

**GÖMÜLÜ ATOM METODU İLE SIVI HCP NADIR
TOPRAK METALLERİNİN ATOMLARARASI
ETKİLESME POTANSİYELLERİ, SIVI YAPILARI
VE BAZI TERMODİNAMİK ÖZELLİKLERİ**

SÜLEYMAN KALAYCI

YÜKSEK LİSANS TEZİ

FİZİK ANABİLİM DALI

Tez Yöneticisi: Prof. Dr. Serap DALGIÇ

EDİRNE - 2005

T.C.
TRAKYA ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

GÖMÜLÜ ATOM METODU İLE SIVI HCP NADIR
TOPRAK METALLERİNİN ATOMLARARASI
ETKİLESME POTANSİYELLERİ, SIVI YAPILARI
VE BAZI TERMODİNAMİK ÖZELLİKLERİ

SÜLEYMAN KALAYCI

YÜKSEK LİSANS TEZİ
FİZİK ANABİLİM DALI

Tez Yöneticisi : Prof. Dr. Serap DALGIÇ

EDİRNE – 2005

T.C.
TRAKYA ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

**GÖMÜLÜ ATOM METODU İLE SIVI HCP NADIR
TOPRAK METALLERİNİN ATOMLARARASI
ETKİLESME POTANSİYELLERİ, SIVI YAPILARI
VE BAZI TERMODİNAMİK ÖZELLİKLERİ**

Süleyman KALAYCI

YÜKSEK LİSANS TEZİ
FİZİK ANABİLİM DALI

Bu tez . .01/09/2005. . tarihinde aşağıdaki jüri tarafından kabul edilmiştir.

.
Prof. Dr. Serap DALGIÇ
Tez Yöneticisi

.
Yrd. Doc. Dr. Seyfettin DALGIÇ
Üye

.
Yrd. Doc. Dr. Yasemin BAKIRCIOĞLU
Üye

ÖZET

Bu çalışmada, sıvı hcp nadir toprak geçiş metallerinin yapısal ve termodinamik özelliklerini doğru olarak açıklayabilen atomlar arası etkin çiftler potansiyellerinin, Gömülü Atom Metodu (GAM) ile elde edilmesi amaçlanmıştır. Bu amaçla literatürde hcp geçiş metalleri için kati özellikleri fit edilerek parametrize edilen farklı Gömülü Atom Metodları ele alınmış, Zhang-Quyang Gömülü Atom Metodu (ZQ-GAM), Hu-Xu, Hu-Zhang, Hu-Deng'in Analitik Yeniden Düzenlenmiş Gömülü Atom Metodları (AYDGAM) ve Chen-Xu GAM ile çalışılmıştır. S. S. Dalgıç vd. tarafından fcc sıvı geçiş metallerinin Gömülü Atom Metodu hesaplamaları için önerilmiş olan parametrizasyon metodu hcp yapısındaki bazı nadir toprak metalleri, Pr, Nd, Gd, Tb, Dy, Ho, Er ile hcp geçiş metallerinden Be, Mg, Sc, Y, La, Ti, Zr, Co' a da uygulanmıştır. ZQ-GAM, Hu-Xu AYGAM, Hu-Zhang AYGAM, Hu-Deng AYGAM ve Chen-Xu GAM potansiyel fonksiyonları önerilen parametrizasyon metodu kullanılarak hesaplanmıştır.

Ayrıca Gömülü Atom Metodunda Finnis-Sinclair (FS) Efektif Çiftler Potansiyel Yaklaşımı kullanılarak, ilk kez AYGAM metodları için FS yaklaşımı geliştirilmiş, enerji düzeltme terimlerinin de yer aldığı iki farklı FS efektif potansiyel metodu ile çalışılmıştır.

Hesaplanan Atomlar - arası etkin çiftler potansiyelleri, sıvı yapı teorilerinden Varyasyonel Hypernetted Chain (VMHNC)'nin giriş datası olarak kullanılmış, incelenen sistemlerin ergime noktaları civarındaki statik yapı faktörleri $S(q)$ ve çiftler dağılım fonksiyonları $g(r)$ hesaplanarak deneysel sonuçlar ile karşılaştırılmıştır. Elde edilen yapısal özellikler ile sıvı hcp geçiş metallerinin iç enerji, Helmholtz serbestlik enerjisi ve entropileri hesaplanmış deneysel veriler ile karşılaştırılmıştır.

SUMMARY

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

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

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

TESEKKÜR

Bana bu çalışma ortamini sağlayan, danışmanlığımı üstlenen ve çalışmamın her adımında bilgilerinden yararlandığım sayın hocam Prof. Dr. Serap DALGIÇ' a teşekkürlerimi sunarım.

Çalışmanın yapıldığı T.Ü. Fen – Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümü Baskanı Prof. Dr. S. Askeri BARAN'a, yardımlarından dolayı Yrd. Doç. Dr. Seyfettin DALGIÇ'a, Sedat SENGÜL ve Ünal DÖMEKELİ'ye teşekkür ederim.

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

İÇİNDEKİLER

	ÖZET.....	<i>i</i>
	SUMMARY.....	<i>ii</i>
	TESEKKÜR.....	<i>iii</i>
	TABLoların Listesi.....	<i>iv</i>
	SEKİLLERİN Listesi.....	<i>vi</i>
1	GİRİS.....	1
2	HCP METALLER İÇİN GÖMÜLÜ ATOM METODLARI (GAM) ...	4
2.1	Zhang-Quyang Gömülü Atom Metodu (ZQ-GAM).....	4
2.2	Analitik Yeniden Düzenlenmiş Gömülü Atom Metodu (AYDGAM).....	8
2.2.1.	Hu-Xu Analitik Yeniden Düzenlenmiş Gömülü Atom Metodu (HX-AYDGAM).....	12
2.2.2.	Hu-Zhang Analitik Yeniden Düzenlenmiş Gömülü Atom Metodu (HZ-AYDGAM).....	16
2.2.3.	Hu-Deng Analitik Yeniden Düzenlenmiş Gömülü Atom Metodu (HD-AYDGAM).....	21
2.3.	Chen-Xu Gömülü Atom Metodu (CX-GAM).....	25
3	HCP METALLERİ İÇİN GAM ETKİN ÇİFTLER POTANSİYEL YAKLASIMLARI.....	31
3.1	ZQ –GAM Etkin Çiftler Potansiyel Yaklaşımı.....	31

3.2	HX -AYDGAM Etkin Çiftler Potansiyel Yaklasimi.....	33
3.3	HZ-AYDGAM Etkin Çiftler Potansiyel Yaklasimi.....	35
3.4	HD-AYDGAM Etkin Çiftler Potansiyel Yaklasimi.....	36
3.5	CX-GAM Etkin Çiftler Potansiyel Yaklasimi.....	38
4	SIVI HCP METALLERİ İÇİN GAM PARAMETRİZASYON METODLARI, SIVILARIN YAPISAL VE TERMODİNAMİK BÜYÜKLÜKLERİ.....	39
4.1	Sivilar için önerilen GAM Parametrizasyon Metodu.....	39
4.2	Siviların Yapısal ve Termodinamik Büyüklükleri.....	41
5	SONUÇLAR VE TARTISMA.....	48
5.1	Sivi hcp Metallerinin Atomlararası Çiftler Potansiyelleri.....	48
5.1.1	ZQ-GAM Etkin Çiftler Potansiyeli.....	50
5.1.2	HX-AYDGAM Etkin Çiftler Potansiyeli.....	58
5.1.3	HZ-AYDGAM Etkin Çiftler Potansiyeli.....	75
5.1.4	HD-AYDGAM Etkin Çiftler Potansiyeli.....	84
5.1.5	CX-GAM Etkin Çiftler Potansiyeli.....	96
5.2	Sivi hcp Geçiş Metallerinin Yapısı.....	104
5.3	Sivi hcp Geçiş Metallerinin İç Enerjisi.....	136
5.4	Sivi hcp Geçiş Metallerinin Helmholtz Serbestlik Enerjisi.....	140
5.5	Sivi hcp Geçiş Metallerinin Entropisi.....	144
5.6	Sonuç.....	148
	KAYNAKLAR.....	149
	ÖZGEÇMİS	

TABLOLARIN LİSTESİ

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

Tablo 5.8: Sivi HCP metalleri için farklı GAM ve AYDGAM modelleri ile elde edilen iç enerji değerleri.....	137
Tablo 5.9: Bazı sivi HCP nadir toprak metalleri için HX-AYDGAM ve HD-AYDGAM ile hesaplanan Helmholtz serbestlik enerjilerinin karşılaştırılması.....	140
Tablo 5.10: Sivi HCP metalleri için farklı GAM ve AYDGAM modelleri ile hesaplanan Helmholtz serbestlik enerjilerinin karşılaştırılması.....	141
Tablo 5.11: Bazı sivi nadir toprak metalleri için HX-AYDGAM ve HD-AYDGAM ile elde edilen entropi değerleri.....	144
Tablo 5.12: Sivi HCP geçiş metalleri için farklı GAM ve AYDGAM modelleri ile elde edilen entropi değerleri.....	145

SEKILLERIN LISTESİ

Sekil 5.1: Ti, Zr ve Co için ZQ-GAM çiftler etkilesme potansiyelleri.....	52
Sekil 5.2: Sc, Y ve La için ZQ-GAM çiftler etkilesme potansiyelleri.....	53
Sekil 5.3: Ti, Zr ve Co için ZQ-GAM gömme enerjisi fonksiyonlari.....	54
Sekil 5.4: Sc, Y ve La için ZQ-GAM gömme enerjisi fonksiyonlari.....	55
Sekil 5.5: Ti, Zr ve Co için ZQ-GAM etkin çiftler etkilesme potansiyelleri....	56
Sekil 5.6: Sc, Y ve La için ZQ-GAM etkin çiftler etkilesme potansiyelleri...	57
Sekil 5.7 : Mg için HX-AYDGAM kullanılarak elde edilen	
a) Çiftler etkilesme potansiyelleri	
b) Gömme enerjisi fonksiyonu.....	61
Sekil 5.8: Sc ve Y için HX-AYDGAM kullanılarak	
(a) Kati parametreleri ile elde edilen çiftler etkilesme potansiyellerinin	
diger çalışmalarla karsilastirilmesi	
(b) Elde edilen sivi çiftler etkilesme potansiyelleri.....	62
Sekil 5.9: Pr, Nd ve Gd için HX-AYDGAM kullanılarak	
(a) Kati parametreleri ile elde edilen çiftler etkilesme potansiyellerinin	
diger çalışmalarla karsilastirilmesi	
(b) Elde edilen sivi çiftler etkilesme potansiyelleri.....	63
Sekil 5.10: Tb, Dy, Ho ve Er için HX-AYDGAM kullanılarak	
(a) Kati parametreleri ile elde edilen çiftler etkilesme potansiyellerinin	
diger çalışmalarla karsilastirilmesi	
(b) Elde edilen sivi çiftler etkilesme potansiyelleri.....	64
Sekil 5.11: Sc ve Y için HX-AYDGAM gömme enerjisi fonksiyonlari.....	65
Sekil 5.12: Pr, Nd ve Gd için HX-AYDGAM gömme enerjisi fonksiyonlari...	66

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

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

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

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

BÖLÜM 1

GİRİS

Johan Gadolin'in itriyumu keşfettiği yıl olan 1794'ten beri nadir toprak metalleri uygarlığın gelişimine katkıda bulundu. Nadir topraklar bir zamanlar bilimsel merak konusu iken özellikle atom enerjisi ve metallerin araştırılması alanlarındaki modern ayırma yöntemleri ve yeni uygulamalar sayesinde ticari değer kazandılar. Nadir topraklar, otomatik katalizör dönüştürmelerde katalizörler, demir çelike katkı maddesi, renksizleştirme özellikleri dolayısıyla seramik ve cam katkısı, ısı yayan maddeler (fosfor) ve elektronik aletlerin parçaları, sürekli mıknatıslar, ampüller olarak ve çeşitli araştırma konularında kullanılırlar. Nadir toprakların, yüksek kaliteli ve yüksek performanslı endüstriyel ürünler için gereken gelişmiş maddeler olarak önemli bir rol oynaması beklenmektedir. Bu maddelerin üstün performansını anlamaya yarayan temel konulardan biri nadir toprak metallerinin atomik etkileşimidir. Bu özelliklerinin eksikliklerinin ve önceden belirlenmeleri bilgisayar simülasyonlarının temelini oluşturur. Atomik simülasyonlarının güvenilirliği modellenen atomik etkileşimlerinin doğruluğuna bağlıdır. İlk prensip yöntemleri atomik etkileşimleri belirlemeye yönelik en güvenilir yaklaşımları oluştursa da bu yöntemlerin birkaç yüz atomdan fazlasını içeren sistemlere uygulanması mümkün değildir. Metallerdeki kusurların atomik simülasyonlarının çoğu atomik etkileşimlerin yarı empirik veya empirik tanımlamaların kullanılmasıyla gerçekleştirilir (Hu W., 2003)

HCP metallerinin özellikleri empirik çiftler potansiyel etkileşimlerini kullanarak hesaplanmıştır. Fakat bu tip potansiyellerin hcp metallerine uygulanması kubik metallere olduğundan daha az yaygındır (Bacon, 1993). Son zamanlarda hcp metalleri için çok cisim potansiyelleri geliştirmiştir (Igarashi 1991, Hu W., 2000). Igarashi tarafından sekiz metal Be, Hf, Ti, Ru, Zr, Co, Mg, Zn için öne sürülen potansiyeller c/a oranı da dahil bir çok fiziksel parametreye uyum ancak normal denge örgü aralığı içindeki atomlararası etkileşimlerinden elde edilen herhangi bir veriyle

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

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

gibi büyüklükleri hesaplanmış; sonuçların deney ile aynı eğilimi gösterdiği bulunmuştur. Tez anahatları ile şu şekilde düzenlenmiştir:

2. bölümde, çalışmada kullanılan Gömülü Atom Metodu (GAM), Analitik Yeniden Düzenlenmiş Gömülü Atom Metod (AYDGAM)'ları verilmiş, 3 bölümde bir önceki bölümde sunulan metodlar için Finnis-Sinclair FS etkin çiftler potansiyel yaklaşımları önerilmiştir, 4 bölümde ise Rose hal denklemi, sıvı yapı teorileri ve termodinamik özellikler anlatılmaktadır. Son bölüm elde edilen sonuçlara ve bu sonuçların tartışılmasına ayrılmıştır.

BÖLÜM 2

HCP METALLER İÇİN GÖMÜLÜ ATOM METODLARI

Atomlararası kuvvetlerin ampirik tanımları sistemin çeşitli kusurlarının bilgisayar simülasyonlarında sıklıkla kullanılır. Atomlararası potansiyelleri tanımlamada pseudopotansiyel teorisinden hariç çok cisim potansiyelleri olarak adlandırılan potansiyel türü vardır ki iki doğrultuda gelişmektedir. İlki Daw-Baskes (Daw ve Baskes, 1983) “Gömülü Atom Metodu” diğeri ise uzun menzilli çok cisim potansiyelleri olarak adlandırılan Finnis-Sinclair (FS) (Finnis ve Sinclair, 1984) potansiyelleridir. HCP metalleri için her iki doğrultuda da çalışmalar yapılmıştır. Biz bu tezde ilk öne sürülen basit GAM metodlarından biri olan Zhang-Quyang (Zhang, Quyang, 1993) GAM metodunu, Analitik Yeniden Düzenlenmiş Gömülü Atom Metodlarından (AYDGAM) birbirinden farklı Hu-Xu, Hu-Zhang, Hu-Deng AYGAM metodları ile FS tipi son GAM metodlarından Chen-Xu ‘nun öne sürdüğü metodu ele aldık.

Bu bölümde literatürde hcp metalleri ve metal alaşımları için öne sürülen GAM metodlarından beş farklı metod ana hatları ile verilmektedir.

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

Bu çalışmada, Zhang ve Quyang (Zhang, Quyang, 1993); Johnson ‘un hcp metalleri için geliştirdikleri basit GAM modelini (Johnson,1991); Oh ve Johnson ‘un (Oh, Johnson, 1988) fcc alaşımlarında kullandıkları yaklaşımla hcp alaşımlarına genişletmişlerdir. Zhang ve Quyang (ZQ) (Zhang, Quyang, 1993) Oh ve Johnson ‘un gömülü atom metodunu (GAM) 11 hcp geçiş metallerine (Sc, Y, La, Ti, Zr, Hf, Tc, Re, Ru, Os ve Co) ve ikili alaşımlarına uyarlamışlardır. Bu modelde tek atomlu kristalin toplam iç enerjisi,

$$E_{top} = NE \quad (2.1)$$

denklemleri ile verilir ve her bir atom için ortalama enerji,

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

ve elektron yoğunluğu,

$$r = \sum_m N_m f(r_m) \quad (2.3)$$

denklemleriyle ifade edilir. Burada N kristaldeki atom sayısını, $F(r)$ atomun r elektron yoğunluğu içine gömme enerjisini, r_m verilen merkezi atomdan komşu kabuk uzaklığını, $f(r_m)$, birbirinden r_m uzaklıktaki atomlar arasındaki iki-cisim etkileşmesini, N_m ise m . kabuktaki atom sayısını ve $f(r_m)$ 'de verilen atomdan r_m uzakındaki bir başka atomun atomik elektron yoğunluğunu göstermektedir. GAM metodunun düzgün uygulanabilmesi için f , f ve F verilmelidir. Oh ve Johnson (Oh ve Johnson, 1988) 'a göre bu potansiyel fonksiyonları sırasıyla aşağıda;

$$f(r) = f_e \exp[-b(r/r_e - 1)] \quad (2.4)$$

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

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

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

denklemleri ile verilir. Burada a , boyutsuz parametredir ve

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

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

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

$$f_e = 5\Omega G/(2g(g - b)) \quad (2.9)$$

$$g = 15\Omega G/(bE_f) \quad (2.10)$$

denklemleri ile verilir. Burada G kayma modülünü, E_f boşluk oluşum enerjisini gösterir. b ayarlanabilir parametredir. r_e, f_e cinsinden

$$r_e = 12 f_e \quad (2.11)$$

şeklinde ifade edilir. m ise $f(r)$ için verilen mevcut üstel fonksiyon ile $F(r)$ nun fiziksel uyumunu sağlayabilmek üzere, Rose hal denkleminin (Rose, 1984) geliştirilmesinden oluşan parametredir. m sıfırdan büyük olmak üzere $F(r)$ ' ya uygulanan tüm $r \leq 10 r_e$ değerleri için $F''(r) > 0$ şartı ile seçilir. Bu modelde bes giris parametresi, denge durumundaki sebecke sabiti a , bağlanma enerjisi E_c , Bulk modülü B , shear modülü G ve unrelaxed boşluk oluşturma enerjisi E_f kullanılmaktadır. Zhang-Quyang'ın 11 geçiş hcp metali için kullandığı fiziksel giris parametreleri tablo 2.1'de verilmektedir.

Tablo 2.1: HCP geis metalleri iin ZQ-GAM giris parametreleri

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

* (Kraftmakher, 1970),

** (Kamel, 1965)

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

Tablo 2.2: HCP geis metalleri iin ZQ-GAM model parametreleri

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

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

2.2 Analitik Yeniden Düzenlenmiş Gömülü Atom Metodu (AYDGAM)

Son yıllarda, metaller ve metal alarimlarının bilgisayar simulyon (benzetisim) çalısmalarında kullanılan ampirik ve yari ampirik metotlar hızla geliştirilmektedir. Yögunluk fonksiyonel teorisine dayanan Daw Baskes'in gömülü atom metodu GAM (Baskes, 1992), fcc'ye veya neredeyse dolu d bandı geçis metallerine, bcc metallerinede basarili bir şekilde uygulanmistir. Finnis ve Sinclair (Finnis ve Sinclair,1984) siki bagli yaklastirmaya dayali N-cismli potansiyel metodu türetmis ve özgün biçimde bcc veya yari dolu d bandı geçis metallerine uygulamistir. FCC metalleri için GAM'in bir analitik en yakin komsu modeli Johnson (Johnson,1988) tarafından geliştirildi. Baskes (Baskes, 1987), GAM'i yönergesel bagi içermesi için modifiye etti ve onu silikona uyguladi. Brenner, bu silikon potansiyellerden birinin analitik seklini, karbon, oksijen ve hidrojen sistemlerini modellemek için kullandi. Bu ilk kez kullanılan Analitik Yeniden düzenlenmiş Gömülü Atom Metodu (AYDGAM) olarak gösterilebilir. Silikon GAM modeli Baskes, Nelson ve Wright tarafından yeniden düzenlenmiş gömülü atom metodu (YDAGAM)' in geliştirildiği yer olan silikon-germanium sistemine genişletilmistir (Baskes 1989). YDAGAM 'in ilk versiyonunda bir sürü yetersizlik tanımlanmistir. Bunlar, boslukta içe doğru genişleme, asiri geniş bir istif bozukluk enerjisi ve sadece nitel olarak doğru olan küçük küme tahminleridir.Yeni hesaplamalar boslukta genişlemenin içe doğru olması gerektiği yönündedir, ama Baskes (Baskes,1992) in sunduğu metot orijinal YDAGAM 'e yeterince yakindir ve bu tür soruların çözümleri beklenmemektedir. Savino, Rao ve Pasianot (Savino, 1988) ikinci düzen invaryantlara dayanan YDGAM ile ilgili bir metot geliştirdiler. Bu metotların hepsi matematiksel olarak benzer ve ortak bir özelliğe sahiptir. İki atom arasındaki etkileşim onların yerel çevrelerine bağlıdır. Hacim etkilerinden farklı olarak atomik çevrenin önemli bir şekilde değişik olduğu yer olan metalik yüzeylerdeki etkileri tahmin etmede YDGAM metotlarının büyük ölçüde basarili olduğu bir gerçektir. YDAGAM'i genişletmek ve geniş yelpazeli bir uygulanabilirliğini göstermek için bir sürü ögeye uygulamak gerekir (Baskes,1992). Bu genişleme ampirik olarak yapılmistir ve GAM ile N cisimli potansiyel metotlarının sahip olduğu gibi güçlü fiziksel tartışmalarla haklı gösterilmemistir. Baskes (Baskes, 1992) makalesinde; bu noktada amacın, sadece ele alınan maddelerin tümü için en elverişli potansiyelleri elde etmek olmadığını, amacının

daha çok, atomistik hesaplamalar için kullanılabilir bir yapı oluşturmak olduğunu belirtmektedir. Metodun geliştirilmesinde önemli bir temanın hesaplamada basitlik ve böylece etkileşimlerin, kolayca, geniş moleküler dinamik veya Monte Carlo simülasyonları için kullanılabilir olacağı belirtilmiştir. Baskes'e göre YDAGAM sadece metallere ve yarı iletkenlere uygulanmayacak; metod öyle bir geliştirecektir ki iki atomlu gaz elementlerine uygulanabilir olacaktır (Baskes, 1992). Bu metotları genişletme sürecinde bütün kristal yapılar (bcc ve hcp dahil) için ilk komşu etkileşimlerine bir basitleştirmenin mümkün olduğu, buna ek olarak gömme fonksiyonunun basit bir analitik modelinin ele alınan elementlerin hepsinin temel özelliklerini taklit etmek için yeterli olduğu bulunmuştur (AYDGAM). Baskes'in YDGAM metodunun ana hatları aşağıda verilmektedir.

Gömülü atom metodunda tüm atomların toplam enerjisini veren temel denklem,

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

burada toplam i. ve j. atomları üzerindedir. F_i gömme fonksiyonu, r_i i. tür atomun elektron yoğunluğudur. f_{ij} ise birbirinden R_{ij} kadar uzaktaki i ve j atomları arasındaki çiftler etkileşim fonksiyonudur.

Denklem (2.1) bütün atomların birbirleriyle etkileşimlerinin toplamıdır. Her bir atomun toplam enerjiye direkt katkısını veren ifade E_i 'dir, ve de dolaylı olarak o atomun komşularıyla etkileşimleri de enerjiye katkıda bulunur.

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

Burada basitlik için background (arka plandaki) elektron yoğunluğu r_i en yakın komşu atomların sayısı Z_i ile yeniden normalize edilmektedir. Katı fazında dengede olan elementler için, fcc yapısında ise $Z_i = 12$, bcc ler için $Z_i = 8$ dir. Elmas kübik kristal yapısındakiler için $Z_i = 4$ dir. (2.13) denklemindeki $F(r)$ gömme fonksiyonu olup,

$$F_i(r) = A_i E_i^0(r) \ln r \quad (2.14)$$

denklemleri ile verilebilir. Bu denklemde A ayarlanabilir parametre, E_i^0 süblimleşme enerjisidir yada referans sebeke yapısının minimum enerji değeridir. Ayrıca enerji fonksiyonunun en yakın komşu uzaklığı r_1 'e bağlı olarak ifadesi Rose hal denklemine göre (Rose, 1984)

$$E(r_1) = -E_c [1 + a(r_1/r_e - 1)] \exp[-a(r_1/r_e - 1)] \quad (2.15)$$

ve

$$a^2 = 9\Omega B / E_c \quad (2.16)$$

ile verilir. (2.15) denklemindeki r_e , Ω ve B sırasıyla en yakın komşu uzaklığı, atomik hacim ve bulk modülüdür ve bu değerler denge durumlarındaki değerleridir. Bunların kullanım şekli,

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

Ayrıca (2.13) denkleminde yoğunluk fonksiyonu bir seri toplamı olarak ifade edilir ve bu fonksiyona katkı sağlayan terimler,

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

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

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

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

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

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

HCP yapılar için ideal c/a oranında tanımlanan denge durumundaki elektron yoğunluğu,

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

denklemleri ile verilir. Burada $t^{(3)}$ terimi, hcp yapı içinde ters simetrik eksikliğini ifade etmektedir. İki cisim potansiyeli ise

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

ve

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

verilir. Burada $b^{(h)}$ atomik yoğunluk içinde exporansiyel bozulma çarpanıdır.

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

Baskes ve Johnson (Baskes, Johnson, 1992, 1994) YDGAM modellerini tasarlarlarken elektron yoğunlugunu baslangiç noktası olarak algılar. GAM'daki küresel olarak ortalaması alınmış atomik yoğunluklarının lineer süperpozisyonu olan elektron yoğunluğu YDGAM'da açılı terimine bağlı olarak artırılmış olmalıdır. Hu-Xu 'nun sunduğu YDGAM modelindeki metod Zhang-Quyang 'dan farklıdır (Zhang-Quyang, 1999). Küresel olarak ortalaması alınmış atomik elektron yoğunluklarının lineer süperpozisyonunu kullanarak GAM dan hesaplanmış atomlar sisteminin enerjisi ile sistemin toplam enerjisi arasındaki farkı ifade etmek için GAM daki toplam enerji ifadesine $M(P)$ gibi bir enerji terimi eklenmektedir. HCP metalleri için Analitik Yeniden Düzenlenmiş Gömülü atom Metodunda toplam enerji

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

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

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

şeklindedir. Burada r_e denge durumundaki elektron yoğunlugunu gösterir. n ayarlanabilir boyutsuz parametredir ve her element için spesifik değeri potansiyel eğrinin sekline göre belirtilir. F_0 fonksiyonu, $F_0 = E_c - E_{1f}$ (Johnson, 1989) olarak alınmıştır. r misafir (host) elektron yoğunluğu,

$$r = \sum_m f(r_m) \quad (2.27)$$

denklemleri ile ifade edilir. $f(r)$ atomik elektron yoğunluk fonksiyonu olup,

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

denklemleri ile verilir. Bu denklemde r_1 denge durumundaki en yakın komşu uzaklığıdır.

f_e denge durumundaki elektron yoğunluğu olup, boyutsuz parametredir ve $f_e = \sqrt{\frac{E_c}{\Omega}}$ ile ifade edilir, Ω atomik hacimdir. $M(P)$ enerji düzeltme terimi,

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

denklemleri ile ifade edilir. a model parametresi, P_e , P argümanının denge durumundaki değeridir.

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

şeklindedir. Burada b es yönsüzlük parametresi, r_m komşudan ayrılma mesafesi, r_{mx}, r_{my}, r_{mz} r_m 'ye bağlı koordinat bileşenleridir. $\Phi(r)$, etkin iki-cisim potansiyeli

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

denklemleri ile verilir. Burada k_i ($i=0,1,2,3,4$ ve 5) model parametreleridir. Bu modelde genel olarak model parametrelerinin sistemin kati durum özelliklerinden; sebeke sabitleri a ve c , kohesive enerjisi E_c , tek boşluk oluşum enerjisi E_f ve elastik sabitler C_{11} , C_{12} , C_{44} , C_{13} ve C_{33} fit edilerek bulunduğu belirtilmiştir. Orijinal çalışmada kullanılan fiziksel parametreler tablo 3'de listelenmiştir. Hu-Xu 'nun AYDGAM modelinde yedinci komşu uzaklığıyla atomik etkileşim dikkate alınmıştır. HCP metallerinin bes elastik sabitesi (Johnson, 1972) hesaplanmıştır. Elastik sabitler için bes

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

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

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

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

Tablo 2.4 : Hcp metalleri için HX-AYDGAM model parametreleri

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

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

Bu modelde Hu ve Zhang (Hu ve Zhang, 2001) , GAM ‘dan hesaplanan ile atomik sisteminin gerçek toplam enerjisi arasındaki farkı ifade etmek için GAM ‘ın toplam enerji ifadesine $M(P)$ düzeltme terimi eklemişlerdir. Atomik sistemler için toplam enerji denklemi,

$$E_{top} = \sum E_i \quad (2.32)$$

ile verilir. Burada E_i , i. atomun enerjisidir ve

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

şeklinde ifade edilir. Denklem (2.33) daha basit ifadeyle

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

olarak yazılabilir. Üstteki denklemde m , m . komşu uzaklığı ve $M(P)$ enerji düzeltme terimidir. Düzeltme enerjisi $M(P)$, orijinal GAM’da atomik elektron yoğunluğunun lineer toplamı kabulünü düzeltmek için elektron yoğunluğunun ikinci derece toplamı olarak gösterilen, P argümanın bir fonksiyonu olarak

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

denklemi ile verilir. Host elektron yoğunluğunun gerçek ifadesi,

$$r = \sum_m f(r_m) \quad (2.36)$$

ve enerji düzeltme teriminin argümanı P,

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

ifadesinde r_{mx}, r_{my}, r_{mz} ; r_m vektörünün bileşenlerini göstermektedir. Seçilen m. atomun yer vektörünün bileşenleri z eksenine paralel olup, c eksenine hegzagonal sebeke ve x, y eksenleri ise temel düzlemde. Atomun orijin dışında herhangi bir (x_m, y_m, z_m) noktasındaki enerji düzeltme teriminin argümanı P'nin ifadesi, orijindeki atomun koordinatları (x_0, y_0, z_0) cinsinden

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

şeklinde yazılabilir. Burada (x_m, y_m, z_m) atomları çevreleyen koordinatları ve r_m ise atomu çevreleyen diğer atom arasındaki uzaklık olarak dikkate alınmıştır. Böylece mevcut potansiyelin kristal eksenlerinin yönünün tanınması fiziksel problemlere uygulanabilir. Atomik yoğunluk fonksiyonu $f(r)$ ve gömme fonksiyonu $F(r)$ (Johnson, Oh 1989)

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

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

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

parametredir ve bunlar her bir element için özgül degerleri deneysel enerji hacim iliskilerini veren Rose hal denkleminde ayarlanarak belirlenir (Rose 1984). Bu modeldeki potansiyelde yedinci komşu mesafesinden potansiyelin dışarı çıktığı düşünölmüş ve bu degerde r_c , potansiyel kesilmiştir ($f(r_c) = 0$). r_c mesafesi

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

olarak tanımlanmıştır. Böylece atomik yoğunluk fonksiyonu $f(r)$; kısaltılmış özgül kesim mesafesi olarak tanımlanan

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

r_{ce} ' den büyük degerler için $f(r)$ sifira esitlenir. Bosluk olusum enerjisi E_{1f} , enerji farklılığı kristal ile bir bosluk örgü aynı numaralı atomları yerini kapsiyor. Formöl olarak gösterimi çiftler potansiyeli cinsinden yazılabilir ve asagidaki ifadeye fitlenebilir.

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

Kullanılan çiftler potansiyel fonksiyonu,

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

sekinde verilir. Hu-Zhang modelinde kullanılan giriş parametreleri Tablo 2.5'te ve model parametreleri Tablo 2.6' da verilmiştir.

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

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

Tablo 2.6: Hcp metalleri için HZ-AYDGAM model parametreleri

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

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

Uzayın homojenliği ve izotropisi ile uyusan sürekli çevirmeler veya dönmeler altında fiziksel uzayın temel değişmezliği sebebiyle potansiyel enerji, koordinatların orijinindeki herhangi bir değişiklik veya koordinat eksenlerin herhangi bir dönmesi altında değişmez olmalıdır. Ancak, bir önceki Hu-Xu AGAM etkileşim modelinde bu dönmeler altında değişmez değildir. Bu modellerinde Hu-Deng potansiyelleri geliştirmiştir.. Daha önceden tanımlandığı gibi parametreler doğru Cauchy ilişkilerine konmalı ve parametrelerinin sayısı spesifik kristalin Cauchy ilişkileri ile aynı olmalıdır. Ayrıca bu sayı kristal simetrisi ile de yani yeni kristal sisteminin simetri işleminin bağımsız parametrelerinin sayısı ile ilgilidir. Triklitik için 6, monoklinik için 4 orthorhombic için 3, tetragonal, trigonal ve hekzagonal için 2, kübik için 1 parametre vardır. Bu modelde modifikasyon terimlerinin sayısı Cauchy ilişkileri ile aynıdır, potansiyelin değişmezliği sağlamak için her bir terimin sadece bir parametresi vardır. Modifikasyon terimlerinin tartışmaları yüksek düzey elektron yoğunluğunun atomik elektron yoğunluğunun lineer süperpozisyonunun uyumsuzluğunu düzeltmek için toplamalıdır. Bu düzende uyum sağlamış fiziksel özellikler kohesive enerji E_e , boşluk oluşum enerjisi E_{lf} , bes bağımsız ikinci düzey esnek sabitler ve hekzagonal yapının iki örgü sabiti a ve c dir. Tüm bu nicelikler tablo 1 özetleniyor. Bu düzende atomlar sisteminin toplam enerjisinin temel denklemi

$$E_{top} = \sum E_i \quad (2.45)$$

i bölgesindeki bir atomun katkısı,

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

ifadesi ile verilir. Bu enerji ifadesinde r_i ,

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

ev sahibi elektron yoğunlugunudur. Bu çalısmada ise sadece bir elektron yoğunluk fonksiyonu kullanilir ve

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

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

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

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

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

$$P_i = \sum_m f^2(r_m) \quad (2.51)$$

$$Q_i = \sum_m f^3(r_m) \quad (2.52)$$

seklindedir. G6mme enerji ifadesi ise,

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

seklindedir. Burada r_e 0 ° K deki denge durumundaki yogunlugun degeridir. Burada

$$F_0 = E_c - E_{1f}$$

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

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

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

seklinde alinir. Hu-Deng 'in hcp metalleri iin kullandigi giris parametreleri ve model parametreleri Tablo 2.7 ve Tablo 2.8'de verilmistir.

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

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

Tablo 2.8: HCP metalleri için HD-AYDGAM model parametreleri

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

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

Son yıllarda, yoğunlaşmış sistemler için Baskes ve is arkadaşları (Baskes, 1994) tarafından geliştirilen gömülü atom metodu (GAM) ve Finnis ve Sinclair (Finnis, 1984) tarafından geliştirilen F-S çoklu cisim potansiyeli, metalleri, saf olmayanları, karışımları, yüzeyleri, kusurlu enerjileri, fononları, kırılmayı ve sıvı metalleri v.b. içeren geniş inceleme sahalarını örten problemlerde iyi bir başarı elde etti.

GAM ve F-S potansiyel modeli, çeşitli arıza simülasyonlarına, özellikle fcc ve bcc'e ilişkin yapılarıdaki eksikliklere, başarılı bir şekilde uygulanmıştır. GAM ve F.S'in altı köşeli yakın istifli metallerde uygulanışı kübik metallerdeki uygulanışından daha fazla zorluk gösterdi. Oh ve Johnson (Oh,1988) fcc ve hcp metaller için yeniden düzenlenmiş bir GAM potansiyeli (YDGAM) geliştirdi. YDGAM modelinde, yoğunluklar açısız hız katkılarını geri elektron yoğunlukları ve atom yoğunluklarıyla ilişkilendirilerek tanımlanır. Bu uygulama, ortak materyaller için olan deneyimsel modellerle yaptıkları gibi bağ eksen güçlerle sonuçlanan açığa bağımlı bir terim olarak anlaşılabilir. İkinci sıra sabit değerlere dayalı ilgili bir metod geliştirdi (Savino, 1988), (Pasianot, 1991). GAM için tam enerji ifadesine genel anlamda açılarla ve gerçek atomlar sistemi ve atomik elektronların küresel yoğunluğunun lineer bir süperpozisyonu kullanılacak orijinal GAM'dan hesaplananlar arasındaki fark ile ilgili bir çoklu cisim kısa terimini ifade etmek için değiştirilmiş bir analitik enerji terimi olan $M(P)$ 'yi eklemiştir. Pasianot ve Savino (Pasianot,1992, Savino,1993) noktanın grup teorisini kullanarak ve iç elastik sabitlerini dikkate alarak, zarif bir matematik stilinde, hcp kristalleri için GAM elastik sabitlerinin formülünü oluşturdu. Yazılarında $f(r)$ 'yi etkili bir çift etkileşim potansiyeli olarak tanımlandı ve özellikle mükemmel örgü yoğunluğunda değersiz olması için çoklu cisim terimi $F(r)$ 'nin ilk türevini kabul ettirdi. Hcp metalleri için analitik bir GAM potansiyeli geliştirdi. Pasianot'ın yaptığına benzer bir yolla tam enerji ifadesine bir enerji değişikliği eklediler ve C_{11} ve C_{12} arasındaki ve C_{13} ve C_{14} arasındaki iki Cauchy bağıntılarını tanımlamak ve hcp yapısının anisotropisini yorumlamak için a ve b parametrelerini tanıttılar (Igarashi,1991). İç esneklikleri dikkate almadan hcp metalleri için F-S potansiyelini geliştirdi, hcp potansiyelini geliştirme metodu kübik metaller için yaptıklarının aynısıdır. Bazı araştırmacılar, açısız güçleri ve iç kabuklardaki atomların yandaki dis

kabuklardaki atomların etkilerini izlemeyi ele aldı. HCP kristalinin yapısı D_{3h} grubuna ait olduğu için, çevirme simetrisinin eksikliği mekanik özelliklerinin ana eksensel yönü ve tabansal düzlem yönü arasında değişik olmasına yol açar. Bu sebepten, potansiyel, Chen-Xu ya göre, a - ve $-b$ -ekseninden c -ekseninde hcp kristallerinin anisotropik özelliklerini sergileyebilecek şekilde dizayn edilmeli idi.

N tane atomdan oluşan atomlar topluluğunun toplam enerjisi

$$E = \sum_{i=1}^N E_i \quad (2.55)$$

tarafından verilebilir. Topluluktaki bir i atomunun enerji fonksiyonu,

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

denklemleri ile ifade edilir. Elektron yoğunluk fonksiyonu;

$$\rho = \sum_{j \neq i} f_j(r_{ij}) \quad (2.57)$$

ifadesi ile verilir. Denklem (2.56) daki $f(r_{ij})$, r_{ij} ayrimında i ve j atomları arasındaki çift çekirdek iteleme olduğu, $F(r_i)$ gömme enerji fonksiyonu ve i atomuyla ilgili r_i elektron yoğunluğunun bir fonksiyonudur ve bu yüzden materyallerdeki atomların türlerine dayanır. Bu modelde, f geri itici fonksiyonu aşağıdaki gibi seçilmiştir.

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

Burada A_k parametresi iki atom çekirdeğinin etkili pozitif şartlarının ürününü simgeler. Bu sebepten, mekanik deneysel veriyi yerleştirerek açıklanmalıdır. $f(r)$ geri itici potansiyeli, Yukawa'nın potansiyeli şeklinde dizayn edildi. Böylece r 'nin artışıyla hızla düşer, veya diğer bir deyişle, sadece bir üssel fonksiyondan daha zordur. Bu çeşit

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

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

$$F = \sqrt{r} \quad (2.60)$$

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

$f(r)$ yerel elektronik sayı yoğunluğu fonksiyonunda, r^n faktörünün önemi sudur: Eger böyle bir faktör olmasaydı $f(r)$ hızla düşerdi, bu atomik yarı çapın asiri küçülmesi demektir. $f(r)$ fonksiyonundaki r^n ile atomlar arası mesafe içinde düşüş azaltılır ve metaldeki iki yakın atom arasındaki ayrılma özgür bir atomun yarı çapından daha geniş olduğu gerçek bir olay için uygundur. r^n faktörü, metaldeki elektronların daha geniş bir sahaya yayılabilmesi olayını yaklaşık olarak tarif etmekle kalmaz, ayrıca bir atomun çevresini kaplamış elektron bulutlarının atomun yakın komsuları menzili için de maksimuma ulaşmasını sağlar. $f(r_{ij})$ ifadesinde, bir titreşim hareketi ile ilgili formu görmek mümkündür. Geri elektron gazındaki bir atomun birleşme değeri atomlarının basitçe üssel olmak yerine titreşen bir şekilde yayıldıklarını ima eder. Chen-Xu göre bazı yazarların, GAM potansiyel fonksiyonlarının geri itici parça $f(r_{ij})$ ve yoğunluk fonksiyonu $f(r_{ij})$ için bir parametreler seti ile tasarlanmış olduklarını görüyor. Böyle tasarımlar Hu (Hu, 2001) tarafından yapılan model hariç, atomun yuvarlak toplar gibi hareket etmelerine sebep olur ki bu hcp metallerinin anisotropik özellikleri için uygun değildir. Bundan kurtulmak için, burada deneysel olarak, saf hcp metallerinin potansiyel modelindeki iki parametre seti kullanılır. Çalışmasında, sadece basit hcp kristal yapısını ele alıyor, merkezi atomun bir A taban düzlemine yerleştirildiğini düşünerek, ilk setin merkezi atom ve komsuları ki onlardan A taban düzlemlerine yerleştirilmiş, arasındaki

etkileşimleri belirlemesine ve ikinci setin merkezi atom ve B taban düzlemlerinde olan komsuları arasındaki etkileşimi belirlemesine izin verir. Böylece, atomlar arasındaki etkileşimler bazı şekillerde hcp metallere anisotropik bir şekilde davranır. Yerel elektronik yoğunluk fonksiyonunun $f(r)$ şekli ayrıca Slater dalga fonksiyonunun değiştirilmiş bir şekli olarak görülür.

Yukarıdaki ifadelerde, r_0 denge örgüsü sabittir, r_i , etrafındaki atomlar tarafından yaratılan i atomunun toplam elektronik yoğunluğudur. A_k , a_k , B_k ve b_k sırasıyla, itici potansiyel ve elektronik yoğunluk fonksiyonları parametreleridir. Saf hcp metallere, iki setten oluşurlar. A_1 , a_1 , B_1 ve b_1 A düzlemindeki merkezi atom ve onun A düzlemindeki bütün komsuları arasındaki etkileşimler içindir ve A_2 , a_2 , B_2 , b_2 A düzlemindeki merkezi atom ve onun B düzlemindeki bütün komsuları arasındaki etkileşim içindir. Hesapları basitleştirmek için, burada, basitçe gömme enerji fonksiyonunun $F(r)$, F-S modelinde benimsendiği gibi yoğunluk fonksiyonu r 'nin bir kare kökü olarak alınmaktadır ve sadece C_{12}/C_{66} olduğunda kullanılabilir. Zn, Be ve Ru için düşük sıcaklıklarda C_{12}/C_{66} olduğunda gömme enerji fonksiyonunun $F(r)$ ifadesi, Igarashi (Igarashi,1991)'nin önerdiği gibi $\sqrt{r}$ 'nin polinomu olarak yeniden düzenlenmiştir. Hesaplamalarda E_c Igarashi (Igarashi,1991) tarafından şöyle tanımlanıyor:

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

Rahatlamadan önceki boşluk oluşumu enerjisi:

$$E_g^f = E_c - F(r) + F'(r_0) r_0 \quad (2.63)$$

ifadesi ile verilir. Rose 'nin (Rose vd. 1984) evrensel ölçekleme fonksiyonu ile potansiyel eğrisini karşılaştırmak için potansiyel eğrisi Rose eğrisini verecek şekilde fit edilir. Rose denklemi

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

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

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

ile verilen indirgenmiş örgü sabitidir. Burada a değişken örgü sabiti, a_0 denge örgü sabiti, B_k bulk modülü ve Ω_0 denge atomik hacimdir;

$$\Omega_0 = \frac{\sqrt{3}}{4} a^2 c \quad (2.66)$$

denklemleri ile verilir. CX-GAM modelinde çalışılan hcp metalleri için fiziksel giriş parametreleri literatürde verilenler ile birlikte karşılaştırmalı olarak Tablo 2.9 'da sunulmuştur. E_c ; bağlanma enerjisi, E_{of} ; boşluk oluşum enerjisi ve a_0 örgü sabitidir

Tablo 2.9: CX-GAM modelinde kullanılan HCP metalleri için fiziksel giriş parametrelerinin karşılaştırılması.

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

* a (Igrashi, 1991); * b Hesaplanan değerler, (Chen, Xu, 2004); * c (Baskes, 1994)

* d (Hu, 2001); * e (Goldstein, 1995)

Ayrıca Tablo 2.10 da CX-GAM modelinde kullanılan model parametreleri verilmektedir. Bu tabloda a-a A yada B düzlemindeki tüm atomlar için atomlararası etkileşimleri, a-b ise biri A düzleminde diğeri B düzleminde olan atomlar arasındaki etkileşimleri tanımlar.

Tablo 2.10: HCP metalleri için CX-GAM model parametreleri

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

BÖLÜM 3

HCP METALLERİ İÇİN ETKİN ÇİFTLER POTANSİYEL YAKLASIMLARI

3.1 ZQ-GAM Etkin Çiftler Potansiyel Yaklasimi

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

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

denklemleri ile verilir. ZQ-GAM için yukarıdaki denklem yazılır ise burada $f(r)$ ZQ-GAM daki çiftler etkileşim potansiyelini gösterilir ve şu formda verilir,

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

burada f_e, g model parametreleri, r_e ise en yakın komşu uzaklığıdır.

$$f_e = 5\Omega G / (2g(g - b)) \quad (3.3)$$

$$g = 15\Omega G / (bE_f) \quad (3.4)$$

şeklinde verilir. Burada G kayma modülünü, E_f boşluk oluşum enerjisini, b ayarlanabilir parametre, O atomik hacmi göstermektedir. ZQ-GAM elektron yoğunluk fonksiyonu,

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

şeklinde ifade edilir. Burada f_e elektron yoğunluk çarpanıdır. Gümme fonksiyonu birinci türevi $F'(r)$,

$$\begin{aligned}
 F'^{ZQ-GAM}(r) = & \left(\frac{E_c}{b r_e r} \right) a \left[\left[1 - \frac{1}{b} \ln \left(\frac{r}{r_e} \right) \right]^{-m} - m \left(1 - \frac{1}{b} \ln \left(\frac{r}{r_e} \right) + m \right)^{-1} + m \right] x \\
 & m \left(1 - \frac{1}{b} \ln \left(\frac{r}{r_e} \right) \right)^{-m-1} - m \left(1 - \frac{1}{b} \ln \left(\frac{r}{r_e} \right) \right)^{-2} \left(\left(1 - \frac{a}{b} \right) \ln \left(\frac{r}{r_e} \right) \right) \left(\frac{r}{r_e} \right)^{\frac{a}{b}} + \\
 & \left[\left[1 - \frac{1}{b} \ln \left(\frac{r}{r_e} \right) \right]^{-m} - m \left(1 - \frac{1}{b} \ln \left(\frac{r}{r_e} \right) + m \right)^{-1} + m \right] \left(1 - \frac{a}{b} \right) \ln \left(\frac{r}{r_e} \right) \left(\frac{r}{r_e} \right)^{\frac{a}{b}-1} \\
 & - 6f_e \left[\frac{1}{r_e} \left[\frac{g}{b} \right] \left(\frac{r}{r_e} \right)^{\frac{g}{b}-1} - \frac{g}{b} \frac{1}{r_e} \right]
 \end{aligned} \tag{3.6}$$

Denklemleri ile ifade edilir.

3.2 HX-AYDGAM Etkin Çiftler Potansiyel Yaklasimi

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

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

formunda yazilir. II. FS-AYDGAM yaklasim için ise

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

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

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

burada k_i 'ler model parametreleridir. r_1 en yakın komşu uzaklığıdır. HX-AYDGAM $f(r)$ elektron yoğunluk fonksiyonu

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

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

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

ile ifade edilir. a model parametresi, P_e ise denge durumundaki değeridir. P argümanı ise

$$P = \sum_m f^2(r_m) \quad (3.12)$$

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

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

ile verilir.

3.3 HZ-AYDGAM Etkin Çiftler Potansiyel Yaklasimi

Bu tezde kullanılan Hu-Zhang AYDGAM etkin çiftler potansiyelini hesaplayabilmek için Finnis- Sinclair'in (Finnis- Sinclair, 1984) öne sürmüs olduğu GAM etkin çiftler potansiyel yaklasimini kullanarak HZ-AYDGAM modeli için bir önceki bölümde önerilen iki farklı FS etkin çiftler potansiyel formundan I. FS-AYDGAM yaklasiminin daha iyi sonuç verdiği görülmüştür. Bu nedenle HZ-AYDGAM modeli için oluşturulan I. FS-AYDGAM etkin çiftler potansiyeli

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

denklemini ile yazılır. Burada $f^{HZ-AYDGAM}(r)$ çiftler etkileşim potansiyelini gösterilir ve

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

formunda verilir. Burada k_i 'ler model parametreleridir. r_1 en yakın komşu uzaklığıdır. HZ-AYDGAM'daki $f(r)$ elektron yoğunluk fonksiyonu

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

denklemini ile verilir. HZ-AYDGAM enerji düzeltme terimi

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

denklemini ile ifade edilir. a model parametresi, P_e ise denge durumundaki değeridir.

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

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

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

denklemini ile verilir.

3.4 HD-AYDGAM Etkin Çiftler Potansiyel Yaklaşımı

Bu tezde hesaplanan bir başka AYDGAM etkin çiftler potansiyeli HD-AYDGAM etkin çiftler potansiyelidir. Bu potansiyeli hesaplayabilmek için Finnis- Sinclair'in (Finnis-Sinclair, 1984) öne sürmüştüğü GAM etkin çiftler potansiyel yaklaşımını kullanarak HD-AYDGAM'daki enerji düzeltme terimleri olan $M(P)$ ve $N(Q)$ leri de içeren iki farklı FS etkin çiftler potansiyel formu oluşturduk. Buna göre HD-AYDGAM etkin çiftler potansiyeli için genel olarak I. FS yaklaşımı

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

ve II. FS yaklaşımı

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

ifadeleriyle verilir. Bu denklemleri HD-AYDGAM modeli için yazarsak $f(r)$ HD-AYDGAM modelindeki çiftler etkileşme potansiyelini gösterilir ve şu formda verilir,

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

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

$$f^{HD-AYDGAM}(r_{ij}) = f_e \left(\frac{r_1}{r_{ij}}\right)^{4.5} \left(\frac{r_{ce} - r_{ij}}{r_{ce} - r_1}\right)^2 \quad (3.23)$$

şeklinde verilir. Burada r_{ce} , $f(r)$ çiftler etkileşme potansiyelini sıfır yapan r değeri alınmıştır.

HD-AYDGAM da enerji modifikasyon terimleri ,

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

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

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

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

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

3.5 CX-GAM Etkin Çiftler Potansiyel Yaklasimi

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

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

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

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

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

$$F^{CX-GAM} = \sqrt{r^{CX-GAM}} \quad (3.29)$$

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

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

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

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

ile verilir.

BÖLÜM 4

SIVI HCP METALLERİ İÇİN GAM PARAMETRİZASYON METODLARI, SIVILARIN YAPISAL VE TERMODİNAMİK BÜYÜKLÜKLERİ

4.1 Sivilar için önerilen GAM Parametrizasyon Metodu

İlk önce bu çalışmada, termodinamik hallerde incelenen her bir metal için E bağlanma enerjisi hesaplandı. Bu hesaplamada Rose' nin hal denklemini kullanıldı. Rose' nin hal denklemine göre E enerjisi,

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

Burada E atom basına bağlanma (kohesif) enerjisini, r_{WS} atom basına ortalama hacim içeren Wigner – Seitz küresinin yarıçapını ve ΔE denge durumundaki bağlanma enerjisini gösterir. a^* , ölçeklendirilmiş örgü parametresi olmak üzere

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

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

denklemini ile verilir. Uzunluk ölçüsü l bağlanma enerjisi egrisinin genişliğini tanımlar. Burada r_{WSE} denge durumundaki Wigner – Seitz küresinin yarıçapı ve l uzunluk boyutunda bir parametredir. $E^*(a^*)$ büyüklüğü

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

seklindeki bir fonksiyonla ifade edilebilir. Burada f^* ' in yavaş değişim gösteren bir fonksiyon olduğu varsayılmaktadır. Sonuç olarak $a^* < 1$ olduğu durumda f^* fonksiyonu bir polinom şeklinde belirlenebilir.

$$f^*(a^*) \approx f_0^* + f_1^* a^* + f_2^* a^{*2} + f_3^* a^{*3} \quad (4.5)$$

$E(r_{ws}) = E_{EOS}(a^*)$ eşitliği kullanılırsa Rose hal denklemi,

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

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

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

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

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

hesaplayabiliriz. Burada r_c kesim mesafesini gösterir. (4.8) denklemi aynı zamanda denge şartı olarak da tanımlanır. Ayrıca potansiyel fonksiyonlarının parametrelerini belirlemek için kullanılan diğer şartlar: $\phi(r)$ çiftler potansiyel ve $f(r)$ elektron yoğunluk fonksiyonlarının ve birinci türevlerinin

$$\phi(r_c) = 0, \quad f(r_c) = 0 \quad (4.9)$$

$$\phi'(r_c) = 0, \quad f'(r_c) = 0 \quad (4.10)$$

r_c kesim mesafesinde sifir olmalıdır. Yine bu fonksiyonlar Born denge kosulunu

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

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

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

denklemleri ile verilen minimizasyon sartleri ele alinir.

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

4.2 Sivilarin Yapisal ve Termodinamik Büyüklükleri

Ornstein-Zernike denklemi (tek bileşenli sistem için)

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

olarak bilinir. Bu denklem $c(r)$ direk korelasyon fonksiyonunu toplam korelasyon fonksiyonu $h(r)=g(r)-1$ cinsinden tanımlar. Burada $g(r)$ çiftler dağılım fonksiyonu ve ρ

atomik sayı yoğunludur. Bu denklem $\phi_{\text{eff}}(r)$ etkin çiftler potansiyelini içeren tam kapalılık bagintisiyle desteklenir.

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

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

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

belirlenir. Burada,

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

dir. Burada $f_{\text{PY}}^{\text{MHNC}}(\eta)$, PY kati küre (HS) dağılım fonksiyonu ve η , paketleme kesirli köprü fonksiyonları kullanıldığında indirgenmiş MHNC Helmholtz serbestlik enerjisinin değeridir ve $f_{\text{CS}}(\eta)$, ampirik HS kati küre Carnahan-Starling Helmholtz serbestlik enerjisidir.

Parçacık basına iç enerji

$$E = \frac{3}{2} N k_B T + \frac{1}{2} \rho \int g(r) \phi_{\text{eff}}(r) d^3 r \quad (4.17)$$

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

Helmholtz serbestlik enerjisinin denklemi

$$F = -k_B T \ln Q_N = F^{\text{ideal}} + F^{\text{fazladan}} \quad (4.18)$$

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

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

olarak alınmıştır. Böylece atom başına Helmholtz serbestlik enerjisi (4.18) ve (4.19) denklemleri kullanılarak

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

şeklinde yazılır. Burada $E(n)$ yoğunluğa bağlı gömme enerjisidir.

Yukarıda anlatılan yapısal ve termodinamik büyüklükler istatistik mekaniksel bir bakış ile aşağıda kısaca özetlenmiştir:

İç Enerji

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

$$Q_N = \Lambda^{3N} Z_N / N! \quad (4.21)$$

formunda yazılır. Burada Λ tek boyutlu harekette kinetik enerji için

$$\Lambda = \left(M k_B T / 2\pi\hbar^2 \right)^{1/2} \quad (4.22)$$

sekinde verilen bölüsüm fonksiyonu ve Z_N konfigürasyonel bölüsüm fonksiyonudur. (4.21) denklemindeki $N!$ Etkisi sistemdeki N parçacığın tamaminin hesaplamaya katılması gerekliliğinden kaynaklanır.

Sistemin toplam enerjisi termodinamik olarak

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

ile verilir. Bölüsüm fonksiyonu ile Helmholtz serbestlik enerjisi arasında

$$F = -k_B T \ln Q_N \quad (4.24)$$

bağıntısı vardır. (4.21) denklemi ile verilen Q_N bölüsüm fonksiyonunun ve Z_N konfigürasyonel bölüsüm fonksiyonunun doğal logaritması alındığında Stirling açılımı yardımıyla

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

$$\ln Z_N = N \ln V + \ln \iint \exp(-\beta U_i) d^3 R_1 \dots d^3 R_N \quad (4.26)$$

bağıntıları elde edilir. Q_N ve Z_N için bulunan bu bağıntılar (4.24) denkleminde kullanıldığında Helmholtz serbestlik enerjisi için

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

sekinde ifade elde edilir. Son bağıntı, sistemin toplam enerjisini veren (4.23) denkleminin sağ tarafında kullanılırsa

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

ifadesi elde edilir.

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

Bu durumda

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

yazılabilir. Integrali referans alınan iki parçacığı ayırarak tekrar yazdığımızda

$$E = \frac{3}{2} N k_B T + \frac{1}{2} \iint \phi(R_{12}) d^3 R_1 d^3 R_2 \frac{N(N-1)}{2} \int \dots \int e^{-\beta U_t} d^3 R_3 \dots d^3 R_N \quad (4.30)$$

elde ederiz. Kanonik topluluğun genel tanımı kullanılarak $R_3 \dots R_N$ üzerinden integral alındığında parçacık başına iç enerji (4.17) denklemi halini alır.

Helmholtz Serbestlik Enerjisi

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

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

şeklinde yazılabilir. Bu temel denklem istatistik mekanik ve termodinamik arasında bir ilişki kurulmasını sağlar. F Helmholtz serbestlik enerjisinin minimum olduğunda sabit V ve T şartları altında termodinamik dengeye ulaşır. Bu sebeple V ve T bağımsız değişkenler olarak seçildiğinde Helmholtz serbestlik enerjisinin kullanılması en uygun termodinamik potansiyeldir. F , V ve T 'nin fonksiyonu olarak bilinirse eğer diğer tüm termodinamik büyüklükler F 'in türevi olarak elde edilebilir.

Sonsuz küçük tersinir hal değişimindeki cisim üzerine yapılan iş

$$dF = dE - dQ = dE - TdS = d(E - TS) \quad (4.32)$$

yada

$$F = E - TS \quad (4.33)$$

olarak yazılabilir. Böylece, tersinir es isili süreçte cisim üzerine yapılan iş, cismin serbestlik enerjisine esittir. Burada E sistemin iç enerjisi, S ise entropisidir.

Birbiriyle etkileşen parçacık sistemi için denklem (4.21) ile verilen bölüşüm fonksiyonu

$$Q_N = \frac{Q_N^{\text{ideal}}}{V^N} Z_N \quad (4.34)$$

şeklinde yazılır. Burada Q_N^{ideal} :

$$Q_N^{\text{ideal}} = \frac{V^N}{N!} \Lambda^{3N} \quad (4.35)$$

şeklinde verilen ideal gaz bölüşüm fonksiyonudur. Helmholtz serbestlik enerjisi denklem (4.21)' in logaritması alındığında

$$F = -k_B T \ln Q_N = F^{\text{ideal}} + F^{\text{fazladan}} \quad (4.36)$$

olduğu görülür. Burada F^{ideal} ideal gaz serbestlik enerjisidir. Serbestlik enerjisine fazladan gelen katkı, etkileşimlerden kaynaklanan etkili bir katkıdır. Bu çalışmada F^{fazladan} katkısı (Bhuiyan ve v.d. 1996)' göre (4.19) denklemi olarak alınır ise (4.20) denklemi elde edilir.

Entropi

Entropi istatistiksel sistemlerin en önemli karakteristiklerinden biridir, ama ne yazık ki herhangi bir toplanabilir veya ikili fonksiyonun ortalaması değildir. Bu nedenle en basit korelasyon fonksiyonları yardımıyla bile doğrudan ifade edilmesi mümkün değildir. Radyal bölüşüm fonksiyonu $g(r)$ 'nin termodinamik parametreler T ve v bağıllığı; $g(r)=g(r; T, v)$ bilinirse, dolaylı bir ifade elde edilebilir. (4.17) denklemi ile verilen iç enerji ifadesi $\rho=N/v$ olmak üzere hacim elemanı açık yazılarak

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

şeklinde ifade edilebilir. Denklem (4.37)'yi sıcaklığa göre türetirsek

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

elde edilir. Entropi iyi bilinen termodinamik bağıntılardan biri olan

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

bağıntısı ile integre edilerek ve ayrıca (4.33) denklemi ile de hesaplanabilir.

BÖLÜM 5

SONUÇLAR VE TARTISMA

5.1 Sivi hcp Metallerinin Atomlararası Çiftler Potansiyelleri

Bu bölümde bazı nadir toprak metallerinin (Be, Mg, Sc, Ti, Co, Y, Zr, La, Pr, Nd, Gd, Tb, Dy, Ho, ve Er) ergime noktaları civarında Gömülü Atom Metodu GAM, Analitik Yeniden Düzenlenmiş Analitik Gömülü Atom Metodu AYDGAM' kullanılarak hesaplanan etkin çiftler potansiyelleri verilmektedir. Bu çalışmada kullanılan potansiyel fonksiyonlarının parametre seti Bölüm 4'de verilen parametrizasyon kullanılarak bağlanma enerjisine, Born kararlılık denge şartına, kesim mesafesi işlemine ve konfigürasyonel serbestlik enerjisini minimize eden bağıntıya fit edilerek elde edilmiştir. Çalıştığımız sistemlerin (Be, Mg, Sc, Ti, Co, Y, Zr, La, Pr, Nd, Gd, Tb, Dy, Ho, ve Er) termodinamik durumu ve bu durumdaki $\rho(\text{at./Å}^3)$ deneysel iyonik sayı yoğunlukları ve sıcaklıklar Waseda (Waseda 1980)' dan alınmış ve Tablo 5.1' de verilmektedir. Ayrıca parametrizasyon işlemine kullanılan a^* ölçeklendirilmiş örgü parametresi, B hacim modülü ve E_c bağlanma enerjisinin hem katı hal hem de sıvı haldeki değerleri sırasıyla a^* , E_c^K , E_c^S , B^K parametreleri ile gösterilmekte ve Tablo 5.1' de verilmektedir. Bu tezde K indisi katı S indisi sıvı için kullanılmıştır.

Tablo 5.1: Bazi HCP geis metalleri GAM potansiyel fonksiyonlarının parametrizasyonunda kullanılan giriş parametreleri a^* , Rose hal denklemi parametresi, a^K kati durum örgü sabiti, a^S sivi durum örgü sabiti, E_c^K kati durumdaki kohesif enerji, E_c^S , sivi durumdaki kohesif enerji

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

⁺ Periyodik cetvelden alınmıştır.

5.1.1 ZQ-GAM Etkin Çiftler Potansiyeli

İlk olarak Zhang ve Quyang'ın (Zhang, Quyang, 1993) kati sistemler için öne sürmüş oldukları Gömülü Atom Metodu potansiyel fonksiyonlarını hem katihal hem de sivihal özelliklerine fit ederek elde edilen parametre seti kullanılarak bazı sivi hcp nadir toprak metallere Sc, Ti, Co, Y, Zr, ve La için atomlararası etkin çiftler potansiyelleri hesaplandı. Zhang-Quyang'nin sivi sistemler için optimize edilmiş potansiyel parametreleri Tablo 5.2' de verilmektedir. Bu tabloda verilen kesme mesafesi için kullanılan r_c değerleri potansiyeli sıfır yapan r değeri olarak alınmıştır.

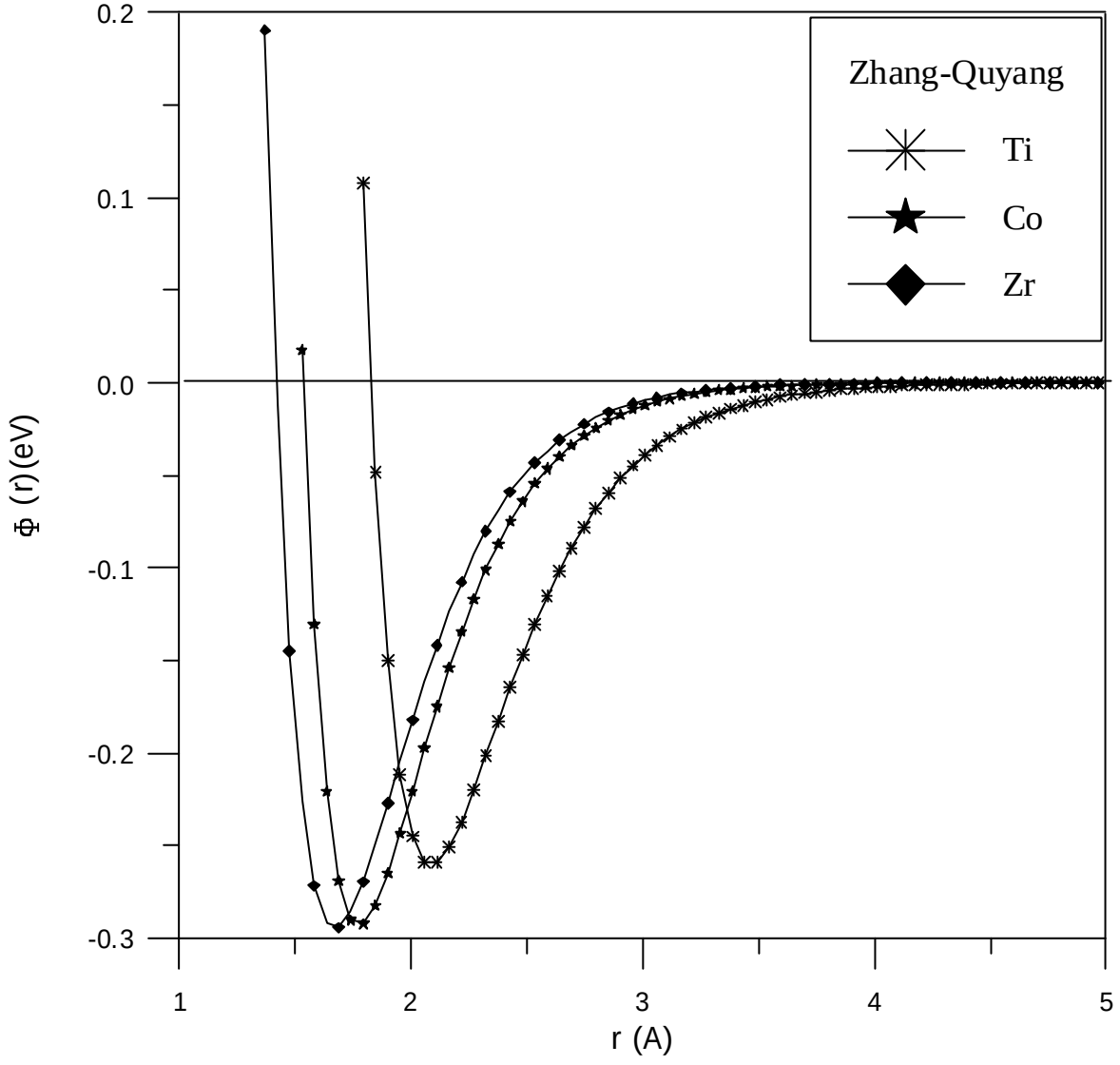
Tablo 5.2: Sivi HCP geçiş metalleri için ZQ-GAM potansiyel parametreleri

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

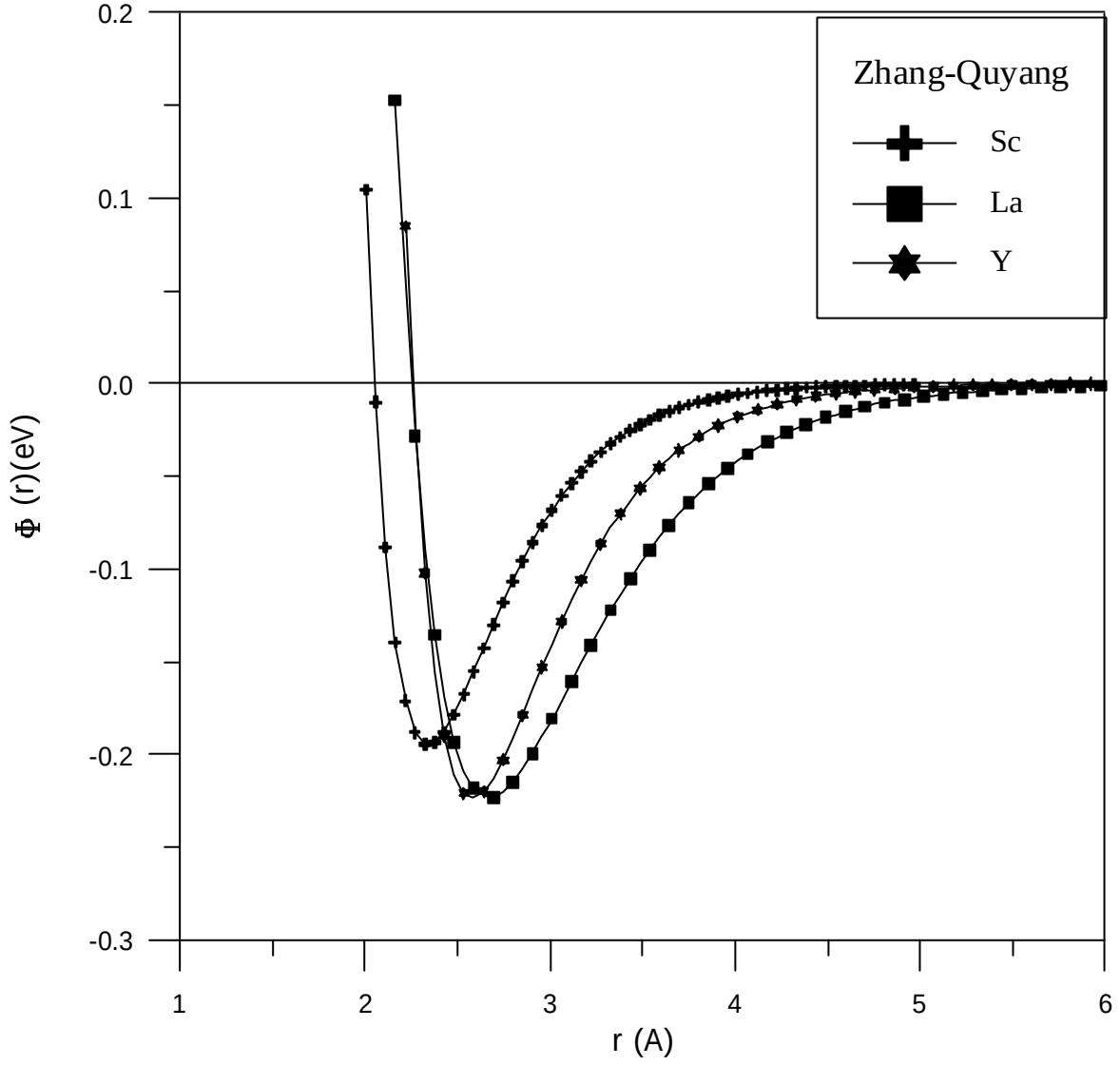
Sekil 5.1 ve Sekil 5.2' de sivi Sc, Ti, Co, Y, Zr ve La için elde ettiğimiz parametre setini kullanarak hesapladığımız çiftler potansiyel fonksiyonları verilmektedir. Periyodik tabloda soldan sağa gidildikçe ve yukarıdan aşağı inildikçe atom numarası artar. Buna bağlı olarak da atomlar arası çekim kuvveti de artar. Sekil 5.1 ve Sekil 5.2'den de görüldüğü gibi çiftler etkileşim fonksiyonları periyodik tablo ile uyumlu olduğu söylenebilir. Sekil 5.3 ve Sekil 5.4'te ise gömme enerji fonksiyonları verilmektedir. Gömme enerji fonksiyonları da periyodik tablo ile aynı eğilimi verdiği göstermektedir. Artan atomik hacim için , periyodik tablo da soldan sağa gidildikçe ve yukarıdan aşağı inildikçe, gömme enerji fonksiyonunun genişliği ve derinliği artmaktadır. Yalnız Sekil 5.3'te Ti Sekil 5.4'de de Y ve Sc potansiyel değerlerini negatif bölgeden gelerek sıfıra gitmektedir.

Sekil 5.5 ve Sekil 5.6'da ZQ- GAM potansiyel fonksiyonları ile Finnis ve Sinclair (Finnis ve Sinclair, 1984) 'in GAM etkin çiftler potansiyel yaklaşımını kullanarak sivi Sc, Ti, Co, Y, Zr, ve La için hesapladığımız ZQ etkin çiftler etkileşme potansiyelleri verilmektedir. Daha önce bölüm 3' de de belirtildiği gibi ZQ – GAM etkin çiftler potansiyellerini elde etmek için Finnis ve Sinclair' in etkin çiftler potansiyel yaklaşımında gömme enerjisinin ikinci ve

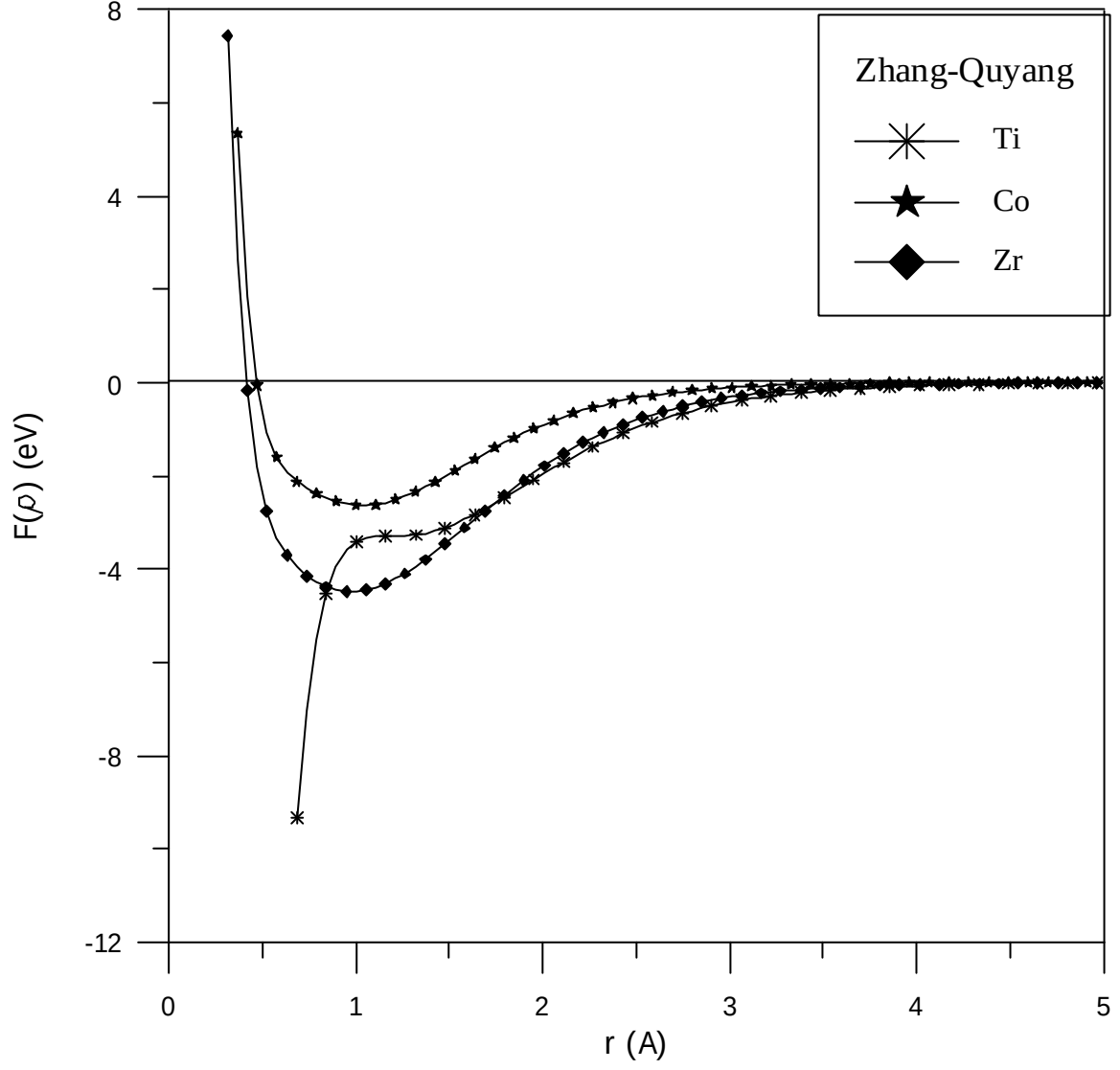
daha yüksek mertebeli türevlerini ihmal ettik. Zhang- Quyang'ın GAM yönteminin, potansiyelin konumu ile ilgili olduğu kadar derinliği ile ilgili olarak da doğru eğilimler verdiği Şekil 5.5'de gözlenmektedir. Periyodik tabloda aynı grupta yukarıdan aşağı inildikçe hesaplanan potansiyel daha yumuşak, genişliği artan ve minimumunun konumu daha büyük r değerlerine doğrudur. Şekil 5.6'da Sc, Y ve La için genişliği azalan ama minimum konumu daha büyük r değerlerine doğru olduğunu söyleyebiliriz.



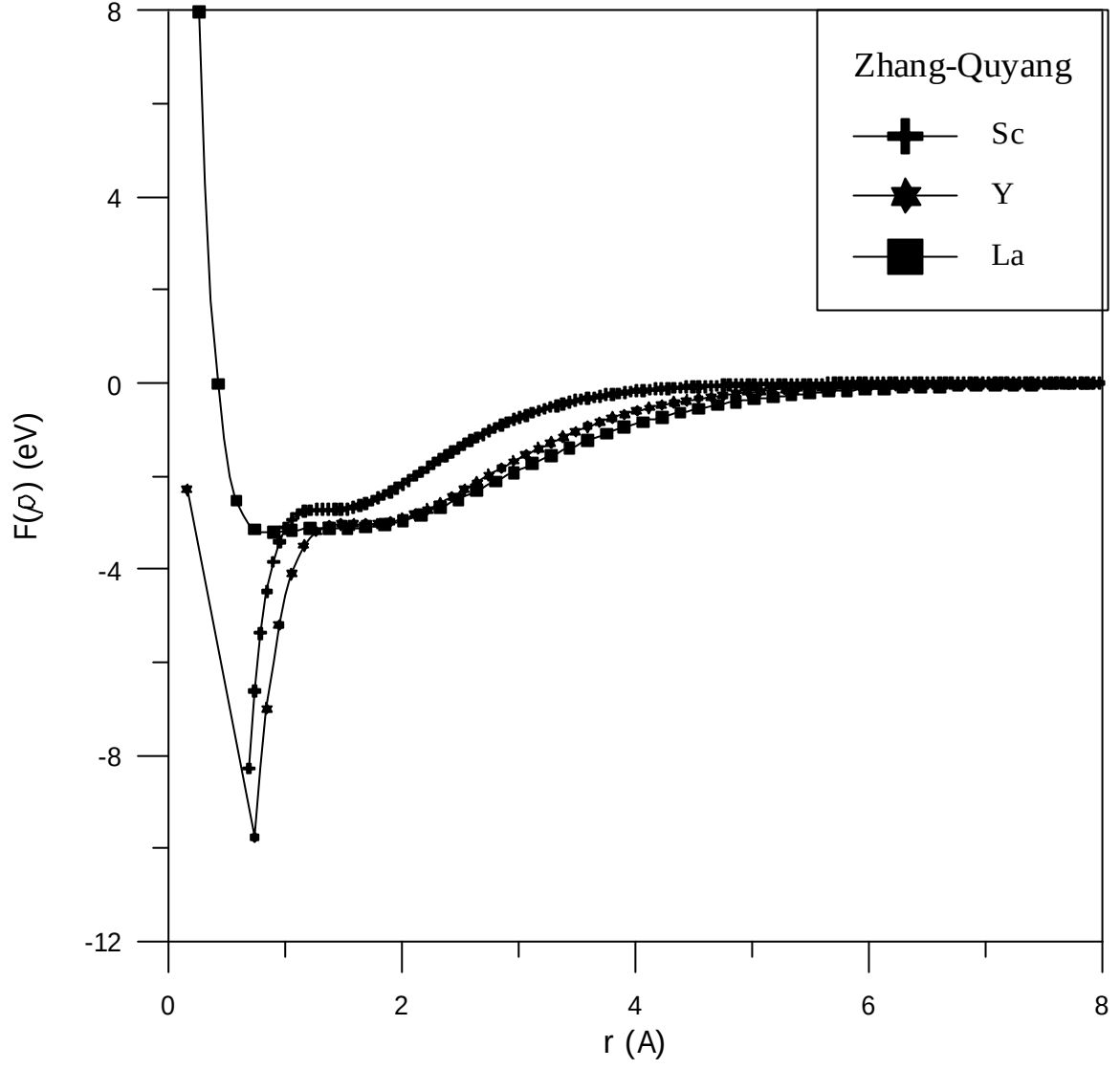
Sekil 5.1: Ti, Zr ve Co için ZQ-GAM çiftler etkilesme potansiyelleri



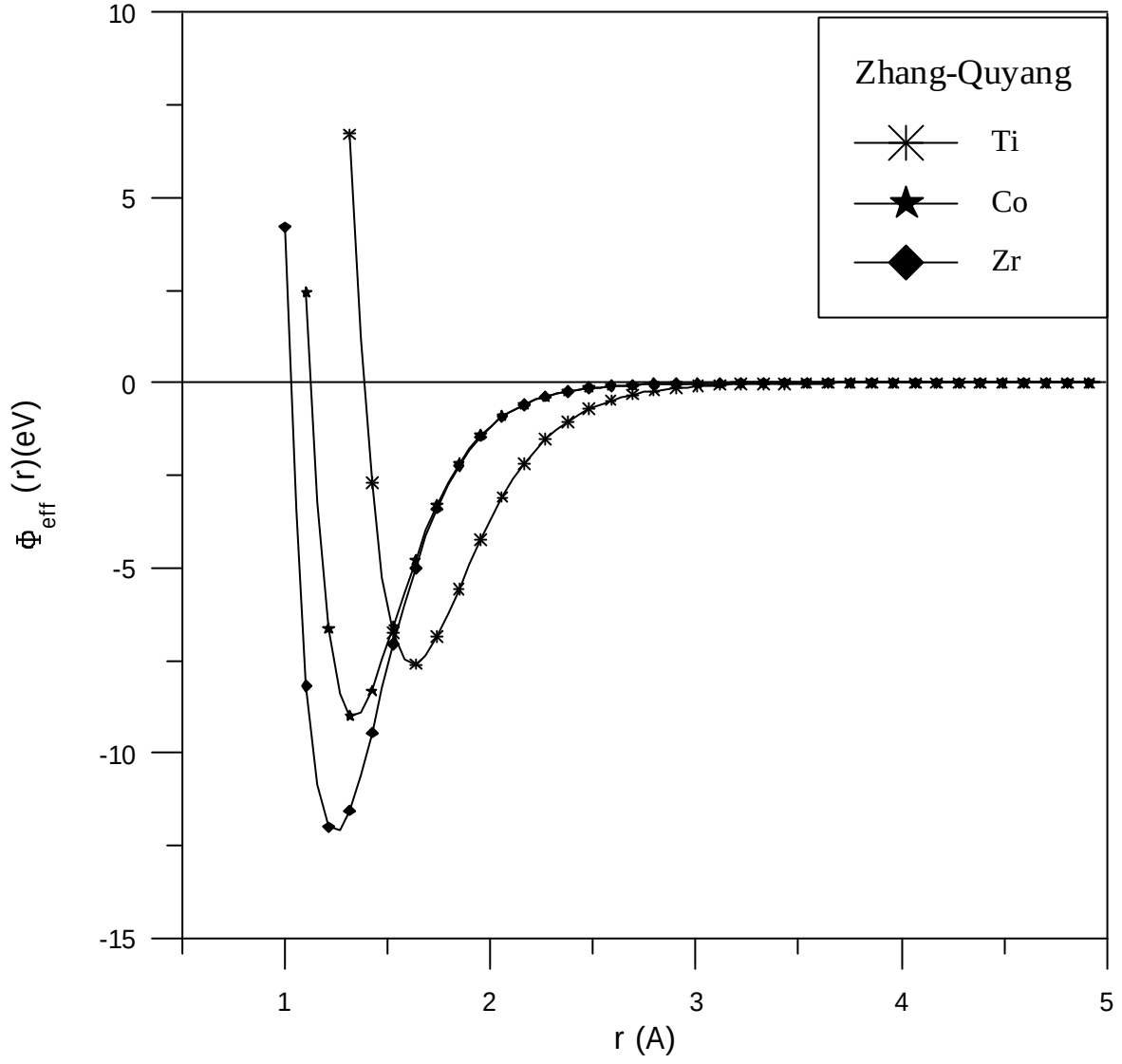
Sekil 5.2: Sc, Y ve La için ZQ-GAM çiftler etkilesme potansiyelleri



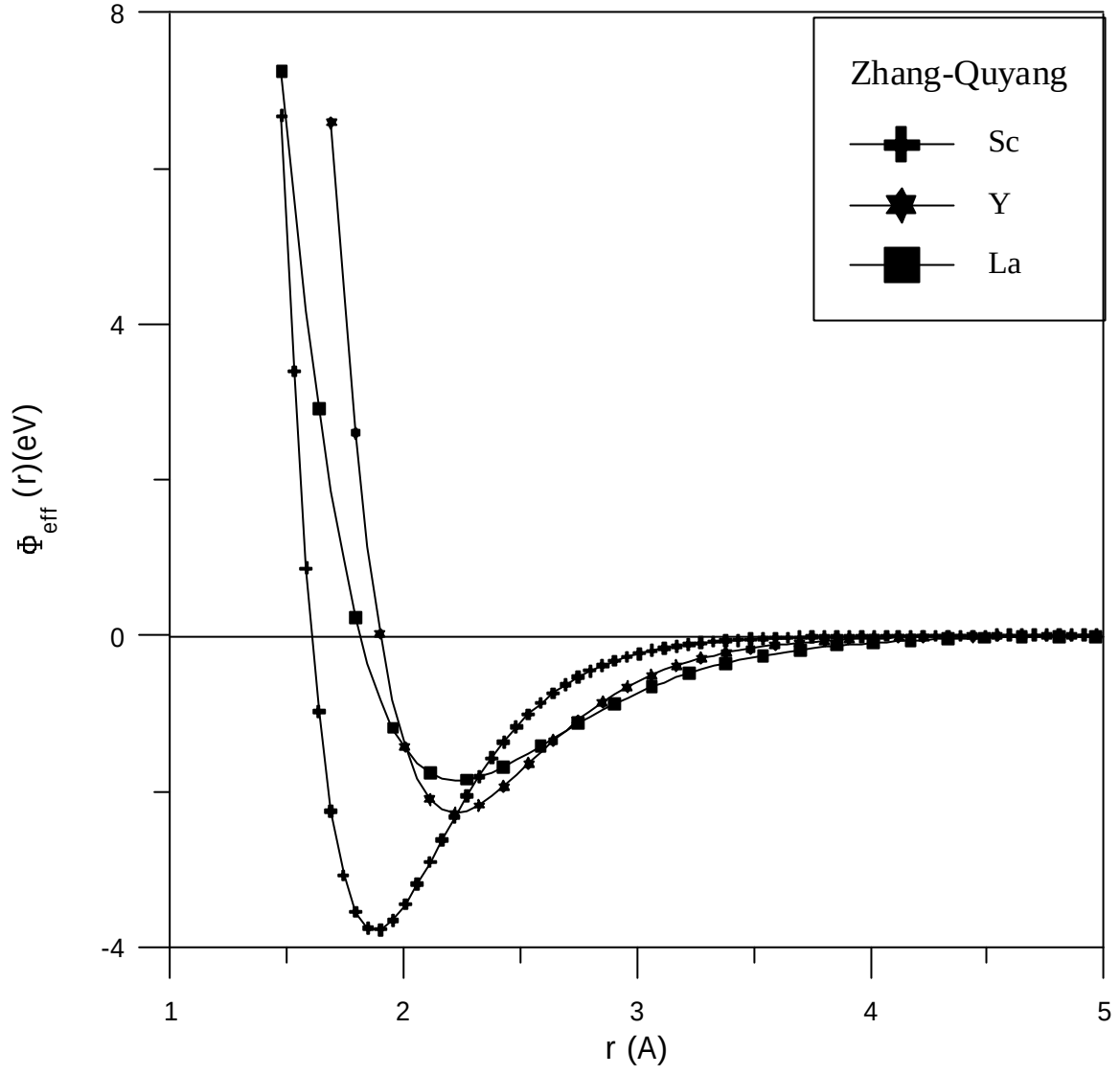
Sekil 5.3: Ti, Zr ve Co için ZQ-GAM gömme enerjisi fonksiyonları



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



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



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

5.1.2 HX-AYDGAM Etkin Çiftler Potansiyeli

Hu, Xu ve arkadaşlarının (Hu W., 2000) kati sistem için öne sürmüs oldukları Analitik Yeniden Düzenlenmiş Gömülü Atom Metodu potansiyel fonksiyonlarını hem katihal hem de sıvihal özelliklerine fit ederek elde edilen parametre seti kullanılarak bazı sıvı hcp nadir toprak metallerinden Mg, Sc, Y, Pr, Nd, Gd, Tb, Dy, Ho, ve Er için atomlararası etkin çiftler potansiyelleri hesaplandı. Hu-Xu AYDGAM 'nın sıvı sistemler için optimize edilmiş potansiyel parametreleri Tablo 5.3' de verilmektedir. Bu tabloda verilen kesme mesafesi için kullanılan r_c değerleri potansiyeli sıfır yapan r değeri alınmıştır.

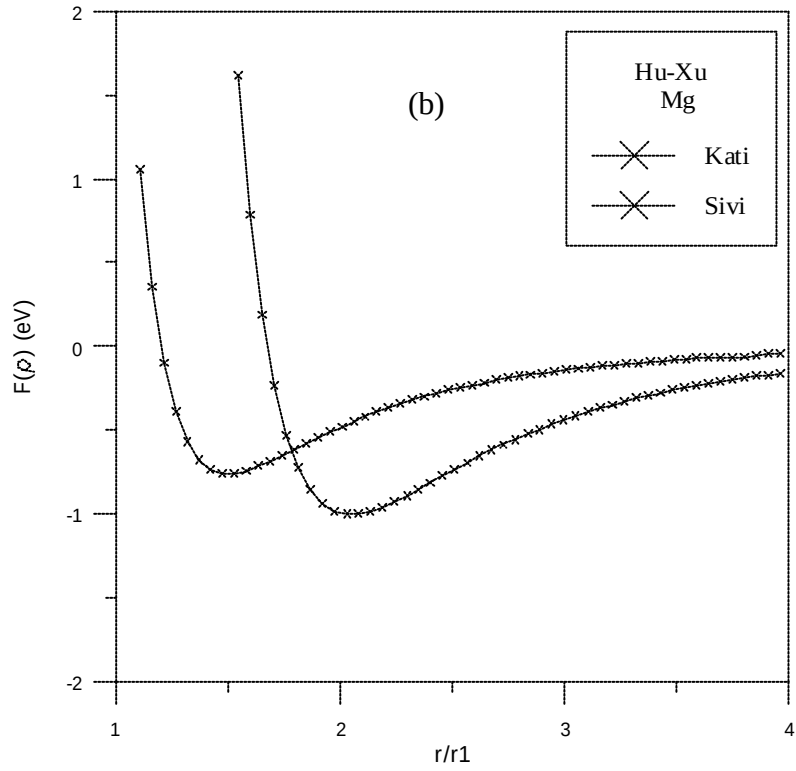
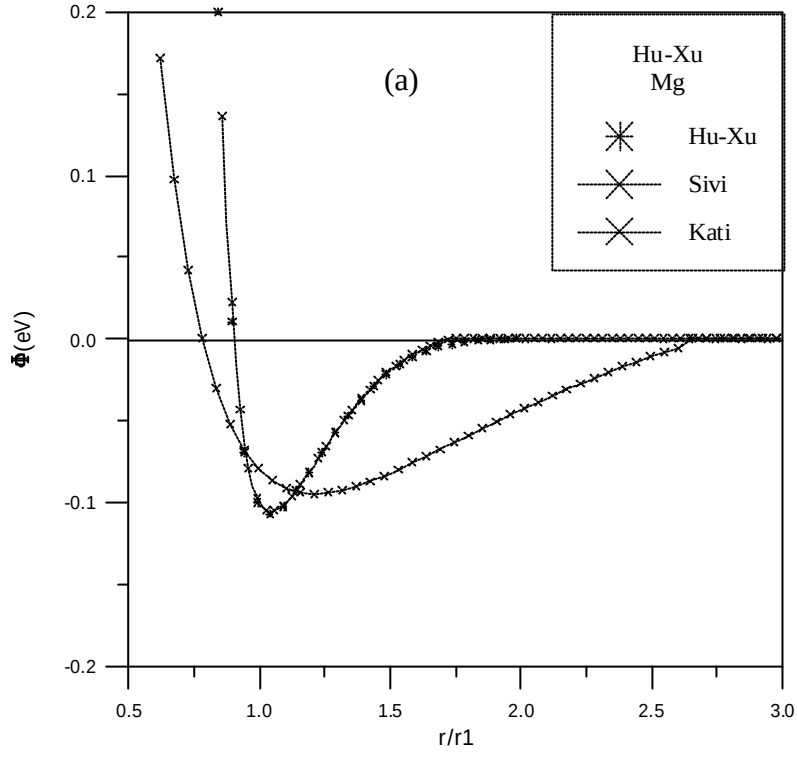
Hu-Xu AYDGAM'dan elde edilen sıvı çiftler etkileşim fonksiyonları Şekil 5.7-Şekil 5.10'da gösterilmiştir. Mg için, kati-sıvı çiftler etkileşim fonksiyonları ve gömme enerji fonksiyonları Şekil 5.7'de verilmektedir. Kati Mg 'un sıvı Mg'a göre daha derindir. Çünkü kati istemde atomlar arası mesafe sıvı sisteme göre daha kısa olduğundan atomlar arası etkileşimler daha kuvvetlidir. Sc ve Y için kati parametreleri ile hesaplanan çiftler etkileşim fonksiyonları ile Hu-Xu'nun değerleri Şekil 5.8 (a) da karşılaştırılmış, Y için aynı değer hesaplanmış, Sc içinse potansiyel derinliği aynı, r/r_1 değerlerinde farklılık gözlenmiştir. Sıvı parametreleri ile hesaplananlarda Şekil 5.8 (b) de gösterilmiştir. Aynı şekilde Pr, Nd ve Gd için Şekil 5.9 da, Tb, Dy, Ho ve Er içinde Şekil 5.10 da verilmiştir. Bulunan değerler Hu-Xu'nun değerleri ile aynıdır. Şekil 5.11'de Sc ve Y'nin gömme enerji fonksiyonları, Şekil 5.12'de Pr, Nd ve Gd'nin Şekil 5.13'te ise Tb, Dy, Ho ve Er'in in gömme enerji fonksiyonları verilmektedir.

Hu-Xu AYDGAM potansiyel fonksiyonları ile Finnis ve Sinclair (Finnis ve Sinclair 1984)' in GAM etkin çiftler potansiyel yaklaşımını kullanarak sıvı Mg, Sc, Y, Tb, Dy, Ho, Gd, Nd, Pr ve Er için bölüm 3'de anlatıldığı gibi her iki yöntem ile hesapladığımız etkin çiftler etkileşim potansiyelleri Şekil 5.14- Şekil 5.17' de verilmektedir. Şekil 5.18-Şekil 20'e her bir metalin I ve II. FS-AYDGAM yöntemden elde edilen etkin çiftler potansiyelleri birbirleri ile karşılaştırmalı olarak verilmektedir. FS-AYDGAM'nu elde etmek için toplam enerjiye $M(P)$ gibi düzeltme terimi eklendi. Şekil 5.14'te Mg 'un her iki yöntem ile elde edilen etkin çiftler etkileşim potansiyel fonksiyonları verilmektedir. Şekilden de görüldüğü gibi I. yöntemden hesaplanan fonksiyonun daha derin ve daha uzun r değerine gittiği görülmektedir. Şekil 5.15 ve Şekil 5.17'de sırasıyla Sc ve Y için I. ve II. yöntem ile hesaplanan etkin çiftler etkileşim potansiyel fonksiyonları verilmektedir. Şekillerden de

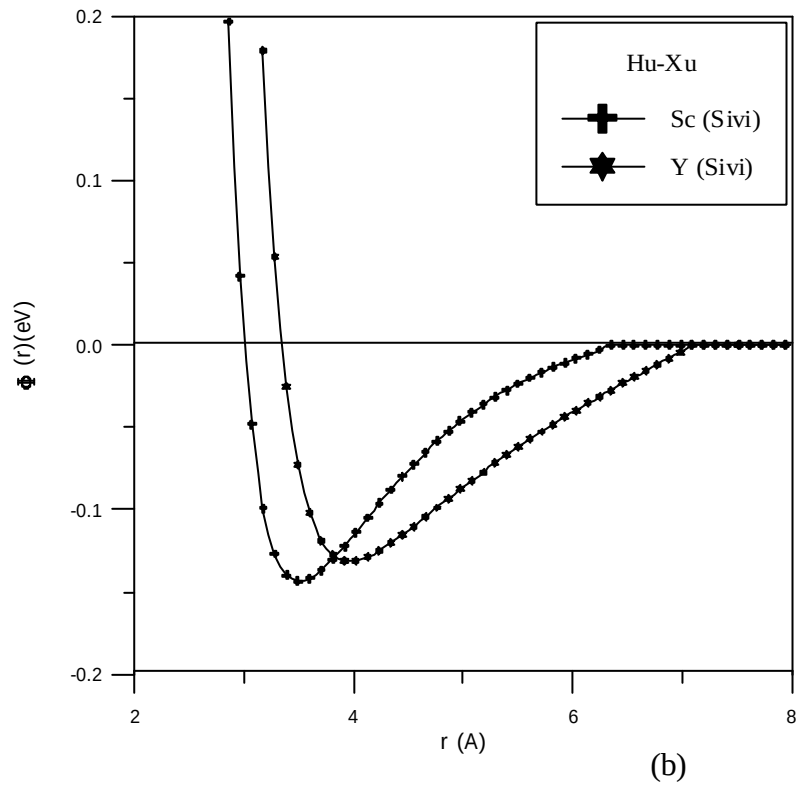
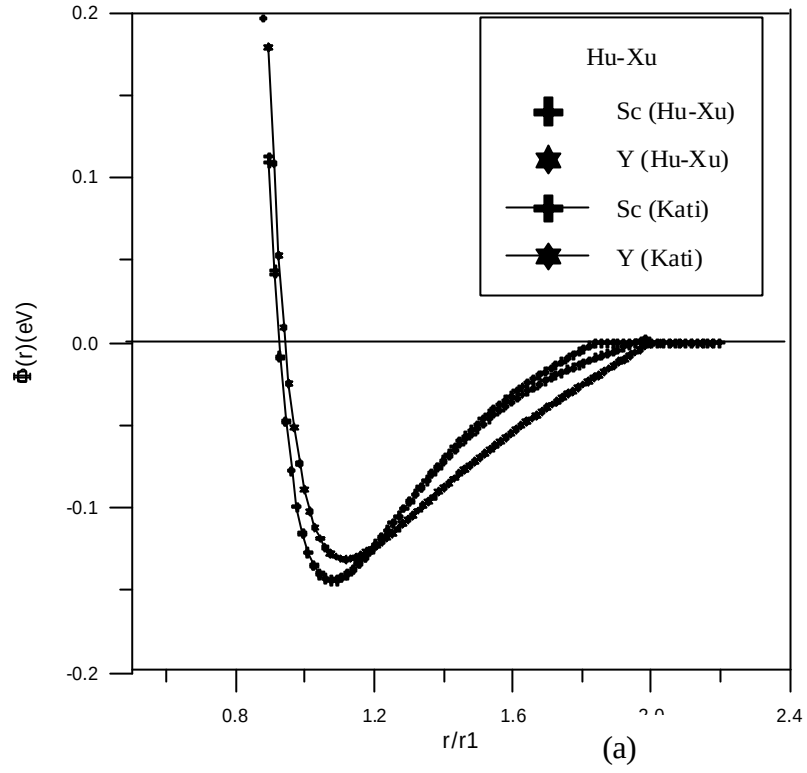
görüldüğü gibi her iki yöntemde potansiyel derinlikte pek fark olmadığı fakat I. yöntemle hesaplanan potansiyelin yumuşak ve minimum konumunun daha büyük r değerlerinde olduğu görülür. Şekil 5.15 ve Şekil 5.18’de sırasıyla Gd, Pr ve Nd için I. ve II. yöntem ile hesaplanan etkin çiftler etkileşme potansiyel fonksiyonları verilmiştir. Şekillerden de görüldüğü gibi I. yöntem ile hesaplanan potansiyellerin daha derin ve minimum konumunun daha büyük r değerlerinde olduğu görülür. Şekil 5.16 ve Şekil 5.19’da Tb.Dy, Ho ve Er için sırasıyla I. ve II. yöntem ile hesaplanan etkin çiftler etkileşme potansiyel fonksiyonları verilmiştir. Şekillerden de görüldüğü gibi I. yöntem ile hesaplanan potansiyellerin daha uzun menzilli olduğu derinliklerinde ise pek farklılık olmadığı görülmektedir. Ayrıca her iki yöntemde de Finnis ve Sinclair’ in etkin çiftler potansiyel yaklaşımında gömme enerjisinin ikinci ve daha yüksek mertebeli türevleri ihmal edilmistir.

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

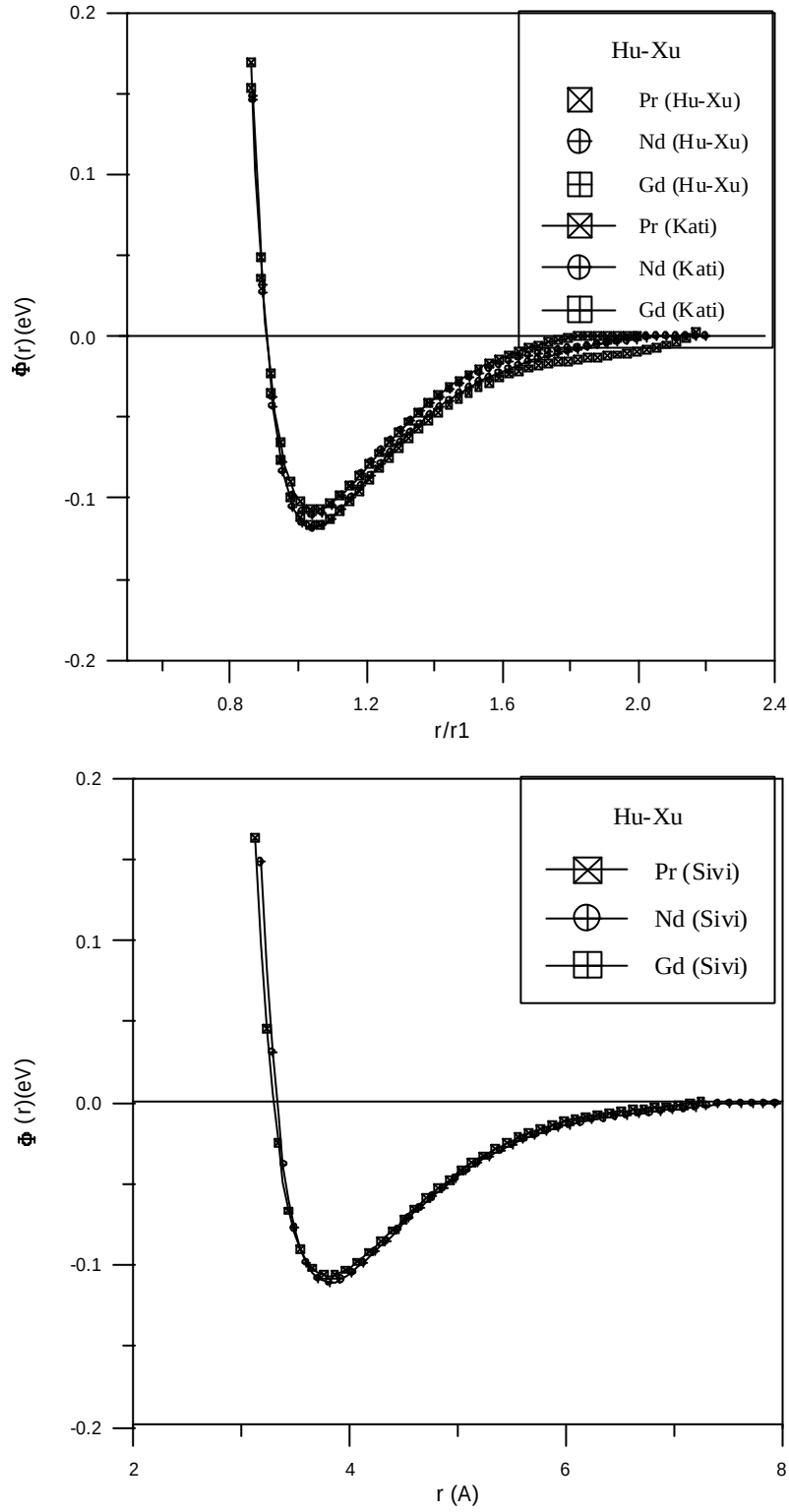
	Mg	Sc	Y	Pr	Nd	Gd	Tb	Dy	Ho	Er
n	0.73	0.64	0.57	0.119	0.112	0.128	0.22	0.14	0.18	0.25
f_e	0.0529	0.0793	0.0636	0.0558	0.0539	0.0617	0.063	0.0552	0.052	0.0591
$F_0(\text{eV})$	0.74	2.72	3.14	5.1	4.9	5.9	5.565	5.05	10	3.63
a (eV)	-0.0279	-0.1098	-0.1243	-0.150	0.0267	-0.0336	-0.0272	-0.0327	-0.041	-0.0595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



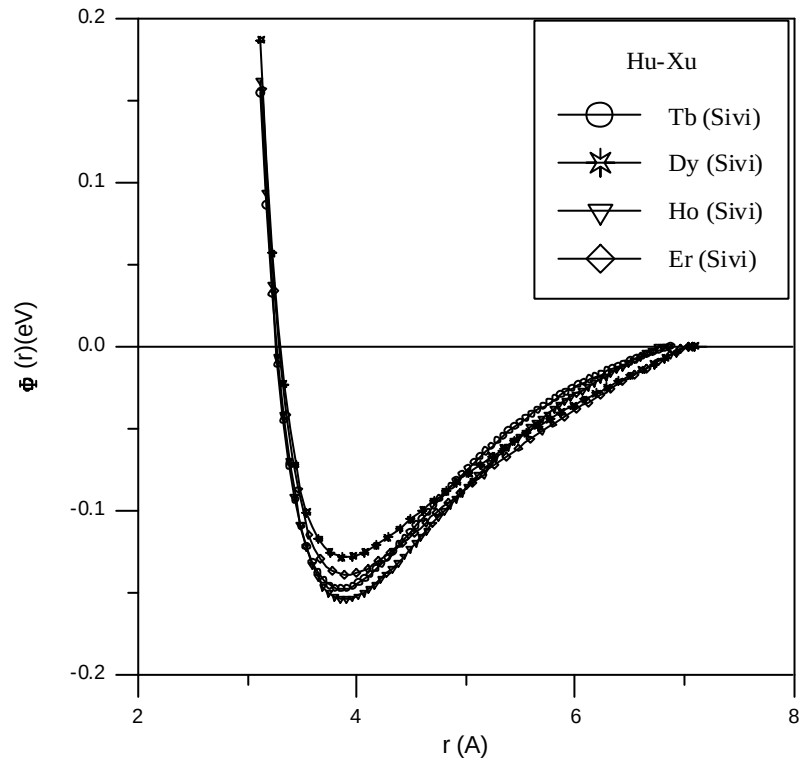
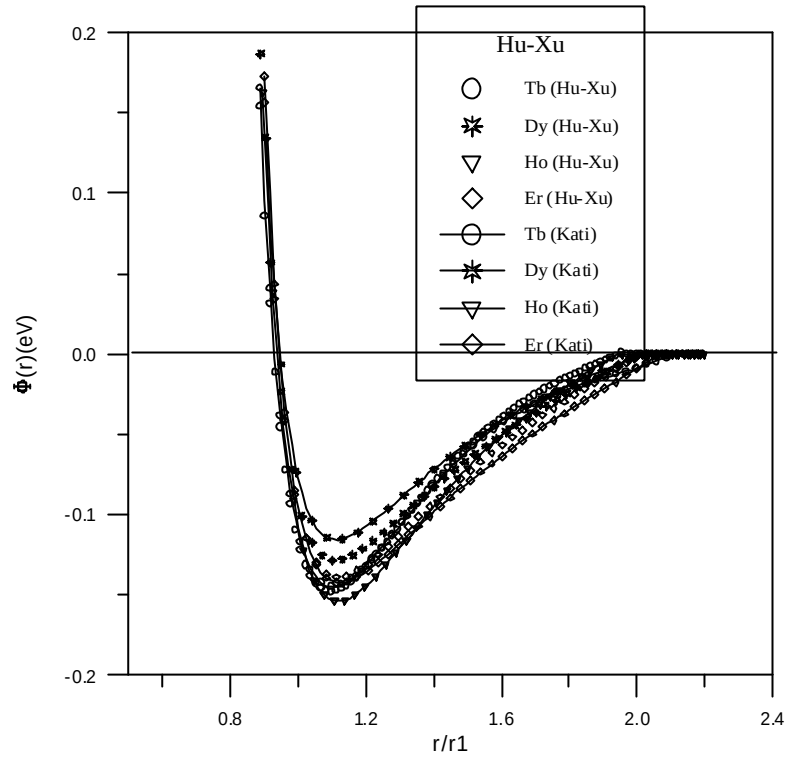
Sekil 5.7 : Mg için HX-AYDGAM kullanılarak elde edilen
a)Çiftler etkilesme potansiyelleri
b)Gömme enerji fonksiyonları



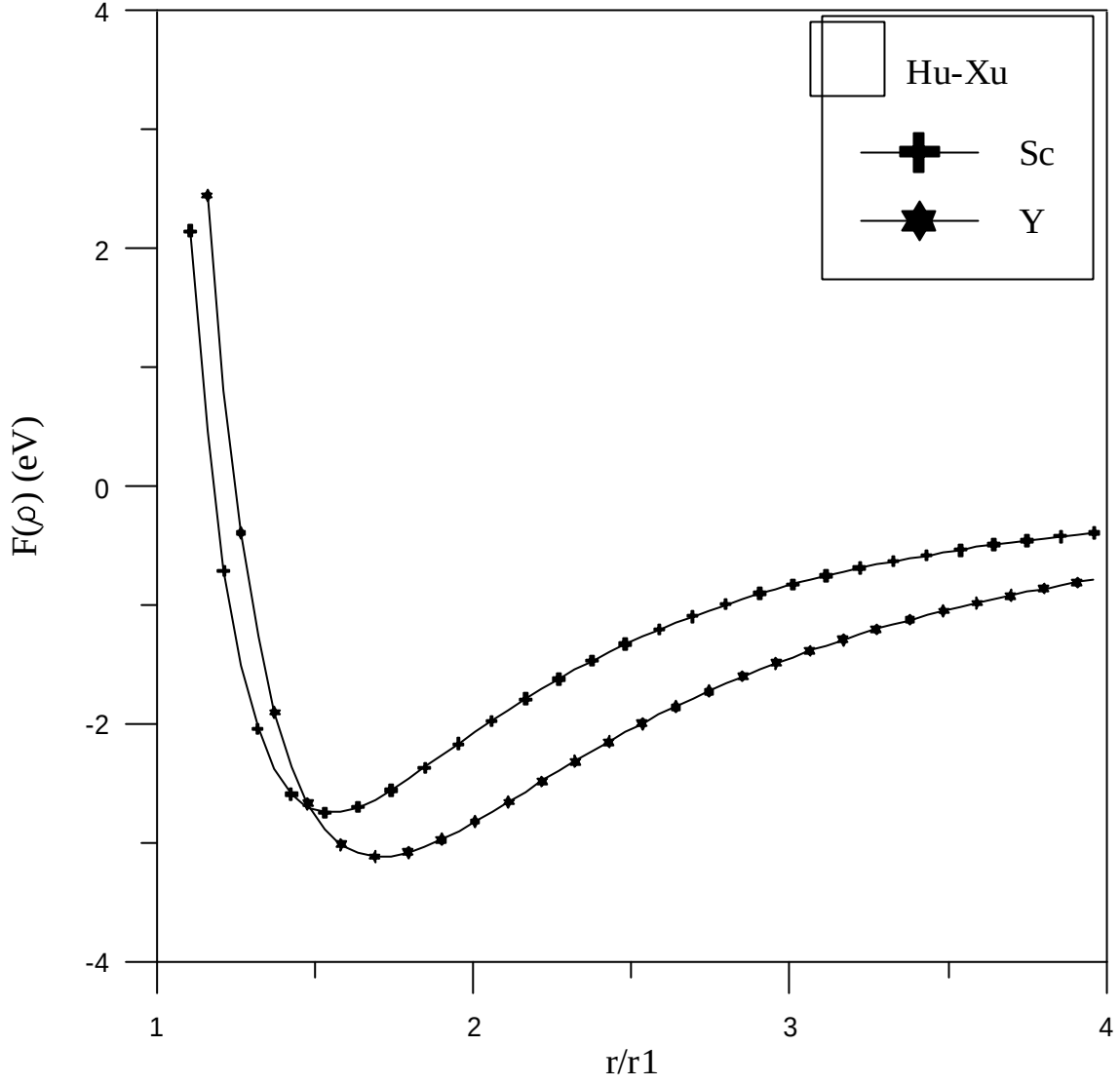
Sekil 5.8: Sc ve Y için HX-AYDGAM kullanarak
 (a) Kati parametreleri ile elde edilen çiftler etkileşme potansiyellerinin diğer çalışmalarla karşılaştırılması
 (b) Elde edilen sıvı çiftler etkileşme potansiyelleri



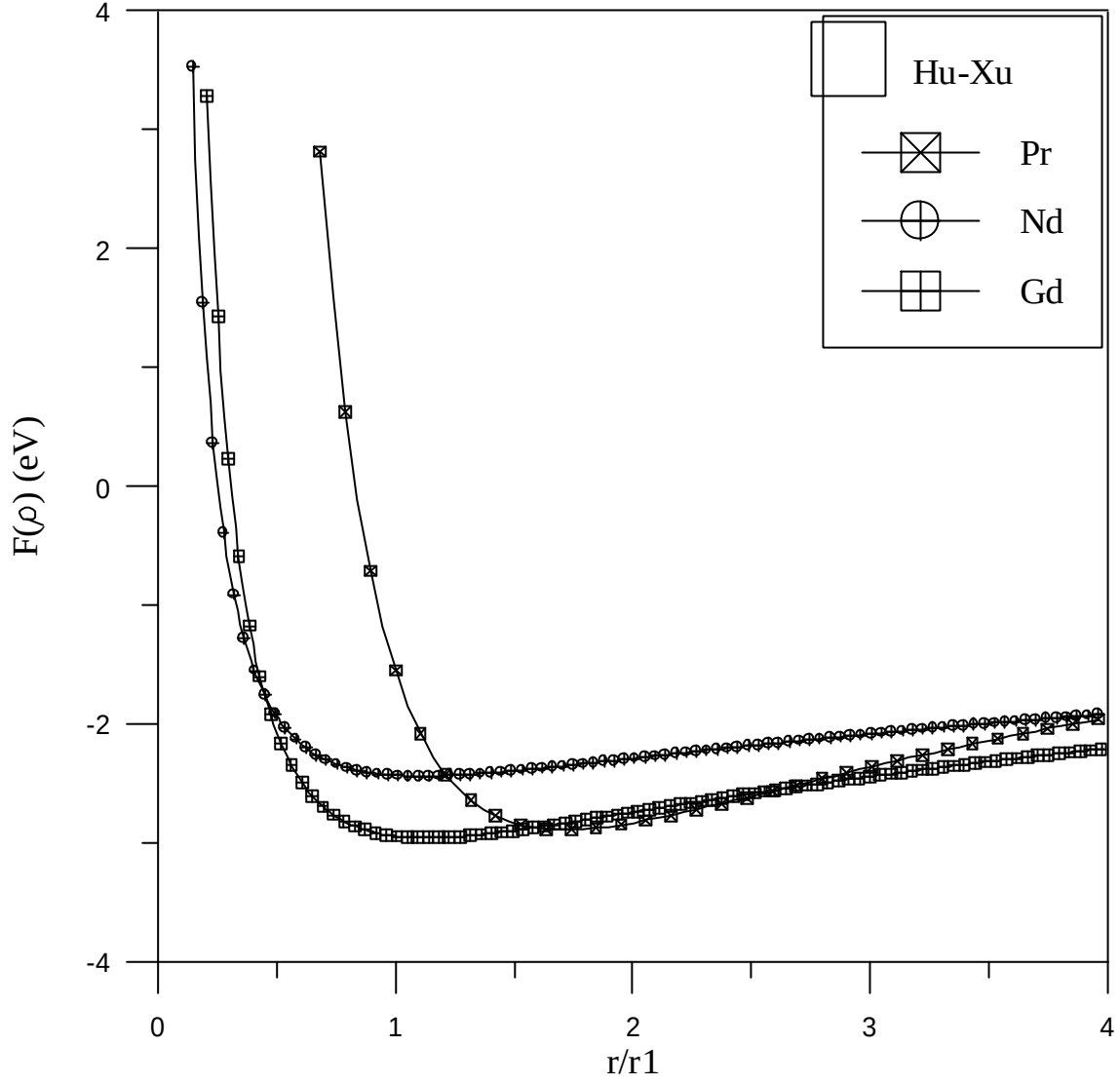
Sekil 5.9: Pr, Nd ve Gd için HX-AYDGAM kullanarak
 (a) Kati parametreleri ile elde edilen çiftler etkileşme potansiyellerinin diğer çalışmalarla karşılaştırılması
 (b) Elde edilen sıvı çiftler etkileşme potansiyelleri



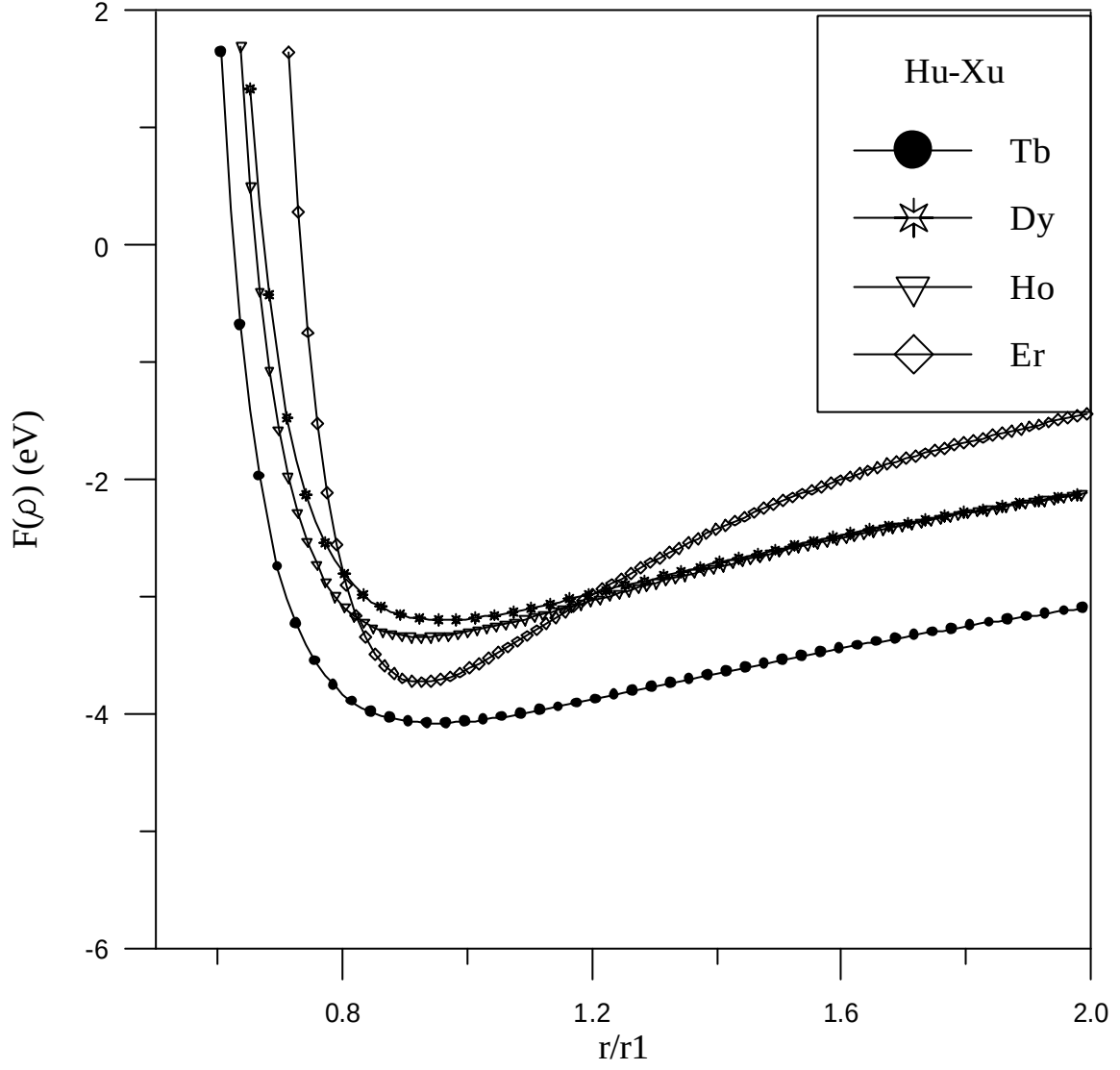
Sekil 5.10: Tb, Dy, Ho ve Er için HX-AYDGAM kullanarak
 (a) Kati parametreleri ile elde edilen çiftler etkileşme potansiyellerinin diğer çalışmalarla karşılaştırılması
 (b) Elde edilen sivi çiftler etkileşme potansiyelleri



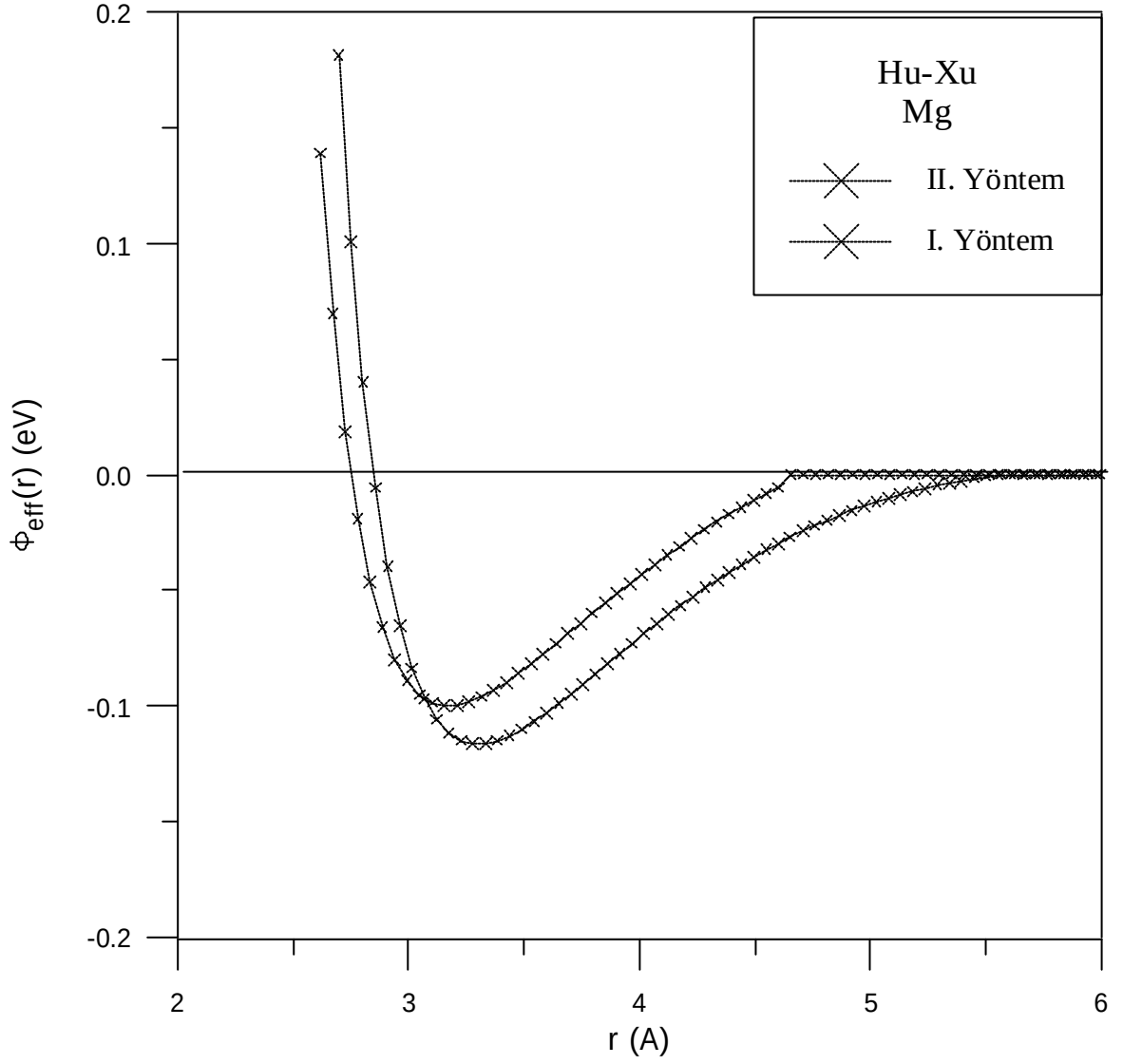
Sekil 5.11: Sc ve Y için HX-AYDGAM gömme enerjisi fonksiyonlari



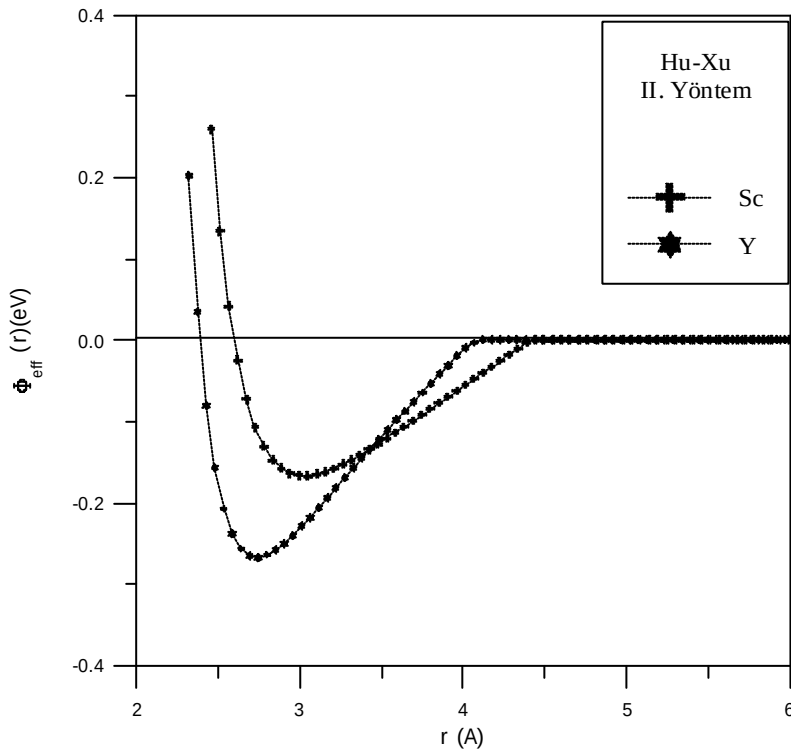
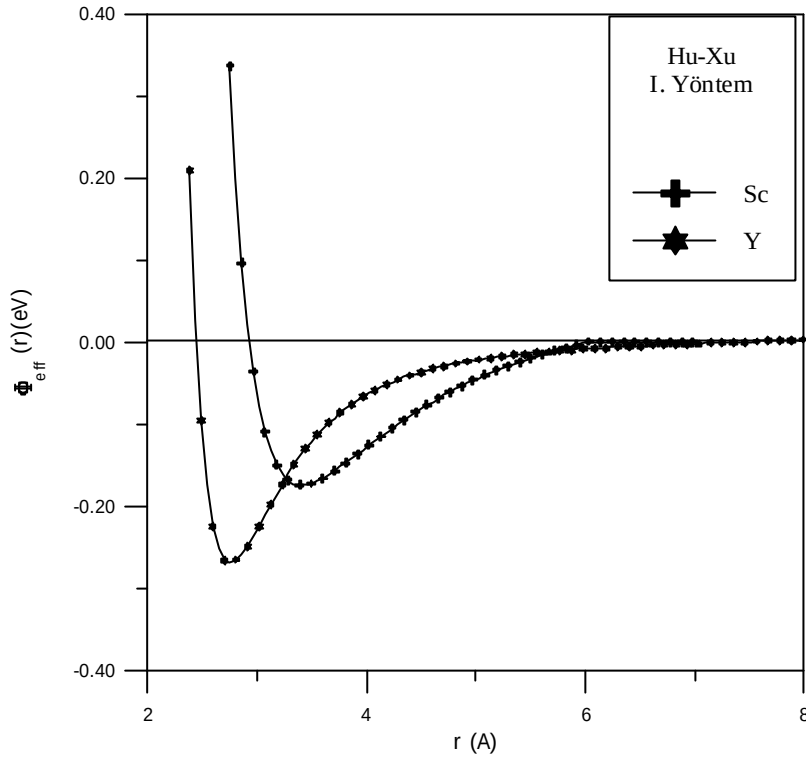
Sekil 5.12: Pr, Nd ve Gd için HX-AYDGAM gömme enerjisi fonksiyonlari



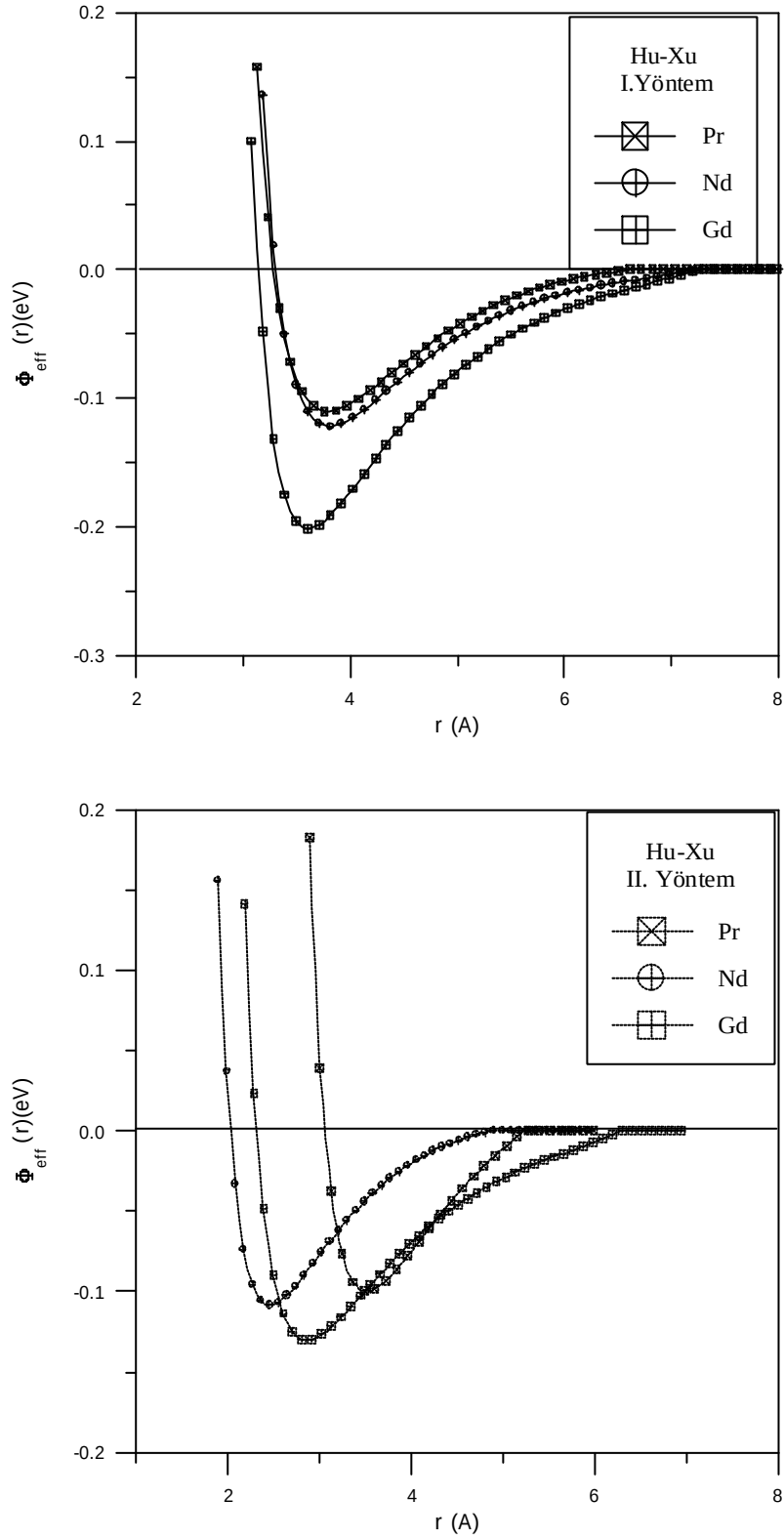
Sekil 5.13: Tb, Dy, Ho ve Er için HX-AYDGAM gömme enerjisi fonksiyonları



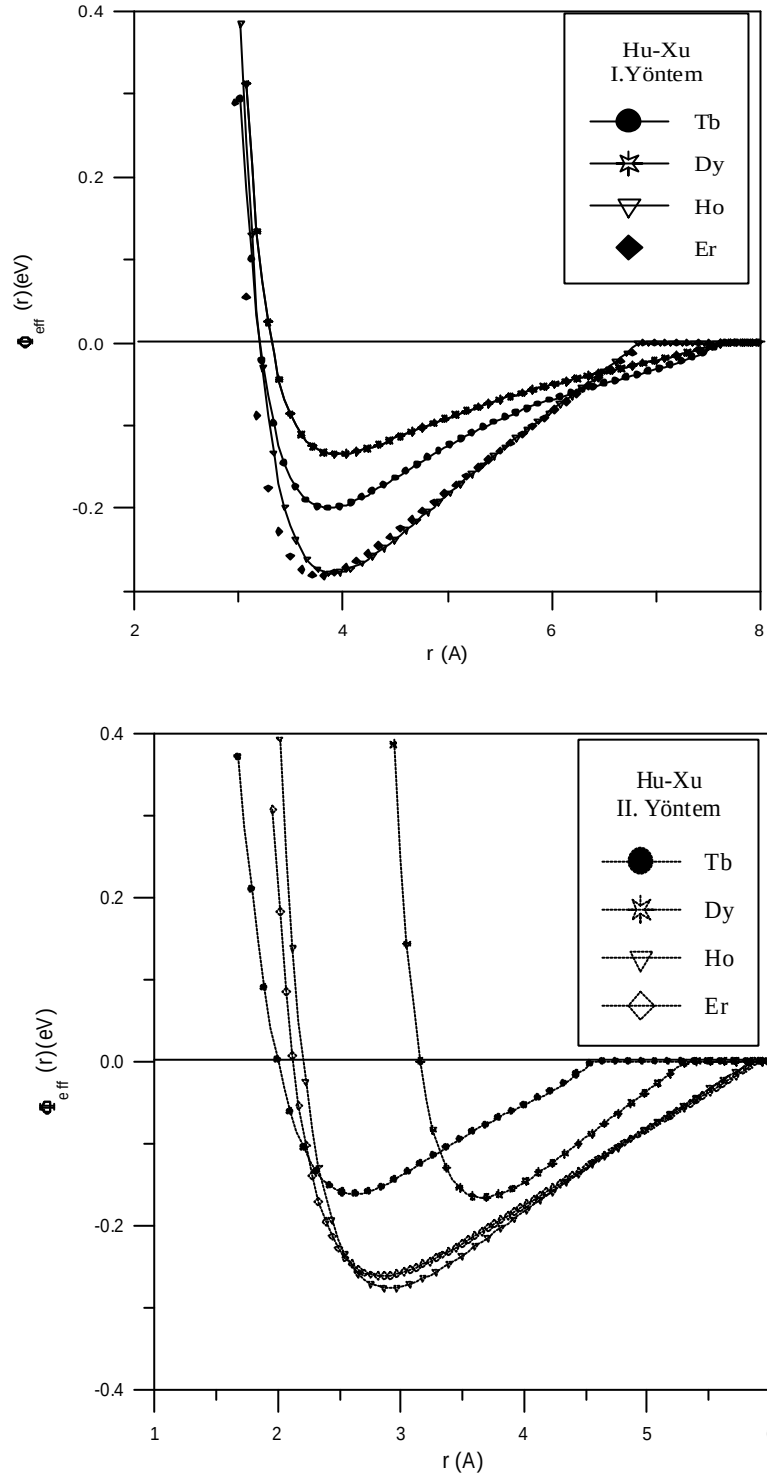
Sekil 5.14: Mg için HX-AYDGAM ve I. - II. FS-AYDGAM yöntemleri ile hesaplanan etkin çiftler etkileşme potansiyelleri



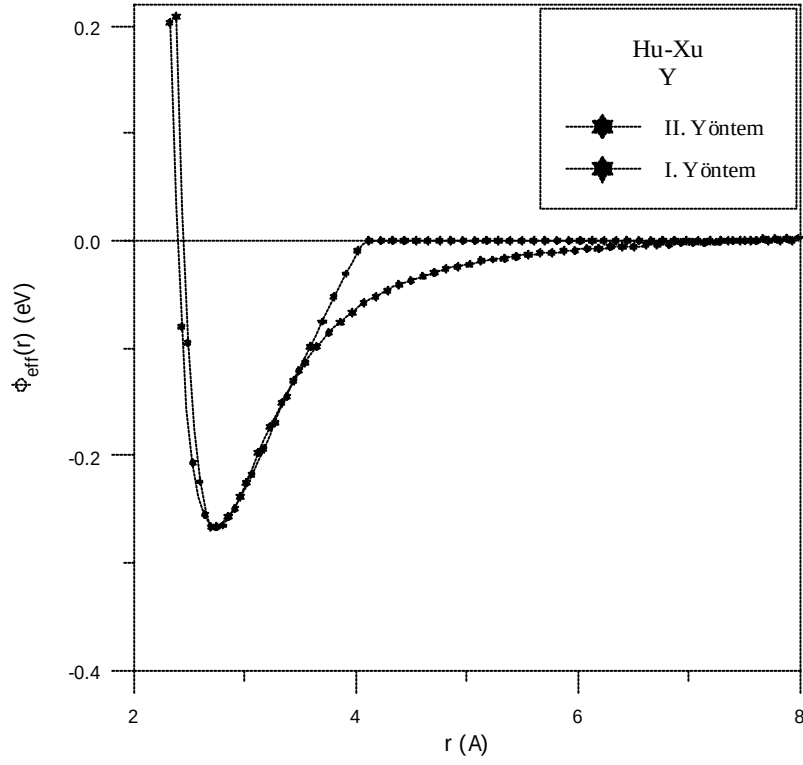
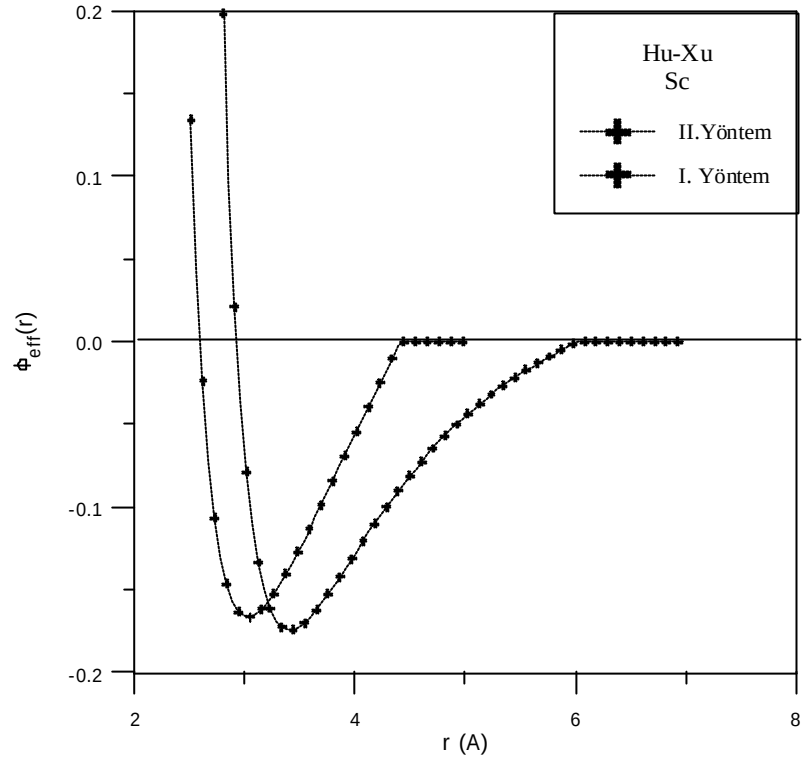
Sekil 5.15: Sc ve Y için HX-AYDGAM ve I. - II. FS-AYDGAM yöntemleri ile hesaplanan etkin çiftler etkileşme potansiyelleri



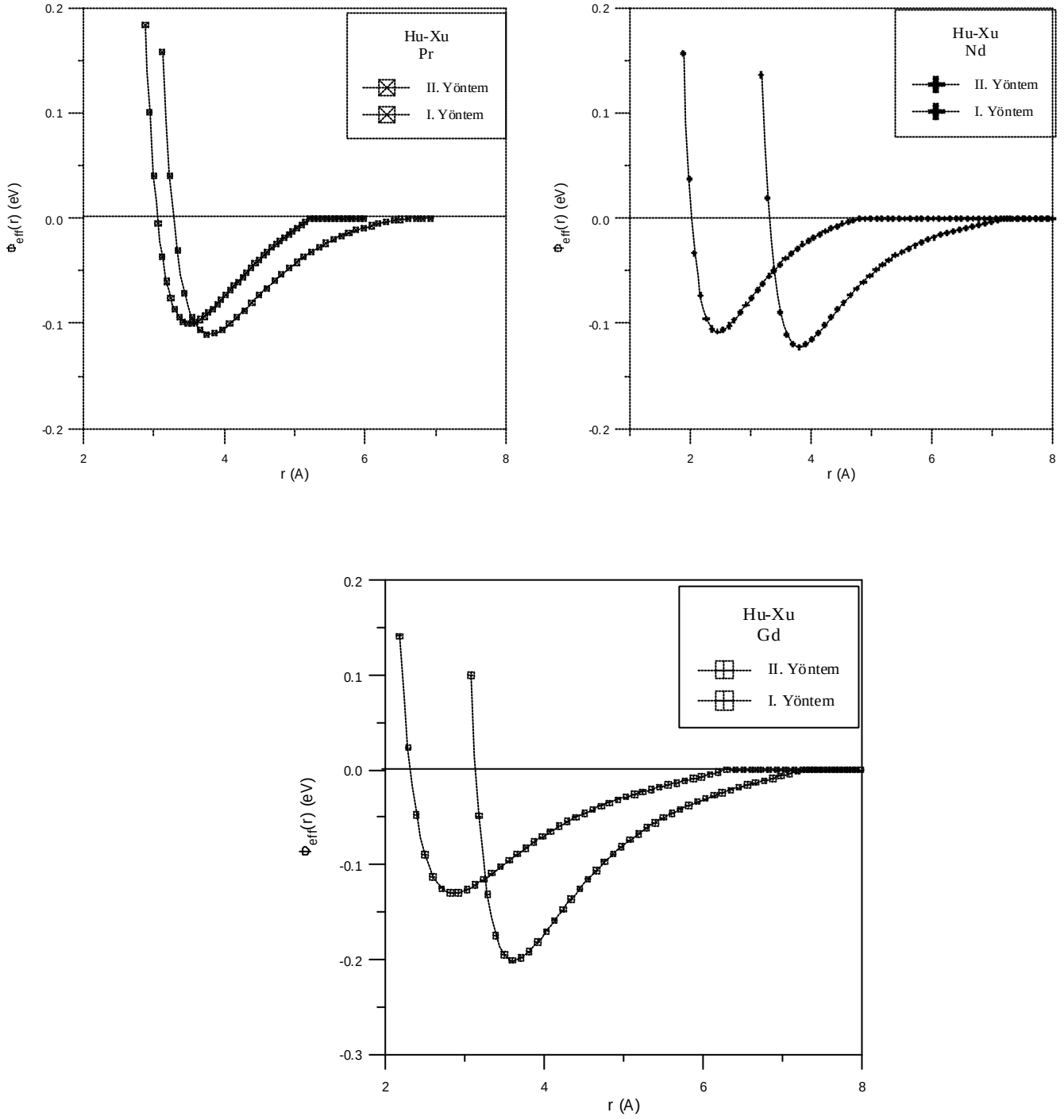
Sekil 5.16: Pr, Nd ve Gd için HX-AYDGAM ve I. - II. FS-AYDGAM yöntemleri ile hesaplanan etkin çiftler etkileşme potansiyelleri



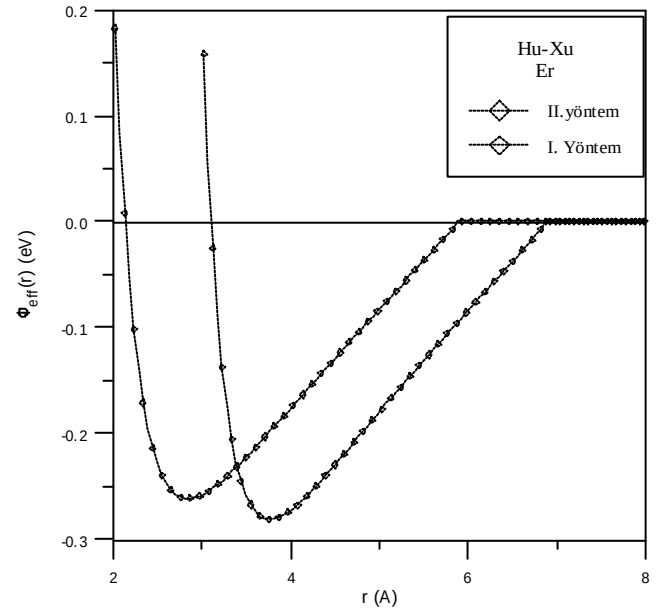
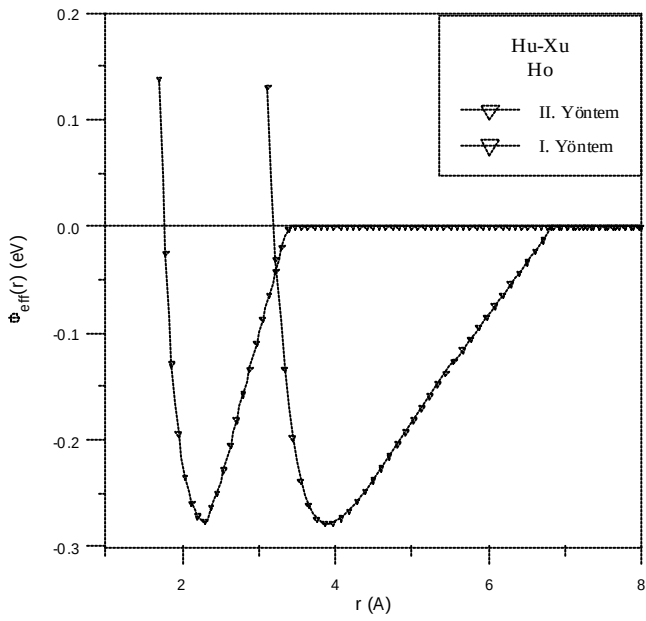
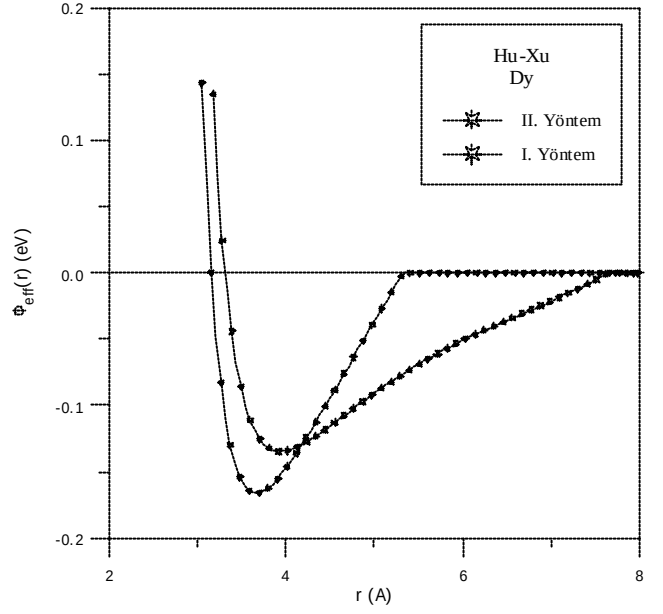
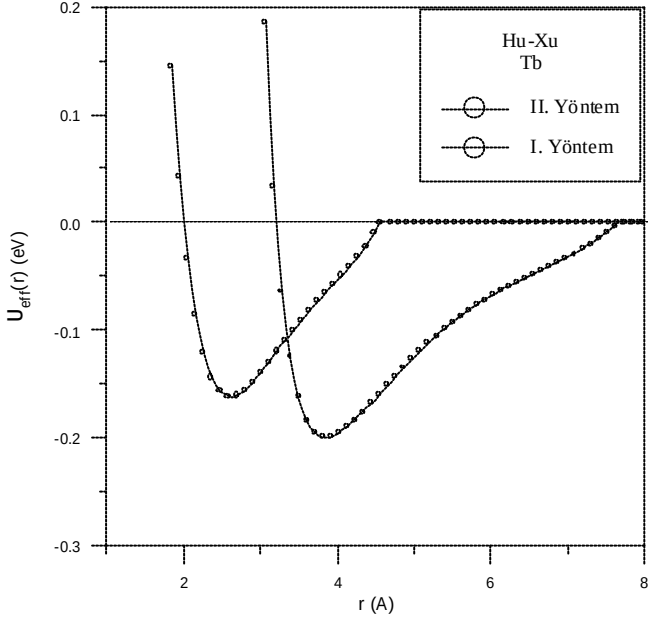
Sekil 5.17: Tb, Dy, Ho ve Er için HX-AYDGAM ve I. - II. FS-AYDGAM yöntemleri ile hesaplanan etkin çiftler etkileşme potansiyelleri



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



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



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

5.1.3 HZ-AYDGAM Etkin Çiftler Potansiyeli

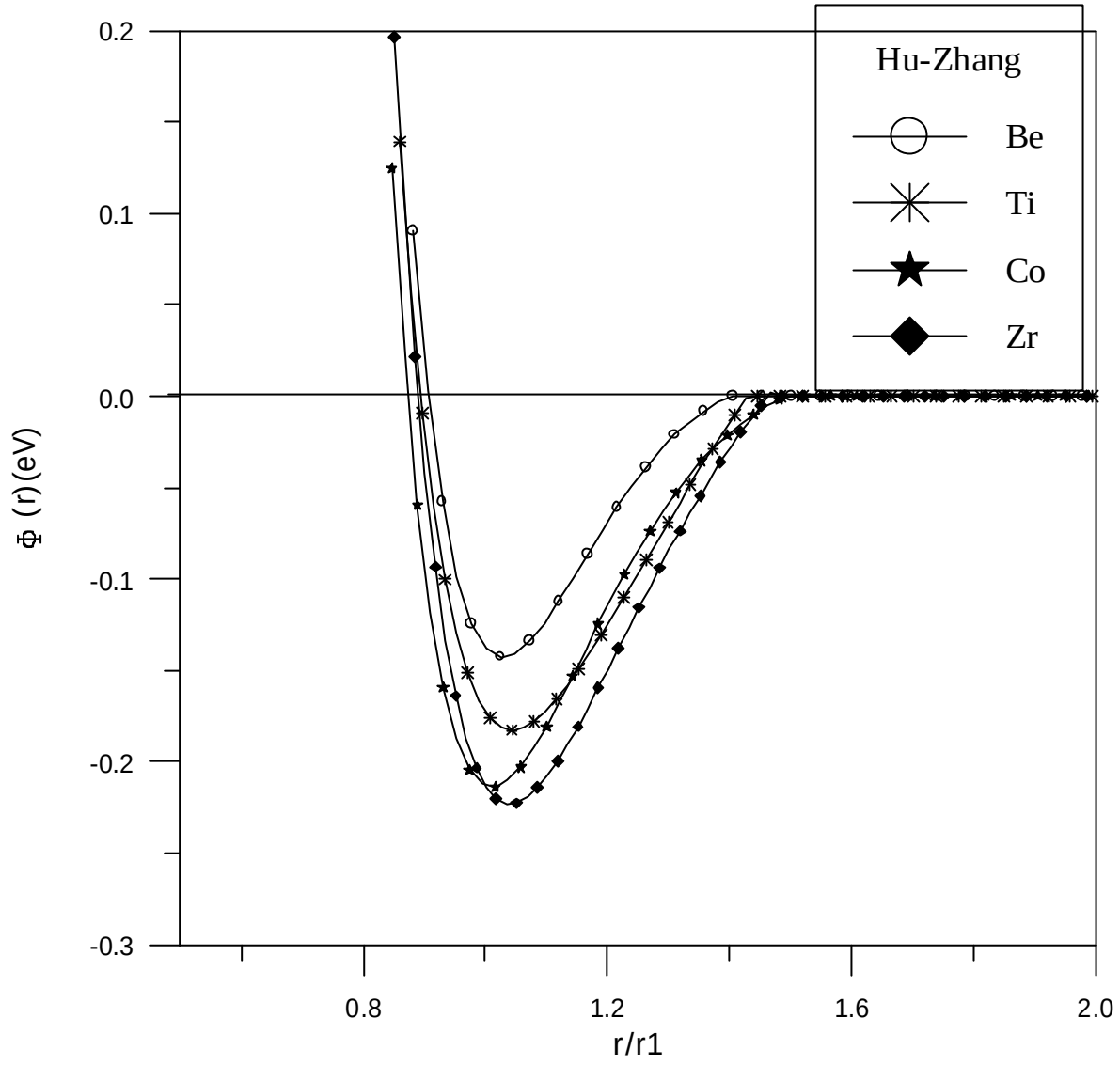
Hu, Zhang ve arkadaşlarının (Hu W., Zhang B., 2001) kati sistem için öne sürmüş oldukları Analitik Yeniden Düzenlenmiş Gömülü Atom Metodu potansiyel fonksiyonlarını hem katihal hem de sivil hal özelliklerine fit ederek elde edilen parametre seti kullanılarak bazı sivi hcp nadir toprak metallerinden Be, Co, Mg, Sc, Ti, Y ve Zr için atomlararası etkin çiftler potansiyelleri hesaplandı. Hu-Zhang AYDGAM 'nın sivi sistemler için optimize edilmiş potansiyel parametreleri Tablo 5.5' de verilmektedir. Bu tabloda verilen kesme mesafesi için kullanılan r_c değerleri potansiyeli sıfır yapan r değeri alınmıştır.

Hu-Zhang AYDGAM'dan elde edilen sivi çiftler etkileşim fonksiyonları, Be, Co, Ti ve Zr Şekil 5.20'de, Mg, Sc ve Y Şekil 5.21'de gösterilmiştir. Şekillerden de görüldüğü gibi potansiyellerin periyodik cetvel ile uyumlu oldukları yani atom numarasının büyük olanın daha derin potansiyeli olduğu ayrıca bu yöntemde Mg'un kısa menzilde etkileşimler yaptığı görülmektedir. Şekil 5.22 ve Şekil 5.23'te verilen gömme enerji fonksiyonlarından da aynı sonuca ulaşabiliriz.

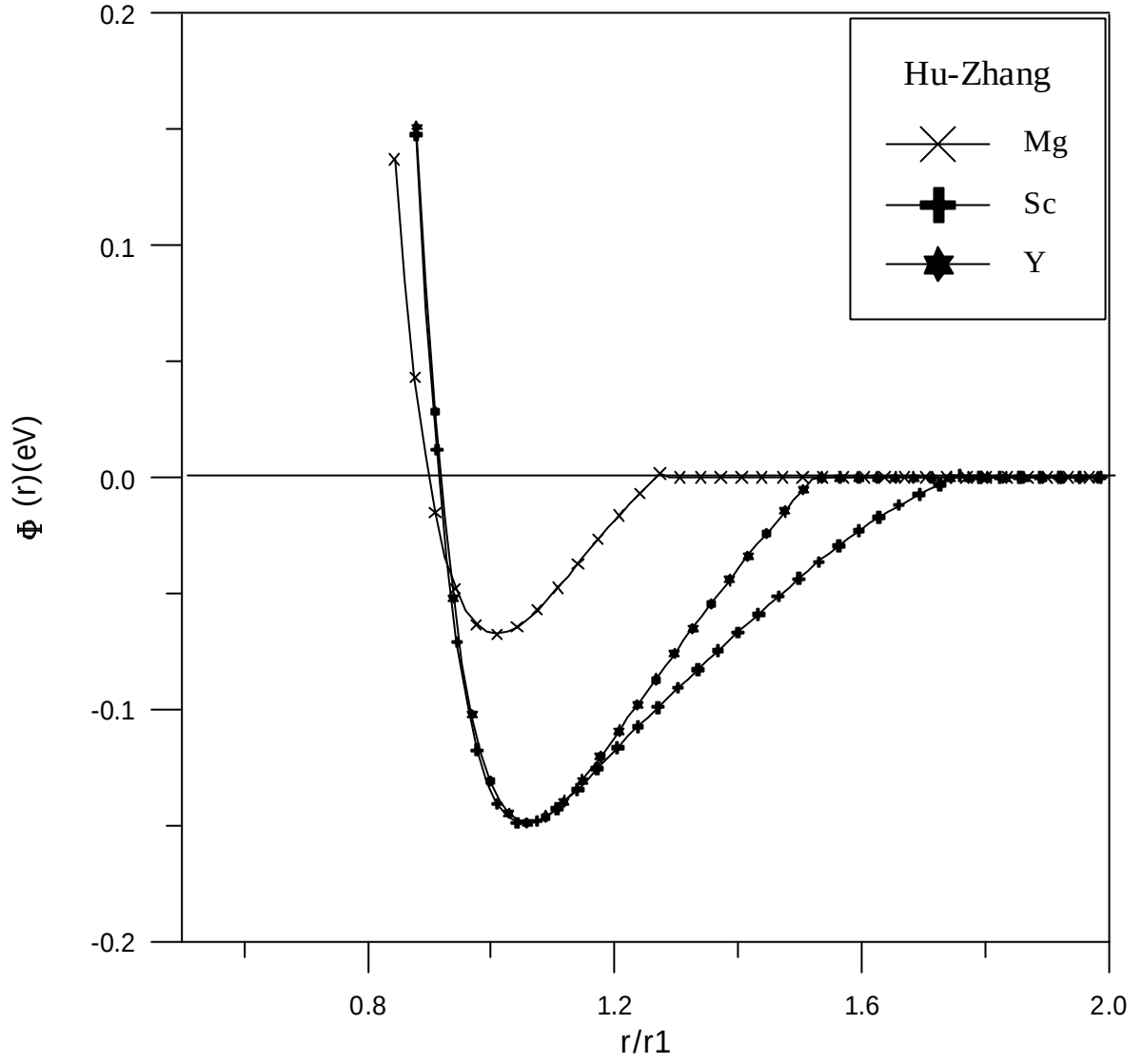
Hu-Zhang AYDGAM potansiyel fonksiyonları ile Finnis ve Sinclair (Finnis ve Sinclair 1984)' in GAM etkin çiftler potansiyel yaklaşımını kullanarak sivi Be, Co, Mg, Sc, Ti, Y ve Zr için I. yöntemden hesapladığımız etkin çiftler etkileşme potansiyelleri, Be ve Mg için Şekil 5.24, Sc ve Y için Şekil 5.24, Co, Ti ve Zr için 5.25'te verilmektedir. Potansiyellerin periyodik tablo ile uyumlu oldukları görülmektedir. Ayrıca Hu-Zhang AYDGAM'nun II. yöntemle etkin çiftler etkileşim fonksiyonları elde edilmediğini belirtelim. Hu-Xu yönteminde olduğu gibi bu yöntemde de etkin çiftler potansiyellerini elde etmek için toplam enerjiye $M(P)$ gibi düzeltme terimi eklendi. Finnis ve Sinclair' in etkin çiftler potansiyel yaklaşımında gömme enerjisinin ikinci ve daha yüksek mertebeli türevleri ihmal edilmiştir.

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

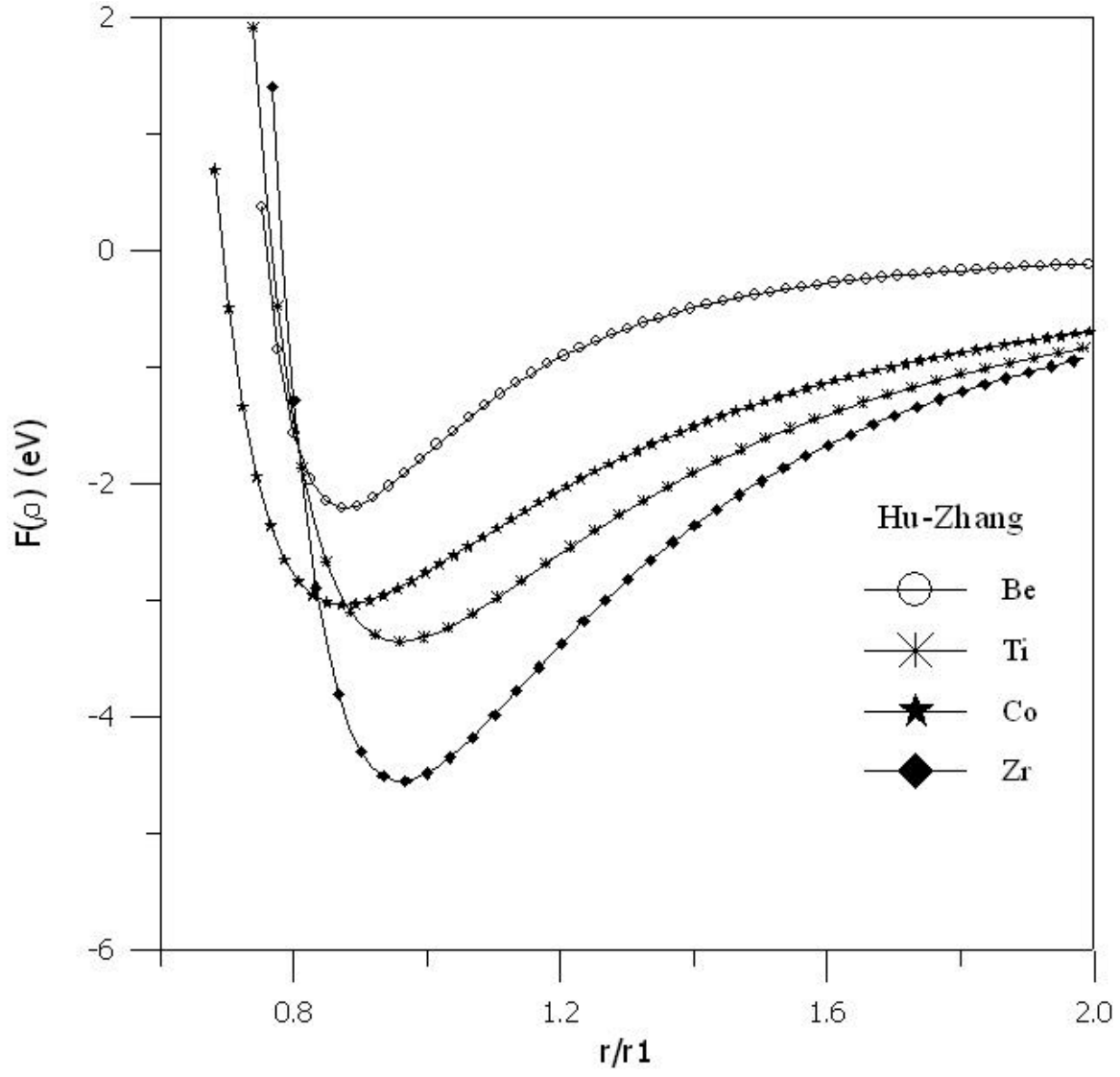
	Be	Mg	Sc	Ti	Co	Y	Zr
n	0.96	0.79	0.83	0.55	0.54	0.83	0.67
F_0 (eV)	3.425	1.56	3.67	4.87	4.64	4.93	5.82
a (eV)	-0.4768	-0.0381	-0.1476	0.03008	0.01424	-0.1497	0.00603
β (eV)	1.00491	3.76605	1.76227	-0.9451	-1.2180	1.93967	-1.0285
k_{-1} (eV)	154.413	103.567	278.064	169.886	123.188	227.687	159.687
k_0 (eV)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



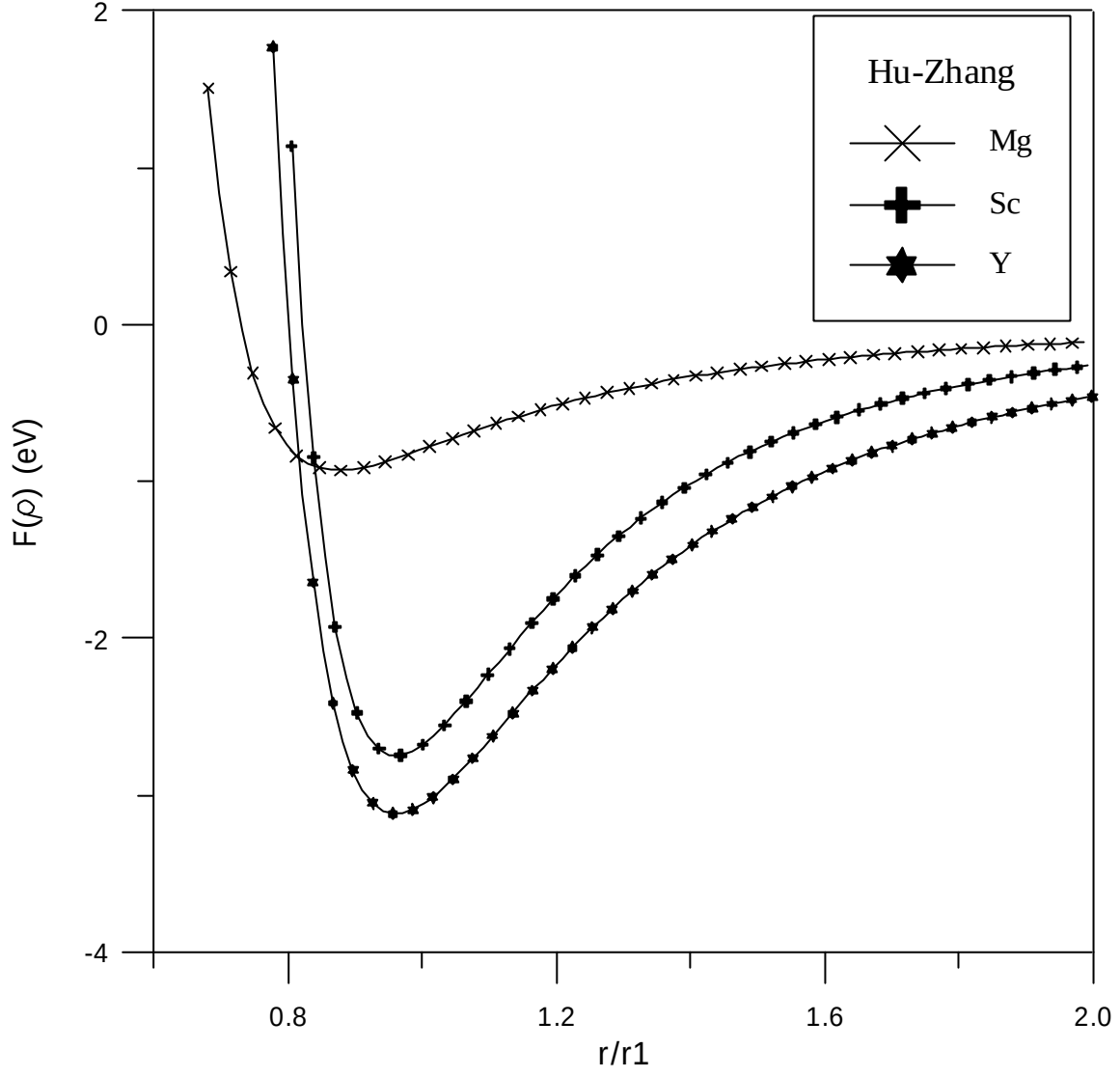
Sekil 5.21 :Be, Ti, Zr ve Co için HZ-AYDGAM çiftler etkilesme potansiyelleri



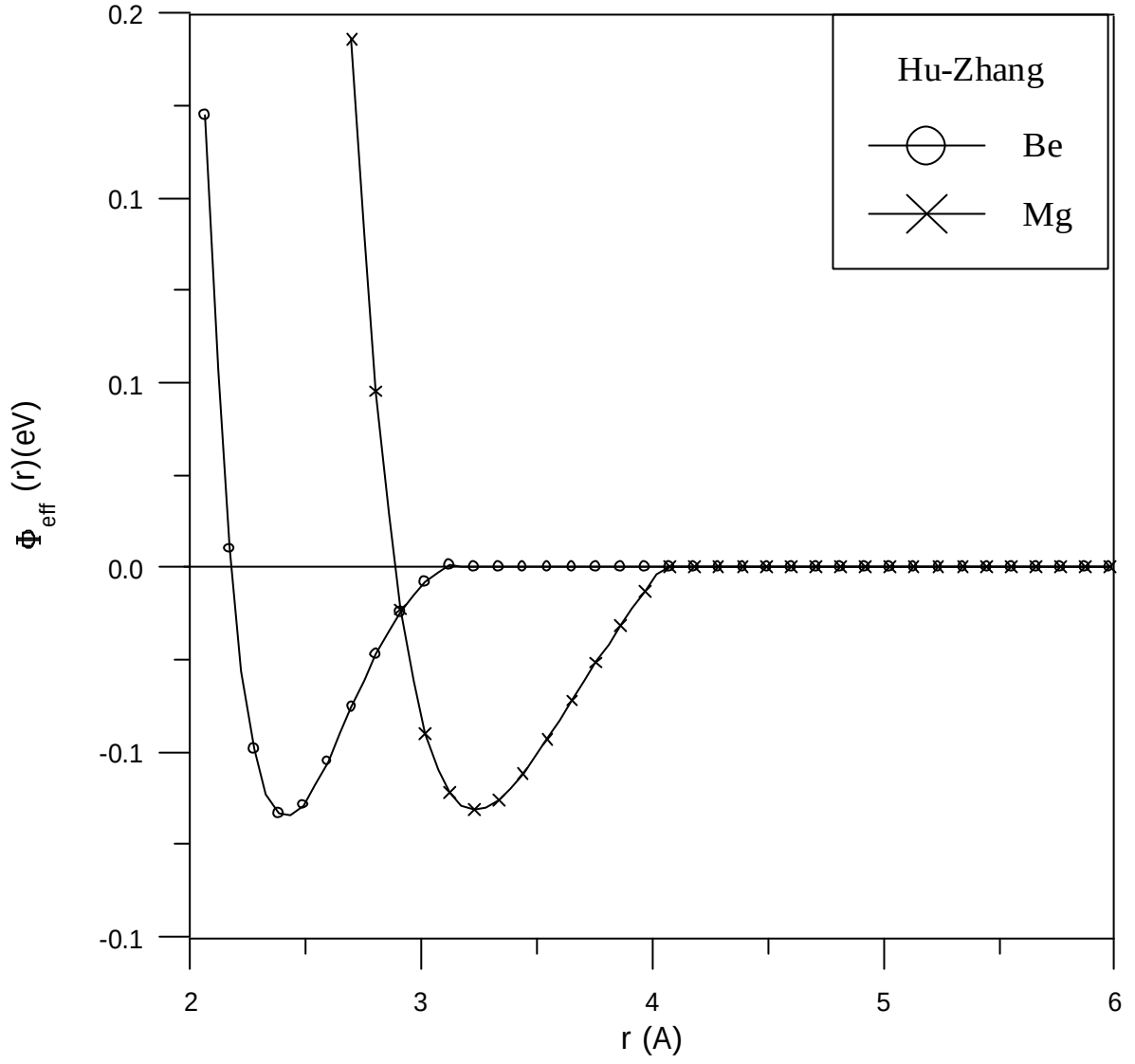
Sekil 5.22 : Mg, Sc ve Y için HZ-AYDGAM çiftler etkilesme potansiyelleri



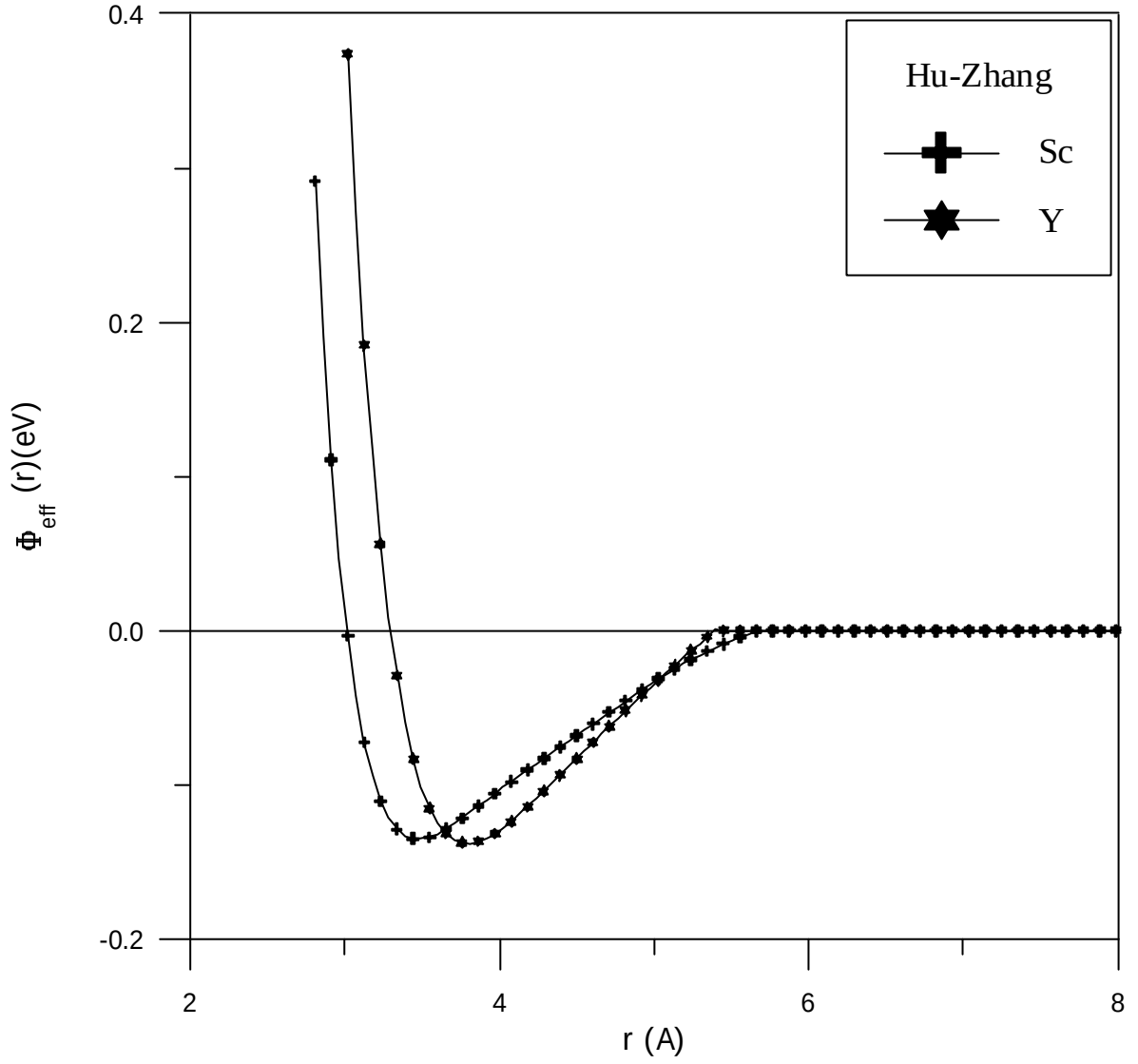
Sekil 5.23 : Be, Ti, Zr ve Co için HZ-AYDGAM gömme enerjisi fonksiyonlari



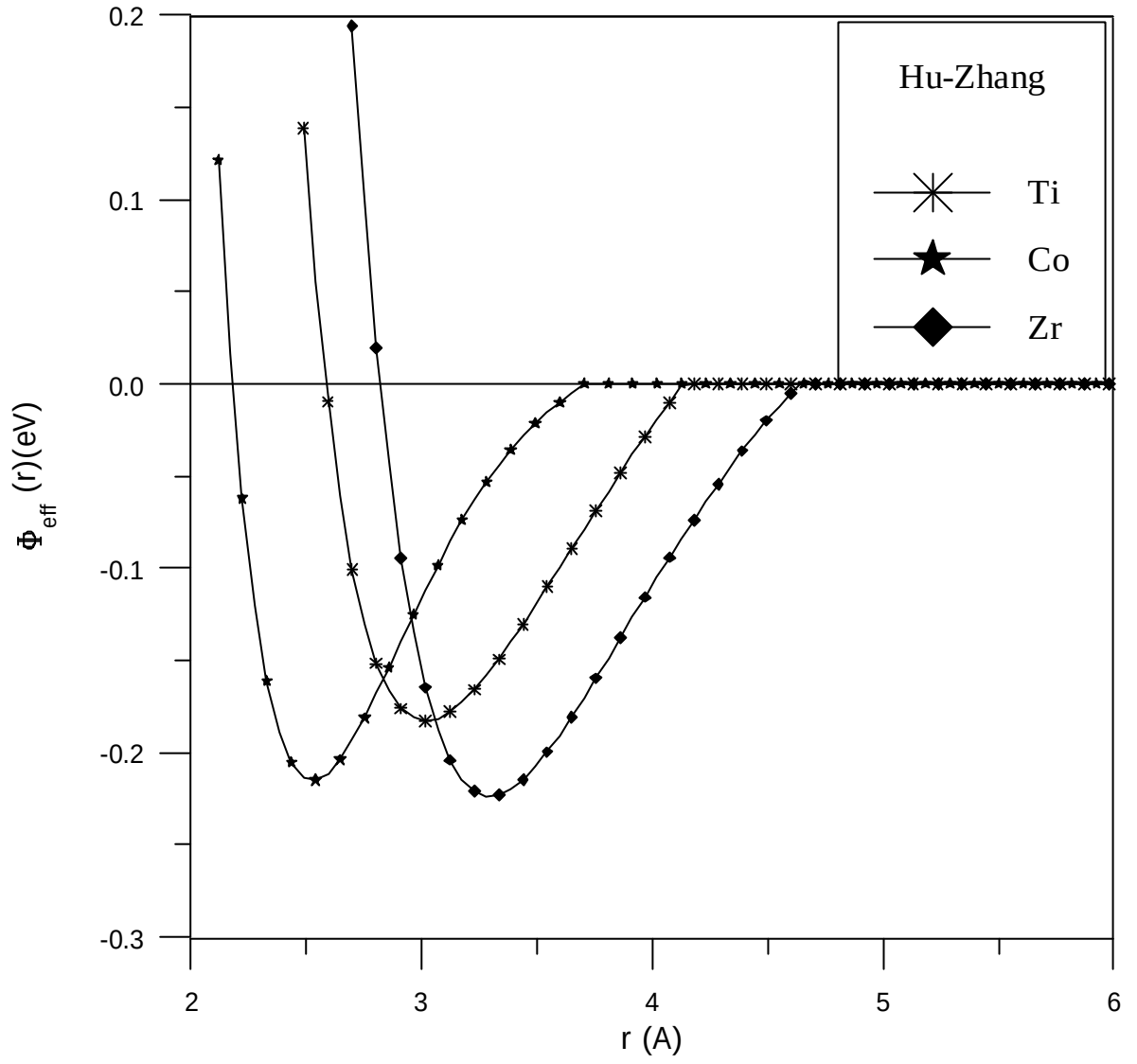
Sekil 5.24 : Mg, Sc ve Y için HZ-AYDGAM gömme enerjisi fonksiyonlari



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



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



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

5.1.4 HD-AYDGAM Etkin Çiftler Potansiyeli

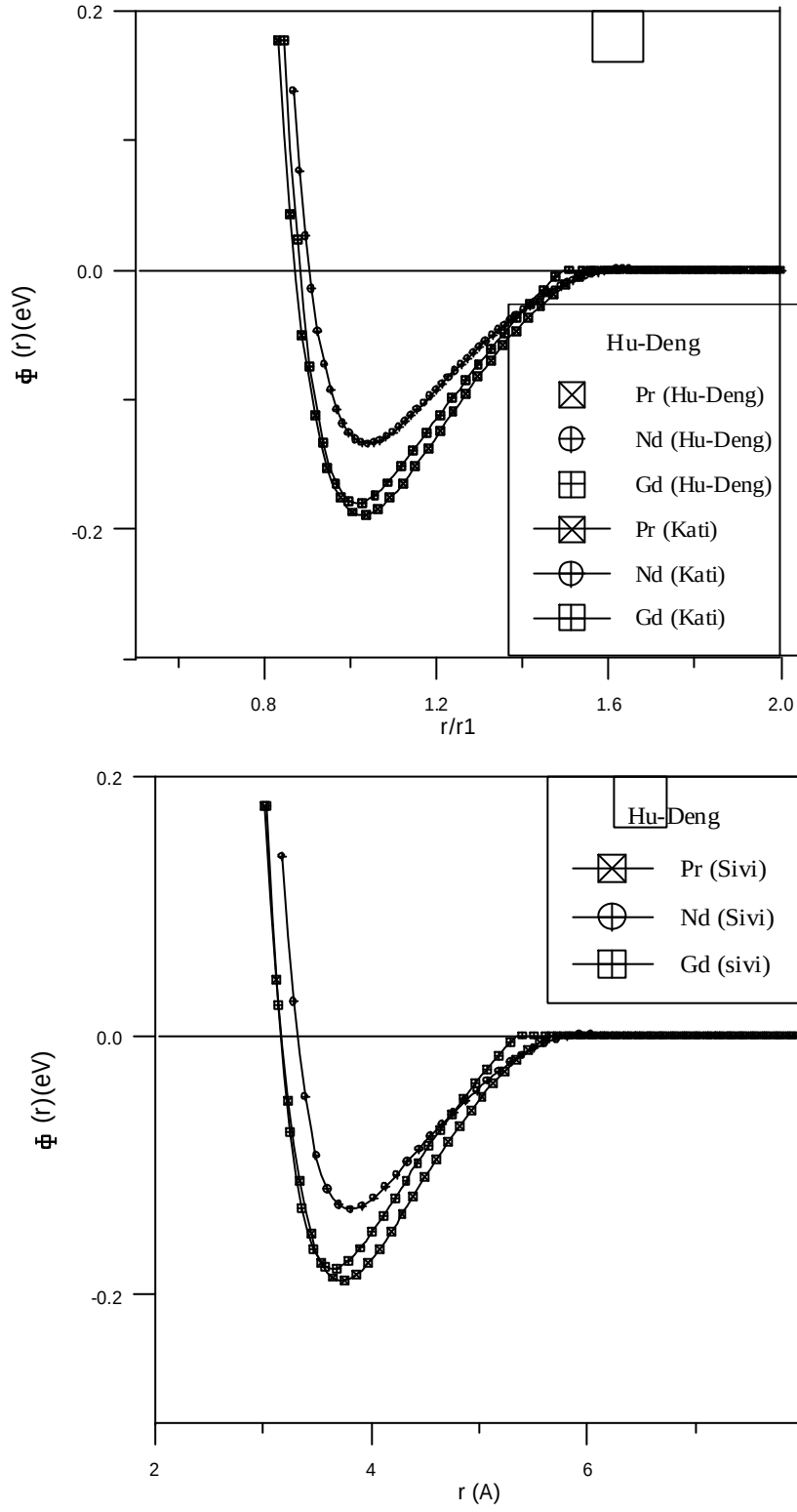
Hu, Deng ve arkadaşlarının (Hu W., Deng H., 2003) kati sistem için öne sürmüş oldukları Analitik Yeniden Düzenlenmiş Gömülü Atom Metodu potansiyel fonksiyonlarını hem katihal hem de sivihal özelliklerine fit ederek elde edilen parametre seti kullanılarak bazı sıvı hcp nadir toprak metallere Tb , Dy , Ho , Gd , Nd , Pr ve Er için atomlararası etkin çiftler potansiyelleri hesaplandı. Hu-Deng AYDGAM 'nın sıvı sistemler için optimize edilmiş potansiyel parametreleri Tablo 5.6' da verilmektedir. Bu tabloda verilen kesme mesafesi için kullanılan r_c değerleri potansiyeli sıfır yapan r değeri alınmıştır.

Hu-Deng AYDGAM'dan elde edilen sıvı çiftler etkileşim fonksiyonları, Pr , Nd ve Gd için Şekil 5.27, Tb , Dy , Ho ve Er için ise Şekil 5.28'de gösterilmiştir. Gömme enerji fonksiyonları yine aynı sırayla Şekil 5.29 ve 5.30'da verilmektedir.

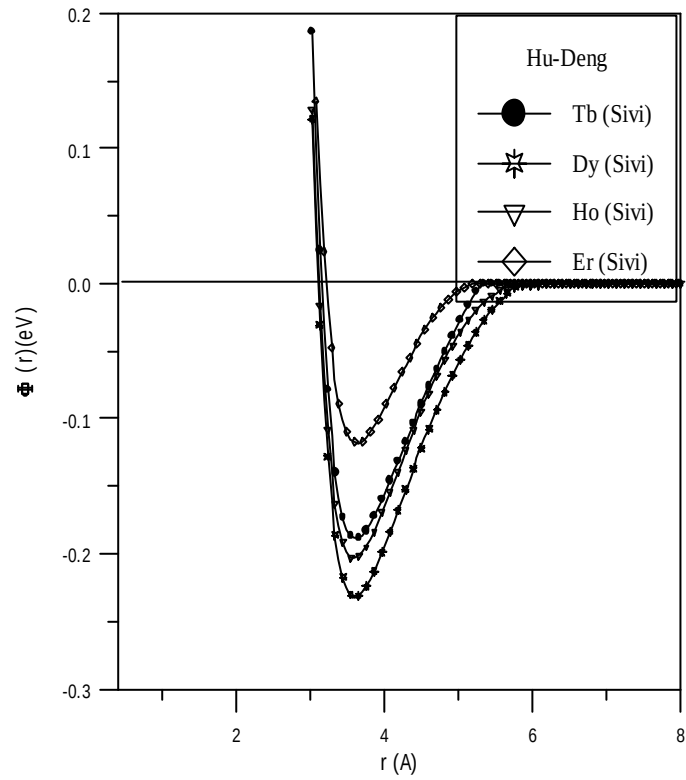
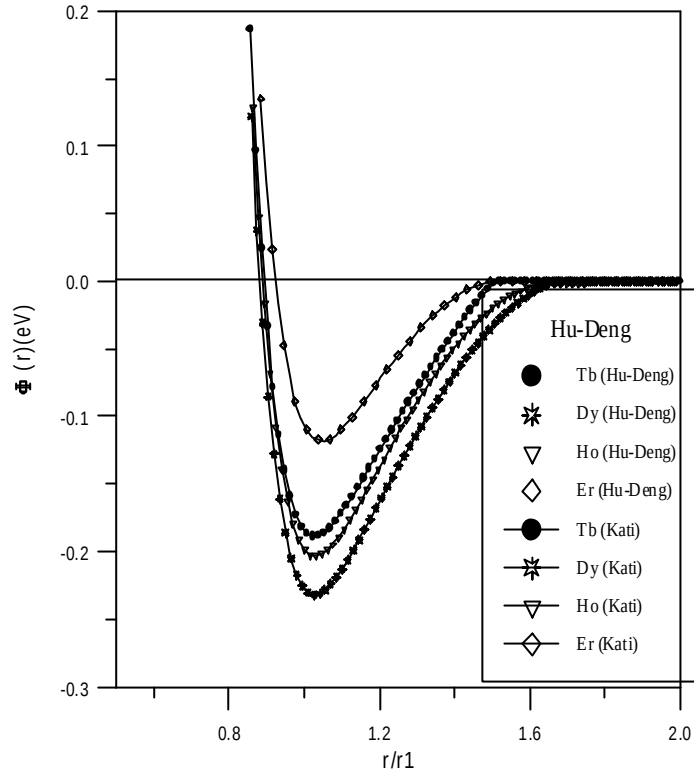
Hu-Deng AYDGAM potansiyel fonksiyonları ile Finnis ve Sinclair (Finnis ve Sinclair 1984)' in GAM etkin çiftler potansiyel yaklaşımını kullanarak sıvı Tb , Dy , Ho , Gd , Nd , Pr ve Er için bölüm 3'de anlatıldığı gibi her iki yöntem ile hesapladığımız etkin çiftler etkileşme potansiyelleri I. yöntem için Şekil 5.31- Şekil 5.32, II. yöntem için Şekil 5.33-Şekil 5.34'de verilmektedir. Hu-Deng AYDGAM'da etkin çiftler potansiyellerini elde etmek için toplam enerjiye $M(P)$ ve $N(Q)$ gibi iki düzeltme terimi eklendi. Şekil 5.31 ile Şekil 5.33 karşılaştırıldığında I. yöntemden hesaplanan fonksiyonun daha derin ve daha uzun r değerine gittiği görülmektedir Nd hariç. Şekil 5.32 ve Şekil 5.34 karşılaştırıldığında ise I. yöntemden hesaplanan potansiyelin biraz daha derin yumuşak ve minimum konumunun daha büyük r değerlerinde olduğu görülür.

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

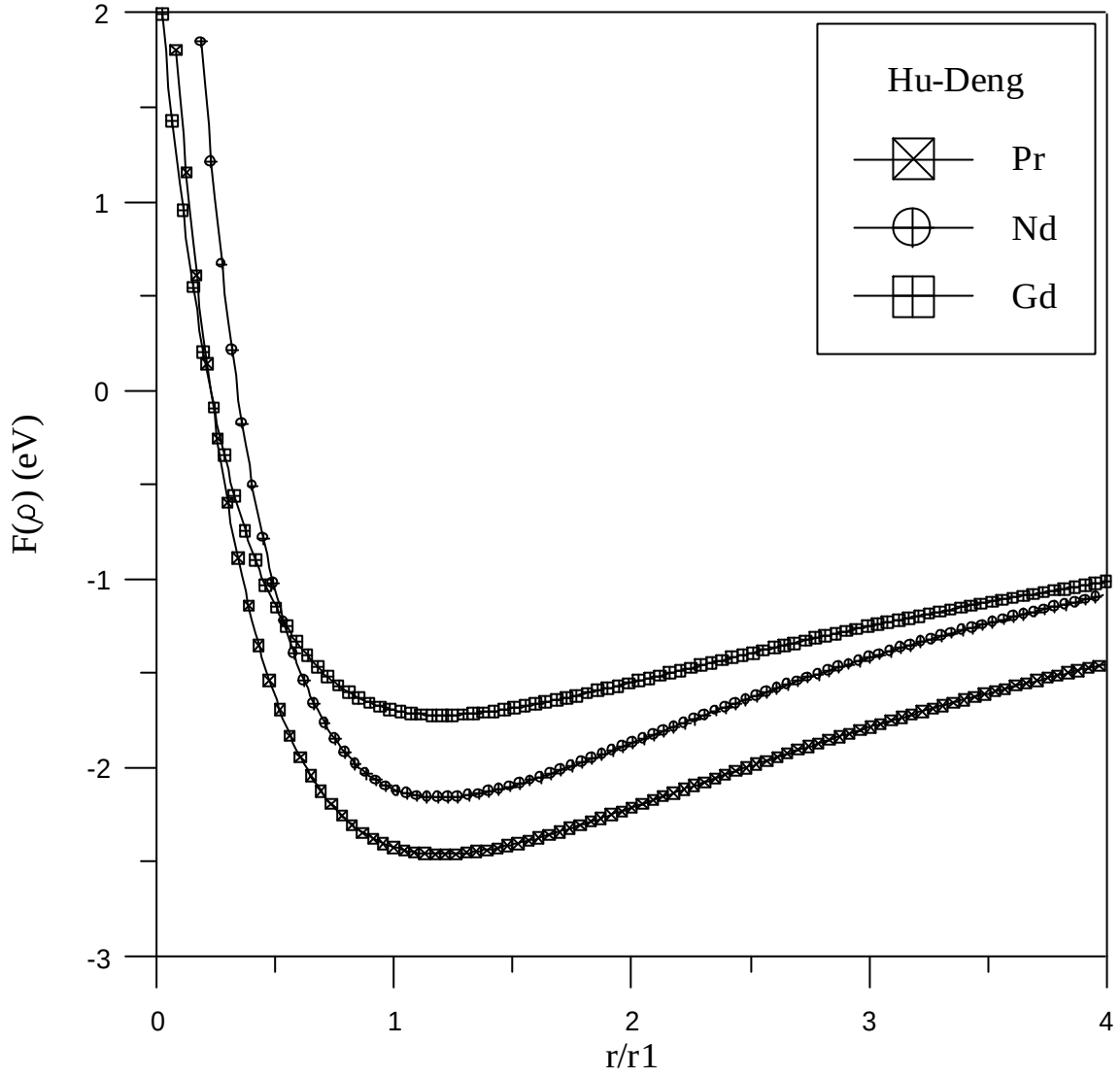
	Pr	Nd	Gd	Tb	Dy	Ho	Er
n	0.43	0.41	0.45	0.49	0.3	0.3	0.46
$F_0(\text{eV})$	5.16	4.76	5.64	4.17	2.87	5.65	6.1
$a \times 10^6 (\text{eV})$	128.99	126.683	14.6398	5.0892	8.37331	11.1886	22.1373
$\beta \times 10^6 (\text{eV})$	-58.676	-57.984	-9.752	-5.541	-6.7179	-8.5469	-13.430
f_e	1	1	1	1	1	1	1
$k_6 (\text{eV})$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



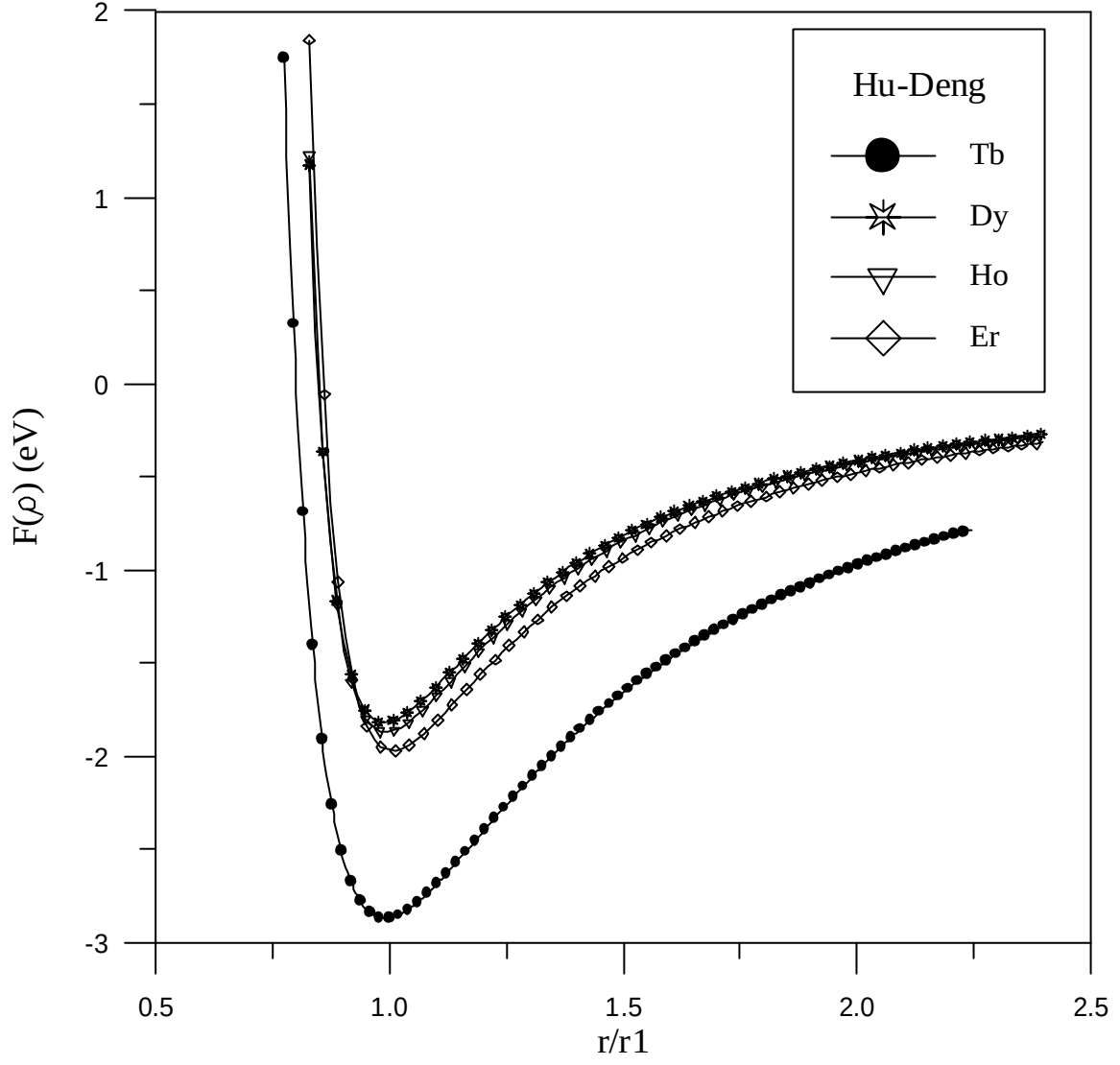
Sekil 5.28: Pr, Nd ve Gd için HD-AYDGAM kullanılarak
 (a) Kati parametreleri ile elde edilen çiftler etkilesme potansiyellerinin diğer çalışmalar ile karşılaştırılması
 (b) Sivi çiftler etkilesme potansiyelleri



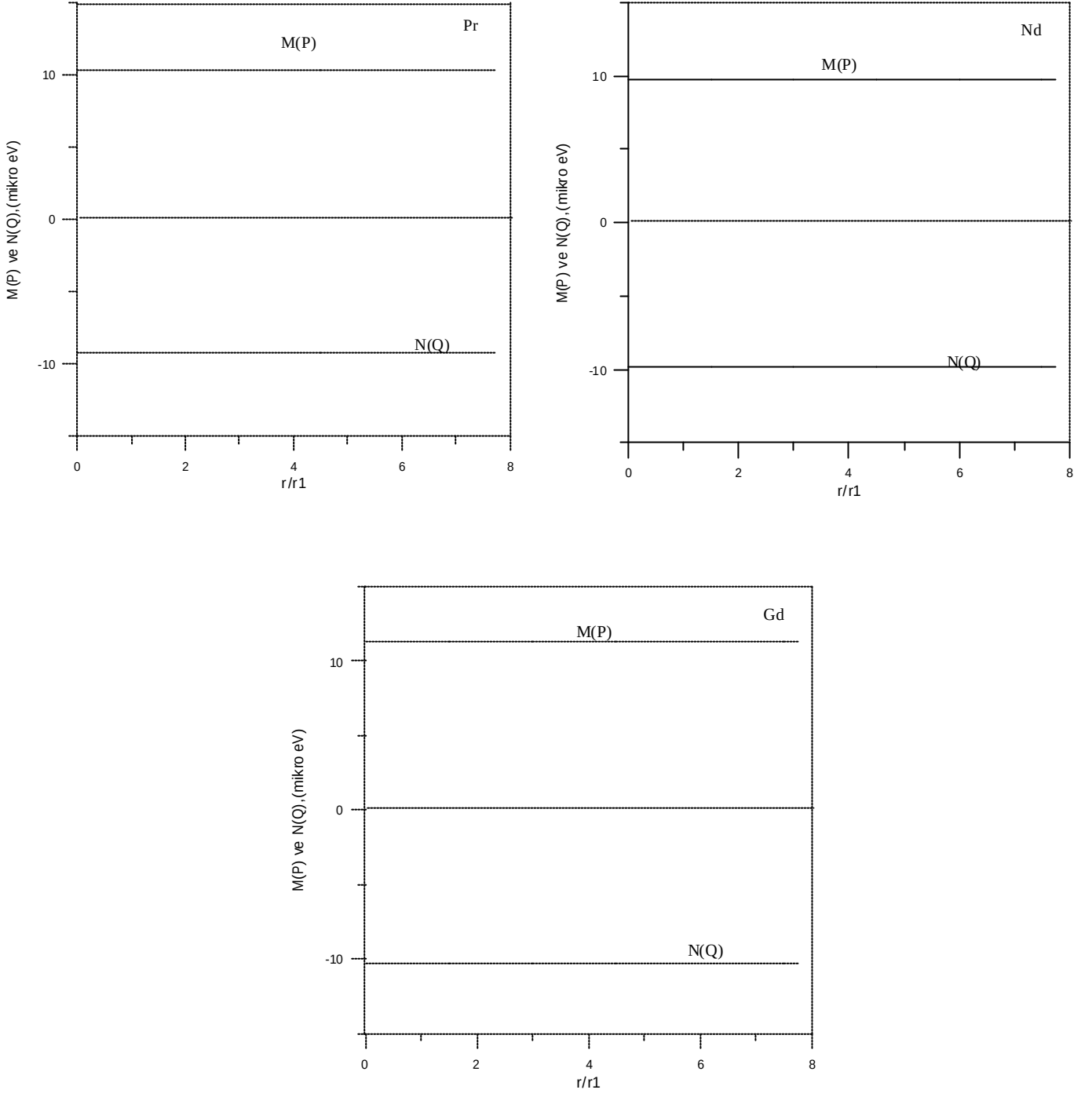
Sekil 5.29: Tb, Dy, Ho ve Er için HD-AYDGAM kullanılarak
 (b) Kati parametreleri ile elde edilen çiftler etkileşme potansiyellerin
 diğer çalışmalar ile karşılaştırılması
 (b) Sivi çiftler etkileşme potansiyelleri



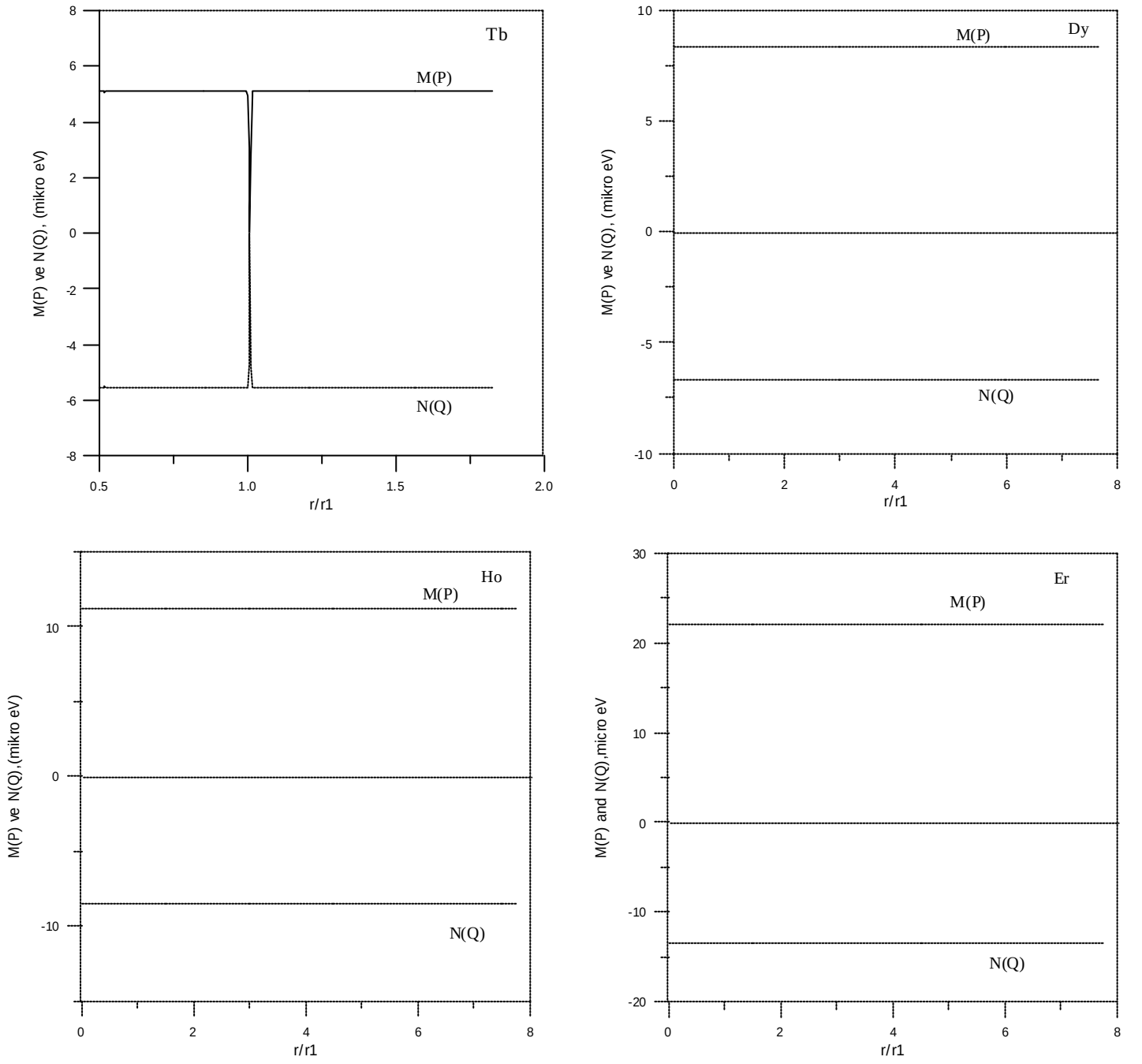
Sekil 5.30: Pr, Nd ve Gd için HD-AYDGAM gömme enerjisi fonksiyonlari



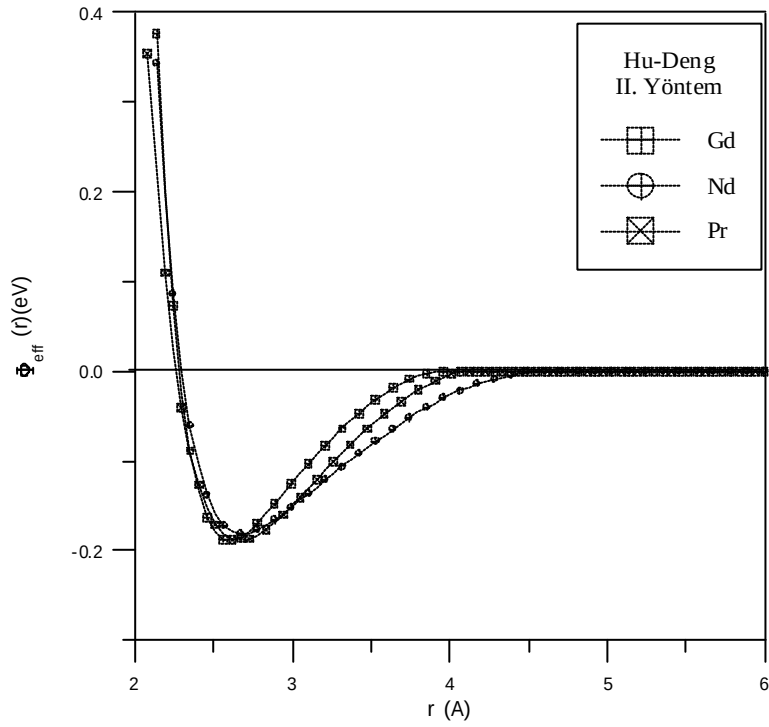
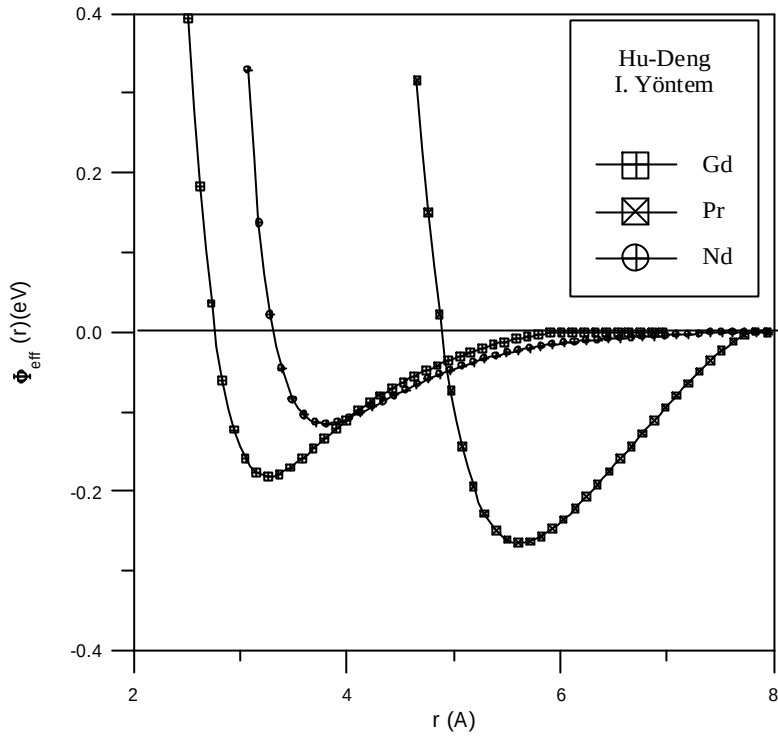
Sekil 5.31: Tb, Dy, Ho ve Er için HD-AYDGAM gömme enerjisi fonksiyonları



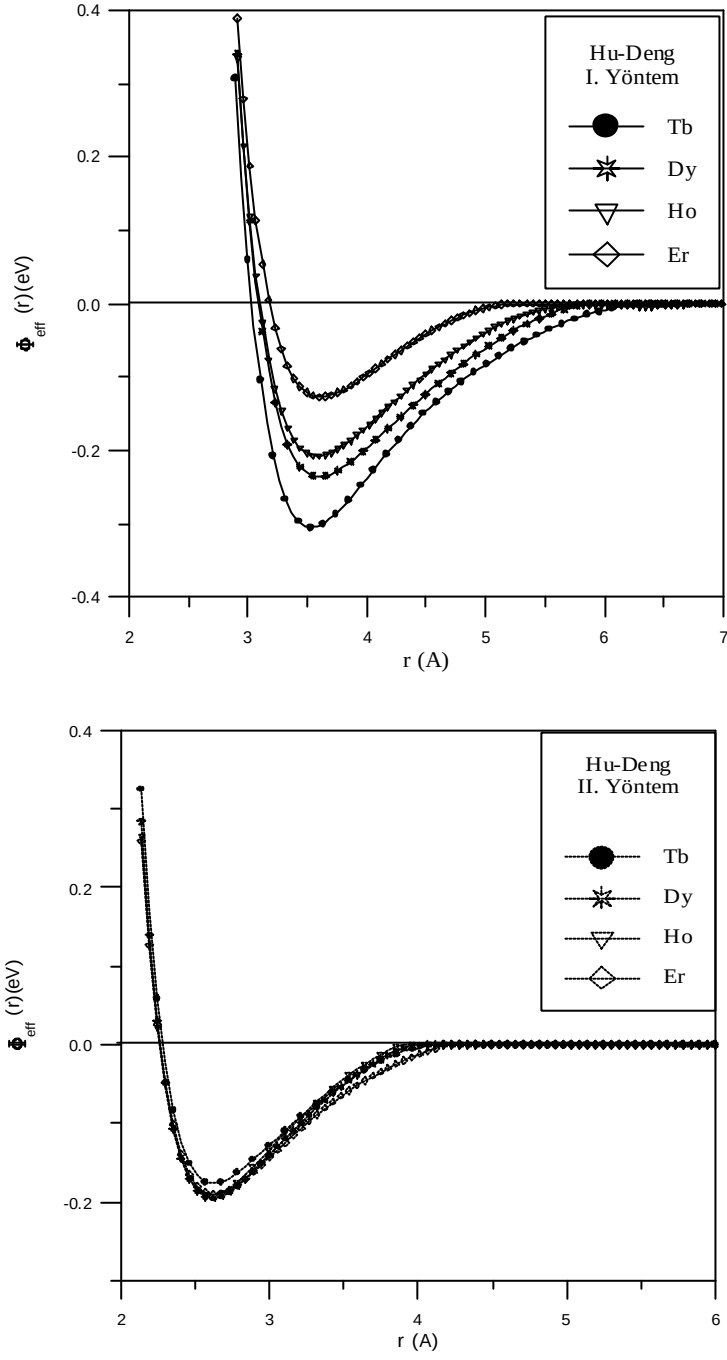
Sekil 5.32: Pr, Nd ve Gd için HD-AYDGAM ile elde edilen $M(P)$ ve $N(Q)$ terimleri



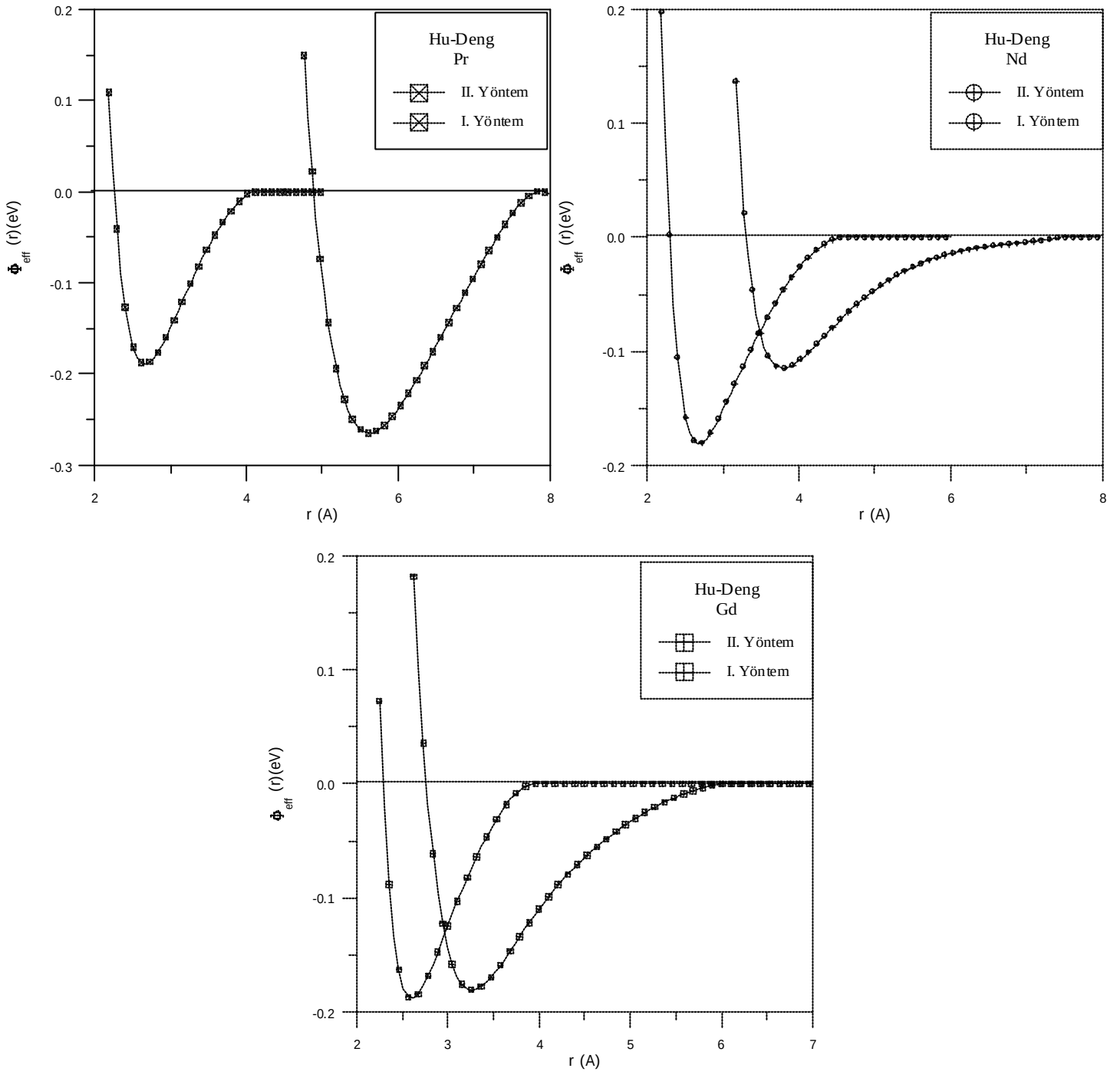
Sekil 5.33: Tb, Dy, Ho ve Er için HD-AYDGAM ile elde edilen $M(P)$ ve $N(Q)$ terimleri



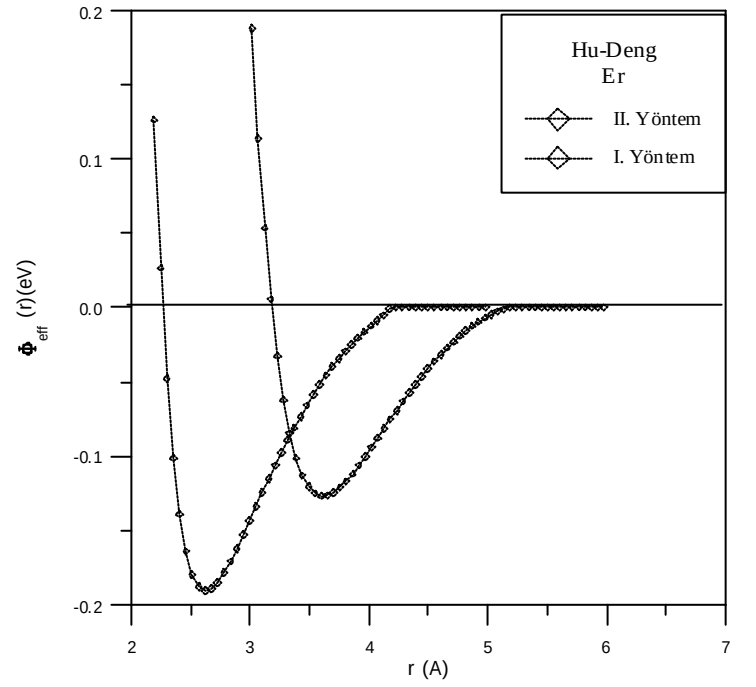
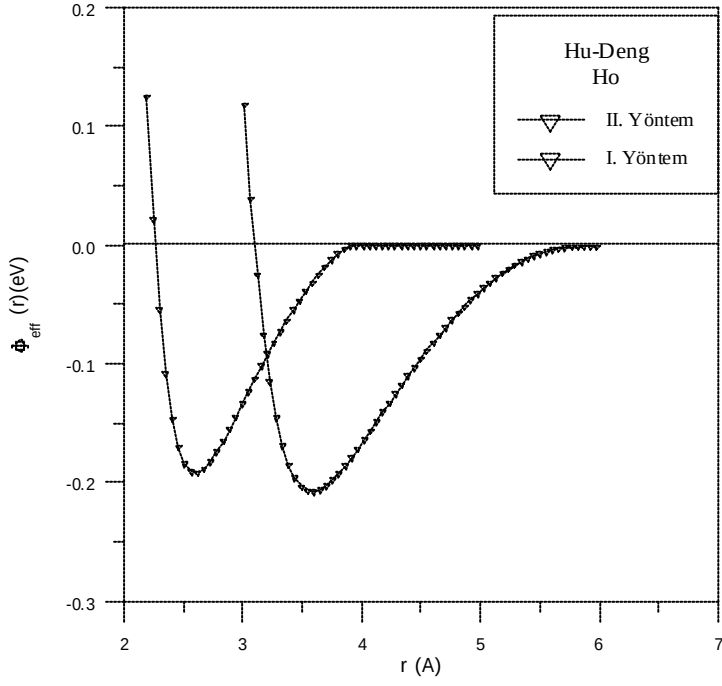
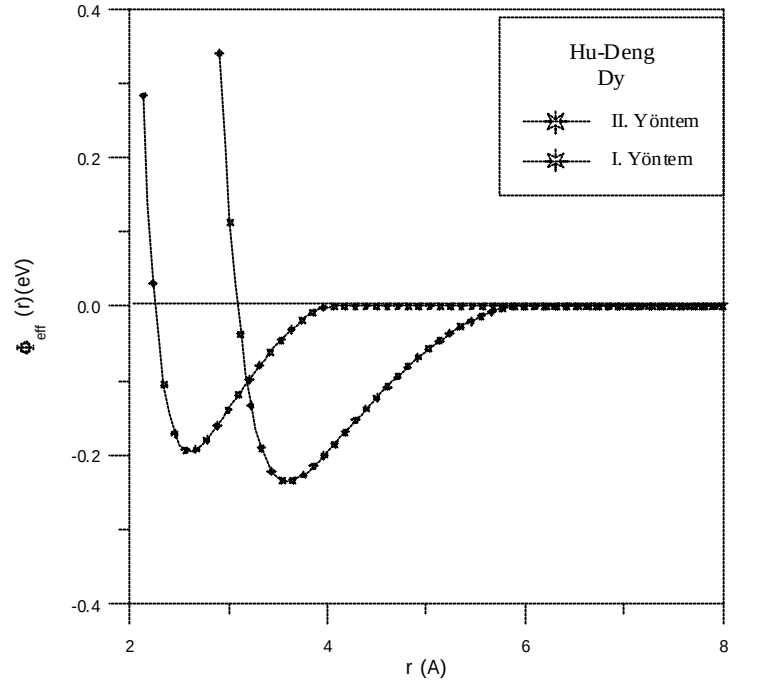
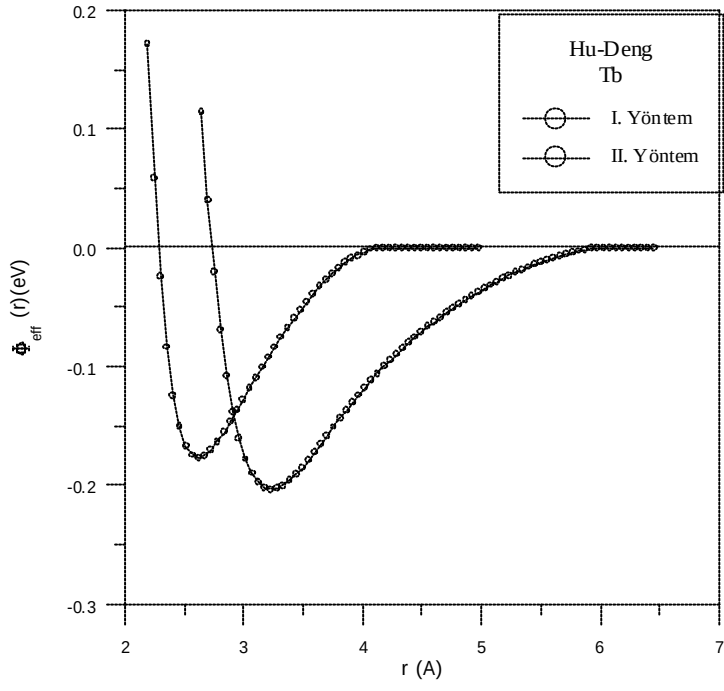
Sekil 5.34: Pr, Nd ve Gd için HD-AYDGAM ve I. - II. FS-AYDGAM yöntemleri ile elde edilen etkin çiftler etkileşme potansiyelleri



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



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



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

5.1.5 CX-GAM Etkin Çiftler Potansiyeli

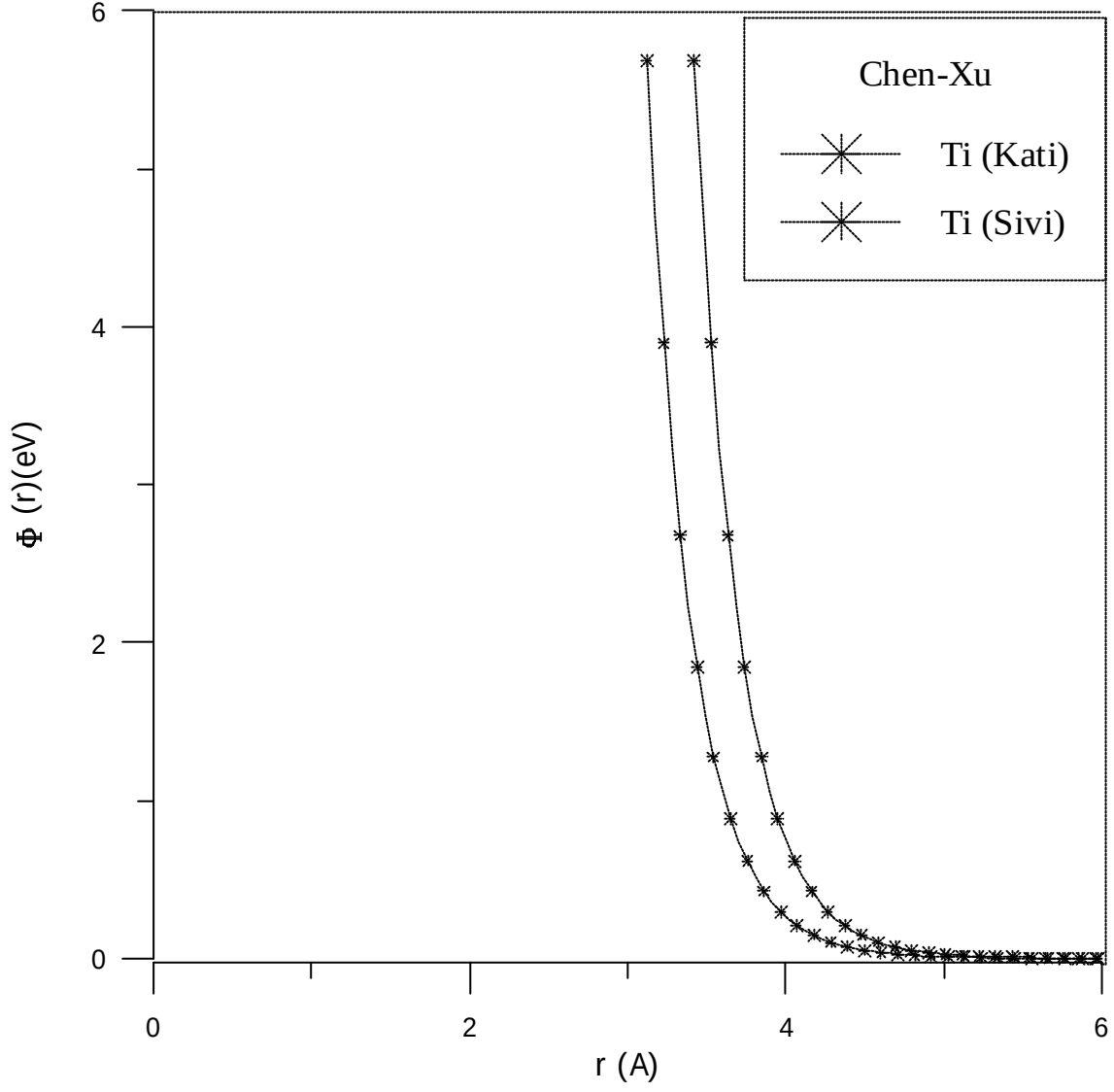
İlk olarak Chen ve Xu'un (Chen S., 2004) kati sistem için öne sürmüs oldukları Gömülü Atom Metodu potansiyel fonksiyonlarını hem katihal hem de sıvihal özelliklerine fit ederek elde edilen parametre seti kullanılarak bazı sıvı hcp nadir toprak metallerinden Zr, Co, ve Ti için atomlararası etkin çiftler potansiyelleri hesaplandı. Chen-Xu sıvı sistemler için optimize edilmiş potansiyel parametreleri Tablo 5.7' de verilmektedir.

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

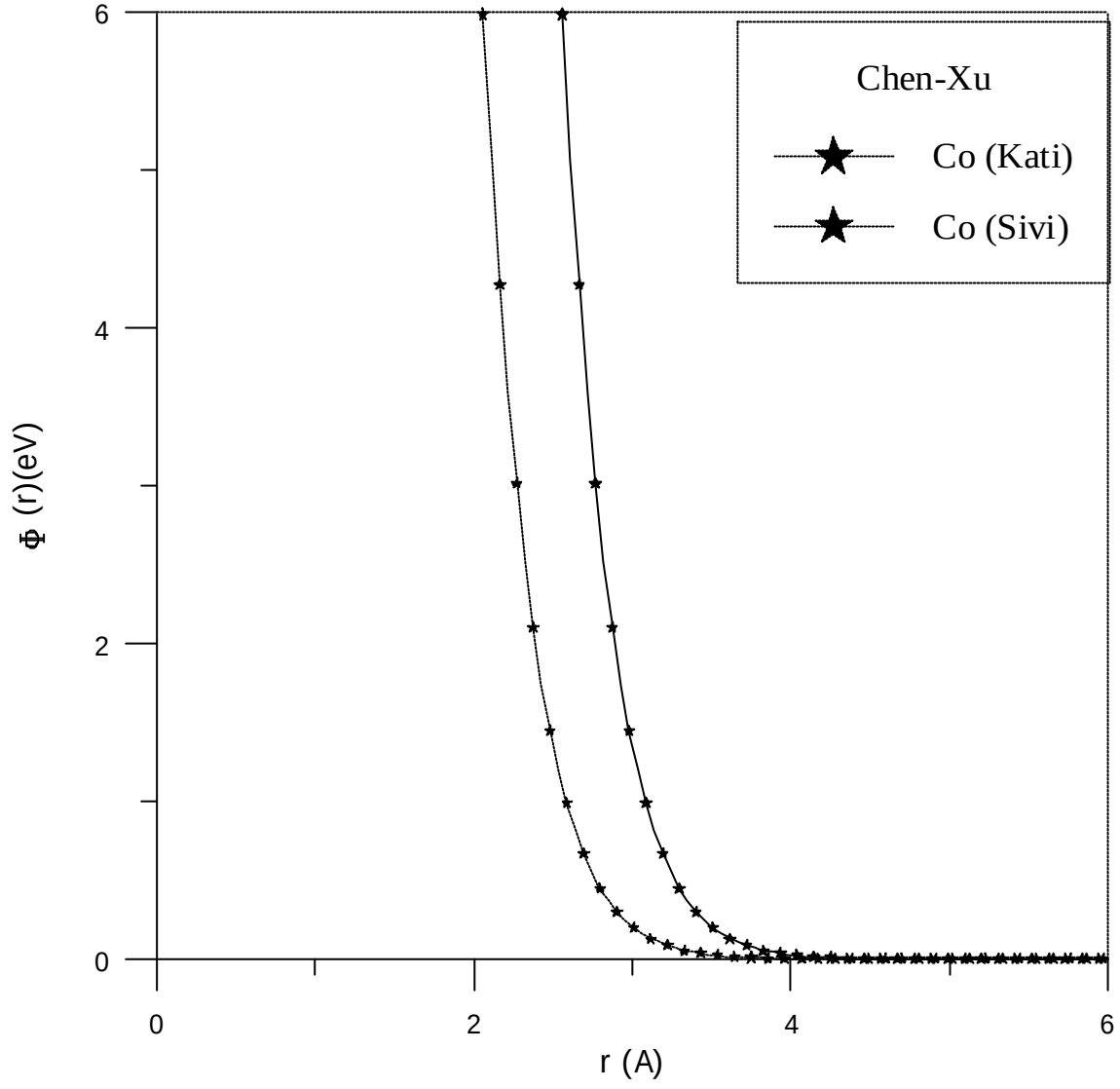
		Ti	Co	Zr
A	a-a	3961.33	7651.03	660.03
	a-b	3967.92	7540.01	672.02
a	a-a	3.0646	3.81122	2.1556
	a-b	3.06427	3.98867	2.13631
B	a-a	452.63	12911.01	315.22
	a-b	462.98	12800.02	316.13
β	a-a	3.82136	5.51372	3.38963
	a-b	3.82119	5.43380	3.38777
n		6	6	6

Co, Ti ve Zr için itici etkileşim potansiyel fonksiyonları sırasıyla Şekil 5.35, Şekil 5.36 ve Şekil 5.37'de verilmiştir. Şekillerden de görüldüğü gibi sıvı durumların kati durumlara göre minimum konumları daha büyük r değerlerinde olduğu görülmektedir. Şekil 5.38'de sıvı Co, Ti ve Zr'nin itici potansiyelleri karşılaştırılmıştır. Zr'nin atom numarası daha büyük olduğundan itici etkileşimleri daha büyük r değerini almakta, bu durum periyodik tablo ile uyum göstermektedir. Şekil 5.39'da gömme enerji fonksiyonları verilmektedir. Şekil 5.40'da ise Chen-Xu GAM potansiyel fonksiyonları ile Finnis ve Sinclair (Finnis ve Sinclair, 1984) 'in GAM etkin çiftler potansiyel yaklaşımını kullanarak sıvı Zr, Co ve Ti için hesapladığımız Chen-Xu etkin çiftler etkileşim potansiyelleri verilmektedir. Etkin çiftler potansiyellerini elde etmek için Finnis ve Sinclair' in etkin çiftler potansiyel yaklaşımında gömme enerjisinin ikinci ve daha yüksek mertebeli türevlerini ihmal ettik. Chen-Xu GAM yönteminin, potansiyelin konumu ile ilgili olduğu kadar derinliği ile ilgili olarak da doğru

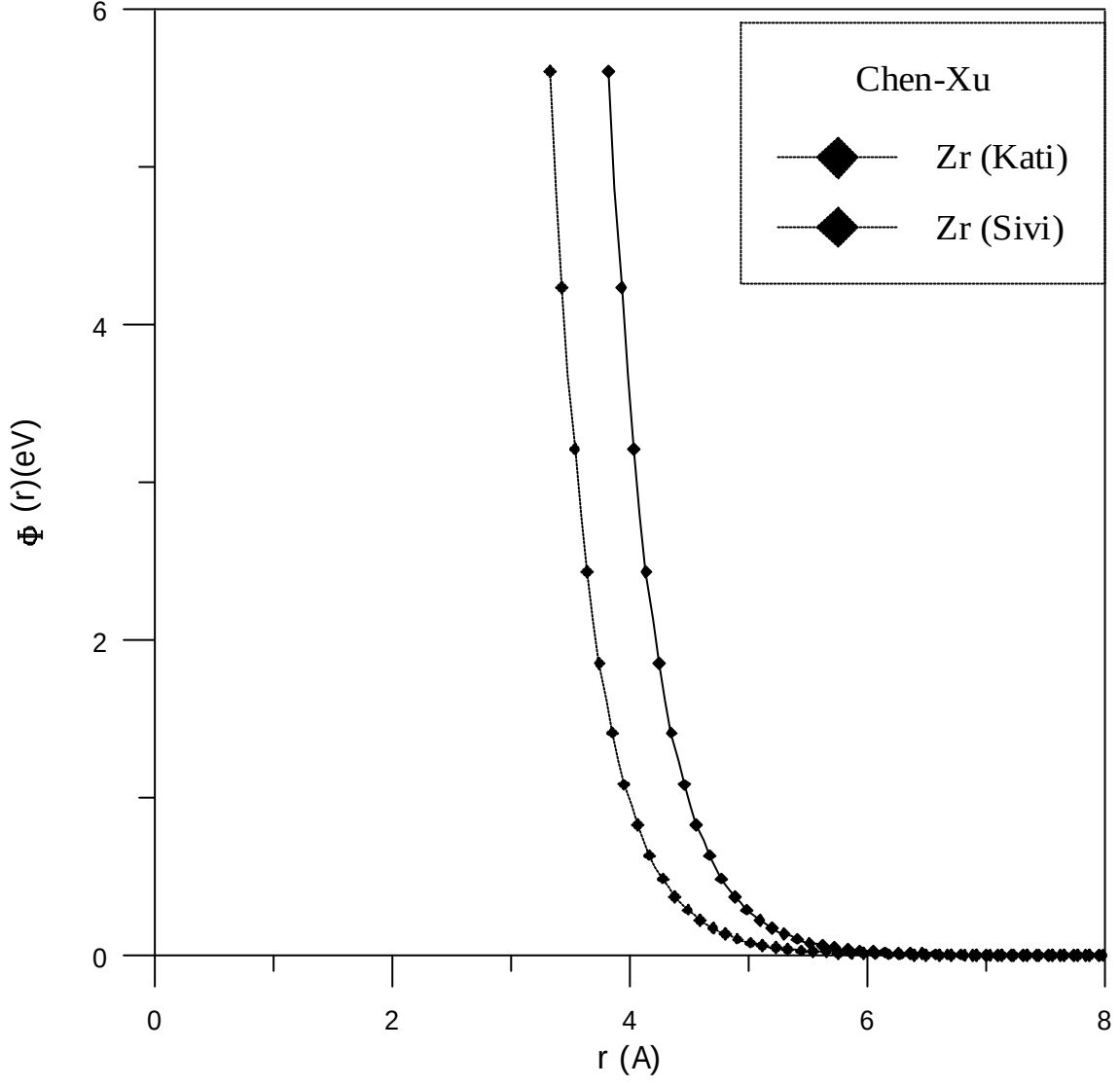
egilimler verdigi Sekil 5.40’da gözlenmektedir. Periyodik tabloda aynı grupta yukarıdan aşağı inildikçe hesaplanan potansiyel daha yumusak, genişligi artan ve minimumunun konumu daha büyük r degerlerine dogrudur. Diğer metodlara göre Chen-Xu GAM’dan hesaplanan etkin çiftler etkileşim potansiyel fonksiyonları çok daha derin çıktığına dikkat etmemiz gerekir.



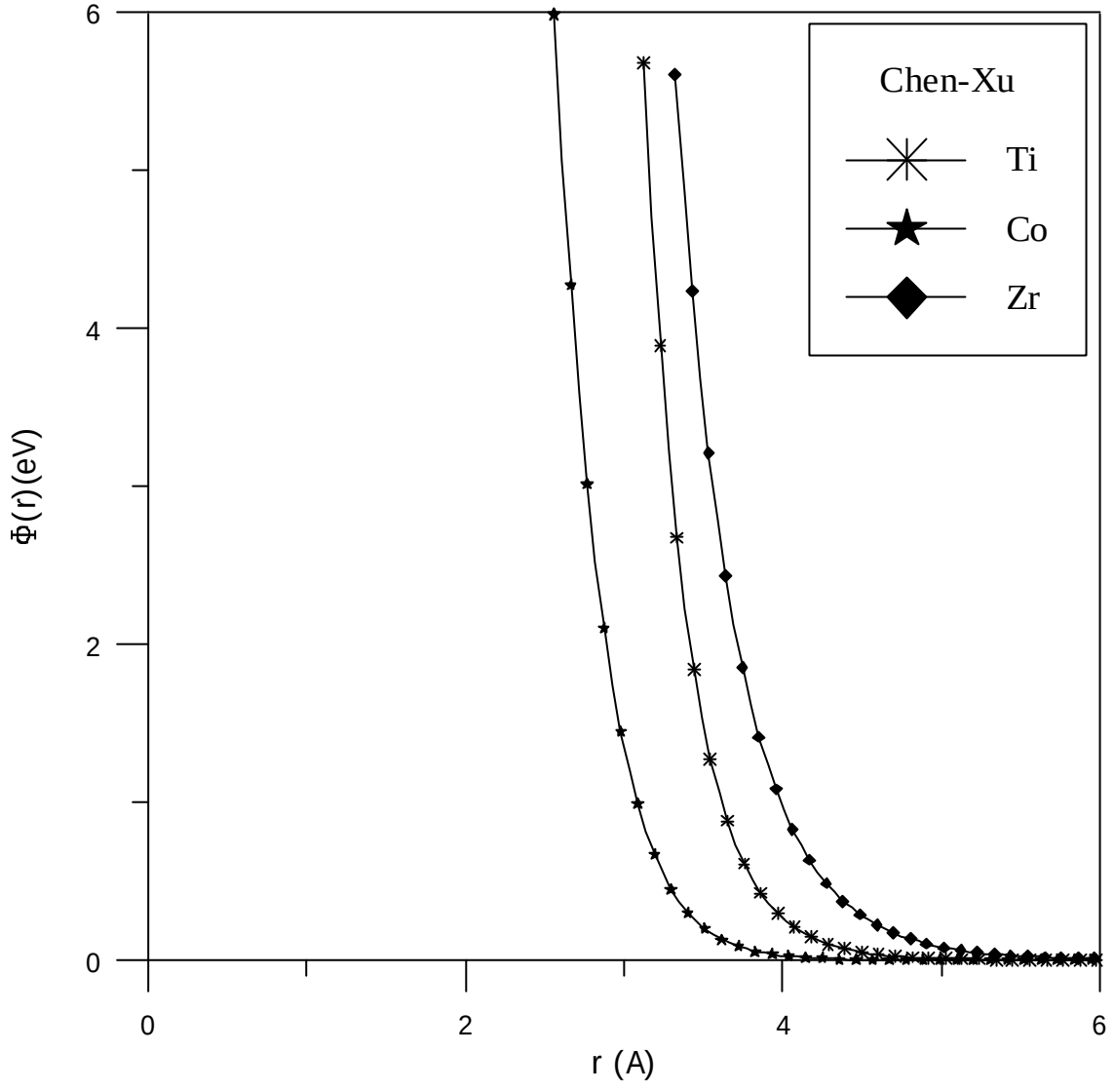
Sekil 5.38: Ti için CX-GAM kullanılarak kati ve sivi parametreleri ile hesaplanan çiftler etkileşme potansiyelleri



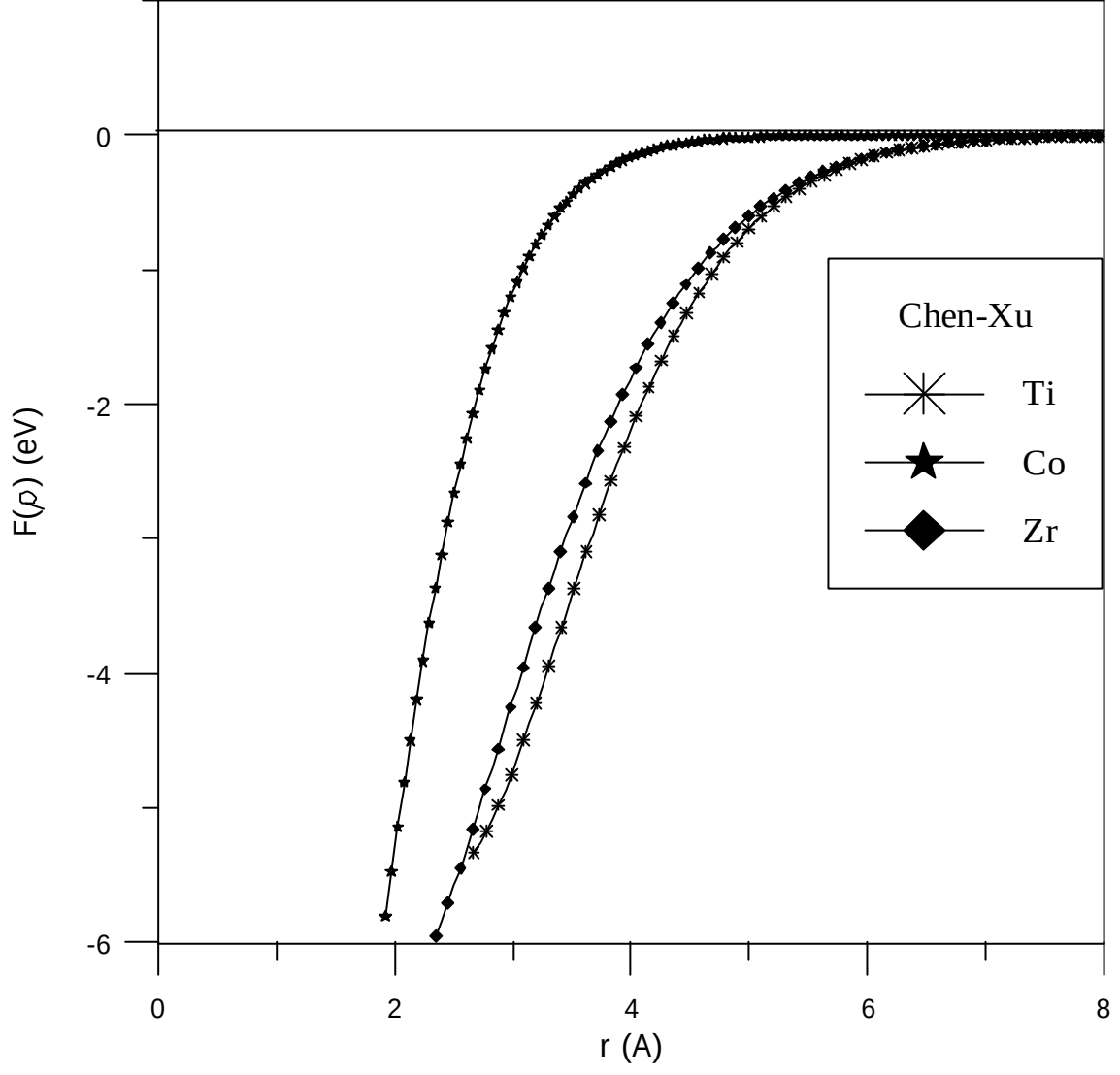
Sekil 5.39: Co için CX-GAM kullanılarak kati ve sivi parametreleri ile hesaplanan çiftler etkileşme potansiyelleri



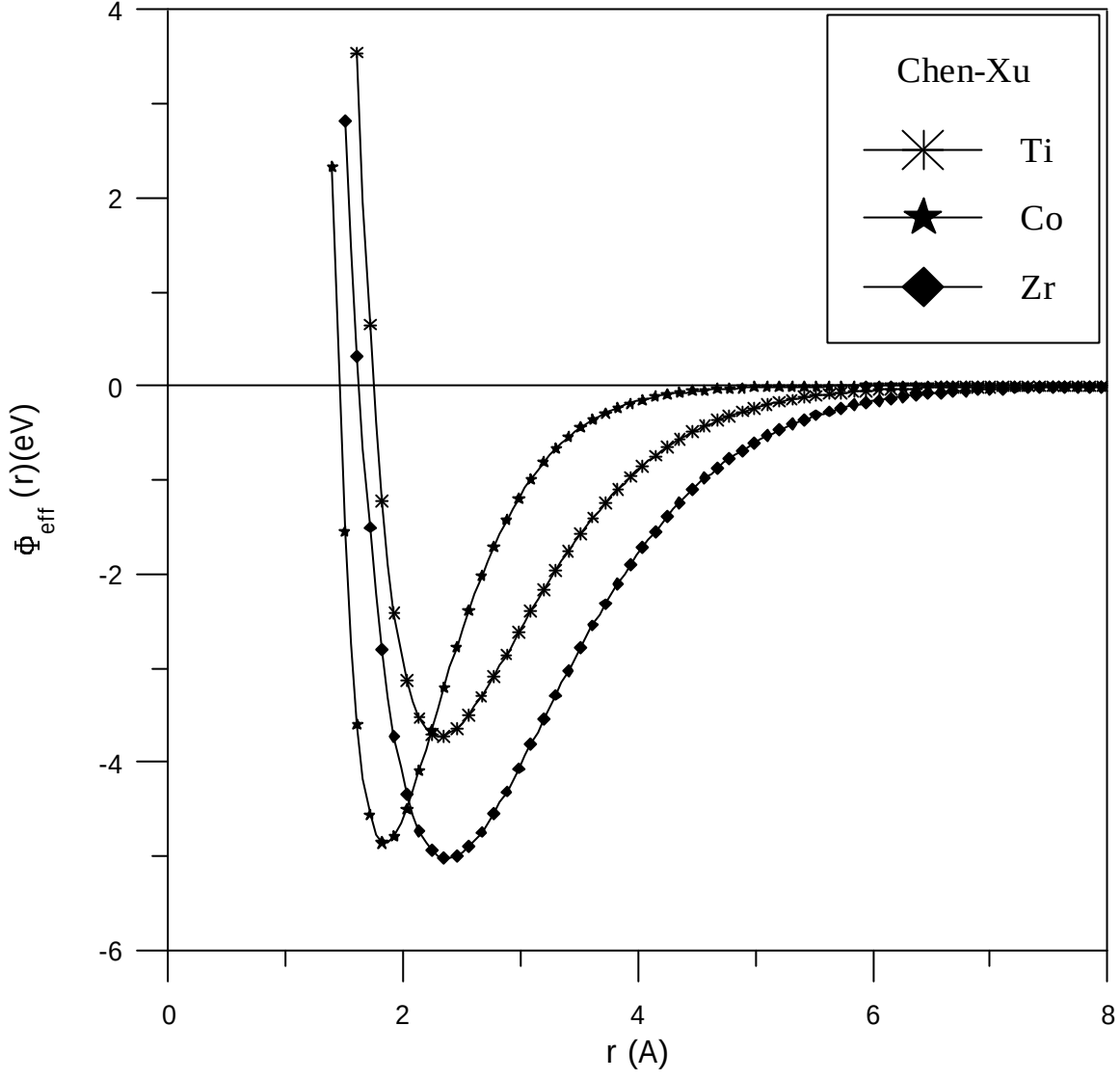
Sekil 5.40: Zr için Chen-Xu GAM kullanılarak kati ve sivi parametreleri ile hesaplanan çiftler etkileşme potansiyelleri



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



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



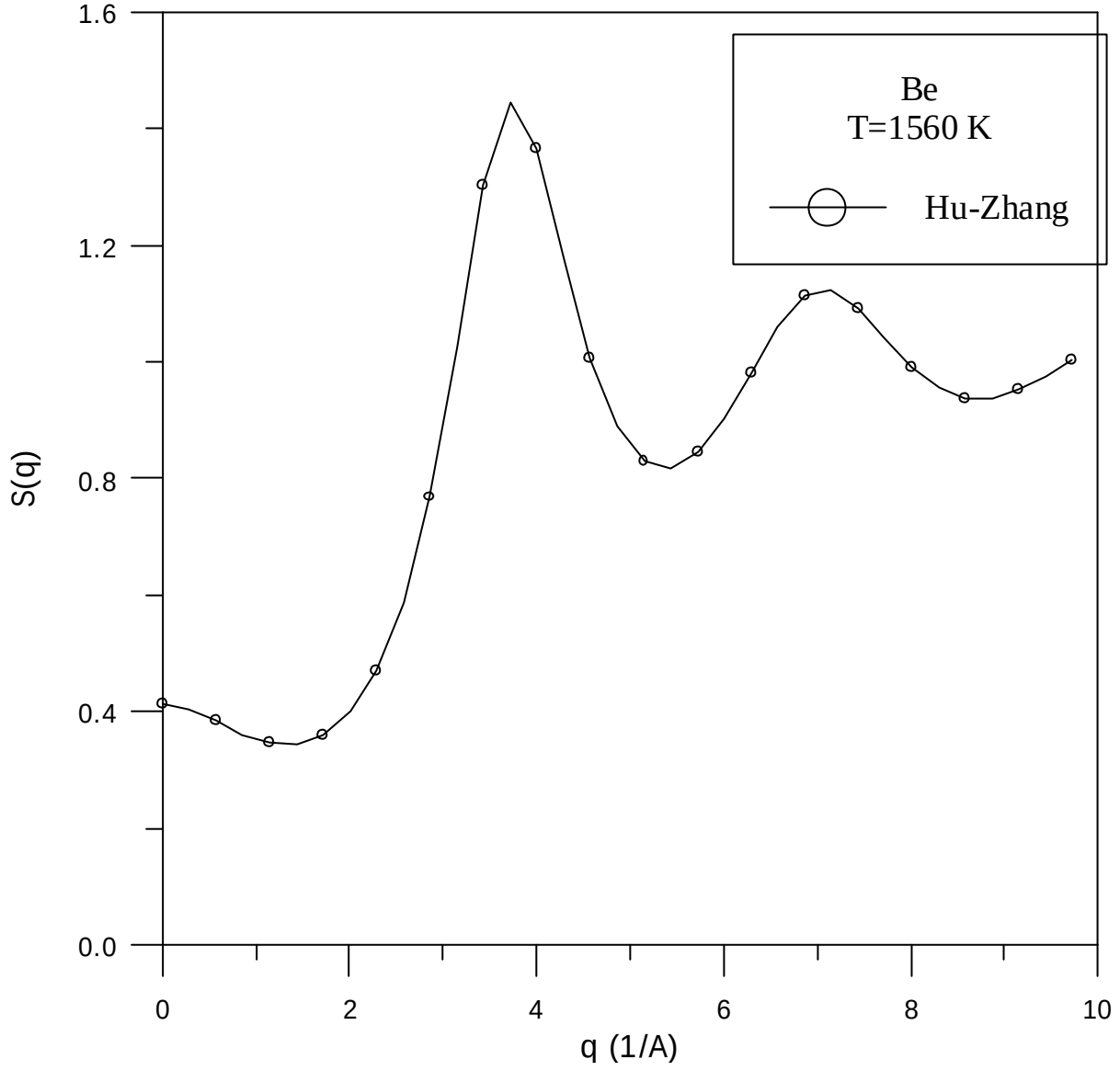
Sekil 5.43: Ti, Zr ve Co için CX-GAM etkin çiftler potansiyelleri

5.3 Sivi hcp Geis Metallerinin Yapisi

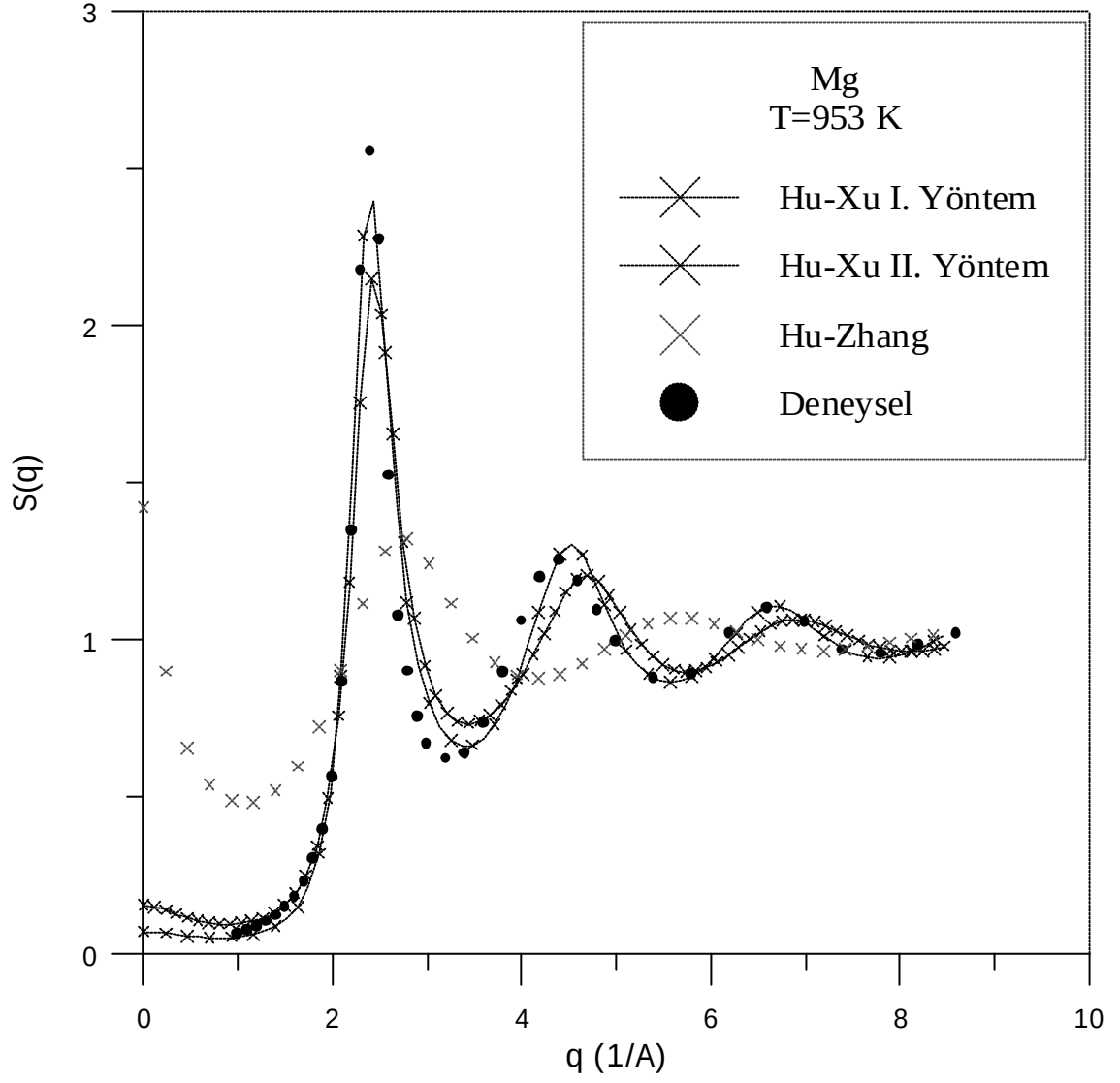
Bu blmde sivi hcp geis metallerinin VMHNC integral teorisi ile ergime noktaları civarında elde edilen yapısal zellikleri ile ilgili sonular verilmektedir. Hesaplanan etkin iftler etkilesme potansiyelleri sivi yapı hesaplamalarında giriş verileri olarak kullanılmıştır. O – Z denklemi Zerah algoritması (Zerah 1985) kullanılarak özld.

Zhang-Quyang, Hu-Xu, Hu-Zhang, Hu-Deng ve Chen-Xu’dan hesaplanan etkin iftler potansiyelleri ile VMHNC integral denklem teorisi kullanılarak hesaplanan statik yapı faktr $S(q)$ Waseda (Waseda 1980)’nin X – isinleri kırımını deney sonuları ile karşılaştırmalı olarak sırası ile Be, Mg, Sc, Ti, Co, Y, Zr, La, Pr, Nd, Gd, Tb, Dy, Ho ve Er iin Sekil 5.43 ile Sekil 5.57 arasında verilmektedir. Y ve Be’nin deneysel deęerleri olmadığı iin sadece hesaplanan yapı deęerleri gsterilmiştir. Ayrıca bu tezde alışılan Zhang-Quyang, Hu-Xu, Hu-Zhang, Hu-Deng ve Chen-Xu etkin iftler potansiyeli ile elde edilen VMHNC sonularının Waseda’ modelleri ve VMHNC ile hesaplanan iftler dağılım fonksiyonu $g(r)$ Waseda’ nin X – isinleri kırımını deneysel deęerleri ile karşılaştırıldı. Be, Mg, Sc, Ti, Co, Y, Zr, La, Pr, Nd, Gd, Tb, Dy, Ho ve Er iin iin sırasıyla Sekil 5.58 ile sekil 5.72 arasında gsterilmiştir. Genelde, Hu-Xu ve Hu-Deng’in I. FS-AYDGAM ynteminden hesaplanan yapıların (Pr, Nd, Gd, Tb, Dy, Ho ve Er) deneysel deęerlerle ikinci pike kadar uyumlu olduğu, ikinci pikten sonra faz farklılıkların olduğu grlmektedir. Zhang-Quyang, Hu-Zhang ve Chen-Xu metotları kullanarak hesaplanan Co, Zr ve Ti sistemleri iin Chen-Xu metodunun deneysel deęer ile biraz daha uyumlu olduğu sylenebilir. Bununla birlikte daha fazla ayrıntı ağıdaki gibidir. Mg iin hesaplanan $S(q)$ deęerleri Hu-Xu I. yntemin, II. ynteme ve Hu-Zhang gre birinci ve ikinci pikin ykseklięi deneysel deęerinden biraz kk olduğu, ikinci pikten sonra deneysel deęerle aynı olduğu grlmektedir. Mg’un hesaplanan $g(r)$ deęerleri ise Hu-Xu I. yntemin birinci minimum disında deneysel deęerle aynı olduğu, Hu-Xu II. yntemin birinci pikinin deneysel deęeri ile aynı olduğu, ikinci pike kadar bir faz farkı olduğu ikinci pikten sonra deneysel deęerle aynı olduğu grlmektedir. Mg iin Hu-Zhang’dan hesaplanan deęerlerle deneysel deęerlerin uymadığı asıkardır. Tb, Ho ve Er iin Hu-Deng I. FS-AYDGAM ynteminden hesaplanan $S(q)$ ve $g(r)$ deęerlerinin birinci pikleri deneysel deęerden yksek ama aynı deęeri aldığı minimum deęerlerinin yaklaşı olarak aynı deęeri aldığı, ikinci pikten sonra $S(q)$ deęerlerinin deneysel deęerle uyusmadığı, $g(r)$ deęerlerinin deneysel deęerlerle yaklaşı aynı deęeri aldığı grlmektedir. Hu-Xu ve Hu-Deng’in II. FS-AYDGAM ynteminden hesaplanan $S(q)$ deęerleri deneysel deęerlerle uyusmadığı grlmektedir. Dy iin Hu-Xu I ve II. yntemlerinden hesaplanan $S(q)$

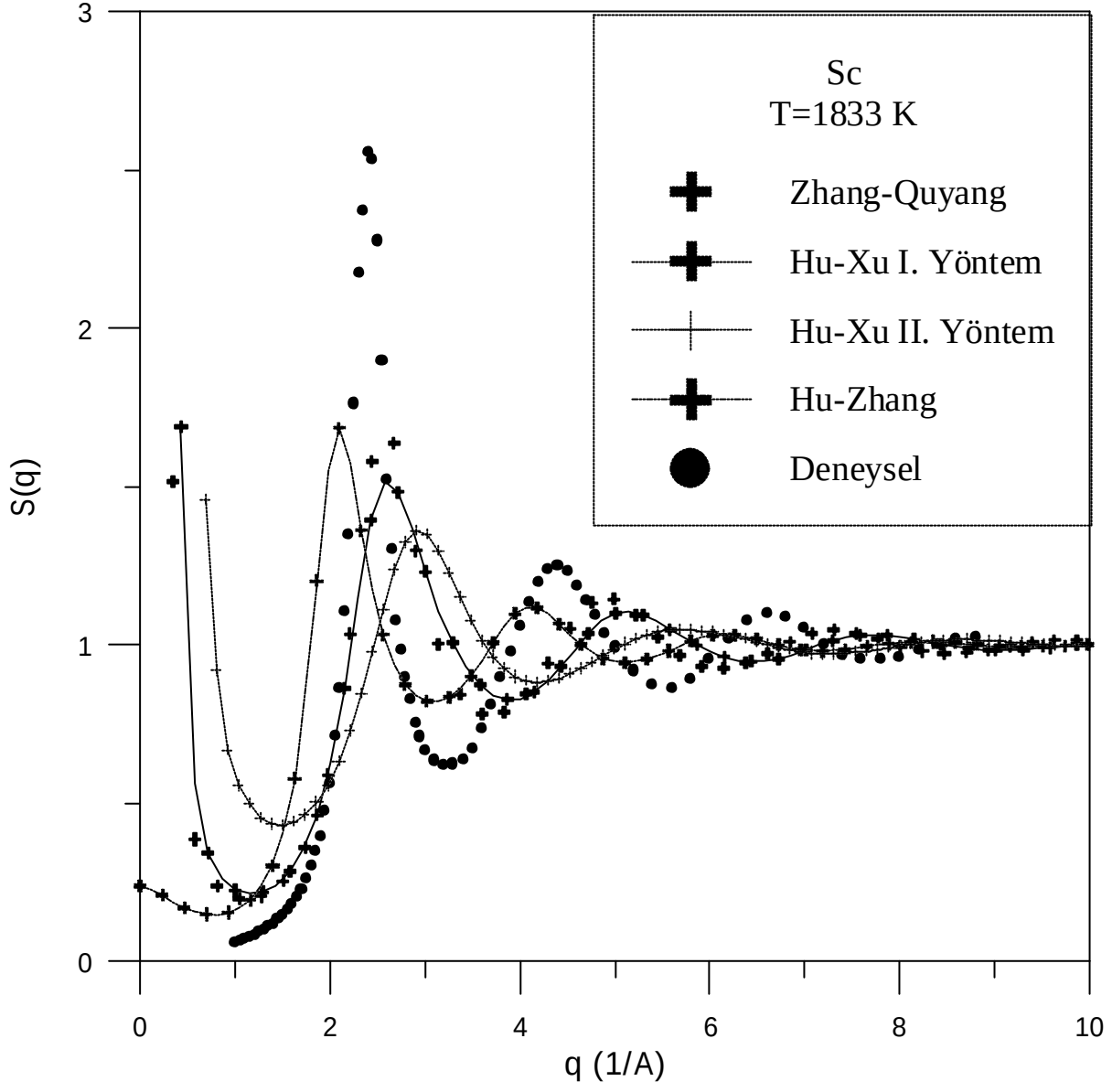
değerlerinin birinci piki deneysel değerlerden yüksek olduğu ve birinci minimumdan sonra deneysel değerlerden daha büyük değerler aldığı görülmektedir. Hu-Deng I. yöntem haricinde diğer yöntemlerden hesaplanan $g(r)$ değerlerinin birinci pikleri deneysel değerinden büyüktür. Yine bu yöntem haricinde diğer yöntemlerden hesaplanan $g(r)$ değerleri ikinci pikten sonra yaklaşık olarak deneysel değerleri almaktadır. Pr, Nd ve Gd için Hu-Xu ve Hu-Deng I. yöntemlerinden hesaplanan $S(q)$ ve $g(r)$ değerlerinin deneysel değerlerden büyük değerler aldığı, $g(r)$ değerlerinin ikinci pikten sonra deneysel değerlerle aynı olduğu, ikinci yöntemlerin ise deneysel değerlerle uyusmadığı görülmektedir. Zr, Co ve Ti için Chen-Xu'den hesaplanan $S(q)$ değerlerinin Co haricinde deneysel değerlerle ikinci pike kadar yaklaşık aynı değeri aldığı ikinci pikten sonra faz farkı oluştuğu görülmektedir. Ayrıca Co için deneysel değerle uyumlu $S(q)$ değerleri faz farkı olmasına rağmen Zhang-Quyang 'dan hesaplanan değerlerdir. Zhang-Quyang ve Chen-Xu'den hesaplanan $g(r)$ değerleri deneysel değerlerle faz farkı olmasına rağmen uyumlu olduğu söylenebilir. Sc için hesaplanan $S(q)$ ve $g(r)$ değerlerinin deneysel değerlerle pek uyusmadığı bunun nedeni ise metalin kendi yapısal özelliği veya VMHNC teorisinden olabilir. La için Zhang-Quyang 'dan hesaplanan $S(q)$ ve $g(r)$ değerlerinden, $g(r)$ 'nin deneysel değeriyle birinci pik hariç aynı değeri almaktadır. $S(q)$ 'nın birinci piki deneysel değerinden küçük ve aralarında faz farkı vardır.



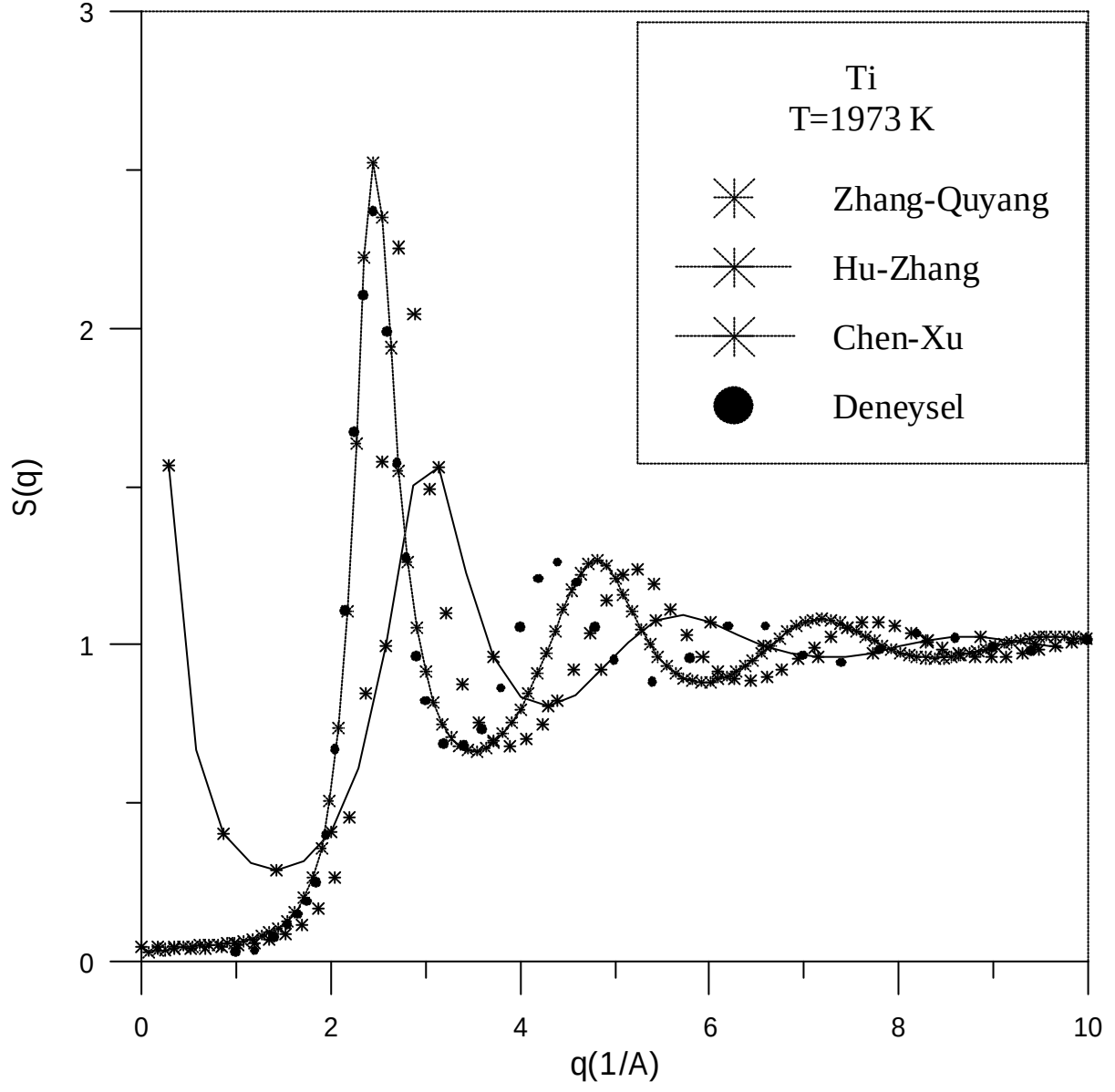
Sekil 5.44: Sivi Be için $S(q)$ statik yapı faktörü



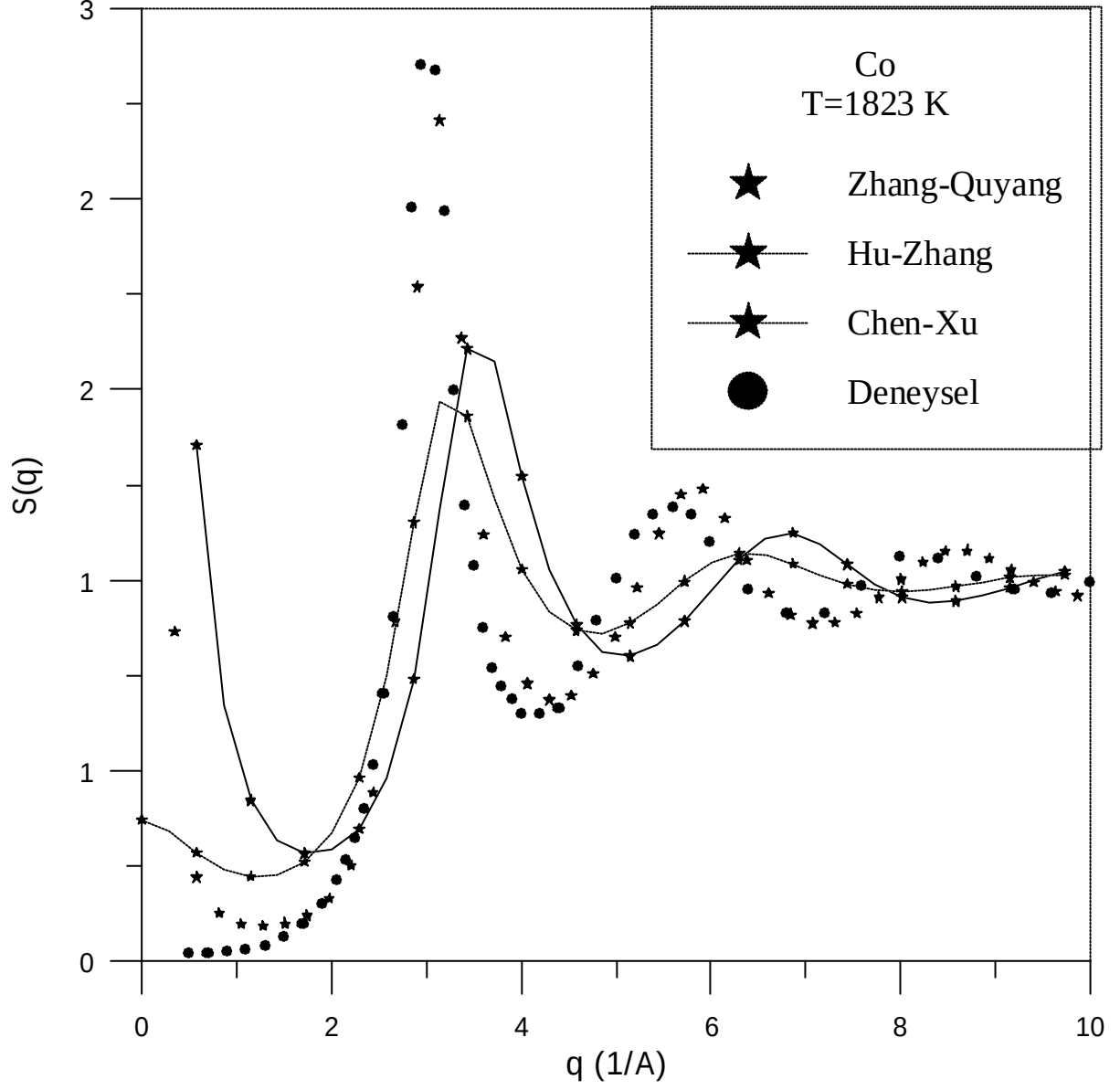
Sekil 5.45: Sivi Mg için $S(q)$ statik yapı faktörü



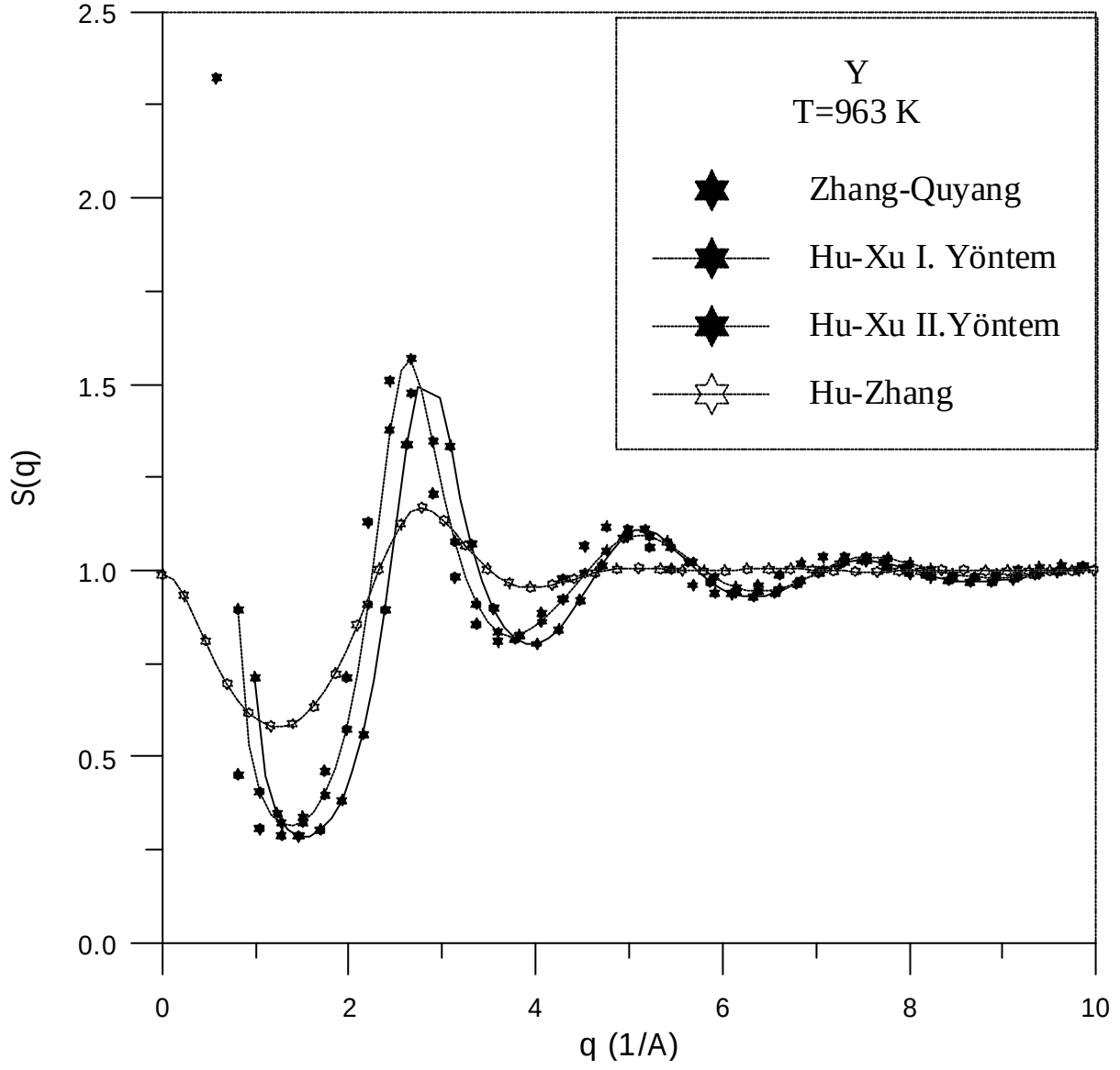
Sekil 5.46: Sivi Sc için $S(q)$ statik yapı faktörü



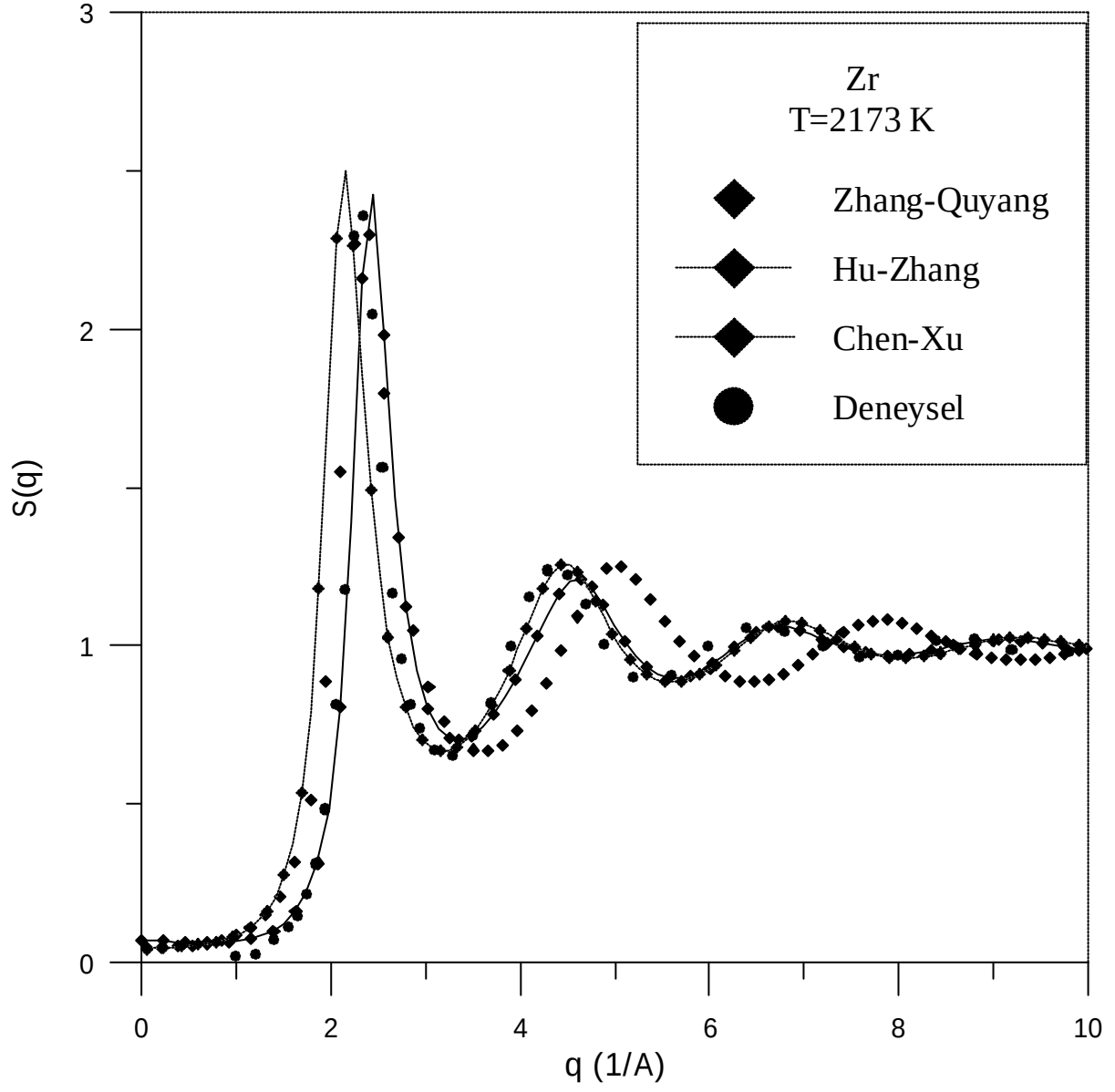
Sekil 5.47: Sivi Ti için $S(q)$ statik yapı faktörü



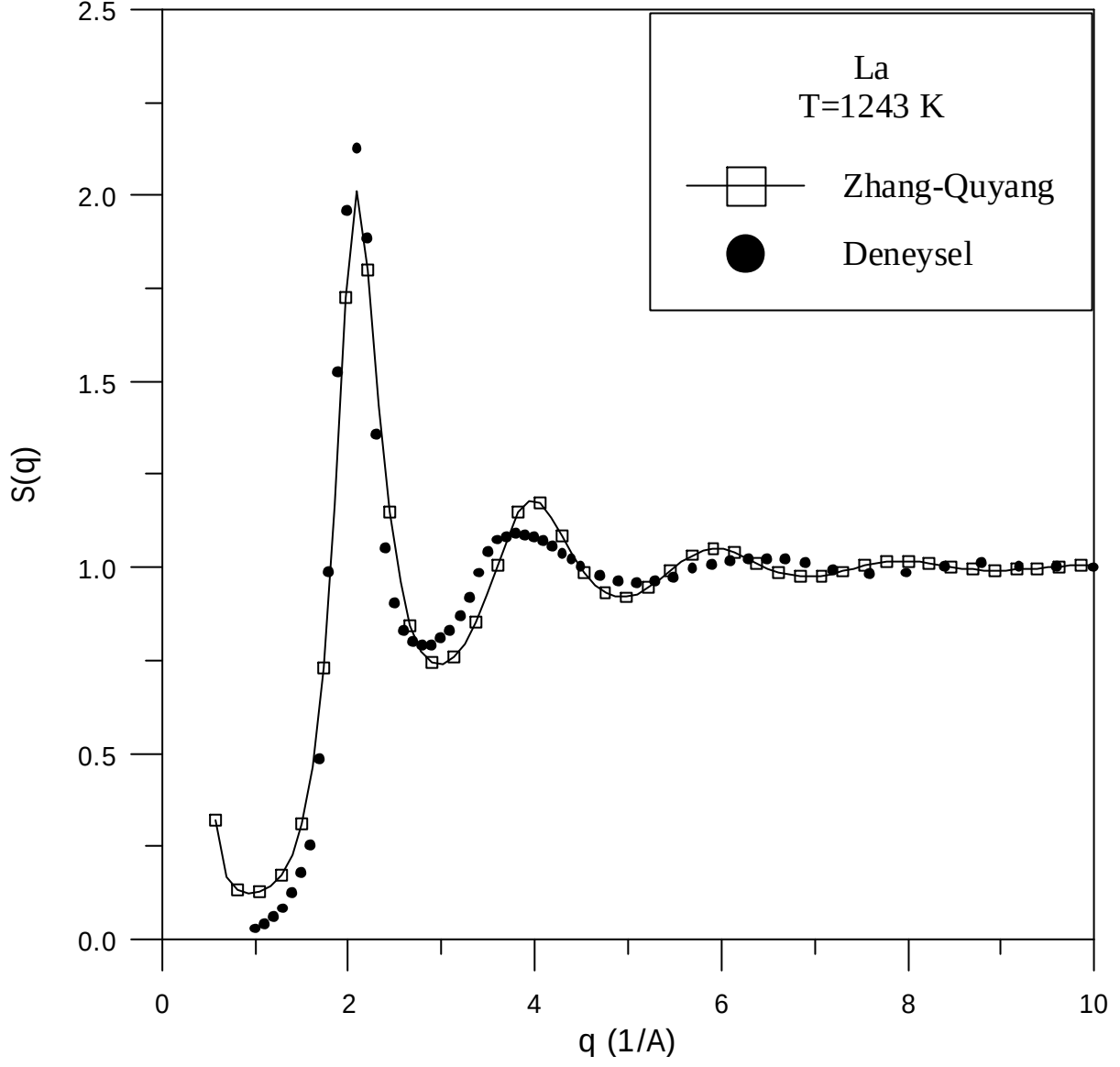
Sekil 5.48: Sivi Co için $S(q)$ statik yapı faktörü



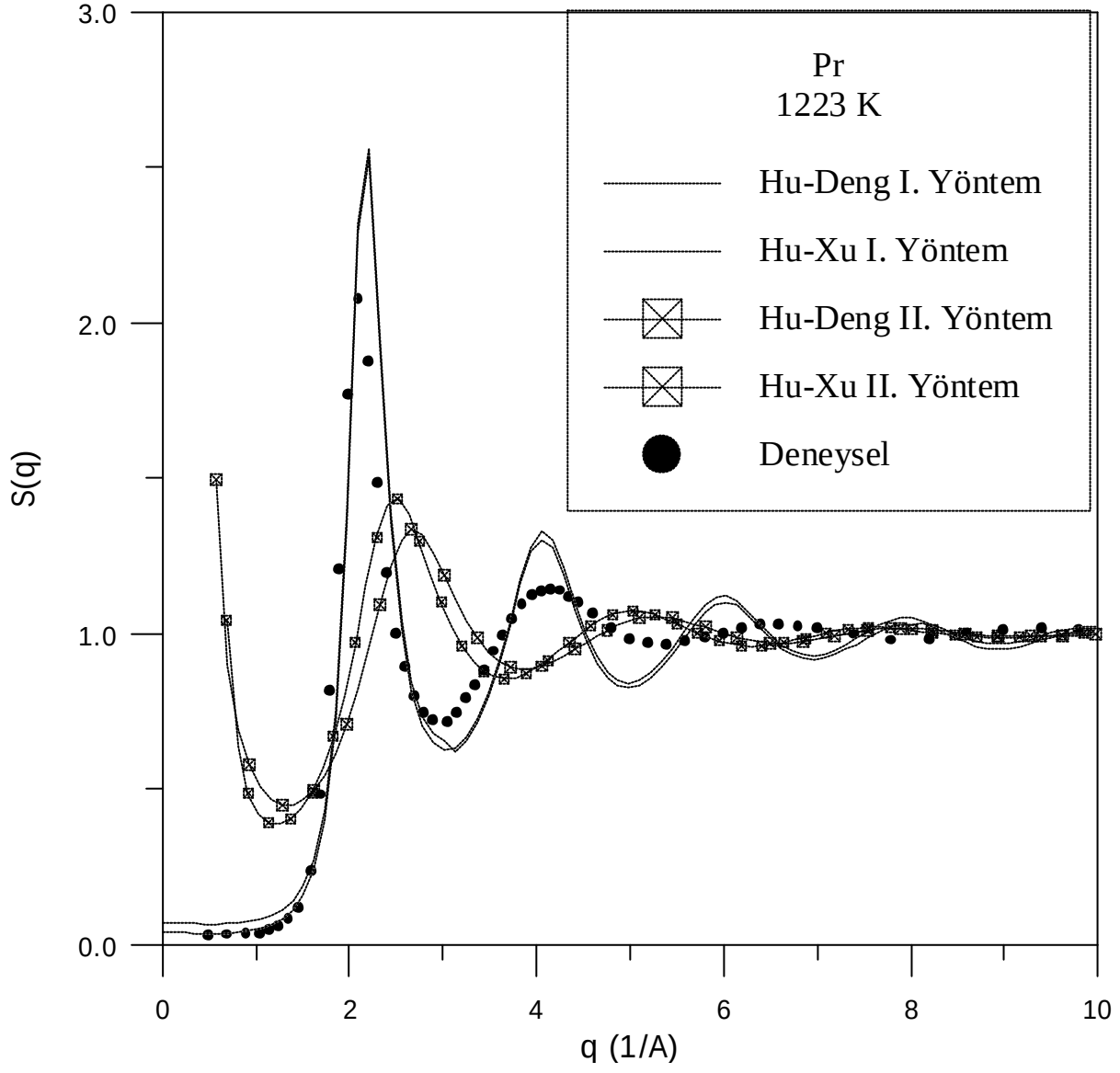
Sekil 5.49: Sivi Y için $S(q)$ statik yapı faktörü



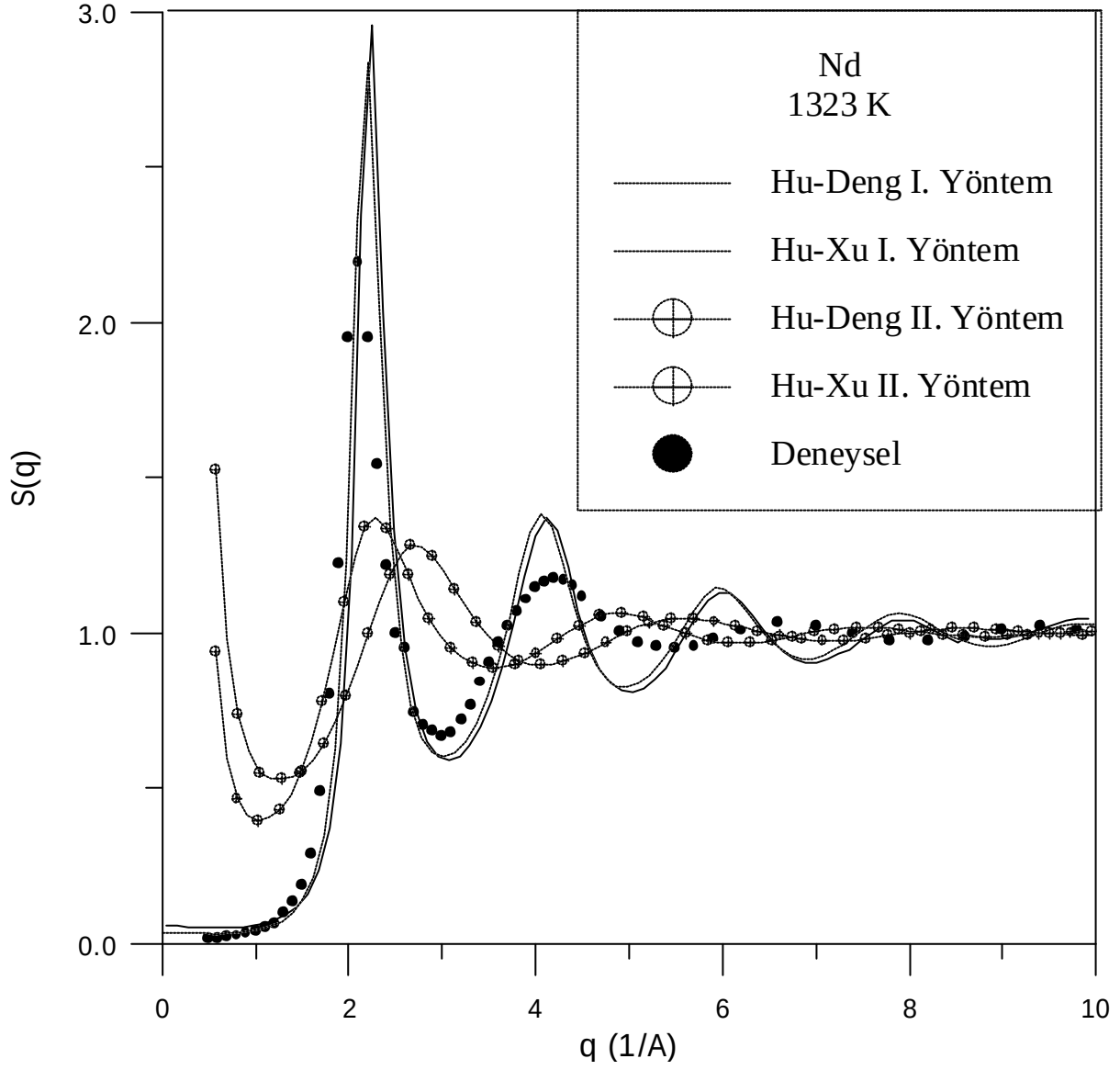
Sekil 5.50: Sivi Zr için $S(q)$ statik yapı faktörü



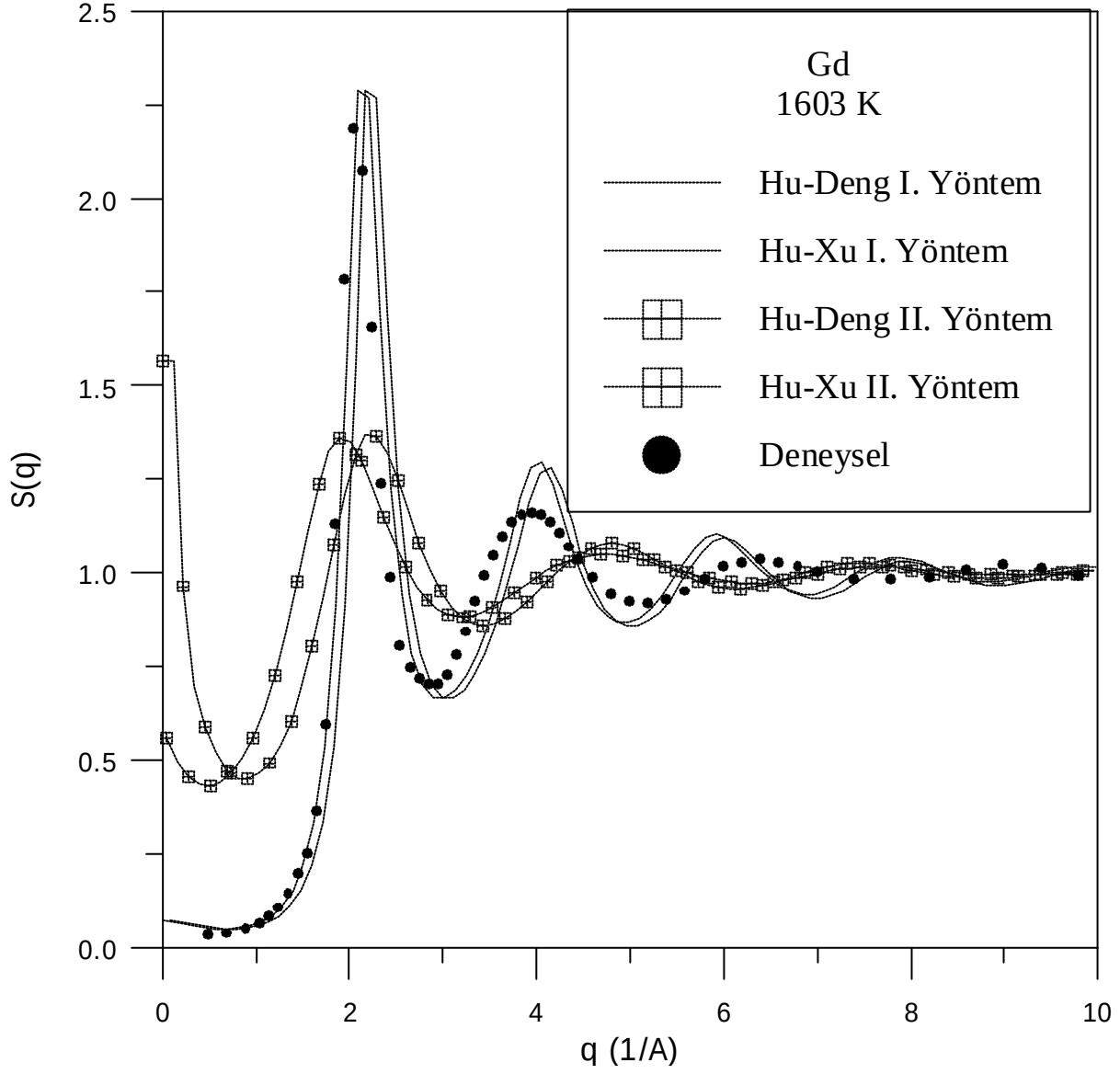
Sekil 5.51: Sivi La için $S(q)$ statik yapı faktörü



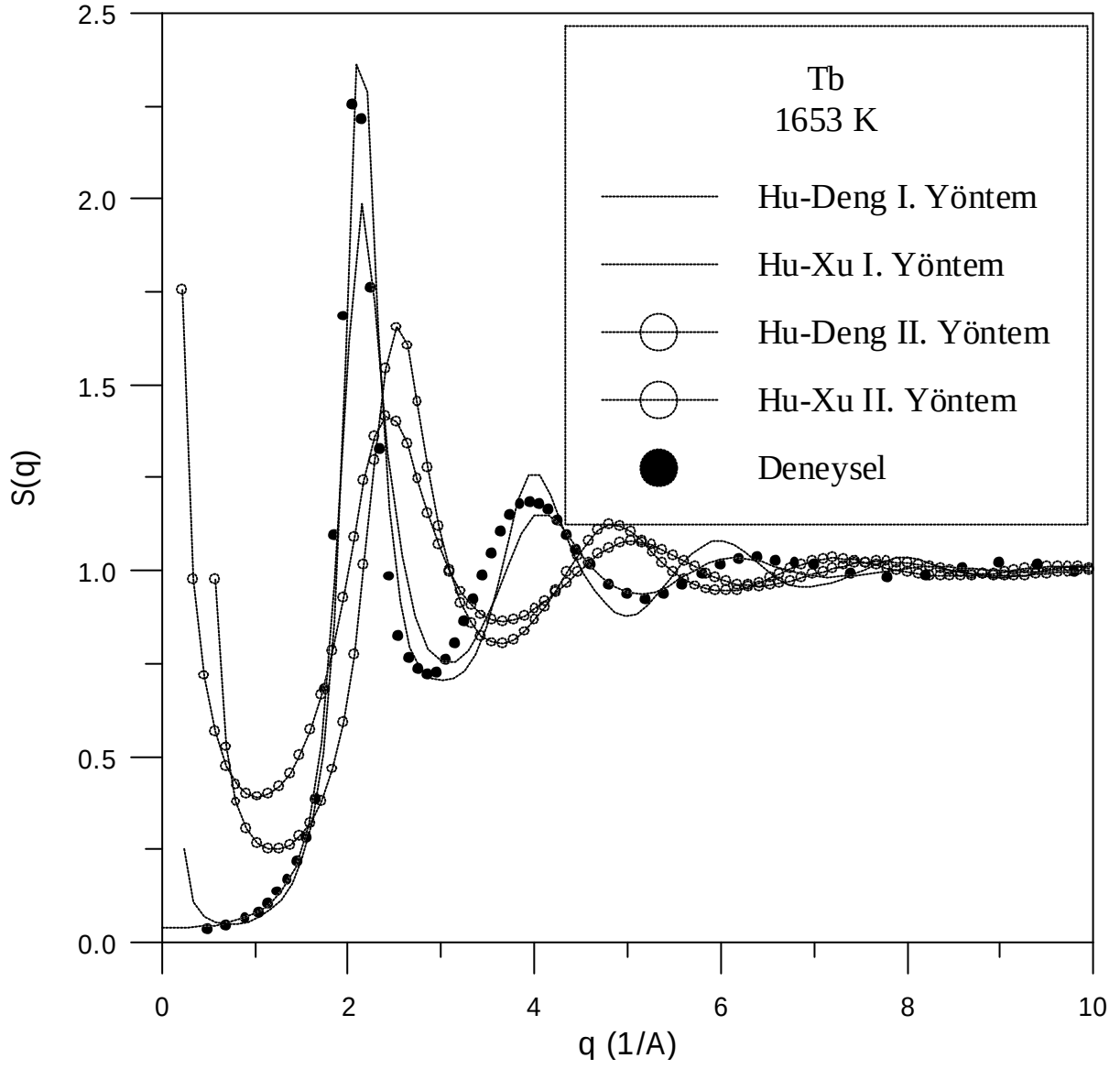
Sekil 5.52: Sivi Pr için $S(q)$ statik yapı faktörü



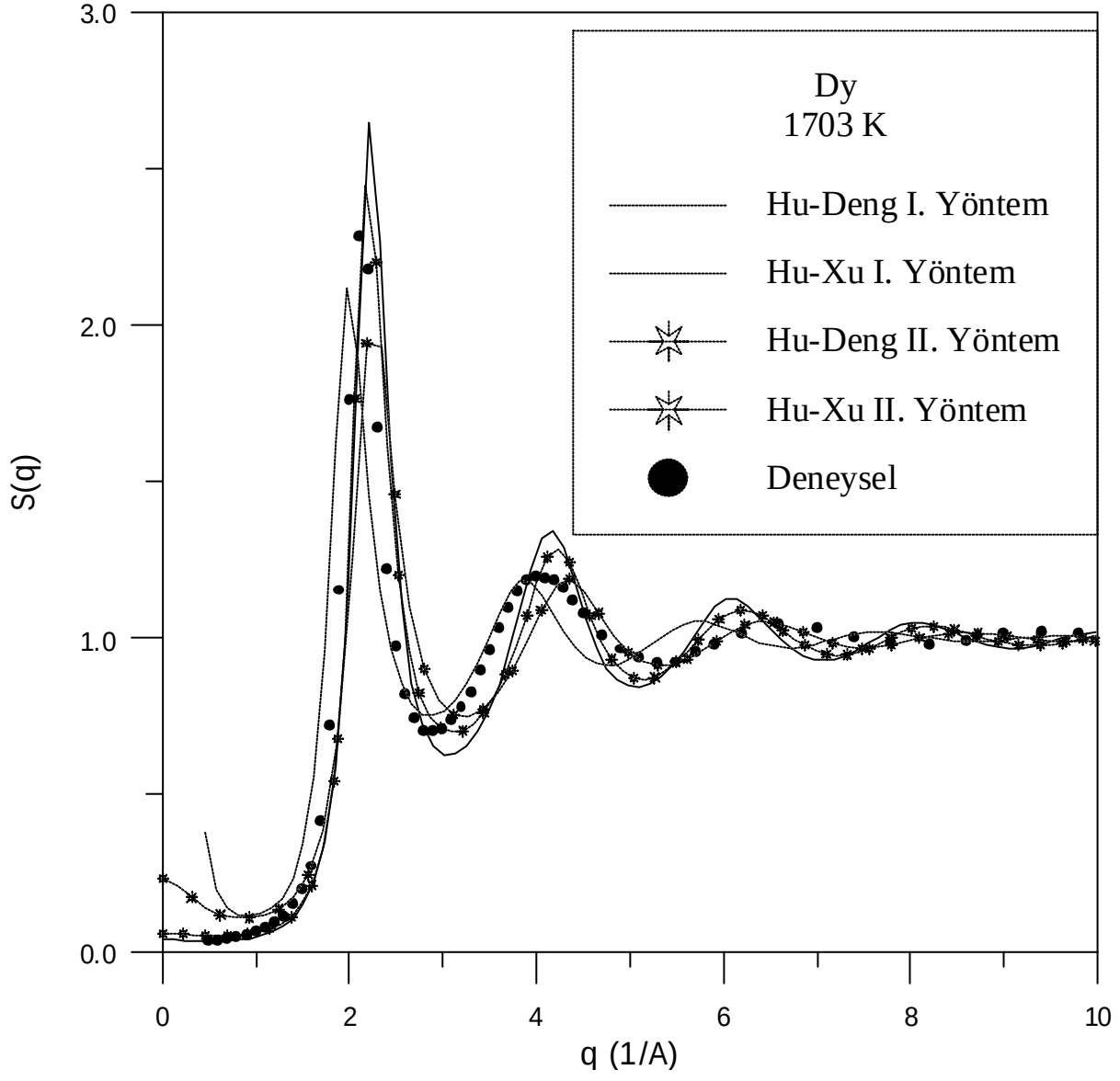
Sekil 5.53: Sivi Nd için $S(q)$ statik yapı faktörü



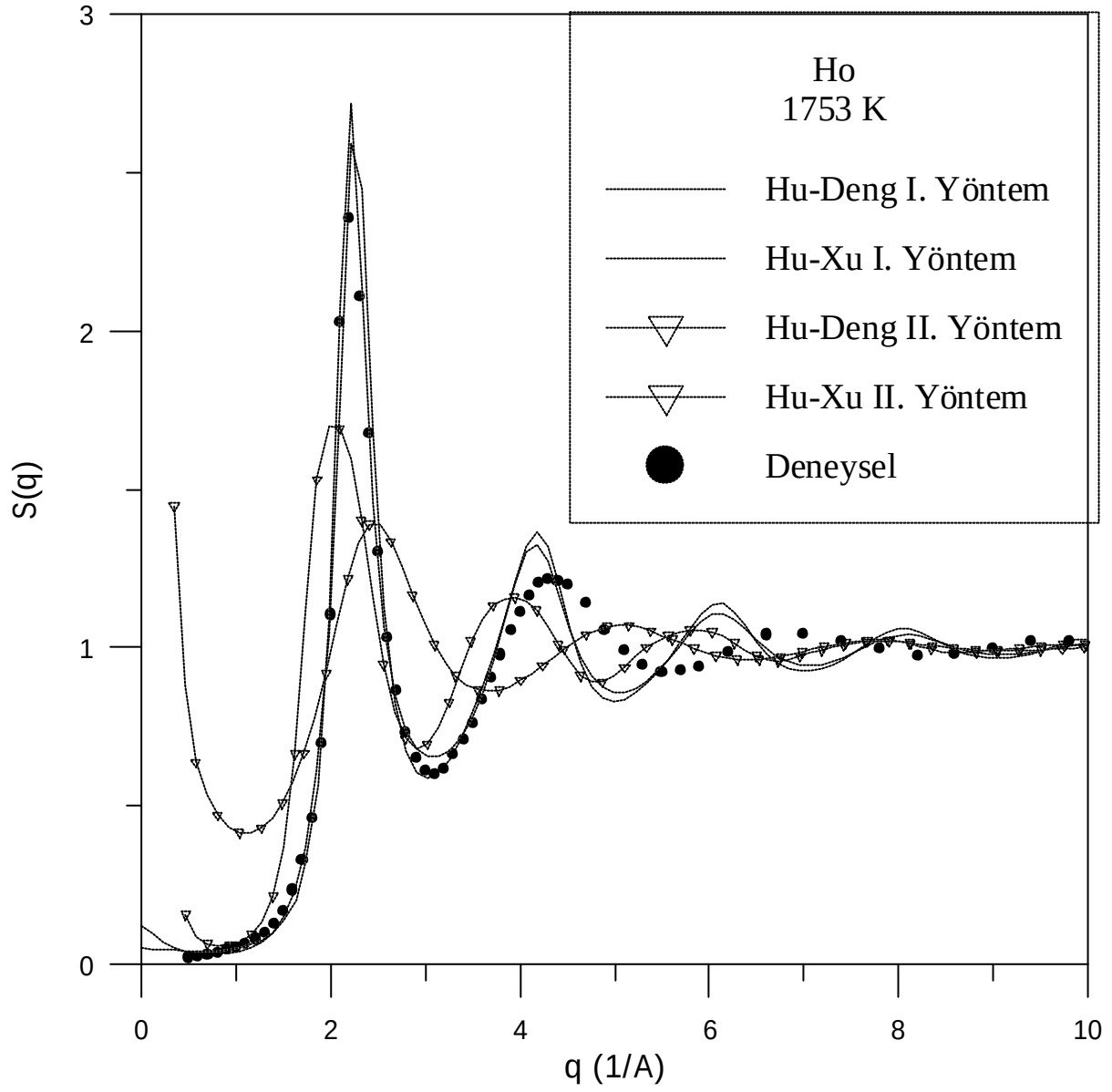
Sekil 5.54: Sivi Gd için $S(q)$ statik yapı faktörü



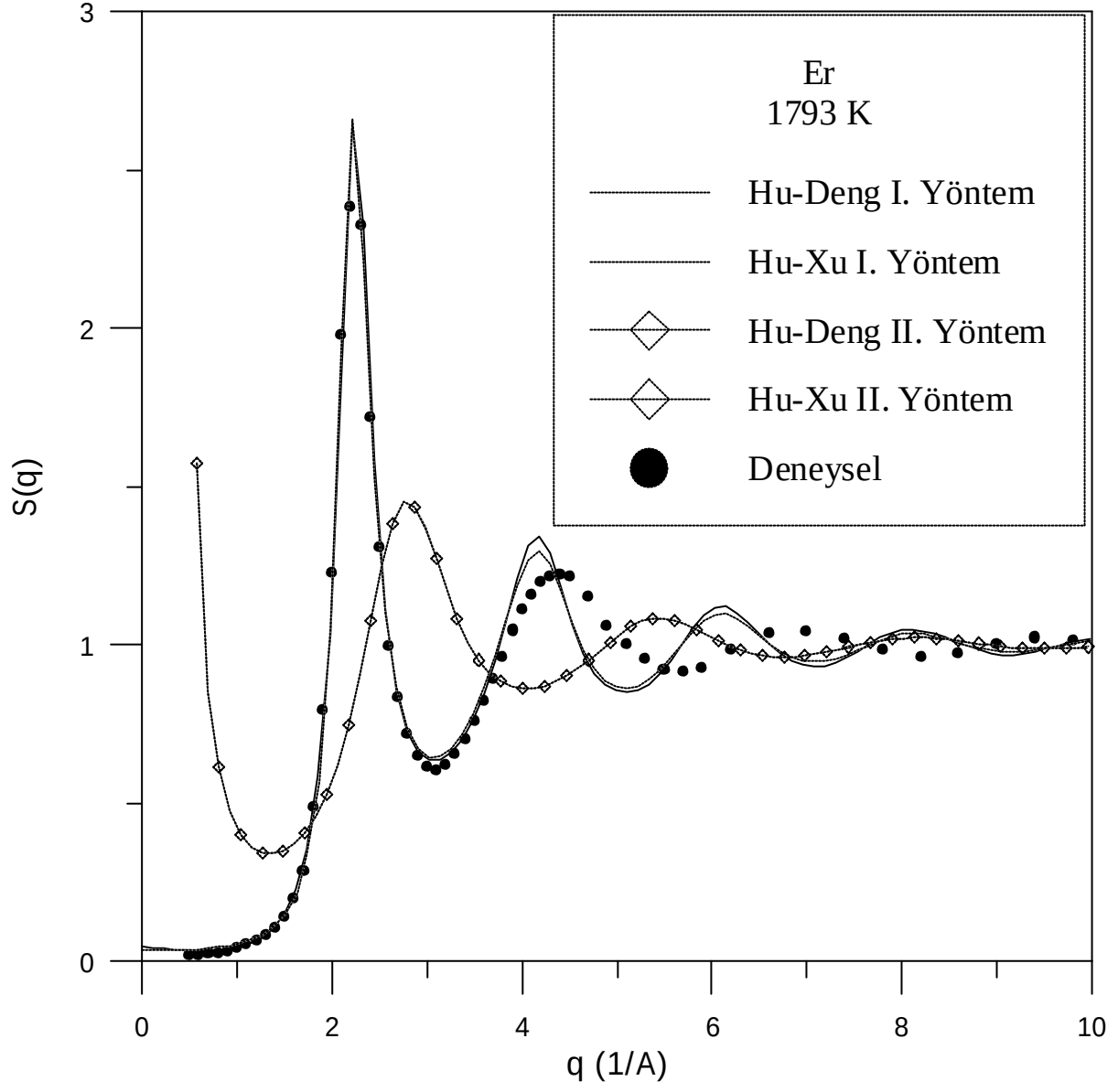
Sekil 5.55: Sivi Tb için $S(q)$ statik yapı faktörü



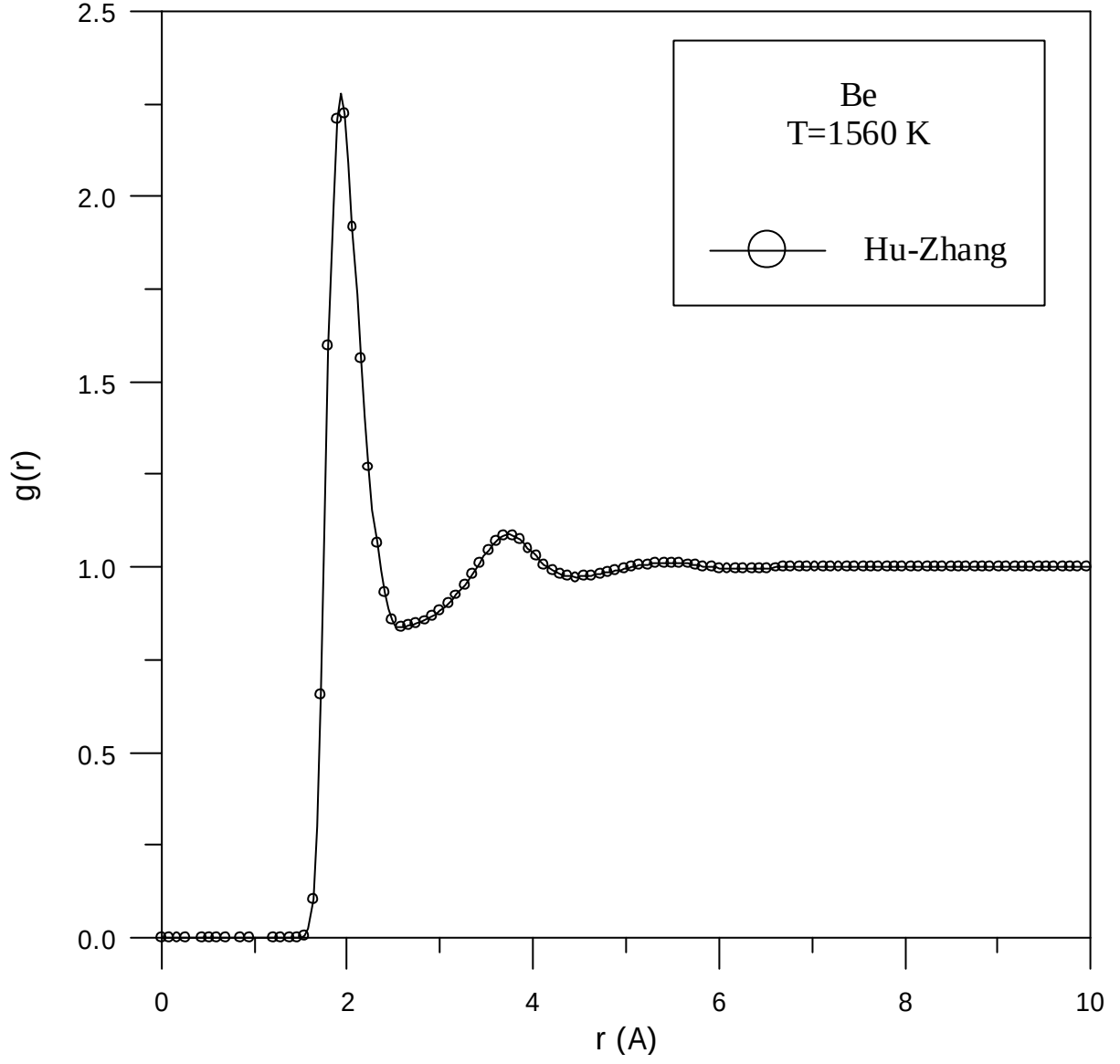
Sekil 5.56: Sivi Dy için $S(q)$ statik yapı faktörü



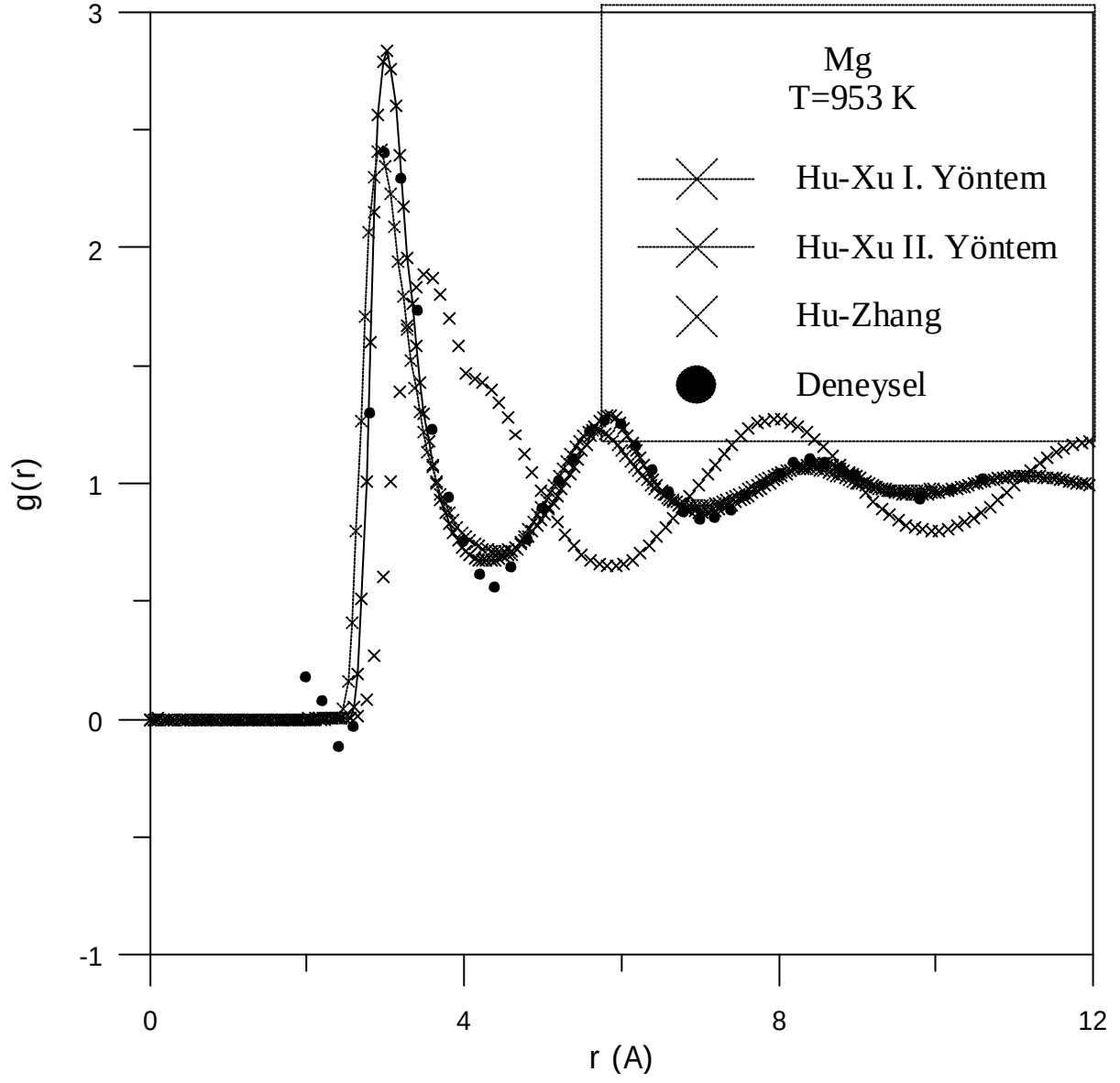
Sekil 5.57: Sivi Ho için $S(q)$ statik yapı faktörü



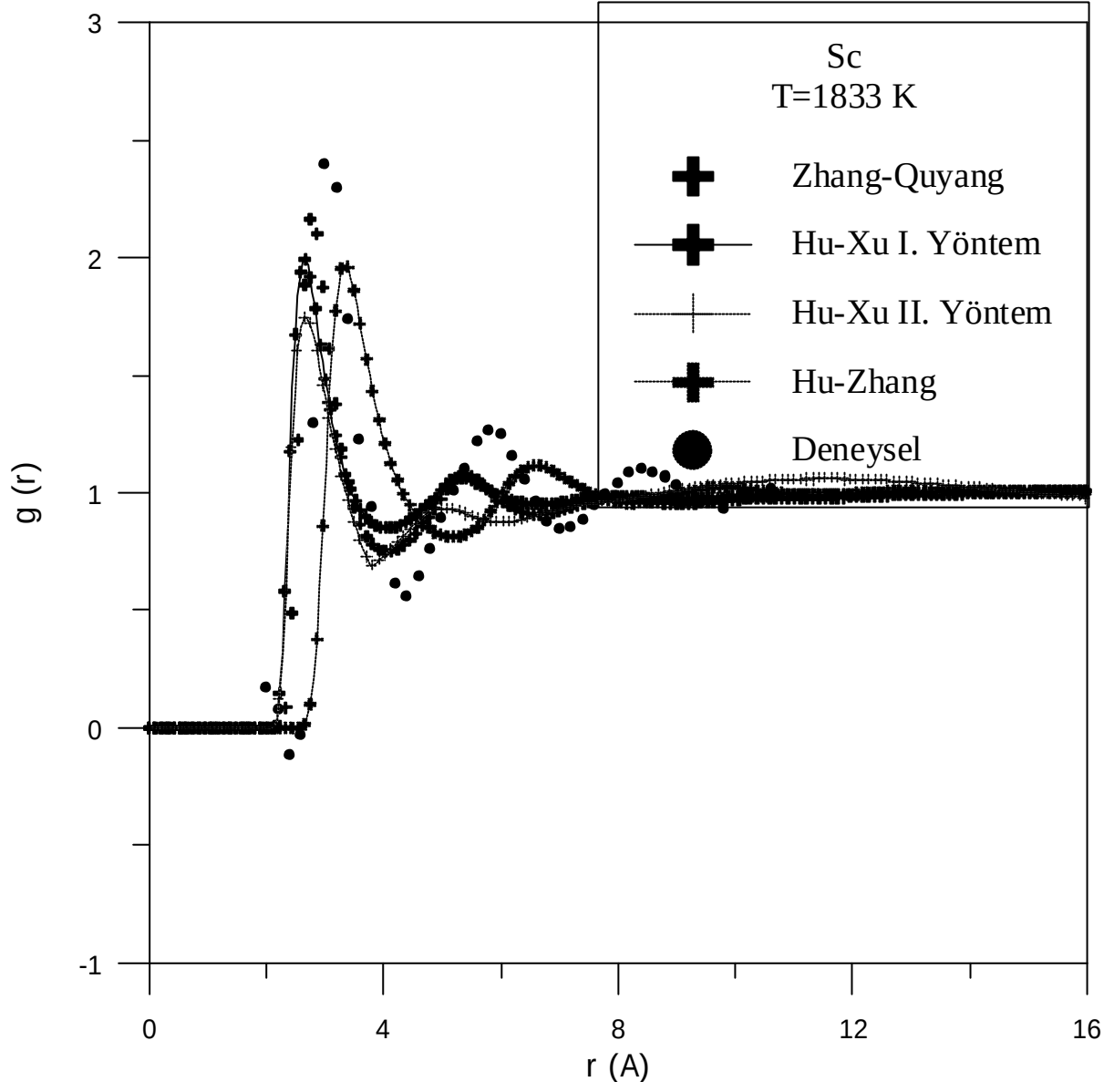
Sekil 5.58: Sivi Er için $S(q)$ statik yapı faktörü



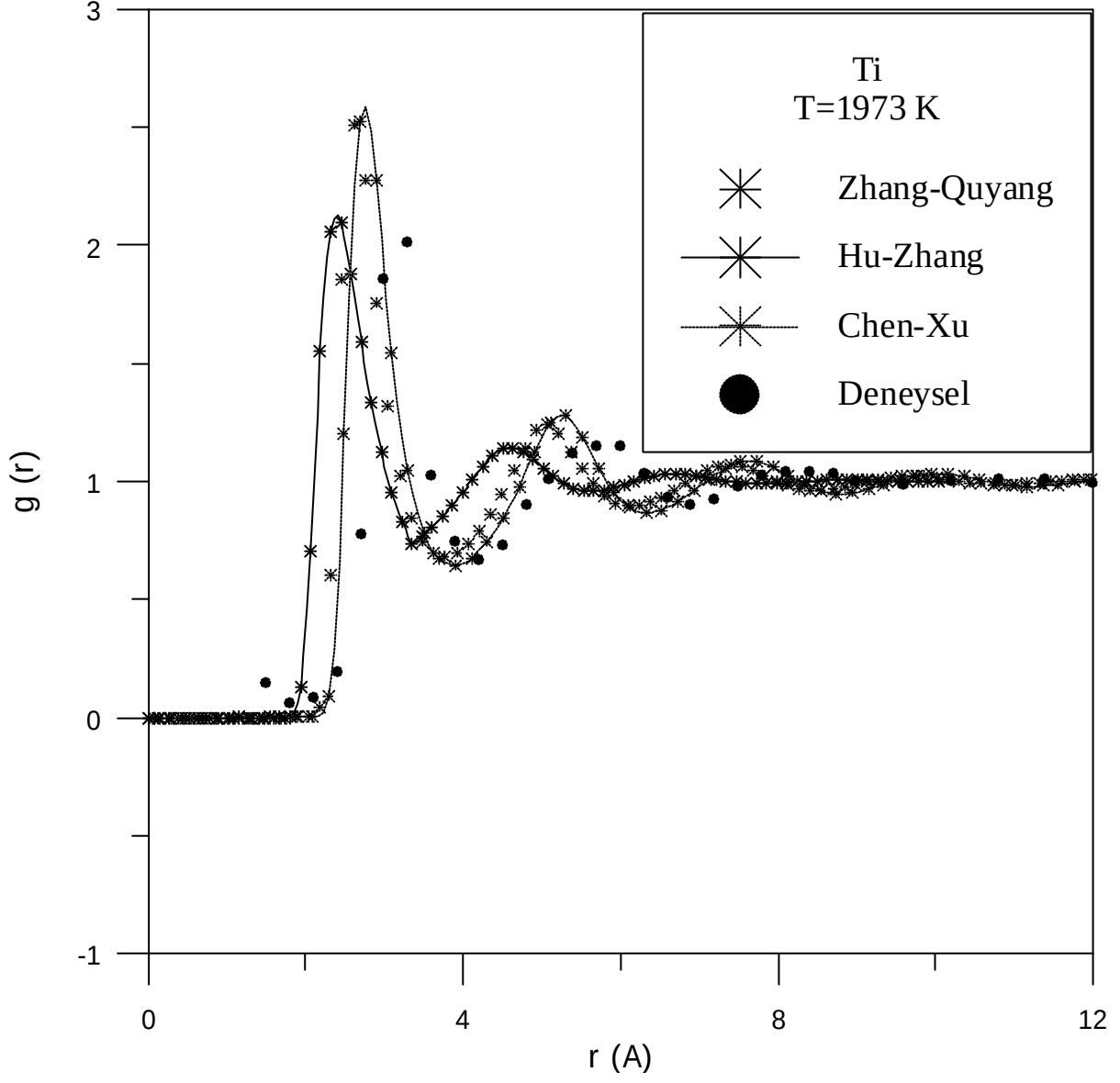
Sekil 5.59: Sivi Be için $g(r)$ çiftler dagılım fonksiyonu



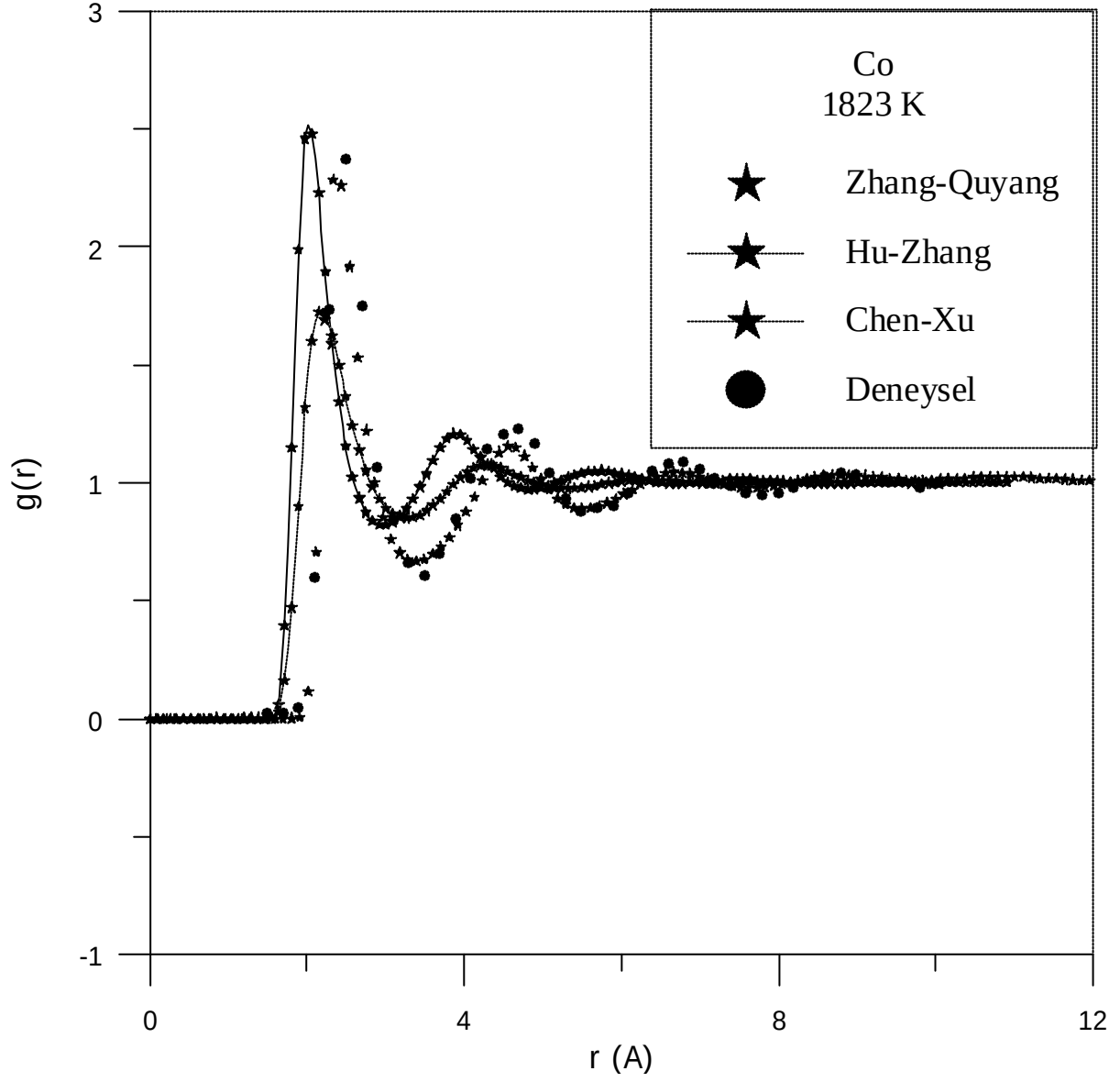
Sekil 5.60: Sivi Mg için $g(r)$ çiftler dagilim fonksiyonu



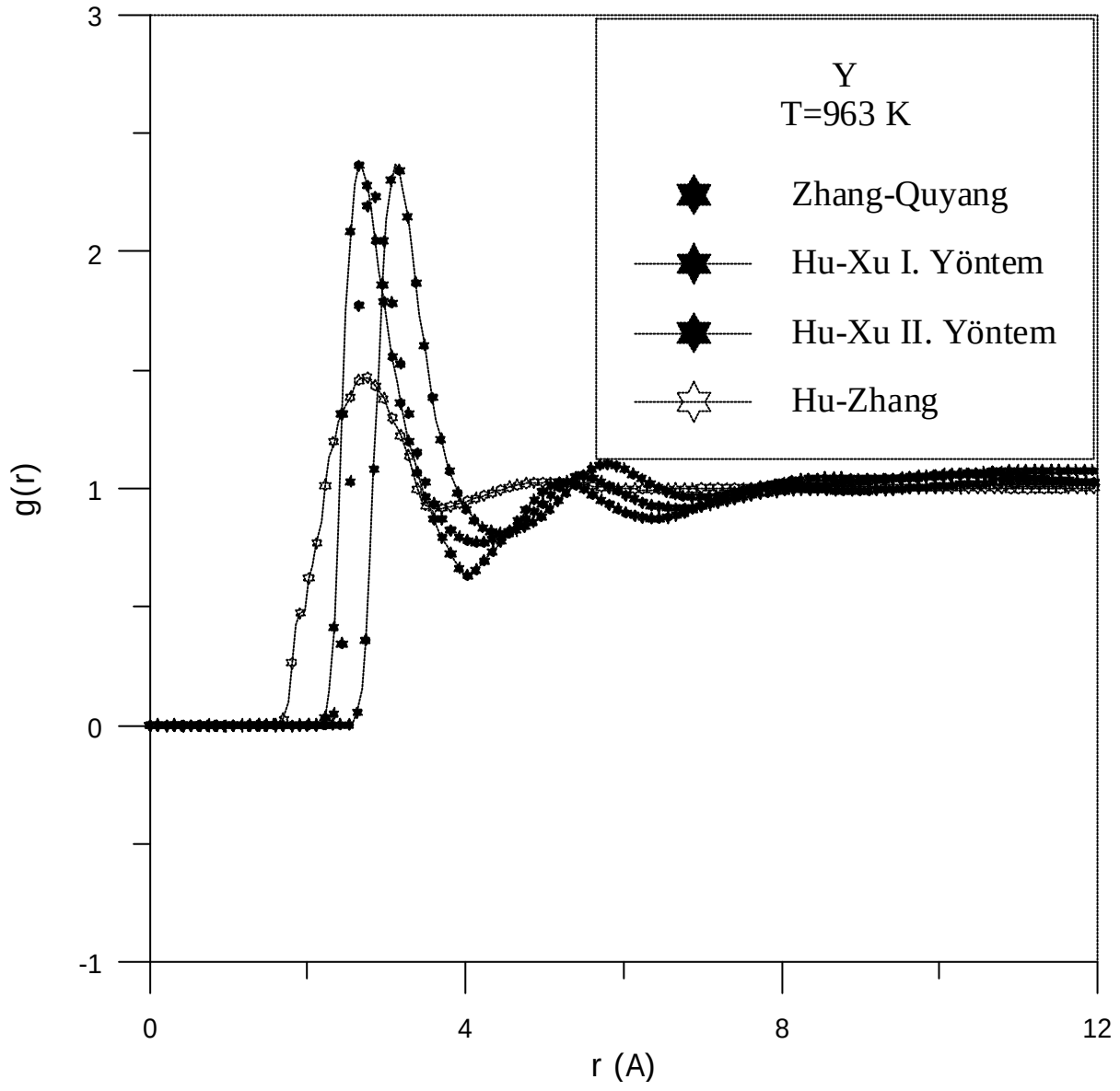
Sekil 5.61: Sivi Sc için $g(r)$ çiftler dagilim fonksiyonu



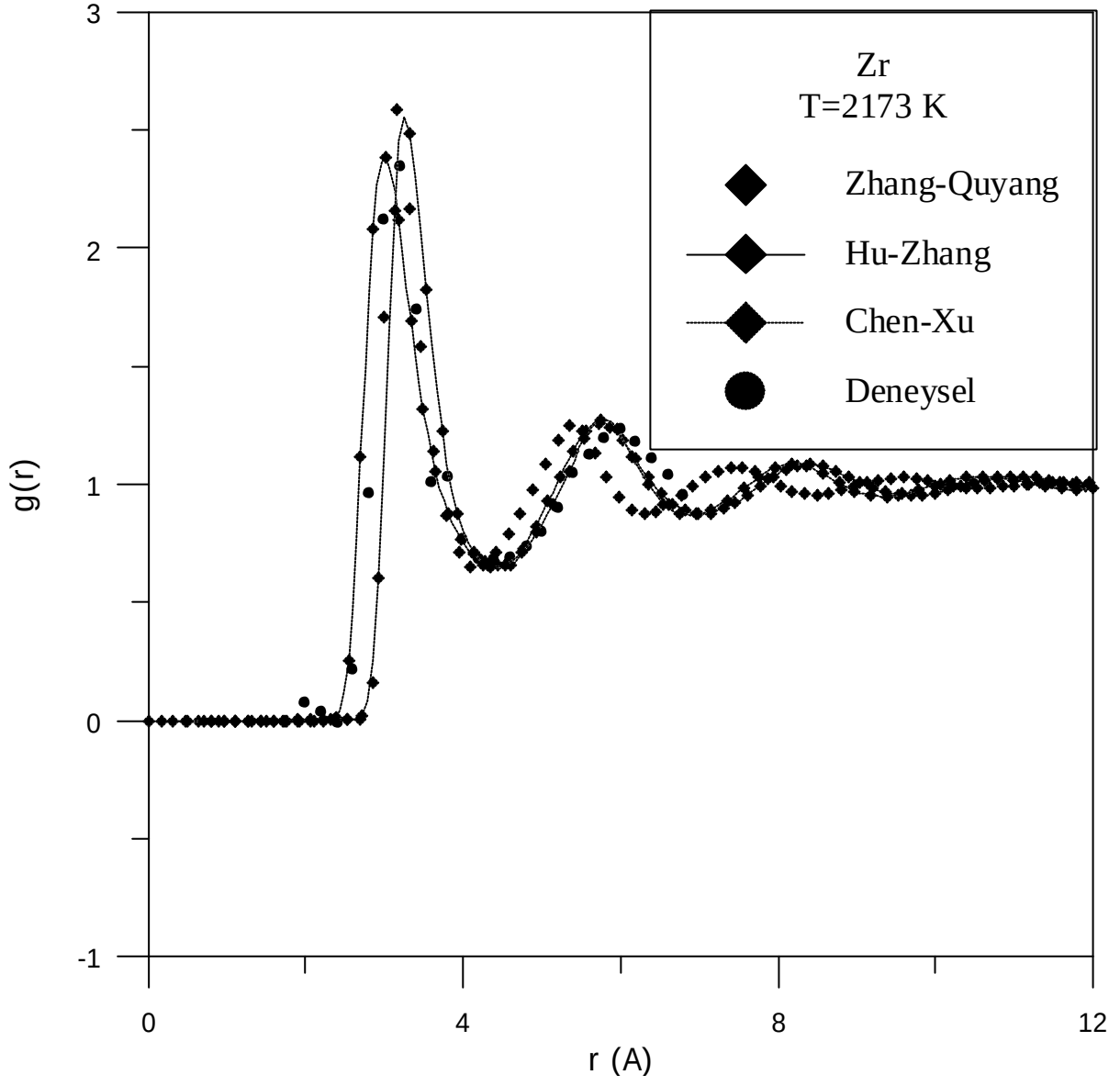
Sekil 5.62: Sivi Ti için $g(r)$ çiftler dagılım fonksiyonu



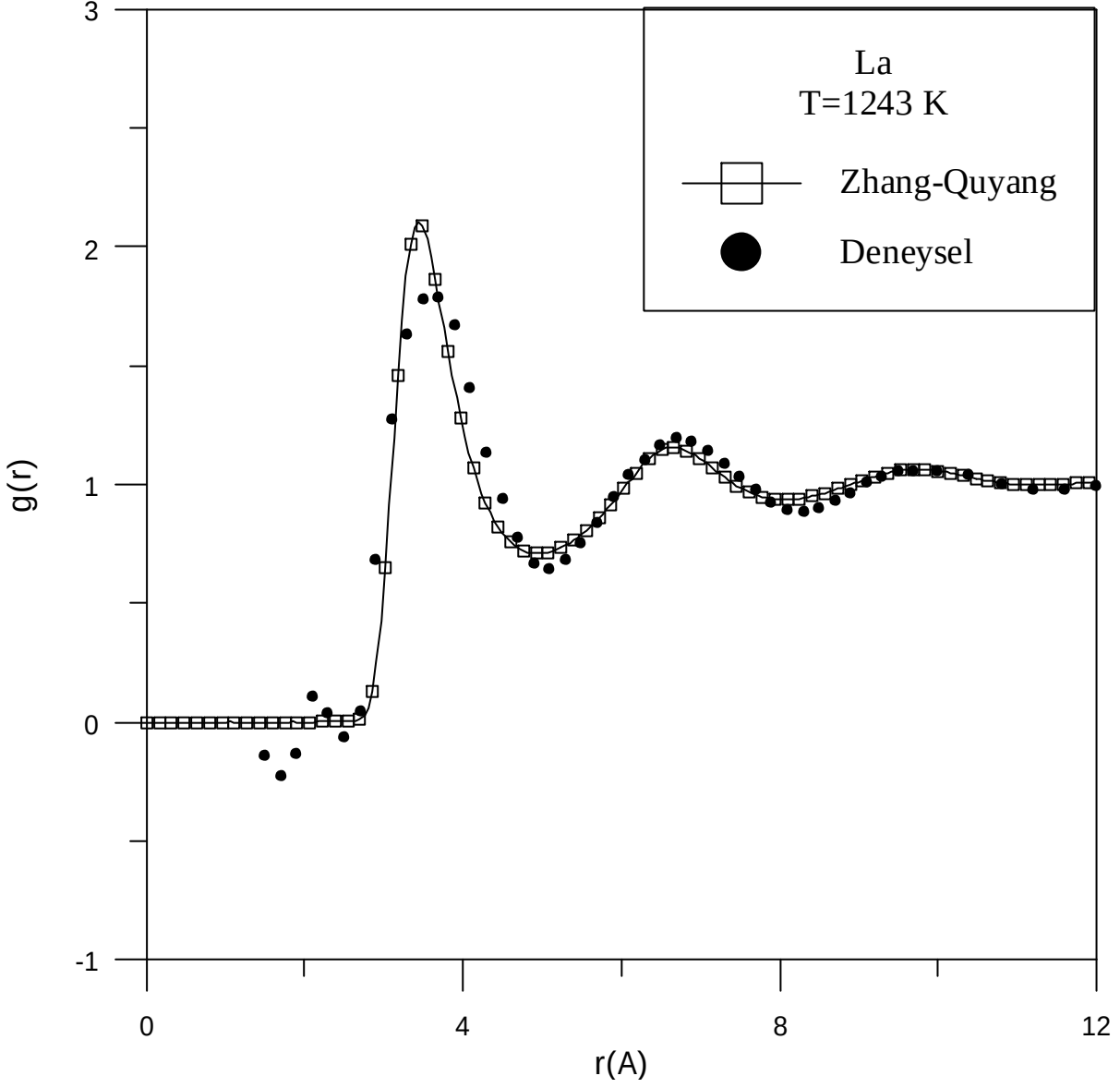
Sekil 5.63: Sivi Co için $g(r)$ çiftler dagılım fonksiyonu



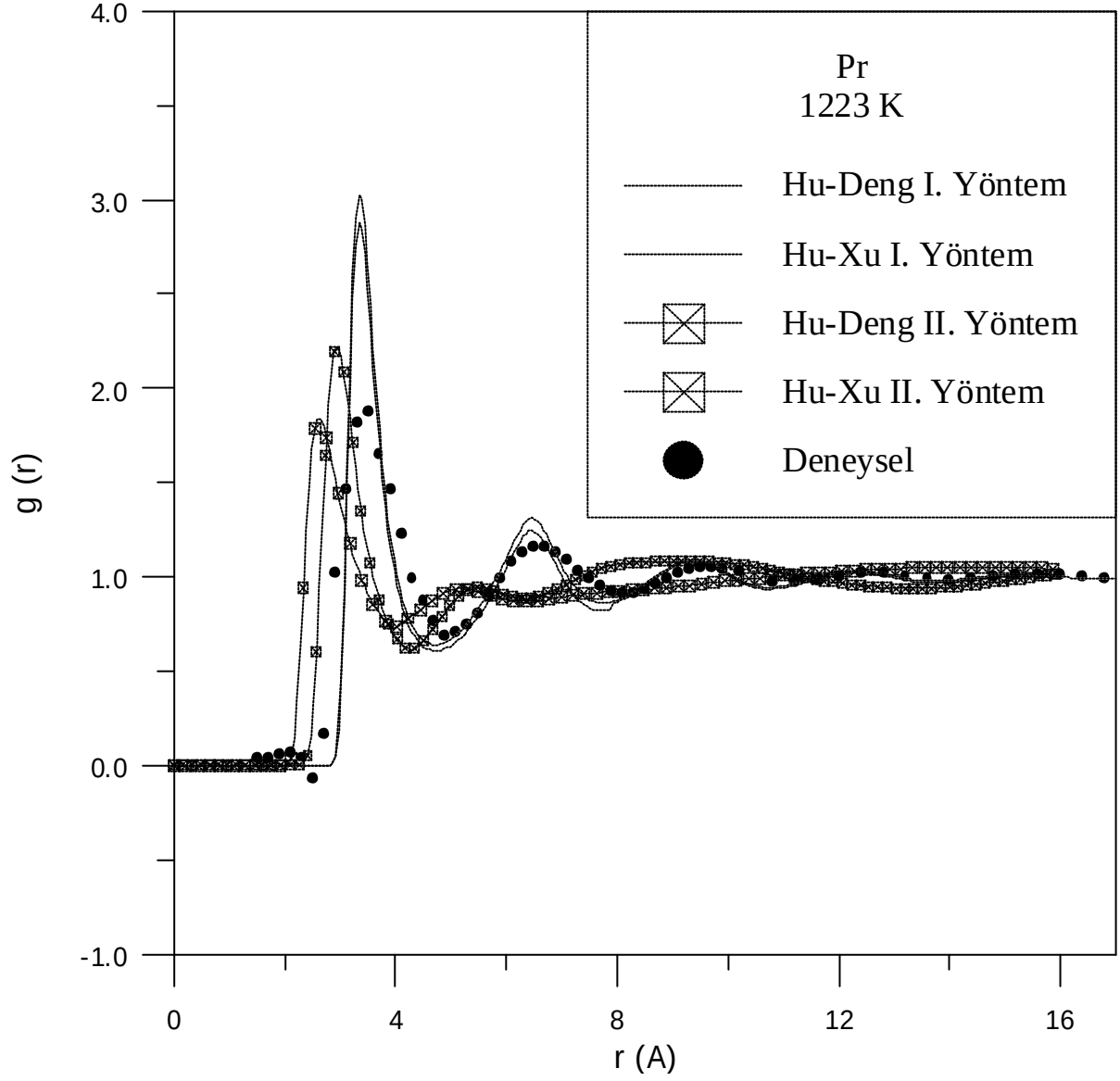
Sekil 5.64: Sivi Y için $g(r)$ çiftler dagilim fonksiyonu



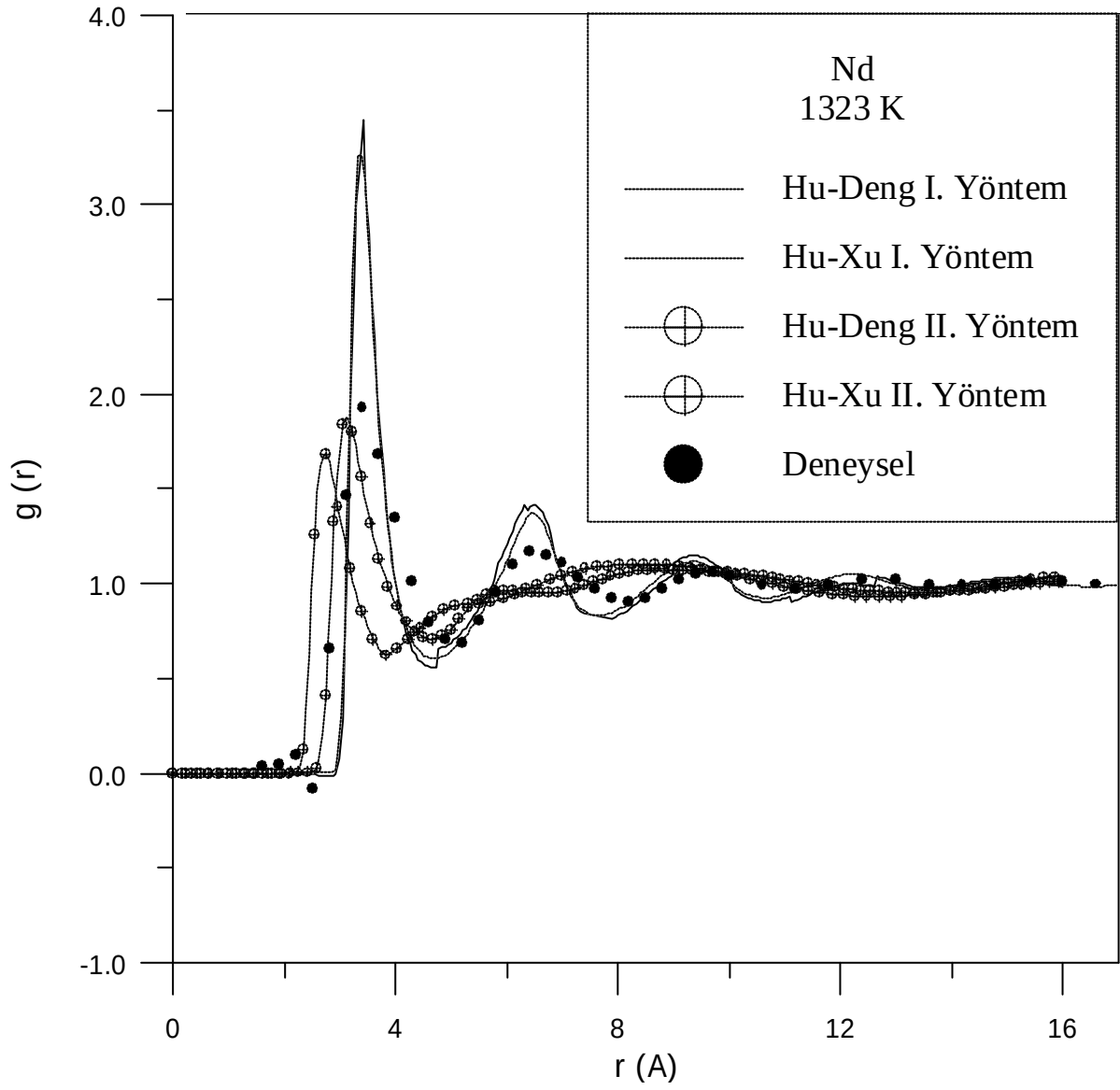
Sekil 5.65: Sivi Zr için $g(r)$ çiftler dagilim fonksiyonu



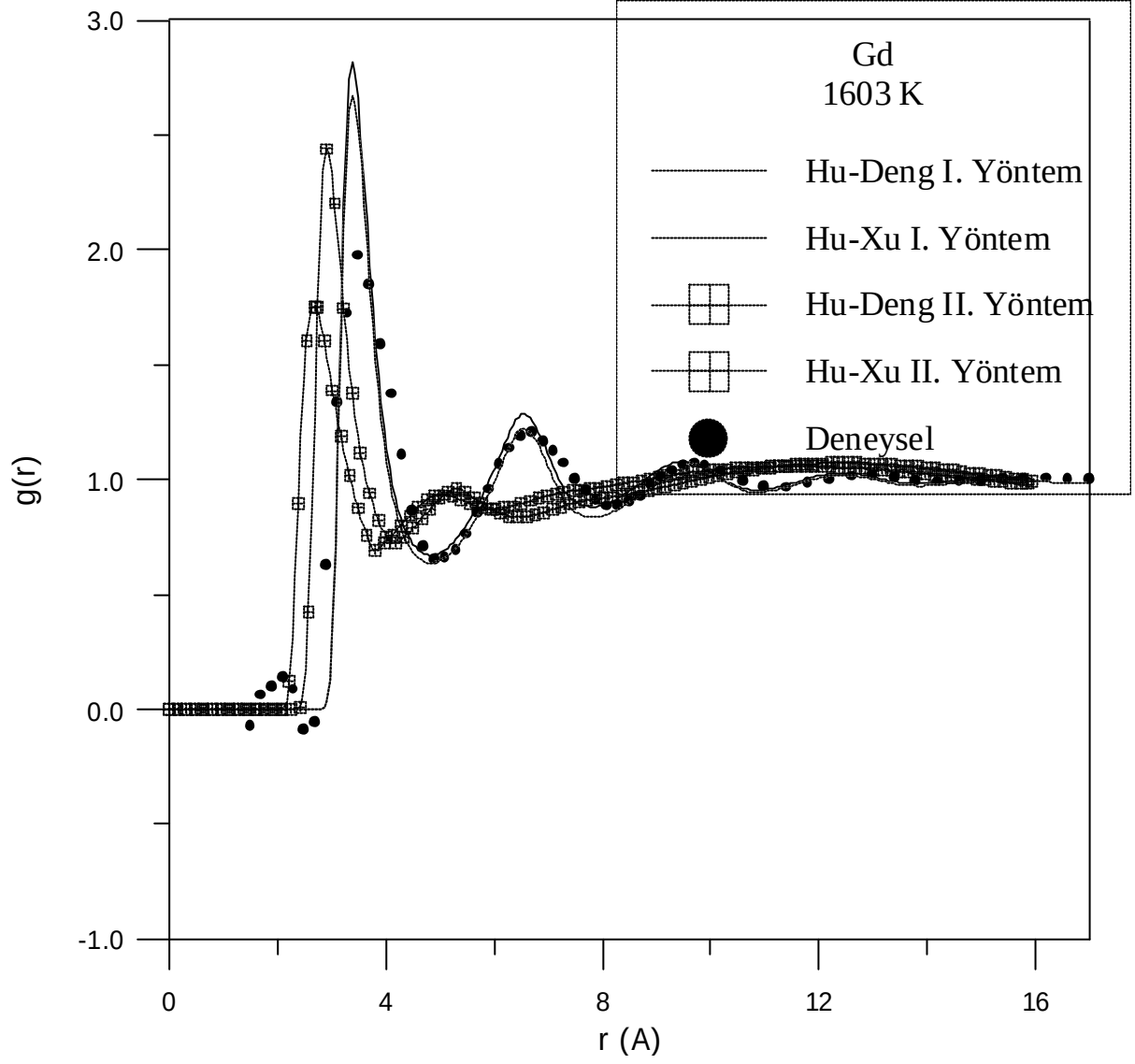
Sekil 5.66: Sivi La için $g(r)$ çiftler dagılım fonksiyonu



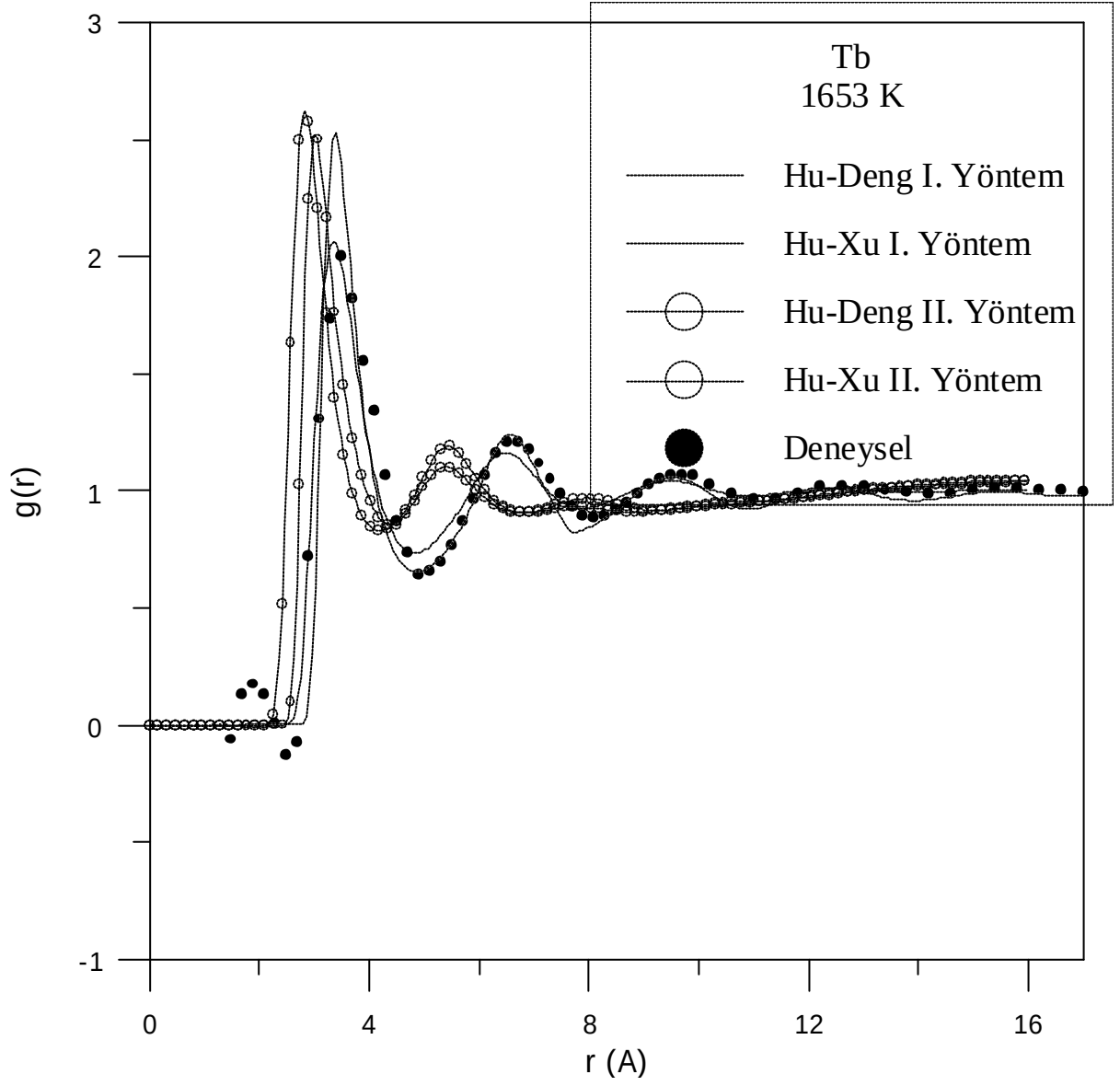
Sekil 5.67: Sivi Pr için $g(r)$ çiftler dagilim fonksiyonu



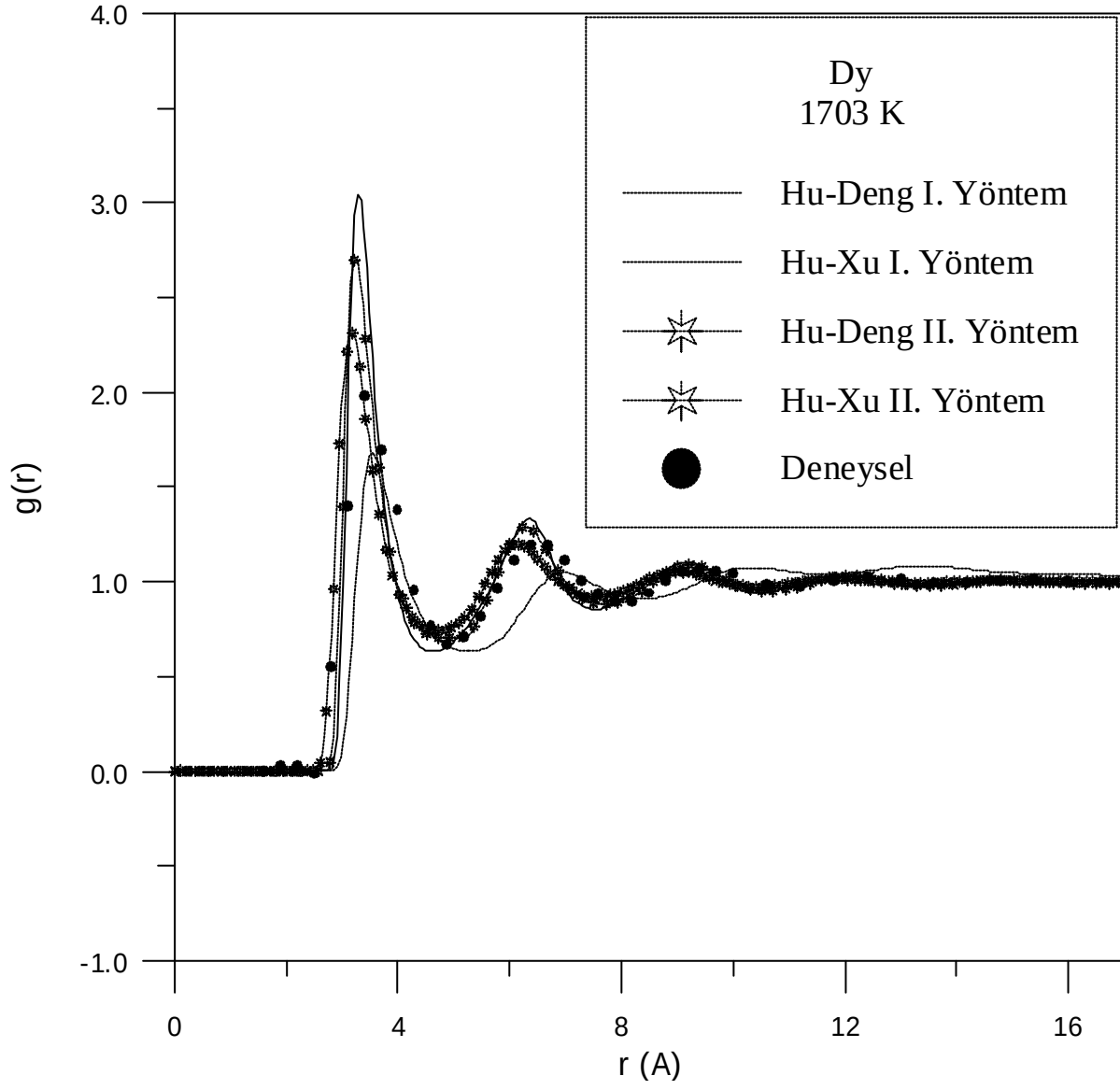
Sekil 5.68: Sivi Nd için $g(r)$ çiftler dagilim fonksiyonu



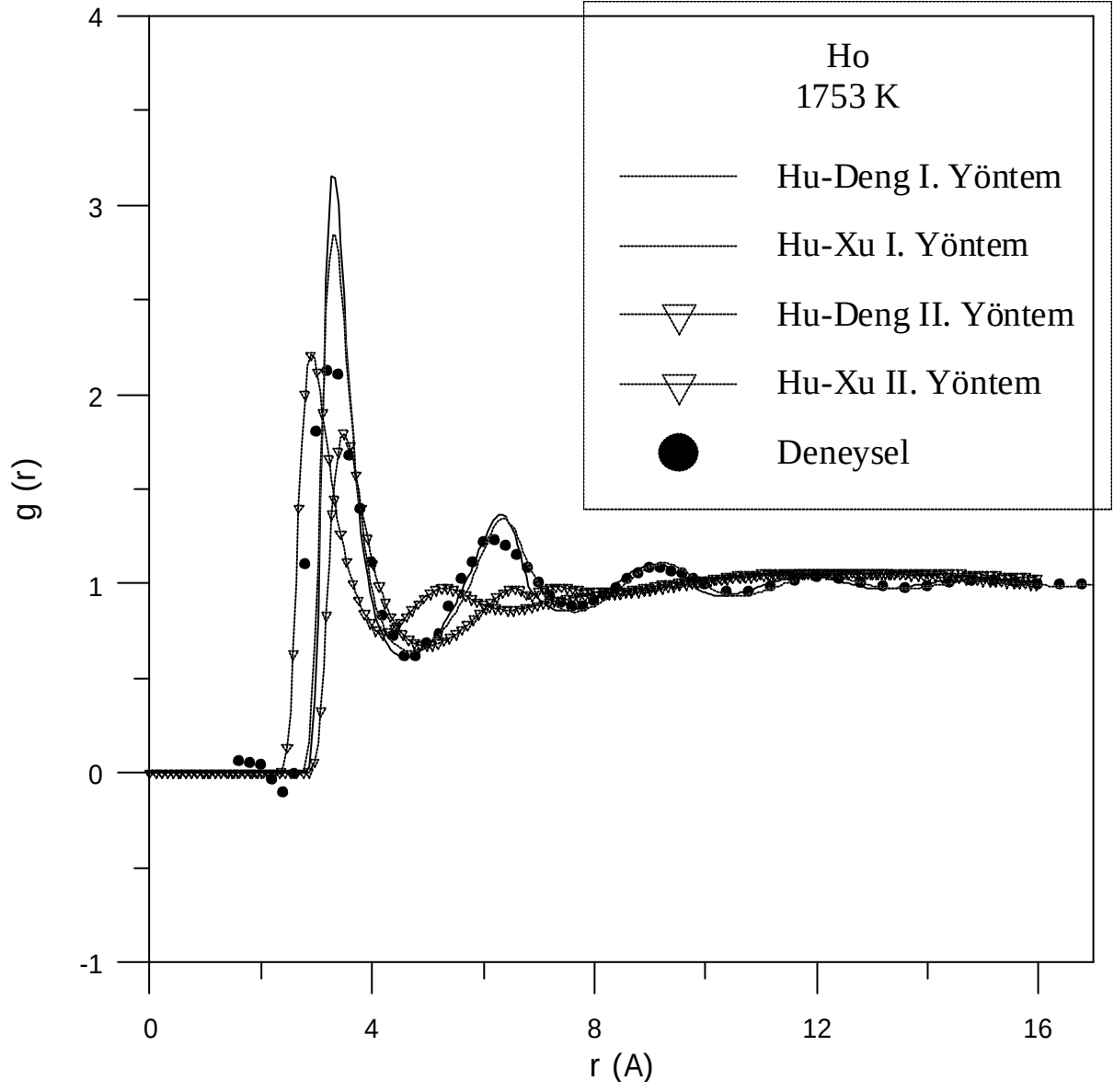
Sekil 5.69: Sivi Gd için $g(r)$ çiftler dagilim fonksiyonu



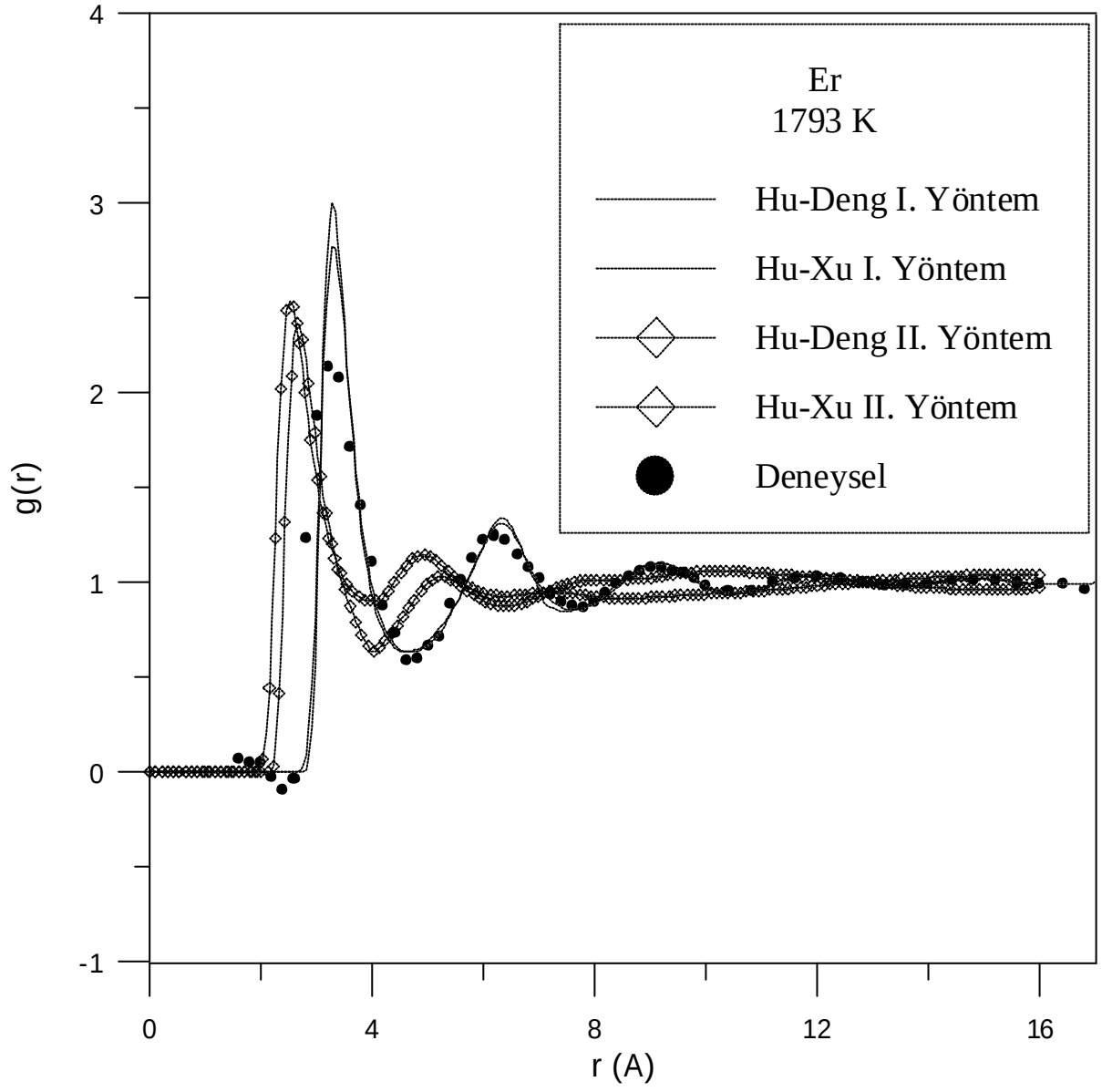
Sekil 5.70: Sivi Tb için $g(r)$ çiftler dagilim fonksiyonu



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



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



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

5.3 Sivi hcp Geçiş Metallerinin İç enerjisi

Bu bölümde sivi Pr, Nd, Gd, Tb, Dy, Ho ve Er için ergime noktaları civarında Hu-Xu ve Hu-Deng'den oluşturulan etkin çiftler potansiyelleri ve sivi Be, Mg,, Sc,Ti, Co, Y, Zr ve La için ergime noktaları civarında Zhang-Quyang, Hu-Xu, Hu-Zhang ve Chen-Xu'dan oluşturulan etkin çiftler potansiyelleri ile VMHNC integral teorisi kullanılarak hesaplanan iç enerji değerleri Tablo 5.7 ve Tablo 5.8'da verilmektedir.

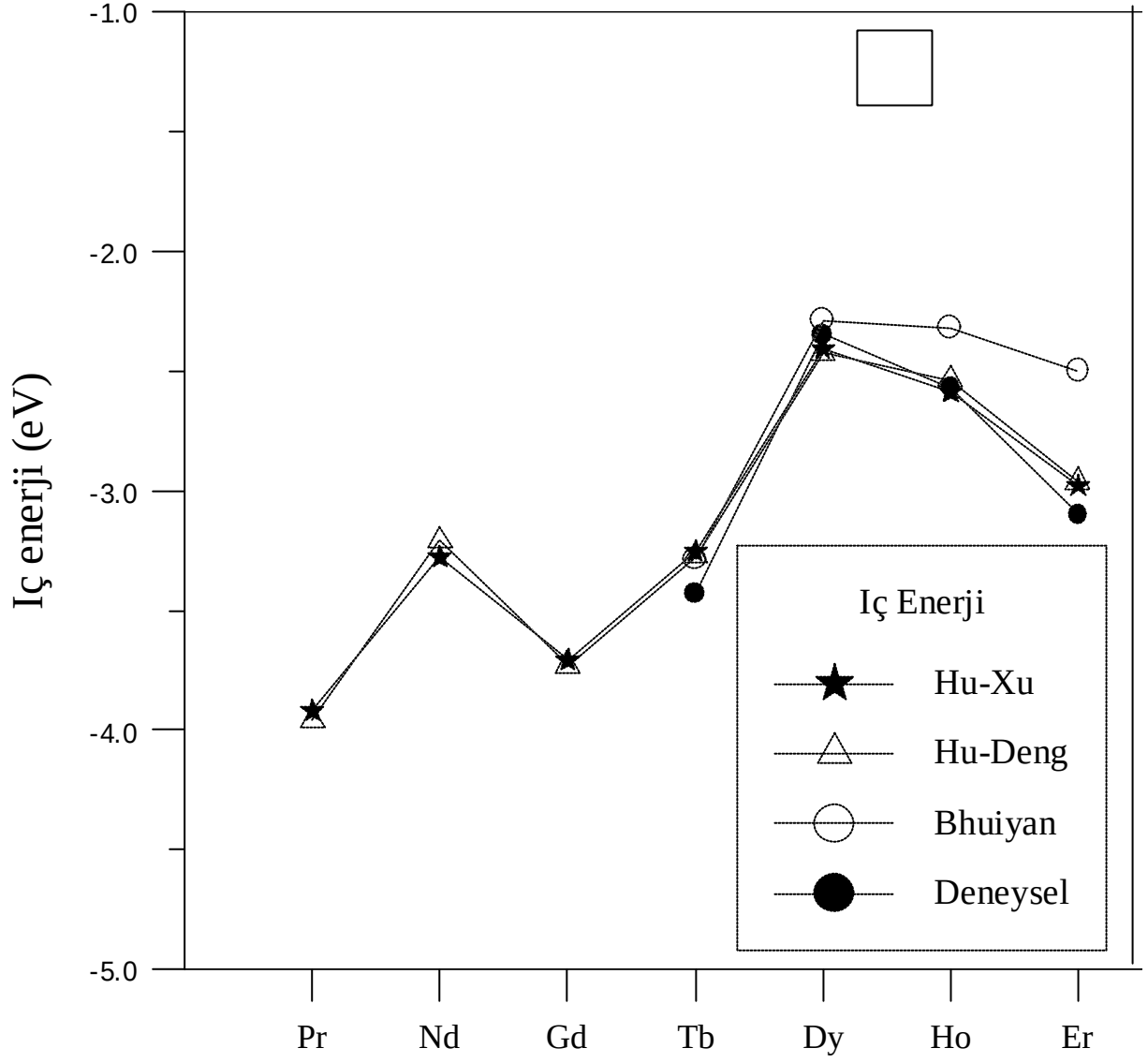
Tablo 5.7: Bazı sivi HCP nadir toprak metalleri için HX-AYDGAM ve HD-AYDGAM ile hesaplanan iç enerji değerlerinin karşılaştırması

Metal	İç Enerji (eV)			
	Hu-Xu	Hu-Deng	Bhuiyan	Deneysel
Pr	-3.92	-3.96	---	---
Nd	-3.28	-3.21	---	---
Gd	-3.71	-3.73	-3.185	-3.5
Tb	-3.256	-3.275	-3.428	-3.285
Dy	-2.41	-2.428	-2.35	-2.29
Ho	-2.59	-2.54	-2.57	-2.32
Er	-2.98	-2.964	-3.1	-2.5

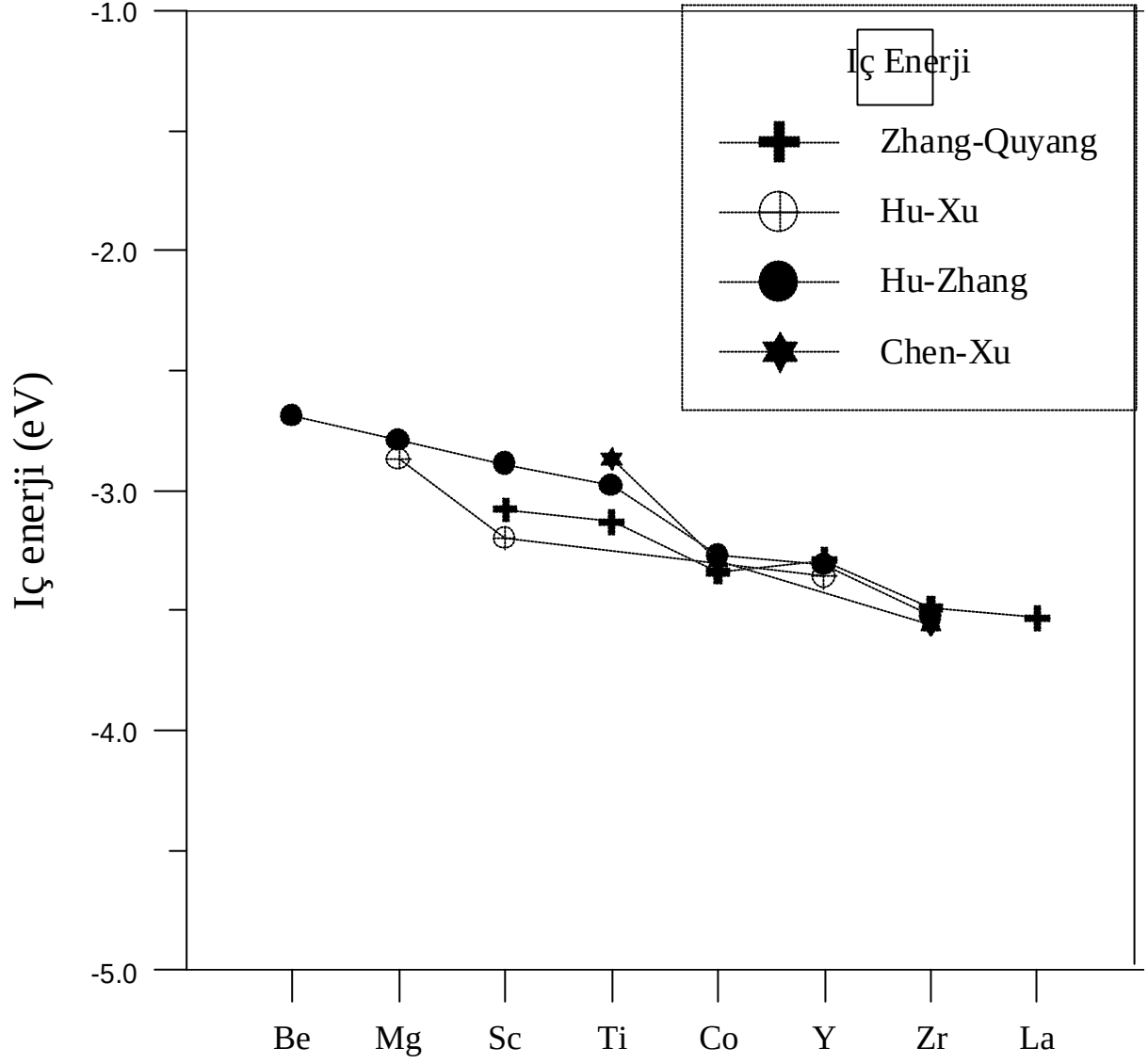
Tablo 5.8: Sivi HCP metalleri için farklı GAM ve AYDGAM modelleri ile elde edilen iç enerji değerleri

Metal	İÇ ENERJİ (eV)			
	Zhang-Quyang	Hu-Xu	Hu-Zhang	Chen-Xu
Be	---	---	-2.69	---
Mg	---	-2.87	-2.79	---
Sc	-3.08	-3.2	-2.89	---
Ti	-3.13	---	-2.98	-2.87
Co	-3.34	---	-3.27	-3.29
Y	-3.29	-3.36	-3.31	---
Zr	-3.49	---	-3.52	-3.56
La	-3.53	---	---	---

Sekil 5.74’ de Hu-Xu ve Hu-Deng I. FS-AYDGAM yönteminden elde edilen potansiyelleri ve VMHNC integral teorisi kullanılarak sivi Pr, Nd, Gd, Tb, Dy, Ho ve Er için elde edilen iç enerji değerleri, deneysel iç enerji değerleri ve Bhuiyan (Bhuiyan, 1998) ’ in bazı metaller için hesaplamış oldukları iç enerji değerleriyle karşılaştırılmıştır. Tablo 5.7 ve Sekil 5.74’ den görüldüğü gibi, hesaplanan iç enerji değerleri deneysel değerlerle iyi bir uyum göstermekte ve Bhuiyan’ nin sonucuna yakın değerde olduğu gözlenmektedir. Sekil 5.75’de Zhang-Quyang, Hu-Xu (I. yöntemden), Hu-Zhang ve Chen-Xu’dan elde edilen potansiyelleri ve VMHNC integral teorisi kullanarak sivi Be, Mg,, Sc,Ti, Co, Y, Zr ve La için elde edilen iç enerji değerleri bazı metaller için karşılaştırmalı olarak gösterilmiş Tablo 5.8’de yazılmıştır.



Sekil 5.74: Sivi Pr, Nd, Gd, Tb, Dy, Ho ve Er için iç enerji degerleri



Sekil 5.75: Sivi Be, Mg,, Sc,Ti, Co, Y, Zr ve La için iç enerji degerleri

5.4 Sivi hcp Geçiş Metallerinin Helmholtz Serbestlik Enerjisi

Bu bölümde sivi Pr, Nd, Gd, Tb, Dy, Ho ve Er için ergime noktaları civarında Hu-Xu ve Hu-Deng'den oluşturulan etkin çiftler potansiyelleri ve sivi Be, Mg, Sc, Ti, Co, Y, Zr ve La için ergime noktaları civarında Zhang-Quyang, Hu-Xu, Hu-Zhang ve Chen-Xu'dan oluşturulan etkin çiftler potansiyelleri ile VMHNC integral teorisi kullanılarak hesaplanan Helmholtz serbestlik enerjisi değerlerinin, Hu-Xu, Hu-Deng ve Bhuiyan'ın değerleri ve deneysel değerlerle karşılaştırılması Tablo 5.9' da verilmektedir. Zhang-Quyang, Hu-Xu, Hu-Zhang ve Chen-Xu'dan hesaplanan değerler ise Tablo 5.10'da gösterilmektedir.

Tablo 5.9: Bazı sivi HCP nadir toprak metalleri için HX-AYDGAM ve HD-AYDGAM ile hesaplanan Helmholtz serbestlik enerjilerinin karşılaştırılması

Metal	HELMHOLTZ SERBESTLIK ENERJISI (eV)			
	Hu-Xu	Hu-Deng	Bhuiyan	Deneysel
Pr	-5.61	-5.53	---	---
Nd	-4.27	-4.12	---	---
Gd	-5.36	-5.41	-5.215	-5.5
Tb	-5.72	-5.625	-5.79	-5.285
Dy	-4.68	-4.6	-4.785	-4.3
Ho	-4.83	-4.78	-4.93	-4.57
Er	-5.18	-5.148	-5.143	-4.97

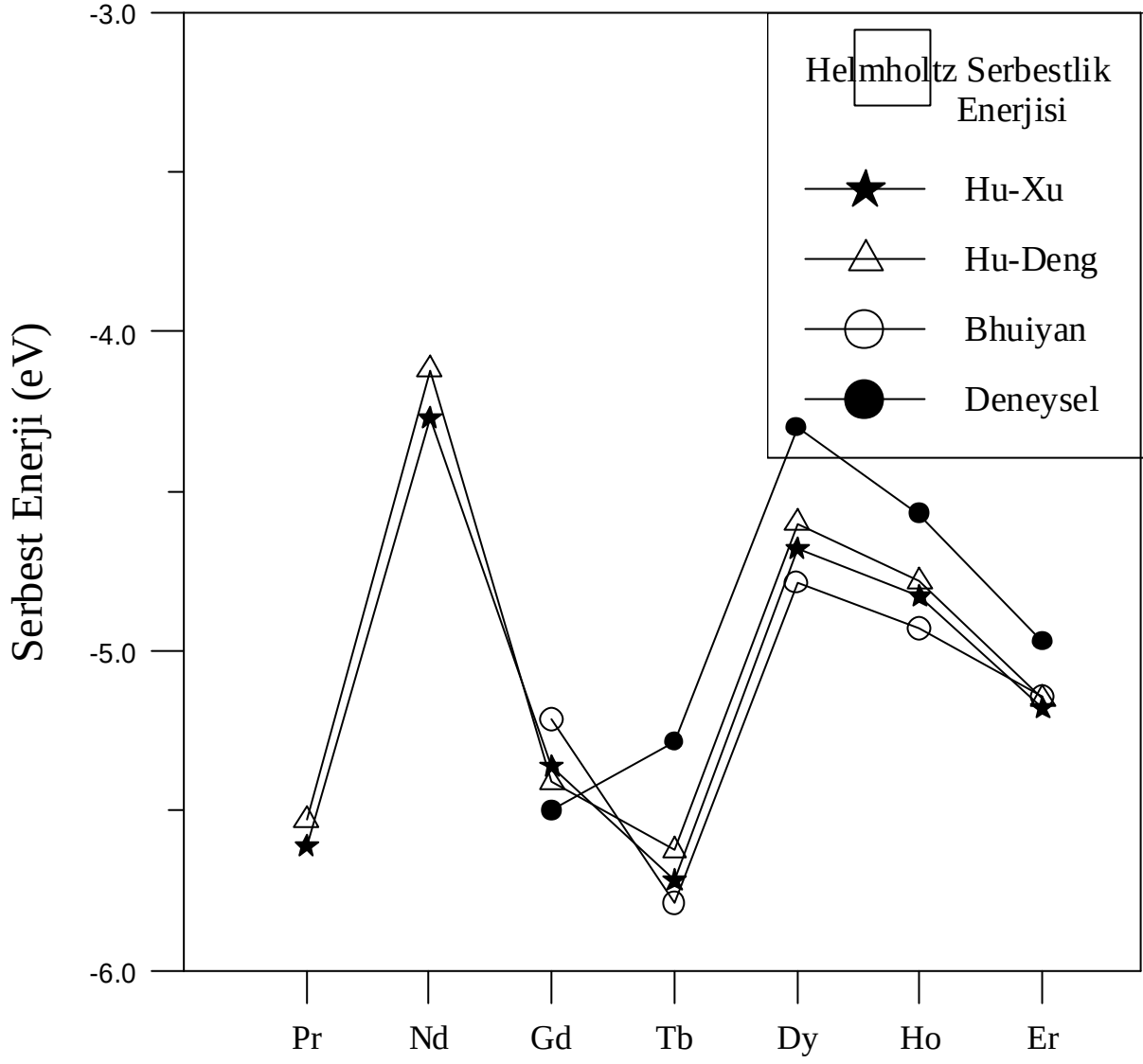
Sekil 5.76' da Hu-Xu ve Hu-Deng'in I. FS-AYDGAM yönteminden hesaplanan potansiyelleri ve VMHNC integral teorisi kullanılarak sivi Pr, Nd, Gd, Tb, Dy, Ho ve Er için elde edilen Helmholtz serbestlik enerji değerleri Bhuiyan (Bhuiyan, 1998) hesaplamış olduğu bazı metaller için değer ve deneysel Helmholtz serbestlik enerji değerleriyle karşılaştırılmıştır. Tablo

5.10 ve Sekil 76' dan görüldüğü gibi, Hu-Xu ve Hu-Deng'den çıkan sonuçlar birbirleriyle uyumlu olduğu, deneysel ve Bhuiyan'ın sonuçlarıyla biraz farklılık göstermektedir.

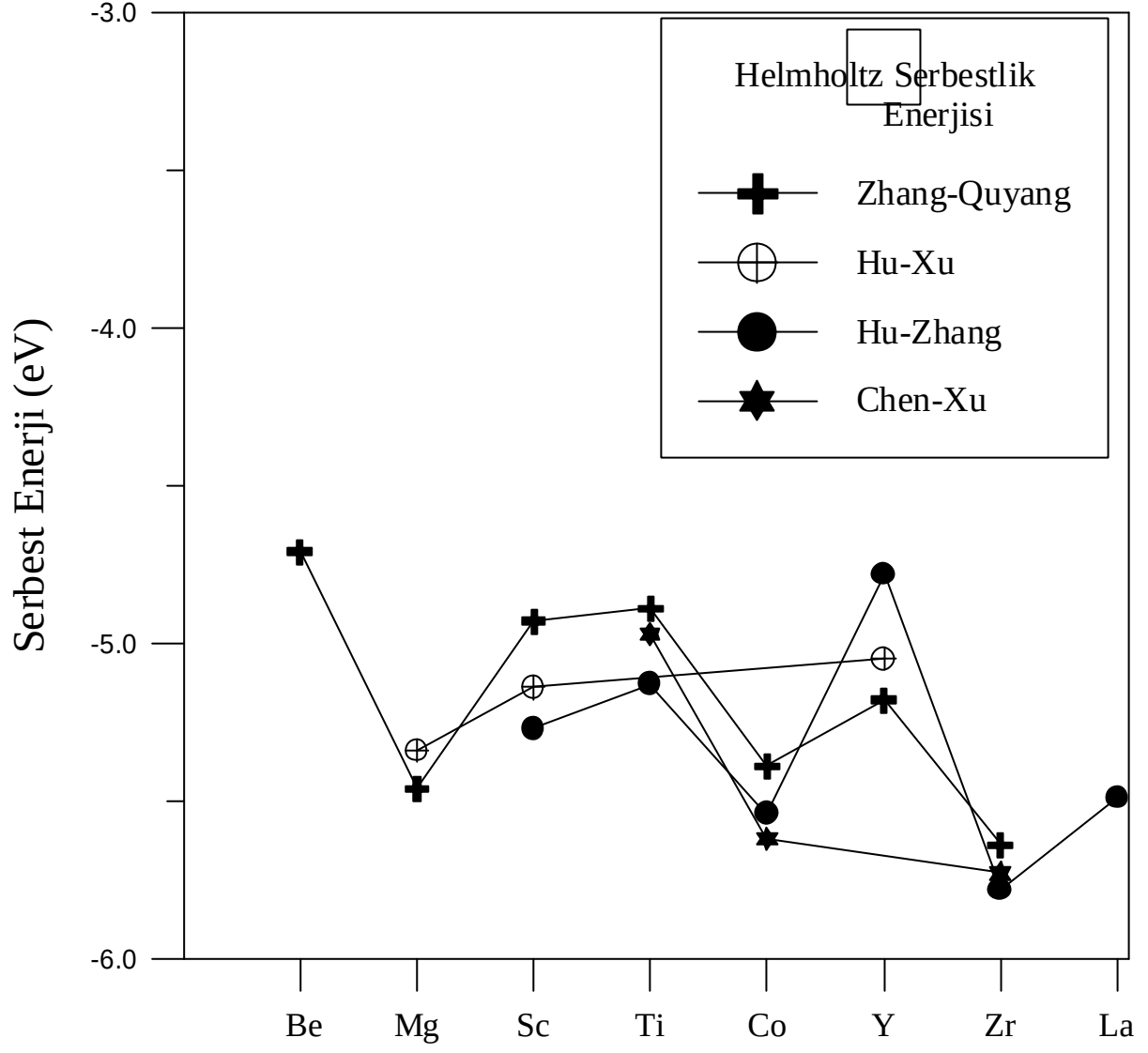
Tablo 5.10: Sivi HCP metalleri için farklı GAM ve AYDGAM modelleri ile hesaplanan Helmholtz serbestlik enerjilerinin karşılaştırılması

Metal	HELMHOLTZ SERBESTLIK ENERJISI (eV)			
	Zhang-Quyang	Hu-Xu	Hu-Zhang	Chen-Xu
Be	---	---	-4.71	---
Mg	---	-5.34	-5.46	---
Sc	-5.27	-5.14	-4.93	---
Ti	-5.13	---	-4.89	-4.97
Co	-5.54	---	-5.39	-5.62
Y	-4.78	-5.05	-5.18	---
Zr	-5.78	---	-5.64	-5.73
La	-5.49	---	---	---

Sekil 5.77'de Zhang-Quyang, Hu-Xu (I. yöntemden), Hu-Zhang ve Chen-Xu'dan hesaplanan potansiyelleri ve VMHNC integral teorisi kullanarak sivi Be, Mg,, Sc,Ti, Co, Y, Zr ve La için elde edilen Helmholtz serbestlik enerji değerleri bazı metaller karşılaştırılarak gösterilmiştir.



Sekil 5.76: Sivi Pr, Nd, Gd, Tb, Dy, Ho ve Er için Helmholtz serbestlik enerji degerleri



Sekil 5.77: Sivi Be, Mg,, Sc,Ti, Co, Y, Zr ve La için Helmholtz serbestlik enerjisi degerleri

5.5 Sivi hcp Geçis Metallerinin Entropisi

Bu bölümde Be, Mg,, Sc,Ti, Co, Y, Zr, La, Pr, Nd, Gd, Tb, Dy, Ho ve Er için ergime noktaları civarında entropileri hesaplanmıştır. Entropisini hesapladığımız metallerden Tb, Dy, Ho, Er, ve Gd deneysel değerleri ile Bhuiyan (Bhuiyan, 1998)'in hesapladığı değerler karşılaştırılmıştır. Metallerin entropi değerleri Tablo 5.11 ve Tablo 5.12 gösterilmiştir.

Tablo 5.11: Bazı sivi nadir toprak metalleri için HX-AYDGAM ve HD- AYGAM ile elde edilen entropi değerleri

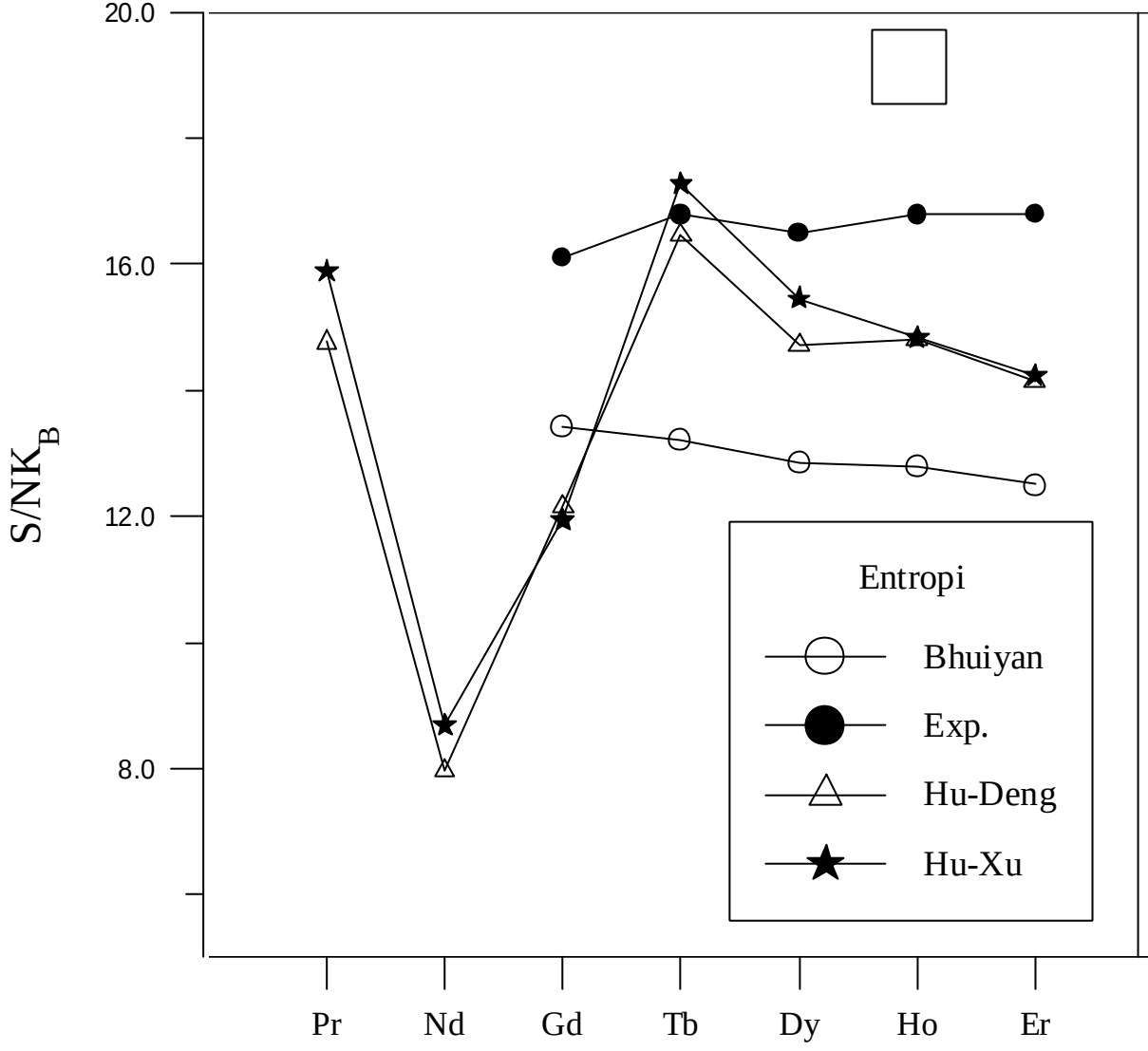
Metal	ENTROPI (eV/K)			
	Hu-Xu	Hu-Deng	Bhuiyan	Deneysel
Pr	15.89	14.76	---	---
Nd	8.68	7.97	---	---
Gd	11.93	12.15	13.41	16.1
Tb	17.28	16.46	13.22	16.78
Dy	15.45	14.72	12.85	16.5
Ho	14.81	14.81	12.8	16.78
Er	14.22	14.15	12.5	16.8

Sekil 5.78'den de görüldüğü gibi hesaplanan entropi değerleri deneysel ve Bhuiyan'ın bulduğu değerler arasındadır. Nd ve Gd'nin karşılaştırmaları olmadığı için hesaplanan değerleri gösterilmiştir.

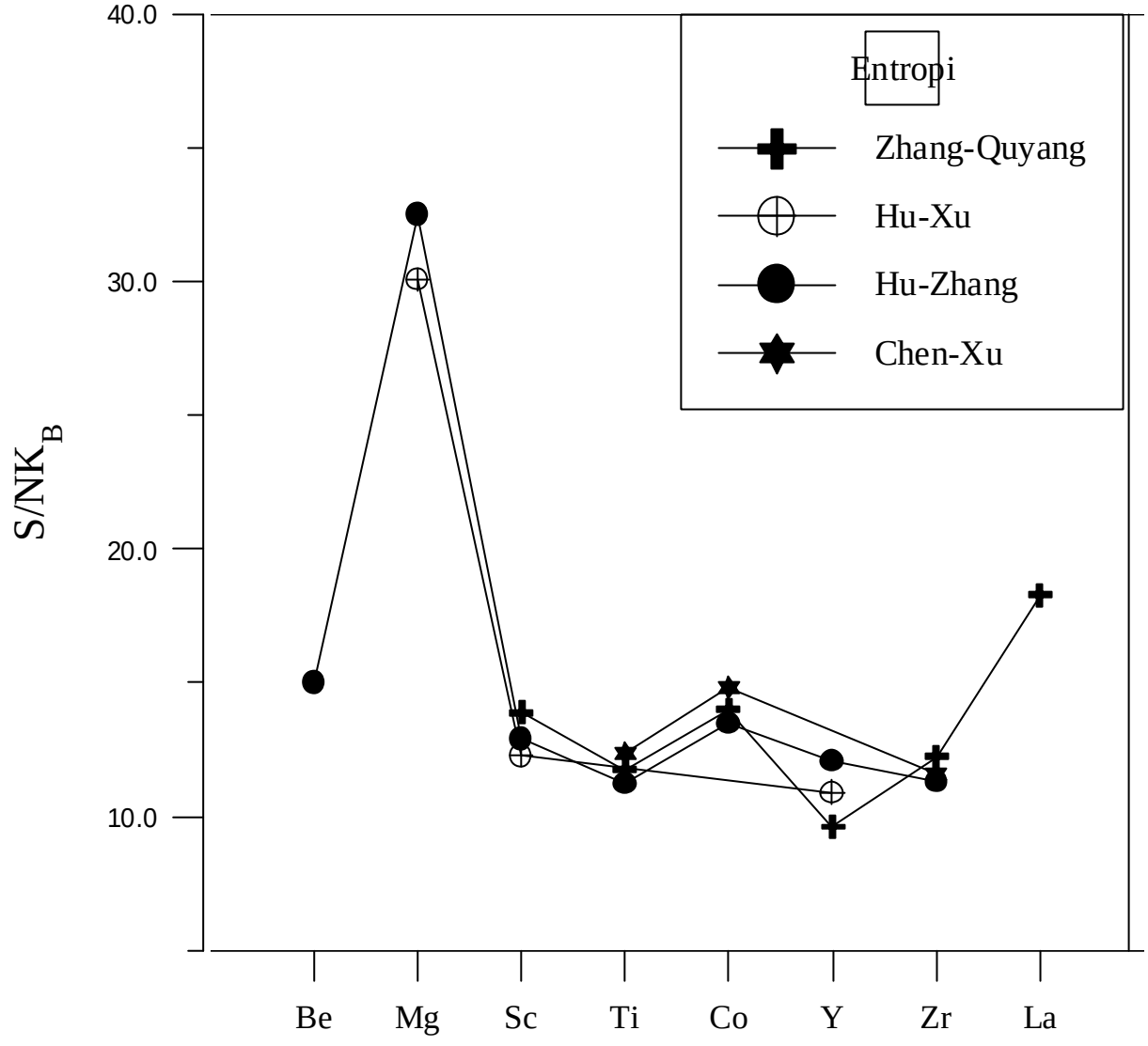
Tablo 5.12: Sivi HCP geis metalleri iin farkli GAM ve AYDGAM modelleri ile elde edilen entropi degerleri

Metal	ENTROPI (eV/K)			
	Zhang-Quyang	Hu-Xu	Hu-Zhang	Chen-Xu
Be	---	---	15.01	---
Mg	---	30.05	32.48	---
Sc	13.90	12.27	12.90	---
Ti	11.75	---	11.22	12.34
Co	13.99	---	13.48	14.82
Y	9.62	10.91	12.08	---
Zr	12.22	---	11.311	11.82
La	18.28	---	---	---

Sekil 5.79’da Zhang-Quyang, Hu-Xu, Hu-Zhang ve Chen-Xu’den hesaplanan entropi degerleri birbiriyle karsilastirmali olarak gsterilmistir.



Sekil 5.78: Sivi Pr, Nd, Gd,Tb, Dy, Ho ve Er için entropi degerleri



Sekil 5.79: Sivi Be, Mg,, Sc,Ti, Co, Y, Zr ve La için entropi degerleri

5.6 Sonuç

Bu çalışmada sıvı hcp metallerinin hem katıhal hem de sıvıhal özellikleri kullanılarak hem yapı hem de termodinamik özellikleri doğru veren çiftler potansiyelini elde edebilme yöntemleri denenmiş; Mg, Be, Zr, Y, Co, Sc, Ti, La, Tb, Dy, Ho, Er, Gd, Nd ve Pr metalleri ile GAM, AGAM ve ADGAM fonksiyonları ve hal denklemleri ile çalışılmıştır. Bu tezde sıvılar için öne sürülen parametrizasyon ile başarılı sonuçlar elde edilmiştir. Tb, Dy, Ho ve Er için ergime noktası civarındaki yapısal özellikleri en iyi veren yöntemin Hu-Deng potansiyel fonksiyonları hal denklemi parametrizasyonu ile Finnis – Sinclair etkin çiftler potansiyel yaklaşımı kullanılarak hesaplanan etkin çiftler potansiyeli ile elde edilen VMHNC sonuçlarının olduğu tespit edilmiştir. Genel olarak hcp metalleri ele alınacak olur ise ADGAM etkin çiftler potansiyelleri ile VMHNC sonuçlarının deneysel değerlere daha yakın olduğu görülür. Zr, Ti sistemleri için Chen-Xu GAM etkin çiftler potansiyelleri ile VMHNC sonuçlarının deneysel değer ile uyumlu olduğu elde edilmiştir. Termodinamik özellikler olarak, Hu-Deng ADGAM+VMHNC ile hesaplanan iç enerji, serbestlik enerjisi ve entropi deneysel değer ile Bhuiyan'ın GAM modelleri ile elde ettiği sonuçlara en yakın olduğu gözlenmiştir.

KAYNAKLAR

- Ackland G.J., Philos. Mag. A 66: 917, (1992)
- Ackland G.J., Wooding S.J., Bacon D.J., Philos. Mag. A 71: 553, (1995)
- Bacon D.J., J. Nucl. Mater. 159:176, (1988)
- Bacon D.J., J. Nucl. Mater. 249: 206, (1993)
- Barrett C S and Massalski T B (eds) 1980 Structure of Metals 3 rd edn, (New York: Pergamon) p 629
- Baskes M. I., Phys. Rev. Lett. 59, 2666, (1987)
- Baskes M. I., Nelson J. S. and Wright A. F., Phys. Rev.B, 40, 6085, (1989)
- Baskes M. I., Phys. Rew. B, 46, 2727, (1991)
- Baskes M I and Johnson R A 1994 Mod Simul. Mater. Sci. Eng 2 147
- Baskes M. I., Johnson R.A., Model. Simul. Mater. Sci. Eng. 2, 147,(1994)
- Bhuiyan G. M., Khaleque M.A., J. Non-Cryst Solids 226, 175, (1998)
- Chen S., Xu J., Zhang H., *Compt. Mater. Sci.* 29, 428, (2004)
- Dalgıç S., Gonzalez L. E., Gonzalez D. J. ve Silbert M. *J. Non-Cryst Solids*, 906 :205-207, 1996.
- Dalgıç S. S. ve Kalayci S. Sivi nadir toprak metalleri için çok cisimli analitik düzenlenmiş gömülü atom potansiyelleri, 21. Uluslararası Türk Fizik Dernegi Özetler Kitabı, 2004, Bodrum
- Dalgıç S. S. ve Kalayci S. Structure of Liquid Rare-Earth Metals using an Analytic Embedded Atom Method, 7. *Ulusal Sivil Fizik Sempozyumu*, Özetler kitabı Sf. 14, 2003, İstanbul
- Dalgıç S.S., Dalgıç S., Sengül S., Celtek M., Tezgör G., J. Opt. And Adv. Mater. 3, (4) 831, (2001)
- Dalgıç S. S., Dalgıç S., Dömekeli U., J. Opt. And Adv. Mater.5, (5) 1263, 20, (2003)
- Daw M. S., *Phys. Rev. B* 39, 7441, (1989)
- Daw M. S. ve Baskes M. I. *Phys. Rev. Lett.* 50: 1285, 1983.
- Daw M. S. ve Baskes M. I. *Phys. Rev. B* 29: 6443, 1984.
- Dömekeli Ü. Yüksek Lisans Tezi, T. Ü. Fen Bilimleri Ens., Edirne, 2003.
- Finnis M. W. ve Sinclair J. E. *Phil. Mag. A* 50: 45,1984.
- Fischer I.Z. Statistical theory of liquids, Chicago, 1964

- Foiles S. M. ve Baskes M. I. *Mater. Sci. Rep* 9: 251, 1993.
- Foiles S. M. ve Baskes M. I. ve Daw M. S. *Phys. Rev. B* 33: 7983, 1986.
- Goldstein A.S., Joonsson H., *Phil. Mag. B* 71, 176, (1995)
- Gonzalez L. E., Gonzalez D. J. ve Silbert M. *Phys. Rev. A* 45: 3803, 1992.
- Hansen J. P. ve McDonald I. R. *Theory of Simple Liquids*, Academic Press, New York, 1986.
- Hu W., Xu H., Shu X., Yuan X., Gao B. and Zhang B., *J. Phys. D: Appl. Phys.* 33, 711 (2000)
- Hu W., Zhang B., Huang B., Gao F., Bacon D.J., *J. Phys.: Cond. Matt.* 13: 1193, (2001)
- Hu W., Fukumoto M., *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.* 10: 707, (2002)
- Hu W., Deng H., Yuan X., Fukumoto M., *Eur. Phys. J. B* 34: 429, (2003)
- Hutgren R. *Selected Values of Thermodynamic Properties of Elements*, American Society for Metals, Ohio, 1973.
- Igarashi M, Kanta k and Vitek V 1991 *Phil. Mag. B* 63 603
- Johnson R.A., *Philos. Mag. A* 63: 865, (1991)
- Johnson R.A., Oh D.J., *J. Mater. Res.* 4: 1195, (1989)
- Johnson R. A. *Phys. Rev. B* 6: 2094, 1972.
- Johnson R. A. *Phys. Rev. B* 37, 3924, (1988)
- Johnson R. A. in *Many Atom Interactions*, *Proceedings in Physics*, 48, Springer - Verlag, Berlin, 1990.
- Kittel C. *Introduction to Solid State Physics*, 4. Baski, Wiley, New York, 1971.
- Moruzzi N. L., Janak J. F. ve Williams A. R. *Calculated Electronic Properties of Metals*, Pergoman, New York, 1978.
- Oh D.J., Johnson R.A., *J. Mater. Res.* 3: 471, (1988)
- Pasianot R., Farkas D., Savino E. J., *Phys. Rev. B*, 43, 6952, (1991)
- Pasianot R, Savino E. J., *Phys. Rev. B*, 45, 22, (1992)
- Pasianot R, Savino E. J., *Phys. Stat. Sol.(B)*, 176, (1993)
- Percus J. K. Ve Yevick G. J. *Phys. Rev.* 110: 1, 1958.
- Rose J. H., Smith J. R., Guinea F. ve Ferrante J. *Phys. Rev. B* 29: 2963, 1984.
- Rose J. H., Ferrante J. ve Smith J. R. *Phys. Rev. Lett.* 47: 675, 1981.
- Rosenfeld Y. *J. Stat. Phys.* 42: 437, 1986.

- Savino J., Rao S., Pasianot R., Atomic Scale Calculations in materials Science, Material Research society, p. 43, Baston, (1988)
- Simmons G. ve Wang H. Single Crystal Elastic Constants and Calculated Aggregate Properties, a Handbook, 2. Baski, MIT Press, Cambridge, Mass., 1971.
- Voter A. F. Intermetallic Compounds, John Wiley ve Sons, 1, 4, New York, 1994.
- Waseda Y. The Structure of Non - Crystalline Materials, McGraw - Hill Publ. Co., New York, 1980.
- Zerah G., *J. Comput. Phys.* 61: 280, 1985.
- Zhang B., Quyang Y., *Z. Phys. B* 92, 431-435, (1993)

ÖZGEÇMİS

1976 yılında Karahallı’da doğdu. İlköğrenimini Zonguldak İnagzi İlköğretim Okulun’da orta öğrenimini Erzincan Merkez İlköğretim Okulun’ da, Lise öğrenimini ise Edirne Lisesi’ nde tamamladı. Eylül 1994’ te Trakya Üniversitesi Fen – Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümü’ nde başladığı Fizik lisans eğitimini Temmuz 1998’ de tamamladı. Eylül 2002 tarihinde yüksek lisans eğitimime başladı. Haziran 2004’ten beri Edirne Kültür Dershanesi’nde fen bilgisi ve fizik öğretmenliği yapmaktadır.