

85949

**BAZI Fe-BAZLI ALAŞIMLARIN ÖRGÜ DİNAMİĞİ ve
BİR İNCE FİLM ÇALIŞMASI**

Gökay UĞUR

**DOKTORA TEZİ
FİZİK**

T.C. YÜKSEKÖĞRETİM KURULU

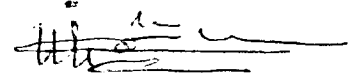
**GAZİ ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

85949

Haziran 1999

ANKARA

Gökay UĞUR tarafından hazırlanan BAZI Fe-BAZLI ALAŞIMLARIN ÖRGÜ DİNAMİĞİ ve BİR İNCE FİLM ÇALIŞMASI adlı bu tezin Doktora tezi olarak uygun olduğunu onaylarım.

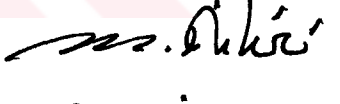


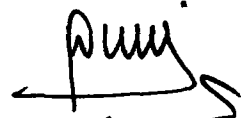
Doç. Dr. İrfan AKGÜN

Tez Yöneticisi

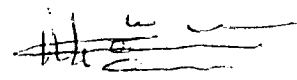
Bu çalışma, jürimiz tarafından FİZİK Anabilim Dalında Doktora tezi olarak kabul edilmiştir.

Başkan : Prof. Dr. Tahsin Nuri Durlu 

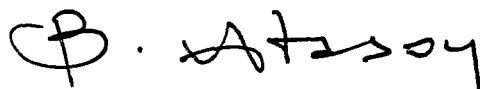
Üye : Prof. Dr. Mustafa Dikiçi 

Üye : Prof. Dr. Mehmet ZENGİN 

Üye : Doç. Dr. Ali Gencer 

Üye : Doç. Dr. İrfan Akgün 

Bu tez Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü tez yazım kuralına uygundur.



İÇİNDEKİLER

ÖZET.....	i
ABSTRACT.....	ii
TEŞEKKÜR.....	iii
ŞEKİLLERİN LİSTESİ.....	iv
ÇİZELGELERİN LİSTESİ.....	vii
1. GİRİŞ.....	1
2. KATILARIN ÖRGÜ DİNAMİĞİ TEORİSİ.....	7
2.1. Giriş.....	7
2.2. Katıların Esneklik Özellikleri.....	7
2.3. Katıların Fonon Frekansları.....	16
3. ÇOK-CİSİM ETKİLEŞME POTANSİYELİ VE PARAMETRİZE METODU.....	20
3.1. Giriş.....	20
3.2. Çok-Cisim Etkileşme Potansiyeli.....	21
3.3. Potansiyel Parametrelerinin Parametrize Metodu.....	23
4. $Fe_{(1-x)}-Mn_x$ ($x=0.30, 0.40$) ALAŞIMLARININ ESNEKLİK ÖZELLİKLERİNİN VE FONON FREKANSLARININ HESAPLANMASI.....	27
4.1. Giriş.....	27
4.2. $Fe_{(1-x)}-Mn_x$ ($x=0.40$) Alaşımının Esneklik Özellikleri.....	28

4.3. $\text{Fe}_{(1-x)}\text{-Mn}_x$ ($x=0.30$) Alařımının Fonon Frekansları.....	33
5. $\text{Fe}_{(1-x)}\text{-Ni}_x$ ($x=0.30, 0.35, 0.76, 0.88$) ALAřIMLARININ ESNEKLİK ÖZELLİKLERİNİN VE FONON FREKANSLARININ HESAPLANMASI.....	38
5.1. Giriř.....	38
5.2. $\text{Fe}_{(1-x)}\text{-Ni}_x$ ($x=0.30$) Alařımının Esneklik Özellikleri.....	38
5.3. $\text{Fe}_{(1-x)}\text{-Ni}_x$ ($x=0.35, 0.76, 0.88$) Alařımlarının Fonon Frekansları.....	41
6. $\text{Fe}_{(1-x)}\text{-Pt}_x$ ($x=0.28, 0.30$) ALAřIMLARININ ESNEKLİK ÖZELLİKLERİNİN VE FONON FREKANSLARININ HESAPLANMASI.....	51
6.1. Giriř.....	51
6.2. $\text{Fe}_{(1-x)}\text{-Pt}_x$ ($x=0.28$) Alařımının Esneklik Özellikleri.....	51
6.3. $\text{Fe}_{(1-x)}\text{-Pt}_x$ ($x=0.30$) Alařımının Fonon Frekansları.....	55
7. $\text{Fe}_{(1-x)}\text{-Mn}_x$ ($x=0.14$) ALAřIMININ İNCE FİLM ÇALIřMASI	58
7.1. Giriř.....	58
7.2. İnce Film Büyütme İřlemi.....	59
7.3. Büyütme İřleminin Yapısal Sonuçları.....	60
7.4. Deney Düzenekleri ve Yöntemler.....	62
7.4.1. Vakum sistemi.....	62
7.4.2. Örnek ısıtıcısı.....	64
7.4.3. Kalınlık ölçer.....	65
7.5. Alttařlar ve Alttařların Temizlenmesi.....	65

7.6. Buharlaştırma İşlemi.....	66
7.7. Direnç Ölçme Düzenegi ve Direnç Ölçümü.....	67
7.8. Manyetizasyon Ölçme Sistemi ve Manyetizasyon Ölçümleri.....	73
7.9. Ferromanyetik Resonans (FMR) Ölçme Sistemi ve FMR Ölçümleri.....	77
8. SONUÇLAR VE TARTIŞMA.....	98
KAYNAKLAR.....	101
ÖZGEÇMİŞ.....	108



**BAZI Fe-BAZLI ALAŞIMLARIN ÖRGÜ DİNAMİĞİ ve
BİR İNCE FİLM ÇALIŞMASI
(Doktora Tezi)**

Gökay UĞUR

**GAZİ ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ
Haziran 1999**

ÖZET

Bu çalışmada, bir amprik çok-cisim etkileşme potansiyeli (MBP) tanımlandı ve o bir uygulama olarak bazı fcc Fe-bazlı alaşımların örgü dinamiğini incelemek için kullanıldı. Yeni MBP hem iki-cisim hem de üç-cisim etkileşmelerini ihtiva eder. İncelenen $Fe_{(1-x)}Mn_x$ ($x=0.30, 0.40$), $Fe_{(1-x)}Ni_x$ ($x=0.30, 0.35, 0.76, 0.88$), $Fe_{(1-x)}Pt_x$ ($x=0.28, 0.30$) alaşımları için MBP' yi tanımlayan parametreler, Akgün ve Uğur [1,2] tarafından tanımlanan metoda göre hesaplandı. Alaşımların fonon frekansları temel simetri doğrultuları boyunca, hesaplanan iki ve üç-cisim kuvvet sabitleri kullanılarak bulundu. Alaşımların bazı esneklik özellikleri; ikinci mertebeden (C_{11}, C_{12}, C_{44}) ve üçüncü mertebeden ($C_{111}, C_{112}=C_{116}, C_{123}=C_{144}$) esneklik sabitleri, ısısal genleşme katsayısı (α_l), bulk modülü ve ikinci mertebeden esneklik sabitlerinin basınçla değişimleri ($(\frac{\partial B}{\partial P})_T$ ve $\frac{\partial C'_{ij}}{\partial P}$), Young modülü (E), anizotropi çarpanı (A), kesme (shear) modülü (G) ve Grüneisen parametresi (γ) gibi nicelikler; Akgün [3] tarafından tanımlanan kristal modeli kullanılarak hesaplandı. Ayrıca, $Fe_{(1-x)}Mn_x$ ($x=0.14$) alaşımının ince filmi hazırlandı ve direnç, manyetizasyon ve ferromanyetik rezonans (FMR) ölçümleri yapıldı. Sonuç olarak, deneysel değerler ile iyi bir uyum içinde olan teorik sonuçlar hem parametrize metodunun hem de bu metot içinde kullanılan MBP' nin fcc ikili tip-II alaşımlarının fonon frekanslarını ve esneklik özelliklerini incelemek için kullanılabileceğini göstermektedir.

Bilim Kodu : 404.05.01
Anahtar Kelimeler : Esneklik sabitleri, fonon frekansları, kuvvet sabitleri, ince film
Sayfa Adedi : 108
Tez Yöneticisi : Doç. Dr. İrfan AKGÜN

**LATTICE DYNAMICS of SOME Fe-BASED ALLOYS and
A THIN FILM STUDY
(Ph. D. Thesis)**

Gökay UĞUR

**GAZİ UNIVERSITY
INSTITUTE OF SCIENCES AND TECHNOLOGY
June 1999**

ABSTRACT

In this work, an empirical many-body interaction potential (MBP) has been developed and it was used as an application to investigate the lattice dynamics of some fcc Fe-based alloys. The new MBP contains both two-and three-body interactions. The parameters defining the MBP for the examined $\text{Fe}_{(1-x)}\text{Mn}_x$ ($x=0.30, 0.40$), $\text{Fe}_{(1-x)}\text{Ni}_x$ ($x=0.30, 0.35, 0.76, 0.88$), $\text{Fe}_{(1-x)}\text{Pt}_x$ ($x=0.28, 0.30$) alloys have been computed following the method defined by Akgün and Uğur [1,2]. The phonon frequencies of the alloys along the principal symmetry directions have been computed using the calculated two-and three-body force constants. Some elastic properties of the alloys; such quantities as the second-order (C_{11}, C_{12}, C_{44}) and third-order ($C_{111}, C_{112}=C_{116}, C_{123}=C_{144}$) elastic constants, the thermal expansion coefficient (α_t), the pressure derivatives of the bulk modulus and second-order elastic constants ($(\frac{\partial B}{\partial P})_T$ and $\frac{\partial C'_{ij}}{\partial P}$), the Young's modulus (E), the anisotropy multiplier (A), the shear modulus (G) and Grüneisen parameter (γ), have been computed using the crystal model defined by Akgün [3]. Furthermore, the thin film of $\text{Fe}_{(1-x)}\text{Mn}_x$ ($x=0.14$) alloy has been prepared and the resistivity, magnetization, ferromagnetic resonance (FMR) measurements have been carried out.

Consequently, the theoretical results which are in a good agreement with the experimental values show that both the parametrize method and the proposed MBP used in this method can be used to study the elastic properties and phonon frequencies of fcc Binary type-II alloys.

Science code	: 404.05.01
Key Words	: Elastic constants, phonon frequencies, force constants, thin film
Page number	: 108
Adviser	: Doç. Dr. İrfan AKGÜN

TEŞEKKÜR

Çalışmalarım boyunca değerli yardım ve katkılarıyla beni yönlendiren hocam Doç. Dr. İrfan AKGÜN'e teşekkürlerimi sunarım.

İnce film çalışması için alışıma veren Öğr. Gör. H. Yaşar OCAK'a, deneysel ince film çalışmalarına yardımcı olan Prof. Dr. Bekir AKTAŞ'a ve çalışmam süresince yardımlarını esirgemeyen eşim Şule UĞUR ile Fizik Bölümündeki arkadaşlarıma teşekkür ederim.



ŞEKİLLERİN LİSTESİ

Şekil	Sayfa
Şekil 2.1. Zor tensörü.....	9
Şekil 3.1. Atomlar arasındaki etkileşme potansiyel enerjisi fonksiyonu.....	20
Şekil 3.2. Sabit n değerine karşılık farklı m değerleri için potansiyel eğrileri.....	25
Şekil 3.3. Sabit m değerine karşılık farklı n değerleri için potansiyel eğrileri.....	25
Şekil 4.1. $\text{Fe}_{(1-x)}\text{-Mn}_x$ ($x=0.30$) alaşımının oda sıcaklığında fonon frekans eğrisi.	37
Şekil 5.1. $\text{Fe}_{(1-x)}\text{-Ni}_x$ ($x=0.88$) alaşımının oda sıcaklığında fonon frekans eğrisi.....	48
Şekil 5.2. $\text{Fe}_{(1-x)}\text{-Ni}_x$ ($x=0.76$) alaşımının oda sıcaklığında fonon frekans eğrisi.....	49
Şekil 5.3. $\text{Fe}_{(1-x)}\text{-Ni}_x$ ($x=0.35$) alaşımının oda sıcaklığında fonon frekans eğrisi.....	50
Şekil 6.1. $\text{Fe}_{(1-x)}\text{-Pt}_x$ ($x=0.30$) alaşımının oda sıcaklığında fonon frekans eğrisi.....	57
Şekil 7.1. İnce film hazırlama sisteminin genel bir görünüşü.....	63
Şekil 7.2. Direnç ölçme düzeneğinin genel bir görünüşü.....	68
Şekil 7.3. Direnç ölçme düzeneğinin silindirik kesiti ve elektronik ölçme sisteminin blok şeması.....	69
Şekil 7.4. Kare örnek direncin, dört nokta tekniği ile ölçümü.....	71
Şekil 7.5. $\text{Fe}_{(1-x)}\text{-Mn}_x$ ($x=0.14$) ince filminin sıcaklığa bağlı öz direnç eğrisi...72	
Şekil 7.6. Manyetik alan $\text{Fe}_{(1-x)}\text{-Mn}_x$ ($x=0.14$) ince film düzlemi içinde iken histerizis eğrisi.....	74

Şekil 7.7. Manyetik alan $\text{Fe}_{(1-x)}\text{-Mn}_x$ ($x=0.14$) ince film düzlemine dik iken histerizis eğrisi.....	75
Şekil 7.8. Tek katlı film probleminde deneysel geometri.....	77
Şekil 7.9. Örnek düzlemi ile manyetik alan arasındaki açının 0^0 olduğu durumda FMR spektrumu.....	81
Şekil 7.10. Örnek düzlemi ile manyetik alan arasındaki açının 5^0 olduğu durumda FMR spektrumu.	82
Şekil 7.11. Örnek düzlemi ile manyetik alan arasındaki açının 10^0 olduğu durumda FMR spektrumu.	83
Şekil 7.12. Örnek düzlemi ile manyetik alan arasındaki açının 20^0 olduğu durumda FMR spektrumu.	84
Şekil 7.13. Örnek düzlemi ile manyetik alan arasındaki açının 30^0 olduğu durumda FMR spektrumu.	85
Şekil 7.14. Örnek düzlemi ile manyetik alan arasındaki açının 40^0 olduğu durumda FMR spektrumu.	86
Şekil 7.15. Örnek düzlemi ile manyetik alan arasındaki açının 50^0 olduğu durumda FMR spektrumu.	87
Şekil 7.16. Örnek düzlemi ile manyetik alan arasındaki açının 60^0 olduğu durumda FMR spektrumu.	88
Şekil 7.17. Örnek düzlemi ile manyetik alan arasındaki açının 70^0 olduğu durumda FMR spektrumu.	89
Şekil 7.18. Örnek düzlemi ile manyetik alan arasındaki açının 80^0 olduğu durumda FMR spektrumu.	90
Şekil 7.19. Örnek düzlemi ile manyetik alan arasındaki açının 90^0 olduğu durumda FMR spektrumu.	91
Şekil 7.20. Örnek düzlemi ile manyetik alan arasındaki açının 91^0 olduğu durumda FMR spektrumu.	92
Şekil 7.21. Örnek düzlemi ile manyetik alan arasındaki açının 92^0 olduğu durumda FMR spektrumu.	93

Şekil 7.22. Örnek düzlemi ile manyetik alan arasındaki açının 93^0 olduğu durumda FMR spektrumu.	94
Şekil 7.23. Örnek düzlemi ile manyetik alan arasındaki açının 94^0 olduğu durumda FMR spektrumu.	95
Şekil 7.24. Örnek düzlemi ile manyetik alan arasındaki açının 95^0 olduğu durumda FMR spektrumu.	96
Şekil 7.25. Örnek düzlemi ile manyetik alan arasındaki açının 100^0 olduğu durumda FMR spektrumu.	97



ÇİZELGELERİN LİSTESİ

Çizelge	Sayfa
Çizelge 4.1. $\text{Fe}_{(1-x)}\text{-Mn}_x$ ($x=0.40$) alaşımasının oda sıcaklığındaki giriş verileri.....	29
Çizelge 4.2. $\text{Fe}_{(1-x)}\text{-Mn}_x$ ($x=0.40$) alaşımı için hesaplanan MBP parametreleri.....	30
Çizelge 4.3. $\text{Fe}_{(1-x)}\text{-Mn}_x$ ($x=0.40$) alaşımı için oda sıcaklığında hesaplanan ikinci ve üçüncü mertebeden esneklik sabitleri.....	30
Çizelge 4.4. $\text{Fe}_{(1-x)}\text{-Mn}_x$ ($x=0.40$) alaşımı için oda sıcaklığında hesaplanan ve ölçülen bazı esneklik özellikleri.....	32
Çizelge 4.5. $\text{Fe}_{(1-x)}\text{-Mn}_x$ ($x=0.40$) alaşımı için oda sıcaklığında hesaplanan ve ölçülen bazı esneklik özellikleri.....	32
Çizelge 4.6. $\text{Fe}_{(1-x)}\text{-Mn}_x$ ($x=0.30$) alaşımasının oda sıcaklığındaki giriş verileri.....	35
Çizelge 4.7. $\text{Fe}_{(1-x)}\text{-Mn}_x$ ($x=0.30$) alaşımı için hesaplanan MBP parametreleri.....	35
Çizelge 4.8. $\text{Fe}_{(1-x)}\text{-Mn}_x$ ($x=0.30$) alaşımı için oda sıcaklığında hesaplanan ve ölçülen ikinci mertebeden esneklik sabitleri.....	35
Çizelge 5.1. $\text{Fe}_{(1-x)}\text{-Ni}_x$ ($x=0.30$) alaşımasının oda sıcaklığındaki giriş verileri.....	39
Çizelge 5.2. $\text{Fe}_{(1-x)}\text{-Ni}_x$ ($x=0.30$) alaşımı için hesaplanan MBP parametreleri.....	39
Çizelge 5.3. $\text{Fe}_{(1-x)}\text{-Ni}_x$ ($x=0.30$) alaşımasının için oda sıcaklığında hesaplanan ikinci ve üçüncü mertebeden esneklik sabitleri.....	40
Çizelge 5.4. $\text{Fe}_{(1-x)}\text{-Ni}_x$ ($x=0.30$) alaşımı için oda sıcaklığında hesaplanan bazı esneklik özellikleri.....	40
Çizelge 5.5. $\text{Fe}_{(1-x)}\text{-Ni}_x$ ($x=0.30$) alaşımı için oda sıcaklığında hesaplanan ve ölçülen bazı esneklik özellikleri.....	41

Çizelge 5.6. Fe ve Ni için oda sıcaklığındaki giriş verileri.....	42
Çizelge 5.7. Fe ve Ni için oda sıcaklığında hesaplanan ve ölçülen ikinci mertebeden esneklik sabitleri.....	42
Çizelge 5.8. $Fe_{(1-x)}-Ni_x$ ($x=0.35, 0.76, 0.88$) alaşımlarının her biri için Fe ve Ni elementlerini tanımlayan MBP parametreleri.....	42
Çizelge 5.9. Fe, Ni ve $Fe_{(1-x)}-Ni_x$ ($x=0.88$) alaşımı için hesaplanan radyal (α_i) ve açısal (β_i) kuvvet sabitleri.....	45
Çizelge 5.10. Fe, Ni ve $Fe_{(1-x)}-Ni_x$ ($x=0.76$) alaşımı için hesaplanan radyal (α_i) ve açısal (β_i) kuvvet sabitleri.....	45
Çizelge 5.11. Fe, Ni ve $Fe_{(1-x)}-Ni_x$ ($x=0.35$) alaşımı için hesaplanan radyal (α_i) ve açısal (β_i) kuvvet sabitleri.....	46
Çizelge 5.12. Fe, Ni ve $Fe_{(1-x)}-Ni_x$ ($x=0.35, 0.76, 0.88$) alaşımları için üç-cisim kuvvet sabitleri.....	47
Çizelge 6.1. $Fe_{(1-x)}-Pt_x$ ($x=0.28$) alaşımının oda sıcaklığındaki giriş verileri.....	52
Çizelge 6.2. $Fe_{(1-x)}-Pt_x$ ($x=0.28$) alaşımı için hesaplanan MBP parametreleri.....	53
Çizelge 6.3. $Fe_{(1-x)}-Pt_x$ ($x=0.28$) alaşımı için oda sıcaklığında hesaplanan ikinci ve üçüncü mertebeden esneklik sabitleri.....	53
Çizelge 6.4. $Fe_{(1-x)}-Pt_x$ ($x=0.28$) alaşımı için oda sıcaklığında hesaplanan ve ölçülen bazı esneklik özellikleri.....	54
Çizelge 6.5. $Fe_{(1-x)}-Pt_x$ ($x=0.28$) alaşımının oda sıcaklığında hesaplanan ve ölçülen bazı esneklik özellikleri.....	54
Çizelge 6.6. Fe ve Pt için oda sıcaklığındaki giriş verileri.....	55
Çizelge 6.7. Fe ve Pt için oda sıcaklığında hesaplanan ve ölçülen ikinci mertebeden esneklik sabitleri.....	55
Çizelge 6.8. $Fe_{(1-x)}-Pt_x$ ($x=0.30$) alaşımı için Fe ve Pt elementlerini tanımlayan MBP parametreleri.....	55

Çizelge 6.9. Fe, Pt ve $\text{Fe}_{(1-x)}\text{Pt}_x$ ($x=0.30$) alaşımı için hesaplanan radyal (α_i) ve açısal (β_i) kuvvet sabitleri.....	56
---	----



1. GİRİŞ

Atomik titreşimlerle ilgili çalışmalar, katıların termal özellikleriyle ilgili çalışmaların bir sonucu olarak başlamıştır [4,5]. Ayrıca radyasyonun yayılması ve soğurulması üzerindeki çalışmalarda atomik titreşim çalışmalarına ışık tutmuştur. Planck, radyasyon enerjisinin kuantumlu olduğunu gösterdikten hemen sonra Einstein atomik osilatörlerin enerjilerinin de kuantumlu olduğunu göstermiştir [4]. Bilindiği gibi Einstein teorisi atomların birbirinden bağımsız ve aynı frekansta titreştiğini kabul eder. Debye ise kristaldeki atomların sabit bir frekansta değil belirli bir frekans aralığında titreştiğini kabul ederek Einstein'den daha iyi bir yaklaşımla atomik titreşimleri incelemiştir [5]. Debye modeli özısının anlaşılmasına katkı sağladığı gibi titreşimlerin; x-ışınları kırınımına, mössbauer etkisine ve süperiletkenliğe etkilerinin bulunmasında da kullanılmıştır. Debye bu çalışmaları yaparken Born ve von Karman [6,7] bir boyutlu örgüde atomik titreşimler için başarılı sonuçlar elde ettiler. Örgü dinamiği üzerine ilk önemli çalışmayı Oppenheimer [8] yapmıştır. Oppenheimer hem elektronları hem de çekirdekleri dikkate alarak çekirdekler hareket ettiğinde elektronların da çekirdeklerin hareketini takip ettiğini gösterdi [8]. Bu ise günümüzde bilinen adyabatik yaklaşımdır.

Örgü titreşimi incelemelerinde ilk kullanılan deneysel metotlar Infrared ve Raman spektroskopisidir. Bu deneysel çalışmalarda elektromanyetik dalgalar kullanıldığından, bu dalgaların dalga vektörleri örgü dalgalarının dalga vektörlerinden oldukça küçüktür. Bu nedenle bu tekniklerde sadece $q=0$ civarındaki örgü dalgalarının enerjileri hesaplanabilir. Bu da yeni deneysel metotların araştırılmasına yol açmıştır. 1944 yılında Weinstock yavaş nötronların kristallerden saçılmaları hakkında çalışmalar yapmıştır [9]. Bu çalışma örgü dinamiği deneylerinin nötronlarla yapılmasına ışık tutmuştur. 1950 yılından itibaren fonon frekansları inelastik nötron saçılması deneyleri

ile bulunmaktadır. Bu tekniğin kullanılmasının nedeni, nötronların dalga boylarının fononların dalga boyları mertebesinde olması ve yüksüz nötronların elektronlarla etkileşmemesidir.

Teorik olarak metallerin örgü dinamiği çalışmaları, esneklik sabitlerinin ve özısılarının hesaplanmaları ile başlamıştır [10,11]. Bu çalışmalarda kuvvetlerin kısa menzilli olduğu varsayılarak *kuvvet sabiti* modelleri kullanılmıştır. Bu modellerin en eskileri Merkezi İkili Etkileşim Potansiyeli (CPP) ve Genel Tensor Kuvveti (GTF) modelleridir [12,13]. Daha yenileri ise deLaunay Açısal Kuvvet (DAF) [14], Eksensel Simetrik (AS) [15] ve Clark-Gazis-Wallis (CGW) [16] modelleridir. Bu kuvvet sabiti modelleri daha uzak erişimli iyon-elektron etkileşmesini hesaba katmazlar. Bu etkileşmelerin de göz önüne alındığı; benzerlik, farklılık ve birbirlerine olan üstünlüklerinin de tartışıldığı bir çok modele literatürde rastlanabilir [17-29].

En önemli iki açısal kuvvet sabiti modeli DAF ve CGW modelleridir. Bu iki modeli birbirinden ayıran fark açısal kuvvetlerin tanımıdır. DAF modelinde açısal kuvvetler, hareketli iki atomu birleştiren doğru ile, denge konumunu birleştiren doğru arasındaki açığa bağlıdır. CGW modelinde ise açısal kuvvet, üçgenin açılarının değişimine bağlıdır. Bu değişim ise denge konumundaki üç atomun oluşturduğu üçgenin açıları ile, bu üç atomun yerdeğiştirmesinden sonra oluşturdukları üçgenin denge konumları düzlemi üzerindeki izdüşümleri karşılaştırılarak elde edilir. Bu açısal kuvvetler, üçgen düzleminde bulunan üç-cisim kuvvetlerinin bileşenlerine karşılık gelir [30]. CGW ve DAF modellerinde açısal kuvvet sabitlerinin sayısı sırasıyla, üçgenlerin sayısı ve atomlar arası uzaklıkla doğru orantılı olarak artar. Ayrıca CGW'de katı-cisim dönmesinin değişmez [31] olduğu, DAF' da ise olmadığı kabul edilmektedir. Kothari ve Singhal [25], CGW'de ikinci komşuluğun ihmal edilmesi halinde her iki modelin bcc metaller için özdeş katsayılar determinantı verdiğini

gösterdiler. Bose ve arkadaşları [24], iyon-iyon etkileşmesini ikinci en yakın komşuluğa kadar uzatarak, iki modelin de bcc yapılar için özdeş katsayılar determinantı verdiğini ve dolayısı ile bu iki modelin özdeş olduğunu iddia ettiler. Bazı araştırmacılar [24,25] ise, fcc metallerin katsayılar determinantını karşılaştırarak iki modelin özdeş olmadığını gösterdiler. Herhangi bir kristal yapı için bu iki modelin özdeşliği, CGW'nin üç-cisim kuvvet bileşeninin DAF'ın iki-cisim kuvvet bileşenine eşit olduğu varsayımına dayanır [23].

1936 yılında Fuchs [32], iletkenlik elektronlarının bakırın dinamiğine getirdiği etkileri incelemiş ve çalışmasında kristalin bağlanma enerjisine gelen katkının iki kısıma ayrılabilceğini göstermiştir. Bu etkileşmenin birinci kısmı iyonların ikili-etkileşimlerinden gelen katkı, ikinci kısmı ise iletkenlik elektronlarından gelen katkı oluşturmaktadır. Bundan sonra bu etkileri içeren çok-cisim etkileşmeleri ile ilgili değişik çalışmalar yapılmıştır. Bu çalışmalar önceleri elektron gazı modelleri şeklinde gelişmiştir. De Launay [14], Bhatia [17], Sharma ve Joshi [18], Krebs [19], Cheveen [33] modelleri örnek gösterilebilecek çalışmalardır. Psedeu potansiyel teorisinin [34] geliştirilmesiyle, örgü dinamiğine üç-cisim etkileşimlerini bu teori ile içerecek şekilde yapılan bir çok çalışmaya literatürde rastlanabilir [35-39].

Elektron gazı ve Psedeu Potansiyel modellerinden başka literatürde çok-cisim etkileşmelerini, tanımladıkları çok-cisim potansiyelleriyle inceleyen örgü dinamiği çalışmaları vardır. Bunlar arasında kovalent kristaller için geliştirilen Tersoff Potansiyeli [40], katı ve sıvı kristaller için tanımlanmış Stillinger-Weber Potansiyeli [41], Pearson-Takai-Halıcıoğlu-Tiller Potansiyeli [42], daha çok elmas yapılı örgüler için geliştirilen Efthimios-Pandey Potansiyeli [43] ve Erkoç Potansiyeli [44] sayılabilir.

Son zamanlarda tanımlanan ve çok-cisim etkileşmelerini içine alan modellerden en çok kullanılanı " Embedded Atom Modeli (EAM) " dir [45]. Daw ve Baskes [45] tanımladıkları iki-cisim etkileşim potansiyel enerjisine yerel elektron yoğunluğunun fonksiyonu olan ilave bir terim (embedding enerji) eklerler. Bir sistemin toplam enerjisi, EAM modeline göre

$$E_{TOT} = \sum_i^n F_i(\rho_{h,i}) + \frac{1}{2} \sum_i^n \sum_{j(i \neq j)}^n \phi_{ij}(\vec{R}_{ij}) \quad (1.1)$$

ifadesi ile tanımlanır. Burada, F_i ; toplam bölgesel elektron yoğunluğuna bağlı yerleştirme enerji terimi, $\rho_{h,i}$; i . atom bölgesindeki toplam çoğunluk (host) elektron yoğunluğudur. $\vec{R}_{ij}$; i . ve j . atomlar arası uzaklıktır. Elektron yoğunluğu ($\rho_{h,i}$) toplam atom yoğunluğu (ρ^a) cinsinden,

$$\rho_{h,i} = \sum_{j \neq i} \rho_j^a(\vec{R}_{ij}) \quad (1.2)$$

şeklinde verilir. Burada ρ_j^a ; j . atomun yoğunluğudur. İki-cisim etkileşme potansiyeli (ϕ_{ij}) ise

$$\phi(\vec{r}_{ij}) = \frac{Z^2(\vec{r}_{ij})}{|\vec{r}_{ij}|} \quad (1.3)$$

dır. Burada etkin yük $Z(\vec{r}_{ij})$; atom türüne ve atomlar arası uzaklığa bağlı bir fonksiyondur.

Birçok metale uygulanan EAM modeli genelde iyi sonuçlar vermiştir [46-48]. Fakat kovalent bağlı kristallere hiç uygulanmamıştır. Bir modelin çok kullanılır olabilmesi için, örgünün kristal yapısına ve bağ özelliğine bakılmaksızın çok iyi sonuçlar vermesi gerekir. Ayrıca EAM' de bilinmeyen parametrelerin belirlenmesinde, kristalin ikinci-mertebeden esneklik sabitlerinin (C_{ij}) ve zon sınırı frekanslarının deneysel değerleri giriş verisi olarak kullanılmaktadır. Bu nedenle, bir kristalin örgü dinamiğinin incelenmesinde EAM' nin çok kullanışlı bir model olamayacağını düşündük.

Halen katıların örgü dinamiği incelemeleri için genel bir teori oluşturulması problemi güncelliğini korumaktadır.

Bu tez çalışmasında, metal ve metal alaşımlarının örgü dinamiği için yeni bir “çok-cisim etkileşme potansiyeli” ve “kristal metodu” tanımladık. Bu potansiyel ve metod, bazı Fe-Bazlı alaşımların örgü dinamiğine uygulanacaktır.

Son yıllarda ince filmler teknolojisinde yaygın bir şekilde kullanılmaya başlamıştır. Bunun en büyük nedenlerinden birisi ince film yüzeyinde parçacıklar üzerine etki eden kuvvetin hacimli malzemelerden farklı olması ve bu yüzeydeki atomların simetrisinin hacimli malzemelerdeki atomların simetrisinden farklı olması ile açıklanabilir. Örneğin yüzeydeki atomlar arası uzaklık diğer hacimli malzemelere göre farklıdır ve bu nedenle yüzey için fiziksel özellikler değişecektir. Bu tez çalışmasında teorik olarak incelenen katıların örgü dinamiğinin yanısıra deneysel alanda da bilgi edinebilmek için bir ince film çalışması düşünüldü. 1000 Å kalınlığındaki $\text{Fe}_{(1-x)}\text{-Mn}_x$ ($x=0.14$) ince filmleri, 2×10^{-6} Torr basınçta ve 0.4-0.5 Å /s 'lik hızla quartz alttabanlar üzerine gönderilen elektron demetleri kullanılarak buharlaştırma tekniği ile hazırlandı. Hazırlanan ince filmler üzerinde direnç, manyetizasyon ve ferromanyetik rezonans (FMR) ölçümleri yapılarak yorumlanacaktır.

2. KATILARIN ÖRGÜ DİNAMIĞI TEORİSİ

2.1. Giriş

Kristaldeki örgü titreşimlerinin, sadece termal özelliklerin incelenmesinde değil aynı zamanda x-ışınları ve nötron saçılmalarının anlaşılmasında ve elektron-fonon etkileşimlerinin incelenmesinde önemli bir yeri vardır. Bu olayları ayrıntılı bir şekilde inceleyen teoriye " örgü dinamiği teorisi" denir. Katıların örgü dinamiği ile de termodinamik, optik, fonon, esneklik, dielektrik, fotoesneklik ve termal özellikler anlaşılır.

Bu teorik çalışmada bazı Fe-bazlı alaşımların esneklik özellikleri ve fonon frekansları inceleneceği için, bu bölümde sadece katıların bu özelliklerini içeren teoriler açıklanacaktır.

2.2. Katıların Esneklik Özellikleri

Maddelerin esneklik özelliklerini ve ses dalgalarının bu maddeler içerisinde yayılmasını inceleyebilmek için Hooke yasasını ifade etmemiz gerekmektedir. σ_{ij} zor tensörü ve e_{kl} zorlanma tensörü, ikinci mertebeden tensörler olmak üzere Hooke yasası aşağıdaki şekilde ifade edilir:

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl} e_{kl} \quad (i, j, k, l = 1, 2, 3) . \quad (2.3)$$

Burada C_{ijkl} , sertlik (esneklik) katsayısı adını alıp, 81 elemanlı dördüncü mertebeden bir tensördür. σ_{ij} ve e_{kl} ($i, j=1, 2, 3$ $k, l=1, 2, 3$) tensörleri matris gösterimi ile,

$$\sigma_{ij} = \begin{bmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & \sigma_{13} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} & \sigma_{23} \\ \sigma_{31} & \sigma_{32} & \sigma_{33} \end{bmatrix} \quad e_{kl} = \begin{bmatrix} e_{11} & e_{12} & e_{13} \\ e_{21} & e_{22} & e_{23} \\ e_{31} & e_{32} & e_{33} \end{bmatrix} \quad (2.4)$$

şeklindedir. Zorlanmış bir cismin x_i noktasındaki yer değiştirme vektörü u_k , dokuz elemanlı bozulma tensörü cinsinden

$$E_{kl} = \frac{\partial u_k}{\partial x_l} \quad (2.5)$$

şeklinde ifade edilir. Burada $\vec{u} = u_1 \hat{i}_1 + u_2 \hat{i}_2 + u_3 \hat{i}_3$ ve $\hat{i}_1, \hat{i}_2, \hat{i}_3$ sırasıyla kartezyen dik koordinat sisteminde x_1, x_2, x_3 eksenleri boyunca birim vektörlerdir. Genel E_{kl} tensörü, simetrik e_{kl} ile asimetrik w_{kl} tensörlerinden oluşur. Burada

$$\left. \begin{aligned} e_{kl} &= \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_k}{\partial x_l} + \frac{\partial u_l}{\partial x_k} \right) \\ w_{kl} &= \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_k}{\partial x_l} - \frac{\partial u_l}{\partial x_k} \right) = -w_{lk} \end{aligned} \right\} \quad (2.6)$$

dır. Önce maddede herhangi bir zorlanma olmadan maddenin koordinat sisteminin başlangıcı etrafında dönüşünü düşünecek olursak, bu takdirde herhangi bir noktanın yer değiştirme vektörü o noktanın yarıçap vektörüne dik olur. Bu yüzden ,

$$\sum_{i=1}^3 u_i x_i = 0 \quad (2.7)$$

veya

$$\sum_{i,j=1}^3 E_{ij} x_i x_j = 0 \quad (2.8)$$

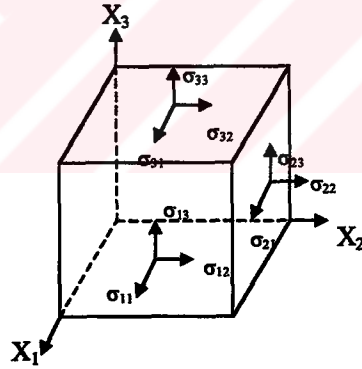
olmalıdır. (2.8) eşitliği i ve j üzerinden açılırsa bu eşitliğin sağlanabilmesi için; $i=j$ iken E_{ij} 'nin sıfıra ve $i \neq j$ iken E_{ij} 'nin $-E_{ji}$ 'ye eşit olması gerektiği görülür. O halde,

$$\left. \begin{aligned} E_{ij} &= 0 & (i = j) \\ E_{ij} &= -E_{ji} & (i \neq j) \end{aligned} \right\} \quad (2.9)$$

olur. Bu ise E_{ij} 'nin antisimetrik olduğu durumdur. Böylece zorlanma olmadan maddenin başlangıç noktası etrafında dönmesi özel durumunda, E_{kl} bozulma tensörü antisimetrik hale gelir. Bu sebeple maddenin başlangıç noktası etrafındaki bu dönmesi tensörün antisimetrik parçası w_{kl} ile verilir. İkinci

durumda, yani maddenin başlangıç noktası etrafında dönmesiyle zorlanma halinde bozulma tensörü simetrik e_{kl} parçasına sahiptir. Kısaca e_{kl} maddedeki zorlanmayı, antisimetrik parça olan w_{kl} ise maddenin eksenler etrafındaki dönmesini verir. e_{kl} tensörünün simetrik özelliğinden dolayı, sadece altı tane bağımsız elemanı vardır. $\frac{\partial u_i}{\partial x_j}$ zoru, $i=j$ için maddenin boyuna yer

değiştirmesini ve $i \neq j$ için enine yer değiştirmesini gösterir. Zor tensörü simetrik bir tensördür ($\sigma_{ij} = \sigma_{ji}$). Bu yüzden, bir noktadaki zor tensörü bağımsız altı bileşene indirgenir. Bu tensör, hacmi sıfıra giden birim kübün birim yüzeyine dik olarak etkiyen kuvvet terimleri cinsinden ifade edilebilir.



Şekil 2.1. Zor tensörü.

Şekil 2.1. den de görüldüğü gibi düzlemlere dik olan σ_{11} , σ_{22} , σ_{33} bileşenlerine normal zorlar denir. Düzleme teğet olarak etkiyenlere yani düzlem içinde bulunan σ_{12} , σ_{13} , σ_{21} , σ_{23} , σ_{31} , σ_{32} bileşenlerine de kayma zorları adı verilir. Herhangi bir zor vektörünün bileşenlerinin altındaki indislerden ilki, o

bileşenin bulunduğu düzleme dik olan eksen, ikinci indis ise zor bileşeninin doğrultusunun hangi eksene paralel olduğunu gösterir. Bu şartlar altında eşitlik (2.3)' den, σ_{ij} ve e_{kl} 'nin simetrisinden dolayı C_{ijkl} 'nin 81 bileşeni yerine en fazla 36 tane bağımsız esneklik sabiti elde edilir. Bu durumda esneklik sabitleri tensörü, çok daha kısa ve öz olan iki indisli bir gösterimle temsil edilir. Böylece $C_{ijkl} (i,j,k,l = 1,2,3)$ tensörü $C_{ij} (i,j = 1,2, \dots, 6)$ matrisi ile ifade edilir. İndis eşitlikleri için aşağıdaki düzen kabul edilmiştir.

Tensör Gösterimi	11	22	33	23,32	31,13	12,21
Matris Gösterimi	1	2	3	4	5	6

Örneğin C_{1112} yerine C_{16} alınabilir. Ayrıca bu düzene göre σ_{ij} ve e_{kl} 'de matris gösterimine çevrilebilir;

$$\sigma_i = C_{ij} e_j \quad , \quad (i, j = 1, 2, \dots, 6). \quad (2.10)$$

Bu eşitlik Hoöke yasasının matris temsilidir.

Bir kristalin potansiyel enerjisi ϕ ' yi zorlanma tensörünün bileşenleri cinsinden Taylor serine açarsak,

$$\begin{aligned} \Delta\phi = \phi - \phi_0 = & \left(\frac{\partial\phi}{\partial e_{ij}} \right) \Big|_0 e_{ij} + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2\phi}{\partial e_{ij} \partial e_{kl}} \right) \Big|_0 e_{ij} e_{kl} \\ & + \frac{1}{6} \left(\frac{\partial^3\phi}{\partial e_{ij} \partial e_{kl} \partial e_{mn}} \right) \Big|_0 e_{ij} e_{kl} e_{mn} + \dots \end{aligned} \quad (2.11)$$

ifadesini elde ederiz. Burada ϕ_0 , kristalin denge durumundaki potansiyel enerjisi ve $\Delta\phi$, denge durumu ile zorlanma olduğu durum arasındaki potansiyel enerji değişimidir. Denge durumu civarındaki zorlanmalarda, $\left(\frac{\partial\phi}{\partial e_{ij}} \right) \Big|_0$ ifadesi

ihmal edilebilir. Küçük yer değiştirmelerde ise $e_{ij} e_{kl} e_{mn}$ 'yi ihtiva eden ve daha yüksek dereceden terimler ihmal edilebilir. Denge durumu civarındaki yer

değiştirmede $\Delta\phi$ pozitif olmalıdır. Bu durum, eşitlik (2.11)'in sağ tarafının mutlaka pozitif ve ikinci dereceden formda olmasını gerektirir. Buradan

$$\left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial e_{ij} \partial e_{kl}} \right) \Big|_0 = \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial e_{kl} \partial e_{ij}} \right) \Big|_0 \quad (2.12)$$

sonucu elde edilir. σ_{ij} zorunun uygulanışı sırasında yapılan iş miktarı ΔW , zorlanma tensörü e_{ij} cinsinden

$$\Delta W = \frac{1}{2} \sigma_{ij} e_{ij} \quad (2.13)$$

şeklinde yazılabilir. Eğer zorlanma olayı adyabatik, izotermal ve tersinir olarak meydana gelirse, zorlanma sırasında yapılan ΔW işi sistemin serbest enerjisindeki $\Delta\phi$ değişimine eşit olur. Bu durumda,

$$\begin{aligned} \Delta W &= \Delta\phi \\ \frac{1}{2} \sigma_{ij} e_{ij} &= \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial e_{ij} \partial e_{kl}} \right) \Big|_0 e_{ij} e_{kl} \\ \sigma_{ij} &= \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial e_{ij} \partial e_{kl}} \right) \Big|_0 e_{kl} \end{aligned} \quad (2.14)$$

sonucu elde edilir. (2.14) eşitliğini Hooke yasası ile karşılaştırarak ve (2.12) eşitliğini de göz önüne alarak,

$$C_{ijkl} = \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial e_{ij} \partial e_{kl}} \right) \Big|_0 = C_{klij} \quad (2.15)$$

sonucu bulunur. Bu ifade, esneklik sabitleri ihtiva eden 15 tane başka eşitlik verir ve bağımsız esneklik sabitlerin maksimum sayısı 21'e indirgenmiş olur. Dikkat edilirse, esneklik sabitleri tensörü C_{ijkl} , kristalin potansiyel enerji fonksiyonuna bağlıdır ve eşitlik (2.15) dördüncü mertebeden esneklik sabitleri verir. Taylor serisi açılımındaki üçüncü terim de, altıncı mertebeden esneklik sabitlerinin elde edilmesine sebebiyet verir ki bunlarda atomlar arasındaki kuvvetlerin anharmonik şeklinin ölçümelerini veya onların ideal Hooke yasasına uyan katılarda harmonik formdan olan sapmalarını verir.

Bir kristalin mekaniksel olarak kararlı olabilmesi için ikinci mertebeden esneklik sabitleri pozitif olmalıdır. Born kararlılık kriteri olarak bilinen bu tanıma göre, kübik kristaller için

$$C_{11} > 0, C_{12} > 0, C_{44} > 0 \text{ ve } C_{12} > C_{44} \quad (2.16)$$

olmalıdır.

Born [49], gösterimi ile kübik kristaller için ikinci mertebeden esneklik sabitleri potansiyele bağlı olarak,

$$C_{11} = \frac{a^4}{2V_b} \sum_m \sum_n \sum_l m^4 \frac{\partial^2 \phi}{\partial (r^2)^2} \quad (2.17)$$

$$C_{12} = \frac{a^4}{2V_b} \sum_m \sum_n \sum_l m^2 n^2 \frac{\partial^2 \phi}{\partial (r^2)^2} \quad (2.18)$$

eşitlikleri ile tanımlamıştır. İfadelerdeki a , örgü parametresi, V_b birim hücre hacmi, m , n ve l atomların örgüdeki koordinatları ve $r = (m^2 + n^2 + l^2)^{1/2} a$ 'dır. Toplamlar, kristaldeki atomlar üzerindendir. Kübik kristallerde altı tane üçüncü mertebeden esneklik sabiti vardır ve bunlar C_{111} , C_{112} , C_{123} , C_{456} , C_{144} , C_{166} 'dır. Bu sabitler arasında merkezi kuvvet etkileşimleri için aşağıdaki Cauchy bağıntıları geçerlidir.

$$C_{112} = C_{116}, C_{123} = C_{456} = C_{144} \quad (2.19)$$

Böylece birbirinden bağımsız üçüncü mertebeden esneklik sabiti sayısı üçe iner ve bunlar da aşağıdaki bağıntılarla

$$C_{111} = \frac{a^6}{2V_b} \sum_m \sum_n \sum_l m^6 \frac{\partial^3 \phi}{\partial (r^2)^3}, \quad (2.20)$$

$$C_{112} = \frac{a^6}{2V_b} \sum_m \sum_n \sum_l m^4 n^2 \frac{\partial^3 \phi}{\partial (r^2)^3}, \quad (2.21)$$

$$C_{123} = \frac{a^6}{2V_b} \sum_m \sum_n \sum_l m^2 n^2 l^2 \frac{\partial^3 \phi}{\partial (r^2)^3} \quad (2.22)$$

tanımlanabilir [50].

İkinci mertebeden etkin esneklik sabitlerin basınçla değişimleri ise

$$\frac{\partial C'_{11}}{\partial P} = - \left(\frac{2C_{11} + 2C_{12} + C_{111} + 2C_{112}}{C_{11} + 2C_{12}} \right), \quad (2.23)$$

$$\frac{\partial C'_{12}}{\partial P} = - \left(\frac{-C_{11} - C_{12} + C_{123} + 2C_{112}}{C_{11} + 2C_{12}} \right), \quad (2.24)$$

$$\frac{\partial C'_{44}}{\partial P} = - \left(\frac{C_{11} + 2C_{12} + C_{44} + C_{144} + 2C_{166}}{C_{11} + 2C_{12}} \right) \quad (2.25)$$

eşitlikleri ile verilir [51].

Bulk modülü kristalin sağlamlığının, yani belirli bir deformasyon oluşturmak için gerekli enerjinin, bir ölçüsüdür ve

$$B = -V \left(\frac{\partial P}{\partial V} \right)_T = \frac{1}{X} \quad (2.26)$$

ifadesi ile tanımlanır. Burada X , sıkışabilirliktir. Mutlak sıfırda entropi sabit olduğundan ve $\partial \Phi = -P \partial V$ termodinamik eşitliğinden

$$\begin{aligned} \frac{\partial P}{\partial V} &= - \frac{\partial^2 \phi}{\partial V^2} \\ B &= V \frac{\partial^2 \phi}{\partial V^2} \end{aligned} \quad (2.27)$$

bulunur. Bulk modülü, kristal yapının sertliği ile doğrudan ilişkili olduğu için, onun basınç ile değişimi önemlidir. Bulk modülünün basınçla değişimi hacime bağlı olarak,

$$\left(\frac{\partial B}{\partial P} \right)_T = \frac{\partial V}{\partial P} \frac{\partial B}{\partial V} \quad (2.28)$$

şeklinde yazılabilir. Burada $V = c a^3$ ve c sabiti fcc yapılar için 2, bcc yapılar için 4' tür. Hacim bağıntısından faydalananarak Eşitlik (2.28),

$$\frac{\partial a}{\partial V} = \frac{1}{3ca^2}$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2 \phi}{\partial V^2} &= \frac{1}{3ca^2} \frac{\partial}{\partial a} \left(\frac{1}{3ca^2} \frac{\partial \phi}{\partial a} \right) = \frac{1}{9c^2 a^2} \left(-\frac{2}{a^3} \frac{\partial \phi}{\partial a} + \frac{1}{a^2} \frac{\partial^2 \phi}{\partial a^2} \right) \\ \frac{\partial^2 \phi}{\partial V^2} &= \left(-\frac{2}{9c^2 a^5} \frac{\partial \phi}{\partial a} + \frac{1}{9c^2 a^4} \frac{\partial^2 \phi}{\partial a^2} \right)\end{aligned}\quad (2.29)$$

olur. Denge durumunda $\left(\frac{\partial \phi}{\partial a} \right)_{a=a_0} = 0$ olduğundan, Eşitlik (2.27)' den

$$B(a_0) = \frac{1}{9ca_0} \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial a^2} \right)_{a=a_0} \quad (2.30)$$

olarak bulunur. Bulk modülünün basınçla değişimi ise,

$$\begin{aligned}\left(\frac{\partial B}{\partial P} \right)_T &= \frac{\partial V}{\partial P} \frac{\partial B}{\partial V} = \frac{\partial V}{\partial P} \frac{1}{3ca^2} \frac{\partial B}{\partial a} \\ \left(\frac{\partial B}{\partial P} \right)_T &= \frac{\partial V}{\partial P} \left(\frac{4}{27c^2 a^5} \frac{\partial \phi}{\partial a} - \frac{1}{9c^2 a^4} \frac{\partial^2 \phi}{\partial a^2} + \frac{1}{27c^2 a^3} \frac{\partial^3 \phi}{\partial a^3} \right)\end{aligned}$$

olur. İfadenin a_0 denge değerindeki ($a_0 = a/2$) sonucu ise,

$$\left(\frac{\partial B}{\partial P} \right)_{a=a_0} = - \left(\frac{\partial V}{\partial P} \right)_{a=a_0} \frac{1}{9c^2 a^4} \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial a^2} \right)_{a=a_0} + \left(\frac{\partial V}{\partial P} \right)_{a=a_0} \frac{1}{27c^2 a^3} \left(\frac{\partial^3 \phi}{\partial a^3} \right)_{a=a_0} \quad (2.31)$$

olarak bulunur. Eşitlik (2.26)' dan $\left(\frac{\partial V}{\partial P} \right)_{a=a_0} = -\frac{V_b}{B(a_0)}$ olup Eşitlik (2.31)' de

yerine konulursa,

$$\left(\frac{\partial B}{\partial P} \right)_T = 1 - \frac{V_b}{27B_{a=a_0} c^2 a_0^3} \left(\frac{\partial^3 \phi}{\partial a^3} \right)_{a=a_0} \quad (2.32)$$

bulunur.

Sabit basınçta ısısal genleşme (α_t)

$$\alpha_t = \left(-\frac{C_v}{2a_0} \right) \left[\frac{\phi'''(a_0)}{(\phi''(a_0))^2} \right] \quad (2.33)$$

ifadesiyle verilir [52]. Burada C_v sabit hacim altındaki özısı, $\phi''(a_0)$ ve $\phi'''(a_0)$ ise potansiyelin atomlar arası mesafeye göre sırası ile ikinci ve üçüncü türevlerinin denge durumundaki ($a_0 = a/2$) değerleridir.

Young modülü (E), shear modülü (G), shear sabiti (C'), boyuna esneklik sabit (C_L) ve anizotropi çarpanı (A) ise esneklik teorisine göre

$$E = \frac{9BG}{(3B + G)}, \quad (2.34)$$

$$G = \frac{1}{10} \frac{[19C_{44}(C_{11} - C_{12}) + 6C_{44}^2 + 3(C_{11} - C_{12})^2]}{\left[2C_{44} + \frac{3}{2}(C_{11} - C_{12})\right]}, \quad (2.35)$$

$$C' = \frac{(C_{11} - C_{12})}{2}, \quad (2.36)$$

$$C_L = \frac{(C_{11} + C_{12} + 2C_{44})}{2}, \quad (2.37)$$

$$A = \frac{2C_{44}}{(C_{11} - C_{12})} \quad (2.38)$$

ifadeleri ile verilir [52,53].

Grüneisen sabiti (γ) teorik olarak örgü titreşimlerinden hesaplanabilir. Bir atomlu örgü titreşimlerinde $\omega \propto K^{1/2}$ olup K kuvvet sabitidir. Örgüdeki atomlar arası etkileşme enerjisi $\phi(a)$ olarak alınır ve $a = a_0$ denge durumunda Taylor serisine açılırsa,

$$\phi(a) = \phi(a = a_0) + \frac{(a - a_0)^2}{2} \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial a^2} \right)_{a=a_0} + \dots$$

elde edilir. Bir titreşicinin enerjisi,

$$E = E(a = a_0) + \frac{1}{2} K (\Delta x)^2 \quad (2.39)$$

şeklinde olduğundan, $K = \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial a^2} \right)_{a=a_0}$ bulunur. $\omega \propto K^{1/2}$ ve $V=a^3$ alınır

Grüneisen sabiti,

$$\begin{aligned} \gamma &= -\frac{V}{\omega} \frac{\partial \omega}{\partial V} \\ \gamma &= -\frac{V}{K^{1/2}} \frac{\partial K^{1/2}}{\partial a^3} = -\frac{a}{6K} \frac{\partial K}{\partial a} \\ \gamma &= -\frac{a}{6} \frac{\left(\frac{\partial^3 \phi}{\partial a^3} \right)_{a=a_0}}{\left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial a^2} \right)_{a=a_0}} \end{aligned} \quad (2.40)$$

olarak elde edilir [54].

2.3. Katıların Fonon Frekansları

Bir örgünün ilkel öteleme vektörleri $\vec{a}_1$, $\vec{a}_2$ ve $\vec{a}_3$ ile gösterilirse genel örgü vektörü

$$\vec{x}_l = l_1 \vec{a}_1 + l_2 \vec{a}_2 + l_3 \vec{a}_3 \quad (2.41)$$

olarak yazılabilir. Burada l_1 , l_2 , l_3 pozitif veya negatif tamsayılar olup sıfır değerini de alabilirler. Eğer birim hücre başına sadece bir atom varsa bu eşitlik aynı zamanda atomların konumlarını tayin etmekte kullanılabilir. Eğer birim hücre p atom içeriyorsa ve $p > 1$ ise p atomlarının birim hücre içindeki yerleri $\vec{x}(b)$ vektörleri ile verilir. Burada b birim hücredeki farklı atomları gösterir ve $1, 2, \dots, p'$ ye kadar değerler alır. Böylece b . inci atomun l . inci birim hücredeki pozisyonu

$$\vec{x}(lb) = \vec{x}(l) + \vec{x}(b) \quad (2.42)$$

ile verilir. Eğer $\vec{u}(lb)$, b . inci atomun denge konumundan yer değiştirmesi ise kristalin kinetik enerjisi

$$T = \frac{1}{2} \sum_{l,b,\alpha} M_b \dot{u}_\alpha^2(lb) \quad (2.43)$$

olarak yazılabilir. Burada M_b , b . inci atomun kütlesidir ve $u_\alpha(lb)$ yer değiştirmenin x,y,z kartezyen koordinatlarını ifade eder. Kristalin potansiyel enerjisi yer değiştirmenin kuvvetleri cinsinden Taylor serisine açılırsa,

$$\phi = \phi_0 + \sum_{lb\alpha} \phi_\alpha(lb) u_\alpha(lb) + \frac{1}{2} \sum_{\substack{lb\alpha \\ l'b'\beta}} \phi_{\alpha\beta}(lb, l'b') u_\alpha(lb) u_\beta(l'b') \dots \quad (2.44)$$

olur. ϕ_0 kristalin denge halindeki potansiyel enerjisi olup, dinamik problemler için bir önem taşımaz. Eşitlikteki $\phi_\alpha(lb)$ ve $\phi_{\alpha\beta}(lb, l'b')$ değerleri

$$\phi_\alpha(lb) = \left. \frac{\partial \phi}{\partial u_\alpha(lb)} \right|_0 \quad (2.45)$$

$$\phi_{\alpha\beta}(lb, l'b') = \left. \frac{\partial^2 \phi}{\partial u_\alpha(lb) \partial u_\beta(l'b')} \right|_0 \quad (2.46)$$

olarak verilir. Burada $|_0$ işareti denge konumunu göstermektedir. Denge halinde $\phi_\alpha(lb)$ değeri sıfırdır. Potansiyel ve kinetik enerji değerleri cinsinden kristalin Hamiltoniyeni

$$H = \phi_0 + \frac{1}{2} \sum_{lb\alpha} M_b \dot{u}_\alpha^2(lb) + \frac{1}{2} \sum_{\substack{lb\alpha \\ l'b'\beta}} \phi_{\alpha\beta}(lb, l'b') u_\alpha(lb) u_\beta(l'b') \quad (2.47)$$

olarak yazılabilir. Bu Hamiltoniyende, l . inci birim hücredeki b .inci atomun hareket denklemi

$$M_b \ddot{u}_\alpha(lb) = - \frac{\partial \phi}{\partial u_\alpha(lb)} = \sum_{l'b'\beta} \phi_{\alpha\beta}(lb, l'b') u_\beta(l'b') \quad (2.48)$$

şeklindedir. Burada $\phi_{\alpha\beta}(lb, l'b')$ kuvvet sabitlerini ifade eder. Bu kuvvet sabitleri iki önemli simetri şartını sağlar. Birincisi örgünün öteleme simetrisinden

$$\phi_{\alpha\beta}(lb, l'b') = \phi_{\alpha\beta}(0b, (l' - l)b') \quad (2.49)$$

elde edilir. İkincisi ise kristaldeki herhangi bir atom üzerindeki toplam kuvvetin, diğer bütün atomların eşit bir şekilde yer değiştirmesi sonucu sıfır olması gerçeğinden

$$\phi_{\alpha\beta}(lb, lb) = - \sum_{l'b' \neq lb} \phi_{\alpha\beta}(lb, l'b') \quad (2.50)$$

kaynaklanır. Kuvvet sabiti $\phi_{\alpha\beta}(lb, lb)$, öz-terim olarak adlandırılır. Örgü geçiş simetrisinden hareket denklemi

$$M_b \ddot{u}_\alpha(lb) = - \sum_{l'b' \neq lb} \phi_{\alpha\beta}(lb, l'b') u_\beta(l'b') \quad (2.51)$$

olarak yazılır. Bu denklem için aşağıdaki formda

$$u_\alpha(lb, \vec{q}) = \frac{1}{\sqrt{M_b}} \sum_{\vec{q}} U_\alpha(b, \vec{q}) \exp\{i[\vec{q} \cdot \vec{x}(l) - \omega t]\} \quad (2.52)$$

bir çözüm aranabilir. Burada $\vec{q}$ örgü vektörü ve $U_\alpha(\vec{q}, b)$, l' den bağımsızdır.

Bu eşitlik hareket denkleminde yerine konursa,

$$\omega^2 U_\alpha(\vec{q}, b) = \sum_{b'\beta} D_{\alpha\beta}(bb', \vec{q}) U_\beta(\vec{q}, b') \quad (2.53)$$

eşitliği elde edilir. Burada $D_{\alpha\beta}(bb', \vec{q})$ 'ya dinamik matris denir ve bu matrisin ifadesi

$$D_{\alpha\beta}(bb', \vec{q}) = \frac{1}{\sqrt{M_b M_{b'}}} \sum_{l'} \phi_{\alpha\beta}(lb, l'b') \exp\{i\vec{q} \cdot \vec{x}(l')\} \quad (2.54)$$

şeklinde verilir. Sonuç olarak fonon modları ,

$$\left| D_{\alpha\beta}(bb', \vec{q}) - \omega^2 \delta_{\alpha\beta} \delta_{bb'} \right| = 0 \quad (2.55)$$

denklemini çözerek elde edilir. Burada $D_{\alpha\beta}$ dinamik matrisi, birim hücredeki atom sayısına bağlı olarak boyutlandırılır. Birim hücrede p tane atom varsa, her bir atomun üç tane serbestlik derecesi olduğundan bu dinamik matris $3p \times 3p$ boyutundadır. Eğer kristalin birim hücresinde sadece bir atom varsa matris 3×3 boyutundadır. Bu durumda sadece akustik modlar elde edilebilir. Eğer kristalde birden fazla atom varsa (örneğin NaCl) dinamik matrisi 6×6 boyutunda olur ve optik modlar da elde edilebilir. Bu kristal için seçilen her

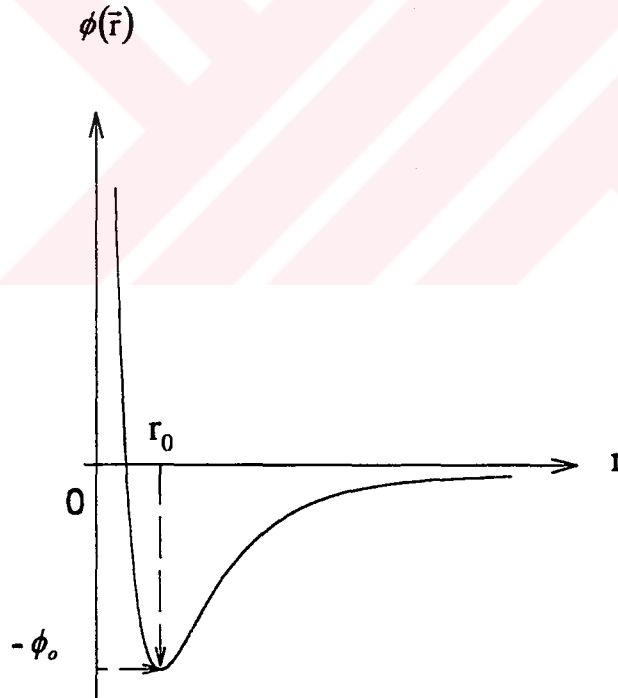
$\bar{q}$ deęerinde 6 tane fonon frekans deęeri bulunur ve bunlardan 3 tanesi akustik, 3 tanesi de optik fonon frekanslarıdır. Sonu olarak bir genelleme yapılırsa p atomlu bir kristalde $3p$ modunun, $3p-3$ tanesi akustik, 3 tanesi de optik olur.



3. ÇOK-CİSİM ETKİLEŞME POTANSİYELİ VE PARAMETRİZE METODU

3.1. Giriş

Atomlar arasındaki etkileşmeyi temsil eden potansiyel enerji fonksiyonu, atomlar arası uzaklıkla hızlı bir değişim gösterir (Şekil 3.1). r_0 uzaklığı için potansiyel bir minimum değere sahiptir. Atomlar mümkün olan en küçük enerji durumunda bulunma eğiliminde olacağından, sistem $r = r_0$ 'da en kararlı halinde olmalıdır ve bu konuma denge konumu denir. Sistemin kararlı olduğu denge konumundaki bağlanma enerjisi $-\phi_0$ 'dır.



Şekil 3.1. Atomlar arasındaki etkileşme potansiyel enerjisi fonksiyonu.

Atomlar arası merkezi etkileşme kuvveti $F(\vec{r})$, korunumlu kuvvet olduğundan,

$$F(\vec{r}) = -\frac{\partial \phi(\vec{r})}{\partial r} \quad (3.1)$$

dir. Bu kuvveti Şekil 3.1 deki potansiyel eğrisine uygularsak; $r > r_0$ için $F(\vec{r}) < 0$ olup kuvvet çekicidir. Bu çekici kuvvet atomları bir arada tutmaya çalışır. $r < r_0$ için, $F(\vec{r}) > 0$ olup kuvvet itici etkiye sahiptir. Sonuç olarak etkileşme kuvveti, uzak mesafelerde etkili olan çekici kuvvet ve kısa mesafelerde etkili olan itici kuvvet olmak üzere iki kısımdan oluşur. Bu iki kuvvet $r = r_0$ 'da birbirini dengeler.

Metallerin ve alaşımların elektronik, örgü ve esneklik özelliklerinin incelenmesinde, birçok amprik ve yarı-amprik atomik potansiyel enerji fonksiyonu uzun yıllardan beri kullanılmaktadır. Bugün bu alandaki çalışmalara halen sürekli ilgi devam etmektedir. Ayrıca metal ve alaşımların yukarıdaki özelliklerinin belirlenmesinde, iyon-iyon ve elektron-iyon-elektron etkileşmelerinin önemi bugüne kadar birçok araştırmacı tarafından açıklanmaya çalışılmıştır. Üç-cisim etkileşmelerinin katkısı için birçok farklı varsayımlar amaçlanırken, iki-cisim etkileşmelerinin katkısı genelde bir merkezi atomik potansiyel enerji fonksiyonu ile tanımlanmıştır.

3.2. Çok-Cisim Etkileşme Potansiyeli

N-atomlu bir sistemin toplam etkileşme enerjisi,

$$\phi = \phi_2 + \phi_3 + \dots + \phi_n + \dots \quad (3.2)$$

şeklinde yazılabilir. Burada ϕ_2 , ϕ_3 ve ϕ_n sırasıyla iki-cisim, üç-cisim ve n-cisim etkileşme potansiyel enerjilerini göstermektedir. Bu çalışmada bir

sistemin toplam etkileşme enerjisi, iki-cisim ve üç-cisim etkileşme enerjilerinin toplamı olarak alındı:

$$\phi = \phi_2 + \phi_3 \quad (3.3)$$

Bu teorik çalışmada, iki-cisim ve üç-cisim etkileşme potansiyellerini içeren yeni bir “çok-cisim etkileşme potansiyeli (MBP)” tanımladık. İyon-iyon (iki-cisim) etkileşmesi için, genelleştirilmiş Morse potansiyeli [55],

$$\phi_2(\vec{r}_{ij}) = \frac{D}{2(m-1)} \sum_{i \neq j} \left(\frac{r_o}{r_{ij}} \right)^n \left[\beta^m \exp(-m\alpha r_{ij}) - m\beta \exp(-\alpha r_{ij}) \right] \quad (3.4)$$

şeklinde değiştirildi. Burada m ve α sırasıyla potansiyelin genişlik ve derinlik kontroölü parametreleridir. D ayrışma enerjisi, r_o atomlar arası denge

uzaklığı ve $\beta = \exp(\alpha r_o)$ dir. $\left(\frac{r_o}{r_{ij}} \right)^n$ terimi ise özellikle kısa mesafelerde

kuvvetlerin gerçek yapısını ortaya çıkarmak için genelleştirilmiş Morse potansiyelini düzenler. r_{ij} ; i . ve j . atomlar arasındaki mesafedir. fcc ve bcc kristaller için $r_{ij} = a(m_{ij}^2 + n_{ij}^2 + l_{ij}^2)^{1/2}$ şeklinde ifade edilir. m_{ij} , n_{ij} ve l_{ij} atomların örgüdeki koordinatları, a ise kristalin örgü sabitidir.

Bir kristalin toplam bağlanma enerjisine, elektron-iyon-elektron etkileşmesinden kaynaklanan enerji katkısını içerebilmek için üç-cisim etkileşme potansiyeli, yeni tanımlanan $\phi_3(\vec{r}_{ij})$ (3.4) dikkate alınarak

$$\phi_3(\vec{r}_{ij}, \vec{r}_{ik}) = \frac{CD}{2(m-1)} \sum_{j \neq k} \sum_i \left(\frac{r_o}{r_{ij} + r_{ik}} \right)^n \left[\beta^m \exp(-m\alpha(r_{ij} + r_{ik})) - m\beta \exp(-\alpha(r_{ij} + r_{ik})) \right] \quad (3.5)$$

şeklinde tanımlandı. Burada r_{ij} ve r_{ik} ; i -atomunun sırasıyla j -ve k -atomlarına olan uzaklıklarıdır. C belirlenecek üç-cisim potansiyel parametresidir.

3.3. Potansiyel Parametrelerinin Parametrize Metodu

MBP' nin (α, r_o, D, C) potansiyel parametreleri, son zamanlarda Akgün ve Uğur [1,2] tarafından tanımlanan metoda göre hesaplanacaktır. Bu kristal metoduna göre, a_o denge konumunda ϕ_2 ve $\phi = \phi_2 + \phi_3$ (MBP) potansiyel enerji fonksiyonları aşağıdaki şartları sağlamalıdır:

$$\phi_2(\vec{r}_{ij}) \Big|_{r_{ij}=a_o} = \varepsilon_o , \quad (3.6)$$

$$\phi_2(\vec{r}_{ij}) \Big|_{r_{ij}=a_o} + \phi_3(\vec{r}_{ij}, \vec{r}_{ik}) \Big|_{r_{ij}=r_{ik}=a_o} = \phi , \quad (3.7)$$

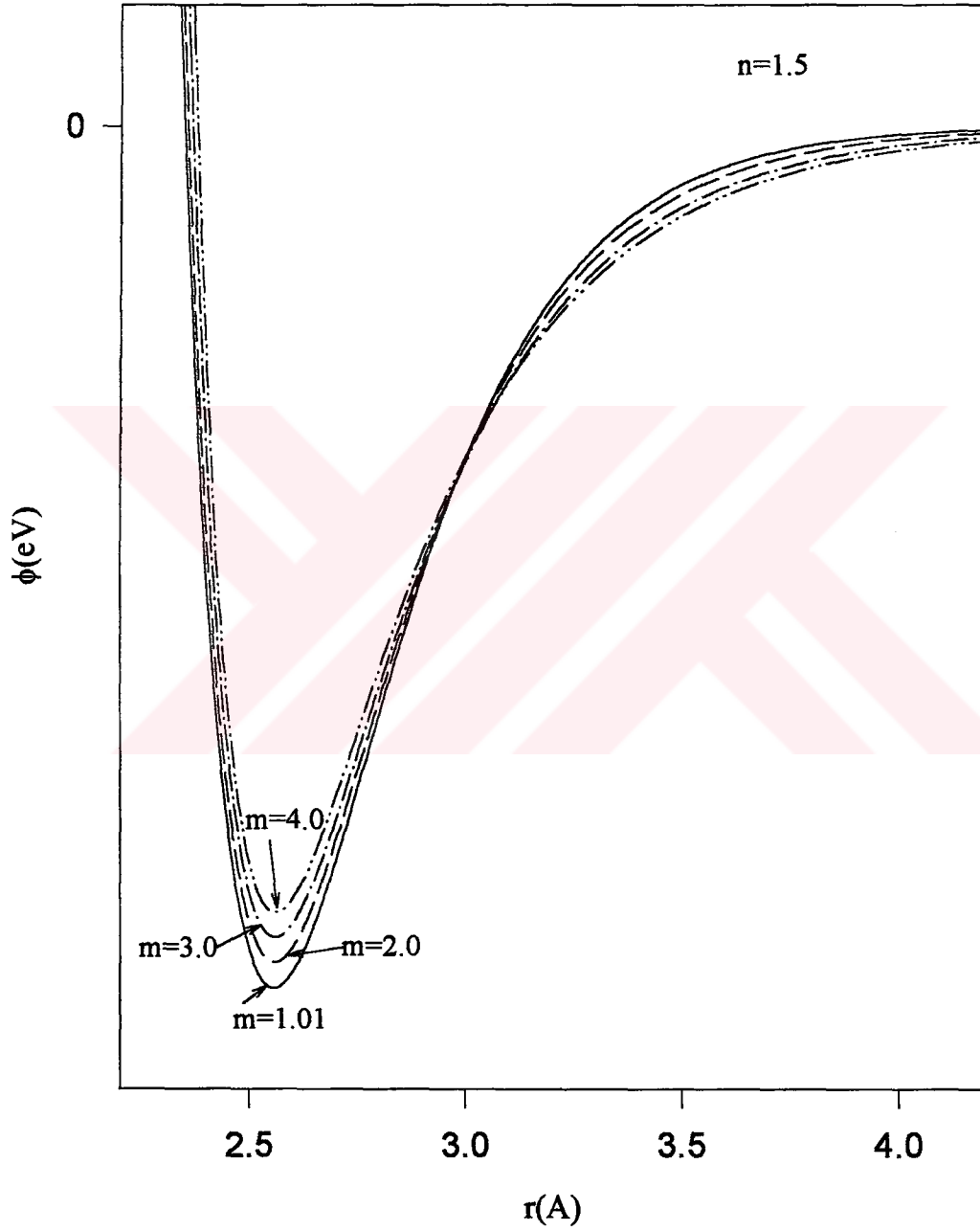
$$\frac{\partial \phi_2(\vec{r}_{ij})}{\partial r_{ij}} \Big|_{r_{ij}=a_o} = 0 , \quad (3.8)$$

$$\frac{\partial^2 \phi_2(\vec{r}_{ij})}{\partial r_{ij}^2} \Big|_{r_{ij}=a_o} + \frac{\partial^2 \phi_3(\vec{r}_{ij}, \vec{r}_{ik})}{\partial r_{ij} \partial r_{ik}} \Big|_{r_{ij}=r_{ik}=a_o} = 9ca_o B . \quad (3.9)$$

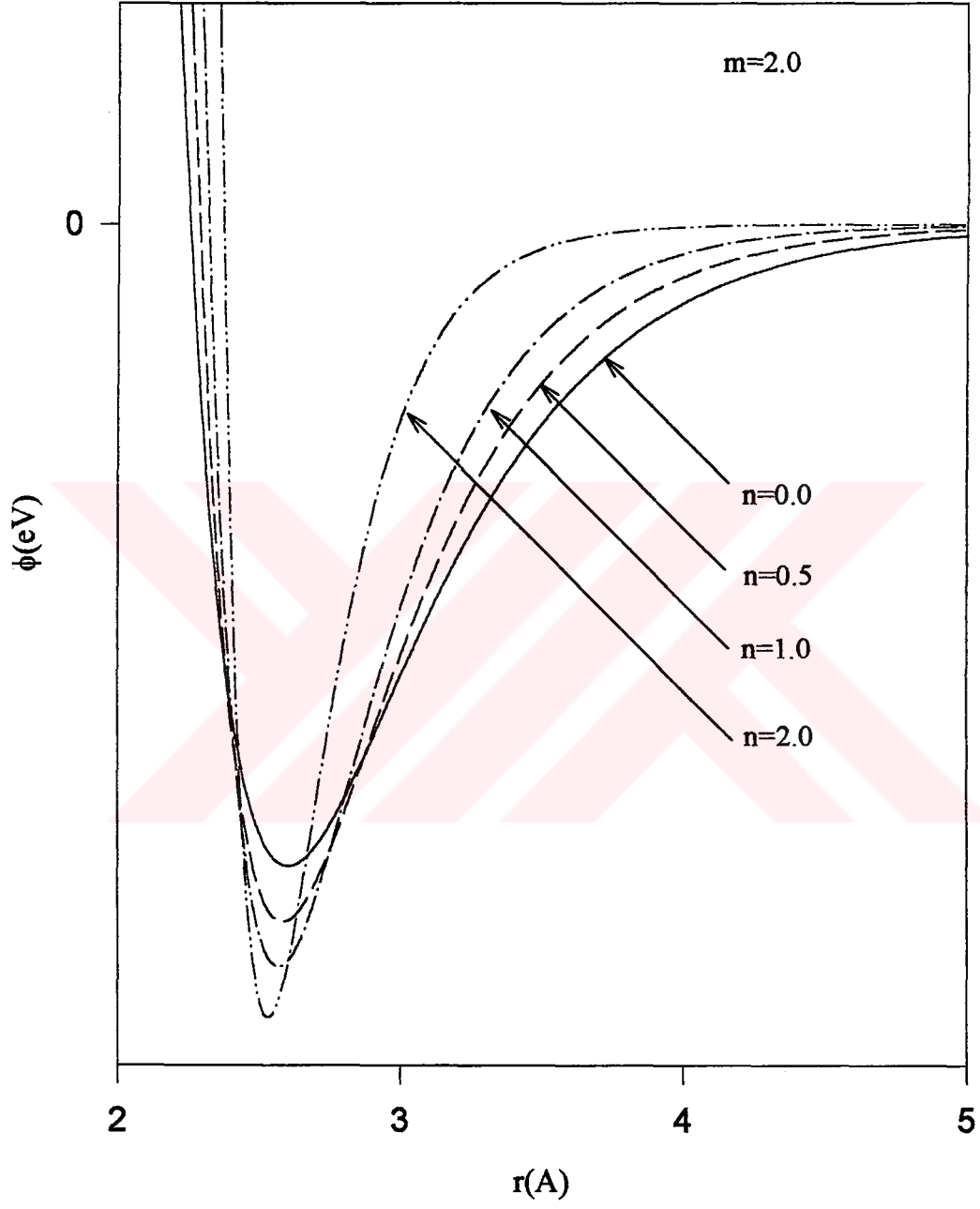
Burada ε_o , toplam bağlanma enerjisinin (ϕ) iyonik kısmı, B toplam Bulk modülü ve c geometrik sabittir (fcc kristaller için $c=2$). Fortran IV ve Basic programlama dilinde yazılan bilgisayar programları ile kristalin a, ε_o, ϕ ve B deneysel değerleri kullanılarak; m ve n 'nin farklı değerleri için sırasıyla eşitlik (3.6)' dan D , (3.7)' den C , (3.8)' den r_o , ve (3.9)' dan α potansiyel parametreleri hesaplanacaktır. Programda hem iki-cisim hem de üç-cisim etkileşmelerindeki toplamlar örgüde 10. komşuluğa kadar dikkate alındı.

Çok-cisim etkileşme (MBP) potansiyelindeki m ve n sabitlerinin alabileceği değerleri test etmek için potansiyelin atomlar arası uzaklığa göre eğrisi incelendi. Sabit n değerine karşılık farklı m değerleri için potansiyel eğrisi Şekil 3.2' de ve sabit m değerine karşılık farklı n değerleri için potansiyel eğrisi Şekil 3.3' de verilmiştir. Şekil 3.2' den görüldüğü gibi n 'nin sabit olduğu durumda, potansiyel $r=r_o$ denge durumunda m 'nin küçük değerlerinde

etkili, fakat denge durumundan uzaklaştıkça m 'nin büyük değerlerinin daha çok etkili olduğu görülmektedir. Şekil 3.3' de m 'nin sabit tutulduğu durumda ise potansiyelin denge durumu için n 'nin büyük değerlerinde etkili, fakat denge durumundan uzaklaştıkça n 'nin küçük değerlerinde daha çok etkili olduğu görülmektedir. fcc yapılı birçok metal için sabit n değerlerine karşılık farklı m değerleri ve sabit m değerlerine karşılık farklı n değerleri için potansiyel parametreleri hesaplandı. Bu değerler kullanılarak metallerin ikinci ve üçüncü mertebeden esneklik sabitleri hesaplandı. Deneye en yakın esneklik sabitlerini veren potansiyel parametreleri içinden m ve n için bir sınırlama yapılmaya çalışıldı. Sonuç olarak en iyi m değerlerinin 1.01 ile 4.00 arası ve n için ise 0.00 ile 2.00 arası olduğuna karar verildi. Hesaplamalarda MBP' nin m ve n sabitleri için bu aralıklar dikkate alınacaktır.



Şekil 3.2. Sabit n değerine karşılık farklı m değerleri için potansiyel eğrileri.



Şekil 3.3. Sabit m değerine karşılık farklı n değerleri için potansiyel eğrileri.

4. $\text{Fe}_{(1-x)}\text{-Mn}_x$ ($x=0.30, 0.40$) ALAŞIMLARININ ESNEKLİK ÖZELLİKLERİNİN VE FONON FREKANSLARININ HESAPLANMASI

4.1. Giriş

Bu çalışmada, eşitlik (3.4) ve (3.5) ile tanımlanan yeni MBP'nin, Fe-bazlı alaşımların örgü dinamiğini incelemeye uygun olup olmadığı araştırıldı. Hesaplanan teorik sonuçları karşılaştırmak için mevcut deneysel çalışmalar, incelenecek alaşımların seçilmesinde belirleyici etken olmaktadır. Bu nedenle Fe-bazlı alaşımlardan, deneysel sonuçları olan ve teorik olarak incelenmemiş alaşımlar amaçlandı.

Fe-Pd, Fe-Ni, Fe-Pt ve Fe-Mn gibi Fe-bazlı alaşımların deneysel olarak ölçülen esneklik sabitlerinin ve ısısal genleşme katsayılarının değerlerine bağlı olarak literatürde tanımlandığı gibi [52,53,56-60] Invar alaşımların tipik örnekleridir. Bu alaşımların ilgi çekici özelliği, alaşımın iki elementinin farklı kristal yapılarda olmasıdır. Örneğin Fe oda sıcaklığında bcc, Mn ise kübik kompleks yapıya sahiptir [59]. Fe-Mn alaşımları ise oda sıcaklığında fcc yapıya sahiptir. Fe-Mn alaşımlarının yapısal karmaşıklığı nedeniyle örgü dinamiği bugüne kadar teorik olarak hiç incelenmemiştir.

Bu bölümde $\text{Fe}_{(1-x)}\text{-Mn}_x$ ($x=0.40$) alaşımının esneklik özellikleri ve $\text{Fe}_{(1-x)}\text{-Mn}_x$ ($x=0.30$) alaşımının ise fonon frekansları Akgün [3] tarafından geliştirilen kristal modeline göre hesaplandı ve deneysel sonuçlarla karşılaştırıldı. Bu kristal modeline göre alaşımın yapısı referans yapı olarak seçilir ve alaşımı tanımlayan potansiyel parametreleri alaşımın kendi örgü sabiti, bağlanma enerjisi ve bulk modülü kullanılarak doğrudan alaşım için hesaplanır. (3.4) ve (3.5) eşitlikleri ile verilen MBP'nin parametreleri (α, r_o, D, C), $\text{Fe}_{(1-x)}\text{-Mn}_x$

($x=0.30, 0.40$) alaşımları için hesaplanırken doğrudan alaşımların örgü sabiti, bulk modülü, bağlanma enerjisi ve bu enerjinin iyonik kısmı kullanıldı.

4.2. $\text{Fe}_{(1-x)}\text{-Mn}_x$ ($x=0.40$) Alaışımının Esneklik Özellikleri

Antiferromanyetik $\text{Fe}_{(1-x)}\text{-Mn}_x$ ($x=0.40$) alaışımının ısısal genleşme katsayısı Invar özellik göstermesine rağmen yine 200 °K ile 450 °K arasında Invar özellik gösteren ferromanyetik Fe-Ni ve Fe-Pt alaşımları kadar farklı oranlarda çok Fe-Mn alaşımlarının örgü dinamiği deneysel olarak incelenmemiştir. $\text{Fe}_{(1-x)}\text{-Mn}_x$ ($x=0.40$) alaşımı için ikinci-mertebeden esneklik sabitleri (C_{11}, C_{12}, C_{44}), bulk modülü (B) ve bunların basınçla değişimleri

$(\frac{\partial C'_{ij}}{\partial P}, \frac{\partial B}{\partial P})$ 4.2-700 °K arasında Cankurtaran ve arkadaşları tarafından

ultrasonik teknikle ölçülmüştür [59]. Deneysel bulgulara göre; (i) Boyuna esneklik sabiti C_L , shear sabiti C' ve bulk modülü B' ye antiferromanyetik katkılar 575°K civarında başlar ve bütün sıcaklıklar için negatiftir. Antiferromanyetik durumda C_{44} küçük miktarda artarken, C_L, C' ve B azalır.

(ii) C_L, C' ve B 'nin hidrostatik basınca göre değişimleri $(\frac{\partial C_L}{\partial P}, \frac{\partial C'}{\partial P}, \frac{\partial B}{\partial P})$ oda sıcaklığından Neel sıcaklığına doğru gidildikçe azalmaktadır.

Bu kesimde antiferromanyetik $\text{Fe}_{(1-x)}\text{-Mn}_x$ ($x=0.40$) alaışımının ikinci mertebeden ($C_{11}, C_{12}, C_{44} \cong C_{12}$ Cauchy bağıntısı) ve üçüncü mertebeden ($C_{111}, C_{112}=C_{116}, C_{123}=C_{144}$) esneklik sabitleri, ısısal genleşme katsayısı (α_i), bulk modülü ve ikinci mertebeden esneklik sabitlerinin basınçla değişimleri

$(\frac{\partial B}{\partial P}, \frac{\partial C'_{ij}}{\partial P})$, boyuna esneklik sabiti (C_L), Shear sabiti (C'), Young modülü (E),

anizotropi çarpanı (A), Shear modülü (G) ve Grüneisen parametresi (γ) teorik olarak hesaplandı.

$\text{Fe}_{(1-x)}\text{-Mn}_x$ ($x=0.40$) alařımı iin eřitlik (3.4) ve (3.5) ile verilen MBP'nin parametreleri (α , r_o , D , C), eřitlik (3.6-9) kullanılarak m ve n 'nin farklı deęerleri iin hesaplanacaktır. Eřitlik (3.6-9)' da kullanılacak giriř verileri izelge 4.1. de verildi. Alařım iin MBP' i en iyi tanımlayan m ve n 'nin uygun deęerlerini bulmak amacıyla, nce ikinci-mertebeden esneklik sabitleri (C_{ij}) hesaplandı. Bu esneklik sabitleri iin 2.Blmde yalnız iki-cisim etkileřmelerine gre verilen (2.17, 2.18) eřitlikleri, cisim etkileřmelerinden gelen katkıları da ierecek řekilde yeniden dzenlendi [61,62]:

$$C_{11} = \frac{\alpha_o^2}{V_c} \sum_{j \neq k} \sum_i \left\{ \left[m_{ij}^4 \frac{\partial^2 \phi_2(\vec{r}_{ij})}{\partial (r_{ij}^2)^2} \right] + \left[m_{ij}^2 m_{ik}^2 \frac{\partial^2 \phi_3(\vec{r}_{ij}, \vec{r}_{ik})}{\partial r_{ij}^2 \partial r_{ik}^2} \right] \right\}, \quad (4.1)$$

$$C_{12} = \frac{\alpha_o^2}{V_c} \sum_{j \neq k} \sum_i \left\{ \left[m_{ij}^2 n_{ij}^2 \frac{\partial^2 \phi_2(\vec{r}_{ij})}{\partial (r_{ij}^2)^2} \right] + \left[m_{ij} m_{ik} n_{ij} n_{ik} \frac{\partial^2 \phi_3(\vec{r}_{ij}, \vec{r}_{ik})}{\partial r_{ij}^2 \partial r_{ik}^2} \right] \right\}. \quad (4.2)$$

Eřitliklerdeki toplamalar fcc yapının 10. komřuluęuna kadar geniřletildi. m ve n 'nin farklı her deęeri iin hesaplanan ikinci mertebeden esneklik sabitlerinden deneysel deęere en yakın olanları tanımlayan parametre deęerleri, alařım iin MBP parametreleri (α , r_o , D , C) olarak seildi. Bu parametrelerin deęerleri izelge 4.2. de ve hesaplanan C_{ij} 'ler izelge 4.3. de verildi. C_{44} iin $C_{12} = C_{44}$ Cauchy eřitlięi kullanıldı.

izelge 4.1. $\text{Fe}_{(1-x)}\text{-Mn}_x$ ($x=0.40$) alařımının oda sıcaklıęındaki giriř verileri [59,63].

a (10^{-10} m)	$-\epsilon_o$ (eV)	$B(10^{11} \text{Nm}^{-2})$	$-\phi$ (eV)
3.614	0.86	1.23	3.736

Çizelge 4.2. $\text{Fe}_{(1-x)}\text{-Mn}_x$ ($x=0.40$) alaşımı için hesaplanan MBP parametreleri.

n	m	D (eV)	α (10^{10} m^{-1})	r_o (10^{10} m)	C
1.16	1.14	0.133997	3.130000	2.611247	0.523476

Üçüncü-mertebeden esneklik sabitleri, Eşitlik(2.20-22) ve üç-cisim etkileşimleri de dikkate alınarak [62],

$$C_{111} = \frac{a_o^3}{V_c} \sum_{j \neq k} \sum_i \left\{ \left[m_{ij}^6 \frac{\partial^3 \phi_2(\vec{r}_{ij})}{\partial (r_{ij}^2)^3} \right] + \left[m_{ij}^2 m_{ik}^2 m_{jk}^2 \frac{\partial^3 \phi_3(\vec{r}_{ij} \vec{r}_{ik} \vec{r}_{jk})}{\partial r_{ij}^2 \partial r_{ik}^2 \partial r_{jk}^2} \right] \right\}, \quad (4.3)$$

$$C_{112} = \frac{a_o^3}{V_c} \sum_{j \neq k} \sum_i \left\{ \left[m_{ij}^4 n_{ij}^2 \frac{\partial^3 \phi_2(\vec{r}_{ij})}{\partial (r_{ij}^2)^3} \right] + \left[m_{ij}^2 m_{ik}^2 n_{jk}^2 \frac{\partial^3 \phi_3(\vec{r}_{ij} \vec{r}_{ik} \vec{r}_{jk})}{\partial r_{ij}^2 \partial r_{ik}^2 \partial r_{jk}^2} \right] \right\}, \quad (4.4)$$

$$C_{123} = \frac{a_o^3}{V_c} \sum_{j \neq k} \sum_i \left\{ \left[m_{ij}^2 n_{ij}^2 l_{ij}^2 \frac{\partial^3 \phi_2(\vec{r}_{ij})}{\partial (r_{ij}^2)^3} \right] + \left[m_{ij}^2 n_{ik}^2 l_{jk}^2 \frac{\partial^3 \phi_3(\vec{r}_{ij} \vec{r}_{ik} \vec{r}_{jk})}{\partial r_{ij}^2 \partial r_{ik}^2 \partial r_{jk}^2} \right] \right\} \quad (4.5)$$

şeklinde tanımlandı. Burada, $r_{ij} = a(m_{ij}^2 + n_{ij}^2 + l_{ij}^2)^{1/2}$, $r_{ik} = a(m_{ik}^2 + n_{ik}^2 + l_{ik}^2)^{1/2}$ ve $r_{jk} = a(m_{jk}^2 + n_{jk}^2 + l_{jk}^2)^{1/2}$ 'dir. Hesaplanan C_{ijk} 'lar Çizelge 4.3. de verildi.

Çizelge 4.3. $\text{Fe}_{(1-x)}\text{-Mn}_x$ ($x=0.40$) alaşımı için oda sıcaklığında hesaplanan ikinci ve üçüncü mertebeden esneklik sabitleri (10^{11} Nm^{-2}).

C_{11}	C_{12}	C_{44}	C_{111}	C_{112}	C_{123}	Referans
1.70	0.98	0.98	-19.41	-11.28	0.11	Bu çalışma
1.70	0.98	1.41	-	-	-	[59]

Sabit basınçta ısısal genleşme katsayısı (α_t) için eşitlik (2.33), eşitlik (3.3-5) yardımı ile çok-cisim etkileşmelerini içerecek şekilde

$$\alpha_t = -\frac{C_v}{2a_0} \sum_{j \neq k} \sum_i \left\{ \frac{\left[\frac{\partial^3 \phi_2(\vec{r}_{ij})}{\partial r_{ij}^3} \right] + \left[\frac{\partial^3 \phi_3(\vec{r}_{ij}, \vec{r}_{ik}, \vec{r}_{jk})}{\partial r_{ij} \partial r_{ik} \partial r_{jk}} \right]}{\left(\left[\frac{\partial^2 \phi_2(\vec{r}_{ij})}{\partial r_{ij}^2} \right] + \left[\frac{\partial^2 \phi_3(\vec{r}_{ij}, \vec{r}_{ik})}{\partial r_{ij} \partial r_{ik}} \right] \right)^2} \right\} \quad (4.6)$$

yeniden düzenlendi. Alaşımın özısı (C_v) hesaplanırken Neumann-Koop kuralından yararlanıldı. Bu kurala göre alaşımın özısı, C_v_{alaşım} = N_A C_{vA} + N_B C_{vB} + ... şeklindedir. Oda sıcaklığında C_{vFe} = 6.038 Jmol⁻¹K⁻¹ ve C_{vMn} = 9.096 Jmol⁻¹K⁻¹ 'dir [63]. C_{vFeMn} = 7.2612 Jmol⁻¹K⁻¹ olarak hesaplandı. Eşitlik (4.6)' dan hesaplanan (α_t) değeri Çizelge 4.4. de verildi.

Bulk modülünün basınçla değişimi, eşitlik (2.32) ve eşitlik (3.3-5) kullanılarak bulunan

$$\left(\frac{\partial B}{\partial P} \right)_T = 1 - \frac{a_0^3}{27BV} \sum_{j \neq k} \sum_i \left\{ \left[\frac{\partial^3 \phi_2(\vec{r}_{ij})}{\partial r_{ij}^3} \right] + \left[\frac{\partial^3 \phi_3(\vec{r}_{ij}, \vec{r}_{ik}, \vec{r}_{jk})}{\partial r_{ij} \partial r_{ik} \partial r_{jk}} \right] \right\} \quad (4.7)$$

bağıntısı ile hesaplandı ve değeri Çizelge 4.4. de verildi.

Eşitlik (4.1-5) ile verilen ikinci ve üçüncü mertebeden esneklik sabitleri, çok-cisim etkileşmesinden gelen katkıyı da içerdiğinden bu esneklik sabitlerine bağlı olarak hesaplanan diğer esneklik özelliklerde dolaylı olarak bu katkıyı içerecektir. Eşitlik (2.34)' den Young modülü (E), (2.35)' den shear modülü (G), (2.36)' den shear sabiti (C'), (2.37)' den boyuna esneklik sabit (C_L) ve (2.38)' den anizotropi çarpanı (A) hesaplandı ve değerleri Çizelge 4.5. de verildi.

İkinci mertebeden etkin esneklik sabitlerinin basınçla değişimleri ise

$\left(\left(\frac{\partial C'_{11}}{\partial P} \right), \left(\frac{\partial C'_{12}}{\partial P} \right), \left(\frac{\partial C'_{44}}{\partial P} \right) \right)$ eşitlik (2.23-25)' den hesaplandı ve değerleri

Çizelge 4.4. de verildi.

Çizelge 4.4. $\text{Fe}_{(1-x)}\text{-Mn}_x$ ($x=0.40$) alaşımı için oda sıcaklığında hesaplanan ve ölçülen bazı esneklik özellikleri.

$(\partial B/\partial P)_T$	$\partial C'_{11}/\partial P$	$\partial C'_{12}/\partial P$	$\partial C'_{44}/\partial P$	$\alpha_t(10^{-6}\text{K}^{-1})$	Referans
9.20	10.02	6.93	4.08	8.9	Bu çalışma
8.25	10.10	7.10	3.80	9.3	[59]

Grüneisen sabiti (γ), eşitlik(2.40) ve eşitlik (3.3-5) yardımıyla elde edilen;

$$\gamma = -\frac{a_0}{6} \sum_{j \neq k} \sum_i \frac{\left\{ \left[\frac{\partial^3 \phi_2(\vec{r}_{ij})}{\partial r_{ij}^3} \right] + \left[\frac{\partial^3 \phi_3(\vec{r}_{ij}\vec{r}_{ik}\vec{r}_{jk})}{\partial r_{ij} \partial r_{ik} \partial r_{jk}} \right] \right\}}{\left\{ \left[\frac{\partial^2 \phi_2(\vec{r}_{ij})}{\partial r_{ij}^2} \right] + \left[\frac{\partial^2 \phi_3(\vec{r}_{ij}\vec{r}_{ik})}{\partial r_{ij} \partial r_{ik}} \right] \right\}} \quad (4.8)$$

bağıntıdan hesaplandı ve değeri Çizelge 4.5. verildi.

Çizelge 4.5. $\text{Fe}_{(1-x)}\text{-Mn}_x$ ($x=0.40$) alaşımı için oda sıcaklığında hesaplanan ve ölçülen bazı esneklik özellikleri (C' , C_L , E ve G 10^{11}Nm^{-2} biriminde).

γ	C'	C_L	A	E	G	Referans
1.85	0.36	2.35	2.72	1.77	0.70	Bu çalışma
-	0.36	2.75	3.91	2.05	0.84	[59]

Çizelge 4.3-5' den de görüldüğü gibi antiferromanyetik $\text{Fe}_{(1-x)}\text{-Mn}_x$ ($x=0.40$) alaşımı için MBP kullanılarak hesaplanan esneklik özelliklerin değerleri

ultrasonik teknikle ölçülen deneysel değerlerle [59] uyum içindedir. $\frac{\partial C'_y}{\partial P}, \frac{\partial B}{\partial P}$

ve α_t için hesaplanan değerler pozitif olduğundan bu alaşımın ısısal genleşmesindeki Invar anormallik (anomaly) oldukça azdır. Kübik kristallerin esneklik özellikleri boyuna esneklik sabiti C_L ve shear modülü C' ile de ifade edilebilir. $\text{Fe}_{(1-x)}\text{-Mn}_x$ ($x=0.40$) alaşımının hem paramanyetik hem de antiferromanyetik durumları için C_L ve C' 'nın sıcaklık bağımlılıkları Cankurtaran ve arkadaşları [59] tarafından ölçülmüştür. 575 °K'nin altındaki paramanyetik bölgede bu sabitler, artan sıcaklık ile yaklaşık doğrusal olarak azalmaktadır. Ancak C_L ve C' , antiferromanyetik duruma geçişte azalırken C_{44} artar. C_L , C' ve C_{44} 'deki bu değişiklikler manyetoesnek etkileşmelerin büyüklüğünü ifade eder. Antiferromanyetik bölgede Cankurtaran ve arkadaşları [59] C_L ve C' 'ye negatif, C_{44} 'e pozitif manyetik katkılar hesaplamışlardır.

Sonuç olarak, fcc antiferromanyetik $\text{Fe}_{(1-x)}\text{-Mn}_x$ ($x=0.40$) alaşımının esneklik özelliklerini incelemeye kullanılan MBP ve kristal modeli deneyle çok iyi uyumlu sonuçlar vermiştir. Bu uyum, bize hem MBP' nin hem de kristal modelinin fcc ikili tip-II alaşımlarının esneklik özelliklerini incelemeye etkili olacağını göstermektedir. Hesaplamalarda kullanılan giriş verilerinin esneklik sabitlerinden ve fonon frekanslarından bağımsız oluşu da bu kristal modelini diğerlerinden daha avantajlı konuma getirmektedir.

4.3. $\text{Fe}_{(1-x)}\text{-Mn}_x$ ($x=0.30$) Alaşımının Fonon Frekansları

fcc kristal yapılı $\text{Fe}_{(1-x)}\text{-Mn}_x$ ($x=0.30$) alaşımı antiferromanyetik ve Invar bir alaşımdır. Invar özelliğinden dolayı geniş sıcaklık bölgesinde, oldukça küçük ısısal genleşme katsayısına sahiptir. Bu alaşımın esneklik sabitleri ise Curie sıcaklığının altında azalmaktadır. Bu azalma sıcaklığa ve fonon frekanslarına

bağlıdır. Fonon frekanslarındaki değişme ise, elektron-fonon etkileşmesinin artmasıyla açıklanabilir. Elektron-fonon arasındaki etkileşmenin artması doğrudan fermi yüzeyindeki elektronik durum yoğunluğuna bağlıdır. Örgü anormallikleri (anomaly) üzerindeki deneysel çalışmalar bize önemli bulgular sağlar. $\text{Fe}_{(1-x)}\text{-Mn}_x$ ($x=0.30$) alaşımı, 0 °K' de negatif ısısal genleşme katsayısına sahiptir ($\alpha/T < 0$) [64,65]. Bu elektronik enerjinin toplam enerjiye katkısının bir sonucudur. Sonuç olarak bu alaşımın fermi enerjisindeki elektron yoğunluğu, elektron-fonon etkileşmesini artıracak kadar büyüktür ve örgü dinamiğindeki bu anormallikler, ferromanyetik Invar alaşımlarınıninkine benzer.

Bu kesimde yeni tanımlanan MBP kullanılarak; yukarıda bahsedilen elektronik enerjinin toplam enerjiye katkısı incelenmektedir.

$\text{Fe}_{(1-x)}\text{-Mn}_x$ ($x=30$) alaşımı için eşitlik (3.4-5) ile verilen MBP'nin parametreleri (α , r_o , D , C), eşitlik (3.6-9) kullanılarak Kesim 4.2.' de tanımlandığı gibi m ve n 'nin farklı değerleri için belirlendi. Eşitlik (3.6-9)' da kullanılan giriş verileri Çizelge 4.6. da verildi. Alaşım için MBP'ni en iyi tanımlayan m ve n 'nin uygun değerlerini bulmak amacıyla, ikinci-mertebeden esneklik sabitleri (C_{11} , C_{12}) eşitlik (4.1-2) den ve C_{44} ise Milstein ve arkadaşları tarafından tanımlanan [66],

$$C_{44} = \frac{1}{3}(2C_{11} - C_{12}) \quad (4.9)$$

bağıntısı ile hesaplandı. m ve n 'nin farklı her değeri için hesaplanan ikinci mertebeden esneklik sabitlerinden deneysel değere en yakın değerleri veren parametre değerleri alaşım için, MBP parametreleri (α , r_o , D , C) olarak seçildi. Hesaplanan parametre değerleri Çizelge 4.7.' de ve esneklik sabitler ise Çizelge 4.8.' de verildi.

Çizelge 4.6. $\text{Fe}_{(1-x)}\text{-Mn}_x$ ($x=0.30$) alaşımı için oda sıcaklığındaki giriş verileri [65,67].

a (10^{-10} m)	$-\varepsilon_o$ (eV)	$B(10^{11}\text{Nm}^{-2})$	$-\phi$ (eV)
3.606	0.87	1.3569	3.872

Çizelge 4.7. $\text{Fe}_{(1-x)}\text{-Mn}_x$ ($x=0.30$) alaşımı için hesaplanan MBP parametreleri.

n	m	D (eV)	$\alpha(10^{10}\text{m}^{-1})$	$r_o(10^{10}\text{m})$	C
1.21	1.17	0.137834	3.463754	2.592955	0.4672

Çizelge 4.8. $\text{Fe}_{(1-x)}\text{-Mn}_x$ ($x=0.30$) alaşımı için oda sıcaklığında hesaplanan ve ölçülen ikinci mertebeden esneklik sabitleri (10^{11}Nm^{-2}).

C_{11}	C_{12}	C_{44}	Referans
2.19	1.19	1.06	Bu çalışma
2.00	1.27	1.30	[65]

$\text{Fe}_{(1-x)}\text{-Mn}_x$ ($x=0.30$) alaşımının fonon frekanslarının hesaplanması için eşitlik (2.55) ile verilen determinantın çözülmesi gerekir. Eşitlikte verilen $D_{\alpha\beta}$, (3x3) boyutunda bir dinamik matristir. Bu eşitliğin çözümünden, [100], [110] ve [111] temel simetri doğrultularında enine ve boyuna kollar için fonon frekans bağıntıları;

$$\left. \begin{aligned}
 M\omega_L^2[100] &= D_{11}[100] \\
 M\omega_T^2[100] &= D_{33}[100] \\
 M\omega_L^2[110] &= D_{11}[110] + D_{12}[110] \\
 M\omega_{T1}^2[110] &= D_{11}[110] - D_{12}[110] \\
 M\omega_{T2}^2[110] &= D_{33}[110] \\
 M\omega_L^2[111] &= D_{11}[111] + 2D_{12}[111] \\
 M\omega_T^2[111] &= D_{11}[111] - D_{12}[111]
 \end{aligned} \right\} \quad (4.10)$$

şeklinde bulunur. CGW modeline göre fcc kristaller için Upadhyaya [68] tarafından bulunan bu dinamik matrisin diagonal ve diagonal olmayan elamanları,

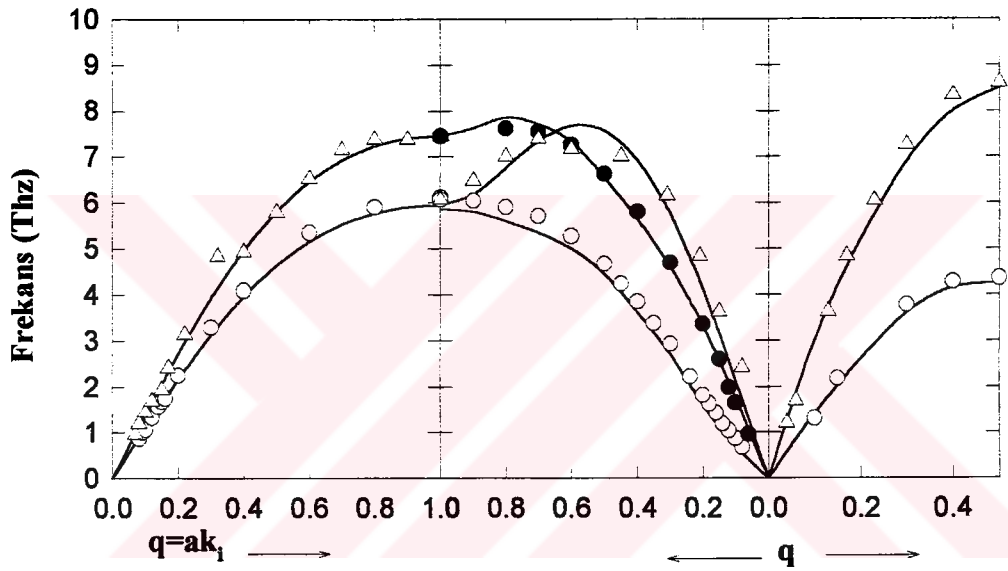
$$\left. \begin{aligned}
 D_{\alpha\alpha}(\vec{q}) &= \pi^2 M v_L^2 [2 - c_1(c_2 + c_3)] \\
 &+ \frac{1}{2} (aC_{11} - \pi^2 M v_L^2) (1 - \cos q_1 a) \\
 &+ \frac{1}{2} \left(aC_{44} - \frac{\pi^2}{2} M v_L^2 \right) (2 - \cos q_2 a - \cos q_3 a) \\
 D_{\alpha\beta}(\vec{q}) &= a(C_{11} + C_{44}) s_1 s_2
 \end{aligned} \right\} \quad (4.11)$$

şeklindedir. Burada M iyonik kütlelerdir. $s_i = \sin q_i a/2$, $c_i = \cos q_i a/2$, q_i fonon dalga vektörü ve C_{ij} 'ler ikinci mertebeden esneklik sabitleridir. v_L , $[100]$ zone sınırındaki boyuna fonon frekansıdır. Eşitlik (4.11)'deki M iyonik kütlesi, $\text{Fe}_{(1-x)}\text{-Mn}_x$ ($x=0.30$) alaşımı için doğrusal bağıntıdan hesaplanabilir;

$$M(\text{Fe-Mn}) = (1-x)M(\text{Fe}) + xM(\text{Mn}). \quad (4.12)$$

Eşitlik (4.10-11) kullanılarak, $\text{Fe}_{(1-x)}\text{-Mn}_x$ ($x=0.30$) alaşımının fonon frekansları hesaplandı ve Şekil 4.1. de fonon frekans eğrileri verildi.

Şekil 4.1. den de görüldüğü gibi hesaplanan frekanslar deneyle uyum içindedir ve bu uyum tanımlanan MBP' nin Fe-Mn alaşımlarının fonon frekanslarının hesaplanmasında etkin olduğunu gösterir.



Şekil 4.1. $\text{Fe}_{(1-x)}\text{-Mn}_x$ ($x=0.30$) alaışımının oda sıcaklığında fonon frekans eğrisi. Sürekli çizgiler hesaplanan, (o, ●, Δ) sembolleri ise deneysel [65] frekansları göstermektedir.

5. $\text{Fe}_{(1-x)}\text{-Ni}_x$ ($x=0.30, 0.35, 0.76, 0.88$) ALAŞIMLARININ ESNEKLİK ÖZELLİKLERİNİN VE FONON FREKANSLARININ HESAPLANMASI

5.1. Giriş

Fe-Ni Invar alaşımları oda sıcaklığında negatif ısısal genleşme değerine sahip olduğu gibi deneysel sonuçlara göre Invar özelliklerin en iyi gözlemlendiği alaşımlardır [52,58,69-71]. Invar alaşımlar için değişik Invar teorileri vardır. Bunlar arasında elektronik band yapıları, elektronik durumların tamamlanması, statik düzensiz değişim teorileri sayılabilir. Invar elektronik band yapısı hakkındaki teori son zamanlarda büyük ilgi görmektedir. Daha çok yüzey merkezli sistemlerde ve geçiş metallerinde yaygın olarak çalışılan bu teoride, manyetik momentin hacim düzensizliğinin Invar özellikleri etkilediği vurgulanmaktadır [72-74]. Ayrıca Invar alaşımlarda ısısal genleşme örgü titreşimleri tarafından tayin edilir ve örgü titreşimleri ile manyetizma arasında bir ilişki olduğu bilinmektedir.

5.2. $\text{Fe}_{(1-x)}\text{-Ni}_x$ ($x=0.30$) Alaşımının Esneklik Özellikleri

Fe-Ni alaşımlarının esneklik sabitleri Ni konsantrasyonlarına bağlı olarak

esneklik sabitleri, ısısal genleşme katsayısı (α_l), Bulk modülü ve ikinci mertebeden esneklik sabitlerinin basınçla değişimleri ($\frac{\partial B}{\partial P}, \frac{\partial C'_{ij}}{\partial P}$), Shear sabiti (C'), boyuna esneklik sabiti (C_L), Young modülü (E), anizotropi çarpanı (A), Shear modülü (G) ve Grüneisen parametresi (γ) hesaplandı.

Eşitlik (3.4-5) de verilen MBP'nin parametreleri (α, r_o, D, C), $\text{Fe}_{(1-x)}\text{-Ni}_x$ ($x=0.30$) alaşımı için eşitlik (3.6-9) kullanılarak m ve n 'nin farklı değerleri için hesaplanacaktır. Eşitlik (3.6-9)' da kullanılan giriş verileri Çizelge 5.1. de verildi. Alaşım için MBP'ni en iyi tanımlayan m ve n değerlerini bulmak için önce (4.1-2) eşitlikleri kullanılarak ikinci-mertebeden esneklik sabitleri (C_{ij}) hesaplandı. m ve n 'nin farklı her değeri için hesaplanan ikinci derece esneklik sabitlerinden deneysel değere en yakın olanları MBP parametreleri (α, r_o, D, C) olarak seçildi. Bu parametrelerin değerleri Çizelge 5.2. de ve hesaplanan C_{ij} 'ler Çizelge 5.3. de verildi. C_{44} için $C_{12} = C_{44}$ eşitliği kullanıldı.

Çizelge 5.1. $\text{Fe}_{(1-x)}\text{-Ni}_x$ ($x=0.30$) alaşımının oda sıcaklığındaki giriş verileri [63,79].

$\alpha (10^{-10} \text{ m})$	$-\varepsilon_o (\text{eV})$	$B(10^{11} \text{ Nm}^{-2})$	$-\phi (\text{eV})$
3.5854	1.251	1.7361	4.328

Çizelge 5.2. $\text{Fe}_{(1-x)}\text{-Ni}_x$ ($x=0.30$) alaşımı için hesaplanan MBP parametreleri.

n	m	$D (\text{eV})$	$\alpha (10^{10} \text{ m}^{-1})$	$r_o(10^{10} \text{ m})$	C
0.32	2.26	0.173236	1.983553	2.592935	0.276536

Üçüncü-mertebeden esneklik sabitleri (C_{ijk}) eşitlik(4.3-5) den hesaplandı ve değerleri Çizelge 5.3. de verildi.

Çizelge 5.3. $\text{Fe}_{(1-x)}\text{-Ni}_x$ ($x=0.30$) alaşımı için oda sıcaklığında hesaplanan ikinci ve üçüncü mertebeden esneklik sabitleri (10^{11}Nm^{-2}).

C_{11}	C_{12}	C_{44}	C_{111}	C_{112}	C_{123}	Referans
1.475	0.899	0.899	-15.003	-9.056	0.245	Bu çalışma
1.475	0.892	1.131	-	-	-	[70]

Sabit basınçta ısısal genleşme katsayısı (α_l) eşitlik (4.6) dan hesaplandı ve hesaplanan değeri Çizelge 5.4. de verildi. Eşitlik (4.6) daki alaşımın özısıısı (C_v), kesim 4.2 de açıklanan Neumann-Koop kuralından bulundu. Oda sıcaklığında $C_{v\text{Fe}}=5.99 \text{ cal mol}^{-1}\text{K}^{-1}$ ve $C_{v\text{Ni}}=6.23 \text{ cal mol}^{-1}\text{K}^{-1}$ [63] olup $C_{v\text{FeNi}}=6.062 \text{ cal mol}^{-1}\text{K}^{-1}$ olarak hesaplandı. Eşitlik (4.7)' den bulk modülünün basınçla değişimi ($(\partial B/\partial P)_T$), eşitlik (2.23-25)' den ise ikinci mertebeden etkin

esneklik sabitlerinin basınçla değişimleri $\left(\left(\frac{\partial C'_{11}}{\partial P} \right), \left(\frac{\partial C'_{12}}{\partial P} \right), \left(\frac{\partial C'_{44}}{\partial P} \right) \right)$

hesaplandı ve değerleri Çizelge 5.4. de verildi.

Eşitlik (4.8)' den Grüneisen sabiti (γ), (2.34)' den Young modülü (E), (2.35)' den shear modülü (G), (2.36)' dan shear sabiti (C'), (2.37)' den boyuna esneklik sabiti (C_L), (2.38)'den anizotropi çarpanı (A) hesaplandı ve değerleri Çizelge 5.5. de verildi.

Çizelge 5.4. $\text{Fe}_{(1-x)}\text{-Ni}_x$ ($x=0.30$) alaşımı için oda sıcaklığında hesaplanan bazı esneklik özellikleri.

$(\partial B/\partial P)_T$	$\partial C'_{11}/\partial P$	$\partial C'_{12}/\partial P$	$\partial C'_{44}/\partial P$	$\alpha_l(10^{-6}\text{K}^{-1})$
6.47	8.25	8.29	4.30	5.8

Çizelge 5.5. $\text{Fe}_{(1-x)}\text{Ni}_x$ ($x=0.30$) alaşımı için oda sıcaklığında hesaplanan ve ölçülen bazı esneklik özellikleri (C' , C_L , E ve G 10^{11} Nm^{-2} biriminde).

γ	C'	C_L	A	E	G	Referans
1.41	0.288	2.086	2.98	1.59	0.59	Bu çalışma
-	0.278	2.547	5.05	1.53	0.55	[71]

Çizelge 5.3.-5.den de görüldüğü gibi MBP ile $\text{Fe}_{(1-x)}\text{Ni}_x$ ($x=0.30$) alaşımının hesaplanan esneklik özellikleri deneysel değerlerle uyum içindedir.

5.3. $\text{Fe}_{(1-x)}\text{Ni}_x$ ($x=0.35, 0.76, 0.88$) Alaşımlarının Fonon Frekansları

Son yıllarda Fe-Ni Invar alaşımları üzerinde yapılan deneysel çalışmalar [80,81] bu alaşımların Invar özelliklerinin araştırılmasına halen ilgi olduğunu göstermektedir. Bu kesimde, MBP kullanılarak $\text{Fe}_{(1-x)}\text{Ni}_x$ ($x=0.35, 0.76, 0.88$) alaşımlarının fonon frekansları temel simetri yönlerinde tanımlanan dinamik matrisle iki-cisim ve üç-cisim etkileşimleri içerilecek şekilde hesaplanacaktır.

Bu amaç için eşitlik (3.4-5) ile verilen MBP parametreleri (α , r_o , D , C), $\text{Fe}_{(1-x)}\text{Ni}_x$ ($x=0.35, 0.76, 0.88$) alaşımlarının her birinde fcc yapıda ve kendi örgü sabitleri kullanılarak ayrı ayrı Fe ve Ni elementleri için eşitlik (3.6-9) kullanılarak m ve n 'nin farklı değerlerinde belirlendi. Eşitlik (3.6-9)' da kullanılan giriş verileri Çizelge 5.6. da verildi. Fe ve Ni için MBP'ni en iyi tanımlayan m ve n değerlerini bulmak için ikinci-mertebeden esneklik sabitleri (C_{11} , C_{12} , C_{44}), eşitlik (4.1-2,9) dan hesaplandı. m ve n 'nin farklı her değeri için hesaplanan ikinci derece esneklik sabitlerinden deneysel değere en yakın değerleri veren parametre değerleri Fe ve Ni için, MBP parametreleri

(α , r_o , D , C) olarak seçildi. Hesaplanan esneklik sabitleri Çizelge 5.7.' de ve parametre değerleri ise Çizelge 5.8.' de verildi.

Çizelge 5.6. Fe ve Ni için oda sıcaklığındaki giriş verileri [67].
 a Fe_(1-x)-Ni_x (x=0.35,0.76,0.88) alaşımlarının örgü sabitidir [80,81].

Element	$-\epsilon_o$ (eV)	B (10^{11} Nm ⁻²)	$-\phi$ (eV)	Fe _{0.12} Ni _{0.88} a (10^{-10} m)	Fe _{0.24} Ni _{0.76} a (10^{-10} m)	Fe _{0.65} Ni _{0.35} a (10^{-10} m)
Fe	0.90	1.683	4.28	3.539	3.553	3.593
Ni	2.07	1.860	4.44	3.539	3.553	3.59

Çizelge 5.7. Fe ve Ni için oda sıcaklığında hesaplanan ve ölçülen ikinci mertebeden esneklik sabitleri (10^{11} Nm⁻²).

İncelenen alaşım	Fe					Ni					Ref.
	n	m	C_{11}	C_{12}	C_{44}	n	m	C_{11}	C_{12}	C_{44}	
Fe _{0.12} Ni _{0.88}	1.05	3.02	2.30	1.26	1.12	0.44	1.97	2.47	1.51	1.14	Bu Çalışma
Fe _{0.24} Ni _{0.76}	0.95	3.77	2.30	1.25	1.11	0.46	1.74	2.47	1.51	1.14	Bu Çalışma
Fe _{0.65} Ni _{0.35}	1.18	2.15	2.30	1.25	1.11	0.49	1.32	2.47	1.51	1.14	Bu Çalışma
			2.30	1.35	1.17			2.47	1.53	1.14	[82]

Çizelge 5.8. Fe_(1-x)-Ni_x (x=0.35, 0.76, 0.88) alaşımlarının her biri için Fe ve Ni elementlerini tanımlayan MBP parametreleri.

Alaşım	Element	n	m	D (eV)	α (10^{-10} m)	r_o (10^{-10} m)	C
Fe _{0.12} Ni _{0.88}	Fe	1.05	3.02	0.1350990	2.1315000	2.5509204	0.5248387
	Ni	0.44	1.97	0.2884381	2.0802000	2.5690219	0.1316212
Fe _{0.24} Ni _{0.76}	Fe	0.95	3.77	0.1319408	1.9227000	2.5598326	0.4859541
	Ni	0.46	1.74	0.2928495	2.2119000	2.5777803	0.1377902
Fe _{0.65} Ni _{0.35}	Fe	1.18	2.15	0.1397238	2.5449650	2.5864159	0.5837867
	Ni	0.49	1.32	0.3007992	2.5386000	2.6033684	0.1483384

Bu çalışmada $\text{Fe}_{(1-x)}\text{-Ni}_x$ ($x=0.35, 0.76, 0.88$) alaşımlarının fonon frekanslarının hesaplanması için eşitlik (2.55)'te verilen $D_{\alpha\beta}$ dinamiksel matrisi, iki-cisim etkileşmesinin ($D_{\alpha\beta}^i$) ve üç-cisim etkileşmesinin ($D_{\alpha\beta}^m$) toplamı olarak düşünüldü,

$$D_{\alpha\beta} = D_{\alpha\beta}^i + D_{\alpha\beta}^m \quad (5.1)$$

$D_{\alpha\beta}^i$ dinamik matrisinin diagonal ve diagonal olmayan elamanları Shyam ve arkadaşları [83] tarafından tanımlanan bağıntılar ile belirlendi:

$$\begin{aligned} D_{\alpha\alpha}^i = & 2(\alpha_1 + \beta_1)(2 - C_1 C_2 - C_1 C_3) + 4\beta_1(1 - C_2 C_3) + 2(\alpha_2 - \beta_2) \\ & \times (1 - C_{21}) + 2\beta_2(3 - C_{21} - C_{22} - C_{23}) + \frac{4}{3}(\alpha_3 - \beta_3)(6 - C_1 C_2 C_{23} \\ & - C_1 C_{22} C_3 - 4C_{21} C_2 C_3) + 8\beta_3(3 - C_1 C_2 C_{23} - C_1 C_{22} C_3 - C_{21} C_2 C_3) + \\ & + 2(\alpha_4 - \beta_4)(2 - C_{21} C_{22} - C_{21} C_{23}) + 4\beta_4(3 - C_{21} C_{22} - C_{21} C_{23} \\ & - C_{22} C_{23}) + \frac{18}{5}(\alpha_5 - \beta_5)(2 - C_{31} C_2 - C_{31} C_3) + \frac{2}{5}(\alpha_5 - \beta_5) \\ & \times (2 - C_1 C_{32} - C_1 C_{33}) + 4\beta_5(6 - C_{31} C_2 - C_{31} C_3 - C_1 C_{32} \\ & - C_1 C_{33} - C_{32} C_3 - C_2 C_{33}) + \frac{8}{3}(\alpha_6 - \beta_6)(1 - C_{21} C_{22} C_{23}) \\ & + 8\beta_6(1 - C_{21} C_{22} C_{23}) + \frac{36}{7}(\alpha_7 - \beta_7)(2 - C_{31} C_{22} C_3 - C_{31} C_2 C_{23}) \\ & + \frac{16}{7}(\alpha_7 - \beta_7)(2 - C_{21} C_{32} C_3 - C_{21} C_2 C_{33}) \\ & + \frac{4}{7}(\alpha_7 - \beta_7)(2 - C_1 C_{22} C_{33} - C_1 C_{32} C_{23}) \\ & + 8\beta_7(6 - C_{31} C_{22} C_3 - C_{31} C_2 C_{23} - C_{21} C_{32} C_3 - C_{21} C_2 C_{33} \\ & - C_1 C_{22} C_{33} - C_1 C_{33} C_{21}) + 2(\alpha_8 - \beta_8)(1 - C_{41}) \\ & + 2\beta_8(3 - C_{41} - C_{42} - C_{43}) + \frac{4}{9}(\alpha_9 - \beta_9)(2 - C_1 C_2 C_{43} - C_1 C_{42} C_3) \\ & + \frac{64}{9}(\alpha_9 - \beta_9)(1 - C_{41} C_2 C_3) + 8\beta_9(3 - C_1 C_2 C_{43} - C_1 C_{42} C_3 \\ & - C_{41} C_2 C_3) + 2(\alpha_9 - \beta_9)(2 - C_{31} C_{32} - C_{31} C_{33}) \\ & + 4\beta_9(3 - C_{31} C_{32} - C_{31} C_{33} - C_{32} C_{33}) + \frac{4}{5}(\alpha_{10} - \beta_{10})(2 - C_{21} C_{42} \\ & - C_{21} C_{43}) + \frac{16}{5}(\alpha_{10} - \beta_{10})(2 - C_{41} C_{22} - C_{41} C_{23}) \\ & + 4\beta_{10}(6 - C_{21} C_{42} - C_{21} C_{43} - C_{41} C_{22} - C_{41} C_{23} - C_{22} C_{43} - C_{42} C_{23}) \end{aligned} \quad (5.2)$$

$$\begin{aligned}
D_{\alpha\beta}^i = & 2(\alpha_1 - \beta_1)S_1S_2 + \frac{4}{3}(\alpha_3 - \beta_3)(S_1S_2C_{23} + 2S_1S_{22}C_3 \\
& + 2S_{21}S_2C_3) + (\alpha_4 - \beta_4)S_{21}S_{22} + \frac{6}{5}(\alpha_5 - \beta_5) \\
& (S_{31}S_2 - S_1S_{32}) + \frac{8}{3}(\alpha_6 - \beta_6)S_{21}S_{22}C_{23} \\
& + \frac{24}{7}(\alpha_7 - \beta_7)(S_{31}S_{22}C_3 + S_{21}S_{32}C_3) \\
& + \frac{8}{7}(\alpha_7 - \beta_7)(S_{21}S_2C_{33} + S_{22}S_1C_{33}) \\
& + \frac{12}{7}(\alpha_7 - \beta_7)(S_1S_{32}C_{23} + S_2S_{31}C_{23}) \\
& + 2(\alpha_9 - \beta_9)S_{31}S_{32} + \frac{4}{9}(\alpha_9 - \beta_9)S_1S_2C_{43} + \frac{16}{9}(\alpha_9 - \beta_9) \\
& (S_{41}S_2C_3 + S_1S_{42}C_3) + \frac{8}{5}(\alpha_{10} - \beta_{10})(S_{21}S_{42} + S_{41}S_{22}).
\end{aligned} \tag{5.3}$$

Burada $C_i = \cos(\pi a k_i)$, $S_i = \sin(\pi a k_i)$, $C_{2i} = \cos(2\pi a k_i)$, $S_{2i} = \sin(2\pi a k_i)$, $C_{3i} = \cos(3\pi a k_i)$, $S_{3i} = \sin(3\pi a k_i)$, $C_{4i} = \cos(4\pi a k_i)$, $S_{4i} = \sin(4\pi a k_i)$ ve $i=1,2,3'$ dür.

Bu bağıntılardaki birbirinden bağımsız kuvvet sabitleri, eşitlik (3.4) te tanımlanan potansiyelin birinci ve ikinci türevlerinden bulunur;

$$\beta_i = \frac{1}{r_{ij}} \frac{\partial \phi_2(\vec{r}_{ij})}{\partial r_{ij}}, \tag{5.4}$$

$$\alpha_i = \frac{\partial^2 \phi_2(\vec{r}_{ij})}{\partial r_{ij}^2}. \tag{5.5}$$

Burada β_i açısal, α_i radyal kuvvet sabitleridir ve $i=1,2,\dots,10$ değerlerini alır. $\text{Fe}_{(1-x)}\text{-Ni}_x$ ($x=0.35,0.76,0.88$) alaşımlarının örgü sabitleri kullanılarak her bir element için bu kuvvet sabitleri hesaplandıktan sonra aşağıdaki doğrusal bağıntılar ile alaşımların kuvvet sabiti bulunur:

$$\beta_i(\text{Fe - Ni}) = (1 - x)\beta_i(\text{Fe}) + x\beta_i(\text{Ni}), \tag{5.6}$$

$$\alpha_i(\text{Fe - Ni}) = (1 - x)\alpha_i(\text{Fe}) + x\alpha_i(\text{Ni}). \tag{5.7}$$

Burada x alaşımlardaki Ni konsantrasyonudur ($x=0.35,0.76,0.88$). Fe, Ni ve $\text{Fe}_{(1-x)}\text{-Ni}_x$ ($x=0.35,0.76,0.88$) alaşımlarının hesaplanan kuvvet sabitleri Çizelge 5.9-11. de verildi. $\text{Fe}_{(1-x)}\text{-Ni}_x$ ($x=0.35,0.76,0.88$) alaşımlarının iyonik kütlesi ise eşitlik (4.17)' den hesaplandı.

Çizelge 5.9. Fe, Ni ve $\text{Fe}_{(1-x)}\text{-Ni}_x$ ($x=0.88$) alaşımı için hesaplanan radyal (α_i) ve açılal (β_i) kuvvet sabitleri.

Serial No.	$\alpha_i(10^{-3}\text{Nm}^{-1})$			$\beta_i(10^{-3}\text{Nm}^{-1})$		
	Fe	Ni	$\text{Fe}_{0.12}\text{Ni}_{0.88}$	Fe	Ni	$\text{Fe}_{0.12}\text{Ni}_{0.88}$
1	23043.59	29910.65	29086.60	-180.5186	-490.9409	-453.6902
2	-805.1759	-1958.611	-1820.199	94.51498	291.2112	267.6077
3	-117.6356	-429.1665	-391.7828	11.32520	46.37583	42.16976
4	-23.52379	-102.5907	-93.10267	1.991516	9.482666	8.583728
5	-5.816796	-28.59373	-25.86050	0.445269	2.364723	2.134389
6	-1.666983	-9.007294	-8.126456	0.117426	0.681586	0.613886
7	-0.533113	-3.120719	-2.810207	0.034985	0.219152	0.197052
8	-0.185729	-1.166266	-1.048602	0.011458	0.076772	0.068935
9	-0.069337	-0.463638	-0.416322	0.004049	0.028826	0.025853
10	-0.027413	-0.194074	-0.174075	0.001524	0.011465	0.010272

Çizelge 5.10. Fe, Ni ve $\text{Fe}_{(1-x)}\text{-Ni}_x$ ($x=0.76$) alaşımı için hesaplanan radyal (α_i) ve açılal (β_i) kuvvet sabitleri.

Serial No.	$\alpha_i(10^{-3}\text{Nm}^{-1})$			$\beta_i(10^{-3}\text{Nm}^{-1})$		
	Fe	Ni	$\text{Fe}_{0.24}\text{Ni}_{0.76}$	Fe	Ni	$\text{Fe}_{0.24}\text{Ni}_{0.76}$
1	23223.60	29907.54	28303.39	-194.2947	-472.6328	-405.8317
2	-748.5683	-2020.775	-1715.445	95.76711	290.9676	244.1195
3	-128.4686	-420.2775	-350.2434	13.64206	43.20737	36.11170
4	-29.81280	-93.43740	-78.16750	2.786120	8.150393	6.862967
5	-8.398762	-24.15300	-20.37198	0.709825	1.878317	1.597879
6	-2.705681	-7.075473	-6.026723	0.210451	0.502657	0.432528
7	-0.962965	-2.288855	-1.970642	0.069782	0.150788	0.131347
8	-0.370417	-0.801858	-0.698312	0.025236	0.049499	0.043676
9	-0.151713	-0.299077	-0.264341	0.009786	0.017482	0.015635
10	-0.065455	-0.118485	-0.105758	0.004019	0.006561	0.005951

Çizelge 5.11. Fe, Ni ve Fe_(1-x)-Ni_x (x=0.35) alaşımları için hesaplanan radyal (α_i) ve açısal (β_i) kuvvet sabitleri.

Serial No.	$\alpha_i(10^{-3}\text{Nm}^{-1})$			$\beta_i(10^{-3}\text{Nm}^{-1})$		
	Fe	Ni	Fe _{0.65} Ni _{0.35}	Fe	Ni	Fe _{0.65} Ni _{0.35}
1	23147.52	29906.27	25513.08	-140.7595	-434.6250	-243.6124
2	-823.5751	-2104.064	-1271.746	83.06965	285.9079	154.0630
3	-86.82253	-395.8438	-194.9800	6.982169	37.20698	17.56085
4	-12.66934	-76.45946	-34.99588	0.891611	5.974684	2.670687
5	-2.364637	-16.92222	-7.459791	0.150248	1.164131	0.505107
6	-0.526242	-4.232777	-1.823128	0.030709	0.263905	0.112328
7	-0.133153	-1.172048	-0.496766	0.007273	0.067420	0.028324
8	-0.037362	-0.353098	-0.147869	0.001909	0.018968	0.007880
9	-0.011387	-0.114181	-0.047365	0.000550	0.005779	0.002380
10	-0.003717	-0.039215	-0.016141	0.000171	0.001882	0.000770

Üç-cisim etkileşmesinin dinamik matrisi ($D_{\alpha\beta}^m$), Mıshra ve arkadaşlarının [84] tanımladığı bağıntılardan

$$D_{\alpha\alpha}^m = 4 \gamma [4 - 2c_{2i} - c_i(c_j + c_k)], \quad (5.8)$$

$$D_{\alpha\beta}^m = 4 \gamma [c_i(c_j + c_k) - 2], \quad (5.9)$$

hesaplandı. Burada $c_j = \cos(\pi a k_j)$, $c_{2i} = \cos(2\pi a k_i)$ ve γ , üç-cisim etkileşme potansiyeli $\phi_3(r_{ij}r_{ik})$ 'nin ikinci türevi;

$$\gamma = \frac{\partial^2 \phi_3(\vec{r}_{ij}\vec{r}_{ik})}{\partial r_{ij} \partial r_{ik}} \quad (5.10)$$

dir. Üç-cisim kuvvet sabiti γ , önce Fe_(1-x)-Ni_x (x=0.35,0.76,0.88) alaşımlarının örgü sabitleri kullanılarak her bir element için ayrı ayrı hesaplandıktan sonra alaşımlar için

$$\gamma(\text{Fe-Ni}) = (1-x)\gamma(\text{Fe}) + x\gamma(\text{Ni}) \quad (5.11)$$

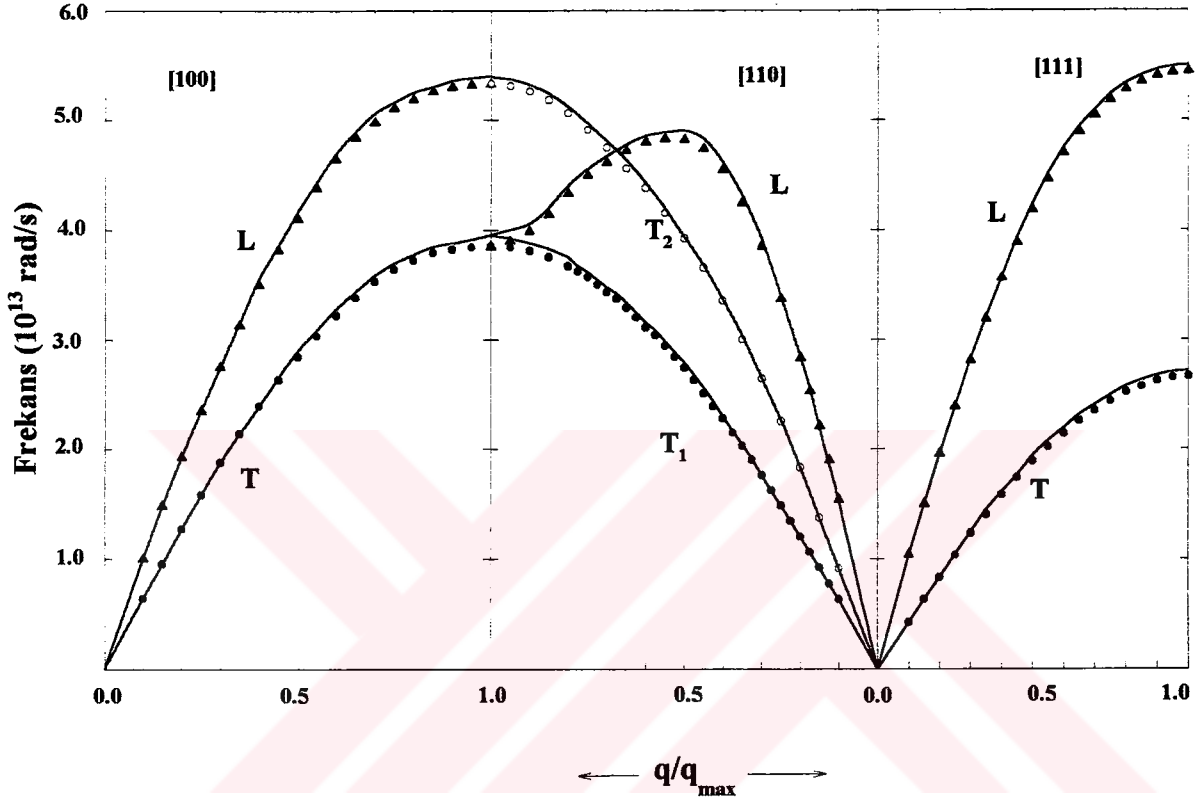
doğrusal bağıntısından hesaplandı ve değerleri Çizelge 5.12' de verildi.

Çizelge 5.12. Fe, Ni ve $\text{Fe}_{(1-x)}\text{Ni}_x$ ($x=0.35, 0.76, 0.88$) alaşımlarının üç-cisim kuvvet sabitleri (γ)(10^{-3}Nm^{-1}).

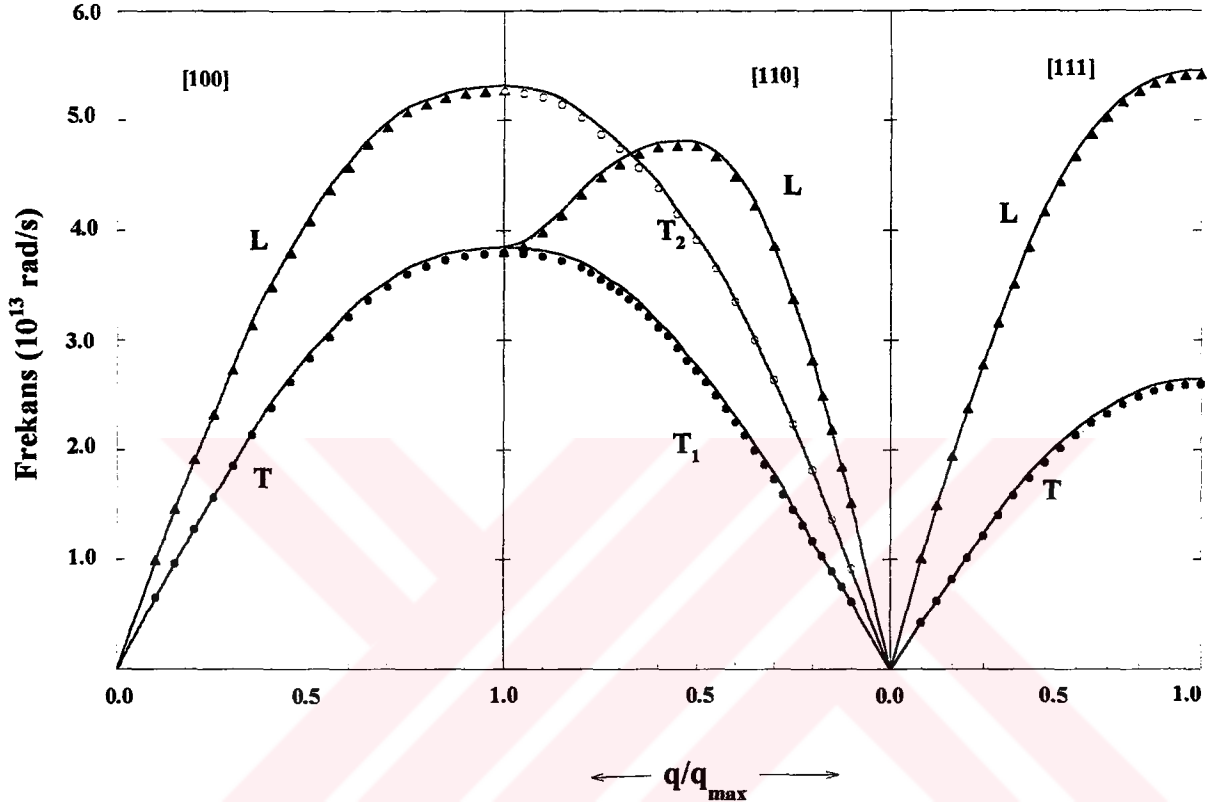
Alaşım	γ (Fe)	γ (Ni)	γ (Fe-Ni)
$\text{Fe}_{0.12}\text{Ni}_{0.88}$	10345.6	1715.65	2751.244
$\text{Fe}_{0.24}\text{Ni}_{0.76}$	11642.6	1795.80	4159.032
$\text{Fe}_{0.65}\text{Ni}_{0.35}$	13513.3	4425.30	10332.50

Eşitlik 2.55, 5.1-3, 8-9 ve 4.10 kullanılarak, $\text{Fe}_{(1-x)}\text{Ni}_x$ ($x=0.35, 0.76, 0.88$) alaşımlarının fonon frekansları hesaplandı ve Şekil 5.1-3. de fonon frekans eğrileri verildi.

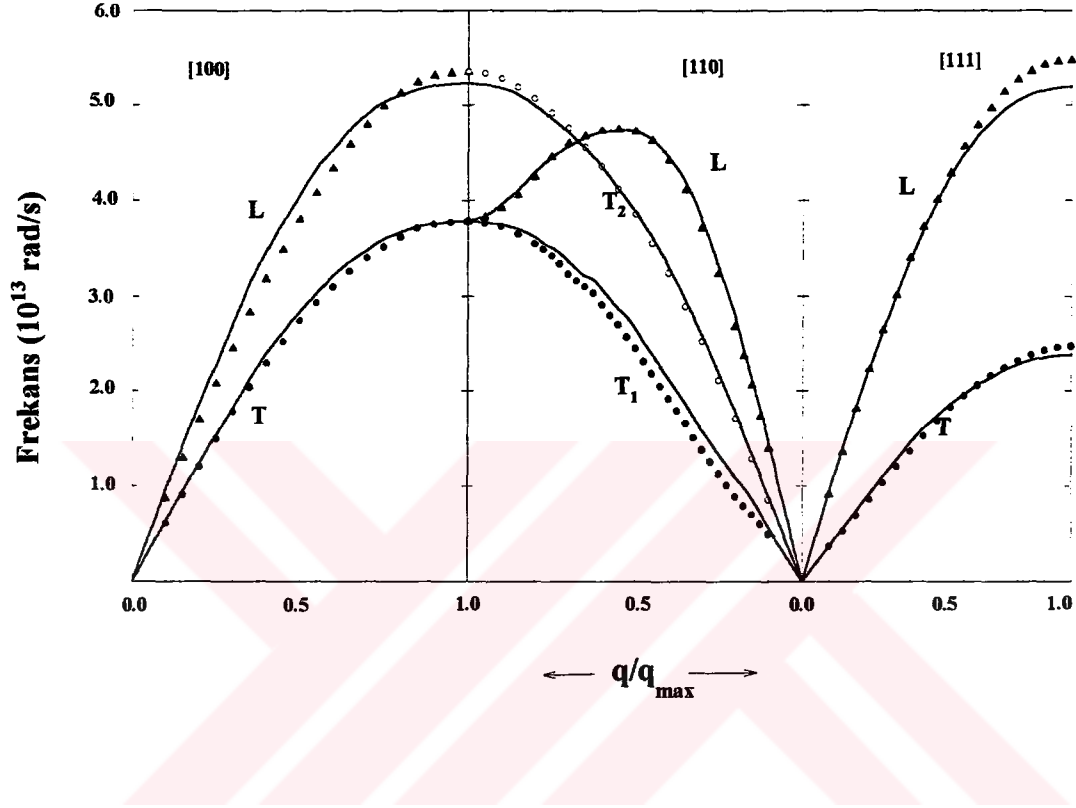
Şekil 5.1-3. den de görüldüğü gibi hesaplanan frekanslar deneysel değerlerle uyum içindedir ve bu uyum tanımlanan MBP' nin Fe-Ni alaşımlarının fonon frekanslarının hesaplanmasında etkin olduğunu gösterir.



Şekil 5.1. $\text{Fe}_{(1-x)}\text{Ni}_x$ ($x=0.88$) alaşıımının oda sıcaklığında fonon frekans eğrisi. Sürekli çizgiler hesaplanan, (o,●,Δ) sembolleri ise deneysel [80] frekansları göstermektedir.



Şekil 5.2. $\text{Fe}_{(1-x)}\text{Ni}_x$ ($x=0.76$) alaşımının oda sıcaklığında fonon frekans eğrisi. Sürekli çizgiler hesaplanan, (o, ●, Δ) sembolleri ise deneysel [80] frekansları göstermektedir.



Şekil 5.3. $\text{Fe}_{(1-x)}\text{Ni}_x$ ($x=0.35$) alaşımının oda sıcaklığında fonon frekans eğrisi. Sürekli çizgiler hesaplanan, (o, ●, Δ) sembolleri ise deneysel [81] frekansları göstermektedir.

6. $\text{Fe}_{(1-x)}\text{-Pt}_x$ ($x=0.28, 0.30$) ALAŞIMLARININ ESNEKLİK ÖZELLİKLERİNİN VE FONON FREKANSLARININ HESAPLANMASI

6.1. Giriş

Fe-Pt alaşımları üzerinde yapılan ısısal genleşme ve Curie sıcaklığının basınçla değişim ölçümleri bunların Invar alaşımlar olduğunu göstermektedir [56,85]. Fe-Pt Invar alaşımlarının manyetik homojensizlik özelliği göstermemesi bu alaşımları Fe-Ni alaşımlarından ayıran en önemli farklardan biridir [86]. Bu alaşımların esneklik sabitlerindeki anormal davranışlar (anomalous behavior) manyetizasyonun karesi ile orantılı olup kuvvetli bir şekilde Invar özellikleri etkiler [53]. Bu davranışlar aynı zamanda manyetoesneklik çiftleşimiyle de ilgilidir. Manyetik anormallik ile Invar etkiler arasındaki ilişki çok incelenmesine rağmen Invar probleminin gerçek yapısının anlaşılması için halen araştırmalara gerek duyulmaktadır. Fe-Pt alaşımlarında Pt konsantrasyonunun düşük olduğu durumlarda gözlenen martensitik faz geçişi özellikleri Fe-Ni alaşımlarında da gözlenmiştir [87]. Fe-Pt alaşımlarındaki martensitik dönüşümlerin kristalografik özellikleri detaylı bir şekilde incelenmesine [86] rağmen martensitik faz geçişi ile Invar özellik arasında bir ilişki olup olmadığı halen açık değildir. $\text{Fe}_{(1-x)}\text{-Pt}_x$ ($x=0.28, 0.30$) alaşımlarındaki Invar etkiler Fe-Ni alaşımlarına göre daha fazladır.

6.2. $\text{Fe}_{(1-x)}\text{-Pt}_x$ ($x=0.28$) Alaşımının Esneklik Özellikleri

AuCuZn₂ [88], Au-Cd [89] gibi bir çok alaşımda gözlenen örgü yumuşaması, $\text{Fe}_{(1-x)}\text{-Pt}_x$ ($x=0.28$) alaşımlarında da esneklik sabiti anormalliğine önemli katkılar getirir. Bir çok araştırmacı Fe-bazlı alaşımlarda M_s sıcaklığı civarında örgü yumuşamasının olup olmadığını tartışırken [71,90,91] Hausch $\text{Fe}_{(1-x)}\text{-Pt}_x$

($x=0.28$) alařımının esneklik sabitlerinin anormallik gösterdiğini ultrasonik teknikle ölçmüřtür [85]. Gözlenen bu anormalliklerde manyetik ve termoesneklik özellikler de etkilidir. Invar alařımlarda esneklik sabitlerinin deneysel ölçümleri ve teorik hesaplamaları, Invar probleminin anlaşılması açısından önemlidir.

Bu kesimde $Fe_{(1-x)}-Pt_x$ ($x=0.28$) alařımının esneklik özelliklerinden ikinci mertebeden (C_{11} , C_{12} , $C_{44} \cong C_{12}$ Cauchy bağıntısı) ve üçüncü mertebeden (C_{111} , $C_{112}=C_{116}$, $C_{123}=C_{144}$) esneklik sabitleri, ısısal genleşme katsayısı (α_l), Bulk modülü ve ikinci mertebeden esneklik sabitlerinin basınçla deęişimleri ($\frac{\partial B}{\partial P}$, $\frac{\partial C'_{ij}}{\partial P}$), Shear sabiti (C'), boyuna esneklik sabiti(C_L), Young modülü (E), anizotropi çarpanı (A), Shear modülü (G) ve Grüneisen parametresi (γ) tanımlanan MBP ile hesaplanacaktır.

Eřitlik (3.4-5) de verilen MBP'nin parametreleri (α , r_o , D , C), $Fe_{(1-x)}-Pt_x$ ($x=0.28$) alařımı için eřitlik (3.6-9) kullanılarak m ve n 'nin farklı deęerlerinde hesaplanacaktır. Eřitlik (3.6-9)' da kullanılan giriş verileri Çizelge 6.1. de verildi. Alařım için MBP'ni en iyi tanımlayan m ve n 'nin uygun deęerlerini bulmak amacıyla, önce (4.1-2) eřitlikleri kullanılarak ikinci-mertebeden esneklik sabitleri (C_{ij}) hesaplandı. m ve n 'nin farklı her deęeri için hesaplanan ikinci mertebeden esneklik sabitlerinden deneysel deęere en yakın olanları MBP parametreleri (α , r_o , D , C) olarak seçildi. Bu parametrelerin deęerleri Çizelge 6.2. de ve hesaplanan C_{ij} 'ler Çizelge 6.3. de verildi.

Çizelge 6.1. $Fe_{(1-x)}-Pt_x$ ($x=0.28$) alařımının oda sıcaklıęındaki giriş verileri [60,63].

a (10^{-10} m)	$-\epsilon_o$ (eV)	$B(10^{11} \text{Nm}^{-2})$	$-\phi$ (eV)
3.746	1.6868	1.148	4.7168

Çizelge 6.2. $\text{Fe}_{(1-x)}\text{-Pt}_x$ ($x=0.28$) alaşımı için hesaplanan MBP parametreleri.

n	m	D (eV)	α (10^{10} m^{-1})	r_o (10^{10} m)	C
0.55	1.08	0.2355042	2.447550	2.740270	0.211502

Alaşımın üçüncü-mertebeden esneklik sabitleri (C_{ijk}) ise eşitlik(4.3-5) den hesaplandı ve değerleri Çizelge 6.3. de verildi.

Çizelge 6.3. $\text{Fe}_{(1-x)}\text{-Pt}_x$ ($x=0.28$) alaşımı için oda sıcaklığında hesaplanan ikinci ve üçüncü mertebeden esneklik sabitleri (10^{11} Nm^{-2}).

C_{11}	C_{12}	C_{44}	C_{111}	C_{112}	C_{123}	Referans
1.44	0.92	0.92	-10.88	6.176	-1.490	Bu çalışma
1.44	1.07	0.80	-	-	-	[56,92]

Sabit basınçta ısısal genleşme katsayısı (α_i) eşitlik (4.6) dan hesaplandı ve hesaplanan değeri Çizelge 6.4. de verildi. Eşitlik (4.6) daki alaşımın özısıısı (C_v), kesim 4.2 de bahsedilen Neumann-Koop kuralından bulundu. Oda sıcaklığında $C_{vFe}=5.99 \text{ cal mol}^{-1}\text{K}^{-1}$ ve $C_{vPt}=6.18 \text{ cal mol}^{-1}\text{K}^{-1}$ [63] olup $C_{vFePt}=6.043 \text{ cal mol}^{-1}\text{K}^{-1}$ olarak hesaplandı. Eşitlik (4.7)' den bulk modülünün basınçla değişimi ($(\partial B/\partial P)_T$) ve eşitlik (2.23-25)' den ikinci mertebeden etkin

esneklik sabitlerinin basınçla değişimleri $\left(\left(\frac{\partial C'_{11}}{\partial P} \right), \left(\frac{\partial C'_{12}}{\partial P} \right), \left(\frac{\partial C'_{44}}{\partial P} \right) \right)$

hesaplandı ve değerleri Çizelge 6.4. de verildi.

Eşitlik (4.8)' den Grüneisen sabiti (γ), (2.34)' den Young modülü (E), (2.35)' den shear modülü (G), (2.36)' dan shear sabiti (C'), (2.37)' den boyuna

esneklik sabit (C_L), (2.38)'den anizotropi çarpanı (A) hesaplandı ve değerleri Çizelge 6.5. de verildi.

Çizelge 6.4. $\text{Fe}_{(1-x)}\text{-Pt}_x$ ($x=0.28$) alaşımı için oda sıcaklığında hesaplanan ve ölçülen bazı esneklik özellikleri.

$(\partial B/\partial P)_T$	$\partial C'_{11}/\partial P$	$\partial C'_{12}/\partial P$	$\partial C'_{44}/\partial P$	$\alpha_t(10^{-6}\text{K}^{-1})$	Referans
-2.05	-1.99	-2.66	0.06	6.57	Bu çalışma
-2.37	-1.92	-2.60	0.06	-12.0	[56]

Çizelge 6.5. $\text{Fe}_{(1-x)}\text{-Pt}_x$ ($x=0.28$) alaşımı için oda sıcaklığında hesaplanan ve ölçülen bazı esneklik özellikleri (C' , C_L , E ve G 10^{11}Nm^{-2} biriminde).

γ	C'	C_L	A	E	G	Referans
1.24	0.260	2.100	4.726	1.472	0.573	Bu çalışma
-	0.182	2.055	-	1.559	0.584	[56,85]

Çizelge 6.3-5.den görüldüğü gibi MBP ile $\text{Fe}_{(1-x)}\text{-Pt}_x$ ($x=0.28$) alaşımının hesaplanan esneklik özellikleri deneysel değerlerle [56,85,92] uyum içindedir. Fe-Pt alaşımlarının esneklik özellikleri sıcaklığa bağlı olarak değişmektedir. Hausch bulk modülünün (B) sıcaklıkla davranışının boyuna esneklik sabiti (C_L) ile benzer olduğunu ve oda sıcaklığındaki değerlerinin düşük sıcaklıktaki paramanyetik değerlerinden büyük olduğunu gözlemiştir [56]. Aynı zamanda Curie sıcaklığının altındaki sıcaklıklarda sıcaklık azaldıkça shear sabiti (C') ve C_{44} 'ün azaldığını göstermiştir. Özellikle C' düşük sıcaklıklarda çok küçük değerlere ulaşmaktadır.

6.3. Fe_(1-x)-Pt_x (x=0.30) Alaşımının Fonon Frekansları

Fe_(1-x)-Pt_x (x=0.30) alaşımının fonon frekansları inelastik nötron saçılması ile Tajima ve arkadaşları tarafından ölçülmüştür [93]. Bu kesimde alaşımının fonon frekansları, iki-cisim ve üç-cisim etkileşmelerini içeren MBP kullanılarak Kesim 5.3. de tanımlanan modele göre hesaplanacaktır.

Fe_(1-x)-Pt_x (x=0.30) alaşımı tanımlayan MBP' nin parametreleri (α , r_o , D , C), kesim 5.3. deki metoda göre Fe ve Pt elementleri için m ve n 'nin farklı değerlerinde belirlendi. Eşitlik (3.6-9)' da kullanılan giriş verileri Çizelge 6.6. da verildi. Fe ve Pt için hesaplanan ikinci-mertebeden esneklik sabitleri (C_{11} , C_{12} , C_{44}) Çizelge 6.7.' de ve parametre değerleri ise Çizelge 6.8.' de verildi.

Çizelge 6.6. Fe ve Pt için oda sıcaklığındaki giriş verileri [63]
 a , Fe_(1-x)-Pt_x (x=0.30) alaşımının örgü sabitidir [93].

Element	a (10^{-10} m)	$-\epsilon_o$ (eV)	B (10^{11} Nm ⁻²)	$-\phi$ (eV)
Fe	3.738	0.90	1.683	4.280
Pt	3.738	3.71	2.783	5.852

Çizelge 6.7. Fe ve Pt için oda sıcaklığında hesaplanan ve ölçülen ikinci mertebeden esneklik sabitleri (10^{11} Nm⁻²).

Fe					Pt					Ref.
n	m	C_{11}	C_{12}	C_{44}	n	m	C_{11}	C_{12}	C_{44}	
1.13	2.92	2.30	1.30	1.10	0.22	2.45	3.467	2.135	1.599	Bu Çalışma [82,94]
		2.30	1.35	1.17			3.467	2.507	0.765	

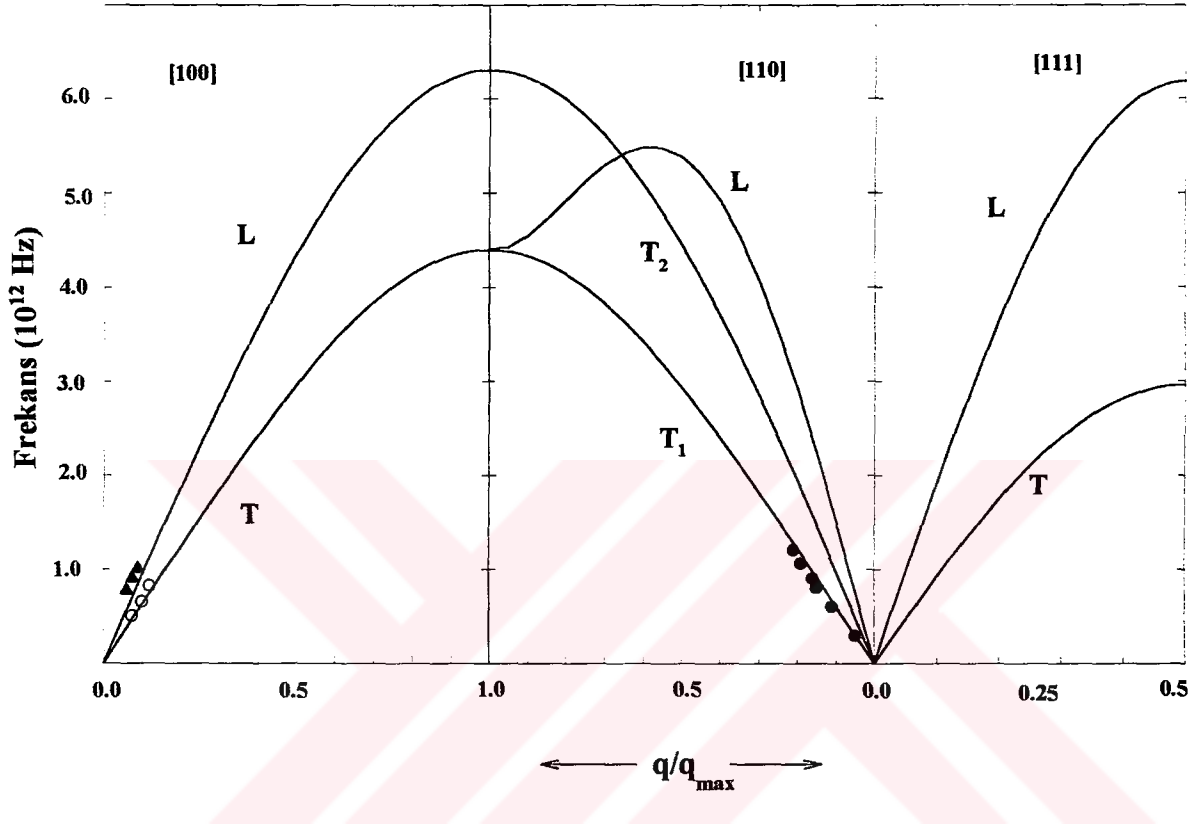
Çizelge 6.8. Fe_(1-x)-Pt_x (x=0.30) alaşımı için Fe ve Pt elementlerini tanımlayan MBP parametreleri.

Element	n	m	D (eV)	α (10^{-10} m)	r_o (10^{-10} m)	C
Fe	1.13	2.92	0.1385324	2.2132000	2.6859766	0.5649876
Pt	0.22	2.45	0.4956149	1.7741000	2.7067246	0.0589458

Kesim 5.3. de $\text{Fe}_{(1-x)}\text{-Ni}_x$ ($x=0.35, 0.76, 0.88$) alaşımlarının fonon frekanslarının hesaplanmasında ki matematiksel işlemler $\text{Fe}_{(1-x)}\text{-Pt}_x$ ($x=0.30$) alaşımının fonon frekanslarının bulunmasında tekrarlandı ve hesaplanan sonuçlar Çizelge 6.9. ile Şekil 6.1' de verildi. Eşitlik 5.8. den üç-cisim kuvvet sabiti γ , Fe ve Pt için sırasıyla 132.2716 Nm^{-1} , 2.65433 Nm^{-1} olarak hesaplandı. $\text{Fe}_{(1-x)}\text{-Pt}_x$ ($x=0.30$) alaşımı için ise eşitlik 5.9 kullanılarak $\gamma = 10.086419 \text{ Nm}^{-1}$ bulundu.

Çizelge 6.9. Fe, Pt ve $\text{Fe}_{(1-x)}\text{-Pt}_x$ ($x=0.30$) alaşımı için hesaplanan radyal (α_i) ve açılmal (β_i) kuvvet sabitleri.

Serial No.	$\alpha_i(10^{-3}\text{Nm}^{-1})$			$\beta_i(10^{-3}\text{Nm}^{-1})$		
	Fe	Pt	$\text{Fe}_{0.70}\text{Pt}_{0.30}$	Fe	Pt	$\text{Fe}_{0.70}\text{Pt}_{0.30}$
1	23489.76	45029.96	29951.82	-135.5805	-776.4483	-328.0299
2	-705.1900	-2824.465	-1340.973	75.38314	457.6830	190.0731
3	-85.56419	-705.6975	-271.6042	7.534221	85.29450	30.86231
4	-14.74556	-196.2675	-69.20278	1.141523	20.43669	6.930074
5	-3.202702	-63.12707	-21.18001	0.224119	5.887593	1.923161
6	-0.816877	-22.66661	-7.371798	0.052592	1.933348	0.616819
7	-0.234812	-8.852596	-2.820148	0.014081	0.700159	0.219904
8	-0.074101	-3.695143	-1.160414	0.004177	0.273726	0.085037
9	-0.025216	-1.628283	-0.506136	0.001345	0.113841	0.035094
10	-0.009135	-0.750703	-0.231613	0.000464	0.049838	0.015276



Şekil 6.1. $\text{Fe}_{(1-x)}\text{Pt}_x$ ($x=0.30$) alaşımının oda sıcaklığında fonon frekans eğrisi. Sürekli çizgiler hesaplanan, (o, ●, ▲) sembolleri ise deneysel [93] frekansları göstermektedir.

7. $\text{Fe}_{(1-x)}\text{-Mn}_x$ ($x=0.14$) ALAŞIMININ İNCE FİLM ÇALIŞMASI

7.1. Giriş

Günümüzde ince filmler, yarıiletken aletlerin yapımında, kayıt ve algılama sistemlerinde, optik kaplamalarda, sert kaplamalarda ve dekoratif işlerde yaygın olarak kullanılmaktadır. Kaplama yöntemlerindeki farklılıklar ve kaplama sırasındaki çeşitli işlemler sonucu, hacimli malzemede bulunmayan pek çok özellik, bu malzemelerin ince filmlerinde yaratılabilir. İnce film malzemelerinde bulunan fakat hacimli malzemelerde bulunmayan şu özellikler sıralanabilir:

- i) Atomik büyüme işleminden kaynaklanan filme özgü malzeme özellikleri.
- ii) Klasik laboratuvar şartlarında elde edilemeyecek seviyede küçük geometrilerin üç boyutta oluşturulması.
- iii) Kalınlık, kristal yönelmesi ve çok katlı yapılardan kaynaklanan, kuantum boyut etkileri ve diğer boyut etkileri.
- iv) Klasik laboratuvar şartlarında elde edilemeyecek ölçüde temizlik.

İnce film deyince hemen kalınlık faktörüyle ilgili malzeme özellikleri de akla gelmelidir. Bu özellikler arasında ince filmler tarafından sergilenen optik özellikler, daha farklı bir yük taşıma sistemi, hacimli malzemede görülmeyen manyetik özellikler sayılabilir. Bu olaylara örnek olarak, metal filmlerde sıcaklık katsayısının değerinin ve ısı iletkenliğin azalması, ince yalıtkan filmler arasında tünel akımı, çok çok ince yarı metallerde kuantum boyut etkileri (direncin, Hall katsayısının ve manyetodirencin kalınlığa bağımlı salınımsal değişimi, yüzey saçılmasından kaynaklanan manyetodirenç vb.), yalıtkan filmlerde girişim olayları, ince film süper iletkenlerde kritik sıcaklığın hacimli malzemedan daha düşük olması gibi daha pek çok özellik sayılabilir [95].

Bu bölümde $\text{Fe}_{(1-x)}\text{-Mn}_x$ ($x=0.14$) alaşımından ince film hazırlanarak; direnç, manyetizasyon ve ferromanyetik rezonans ölçümleri yapılacaktır. Bu deneysel çalışmalar, H.Ü. Müh. Fakültesi ince film laboratuvarında, Tubitak Ulusal Metroloji Enstitüsü laboratuvarında ve Gebze Yüksek Teknoloji Enstitüsü laboratuvarında gerçekleştirilmiştir.

7.2. İnce Film Büyütme İşlemi

İnce film büyütme işlemi üç ana aşamada gerçekleşir.

- i) Uygun atomik, moleküler veya iyonik parçacıkların oluşturulması.
- ii) Bu parçacıkların alttaş üzerine taşınması.
- iii) Alttaş üzerinde direk veya fotokimyasal reaksiyon sonucu yoğunlaşma.

İnce film oluşturma işlemi çekirdeklenme ve büyüme aşamalarıyla gerçekleşir. Genel büyüme işlemi aşağıdaki gibi sıralanabilir.

- a) Alttaş üzerine çarpan parçacıklar, alttaş yüzeyine dik hız bileşenlerini kaybederler ve alttaş yüzeyinde fiziksel olarak tutunurlar.
- b) Alttaş üzerine çarpan parçacıklar, başlangıçta alttaş ve ısı dengede değildirler. Dolayısıyla alttaş üzerinde hareket ederler. Bu işlem sırasında birbirleriyle etkileşerek büyük kümecikler oluştururlar.
- c) Bu kümecikler veya çekirdekler termodinamik olarak kararsızdırlar. Bu nedenle biriktirme parametrelerine bağlı olarak, zamanla yerlerinden kalkabilirler. Eğer biriktirme parametreleri, bu çekirdekçiklerin kalkmalarından önce yüzeye yapışan diğer çekirdekçiklerle çarpışması yönünde ise, çekirdekçikler büyümeye başlar. Kritik bir büyüklüğe ulaşıldığında artık kümecikler termodinamik olarak kararlı hale gelir ve çekirdeklenme barajı aşılır. Bu aşama çekirdeklenme aşaması olarak bilinir.
- d) Bu kritik çekirdekler sayıca ve boyutça artmaya başlar. Sonunda bir doyum çekirdek yoğunluğuna ulaşılır. Çekirdek yoğunluğu ve ortalama çekirdek

boyutu, alttaşa gelen parçacıkların enerjisine, birim zamanda alttaşa ulaşan parçacık sayısına, yapışma, kopma, ısı difüzyon kinetik enerjilerine, sıcaklığa, alttaşın fiziksel ve kimyasal yapısına bağlıdır. Bir çekirdek alttaş yüzeyine dik veya paralel büyüyebilir. Fakat film oluşmasının ilk aşamalarında enine büyüme boyuna büyümeden çok daha fazladır. Büyüyen bu çekirdekçiklere ada denir.

e) Film oluşturmada bir sonraki aşama birleşme aşamasıdır. Bu aşamada küçük adacıklar birleşerek, yüzey alanını minimum yapmaya diğer bir deyişle daha kararlı bir hale geçmeye başlarlar. Bu gidiş daha büyük adacıkların oluşmasına yol açar. Bu gidişi hızlandırmak için, yüzeye gelen parçacıkların yüzey hareketliliğini artırmak gereklidir.

f) Büyük adacıklar birleşirler. Dolayısıyla arkalarında kaplanmamış delikler ve kanallar bırakırlar. Bu aşamada filmin yapısı, süreksiz adalar yapısından delikli bir yapıya döner. Bu kanallar ve oyuklar da doldurularak sürekli bir film oluşur. Bu birleşme ve dolma aşamaları nedeniyle kaçınılmaz olarak yapısal örgü hataları doğar.

7.3. Büyüme İşleminin Yapısal Sonuçları

İnce filmin mikroyapısı ve topografik detayları büyüme işleminin kinetiğine bağlıdır. Dolayısıyla alttaş sıcaklığı, safsızlıkların kaynağı ve enerjileri, alttaşın fiziksel ve kimyasal özellikleri, gaz ortamı önemli parametrelerdir. Yüzeye gelen parçacıkların yüzey hareketliliklerini etkileyen parametreler olarak da; gelen parçacıkların kinetik enerjileri, birim zamanda gelen parçacık sayısı, yoğunlaşma veya yapışma katsayısı, safsızlık miktarı ve süper doyum oranı (yoğunlaşma için gerekenden fazla olan buhar basıncı/sıvı derişimi oranı) sayılabilir.

Filmlerin *mikroyapısı* filmlerin çekirdek boyutu ile ilgilidir. Çekirdek boyutunun, süper doyumu azaltarak ve yüzeye gelen parçacıkların yüzey hareketliliğini artırarak büyüyebileceğini söylemek doğru olur. Sonuç olarak, büyük çekirdek boyutlu filmler, yüksek kaynak ve yüksek alttaş sıcaklıklarında oluşur. Kaynak sıcaklığını artırmak, parçacıkların kinetik enerjilerini dolayısıyla da yüzey hareketliliklerini artırmak demektir. Çekirdek boyutu, film oluşturma işlemi tamamlandıktan sonra, yüksek sıcaklıklarda tavlama sonucu da artırılabilir. Bu tavlama kalın filmler de daha belirgin bir etkiye sahiptir. Fakat unutulmamalıdır ki bu şekilde hazırlanan filmlerdeki çekirdek boyutu, film hazırlanırken yüksek alttaş sıcaklığında tutulan filmlerden daha düşük kalır. Hazırlandıktan sonra bir filmin kalitesini ve özelliklerini, tavlamarak iyileştirmek zor ve sınırlı bir işlemdir.

Yoğunluk fiziksel yapının önemli bir parametresidir. İnce Filmlerde görülen önemli bir özellik, film kalınlığının azalmasıyla yoğunluğunda azalmasıdır. Gözenekli filmlerde yoğunluk gerçek malzeme yoğunluğunun %2-3' ü olabilir.

Filmin *yapışması*, alttaşın fiziksel ve kimyasal yapısına, temizliğine bağlıdır. Gelen parçacıkların kinetik enerjilerinin artması, tutunma enerjisinin yüksek olması ve başlangıç çekirdeklenme yoğunluğunun yüksekliği yapışmanın daha iyi olmasını sağlar. Yüzey üzerinde bulunan kirleticiler, tutunma enerjisini artıracak veya azaltacak yönde olmalarına göre, yapışmayı artırır veya azaltır. Bu anlamda zayıf vakum seviyesi de yapışmayı azaltan bir unsurdur. Çünkü yüzey üzerine yapışmış çok sayıda gaz atomu tutunma enerjisini azaltır.

Genelde *kristal bağ sabitlerinin*, gerçek değerlerinden çok farklı olduğu durumlar, yalnızca çok ince filmlerde görülür. Bağ sabiti yüzey enerjisinin negatif veya pozitif olmasına göre artırılabilir veya azaltılabilir. Film kalınlığı arttıkça bağ sabitlerinin değeri, gerçek değerlerine yaklaşır.

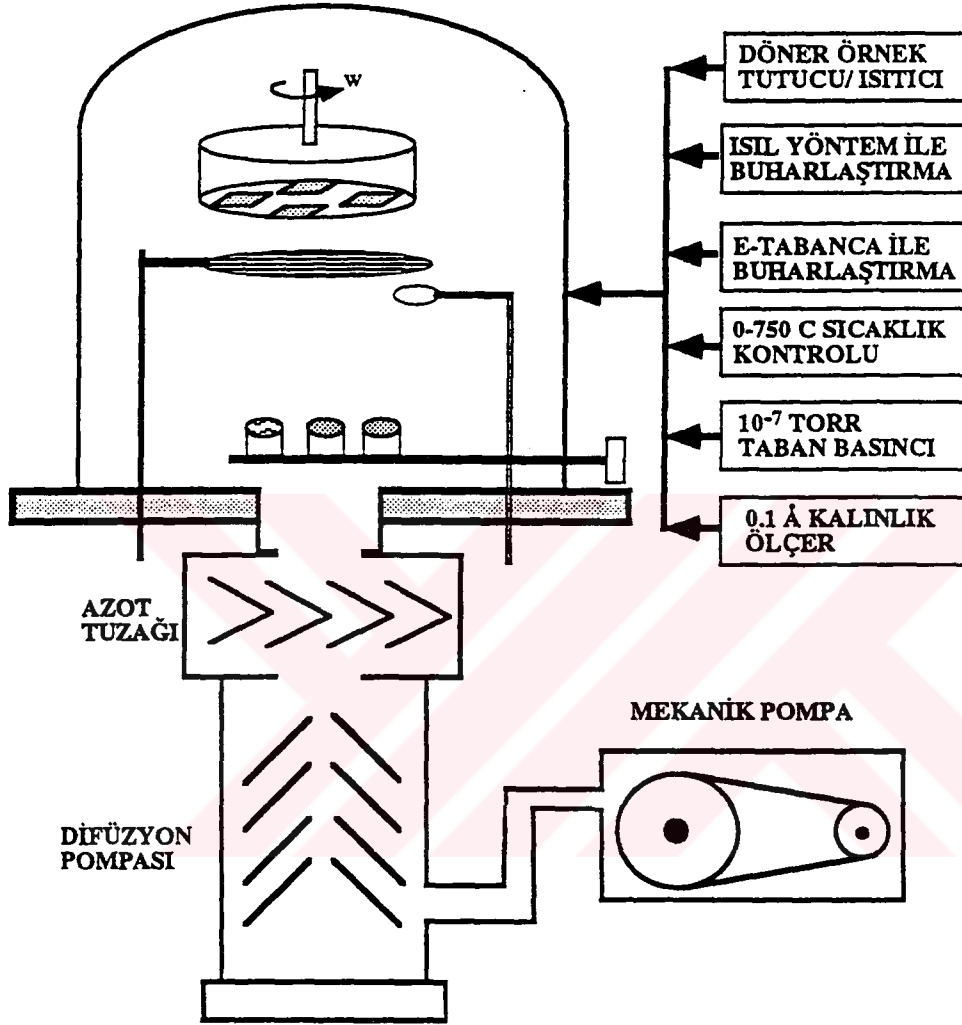
7.4. Deney Düzenekleri ve Yöntemler

7.4.1. Vakum sistemi

Şekil 7.1.'de genel bir görünüşü verilen vakum sistemi MRC firmasına ait; temel olarak döner kanatlı mekanik pompa, su soğutmalı yağlı difüzyon pompası ve sıvı azot tuzağına sahip bir sistemdir. Çalışma bölgesi 18" lik bir pyrex cam fanusdur. Bu çalışma bölgesine, besleme girişi adı verilen pek çok girişle bağlantı sağlanmaktadır. Bu besleme girişlerinin bazıları elektriksel sinyal ve güç aktarımında, bazıları mekanik hareket aktarımında, bazıları da soğutma amaçlı su iletimi için kullanılır.

Çalışma bölgesinin vakuma alınmasını kolaylaştırmak ve vakum seviyesini iyileştirmek için vakuma alınan bölgeyi ısıtmanın büyük faydası olduğu bilinmektedir. Bu sebeple vakum ısıtma amaçlı 150W' lık iki quartz lamba vakum içerisine yerleştirilmiştir. Bu sayede vakum içerisindeki parçalar 100 °C' ye kadar tavlanylabilir. Isıtmanın homojen olmasını sağlamak amacıyla lambalar, yapılan yansıtıcılar içine yerleştirilmiştir. Vakum sisteminde şimdiye kadar en düşük 3×10^{-7} torr'luk bir vakum seviyesine inilmiştir.

Sistemde buharlaşma amacıyla kullanılan bir elektron demeti ile buharlaştırma ünitesi bulunmaktadır. Oldukça eski model (1960) olan bu sistemde, üç potansiyometre-çekme hareketiyle elektron demeti hedef sahasına getirilebilmektedir. Sisteme ısıtma ile buharlaştırma için de uygun beslemeler konulmuştur. Buharlaştırma işlemi sırasında, buharlaşma hızını ve anlık kalınlığı ölçmek için, bir INFICON marka quartz-kristal kalınlık ölçeri sistem içerisine yerleştirilmiştir. Bu kalınlık ölçer 0.1 Å/s' lik bir duyarlılığa sahiptir.



Şekil 7.1. İnce film hazırlama sisteminin genel bir görünüşü.

Vakum sistemi içindeki diğer önemli bir parça da örnek ısıtıcısıdır. Örnek ısıtıcısı temel olarak optik ısıtma prensibi ile çalışmakta ve 725 °C sıcaklığa kadar çıkabilmektedir [96].

7.4.2. Örnek ısıtıcısı

Örnek ısıtıcısı temel olarak optik ısıtma prensibi ile çalışmaktadır. Silindirik bir bakır bloğun içerisi yarı küre olacak şekilde boşaltılmış, bu boşluğa dört adet 50W'lık quartz lamba yerleştirilmiştir. Paslanmaz çelikten yapılan asıl örnek tutucu, bu boşluğun önünü kapatacak şekilde, bakır bloğa zayıf bir bağlantıyla tutturulur. Bakır blok arka yüzeyinden su soğutma sistemiyle soğutulur. Bu nedenle örneğin durduğu bölge ısınırken, bakır bloğun kendisi soğuk kalır. Quartz lambadan çıkan ışınların bir kısmı direk olarak, bir kısmı da bakır bloğun iç yüzeyinden yansıyıp örnek tutucunun arka yüzeyine gelir. Bakır bloğun iç yüzeyinin yansıtıcılığını artırmak için bu yüzey çok iyi bir şekilde parlatılmıştır. Bloğun önündeki örnek tutucu içerisine bir K-tipi ısı çifti yerleştirilmiştir. Bu sayede hem örnek tutucunun sıcaklığı okunabilmekte, hem de istenildiğinde, bu ısı çifti bir sıcaklık kontrol cihazına bağlanarak, örnek sıcaklığı kontrol edilebilmektedir. Örneğin bağlandığı bölgeye ise bir S-tipi ısı çifti daha yerleştirilmiştir. Bu ısı çifti istenildiği zaman direk olarak örnek yüzeyinin sıcaklığını ölçmekte kullanılmaktadır. Bu ısı çifti ile örneğin yüzey sıcaklığının kalibrasyonu yapılmıştır. Bu ısıtıcı ile 725 °C'ye kadar örnek yüzey sıcaklığını artırmak mümkün olmaktadır. Sıcaklık kontrol sistemi yardımıyla istenilen sıcaklığa kontrollü bir şekilde çıkmak, o sıcaklıkta durmak mümkün olmaktadır. Böyle bir örnek ısıtıcısının temel üstünlüğü oksijenli ortamlarda dahi problemsiz olarak çalışması ve yüksek verimliliğidir.

7.4.3. Kalınlık ölçer

Sistem içerisine yerleştirilen kalınlık ölçer INFICON marka 0.1 Å/s hassasiyete sahip bir kalınlık ve buharlaşma hızı ölçen cihazdır. Temel çalışma prensibi, kütlesi değişen bir piezoelektrik kristalin, titreşim frekansının algılanmasıdır. Algılayıcı dedektör bir kafa içerisine yerleştirilmiş, quartz kristaldir. Bu kafa buharlaşma kaynağını görebilecek şekilde sistem içerisine yerleştirilir. Buharlaşma başladığında hem alttaş üzerine, hemde quartz kristal üzerine malzeme kaplanmaya başlar. Quartz kristalin kütle artışından dolayı, frekansı kayar. Kalınlık ölçerin elektronik kontrolü bu kaymayı kaydederek, bu frekans kayması bilgisini, uygun kalınlık ve buharlaşma hızı değerlerine dönüştürür.

Kalınlık ölçer bir sistemde direk olarak alttaşın konulduğu yere konulmaz. Dolayısı ile alttaş üzerine kaplanan malzeme miktarı ile kalınlık ölçerin quartz kristali üzerine kaplanan malzeme miktarı arasında fark vardır. Bu farkın kalınlık ölçer elektronik kontrolcüsüne verilmesi gereklidir. Bu farka geometri faktörü denir.

7.5. Alttaşlar ve Alttaşların Temizlenmesi

$\text{Fe}_{(1-x)}\text{-Mn}_x$ ($x=0.14$) ince filmler quartz alttaşlar üzerine oluşturulmuştur. Alttaşlar vakum sistemi içerisine yerleştirilmeden önce, dikkatlice temizlenmiştir. Örnek tutucuyla kenarlarından tutulan alttaşlar üzerine aseton dökülerek, alttaşın yüzeyi Q-tip ile ovuldu. Bu tip bir temizlik yüzeye derinlemesine girmiş yağ tabakalarını, büyük toz ve kirleri yüzeyden alır. Daha sonra alttaşlar TCE ile ultrasonik temizleyicide yıkandı. Böylece yağlardan tamamen arındı. Damıtık sudan geçirildi. Sırasıyla asetik asit, metanol ve isopropil alkol içerisinde ultrasonik temizleyicide yıkandı. Bu son

işlemlerden sonra argon gazıyla kurutuldu. En kısa zamanda örnek tutucuya bağlanıp vakum içerisine yerleştirildi.

7.6. Buharlaştırma İşlemi

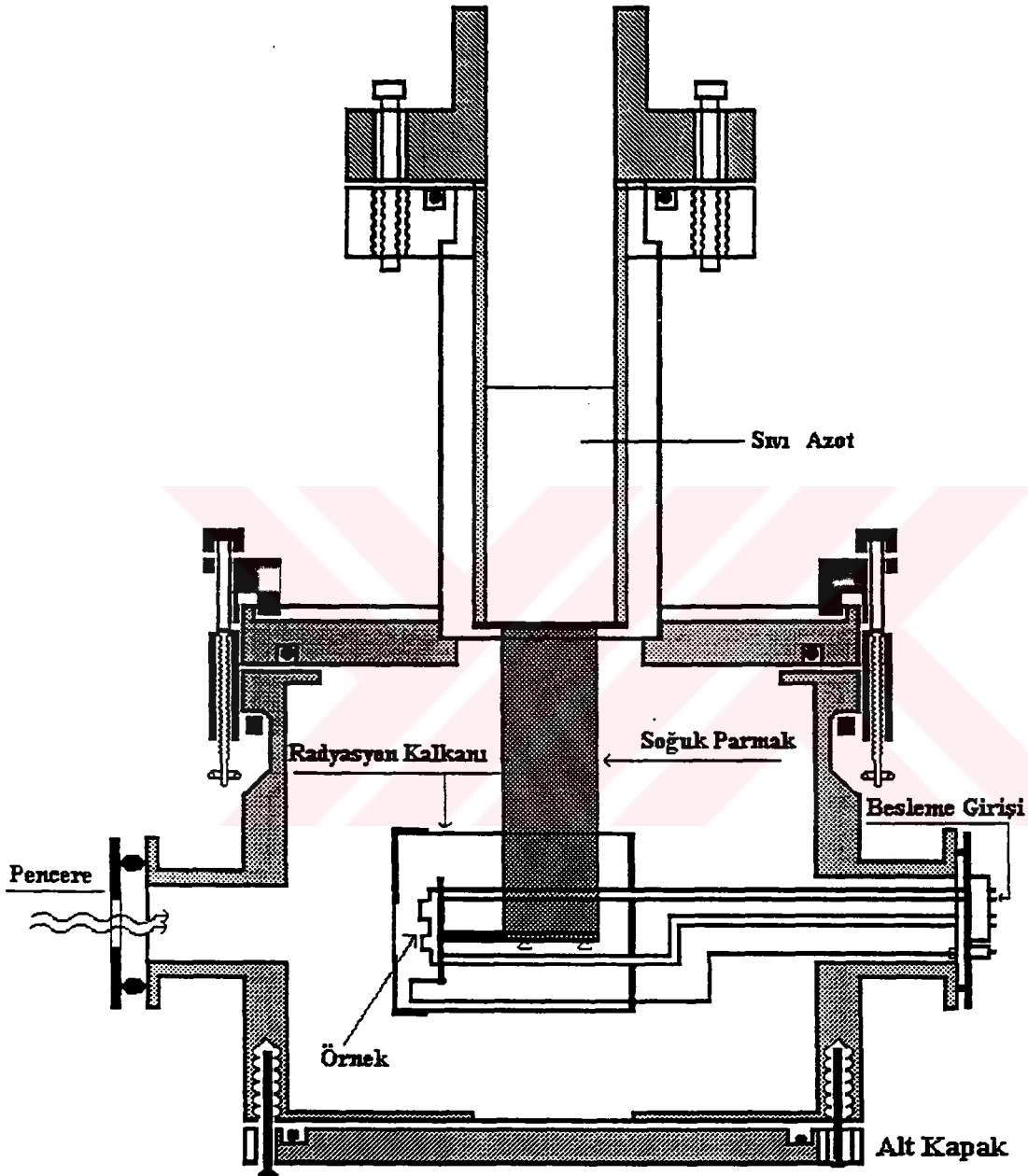
Yapılan buharlaştırma işlemi, elektron demeti ile buharlaştırma sınıfına girer. Elektron kaynağı olarak, ilmek şeklinde bükülmüş tungsten bir tel kullanılır. Bu tel, üzerinden geçen alternatif akımla ısınarak elektron salar. Salınan elektronlar tungsten tel ile pota arasındaki yüksek potansiyel tarafından hızlandırılır ve pota üzerindeki malzemeye çarparlar. Yüksek hızlarda malzeme üzerine çarpan elektronlar kinetik enerjilerini kaybederler ve devreyi tamamlarlar. Bu şekilde ısınan malzeme erir ve buharlaşır.

Film yapma işleminin ilk aşaması sistemin vakuma alınmasıdır. Bu amaçla sistem vakum ısıtıcı lambalarla ısıtılarak uzunca bir süre difüzyon pompasıyla pompalanmıştır. Bu pompalama süresince sistemin içerisine bağlı su girişlerinin hepsinin vanaları kapalı tutulmuştur. Böylece sistem içerisinde bazı yüzeylerin soğuk, bazı yüzeylerin sıcak olması engellenmeye çalışılmıştır. 2×10^{-6} torrluk vakum seviyesi elde edildikten sonra, sisteme bağlantılı su girişleri açılmış ve örnek ısıtıcısı çalıştırılmıştır. Alttaşlar $650\text{ }^{\circ}\text{C}$ 'de vakum içerisinde 30 dakika tavlansmıştır. Böyle bir tavlama, yüzeyde kimyasal olarak tutunmuş bazı pislikleri kopararak daha temiz bir alttaş yüzeyi elde edilmesini sağlamıştır. Daha sonra film yapma sıcaklığına inilmiştir. Bütün bu işlemler sırasında alttaşların önü, bir perdeleyici ile kapalı tutulmuştur. Potanın önü de pota perdeleyicisi ile kapalı tutulurken pota içerisindeki $\text{Fe}_{(1-x)}\text{-Mn}_x$ ($x=0.14$) parça ısıtılmaya başlanmıştır. Böylece $\text{Fe}_{(1-x)}\text{-Mn}_x$ ($x=0.14$) parça üzerindeki pislikler atılmıştır. Isıtma gücü artırılarak $\text{Fe}_{(1-x)}\text{-Mn}_x$ ($x=0.14$)'nın buharlaşması sağlanmıştır. Daha sonra pota önündeki perdeleyici açılarak buharlaşma hızı kalınlık ölçerden gözlenmiştir. İstenilen

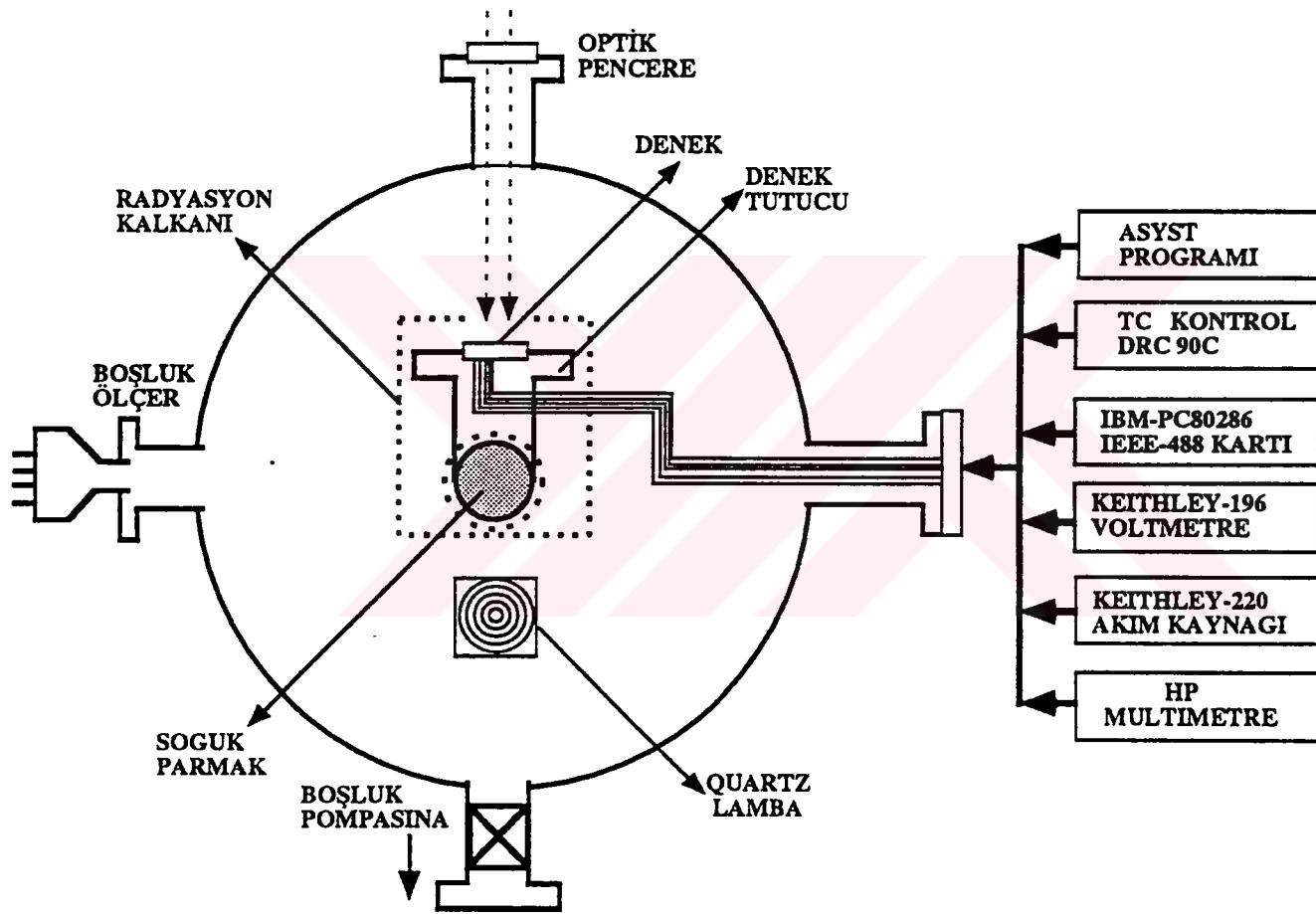
buharlařma hızı yakalandıktan sonra örnek perdeleyicisi de açılarak kaplama işleminde başlanmıştır. Filmler, ortalama 0.4-0.5 Å/s lik buharlařma hızlarında 1000 Å kalınlıęa ulařıncaya kadar kaplanmıştır.

7.7. Direnç Ölçme Düzenegi ve Direnç Ölçümü

Hacettepe Üniversitesi Fizik Mühendislięi İnce Film Labaratuvarında bulunan ölçü düzenegi genel olarak 0.5x0.5 inç ve 0.25x0.25 inç boyutunda olan ince film örneklerin elektriksel ve optik özelliklerinin ölçülmesi amacıyla tasarlanmıştır. Ölçü düzenegi temel olarak gövde, örnek tutucu, vakum ve elektriksel bağlantı beslemelerinden oluşmaktadır. Düzenegin gövdesi 12 cm dış çaplı paslanmaz çelik silindirik bir yapıdır. Gövde üzerinde, dışarıdan iç yüzeye açılan dört giriş bulunmaktadır. Bunlardan birisi elektriksel ölçümleri ve ısılıft bağlantısı için kullanılmıştır. Elektriksel bağlantılar için koaksiyel bağlantı girişleri konulmuştur. Bu şekilde sistemin bilgisayar kontrollü ölçme düzenegine bağlanması da son derece kolaylaşmıştır. Girişlerden bir tanesine ısılıft vakum ölçer bağlanmıştır. Üçüncü giriş vakum vanası yerleştirilmiştir. Son giriş optik ölçümlerde pencere görevi için boş bırakılmıştır. Gövdenin üst kısmı üç parçadan oluşmaktadır ve bu parçalar argon kaynağıyla birleştirilmiştir. Soğuk parmak en üstten vidalanarak bağlanmaktadır. Sistemi daha iyi vakuma alabilmek için, sistemin içine ısıtıcı olarak 50 Watt'lık bir quartz lamba konulmuştur. Örnek tutucu elektrolitik bakırdan yapılmıştır. Örneğin sıcaklığını, azot sıcaklığına yakın değerlere kadar düşürebilmek için, örnek tutucunun etrafına, ince paslanmaz çelik levhadan bir radyasyon kalkanı yapılmıştır. Bu sayede, kalkan olmadığı zaman ancak 95 °K'ne inmek mümkün olmuşken, kalkan kullanılarak örnek sıcaklığı 82 °K'ne düşülebilmektedir. Şekil 7.2. direnç ölçme düzeneginin genel yapısını, Şekil 7.3. bu düzenegine bağlı elektronik ölçme sistemini göstermektedir [95].

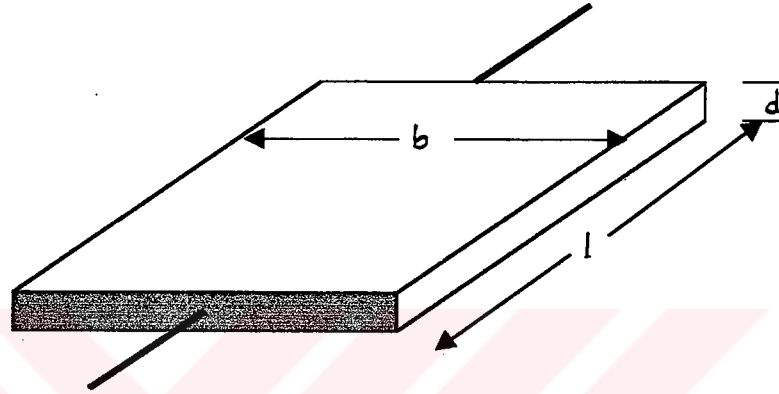


Şekil 7.2. Direnç ölçme düzeneğinin genel bir görünüşü.



Şekil 7.3. Direnç ölçme düzeneğinin silindirik kesiti ve elektronik ölçme sisteminin blok şeması

Direnç ölçümleri bu sistem içerisinde dört nokta direnç ölçümü tekniği kullanılarak yapılmaktadır. Örneğin sıcaklığı bir bakır-konstantan ısılıçift ile okunmaktadır. Şekilde gösterilen dikdörtgen prizma biçiminde bir malzemenin direnci,



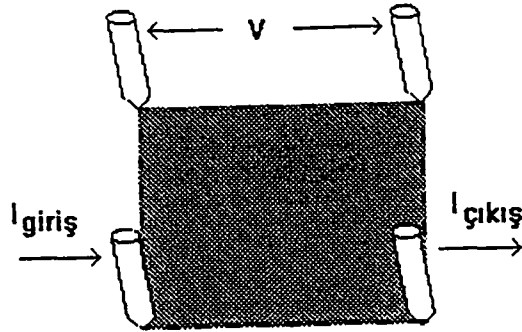
$$R = (\rho/d)(l/b) \quad (7.1)$$

olarak verilir. $l=b$ ise yukarıdaki ifade $R = \rho/d = R_s$ şeklinde bir filmin direncidir. Bu direnç karenin kenar uzunluğundan bağımsızdır. Yalnızca öz direnç ve kalınlığa bağlıdır. R_s aynı şartlar altında, aynı malzeme buharlaştırılarak elde edilen filmlerin dirençlerini karşılaştırmak için yaygın olarak kullanılan çok yararlı bir değerdir. Eğer kalınlık biliniyorsa öz direnç $\rho = d R_s$ formülüyle bulunur.

Şekil 7.4.'de görüldüğü gibi kare dört nokta ölçme tekniğinde yanyana iki uçtan akım sürülür, diğer iki uçtan voltaj okunur. Daha sonra levha direnci R_s ,

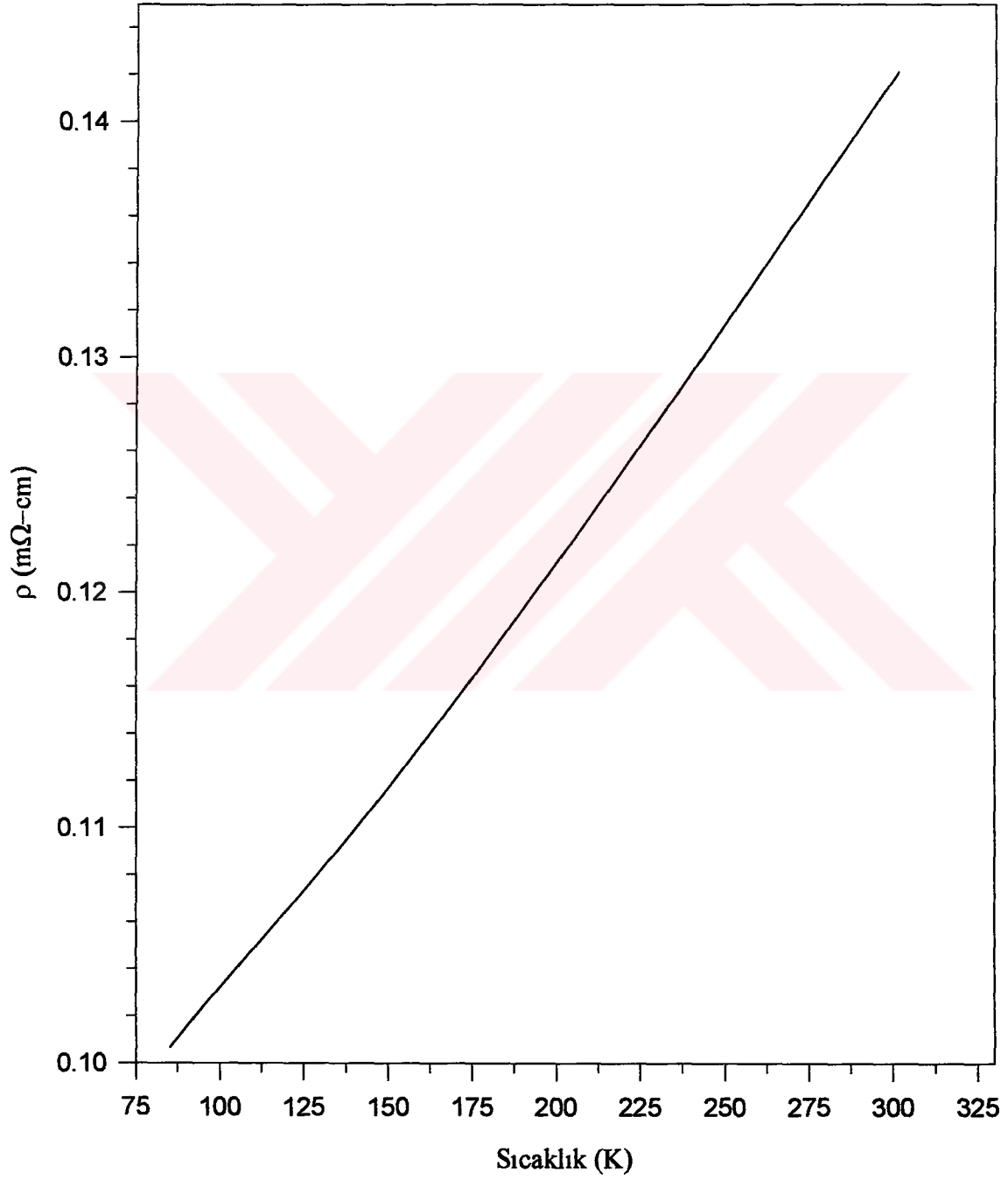
$$R_s = (V/I)(2 \pi / \ln 2) = 9.06 (V/I) \quad (7.2)$$

olarak bulunur.



Şekil 7.4. Kare örnek direncin, dört nokta tekniği ile ölçümü.

R(T) ölçme düzeneği de, temel olarak kare geometrili örnekleri ölçmek için yapılmıştır. Ölçme sistemi elektroniği bir adet Keithley 196 multimetre, bir adet Keithley 220 akım kaynağı, bir adet HP multimetre, 80286 bilgisayar ve IEEE kartından oluşmaktadır. Yapılan $\text{Fe}_{(1-x)}\text{-Mn}_x$ ($x=0.14$) ince film örneğinin dört köşesine taze indiyum parçalar bastırıldı ve bu parçaların üzerine de akım ile voltaj uçları bastırıldı. Bu sayede örnek hem soğuk parmak üzerine sabitlendi hem de omik bir eklem elde edilmeye çalışıldı. Sistem vakuma alındı. Direnç ölçme sistemi sıvı azot ile soğutulurken sıcaklığa bağlı direnç verileri alındı. Daha sonra $d = 1000 \text{ \AA}$ alınarak eşitlik (7.1) ve (7.2)'den öz direnç değerleri hesaplandı. $\text{Fe}_{(1-x)}\text{-Mn}_x$ ($x=0.14$) ince filminin sıcaklığa bağlı öz direnç eğrisi Şekil 7.5.'de verildi.

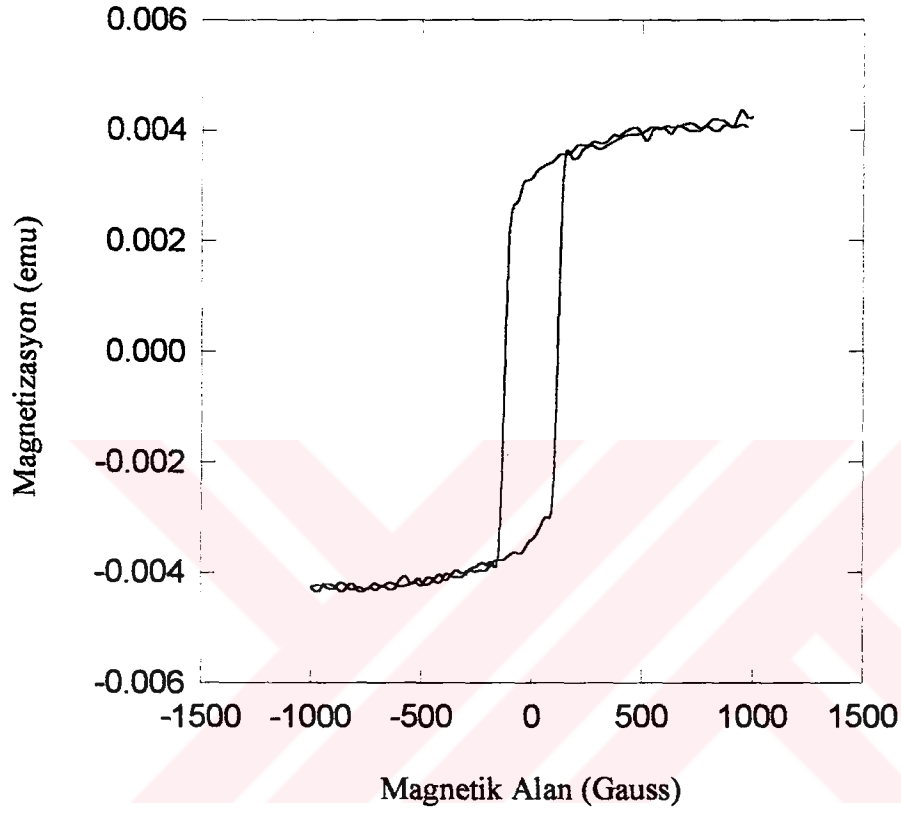


Şekil 7.5. $\text{Fe}_{(1-x)}\text{Mn}_x$ ($x=0.14$) ince filminin sıcaklığa bağlı öz direnç eğrisi.

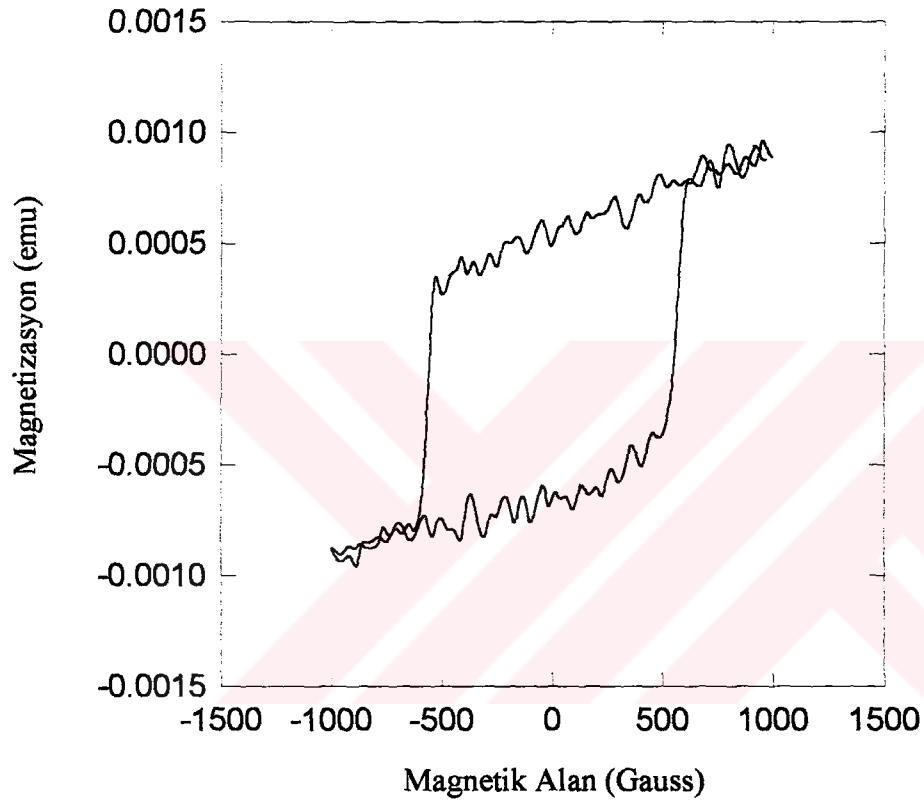
7.8. Manyetizasyon Ölçme Sistemi ve Manyetizasyon Ölçümleri

Deneyler; bir ince filmin manyetik alan uygulanmadan da tek bir manyetik çekirdek yapısına sahip olabileceğini göstermektedir. Eğer mıknatıslanma yalnızca çekirdeklerin aynı anlı ve eşit miktarda dönüleri sebebiyle değişiyorsa; bu filmin histerizis eğrisi, tek çekirdekli hacimli malzemelerin histerizis eğrilerinin hesaplanması yöntemiyle hesaplanabilir. Film kalınlığı filmin diğer boyutlarına nazaran son derece küçük olduğundan, eğer filmin mıknatıslanması film düzlemi içerisinde değilse, mıknatıslanmayı bozan alan çok büyük olmalıdır. Bu nedenle şekil anizotropisine karşı koyacak herhangi bir enerji terimi yoksa, bir ince filmin mıknatıslanma vektörü her zaman film düzlemi içerisinde olur. Film düzlemi içerisindeki mıknatıslanma ölçümlerinde birbirine dik iki manyetik alan kullanılması anlamlı olur. Eğer film tek eksenli bir anizotropiye sahipse, alanlardan biri bu tek eksenli anizotropinin kolay eksenine paralel uygulanır. Diğer bir alan ise bu kolay eksene dik olarak uygulanır.

Manyetizasyon ölçümleri Tübitak ulusal metroloji enstitüsü laboratuvarında bulunan Lake Shore 730M manyetometresi kullanılarak oda sıcaklığında (295 °K) yapılmıştır. Bu bir standart titreşen örnek (Vibrating Sample) manyetometredir. $Fe_{(1-x)}-Mn_x$ ($x=0.14$) ince filminin manyetizasyon sonuçları Şekil 7.6-7' de görülmektedir.



Şekil 7.6. Manyetik alan $\text{Fe}_{(1-x)}\text{Mn}_x$ (x=0.14) ince film düzlemi içinde iken histerizis eğrisi.



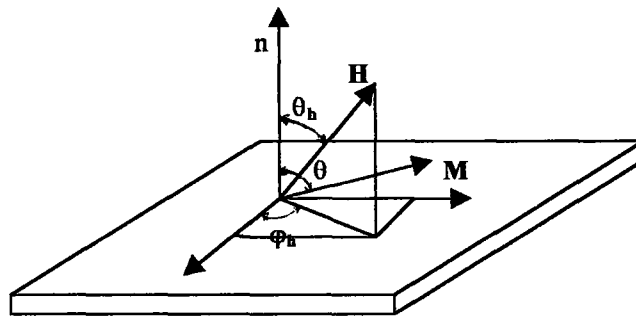
Şekil 7.7. Manyetik alan $\text{Fe}_{(1-x)}\text{Mn}_x$ ($x=0.14$) ince film düzlemine dik iken histerizis eğrisi.

Şekilden görüldüğü gibi $\text{Fe}_{(1-x)}\text{Mn}_x$ ($x=0.14$) ince filminin kolay eksenini boyunca uygulanan manyetik alan için histerizis eğrisi pek çok ince filmde olduğu gibi dikdörtgenseldir. Bunun sebebi çekirdeklenme için gereken manyetik alanın, duvar hareketi için gereken manyetik alandan daha fazla olmasıdır. Bazı filmlerin koersif kuvvetleri anizotropi alanından daha büyüktür. Böyle beklenmedik bir olayın sebebi filmin bazı bölgelerinde mıknatıslanmanın bir tarafa doğru dönerken, filmin diğer bazı kesimlerinde mıknatıslanmanın ters yöne dönmesidir. Bu davranış, eğer filmin anizotropi yönü film içerisinde bir bölgeden bir bölgeye değişiyorsa gerçekleşir. Bu olayın sonucunda çekirdek duvarları, kolay eksene dik olacak şekilde yönelmiş bazı çekirdekler ortaya çıkarır.

Tek eksenli anizotropinin gerçek sebebi henüz iyi anlaşılmış değildir. Fakat en muhtemel olarak bu olay manyetik atomların bir yöne doğru düzgün olarak yönelmesinden doğduğu söylenebilir. Buharlaşıma sırasında uygulanan bir manyetik alan, mıknatıslanmayı alan doğrultusunda yönlendirir. Bunun sonucunda atomlarda, alan yönüne paralel olacak şekilde film yüzeyinde yayılırlar. Film yapımı durdurulup sıcaklık düşürüldüğünde, atomlar yerlerinde donarlar ve tek eksen anizotropisi ortaya çıkar. Diğer taraftan alttaş yüzeyinin malzeme buharı ile açığı yaptığı durumlarda da bu anizotropinin ortaya çıktığı gözlenmiştir. Bir filmde, aynı zamanda küçük kristalcik ve stress anizotropileride bulunur. Film polikristal olduğundan bu anizotropilerin yönü film üzerinde her yerde başka başkadır. Sonuç olarak, bu küçük lokal anizotropilerde, tek eksen anizotropisinin hem büyüklüğünde hemde yönünde bir dağınılığın ortaya çıkmasına sebep olurlar. Bu kolay eksenin dağınılığı gözlenen manyetik çekirdek yapısı üzerinde önemli bir etkiye sahiptir [97].

7.9. Ferromanyetik Resonans (FMR) Ölçme Sistemi ve FMR Ölçümleri

Ferromanyetik rezonans (FMR), manyetik filmlerin özelliklerinin çalışılmasında en güçlü yöntemlerden birisidir. Bu tekniğin gösterimi Şekil 7.8. de verilmiştir. Denge durumundan ayrılan manyetik momentler uygulanan manyetik alanın etkisiyle denge konumları etrafında presesyon hareketi yaparlar. Bu presesyonun frekansı uygulanan dış manyetik alanın gücüne, denge manyetizasyonunun dış manyetik alanla yaptığı açıya sıkı sıkıya bağlıdır. FMR ölçümlerinde, dışarıdan uygulanan bir RF alan frekansının, denge durumundan ayrılan manyetik momentlerin doğal presesyonlarının frekansına eşit olması durumunda, mikrodalga alanından bir enerji soğurulur. Bu enerji soğurumu, DC manyetik alanın değiştirilmesi ile doğal presesyon frekansının değiştirilerek RF alanının frekansına eşitlenmesi ile sağlanır. Malzemenin geometrisinden kaynaklanan boyut etkileri, malzemeyi oluşturan bileşenlerin kristal yapılarından kaynaklanan manyetik anizotropi gibi faktörler FMR spektrumunda gözlenen rezonans alan değerinin büyüklüğünü etkiler. Malzemenin kolay mıknatıslanma eksenine boyunca uygulanan bir manyetik alan için sistem anizotropi enerjisi bakımından minimumdadır, dolayısıyla spektrumda gözlenen rezonans alan değeri küçük olacaktır.



Şekil 7.8. Tek katlı film probleminde deneysel geometri.

Film düzlemi içerisinde bulunan bir simetri eksen ile φ_h ve film düzlemine dik normalle θ_h açısı yapan ve bir manyetik alan içerisinde bulunan tek katlı film düşünelim. Filmin mıknatıslanma vektörünün aynı eksenlerle yaptığı açılara da φ ve θ diyelim (Şekil 7.8.). Bu durumda sistemin toplam serbest enerjisi

$$F = F_h + F_d + F_{cub} + F_u \quad (7.3)$$

ile verilebilir. Bu denklemde

$$F_h = -HM(\sin(\theta)\sin(\theta_h)\cos(\varphi - \varphi_h) + \cos(\theta)\cos(\theta_h)) \quad (7.4)$$

dir. F_h terimi H alan vektörüyle M vektörünün skaler çarpımından gelen serbest enerji terimidir. Boyut etkisinden kaynaklanan ikinci terim

$$F_d = 2\pi M\tilde{M}\cos^2(\theta) \quad (7.5)$$

şeklindedir. Burada $\tilde{M} = M + K_u/(2\pi M)$ etkin mıknatıslanmayı bozma alanı olarak tanımlanmıştır. K_u film düzlemine dik uniaxial anizotropi ve M gerçek doyum mıknatıslanmasıdır. Eğer sonlu bir malzeme manyetik alan içerisinde mıknatıslanırsa, malzemenin sonlu uçlarında manyetik kutuplar oluşur. Bu olay sonucunda malzeme içerisinde, uygulanan manyetik alanın tersi yönünde bir mıknatıslanmayı bozma alanı oluşur. Bu alanın serbest enerjiye katkısı F_d terimi ile verilmiştir. Diğer önemli terimler anizotropi terimleridir;

$$\left. \begin{aligned} F_{cub} &= \frac{K_1}{4} \left(\sin^2(2\theta) + \sin^4(\theta) \sin^2(2\varphi) \right) \\ F_u &= K_2 \sin^2(\theta) \sin^2(\varphi) + K_4 \sin^4(\theta). \end{aligned} \right\} \quad (7.6)$$

F_{cub} , kübik kristallerde manyetik anizotropi etkisi dolayısıyla ortaya çıkan serbest enerji terimidir. K_1 kübik anizotropinin birinci sabitidir. F_u hekzogonal kristaller için bulunan anizotropi kaynaklı serbest enerji terimidir.

Doyum mıknatıslanmasının film düzlemi açısına (φ) göre türevi, bu açı için serbest enerjinin minimum olduğu denge durumunu verir. Aynı şekilde denge durumundaki θ açısı, serbest enerjinin θ açısına göre türevinin sıfıra eşitlenmesi ile bulunur:

$$\frac{\partial F}{\partial \varphi} = 0 = H \sin(\theta) \sin(\theta_h) \sin(\varphi - \varphi_h) + H_1 \sin^4(\theta) \sin(2\varphi) \cos(2\varphi) + H_2 \sin^2(\theta) \sin(2\varphi) \quad (7.7)$$

$$\frac{\partial F}{\partial \theta} = 0 = -HM (\cos(\theta) \sin(\theta_h) \cos(\varphi - \varphi_h) - \sin(\theta) \cos(\theta_h)) - 2\pi M \sin(2\theta) + H_1 \left(\frac{1}{2} \sin(4\theta) + \sin^3(\theta) \cos(\theta) \sin^2(2\theta) \right) + H_2 \sin(2\theta) \sin^2(\varphi) + 4H_2 \sin^3(\theta) \cos(\theta). \quad (7.8)$$

Yukarıdaki eşitliklerde $H_i = K_i/M$ olarak tanımlanmıştır ve anizotropi alanlarını göstermektedir. H_1 , kübik anizotropi terimi K_1 'e karşılık gelen anizotropi alanı olarak, H_2 ve H_4 hegzogonal anizotropi terimleri K_2 ve K_4 'e karşılık gelen anizotropi alanları olarak tanımlanmıştır. Bu türev eşitliklerinden bilinen H manyetik alanı ve (φ_h, θ_h) açıları kullanılarak ile doyum mıknatıslanması M 'nin denge açıları (φ, θ) bulunabilir.

Ferromanyetik rezonans koşulu serbest enerjiye bağlı olarak,

$$\left(\frac{\omega}{\gamma} \right)^2 = \frac{1}{\sin^2 \theta} \left[\frac{\partial^2 F}{\partial \theta^2} \frac{\partial^2 F}{\partial \varphi^2} - \left(\frac{\partial^2 F}{\partial \theta \partial \varphi} \right)^2 \right] \quad (7.9)$$

eşitliği ile verilir. Eşitliğin sağ tarafı manyetizasyonun denge durumu için çözümlidir. Burada ω ESR spektrometresinin mikrodalga frekansı ve γ incelenen ferromanyetik malzemenin jiromanyetik oran sabitidir. (7.9) eşitliği, (7.3), (7.7) ve (7.8) eşitlikleri ile aynı anda çözülerek herhangi bir dış manyetik alan büyüklüğü ve yönelimi (φ, θ) için FMR alan değeri bulunur. Bu eşitlikler bazı özel durumlar için daha sade bir biçimde elde edilebilirler.

DC manyetik alan film düzlemi içerisinde olacak şekilde yalnız φ yönünde döndürülürse böyle ölçümlere düzlem içi ölçümler denir. Bu durumda $\theta = \theta_h = \pi/2$ değerindedir. Düzlem içerisindeki kolay eksen boyunca uygulanan $(\varphi = \varphi_h = 0^\circ)$ bir dış manyetik alanın rezonans alan değeri

$$H_{\text{paralel}}^{\text{kolay}} = -2H_1 - 2H_2 + \frac{(\omega/\gamma)^2}{|4\pi M - 2H_2 - 4H_4|} \quad (7.10)$$

şeklindedir. Düzlem içi zor eksen için dış manyetik alan M doyum mıknatıslanmasını kendi yönünde yöneltebilecek kadar güçlü olmak üzere FMR rezonans alan değeri

$$H_{\text{dik}}^{\text{zor}} = 2H_1 + \frac{(\omega/\gamma)^2}{|4\pi M - 3H_1 - H_2 - 4H_4|} \quad (7.11)$$

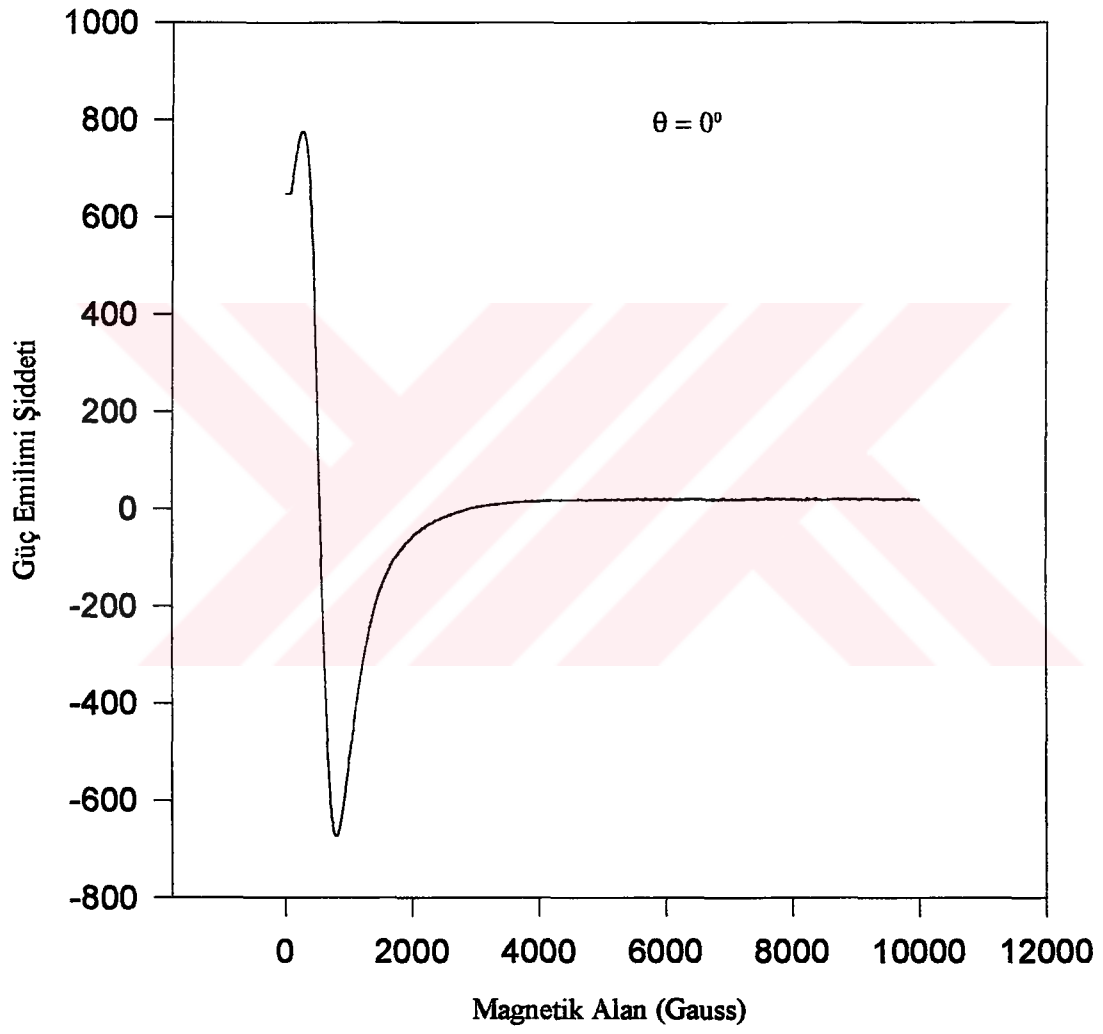
olarak bulunur.

Eğer DC manyetik alan film düzleminden dışarı film normaline doğru döndürülürse ($\theta_h \neq 0^0$), bu tarz bir ölçüm düzlem dışı ölçüm olarak adlandırılır. Düzlem dışı ölçümler ($\varphi = \varphi_h = 0^0$) olacak şekilde yapılır. Dış manyetik alanın film düzlemine dik olduğu durumda ve dış manyetik alanın mıknatıslanmayı kendi yönünde yöneltebileceği kadar güçlü olduğu durum için ($\theta = \theta_h = 0^0$), rezonans alan değeri

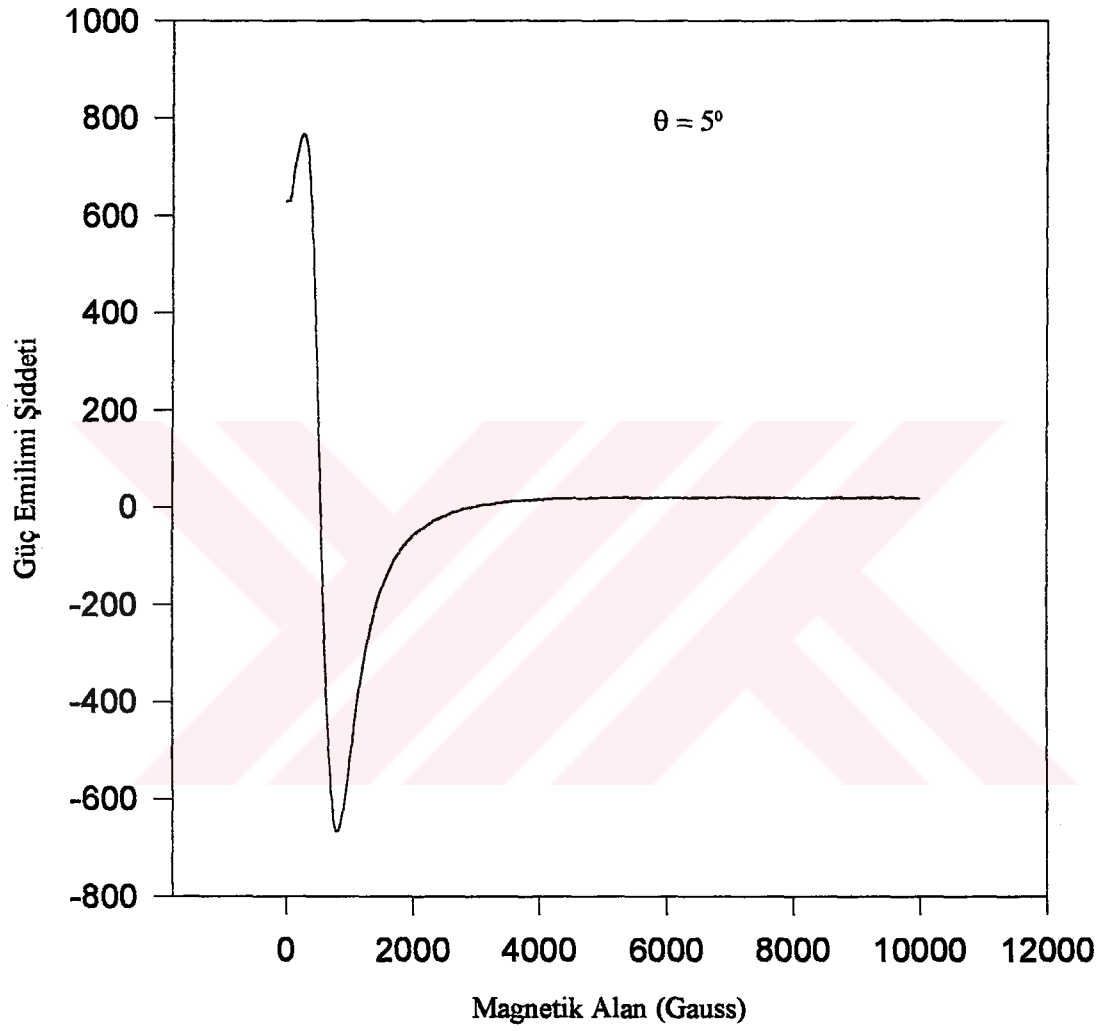
$$H_{\text{dik}} = 4\pi M - 2H_1 - H_2 + |\omega/\gamma| + \frac{1}{2} \frac{H_2^2}{|\omega/\gamma|} \quad (7.12)$$

olarak elde edilir.

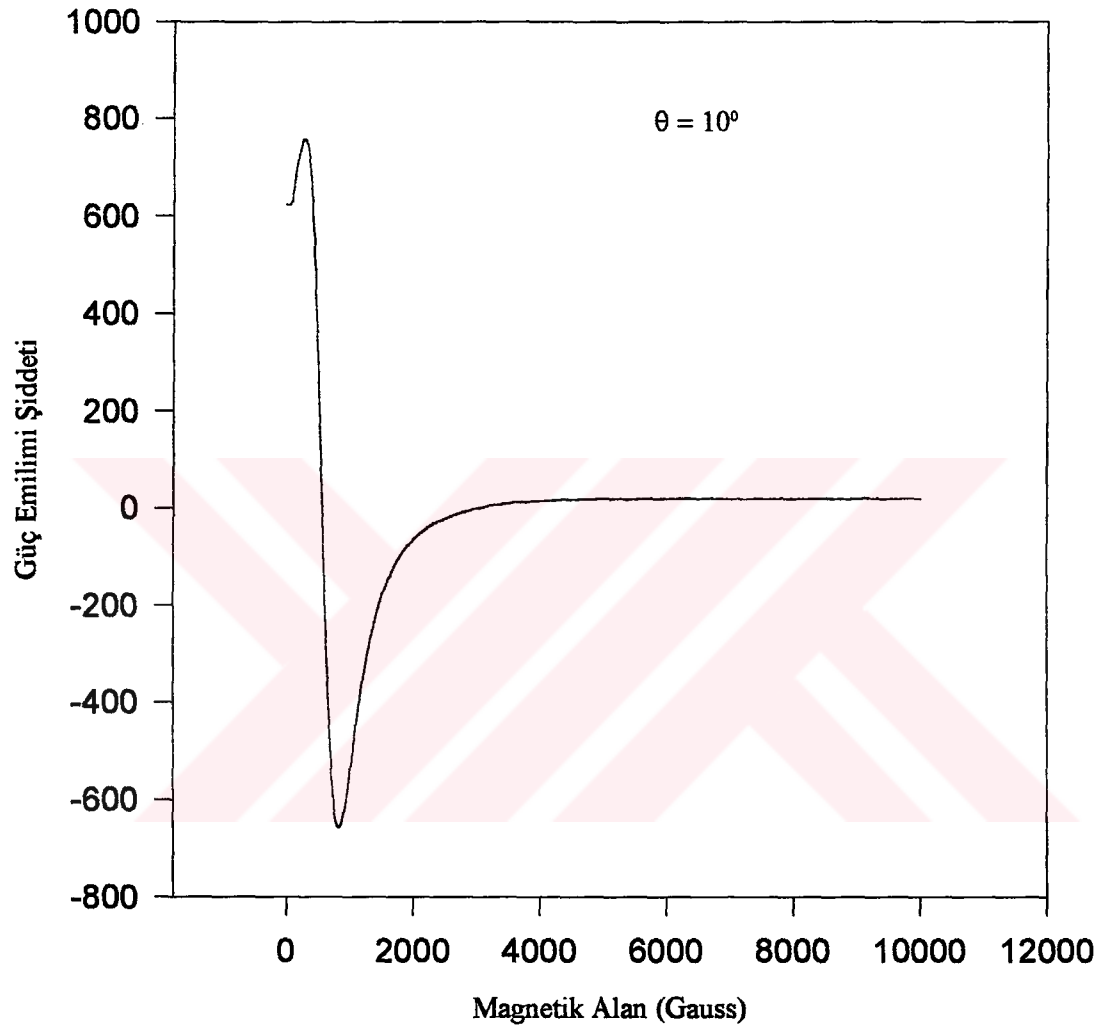
FMR ölçümleri Gebze Yüksek Teknoloji Enstitüsünde bulunan BRUKER X-band spektrometresinde gerçekleştirildi. Bu spektrometrenin mikrodalga frekansı 9.7 GHz' dir. Manyetik alan açısına bağlı spektrumlarını alabilmek için ince film ganyometre üzerine yerleştirildi ve oda sıcaklığında ölçümler alındı. Ölçülen FMR spektrumları Şekil 7.9-25 'de verildi.



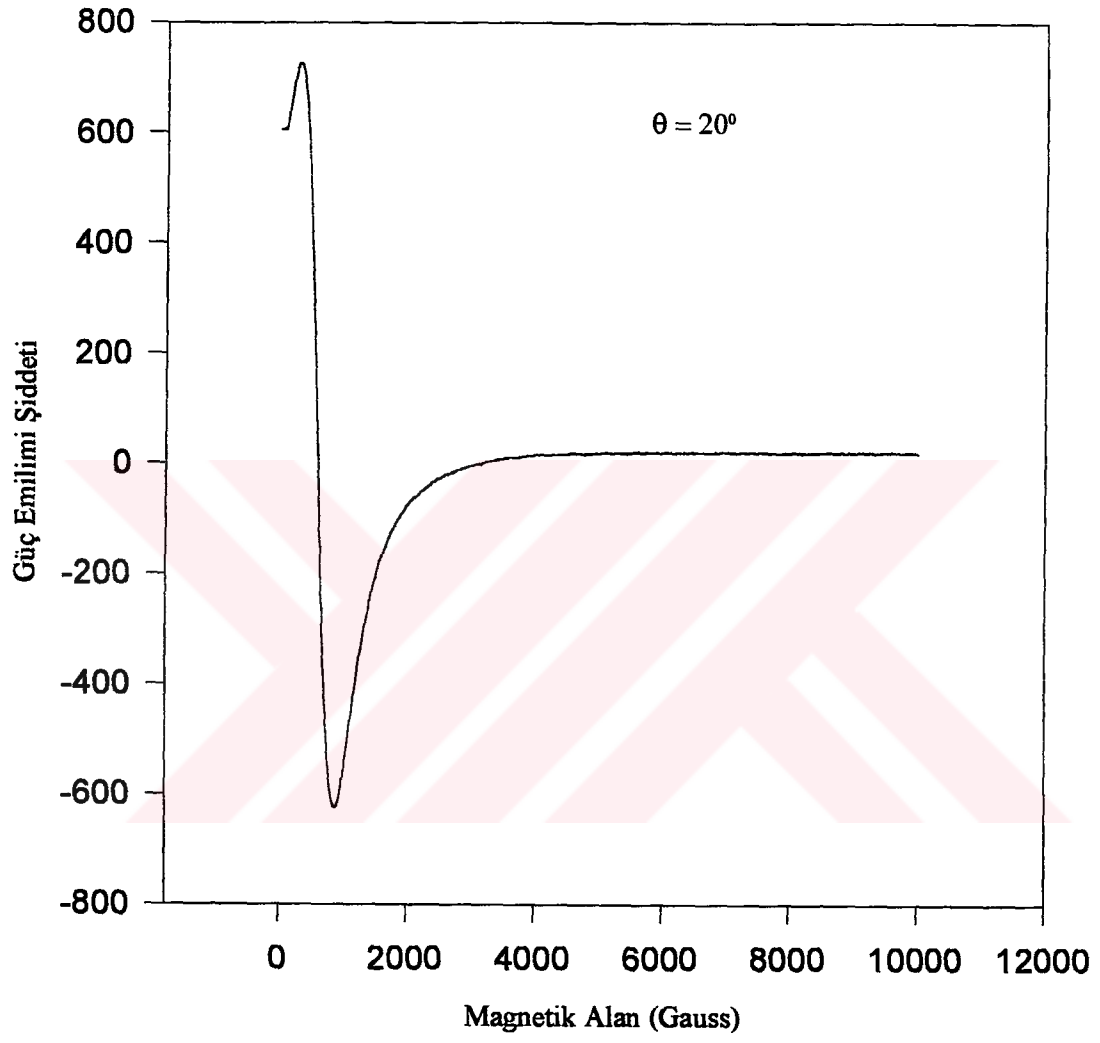
Şekil 7.9. Örnek düzlemi ile manyetik alan arasındaki açının 0° olduğu durumda FMR spektrumu.



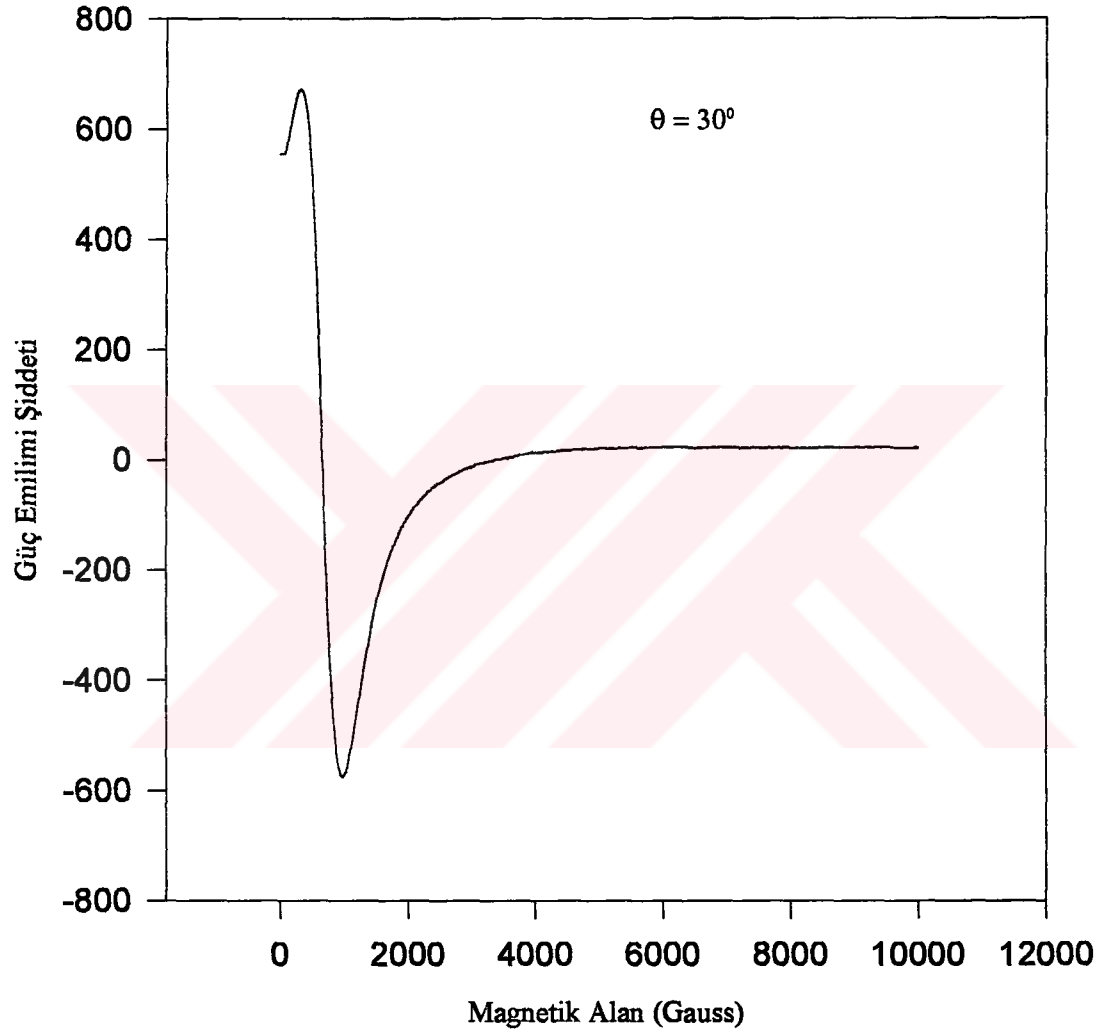
Şekil 7.10. Örnek düzlemi ile manyetik alan arasındaki açının 5° olduğu durumda FMR spektrumu.



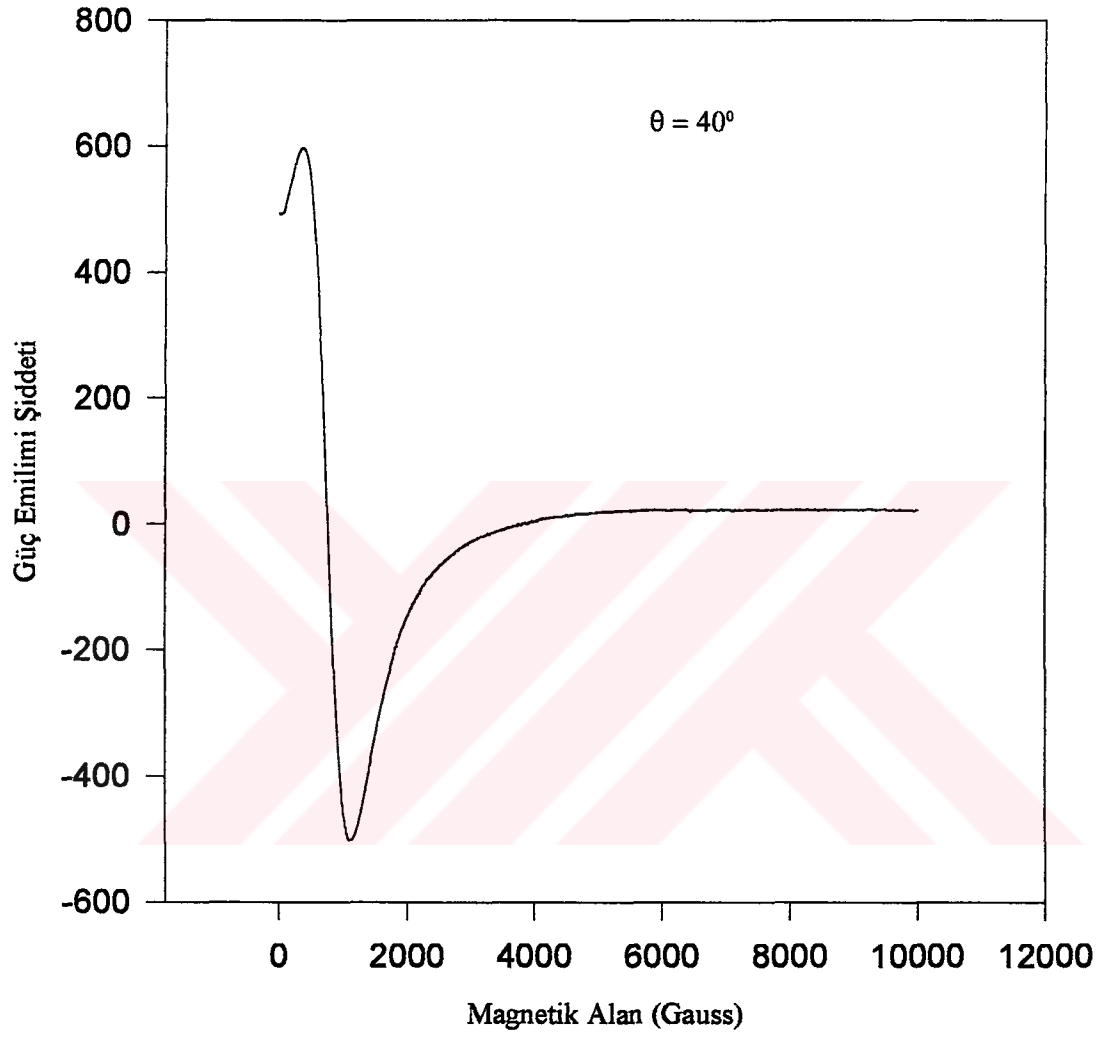
Şekil 7.11. Örnek düzlemi ile manyetik alan arasındaki açının 10° olduğu durumda FMR spektrumu.



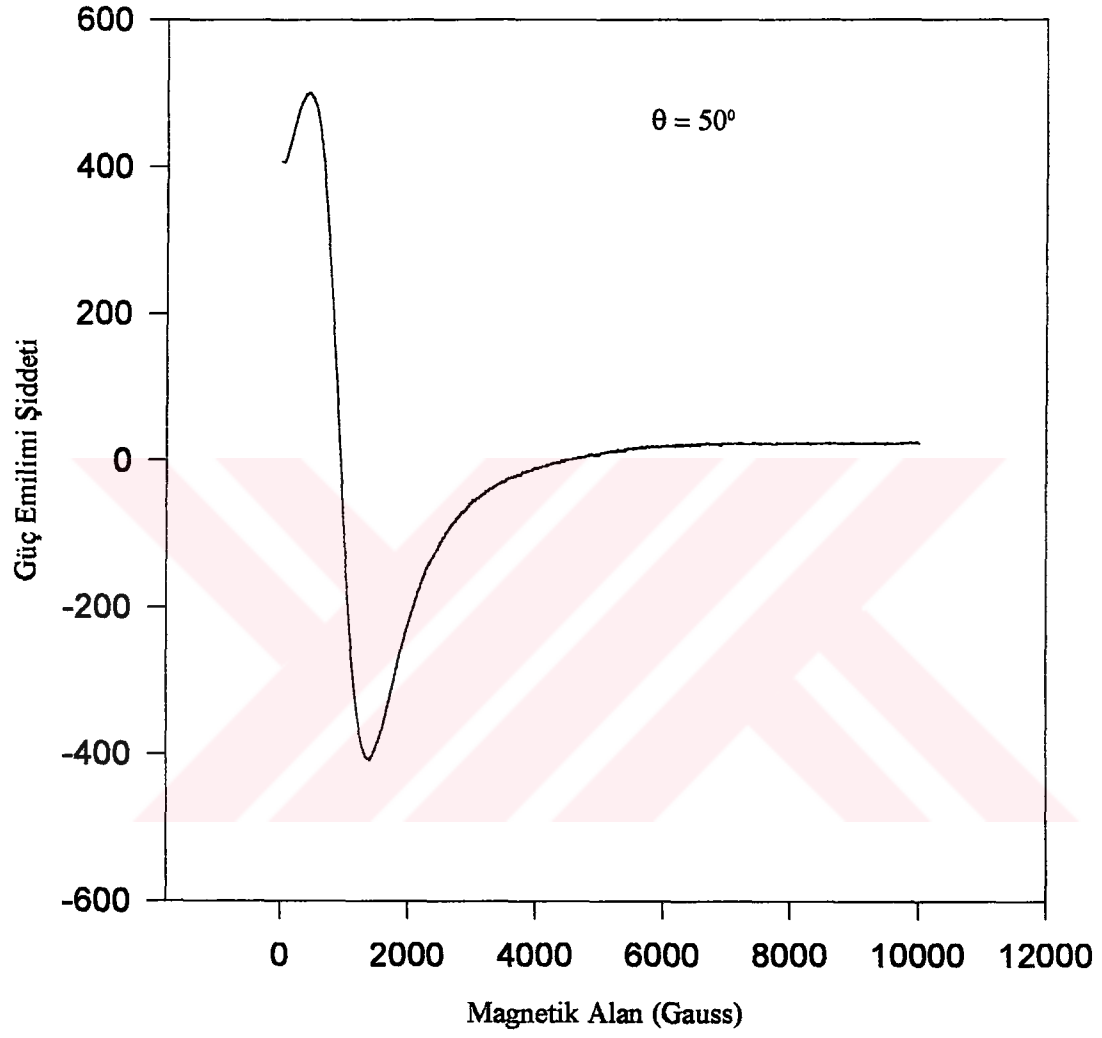
Şekil 7.12. Örnek düzlemi ile manyetik alan arasındaki açının 20° olduğu durumda FMR spektrumu.



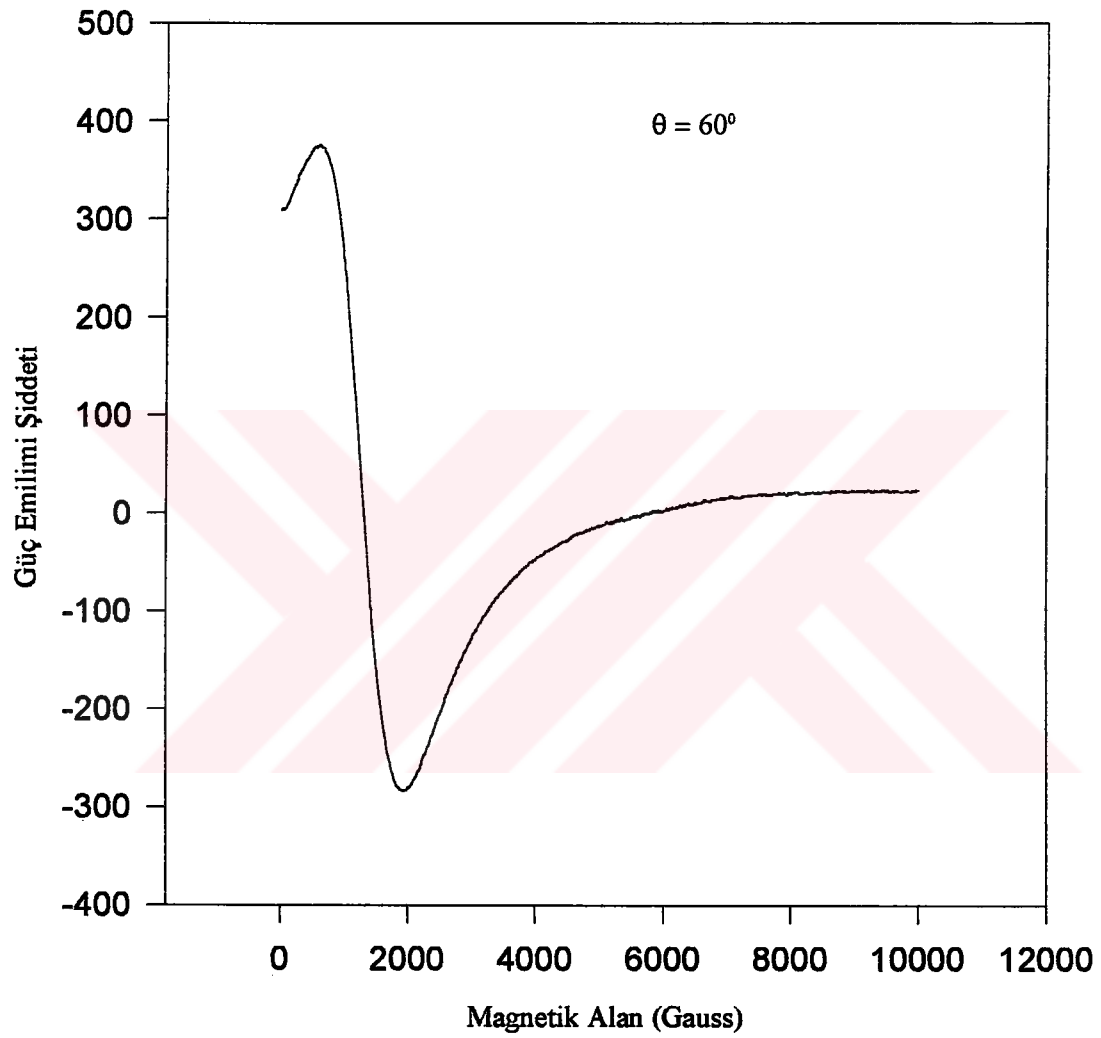
Şekil 7.13. Örnek düzlemi ile manyetik alan arasındaki açının 30° olduğu durumda FMR spektrumu.



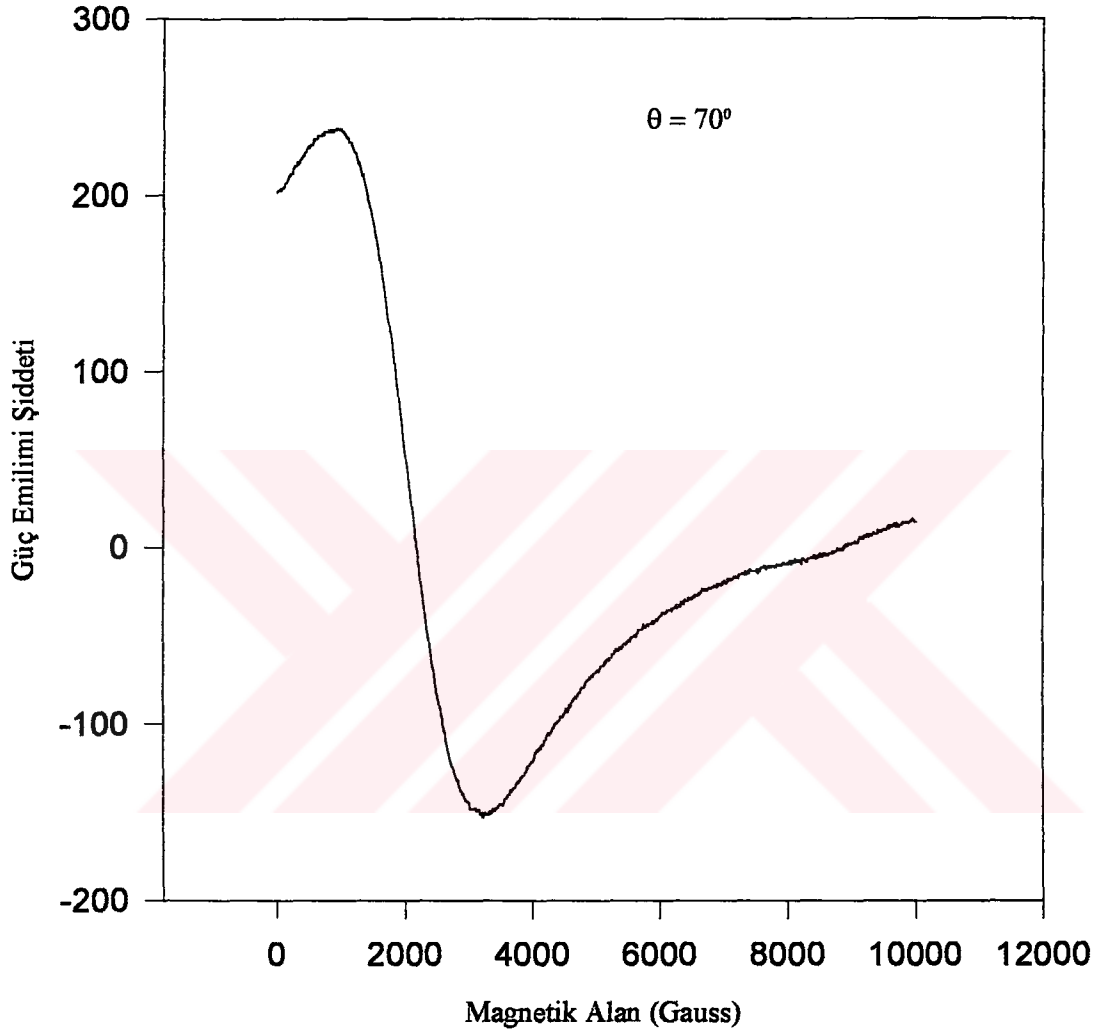
Şekil 7.14. Örnek düzlemi ile manyetik alan arasındaki açının 40° olduğu durumda FMR spektrumu.



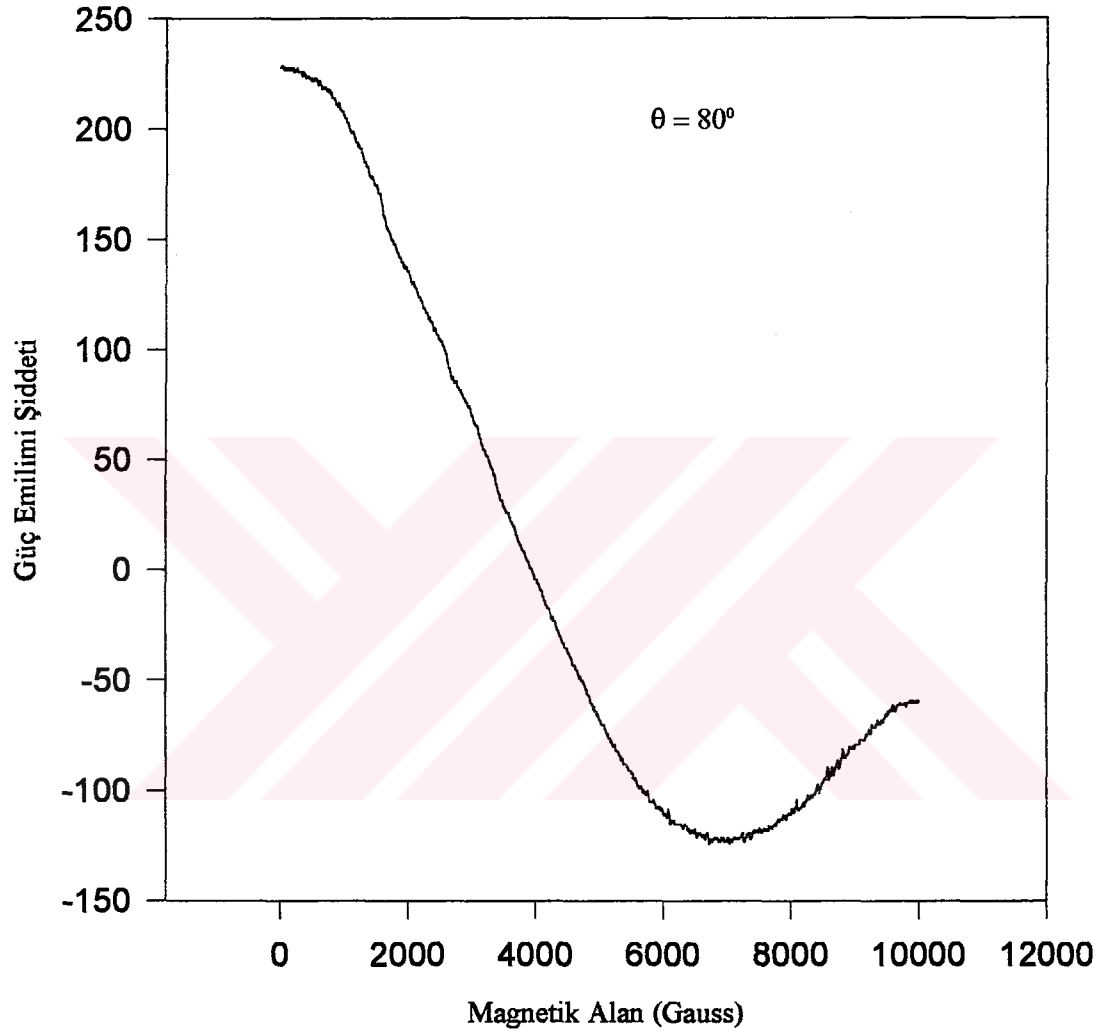
Şekil 7.15. Örnek düzlemi ile manyetik alan arasındaki açının 50° olduğu durumda FMR spektrumu.



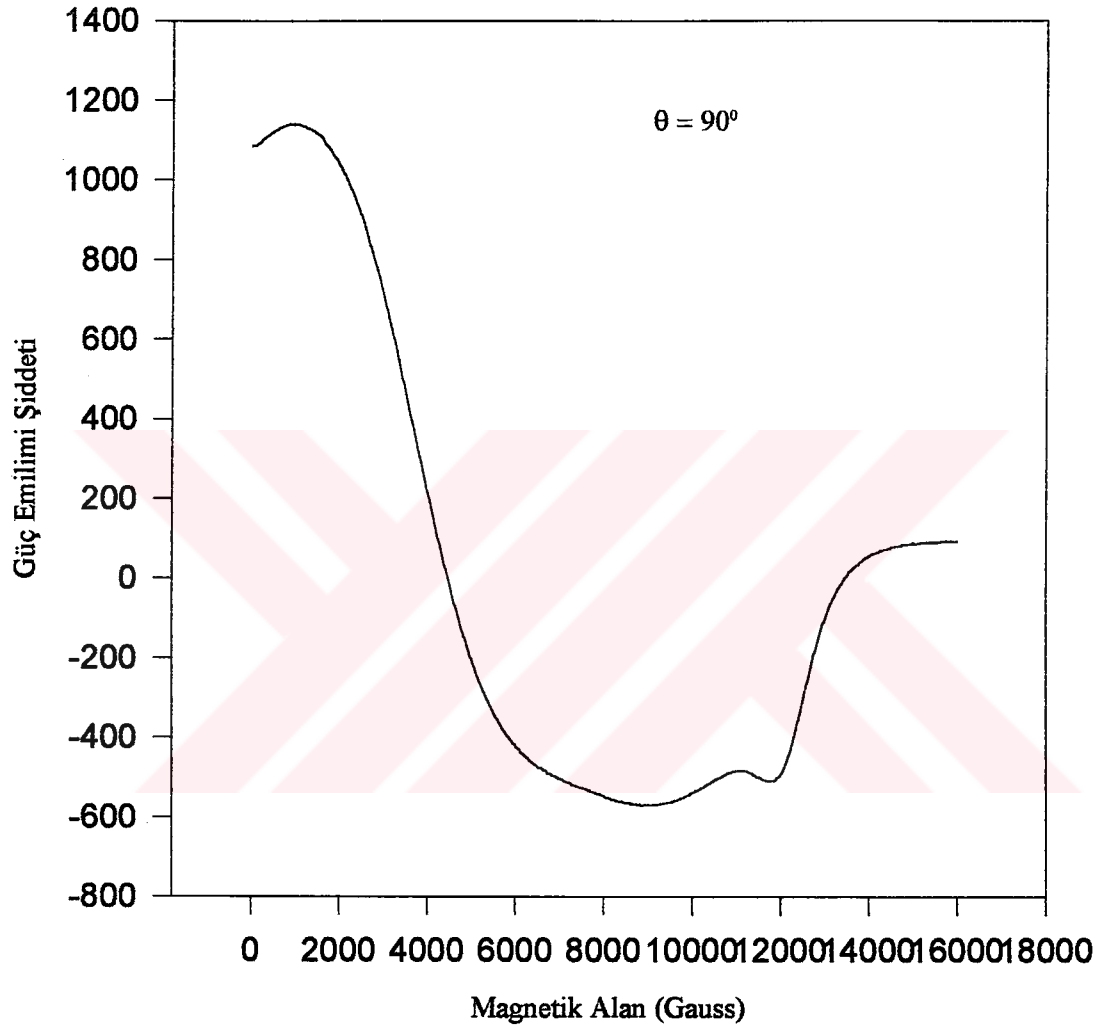
Şekil 7.16. Örnek düzlemi ile manyetik alan arasındaki açının 60° olduğu durumda FMR spektrumu.



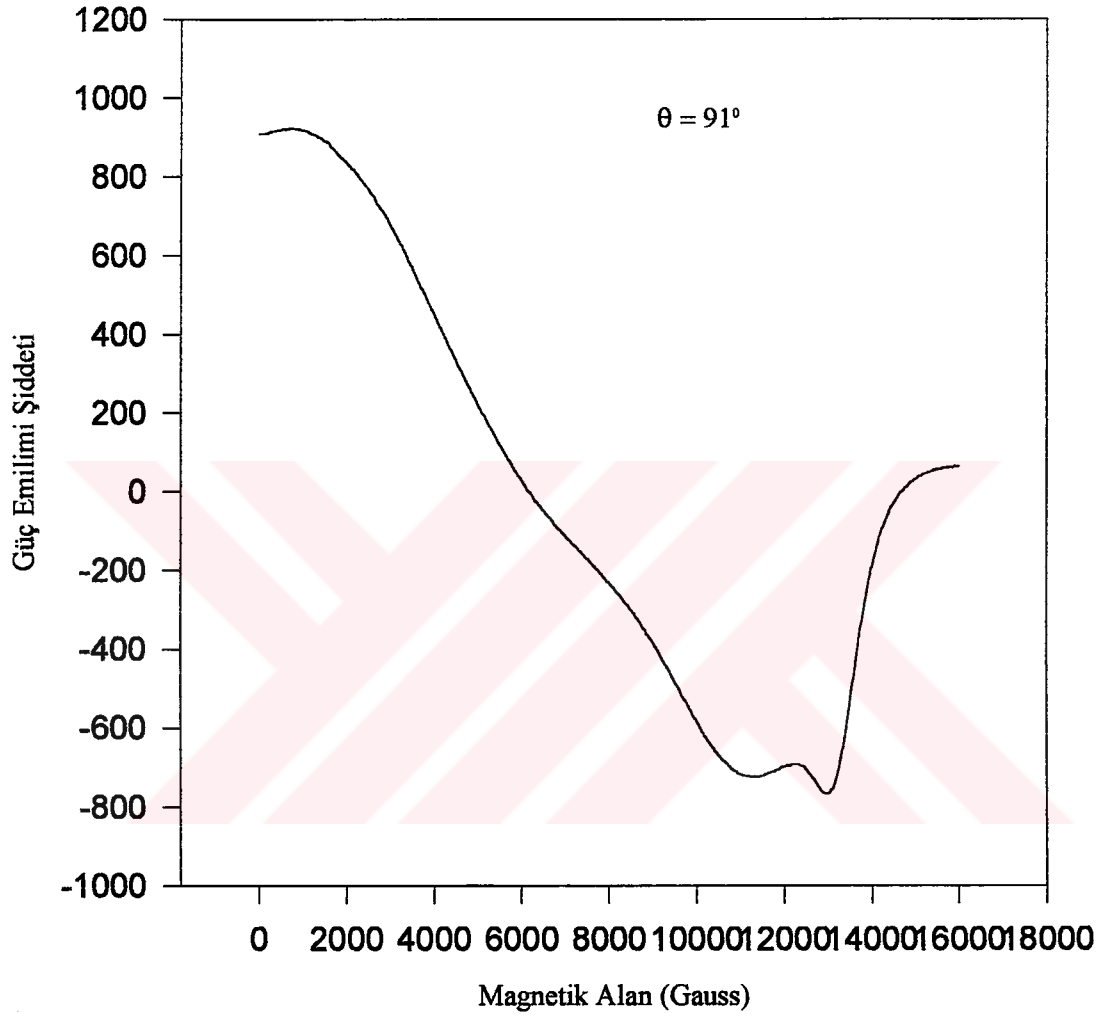
Şekil 7.17. Örnek düzlemi ile manyetik alan arasındaki açının 70° olduğu durumda FMR spektrumu.



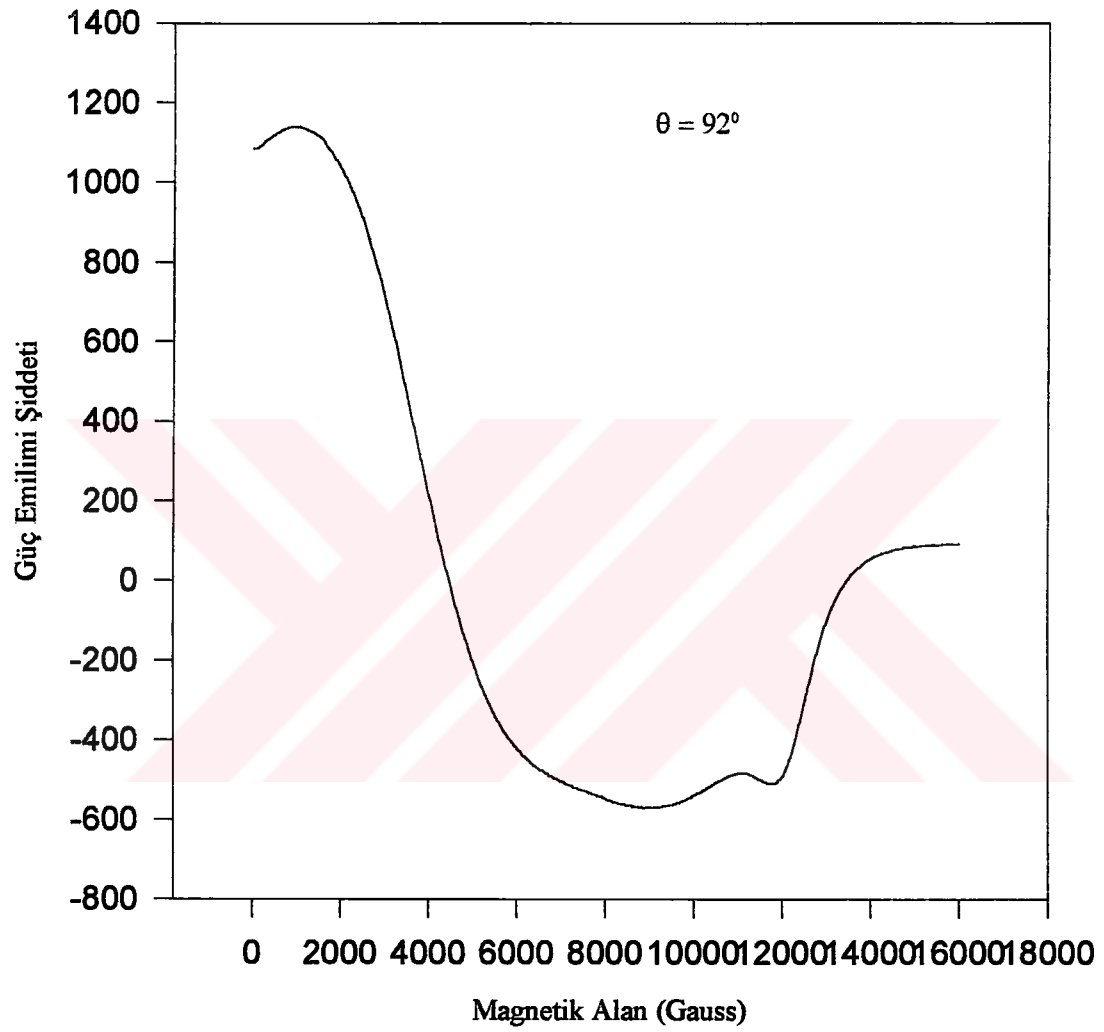
Şekil 7.18. Örnek düzlemi ile manyetik alan arasındaki açının 80° olduğu durumda FMR spektrumu.



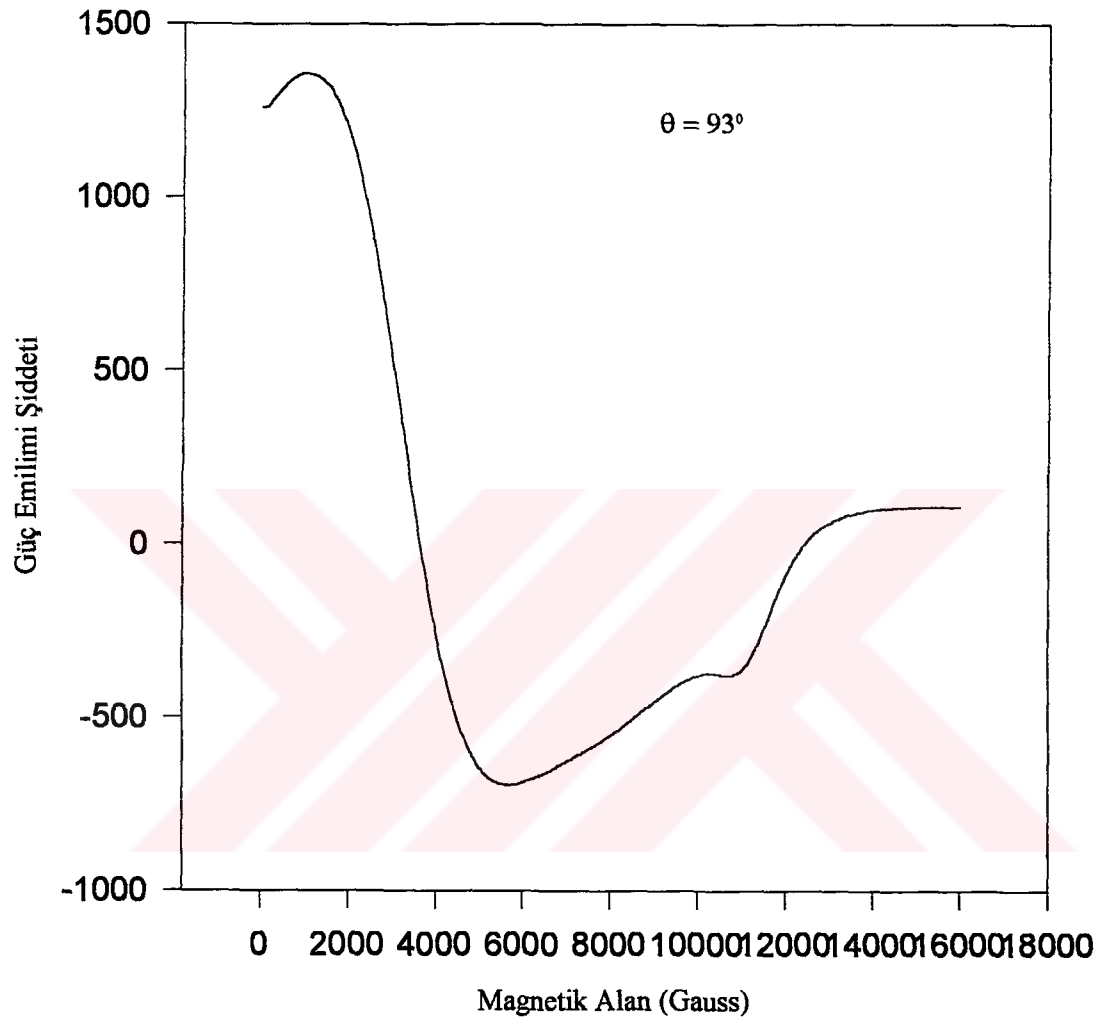
Şekil 7.19. Örnek düzlemi ile manyetik alan arasındaki açının 90° olduğu durumda FMR spektrumu.



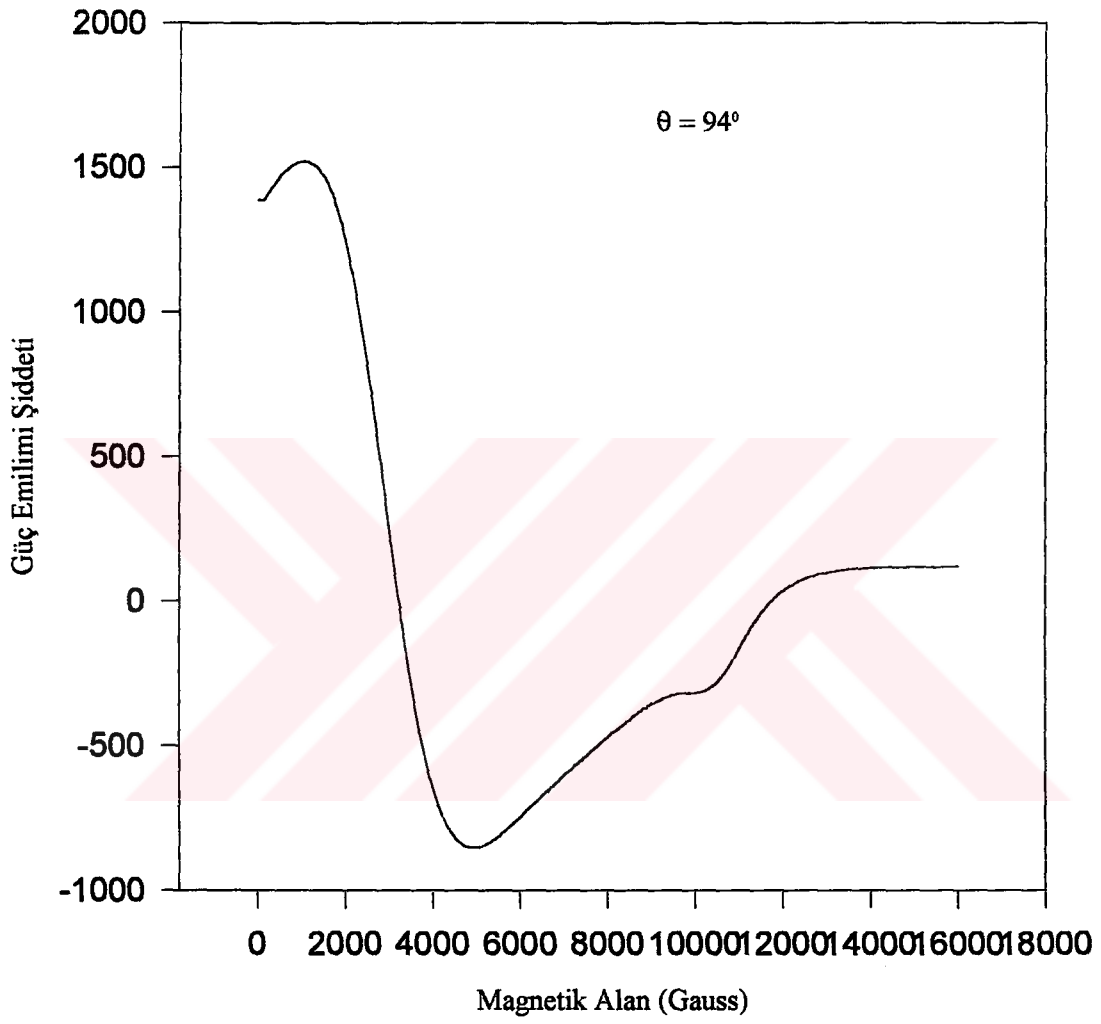
Şekil 7.20. Örnek düzlemi ile manyetik alan arasındaki açının 91° olduğu durumda FMR spektrumu.



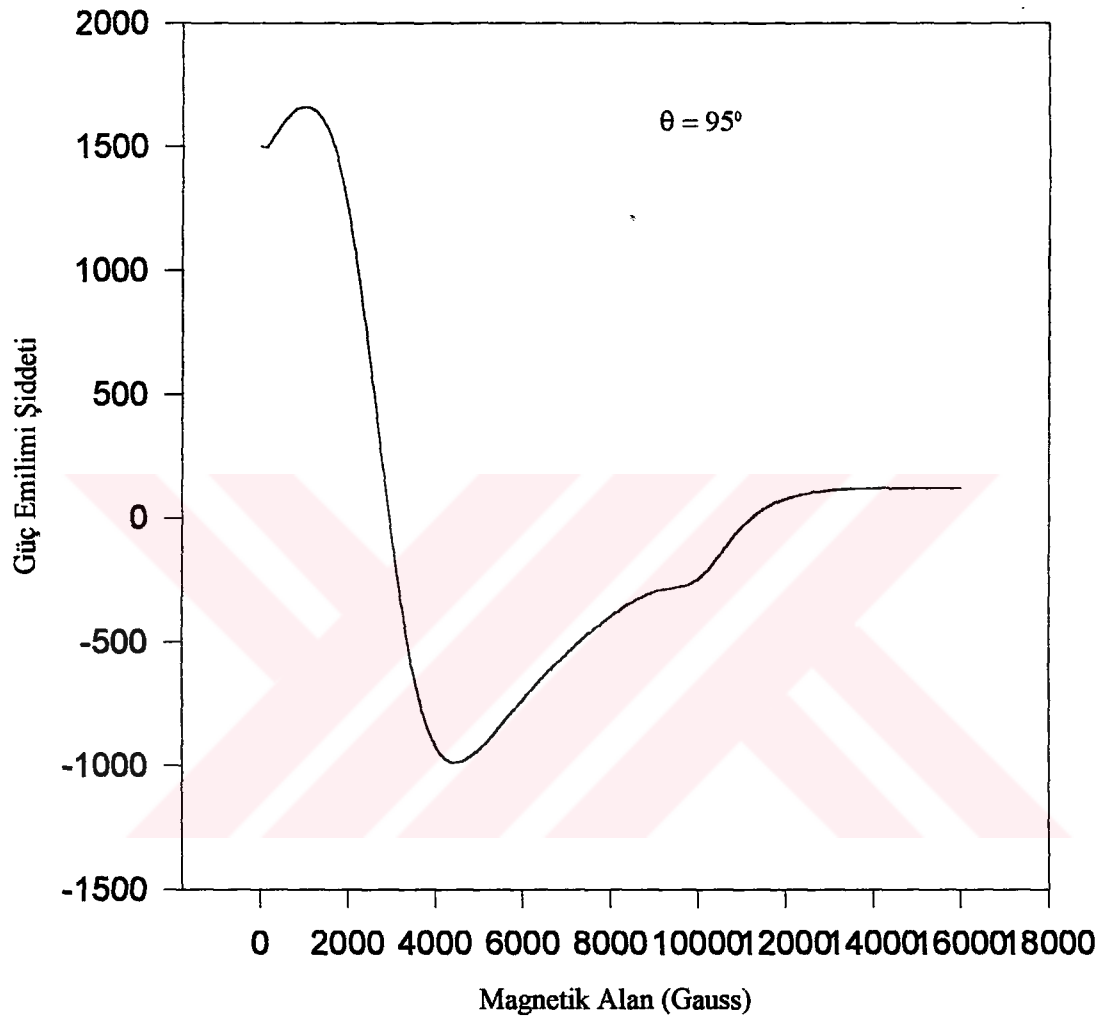
Şekil 7.21. Örnek düzlemi ile manyetik alan arasındaki açının 92° olduğu durumda FMR spektrumu.



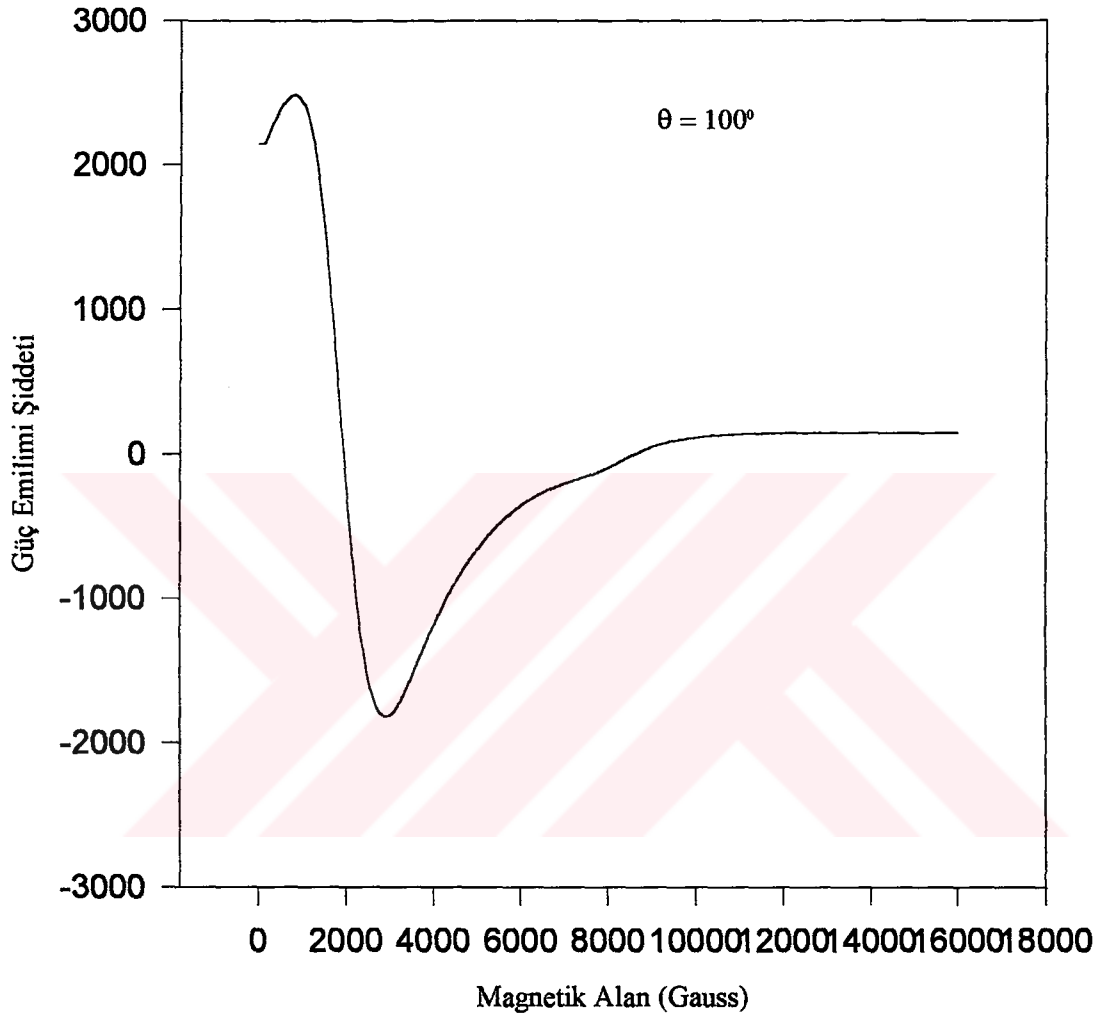
Şekil 7.22. Örnek düzlemi ile manyetik alan arasındaki açının 93° olduğu durumda FMR spektrumu.



Şekil 7.23. Örnek düzlemi ile manyetik alan arasındaki açının 94° olduğu durumda FMR spektrumu.



Şekil 7.24. Örnek düzlemi ile manyetik alan arasındaki açının 95° olduğu durumda FMR spektrumu.



Şekil 7.25. Örnek düzlemi ile manyetik alan arasındaki açının 100° olduğu durumda FMR spektrumu.

8. SONUÇLAR VE TARTIŞMA

İncelenen Fe-bazlı alaşımlar “Binary-Type II” alaşımlardır. Bu alaşımların özelliği, alaşımı oluşturan elementler ile alaşımın kristal yapılarının farklı olmasıdır. Gerek kompleks yapıya sahip olmaları gerekse örgü dinamiği sonuçlarını teorik olarak iyi tanımlayan modellerin geliştirilememesi nedeniyle Fe-Mn, Fe-Ni ve Fe-Pt alaşımlarının hem esneklik özellikleri hem de fonon frekansları teorik olarak incelenmemiştir. Örgü dinamiği incelemeleri için literatürde bilinen kristal modeline göre, alaşımı oluşturan elementlerin kristal yapılarının bilinmesi gerekmektedir. Halbuki Fe-Mn alaşımlarında, oda sıcaklığı için Fe bcc ve Mn kompleks bir yapıya sahip iken Fe-Mn alaşımları fcc yapıya sahiptir. Bu nedenle Fe-Mn alaşımlarının örgü dinamiği teorik olarak hiç çalışılmamıştır. Özellikle bu tür alaşımların teorik olarak incelenebilmesi için son zamanlarda Akgün tarafından bir kristal modeli tanımlanmıştır [3]. Fe-Ni ve Fe-Pt alaşımlarını oluşturan elementlerin kristal yapıları bilinmesine rağmen örgü dinamiği teorik olarak incelenmemiştir. Sebebi ise iyi sonuç vermediği için literatürde bilinen parametrize metoduna bağlanabilir. Literatürde çok rastlanan bu metoda [45,98] göre, alaşımları oluşturan elementlerin esneklik sabitleri ve zon sınırı frekanslarının deneysel değerleri ile toplam bağlanma enerjileri sadece iyon-iyon etkileşmesinden kaynaklanıyormuş gibi kullanılmaktadır. Elektron-iyon-elektron etkileşmelerinden gelen katkıları içermeyen bu parametrize metoduna göre hesaplanan sonuçların çok iyi olması beklenemez. Bu tür hataları da ortadan kaldıran yeni bir parametrize metodu Akgün tarafından tanımlanmış ve sadece fonon frekanslarının hesabına uygulanmıştır [99]. Bu tez çalışmasında, bu metod biraz daha geliştirilerek alaşımların esneklik özelliklerine de uygulanmıştır. Bu yeni parametrize metoduna göre incelenen örneğin denge durumu özellikleri ve toplam bağlanma enerjisi hem iyon-iyon hem de elektron-iyon-elektron etkileşmeleri dikkate alınarak kullanılmaktadır.

Fe-Mn, Fe-Ni ve Fe-Pt alaşımlarının esneklik özelliklerini ve fonon frekanslarını incelerken; yeni parametrize metoduna göre sistemin toplam etkileşme enerjisi, iki-cisim ve üç-cisim etkileşme enerjilerinin toplamı ($\phi = \phi_2 + \phi_3$) olarak tanımlandı. Bu nedenle bu çalışmada ilk defa kullanılan yeni bir MBP geliştirildi. $\text{Fe}_{(1-x)}\text{-Mn}_x$ ($x=0.30, 0.40$) alaşımlarının esneklik özellikleri ve fonon frekansları ile $\text{Fe}_{(1-x)}\text{-Ni}_x$ ($x=0.30$) ve $\text{Fe}_{(1-x)}\text{-Pt}_x$ ($x=0.28$) alaşımlarının esneklik özellikleri; Akgün kristal modeline göre [3] yeni tanımlanan MBP ve parametrize metodu kullanılarak hesaplandı. Şekil 4.1 , Çizelge 4.3-5 , Çizelge 5.3-5 , Çizelge 6.3-5' den görüldüğü gibi hesaplanan teorik sonuçlar deneysel değerler ile çok iyi uyum içindedir. Bu uyum yeni tanımlanan MBP ile parametrize metodunun ve kullanılan kristal modelin [3] çok etkin olduğunu gösterir.

Yeni tanımlanan MBP ile parametrize metodunu test etmek için, $\text{Fe}_{(1-x)}\text{-Ni}_x$ ($x=0.35, 0.76, 0.88$) ve $\text{Fe}_{(1-x)}\text{-Pt}_x$ ($x=0.30$) alaşımlarının fonon frekansları ise literatürde bilinen kristal modeline göre hesaplandı. Şekil 5.1-3 ve Şekil 6.1' den görüldüğü gibi teorik sonuçlar deneysel değerler ile çok tutarlıdır. Bu sonuçlar ise hem MBP' nin hem de parametrize metodunun etkinliğini bir kez daha doğrulamaktadır.

Fe-Mn alaşımları, ϵ -türü martensitik ($\text{fcc} \leftrightarrow \text{hcp}$) dönüşüm göstermeleri ve şekil hatırlama özelliğine sahip olmaları nedeniyle [101,101] araştırmacıların ilgisini çekmektedir. Bu alaşımların hacimli (bulk) numunelerinin kristalografik ve manyetik özellikleri detaylı bir şekilde araştırılırken, ince film özellikleri hiç incelenmemiştir. Bu nedenle $\text{Fe}_{(1-x)}\text{-Mn}_x$ ($x=0.14$) alaşımından ince bir film hazırlanarak; direnç, manyetizasyon ve FMR ölçümleri yapılmıştır. Şekil 7.5' den öz direncin sıcaklık arttıkça yaklaşık eksponensiyel bir artış gösterdiği görülmektedir. Manyetizasyon histerizis

eğrilerinin ise, manyetik alan ince film düzlemi içinde ve film düzlemine dik iken farklılık gösterdiği Şekil 7.6-7' den görülmektedir. Manyetizasyon ölçümlerinde artan manyetik alanla manyetizasyonun net olarak artması örneğin ferromanyetik olduğunu gösterir. İnce film düzlemi ve manyetik alan arasındaki açıya bağlı olarak ölçülen FMR spektrumları ise Şekil 7.9-25' de verildi. $0^0 \leq \theta \leq 60^0$ aralığında önemli bir değişim görülmezken $60^0 < \theta < 100^0$ aralığında dikkate değer farklılıklar vardır. Bu farklılıklar Şekil 7.9-25' den görüldüğü gibi manyetik alan düzleme paralel iken şiddetli ve keskin bir pik, manyetik alan dik pozisyonda iken çizgi genişliği büyük şiddeti düşük pikler şeklindedir.

Sonuç olarak bu tez çalışması; bazı Fe-bazlı Binary-Type II alaşımlarının esneklik özelliklerini ve fonon frekanslarını teorik olarak incelemek için yeni tanımlanan hem MBP' nin hem de parametrize metodunun çok etkin olduğunu, hesaplanan teorik sonuçların literatürde yer alması ile doğrulamaktadır [1,2,102-111]. Ayrıca MBP ve parametrize metodu bazı fcc ve bcc metallere de uygulanarak uygulanabilirliği test edildi [112-114]. Bu sonuçlar, tezi yoğunlaştırmamak için içerikte verilmedi. Fakat bu çalışmada tanımlanan MBP' nin, parametrize metodunun ve kristal modelinin; bütün katıların kristal yapılarına ve bağ özelliklerine bakılmaksızın örgü dinamiğini incelemek için genel bir teori oluşturur diyebilmek için uygulama uygunluğunun daha çok test edilmesi gerekir.

KAYNAKLAR

1. Akgün, İ. and Uğur, G., 1995, **Phys. Rev. B**, 51, 3458.
2. Akgün, İ. and Uğur, G., 1997, **Nuovo Cimento D**, 19, 779.
3. Akgün, İ., 1994, **J. Mater. Sci.Lett.**, 13, 56.
4. Einstein, A., 1907, **Ann. Phys.**, 22, 180.
5. Debye, P., 1912, **Ann. Phys.**, 39, 789.
6. Born, M. and von Karman, Th., 1912, **Phys. Z.**, 13, 297.
7. Born, M. and von Karman, Th., 1913, **ibid.**, 14, 65.
8. Oppenheimer, J.R., Born, M., 1927, **Ann. Phys.**, 84, 457.
9. Weinstock, R., 1944, **Phys. Rev. B.**, 65, 1.
10. Blackman, M., 1935, **Proc. Roy. Soc.**, A148, 365.
11. Fine, P.C., 1939, **Phys. Rev. B.**, 56, 355.
12. Begbie, G.H. and Born, M., 1947, **Proc. R. Soc. London, Ser. A**, 188, 179.
13. Begbie, G.H., 1947, **Proc. R. Soc. London, Ser. A**, 188, 189.
14. de Launay, J., 1953, **J. Chem. Phys.**, 21, 1975.; 1956, **Sol. Stat. Phys.**, 2, 219.
15. Lehman, G.W., Wolfram, T. and Dewames, R.E., 1962, **Phys. Rev.**, 128, 1593.
16. Clark, B.C., Gazis, D.C. and Wallis, R.F., 1964, **Phys. Rev.**, 134, A1486.
17. Bhatia, A.B., 1955, **Phys. Rev.**, 97, 363.
18. Sharma, P.K. and Joshi, S.K., 1963, **J. Chem. Phys.**, 39, 2633.
19. Krebs, K., 1965, **Phys. Rev.**, 138, A143.

20. Varshni, Y.P. and Yuen, P.S., 1968, **Phys. Rev.**, 174, 766.
21. Behari, J. and Triphatti, B.B., 1970, **J. Phys. C**, 3, 659.
22. Shukla, M.M. and Closs, H., 1973, **J. Phys. F**, 3, L83.
23. Ramamurthy, V., 1982, **Phys. Status Solidi (b)**, 112, 463.
24. Bose, G., Gupta, H.C. and Triphatti, B.B., 1972, **J. Phys. F**, 2, 426.
25. Kothari, L.S. and Gupta, H.C., 1972, **J. Phys. C**, 5, 293.
26. Garg, S. and Gupta, H.C., 1986, **Phys. Status Solidi (b)**, 136, 453.
27. Thakur, V.K. and Singh, T.N., 1986, **Phys. Status Solidi (b)**, 135, 67.
28. Thakur, V.K. and Singh, T.N., 1987, **Phys. Status Solidi (b)**, 142, 40.
29. Rathore, R.P.S., 1978, **Acta Phys. Pol. A**, 5, 283.
30. Fielek, B.L., 1978, **J. Phys. F**, 8, 577.
31. Gazis, D.C. and Wallis, R.F., 1966, **Phys. Rev.**, 151, 578.
32. Fuchs, K., 1936, **Proc. Roy. Soc.**, A153, 622.
33. Cheveen, L., 1968, **Phys. Rev.**, 169, 496.
34. Harrison, W.A., 1966, **Pseudopotentials in the Theory of Metals**, Benjamin, New York.
35. Bertoni, C.M., Bisi, O., Calendra, C. and Nizzoli, F., 1975, **J. Phys. F**, 5, 419.
36. Bertoni, C.M., Bortoloni, V., Calendra, C. and Nizzoli, F., 1973, **Phys. Rev. Letters**, 31, 1466.
37. Bertoni, C.M., Bortoloni, V., Calendra, C. and Nizzoli, F., 1974, **J. Phys. F**, 4, 19.
38. Brovman, E.G. and Kagan Y., 1968, **IAEA Sym. On Inelastic Scattering of Neutrons**, Copenhagen, page 203.

39. Schmuck, P. and Quittner, G., 1966, **Phys. Rev. Letters**, 28A, 226.
40. Tersoff, J., 1986, **Phys. Rev. Letters**, 56, 632.
41. Stillinger, F.H. and Weber, T.A., 1985, **Phys. Rev. B**, 31, 5262.
42. Pearson, E., Takat, T., Halicioğlu, T. and Tiller, W.A., 1984, **J. Crystal Growth**, 70, 33.
43. Efthimios, K. and Pandey, K.C., 1988, **Phys. Rev. B**, 38, 12736.
44. Erkoç, Ş., 1989, **Phys. Status Solidi (b)**, 152, 447.
45. Daw, M.S., 1984, **Phys. Rev. B**, 29, 6443.
46. Daw, M.S. and Hatcher, R.D., 1985, **Solid State Commun.**, 56, 697.
47. Johnson, R.A., 1988, **Phys. Rev. B**, 37, 6121.
48. Luo, N., Xu, W. and Shen, S., 1988, **Phys. Status Solidi (b)**, 147, 511.
49. Born, M. and Kun, H., 1954, **Dynamical Theory of Crystal Lattices**, Oxford University, Oxford.
50. Lincoln, R.C., Koliwad, K.M. and Ghate, P.B., 1967, **Phys. Rev.**, 157, 463.
51. Birch, L.F., 1947, **Phys. Rev.**, 71, 809.
52. Endoh, Y. and Noda, Y., 1979, **J. Phys. Soc. Jpn.**, 46, 806.
53. Hausch, G., 1974, **J. Phys. Soc. Japan**, 37, 824.
54. Singh, R.K. and Sanyal, S.P., 1982, **J. Phys. C**, 15, 1765.
55. Milstein, F., 1973, **J. Appl. Phys.**, 44, 3825.
56. Manosa, L1, Saunders, G.A., Rahdi, H., Kawald, U., Pelzl, J. and Bach, H., 1992, **Phys. Rev. B**, 45, 2224.
57. Oomi, G. and Möri, N., 1981, **J. Phys. Soc. Jpn.**, 50, 2917.
58. Hausch, G. and Warlimont, H., 1973, **Acta Met.**, 21, 401.

59. Cankurtaran, M., Saunders, G.A., Ray, P., Wang, Q., Kawald, U., Pelzl, J. and Bach, H., 1993, **Phys. Rev. B**, 47, 3161.
60. Sumiyama, K., Shiga, M., Morioka, M. and Nakamura, Y., 1979, **J. Phys. F**, 9, 1665.
61. Aradhana, K. and Rathore, R.P.S., 1986, **Phys. Stat. Sol. (b)**, 156, 77.
62. Singh, G. and Rathore, R.P.S., 1986, **Indian J. Appl. Phys**, 24, 303.
63. Hultgren, R., Orr, R.L., Anderson, P.D., and Kelley, K.K., 1963, **Selected Values of Thermodynamics Properties of Metals Alloys**, Wiley, New York.
64. Fujimori, H. and Saito, H., 1964, **J. Phys. Soc. Jpn.**, 20, 293.
65. Endoh, Y., Noda, Y. and Iizumi, M., 1981, **J. Phys. Soc. Jpn.**, 50, 469.
66. Milstein, F. and Rasky, D.J., 1985, **Solid State Commun.**, 55, 729.
67. Morse, M.D., 1986, **Chem. Rev.**, 86, 1049.
68. Upadhyaya, J.C., 1977, **J. Phys. F**, 7, 769.
69. Endoh, Y., Noda, Y. and Ishikawa, Y., 1977, **Sol. Stat. Com.**, 23, 951.
70. Alers, G.A., Neighbours, J.R. and Sato, H., 1960, **Phys. Chem. Solids.**, 13, 40.
71. Goldman, A.J. and Robertson, W.D., 1964, **Acta Metallurgica**, 12, 1265.
72. Mohn, P., Schwart, K. and Wagner, D., 1991, **Phys. Rev. B**, 43, 3318.
73. Entel, P., Hoffmann, E., Mohn, P., Schwart, K. and Moruzzi, V.L., 1993, **Phys. Rev. B**, 47, 8706.
74. Podgorny, M., 1990, **Acta Phys. Polon. A**, 78, 941.
75. Sakurai, J., Fuji, M. and Nakamura, Y., 1964, **J. Phys. Soc. Jpn.**, 19, 308.
76. Eeinspruch, N.G. and Clairborne, L.T., 1964, **J. Appl. Phys.**, 35, 175.

77. Shirakawa, Y., Tanji, Y., Moriya, H. and Ogum, G., 1969, **Sci. Rep. RITU**, 29, 617.
78. Salama, K., Alers, G.A., 1968, **J. Appl. Phys.**, 39, 48.
79. Goldman, A.J. and Wagner, C.N.J., 1963, **Acta Metallurgica**, 11, 405.
80. Maliszewski, E. and Bednarski, S., 1997, **Phys. Status Sol. (b)**, 200, 435.
81. Maliszewski, E. and Bednarski, S., 1999, **Phys. Status Sol. (b)**, 211, 621.
82. Hearmon, R.F.S., 1979, in **Elastic, Piezoelectric, Pyroelectric, Piezo-optic, Electro-optic Constants and Nonlinear Dielectric Susceptibilities of Crystals**, edited by K.H. Hellwege, Landolt-Bornstein. New Series, Vol 11, Springer-Verlag, Berlin.
83. Shyam, R., Upadhyaya, S.C. and Upadhyaya, J.C., 1990, **Phys. Status Sol. (b)**, 161, 565.
84. Mishra, M.K., Srivastava, P. and Mishra, S.K., 1992, **Phys. Status Sol. (b)**, 171, K5.
85. Hausch, G., 1974, **J. Phys. Soc. Japan**, 37, 819.
86. Shiga, M., Miyoshi, A. and Nakamura, Y., 1972, **Phys. Status Solidi (b)**, 49, K195.
87. Kataev, G.I. and Sirota, Z.D., 1960, **Soviet Physics-JETP**, 11, 747.
88. Murakami, Y., 1972, **J. Phys. Soc. Japan**, 33, 1350.
89. Zirinsky, S., 1956, **Acta Metallurgica**, 4, 164.
90. Suzuki, T. and Wutting, M., 1972, **Met. Trans.**, 3, 1555.
91. Suzuki, T. and Kojima, K., 1973, **Bull. Jap. Inst. Metals.**, 12, 861.
92. Saunders, G.A., Senin, H.B. and Sidek H.A.A., 1993, **Phys. Rev. B.**, 48, 15801.
93. Tajima, K., Endoh, Y. and Ishikawa, Y., 1976, **Phys. Rev. Letters**, 37, 519.

94. Bertola, L.A. and Shukla, M.M., 1975, **J. Phys. Soc. Japan**, 38, 1439.
95. Birlikseven, C, 1997, **H.Ü. Fen Bilimleri Enstitüsü**, Y. Lisans Tezi, Ankara.
96. Durusoy, H.Z., Birlikseven, C., Topaçlı, C. ve Aktaş, B., 1998, **TBAG 1271**, Çok Katlı İnce Filmlerden Dev-Magnetodirenç ve Magnetik Anisotropi Olaylarının İncelenmesi.
97. Morris, A.H., 1965, **The Physical Principles of Magnetism**, John Wiley & Sons Inc, p680.
98. Girifalco, L.A. and Weizer, V.G., 1959, **Phys. Rev.**, 114, 687.
99. Akgün, İ., 1995, **Can. J. Phys**, 75, 143.
100. Durlu, T.N., 1995, **J. of Mat. Sci.Lett.**, 14, 1604.
101. Navruz, N. and Durlu, T.N., 1995, **Zeitschrift fur Metalkunde**, 86, 746.
102. Akgün, İ. and Uğur, G., 1998, **Nuovo Cimento D**, 20, 1549.
103. Uğur, G., Akgün, İ. and Uğur, Ş., 1999, **Physica Scripta**, (in press).
104. Akgün, İ. and Uğur, G., 1999, **Acta Physica Polonica A**, (in press).
105. Akgün, İ. and Uğur, G., 1999, **Journal of Materials Science Letters**, (incelemede).
106. Akgün, İ. and Uğur, G., 1997, **Yoğun Madde Fiziği Seminerleri VI**, 28 Kasım 1997, Ankara.
107. Akgün, İ., Uğur, G. and Uğur, Ş. 1997, **3. General Conference of the Balkan Physical Union**, 2-5 September 1997, Napoca, Romania.
108. Uğur, G., Akgün, İ. and Ocak H.Y., 1999, **II. International Symposium Mathematical & Computational Applications**, 1-3 September 1999, Baku Azerbaijan.
109. Uğur, G., Akgün, İ. and Ocak, H.Y., 1999, **Türk Fizik Derneği 18. Fizik Kongresi**, 25-28 Ekim 1999, Adana.

110. Uğur, G., Akgün, İ. and Uğur, Ş., 1998, **Türk Fizik Derneği 17. Fizik Kongresi**, 27-31 Ekim 1998, Alanya.
111. Uğur, G., Akgün, İ., Birlikseven, C., Durusoy, H.Z. and Bek, A., 1998, **II. Ulusal Atom ve Molekül Fiziği Sempozyumu**, 9-11 Eylül 1998, Ankara.
112. Akgün, İ., Uğur, G., Günen, A. and Çivi, M., 1997, **Nuovo Cimento D**, 19, 787.
113. Uğur, G., Akgün, İ. and Ocak H.Y., 1998, **Yoğun Madde Fiziği Seminerleri VII**, 30 Kasım 1998, Ankara.
114. Uğur, G., Akgün, İ. and Ocak H.Y., 1999, **Journal Institute of Science and Technology Gazi University**, (in press).



**Y.C. YÜKSEKÖĞRETİM KURULU
DOKÜMANTASYON MERKEZİ**

ÖZGEÇMİŞ

1966 yılında Isparta'da doğdu. İlk ve orta öğrenimini Isparta'da tamamladı. 1988 yılında Ankara Üniversitesi Fen Fakültesi Fizik Mühendisliği Bölümünden mezun oldu. 1989 yılında askerlik, 1991-1993 yıllarında Milli Eğitim Bakanlığına bağlı değişik okullarda öğretmenlik yaptı. 1993 yılında Gazi Üniversitesi Fen-Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümünde araştırma görevlisi olarak başladığı görevine halen devam etmektedir. 1994 yılında Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Anabilim Dalında Yüksek Lisans programını bitirdi ve 1995 yılında aynı enstitüde Doktora programına girdi. Evli ve iki çocuk babasıdır.