

**ATOMLARARASI ETKİLEŞME POTANSİYELLERİ VE MATERYAL  
FİZİĞİNDEKİ UYGULAMALARI**

**BİLGE BORAZAN**

**YÜKSEK LİSANS TEZİ**

**FİZİK ANA BİLİM DALI**

**2013**

**TRAKYA ÜNİVERSİTESİ**

**FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

T.Ü. Fen Bilimleri Enstitüsü onayı

Prof. Dr. Mustafa ÖZCAN  
Fen Bilimleri Enstitüsü Müdürü

Bu tezin Yüksek Lisans tezi olarak gerekli şartları sağladığını onaylarım.

Prof. Dr. Şevket Erol OKAN  
Anabilim Dalı Başkanı

Bu tez tarafımca (tarafımızca) okunmuş, kapsamı ve niteliği açısından bir Yüksek Lisans tezi olarak kabul edilmiştir.

Doç. Dr. Seyfettin DALGIÇ  
Tez Danışmanı

Bu tez, tarafımızca okunmuş, kapsam ve niteliği açısından Fizik Anabilim Dalında bir Yüksek lisans tezi olarak oy birliği/oy çokluğu ile kabul edilmiştir.

Jüri Üyeleri (Ünvan, Ad, Soyad):

İmza

Doç. Dr. Seyfettin DALGIÇ

.....

Doç. Dr. Mesut KAÇAN

.....

Yrd. Doç. Dr. Sedat ŞENGÜL

.....

Tarih: ...../...../.....

**T.Ü.FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**  
**FİZİK ANABİLİM DALI YÜKSEK LİSANS/DOKTORA PROGRAMI**  
**DOĞRULUK BEYANI**

İlgili tezin akademik ve etik kurallara uygun olarak yazıldığını ve kullanılan tüm literatür bilgilerinin kaynak gösterilerek ilgili tezde yer aldığını beyan ederim.

.... / .... /2013  
BİLGE BORAZAN

## ÖZET

Bugünlerde, bilgisayar teknikleri atomik seviyede yapılan araştırmalarda sık kullanılır ve çeşitli problemlerin anlaşılmasında önemli rol oynar. Tekniklerinin çoğu ampirik denilen atomlararası potansiyeller esasına dayanır. Bu tezde, gerçek uzay formalizminde verilen atomlararası potansiyeller basit metal sistemlerine uygulanmıştır. Kullanılan bu potansiyellerin kuvvetli ve zayıf yönleri ortaya çıkarılmıştır. Bundan dolayı üzerinde çok çalışılmış ve tam olarak anlaşılmuş metal sistemler seçilmiştir. Ayrıca, Pseudopotansiyel kavramı geniş bir şekilde ele alınmıştır. Modifiye edilmiş boş küre(MAEC) model pseudopotansiyeli kullanılarak basit sıvı metallerin atomlararası çiftler potansiyelleri hesaplanmıştır.

Yıl : 2013  
Sayfa Sayısı : 69  
Anahtar Kelimeler : Atomlararası Etkileşme Potansiyelleri, Pseudopotansiyel, Metaller ve Basit Sıvı Metaller

Master Of Science Thesis  
Interatomic Interaction Potential and Applications of Material Physic  
Trakya University Institute of Natural Sciences  
Department Of Physics

## **ABSTRACT**

Nowadays, computer techniques are often used in research conducted at the atomic level and plays an important role in understanding the various problems. Many of these computer techniques are based on the so-called empirical interatomic potentials. In this thesis, the real space formalism interatomic potentials applied to simple metal systems. Through use of these potentials have revealed strengths and weaknesses. Therefore, metal systems have been selected on the most studied and completely understood. In addition, the concept of pseudopotentials is discussed extensively. Interatomic pair potentials of simple liquid metals have been calculated by using a modified empty core model pseudopotential (MAEC).

Year : 2013  
Number of Pages : 69  
Keywords : Interatomic Interaction Potentials, Pseudopotential, Simple Basic Metals and Metals.

## TEŞEKKÜR

Bana bu çalışma ortamını sağlayan, çalışmamın her aşamasını titizlikle takip ederek, önerileri ve engin tecrübesi ile bana yol gösteren ve beni yönlendiren; düzenli, planlı ve çalışma zevkini veren çok değerli hocam Doç. Dr. Seyfettin DALGIÇ' a teşekkürlerimi sunmayı çok zevkli bir görev sayarım.

Çalışmam süresince bilgisayar ve diğer konularda öneri ve bilgisinden, her türlü olanaklarından faydalandığım çok değerli hocamlarım Prof. Dr. Serep ŞENTÜRK DALGIÇ ve Yrd. Doç. Dr. Sedat ŞENGÜL' e teşekkürlerimi sunmayı bir borç bilirim.

Çalışmam süresince her türlü zorluğa katlanarak yanımda olan, bana her konuda yardımcı olan desteğini esirgemeyen sözlüm Alper Koray GÜNER'e teşekkür ederim.

Manevi desteklerinden dolayı aileme ve yardımlarından dolayı da arkadaşım Sezgin Akalın' a teşekkür ederim.

Bu tez çalışması Trakya Üniversitesi Bilimsel Araştırma Projeleri TÜBAP-2012-04 no'lu Proje ile desteklenmiştir. Desteklerinden dolayı TÜBAP' a teşekkür ederim.

# İÇİNDEKİLER

BÖLÜM 1.....	1
GİRİŞ .....	1
BÖLÜM 2 .....	5
ATOMLARARASI POTANSİYELLER .....	5
(2.1) Giriş .....	5
(2.2) Potansiyel Türleri .....	7
(2.3) Atomlararası Potansiyellerden Hesaplanabilen Fiziksel Özellikler .....	8
(2.4) Morse Potansiyeli .....	10
(2.5) Sutton-Chen Potansiyeli .....	11
(2.6) Gupta Potansiyeli .....	11
(2.7) Finnis-Sinclair Potansiyeli .....	12
(2.8) Erkoç Potansiyeli .....	13
(2.9) Tersoff Potansiyeli .....	14
(2.10) Atomlararası Potansiyellerin Karşılaştırılması .....	16
BÖLÜM 3.....	18
PSEUDOPOTANSİYEL KAVRAMI .....	18
(3.1) Giriş .....	18
(3.2) Pseudopotansiyel Kavramı .....	19
(3.3) Pseudopotansiyel Formalizmi .....	20
(3.4) Ekranlama Teorisi .....	28
(3.5) Yerel Alan Düzeltme Fonksiyonu .....	29
(3.6) Modifiye Edilmiş Ascroft Boş Küre Model Pseudopotansiyelleri .....	31
(3.7) Pseudopotansiyel Hesaplamaları .....	32
(3.8) Radyal Dağılım Fonksiyonları İle Atomlararası Çiftler Potansiyellerinin Karşılaştırılması .....	37

BÖLÜM 4.....	42
SONUÇLAR VE TARTIŞMA .....	42
(4.1) Morse Potansiyeli .....	42
(4.2) Sutton-Chen Potansiyeli .....	47
(4.3) Gupta Potansiyeli .....	52
(4.4) Üç Farklı Potansiyelde Metallerin Karşılaştırma Hesapları .....	57
KAYNAKÇA .....	64
ÖZGEÇMİŞ .....	69

## ŞEKİLLER LİSTESİ

Şekil 2.1. Deneysel Veriler İçin Bir Potansiyelin Uygun Parametrelere Fitlenmesi.....	6
Şekil 3.1. Basit Sıvı Metaller İçin Hesaplanan Matris Elemanları .....	33
Şekil 3.2. Basit Sıvı Metaller İçin Hesaplanan Atomlararası Çiftler Potansiyeli.....	34
Şekil 3.3. Farklı Metallere Sahip Sıvı Metallerin Hesaplanan Matris Elemanları .....	35
Şekil 3.4. Farklı Metallere Sahip Sıvı Metallerin Hesaplanan Atomlararası Çiftler Potansiyelleri .....	36
Şekil 3.5. Sıvı Metal Li İçin Radyal Dağılım Fonksiyonu İle Atomlararası Çiftler Potansiyelinin Karşılaştırılması .....	37
Şekil 3.6. Sıvı Metal Na İçin Radyal Dağılım Fonksiyonu İle Atomlararası Çiftler Potansiyelinin Karşılaştırması .....	38
Şekil 3.7. Sıvı Metal K İçin Radyal Dağılım Fonksiyonu İle Atomlararası Çiftler Potansiyelinin Karşılaştırması .....	38
Şekil 3.8. Sıvı Metal Rb İçin Radyal Dağılım Fonksiyonu İle Atomlararası Çiftler Potansiyelinin Karşılaştırması .....	39
Şekil 3.9. Sıvı Metal Cs İçin Radyal Dağılım Fonksiyonu İle Atomlararası Çiftler Potansiyelinin Karşılaştırması .....	39
Şekil 3.10. Sıvı Metal Mg İçin Radyal Dağılım Fonksiyonu İle Atomlararası Çiftler Potansiyelinin Karşılaştırması .....	40
Şekil 3.11. Sıvı Metal Al İçin Radyal Dağılım Fonksiyonu İle Atomlararası Çiftler Potansiyelinin Karşılaştırması .....	41
Şekil 3.12. Sıvı Metal Al İçin Radyal Dağılım Fonksiyonu İle Atomlararası Çiftler Potansiyelinin Karşılaştırması .....	42
Şekil 4.1. Cu Metali İçin Morse Potansiyeli .....	43
Şekil 4.2. Ag Metali İçin Morse Potansiyeli .....	44
Şekil 4.3. Au Metali İçin Morse Potansiyeli .....	44
Şekil 4.4. Ni Metali İçin Morse Potansiyeli .....	45
Şekil 4.5. Ir Metali İçin Morse Potansiyeli .....	45
Şekil 4.6. Pt Metali İçin Morse Potansiyeli .....	46
Şekil 4.7. Tüm Metaller İçin Morse Potansiyeli .....	47
Şekil 4.8. Cu Metali İçin Sutton-Chen Potansiyeli .....	48
Şekil 4.9. Ag Metali İçin Sutton-Chen Potansiyeli .....	49
Şekil 4.10. Au Metali İçin Sutton-Chen Potansiyeli .....	49

Şekil 4.11. Ni Metali İçin Sutton-Chen Potansiyeli .....	50
Şekil 4.12. Ir Metali İçin Sutton-Chen Potansiyeli .....	50
Şekil 4.13. Pt Metali İçin Sutton-Chen Potansiyeli .....	51
Şekil 4.14. Tüm Metaller İçin Sutton-Chen Potansiyeli.....	52
Şekil 4.15. Cu Metali İçin Gupta Potansiyeli .....	53
Şekil 4.16. Ag Metali İçin Gupta Potansiyeli .....	54
Şekil 4.17. Au Metali İçin Gupta Potansiyeli .....	54
Şekil 4.18. Ni Metali İçin Gupta Potansiyeli .....	55
Şekil 4.19. Ir Metali İçin Gupta Potansiyeli .....	55
Şekil 4.20. Pt Metali İçin Gupta Potansiyeli .....	56
Şekil 4.21. Tüm Metaller İçin Gupta Potansiyeli .....	57
Şekil 4.22. Cu Metali İçin Farklı Potansiyellerin Karşılaştırılması .....	58
Şekil 4.23. Ag Metali İçin Farklı Potansiyellerin Karşılaştırılması .....	59
Şekil 4.24. Au Metali İçin Farklı Potansiyellerin Karşılaştırılması .....	60
Şekil 4.25. Ni Metali İçin Farklı Potansiyellerin Karşılaştırılması .....	61
Şekil 4.26. Ir Metali İçin Farklı Potansiyellerin Karşılaştırılması .....	62
Şekil 4.27. Pt Metali İçin Farklı Potansiyellerin Karşılaştırılması .....	63

## TABLULARIN LİSTESİ

Tablo 2.1.Atomlararası Potansiyellerin Karşılaştırılması .....	17
Tablo 3.1.Modifiye Edilmiş Ascroft Boş Küre (MAEC) Model Potansiyeli Hesaplamalarında Kullanılan Giriş Parametreleri .....	32
Tablo 4.1.Morse Potansiyeli Parametreleri .....	43
Tablo 4.2.Sutton-Chen Potansiyeli Parametreleri .....	48
Tablo 4.3.Gupta Potansiyeli Parametreleri .....	53

# BÖLÜM 1

## GİRİŞ

Malzemeler ile ilgili uzun süre devam eden bilimsel arařtırmaların amaçlarından biri, malzemelerin özellikleri ve mikro-yapıları arasındaki ilişkileri doğru olarak tespit etmektir. Örneğın, metal ve metal alařımların modern teorisi, 19. yüzyılın sonunda başlayan ve son yüzyıl süresince hızlı bir şekilde gelişen Fiziksel Metalürji (malzeme bilimi) üzerine dayandırılır. Bir alařımın bazı belirli yapılarını oluşturulup oluşturulmayacağını öngörmek, atomik boyutu ve elektro-negatifliğı açıklamak için kristalimsi yapı kullanan, ampirik (deneysel) bir kural 1930'larda, Hume-Rothery ve arkadaşları[1] tarafından önerildi. 1950'lerde Darken ve Gurry, bir metalik sistemin katı çözünürlüğünün önceden tahmin edilebilmesi için iki parametre, elektro-negatiflik ve atomik yarıçap kullanılmasını önerdiler[2,3]. Katıların termodinamiklerine dayalı olarak ve Enerji-Band Teorisinin bazı hesaplanmış sonuçları, tamamlayıcı elementlerin bileşenlerine esas teşkil eden alařımlar ve metallerin termodinamik özelliklerini hesaplamak için bir yarı- nicel makroskopik model Miedema ve arkadaşları tarafından 1970'lerin ortasında geliştirildi[4]. Daha sonra Miedema'nın modeli, ikili metal sistemlerinin Gibbs serbest enerji diyagramını kurmak, yani tüm ilişkili alařım fazlarını serbest enerji eğrilerini hesaplamak için kullanıldı[5,6]. Üstelik, Miedema'in modeli, metal-metal çok tabakalıların ara yüzeyle ilgili serbest enerji ve yarı kararlı alařım fazlarının özelliklerini hesaplamak içinde kullanıldı[7-9]. Son on yılda, bir fiziksel ölçek genişliğinde sayısal yaklaşımların anlamlı ilerlemesi, örneğın, makroskopikten atomiğe ve elektronik ölçeklerinden daha ařağıya kadar yeni ve heyecan verici dallar arası

bilim alanı (Hesaplamalı Malzemeler Bilimi) geliştirilmiştir. Hesaplamalı malzemeler bilimi, malzemeler biliminin gelişmesini desteklemede önemli bir rol oynamıştır. Bu teori, aşırı basitleştirilen ilkeler doğrultusunda sıkı bir şekilde sınırlandırılmış ve uygulamada gerekli parametreler tarafından çoğu kez sınırlandırılmış gerçek deneye köprü kurar. Ayrıntılı bir şekilde mekanizma ile ilgilenen hesaplama, bir atomik ölçekte veya katıların elektronik yapı derinliğine kadar düşmesi ile anlamlı bir ilerleme başarılmıştır. Bu yüzden, metaller ve alaşımların özelliği ve mikro-yapısı arasındaki ilişkinin bir nicel anlaşılmasına yaklaşmak mümkündür. Bu alandaki araştırmacılar, bilinen malzemelerin fiziksel ve kimyasal özelliklerinin nasıl geliştirileceğini öğrenmeye çalışıyorlar. Hatta doğada bulunmayan, fakat laboratuvarında suni olarak sentezlenmiş ve tasarlanmış bazı yeni malzemelerin özelliklerini tahmin ediyorlar. Hesaplamalı malzemeler biliminin asıl amacı, uygun yöntemler kullanılarak elde edilen bilginin performansı ve arzu edilen mikro-yapı ile belirli bir malzemeyi tasarlayabileceği konusunda insanoğluna yardım etmektir.

Hesaplamalı malzemeler biliminde, fizik, kimya, matematik, mekanik mühendisliği ve bilgisayar biliminde iyi bilinen kavramlar ve ilerlemeler birleştirilmiş ve ilişkili bilim konuları sayısal olarak uygulanmıştır. Fiziksel bir ölçekte, malzemelerin özelliği ve mikro-yapısı arasındaki ilişki (korelasyon), dört farklı ölçekte ele alınır. Bunlar sırası ile, elektronik ölçek, atomik ölçek, makroskopik ölçek ve mezoskopik ölçektir[10,11]. Herhangi bir şüphe olmaksızın, malzemelerin özelliği ve mikro-yapısı arasındaki korelasyonun doğru tahmini, gerçek materyalde yaklaşık  $10^{23}$  çekirdek ve elektron için Schrödinger dalga denkleminin çözümünü gerektirmektedir. Böyle bir diferansiyel denklem, problemde kapsanan tüm parçacık etkileşimlerini tarif eden bir Hamiltonyen ile donatılmış olmalıdır. Maalesef, böyle geniş hesaplama çaba gerektirdiğinden, gerçek malzemeler için Schrödinger denklemini doğrudan çözmek çok zordur. Bunun yanında, ab-initio hesaplamalarının bazı akla yatkın varsayımları ve uygulamadaki yaklaşımları içerdiği görüldüğü açıktır. Örneğin, bu hesaplamalarda yerel yoğunluk fonksiyonel teoriye dayanan ve adyabatik Born–Oppenheimer yaklaşımı kullanılır. Genelde hesaplamalar üç ana grupta sınıflandırılabilir. Birincisi, sıkı bir elektron yaklaşımını öneren, Hartree–Fock yaklaşımından oluşur. İkinci grup ise yine sadece yaklaşık olarak çözülebilen, çok-cisimli problem için tam bir arka plan öneren, yoğunluk fonksiyonel teori üzerine dayanan yaklaşımlardan oluşur. Bu her iki durumda da sonuç tek elektron benzeri bir denkleme gider. Üçüncü grup ise kuantum Monte Carlo yönteminden oluşur. Gerçekten, çoğu durumda bazı varsayımlar ve yaklaşımlar ile ab-initio hesaplamalarının uygulanması, atomların sadece birkaçını içeren bir sistemin statik

özelliklerinin çalışmasıyla sınırlandırılmıştır. Bu yöntemler ve yaklaşımlar çalışan bir sistemin periyodik sınır koşullarına rağmen gerçekten sistem içinde kapsanan atomların sayısını arttırmaz. Sonuç olarak, ab-initio hesaplamalar ile çoğu gerçek malzemelerin özelliklerini hesaplamak mümkün değildir. Bu bakımdan, klasik Monte Carlo yöntemi ve Moleküler Dinamik simülasyon gibi diğer yöntemler, çok güçlü araçlardır ve hala hesaplamalı malzemeler biliminin hızla büyüyen alanında geniş ölçüde uygulanmaktadır[12]. Birçok durumda araştırmacılar, malzemelerin yapısal fonksiyonları tahmin edebilir ve güvenilir deneysel verilerde parametreleri uygun hale getirebilirler. Metal ve metal alaşımlarında atomlararası potansiyeller ile ilgili yöntem, yoğun madde fiziği ve aynı zamanda malzeme biliminin bazı temel konularını ve onların uygulamalarını kapsamaktadır.

Maddenin fiziksel özellikleri katı, sıvı ve gaz gibi çeşitli fazlarda gözlenebilir. Ayrıca çeşitli fazlarda yine maddenin birçok fiziksel özelliğini de teorik olarak hesaplamak ve tahmin etmek mümkündür. Kuantum mekanik metotlarının ilk prensibi dikkate alınarak yapılan hesaplamalar hiç şüphe olmadan doğru sonuçlar verir. Ancak Schrödinger denklemini doğru çözmek büyük bir hesaplama gerektirdiğinden, bu yöntemler henüz onlarca atomun sadece birkaçını içeren sistemlerde statik özelliklerin çalışmaları ile sınırlıdır. Diğer yandan eksikliğine rağmen eski yöntemlerin doğruluğu, ampirik(deneysel) atomlararası potansiyelleri çok büyük sistemlerde ele alabilir ve statik çalışmanın yanı sıra bu tür sistemlerin dinamik özellikleri kullanılabilir[13].

Geliştirilmiş model potansiyelleri genellikle küçük veya orta ölçekli atomları içeren sistemler için kullanılmaktadır. Lantanit ve aktinit serisi yani ağır elementleri içeren sistemler için geliştirilen sadece birkaç model potansiyel vardır. Her ne kadar bilgisayar olanakları gün geçtikçe daha iyi bir hale gelse de, tüm elektron sistemlerini içeren yöntemler kullanılarak çok cisimli potansiyelleri hesaplamak zordur. Bundan dolayı, model potansiyelleri şu ana kadar kullanılmıştır ve uzun süre de kullanılacaktır.

Genişlemeye bağlı olarak atomlar arası potansiyeller genellikle iki şekilde sınıflandırılır; Çiftler potansiyeller sadece iki-cisimli terimleri içerir ve çok cisimli potansiyeller, üç cisimli ve daha yüksek terimleri içerir. Teoride sadece n-cisimli atom etkileşmesini tanımlamak zor olmadığı gibi ayrıca hesaplamada n-cisimli genişlemesini kullanmakta zor olmadığından, n-cisim genişlemesi genellikle üç-cisim genişlemesinden sonra kesilir. Kesilen terimlerden gelen katkı kalan terimlerdeki çeşitli parametreler arasına yerleştirilerek dahil edilebilir. Birçok durumda araştırmacılar, fonksiyonları tahmin edebilir ve

güvenilir deneysel verilere parametreleri uygun hale getirebilirler. Öncelikle, metaller ve alaşımların atomlararası potansiyelleri ile ilişkin yöntem bilimi, yoğunlaştırılmış madde fiziği ve aynı zamanda malzemeler biliminin bazı temel konularını ve onların uygulamalarını kapsamaktadır. Gömülü atom potansiyeli, Finnis–Sinclair potansiyeli, Tersoff potansiyeli, Sutton-Chen potansiyeli, Morse potansiyeli, Erkoç potansiyeli ve Gupta potansiyeli gibi birkaç atomlararası potansiyelin temel kavramları ve yöntemleri ayrıntılı olarak tanımlanacaktır. Potansiyel fonksiyonlar ve fiziksel özellikler arasındaki bağıntılar, uygun işlemlerde kullanılan bu özelliklerin, atomlararası potansiyellerden nasıl ortaya çıkarıldığını göstermek için tanımlanır. Bu tanımlamada önemli bir yöntem, atomlararası potansiyellerin hesaplanmasında ab-initio yöntemi kullanılır. Bu yöntem, değişik termodinamik özelliklerini içeren ikili geçiş metal sistemlerinde çok olumlu (esas olarak dengede karıştırılmayan) durumdan, çok olumsuz (sık sık karıştırılabilen) duruma kadar olan kısımları içerir. Yönteme dayalı olarak, değişik atomlararası potansiyelleri yapılandırmak için ayrıntılı işlemlerle bazı ikili geçiş metal sistemlerine uygulanmıştır. Son zamanlarda bazı araştırmacılar tarafından uzun-menzilli deneysel potansiyeller üzerine çalışmalar yapılmıştır[14].

Bugün birçok alanda, bilgisayar teknikleri atomik seviyede araştırma yöntemlerinin gerekli parçasını oluşturur ve çeşitli problemleri anlamak için önemli rol oynar. Tekniklerinin çoğu ampirik (deneysel) de denilen “Atomlararası Potansiyeller” esasına dayanır. Born-Oppenheimer yaklaşımı esasına dayanan atomlararası potansiyeller, atomların koordinatlarına bağlı bir klasik sistemin potansiyel enerjisinin nasıl olduğunu tanımlar. Çeşitli termodinamik özelliklerin hesaplanmasında kullanılan istatistiksel mekanik formalizmini kolaylaştıran atomlararası çiftler potansiyeli aynı zamanda kolay simülasyon yapılmasını da sağlar.

Bu tez şu şekilde planlanmıştır. Birinci bölümde, Atomlararası Potansiyeller konusuna kısa bir giriş yapılmıştır. İkinci bölümde, Atomlararası Potansiyeller geniş bir şekilde ele alınarak bu konuda teori bilgileri açıklamalarıyla verilmiştir. Üçüncü bölümde, Pseudopotansiyel kavramı geniş bir şekilde sunulmuş ve basit sıvı metal sistemlerin atomlararası çiftler potansiyelleri hesaplanmıştır. Son bölümde ise metal sistemlerine uygulanan farklı atomlararası potansiyeller hesaplanmıştır. Ayrıca bu potansiyellerin kendi aralarında genel karşılaştırılması yapılmıştır.

## BÖLÜM 2

### ATOMLARARASI POTANSİYELLER

#### 2.1 Giriş

Atomlararası potansiyeller, atomlar arasındaki etkileşmeleri tanımlamak için kullanılır. Bunlar malzemelerin gerçek davranışlarını belirler. İki atom arasındaki uzaklık çok büyükse bunlar arasındaki kuvvet ve sistemin elektrostatik potansiyel enerjisi sıfırdır. Atomlar birbirine yaklaştığında iki kuvvet etkili olur. Bunlar çekici ve itici kuvvetlerdir. Bu durumda sistemin potansiyel enerjisi uzaklığa bağlı olarak pozitif veya negatif olabilir.

İyi ve doğru hesaplama yapabilmek için atomlararası potansiyellerin aşağıdaki özellikleri taşıması gerekir.

**a-) Esneklik:** Potansiyel enerji fonksiyonu çok sayıda ve değişik veriyi tarif edebilmelidir. Kohezif ve yüzey enerjileri bunların başında gelir.

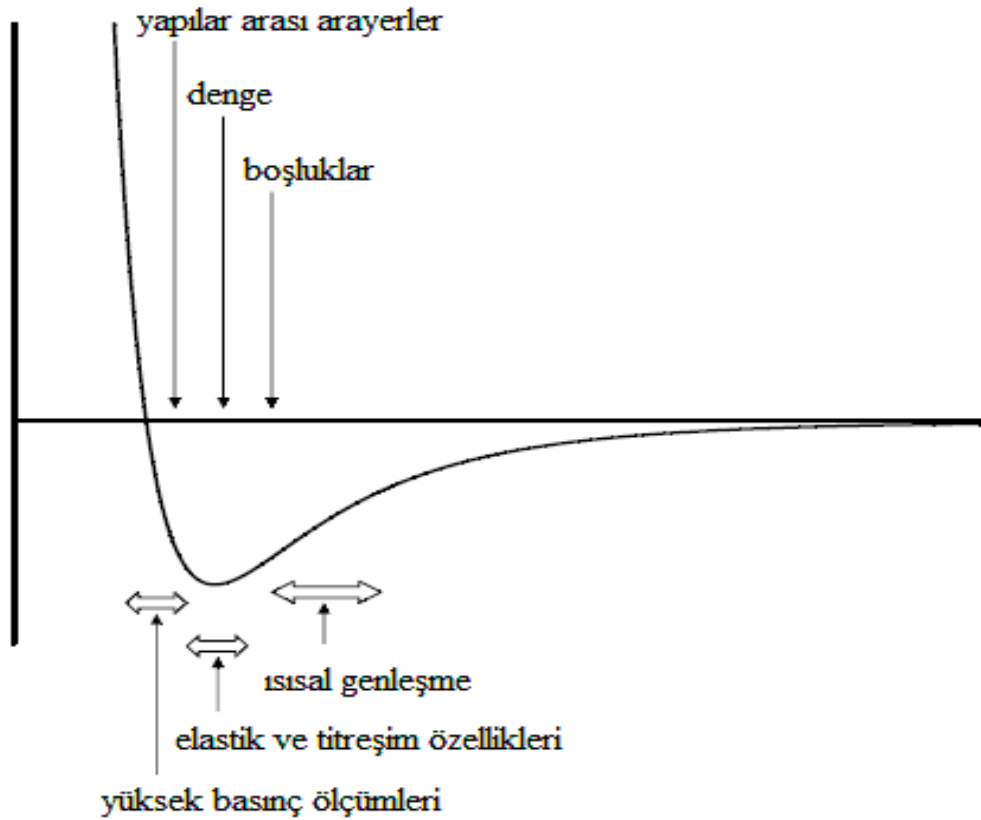
**b-) Doğruluk:** Potansiyel enerji fonksiyonunun yapılandırılmasında kullanılan veriyi tam olarak üretir. Deneyi ifade eden doğruluk farklı bir kriterdir ve Schrödinger denklemini ifade eden doğrulukla karıştırılmamalıdır. Doğruluk, verilere dayalı tahmin aracı olarak kullanıldığında bazı ampirik potansiyellerin sonuçları büyük ölçüde tutarlıdır.

**c-) Taşınabilirlik:** Potansiyel fonksiyonu en azından nitelik olarak yapılandırmaya dahil edilmemiş verileri tanımlamalıdır. Bu özellik neredeyse tüm atomlararası potansiyellerin altındaki kavramdır. Geometrilerin ve olguların bir aralık içinde toplam enerjilerini herhangi

bir özel ayarlama yapmadan aynı algorithmada tutmak gerekir. Bu özellik sık sık bazı örneklerin kullanılabilir olduğu konusundaki yanlışlığı ortaya çıkardığından oldukça önemlidir.

**d-) Hesaplama Verimliliği:** Sistemin büyüklüğü, zaman ölçeği ve hesap kaynakları gibi etkilerde fonksiyonun hesaplanması yeterince hızlı olmalıdır.

Ayrıca, deneysel verileri için bir potansiyelin uygun parametrelere fitlenmesi Şekil (2.1)'de şematik olarak verilmiştir. Şekilden de görüldüğü gibi değişik durumlara karşılık gelen fiziksel özellikler açık bir şekilde gösterilmiştir.



Şekil 2.1. Deneysel veriler için bir potansiyelin uygun parametrelere fitlenmesi

Çok cisim etkileri, çiftler potansiyelinden daha ileridir ve bu katkılarda iki yaklaşım bulunur ilk yaklaşımda, çiftler terimine bir başka terim eklenir. Bu verilen atomun yerel elektron yoğunluğunun fonksiyonudur. Bu tip potansiyellere, Gömülü Atom(EAM) Potansiyelleri[15], Finnis-Sinclair(FS) Potansiyelleri[16], Sutton-Chen(SC) Potansiyeli[17] verilebilir. İkinci yaklaşımda ise üç-cisimli ve daha yüksek mertebeden etkileşmelere uygun olan fonksiyonlara gidilir. Bu yüksek mertebeli terimlerin eklenmesi, çiftler potansiyelinin tek başına kullanılarak elde edilecek enerji modelleme sonuçlarından daha iyi sonuç verir.

## **2.2 Potansiyel Türleri**

Genelde Potansiyel türleri ikiye ayırılır. Bunları şematik olarak gruplamak faydalı olacaktır.

### **I. Tür Potansiyeller**

#### **a-) Model Potansiyeller**

- Katı küre, kare kuyu, yumuşak küre,
- Simülasyon metotlarının detaylı incelenmesi,
- Taneli dinamik, enerji tüketen parçacık dinamiğidir.

#### **b-) Valans Kuvvet Alanları**

- Harmonik kuvvetler (bağlar ve açılar),
- Kovalent sistemler için moleküler kuvvet alanlarıdır.

#### **c-) Merkezi Kuvvet Potansiyeller**

- Atomlar ve iyonlar arasında sadece uzaklığa bağlı çiftler etkileşmeleri,
- Tipik örnekler seyrek gazlar ve iyonik katılardır.

#### **d-) Moleküler Mekanik Kuvvet Alanları**

- Moleküler kuvvet alanları valans kuvvet alanlarıdır. Moleküller arası alanlar ise merkezi kuvvet potansiyelleridir.
- Kompleks sistemler için temel kullanımlardır.

## II. Tür Potansiyeller

### a-) Polarize Edilebilir Modeller

- En iyi bilineni kabuk modelidir fakat başka örnekleri de vardır.

### b-) Metal Potansiyeller

- İtici çiftler potansiyeli ve çok-cisimli bağlanma terimlerinden oluşmaktadır. sp bağlanma yönlü etkileri de dikkate almak gereklidir.
- Çok-cisimli potansiyeller ise Glue modeli, Finnis-Sinclair modelleri ve Gömülü Atom modelleridir.

### c-) Bağlanma Yönelimindeki Sistemler İçin Potansiyeller

- Her zaman çok-cisimli potansiyeller bu form sistemine bağlı kullanılır.
- Zeolitler ve diğer silikatlarda merkeze bağlı potansiyeller ile açığa bağlı terimler sıklıkla kullanılır.
- Çok-cisimli terimlerin bağ-düzen potansiyelleri atomlarının yerel ortamına bağlıdır. Başlangıçta kovalent sistemler için geliştirilmiştir (C,Si), fakat aynı zamanda bağ oluşumu ve kopmasında da etkili olduğu ortaya çıkmıştır.

Bazı potansiyeller Bölüm 2.4'den itibaren detaylı bir şekilde ele alınarak anlatılacaktır.

## 2.3 Atomlararası Potansiyelden Hesaplanabilen Fiziksel Özellikler

Atomlararası potansiyelin parametreleri ve fonksiyon formunun bilinmesi, herhangi bir sistemin kohezif enerjisini, örgü sabitlerini, esneklik katsayılarını ve bulk modülü gibi bazı fiziksel özelliklerinin doğrudan hesaplanabilmesini veya tahmin edilebilmesini sağlar. Özellikle, atomlararası potansiyel oluşturmak için fiziksel özelliklere fit işleminin sık kullanılmasında, stabil ya da yarı dengeli kristalimsi yapılara odaklanılır. Elastik sabitler ve bulk modülü gibi bir yük altında malzemenin deformasyon direnç ölçümü, malzeme kaldırıldığında atomların orijinal denge konumlarına dönebilir. Malzemedeki atomlararası kuvvetlerin gerçek dayanma gücünü yansıtır. Bu yüzden, bir malzemenin temel fiziksel özellikleri olarak, elastik sabitler ve bulk modülü atomlararası potansiyellerde çoğu kez kullanılır.

### a-) Kohezif Enerji Ve Kafes Sabiti

Belirli bir yapının toplam enerjisi  $\Phi_{\text{tot}}$ ,  $\varepsilon$  gerilme olan sürekli parametre  $x$ , atomik hacim  $V$  ya da diğer benzer parametrelerin fonksiyonudur ve  $x$ 'in denge değeri  $x_0$ 'a eşittir. Kararlı veya yarı-kararlı bir yapının toplam enerjisi  $x=x_0$  olduğunda en düşük toplam enerjisi olan duruma karşılık gelir. Enerjinin bu durumları ise sırasıyla,

$$\left. \frac{d^2\Phi_{\text{tot}}}{dx^2} \right|_{x=x_0} > 0 \quad (2.1)$$

$$\left. \frac{d\Phi_{\text{tot}}}{dx} \right|_{x=x_0} = 0 \quad (2.2)$$

şeklinde yazılır. (2.1) ve (2.2) denklemleri bir yapının toplam enerjisinin hesaplandığı tüm enerjilerin denge koşuludur.

### b-) Esneklik Katsayıları Ve Bulk Modülleri

Atomların esneklik katsayıları ve bulk modülleri bir malzemenin yüksüz olduğunda, orijinal denge pozisyonlarına geri dönebilir olduğunu eğer bir yük altında ise malzemenin şekil değiştirmeye karşı direncini ölçer. Esneklik katsayıları ve bulk modülleri malzemedeki atomlararası kuvvetlerin gerçek dayanma gücünü yansıtır. Bu yüzden, bir malzemenin temel fiziksel özellikleri olan esneklik katsayıları ve bulk modülleri atomlararası potansiyellere fitlemede çok sık olarak kullanılır[18]. Esneklik katsayısı,

$$C_{\alpha\beta\eta\mu} = \frac{1}{V} \frac{d^2\Phi_{\text{tot}}}{d\varepsilon_{\alpha\beta} d\varepsilon_{\eta\mu}} \quad (2.3)$$

şeklinde yazılır. Denge durumunda bir yapının bulk modülü ise,

$$B_0 = \frac{1}{V_0} \left. \frac{\partial^2 \Phi_{\text{tot}}}{\partial V^2} \right|_0 \quad (2.4)$$

formunda yazılır. Burada  $V_0$  deforme olmamış hacmi ifade etmektedir.

### c-) Boşluk Oluşum Enerjisi

Atomlararası etkileşimin ortama bağlı olduğu iyi bilinir, bunun anlamı “tek bağ” kuvveti, yerel ortam çok karışık olduğu zaman azalır. Çiftler potansiyeli üzerinde çok cisimli potansiyelin bir avantajı önce ortama bağlılığı yansıtırken, sonra yansıtmayabilir. Tanımlanan çevresel bağlılık çok cisimli potansiyeli incelemek için, boşluk oluşum enerjisi, yüzey enerjisi ve çatlak oluşum enerjisi gibi özellikler potansiyelden çoğu kez hesaplanabilmektedir. Yüzey enerjisi ve çatlak oluşum enerjisini bulmak için, hesaplamalardaki atomik konfigürasyonu yumuşatmak, moleküler dinamik metodu veya moleküler statikleri kullanmak gereklidir[19-21].

## 2.4 Morse Potansiyeli

Morse potansiyeli adını fizikçi Philip M. Morse’ dan almıştır. İki atomlu molekülün potansiyel enerjisi için uygun bir modeldir. Morse potansiyeli aynı zamanda bir yüzey ve bir atom arasındaki etkileşim gibi diğer etkileşimleri modellemek içinde kullanılır. Bu potansiyel,

$$\Phi_{r_{ij}} = D \left[ e^{-2\alpha(r_{ij}-r_0)} - 2e^{-\alpha(r_{ij}-r_0)} \right] \quad (2.5)$$

formundadır. Burada  $D$  atomlar arasındaki bağlanma enerjisi,  $\alpha$  sertlik sabiti,  $r_0$  denge durumunda atomlar arası uzaklıktır, bu parametreler etkileşmenin kuvvet ve menzili ile ilgilidir,  $r_{ij}$  kristalin dış kuvvet etkisindeki atomlar arasındaki uzaklığı gösterir ve potansiyelin minimum konumunu belirler[22].

## 2.5 Sutton-Chen Potansiyeli

Sutton ve Chen tarafından metaller için geliştirilen bu potansiyel uzun menzilli etkileşimleri hesaba katan Finnis-Sinclair potansiyelidir. Finnis-Sinclair potansiyelindeki kısa menzilli etkileşimlerin ileri bir tanımı ile uzun menzilli etkileşimleri daha iyi veren Van der Waals etkileşimlerinin birleşimi şeklindedir. Potansiyelin analitik formu;

$$\Phi(r) = \varepsilon \left( \frac{1}{2} \sum_i \sum_{j \neq i} \Phi^r(r_{ij}) - c \sum_i \sqrt{\rho_i} \right) \quad (2.6)$$

şeklindedir. Burada birinci terim,

$$\Phi^r(r_{ij}) = \sum_j \left( \frac{\alpha}{r_j} \right)^n \quad (2.7)$$

formunda ve ikinci terim,

$$\rho_i = \sum_j \left( \frac{\alpha}{r_j} \right)^m \quad (2.8)$$

şeklindedir.  $\varepsilon$  enerji boyutunda parametre,  $\alpha$  genellikle denge örgü mesafesi olarak alınan uzunluk boyutunda bir parametre,  $m$  ve  $n$  ( $n > m$ ) koşuluna uygun tamsayılar ve  $c$  ise çekici kısmı ölçeklemek için kullanılan boyutsuz parametredir[23].

## 2.6 Gupta Potansiyeli

Gupta potansiyeli Cleri ve Rosato tarafından geliştirilen Sıkı-Bağlanma potansiyeli türlerindedir ve beşinci yakın komşuya kadar olan etkileşimleri ifade edebildiği için “uzun

menzilli sıkı-bağlanma potansiyeli” olarak da bilinir. Bu potansiyel, boşluk oluşum enerjisi ve hacmi, Frenkel çiftlerinin oluşumu gibi basit nokta kusurları ve fonon dağılım eğrilerini başarılı bir şekilde üretmektedir. Bu potansiyel,

$$\Phi(r) = \Phi^r(r) + \Phi^\alpha(r) \quad (2.9)$$

formunda iki terim toplamı olarak yazılır. Eşitliğin sağındaki ilk terim itici, ikinci terim ise çekici etkiye sahiptir. Bu terimlerin açık ifadeleri sırasıyla,

$$\Phi^r(r) = \frac{1}{2} \sum_{ij}^n A_{ij} \exp\left(-p_{ij} \left(\frac{r_{ij}}{r_0} - 1\right)\right) \quad (2.10)$$

$$\Phi^\alpha(r) = -B \sum_{i \neq j}^n \exp\left(-2q_{ij} \left(\frac{r_{ij}}{r_0} - 1\right)\right)^{1/2} \quad (2.11)$$

şeklinindedir. Yukarıdaki ifadede  $r_{ij}$ ,  $i$  ve  $j$  atomları arasındaki uzaklık,  $r_0$  denge komşu uzaklığıdır.  $A_{ij}$  itici çiftler teriminin katsayısı ve  $B_{ij}$  ise  $i$  ve  $j$  bölgelerindeki atomlar arasındaki sıçrama aralığıdır.  $p_{ij}$  ve  $q_{ij}$  de itici ve çekici atomlar arası uzaklığa potansiyel terimlerinin bağlılığını ifade eden terimlerdir[24].

## 2.7 Finnis-Sinclair Potansiyeli

Bu potansiyel enerji fonksiyonu geçiş metalleri için M.W. Finnis ve J.E. Sinclair tarafından geliştirilmiştir[25]. Potansiyel genelde iki terim toplamı olarak,

$$\Phi = \Phi_2 = \Phi_2^N + \Phi_2^P \quad (2.12)$$

verilir. Burada birinci terim,

$$\Phi_2^N = -A \sum_i \left( \sum_{j \neq i} \Phi(r_{ij}) \right)^{1/2} \quad (2.13)$$

formunda itici terimdir. İkinci terim ise,

$$\Phi_2^P = \sum_{i < j} V(r_{ij}) \quad (2.14)$$

şeklinde çekici terim olarak bilinir. Denklem (2.13)'de verilen  $\Phi(r_{ij})$  ve denklem (2.14)'de verilen  $V(r_{ij})$  terimleri genelde,

$$\Phi(r) = \begin{cases} (r - d)^2 + \beta(r - d)^3/d & r \leq d \\ 0 & r > d \end{cases} \quad (2.15)$$

$$V(r) = \begin{cases} (r - c)^2(c_0 + c_1r + c_2r^2) & r \leq c \\ 0 & r > c \end{cases} \quad (2.16)$$

formlarında yazılırlar. Finnis-Sinclair potansiyelinin parametreleri örgü sabiti, kohezif enerji, esneklik katsayısı, kesme modülü ve elementlerin Cauchy basıncı dikkate alınarak belirlenir.

## 2.8 Erkoç Potansiyeli

Bu potansiyel enerji fonksiyonu kübik sistemler için Ş. Erkoç tarafından geliştirilmiştir[26]. Bu potansiyel,

$$\Phi = \Phi_2 = D_{21}\Phi_{21} + D_{22}\Phi_{22} \quad (2.17)$$

formunda iki terim toplamı şeklinde verilir. Burada  $\Phi_{21}$  ve  $\Phi_{22}$  terimleri sırasıyla,

$$\Phi_{2l} = \sum_{i<j} U_{ij}^{(2l)} \quad (2.18)$$

$$U_{ij}^{(2l)} = \frac{A_l}{r_{ij}^{\lambda_l}}, \quad l = 1,2 \quad (2.19)$$

şeklinde yazılırlar. Erkoç potansiyelinin parametreleri bulk, kohezif enerji ve bulk kararlılık koşulunun dikkate alınması ile belirlenir. Bu potansiyel enerji fonksiyonu uygun olan elementler için bulk modüllerini, esneklik katsayılarını ve kristal kararlılığını karşılar.

## 2.9 Tersoff Potansiyeli

Son zamanlarda, kovalent sistemler içinde ampirik atomlararası potansiyeller (özellikle silisyum için) gelişmiştir ve yoğun ilgi görmüştür. Bu potansiyeller, sistemi oluşturan atomların toplam enerjisini atomik durumların açık bir fonksiyonu olarak ifade eder. Daha sonraları silisyum için bu potansiyellerin on türü ve en az sekiz bağımsız grubu önerilmiştir[27]. Aynı zamanlarda bu potansiyellerin doğruluğu ve kullanışlığı ile ilgili herhangi bir sonuca varmak için potansiyeller yeterince karakterize edilmemiş ve testten geçmemiştir.

Son araştırmalarda[28], kovalent sistemleri için uygun bir ampirik atomlararası potansiyel formu önerilmiştir ve silisyum için parametrelerin belirli bir kısmı kullanılmıştır. Genel olarak silisyumun özellikleri çok iyi bilinsede, potansiyel bağ bükme kuvvetlerinin tanımı zayıf kalmıştır. Birçok uygulamada bu tür kuvvetler oldukça önemlidir ve bu nedenle silisyumun esneklik özelliklerinin daha iyi açıklanması için bir dizi parametrenin verilmesi ve alternatif aranmasına gerek duyulmuştur.

Bununla beraber, önceki parametrize korunurken silisyumun tam olarak esneklik özelliklerini açıklayan sadece bir set parametreyi bulmak mümkün değildir. Yeni parametrelerin kullanılmasıyla yapılan kuvvetli ve zayıf yönler ortaya konulmuştur. Bu enerji, çiftler etkileşmelerin toplamı olarak modellenir. Burada çiftler potansiyelinde çekici terim katsayıları verilen çok cisim potansiyelinde yerel ortama bağlıdır. Atomik koordinatların fonksiyonu olarak enerji,

$$\Phi = \sum_i \Phi_i = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} V_{ij} \quad (2.20)$$

formunda verilir. Burada etkileşme terimi,

$$V_{ij} = f_c(r_{ij})[a_{ij}f_R(r_{ij}) + b_{ij}f_A(r_{ij})] \quad (2.21)$$

şeklindedir. Bu terim içinde yer alan diğer ifadelerin açık şekilleri sırasıyla,

$$f_R(r) = A \exp(-\lambda_1 r) \quad (2.22)$$

$$f_A(r) = -B \exp(-\lambda_2 r) \quad (2.23)$$

$$f_c(r) = \begin{cases} 1, & r < R - D \\ \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \sin \left[ \frac{\pi}{2} (r - R) / D \right], & R - D < r < R + D \\ 0, & r > R + D \end{cases} \quad (2.24)$$

$$b_{ij} = (1 + \beta^n \xi_{ij}^n)^{-1/2n} \quad (2.25)$$

$$\xi_{ij} = \sum_{k(\neq i,j)} f_c(r_{ik}) g(\theta_{ijk}) \exp \left[ \lambda_3^3 (r_{ij} - r_{ik})^2 \right] \quad (2.26)$$

$$g(\theta) = 1 + c^2/d^2 - c^2/[d^2 + (h - \cos \theta)^2] \quad (2.27)$$

$$a_{ij} = (1 + a^n \eta_{ij}^n)^{-1/2n} \quad (2.28)$$

$$\eta_{ij} = \sum_{k(\neq i,j)} f_c(r_{ik}) \exp \left[ \lambda_3^3 (r_{ij} - r_{ik})^3 \right] \quad (2.29)$$

şeklinde yazılırlar. Burada i, j ve k sistemdeki atomları sınıflandırır,  $r_{ij}$ , ij bağının uzunluğudur ve  $\theta_{ijk}$ , ij ve ik bağları arasındaki bağ açısıdır.

Önceki çalışmalarda potansiyel parametreleri, elmas yapıda bağ uzunluğu ve bulk modülü ile birlikte silisyumun varsayımsal bulk politipini ve gerçek kohezif enerjisini kapsayan veri tabanına uydurularak belirlenmiştir. Parametreler  $\lambda_3$ ,  $\alpha$ , R ve D sistematik olarak yeterince optimize edilmemiştir.  $\lambda_3=0$  olması sonuçları değiştirmez.  $\lambda_3=0$  olması basit potansiyellerin ve kuvvetlerin hesaplanmasında büyük ölçüde kolaylık sağlar.

## 2.10 Atomlararası Potansiyellerin Karşılaştırılması

Ele alınan bazı atomlararası potansiyellerin karşılaştırılması Tablo (2.1)' de şematik olarak verilmiştir.

Tablo 2.1. Atomlararası Potansiyellerin Karşılaştırılması

Potansiyelin Adı	Modeli	Uygulaması
Morse Potansiyeli	$\Phi_{r_{ij}} = D \left[ e^{-2\alpha(r_{ij}-r_0)} - 2e^{-\alpha(r_{ij}-r_0)} \right]$ <p><math>r_{ij}</math>, kristalin dış kuvvet etkisindeki atomlar arasındaki uzaklığı ve <math>r_0</math>, denge durumundaki uzaklığını gösterir. <math>\alpha</math> ve <math>D</math> sırasıyla <math>i</math> ve <math>j</math> atomları arasında malzemenin fiziksel özellikleri temel alınarak belirlenen sabitlerdir (Morse,1929).</p>	Çoğunlukla kübik metaller için uygundur.
Sutton-Chen Potansiyeli	$\Phi(r) = \varepsilon \left( \frac{1}{2} \sum_i \sum_{j \neq i} \Phi^r(r_{ij}) - c \sum_i \sqrt{\rho_i} \right)$ <p><math>\varepsilon</math> enerji boyutunda parametre, <math>\alpha</math> genellikle denge örgü mesafesi olarak alınan uzunluk boyutunda bir parametredir(Sutton ve Chen,1990).</p>	Çoğunlukla metaller için uygundur
Gupta Potansiyeli	$\Phi(r) = \Phi^r(r) + \Phi^\alpha(r)$ <p>formunda iki terim toplamı olarak yazılır. Eşitliğin sağındaki ilk terim itici, ikinci terim ise çekici etkiye sahiptir (Cleri ve Rosato,1993).</p>	Çoğunlukla çeşitli metaller modellemek için uygundur
Finnis-Sinclair Potansiyeli	$\Phi = \Phi_2 = \Phi_2^N + \Phi_2^P$ <p>formunda iki terim toplamı olarak yazılır. İlk terim itici, ikinci terim çekici etkiye sahiptir(Finnis ve Sinclair,1984).</p>	Çoğunlukla geçiş metalleri için uygundur.
Erkoç Potansiyeli	$\Phi = \Phi_2 = D_{21}\Phi_{21} + D_{22}\Phi_{22}$ <p>formunda iki terim toplamı olarak yazılır. Parametreler bulk, kohezif enerji ve bulk kararlılık koşulunun dikkate alınması ile belirlenir (Erkoç,1994).</p>	Çoğunlukla kübik sistemler için uygundur.
Tersoff Potansiyeli	$\Phi = \sum_i \Phi_i = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} V_{ij}$ <p><math>V_{ij}</math>, <math>i</math> ve <math>j</math> atomları arasındaki itici ve çekici kuvvetler nedeniyle oluşan etkileşmedir(Tersoff,1988a,1988b).</p>	Çoğunlukla kovalent bağlı materyaller için uygundur.

## BÖLÜM 3

### PSEUDOPOTANSİYEL KAVRAMI

#### 3.1 Giriş

Katıların veya sıvıların oluşumu için temel gereksinim pozitif yüklü çekirdek ve negatif yüklü elektronlar arasındaki çekici elektrostatik etkileşimdir. En dıştaki elektronlar olarak ifade edilen değerlik(valans) elektronları, tüm fiziksel özelliklerinin yanı sıra malzemenin kimyasal özelliklerini de belirler. Bu özellikleri incelemek için çeşitli teknikler geliştirilmiştir. Pseudopotansiyel methodu[29,30] malzemelerin fiziksel ve kimyasal özelliklerini incelemek için kullanılan en basit araçlardan biridir. Bu method öncelikle katıların elektron teorisi için geliştirilmiştir[31]. Pseudopotansiyel methodu, malzemelerin üç özelliğini doğru bir şekilde açıklar. Bunlardan birincisi, toplam kristal enerjinin ya da bazı bileşenlerin değeri ile ilişkilidir. İkinci özellik, bir katının basınç-ısı gibi dış etkilere gösterdiği tepkinin nasıl olduğudur. Genellikle, bu özellik durumlarlar arasındaki dış geçişleri kapsamaktadır. Üçüncü özellik ise madde içinde fononlar olarak bilinen iç enerjiler veya titreşim ile ilgilidir.

"Pseudopotansiyel" terimi ilk kez belirgin bir şekilde, düşük enerji nükleon-nükleon saçılması problemini açıklamak için Fermi tarafından kullanılmıştır[32]. Fermi tekniği, birinci dereceden pertürbasyon teorisi çerçevesinde düşük sıcaklık N-cisim saçılmasını açıklar. Bardeen[33] kendisi ile uyumlu ekranla düşüncesi ile bir elektronun deneyimli ortalama etkileşimi açıklamıştır. Pseudopotansiyel teorisi düzlemsel dalgalar[29,34-39] fikrine dayanır.

Kristallerde pseudopotansiyel formalizminin temel kavramları Phillips ve Kleinman[40] tarafından formüle edilmiştir. Antonick[41] yarı iletkenlerin enerji bant yapısının çalışma fikrini genişletmiştir.

### 3.2 Pseudopotansiyel Kavramı

Bir iletken davranışı için kristaldeki serbest elektron ya da değerlik tarafından deneyimli kuvvet gereklidir. Birçok sistem için, sadece sıkı bağlı kor elektronların yer tutucu olarak görev yapabilmesi ve birkaç değerlikli elektronların kimyasal sürece katılabilmesi ile ilgilenir. Pseudopotansiyel teorisi, çok elektronlu kimyasal sorunun boyutunu azaltmak için bir avantaj sağlar. Schrödinger denklemi sadece değerlik elektronları için çözülür ve Hamiltonyene ilave bir terim ile kor elektronların etkileri dolaylı olarak dahil edilmilir. Bir pseudopotansiyeli hesaplama yönteminde, temel kavram iyon çekirdeğin ihmal edilebilir olmasıdır. Pseudopotansiyel metodu katıhal fizikçileri arasında enerji bant yapısını hesaplamak için temel bir yöntem olarak kullanılır. Metallerin çeşitli özelliklerini, yarıiletkenleri, alaşımları, bileşikleri ve kristal olmayan maddeleri, sıvı ve metalik camlar gibi malzemelerin düzensiz aşamalarını incelemek içinde kullanılan çok popüler bir tekniktir.

Pseudopotansiyel terimi; "**Bir elektron ve iyonların çevresindeki elektronların bulutu tarafından modüle edilmiş fakat fiziksel olarak gerçekleştirilebilir zayıf bir efektif potansiyeli**" olarak tanımlanır.

Pseudopotansiyel iki değişik şekilde yapılandırılır. Birincisi, gerçek atom potansiyeline ve ilgili kor dalga fonksiyonlarına açıkça dahil olması gereklidir. Bu birinci ilke metodu olarak adlandırılır. İkincisi ise, basit analitik bir yapıya veya ampirik bir forma sahip model potansiyeli tarafından pseudopotansiyel yer değiştirilir.

Genel olarak, pseudopotansiyel belirli parametreleri içeren belirli bölge içinde geliştirilen ve gerçek potansiyel ile tam olarak yer değiştirebilen açık bir iyon potansiyeli şeklinde kurulur.

Aynı zamanda, pseudopotansiyel yerel ve yerel olmayan özelliklerine göre de sınıflandırılır. Eğer iyon pozisyonlarına bağlı ise yerel pseudopotansiyel olarak adlandırılır. Eğer momentuma veya enerjiye bağlı ise de yerel olmayan pseudopotansiyel olarak[29] adlandırılır. Yerel olmayan pseudopotansiyel enerji özdeğerine bağlı olduğundan,

pseudopotansiyelin tam formu oldukça karmaşıktır. Abarnkov ve Heine[42], Animalu ve Heine[43], Shaw ve Harrison[44] ve Shaw[45] yerel olmayan pseudopotansiyellerini kullanmışlardır. Ancak matematiksel karmaşıklığı nedeniyle, yerel olmayan pseudopotansiyeller, yerel pseudopotansiyellerine kıyasla fazla kullanılmazlar. Yerel pseudopotansiyelin kullanımında farklı sonuçların çok küçük yanlışları olabilir, fakat bu matematiksel karmaşıklığı ve hesaplama süresini azaltır. Bu nedenle yerel model pseudopotansiyeller katı, sıvı ve amorf malzemelerin çeşitli özelliklerinin incelenmesinde çok sık kullanılır. Bugün yaygın bir şekilde, pseudopotansiyel teorisi statik, dinamik, elektronik, manyetik, termodinamik ve metallerin moleküler dinamiği, sıvı metaller, yarı iletkenler, alaşımlar, metalik camlar ve malzemelerin diğer düzensiz fazlarını incelemek için kullanılır[46-78].

Birkaç elektronlu sistemler için Schrödinger denklemini çözmek mümkündür. Fakat çok fazla elektronlu sistemler için modern bilgisayar olanakları ile bile hala bu denklemi tam olarak çözmek mümkün değildir. Pseudopotansiyel kavramı ortogonalleştirilmiş (dik hale getirilmiş) düzlem dalga(OPW) sayısı  $\vec{k}$  ile kolayca anlaşılmalıdır[29, 31, 34, 36].

### 3.3 Pseudopotansiyel Formalizmi

Pseudopotansiyeli formülize etmenin birçok yolu vardır. Bu formülize, ortogonalleştirilmiş (dik hale getirilmiş) düzlem dalga yöntemine dayalı olmalıdır(OPW)[29, 31, 34, 36].

İletim elektron öz-durumu tarafından enerji öz-değer denklemi,

$$H\Psi_k = E_k\Psi_k \quad (3.1)$$

formunda yazılır. Burada H toplam Hamiltonyen ve  $E_k$  toplam enerjidir. Bu enerji kinetik ve potansiyel enerji toplamı,

$$E_k = T + V(r) \quad (3.2)$$

şeklindedir. Metalik sistemlerinde Schödinger denklemi tekrar yazılırsa,

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r) \right] \Psi_k = E_k \Psi_k \quad (3.3)$$

formunu alır. Burada  $\hbar = h/2\pi$ ,  $h$  Planck sabiti ve  $m$  elektronun kütesidir. Burada  $\Psi_k$  durumları, özdeğer denkleminde  $V(r)$  ile aynı tahmin edilir. Kor dalga fonksiyonlarının serbest atom ile aynı olduğu kabul edilse de kor enerjileri genel olarak aynı olmadığına dikkat edilmelidir. Korların küçük olması sebebiyle tüm kor üzerinden toplam katkılar sabit olacaktır. Böylece enerji değil dalga fonksiyonu kayması olur. İletim bandı dalga fonksiyonu, ortogonalleştirilmiş düzlem dalgaların genişletilmiş terimidir. İlk olarak, kor durumlarda ortogonal olarak yapılandırılan basit fonksiyon terimlerinde elektron dalga fonksiyonu genişletilir. Harrison'a[29] göre normalize edilmiş düzlem dalga fonksiyonu,

$$|\vec{k}\rangle = \Omega^{-1/2} \cdot \exp(ik \cdot r) \quad (3.4)$$

şeklindedir.  $r_i$  iyon konumu merkezli normalize edilmiş kor fonksiyonu,

$$|\vec{e}, \vec{r}\rangle = \Psi_e(\vec{r} - \vec{r}_i) \quad (3.5)$$

olduğundan,

$$\langle \vec{e}, \vec{r} | \vec{k} \rangle = \Omega^{-1/2} \int \Psi_e^*(\vec{r} - \vec{r}_i) \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}) d^3r \quad (3.6)$$

şeklinde yazılır. Ortogonalleştirilmiş düzlem dalga ise,

$$|OPW_{\vec{k}}\rangle = |\vec{k}\rangle - \sum_{e,i} |\vec{e}, \vec{i}\rangle \langle \vec{e}, \vec{i} | \vec{k}\rangle \quad (3.7)$$

formundadır ve projeksiyon operatörü,

$$P = \sum_{e,i} |\vec{e}, \vec{i}\rangle \langle \vec{e}, \vec{i}| \quad (3.8)$$

şeklinde yazılır. Bu operatörü OPW formunda,

$$|OPW_{\vec{k}}\rangle = (1 - P)|\vec{k}\rangle \quad (3.9)$$

olarak yazılır. (3.9) denkleminin genişlemesiyle dalga fonksiyonu,

$$\Psi_{\vec{k}} = \sum_{\vec{q}} a_{\vec{q}}(\vec{k}) (1 - P) |\vec{k} + \vec{q}\rangle \quad (3.10)$$

formunu alır. Burada  $a_{\vec{q}}$  genişleme katsayılarıdır.  $\vec{q}$  'nun küçük değerleri için sadece  $\vec{q}$  üzerinden toplamlar önemli katkı sağlar. Varsayılan,

$$\Phi_{\vec{k}} = \sum_{\vec{q}} a_{\vec{q}}(\vec{k}) |\vec{k} + \vec{q}\rangle \quad (3.11)$$

denkleminde  $\Phi_k$  düzgün bir fonksiyon olur ve pseudo-dalga fonksiyonu olarak isimlendirilir. Burada serbest elektron durumlarında  $\Phi_k$  genişlemesi ve kor dışında  $\Phi_k = \Psi_k$  durumunda projeksiyon operatörü sıfırdır. Schrödinger denklemini vermek yerine,

$$\Psi_k = (1 - P)\Phi_k \quad (3.12)$$

denklemini kullanılır. (3.1)' deki Schrödinger denklemini için genişleme uygulanırsa sırasıyla,

$$H(1 - P)\Phi_k = E_k(1 - P)\Phi_k \quad (3.13)$$

$$[T + V(\vec{r})](1 - P)\Phi_k = E_k(1 - P)\Phi_k \quad (3.14)$$

$$[T + V(\vec{r})]\Phi_k - [T + V(\vec{r})]P\Phi_k = E_k(1 - P)\Phi_k \quad (3.15)$$

denklemleri yazılır ve var olan terimler düzenlenerek,

$$T\Phi_k - V(\vec{r})\Phi_k - [T + V(\vec{r})]P\Phi_k + E_kP\Phi_k = E_k(1 - P)\Phi_k \quad (3.16)$$

veya,

$$T\Phi_k + W(\vec{r})\Phi_k = E_k\Phi_k \quad (3.17)$$

şeklinde yazılırlar.

Burada,

$$W(\vec{r}) = V(\vec{r}) - [T + V(\vec{r})]P + E_k P \quad (3.18)$$

formunda yazılır. Bunun 2. terimi,

$$[T + V(\vec{r})]P = \sum_{e,i} E_{e,i} |\vec{e}, \vec{i}\rangle \langle \vec{e}, \vec{i}| \quad (3.19)$$

şeklindedir. Bu denklem (3.18)' de yerine yazılırsa,

$$W(\vec{r}) = V(\vec{r}) - \sum_{e,i} [E_k - E_{e,i}] |\vec{e}, \vec{i}\rangle \langle \vec{e}, \vec{i}| \quad (3.20)$$

denklemi elde edilir. Burada  $W(\vec{r})$  pseudopotansiyel ve  $\Phi_k$  ise pseudo dalga fonksiyonu olarak bilinir. Son denklem pseudopotansiyel denklemdir. Bu denklemde sağdaki ikinci terim iticidir, çünkü baskın olan  $W(\vec{r})$  kor orbitallerin dış bölgesinden ortaya çıkar, böylece  $E_k - E_{e,i}$  farkı büyük ve pozitif olur. Birinci terim ise, doğru potansiyel nedeniyle güçlü ve çekici iyonların kor bölgesindeki değerlik elektronu tarafından hissedilir. Sonuç olarak, itici katkıdan dolayı pseudopotansiyel etkili bir şekilde zayıflar ve doğru potansiyeli iptal eder[29-37]. Değerlik elektronları üzerine iyon kor katkı potansiyelin net etkisi zayıf etkili bir potansiyel olur. Bu pseudopotansiyel olarak bilinen bir pertürbasyon şeklidir.

Böyle bir yöntem basit metallere doğru bir şekilde uygulanır. Bu tür pseudopotansiyel, valans bölgesinde d ve f bantları bulunmayan iyi bilinen metaller gibi yarı iletkenleri tanımlamak için kullanılan bu düzlem dalga grubunun hızlı bir yakınsamaya sahip olduğu bulunmuştur.

Herhangi bir noktada bir elektron, örgü alanı içinde tüm iyonlar ile etkileşime neden olacaktır ve bu yüzden pseudopotansiyel, küresel simetrik bireysel iyonların süperpozisyonu ya da toplamı olarak varsayılır. Böylece,

$$W(\vec{r}) = \sum_i w(\vec{r} - \vec{r}_i) \quad (3.21)$$

şeklinde yazılır. Pertürbasyon genişlemesi kullanılarak pseudopotansiyelin matris elemanları,

$$\langle \vec{k}' | W(\vec{r}) | \vec{k} \rangle = \frac{1}{\Omega} \int \exp(i\vec{k}' \cdot \vec{r}) \sum_i w(\vec{r} - \vec{r}_i) \exp(-i\vec{k} \cdot \vec{r}) d^3r \quad (3.22)$$

şeklinde olur. Toplam ve integral değiştirildiğinde,

$$\begin{aligned} \langle \vec{k}' | W(\vec{r}) | \vec{k} \rangle &= \frac{1}{N} \sum_i \exp[-i(\vec{k}' - \vec{k}) \cdot \vec{r}_i] \\ &\times \frac{1}{\Omega_0} \int \exp[-i\vec{k}' \cdot (\vec{r} - \vec{r}_i)] w(\vec{r} - \vec{r}_i) \exp[i\vec{k} \cdot (\vec{r} - \vec{r}_i)] d^3r \end{aligned} \quad (3.23)$$

denklemi elde edilir. Burada  $\Omega = N\Omega_0$  olarak kullanılmıştır. Son integral tek bir potansiyeli içerir ve tüm konumlarda ölçülebilen iyonun konumu ile düzlem dalgalarıdır.  $\vec{k}' = \vec{k} + \vec{q}$  değerinin kullanılması,

$$\langle \vec{k} + \vec{q} | W(\vec{r}) | \vec{k} \rangle = S(\vec{q})W(\vec{q}) \quad (3.24)$$

formunu alır. Burada sırasıyla  $S(\vec{q})$  ve  $W(\vec{q})$ ,

$$S(\vec{q}) = \frac{1}{N} \sum_i \exp(i\vec{q} \cdot \vec{r}_i) \quad (3.25)$$

$$W(\vec{q}) = \langle \vec{k} + \vec{q} | W(\vec{r}) | \vec{k} \rangle = \frac{1}{\Omega_0} \int \exp[-i(\vec{k} + \vec{q}) \cdot \vec{r}] w(\vec{r}) \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}) d^3\vec{r} \quad (3.26)$$

şeklinde yazılır. Burada **S( $\vec{q}$ ) Yapı faktörü** ve **W( $\vec{q}$ ) Form faktörü** olarak bilinir.

Basit metaller için saçılma matrisinin sadece iyon konumlarına bağlı bir yapı faktörü ve sadece iyon tipine bağlı form faktörü olarak yazılabildiği gösterilmiştir. Bu form faktörü basit olarak pseudopotansiyel olarak ifade edilir. Daha önceden belirtildiği gibi pseudopotansiyel yerel veya yerel olmayan şeklinde olabilir. Bunlar malzemenin özellikleri için kesin tahminler verirler[37]. Özellikle yerel olmayan pseudopotansiyel enerji özdeğerine bağlıdır bu yüzden pseudopotansiyelin tam formu oldukça karmaşıktır. Yerel pseudopotansiyel sadece konuma bağlıdır bu yüzden daha çok tercih edilir[29]. Doğrusu yerel olmayan pseudopotansiyeller gerçek malzemelerin özelliklerinin kesin tahmini için tercih edilmelidir. Ancak, düzgün bir şekilde yerel pseudopotansiyel tarafından oluşturulan sonuçlar kavramsal ve hesaplama açısından basit bir yaklaşım nedeniyle herhangi bir başka yöntem ile elde edilen sonuçlarla karşılaştırılabilir. Literatürde yerel model pseudopotansiyellerinin yapılandırılması ve uygulamaları ile ilgili çok sayıda denemeler bulunur ve araştırmacılar hala yoğun sisteminin nitel ve nicel çalışmaları için yerel pseudopotansiyel tercih etmektedirler[42-52]. Yapı faktörü  $S(\vec{q})$  sıvılar ve katılar içindeki atomların düzeni tarafından yapılandırılan geometrik bir faktördür. Katılar ve sıvılar için bu faktörün hesabı farklıdır. Sadece Fermi yüzeyindeki elektronun durumları ile ilgilenir, bu durumda form faktörü süreklilik gösteren tek bir eğri ile verilir ve  $q/k_f$  oranına bağlıdır.

Form faktörü, metaller içindeki etkileşimler hakkında çok değerli bilgiler verir. Bilinen bu etkileşimlerden, bir metalin çeşitli özellikleri hesaplanabilir. Bu etkileşimler üç türdür. Birinci tür, açık iyon pseudopotansiyeli  $W_B(\vec{q})$  iyon korlarındaki iyonlarla elektronların etkileşimini gösterir. İkinci tür, diğer iletim elektronları ile coulomb etkileşimlerinin birleşimi olan ekranlama etkileri nedeniyle oluşan  $W_S(\vec{q})$ 'dir. Bu Hartree

ekranlama katkıları olarak bilinir. Üçüncü katkı ise değiş-tokuş ve korelasyon etkileri gösteren  $W_X(q)$ 'dir. Böylece herhangi bir yerel pseudopotansiyel bu katkıların toplamı,

$$W(\vec{q}) = W_B(\vec{q}) + W_S(\vec{q}) + W_X(\vec{q}) \quad (3.27)$$

şeklinde tanımlanır. Çinko-blend veya elmas yapılara sahip kovalent kristaller için, form faktörü basit metallerde olduğu kadar basit değildir. Toplam potansiyel (veya form faktörü) yapı faktörü  $S(\vec{q})$ 'nin bir ürünüdür ve açık iyon pseudopotansiyeli  $W_B(\vec{q})$  simetrik ve antisimetrik parçanın toplamı olarak,

$$W_B(\vec{q}) = S_S(\vec{q})V_S(q) + iS_A(\vec{q})V_A(q) \quad (3.28)$$

şeklinde yazılır. Denklem (3.28)'deki terimlerin eşitliği sırasıyla,

$$V_S(q) = \frac{1}{2}\{V_1(q) + V_2(q)\} \quad (3.29)$$

$$V_A(q) = \frac{1}{2}\{V_1(q) - V_2(q)\} \quad (3.30)$$

$$S_S(\vec{q}) = \sum_G \delta_{q,G} \cos(\vec{\rho} \cdot \vec{\tau}) = \cos(\vec{G} \cdot \vec{\tau}) \quad (3.31)$$

$$S_A(\vec{q}) = \sum_G \delta_{q,G} \sin(\vec{\rho} \cdot \vec{\tau}) = \sin(\vec{G} \cdot \vec{\tau}) \quad (3.32)$$

formunda verilirler. Burada  $V_1(q)$  ve  $V_2(q)$  bir serbest iyonun kendi form faktörleridir.  $\mathbf{G}_{fcc}$ 'nin ters örgü vektörü ve  $\boldsymbol{\tau}$  ise cisimde köşegen yönündeki iç içe geçen fcc örgülerini ayıran vektörün yarısıdır.

### 3.4 Ekranlama Teorisi

Ekranlama olgusu, en basit ve en önemli elektron-elektron etkileşme belirtisidir. Dejenere elektron gazı ile metalik özelliklerin formülize edilmesinde uniform arka plan kullanılmıştır. Elektron gazı içinde belirli bir durumda pozitif yüklü bir parçacık yerleştirildiğinde, o zaman elektronlar ve kendi alanları içinde negatif bir ek yük (ekranlama) oluşturur. Yani etrafında elektron yoğunluğu değiştirilir ve pozitif yük ekranları elde edilir. Toplam yer değiştirme yükü iyonunun yüküne eşittir. Böylece potansiyelin, elektron gazı tarafından ekranlandığı söylenebilir. Gerçek bir kristalde, potansiyel ekranda elektronlar serbest değildir. İletkenlik elektronları tarafından sağlanan ekranlama etkileri, bir serbest elektron gazı için Thomas-Fermi yaklaşımı yardımı ile anlaşılabilir[29]. Yerel bir itici potansiyel elektron gazında mevcut ise, yerel elektron yoğunluğu homojen bir Fermi enerji sağlamak için azalmış olacaktır. Bu bir kimyasal potansiyeldir ve her yerde aynı olmalıdır. Açık iyon  $W_B(q)$  potansiyeli elektronların bir iyonu etkisini ifade ettiğinde, elektronların etkisi her birine dahil olmalıdır. Genel olarak, ekranlama etkisi bir faktör ile ekranlanmamış  $W_B(q)$  potansiyelin Fourier ögelerine bölünmesi ile kendisiyle uyumlu alanı içinde dahil edilebilir. Bu diğer tüm değerlik elektron ekranlama bulutun bir değerlik elektron üzerindeki etkisidir. Bu ekranlama etkisi, açık iyon potansiyelin  $\epsilon(q)$  ekranlama fonksiyonu olarak adlandırılan bir faktöre bölünmesi ile dahil edilebilir. Bu nedenle potansiyelin değiştirilmiş formu,

$$W_S(q) = \frac{W_B(q)}{\epsilon(q)} \quad (3.33)$$

şeklinde ekranlanmış potansiyel olarak adlandırılır.

Dielektrik ekranlama, elektron gazının ekranlaması nedeniyle kendisiyle uyumlu potansiyelin değerlendirilmesinde önemli rol oynar. Başlangıçta sadece statik dielektrik fonksiyonu tanıtıldı, doğrudan elektron etkileşimleri dahil edilmedi. Bu statik Hartree dielektrik fonksiyonu olarak adlandırıldı[29]. Sonra antisimetrik dalga fonksiyonu için Pauli dışarlama ilkesinden dolayı ilave terim değiş-tokuş katkısı dahil edildi. Ayrıca dielektrik fonksiyonunu kesin olarak anlamak için korelasyon etkilerini tanımlamak gereklidir. Potansiyelin korelasyon etkilerini ve değiş-tokuşu tanımlayan dielektrik fonksiyonu,

$$\varepsilon(q) = 1 + [\varepsilon_H(q) - 1][1 - f(q)] \quad (3.34)$$

formunda verilir. Burada  $\varepsilon_H(q)$  serbest elektronlar için Hartree dielektrik fonksiyonu ve  $f(q)$ 'da yerel alan düzeltme fonksiyonudur. Hartree dielektrik ekranlama fonksiyonu,

$$\varepsilon_H(q) = 1 + \frac{me^2}{2\pi k_F \hbar^2 \eta^2} \left[ \frac{1 - \eta^2}{2\eta} \ln \left| \frac{1 + \eta}{1 - \eta} \right| + 1 \right] \quad (3.35)$$

şeklinde yazılır. Denklem (3.35)' deki  $\eta$ ,

$$\eta = \frac{q}{2k_F} \quad (3.36)$$

değerindedir. Yerel alan düzeltme fonksiyonu  $f(q)$ , iyi bir yerel pseudopotansiyel ve araştırma kapsamında özelliklerin uygun çoğaltılması için önemli bir faktördür.

### 3.5 Yerel Alan Düzeltme Fonksiyonu

Değiş-tokuş ve korelasyon etkileşimi, yaygın olarak çok cisimli pertürbasyon teorisinde serbest elektron gazının araştırılmasında uzun süreden beri kullanılmıştır. Hartree yaklaşımı doğrudan elektron-elektron(e-e) etkileşimini ihmal eder. Korelasyon etkileri, elektronlar arasındaki Coulomb itme etkisinden kaynaklanır ve diğer elektronları dışlayan elektronlar arası korelasyon boşluk kavramını ortaya çıkarır. Pseudopotansiyel form

faktörünün seçilmesi metalik özelliklerin çalışmasında önemli bir etkidir ve gerçek form elektron gazının dielektrik fonksiyonunun seçiminde daha hassastır. Çeşitli araştırmacılar bazı özelliklerin oldukça iyi sonuç verdiği farklı türlerde yerel alan düzeltme fonksiyonları yayınlamıştır[29,79-86] fakat bunlar diğer özellikler için eşit bir şekilde çalışmamıştır.

Yerel alan düzeltme fonksiyonu  $f(q)$  iyi bir yerel pseudopotansiyel oluşturulması ve malzemelerin özelliklerinin araştırılması için önemli bir faktördür. Nagy[86] yoğun elektron gazı için ikili korelasyon model fonksiyonu kullanarak statik yerel alan düzeltme fonksiyonu önermiştir ve bu fonksiyon yarı iletkenler için oldukça başarılı olmuştur. Nagy'nin yerel alan düzeltme fonksiyonu ekranlama etkisinin göreceli etkisiyle karşılaştırılması için Hatree'nin[29], Taylor'ın[81], Ichimaru ve arkadaşlarının[83], Farid ve arkadaşlarının[84] son olarak Sarid ve arkadaşlarının[85] ekranlama fonksiyonları birleştirilmiştir. Yerel alan düzeltme fonksiyonlarının matematiksel tanımı,

$$f_H(q) = 0 \quad (3.37)$$

formunda yazılır. Burada Hatree[29] nedeniyle yerel alan düzeltme fonksiyonu tamamen statiktir, değiş-tokuşu ve korelasyon etkilerini içermez. Taylor[81] elektronun korelasyon hareketini ve değiş-tokuşunu içeren çok basit analitik bir ifade önermiştir ve bu ifade Coulomb etkileşiminin normalize edilen değiş-tokuş etkileşimini ve korelasyonu hesaba katar. Ayrıca 1972 yılından önce önerilen yerel alan düzeltme fonksiyonunun genel özelliklerini kapsar, tam olarak sıkıştırılabilirliğin toplam kuralını verir ve,

$$f_T(q) = \frac{q^2}{4k_F^2} \left( 1 + \frac{0.1534}{\pi k_F} \right) \quad (3.38)$$

formunda ifade edilir. Ichimaru ve arkadaşlarının[83] yerel alan fonksiyonu düşük yoğunluklarda ve metalikteki dejenere elektron sınırlarının dielektrik ekranlama fonksiyonu için fitlenmiş formudur, doğru Monte Carlo sonuçlarının yanı sıra kısa menzilli düzeltmeyi ve sıkıştırılabilirlik toplam kuralının kendi içinde tutarlılığını sağlar ve mikroskobik korelasyonu üretir. Fitlenmiş durumu,

$$f_1(q) = Aq^4 + Bq^2 + C + \left[ Aq^4 + \left( B + \frac{3A}{8} \right) q^2 - C \right] \left[ \frac{4 - Q^2}{4Q} \ln \left| \frac{2 + Q}{2 - Q} \right| \right] \quad (3.39)$$

formundadır. Farid ve arkadaşları[84] yerel alan düzeltme fonksiyonunu modifiye etmişlerdir ve bu durumda,

$$f_F(q) = AQ^4 + BQ^2 + C + [AQ^4 + DQ^2 - C] \left[ \frac{4 - Q^2}{4Q} \ln \left| \frac{2 + Q}{2 - Q} \right| \right] \quad (3.40)$$

fonksiyonu şeklinde yazılır. Sarkar ve arkadaşları[85] yerel alan düzeltme fonksiyonu için basit bir form önermişlerdir ve bu form ise,

$$f_S(q) = A[1 - \{1 + BQ^4\} \exp(-CQ^4)] \quad (3.41)$$

şeklinde yazılır. Bu denklemlerde  $Q = q/k_F$  dir.

### 3.6 Modifiye Edilmiş Aschroft Boş Küre Model Pseudopotansiyelleri (MAEC)

Aschroft boş küre model pseudopotansiyelinin kor dışında  $-\frac{Ze^2}{r}$  şeklindeki Coulomb potansiyelinin sönümlü olabilmesi için Thakor ve arkadaşları tarafından[87]  $-\frac{Ze^2}{r} \exp(-\frac{r}{r_c})$  terimi eklenmiştir. Bu model potansiyelin gerçek uzaydaki formu,

$$W(r) = \begin{cases} 0 & r < r_c \\ \left(-\frac{Ze^2}{r}\right) \left[1 - \exp\left(-\frac{r}{r_c}\right)\right] & r \geq r_c \end{cases} \quad (3.42)$$

şeklinde yazılır. Burada Z, e,  $r_c$  sırasıyla değerlik, elektronik yük ve potansiyel parametresidir. Bu model potansiyelin q uzayındaki formu,

$$W(q) = \left(\frac{-4\pi Z e^2}{\Omega q^2}\right) \times \left[ \cos(qr_c) - \left\{ \frac{(qr_c) \exp(-1)}{1 + q^2 r_c^2} \right\} \{ \sin(qr_c) + (qr_c) \cos(qr_c) \} \right] \quad (3.43)$$

olarak verilir. Potansiyel parametresi pseudopotansiyel form faktörü W(q)' nun ilk sıfır olduğu  $q = q_0$  değerinden elde edilir. Bu model potansiyeli için Thakor ve arkadaşları tarafından  $q_0 r_c = 1.3439$  şartı kullanılarak basit sıvı metaller için  $r_c$  değerleri elde edilmiştir.  $r_c$ ' nin Heine ve arkadaşları tarafından verilen ve deneysel olarak gözlenen[88]  $q_0/2k_F$  değerleri cinsinden  $r_c = 1.3439/(q_0/2k_F).2k_F$  bağıntısı ile verilebileceği açıktır[89].

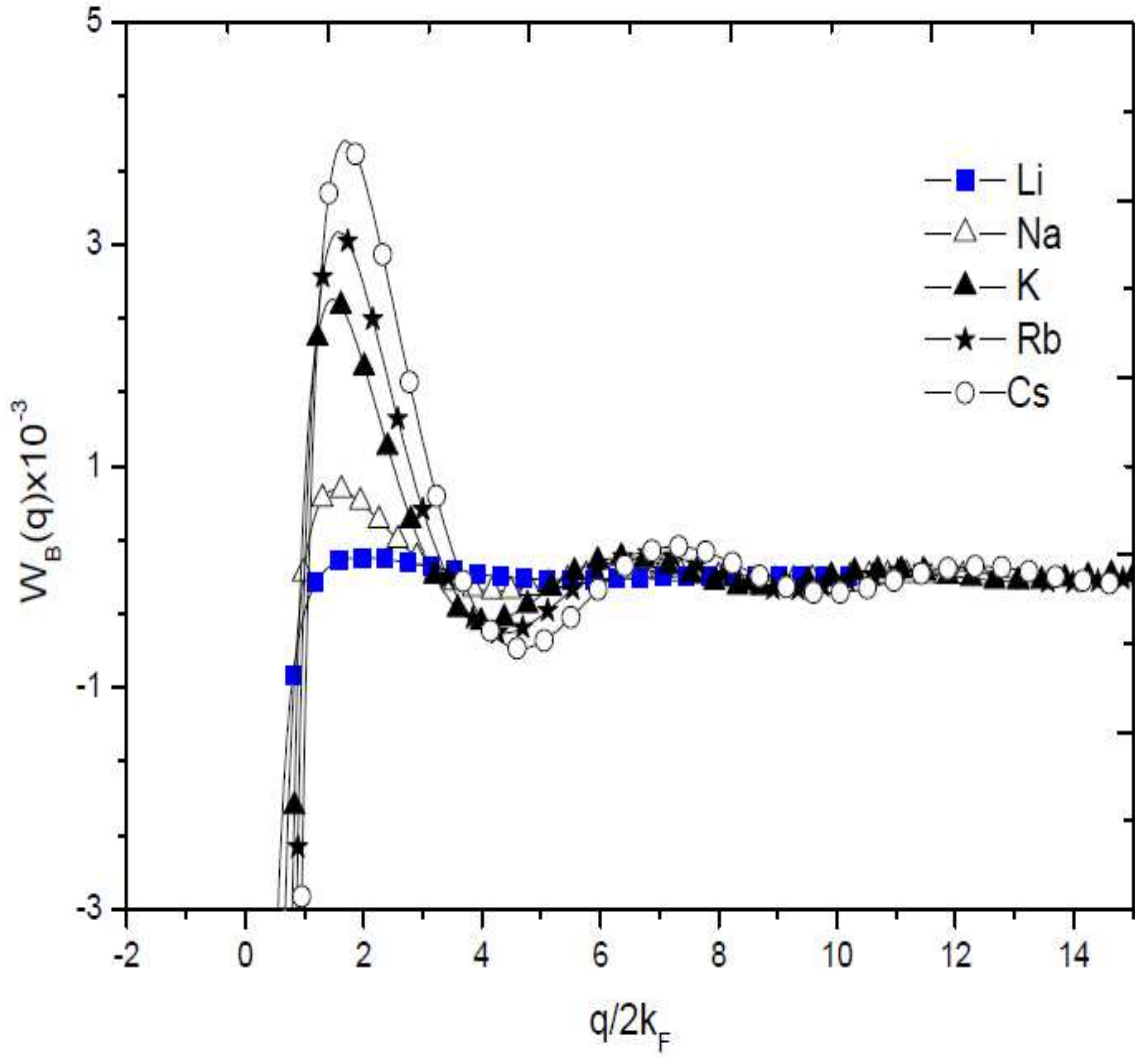
### 3.7 Pseudopotansiyel Hesaplamaları

Bu bölümde modifiye edilmiş boş küre(MAEC) model potansiyeli kullanılarak basit sıvı metallerin matris elemanları ve atomlararası çiftler potansiyelleri hesaplanmıştır. 1A grubu Li'dan Cs'a basit sıvı metaller ve farklı değerlikte bulunan Mg, Al ve Pb gibi sıvı metaller seçilmiştir. Bu sistemlerin giriş parametreleri Tablo (3.1)'de listelenmiştir.

Tablo 3.1- Modifiye Edilmiş Ascroft Boş küre(MAEC) Model Potansiyeli Hesaplamalarında Kullanılan Giriş Parametreleri

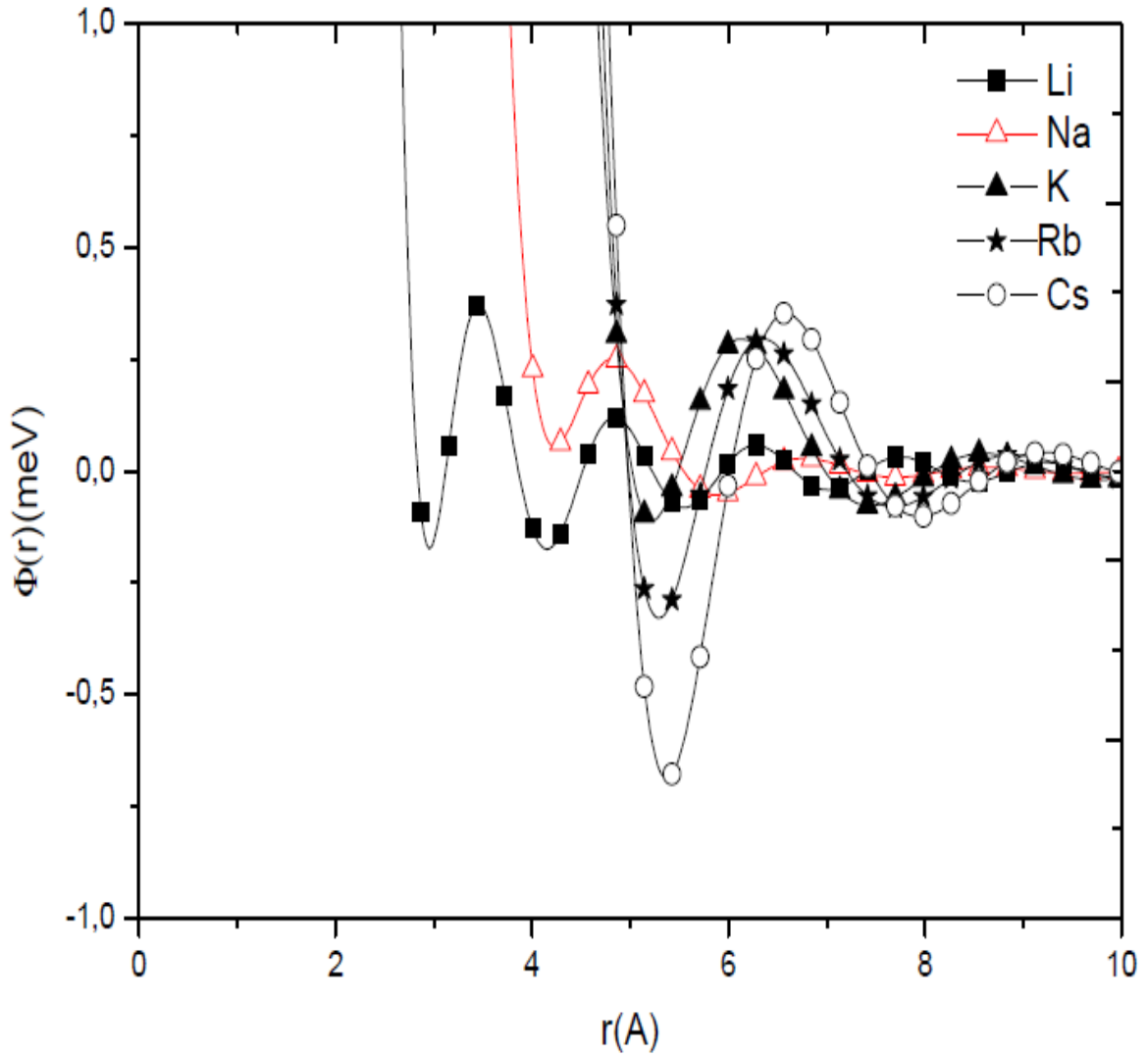
Metal	Z	T(K)	$k_F$ (a.u)	$\rho(10^{-3}$ a.u)	$q_0/2k_F$	$R_c$ (a.u)
Li	1	463	0.5799	6.5867	1.26	0.9197
Na	1	378	0.4742	3.6033	0.98	1.4457
K	1	343	0.3822	1.8858	0.94	1.8703
Rb	1	313	0.3573	1.5415	1.00	1.8802
Cs	1	303	0.3318	1.2344	1.07	1.8923
Mg	2	953	0.6947	5.6697	0.83	0.1656
Al	3	943	0.8866	7.8163	0.76	0.9977
Pb	4	613	0.8162	4.5891	0.84	0.9803

1A grubu basit sıvı metaller için hesaplanan matris elemanları Şekil (3.1)'de verilmiştir. Basit alkali sıvı metallerin atomlararası çiftler potansiyel hesaplamalarında kullanılan matris elemanlarında periyodik tablo değerlerine uygun olarak Li'dan Cs'a doğru gidildiğinde ilk pik yüksekliğinin arttığı görülmektedir. Ayrıca tüm sıvı metaller için  $q \rightarrow 0$  limitinde  $W(0)$ 'in sifıra gitmesi fiziksel doğruluğu göstermektedir.



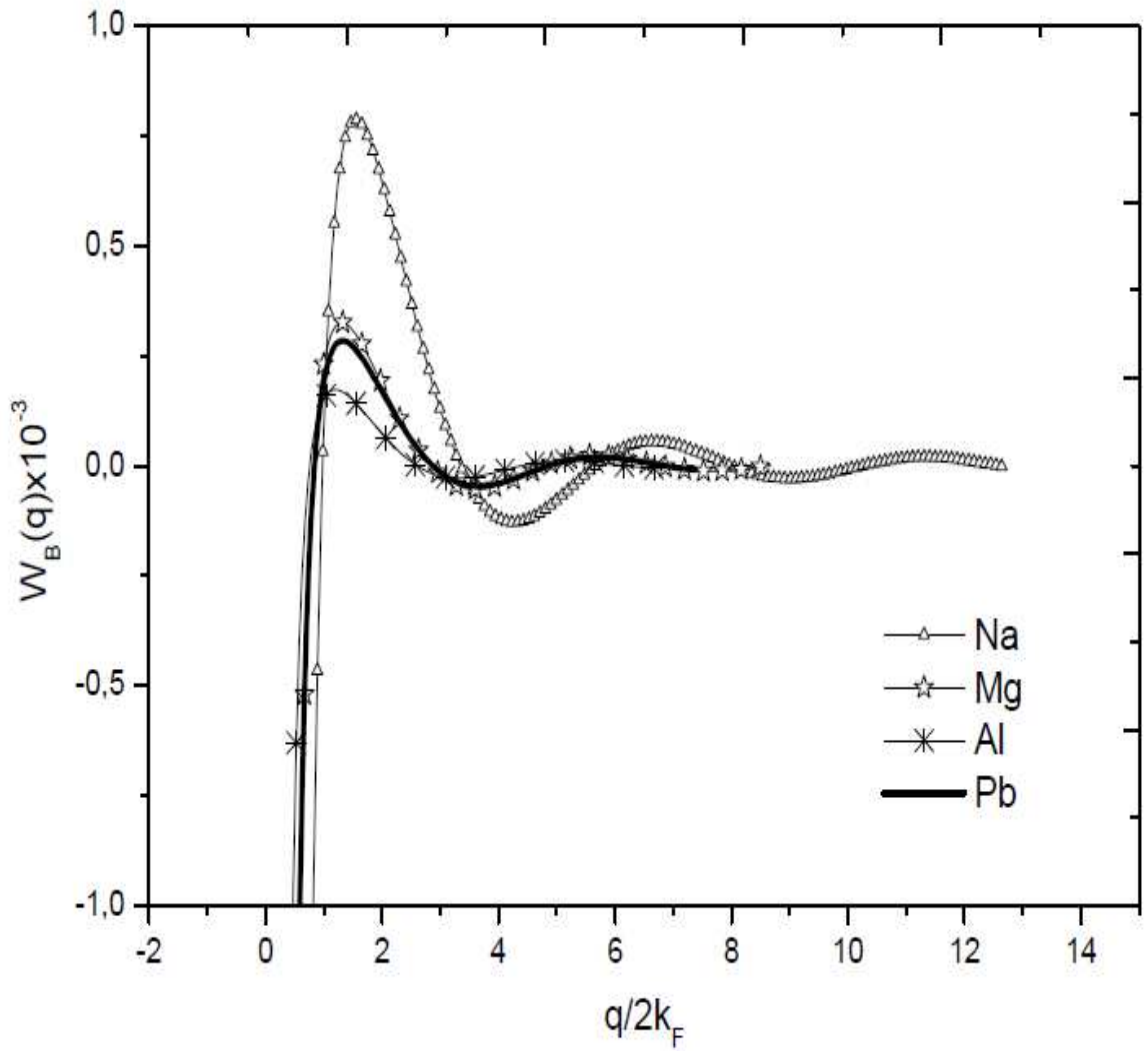
Şekil 3.1. Basit Sıvı Metaller için Hesaplanan Matris Elemanları

Basit sıvı metaller için hesaplanan atomlararası çiftler potansiyelleri Şekil (3.2)'de verilmişlerdir. Şekilde de görüldüğü gibi periyodik tabloda sıralama kendini korumakta, potansiyelde en sığ durum sıvı Na'da, en derin durum ise Cs'de görülmektedir. Ayrıca atomlararası çiftler potansiyelinde ossilasyonların çokluğu dikkat çekmektedir. Bunu matris elemanı hesabında kullanılan ekranlama fonksiyonuna veya parametre tayinine bağlamak mümkündür.



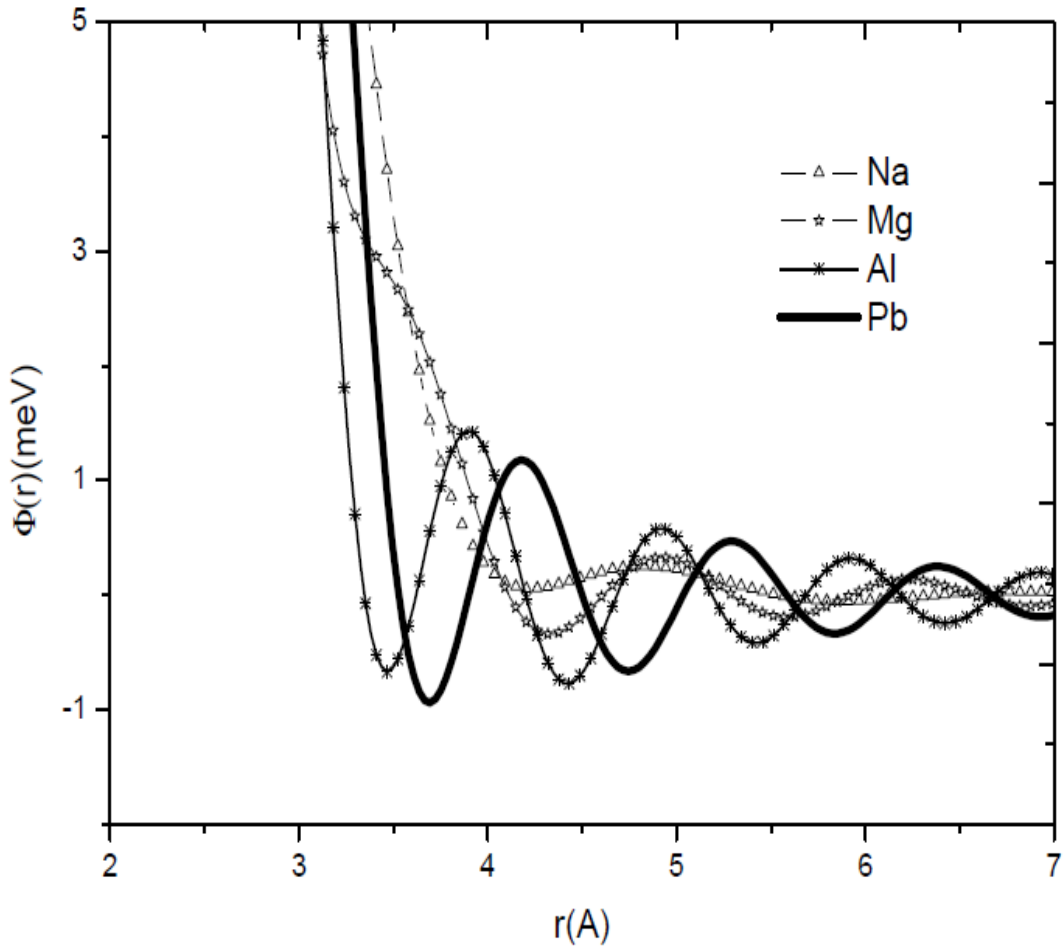
Şekil 3.2. Basit Sıvı Metaller için Hesaplanan Atomlararası Çiftler Potansiyelleri

Farklı deęerliklere sahip sıvı metallerin hesaplanan matris elemanları Şekil(3.3)'de verilmiştir. İlk bakışta deęerlięi düşük olan sıvı metalin ilk pik yükseklięinin fazla olduęu görölmektedir (Pb hariç). Bunun sebeplerinin açıklanması olası olmamakla beraber seçilen ekranlama fonksiyonuna baęlı olduęu bilinmektedir



Şekil 3.3. Farklı Deęerliklere Sahip Sıvı Metallerin Hesaplanan Matris Elemanları

Şekil (3.4.)’de farklı değerliklere sahip(+1, +2, +3, +4) sıvı metallerin hesaplanan atomlararası çiftler potansiyelleri karşılaştırmalı olarak verilmiştir. Değerlik arttıkça potansiyelin minimum değeri artmaktadır. Ayrıca basit sıvı metallerde olduğu gibi osilasyonlar oldukça sık bir şekilde tekrar etmektedir. Bunun nedeni olarak seçilen ekranlama fonksiyonu gösterilebilir.

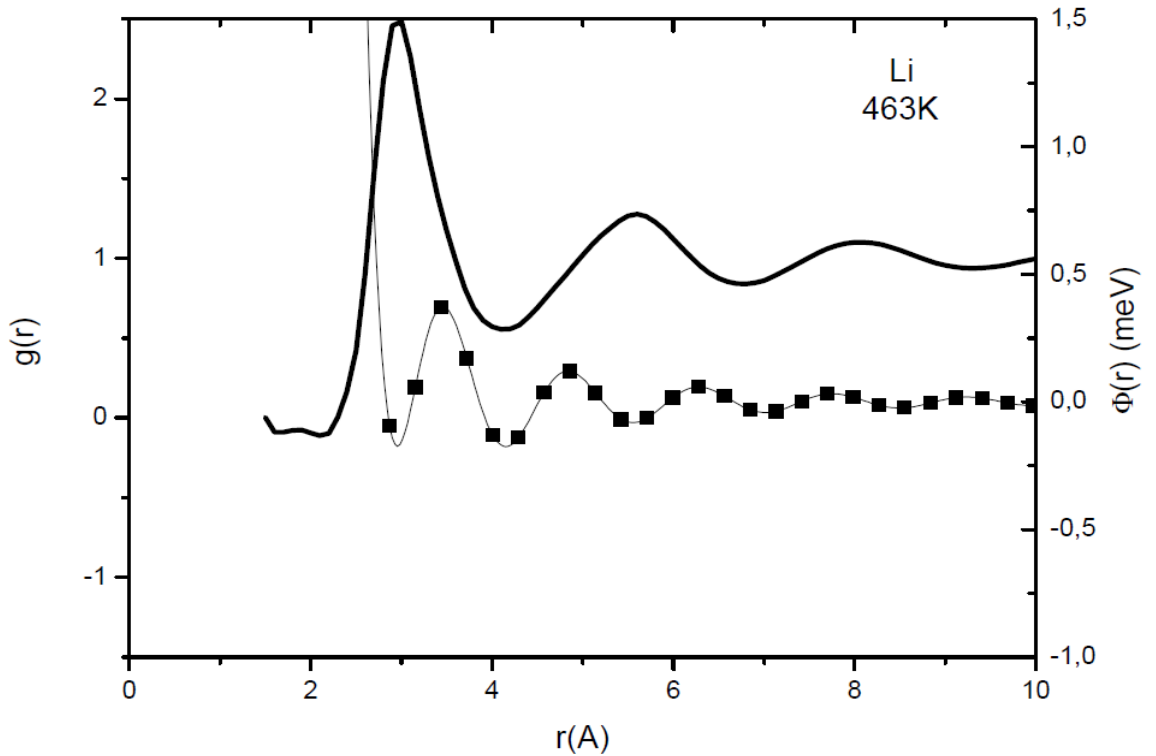


Şekil 3.4. Farklı Değerliklere Sahip Sıvı Metallerin Hesaplanan Atomlararası Çiftler Potansiyelleri

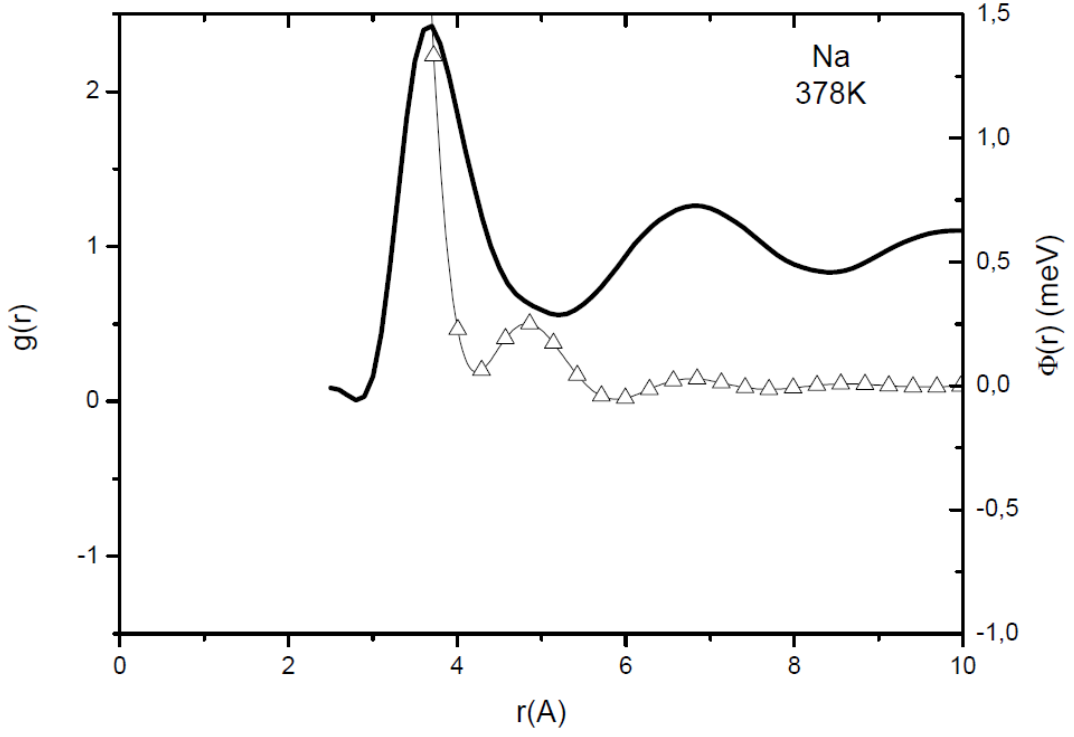
### 3.8 Radyal Dağılım Fonksiyonları ile Atomlararası Çiftler Potansiyellerinin Karşılaştırılması

Basit sıvı metallerde, deneysel radyal dağılım fonksiyonları Waseda[90]'dan alınarak hesaplanan atomlararası çiftler potansiyeller ile karşılaştırmalı olarak ayrı Şekiller (3.5-3.12)'de verilmişlerdir. Şekillerde sol taraf radyal dağılım fonksiyonunu, sağ taraf ise atomlararası çiftler potansiyelini göstermektedir.

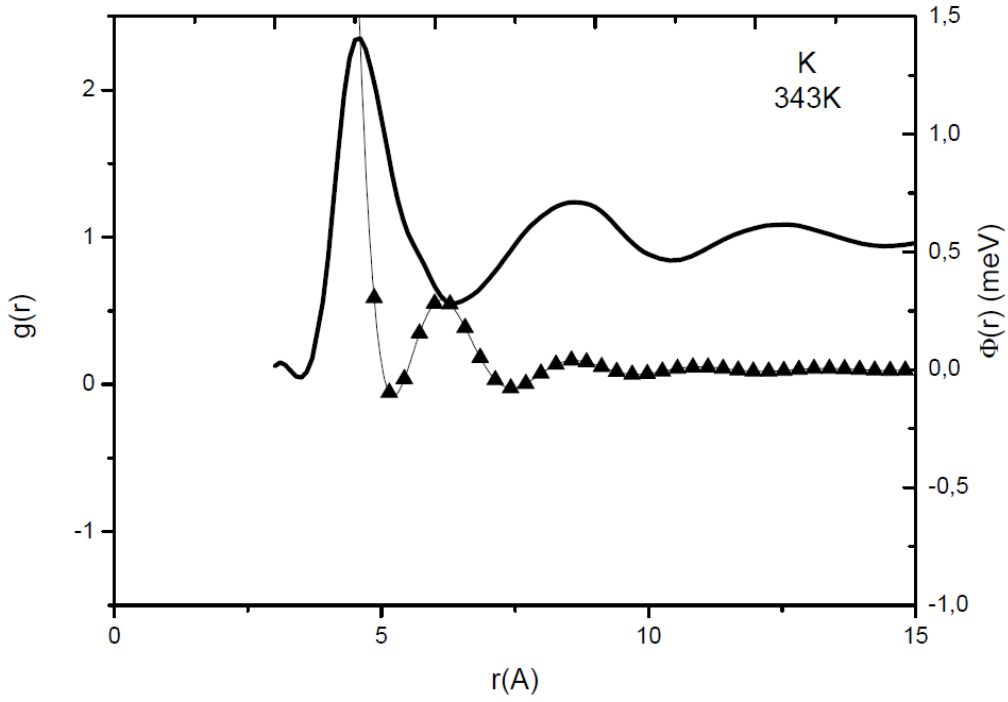
Şekiller dikkatlice incelendiğinde; Li, Rb ve Cs sıvı metaller için  $g(r)$ 'nin maksimum durumu çiftler potansiyelinin minimum değerine karşılık gelmektedir. Na ve K sıvı metaller için azda olsa potansiyel sağa kaymaktadır. 1A grubu basit sıvı metaller için hesaplanan  $\Phi(r)$  ile  $g(r)$  uyumu olduğu gözlenmiştir. Bu malzemeler için (e-i) model potansiyel parametrelerinin iyi seçildiği söylenebilir. Ayrıca  $r \rightarrow \infty$  limitinde her iki büyüklük değerleri  $g(r) \rightarrow 1$  ve  $\Phi(r) \rightarrow 0$  gitmektedir. Bu durum fiziksel olarak doğruluk olduğunu göstermektedir.  $g(r)$ 'nin 1'e gitmesi durumu, merkezde bulunan bir atomdan sonsuz uzaklıkta ikinci bir atomun kesinlikle olduğunu gösterir.  $\Phi(r)$ 'nin sifıra gitmesi ise uzaklık arttıkça etkileşme potansiyelinin sıfır olduğu yani sonsuz uzaklıkta etkileşmenin olmadığı anlamını taşır.



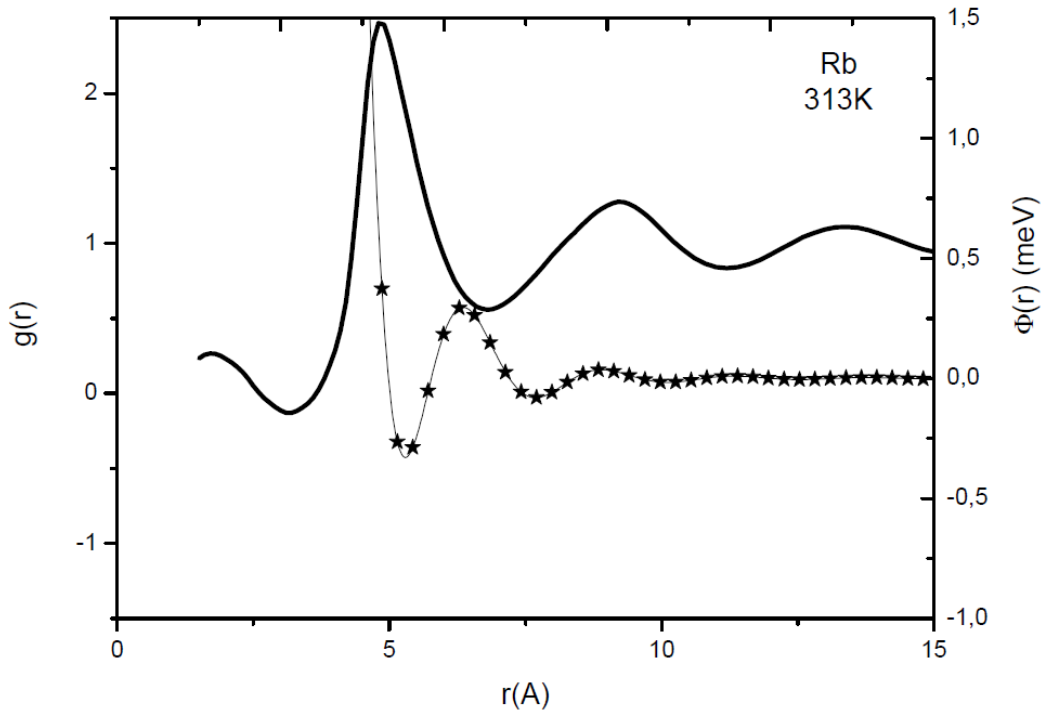
Şekil 3.5. Sıvı Metal Li için Radyal Dağılım Fonksiyonu ile Atomlararası Çiftler Potansiyelinin Karşılaştırılması



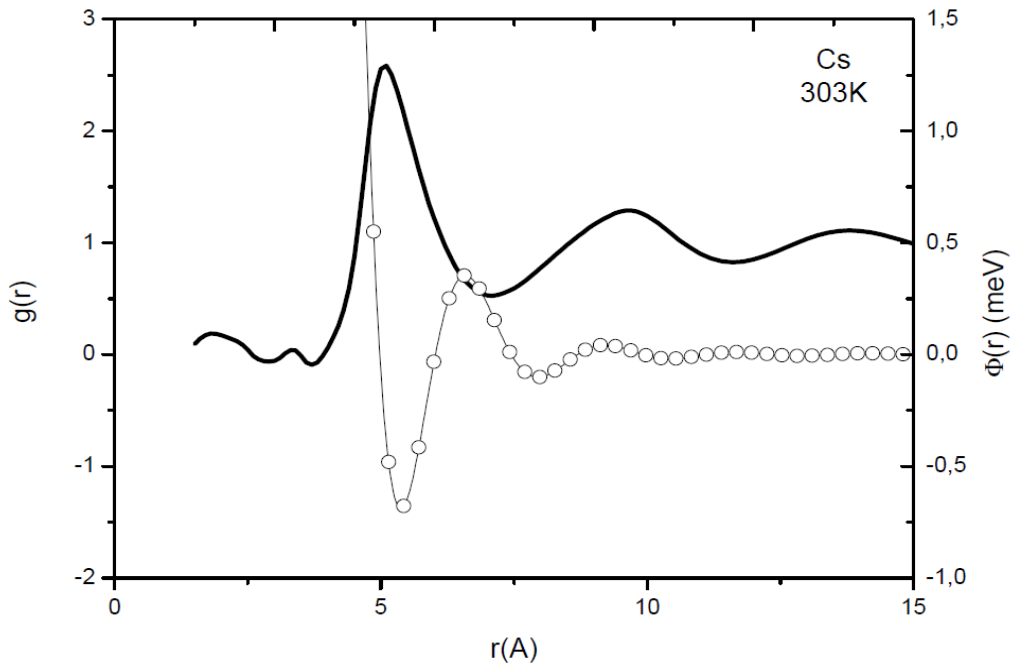
Şekil 3.6. Sıvı Metal Na için Radyal Dağılım Fonksiyonu ile Atomlararası Çiftler Potansiyelinin Karşılaştırılması



Şekil 3.7. Sıvı Metal K için Radyal Dağılım Fonksiyonu ile Atomlararası Çiftler Potansiyelinin Karşılaştırılması

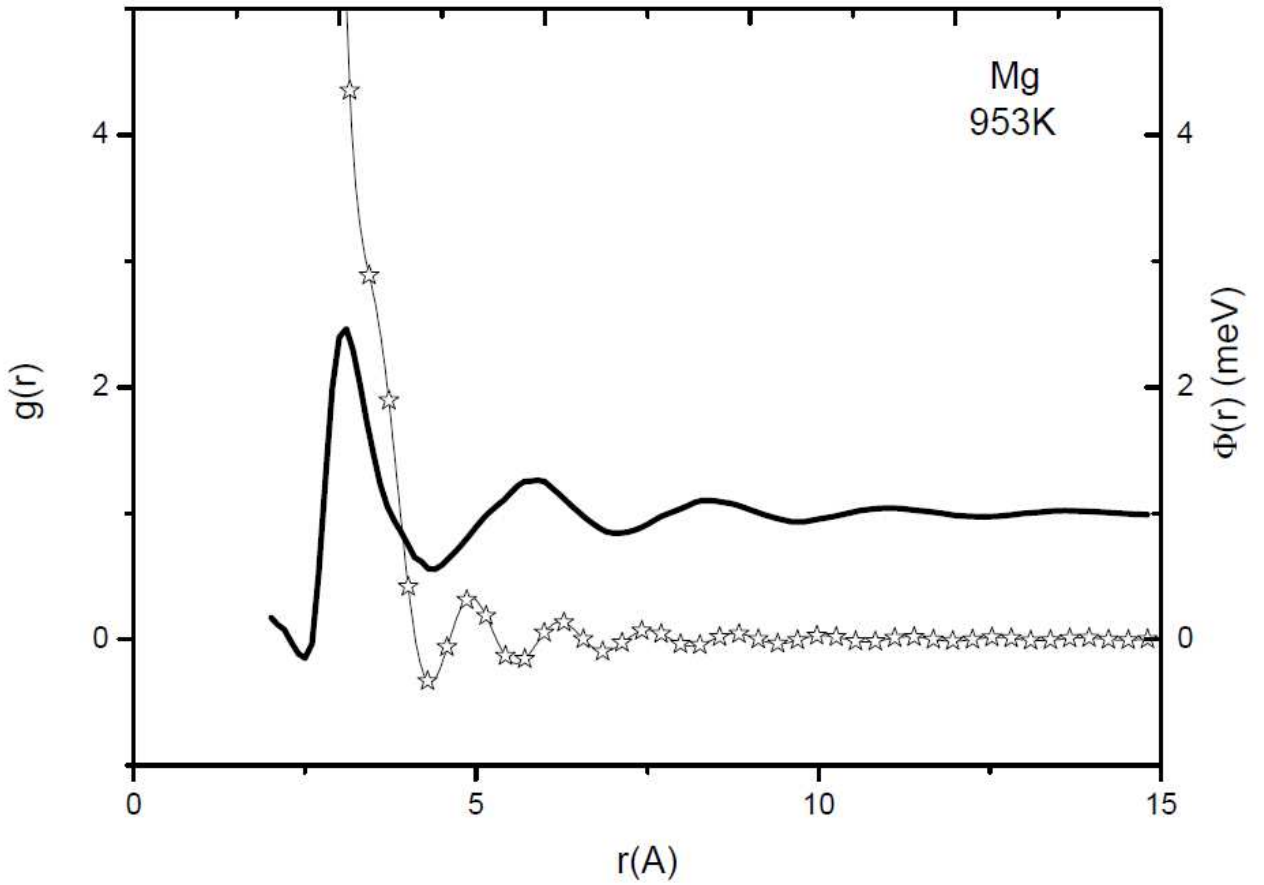


Şekil 3.8. Sıvı Metal Rb için Radyal Dağılım Fonksiyonu ile Atomlararası Çiftler Potansiyelinin Karşılaştırılması

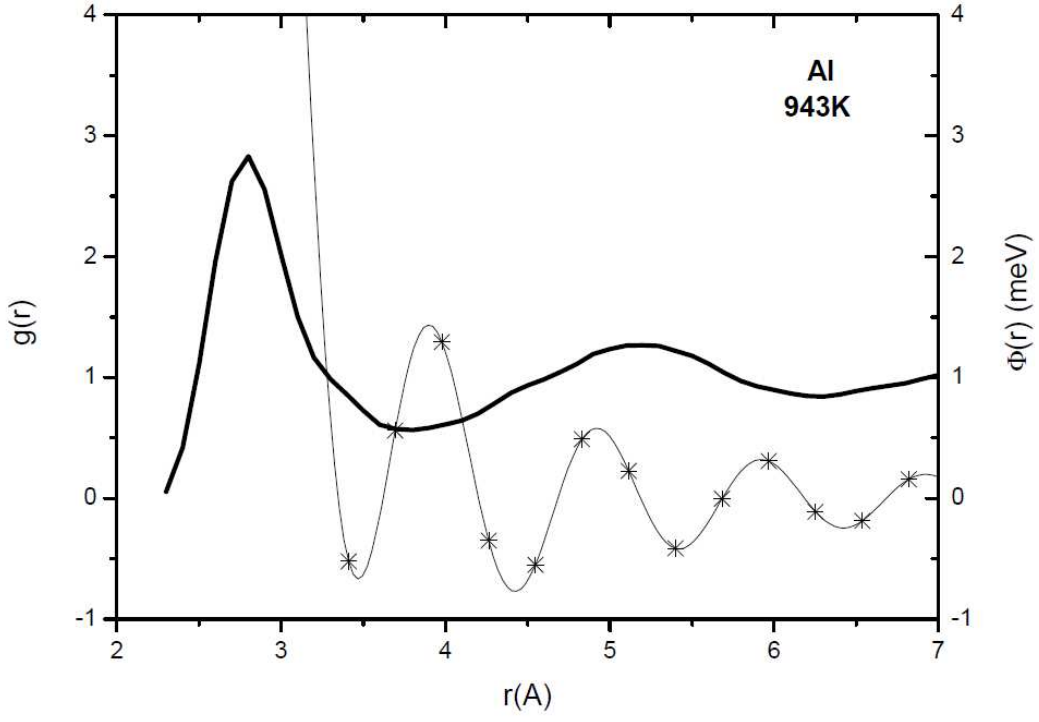


Şekil 3.9. Sıvı Metal Cs için Radyal Dağılım Fonksiyonu ile Atomlararası Çiftler Potansiyelinin Karşılaştırılması

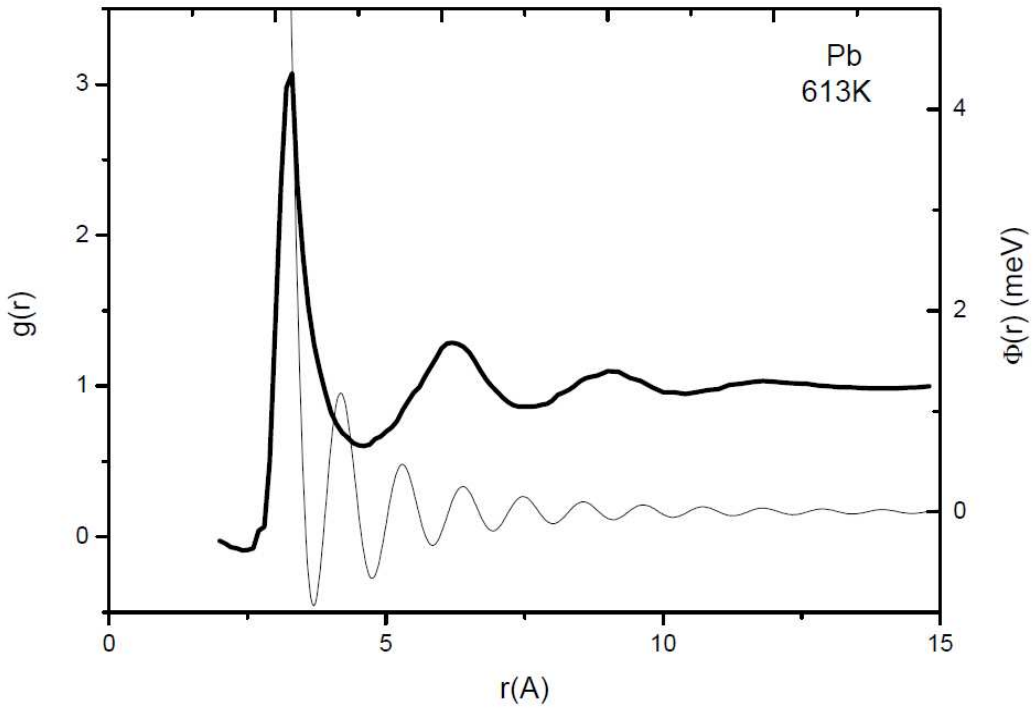
Mg, Al ve Pb gibi farklı değerlikte sıvı metallere bakıldığında;  $g(r)$ 'nin maksimum durumu çiftler potansiyelinin minimum değerine karşılık gelmediği görülmektedir. Bunun sebebi olarak iki durum söylenebilir. Birincisi, bu malzemeler için (e-i) model potansiyel parametrelerinin iyi seçilmediği şeklindedir. İkincisi ise seçilen ekranlama fonksiyonunun bu malzemeler için iyi çalışmadığı durumudur. Ayrıca, bu malzemeler içinde  $r \rightarrow \infty$  limitinde her iki büyüklük değerleri  $g(r) \rightarrow 1$  ve  $\Phi(r) \rightarrow 0$  gittiği gözlenmektedir.



Şekil 3.10. Sıvı Metal Mg için Radyal Dağılım Fonksiyonu ile Atomlararası Çiftler Potansiyelinin Karşılaştırılması



Şekil 3.11. Sıvı Metal Al için Radyal Dağılım Fonksiyonu ile Atomlararası Çiftler Potansiyelinin Karşılaştırılması



Şekil 3.12. Sıvı Metal Pb için Radyal Dağılım Fonksiyonu ile Atomlararası Çiftler Potansiyelinin Karşılaştırılması

## BÖLÜM 4

### SONUÇLAR VE TARTIŞMA

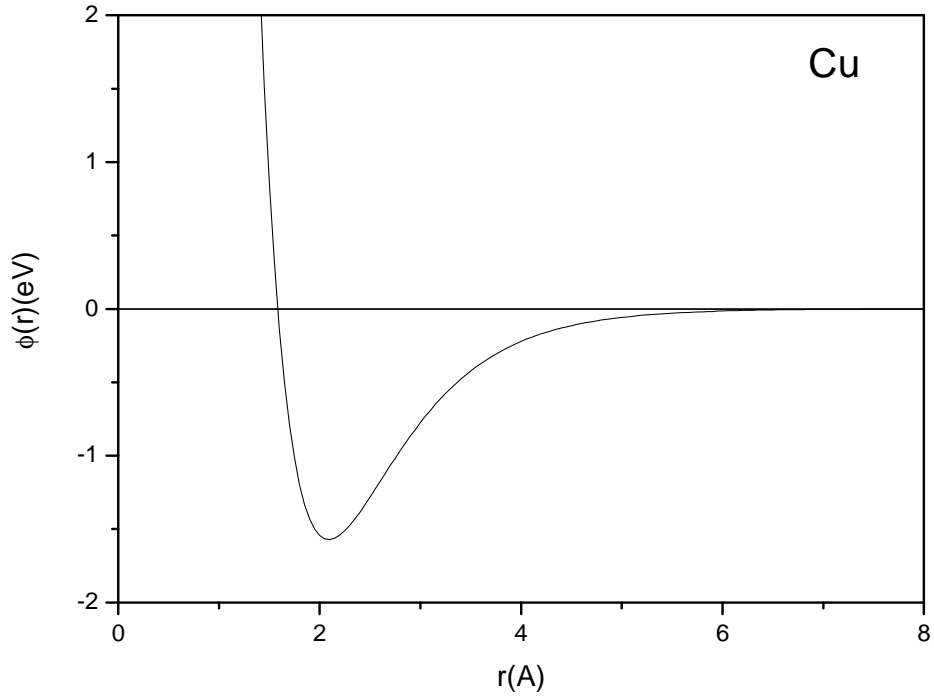
Bölüm 2' de detaylı bir şekilde verilen atomlararası potansiyeller Cu, Ag, Au, Ni, Ir ve Pt metallerine uygulanmıştır. Bu bölümde hesaplanan potansiyellerin tartışması yapılacaktır. Bu tezin amacı, gerçek uzay formalizminde verilen atomlararası potansiyellerin teorileri karışık olmayan metal sistemlerine uygulanması ve kullanılan potansiyellerin kuvvetli ve zayıf yönlerinin çıkarılmasıdır. Bundan dolayı üzerinde çok çalışılmış ve tam olarak anlaşılmiş sistemler seçilmiştir.

#### 4.1 Morse Potansiyeli

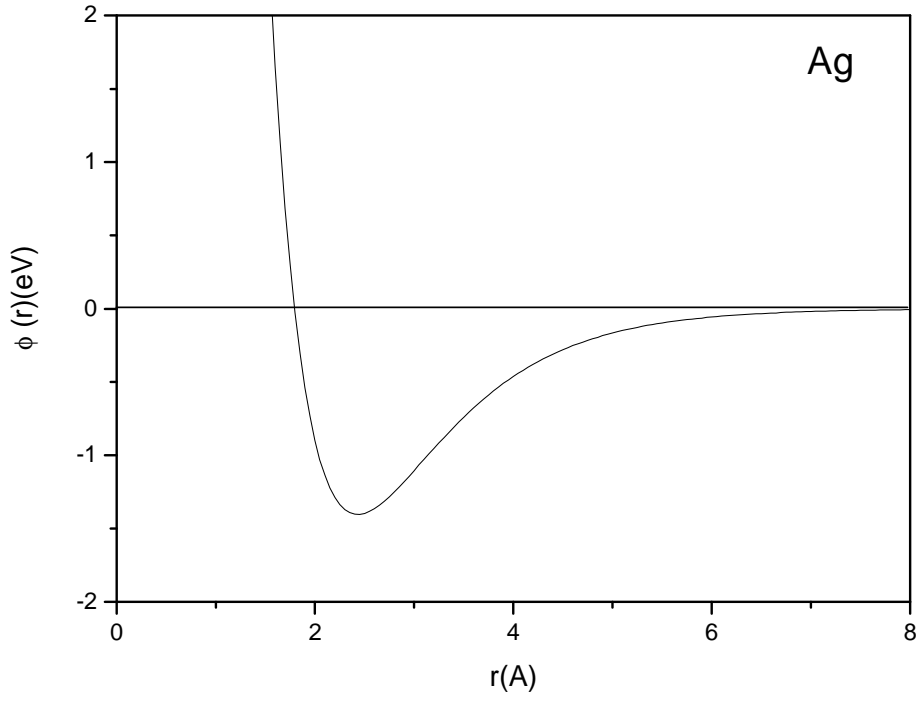
Morse potansiyel formu Denklem(2.5)'de verilmiştir. Potansiyel parametreleri kaynak [91]'dan alınmış ve Tablo (4.1)' de listelenmiştir. Tabloda yer alan sistemler için hesaplanan potansiyeller Şekiller (4.1-4.6)'da verilmişlerdir.

Tablo 4.1. Morse Potansiyeli Parametreleri

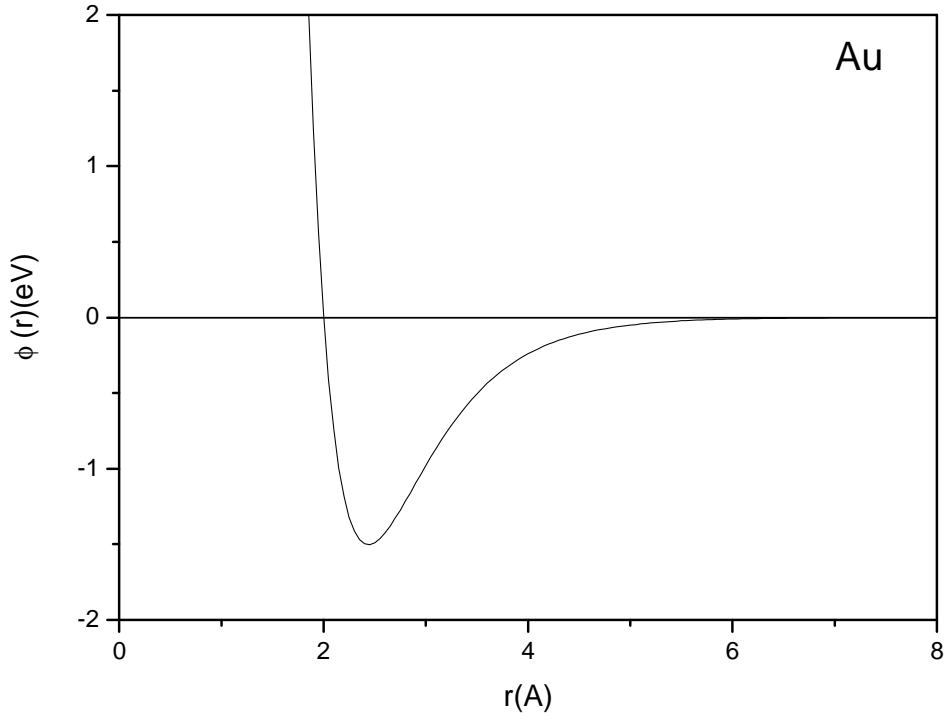
	Cu	Ag	Au	Ni	Ir	Pt
D(eV)	1.5716	1.4034	1.5038	0.4290	0.8435	0.7102
$\alpha$ (Å <sup>-1</sup> )	1.3690	1.0890	1.5890	1.3917	1.6260	1.6047
$r_0$ (Å)	2.0904	2.4320	2.4380	2.7930	2.8640	2.8970



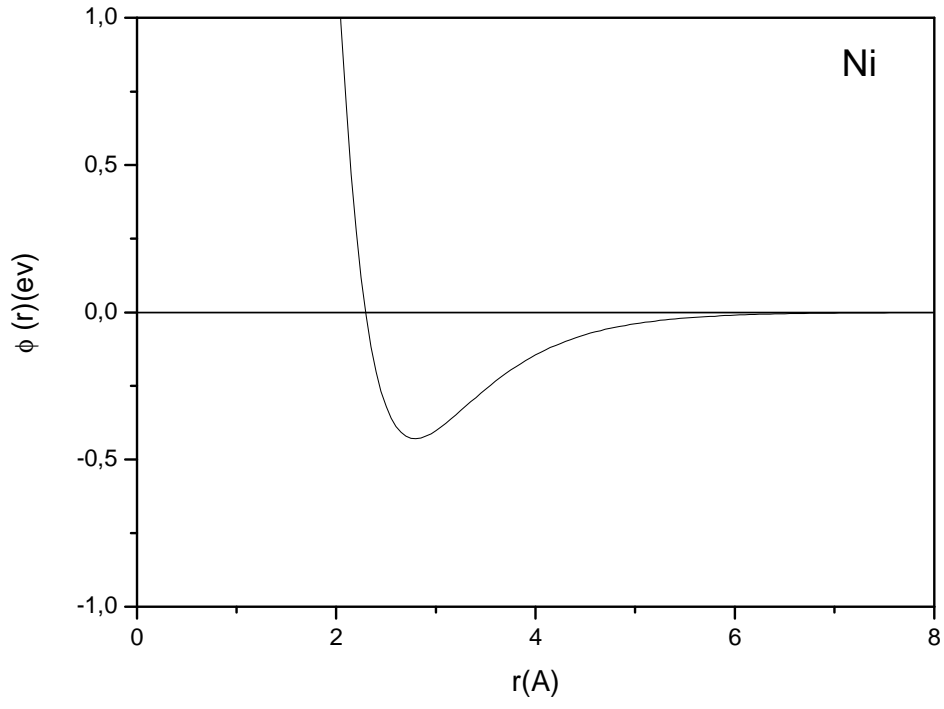
Şekil 4.1. Cu Metali için Morse Potansiyeli



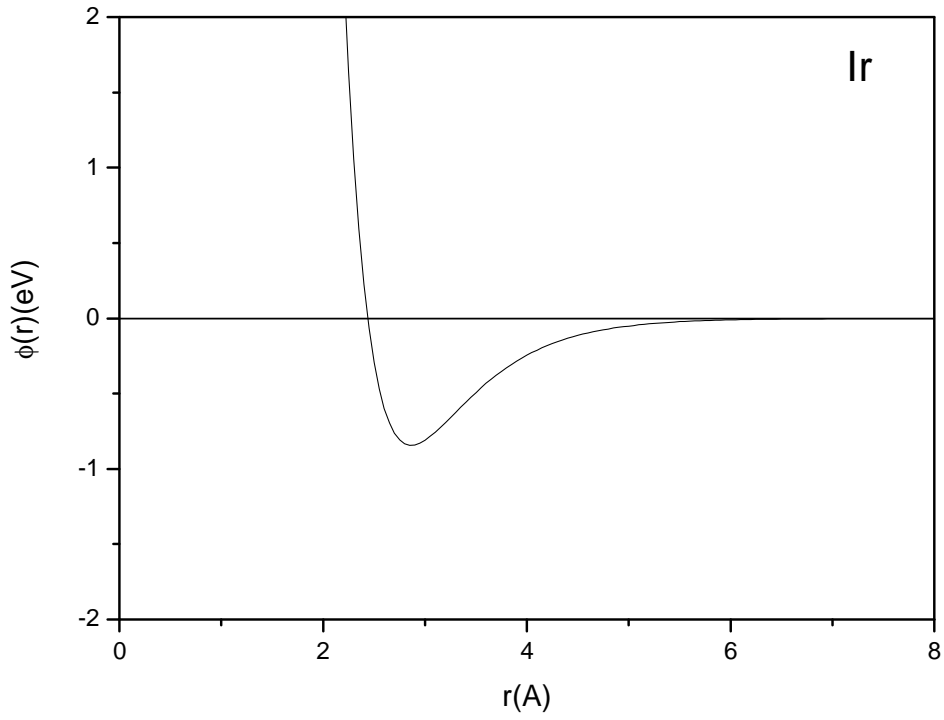
Şekil 4.2. Ag Metali için Morse Potansiyeli



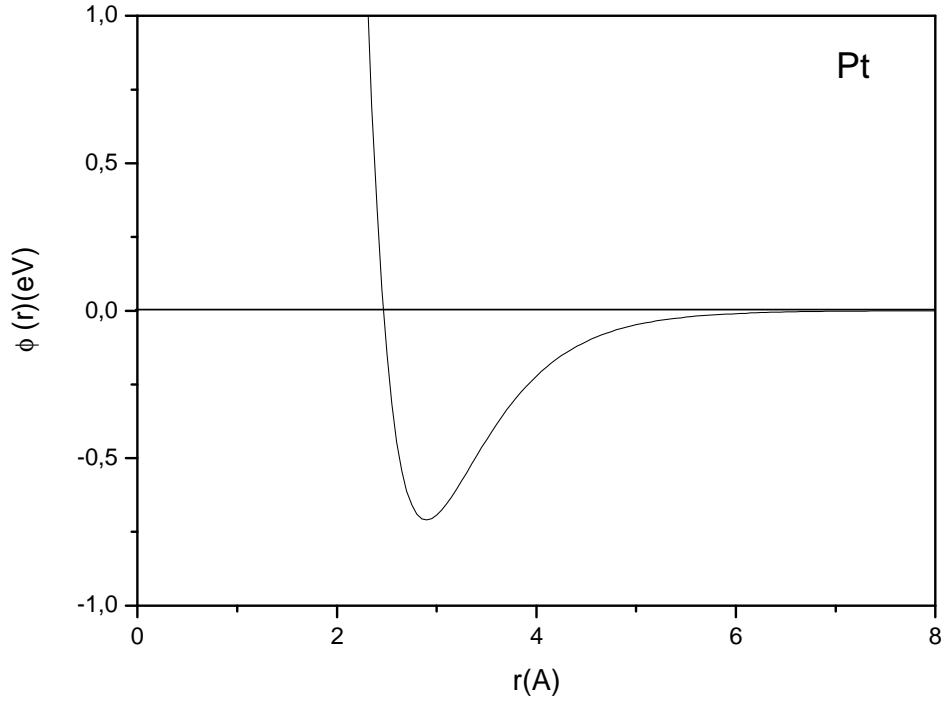
Şekil 4.3. Au Metali için Morse Potansiyeli



Şekil 4.4. Ni Metali için Morse Potansiyeli

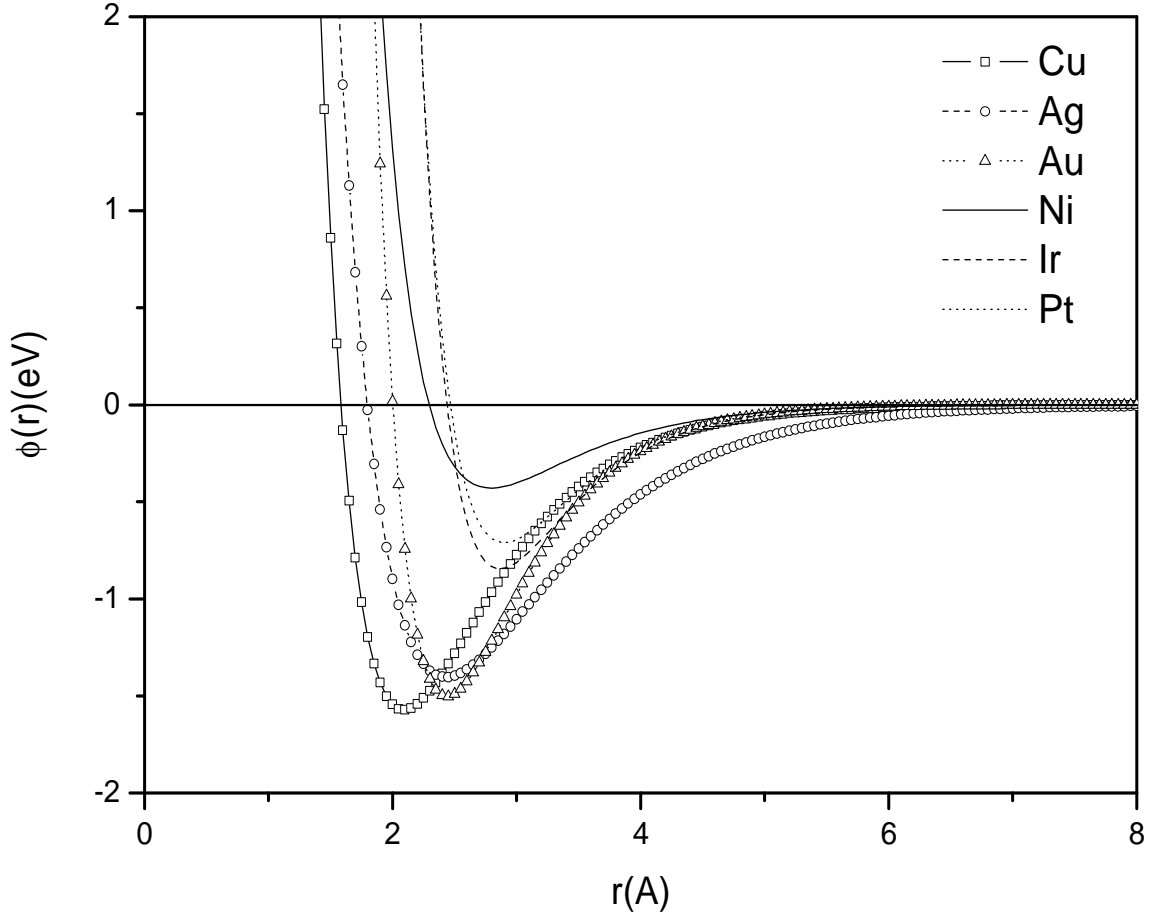


Şekil 4.5. Ir Metali için Morse Potansiyeli



Şekil 4.6. Pt Metali için Morse Potansiyeli

Hesaplanan potansiyel şekilleri, birbirine benzemekle beraber Cu'dan Pt 'ye doğru potansiyelin minimum değerleri sağa doğru kaydığı görülmektedir. En sığ potansiyel değeri Ni'de ve en derin potansiyel ise Cu metalindedir. Ayrıca bütün metallerin karşılaştırmalı potansiyel değerleri Şekil (4.7)'de verilmiştir. Şekil dikkatlice incelendiğinde aynı özelliklerin burada da mevcut olduğu görülmektedir. Bu potansiyel değerlerini metallerin örgü sabitlerine bağlamak mümkündür. Örgü sabitleri birbirine yakın olan Ag( $a=4.09\text{Å}$ ) ve Au( $a=4.08\text{Å}$ ) metallerin potansiyeleri benzerlik gösterirler. Ni( $a=3.52\text{Å}$ ) ise en düşük potansiyel derinliğine sahiptir.



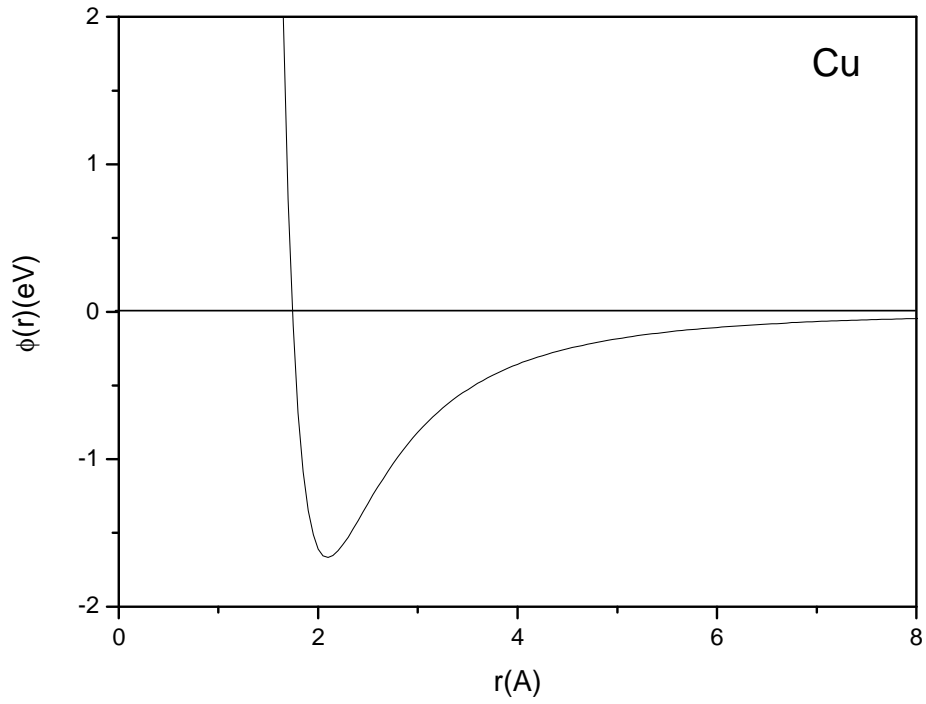
Şekil 4.7. Tüm Metaller için Morse Potansiyeli

#### 4.2 Sutton-Chen Potansiyeli

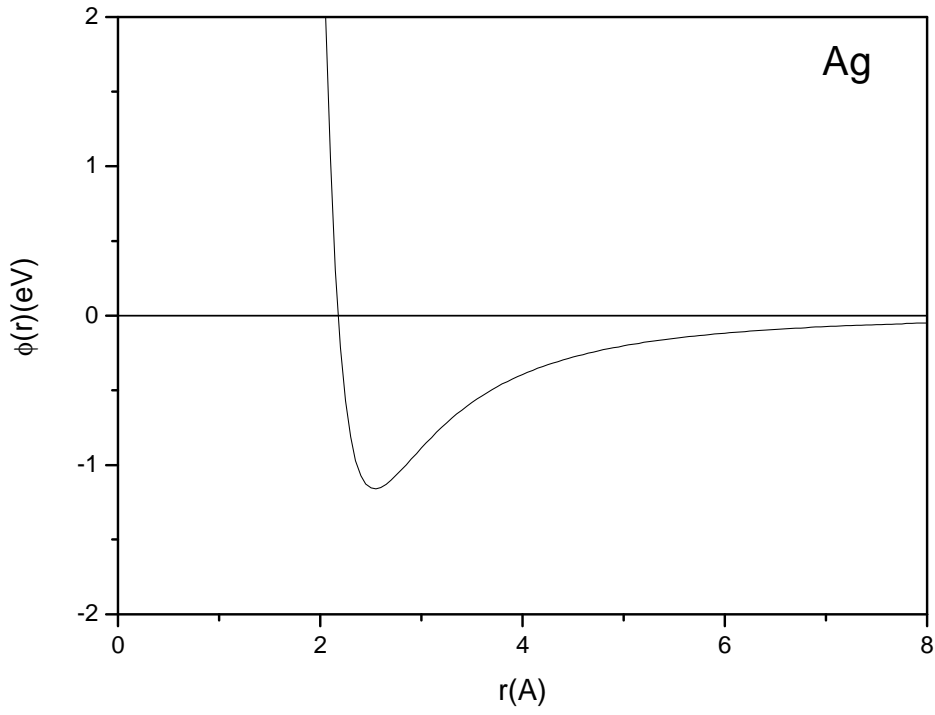
Sutton-Chen potansiyel formu Denklem(2.6)'de verilmiştir. Potansiyel parametreleri kaynak [23]'dan alınmış ve Tablo (4.2)'de listelenmiştir. Tabloda yer alan sistemler için hesaplanan potansiyeller Şekiller (4.8-4.13)'de verilmişlerdir.

Tablo 4.2. Sutton-Chen Potansiyeli Parametreleri

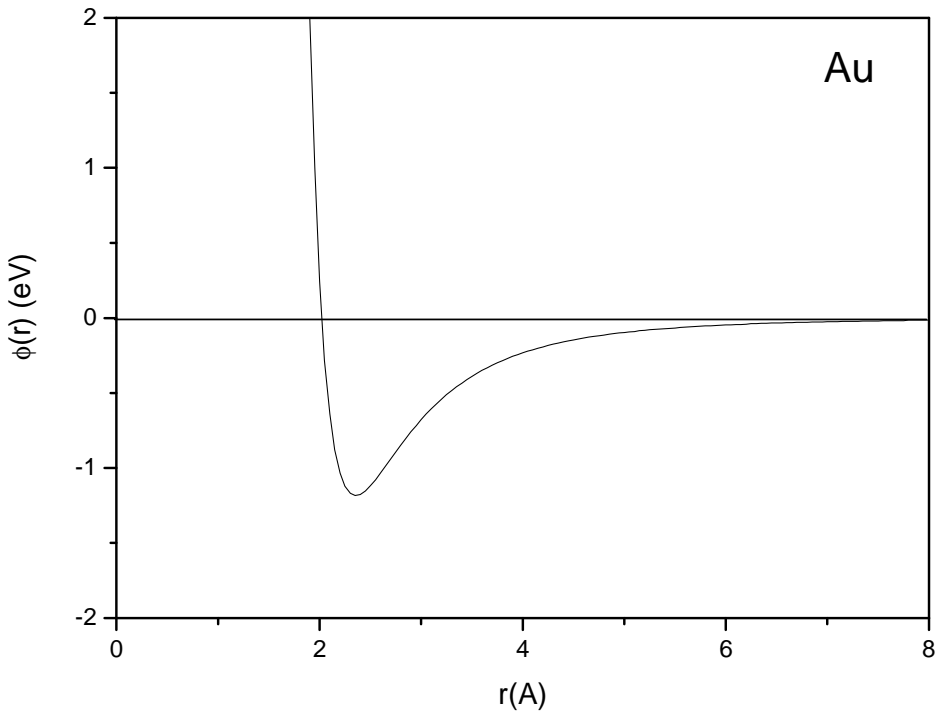
	Cu	Ag	Au	Ni	Ir	Pt
$\epsilon$ (eV)	0.012382	0.0025415	0.012793	0.015707	0.0024489	0.019833
$\alpha$ (Å)	3.61	4.09	4.08	3.52	3.84	3.92
c	39.432	144.41	34.408	39.432	334.94	34.408
n	9	12	10	9	14	10
m	6	6	8	6	6	8



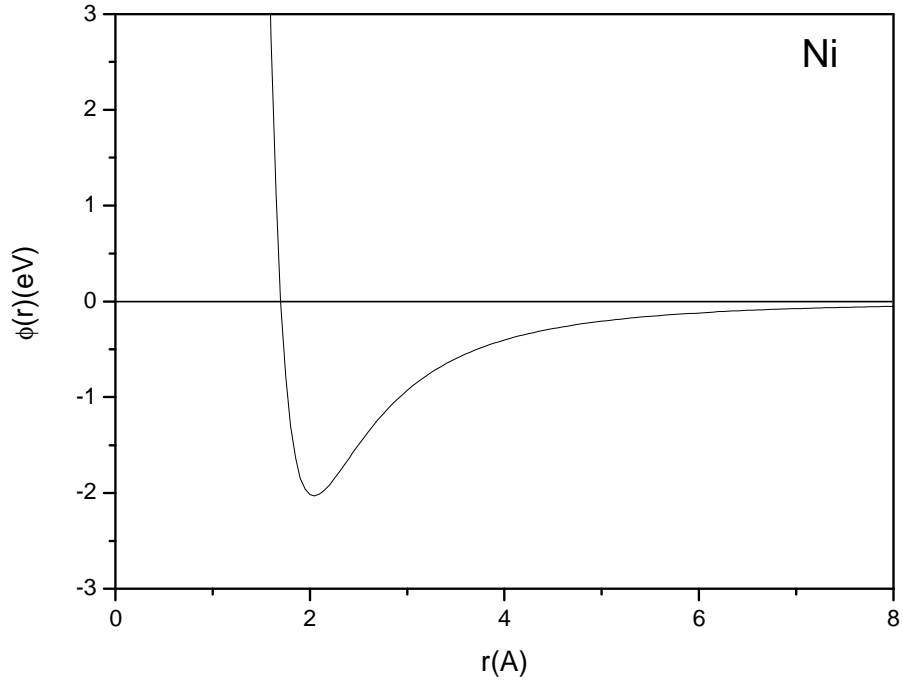
Şekil 4.8. Cu Metali için Sutton-Chen Potansiyeli



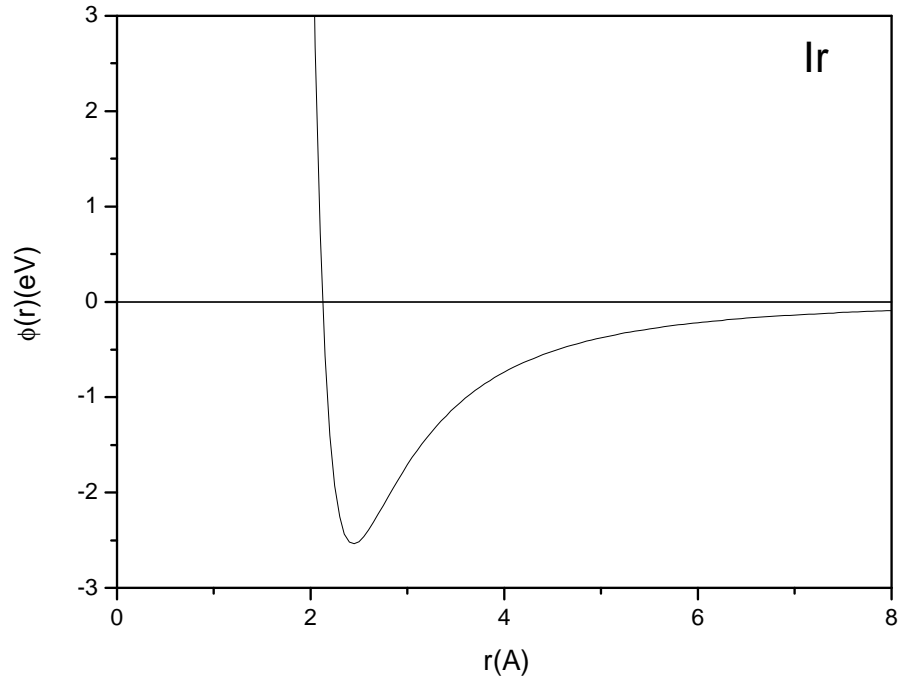
Şekil 4.9. Ag Metali için Sutton-Chen Potansiyeli



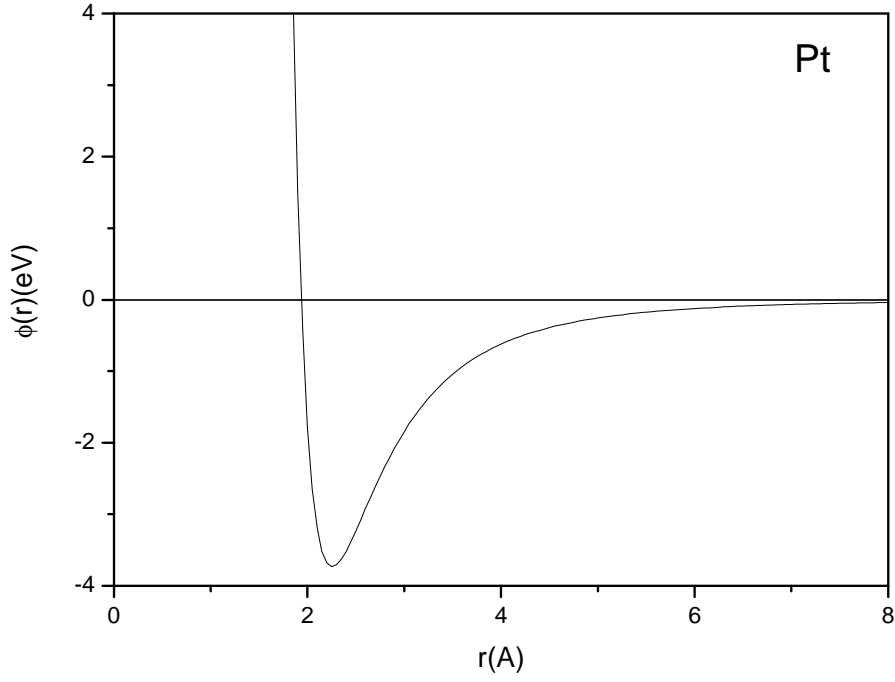
Şekil 4.10. Au Metali için Sutton-Chen Potansiyeli



Şekil 4.11. Ni Metali için Sutton-Chen Potansiyeli

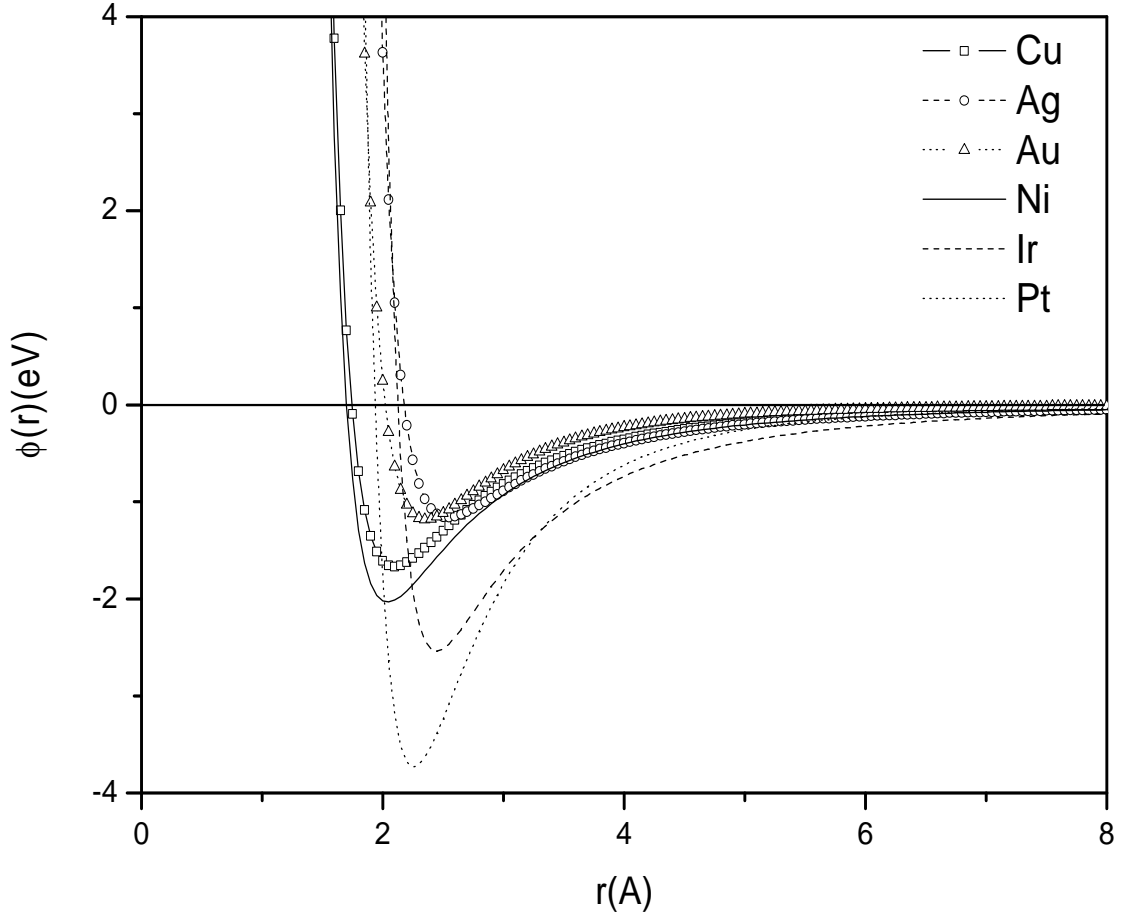


Şekil 4.12. Ir Metali için Sutton-Chen Potansiyeli



Şekil 4.13. Pt Metali için Sutton-Chen Potansiyeli

Sutton-Chen potansiyelinde parametre sayısı fazla olduğundan hesaplamalar daha hassas yapıldığından Morse potansiyeline göre bazı farklılıklar göstermektedir. Örneğin en derin potansiyel Pt metalindedir. En sığ potansiyel ise Ag metalinde görülmektedir. Potansiyelin minimum değerleri örgü sabiti düşük olan metalden başlayarak sağa doğru kaydığı görülmektedir. Bütün metallerin karşılaştırmalı potansiyel değerleri Şekil (4.14)'de verilmiştir.



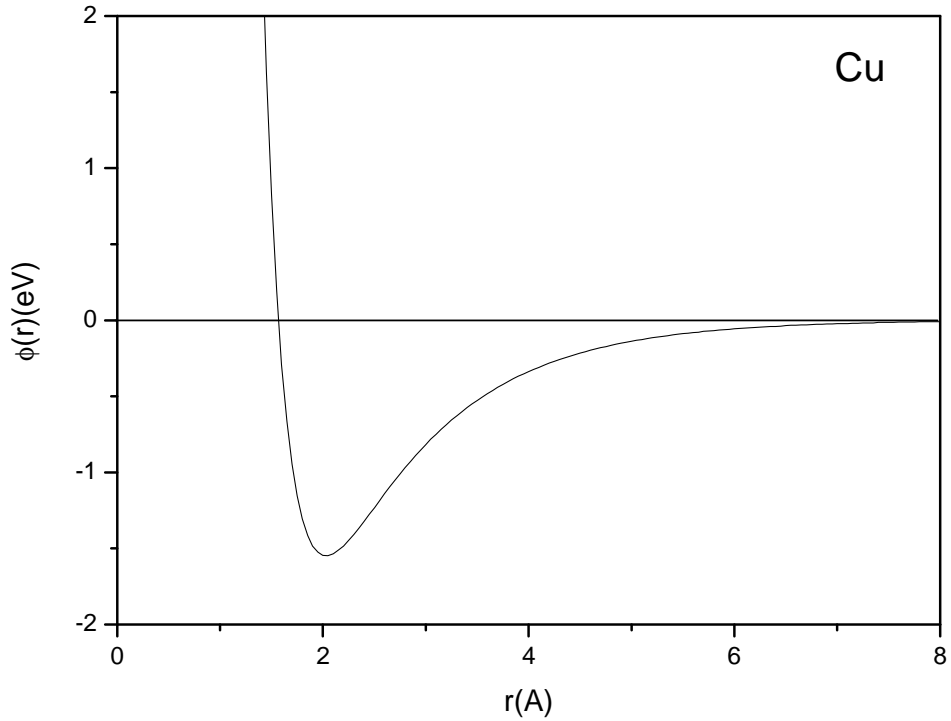
Şekil 4.14. Tüm Metaller için Sutton-Chen Potansiyeli

### 4.3 Gupta Potansiyeli

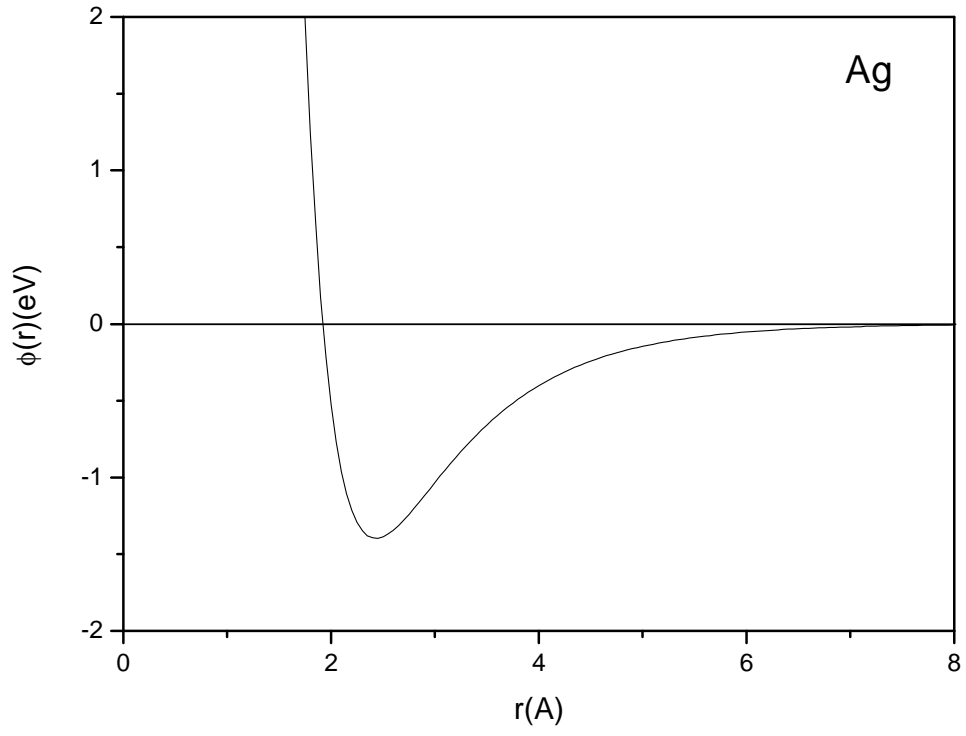
Bu potansiyel formu Denklem(2.9)'da verilmiştir. Potansiyel parametreleri kaynak [24]'den alınmış ve Tablo (4.3)' de listelenmiştir. Tabloda yer alan sistemler için hesaplanan potansiyeller Şekiller (4.15-4.20)'da verilmişlerdir.

Tablo 4.3. Gupta Potansiyeli Parametreleri

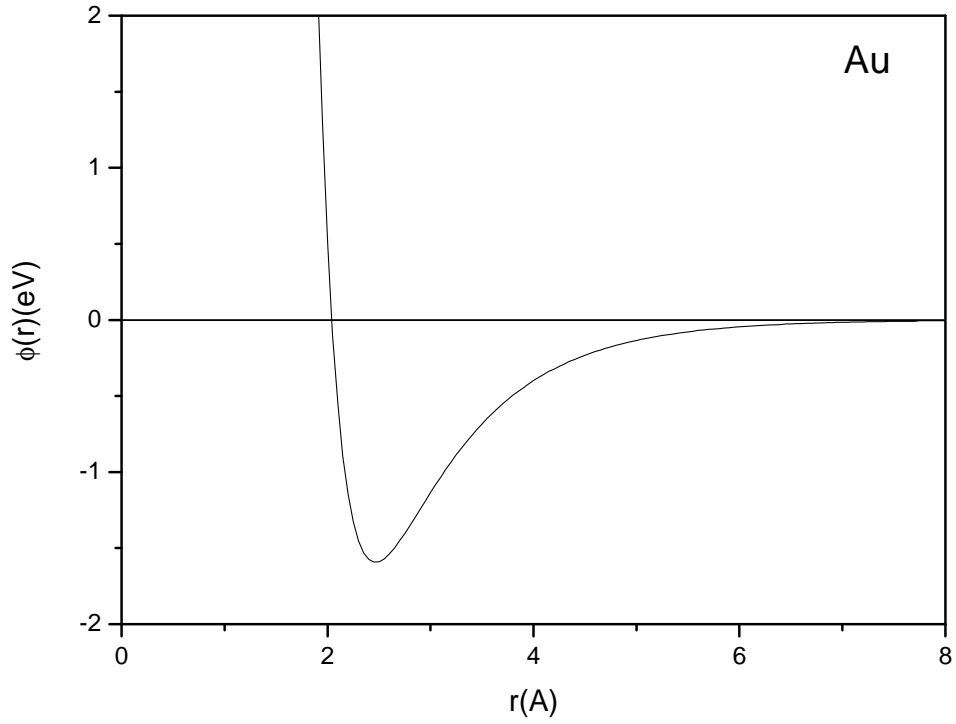
	Cu	Ag	Au	Ni	Ir	Pt
A(eV)	0.0855	0.1610	0.1471	0.0376	0.1156	0.2975
B(eV)	1.224	1.082	1.294	1.070	2.289	2.695
p	10.960	10.167	12.696	16.999	16.980	10.612
q	2.278	3.105	3.179	1.189	2.691	4.004
$r_0$ (Å)	2.556	3.039	2.921	2.491	2.715	2.775



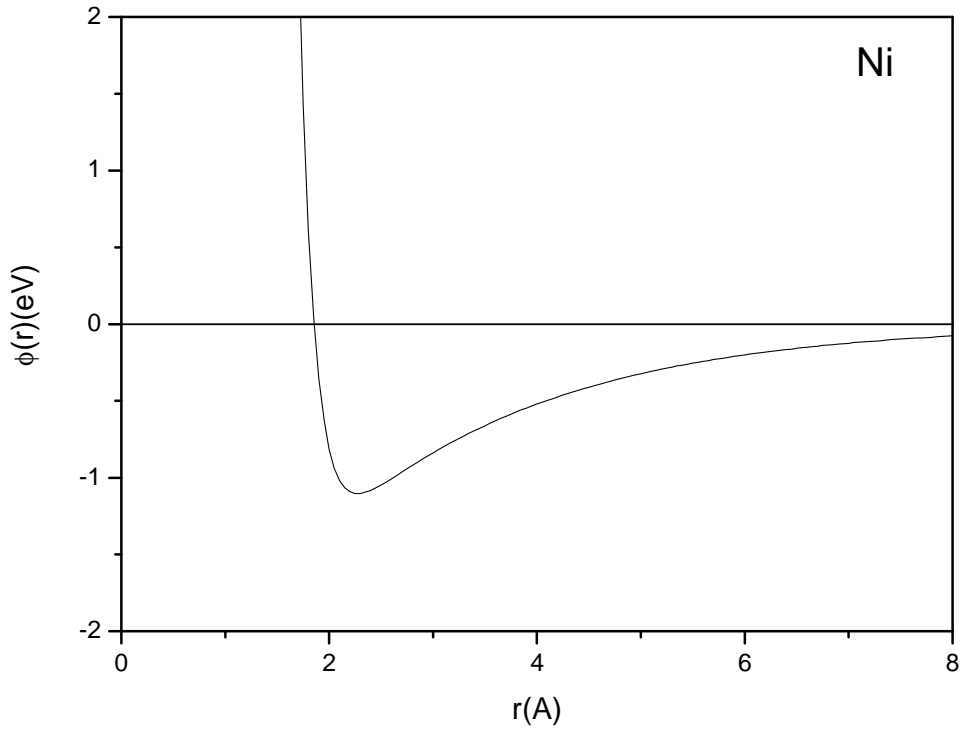
Şekil 4.15. Cu Metali için Gupta Potansiyeli



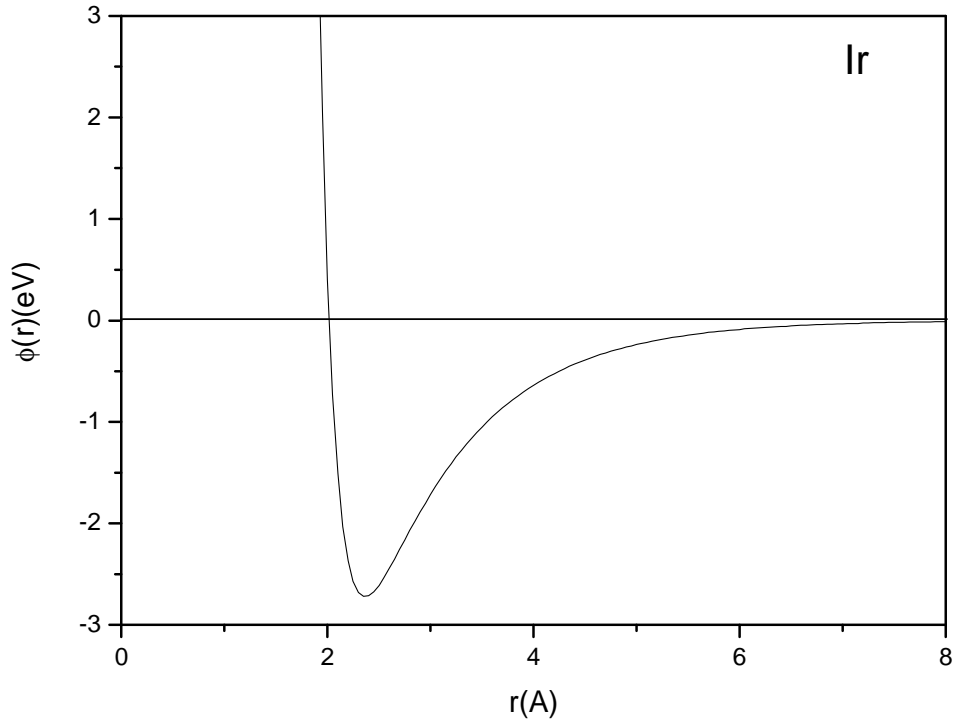
Şekil 4.16. Ag Metali için Gupta Potansiyeli



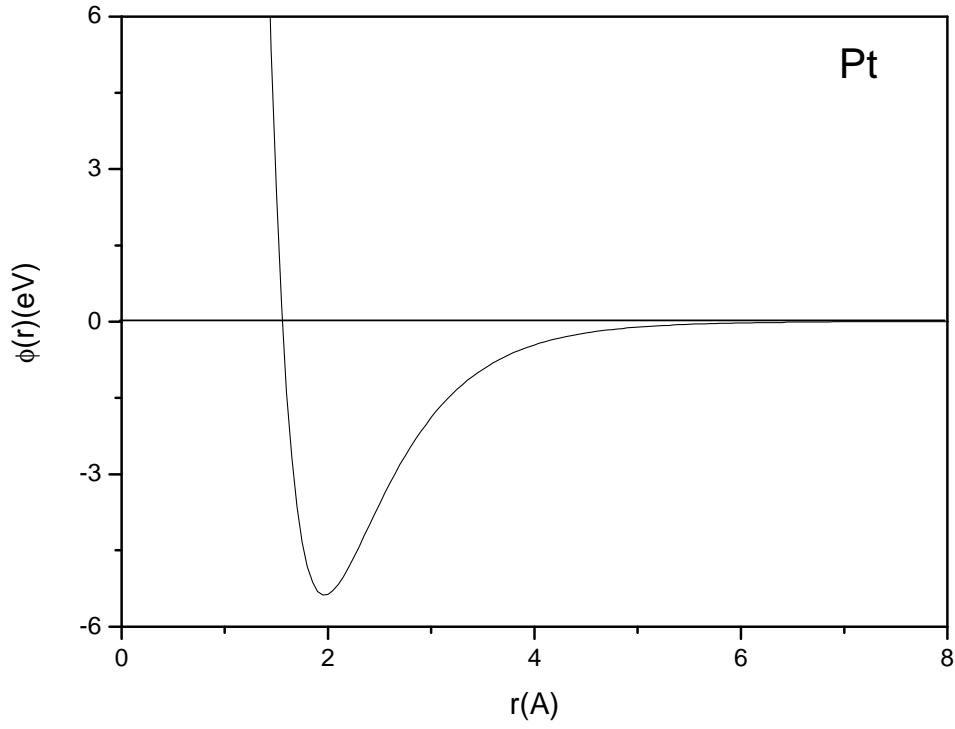
Şekil 4.17. Au Metali için Gupta Potansiyeli



Şekil 4.18. Ni Metali için Gupta Potansiyeli

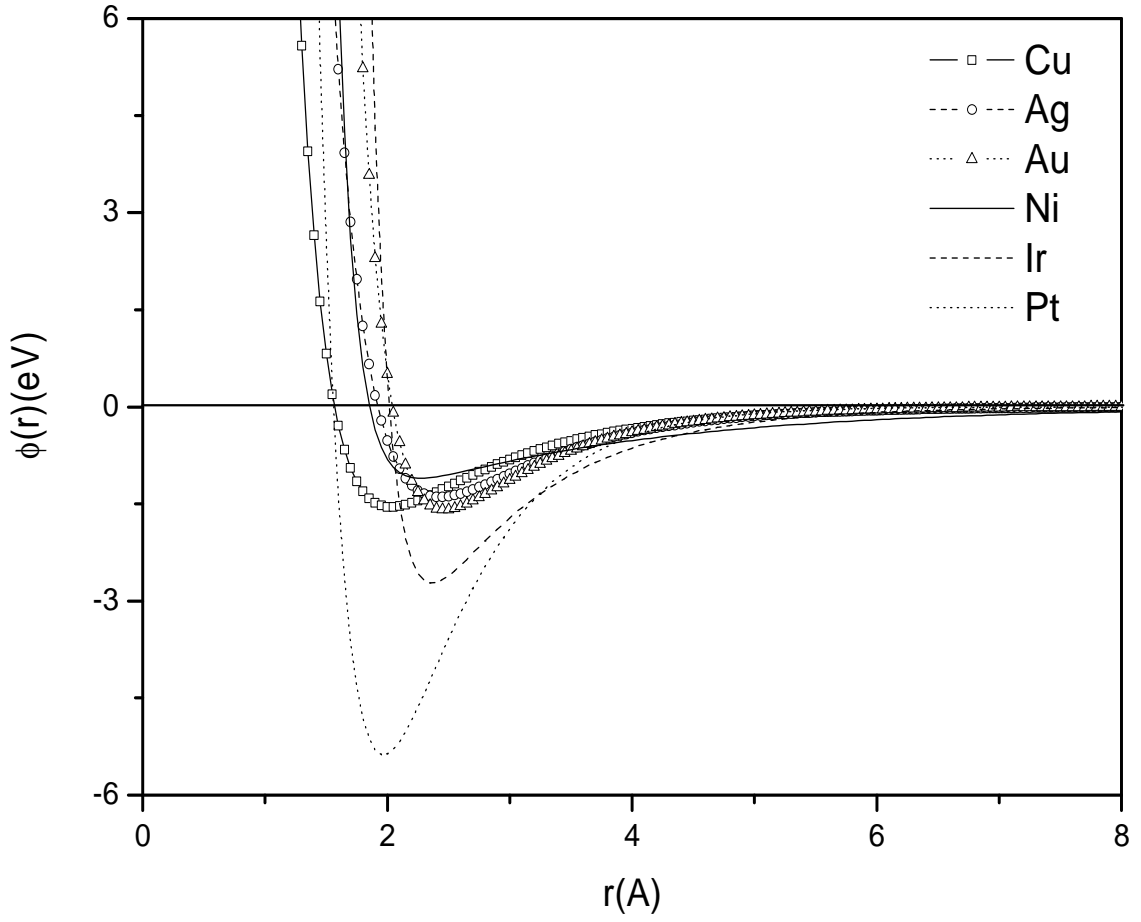


Şekil 4.19. Ir Metali için Gupta Potansiyeli



Şekil 4.20. Pt Metali için Gupta Potansiyeli

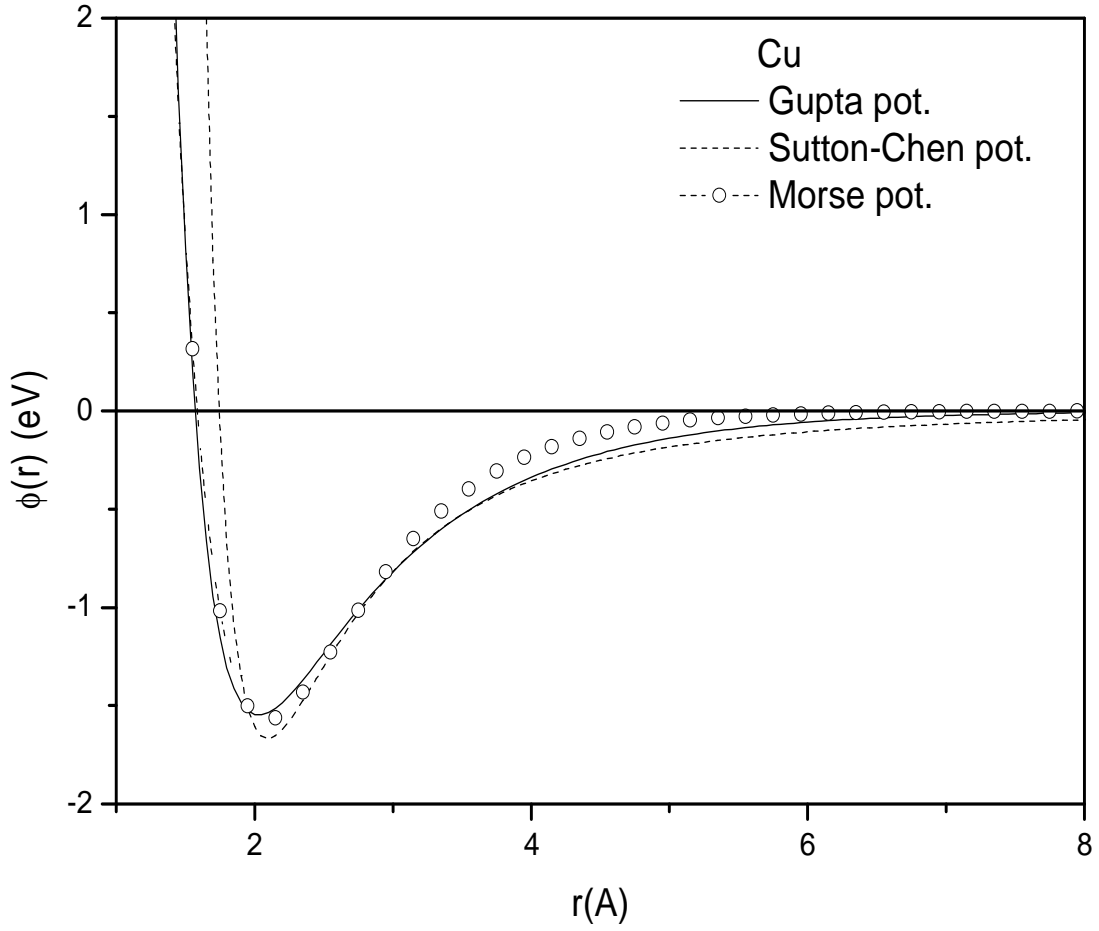
Sutton-Chen Potansiyelinde olduğu gibi Gupta potansiyelinde de parametre sayısı aynı olduğundan hesaplamalar benzer özellikler göstermektedir. Burada da en derin potansiyel Pt metalinde ve en sığ potansiyel ise Ni metalinde bulunur. Potansiyelin minimum değerlerindeki kaymalar belli bir özellik göstermez. Fakat Cu, Ag ve Au grubu birbirine çok yakın değerlere sahiptirler ve potansiyel minimum değerleri Cu' dan Au'a sağa doğru kaydığı görülmektedir. Bütün metallerin karşılaştırmalı potansiyel değerleri Şekil (4.21)'de verilmiştir.



Şekil 4.21. Tüm Metaller için Gupta Potansiyeli

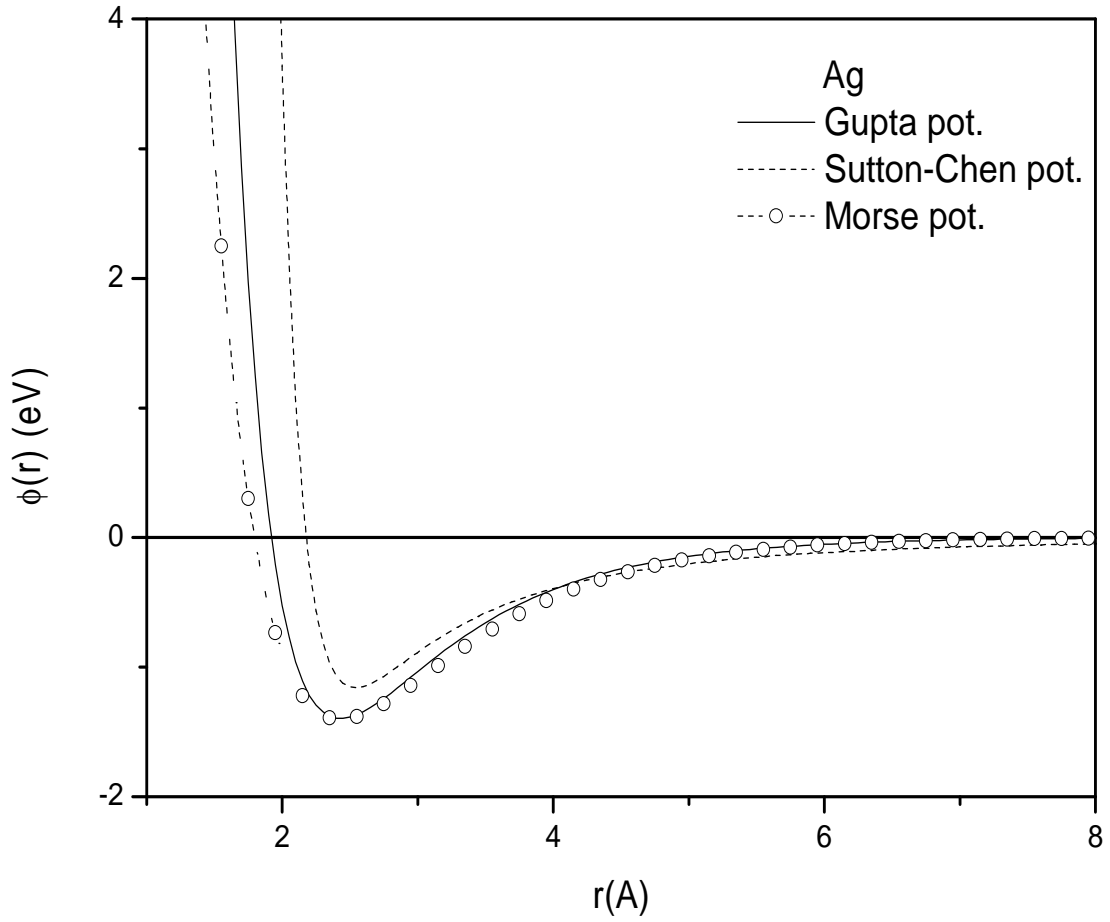
#### 4.4 Üç Farklı Potansiyelde Metallerin Karşılaştırma Hesapları

Ele alınan üç farklı potansiyel ile hesaplanan metaller Cu'dan Ir'a Şekil (4.22-4.27) arasında verilmiştir. Her metal için bu potansiyellerin karşılaştırılması önemli bir yere sahiptir. Şimdi bu hesaplamaları sırayla ele alalım.



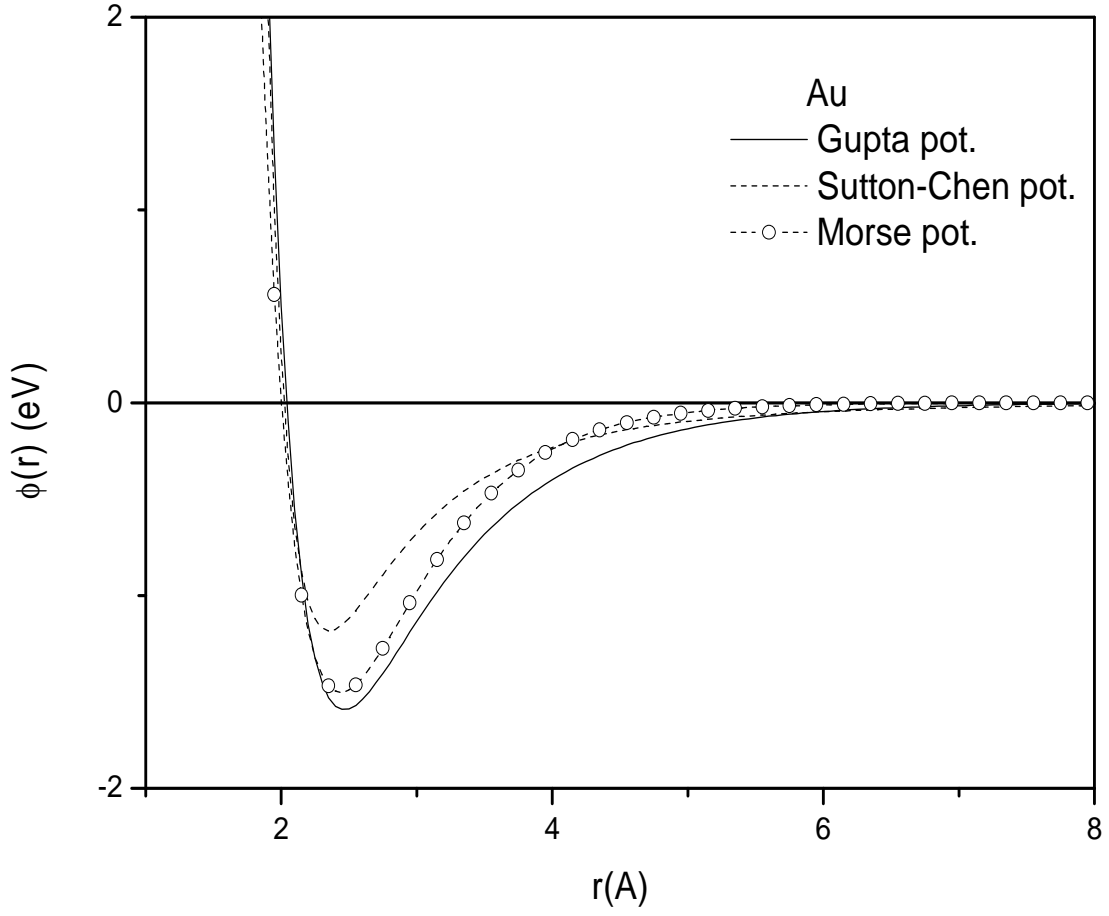
Şekil 4.22. Cu Metali İçin Farklı Potansiyellerin Karşılaştırılması

Şekilden de görüldüğü gibi Cu metali için bu potansiyeller arasında pek fark yoktur. Gupta ve Morse potansiyelleri birbirine çok benzerlik göstermektedir. Sutton-Chen potansiyelinde, potansiyel derinliği daha fazla ve potansiyel minimumu konum olarak sağa kaydığı görülmektedir. Cu metali için bu potansiyellerin çalıştığı rahatlıkla söylenebilir.



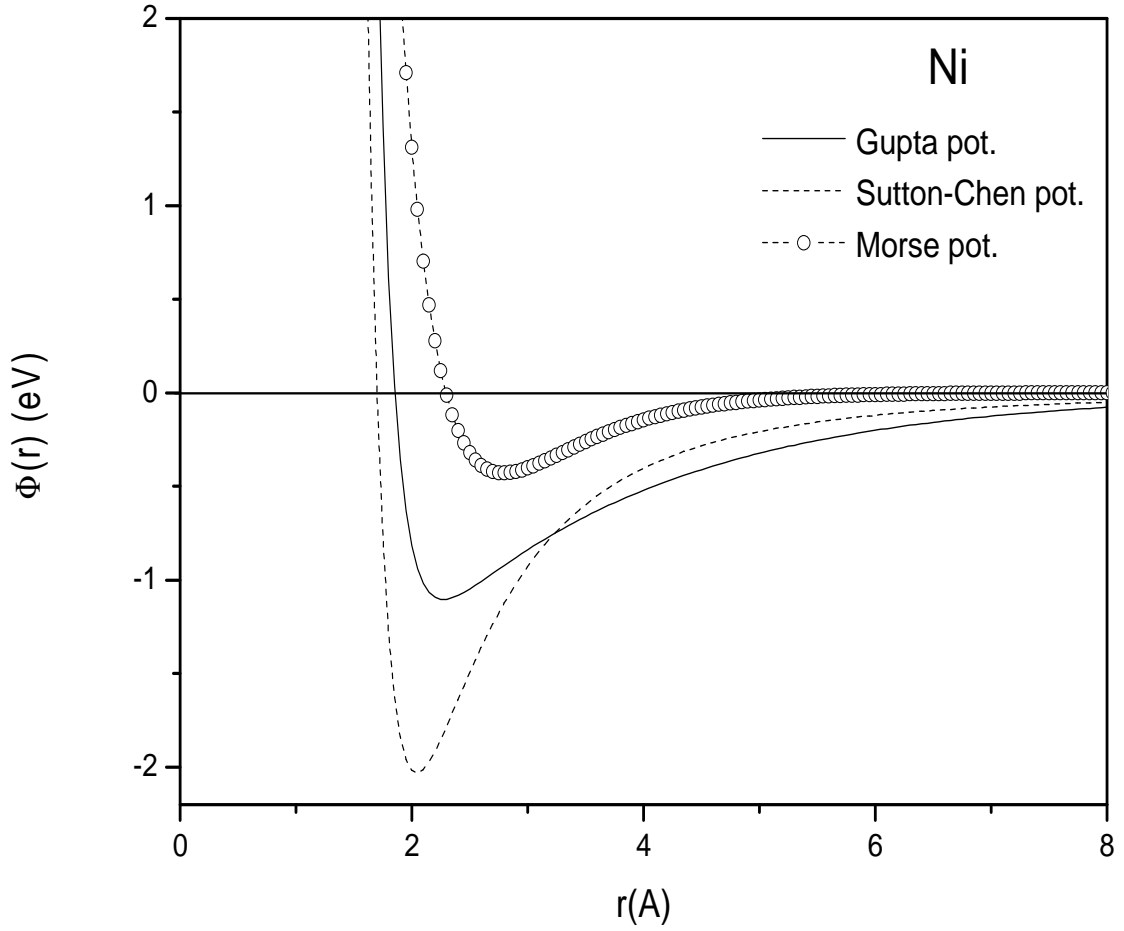
Şekil 4.23. Ag Metali İçin Farklı Potansiyellerin Karşılaştırılması

Şekilden de görüldüğü gibi Ag metali için Cu metalinde olduğu gibi Gupta ve Morse potansiyelleri birbirine çok benzerlik göstermektedir ve sonuçlar hemen hemen aynıdır. Sutton-Chen potansiyelinde, potansiyel derinliği Cu metaline göre daha sığ ve potansiyel minimumu konum olarak sağa kaydığı görülmektedir. Ag metali için özellikle Gupta ve Morse potansiyellerinin çalıştığı söylenebilir.



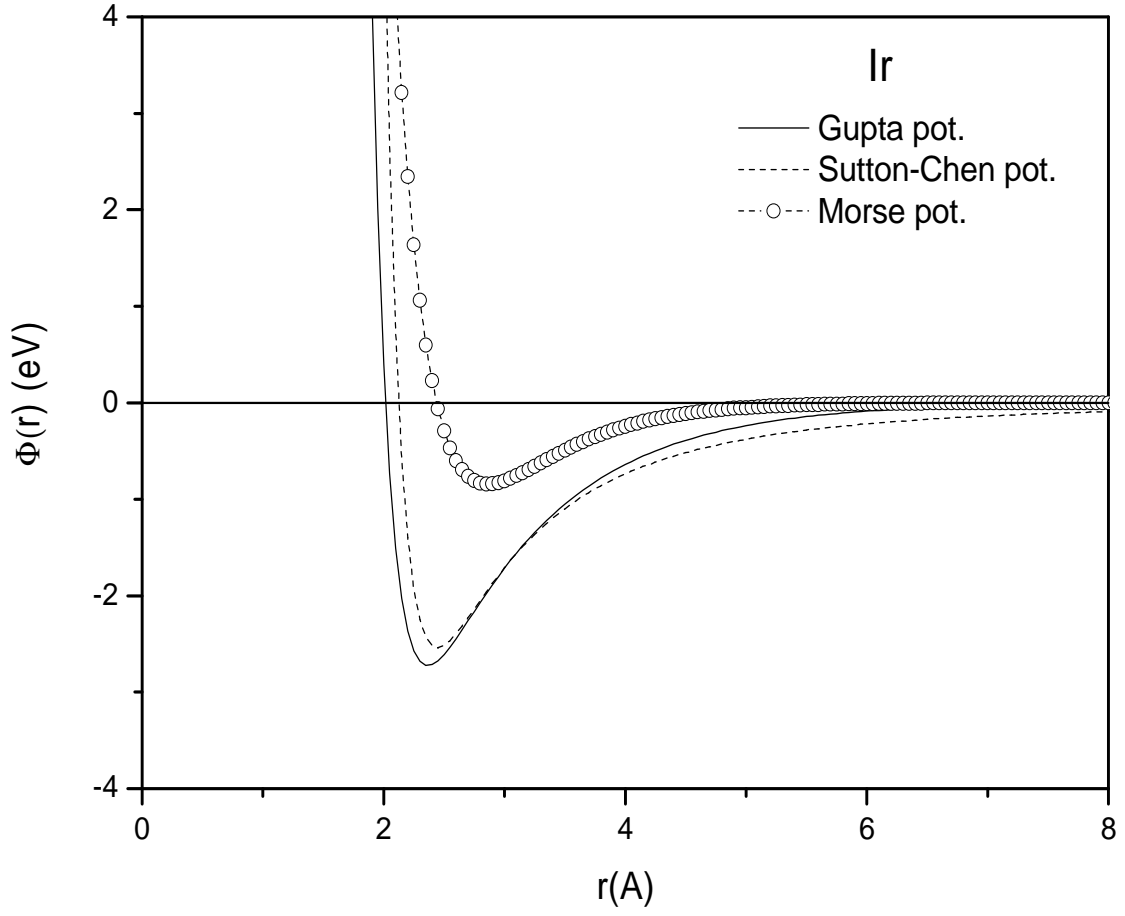
Şekil 4.24. Au Metali İçin Farklı Potansiyellerin Karşılaştırılması

Au metali için Şekil (4.24) Ag metalinde olduğu gibi Gupta ve Morse potansiyelleri birbirine benzerlik göstermektedir. Bunların potansiyel derinlikleri Sutton-Chen potansiyelinden daha fazla ve potansiyel minimumu konum olarak sağa kaydığı görülmektedir. Sonuç olarak, Au metali için özellikle Gupta ve Morse potansiyellerinin Sutton-Chen potansiyelinden daha iyi çalıştığı söylenebilir.



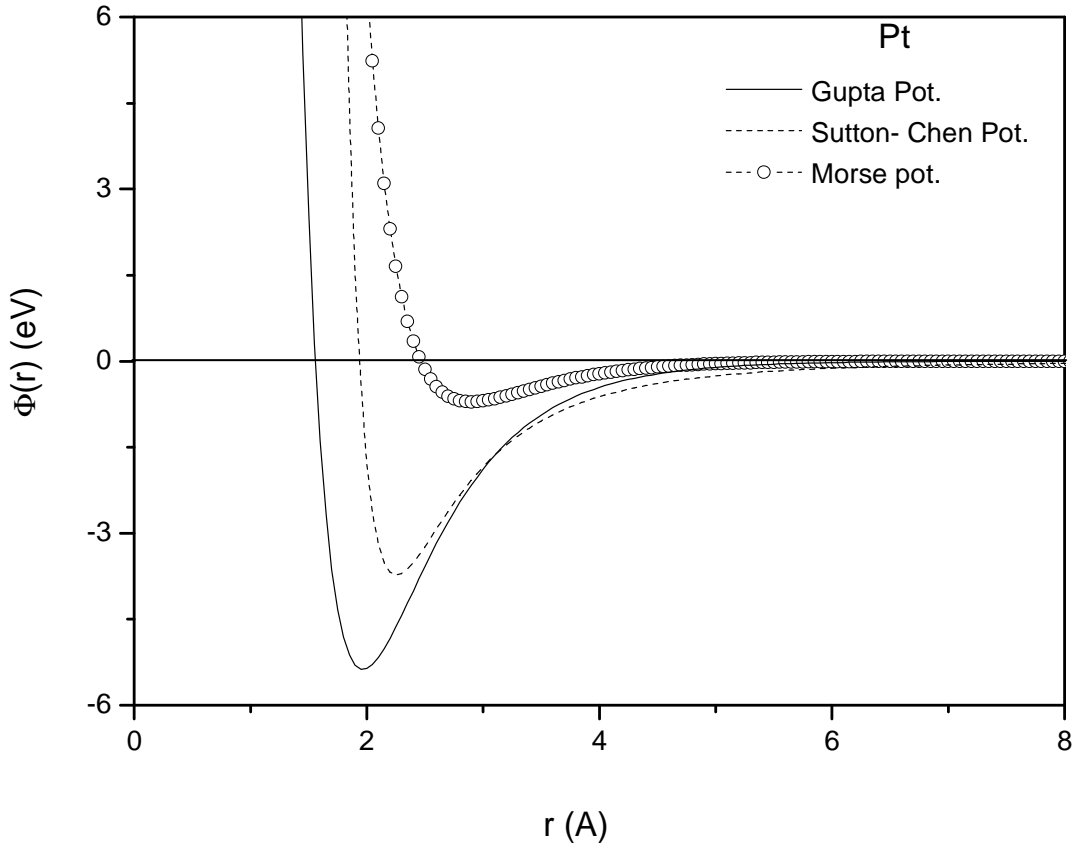
Şekil 4.25. Ni Metali İçin Farklı Potansiyellerin Karşılaştırılması

Ni metali için Şekil (4.25) her üç potansiyelde farklılıklar göstermektedir. Ni metalinde potansiyel derinlikleri Sutton-Chen potansiyelinden Morse potansiyeline doğru azalmaktadır. Potansiyel minimumları ise aynı sırada konum olarak sağa kaydığı görülmektedir. Sonuç olarak, Ni metali için özellikle Sutton-Chen potansiyeli Gupta ve Morse potansiyellerinden iyi çalıştığı söylenebilir.



Şekil 4.26. Ir Metali İçin Farklı potansiyellerin karşılaştırılması

Şekilden de görüldüğü gibi Ir metali için Sutton-Chen ve Gupta potansiyelleri benzerlik göstermektedir. Bu potansiyellerin derinlikleri aynıdır. Morse potansiyel derinliği bunlara göre daha az ve potansiyel minimumu ise konum olarak sağa kaydığı görülmektedir. Sonuç olarak, Ir metali için özellikle Sutton-Chen ve Gupta potansiyelleri Morse potansiyelinden iyi çalıştığı söylenebilir.



Şekil 4.27. Pt Metali İçin Farklı Potansiyellerin Karşılaştırılması

Şekilden de görüldüğü Pt metali için Ni’de olduğu gibi her üç potansiyelde farklılıklar göstermektedir. Pt metalinde potansiyel derinlikleri Gupta potansiyelinden Morse potansiyeline doğru azalmaktadır. Potansiyel minimumları ise aynı sırada konum olarak sağa kaydığı görülmektedir. Sonuç olarak, Pt metali için özellikle Gupta potansiyeli Sutton-Chen ve Morse potansiyellerinden iyi çalıştığı söylenebilir.

## KAYNAKÇA

- [1] Hume-Rothery W., 1931. *“The Metallic State: Electrical Properties and Theories”* The Clarendon Press, Oxford.
- [2] Darken S. Lawrence, Gurry W. Robert, *“Physical Chemistry of Metals”*, Mc Graw, New York, 1953.
- [3] Rohrer, G.S., 2001. *“Structure and Banding in Crystalline Materials”* Cambridge University Press, New York.
- [4] Boom R., de Boer F.R., Mattens W.C.M., Miedemma A.R., Niesson A.K., 1989. *“Cohesion in Metals: Transition Metal Alloys”* North-Holland, Amsterdam.
- [5] Alanso J.A., Lopez J.M., March N.H., 1982. *“Concentration fluctuation in simple liquid alloys with atomic size mismatch”* J. Phys. (Paris) Lett.43 441-445.
- [6] Alanso J.A., Gallego L.J., Lopez J.M., 1988. *“Glass formation in binary alloy systems: A prediction of the composition range”* Philos. Mag. A58 79-92.
- [7] Liu, B.X., Zhang Z.J., Jin O. and Pan F., 1995. *“Metastable alloys synthesised by ion mixing and thermodynamic and kinetic modelling”* NuCl. Instrum. Methods Phys. Res. B 106 17-22.
- [8] Delemare J., Lemarchand D., Vigier P., 1955. *“Structural investigation of the metastable compound Al in as-cast Fe-Nd eutectic alloy”* J. Alloys Compd. 216 273-280.
- [9] Chen Y.G., Liu B.X., 1997. *“Alloy phases formed in immiscible Cu-Mo and Cu-W systems by multilayer-technique”* J.Alloys Compd. 261 217-224.
- [10] Hergert W., Ernst A. and De M., 2004. *“Computational Materials Science:From Basic Principles to Materials Properties”* Springer-Verlag, New York.
- [11] Raabe, D., 1998. Computational Materials Science, Wiley- VCH, New York.
- [12] Erkoç Ş., 1997. *“Empirical many-body potential energy functions used in computer simulations of condensed matter properties”*Phys. Rep. 278 80-105.
- [13] Carlsson A.E., 1990. In Solid State Physics,eds., Ehrenreich H. and Turnbull D.(Academic) Vol.43, p.1.
- [14] *“Interatomic potentials of the binary transition metal systems and some applications in materials physics”*. Advanced Materials Laboratory of Materials Science and Engineering Tsinghua University Beijing 100084, China Pyhsics Report 455 (2008) 1-134.
- [15] Foiles S.M., Baskes M.I. and Daw M.S., *“Embedded-atom-method functions for the fcc metals Cu, Ag, Au, Ni, Pd, Pt and their alloys”* Sendia National Laboratories, Livermore California 94550 (Received 13 January 1986).
- [16] Finnis M.W. and Sinclair J.E., Philos. Mag A50,45 (1984).

- [17] Suttonand A.P., Philos Chen J., Mag Lett 61: 139,1990.
- [18] Grimwall Gan, “*Thermopyhsical Properties of Materials*”, Elsevier, Amsterdam, 1999.
- [19] Hu W.Y., Shu X.L., Zhang B.W., “*Point-defect properties in body-centered cubic transition metals with analytic EAM interatomic potentials*” Comput. Mater, Sci, 23 (2002) 175-189.
- [20] Hu W.Y., Deng H.Q., Yuan X.J., Massahiro Fukumoto, “*Point-defect properties in hcp rare earth alloys with the embedded atom method*”, J. Alloys Compd. 420 (2006) 83-93.
- [21] Igarashi M., Khantha M., Vitek V., N-body interatomic potentials for hexagonal close-packed metals, Philos. Mag. B 63 (1991) 603-627.
- [22] Halicioglu T. and Pound G.M., 1975. *Phys. Stat. Sol. (b)* 30, 619.
- [23] Suttonand A.P., Philos Chen J., Mag Lett 61: 139,1990.
- [24] Cleriond F., Rosato V., Phys. Rev B48, 22 (1993).
- [25] Finnis M.W. and Sinclair J.E., Philos. Mag A50,45 (1984).
- [26] Erkoç Ş., Z Phys. D: Atoms, Molecules and Clusters 32, 257 (1994).
- [27] Most of the recent interatomic potentials for silicon are cited by Baskes M.I., Phys. Rev. Lett. 59,2666
- [28] Tersoff J., Phys. Rev. B37, 6991 (1988).
- [29] Harrison W.A. “*Pseudopotentials in the theory of metals*”, (W.A. Benjamin Pub. Co., New York) (1967), “*Solid State Theory*” (McGraw Hill Pub. Co., New York) (1970).
- [30] Harrison W.A. “*Elementary Electronic Structure*” (World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., Singapore) (1999).
- [31] Yastrabov L. I. and Katsndon A. A., “*Foundation of the One – electron Theory of Solids*”, (Mir Pub., Moscow) (1987).
- [32] Fermi E., *Ricerca sci* 7 (1936) 13.
- [33] Bardeen J., Phys. Rev 52 (1937) 688.
- [34] Heine V., Cohen M. L., Weire D., “*Solid State Physics, Advance in Research and Applications*”, Edited by H. Ehrenreich, F. Seit and D. Turnbull, (Academic Press, New York) 24 (1970).
- [35] Wallace D. C., “*Thermodynamics of Crystal*”, (John Wiley and Sons. Inc., New York) (1972).
- [36] Srivastava S. K., “*Pseudopotentials in Physics and Chemistry of Solids*”, (T. P. I. Printers, India) (1977).

- [37] Ziman J. M., “*Principals of the Theory of Solids*”, II Edition, (Cambridge University Press, London) (1972).
- [38] Waseda Y., “*The structure of non-crystalline materials: Liquids and Amorphous Solids*”, (McGraw Hill Pub. Co., New York) (1980).
- [39] Shimoji M., “*Liquid Metals*”, (Academic Press, London) (1977).
- [40] Phillip J. C., Kleinman L., Phys Rev. **116** (1959) 287; **116** (1959) 880.
- [41] Antonick E., J. Phys. Chem. Solids **10** (1959) 314.
- [42] Abarenkov I., Heine V., Phil. Mag **12** (1965) 529.
- [43] Animalu A. O. E., Heine V., Phil.Mag.**12** (1965) 1249.
- [44] Shaw R. W., Harrison W. A., Phys. Rev **163** (1967) 604.
- [45] Shaw R. W., Phys. Rev. **174** (1968) 769, Phys. Rev. B **135** (1972) 2742.
- [46] Vyas P. S., Gajjar P. N., Thakore B. Y., Jani A. R., Physica B **406** (2011) 4412.
- [47] Vyas P. S., Thakore B. Y., Gajjar P. N., Jani A. R., Am. Inst. Phys. Conf. Publ. **1393** (2011) 139.
- [48] Vyas P. S., Thakore B. Y., Gajjar P. N., Jani A. R., Am. Inst. Phys. Conf. Publ. **1349** (2011) 1113.
- [49] Vyas P. S., Thakore B. Y., Gajjar P. N., Jani A. R., Am. Inst. Phys. Conf. Publ. **1313** (2010) 379.
- [50] Vyas P. S., Thakore B. Y., Gajjar P. N., A. R. Jani, Commun. Theor. Phys. **54** (2010) 573.
- [51] Vyas P. S., Thakore B. Y., Gajjar P. N., A. R. Jani, J. Sci. **1** (2010) 44.
- [52] Vyas P. S., Thakore B. Y., Gajjar P. N., A. R. Jani, Commun. Theor. Phys. **50** (2008) 763.
- [53] Thakore B. Y., Khambholja S. G., Joshi M., Jani A. R., J. Opto. Advan. Mater **13** (2011) 293.
- [54] Patel A. D., Khambholja S. G., Bhatt N. K., Thakore B. Y., Jani A. R., J. Sci. Tech. **2** (2011) 48.
- [55] Thakore B. Y., Khambholja S. G., Suthar P. H., Bhatt N. K., Jani A. R., Am. Inst. Phys. Conf. Publ. **1349** (2011) 525.
- [56] Thakore B. Y., Suthar P. H., Khambholja S. G., Gajjar P. N., Jani A. R., Am. Inst. Phys. Conf. Publ. **1349** (2011) 525.
- [57] Patel A. D., Khambholja S. G., Bhatt N. K., Thakore B. Y., Vyas P. R., Jani A. R., Am. Inst. Phys. Conf. Publ. **1349** (2011) 525.

- [58] Thakore B. Y., Khambholja S. G., Suthar P. H., Bhatt N. K., Jani A. R., Chinese Phys. Lett. **27** (2010) 096203.
- [59] Thakore B. Y., Suthar P. H., Khambholja S. G., Gajjar P. N. and Jani A. R., Am. Inst. Phys. Conf. Publ. **1313** (2010) 106.
- [60] Gajjar P. N., Vora A. M., Patel M. H., Jani A. R., Int. J. Mod. Phys. B **17** (2003) 6001.
- [61] Baria J. K., Gajjar P. N., Jani A. R., Ind. J. Pure and Appl. Phys. **40** (2002) 714. Fizika **12** (2003) 23.
- [62] Vora A. M., Patel M. H., Gajjar P. N., Jani A. R., Solid State Phys. (India) **46** (2003) 315.
- [63] Baria J. K., Jani A. R., Physica B **328** (2003) 317.
- [64] Vora A. M., Patel M. H., Gajjar P. N., Jani A. R., Pramana **58** (2002) 849.
- [65] Jivani A. R., Gajjar P. N., Jani A. R., Semi. Phys. Quantum Electronics and Optoelectronics **5** (2002) 243.
- [66] Patel M. H., Vora A. M., Gajjar P. N., Jani A. R., Physica B **304** (2001) 152, Commun. Theor. Phys. **38** (2002) 365.
- [67] Gajjar P. N., Thakore B. Y., Jani A. R., Rom. J. Phys. **43** (1998) 747.
- [68] Gajjar P. N., Thakore B. Y., Jani A. R., Solid State Commun. **100** (1996) 785.
- [69] Gajjar P. N., Thakore B. Y., Jani A. R., Luhar J. S., Physica B **215** (1995) 293.
- [70] Gajjar P. N., Thakore B. Y., Patel H. K., Jani A. R., Acta Physica Polonica A **88** (1995) 489.
- [71] Gajjar P. N., Thakore B. Y., Jani A. R., Luhar J. S., Ind. J. Pure Appl. Phys. **33** (1995) 309.
- [72] Gajjar P. N., Thakore B. Y., Jani A. R., Luhar J. S., Acta Physica Polonica A **86** (1994) 369.
- [73] Jani A. R., Patel H. K., Gajjar P. N., Ind. J. Pure and App. Phys. **31** (1993) 439.
- [74] Gajjar P. N., Thakore B. Y., Patel M. H., Jani A. R., Prajna **3** (1993) 93.
- [75] Jani A. R., Gajjar P. N., Patel H. K., Phys. Stat. Sol. (b) **169** (1991) k105.
- [76] Aschroft N.W., Phys. Lett. **23** (1966) 48, J. Phys. C **1** (1968) 232, Phys. Rev. **155** (1966) 3.
- [77] Kachhava C.M., Sharma K.S., Phy. Stat. Sol. (b) **97** (1981) 601.
- [78] Vрати S.C., Rani N., Gupta D.K., Phy. Let. **74A** (1979) 139.
- [79] Sham L.J., Proc. R. Soc. (London) A **283** (1965) 33.
- [80] Hubbard J., Phys. Lett. A **125** (1967) 709.

- [81] Taylor R., J. Phy. F **8** (1978) 1699.
- [82] Vashishta P., Singwi K.S., Phys. Rev. B **6** (1972) 875.
- [83] Utsumi K., Ichimaru S., Phys. Rev. B **22** (1980) 5203.
- [84] Farid B., Heine V., Engel G., Robertson I. J., Phys. Rev. B **48** (1993) 11602.
- [85] Sarkar A., Sen D., Haldar H., Roy D., Mod. Phys. Lett. B **12** (1998) 639.
- [86] Nagy I., J. Phys. C **19** (1986) 481.
- [87] Thakor P.B., Patel V.N., Thakore B.Y., Gajjar P.N., Jani A.R., “ *Bulk modulus of simple liquid metals*” Indian Journal of Pure & Applied Physics, 46, 431 (2008).
- [88] Heine V., Cohen M.L. and Weaire D., Solid State Physics (Academic Press, New York, 1970). Vol. 24.
- [89] Şentürk Dalgıç S., (yayına hazırlanıyor)
- [90] Waseda Y., “*The Structure of Non-Crystalline Metals*”, McGraw- Hill, New York, (1980).
- [91] Erkoç Ş., “*Empirical Potential Energy Functions Used in the Simulations of Materials Properties*” Annual Reviews of Computational Physics IX(pp. 1-103).

## **ÖZGEÇMİŞ**

3 Haziran 1986 yılında İstanbul'un Fatih ilçesinde doğdum. İlkokul ve ortaokulu Yeşilköy Şehit Pilot Muzaffer Erdönmez İlköğretim Okulunda okulunda, liseyi Küçükçekmece Anadolu Lisesinde okudum. 2004 yılında ise Trakya Üniversitesi Fen Fakültesi Fizik Bölümünde lisans eğitimine başladım ve 2009 yılında lisans eğitimimi tamamladım. Şubat 2011 yılında Trakya Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Anabilim Dalında yüksek lisans öğrenimine başladım.