**GÖMÜLÜ ATOM METODU ILE SIVI HCP NADIR TOPRAK METALLERININ ATOMLARARASI ETKILESME POTANSIYELLERI, SIVI YAPILARI VE BAZI TERMODINAMIK ÖZELLIKLERI**

SÜLEYMAN KALAYCI

YÜKSEK LISANS TEZI

FIZIK ANABILIM DALI

Tez Yöneticisi: Prof. Dr. Serap DALGIÇ

EDIRNE - 2005

**T.C.**
**TRAKYA ÜNIVERSITESI**
**FEN BILIMLERI ENSTITÜSÜ**

# GÖMÜLÜ ATOM METODU ILE SIVI HCP NADIR TOPRAK METALLERININ ATOMLARARASI ETKILESME POTANSIYELLERI, SIVI YAPILARI VE BAZI TERMODINAMIK ÖZELLIKLERI

**SÜLEYMAN KALAYCI**

**YÜKSEK LISANS TEZI**
**FIZIK ANABILIM DALI**

**Tez Yöneticisi : Prof. Dr. Serap DALGIÇ**

**EDIRNE – 2005**

T.C.
TRAKYA ÜNIVERSITESI
FEN BILIMLERI ENSTITÜSÜ

# GÖMÜLÜ ATOM METODU ILE SIVI HCP NADIR TOPRAK METALLERININ ATOMLARARASI ETKILESME POTANSIYELLERI, SIVI YAPILARI VE BAZI TERMODINAMIK ÖZELLIKLERI

Süleyman KALAYCI

YÜKSEK LISANS TEZI
FIZIK ANABILIM DALI

Bu tez . .01/09/2005. . tarihinde asagidaki jüri tarafindan kabul edilmistir.

| | | |
|---|---|---|
| . . . . . | . . . . . | . . . . . |
| Prof. Dr. Serap DALGIÇ | Yrd. Doc. Dr. Seyfettin DALGIÇ | Yrd. Doc. Dr. Yasemin BAKIRCIOGLU |
| Tez Yöneticisi | Üye | Üye |

# ÖZET

Bu çalismada, sivi hcp nadir toprak geçis metallerinin yapisal ve termodinamik özelliklerini dogru olarak açiklayabilen atomlar arasi etkin çiftler potansiyellerinin, Gömülü Atom Metodu (GAM) ile elde edilmesi amaçlanmistir. Bu amaçla literatürde hcp geçis metalleri için kati özellikleri fit edilerek parametrize edilen farkli Gömülü Atom Metodlari ele alinmis, Zhang-Quyang Gömülü Atom Metodu (ZQ-GAM), Hu-Xu, Hu-Zhang, Hu-Deng'in Analitik Yeniden Düzenlenmis Gömülü Atom Metodlari (AYDGAM) ve Chen-Xu GAM ile çalisilmistir. S. S. Dalgiç vd. tarafindan fcc sivi geçis metallerinin Gömülü Atom Metodu hesaplamalari için önerilmis olan parametrizasyon metodu hcp yapisindaki bazi nadir toprak metalleri, Pr, Nd, Gd, Tb, Dy, Ho, Er ile hcp geçis metallerinden Be, Mg, Sc, Y, La, Ti, Zr, Co' a da uygulanmistir. ZQ-GAM, Hu-Xu AYDGAM, Hu-Zhang AYDGAM, Hu-Deng AYDGAM ve Chen-Xu GAM potansiyel fonksiyonlari önerilen parametrizasyon metodu kullanilarak hesaplanmistir.

Ayrica Gömülü Atom Metodunda Finnis-Sinclair (FS) Efektif Çiftler Potansiyel Yaklasimi kullanilarak, ilk kez AYDGAM metodlari için FS yaklasimi gelistirilmis, enerji düzeltme terimlerinin de yer aldigi iki farkli FS efektif potansiyel metodu ile çalisilmistir.

Hesaplanan Atomlar - arasi etkin çiftler potansiyelleri, sivi yapi teorilerinden Varyasyonel Hypernetted Chain (VMHNC)'nin giris datasi olarak kullanilmis, incelenen sistemlerin ergime noktalari civarindaki statik yapi faktörleri S(q) ve çiftler dagilim fonksiyonlari g(r) hesaplanarak deneysel sonuçlar ile karsilastirilmistir. Elde edilen yapisal özellikler ile sivi hcp geçis metallerinin iç enerji, Helmholtz serbestlik enerjisi ve entropileri hesaplanmis deneysel veriler ile karsilastirilmistir.

## SUMMARY

In the present work, the interatomic effective pair potentials which are capable of predicting both the structural and thermodynamic properties of the liquid hcp rare-earth metals have been obtained using the embedded atom method (EAM). For this purpose, the different versions of EAM model for the hcp metals which were parameterised by fitting the solid state properties in the literature have been taken into account. It has been studied with the Zhang-Quyang embedded atom method (ZQ-EAM), the Analytical Modified Embedded Atom Method (AMEAM) of Hu-Xu, Hu-Zhang, Hu-Deng and Chen-Xu EAM method. The parameterisation method proposed by S.S. Dalgic and co-workers for the EAM calculations of fcc liquid metals has been applied to hcp rare-earth metals such as Pr, Nd, Gd, Tb, Dy, Ho, Er and some hcp transition metals such as Be, Mg, Sc, Y, La, Ti, Zr, Co. The potential functions of the EAM models have been computed with this proposed parameterisation method.

On the other hand, the Finnis-Sinclair (FS) effective pair potential approach in the EAM has been used and extended to AMEAM calculations for the first time in the literature. It has been studied with the two different FS approaches which include the energy correction terms of AMEAM.

The interatomic effective pair interaction potentials are used as input data for the variational modified hypernetted chain (VMHNC) integral equation approximation which is one of the liquid state theories. The static structure factors and the pair distributions of the investigated systems at near their melting points are computed and compared with the experimental data. The computed structural properties have been used in order to obtain the thermodynamic properties of the liquid hcp metals such as internal energy, Helmholtz free energy, entropy and compared with experimental data and the theoretical results those obtained by others.

# TESEKKÜR

Bana bu çalisma ortamini saglayan, danismanligimi üstlenen ve çalismamin her adiminda bilgilerinden yararlandigim sayin hocam Prof. Dr. Serap DALGIÇ' a tesekkürlerimi sunarim.

Çalismanin yapildigi T.Ü. Fen – Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümü Baskani Prof. Dr. S. Askeri BARAN'a, yardimlarindan dolayi Yrd. Doç. Dr. Seyfettin DALGIÇ'a, Sedat SENGÜL ve Ünal DÖMEKELI'ye tesekkür ederim.

Son olarak, bu çalisma boyunca destegini hiç eksik etmeyen sevgili aileme sonsuz tesekkür ederim.

IÇINDEKILER

ÖZET.....*i*
SUMMARY.....*ii*
TESEKKÜR.....*iii*
TABLOLARIN LISTESI.....*iv*
SEKILLERIN LISTESI.....*vi*
1 GIRIS.....1
2 HCP METALLER IÇIN GÖMÜLÜ ATOM METODLARI (GAM) ...4
2.1 Zhang-Quyang Gömülü Atom Metodu (ZQ-GAM)…… 4
2.2 Analitik Yeniden Düzenlenmis Gömülü Atom Metodu (AYDGAM)……...8
2.2.1. Hu-Xu Analitik Yeniden Düzenlenmis Gömülü Atom Metodu (HX-AYDGAM)……..12
2.2.2. Hu-Zhang Analitik Yeniden Düzenlenmis Gömülü Atom Metodu (HZ-AYDGAM)…….16
2.2.3. Hu-Deng Analitik Yeniden Düzenlenmis Gömülü Atom Metodu (HD-AYDGAM)…….……..……...21
2.3. Chen-Xu Gömülü Atom Metodu (CX-GAM)……25
3 HCP METALLERI IÇIN GAM ETKIN ÇIFTLER POTANSIYEL YAKLASIMLARI…….…..31
3.1 ZQ –GAM Etkin Çiftler Potansiyel Yaklasimi……31

3.2 HX -AYDGAM Etkin Çiftler Potansiyel Yaklasimi……...33
3.3 HZ-AYDGAM Etkin Çiftler Potansiyel Yaklasimi…….35
3.4 HD-AYDGAM Etkin Çiftler Potansiyel Yaklasimi……36
3.5 CX-GAM Etkin Çiftler Potansiyel Yaklasimi…….……38
4 SIVI HCP METALLERI IÇIN GAM PARAMETRIZASYON METODLARI, SIVILARIN YAPISAL VE TERMODINAMIK BÜYÜKLÜKLERI…..……..…39
4.1 Sivilar için önerilen GAM Parametrizasyon Metodu……..39
4.2 Sivilarin Yapisal ve Termodinamik Büyüklükleri……..…….41
5 SONUÇLAR VE TARTISMA……48
5.1 Sivi hcp Metallerinin Atomlararasi Çiftler Potansiyelleri……...48
5.1.1 ZQ-GAM Etkin Çiftler Potansiyeli…….……..50
5.1.2 HX-AYDGAM Etkin Çiftler Potansiyeli……..……..…58
5.1.3 HZ-AYDGAM Etkin Çiftler Potansiyeli……..…….75
5.1.4 HD-AYDGAM Etkin Çiftler Potansiyeli……..…….84
5.1.5 CX-GAM Etkin Çiftler Potansiyeli…….…...96
5.2 Sivi hcp Geçis Metallerinin Yapisi……...……104
5.3 Sivi hcp Geçis Metallerinin Iç Enerjisi……....136
5.4 Sivi hcp Geçis Metallerinin Helmholtz Serbestlik Enerjisi…….140
5.5 Sivi hcp Geçis Metallerinin Entropisi…….…….144
5.6 Sonuç……148
KAYNAKLAR……149
ÖZGEÇMIS

# TABLOLARIN LISTESI

Tablo 2.1: HCP geçis metalleri için ZQ-GAM giris parametreleri.....7
Tablo 2.2: HCP geçis metalleri için ZQ-GAM model parametreleri……..7
Tablo 2.3: HCP metalleri için HX-AYDGAM giris parametreleri.....14
Tablo 2.4: HCP metalleri için HX-AYDGAM model parametreleri.....15
Tablo 2.5: HCP metalleri için HZ-AYDGAM giris parametreleri.....19
Tablo 2.6: HCP metalleri için HZ-AYDGAM model parametreleri.....20
Tablo 2.7 HCP metalleri için HD-AYDGAM giris parametreleri.....24
Tablo 2.8: HCP metalleri için HD-AYDGAM model parametreleri.....24
Tablo 2.9: CX-GAM modelinde kullanilan HCP metalleri için fiziksel giris parametrelerinin karsilastirilmasi.....29
Tablo 2.10: HCP metalleri için CX-GAM model parametreleri.....30
Tablo 5.1: Bazi HCP geçis metalleri GAM potansiyel fonksiyonlarinin parametrizasyonunda kullanilan giris parametreleri.....49
Tablo 5.2: Sivi HCP geçis metalleri için ZQ-GAM potansiyel parametreleri.....50
Tablo 5.3: Sivi HCP metalleri için HX-AYDGAM potansiyel parametreleri.....60
Tablo 5.4: Sivi HCP metalleri için HZ-AYDGAM potansiyel parametreleri.....76
Tablo 5.5: Sivi HCP metalleri için HD-AYDGAM potansiyel parametreleri….85
Tablo 5.6: Sivi HCP metalleri için CX-GAM potansiyel parametreleri.....96
Tablo 5.7: Bazi sivi HCP nadir toprak metalleri için HX-AYDGAM ve HD-AYDGAM ile hesaplanan iç enerji degerlerinin karsilastirmasi…..136

Tablo 5.8: Sivi HCP metalleri için farkli GAM ve AYDGAM modelleri ile elde edilen iç enerji degerleri.....137
Tablo 5.9: Bazi sivi HCP nadir toprak metalleri için HX-AYDGAM ve HD-AYDGAM ile hesaplanan Helmholtz serbestlik enerjilerinin karsilastirilmasi.....140
Tablo 5.10: Sivi HCP metalleri için farkli GAM ve AYDGAM modelleri ile hesaplanan Helmholtz serbestlik enerjilerinin karsilastirilmasi.....141
Tablo 5.11: Bazi sivi nadir toprak metalleri için HX-AYDGAM ve HD-AYDGAM ile elde edilen entropi degerleri.....144
Tablo 5.12: Sivi HCP geçis metalleri için farkli GAM ve AYDGAM modelleri ile elde edilen entropi degerleri…….....145

# SEKILLERIN LISTESI

Sekil 5.1: Ti, Zr ve Co için ZQ-GAM çiftler etkilesme potansiyelleri…….52

Sekil 5.2: Sc, Y ve La için ZQ-GAM çiftler etkilesme potansiyelleri.....53

Sekil 5.3: Ti, Zr ve Co için ZQ-GAM gömme enerjisi fonksiyonlari.....54

Sekil 5.4: Sc, Y ve La için ZQ-GAM gömme enerjisi fonksiyonlari……. 55

Sekil 5.5: Ti, Zr ve Co için ZQ-GAM etkin çiftler etkilesme potansiyelleri....56

Sekil 5.6: Sc, Y ve La için ZQ-GAM etkin çiftler etkilesme potansiyelleri...57

Sekil 5.7 : Mg için HX-AYDGAM kullanilarak elde edilen

a) Çiftler etkilesme potansiyelleri
b) Gömme enerjisi fonksiyonu.....61

Sekil 5.8: Sc ve Y için HX-AYDGAM kullanilarak

(a) Kati parametreleri ile elde edilen çiftler etkilesme potansiyellerinin diger çalismalarla karsilastirilmasi
(b) Elde edilen sivi çiftler etkilesme potansiyelleri.....62

Sekil 5.9: Pr, Nd ve Gd için HX-AYDGAM kullanilarak
(a) Kati parametreleri ile elde edilen çiftler etkilesme potansiyellerinin diger çalismalarla karsilastirilmasi
(b) Elde edilen sivi çiftler etkilesme potansiyelleri.....63

Sekil 5.10: Tb, Dy, Ho ve Er için HX-AYDGAM kullanilarak
(a) Kati parametreleri ile elde edilen çiftler etkilesme potansiyellerinin diger çalismalarla karsilastirilmasi
(b) Elde edilen sivi çiftler etkilesme potansiyelleri.....64

Sekil 5.11: Sc ve Y için HX-AYDGAM gömme enerjisi fonksiyonlari.....65

Sekil 5.12: Pr, Nd ve Gd için HX-AYDGAM gömme enerjisi fonksiyonlari...66

Sekil 5.13: Tb,Dy,Ho, Er için HX-AYDGAM gömme enerjisi fonksiyonu…67
Sekil 5.14: Mg için HX-AYDGAM ve I. - II. FS-AYDGAM formu ile hesaplanan etkin çiftler etkilesme potansiyelleri.....68
Sekil 5.15: Sc ve Y için HX-AYDGAM ve I. - II. FS-AYDGAM yöntemleri ile hesaplanan etkin çiftler etkilesme potansiyelleri.....69
Sekil 5.16: Pr, Nd ve Gd için HX-AYDGAM ve I. - II. FS-AYDGAM yöntemleri ile hesaplanan etkin çiftler etkilesme potansiyelleri.....70
Sekil 5.17: Tb, Dy, Ho ve Er için HX-AYDGAM ve I.- II. FS- AYDGAM yöntemleri ile hesaplanan etkin çiftler etkilesme potansiyelleri.....71
Sekil 5.18: Sc ve Y için HX-AYDGAM ve I. - II. FS-AYDGAM yöntemleri ile hesaplanan etkin çiftler potansiyellerinin karsilastirilmasi..... ...72
Sekil 5.19: Pr, Nd ve Gd için HX-AYDGAM ve I. - II. FS-AYDGAM yöntemleri ile elde edilen etkin çiftler potansiyellerinin karsilastirilmasi.....73
Sekil 5.20: Tb, Dy, Ho ve Er için HX-AYDGAM ve I. - II. FS-AYDGAM yöntemleri ile elde edilen etkin çiftler potansiyellerinin karsilastirilmasi……74
Sekil 5.21:Be,Ti,Zr veCo için HZ-AYDGAM çiftler etkilesme potansiyelleri 77
Sekil 5.22: Mg, Sc ve Y için HZ-AYDGAM çiftler etkilesme potansiyelleri...78
Sekil 5.23:Be,Co,Zr ve Ti için HZ-AYDGAM gömme enerjisi fonksiyonlari 79
Sekil 5.24 : Mg, Sc ve Y için HZ-AYDGAM gömme enerji fonksiyonlari.....80
Sekil 5.25 : Be ve Mg için HZ-AYDGAM ve I. FS-AYDGAM yöntemi ile elde edilen etkin çiftler etkilesme potansiyelleri.....81
Sekil 5.26 : Sc ve Y için HZ-AYDGAM ve I. FS-AYDGAM yöntemi ile elde edilen etkin çiftler etkilesme potansiyelleri..... 82

Sekil 5.27 : Ti, Zr ve Co için HZ-AYDGAM ve I. FS-AYDGAM yöntemi ile elde edilen etkin çiftler etkilesme potansiyelleri…….....83
Sekil 5.28 : Pr, Nd ve Gd için HD-AYDGAM kullanilarak
(a) Kati parametreleri ile elde edilen çiftler etkilesme potansiyellerinin diger çalismalar ile karsilastirilmasi
(b) Sivi çiftler etkilesme potansiyelleri.....86
Sekil 5.29 : Tb, Dy, Ho ve Er için HD-AYDGAM kullanilarak
(a) Kati parametreleri ile elde edilen çiftler etkilesme potansiyellerin diger çalismalar ile karsilastirilmasi
(b) Sivi çiftler etkilesme potansiyelleri.....87
Sekil 5.30 : Pr, Nd ve Gd için HD-AYDGAM gömme enerjisi fonksiyonlari..88
Sekil 5.31 : Tb,Dy,Ho ve Er için HD-AYDGAM gömme enerjisi fonksiyonu.89
Sekil 5.32 : Pr, Nd ve Gd için HD-AYDGAM ile elde edilen M(P) ve N(Q) terimleri.....90
Sekil 5.33: Tb, Dy, Ho ve Er için HD-AYDGAM ile elde edilen M(P) ve N(Q) terimleri.....91
Sekil 5.34 : Pr, Nd ve Gd için HD-AYDGAM ve I.- II. FS- AYDGAM yöntemleri ile elde edilen etkin çiftler etkilesme potansiyelleri....92
Sekil 5.35 : Tb, Dy, Ho ve Er için HD-AYDGAM ve I.-II. FS- AYDGAM yöntemleri ile elde edilen etkin çiftler etkilesme potansiyelleri .93
Sekil 5.36 : Pr, Nd ve Gd için HD-AYDGAM ve I- II. FS-AYDGAM yöntemleri ile elde edilen etkin çiftler etkilesme potansiyellerinin karsilastirilmasi.....94

Sekil 5.37 : Tb, Dy, Ho ve Er için HD-AYDGAM ve I- II. FS-AYDGAM yöntemleri ile elde edilen etkin çiftler etkilesme potansiyellerinin karsilastirilmasi.....95
Sekil 5.38: Ti için CX-GAM kullanilarak kati ve sivi parametreleri ile hesaplanan çiftler etkilesme potansiyelleri .....98
Sekil 5.39: Co için CX-GAM kullanilarak kati ve sivi parametreleri ile hesaplanan çiftler etkilesme potansiyelleri.....99
Sekil 5.40: Zr için CX-GAM kullanilarak kati ve sivi parametreleri ile hesaplanan çiftler etkilesme potansiyelleri.....100
Sekil 5.41: Ti, Zr ve Co için CX-GAM çiftler etkilesme potansiyelleri.....101
Sekil 5.42 : Ti, Zr ve Co için CX-GAM gömme enerjisi fonksiyonlari.....102
Sekil 5.43 : Ti, Zr ve Co için CX-GAM etkin çiftler potansiyelleri……103
Sekil 5.44: Sivi Be için S(q) statik yapi faktörü.....106
Sekil 5.45: Sivi Mg için S(q) statik yapi faktörü.....107
Sekil 5.46: Sivi Sc için S(q) statik yapi faktörü.....108
Sekil 5.47: Sivi Ti için S(q) statik yapi faktörü.....109
Sekil 5.48: Sivi Co için S(q) statik yapi faktörü.....110
Sekil 5.49: Sivi Y için S(q) statik yapi faktörü.....111
Sekil 5.50: Sivi Zr için S(q) statik yapi faktörü.....112
Sekil 5.51: Sivi La için S(q) statik yapi faktörü.....113
Sekil 5.52: Sivi Pr için S(q) statik yapi faktörü.....114
Sekil 5.53: Sivi Nd için S(q) statik yapi faktörü.....115
Sekil 5.54: Sivi Gd için S(q) statik yapi faktörü.....116
Sekil 5.55: Sivi Tb için S(q) statik yapi faktörü.....117
Sekil 5.56: Sivi Dy için S(q) statik yapi faktörü.....118

Sekil 5.57: Sivi Ho için S(q) statik yapi faktörü..... 119
Sekil 5.58: Sivi Er için S(q) statik yapi faktörü..... 120
Sekil 5.59: Sivi Be için g(r) çiftler dagilim fonksiyonu.....121
Sekil 5.60: Sivi Mg için g(r) çiftler dagilim fonksiyonu.....122
Sekil 5.61: Sivi Sc için g(r) çiftler dagilim fonksiyonu..... 123
Sekil 5.62: Sivi Ti için g(r) çiftler dagilim fonksiyonu.....124
Sekil 5.63: Sivi Co için g(r) çiftler dagilim fonksiyonu.....125
Sekil 5.64: Sivi Y için g(r) çiftler dagilim fonksiyonu.....126
Sekil 5.65: Sivi Zr için g(r) çiftler dagilim fonksiyonu.....127
Sekil 5.66: Sivi La için g(r) çiftler dagilim fonksiyonu.....128
Sekil 5.67: Sivi Pr için g(r) çiftler dagilim fonksiyonu.....129
Sekil 5.68: Sivi Nd için g(r) çiftler dagilim fonksiyonu.....130
Sekil 5.69: Sivi Gd için g(r) çiftler dagilim fonksiyonu.....131
Sekil 5.70: Sivi Tb için g(r) çiftler dagilim fonksiyonu.....132
Sekil 5.71: Sivi Dy için g(r) çiftler dagilim fonksiyonu.....133
Sekil 5.72: Sivi Ho için g(r) çiftler dagilim fonksiyonu.....134
Sekil 5.73: Sivi Er için g(r) çiftler dagilim fonksiyonu.....135
Sekil 5.74: Sivi Pr, Nd, Gd, Tb, Dy, Ho ve Er için iç enerji degerleri.....138
Sekil 5.75: Sivi Be, Mg, Sc, Ti, Co, Y, Zr ve La için iç enerji degerleri.....139
Sekil 5.76: Sivi Pr, Nd, Gd, Tb, Dy, Ho ve Er için Helmholtz serbestlik enerjisi degerleri.....142
Sekil 5.77: Sivi Be, Mg, Sc, Ti, Co, Y, Zr ve La için Helmholtz serbestlik enerjisi degerleri.....143
Sekil 5.78: Sivi Pr, Nd, Gd,Tb, Dy, Ho ve Er için entropi degerleri.....146
Sekil 5.79: Sivi Be, Mg, Sc, Ti, Co, Y, Zr ve La için entropi degerleri.....147

# BÖLÜM 1

# GIRIS

Johan Gadolin'in itriyumu kesfettigi yil olan 1794'ten beri nadir toprak metalleri uygarligin gelisimine katkida bulundu. Nadir topraklar bir zamanlar bilimsel merak konusu iken özellikle atom enerjisi ve metallerin arastirilmasi alanlarindaki modern ayristirma yöntemleri ve yeni uygulamalar sayesinde ticari deger kazandilar. Nadir topraklar, otomativ katalizör dönüstürmelerde katalizörler, demir çelike katki maddesi, renksizlestirme özellikleri dolayisiyla seramik ve cam katkisi, isik yayan maddeler (fosfor) ve elektronik aletlerin parçalari, sürekli miknatislar, ampüller olarak ve çesitli arastirma konularinda kullanilirlar. Nadir topraklarin, yüksek kaliteli ve yüksek performansli endüstriyel ürünler için gereken gelismis maddeler olarak önemli bir rol oynamasi beklenmektedir. Bu maddelerin üstün performansini anlamaya yarayan temel konulardan biri nadir toprak metallerinin atomik etkilesimidir. Bu özelliklerinin eksikliklerinin ve önceden belirlenmeleri bilgisayar simülasyonlarinin temelini olusturur. Atomik simülasyonlarinin güvenirligi modellenen atomik etkilesimlerinin dogruluguna baglidir. Ilk prensip yöntemleri atomik etkilesimleri belirlemeye yönelik en güvenilir yaklasimi olustursa da bu yöntemlerin birkaç yüz atomdan fazlasini içeren sistemlere uygulanmasi mümkün degildir. Metallerdeki kusurlarin atomik simülasyonlarinin çogu atomik etkilesimlerin yari empirik veya empirik tanimlamalarin kullanilmasiyla gerçeklestirilir(Hu W., 2003)

HCP metallerinin özellikleri empirik çiftler potansiyel etkilesimlerini kullanarak hesaplanmistir. Fakat bu tip potansiyellerin hcp metallerine uygulanmasi kubik metallere oldugundan daha az yaygindir (Bacon, 1993). Son zamanlarda hcp metalleri için çok cisim potansiyelleri gelistirmistir (Igarashi 1991, Hu W., 2000). Igarashi tarafindan sekiz metal Be, Hf, Ti, Ru, Zr, Co, Mg, Zn için öne sürülen potansiyeller c/a orani da dahil bir çok fiziksel parametreye uymus ancak normal denge örgü araligi içindeki atomlararasi etkilesimlerinden elde edilen her hangi bir veriyle

uyusmamistir. Asiri kati çift itme terimi, bosluga ait atomun olusum enerjisinin çok büyük degerler vermesine yol açmistir. Ayrica Bacon bazi potansiyellerin çift sinirlari örneklemek için kullanildiginda kararsiz kristal olusturdugunu buldu. Baskes ve Johnson tarafindan açisal kuvvetlerle öne sürülen yeniden düzenlenmis gömülü atom potansiyelleri hcp nadir toprak metalleri de dahil onsekiz hcp metaline uygulandi (Baskes, Johnson, 1994). Baskes ve Johnson boslugu, çift boslugu, yigilma hatasini ve yüzeyini çalismislardir (Hu, 2003). Ancak çift bosluk Be hariç ele alinan tüm metallerde serbestti (sinirsizdi). Ayrica modellerinin kendi bosluk atomlara uygulanmasi hakkinda bilgi verilmedi. Johnson ve Ackland tarafindan hcp metalleri için önerilen çok cisim potansiyellerinin sadece ideal degere yakin bir c/a örgü parametre oranina sahip Mg, Ti, Zr gibi metaller için uygun oldugu öne sürüldü (Oh 1998, Johnson 1991, Ackland 1992-1995).

Bu çalismanin amaci hem kati hemde sivi hal özelliklerini kullanarak sivi hcp metallerinin sivi yapi ve bazi termodinamik özeliklerini dogru veren etkin çiftler potansiyellerini elde edebilen yöntemi belirlemektir. Bu amaçla Be, Mg, Sc, Ti, Co, Y, Zr, La, Pr, Nd, Gd, Tb, Dy, Ho, ve Er metalleri için parametreleri kati hal özelliklerine fit edilmis olan, Zhang-Quyang GAM (Zhang,1993), Hu-Zhang (Hu, 2001) AYDGAM, Hu-Xu (Hu ve vd. 2000) AYDGAM ile son modelin yeni bir düzeltme terimi eklenmis versiyonu olan Hu-Deng modeli ( Hu W. ve vd. 2003) AYDGAM ve son olarak Chen-Xu (Chen, 2004) GAM modeli uygulanmistir. Su ana kadar ki bilgilerimize göre üstte adi geçen GAM lar sivi hcp metallerine uygulanmamistir. Bu tezde hem katihal hemde sivi hal özelliklerini kullanarak çalisilan GAM, AYDGAM model potansiyel fonksiyonlari yeniden parametrize edilmis; bu potansiyel fonksiyonlarindan etkin çiftler potansiyellerin elde edilmesi için Finnis-Sinclair (Finnis ve Sinclair 1984) efektif potansiyel formuna M(P) ve N(Q) düzeltme terimlerini katarak AYDGAM için atomlararasi etkin çiftler potansiyel formu olusturulmustur. Elde edilen çiftler potansiyelleri sivilarin VMHNC integral yaklasimi için giris datasi olarak kullanilarak çalisilan sivi sistemlerinin statik yapi faktörleri S(q) ve çiftler dagilim fonksiyonlari g(r) elde edilmistir. Hesaplanan VMHNC sonuçlari ile deney sonuçlari arasinda genelde iyi bir uyum oldugunu gözlenmistir. Ayrica VMHNC yapi sonuçlari kullanilarak sistemlerin termodinamik özelliklerinden iç enerji, Helmholtz serbestlik enerjisi, entropi

gibi büyüklükleri hesaplanmis; sonuçlarin deney ile ayni egilimi gösterdigi bulunmustur. Tez anahatlari ile su sekilde düzenlenmistir:

2. bölümde, çalismada kullanilan Gömülü Atom Metodu (GAM), Analitik Yeniden Düzenlenmis Gömülü Atom Metod (AYDGAM)'lari verilmis, 3 bölümde bir önceki bölümde sunulan metodlar için Finnis-Sinclair FS etkin çiftler potansiyel yaklasimlari önerilmistir, 4 bölümde ise Rose hal denklemi, sivi yapi teorileri ve termodinamik özellikler anlatilmaktadir. Son bölüm elde edilen sonuçlara ve bu sonuçlarin tartisilmasina ayrilmistir.

# BÖLÜM 2

## HCP METALLER IÇIN GÖMÜLÜ ATOM METODLARI

Atomlararasi kuvvetlerin ampirik tanimlari sistemin çesitli kusurlarinin bilgisayar simulasyonlarinda siklikla kullanilir. Atomlararasi potansiyelleri tanimlamada pseudopotansiyel teorisinden hariç çok cisim potansiyelleri olarak adlandirilan potansiyel türü vardir ki iki dogrultuda gelismektedir. Ilki Daw-Baskes (Daw ve Baskes, 1983) "Gömülü Atom Metodu" digeri ise uzun menzilli çok cisim potansiyelleri olarak adlandirilan Finnis-Sinclair (FS) (Finnis ve Sinclair, 1984) potansiyelleridir. HCP metalleri için her iki dogrultuda da çalismalar yapilmistir. Biz bu tezde ilk öne sürülen basit GAM metodlarindan biri olan Zhang-Quyang (Zhang, Quyang, 1993) GAM metodunu, Analitik Yeniden Düzenlenmis Gömülü Atom Metodlarindan (AYDGAM) birbirinden farkli Hu-Xu, Hu-Zhang, Hu-Deng AYDGAM metodlari ile FS tipi son GAM metodlarindan Chen-Xu 'nun öne sürdügü metodu ele aldik.

Bu bölümde literatürde hcp metalleri ve metal alasimlari için öne sürülen GAM metodlarindan bes farkli metod ana hatlari ile verilmektedir.

### 2.1 Zhang-Quyang Gömülü Atom Metodu (ZQ-GAM)

Bu çalismada, Zhang ve Quyang (Zhang, Quyang, 1993); Johnson 'un hcp metalleri için gelistirdikleri basit GAM modelini (Johnson,1991); Oh ve Johnson 'un (Oh, Johnson, 1988) fcc alasimlarinda kullandiklari yaklasimla hcp alasimlarina genisletmislerdir. Zhang ve Quyang (ZQ) (Zhang, Quyang, 1993) Oh ve Johnson 'un gömülü atom metodunu (GAM) 11 hcp geçis metaline (Sc, Y, La, Ti, Zr, Hf, Tc, Re, Ru, Os ve Co) ve ikili alasimlarina uyarlamislardir. Bu modelde tek atomlu kristalin toplam iç enerjisi,

$$E_{top} = NE \tag{2.1}$$

denklemi ile verilir ve her bir atom için ortalama enerji,

$$E = F(r) + \frac{1}{2}\sum_m f_m(r_m) \tag{2.2}$$

ve elektron yogunlugu,

$$r = \sum_m N_m f(r_m) \tag{2.3}$$

denklemleriyle ifade edilir. Burada N kristaldeki atom sayisini, $F(r)$ atomun $r$ elektron yogunlugu içine gömme enerjisini, $r_m$ verilen merkezi atomdan komsu kabuk uzakligini, $f(r_m)$, birbirinden $r_m$ uzakliktaki atomlar arasindaki iki-cisim etkilesmesini, $N_m$ ise m. kabuktaki atom sayisini ve $f(r_m)$'de verilen atomdan $r_m$ uzagindaki bir baska atomun atomik elektron yogunlugunu göstermektedir. GAM metodunun düzgün uygulanabilmesi için f, $f$ ve F verilmelidir. Oh ve Johnson (Oh ve Johnson, 1988) 'a göre bu potansiyel fonksiyonlari sirasiyla asagida;

$$f(r) = f_e \exp\left[-b\left(r/r_e - 1\right)\right] \tag{2.4}$$

$$f(r) = f_e\left\{\exp\left[-g\left(r/r_e - 1\right)\right] - \frac{g}{b}\exp\left[-b\left(r/r_e - 1\right)\right]\right\} \tag{2.5}$$

$$F(r) = -E_c\left\{1 - \frac{a}{b}\ln\left(r/r_e\right)\right\}\left[\left(1 - \frac{1}{b}\ln\left(r/r_e\right)\right)^{-m} - m\left(1 - \frac{1}{b}\ln\left(r/r_e\right)\right)^{-1} + m\right]\left(\frac{r}{r_e}\right)^{a/b}$$

$$-6f_e\left[\left(\frac{r}{r_e}\right)^{g/b} - \frac{g}{b}\left(\frac{r}{r_e}\right)\right] \tag{2.6}$$

denklemleri ile verilir. Burada $a$ , boyutsuz parametredir ve

$$a = (9\Omega B/E_c)^{1/2} \tag{2.7}$$

formülünden bulunur. Burada O, atomik hacim, B ve $E_c$ saf metaller için sirasiyla hacim modülü ve kohesive (baglanma) enerjisidir. Model parametreleri $f_e, f_e$ ve $g$ sirasiyla,

$$f_e = \left((E_c - E_f)/\Omega\right)^{1/3} \tag{2.8}$$

$$f_e = 5\Omega G/(2g(g - b)) \tag{2.9}$$

$$g = 15\Omega G/(bE_f) \tag{2.10}$$

denklemleri ile verilir. Burada G kayma modülünü, $E_f$ bosluk olusum enerjisini gösterir. $b$ ayarlanabilir parametredir. $r_e$, $f_e$ cinsinden

$$r_e = 12 f_e \tag{2.11}$$

seklinde ifade edilir. m ise $f(r)$ için verilen mevcut üstel fonksiyon ile $F(r)$ nun fiziksel uyumunu saglayabilmek üzere, Rose hal denkleminin (Rose, 1984) gelistirilmesinden olusan parametredir. m sifirdan büyük olmak üzere $F(r)$' ya uygulanan tüm $r \le 10 r_e$ degerleri için $F''(r) \rangle 0$ sarti ile seçilir. Bu modelde bes giris parametresi, denge durumundaki sebeke sabiti a, baglanma enerjisi $E_c$, Bulk modülü B, shear modülü G ve unrelaxed bosluk olusturma enerjisi $E_f$ kullanilmaktadir. Zhang-Quyang'in 11 geçis hcp metali için kullandigi fiziksel giris parametreleri tablo 2.1'de verilmektedir.

Tablo 2.1: HCP geçis metalleri için ZQ-GAM giris parametreleri

| Metal | a (A) | $E_c$ (eV) | B (eV) | G (eV) | $E_f$ (eV) |
|---|---|---|---|---|---|
| Sc | 3.309 | 3.90 | 0.358 | 0.195 | 1.17 |
| Y | 3.647 | 4.37 | 0.229 | 0.161 | 1.34 |
| La | 3.774 | 4.47 | 0.152 | 0.093 | 1.34 |
| Ti | 2.950 | 4.85 | 0.686 | 0.365 | 1.563* |
| Zr | 3.231 | 6.25 | 0.608 | 0.265 | 1.771* |
| Hf | 3.195 | 6.44 | 0.691 | 0.380 | 1.93 |
| Te | 2.735 | 6.85 | 1.856 | 0.888 | 3.42 |
| Re | 2.760 | 8.03 | 2.321 | 1.11 | 4.02 |
| Ru | 2.751 | 6.74 | 1.967 | 1.244 | 3.37 |
| Os | 2.735 | 8.17 | 2.602 | 1.311 | 4.08 |
| Co | 2.507 | 4.39 | 1.216 | 0.569 | 1.76** |

* (Kraftmakher, 1970), ** (Kamel, 1965)

Tablo 2.1'de verilen giris parametrelerinden hesaplanan model parametreleri $f_e, f_e$, $g$ , $b$ ve m, Tablo 2.2'de verilmektedir.

Tablo 2.2: HCP geçis metalleri için ZQ-GAM model parametreleri

| Metal | $f_e$ | $f_e$ (eV) | $b$ | $g$ | m |
|---|---|---|---|---|---|
| Sc | 0.474 | 0.250 | 6 | 10.675 | 2.3 |
| Y | 0.445 | 0.311 | 6 | 10.303 | 2.8 |
| La | 0.435 | 0.383 | 5 | 7.914 | 2.7 |
| Ti | 0.566 | 0.340 | 6 | 10.598 | 1.6 |
| Zr | 0.573 | 0.606 | 6 | 8.992 | 2.1 |
| Hf | 0.580 | 0.361 | 6 | 11.352 | 2.5 |
| Te | 0.619 | 1.009 | 6 | 9.390 | 2.5 |
| Re | 0.646 | 0.933 | 6 | 10.309 | 2.6 |
| Ru | 0.595 | 0.444 | 6 | 13.586 | 2.8 |
| Os | 0.656 | 0.726 | 6 | 11.621 | 3.3 |
| Co | 0.618 | 0.536 | 6 | 9.005 | 2.1 |

Tablo 2. 2 de verilen $f_e, f_e$, $g$ , $b$ ve m boyutsuz parametrelerdir.

## 2.2 Analitik Yeniden Düzenlenmis Gömülü Atom Metodu (AYDGAM)

Son yillarda, metaller ve metal alasimlarinin bilgisayar simulasyon (benzetisim) çalismalarinda kullanilan ampirik ve yari ampirik metotlar hizla gelistirilmektedir. Yogunluk fonksiyonel teorisine dayanan Daw Baskes'in gömülü atom metodu GAM (Baskes, 1992), fcc'ye veya neredeyse dolu d bandi geçis metallerine, bcc metallerinede basarili bir sekilde uygulanmistir. Finnis ve Sinclair (Finnis ve Sinclair,1984) siki bagli yaklastirmaya dayali N-cismli potansiyel metodu türetmis ve özgün biçimde bcc veya yari dolu d bandi geçis metallerine uygulamistir. FCC metalleri için GAM'in bir analitik en yakin komsu modeli Johnson (Johnson,1988) tarafindan gelistirildi. Baskes (Baskes, 1987), GAM'i yönergesel bagi içermesi için modifiye etti ve onu silikona uyguladi. Brenner, bu silikon potansiyellerden birinin analitik seklini, karbon, oksijen ve hidrojen sistemlerini modellemek için kullandi. Bu ilk kez kullanilan Analitik Yeniden düzenlenmis Gömülü Atom Metodu (AYDGAM) olarak gösterilebilir. Silikon GAM modeli Baskes, Nelson ve Wright tarafindan yeniden düzenlenmis gömülü atom metodu (YDAGAM)' in gelistirildigi yer olan silikon-germanium sistemine genisletilmistir (Baskes 1989). YDAGAM 'in ilk versiyonunda bir sürü yetersizlik tanimlanmistir. Bunlar, boslukta içe dogru genisleme, asiri genis bir istif bozukluk enerjisi ve sadece nitel olarak dogru olan küçük küme tahminleridir.Yeni hesaplamalar boslukta genislemenin içe dogru olmasi gerektigi yönündedir, ama Baskes (Baskes,1992) in sundugu metot orijinal YDAGAM 'e yeterince yakindir ve bu tür sorularin çözümleri beklenmemektedir. Savino, Rao ve Pasianot (Savino, 1988) ikinci düzen invaryantlara dayanan YDGAM ile ilgili bir metot gelistirdiler. Bu metotlarin hepsi matematiksel olarak benzer ve ortak bir özellige sahiptir. Iki atom arasindaki etkilesim onlarin yerel çevrelerine baglidir. Hacim etkilerinden farkli olarak atomik çevrenin önemli bir sekilde degisik oldugu yer olan metalik yüzeylerdeki etkileri tahmin etmede YDGAM metotlarinin büyük ölçüde basarili oldugu bir gerçektir. YDAGAM'i genisletmek ve genis yelpazeli bir uygulanabilirligini göstermek için bir sürü ögeye uygulamak gerekir (Baskes,1992). Bu genisleme ampirik olarak yapilmistir ve GAM ile N cisimli potansiyel metotlarinin sahip oldugu gibi güçlü fiziksel tartismalarla hakli gösterilmemistir. Baskes (Baskes, 1992) makalesinde; bu noktada amacin, sadece ele alinan maddelerin tümü için en elverisli potansiyelleri elde etmek olmadigini, amacinin

daha çok, atomistik hesaplamalar için kullanilabilecek bir yapi olusturmak oldugunu belirtmektedir. Metodun gelistirilmesinde önemli bir temanin hesaplamada basitlik ve böylece etkilesimlerin, kolayca, genis moleküler dinamik veya Monte Carlo simülasyonlari için kullanilabilir olacagi belirtilmistir. Baskes'e göre YDAGAM sadece metallere ve yari iletkenlere uygulanmayacak; metod öyle bir gelistirecektir ki iki atomlu gaz elementlerine uygulanabilir olacaktir (Baskes, 1992). Bu metotlari genisletme sürecinde bütün kristal yapilar (bcc ve hcp dahil) için ilk komsu etkilesimlerine bir basitlestirmenin mümkün oldugu, buna ek olarak gömme fonksiyonunun basit bir analitik modelinin ele alinan elementlerin hepsinin temel özelliklerini taklit etmek için yeterli oldugu bulunmustur (AYDGAM). Baskes'in YDGAM metodunun ana hatlari asagida verilmektedir.

Gömülü atom metodunda tüm atomlarin toplam enerjisini veren temel denklem,

$$E = \sum_i \left( F_i(r_i) + \frac{1}{2} \sum_{j(\neq i)} f_{ij}(R_{ij}) \right) \tag{2.12}$$

burada toplam i. ve j. atomlari üzerindendir. $F_i$ gömme fonksiyonu, $r_i$ i. tür atomun elektron yogunlugudur. $f_{ij}$ ise birbirinden $R_{ij}$ kadar uzaktaki i ve j atomlari arasindaki çiftler etkilesim fonksiyonudur.

Denklem (2.1) bütün atomlarin birbirleriyle etkilesimlerinin toplamidir. Her bir atomun toplam enerjiye direkt katkisini veren ifade $E_i$'dir, ve de dolayli olarak o atomun komsulariyla etkilesimleri de enerjiye katkida bulunur.

$$E_i = F_i(r_i / Z_i) + \frac{1}{2} \sum_{j(\neq i)} f_{ij}(R_{ij}) \tag{2.13}$$

Burada basitlik için background (arka plandaki) elektron yogunlugu $r_i$ en yakin komsu atomlarin sayisi $Z_I$ ile yeniden normalize edilmektedir. Kati fazinda dengede olan elementler için, fcc yapisinda ise $Z_I = 12$, bcc ler için $Z_I = 8$ dir. Elmas kübik kristal yapisindakiler için $Z_I = 4$ dir. (2.13) denklemindeki $F(r)$ gömme fonksiyonu olup,

$$F_i(r) = A_i E_i^0(r) \ln r \tag{2.14}$$

denklemi ile verilebilir. Bu denklemde A ayarlanabilir parametre, $E_I^O$ süblimlesme enerjisidir yada referans sebeke yapisinin minimum enerji degeridir. Ayrica enerji fonksiyonunun en yakin komsu uzakligi $r_1$'e bagli olarak ifadesi Rose hal denklemine göre (Rose, 1984)

$$E(r_1) = -E_c\left[1 + a\left(r_1 / r_e - 1\right)\right]\exp\left[-a\left(r_1 / r_e - 1\right)\right] \tag{2.15}$$

ve

$$a^2 = 9\Omega B / E_c \tag{2.16}$$

ile verilir. (2.15) denklemindeki $r_e$, $\Omega$ ve B sirasiyla en yakin komsu uzakligi, atomik hacim ve bulk modülüdür ve bu degerler denge durumlarindaki degerleridir. Bunlarin kullanim sekli,

$E\big|_e = E_c$, $dE/dr_1\big|_e = 0$ ve $d^2E/dr_1^2\big|_e = 9\Omega B / r_e^2$ dir. (hcp ve fcc için $r_e^3 = \sqrt{2}\Omega$ )

Ayrica (2.13) denkleminde yogunluk fonksiyonu bir seri toplami olarak ifade edilir ve bu fonksiyona katki saglayan terimler,

$$r^{(0)} = \sum_u f^{(0)}(r^u) \tag{2.17}$$

$$(r^{(1)})^2 = \sum_t \sum_{u,v} f^{(1)}(r^u) f^{(1)}(r^v) \frac{r_i^u r_i^v}{r^u r^v} \tag{2.18}$$

$$(r^{(2)})^2 = \sum_{i,j} \sum_{u,v} f^{(2)}(r^u) f^{(2)}(r^v) \frac{r_i^u r_j^u r_i^v r_j^v}{r^u r^v} - \frac{1}{3}\sum_{u,v} f^{(2)}(r^u) f^{(2)}(r^v) \tag{2.19}$$

$$(r^{(3)})^2 = \sum_{i,j,k} \sum_{u,v} f^{(3)}(r^u) f^{(3)}(r^v) \frac{r_i^u r_j^u r_k^u r_i^v r_j^v r_k^v}{(r^u r^v)^3} \tag{2.20}$$

denklemleri ile verilir. Bu denklemlerde $f^{(h)}(r)$ azaltilmis katkili radyal fonksiyonu, u ve v ise sorudaki komsu atomlarin yerini gösterir. i, j ve k üç boyutlu koordinati gösterir. Bireysel katkilar, üstelce azaltmak için farzedilir sonuç olarak

$$f^{(h)}(r) = \exp\left[-b^{(h)}(r/r_e - 1\right] \tag{2.21}$$

HCP yapilar için ideal c/a oraninda tanimlanan denge durumundaki elektron yogunlugu,

$$r_e = 12\exp(t^{(3)}/864) \tag{2.22}$$

denklemi ile verilir. Burada $t^{(3)}$ terimi, hcp yapi içinde ters simetrik eksikligini ifade etmektedir. Iki cisim potansiyeli ise

$$f(r) = -\frac{1}{6}E_c\left\{\left[1 + a\left(r/r_e - 1\right)\right]\exp\left[-a\left(r/r_e - 1\right)\right] + A\left[r^*(r)/r_e\right]\ln\left[r^*(r)/r_e\right]\right\} \tag{2.23}$$

ve

$$r^*(r) = r_e\exp\left(-b^{(0)}\left(r/r_e - 1\right) + \left(t^{(3)}/864\right)\left\{\exp - 2\left[b^{(3)} - b^{(0)}\left(r/r_e - 1\right)\right] - 1\right\}\right) \tag{2.24}$$

verilir. Burada $b^{(h)}$ atomik yogunluk içinde exponansiyel bozulma çarpanidir.

### 2.2.1. Hu-Xu Analitik Analitik Yeniden Düzenlenmis Gömülü Atom Metodu (HX-AYDGAM)

Baskes ve Johnson (Baskes, Johnson, 1992, 1994) YDGAM modellerini tasarlarken elektron yogunlugunu baslangiç noktasi olarak algilar. GAM'daki küresel olarak ortalamasi alinmis atomik yogunluklarinin lineer süperposizyonu olan elektron yogunlugu YDGAM'da açi terimine bagli olarak artirilmis olmalidir. Hu-Xu 'nun sundugu YDGAM modelindeki metod Zhang-Quyang 'dan farklidir (Zhang-Quyang, 1999). Küresel olarak ortalamasi alinmis atomik elektron yogunluklarinin lineer süperposizyonunu kullanarak GAM dan hesaplanmis atomlar sisteminin enerjisi ile sistemin toplam enerjisi arasindaki farki ifade etmek için GAM daki toplam enerji ifadesine M(P) gibi bir enerji terimi eklenmektedir. HCP metalleri için Analitik Yeniden Düzenlenmis Gömülü atom Metodunda toplam enerji

$$E_{top} = F(r) + \frac{1}{2}\sum_m \Phi(r_m) + M(P). \tag{2.25}$$

Burada , $F(r)$ gömme enerjisi, $\Phi(r)$, etkin iki-cisim potansiyeli M(P) ise enerji düzeltme terimidir. , $F(r)$

$$F(r) = -F_0\left[1 - n\ln\left(\frac{r}{r_e}\right)\right]\left(\frac{r}{r_e}\right)^n \tag{2.26}$$

seklindedir. Burada $r_e$ denge durumundaki elektron yogunlugunu gösterir. n ayarlanabilir boyutsuz parametredir ve her element için spesifik degeri potansiyel egrinin sekline göre belirtilir. $F_0$ fonksiyonu, $F_0 = E_c - E_{1f}$ (Johnson, 1989) olarak alinmistir. $r$ misafir (host) elektron yogunlugu,

$$r = \sum_m f(r_m) \tag{2.27}$$

denklemi ile ifade edilir. $f(r)$ atomik elektron yogunluk fonksiyonu olup,

$$f(r) = f_e\left(\frac{r_1}{r}\right)^6 \tag{2.28}$$

denklemi ile verilir. Bu denklemde $r_1$ denge durumundaki en yakin komsu uzakligidir. $f_e$ denge durumdaki elektron yogunlugu olup, boyutsuz parametredir ve $f_e = \sqrt{\frac{E_c}{\Omega}}$ ile ifade edilir, $\Omega$ atomik hacimdir. M(P) enerji düzeltme terimi,

$$M(P) = a\left(\frac{P}{P_e} - 1\right)^2 \exp\left[-\left(\frac{P}{P_e} - 1\right)^2\right] \tag{2.29}$$

denklemi ile ifade edilir. $a$ model parametresi, $P_e$ , P argümaninin denge durumdaki degeridir.

$$P = \sum_m f^2(r_m)\frac{r_{mx}^2 + r_{my}^2 + br_{mz}^2}{r_m^2} \tag{2.30}$$

seklindedir. Burda $b$ es yönsüzlük parametresi, $r_m$ komsudan ayrilma mesafesi, $r_{mx}, r_{my}, r_{mz}$ $r_m$'ye bagli koordinat bilesenleridir. $\Phi(r)$, etkin iki-cisim potansiyeli

$$\Phi(r) = k_0 + k_1\left(\frac{r}{r_1}\right)^2 + k_2\left(\frac{r}{r_1}\right)^3 + k_3\left(\frac{r}{r_1}\right)^4 + k_4\left(\frac{r}{r_1}\right)^{-6} + k_5\left(\frac{r}{r_1}\right)^{-12} \tag{2.31}$$

denklemi ile verilir. Burada $k_i$ (i=0,1,2,3,4 ve 5) model parametreleridir. Bu modelde genel olarak model parametrelerinin sistemin kati durum özelliklerinden; sebeke sabitleri a ve c, kohesive enerjisi $E_c$, tek bosluk olusum enerjisi $E_{1f}$ ve elastik sabitler $C_{11}$, $C_{12}$, $C_{44}$, $C_{13}$ ve $C_{33}$ fit edilerek bulundugu belirtilmistir. Orijinal çalismada kullanilan fiziksel parametreler tablo 3'de listelenmistir. Hu-Xu 'nun AYDGAM modelinde yedinci komsu uzakligiyla atomik etkilesim dikkate alinmistir. HCP metallerinin bes elastik sabitesi (Johnson, 1972) hesaplanmistir. Elastik sabitler için bes

denklem yazilir. $C_{11}$ ve $C_{44}$ arasindaki iliski kadar $C_{11}$ ve $C_{12}$ arasindaki iki Cauchy iliskisinden iki parametre $(a, b)$ belirlenir. Kübik spline fonksiyonu yedi ve sekizinci komsu uzakliklari arasindaki potansiyeli kesmek için kullanilir. Kesme prosedürü düzgün karsilastirma degerlerine sahip ve baslangiç noktasinda hesaplanan potansiyele yön veren bir kesme potansiyeldir. $r_s = \sqrt{a^2 + c^2}$ ,ve sifir degere sahip ve son noktaya yön veren $r_c = \frac{1}{4}\left(6a + \sqrt{a^2 + c^2}\right)$ , elektron yogunluklu kesme prosedürü bir denge kadar farklidir. Bu modelde çiftli potansiyeli $r_c$ nin kesme uzakliklari içindeki elektron yogunlugu kullanarak hesaplanmistir. Hu-Xu modelinde kullanilan giris parametreleri tablo 2.3'te verilmistir.

Tablo 2.3: HCP metalleri için HX-AYDGAM giris parametreleri: ( a ve c lattice sabitleri, $E_c$ kohesive enerji, $E_{1f}$ tek degerli olusum enerjisi, $C_{mn}$ elastik sabitler)

| Element | a (A) | c (A) | $E_c$ (eV) | $E_{1f}$ (eV) | $C_{11}$ (GPa) | $C_{12}$ (GPa) | $C_{44}$ (GPa) | $C_{13}$ (GPa) | $C_{33}$ (GPa) |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| Mg | 3.2094 | 5.2105 | 1.51 | 0.75 | 59.3 | 25.7 | 16.4 | 21.4 | 61.5 |
| Sc | 3.3080 | 5.2670 | 3.9 | 1.15 | 99.3 | 39.7 | 27.2 | 29.4 | 107 |
| Y | 3.6474 | 5.7306 | 4.37 | 1.25 | 77.9 | 29.2 | 24.3 | 20.0 | 76.9 |
| Pr | 3.6702 | 5.9140 | 3.70 | 0.81 | 49.4 | 23.0 | 13.6 | 14.3 | 57.4 |
| Nd | 3.6582 | 5.9010 | 3.40 | 0.88 | 54.8 | 24.6 | 15.0 | 16.6 | 60.9 |
| Gd | 3.6315 | 5.7770 | 4.14 | 1.13 | 66.7 | 25.0 | 20.7 | 21.3 | 71.9 |
| Tb | 3.5990 | 5.6960 | 4.05 | 1.18 | 69.2 | 25.0 | 21.8 | 74.4 | 21.8 |
| Dy | 3.5923 | 5.6545 | 3.04 | 1.22 | 74.0 | 25.5 | 24.3 | 21.8 | 78.6 |
| Ho | 3.5761 | 5.6174 | 3.14 | 1.27 | 76.5 | 25.6 | 25.9 | 21.0 | 79.6 |
| Er | 3.5590 | 5.5920 | 3.29 | 1.32 | 84.1 | 29.4 | 27.4 | 22.6 | 84.7 |

Örgü sabitleri a ve c'nin; kohezyon enerjisi $E_c$' nin; tek degerli olusum enerjisi $E_{1f}$ ve fiziksel giris parametreleri olarak bes elastik sabite $C_{11}$,$C_{12}$,$C_{44}$,$C_{33}$ ve $C_{13}$ fit edilen model parametreleri n, $F_0$, a, ß, $k_0$, $k_1$, $k_2$, $k_3$, $k_4$ ve $k_5$ tablo 2.4'de verilmistir.

Tablo 2.4 : Hcp metalleri için HX-AYDGAM model parametreleri

| | Mg | Sc | Y | pr | Nd | Gd | Tb | Dy | Ho | Er |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| n | 0.74 | 0.61 | 0.53 | 0.23 | 0.15 | 0.32 | 0.26 | 0.26 | 0.22 | 0.37 |
| $f_e$ | 0.0529 | 0.0791 | 0.0633 | 0.0558 | 0.0539 | 0.0617 | 0.0630 | 0.0552 | 0.0570 | 0.0591 |
| $F_0$(eV) | 0.76 | 2.75 | 3.12 | 2.89 | 2.52 | 3.01 | 2.87 | 1.82 | 1.87 | 1.97 |
| a (eV) | -0.0272 | -0.1096 | -0.1245 | 0.0150 | 0.0267 | -0.0336 | -0.0272 | -0.0327 | -0.0421 | -0.0595 |
| ß (eV) | 27.548 | 2.6828 | 4.2063 | -0.9455 | -0.5966 | -16.544 | -6.1589 | -6.8366 | -8.3442 | -22.615 |
| $k_5$(eV) | 0.0547 | 0.1102 | 0.1175 | 0.0702 | 0.0887 | 0.1079 | 0.0862 | 0.1131 | 0.0908 | 0.1210 |
| $k_4$(eV) | 0.0025 | -0.0327 | -0.0382 | -0.0285 | -0.0788 | -0.0577 | 0.0525 | -0.0395 | 0.0766 | -0.0323 |
| $k_3$(eV) | 0.1322 | 0.1068 | 0.0456 | 0.1124 | 0.0932 | 0.0857 | 0.1389 | 0.0530 | 0.1293 | 0.0541 |
| $k_2$(eV) | -0.6665 | -0.5502 | -0.2417 | -0.5636 | -0.4642 | -0.4360 | -0.7154 | -0.2772 | -0.6696 | -0.2856 |
| $k_1$(eV) | 0.9476 | 0.8173 | 0.3930 | 0.8007 | 0.6554 | 0.6422 | 1.0614 | 0.4374 | 1.0101 | 0.4577 |
| $k_0$(eV) | -0.5728 | -0.5723 | -0.3671 | -0.4914 | -0.3995 | -0.4523 | -0.7406 | -0.3802 | -0.7460 | 0.4120 |

### 2.2.2. Hu-Zhang Analitik Yeniden Düzenlenmis Gömülü Atom Metodu (HZ-AYD GAM)

Bu modelde Hu ve Zhang (Hu ve Zhang, 2001) , GAM ‘dan hesaplanan ile atomik sisteminin gerçek toplam enerjisi arasindaki farki ifade etmek için GAM ‘in toplam enerji ifadesine M(P) düzeltme terimi eklemislerdir. Atomik sistemler için toplam enerji denklemi,

$$E_{top} = \sum E_i \tag{2.32}$$

ile verilir. Burada $E_i$ , i. atomun enerjisidir ve

$$E_i = F(r_i) + \frac{1}{2}\sum \Phi(r_{ij}) + M(P_i) \tag{2.33}$$

seklinde ifade edilir. Denklem (2.33) daha basit ifadeyle

$$E = F(r) + \frac{1}{2}\sum_m \Phi(r_m) + M(P) \tag{2.34}$$

olarak yazilabilir. Üstteki denklemde m, m. komsu uzakligi ve M(P) enerji düzeltme terimidir. Düzeltme enerjisi M(P) , orijinal GAM’da atomik elektron yogunlugunun lineer toplami kabulunü düzeltmek için elektron yogunlugunun ikinci derece toplami olarak gösterilen, P argümanin bir fonksiyonu olarak

$$M(P) = a\left\{1 - \exp\left[-\left[\ln\left|\frac{P}{P_e}\right|\right]^2\right]\right\} \tag{2.35}$$

denklemi ile verilir. Host elektron yogunlugunun gerçek ifadesi,

$$r = \sum_m f(r_m) \tag{2.36}$$

ve enerji düzeltme teriminin argümani P,

$$P = \sum_m f^2(r_m) \frac{r_{mx}^2 + r_{my}^2 + b r_{mz}^2}{r_m^2}, \tag{2.37}$$

ifadesinde $r_{mx}, r_{my}, r_{mz}$; $r_m$ vektörünün bilesenlerini göstermektedir. Seçilen m. atomun yer vektörünün bilesenleri z eksenine paralel olup, c ekseni hekzoganal sebeke ve x, y eksenleri ise temel düzlemdedir. Atomun orijin disinda herhangi bir $(x_m, y_m, z_m)$ noktasindaki enerji düzeltme teriminin argümani P'nin ifadesi, orjindeki atomun koordinatlari $(x_0, y_0, z_0)$ cinsinden

$$P = \sum_m f^2(r_m) \frac{(x_m - x_0)^2 + (y_m - y_0)^2 + b(z_m - z_0)^2}{(x_m - x_0)^2 + (y_m - y_0)^2 + b(z_m - z_0)^2} \tag{2.38}$$

seklinde yazilabilir. Burada $(x_m, y_m, z_m)$ atomlari çevreleyen koordinatlari ve $r_m$ ise atomu çevreleyen diger atom arasindaki uzaklik olarak dikkate alinmistir. Böylece mevcut potansiyelin kristal eksenlerinin yönünün taninmasi fiziksel problemlere uygulanabilir. Atomik yogunluk fonksiyonu $f(r)$ ve gömme fonksiyonu $F(r)$ (Johnson, Oh 1989)

$$f(r) = f_e \left( \frac{r_1}{r} \right)^6 \tag{2.39}$$

$$F(r) = -F_0 \left[ 1 - n \ln \left( \frac{r}{r_e} \right) \right] \left( \frac{r}{r_e} \right)^n \tag{2.40}$$

ifadeleri ile gösterilir. Bu modelde (2.40) denklemindeki $F_0 = E_c - E_{1f}$. $f_e$ denge durumundaki atomik yogunluk fonksiyonu olup, boyutsuz parametredir ve (Johnson, Oh 1989) dan alinmistir. $r_e$ ve $P_e$ denge durumu degerleridir. n ayarlanabilir

parametredir ve bunlar her bir element için özgül degerleri deneysel enerji hacim iliskilerini veren Rose hal denkleminden ayarlanarak belirlenir (Rose 1984). Bu modeldeki potansiyelde yedinci komsu mesafesinden potansiyelin disari çiktigi düsünülmüs ve bu degerde $r_c$ , potansiyel kesilmistir $\left(f(r_c)=0\right)$. $r_c$ mesafesi

$$r_c = \frac{1}{4}\left(6a + \sqrt{a^2 + c^2}\right) \tag{2.41}$$

olarak tanimlanmistir. Böylece atomik yogunluk fonksiyonu $f(r)$; kisaltilmis özgül kesim mesafesi olarak tanimlanan

$$r_{ce} = 2a + \frac{3}{4}\left(\sqrt{\frac{13}{3}a^2 + \frac{1}{4}c^2} - 2a\right) \tag{2.42}$$

$r_{ce}$' den büyük degerler için $f(r)$ sifira esitlenir. Bosluk olusum enerjisi $E_{1f}$ ,enerji farkliligi kristal ile bir bosluk örgü ayni numarali atomlari yerini kapsiyor. Formül olarak gösterimi çiftler potansiyeli cinsinden yazilabilir ve asagidaki ifadeye fitlenebilir.

$$E_{1f} = -\frac{1}{2}\sum_m f(r_m) \tag{2.43}$$

Kullanilan çiftler potansiyel fonksiyonu,

$$\Phi(r) = k_{-1}\left(\frac{r}{r_1}\right)^{-1} + k_0 + k_1\left(\frac{r}{r_1}\right)^{1} + k_2\left(\frac{r}{r_1}\right)^{2} + k_3\left(\frac{r}{r_1}\right)^{3} + k_4\left(\frac{r}{r_1}\right)^{4} + k_5\left(\frac{r}{r_1}\right)^{5} + k_6\left(\frac{r}{r_1}\right)^{6} \tag{2.44}$$

seklinde verilir. Hu-Zhang modelinde kullanilan giris parametreleri Tablo 2.5'te ve model parametreleri Tablo 2.6' da verilmistir.

Tablo 2.5: HCP metalleri için HZ-AYDGAM giris parametreleri ( a ve c lattice sabitleri, $E_c$ kohesive enerji, $E_{1f}$ bir degerli olusum enerjisi, $C_{mn}$ elastik sabitler)

| Element | a (A) | c (A) | $E_c$ (eV) | $E_{1f}$ (eV) | $C_{11}$ (GPa) | $C_{12}$ (GPa) | $C_{44}$ (GPa) | $C_{13}$ (GPa) | $C_{33}$ (GPa) |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| Be | 2.2856 | 3.5832 | 3.32 | 1.11 | 292.3 | 26.7 | 162.4 | 14 | 246 |
| Co | 2.497 | 4.069 | 4.39 | 1.35 | 295 | 159 | 71 | 111 | 335 |
| Mg | 3.2094 | 5.2105 | 1.51 | 0.58 | 59.3 | 25.7 | 16.4 | 21.4 | 61.5 |
| Sc | 3.3080 | 5.2670 | 3.9 | 1.15 | 99.3 | 39.7 | 27.2 | 29.4 | 107 |
| Ti | 2.9506 | 4.6788 | 4.85 | 1.50 | 160 | 90 | 46.5 | 66 | 181 |
| Y | 3.6474 | 5.7306 | 4.37 | 1.25 | 77.9 | 28.5 | 24.31 | 21.0 | 76.9 |
| Zr | 3.2312 | 5.1477 | 6.25 | 1.70 | 144 | 74 | 33.4 | 67 | 166 |
| Hf | 0.31946 | 0.50511 | 6.44 | 1.80 | 181 | 77 | 55.7 | 66 | 197 |
| Re | 0.27600 | 0.44580 | 8.03 | 2.3 | 616 | 273 | 161 | 206 | 683 |
| Ru | 0.27057 | 0.42816 | 6.74 | 1.85 | 563 | 188 | 181 | 168 | 535 |

Tablo 2.6: Hcp metalleri için HZ-AYDGAM model parametreleri

| | Be | Co | Hf | Mg | Re | Ru | Sc | Ti | Y | Zr |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| n | 0.98 | 0.58 | 0.32 | 0.75 | 0.48 | 0.58 | 0.70 | 0.48 | 0.60 | 0.53 |
| $F_0(eV)$ | 2.21 | 3.04 | 4.64 | 0.93 | 5.73 | 4.89 | 2.75 | 3.35 | 3.12 | 4.55 |
| a (eV) | -0.4798 | 0.01422 | 0.01656 | -0.0384 | 0.04182 | -0.2294 | -0.1473 | 0.03005 | -0.1496 | 0.00604 |
| ß (eV) | 1.00490 | -1.2182 | -0.9289 | 3.76607 | -0.9303 | 1.21617 | 1.76217 | -0.9450 | 1.93961 | -1.0284 |
| $k_{-1}$ (eV) | 154.410 | 123.185 | 196.078 | 103.569 | 803.604 | 257.768 | 278.060 | 169.887 | 227.685 | 159.684 |
| $k_0$ (eV) | -699.29 | -541.74 | -897.48 | -480.43 | -3777.7 | -1094.2 | -1327.2 | -806.22 | -1078.0 | -737.50 |
| $k_1$ (eV) | 1352.70 | 1009.10 | 1758.20 | 945.667 | 7520.87 | 1958.03 | 2692.65 | 1637.53 | 2175.94 | 1459.80 |
| $k_2$ (eV) | -1457.1 | -1038.2 | -1918.9 | -1026.4 | -8243.2 | 1933.9 | -3011.7 | -1847.0 | -2429.2 | -1610.1 |
| $k_3$ (eV) | 946.627 | 639.281 | 1261.61 | 664.156 | 5360.53 | 1150.51 | 2005.28 | 1247.62 | 1619.29 | 1068.40 |
| $k_4$ (eV) | -371.3 | -235.94 | -499.29 | -256.28 | -2076.7 | -416.33 | -794.62 | -503.61 | -644.08 | -425.73 |
| $k_5$ (eV) | 81.3505 | 48.3404 | 109.947 | 54.6063 | 443.583 | 85.4510 | 173.495 | 112.266 | 141.461 | 94.1193 |
| $k_6$ (eV) | -7.6651 | -4.2398 | -10.371 | -4.9557 | -40.317 | -7.6976 | -16.101 | -10.646 | -13.228 | -8.8869 |

### 2.2.3. Hu-Deng Analitik Yeniden Düzenlenmis Gömülü Atom Metodu (HD-AYDGAM)

Uzayin homojenligi ve izotropisi ile uyusan sürekli çevirmeler veya dönmeler altinda fiziksel uzayin temel degismezligi sebebiyle potansiyel enerji, koordinatlarin orijinindeki herhangi bir degisiklik veya koordinat eksenlerin herhangi bir dönmesi altinda degismez olmalidir. Ancak, bir önceki Hu-Xu AGAM etkilesim modelinde bu dönmeler altinda degismez degildir. Bu modellerinde Hu-Deng potansiyelleri gelistirmistir.. Daha önceden tanimlandigi gibi parametreler dogru Cauchy iliskilerine konmali ve parametrelerinin sayisi spesifik kristalin Cauchy iliskileri ile ayni olmalidir. Ayrica bu sayi kristal simetrisi ile de yani yeni kristal sisteminin simetri isleminin bagimsiz parametrelerinin sayisi ile ilgilidir. Triklinik için 6, monoklinik için 4 orthorhombic için 3, tetrogonal, trigonal ve hekzogonal için 2, kübik için 1 parametre vardir. Bu modelde modifikasyon terimlerinin sayisi Cauchy iliskileri ile aynidir, potansiyelin degismezligi saglamak için her bir terimin sadece bir parametresi vardir. Modifikasyon terimlerinin tartismalari yüksek düzey elektron yogunlugunun atomik elektron yogunlugunun linear süperpozisyonunun uyusmazligini düzeltmek için toplamalidir. Bu düzende uyum saglamis fiziksel özellikler kohesive enerji $E_c$, bosluk olusum enerjisi $E_{1f}$, bes bagimsiz ikinci düzey esnek sabitler ve hekzogonal yapinin iki örgü sabiti a ve c dir. Tüm bu nicelikler tablo 1 özetleniyor. Bu düzende atomlar sisteminin toplam enerjisinin temel denklemi

$$E_{top} = \sum E_i \tag{2.45}$$

i bölgesindeki bir atomun katkisi,

$$E_{top} = F(r_i) + \frac{1}{2}\sum_j \Phi(r_{ij}) + M(P_i) + N(Q_i) \tag{2.46}$$

ifadesi ile verilir. Bu enerji ifadesinde $r_i$,

$$r_i = \sum_j f(r_{ij}) \tag{2.47}$$

ev sahibi elektron yogunlugunudur. Bu çalismada ise sadece bir elektron yogunluk fonksiyonu kullanilir ve

$$f(r_{ij}) = f_e \left( \frac{r_1}{r_{ij}} \right)^{4.5} \left( \frac{r_{ce} - r_{ij}}{r_{ce} - r_1} \right)^2 \tag{2.48}$$

olarak tanimlanir. Burada $f_e$ boyutsuz parametre ve Johnson 'nun (Johnson,1989) yaptigi gibi 1 alinir. $f(r)$, $r_{ce}$ de kesilir; $r_{ce} = r_8 + k_c(r_9 - r_8)$, $r_8$ ve $r_9$ sirasiyla gerçek c/a oraniyla hcp kristalinin 8 inci ve 9 uncu en yakin komsu uzakligidir; $k_c$, çift potansiyel ve kristal kararliliginda titresim saglamayan ayarlanabilir parametredir. r , $r_{ce}$ den daha büyükse $f(r)$ sifirdir. $r_1$ en yakin komsu uzakligidir. M(P) ve N(Q) ise modifikasyon terimleridir. Bu çalismada modifikasyon terimlerinin sayisi Cauchy iliskisi ile aynidir. Potansiyelin degismezligini saglamak için her bir terimin sadece bir parametresi vardir. Modifikasyon terimlerinin tartismasi, yüksek düzey elektron yogunlugunun, atomik elektron yogunlugunun lineer (çizgisel) süperpozisyonunun uyusmazligini düzeltmenin toplamidir. Enerji modifikasyon terimleri deneysel olarak,

$$M(P_i) = a \left\{ 1 - \exp\left[ -10000 \left( \ln\left( \frac{P_i}{P_e} \right) \right)^2 \right] \right\} \tag{2.49}$$

$$N(Q_i) = b \left\{ 1 - \exp\left[ -10000 \left( \ln\left( \frac{Q_i}{Q_e} \right) \right)^2 \right] \right\} \tag{2.50}$$

alinir. Burada $a$ ve $b$ eV boyutunda model parametreleridir, $P_e$ ve $Q_e$ 0 $^oK$ deki denge degerleridir. $P_i$ ve $Q_i$ ,

$$P_i = \sum_m f^2(r_m) \tag{2.51}$$

$$Q_i = \sum_m f^3(r_m) \tag{2.52}$$

seklindedir. Gömme enerji ifadesi ise,

$$F(r_i) = -F_0\left[1 - n\ln\left(\frac{r_i}{r_e}\right)\right]\left(\frac{r_i}{r_e}\right)^n \tag{2.53}$$

seklindedir. Burada $r_e$ 0 $^oK$ deki denge durumundaki yogunlugun degeridir. Burada $F_0 = E_c - E_{1f}$

$E_c$, cohesive (baglanma) enerjisi, $E_{1f}$ ise birinci degerlik enerjisi dir. n ayarlanabilir parametredir ve her bir element için deneysel degeri (Rose,1989) ilk komsu uzakligi içinde atomik yerlesme için makul degeri saglayan deneysel enerji-hacim iliskisine uyarak belirlenir.

Toplam enerjisindeki $f(r_{ij})$ ise etkin çiftler potansiyelidir ve

$$\Phi(r_{ij}) = k_{-1}\left(\frac{r_{ij}}{r_1}\right)^{-1} + k_0 + k_1\left(\frac{r_{ij}}{r_1}\right)^1 + k_2\left(\frac{r_{ij}}{r_1}\right)^2 + k_3\left(\frac{r_{ij}}{r_1}\right)^3 + k_4\left(\frac{r_{ij}}{r_1}\right)^4 + k_5\left(\frac{r_{ij}}{r_1}\right)^5 + k_6\left(\frac{r_{ij}}{r_1}\right)^6 \tag{2.54}$$

seklinde alinir. Hu-Deng ’in hcp metalleri için kullandigi giris parametreleri ve model parametreleri Tablo 2.7 ve Tablo 2.8’de verilmistir.

Tablo 2.7: HCP metalleri için HD-AYDGAM giris parametreleri. ( a ve c lattice sabitleri, $E_c$ cohesive enerji, $E_{1f}$ bir degerli olusum enerjisi, $C_{mn}$ elastik sabitler )

| Metal | a (A) | c (A) | $E_c$ (eV) | $E_{1f}$ (eV) | $C_{11}$ (GPa) | $C_{12}$ (GPa) | $C_{44}$ (GPa) | $C_{13}$ (GPa) | $C_{33}$ (GPa) |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| Pr | 3.6702 | 5.9140 | 3.70 | 1.24 | 49.4 | 23.0 | 13.6 | 14.3 | 57.4 |
| Nd | 3.6582 | 5.9010 | 3.40 | 1.24 | 54.8 | 24.6 | 15.0 | 16.6 | 60.9 |
| Gd | 3.6315 | 5.7770 | 4.14 | 1.13 | 66.7 | 25.0 | 20.7 | 21.3 | 71.9 |
| Tb | 3.5990 | 5.6960 | 4.05 | 1.18 | 69.2 | 25.0 | 21.8 | 21.8 | 74.4 |
| Dy | 3.5923 | 5.6545 | 3.04 | 1.22 | 74.0 | 25.5 | 24.3 | 21.8 | 78.6 |
| Ho | 3.5761 | 5.6174 | 3.14 | 1.27 | 76.5 | 25.6 | 25.9 | 21.0 | 79.6 |
| Er | 3.5590 | 5.5920 | 3.29 | 1.32 | 84.1 | 29.4 | 27.4 | 22.6 | 84.7 |

Tablo 2.8: HCP metalleri için HD-AYDGAM model parametreleri

| | Pr | Nd | Gd | Tb | Dy | Ho | Er |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| n | 0.38 | 0.45 | 0.45 | 0.45 | 0.49 | 0.49 | 0.49 |
| $F_0$(eV) | 2.46 | 2.16 | 3.01 | 2.87 | 1.82 | 1.87 | 1.97 |
| ax$10^6$ (eV) | 128.990 | 126.680 | 14.6398 | 5.0892 | 8.37331 | 11.1886 | 22.1373 |
| ßx$10^6$ (eV) | -58.676 | -57.981 | -9.752 | -5.541 | -6.7179 | -8.5469 | -13.430 |
| $k_c$ (eV) | 0.10 | 0.45 | 0.35 | 0.40 | 0.45 | 0.45 | 0.55 |
| $k_6$ (eV) | -6.5043 | -13.894 | -23.133 | -21.088 | -19.211 | -19.472 | -16.129 |
| $k_5$ (eV) | 69.6499 | 148.014 | 244.144 | 221.738 | 201.307 | 203.565 | 169.121 |
| $k_4$ (eV) | -317.50 | -669.62 | -1094.3 | -990.61 | -896.77 | -904.70 | -754.75 |
| $k_3$ (eV) | 800.211 | 1668.49 | 2701.19 | 2438.32 | 2203.04 | 2217.52 | 1860.29 |
| $k_2$ (eV) | -1207.0 | -2475.0 | -3966.6 | -3573.4 | -3226.2 | -3240.9 | -2738.4 |
| $k_1$ (eV) | 1091.81 | 2187.76 | 3467.05 | 3120.27 | 2819.08 | 2827.28 | 2410.12 |
| $k_0$ (eV) | -548.78 | -1067.8 | -1670.6 | -1503.8 | -1361.7 | -1364.1 | -1175 |
| $k_{-1}$ (eV) | 117.928 | 221.838 | 342.200 | 308.480 | 280.324 | 280.600 | 244.563 |

## 2.3. Chen-Xu Gömülü Atom Metodu (CX-GAM)

Son yillarda, yogunlasmis sistemler için Baskes ve is arkadaslari (Baskes, 1994) tarafindan gelistirilen gömülü atom metodu (GAM) ve Finnis ve Sinclair (Finnis, 1984) tarafindan gelistirilen F-S çoklu cisim potansiyeli, metalleri, saf olmayanlari, karisimlari, yüzeyleri, kusurlu enerjileri, fononlari, kirilmayi ve sivi metalleri v.b. içeren genis inceleme sahalarini örten problemlerde iyi bir basari elde etti.

GAM ve F-S potansiyel modeli, çesitli ariza simulasyonlarina, özellikle fcc ve bcc'e iliskin yapilardaki eksikliklere, basarili bir sekilde uygulanmistir. GAM ve F.S'in alti köseli yakin istifli metallerde uygulanisi kübik metallerdeki uygulanisindan daha fazla zorluk gösterdi. Oh ve Johnson (Oh,1988) fcc ve hcp metaller için yeniden düzenlenmis bir GAM potansiyeli (YDGAM) gelistirdi. YDGAM modelinde, yogunluklar açisal hiz katkilarini geri elektron yogunluklari ve atom yogunluklariyla iliskilendirerek tanimlanir. Bu uygulama, ortak materyaller için olan deneyimsel modellerle yaptiklari gibi bag egen güçlerle sonuçlanan açiya bagimli bir terim olarak anlasilabilir. Ikinci sira sabit degerlere dayali ilgili bir metod gelistirdi (Savino, 1988), (Pasianot, 1991). GAM için tam enerji ifadesine genel anlamda açilarla ve gerçek atomlar sistemi ve atomik elektronlarin küresel yogunlugunun lineer bir süperpozisyonu kullanilacak orijinal GAM'dan hesaplananla arasindaki fark ile ilgili bir çoklu cisim kisa terimini ifade etmek için degistirilmis bir analitik enerji terimi olan M(P)'yi eklemis. Pasianot ve Savino (Pasianot,1992, Savino,1993) noktanin grup teorisini kullanarak ve iç elastik sabitlerini dikkate alarak, zarif bir matematik stilinde, hcp kristalleri için GAM elastik sabitlerinin formülünü olusturdu. Yazilarinda $f$ (r)' yi etkili bir çift etkilesim potansiyeli olarak tanimlandi ve özellikle mükemmel örgü yogunlugunda degersiz olmasi için çoklu cisim terimi $F(r)$'nun ilk türevini kabul ettirdi. Hcp metalleri için analitik bir GAM potansiyeli gelistirdi. Pasianot'in yaptigina benzer bir yolla tam enerji ifadesine bir enerji degisikligi eklediler ve $C_{11}$ ve $C_{12}$ arasindaki ve $C_{13}$ ve $C_{14}$ arasindaki iki Cauchy bagintilarini tanimlamak ve hcp yapisinin anisotropisini yorumlamak için $a$ ve $b$ parametrelerini tanittilar (Igarashi,1991). Iç esneklikleri dikkate almadan hcp metalleri için F-S potansiyelini gelistirdi, hcp potansiyelini gelistirme metodu kübik metaller için yaptiklarinin aynisidir. Bazi arastirmacilar, açisal güçleri ve iç kabuklardaki atomlarin yandaki dis

kabuklardaki atomlarin etkilerini izlemeyi ele aldi. HCP kristalinin yapisi $D_{3h}$ grubuna ait oldugu için, çevirme simetrisinin eksikligi mekanik özelliklerinin ana eksensel yönü ve tabansal düzlem yönü arasinda degisik olmasina yol açar. Bu sebepten, potansiyel, Chen-Xu ya göre, a- ve –be ekseninden c-ekseninde hcp kristallerinin anisotropik özelliklerini sergileyebilecek sekilde dizayn edilmeli idi.

N tane atomdan olusan atomlar toplulugunun toplam enerjisi

$$E = \sum_{i=1}^{N} E_i \tag{2.55}$$

tarafindan verilebilir. Topluluktaki bir i atomunun enerji fonksiyonu,

$$E_i = \frac{1}{2}\sum_{j\neq 1} f(r_{ij}) - F(r) \tag{2.56}$$

denklemi ile ifade edilir. Elektron yogunluk fonksiyonu;

$$r = \sum_{j\neq i} f_j(r_{ij}) \tag{2.57}$$

ifadesi ile verilir. Denklem (2.56) daki $f(r_{ij})$, $r_{ij}$ ayriminda i ve j atomlari arasindaki çift çekirdek itelemesi oldugunda, $F(r_i)$ gömme enerji fonksiyonu ve i atomuyla ilgili $r_i$ elektron yogunlugunun bir fonksiyonudur ve bu yüzden materyallerdeki atomlarin türlerine dayanir. Bu modelde , $f$ geri itici fonksiyonu asagidaki gibi seçilmistir.

$$f(r) = \frac{A_k}{r}\ \exp(-a_k r) \tag{2.58}$$

Burada $A_k$ parametresi iki atom çekirdeginin etkili pozitif sartlarinin ürününü simgeler. Bu sebepten, mekanik deneysel veriyi yerlestirerek açiklanmalidir. $f(r)$ geri itici potansiyeli, Yukawa'nin potansiyeli seklinde dizayn edildi. Böylece r'nin artisiyla hizlica düser, veya diger bir deyisle, sadece bir üssel fonksiyondan daha zordur. Bu çesit

geri itici potansiyel Daw 'in makalesinde görülebilir (Daw,1989). Gömülen enerji fonksiyonu $F(r)$ ve yerel elektronik yogunluk fonksiyonu $f(r)$ asagidaki gibi tanimlanir:

$$f(r) = B_k r^n \left[1 + \sin\left(\frac{r}{2r_0} p\right)\right] \exp(-b_k r) \tag{2.59}$$

$$F = \sqrt{r} \tag{2.60}$$

$$r = \sum_{j \neq i}^{n} f(r_{ij}) \tag{2.61}$$

$f(r)$ yerel elektronik sayi yogunlugu fonksiyonunda, $r^n$ faktörünün önemi sudur: Eger böyle bir faktör olmasaydi $f(r)$ hizla düserdi, bu atomik yari çapin asiri küçülmesi demektir. $f(r)$ fonksiyonundaki $r^n$ ile atomlar arasi mesafe içinde düsüs azaltilir ve metaldeki iki yakin atom arasindaki ayrilma özgür bir atomun yari çapindan daha genis oldugu gerçek bir olay için uygundur. $r^n$ faktörü, metaldeki elektronlarin daha genis bir sahaya yayilabilmesi olayini yaklasik olarak tarif etmekle kalmaz, ayrica bir atomun çevresini kaplasmis elektron bulutlarinin atomun yakin komsulari menzili için de maksimuma ulasmasini saglar. $f(r_{ij})$ ifadesinde, bir titresim hareketi ile ilgili formu görmek mümkündür. Geri elektron gazindaki bir atomun birlesme degeri atomlarinin basitçe üssel olmak yerine titresen bir sekilde yayildiklarini ima eder. Chen-Xu göre bazi yazarlarin, GAM potansiyel fonksiyonlarinin geri itici parça $f(r_{ij})$ ve yogunluk fonksiyonu $f(r_{ij})$ için bir parametreler seti ile tasarlanmis olduklarini görüyor. Böyle tasarilar Hu (Hu, 2001) tarafindan yapilan model hariç, atomun yuvarlak toplar gibi hareket etmelerine sebep olur ki bu hcp metallerinin anisotropik özellikleri için uygun degildir. Bundan kurtulmak için, burada deneysel olarak, saf hcp metallerinin potansiyel modelindeki iki parametre seti kullanilir. Çalismasinda, sadece basit hcp kristal yapisini ele aliyor, merkezi atomun bir A taban düzlemine yerlestirildigini düsünerek, ilk setin merkezi atom ve komsulari ki onlardan A taban düzlemlerine yerlestirilmis, arasindaki

etkilesimleri belirlemesine ve ikinci setin merkezi atom ve B taban düzlemlerinde olan komsulari arasindaki etkilesimi belirlemesine izin verir. Böylece, atomlar arsindaki etkilesimler bazi sekillerde hcp metallerinde anisotropik bir sekilde davranir. Yerel elektronik yogunluk fonksiyonunun $f(r)$ sekli ayrica Slater dalga fonksiyonunun degistirilmis bir sekli olarak görülür.

Yukaridaki ifadelerde, $r_0$ denge örgüsü sabittir, $r_i$, etrafindaki atomlar tarafindan yaratilan i atomunun toplam elektronik yogunlugudur. $A_k$, $a_k$, $B_k$, ve $b_k$ sirasiyla, itici potansiyel ve elektronik yogunluk fonksiyonlari parametreleridir. Saf hcp metallerinde, iki setten olusurlar. $A_1$, $a_1$, $B_1$ ve $b_1$ A düzlemindeki merkezi atom ve onun A düzlemindeki bütün komsulari arasindaki etkilesimler içindir ve $A_2$, $a_2$, $B_2$, $b_2$ A düzlemindeki merkezi atom ve onun B düzlemindeki bütün komsulari arasindaki etkilesim içindir. Hesaplari basitlestirmek için, burada, basitçe gömme enerji fonksiyonunun $F(r)$, F-S modelinde benimsendigi gibi yogunluk fonksiyonu $r$ 'nun bir kare kökü olarak alinmaktadir ve sadece $C_{12} \rangle C_{66}$ oldugunda kullanilabilir. Zn, Be ve Ru için düsük sicakliklarda $C_{12} \rangle C_{66}$ oldugunda gömme enerji fonksiyonunun $F(r)$ ifadesi, Igarashi (Igarashi,1991)'nin önerdigi gibi $\sqrt{r}$ 'nun polinomu olarak yeniden düzenlenmistir. Hesaplamalarda $E_c$ Igarashi (Igarashi,1991) tarafindan söyle tanimlaniyor:

$$E_c = -\frac{1}{2}\sum_j f(r_{ij}) + F(r_0) \tag{2.62}$$

Rahatlamadan önceki bosluk olusumu enerjisi:

$$E_g^f = E_c - F(r) + F'(r_0)\, r_0 \tag{2.63}$$

ifadesi ile verilir. Rose 'nin (Rose vd. 1984) evrensel ölçekleme fonksiyonu ile potansiyel egrisini karsilastirmak için potansiyel egrisi Rose egrisini verecek sekilde fit edilir. Rose denklemi

$$E_c(a^*) = -E_{coh}(1 + a^*)\exp(-a^*) \tag{2.64}$$

ile verilir. Bu denklemde $E_{coh}$, denge durumundaki baglanma enerjisi ve $a^*$

$$a^* = \frac{a/a_0 - 1}{\sqrt{E_{coh}/(9B_k\Omega_0)}} \tag{2.65}$$

ile verilen indirgenmis örgü sabitidir. Burada a degisken örgü sabiti, $a_0$ denge örgü sabiti, $B_k$ bulk modülü ve $\Omega_0$ denge atomik hacimdir;

$$\Omega_0 = \frac{\sqrt{3}}{4} a^2 c \tag{2.66}$$

denklemi ile verilir. CX-GAM modelinde çalisilan hcp metalleri için fiziksel giris parametreleri literatürde verilenler ile birlikte karsilastirmali olarak Tablo 2.9 'da sunulmustur. $E_c$; baglanma enerjisi, $E_{of}$ ;bosluk olusum enerjisi ve $a_0$ örgü sabitidir

Tablo 2.9: CX-GAM modelinde kullanilan HCP metalleri için fiziksel giris parametrelerinin karsilastirilmasi.

| | Co | Ti | Hf | Zr | Ru | Referans |
|---|---|---|---|---|---|---|
| $E_c$ (eV) | 4.3900 | 4.8500 | 6.4400 | 6.25 | 6.7400 | a |
| | 4.3909 | 4.8580 | 6.4635 | 6.2490 | 6.7827 | b |
| | 4.4100 | 4.8700 | 6.3500 | 6.3600 | 6.7400 | c |
| | | | | 6.2510 | | e |
| $E_{0f}$ (eV) | 1.4600 | 1.5500 | 2.1500 | 1.7500 | 2.2500 | a |
| | 1.2501 | 1.5150 | 2.3175 | 1.9760 | 2.4481 | b |
| | 1.4800 | 1.8000 | 2.0200 | 1.9300 | 2.1100 | c |
| | 1.3800 | 1.490 | 1.800 | 1.700 | 1.870 | d |
| | | | | 1.4300 | | e |
| $a_0$ | 2.507 | 2.95 | 3.194 | 3.232 | 2.751 | a |
| | 2.477 | 2.986 | 3.194 | 3.232 | 2.751 | b |
| c/a | 1.623 | 1.588 | 1.581 | 1.593 | 1.582 | a |

*a (Igrashi, 1991); *b Hesaplanan degerler, (Chen, Xu, 2004); *c (Baskes, 1994)
*d (Hu, 2001); *e (Goldstein, 1995)

Ayrica Tablo 2.10 da CX-GAM modelinde kullanilan model parametreleri verilmektedir. Bu tabloda a-a A yada B düzlemindeki tüm atomlar için atomlararasi etkilesmeleri, a-b ise biri A düzleminde digeri B düzleminde olan atomlar arasindaki etkilesmeleri tanimlar.

Tablo 2.10: HCP metalleri için CX-GAM model parametreleri

| | | Co | Ti | Hf | Zr | Ru |
|---|---|---|---|---|---|---|
| A | a-a | 7651.00 | 3961.31 | 3813.79 | 660.00 | 120310.00 |
| | a-b | 7540.00 | 3967.96 | 3403.52 | 672.00 | 120360.00 |
| ? | a-a | 3.81113 | 3.0650 | 2.81221 | 2.1565 | 4.5462 |
| | a-b | 3.98873 | 3.06430 | 2.73648 | 2.13627 | 4.54518 |
| B | a-a | 12911.00 | 452.66 | 340.00 | 315.20 | 3452.96 |
| | a-b | 12800.00 | 462.96 | 321.00 | 316.10 | 3492.48 |
| ? | a-a | 5.51386 | 3.82131 | 3.44343 | 3.38950 | 5.61265 |
| | a-b | 5.43358 | 3.82117 | 3.44342 | 3.38780 | 5.59189 |
| N | | 6 | 6 | 6 | 6 | 9 |

# BÖLÜM 3

# HCP METALLERI IÇIN ETKIN ÇIFTLER POTANSIYEL YAKLASIMLARI

## 3.1 ZQ-GAM Etkin Çiftler Potansiyel Yaklasimi

Bu tezde kullanilan Zhang-Quyang GAM etkin çiftler potansiyelini hesaplayabilmek için Finnis- Sinclair'in (Finnis- Sinclair, 1984) öne sürmüs oldugu GAM etkin çiftler potansiyel yaklasimindan yola çikarak analitik olarak etkin çiftler potansiyel yaklasimi olusturduk. Genel olarak GAM 'da FS yaklasimina göre etkin çiftler potansiyeli,

$$f_{eff}(r) = f(r) - 2F'(r)\, f(r) \tag{3.1}$$

denklemi ile verilir. ZQ-GAM için yukaridaki denklem yazilir ise burada $f(r)$ ZQ-GAM daki çiftler etkilesme potansiyelini gösterilir ve su formda verilir,

$$f^{ZQ-GAM}(r) = f_e \left\{ \exp\left[-g\left(r/r_e - 1\right)\right] - \frac{g}{b} \exp\left[-b\left(r/r_e - 1\right)\right] \right\} \tag{3.2}$$

burada $f_e, g$ model parametreleri, $r_e$ ise en yakin komsu uzakligidir.

$$f_e = 5\Omega G/(2g(g-b)) \tag{3.3}$$

$$g = 15\Omega G/(bE_f) \tag{3.4}$$

seklinde verilir. Burada G kayma modülünü, $E_f$ bosluk olusum enerjisini, $b$ ayarlanabilir parametre, O atomik hacmi göstermektedir. ZQ-GAM elektron yogunluk fonksiyonu,

$$f^{ZQ-GAM}(r) = f_e \exp\left[-b\left(r/r_e - 1\right)\right] \tag{3.5}$$

seklinde ifade edilir. Burada $f_e$ elektron yogunluk çarpanidir. Gömme fonksiyonu birinci türevi $F^{'}(r)$,

$$F^{'ZQ-GAM}(r)=\left(\frac{E_c}{b\,r_e\,r}\right)a\left[\left[1-\frac{1}{b}\ln(\frac{r}{r_e})\right]^{-m}-m\left(1-\frac{1}{b}\ln\left(\frac{r}{r_e}\right)+m\right)^{-1}+m\right]x$$

$$m\left(1-\frac{1}{b}\ln\left(\frac{r}{r_e}\right)\right)^{-m-1}-m\left(1-\frac{1}{b}\ln\left(\frac{r}{r_e}\right)\right)^{-2}\left(\left(1-\frac{a}{b}\right)\ln\left(\frac{r}{r_e}\right)\right)\left(\frac{r}{r_e}\right)^{\frac{a}{b}}+ \qquad (3.6)$$

$$\left[\left[1-\frac{1}{b}\ln(\frac{r}{r_e})\right]^{-m}-m\left(1-\frac{1}{b}\ln\left(\frac{r}{r_e}\right)+m\right)^{-1}+m\right]\left(1-\frac{a}{b}\right)\ln\left(\frac{r}{r_e}\right)\left(\frac{r}{r_e}\right)^{\frac{a}{b}-1}$$

$$-6f_e\left[\frac{1}{r_e}\left[\frac{g}{b}\right]\left(\frac{r}{r_e}\right)^{\frac{g}{b}-1}-\frac{g}{b}\frac{1}{r_e}\right]$$

Denklemi ile ifade edilir.

### 3.2 HX-AYDGAM Etkin Çiftler Potansiyel Yaklasimi

Bu tezde kullanilan HX-AYDGAM etkin çiftler potansiyelini hesaplayabilmek için Finnis- Sinclair'in (Finnis- Sinclair, 1984) öne sürmüs oldugu GAM etkin çiftler potansiyel yaklasimindan yola çikarak M(P) enerji düzeltme terimi içeren AYDGAM'lari için yeni bir FS-AYDGAM yaklasimi önerdik. Bu amaçla AYDGAM etkin çiftler potansiyeli için önerilen I. FS-AYDGAM yaklasimi genel olarak

$$f_{eff}(r) = f(r) - 2(F'(r) + M(P))\, f(r) \tag{3.7}$$

formunda yazilir. II. FS-AYDGAM yaklasim için ise

$$f_{eff}(r) = f(r) - 2F'(r)M(P)f(r) \tag{3.8}$$

formunu önerdik. HX-AYDGAM için yukarida verilen FS-AYDGAM denklemleri yeniden yazilir ise burada $f(r)$ HX-AYDGAM çiftler etkilesme potansiyelini gösterilir ve su formda verilir,

$$\Phi^{HX-AYDGAM}(r) = k_0 + k_1\left(\frac{r}{r_1}\right)^2 + k_2\left(\frac{r}{r_1}\right)^3 + k_3\left(\frac{r}{r_1}\right)^4 + k_4\left(\frac{r}{r_1}\right)^{-6} + k_5\left(\frac{r}{r_1}\right)^{-12} \tag{3.9}$$

burada $k_i$'ler model parametreleridir. $r_1$ en yakin komsu uzakligidir. HX-AYDGAM $f(r)$ elektron yogunluk fonksiyonu

$$f^{HX-AYDGAM}(r) = f_e\left(\frac{r_1}{r}\right)^6 \tag{3.10}$$

formunda verilir. Burada $f_e$ boyutsuz parametredir ve $f_e = \sqrt{\frac{E_c}{\Omega}}$ ile ifade edilir, $\Omega$ atomik hacimdir. HX-AYDGAM enerji düzeltme terimi

$$M^{HX-AYDGAM}(P) = a\left(\frac{P}{P_e} - 1\right)^2 \exp\left[-\left(\frac{P}{P_e} - 1\right)^2\right] \tag{3.11}$$

ile ifade edilir. $a$ model parametresi, $P_e$ ise denge durumundaki degeridir. P argumani ise

$$P = \sum_{m} f^{2}(r_m) \tag{3.12}$$

ile verilir. HX-AYDGAM gömme fonksiyonu birinci türevi $F^{'}(r)$

$$F^{HX-AYDGAM}(r) = F_0 n^2 \frac{r^{n-1}}{r_e^{n}} \ln\left(\frac{r}{r_e}\right) \tag{3.13}$$

ile verilir.

### 3.3 HZ-AYDGAM Etkin Çiftler Potansiyel Yaklasimi

Bu tezde kullanilan Hu-Zhang AYDGAM etkin çiftler potansiyelini hesaplayabilmek için Finnis- Sinclair'in (Finnis- Sinclair, 1984) öne sürmüs oldugu GAM etkin çiftler potansiyel yaklasimini kullanarak HZ-AYDGAM modeli için bir önceki bölümde önerilen iki farkli FS etkin çiftler potansiyel formundan I. FS-AYDGAM yaklasiminin daha iyi sonuç verdigi görülmüstür. Bu nedenle HZ-AYDGAM modeli için olusturulan I. FS-AYDGAM etkin çiftler potansiyeli

$$f_{eff}^{HZ-AYDGAM}(r) = f^{HZ-AYDGAM}(r) - 2(F'^{HZ-AYDGAM}(r) + M^{HZ-AYDGAM}(P))\, f^{HZ-AYDGAM}(r) \tag{3.14}$$

denklemi ile yazilir. Burada $f^{HZ-AYDGAM}(r)$ çiftler etkilesme potansiyelini gösterilir ve

$$\Phi^{HZ-AYDGAM}(r) = k_{-1}\left(\frac{r}{r_1}\right)^{-1} + k_0 + k_1\left(\frac{r}{r_1}\right)^{1} + k_2\left(\frac{r}{r_1}\right)^{2} + k_3\left(\frac{r}{r_1}\right)^{3} + k_4\left(\frac{r}{r_1}\right)^{4} + k_5\left(\frac{r}{r_1}\right)^{5} + k_6\left(\frac{r}{r_1}\right)^{6} \tag{3.15}$$

formunda verilir. Burada $k_i$'ler model parametreleridir. $r_1$ en yakin komsu uzakligidir. HZ-AYDGAM daki $f(r)$ elektron yogunluk fonksiyonu

$$f^{HZ-AYDGAM}(r) = f_e\left(\frac{r_1}{r}\right)^{6} \tag{3.16}$$

denklemi ile verilir. HZ-AYDGAM enerji düzeltme terimi

$$M^{HZ-AYDGAM}(P) = a\left\{1 - \exp\left[-\left[\ln\left|\frac{P}{P_e}\right|\right]^{2}\right]\right\} \tag{3.17}$$

denklemi ile ifade edilir. $a$ model parametresi, $P_e$ ise denge durumundaki degeridir.

$$P = \sum_m f^2(r_m)\frac{r_{mx}^2 + r_{my}^2 + br_{mz}^2}{r_m^2} \tag{3.18}$$

HZ-AYDGAM daki Gömme fonksiyonunun birinci türevi $F'(r)$

$$F'^{HZ-AYDGAM}(r) = F_0 n^2 \frac{r^{n-1}}{r_e^n} \ln\left(\frac{r}{r_e}\right) \tag{3.19}$$

denklemi ile verilir.

### 3.4 HD-AYDGAM Etkin Çiftler Potansiyel Yaklasimi

Bu tezde hesaplanan bir baska AYDGAM etkin çiftler potansiyeli HD-AYDGAM etkin çiftler potansiyelidir. Bu potansiyeli hesaplayabilmek için Finnis- Sinclair'in (Finnis-Sinclair, 1984) öne sürmüs oldugu GAM etkin çiftler potansiyel yaklasimini kullanarak HD-AYDGAM daki enerji düzeltme terimleri olan M(P) ve N(Q) lari da içeren iki farkli FS etkin çiftler potansiyel formu olusturduk. Buna göre HD-AYDGAM etkin çiftler potansiyeli için genel olarak I. FS yaklasimi

$$f_{eff}(r) = f(r) - 2(F'(r) + M(P) + N(Q))f(r) \tag{3.20}$$

ve II. FS yaklasimi

$$f_{eff}(r) = f(r) - 2F'(r)[(M(P) + N(Q)]f(r) \tag{3.21}$$

ifadeleriyle verilir. Bu denklemleri HD-AYDGAM modeli için yazar isek $f(r)$ HD-AYDGAM modelindeki çiftler etkilesme potansiyelini gösterilir ve su formda verilir,

$$\Phi^{HD-AYDGAM}(r_{ij}) = k_{-1}\left(\frac{r_{ij}}{r_1}\right)^{-1} + k_0 + k_1\left(\frac{r_{ij}}{r_1}\right)^1 + k_2\left(\frac{r_{ij}}{r_1}\right)^2 + k_3\left(\frac{r_{ij}}{r_1}\right)^3 + k_4\left(\frac{r_{ij}}{r_1}\right)^4 + k_5\left(\frac{r_{ij}}{r_1}\right)^5 + k_6\left(\frac{r_{ij}}{r_1}\right)^6 \tag{3.22}$$

HD-AYDGAM için $f(r)$ elektron yogunluk fonksiyonu ise

$$f^{HD-AYDGAM}(r_{ij}) = f_e\left(\frac{r_1}{r_{ij}}\right)^{4.5}\left(\frac{r_{ce} - r_{ij}}{r_{ce} - r_1}\right)^2 \tag{3 .23}$$

seklinde verilir. Burada $r_{ce}$, $f(r)$ çiftler etkilesme potansiyelini sifir yapan r degeri alinmistir.

HD-AYDGAM da enerji modifikasyon terimleri ,

$$M^{HD-AYDGAM}(P_i) = a\left\{1-\exp\left[-10000\left(\ln\left(\frac{P_i}{P_e}\right)\right)^2\right]\right\} \tag{3.24}$$

$$N^{HD-AYDGAM}(Q_i) = b\left\{1-\exp\left[-10000\left(\ln\left(\frac{Q_i}{Q_e}\right)\right)^2\right]\right\} \tag{3.25}$$

ifadeleri ile verilir. HD-AYDGAM için gömme fonksiyonu birinci türevi $F'(r)$

$$F'^{HD-AYDGAM}(r) = F_0 n^2 \frac{r^{n-1}}{r_e^n}\ln\left(\frac{r}{r_e}\right) \tag{3.26}$$

ifadesi ile denklem (3.20) ve (3.21) denklemlerinde kullanilir.

### 3.5 CX-GAM Etkin Çiftler Potansiyel Yaklasimi

Bu tezde kullanilan CX-GAM etkin çiftler potansiyelini hesaplayabilmek için Finnis-Sinclair'in (Finnis- Sinclair, 1984) öne sürmüs oldugu GAM etkin çiftler potansiyel yaklasimini kullandik. Bu yaklasima göre CX-GAM etkin çiftler potansiyeli,

$$f_{eff}^{CX-GAM}(r) = f(r)^{CX-GAM} - 2F'^{CX-GAM}(r)\, f^{CX-GAM}(r) \tag{3.27}$$

Burada $f^{CX-GAM}(r)$ itici bir fonksiyondur ve

$$f^{CX-GAM}(r) = \frac{A_k}{r} \exp(-a_k r) \tag{3.28}$$

formunda verilir. Burada $A_1$ ve $a_1$ geri itici potansiyel parametreleridir. CX-GAM daki gömme enerjisi fonksiyonu $F(r)$ ve yerel elektronik yogunluk fonksiyonu f(r) asagidaki gibi tanimlanir:

$$F^{CX-GAM} = \sqrt{r^{CX-GAM}} \tag{3.29}$$

$$r^{CX-GAM} = \sum_{j \neq i}^{n} f^{CX-GAM}(r_{ij}) \tag{3.30}$$

$$f^{CX-GAM}(r) = B_k r^n \left[1 + \sin\left(\frac{r}{2r_0} p\right)\right] \exp(-b_k r) \tag{3.31}$$

Yukaridaki denklemlerde $r_0$ denge durumdaki örgü sabiti, $b_1$ elektronik yogunluk fonksiyonu parametresidir. CX-GAM gömme fonksiyonunun birinci türevi $F'(r)$

$$F'^{CX-GAM}(r) = \frac{1}{2}(r)^{-\frac{1}{2}} \tag{3.32}$$

ile verilir.

# BÖLÜM 4

# SIVI HCP METALLERI IÇIN GAM PARAMETRIZASYON METODLARI, SIVILARIN YAPISAL VE TERMODINAMIK BÜYÜKLÜKLERI

## 4.1 Sivilar için önerilen GAM Parametrizasyon Metodu

Ilk önce bu çalismada, termodinamik hallerde incelenen her bir metal için E baglanma enerjisi hesaplandi. Bu hesaplamada Rose' nin hal denklemini kullanildi. Rose' nin hal denklemine göre E enerjisi,

$$E(r_{WS}) = \Delta E\, E^*(a^*) \tag{4.1}$$

Burada $E$ atom basina baglanma (kohesif) enerjisini, $r_{WS}$ atom basina ortalama hacim içeren Wigner – Seitz küresinin yariçapini ve $\Delta E$ denge durumundaki baglanma enerjisini gösterir. $a^*$, ölçeklendirilmis örgü parametresi olmak üzere

$$a^* = \left(r_{WS} - r_{WSE}\right) / l \tag{4.2}$$

$$l = \left[\frac{\Delta E}{12\pi B r_{WSE}}\right]^{1/2} \tag{4.3}$$

denklemi ile verilir. Uzunluk ölçüsü $l$ baglanma enerjisi egrisinin genisligini tanimlar. Burada $r_{WSE}$ denge durumundaki Wigner – Seitz küresinin yariçapi ve $l$ uzunluk boyutunda bir parametredir. $E^*(a^*)$ büyüklügü

$$E^*(a^*) \approx f^*(a^*)\, e^{-a^*} \tag{4.4}$$

seklindeki bir fonksiyonla ifade edilebilir. Burada $f^*$' in yavas degisim gösteren bir fonksiyon oldugu varsayilmaktadir. Sonuç olarak $a^* < 1$ oldugu durumda $f^*$ fonksiyonu bir polinom seklinde belirlenebilir.

$$f^*(a^*) \approx f_o^* + f_1^* a^* + f_2^* a^{*2} + f_3^* a^{*3} \tag{4.5}$$

$E(r_{WS}) = E_{EOS}(a^*)$ esitligi kullanilirsa Rose hal denklemi,

$$E_{EOS}(a^*) = -E_{coh}(1 + a^* + ka^*)e^{-a^*} \tag{4.6}$$

ifadesi ile verilir. Burada $E_{coh}$ denge durumundaki baglanma enerjisidir. Bu konuda daha fazla bilgi için (Dömekeli 2003) den yararlanilabilir. Denklem (4.6) daki $E_{EOS}$ enerjisini,

$$E_{top} = \sum_i F(\rho_i) + \sum_i \sum_{i \neq j} \frac{1}{2} \phi(r_{ij}) \tag{4.7}$$

denkleminde $E_{top}$ baglanma enerjisi yerine koyarak F gömme enerjisini:

$$F(\rho_c) = E_{EOS}(a^*) - \frac{1}{2} \sum \phi(r_c) \tag{4.8}$$

hesaplayabiliriz. Burada $r_c$ kesim mesafesini gösterir. (4.8) denklemi ayni zamanda denge sarti olarak da tanimlanir. Ayrica potansiyel fonksiyonlarinin parametrelerini belirlemek için kullanilan diger sartlar: $\phi(r)$ çiftler potansiyel ve f(r) elektron yogunluk fonksiyonlarinin ve birinci türevlerinin

$$\phi(r_c) = 0 \ , \qquad f(r_c) = 0 \tag{4.9}$$

$$\phi'(r_c) = 0 \ , \qquad f'(r_c) = 0 \tag{4.10}$$

$r_c$ kesim mesafesinde sifir olmalidir. Yine bu fonksiyonlar Born denge kosulunu

$$r\frac{d}{dr}\left[F(\rho) + \frac{1}{2}\sum\phi\right]\Bigg|_{r=r_c} = 0 \tag{4.11}$$

$r_c$ kesim mesafesinde saglamalidir. Son kosul olarak sivi metal sistemin konfigurasyonel serbestlik enerjisini minimize eden

$$\frac{\partial f^{VMHNC}(\beta,\rho,\eta)}{\partial\eta} = 0 \tag{4.12}$$

denklemi ile verilen minimizasyon sarti ele alinir.

Bu tezde sivi parametreleri olarak ergime noktasi civarindaki yogunluk degerinden elde edilen $r_{WS}$ ile hesaplanan $E_{coh}$ enerjisini veren (4.8-4.12) denklemlerini saglayan parametre seti sivi metal için model parametreleri olarak alinmistir.

### 4.2 Sivilarin Yapisal ve Termodinamik Büyüklükleri

Ornstein-Zernike denklemi (tek bilesenli sistem için)

$$h(r) = c(r) + \rho\int d\vec{r}\,'h(|\vec{r} - \vec{r}\,'|)c(\vec{r}\,') \tag{4.13}$$

olarak bilinir. Bu denklem c(r) direk korelasyon fonksiyonunu toplam korelasyon fonksiyonu h(r)=g(r)-1 cinsinden tanimlar. Burada g(r) çiftler dagilim fonksiyonu ve $\rho$

atomik sayi yogunlugudur. Bu denklem $\phi_{eff}(r)$ etkin çiftler potansiyelini içeren tam kapalilik bagintisiyla desteklenir.

$$g(r) = \exp[\,h(r) - c(r) - \beta\phi_{eff}(r) - B(r)] \tag{4.14}$$

Burada $\beta = (k_B T)^{-1}$ ve B(r) köprü fonksiyonudur. Bu tezde kati küre için Percus-Yevick (PY) denkleminin çözümü; yani $B(r) = B_{PY}(r,\eta)$ kullanilarak B(r)' ye yaklasim yapilmistir. $\eta = \eta(\beta,\rho)$ paketleme kesri T sicakliginda VMHNC konfigürasyonel serbest enerji minimize edilerek

$$\frac{\partial f^{VMHNC}(\beta,\rho,\eta)}{\partial\eta} = 0 \tag{4.15}$$

belirlenir. Burada,

$$f^{VMHNC}(\beta,\rho,\eta) = f^{MHNC}(\beta,\rho,\eta) - f_{PY}^{MHNC}(\eta) + f_{cs}(\eta) \tag{4.16}$$

dir. Burada $f_{PY}^{MHNC}(\eta)$, PY kati küre (HS) dagilim fonksiyonu ve $\eta$, paketleme kesirli köprü fonksiyonlari kullanildigindaki indirgenmis MHNC Helmholtz serbestlik enerjisinin degeridir ve $f_{cs}(\eta)$, ampirik HS kati küre Carnahan-Starling Helmholtz serbestlik enerjisidir.

Parçacik basina iç enerji

$$E = \frac{3}{2}Nk_BT + \frac{1}{2}\rho\int_0 g(r)\phi_{eff}(r)d^3r \qquad . \tag{4.17}$$

olarak yazilir. Burada r çift olusturan parçaciklar arasindaki uzakliktir ($R_{12}$).

Helmholtz serbestlik enerjisinin denklemi

$$F = -k_B T \ln Q_N = F^{ideal} + F^{fazladan} \tag{4.18}$$

oldugu görülür. Burada $F^{ideal}$ ideal gaz serbestlik enerjisidir. Serbestlik enerjisine fazladan gelen katki, etkilesmelerden kaynaklanan etkili bir katkidir. Bu çalismada $F^{fazladan}$ katkisi (Bhuiyan ve v.d. 1996)' göre

$$F^{fazladan} = E(n) + k_B T f^{VMHNC} \tag{4.19}$$

olarak alinmistir. Böylece atom basina Helmholtz serbestlik enerjisi (4.18) ve (4.19) denklemleri kullanilarak

$$F = F^{ideal} + E(n) + k_B T f^{VMHNC} \tag{4.20}$$

seklinde yazilir. Burada E(n) yogunluga bagli gömme enerjisidir.

Yukarida anlatilan yapisal ve termodinamik büyüklükler istatistik mekaniksel bir bakis ile asagida kisaca özetlenmistir:

*Iç Enerji*

Sivi metaldeki atomlar gibi, her birinin kütlesi M olan N tane özdes klasik parçacikli sistem ele alinsin. Sistemin toplam enerjisi $U_T$ tamamen N tane parçacigin $R_1.....R_N$ koordinatlari ile elde ediliyorsa, kanonik topluluk için bu sistemin $Q_N$ bölüsüm fonksiyonu

$$Q_N = \Lambda^{3N} Z_N / N! \tag{4.21}$$

formunda yazilir. Burada $\Lambda$ tek boyutlu harekette kinetik enerji için

$$\Lambda = \left(Mk_B T / 2\pi\hbar^2\right)^{1/2} \tag{4.22}$$

seklinde verilen bölüsüm fonksiyonu ve $Z_N$ konfigürasyonal bölüsüm fonksiyonudur. (4.21) denklemindeki N! Etkisi sistemdeki N parçacigin tamaminin hesaplamaya katilmasi gerekliliginden kaynaklanir.

Sistemin toplam enerjisi termodinamik olarak

$$E = F - T\left(\frac{\partial(F/T)}{\partial}\right)_V \tag{4.23}$$

ile verilir. Bölüsüm fonksiyonu ile Helmholtz serbestlik enerjisi arasinda

$$F = -k_B T \ln Q_N \tag{4.24}$$

bagintisi vardir. (4.21) denklemi ile verilen $Q_N$ bölüsüm fonksiyonunun ve $Z_N$ konfigürasyonal bölüsüm fonksiyonunun dogal logaritmasi alindiginda Stirling açilimi yardimiyla

$$\ln Q_N = \frac{3}{2} N \ln \frac{M k_B T}{2\pi\hbar^2} + N \ln V + \ln \iint \exp(-\beta U_t) d^3R_1 ... d^3R_N - N \ln N + N \tag{4.25}$$

$$\ln Z_N = N \ln V + \ln \iint \exp(-\beta U_t) d^3R_1 ... d^3R_N \tag{4.26}$$

bagintilari elde edilir. $Q_N$ ve $Z_N$ için bulunan bu bagintilar (4.24) denkleminde kullanildiginda Helmholtz serbestlik enerjisi için

$$\frac{F}{T} = -N k_B \left[\frac{3}{2}\left(\frac{M k_B T}{2\pi\hbar^2}\right) + \ln V + \frac{1}{N} \ln \iint e^{-\beta U_T} d^3R_1 ... d^3R_N - \ln N + 1\right] \tag{4.27}$$

seklinde ifade elde edilir. Son baginti, sistemin toplam enerjisini veren (4.23) denkleminin sag tarafinda kullanilirsa

$$E = \frac{3}{2} N k_B T + \frac{1}{Z_N} \iint U_t \exp(-\beta U_t) d^3R_1 ... d^3R_N \qquad (4.28)$$

ifadesi elde edilir.

Toplam potansiyeli çiftler etkilesme terimi olarak aldigimizda Ų, N parçacikli sistemdeki bir parçacik çiftinin etkilesmesi olan $\phi(r_{ij})$'nin $N(N-1)/2$ tane toplam olur. Bu durumda

$$E = \frac{3}{2} N k_B T + \frac{N(N-1)}{2} \frac{1}{Z_N} \iint \exp(-\beta U_t) \phi(R_{12})\, d^3R_1 ... d^3R_N \qquad (4.29)$$

yazilabilir. Integrali referans alinan iki parçacigi ayirarak tekrar yazdigimizda

$$E = \frac{3}{2} N k_B T + \frac{1}{2} \iint \phi(R_{12})\, d^3R_1 d^3R_2 \; \frac{N(N-1)}{2} \int ... \int e^{-\beta U_T} d^3R_3 ... d^3R_N \qquad (4.30)$$

elde ederiz. Kanonik toplulugun genel tanimi kullanilarak $R_3 ... R_N$ üzerinden integral alindiginda parçacik basina iç enerji (4.17) denklemi halini alir.

*Helmholtz Serbestlik Enerjisi*

(4.24) denkleminde yeniden düzenlendiginde bölüsüm fonksiyonu $Q_N$, Helmholtz serbestlik enerjisi cinsinden

$$Q_N = \exp[-\beta F] \qquad (4.31)$$

seklinde yazilabilir. Bu temel denklem istatistik mekanik ve termodinamik arasinda bir iliski kurulmasini saglar. F Helmholtz serbestlik enerjisinin minimum oldugunda sabit V ve T sartlari altinda termodinamik dengeye ulasir. Bu sebeple V ve T bagimsiz degiskenler olarak seçildiginde Helmholtz serbestlik enerjisinin kullanilmasi en uygun termodinamik potansiyeldir. F, V ve T' nin fonksiyonu olarak bilinirse eger diger tüm termodinamik büyüklükler F' in türevi olarak elde edilebilir.

Sonsuz küçük tersinir hal degisimindeki cisim üzerine yapilan is

$$dF = dE - dQ = dE - TdS = d(E - TS) \tag{4.32}$$

yada

$$F = E - TS \tag{4.33}$$

olarak yazilabilir. Böylece, tersinir es isili süreçte cisim üzerine yapilan is, cismin serbestlik enerjisine esittir. Burada E sistemin iç enerjisi, S ise entropisidir.

Birbiriyle etkilesen parçacik sistemi için denklem (4.21) ile verilen bölüsüm fonksiyonu

$$Q_N = \frac{Q_N^{ideal}}{V^N} Z_N \tag{4.34}$$

seklinde yazilir. Burada $Q_N^{ideal}$ :

$$Q_N^{ideal} = \frac{V^N}{N!} \Lambda^{3N} \tag{4.35}$$

seklinde verilen ideal gaz bölüsüm fonksiyonudur. Helmholtz serbestlik enerjisi denklem (4.21)' in logaritmasi alindiginda

$$F = -k_B T \ln Q_N = F^{ideal} + F^{fazladan} \tag{4.36}$$

oldugu görülür. Burada $F^{ideal}$ ideal gaz serbestlik enerjisidir. Serbestlik enerjisine fazladan gelen katki, etkilesmelerden kaynaklanan etkili bir katkidir. Bu çalismada $F^{fazladan}$ katkisi (Bhuiyan ve v.d. 1996)' göre (4.19) denklemi olarak alinir ise (4.20) denklemi elde edilir.

*Entropi*

Entropi istatistiksel sistemlerin en önemli karakteristiklerinden biridir, ama ne yazik ki herhangi bir toplanabilir veya ikili fonksiyonun ortalamasi degildir. Bu nedenle en basit korelasyon fonksiyonlari yardimiyla bile dogrudan ifade edilmesi mümkün degildir. Radyal bölüsüm fonksiyonu g(r)'nin termodinamik parametreler T ve v bagliligi; g(r)=g(r; T, v) bilinirse, dolayli bir ifade elde edilebilir. (4.17) denklemi ile verilen iç enerji ifadesi ρ=N/v olmak üzere hacim elemani açik yazilarak

$$E = N\left[\frac{3}{2}kT + \frac{2p}{v}\int \Phi(r)g(r)r^2 dr\right] \tag{4.37}$$

seklinde ifade edilebilir. Denklem (4.37)'yi sicakliga göre türetirsek

$$\frac{\partial E}{\partial T} = \frac{3}{2}Nk + \frac{2pN}{v}\int \Phi(r)\frac{\partial g}{\partial T}r^2 dr \tag{4.38}$$

elde edilir. Entropi iyi bilinen termodinamik bagintilardan biri olan

$$T\left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_v = \left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_v \tag{4.39}$$

bagintisi ile integre edilerek ve ayrica (4.33) denklemi ile de hesaplanabilir.

# BÖLÜM 5

# SONUÇLAR VE TARTISMA

## 5.1 Sivi hcp Metallerinin Atomlararasi Çiftler Potansiyelleri

Bu bölümde bazi nadir toprak metallerinin ( Be, Mg, Sc, Ti, Co, Y, Zr, La, Pr, Nd, Gd, Tb, Dy, Ho, ve Er ) ergime noktalari civarinda Gömülü Atom Metodu GAM, Analitik Gömülü Atom Metodu AGAM ve Yeniden Düzenlenmis Analitik Gömülü Atom Metodu DAGAM'nu kullanilarak hesaplanan etkin çiftler potansiyelleri verilmektedir. Bu çalismada kullanilan potansiyel fonksiyonlarinin parametre seti Bölüm 4'de verilen parametrizasyon kullanilarak baglanma enerjisine, Born kararlilik denge sartina, kesim mesafesi islemine ve konfigurasyonel serbestlik enerjisini minimize eden bagintiya fit edilerek elde edilmistir. Çalistigimiz sistemlerin (Be, Mg, Sc, Ti, Co, Y, Zr, La, Pr, Nd, Gd, Tb, Dy, Ho, ve Er) termodinamik durumu ve bu durumdaki $\rho(at./A^3)$ deneysel iyonik sayi yogunluklari ve sicakliklar Waseda (Waseda 1980)' dan alinmis ve Tablo 5.1' de verilmektedir. Ayrica parametrizasyon isleminde kullanilan $a^*$ ölçeklendirilmis örgü parametresi, B hacim modülü ve $E_c$ baglanma enerjisinin hem katihal hem de sivihaldeki degerleri sirasiyla $a^*$ , $E_c^K$ , $E_c^S$ , $B^K$ parametreleri ile gösterilmekte ve Tablo 5.1' de verilmektedir. Bu tezde K indisi kati S indisi sivi için kullanilmistir.

Tablo 5.1: Bazi HCP geçis metalleri GAM potansiyel fonksiyonlarinin parametrizasyonunda kullanilan giris parametreleri. a*, Rose hal denklemi parametresi, $a^K$ kati durum örgü sabiti, $a^S$ sivi durum örgü sabiti, $E_c^K$ kati durumdaki kohesif enerji, $E_c^S$, sivi durumdaki kohesif enerji

| Metal | T(K) | $r(at./A^3)$ | $a^*$ (A) | $a^K$ (A) | $a^S$ (A) | $E_c^K$(eV) | $E_c^S$(eV) | $B^K(eV/A^3)$ |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| Be | 1560[+] | 0.1294 | 0.2285 | 2.27 | 2.270 | 3.52 | 3.520 | 0.62680 |
| Mg | 953 | 0.0383 | 0.0886 | 3.21 | 3.220 | 1.51 | 1.530 | 0.22120 |
| Sc | 1833 | 0.0391 | 0.1463 | 3.31 | 3.340 | 3.9 | 3.795 | 0.27180 |
| Ti | 1973 | 0.0522 | 0.2170 | 2.95 | 3.012 | 4.85 | 4.820 | 0.65680 |
| Co | 1823 | 0.0792 | 0.1752 | 2.51 | 2.660 | 4.39 | 4.378 | 1.19620 |
| Y | 1795[+] | 0.0302 | 0.3647 | 3.65 | 3.650 | 4.37 | 4.370 | 0.22875 |
| Zr | 2173 | 0.0392 | 0.2120 | 3.23 | 3.311 | 6.25 | 6.305 | 0.52060 |
| La | 1243 | 0.0522 | 0.27401 | 3.77 | 3.786 | 4.47 | 4.430 | 0.15180 |
| Pr | 1233 | 0.0282 | 0.0670 | 3.67 | 3.687 | 3.70 | 3.692 | 0.19130 |
| Nd | 1323 | 0.0288 | 0.0433 | 3.66 | 3.670 | 3.40 | 3.704 | 0.20430 |
| Gd | 1603 | 0.0264 | 0.3916 | 3.63 | 3.720 | 4.14 | 3.894 | 0.23930 |
| Tb | 1653 | 0.0274 | 0.1911 | 3.60 | 3.690 | 4.05 | 3.995 | 0.24930 |
| Dy | 1703 | 0.0301 | 0.0797 | 3.59 | 3.623 | 3.04 | 3.030 | 0.24000 |
| Ho | 1753 | 0.0301 | 0.1036 | 3.58 | 3.623 | 3.14 | 3.124 | 0.24810 |
| Er | 1793 | 0.0302 | 0.1355 | 3.56 | 3.616 | 3.29 | 3.262 | 0.25680 |

[+] Periyodik cetvelden alinmistir.

### 5.1.1 ZQ-GAM Etkin Çiftler Potansiyeli

Ilk olarak Zhang ve Quyang'in (Zhang, Quyang, 1993) kati sistemler için öne sürmüs olduklari Gömülü Atom Metodu potansiyel fonksiyonlarini hem katihal hem de sivihal özelliklerine fit ederek elde edilen parametre seti kullanilarak bazi sivi hcp nadir toprak metallerinden Sc, Ti, Co, Y, Zr, ve La için atomlararasi etkin çiftler potansiyelleri hesaplandi. Zhang-Quyang'nin sivi sistemler için optimize edilmis potansiyel parametreleri Tablo 5.2' de verilmektedir. Bu tabloda verilen kesme mesafesi için kullanilan $r_c$ degerleri potansiyeli sifir yapan r degeri olarak alinmistir.

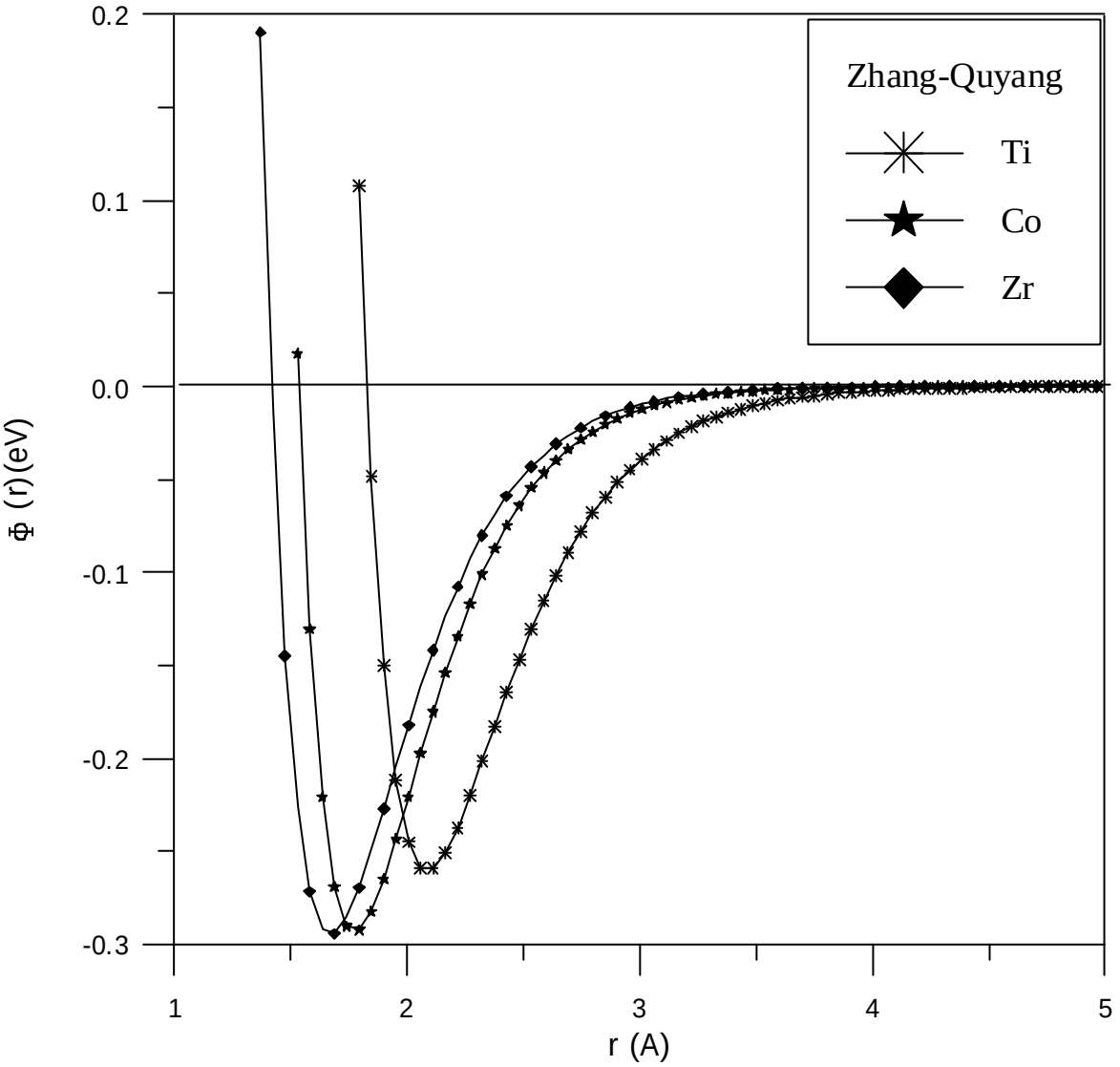
Tablo 5.2: Sivi HCP geçis metalleri için ZQ-GAM potansiyel parametreleri

| Metal | $f_e$ | $f_e$ (eV) | $b$ | $g$ | m | $r_c$(A) |
|---|---|---|---|---|---|---|
| Sc | 0.477 | 0.251 | 6 | 10.681 | 2.42 | 4.80 |
| Ti | 0.561 | 0.339 | 6 | 10.593 | 1.61 | 5.25 |
| Co | 0.621 | 0.537 | 6 | 9.002 | 2.11 | 4.490 |
| Y | 0.441 | 0.313 | 6 | 10.306 | 2.83 | 6.289 |
| Zr | 0.576 | 0.608 | 6 | 8.989 | 2.13 | 4.385 |
| La | 0.433 | 0.388 | 5 | 7.917 | 2.72 | 6.183 |

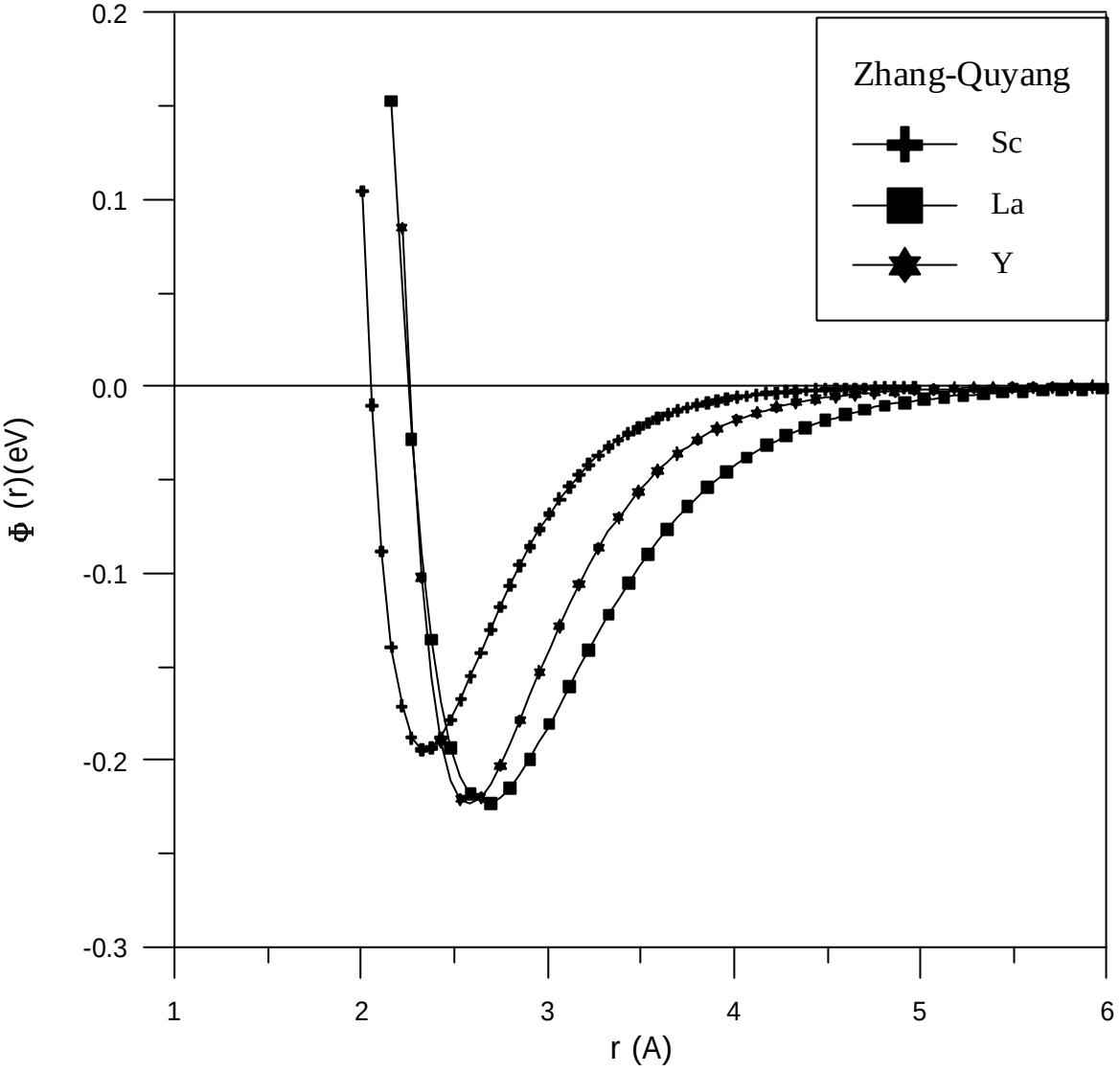
Sekil 5.1 ve Sekil 5.2' de sivi Sc, Ti, Co, Y, Zr ve La için elde ettigimiz parametre setini kullanarak hesapladigimiz çiftler potansiyel fonksiyonlari verilmektedir. Periyodik tabloda soldan saga gidildikçe ve yukaridan asagi inildikçe atom numarasi artar. Buna bagli olarak da atomlar arasi çekim kuvveti de artar. Sekil 5.1 ve Sekil 5.2'den de görüldügü gibi çiftler etkilesim fonksiyonlari periyodik tablo ile uyumlu oldugu söylenebilir. Sekil 5.3 ve Sekil 5.4'te ise gömme enerji fonksiyonlari verilmektedir. Gömme enerji fonksiyonlari da periyodik tablo ile ayni egilimi verdigi göstermektedir. Artan atomik hacim için , periyodik tablo da soldan saga gidildikçe ve yukaridan asagi inildikçe, gömme enerji fonksiyonunun genisligi ve derinligi artmaktadir. Yalniz Sekil 5.3'te Ti Sekil 5.4'de de Y ve Sc potansiyel degerlerini negatif bölgeden gelerek sifira gitmektedir.

Sekil 5.5 ve Sekil 5.6'da ZQ- GAM potansiyel fonksiyonlari ile Finnis ve Sinclair (Finnis ve Sinclair, 1984) 'in GAM etkin çiftler potansiyel yaklasimini kullanarak sivi Sc, Ti, Co, Y, Zr, ve La için hesapladigimiz ZQ etkin çiftler etkilesme potansiyelleri verilmektedir. Daha önce bölüm 3' de de belirtildigi gibi ZQ – GAM etkin çiftler potansiyellerini elde etmek

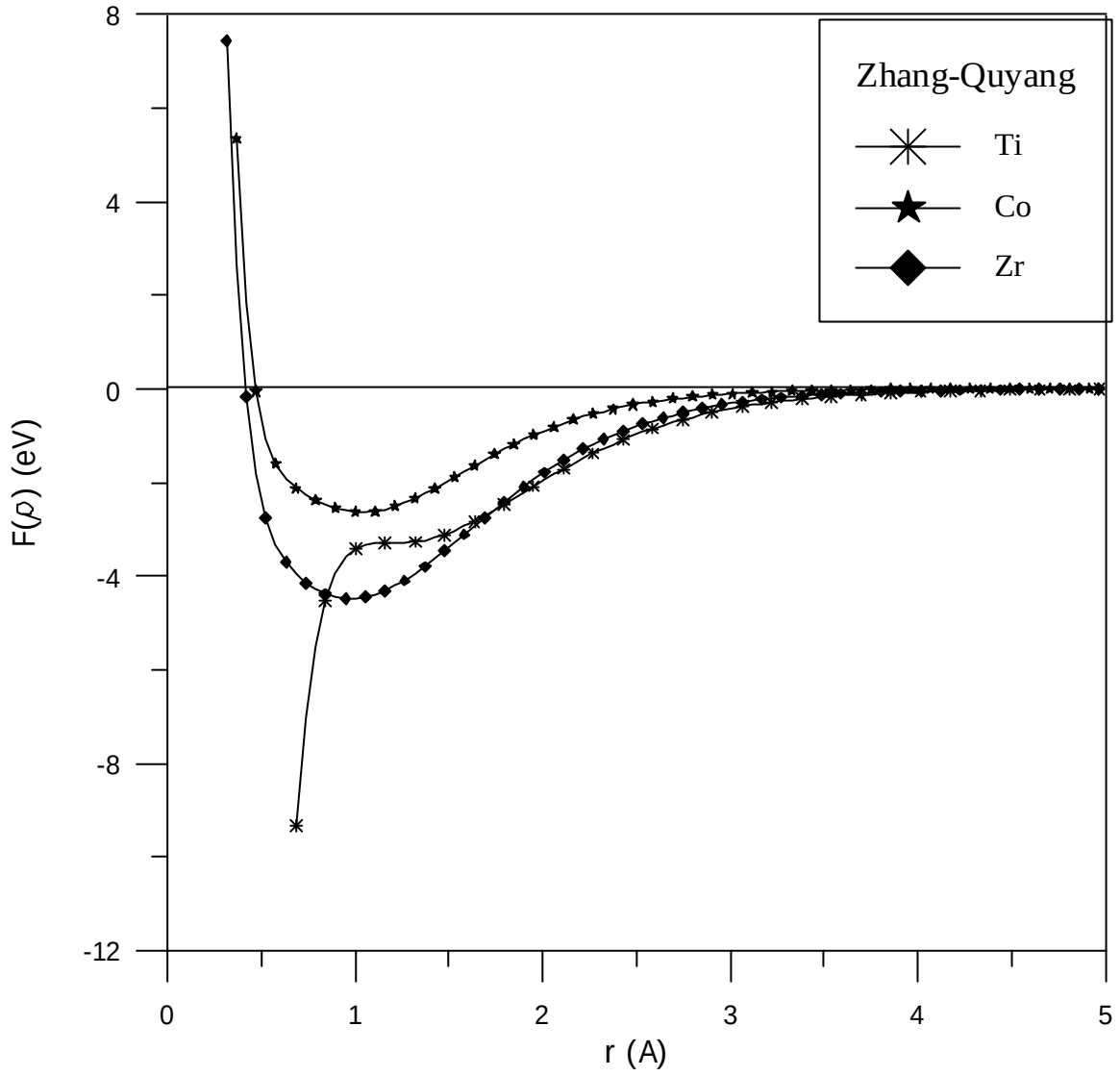
için Finnis ve Sinclair' in etkin çiftler potansiyel yaklasiminda gömme enerjisinin ikinci ve daha yüksek mertebeli türevlerini ihmal ettik. Zhang- Quyang'in GAM yönteminin, potansiyelin konumu ile ilgili oldugu kadar derinligi ile ilgili olarak da dogru egilimler verdigi Sekil 5.5'de gözlenmektedir. Periyodik tabloda ayni grupta yukaridan asagi inildikçe hesaplanan potansiyel daha yumusak, genisligi artan ve minimumunun konumu daha büyük r degerlerine dogrudur. Sekil 5.6'da Sc, Y ve La için genisligi azalan ama minumum konumu daha büyük r degerlerine dogru oldugunu söyleyebiliriz.



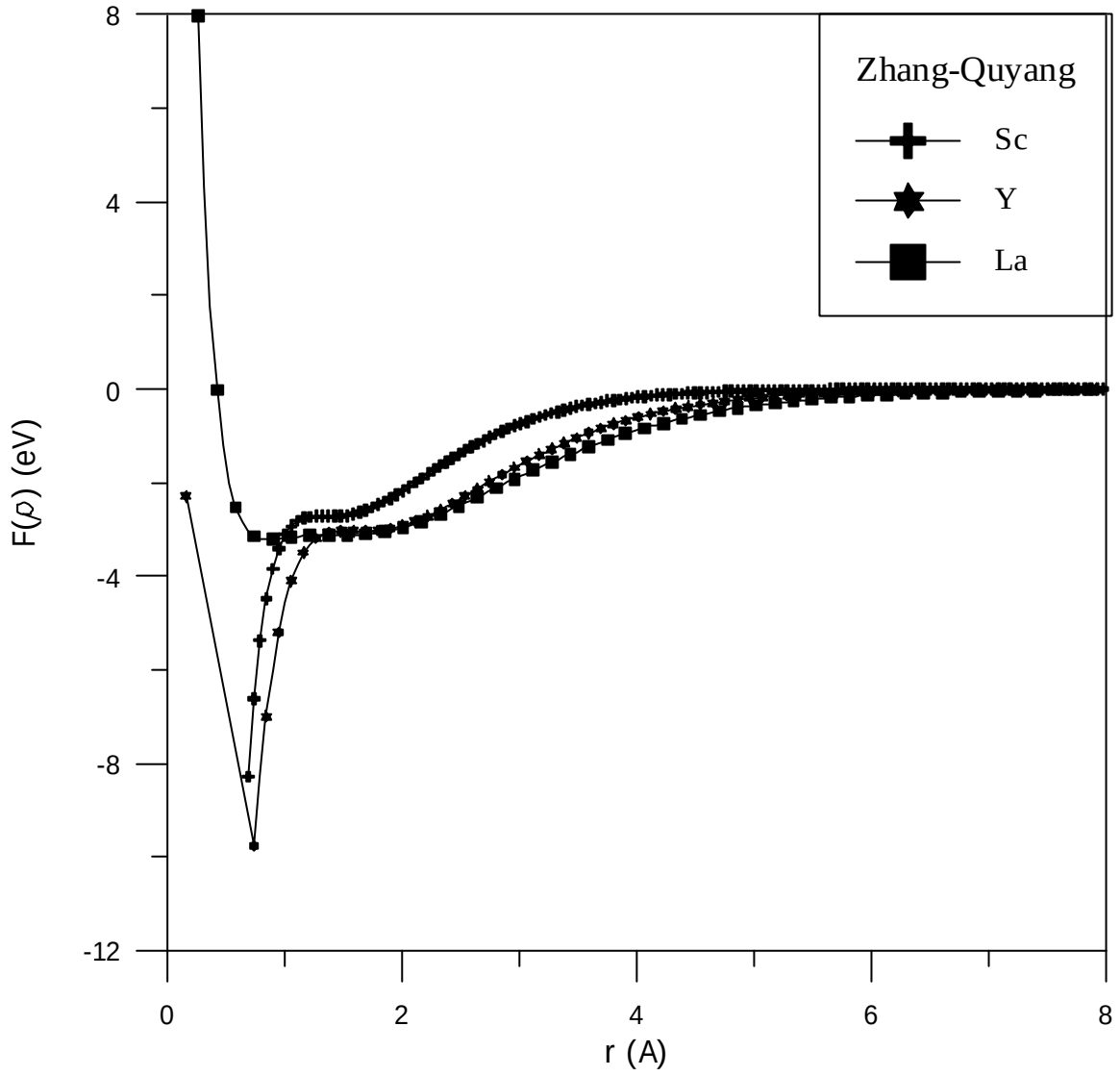

Sekil 5.1: Ti, Zr ve Co için ZQ-GAM çiftler etkilesme potansiyelleri



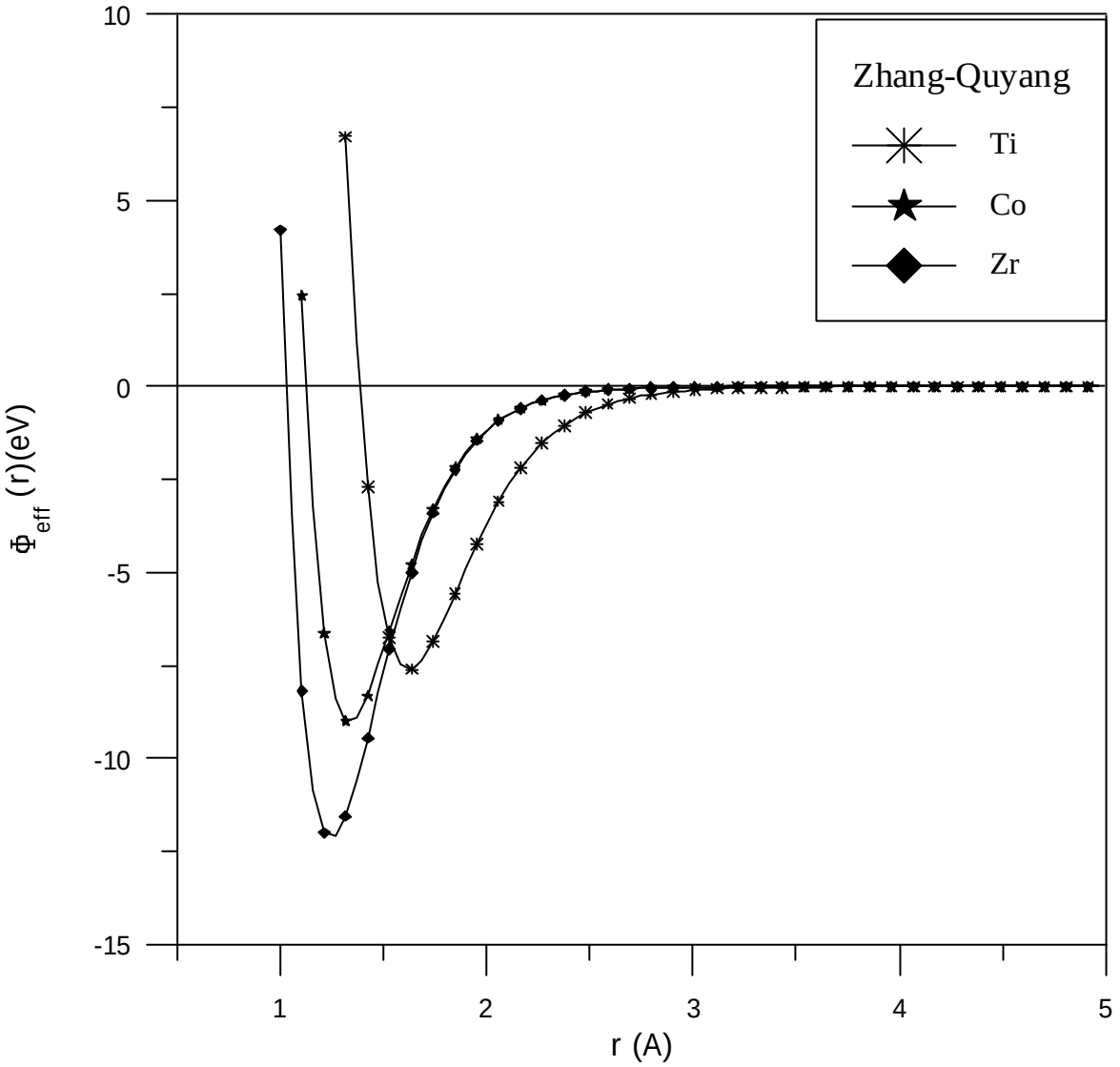

Sekil 5.2: Sc, Y ve La için ZQ-GAM çiftler etkilesme potansiyelleri



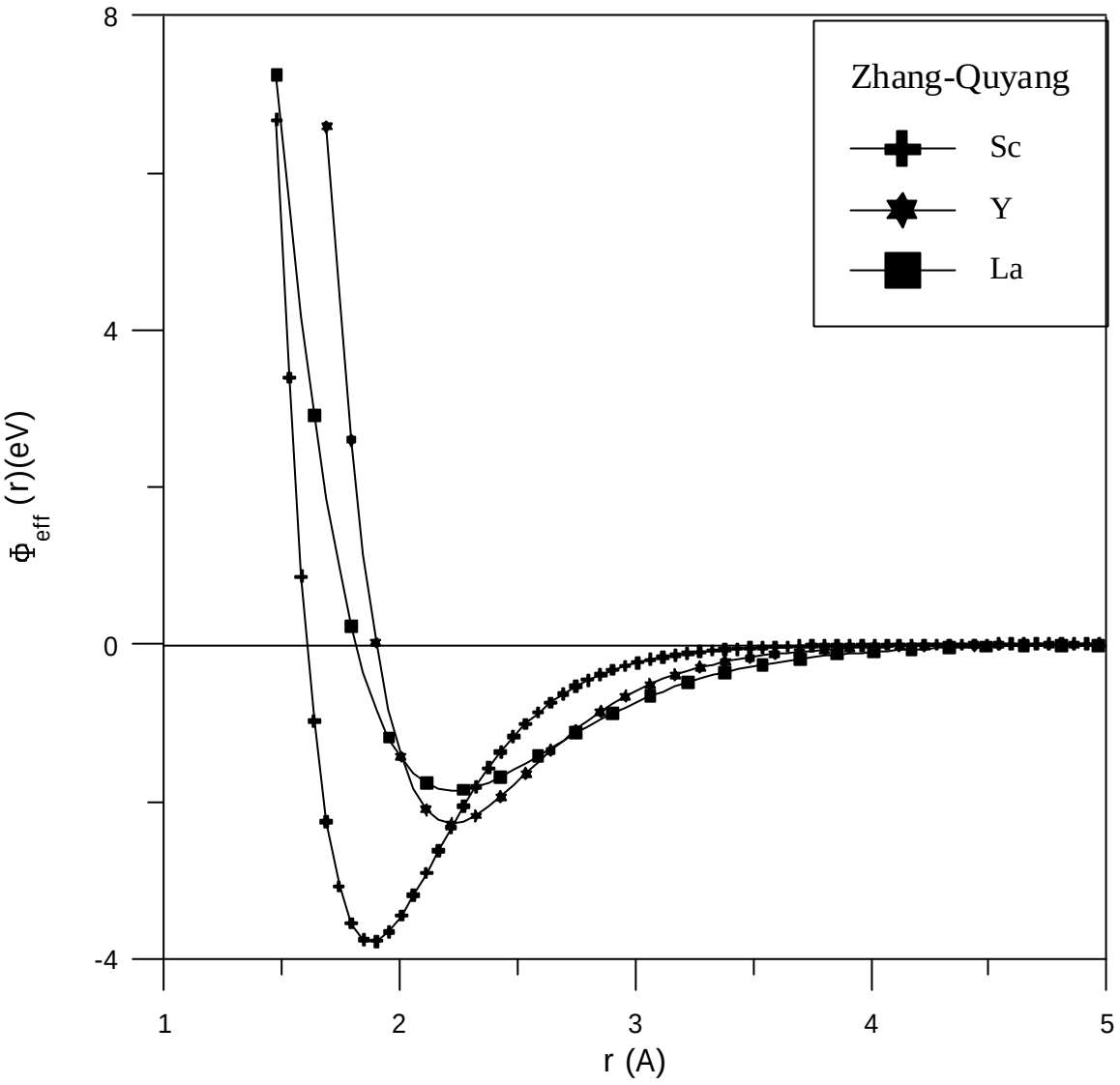

Sekil 5.3: Ti, Zr ve Co için ZQ-GAM gömme enerjisi fonksiyonlari fonksiyonlari




Sekil 5.4: Sc, Y ve La için ZQ-GAM gömme enerji fonksiyonlari




Sekil 5.5: Ti , Zr ve Co için ZQ GAM etkin çiftler etkilesme potansiyelleri




Sekil 5.6: Sc, Y ve La için ZQ- etkin çiftler etkilesme potansiyelleri

### 5.1.2 HX-AYDGAM Etkin Çiftler Potansiyeli

Hu, Xu ve arkadaslarinin (Hu W., 2000) kati sistem için öne sürmüs olduklari Analitik Gömülü Atom Metodu potansiyel fonksiyonlarini hem katihal hem de sivihal özelliklerine fit ederek elde edilen parametre seti kullanilarak bazi sivi hcp nadir toprak metallerinden Mg, Sc, Y, Pr, Nd, Gd, Tb, Dy, Ho, ve Er için atomlararasi etkin çiftler potansiyelleri hesaplandi. Hu-Xu AGAM 'nun sivi sistemler için optimize edilmis potansiyel parametreleri Tablo 5.3' de verilmektedir. Bu tabloda verilen kesme mesafesi için kullanilan $r_c$ degerleri potansiyeli sifir yapan r degeri alinmistir.

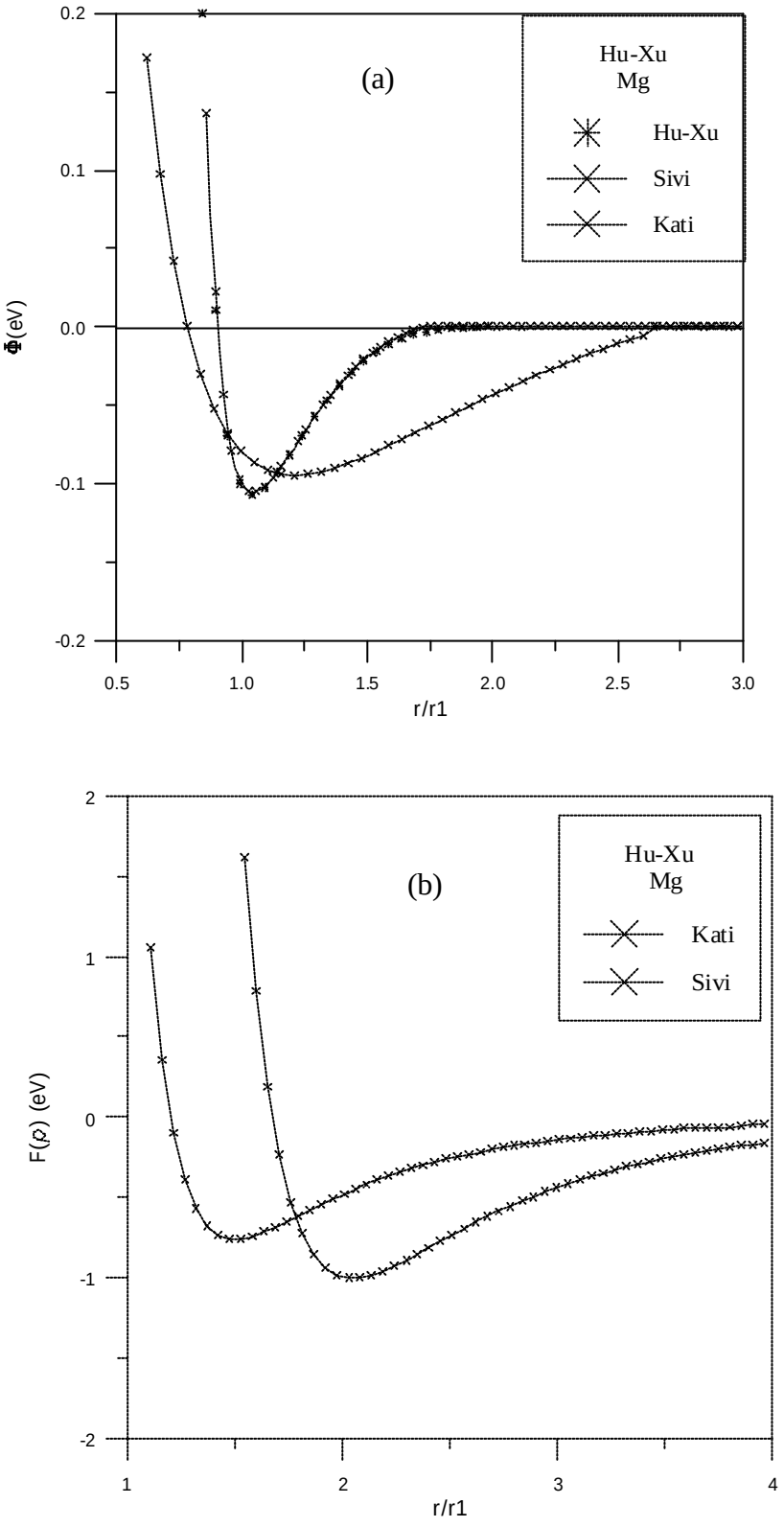
Hu-Xu AGAM'dan elde edilen sivi çiftler etkilesim fonksiyonlari Sekil 5.7-Sekil 5.10'da gösterilmistir. Mg için, kati-sivi çiftler etkilesim fonksiyonlari ve gömme enerji fonksiyonlari Sekil 5.7'de verilmektedir. Kati Mg 'un sivi Mg'a göre daha derindir. Çünkü kati istemde atomlar arasi mesafe sivi sisteme göre daha kisa oldugundan atomlar arasi etkilesmeler daha kuvvetlidir. Sc ve Y için kati parametreleri ile hesaplanan çiftler etkilesme fonksiyonlari ile Hu-Xu'nun degerleri Sekil 5.8 (a) da karsilastirilmis, Y için ayni deger hesaplanmis, Sc içinse potansiyel derinligi ayni, $r/r_1$ degerlerinde farklilik gözlenmistir. Sivi parametreleri ile hesaplananlarda Sekil 5.8 (b) de gösterilmistir. Ayni sekilde Pr, Nd ve Gd için Sekil 5.9 da, Tb, Dy, Ho ve Er içinde Sekil 5.10 da verilmistir. Bulunan degerler Hu-Xu'nun degerleri ile aynidir. Sekil 5.11'de Sc ve Y'nin gömme enerji fonksiyonlari, Sekil 5.12'de Pr, Nd ve Gd'nin Sekil 5.13'te iseTb, Dy, Ho ve Er'in in gömme enerji fonksiyonlari verilmektedir.

Hu-Xu AGAM potansiyel fonksiyonlari ile Finnis ve Sinclair (Finnis ve Sinclair 1984)' in GAM etkin çiftler potansiyel yaklasimini kullanarak sivi Mg, Sc, Y, Tb, Dy, Ho, Gd, Nd, Pr ve Er için bölüm 3'de anlatildigi gibi her iki yöntem ile hesapladigimiz etkin çiftler etkilesme potansiyelleri Sekil 5.14- Sekil 5.17' de verilmektedir. Sekil 5.18-Sekil 20'e her bir metalin I ve II. FS-AGAM yöntemden elde edilen etkin çiftler potansiyelleri birbirleri ile karsilastirmali olarak verilmektedir.FS-AGAM'nu elde etmek için toplam enerjiye M(P) gibi düzeltme terimi eklendi. Sekil 5.14'te Mg 'un her iki yöntem ile elde edilen etkin çiftler etkilesme potansiyel fonksiyonlari verilmistir. Sekilden de görüldügü gibi I. yöntemden hesaplanan fonksiyonun daha derin ve daha uzun r degerine gittigi görülmektedir. Sekil 5.15 ve Sekil 5.17'de sirasiyla Sc ve Y için I. ve II. yöntem ile hesaplanan etkin çiftler etkilesme

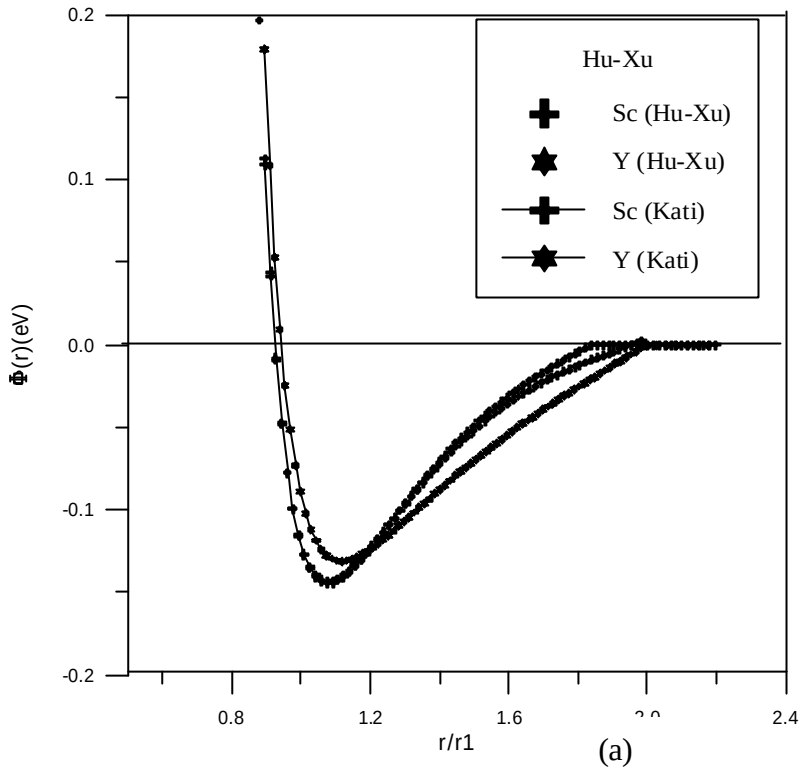
potansiyel fonksiyonlari verilmistir. Sekillerden de görüldügü gibi her iki yöntemde potansiyel derinlikte pek fark olmadigi fakat I. yöntemle hesaplanan potansiyelin yumusak ve minimum konumunun daha büyük r degerlerinde oldugu görülür. Sekil 5.15 ve Sekil 5.18'de sirasiyla Gd, Pr ve Nd için I. ve II. yöntem ile hesaplanan etkin çiftler etkilesme potansiyel fonksiyonlari verilmistir. Sekillerden de görüldügü gibi I. yöntem ile hesaplanan potansiyellerin daha derin ve minimum konumunun daha büyük r degerlerinde oldugu görülür. Sekil 5.16 ve Sekil 5.19'da Tb.Dy, Ho ve Er için sirasiyla I. ve II. yöntem ile hesaplanan etkin çiftler etkilesme potansiyel fonksiyonlari verilmistir. Sekillerden de görüldügü gibi I. yöntem ile hesaplanan potansiyellerin daha uzun menzilli oldugu derinliklerinde ise pek farklilik olmadigi görülmektedir. Ayrica her iki yöntemde de Finnis ve Sinclair' in etkin çiftler potansiyel yaklasiminda gömme enerjisinin ikinci ve daha yüksek mertebeli türevleri ihmal edilmistir.

Tablo 5.3: Sivi HCP metalleri için HX-AYDGAM potansiyel parametreleri

| | Mg | Sc | Y | Pr | Nd | Gd | Tb | Dy | Ho | Er |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| n | 0.73 | 0.64 | 0.57 | 0.119 | 0.112 | 0.128 | 0.22 | 0.14 | 0.18 | 0.25 |
| $f_e$ | 0.0529 | 0.0793 | 0.0636 | 0.0558 | 0.0539 | 0.0617 | 0.063 | 0.0552 | 0.052 | 0.0591 |
| $F_0$(eV) | 0.74 | 2.72 | 3.14 | 5.1 | 4.9 | 5.9 | 5.565 | 5.05 | 10 | 3.63 |
| a (eV) | -0.0279 | -0.1098 | -0.1243 | -0.150 | 0.0267 | -0.0336 | -0.0272 | -0.0327 | -0.041 | -0.0595 |
| ß (eV) | 27.547 | 2.6829 | 4.2067 | -0.9459 | -0.5969 | -16.541 | -6.1585 | -6.8366 | -8.3462 | -22.615 |
| $k_5$(eV) | 0.0543 | 0.1103 | 0.1176 | 0.0718 | 0.0894 | 0.1087 | 0.0868 | 0.1158 | 0.1221 | 0.1271 |
| $k_4$(eV) | 0.0026 | -0.0323 | -0.0382 | -0.0297 | -0.0772 | -0.0582 | 0.0565 | -0.0399 | 0.0711 | -0.0331 |
| $k_3$(eV) | 0.1324 | 0.1065 | 0.0459 | 0.1131 | 0.0942 | 0.0861 | 0.1372 | 0.0518 | 0.1284 | 0.0538 |
| $k_2$(eV) | -0.6668 | -0.5506 | -0.2414 | -0.5644 | -0.4649 | -0.4371 | -0.7141 | -0.2783 | -0.6492 | -0.2836 |
| $k_1$(eV) | 0.9473 | 0.8174 | 0.3932 | 0.8016 | 0.6561 | 0.6426 | 1.062 | 0.4415 | 1.016 | 0.4531 |
| $k_0$(eV) | -0.5727 | -0.5721 | -0.3675 | -0.4929 | -0.41 | -0.4537 | -0.7402 | -0.3696 | -0.911 | 0.4130 |
| $r_c(A)$ | 6.24 | 6.347 | 7.05 | 6.65 | 7.3 | 7.3 | 7.07 | 7.02 | 6.83 | 7.01 |
| $r_1(A)$ | 3.2 | 3.25 | 3.55 | 3.63 | 3.66 | 3.58 | 3.52 | 3.51 | 3.49 | 3.47 |



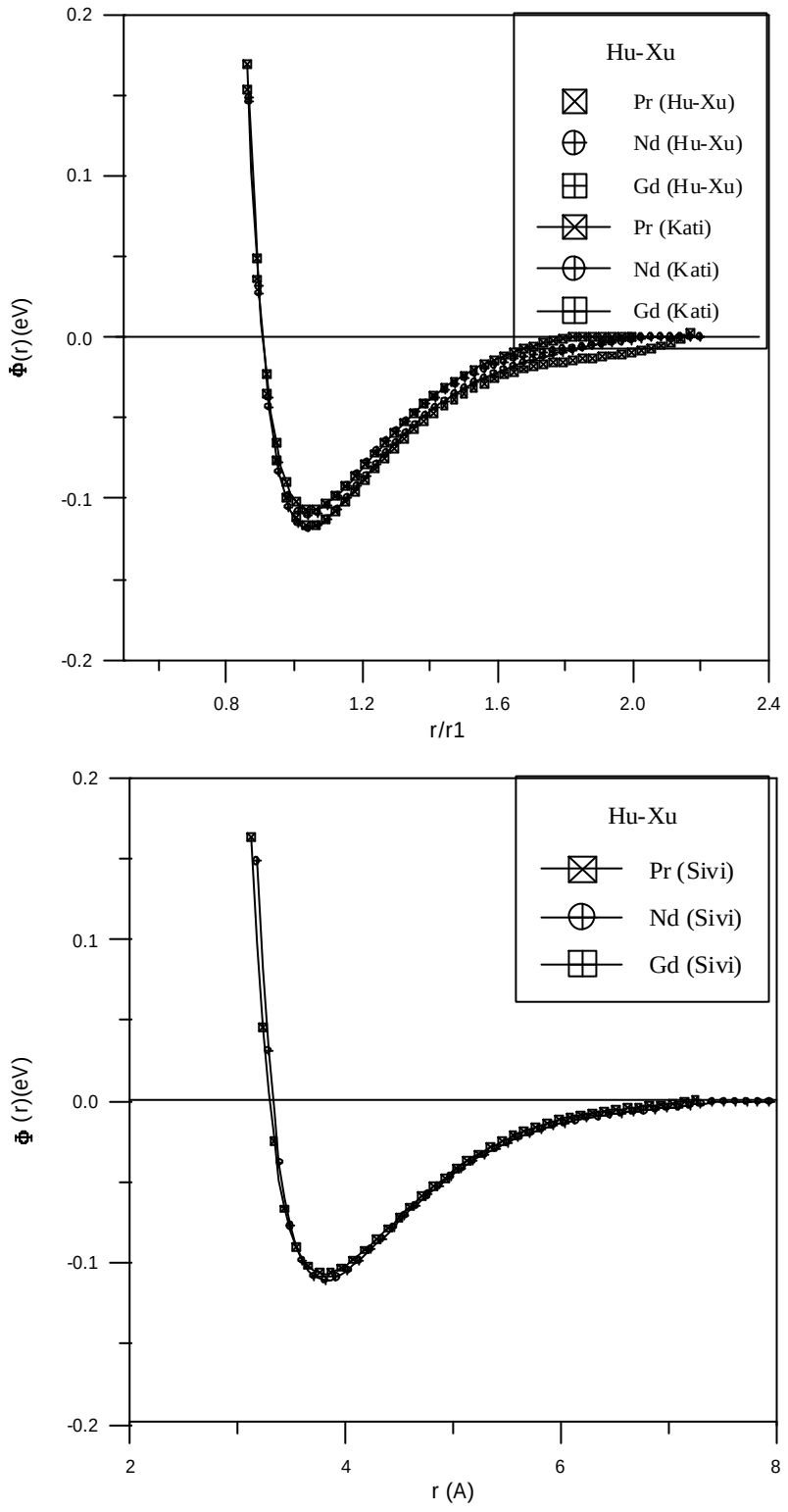

Sekil 5.7 : Mg için HX-AYDGAM kullanilarak elde edilen
a)Çiftler etkilesme potansiyelleri
b)Gömme enerjisi fonksiyonlari



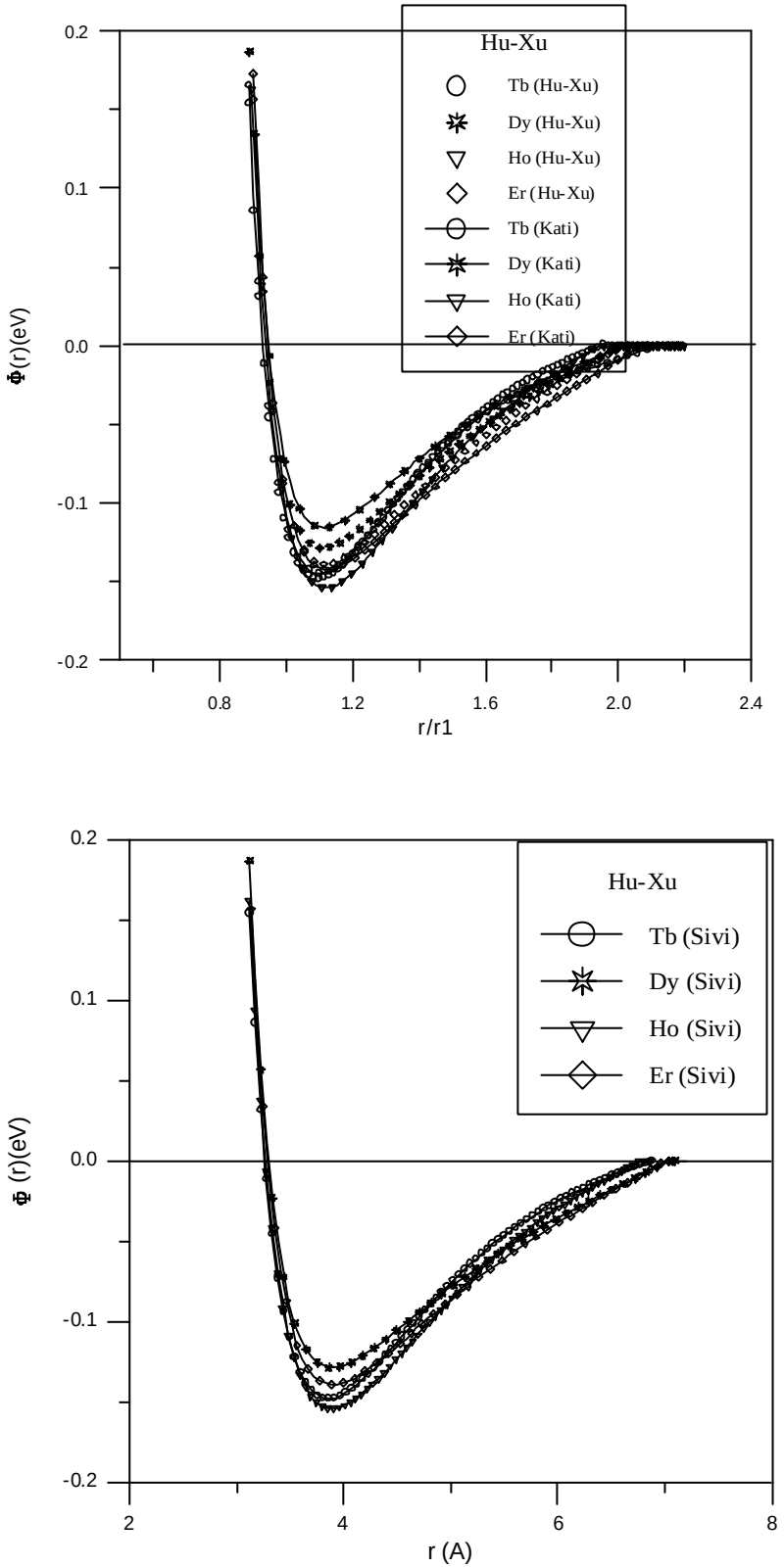

Sekil 5.8: Sc, Y için HX-AYDGAM kullanarak

(a) Kati parametreleri ile elde edilen çiftler etkilesme potansiyellerinin diger çalismalarla karsilastirilmasi

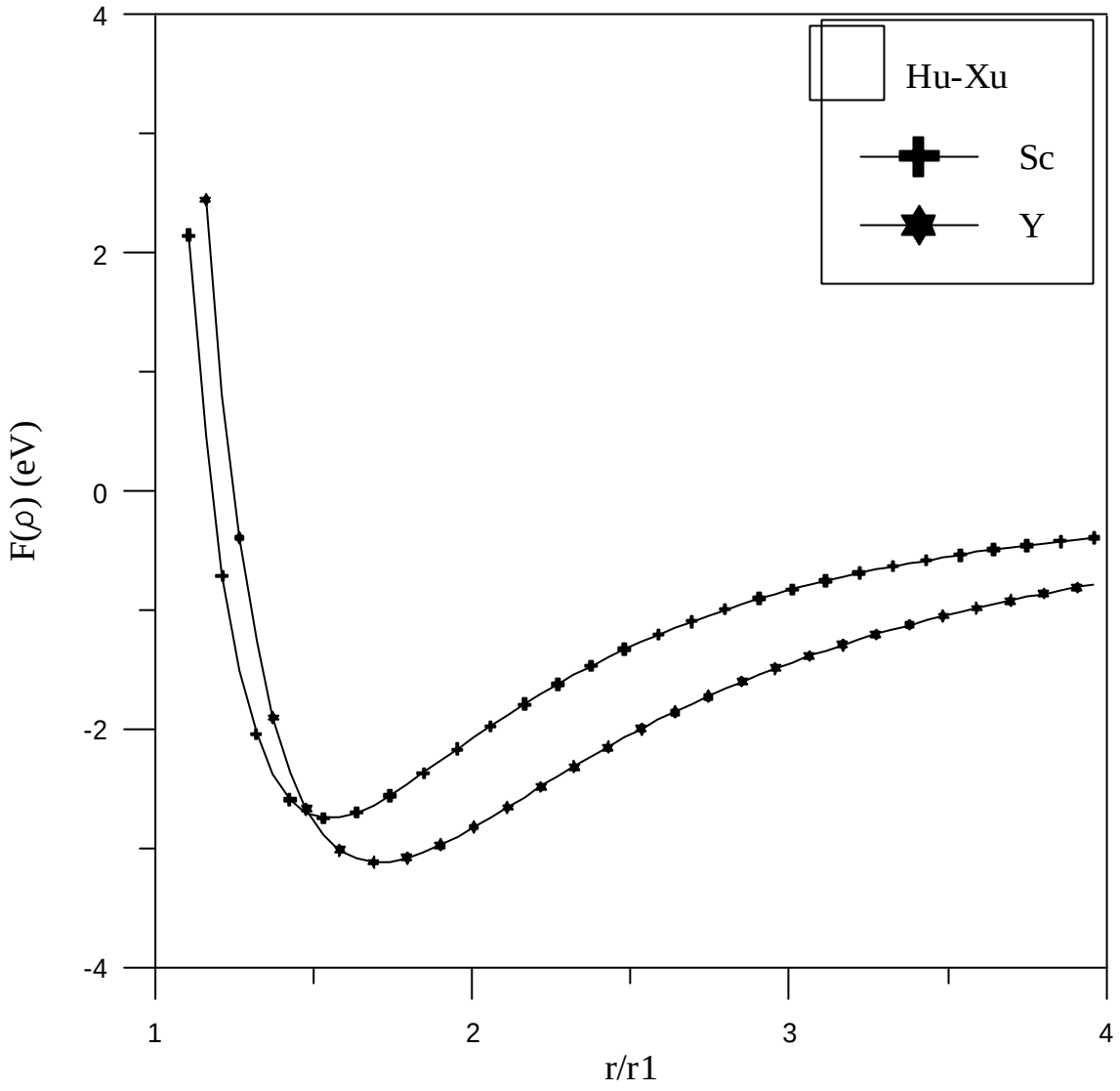
(b) Elde edilen sivi çiftler etkilesme potansiyelleri



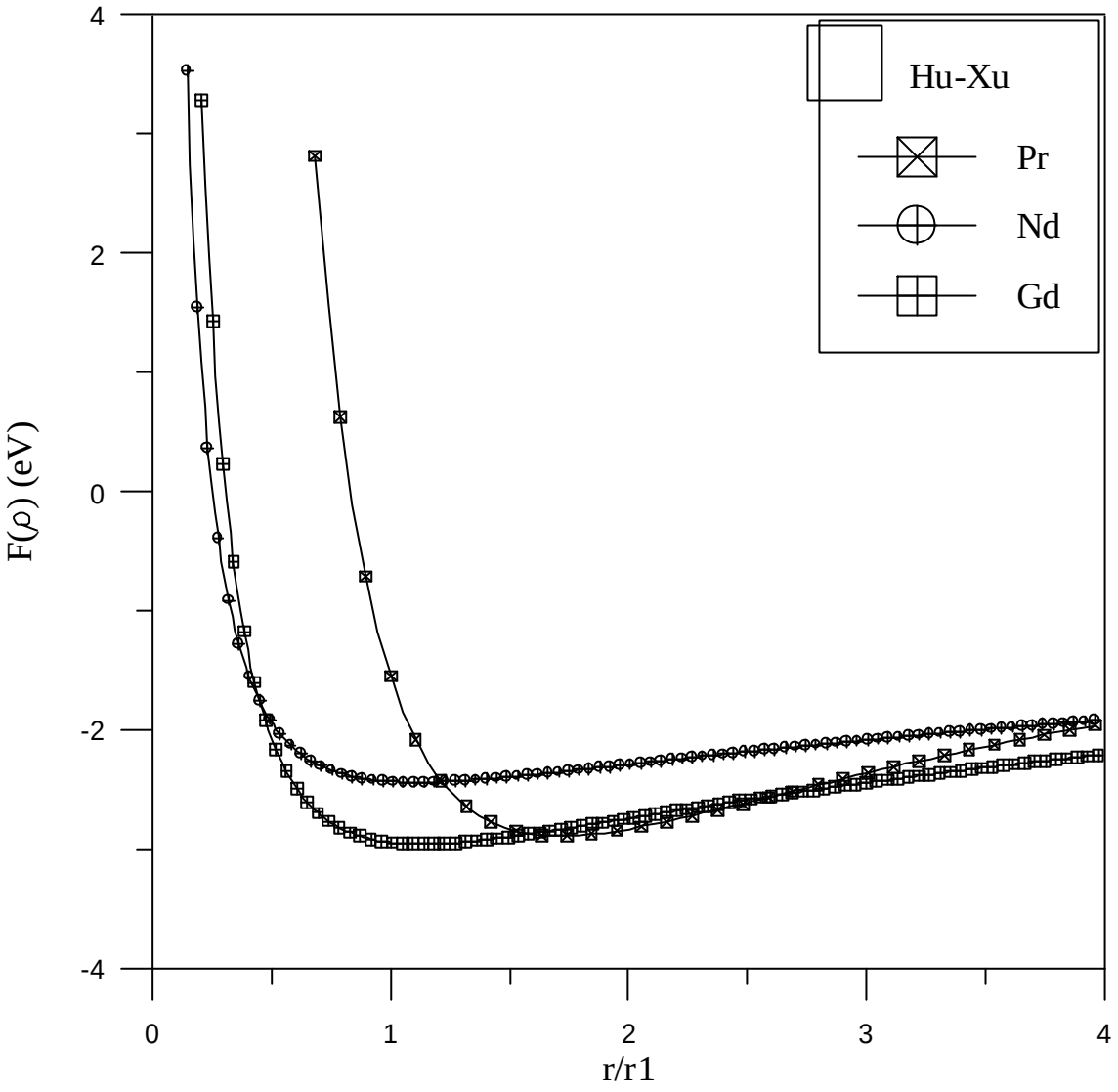

Sekil 5.9: Pr, Nd ve Gd için HX-AYDGAM kullanarak
(a) Kati parametreleri ile elde edilen çiftler etkilesme potansiyellerinin diger çalismalarla karsilastirilmasi
(b) Elde edilen sivi çiftler etkilesme potansiyelleri



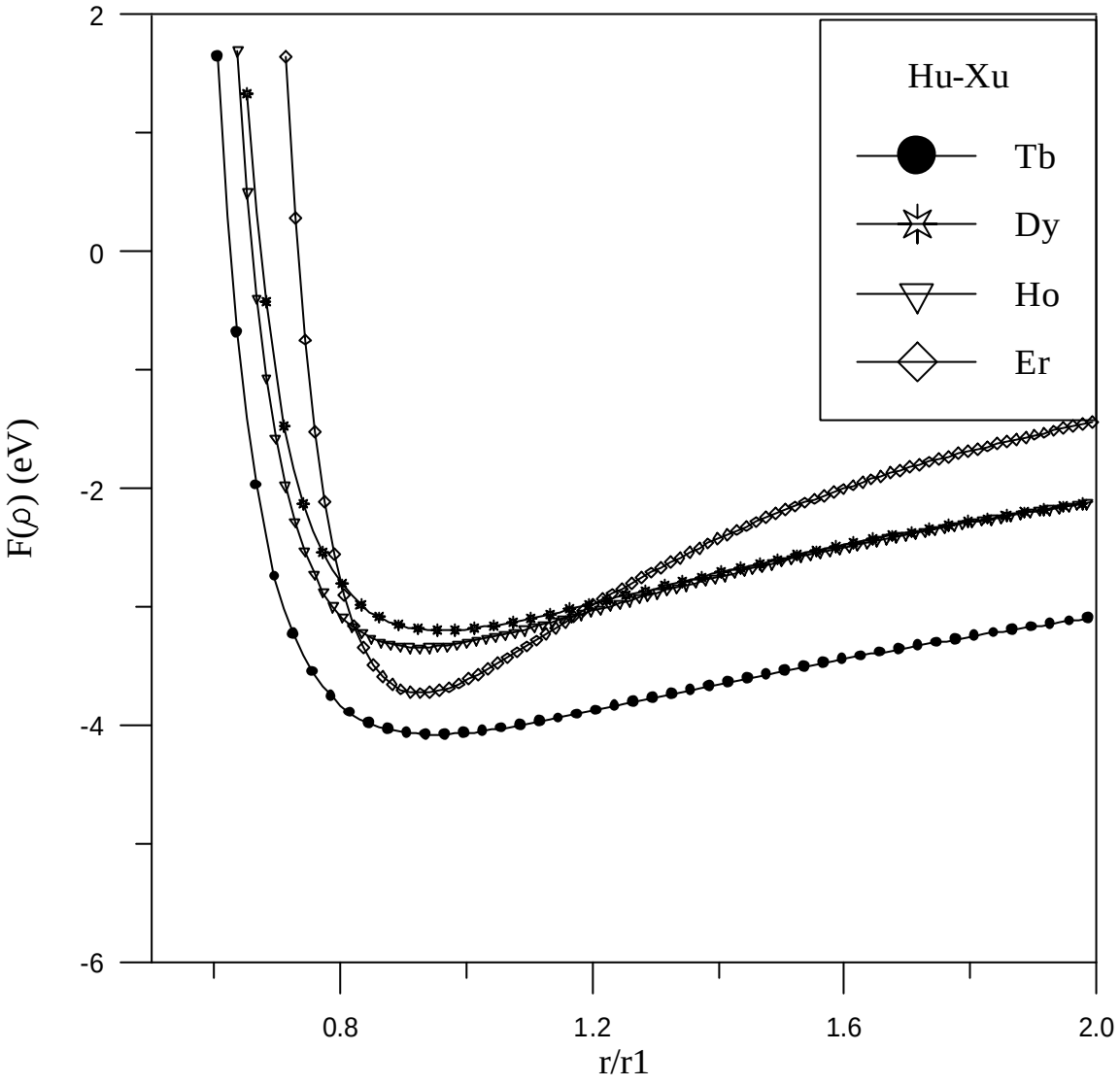

Sekil 5.10: Tb, Dy, Ho ve Er için HX-AYDGAM kullanarak
(a) Kati parametreleri ile elde edilen çiftler etkilesme potansiyellerinin diger çalismalarla karsilastirilmasi
(b) Elde edilen sivi çiftler etkilesme potansiyelleri



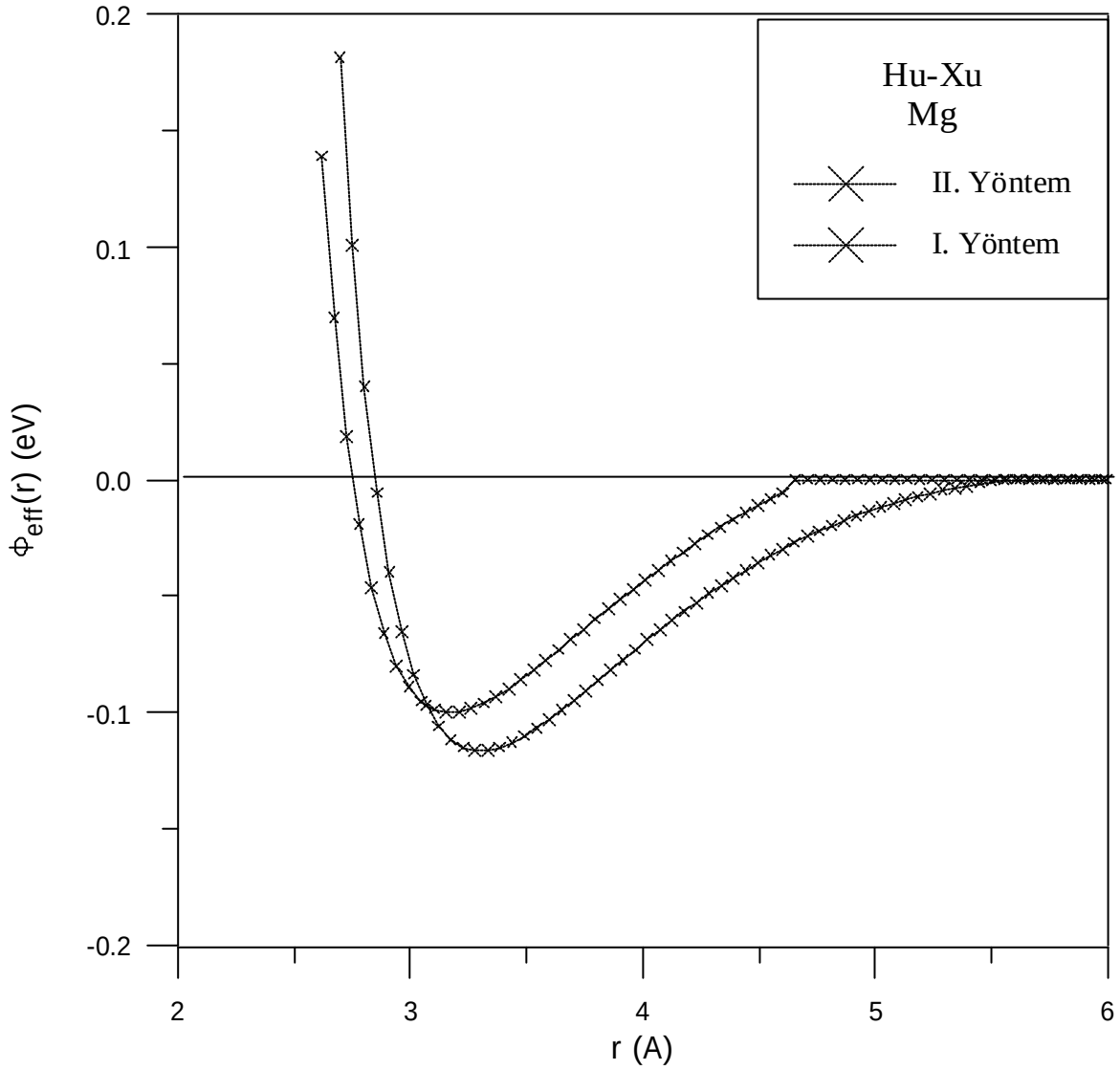

Sekil 5.11: Sc ve Y için HX-AYDGAM gömme enerjisi fonksiyonlari



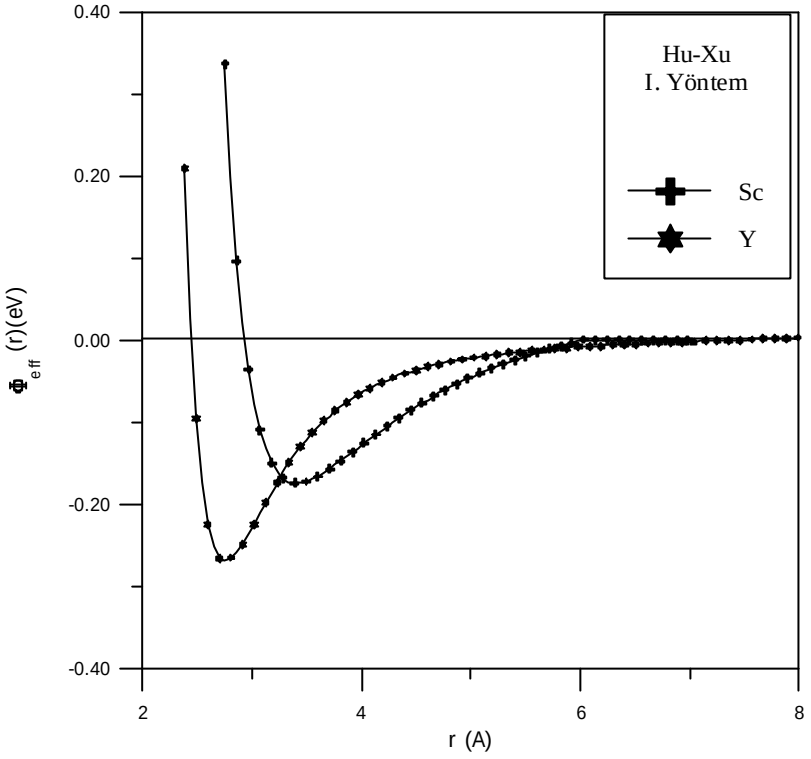

Sekil 5.12: Pr, Nd ve Gd için HX-AYDGAM gömme enerjisi fonksiyonlari

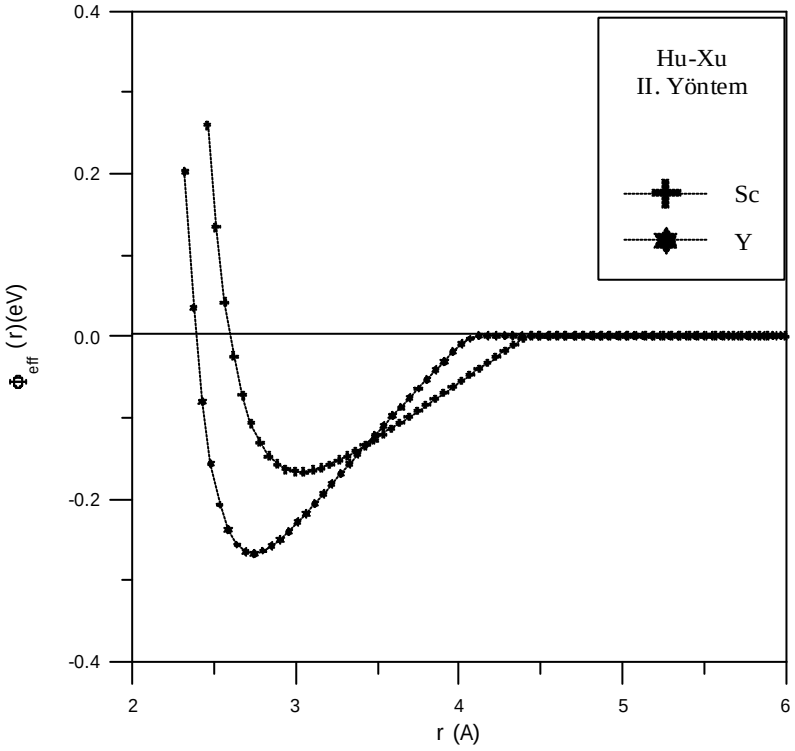



Sekil 5.13: Tb, Dy, Ho ve Er için HX-AYDGAM gömme enerjisi fonksiyonlari

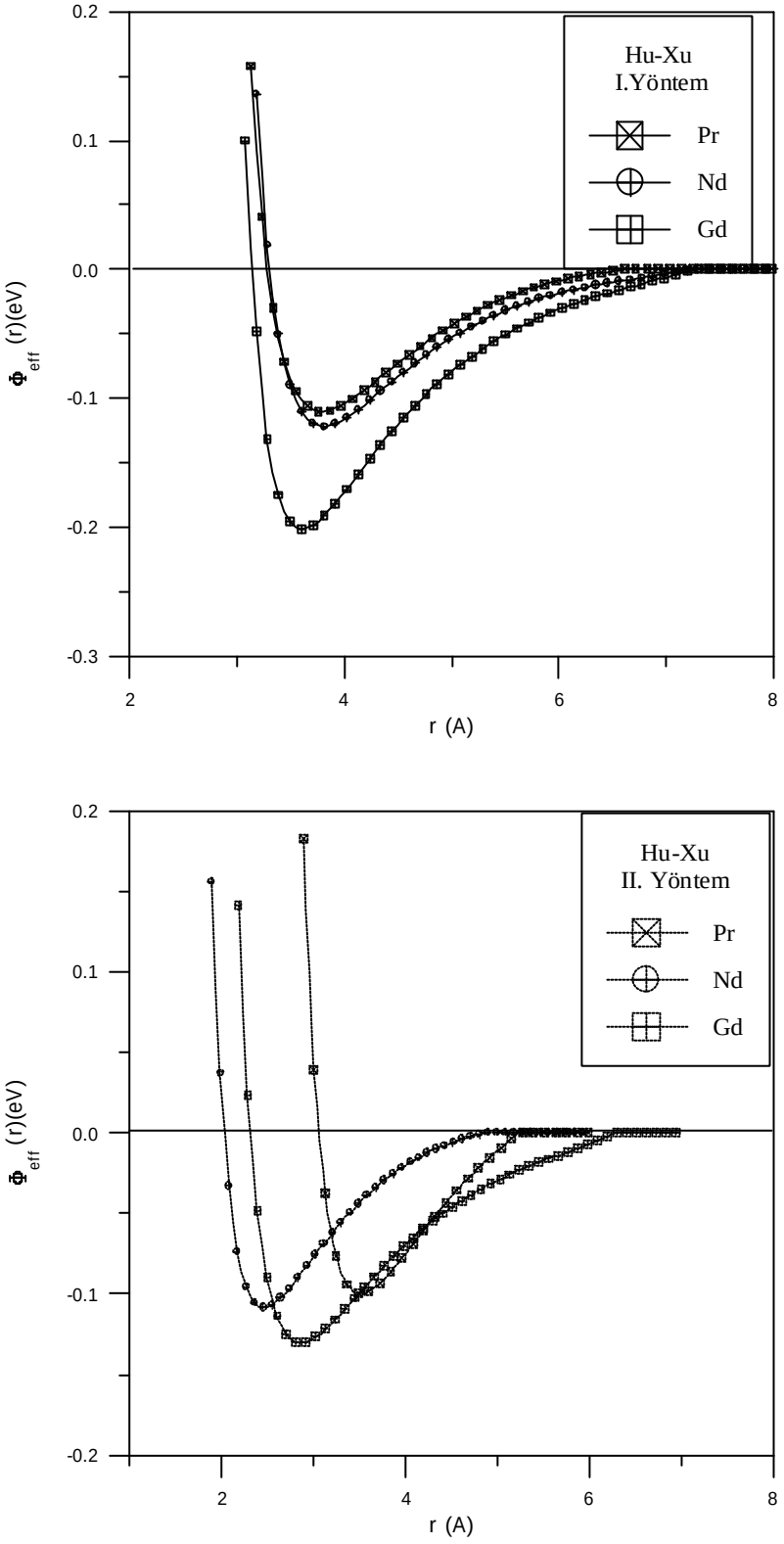



Sekil 5.14: Mg için HX-AYDGAM ve I.-II. FS-AYDGAM formu ile hesaplanan etkin çiftler etkilesme potansiyelleri

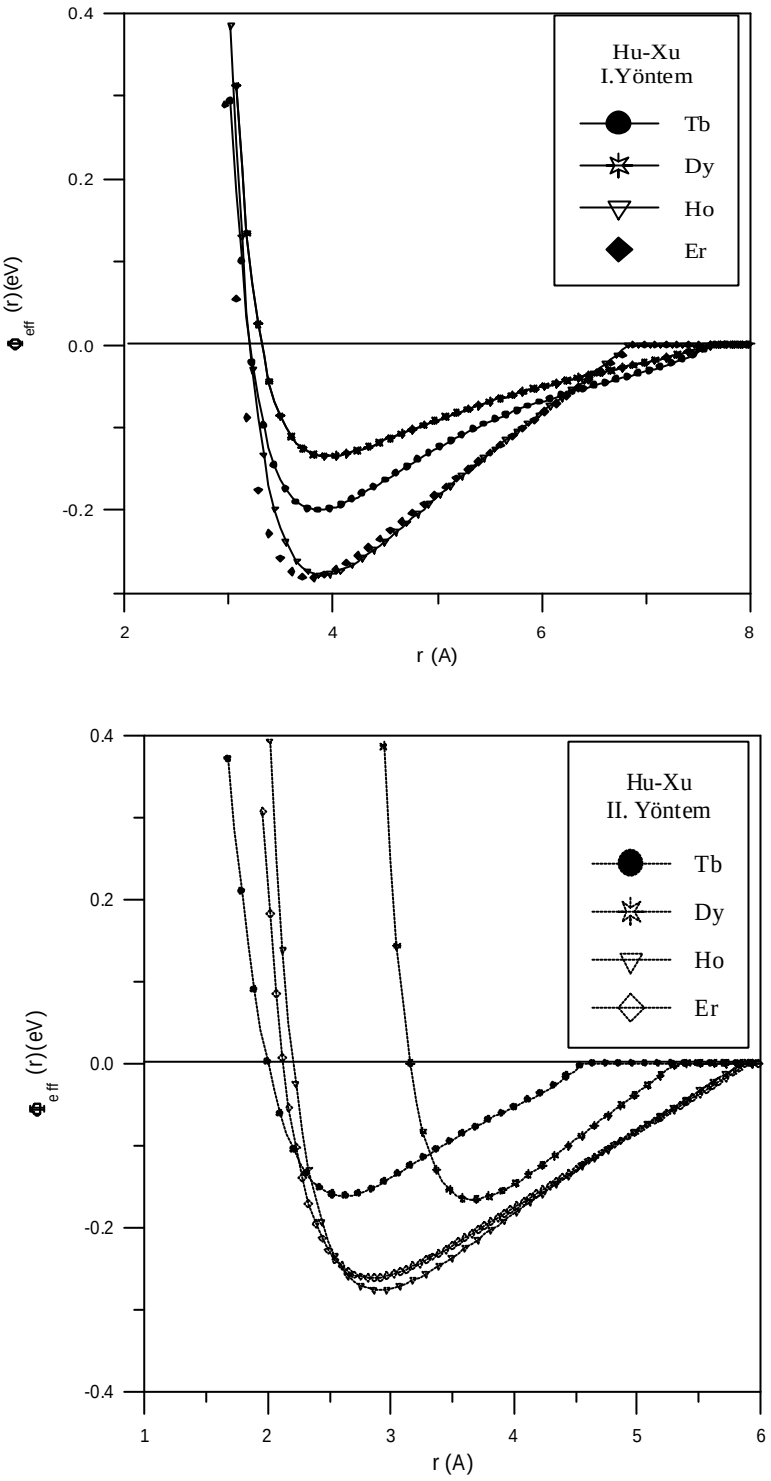


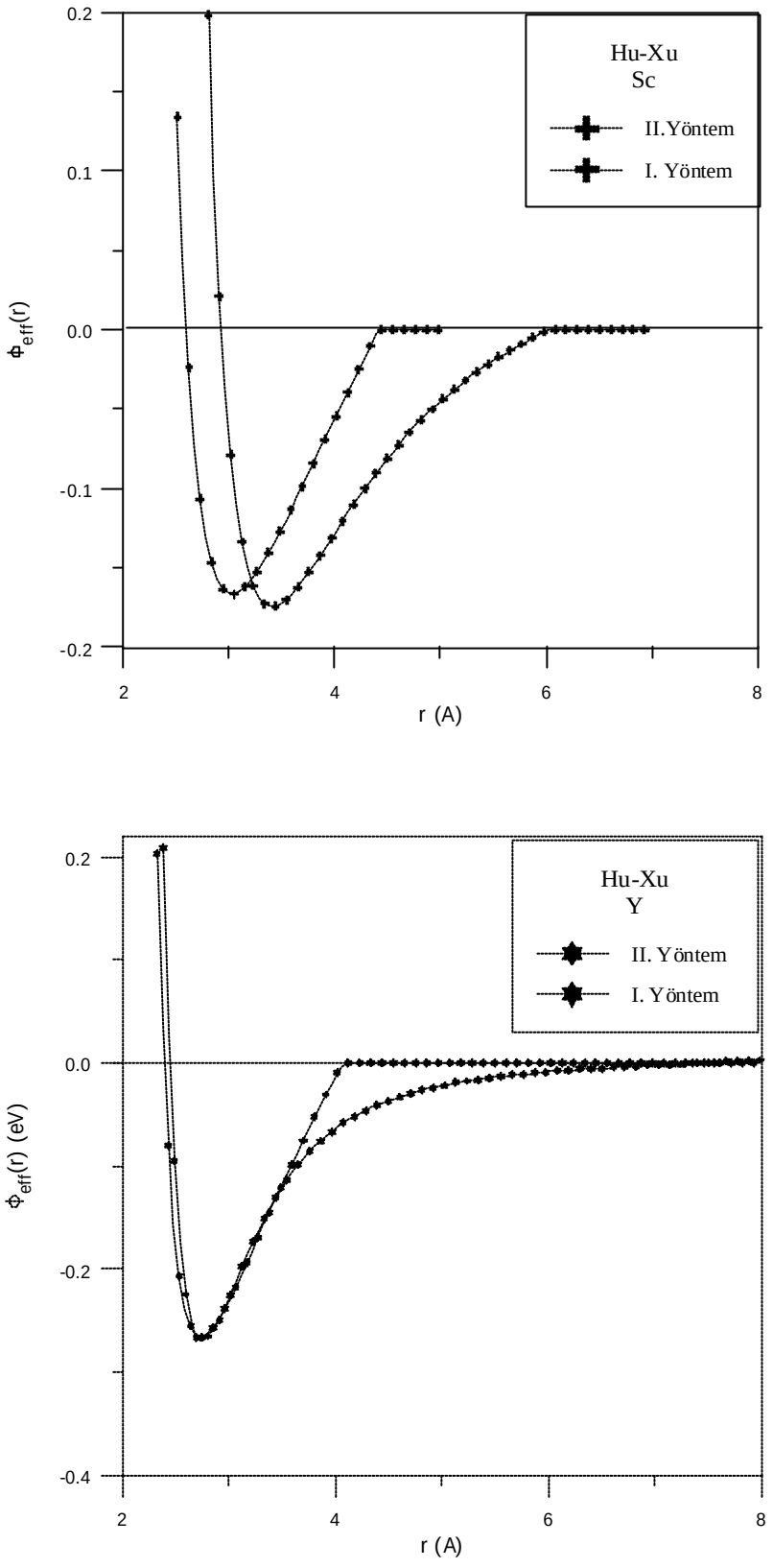

Sekil 5.15: Sc ve Y için HX-AYDGAM ve I.-II. FS-AYDGAM yöntemleri ile hesaplanan etkin çiftler etkilesme potansiyelleri



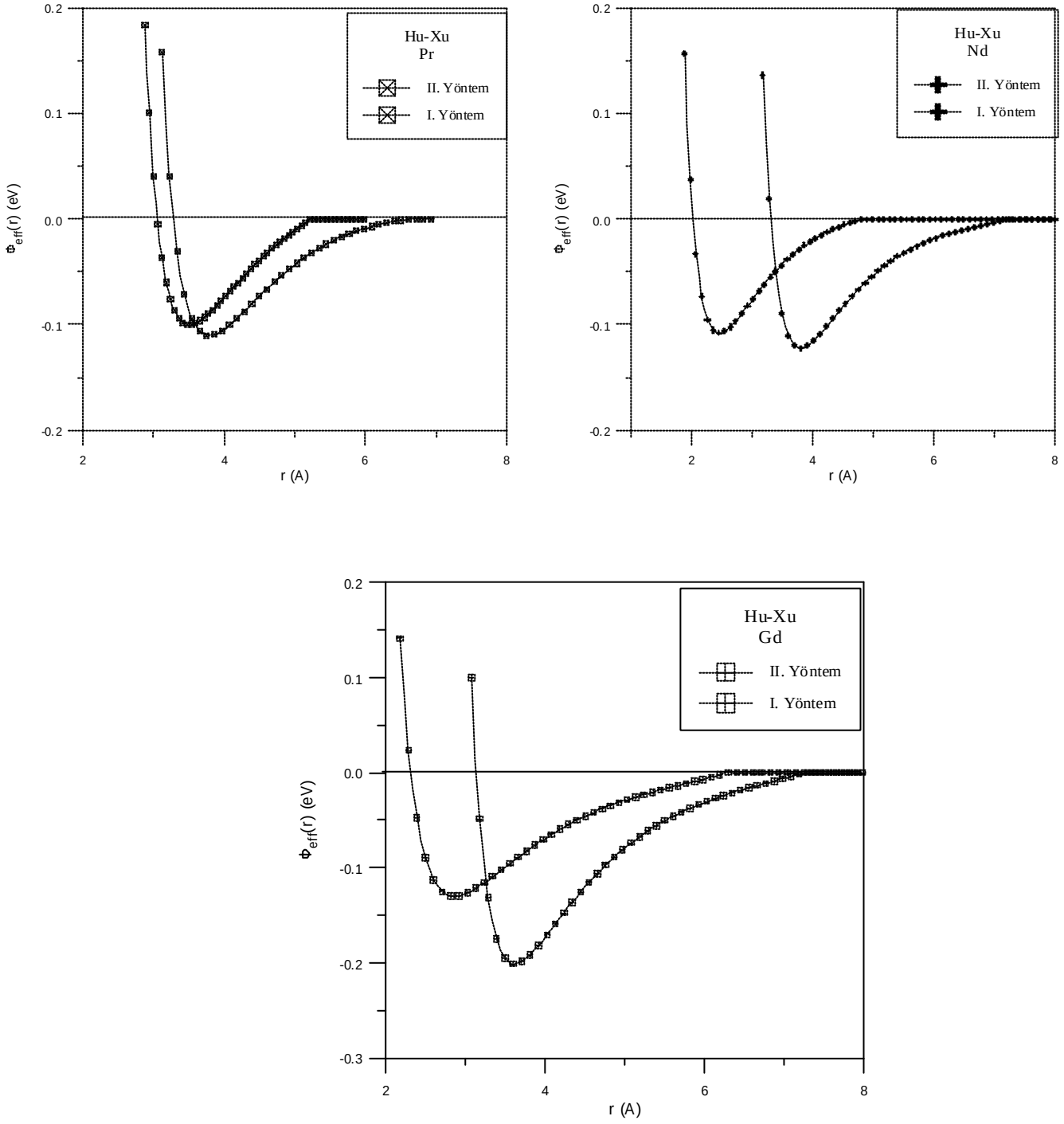

Sekil 5.16: Pr, Nd ve Gd için HX-AYDGAM ve I.-II. FS-AYDGAM yöntemleri ile hesaplanan etkin çiftler etkilesme potansiyelleri



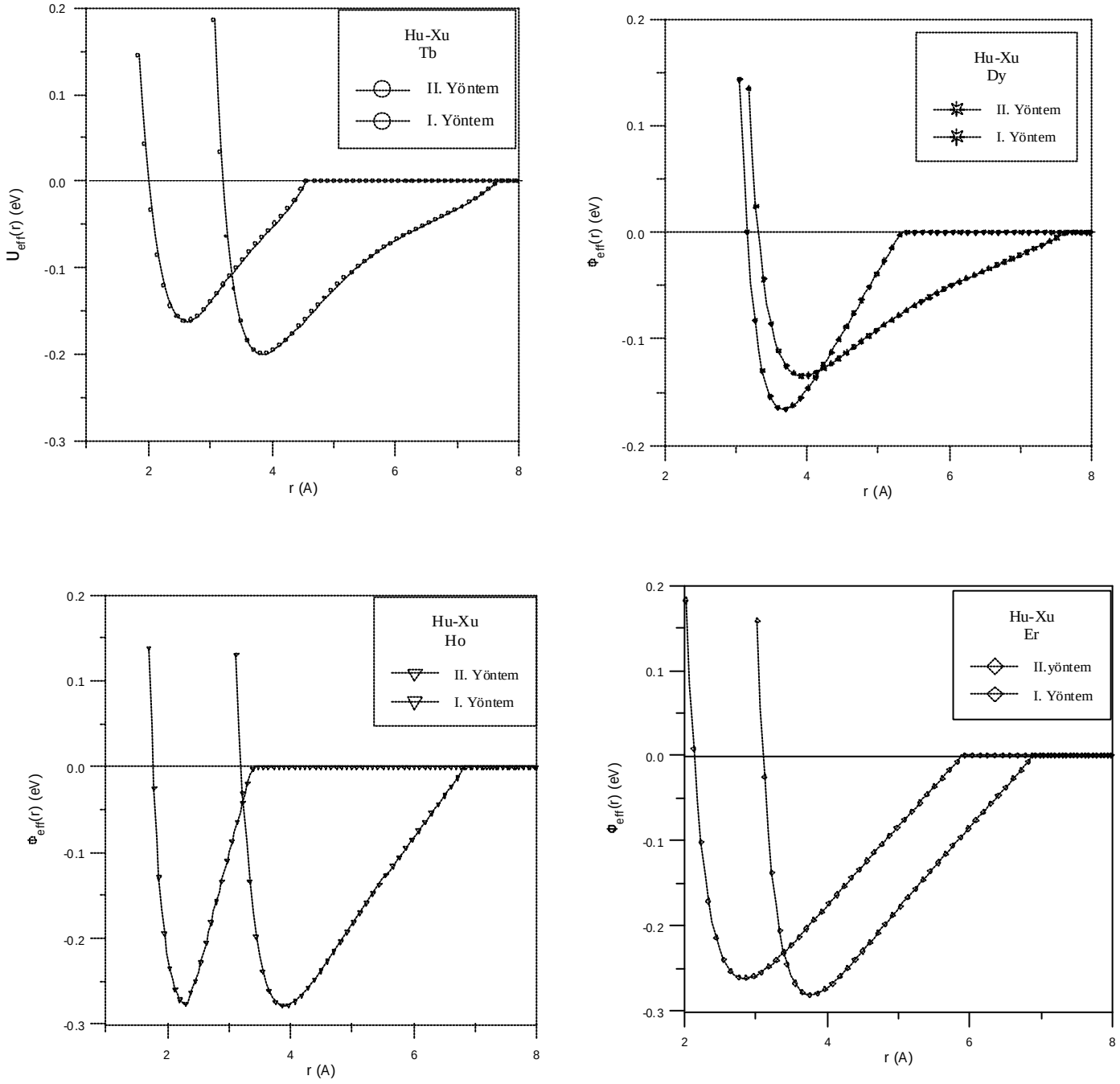

Sekil 5.17: Tb, Dy, Ho ve Er için HX-AYDGAM ve I.-II. FS-AYDGAM yöntemleri ile hesaplanan etkin çiftler etkilesme potansiyelleri




Sekil 5.18: Sc ve Y için HX-AYDGAM ve I.-II. FS-AYDGAM yöntemleri ile hesaplanan etkin çiftler potansiyellerinin karsilastirilmasi




Sekil 5.19: Pr, Nd ve Gd için HX-AYDGAM ve I.-II. FS-AYDGAM formu ile elde edilen etkin çiftler potansiyellerinin karsilastirilmasi




Sekil 5.20: Tb, Dy, Ho ve Er için HX-AYDGAM ve I.-II. FS-AYDGAM yöntemleri ile elde edilen etkin çiftler potansiyellerinin karsilastirilmasi

### 5.1.3 HZ-AYDGAM Etkin Çiftler Potansiyeli

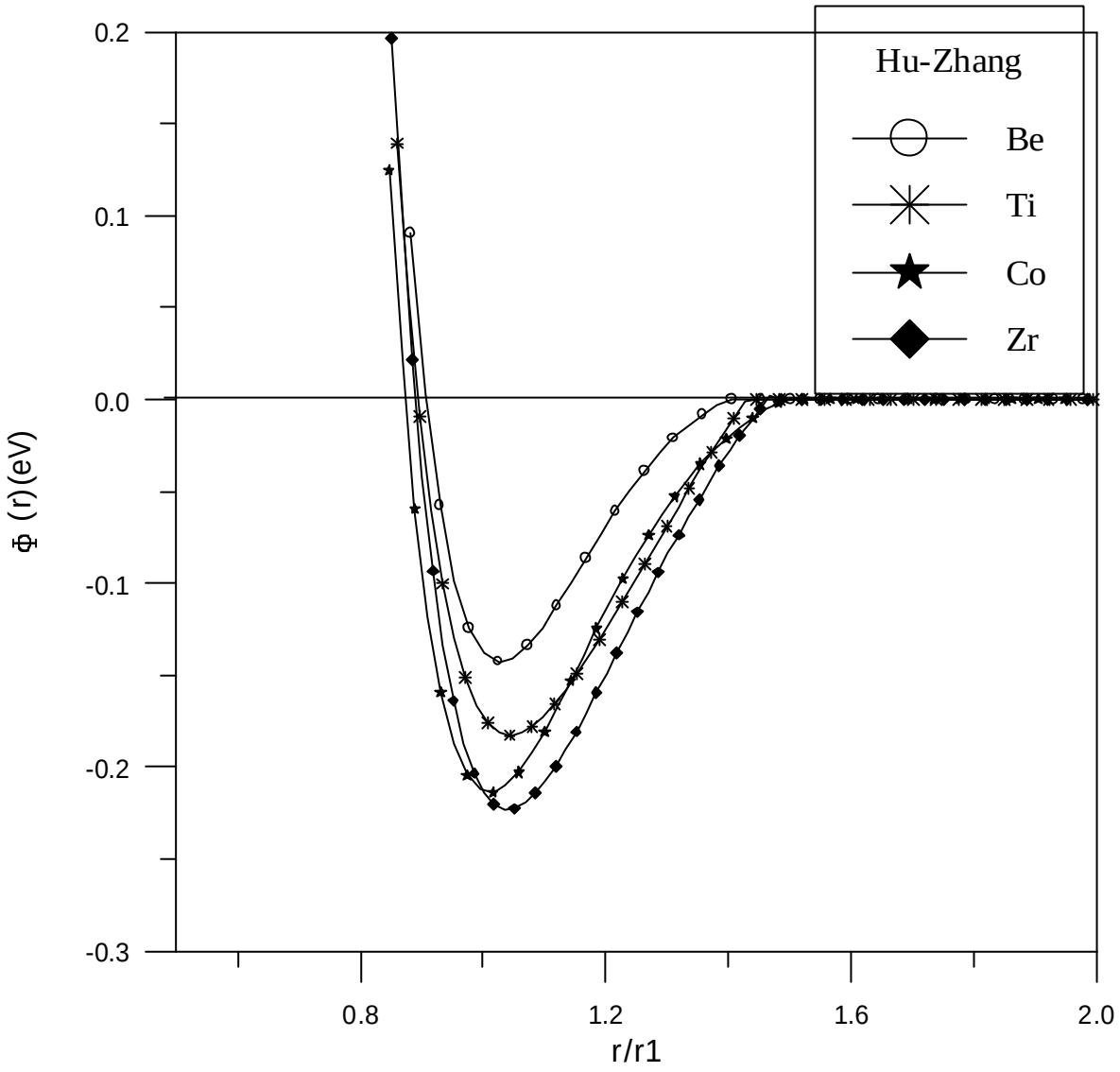
Hu, Zhang ve arkadaslarinin (Hu W., Zhang B., 2001) kati sistem için öne sürmüs olduklari Analitik Gömülü Atom Metodu potansiyel fonksiyonlarini hem katihal hem de sivihal özelliklerine fit ederek elde edilen parametre seti kullanilarak bazi sivi hcp nadir toprak metallerinden Be, Co, Mg, Sc, Ti, Y ve Zr için atomlararasi etkin çiftler potansiyelleri hesaplandi. Hu-Zhang AGAM 'nun sivi sistemler için optimize edilmis potansiyel parametreleri Tablo 5.5' de verilmektedir. Bu tabloda verilen kesme mesafesi için kullanilan $r_c$ degerleri potansiyeli sifir yapan r degeri alinmistir.

Hu-Zhang AGAM'dan elde edilen sivi çiftler etkilesim fonksiyonlari, Be, Co, Ti ve Zr Sekil 5.20'de, Mg, Sc ve Y Sekil 5.21'de gösterilmistir. Sekillerden de görüldügü gibi potansiyellerin periyodik cetvel ile uyumlu olduklari yani atom numarasinin büyük olanin daha derin potansiyeli oldugu ayrica bu yöntemde Mg'un kisa menzilde etkilesimler yaptigi görülmektedir. Sekil 5.22 ve Sekil 5.23'te verilen gömme enerji fonksiyonlarindan da ayni sonuca ulasabiliriz.

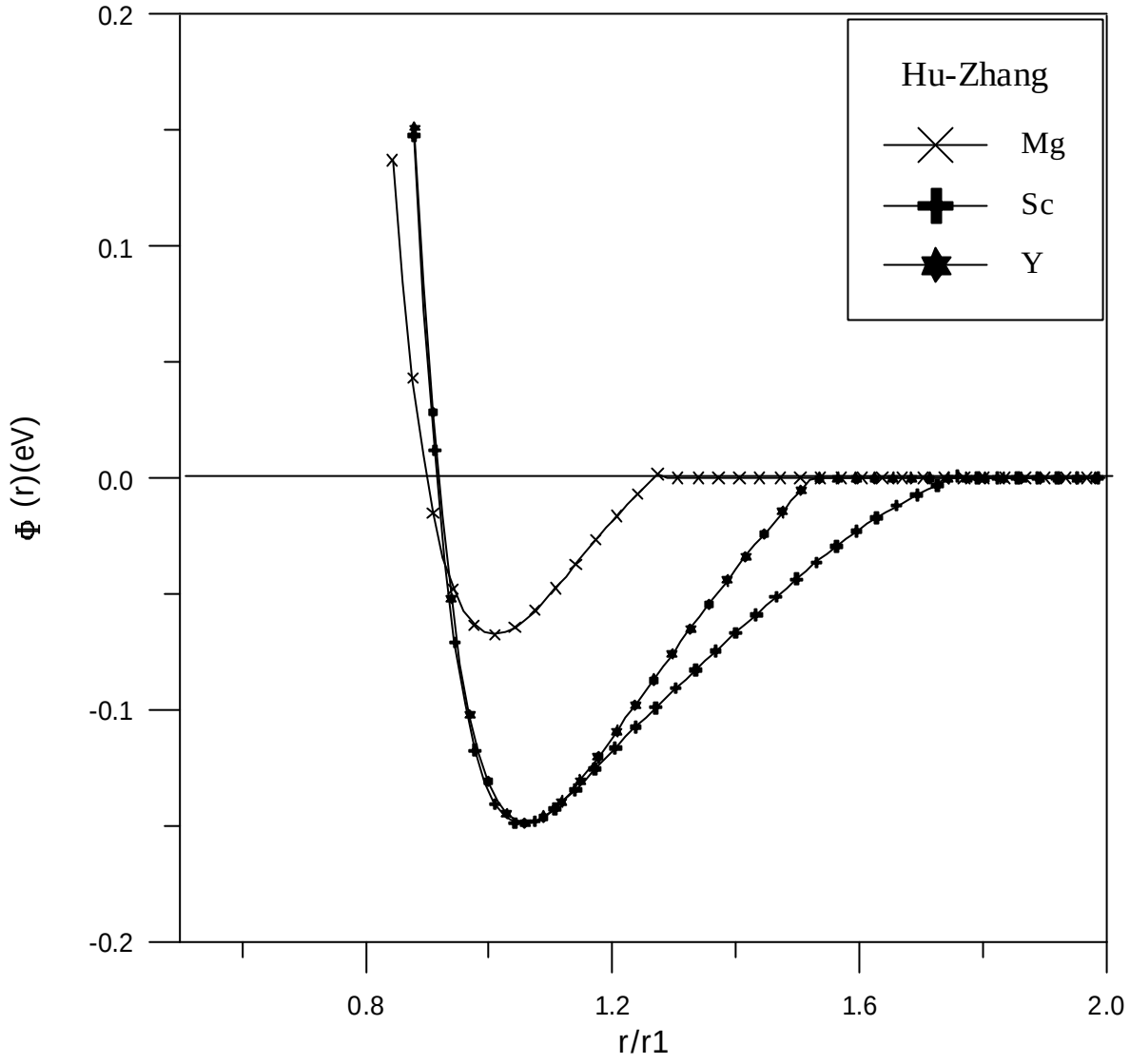
Hu-Zhang AGAM potansiyel fonksiyonlari ile Finnis ve Sinclair (Finnis ve Sinclair 1984)' in GAM etkin çiftler potansiyel yaklasimini kullanarak sivi Be, Co, Mg, Sc, Ti, Y ve Zr için I. yöntemden hesapladigimiz etkin çiftler etkilesme potansiyelleri, Be ve Mg için Sekil 5.24, Sc ve Y için Sekil 5.24, Co, Ti ve Zr içi 5.25'te verilmektedir. Potansiyellerin periyodik tablo ile uyumlu olduklari görülmektedir. Ayrica Hu-Zhang AGAM'nun II. yöntemle etkin çiftler etkilesim fonksiyonlari elde edilmedigini belirtelim. Hu-Xu yönteminde oldugu gibi bu yöntemde de etkin çiftler potansiyellerini elde etmek için toplam enerjiye M(P) gibi düzeltme terimi eklendi. Finnis ve Sinclair' in etkin çiftler potansiyel yaklasiminda gömme enerjisinin ikinci ve daha yüksek mertebeli türevleri ihmal edilmistir.

Tablo 5.4: Sivi HCP metalleri için HZ-AYDGAM potansiyel parametreleri

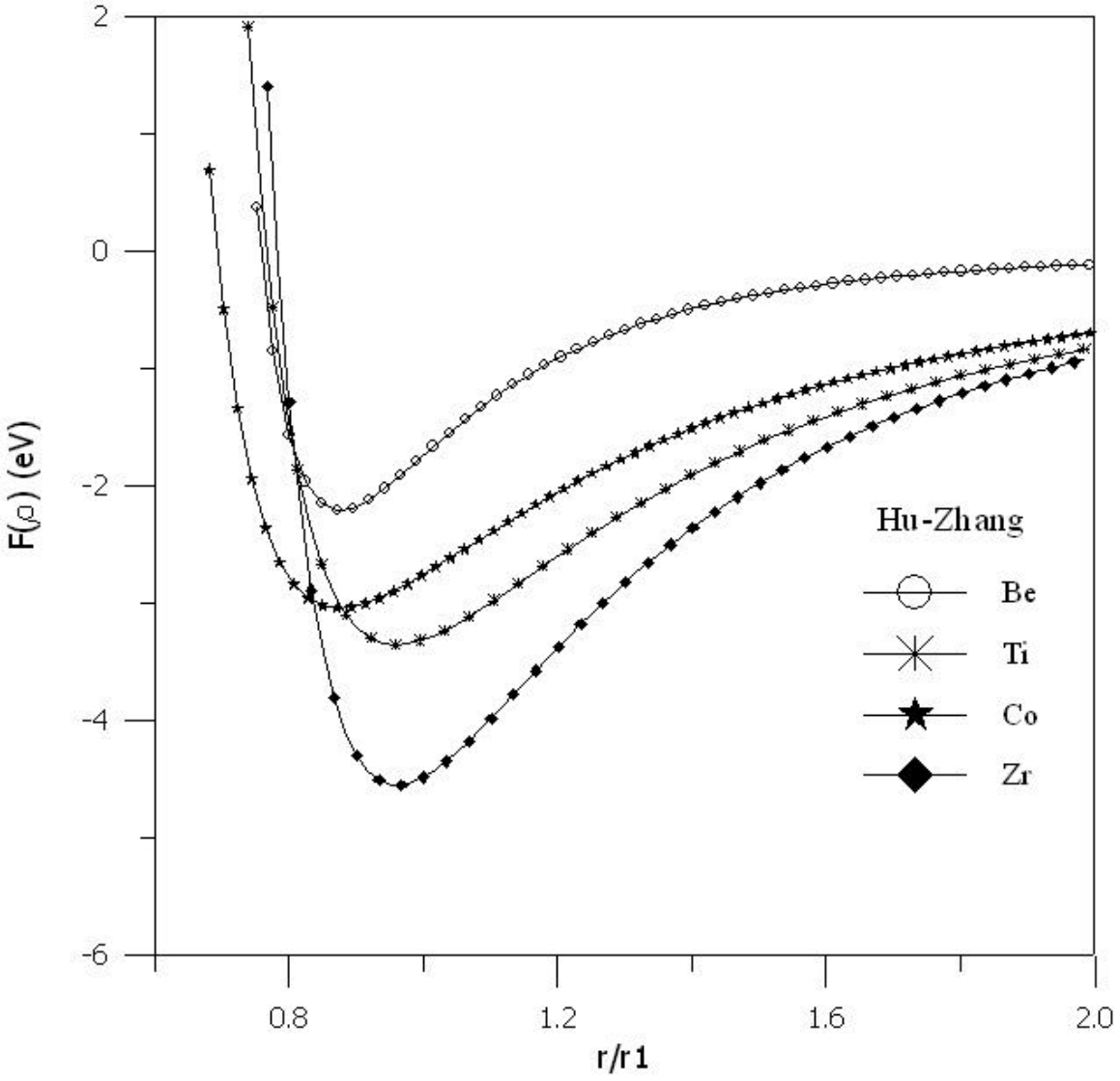
| | Be | Mg | Sc | Ti | Co | Y | Zr |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| n | 0.96 | 0.79 | 0.83 | 0.55 | 0.54 | 0.83 | 0.67 |
| $F_0(eV)$ | 3.425 | 1.56 | 3.67 | 4.87 | 4.64 | 4.93 | 5.82 |
| a (eV) | -0.4768 | -0.0381 | -0.1476 | 0.03008 | 0.01424 | -0.1497 | 0.00603 |
| ß (eV) | 1.00491 | 3.76605 | 1.76227 | -0.9451 | -1.2180 | 1.93967 | -1.0285 |
| $k_{-1}$(eV) | 154.413 | 103.567 | 278.064 | 169.886 | 123.188 | 227.687 | 159.687 |
| $k_0$(eV) | -699.27 | -480.44 | -1327.12 | -806.21 | -541.76 | -1078.3 | -737.51 |
| $k_1$(eV) | 1352.72 | 945.669 | 2692.645 | 1637.54 | 1009.13 | 2175.96 | 1459.82 |
| $k_2$(eV) | -1457.11 | -1026.5 | -3011.65 | -1847.1 | -1038.1 | -2429.21 | -1610.1 |
| $k_3$(eV) | 946.623 | 664.153 | 2005.30 | 1247.63 | 639.283 | 1619.285 | 1068.42 |
| $k_4$(eV) | -371.32 | -256.25 | -794.6115 | -503.65 | -235.91 | -644.075 | -425.74 |
| $k_5$(eV) | 81.3507 | 54.6061 | 173.500 | 112.269 | 48.3414 | 141.4605 | 94.1196 |
| $k_6$(eV) | -7.6654 | -4.9559 | -16.102 | -10.647 | -4.2395 | -13.2275 | -8.8870 |



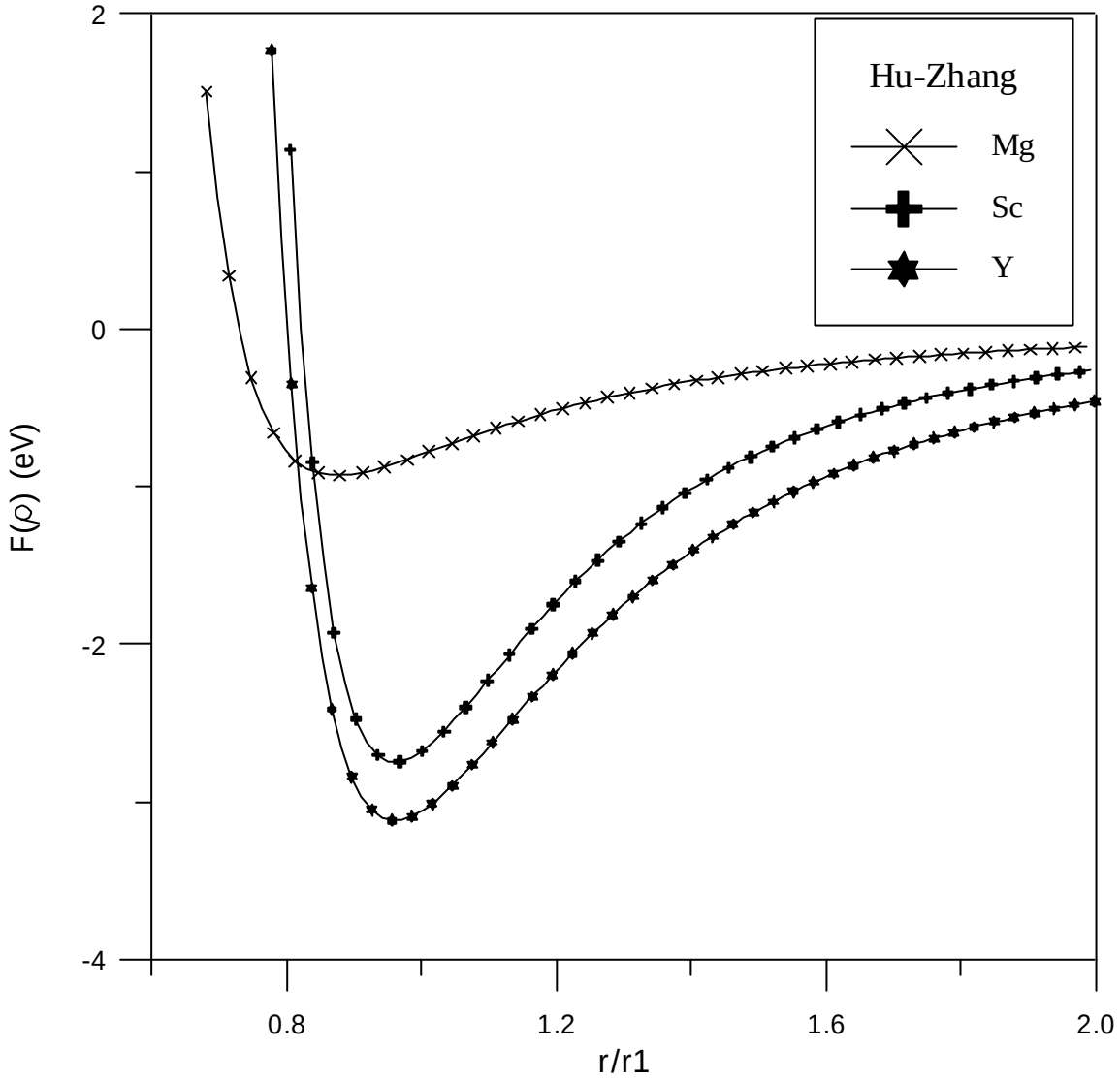

Sekil 5.21 :Be, Ti, Zr ve Co için HZ-AYDGAM çiftler etkilesme potansiyelleri



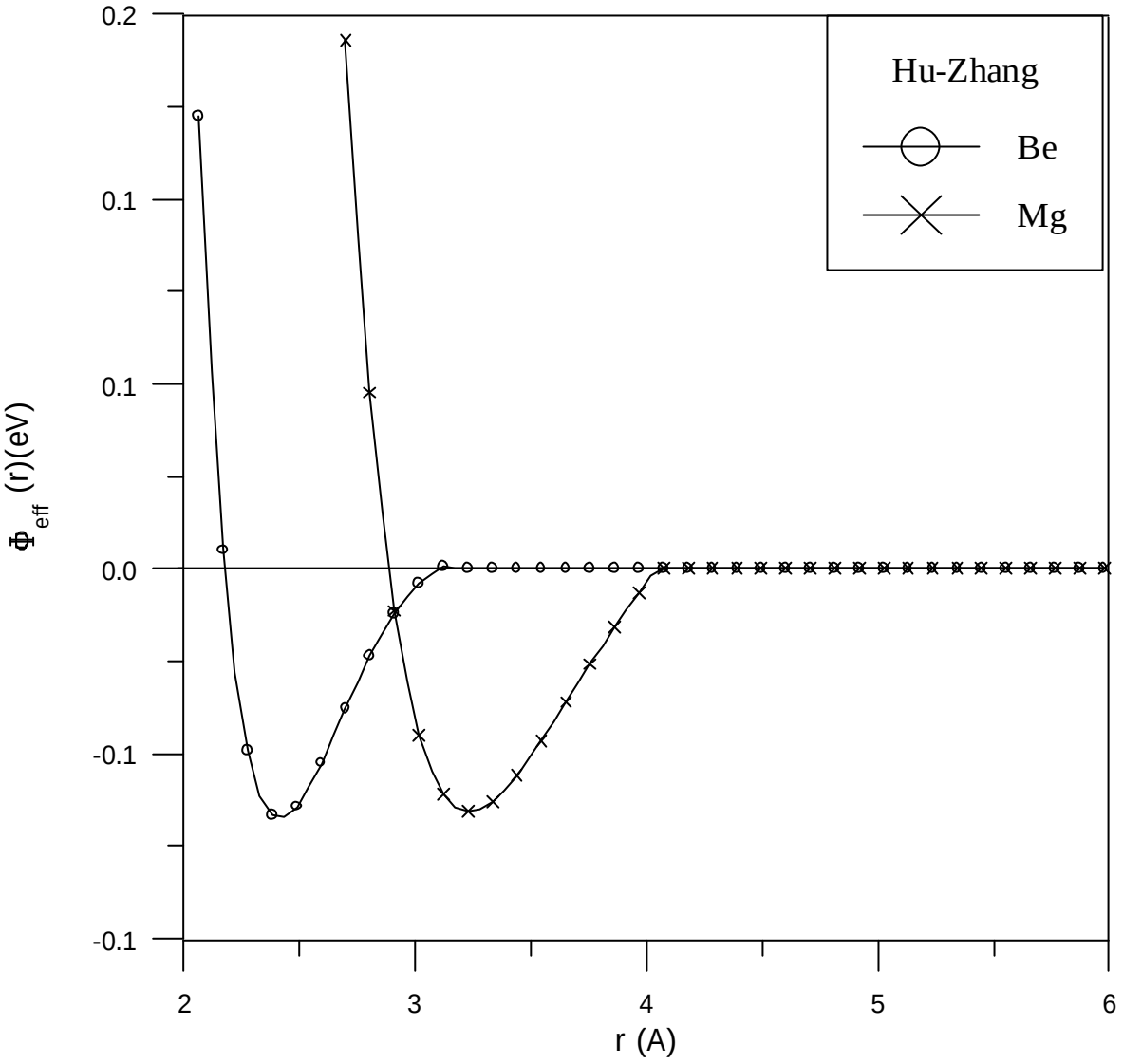

Sekil 5.22 : Mg, Sc ve Y için HZ-AYDGAM çiftler etkilesme potansiyelleri



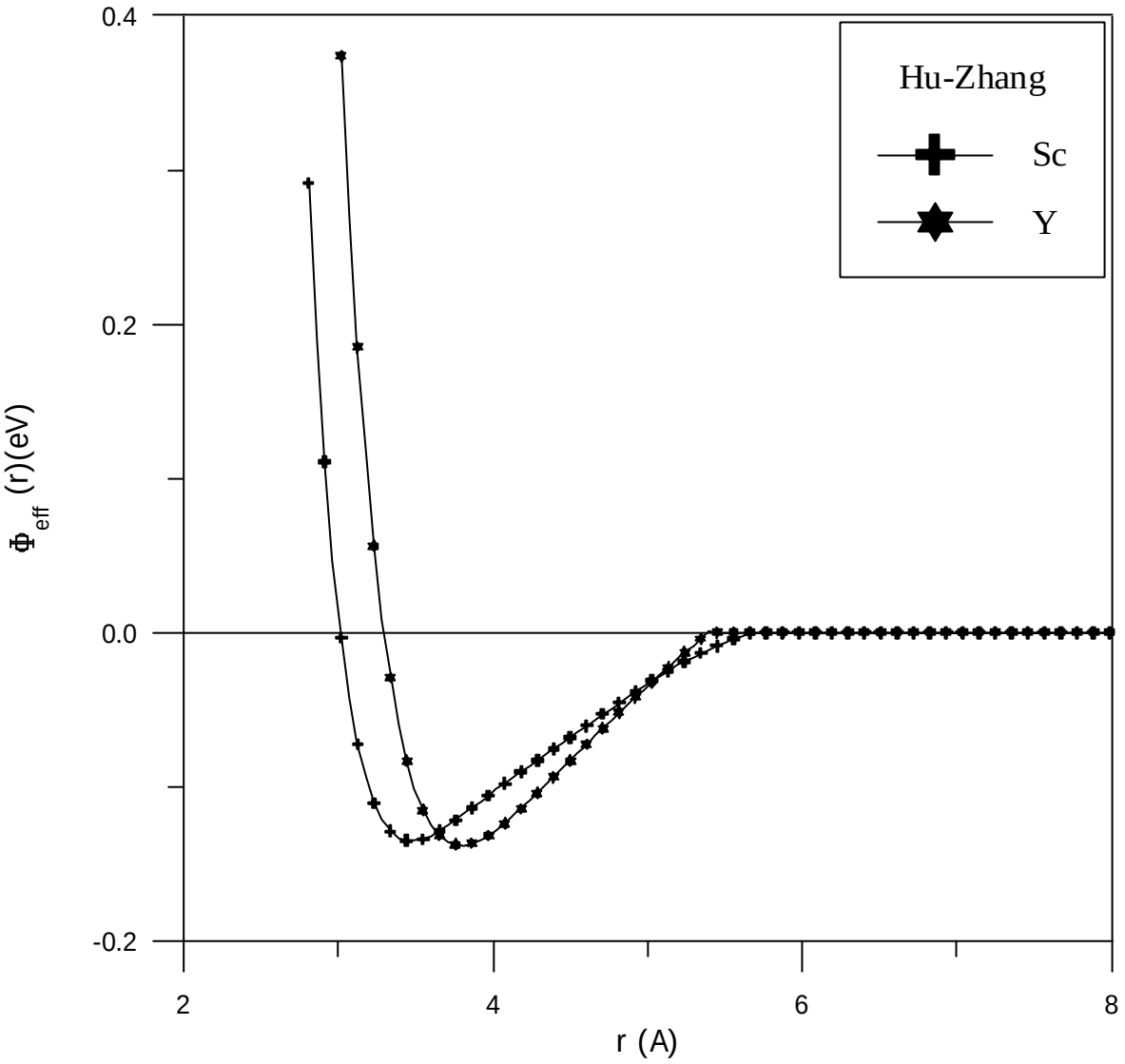

Sekil 5.23 : Be, Co, Zr ve Ti için HZ-AYDGAM gömme enerjisi fonksiyonlari



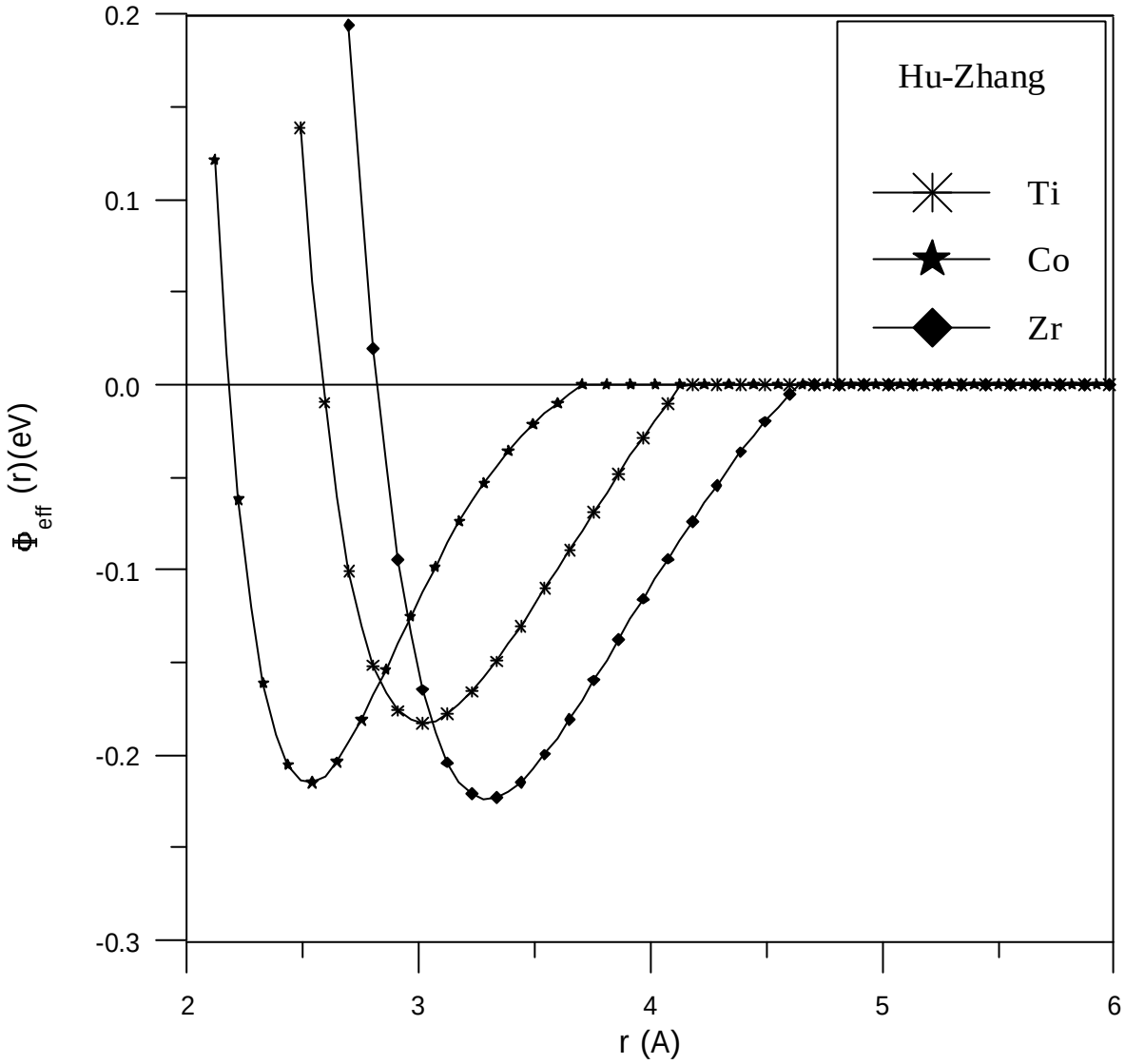

Sekil 5.24 : Mg, Sc ve Y için HZ-AYDGAM gömme enerjisi fonksiyonlari




Sekil 5.25: Be ve Mg için HZ-AYDGAM ve I. FS-AYDGAM yöntemi ile elde edilen etkin çiftler etkilesme potansiyelleri




Sekil 5.26: Sc ve Y için HZ-AYDGAM ve I. FS-AYDGAM yöntemi ile elde edilen etkin çiftler etkilesme potansiyelleri




Sekil 5.27: Ti, Zr ve Co için HZ-AYDGAM ve I. FS-AYDGAM yöntemi ile elde edilen etkin çiftler etkilesme potansiyelleri

### 5.1.4 HD-AYDGAM Etkin Çiftler Potansiyeli

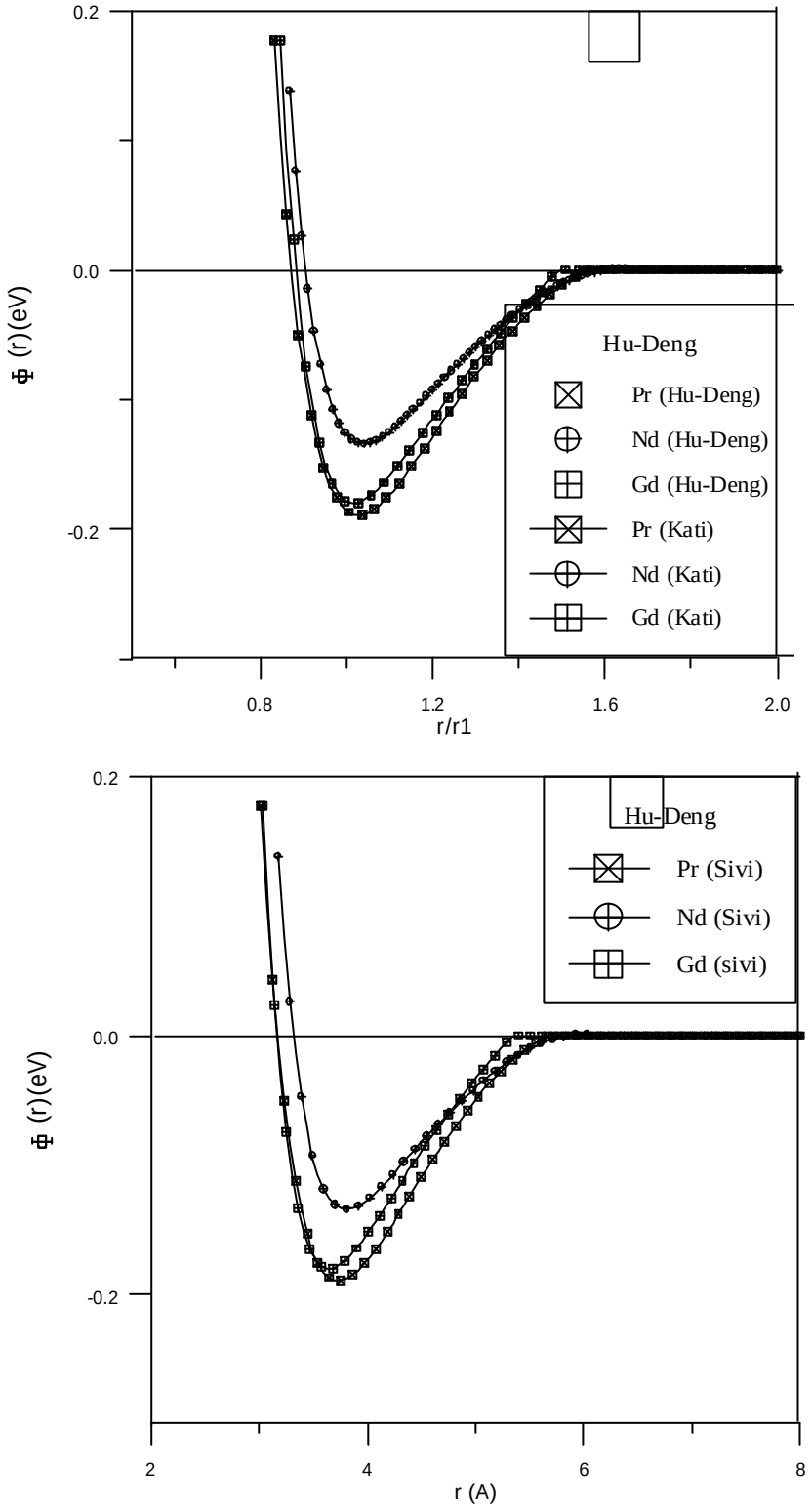
Hu, Deng ve arkadaslarinin (Hu W., Deng H., 2003) kati sistem için öne sürmüs olduklari Düzeltilmis Analitik Gömülü Atom Metodu potansiyel fonksiyonlarini hem katihal hem de sivihal özelliklerine fit ederek elde edilen parametre seti kullanilarak bazi sivi hcp nadir toprak metallerinden Tb, Dy, Ho, Gd, Nd, Pr ve Er için atomlararasi etkin çiftler potansiyelleri hesaplandi. Hu-Deng ADGAM 'nun sivi sistemler için optimize edilmis potansiyel parametreleri Tablo 5.6' da verilmektedir. Bu tabloda verilen kesme mesafesi için kullanilan $r_c$ degerleri potansiyeli sifir yapan r degeri alinmistir.

Hu-Deng ADGAM'dan elde edilen sivi çiftler etkilesim fonksiyonlari, Pr, Nd ve Gd için Sekil 5.27, Tb, Dy, Ho ve Er için ise Sekil 5.28'de gösterilmistir. Gömme enerji fonksiyonlari yine ayni sirayla Sekil 5.29 ve 5.30'da verilmektedir.

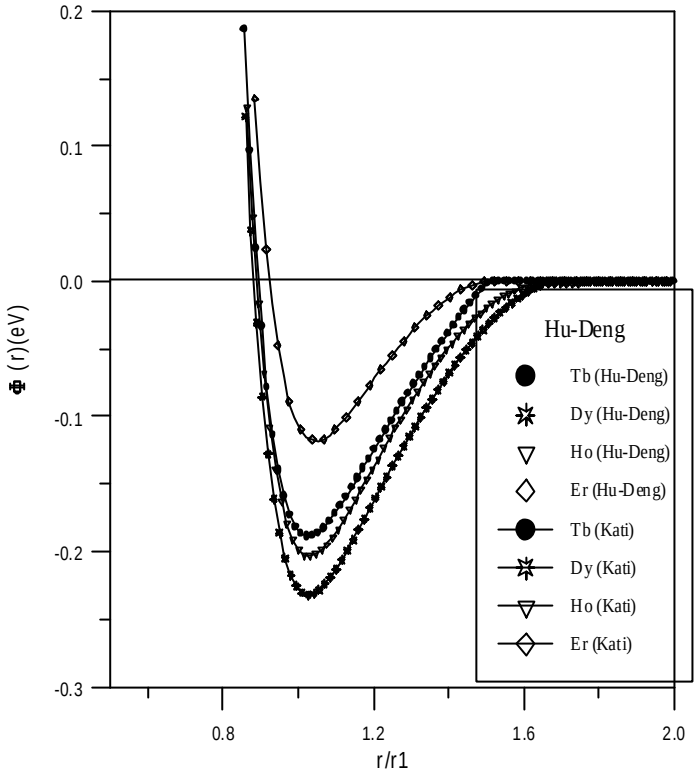
Hu-Deng ADGAM potansiyel fonksiyonlari ile Finnis ve Sinclair (Finnis ve Sinclair 1984)' in GAM etkin çiftler potansiyel yaklasimini kullanarak sivi Tb, Dy, Ho, Gd, Nd, Pr ve Er için bölüm 3'de anlatildigi gibi her iki yöntem ile hesapladigimiz etkin çiftler etkilesme potansiyelleri I. yöntem için Sekil 5.31- Sekil 5.32, II. yöntem için Sekil 5.33-Sekil 5.34'de verilmektedir. Hu-Deng ADGAM'da etkin çiftler potansiyellerini elde etmek için toplam enerjiye M(P) ve N(Q) gibi iki düzeltme terimi eklendi. Sekil 5.31 ile Sekil 5.33 karsilastirildiginda I. yöntemden hesaplanan fonksiyonun daha derin ve daha uzun r degerine gittigi görülmektedir Nd hariç. Sekil 5.32 ve Sekil 5.34 karsilastirildiginda ise I. yöntemden hesaplanan potansiyelin biraz daha derin yumusak ve minimum konumunun daha büyük r degerlerinde oldugu görülür.

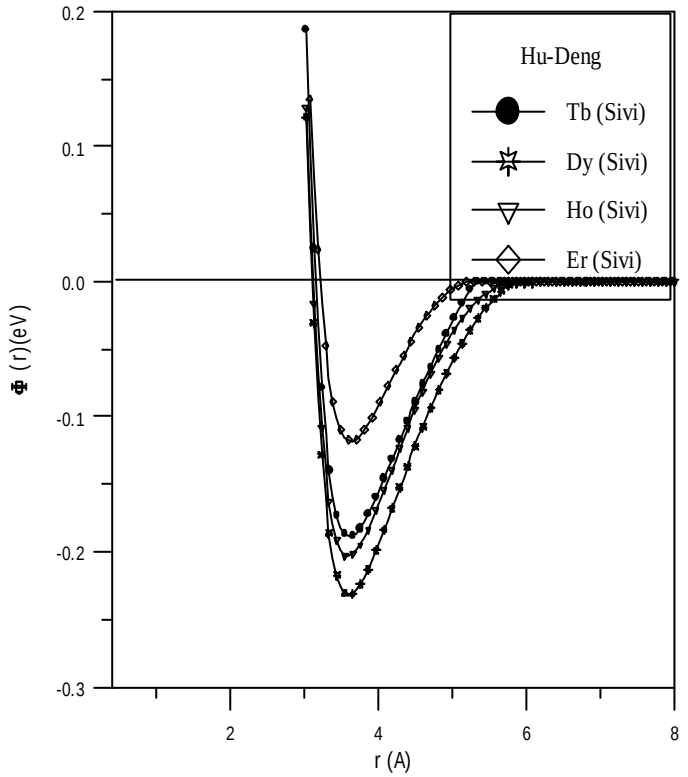
Tablo 5.5: Sivi HCP metalleri için HD-AYDGAM potansiyel parametreleri

| | Pr | Nd | Gd | Tb | Dy | Ho | Er |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| n | 0.43 | 0.41 | 0.45 | 0.49 | 0.3 | 0.3 | 0.46 |
| $F_0$(eV) | 5.16 | 4.76 | 5.64 | 4.17 | 2.87 | 5.65 | 6.1 |
| ax$10^6$ (eV) | 128.99 | 126.683 | 14.6398 | 5.0892 | 8.37331 | 11.1886 | 22.1373 |
| ßx$10^6$ (eV) | -58.676 | -57.984 | -9.752 | -5.541 | -6.7179 | -8.5469 | -13.430 |
| $f_e$ | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 |
| $k_6$ (eV) | -6.5044 | -13.894 | -23.134 | -21.087 | -19.212 | -19.475 | -16.125 |
| $k_5$ (eV) | 69.65 | 148.01403 | 244.147 | 221.739 | 201.308 | 203.568 | 169.124 |
| $k_4$ (eV) | -317.504 | -669.6206 | -1094.305 | -990.60 | -896.78 | -904.703 | -754.752 |
| $k_3$ (eV) | 800.214 | 1668.4902 | 2701.1904 | 2438.33 | 2203.06 | 2217.525 | 1860.296 |
| $k_2$ (eV) | -1207.006 | -2475.03 | -3966.63 | -3573.3 | -3226.206 | -3240.906 | -2738.403 |
| $k_1$ (eV) | 1091.805 | 2187.762 | 3467.08 | 3120.28 | 2819.085 | 2827.295 | 2410.125 |
| $k_0$ (eV) | -548.789 | -1067.805 | -1670.62 | -1503.9 | -1361.705 | -1364.108 | -1175.105 |
| $k_{-1}$ (eV) | 117.923 | 221.833 | 342.208 | 308.481 | 280.326 | 280.605 | 244.561 |
| $r_c(A)$ | 5.713 | 6.112 | 5.406 | 5.57 | 5.872 | 6.135 | 5.5 |
| $r_1(A)$ | 3.63 | 3.66 | 3.58 | 3.52 | 3.51 | 3.49 | 3.47 |




Sekil 5.28: Pr, Nd ve Gd için HD-AYDGAM kullanilarak
(a) Kati parametreleri ile elde edilen çiftler etkilesme potansiyellerin diger çalismalar ile karsilastirilmasi
(b) Sivi çiftler etkilesme potansiyelleri

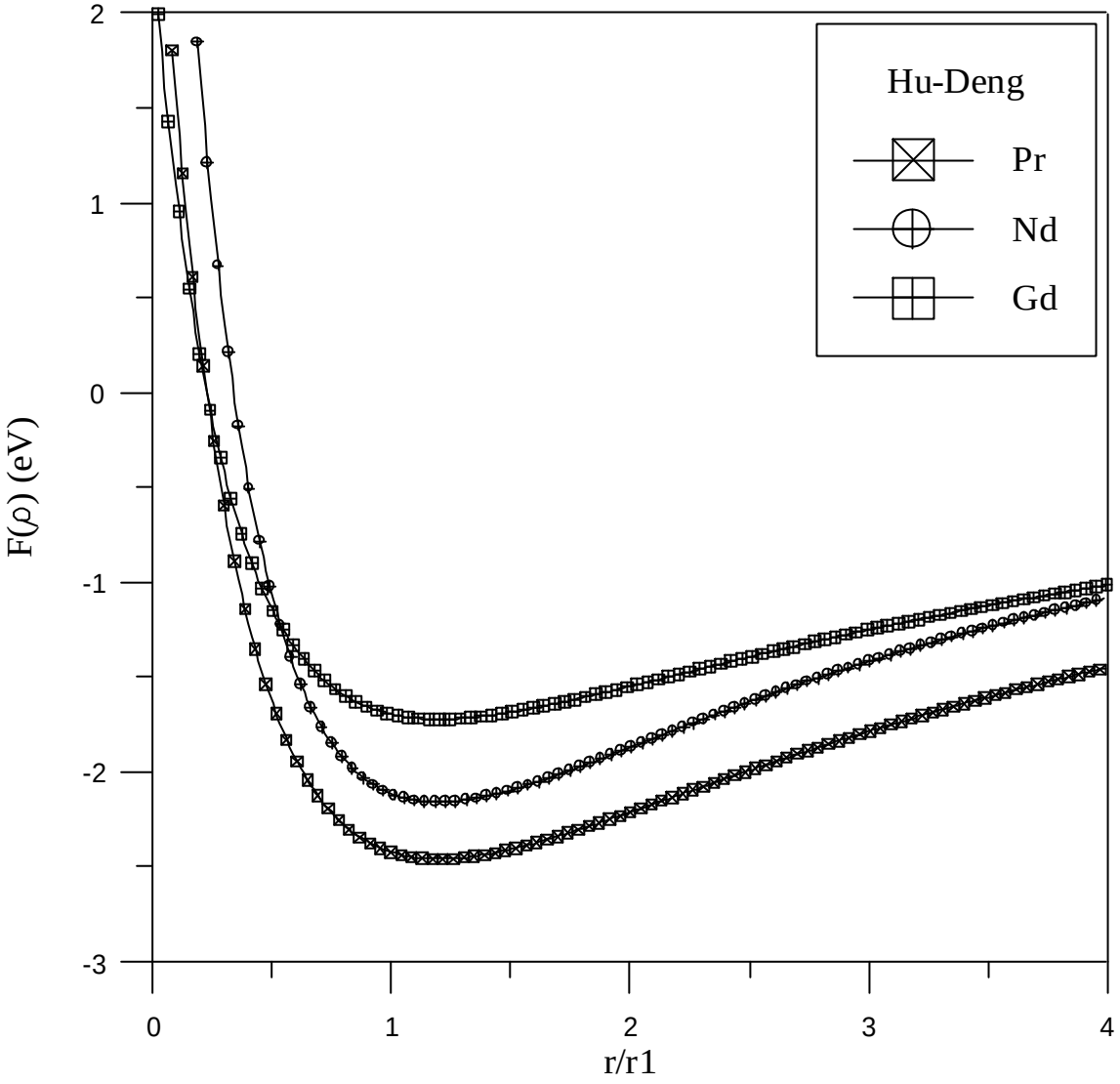


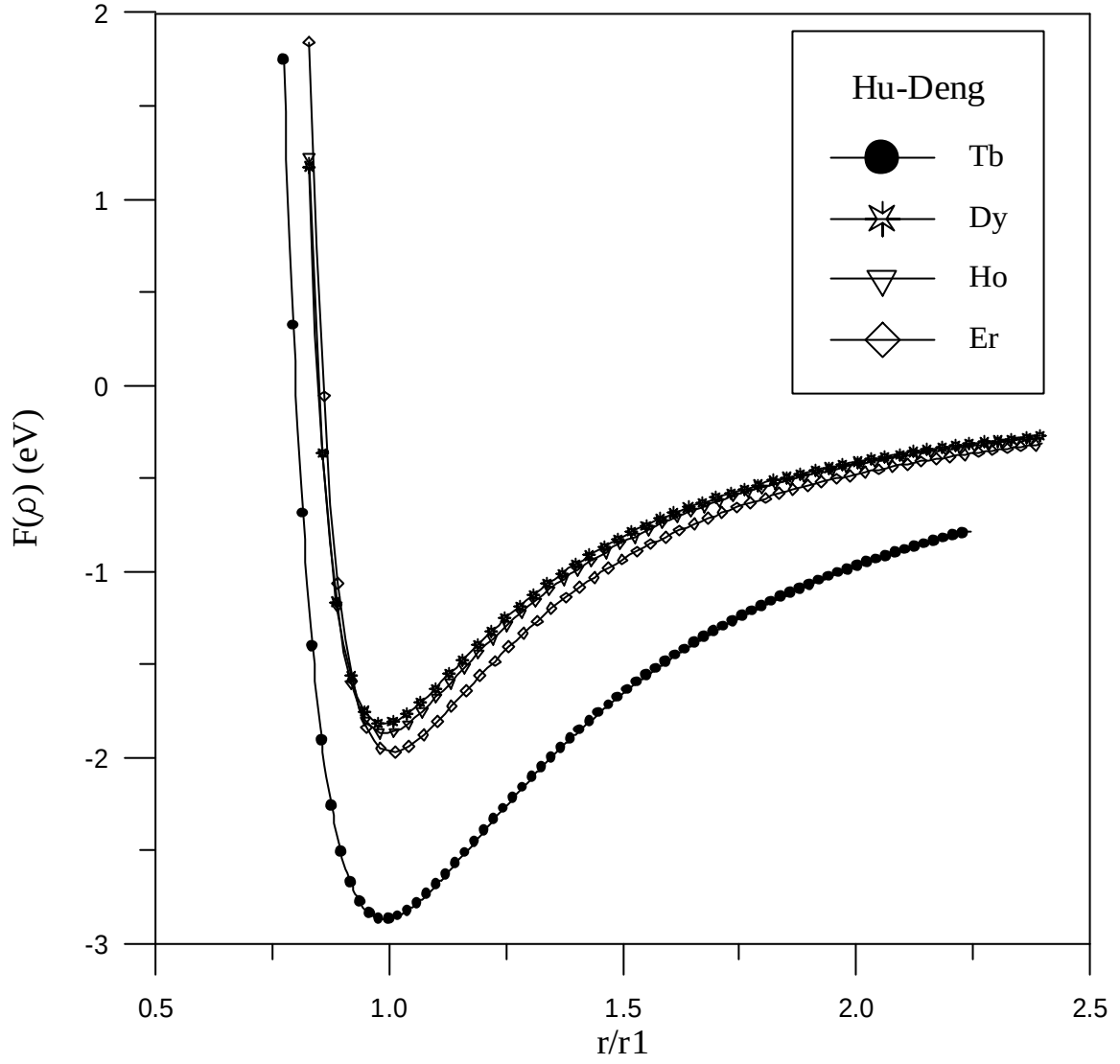

Sekil 5.29: Tb, Dy, Ho ve Er için HD-AYDGAM kullanilarak

(a) Kati parametreleri ile elde edilen çiftler etkilesme potansiyellerin diger çalismalar ile karsilastirilmasi

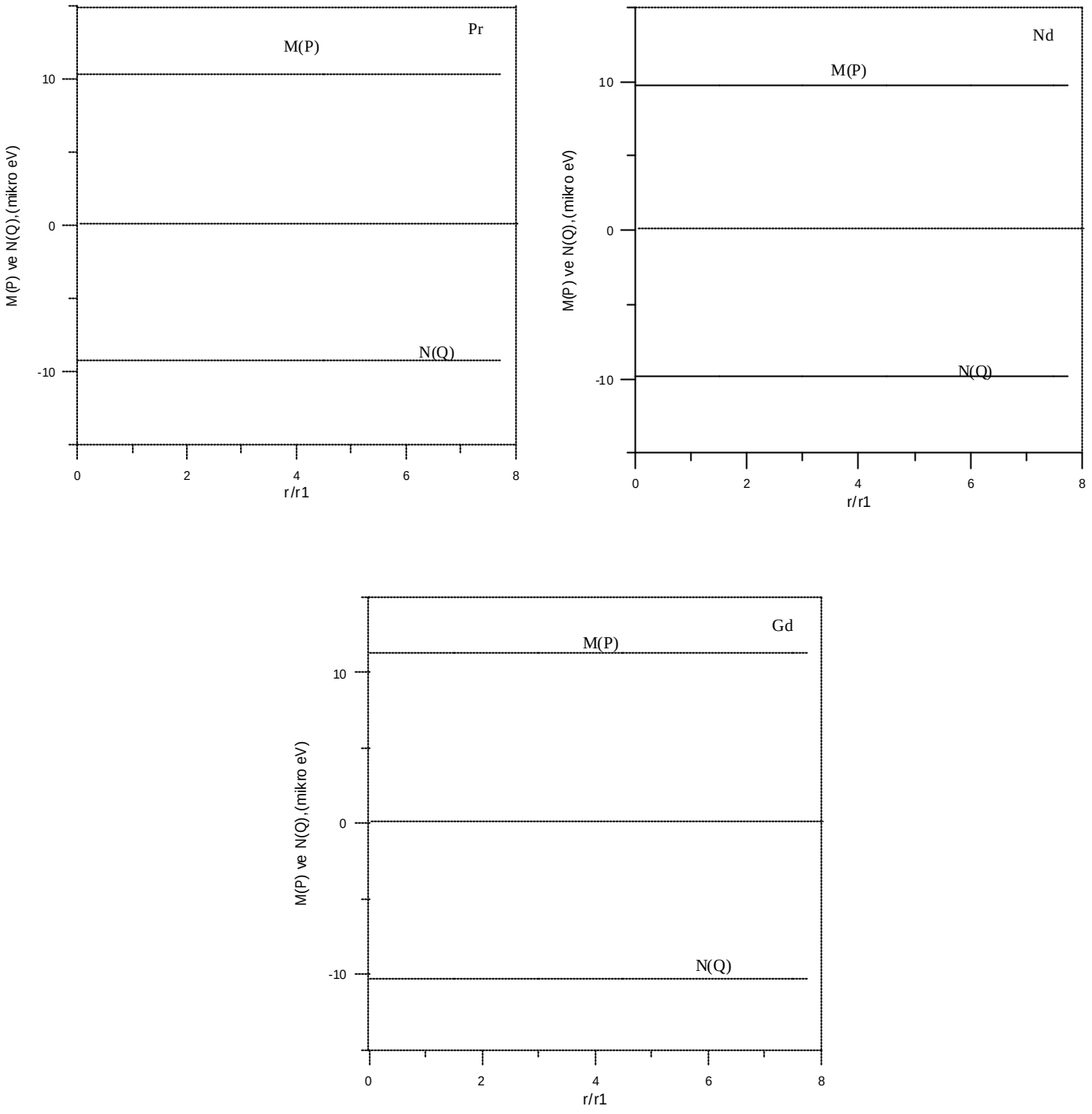
(b) Sivi çiftler etkilesme potansiyelleri



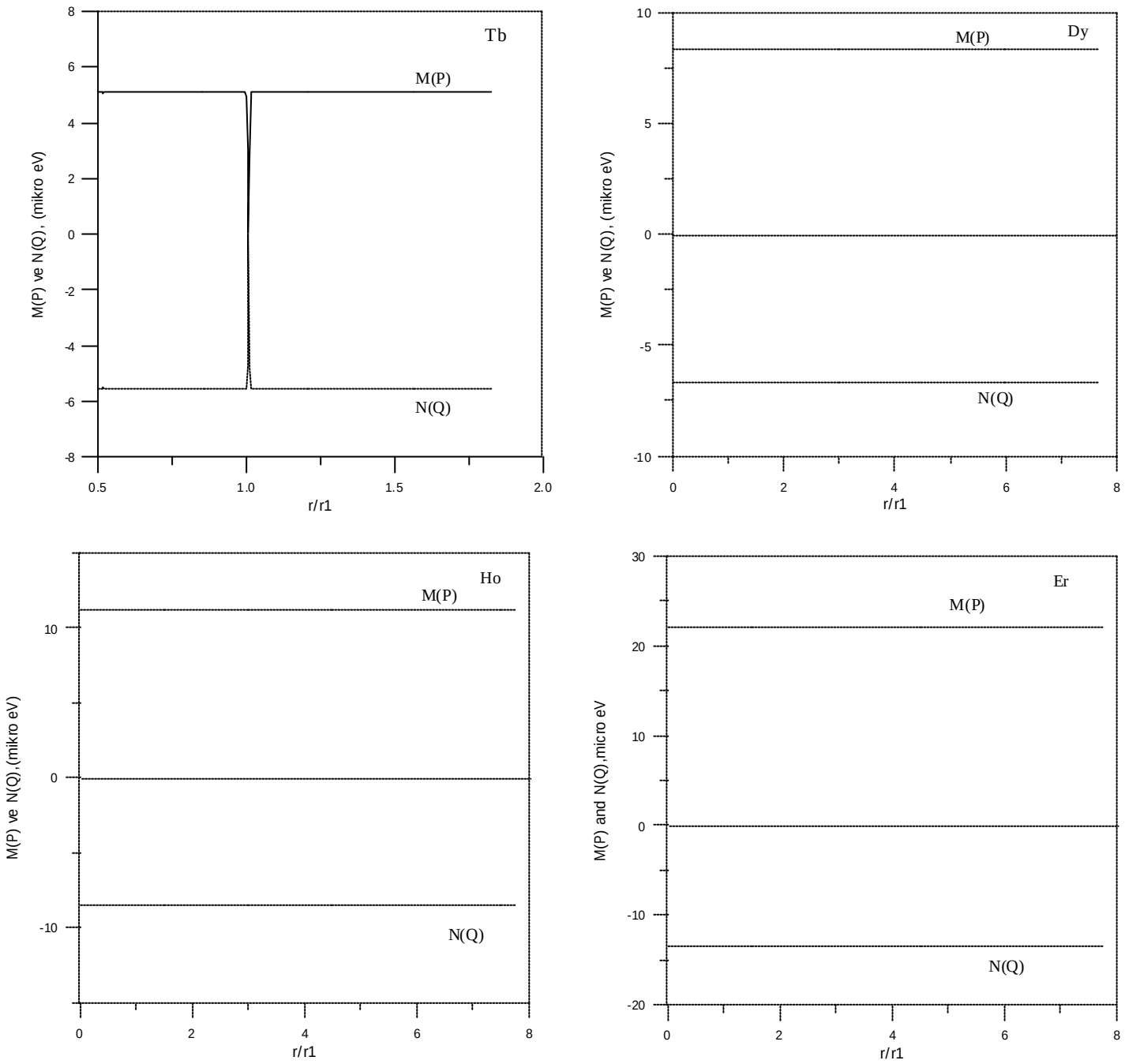

Sekil 5.30: Pr, Nd ve Gd için HD-AYDGAM gömme enerjisi fonksiyonlari



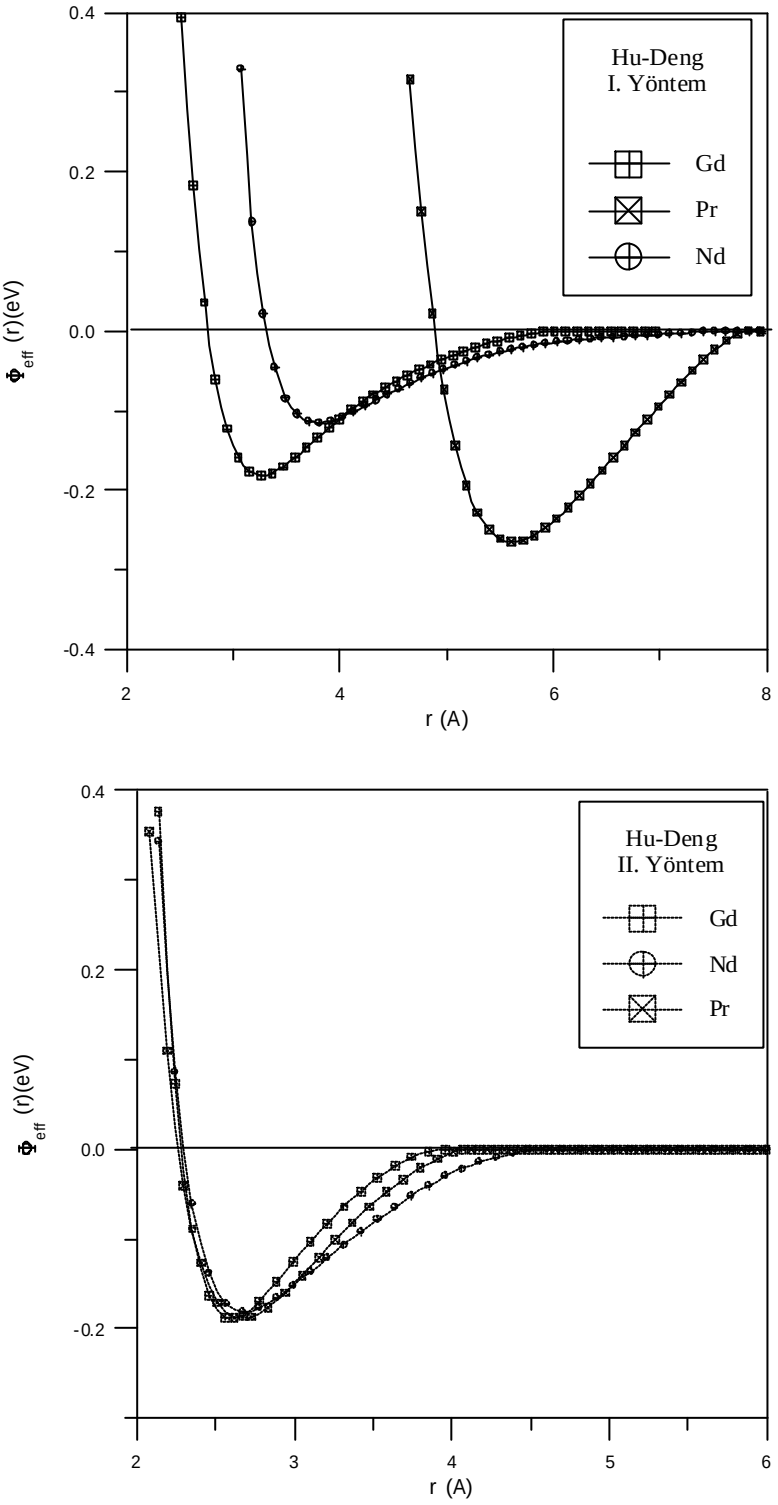

Sekil 5.31: Tb, Dy, Ho ve Er için HD-AYDGAM gömme enerjisi fonksiyonlari



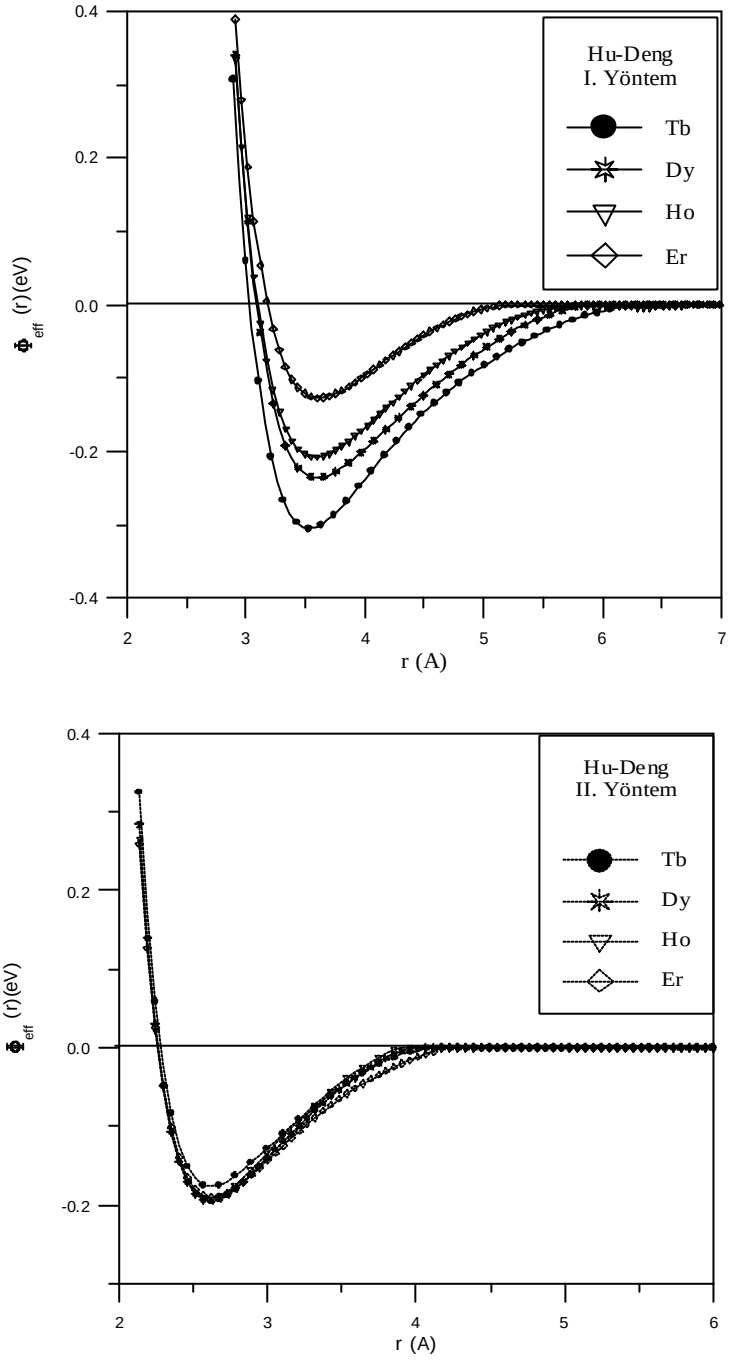

Sekil 5.32: Pr, Nd ve Gd için HD-AYDGAM ile elde edilen M(P) ve N(Q) terimleri



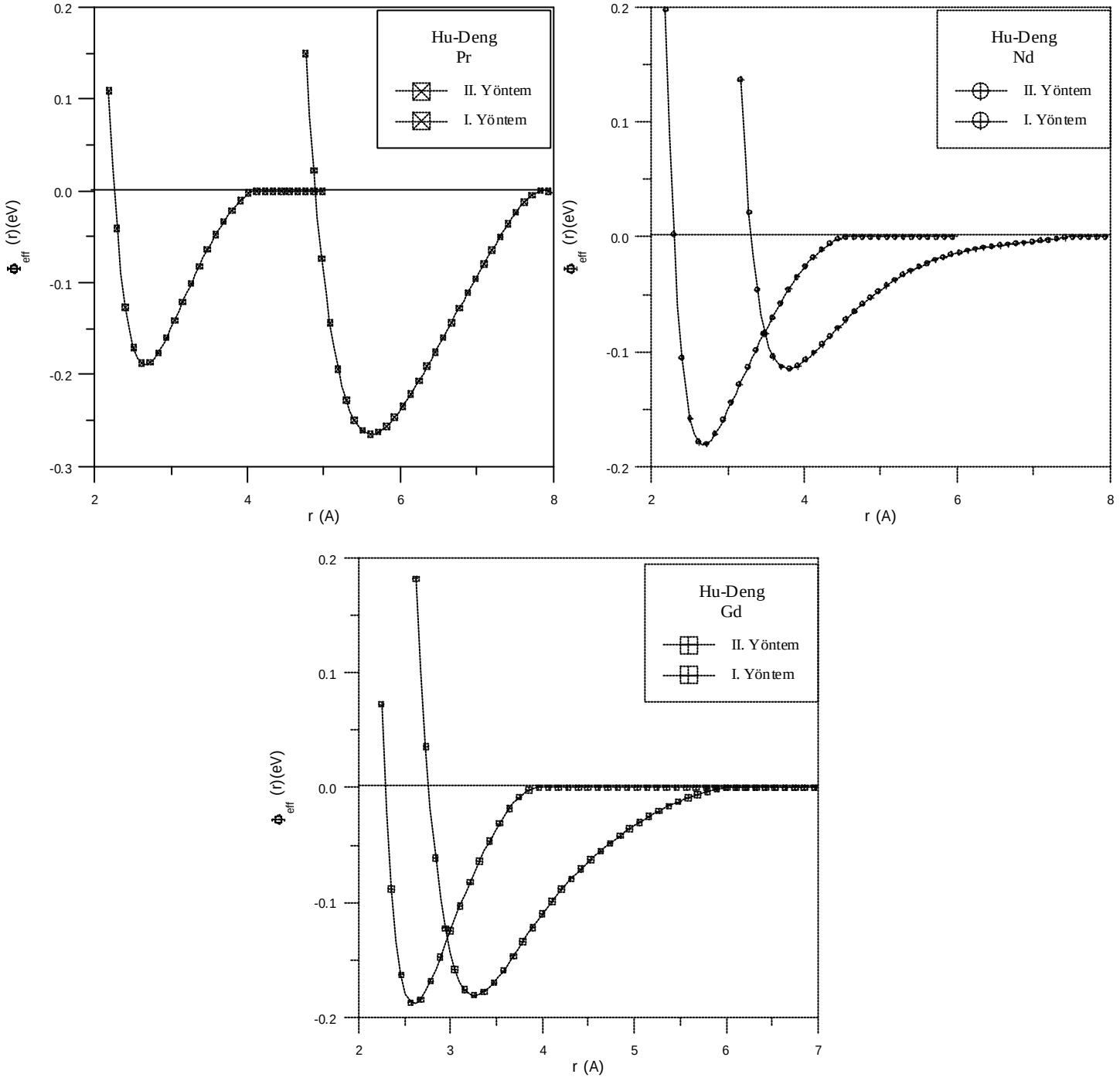

Sekil 5.33: Tb, Dy, Ho ve Er için HD-AYDGAM ile elde edilen M(P) ve N(Q) terimleri



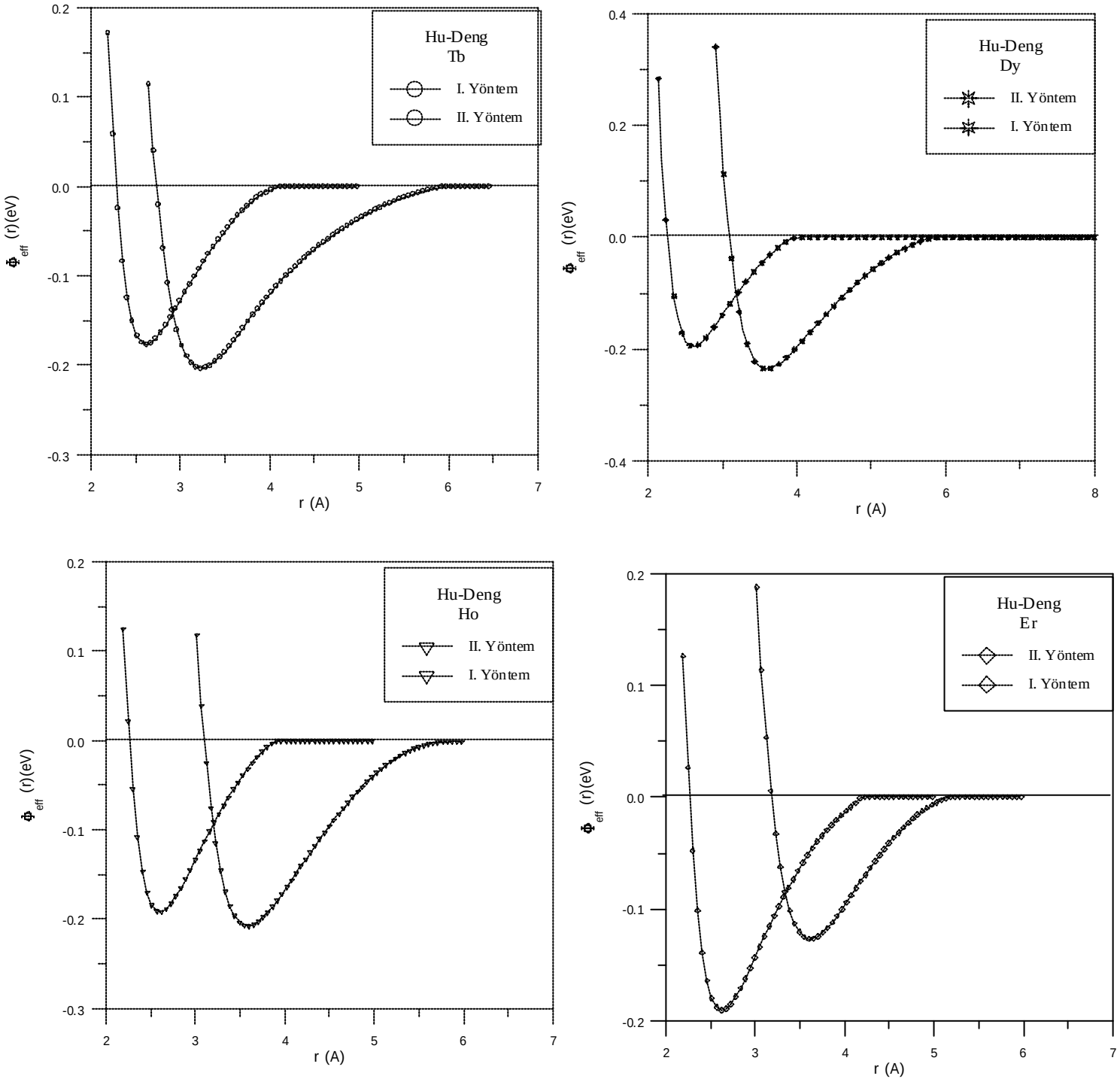

Sekil 5.34: Pr, Nd ve Gd için HD-AYDGAM ve I.-II. FS-AYDGAM yöntemleri ile elde edilen etkin çiftler etkilesme potansiyelleri




Sekil 5.35: Tb, Dy, Ho ve Er için HD-AYDGAM ve I.-II. FS-AYDGAM yöntemleri ile elde edilen etkin çiftler etkilesme potansiyelleri




Sekil 5.36: Pr, Nd ve Gd için HD-AYDGAM ve I.-II. FS-AYDGAM yöntemleri ile elde edilen etkin çiftler etkilesme potansiyellerinin karsilastirilmasi




Sekil 5.37: Tb, Dy, Ho ve Er için HD-AYDGAM ve I.-II. FS-AYDGAM yöntemleri ile elde edilen etkin çiftler etkilesme potansiyellerinin karsilastirilmasi

### 5.1.5 CX-GAM Etkin Çiftler Potansiyeli

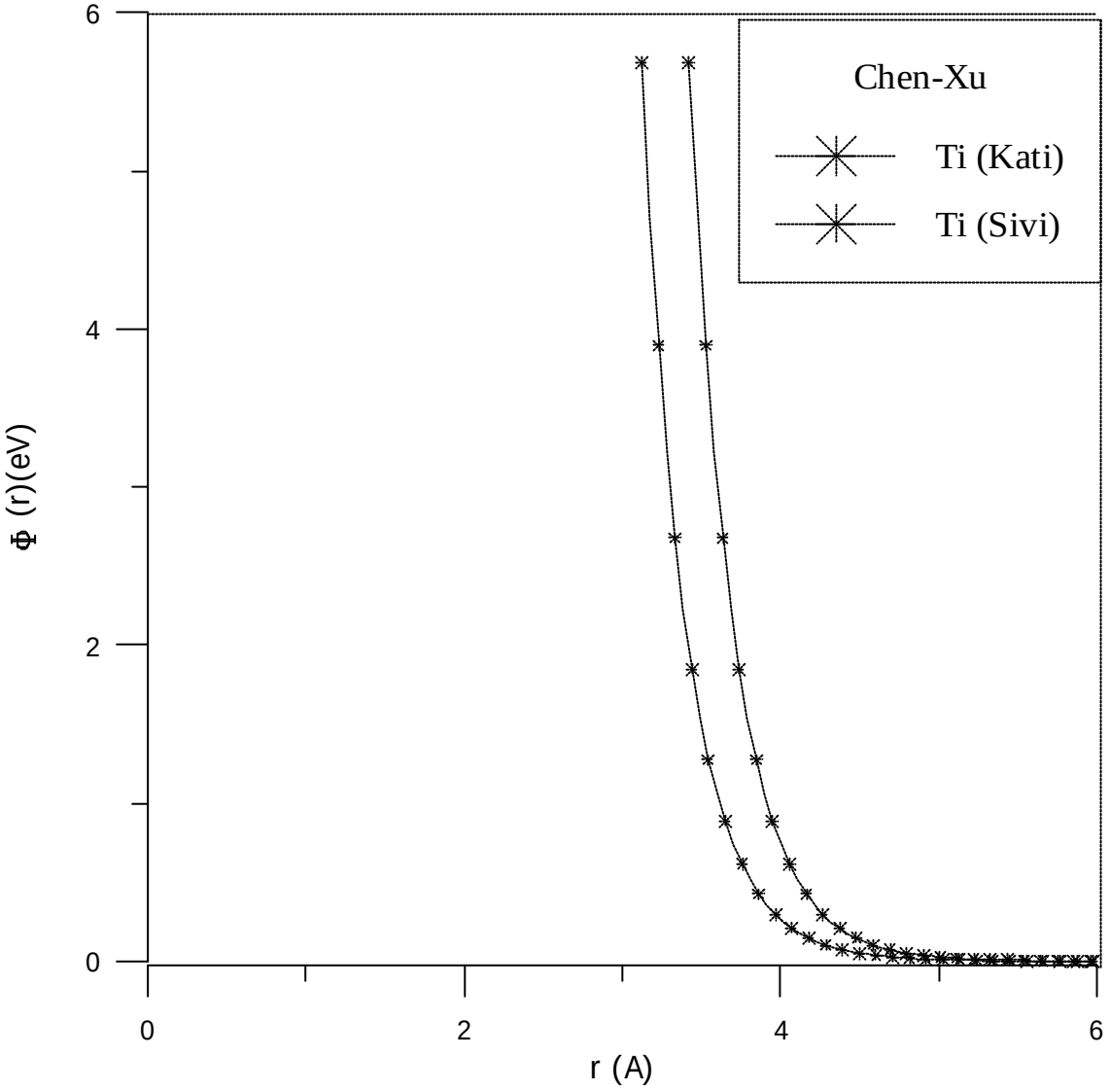
Ilk olarak Chen ve Xu' un (Chen S., 2004 ) kati sistem için öne sürmüs olduklari Gömülü Atom Metodu potansiyel fonksiyonlarini hem katihal hem de sivihal özelliklerine fit ederek elde edilen parametre seti kullanilarak bazi sivi hcp nadir toprak metallerinden Zr, Co, ve Ti için atomlararasi etkin çiftler potansiyelleri hesaplandi. Chen-Xu sivi sistemler için optimize edilmis potansiyel parametreleri Tablo 5.7' de verilmektedir.

Tablo 5.6: Sivi HCP metalleri için CX-GAM potansiyel parametreleri

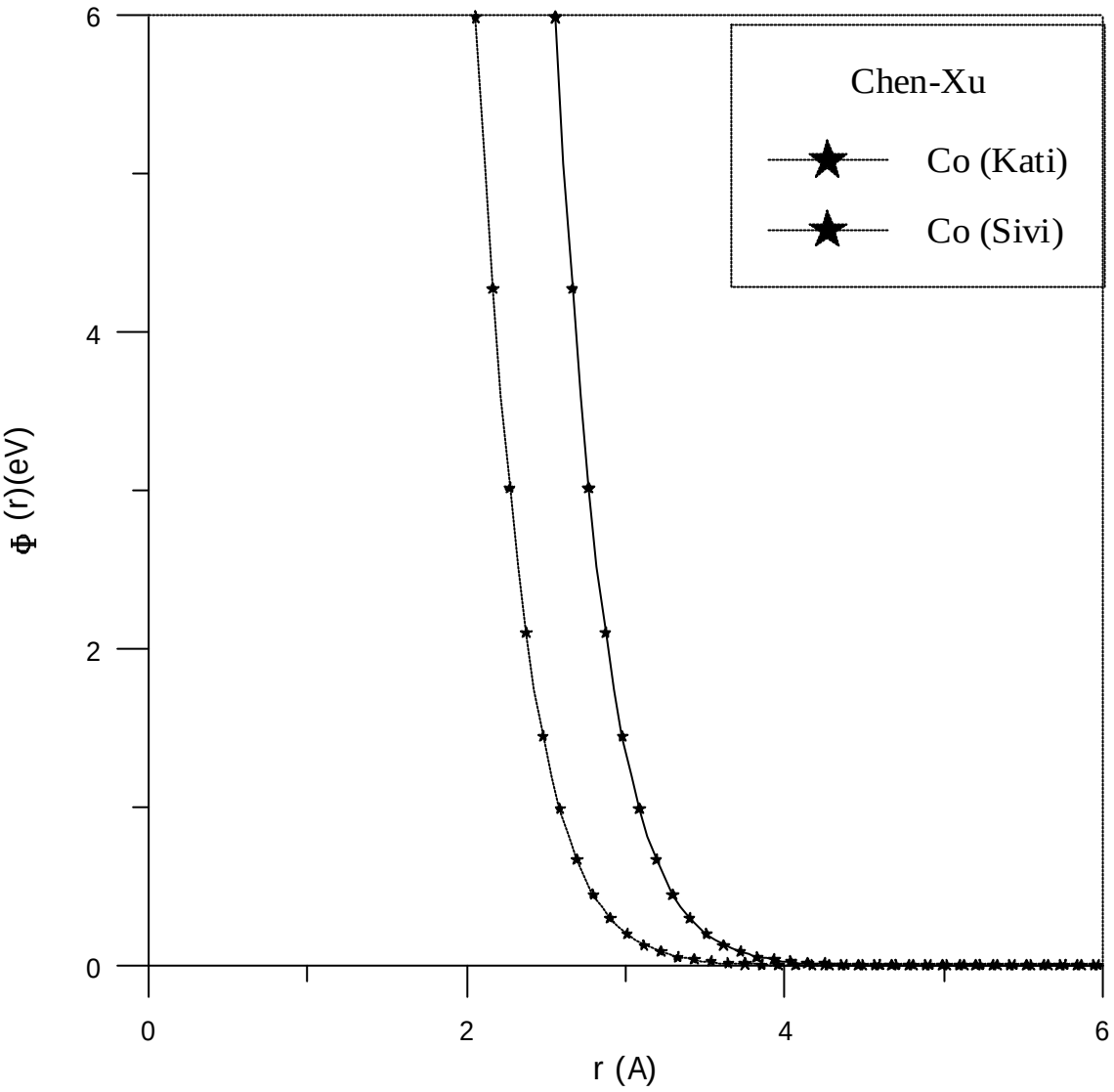
| | | Ti | Co | Zr |
|---|---|---|---|---|
| A | a-a<br>a-b | 3961.33<br>3967.92 | 7651.03<br>7540.01 | 660.03<br>672.02 |
| a | a-a<br>a-b | 3.0646<br>3.06427 | 3.81122<br>3.98867 | 2.1556<br>2.13631 |
| B | a-a<br>a-b | 452.63<br>462.98 | 12911.01<br>12800.02 | 315.22<br>316.13 |
| ß | a-a<br>a-b | 3.82136<br>3.82119 | 5.51372<br>5.43380 | 3.38963<br>3.38777 |
| n | | 6 | 6 | 6 |

Co, Ti ve Zr için itici etkilesim potansiyel fonksiyonlari sirasiyla Sekil 5.35, Sekil 5.36 ve Sekil 5.37'de verilmistir. Sekillerden de görüldügü gibi sivi durumlarin kati durumlara göre minimum konumlari daha büyük r degerlerinde oldugu görülmektedir. Sekil 5.38'de sivi Co, Ti ve Zr'nin itici potansiyelleri karsilastirilmistir. Zr'nin atom numarasi daha büyük oldugundan itici etkilesimleri daha büyük r degerini almakta, bu durum periyodik tablo ile uyum göstermektedir. Sekil 5.39'da gömme enerji fonksiyonlari verilmektedir. Sekil 5.40'da ise Chen-Xu GAM potansiyel fonksiyonlari ile Finnis ve Sinclair (Finnis ve Sinclair, 1984) 'in GAM etkin çiftler potansiyel yaklasimini kullanarak sivi Zr, Co ve Ti için hesapladigimiz Chen-Xu etkin çiftler etkilesme potansiyelleri verilmektedir. Etkin çiftler potansiyellerini elde etmek için Finnis ve Sinclair' in etkin çiftler potansiyel yaklasiminda gömme enerjisinin ikinci ve daha yüksek mertebeli türevlerini ihmal ettik. Chen-Xu GAM

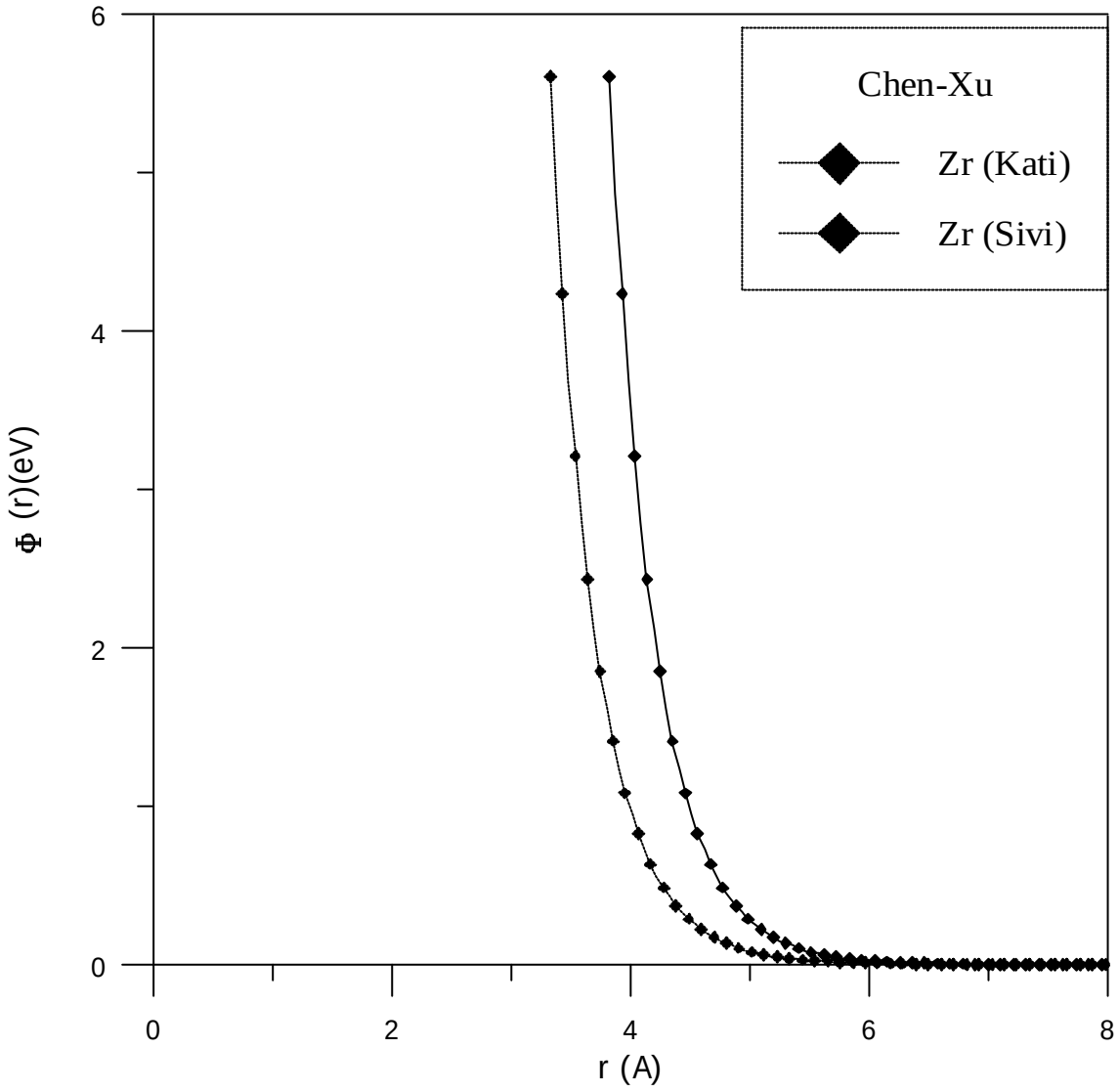
yönteminin, potansiyelin konumu ile ilgili oldugu kadar derinligi ile ilgili olarak da dogru egilimler verdigi Sekil 5.40'da gözlenmektedir. Periyodik tabloda ayni grupta yukaridan asagi inildikçe hesaplanan potansiyel daha yumusak, genisligi artan ve minimumunun konumu daha büyük r degerlerine dogrudur. Diger metodlara göre Chen-Xu GAM'dan hesaplanan etkin çiftler etkilesim potansiyel fonksiyonlari çok daha derin çiktigina dikkat etmemiz gerekir.



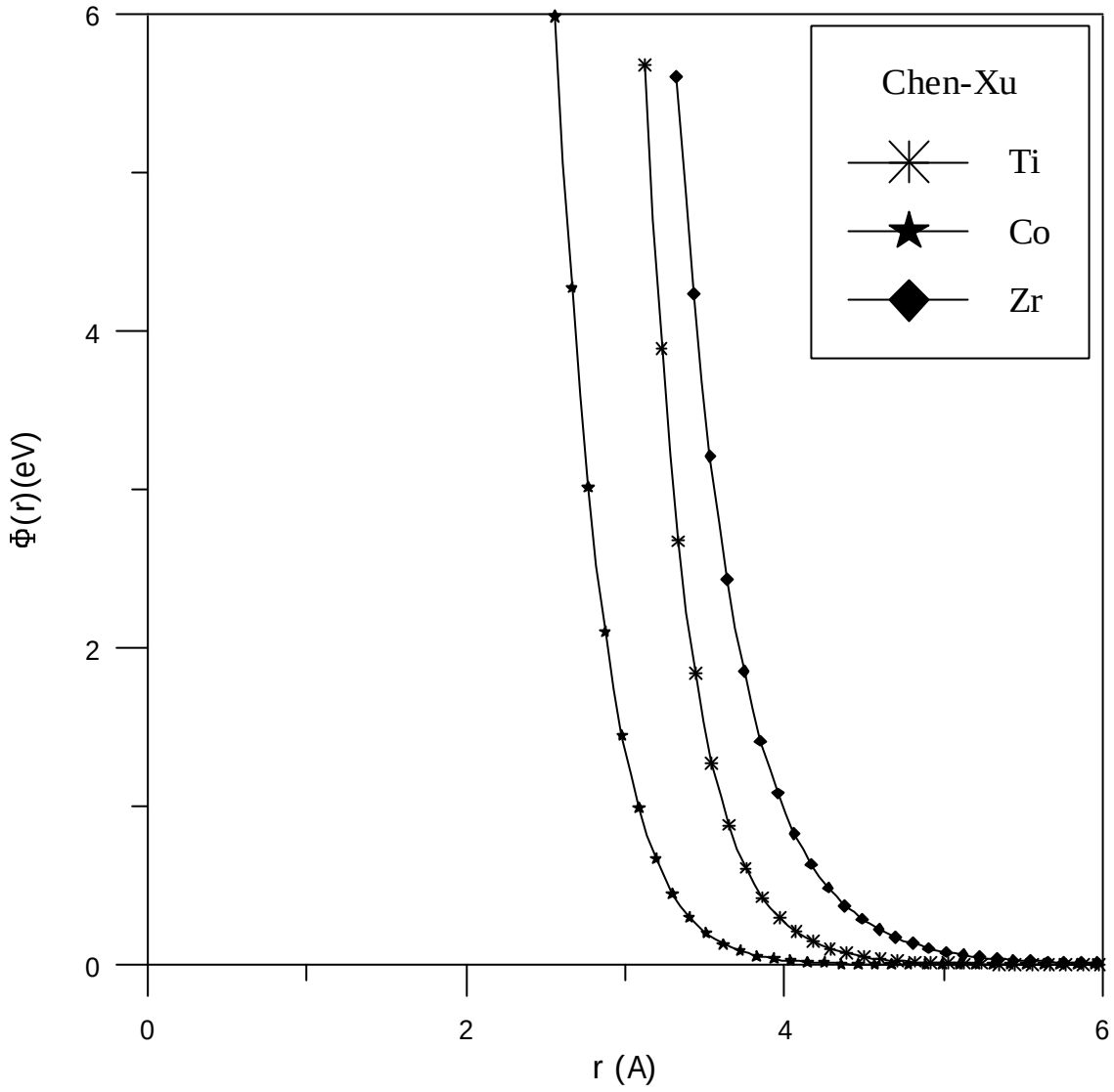

Sekil 5.38: Ti için CX-GAM kullanilarak kati ve sivi parametreleri ile hesaplanan çiftler etkilesme potansiyelleri



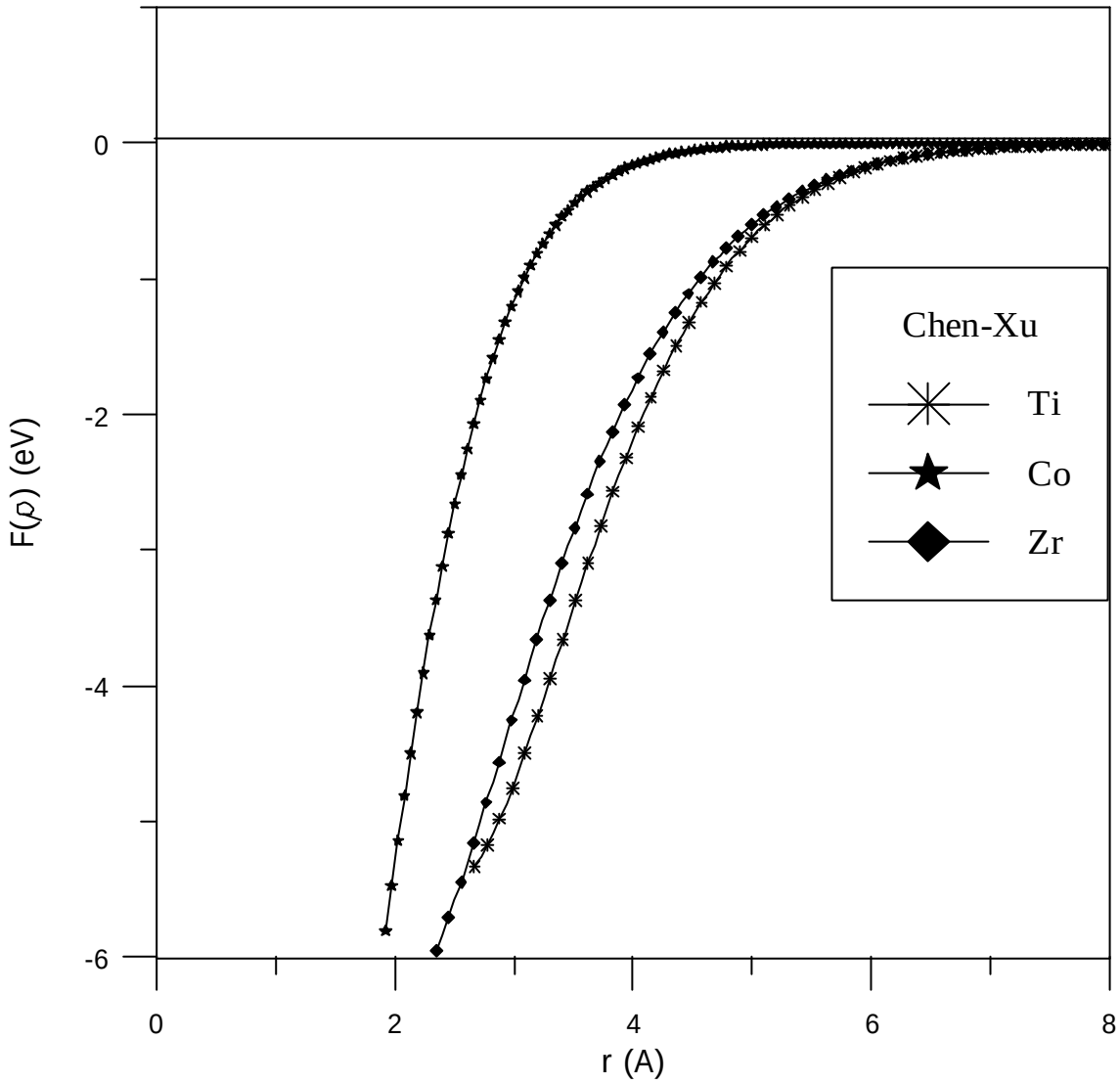

Sekil 5.39: Co için CX-GAM kullanilarak kati ve sivi parametreleri ile hesaplanan çiftler etkilesme potansiyelleri



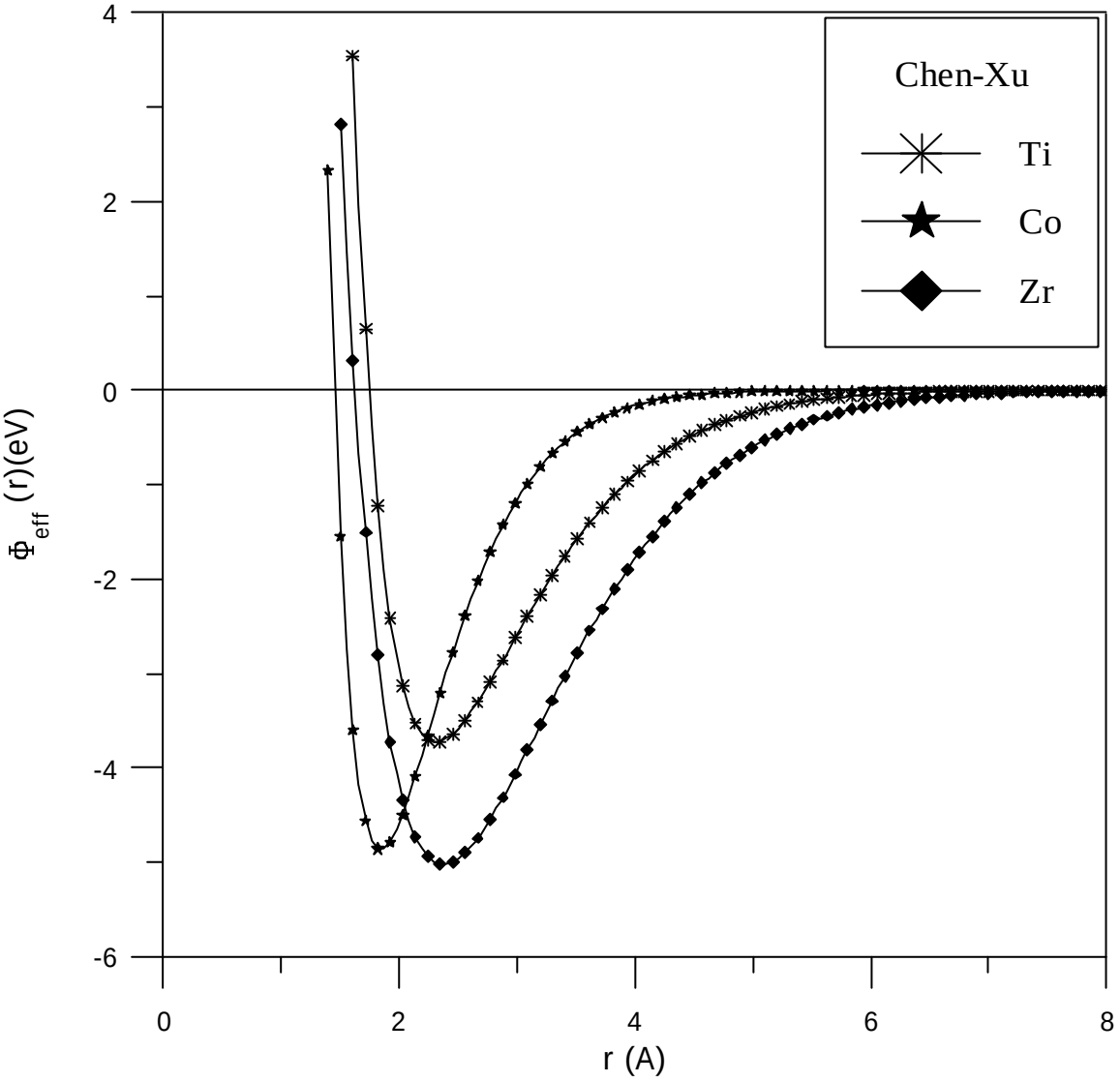

Sekil 5.40: Zr için CX-GAM kullanilarak kati ve sivi parametreleri ile hesaplanan çiftler etkilesme potansiyelleri




Sekil 5.41: Ti, Zr ve Co için CX-GAM çiftler etkilesme potansiyelleri




Sekil 5.42: Ti, Zr ve Co için CX-GAM gömme enerjisi fonksiyonlari



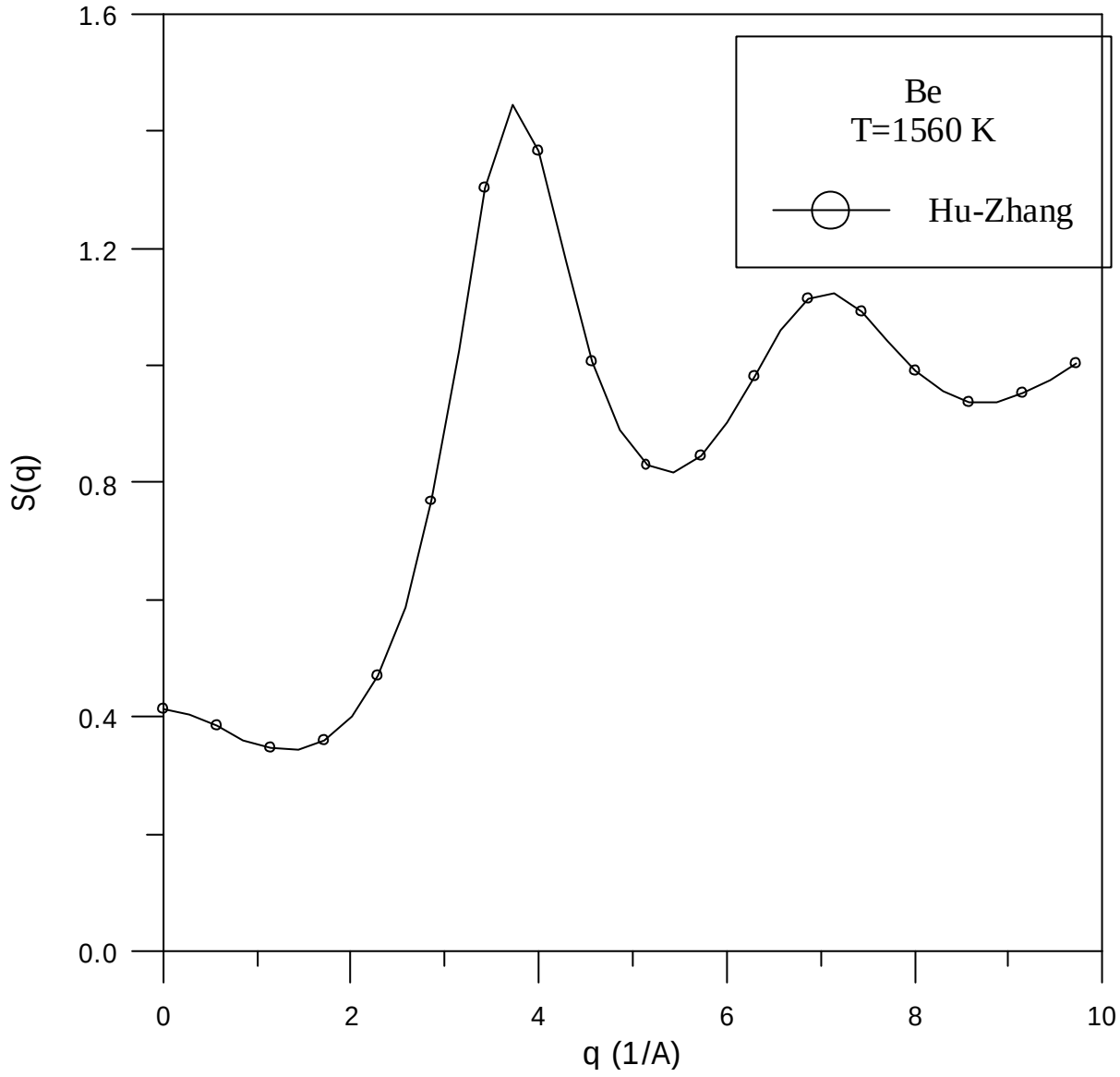

Sekil 5.43 : Ti, Zr ve Co için CX-GAM etkin çiftler potansiyelleri

## 5.2 Sivi hcp Geçis Metallerinin Yapisi

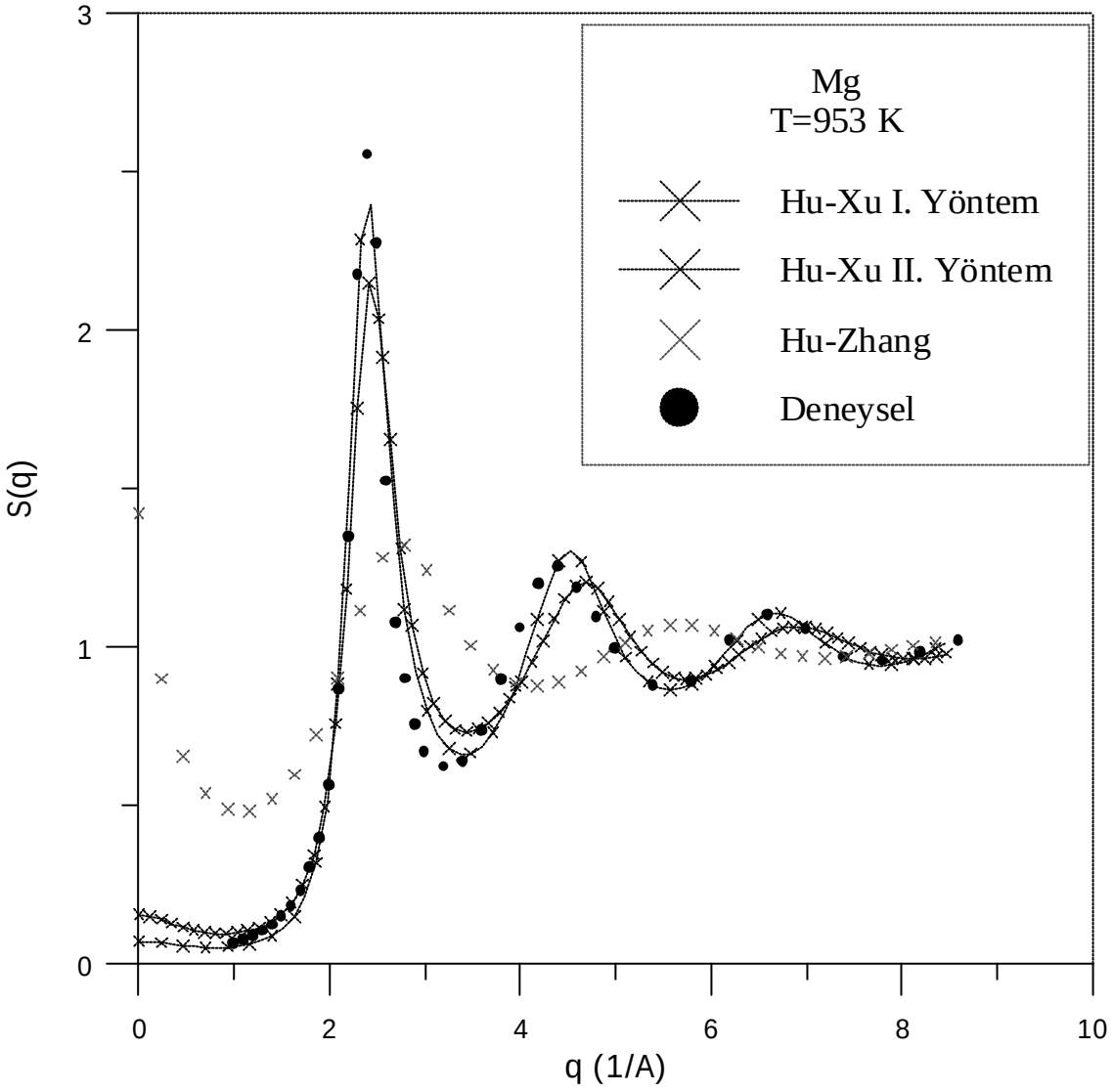
Bu bölümde sivi hcp geçis metallerinin VMHNC integral teorisi ile ergime noktalari civarinda elde edilen yapisal özellikleri ile ilgili sonuçlar verilmektedir. Hesaplanan etkin çiftler etkilesme potansiyelleri sivi yapi hesaplamalarinda giris verileri olarak kullanilmistir. O – Z denklemi Zerah algoritmasi (Zerah 1985) kullanilarak çözüldü.

Zhang-Quyang, Hu-Xu, Hu-Zhang, Hu-Deng ve Chen-Xu'dan hesaplanan etkin çiftler potansiyelleri ile VMHNC integral denklem teorisi kullanilarak hesaplanan statik yapi faktörü S(q) Waseda (Waseda 1980)' nin X – isinlari kirinimi deney sonuçlari ile karsilastirmali olarak sirasi ile Be, Mg, Sc, Ti, Co, Y, Zr, La, Pr, Nd, Gd, Tb, Dy, Ho ve Er için Sekil 5.43 ile Sekil 5.57 arasinda verilmektedir. Y ve Be'nin deneysel degerleri olmadigi için sadece hesaplanan yapi degerleri gösterilmistir. Ayrica bu tezde çalisilan Zhang-Quyang, Hu-Xu, Hu-Zhang, Hu-Deng ve Chen-Xu etkin çiftler potansiyeli ile elde edilen VMHNC sonuçlarinin Waseda' modelleri ve VMHNC ile hesaplanan çiftler dagilim fonksiyonu g(r) Waseda' nin X – isinlari kirinimi deneysel degerleri ile karsilastirildi. Be, Mg, Sc, Ti, Co, Y, Zr, La, Pr, Nd, Gd, Tb, Dy, Ho ve Er için için sirasiyla Sekil 5.58 ile sekil 5.72 arasinda gösterilmistir. Genelde, Hu-Xu ve Hu-Deng'in I. yönteminden hesaplanan yapilarin (Pr, Nd, Gd, Tb, Dy, Ho ve Er) deneysel degerlerle ikinici pike kadar uyumlu oldugu, ikinci pikten sonra faz farkliliklarin oldugu görülmektedir. Zhang-Quyang, Hu- Zhang ve Chen-Xu metotlari kullanarak hesaplanan Co, Zr ve Ti sistemleri için Chen-Xu metodunun deneysel deger ile biraz daha uyumlu oldugu söylenebilir. Bununla birlikte daha fazla ayrinti asagidaki gibidir. Mg için hesaplanan S(q) degerleri Hu-Xu I. yöntemin, II. yönteme ve Hu-Zhang göre birinci ve ikinci pikin yüksekligi deneysel degerinden biraz küçük oldugu, ikinci pikten sonra deneysel degerle ayni oldugu görülmektedir. Mg'un hesaplanan g(r) degerleri ise Hu-Xu I. yöntemin birinci minimum disinda deneysel degerle ayni oldugu, Hu-Xu II. yöntemin birinci pikinin deneysel degeri ile ayni oldugu, ikinci pike kadar bir faz farki oldugu ikinci pikten sonra deneysel degerle ayni oldugu görülmektedir. Mg için Hu-Zhang'dan hesaplanan degerlerle deneysel degerlerin uymadigi asikardir. Tb, Ho ve Er için Hu-Deng I. yöntemden hesaplanan S(q) ve g(r) degerlerinin birinci pikleri deneysel degerden yüksek ama ayni degeri aldigi minimum degerlerinin yaklasik olarak ayni degeri aldigi, ikinci pikten sonra S(q) degerlerinin deneysel degerle uyusmadigi, g(r) degerlerinin deneysel degerlerle yaklasik ayni degeri aldigi görülmektedir. Hu-Xu ve Hu-Deng'in II. yöntemden hesaplanan S(q) degerleri deneysel degerlerle uyusmadigi görülmektedir. Dy için Hu-Xu I ve II. yöntemlerinden hesaplanan S(q) degerlerinin birinci piki deneysel degerlerden yüksek oldugu ve birinci

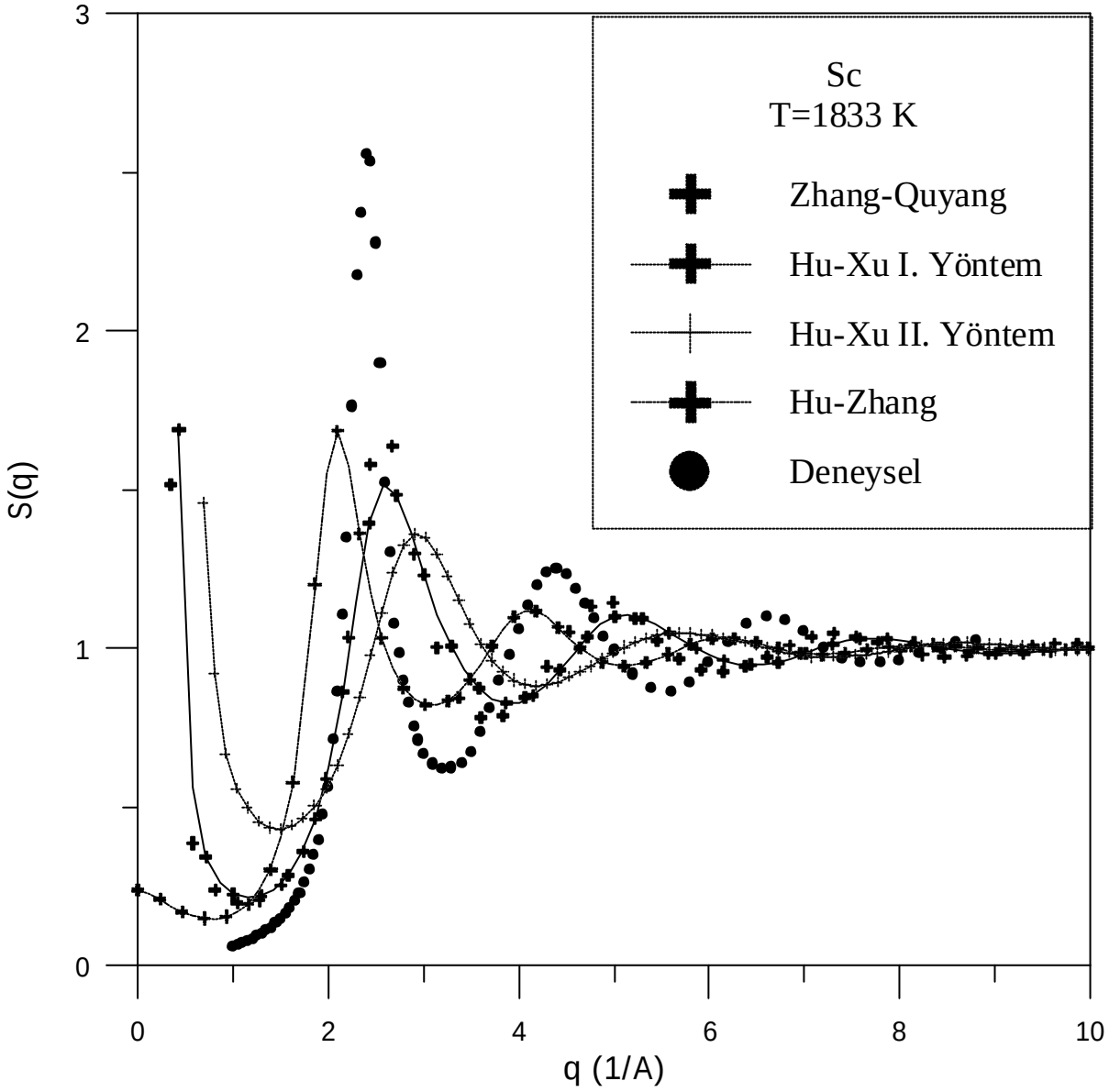
minimumdan sonra deneysel degerlerden daha büyük degerler aldigi görülmektedir. Hu-Deng I. yöntem haricinde diger yöntemlerden hesaplanan g(r) degerlerinin birinci pikleri deneysel degerinden büyüktür.Yine bu yöntem haricinde diger yöntemlerden hesaplanan g(r) degerleri ikinci pikten sonra yaklasik olarak deneysel degerleri almaktadir. Pr, Nd ve Gd için Hu-Xu ve Hu-Deng I. yöntemlerinden hesaplanan S(q) ve g(r) degerlerinin deneysel degerlerden büyük degerler aldigi, g(r) degerlerinin ikinci pikten sonra deneysel degerlerle ayni oldugu, ikinci yöntemlerin ise deneysel degerlerle uyusmadigi görülmektedir. Zr, Co ve Ti için Chen-Xu'den hesaplanan S(q) degerlerinin Co haricinde deneysel degerlerle ikinci pike kadar yaklasik ayni degeri aldigi ikinci pikten sonra faz farki olustugu görülmektedir. Ayrica Co için deneysel degerle uyumlu S(q) degerleri faz farki olmasina ragmen Zhang-Quyang 'dan hesaplanan degerlerdir. Zhang-Quyang ve Chen-Xu'den hesaplanan g(r) degerleri deneysel degerlerle faz farki olmasina ragmen uyumlu oldugu söylenebilir. Sc için hesaplanan S(q) ve g(r) degerlerinin deneysel degerlerle pek uyusmadigi bunun nedeni ise metalin kendi yapisal özelligi veya VMHNC teorisinden olabilir. La için Zhang-Quyang 'dan hesaplanan S(q) ve g(r) degerlerinden, g(r)'nin deneysel degeriyle birinci pik hariç ayni degeri almaktadir. S(q)'nun birinci piki deneysel degerinden küçük ve aralarinda faz farki vardir.



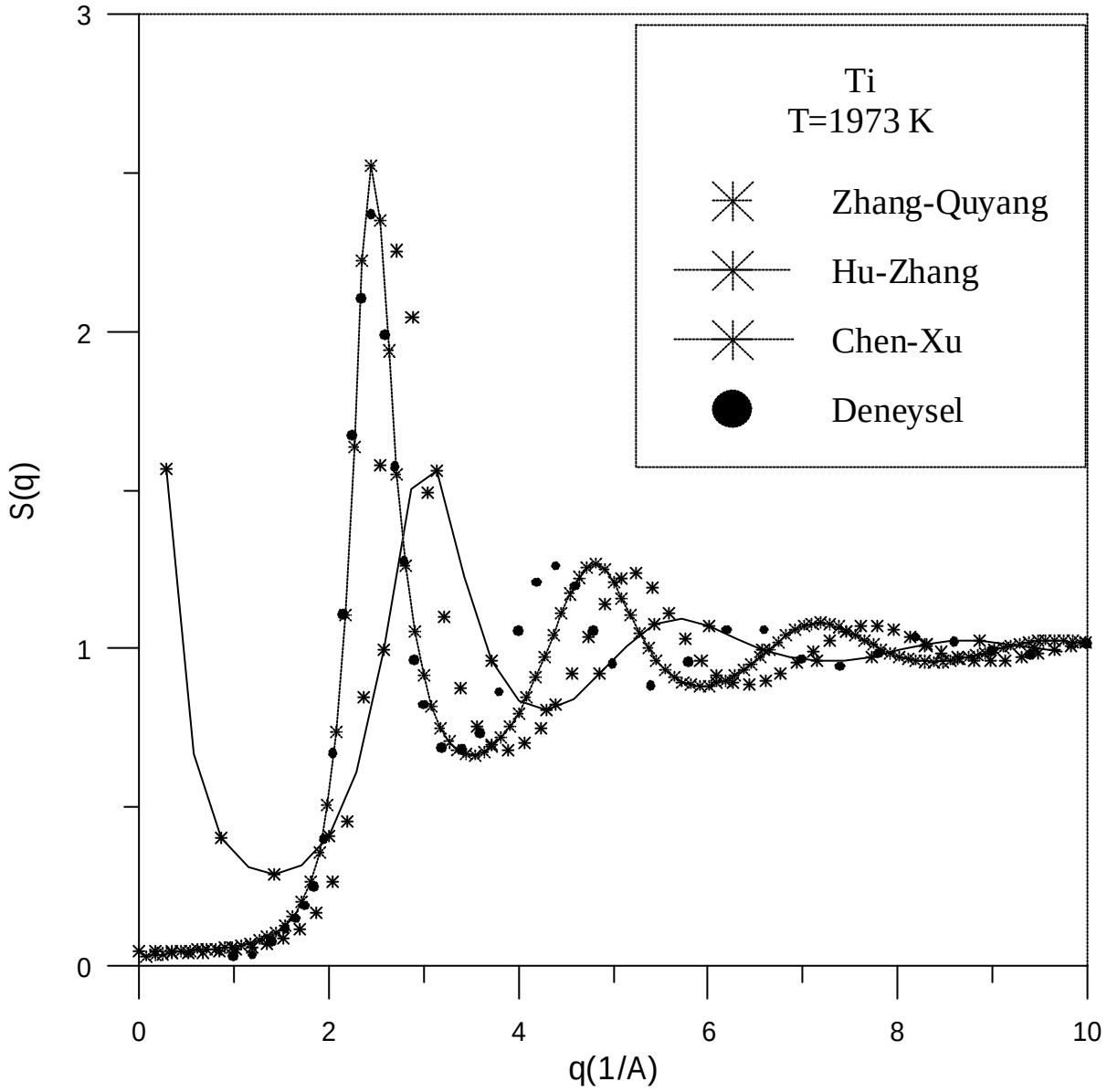

Sekil 5.44: Sivi Be için S(q) statik yapi faktörü



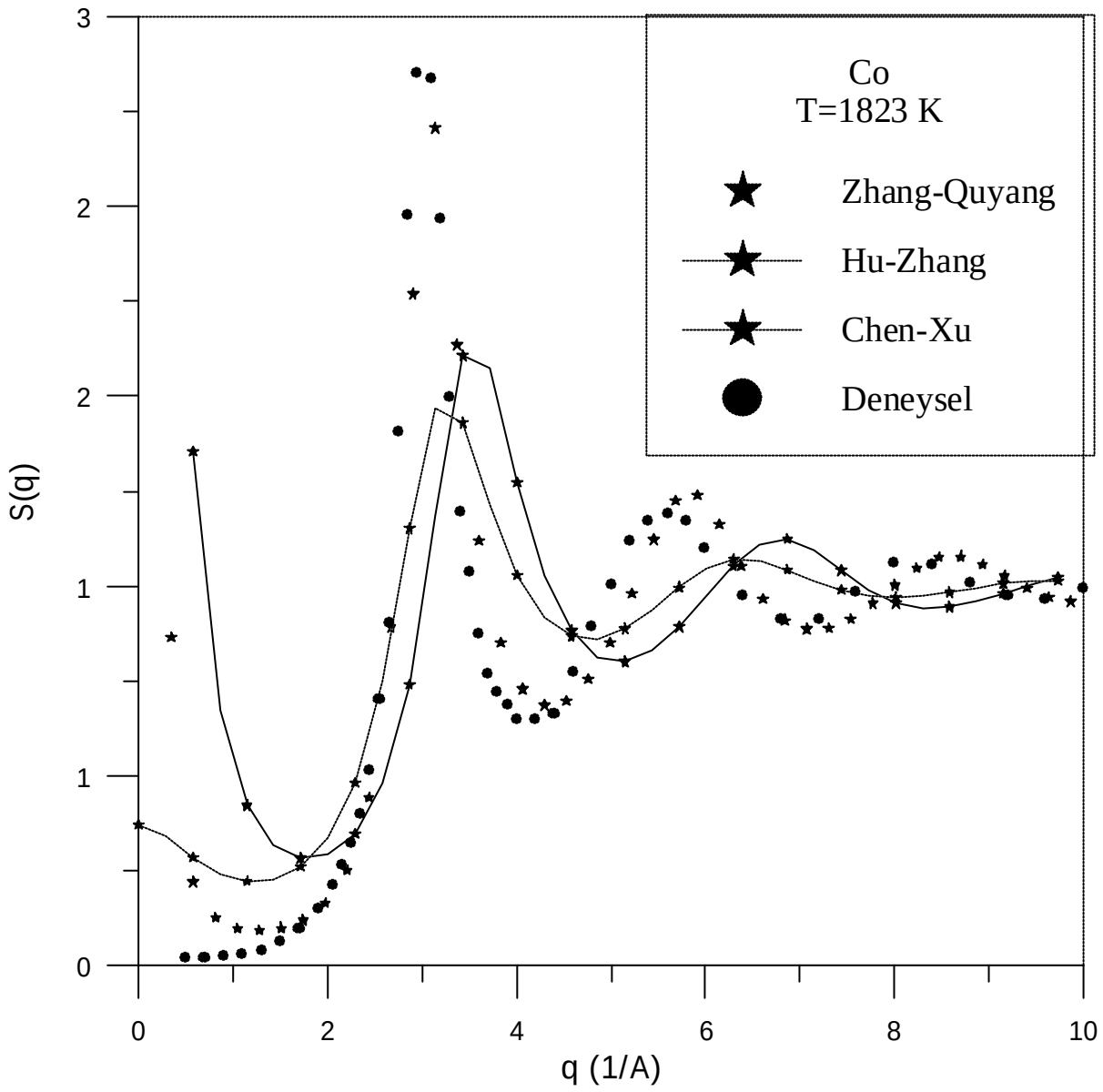

Sekil 5.45: Sivi Mg için S(q) statik yapi faktörü



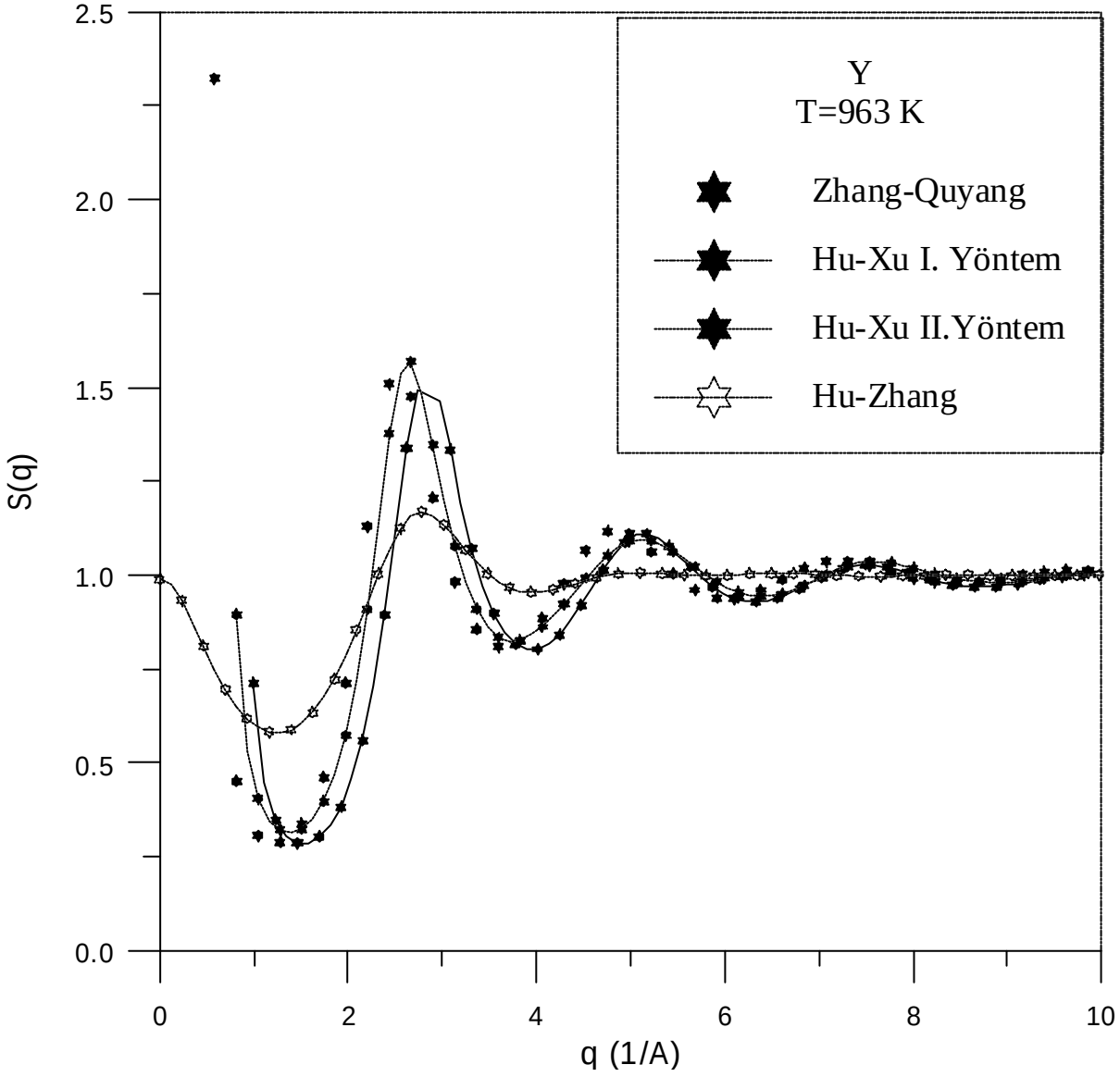

Sekil 5.46: Sivi Sc için S(q) statik yapi faktörü



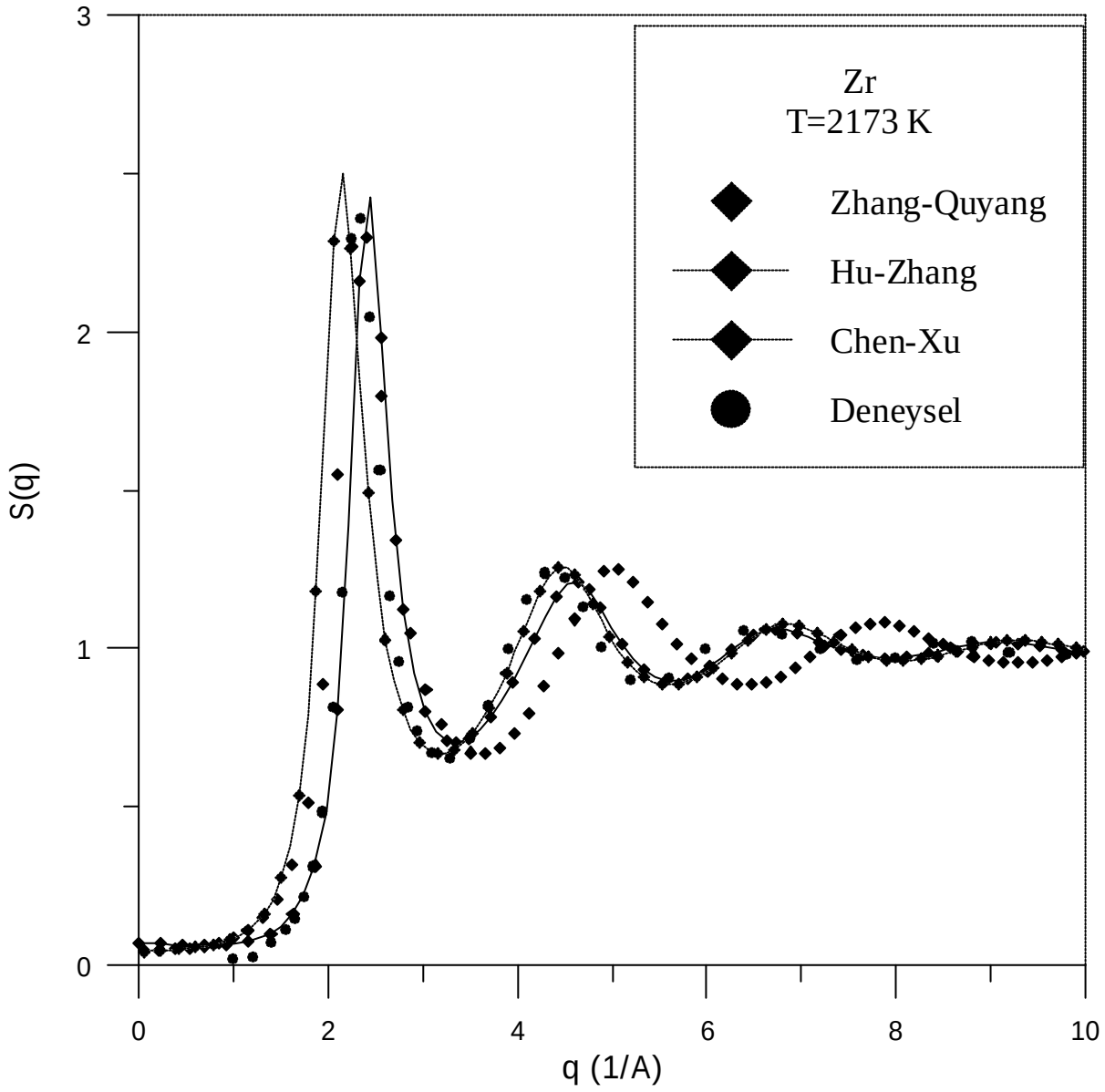

Sekil 5.47: Sivi Ti için S(q) statik yapi faktörü



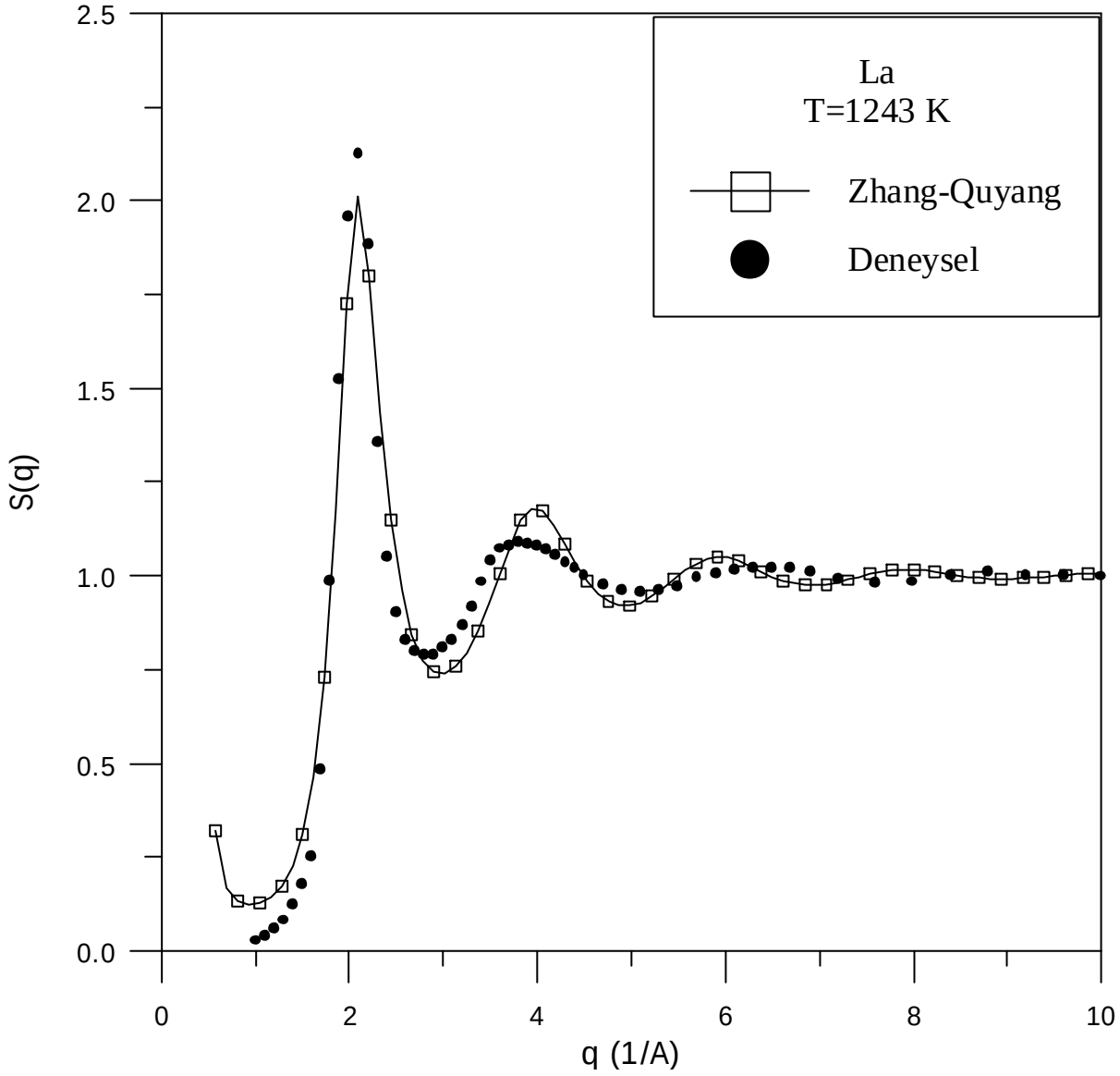

Sekil 5.48: Sivi Co için S(q) statik yapi faktörü



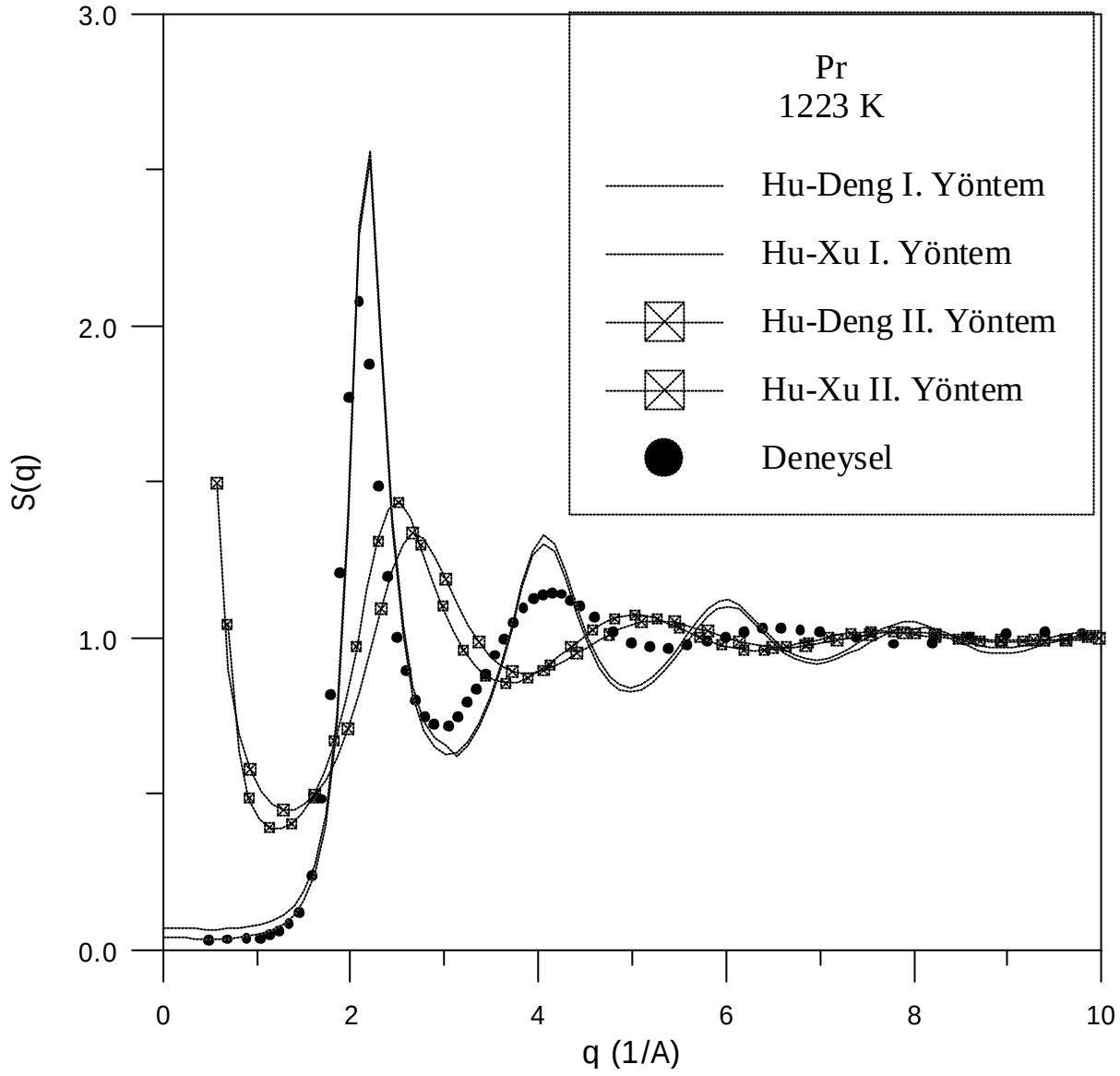

Sekil 5.49: Sivi Y için S(q) statik yapi faktörü



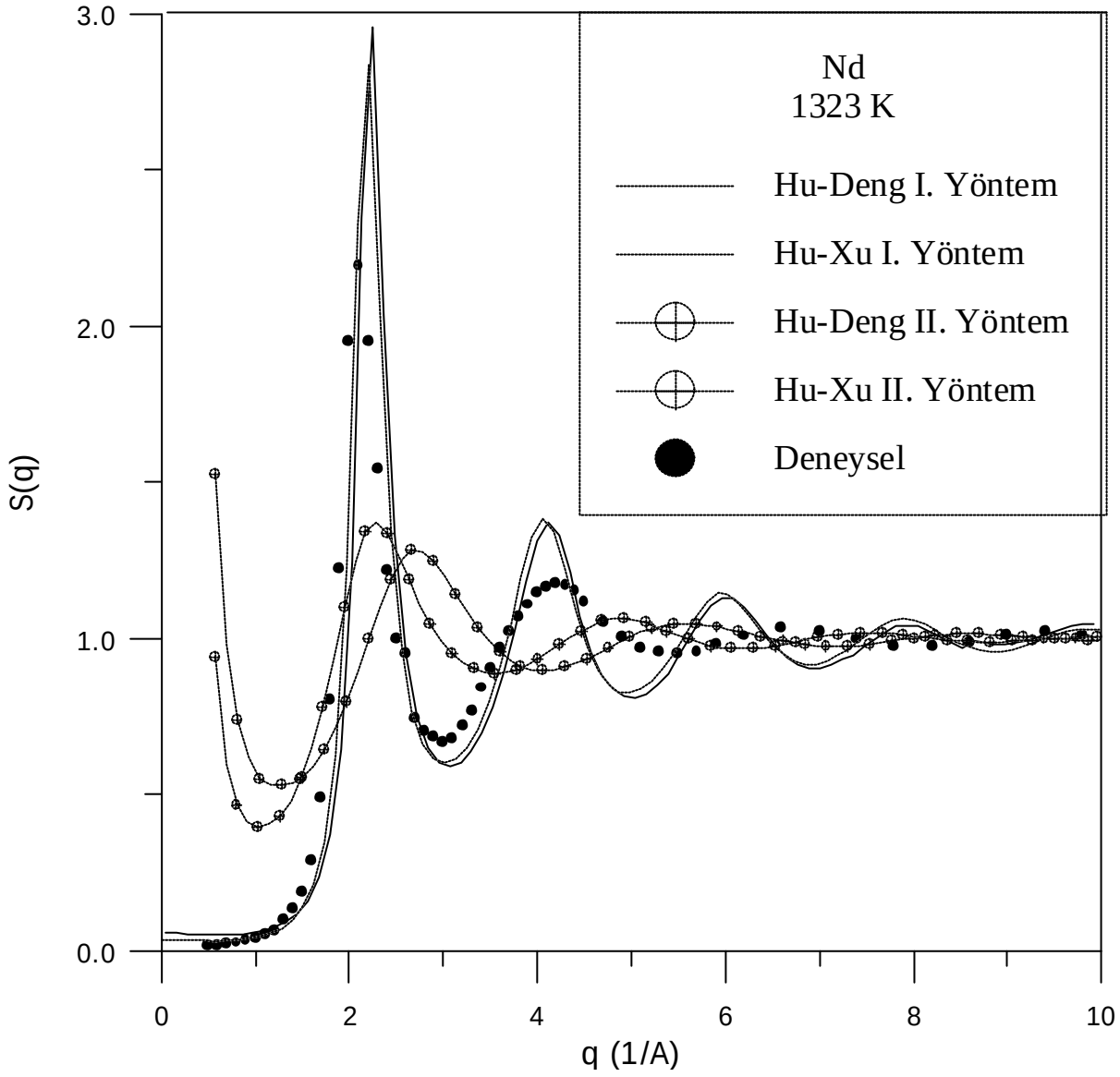

Sekil 5.50: Sivi Zr için S(q) statik yapi faktörü



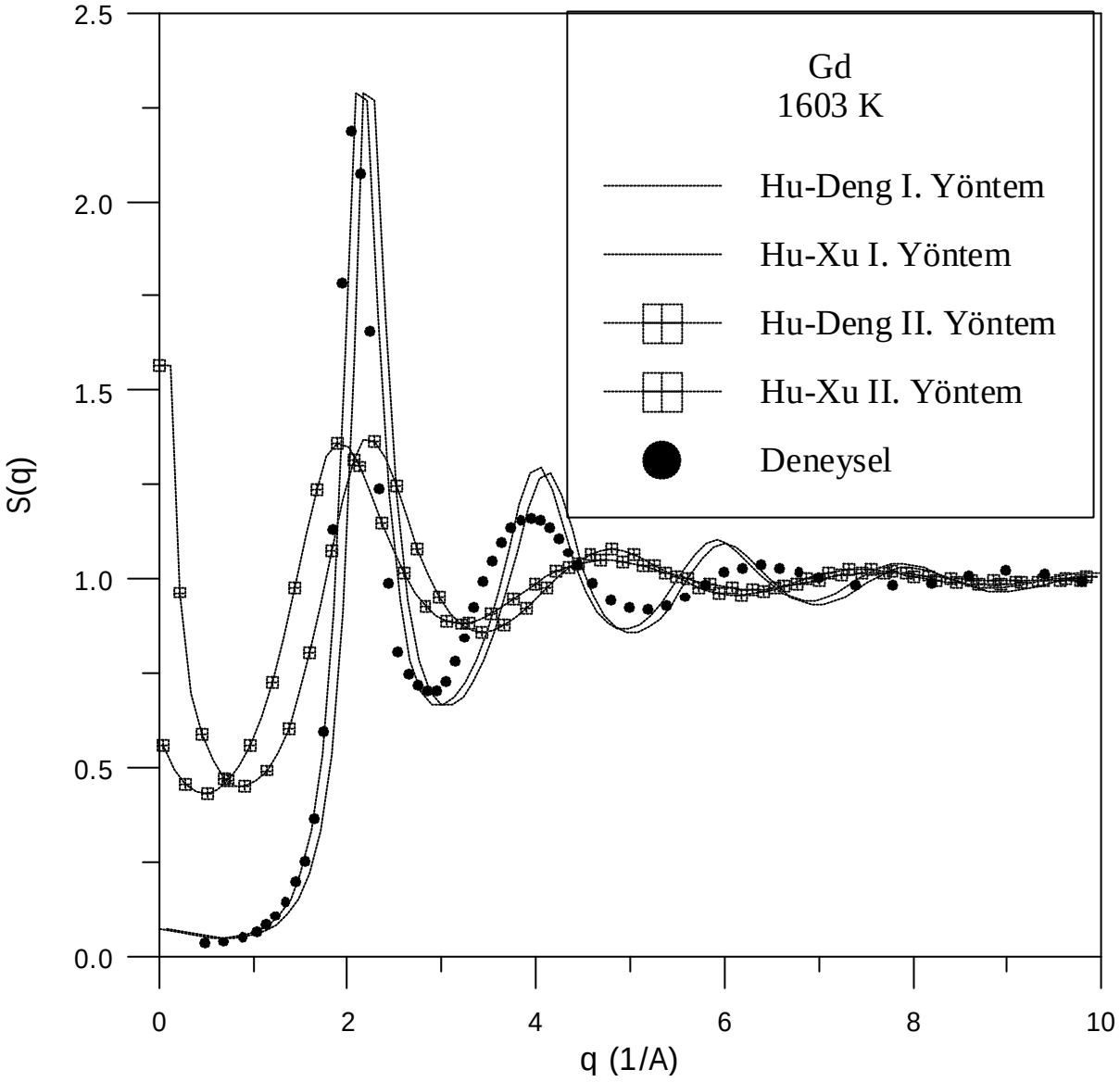

Sekil 5.51: Sivi La için S(q) statik yapi faktörü



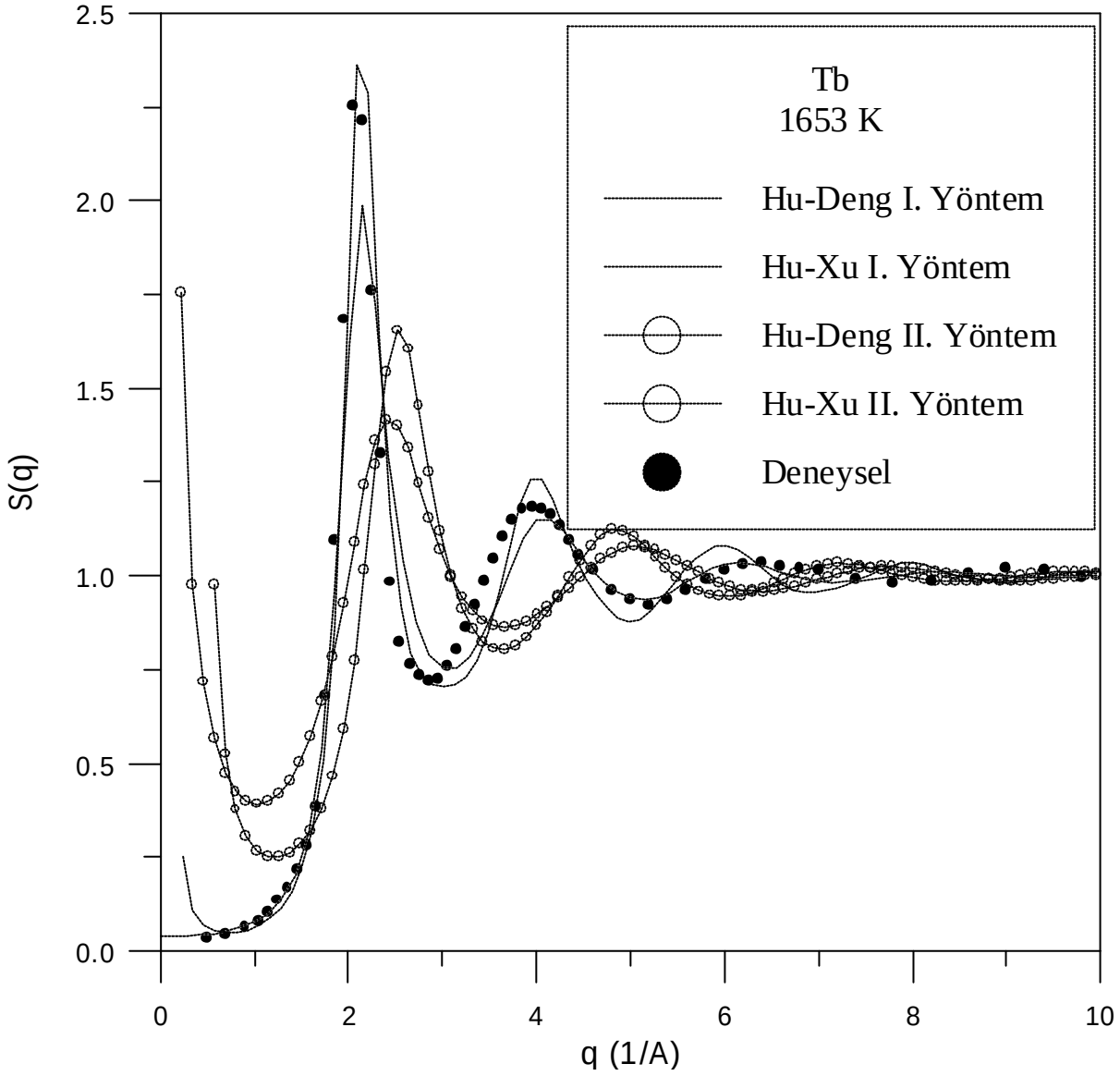

Sekil 5.52: Sivi Pr için S(q) statik yapi faktörü



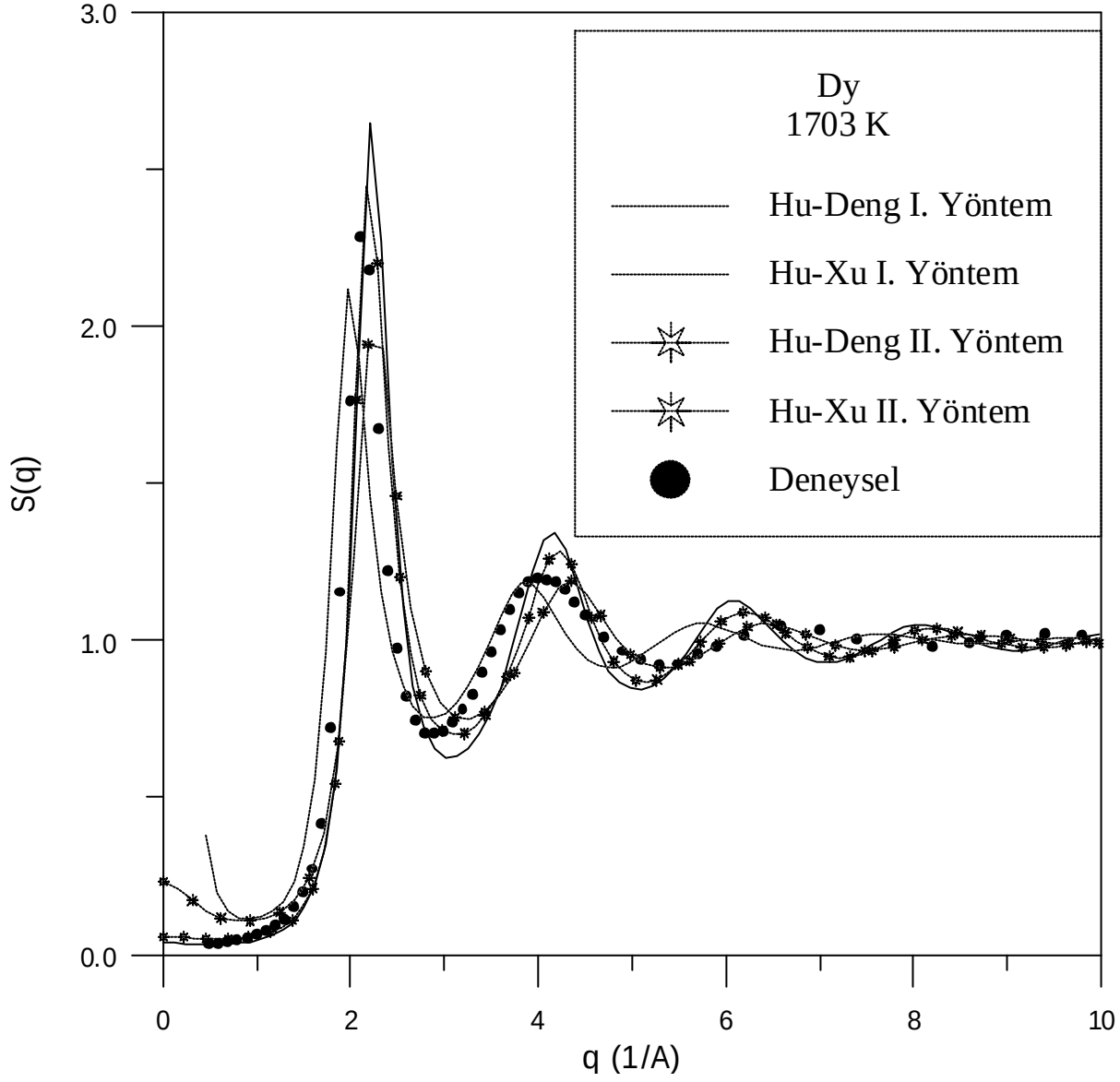

Sekil 5.53: Sivi Nd için S(q) statik yapi faktörü



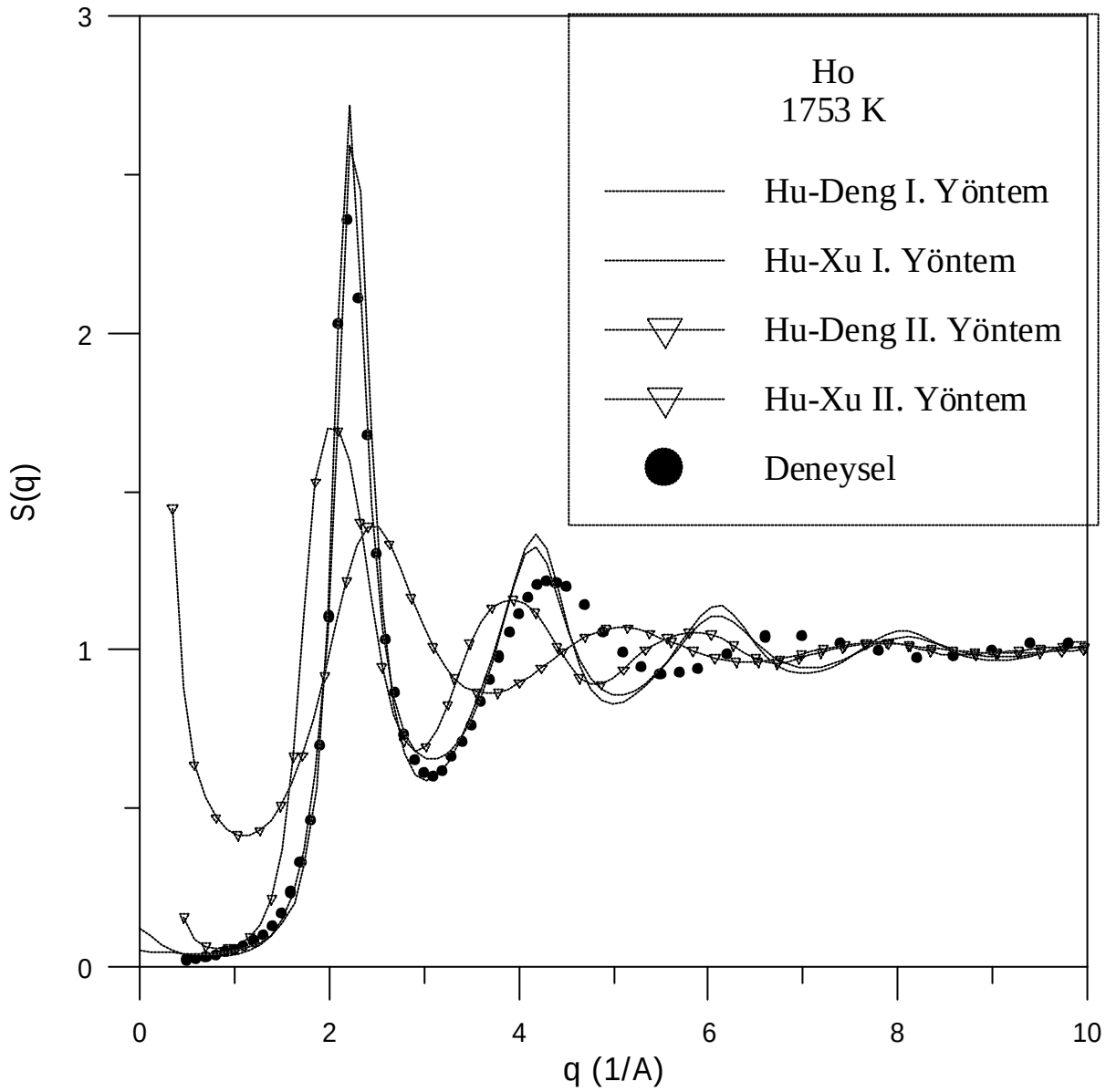

Sekil 5.54: Sivi Gd için S(q) statik yapi faktörü



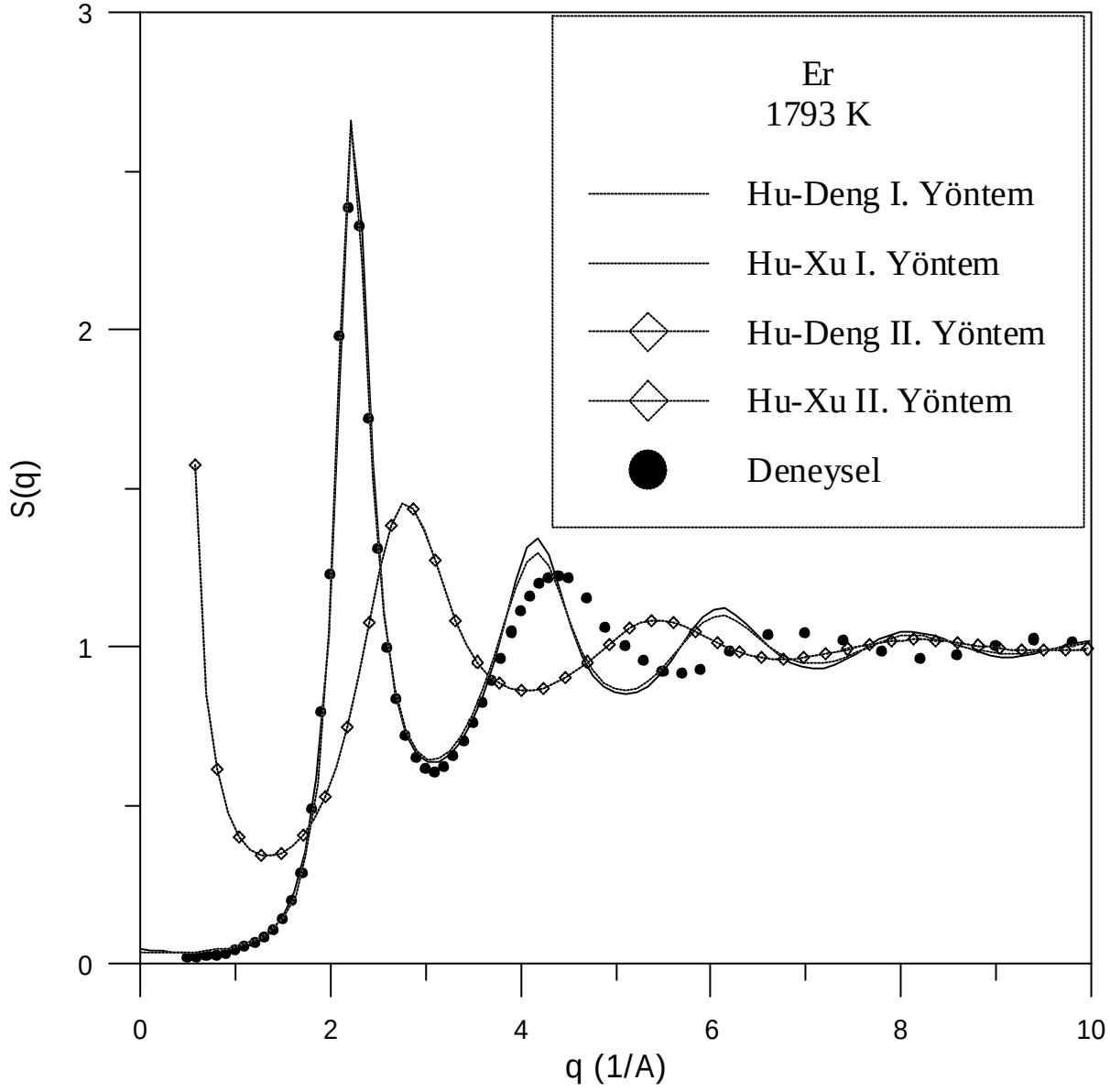

Sekil 5.55: Sivi Tb için S(q) statik yapi faktörü



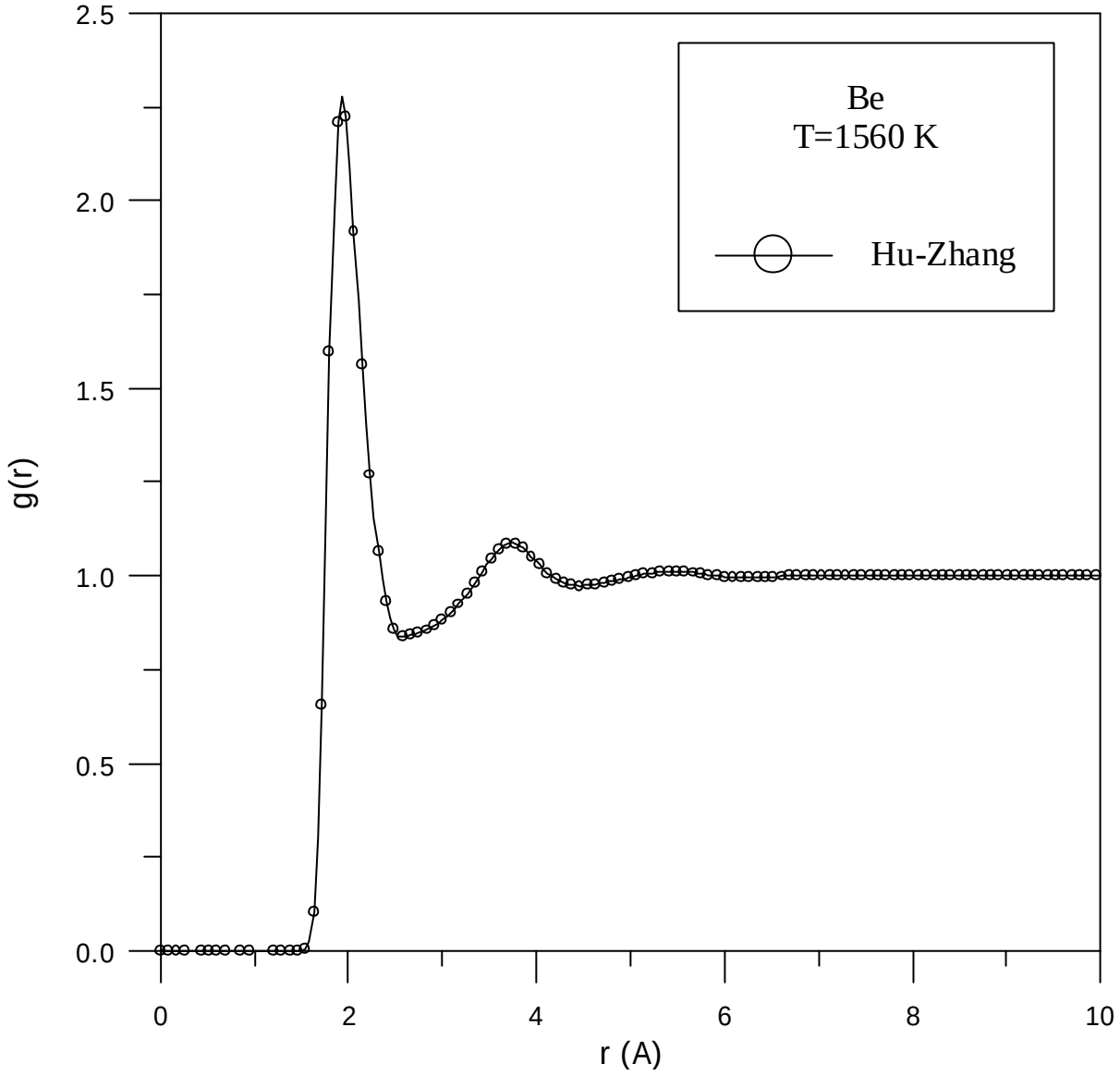

Sekil 5.56: Sivi Dy için S(q) statik yapi faktörü



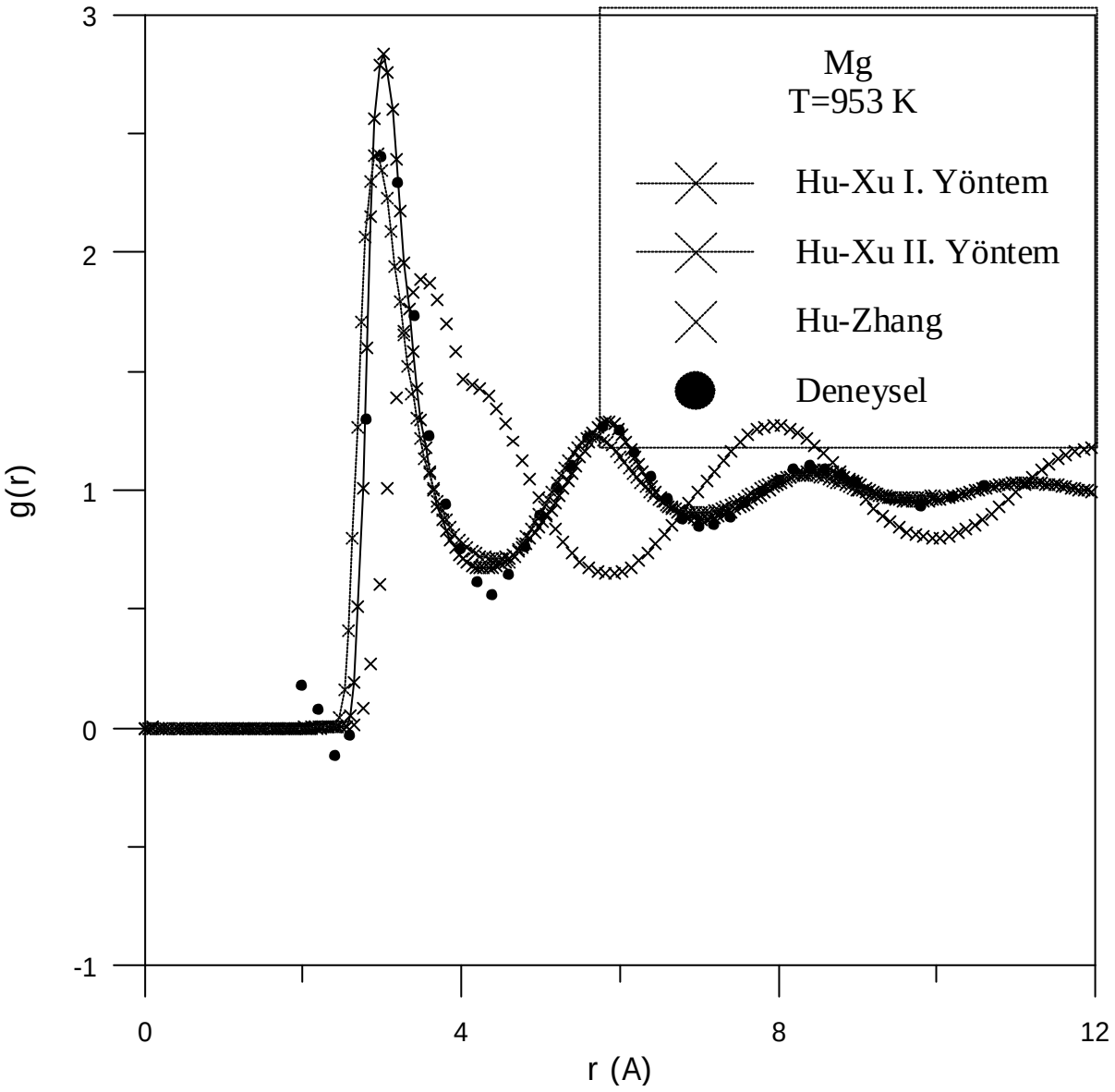

Sekil 5.57: Sivi Ho için S(q) statik yapi faktörü



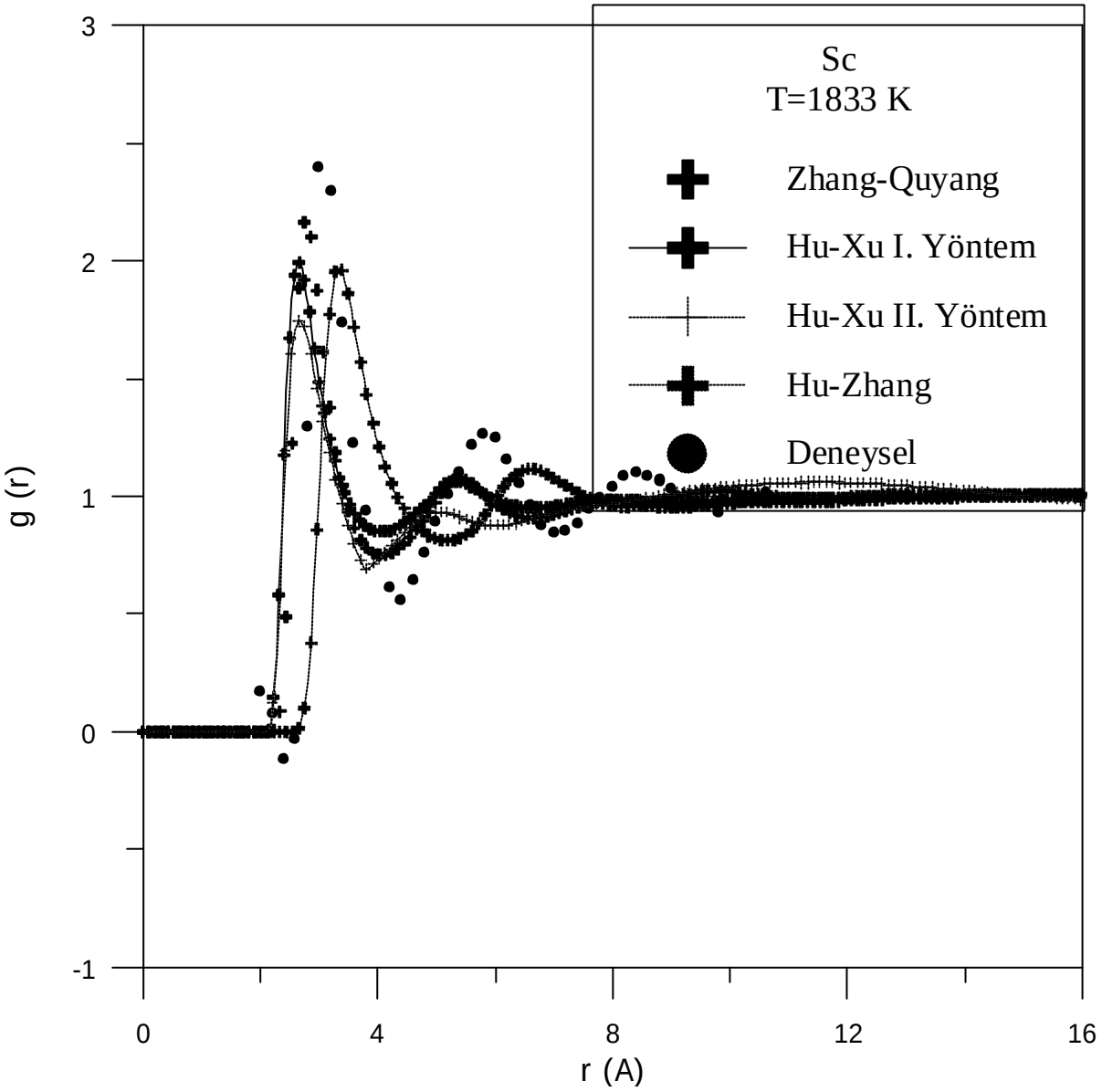

Sekil 5.58: Sivi Er için S(q) statik yapi faktörü



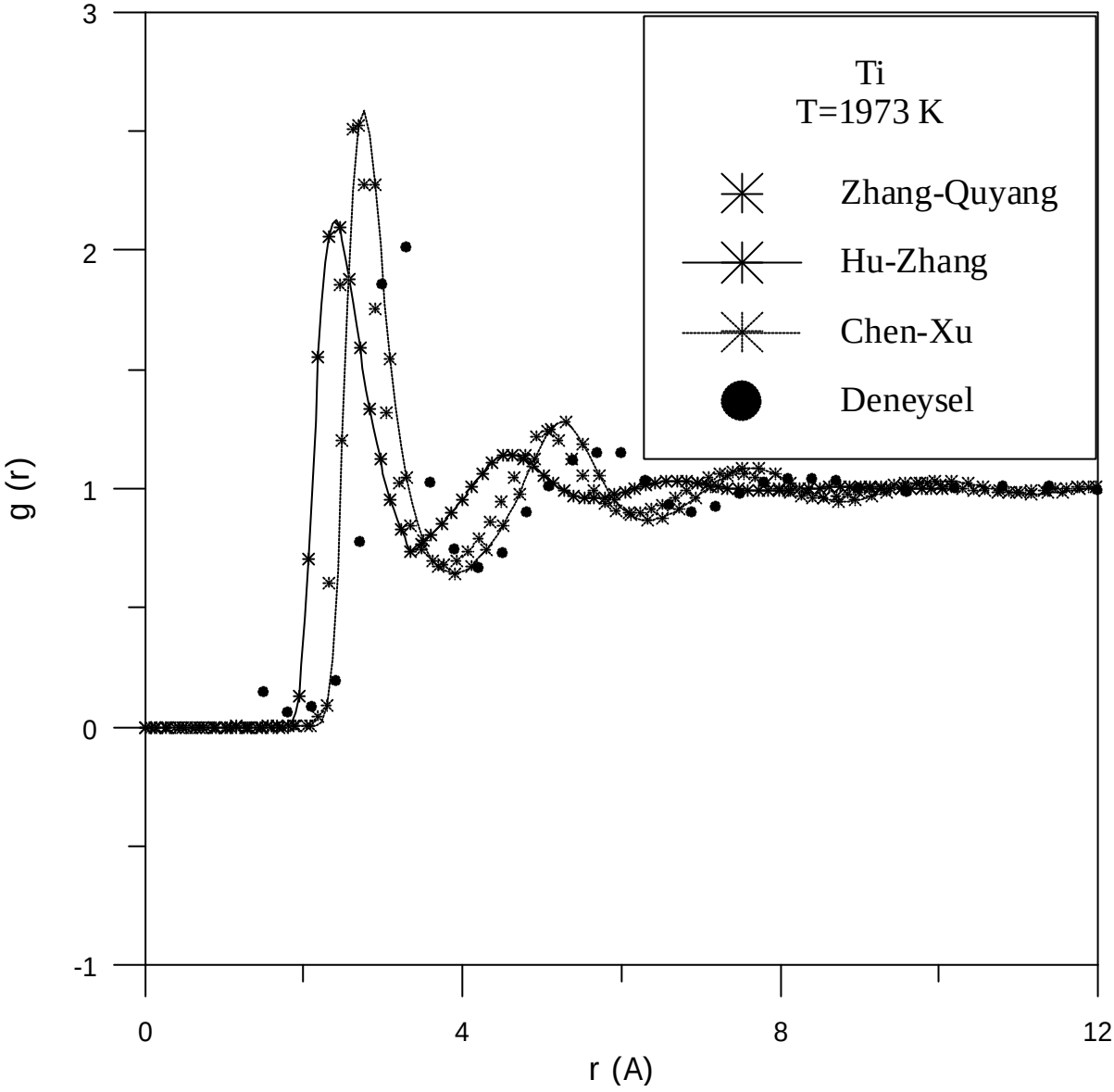

Sekil 5.59: Sivi Be için g(r) çiftler dagilim fonksiyonu



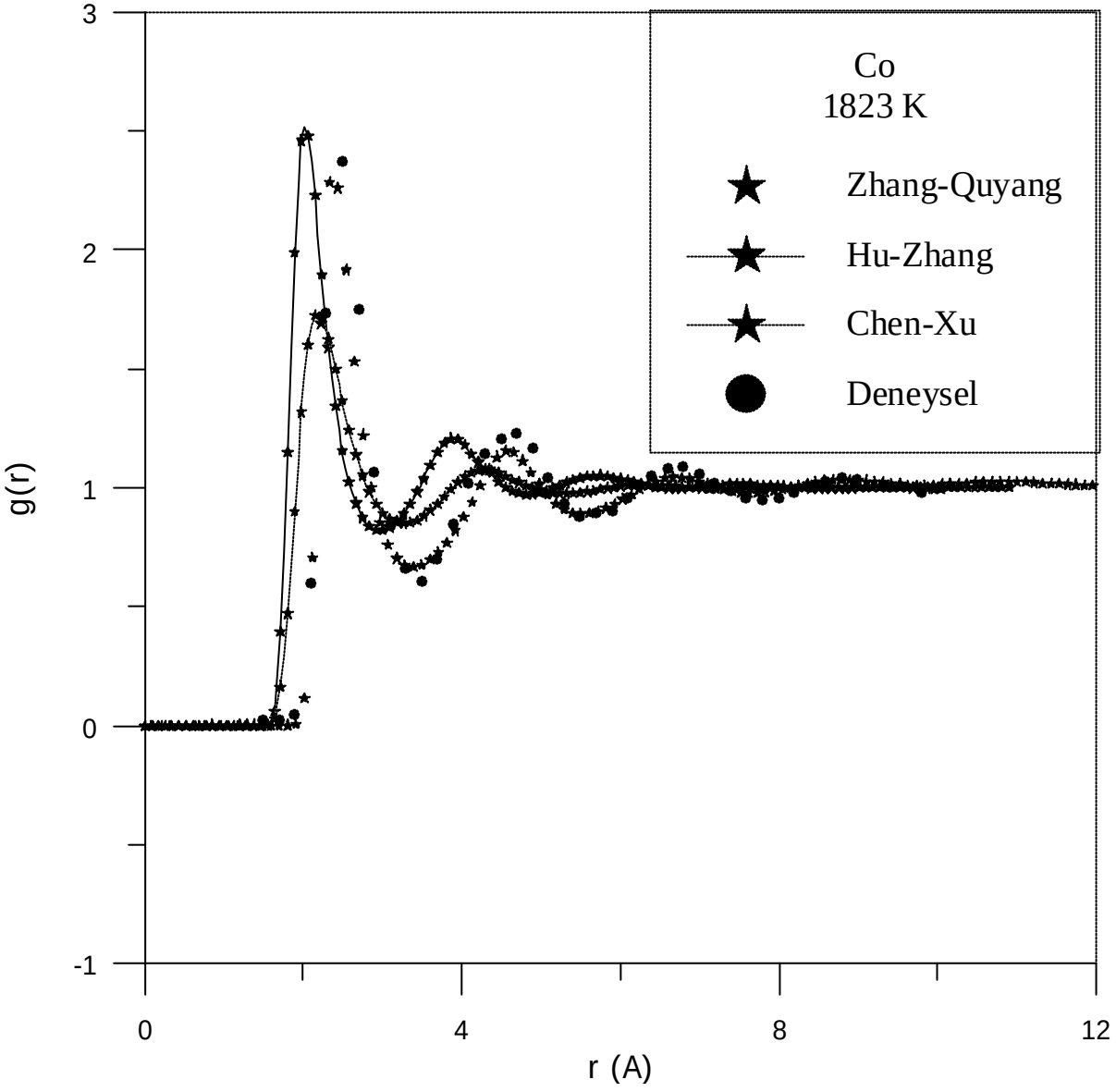

Sekil 5.60: Sivi Mg için g(r) çiftler dagilim fonksiyonu



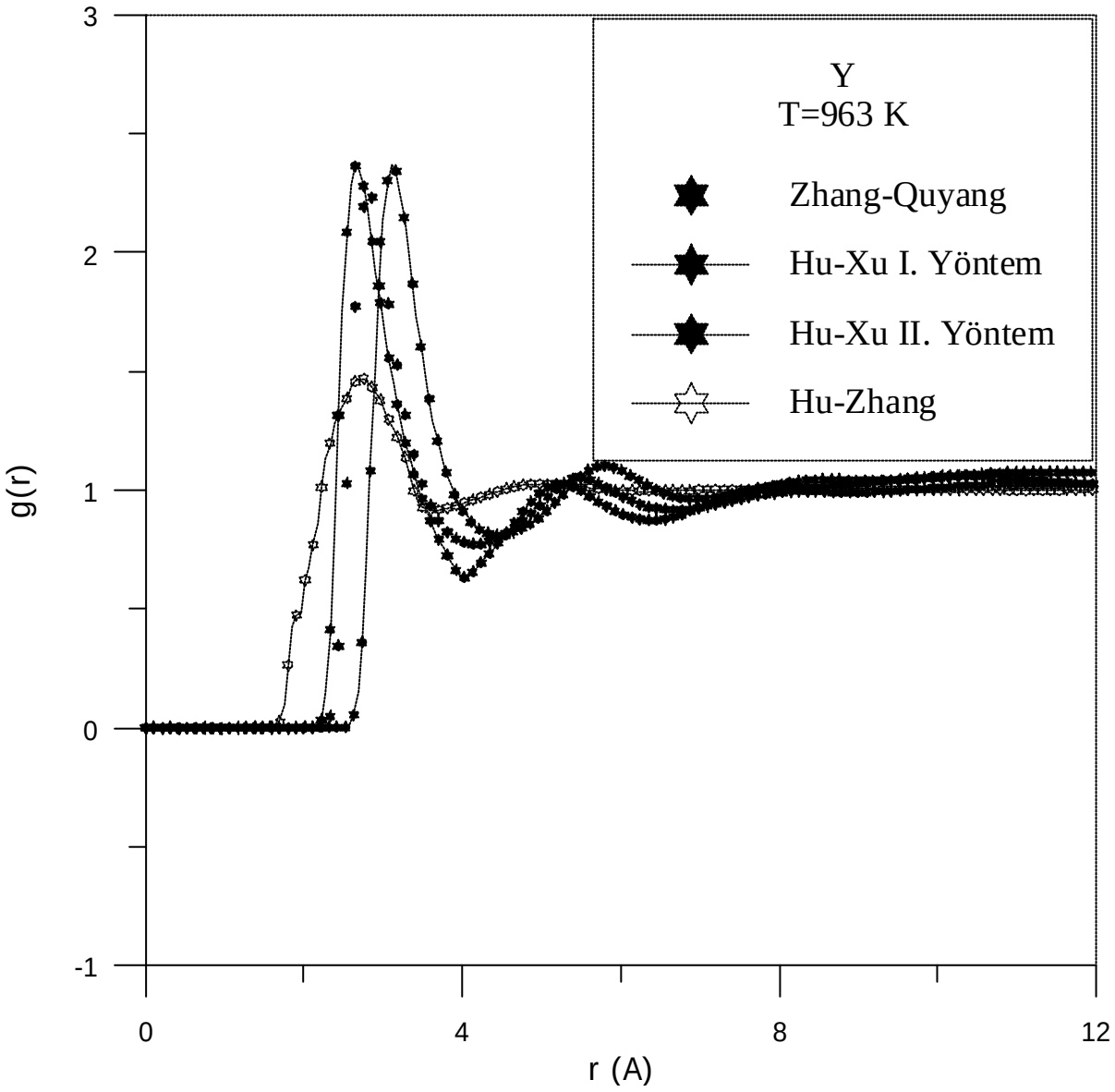

Sekil 5.61: Sivi Sc için g(r) çiftler dagilim fonksiyonu



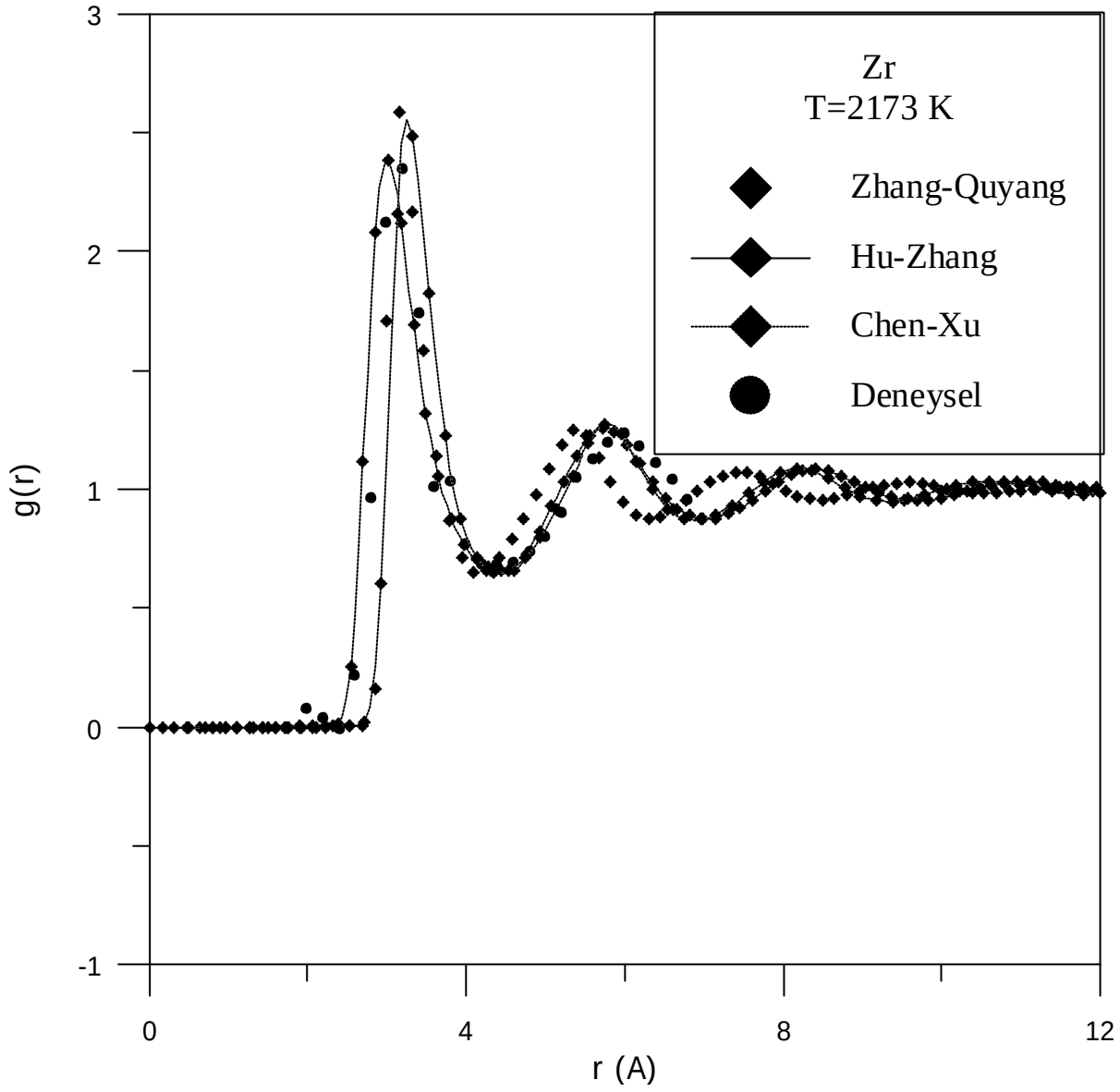

Sekil 5.62: Sivi Ti için g(r) çiftler dagilim fonksiyonu



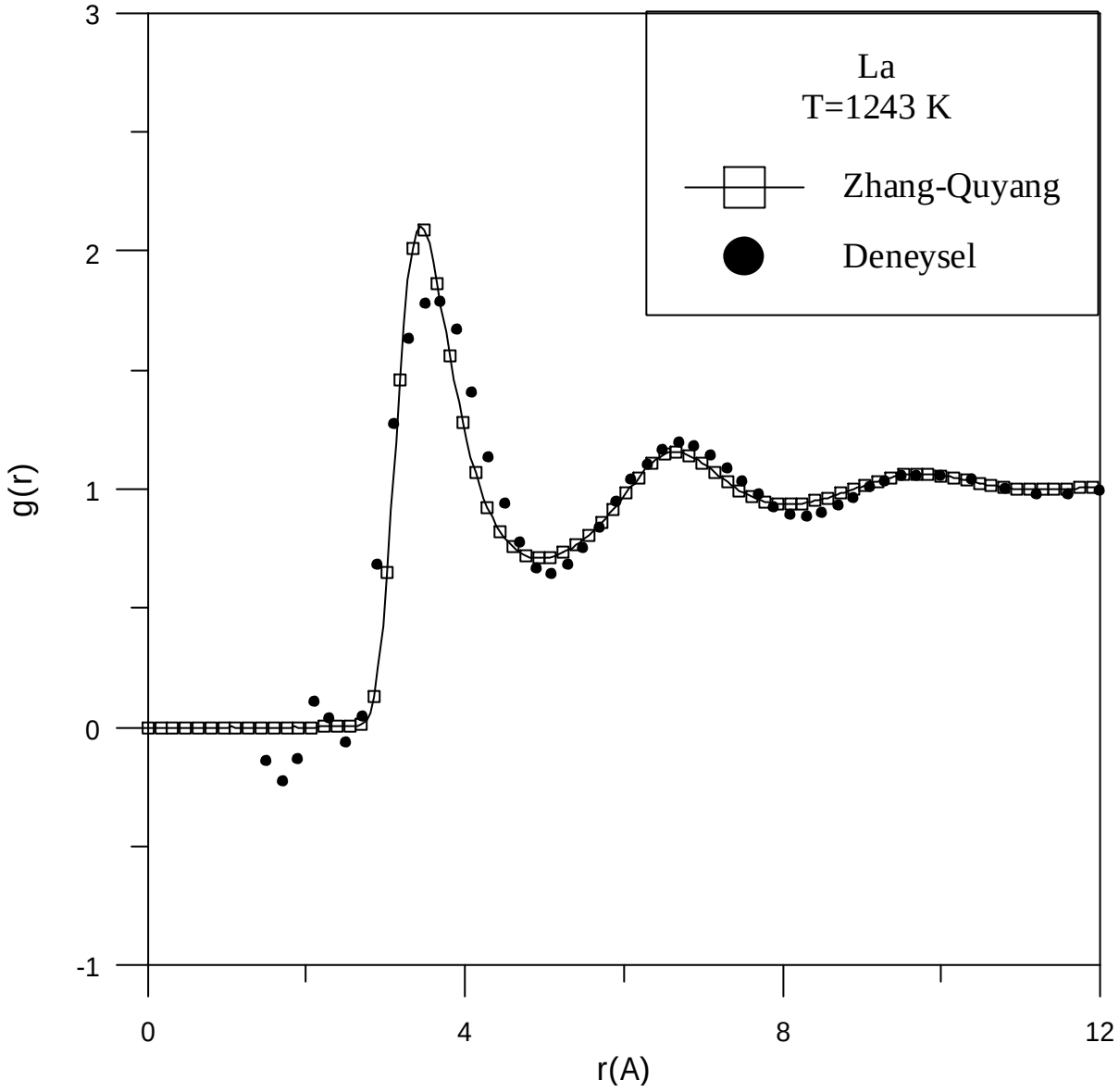

Sekil 5.63: Sivi Co için g(r) çiftler dagilim fonksiyonu



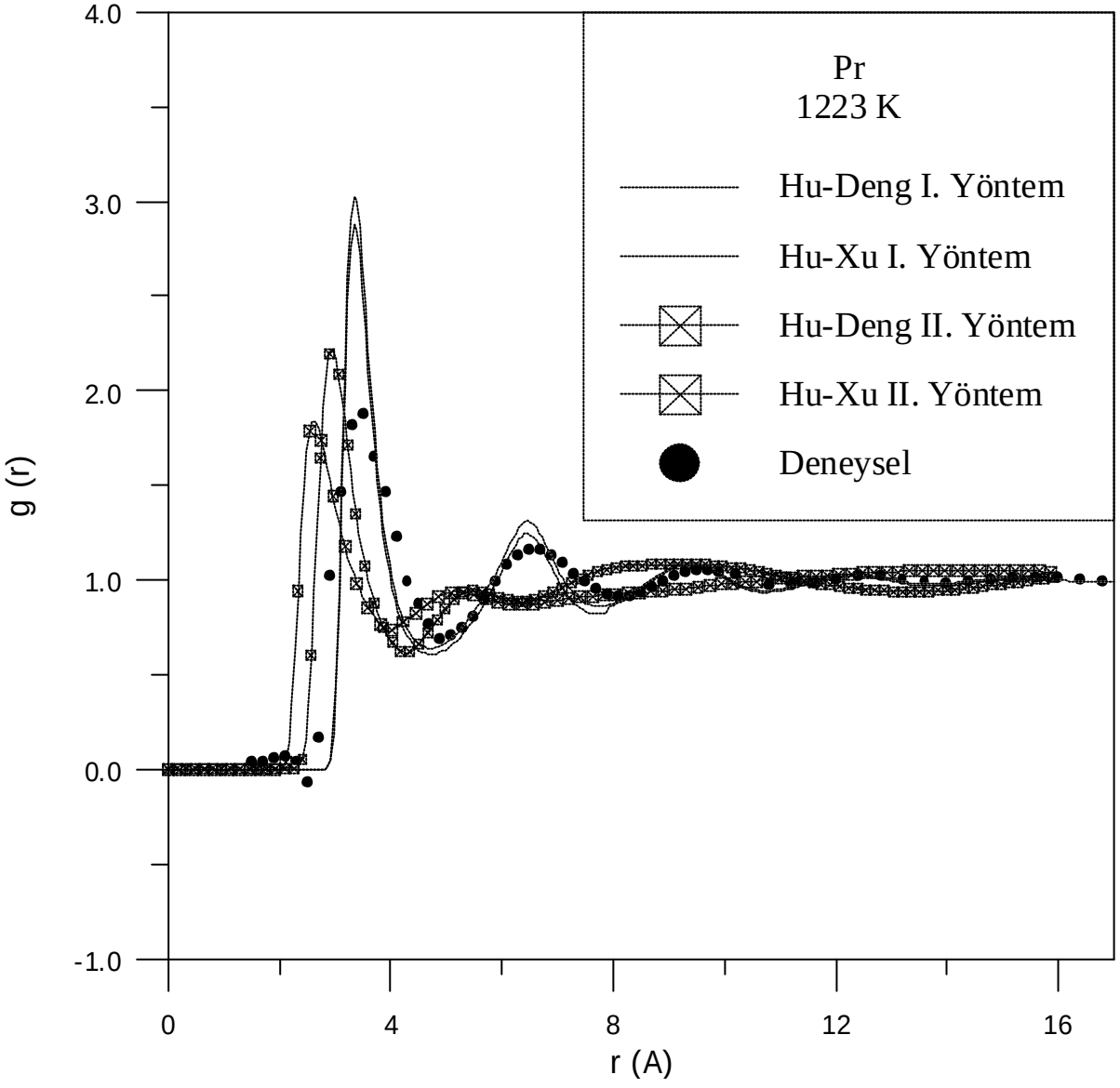

Sekil 5.64: Sivi Y için g(r) çiftler dagilim fonksiyonu



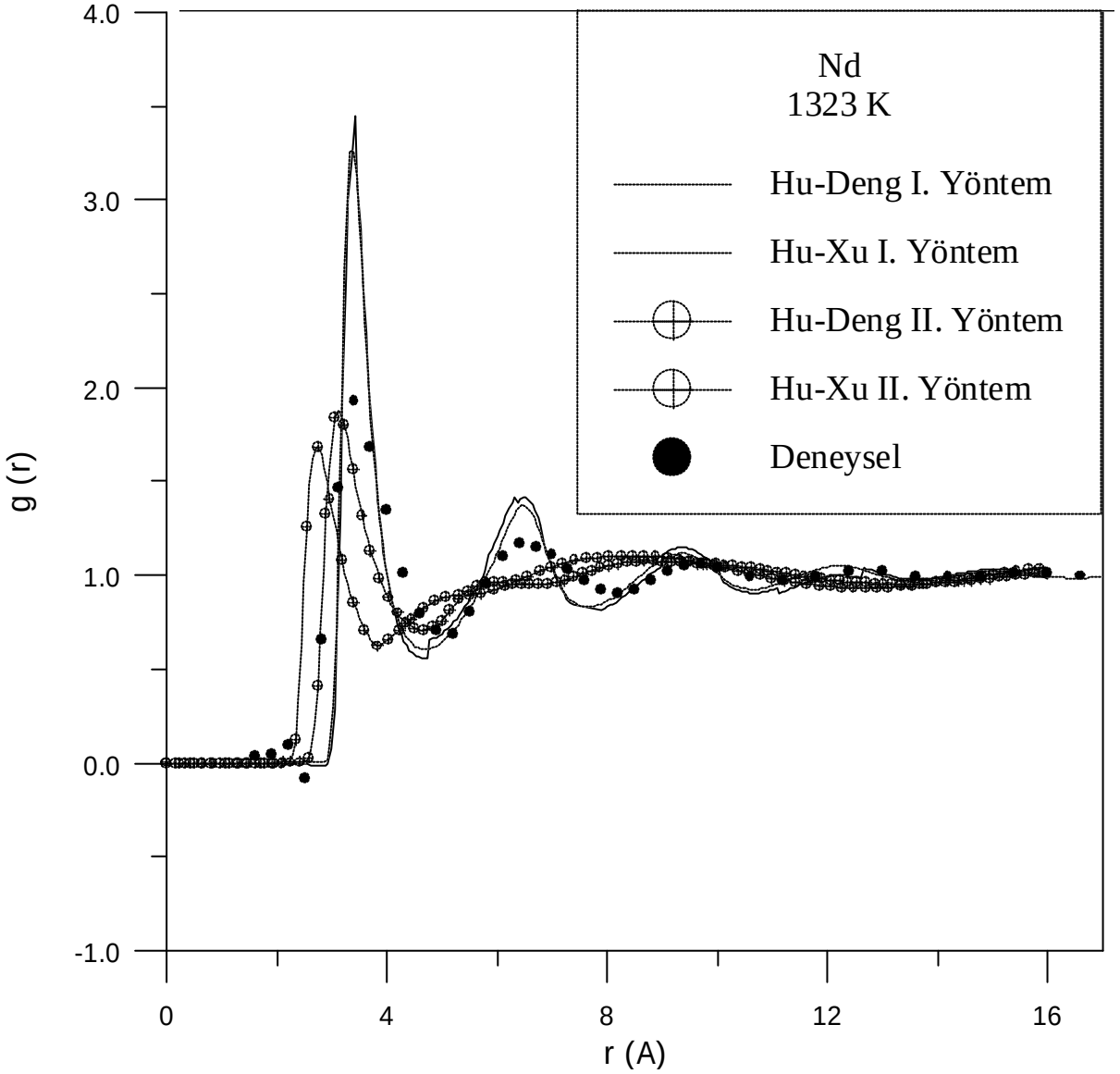

Sekil 5.65: Sivi Zr için g(r) çiftler dagilim fonksiyonu



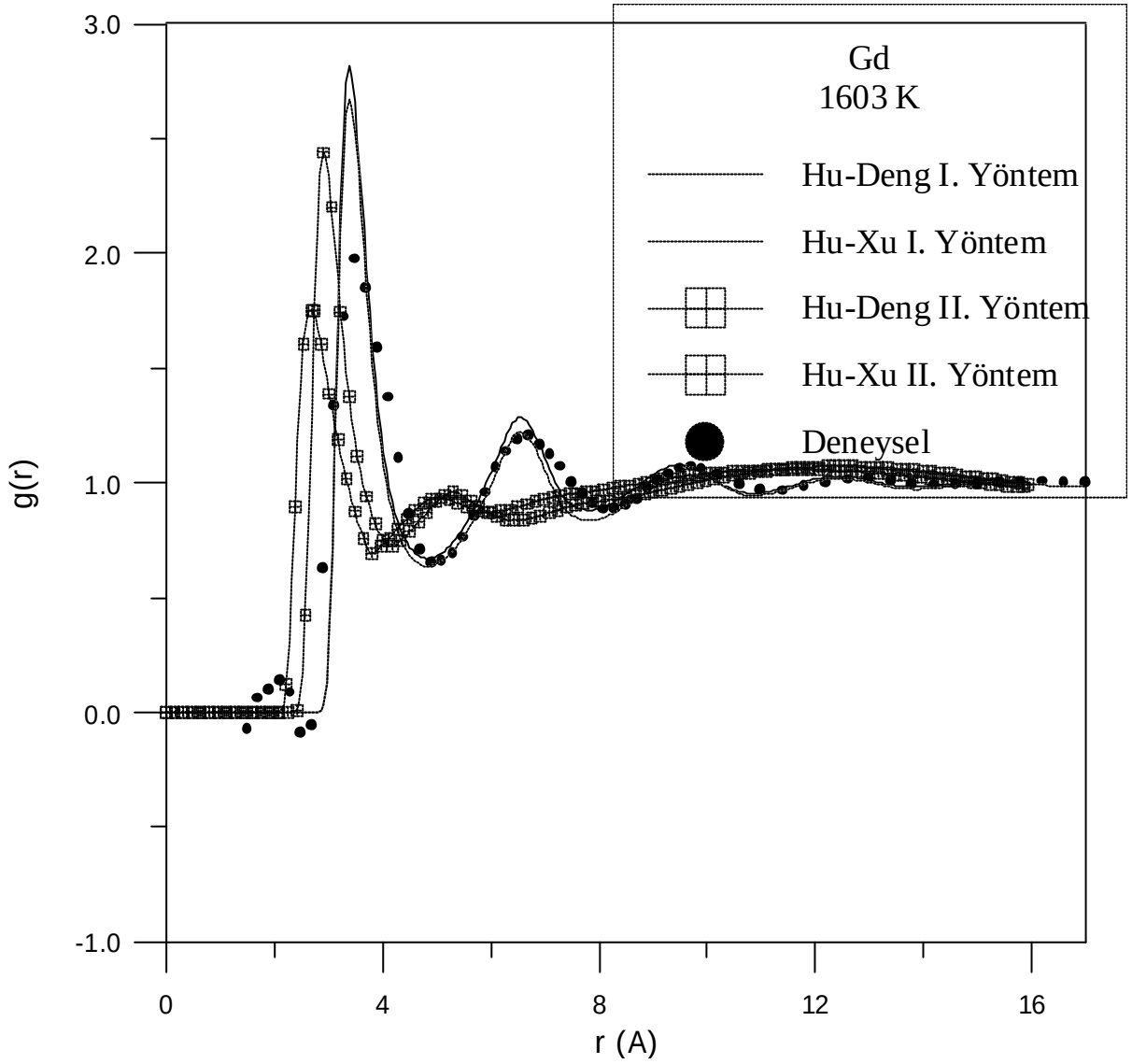

Sekil 5.66: Sivi La için g(r) çiftler dagilim fonksiyonu



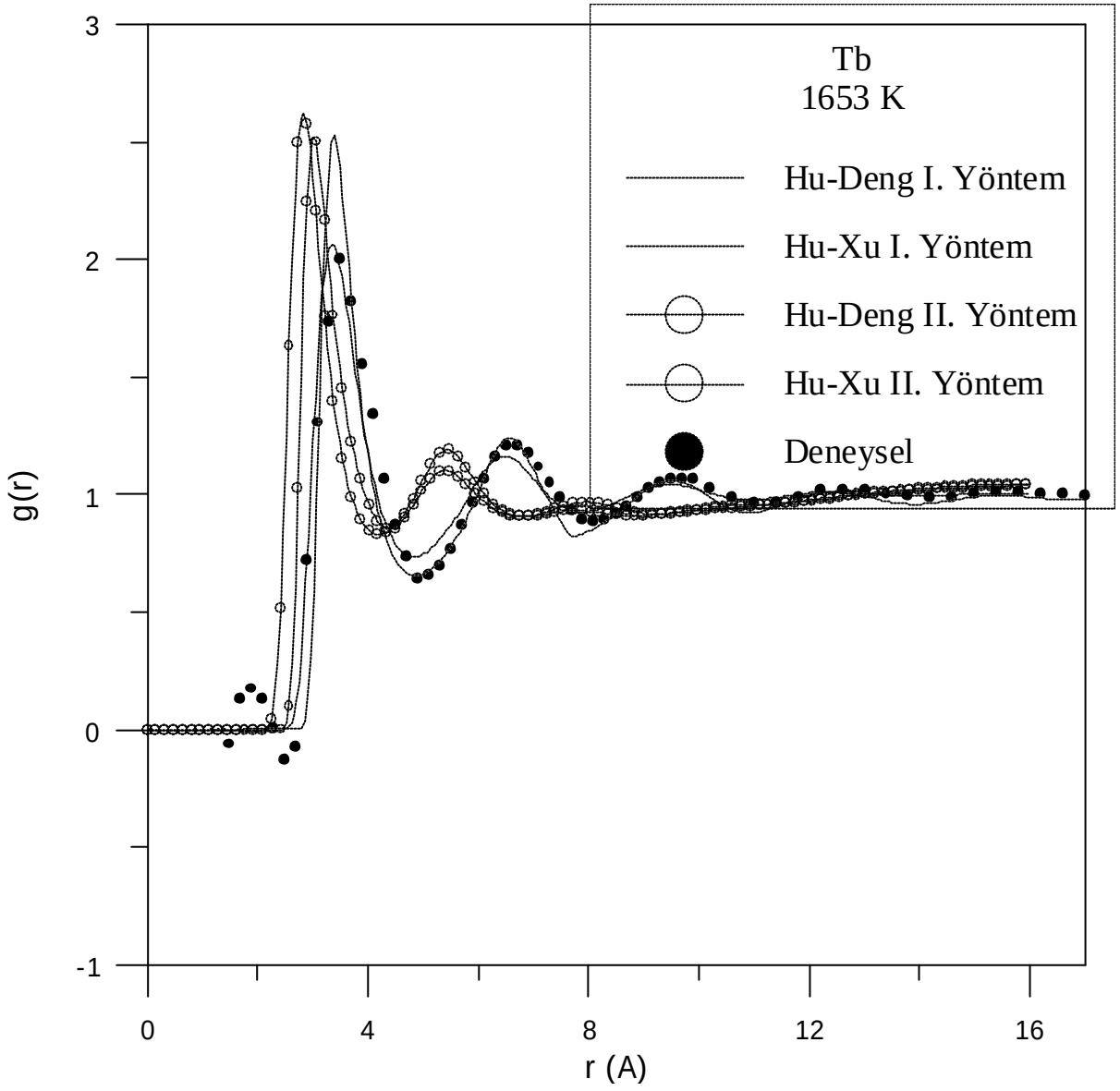

Sekil 5.67: Sivi Pr için g(r) çiftler dagilim fonksiyonu



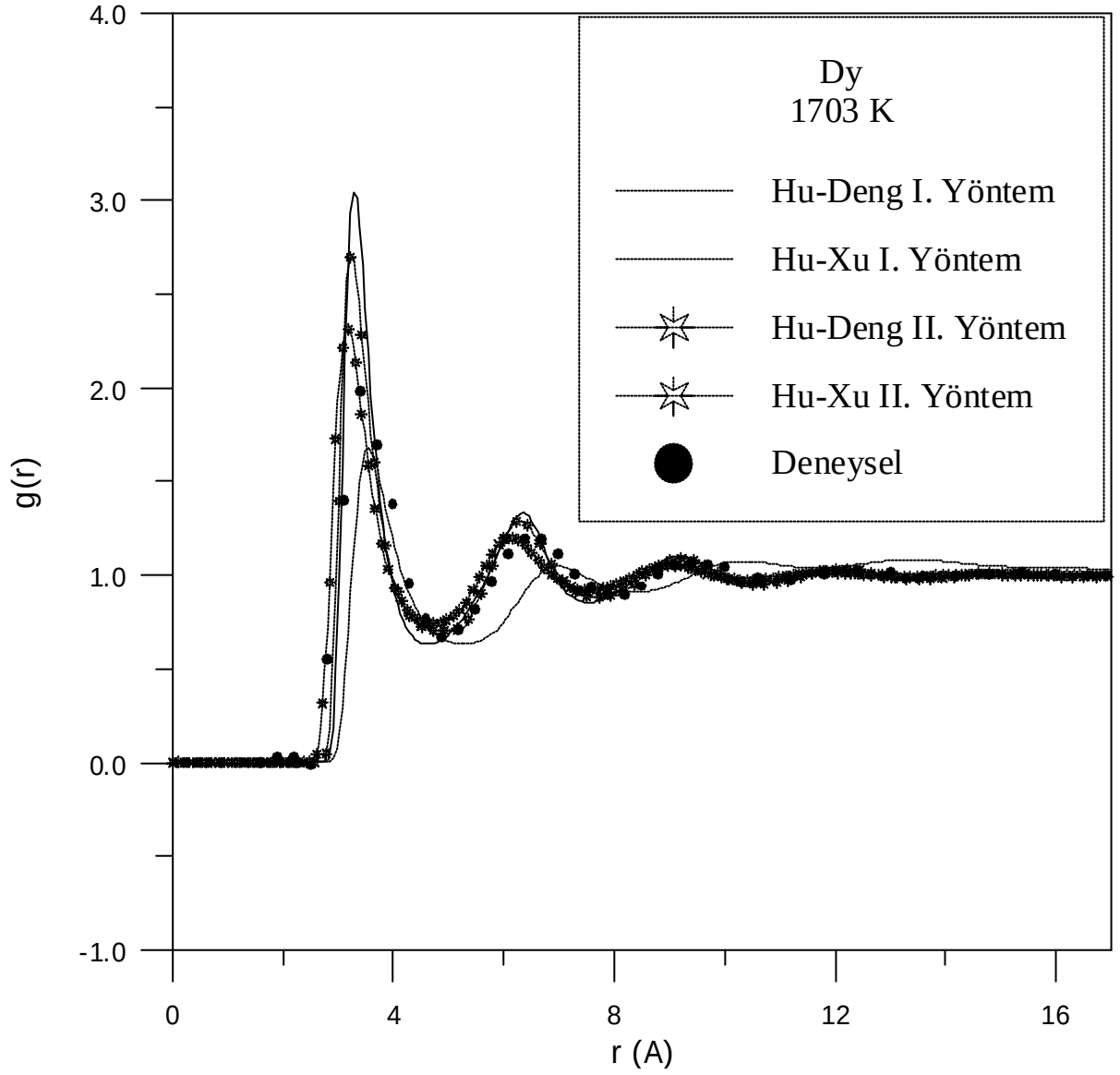

Sekil 5.68: Sivi Nd için g(r) çiftler dagilim fonksiyonu



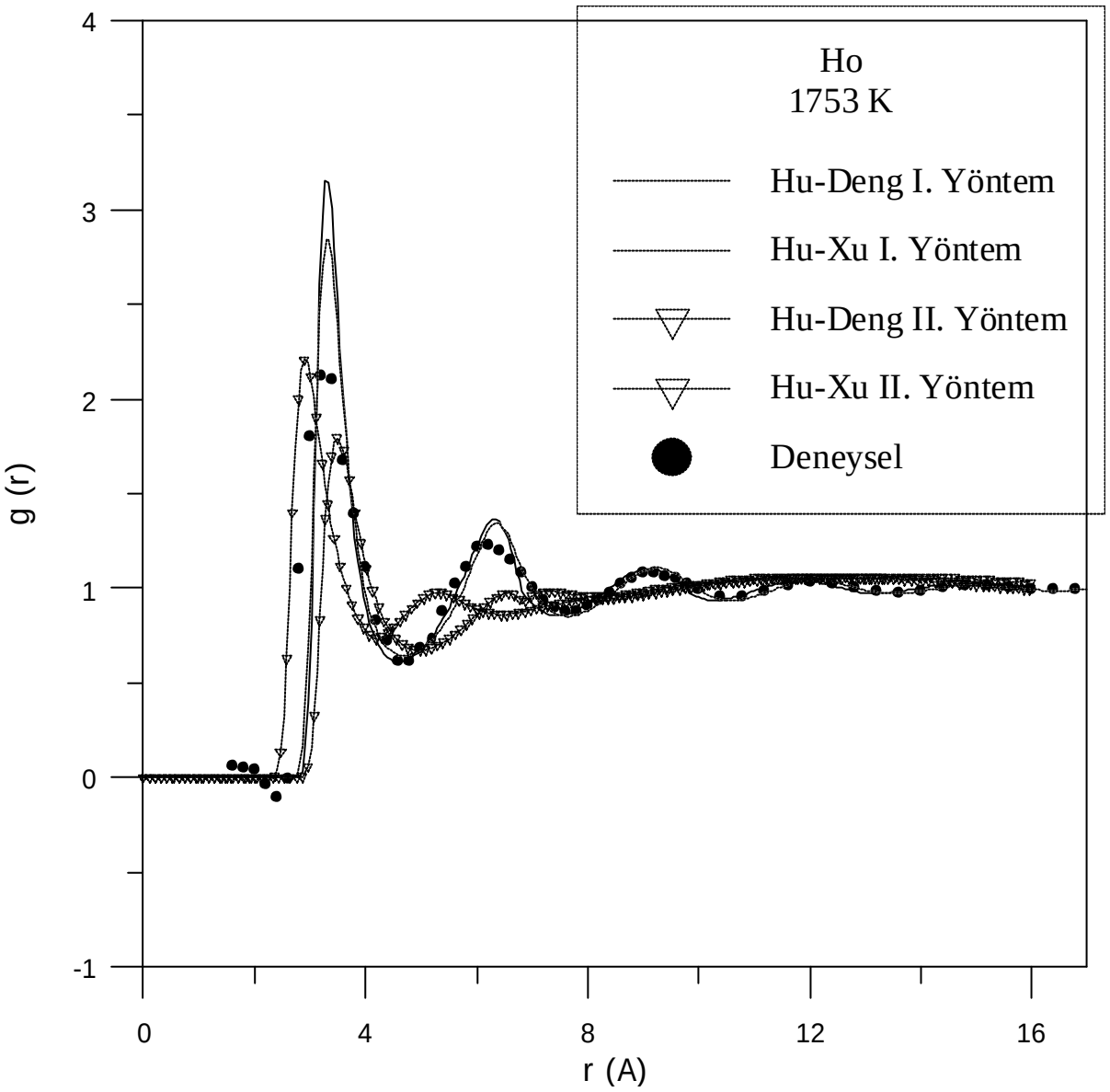

Sekil 5.69: Sivi Gd için g(r) çiftler dagilim fonksiyonu



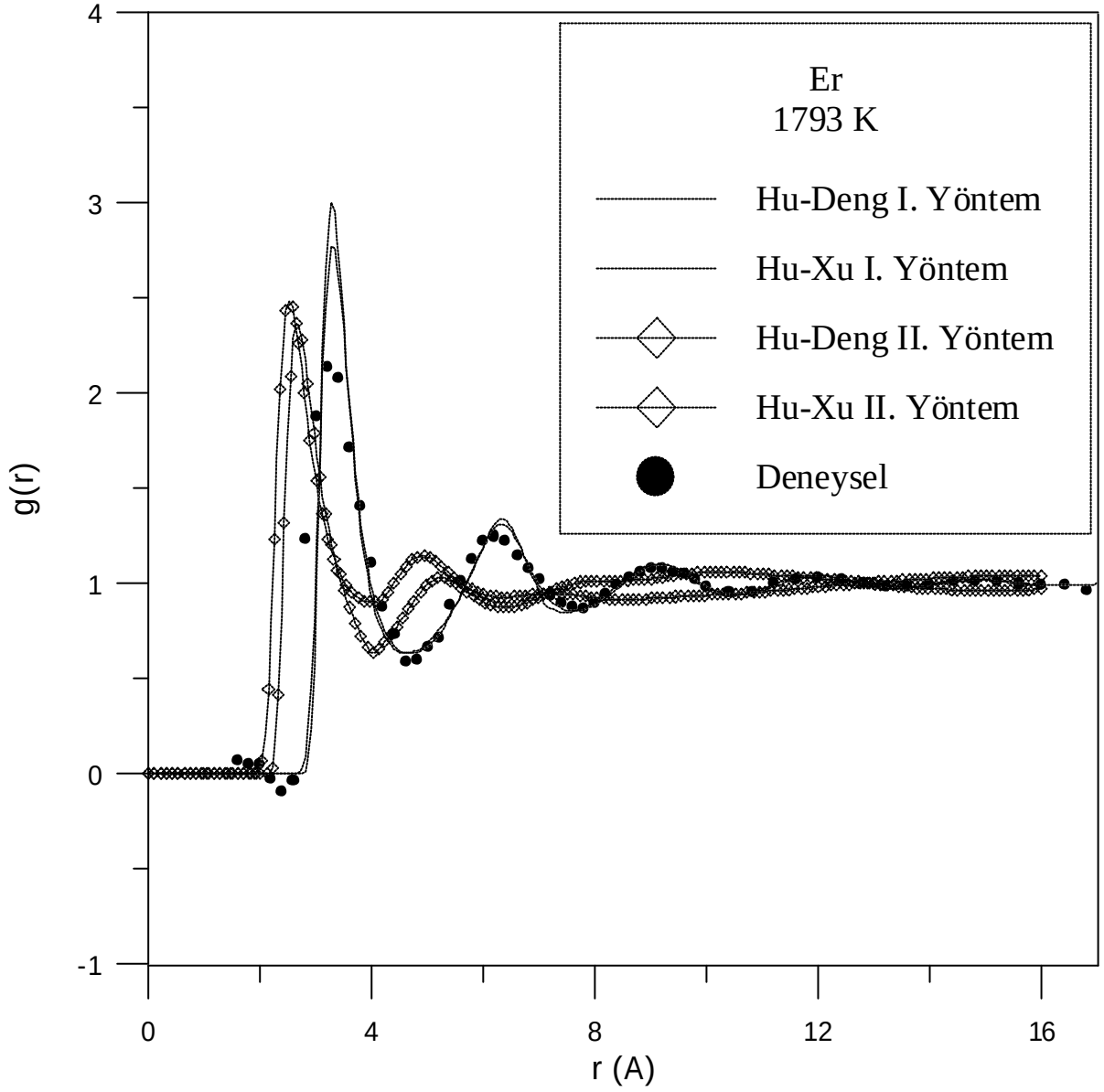

Sekil 5.70: Sivi Tb için g(r) çiftler dagilim fonksiyonu




Sekil 5.71: Sivi Dy için g(r) çiftler dagilim fonksiyonu




Sekil 5.72: Sivi Ho için g(r) çiftler dagilim fonksiyonu




Sekil 5.73: Sivi Er için g(r) çiftler dagilim fonksiyonu

## 5.6 Sonuç

Bu çalismada sivi hcp metallerinin hem katihal hem de sivihal özellikleri kullanilarak hem yapi hem de termodinamik özellikleri dogru veren çiftler potansiyelini elde edebilme yöntemleri denenmis; Mg, Be, Zr, Y, Co, Sc, Ti, La, Tb, Dy, Ho, Er, Gd, Nd ve Pr metalleri ile GAM, AGAM ve ADGAM fonksiyonlari ve hal denklemleri ile çalisilmistir. Bu tezde sivilar için öne sürülen parametrizasyon ile basarili sonuçlar elde edilmistir. Tb, Dy,Ho ve Er için ergime noktasi civarindaki yapisal özellikleri en iyi veren yöntemin Hu-Deng potansiyel fonksiyonlari hal denklemi parametrizasyonu ile Finnis – Sinclair etkin çiftler potansiyel yaklasimi kullanilarak hesaplanan etkin çiftler potansiyeli ile elde edilen VMHNC sonuçlarinin oldugu tespit edilmistir. Genel olarak hcp metalleri ele alinacak olur ise ADGAM etkin çiftler potansiyelleri ile VMHNC sonuçlarinin deneysel degerlere daha yakin oldugu görülür. Zr, Ti sistemleri için Chen-Xu GAM etkin çiftler potansiyelleri ile VMHNC sonuçlarinin deneysel deger ile uyumlu oldugu elde edilmistir. Termodinamik özellikler olarak, Hu-Deng ADGAM+VMHNC ile hesaplanan iç enerji, serbestlik enerjisi ve entropi deneysel deger ile Bhuiyan'in GAM modelleri ile elde ettigi sonuçlara en yakin oldugu gözlenmistir.

## KAYNAKLAR


Ackland G.J., Philos. Mag. A 66: 917, (1992)

Ackland G.J., Wooding S.J., Bacon D.J., Philos. Mag. A 71: 553, (1995)

Bacon D.J., J. Nucl. Mater. 159:176, (1988)

Bacon D.J., J. Nucl. Mater. 249: 206, (1993)

Barrett C S and Massalski T B (eds) 1980 Structure of Metals 3 rd edn, (New York: Pergamon) p 629

Baskes M. I., Phys. Rev. Lett. 59, 2666, (1987)

Baskes M. I., Nelson J. S. and Wright A. F., Phys. Rev.B, 40, 6085, (1989)

Baskes M. I., Phys. Rew. B, 46, 2727, (1991)

Baskes M I and Johnson R A 1994 Mod Simul. Mater. Sci. Eng 2 147

Baskes M. I., Johnson R.A., Model. Simul. Mater. Sci. Eng. 2, 147,(1994)

Bhuiyan G. M., Khaleque M.A., J. Non-Cryst Solids 226, 175, (1998)

Chen S., Xu J., Zhang H., *Compt. Mater. Sci.* 29, 428, (2004)

Dalgiç S., Gonzalez L. E., Gonzalez D. J. ve Silbert M. *J. Non-Cryst Solids,* 906 :205-207, 1996.

Dalgiç S. S. ve Kalayci S. Sivi nadir toprak metalleri için çok cisimli analitik düzenlenmis gömülü atom potansiyelleri, 21. Uluslararasi Türk Fizik Dernegi Özetler Kitabi, 2004, Bodrum

Dalgiç S. S. ve Kalayci S. Structure of Liquid Rare-Earth Metals using an Analytic Embedded Atom Method, 7. *Ulusal Sivihal Fizigi Sempozyumu,* Özetler kitabi Sf. 14, 2003, Istanbul

Dalgiç S.S., Dalgiç S., Sengül S., Celtek M., Tezgör G., J. Opt. And Adv. Mater. 3, (4) 831, (2001)

Dalgiç S. S., Dalgiç S., Dömekeli U., J. Opt. And Adv. Mater.5, (5) 1263, 20, (2003)

Daw M. S., *Phys. Rev. B 3*9, 7441, (1989)

Daw M. S. ve Baskes M. I. *Phys. Rev. Lett*. 50: 1285, 1983.

Daw M. S. ve Baskes M. I. *Phys. Rev. B* 29: 6443, 1984.

Dömekeli Ü. Yüksek Lisans Tezi, T. Ü. Fen Bilimleri Ens., Edirne, 2003.

Finnis M. W. ve Sinclair J. E. *Phil. Mag. A* 50: 45,1984.

Fischer I.Z. Statistical theory of liquids, Chicago, 1964

Foiles S. M. ve Baskes M. I. *Mater. Sci. Rep* 9: 251, 1993.

Foiles S. M. ve Baskes M. I. ve Daw M. S. *Phys. Rev. B* 33: 7983, 1986.

Goldstein A.S., Joonsson H., Phil. Mag. B 71, 176, (1995)

Gonzalez L. E., Gonzalez D. J. ve Silbert M. *Phys. Rev. A* 45: 3803, 1992.

Hansen J. P. ve McDonald I. R. Theory of Simple Liquids, Academic Press, New York, 1986.

Hu W., Xu H., Shu X., Yuan X., Gao B. and Zhang B.,J. Phys. D: Appl. Phys. 33, 711 (2000)

Hu W., Zhang B., Huang B., Gao F., Bacon D.J., J. Phys.: Cond. Matt. 13: 1193, (2001)

Hu W., Fukumoto M., Modelling Simul. Mater. Sci. Eng. 10: 707, (2002)

Hu W., Deng H., Yuan X., Fukumoto M., Eur. Phys. J. B 34: 429, (2003)

Hutgren R. Selected Values of Thermodynamic Properties of Elements, American Society for Metals, Ohio, 1973.

Igarashi M, Kanta k and Vitek V 1991 Phil. Mag. B 63 603

Johnson R.A., Philos. Mag. A 63: 865, (1991)

Johnson R.A., Oh D.J., J. Mater. Res. 4: 1195, (1989)

Johnson R. A. *Phys. Rev. B* 6: 2094, 1972.

Johnson R. A. *Phys. Rev.B 37,3924, (1988)*

Johnson R. A. in Many Atom Interactions, Proceedings in Physics, 48, Springer - Verlag, Berlin, 1990.

Kittel C. Introduction to Solid State Physics, 4. Baski, Wiley, New York, 1971.

Moruzzi N. L., Janak J. F. ve Williams A. R. Calculated Electronic Properties of Metals, Pergoman, New York, 1978.

Oh D.J., Johnson R.A., J. Mater. Res. 3: 471, (1988)

Pasianot R.,Farkas D., Savino E. J., Phys. Rev. B, 43, 6952, (1991)

Pasianot R, Savino E. J., Phys. Rev. B, 45, 22, (1992)

Pasianot R, Savino E. J., Phys. Stat. Sol.(B), 176, (1993)

Percus J. K. Ve Yevick G. J. *Phys. Rev.* 110: 1, 1958.

Rose J. H., Smith J. R., Guinea F. ve Ferrante J. *Phys. Rev. B* 29: 2963, 1984.

Rose J. H., Ferrante J. ve Smith J. R. *Phys. Rev. Lett.* 47: 675, 1981.

Rosenfeld Y. *J. Stat. Phys.* 42: 437, 1986.

Savino J.,Rao S., Pasianot R., Atomic Scale Calculations in materials Science, Material Research society, p. 43, Baston, (1988)

Simmons G. ve Wang H. Single Crystal Elastic Constants and Calculated Aggregate Properties, a Handbook, 2. Baski, MIT Press, Cambridge, Mass., 1971.

Voter A. F. Intermetallic Compounds, John Wiley ve Sons, 1, 4, New York, 1994.

Waseda Y. The Structure of Non - Crystalline Materials, McGraw - Hill Publ. Co., New York, 1980.

Zerah G., *J. Comput. Phys.* 61: 280, 1985.

Zhang B., Quyang Y.,Z. Phys. B 92, 431-435, (1993)

# ÖZGEÇMIS

1976 yilinda Karahalli'da dogdu. Ilkögrenimini Zonguldak Inagzi Ilkögretim Okulun'da orta ögrenimini Erzincan Merkez Ilkögretim Okulun' da, Lise ögrenimini ise Edirne Lisesi' nde tamamladi. Eylül 1994' te Trakya Üniversitesi Fen – Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümü' nde basladigi Fizik lisans egitimini Temmuz 1998' de tamamladi. Eylül 2002 tarihinde yüksek lisans egitimime basladi. Haziran 2004'ten beri Edirne Kültür Dershanesi'nde fen bilgisi ve fizik ögretmenligi yapmaktadir.