

**ÖRGÜ DİNAMİĞİNDE
BAZI AÇISAL KUVVET MODELLERİ**

114708
Engin DELİGÖZ

**YÜKSEK LİSANS TEZİ
(FİZİK)**

**GAZİ ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

**T.C. YÜKSEKÖĞRETİM KURULU
DOKÜMANTASYON MERKEZİ**

**Ağustos 2001
ANKARA**

114708

Engin DELİGÖZ tarafından hazırlanan ÖRGÜ DİNAMİĞİNDE BAZI AÇISAL KUVVET MODELLERİ adlı bu tezin Yüksek Lisans tezi olarak uygun olduğu olduğunu onaylarım.



Prof. Dr. Kemal ÇOLAKOĞLU

Tez Yöneticisi

Bu çalışma, jürimiz tarafından Fizik Anabilim Dalında Yüksek Lisans tezi olarak kabul edilmiştir.

Başkan

: Prof. Dr. Kemal Çolakoglu



Üye

: Doç. Dr. Mehmet Elvi



Üye

: Yrd. Doç. Dr. Mehmet Çakmak



Üye

: _____

Üye

: _____

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



İÇİNDEKİLER

	Sayfa
ÖZET.....	i
ABSTRACT.....	ii
TEŞEKKÜR.....	iii
ÇİZELGELERİN LİSTESİ.....	iv
ŞEKİLLERİN LİSTESİ.....	vii
SİMGELER VE KISALTMALAR.....	viii
1. GİRİŞ.....	1
2. CGW, GTF VE SJ MODELLERİNE GENEL BAKIŞ.....	2
3. CGW MODELİ.....	5
4. GTF MODELİ.....	8
5. SHARMA-JOSHI MODELİ.....	12
5.1. Fonon Dispersiyon Bağlantıları.....	14
5.1.1. Bcc yapılar için.....	14
5.1.2. Fcc yapılar için.....	15
6. CGW VE GTF MODELLERİNİN DİNAMİK MATRİSİ ve KUVVET SABİTLERİNİN KARŞILAŞTIRILMASI.....	17
6.1. CGW Modelinde Dinamik Matris ve Fonon Frekans İfadeleri.....	17
6.1.1 Fcc yapılar için.....	17
6.1.2 Bcc yapılar için.....	22
6.2 GTF Modelinde Dinamik Matris ve Fonon Frekans İfadeleri.....	24
6.2.1 Fcc yapılar için.....	24
6.2.2 Bcc yapılar için.....	26
7. SONUÇ VE ÖNERİLER.....	57

KAYNAKLAR.....	70
EKLER.....	76
ÖZGEÇMİŞ.....	82



**ÖRGÜ DİNAMIĞİNDE
BAZI AÇISAL KUVVET MODELLERİ
(Yüksek Lisans Tezi)**

Engin DELİGÖZ

**GAZİ ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ
Ağustos 2001**

ÖZET

Bu çalışmada, CGW ve GTF modelleri kullanarak, bazı kübik metal ve alaşımların temel simetri yönlerindeki fonon frekansları hesaplandı. Frekanslar üzerine iyon-elektron etkileşmesinin katkısını görmek üzere, üçüncü komşuluk etkileşmeli CGW modeline Sharma-Joshi modeli eklenmiştir. Elde edilen sonuçlar; mevcut deneysel verilerle kıyaslanmıştır. CGW ve GTF modellerinin, bcc yapılarda benzer sonuçlar verdiği; CGW modelinin metallerde, GTF modelinin alaşımlarda öteki modellerden daha üstün olduğu görüldü.

Bilim Kodu : 500.01.02

Anahtar Kelimeler : Örgü dinamiği, CGW modeli, GTF modeli, Sharma-Joshi modeli

Sayfa Adedi : ix + 82

Tez Yöneticisi : Prof. Dr. Kemal ÇOLAKOĞLU

**SOME ANGULAR FORCE MODELS
IN THE LATTICE DYNAMICS
(M.Sc. Thesis)**

Engin DELİGÖZ

**GAZİ UNIVERSITY
INSTITUTE OF SCIENCE AND TECHNOLOGY
August 2001**

ABSTRACT

In this study, theoretical phonon frequencies have been calculated along the principal symmetry directions of some cubic metals and alloys by using of the third-neighbours CGW and GTF models. To see the contribution of the ion-electron interactions on the frequencies, Sharma-Joshi scheme is included in the third-neighbours CGW model. The obtained results have been compared with the available experimental data. It is found that CGW and GTF models give the similar results for the bcc structure, and the CGW model for metals and the GTF model for alloys are both superior than others.

Science code :500.01.02

Key Words : Lattice dynamics, CGW model, GTF model, Sharma-Joshi model

Page Number : ix + 82

Adviser : Prof. Dr. Kemal ÇOLAKOĞLU

TEŞEKKÜR

Çalışmalarım boyunca değerli yardım ve katkılarıyla beni yönlendiren, karşılaştığım tüm zorlukların çözümlenmesinde yakın ilgisini esirgemeyen değerli hocam Sayın Prof.Dr. Kemal ÇOLAKOĞLU'na, ayrıca yine yardımlarından faydalandığım Arş. Gör. Yasemin ÖZTEKİN'e teşekkürü borç bilirim.



ÇİZELGELERİN LİSTESİ

Çizelge	Sayfa
Çizelge 6.1.	Metallerin deneysel esneklik sabitleri..... 29
Çizelge 6.2.	Alaşımların deneysel esneklik sabitleri..... 29
Çizelge 6.3.	Metallerin yoğunlukları..... 29
Çizelge 6.4.	Alaşımların yoğunlukları..... 29
Çizelge 6.5.	Ca için hesaplanan kuvvet sabitleri..... 30
Çizelge 6.6.	Ba için hesaplanan kuvvet sabitleri..... 30
Çizelge 6.7.	Sr için hesaplanan kuvvet sabitleri..... 30
Çizelge 6.8.	Fe için hesaplanan kuvvet sabitleri..... 30
Çizelge 6.9.	Ca için hesaplanan kuvvet sabitleri..... 31
Çizelge 6.10.	Ni için hesaplanan kuvvet sabitleri..... 31
Çizelge 6.11.	Sr için hesaplanan kuvvet sabitleri..... 31
Çizelge 6.12.	Cu için hesaplanan kuvvet sabitleri..... 31
Çizelge 6.13.	Ta ₇₇ W ₂₃ için hesaplanan kuvvet sabitleri..... 32
Çizelge 6.14.	Ta ₅₀ W ₅₀ için hesaplanan kuvvet sabitleri..... 32
Çizelge 6.15.	Ta ₃₃ W ₆₇ için hesaplanan kuvvet sabitleri..... 32
Çizelge 6.16.	Pd _{0,96} Fe _{0,04} için hesaplanan kuvvet sabitleri..... 32
Çizelge 6.17.	Pd _{0,90} Fe _{0,10} için hesaplanan kuvvet sabitleri..... 33
Çizelge 6.18.	Pd _{0,28} Fe _{0,72} için hesaplanan kuvvet sabitleri..... 33
Çizelge 6.19.	Co _{0,92} Fe _{0,08} için hesaplanan kuvvet sabitleri..... 33
Çizelge 6.20.	Ca için [100] yönünde frekans değerleri..... 34
Çizelge 6.21.	Ca için [110] yönünde frekans değerleri..... 34
Çizelge 6.22.	Ca için [111] yönünde frekans değerleri..... 34
Çizelge 6.23.	Ba için [100] yönünde frekans değerleri..... 35
Çizelge 6.24.	Ba için [110] yönünde frekans değerleri..... 35
Çizelge 6.25.	Ba için [111] yönünde frekans değerleri..... 35
Çizelge 6.26.	Sr için [100] yönünde frekans değerleri..... 36
Çizelge 6.27.	Sr için [110] yönünde frekans değerleri..... 36
Çizelge 6.28.	Sr için [111] yönünde frekans değerleri..... 36

Çizelge 6.29.	Fe için [100] yönünde frekans değerleri.....	37
Çizelge 6.30.	Fe için [110] yönünde frekans değerleri.....	37
Çizelge 6.31.	Fe için [111] yönünde frekans değerleri.....	37
Çizelge 6.32.	Ca için [100] yönünde frekans değerleri.....	38
Çizelge 6.33.	Ca için [110] yönünde frekans değerleri.....	38
Çizelge 6.34.	Ca için [111] yönünde frekans değerleri.....	38
Çizelge 6.35.	Cu için [100] yönünde frekans değerleri.....	39
Çizelge 6.36.	Cu için [110] yönünde frekans değerleri.....	39
Çizelge 6.37.	Cu için [111] yönünde frekans değerleri.....	39
Çizelge 6.38.	Ni için [100] yönünde frekans değerleri.....	40
Çizelge 6.39.	Ni için [110] yönünde frekans değerleri.....	40
Çizelge 6.40.	Ni için [111] yönünde frekans değerleri.....	40
Çizelge 6.41.	Sr için [100] yönünde frekans değerleri.....	41
Çizelge 6.42.	Sr için [110] yönünde frekans değerleri.....	41
Çizelge 6.43.	Sr için [111] yönünde frekans değerleri.....	41
Çizelge 6.44.	Ta ₇₇ W ₂₃ için [100] yönünde frekans değerleri.....	42
Çizelge 6.45.	Ta ₇₇ W ₂₃ için [110] yönünde frekans değerleri.....	42
Çizelge 6.46.	Ta ₇₇ W ₂₃ için [111] yönünde frekans değerleri.....	42
Çizelge 6.47.	Ta ₅₀ W ₅₀ için [100] yönünde frekans değerleri.....	43
Çizelge 6.48.	Ta ₅₀ W ₅₀ için [110] yönünde frekans değerleri.....	43
Çizelge 6.49.	Ta ₅₀ W ₅₀ için [111] yönünde frekans değerleri.....	43
Çizelge 6.50.	Ta ₃₃ W ₆₇ için [100] yönünde frekans değerleri.....	44
Çizelge 6.51.	Ta ₃₃ W ₆₇ için [110] yönünde frekans değerleri.....	44
Çizelge 6.52.	Ta ₃₃ W ₆₇ için [111] yönünde frekans değerleri.....	44
Çizelge 6.53.	Pd _{0,96} Fe _{0,04} için [100] yönünde frekans değerleri.....	45
Çizelge 6.54.	Pd _{0,96} Fe _{0,04} için [110] yönünde frekans değerleri.....	45
Çizelge 6.55.	Pd _{0,96} Fe _{0,04} için [111] yönünde frekans değerleri.....	45
Çizelge 6.56.	Pd _{0,90} Fe _{0,10} için [100] yönünde frekans değerleri.....	46
Çizelge 6.57.	Pd _{0,90} Fe _{0,10} için [110] yönünde frekans değerleri.....	46
Çizelge 6.58.	Pd _{0,90} Fe _{0,10} için [111] yönünde frekans değerleri.....	46
Çizelge 6.59.	Pd _{0,28} Fe _{0,72} için [100] yönünde frekans değerleri.....	47
Çizelge 6.60.	Pd _{0,28} Fe _{0,72} için [110] yönünde frekans değerleri.....	47

Çizelge 6.61.	$\text{Pd}_{0,28}\text{Fe}_{0,72}$ için [111] yönünde frekans değerleri.....	47
Çizelge 6.62.	$\text{Co}_{0,92}\text{Fe}_{0,08}$ için [100] yönünde frekans değerleri.....	48
Çizelge 6.63.	$\text{Co}_{0,92}\text{Fe}_{0,08}$ için [110] yönünde frekans değerleri.....	48
Çizelge 6.64.	$\text{Co}_{0,92}\text{Fe}_{0,08}$ için [111] yönünde frekans değerleri.....	48



ŞEKİLLERİN LİSTESİ

Şekil		Sayfa
Şekil 6.1.	Ca için fonon dispersiyon.....	49
Şekil 6.2.	Ba için fonon dispersiyon eğrisi.....	49
Şekil 6.3.	Sr için fonon dispersiyon eğrisi.....	50
Şekil 6.4.	Fe için fonon dispersiyon eğrisi.....	50
Şekil 6.5.	Ca için fonon dispersiyon eğrisi.....	51
Şekil 6.6.	Cu için fonon dispersiyon eğrisi.....	51
Şekil 6.7.	Ni için fonon dispersiyon eğrisi.....	52
Şekil 6.8.	Sr için fonon dispersiyon eğrisi.....	52
Şekil 6.9.	Ta ₇₇ W ₂₃ için fonon dispersiyon eğrisi.....	53
Şekil 6.10.	Ta ₅₀ W ₅₀ için fonon dispersiyon eğrisi.....	53
Şekil 6.11.	Ta ₃₃ W ₆₇ için fonon dispersiyon eğrisi.....	54
Şekil 6.12.	Pd _{0,96} Fe _{0,04} için fonon dispersiyon eğrisi.....	54
Şekil 6.13.	Pd _{0,90} Fe _{0,10} için fonon dispersiyon eğrisi.....	55
Şekil 6.14.	Pd _{0,28} Fe _{0,72} için fonon dispersiyon eğrisi.....	55
Şekil 6.15.	Co _{0,92} Fe _{0,08} için fonon dispersiyon eğrisi.....	56

SİMGELER VE KISALTMALAR

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

Simgeler	Açıklama
$\vec{r}(\ell)$	Öteleme vektörü
$F_{\alpha}^{\left(\ell\right)}\left(k\right)$	ℓ . Hücrenin k. atomu üzerine α yönünde etki eden kuvvet
F_{ℓ}^A	Örgüdeki ℓ . Atom üzerine etki eden merkezi ve açısal kuvvet bileşenlerinin toplamı
α_{ℓ}^A, ξ_L	Merkezi kuvvet sabitleri
β_L	Açısal kuvvet sabiti
$\Phi_{\alpha\beta}^{\left(\ell\right)}\left(k\right)$	Atomik kuvvet sabiti
$\Phi_{\alpha\beta}$	Potansiyel enerji
m_k	k. atomun kütlesi
$\vec{q}$	Fonon dalga vektörü
$D(\vec{q})$	Dinamik matris
$D_{\alpha\beta}(\vec{q})$	Dinamik matris elemanı
C_{rs}	Esneklik sabiti
a	Örgü sabiti
ν	Frekans
W	Sütun matris
ω	Açısal frekans
$\hat{V}_L$	Açısal potansiyel enerji
r_0	Wigner-Seitz hücresinin yarıcapı
ρ	Yoğunluk

Kısaltmalar	Açıklama
CGW	Clark-Gazis-Wallis Kuvvet Modeli
GTF	Genel Tensör Kuvvet Modeli
SJ	Sharma –Joshi Modeli
CGW+SJ	Clark-Gazis-Wallis Modeline, Jharma – Joshi Modelinin Eklenmiş Hali
DAF	Launay Açısai Kuvvet Modeli



1. GİRİŞ

Katıların örgü dinamiği ile ilgili araştırmalar 18. yüzyılda başlamasına rağmen günümüzde en yoğun araştırma konularından biridir.

Katıların örgü dinamiği üzerindeki çalışmalar özellikle kuvvet sabiti modelleri şeklinde olup; bu çalışmaların ilk örneklerini Merkezi İkili Etkileşim Potansiyeli / Central Pair Potential (CPP) ve Genel Tensör Kuvveti / General Tensor Force (GTF) [1,2,3,4] modelleri oluşturur. Daha sonraki modeller ise fiziksel sezgi ve araştırmalara dayanan; Eksensel Simetrik / Axially Symmetric (AS) [18], de Launay Açısal Kuvvet / de Launay Angular Force (DAF) [11,20] ve Clark-Gazis – Wallis'in (CGW) [10,11,15] modelleridir. Bu modellerin tamamı kısa erişimli kuvvet modelleri olup sadece iyon-iyon etkileşmesi hesaba katılır yani uzak erişimli elektron-iyon etkileşmesi dikkate alınmaz. Elektron-iyon etkileşmesinin hesaplandığı modellerden biri ise, perturbasyon metodunun kullanıldığı Sharma-Joshi (SJ) [5,6] modelidir.

Dinamik matrislerin dikkate alınarak kuvvet sabiti modelleri karşılaştırdığında, bir modelin diğer model üzerindeki üstünlüğü hakkında yoğun tartışmalar yapılmış olup [11,20,22,23,24,25]; bunlarla ilgili çalışmalar günümüzde halâ devam etmektedir.

Bu çalışmanın esas amacı üçüncü en yakın komşu etkileşmelerin dikkate alındığı CGW, GTF modelleri ile elektron-iyon etkileşmesinin hesaplandığı Sharma Joshi (SJ) modelini, CGW modelinin dinamik matrisine ekleyerek, bunları bazı element ve I. ve II. tip bazı kübik ikili alaşımların örgü dinamiğine uygulamak olmuştur.

İlk altı bölümde CGW, GTF ve SJ modellerinin varsayımları ve türetilişi özetle fakat gereken ayrıntıları ile verilmiş ve CGW ve GTF modeli ile SJ modelinin CGW modeline eklenmiş hali, önce elementlere daha sonra da alaşımlara uygulanmıştır. Son bölümde ise bu modellerin başarısı yorumlanmıştır.

2. CGW, GTF ve SJ MODELLERİNE GENEL BAKIŞ

Atomik titreşimlerle ilgili çalışmalar, katıların termal özellikleriyle ilgili çalışmaların bir sonucu olarak başlamıştır. Radyasyonun yayılması ve soğurulması üzerindeki çalışmalar atomik titreşim çalışmalarına ışık tutmuştur. Planck, radyasyon enerjisinin kuantumlu olduğunu gösterdikten sonra, Einstein (1907) atomik osilatörlerin enerjilerinin de kuantumlu olduğunu göstermiştir. Bilindiği üzere Einstein teorisi, atomların birbirinden bağımsız ve aynı frekansta titreştiğini kabul eder. Debye ise kristaldeki atomların sabit bir frekansta değil, belirli bir frekans aralığında titreştiğini kabul ederek Einstein'den daha iyi bir yaklaşımla atomik titreşimleri incelemiştir (1912). Debye modeli, ısı sıçasının anlaşılmasına katkı sağladığı gibi titreşimlerin X ışınları kırımında da kullanılmıştır [13].

Debye bu çalışmaları yaparken, örgü dinamiğine bakış açısından "açısal kuvvet modelleri" ilk kez elmas yapıyı araştırmak üzere M. Born (1912) tarafından önerilmiştir. Örgü dinamiği üzerindeki ilk önemli çalışmayı ise Oppenheimer (1927) hem elektronları hem de çekirdekleri dikkate alarak çekirdekler hareket ettiğinde elektronların çekirdeklerin hareketini takip ettiğini göstermiştir.

Metallerdeki Cauchy uyumsuzluğunu açıklamak ve DAF [11,20] modelindeki eksiklikleri gidermek amacı ile CGW (Clark-Gazis-Walis) [15] modeli geliştirilmiştir. DAF ve CGW modelleri arasındaki fark, açısal kuvvetlerin tanımından kaynaklanır. DAF modelinde açısal kuvvetler, hareketli iki atomu birleştiren doğru ile, bu atomların denge konumlarını birleştiren doğru arasındaki açıya bağlıdır. CGW modelinde ise açısal kuvvet, üçgen açılarının değişimine bağlıdır. Bu değişim ise üç tane denge konumundaki atomun oluşturduğu üçgenin açıları ile, bu üç atomun yer değiştirmesinden sonra oluşturdukları üçgenin denge konumları düzlemi üzerindeki izdüşümleri kıyaslanarak elde edilir [14]. Yani, açısal kuvvet sabitlerinin sayısı CGW modelinde üçgenlerin sayısı ile, DAF modelinde ise atomlar arası uzaklıkla doğru orantılı olarak artar. Ayrıca CGW'de katı cisimlerin dönmesinin

invariant olduğu, DAF modelinde ise invariant olmadığı Gazis ve arkadaşları (1966) tarafından açıklanmıştır.

GTF modeli [1,2] eski bir “kuvvet sabiti” modeli olup, CGW modeli ile aynı sayıda kuvvet sabitine sahip olduğu saptanmıştır [20]. CGW modelinin kuvvet sabitleri küp bir eksen boyunca kartezyen elemanı olarak yazılırsa, CGW modelinin GTF modeline özdeş olduğu görülür [11]. CGW modelinin, GTF modelinin tekrar üretilmesi ile oluşan ayrıntılı bir durum olduğu ve bu modelin kullanılmasıyla hiçbir şeyin değişmeyeceği Woods, Dutton ve arkadaşları tarafından öne sürülmüştür [11].

Bcc sistemleri için üçüncü en yakın komşulukta GTF modeli için, CGW modelinin dinamik matrisinin [20] yedi kuvvet sabitine eşit olan, yedi adet kuvvet sabitine ($\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \tau_1, \tau_3, \lambda_2, \lambda_3$) ihtiyaç vardır [20]. Bunlar,

$$\begin{aligned} \frac{1}{3}(\alpha_1 + 2\alpha'_1) &= \sigma_1, & \frac{1}{3}(\alpha_1 - \alpha'_1) &= \tau_1, & \alpha_2 &= \sigma_2 \\ \sigma'_2 &= \lambda_2 & (\alpha_3 + \alpha'_3) &= 2\sigma_3 & \frac{1}{2}(\alpha_3 - \alpha'_3) &= \tau_3 \quad (2.1) \\ (\sigma'_3 + \sigma_3^N) &= \lambda_3 \end{aligned}$$

dır. Bu eşitliklerin CGW modelinin dinamik matris ifadesinde yerine konularak GTF modeli için dinamik matris ifadesi ve kuvvet sabitleri elde edilir [20]. Bu nedenle de bcc yapı için, CGW ve GTF modelleri özdeş dinamik matrisler verir. Bununla beraber Moore'ye [52] göre, GTF modelinin kuvvet sabitleri ($\sigma_i, \tau_i, \lambda_i$) bileşik niceliklerdir. Yarı mikroskobik CGW kuvvet sabitlerinin yarı analizlerinden ortaya çıkmaktadır.

Fcc sistemleri için üçüncü en yakın komşuluktaki GTF modeli için, CGW modelinin dinamik matrisinin [20], dokuz kuvvet sabitine eşit olan, dokuz adet kuvvet sabitine ($\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \beta_1, \beta_2, \beta_3, \gamma_1, \gamma_3, \varepsilon_3$) ihtiyaç vardır [20]. Bunlar,

$$\begin{aligned}
\alpha'_1 + \alpha_1^N &= \alpha_1, \quad \frac{\alpha_1 + \alpha'_1}{2} = \beta_1, \quad \frac{\alpha_1 - \alpha'_1}{2} = \gamma_1, \quad \alpha_2 = \alpha_2, \quad \alpha'_2 = \beta_2 \\
\frac{\alpha'_3}{3} + \frac{2}{3} \alpha_3 + \frac{\alpha_3^{N_1}}{3} + \frac{2\sqrt{2}}{3} \alpha_3^{N_2} &= \alpha_3 \\
\frac{1}{2} \left(\frac{\alpha_3}{3} + \frac{2}{3} \alpha'_3 + \frac{2}{3} \alpha_3^{N_1} - \frac{2\sqrt{2}}{3} \alpha_3^{N_2} \right) &= \beta_3 \\
\frac{1}{2} \left(\frac{\alpha_3}{3} - \frac{\alpha'_3}{3} + \frac{2}{3} \alpha_3^{N_1} - \frac{2\sqrt{2}}{3} \alpha_3^{N_2} \right) &= \gamma_3 \\
\frac{1}{2} \alpha_3 - \frac{1}{3} \alpha'_3 - \frac{1}{3} \alpha_3^{N_1} - \frac{\sqrt{2}}{6} \alpha_3^{N_2} &= \varepsilon_3
\end{aligned} \tag{2.2}$$

dır. Bu eşitliklerinin kullanılmasıyla bcc yapıda olduğu gibi CGW modelinin dinamik matris ifadesinden GTF modeli için dinamik matris ifadesi ve kuvvet sabitleri elde edilir [20].

GTF modelinin kuvvet sabitlerinin CGW kuvvet sabitlerinden oluşan bir nicelik olduğunu ve CGW modelinde hacim modülünün açısallık kuvvet sabitinden farklı olduğu unutulmamalıdır. Bu nedenle de CGW modeli GTF modeli ile karşılaştırıldığında, CGW modeli daha mikroskobiktir ve bundan dolayı da kavramsal olarak daha uygundur [20].

Buraya kadar bahsettiğimiz açısallık kuvvet modelleri kısa erişimli kuvvet modelleri idi. Yani hesaplamalarda sadece iyon-iyon etkileşmesi dikkate alınmış, daha uzak erişimli elektron-iyon etkileşmesi dikkate alınmamıştır. Bu etkileşmenin hesaplandığı modellerden biri Sharma-Joshi modelidir [5,6,7,8,9]. Bu modelle hesaplanan elektron-iyon etkileşmesi, açısallık kuvvet modellerinin dinamik matrisine eklenmesiyle bu etkileşmede hesaba katılmış olur.

3. CGW MODELİ

CGW modelinin özü Upadhyaya (1979) [11] izleyerek aşağıdaki şekilde verilebilir. Modelde örgüdeki referans atomun üçüncü en yakın komşu atomlarla etkileşimleri dikkate alınmaktadır.

Birbirine göre lineer olmayan üç atomun, orjindeki atoma göre konumları sırasıyla ℓ , $\ell + L_1$, $\ell + L_2$ şeklinde tanımlansın. Bu durumda açısal potansiyel enerji,

$$\begin{aligned}
 V_3^A = & \frac{1}{2} \gamma(\ell, L_1, L_2) \left\{ \frac{1}{L_1} [\hat{L}_1 \times X_{\ell L_1}] - \frac{1}{L_2} [\hat{L}_2 \times X_{\ell L_2}] \right\}^2 + \frac{1}{2} \gamma(\ell + L_1, L_2 - L_1, -L_1) \\
 & \times \left\{ \frac{1}{|L_2 - L_1|} [(\hat{L}_2 - \hat{L}_1) \times X_{L_1, L_2}] - \frac{1}{L_1} [\hat{L}_1 \times X_{\ell L_1}] \right\}^2 \\
 & + \frac{1}{2} \gamma(\ell + L_2, -L_2, L_1 - L_2) \\
 & \times \left\{ \frac{1}{L_2} [\hat{L}_2 \times X_{\ell L_2}] + \frac{1}{|L_1 - L_2|} [(\hat{L}_1 - \hat{L}_2) \times X_{L_1, L_2}] \right\}^2
 \end{aligned} \tag{3.1}$$

şeklinde tanımlanır [11]. Burada atomlar arası uzaklıklar,

$$X_{\ell L_1} = L_{\ell+L_1} - X_{\ell}, \quad X_{L_1 L_2} = X_{\ell+L_2} - X_{\ell+L_1}, \quad L = \ell' - \ell$$

şeklinde tanımlanmıştır. Açısal kuvvet sabitleri $\gamma(\ell, L_1, L_2)$, L_1 ve L_2 'nin büyüklükleri ile aralarındaki açının kosinüsüne bağlı olarak verilir.

CGW modelinde daha önce bahsedildiği üzere üçgenlerin açılarındaki değişimler, denge konumları üçgenin yer değiştirmiş haldeki parçacıkların düzlemi üzerine izdüşümlerini kıyaslayarak elde edilir. Ayrıca denge düzlemine dik olan açısal yer değiştirmelerinin potansiyel enerjisi ihmal edilir.

bcc yapıdaki sistemler için, örgüdeki ℓ 'inci atom üzerine etki eden merkezi ve açılal kuvvet bileşenlerinin toplamı olan F_ℓ^A ,

$$F_\ell^A = \sum_L \left\{ \alpha_L^A (\hat{L} \cdot X_{\ell L}) \hat{L} + \beta_L [\hat{L} \times (X_{\ell L} \times \hat{L})] + \zeta_L [\hat{V}_L \cdot X_{\ell L}] \hat{V}_L \right\} \quad (3.2)$$

şeklinde verilir [11]. Burada α_L^A ve ζ_L merkezi kuvvet sabitleri, β_L açılal kuvvet sabitidir. Üçüncü en yakın komşu etkileşmelerinde kullanılan $\hat{V}_L$ ise,

$$\hat{V}_L = \sum_i S_L [1 - 2 (\hat{L} \cdot \hat{e}_i)^2] \hat{e}_i \quad (3.3)$$

şeklinde ifade edilir. Burada $\hat{e}_i$ kartezyen birim vektör, S_L ise $\hat{L}$ 'nin sıfırdan farklı olan ilk bileşenini ifade etmektedir.

fcc sistemlerde ise,

$$F_\ell^A = \sum_L \left\{ \alpha_L^A (\hat{L} \cdot X_{\ell L}) \hat{L} + \beta_L [\hat{L} \times (X_{\ell L} \times \hat{L})] + \zeta_L [\hat{V}_L \cdot X_{\ell L}] \hat{V}_L + \eta_L [\hat{V}_L \cdot L_{\ell L}] \hat{L} + (\hat{L} \cdot X_{\ell L}) \hat{V}_{\ell L} \right\} \quad (3.4)$$

şeklindedir [11]. Yine bcc sistemlerde olduğu gibi $\hat{V}_L$ ise,

$$\hat{V}_L = \sum_i S_L [1 - 2 (\hat{L} \cdot \hat{e}_i)^2] \hat{e}_i \quad (3.5)$$

eşitliğiyle ifade edilir. Burada S_L , en yakın komşu etkileşmeleri için $\hat{L}$ 'nin sıfırdan farklı ilk bileşenini ifade eder. İkinci en yakın komşu etkileşmelerine dahil edilmeyen $\hat{N}_L$, birinci en yakın komşu ve üçüncü en yakın komşu etkileşmelerinde,

$$\hat{V}_L = \sum \frac{1}{\sqrt{3}} \left(\frac{\hat{e}_i \cdot \hat{L}_i}{|\hat{e}_i \cdot \hat{L}_i|} \right) \left[\frac{5}{3} - 4 (\hat{e}_i \cdot \hat{L})^2 \right] \hat{e}_i \quad (3.6)$$

olur. Burada α_L^A , ζ_L , η_L merkezi kuvvet sabitleri, β_L ise açısall kuvvet sabitidir.

Kübik sistemler için hareket denklemleri,

$$M \ddot{U}_0 = -F_\ell^A$$

$$M \ddot{v} = -F_\ell^A \quad (3.7)$$

$$M \ddot{W} = -F_\ell^A$$

şeklindedir. (3.1) eşitliğinde verilen potansiyel enerji fonksiyonundan türetilen kuvvet ifadesi, bcc yapılar için (3.3) eşitliği ile , fcc yapılar içinde (3.4) eşitliği ile verilen ifadelerle karşılaştırması sonucunda kuvvet sabitlerini değerleri elde edilir. Kuvvet sabitlerinin eşitlikleri ve dispersiyon bağıntıları Bölüm 6'da verilmiştir.

4. GTF MODELİ

Bu bölümde GTF modeli özet olarak tanıtılacaktır. Bu model ilk olarak birkaç özel yapı için x-ışınlarının termal yayılımının hesaplanmasında kullanılmış olup, genel teorisi Waller (1925) ve birçok fizikçi tarafından verilmiştir [1]. Bu modelde de atomların üçüncü en yakın komşu etkileşimleri dikkate alınmıştır.

Kübik sistemler için hareket denklemi,

$$v_{\alpha} \left(\begin{smallmatrix} \ell \\ k \end{smallmatrix} \right) = x_{\alpha} \left(\begin{smallmatrix} \ell \\ k \end{smallmatrix} \right) - x_{\alpha}^0 \left(\begin{smallmatrix} \ell \\ k \end{smallmatrix} \right), \quad (4.1)$$

olmak üzere,

$$m_k \ddot{v}_{\alpha} \left(\begin{smallmatrix} \ell \\ k \end{smallmatrix} \right) + \sum_{\beta \ell' k'} \Phi_{\alpha\beta} \left[\begin{smallmatrix} \ell - \ell' \\ kk' \end{smallmatrix} \right] v_{\beta} \left(\begin{smallmatrix} \ell' \\ k' \end{smallmatrix} \right) = 0 \quad (4.2)$$

eşitliği ile ifade edilir. Burada m_k , k tipi parçacığın kütlesidir. $v_{\beta} \left(\begin{smallmatrix} \ell' \\ k' \end{smallmatrix} \right)$, $\left(\begin{smallmatrix} \ell' \\ k' \end{smallmatrix} \right)$ şeklinde etiketlenen atomun β yönündeki birim yerdeğiştirmesini, $\Phi_{\alpha\beta} \left(\begin{smallmatrix} \ell \\ kk' \end{smallmatrix} \right)$ ise kuvvet sabitini ifade eder.

$\Phi_{\alpha\beta} \left(\begin{smallmatrix} \ell \\ kk' \end{smallmatrix} \right)$ niceliği herhangi bir $\left(\begin{smallmatrix} \ell \\ k \end{smallmatrix} \right)$ noktası ile temel $\left(\begin{smallmatrix} 0 \\ k \end{smallmatrix} \right)$ noktası arasındaki esneklik kuvvetleri de ifade eder. Özellikle kendi $\left[\Phi_1 \left(\begin{smallmatrix} 0 \\ kk' \end{smallmatrix} \right) \right]$ üzerindeki bir $\left(\begin{smallmatrix} \ell \\ k \end{smallmatrix} \right)$ noktasının kuvveti, diğer tüm kuvvetlerden bulunabilir.

$v_{\alpha} \left(\begin{smallmatrix} \ell \\ k \end{smallmatrix} \right) = \text{sabit}$, $\ddot{v}_{\alpha} \left(\begin{smallmatrix} \ell \\ k \end{smallmatrix} \right) = 0$ olmak üzere (4.2) denkleminde

$$\sum_{\ell' k'} \Phi_{\alpha\beta} \left(\begin{smallmatrix} \ell' \\ kk' \end{smallmatrix} \right) = 0, \text{ veya } \Phi_{\alpha\beta} \left(\begin{smallmatrix} 0 \\ kk \end{smallmatrix} \right) = - \sum_{\ell' k'}' \Phi_{\alpha\beta} \left(\begin{smallmatrix} \ell' \\ kk' \end{smallmatrix} \right), \quad (4.3)$$

eşitliği elde edilir. Toplam üzerindeki tire işareti $\ell' = 0$, $k = k'$ de olan terimlerin toplamda ihmal edileceğini gösterir. Bir takım ara işlemlerden sonra,

$$\left. \begin{aligned} \sum_{\ell k} \Phi_{\alpha\beta} \left(\begin{smallmatrix} \ell-\ell' \\ kk' \end{smallmatrix} \right) x_{\lambda} \left(\begin{smallmatrix} \ell \\ k \end{smallmatrix} \right) &= \sum_{\ell k} \Phi_{\lambda\beta} \left(\begin{smallmatrix} \ell-\ell' \\ kk' \end{smallmatrix} \right) x_{\alpha} \left(\begin{smallmatrix} \ell \\ k \end{smallmatrix} \right), \\ \sum_{\ell' k'} \Phi_{\alpha\beta} \left(\begin{smallmatrix} \ell-\ell' \\ kk' \end{smallmatrix} \right) x_{\mu} \left(\begin{smallmatrix} \ell' \\ k' \end{smallmatrix} \right) &= \sum_{\ell' k'} \Phi_{\alpha\mu} \left(\begin{smallmatrix} \ell-\ell' \\ kk' \end{smallmatrix} \right) x_{\beta} \left(\begin{smallmatrix} \ell' \\ k' \end{smallmatrix} \right). \end{aligned} \right\} \quad (4.4)$$

eşitlikleri elde edilir. Eşitlik (4.2)'nin katsayıları,

$$v_{\alpha} \left(\begin{smallmatrix} \ell \\ k \end{smallmatrix} \right) = \sqrt{m_k} u_{\alpha} \left(\begin{smallmatrix} \ell \\ k \end{smallmatrix} \right), \quad (4.5)$$

$$D_{\alpha\beta} \left(\begin{smallmatrix} \ell \\ kk' \end{smallmatrix} \right) = \frac{1}{\sqrt{(m_k m_{k'})}} \Phi_{\alpha\beta} \left(\begin{smallmatrix} \ell \\ kk' \end{smallmatrix} \right), \quad (4.6)$$

$$D_{\alpha\beta} \left(\begin{smallmatrix} \ell \\ kk' \end{smallmatrix} \right) = D_{\beta\alpha} \left(\begin{smallmatrix} -\ell \\ k'k \end{smallmatrix} \right). \quad (4.7)$$

şeklinde tanımlanarak [1], hareket denklemi,

$$\ddot{v}_{\alpha} \left(\begin{smallmatrix} \ell \\ k \end{smallmatrix} \right) = - \sum_{\beta \ell' k'} D_{\alpha\beta} \left(\begin{smallmatrix} \ell-\ell' \\ kk' \end{smallmatrix} \right) v_{\beta} \left(\begin{smallmatrix} \ell' \\ k' \end{smallmatrix} \right). \quad (4.8)$$

şeklinde olur. Burada $D_{\alpha\beta} \left(\begin{smallmatrix} \ell & \ell' \\ k & k' \end{smallmatrix} \right)$ katsayıları için (α, ℓ, k) , (β, ℓ', k') şeklinde ikili olarak etiketlenen (3 x3)'lük matris ifadesi,

$$D \left(\begin{smallmatrix} \ell \\ kk' \end{smallmatrix} \right) = \begin{pmatrix} D_{11} \left(\begin{smallmatrix} \ell \\ kk' \end{smallmatrix} \right) & D_{12} \left(\begin{smallmatrix} \ell \\ kk' \end{smallmatrix} \right) & D_{13} \left(\begin{smallmatrix} \ell \\ kk' \end{smallmatrix} \right) \\ D_{21} \left(\begin{smallmatrix} \ell \\ kk' \end{smallmatrix} \right) & \dots\dots\dots & \dots\dots\dots \\ D_{31} \left(\begin{smallmatrix} \ell \\ kk' \end{smallmatrix} \right) & \dots\dots\dots & \dots\dots\dots \end{pmatrix}. \quad (4.9)$$

şeklinde tanımlanır [2].

Eşitlik (4.8)'in düzlem dalga çözümü,

$$v_{\alpha} \left(\begin{smallmatrix} \ell \\ k \end{smallmatrix} \right) = V_{\alpha} (k) e^{-i\omega t} e^{2\pi i q \cdot r(\ell)} \quad (4.10)$$

$$v_{\alpha} \left(\begin{smallmatrix} \ell \\ k \end{smallmatrix} \right) = W_{\alpha} (k) e^{-i\omega t} e^{2\pi i q \cdot r \left(\begin{smallmatrix} \ell \\ k \end{smallmatrix} \right)} \quad (4.11)$$

şeklinde ifade edilir. Burada genlik ifadesi,

$$W_{\alpha}(k) = V_{\alpha}(k) e^{-2\pi i q r(k)}. \quad (4.12)$$

olur. $\vec{q}$, yayılma vektörü ve $\vec{r}(k)$ k'inci atomun gerçek uzaydaki konum vektörüdür.

Eşitlik (4.8)'deki ifadenin $V_{\alpha}(k)$ ve $W_{\alpha}(k)$ genliklerine bağlı olarak matris şeklinde tanımlanırsa,

$$\omega^2 V_{\alpha}(k) = \sum_{\beta k'} D_{\alpha\beta}(q | kk') V_{\beta}(k') \quad (4.13)$$

$$\omega^2 W_{\alpha}(k) = \sum_{\beta k'} C_{\alpha\beta}(q | kk') W_{\beta}(k') \quad (4.14)$$

şeklinde olur[1]. Burada,

$$C_{\alpha\beta}(q | kk') = D_{\alpha\beta}(q | kk') e^{-2\pi i q \cdot r(kk')} = \sum_{\ell} D_{\alpha\beta} \left(\begin{matrix} \ell \\ kk' \end{matrix} \right) e^{-2\pi i q \cdot r \left(\begin{matrix} \ell \\ kk' \end{matrix} \right)}, \quad (4.15)$$

şeklinde ifade edilir.

Hareket denklemini uzun dalga boyu limitinde çözümünü yapabilmek için matris şeklinde yeniden,

$$\Omega W = C(q) W \quad (4.16)$$

şeklinde yazalım. Burada $\Omega = \omega^2$ ve W bir sütun matrisi ifade eder. $C(q)$ matrisi ise dalga sayısına bağlı olarak genişletilebilen matris elemanıdır [2].

Yer değiştirme ifadelerinin x, y, z yönlerinde tanımlanması ve genlik çözümlerinin yerinde kullanılması ile hareket denklemi,

$$\rho \omega^2 U_{\alpha} = \sum_{\beta} D'_{\alpha\beta}(q) U_{\beta} \quad (4.17)$$

ile ifade edilir. Burada ρ yoğunluk, ω açısal frekanstır. $D'_{\alpha\beta}(q)$ sütun matrisi, esneklik sabitleri ve yayılma vektörlerine bağlı olarak,

$$\begin{pmatrix} D'_{11}(q) \\ D'_{22}(q) \\ D'_{33}(q) \\ D'_{23}(q) \\ D'_{31}(q) \\ D'_{12}(q) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{66} & C_{55} & C_{65} & C_{51} & C_{16} \\ C_{66} & C_{22} & C_{44} & C_{24} & C_{46} & C_{62} \\ C_{55} & C_{44} & C_{33} & C_{43} & C_{35} & C_{54} \\ C_{65} & C_{24} & C_{43} & \frac{1}{2}(C_{23} + C_{44}) & \frac{1}{2}(C_{45} + C_{36}) & \frac{1}{2}(C_{64} + C_{25}) \\ C_{51} & C_{46} & C_{35} & \frac{1}{2}(C_{45} + C_{36}) & \frac{1}{2}(C_{31} + C_{55}) & \frac{1}{2}(C_{56} + C_{14}) \\ C_{16} & C_{62} & C_{54} & \frac{1}{2}(C_{64} + C_{25}) & \frac{1}{2}(C_{56} + C_{14}) & \frac{1}{2}(C_{12} + C_{66}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} q_1^2 \\ q_2^2 \\ q_3^2 \\ 2q_2q_3 \\ 2q_3q_1 \\ 2q_1q_2 \end{pmatrix} \quad (4.18)$$

şeklinde olur [1]. Burada C_n esneklik sabitleridir.

Eşitlik (4.2)'deki hareket denkleminin çözümünde $Q_{\alpha\beta} \begin{pmatrix} \ell & \ell' \\ k & k \end{pmatrix}$ sabitleri genel tensör kuvvet sabitleri olarak isimlendirilerek, her bir komşuluk için matris şeklinde ifade edilir [2].

Bu sabitler (2.1) ve (2.2) eşitliklerden yararlanarak kolayca bulunur. Elde edilen ifadelerin CGW modelinin dinamik matrisinde yerine konmasıyla, GTF modeli için dispersiyon bağıntıları bulunur [20]. Böylece de dispersiyon bağıntılarından frekansların nümerik değerleri kolaylıkla bulunabilir. GTF modelinin dinamik matris ifadesi ve dispersiyon bağıntıları Bölüm 6'da verilmiştir.

5. SHARMA-JOSHI MODELİ

Sharma – Joshi Modeli [5,6,7,8,9] uzak erişimli elektron iyon etkileşmesinin hesaplandığı bir modeldir. Bu bölümde önce modelin özü tanıtılacak daha sonrada bcc ve fcc yapılar için dispersiyon bağıntıları verilecektir.

Kristalin toplam potansiyel enerjisi Φ olmak üzere,

$$\Phi = \Phi_0 + \frac{1}{2} \sum_{m,n} \sum_{i,j} \Phi_{ij}^{mn} u_i^m u_j^n + \frac{1}{2} K_e \int \chi^2(r) d\tau \quad (5.1)$$

eşitliği ile ifade edilir. Burada Φ_0 kristalin R^m denge konumundaki enerjisi, u_i^m ise m'nci iyonun u^m yerdeğişiminin i'nci kartezyen bileşenidir. Φ_{ij}^{mn} kuvvet sabiti olup,

$$\Phi_{ij}^{mn} = \frac{\partial^2 \Phi}{\partial r_i^m \partial r_j^n} \bigg|_{r_i^m=R_i^m, r_j^n=R_j^n} \quad (5.2)$$

şeklinde ifade edilir [5]. K_e , serbest elektron gazı bulk modülü, χ ise,

$$\chi(r) = -\text{div}u(r) \quad (5.3)$$

eşitliği ile ifade edilir [5].

(5.1) eşitliğindeki integralin alınmasıyla kristalin hacmi elde edilir. Örgü titreşimlerinin analizinden bu eşitlik iki bölüme ayrılabilir. Birincisi iyon-iyon etkileşmesi, ikincisi ise elektron-iyon etkileşmesidir. Φ_{ij} 'li bölüm iyon-iyon etkileşmesini, integrallı bölüm ise elektron-iyon etkileşmesini ifade eder.

r_0 , atomun Wigner-Seitz hücre yarıçapı olmak üzere atomun hacmi,

$$\Omega = \frac{4}{3} \pi r_0^3 \quad (5.4)$$

şeklindedir. Burada merkezi R^m 'de olan Wigner-Seitz küresi içindeki $R^m + r$ noktasındaki düzgün olarak dağılan elektron gazı ortamındaki termal hareket nedeni ile ortaya çıkan yerdeğiştirme,

$$u^m(r) = eA \exp i \{ q \cdot (R^m + r) - \omega t \} \quad (5.5)$$

şeklinde olduğu varsayılmıştır. [5]. Eşitlikte, q fonon dalga vektörü, ω açısal frekans, A genişlik ve e yerdeğiştirme yönündeki birim vektördür. (5.3) eşitliği kullanılarak ,

$$\chi^m(r) = -i(e.q)A \exp i \{ q \cdot (R^m + r) - \omega t \} \quad (5.6)$$

eşitliği elde edilir. Burada, χ^m 'in Wigner-Seitz hücresindeki ifadesi,

$$\langle \chi^m \rangle = -i(e.q)A \exp i \{ q \cdot R^m - \omega t \} G(qr_o) \quad (5.7)$$

şeklindedir. $G(qr_o)$,

$$G(x) = 3 \left[(\sin x - x \cos x) / x^3 \right] \quad (5.8)$$

şeklinde ifade edilen bir fonksiyondur [5,7,8,9]. (5.8) eşitliğinin (5.1) eşitliğinde yerine yazılması ile elektron-iyon etkileşmesini temsil eden potansiyel enerji,

$$\Phi_e = \frac{1}{4} (e.q)^2 A^2 G(q.r_o) K_e V \quad (5.9)$$

eşitliği ile ifade edilir [5,13]. Elektron gazının sıkıştırma özelliğinden dolayı, iyonlar üzerine bir kuvvet etki eder ve bu kuvvet, q dalga vektörü boyuncadır. Dalga vektörünün boyunca iyonik hareketin genliği, $A(e.q) / q$ dır. Buradan m 'nci atoma uygulanan kuvvetin bu bileşeni,

$$(F^m)_{elektron} = -CAq(e.q / q^2) \exp i \{ q \cdot R^m - \omega t \} \quad (5.10)$$

şeklindedir. Buradaki C sabit olup, (5.9) eşitliği ile (5.10) eşitliğindeki $(F^m)_{elektron}$ kuvvetinin temsil ettiği potansiyel enerjinin eşitlenmesiyle bulunur ve

$$C = K_e \Omega q^2 G^2(qr_o) \quad (5.11)$$

eşitliği ile ifade edilir [5]. Buradaki C, genel olarak Sharma-Joshi modelinde elektron-iyon etkileşmesinin dinamik matrisini ifade eder [7,8,9].

Sonuç olarak $(F^m)_{elektron}$ kuvveti,

$$(F^m)_{elektron} = -AK_e \Omega q(eq)G^2(qr_o) \exp i(q.R^m - \omega t) \quad (5.12)$$

eşitliği ile ifade edilir [5].

5.1. Fonon Dispersiyon Bağlıları

5.1.1. Bcc yapılar için

Sharma-Joshi modelinde, bcc yapılar için temel simetri yönündeki fonon dispersiyon bağlantıları,

[100] Doğrultusunda,

$$\omega_L^2 = \frac{4C_{44}}{\rho a^2} \sin^2 \frac{1}{2} qa + \frac{C_{11} - C_{12}}{\rho a^2} \sin^2 qa + \frac{C_{12} - C_{44}}{\rho} q^2 G(qr_o) \quad (5.13)$$

$$\omega_T^2 = \left(\frac{4C_{44}}{\rho a^2} \right) \sin^2 \frac{1}{2} qa \quad (5.14)$$

[110] Doğrultusunda,

$$\omega_L^2 = \frac{4C_{44} + C_{11} - C_{12}}{\rho a^2} \sin^2 qa \sqrt{2} + \frac{C_{12} - C_{44}}{\rho} q^2 G^2(qr_o) \quad (5.15)$$

$$\omega_{T1}^2 = [(C_{11} - C_{12}) / \rho a^2] \sin^2 \frac{qa}{\sqrt{2}} \quad (5.16)$$

$$\omega_{T2}^2 = (2C_{44} / \rho a^2) \sin^2 \frac{qa}{\sqrt{2}} \quad (5.17)$$

[111] Doğrultusunda,

$$\omega_L^2 = \frac{3C_{44}}{\rho a^2} \sin^2 \frac{qa\sqrt{3}}{2} + \frac{C_{44}}{\rho a^2} \sin^2 \frac{qa}{2\sqrt{3}} + \frac{C_{11} - C_{12}}{\rho a^2} \frac{qa}{\sqrt{3}} + \frac{C_{12} - C_{44}}{\rho} q^2 G^2(qr_0) \quad (5.18)$$

$$\omega_T^2 = \frac{4C_{44}}{\rho a^2} \sin^2 \frac{qa}{2\sqrt{3}} + \frac{C_{11} - C_{12}}{\rho a^2} \sin^2 \frac{qa}{\sqrt{3}} \quad (5.19)$$

eşitlikleri ile ifade edilir [5]. Kuvvet sabitleri ile esneklik sabitleri arasındaki ilişki ise,

$$K_e = C_{12} - C_{44} \quad (5.20)$$

$$\alpha = -aC_{44} \quad (5.21)$$

$$\alpha' = -a(C_{11} - C_{12}) \quad (5.22)$$

şeklindedir [5].

5.1.2. Fcc yapılar için

Benzer şekilde fcc yapılar için dispersiyon bağıntıları,

[100] Doğrultusunda,

$$\omega_L^2 = \frac{8C_{44}}{\rho a^2} \sin^2 \frac{1}{2} qa + \frac{C_{11} - C_{12} - C_{44}}{\rho a^2} \sin^2 qa + \frac{C_{12} - C_{44}}{\rho} q^2 G^2(qr_0) \quad (5.23)$$

$$\omega_T^2 = \frac{4C_{44}}{\rho a^2} \sin^2 \frac{1}{2} qa \quad (5.24)$$

[110] Doğrultusunda,

$$\omega_L^2 = \frac{4C_{44}}{\rho a^2} \sin^2 \frac{qa}{2\sqrt{2}} + \frac{C_{11} - C_{12} + 3C_{44}}{\rho a^2} \sin^2 \frac{qa}{\sqrt{2}} + \frac{C_{12} - C_{44}}{\rho} q^2 G^2(qr_0) \quad (5.25)$$

$$\omega_{T1}^2 = \frac{4C_{44}}{\rho a^2} \sin^2 \frac{qa}{2\sqrt{2}} + \frac{C_{11} - C_{12} - C_{44}}{\rho a^2} \sin^2 \frac{qa}{\sqrt{2}} \quad (5.26)$$

$$\omega_{T2}^2 = \frac{8C_{44}}{\rho a^2} \sin^2 \frac{qa}{2\sqrt{2}} \quad (5.27)$$

[111] Doğrultusunda,

$$\omega_L^2 = \frac{8C_{44}}{\rho a^2} \sin^2 \frac{qa}{\sqrt{3}} + \frac{C_{11} - C_{12} - C_{44}}{\rho a^2} \sin^2 \frac{qa}{\sqrt{3}} + \frac{C_{12} - C_{44}}{\rho} q^2 G^2(qr_0) \quad (5.28)$$

$$\omega_L^2 = \frac{C_{11} - C_{12} + C_{44}}{\rho a^2} \sin^2 \frac{qa}{\sqrt{3}} \quad (5.29)$$

eşitlikleri ile ifade edilir [6]. Kuvvet sabitleri ile esneklik sabitleri arasındaki ilişki ise, $\alpha = \beta' = 0$ ve $\beta = \gamma$ olmak üzere,

$$K_e = C_{12} - C_{44} \quad (5.30)$$

$$\beta = -\alpha C_{44} \quad (5.31)$$

$$\alpha' = -\frac{1}{2} \alpha (C_{11} - C_{12} - C_{44}) \quad (5.32)$$

şeklindedir [6].

6. CGW VE GTF MODELLERİNİN DİNAMİK MATRİSİ VE KUVVET SABİTLERİNİN KARŞILAŞTIRILMASI

Bu bölümde, Moore ve Upadhyaya [11] ve Upadhyaya ve arkadaşları [20] tarafından en yakın üçüncü komşuluklarla kadar genelleştirilen CGW modelinin ve bu model yararlanarak elde edilen GTF modelinin D_{ij} dinamik matris elemanları ve buradan elde edilen temel simetri yönlerindeki fonon frekansları aşağıda ayrı ayrı verilmiştir.

6.1. CGW Modelinde Dinamik Matris ve Fonon Frekans İfadeleri

CGW modelinden Upadhyaya ve arkadaşları [20] tarafından geliştirilen üçüncü en – yakın komşuluk etkileşimlerine ait dinamik Matrisin D_{11} ve D_{12} elemanları aşağıda biçimde verilmiştir.

6.1.1. Fcc yapılar için

$$\begin{aligned}
 D_{11} = D_{xx} = & 2 (\alpha_1 + \alpha'_3) (2 - C_1 (C_2 + C_3)) + 4 (\alpha'_1 + \alpha_1^N) \times \\
 & (1 - C_2 C_3) + 4\alpha_2 S_1^2 + 4 \alpha'_2 (S_2^2 + S_3^2) + 8 (\alpha_3^1 + \frac{1}{3} \alpha_3^{N1}) \times \\
 & (3 - C_1 C_2 C_{23} - C_1 C_{22} C_3 - C_{21} C_2 C_3) \\
 & + \frac{4}{3} (\alpha_3 - \alpha'_3) (6 - C_1 C_2 C_{23} - C_1 C_{22} C_3 - 4 C_{21} C_2 C_3) \\
 & + \frac{8\sqrt{2}}{3} \alpha_3^{N2} [C_1 C_2 C_{23} + C_1 C_{22} C_3 - 2 C_{21} C_2 C_3] \quad (6.1)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 D_{12} = D_{xy} = & 2 (\alpha_1 - \alpha'_1) S_1 S_2 + \frac{4}{3} (\alpha_3 + \alpha'_3) \times \\
 & (S_1 S_2 S_{23} + 2 S_1 S_{22} C_3 + 2 S_{21} S_2 C_3) +
 \end{aligned}$$

$$\frac{8}{3} \alpha_3^{N1} (S_1 S_2 C_{23} - S_1 S_{22} C_3 - S_{21} S_2 C_3) +$$

$$\frac{4\sqrt{2}}{3} \alpha_3^{N2} (-S_1 S_2 C_{23} - 2S_1 S_{22} C_3 + S_{21} S_2 C_3)$$

Burada,

$$S_i = \text{Sin} q_i \frac{a}{2} \quad C_i = \text{Cos} q_i \frac{a}{2}$$

$$S_{2i} = \text{Sin} q_i a \quad C_{2i} = \text{Cos} q_i a$$

şeklindedir ve a örgü parametresidir.

Esneklik sabitleri ve fonon frekans ifadeleri,

$$|D(\vec{q}) - M\omega^2 I| = 0 \quad (6.2)$$

katsayılar determinantından elde edilir. Burada $D(\vec{q})$ dinamik matris, I birim matris, M iyonik kütle, ω fonon açılal frekansıdır.

[100], [110] ve [111] temel simetri yönlerinde dinamik matris elemanları,

$$M\omega_L^2 = D_{xx} (100)$$

[100] için

$$M\omega_T^2 = D_{yy} (100)$$

$$M\omega_L^2 = D_{xx} (110) + D_{yy} (110)$$

[110] için

$$M\omega_{T1}^2 = D_{xx} (110) - D_{yy} (110)$$

$$M\omega_{T2}^2 = D_{zz} (110)$$

$$[111] \text{ için } M\omega_L^2 = D_{xx} (111) + 2 D_{xy} (111)$$

$$M\omega_T^2 = D_{xx} (111) - D_{xy} (111)$$

olarak verilir [19].

CGW modeli, $\beta_1', \beta_2', \beta_3'$ (merkezi) ve $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3, \gamma_5, \gamma_6$ ve γ_7 (açısal) olmak üzere dokuz adet kuvvet sabiti içerir. Bu sabitlere bağlı olarak modelin parametreleri;

$$\alpha_1 = \beta_1' + 6\gamma_1 + 4\gamma_3 + 4\gamma_5 + \frac{8}{3}\gamma_8 + \frac{22}{9}\gamma_{10} \quad (6.3)$$

$$\alpha_2 = \beta_2' + 4\gamma_2 + \frac{16}{3}\gamma_7 + \frac{40}{9}\gamma_{12} \quad (6.4)$$

$$\alpha_3 = \beta_3' + \gamma_4 + \frac{4}{3}\gamma_6 + \frac{22}{9}\gamma_9 + \frac{20}{9}\gamma_{11} + \gamma_{13} \quad (6.5)$$

$$\alpha_1' = 2\gamma_1 + 8\gamma_2 + 4\gamma_3 + 8\gamma_4 + 4\gamma_5 + \frac{120}{11}\gamma_9 - \frac{2}{11}\gamma_{10} \quad (6.6)$$

$$\alpha_2' = -2\gamma_2 + 4\gamma_6 + \frac{4}{3}\gamma_8 + \frac{16}{3}\gamma_{11} - \frac{4}{9}\gamma_{12} \quad (6.7)$$

$$\alpha_3' = -3\gamma_4 - \frac{4}{3}\gamma_5 + \frac{2}{33}\gamma_9 + \frac{4}{33}\gamma_{10} + \frac{4}{15}\gamma_{11} + \frac{8}{5}\gamma_{12} + \gamma_{13} \quad (6.8)$$

$$\alpha_1^N = 2\gamma_1 - 8\gamma_2 - 4\gamma_3 + 8\gamma_4 + 4\gamma_5 + 8\gamma_6 + \frac{16}{3}\gamma_7 - \frac{280}{33}\gamma_9 + \frac{14}{99}\gamma_{10} \quad (6.9)$$

$$\alpha_3^{N1} = 3\gamma_4 + \frac{4}{3}\gamma_5 - \frac{4}{3}\gamma_6 + \frac{10}{99}\gamma_9 - \frac{4}{45}\gamma_{11} - \frac{8}{45}\gamma_{12} - \gamma_{13} + \frac{20}{99}\gamma_{10} \quad (6.10)$$

$$\alpha_3^{N2} = \frac{\sqrt{2}}{3}\gamma_6 - \frac{2\sqrt{2}}{3}\gamma_7 + \frac{\sqrt{2}}{3}\gamma_8 + \frac{20\sqrt{2}}{9}\gamma_9 - \frac{8\sqrt{2}}{9}\gamma_{11} - \frac{4\sqrt{2}}{9}\gamma_{10} + \frac{4\sqrt{2}}{9}\gamma_{12} \quad (6.11)$$

şeklinde ifade edilir [20]. fcc yapıda $\gamma_4=\gamma_8=\gamma_9=\gamma_{10}=\gamma_{11}=\gamma_{12}=\gamma_{13}=0$ 'dır. Kuvvet sabitleri ile esneklik sabitleri arasındaki ilişki,

$$a C_{11} = 2 \beta'_1 + 2 \beta'_3 + 4 \beta'_3 + \frac{16}{3} (2 \gamma_1 + \gamma_2 + 2 \gamma_3) \quad (6.12)$$

$$a C_{12} = \frac{2}{3} \beta'_1 + 2 \beta'_3 + \frac{8}{3} (2 \gamma_1 + \gamma_2 + 2 \gamma_3) \quad (6.13)$$

$$a C_{44} = \frac{2}{3} \beta'_1 + 2 \beta'_3 + \frac{8}{9} (2 \gamma_1 + 9 \gamma_2 + 2 \gamma_3 + 9 \gamma_5) \quad (6.14)$$

şeklindedir [20].

Fcc yapıda fonon frekans ifadeleri ise,

$$M\omega_L^2(100) = 8 \left(\alpha_1 + \frac{2}{3} \alpha_3 + \beta_1 + \frac{10}{3} \beta_3 + \frac{4}{3} \zeta_3 + \frac{4\sqrt{2}}{3} \eta_3 \right) \sin^2 \left(\frac{1}{2} \pi \zeta \right) \quad (6.15)$$

$$+ 4 \left(\alpha_2 + \frac{8}{3} \alpha_3 + \frac{4}{3} \beta_3 + \frac{4}{3} \zeta_3 - \frac{8\sqrt{2}}{3} \eta_3 \right) \sin^2 (\pi \zeta)$$

$$M\omega_T^2(100) = 4 \left(\alpha_1 + \frac{10}{3} \alpha_3 + 3\beta_1 + \frac{14}{3} \beta_3 + 2 \zeta_1 + \frac{8}{3} \zeta_3 - \frac{4\sqrt{2}}{3} \eta_3 \right) \sin^2 \left(\frac{1}{2} \pi \zeta \right)$$

$$+ 4 \left(\frac{2}{3} \alpha_3 + \beta_2 + \frac{10}{3} \beta_3 + \frac{4}{3} \zeta_3 + \frac{4\sqrt{2}}{3} \eta_3 \right) \sin^2 (\pi \zeta) \quad (6.16)$$

$$M\omega_L^2(110) = 4 \left(\alpha_1 + \frac{1}{3} \alpha_3 + 3 \beta_1 + \frac{11}{3} \beta_3 + 2 \zeta_3 - \frac{4\sqrt{2}}{3} \eta_3 \right) \sin^2 \left(\frac{1}{2} \pi \zeta \right) \quad (6.17)$$

$$+ 4 \left(\alpha_1 + \alpha_2 + \frac{2}{3} \alpha_3 + \beta_2 + \frac{4}{3} \beta_3 + \frac{4}{3} \zeta_3 + \frac{4\sqrt{2}}{3} \eta_3 \right) \sin^2 (\pi \zeta) + 4 (3 \alpha_3 + \beta_3) \sin^2 \left(\frac{3}{2} \pi \zeta \right)$$

$$\begin{aligned}
M\omega_{T1}^2(110) &= 4(\alpha_1 + 3\alpha_3 + 3\beta_1 + \beta_3 + 2\zeta_1) \sin^2\left(\frac{1}{2}\pi\zeta\right) \\
&+ 4(\alpha_2 + \beta_1 + \beta_2 + 2\beta_3) \sin^2(\pi\zeta) \\
&+ \frac{4}{3}(\alpha_3 + 11\beta_3 + 8\zeta_3 - 4\sqrt{2}\eta_3) \sin^2\left(\frac{3}{2}\pi\zeta\right)
\end{aligned} \tag{6.18}$$

$$\begin{aligned}
M\omega_{T2}^2(100) &= 8\left(\alpha_1 + \frac{1}{3}\alpha_3 + \beta_1 + \frac{5}{3}\beta_3 + \frac{2}{3}\zeta_3 + \frac{2\sqrt{2}}{3}\eta_3\right) \sin^2\left(\frac{1}{2}\pi\zeta\right) \\
&+ 4\left(\frac{4}{3}\alpha_3 + \beta_1 + 2\beta_2 + \frac{2}{3}\beta_3 + \zeta_1 + \frac{2}{3}\zeta_3 - \frac{4\sqrt{2}}{3}\eta_3\right) \sin^2(\pi\zeta)
\end{aligned} \tag{6.19}$$

$$\begin{aligned}
&+ \frac{8}{3}(\alpha_3 + 5\beta_3 + 2\zeta_3 + 2\sqrt{2}\eta_3) \sin^2\left(\frac{3}{2}\pi\zeta\right) \\
M\omega_L^2(111) &= 4\left(2\alpha_1 + \alpha_2 + \frac{4}{3}\alpha_3 + \beta_1 + 2\beta_2 + \frac{14}{3}\beta_3 + \zeta_1 + \frac{2}{3}\zeta_3 - \frac{4\sqrt{2}}{3}\eta_3\right) \sin^2(\pi\zeta) \\
&+ \frac{4}{3}(8\alpha_3 + \beta_3 + \zeta_3 + 4\sqrt{2}\eta_3) \sin^2(2\pi\zeta)
\end{aligned} \tag{6.20}$$

$$\begin{aligned}
M\omega_T^2(111) &= 2\left(\alpha_1 + 2\alpha_2 + \frac{14}{3}\alpha_3 + 5\beta_1 + 4\beta_2 + \frac{22}{3}\beta_3 + 2\zeta_1 + \frac{16}{3}\zeta_3 + \frac{4\sqrt{2}}{3}\eta_3\right) \sin^2(\pi\zeta) \\
&+ \frac{2}{3}(\alpha_3 + 17\beta_3 + 8\zeta_3 - 4\sqrt{2}\eta_3) \sin^2(2\pi\zeta)
\end{aligned} \tag{6.21}$$

şeklindedir [11]. Modelin dokuz parametresi $(\beta'_1, \beta'_2, \beta'_3, \gamma_1, \gamma_2, \gamma_3, \gamma_5, \gamma_6, \gamma_7)$ üçü (6.12), (6.13) ve (6.14) eşitliklerin de ifade edilen elastik sabitler olmak üzere dokuz denklem yardımı ile elde edilir.

Gerekli olan diğer altı denklem ise, $v_L [100]$ ($\zeta=1$), $v_T [100]$ ($\zeta=1$), $v_L [110]$ ($\zeta=1/2$), $v_{T1} [110]$ ($\zeta=1/2$), $v_L [111]$ ($\zeta=1/2$) ve $v_T [111]$ ($\zeta=1/2$)'deki deneysel

zon sınırı frekanslarına kullanılmasıyla elde edilir. Dokuz bilinmeyenli dokuz denklem ise uygun nümerik metotlarla çözülür.

6.1.2. Bcc yapılar için

CGW modeli için üçüncü en-yakın komşu etkileşmeli dinamik matrisin elemanlarının “düzeltilmiş” biçimde Upadhyaya [20] tarafından,

$$D_{11} = D_{xx} = \frac{8}{3} (\alpha_1 + 2\alpha'_1) (1 - C_1 C_2 C_3) + 4\alpha_2 S_1^2 + 4\alpha_2^2 (S_2^2 + S_3^2) + 2(\alpha_3 + \alpha'_3) (2 - C_{21} C_{22} - C_{21} C_{23}) + 4(\alpha'_3 + \alpha_3^N) (1 - C_{22} C_{23}) \quad (6.22)$$

$$D_{12} = D_{xy} = \frac{8}{3} (\alpha_1 - \alpha'_1) S_1 S_2 C_3 + 2(\alpha_3 - \alpha'_3) S_{21} S_{22}$$

şeklinde verilir. Burada S_i ve C_i 'ler fcc yapıdaki anlamdadır.

Yine β_i 'ler merkezi kuvvet sabitleri γ_i 'ler açılal kuvvet sabitleri olmak üzere yedi adet kuvvet sabiti içerir. Bu sabitlere bağlı olarak modelin parametreleri,

$$\alpha_i = \beta'_1 + \frac{16}{3} \gamma_2 + \frac{8}{3} \gamma_4 \quad (6.23)$$

$$\alpha_2 = \beta'_2 + \frac{32}{9} \gamma_1 + 4 \gamma_6 \quad (6.24)$$

$$\alpha_3 = \beta'_3 + \frac{8}{9} \gamma_3 + \gamma_5 + \frac{3}{2} \gamma_7 \quad (6.25)$$

$$\alpha'_1 = \frac{8}{3} \gamma_1 + \frac{4}{3} \gamma_2 + \frac{16}{3} \gamma_3 + \frac{8}{3} \gamma_4 \quad (6.26)$$

$$\alpha'_2 = \frac{4}{3} \gamma_2 - \frac{8}{9} \gamma_1 + 4 \gamma_5 + 2 \gamma_6 \quad (6.27)$$

$$\alpha'_3 = -\gamma_5 + \frac{\gamma_7}{2} \quad (6.28)$$

$$\alpha_3^N = -\frac{16}{9}\gamma_3 - \frac{2}{3}\gamma_4 + \gamma_5 + \frac{\gamma_7}{2} \quad (6.29)$$

şeklinde ifade edilir [20]. Burada $\gamma_4 = \gamma_6 = \gamma_7 = 0$ alınır. Kuvvet sabitleri ile esneklik sabitleri arasındaki ilişki,

$$a C_{11} = \frac{2}{3}\beta_1' + 2\beta_2' + 4\beta_3' + \frac{16}{3}(2\gamma_1 + \gamma_2 + 2\gamma_3) \quad (6.30)$$

$$a C_{12} = \frac{2}{3}\beta_1' + 2\beta_3' - \frac{8}{3}(2\gamma_1 + \gamma_2 + 2\gamma_3) \quad (6.31)$$

$$a C_{44} = \frac{2}{3}\beta_1' + 2\beta_3' + \frac{8}{9}(2\gamma_1 + 9\gamma_2 + 2\gamma_3 + 9\gamma_5) \quad (6.32)$$

şeklindedir [11,20,22]. Fonon frekans ifadeler ise,

$$M\omega_L^2(100) = (16/3)(\alpha_1 + 2\beta_1)\sin^2\left(\frac{1}{2}\pi\zeta\right) + 4(\alpha_2 + 2\alpha_3 + 2\beta_3)\sin^2(\pi\zeta) \quad (6.33)$$

$$M\omega_T^2(100) = (16/3)(\alpha_1 + 2\beta_1)\sin^2\left(\frac{1}{2}\pi\zeta\right) + 4(\alpha_3 + \beta_2 + 3\beta_3 + 2\zeta_3)\sin^2(\pi\zeta) \quad (6.34)$$

$$M\omega_L^2(110) = 4\left(\frac{4}{3}\alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3 + \frac{2}{3}\beta_1 + \beta_2 + 3\beta_3 + 2\zeta_3\right)\sin(\pi\zeta) + 4\alpha_3\sin^2(2\pi\zeta) \quad (6.35)$$

$$M\omega_{T_1}^2(110) = 4(\alpha_2 + \alpha_3 + 2\beta_1 + \beta_2 + 3\beta_3 + 2\zeta_3)\sin^2(\pi\zeta) + 4\beta_3\sin^2(2\pi\zeta) \quad (6.36)$$

$$M\omega_{T_2}^2(110) = 8\left(\frac{1}{3}\alpha_1 + \alpha_3 + \frac{2}{3}\beta_1 + \beta_2 + \beta_3\right)\sin^2(\pi\zeta) + 4(\beta_3 + \zeta_3)\sin^2(2\pi\zeta) \quad (6.37)$$

$$M\omega_L^2(111) = \frac{4}{3}(\alpha_1 + 8\beta_1)\sin^2\left(\frac{1}{2}\pi\zeta\right) + 4(\alpha_2 + 2\beta_2)\sin^2(\pi\zeta) + 4\alpha_1\sin^2\left(\frac{3}{2}\pi\zeta\right) \\ + 4(2\alpha_3 + \beta_3 + \zeta_3)\sin^2(2\pi\zeta) \quad (6.38)$$

$$\begin{aligned}
M\omega_T^2(111) = & \frac{4}{3}(4\alpha_1 + 5\beta_1) \sin^2 \left(\frac{1}{2}\pi\zeta \right) + 4(\alpha_2 + 2\beta_2) \sin^2 (\pi\zeta) + 4\beta_1 \sin^2 \left(\frac{3}{2}\pi\zeta \right) \\
& + 2(\alpha_3 + 5\beta_3 + 2\zeta_3) \sin^2 (2\pi\zeta)
\end{aligned} \tag{6.39}$$

şeklindedir [11].

Bu modelin yedi kuvvet sabiti ($\beta'_1, \beta'_2, \beta'_3, \gamma_1, \gamma_2, \gamma_3, \gamma_5$) üçü elastik sabitlerden, dördü zon sınırı frekansları ν_L [100] ($\zeta=1$), ν_L [110] ($\zeta=0,5$), ν_{T1} [110] ($\zeta=0,5$) ve ν_L [111] ($\zeta=0,5$) olmak üzere, bulunacak yedi denklem nümerik metotlarla çözümünden bulunur. Daha sonra, elde edilen kuvvet sabitleri benzer şekilde fonon frekanslarının hesaplanmasında kullanılır.

6.2. GTF Modelinde Dinamik Matris ve Fonon Frekans İfadeleri

6.2.1. Fcc yapılar için

GTF modelinin fcc yapılar için üçüncü en yakın komşulukta dinamik matrisin D_{xx} ve D_{xy} elemanları,

$$\begin{aligned}
D_{xx} = & 4\beta_1(2 - C_1 (C_2 + C_3)) + 4\alpha_1 x \\
& (1 - C_2 C_3) + 4\alpha_2 S_1^2 + 4\beta_2 (S_2^2 + S_3^2) + 8(4\gamma_3 - 4\epsilon_3 + \alpha_3) x \\
& (3 - C_1 C_2 C_{23} - C_1 C_{22} C_3 - C_{21} C_2 C_3) \\
& + \frac{8}{9} (2\gamma_3 - \beta_3 + 2\epsilon_3 + \alpha_3) (6 - C_1 C_2 C_{23} - C_1 C_{22} C_3 - 4 C_{21} C_2 C_3) \\
& + \frac{16}{9} (\alpha_3 - \gamma_3 - \epsilon_3 - \beta_3) [C_1 C_2 C_{23} + C_1 C_{22} C_3 - 2 C_{21} C_2 C_3] \tag{6.40} \\
D_{xy} = & 4(\alpha_1) S_1 S_2 + \frac{8}{9} (2\gamma_3 - \beta_3 + 2\epsilon_3 + \alpha_3) x \\
& (S_1 S_2 S_{23} + 2 S_1 S_{22} C_3 + 2 S_{21} S_2 C_3) +
\end{aligned}$$

$$\frac{8}{9}(5\alpha_3 - \beta_3 - 4\epsilon_3 + \alpha_3) (S_1 S_2 C_{23} - S_1 S_{22} C_3 - S_{21} S_2 C_3) +$$

$$\frac{8}{9}(\alpha_3 - \gamma_3 - \epsilon_3 - \beta_3)(-S_1 S_2 C_{23} - 2S_1 S_{22} C_3 + S_{21} S_2 C_3)$$

şeklinde. Burada S_i , C_i , S_{2i} ve C_{2i} CGW modelinde olduğu gibi aynı şekildedir. α_1 , α_2 , α_3 , β_1 , β_2 , β_3 , γ_1 , γ_2 , ϵ_3 modelin dokuz kuvvet sahibi olup, (6.2) eşitliğindeki katsayılar determinatından elde edilen elastik sabitler ve fonon frekansları arasında ilişki kullanarak tayin edilir.

(2.2) eşitliğindeki ifadelerin, CGW modelinin fonon frekans ifadelerinin de yerine konmasıyla elde edilen GTF modelinin fonon frekans ifadeleri,

$$\begin{aligned} M\omega_L^2(100) = & 8(2\beta_1 + (-\frac{16}{9}\gamma_3 + \frac{20}{9}\beta_3 - \frac{16}{9}\epsilon_3 + \frac{16}{9}\gamma_3) \sin^2(\frac{1}{2}\pi\zeta) \\ & + 4(\frac{32}{9}\gamma_3 + \frac{32}{9}\epsilon_3 + \frac{4}{9}\alpha_3 + \alpha_2) \sin^2(\pi\zeta) \end{aligned} \quad (6.41)$$

$$\begin{aligned} M\omega_T^2(100) = & 4(\frac{16}{9}\gamma_3 + \frac{16}{9}\epsilon_3 + \frac{52}{9}\beta_3 + \frac{20}{9}\alpha_3 + 2\beta_1 + 2\alpha_1) \sin^2(\frac{1}{2}\pi\zeta) \\ & + 4(-\frac{16}{9}\gamma_3 + \frac{20}{9}\beta_3 - \frac{16}{9}\epsilon_3 + \frac{16}{9}\alpha_3 + \beta_2) \sin^2(\pi\zeta) \end{aligned} \quad (6.42)$$

$$\begin{aligned} M\omega_L^2(110) = & 4(2\beta_1 + 2\alpha_1 + \frac{16}{9}\gamma_3 - \frac{20}{9}\epsilon_3 + \frac{2}{9}\alpha_3 + \frac{34}{9}\beta_3) \sin^2(\pi\zeta) \\ & + 4(\beta_1 + \gamma_1 + \alpha_2 + \frac{2}{9}\gamma_3 - \frac{16}{9}\epsilon_3 + \frac{16}{9}\alpha_3 + \beta_2 + \frac{2}{9}\beta_3) \sin^2(\pi\zeta) \\ & + 4(4\epsilon_3 + 2\alpha_3 + 2\beta_3) \sin^2(\frac{3}{2}\pi\zeta) \end{aligned} \quad (6.43)$$

$$M\omega_{T_1}^2(110) = 4(2\beta_1 + 4\epsilon_3 + 2\alpha_3 + 2\beta_3 + 2\alpha_1) \sin^2(\frac{1}{2}\pi\zeta)$$

$$+ 4(\alpha_2 + \beta_1 - \gamma_1 + \beta_2 + 2\beta_3 - 2\gamma_3) \sin^2 (\pi\zeta) \quad (6.44)$$

$$+ \frac{4}{9} (16\gamma_3 - 20\epsilon_3 + 2\alpha_3 + 34\beta_3) \sin^2 \left(\frac{3}{2}\pi\zeta\right)$$

$$M\omega_{T_2}^2(110) = 8(2\beta_1 - \frac{8}{9}\gamma_3 - \frac{8}{9}\epsilon_3 + \frac{8}{9}\alpha_3 + 2\beta_2 + \frac{10}{9}\beta_3) \sin^2 \left(\frac{1}{2}\pi\zeta\right) \\ + 4\left(\frac{16}{9}\gamma_3 + \frac{16}{9}\epsilon_3 + \frac{16}{9}\beta_3 + 2\beta_2 + \alpha_1 + \frac{2}{9}\alpha_3\right) \sin^2 (\pi\zeta) \quad (6.45)$$

$$+ \frac{16}{9} (-4\gamma_3 - 4\epsilon_3 + 8\alpha_3 + 5\beta_3) \sin^2 \left(\frac{3}{2}\pi\zeta\right)$$

$$M\omega_L^2(111) = 4(2\beta_1 + 2\gamma_1 + \alpha_2 + 2\beta_2 + \alpha_1 - \frac{20}{9}\gamma_3 + \frac{16}{9}\epsilon_3 \\ + \frac{2}{9}\alpha_3 + \frac{52}{9}\beta_3) \sin^2 (\pi\zeta) \quad (6.46)$$

$$\frac{4}{9}(2\gamma_3 + 20\epsilon_3 + 25\alpha_3 + 2\beta_3) \sin^2 (2\pi\zeta)$$

$$M\omega_T^2(111) = 2\left(4\beta_1 - 2\alpha_1 + 2\alpha_2 + 2\alpha_1 + 4\beta_2 + \frac{52}{9}\alpha_3 + \frac{20}{9}\gamma_3 - \frac{16}{9}\epsilon_3 + \frac{56}{9}\beta_3\right) \sin^2 (\pi\zeta) + \frac{2}{9}[2\alpha_3 + 52\beta_3 - 2\gamma_3 - 20\epsilon_3] \sin^2 (2\pi\zeta) \quad (6.47)$$

şeklinde ifade edilir.

Modelin kuvvet sabitleri ise, yine (2.2) eşitliğindeki ifadelerin kullanılmasıyla, CGW modelinin kuvvet sabitlerinden elde edilir. Elde edilen bu kuvvet sabitlerinin fonon frekans ifadelerinde yerine konmasıyla, fonon frekanslarının nümerik değerleri elde edilmiş olur.

6.2.2. Bcc yapılar için

Dinamik Matrisin D_{11} ve D_{12} elemanları,

$$\begin{aligned}
M D_{11} = & 4 [2 \sigma_1 (1 - C_x C_y C_z) + \sigma_2 S_x^2 + \lambda_2 (S_y^2 + S_z^2) \\
& + \sigma_3 [2 - C_{2x} (C_{2y} + C_{2z})] + \lambda_3 (1 - C_{2y} C_{2z})]
\end{aligned} \tag{6.48}$$

$$M D_{12} = 4 [2 \tau_1 S_x S_y C_z + \tau_3 S_{2x} S_{2y}]$$

şeklinde ifade edilir [3]. Burada,

$$S_x = \sin (q_x a/2) \quad S_{2x} = \sin (q_x a)$$

$$C_x = \cos (q_x a/2) \quad C_{2x} = \cos (q_x a/2)$$

dir. $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \tau_1, \tau_3, \lambda_2$ ve λ_3 ise modelin kuvvet sabitleridir.

(2.1) eşitliğindeki ifadelerin CGW modelinin fonon frekans ifadelerinde yerine konmasıyla elde edilen GTF modelinin fonon frekans ifadeleri,

$$M\omega_L^2(100) = 16 \sigma_1 \sin^2 \left(\frac{1}{2} \pi \zeta \right) + 4(\sigma_2 + 4\sigma_3) \sin^2 (\pi \zeta) \tag{6.49}$$

$$\begin{aligned}
M\omega_T^2(100) = & 16\sigma_1 \sin^2 \left(\frac{1}{2} \pi \zeta \right) + 4(2\sigma_3 + \lambda_2 + 2\lambda_3) \sin^2 (\pi \zeta) \\
& + 4(\sigma_3 + \tau_3) \sin^2 (2\pi \zeta)
\end{aligned} \tag{6.50}$$

$$\begin{aligned}
M\omega_L^2(110) = & 4(2\sigma_1 + 2\tau_1 + \sigma_2 + 2\sigma_3 + \lambda_2 + 2\lambda_3) \sin^2 (\pi \zeta) \\
& + 4(\sigma_3 + \tau_3) \sin^2 (2\pi \zeta)
\end{aligned} \tag{6.51}$$

$$\begin{aligned}
M\omega_{T_1}^2(110) = & 4(\sigma_2 + 2\sigma_3 + 2\sigma_1 - 2\tau_1 + \lambda_2 + 2\lambda_3) \sin^2 (\pi \zeta) \\
& + 4[\sigma_3 - \tau_3] \sin^2 (2\pi \zeta)
\end{aligned} \tag{6.52}$$

$$M\omega_{T_2}^2(110) = 8[\sigma_1 + 2\sigma_3 + \lambda_2] \sin^2 (\pi \zeta) + 4\lambda_3 \sin^2 (2\pi \zeta) \tag{6.53}$$

$$\begin{aligned}
M\omega_L^2(111) &= 4(3\sigma_1 - 2\tau_1) \sin^2\left(\frac{1}{2}\pi\zeta\right) + 4[\sigma_2 + 2\lambda_2] \sin^2(\pi\zeta) \\
&+ 4(\sigma_1 + 2\tau_1) \sin^2\left(\frac{3}{2}\pi\zeta\right) \\
&+ 4(2\sigma_3 + 2\tau_3 + \lambda_3) \sin^2(2\pi\zeta)
\end{aligned} \tag{6.54}$$

$$\begin{aligned}
M\omega_T^2(111) &= 4(3\sigma_1 + \tau_1) \sin^2\left(\frac{1}{2}\pi\right) + 4(\sigma_2 + 2\lambda_2) \sin^2(\pi\zeta) \\
&+ 4(\sigma_1 - \tau_1) \sin^2\left(\frac{3}{2}\pi\zeta\right) \\
&+ 4(2\sigma_3 - \tau_3 + \lambda_3) \sin^2(2\pi\zeta)
\end{aligned} \tag{6.55}$$

şeklinde ifade edilir.

Yedi kuvvet sabitinin değerleri ise yine fcc yapıda olduğu gibi, CGW modelinin kuvvet sabiti değerlerinin (2.1) eşitliğinde yerine konmasıyla elde edilmiş olur.

Çizelge 6.1. Metaller için kuvvet sabitlerin hesaplanmasında kullanılan esneklik sabitleri

Kristal Yapısı	METAL	Esneklik Sabitleri			Örgü Sabiti	Kütle	W.Seitz Hücre Yarıçabı
		(10 ¹² dyn/cm ²)					
Bcc		C11	C12	C44	a	M	r _o
	Ca ^a	0.317	0.234	0.187	4.42	40.08	1.73
	Ba ^b	1,000	0,642	0,95	5.00	137.34	1.96
	Sr ^c	0.109	0.077	0.074	4.83	87.62	1.89
	Fe ^d	2.33	1.355	1.178	2.87	55.85	1.12
Fcc	Ca ^e	0.278	0.182	0.163	5.58	40.08	1.73
	Cu ^f	1.685	1.215	0.755	3.61	63.54	1.41
	Ni ^g	2.46	1.500	1.22	3.52	58.71	1.09
	Sr ^h	0.153	0.103	0.099	6.08	87.62	1.89

a: Ref. 27

b: Ref. 32

c: Ref. 27

d: Ref. 33

e: Ref. 28

f: Ref. 21

g: Ref. 55

h: Ref. 27

Çizelge 6.2. Alaşımlar için kuvvet sabitlerin hesaplanmasında kullanılan esneklik sabitleri

Kristal Yapısı	ALAŞIM	Esneklik Sabitleri			Örgü Sabiti	Kütle	W.Seitz Hücre Yarıçabı
		$(10^{12} \text{ dyn/cm}^2)$					
Bcc		C11	C12	C44	a	M	r _o
	Ta ₇₇ W ₂₃	3.2227	1.7010	0.9916	3.2755	181.617	1.27
	Ta ₅₀ W ₅₀	3.6651	1.8223	0.8803	3.235	182.4	1.26
	Ta ₃₃ W ₆₇	4.2698	1.8997	1.1314	3.2095	182.893	1.24
Fcc	Pd _{0.96} Fe _{0.04}	0.278	1.53	0.78	3.8826	104.378	1.21
	Pd _{0.90} Fe _{0.10}	1.685	1.64	0.86	3.8720	101.345	1.21
	Pd _{0.28} Fe _{0.72}	1.40	1.342	0.80	3.755	70.00	1.14
	Co _{0.92} Fe _{0.08}	2.21	1.47	1.24	3.548	58.69	0.99

* : Ref. 42,43

** : Ref. 44

***:Ref. 35

****: Ref.46

***** : Ref. 41

Çizelge 6.3. Metallerin yoğunlukları (g/cm³)

Ca	Ba	Sr	Fe	Cu	Ni
1,54	3,50	2,60	7,86	8,96	8,90

Çizelge 6.4. Alaşımların yoğunlukları (g/cm³)

Ta ₇₇ W ₂₃	Ta ₅₀ W ₅₀	Ta ₃₃ W ₆₇	Pd _{0.96} Fe _{0.04}	Pd _{0.90} Fe _{0.10}	Pd _{0.28} Fe _{0.72}	Co _{0.92} Fe _{0.08}
17,16	17,89	18,37	11,84	11,60	8,78	8,73

Çizelge 6.5. CGW, GTF ve CGW+SJ modellerine göre Ca için hesaplanan kuvvet sabitleri (10^{-3} dyn/cm)

CGW	β'_1	β'_2	β'_3	γ_1	γ_2	γ_3	γ_5		
	12689,41	1349,52	829,754	-118,88	-326,36	238,20	-135,114		
GTF	σ_1	σ_2	σ_3	τ_1	τ_3	λ_2	λ_3		
	3995,09	926,82	520,74	3476,85	385,63	-869,63	-423,47		
CGW+SJ	β'_1	β'_2	β'_3	γ_1	γ_2	γ_3	γ_5		
	11279,92	3961,35	529,52	-1093,19	-37,25	779,45	-136,01		

Çizelge 6.6. CGW, GTF ve CGW+SJ modellerine göre Ba için hesaplanan kuvvet sabitleri (10^{-3} dyn/cm)

CGW	β'_1	β'_2	β'_3	γ_1	γ_2	γ_3	γ_5		
	9124,40	-112,35	-821,03	642,54	-118,47	-355,50	94,37		
GTF	σ_1	σ_2	σ_3	τ_1	τ_3	λ_2	λ_3		
	2603,82	2172,26	-568,51	9944,34	-474,14	-351,63	632,00		
CGW+SJ	β'_1	β'_2	β'_3	γ_1	γ_2	γ_3	γ_5		
	7015,53	523,41	-455,46	177,11	8,94	-78,12	92,71		

Çizelge 6.7. CGW, GTF ve CGW+SJ modellerine göre Sr için hesaplanan kuvvet sabitleri (10^{-3} dyn/cm)

CGW	β'_1	β'_2	β'_3	γ_1	γ_2	γ_3	γ_5		
	6953,06	1148,46	-435,81	-13,12	-14,23	27,73	12,11		
GTF	σ_1	σ_2	σ_3	τ_1	τ_3	λ_2	λ_3		
	2355,01	1101,79	-205,58	2261,58	2261,07	-217,69	-49,30		
CGW+SJ	β'_1	β'_2	β'_3	γ_1	γ_2	γ_3	γ_5		
	6899,99	1246,81	-447,12	-49,81	-3,34	48,11	-12,14		

Çizelge 6.8. CGW, GTF ve CGW+SJ modellerine göre Fe için hesaplanan kuvvet sabitleri (10^{-3} dyn/cm)

CGW	β'_1	β'_2	β'_3	γ_1	γ_2	γ_3	γ_5		
	57711,28	12030,52	660,67	695,22	-2222,58	578,80	1196,06		
GTF	σ_1	σ_2	σ_3	τ_1	τ_3	λ_2	λ_3		
	16604,12	14502,24	587,57	1462,70	1783,64	1202,82	-1028,97		
CGW+SJ	β'_1	β'_2	β'_3	γ_1	γ_2	γ_3	γ_5		
	65703,99	9605,56	-736,65	2528,54	-2710,56	-538,50	1210,65		

Çizelge 6.9. CGW, GTF ve CGW+SJ modellerine göre Ca için hesaplanan kuvvet sabitleri (10^{-3} dyn/cm)

CGW	β'_1	β'_2	β'_3	γ_1	γ_2	γ_3	γ_5	γ_6	γ_7
	53699,20	34634,12	45040,67	10618,98	55858,95	14639,11	15512,95	10153,60	9097,63
GTF	α_1	α_2	α_3	β_1	β_2	β_3	γ_1	γ_3	ε_3
	330,78	-862,60	282,33	3394,48	136,08	25,37	3844,35	249,11	79,67
CGW+SJ	β'_1	β'_2	β'_3	γ_1	γ_2	γ_3	γ_5	γ_6	γ_7
	5736,36	349,74	478,35	-103,85	-363,64	486,85	167,80	-113,56	19,41

Çizelge 6.10. CGW, GTF ve CGW+SJ modellerine göre Ni için hesaplanan kuvvet sabitleri (10^{-3} dyn/cm)

CGW	β'_1	β'_2	β'_3	γ_1	γ_2	γ_3	γ_5	γ_6	γ_7
	39355,69	-1667,39	1315,95	763,11	503,92	-1489,61	-567,65	169,84	119,24
GTF	α_1	α_2	α_3	β_1	β_2	β_3	γ_1	γ_3	ε_3
	-214,09	984,23	922,27	16156,92	-328,48	635,26	19188,38	-241,59	597,27
CGW+SJ	β'_1	β'_2	β'_3	γ_1	γ_2	γ_3	γ_5	γ_6	γ_7
	51522,79	-5037,36	260,42	-1233,93	441,41	-443,20	-425,61	459,89	556,77

Çizelge 6.11. CGW, GTF ve CGW+SJ modellerine göre Sr için hesaplanan kuvvet sabitleri (10^{-3} dyn/cm)

CGW	β'_1	β'_2	β'_3	γ_1	γ_2	γ_3	γ_5	γ_6	γ_7
	7499,38	-735,96	-217,77	242,61	222,53	-506,24	27,07	8,14	-104,08
GTF	α_1	α_2	α_3	β_1	β_2	β_3	γ_1	γ_3	ε_3
	697,11	-400,97	-45,41	3693,59	-412,46	-104,22	3344,80	-68,12	-89,38
CGW+SJ	β'_1	β'_2	β'_3	γ_1	γ_2	γ_3	γ_5	γ_6	γ_7
	7658,46	-786,95	-235,78	213,12	213,51	-473,59	27,07	11,36	-93,46

Çizelge 6.12. CGW, GTF ve CGW+SJ modellerine göre Cu için hesaplanan kuvvet sabitleri (10^{-3} dyn/cm)

CGW	β'_1	β'_2	β'_3	γ_1	γ_2	γ_3	γ_5	γ_6	γ_7
	36075,11	-2010,49	512,20	-774,90	330,02	-730,02	21,78	171,08	119,84
GTF	α_1	α_2	α_3	β_1	β_2	β_3	γ_1	γ_3	ε_3
	-917,46	-48,15	387,01	13428,14	22,77	48,07	15164,59	77,11	330,43
CGW+SJ	β'_1	β'_2	β'_3	γ_1	γ_2	γ_3	γ_5	γ_6	γ_7
	40467,05	-3447,14	19,66	-1593,69	84,19	171,58	21,80	261,04	414,81

Çizelge 6.13. CGW, GTF ve CGW+SJ modellerine göre $Ta_{77}W_{23}$ için hesaplanan kuvvet sabitleri (10^{-3} dyn/cm)

CGW	β'_1	β'_2	β'_3	γ_1	γ_2	γ_3	γ_5		
	79107,75	13609,44	3949,00	1056,09	-6204,12	2953,40	1804,02		
GTF	σ_1	σ_2	σ_3	τ_1	τ_3	λ_2	λ_3		
	22203,42	17364,44	3287,12	11907,83	5091,15	-1994,80	-5050,49		
CGW+SJ	β'_1	β'_2	β'_3	γ_1	γ_2	γ_3	γ_5		
	70131	30244,44	2036,81	-5149,37	-4362,75	6400,64	1798,26		

Çizelge 6.14. CGW, GTF ve CGW+SJ modellerine göre $Ta_{50}W_{50}$ için hesaplanan kuvvet sabitleri (10^{-3} dyn/cm)

CGW	β'_1	β'_2	β'_3	γ_1	γ_2	γ_3	γ_5		
	86400,38	33723,22	-464,00	-1797,46	-5324,25	4016,17	1316,22		
GTF	σ_1	σ_2	σ_3	τ_1	τ_3	λ_2	λ_3		
	25686,36	27332,21	1552,96	16159,00	2869,19	-236,34	-7139,86		
CGW+SJ	β'_1	β'_2	β'_3	γ_1	γ_2	γ_3	γ_5		
	74626,5	55542,13	-2972,18	-9936,64	-2909,09	8537,68	1308,67		

Çizelge 6.15. CGW, GTF ve CGW+SJ modellerine göre $Ta_{33}W_{67}$ için hesaplanan kuvvet sabitleri (10^{-3} dyn/cm)

CGW	β'_1	β'_2	β'_3	γ_1	γ_2	γ_3	γ_5		
	137003,5	6252,25	-3436,5	12469	-11829,6	-2175,09	3572,77		
GTF	σ_1	σ_2	σ_3	τ_1	τ_3	λ_2	λ_3		
	28555,59	50586,47	-2684,59	22678,27	887,82	-12565,2	3866,83		
CGW+SJ	β'_1	β'_2	β'_3	γ_1	γ_2	γ_3	γ_5		
	127559	23754,38	-5448,37	5940,25	-9892,25	1451,84	3566,71		

Çizelge 6.16. CGW, GTF ve CGW+SJ modellerine göre $Pd_{0,96}Fe_{0,04}$ için hesaplanan kuvvet sabitleri (10^{-3} dyn/cm)

CGW	β'_1	β'_2	β'_3	γ_1	γ_2	γ_3	γ_5	γ_6	γ_7
	36311,68	9851,814	977,22	297,39	-892,59	81,73	856,83	-716,33	-659,326
GTF	α_1	α_2	α_3	β_1	β_2	β_3	γ_1	γ_3	ϵ_3
	-1202,55	2765,62	600,75	19529,57	-1080,30	-382,98	22320,71	759,45	-377,91
CGW+SJ	β'_1	β'_2	β'_3	γ_1	γ_2	γ_3	γ_5	γ_6	γ_7
	55368,22	3365,45	-1117,80	-3334,59	-1962,57	4038,36	859,35	-311,63	653,12

Çizelge 6.17. CGW, GTF ve CGW+SJ modellerine göre $\text{Pd}_{0,90}\text{Fe}_{0,10}$ için hesaplanan kuvvet sabitleri (10^{-3} dyn/cm)

CGW	β'_1	β'_2	β'_3	γ_1	γ_2	γ_3	γ_5	γ_6	γ_7
	49157,30	-435,3	865,93	-2676,43	-947,16	1954,16	771,15	-145,07	479,85
GTF	α_1	α_2	α_3	β_1	β_2	β_3	γ_1	γ_3	ϵ_3
	-3137,85	-1665,51	21,80	20984,79	1314,43	-92,03	23015,19	936,17	282,17
CGW+SJ	β'_1	β'_2	β'_3	γ_1	γ_2	γ_3	γ_5	γ_6	γ_7
	69514,35	-7835,89	-1298,01	-6659,07	-2077,24	6236,32	782,86	300,90	1918,60

Çizelge 6.18. CGW, GTF ve CGW+SJ modellerine göre $\text{Pd}_{0,28}\text{Fe}_{0,72}$ için hesaplanan kuvvet sabitleri (10^{-3} dyn/cm)

CGW	β'_1	β'_2	β'_3	γ_1	γ_2	γ_3	γ_5	γ_6	γ_7
	48915,56	-9032,84	-257,36	269,97	1866,71	-3517,26	-645,49	453,86	-216,83
GTF	α_1	α_2	α_3	β_1	β_2	β_3	γ_1	γ_3	ϵ_3
	-1609,58	-2722,44	424,60	16353,5	-1917,95	89,34	17530,88	-771,31	219,03
CGW+SJ	β'_1	β'_2	β'_3	γ_1	γ_2	γ_3	γ_5	γ_6	γ_7
	63490,82	-13910,1	-1873,69	-2466,91	1057,38	-529,43	-645,39	758,23	771,81

Çizelge 6.19. CGW, GTF ve CGW+SJ modellerine Göre $\text{Co}_{0,92}\text{Fe}_{0,08}$ için hesaplanan kuvvet sabitleri (10^{-3} dyn/cm)

CGW	β'_1	β'_2	β'_3	γ_1	γ_2	γ_3	γ_5	γ_6	γ_7
	28081,84	7130,671	1744,65	3739,546	1113,25	-4347,13	-744,24	-124,76	-1396,66
GTF	α_1	α_2	α_3	β_1	β_2	β_3	γ_1	γ_3	ϵ_3
	557,24	4133,89	2293,68	12965,73	-2725,10	221,64	17067,96	-770,67	174,14
CGW+SJ	β'_1	β'_2	β'_3	γ_1	γ_2	γ_3	γ_5	γ_6	γ_7
	32767,55	8170,03	790,48	3355,59	683,94	-3506,92	-758,49	-134,05	-1270,93

Çizelge 6.20. Ca için [100] yönünde frekans değerleri (10^{12}s^{-1})

q	v_L				v_T			
	Deneyisel*	CGW	CGW+SJ	GTF	Deneyisel*	CGW	CGW+SJ	GTF
0,1	1,11	1,02	1,02	1,02	0,79	0,71	0,71	0,71
0,2	1,73	1,98	1,98	1,98	1,30	1,40	1,41	1,40
0,3	2,65	2,83	2,85	2,83	2,00	2,08	2,11	2,08
0,4	3,65	3,54	3,59	3,54	2,60	2,73	2,80	2,73
0,5	3,95	4,09	4,18	4,09	3,26	3,34	3,45	3,34
0,6	4,30	4,48	4,62	4,48	3,84	3,87	4,04	3,87
0,7	4,62	4,72	4,92	4,72	4,31	4,32	4,53	4,32
0,8	4,79	4,86	5,10	4,86	4,64	4,65	4,91	4,65
0,9	4,93	4,92	5,20	4,92	—	4,86	5,15	4,86
1,0	4,93	4,93	5,23	4,93	—	4,93	5,23	4,93

*: Ref. 27

Çizelge 6.21. Ca için [110] yönünde frekans değerleri (10^{12}s^{-1})

q	v_L				v_{T1}			
	Deneyisel	CGW	CGW+SJ	GTF	Deneyisel	CGW	CGW+SJ	GTF
0,1	1,70	1,64	1,64	1,64	0,39	0,51	0,51	0,51
0,2	2,95	3,04	3,02	3,04	0,70	0,93	0,93	0,93
0,3	4,00	4,05	3,99	4,05	1,11	1,21	1,21	1,21
0,4	4,63	4,63	4,53	4,63	1,26	1,36	1,36	1,36
0,5	4,84	4,81	4,70	4,81	1,40	1,40	1,40	1,40

q	v_{T2}			
	Deneyisel	CGW	CGW+SJ	GTF
0,1	0,99	0,96	1,02	0,96
0,2	1,95	1,79	2,12	1,79
0,3	2,78	2,50	3,20	2,50
0,4	3,36	2,89	4,01	2,89
0,5	3,56	3,00	4,31	3,00

*: Ref. 27

Çizelge 6.22. Ca için [111] yönünde frekans değerleri (10^{12}s^{-1})

q	v_L				v_T			
	Deneyisel	CGW	CGW+SJ	GTF	Deneyisel	CGW	CGW+SJ	GTF
0,1	1,79	2,06	2,07	2,06	0,77	0,86	0,89	0,86
0,2	3,40	3,62	3,68	3,62	1,54	1,63	1,78	1,63
0,3	4,16	4,35	4,53	4,35	2,20	2,27	2,64	2,27
0,4	4,07	4,16	4,52	4,16	2,77	2,80	3,36	2,80
0,5	3,30	3,31	3,86	3,31	3,30	3,31	3,86	3,31
0,6	2,43	2,49	3,17	2,49	3,77	3,81	4,21	3,81
0,7	—	2,76	3,26	2,76	4,14	4,27	4,50	4,27
0,8	3,70	3,77	4,10	3,77	4,40	4,63	4,82	4,63
0,9	4,43	4,62	4,91	4,62	4,79	4,86	5,11	4,86
1,0	4,93	4,93	5,23	4,93	4,93	4,93	5,23	4,93

*: Ref. 27

Çizelge 6.23. Ba için [100] yönünde frekans değerleri (10^{12}s^{-1})

q	v_L				v_T			
	Deneysel*	CGW	CGW+SJ	GTF	Deneysel*	CGW	CGW+SJ	GTF
0,1	0,28	0,33	0,33	0,33	0,31	0,32	0,32	0,32
0,2	0,56	0,65	0,65	0,65	0,65	0,64	0,64	0,64
0,3	0,82	0,96	0,95	0,96	0,98	0,94	0,93	0,94
0,4	1,05	1,25	1,23	1,25	1,24	1,23	1,21	1,23
0,5	1,22	1,51	1,48	1,51	1,52	1,49	1,46	1,49
0,6	1,44	1,73	1,68	1,73	1,73	1,71	1,67	1,71
0,7	1,74	1,91	1,85	1,91	1,93	1,90	1,84	1,90
0,8	2,01	2,04	1,97	2,04	2,05	2,04	1,96	2,04
0,9	2,10	2,12	2,04	2,12	2,15	2,12	2,04	2,12
1,0	—	2,15	2,07	2,15	2,15	2,15	2,07	2,15

*: Ref. 32

Çizelge 6.24. Ba için [110] yönünde frekans değerleri (10^{12}s^{-1})

q	v_L				v_{T1}			
	Deneysel*	CGW	CGW+SJ	GTF	Deneysel*	CGW	CGW+SJ	GTF
0,1	0,60	0,63	0,62	0,63	0,27	0,20	0,20	0,20
0,2	1,25	1,36	1,21	1,36	0,50	0,40	0,40	0,40
0,3	1,81	1,84	1,71	1,84	0,65	0,58	0,58	0,58
0,4	2,10	2,25	2,05	2,25	0,71	0,70	0,70	0,70
0,5	2,30	2,41	2,17	2,41	0,75	0,75	0,75	0,75

q	v_{T2}			
	Deneysel*	CGW	CGW+SJ	GTF
0,1	0,47	0,44	0,45	0,44
0,2	0,88	0,77	0,84	0,77
0,3	1,23	0,95	1,13	0,95
0,4	1,44	1,00	1,31	1,00
0,5	1,53	1,00	1,37	1,00

*: Ref. 32

Çizelge 6.25. Ba için [111] yönünde frekans değerleri (10^{12}s^{-1})

q	v_L				v_T			
	Deneysel*	CGW	CGW+SJ	GTF	Deneysel*	CGW	CGW+SJ	GTF
0,1	0,78	0,80	0,79	0,80	—	0,38	0,38	0,38
0,2	1,56	1,48	1,45	1,48	0,80	0,76	0,76	0,76
0,3	2,12	1,92	1,86	1,92	1,16	1,12	1,13	1,12
0,4	1,97	2,02	1,94	2,02	1,47	1,45	1,45	1,45
0,5	1,72	1,72	1,69	1,72	1,72	1,72	1,69	1,72
0,6	—	1,13	1,25	1,13	1,90	1,92	1,84	1,92
0,7	—	0,78	1,07	0,78	1,99	2,05	1,93	2,05
0,8	1,36	1,31	1,43	1,31	2,05	2,12	2,00	2,12
0,9	1,90	1,92	1,88	1,92	2,08	2,14	2,05	2,14
1,0	—	2,15	2,07	2,15	—	2,15	2,07	2,15

*: Ref. 32

Çizelge 6.26. Sr için [100] yönünde frekans değerleri (10^{12}s^{-1})

q	ν_L				ν_T			
	Deneysel*	CGW	CGW+SJ	GTF	Deneysel*	CGW	CGW+SJ	GTF
0,1	0,41	0,42	0,42	0,42	0,34	0,35	0,35	0,35
0,2	0,85	0,83	0,83	0,83	0,73	0,70	0,70	0,70
0,3	1,25	1,22	1,22	1,22	1,06	1,05	1,05	1,05
0,4	1,57	1,56	1,57	1,56	1,43	1,38	1,38	1,38
0,5	1,86	1,86	1,87	1,86	1,77	1,70	1,70	1,70
0,6	2,20	2,11	2,12	2,11	2,07	1,98	1,99	1,98
0,7	2,42	2,31	2,32	2,31	2,30	2,23	2,23	2,23
0,8	2,44	2,45	2,46	2,45	2,44	2,41	2,41	2,41
0,9	—	2,53	2,54	2,53	2,54	2,52	2,52	2,52
1,0	2,56	2,56	2,57	2,56	—	2,56	2,57	2,56

*: Ref. 26

Çizelge 6.27. Sr için [110] yönünde frekans değerleri (10^{12}s^{-1})

q	ν_L				ν_{T1}			
	Deneysel*	CGW	CGW+SJ	GTF	Deneysel*	CGW	CGW+SJ	GTF
0,1	0,75	0,74	0,74	0,74	0,22	0,23	0,23	0,23
0,2	1,52	1,44	1,44	1,44	0,40	0,43	0,43	0,43
0,3	2,16	2,05	2,04	2,05	0,56	0,58	0,58	0,58
0,4	2,49	2,46	2,46	2,46	0,65	0,68	0,68	0,68
0,5	2,61	2,61	2,61	2,61	0,71	0,71	0,71	0,71

q	ν_{T2}			
	Deneysel*	CGW	CGW+SJ	GTF
0,1	0,51	0,49	0,49	0,49
0,2	1,01	0,94	0,94	0,94
0,3	1,45	1,30	1,32	1,30
0,4	1,72	1,54	1,57	1,54
0,5	1,83	1,62	1,65	1,62

*: Ref. 26

Çizelge 6.28. Sr için [111] yönünde frekans değerleri (10^{12}s^{-1})

q	ν_L				ν_T			
	Deneysel*	CGW	CGW+SJ	GTF	Deneysel*	CGW	CGW+SJ	GTF
0,1	0,97	0,94	0,94	0,94	0,41	0,42	0,43	0,42
0,2	1,88	1,73	1,73	1,73	0,89	0,87	0,87	0,87
0,3	2,35	2,22	2,23	2,22	1,33	1,30	1,32	1,30
0,4	2,49	2,31	2,33	2,31	1,68	1,69	1,71	1,69
0,5	1,99	1,99	2,01	1,99	1,99	1,99	2,01	1,99
0,6	—	1,42	1,45	1,42	2,24	2,20	2,21	2,20
0,7	—	1,19	1,21	1,19	2,45	2,34	2,34	2,34
0,8	—	1,71	1,73	1,71	2,50	2,45	2,45	2,45
0,9	2,36	2,32	2,33	2,32	—	2,53	2,54	2,53
1,0	—	2,56	2,57	2,56	—	2,56	2,57	2,56

*: Ref. 26

Çizelge 6.29. Fe için [100] yönünde frekans değerleri (10^{12}s^{-1})

q	v_L				v_T			
	Deneysel*	CGW	CGW+SJ	GTF	Deneysel*	CGW	CGW+SJ	GTF
0,1	—	1,88	1,88	1,88	—	1,35	1,35	1,35
0,2	—	3,65	3,65	3,65	2,48	2,66	2,66	2,66
0,3	—	5,20	5,21	5,20	—	3,90	3,91	3,90
0,4	—	6,46	6,48	6,46	—	5,04	5,07	5,04
0,5	7,44	7,40	7,44	7,40	5,94	6,05	6,11	6,05
0,6	—	8,01	8,08	8,01	—	6,92	7,00	6,92
0,7	—	8,35	8,45	8,35	—	7,61	7,72	7,61
0,8	8,64	8,49	8,62	8,49	—	8,11	8,25	8,11
0,9	—	8,50	8,68	8,50	—	8,42	8,58	8,42
1,0	8,52	8,52	8,68	8,52	8,52	8,52	8,68	8,52

*: Ref. 33

Çizelge 6.30. Fe için [110] yönünde frekans değerleri (10^{12}s^{-1})

q	v_L				v_{T1}			
	Deneysel*	CGW	CGW+SJ	GTF	Deneysel*	CGW	CGW+SJ	GTF
0,1	3,68	2,99	3,01	2,99	—	1,23	1,23	1,23
0,2	—	5,61	5,72	5,61	2,40	2,43	2,43	2,43
0,3	—	7,59	7,88	7,59	—	3,50	3,50	3,50
0,4	8,82	8,79	9,26	8,79	4,20	4,26	4,26	4,26
0,5	9,19	9,19	9,74	9,19	4,53	4,53	4,53	4,53

q	v_{T2}			
	Deneysel*	CGW	CGW+SJ	GTF
0,1	—	1,89	1,87	1,89
0,2	—	3,65	3,51	3,65
0,3	—	5,11	4,74	5,11
0,4	5,92	6,09	5,48	6,09
0,5	6,49	6,44	5,73	6,44

*: Ref. 33

Çizelge 6.31. Fe için [111] yönünde frekans değerleri (10^{12}s^{-1})

q	v_L				v_T			
	Deneysel*	CGW	CGW+SJ	GTF	Deneysel*	CGW	CGW+SJ	GTF
0,1	4,52	3,75	3,76	3,75	2,22	1,82	1,82	1,82
0,2	—	6,71	6,76	6,71	—	3,59	3,57	3,59
0,3	—	8,32	8,45	8,32	—	5,21	5,17	5,21
0,4	8,38	8,44	8,61	8,44	6,26	6,51	6,50	6,51
0,5	—	7,40	7,47	7,40	—	7,40	7,47	7,40
0,6	5,78	6,13	5,90	6,13	7,90	7,90	8,08	7,90
0,7	—	5,90	5,44	5,90	—	8,15	8,41	8,15
0,8	—	6,91	6,64	6,91	—	8,32	8,57	8,32
0,9	7,72	8,05	8,09	8,05	8,40	8,46	8,66	8,46
1,0	8,52	8,52	8,68	8,52	8,52	8,52	8,68	8,52

*: Ref. 33

Çizelge 6.32. Ca için [100] yönünde frekans değerleri (10^{12}s^{-1})

q	v_L				v_T			
	Deneysel*	CGW	CGW+SJ	GTF	Deneysel*	CGW	CGW+SJ	GTF
0,1	—	0,77	0,75	0,75	—	0,57	0,59	0,59
0,2	1,50	1,52	1,48	1,48	1,07	1,13	1,16	1,16
0,3	2,28	2,21	2,16	2,16	1,69	1,66	1,70	1,70
0,4	3,17	2,82	2,79	2,78	2,28	2,15	2,18	2,19
0,5	3,66	3,34	3,34	3,31	2,54	2,59	2,61	2,62
0,6	4,13	3,77	3,81	3,75	2,92	2,96	2,97	2,99
0,7	4,35	4,09	4,18	4,10	3,29	3,26	3,25	3,28
0,8	4,40	4,31	4,45	4,34	3,42	3,47	3,45	3,49
0,9	4,59	4,44	4,61	4,49	3,61	3,61	3,58	3,62
1,0	4,52	4,49	4,66	4,54	3,63	3,65	3,62	3,66

*: Ref. 28

Çizelge 6.33. Ca için [110] yönünde frekans değerleri (10^{12}s^{-1})

q	v_L				v_{T1}			
	Deneysel*	CGW	CGW+SJ	GTF	Deneysel*	CGW	CGW+SJ	GTF
0,1	1,29	1,26	1,26	1,26	—	0,48	0,42	0,46
0,2	2,44	2,38	2,40	2,39	0,80	0,92	0,82	0,89
0,3	3,22	3,26	3,30	3,28	1,15	1,30	1,20	1,28
0,4	3,94	3,85	3,91	3,87	1,64	1,66	1,59	1,66
0,5	4,14	4,13	4,21	4,16	2,01	2,03	2,00	2,06
0,6	4,19	4,17	4,25	4,19	2,63	2,45	2,44	2,49
0,7	4,04	4,04	4,10	4,06	3,02	2,88	2,88	2,92
0,8	3,84	3,86	3,88	3,87	3,14	3,28	3,26	3,30
0,9	3,68	3,71	3,69	3,72	3,30	3,55	3,52	3,57
1,0	—	3,65	3,62	3,66	3,63	3,65	3,62	3,66

q	v_{T2}			
	Deneysel*	CGW	CGW+SJ	GTF
0,1	—	0,81	0,83	0,83
0,2	—	1,59	1,63	1,62
0,3	2,42	2,31	2,37	2,35
0,4	2,91	2,95	3,03	2,98
0,5	3,50	3,48	3,58	3,50
0,6	4,14	3,89	4,01	3,91
0,7	4,39	4,18	4,32	4,20
0,8	4,61	4,36	4,52	4,40
0,9	4,70	4,46	4,63	4,50
1,0	4,62	4,49	4,66	4,54

*: Ref. 28

Çizelge 6.34. Ca için [111] yönünde frekans değerleri (10^{12}s^{-1})

q	v_L				v_T			
	Deneysel*	CGW	CGW+SJ	GTF	Deneysel*	CGW	CGW+SJ	GTF
0,1	1,60	1,59	1,61	1,61	—	0,74	0,72	0,74
0,2	2,90	2,94	3,00	2,96	1,26	1,40	1,37	1,41
0,3	3,90	3,91	4,00	3,92	1,81	1,91	1,90	1,94
0,4	4,51	4,46	4,57	4,45	2,16	2,23	2,25	2,28
0,5	4,61	4,63	4,75	4,62	2,36	2,34	2,37	2,40

*: Ref. 28

Çizelge 6.35. Cu için [100] yönünde frekans değerleri (10^{12}s^{-1})

q	v_L				v_T			
	Deneysel	CGW	CGW+SJ	GTF	Deneysel	CGW	CGW+SJ	GTF
0,1	—	1,17	1,11	1,19	—	0,82	0,86	0,80
0,2	2,42	2,31	2,20	2,34	1,56	1,61	1,69	1,58
0,3	3,56	3,38	3,27	3,41	2,30	2,36	2,45	2,32
0,4	4,47	4,35	4,28	4,39	3,10	3,04	3,13	3,00
0,5	5,32	5,21	5,21	5,23	3,62	3,63	3,70	3,61
0,6	6,05	5,93	6,04	5,94	4,15	4,13	4,16	4,12
0,7	6,60	6,50	6,73	6,49	4,54	4,53	4,51	4,53
0,8	6,99	6,92	7,24	6,88	4,86	4,81	4,75	4,84
0,9	7,17	7,17	7,56	7,11	5,02	4,98	4,89	5,02
1,0	7,19	7,25	7,67	7,19	5,08	5,04	4,94	5,08

*: Ref. 21

Çizelge 6.36. Cu için [110] yönünde frekans değerleri (10^{12}s^{-1})

q	v_L				v_{T1}			
	Deneysel	CGW	CGW+SJ	GTF	Deneysel	CGW	CGW+SJ	GTF
0,1	2,03	1,92	1,94	1,91	—	0,57	0,34	0,64
0,2	3,70	3,64	3,70	3,63	1,35	1,19	0,87	1,30
0,3	5,11	5,02	5,12	5,00	2,03	1,88	1,60	1,98
0,4	5,97	5,94	6,10	5,92	2,70	2,61	2,43	2,68
0,5	6,36	6,38	6,58	6,36	3,34	3,31	3,23	3,34
0,6	6,38	6,38	6,60	6,38	3,89	3,93	3,92	3,94
0,7	5,91	6,07	6,24	6,08	4,34	4,43	4,42	4,43
0,8	5,51	5,61	5,68	5,63	4,75	4,77	4,74	4,79
0,9	5,19	5,20	5,16	5,24	5,03	4,98	4,89	5,01
1,0	5,08	5,04	4,94	5,08	5,08	5,04	4,94	5,08

q	v_{T2}			
	Deneysel	CGW	CGW+SJ	GTF
0,1	1,11	1,16	1,22	1,13
0,2	2,27	2,27	2,39	2,23
0,3	3,37	3,31	3,48	3,28
0,4	4,30	4,25	4,47	4,23
0,5	5,07	5,09	5,35	5,09
0,6	5,71	5,81	6,12	5,82
0,7	6,31	6,41	6,76	6,41
0,8	6,80	6,87	7,25	6,84
0,9	7,13	7,15	7,56	7,10
1,0	7,19	7,25	7,67	7,19

*: Ref. 21

Çizelge 6.37. Cu için [111] yönünde frekans değerleri (10^{12}s^{-1})

q	v_L				v_T			
	Deneysel	CGW	CGW+SJ	GTF	Deneysel	CGW	CGW+SJ	GTF
0,1	2,46	2,44	2,50	2,42	1,01	0,98	0,92	1,01
0,2	4,54	4,56	4,69	4,53	1,87	1,91	1,83	1,94
0,3	6,14	6,13	6,34	6,12	2,66	2,69	2,66	2,70
0,4	7,06	7,07	7,35	7,08	3,17	3,21	3,26	3,20
0,5	7,40	7,37	7,69	7,40	3,37	3,40	3,47	3,37

*: Ref. 21

Çizelge 6.38. Ni için [100] yönünde frekans değerleri (10^{12}s^{-1})

q	V_L				V_T			
	Deneysel	CGW	CGW+SJ	GTF	Deneysel	CGW	CGW+SJ	GTF
0,1	1,71	1,48	1,38	1,43	—	1,10	1,11	1,09
0,2	3,12	2,91	2,73	2,80	2,03	2,16	2,17	2,13
0,3	4,42	4,22	4,04	4,09	2,99	3,13	3,15	3,10
0,4	5,58	5,39	5,26	5,24	3,83	3,99	3,99	3,96
0,5	6,54	6,39	6,36	6,23	4,49	4,72	4,69	4,70
0,6	7,34	7,19	7,33	7,05	5,12	5,30	5,24	5,29
0,7	7,94	7,80	8,11	7,69	5,67	5,74	5,64	5,74
0,8	8,34	8,22	8,70	8,14	6,01	6,04	5,91	6,06
0,9	8,56	8,47	9,06	8,41	6,23	6,21	6,06	6,24
1,0	8,55	8,55	9,18	8,50	6,27	6,27	6,11	6,31

*: Ref. 55

Çizelge 6.39. Ni için [110] yönünde frekans değerleri (10^{12}s^{-1})

q	V_L				V_{T1}			
	Deneysel	CGW	CGW+SJ	GTF	Deneysel	CGW	CGW+SJ	GTF
0,1	2,34	2,38	2,39	2,38	—	0,99	0,66	1,04
0,2	4,44	4,50	4,55	4,49	1,96	1,94	1,44	2,02
0,3	6,08	6,14	6,26	6,13	2,81	2,83	2,35	2,91
0,4	7,25	7,19	7,39	7,17	3,62	3,64	3,32	3,69
0,5	7,63	7,63	7,92	7,62	4,36	4,36	4,24	4,39
0,6	7,68	7,58	7,90	7,57	4,98	4,99	5,01	4,99
0,7	7,39	7,21	7,48	7,22	5,59	5,52	5,56	5,52
0,8	6,85	6,76	6,86	6,78	5,97	5,92	5,90	5,94
0,9	6,54	6,40	6,32	6,43	6,26	6,18	6,06	6,21
1,0	6,27	6,27	6,11	6,31	—	6,27	6,11	6,31

q	V_{T2}			
	Deneysel	CGW	CGW+SJ	GTF
0,1	1,28	1,55	1,57	1,53
0,2	2,76	2,98	3,04	2,95
0,3	4,14	4,22	4,35	4,19
0,4	5,50	5,27	5,48	5,23
0,5	6,15	6,10	6,46	6,10
0,6	6,85	6,84	7,31	6,85
0,7	7,67	7,50	8,05	7,49
0,8	8,13	8,03	8,65	8,02
0,9	8,52	8,42	9,04	8,37
1,0	—	8,55	9,18	8,50

*: Ref. 55

Çizelge 6.40. Ni için [111] yönünde frekans değerleri (10^{12}s^{-1})

q	V_L				V_T			
	Deneysel	CGW	CGW+SJ	GTF	Deneysel	CGW	CGW+SJ	GTF
0,1	3,05	3,02	3,08	3,00	1,33	1,45	1,28	1,47
0,2	5,60	5,60	5,75	5,58	2,47	2,69	2,47	2,71
0,3	7,44	7,47	7,73	7,46	3,37	3,58	3,46	3,58
0,4	8,53	8,54	8,90	8,55	4,02	4,08	4,13	4,07
0,5	8,88	8,88	9,28	8,91	4,24	4,24	4,36	4,21

*: Ref. 55

Çizelge 6.41. Sr için [100] yönünde frekans değerleri (10^{12}s^{-1})

q	ν_L				ν_T			
	Deneysel	CGW	CGW+SJ	GTF	Deneysel	CGW	CGW+SJ	GTF
0,1	0,48	0,44	0,44	0,43	0,38	0,29	0,29	0,32
0,2	0,83	0,88	0,88	0,86	0,64	0,59	0,59	0,64
0,3	1,27	1,31	1,31	1,29	1,00	0,89	0,90	0,96
0,4	1,71	1,72	1,72	1,71	1,28	1,20	1,21	1,26
0,5	2,08	2,10	2,11	2,11	1,56	1,51	1,51	1,55
0,6	2,54	2,44	2,45	2,47	1,85	1,79	1,79	1,81
0,7	2,83	2,72	2,74	2,77	2,09	2,03	2,04	2,03
0,8	3,08	2,94	2,96	3,01	2,24	2,22	2,22	2,19
0,9	3,10	3,07	3,10	3,15	2,30	2,34	2,34	2,30
1,0	3,20	3,11	3,15	3,20	2,33	2,38	2,38	2,33

*: Ref. 27

Çizelge 6.42. Sr için [110] yönünde frekans değerleri (10^{12}s^{-1})

q	ν_L				ν_{T1}			
	Deneysel	CGW	CGW+SJ	GTF	Deneysel	CGW	CGW+SJ	GTF
0,1	0,76	0,67	0,67	0,68	0,25	0,33	0,32	0,24
0,2	1,37	1,30	1,31	1,33	0,50	0,66	0,64	0,51
0,3	1,98	1,87	1,88	1,90	0,86	0,97	0,96	0,84
0,4	2,34	2,32	2,34	2,36	1,18	1,28	1,27	1,19
0,5	2,66	2,63	2,65	2,66	1,82	1,57	1,57	1,53
0,6	2,71	2,77	2,79	2,79	—	1,83	1,83	1,83
0,7	2,66	2,74	2,76	2,74	2,04	2,06	2,06	2,06
0,8	2,53	2,61	2,62	2,58	2,22	2,23	2,23	2,22
0,9	2,40	2,45	2,45	2,41	2,28	2,34	2,34	2,30
1,0	2,37	2,38	2,38	2,33	2,37	2,38	2,38	2,33

q	ν_{T2}			
	Deneysel	CGW	CGW+SJ	GTF
0,1	0,50	0,41	0,42	0,45
0,2	1,00	0,84	0,85	0,91
0,3	1,45	1,29	1,31	1,35
0,4	1,84	1,75	1,76	1,77
0,5	2,30	2,16	2,19	2,17
0,6	2,59	2,52	2,54	2,52
0,7	2,88	2,79	2,82	2,81
0,8	3,05	2,98	3,01	3,02
0,9	3,27	3,08	3,11	3,16
1,0	3,20	3,11	3,15	3,20

*: Ref. 27

Çizelge 6.43. Sr için [111] yönünde frekans değerleri (10^{12}s^{-1})

q	ν_L				ν_T			
	Deneysel	CGW	CGW+SJ	GTF	Deneysel	CGW	CGW+SJ	GTF
0,1	1,08	0,84	0,85	0,88	0,50	0,43	0,43	0,39
0,2	1,86	1,65	1,66	1,70	0,87	0,82	0,82	0,78
0,3	2,48	2,36	2,38	2,38	1,17	1,14	1,14	1,13
0,4	2,90	2,86	2,88	2,84	1,36	1,34	1,35	1,37
0,5	3,04	3,04	3,06	3,00	1,46	1,41	1,42	1,46

*: Ref. 27

Çizelge 6.44. $Ta_{77}W_{23}$ için [100] yönünde frekans değerleri ($10^{12}s^{-1}$)

q	v_L				v_T			
	Deneysel*	CGW	CGW+SJ	GTF	Deneysel*	CGW	CGW+SJ	GTF
0,1	—	1,31	1,31	1,31	—	0,74	0,74	0,74
0,2	2,57	2,53	2,54	2,53	—	1,47	1,48	1,47
0,3	3,64	3,59	3,61	3,59	2,26	2,20	2,24	2,20
0,4	4,44	4,43	4,48	4,43	—	2,92	3,00	2,92
0,5	4,80	5,02	5,12	5,02	—	3,60	3,74	3,60
0,6	—	5,37	5,53	5,37	4,22	4,21	4,42	4,21
0,7	—	5,51	5,75	5,51	—	4,73	5,01	4,73
0,8	—	5,53	5,83	5,53	—	5,13	5,46	5,13
0,9	—	5,49	5,84	5,49	—	5,38	5,74	5,38
1,0	5,46	5,46	5,84	5,46	5,46	5,46	5,84	5,46

*: Ref. 45

Çizelge 6.45. $Ta_{77}W_{23}$ için [110] yönünde frekans değerleri ($10^{12}s^{-1}$)

q	v_L				v_{T1}			
	Deneysel*	CGW	CGW+SJ	GTF	Deneysel*	CGW	CGW+SJ	GTF
0,1	1,86	1,88	1,87	1,88	—	0,90	0,91	0,90
0,2	3,28	3,43	3,41	3,43	—	1,78	1,78	1,78
0,3	4,44	4,48	4,41	4,48	—	2,55	2,55	2,55
0,4	4,97	5,02	4,89	5,02	—	3,09	3,09	3,09
0,5	5,11	5,17	5,02	5,17	3,28	3,28	3,28	3,28

q	v_{T2}			
	Deneysel*	CGW	CGW+SJ	GTF
0,1	1,37	1,05	1,09	1,05
0,2	1,91	2,15	2,37	2,15
0,3	3,15	3,19	3,70	3,19
0,4	4,00	3,96	4,73	3,96
0,5	4,53	4,24	5,12	4,24

*: Ref. 45

Çizelge 6.46. $Ta_{77}W_{23}$ için [111] yönünde frekans değerleri ($10^{12}s^{-1}$)

q	v_L				v_T			
	Deneysel*	CGW	CGW+SJ	GTF	Deneysel*	CGW	CGW+SJ	GTF
0,1	2,22	2,30	2,31	2,30	1,02	1,16	1,19	1,16
0,2	3,82	4,07	4,14	4,07	2,13	2,28	2,44	2,28
0,3	—	4,95	5,17	4,95	3,20	3,26	3,63	3,26
0,4	—	4,94	5,36	4,94	3,91	3,98	4,55	3,98
0,5	4,41	4,41	5,00	4,41	4,41	4,41	5,00	4,41
0,6	3,73	4,04	4,65	4,61	5,06	4,61	5,07	4,61
0,7	—	4,27	4,74	4,27	—	4,78	5,07	4,78
0,8	—	4,84	5,21	4,84	—	5,05	5,29	5,05
0,9	—	5,30	5,66	5,30	—	5,34	5,66	5,34
1,0	5,46	5,46	5,84	5,46	5,46	5,46	5,84	5,46

*: Ref. 45

Çizelge 6.47. $Ta_{50}W_{50}$ için [100] yönünde frekans değerleri ($10^{12}s^{-1}$)

q	v_L				v_T			
	Deneysel	CGW	CGW+SJ	GTF	Deneysel	CGW	CGW+SJ	GTF
0,1	1,46	1,38	1,38	1,38	—	0,69	0,69	0,69
0,2	2,80	2,68	2,68	2,68	1,37	1,40	1,42	1,40
0,3	4,08	3,80	3,83	3,80	2,15	2,14	2,19	2,14
0,4	5,02	4,69	4,76	4,69	3,11	2,90	3,01	2,90
0,5	5,46	5,33	5,45	5,33	3,77	3,66	3,83	3,66
0,6	5,71	5,71	5,91	5,71	4,44	4,36	4,62	4,36
0,7	5,88	5,89	6,17	5,89	5,06	4,98	5,31	4,98
0,8	—	5,91	6,28	5,91	5,46	5,46	5,85	5,46
0,9	—	5,88	6,31	5,88	5,71	5,76	6,19	5,76
1,0	5,86	5,86	6,31	5,86	5,86	5,86	6,31	5,86

*: Ref. 45

Çizelge 6.48. $Ta_{50}W_{50}$ için [110] yönünde frekans değerleri ($10^{12}s^{-1}$)

q	v_L				v_{T1}			
	Deneysel	CGW	CGW+SJ	GTF	Deneysel	CGW	CGW+SJ	GTF
0,1	1,91	1,92	1,91	1,92	1,11	0,98	0,98	0,98
0,2	4,08	3,59	3,55	3,59	2,22	1,91	1,91	1,91
0,3	—	4,81	4,71	4,81	—	2,69	2,69	2,69
0,4	5,77	5,54	5,38	5,54	—	3,23	3,23	3,23
0,5	5,86	5,77	5,59	5,77	3,42	3,42	3,42	3,42

q	v_{T2}			
	Deneysel	CGW	CGW+SJ	GTF
0,1	1,11	1,00	1,05	1,00
0,2	2,22	2,11	2,39	2,11
0,3	3,33	3,22	3,86	3,22
0,4	4,35	4,06	5,02	4,06
0,5	5,24	4,37	5,46	4,37

*: Ref. 45

Çizelge 6.49. $Ta_{50}W_{50}$ için [111] yönünde frekans değerleri ($10^{12}s^{-1}$)

q	v_L				v_T			
	Deneysel	CGW	CGW+SJ	GTF	Deneysel	CGW	CGW+SJ	GTF
0,1	2,46	2,33	2,34	2,33	1,33	1,22	1,25	1,22
0,2	4,53	4,21	4,30	4,21	2,66	2,47	2,65	2,47
0,3	5,55	5,33	5,59	5,33	3,88	3,65	4,08	3,65
0,4	5,64	5,57	6,05	5,57	4,62	4,58	5,21	4,58
0,5	5,12	5,12	5,78	5,12	5,12	5,12	5,78	5,12
0,6	4,48	4,47	5,19	4,47	5,11	5,30	5,82	5,30
0,7	4,22	4,33	4,93	4,33	5,44	5,35	5,68	5,35
0,8	4,88	4,89	5,35	4,89	5,51	5,51	5,79	5,51
0,9	5,42	5,57	6,01	5,57	—	5,75	6,13	5,75
1,0	5,86	5,86	6,31	5,86	5,86	5,86	6,31	5,86

*: Ref. 45

Çizelge 6.50. $Ta_{33}W_{67}$ için [100] yönünde frekans değerleri ($10^{12}s^{-1}$)

q	v_L				v_T			
	Deneysel*	CGW	CGW+SJ	GTF	Deneysel*	CGW	CGW+SJ	GTF
0,1	1,56	1,48	1,49	1,48	1,07	0,78	0,78	0,78
0,2	3,23	2,87	2,88	2,87	1,56	1,57	1,58	1,57
0,3	4,55	4,07	4,09	4,07	2,33	2,37	2,41	2,37
0,4	5,41	5,02	5,07	5,02	3,26	3,18	3,26	3,18
0,5	5,90	5,69	5,79	5,69	—	3,96	4,09	3,96
0,6	—	6,08	6,23	6,08	4,56	4,68	4,87	4,68
0,7	6,46	6,24	6,46	6,24	5,16	5,29	5,55	5,29
0,8	—	6,25	6,53	6,25	5,63	5,77	6,08	5,77
0,9	—	6,20	6,53	6,20	—	6,07	6,41	6,07
1,0	6,17	6,17	6,52	6,17	6,17	6,17	6,52	6,17

*: Ref. 45

Çizelge 6.51. $Ta_{33}W_{67}$ için [110] yönünde frekans değerleri ($10^{12}s^{-1}$)

q	v_L				v_{T1}			
	Deneysel*	CGW	CGW+SJ	GTF	Deneysel*	CGW	CGW+SJ	GTF
0,1	—	2,08	2,08	2,08	—	1,12	1,12	1,12
0,2	4,22	3,99	3,97	3,99	—	2,22	2,22	2,22
0,3	5,45	5,54	5,47	5,54	3,38	3,21	3,21	3,21
0,4	—	6,55	6,45	6,55	—	3,91	3,91	3,91
0,5	6,36	6,90	6,79	6,90	4,89	4,17	4,17	4,17

q	v_{T2}			
	Deneysel*	CGW	CGW+SJ	GTF
0,1	—	1,06	1,10	1,06
0,2	—	1,90	2,15	1,90
0,3	—	2,41	3,08	2,41
0,4	—	2,62	3,73	2,62
0,5	4,18	2,66	3,96	2,66

*: Ref. 45

Çizelge 6.52. $Ta_{33}W_{67}$ için [111] yönünde frekans değerleri ($10^{12}s^{-1}$)

q	v_L				v_T			
	Deneysel*	CGW	CGW+SJ	GTF	Deneysel*	CGW	CGW+SJ	GTF
0,1	2,49	2,50	2,51	2,50	—	1,35	1,37	1,35
0,2	5,02	4,52	4,59	4,52	—	2,64	2,78	2,64
0,3	—	5,70	5,90	5,70	—	3,77	4,11	3,77
0,4	—	5,89	6,26	5,89	—	4,66	5,17	4,66
0,5	5,23	5,25	5,78	5,25	5,23	5,25	5,78	5,25
0,6	—	4,34	4,95	4,34	—	5,59	6,00	5,59
0,7	4,65	4,11	4,62	4,11	—	5,80	6,05	5,80
0,8	—	4,87	5,25	4,87	—	5,97	6,19	5,97
0,9	5,79	5,79	6,14	5,79	—	6,11	6,41	6,11
1,0	6,17	6,17	6,52	6,17	6,17	6,17	6,52	6,17

*: Ref. 45

Çizelge 6.53. $\text{Pd}_{0,96}\text{Fe}_{0,04}$ için [100] yönünde frekans değerleri (10^{12}s^{-1})

q	v_L				v_T			
	Deneysel*	CGW	CGW+SJ	GTF	Deneysel*	CGW	CGW+SJ	GTF
0,1	—	1,21	1,04	1,16	—	0,58	0,73	0,66
0,2	2,17	2,37	2,08	2,28	1,32	1,18	1,44	1,31
0,3	—	3,42	3,12	3,31	1,99	1,79	2,10	1,95
0,4	3,98	4,33	4,12	4,23	—	2,40	2,70	2,56
0,5	—	5,07	5,07	5,01	3,17	3,01	3,23	3,12
0,6	5,49	5,64	5,93	5,65	—	3,58	3,67	3,62
0,7	—	6,05	6,65	6,13	4,13	4,07	4,01	4,04
0,8	6,42	6,32	7,21	6,46	—	4,44	4,26	4,36
0,9	—	6,46	7,55	6,65	—	4,68	4,41	4,55
1,0	6,72	6,51	7,67	6,71	4,62	4,76	4,46	4,62

*: Ref. 35

Çizelge 6.54. $\text{Pd}_{0,96}\text{Fe}_{0,04}$ için [110] yönünde frekans değerleri (10^{12}s^{-1})

q	v_L				v_{T1}			
	Deneysel*	CGW	CGW+SJ	GTF	Deneysel*	CGW	CGW+SJ	GTF
0,1	—	1,69	1,75	1,71	—	0,84	0,38	0,65
0,2	3,27	3,24	3,40	3,29	1,22	1,59	0,86	1,28
0,3	4,66	4,54	4,83	4,61	—	2,20	1,47	1,87
0,4	5,65	5,50	5,93	5,57	2,29	2,66	2,15	2,42
0,5	6,09	6,04	6,58	6,10	2,94	3,06	2,82	2,95
0,6	—	6,16	6,71	6,19	—	3,46	3,42	3,45
0,7	5,52	5,91	6,34	5,90	—	3,91	3,89	3,90
0,8	—	5,44	5,60	5,37	—	4,33	4,22	4,28
0,9	4,73	4,96	4,82	4,84	—	4,65	4,40	4,53
1,0	4,62	4,76	4,46	4,62	4,62	4,76	4,46	4,62

q	v_{T2}			
	Deneysel*	CGW	CGW+SJ	GTF
0,1	1,02	0,83	1,04	0,94
0,2	1,85	1,72	2,11	1,87
0,3	—	2,67	3,20	2,80
0,4	—	3,64	4,27	3,71
0,5	4,47	4,55	5,27	4,55
0,6	—	5,31	6,14	5,29
0,7	5,98	5,88	6,82	5,90
0,8	—	6,25	7,30	6,35
0,9	—	6,45	7,58	6,63
1,0	—	6,51	7,67	6,72

*: Ref. 35

Çizelge 6.55. $\text{Pd}_{0,96}\text{Fe}_{0,04}$ için [111] yönünde frekans değerleri (10^{12}s^{-1})

q	v_L				v_T			
	Deneysel*	CGW	CGW+SJ	GTF	Deneysel*	CGW	CGW+SJ	GTF
0,1	—	2,06	2,25	2,14	—	1,01	0,83	0,92
0,2	—	3,95	4,35	4,05	1,63	1,90	1,69	1,80
0,3	5,42	5,50	6,10	5,53	—	2,58	2,51	2,54
0,4	—	6,52	7,29	6,46	—	2,99	3,11	3,05
0,5	6,78	6,88	7,71	6,78	3,23	3,12	3,33	3,23

*: Ref. 35

Çizelge 6.56. $\text{Pd}_{0,90}\text{Fe}_{0,10}$ için [100] yönünde frekans değerleri (10^{12}s^{-1})

q	v_L				v_T			
	Deneysel*	CGW	CGW+SJ	GTF	Deneysel*	CGW	CGW+SJ	GTF
0,1	—	1,08	—	1,15	—	0,75	—	0,70
0,2	2,29	2,13	—	2,26	1,38	1,48	—	1,39
0,3	—	3,14	—	3,30	2,09	2,17	—	2,06
0,4	—	4,08	—	4,24	—	2,79	—	2,69
0,5	4,95	4,93	—	5,05	—	3,34	—	3,26
0,6	—	5,66	—	5,72	—	3,80	—	3,77
0,7	6,16	6,25	—	6,24	4,27	4,16	—	4,18
0,8	—	6,70	—	6,61	—	4,42	—	4,49
0,9	—	6,97	—	6,84	—	4,58	—	4,68
1,0	6,91	7,06	—	6,91	4,74	4,64	—	4,74

*: Ref. 35

Çizelge 6.57. $\text{Pd}_{0,90}\text{Fe}_{0,10}$ için [110] yönünde frekans değerleri (10^{12}s^{-1})

q	v_L				v_{T1}			
	Deneysel*	CGW	CGW+SJ	GTF	Deneysel*	CGW	CGW+SJ	GTF
0,1	—	1,80	—	1,78	0,63	0,40	—	0,61
0,2	3,36	3,43	—	3,39	1,18	0,89	—	1,21
0,3	4,73	4,76	—	4,71	1,73	1,49	—	1,79
0,4	—	5,68	—	5,63	—	2,16	—	2,37
0,5	6,11	6,16	—	6,11	2,91	2,84	—	2,93
0,6	—	6,19	—	6,17	—	3,46	—	3,48
0,7	—	5,86	—	5,87	—	3,97	—	3,97
0,8	5,27	5,34	—	5,39	—	4,34	—	4,38
0,9	—	4,84	—	4,93	—	4,56	—	4,65
1,0	4,74	4,64	—	4,74	4,74	4,64	—	4,74

q	v_{T2}			
	Deneysel*	CGW	CGW+SJ	GTF
0,1	—	1,07	—	1,00
0,2	1,98	2,12	—	2,02
0,3	—	3,15	—	3,06
0,4	3,79	4,11	—	4,07
0,5	—	4,98	—	4,98
0,6	—	5,72	—	5,73
0,7	—	6,30	—	6,29
0,8	—	6,72	—	6,65
0,9	—	6,97	—	6,85
1,0	6,91	7,06	—	6,91

*: Ref. 35

Çizelge 6.58. $\text{Pd}_{0,90}\text{Fe}_{0,10}$ için [111] yönünde frekans değerleri (10^{12}s^{-1})

q	v_L				v_T			
	Deneysel	CGW	CGW+SJ	GTF	Deneysel	CGW	CGW+SJ	GTF
0,1	—	2,29	—	2,24	—	0,85	—	0,93
0,2	—	4,30	—	4,23	1,71	1,72	—	1,80
0,3	—	5,81	—	5,79	2,35	2,52	—	2,54
0,4	6,85	6,72	—	6,77	—	3,10	—	3,05
0,5	7,09	7,03	—	7,16	3,23	3,31	—	3,23

*: Ref. 35

Çizelge 6.59. $\text{Pd}_{0,28}\text{Fe}_{0,72}$ için [100] yönünde frekans değerleri (10^{12}s^{-1})

q	v_L				v_T			
	Deneysel*	CGW	CGW+SJ	GTF	Deneysel*	CGW	CGW+SJ	GTF
0,1	—	1,11	—	1,05	—	0,77	—	0,80
0,2	2,44	2,20	—	2,10	—	1,53	—	1,58
0,3	3,38	3,27	—	3,14	2,35	2,26	—	2,32
0,4	4,30	4,28	—	4,16	—	2,94	—	3,01
0,5	—	5,22	—	5,13	3,70	3,57	—	3,62
0,6	5,92	6,05	—	6,00	—	4,12	—	4,14
0,7	—	6,74	—	6,74	4,75	4,57	—	4,56
0,8	—	7,25	—	7,30	—	4,90	—	4,86
0,9	—	7,58	—	7,65	—	5,11	—	5,05
1,0	7,77	7,69	—	7,77	5,11	5,18	—	5,11

*: Ref. 46

Çizelge 6.60. $\text{Pd}_{0,28}\text{Fe}_{0,72}$ için [110] yönünde frekans değerleri (10^{12}s^{-1})

q	v_L				v_{T1}			
	Deneysel*	CGW	CGW+SJ	GTF	Deneysel*	CGW	CGW+SJ	GTF
0,1	1,61	1,83	—	1,84	—	0,46	—	0,27
0,2	3,40	3,48	—	3,51	0,86	1,00	—	0,75
0,3	—	4,81	—	4,85	1,51	1,66	—	1,45
0,4	—	5,73	—	5,76	2,45	2,39	—	2,26
0,5	6,34	6,20	—	6,22	3,08	3,14	—	3,08
0,6	—	6,26	—	6,28	—	3,82	—	3,82
0,7	—	6,03	—	6,02	4,32	4,40	—	4,40
0,8	—	5,65	—	5,62	—	4,83	—	4,81
0,9	—	5,31	—	5,26	—	5,09	—	5,04
1,0	5,30	5,18	—	5,11	5,30	5,18	—	5,11

q	v_{T2}			
	Deneysel*	CGW	CGW+SJ	GTF
0,1	1,09	1,09	—	1,13
0,2	2,28	2,14	—	2,20
0,3	—	3,14	—	3,20
0,4	4,25	4,09	—	4,12
0,5	—	4,98	—	4,98
0,6	5,99	5,82	—	5,81
0,7	—	6,56	—	6,57
0,8	—	7,16	—	7,20
0,9	—	7,55	—	7,62
1,0	7,77	7,69	—	7,77

*: Ref. 46

Çizelge 6.61. $\text{Pd}_{0,28}\text{Fe}_{0,72}$ için [111] yönünde frekans değerleri (10^{12}s^{-1})

q	v_L				v_T			
	Deneysel*	CGW	CGW+SJ	GTF	Deneysel*	CGW	CGW+SJ	GTF
0,1	2,31	2,34	—	2,38	—	0,87	—	0,82
0,2	—	4,43	—	4,47	—	1,60	—	1,54
0,3	—	6,05	—	6,06	—	2,11	—	2,09
0,4	—	7,07	—	7,04	—	2,40	—	2,43
0,5	—	7,42	—	7,37	2,55	2,48	—	2,55

*: Ref. 46

Çizelge 6.62. $\text{Co}_{0,92}\text{Fe}_{0,08}$ için [100] yönünde frekans değerleri (10^{12}s^{-1})

q	ν_L				ν_T			
	Deneysel	CGW	CGW+SJ	GTF	Deneysel	CGW	CGW+SJ	GTF
0,1	—	1,65	1,63	1,38	0,94	0,86	0,88	1,05
0,2	3,06	3,20	3,17	2,71	2,00	1,72	1,76	2,06
0,3	—	4,56	4,55	3,95	2,96	2,57	2,61	2,99
0,4	5,42	5,66	5,71	5,05	3,80	3,39	3,43	3,79
0,5	6,25	6,48	6,61	6,00	4,44	4,16	4,18	4,46
0,6	—	7,01	7,26	6,77	4,99	4,85	4,86	4,98
0,7	—	7,30	7,68	7,36	5,28	5,42	5,42	5,36
0,8	—	7,42	7,92	7,78	—	5,86	5,84	5,61
0,9	—	7,44	8,03	8,02	—	6,14	6,10	5,76
1,0	8,10	7,44	8,06	8,10	5,80	6,23	6,19	5,80

*: Ref. 41

Çizelge 6.63. $\text{Co}_{0,92}\text{Fe}_{0,08}$ için [110] yönünde frekans değerleri (10^{12}s^{-1})

q	ν_L				ν_{T1}			
	Deneysel	CGW	CGW+SJ	GTF	Deneysel	CGW	CGW+SJ	GTF
0,1	—	2,24	2,26	2,32	—	1,32	1,28	0,82
0,2	4,27	4,23	4,29	4,38	1,71	2,47	2,41	1,65
0,3	—	5,75	6,91	5,95	2,50	3,34	3,28	2,48
0,4	—	6,71	7,01	6,93	3,24	3,92	3,88	3,27
0,5	7,30	7,12	7,55	7,30	4,00	4,32	4,30	4,01
0,6	—	7,10	7,59	7,19	—	4,70	4,71	4,65
0,7	—	6,84	7,27	6,78	—	5,17	5,17	5,15
0,8	—	6,53	6,79	6,30	—	5,68	5,67	5,52
0,9	—	6,31	6,36	5,94	—	6,08	6,05	5,73
1,0	5,80	6,23	6,19	5,80	5,80	6,23	6,19	5,80

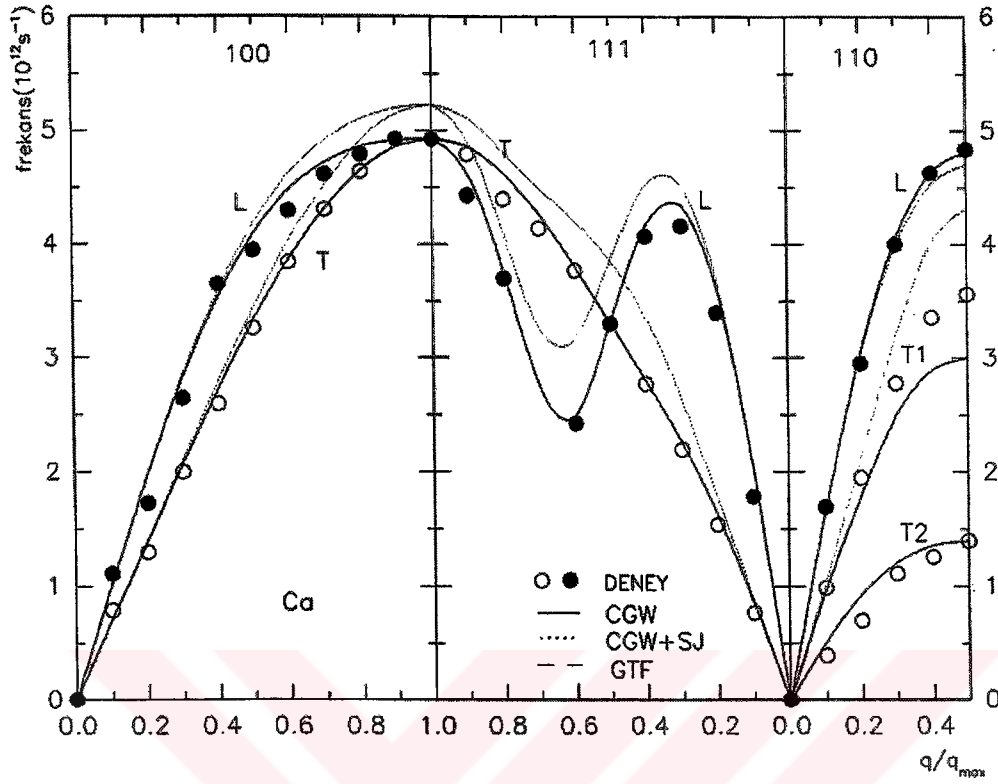
q	ν_{T2}			
	Deneysel	CGW	CGW+SJ	GTF
0,1	1,50	1,21	1,24	1,47
0,2	2,96	2,37	2,45	2,78
0,3	4,25	3,45	3,60	3,82
0,4	5,32	4,41	4,66	4,61
0,5	—	5,25	5,61	5,25
0,6	—	5,98	6,44	5,91
0,7	—	6,58	7,12	6,65
0,8	7,88	7,04	7,63	7,37
0,9	—	7,34	7,95	7,90
1,0	8,10	7,44	8,06	8,10

*: Ref. 41

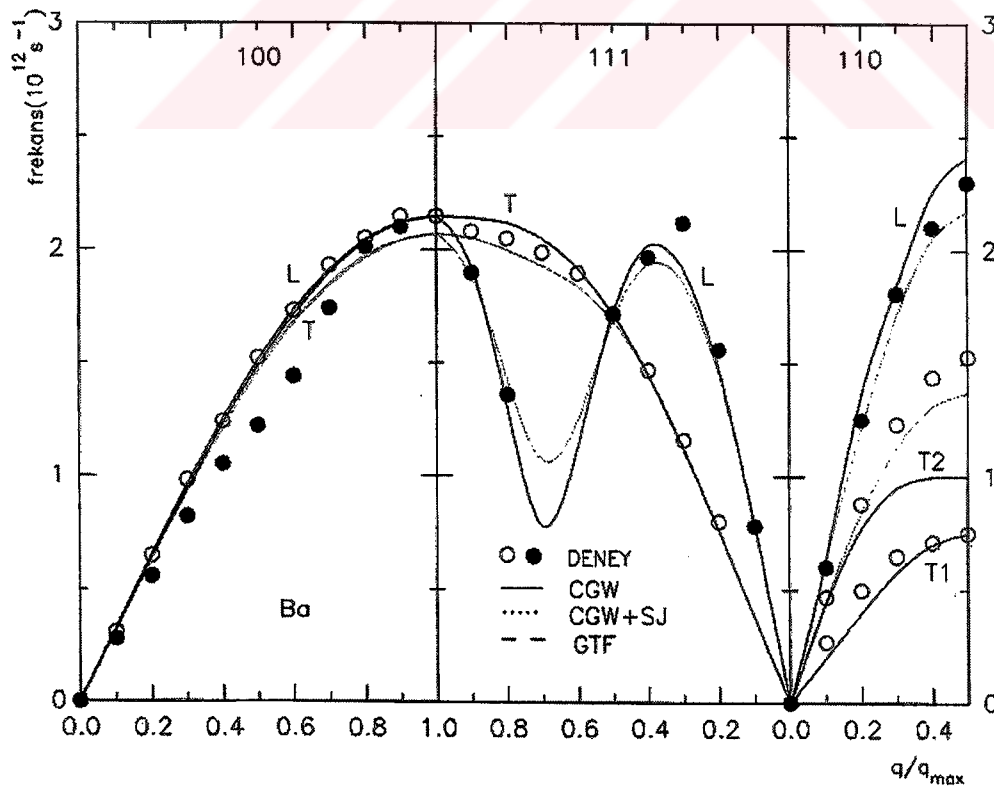
Çizelge 6.64. $\text{Co}_{0,92}\text{Fe}_{0,08}$ için [111] yönünde frekans değerleri (10^{12}s^{-1})

q	ν_L				ν_T			
	Deneysel	CGW	CGW+SJ	GTF	Deneysel	CGW	CGW+SJ	GTF
0,1	3,04	2,71	2,75	2,94	1,31	1,54	1,52	1,31
0,2	—	5,10	5,26	5,38	2,42	2,71	2,69	2,43
0,3	—	6,92	7,28	7,02	3,26	3,35	3,34	3,25
0,4	—	8,04	8,60	7,86	3,72	3,52	3,54	3,72
0,5	8,10	8,42	9,00	8,10	3,87	3,52	3,56	3,87

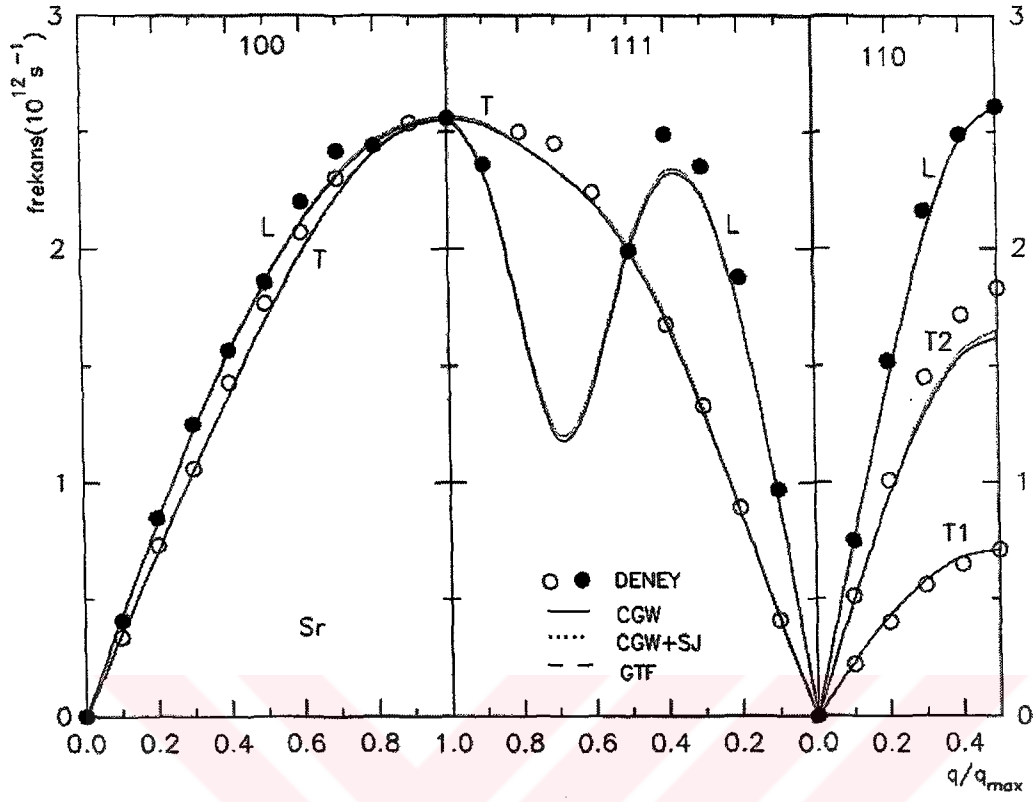
*: Ref. 41



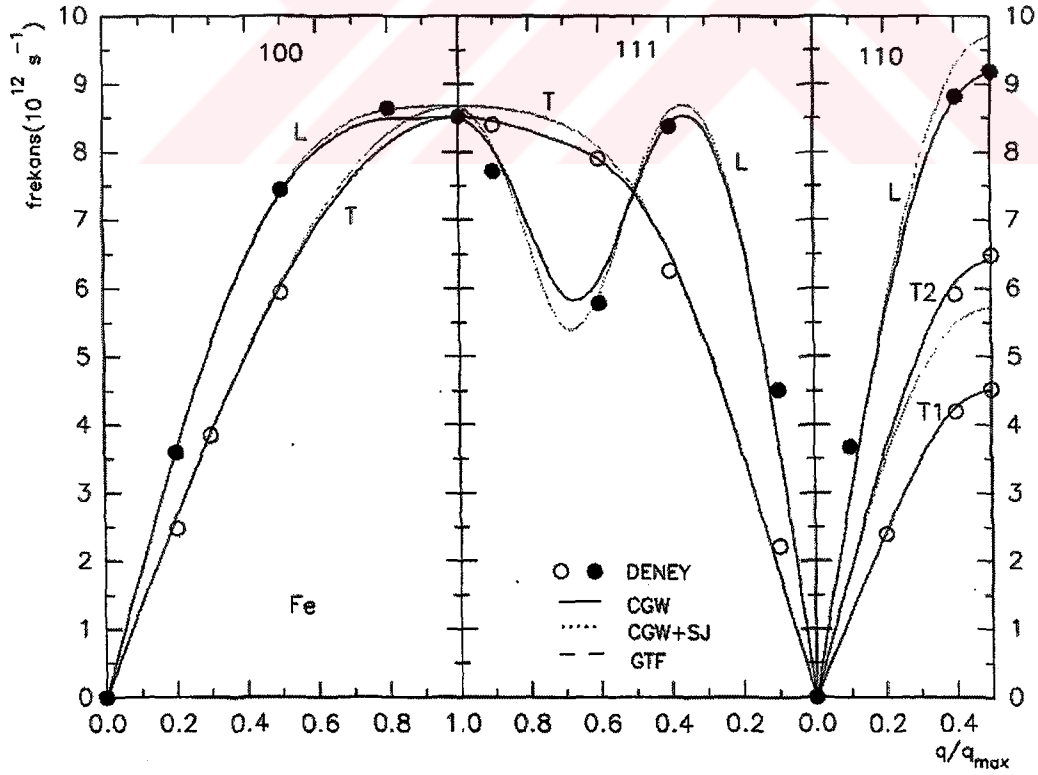
Şekil 6.1: Calsiyum için fonon dispersiyon eğrisi



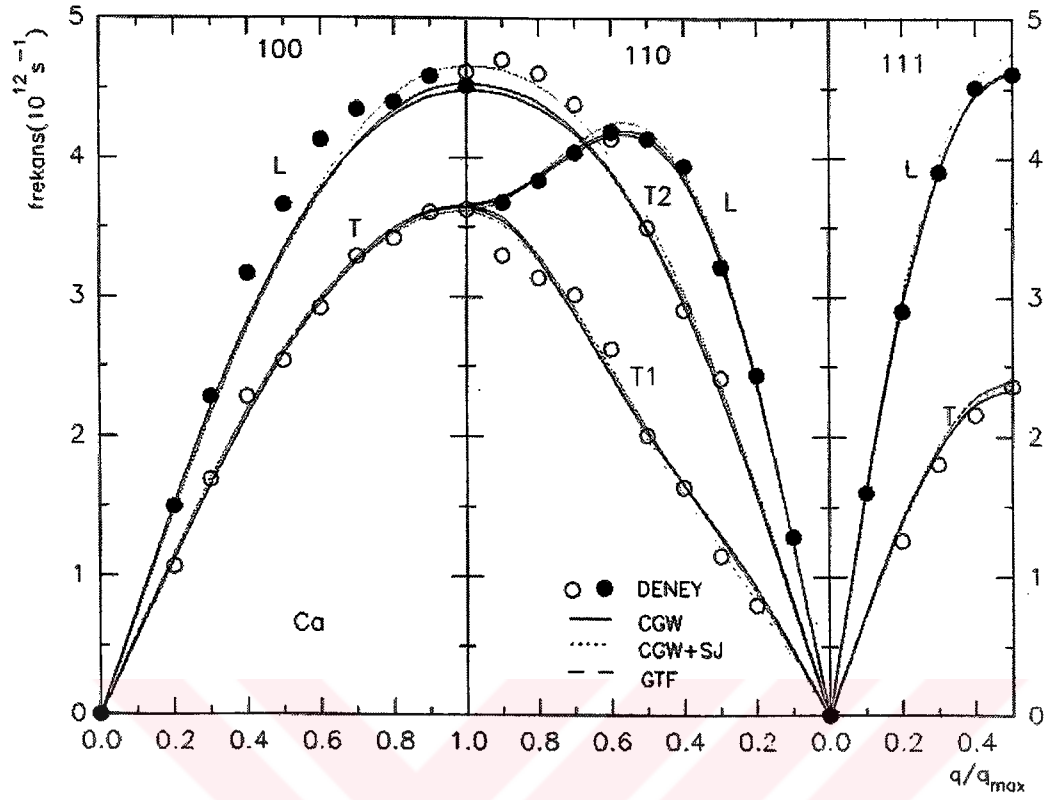
Şekil 6.2: Baryum için fonon dispersiyon eğrisi



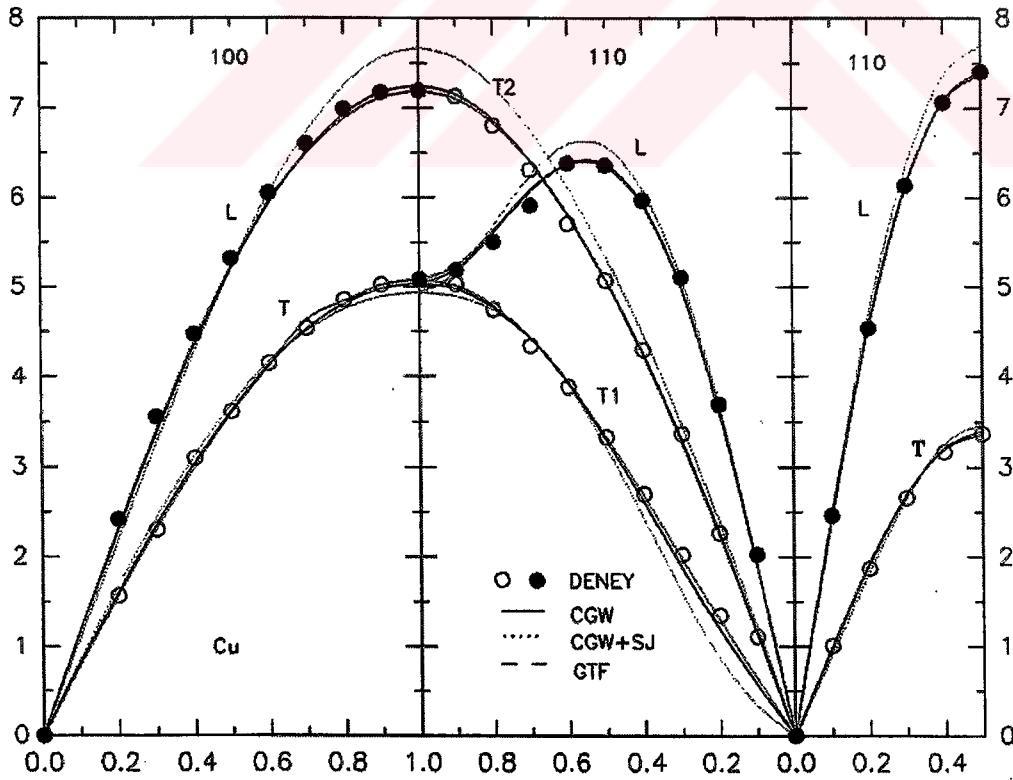
Şekil 6.3: Strontium için fonon dispersiyon eğrisi



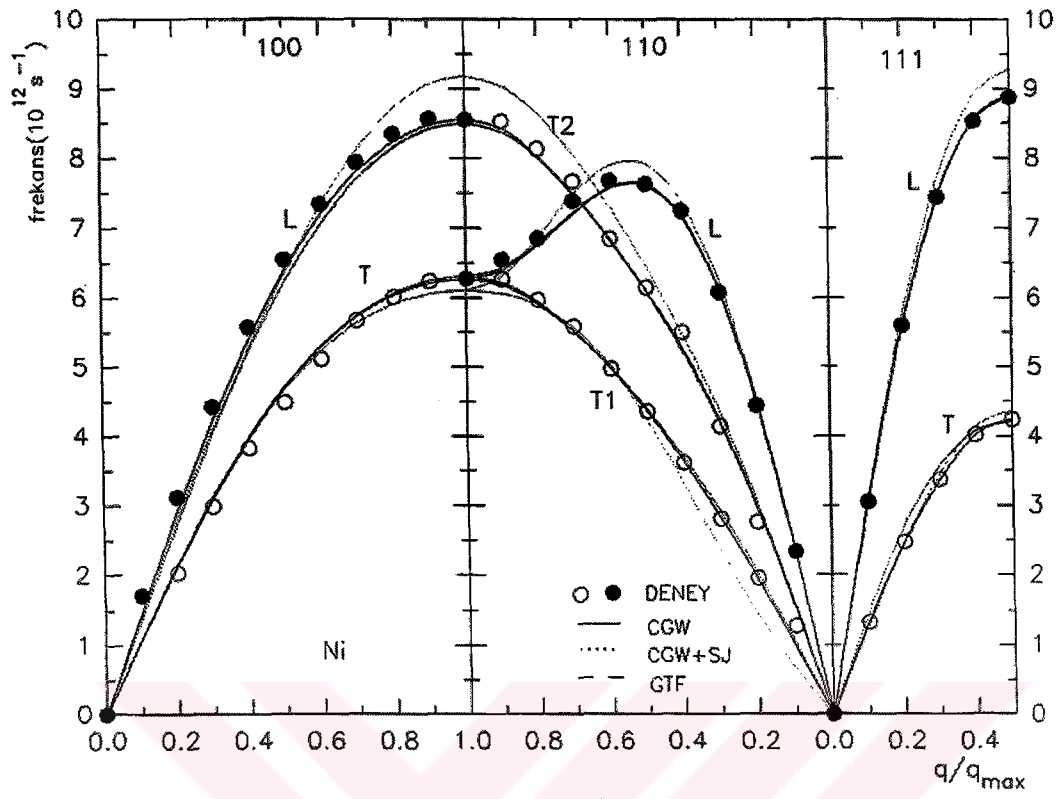
Şekil 6.4: Demir için fonon dispersiyon eğrisi



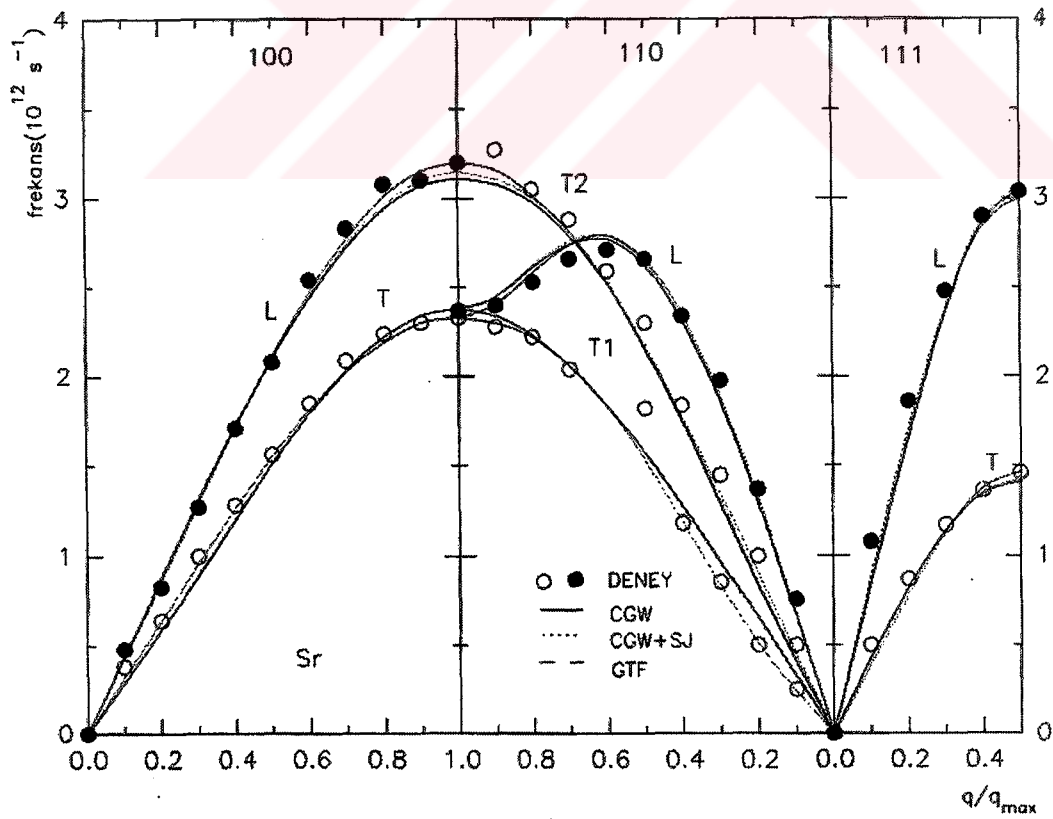
Şekil 6.5: Calsiyum için fonon dispersiyon eğrisi



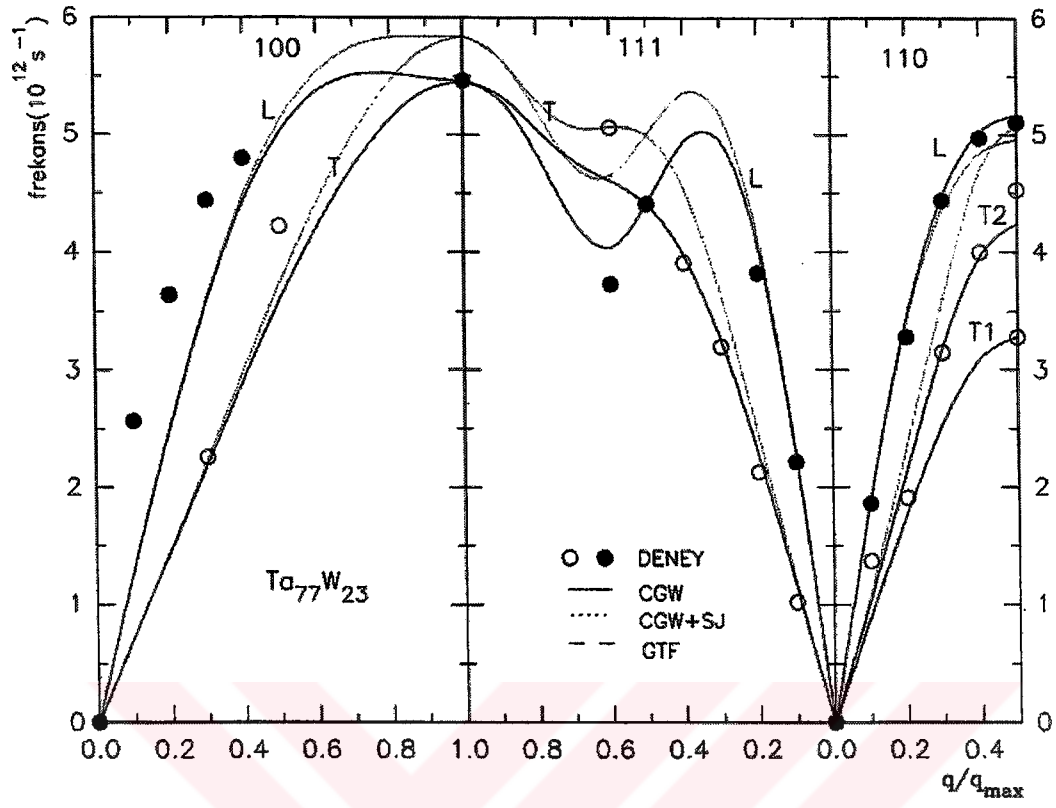
Şekil 6.6: Bakır için fonon dispersiyon eğrisi



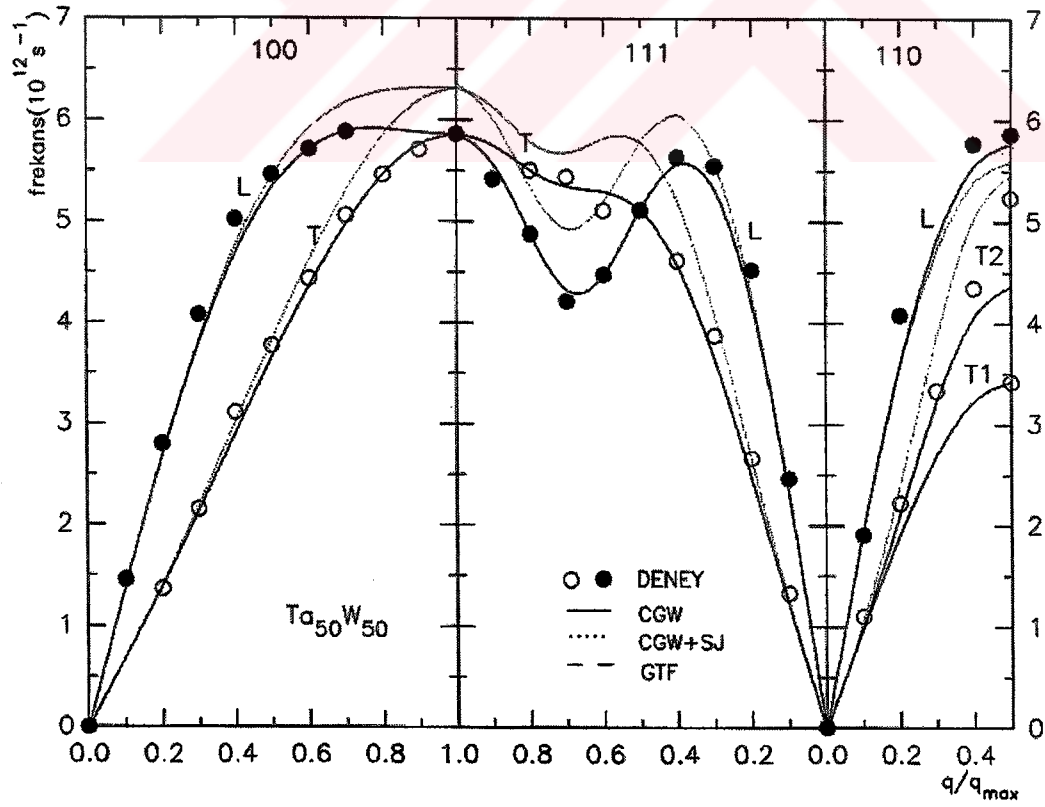
Şekil 6.7: Nikel için fonon dispersiyon eğrisi



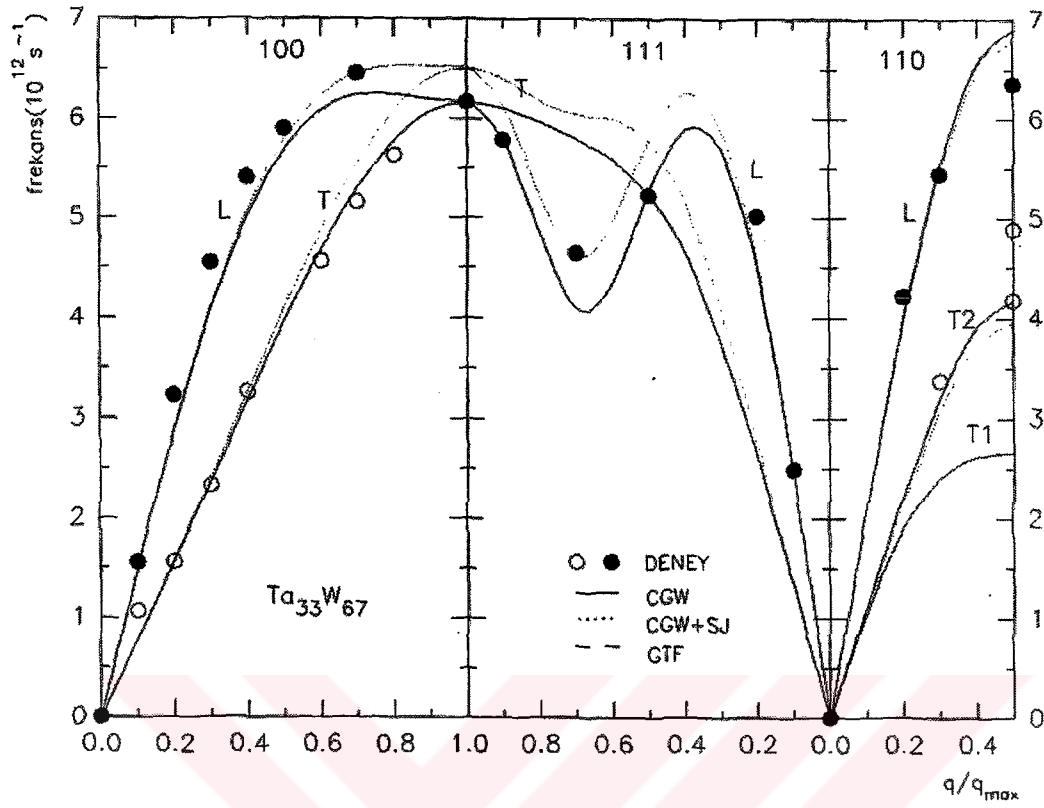
Şekil 6.8: Strontium için fonon dispersiyon eğrisi



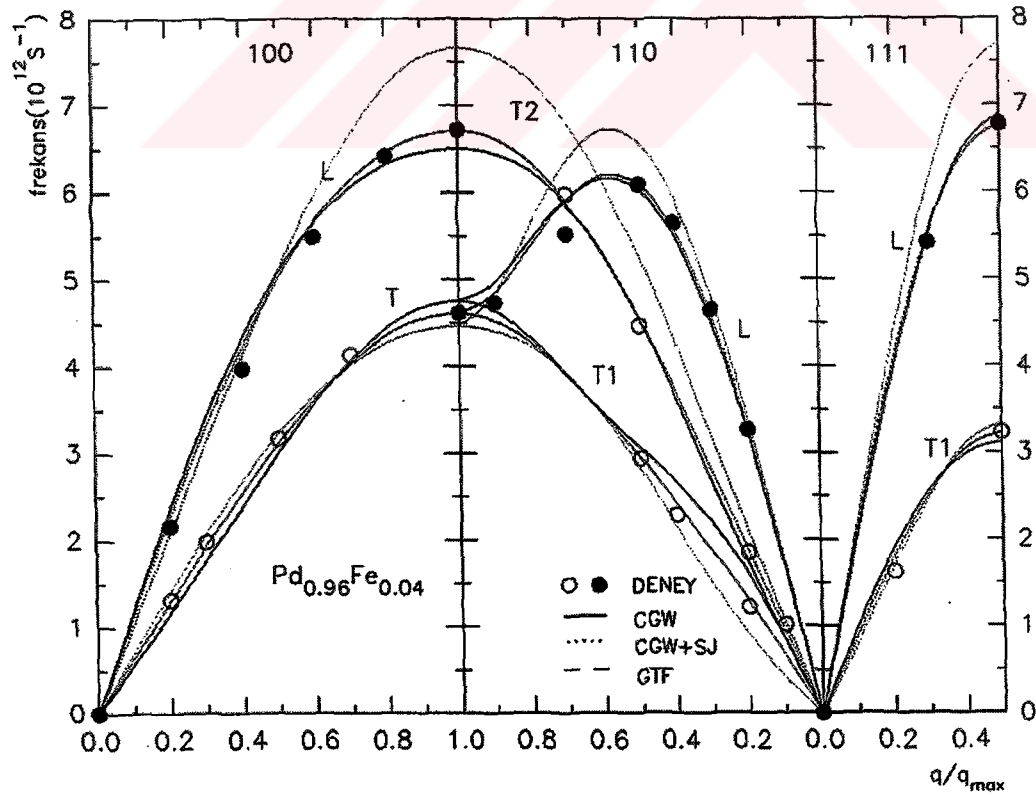
Şekil 6.9: Ta₇₇W₂₃ için fonon dispersiyon eğrisi



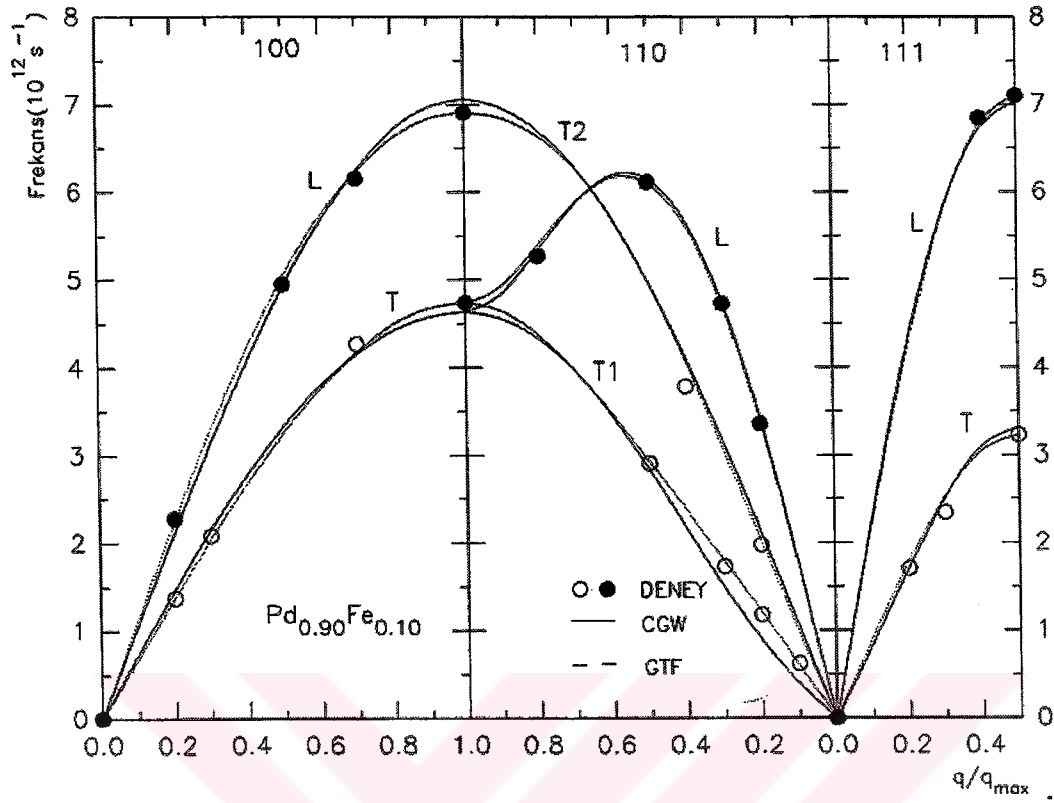
Şekil 6.10: Ta₅₀W₅₀ için fonon dispersiyon eğrisi



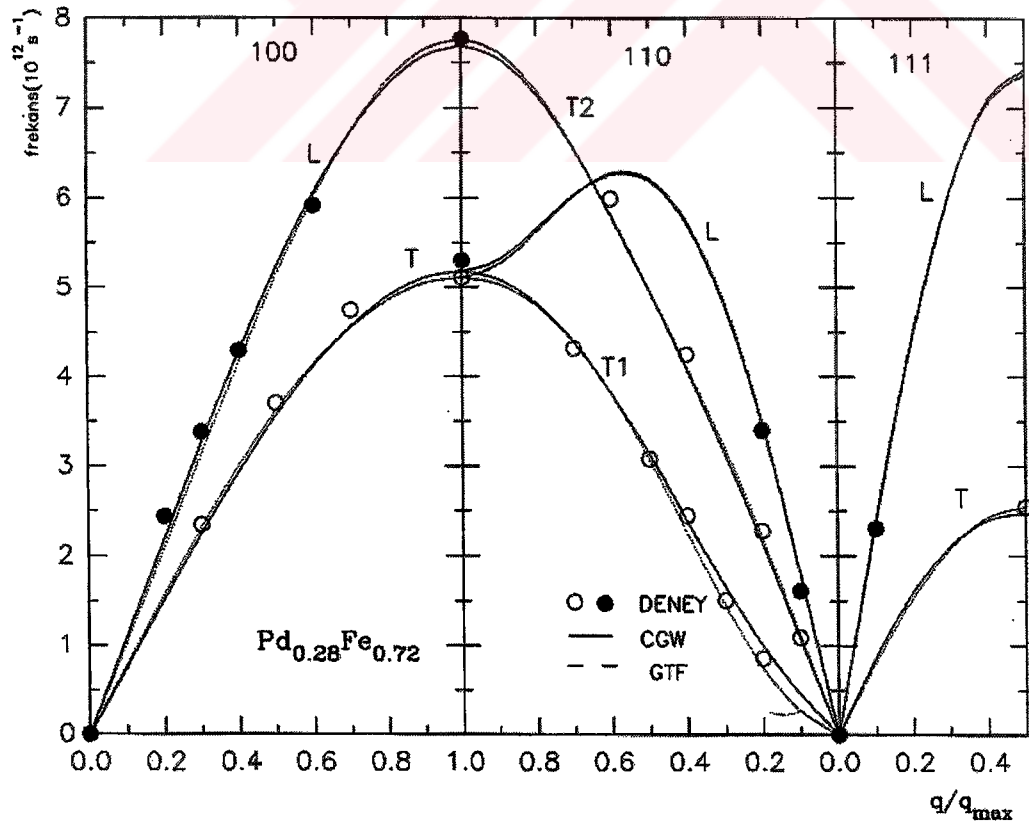
Şekil 6.11: $\text{Ta}_{33}\text{W}_{67}$ için fonon dispersiyon eğrisi



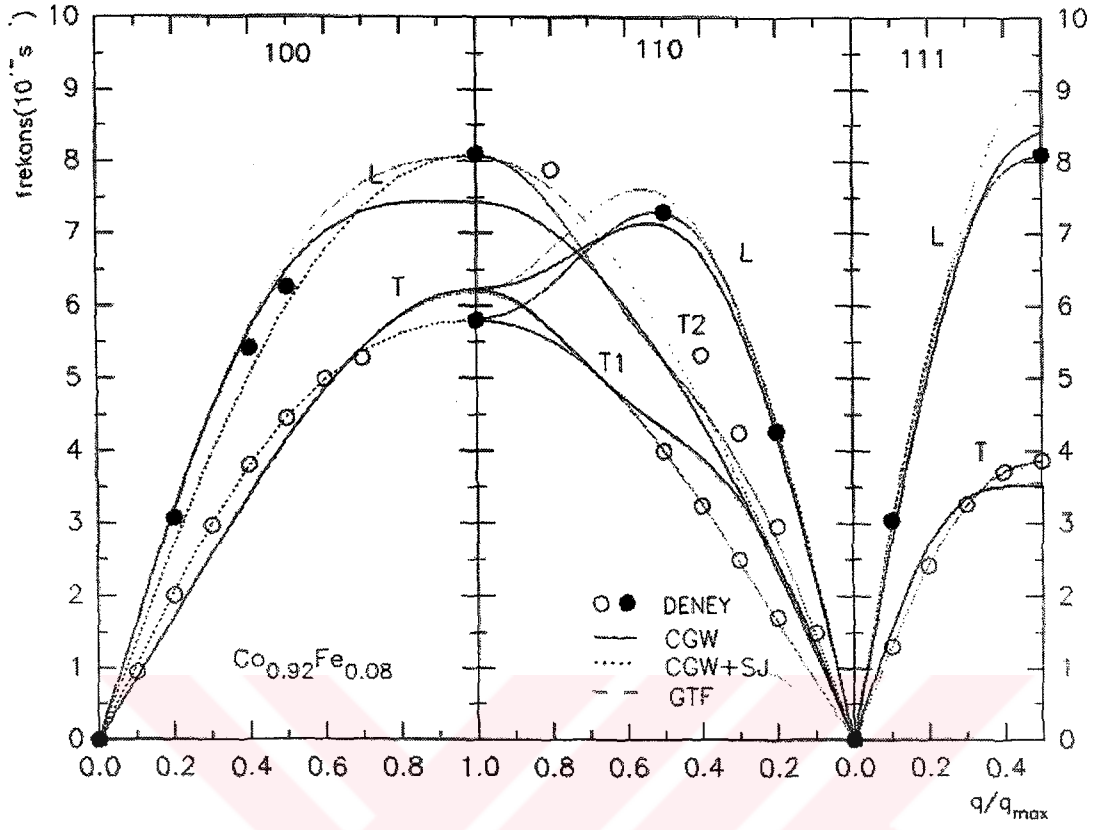
Şekil 6.12: $\text{Pd}_{0.96}\text{Fe}_{0.04}$ için fonon dispersiyon eğrisi



Şekil 6.13: $\text{Pd}_{0.90}\text{Fe}_{0.10}$ için fonon dispersiyon eğrisi



Şekil 6.14: $\text{Pd}_{0.28}\text{Fe}_{0.72}$ için fonon dispersiyon eğrisi



Şekil 6.15: $\text{Co}_{0.92}\text{Fe}_{0.08}$ için fonon dispersiyon eğrisi

7. SONUÇ VE ÖNERİLER

7.1. CGW Modeli ve Sonuçları

İncelediğimiz metal ve alaşımların fonon frekansları, üçüncü komşuluk etkileşmeli CGW modeli kullanarak yapıldı. Etkileşmelerin dördüncü ve daha uzak komşuluklara uzatılması halinde, dinamik matris elemanları çok karmaşık olmakta ve kuvvet sabitlerinin sayısı da çok artmaktadır. Bu hesaplamalar; hem fcc hem de bcc yapılar için incelenmiş olup, ayrıca bazı metalin hem fcc hem de bcc yapısı dikkate alındı. İncelenen metaller için giriş parametleri ve esneklik sabitleri her metal için ayrı ayrı olarak Çizelge 6.1'de verilmiştir.

7.1.1. Fcc metaller

Üçüncü en yakın komşu etkileşmeli CGW modeli kullanarak Ca, Sr, Cu ve Ni elementlerinin kuvvet sabitleri hesaplandı (Çizelge 6.7-10). Hesaplanan bu değerler kullanarak bu elementlerin fonon frekansları bulundu (Çizelge 6.32-43). Ca, Sr, Cu ve Ni'nin fonon frekans eğrileri Şekil 6.5, Şekil 6.6, Şekil 6.7 ve Şekil 6.8'de topluca gösterilmiştir. Bu grafiklerde (•,0) deneysel değerleri temsil etmektedir.

Ca'un CGW modeline göre hesaplanan kuvvet sabitleri ve fonon frekansları Çizelge 6.7 ve Çizelge 6.32, 6.33, 6.34'de verilmiştir. İlgili fonon frekanslarının kullanılmasıyla çizilen fonon dispersiyon eğrileri Şekil 6.5'de verilmiştir.

Hesaplanan frekans değerleri [100] doğrultusunun L dalında ve [110] doğrultularındaki T1 ve T2 dalında $\bar{q}$ 'nın yüksek değerlerinde aykırılık göstermekte olup, diğer tüm dallar deneysel değerlerle mükemmel uyum içindedir.

Sr için hesaplanan kuvvet sabitleri Çizelge 6.9 'da , fonon frekansları ise Çizelge 6.41, 6.42, 6.43 'de verilmiştir. Bu fonon frekanslarının kullanılmasıyla çizilen fonon dispersiyon eğrileri Şekil 6.8'de verilmiştir.

Hesaplanan frekans değerleri [110] doğrultusunda T1 dalında $\bar{q}$ 'nın düşük değerlerinde ve T2 dallarında $\bar{q}$ 'nın yüksek değerlerinde ve [111] doğrultusundaki L dalında $\bar{q}$ 'nın ara değerleri ile bir miktar aykırılık göstermekte olup, diğer tüm dallar, deneysel değerlerle uyum içindedir.

Cu için hesaplanan kuvvet sabitleri Çizelge 6.10'da fonon frekansları Çizelge 6.35, 6.36 ve 6.37'de; fonon dispersiyon eğrisi ise Şekil 6.6'de verilmiştir. Fonon dispersiyon eğrisinden görüleceği üzere [100] yönündeki L dalı hariç hemen hemen tüm dallarda deneysel verilerle çakışmakta olup mükemmel uyum göstermektedir. CGW modeli, literatürde [4,18,48,49,50] Cu için başka metotlarla hesaplanan teorik değerlerin bir kısmından daha iyi sonuçlar vermiştir.

Aynı hesaplar Ni için tekrar edildiğinde sonuçlar hemen hemen tüm dallarda verilerle çok iyi uyum içindedir. Bu modelin literatürde başka metotlarla hesaplanan [16,50,51] teorik değerlerin bir kısmından daha iyi sonuçlar verdiği görülmektedir (Şekil 6.7).

7.1.2 Bcc metaller

Bcc yapıya sahip Fe,Ba ve fcc yapılarını incelediğimiz Ca ve Sr'ün bcc yapısı CGW modelinde üçüncü en yakın komşuluk için uygulandı. Bu metallerin kuvvet sabitleri Çizelge 6.3-6'da ,bu kuvvet sabitlerini kullanarak elde edilen fonon frekansları ise Çizelge 6.20-31'de verilmiştir. İlgili fonon frekans eğrilerinin kullanılmasıyla elde edilen fonon dispersiyon eğrileri ise Şekil 6.1, Şekil 6.2, Şekil 6.3 ve Şekil 6.4'de verilmiştir.

Fe için kullanılan giriş parametrelili Çizelge 6.1'de hesaplanan kuvvet sabitleri Çizelge 6.6'da fonon frekans değerleri ise Çizelge 6.29, 6.30, 6.31'de

verilmiştir. Bu fonon frekans değerlerinin kullanılmasıyla elde edilen fonon dispersiyon eğrisi ise Şekil 6.4 'de verilmiştir.

Şekilden görüleceği üzere Fe için CGW modeline göre çizilen fonon dispersiyon eğrileri hemen hemen tüm dallarda deneysel verilerle mükemmel uyum içindedir. Yalnız [111] doğrultusunun L dalında bazı $\vec{q}$ 'nun ara değerlerinde bir miktar uyumsuzluk göstermiştir.

Ba'un hesaplanan kuvvet sabitleri ve fonon frekans değerleri Çizelge 6.4 ve Çizelge 6.23, 6.24, 6.25'de verilmiştir. Fonon frekans eğrisi ise Şekil 6.2'de verilmiştir.

Hesaplanan fonon frekans değerleri, [100] doğrultusunun T dalında $\vec{q}$ 'nun ara değerlerinde ve [110] doğrultusunun T2 ve T1 dallarında $\vec{q}$ 'nun yüksek değerlerinde aykırılık göstermekte olup; diğer tüm dallarda genelde uyum içindedir.

Fcc yapısını incelediğimiz Ca 'un bcc yapısı için giriş parametleri Çizelge 6.1'de, hesaplanan kuvvet sabitleri Çizelge 6.3'de ve fonon frekans değerleri ise Çizelge 6.19, 6.20 ve 6.21'de verilmiştir. Elde edilen fonon dispersiyon eğrisi ise Şekil 6.1'de gösterilmektedir.

Şekilde görüleceği üzere sadece [110] doğrultusunun T1 dalında $\vec{q}$ 'nun yüksek değerlerinde ve T2 dalında $\vec{q}$ 'nun ara değerlerinde bir miktar ayrılık gösterirken, diğer tüm dallarda deneysel verilerle mükemmel uyum içindedir.

Aynı şekilde incelediğimiz Sr için hesaplanan kuvvet sabitleri ve bu sabitlerden bulunan fonon frekans değerleri Çizelge 6.5 ve Çizelge 6.26, 6.27 ve 6.28'de gösterilmektedir. Fonon dispersiyon eğrisi ise Şekil 6.3'dedir.

Fonon dispersiyon eğrisinde $[110]$ doğrultusunun T2 dalında $\vec{q}$ 'nın yüksek değerlerinde ve $[111]$ doğrultusunun L dalında $\vec{q}$ 'nın ara değerlerinde deneysel değerlerden sapmalar olup; diğer tüm dallarda uyum içindedir.

7.2. GTF Modeli ve Sonuçları

İncelediğimiz metal ve alaşımların fonon frekansları üçüncü en yakın komşuluk etkileşmeli GTF modeli kullanılarak da hesaplandı. Bcc yapılar için GTF modeli ile CGW modelinin özdeş olduğu, fcc yapılarda ise CGW modeli ile GTF modeli arasında fonon dispersiyon eğrisinin bazı dallarında %1-2'lik farklar ortaya çıkmıştır. Bunun nedeni GTF modelinin kuvvet sabitlerinin CGW modelinin kuvvet sabitlerinden oluşan bir nicelik olması ve CGW modelinin doğada GTF modeline göre daha mikroskobik olmasıdır.

7.2.1. Fcc metaller

CGW modelinin kuvvet sabitlerinden yararlanarak GTF modelinin kuvvet sabitleri bulundu. Bu sabitler Ca için Çizelge 6.7'de, Sr için Çizelge 6.9'da, Cu için Çizelge 6.10'da ve Ni içinde Çizelge 6.8'de verilmiştir. Bu sabitlerin kullanılmasıyla bu metallerin fonon frekans değerleri hesaplandı (Çizelge 6.32-43). Fonon dispersiyon eğrileri ise Şekil 6.5-8'dedir.

Ca için üçüncü en yakın komşuluk etkileşmeli CGW ve GTF modellerinin fonon dispersiyon eğrileri Şekil 6.5'de görüleceği üzere frekans değerleri arasında %1-2 gibi bir fark söz konusu olup genelde uyum içindedir. Hesaplanan frekans değerleri CGW modeline göre hemen hemen daha iyi uyum içindedir.

Aynı hesaplar Sr için tekrar edildiğinde, GTF modeli CGW modeline göre deneysel değerlerle daha iyi uyum sağlamaktadır.. CGW modelinden elde edilen frekans değerleri ile veriler arasındaki $[110]$ doğrultusunun T1 dalında $\vec{q}$ 'nın düşük, T2 dalında $\vec{q}$ 'nın yüksek değerlerindeki ve $[111]$ doğrultusunda L dalındaki $\vec{q}$ 'nın ara değerlerindeki uyumsuzluk hemen hemen ortadan

kalkmış ve GTF modelinden elde edilen frekans değerleri daha iyi uyum içindedir (Şekil 6.8).

Cu için üçüncü en yakın komşuluk etkileşmeli CGW ve GTF modellerinin fonon dispersiyon eğrileri , Şekil 6.6'de görüleceği üzere CGW modeli [100] doğrultusunun T dalı hariç , deneysel değerlerle mükemmel uyum gösterirken; GTF modeli tüm dallarda mükemmel uyum göstermiştir.

Ni'in CGW ve GTF modeline göre hesaplanan kuvvet sabitleri ve fonon frekansları Çizelge 6.8'de ve Çizelge 6.38-39-40'da verilmiştir. İlgili fonon frekanslarının kullanılması ile çizilen fonon dispersiyon eğrisi Şekil 6.7'de verilmiştir.

Hesaplanan frekans değerleri genelde verilerle uyum içinde olup ancak GTF modelinin frekans değerleri ile veriler arasında [110] doğrultusunun T1 ve T2 dalı ile [111] doğrultusunun L dalında $\bar{q}$ 'nın yüksek değerlerinde %2-3'lük bir aykırılık göstermektedir.

7.2.2. Bcc metaller

Bcc yapıya sahip Fe, Ba ve Fcc yapıya sahip Ca,Sr bcc yapısı için GTF modelini üçüncü enyakın komşuluk için uyguladık. Elde edilen frekans değerleri Çizelge 6.20-31 'de, çizilen fonon dispersiyon eğrileri ise Şekil 6.1-4'de verilmiştir. GTF modelinden yararlanarak bulunan frekans değerleri tüm metaller için, CGW modelinden bulunan frekans değerleri ile tamamen özdeştir.

7.3. CGW+SJ Modeli ve Sonuçları

İncelediğimiz metal ve alaşımların fonon frekansları CGW ve GTF modelinde dikkate alınmayan uzak erişimli elektron-iyon etkileşmesinin hesaplandığı SJ modelinin CGW modeline eklenmesiyle de yapıldı. SJ modeli ile elektron-iyon etkileşmesinin [100],[110] ve [111] temel simetri yönlerindeki katkıları bulundu. Bu katkılar CGW modelinin temel simetri yönlerindeki dinamik

matris elemanlarına eklendi. Elde edilen bu ifadelerin fonon frekans ifadelerinde yerine yazılması ile fonon frekans değerleri elde edildi.

7.3.1. Fcc metaller

Üçüncü en yakın komşu etkileşmeli CGW modeline SJ modelinin eklenmesiyle Ca,Sr,Cu ve Ni elementlerinin kuvvet sabitleri hesaplandı (Çizelge 6.7-10). Hesaplanan bu değerler kullanarak bu elementlerin fonon frekansları bulundu (Çizelge 6.32-43). Fonon frekans eğrisi Ca için Şekil 6.5'de, Sr için Şekil 6.8'de, Cu için Şekil 6.6'da ve Ni içinde de Şekil 6.7'de verilmiştir.

Ca için hesaplanan frekans değerleri [100] doğrultusunun L ve T dallarında CGW ve GTF modellerine göre daha iyi uyum göstermiştir. [100] doğrultusunun L dalında $\vec{q}$ 'nın yüksek değerlerine gidildikçe, T dalında ise tüm $\vec{q}$ değerlerinde CGW+SJ modeli CGW modeline göre zon sınırı hariç deneysel verilerle çok daha iyi uyum içindedir. Aynı şekilde [110] doğrultusunun tüm dallarında daha iyi sonuçlar elde edilmiştir. Özellikle [110] doğrultusunun T2 dalında CGW ve GTF modeline göre $\vec{q}$ 'nın yüksek değerlerindeki aykırılık ortadan kalkmış deneysel verilerle daha iyi uyum sağlamıştır. [111] doğrultusunda ise L dalı hariç diğer iki modele göre daha iyi uyum göstermiştir.

Aynı hesaplar Cu için tekrar edildiğinde, tüm dallarda $\vec{q}$ 'nın yüksek değerlerine gidildikçe [100] doğrultusunun L dalında deneysel verilerle hesaplanan frekans değerleri arasında aykırılık daha da artmakta T dalında ise zon sınırı hariç iyi uyum göstermiştir. Bunun yanında [110] doğrultusunun T1 dalında $\vec{q}$ 'nın düşük değerlerinde de L ve T2 dalında ise $\vec{q}$ 'nın yüksek değerlerinde aykırılık söz konusudur. [111] doğrultusunun L dalında ise yine $\vec{q}$ 'nın yüksek değerlerinde aykırılık söz konusu olup, T dalında ise verilerle uyumlu sonuçlar elde edilmiştir.

CGW+SJ modelinde Sr için hesaplanan frekans değerleri incelendiğinde [100] doğrultusunun L dalında ve [110] doğrultusunun T2 dalında elde edilen frekans değerleri diğer iki modele göre daha iyi uyum göstermiştir. [110] doğrultusunun L ve T1 dalında ise hemen hemen CGW modelle aynı sonuçlar elde edilmiş olup, [111] doğrultusunun L ve T dalında ise hesaplanan veriler diğer iki modele göre verilerle daha iyi uyum içindedir.

Ni için hesaplanan frekans değerleri [110] doğrultusunun T1 dalında $\bar{q}$ 'nın düşük değerlerinde ve diğer tüm dallarda, $\bar{q}$ 'nın yüksek değerlerine doğru verilerle uyumsuzluk söz konusudur.

7.3.2. Bcc metaller

Benzer şekilde bcc yapıya sahip Ca, Ba, Sr ve Fe elementleri için CGW+SJ modelinde kuvvet sabitleri hesaplandı(Çizelge 6.3-6). Bu kuvvet sabitlerinden fonon frekans değerleri elde edildi(Çizelge 6.20-31). Fonon frekans eğrileri Ca için Şekil 6.1'de, Ba için Şekil 6.2'de, Sr için Şekil 6.3'de ve Fe için Şekil 6.4'de verilmiştir.

Şekil 6.1'den görüleceği üzere Ca için [100] ve [111] doğrultusunun tüm dallarında diğer iki modele göre $\bar{q}$ 'nın yüksek değerlerine gidildikçe daha kötü sonuçlar elde edilmiştir. [110] doğrultusunun T2 dalında özdeş sonuçlar elde edilmiş olup, L ve T1 dalında CGW modeline göre daha kötü sonuçlar elde edilmiştir.

Ba için CGW+SJ modeli; CGW modeline göre, [111] doğrultusunun T dalının $\bar{q}$ 'nın yüksek değerleri hariç, tüm dallarda daha iyi sonuçlar elde edilmiştir. [110] doğrultusunda L dalında sonuçlar CGW modeline göre daha uyumludur. Aynı şekilde T2 dalında CGW modeline göre $\bar{q}$ 'nın yüksek değerlerindeki deneysel verilerle olan aykırılık büyük oranda azalmış ve [100] doğrultusunun T dalında, $\bar{q}$ 'nın yüksek değerlerinde CGW modeline göre daha iyi uyum göstermiştir.

Aynı hesaplar Sr için tekrar edildiğinde elde edilen sonuçlar tüm dallarda %1 gibi CGW modeline göre daha iyi uyum içindedir. Özellikle [110] doğrultusunun T2 dalında hesaplanan frekans değerleri CGW modeline göre çok daha iyi uyumludur.

Fe için [100] ve [111] doğrultularının zon sınırları hariç, CGW modeline göre daha sonuçlar elde edilmiştir. [110] doğrultusunun L ve T2 dalında ise $\bar{q}$ 'nın yüksek değerlerinde uyumsuzluk gözlenmiş, T1 dalında ise CGW modeli ile özdeş sonuçlar elde edilmiştir.

7.4. CGW, GTF ve CGW+SJ Modellerinin Alaşımlara Uygulanması

Bu çalışmada CGW, GTF ve CGW+SJ modelleri $A_{1-x}B_x$ şeklinde olan ikili alaşımların ; fonon dispersiyon eğrilerini elde edilmesinde de kullanıldı. Bu tip alaşımlar ya Ta-W, Cu-Al ,Ni-Pt vb. olduğu gibi bileşen atomlar aynı kristal yapılı (I. tip alaşımlar) ya da Fe-Pd, Co-Fe,Fe-Mn vb. gibi olduğu gibi farklı kristal yapıda (II. tip alaşımlar) oluşurlar. II. tip alaşımlarda; örneğin Fe oda sıcaklığında bcc yapıda , Pd ise fcc yapıya sahiptir. Fe-Pd alaşımı ise oda sıcaklığında fcc yapıdadır. Burada X değeri bileşenin ağırlıkça yüzde olanı olup; X'in alacağı değere göre ve elementlerin esneklik sabitlerinin , ısısal genleşme katsayılarının değerlerine bağlı olarak alaşım ya fcc ya da bcc yapıda tek bir örgü oluşturur.

Bu çalışmada $Ta_{77}W_{23}$, $Ta_{50}W_{50}$, $Ta_{33}W_{67}$, $Pd_{0.96}Fe_{0.04}$, $Pd_{0.90}Fe_{0.10}$, $Pd_{0.28}Fe_{0.72}$ ve $Co_{0.92}Fe_{0.08}$ alaşımlarının fonon dispersiyon eğrileri hesaplanmıştır. Etkileşmeler üçüncü komşuluğa kadar dahil edimiş olup, dinamik matris için kullanılan formülasyon, elemental metaller için kullandığımız formülasyonla aynı şekildedir.

Alaşımların kütlesi (m) olarak, alaşımı oluşturan bileşen atomların kütlelerinin ortalaması alınmıştır. Aynı şekilde alaşımlara ait örgü sabiti (a), esneklik sabitlerin ve wigner-seitz hücre yarıçabının (r_0) bilinmediği durumlarda, bu özelliklerin %'leri üzerinden lineer toplamaları alınarak hesaplanmıştır. Örneğin

$\lambda_{\text{alaşım}}$ olmak üzere, A ve B elementlerinin alaşımına ait özellik olmak ve $X=0.30$ ise $\lambda_{\text{alaşım}}=0.30\lambda_A + 0.70\lambda_B$ eşitliği literatürde verildiği [25] şekliyle bu çalışmada da kullanılmıştır. Çalışmamızda tüm alaşımların Wigner Seitz hücre yarıçabı (r_0) yukarıdaki lineer bağıntı kullanarak hesaplanmıştır. Ayrıca Ta-W alaşımların örgü sabiti literatürde bulunamadığından yine yukarıdaki bağıntı kullanılmıştır. $\text{Pd}_{0.96}\text{Fe}_{0.04}$, $\text{Pd}_{0.90}\text{Fe}_{0.10}$, $\text{Pd}_{0.28}\text{Fe}_{0.72}$, $\text{Co}_{0.92}\text{Fe}_{0.08}$ alaşımların örgü ve esneklik sabitlerinin deneysel değerleri [35,36,40,41] ve $\text{Ta}_{50}\text{W}_{50}$, $\text{Ta}_{33}\text{W}_{67}$ alaşımlarının ise esneklik sabitlerinin deneysel değerleri literatürde verildiğinden yukarıda bahsedilen lineer bağıntıyı kullanmaya gerek kalmadı. Ancak $\text{Ta}_{77}\text{W}_{23}$ alaşımının esneklik sabiti literatürde bulunamadığından yukarıdaki bağıntı kullanarak alaşımın esneklik sabiti hesaplandı.

CGW, GTF ve CGW+SJ modellerine göre hesaplanan fonon frekans değerleri için giriş parametreleri ve esneklik sabitleri Çizelge 6.2’de her alaşım için ayrı ayrı verilmiştir.

İncelenen I.tip alaşımlardan $\text{Ta}_{77}\text{W}_{23}$ alaşımının üçüncü en yakın komşuluklu CGW, GTF, CGW+SJ modellerine göre hesaplanan kuvvet sabitleri Çizelge 6.11’de ,bu değerlerin kullanılmasıyla hesaplanan fonon dispersiyon değerleri Çizelge 6.44-46’ da , çizilen fonon dispersiyon eğrisi ise Şekil 6.9’ da verilmiştir.

CGW modeline göre [100] doğrultusunun L ve T dallarında $\vec{q}$ ’nın ara değerlerinde sapmalar göstermiş olup, diğer tüm dallarda hemen hemen mükemmel uyum göstermiştir. GTF modelinde ise daha önce bcc metallerde olduğu gibi CGW modeli ile tamamen özdeş sonuçlar elde edilmiştir. CGW+SJ modelinde ise [110] doğrultusunun T1 dalı hariç tüm dallarda $\vec{q}$ ’nın yüksek değerlerine doğru gidildikçe deneysel verilerle aykırık göstermiştir.

$Ta_{50}W_{50}$ alařımının ise hesaplanan kuvvet sabitleri izelge 6.12'de , fonon dispersiyon deęerleri ise izelge 6.47-49'da verilmiřtir. Fonon dispersiyon eęrisi ise řekil 6.10'da verilmiřtir.

řekilden grleceęi zere CGW modeli [110] doęrultusunun T2 dalının zon sınırı hari dięer tm dallarda deneysel deęerlerle hemen hemen mkemmел uyum gstermiřtir. GTF modelinde ise yine CGW modeli ile zdeř sonular elde edilmiřtir. CGW+SJ modelinde ise [111] doęrultusunun T1 dalı hari, yine $\vec{q}$ 'nun yksek deęerlerine doęru gidildike deneysel verilerle uyumsuzluk gstermiřtir.

Aynı řekilde hesapladıęımız $Ta_{33}W_{67}$ alařımının hesaplanan kuvvet sabitleri izelge 6.13'de, bu kuvvet sabitlerinden bulunan fonon dispersiyon deęerleri izelge 6.50-52'de ve fonon dispersiyon eęrisi ise řekil 6.11'de verilmiřtir.

CGW modeli [100] doęrultusunun L dalında $\vec{q}$ 'nun ara deęerlerine aykırık gstermiř olup dięer tm dallarda deneysel verilerle mkemmел uyum gstermiřtir. GTF modelinde ise CGW modeli ile tamamen zdeř sonular elde edilmiřtir. CGW+SJ modelinde [110] doęrultusunun T1 dalı hari,[100] [110] ve [111] doęrultularının tm dallarında $\vec{q}$ 'nun yksek deęerlerine doęru gidildike deneysel deęerlerle uyumsuzluk gstermiřtir.

Sonu olarak řunu diyebiliriz ki CGW+SJ modeli, $\vec{q}$ 'nun yksek deęerlerine doęru gidildike deneysel deęerlerle uyumsuzluk gstermiř ve bcc metallerde olduęu gibi GTF modeli, GTF modeli zdeř sonular vermiřtir. CGW ve GTF modelleri ile bu alařımların fonon frekansları, hemen hemen deneysel verilerle uyuřacak řekilde retebilmiřtir. Alařımı oluřturan elementlerin konsantrasyonun deęiřmesi alıřtıęımız modellerin deneysel verilerle uyum saęlamasında etkili olmamıřtır. Yapılan literatr taramasına gre de , bu alařımların CGW,GTF,CGW+SJ modelleri ile ilk kez bu alıřmada fonon frekansları teorik olarak hesaplanmıřtır.

$\text{Pd}_x\text{Fe}_{1-x}$ ve $\text{Fe}_x\text{Ni}_{1-x}$ [51,62,65] vb. tipi alaşımlar invar alaşım olarak isimlendirir. Bu tip alaşımların genel özelliği; çok geniş bir sıcaklık aralığında beklenenin dışında anormal denecek kadar küçük değerlerde termal genleşme katsayısına sahip olmalarıdır. Elektron fonon etkileşmesinin bu olaya neden olduğu [46] düşünülmektedir. Ayrıca invar alaşımlarda ısısal genleşme örgü titreşimleri tarafından tayin edilir ve örgü titreşimleri ile magnetizma arasında bir ilişki olduğu bilinmektedir. $\text{Pd}_x\text{Fe}_{1-x}$ alaşımları üzerindeki [35,36,37,38,46] araştırmalar oldukça sınırlı kalmış ve daha çok invar özellikleri üzerinde olmuştur. Bu nedenle de giriş dataları ve deneysel değerler için sınırlı sayıda makaleden yararlanılmıştır.

$\text{Pd}_{0.96}\text{Fe}_{0.04}$ alaşımının fonon dispersiyon eğrisi Şekil 6.12'de; bu alaşıma ait hesaplanan kuvvet sabitleri ve fonon frekansları Çizelge 6.14 ve Çizelge 6.53-55'de verilmiştir.

CGW modeli [100] doğrultusunun L ve T dallarında $\bar{q}$ 'nın ara değerlerinde ve [110] doğrultusunun T1 dalında $\bar{q}$ 'nın alt değerlerinde deneysel verilerle uyumsuzluk göstermiştir. Diğer tüm dallarda verilerle mükemmel uyum içindedir. GTF modeli ise CGW modeline göre çok daha iyi uyum göstermiştir. CGW modelindeki [100] doğrultusunun L ve T dallarındaki ve [110] doğrultusunun T2 dalındaki $\bar{q}$ 'nın değerlerindeki uyumsuzluk %1-2 kadar daha azalmış ,özellikle [100] doğrultusunun tüm dallarında zon sınırında mükemmel uyum sağlayarak , tüm dallarda deneysel verilerle hemen hemen uyum sağlamıştır. CGW+SJ modelinde ise [110] doğrultusunun T1 dalında, $\bar{q}$ 'nın alt değerlerine, diğer tüm dallarda ise $\bar{q}$ 'nın yüksek değerlerinde verilerle aykırılık göstermiştir.

Aynı şekilde hesaplanan $\text{Pd}_{0.90}\text{Fe}_{0.10}$ alaşımı için kuvvet sabitleri Çizelge 6.15'de ,frekans değerleri ise Çizelge 6.56, 6.57, 6.58'de verilmiştir. Fonon dispersiyon eğrisi ise Şekil 6.13'dedir.

[110] doğrultusunun T1 dalının $\vec{q}$ 'nın alt değerlerindeki aykırılık hariç diğer tüm dallarda CGW modeli deneysel verilerle uyum sağlamıştır. GTF modeli ise tüm dallarda verilerle mükemmel uyum göstermiştir.

$\text{Pd}_{0.28}\text{Fe}_{0.72}$ alaşımın hesaplanan kuvvet sabitleri Çizelge 6.16'da, hesaplanan frekans değerleri ise Çizelge 6.59, 6.60, 6.61'de verilmiştir. Fonon dispersiyon eğrisi Şekil 6.14'dedir.

Şekilden görüleceği üzere CGW modeli [110] doğrultusunun T1 dalında $\vec{q}$ 'nın ara değerlerindeki aykırılık hariç tüm dallarda mükemmel uyum göstermiştir. GTF modelinde hesaplanan frekans değerleri ile CGW modelinde hesaplanan frekans değerleri arasında %1 kadar fark vardır ve CGW modelindeki [110] doğrultusunun T1 dalındaki $\vec{q}$ 'nın ara değerlerindeki aykırılığa ortadan kalkmış ve deneysel değerlerle mükemmel uyum göstermiştir.

Yaptığımız literatür taramasında A_xB_{1-x} tipi alaşımlar üzerinde pek çok deneysel ve teorik çalışma olmasına rağmen [37,51,56,57,58,59,61,62,65,68,69,70,71,72,73] $\text{Pd}_{0.96}\text{Fe}_{0.04}$ ve $\text{Pd}_{0.90}\text{Fe}_{0.10}$ alaşımlarının üçüncü komşuluk için CGW ve GTF modelleri ile çalışan bir araştırmaya rastlanmamıştır. İlk defa bu çalışmada yukarıda bahsedilen modeller kullanarak fonon dispersiyon eğrileri elde edilmiştir. $\text{Pd}_{0.90}\text{Fe}_{0.10}$ alaşımı için literatürde [37] Akgün(1995) tarafından Three-body effect modeli kullanılarak fonon dispersiyon eğrisi çizilmiştir ancak bu çalışmada CGW ve GTF modellerini kullanarak çizdiğimiz fonon dispersiyon eğrileri Akgün(1995) tarafından çizilen fonon dispersiyon eğrilere göre deneysel verilerle daha iyi uyum sağlamıştır. Benzer şekilde $\text{Pd}_{0.28}\text{Fe}_{0.72}$ alaşımı içinde literatürde [38] Garg (1985) tarafından en yakın ikinci komşuluk etkileşmeli fonon dispersiyon eğrisi çizilmiştir. Bu çalışmada [110] doğrultusunda belirgin bir uyumsuzluk vardır. Bizim yaptığımız bu çalışmada ise CGW ve GTF modellerinde bu çalışmaya göre mükemmel uyum gösteren eğriler edilmiştir. İnceldiğimiz alaşımlarda; alaşımın demir oranı arttıkça CGW ve GTF

modellerinden bulduğumuz sonuçlar deneysel verilerle daha iyi uyum sağlamıştır.

$\text{Co}_{0.92}\text{Fe}_{0.08}$ [39,40,41] alaşımı içinde hesaplanan kuvvet sabitleri Çizelge 6.17'de, hesaplanan frekans değerleri ise Çizelge 6.62, 6.63, 6.64'de ve fonon dispersiyon eğrisi Şekil 6.15'de verilmiştir.

[100] doğrultusunun L yönünde zon sınırı hariç; CGW+SJ modeli, CGW modeline göre daha iyi uyum göstermiştir. Aynı doğrultunun T dalında ise GTF modeli mükemmel uyum sağlamıştır. [110] doğrultusunun L dalında GTF modeli verilerle uyum sağlamış, CGW ve CGW+SJ modeli ise $\vec{q}$ 'nın yükselen değerlerinde uyumsuzluk sağlamıştır. T1 dalında ise GTF modeli mükemmel uyum sağlamıştır. Aynı doğrultunun T2 dalında, CGW+SJ modeli diğer modellere göre daha iyi uyum sağlamıştır. [111] doğrultusunun L ve T dalında yine GTF modeli mükemmel uyum sağlarken diğer iki model $\vec{q}$ 'nın yükselen değerlerinde uyumsuzluk göstermiştir. Aynı doğrultunun T dalında CGW+SJ modeli, CGW modeline göre deneysel verilerle daha iyi uyum sağlamıştır.

Sonuç olarak alaşımlarda GTF modeli ile diğer iki modele göre deneysel değerlerle daha iyi uyum göstermiştir.

KAYNAKLAR

1. Begbie, G.H., Born, M., 1947, Thermal scattering of X-rays by crystals I. Dynamical foundation, **Proc. R. Soc. London**, Ser. A, 188, 179.
2. Begbie, G.H., 1947, Thermal scattering of X-rays by crystals II. The thermal scattering of the face-centred cubic and the close-packed hexagonal lattices, **Proc. R. Soc. London**, Ser. A, 188, 189.
3. Ramamurthy, V., Satishkumar, M., 1985, Unified study of lattice dynamics of alkali metals with use of general tensor force model, **Phys. Rev. B.**, 32, 8, 5471.
4. Jacobsen, E.H., 1955, Elastic spectrum of copper from temperature-diffuse scattering of X-rays, **Phys. Rev. B.**, 97, 3, 654.
5. Sharma, P.K., Joshi, S.K., 1963, Model for the lattice dynamics of metals and its application to sodium, **J. Chem. Phys.**, 39, 10, 2633
6. Sharma, P.K., Joshi, S.K., 1964, Model for the lattice dynamics of metals. II. application to face-centered cubic metal copper, **J. Chem. Phys.**, 40, 3, 662.
7. Rathore, R.P.S., 1977, Dispersion spectra of fcc metals (Pt, Pb and Th), **Indian J. Phys.**, 51A, 108.
8. Rathore, R.P.S., 1979, Lattice excitation in alkali metals, **Indian J. Phys.**, 53A, 409.
9. Upadhyaya, J.C., Sharma, S.S., Kulshrestha, O.P., 1975, Crystal equilibrium and phonon dispersion in some bcc transition metals, **Phys. Rev. B.**, 12, 6, 2236.
10. Upadhyaya, J.C., 1977, On the angular force models of de launay and CGW, **J. Phys. F: metal phys.**, 7, 5, 769.
11. Moore, R.A., Upadhyaya, J.C., 1979, Comparison of the major force constant models for cubic systems using a self-consistency condition, **Canad. J. Phys.**, 57, 12, 2053.
12. Ashcroft, N.W., Mermin N.D., 1976, Solid State Physics, **Saunders College Publishing**, Florida.
13. Rao, K.R., 1978, Lattice Dynamics, **Indian Physics Association**, Bombay, 197-290

14. Fielek, 1978, The inclusion of three-body forces and the condition of equilibiri, **J. Phys. F: Metal Phys**, 8, 4, 577.
15. Clark, B.C., Gazis, D.C., Wallis, R.F., 1964, Frequency spectra of body-centered cubic lattices, **Phys. Rev.**, 134, A1486.
16. Upadhyaya, J.C., Prakash, D., 1986, Three-body forces in the lattice dynamics of fcc nickel, **Phys. Rev.B.**, 151, 578.
17. Joshi, S.K., Rajagopal, A.K., Lattice Dynamis of Metals, **Solid State Physics**, 22, 160.
18. Lehnan, G.W., Wolfram, T. and Dewames, R.E., 1962, Axially symmetric model for lattice dynamics of metals with application to Cu, Al and ZrH₂, **Phys. Rev.**, 128, 1593.
19. Reissland, J.A., 1973, Phys. of Phonons, **John Wiley Sonts. Ltd.**, Lawford.
20. Upadhyaya, J.C., Lehri, S., Sharma, D.K., Upadhyaya, S.C., 1990, Angular force models in the lattice dynamics of cubic systems, **Phys. Stat. Sol. (b)**, 159, 659.
21. Svensan, E.C., Brockhouse, B.N., Rowe J.M., 1967, The lattice dynamics of Cu, **Phys. Rev.**, 155, 619.
22. Ramamurthy, V., 1982, Nonequivalence of de launay and clark, gazis, and wallis angular force models, **Phys. Stat. Sol. (b)**, 112, 463.
23. Krebs, K., 1965, Dispersion curves and lattice frequency distribution of metals, **Phys. Rev.**, 138, A143.
24. Thakur, V.K., Sing, T.N., 1986, Lattice dynamic of fcc metals, **Phys. Stat. Sol. (b)**, 135, 67.
25. Garg, S., Gubta, H.C., 1986, Phonon dispersion of disordered Fe-Al alloy, **Phys. Stat. Sol. (b)**, 136, 453.
26. Mizuki, J., Stassis, C., 1985, Lattice dynamics of bcc Sr, **Phys. Rev. B**, 32, 12, 8372.
27. Singh, N., Singh, S.P., 1990, Lattice dynamics of Ca and Sr in bcc and fcc phanes, **Phys. Stat. Sol. (b)**, 158, 433.
28. Nicklow, R.M., 1983, Lattice dynamics of fcc Ca, **Phys. Rev. B**, 27, 6, 3303.

29. Wang, Y.R., Overhauser, A.W., 1987, Dynamic pseudopotential theory of phonons in twelve cubic metals, **Phys. Rev. B**, 35, 2, 501.
30. Heiroth, M., Buchenau, U., Schober, H.R., 1986, Lattice dynamics of fcc and bcc calcium, **Phys. Rev. B**, 34, 10, 6681.
31. Singh, D., Rathore, R.P.S., 1993, Phonons in fcc calcium and barium, **Indian Journal of Pure-Applied Physics**, 31, 391.
32. Mizuki, J., Chen, Y., Ho, K.M., Stassis, C., 1985, Phonon dispersion curves of bcc Ba, **Phys. Rev. B**, 32, 2, 666.
33. Brockhouse, B.N., Abou-Helal, H.E., Hallman, E.D., 1967, Phonon dispersion curves of bcc Fe, **Solid. Stat. Comm.**, 5, 211
34. Buchenau, U., Heiroth, M., Schober, R., 1984, Lattice dynamics of strontium and barium, , **Phys. Rev. B**, 30, 6, 3502.
35. Maliszewski, E., Sosnowski, J., Bednarski, S., Czachor, A., Holas, A., 1975, Lattice dynamics of $\text{Pd}_{1-x}\text{Fe}_x$ system, **J. Phys. F: Metal Phys**, 5, 1455.
36. Sing, N., 1990, Phonon dispersion curves in iron-based fcc alloys using microscopic force constants, **Phys. Rev. B**, 42, 14, 8882.
37. Akgün, İ., Uğur, G., 1995, Three-body effect on the lattice dynamics of Pd-10%Fe alloys, **Phys. Rev. B**, 51, 6, 3458.
38. Garg, S., Gubta, H.C., Bansal, T.K., Tripathi, B.B., 1985, Phonon dispersion relations in iron-based fcc alloys, **J. Phys. F: Metal Phys**, 15, 1895.
39. Shyam, R., Upadhyaya, S.C., Upadhyaya, J.C., 1990, First-principles calculation of the lattice dynamics of the $\text{Co}_{0.92}\text{Fe}_{0.08}$ alloy, **Phys. Stat. Sol. (b)**, 161, 563.
40. Shapiro, S.M., Moss, S.C., 1977, Lattice dynamics of face-centered-cubic $\text{Co}_{0.92}\text{Fe}_{0.08}$, **Phys. Rev. B**, 15, 5, 2726.
41. Svensson, E.C., Powell, B.M., Woods, A.D.B., Teuchert, W.D., 1979, Phonon dispersion in $\text{Co}_{0.92}\text{Fe}_{0.08}$, **Canad. J. Phys.**, 57, 253.
42. Chen, S.H., Brockhouse, B.N., 1964, Lattice vibrations of tungsten, **Solid. Stat. Comm.**, 2, 73.
43. Woods, A.D.B., 1964, Lattice of Tantalum, **Phys. Rev.**, 136, 3A, A781.

44. Anderson, C.E., Brotzen, F.R., 1982, Elastic constants of tantalum-tungsten alloys, **J. Appl. Phys.**, 53(1),292.
45. Higuera, B.J., Brotzen, F.R., 1985, Phonon dispersion in the Ta-W system, **Phys. Rev. B.**, 31, 2, 730.
46. Sato, M., Grier, B.H., Shapiro, S.M., Miyajima, H., 1982, Effect of magnetic ordering on the lattice dynamics of fcc $\text{Fe}_{1-x}\text{Pd}_x$, **J. Phys. F: Metal Phys.**, 12, 10, 2117.
47. Nakayama, T., Kikuchi, M., Fukamichi, F., 1980, Young's modulus and the delta e effect of the Fe-Pd invar alloys, **J. Phys. F: Metal Phys.**, 10, 4, 715.
48. Mohammed, K., Shukla, M.M., Milstein, F., Merz, J.L., 1984, Lattice dynamic of face-centered-cubic metals using the ionic morse potential immersed in the sea of free-elektron gas, **Phys. Rev. B.**, 29, 3117.
49. Mishra, M.K., Srivastava, P., Mishra, S.K., 1992, A lattice dynamical study of nickel based on the morse potential, **Phys. Stat. Sol. (b)**, 171, K5.
50. Feldman, J.L., 1970, Lattice- vibrational properties of chromium in the harmonic approximation on the tensor model, **Phys. Rev. B.**, 29, 2, 3117.
51. Maliszewski, E., Bednarski, S., 1997, The lattice dynamics of $\text{Ni}_{0.88}\text{Fe}_{0.12}$, $\text{Ni}_{0.76}\text{Fe}_{0.24}$ and single crystals, **Phys. Stat. Sol. (b)**, 200, 135.
52. Moore, R.A., 1981, Analysis of a generalized N-particle interaction with application to the elastic constants of bcc crystals, **Canad. J. Phys.**, 59, 1829.
53. Katahara, K.W., Manghnani, M.H., Fisher, E.S., 1979, Pressure derivatives of the elastic moduli of bcc Ti-V-Cr, Nb-Mo, Ta-W alloys, **J. Phys. F: Metal Phys.**, 9, 5, 1979.
54. Lin, A.C., Brotzen, F.R., 1979, Thermoelectric power of tantalum-tungsten alloys, **J. Appl. Phys.**, 51(3),1660.
55. Birgeneu, R.J., Cordes, J., Dolling, G., Woods, A.D.B., 1964, The lattice dynamics of Ni, **Phys. Rev.**, 136, A1359.
56. Garg, S., Gubta, H.C., Tripathi, B.B., 1985, Phonon dispersion relation in In-Tl alloy, **Sol. Stat. Comm.**, 56, 6, 519.
57. Tajima, K., Endoh, Y., Ishikawa, Y., 1976, Acoustis-phonon softening in the invar alloy Fe_3Pt , **Phys. Rev. Let.**, 37, 9, 519.

58. Gambetti, L., Menzinger F., Sacchetti, F., 1974, Phonons in the equiatomic Co Ni alloy, **Phys. Let.**, 49A, 4, 327.
59. Kunitomi, N., Tsunoda, Y., Hirai, Y., 1973, Phonons models in mass-defect disordered alloy Ni-Pt, **Sol. Stat. Comm.** , 13, 495.
60. Shukla, M.M., 1978, The monequi valence of angular force models of the Launay and Clark, Gazis and Wallis for fcc metal, **J. Phys. F: Metal Phys.**, 8, 6, L131.
61. Menzinger, F., 1975, Concentration dependence of the phonon dispersion relations in substitutional fcc Co-Ni alloys, **Phys. Rev. B.**, 12, 6, 2253.
62. Maliszewski, E., Bednarski, S. 1999, Lattice dynamics of $\text{Fe}_{0.65}\text{Ni}_{0.35}$ classical invar. **Phys. stat. bol. (b).**, 211, 621.
63. Zarestky, J., Stassis, C., 1987, Lattice dynamics of γ -Fe, **Phys. Rev. B.**, 35, 9, 4500.
64. Sing, D., Rathore, R.P.S., 1992, Phonon in fcc iron, **Phys. stat. bol. (b).**, 173, 443.
65. Hallman, E.D., Brockhouse, B.N., 1969, Crystal dynamics of nickel-iron and copper-zinc alloys, **Canad. J. Phys.**, 47, 1117.
66. Kumar, S., 1977, Phonon dispersion and electrical resistivity of sodium using an angular force model, **Indian J. Phys.** , 51A, 167.
67. Ghatak, A.K., Kothari, L.S., 1972, An introduction to lattice dynamic, **Addison Wesley Publishing Company**, London.
68. Upadhyaya, S.C., Upadhyaya, J.C., Shyam, R., 1991, Model-potential study of the lattice dynamics and elastic constants of the $\text{Ni}_{0.55}\text{Pd}_{0.45}$ alloy, **Phys. Rev. B.**, 44, 1, 122.
69. Yasuhisa, N., Saha, D.K., Ohshima, K., 1993, Phonon dispersion curves in disordered $\text{Cu}_{0.715}\text{Pd}_{0.285}$ alloy, **J. Phys.: Condens. Matter**, 5, 1655.
70. Chou, H., Shapiro, S.M., Moss, S.C., Mostoller, M., 1990, Phonon dispersion and Kohn anomalies in $\text{Cu}_{0.84}\text{Al}_{0.16}$, **Phys. Rev. B.**, 42, 1, 500.
71. Robertson, I.M., 1985, Phonon dispersion curves in ordered and disordered Fe_3Al , **Sol. Stat. Comm.**, 53, 10, 901.

72. Robertson, I.M., 1991, Phonon dispersion curves for ordered, partially-ordered and disordered iron-aluminium alloys, **J. Phys.: Condens. Matter**, 3, 8181.
73. Kentzinger. E., Cadeville, M.C., Petry, W., Hennion, B., 1996, Lattice dynamics and migration enthalpies in iron-rich Fe-Al alloys and ordered DO₃ and B2 compounds, **J. Phys.: Condens. Matter**, 8, 5535.



EK 1

```

C PROGRAM CALCULATES PHONON FREQS. USING CGW3 MODEL
C234567
REAL A1,A2,A3,B1,B2,B3,Y1,Y2,Y3,Y5,Y6,Y7
REAL X,Y,Z,R,PI,ML100,MT100,ML110,MT1,MT2
REAL ML111,MT111,S1,S2,S3,S4,M
REAL NL100,NT100,NL110,NT1,NT2,NT111,NL111
B1=6849.957
B2=1282.084
B3=-443.4312
Y1=-56.02759
Y2=1.52147
Y3=47.03171
Y5=-12.16114
A1=B1+(16./3.)*Y2
A2=B2+(32./9.)*Y1
A3=B3+(8./9.)*Y3+Y5
A11=(8./3.)*Y1+(4./3.)*Y2+(16./3.)*Y3
A22=(4./3.)*Y2-(8./9.)*Y1+4*Y5
A33=-Y5
KS3=-(16./9.)*Y3+Y5
X=3.141592/20.
Y=3.141592/10.
Z=(2.*3.141592)/10.
R=(3.*3.141592)/20.
M=87.62*1.66
DO 50 N=1,10
  C      SIN(1/2PIKS)
  S1=SIN(N*X)*SIN(N*X)
  C      SIN(PI*KS)
  S2=SIN(N*Y)*SIN(N*Y)
  C      SIN(2*PIKS)
  S3=SIN(N*Z)*SIN(N*Z)
  C      SIN(3/2PIKS)
  S4=SIN(N*R)*SIN(N*R)
  ML100=(16./3.)*(A1+2*A11)*(SIN(N*X))**2+4*(A2+2*A3+2*A33)
  *  *(SIN(N*Y))**2
  MT100=(16./3.)*(A1+2*A11)*S1+4*((A3+A22+3*A33)+2*KS3)*S2
  ML110=4.*((4./3.)*A1+A2+A3+(2./3.)*A11+A22+3*A33+2*KS3)
  *  *S2+4*A3*S3
  MT1=4*(A2+A3+2*A11+A22+3*A33+2*KS3)*S2+4*A33*S3
  MT2=8*((1./3.)*A1+A3+(2./3.)*A11+A22+A33)*S2+4*(A33+KS3)*S3
  ML111=(4./3.)*(A1+8*A11)*S1+4*(A2+2*A22)*S2+4*A1*S4+4*
  *  (2*A3+A33+KS3)*S3
  MT111=(4./3.)*(4*A1+5*A11)*S1+4*(A2+2*A22)*S2+4*A1*S4+
  *  2*(A3+5*A33+2*KS3)*S3
  NL100=(SQRT(ML100/M))/6.28318
  NT100=(SQRT(MT100/M))/6.28318
  NL110=(SQRT(ML110/M))/6.28318
  NT1=(SQRT(MT1/M))/6.28318
  NT2=(SQRT(MT2/M))/6.28318
  NL111=(SQRT(ML111/M))/6.28318
  NT111=(SQRT(MT111/M))/6.28318
  WRITE (*,8) N,NL100,NT100,NL111,NT111,NL110,NT1,NT2
  8      FORMAT(1X,I2,2X,7F7.2)
50      CONTINUE
STOP
END

```

```

C PROGRAM CALCULATES PHONON FREQS.USING CGW3 MODEL
C
REAL A1,A2,A3,A11,A22,A33,B1,B2,B3,Y1,Y2,Y3,Y5
REAL Y6,Y7,KS1,KS3,ETA3,M,ML100,NL100
REAL MT100,NT100,ML110,NL110,MT1,NT1,MT2,NT2
REAL ML111,NL111,MT111,NT111,X,Y,R,Z
b1=32105.41
b2=13863.32
b3=-1471.809
y1=2199.786
y2=-662.6742
y3=-2215.216
y5=22.10407
y6=-325.1693
y7=-623.6577
M=63.54*1.66
A1=B1+6*Y1+4*Y3+4*Y5
A2=B2+4*Y2+(16./3.)*Y7
A3=B3+(4./3.)*Y6
A11=2*Y1+8*Y2+4*Y3+4*Y5
A22=-2*Y2+4*Y6
A33=-(4./3.)*Y5
KS1=2*Y1-8*Y2-4*Y3+4*Y5+8*Y6+(16./3.)*Y7
KS3=(4./3.)*Y5-(4./3.)*Y6
ETA3=(SQRT(2.)/3.)*Y6+(2*SQRT(2.)/3.)*Y7
X=3.141592/20.
Y=3.141592/10.
Z=3*3.141592/20.
R=2*3.141592/10.
write(*,*)'N      NL100      NT100      NL110      NT1      NT2      NL111      NT111'
write(*,*)'-----'

DO 5 N=1,10
ML100=8*(A1+(2./3.)*A3+A11+(10./3.)*A33+(4./3.)*KS3
* +(4*SQRT(2.)/3.)*ETA3)*(SIN(N*X))**2
* +4*(A2+(8./3.)*A3+(4./3.)*A33+(4./3.)*KS3
* -(8*SQRT(2.)/3.)*ETA3)*(SIN(N*Y))**2
NL100=(SQRT(ML100/M))/6.28318
MT100=4*(A1+(10./3.)*A3+3*A11+(14./3.)*A33+2*KS1
* +(8./3.)*KS3-(4*SQRT(2.)/3.)*ETA3)*(SIN(N*X))**2
* +4*((2./3.)*A3+A22+(10./3.)*A33+(4./3.)*KS3
* +(4*SQRT(2.)/3.)*ETA3)*(SIN(N*Y))**2
NT100=(SQRT(MT100/M))/6.28318
ML110=4*(A1+(1./3.)*A3+3*A11+(11./3.)*A33+2*KS1
* +(8./3.)*KS3-(4*SQRT(2.)/3.)*ETA3)*(SIN(N*X))**2
* +4*(A1+A2+(2./3.)*A3+A22+(4./3.)*A33+(4./3.)*KS3
* +(4*SQRT(2.)/3.)*ETA3)*(SIN(N*Y))**2+
* 4*(3*A3+A33)*(SIN(N*Z))**2
NL110=(SQRT(ML110/M))/6.28318
MT1=4*(A1+3*A3+3*A11+A33+2*KS1)*(SIN(N*X))**2
* +4*(A2+A11+A22+2*A33)*(SIN(N*Y))**2
* +(4./3.)*(A3+11*A33+8*KS3-4*SQRT(2.)*ETA3)*(SIN(N*Z))**2
NT1=(SQRT(MT1/M))/6.28318
MT2=8*(A1+(1./3.)*A3+A11+(5./3.)*A33+(2./3.)*KS3+
* (2*SQRT(2.)/3.)*ETA3)*(SIN(N*X))**2+4*((4./3.)*A3+
* A11+2*A22+(2./3.)*A33+KS1+(2./3.)*KS3-(4*SQRT(2.)/3.)*
* ETA3)*(SIN(N*Y))**2+(8./3.)*(A3+5*A33+2*KS3+
* 2*SQRT(2.)*ETA3)*(SIN(N*Z))**2
NT2=(SQRT(MT2/M))/6.28318

```

```

if(n.lt.51)goto 1000
goto 1100
1000    ML111=4*(2*A1+A2+(4./3.)*A3+A11+2*A22+(14./3.)*A33
*      +KS1+(2./3.)*KS3-(4*SQRT(2.)/3.)*ETA3)*(SIN(N*Y))**2
*      +( 4./3.)*(8*A3+A33+KS3+4*SQRT(2.)*ETA3)*
*      (SIN(N*R))**2
NL111=(SQRT(ML111/M))/6.28318
MT111=2*(A1+2*A2+(14./3.)*A3+5*A11+4*A22+(22./3.)*A33
*      +2*KS1+(16./3.)*KS3+(4.*SQRT(2.)/3.)*ETA3)*
*      (SIN(N*Y))**2+(2./3.)*(A3+17.*A33+8*KS3-4*SQRT(2.)*
*      ETA3)*(SIN(N*R))**2
NT111=(SQRT(MT111/M))/6.28318
goto 1110
1100    nt111=0
nl111=0
1110    WRITE(*,11)N,NL100,NT100,NL110,NT1,NT2,NL111,NT111
11      FORMAT(I3,1X,F6.2,2X,F6.2,2X,F6.2,1X,F6.2,1X,F6.2,
*      1X,F6.2,1X,F6.2)
5      continue
END

```

```

C PROGRAM CALCULATES PHONON FREQS. USING GTF3 MODEL
C234567
REAL A1,A2,A3,B1,B2,B3,Y1,Y2,Y3,Y5,Y6,Y7
REAL X,Y,Z,R,PI,ML100,MT100,ML110,MT1,MT2
REAL ML111,MT111,S1,S2,S3,S4,M
REAL NL100,NT100,NL110,NT1,NT2,NT111,NL111
B1=19700.573
B2=12030.35
B3=619.735
Y1=19005.353
Y2=40.935
Y3=-2222.58
Y5=1774.86
A1=B1+2*Y1
A2=B1-Y1
A3=B2
A11=Y3
A22=B3+Y2
A33=B3-Y2
KS3=Y5-B3+Y2
X=3.141592/20.
Y=3.141592/10.
Z=(2.*3.141592)/10.
R=(3.*3.141592)/20.
M=55.85*1.66
DO 50 N=1,10
  C      SIN(1/2PIKS)
  S1=SIN(N*X)*SIN(N*X)
  C      SIN(PI*KS)
  S2=SIN(N*Y)*SIN(N*Y)
  C      SIN(2*PIKS)
  S3=SIN(N*Z)*SIN(N*Z)
  C      SIN(3/2PIKS)
  S4=SIN(N*R)*SIN(N*R)
  ML100=(16./3.)*(A1+2*A11)*(SIN(N*X))**2+4*(A2+2*A3+2*A33)
  *  *(SIN(N*Y))**2
  MT100=(16./3.)*(A1+2*A11)*S1+4*((A3+A22+3*A33)+2*KS3)*S2
  ML110=4.*((4./3.)*A1+A2+A3+(2./3.)*A11+A22+3*A33+2*KS3)
  *  *S2+4*A3*S3
  MT1=4*(A2+A3+2*A11+A22+3*A33+2*KS3)*S2+4*A33*S3
  MT2=8*((1./3.)*A1+A3+(2./3.)*A11+A22+A33)*S2+4*(A33+KS3)*S3
  ML111=(4./3.)*(A1+8*A11)*S1+4*(A2+2*A22)*S2+4*A1*S4+4*
  *  (2*A3+A33+KS3)*S3
  MT111=(4./3.)*(4*A1+5*A11)*S1+4*(A2+2*A22)*S2+4*A11*S4+
  *  2*(A3+5*A33+2*KS3)*S3
  NL100=(SQRT(ML100/M))/6.28318
  NT100=(SQRT(MT100/M))/6.28318
  NL110=(SQRT(ML110/M))/6.28318
  NT1=(SQRT(MT1/M))/6.28318
  NT2=(SQRT(MT2/M))/6.28318
  NL111=(SQRT(ML111/M))/6.28318
  NT111=(SQRT(MT111/M))/6.28318
  WRITE (*,8) N,NL100,NT100,NL111,NT111,NL110,NT1,NT2
  8      FORMAT(1X,I2,2X,7F7.2)
  50      CONTINUE
STOP
END

```

C PROGRAM CALCULATES PHONON FREQS.USING GTF3 MODEL

C

```

REAL A1,A2,A3,A11,A22,A33
REAL KS1,KS3,ETA3,M,ML100,NL100
REAL MT100,NT100,ML110,NL110,MT1,NT1,MT2,NT2
REAL ML111,NL111,MT111,NT111,X,Y,R,Z
M=101.345*1.66
A1=-2155.5685
A2=-1204.365
A3=1828.473
A11=23394.0255
A22=-977.2128
A33=1653.728
KS1=26332.3545
KS3=-521.081
ETA3=-522.95
X=3.141592/20.
Y=3.141592/10.
Z=3*3.141592/20.
R=2*3.141592/10.
write(*,*) 'N      NL100      NT100      NL110      NT1      NT2      NL111      NT111'
write(*,*) '-----'

DO 5 N=1,10
ML100=8*(2*A11-(16./9.)*KS3+(20./9.)*A33-(16./9.)*ETA
* +(16./9.)*A3)*(SIN(N*X))**2
* +4*((32./9.)*KS3+(32./9.)*ETA3+(4./9.)*A3
* +A2)*(SIN(N*Y))**2
NL100=(SQRT(ML100/M))/6.28318
MT100=4*((16./9.)*KS3+(16./9.)*ETA3+(52./9.)*A33
* +(20./9.)*A3+2*A11+2*A1)*(SIN(N*X))**2
* +4*((-16./9.)*KS3+(20./9.)*A33-(16./9.)*ETA3
* +(16./9.)*A3+A22)*(SIN(N*Y))**2
NT100=(SQRT(MT100/M))/6.28318
ML110=4*(2*A11+2*A1+(16./9.)*KS3-(20./9.)*ETA3
* +(2./9.)*A3+(34./9.)*A33)*(SIN(N*X))**2
* +4*(A11+A2+KS1+(2./9.)*KS3-(16./9.)*ETA3+(16./9.)*A3
* +A22+(2./9.)*A33)*(SIN(N*Y))**2+
* 4*(4*ETA3+2*A3+2*A33)*(SIN(N*Z))**2
NL110=(SQRT(ML110/M))/6.28318
MT1=4*(2*A11+4*ETA3+2*A3+2*A33+2*A1)*(SIN(N*X))**2
* +4*(A2+A11-KS1+A22+2*A33-2*KS3)*(SIN(N*Y))**2
* +(4./9.)*(16*KS3-20*ETA3+2*A3+34*A33)*(SIN(N*Z))**2
NT1=(SQRT(MT1/M))/6.28318
MT2=8*(2*A11-(8./9.)*KS3-(8./9.)*ETA3+(8./9.)*A3+
* (10./9.)*A33)*(SIN(N*X))**2+4*((16./9.)*KS3+
* (16./9.)*ETA3+(16./9.)*A33+2*A22+A1+(2./9.)*
* A3)*(SIN(N*Y))**2+(8./9.)*(-8*KS3-8*ETA3+8*A3+
* 10*A33)*(SIN(N*Z))**2
NT2=(SQRT(MT2/M))/6.28318
if(n.lt.51)goto 1000
goto 1100
1000 ML111=4*(2*A11+2*KS1+A2+2*A22+A1-(20./9.)*KS3
* +(16./9.)*ETA3+(2./9.)*A3+(52./9.)*A33)*(SIN(N*Y))**2
* +( 4./9.)*(2*KS3+20*ETA3+25*A3+2*A33)*
* (SIN(N*R))**2
NL111=(SQRT(ML111/M))/6.28318
MT111=2*(4*A11-2*KS1+2*A2+2*A1+4*A22+(52./9.)*A3
* +(20./9.)*KS3-(16./9.)*ETA3+(56./9.)*A33)*

```

```

*   (SIN(N*Y))**2+(2./9.)*(2*A3+52*A33-2*KS3-20*
*   ETA3)*(SIN(N*R))**2
NT111=(SQRT(MT111/M))/6.28318
goto 1110
1100   nt111=0
nl111=0
1110   WRITE(*,11)N,NL100,NT100,NL110,NT1,NT2,NL111,NT111
11     FORMAT(I3,1X,F6.2,2X,F6.2,2X,F6.2,1X,F6.2,1X,F6.2,
*   1X,F6.2,1X,F6.2)
5      continue
END

```

ÖZGEÇMİŞ

01.01.1976 tarihinde Amasya'nın Gümüşhacıköy ilçesinde doğdu. İlk, Orta ve Lise öğrenimini aynı yerde tamamladı. 1993 yılında K.T.Ü. Fen Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümünde başladığı lisans eğitimini, 1997 yılında tamamladı. 1998 yılında Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Anabilim Dalında, Yüksek Lisans eğitimini başladı ve halen devam etmektedir. Aynı zamanda M.E.B. Fen Liseleri Bilim Danışma Grubunda Fizik öğretmeni olarak görev yapmaktadır.

