GÖMÜLÜ ATOM METODU İLE SIVI BCC GEÇİŞ METALLERİNİN ATOMLARARASI ETKİLEŞME POTANSİYELLERİ, SIVI YAPILARI VE TERMODİNAMİK ÖZELLİKLERİ

HAMİYET KARAGÜLLE

YÜKSEK LİSANS TEZİ

FİZİK ANABİLİM DALI

Tez Yöneticisi: Yrd.Doç.Dr. Gülsen TEZGÖR

EDİRNE - 2005

T.C.
TRAKYA ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

GÖMÜLÜ ATOM METODU İLE SIVI BCC GEÇİŞ METALLERİNİN ATOMLARARASI ETKİLEŞME POTANSİYELLERİ, SIVI YAPILARI VE TERMODİNAMİK ÖZELLİKLERİ

HAMİYET KARAGÜLLE

YÜKSEKLİSANS TEZİ
FİZİK ANABİLİM DALI

Tez Yöneticisi : Yrd.Doç.Dr. Gülsen TEZGÖR

EDİRNE – 2005

T.C.
TRAKYA ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

GÖMÜLÜ ATOM METODU İLE SIVI BCC GEÇİŞ METALLERİNİN ATOMLARARASI ETKİLEŞME POTANSİYELLERİ, SIVI YAPILARI VE TERMODİNAMİK ÖZELLİKLERİ

Hamiyet KARAGÜLLE

YÜKSEK LİSANS TEZİ
FİZİK ANABİLİM DALI

Bu Tez 29.08.2005 tarihinde Aşağıdaki Jüri Tarafından Kabul Edilmiştir.

…….	……	…..……..
Yrd. Doç.Dr. Gülsen Tezgör	Prof. Dr. Serap DALGIÇ	Yrd. Doç. Dr. Nurşen SUÇSUZ
Danışman	Üye	Üye

ÖZET

Bu çalışmada, sıvı bcc geçiş metallerinin yapısal ve termodinamik özelliklerini doğru olarak açıklayabilen atomlar arası etkin çiftler potansiyellerinin, Analitik Gömülü Atom Metodu ve Analitik yeniden Düzenlenmiş Gömülü Atom Metodu kullanılarak elde edilmesi amaçlanmıştır. Bu amaçla literatürde katı - hal özelliklerine fit edilerek parametrize edilen Zhang-Jin Analitik Yeniden Düzenlenmiş Gömülü Atom Metodu (AYDGAM), Hu-Zhang Analitik Gömülü Atom Metodu (AGAM) ve Fang-Zhu Yeniden Düzenlenmiş Analitik Gömülü Atom Metod (YDAGAM)'ları ile çalışılmıştır. S. S. Dalgıç vd. tarafından fcc sıvı geçiş metallerinin Gömülü Atom Metodu hesaplamaları için önerilmiş olan parametrizasyon metodu V, Cr, Fe, Nb, Mo, Ta ve W gibi bazı bcc metallerine uygulanmıştır. Zhang-Jin AYDGAM, Hu-Zhang AGAM ve Fang-Zhu YDAGAM potansiyel fonksiyonları önerilen parametrizasyon metodu kullanılarak hesaplanmıştır.

Ayrıca İkili Karıştırılamaz fcc Alaşım Sistemleri için öne sürülen YDAGAM modellerinden Fang-Deng ve Fang-Zhu YDAGAM ele alınmış ve $Al_{50}Pb_{50}$, $Ag_{50}Cu_{50}$ ve $Ag_{50}Ni_{50}$ kompozisyonlarındaki sıvı alaşım sistemleri ile çalışılmıştır. Bu ikili Karıştırılamaz fcc alaşım sistemlerindeki kısmi iyonlar arası potansiyeller hesaplanmıştır.

Atomlar - arası etkin çiftler etkileşme potansiyelleri sıvı yapısına, sıvı yapı teorilerinden Varyasyonel Hypernetted Chain integral denklem yaklaşımı (VMHNC) ile bağlanmaktadır. İncelenen tek bileşenli sistemlerin ergime noktaları civarındaki statik yapı faktörleri S(q) ve çiftler dağılım fonksiyonları g(r) hesaplanmış ve deneysel sonuçlar ile karşılaştırılmıştır. Elde edilen özellikler kullanılarak sıvı bcc geçiş metallerinin termodinamik özelliklerinden iç enerjileri hesaplanmıştır. İkili karıştırılamaz fcc alaşım sistemlerininde kısmi yapı faktörleri, kısmi çiftler dağılım fonksiyonları hesaplanmıştır.

SUMMARY

In the present work, it is aimed to obtain the interatomic efective pair potantials, which can succesfully explain the structural and ther the modynamic properties of liquid bcc transition metals, by using Analytic Embedded Atoms Method and Analytically Modified Embedded Atoms Method. For this purpose it has been studied with in Zhang-Jin Analytically Modified Embedded Atom Method (AMEAM), Hu-Zhang Analytically Embedded Atom Method (AEAM) and Fang-Zhu Modified Analytically Embedded Atom Method (MAEAM).

The parametrization method, proposed by S. S. Dalgıc and co-workers for the embedded atom calculations of fcc liquid metals, is applied to V, Fe, Cr, Nb, Mo, Ta and W bcc metals. The potential functions of Zhang-Jin AMEAM, Hu-Zhang AEAM and Fang-Zhu MAEAM are computed with the proposed parametrization method.

On the other hand, the MAEAM models, proposed by Fang-Deng and Fang-Zhu for the immiscible alloys have been studied and applied to liquid binary alloys, with $Al_{50}Pb_{50}$, $Ag_{50}Cu_{50}$ and $Ag_{50}Ni_{50}$ compositions. The partial interionic effective pair potentials for these systems have been calculated.

Interatomic effective pair interaction potential is related to liquid structure by Variational Hypernetted Chein integral equation approach whish is one of the liquid structure theories. The static structute factors and pair distribution functions for the investigated pure systems have been calculated near their melting points and compared with experimental data. The computed structural functions have been used in order to calculate one of the thermodynamic properties such as internal energy. The partial structure factors and partial distribution functions of the investigated fcc immiscible alloys have been also calculated.

TEŞEKKÜR

Bana bu çalışma ortamını sağlayan, danışmanlığımı üstlenen ve çalışmamın her adımında bilgilerinden yararlandığım sayın hocam Prof. Dr. Serap DALGIÇ' a ve Yrd. Doç. Dr. Gülsen TEZGÖR' e teşekkürlerimi sunarım.

Çalışmanın yapıldığı T.Ü. Fen – Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümü Başkanı Prof. Dr. S. Askeri BARAN' a, yardımlarından dolayı Yrd. Doç. Dr. Seyfettin DALGIÇ' a, Arş. Gör. Sedat ŞENGÜL' e, Arş. Gör. Ünal DÖMEKELİ' ye ve tüm arkadaşlarıma teşekkür ederim.

Son olarak, bu çalışma boyunca desteğini hiç eksik etmeyen aileme sonsuz teşekkür ederim.

İÇİNDEKİLER

ÖZET.....*i*
SUMMARY.....*ii*
TEŞEKKÜR.....*iii*
TABLOLARIN LİSTESİ.....*iv*
ŞEKİLLERİN LİSTESİ.....*v*
1 GİRİŞ.....1
2 BCC METALLER İÇİN GÖMÜLÜ ATOM METODLARI (GAM) VE ETKİN ÇİFTLER POTANSİYELİ……..……...4
2.1 Zhang-Jin Analitik Yeniden Düzenlenmiş Gömülü Atom Metodu (ZJ-AYDGAM)……..4
2.2 Hu-Zhang Analitik Gömülü Atom Metodu (HZ-AGAM)……...10
2.3 Fang-Zhu Yeniden Düzenlenmiş Analitik Gömülü Atom Metodu (FZ-YDAGAM)…….……...14
2.4 ZJ -AYDGAM Etkin Çiftler Potansiyel Yaklaşımı…….17
2.5 HZ -AGAM Etkin Çiftler Potansiyel Yaklaşımı…….19
2.6 FZ-YDAGAM Etkin Çiftler Potansiyel Yaklaşımı…….20
2.7 Çiftler Potansiyelinin parametrizasyonu……..21
3 İKİLİ KARIŞTIRILAMAZ FCC ALAŞIM SİSTEMLERİ İÇİN YDAGAM MODELLERİ VE ALAŞIM ÇİFTLER POTANSİYELLERİ……..23

3.1 Fang-Deng İkili Karıştırılamaz fcc Alaşım Sistemleri İçin YDAGAM Modeli……...24
3.2 FZ-YDAGAM İkili Karıştırılamaz fcc Alaşım Sistemleri İçin YDAGAM Modeli……...26
3.3 İkili Karıştırılamaz Alaşım Sistemleri İçin YDAGAM Effektif Potansiyel Yaklaşımı……...29
4 SIVILARIN YAPISI VE TERMODİNAMİK BÜYÜKLÜKLER……32
4.1 Varyasyonel Yeniden Düzenlenmiş Hypernetted Chain (VMHNC)İntegral Denklem Yaklaşımı……...36
4.2 Termodinamik Büyüklükler…….38
5 SONUÇLAR VE TARTIŞMA……41
5.1 Sıvı bcc Geçiş Metallerinin Atomlararası Çiftler Potansiyelleri……41
5.1.1 ZJ-AYDGAM Etkin Çiftler Potansiyel Yaklaşımı……42
5.1.2 HZ-AGAM Etkin Çiftler Potansiyel Yaklaşımı……58
5.1.3 FZ-YDAGAM Etkin Çiftler Potansiyel Yaklaşımı……...69
5.2 Sıvı bcc Geçiş Metallerinin Yapısı……..……..79
5.3 Sıvı Geçiş Metallerinin İç Enerjisi……...102
5.4 İkili Karıştırılamaz fcc Alaşım Sistemlerinin Atomlararası Çiftler Potansiyelleri……104
5.5 İkili Karıştırılamaz fcc Alaşım Sistemlerinin Yapısı……..111
5.6 Sonuç……119
KAYNAKLAR……120
ÖZGEÇMİŞ

TABLOLARIN LİSTESİ

Tablo 2.1. BCC geçiş metalleri için ZJ-AYDGAM modeli giriş parametreleri..9
Tablo 2.2. BCC geçiş metalleri için ZJ-AYDGAM model parametreleri……..9
Tablo 2.3. BCC geçiş metalleri için HZ-AGAM modeli giriş parametreleri.....13
Tablo 2.4. BCC geçiş metalleri için HZ-AGAM modeli giriş parametreleri….14
Tablo 2.5. BCC geçiş metalleri için FZ-YDAGAM modeli giriş parametreleri..16
Tablo 2.6. BCC geçiş metalleri için FZ-YDAGAM model parametreleri…….17
Tablo 3.1. Al ve Pb metalleri için Fang-Deng YDAGAM modeli giriş parametreleri……26
Tablo 3.2. Al ve Pb metalleri için Fang-Deng YDAGAM model parametreleri……26
Tablo 3.3.FCC metalleri için FZ-YDAGAM modeli giriş parametreleri……..28
Tablo 3.4 FCC metalleri için FZ-YDAGAM model parametreleri…..……..29
Tablo 5.1. Bazı BCC geçiş metalleri için YDAGAM potansiyel fonksiyonlarının parametrizasyonunda kullanılan giriş parametreleri…….....42
Tablo 5.2. Bazı BCC geçiş metalleri için ZJ- AYDGAM potansiyel parametreleri…….……43
Tablo 5.3. Bazı BCC geçiş metalleri için HZ-AGAM potansiyel parametreleri…….……...58

Tablo 5.4. Bazı BCC geçiş metalleri için FZ-YDAGAM potansiyel parametreleri……69
Tablo 5.5. ZJ–AYDGAM, HZ – DGAM ve FZ–YDAGAM etkin çiftler potansiyelleri ve VMHNC integral teorisi kullanılarak elde edilen iç enerji değerleri…….……..……..102
Tablo 5.6. Bazı İkili karıştırılamaz alaşım sistemleri için YDAGAM potansiyel fonksiyonlarının parametrizasyonunda kullanılan giriş parametreleri…..……..104
Tablo 5.7. Fang-Deng-YDAGAM modeli ile hesaplanan Al-Pb alaşım sistemi için sıvı Al ve Pb metallerinin saf durumdaki potansiyel parametreleri……..……...105
Tablo 5.8. FZ-YDAGAM modeli ile hesaplanan Ag-Ni ve Ag-Cu alaşım sistemi için sıvı Ag , Cu ve Ni metallerinin saf durumdaki potansiyel parametreleri…...……..107
Tablo 5.9. $Al_{50}Pb_{50}$ alaşımı için termodinamik durum parametreleri……..111
Tablo 5.10. $Ag_{50}Cu_{50}$ alaşımı için termodinamik durum parametreleri……...111
Tablo 5.11. $Ag_{50}Ni_{50}$ alaşımı için termodinamik durum parametreleri……111

ŞEKİLLERİN LİSTESİ

Şekil 5.1. Sıvı V, Cr ve Fe metalleri için ZJ-AYDGAM sıvı parametreleri kullanılarak elde edilen potansiyel fonksiyonu ……..45
Şekil 5.2. Sıvı Nb, Mo, Ta ve Mo metalleri için ZJ- AYDGAM sıvı parametreleri kullanılarak elde edilen potansiyel fonksiyonu……..46
Şekil 5.3. Sıvı V, Cr ve Fe metalleri için ZJ-AYDGAM sıvı parametreleri kullanılarak elde edilen gömme enerjisi fonksiyonu……47
Şekil 5.4. Sıvı Nb, Mo, Ta ve W metalleri için ZJ-AYDGAM sıvı parametreleri kullanılarak elde edilen gömme enerjisi fonksiyonu……..48
Şekil 5.5. V için ZJ-AYDGAM kullanılarak elde edilen etkin çiftler potansiyel fonksiyonu……...49
Şekil 5.6. Cr için ZJ-AYDGAM kullanılarak elde edilen etkin çiftler potansiyel fonksiyonu……...50
Şekil 5.7. Fe için ZJ-AYDGAM kullanılarak elde edilen etkin çiftler potansiyel fonksiyonu……..51
Şekil 5.8. Nb için ZJ-AYDGAM kullanılarak elde edilen etkin çiftler potansiyel fonksiyonu……..52
Şekil 5.9. Mo için ZJ-AYDGAM kullanılarak elde edilen etkin çiftler potansiyel fonksiyonu……..53

Şekil 5.10. Ta için ZJ-AYDGAM kullanılarak elde edilen etkin çiftler potansiyel fonksiyonu……..54
Şekil 5.11. W için ZJ-AYDGAM kullanılarak elde edilen etkin çiftler potansiyel fonksiyonu…..……...……55
Şekil 5.12. Sıvı V, Cr ve Fe metalleri için ZJ-AYDGAM kullanılarak elde edilen etkin çiftler potansiyel fonksiyonu……...56
Şekil 5.13. Sıvı Nb, Mo, Ta ve W metalleri için ZJ-AYDGAM kullanılarak elde edilen etkin çiftler potansiyel fonksiyonu…..…..57
Şekil 5.14. Sıvı V,Cr ve Fe metalleri için HZ-AGAM kullanılarak elde edilen potansiyel fonksiyonu……..…….60
Şekil 5.15. Sıvı Nb, Mo, Ta ve W metalleri için HZ-AGAM kullanılarak elde edilen potansiyel fonksiyonu……...61
Şekil 5.16. Sıvı V,Cr ve Fe için HZ-AGAM kullanılarak elde edilen gömme enerjisi fonksiyonu…….……..…62
Şekil 5.17. Sıvı Nb, Mo, Ta ve W metalleri için HZ-AGAM kullanılarak elde edilen gömme enerjisi fonksiyonu……...63
Şekil 5.18. V için HZ-AGAM kullanılarak elde edilen efektif çiftler potansiyel fonksiyonu……....64
Şekil 5.19. Cr için HZ-AGAM kullanılarak elde edilen efektif çiftler potansiyel fonksiyonu…….65
Şekil 5.20. Fe için HZ-AGAM kullanılarak elde edilen efektif çiftler potansiyel fonksiyonu……..……66
Şekil 5.21. Sıvı V, Cr ve Fe metalleri için HZ-AGAM kullanılarak elde edilen efektif çiftler potansiyel fonksiyonu……....67
Şekil 5.22. Sıvı Nb, Mo, Ta ve W metalleri için HZ-AGAM kullanılarak elde edilen efektif çiftler potansiyel fonksiyonu ……....68

Şekil 5.23. Sıvı Fe, Ta ve W için FZ-YDAGAM kullanılarak elde edilen potansiyel fonksiyonu……71
Şekil 5.24. Sıvı Fe, Ta ve W için FZ-YDAGAM kullanılarak elde edilen gömme enerjisi fonksiyonu……..…72
Şekil 5.25. Fe için FZ-YDAGAM kullanılarak elde edilen efektif çiftler potansiyel fonksiyonu …….…...73
Şekil 5.26. Ta için FZ-YDAGAM kullanılarak elde edilen efektif çiftler potansiyel fonksiyonu ……...74
Şekil 5.27. W için FZ-YDAGAM kullanılarak elde edilen efektif çiftler potansiyel fonksiyonu……75
Şekil 5.28. Sıvı Fe, Ta ve W için FZ-YDAGAM kullanılarak elde edilen efektif çiftler potansiyel fonksiyonu……....76
Şekil 5.29a. V, Cr, Fe için etkin çiftler potansiyellerinin karşılaştırılması……77
Şekil 5.29b. Nb, Mo, Ta, W için etkin çiftler potansiyellerinin karşılaştırılması……..78
Şekil 5.30. V için ZJ-AYDGAM kullanılarak elde edilen statik yapı faktörü…….82
Şekil 5.31. Cr için ZJ-AYDGAM kullanılarak elde edilen statik yapı faktörü…….83
Şekil 5.32. Fe için ZJ-AYDGAM kullanılarak elde edilen statik yapı faktörü…….84
Şekil 5.33. V için ZJ-AYDGAM kullanılarak elde edilen çiftler dağılım fonksiyonu ……..85
Şekil 5.34. Cr için ZJ-AYDGAM kullanılarak elde edilen çiftler dağılım fonksiyonu ……..86

Şekil 5.35. Fe için ZJ-AYDGAM kullanılarak elde edilen çiftler dağılım fonksiyonu ……..87
Şekil 5.36. V için HZ-AGAM kullanılarak elde edilen statik yapı faktörü…...88
Şekil 5.37. Cr için HZ-AGAM kullanılarak elde edilen statik yapı faktörü…….89
Şekil 5.38. Fe için HZ-AGAM kullanılarak elde edilen statik yapı faktörü…….90
Şekil 5.39. V için HZ-AGAM kullanılarak elde edilen çiftler dağılım fonksiyonu ……..91
Şekil 5.40. Cr için V için HZ-AGAM kullanılarak elde edilen çiftler dağılım fonksiyonu ……..92
Şekil 5.41 Fe için V için HZ-AGAM kullanılarak elde edilen çiftler dağılım fonksiyonu ……..93
Şekil 5.42. Fe için FZ-YDAGAM kullanılarak elde edilen statik yapı faktörü……94
Şekil 5.43. Fe için FZ-YDAGAM kullanılarak elde edilen çiftler dağılım fonksiyonu…… ……..95
Şekil 5.44. V için farklı modeller için statik yapı faktörü……..96
Şekil 5.45. Cr için farklı modeller için statik yapı faktörü…….97
Şekil 5.46. Fe için farklı modeller için statik yapı faktörü……..…...98
Şekil 5.47. V için farklı modeller için çiftler dağılım fonksiyonu…….99
Şekil 5.48. Cr için farklı modeller için çiftler dağılım fonksiyonu……..100
Şekil 5.49. Fe için farklı modeller için çiftler dağılım fonksiyonu……..101
Şekil 5.50. Sıvı BCC metalleri için İç Enerji grafiği..…...……..103
Şekil 5.51. $Al_{50}Pb_{50}$ ikili alaşımı için Fang-Deng YDAGAM kullanılarak elde edilen efektif çiftler potansiyel fonksiyonu …….106

Şekil 5.52. $Ag_{50}Cu_{50}$ ikili alaşımı için FZ-YDAGAM kullanılarak elde edilen efektif çiftler potansiyel fonksiyonu ……109
Şekil 5.53. $Ag_{50}Ni_{50}$ ikili alaşımı için FZ-YDAGAM kullanılarak elde edilen efektif çiftler potansiyel fonksiyonu ……110
Şekil 5.54. $Al_{50}Pb_{50}$ ikili alaşımı için Statik yapı faktörü……....113
Şekil 5.55. $Al_{50}Pb_{50}$ ikili alaşımı için çiftler dağılım fonksiyonu……....114
Şekil 5.56. $Ag_{50}Cu_{50}$ ikili alaşımı için Statik yapı faktörü……...115
Şekil 5.57. $Cu_{50}Ni_{50}$ ikili alaşımı için Statik yapı faktörü ……...116
Şekil 5.58. $Ag_{50}Cu_{50}$ ikili alaşımı için çiftler dağılım fonksiyonu……...117
Şekil 5.59. $Ag_{50}Ni_{50}$ ikili alaşımı için çiftler dağılım fonksiyonu……...118

BÖLÜM 1

GİRİŞ

Atomlararası kuvvetlerin ampirik tanımları çeşitli kusurların bilgisayar simülasyonlarında sıklıkla kullanılır. Atomlararası potansiyelleri tanımlama da iki temel çok-cisim potansiyel türü vardır. Bunlardan biri Daw-Baskes (Daw ve Baskes 1983, 1984) "gömülü atom metodu" (GAM) potansiyeli diğeri ise Finnis-Sinclair (FS) (Finnis ve Sinclair 1984) potansiyelleridir. Bu modellerin her ikisi de örgü parametresi, kohesiv ve boşluk oluşum enerjileri ve elastik sabitlere fit edilmiştir. Gömülü Atom Metodu (GAM) Daw ve Baskes tarafından ileri sürüldüğünden beri malzeme bilimi ve katıhal fiziği alanında bilim adamlarının ilgisini çekmiştir. Yüzey merkezli kübik (fcc) metallerin pek çoğu ve cisim merkezli kübik (bcc) metallerin birkaçı için Gömülü atom metodu uygulamaları vardır. Johnson ve Oh (Johnson ve Oh 1989) bcc geçiş metalleri için analitik modeli öne sürmüşlerdir. Bu modelle bcc metallerinin fonon spektrası, termal genişleme, oluşum ve yüzey enerjileri (Guellil ve Adams 1992) ve ikili alaşımlarının oluşum entalpileri (Zhang ve Ouyang 1993) çalışılmıştır. Bu model de çiftler potansiyelin önerilen kübik polinom formu ve eksponansiyel formu fcc metallerinde kullanılan ile benzerdir.

Zhang ve Ouyang (Zhang ve Ouyang 1993) modellerin de V, Cr, Fe, Nb, Mo, Ta ve W metalleri ile çalışmışlardır, bu model Cr için Cauchy basıncı negatif olması sebebiyle bu metal için iyi sonuç vermemiştir. Adams ve Foiles (Adams ve Foiles 1990) atomlar arasındaki çiftler potansiyeli için Morse potansiyelini alarak bcc metallerinden V için bir model geliştirmişlerdir. Bu model V' nin birçok özelliğinin hesaplanmasında başarıyla kullanılmıştır. Fakat, bu prosedür de tayin edilen model parametreleri çok komplekstir ve bu modelde de yine Cr için Cauchy basıncının negatif olması ile ilgili olan problemler çözülememiştir. Wang ve Boercker (Wang ve Boercker 1995) bcc metalleri için başka bir potansiyel önermişlerdir ve bcc geçiş metallerinin fonon

spektrasında gözlenen tüm anormallikleri potansiyellerinde kullanmışlardır. Bununla beraber, potansiyel de diğer özellikler tanımlanamamıştır.

Pasianot ve arkadaşları (Pasianot ve vd. 1991), Si ve Ge için Baskes ve arkadaşlarının (Baskes ve vd. 1989) geliştirdikleri Yeniden Düzenlenmiş Gömülü Atom Metodunu (YDGAM) izleyerek Cr, Fe ve Nb bcc geçiş metalleri için atomlararası çok cisim potansiyeli önermişlerdir. Modelin temeli GAM'ın doğasındaki açıya bağlı çok-cisim kuvvetlerini anlamaktır ve avantajı Cr'nin negatif Cauchy basıcını üretebilmesidir. Modelin uygulama prosedürü karmaşıktır ve basit analitik bir form içermemektedir.

Matthai ve Bacon (Matthai ve Bacon 1985) bcc geçiş metallerinin boşluk ve yüzey enerjisi çalışmalarında ve Ackland-Finnis (Ackland ve Finnis 1986) V, Nb, Mo, Ta ve W katı yüzey gerilmesi hesaplamaların da FS çok-cisim potansiyel yaklaşımını kullanmışlardır. Bununla beraber, denge durumunda fit edilip bulunan parametreler atomları bir araya gelmeye zorlayan yüksek basınçta ki sıkıştırılabilirlilik gibi özelliklerinde de anormallikler gösterir. Vanadyum ve Niobyum için iki potansiyelinde çekici kısımları kısa mesafelidir. Bu problemlerin atomlar için moleküler dinamik hesaplamaların da azaldığına dikkat edilmelidir. Bu sorun orijinal FS potansiyellerinde (Rebonato ve vd. 1987, Ackland ve Thetford 1987) gösterilen çekirdeklerin iticiliği yeniden düzenlenerek giderilmiştir. FS potansiyellerinin yeniden düzenlenmesiyle bcc geçiş metallerin de küçük gruplar arasında çalışılmıştır (Harder ve Bacon 1988).

FS potansiyelleri ile GAM potansiyelleri arasındaki farkı göstermek için özellikle öz-bağlar arasında bulunan atomlar (SIA) için bcc metallarine uygulanmıştır. Adams ve Foiles (Adams ve Foiles 1990) atomlar arasındaki çiftler potansiyeli için Morse potansiyelini seçerek bcc metallerinden V için bir model geliştirmişlerdir ve bu model SIA ve V için pek çok özelliği hesaplama da kullanılmıştır. Son zamanlarda, kübik metaller için birçok GAM potansiyeli oluşturulmuştur (Chantasiriwan ve Milstein 1998, Doyama ve Kagure 1999). Bununla beraber, şu ana kadarki bilgimize göre önerilen birçok GAM potansiyeli bcc metallerinin sıvı hal özelliklerinin araştırılmasında kullanılmamıştır.

Bu çalışmanın amacı hem katıhal hem de sıvıhal özelliklerini kullanarak sıvı bcc geçiş metallerinin hem yapı hem de termodinamik özelliklerini doğru veren etkin çiftler potansiyelini elde edebilen yöntemi belirlemektir. Bu amaçla V, Cr Nb, Ta, Mo, W ve

Fe bcc geçiş metalleri için Zhang (Zhang ve v.d. 1999) ve Hu (W. Hu ve vd. 2002) ve Fang (Fang ve vd. 2003). Yeniden Düzenlenmiş Analitik Gömülü Atom Metodları (YDAGAM) kullanılmıştır. Modellerde metaller için verilen ve katıhal özeliklerine sahip model parametrelerini Rose Parametrizasyon yöntemine dayanarak yeniden parametrize ettik. Şu ana kadar ki bilgilerimiz ışığında bu metod sıvı bcc metalleri için uygulanmamıştır. Bu tezde hem katıhal hem de sıvıhal özellikleri kullanılarak bcc metalleri için YDAGAM etkin çiftler model yaklaşımı önerilmiş ve bazı bcc geçiş metalleri için uygulanmıştır.

YDAGAM etkin çiftler potansiyellerinin elde edilmesinde Finnis – Sinclair (Finnis ve Sinclair 1984) çiftler potansiyel yaklaşım tanımı ile çalıştık. M(P) düzeltme teriminin GAM etkin çiftler potansiyelinde ki etkisi tartışıldı. Bu tezde sıvı V, Cr, Fe Nb, Mo, Ta ve W için Zhang (Zhang ve vd. 1999) potansiyel fonksiyonlarını Dalgıç ve vd.'nin Rose Parametrizasyon yöntemini kullanarak öne sürdükleri denklemleri kullanarak parametrize ettik (Dalgıç ve Dömekeli 2003). Elde edilen parametre seti ile atomlar arası etkin çiftler potansiyelini hesapladık. Elde ettiğimiz çiftler potansiyellerini sıvıların VMHNC integral yaklaşımı için giriş datası olarak kullanarak çalışılan sıvı sistemlerinin statik yapı faktörleri S(q) ve çiftler dağılım fonksiyonlarını g(r) elde ettik. Elde edilen VMHNC sonuçları ile deney sonuçları arasında genelde iyi bir uyum olduğunu gözledik. Bu bize hesaplanan gömme fonksiyonlarının ve etkin çiftler etkileşmelerinin tek atomlu bcc geçiş metallerinin sıvı yapısını açıklamak için uygun olduğunu gösterdi. Böylece öne sürülen parametrizasyon yaklaşımının katı veya sıvı fazdaki herhangi bir sistemde kullanılan potansiyel için uygunluğunu da gözlemlemiş olduk. Son olarak bu çalışmada incelenen sıvı bcc geçiş metallerinin termodinamik özelliklerinden iç enerjiyi hesapladık. Hesaplanan sonuçları literatürde daha önce farklı DAGAM metodları ile hesaplanmış sonuçlar ile karşılaştırdık

Tez ana hatları ile şu şekilde düzenlenmiştir:

2. bölümde çalışmada kullanılan farklı GAM metotları ve bu metotların FS Etkin Çiftler Potansiyel Yaklaşımları verilmiş, 3. bölümde İkili Karıştırılamaz fcc Alaşım sistemleri ele alınarak ilgili YDAGAM metodu ve bu metotların Etkin Çiftler Potansiyel Yaklaşımları sunulmuştur. 4. bölümde ise sıvı yapı teorileri ve termodinamik büyüklükler anlatılmaktadır. Son bölüm elde edilen sonuçlara ve bu sonuçların tartışılmasına ayrılmıştır.

BÖLÜM 2

BCC METALLER İÇİN GÖMÜLÜ ATOM METODLARI (GAM) VE ETKİN ÇİFTLER POTANSİYELİ

2.1. Zhang-Jin Analitik Yeniden Düzenlenmiş Gömülü Atom Metodu (ZJ-AYDGAM)

Orijinal GAM modelinde (Daw ve Baskes 1984 ve Johnson 1988), atomik elektron yoğunluklarının Clementi ve Roetti (Clementi ve Roetti 1974) ve McClean (A.D. McClean ve R.S. McClean 1981) tarafından Hartree-Fock teorisinden hesaplanan küresel olarak ortalama serbest atom yoğunluklarıyla iyi bir biçimde tanıtıldığı ve yerel elektron yoğunluğunun bileşenlerinin atomik yoğunluklarının lineer toplamı yaklaşımı yapıldığı farz edilir. Fakat gerçekte dış kabuk elektron dağılımı küresel simetriden sapma gösterir. Ayrıca komşu elektron yoğunluğu ve özellikle bcc metalleri için (Adams ve Foiles 1990) atomik elektron yoğunluğu toplamından dolayı sapmaktadır. Bu nedenlerden dolayı enerji gerçek bir enerji olmayabilir. Bu problemi çözmek için Baskes (Baskes 1992) komşu elektron yoğunluğunu başlangıç noktası olarak almıştır. GAM daki ortalama küresel atomik yoğunlukların, YDGAM da açıya bağlılığını arttırması gerektiğini, yerel elektron yoğunluğunu kullanarak önermiştir. Zhang ve Ouyang teorisine göre ise elektron yoğunluğu olarak orijinal GAM deki yoğunluk kullanılmıştır. Küresel atomik elektron yoğunluklarının doğrusal toplamları kullanılarak orijinal GAM dan hesaplanan sistemin toplam enerjisi ile AYDGAM dan hesaplanan enerji ile arasındaki farkı açıklamak için toplam enerjiye M(P) gibi bir enerji terimi eklenir. Böylece sistemin toplam enerjisini oluşturan temel denklem aşağıdaki gibi yazılabilir,

$$E_T = \sum_i F_i(\rho_i) + \frac{1}{2}\sum_{i,j,i\neq j}\phi(r_{ij}) + \sum_i M_i(P_i) \tag{2.1.1}$$

burada yerel elektron yoğunluğu ;

$$\rho_i = \sum_{j\neq i} f(r_{ij}) \tag{2.1.2}$$

Atomik elektron yoğunluğu $f(r_{ij})$, Johnson ve Oh'un (Johnson ve Oh 1989) kullandığı fonksiyon ile benzerdir,

$$f(r) = f_e\left(\frac{r_1}{r}\right)^{\beta} \tag{2.1.3}$$

buradaki β bütün bcc geçiş metalleri için 6 olarak alınır, f_e parametresi en yakın komşu atomun atomik elektron yoğunluk dağınımını simgelemektedir. Johnson'un analitik modelinde f_e=1 olarak alınmıştır (Johnson ve Oh 1989 ve Zhang ve Ouyang 1993). Serbest elektron modeline göre c'nin sabit ve d'nin elektron yoğunluğu durumda katıda elektron başına enerji $cd^{2/3}$ dür (Liebfried ve Breuer 1978). Elektronların enerji yoğunluğu ε, elektron yoğunluğu ile elektron başına düşen enerjinin çarpımına eşittir. Buna göre $\varepsilon \propto d^{5/3}$ yada aynı şekilde $d \propto \varepsilon^{3/5}$ veya $d \propto (E_c/\Omega)^{3/5}$'dır. Bunun sonucunda E_f boşluk oluşum enerjisi sadece çiftler potansiyeli ϕ (Johnson ve Oh 1989 ve Zhang ve Ouyang 1993) ile belirlenir.

E_f'nin sadece çiftler potansiyeli $\phi(r)$ ile belirlendiğini varsayarsak elektron yoğunluğu ve enerji yoğunluğu arasındaki ilişkiyi göz önüne aldığımızda E_f, E_c'den çıkartılmalıdır. Buna göre de ampirik olarak f_e aşağıdaki gibi

$$f_e = \left[(E_c - E_f)/\Omega\right]^{3/5} \tag{2.1.4}$$

yazılabilir. Burada Ω dengedeki atomik hacimdir.

Gömme fonksiyonu $F(\rho)$ olarak Johnson'nın (Johnson ve Oh 1989) genel formu kullanılmaktadır,

$$F(\rho) = -F_0\left[1 - n\ln\left(\frac{\rho}{\rho_e}\right)\right]\left(\frac{\rho}{\rho_e}\right)^n \tag{2.1.5}$$

burada ρ_e elektron yoğunluğunun denge değeridir. F_0 ve n aşağıdaki formüllerden hesaplanır,

$$F_0 = E_c - E_f,$$
$$n = \sqrt{\frac{\Omega B}{A\beta^2 E_f}} \tag{2.1.6}$$

burada B hacim modülü ve $A = 2C_{44}/(C_{11} - C_{12})$, anizotropik orandır. C_{11}, C_{12} ve C_{44} elastik sabitlerdir.

Bcc metalleri için birkaç çiftler potansiyeli önerilmiştir. Johnson'un potansiyeli kübik polinomik (Johnson ve Oh 1989) fonksiyondur. Bununla beraber bu modelde Ta-W sisteminin ısı oluşumu doğru olarak tahmin edilemeyebilir. Aynı zamanda Cr (Zhang ve Ouyang 1993) metali için de uygulanamayabilir. Ouyang ve Zhang (Ouyang ve Zhang 1994) potansiyelleri için eksponansiyel fonksiyon ile çarpılan lineer bir fonksiyon önermişlerdir. Bu önerilen fonksiyon ile Ta-W sistemi iyi tahmin edilebilir fakat yine bu modelde Cr metali için uygun değildir. Wang ve Boercker (Wang ve Boercker 1995), Ouyang ve Zhang'ın yöntemine benzer bir potansiyel yöntemi önermişlerdir (Ouyang ve Zhang 1994). Finnis ve Sinclair (Finnis ve Sinclair 1984) modeli ise 4. dereceden polinom fonksiyonudur. Pasianot (Pasianot ve vd. 1991), potansiyel modeli ise $r<r_1$ olduğunda 5. dereceden bir polinom fonksiyondur. Finnis-Sinclair ve Pasianot potansiyel modelleri Nb metali için uygulanabilir. Tüm bu çalışmaların sonunda önerilen her bir potansiyel ele alınarak ve sonuçlar deneysel verilerle karşılaştırılarak çiftler potansiyeli için daha kompleks bir polinom fonksiyonu oluşturulmuştur ve bu potansiyel fonksiyonu aşağıdaki gibi verilir,

$$\phi(r) = k_1 + k_2\left(\frac{r}{r_1}\right)^2 + k_3\left(\frac{r}{r_1}\right)^4 + k_4\left(\frac{r_1}{r}\right)^{12} \tag{2.1.7}$$

buradaki k_i (i=1,2,3,4) parametreleri, tek boşluk oluşum enerjisi ve elastik sabitlerin denge durumunda elde edilmiş değerlerdir ve aşağıdaki gibi belirlenirler,

$$k_1 = -\frac{1}{7}E_{1f} - 15\Omega G\frac{10097924A + 12332488}{96(1238475A + 825650)} \tag{2.1.8}$$

$$k_2 = 15\Omega G\frac{1633023A - 811174}{96(1238475A + 825650)} \tag{2.1.9}$$

$$k_3 = 15\Omega G\frac{688128 - 137781A}{32(1238475A + 825650)} \tag{2.1.10}$$

$$k_4 = 15\Omega G\frac{1024(2A - 1)}{1238475A + 825650} \tag{2.1.11}$$

burada $G = (3C + 2C')/5$ Voight ortalama kesme modülüdür. Ayrıca $C' = (C_{11} - C_{12})/2$ dir.

İkinci ve üçüncü komşu uzaklıkları arasındaki kesme potansiyeli için kübik spline fonksiyonu kullanılmıştır. Kesme potansiyeli eğimle hesaplanan potansiyel ile çok iyi uyuşmaktadır. Potansiyeldeki başlangıç noktası $r_s = a$ ve sıfır değer eğrisinde son nokta $r_c = \sqrt{2}a$ (Zhang ve Ouyang 1993) dır. Benzer şekilde ikinci ve üçüncü komşu uzaklıkları arasında bir kübik spline fonksiyonunda elektron kesme yoğunluğu $f_b(r)$ 'yi bulmak için kullanılmıştır. Kesme şartı, kesme potansiyeli için aynıdır.

Literatürlerde, toplam enerjiye eklenmesi önerilen M(P) terimi için Pasianot (Pasianot ve vd. 1991) modelinde bir açıklama vermemiştir, Johnson-Oh (Johnson ve Oh 1989) modelinde ise (denklem 2.1.1) den geliştirdikleri M(P) fonksiyonu için $M(P_e) = 0 \, ve \, M'(P_e) = 0$ şartı verilmektedir. Eğer yerel elektron yoğunluğu ve küresel ortalama atomik elektron yoğunluğu ρ' arasındaki farkı $\Delta\rho'$ olarak gösterilirse, toplam

enerjideki değişmenin nedeninin; $\Delta E(\Delta\rho)$ ve $\propto(\Delta\rho)^2$ farkı olduğu görülebilir. $M(P)$ düzeltme terimi bu faktörlerin fonksiyonu olabilir. Toplam enerji için düzeltme teriminin fiziksel anlamı göz önüne alındığında toplam enerji, r arttıkça küçük olmaktadır ve bunu negatif üstel bir fonksiyon sağlar. Bu yüzden enerji düzeltme terimi

$$M(P)=\alpha\left[\left(\frac{P}{P_e}-1\right)^2\right]\exp\left[-\left(\frac{P}{P_e}-1\right)^2\right] \tag{2.1.12}$$

şeklinde alınır. Buradaki α parametresi fiziksel veri ve ilişkili denklemlerden elde edilebilir.

$$\alpha=\frac{n^2F_0}{8}+\frac{9\Omega B-15\Omega G}{8\beta^2} \tag{2.1.13}$$

P_e; P parametresinin denge değeridir. Denklem (2.1.12) deki $M(P)$'nin formu tek değildir. $M(P)$'nin diğer formları da kullanılabilir.

Bütün model parametreleri f_e, F_0, n, k_i (i=1,2,3,4) ve α, yukarıdaki denklemlerde E_c, E_f, a, Ω, G, B gibi fiziksel giriş parametrelerinden hesaplanmaktadır. Burada β parametresi uyum göstermesi için 6 olarak alınmaktadır ve enerji düzeltme teriminin argümanı

$$P_i=\sum_{j\neq i}f^2(r_{ij}) \tag{2.1.14}$$

ile verilmektedir.

Bu modelle çalışılan 7 bcc metal için giriş parametreleri a, E_c kohesif enerji, E_f boşluk oluşum enerjisi, ΩB, ΩG ve A parametreleri Tablo 2.1.'de verilmektedir.

Tablo 2.1. Bcc geçiş metalleri için ZJ-AYDGAM modeli giriş parametreleri

	V	**Cr**	**Fe**	**Nb**	**Mo**	**Ta**	**W**
a (A°)	3.0399	2.8845	2.8645	3.3008	3.15	3.3026	3.16475
E_c **(eV)**	5.30	4.10	4.29	7.47	6.81	8.089	8.66
E_f **(eV)**	2.10	1.80	1.79	2.75	3.10	2.95	3.95
ΩB	13.62	11.936	12.255	18.857	25.656	21.733	30.630
ΩG	4.17	8.688	6.555	4.409	12.290	7.961	15.829
A	0.791	0.714	2.462	0.514	0.762	1.559	1.001

Tablo 2.1'de giriş parametrelerinden hesaplanan model parametreleri Tablo 2.2.'de verilmektedir.

Tablo 2.2. Bcc geçiş metalleri için ZJ-AYDGAM model parametreleri

	V	**Cr**	**Fe**	**Nb**	**Mo**	**Ta**	**W**
$\alpha(eV)$	0.117	-0.154	0.017	0.141	0.022	0.180	0.006
f_e	0.412	0.371	0.395	0.448	0.422	0.471	0.483
F_0 **(eV)**	3.200	2.300	2.500	4.720	3.710	5.139	4.710
n (eV)	0.477	0.508	0.278	0.608	0.549	0.362	0.464
k_1 **(eV)**	0.444	1.464	-0.349	0.764	1.836	0.007	1.538
k_2 **(eV)**	-1.395	-3.164	-0.299	-2.030	-4.241	-1.176	-4.213
k_3 **(eV)**	0.628	1.405	0.277	0.872	1.899	0.641	1.978
k_4 **(eV)**	0.021	0.033	0.102	0.001	0.056	0.094	0.118

Zhang ve Jin bu çalışmaları ile basit orijinal GAM modelindeki toplam enerji ile gerçeği arasındaki fark olarak verilen enerji modeli düzeltme terimi göz önüne alındığında yeni Analitik YDGAM modelini Cr dahil çalışılan bcc metalleri için deneysel data ile uygun sonuç verdiğini açıklamışlardır.

2.2. Hu-Zhang Analitik Gömülü Atom Metodu (HZ-AGAM)

Bu modelde de (Hu ve vd. 2002) düzeltme terimi Johnson modelindeki negatif Cauchy basıncı problemini çözmek için toplam enerji ifadesine yerleştirilir. Düzeltme enerjisi *M(P)*, orijinal GAM'da atomik elektron yoğunluğunun lineer toplamı kabulünü düzeltmek için elektron yoğunluğunun ikinci derecede toplamı olarak gösterilen, *P* argümanının fonksiyonudur. Buna göre atom sisteminin temel toplam enerji denklemi basitleştirmek için

$$E = F(\rho) + \frac{1}{2}\sum_{m}\phi(r_m) + M(P) \tag{2.2.1}$$

olarak yazılır. Burada m, *m*'inci komşuyu göstermektedir.

Enerji düzeltme terimi

$$M(P) = \alpha\left\{1 - \exp\left[-\left(\ln\left(\frac{P}{P_e}\right)\right)^2\right]\right\} \tag{2.2.2}$$

ve P argümanı da

$$P = \sum_{m} f^2(r_m) \tag{2.2.3}$$

şeklindedir.

Yerel elektron yoğunluğu Johnson ve Oh'dan (Johnson ve Oh 1989) orijinal form da

$$\rho = \sum_{m} f(r_m) \tag{2.2.4}$$

alınır. Atomik yoğunluk $f(r)$ ve gömme fonksiyonu $F(\rho)$ Johnson ve Oh (Johnson ve Oh 1989), tarafından kullanılan form ile aynı alınır;

$$f(r) = f_e\left(\frac{r_1}{r}\right)^6 \tag{2.2.5}$$

$$\mathrm{F}(\rho) = -F_0\left[1 - n\ln\left(\frac{\rho}{\rho_e}\right)\right]\left(\frac{\rho}{\rho_e}\right)^n \tag{2.2.6}$$

burada r_1 dengede ilk komşu uzaklığı, $\mathrm{F}_0 = E_c - E_{1f}$, $E_c ve\ E_{1f}$ sırasıyla kohesif enerji ve gevşememiş boşluk oluşum enerjisidir, f_e Johnson'un (Johnson ve Oh 1989) yaptığı gibi 1 alınır. $P_e ve \rho_e$ de denge değerleridir. n ayar parametresi toplam enerjiye gömme enerjisinin katkısını gösterir ve değeri her element için Rose ve arkadaşlarının (Rose ve vd. 1984) deneysel enerji-hacim ilişkisinin fit edilmesiyle elde edilebilir.

Gevşememiş boşluk oluşum enerjisi çiftler potansiyeli kullanılarak aşağıdaki gibi (Johnson ve Oh 1989) ifade edilebilir;

$$E_{1f} = -\frac{1}{2}\sum_m \phi(r_m) \tag{2.2.7}$$

Denge şartı, kristalde zorlanma olmaması şeklinde ifade edilebilir ve bu şart

$$\frac{1}{2}\sum_m \frac{r_{mi}r_{mj}}{r_m}\phi'(r_m) = 0 \tag{2.2.8}$$

denklemi ile gösterilir. Burada $\phi'(r_m)$ çiftler potansiyel fonksiyonunun 1. türevini göstermektedir.

2. derece elastik sabitler C_{ijkl}

$$\begin{aligned}\Omega_0 \mathrm{C}_{\mathrm{ijkl}} &= F''(\rho)\sum_m \frac{r_{mi}r_{mj}}{r_m} f'(r_m)\sum_m \frac{r_{mk}r_{ml}}{r_m} f'(r_m) \\ &+ \frac{1}{2}\sum_m \frac{r_{mi}r_{mj}r_{mk}r_{ml}}{r_m}\left[\phi''(r_m) - \frac{\phi'(r_m)}{r_m}\right] \\ &+ 4M''(P)\sum_m \frac{r_{mi}r_{mj}}{r_m} f(r_m) f'(r_m) \\ &x\sum_m \frac{r_{mk}r_{ml}}{r_m} f(r_m) f'(r_m)\end{aligned} \tag{2.2.9}$$

ile hesaplanabilir. Bcc metalleri için birbirinden bağımsız 3 elastik sabit ve dolayısıyla 3 denklem elde edilir.

Çiftler potansiyeli fonksiyonu;

$$\phi(r) = \sum_{j=-1}^{j=4} k_j \left(\frac{r}{r_1}\right)^j \tag{2.2.10}$$

olarak alınır. Bu modelde, atomik etkileşmeler 2'inci komşu mesafesine kadar alınır ve hem $f(r)$ hem de $\phi(r)$ ikinci ve üçüncü komşu uzaklığı arasında bir r_c mesafesinde kesilir, formu $r_c = r_2 + k_c(r_3 - r_2)$ gibidir. Burada k_c çiftler potansiyelinde salınım olmamasını sağlayan ayar parametresidir. Bu noktada çiftler potansiyeli ve eğimi sıfırdır yani;

$$\phi(r_c) = 0 \tag{2.2.11}$$

$$\phi'(r_c) = 0 \tag{2.2.12}$$

Elastik sabitler için 3 tane denklemi (denklem 2.2.9 ile verilen), denge şartı denklemi (denklem 2.2.8) ile, kesme için iki denklem (denklem 2.2.11 ve 2.2.12) ile ve boşluk oluşum enerjisi için denklem (denklem 2.2.7) ile birleştirerek 7 tane model parametresi $\alpha ve k_j$ ($j = -1,0,1,2,3,4$) 'nin değerleri analitik olarak çözülür.

Elde edilen potansiyeller V ve Nb için kısa mesafede çekici değildir, fakat itici kısımları küçük mesafelerde hala yumuşaktır. Çiftler potansiyelini sertleştirmek için bu iki elementin çiftler potansiyellerinin itici kısımları

$$\varphi(r) = \phi(r_1) + [\phi(r) - \phi(r_1)]\left(\frac{r_1}{r}\right)^m \qquad r < r_1 \tag{2.2.13}$$

şeklinde düzenlenir. Burada m, V ve Nb için sırasıyla 4 ve 5'tir. Diğer elementler için 0'dır. Bu modelle çalışılan bcc sistemleri için giriş parametreleri Tablo 2.3.'de verilmiştir.

Tablo 2.3. Bcc geçiş metalleri için HZ-AGAM modeli giriş parametreleri

	V	**Cr**	**Fe**	**Nb**	**Mo**	**Ta**	**W**
a (A°)	3.0282	2.8846	2.8664	3.3007	3.1468	3.3026	3.1650
E_c **(eV)**	5.31	4.10	4.28	7.57	6.82	8.10	8.90
E_{1f} **(eV)**	2.10	1.80	1.79	2.75	3.10	2.95	3.95
C_{11}	230	346	230	245	459	262	517
C_{12}	120	66.0	135	132	168	156	203
C_{44}	43.2	100	117	28.4	111	82.6	157

Tablo 2.3'de verilen giriş parametreleri ile hesaplanan model parametreleri Tablo 2.4.'de verilmiştir.

Tablo 2.4. Bcc geçiş metalleri için HZ-AGAM modeli giriş parametreleri

	V	Cr	Fe	Nb	Mo	Ta	W
$\alpha(eV)$	0.1372	-0.3557	0.0032	0.2621	0.0475	0.1157	0.0621
F_0 (eV)	3.21	2.30	2.49	4.82	3.72	5.15	4.95
N	0.42	0.98	0.35	0.41	0.52	0.47	0.36
M	4.0	0.0	0.0	5.0	0.0	0.0	0.0
k_c	0.600	0.35	0.510	0.600	0.394	0.550	0.410
k_1 (eV)	673.039	8547.89	1478.54	1723.79	8859.23	3598.77	9973.49
k_2 (eV)	-629.26	-7769.60	-1287.3	-1564.0	-8045.3	-3149.4	-8992.5
k_3 (eV)	293.740	3522.52	563.58	705.897	3644.56	1375.68	4047.12
k_4 (eV)	-54.434	-636.70	-98.957	-126.5	-658.07	239.53	-726.38
k_{-1} (eV)	78.707	1030.26	199.603	208.294	1071.46	469.637	1226.04
k_0 (eV)	-361.96	-4694.6	-855.74	-947.97	-4872.4	-2055.6	-5528.4

2.3. Fang-Zhu Yeniden Düzenlenmiş Analitik Gömülü Atom Metodu (FZ-YDAGAM)

Daw ve Baskes tarafından önerilen gömülü atom metodu, son derece yararlı yarı-deneysel simülasyon metotlarından biri ve genellikle geçiş mesafeli metalik sistemlerin ve eksik nokta, alaşım, ayrım yüzeyi, sınır yapı ve bunun gibi bilgisayar simülasyon bakış açıları içindir (Johnson ve Oh 1989 ve Swiler ve Loehman 2000). Daw ve Baskes'a dayanan GAM modelini kullanarak, Johnson bcc, fcc ve hcp metal ve alaşımlarında en yakın komşu modelleri için Analitik GAM'u sunmuştur (Johnson ve Oh 1989 ve Johnson 1988). Hesaplamalar Johnson'un modellerinde pek çok metal ve metal alaşımlarında uyumlu sonuçlar vermiştir fakat Cr metali için Cauchy basıncı negatif olduğu için başarısız olmuştur (Fang ve vd. 2003).

Zhang ve diğerlerinin geliştirdikleri ve bcc (Zhang ve Ouyang 1993 ve Zhang ve vd. 1996) , fcc ve hcp (Hu ve vd. 2001) metalleri için genişlettikleri Yeniden Düzenlenmiş Analitik GAM (YDAGAM) modeli Johnson'un analitik GAM modeline dayanmaktadır. Düzensiz katı-eriyik ve düzenli metaller arası bileşikler ve bunlar gibiler için yüzey yapılarının eksik nokta oluşum entalpilerini hesaplamışlardır.

YDAGAM modelinde atom sistemlerinin toplam enerji ifadesi, GAM modelinden farklı olarak toplam enerji ifadesine $M(P)$ enerji düzeltme terimi eklenmesiyle yeniden yazılmıştır (Deng ve vd. 2002) ve YDAGAM potansiyelleri için sistemin toplam iç enerjisi (Zhang ve Ouyang 1993)

$$E_{top} = \sum F(\rho_i) + \frac{1}{2}\sum \phi(r_{ij}) + \sum M(P_i) \tag{2.3.1}$$

ifade edilir. Burada $F(P_i)$ gömme fonksiyonu, $\phi(r_{ij})$ i ve j atomları arasındaki etkileşme potansiyeli, r_{ij} ayrılma mesafesidir. Bu modelde farklı olarak f_e (Hu ve vd. 2001) deki gibi alınırsa;

$$f_e = \frac{\sqrt{E_c}}{\Omega} \tag{2.3.2}$$

burada Ω atomik hacimdir.

$F(\rho_i)$ gömme fonksiyonu aşağıda gösterilen formdadır,

$$\mathrm{F}(\rho) = -F_0\left[1 - n\ln\left(\frac{\rho}{\rho_e}\right)\right]\left(\frac{\rho}{\rho_e}\right)^n \tag{2.3.3}$$

kesme mesafesi 2. ve 3. komşu mesafeleri arasındadır.

$$r_{ce} = r_2 + k_{ce}(r_3 - r_2) \tag{2.3.4}$$

Eğer mesafe r_{ce} den daha küçük veya r_{ce} ye eşit ise, potansiyel fonksiyonu (Hu ve vd. 2002) deki gibi

$$\phi(r) = k_0 + k_{-1}\left(\frac{r}{r_{1e}}\right)^{-1} + k_1\left(\frac{r}{r_{1e}}\right) + k_2\left(\frac{r}{r_{1e}}\right)^2 + k_3\left(\frac{r}{r_{1e}}\right)^3 + k_4\left(\frac{r}{r_{1e}}\right)^4 \tag{2.3.5}$$

alınır, diğer durumlarda $\phi(r) \to 0$ dır.

$M(P_i)$ enerji düzenleme terimi (Zhang ve Ouyang 1993) daki gibi

$$M(P) = \alpha\left\{1 - \exp\left[-\left(\ln\left|\frac{P}{P_e}\right|\right)^2\right]\right\} \tag{2.3.6}$$

yazılır. Bcc metalleri için P enerji düzeltme teriminin argümanı ise;

$$P = \sum_m f^2(r_m) \tag{2.3.7}$$

Tablo 2.5. Bcc geçiş metalleri için FZ-YDAGAM modeli giriş parametreleri

	Fe	**Ta**	**W**
a (A°)	2.8664	3.3026	3.1650
E_c **(eV)**	4.28	8.10	8.90
E_{1f} **(eV)**	1.79	2.95	3.95
C_{11}	230	262	517
C_{12}	135	156	203
C_{44}	117	82.6	157

ile verilir.

Fang ve vd.'nin Fe, Ta, W için giriş parametresi olarak kullandıkları değerler tablo 2.5'de, bu değerlerle hesaplanan model parametreleri ise Tablo 2.6'da verilmektedir.

Tablo 2.6. Bcc geçiş metalleri için FZ-YDAGAM model parametreleri

	Fe	**Ta**	**W**
$\alpha(eV)$	0.0032	0.1157	0.0621
F_0 (eV)	2.49	5.15	4.95
N	0.35	0.47	0.36
k_c	0.51	0.55	0.41
k_1 (eV)	1478.54	3598.77	9973.49
k_2 (eV)	-1287.3	-3149.4	-8992.5
k_3 (eV)	563.58	1375.68	4047.12
k_4 (eV)	-98.957	239.53	-726.38
k_{-1} (eV)	199.603	469.637	1226.04
k_0 (eV)	-855.74	-2055.6	-5528.4

2.4. ZJ-AYDGAM Etkin Çiftler Potansiyel Yaklaşımı

Bu tezde kullanılan Zhang-Jin AYDGAM etkin çiftler potansiyelini hesaplayabilmek için Finnis – Sinclair' ın öne sürmüş olduğu GAM etkin çiftler potansiyel yaklaşımından yola çıkarak Finnis-Sinclair tipi etkin çiftler potansiyelini oluşturduk. ZJ–AYDGAM etkin çiftler potansiyeli

$$\phi_{eff}^{ZJ-AYDGAM}(r) = \phi^{ZJ-AYDGAM}(r) - 2F'^{ZJ-AYDGAM}(\rho) f(r) M^{ZJ-AYDGAM}(P) \tag{2.4.1}$$

formunda ifade edilir. Burada $\phi(r)$ çiftler etkileşme potansiyelini gösterir ve şu formda verilir,

$$\phi^{ZJ-AYDGAM}(r) = k_1 + k_2\left(\frac{r}{r_1}\right)^2 + k_3\left(\frac{r}{r_1}\right)^4 + k_4\left(\frac{r}{r_1}\right)^{12} \tag{2.4.2}$$

buradaki k_i (i=1,2,3,4) parametreleri, tek boşluk oluşum enerjisi ve elastik sabitleri ile verilir ve denge durumunda elde edilmiş değerlerdir.

Gömme fonksiyonunun birinci türevi $F'(\rho)$;

$$F'^{ZJ-AYDGAM}(\rho) = -F_0\left\{\left[-\left(\frac{n}{\rho}\right)\left(\frac{\rho}{\rho_e}\right)^n\right]-\left[\left(\frac{n}{\rho_e^n}\right)\rho^{n-1}\right]\left(1-n\ln\left(\frac{\rho}{\rho_e}\right)\right)\right\} \tag{2.4.3}$$

$f(r)$ elektron yoğunluk fonksiyonu

$$f(r) = f_e\left(\frac{r_1}{r}\right)^{\beta} \tag{2.4.4}$$

formunda verilir. Buradaki β bütün bcc geçiş metalleri için 6 olarak alınır, f_e parametresi en yakın komşu atomun atomik elektron yoğunluk dağınımını simgelemektedir. (2.4.1) denklemindeki $M(P)$ enerji düzeltme terimi ise aşağıdaki gibi verilir;

$$M^{ZJ-AYDGAM}(P) = \alpha\left[\left(\frac{P}{P_e}-1\right)^2\right]\exp\left[-\left(\frac{P}{P_e}-1\right)^2\right] \tag{2.4.5}$$

şeklinde alınır. Buradaki α parametresi fiziksel veri ve göreli denklemlerinden elde edilebilir.

2.5. HZ-AGAM Etkin Çiftler Potansiyel Yaklaşımı

Bu tezde hesaplanan diğer başka YDAGAM etkin çiftler potansiyeli HZ - AGAM etkin çiftler potansiyelidir. HZ – AGAM etkin çiftler potansiyelini hesaplamak için Finnis – Sinclair' ın öne sürmüş olduğu GAM etkin çiftler potansiyel yaklaşımından yola çıkarak HZ – AGAM modeline dayalı etkin çiftler potansiyelini oluşturduk.

$$\phi_{eff}^{HZ-AGAM}(r) = \phi^{HZ-AGAM}(r) - 2F'^{HZ-AGAM}(\rho) f(r) M^{HZ-AGAM}(P) \tag{2.5.1}$$

formunda ifade edilir. Burada $\phi(r)$ çiftler etkileşme potansiyelini gösterir ve şu formda verilir,

$$\phi^{HZ-AGAM}(r) = \sum_{j=-1}^{j=4} k_j \left(\frac{r}{r_1}\right)^j \tag{2.5.2}$$

HZ-AGAM modelinde, 2.-komşu mesafelerine kadar atomlararası etkileşme dikkate alınmıştır ve $f(r)$ ve $\phi(r)$ için r_c kesme mesafesi 2. ve 3. komşu mesafeleri arasında kesilmiştir, formu $r_c = r_2 + k_c(r_3 - r_2)$ gibidir. k_c ayarlanabilir parametredir ve ki burada çiftler potansiyelindeki osilasyonları sağlar. r_c noktasında, çiftler potansiyeli ve türevi sıfır olur. (2.5.1) denklemindeki *M*(*P*) enerji düzeltme terimi;

$$M^{HZ-AGAM}(P) = \alpha\left\{1 - \exp\left[-\left(\ln\left(\frac{P}{P_e}\right)\right)^2\right]\right\} \tag{2.5.3}$$

şeklinde alınır. (2.5.1) denklemindeki $f(r)$ ve $F'(\rho)$ terimleri ZJ-AYDGAM modelindeki gibi (2.4.3) ve (2.4.4) ifadeleri ile verilir.

2.6. FZ-YDAGAM Etkin Çiftler Potansiyeli

Bu tezde son olarak kullanılan diğer bir YDAGAM etkin çiftler potansiyeli FZ - YDAGAM etkin çiftler potansiyelidir. FZ– YDAGAM etkin çiftler potansiyeli Finnis – Sinclair' ın öne sürmüş olduğu GAM etkin çiftler potansiyel yaklaşımından yola çıkarak oluşturuldu ve

$$\phi_{eff}^{FZ-YDAGAM}(r) = \phi^{FZ-YDAGAM}(r) - 2F'^{FZ-YDAGAM}(\rho) f(r) M^{FZ-YDAGAM}(P) \tag{2.6.1}$$

formunda ifade edilir. Burada $\phi(r)$ çiftler etkileşme potansiyelini gösterir ve şu formda verilir,

$$\phi^{FZ-YDAGAM}(r) = k_0 + k_{-1}\left(\frac{r}{r_{1e}}\right)^{-1} + k_1\left(\frac{r}{r_{1e}}\right) + k_2\left(\frac{r}{r_{1e}}\right)^2 + k_3\left(\frac{r}{r_{1e}}\right)^3 + k_4\left(\frac{r}{r_{1e}}\right)^4 \tag{2.6.2}$$

FZ-YDAGAM modelinde, 2.-komşu mesafelerine kadar atomlararası etkileşme dikkate alınmıştır ve $f(r)$ ve $\phi(r)$ için r_c kesme mesafesi 2. ve 3. komşu mesafeleri arasında kesilmiştir, formu $r_c = r_2 + k_c(r_3 - r_2)$ gibidir. k_c ayarlanabilir parametredir ve ki burada çiftler potansiyelindeki osilasyonları sağlar. r_c noktasında, çiftler potansiyeli ve türevi sıfır olur.

Gömme fonksiyonunun birinci türevi $F'(\rho)$;

$$F'^{FZ-YDAGAM}(\rho) = -F_0\left\{\left[-\left(\frac{n}{\rho}\right)\left(\frac{\rho}{\rho_e}\right)^n\right] - \left[\left(\frac{n}{\rho_e^n}\right)\rho^{n-1}\right]\left(1 - n\ln\left(\frac{\rho}{\rho_e}\right)\right)\right\} \tag{2.6.3}$$

$M(P)$ enerji düzeltme terimi ise aşağıdaki gibi verilir;

$$M^{FZ-YDAGAM}(P) = \alpha\left\{1 - \exp\left[-\left(\ln\left|\frac{P}{P_e}\right|\right)^2\right]\right\} \tag{2.6.4}$$

şeklinde alınır. $f(r)$ terimi ZJ-AYDGAM modelindeki gibi (2.4.4) ifadesi ile verilir.

2.7. Atomlararası Çiftler Potansiyelinin Parametrizasyonu

Çalıştığımız sistemlerde sıvı durum için kohesif enerji Rose'nin hal denklemini, S. S. Dalgıç ve diğerleri (S. S. Dalgıç ve vd. 2003) tarafından öne sürülen parametrizasyon yöntemi ile hesaplanmıştır.

Birinci şart; çiftler potansiyeli için denge şartı olup kesme mesafesine bağlı olarak

$$\begin{aligned} \phi(r_c) &= 0, \qquad \phi'(r_c) = 0 \\ f(r_c) &= 0, \qquad f'(r_c) = 0 \end{aligned} \tag{2.7.1}$$

ile verilir.

Sıvı sistem için kohesif enerji denklemi; denge şartından

$$F(\rho_c) = E_{EOS}(a^*) - \frac{1}{2}\sum\phi(r_c) - M(P) \tag{2.7.2}$$

şeklinde yazılabilir. Burada $E_{EOS}(a^*)$ sıvı metalin denge durumundaki bağlanma enerjisi, a^* indirgenmiş örgü parametresi, olup

$$E_{EOS}(a^*) = E_c(1 + a^*)e^{-a} \tag{2.7.3}$$

bu denklemde E_c kohesif enerji göstermektedir, a^* birimsiz bir parametre olup

$$a^{*} = (a/a_0 - 1)(E_{coh}/9B\Omega)^{1/2} \tag{2.7.4}$$

denklemi ile verilir.

Boşluk oluşum enerjisi

$$E_{1f} = -\frac{1}{2}\sum \phi(r_c) \tag{2.7.5}$$

denklem yaklaşıklığı üçüncü denge şartı olarak kullanılabilir.

Son olarak saf sistemin konfigürasyonal serbestlik enerjisini minimize edecek

$$\frac{\partial f^{VMHNC}(\beta,\rho,\eta)}{\partial \eta} = 0, \quad k = 0,1,2.....m \tag{2.7.6}$$

denklem şartı, sistemin S(q) statik yapı faktörü ve g(r) çiftler dağılım fonksiyonunu deneysel data ile uyumlu olması da göz önünde bulundurularak tüm koşullar tekrar değerlendirilir.

BÖLÜM 3

İKİLİ KARIŞTIRILAMAZ FCC ALAŞIM SİSTEMLERİ İÇİN YDAGAM MODELLERİ VE ALAŞIM ÇİFTLER POTANSİYELLERİ

İki (Landa ve v.d. 1998 , Teraoka ve Komaki 1999) veya üç (Landa ve v.d. 1999, Cheng ve Wynblatt 1997) parçacıktan meydana gelen metalik sistemlerin yüzey ayrımlarının bilgisayar benzetişimleri için çeşitli uygun yaklaşımlar geliştirilmiştir. Fang ve Deng çalışmalarının çoğunda Monte Carlo (MC) yaklaşımı ile Gömülü Atom Metodu (GAM) potansiyelleri kullanmışlardır ve çalışmalarının bir kısmını karışmaz alaşım sistemi için geliştirmişlerdir (Fang ve Deng 2003). Foiles MC sayısal yaklaşımını, karışmaz Ni-Cu ve Ag-Cu alaşım sistemleri için geliştirmiştir. Foiles'in bu yaklaşımında, çok-cisimli atomlararası etkileşme potansiyelleri Gömülü Atom Metodu (GAM) ile tanımlanmıştır (Foiles 1985). Al-Pb karıştırılamaz alaşım sistemi için birçok modelle potansiyel elde edilmiştir. Örneğin, Landa ve arkadaşları MC benzetişimi ile Al-Pb alaşım sisteminin Pb/Al ara yüzeyi ile ilgili serbestlik enerjisini glue-tip deneysel çok-cisimli potansiyellerle birleştirerek hesaplamışlardır (Landa ve v.d. 2000).

Temel Pb alaşımları için halen sınırlı sayıda potansiyel mevcuttur. Ercolessi saf Pb (Lim ve v.d. 1992) için glue-tip potansiyeli (Ercolessi ve v.d. 1988) başarılı biçimde geliştirmiştir. Landa ve arkadaşları (Landa ve v.d. 1999) Finnis-Sinclair düzeni (Finnis ve Sinclair 1984, Ackland ve v.d. 1987) ile Pb-Bi-Ni sistemi için atomlararası potansiyel geliştirmişlerdir. Landa ve arkadaşları Al-Pb sistemi için geliştirdikleri çok-cisimli glue-tip potansiyelinin termodinamik özelliklerini ve Al-Pb sisteminin faz diyagramını bilgisayar benzetişimiyle yeni bir çalışmada göstermişlerdir (Landa ve v.d. 2000). Modellerinde yapmış oldukları yaklaşımlar, Landa'nın hesapladığı sonuçlar ve deneysel veriler arasında oluşan farklılıklar için düzeltme ilaveleri yapmışlardır.

Johnson, fcc ve hcp (Oh ve Johnson 1988), bcc (Johnson ve Oh 1989) metalleri için Analitik GAM modelini geliştirmişlerdir fakat bu modellerde Cr için Cauchy basıncı negatiftir bu noktada model başarısızdır. GAM potansiyelleri için model parametreleri metal ve alaşımların örgü sabiti, bağlanma enerjisi, boşluk oluşum enerjisi ve esneklik sabiti gibi fiziksel özellikleri kullanılarak elde edilmiştir. Johnson'ın temel Analitik GAM modeli ile, Zhang ve arkadaşları Yeniden Düzeltilmiş Analitik GAM modelini geliştirmişlerdir (Zhang ve vd. 1996, Ouyang ve v.d. 1996, Zhang ve vd. 1999, Hu ve v.d. 2000 ve Hu ve v.d. 2001).

YDAGAM karıştırılamaz alaşımlar için atomlararası potansiyeli oluşturmada akla uygun bir yapı göstermektedir. Çünkü alaşımlar için YDAGAM potansiyellerini oluştururken sadece saf metallerin fiziksel giriş parametreleri kullanmak yeterli olmaktadır. Bu çalışmanın bir amacı da ikili karıştırılamaz fcc alaşım sistemleri için uygun YDAGAM atomlararası potansiyellerini oluşturmaktır.

3.1. Fang-Deng İkili Karıştırılamaz FCC Alaşım Sistemleri İçin YDAGAM Modeli

Bu modelde alaşımı oluşturan bileşenlerin her biri için enerji düzeltme terimi

$$M^{Fang-Deng}(P) = \alpha\left(\frac{P}{P_e}\right)^2 \exp\left[-\left(\frac{P}{P_e}\right)^2\right] \tag{3.1.1}$$

alınır. Burada sırasıyla ρ_i sistemdeki diğer tüm atomların etki ettiği i. atomunun elektron yoğunluğu, $F(\rho_i)$ gömme fonksiyonu, $\phi(r_{ij})$ ve j atomları arasındaki etkileşme potansiyeli, P_i, enerji düzeltme argümanı

$$\rho_i = \sum f(r_{ij}) \tag{3.1.2}$$

$$P = \sum f^2(r_{ij}) \tag{3.1.3}$$

$$F^{Fang-Deng}(\rho) = -F_0\left[1 - n\ln\left(\frac{\rho}{\rho_e}\right)\right]\left(\frac{\rho}{\rho_e}\right) \tag{3.1.4}$$

$$f(r) = f_e\left(\frac{r_{1e}}{r}\right)^6 \tag{3.1.5}$$

$$\phi^{Fang-Deng}(r) = k_0 + k_1\left(\frac{r}{r_{1e}}\right)^2 + k_2\left(\frac{r_{1e}}{r}\right)^6 + k_3\left(\frac{r_{1e}}{r}\right)^{12} \tag{3.1.6}$$

denklemleri ile verilir. Burada e alt indisi denge durumunu ve r_{1e} dengedeki en yakın komşu uzaklığını gösterir.

Esneklik sabiti enerji yoğunluğuna bağlı olduğu kadar denge durumuna da bağlanmıştır ve fcc metalleri için tek boşluk oluşum enerjisi E_{1f} bağıntısı (Colinet ve v.d. 1985 ve Manh vd. 1995) potansiyel parametreleri aşağıdaki denklemlerle hesaplanmaktadır. (Deng vd. 2002):

$$k_0 = -E_f/9 - \Omega(-2989C_{11} + 2989C_{12} + 5481C_{44})/42840 \tag{3.1.7}$$

$$k_1 = \Omega(-939C_{11} + 939C_{12} + 1311C_{44})/9520 \tag{3.1.8}$$

$$k_2 = \Omega(32C_{11} - 32C_{12} - 33C_{44})/1020 \tag{3.1.9}$$

$$k_3 = 8\Omega(-C_{11} + C_{12} - 9C_{44})/5355 \tag{3.1.10}$$

burada Ω atomik hacimdir.

Model parametreleri a örgü parametresi, E_c bağlanma enerjisi, E_f tek boşluk oluşum enerjisi ve C_{11}, C_{12}, C_{44} esneklik sabitleri kullanılarak uygun olarak belirlenmiştir. Etkileşme potansiyeli $f(r)$ kesme fonksiyonu ile 2. komşu noktasından başlar ve bu nokta 2. ve 3. en yakın komşu civarındaki 3 noktada biter.

Al-Pb alaşımı için atomlararası potansiyel bazı düzeltmeler ile Jhonson'un formülü esas alarak elde edilmiştir (Hu ve v.d. 2000).

$$\phi^{Fang-Deng}(r) = \frac{1}{2}\left[\frac{\Omega^{Pb} f^{Pb}(r)}{\Omega^{Al} f^{Al}(r)}\phi^{Al}(r) + \frac{\Omega^{Al} f^{Al}(r)}{\Omega^{Pb} f^{Pb}(r)}\phi^{Pb}(r)\right] \qquad (3.1.11)$$

alınır. Burada Ω^{Al} ve Ω^{Pb} sırasıyla Al ve Pb atomlarının atomik hacmidir.

Al ve Pb elementleri için bu modelde kullanılan giriş parametreleri Tablo 3.1.'de verilmektedir.

Tablo 3.1. Al ve Pb metalleri için Fang-Deng YDAGAM modeli giriş parametreleri

	a (A°)	**E_c (eV)**	**E_{1f} (eV)**	**C_{11} (GPa)**	**C_{12} (GPa)**	**C_{44} (GPa)**
Al	4.0496	3.39	0.64	108	62	28.3
Pb	4.9502	2.03	0.50	48.8	41.4	14.8

Al ve Pb metalleri için GAM model parametreleri Tablo 3.2.'de verilmektedir.

Tablo 3.2. Al ve Pb metalleri için Fang-Deng YDAGAM model parametreleri

	***α* (eV)**	***N***	***f_e***	***F_0* (eV)**	***k_0* (eV)**	***k_1* (eV)**	***k_2* (eV)**	***k_3* (eV)**	***l_0* (eV)**	***l_1* (eV)**	***l_2* (eV)**	***l_3* (eV)**
Al	1.19	0.3	0.34	2.75 (3.4)	-0.113	-0.066	0.054	0.032	-0.027	0.603	-4.289	9.884
Pb	0.13	0.5	1.66	1.53 (2.3)	-0.316	0.247	-0.046	0.035	-0.007	0.236	-2.050	5.33

Parantez içinde verilen değerler sıvı E_c'ye fit edilerek bulunan değerlerdir.

3.2. Fang-Zhu İkili Karıştırılamaz FCC Alaşım Sistemleri İçin YDAGAM Modeli (FZ-YDAGAM)

Bu çalışmada bu modelin ikili karıştırılamaz fcc alaşım sistemlerine uygulaması ele alınmıştır. A ve B metallerinin kristal yapısına göre önerilen potansiyel fonksiyonları kullanılmıştır. Alaşım potansiyeli alaşımı oluşturan metallerin saf (pure) halleri için öne sürülen potansiyel fonksiyonu kullanılarak elde edilmiştir. Alaşım formunda kullanılan bileşenler için önerilen metod genel hatlarıyla Fang-Deng metoduyla aynı olup, farklı olan terimler aşağıda belirtilmiştir.

Bu modelde bir öncekinden farklı olarak Enerji düzeltme terimi;

$$M^{FZ-YDAGAM}(P) = \alpha\left\{1 - \exp\left[-\left(\ln\left|\frac{P}{P_e}\right|\right)^2\right]\right\} \tag{3.2.1}$$

denklemi ile verilir.

$$f(r) = f_e\left(\frac{r_{1e}}{r}\right)^6 \tag{3.2.2}$$

denklemi ile verilen atomik elektron yoğunluğundaki f_e terimi (Hu ve v.d. 2001);

$$f_e = \frac{\sqrt{E_c}}{\Omega} \tag{3.2.3}$$

olarak alınır. Burada Ω atomik hacimdir.

Bu model için alaşım potansiyeli ise;

$$\phi^{FZ-YDAGAM}(r) = \frac{1}{2}\left[\frac{f^B(r)}{f^A(r)}\phi^{AA}(r) + \frac{f^A(r)}{f^B(r)}\phi^{BB}(r)\right] \tag{3.2.4}$$

burada A ve B sırasıyla A ve B metallerini göstermektedir. Alaşım içindeki AA ve BB türlerinin çiftler potansiyeli $\phi^{AA}(r)$ ve $\phi^{BB}(r)$ olarak A ve B metallerinin saf haldeki çiftler potansiyeli alınmaktadır. Bu potansiyeller A ve B metallerinin fcc yada bcc yapısında olmasına göre değişir.

Model parametreleri (α, k_{ce} ve potansiyel fonksiyonundaki k değerleri gibi), a örgü parametresi, E_c bağlanma enerjisi, E_f tek boşluk oluşum enerjisi ve C_{11}, C_{12}, C_{44}, C_{13}, C_{33} esneklik sabitleri gibi mevcut fiziksel parametreleri kullanılarak potansiyellere uygun olarak belirlenmiştir.

Fcc metal potansiyellerinin kesme mesafesi 5. ve 6. komşu mesafeleri arasında yer almaktadır.

$$r_{ce} = r_5 + k_{ce}(r_6 - r_5) \tag{3.2.5}$$

burada r_{ce} kesme mesafesi, k_{ce} model parametresidir.

Alınan atomlar arası mesafe r_{ce} den daha küçük veya r_{ce} ye eşit ise fcc metalleri için çiftler potansiyeli (Shu 2001) ;

$$\phi_{fcc}^{FZ-YDAGAM}(r) = k_0 + k_1\left(\frac{r}{r_{1e}}\right) + k_2\left(\frac{r}{r_{1e}}\right)^2 + k_3\left(\frac{r}{r_{1e}}\right)^6 + k_4\left(\frac{r}{r_{1e}}\right)^{-12} + k_5\left(\frac{r}{r_{1e}}\right)^{-1} \tag{3.2.6}$$

eğer mesafe r_{ce} den büyükse $\phi_{fcc}^{FZ-YDAGAM}(r) = 0$ olur.

Bu modelde çalışılan fcc metalleri için fiziksel giriş parametreleri Tablo 3.3.'de, model parametreleri ise Tablo 3.4.'de verilmiştir.

Tablo 3.3. Fcc metalleri için FZ-YDAGAM modeli giriş parametreleri

	a (A°)	**E_c (eV)**	**E_{1f} (eV)**	**C_{11} (GPa)**	**C_{12} (GPa)**	**C_{44} (GPa)**
Ag	4.0857	2.95	1.10	123	92.0	45.3
Cu	3.6147	3.49	1.17	169	122	75.3
Ni	3.5236	4.44	1.60	247	153	122

Tablo 3.4. Fcc metalleri için FZ-YDAGAM model parametreleri

	Ag	**Cu**	**Ni**
α (eV)	-0.0001666	0.00316257	0.003515689
N	0.82	0.6	0.42
k_c	0.3	0.3	0.1
F_0 ***(eV)***	1.85 (2.57)	2.32 (3.15)	2.84 (3.395)
k_0 ***(eV)***	0.2821774	1.499487	3.3719958
k_1 ***(eV***	0.1474579	-0.650171	-1.56871677
k_2 ***(eV)***	-0.0803378	0.097645	0.2434557
k_3 ***(eV)***	0.00303516	-0.000056	-0.0000122
k_4 ***(eV)***	0.084663779	0.098837	-0.150326
k_5 ***(eV)***	-0.55494136	-1.178326	-2.4124929

Parantez içinde verilen değerler sıvı E_c'ye fit edilerek bulunan değerlerdir.

3.3.İkili Karıştırılamaz Alaşım Sistemleri İçin Önerilen YDAGAM Efektif Çiftler Potansiyel Yaklaşımı

Bu tezde çalışılan YDAGAM' da etkin çiftler etkileşmelerini elde edebilmek için orijinal GAM'a dayanan FS etkin çiftler potansiyel yaklaşımını kullandık. $F(\rho)$ gömme fonksiyonunun ikinci ve daha yüksek türevlerinin ihmal edilmesi önerildi. Böylece atomlar saf metal için

$$\phi_{eff}(r) = \phi(r) - 2F'(\rho) f(r) M(P) \tag{3.3.1}$$

ifadesi ile verilen $\phi_{eff}(r)$ etkin çiftler etkileşmesi ile etkileşirler. Burada $F'(\rho)$ gömme fonksiyonunun birinci türevidir. Bu tezde FS modeline dayanan İkili Karıştırılamaz Alaşım sistemleri İçin YDAGAM efektif çiftler potansiyel yaklaşım formu öne sürülmüştür ve

$$\phi_{eff}^{AB}(r) = \phi_{AB}(r) - 2F'_{AB}(\rho) f_{AB}(r) M_{AB}(P_{AB}) \tag{3.3.2}$$

şeklinde verilir. Çalışılan modellerden Fang-Deng YDAGAM için farklı atom türleri arasındaki alaşım efektif çiftler potansiyeli $\phi_{AB}(r)$ Johnson'un formu esas alınarak elde edilmiştir (Hu ve v.d. 2000),

$$\phi^{AB(Fang-Deng)}(r)=\frac{1}{2}\left[\frac{\Omega^{Pb}f^{Pb}(r)}{\Omega^{Al}f^{Al}(r)}\phi^{Al}(r)+\frac{\Omega^{Al}f^{Al}(r)}{\Omega^{Pb}f^{Pb}(r)}\phi^{Pb}(r)\right] \qquad (3.3.3)$$

alaşım efektif çiftler potansiyeli $\phi_{AB}(r)$ Fang-Zhu YDAGAM modelinde ise Johnson'un formu gibidir,

$$\phi^{AB(FZ-YDAGAM)}(r)=\frac{1}{2}\left[\frac{f^{B}(r)}{f^{A}(r)}\phi^{AA}(r)+\frac{f^{A}(r)}{f^{B}(r)}\phi^{BB}(r)\right] \qquad (3.3.4)$$

şeklinde alınmıştır. Burada AA ve BB ikili alaşım içindeki A ve B tür atomları göstermektedir. $\phi^{AA}(r),\phi^{BB}(r)$ Fang-Deng YDAGAM için denklem (3.1.6) ve Fang-Zhu YDAGAM için ise denklem (3.2.6)da verilen tek bileşenlerin sistemlerin çiftler potansiyelleridir. Yukarıdaki denklemlerde $r_{1eAB}=(r_{1eAA}+r_{1eBB})/2$ ve $f_{eAB}=(f_{eAA}+f_{eBB})/2$ olmak üzere

$$f_{AB}(r)=f_{eAB}\left(\frac{r_{1eAB}}{r}\right)^{6} \qquad (3.3.5)$$

ve $\alpha_{AB}=(\alpha_{AA}+\alpha_{BB})/2$ *ve* $P_{eAB}=(P_{eAA}+P_{eBB})/2$ olmak üzere

$$M_{AB}^{Fang-Deng}(P_{AB})=\alpha_{AB}\left(\frac{P_{AB}}{P_{eAB}}\right)^{2}\exp\left[-\left(\frac{P_{AB}}{P_{eAB}}\right)^{2}\right] \qquad (3.3.6)$$

$$M_{AB}^{FZ-YDAGAM}(P_{AB}) = \alpha_{AB}\left\{1 - \exp\left[-\left(\ln\left|\frac{P_{AB}}{P_{eAB}}\right|\right)^2\right]\right\} \tag{3.3.7}$$

$$P_{AB} = \sum f_{AB}^2(r_{ij}) \tag{3.3.8}$$

şeklindedir.

BÖLÜM 4

SIVILARIN YAPISI VE TERMODİNAMİK BÜYÜKLÜKLER

Hacmi V olan N parçacıklı bir sistem için dağılım fonksiyonunu bölüm içerisinde tanımlanacak bağıntılarla elde edebiliriz. Sistem için durum vektörü $\{R_i\}$ ile gösterilmektedir (Cusack 1987). Ortalama sayı yoğunluğu

$$n_0 \equiv \frac{N}{V} \tag{4.1}$$

şeklinde verilir. Tek bir parçacığın merkezinin bir noktayı doldurabildiği kabul edilirse, uzaydaki tüm noktalar ya tek parçacıkla dolu bölge yada boş olacaktırlar. Dirac δ fonksiyonuna göre tek parçacık yoğunluk fonksiyonu,

$$v^{(1)}(r) \equiv \sum_{i=1}^{N} \delta(r - R_i) \tag{4.2.1}$$

şeklinde ve

$$\int v^{(1)}(r)\, dr = N \tag{4.2.2}$$

olarak alınabilir. İki parçacık yoğunluk fonksiyonu ise,

$$v^{(2)}(\mathrm{r}_1, \mathrm{r}_2) \equiv \sum_{i}^{N} \sum_{j \neq 1}^{N-1} \delta(r_1 - R_i)\, \delta(r_2 - R_j) \tag{4.3.1}$$

şeklindedir. Bu parçacıklar R_i ve R_j de sıfıra giderler. Eğer bu ifadenin r_2'ye göre türevi alınırsa katkı $r_2 = R_j \neq R_i$ olduğu zaman,

$$\int v(2)\,dr = (N-1)\sum_{i}^{N} \delta(r_1 - R_i) = (N-1)\,v^{(1)}(r_1) \tag{4.3.2}$$

şeklini alır. Eğer parçacıklar fiziksel sistemlerdeki atom veya iyonlar ise sabit değillerdir. Zaman ve grup ortalamaları alınmalı ve $\left\langle V^{(1)}(r)\right\rangle; n^{(1)}(r)$ ile gösterilir. Buna göre $n^{(1)}(r)\,dr$; dr deki ortalama parçacık merkezi sayısını verir ve bunun tekten fazla olamayacağı çünkü parçacıkların grup oluşturmayacağı varsayımına göre $n^{(1)}(r)\,dr$ aynı zamanda parçacığın dr de bulunma olasılığıdır. Bu yüzden $n^{(1)}(r)$ sayı yoğunluk fonksiyonu veya tekil-parçacık dağılım fonksiyonu olduğunda,

$$\int n^{(1)}(r)\,dr = N \tag{4.4}$$

dir. Burada $n^{(1)}(r)$ sayı yoğunluk fonksiyonu veya *tek-parçacık dağılım fonksiyonu*'dur. Eğer (4.3.b)'deki denklemin ortalaması alınırsa,

$$dr_1 \int_{v} n^{(2)}(r_1, r_2)\,dr_2 = (N-1)\,n^{(1)} r_1\,dr_1 \tag{4.5}$$

burada $n^{(2)}(r_1, r_2)\,dr_1\,dr_2$ parçacıkların aynı anda dr_1, dr_2 de bulunma olasılığıdır. (4.5) eşitliğinin iki tarafının anlamı r_1'de parçacık bulunma olasılığının $n^{(1)}(r)\,dr_1$, dr_2 olarak toplanan parçacık sayısıyla çarpımı V hacmini verir. $(N-1)n^{(2)}$ iki parçacık dağılım fonksiyonudur.

$n^{(2)}(r_1, r_2) \neq n^{(1)}(r_1)\,n^{(1)}(r_2)$ çünkü r_2'nin bulunma olasılığı r_1'inkinden etkilenir. Eğer r_1-r_2 aralığında bariz parçacıklar arası kuvvetler varsa bu beklenen bir durumdur. Bir çift dağılım fonksiyonu $g^{(2)}(r_1, r_2)$

$$n^{(2)}(r_1,r_2) \equiv n^{(1)}(r_1)\,n^{(1)}(r_2)\,g^{(2)}(r_1,r_2) \tag{4.6.1}$$

$r_1 - r_2 \to \infty, g^{(2)} \to 1$ olması beklenir çünkü parçacıklar arası etkileşim kaybolur.

Eğer sistem homojen ise, $n^{(1)}(r_1) = n^{(1)}(r_2) = n_0$ ardışık olarak

$$n^{(2)}(r_1,r_2) = n_0^2 g^{(2)}(r_1,r_2) g^{(2)}(r_1,r_2) \tag{4.6.2}$$

olur. Genellikle $r_2 - r_1 = r$ konulması ve orijinin 1. parçacıkta seçilmesi uygundur. Buna göre (4.5) ve (4.6.2) denklemleri

$$n_0 \int g^{(2)}(r)\,dr = N - 1 \tag{4.7}$$

bağıntısını verir. (4.7) denkleminin açıklaması, '$n_0 g^{(2)}(r)\,dr$ bir parçacığın *dr* noktasında bulunma olasılığını verir burada *dr* orijindeki başka bir parçacıkla olan *r* uzaklığıdır' olarak verilebilir.Bazen parçacığı orijinde kabul eden bir integrand kullanmak faydalıdır.

$$z(r) \equiv n_0 g^{(2)}(r) + \delta(r) \tag{4.8.1}$$

$$\int_v z(r)\,dr = N \tag{4.8.2}$$

Dağınık parçacıkların çoğu sadece homojen değil aynı zamanda izotropiktir. Bu durumda,

$$g^{(2)}(r) \to g^{(2)}(|r|) \to g(r) = \frac{n}{\rho} \tag{4.9}$$

son terimde üs ifadesi düşmüştür; $g(r)$ geleneksel olarak çiftler dağılım fonksiyonu olarak adlandırılır.

Orijinde ve dr kalınlığında bir parça üzerinde merkezlenmiş küresel kabuk içindeki ortalama parçacık sayısı

$$\int_{kabuk} n_0 g(r)\, dr = 4\pi r^2 n_0 g(r)\, dr = n_0\, \rho(r)\, dr \tag{4.10}$$

ifadesi ile verilir.burada $4\pi r^2 g(r)$ Radyal Dağılım Fonksiyonu (RDF) ifadesidir. (4.10) denklediğimizden de anladığımız gibi orijindeki parçacığı r_1 uzaklığına kadar saran parçacıkların ortalama sayısı

$$n_1 \equiv n_0 \int_0^{r_1} \rho(r)\, dr \tag{4.11}$$

dir. Eğer r_1 sadece $g(r)$'nin ilk pikini alır, n_1 en yakın komşuların sayısı veya bazen koordinasyon sayısı olarak adlandırılabilir.

4.1 Sıvı Yapı Teorileri ve İntegral Denklem Yaklaşımları

4.1.1 Varyasyonel Yeniden Düzenlenmiş Hypernetted Chain Integral Denklem Yaklaşımı (VMHNC)

4.1.1.1 Tek Bileşenli Sistemler için

Atomlar – arası etkin çiftler potansiyelinin bilinmesiyle integral denklemler metaller için sıvı yapıyı verebilirler. Yapısal hesaplamalar için, varyasyonel yeniden düzenlenmiş hypernetted chain (VMHNC)' nin sıvıların kabul edilebilir teorisi olduğu gösterilmiş olan integral denklem teorisi ile yapılır (Rosenfeld 1986, Gonzales ve v.d. 1992, Dalgıç ve v.d. 2001). Sıvıların integral denklem teorilerin çoğunun başlangıç noktası homojen ve izotropik sistemler için,

$$h(r) = c(r) + \rho \int d\vec{r}\,' h(|\vec{r} - \vec{r}\,'|) c(\vec{r}\,') \tag{4.12}$$

olarak yazılabilen O – Z denklemidir. Denklem c(r) direk korelasyon fonksiyonunu toplam korelasyon fonksiyonu h(r)=g(r)-1 cinsinden tanımlar. Burada g(r) çiftler dağılım fonksiyonu ve ρ atomik sayı yoğunluğudur. Bu denklem $\phi(r)$ etkin çiftler potansiyelini içeren tam kapalılık bağıntısıyla desteklenir,

$$g(r) = \exp[h(r) - c(r) - \beta\phi(r) - B(r)] \tag{4.13}$$

burada $\beta = (k_B T)^{-1}$ ve B(r) köprü fonksiyonudur. Bu tezde katı küre için Percus-Yevick (PY) denkleminin çözümü; yani $B(r) = B_{PY}(r, \eta)$ kullanılarak B(r)' ye yaklaşım yapılmıştır. $\eta = \eta(\beta, \rho)$ paketleme kesri T sıcaklığında VMHNC konfigurasyonel serbest enerji minimize edilerek

$$\frac{\partial f^{VMHNC}(\beta, \rho, \eta)}{\partial \eta} = 0 \tag{4.14}$$

belirlenir. Burada, f^{VMHNC} konfigürasyonel Helmholtz serbestlik enerjisidir. (Daha fazla bilgi için bakınız Gonzales ve vd. 1992)

4.1.1.2 İki Bileşenli Sistemler için

Homojen ve izotropik sistemler için verilen Ornstein-Zernike denklemi, ikili sistemler için (i, j =1, 2) aşağıdaki gibi

$$h_{ij}(r) = c_{ij}(r) + \sum_{l=1}^{2} \rho_l h_{il}(r) * c_{lj}(r) \tag{4.15}$$

verilir. Burada $c_{ij}(r)$, direkt korelasyon fonksiyonu, $h_{ij}(r) = g_{ij}(r) - 1$ toplam korelasyon fonksiyonu, $g_{ij}(r)$ çiftler kısmi dağılım fonksiyonu ve ρ_l iyonik sayı yoğunluğudur. Kapalılık şartı ise

$$c_{ij}(r) = h_{ij}(r) - \ln\left[g_{ij}(r)\, e^{\beta\phi_{ij}(r) + B_{ij}(r)}\right] \tag{4.16}$$

burada $\phi_{ij}(r)$ atomlararası kısmi çiftler fonksiyonu ve $B_{ij}(r)$ ikili sistemler için PY köprü fonksiyonudur. İkili sıvı metal alaşımları için VMHNC integral yaklaşımı Gonzalez ve arkadaşlarının ki gibidir (Gonzales ve vd. 1993). Konfigürasyonel Helmholtz serbestlik enerji fonksiyonunun $f^{VMHNC}(\beta, \rho, x_l, \eta_\alpha)$ çok bileşenli sistemler için minimizasyonu ise;

$$\frac{\partial f^{VMHNC}(\beta, \rho, x_{l,}, \eta_\alpha)}{\partial \eta_k} = 0 \quad , k=1,2,...,m \tag{4.17}$$

η sistemin kısmi paketleme kesri elde edilir.

4.2 Termodinamik Büyüklükler

4.2.1 İç Enerji

Sıvı metaldeki atomlar gibi, her birinin kütlesi M olan N tane özdeş klasik parçacıklı sistem ele alınsın. Sistemin toplam enerjisi U_T tamamen N tane parçacığın $R_1.....R_N$ koordinatları ile elde ediliyorsa, kanonik topluluk için bu sistemin Q_N bölüşüm fonksiyonu

$$Q_N = \Lambda^{3N} Z_N / N! \tag{4.18}$$

formunda yazılır. Burada Λ tek boyutlu harekette kinetik enerji için

$$\Lambda = (Mk_B T / 2\pi\hbar^2)^{1/2} \tag{4.19}$$

şeklinde verilen bölüşüm fonksiyonu ve Z_N denklem (4.5) ile verilen konfigürasyonal bölüşüm fonksiyonudur. (4.15) denklemindeki N! Etkisi sistemdeki N parçacığın tamamının hesaplamaya katılması gerekliliğinden kaynaklanır.
Sistemin toplam enerjisi termodinamik olarak

$$E = F - T\left(\frac{\partial(F/T)}{\partial T}\right)_V \tag{4.20}$$

ile verilir. Bölüşüm fonksiyonu ile Helmholtz serbestlik enerjisi arasında

$$F = -k_B T \ln Q_N \tag{4.21}$$

bağıntısı vardır 4.18 denklemi ile verilen Q_N bölüşüm fonksiyonunun ve $Z_N = \int .....\int \exp(-\beta U_T(r_1, r_2, ..., r_N)) d^3 r_1 .....d^3 r_N$ denklemi ile verilen Z_N

konfigürasyon bölüşüm fonksiyonunun doğal logaritması alındığında string fonksiyonu yardımıyla

$$\ln Q_N = \frac{3}{2} N \ln \frac{M k_B T}{2\pi\hbar^2} + N \ln V + \ln \iint \exp(-\beta U_t) d^3R_1 ... d^3R_N - N \ln N + N \tag{4.22}$$

$$\ln Z_N = N \ln V + \ln \iint \exp(-\beta U_t) d^3R_1 ... d^3R_N \tag{4.23}$$

bağıntısından elde edilir. Q_N ve Z_N için bulunan bu bağıntılar (4.20) denkleminde kullanıldığında

$$\frac{F}{T} = -N k_B \left[\frac{3}{2} \left(\frac{M k_B T}{2\pi\hbar^2} \right) + \ln V + \frac{1}{N} \ln \iint e^{-\beta U_T} d^3R_1 ... d^3R_N - \ln N + 1 \right] \tag{4.24}$$

ifadesi bulunan Helmholtz serbestlik enerjisi için elde ettiğimiz (4.24) bağıntısı, sistemin toplam enerjisini veren (4.16) denkleminin sağ tarafında kullanılırsa

$$E = \frac{3}{2} N k_B T + \frac{1}{Z_N} \iint U_t \exp(-\beta U_t) d^3R_1 ... d^3R_N \tag{4.25}$$

elde edilir.

Toplam potansiyeli çiftler etkileşme terimi olarak aldığımızda U_t, N parçacıklı sistemdeki bir parçacık çiftinin etkileşmesi olan $\phi(r_{ij})$'nin $N(N-1)/2$ tane toplam olur. Bu durumda

$$E = \frac{3}{2} N k_B T + \frac{N(N-1)}{2} \frac{1}{Z_N} \iint \exp(-\beta U_t) \phi(R_{12}) d^3R_1 ... d^3R_N \tag{4.26}$$

yazılabilir.

İntegral kanonik topluluğun (4.9) g(r) çiftler dağılım fonksiyonu tanımı kullanılarak parçacık başına iç enerji

$$E = \frac{3}{2} N k_B T + \frac{1}{2} \rho \int g^{(2)}(r) \phi(r) r^2 d^3 r \tag{4.27}$$

olarak yazılır. Burada r çift oluşturan parçacıklar arasındaki uzaklıktır (R_{12}).

Gömülü Atom Metod (GAM) modeli için iç enerji formu

$$U_{İE} = \frac{3}{2} k_B T + E(n) + 2\pi n \int_0^{\infty} g(r)\, v(r)\, dr \tag{4.28}$$

şeklindedir. Burada

$$E(n) = F(\rho) = -F_0 \left[1 - n \ln\left(\frac{\rho}{\rho_e} \right) \right] \left(\frac{\rho}{\rho_e} \right)^n \tag{4.29}$$

olarak alınmıştır.

BÖLÜM 5

SONUÇLAR VE TARTIŞMA

5.1 Sıvı bcc Geçiş Metallerinin Atomlararası Çiftler Potansiyelleri

Bu bölümde bazı tek atomlu sıvı bcc geçiş metalleri için ergime noktaları civarında Zhang-Jin Analitik Yeniden Düzenlenmiş Gömülü Atom Metodu (ZJ – AYDGAM), Hu-Zhang Analitik Gömülü Atom Metodu (HZ – AGAM) ve Fang-Zhu Yeniden Düzenlenmiş Analitik Gömülü Atom Metodu (FZ – YDAGAM) kullanılarak hesaplanan etkin çiftler potansiyelleri verilmektedir. Bu çalışmada kullanılan potansiyel fonksiyonlarının parametre seti, bağlanma enerjisine, Born kararlılık denge şartına, kesim mesafesi işlemine, konfigurasyonel serbestlik enerjisini minimize eden bağıntıya ve boşluk oluşum enerjisine fit edilerek elde edilmiştir. Aynı zamanda bu sonuçlar yapı faktörü için iyi bir fiti de elde eder. Çalıştığımız sistemlerin (V, Cr, Fe, Nb, Mo, Ta ve W) termodinamik durumu ve bu durumdaki $\rho(at./A^3)$ deneysel iyonik sayı yoğunlukları ve sıcaklıklar Waseda (Waseda 1980)' dan alınmış ve Tablo 5.1.' de verilmektedir. Ayrıca parametrizasyon işleminde kullanılan a örgü parametresi ve E_c bağlanma enerjisinin hem katıhal hem de sıvıhal deki değerleri ve hacim modülünün sıvıhal deki değeri sırasıyla a^K , a^S , E_c^K , E_c^S , B^S parametreleri ile gösterilmekte ve Tablo 5.1.' de verilmektedir verilen katı parametreleri (Zhang ve v.d. 1999)'dan alınmıştır. Parametrelerde kullanılan K ve S indisleri katı ve sıvı durumları göstermektedir. Bu tezde katı olarak tanımlanan durum katı özellikleri fit edilerek daha önce literatürde var olan parametrelerle çalışılan sistemin ergime noktası civarındaki özellikleridir.

Tablo 5.1. Bazı bcc geçiş metalleri için GAM potansiyel fonksiyonlarının parametrizasyonunda kullanılan giriş parametreleri

Metal	**T(K)**	$\rho(at./\overset{\circ}{A}^3)$	$a^K(\overset{\circ}{A})$	$a^S(\overset{\circ}{A})$	$E_c^K(eV)$	$E_c^S(eV)$	$B^S(eV/\overset{\circ}{A}^3)$
V	2173	0.0633	3.0282	3.1613	5.31	5.208	0.395
Cr	2173	0.0728	2.8846	3.0173	4.10	4.093	0.545
Fe	1833	0.0756	2.8664	2.9796	4.28	4.205	0.426
Nb	2741	0.0493	3.3007	3.4360	7.57	7.492	0.364
Mo	2890	0.0586	3.1468	3.2437	6.82	6.715	0.452
Ta	3269	0.0499	3.3026	3.4222	8.10	7.986	0.669
W	3703	0.0632	3.1650	3.1630	8.90	8.666	0.593

5.1.1 Zhang-Jin AYDGAM Etkin Çiftler Potansiyel Yaklaşımı

Analitik Yeniden Düzenlenmiş Gömülü Atom Metodu potansiyel fonksiyonlarını hem katıhal hem de sıvıhal özelliklerine fit ederek elde edilen parametre seti kullanılarak bazı sıvı bcc geçiş metallerinden periyodik tablodaki yerleşimlerine göre V, Cr, Fe, Nb, Mo, Ta ve W metalleri için atomlararası etkin çiftler potansiyelleri hesaplandı. Bu model için kullandığımız (Zhang ve v.d. 1999) literatüründe yer alan katı model parametre seti (Tablo 2.2.' verilmektedir.) (Zhang ve v.d. 1999)'de verilen ve (denklem 2.1.8 – 2.1.11) leri ile hesaplanan değerler ile aynı sonucu vermediği için biz bu çalışma için k_i (i=1, 2, 3, 4) parametrelerini $r_s = a$ ve $r_c = \sqrt{2}a$ da sistemin potansiyel fonksiyonunu en iyi veren değerleri yeniden elde ettik. ZJ-AYDGAM' ın sıvı sistemler için optimize edilmiş potansiyel parametreleri potansiyel fonksiyonunu en iyi verecek şekilde elde ettiğimiz katı model parametreleri ile karşılaştırılmalı olarak Tablo 5.2.' de parantez içinde verilmektedir.

Tablo 5.2. Bazı bcc geçiş metalleri için ZJ-AYDGAM potansiyel parametreleri

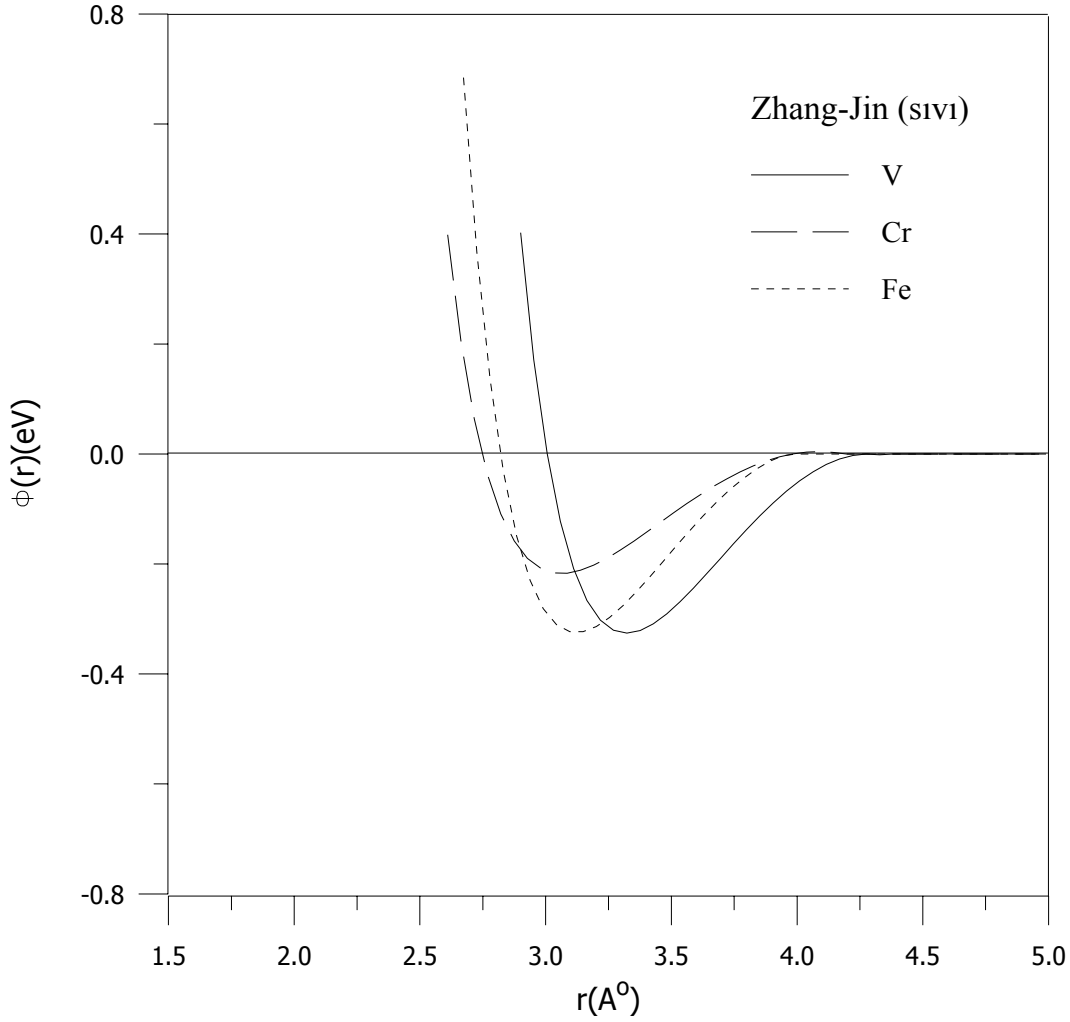
	V	**Cr**	**Fe**	**Nb**	**Mo**	**Ta**	**W**
$\alpha(eV)$	0.117 (0.062)	-0.154 (-0.370)	0.017 (0.008)	0.141 (0.061)	0.022 (0.012)	0.180 (0.144)	0.006 (0.004)
f_e	0.412 (0.407)	0.371 (3.795)	0.395 (0.398)	0.448 (0.434)	0.422 (0.452)	0.471 (0.455)	0.483 (0.555)
F_0 (eV)	3.20 (3.54)	2.30 (2.73)	2.50 (2.85)	4.72 (5.05)	3.71 (4.55)	5.139 (5.045)	4.710 (5.93)
n (eV)	0.477	0.508	0.278	0.608	0.549	0.362	0.464
k_1 (eV)	-4.092 (-3.739)	-3.188 (-1.919)	-3.792 (-3.526)	-5.349 (-8.292)	-3.665 (-2.778)	-5.601 (-5.113)	-4.035 (-3.363)
k_2 (eV)	3.022 (2.762)	2.366 (1.424)	2.804 (2.607)	3.944 (6.114)	2.723 (2.064)	4.163 (3.767)	3.003 (2.503)
k_3 (eV)	-0.560 (-0.512)	-0.439 (-0.264)	-0.519 (-0.483)	-0.730 (-1.131)	-0.507 (-0.384)	-0.769 (-0.699)	-0.560 (-0.467)
k_4 (eV)	5.599 (5.117)	3.029 (1.824)	4.800 (4.464)	8.149 (12.60)	3.049 (2.311)	8.970 (8.118)	3.299 (2.749)
r_c (^{o}A)	4.2825 (4.4575)	4.0794 (4.2545)	4.0537 (4.2013)	4.6678 (4.8448)	4.4502 (4.5736)	4.6705 (4.8253)	4.4759 (4.4598)

Parantez içerisinde verilen değerler sıvı E_c'ye fit edilerek bulunan değerlerdir.

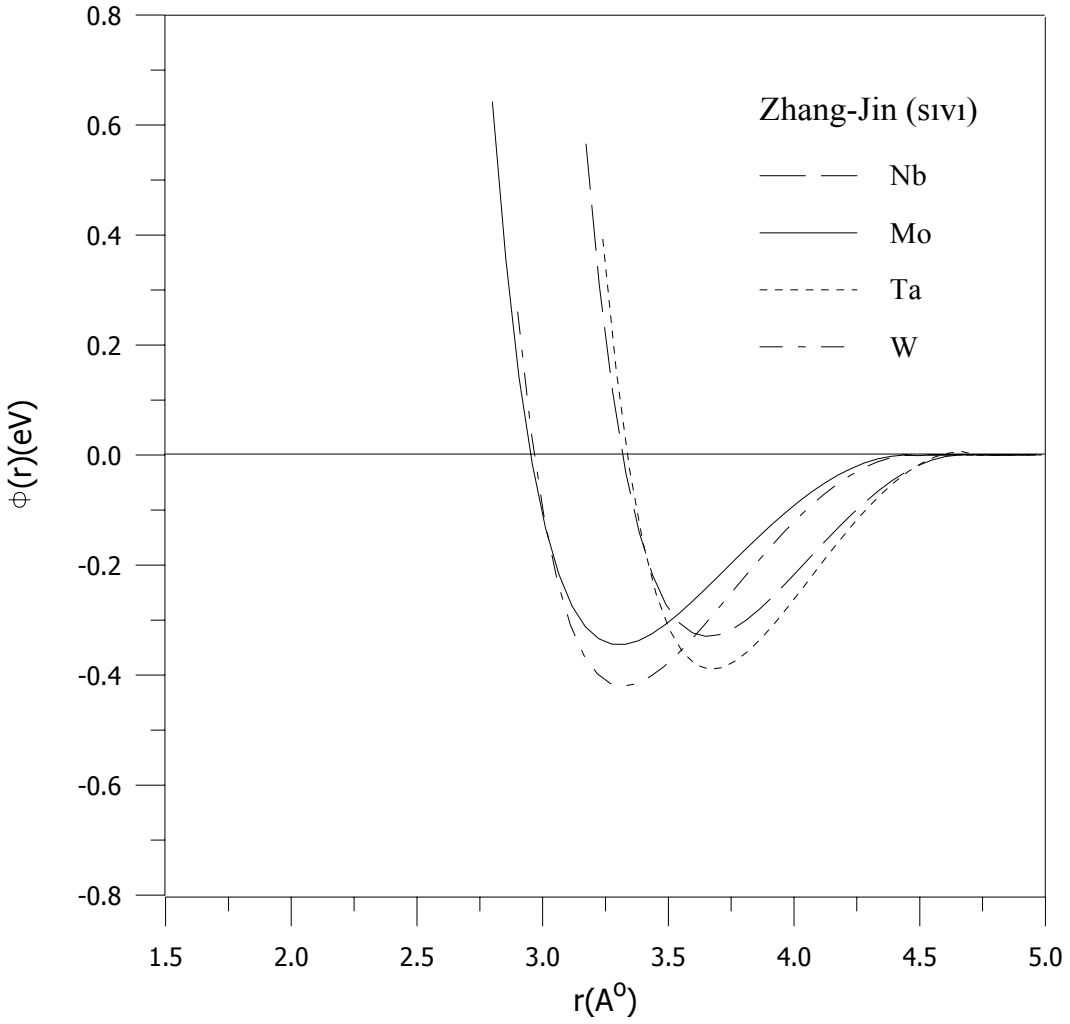
Bcc geçiş metallerinden V, Cr ve Fe metalleri için ZJ-AYDGAM model potansiyel fonksiyonu Şekil 5.1.'de ve Nb, Mo, Ta ve W metalleri için ZJ-AYDGAM model potansiyel fonksiyonu Şekil 5.2.'de verilmektedir. Bu çalışmada, hesaplanan potansiyel fonksiyonları belirli bir kesim mesafesinde kesilmektedir. Bu kesme prosedürü Zhang ve v.d.'den alınmaktadır (Zhang ve v.d. 1999). Bu prosedür $r_s = a$ ve $r_c = \sqrt{2}a$ değerleri arasında seçilmiştir burada a örgü parametresidir. Şekil 5.1.'den görüldüğü üzere aynı periyotta yer alan metallerden Cr için şekil V ve Fe metallerine göre daha sığ ve daha geniştir. Buda bize Cr için atomlararası mesafenin daha uzun olduğunu göstermektedir. Fakat metallerin periyottaki V-Cr-Fe dizilimi göz önüne alınırsa Cr'nin diğer iki metal arasında bir eğilim göstermesi gerekirdi. Bu fark Cr'nin diğer metallerden farklı olarak negatif Couchy basıncına sahip olmasından kaynaklanmaktadır. Şekil 5.2.'ye baktığımızda ise aynı periyotta yer alan Nb-Mo ve Ta-W ikilileri için grafiğin gösterdiği eğilimin uyumlu olduğu gözlenmektedir. Periyodik tabloda yukarıdan aşağıya inildikçe metaller için potansiyel derinliğinin daha fazlası olması gerekir ve burada da aynı sütunda yer alan Nb-Ta ve Mo-W metallerinden Ta, Nb' den ve W ise Mo' dan daha derindir.Bu metaller için çekici etkileşmeler diğerlerine göre daha azdır. Periyodik tabloda soldan sağa doğru gidildikçe atomik hacim azalır ve artan atomik hacim için periyodik tabloda sütundan aşağı inildikçe gömme enerjisi

artar. Bu bilgiyle birlikte Şekil 5.3.'de yine Cr'nin sahip olduğu farkla birlikte metaller periyodik tablo uyum içerisindedirler. Şekil 5.4. için de benzer uyumun görüldüğünü söyleyebiliriz ancak Zhang-Jin modeliyle Nb hariç çalıştığımız bcc metallerinin gömme enerjisi fonksiyonlarının sıfırı kesmediğini gördük.

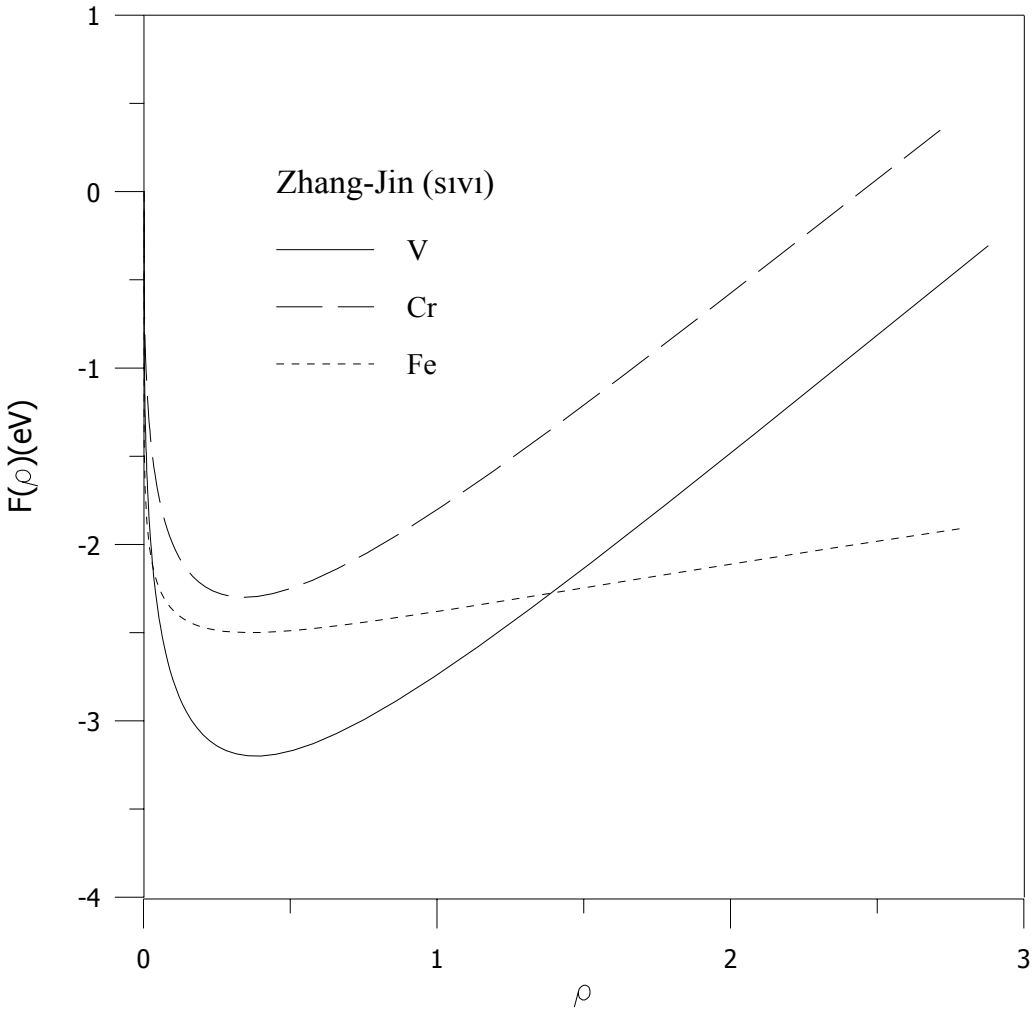
Literatürde var olan Finnis – Sinclair GAM etkin çiftler potansiyel yaklaşımını kullanarak önerdiğimiz AYDGAM etkin çiftler potansiyel yaklaşımı ile sıvı bcc geçiş metallerinden V, Cr, Fe, Nb, Mo, Ta ve W metalleri için hesaplanan etkin çiftler potansiyelleri sırasıyla Şekil 5.5. - 5.11.'de metallerin katı sıvı durumlardaki etkin çiftler potansiyelleri gösterilmiştir. Katı sistemlerde atomlararası bağlanma enerjileri sıvı sistemlere göre daha fazladır yani katı sistemlerde atomlar birbirlerine sıvı sistemlere göre daha sıkı tutunurlar bu nedenle aralarındaki mesafe daha azdır. Buda katı sistemlerde potansiyel derinliğinin sıvı sistemlere göre daha fazla olmasına sebep olmaktadır. V, Cr ve Fe metalleri içinin için hesaplanan etkin çiftler potansiyelleri Şekil 5.12.'de ve Nb, Mo, Ta ve W metalleri için ise Şekil 5.13.'de bir arada verilmiştir. Bu şekillerden grafiklerin Cr metali hariç periyodik tabloyla uyumlu olduğunu görebiliriz. Cr metali negatif Couchy basıncına sahip olması nedeniyle periyodik tabloya uygun bir eğilim göstermiyor. Şekillerden de görülebileceği gibi hesaplanan potansiyellerin birinci ve ikinci komşu atomlarda belirgin bir minimuma sahip olduğu, bunun Johnson [2]'un potansiyeline benzerdir. Artan atomik hacim için, periyodik tabloda sütundan aşağı inildikçe, etkin çiftler potansiyelleri fonksiyonunun derinliği artmaktadır ve buda bize önerdiğimiz AYDGAM etkin çiftler potansiyel yaklaşımının sıvı sistemler için uygulanabilir olduğunu göstermiştir.



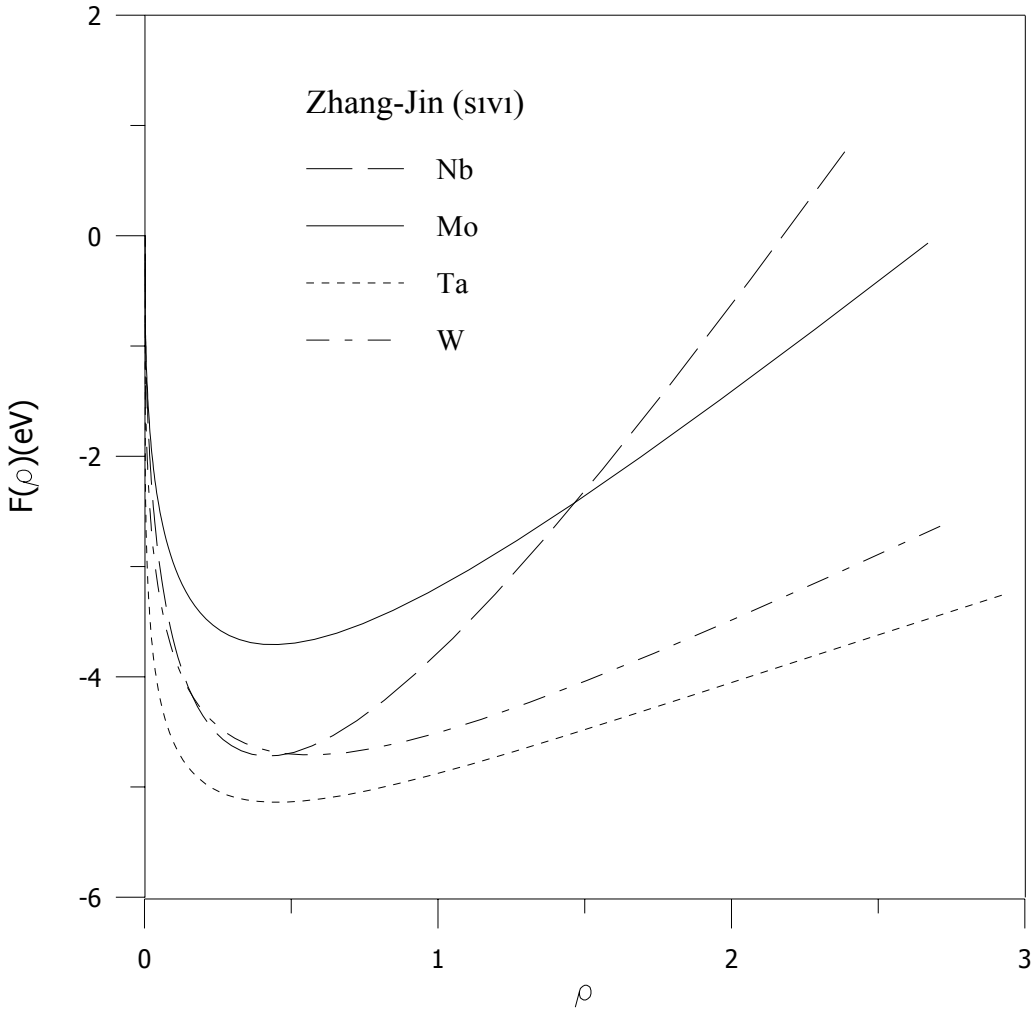
Şekil 5.1. Sıvı V, Cr ve Fe metalleri için Zhang-Jin AYDGAM sıvı parametreleri kullanılarak elde edilen potansiyel fonksiyonu



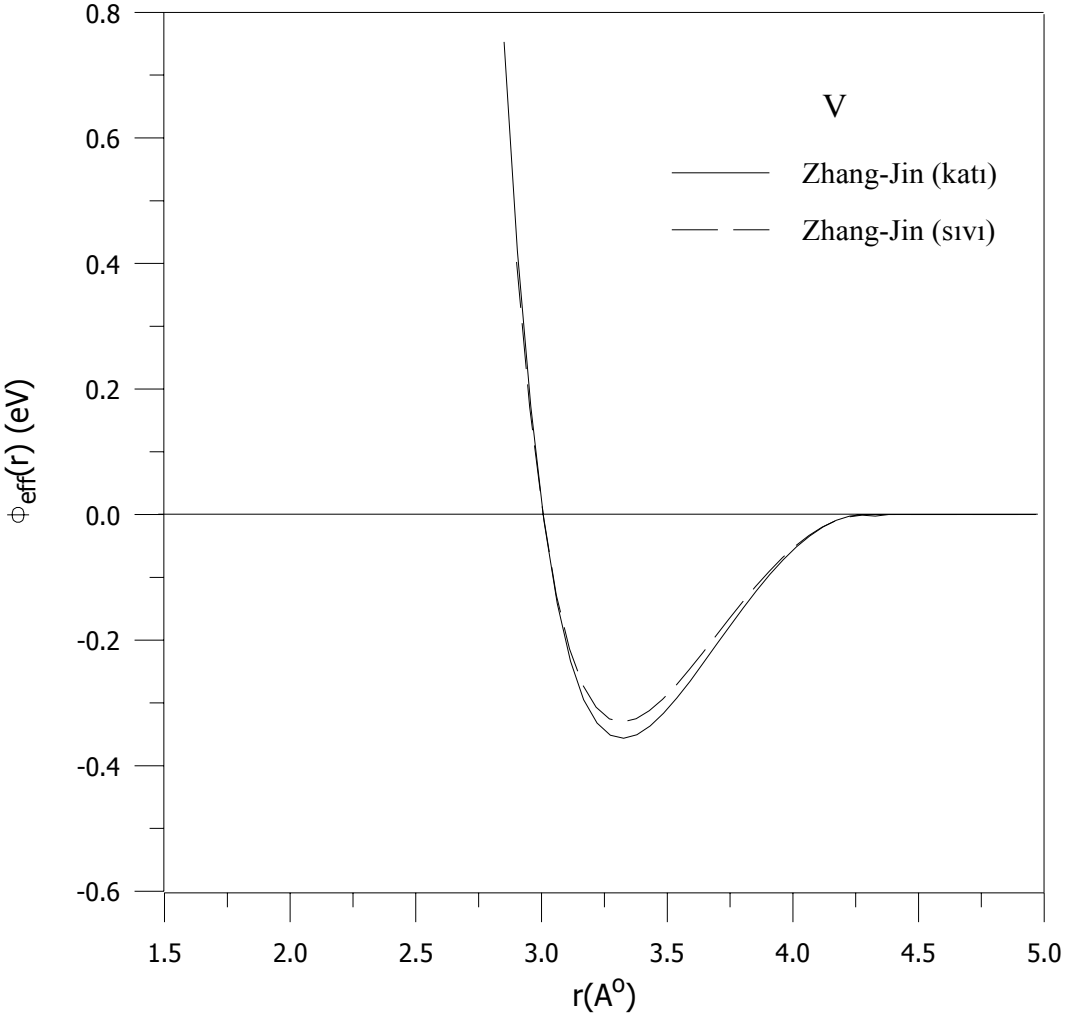
Şekil 5.2. Sıvı Nb, Mo, Ta ve Mo metalleri için Zhang-Jin AYDGAM sıvı parametreleri kullanılarak elde edilen potansiyel fonksiyonu



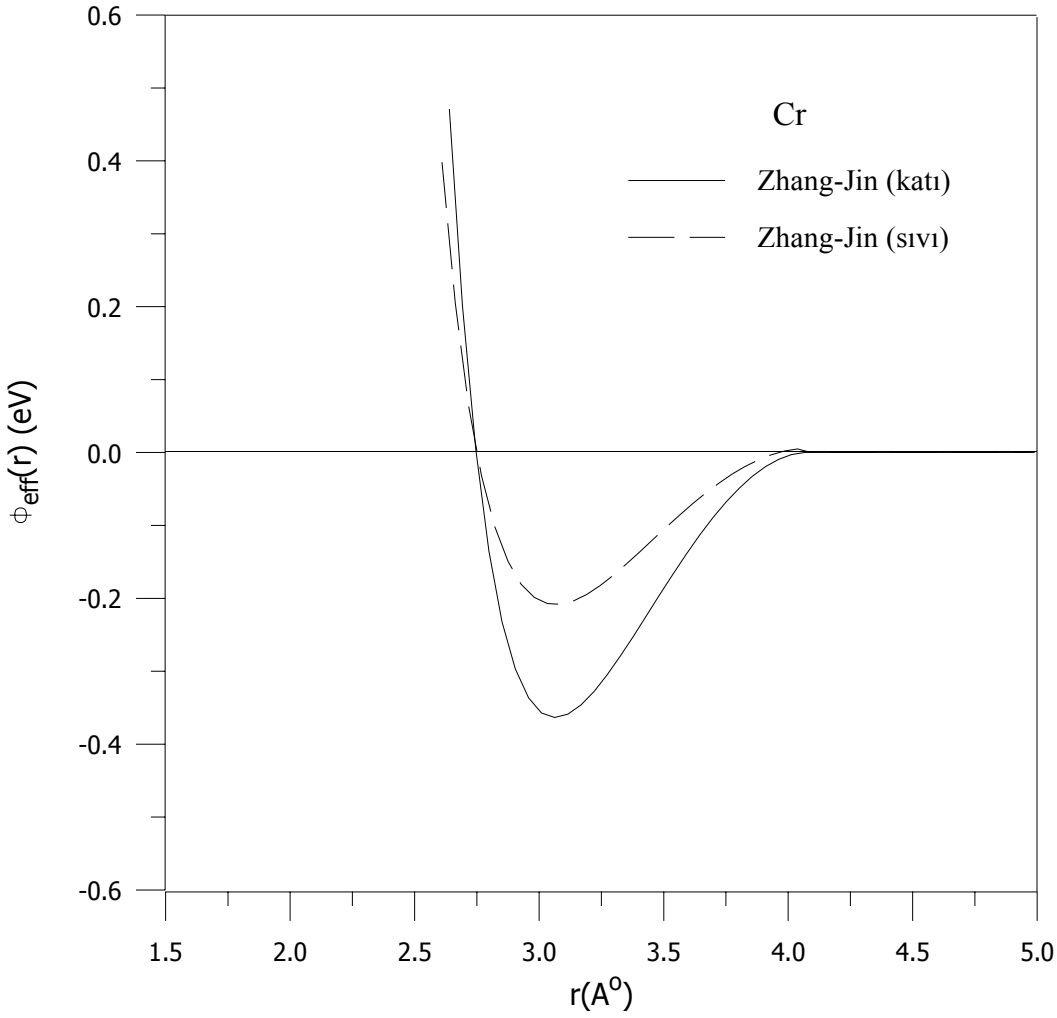
Şekil 5.3. Sıvı V, Cr ve Fe metalleri için Zhang-Jin AYDGAM sıvı parametreleri kullanılarak elde edilen gömme enerjisi fonksiyonu



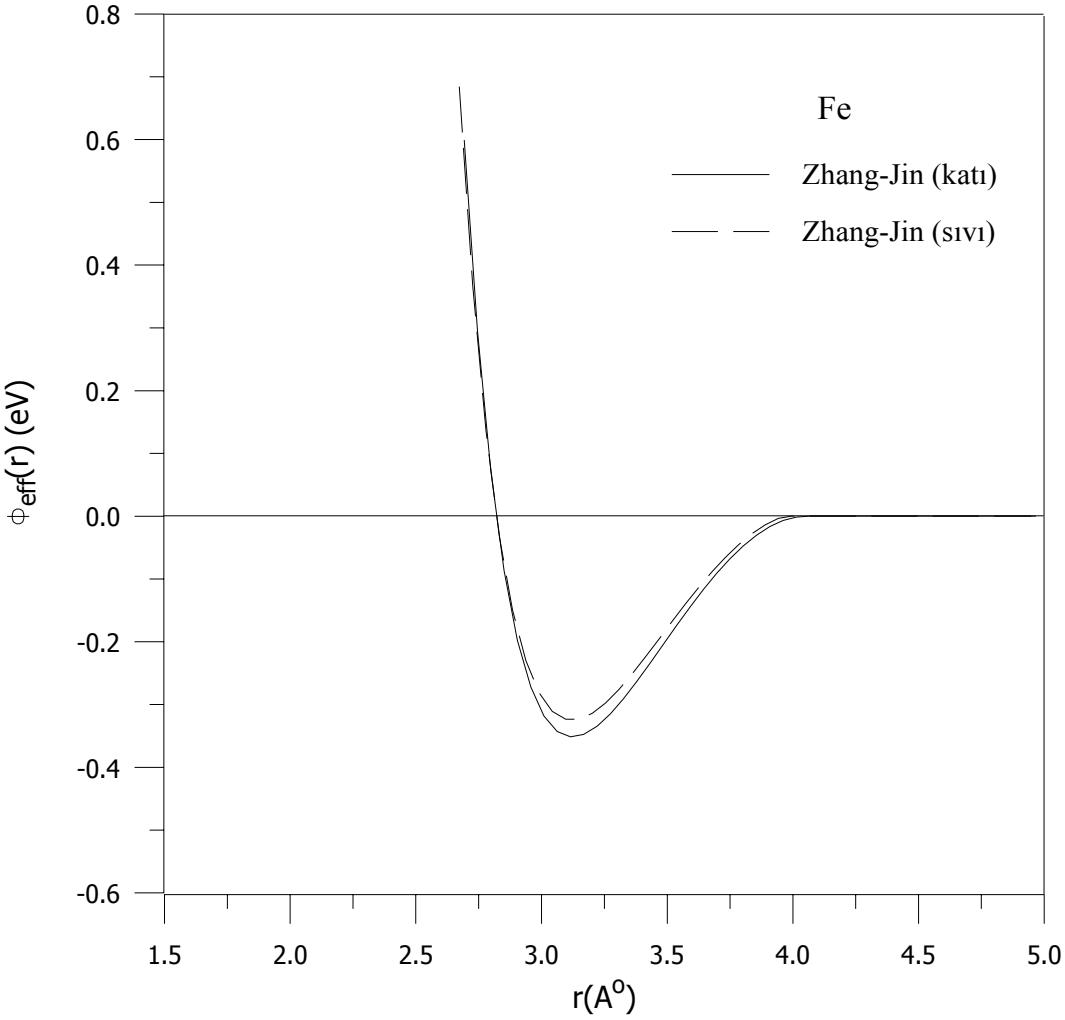
Şekil 5.4. Sıvı Nb, Mo, Ta ve W metalleri için Zhang-Jin AYDGAM sıvı parametreleri kullanılarak elde edilen gömme enerjisi fonksiyonu



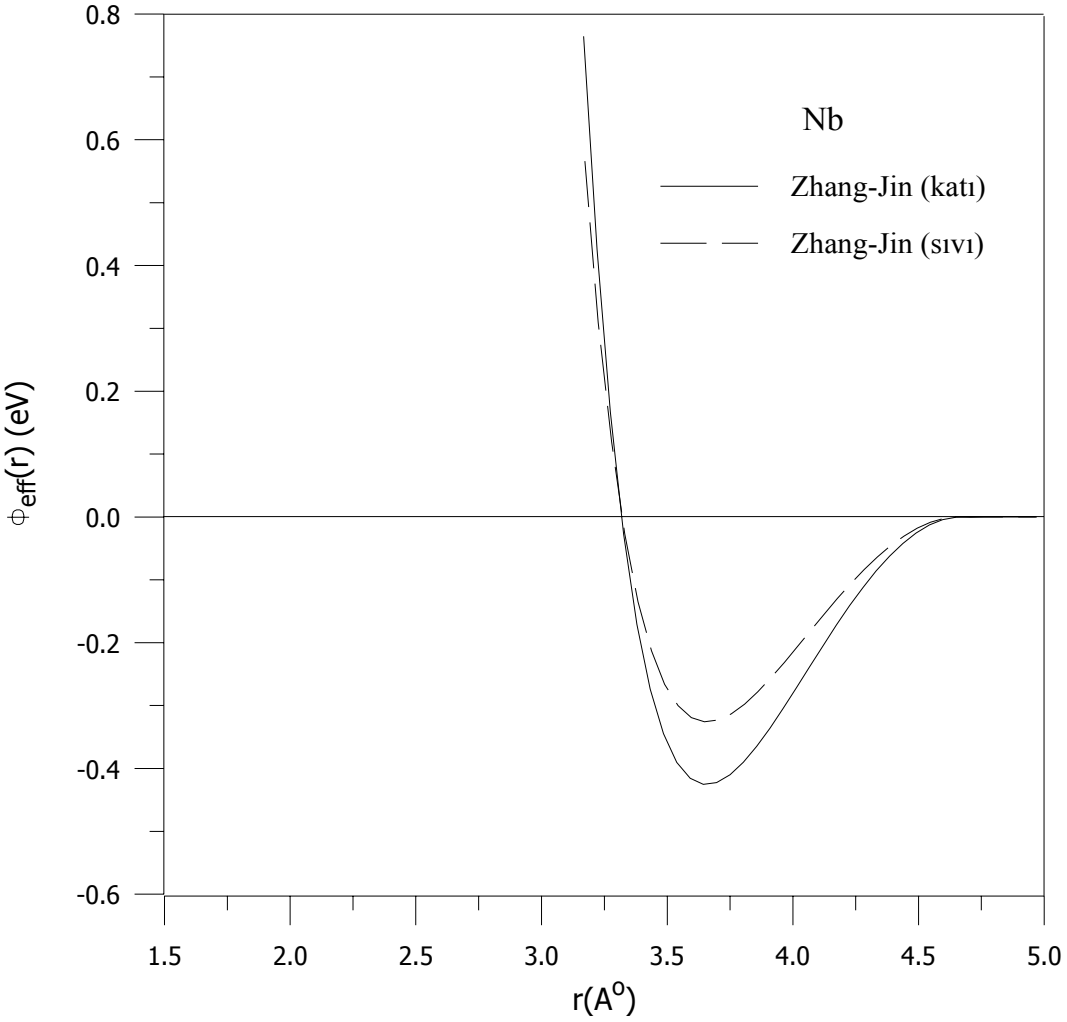
Şekil 5.5. V için Zhang-Jin AYDGAM kullanılarak elde edilen etkin çiftler potansiyel fonksiyonu



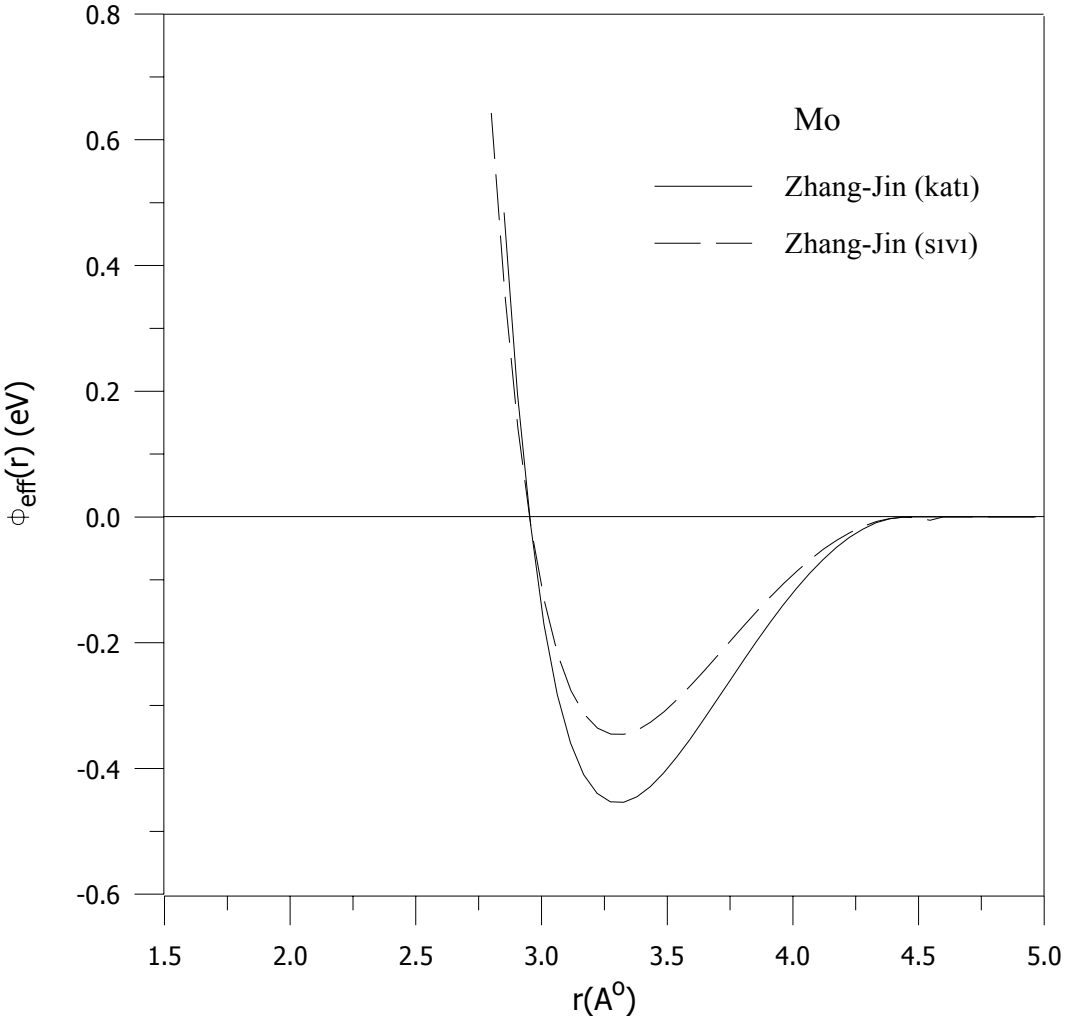
Şekil 5.6. Cr için Zhang-Jin AYDGAM kullanılarak elde edilen etkin çiftler potansiyel fonksiyonu



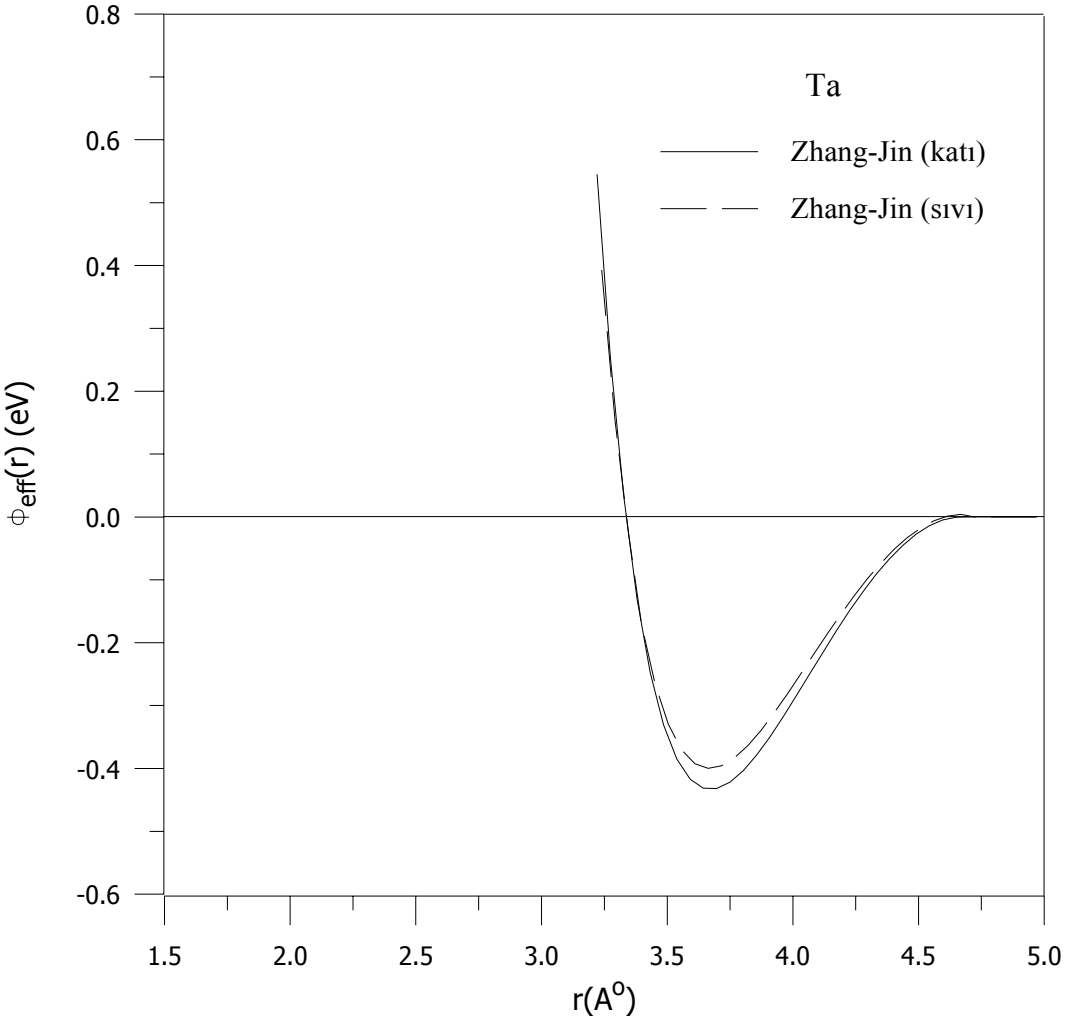
Şekil 5.7. Fe için Zhang-Jin AYDGAM kullanılarak elde edilen etkin çiftler potansiyel fonksiyonu



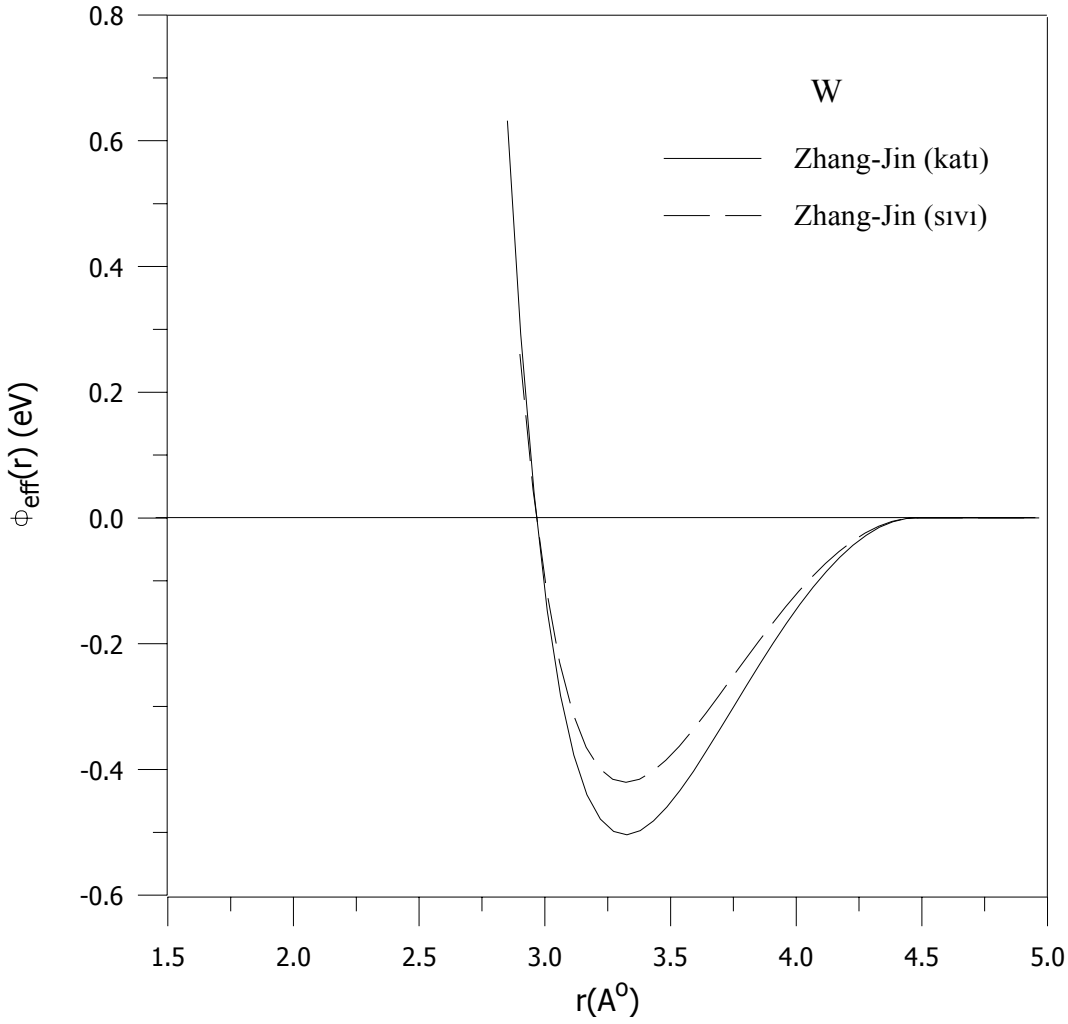
Şekil 5.8. Nb için Zhang-Jin AYDGAM kullanılarak elde edilen etkin çiftler potansiyel fonksiyonu



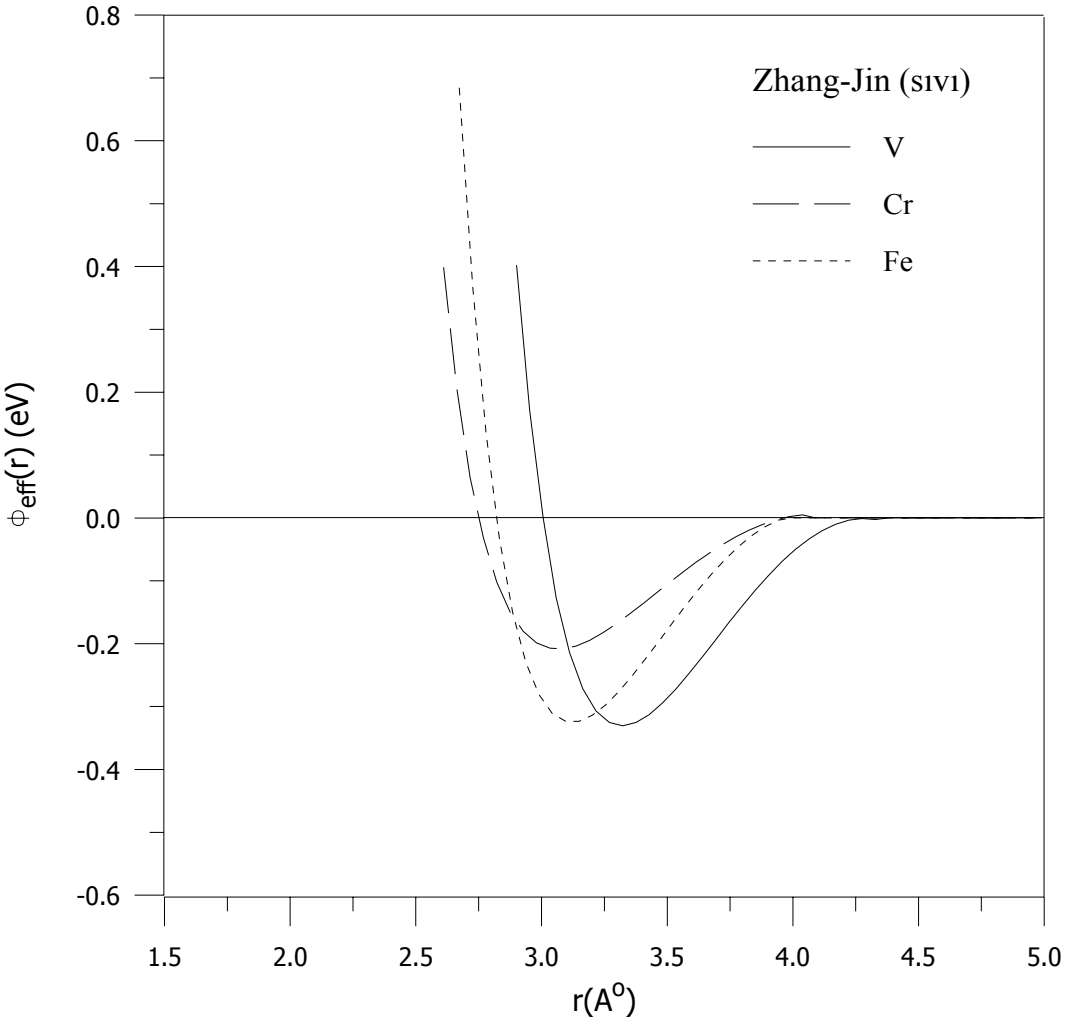
Şekil 5.9. Mo için Zhang-Jin AYDGAM kullanılarak elde edilen etkin çiftler potansiyel fonksiyonu



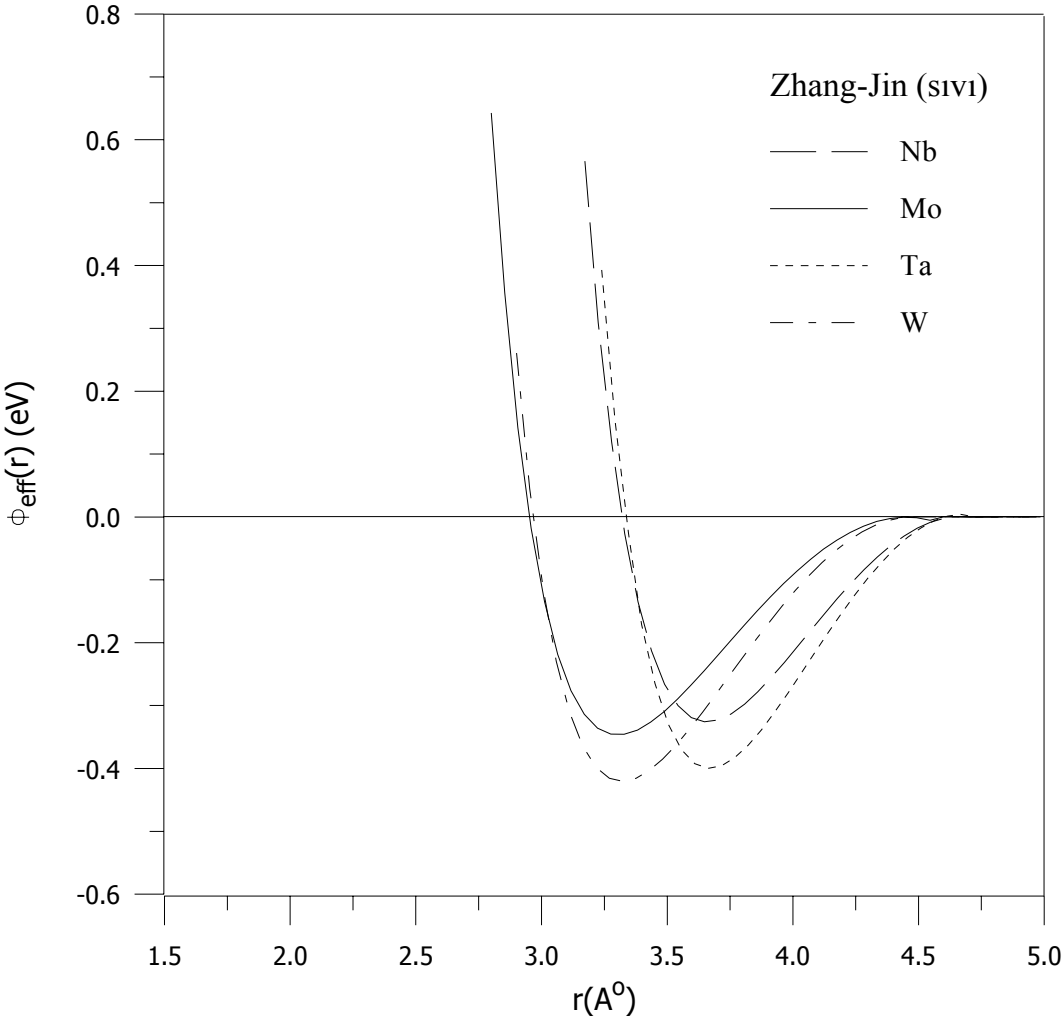
Şekil 5.10. Ta için Zhang-Jin AYDGAM kullanılarak elde edilen etkin çiftler potansiyel fonksiyonu



Şekil 5.11. W için Zhang-Jin AYDGAM kullanılarak elde edilen etkin çiftler potansiyel fonksiyonu



Şekil 5.12. Sıvı V, Cr ve Fe metalleri için Zhang-Jin AYDGAM kullanılarak elde edilen etkin çiftler potansiyel fonksiyonu



Şekil 5.13. Sıvı Nb, Mo, Ta ve W metalleri için Zhang-Jin AYDGAM kullanılarak elde edilen etkin çiftler potansiyel fonksiyonu

5.1.2 Hu-Zhang AGAM Etkin Çiftler Potansiyel Yaklaşımı

Analitik Gömülü Atom Metodu potansiyel fonksiyonlarını hem katıhal hem de sıvıhal özelliklerine fit ederek elde edilen parametre seti kullanılarak bazı sıvı bcc geçiş metallerinden V, Cr, Fe, Nb, Mo, Ta ve W için atomlararası etkin çiftler potansiyelleri hesaplandı. Hu-Zhang AGAM' nun sıvı sistemler için optimize edilmiş potansiyel parametreleri katı model parametreleri (Hu ve v.d. 2002) ile karşılaştırılmalı olarak Tablo 5.3.' de verilmektedir.

Tablo 5.3. Bazı bcc geçiş metalleri için Hu-Zhang AGAM potansiyel parametreleri

	V	**Cr**	**Fe**	**Nb**	**Mo**	**Ta**	**W**
$\alpha(eV)$	0.137 (0.089)	-0.356 (-0.281)	0.003 (0.0026)	0.262 (0.196)	0.047 (0.033)	0.116 (0.073)	0.062 (0.042)
f_e	1	1	1	1	1	1	1
F_0 (eV)	3.20 (3.54)	2.30 (2.73)	2.50 (2.85)	4.72 (5.05)	3.71 (4.55)	5.14 (5.39)	4.71 (5.93)
n (eV)	0.42	0.98	0.35	0.41	0.52	0.47	0.36
K_1 (eV)	673.039 (500.06)	8547.89 (6966.53)	1478.54 (1123.69)	1723.79 (1244.57)	8859.23 (6493.81)	3598.77 (2605.50)	9973.49 (7719.48)
K_2 (eV)	-629.26 (-467.54)	-7769.60 (-6332.2)	-1287.3 (-978.3)	-1564.0 (-1129.2)	-8045.3 (-5897.2)	-3149.4 (-2280.2)	-8992.5 (-6960.2)
K_3 (eV)	293.740 (218.24)	3522.52 (2870.85)	563.58 (4298.32)	705.897 (509.65)	3644.56 (2671.46)	1375.68 (995.99)	4047.12 (3132.47)
K_4 (eV)	-54.434 (-40.44)	-636.70 (-518.91)	-98.957 (-75.20)	-126.5 (-91.29)	-658.07 (-482.36)	-239.53 (-173.41)	-726.38 (-562.21)
k_{-1} (eV)	78.707 (58.37)	1030.26 (839.66)	199.603 (151.69)	208.294 (150.38)	1071.46 (785.38)	469.637 (340.01)	1226.04 (948.95)
K_0 (eV)	-361.96 (-268.93)	-4694.6 (-3826.1)	-855.74 (-650.36)	-947.97 (-684.43)	-4872.4 (-3571.5)	-2055.6 (-1488.3)	-5528.4 (-4278.9)
r_c (^{o}A)	3.7805 (4.4575)	3.3026 (4.2545)	3.4717 (4.2013)	4.1208 (4.8448)	3.6602 (4.5736)	4.0549 (4.8253)	3.6230 (4.4598)

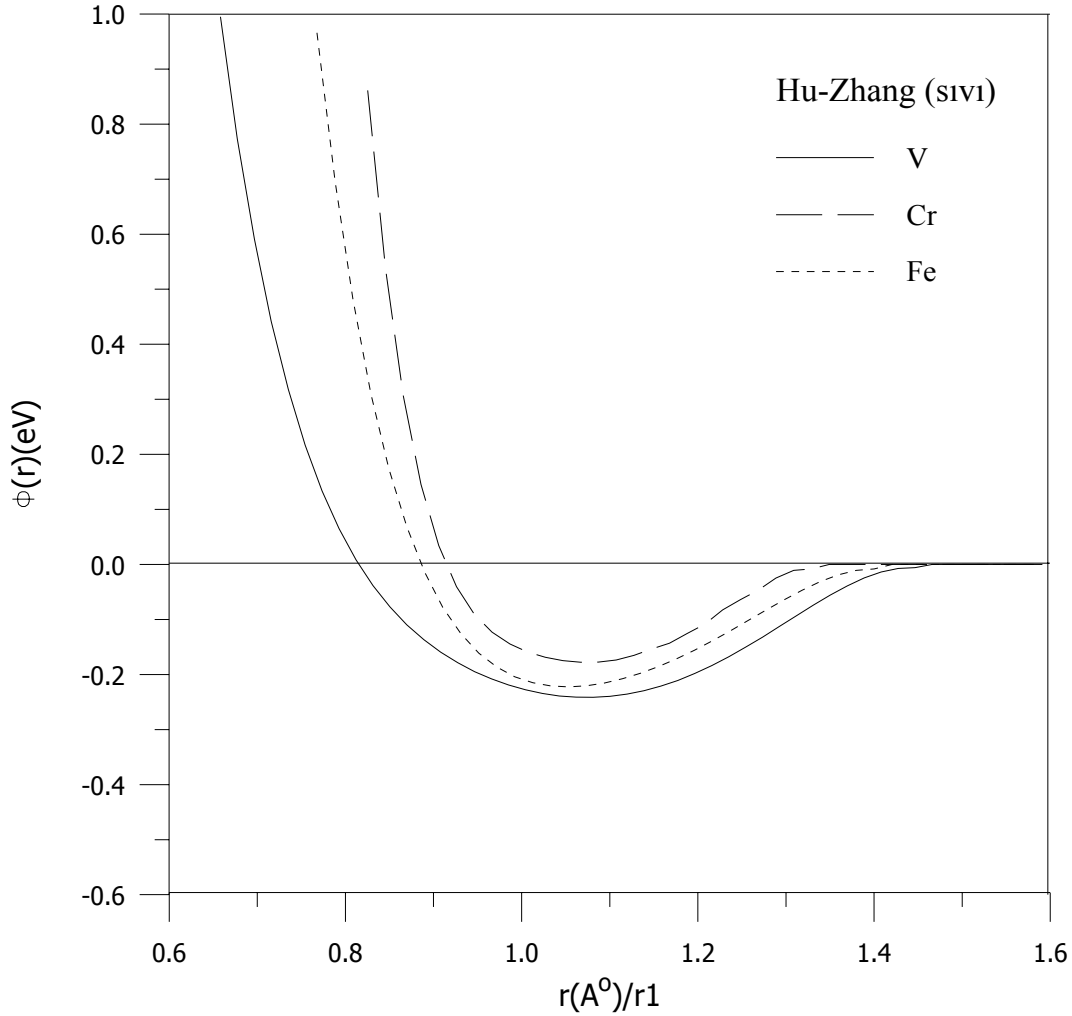
Parantez içinde verilen değerler sıvı E_c'ye fit edilerek bulunan değerlerdir.

Bcc geçiş metallerinden V, Cr ve Fe metalleri için , Nb, Mo, Ta ve W için Hu-Zhang AGAM model potansiyel fonksiyonu Şekil 5.14.'de ve Nb, Mo, Ta ve W metalleri için ise Hu-Zhang AGAM model potansiyel fonksiyonu Şekil 5.15.'de verilmektedir.Bu model için kesme prosedürü (Hu ve v.d. 2002)'den alınmıştır ve bu prosedür $r_c = r_2 + k_c[r_3 - r_2]$ değerleri arasında seçilmiştir. Şekilden de görülebileceği gibi V ve Fe metalleri periyodik tabloda soldan sağa doğru gidildikçe artan atomik hacim özelliği nedeniyle Fe'nin potansiyel derinliği V den daha büyüktür fakat Cr

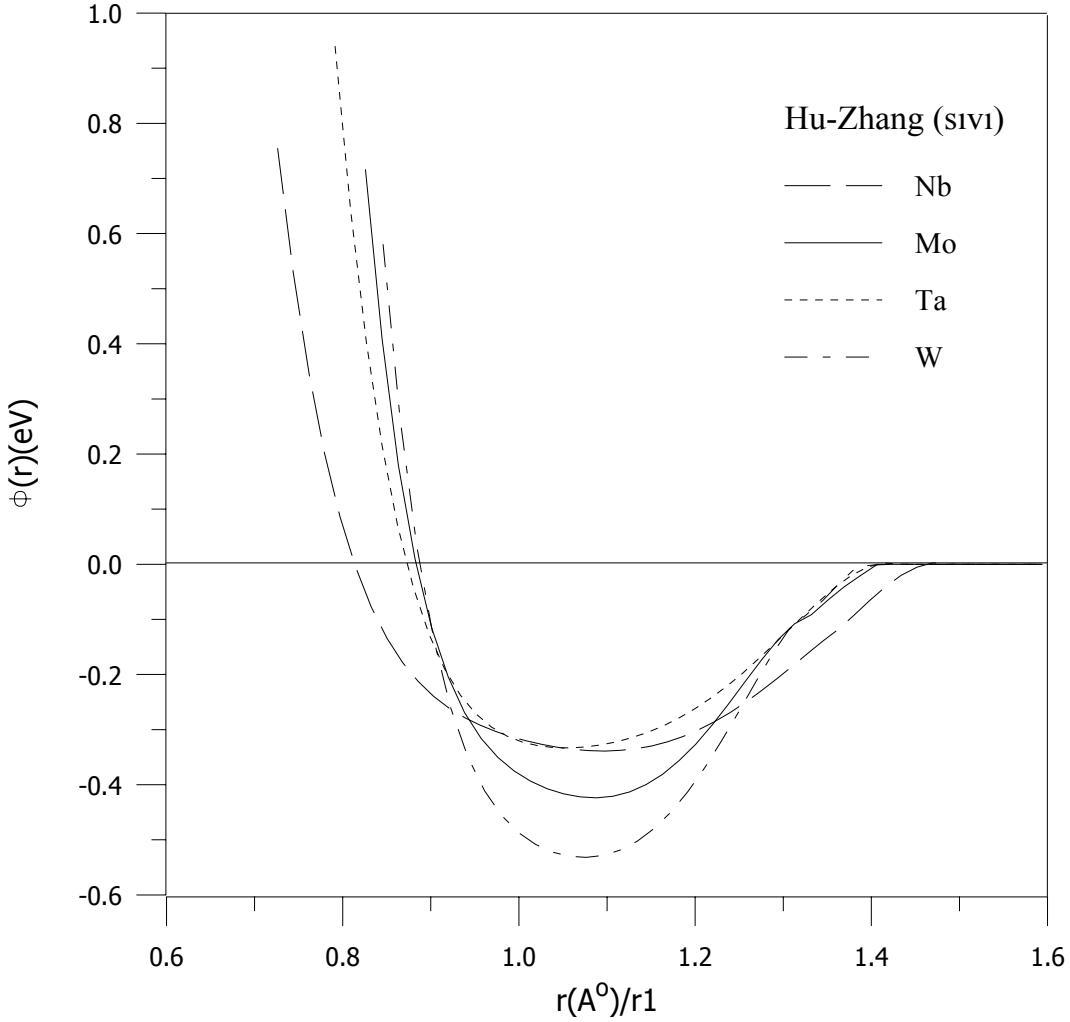
Couchy basıncının negatif olması sebebiyle farklı eğilim göstermektedir. Şekil 5.15.'de metallerde periyodik tablodaki yerleşimlerine göre iyi bir uyum göstermektedirler. Aynı sütunda yer alan metal çiftlerinden (Mo-W ve Nb-Ta) üst periyotta bulunan metalin derinliği alt periyotta bulunan metalin derinliğinden daha büyüktür.

Periyodik tabloda soldan sağa doğru gidildikçe atomik hacim azalır ve artan atomik hacim için periyodik tabloda sütundan aşağı inildikçe gömme enerjisi artar. Sıvı Bcc geçiş metallerinden V, Cr ve Fe metalleri için hesaplanan gömme enerjisi fonksiyonları Şekil 5.16.' da ve Nb, Mo, Ta ve W metalleri için ise Şekil 5.17.'de bir arada verilmiştir. Şekillerden görülebileceği üzere metallerin potansiyel derinlikleri Cr metali hariç periyodik tablo ile aynı eğilimi göstermektedir. Yine bu modelde Şekil 5.17 ve 5.18.'den görüldüğü üzere metallerin gömme enerji fonksiyonları sıfırı kesmemektedirler.

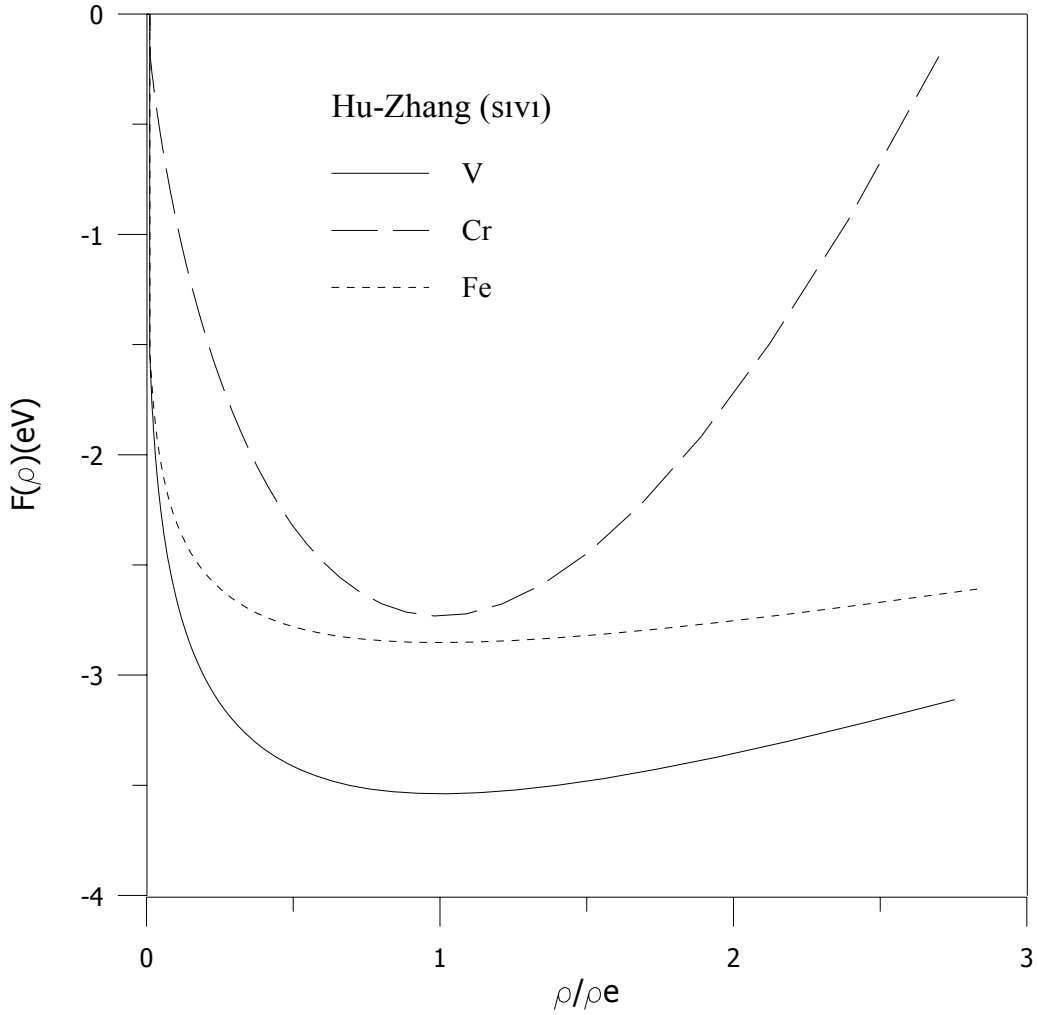
Finnis-Sinclair GAM etkin çiftler potansiyel yaklaşımını kullanarak önerdiğimiz AGAM etkin çiftler potansiyel yaklaşımı ile sıvı bcc geçiş metallerinden V, Cr ve Fe için hesaplanan etkin çiftler potansiyelleri sırasıyla Şekil 5.18. - 5.20.'de gösterilmektedir. Potansiyelin bu formunun birinci ve ikinci komşu atomlar arasında bir minimuma ve en yakın komşu mesafesi içinde itmeye sahip olduğu görülebilir. Hesaplanan etkin çiftler potansiyelleri V, Cr ve Fe metaller için Şekil 5.21.'de ve Nb, Mo, Ta ve W metalleri için ise 5.22.'de bir arada verilmiştir. Katı sistem için potansiyel derinliğinin sıvı sisteme göre daha fazla olması beklenir burada V metali hariç bu şart sağlanmaktadır. Şekil 5.18.'de normalden farklı bir trend sergilemesine dayanarak bu modelde etkin çiftler potansiyel fonksiyonun V metali için doğru çalışmadığını söyleyebiliriz.



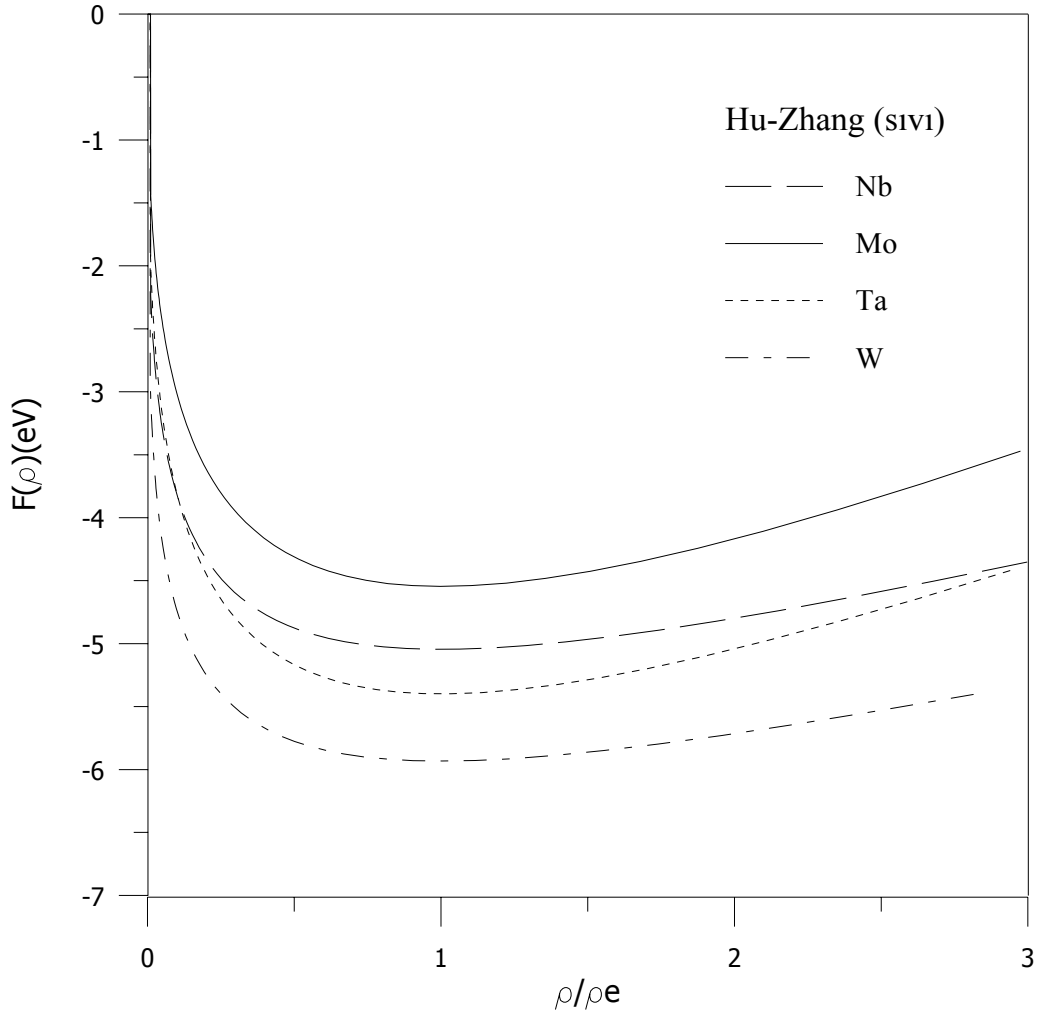
Şekil 5.14. Sıvı V,Cr ve Fe metalleri için Hu-Zhang AGAM kullanılarak elde edilen potansiyel fonksiyonu



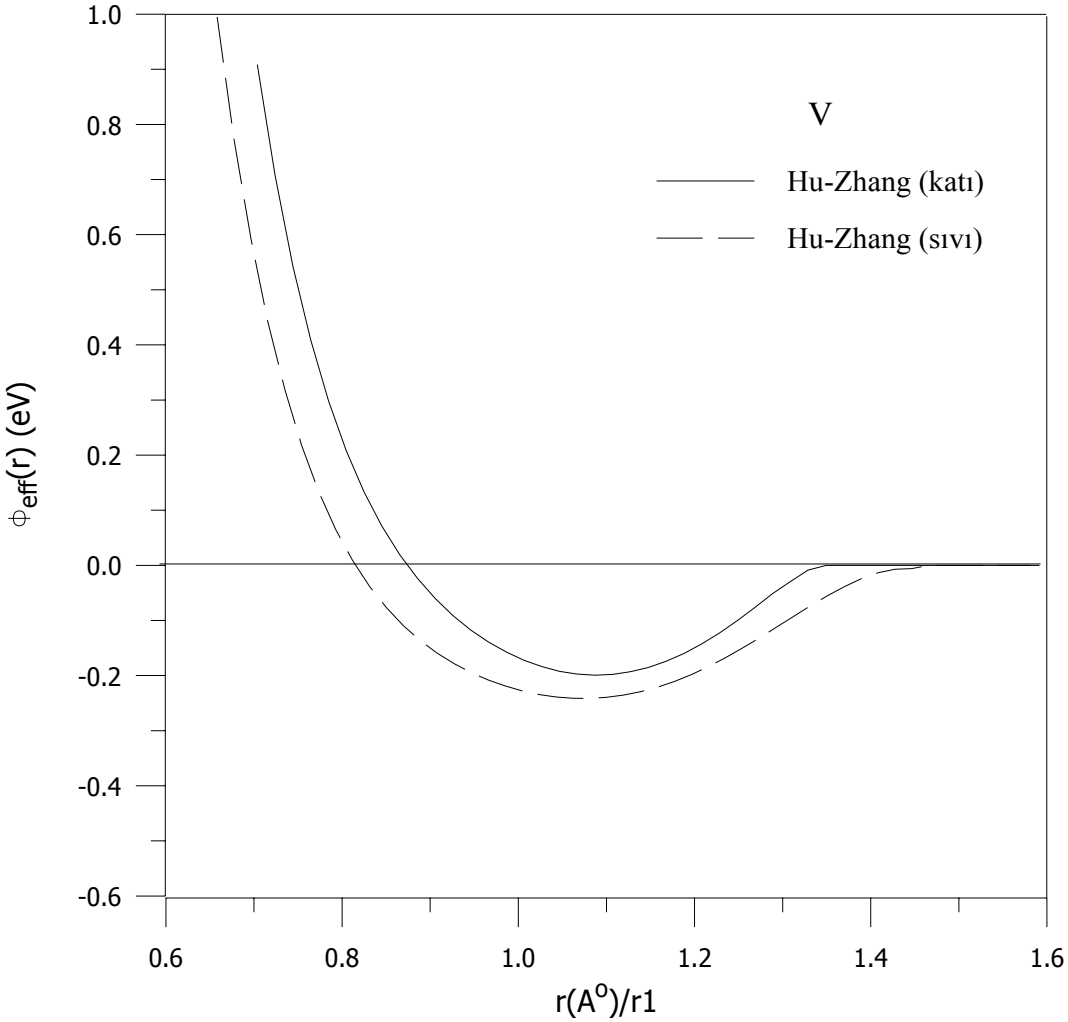
Şekil 5.15. Sıvı Nb, Mo, Ta ve W metalleri için Hu-Zhang AGAM kullanılarak elde edilen potansiyel fonksiyonu



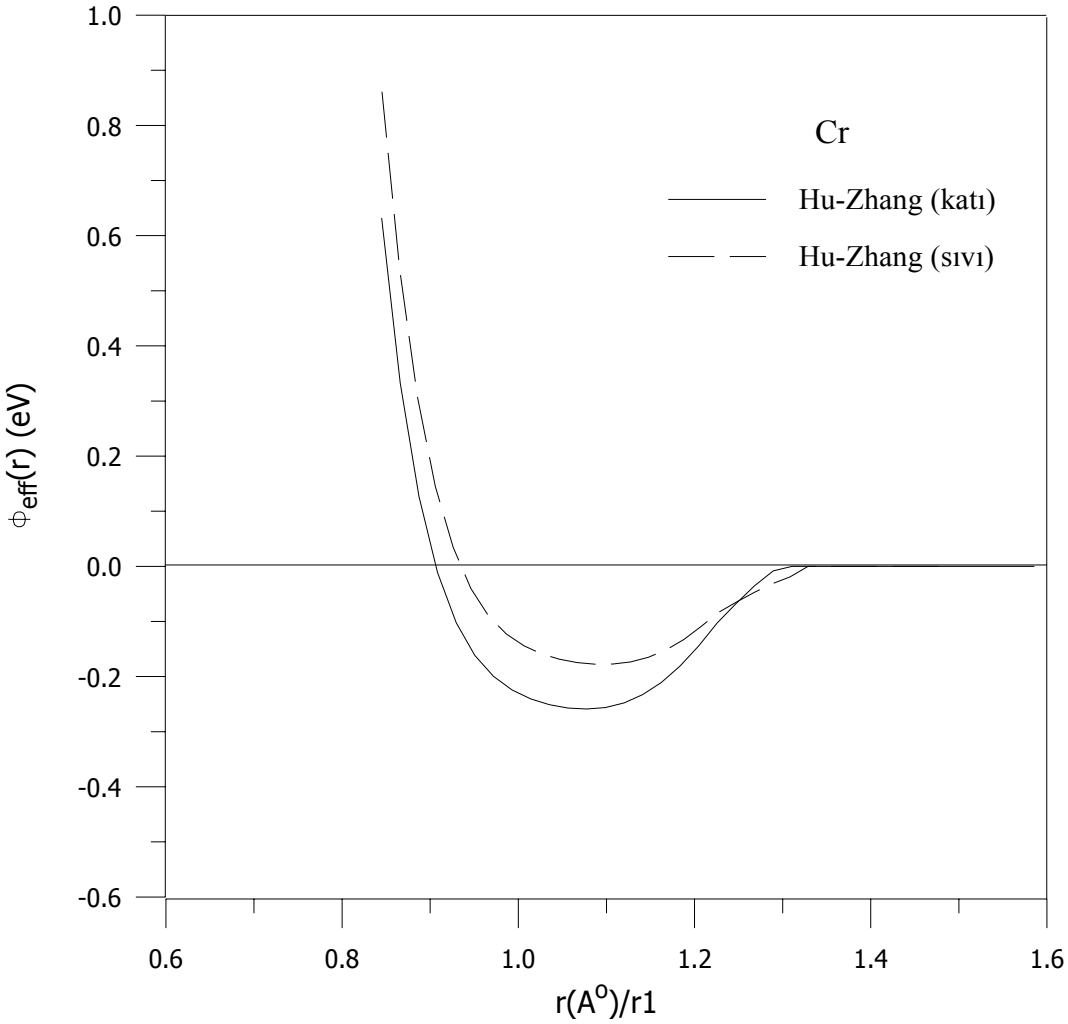
Şekil 5.16. Sıvı V,Cr ve Fe için Hu-Zhang AGAM kullanılarak elde edilen gömme enerjisi fonksiyonu



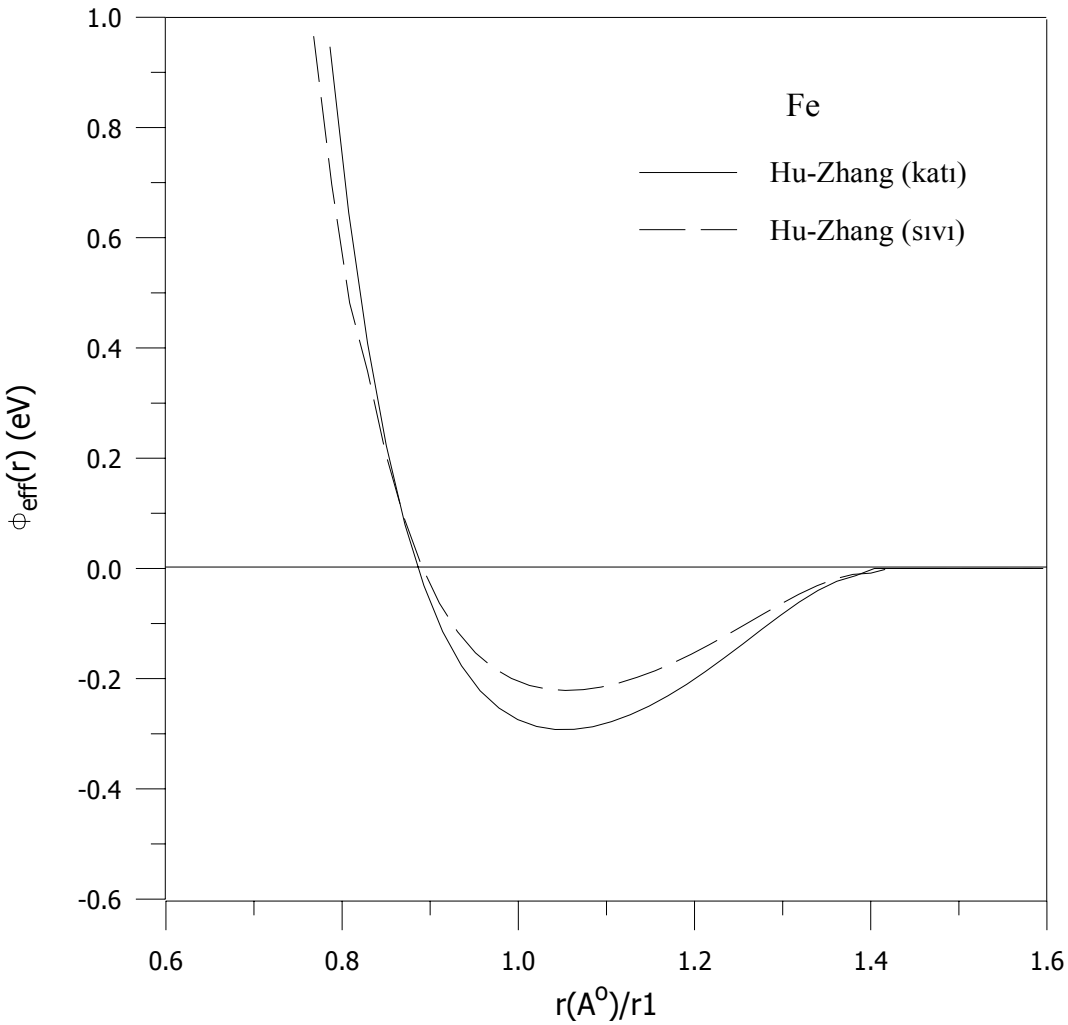
Şekil 5.17. Sıvı Nb, Mo, Ta ve W metalleri için Hu-Zhang AGAM kullanılarak elde edilen gömme enerjisi fonksiyonu



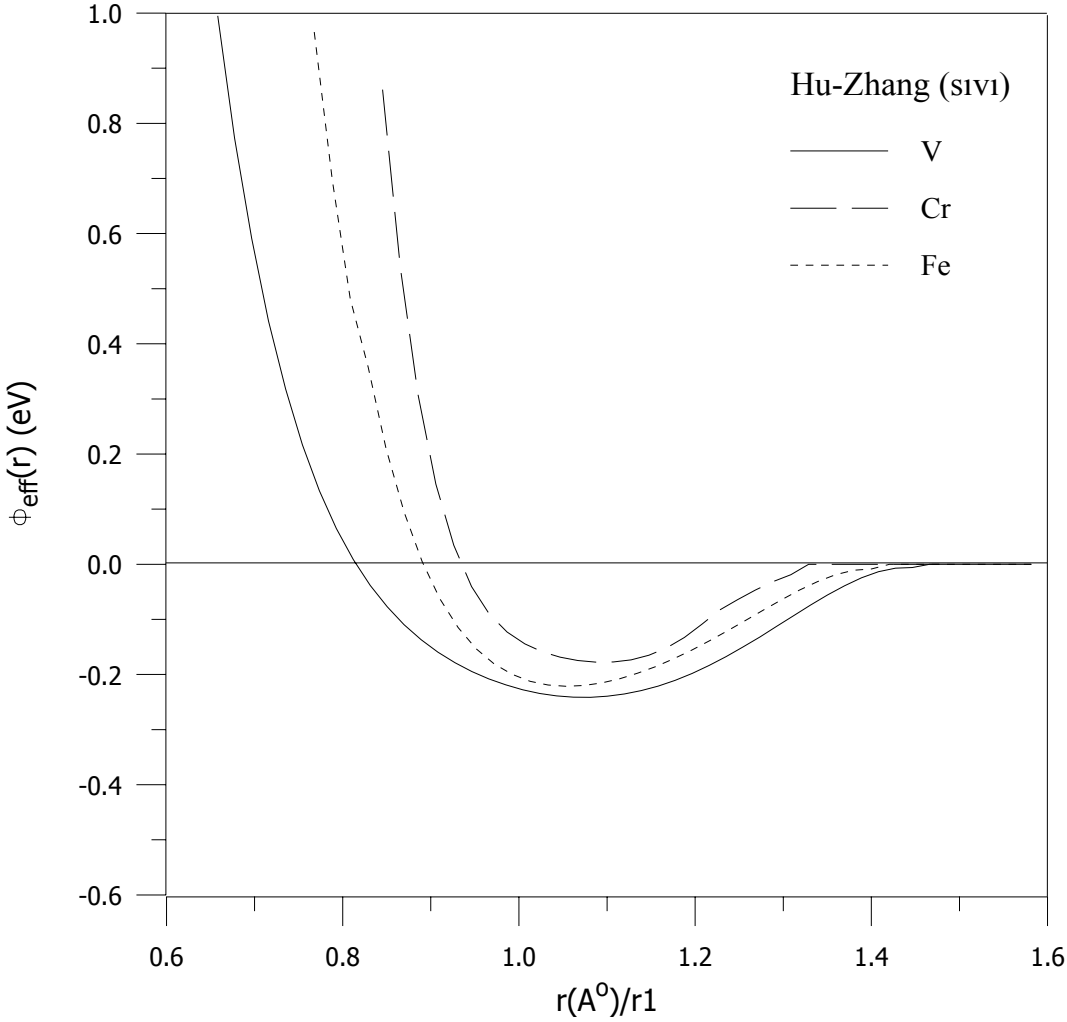
Şekil 5.18. V için Hu-Zhang AGAM kullanılarak elde edilen efektif çiftler potansiyel fonksiyonu



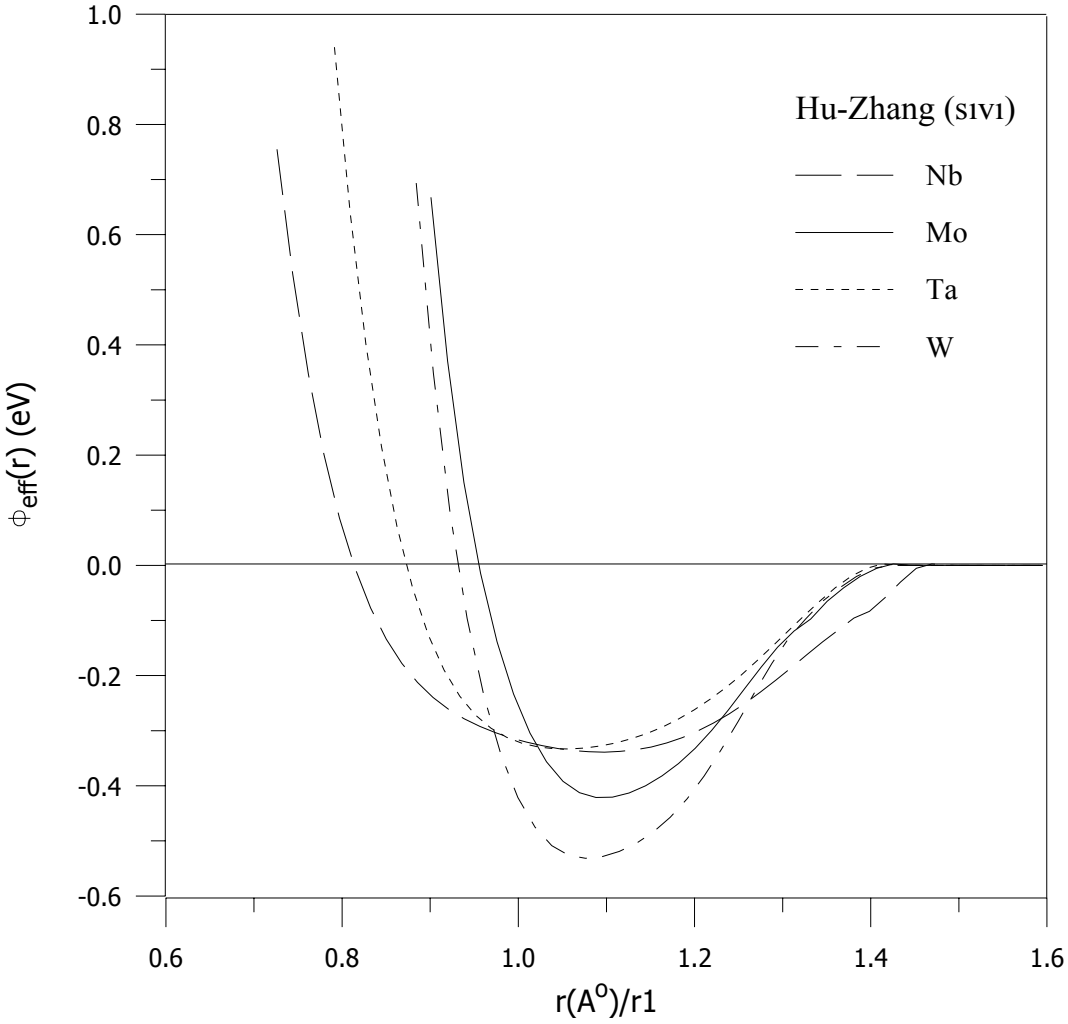
Şekil 5.19. Cr için Hu-Zhang AGAM kullanılarak elde edilen efektif çiftler potansiyel fonksiyonu



Şekil 5.20. Fe için Hu-Zhang AGAM kullanılarak elde edilen efektif çiftler potansiyel fonksiyonu



Şekil 5.21. Sıvı V, Cr ve Fe metalleri için Hu-Zhang AGAM kullanılarak elde edilen efektif çiftler potansiyel fonksiyonu



Şekil 5.22. Sıvı Nb, Mo, Ta ve W metalleri için Hu-Zhang AGAM kullanılarak elde edilen efektif çiftler potansiyel fonksiyonu

5.1.3 Fang-Zhu YDAGAM Etkin Çiftler Potansiyel Yaklaşımı

Yeniden Düzenlenmiş Analitik Gömülü Atom Metodu potansiyel fonksiyonlarını hem katıhal hem de sıvıhal özelliklerine fit ederek elde edilen parametre seti kullanılarak bazı sıvı bcc geçiş metallerinden Fe, Cr, V, Nb, Ta ve W için atomlararası etkin çiftler potansiyelleri hesaplandı. FZ-YDAGAM' nun sıvı sistemler için optimize edilmiş potansiyel parametreleri katı model parametreleri (Fang ve v.d. 2003) ile karşılaştırılmalı olarak Tablo 5.4.' de verilmektedir.

Tablo 5.4. Bazı bcc geçiş metalleri için Fang-Zhu YDAGAM potansiyel parametreleri

	Fe	**Ta**	**W**
$\alpha(eV)$	0.003 (0.0026)	0.116 (0.073)	0.062 (0.042)
f_e	0.176 (0.156)	0.158 (0.142)	0.188 (0.188)
F_0 (eV)	2.50 (2.85)	5.14 (5.39)	4.71 (5.93)
n (eV)	0.35	0.47	0.36
k_1 (eV)	1478.54 (1123.69)	3598.77 (2605.50)	9973.49 (7719.48)
k_2 (eV)	-1287.3 (-978.34)	-3149.4 (-2280.16)	-8992.5 (-6960.19)
k_3 (eV)	563.58 (4298.32)	1375.68 (995.99)	4047.12 (3132.47)
k_4 (eV)	-98.957 (-75.20)	-239.53 (-173.41)	-726.38 (-562.21)
k_{-1} (eV)	199.603 (151.69)	469.637 (340.01)	1226.04 (948.95)
k_0 (eV)	-855.74 (-650.36)	-2055.6 (-1488.25)	-5528.4 (-4278.98)
r_c (^{o}A)	3.4717 (4.2013)	4.0549 (4.8253)	3.6230 (4.4598)

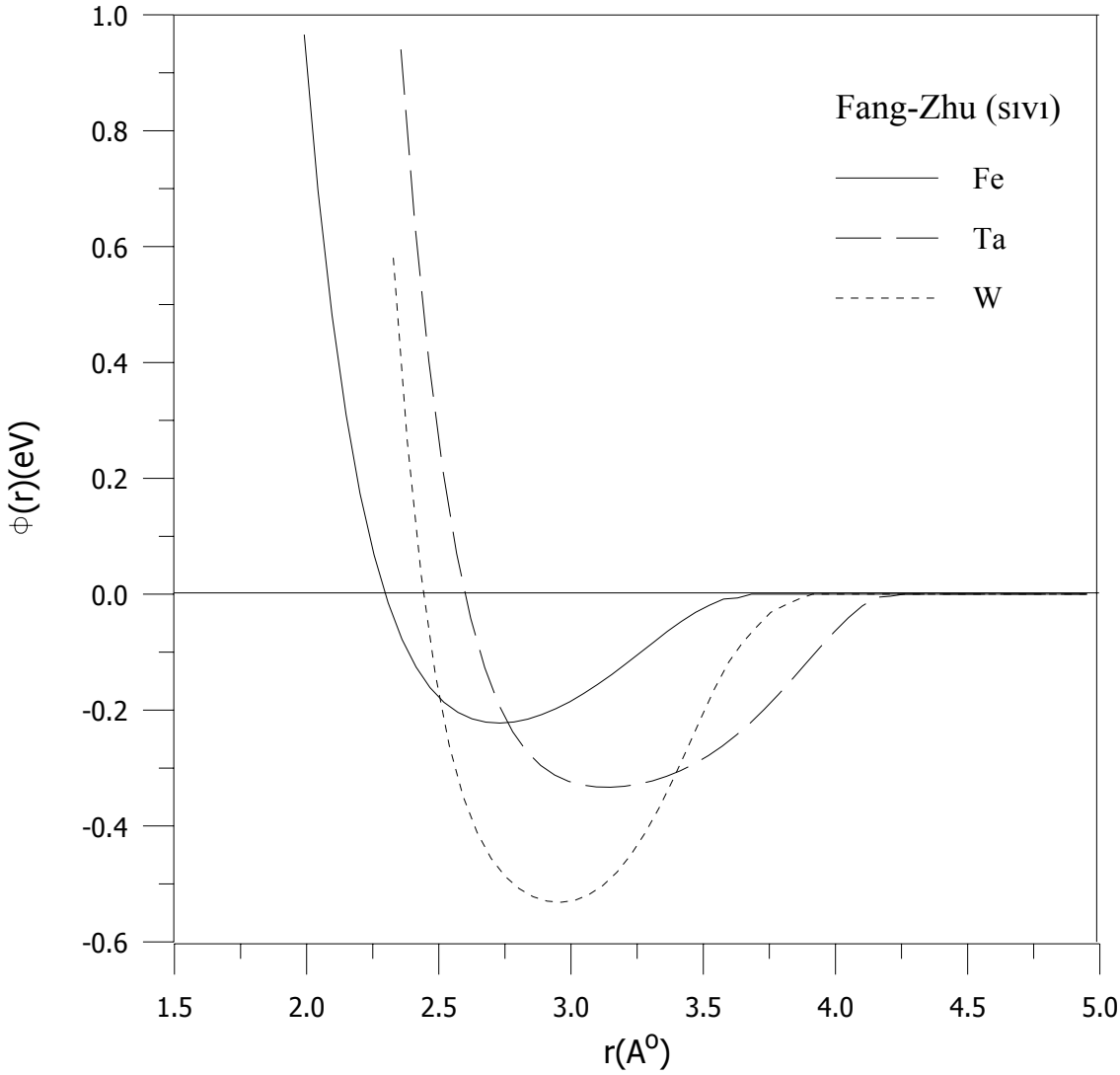
Parantez içinde verilen değerler sıvı E_c'ye fit edilerek bulunan değerlerdir.

Bcc geçiş metallerinden Fe, Ta ve W metalleri için FZ-YDAGAM model potansiyel fonksiyonu Şekil 5.23.'de bir arada verilmektedir. Bu model için kesme prosedürü (Fang ve v.d. 2003)'den alınmıştır ve bu prosedür $r_c = r_2 + k_c[r_3 - r_2]$ değerleri arasında seçilmiştir. GAM potansiyel fonksiyonları için sıvı haldeki potansiyel fonksiyonunun katı haldekinden daha yumuşak olduğu ve genişliğinin arttığı, potansiyelin minimumunun konumunun daha küçük r değerlerine doğru kaydığı açıktır.

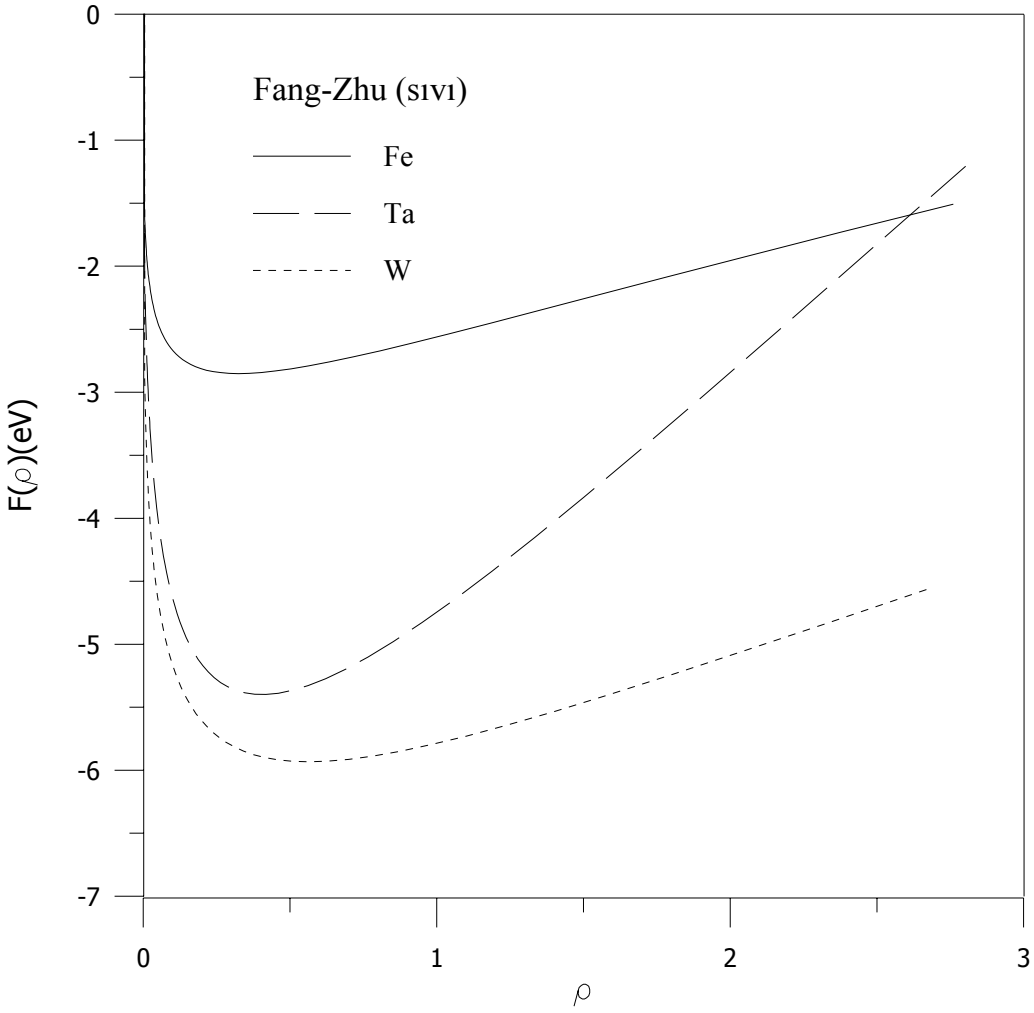
Sıvı Bcc geçiş metallerinden Fe, Ta ve W için hesaplanan gömme enerjisi fonksiyonları Şekil 5.24.'de bir arada gösterilmiştir. Çalıştığımız diğer iki modelde de olduğu gibi Fang-Zhu modeli içinde gömme enerji fonksiyonunun sıfır kesmeme durumu söz konusudur. Şekil 5.24.' e baktığımızda metaller farklı periyotta ve faklı sütunlarda olmalarına rağmen periyodik tablonun genel özelliği olan periyodik tabloda soldan sağa doğru gidildikçe atomik hacim azalır ve artan atomik hacim için sütundan aşağı inildikçe gömme enerjisi artar durumu korunmaktadır. Hesaplanan gömme enerji değerlerinin r minimum değeri katı durumundan daha küçüktür. Buda periyodik tabloyla olan uyumu göstermektedir.

Finnis – Sinclair GAM etkin çiftler potansiyel yaklaşımını kullanarak önerdiğimiz YDAGAM etkin çiftler potansiyel yaklaşımı ile sıvı bcc geçiş metallerinden Fe, Ta ve W metalleri için hesaplanan etkin çiftler potansiyelleri sırasıyla Şekil 5.25. - 5.27.'de gösterilmektedir. Metaller için etkin çiftler potansiyelleri Şekil 5.28.' de bir arada verilmektedir. Şekillerden etkin çiftler potansiyelleri için metallerin yine katı ve sıvı özellikleri sebebiyle derinlik faklılıklarına sahip olduğunu görebiliriz.

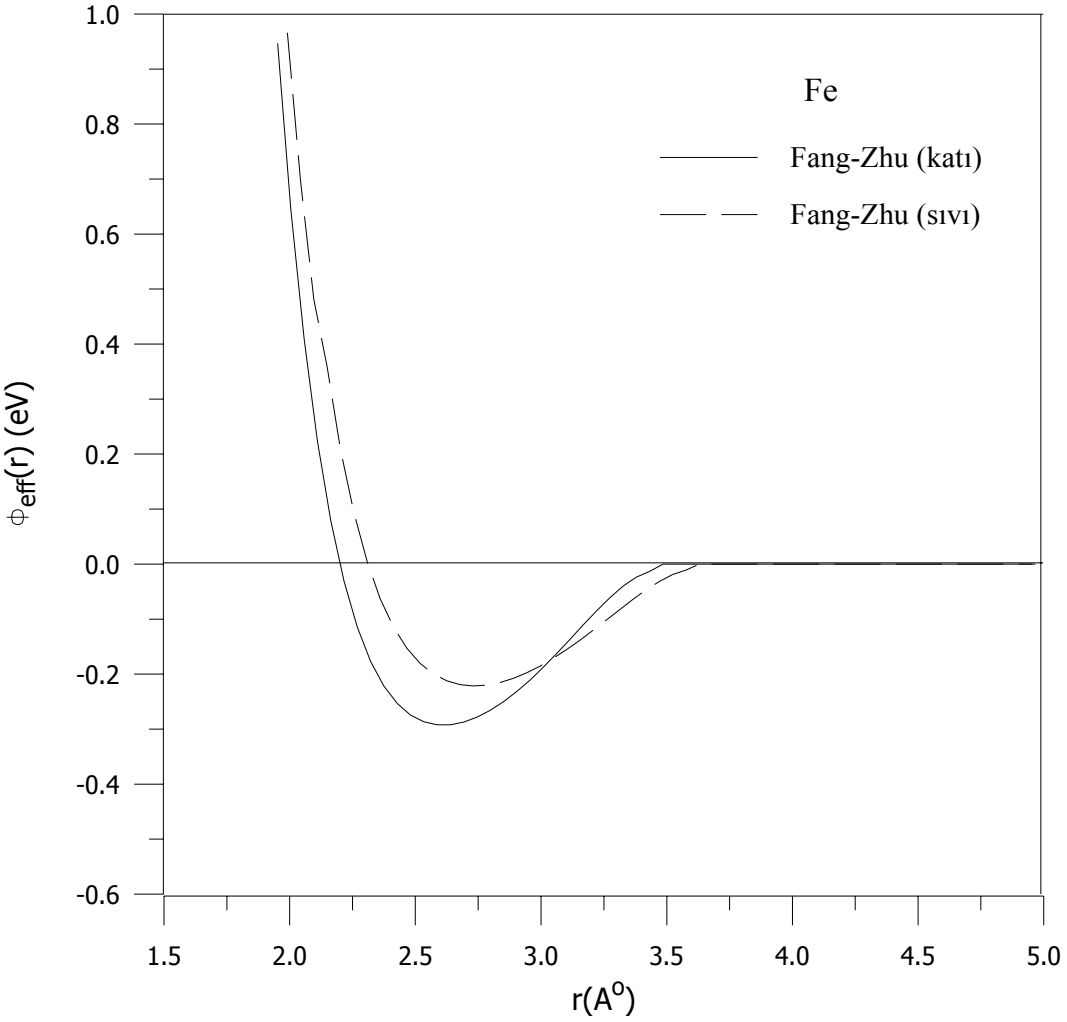
Çalıştığımız üç ayrı model için V, Cr, Fe, Nb, Mo, Ta ve W metalleri için efektif çiftler potansiyelleri sırasıyla Şekil 5.29a-5.29b'de karşılaştırmalı olarak verilmektedir.



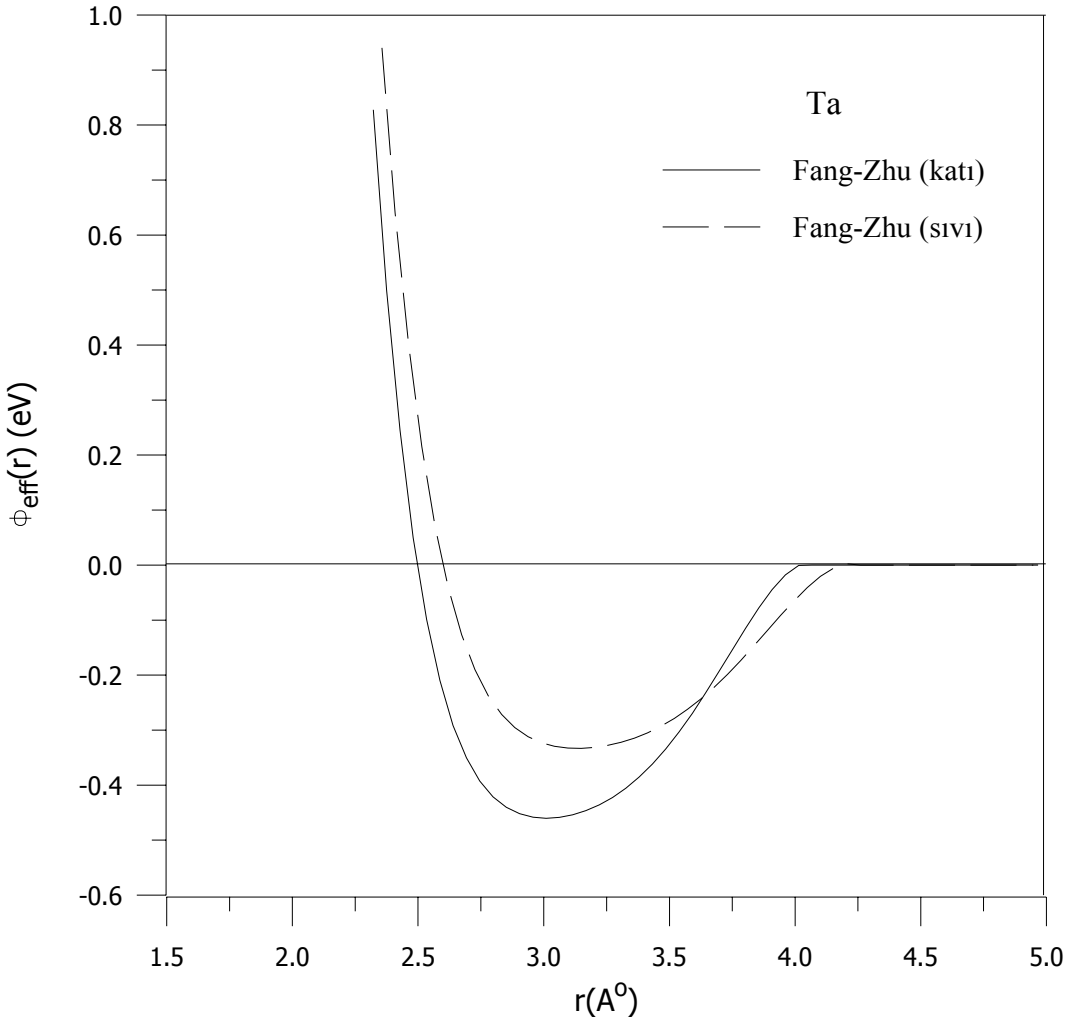
Şekil 5.23. Sıvı Fe, Ta ve W için Fang-Zhu YDAGAM kullanılarak elde edilen potansiyel fonksiyonu



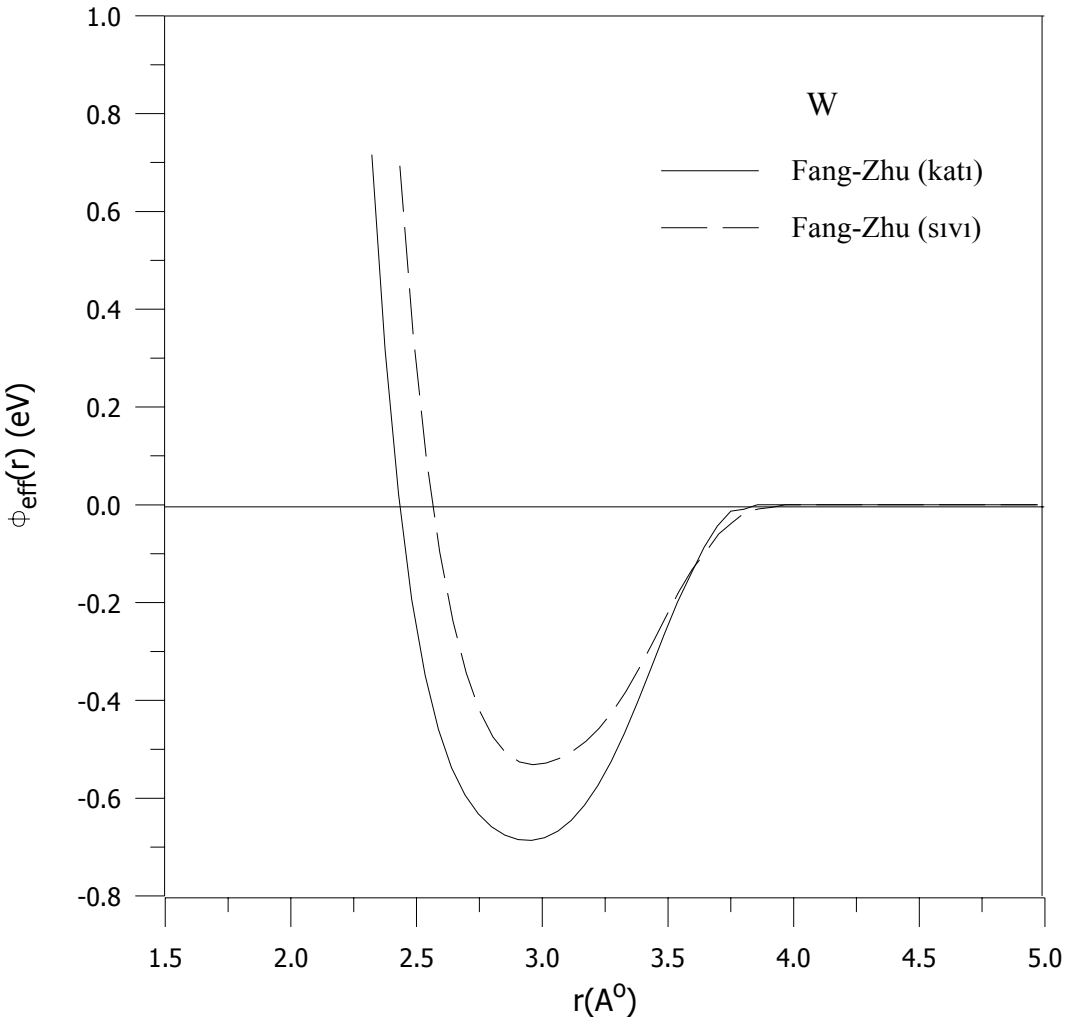
Şekil 5.24. Sıvı Fe, Ta ve W için Fang-Zhu YDAGAM
kullanılarak elde edilen gömme enerjisi fonksiyonu



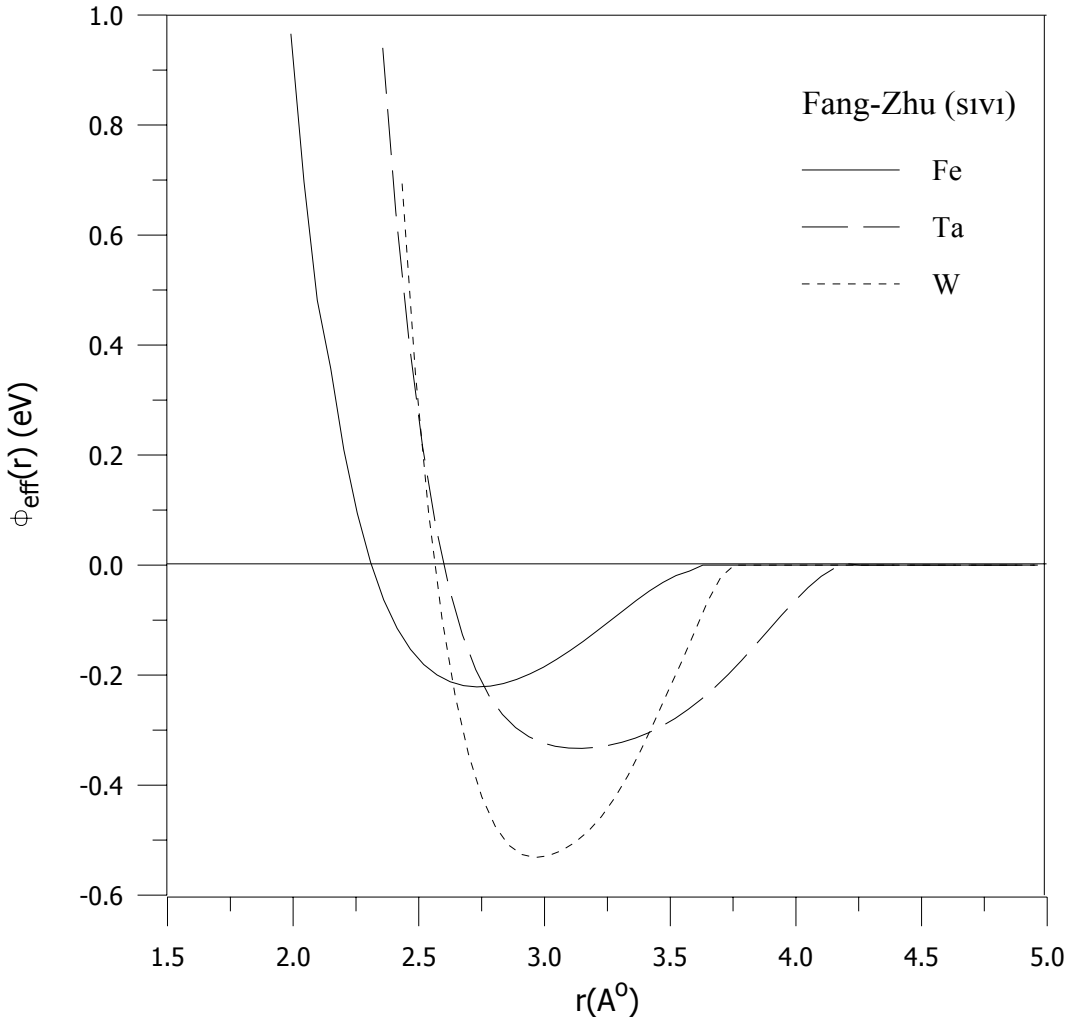
Şekil 5.25. Fe için Fang-Zhu YDAGAM kullanılarak elde edilen efektif çiftler potansiyel fonksiyonu



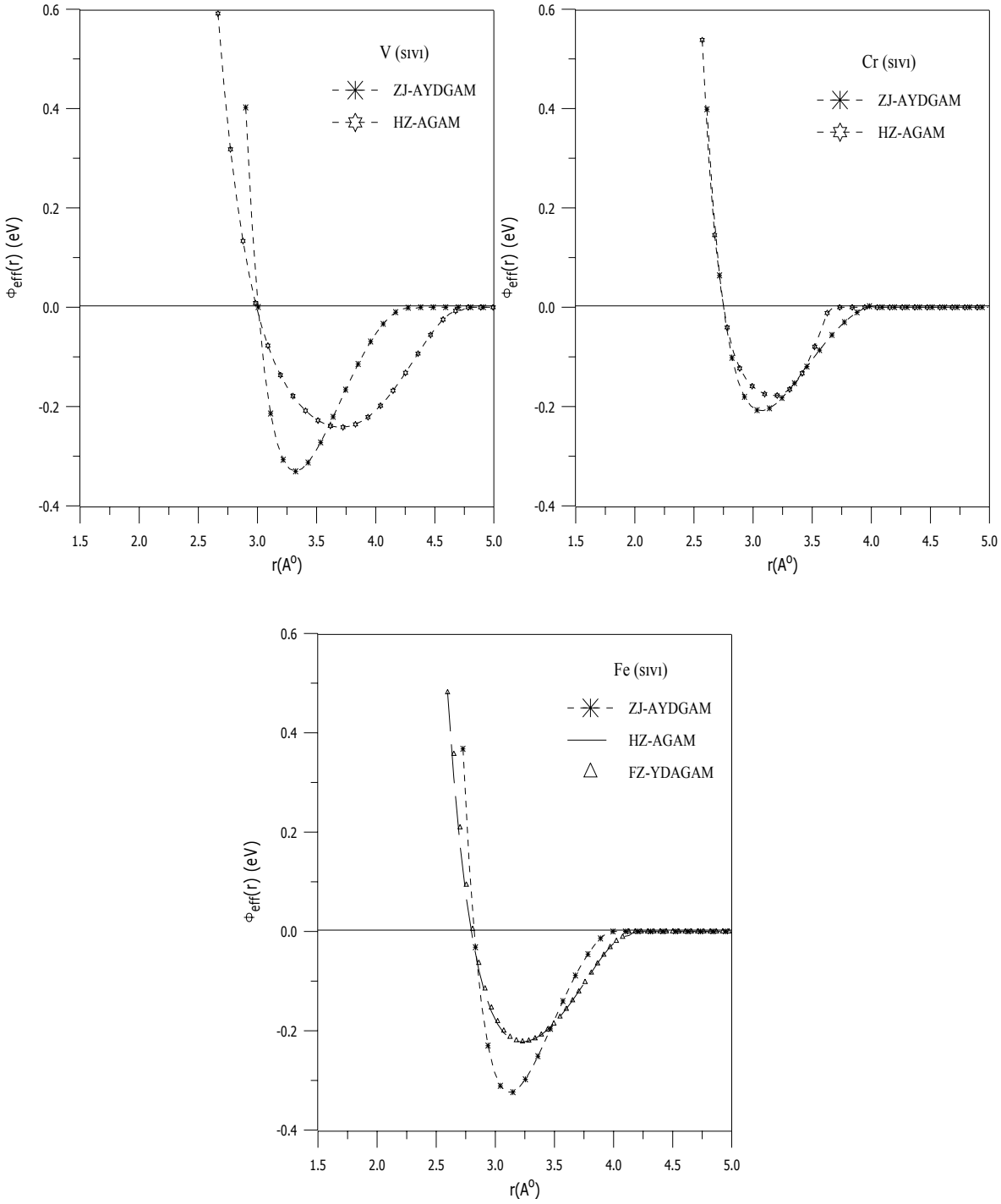
Şekil 5.26. Ta için Fang-Zhu YDAGAM kullanılarak elde edilen efektif çiftler potansiyel fonksiyonu



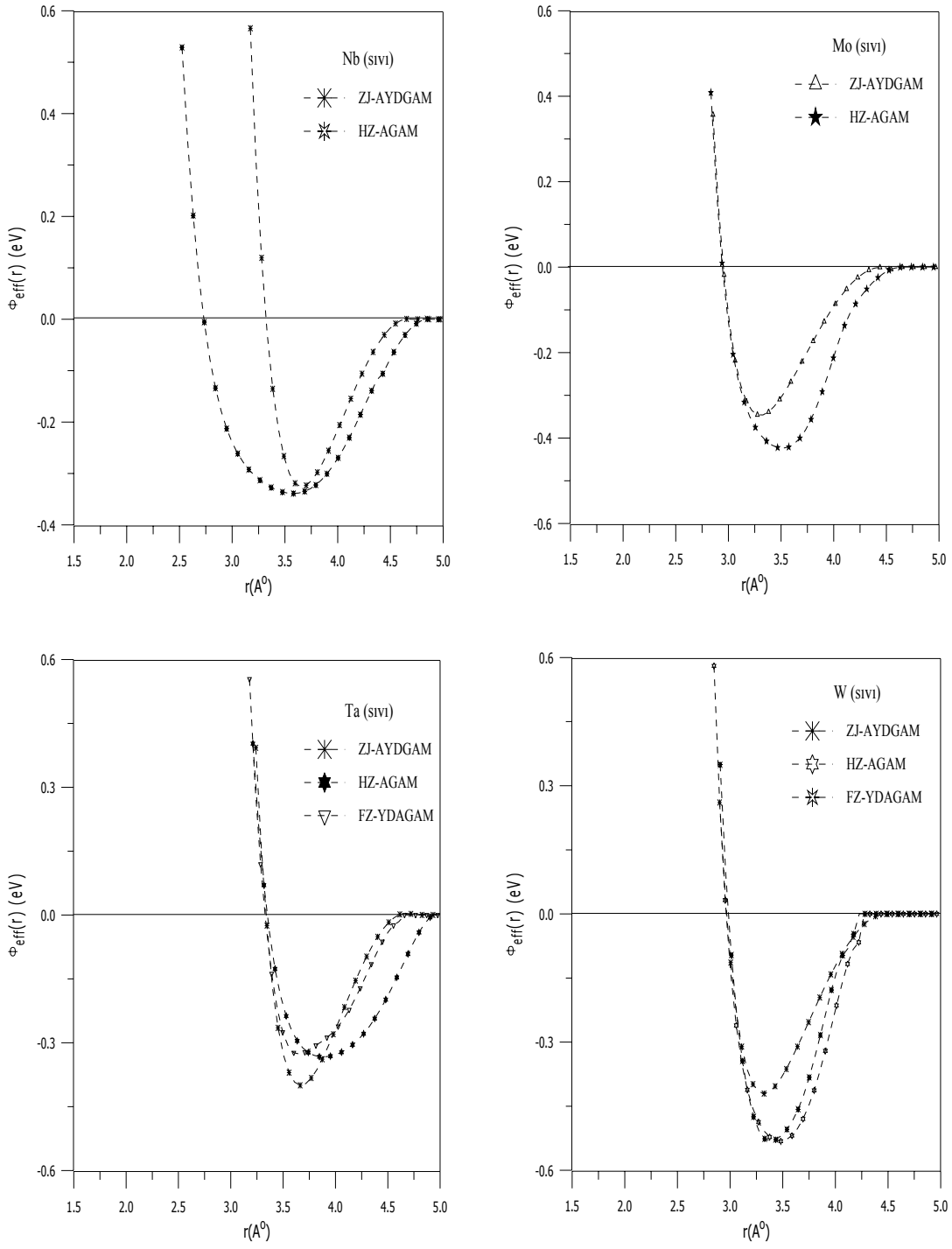
Şekil 5.27. W için Fang-Zhu YDAGAM kullanılarak elde edilen efektif çiftler potansiyel fonksiyonu



Şekil 5.28. Sıvı Fe, Ta ve W için Fang-Zhu YDAGAM kullanılarak elde edilen efektif çiftler potansiyel fonksiyonu



Şekil 5.29a.V, Cr, Fe için etkin çiftler potansiyellerinin karşılaştırılması



Şekil 5.29b. Nb, Mo, Ta, W için etkin çiftler potansiyellerinin karşılaştırılması

5.2 Sıvı Bcc Geçiş Metallerinin Yapısı

Bu bölümde sıvı bcc geçiş metallerinin VMHNC integral teorisi ile ergime noktaları civarında elde edilen yapısal özellikleri ile ilgili sonuçlar verilmektedir. Hesaplanan etkin çiftler etkileşme potansiyelleri sıvı yapı hesaplamalarında giriş verileri olarak kullanılmıştır. O–Z denklemi Zerah algoritması (Zerah 1985) kullanılarak çözüldü.

Sıvı bcc geçiş metallerinden deneysel değerleri mevcut olan V, Cr ve Fe metalleri için Tablo 5.2.'de verilen ZJ–AYDGAM etkin çiftler potansiyelleri ile VMHNC integral denklem teorisi kullanılarak hesaplanan statik yapı faktörü S(q) ise sırasıyla Şekil 5.30. - 5.32.'de ve hesaplanan çiftler dağılım fonksiyonu g(r) Waseda' nın X–ışınları kırınımı deneysel değerleri ile karşılaştırıldı ve sırasıyla Şekil 5.33. - 5.35. 'de gösterilmiştir. Şekil 5.30. -5.32.'den görülebileceği üzere Zhang-Jin modeli için sıvı parametrizasyon sonucu bulduğumuz potansiyel parametreleri ile hesaplanan S(q) değerleri katı potansiyel parametreleri ile hesaplananlara göre gerek ilk pik yüksekliği gerekse sergiledikleri salınım şekilleri ile deneysel değerlerle daha iyi bir uyum içerisindedirler. Deneysel değerleri mevcut olan bu üç metal arasında ise deneysel ile en yakın grafiği Fe metali vermektedir. İlk pikten itibaren tüm pik yükseklikleri hemen hemen deneysel ile üst üste çakışmaktadır. Bu model için g(r) grafiklerine baktığımızda ise V'nin diğer iki metale göre daha kötü sonuç verdiğini görebiliriz. Cr metali ise hem katı hem de sıvı durum için deneyselle tam bir uyum içerisindedir. Fe metali sıvı durum için katı durumdan daha iyidir. Sadece ilk pik yüksekliği deneyselden çok az farklıdır.

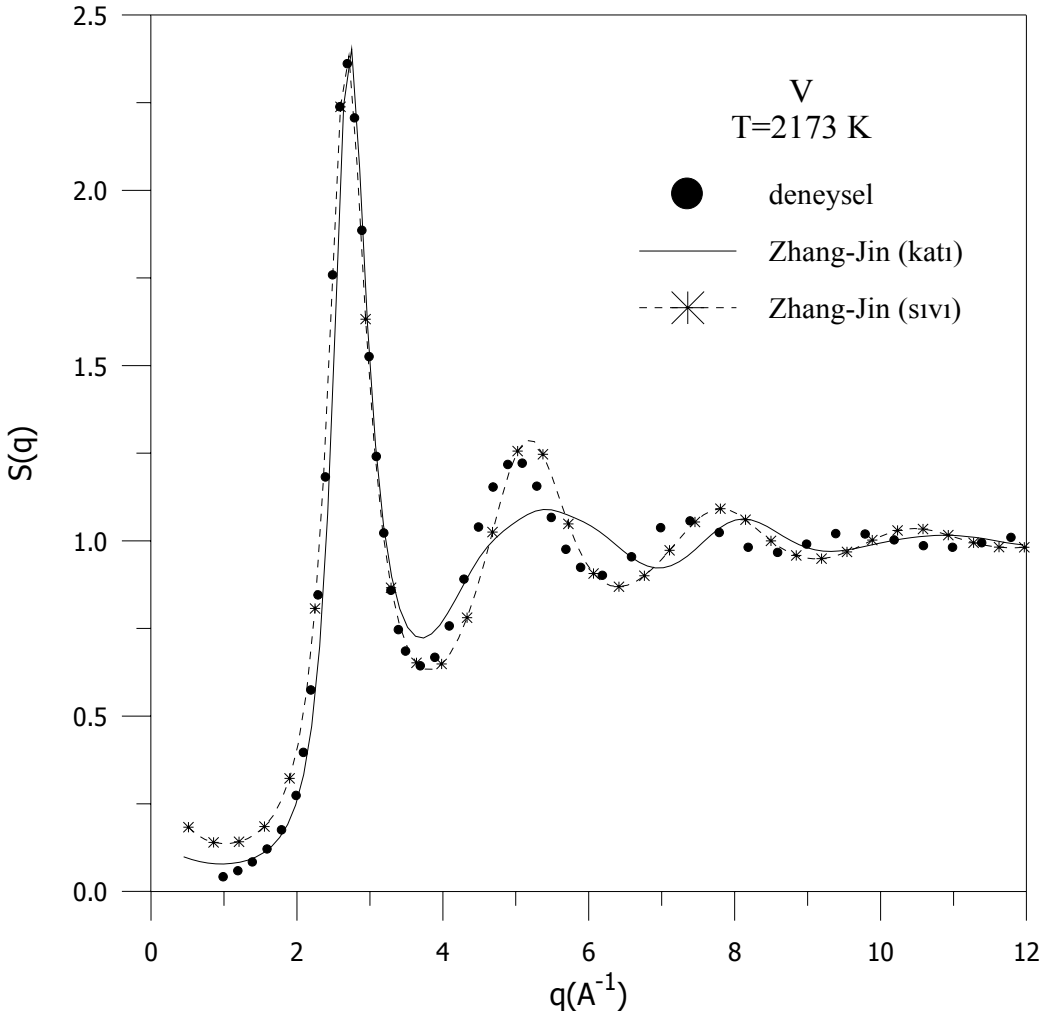
Bu tezde çalışılan diğer bir model olan Hu-Zhang AGAM için Tablo 5.3.'de verilen parametreler ile hesaplanan etkin çiftler potansiyelleri ve VMHNC integral denklem teorisi kullanılarak hesaplanan statik yapı faktörü S(q) ise sırasıyla Şekil 5.36. - 5.38.'de ve çiftler dağılım fonksiyonu g(r) Waseda' nın X–ışınları kırınımı deneysel değerleri ile karşılaştırıldı ve sırasıyla Şekil 5.39. - 5.41.'da gösterilmiştir. S(q) statik yapı faktörü şekillerine baktığımızda bu modelin V metali de dahil olmak üzere üç metal için de Zhang-Jin modeline nazaran deneyselle daha uyumlu olduğunu söyleyebiliriz. V metali sıvı durum için ilk pik yüksekliği bakımından deneyselle tamamen uyumludur fakat bu metal için katı ve sıvı durumlarının ortak özelliği 2.

pikten itibaren titreşimlerin giderek sönüme ulaştığını görebiliriz. Cr metalinde ise sıvı durum için ilk pik deneyselle uyumludur fakat yine bu metalde de 3. ve daha sonraki piklerin giderek sönümlendiğini görmekteyiz. V metalinden farklı olarak Cr metalinde katı durumda ilk pik haricinde iyi bir uyum gözlenmese de tüm salınımlara ulaşabilmekteyiz. Yine bu modelde de Fe metali katı ve sıvı durum için hem ilk pik hem de S(0) değeri için deneyselle benzerdir. Bu model için g(r) grafiklerini incelersek g(r)'lerin S(q)'lara nazaran daha iyi sonuç verdiğini söyleyebiliriz. Burada üç metal arasında sıvı durum için Cr'nin deneyselle en iyi uyumu verdiğini belirtebiliriz. Fakat katı ve sıvı durum bir arada ele alındığında ise yine Fe metali en yakın sonucu vermektedir.

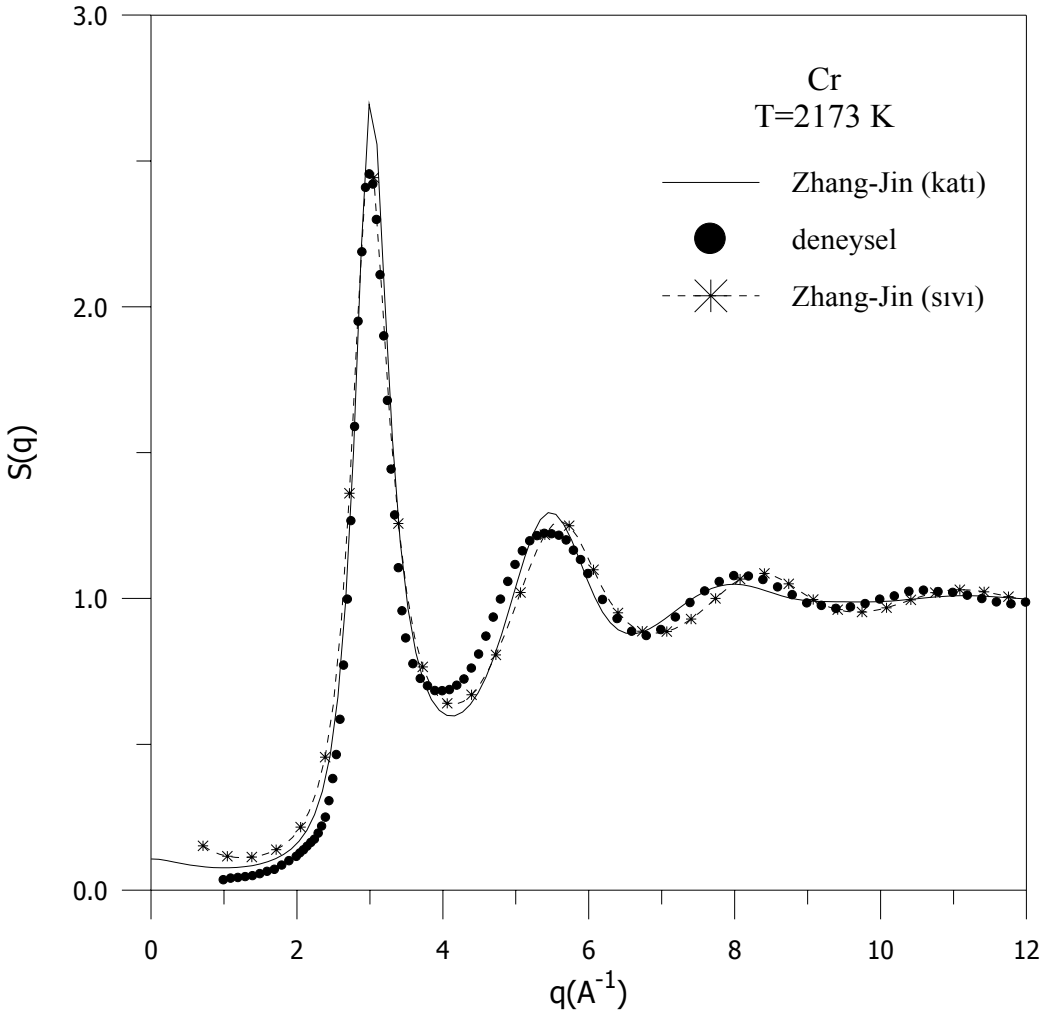
Son olarak Fe metali için Fang-Zhu YDAGAM Tablo 5.4.'de verilen potansiyel parametreleri ile hesaplanan etkin çiftler potansiyelleri ve VMHNC integral denklem teorisi kullanılarak hesaplanan statik yapı faktörü S(q) ise sırasıyla Şekil 5.42.'de ve çiftler dağılım fonksiyonu g(r) Waseda' nın X–ışınları kırınımı deneysel değerleri ile karşılaştırıldı ve sırasıyla Şekil 5.43. de ve gösterilmiştir. Bu model ile üç metal çalışıldı fakat bu metallerden sadece Fe için deneysel değerlerimiz mevcut olduğu için burada sadece Fe için S(q) ve g(r) şekillerini gösterdik. Tüm modellerde en iyi sonucu veren Fe metali yine bu modelde de hem S(q) hem de g(r) için deneyselle uyumludur.

Çalıştığımız üç farklı model için V, Cr ve Fe metalleri için hesaplanan statik yapı faktörü S(q) sırasıyla Şekil 5.44.-5.46.'da ve çiftler dağılım fonksiyonu g(r) sırasıyla ve 5.47.-5.49.' da verilmektedir. Şekillerde hesaplamalar Zhang-Jin modeli için 'çizgi yıldız', Hu-Zhang modeli için 'yıldız' ve Fang-Zhu modeli için ise 'üçgen' şekli ile gösterilmiştir. Bu üç model içinde en iyi sonucu Fe metali göstermektedir. Küçük q değerlerinde Fang-Zhu modeli ile hesaplanan S(0) değeri deneyselle en yakın sonucu vermektedir. Ayrıca yine bu model için ilk pik yüksekliği de diğer modellere göre deneyselle en iyi uyumu vermektedir. Şekil 5.44.'de görüldüğü üzere V metali için Zhang-Jin modeli küçük q değeri için hesaplanan S(0) değeri Hu-Zhang modeliyle hesaplanan değere göre daha iyidir. İlk pik ve genel salınım itibariyle V için Zhang-Jin modeli diğer modele göre deneyselle daha uyumludur. Ancak 2. pikten sonra bu metal için her iki modelde de uzun dalga boylarında faz farkı gözlenmektedir. Şekil 5.45.' bakıldığında ise S(0) da Hu-Zhang modeli deneyselle uyumludur. g(r) şekillerinde ise yine Fe metali en iyi uyumu göstermekle birlikte S(q)'dan farklı olarak en iyi sonucu

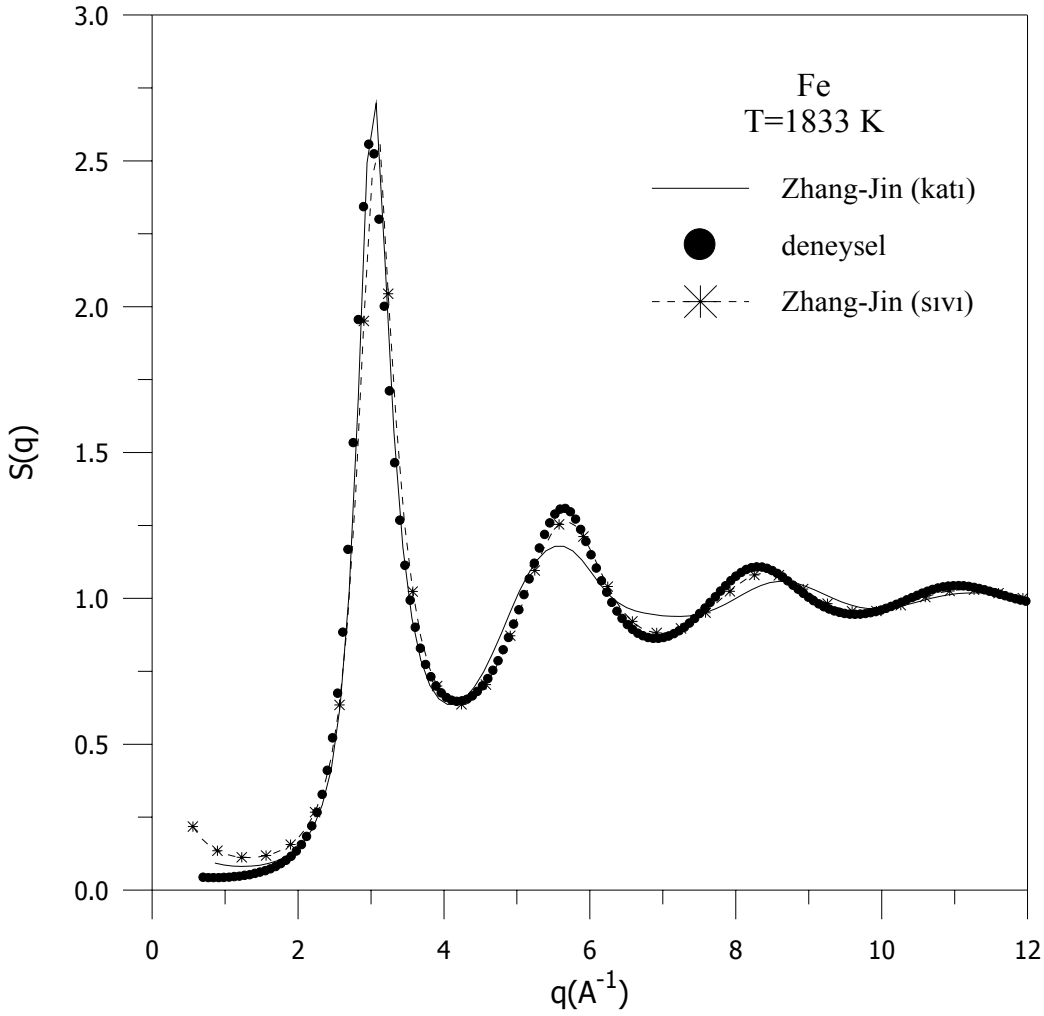
Hu-Zhang modeli için elde ettiğimiz görülüyor. Cr ve V metallerinde de yine en iyi sonuç Hu-Zhang modeli için gözlenmektedir.



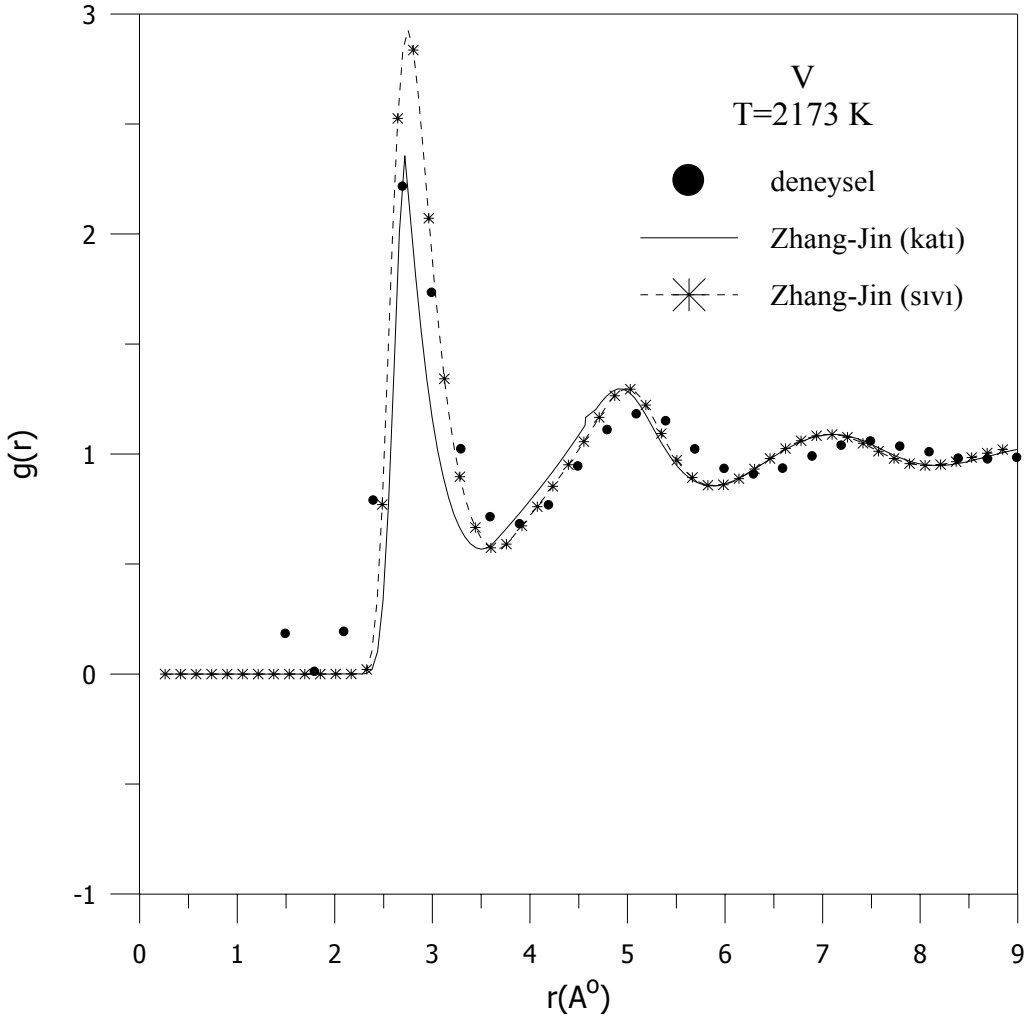
Şekil 5.30. V için Zhang-Jin AYDGAM kullanılarak elde edilen statik yapı faktörü



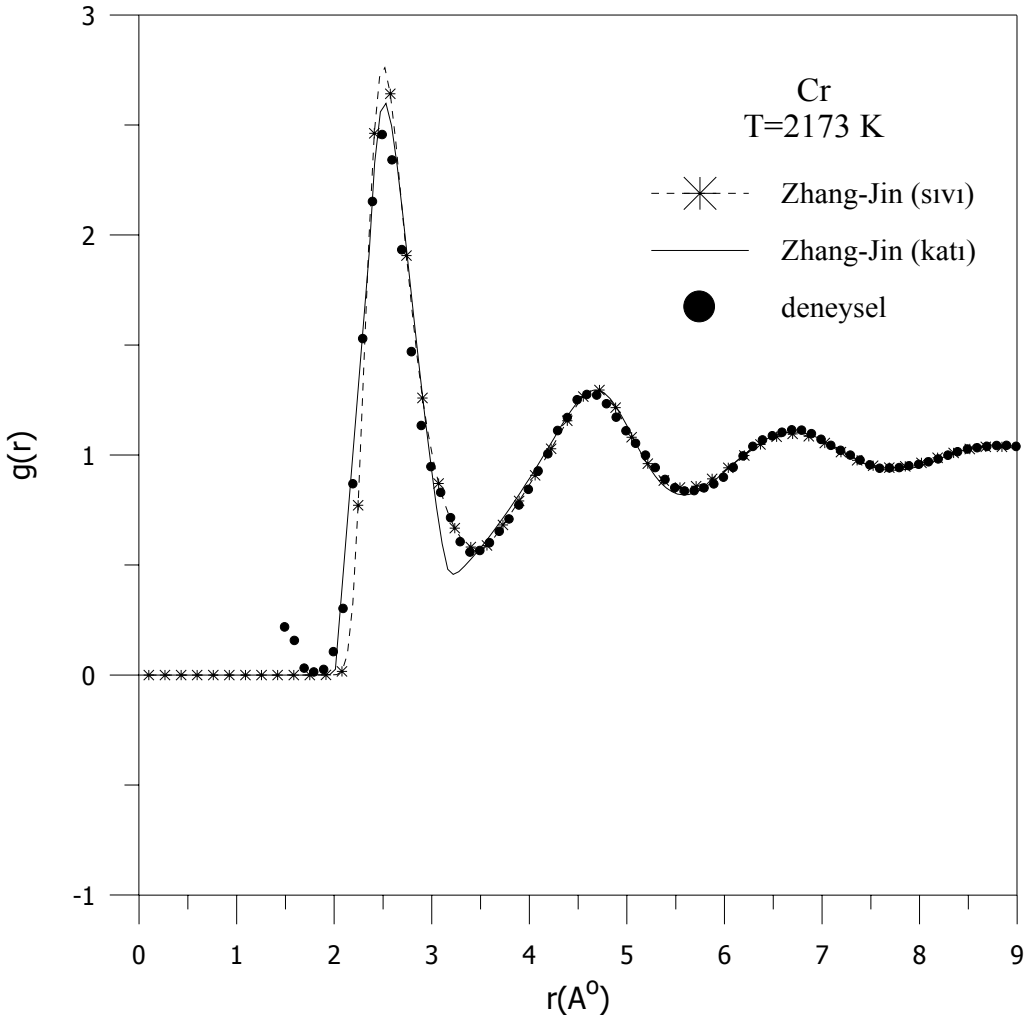
Şekil 5.31. Cr için Bangwei-AYDGAM kullanılarak elde edilen statik yapı faktörü



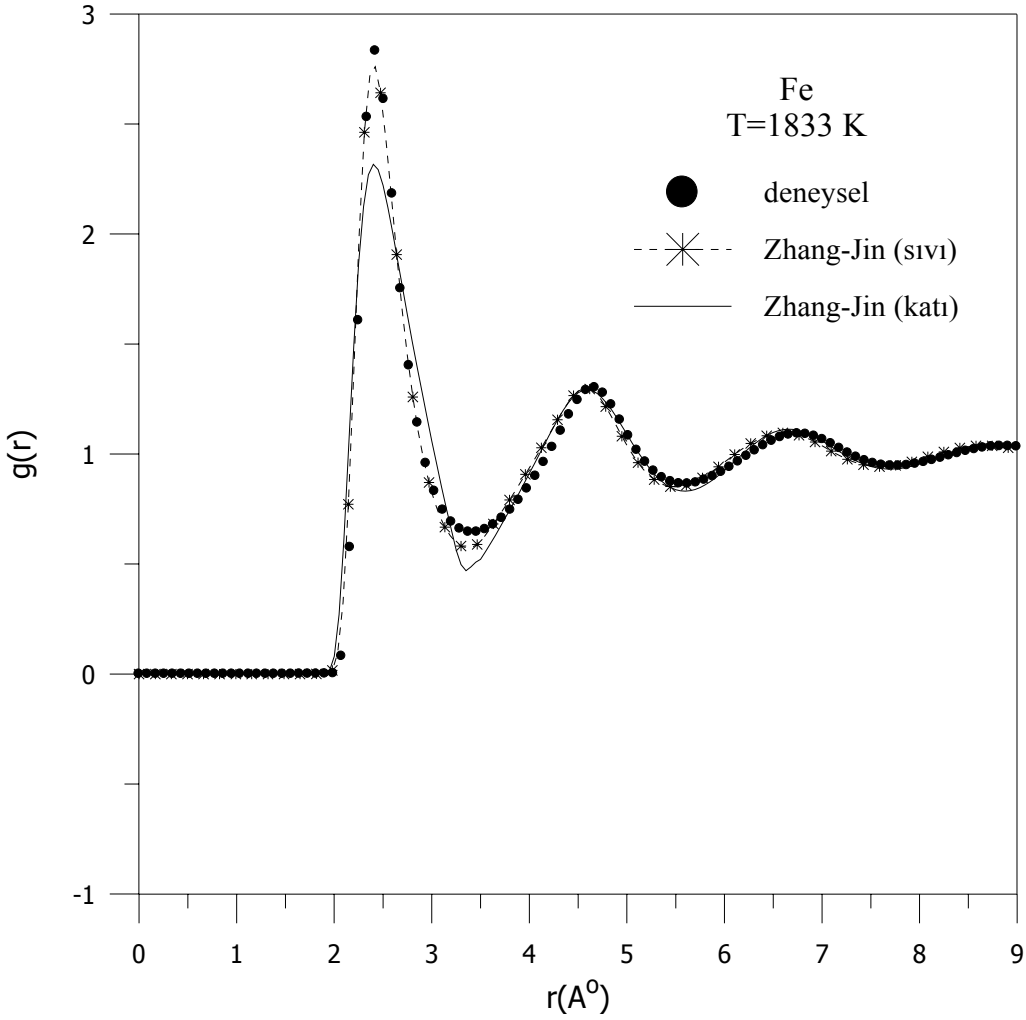
Şekil 5.32. Fe için Zhang-Jin AYDGAM kullanılarak elde edilen statik yapı faktörü



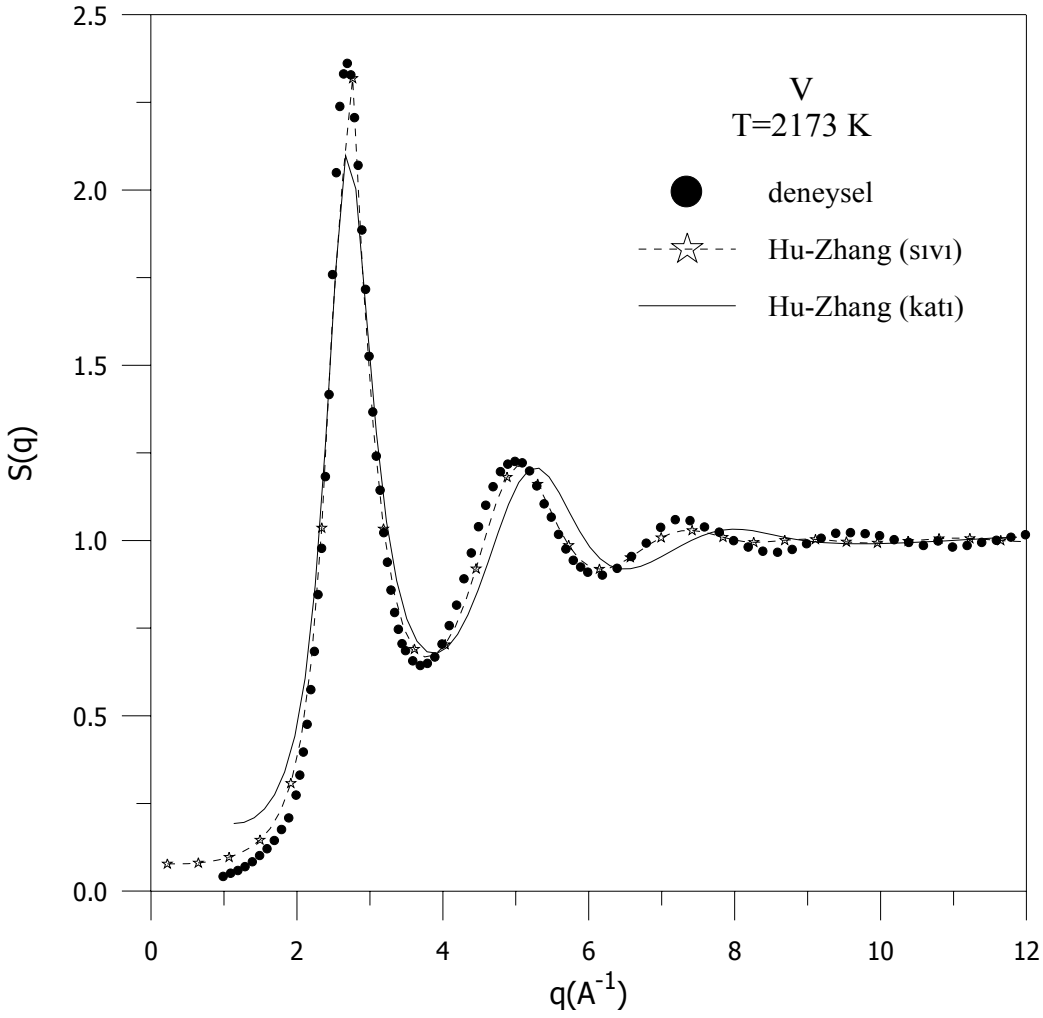
Şekil 5.33. V için Zhang-Jin AYDGAM kullanılarak elde edilen çiftler dağılım fonksiyonu



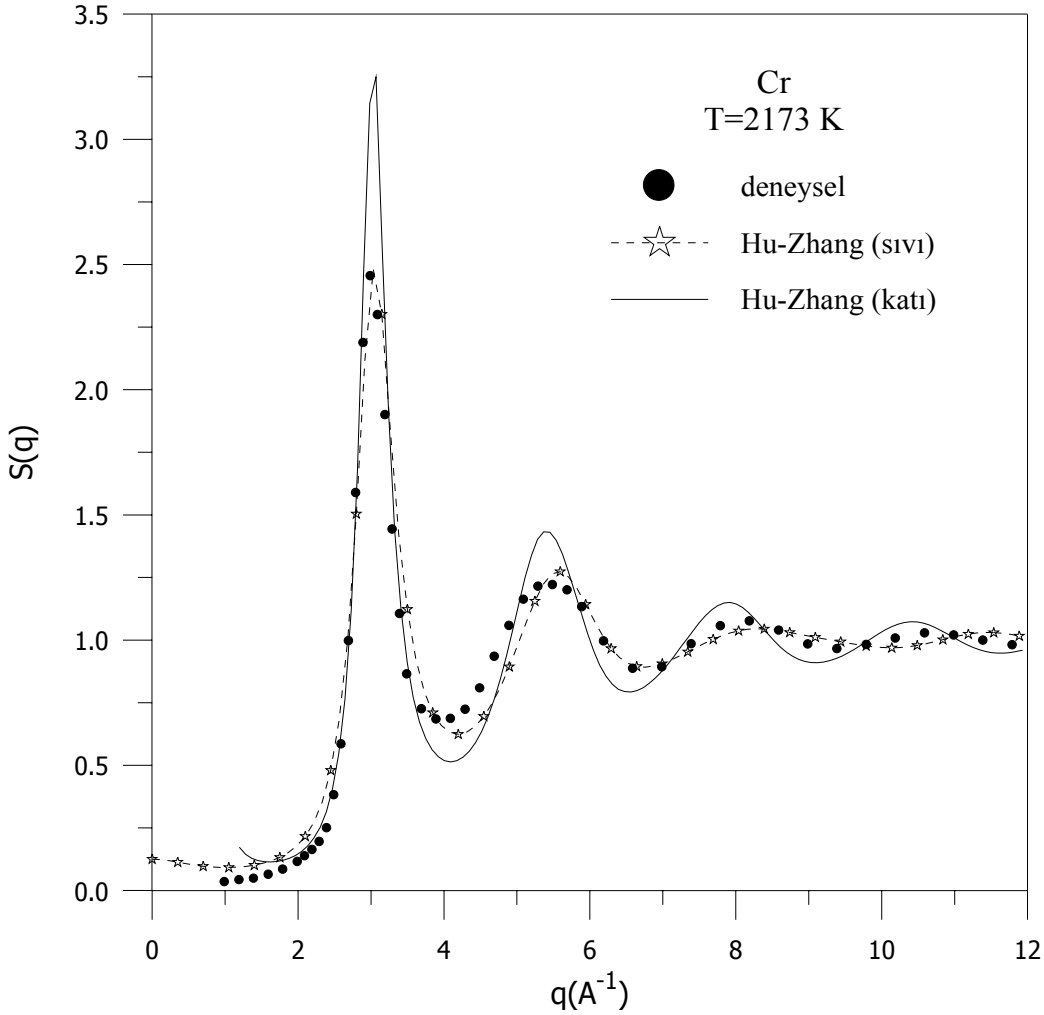
Şekil 5.34. Cr için Zhang-Jin AYDGAM kullanılarak elde edilen çiftler dağılım fonksiyonu



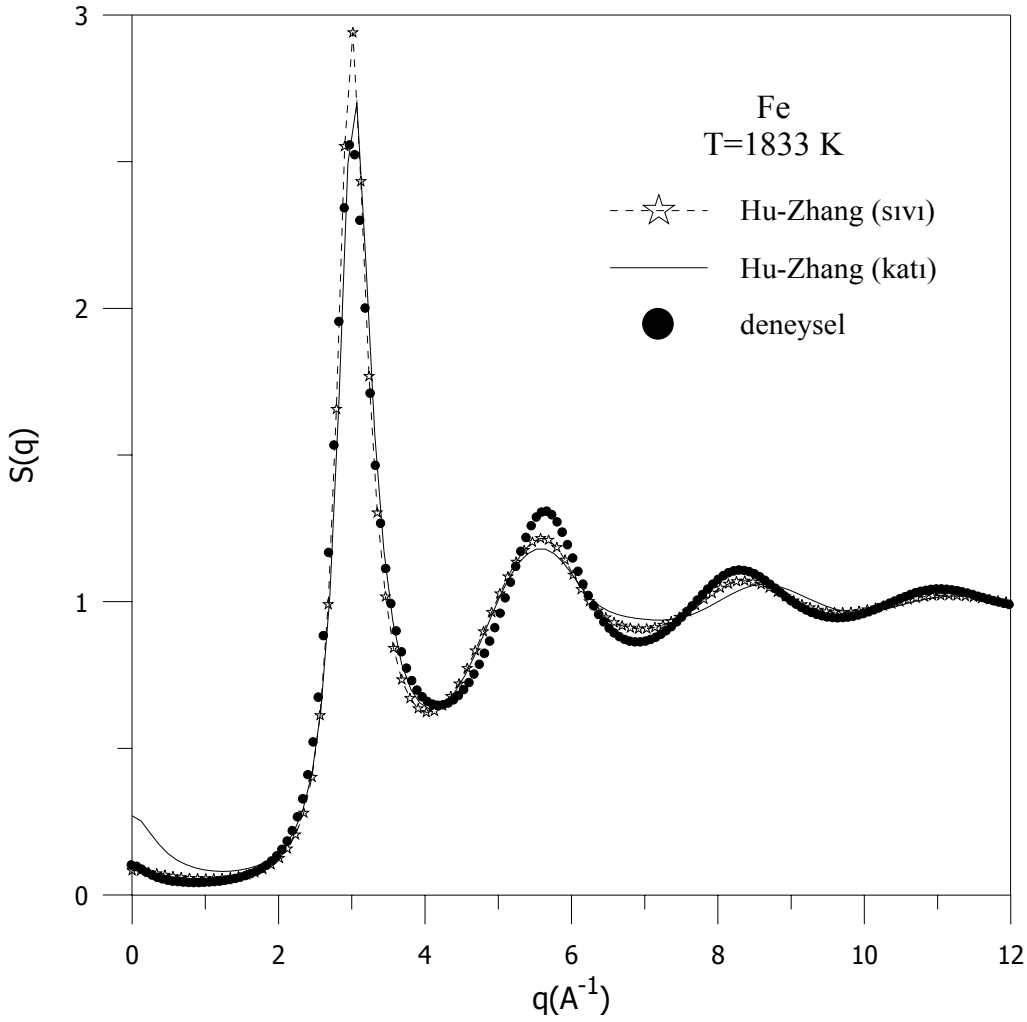
Şekil 5.35. Fe için Zhang-Jin AYDGAM kullanılarak elde edilen çiftler dağılım fonksiyonu



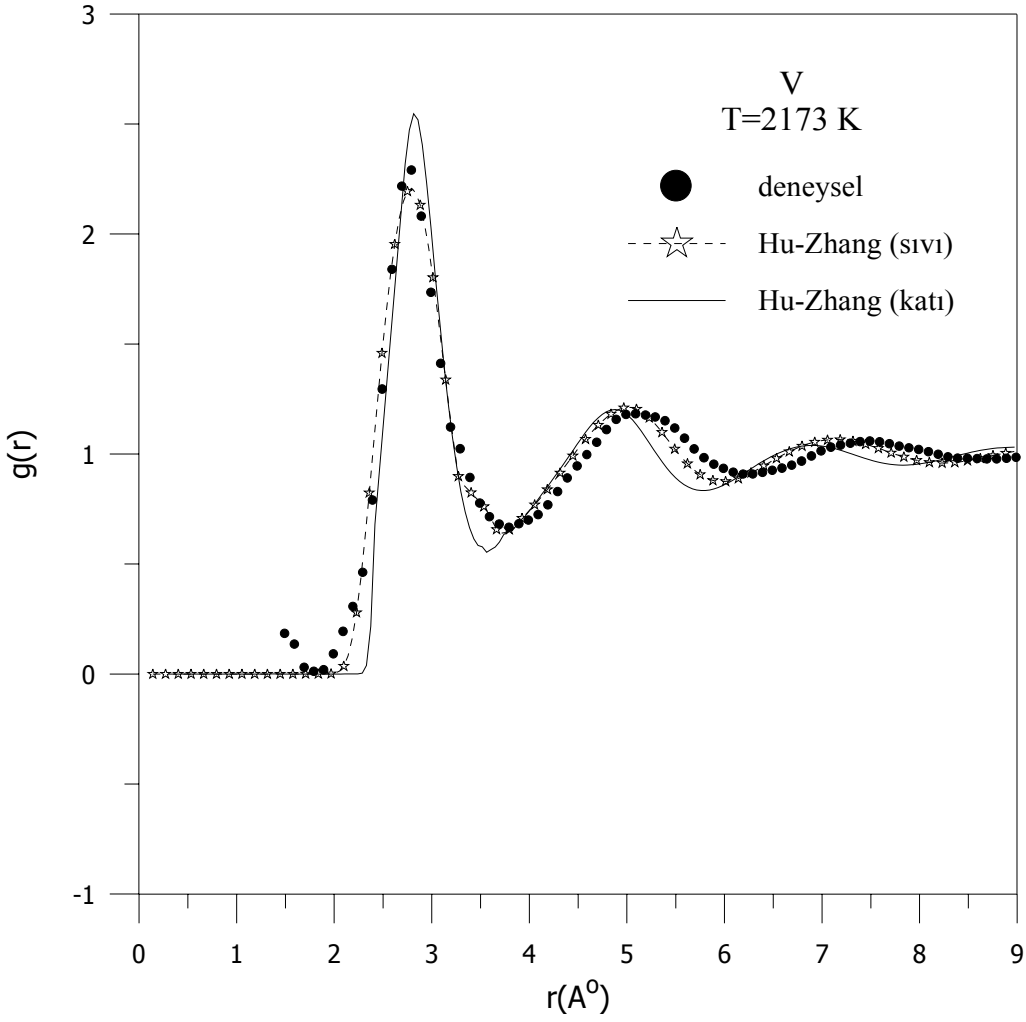
Şekil 5.36. V için Hu-Zhang AGAM kullanılarak elde edilen statik yapı faktörü



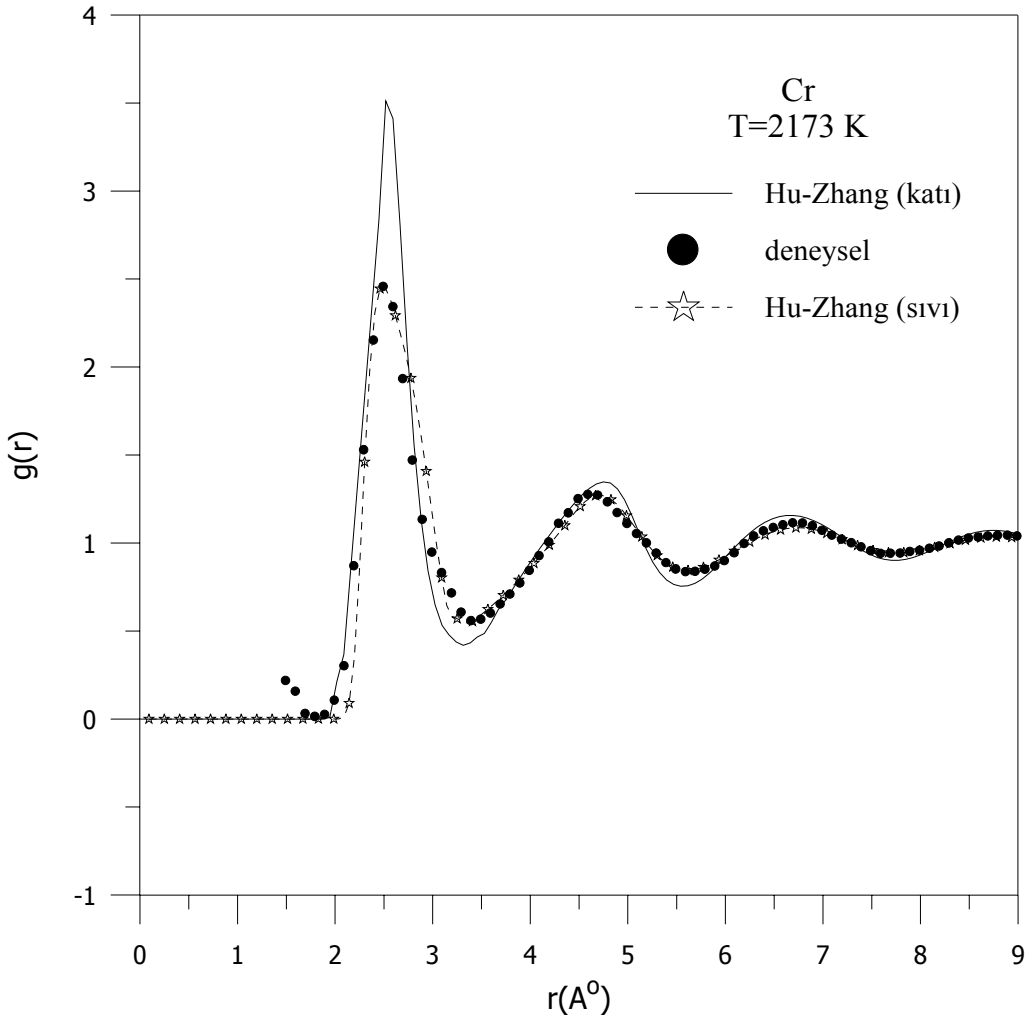
Şekil 5.37. Cr Hu-Zhang AGAM kullanılarak elde edilen statik yapı faktörü



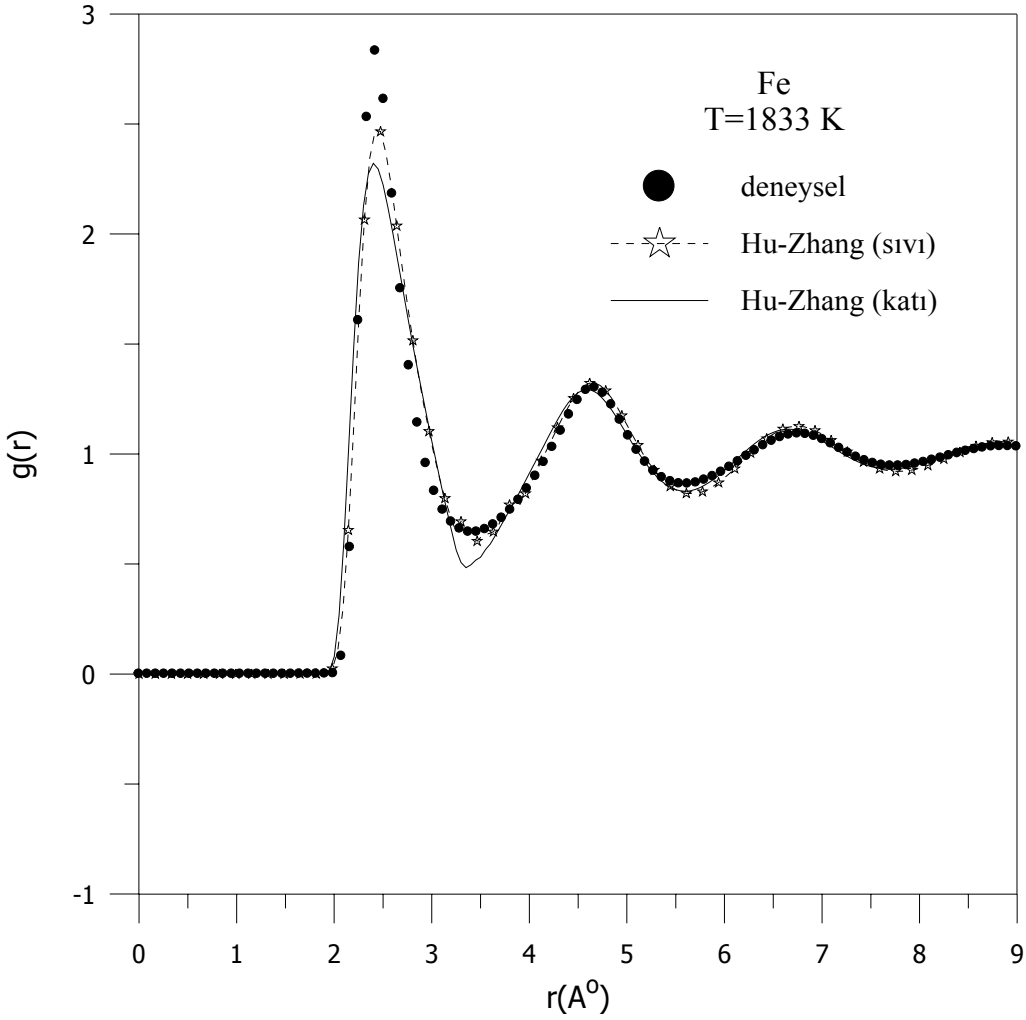
Şekil 5.38. Fe için Hu-Zhang AGAM kullanılarak elde edilen statik yapı faktörü



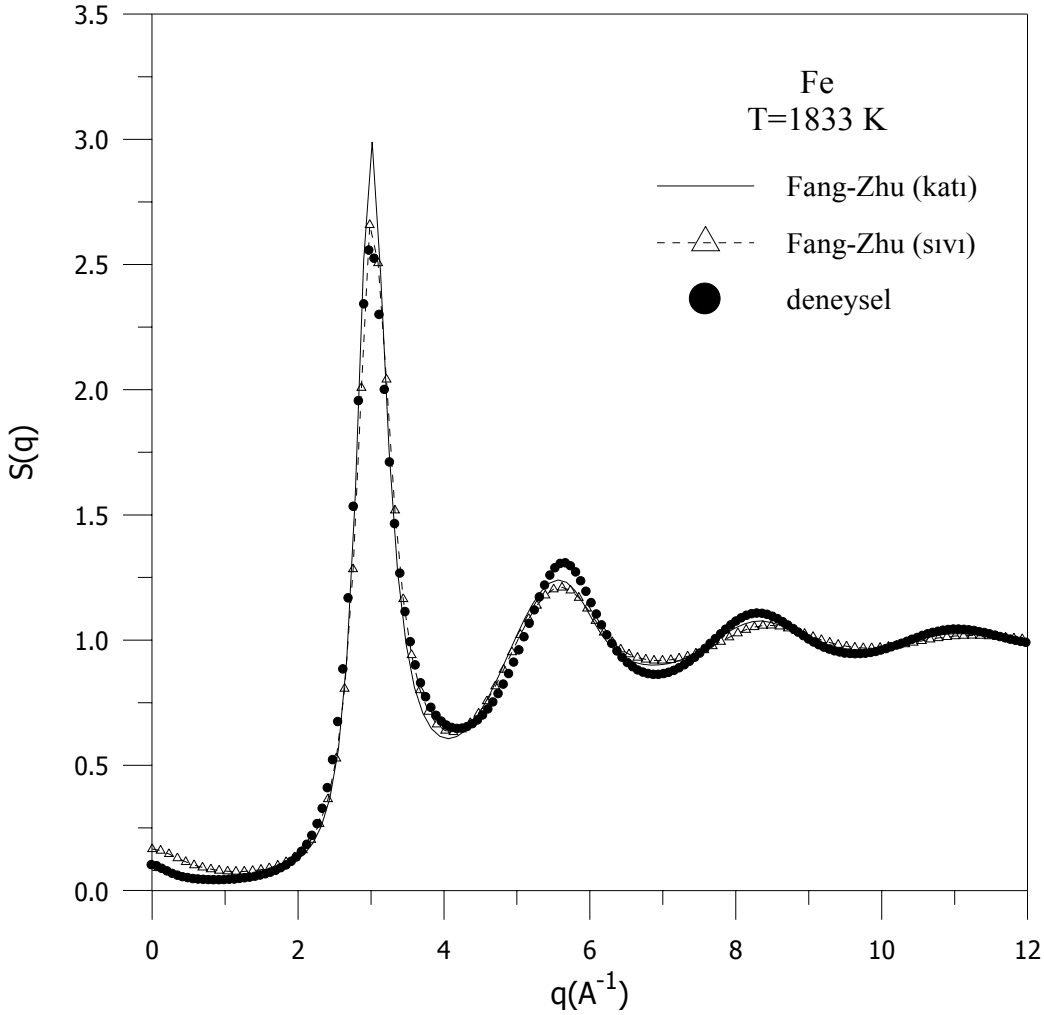
Şekil 5.39. V için Hu-Zhang AGAM kullanılarak elde edilen çiftler dağılım fonksiyonu



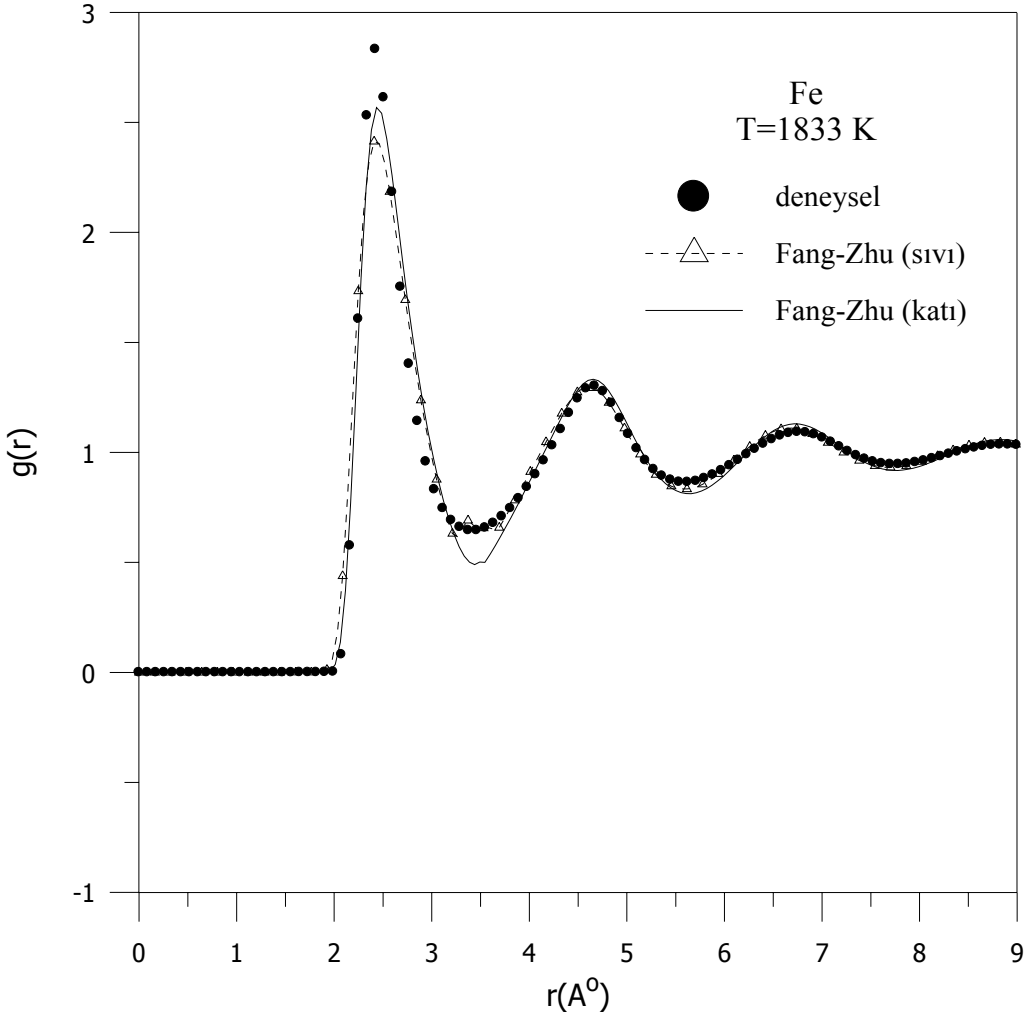
Şekil 5.40. Cr için Hu-Zhang AGAM kullanılarak elde edilen çiftler dağılım fonksiyonu



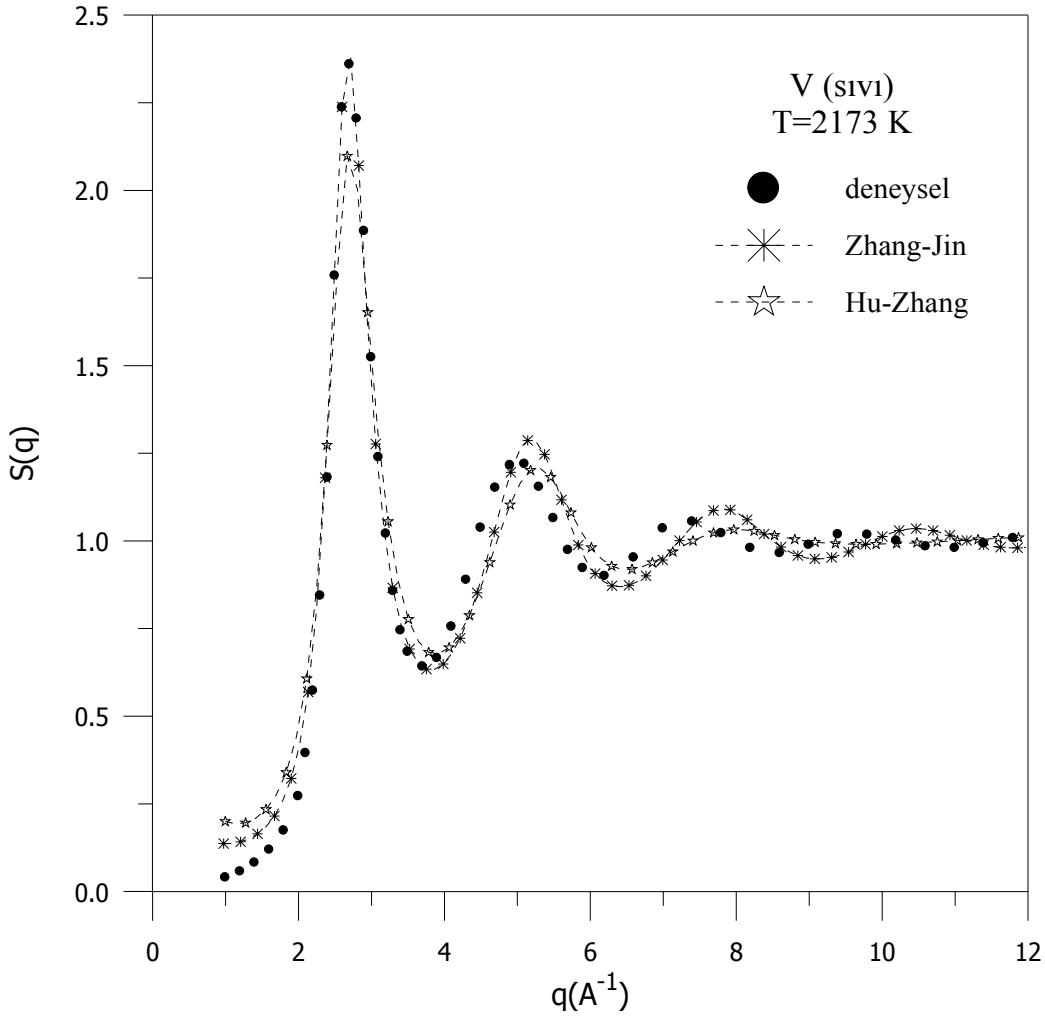
Şekil 5.41. Fe için Hu-Zhang AGAM kullanılarak elde edilen çiftler dağılım fonksiyonu



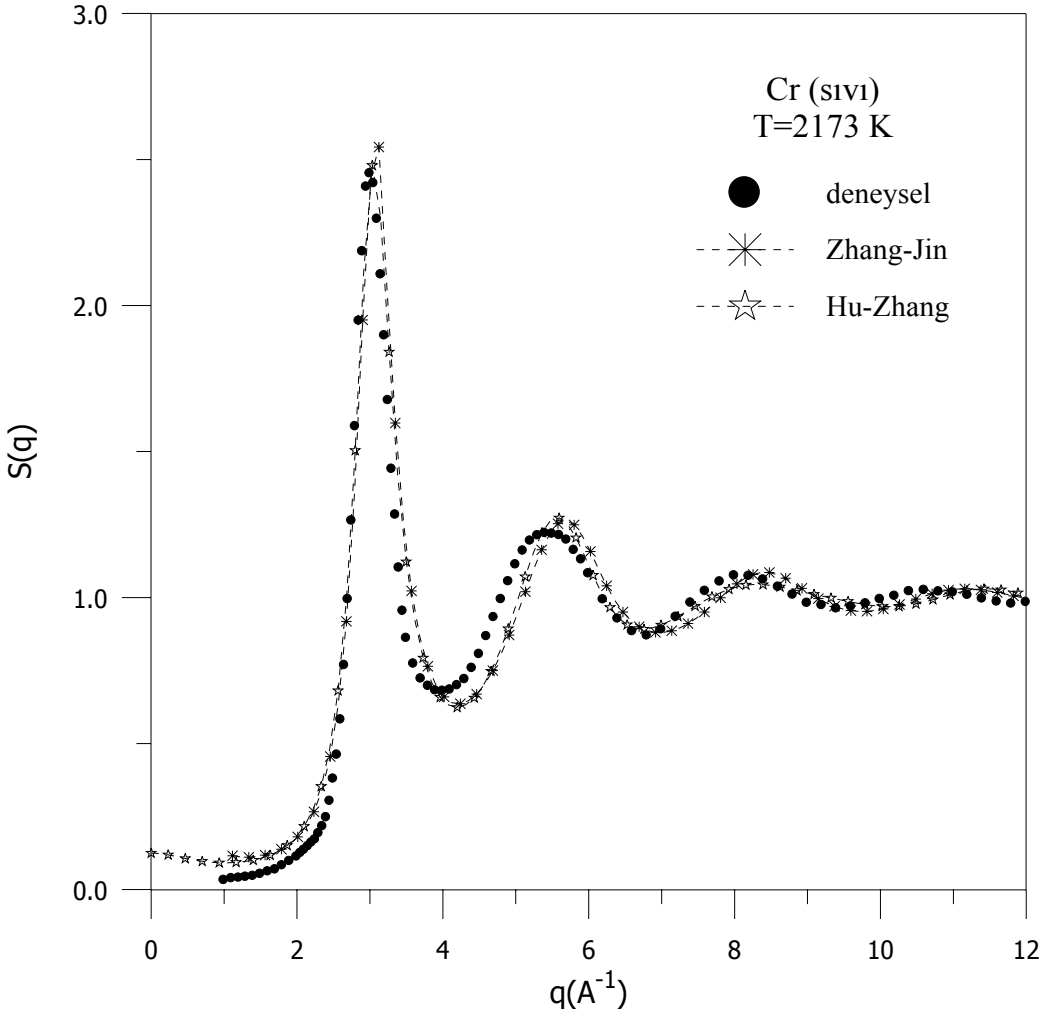
Şekil 5.42. Fe için Fang-Zhu YDAGAM kullanılarak elde edilen statik yapı faktörü



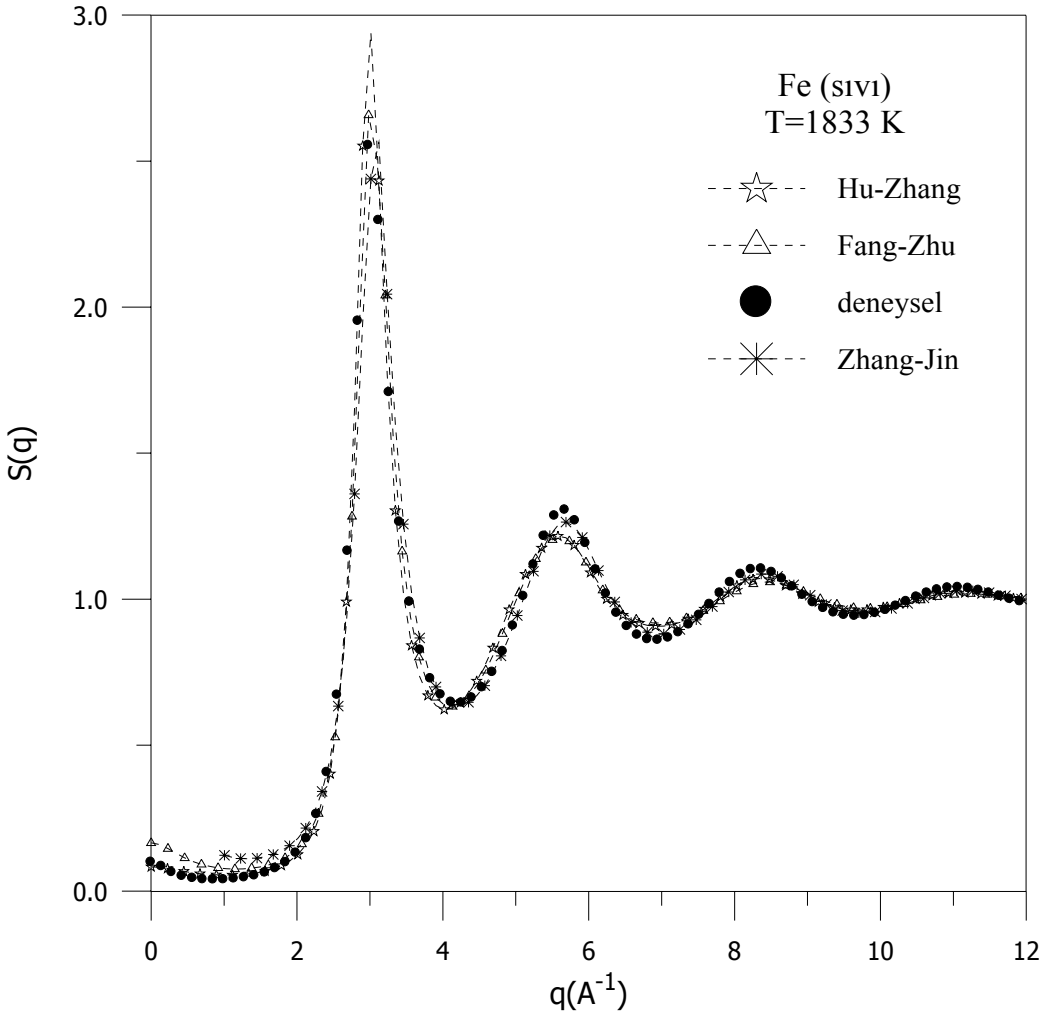
Şekil 5.43. Fe için Fang-Zhu YDAGAM kullanılarak elde edilen çiftler dağılım fonksiyonu



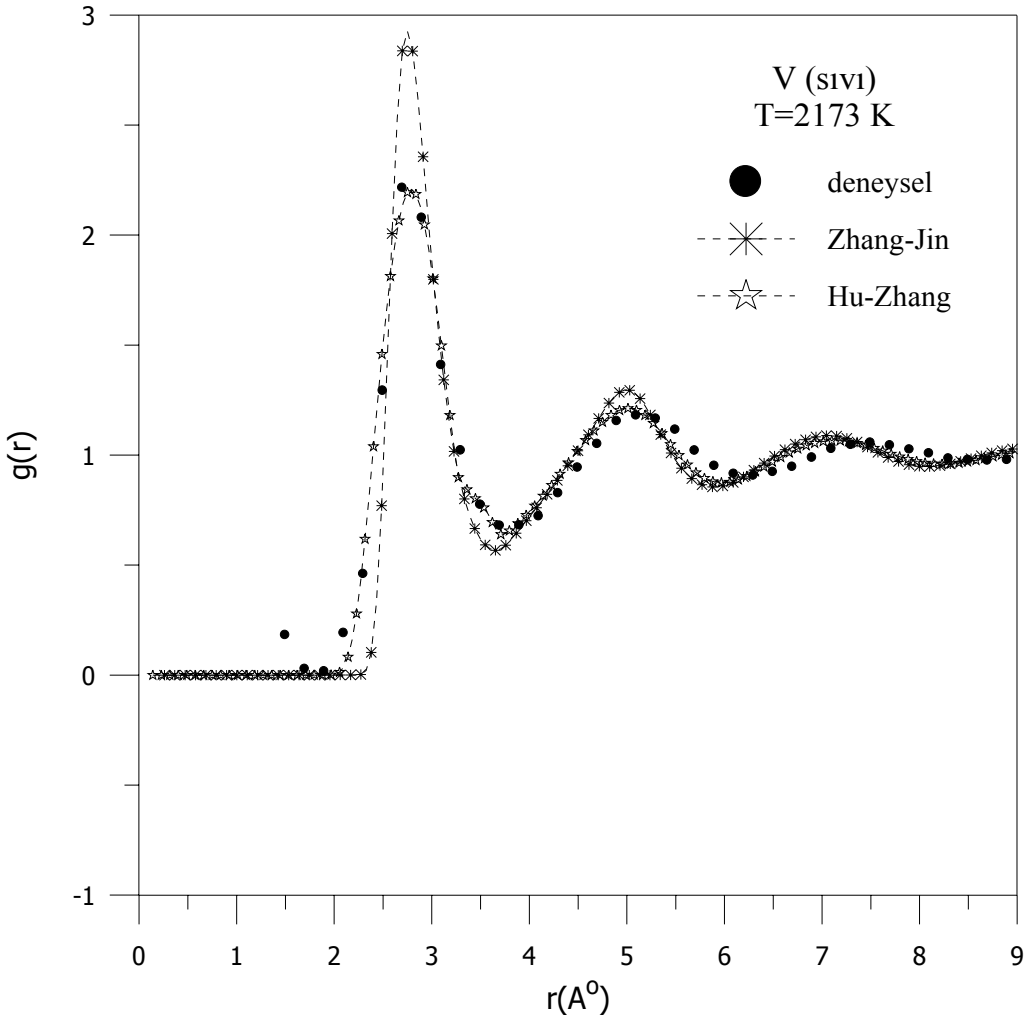
Şekil 5.44. V için farklı modeller için statik yapı faktörü



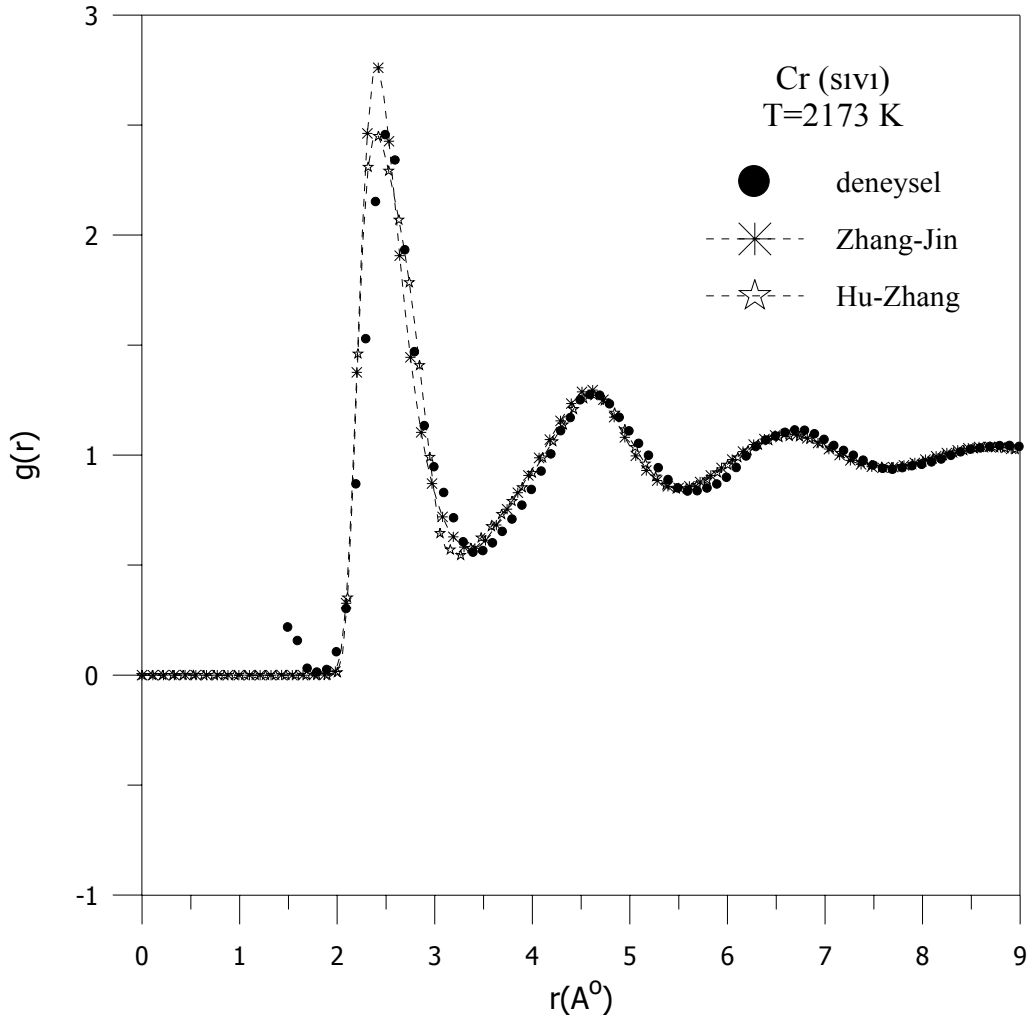
Şekil 5.45. Cr için farklı modeller için statik yapı faktörü



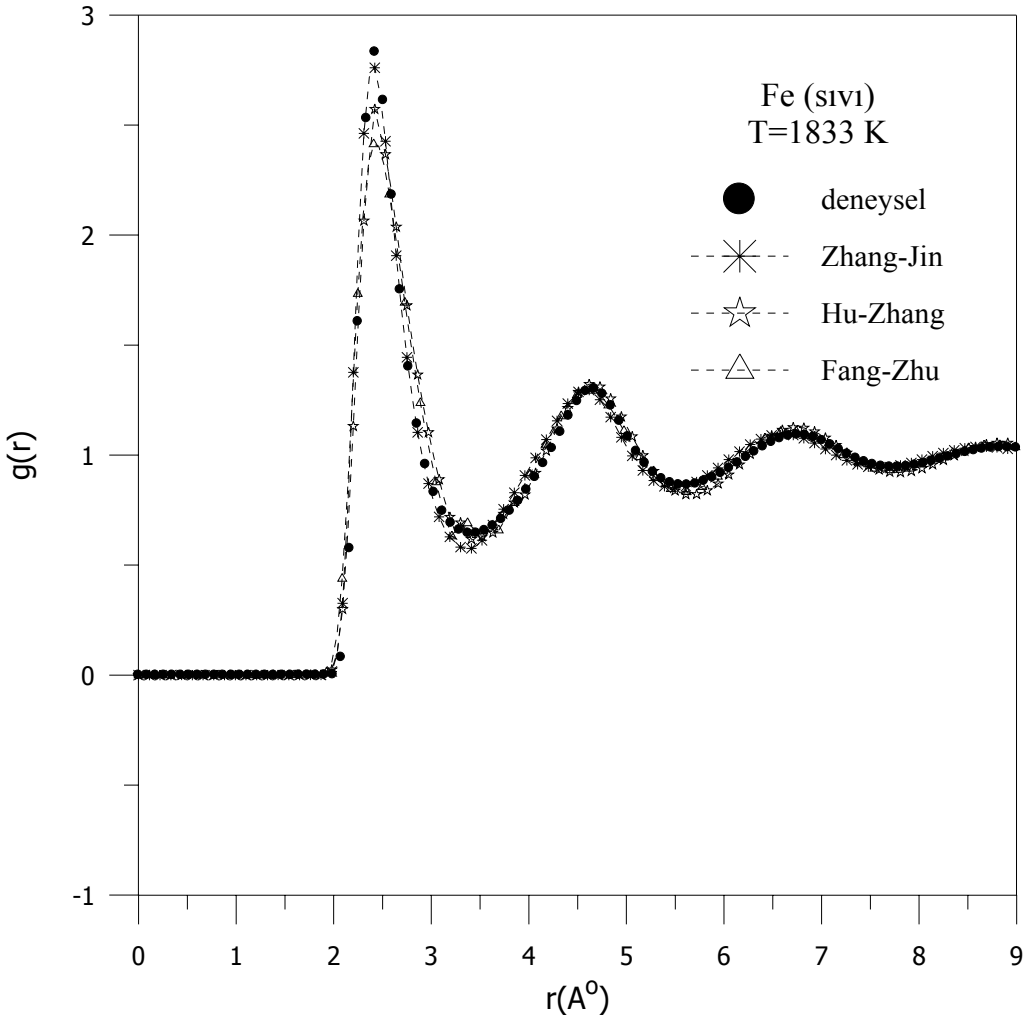
Şekil 5.46. Fe için farklı modeller için statik yapı faktörü



Şekil 5.47. V için farklı modeller için çiftler dağılım fonksiyonu



Şekil 5.48. Cr için farklı modeller için çiftler dağılım fonksiyonu



Şekil 5.49. Fe için farklı modeller için çiftler dağılım fonksiyonu

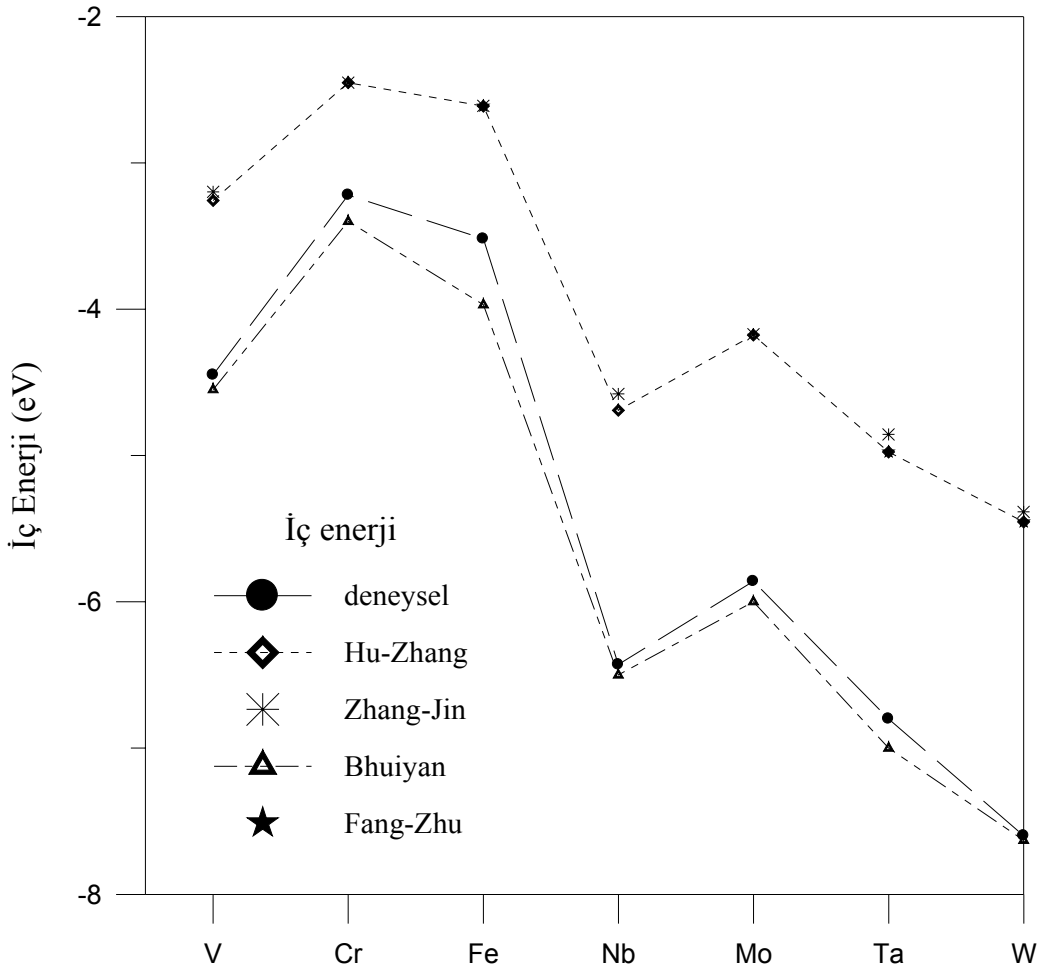
5.3 Sıvı bcc Geçiş Metallerinin İç enerjisi

Bu bölümde sıvı V, Cr, Fe, Nb, Mo, Ta ve W için ergime noktaları civarında Zhang-Jin AYDGAM, Hu-Zhang AGAM ve Fang-Zhu YDAGAM etkin çiftler potansiyelleri ve VMHNC integral teorisi kullanılarak (4.28) denklemi ile hesaplanan iç enerji değerleri Tablo 5.5.' de verilmektedir.

Tablo 5.5. ZJ –AYDGAM, HZ – DGAM ve FZ - YDAGAM etkin çiftler potansiyelleri ve VMHNC integral teorisi kullanılarak elde edilen iç enerji değerleri

Metal	İÇ ENERJİ $U_{iç}$ (eV)				
	Zhang-Jin	Hu-Zhang	Fang-Zhu	Bhuiyan	Deneysel
V	-3.1985	-3.2580	-	-4.55	-4.45
Cr	-2.4515	-2.4511	-	-3.40	-3.22
Fe	-2.6096	-2.6116	-2.6116	-3.97	-3.52
Nb	-4.5792	-4.6916	-	-6.50	-6.43
Mo	-4.1717	-4.1773	-	-6.0	-5.86
Ta	-4.8566	-4.9765	-4.9765	-7.0	-6.80
W	-5.3854	-5.4547	-5.4547	-7.63	-7.60

Şekil 5.50.' de Zhang-Jin AYDGAM, Hu-Zhang AGAM ve Fang-Zhu Mo, Ta ve W için elde edilen iç enerji değerleri Bhuiyan (Bhuiyan ve v.d. 1996)'ın hesaplamış olduğu iç enerji değerleri ve deneysel verilerle (Hultgren 1973 ve Barin ve v.d. 1973) değerleriyle karşılaştırılmıştır. Tablo 5.5. den görüldüğü üzere bulunan değerler deneysel değerlerle ve Bhuiyan' nın elde ettiği değerlerle uyumlu olmasa da Şekil 5.50.' den görüleceği üzere deneyselle aynı trendi göstermektedir. Zhang-Jin ve Hu-Zhang modelleri için iç enerji hesabında kullanılan atomlararası potansiyel fonksiyonu benzer yapıda ve gömme enerjisi si fonksiyonu ise aynıdır. Bu nedenle bu iki model birbirleri ile kıyaslandığında iç enerji değerleri birbirleriyle uyumludur.



Şekil 5.50. Sıvı bcc metalleri için İç Enerji grafiği

5.4 İkili Karıştırılamaz Fcc Alaşım Sistemlerinin Atomlararası Çiftler Potansiyelleri

Bu bölümde bazı ikili karıştırılamaz alaşım sistemleri için ergime noktaları civarında Fang-Deng YDAGAM Modeli ve Fang-Zhu (FZ – YDAGAM) kullanılarak hesaplanan etkin çiftler potansiyelleri verilmektedir. Bu çalışmada kullanılan potansiyel fonksiyonlarının parametre seti, bağlanma enerjisine, Born kararlılık denge şartına, kesim mesafesi işlemine ve konfigurasyonel serbestlik enerjisini minimize eden bağıntıya fit edilerek elde edilmiştir. Aynı zamanda bulunanlar yapı faktörü için iyi bir sonuç vermektedir. Çalıştığımız sistemlerin ($Al_{50}Pb_{50}$, $Ag_{50}Cu_{50}$ ve $Ag_{50}Ni_{50}$) termodinamik durumu ve bu durumdaki $\rho(at./A^3)$ deneysel iyonik sayı yoğunlukları ve sıcaklıklar Waseda (Waseda 1980)' dan alınmış ve Tablo 5.4.' de verilmektedir. Ayrıca parametrizasyon işleminde kullanılan a örgü parametresi ve E_c bağlanma enerjisinin hem katıhal hem de sıvıhal deki değerleri sırasıyla a^K , a^S , E_c^K , E_c^S , parametreleri ile gösterilmekte ve Tablo 5.6.' da verilmektedir. Parametrelerde kullanılan K ve S indisleri katı ve sıvı durumları göstermektedir.

Tablo 5.6. Bazı İkili karıştırılamaz alaşım sistemleri için YDAGAM potansiyel fonksiyonlarının parametrizasyonunda kullanılan giriş parametreleri

Metal	**T(K)**	$\rho(\text{at.}/\text{Å}^3)$	$a^K(\text{Å})$	$a^S(\text{Å})$	$E_c^K(\text{eV})$	$E_c^S(eV)$
Al	943	0.0528	4.0496	4.2313	3.39	2.504
Pb	613	0.0313	4.9502	5.050	2.03	1.907
Ag	1273	0.0517	0.40857	4.209	2.95	2.440
Cu	1423	0.0755	3.6147	3.729	3.49	3.110
Ni	1773	0.0792	0.35236	3.580	4.44	3.846

5.4.1 Fang-Deng İkili Fcc Karıştırılamaz Alaşım Sistemi için YDAGAM Etkin Çiftler Potansiyel Yaklaşımı

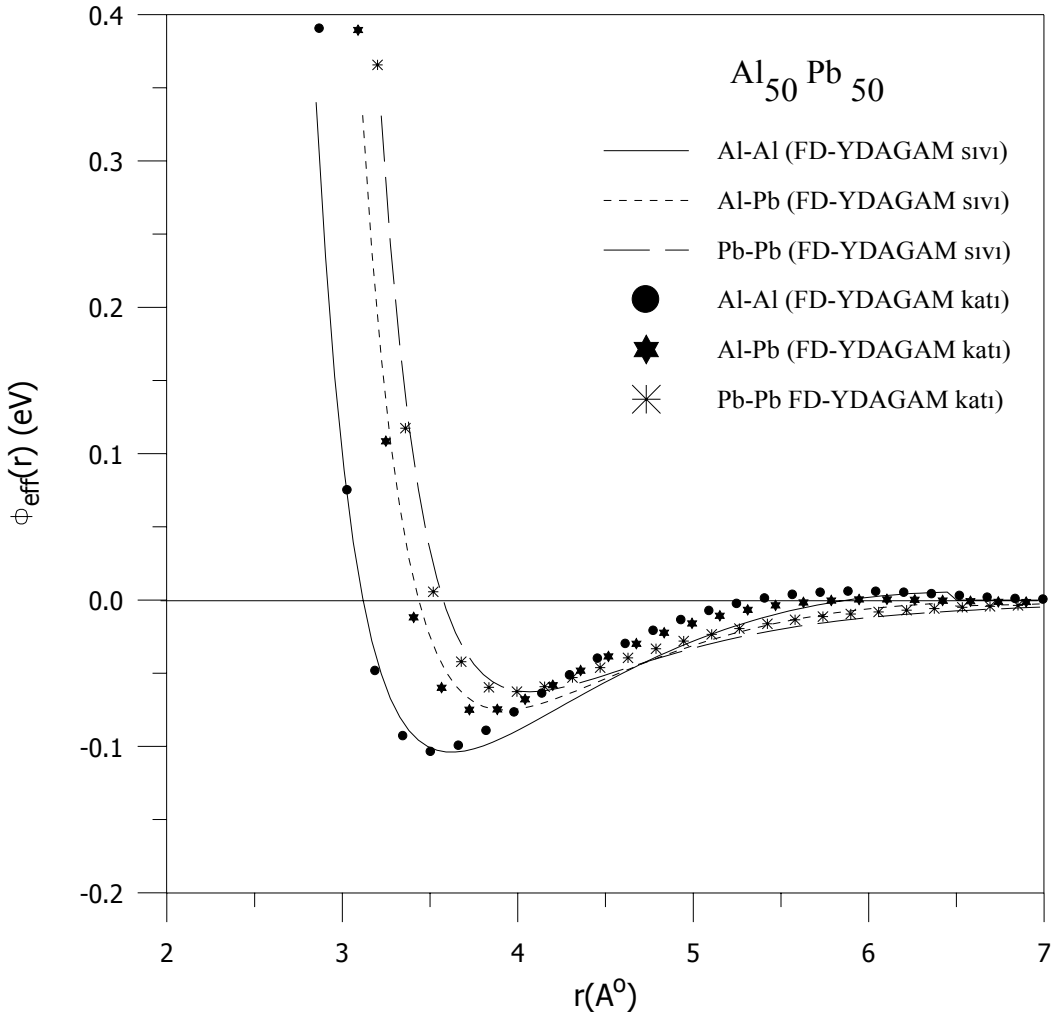
Yeniden Düzenlenmiş Analitik Gömülü Atom Metodu potansiyel fonksiyonlarını hem katıhal hem de sıvıhal özelliklerine fit ederek elde edilen parametre seti kullanılarak $Al_{50}Pb_{50}$ ikili fcc karıştırılamaz alaşım sistemi için atomlararası etkin çiftler potansiyelleri hesaplandı. Fang-Deng YDAGAM modeli ile hesaplanan $Al_{50}Pb_{50}$ alaşım sisteminde yer alan sıvı fcc Al ve Pb metalleri için optimize edilmiş potansiyel parametreleri katı model parametreleri ile karşılaştırılmalı olarak Tablo 5.7.' de verilmektedir.

Tablo 5.7. Fang-Deng YDAGAM modeli ile hesaplanan $Al_{50}Pb_{50}$ alaşım sistemi için sıvı Al ve Pb metallerinin saf durumdaki potansiyel parametreleri

	α (eV)	***n***	***f_e***	***F_0 (eV)***	***k_0 (eV)***	***k_1 (eV)***	***k_2 (eV)***	***k_3 (eV)***
Al	1.1961	0.3396	0.34	2.75 (3.4)	-0.1137	-0.0663	0.0547	0.0323
Pb	0.1353	0.5317	1.6602	1.53 (2.3)	-0.3163	0.2476	-0.0467	0.0356

Parantez içinde verilen değerler sıvı E_c'ye fit edilerek elde edilen değerlerdir.

$Al_{50}Pb_{50}$ ikili karıştırılamaz alaşım sistemi için Fang-Deng YDAGAM etkin çiftler potansiyeli katı ve sıvı hal durumları için karşılaştırmalı olarak Şekil 5.51.'de verilmektedir. Çalışmada kullanılan modelde potansiyel fonksiyonu belirli bir mesafede kesilmektedir. Kesme prosedürü (Fang ve v.d. 2003)'den alınmıştır ve bu prosedür $r_c = r_2 + k_c[r_3 - r_2]$ şeklindedir. GAM potansiyel fonksiyonları için sıvı haldeki potansiyel fonksiyonunun katıhal dekinden daha yumuşak olduğu ve genişliğinin arttığı, potansiyelin minimumunun konumunun daha büyük r değerlerine doğru kaydığı açıktır.



Şekil 5.51. $Al_{50}Pb_{50}$ ikili alaşımı için Fang-Deng YDAGAM kullanılarak elde edilen efektif çiftler potansiyel fonksiyonu

5.4.2 Fang –Zhu YDAGAM İkili Fcc Karıştırılamaz Alaşım Sistemi için Etkin Çiftler Potansiyel Yaklaşımı

Yeniden Düzenlenmiş Analitik Gömülü Atom Metodu potansiyel fonksiyonlarını hem katıhal hem de sıvıhal özelliklerine fit ederek elde edilen parametre seti kullanılarak $Ag_{50}Cu_{50}$ ve $Ag_{50}Ni_{50}$ ikili karıştırılamaz alaşım sistemi için atomlararası etkin çiftler potansiyelleri hesaplandı. Fang-Zhu YDAGAM modeli ile hesaplanan $Ag_{50}Cu_{50}$ ve $Ag_{50}Ni_{50}$ alaşım sisteminde yer alan sıvı fcc Cu, Ag ve Ni metalleri için optimize edilmiş potansiyel parametreleri katı model parametreleri ile karşılaştırılmalı olarak Tablo 5.8.' de verilmektedir.

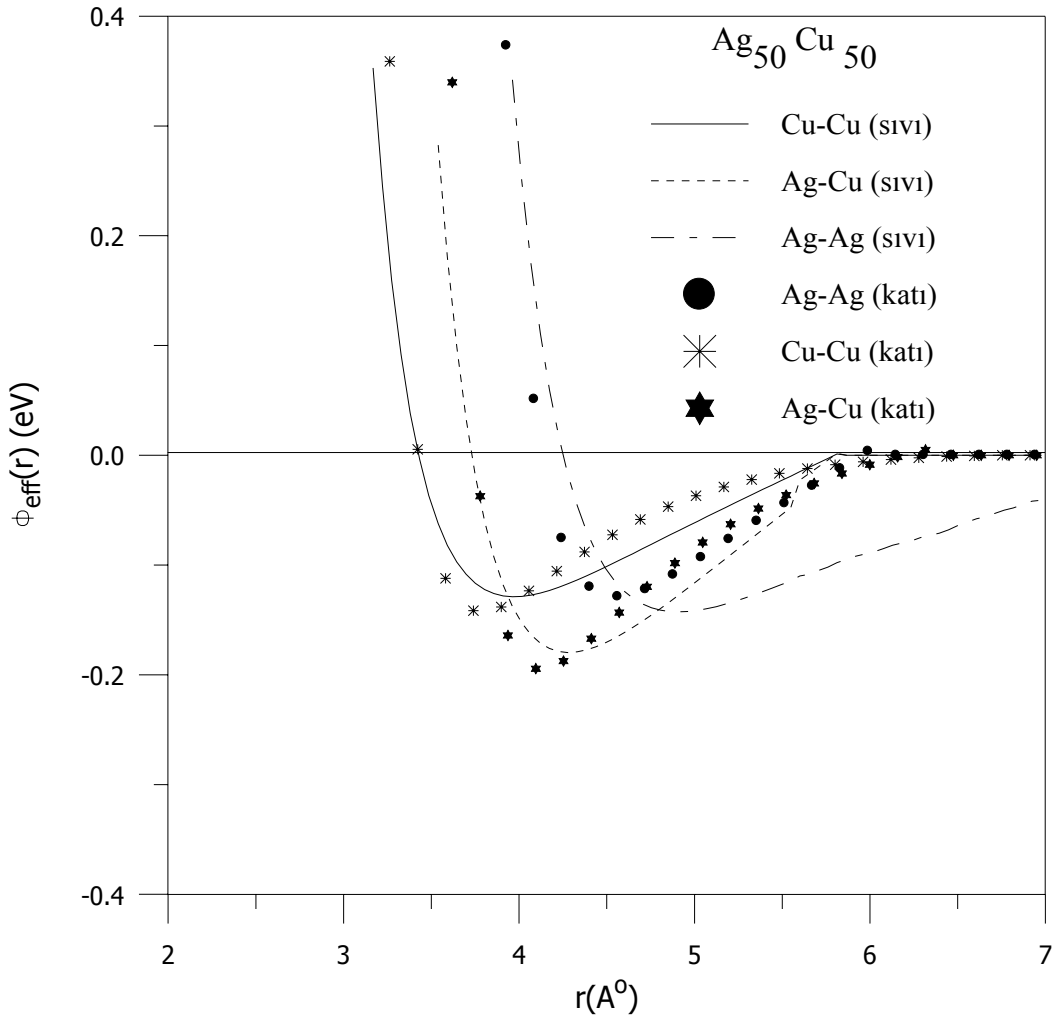
Tablo 5.8. FZ-YDAGAM modeli ile hesaplanan $Ag_{50}Cu_{50}$ ve $Ag_{50}Ni_{50}$ alaşım sistemi için sıvı Ag , Cu ve Ni metallerinin saf durumdaki potansiyel parametreleri

	Ag	**Cu**	**Ni**
α (eV)	-0.0001666	0.00316257	0.003515689
N	0.82	0.6	0.42
k_c	0.3	0.3	0.1
F_0 ***(eV)***	1.85 (2.57)	2.32 (3.15)	2.84 (3.395)
k_0 ***(eV)***	0.2821774	1.499487	3.3719958
k_1 ***(eV***	0.1474579	-0.650171	-1.56871677
k_2 ***(eV)***	-0.0803378	0.097645	0.2434557
k_3 ***(eV)***	0.00303516	-0.000056	-0.0000122
k_4 ***(eV)***	0.084663779	0.098837	-0.150326
k_5 ***(eV)***	-0.55494136	-1.178326	-2.4124929
r_c	6.6449	5.5516	5.6244

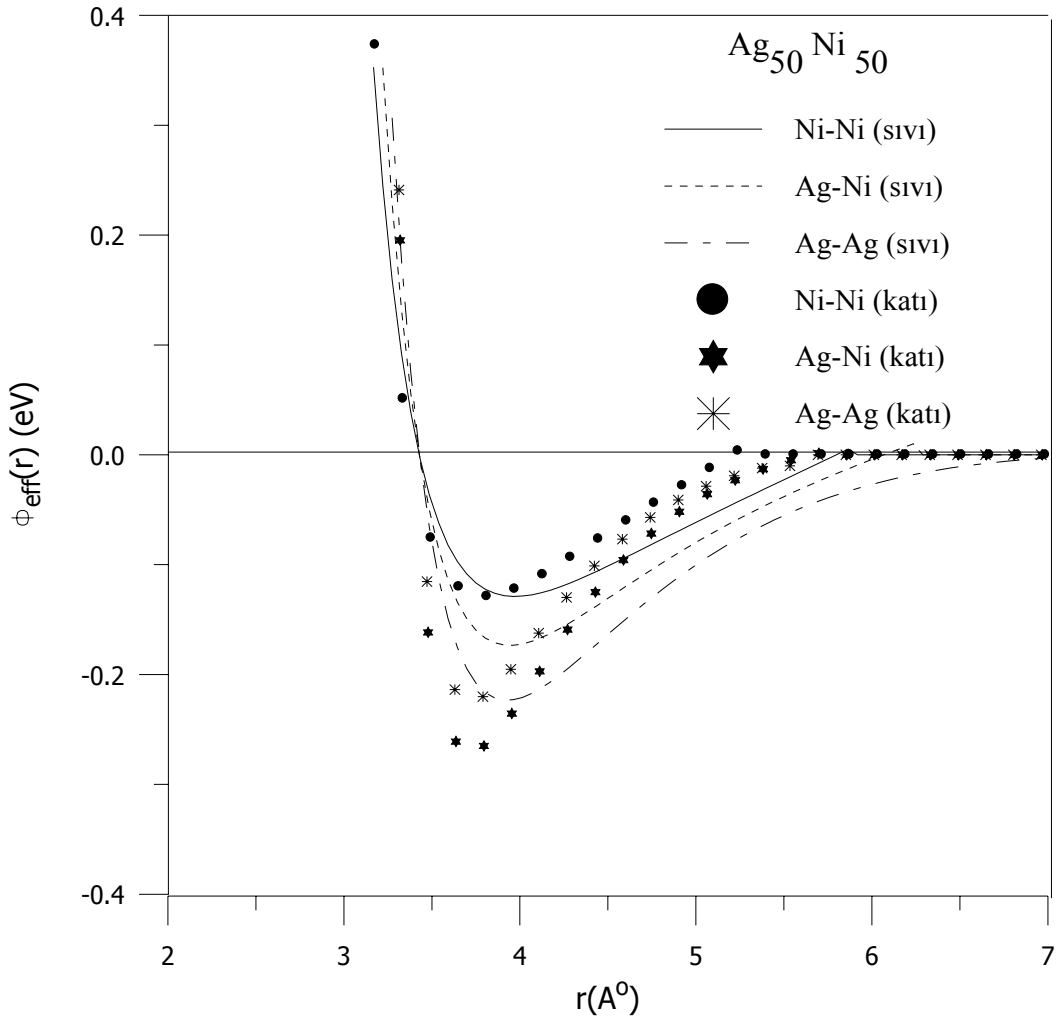
Parantez içinde verilen değerler sıvı E_c'ye fit edilerek bulunan değerlerdir.

$Ag_{50}Cu_{50}$, $Ag_{50}Ni_{50}$ ikili karıştırılamaz alaşım sistemi için FZ - YDAGAM etkin çiftler potansiyeli sırasıyla katı ve sıvı hal durumları için karşılaştırmalı olarak sırasıyla Şekil 5.52. - 5.53.'de verilmektedir. Çalışmada kullanılan modelde potansiyel fonksiyonu belirli bir mesafede kesilmektedir. Kesme prosedürü (Fang ve v.d. 2003)'den alınmıştır ve bu prosedür $r_c = r_2 + k_c[r_3 - r_2]$ değerleri arasında seçilmiştir.

Şekil 5.51.'den görüldüğü üzere sıvı potansiyel parametreleri kullanılarak türetilen etkin çiftler potansiyel parametreleri $Ag_{50}Cu_{50}$ için katı parametrelerinden elde edilen etkin çiftler potansiyelleri ile daha farklı bir eğilim gösterir. Şekil 5.52.'de katı hal özelliklerine fit edilmiş tanıttığımız YDAGAM potansiyel fonksiyonlarının sıvı hal özelliklerinden elde edilenlerden daha derin bir potansiyelin artış verdiği görülür. Sıvı parametrizasyonu kullanılarak hesaplanmış YDAGAM çiftler potansiyelleri diğerlerinden daha uzun bir karakter gösterir. Şekil 5.53.'den de görüleceği üzere $Ag_{50}Ni_{50}$ alaşımı için katı ve sıvı durumlar için farklı eğilimler gösterse de $Ag_{50}Cu_{50}$ alaşımından daha iyi bir sonuç vermektedir.



Şekil 5.52. $Ag_{50}Cu_{50}$ ikili alaşımı için FZ-YDAGAM kullanılarak elde edilen efektif çiftler potansiyel fonksiyonu



Şekil 5.53. $Ag_{50}Ni_{50}$ ikili alaşımı için FZ-YDAGAM kullanılarak elde edilen efektif çiftler potansiyel fonksiyonu

5.5 İkili Karıştırılamaz Fcc Alaşım Sistemlerinin Yapısı

Bu bölümde ikili karıştırılamaz alaşım sistemlerinin VMHNC integral teorisi ile ergime noktaları civarında elde edilen yapısal özellikleri ile ilgili sonuçlar verilmektedir. Hesaplanan etkin çiftler etkileşme potansiyelleri sıvı yapı hesaplamalarında giriş verileri olarak kullanılmıştır. O – Z denklemi Zerah algoritması (Zerah 1985) kullanılarak çözüldü.

Bu çalışmada çalışılan iki karıştırılamaz fcc alaşım sistemleri için termodinamik durum parametreleri sırasıyla Tablo 5.9. – 5.11.'de verilmektedir. Alaşım sıcaklığı olarak alaşımdaki bileşenlerden en yüksek ergime sıcaklığına sahip olan bileşenin sıcaklığı seçilmiştir. Diğer bileşenin o sıcaklıktaki hacmi Iıda'daki (T. Iıda ve R. I. L. Guthrie, 1993) $V = V_M \{1 + \alpha(T - T_M)\}$ formu kullanılarak hesaplanmıştır. X=50 konsantrasyonu için alaşım hacmi bulunmuştur.

Tablo 5.9. $Al_{50}Pb_{50}$ alaşımı için termodinamik durum parametreleri

Alaşım	T(K)	$\rho(at./\mathring{A}^3)$
Al	943	0.0528
$Al_{50}Pb_{50}$	943	0.0413
Pb	943	0.0298

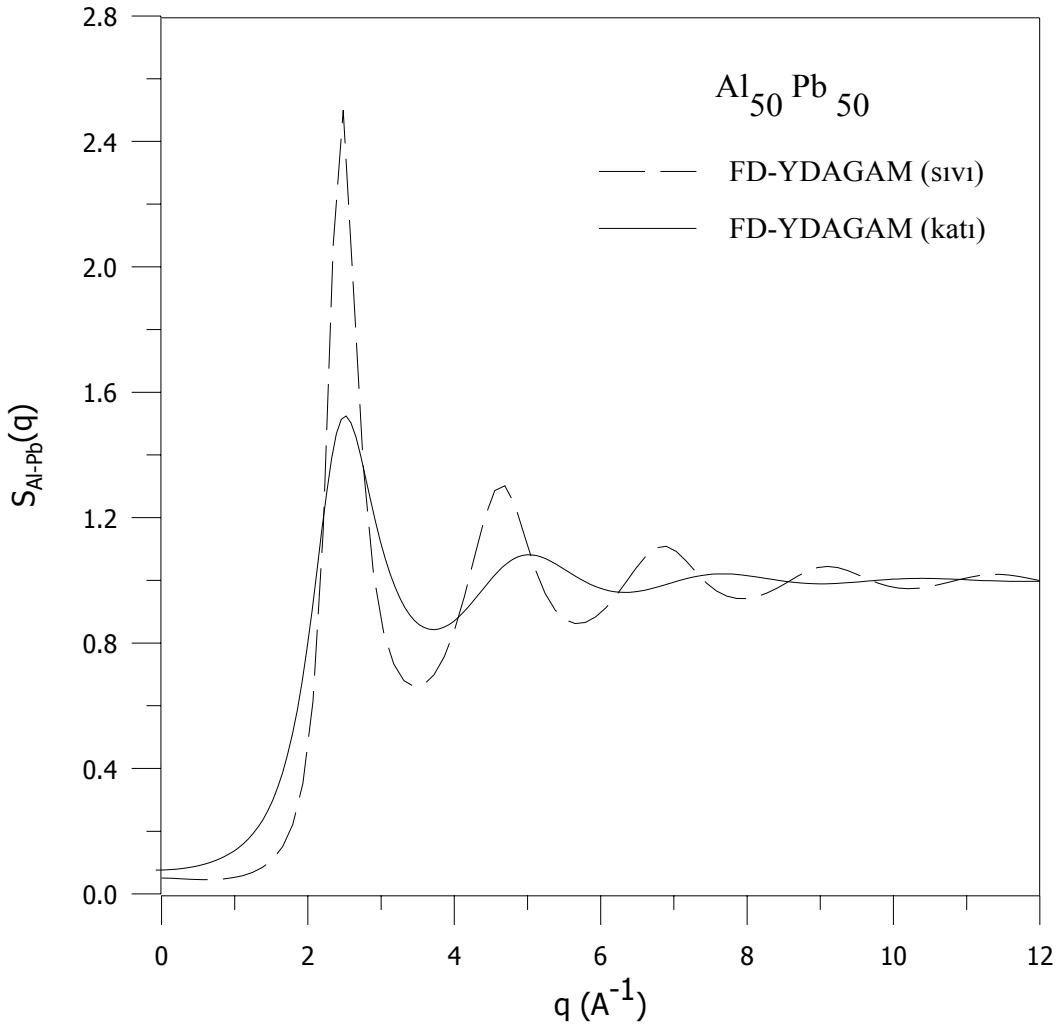
Tablo 5.10. $Ag_{50}Cu_{50}$ alaşımı için termodinamik durum parametreleri

Alaşım	T(K)	$\rho(at./\mathring{A}^3)$
Ag	1423	0.0500
$Ag_{50}Cu_{50}$	1423	0.0627
Cu	1423	0.0755

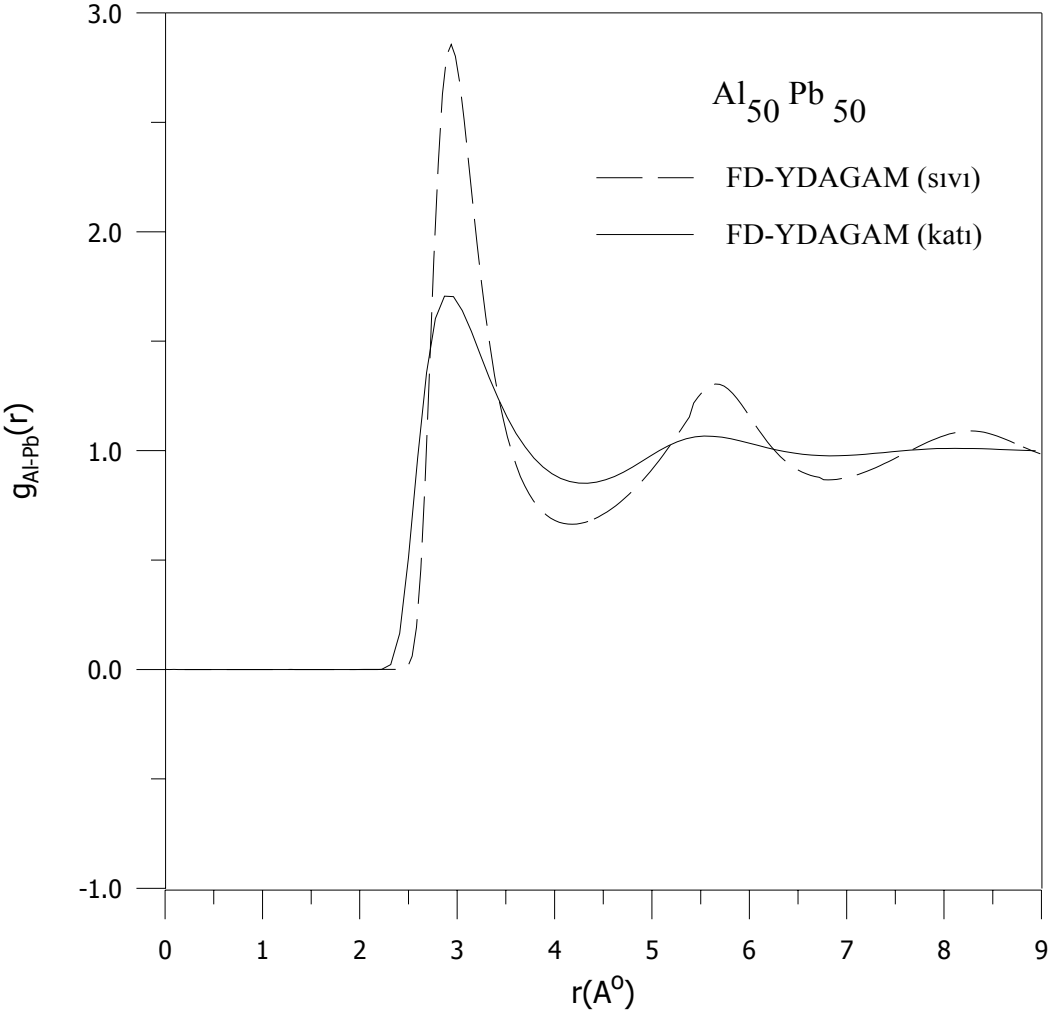
Tablo 5.11. $Ag_{50}Ni_{50}$ alaşımı için termodinamik durum parametreleri

Alaşım	T(K)	$\rho(at./\mathring{A}^3)$
Ag	1773	0.0491
$Ag_{50}Ni_{50}$	1773	0.0642
Ni	1773	0.0792

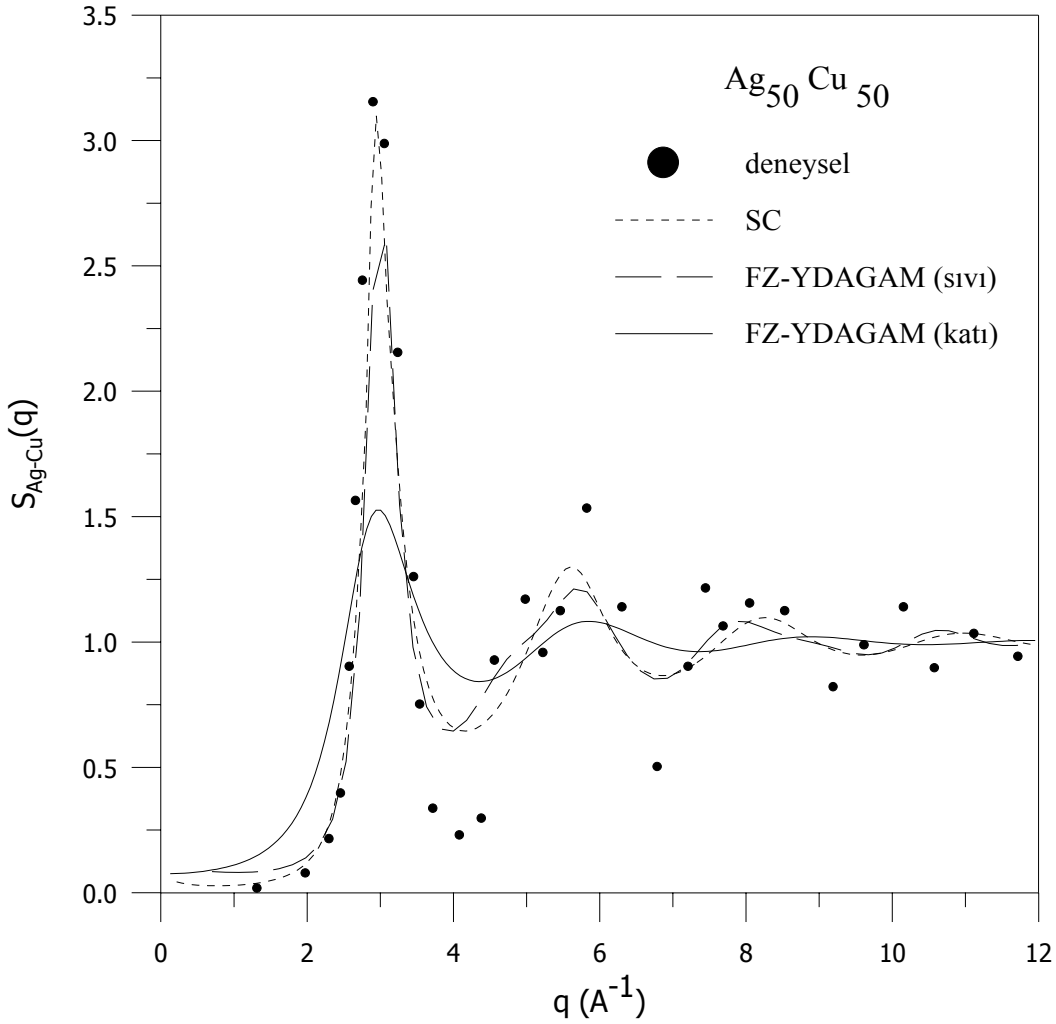
İkili karıştırılamaz fcc alaşım sistemlerinden $Al_{50}Pb_{50}$ FD–YDAGAM etkin çiftler potansiyelleri ile VMHNC integral denklem teorisi kullanılarak hesaplanan statik yapı faktörü S(q) ise Şekil 5.54'de çiftler dağılım fonksiyonu g(r) Waseda' nın X–ışınları kırınımı deneysel değerleri ile karşılaştırıldı ve Şekil 5.55.'de , gösterilmiştir. Bu tezde çalışılan diğer ikili karıştırılamaz alaşım sistemlerinden $Ag_{50}Cu_{50}$ ve $Ag_{50}Ni_{50}$ için FZ–YDAGAM etkin çiftler potansiyelleri ile VMHNC integral denklem teorisi kullanılarak hesaplanan statik yapı faktörü S(q) ise sırasıyla Şekil 5.56. - 5.57.'de ve çiftler dağılım fonksiyonu g(r) Waseda' nın X–ışınları kırınımı deneysel değerleri ile karşılaştırıldı ve sırasıyla Şekil 5.58. - 5.59.'da gösterilmiştir. Şekil 5.56.'da deneysel değeri ve daha önce bu $Ag_{50}Cu_{50}$ alaşımı ile alakalı SC verimiz olduğu için sadece bu alaşım için karşılaştırma verebiliyoruz. Uzun menzilli FS tipi Sutton-Chen (SC) potansiyelleri kullanılarak elde edilen $Ag_{50}Cu_{50}$ eşatomik alaşımındaki VMHNC kısmi statik yapı faktörleri $S_{Ag\text{-}Cu}(q)$'den da açıkça görüleceği üzere 1. pik etkin çiftler potansiyeline dayanan sıvı GAM kullanılarak iyi bir biçimde tahmin edilmektedir. Katı hal parametrizasyonu ile YDAGAM etkin potansiyelleri kullanılarak hesaplanmış $S_{Ag\text{-}Cu}(q)$ daha küçük q değerleri doğrultusunda küçük bir kayma sergiler. Temel deneysel pikin yüksekliğinin tahminin altında olduğu görülür. Sıvı yapısının küçük q davranışında yansıtılan potansiyelin asimptotik davranışı açıkça görülebilir. Açıkça görülebilir ki düşük q bölgesi sıvı tabanlı etkin potansiyel durumlarda iyi üretilebilir. Tüm S(q) şekillerinden de görüldüğü gibi sıvı hal parametrizasyonu kullanılarak hesaplanan kısmi yapı faktörleri katı hal parametreleri kullanılarak hesaplanan S(q)'nun temel pikinin yüksekliğini olduğundan daha fazla olduğunu tahmin etmek eğilimindedir. Ayrıca bunların osilasyon fazlarında küçük farklar vardır.



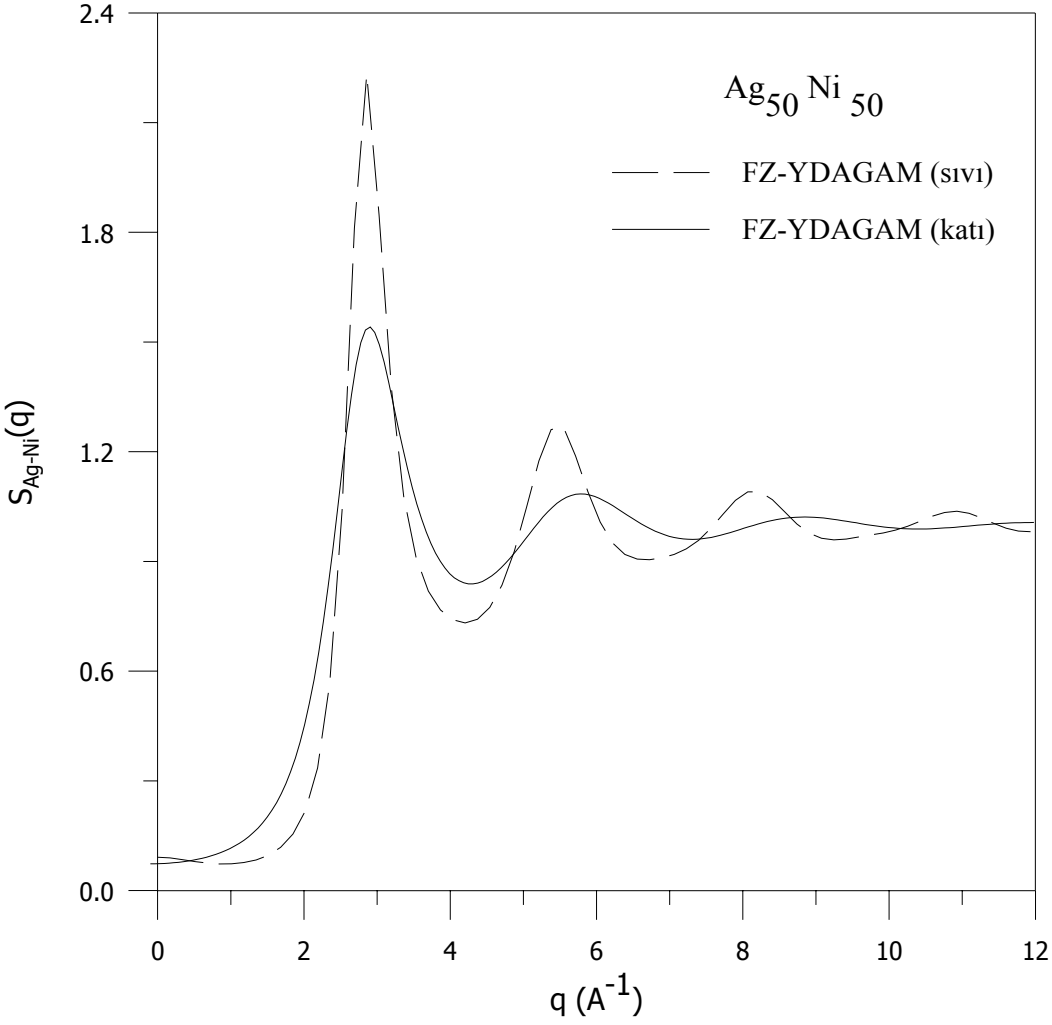
Şekil 5.54. $Al_{50}Pb_{50}$ ikili alaşımı için Statik yapı faktörü



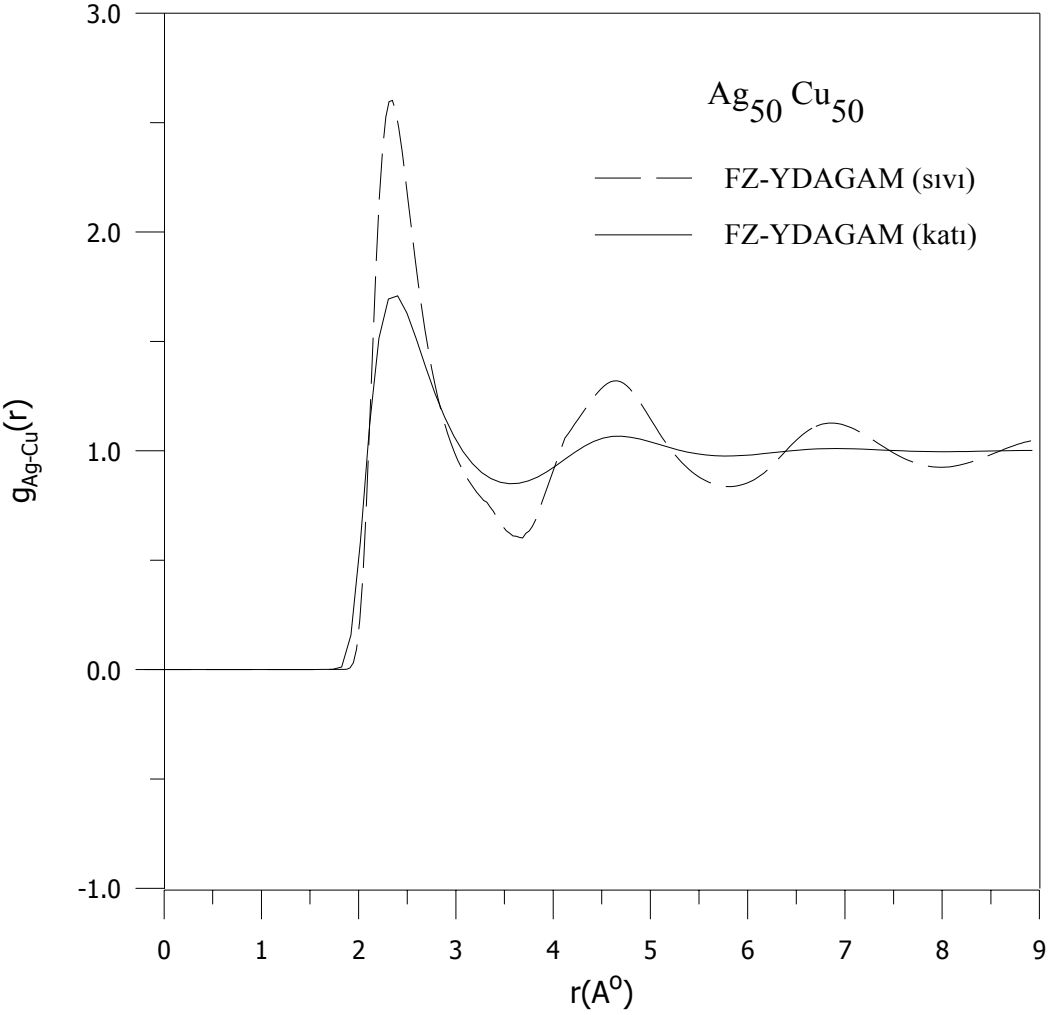
Şekil 5.55. $Al_{50}Pb_{50}$ ikili alaşımı için çiftler dağılım fonksiyonu



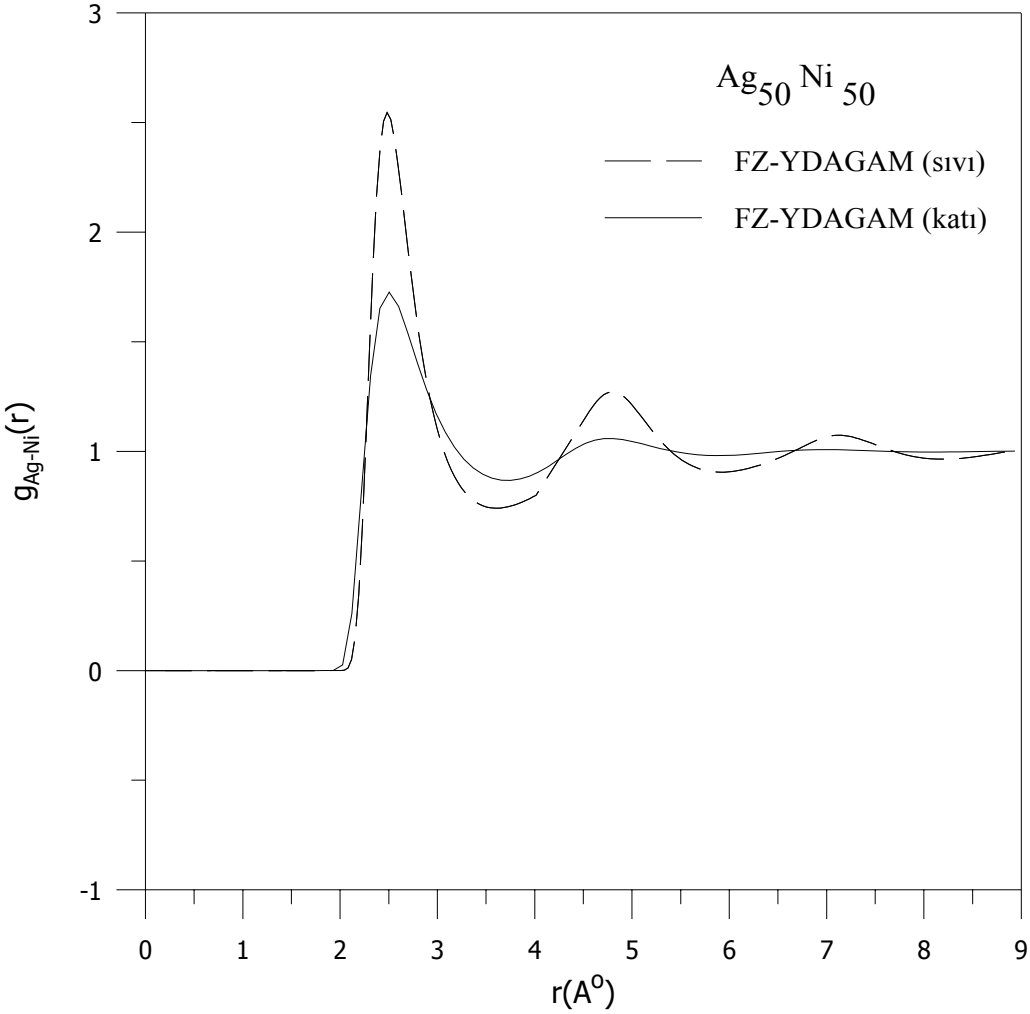
Şekil 5.56. $Ag_{50}Cu_{50}$ ikili alaşımı için Statik yapı faktörü



Şekil 5.57. $Ag_{50}Ni_{50}$ ikili alaşımı için Statik yapı faktörü



Şekil 5.58. $Ag_{50}Cu_{50}$ ikili alaşımı için Çiftler dağılım fonksiyonu



Şekil 5.59. $Ag_{50}Ni_{50}$ ikili alaşımı için Çiftler dağılım fonksiyonu

Sonuç

Bu çalışmada gömülü atom metodu potansiyellerinden Zhang-Jin Analitik Yeniden Düzenlenmiş GAM, Hu-Zhang Analitik GAM ve Fang-Zhu Yeniden DüzenlenmişA GAM potansiyellerinin sıvı bcc V, Cr, Fe, Nb, Mo, Ta ve W metalleri ile çalışılmış ve bu farklı metodlardan hem sıvı hem yapı hem de termodinamik özellikleri doğru veren çiftler potansiyelini elde edebilme yöntemleri denenmiştir ve sonuçta r_{son} mesafesinin $r_c = r_2 + k_c(r_3 - r_2)$ olarak alındığı Hu-Zhang AGAM metodunun hesaplanan sıvı geçiş metallerinin yapısal özelliklerinin çalıştığımız diğer metodlara göre deneysel sonuçlar ile daha uyumludur. Ayrıca bu tezde çalışılan Fang-Deng Yeniden Düzenlenmiş Analitik GAM ve Fang-Zhu Yeniden Düzenlenmiş Analitik GAM metotlarının ikili karıştırılamaz $Al_{50}Pb_{50,}$ $Ag_{50}Cu_{50}$ ve $Ag_{50}Ni_{50}$ fcc alaşım sistemleri için etkileşme potansiyelleri elde edilerek sıvı yapıları hesaplanmıştır. Çalışılan alaşım sistemlerinden $Ag_{50}Cu_{50}$ alaşım sisteminin yapı faktörü deneysel sonuçlarla karşılaştırıldığında ilk piki doğru verdiği fakat diğer pikler için faz kayması olduğu görülmektedir. Çalışılan diğer $Al_{50}Pb_{50}$ ve $Ag_{50}Ni_{50}$ alaşım sistemleri için deneysel sonuçların bilgimiz dahilinde olmaması nedeniyle karşılaştırılamamıştır. Genel olarak katı ve sıvı parametreleriyle $Ag_{50}Cu_{50}$ alaşımındaki trendi göstermektedirler.

KAYNAKLAR

Ackland G. J. ve Finnis M. W. *Philos. Mag. A* 54: 301, 1986.
Adams J. B. ve Foiles S. M. *Phys. Rev. B* 41: 3316, 1990.
Ackland G. J. ve Thetford R. *Philos. Mag. A* 56: 15, 1987.
Barin I., Knacke O., Kubaschewski O. *Thermodynamics Properties of Inorganic Substances*, Springer-Verlag, Berlin, 1973. Baskes M. I., Nelson S. J., Wright A. F. *Phys. Rev. B* 40: 6085, 1989.
Baskes M. I. *Phys. Rev. B* 46: 2727, 1992.
Bhuiyan G. M., Silbert M. ve Statt M. J. *Phys. Rev. B* 53: 636, 1996.
Brandes E.A. (Ed.) *Smitshells Reference Book, 6th ed.,* Butterworths, London, 1983.
Carisson A. E., Gelatt C. D. ve Ehrenreich H. *Mag. A* 41: 241, 1980.
Chantasiriwan S. ve Milstein F. *Phys. Rev. B* 58: 5996, 1998.
Cheng W. ve Wynblatt P. *J. Cryst. Growth* 173: 513, 1997.
Clementi E. ve Roetti C. Atomic Data and Nuclear Data Tables, 14, 3 ve 4, Academic, New York, 1974.
Colinet C., Pasture A., Hicter P., *CALPHAD* 9: 71, 1985.
Cusack N. E. *The Physics of structurally disordered Matter*, Adam Hilger, 1987.
Dalgıç S. Ş. , Dalgıç S.ve Dömekeli Ü. Structure properties of liquid fcc transition metals using the embedded atom method potential, *Romanian conference on advanced materials,* 2003, Romanya. 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.
Deng H. Q., Hu w. Y., Shu X. L., Zhang L., Zhang B. W. *Surf. Sci.*: 177, 2002.
Doyama M. ve Kagure Y. *Compt. Mater. Sci.* 14: 80,1999.
Ercolessi F., Parinello M., Tosatti E. *Phil. Mag. A* 58: 213, 1988.
Fang F., Shu X. L., Deng H. Q., Hu W. Y., Zhu M. *Mater. Sci. And Eng. A* 355: 1, 2003.
Fang F., Deng H. Q., *Mater. Sci. and Eng. B* 98: 265, 2003.
Ferrante J., Smith J. R. Ve Rose J. H. *Phys. Rev. Lett.* 50: 1385, 1983.
Finnis M. W. ve Sinclair J. E. *Phil. Mag. A* 50: 45,1984.
Foiles S. M. *Phys. Rev. B* 32 : 7865, 1985.
G. Zerah *J. Comput. Phys.* 61: 280, 1985.
Gonzalez L. E., Gonzalez D. J. ve Silbert M. *Phys. Rev. A* 45: 3803, 1992.
Gonzales L. E., Meyer A., Iniguez M. P., Gonzales D. J., Silbert M., *Phys. Rev E* 47: 4120, 1993.
Guellil A. M. ve Adams J. B. *J. Mater. Res.* 7: 639, 1992.
Guinea F., Smith J. R., Rose J. H. ve Ferrante J. *Appi. Phys. Lett.* 44: 53, 1984.
Harder J. M. ve Bacon D. J. *Philos. Mag. A* 58: 165, 1988.
Herbst J. F. *Phys. Rev. B* 24: 608, 1981.
Hultgren R. *Selected Values of Thermodynamic Properties of Elements*, American Society for Metals, Ohio, 1973.
Hu W., Xu H., Shu X., Yuan X., Gao B., Zhang B. W. *J. Phys. D: Appl. Phys.* 33: 711, 2000.
Hu W. Y., Zhang B. W., Huang B. Y., Gao F., Bacon D. J. *J. Phys. Condens. Matter.* 13: 1193, 2001.
Hu W. Y., Shu X., Zhang B. W. *Comp. Mater. Sci.* 23: 175, 2002.
Iıda T., Guthrie R. I. L. *The Physical Properties of Liquid Metals,* Clarendon Press, Oxford, 1993.

Johnson R. A. *Phys. Rev. B* 37: 3924, 1988.
Jhonson R. A. ve Oh D. J. *J. Mater. Res.* 4: 1195, 1989.
Kittel C. *Introduction to Solid State Physics*, 4. Baskı, Wiley, New York, 1971.
Landa, P. Wynblatt, A. Girshick, V. Vitek, A. Ruban, H. Skriver *Acta Mater.* 46: 3027, 1998
Landa A., Wynblatt P., Girshick A., Vitek V., Ruban A., Skriver H. *Acta Mater.* 47: 2477, 1999.
Landa A., Wynblatt P., Siegel D. J., Adams J. B., Mryasov O. N., Liu X. Y. , *Acta Mater.* 48: 1753, 2000, düzeltme *Acta Mater.* 48 : 3621, 2000.
Landa A., Wynblatt P., Johnson E., Dahmen U. *Acta Mater.* 48: 2557, 2000.
Liebfried G. ve Breuer N. *Point defects in metals I, in: Springer Tracts in Modern Physics* 81: Springer, Berlin, 1978.
Lim H. S., Ong C. K., Ercolessi F. *Surf. Sci.*: 1109, 1992.
Manh D. N., Paxton A. T., Pettifor D. G., *Intermetallics* 3: 9, 1995.
Matthai C. C. ve Bacon D. J. *Philos. Mag. A* 52: 1, 1985.
McClean A. D. ve McClean R. S. At. Data Nucl. Data Tables 26: 197, 1981.
Moruzzi N. L., Janak J. F. ve Williams A. R. Calculated Electronic Properties of Metals, Pergoman, New York, 1978.
Ouyang Y. F. ve Zhang B. W. *Phys. Lett. A* 192: 79, 1994.
Ouyang Y., Zhang B. W. , Liao S., Jin Z., *Z. Physik. B* 101: 161, 1996.
Pasianot R., Farkas D., Savino E. J. *Phys. Rev. B* 43: 6952, 1991.
Rebonato R., Welch D. O., Hatcher R. D., Bilello J. C. *Philos. Mag. A* 55: 655, 1987.
Rose J. H., Smith J. R., Guinea F. ve Ferrante J. *Phys. Rev. B* 29: 2963, 1984.
Rosenfeld Y. *J. Stat. Phys.* 42: 437, 1986.
Shu S. L. *Study on the physical properties, point defects and atomic diffusion in Intermetallics by a modified analytic EAM model*, Ph. D. Dissertation, Hunan University, Changsha, P. R. China, 2001.
Swiler T. P. ve Loehman R. E. *Acta. Mater.* 48: 4419, 2000.
Teraoka T. ve Komaki M. *Surf. Sci.* 439: 1, 1999.
Wang Y. R. ve Boercker D. B. *J. Appl. Phys.* 78: 122, 1995.
Waseda Y., *The Structure of Non-Crystalline Matterials-Liquids and Amorphpus Solids,* McGraw-Hill, New-York, 1981.
Yin M. T. ve Cohen M. L. *Phys. Rev. B* 26: 5668, 1982.
Zhang B. W. ve Ouyang Y. F. *Phys. Rev. B* 48: 3022, 1993.
Zhang B. W., Ouyang Y. F., Liao S. Z., Jin Z. P. *Trans. Nonferrous Met. Soc. China* 6: 52, 1996.
Zhang B. W., Ouyang Y. F., Liao S., Jin Z. *Physica B* 262: 218, 1999.

ÖZGEÇMİŞ

1980 yılında Samsun'da doğdum. İlk öğrenimimi Şirinevler İlköğretim Okulun' da, orta öğrenimimi Ataköy Mimar Sinan İlköğretim Okulun' da, Lise öğrenimimi ise Ataköy Cumhuriyet Lisesi' nde tamamladım. Eylül 1998' da Trakya Üniversitesi Fen – Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümü' nde lisans eğitimime başladım ve Haziran 2002' de mezun oldum. Eylül 2002 tarihinde yüksek lisans eğitimime başladım.