quad (3.19)$$

$$C_{12} = \frac{1}{4}a_1 a_2 F''(\sum l_1^2 f')(\sum l_2^2 f') + \frac{1}{4}a_1 a_2 F' \sum l_1^2 l_2^2 f'' + \frac{1}{8}a_1 a_2 \sum l_1^2 l_2^2 \phi'' \quad (3.20)$$

$$C_{23} = \frac{1}{4}a_2^2 F''(\sum l_2^2 f')(\sum l_3^2 f') + \frac{1}{4}a_2 a_3 F' \sum l_2^2 l_3^2 f'' + \frac{1}{8}a_2^2 \sum l_2^2 l_3^2 \phi'' \quad (3.21)$$

$$C_{44} = \frac{1}{4}a_2^2 F' \sum l_2^2 l_3^2 f'' + \frac{1}{8}a_2^2 \sum l_2^2 l_3^2 \phi'' \quad (3.22)$$

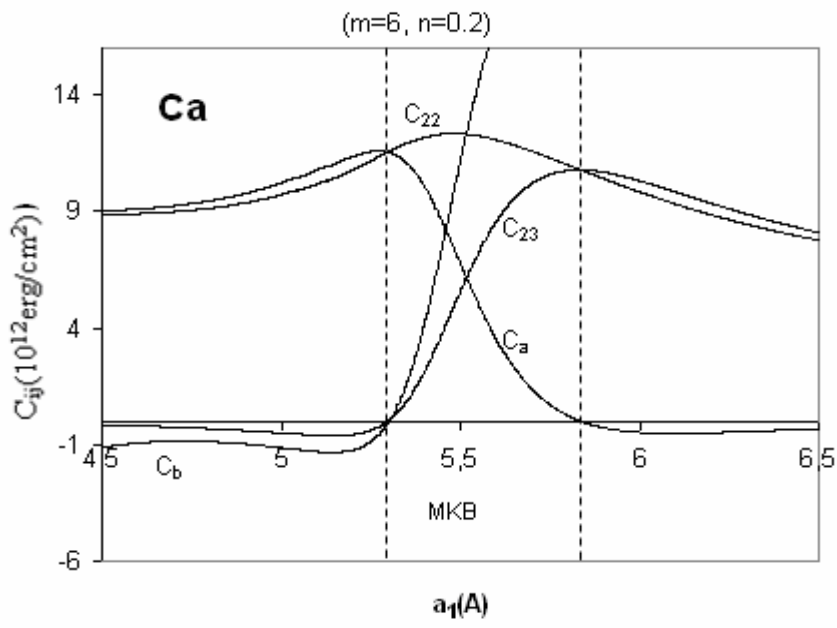
$$C_{55} = \frac{1}{4}a_1 a_2 F' \sum l_1^2 l_3^2 f'' + \frac{1}{8}a_1 a_2 \sum l_1^2 l_3^2 \phi'' \quad (3.23)$$

olur. Kısaltmak amacı ile

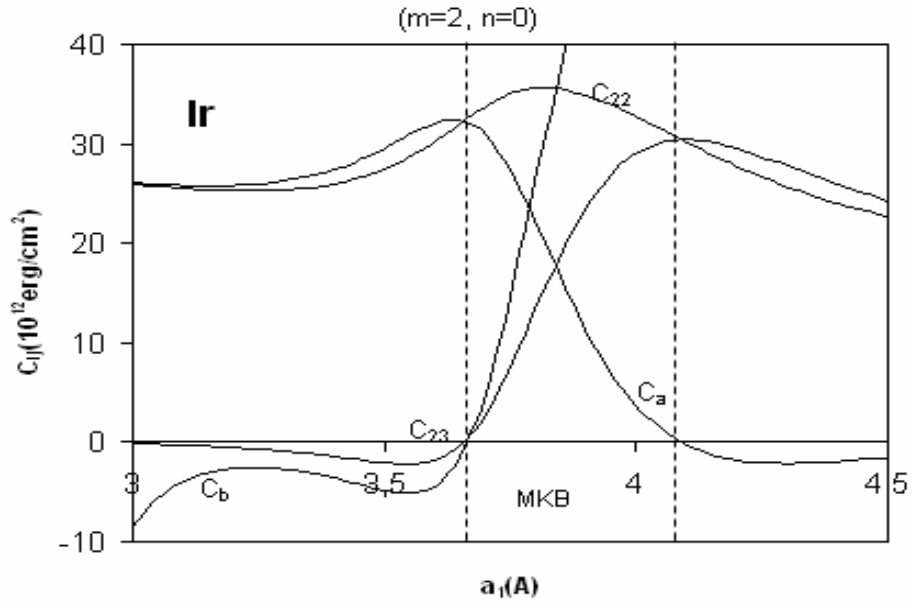
$$C_a = C_{22}^2 - C_{23}^2 \quad (3.24)$$

$$C_b = C_{11} + (C_{22} + C_{23}) - 2C_{12}^2 \quad (3.25)$$

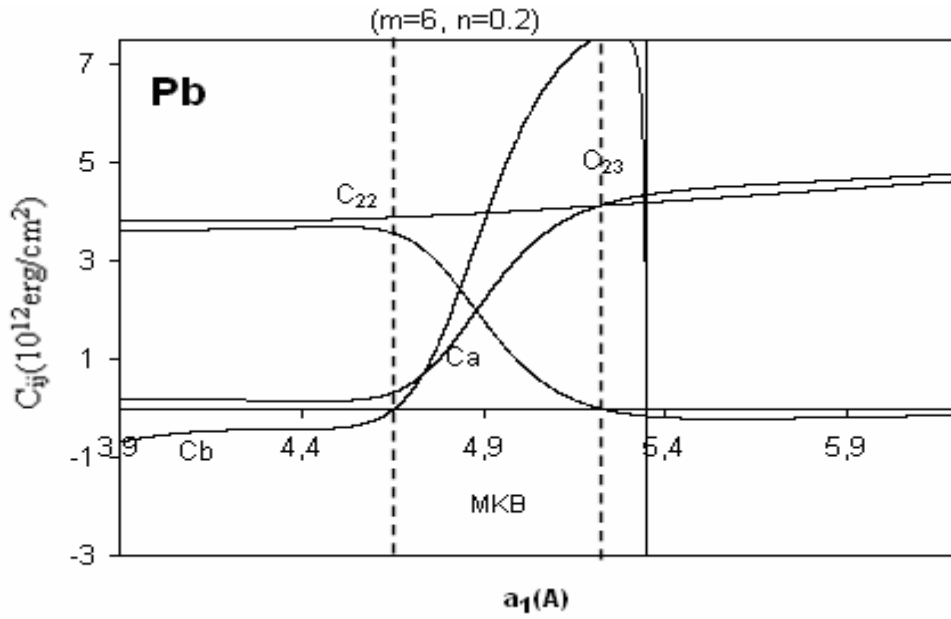
olarak yazılabilir. Ir, Rh, Sr, Ca ve Pb için  $C_{22}$ ,  $C_{23}$ ,  $C_{44}$ ,  $C_{55}$ ,  $C_a$  ve  $C_b$ ,  $a_l$ 'in fonksiyonu olarak Şekil 3.8- Şekil 3.12 arasında verildi.



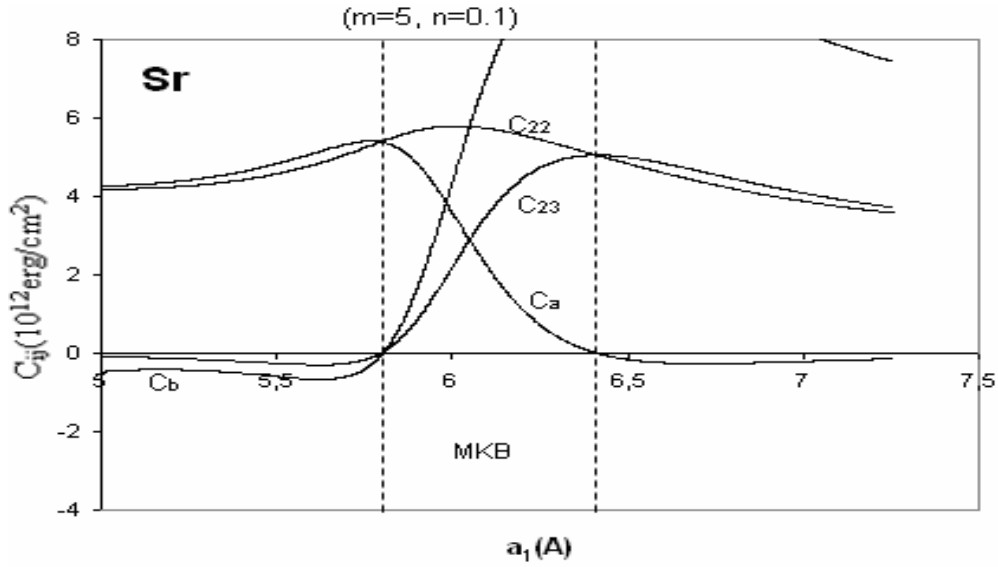
Şekil 3.8. Keyfi birimlerde Ca için  $C_{ij}$  elastik modüllerinin  $a_1$  ile değişimi



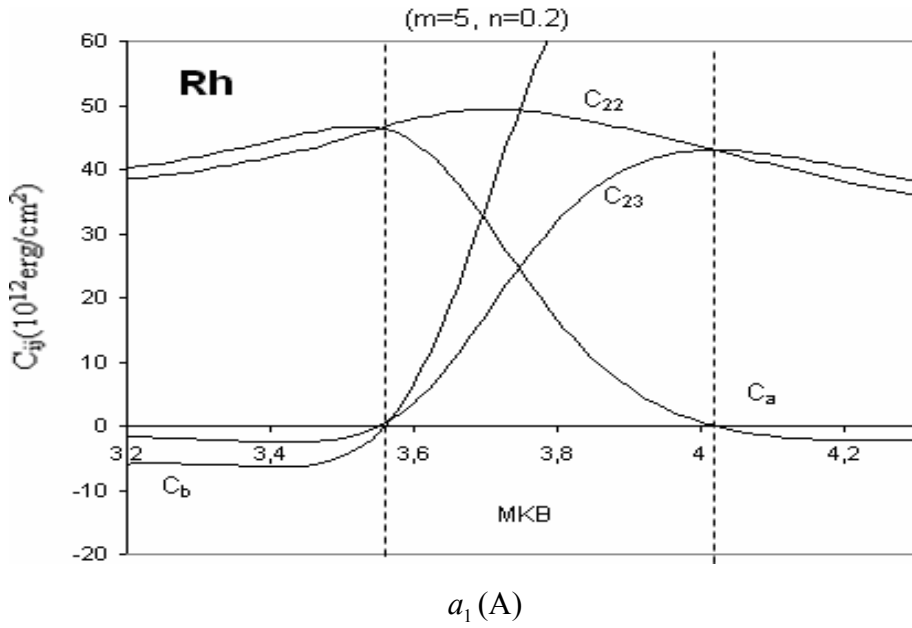
Şekil 3.9. Keyfi birimlerde Ir için  $C_{ij}$  elastik modüllerinin  $a_1$  ile değişimi



Şekil 3.10. Keyfi birimlerde Pb için  $C_{ij}$  elastik modüllerinin  $a_1$  ile değişimi



Şekil 3.11. Keyfi birimlerde Sr için  $C_{ij}$  elastik modüllerinin  $a_1$  ile değişimi



Şekil 3.12. Keyfi birimlerde Rh için  $C_{ij}$  elastik modüllerinin  $a_1$  ile değişimi

EAM ile hesapladığımız  $C_{ij}$  elastik modülündeki  $C_a > 0$  ve  $C_b > 0$  kararlılık kriterlerinin bozulduğu  $a_1$  ve  $a_2 = a_3$  hücre uzunluklarının değerleri ve bu noktadaki  $\sigma_1$  zor değeri (teoriksel kararlılık) Çizelge 3.3.'de verildi.

Çizelge 3.3. EAM ile, sıkışma ve gerilme durumunda, kararsızlığın başlangıç noktasındaki  $a_1, a_2 (= a_3)$  hücre uzunluklarının değeri (MKB) ve bu noktalardaki  $\sigma_1$  zor değerleri (teorik kararlılık) [22]

MKB						
Gerilme Bozulması			Sıkışma Bozulması			
$C_a$			$C_b$			
Metal	$a_1(A^0)$	$a_2(A^0)$	$\sigma_1(\text{GPa})$	$a_1(A^0)$	$a_2(A^0)$	$\sigma_1(\text{GPa})$
Ir	4,089	3,808	0,851	3,664	3,948	-0,702
Sr	6,412	6,008	0,075	5,802	6,207	-0,063

Çizelge 3.3. (Devam) EAM ile, sıkışma ve gerilme durumunda, kararsızlığın başlangıç noktasındaki  $a_1, a_2 (=a_3)$  hücre uzunluklarının değeri (MKB) ve bu noktadaki  $\sigma_1$  zor değerleri (teorik kararlılık) [22]

Ca	5,835	5,481	0,165	5,302	5,655	-0,142
Pb	5,218	4,851	0,076	4,658	5,054	-0,054
Rh	4,018	3,714	1,299	3,559	3,863	-1,050

Çizelge 3.2. ve Çizelge 3.3.'ü örnek olarak Ir için yorumlarsak, gerilme durumunda örgü parametresi  $a_1$  4.089A'dan daha büyük olduğunda  $C_a = C_{22}^2 - C_{23}^2$  ilk olarak negatif olmakta, sıkışma durumunda  $a_1$  3.664A'dan daha küçük olduğu zaman  $C_b = C_{11}(C_{22} + C_{23}) - 2C_{12}^2 > 0$  ilk olarak bozulmaktadır. [100] yönündeki yük altında kristalin elastik kararlılık şartları uygulandığında EAM'ye göre elastik kararlılık bölgesi 3.664A- 4.089A aralıklı örgü parametresinin değişim aralığına karşılık gelir. Bu sonuçlara göre EAM hesaplarındaki MKB-I aralığı daha geniştir. F.c.c. faz MKB-I'e düşer, b.c.c. faz ise kararlılık bölgesine düşmez. Böylece mekaniksel kararlılık bakış açısından, f.c.c faz kararlıdır fakat b.c.c. faz EAM için kararlı değildir. Bizim kullandığımız EAM modelinde hesapladığımız bütün metaller için enerji eğrilerine f.c.c. faz birinci minimuma, b.c.c. faz enerjinin yerel maksimumunda, f.c.t. faz ise ikinci minimuma karşılık gelir. Böylece f.c.c. ve f.c.t. faz kararlı iken b.c.c. faz kararsız olur. Aynı durum, elastik modülü hesaplarından da görülmektedir.

Born'a göre teorik kararlılık, deforme olmuş kristal elastik kararlılık sınırlarında kaldığında, stresin maksimum değeri olarak tanımlanır. Sayısal sonuçlar özetlenmiştir. Stresin küçük artımı aşağıdaki formülle ifade edilebilir [9, 11]:

$$\Delta\sigma_1 = [(C_{11} - 2C_{12}^2)/(C_{22} + C_{23})]\Delta a_1 \quad (3.26)$$

Burada  $\Delta a_1$ ,  $a_1$  örgü parametresindeki küçük artımı gösterir. Yukarıdaki bağıntıdan  $\sigma_1$ 'in, Eş 3.26'deki gibi elastik modüllerine bağlı olarak hesaplanabileceğini gösterir. Elastik modülü'nün  $a_1$  ile değişimi eğrilerinden görüldüğü gibi, teorik kararlılık  $C_a$ 'nın sıfır olduğu duruma karşılık gelir. Böylece teorik kararlılık tam olarak ikili etkileşim potansiyeli veya çok cisim potansiyeli ile hesaplanan  $C_{11}$ ,  $C_{22}$ ,  $C_{12}$  ve  $C_{23}$  değerlerine sadece bağlıdır.

#### 4. EMBEDDED- ATOM METODUNA GÖRE ÜÇÜNCÜ- MERTEBEDEN ELASTİK SABİTLERİ

Bu bölümde, EAM tekniği ile bazı f.c.c. metallerin üçüncü merteye elastik sabitleri hesaplanmıştır. Kübik simetrlili kristal için 6 tane bağımsız üçüncü merteye elastik sabiti vardır. Bunlar ;  $C_{111}$ ,  $C_{112}$ ,  $C_{123}$ ,  $C_{144}$ ,  $C_{166}$  ve  $C_{456}$  dir.

EAM modelinde ikinci- ve üçüncü- merteye elastik sabitler, Chantasiriwan ve Milstein'i izleyerek

$$\begin{aligned} \Omega_0 C_{IJ} = & F'' \left( \sum \frac{X_I f'}{r} \right) \left( \sum \frac{X_J f'}{r} \right) + F' \left( \sum \frac{X_I X_J}{r^2} \right) \left( f'' - \frac{f'}{r} \right) \\ & + \frac{1}{2} \left( \sum \frac{X_I X_J}{r^2} \right) \left( \phi'' - \frac{\phi'}{r} \right) \end{aligned} \quad (4.1)$$

$$\begin{aligned} \Omega_0 C_{IJK} = & F''' \left( \sum \frac{X_I f'}{r} \right) \left( \sum \frac{X_J f'}{r} \right) \left( \sum \frac{X_K f'}{r} \right) + F'' \left( \sum \frac{X_I f'}{r} \right) \left[ \sum \frac{X_J X_K}{r^2} \left( f'' - \frac{f'}{r} \right) \right] \\ & + F'' \left( \sum \frac{X_J f'}{r} \right) \left[ \sum \frac{X_I X_K}{r^2} \left( f'' - \frac{f'}{r} \right) \right] + F'' \left( \sum \frac{X_K f'}{r} \right) \left[ \sum \frac{X_I X_J}{r^2} \left( f'' - \frac{f'}{r} \right) \right] \\ & + F' \sum \frac{X_I X_J X_K}{r^3} \left( f''' - 3 \frac{f''}{r} + 3 \frac{f'}{r^2} \right) + \frac{1}{2} \sum \frac{X_I X_J X_K}{r^3} \left( \phi''' - 3 \frac{\phi''}{r} + 3 \frac{\phi'}{r^2} \right) \end{aligned} \quad (4.2)$$

şeklinde yazılabilir [30]. Burada (') üstleri sırasıyla  $F$  ve  $f$  fonksiyonlarının  $\rho$  ve  $r$ 'ye göre türevlerini temsil eder. Buradan kübik simetrlili kristal için, 6 bağımsız üçüncü merteye elastik sabitleri için

$$\begin{aligned} \Omega_0 C_{111} = & F''' \left( \sum \frac{x_1^2 f'}{r} \right)^3 + 3F'' \left( \sum \frac{x_1^2 f'}{r} \right) \left[ \sum \frac{x_1^4}{r^2} \left( f'' - \frac{f'}{r} \right) \right] \\ & + F' \sum \frac{x_1^6}{r^3} \left( f''' - 3 \frac{f''}{r} + 3 \frac{f'}{r^2} \right) + \frac{1}{2} \sum \frac{x_1^6}{r^3} \left( \phi''' - 3 \frac{\phi''}{r} + 3 \frac{\phi'}{r^2} \right) \end{aligned} \quad (4.3)$$

$$\begin{aligned}
\Omega_0 C_{112} &= F''' \left( \sum \frac{x_1^2 f'}{r} \right)^3 + F'' \left( \sum \frac{x_1^2 f'}{r} \right) \left[ \sum \frac{x_1^4}{r^2} \left( f'' - \frac{f'}{r} \right) \right] \\
&+ 2F'' \left( \sum \frac{x_1^2 f'}{r} \right) \left[ \sum \frac{x_1^2 x_2^2}{r^2} \left( f'' - \frac{f'}{r} \right) \right] + F' \sum \frac{x_1^4 x_2^2}{r^3} \left( f''' - 3 \frac{f''}{r} + 3 \frac{f'}{r^2} \right) \\
&+ \frac{1}{2} \sum \frac{x_1^4 x_2^2}{r^3} \left( \phi''' - 3 \frac{\phi''}{r} + 3 \frac{\phi'}{r^2} \right)
\end{aligned} \quad (4.4)$$

$$\begin{aligned}
\Omega_0 C_{123} &= F''' \left( \sum \frac{x_1^2 f'}{r} \right)^3 + 3F'' \left( \sum \frac{x_1^2 f'}{r} \right) \left[ \sum \frac{x_1^2 x_2^2}{r^2} \left( f'' - \frac{f'}{r} \right) \right] \\
&+ F' \sum \frac{x_1^2 x_2^2 x_3^2}{r^3} \left( f''' - 3 \frac{f''}{r} + 3 \frac{f'}{r^2} \right) + \frac{1}{2} \sum \frac{x_1^2 x_2^2 x_3^2}{r^3} \left( \phi''' - 3 \frac{\phi''}{r} + 3 \frac{\phi'}{r^2} \right)
\end{aligned} \quad (4.5)$$

$$\begin{aligned}
\Omega_0 C_{144} &= F'' \left( \sum \frac{x_1^2 f'}{r} \right) \left[ \sum \frac{x_1^2 x_2^2}{r^2} \left( f'' - \frac{f'}{r} \right) \right] + F' \sum \frac{x_1^2 x_2^2 x_3^2}{r^3} \left( f''' - 3 \frac{f''}{r} + 3 \frac{f'}{r^2} \right) \\
&+ \frac{1}{2} \sum \frac{x_1^2 x_2^2 x_3^2}{r^3} \left( \phi''' - 3 \frac{\phi''}{r} + 3 \frac{\phi'}{r^2} \right)
\end{aligned} \quad (4.6)$$

$$\begin{aligned}
\Omega_0 C_{166} &= F'' \left( \sum \frac{x_1^2 f'}{r} \right) \left[ \sum \frac{x_1^2 x_2^2}{r^2} \left( f'' - \frac{f'}{r} \right) \right] + F' \sum \frac{x_1^4 x_2^2}{r^3} \left( f''' - 3 \frac{f''}{r} + 3 \frac{f'}{r^2} \right) \\
&+ \frac{1}{2} \sum \frac{x_1^4 x_2^2}{r^3} \left( \phi''' - 3 \frac{\phi''}{r} + 3 \frac{\phi'}{r^2} \right)
\end{aligned} \quad (4.7)$$

$$\Omega_0 C_{166} = F' \sum \frac{x_1^2 x_2^2 x_3^2}{r^3} \left( f''' - 3 \frac{f''}{r} + 3 \frac{f'}{r^2} \right) + \frac{1}{2} \sum \frac{x_1^2 x_2^2 x_3^2}{r^3} \left( \phi''' - 3 \frac{\phi''}{r} + 3 \frac{\phi'}{r^2} \right) \quad (4.8)$$

ifadeleri elde edilir. Eş. 4.1- Eş. 4.8 'deki toplamlar *i*. referans atomuna göre *j*. atom üzerinden alınır. Eş. 4.3 ve Eş. 4.8 'de bizim enerji fonksiyonu ile Ir, Sr, Ca, Pb ve Rh için hesapladığımız üçüncü-mertebe elastik sabitleri Çizelge 4.1'de verilmiştir. Deneysel değerleri bulamadığımız için karşılaştıramadık.



Çizelge 4.1. Bazı f.c.c. metaller için EAM ile hesaplanan üçüncü-mertebe elastik sabitleri

$C_{ijk} (10^{12}$ dyn/cm <sup>2</sup> )	Ir ( $m=2.0, n=0.0$ )	Sr ( $m=3.0, n=0.5$ )	Ca ( $m=6.0, n=0.2$ )	Pb ( $m=6.0, n=0.5$ )	Rh ( $m=5.0, n=0.2$ )
$C_{111}$	-68,949	-1,479	-4,339	-5,453	-53,511
$C_{112}$	-36,483	-0,838	-2,240	-2,706	-28,222
$C_{123}$	-2,277	-6,296	-8,226	0,751	-0,756
$C_{144}$	-4,915	6,360	1,491	-0,367	0,119
$C_{166}$	-36,151	-0,797	-2,205	-2,265	-27,819
$C_{456}$	-0,249	-0,112	-0,115	-6,629	-1,151

## 5. BASINÇ-HACİM (P-V) DAVRANIŞI

Merkezi-kuvvet etkileşmeleri için denge şartı,

$$\sum_{l_1} \sum_{l_2} \sum_{l_3} l_i^2 \frac{\partial \varphi}{\partial r^2} = 0 \quad (5.1)$$

biçimindedir. Bu bağıntı, kristal hiç bir dış kuvvete maruz kalmadığı zaman geçerli olan denge şartıdır. Atomlar arası merkezi iki-cisim kuvvet etkileşmeli bir kübik kristal, birim hücrenin yüzeyine dik uygulanan bir dış kuvvete maruz kalırsa, hücre yüzeyine etki eden iç kuvvet

$$F_i = \frac{1}{4} n a_i \sum_{l_1} \sum_{l_2} \sum_{l_3} l_i^2 \frac{\partial \varphi(r)}{\partial r^2} \quad (5.2)$$

olarak yazılabilir [31, 32]. Burada  $n$ , f.c.c. yapılar için 4, b.c.c. yapılar için 2 dir.  $r$  ise

$$r = \frac{1}{2} (l_1^2 a_1^2 + l_2^2 a_2^2 + l_3^2 a_3^2)^{(1/2)} \quad (5.3)$$

dir. Kuvvetin yönü  $a_i$  boyuncadır ( $i=1, 2, 3$ ) ve  $a_i$  hücre uzunluğudur. Hidrostatik basınç altında bütün  $a_i$ 'ler eşittir ve basınç ( $P$ ) aşağıdaki gibi olur:

$$P = \frac{F_1}{a^2} = \frac{n}{4a} \sum_{l_1 l_2 l_3} l_i^2 \frac{\partial \varphi(r)}{\partial r^2} \quad (5.4)$$

Bu durumda

$$r = \frac{1}{2} a (l_1^2 + l_2^2 + l_3^2)^{(1/2)} \quad (5.5)$$

olur.  $V$  atomik hacim olmak üzere

$$\frac{V}{V_0} = \left( \frac{a}{a_0} \right)^3 \quad a = a_0 \left( \frac{V}{V_0} \right)^{1/3} \quad (5.6)$$

olur.

Embedded Atom Metot (EAM) için uyguladığımız basınç ifadesi aşağıda verilmiştir. Basınç genel olarak

$$P_i = \frac{n}{a_j^0 a_k^0} \frac{\partial E}{\partial a_i} \quad (5.7)$$

şeklinde verilir. EAM'de

$$E(a_i) = F(\rho) + \frac{1}{2} \sum_l \varphi(r_l) \quad (5.8)$$

olduğundan ( $\rho = \sum_l f(r_l)$ )

$$\frac{\partial E}{\partial a_i} = \frac{\partial F}{\partial \rho} \sum \frac{df}{dr^2} \frac{dr^2}{da_i} + \frac{1}{2} \sum \frac{\partial \varphi}{\partial r^2} \frac{\partial r^2}{\partial a_i} \quad (5.9)$$

olur. Kuvvet  $a_1$  boyunca uygulanmışsa Eş. 5.3' den, hidrostatik basınç durumunda  $a_1 = a_2 = a_3 = a$  olduğundan

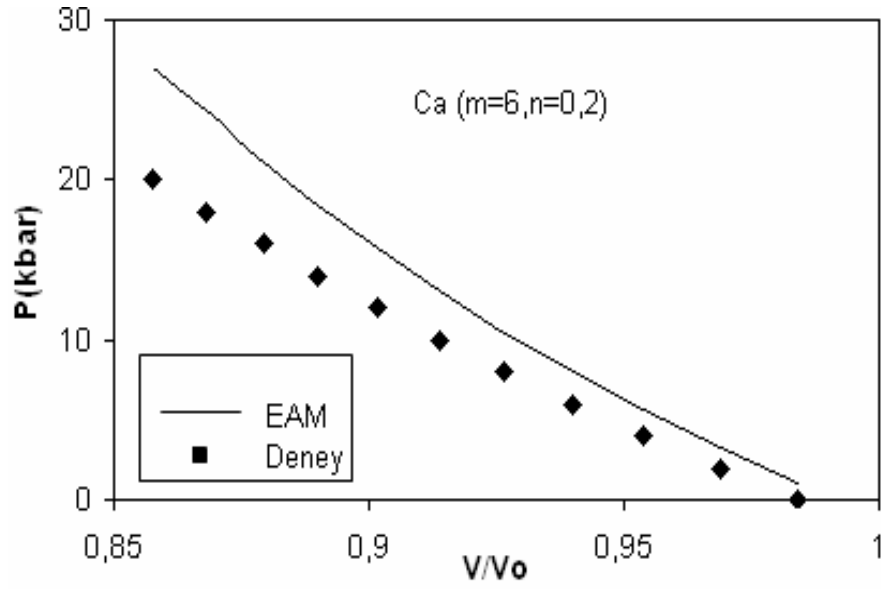
$$\frac{\partial r^2}{\partial a_1} = \frac{1}{2} a l_1^2 \quad (5.10)$$

olur. Sonuçta EAM için basınç

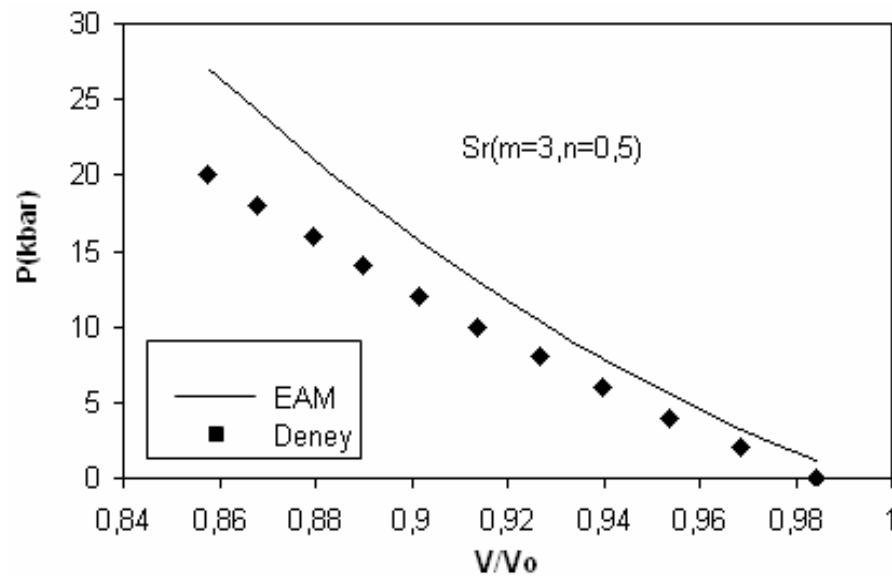
$$P = \frac{n}{a} \left\{ \frac{1}{2} F' \sum_{l_1 l_2 l_3} l_1^2 \frac{df}{dr^2} + \frac{1}{4} \sum_{l_1 l_2 l_3} l_1^2 \frac{\partial \varphi(r)}{\partial r^2} \right\} \quad (5.11)$$

olarak elde edilir.

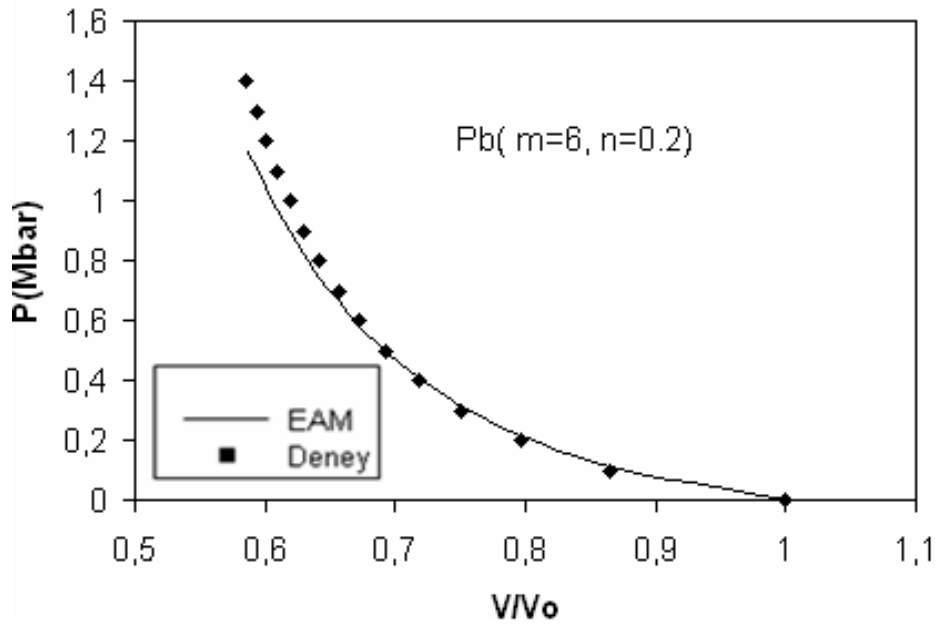
EAM potansiyel fonksiyonu için Eş. 5.11 kullanılarak,  $V/V_0$  'a göre Kbar boyutunda basınç; Ca, Sr ve Pb için çizilmiş ve deneysel verilerle aynı grafikte gösterilmiştir. Sonuç özellikle düşük basınçlarda deneysel değerlerle uyumludur. Deneysel veriler [33] nolu kaynaktan alınmıştır.



Şekil 5.1. Ca için basınç-hacim değişimi



Şekil 5.2 Sr için basınç-hacim değişimi



Şekil 5.3. Pb için basınç-hacim değişimi

## 6. SONUÇ VE TARTIŞMA

Bu çalışmada bazı f.c.c. metallerin (Ir, Rh, Sr, Ca ve Pb) elastik ve mekanik özellikleri EAM ile hesaplandı ve sonuçlar mevcut deneysel verilerle kıyaslandı. Çalışmanın 2. bölümünde metalik sistemlerin teoriksel kararlılığı hakkında bilgi verildi.

Üçüncü bölümde Cai'in yöntemi izlenerek bazı f.c.c. metaller için (Ir, Rh, Sr, Ca ve Pb) [100] boyunca tek eksenli yük altında hesaplanan teorik kararlılık ve yapısal faz dönüşümlerini incelemek için tamamen analitik ve uzun erişimli embedded-atom metodunu (EAM) kullandık [34]. Cai tarafından önerilen EAM formundan farklı olarak, burada kullanılan ikili etkileşim potansiyeli EGEP fonksiyonuna benzer olarak modifiye edilerek kullanılmıştır. EAM potansiyelinin parametrelerini bulmak için yapılan fit işleminde, beşinci ve altıncı komşulukların arasına girecek şekilde  $r_{kes} = 1.65a_0$  olarak alınmıştır. Çünkü toplam enerji büyük bir yaklaşıklıkla sabit kalacağından, daha büyük almak sonuçları fazla değiştirmeyecektir. Fit sonucunda, örgü sabiti, kohesif enerji, elastik sabitleri ve boşluk oluşturma enerjisi, deneyle yeterince uyumludur. Bu bölümde, teoriksel kararlılık ve faz geçişleri hesapları EAM potansiyeliyle incelenmiştir. Burada zor, enerji ve elastik modülü hesapları yapılmış ve bunların  $a_1$  örgü parametresine göre değişimleri çizilmiştir. Zor eğrilerinden hesapladığımız  $a_{fcc}$  örgü sabiti ve  $E_{fcc}$  kohesif enerji deneysel verilere yakın sonuçlar vermiştir. Enerji eğrilerinde iki tane enerji minimumu gözlenmiştir. Bunlardan ilk minimum, zor uygulanmamış f.c.c. denge durumuna; ikinci minimum, b.c.c. denge durumuna karşılık gelmektedir. Kristalin kararlılık bölgesini belirlemek için elastik modüllerinin  $a_1$  ile değişimleri çizilmiştir. İncelediğimiz 5 metalin yalnız f.c.c. fazlarının kararlılık bölgesinin içinde bulunduğunu gördük. b.c.c. fazdaki örgü sabiti  $a_{bcc}$  kararlılık bölgesinin dışında bulunduğu için kararsız yapı olarak tahmin edilmiştir. Kararlılık bölgesinde maksimum zor değeri alınarak teorik kararlılık değerleri hesaplanmış ve çizelgede verilmiştir.

Çalışmanın dördüncü bölümünde, EAM'ye göre Ir, Rh, Sr, Ca ve Pb için üçüncü-mertebeden elastik sabitleri hesaplanmıştır. Deneysel değerlere ulaşamadığımız için kıyaslanamamıştır. EAM ile üçüncü-mertebeden elastik sabitleri, çalıştığımız metaller için yapılan ilk teorik çalışmadır. Formüllerini kullandığımız Milstein ve Chantasiriwan üçüncü-mertebe elastik sabitleri ifadelerini potansiyel parametrelerini hesaplamak için kullanmışlardır [30].

Beşinci bölümde basınç- hacim davranışı EAM ile Ca, Sr ve Pb için hesaplanmış ve deneysel verilerle birlikte aynı şekil üzerinde gösterilmiştir (Şekil 5.1). Sonuçlar bu üç metal için deneyle uyumludur. Genel olarak düşük basınçlarda uyum daha iyi iken yüksek basınçlarda az bir sapma mevcuttur.

Bu çalışmanın genelinde, EAM ile hesaplanan sonuçlar deneysel verilerle uyumludur. EAM'de toplam enerjinin doğrudan elektron yoğunluğuna bağlı ifadesinin çok cisim etkileşmelerini temsil etmesinden dolayı ikili etkileşim potansiyeline olan üstünlüğü, sonuçlarda etkili olmuştur. Hesapların analitik olması, az zaman alması ve hesaplama kolaylığının olması ise diğer avantajlarındandır.

## KAYNAKLAR

1. Foiles, S.M., Baskes, M.I. and Daw, M.S., "Atomistic Studies of Interfacial Structure and Properties", and design ed., Yoo, M.H., Clark, W.A.T. and Briant, C.L., *Mat.Res. Sci.*, Pittsburg, PA, 343-365 (1988).
2. Foiles, S.M., Baskes, M.I. and Daw, M.S., "The calculation of the equilibrium interface structure of alloys", *Mat. Sci. Forum*, 37: 223-234 (1989).
3. Abraham, F.F., "Computer simulations of surfaces, interfaces and physisorbed films", *J.Vac. Sci. Technol B*, 2: 534-549 (1984).
4. Manninen, M., Jena, P., Nieminen, R.M. and Lee, J.K., "Ab initio calculation of interatomic potentials and electronic properties of a simple metal-Al", *Phys. Rev. B*, 24: 7057-7070 (1981).
5. Norskov, J.K. and Lang, N.D., "Effective-medium theory of chemical binding: Application to chemisorption", *Phys. Rev. B*, 21: 2131-2136 (1980).
6. Stott, M.J. and Zaremba, E., "Quasiatoms: An approach to atoms in nonuniform electronic systems", *Phys. Rev. B*, 22: 1564-1583 (1980).
7. Born, M. And Kun, H., "Dynamical Theory of Crystal Lattices", *Clarendon Press*, Oxford, 387-400 (1954).
8. Misra, R.D., "On the stability of crystals II", *Proc. Cambridge Phil. Soc.*, 36: 173-182 (1940).
9. Milstein, F., "Applicability of exponentially attractive and repulsive interatomic potential functions in the description of cubic crystals", *J.Appl. Phys.* 44 (9): 3825-3832 (1973).
10. Milstein, F., "Mechanical stability of crystal lattices with two-body interactions", *Phys. Rev. B*, 2: 512-518 (1970).
11. Milstein, F., "Theoretical strength of a perfect crystal", *Phys. Rev. B*, 3: 1130-1141 (1971).
12. Daw, M.S., Baskes, M.I., "Embedded atom method: derivation and application to impurities, surfaces and other defects in metals", *Phys. Rev. B*, 29 (12): 6443-6453 (1984).
13. Finnis, M.W. and Sinclair, J.R., "A Simple Empirical N-Body Potential for Transition Metals", *Phil. Mag. A*, 50 (1): 45-55 (1984).
14. Pusca, M.J., Nieminen, R.M. and Manninen, M., "Atoms embedded in an electron gas: immersion energies", *Phys. Rev. B*, 24: 3037-3047 (1981).



15. Banerjea, A. And Smith, J.R., "Origins of the universal binding-energy relation", *Phys. Rev. B*, 37: 6632-6645 (1988).
16. Hildebrand, F.B., "Methods of applied mathematics", *Prentice-Hall*, New York, 480-523 (1952).
17. Carlson, A.E., Klein, M.L. and Ehrenreich, H., "Physical status solidi", *Phil. Mag. A*, 41: 241-247 (1980).
18. Daw, M.S. and Baskes, M.I., "Semiempirical, quantum mechanical calculation of Hydrogen embrittlement in metals", *Phys. Rev. A*, 50 (17): 1285-1288 (1983).
19. Daw, M.S., Baskes, M.I., "Embedded atom method: derivation and application to impurities, surfaces and other defects in metals", *Phys. Rev. B*, 28: 6443-6453 (1984).
20. Cai, J., Ye, Y.Y., "Simple analytical embedded atom potential model including a long range for fcc", *Phys. Rev. B*, 54 (12): 8398-8410 (1996).
21. Kittel, C., "Introduction to solid state physics, 5<sup>th</sup> ed.", *John Willey*, New York, 142-149 (1986).
22. Macmillan, N.H. and Kelly, A., "Some Limitations in use of morse potentials for calculating ideal strengths of metals", *Materials Science and Engineering*, 12 (2): 79-86 (1973).
23. Wycisk, W. and Feller- Kniepmeier, M., "Queching experiments in high purity Ni", *Phys. Stat. Sol.A.*, 37 (1): 183-191 (1996).
24. Balluffi, R.W., "Vacancy defect mobilities and binding energies obtained from annealing studies", *Journal of Nuclear Materials*, 69: 240-247 (1978).
25. Koehler, J.S., "In vacancies and interstitials in metals", edited by Seger, A., Schmacher, D., Schilling, W. and Diehl, J., *Nort-Holland*, Amsterdam, 1-175 (1970).
26. Baskes, M.I., "Modified embedded-atom potentials for cubic materials and impurities", *Phys. Rev. B*, 46 (5): 2727-2742 (1992).
27. Milstein, F. and Chantasiriwan, S., "Theoretical study of the response of 12 cubic metals to uniaxial loading", *Phys. Rev. B*, 58: 6006-6018 (1998).
28. Sigalas, M. Papaconstantopoulos, A. and Bacalis, N.C., "Total energy and band structure of the 3d, 4d and 5d metals", *Phys. Rev. B*, 45: 5777-5783 (1992).

29. Mehl, M.J. and Bayer, L.L., "Calculation of energy barriers for physically allowed lattice- invariant strains in Aluminum and Iridium", *Phys. Rev. B*, 43: 9498-9502 (1991).
30. Chantasiriwan, S. and Milstein, F., "Higher-order elasticity of cubic metals in the embedded-atom method", *Phys. Rev. B*, 53: 14080-14088 (1996).
31. Milstein, F., Hill, R. and, "Divergences Among the Born and Classical Stability Criteria for cubic Crystals under Hydrostatic Loading", *Phys. Rev. Lett.*, 43: 1411-1413 (1980).
32. Thakur, K.P., "Theoretical strength of a perfect nickel crystal under simple stresses", *J. Appl. Phys.* 53 (12): 8727-8729 (1982).
33. Mc Queen, R.G. and Marsh, S.P., "Equation of state for nineteen metallic elements from shock-wave measurements to two megabars", *J. Appl. Phys.*, 31 (7): 1253-1269 (1960).
34. Cai, J., "The structural phase transformation and elastic instability in fcc metals", *Phys. Stat. Sol. B*, 203 (2): 345-356 (1997).

## ÖZGEÇMİŞ

### Kişisel Bilgiler

Soyadı, adı : YİĞİTER, Rahime  
 Uyuğu : T.C.  
 Doğum tarihi ve yeri : 18.03.1975 Hollanda  
 Medeni hali : Evli  
 Telefon : 0 (505) 270 38 22  
 e-mail : embedded75@hotmail.com.tr

### Eğitim

Derece	Eğitim Birimi	Mezuniyet tarihi
Yüksek lisans	Gazi Üniversitesi /Fizik Bölümü	2007
Lisans	Gazi Üniversitesi/ Fizik Bölümü	1998
Lise	İmam Hatip Lisesi	1993

### İş Deneyimi

Yıl	Yer	Görev
1999-2007	Özel Nene Hatun Fen Lisesi	Fizik Öğretmeni

### Bilgisayar Bilgileri

Microsoft Office Yazılımları (Word, Excel, Powerpoint)

### Konferans ve Kurslar

Gazi Üniversitesi Pedagojik Formasyon Belgesi  
 Gazi Üniversitesi Fizik Bölümü Seminerleri  
 Muraş Öğretim Kurumları Hizmet İçi ve Yaygın Eğitim Seminerleri

### Yabancı Dil

İngilizce