

T.C.
TRAKYA ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

136506

SIVI GEÇİŞ METAL VE METAL ALAŞIMLARININ
ATOMLAR-ARASI ÇOK CISİMLİ UZUN MENZİLLİ GÖMÜLÜ
ATOM POTANSİYELLERİ VE YAPISAL ÖZELLİKLERİ

Elif BAĞMEN

T.C. YÜKSEKÖĞRETİM KURULU
DOKUMANTASYON MERKEZİ

YÜKSEK LİSANS TEZİ
FİZİK ANABİLİM DALI

Tez Yöneticisi : Prof. Dr. Serap DALGIC

EDİRNE – 2003



**SIVI GEÇİŞ METAL VE METAL
ALAŞIMLARININ ATOMLAR-ARASI
ÇOK CISİMLİ
UZUN MENZİLLİ GÖMÜLÜ ATOM
POTANSİYELLERİ VE
YAPISAL ÖZELLİKLERİ**

ELİF BAĞMEN

YÜKSEK LİSANS TEZİ

FİZİK ANABİLİM DALI

Tez Yöneticisi: Prof. Dr. Serap DALGIÇ

EDİRNE - 2003

T.C.
TRAKYA ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

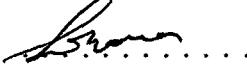
SIVI GEÇİŞ METAL VE METAL ALAŞIMLARININ
ATOMLAR-ARASI ÇOK CISİMLİ UZUN MENZİLLİ
GÖMÜLÜ ATOM POTANSİYELLERİ VE YAPISAL ÖZELLİKLERİ

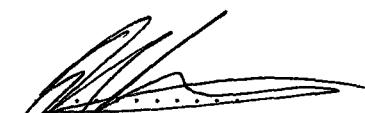
Elif BAĞMEN

YÜKSEK LİSANS TEZİ
FİZİK ANABİLİM DALI

Bu tez . 26./.09./ 2003. . tarihinde aşağıdaki jüri tarafından kabul edilmiştir.


Prof. Dr. Serap DALGIÇ
Tez Yöneticisi


Prof. Dr. S. Askeri BARAN
Üye


Yrd. Doc. Dr. Ercan BULUŞ
Üye

ÖZET

Bu çalışmada, sıvı geçiş metal ve metal alaşımlarındaki atomlar arası etkileşmeler çok cısimli uzun menzilli Finnis-Sinclair tipi gömülü atom potansiyelleri olan Sutton-Chen potansiyelleri kullanılarak elde edilmektedir. Metalik materyallerin atomik yapılarının anlaşılması ve metalik atom gruplarının bilgisayar benzetişim çalışmalarında yaygın olarak kullanılan; henüz sıvı metalik sistemlere uygulanmamış olan çok cısimli Sutton-Chen (SC) tipi empirik potansiyeller sıvı metaller için sıvı sistemlerinin deneysel verileri kullanarak parametrize edilmiştir. Farklı parametrizasyon yöntemleri ile elde edilen çiftler potansiyelleri Varyasyonel düzenlenmiş hypernetted chain (VMHNC) sıvı yapı teorisi kullanılarak sistemlerin statik yapı faktörleri ve çiftler dağılım fonksiyonlarının hesaplanması ile test edilmiştir.

Ayrıca SC potansiyelleri sıvı metal alaşım sistemlerine genişletilmiş ve metal alaşım sistemleri için yeni bir SC potansiyelleri formu verilerek alaşım sistemlerinin kısmi yapı faktörleri ve karma entalpileri hesaplanarak deneysel sonuçlar ve literatürde verilen diğer teorik sonuçlar ile karşılaştırılmıştır.

SUMMARY

In this study, interatomic interactions are calculated by using Sutton-Chen (S-C) potentials in which are long-range N-body Finnis-Sinclair type embedded atom potentials. Many body SC type empirical potentials which are commonly used for understanding the atomic structures of metallic materials and computer simulation process of metallic atom clusters that are not applied to liquid metallic systems yet, are parametrized by using the experimental value of liquid systems for the liquid metals. The pair potentials obtained by different parametrization method are tested by calculating static structure factors and pair distribution functions of the systems with the Variational Modified Hypernetted Chain (VMHNC) liquid structure theory.

Furthermore, SC potentials are extended to liquid metal alloys and the partial structure factors and enthalpy of mixing of alloys have been calculated by a new proposed form of SC potentials for these systems and calculated results are compared with experimental and other theoretic results given in literature.

TEŞEKKÜR

Bana bu çalışma ortamını sağlayan, danışmanlığını üstlenen ve çalışmamın her adımda bilgilerinden yararlandığım sayın hocam Prof. Dr. Serap DALGIÇ' a teşekkürlerimi sunarım.

Çalışmanın yapıldığı T.Ü. Fen-Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümü Başkanı Prof. Dr. S. Askeri BARAN'a, yardımlarından dolayı Yrd. Doç. Dr M. Akif SABANER, dostlarım Sedat ŞENGÜL, Ünal DÖMEKELİ, Murat ÇELTEK ,Selim KARA, Ayşegül ÜNAL ve Hakan Yılmaz KEFKİR'e teşekkürler ederim.

Son olarak bu çalışma boyunca desteklerini hiç esirgemeyen aileme sonsuz teşekkür ederim.

İÇİNDEKİLER

ÖZET.....	i
SUMMARY.....	ii
TEŞEKKÜR.....	iii
TABLOLARIN LİSTESİ.....	vi
ŞEKİLLERİN LİSTESİ.....	vi
1 GİRİŞ.....	1
2 TEK BİLEŞENLİ SİSTEMLER İÇİN ÇOK CISİMLİ UZUN MENZİLLİ GÖMÜLÜ ATOM METODU (GAM) POTANSİYELLERİ.....	5
2.1 Basit Ampirik Çok Cisimli Finnis-Sinclair Potansiyelleri.....	5
2.2 Uzun menzilli Finnis-Sinclair tipi Sutton-Chen Potansiyelleri.....	9
2.3 Sutton-Chen Potansiyelleri için Yeni bir form: Feraoun ve Esling SC Formu.....	16
2.4 Sıvı geçiş metalleri için önerilen Sutton-Chen Potansiyeli.....	17
2.4.1 Sıvı geçiş metalleri için SC potansiyellerinin parametrizasyon Metodları.....	17
2.4.2 Sıvı geçiş metalleri için etkin çiftler potansiyeli.....	18
2.4.2.1 Koordinasyon sayısına göre.....	18
2.4.2.2 Kesme mesafesine göre.....	20
3 FCC METALİK ALAŞIMLARI İÇİN UZUN MENZİLLİ FINNİS-SİNCLAİR TİPİ SUTTON-CHEN POTANSİYELLERİ.....	21
3.1 Raffi-Tabbar-Sutton Formu.....	21
3.2 Feraoun ve Esling Formu.....	24
3.3 Sıvı fcc Metal alaşımıları için önerilen Sutton-Chen Potansiyel Modeli.....	27

4	SIVI METAL VE METAL ALAŞIMLARIN YAPISI VE TERMODİNAMİK BÜYÜKLÜKLERİ.....	30
4.1	Sıvı Metal ve Metal Alaşımının Yapısı.....	30
4.1.1	Sıvı Metaller için Yapı Faktörleri.....	30
4.1.2	İkili Sıvı Metal Alaşımı için Kısmi Yapı Faktörleri.....	32
4.1.3	Sıvı Yapı Teorileri: VMHNC İntegral Denklem Yaklaşımı.....	34
4.2	Termodinamik Büyüklükler.....	36
4.2.1	İç enerji.....	36
4.2.2	Karışma entalpisi.....	37
5	SONUÇLAR VE TARTIŞMA.....	39
5.1	Sıvı Metaller	39
5.1.1	Atomlararası SC etkin çiftler potansiyelleri.....	41
5.1.2	Sıvı fcc geçiş metallerinin yapısal özellikleri.....	56
5.1.3	Sıvı fcc geçiş metallerinin termodinamik özellikleri.....	99
5.2.	Sıvı Metal Alaşımları.....	101
5.2.1	Cu-Ni.....	101
5.2.2	Ni-Al.....	106
5.2.3	Cu-Ag.....	116
5.2.4	Sıvı Alaşımında Kısmi Yapı Faktörlerinin Uzun Dalga Boyu Limitleri.....	122
5.2.5	Sıvı alaşımalar için entalpi.....	123
5.3.	Sonuç.....	124
	KAYNAKLAR.....	126
	ÖZGEÇMİŞ	

TABLOLARIN LİSTESİ

Tablo 1: Sıvı geçiş metallerinin ergime noktaları civarındaki termodinamik durum parametreleri.....	39
Tablo 2: Bazı sıvı geçiş metalleri için Sutton-Chen parametreleri	40
Tablo 3: 140 atom için hesaplanan potansiyel parametrelerinin S-C parametreleri ile karşılaştırılması	41
Tablo 4: 180 atom için hesaplanan potansiyel parametrelerinin S-C parametreleri ile karşılaştırılması.....	46
Tablo 5: $r_{\text{son}}=2a^f$ kesme mesafesine göre hesaplanan potansiyel parametrelerinin S-C parametreleri ile karşılaştırılması	50
Tablo 6: $r_{\text{son}}=r_{\text{BS}}$ kesme mesafesine göre hesaplanan potansiyel parametrelerinin S-C parametreleri ile karşılaştırılması	53
Tablo 7: Sıvı fcc metallerinin SC potansiyellerinin VMHNC ile hesaplanan uzun dalga boyu limitleri.....	98
Tablo 8: Ni,Cu,Pd,Ag,Pt ve Au metalleri için hesaplanan iç enerjiler.....	99
Tablo 9: Sıvı $\text{Cu}_{25}\text{Ni}_{75}$ alaşımı için potansiyel parametreleri.....	101
Tablo 10: Sıvı $\text{Ni}_{20}\text{Al}_{80}$ alaşımı için potansiyel parametreleri.....	107
Tablo 11: Sıvı $\text{Ni}_{80}\text{Al}_{20}$ alaşımı için potansiyel parametreleri.....	107
Tablo 12: Sıvı $\text{Cu}_{50}\text{Ag}_{50}$ alaşımı için potansiyel parametreleri.....	116
Tablo 13: Alaşımaların konsantrasyonlarına göre uzun dalga boyundaki $S_{\text{CC}}(0)$ Değerleri.....	122
Tablo 14: Sıvı $\text{Cu}_{25}\text{Ni}_{75}$, $\text{Ni}_{20}\text{Al}_{80}$, $\text{Ni}_{80}\text{Al}_{20}$ ve $\text{Cu}_{50}\text{Ag}_{50}$ alaşımaları için hesaplanan entalpi.....	123

ŞEKİLLERİN LİSTESİ

Şekil 2.1: $g(r)$ çiftler dağılım fonksiyonunun şematik gösterimi.....	17
Şekil 2.2: Koordinasyon sayısının elde edilmesinde kullanılan Radyal Dağılım Fonksiyonunun (RDF) şematik gösterimi (1. Yöntem).....	18

Şekil 2.3: Koordinasyon sayısının elde edilmesinde kullanılan Radyal Dağılım

Fonksiyonunun (RDF) şematik gösterimi (2. Yöntem)	19
Şekil 5.1: 140 atom için Ni,Pd,Pt metallerinin etkin çiftler potansiyeller.....	43
Şekil 5.2: 140 atom için Cu,Ag,Au metallerinin etkin çiftler potansiyelleri.....	44
Şekil 5.3: 140 atom için Al,Pb metallerinin etkin çiftler potansiyelleri.....	45
Şekil 5.4: 180 atom için Ni,Pd,Pt metallerinin etkin çiftler potansiyelleri.....	47
Şekil 5.5: 180 atom için Cu,Ag,Au metallerinin etkin çiftler potansiyelleri.....	48
Şekil 5.6: 180 atom için Al,Pb metallerinin etkin çiftler potansiyelleri.....	49
Şekil 5.7: $r_{son}=2a^f$ mesafesi için Ni,Pd,Pt metallerinin etkin çiftler potansiyelleri.....	51
Şekil 5.8: $r_{son}=2a^f$ mesafesi için Cu,Ag,Au metallerinin etkin çiftler potansiyelleri.....	52
Şekil 5.9: $r_{son}=r_{BS}$ mesafesi için Ni,Pd,Pt metallerinin etkin çiftler potansiyelleri.....	54
Şekil 5.10: $r_{son}=r_{BS}$ mesafesi için Cu,Ag,Au metallerinin etkin çiftler potansiyeller....	55
Şekil 5.11: Ni için 140 ve 180 atom sayısında hesaplanan S(q) statik yapı faktörlerinin deneysel değer ile karşılaştırılması.....	58
Şekil 5.12: Pd için 140 ve 180 atom sayısında hesaplanan S(q) statik yapı faktörlerinin deneysel değer ile karşılaştırılması.....	59
Şekil 5.13: Pt için 140 ve 180 atom sayısında hesaplanan S(q) statik yapı faktörlerinin deneysel değer ile karşılaştırılması.....	60
Şekil 5.14: Cu için 140 ve 180 atom sayısında hesaplanan S(q) statik yapı faktörlerinin deneysel değer ile karşılaştırılması.....	61
Şekil 5.15: Ag için 140 ve 180 atom sayısında hesaplanan S(q) statik yapı faktörlerinin deneysel değer ile karşılaştırılması.....	62
Şekil 5.16: Au için 140 ve 180 atom sayısında hesaplanan S(q) statik yapı faktörlerinin deneysel değer ile karşılaştırılması.....	63
Şekil 5.17: Al için 140 ve 180 atom sayısında hesaplanan S(q) statik yapı faktörlerinin deneysel değer ile karşılaştırılması.....	64
Şekil 5.18: Pb için 140 ve 180 atom sayısında hesaplanan S(q) statik yapı faktörlerinin deneysel değer ile karşılaştırılması.....	65
Şekil 5.19: Ni için 140 ve 180 atom sayısında hesaplanan g(r) çiftler dağılım fonksiyonlarının deneysel değer ile karşılaştırılması.....	66

Şekil 5.20: Pd için 140 ve 180 atom sayısında hesaplanan $g(r)$ çiftler dağılım fonksiyonlarının deneysel değer ile karşılaştırılması.....	67
Şekil 5.21: Pt için 140 ve 180 atom sayısında hesaplanan $g(r)$ çiftler dağılım fonksiyonlarının deneysel değer ile karşılaştırılması.....	68
Şekil 5.22: Cu için 140 ve 180 atom sayısında hesaplanan $g(r)$ çiftler dağılım fonksiyonlarının deneysel değer ile karşılaştırılması.....	69
Şekil 5.23: Ag için 140 ve 180 atom sayısında hesaplanan $g(r)$ çiftler dağılım fonksiyonlarının deneysel değer ile karşılaştırılması.....	70
Şekil 5.24: Au için 140 ve 180 atom sayısında hesaplanan $g(r)$ çiftler dağılım fonksiyonlarının deneysel değer ile karşılaştırılması.....	71
Şekil 5.25: Al için 140 ve 180 atom sayısında hesaplanan $g(r)$ çiftler dağılım fonksiyonlarının deneysel değer ile karşılaştırılması.....	72
Şekil 5.26: Pb için 140 ve 180 atom sayısında hesaplanan $g(r)$ çiftler dağılım fonksiyonlarının deneysel değer ile karşılaştırılması.....	73
Şekil 5.27: Ni için $r_{son}=2a^f$ ve $r_{son}=r_{BS}$ mesafelerinde hesaplanan $S(q)$ statik yapı faktörlerinin deneysel değer ile karşılaştırılması.....	74
Şekil 5.28: Pd için $r_{son}=2a^f$ ve $r_{son}=r_{BS}$ mesafelerinde hesaplanan $S(q)$ statik yapı faktörlerinin deneysel değer ile karşılaştırılması.....	75
Şekil 5.29: Pt için $r_{son}=2a^f$ ve $r_{son}=r_{BS}$ mesafelerinde hesaplanan $S(q)$ statik yapı faktörlerinin deneysel değer ile karşılaştırılması.....	76
Şekil 5.30: Cu için $r_{son}=2a^f$ ve $r_{son}=r_{BS}$ mesafelerinde hesaplanan $S(q)$ statik yapı faktörlerinin deneysel değer ile karşılaştırılması.....	77
Şekil 5.31: Ag için $r_{son}=2a^f$ ve $r_{son}=r_{BS}$ mesafelerinde hesaplanan $S(q)$ statik yapı faktörlerinin deneysel değer ile karşılaştırılması.....	78
Şekil 5.32: Au için $r_{son}=2a^f$ ve $r_{son}=r_{BS}$ mesafelerinde hesaplanan $S(q)$ statik yapı faktörlerinin deneysel değer ile karşılaştırılması.....	79
Şekil 5.33: Ni için $r_{son}=2a^f$ ve $r_{son}=r_{BS}$ mesafelerinde hesaplanan $g(r)$ çiftler dağılım fonksiyonlarının deneysel değer ile karşılaştırılması.....	80
Şekil 5.34: Pd için $r_{son}=2a^f$ ve $r_{son}=r_{BS}$ mesafelerinde hesaplanan $g(r)$ çiftler dağılım fonksiyonlarının deneysel değer ile karşılaştırılması.....	81
Şekil 5.35: Pt için $r_{son}=2a^f$ ve $r_{son}=r_{BS}$ mesafelerinde hesaplanan $g(r)$ çiftler dağılım fonksiyonlarının deneysel değer ile karşılaştırılması.....	82

Şekil 5.36: Cu için $r_{son}=2a^f$ ve $r_{son}=r_{BS}$ mesafelerinde hesaplanan $g(r)$ çiftler dağılım fonksiyonlarının deneysel değer ile karşılaştırılması.....	83
Şekil 5.37: Ag için $r_{son}=2a^f$ ve $r_{son}=r_{BS}$ mesafelerinde hesaplanan $g(r)$ çiftler dağılım fonksiyonlarının deneysel değer ile karşılaştırılması.....	84
Şekil 5.38: Au için $r_{son}=2a^f$ ve $r_{son}=r_{BS}$ mesafelerinde hesaplanan $g(r)$ çiftler dağılım fonksiyonlarının deneysel değer ile karşılaştırılması.....	85
Şekil 5.39: Ni için 140,180 atom, $r_{son}=2a^f$ ve $r_{son}=r_{BS}$ mesafelerinde hesaplanan $S(q)$ statik yapı faktörlerinin deneysel değer ile karşılaştırılması.....	86
Şekil 5.40: Pd için 140,180 atom, $r_{son}=2a^f$ ve $r_{son}=r_{BS}$ mesafelerinde hesaplanan $S(q)$ s statik yapı faktörlerinin deneysel değer ile karşılaştırılması.....	87
Şekil 5.41: Pt için 140,180 atom, $r_{son}=2a^f$ ve $r_{son}=r_{BS}$ mesafelerinde hesaplanan $S(q)$ statik yapı faktörlerinin deneysel değer ile karşılaştırılması.....	88
Şekil 5.42: Cu için 140,180 atom, $r_{son}=2a^f$ ve $r_{son}=r_{BS}$ mesafelerinde hesaplanan $S(q)$ statik yapı faktörlerinin deneysel değer ile karşılaştırılması.....	89
Şekil 5.43: Ag için 140,180 atom, $r_{son}=2a^f$ ve $r_{son}=r_{BS}$ mesafelerinde hesaplanan $S(q)$ statik yapı faktörlerinin deneysel değer ile karşılaştırılması.....	90
Şekil 5.44: Au için 140,180 atom, $r_{son}=2a^f$ ve $r_{son}=r_{BS}$ mesafelerinde hesaplanan $S(q)$ statik yapı faktörlerinin deneysel değer ile karşılaştırılması.....	91
Şekil 5.45: Ni için 140,180 atom, $r_{son}=2a^f$ ve $r_{son}=r_{BS}$ mesafelerinde hesaplanan $g(r)$ çiftler dağılım fonksiyonlarının deneysel değer ile karşılaştırılması.....	92
Şekil 5.46: Pd için 140,180 atom, $r_{son}=2a^f$ ve $r_{son}=r_{BS}$ mesafelerinde hesaplanan $g(r)$ çiftler dağılım fonksiyonlarının deneysel değer ile karşılaştırılması.....	93
Şekil 5.47: Pt için 140,180 atom, $r_{son}=2a^f$ ve $r_{son}=r_{BS}$ mesafelerinde hesaplanan $g(r)$ çiftler dağılım fonksiyonlarının deneysel değer ile karşılaştırılması.....	94
Şekil 5.48: Cu için 140,180 atom, $r_{son}=2a^f$ ve $r_{son}=r_{BS}$ mesafelerinde hesaplanan $g(r)$ çiftler dağılım fonksiyonlarının deneysel değer ile karşılaştırılması.....	95
Şekil 5.49: Ag için 140,180 atom, $r_{son}=2a^f$ ve $r_{son}=r_{BS}$ mesafelerinde hesaplanan $g(r)$ çiftler dağılım fonksiyonlarının deneysel değer ile karşılaştırılması.....	96
Şekil 5.50: Au için 140,180 atom, $r_{son}=2a^f$ ve $r_{son}=r_{BS}$ mesafelerinde hesaplanan $g(r)$ çiftler dağılım fonksiyonlarının deneysel değer ile karşılaştırılması.....	97
Şekil 5.51: Sıvı Ni,Cu,Pd,Ag,Pt ve Au için iç enerji değerleri.....	100
Şekil 5.52: $Cu_{25}Ni_{75}$ konsantrasyonunda elde edilen etkin çiftler potansiyelleri.	102

Şekil 5.53: Cu ₂₅ Ni ₇₅ konsantrasyonunda hesaplanan kısmi yapı faktörlerinin deneysel değerler ile karşılaştırılması.....	103
Şekil 5.54: Cu ₂₅ Ni ₇₅ konsantrasyonunda hesaplanan çiftler dağılım fonksiyonları.....	104
Şekil 5.55: Cu ₂₅ Ni ₇₅ alsaımı için hesaplanan S _{CC} ,S _{NN} ve S _{NC} kısmi yapı faktörleri.....	105
Şekil 5.56: Al konsantrasyonunda a örgü parametresi grafiği.....	106
Şekil 5.57: Ni ₂₀ Al ₈₀ için hesaplanan etkin çiftler potansiyelleri.....	108
Şekil 5.58: Ni ₈₀ Al ₂₀ için hesaplanan etkin çiftler potansiyelleri.....	109
Şekil 5.59: Ni ₂₀ Al ₈₀ konsantrasyonunda hesaplanan kısmi yapı faktörlerinin deneysel değerler ile karşılaştırılması.....	110
Şekil 5.60: Ni ₈₀ Al ₂₀ konsantrasyonunda hesaplanan kısmi yapı faktörleri.....	111
Şekil 5.61: Ni ₂₀ Al ₈₀ konsantrasyonunda hesaplanan çiftler dağılım fonksiyonları.....	112
Şekil 5.62: Ni ₈₀ Al ₂₀ konsantrasyonunda hesaplanan çiftler dağılım fonksiyonları.....	113
Şekil 5.63: Ni ₂₀ Al ₈₀ alsaımı için hesaplanan S _{CC} ,S _{NN} ve S _{NC} kısmi yapı faktörleri.....	114
Şekil 5.64: Ni ₈₀ Al ₂₀ alsaımı için hesaplanan S _{CC} ,S _{NN} ve S _{NC} kısmi yapı faktörleri.....	115
Şekil 5.65: Cu ₅₀ Ag ₅₀ için hesaplanan etkin çiftler potansiyelleri.....	117
Şekil 5.66: Cu ₅₀ Ag ₅₀ konsantrasyonunda hesaplanan kısmi yapı faktörünün deneysel değerler ile karşılaştırılması.....	118
Şekil 5.67: Cu ₅₀ Ag ₅₀ konsantrasyonunda hesaplanan kısmi yapı faktörleri.....	119
Şekil 5.68: Cu ₅₀ Ag ₅₀ konsantrasyonunda hesaplanan çiftler dağılım fonksiyonları.....	120
Şekil 5.69: Cu ₅₀ Ag ₅₀ alsaımı için hesaplanan S _{CC} ,S _{NN} ve S _{NC} kısmi yapı faktörleri....	121

BÖLÜM 1

GİRİŞ

Metalik metaryeller için geliştirilen teorik ve bilgisayar benzetişim modellerinin endüstriyel uygulamaları her geçen gün önemli hale gelmektedir. Değişik şartlardaki geçiş metallerinin atomik düzeyde anlaşılması bu sistemlerin teknolojik uygulamaları için önemlidir. Değişik model sistemleri üzerindeki bilgisayar benzetişim çalışmalarında genellikle basit çiftler potansiyeli kullanılır. (Maeda vd. 1982)'nın çiftler potansiyel tanımının teorik temeli olmamasına rağmen hala atomların mümkün dağılımları gibi nicel bilgi üretmek için kullanılmıştır. Yinede uygulama seviyesinde bile çiftler potansiyel modeli yetersiz kalır. Gerçek metal ve metalik alaşımlarındaki etkileşmeler, yalnızca basit çiftler potansiyelleri ile gösterilemez. Bu nedenle çok cısimli etkileşmeler gözönüğe alınmalıdır. Sp bağı metal sistemleri için pseudopotansiyel teorisinden türetilen çiftler potansiyelleri kullanılabilir. Fakat d-band metal sistemlerinde çok cısim etkilerinin gözönüne alınması gerekliliği ortaya çıkmıştır. Bilgisayar benzetişim çalışmalarında sistemlerin termodinamik ve metalik özellikleri 0 C ve daha yüksek sıcaklıklarda çalışılmaktadır.

Son yıllarda bu çalışmalarında Daw-Baskes ve Finnis-Sinclair (birbirlerinden bağımsız olarak) tarafından öne sürülen gömülü atom metodu (GAM) potansiyelleri yaygın olarak kullanılmaktadır. Her iki yaklaşımda toplam iç enerji çiftler etkileşmelerinin oldukça etkin itici çiftler potansiyelinin bir fonksiyoneli ile ifade edilir. Sıkı bağlanma teorisindeki ikinci derece yaklaşma dayalı ifadeleri kullanan Finnis-Sinclair , N-cısimli (çok cısimli) etkileşmeleri açıklayan basit bir formu, geçiş metallerinin atomik benzeşimini yapmak amacıyla oluşturmuştur. Oluşturulan bu formda bağlanma teriminin bölge yoğunluğunun karakökü olması gerektiğini göstermişlerdir. Bu amaçla kısa menzilli çekici ve itici terimlerden oluşan basit modeli

bazı bcc geçiş metallerinin bağlanma enerjisi ve örgü sabitlerini fit ederek parametrize ettiler. 1. ve 2. komşu mesafesine kadar olumlu sonuç veren bu potansiyel, içerisinde 3. komşu etkileşmesini de kapsayan fcc yapılarının enerjilerini açıklamak için yeterli değildir. Fonksiyonel bir atomdan diğerine uygulanan kuvvetin bu atomlar ile ilgili tüm komşuların yerdeğiştirmesine dayalı N-cisim etkileşmelerini daha duyarlı olarak tanımlar. Buna zıt olarak çiftler potansiyeli tek başına iki atom arasındaki uzaklığa bağlı kuvvette dayanır. Bu özellik metalin serbest yüzeylerindeki gevşemenin fiziksel olarak çok daha doğru bir tanımını üretir.

Bilgisayar simulasyon deneylerinden FS potansiyelleri ile daha doğru sonuçlar elde etmek amacıyla (Sutton ve Chen 1990), (Pethica ve Sutton 1988) tarafından Lennard-Jones çiftler potansiyelleri kullanılarak gösterilen ve (Smith vd. 1989) tarafında yeniden doğrulanın atom kümeleri arasındaki mekanik etkileşmeleri modellemeye çalışıldılar. fcc ve hcp kristaldeki üçüncü komşulara kadar genişleyen ve $1/r^6$ wan der Waals kuyruğuna sahip olmayan Finnis-Sinclair potansiyelleri; temelde uzun menzilli etkileşmeyi doğru tanımlayan wan der Waals kuyruğuyla yüzey gevşemesinin doğru tanımını elde etmek için N-cisim potansiyeli ile kısa mesafeli etkileşmelerin bir tammîmî birleştirmek düşüncesi ile geliştirilmiştir (Sutton ve Chen 1990). Bu nedenle Sutton-Chen (SC) potansiyelleri uzun menzilli FS potansiyelleri olarak da adlandırılırlar. SC potansiyelleri fcc geçiş metallerinin hacim, yüzey vd. gibi özelliklerini elde etmek için yaygın olarak çalışılmaktadır.(Todd ve Lyndenbell 1993,1995) Ayrıca SC potansiyeli bazı fcc geçiş sıvı metallerinin mekanik özelliklerini moleküler dinamik (MD) ile arştırmada kullanılmıştır (Dereli vd. 1997). Sıvı fcc geçiş metallerini atomlararası etkin çok cisimli SC potansiyelleri ve bu potansiyel ile yapısı (Dalgıç S. vd.1999) tarafından öne sürülen model ile incelenmekte.

İkili fcc metalik alaşımaların atomik ölçekte modellenmesi için Finnis-Sinclair tipi N-cisimli uzun menzilli F-S potansiyelleri, (Rafii vd. 1991) tarafından formalize edilmiştir. Bu yöntemde alaşım potansiyellerinin parametreleri ayarlanabilir fit içermeksizin alaşımındaki element metallerinin parametrelerinden doğrudan elde edilmiştir. fcc alaşımalar için entalpi, örgü parametresi ve elastik sabitler hesaplanmıştır.

Kısa bir süre önce (Feraoun vd. 2002) alaşımalar için Sutton-Chen parametrizasyonundan esinlenerek analitik yapıda çok cisim potansiyeli önermişlerdir. Öne sürdükleri bu yaklaşım alaşımalar için geçiş etkileşmesi modelini kullanmaktadır.

(Feraoun vd. 2002) oluşturdukları potansiyeli saf bileşenler için deneyle uyumlu yapısal ve elastik özellikler veren atomik hesaplamalarda kullanmışlardır.

Bu tezde sıvı fcc geçiş metallerindeki (Cu,Ag,Au,Ni,Pd,Pt,Pb,Al) atomlararası etkileşmeler, henüz sıvı metalik sistemlere uygulanmamış olan çok cisimli uzun menzilli Finnis-Sinclair tipi Sutton-Chen empirik potansiyelleri ile sıvı sistemlerin deneysel verileri kullanılarak farklı parametrisasyon yöntemleri ile; koordinasyon sayısına ve kesme mesafelerine göre belirlenmiştir (Dalgıç S. vd. 2002a). Elde edilen etkin çiftler potansiyelleri ile sıvı yapıları hesaplanarak x-işinleri difraksiyonunun deneysel sonuçları ile karşılaştırılmış ve böylece en uygun parametrisasyon yöntemi belirlenmiştir.

Bu tezde bir çok araştırmacı tarafından hem pseudopotansiyel hemde GAM hesaplamalarında kullanılan (Dalgıç S. vd. 2001a,Dalgıç S. vd. 2002a,b, Gonzalez L.E. vd. 1996, Gonzalez L.E. vd. 1997, Bhuiyan vd. 1996, Alemany vd.1998) Varyasyonel düzenlenmiş hypernetted chain (VMHNC) sıvı yapı teorisi ile incelenen sistemlerin yapısal ve termodynamik özellikleri elde edilmiştir.

SC potansiyelleri ilk olarak sıvı metal合金 sistemlerine genişletilmiş ve metalik合金 sistemleri için (Raffi vd 1991) önerdiği yöntemden farklı yeni bir SC合金 potansiyel formu verilmiştir. Bu formalizm Cu-Ni (Dalgıç S. vd. 2002c), Ni-Al (Dalgıç S. ve Bağmen E. 2003).ve Cu-Ag合金ları için test edilmiştir. Bu sistemlerin kısmi yapı faktörleri $S_{ij}(q)$ 'lar hesaplanmış literatürde var olan deneysel sonuçlar ile karşılaştırılmıştır. Ele alınan sistemlerin karma entalpileri hesaplanmıştır.

Tek bileşenli sıvı geçiş metalik sistemleri için ele alınan parametrisasyon yöntemlerinden en iyi sonuçlar genel olarak kesme mesafesinin ($r_{son}=2a^f$) alınarak etkin çiftler potansiyelinin hesapladığı yöntem olarak bulunmuştur.

İki bileşenli sıvı合金 sistemleri için bu tezde öne sürülen formalizm, (Rafii vd. 1991)'nın öne sürdüğünden daha iyi sonuç vermektedir. Farklı konsantrasyondaki üç合金 (Cu-Ni, Ni-Al ve Cu-Ag) uygulanan bu formalizmin Cu-Ni合金 için deneysel veriler ile en uyumlu sonuç verdiği gözlenmiştir.

Tez anahtarları ile şu şekilde düzenlenmiştir:

2. ve 3. Bölümde sırasıyla sıvı metal ve metal alaşımaları için çok cisimli uzun menzilli FS tipi SC potansiyelleri sıvı metallerini ile ilgili teorik modeller sunulmuştur. 4. bölümde sıvı metal ve metal alaşımalarını temel yapısal ve termodynamik özellikleri ile ilgili bilgiler verilmiştir. 5. Bölüm elde edilen sonuçların sunumuna ve tartışmaya ayrılmıştır.

BÖLÜM 2

ÇOK CISİMLİ UZUN MENZİLLİ GÖMÜLÜ ATOM METODU (GAM) POTANSİYELLERİ

2.1. Basit empirik Çok Cisimli Finnis-Sinclair Potansiyeli

Çok cisimli etkileşmesinin basit bir formu olarak geçiş metallerinin atomik simulasyonunu çalışmaları için oluşturulmuştur. Enerji modeli i'inci atomlar üzerinden toplam alınarak üzere, ρ_i bölge yoğunluğunun karekökü olan bağ terimini ve $\sum_{i,j} \frac{1}{2} V(R_{ij})$ formunda itici çiftler etkileşme terimini içerir. Bölge yoğunluğu $\phi(R_{ij})$ bağlanma enerjisinin j komşu bölgeleri üzerinden toplamı olarak tanımlanır. V ve ϕ 'nin her ikisinin kısa mesafeli olduğu farz edilir ve örgü sabiti, bağ enerjisi ve 7 tane cisim merkezli kübik (fcc) geçiş metalinin elastik modülüne fit edilerek parametrize edilirler. Çiftler potansiyel modeline benzemeyen, deneysel boşluk düzen enerjisi olarak hesaplanabilen ve "Couchy basıncı" ni dengelemek için dışarıdan basınç uygulaması gerektirmeyen basit bir modeldir (Finnis ve Sinclair 1984). $\{R_i\}$ konumlarında yerleşen atomların toplam enerjisi aşağıdaki gibi yazılabılır.

$$U_{tot} = U_N + U_P \quad (2.1)$$

Burada U_N , N-cisim terimi ve U_P merkezi çiftler potansiyel toplamıdır. U_N 'i bağlanma fonksiyonunu tüm atomlar üzerinden bir toplamı şeklinde yazmak için tamamen empirik yöntemler kullanılır. Bunun için:

$$U_N = A \sum_i f(\rho_i) \quad (2.2)$$

alınır.

Burada

$$\rho_i = \sum_j \phi(R_{ij}) \quad (2.3)$$

ve $R_{ij} = |R_{ij}| = |R_j - R_i|$

Bu formda alınır. Burada A pozitif olması beklenen bir sabittir.

$f(\rho)$ 'yu, $\phi(R)$ 'nin overlap integrallerin kareköklerinin bir toplamı olarak (Masuda ve Sato 1981) tarafından yorumlandığından sıkı-bağlanma teorisinin sonuçlarına uyması için $f(\rho) = \sqrt{\rho}$ olarak seçilir. U_p terimide

$$U_p = \frac{1}{2} \sum_{i,j} V(R_{ij})$$

olarak yazılabilir.

Sıkı bağlanma teorisine göre, U_N bağlı yapıda U_p itici kor-kor etkileşmesini gösteren bir bağ enerjisidir. Bu model formunun iki fiziksel açıklaması vardır.

- 1) (Daw ve Baskes 1983)'a göre ρ_i , atomik yük yoğunlıklarının ϕ katı hali ile i'inci atomun bulunduğu bölgede oluşturulmuş yerel elektronik yük yoğunluğuudur.
- 2) ρ_i , atom bölgelerinin yerel yoğunlıklarının ölçüsüdür. Bağlı-hacim enerjisi Denklem (2.1)'deki gibi U_N ve U_p 'nin çiftli toplamı olarak açıklanmıştır.

İdeal bir kristalin basınç ve elastik sabitleri bazı model denklemler ile hesaplanabilmektedir. Bu hesaplamlarda kolaylık sağlamak için ele alınan sistemler bcc yapısıyla sınırlanmış ve sonraki hesaplamlarla uyum sağlaması için itici ve çekici etkileşmelerin ikinci komşu kabuğundan daha uzağa genişleyemeyeceği varsayılmıştır. İçindeki bütün atomların özdeş olduğu bir kristalde atom başına enerji

$$u_{tot} = u_N + u_p \quad (2.4)$$

ile gösterilebilir.

Burada

$$u_N = -Af(\rho) \quad (2.5)$$

$$\rho = \sum_{i \neq 0} \phi(R_i) \quad (2.6)$$

$$u_P = \frac{1}{2} \sum_{i \neq 0} V(R_i) \quad (2.7)$$

$\{R_i\}$ konumları, orjindeki bir atoma göre referans alınmıştır. bcc yapıdaki ilk komşu uzaklığı $\sqrt{3}a/2$ ve ikinci komşu uzaklığı a mesafesindedir. İtici ve çekici etkileşme mesafelerini birinci ve ikinci komşu uzaklığına sınırlayarak ve

$$\phi_1 = \phi(\sqrt{3}a/2), \quad \phi_2 = \phi(a)$$

$$V_1 = V(\sqrt{3}a/2), \quad V_2 = V(a)$$

gösterimi kullanarak ρ ve u_P değerleri

$$\rho = 8\phi_1 + 6\phi_2 \quad (2.8)$$

$$u_P = 4V_1 + 3V_2 \quad (2.9)$$

şeklinde yazılabilir. Burada basınç $P = -du_{tot}/d\Omega$, atomik hacim $\Omega = a^3/2$ dir.

Denklem (2.4)'ten

$$P = P_N + P_P$$

Burada

$$P = -du_N/d\Omega, \quad P = -du_P/d\Omega$$

Bu değerleri denklem (2.8 ve 2.9) da yerine yazarsak

$$P_N = \frac{4A}{3a^2} (2\sqrt{3}\phi'_1 + 3\phi'_2) f' \quad (2.10)$$

$$P_P = \frac{-2}{3a^2} (2\sqrt{3}V'_1 + 3V'_2) \quad (2.11)$$

denklemleri elde edilir. Burada $f' = -\frac{1}{2}\rho/A$ göstermektedir. Üst simgesi r 'ye göre türevi temsil etmektedir. u_P nin türevleri, $f = \rho^{1/2}$ yerine $f' = -\frac{1}{2}\rho/A$ koyarak ve itici ve çekici etkileşmelerin değerlerini yer değiştirerek sistematik bir şekilde u_N değerlerinden elde edilebilir. Hacim modülü için

$$B = B_N + B_P$$

denklemi kullanılır. Burada

$$B_N = -\frac{4A}{9a^2} (3a\phi'_1 + 3a\phi''_2 - 4\sqrt{3}\phi'_1 - 6\phi'_2) f' - \frac{8A}{9a} (2\sqrt{3}\phi'_1 + 3\phi'_2)^2 f'' \quad (2.12)$$

$$B_P = \frac{2}{9a^2} (3aV'_1 + 3aV''_2 - 4\sqrt{3}V'_1 - 6V'_2) \quad (2.13)$$

şeklinde ifade edilir. Bu eşitsizliklerin hesaplanmasıında $P=0$ koşulu kullanılmamıştır. f'' teriminin B deki varlığı haricinde sonuçların,

$$V_{eff}(r) = V(r) - 2Af'\phi(r) \quad (2.14)$$

ifadesiyle verilen etkin çiftler potansiyelinden elde edilen sonuçlarından farklı olmadığı görülmektedir. Eğer f' in ikinci ve daha üst mertebedeki türevleri ihmal edilirse $\{R_i\}$ konumundaki herhangi bir değişim ile ilgili enerji değişimi, atomların etkin çiftler etkileşimi V_{eff} ile etkileşmeye girdikleri farz edilerek hesaplanabilir.

2.2. Uzun menzilli Finnis-Sinclair tipi Sutton-Chen (SC) Potansiyelleri

Kısa mesafedeki metalik bağları açıklamak için geliştirilen, Finnis-Sinclair potansiyellerinin, iyi ayrılmış atomik bulutların arasındaki Van der Waals tipindeki etkileşimler olarak ele alınan SC potansiyelleri bilgisayar simülasyonları için geliştirilmiştir (Sutton ve Chen 1990). Potansiyeller daima bcc yapısı yerine fcc ve hcp yapılarını tercih ederler. Potansiyeller ideal kristalin analitik olarak türetilebilirliğinin özelliklerinin, sayısı, uzunluğu ve enerjisi için uygun değerleri gösterir.

Van der Waals etkileşmeleri, çekici $\frac{1}{r^6}$ çift potansiyeli tarafından genelde bu şekilde gösterilir. SC potansiyellerinde çift potansiyel bileşenine negatif $\frac{1}{r^6}$ uzantısının eklenmesinin nedeni, Finnis-Sinclair formunu bilinen yöntemle yazmak istemelerinden dolayıdır. Bununla birlikte itici katkılardan ayrı olarak toplam enerjiye etki eden çekici katkılara korunması tercih edilir. Bu nedenle Finnis-Sinclair formundaki toplam enerji aşağıdaki gibi yazılabılır.

$$E_T = \epsilon \left[\frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \sum V(r_{ij}) - c \sum_i \sqrt{\rho_i} \right] \quad (2.15)$$

Burada $V(r)$,

$$V(r) = (a/r)^n \quad (2.16)$$

ve ρ_i şu şekilde verilir.

$$\rho_i = \sum_{j \neq i} \left(\frac{a}{r_{ij}} \right)^m \quad (2.17)$$

Burada r_{ij} , i ve j atomları arasındaki uzaklık, c pozitif boyutsuz bir parametre, ϵ enerji boyutunda bir parametre, a uzunluk boyutunda bir parametre ve m ve n pozitif

tamsayılardır. n, m 'den büyük olmalıdır. $V(r_{ij})$ çift potansiyeli tamamen itici bir potansiyeldir ve N-cisim terimine bağlıdır. Denklem (2.17)'deki toplamda belirtilen ρ^s bir atom için serbest bir yüzeye uygun olan ρ 'nun değerini gösterir. Bu bağlanma katkısı $e^s = -\epsilon c \sqrt{\rho^s}$ atomun oluşturduğu toplam yüzey enerjisidir. Bir tane daha atom yüzeye yerleştirilirse ve r konumunda yerleşmiş olan bir atomun yüzey atomundan ayrılması durumunda, e^s değeri aşağıdaki denkleme dönüşür.

$$-\epsilon c [\rho^s + (a/r)^m]^{1/2}$$

r 'nin a ile karşılaştırılmış değeri için, karekök değeri genelleştirilirse

$$[\rho^s + (a/r)^m]^{1/2} \cong \sqrt{\rho^s} + \frac{(a/r)^m}{2\sqrt{\rho^s}} \quad (2.18)$$

elde edilir. Bu denklem, bir atomun yüzeye yaklaştığında r de yerleşmiş olan bir atom ile birbirlerini etkilerler, buna rağmen çift potansiyelin büyülüğu her yüzey atomuna etkiyen komşuların sayısından etkilenir. r mesafesinin azalması ile denklem (2.18)'deki genleşme artarak geçersiz olur ve etkileşimler düzgün olarak N-cisim formuna dönüşür. Bu nedenle denklem (2.17)'de $m=6$ kabul edersek, küçük farklı doğal N-cisim etkileşimli çekici $\frac{1}{r^6}$ çift potansiyeli, iki tane atom demeti arasında objektif uzunmenzilli etkileşim elde edilir. Ayrıca bu iki limit arasındaki geçiş düzgün ve devamlıdır.

Denklem (2.15)'deki ϵ ve a enerji ve uzunluk birimleri ile tanımlanabilir. Denklem (2.15)'de verilen kristal yapıdaki Finnis-Sinclair potansiyelleri tamamıyla m ve n bileşenleri ile tanımlanmıştır. Bu yüzden özel kristal yapının denge koşulları ϵ parametresini sabit tutar. Eğer aynı kristal yapıdaki iki metal m ve n bileşenlerinin aynı değerleri ile belirtilirse sonuçlar enerji ve uzunluk birimlerini değiştirerek başka birimlere çevrilir.

Ideal bir fcc kristalindeki örgü toplamı S_m^f

$$S_m^f = \sum_j \left(\frac{a_f}{r_j} \right)^m \quad (2.19)$$

olarak verilir. Burada toplam, keyfi bir atomdan tüm atomik uzaklıklar (r_j) üzerindendir. Bu nedenle a_f , fcc örgü parametresine denk kabul ederek uzunluk birimi sabitlenir. Örgü parametresi değiştirildiğinde kristalin toplam enerjisinin değişmemesi denge koşuludur ve c denklemini hesaplamak için (Xie vd. 1997)'nin aşağıdaki denklemden

$$\phi'(r) + F(\rho)\rho'(r) = 0 \quad (2.20)$$

Burada

$$\phi(r) = S_n^f = \sum_j \left(\frac{a_f}{r_j} \right)^n \quad (2.21)$$

$$\rho(r) = S_m^f = \left(\frac{a_f}{r_j} \right)^m \quad (2.22)$$

$$F(\rho) = -c\rho^{1/2} \quad (2.23)$$

olarak verilir ve bu formülleri (2.20) denkleminde yerine koyarsak

$$\frac{1}{2n} n S_n^f + \left(-\frac{1}{2} c - \frac{1}{\sqrt{S_m^f}} \right) m S_m^f = 0 \quad (2.24)$$

$$\frac{1}{2n} n S_n^f - \frac{c}{2} m \sqrt{S_m^f} = 0 \quad (2.25)$$

$$c = \frac{nS_n^f}{m\sqrt{S_m^f}} \quad (2.26)$$

denklemi elde edilir.

Atomun bağlanma enerjisini hesaplamak için (Xie vd. 1997)'nin aşağıdaki bağlanma enerji formülünden

$$F(\rho) + \frac{1}{2}\phi(r) = -E_c^f \quad (2.27)$$

Burada

$$F(\rho) = A\rho^{1/2} = -c\varepsilon\rho^{1/2} \quad (2.28)$$

olarak verilir ve (2.21), (2.26) ve (2.28) denklemelerini (2.27)'de yerine yazarsak

$$-\frac{nS_n^f}{m\sqrt{S_m^f}}\varepsilon\sqrt{S_m^f} + \frac{1}{2}S_n^f = -E_c^f \quad (2.29)$$

$$E_c^f = \frac{\varepsilon S_m^f}{2m}(2n - m) \quad (2.30)$$

Atomun bağlanma enerjisi elde edilir. Hacim modülü B_v^f hesaplanması için (Xie vd. 1997)'nin aşağıdaki hacim modülü formülünden

$$B = \frac{1}{9\Omega} \left[r_1^2 [\phi'(r_1) + F'(\rho)\rho''(r_1)] - r_1 [\phi'(r_1) + F'(\rho)\rho'(R_1)] + F''(\rho)r_1^2 [\rho'(r_1)]^2 \right] \quad (2.31)$$

(2.32) denklemi elde etmiş oluruz ve bunun hesaplanması Ek A'da verilmektedir.

$$B_v^f = \frac{(2n - m)n\varepsilon S_m^f}{36\Omega^f} \quad (2.32)$$

Burada Ω^f , atomik hacim ve

$$\Omega^f = \frac{(a^f)^3}{4} \quad (2.33)$$

olarak gösterilir. (2.30) denkleminde S_m^f 'yi çekip denklem (2.32) yerine koyarak

$$S_m^f = \frac{2mE_c^f}{\epsilon(2n - m)} \quad (2.34)$$

$$B_v^f = \frac{(2n - m)n \epsilon 2mE_c^f}{36\Omega^f \epsilon(2n - m)} \quad (2.35)$$

$$B_v^f = \frac{n 2mE_c^f}{36\Omega^f} \quad (2.36)$$

elde edilir. Bu denklem bir orantı şeklinde

$$\frac{\Omega^f B^f}{E_c^f} = \frac{nm}{18} \quad (2.37)$$

olarak yazılabilir. fcc kristalinin hacim basıncı için ilişkisi (2.15), (2.17), (2.19), (2.26) ve (2.32) denklemeleri kullanılarak aşağıdaki gibi elde edilir.

$$P = \frac{6B^f}{2n - m} \left[\left(\frac{v}{v_0} \right)^{m/n} - \left(\frac{v}{v_0} \right)^{n/m} \right] \quad (2.38)$$

Burada v basit bir kristalin hacmi, v_0 dengedeki bir kristalin hacmini denklem (2.32)'de verilen B^f denge hacmindeki hacim modülüdür. Her bir metal için deneysel bağlanma enerjisi ve kristal örgü parametresi tamamen uygundur. m ve n indisleri

tamsayı değerleri ile sınırlanmıştır, öyle ki $m n 18\Omega^f B^f / E_c^f$ değerine en yakın tamsayıdır. Bu hacim modülünün tam bir fitinin yapılamayacağı, m ve n 'nin sınırlı tamsayı değerleri ile fit edileceği anlamına gelir. Bu koşulla potansiyelin özelliklerini derecelendirilmesi avantajları elde edilebilir.

(Finnis ve Sinclair 1984) tarafından gösterildiği gibi etkili çift potansiyeller, referans yoğunluğu ile ilgili N-cism terimini genişletecek denklem (2.15)'te açıklanmıştır. V^{eff} etkin çiftler potansiyelini elde etmek için

$$V^{eff}(r) = V(r) - 2Af'\phi(r) \quad (2.39)$$

denkleminde (2.26),(2.40),(2.41), (2.42) ve(2.43) denklemleri yerine yazarsak

$$V(r) = \epsilon \left(\frac{a^f}{r} \right)^n \quad (2.40)$$

$$A = c\epsilon \quad (2.41)$$

$$f(\rho) = \rho^{1/2} \quad (2.42)$$

$$\phi(r) = \left(\frac{a^f}{r} \right)^m \quad (2.43)$$

$$V^{eff}(r) = \epsilon \left(\frac{a}{r} \right)^n - 2c\epsilon \frac{1}{2} \rho^{-1/2} \left(\frac{a}{r} \right)^m \quad (2.44)$$

$$V^{eff}(r) = \epsilon \left(\frac{a}{r} \right)^n - \frac{nS_n^f}{m\sqrt{S_m^f}} \frac{\epsilon}{\sqrt{S_m^f}} \left(\frac{a}{r} \right)^m \quad (2.45)$$

2.3. Sutton-Chen Potansiyelleri için yeni bir form: Feraoun-Esling SC Formu

(Feraoun ve Esling 2002) tarafından metalik alaşımalar için geliştirilen Sutton-Chen (SC) potansiyellerinde tek bileşenli sistemler için i'inci atomun toplam bağlanma enerjisi

$$E_i = \frac{\varepsilon_a}{2} \left[\sum_{j=1, j \neq i}^N V(r_{ij}) - B_a \rho_i^2 \right] \quad (2.47)$$

şeklinde tanımlanır. Burada ε_a potansiyel parametresi B_a hacim modülüdür. $V(r_{ij})$ çiftler potansiyeli

$$V(r_{ij}) = \left(\frac{\alpha}{r_{ij}} \right)^n \quad (2.48)$$

şeklinde verilir. ρ_i i'inci atom ile ilgili olan yerel enerji yoğunluğuudur ve

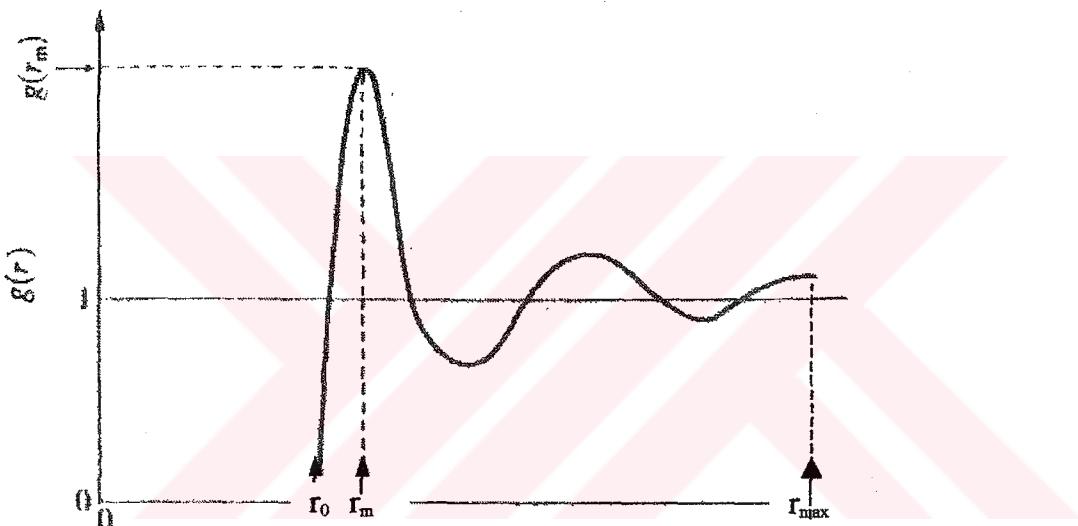
$$\rho_i = \sum_{j=1, j \neq i}^N \left(\frac{\alpha}{r_{ij}} \right)^m \quad (2.49)$$

ile gösterilir. Burada α örgü parametresidir. $E_{bağ}$ ve α örgü parametresi verilen bileşenli metallerin (elementlerin) parametrelerini elde etmek için yeterlidir.

2.4. Sıvı geçiş metalleri için önerilen Sutton-Chen Potansiyeli

2.4.1. Sıvı geçiş metalleri için SC potansiyellerinin parametrizasyon metodları

Sıvı geçiş metallerinin (2.46) denklemi ile verilen SC etkin çiftler potansiyelini V^{eff} 'i hesaplamak ve S_n^f ve S_m^f toplamlarını bulmak için ilk olarak sistemlerin ergime noktaları civarındaki deneysel $g(r)$ çiftler dağılım fonksiyonunu kübik spline yöntemi ile extrapol ettiğimiz.



Şekil 2.1 $g(r)$ çiftler dağılım fonksiyonunun şematik gösterimi

Burada r_0 , $g(r)$ 'nin $g(r)=0$ olduğu ilk r değerlerini, r_m ise $g(r)$ 'nin ana pikine karşı gelen r değerini göstermektedir. r_{\max} , i ve j atomları arasındaki etkileşmeleri kestiğimiz r mesafesidir. Keyfi bir i atomundan r_j uzaklığundaki bir j atom arasındaki etkileşmeyi r_{\max} 'a kadar iki yöntem ile hesapladık. İlk olarak r_{\max} 'a kadarki mesafede etkileşmeye giren toplam atom sayısı olarak

$$N_1 + N_2 + N_3 + \dots = N \quad (2.50)$$

Denklemi ile hesaplanan N sayısının 140 ve 180 atom olduğu durumlardaki etkin çiftler potansiyelini hesapladık.

Diğer yöntem ise Bilgisayar benzetişim çalışmalarında olduğu gibi i atomdan r_j uzaklığındaki j atomu arasındaki etkileşmeler için r_{\max} değerini r_c (cut-off) gibi kesme mesafesini eşit olarak hesapladık. Sıvı sistemlerin etkin çiftler potansiyeli hesaplamalarında uygunluk sağlama amacıyla Bhuiyan tarafından bir başka Gömülü Atom Metodu (GAM) hesaplamalarında kullanılan r_c mesafesini alarak atomlar arası etkileşmeleri bu r_{\max} değerlerinde kestik.

2.4.2 Sıvı geçiş metalleri için SC etkin çiftler potansiyeli

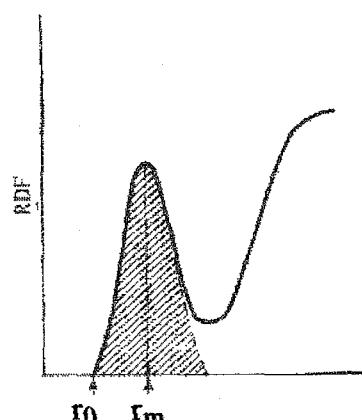
2.4.2.1 Koordinasyon sayısına göre

Sıvı fcc metallerinin koordinasyon sayısını hesaplamak için Ω atomik hacmini $\Omega = \frac{a^3}{4}$ şeklinde verilir. (Sutton ve Chen 1990) potansiyelindeki S_n^f terimi, ki bu terim keyfi bir atomdan tüm atomik r_j uzaklıklarını üzerinden alınan toplam olmak üzere aşağıdaki gibi verilir.

$$S_n^f = \sum_{i \neq j} \left(\frac{a}{r_{ij}} \right)^n \quad (2.51)$$

$$S_n^f = N_1 \left(\frac{a}{r_1} \right)^n + N_2 \left(\frac{a}{r_2} \right)^n + N_3 \left(\frac{a}{r_3} \right)^n + \dots, r_i \rightarrow r_{\max}$$

Burada N_i en yakın komşu atomların i'inci koordinasyon sayısıdır.



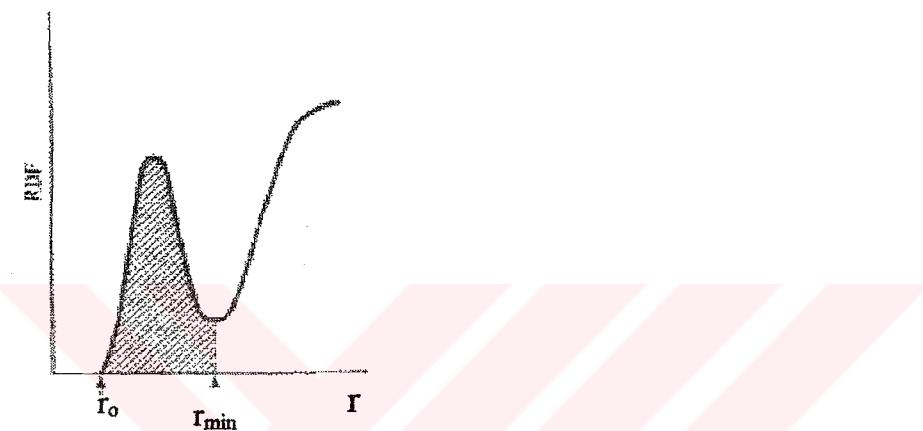
Şekil 2.2 Koordinasyon sayısının elde edilmesinde kullanılan Radyal Dağılım Fonksiyonunun (RDF) şematik gösterimi (1. Yöntem).

Koordinasyon sayısını sıvı yapıda belirlenmesi için 2 yöntem kullandık.

1. Yöntem: Şekil 2.2'deki simetrik r 'lere göre 1. koordinasyon sayısını hesaplamak için

$$N_1 = 2 \int_{r_0}^{r_m} 4\pi r^2 g(r) dr \quad \text{sym} \quad (2.52)$$

denklemi kullanılır.



Şekil 2.3 Koordinasyon sayısının elde edilmesinde kullanılan Radyal Dağılım Fonksiyonunun (RDF) şematik gösterimi (2. Yöntem).

2. yöntem: Şekil 2.3.'teki $4\pi r^2 g(r)$ eğrisinde ilk minimuma kadar integrasyon için

$$N_1 = \int_{r_0}^{r_{\min}} 4\pi r^2 g(r) dr \quad \text{sym} \quad (2.53)$$

denklemi kullanılır. Finnis-Sinclair tipi SC potansiyeli hesaplamalarında denklem (2.53) bağıntısının üst sınırı, belirlenen koordinasyon sayısını veren etkileşme mesafesine göre uzatılır. Bu mesafe metale göre 3. ve 4. kabuk arası (3.minimum-4.minimum) olmaktadır. Koordinasyon sayısına göre bulunan etkileşme mesafesine göre, potansiyeli hesaplamak için denklem (2.46) kullanılır. S_n^f ve S_m^f toplamlarını (2.46) denkleminde yerine yazarsak

$$V^{eff}(r) = \epsilon \left| \frac{\left(\frac{a^f}{r} \right)^n + N_1 \left(\frac{a}{r_1} \right)^n + N_2 \left(\frac{a}{r_2} \right)^n + N_3 \left(\frac{a}{r_3} \right)^n + \dots}{\left(\frac{a^f}{r} \right)^m + N_1 \left(\frac{a}{r_1} \right)^m + N_2 \left(\frac{a}{r_2} \right)^m + N_3 \left(\frac{a}{r_3} \right)^m + \dots} \right|_{r=r_{max}} \quad (2.54)$$

denklemini elde etmiş oluruz.

2.4.2.2 Kesme mesafesine göre

Potansiyeldeki a ve r_{max} parametrelerini hesaplamada kübik spline fonksiyonları kullanarak extrapole ettik. Deneysel $g_{deneysel}(r)$ değerlerini kullandık. Şekil 2.1'deki r_0 ve r_m , $g(r)$ eğrisinde radyal uzaklığın sırasıyla başlangıç ve ilk pik değerini gösterir.

Potansiyeldeki a örgü parametresini hesaplamak için, a parametresini fcc örgü parametresi olarak aşağıdaki gibi seçilir.

$$\frac{\sqrt{2}a}{2} = r_m \quad (2.55)$$

Finnis-Sinclair tipi SC potansiyeli hesaplamalarında denklem (2.55) bağıntısındaki r kesme mesafesi, metallerin a örgü parametrelerine göre koordinasyon sayısının belirlenmesinde kullanılır. Bu mesafe metale göre 3. ve 4. kabuk arası (3.minimum-4.minimum) olmaktadır. Aşağıdaki denklemi kullanarak kesme mesafesine göre etkin çiftler potansiyelini hesapladık. Kesme mesafesine göre etkin çiftler potansiyeli şu formda verilir.

$$V^{eff}(r) = \epsilon \left| \frac{\left(\frac{a^f}{r} \right)^n + N_1 \left(\frac{a}{r_1} \right)^n + N_2 \left(\frac{a}{r_2} \right)^n + N_3 \left(\frac{a}{r_3} \right)^n + \dots}{\left(\frac{a^f}{r} \right)^m + N_1 \left(\frac{a}{r_1} \right)^m + N_2 \left(\frac{a}{r_2} \right)^m + N_3 \left(\frac{a}{r_3} \right)^m + \dots} \right|_{r=r_c} \quad (2.56)$$

BÖLÜM 3

FCC METALİK ALAŞIMLARI İÇİN UZUN MENZİLLİ FINNIS-SINCLAIR TİPİ SUTTON-CHEN POTANSİYELLERİ

3.1. Rafii -Tabar-Sutton Formu

Çok-cisim, uzun-menzilli Finnis-Sinclair tipindeki potansiyeller, ikili fcc metalik alaşımının atomistik tanımlanması için Tabar-Sutton tarafından biçimlendirildi. Bu potansiyeller temelde (Sutton ve Chen 1990) tarafından fcc elementer metallerinin atomistik modellemelerinin metalik alaşımına yapılmış genelleştirilmelerdir. Alaşım potansiyellerinin parametreleri direkt olarak elementer metallerin parametrelerinden başka herhangi bir uygunsuzluk göstermeksızın elde edilmiştir. Örgü parametreleri, elastik sabitler ve 45 adet ikili alaşım sistemlerinin durum entalpisi (Tabar ve Sutton 1991) tarafından fcc metal alaşımalar için hesaplanmıştır .

Bir saf metalin iç enerjisi FS formunda, (Sutton ve Chen 1990) tarafından

$$E^{FS} = \epsilon \left[\frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \sum V(r_{ij}) - c \sum_i \rho_i^{1/2} \right] \quad (3.1)$$

$$V(r) = \left(\frac{a}{r} \right)^n \quad (3.2)$$

$$\rho_i = \sum_{i \neq j} \left[\frac{a}{r_{ij}} \right]^m \quad (3.3)$$

denklemleri ile verilmektedir.

Burada m ve n pozitif tamsayılar, a fcc örgü sabiti ve c enerji boyutunda bir parametredir.

Hamiltoniyeni açıklayarak (3.1) ve (3.3) denklemleri ikili A-B alaşımlarını tanımlamak için kolayca genelleştirilmiştir.(Finnis ve Sinclair 1984) formu şu şekilde belirlendi: Burada A 1. metali B 2. metali i ve j türlerini gösterir, aynı zamanda ($i,j=A,B$) olarak verilir.

$$H = \frac{1}{2} \left[\sum_{i \neq j} \sum \vec{p}_i \vec{p}_j V^{AA}(r_{ij}) + (1 - \vec{p}_i)(1 - \vec{p}_j) V^{BB}(r_{ij}) + [\vec{p}_i(1 - \vec{p}_j) + \vec{p}_j(1 - \vec{p}_i)] V^{AB}(r_{ij}) \right] \\ - d^{AA} \sum_i \vec{p}_i \left[\sum_{j \neq i} \vec{p}_j \phi^{AA}(r_{ij}) + (1 - \vec{p}_j) \phi^{AB}(r_{ij}) \right]^{1/2} \\ - d^{BB} \sum_i (1 - \vec{p}_i) \left[\sum_{j \neq i} (1 - \vec{p}_j) \phi^{BB}(r_{ij}) + \vec{p}_j \phi^{AB}(r_{ij}) \right]^{1/2} \quad (3.4)$$

\vec{p}_i , bölgeyi dolduran operatörler aşağıdaki gibi belirtilmiştir.

$$\vec{p}_i = \begin{cases} 1, & i \text{ bölgeyi A atomu ile kapsı ise} \\ 0, & i \text{ bölgeyi B atomu ile kapsı ise} \end{cases} \quad (3.5)$$

iki bileşenli sistem için V^{AA} , V^{BB} ve V^{AB} fonksiyonları enerjinin itici kısmını gösterir ve aşağıdaki gibi verilmektedir.

$$V^{AA}(r) = c^{AA} \left[\frac{a^{AA}}{r} \right]^{n^{AA}} \\ V^{BB}(r) = c^{BB} \left[\frac{a^{BB}}{r} \right]^{n^{BB}} \quad (3.6)$$

$$V^{AB}(r) = c^{AB} \left[\frac{a^{AB}}{r} \right]^{n^{AB}}$$

Ayrıca (3.1) denkleminde ρ_i ile tanımlanan i. atom etrafındaki elektron yoğunluğu için iki bileşenli sistemlerde

$$\begin{aligned}\phi^{AA}(r) &= \left[\frac{a^{AA}}{r} \right]^{m^{AA}} \\ \phi^{BB}(r) &= \left[\frac{a^{BB}}{r} \right]^{m^{BB}} \\ \phi^{AB}(r) &= \left[\frac{a^{AB}}{r} \right]^{m^{AB}}\end{aligned}\tag{3.7}$$

fonksiyonları tanımlanmıştır.

$\epsilon^{AA}, c^{AA}, a^{AA}, m^{AA}$ ve n^{AA} parametreleri A metallinin saf ϵ, c, a parametrelerine eşitlenmiştir. Benzer olarak $\epsilon^{BB}, c^{BB}, a^{BB}, m^{BB}$ ve n^{BB} parametreleride B metalinin ϵ, c, a parametrelerine eşitlenmiştir. Bu nedenle sadece $\epsilon^{AB}, a^{AB}, m^{AB}$ ve n^{AB} bu 4 parametre sınırlandırmak ve hesaplamak için kalmıştır. Bu parametreler V^{AB} ve ϕ^{AB} fonksiyonlarını açıklamak düşüncesi ile aşağıdaki gibi sınırlanmıştır.

$$V^{AB} = (V^{AA} V^{BB})^{1/2} \quad \text{ve} \quad \phi^{AB} = (\phi^{AA} \phi^{BB})^{1/2}\tag{3.8}$$

$\epsilon^{AB}, a^{AB}, m^{AB}$ ve n^{AB} parametreleri de aynı düşünce ile aşağıdaki gibi verilmektedir.

$$m^{AB} = \frac{1}{2}(m^{AA} + m^{BB}), \quad n^{AB} = \frac{1}{2}(n^{AA} + n^{BB})\tag{3.9}$$

$$a^{AB} = (a^{AA} a^{BB})^{1/2}, \quad \epsilon^{AB} = (\epsilon^{AA} \epsilon^{BB})^{1/2}$$

Böylece denklem (3.4)'teki Hamiltonyenin tüm parametreleri (Sutton ve Chen 1990) tarafından tablo edilen saf metaller içinkî parametrelerden elde edilebilir. V^{AB} ve ϕ^{AB} denklem (3.9)'da verilen varsayımlar tamamıyla deneysel temeller üzerine yapılmıştır. Örnek olarak $\epsilon^{AB} = (\epsilon^{AA} + \epsilon^{BB}) / 2$ yaklaşım alındığında alaşımın bazı özellikleri için doğru hesaplanmadığı bulunmuştur.

%50 consantrasyona sahip alaşım modelinde A ve B atomları ortalama konsantrasyona sahip bir rastgele fcc alaşım modeline adapte edilmiştir. Atomik pozisyonların hiçbir gevşekliği hesaba katılmamıştır ve alaşımın sadece $0^{\circ}K$ 'deki entalpisi hesaplanmıştır. (Ackland ve Vitek 1990) tarafından verilen bu standart rastgele alaşım modelinin SC potansiyellerinin uygulamasıdır.

3.2 Feraoun ve Esling Formu

Bu potansiyellerde N atomlu bir sistemdeki her bir atom başına düşen enerji

$$E_i = \sum_{j=1 \neq i}^N D_{ab} V(r_{ij}) - D_{aa} c_a \rho_i^{\frac{1}{2}} \quad (3.10)$$

şeklinde verilmektedir.

Burada r_{ij} , i ve j atomları arasındaki uzaklıktır. $V(r_{ij})$, i ve j atomları arasındaki çiftler itici terimi ve bu terim

$$V(r_{ij}) = \left(\frac{\alpha_{ab}}{r_{ij}} \right)^{n_{ab}} \quad (3.11)$$

şeklinde verilir. Metalik bağlar ρ_i 'de tutulurken i'inci atom ile ilgili olan yerel enerji yoğunluğu

$$\rho_i = \sum_{j=1 \neq i}^N \left(\frac{\alpha_{ab}}{r_{ij}} \right)^{m_{ab}} \quad (3.12)$$

denklemi ile tanımlanmaktadır. Yukarıdaki denklemlerde α , $V(r)$ ve $\rho(r)$ fonksiyonları için boyutsuz argüman elde etmek için kullanılan uzunluk boyutunda bir parametredir ve α denge örgü parametresine eşittir. Diğer parametreler saf metallerin 0 K sıcaklığındaki özelliklerini fit edilerek elde edilmiştir. Alaşım sistemi için geometrik anlamı D' enerjisini hesaplamak için alınmıştır. Aritmetik ortalaması ise uzunluk boyutu ve integral hesaplamalarında kullanılmıştır. Eğer bu denklemler daha dikkatlice ele alırsakalaşım sistemi için α_{ab} örgü parametresi biliniyor ise, bu durumda asıl tanımlanması gereken enerji boyutunda bir parametre olan D_{ab} 'dır. Asıl ihtiyacımız olan birbirine benzemeyen itici atomları ayırmak için gereken boyutsuz parametreyi tanımlamaktır. Bu durumda denklem (2.15)'de yerine yazarsak

$$E_i = \frac{\epsilon_i}{2} \left[\sum_{j=1, j \neq i}^N A_{ab} V(r_{ij}) - B_a \rho_i^{\frac{1}{2}} \right] \quad (3.13)$$

elde edilir. Burada ϵ_i , i 'inci tür atoma uyan enerji boyutunda parametresidir. Bu yeni bir tür parametre seti olarak tanımlanabilir. Bu ifadede uygulanacak asıl durum ikili sistem için bir tek boyutsuz A_{ab} parametresine ihtiyaç vardır.

Burada bütün iki cisim bağları birbirine eşit olduğu sürece A_{aa} 'yı boyutlu hale getirebilir. (3.14) denklemi daha açık bir ifade ile

$$E_i = \frac{\epsilon_a}{2} \left[\sum_{j=1, j \neq i}^N \left(\frac{\alpha_a}{r_{ij}} \right)^{n_a} - B_a \left[\sum_{j=1, j \neq i}^N \left(\frac{\alpha_{ab}}{r_{ij}} \right)^{m_a} \right]^{\frac{1}{2}} \right] \quad (3.14)$$

şeklinde yazılır. Eğer r_l en yakın komşu uzaklığı ve her r_j 'inci komşu atom için i 'inci atom uzaklığı r_{ij} ise $r_{ij} = \delta_{ij} r_l$ 'dır. Bu durumda denklem (3.14) şu şekilde yazılabılır.

$$E_i = \frac{\epsilon_a}{2} \left[\left(\frac{\alpha_a}{r_i} \right)^{n_a} \sum_{j-kabuk} \frac{n_j}{\delta_{ij}^{n_a}} - B_a \left(\frac{\alpha_a}{r_i} \right)^{\frac{m_a}{2}} \left(\sum_{j-kabuk} \frac{n_j}{\delta_{ij}^{m_a}} \right)^{\frac{1}{2}} \right] \quad (3.15)$$

Burada j kabuğu bütün komşu kabuklar üzerinden toplam ifadesidir. Denklem (3.15) deki iki toplam, örgü içerisindeki atomların uyuşmasına bağlıdır ve metallerin gerçek özelliklerinden bağımsız bir şekilde sayısal olarak hesaplanabilir. Eğer $\beta_k = \sum_{j \text{ kabuk}} \frac{n_j}{\delta_{ij}^k}$ alınır

$$E_i = \frac{\epsilon_a}{2} \left[\beta_{n_a} \left(\frac{\alpha_a}{r_i} \right)^{n_a} - \sqrt{\beta_{m_a}} B_a \left(\frac{\alpha_a}{r_i} \right)^{\frac{m_a}{2}} \right] \quad (3.16)$$

denklemi elde edilir. Bu eşitlikte, $E_i = E_0^a$, $r_i = r_0 = \alpha_a / \sigma_a$ alınır ise

$$E_0^a = \frac{\epsilon_a}{2} \left[\beta_{n_a} \sigma_a^{n_a} - \sqrt{\beta_{m_a}} B_a \sigma_a^{\frac{m_a}{2}} \right] \quad (3.17)$$

denklemi yazılabılır. Böylece en yakın komşu atom uzaklığına göre enerjinin türevi

$$\frac{dE_i}{dr_i} = -\frac{\epsilon_a}{2} \left[n_a \beta_{n_a} \alpha_a^{n_a} \left(\frac{1}{r_i} \right)^{n_a+1} - \frac{m_a}{2} \sqrt{\beta_{m_a}} B_a \alpha_a^{\frac{m_a}{2}} \left(\frac{1}{r_i} \right)^{\frac{m_a+1}{2}} \right] \quad (3.18)$$

denklemi elde edilir. Bu türev, denklem aşağıdaki verildiği eşitlikte sıfır olmalıdır.

$$n_a \beta_{n_a} \sigma_a^{n_a} - \frac{m_a}{2} \sqrt{\beta_{m_a}} B_a \sigma_a^{\frac{m_a}{2}} = 0 \quad (3.19)$$

Bu eşitlikten türev denkleminin B_a değeri elde edilebilir.

$$B_a = 2 \frac{n_a \beta_{n_a}}{m_a \sqrt{\beta_{m_a}}} \sigma_a^{n_a - \frac{m_a}{2}} \quad (3.20)$$

Denklem (3.17) 'den

$$\varepsilon_a = \frac{2E_0^a}{\sigma_a^{n_a} m_a} \left(1 - \frac{2n_a}{m_a} \right)^{-1} \quad (3.21)$$

elde edilebilir.

3.3 Sıvı fcc metal alaşımıları için önerilen Sutton-Chen Potansiyel Modeli

Sıvı alaşımalar için (S. Dalgıç 2002) tarafından, Sutton-Chen potansiyeli için yeni bir form geliştirilmiştir. İki bileşenli sıvı metal alaşımlarında $A_c - B_{1-c}$, A ve B iyon türlerini, c sayı konsantrasyonunu gösterir. α alaşımı oluşturan A tipi bileşeni göstermek üzere, $\alpha\alpha$ etkileşmeleri için önerilen iki bileşenli metalik alaşımının potansiyel formu

$$V_{\alpha\alpha}^{\text{eff}}(r) = \varepsilon_{\alpha\alpha} \left[\left(\frac{a_{\alpha\alpha}^f}{r} \right)^{n_{\alpha\alpha}} - \frac{n_{\alpha\alpha} S_{n_{\alpha\alpha}}^f}{m_{\alpha\alpha} S_{m_{\alpha\alpha}}^f} \left(\frac{a_{\alpha\alpha}^f}{r} \right)^{m_{\alpha\alpha}} \right] \quad (3.22)$$

ile verilir. $\varepsilon_{\alpha\alpha}$ saf metaller için enerji boyutunda bir parametre, $S_{n_{\alpha\alpha}}^f$ ve $S_{m_{\alpha\alpha}}^f$ ideal bir fcc kristalinin örgü toplamıdır ve aşağıdaki gibi verilir

$$S_{n_{\alpha\alpha}}^f = \sum_{j \neq i} \left(\frac{a_{\alpha\alpha}^f}{r_j} \right)^{n_{\alpha\alpha}}, \quad S_{m_{\alpha\alpha}}^f = \sum_{j \neq i} \left(\frac{a_{\alpha\alpha}^f}{r_j} \right)^{m_{\alpha\alpha}} \quad (3.23)$$

$a_{\alpha\alpha}^f$ saf metaller için örgü parametresidir. $\varepsilon_{\alpha\alpha}, c_{\alpha\alpha}, m_{\alpha\alpha}$ ve $n_{\alpha\alpha}$ potansiyel parametreleridir. $c_{\alpha\alpha}$ potansiyel parametresi aşağıdaki gibidir.

$$c_{\alpha\alpha} = \frac{n_{\alpha\alpha} S_{n_{\alpha\alpha}}^f}{m_{\alpha\alpha} (S_{m_{\alpha\alpha}}^f)^{1/2}} \quad (3.24)$$

Buradaki $m_{\alpha\alpha}$ ve $n_{\alpha\alpha}$ parametreleri pozitif tamsayılar ve saf metaller için $n_{\alpha\alpha} > m_{\alpha\alpha} \geq 4$ şartını sağlaması gereklidir.

β alaşımı oluşturan B tipi bileşeni göstermek üzere, $\beta\beta$ etkileşmeleri için önerilen iki bileşenli metalik alaşumların potansiyel formu

$$V_{\beta\beta}^{eff}(r) = \epsilon_{\beta\beta} \left[\left(\frac{a_{\beta\beta}^f}{r} \right)^{n_{\beta\beta}} - \frac{n_{\beta\beta} S_{n_{\beta\beta}}^f}{m_{\beta\beta} S_{m_{\beta\beta}}^f} \left(\frac{a_{\beta\beta}^f}{r} \right)^{m_{\beta\beta}} \right] \quad (3.25)$$

ile verilir. $\epsilon_{\beta\beta}$ saf metaller için enerji boyutunda bir parametre, $S_{n_{\beta\beta}}^f$ ve $S_{m_{\beta\beta}}^f$ ideal bir fcc kristalinin örgü toplamıdır ve aşağıdaki gibi verilir

$$S_{n_{\beta\beta}}^f = \sum_{j \neq i} \left(\frac{a_{\beta\beta}^f}{r_j} \right)^{n_{\beta\beta}}, \quad S_{m_{\beta\beta}}^f = \sum_{j \neq i} \left(\frac{a_{\beta\beta}^f}{r_j} \right)^{m_{\beta\beta}} \quad (3.26)$$

$a_{\beta\beta}^f$ saf metaller için örgü parametresidir. $\epsilon_{\beta\beta}, c_{\beta\beta}, m_{\beta\beta}$ ve $n_{\beta\beta}$ potansiyel parametreleridir. $c_{\beta\beta}$ potansiyel parametresi aşağıdaki gibidir.

$$c_{\beta\beta} = \frac{n_{\beta\beta} S_{n_{\beta\beta}}^f}{m_{\beta\beta} (S_{m_{\beta\beta}}^f)^{1/2}} \quad (3.27)$$

Buradaki $m_{\beta\beta}$ ve $n_{\beta\beta}$ parametreleri pozitif tamsayılar ve saf metaller için $n_{\beta\beta} > m_{\beta\beta} \geq 4$ şartını sağlaması gereklidir.

A_c-B_{1-c} iki bileşenli metalik alaşımında A ve B iyonları arasındaki etkileşmeleri tanımlamak için önerilen potansiyel

$$V_{\alpha\beta}^{\text{eff}}(r) = \epsilon_{\alpha\beta} \left[\left(\frac{a_{\alpha\beta}^f}{r} \right)^{n_{\alpha\beta}} - \frac{n_{\alpha\beta} S_{n_{\alpha\beta}}^f}{m_{\alpha\beta} S_{m_{\alpha\beta}}^f} \left(\frac{a_{\alpha\beta}^f}{r} \right)^{m_{\alpha\beta}} \right] \quad (3.28)$$

bu formda verilir. Burada α A iyonunu β ise B iyonunu göstermektedir. $S_{n\beta}^f$ ve $S_{m\alpha\beta}^f$ alaşımlar için örgü toplamıdır ve

$$S_{n_{\alpha\beta}}^f = \sum_{j \neq i} \left(\frac{a_{\alpha\beta}^f}{r_j} \right)^{n_{\alpha\beta}}, \quad S_{m_{\alpha\beta}}^f = \sum_{j \neq i} \left(\frac{a_{\alpha\beta}^f}{r_j} \right)^{m_{\alpha\beta}} \quad (3.29)$$

$c_{\alpha\alpha}$ potansiyel parametresi aşağıdaki gibi verilir.

$$c_{\alpha\beta} = \frac{n_{\alpha\beta} S_{n_{\alpha\beta}}^f}{m_{\alpha\beta} (S_{m_{\alpha\beta}}^f)^{1/2}} \quad (3.30)$$

$\epsilon_{\alpha\beta}$, $m_{\alpha\beta}$ ve $n_{\alpha\beta}$ potansiyel parametreleri

$$\epsilon_{\alpha\beta} = (\epsilon_{\alpha\alpha} \epsilon_{\beta\beta})^{1/2}, \quad m_{\alpha\beta} = \frac{1}{2}(m_{\alpha\alpha} + m_{\beta\beta}), \quad n_{\alpha\beta} = \frac{1}{2}(n_{\alpha\alpha} + n_{\beta\beta}) \quad (3.31)$$

ile verilir. Alaşımlar için önerilen bu potansiyelde, saf metallerin a örgü parametresi kullanılmamaktadır. Alaşımlar için a örgü parametresi bağlanma enerjilerinin fit edilmesiyle elde edilmektedir.

BÖLÜM 4

SIVI METAL VE METAL ALAŞIMLARIN YAPISI VE TERMODİNAMİK BÜYÜKLÜKLERİ

Bu bölümde sıvı metal ve metal合金 sistemleri için değişik parametrizasyon yöntemleri ile hesaplanan etkin çiftler potansiyellerini kullanarak incelenen sistemlerin hesaplanan yapısal ve termodinamik özellikleri ile ilgili bilgiler verilmektedir.

4.1. Sıvı Metal ve Metal Alışımaların Yapısı

4.1.1 Sıvı Metaller için Yapı Faktörleri

Çiftler korelasyon fonksiyonu $g(r)$ 'nin sıvı teorilerinde merkezi bir önemi vardır. Deneysel olarak bu fonksiyon sıvılar üzerindeki X-işını ve nötron girişim deneylerinden elde edilebilir.

N özdeş atomlardan oluşmuş sıvinin λ dalga boylu tek renkli x-işinlarına maruz kaldığı durumu ele alalım. Her atomdan gelen saçılmanın genliği verilen atomla bağlantılı elektrondan gelen atomik saçılma faktörü cinsinden ifade edilir. \vec{r}_j konumunda yerleşmiş atomdan saçılan dalganın faz faktörü $\exp[i(\vec{k}' - \vec{k})\vec{r}_j]$ 'dir. Burada \vec{k} ve \vec{k}' vektörleri geren ve saçilan işinların dalga vektörleridir. Sıvı örnekler için gözlenen saçılma genliği atomların ortalama konfigürasyonuna bağlı olduğu için saçılma şiddeti

$$I = I^{(A)} \left\langle \sum_{i,j} \exp[i\vec{q}(\vec{R}_j - \vec{R}_i)] \right\rangle \quad (4.1)$$

formunda yazılır (Shimoji 1977).

Burada $\vec{q} = \vec{k}' - \vec{k}$ ve $I^{(A)}$ atomik saçılma faktörünün modülünün karesine eşit olan, tek atomdan saçılma faktörüdür ve $\langle \dots \rangle$ ıslık ortalamayı gösterir. \vec{q} 'nun büyüklüğü

$$q = |\vec{q}| = (4\pi/\lambda) \sin \frac{1}{2}\theta \quad (4.2)$$

şeklinde verilir. Burada θ saçılma açısıdır. $\sum_{i,j} \exp[i\vec{q}(\vec{R}_j - \vec{R}_i)]$ 'nin ortalamasını almak $\exp[i\vec{q} \cdot \vec{R}]$ niceliğinin atom çiftlerinin tüm konfigürasyonları üzerinden ortalamasını almaktır. Denklem (4.7)'de verilen $g(r)$ çiftler korelasyon fonksiyonu ve $g(r) - 1 (= h(r))$ tanımı kullanılarak

$$I(q) = N I^{(A)}(q) S(q) \quad (4.3)$$

elde edilir. Burada $S(q)$ statik yapı faktörü olarak adlandırılır. Ve

$$S(q) = 1 + \rho \int [g(r) - 1] \exp[i\vec{q} \cdot \vec{R}] d^3 R \quad (4.4)$$

ile verilir. Fourier ters dönüşümünün kullanılmasıyla

$$g(r) = 1 + \rho \int [S(q) - 1] \frac{q \sin qR}{R} dq \quad (4.5)$$

olduğu bulunur.

4.1.2 İkili Sıvı Metaller Alaşımları için Kısmi Yapı Faktörleri

T sıcaklığında, V toplam hacminde, N_1 tane birinci cins atom ve N_2 tane ikinci cins atomdan oluşan basit iki bileşenli bir sistem düşünelim. Bu alaşımın toplam iyon sayısı $N = N_1 + N_2$ ve toplam iyon sayı yoğunluğu $\rho = N/V$ dir. Alaşımın bileşenlerinin atomik yoğunlukları $C_1 = C$ ve $C_2 = 1-C$ ve kısmi sayı yoğunlukları $\rho_i = N_i/V_i = C_i\rho$ olarak yazılabilir.

Orijinde bulunan i cinsi bir iyondan r uzaklığında ve dr hacim elemanı içinde j cinsi bir iyonun bulunma olasılığı $\rho_i g_{ij}(r) dr$ ile verilir. Burada $g_{ij}(r)$ istatistik mekanığın temel bir tanımı olan çiftler dağılım fonksiyonudur.

Ashcroft - Langreth (AL) kısmi yapı faktörleri $S_{ij}(r)$ ' ler, $g_{ij}(r)$ çiftler korelasyon fonksiyonları cinsinden

$$S_{ij}(q) = \delta_{ij} + (\rho_i \rho_j)^{1/2} \int [g_{ij}(r) - 1] e^{iq \cdot r} dr \quad (4.6)$$

denklemi ile verilir. Bu denklemin Fourier dönüşümü ile $g_{ij}(r)$ çiftler korelasyon fonksiyonları elde edilir.

$$g_{ij}(r) = 1 + \frac{1}{(2\pi)^3 (\rho_i \rho_j)^{1/2}} \int [S_{ij}(q) - \delta_{ij}] e^{-iq \cdot r} dq \quad (4.7)$$

denklemi ile tanımlanır.

(Bhatia ve Thornton 1970) , AL'in yalnızca alaşımındaki iyon türleri üzerine yaptıkları tanımlamalar yerine, N toplam parçacık sayısı ve C sayı yoğunluğu değişkenlerine bağlı tanımlar yapmışlardır. Daha sonra geliştirilen bu teoriye $g_{NN}(r)$, $g_{NC}(r)$ ve $g_{CC}(r)$ tanımlarını vererek başlayabiliriz, (March ve Tosi 1966);

$$\begin{aligned}
g_{NN} &= C_1^2 g_{11}(r) + 2C_1 C_2 g_{12}(r) + C_2^2 g_{22}(r), \\
g_{NC} &= C_1 C_2 [C_1 g_{11}(r) + (C_2 - C_1) g_{12}(r) - C_2 g_{22}(r)], \\
g_{CC} &= C_1^2 C_2^2 [g_{11}(r) - 2g_{12}(r) - g_{22}(r)]
\end{aligned} \tag{4.8}$$

Bu denklemler göstermektedir ki büyük yada küçük $S_{CC}(q)$ aynı dalga boyunun büyük yada küçük yoğunluk sıçramalarının gösterimidir. Gerçekte $q = 0$ da, $S_{CC}(0) = \infty$, faz ayrimı (PS) sağlarken, $S_{CC}(0) = 0$ bileşik oluşumunu (CF) anlatır. Diğer bir deyişle; eğer $S_{CC}(0) \gg C_1 C_2$ ise PS eğiliminden, $S_{CC}(0) \ll C_1 C_2$ ise CF eğiliminden bahsedilir. $S_{CC}(q)$ 'nun deneysel olarak ölçülmesi, $S_{NC}(q) = 0$ olan alaşımalar için $\phi_{CC}(r)$ düzen potansiyeli olarak tanımlanan çiftler potansiyelinin, (Ashcroft ve Langreth 1967) kısmi yapı faktörleri $S_{ij}(r)$ 'ler, $g_{ij}(r)$ çiftler dağılım fonksiyonları cinsinden

$$\begin{aligned}
S_{NN}(q) &= C_1 S_{11}(q) + C_2 S_{22}(q) + 2(C_1 C_2)^{1/2} S_{12}(q) \\
S_{NC}(q) &= C_1 C_2 [S_{11}(q) + [(C_2/C_1)^{1/2} - (C_1/C_2)^{1/2}] S_{12}(q) - S_{22}(q)] \\
S_{CC}(q) &= C_1 C_2 [C_2 S_{11}(q) - 2(C_1 C_2)^{1/2} S_{12}(q) + C_2 S_{22}(q)]
\end{aligned} \tag{4.9}$$

denklemleriyle bağlıdır.

Faber ve Zeman, sıvı ikili alaşımaların transport özellikleri hakkındaki çalışmalarında kısmi yapı faktörleri için kullandıkları ifade

$$a_{\alpha\beta}(Q) = 1 + \rho_0 \int [g_{\alpha\beta}(r) - 1] \exp(-iQr) dr \tag{4.10}$$

dir (Faber ve Ziman 1965). Ashcroft-Langreth tarafından verilen yapı faktörünün Faber-Zeman formu

$$\begin{aligned} a_{11}(Q) &= [S_{11}(Q) - c_2]/c_1 \\ a_{22}(Q) &= [S_{22}(Q) - c_1]/c_2 \\ a_{12}(Q) &= S_{12}(Q)/(c_1 c_2)^{1/2} + 1 \end{aligned} \quad (4.11)$$

bu formda yazılabılır.

4.1.3 Sıvı yapı teorileri: VMHNC İntegral Denklem Yaklaşımı

Sıvı hal teorisinde, O-Z denklemindeki $c(r)$ için verilen bir yaklaşım

$$c(r) = h(r) - \ln(g(r)e^{\beta\phi(r)+B(r)}) \quad (4.12)$$

şeklindeki hypernetted chain (HNC) yaklaşımıdır (Green 1960, Leeuwen vd. 1959, Meeron 1960, Morita ve Hiroike 1960, Rushbrook 1960, Verlet 1960). Burada $\beta = (k_B T)^{-1}$ sıcaklık kere Boltzman sabitinin tersidir. $\phi(r)$ çiftler etkileşme potansiyelidir ve $B(r)$ 'ye köprü fonksiyonu denir. Bunun için bazı yaklaşımlar yapılmalıdır. Köprü fonksiyonunun evrensel varsayımini takip ederek (Hansen ve McDonald 1986) katı küreler için Percus-Yevick (PY)'nin yaklaşımında elde edilmiş olanını, $B_{PY}(r, \eta)$ seçtik. Bu fonksiyonlar yalnız bir parametreye, sıklık paketleme kesrine bağlıdır ve bunu belirleme işlemi, birbirine çok yakın olmasına karşın, bizi farklı yaklaşımlara götürür (Percus ve Yevick 1958, Thiele 1963). Aşağıda bu çalışmada kullanılan VMHNC teorisini kısaca tarif edeceğiz ve ilgilenen okuyuculara (Rosenfeld 1986, Gonzalez vd. 1991, Gonzalez vd. 1992) kaynaklarını öneririz.

Verilen termodinamik durumun bir fonksiyonu ve köprü fonksiyonunun bir fonksiyoneli (Rosenfeld 1986, Gonzalez vd. 1991, Gonzalez vd. 1992) olan indirgenmiş Helmholtz serbestlik enerjisinin konfigrasyonel kısmı için yeniden düzenlenmiş-Hypernetted edilmiş zincir (MHNC) ifadesini,

$$f^{MHNC} \equiv F'_{MHNC}/Nk_B T$$

şeklinde ele alarak işe başlayalım. Yukarda ki $B_{PY}(r, \eta)$ 'yı seçersek, MHNC serbestlik enerjisi β , ρ ve η 'nın bir fonksiyonu olur. η 'yı termodinamik durumun bir fonksiyonu olarak, yani $\eta = \eta(\beta, \rho)$, seçmek için VMHNC kriteri,

$$\frac{\partial f^{VMHNC}(\beta, \rho, \eta)}{\partial \eta} = 0 \quad (4.13)$$

şeklini alır. Burada,

$$f^{VMHNC}(\beta, \rho, \eta) = f^{MHNC}(\beta, \rho, \eta) - f_{PY}^{MHNC}(\eta) + f_{CS}(\eta) \quad (4.14)$$

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

4.2 Termodinamik Büyüklükler

Bu bölümde sıvı metallerin iç enerjilerini E_{iq} ve sıvı alaşımaların entalpi değerlerini hesaplamak için kullanılan yöntemlerle ile ilgili bilgiler verilmektedir.

4.2.1 İç Enerji

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

$$Q_N = \Lambda^{3N} Z_N / N! \quad (4.15)$$

formunda yazılır. Burada Λ tek boyutlu harekette kinetik enerji için

$$\Lambda = (Mk_B T / 2\pi\hbar^2)^{1/2} \quad (4.16)$$

şeklinde verilen bölüşüm fonksiyonu ve Z_N ile verilen konfigürasyonal bölüşüm fonksiyonudur. Denklemindeki $N!$ etkisi sisteme deki N parçacığın tamamının hesaplamaya katılması gerekliliğinden kaynaklanır. Metalin toplam enerjisi

$$E = \frac{3}{2}k_B T + \frac{1}{Z_N} \int \dots \int U_T \exp(-U_T/k_B T) d^3R_1 \dots d^3R_N \quad (4.17)$$

olarak yazılabılır. Denklem (4.17)'de aşağıdaki U_T formu kullanılrsa

$$U_T(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) = Nu_{eg} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \phi(r_{ij}) \quad (4.18)$$

$$E = N u_{eg} + \frac{3}{2} N k_B T + \frac{N}{2} \rho \int g_0^{(2)}(r) \phi(r) d^3 r \quad (4.19)$$

elde edilir. Metalin atom başına iç enerjisi ise

$$E_{ic} = \frac{3}{2} k_B T + \frac{1}{2} \rho \int g_0^{(2)}(r) \phi(r) d^3 r \quad (4.20)$$

şeklinde yazılabilir.

4.2.2 Karışma Entalpisi

Hamiltonyenin her bir atomu için beklenen E' değeri rastgele $A_C B_{l-C}$ alaşımı için $c_A = x$ ve $c_B = 1 - x$ olmak üzere $c_A + c_B = 1$ koşuluyla aşağıdaki gibi verilmiştir (Tabar ve Sutton 1991).

$$\begin{aligned} E' = & \frac{1}{2} \left\{ \sum_s Z_s [c_A^2 V^{AA}(r_s) + c_B^2 V^{BB}(r_s) + 2c_A c_B V^{AB}(r_s)] \right\} \\ & - c_A d^{AA} \left\{ \sum_s Z_s [c_A \phi^{AA}(r_s) + c_B \phi^{AB}(r_s)] \right\}^{1/2} \\ & - c_B d^{BB} \left\{ \sum_s Z_s [c_B \phi^{BB}(r_s) + c_A \phi^{AB}(r_s)] \right\}^{1/2} \end{aligned} \quad (4.21)$$

r_s , s 'nin koordinasyon kabuğunun yarıçapı ve Z_s uygun koordinasyon numarasıdır. Her r_s , ve a^{AA}, a^{BB} ve a^{AB} parametreleri aynı uzunluktaki ölçeklerde ifade edilmelidir. Rastgele alaşımının a^* denge örgü parametresinin evrensel uzunluk ölçüsünde seçtil. Bu yolla rastgele alaşımının E' enerjisi a^* fonksiyonu cinsinden aşağıdaki formda verilebilir.

$$\begin{aligned}
E^r = & \frac{1}{2} c_A^2 S_{nAA} \left[\frac{a^{AA}}{a^*} \right]^{nAA} + \frac{1}{2} c_B^2 S_{mBB} \left[\frac{a^{BB}}{a^*} \right]^{mBB} + c_A c_B S_{nAB} \left[\frac{a^{AB}}{a^*} \right]^{nAB} \\
& - c_A d^{AA} \left(c_A S_{mAA} \left[\frac{a^{AA}}{a^*} \right]^{mAA} + c_B S_{mAB} \left[\frac{a^{AB}}{a^*} \right]^{mAB} \right)^{1/2} \\
& - c_B d^{BB} \left(c_B S_{mBB} \left[\frac{a^{BB}}{a^*} \right]^{mBB} + c_A S_{mAB} \left[\frac{a^{AB}}{a^*} \right]^{mAB} \right)^{1/2}
\end{aligned} \tag{4.22}$$

Burada, $d^{AA} = \varepsilon^{AA} c^{AA}$, $d^{BB} = \varepsilon^{BB} c^{BB}$ olmak üzere, S_{nAA}, S_{mBB} gibi parametreler boyutsuz fcc örgü toplamlarıdır

$$S_{nAA} = \sum_s Z_s \left[\frac{a^*}{r_s} \right]^{nAA}, S_{mAA} = \sum_s Z_s \left[\frac{a^*}{r_s} \right]^{mAA} \tag{4.23}$$

denklemleri ile verilebilir. Her bir alaşım konsantrasyonunda a^* için denge koşulu verilmektedir.

$$\frac{\partial E^r}{\partial a^*} = 0 \tag{4.24}$$

Rastgele bir alaşım için denge örgü parametreleri sınırlandırıldığında c_{11}^r, c_{12}^r ve c_{44}^r elastik sabitlerini hesaplayabiliriz. Bu sabitler şu şekilde verilmiştir.

$$c_{11}^r = \frac{1}{\Omega} \frac{\partial^2 E^r}{\partial e_{11}^2}, c_{12}^r = \frac{1}{\Omega} \frac{\partial^2 E^r}{\partial e_{11} \partial e_{22}}, c_{44}^r = \frac{1}{4\Omega} \frac{\partial^2 E^r}{\partial e_{12}^2} \tag{4.25}$$

Ω atomik hacim $(a^*)^3 / 4$ ve e_{11}, e_{22} ve e_{12} gerilim tensörlerinin bileşenleridir. Her atom için 0K'deki karışımın entalpisi ΔH bir kereliğine ihmali edilebilir ve aşağıdaki denklem ile hesaplanır.

$$\Delta H = E^r - c_A E^A - c_B E^B \tag{4.26}$$

E^A ve E^B , A ve B elementer metallerinin atomik bağlanma enerjileridir.

BÖLÜM 5

SONUÇLAR VE TARTIŞMA

5.1 Sıvı Metaller

Bu bölümde bazı sıvı geçiş metaller için ergime noktaları civarında Sutton-Chen potansiyellerini kullanarak hesaplanan etkin çiftler potansiyelleri verilmektedir. Bu çalışmada sıvı geçiş metallerinin ergime noktaları civarındaki termodinamik durum parametreleri (Waseda 1982)'dan alınmış olup Tablo 1'de verilmektedir.

Tablo 5.1. Sıvı geçiş metallerinin ergime noktaları civarındaki termodinamik durum parametreleri

Metal	T(K)	ρ (atom/ A^3)
Ni	1773	0.0792
Cu	1423	0.0755
Pd	1853	0.0594
Ag	1273	0.0518
Pt	2053	0.0577
Au	1423	0.0526
Pb	1023	0.0295
Al	943	0.0528

Bu çalışmada Ni,Cu,Pd,Ag,Pt,Au,Pb,Al metalleri için çok cisimli Sutton-Chen tipi potansiyelleri sıvı sistemlerinin deneysel verileri kullanarak değişik parametrisasyon yöntemleri ile; koordinasyon sayılarına göre (140 ve 80 atom için), kesme mesafesine göre ($r_{\text{son}}=2a^f$ ve $r_{\text{son}}=r_{\text{BS}}$) belirlenen potansiyel parametreleri kullanılarak hesaplanmıştır. Elde edilen parametreler için katı özellikleri fit edilerek belirlenen SC (Sutton ve Chen 1990) potansiyel parametreleri ile karşılaştırılmıştır. SC tarafından verilen katı sistemlerdeki potansiyel parametreleri Tablo 5.2'de sunulmuştur. Burada a^f örgü parametresi, c , m ve n boyutsuz parametre, B^f hacim modülü, E_c^f bağlanma enerjisi ve ϵ enerji boyutunda bir potansiyel parametredir.

Tablo 5.2. Bazı sıvı geçiş metalleri için Sutton-Chen (SC) potansiyel parametreleri

Metal	m	n	$\epsilon(eV)$	C	$E_c^f(eV)$	a^f	$B^f(eVA^{-3})$
Ni	6	9	1.5707×10^{-2}	39.432	4.44	3.52	1.22
Cu	6	9	1.2382×10^{-2}	39.432	3.50	3.61	0.89
Pd	7	12	4.1790×10^{-3}	108.27	3.94	3.89	1.25
Ag	6	12	2.5415×10^{-3}	144.41	2.96	4.09	0.69
Pt	8	10	1.9833×10^{-2}	34.408	5.86	3.92	1.73
Au	8	10	1.2793×10^{-2}	34.408	3.78	4.08	0.99
Pb	7	10	5.5765×10^{-3}	45.778	2.04	4.95	0.26
Al	6	7	3.3147×10^{-2}	16.399	3.34	4.05	0.47

5.1.1 Atomlararası SC etkin çiftler potansiyelleri

Koordinasyon sayısına göre

Bu bölümde bazı sıvı geçiş metallerinin koordinasyon sayılarına göre yapılan parametrisasyon ile belirlenen S-C potansiyel parametreleri ile Finnis-Sinclair etkin çiftler potansiyel yaklaşımı kullanılarak hesaplanan atomlar arası etkin çiftler potansiyelleri verilmektedir.

140 atom için

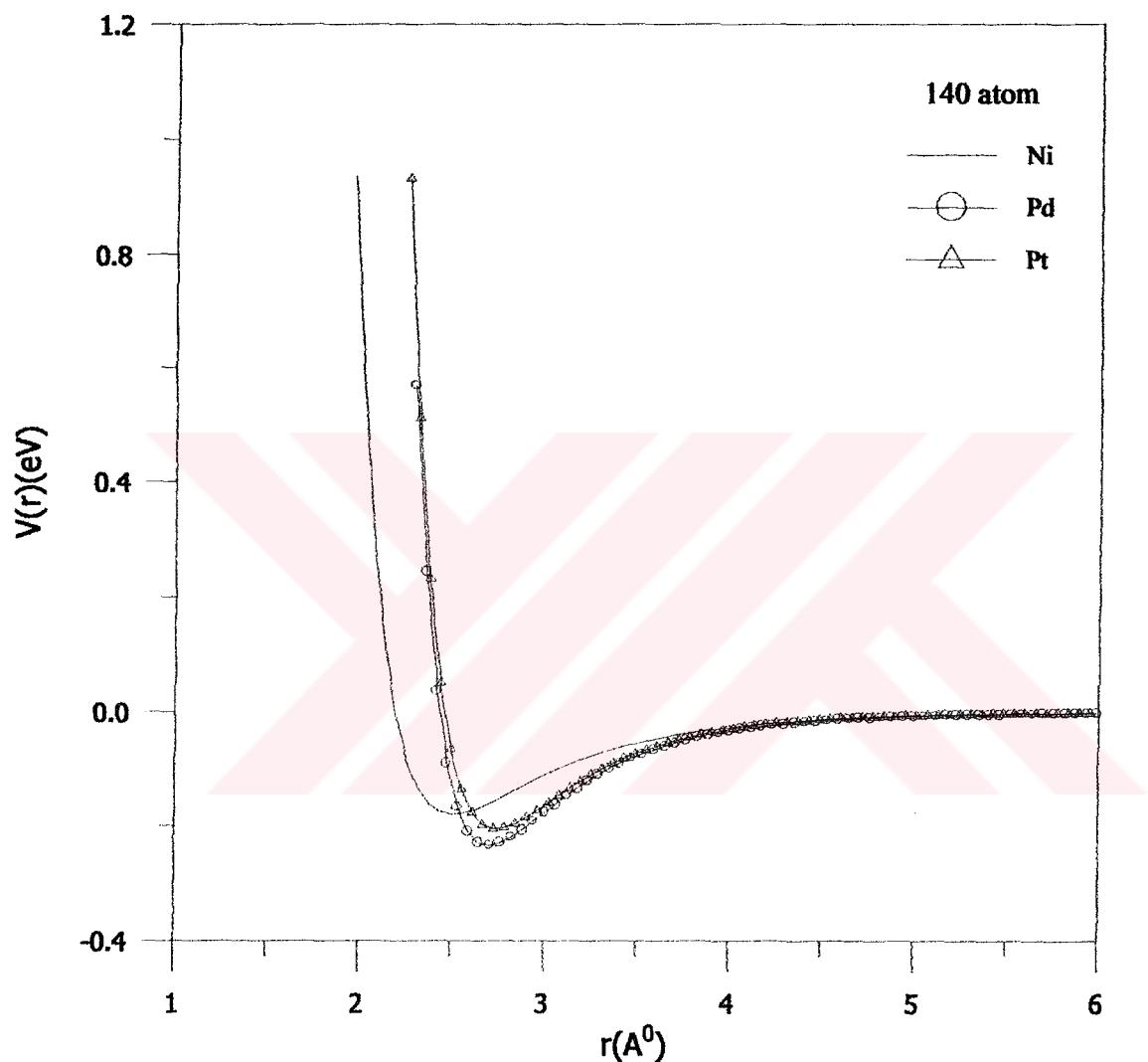
Ni,Cu,Pd,Ag,Pt,Au,Pb,Al sıvı metaller için koordinasyon sayıları 140 olan metallerin potansiyel parametreleri hesaplanmış ve S-C potansiyel parametreleri ile Tablo 5.3'de karşılaştırılmıştır. Aynı tabloda 140 atoma karşılık gelen kesme mesafesi r_{son} 'da verilmektedir. Tablo 5.3'ten görüldüğü gibi r_{son} mesafesi, periyodik tablodaki trende uygun olarak bir sütun boyunca uygun olarak artmaktadır sadece Au metalinde bir uyumsuzluk görülmektedir. Ayrıca periyodik tabloya uygun bir şekilde soldan sağa doğru gidildikçe r_{son} mesafesi artmaktadır.

Tablo 5.3. 140 atom için hesaplanan potansiyel parametrelerinin S-C parametreleri ile karşılaştırılması

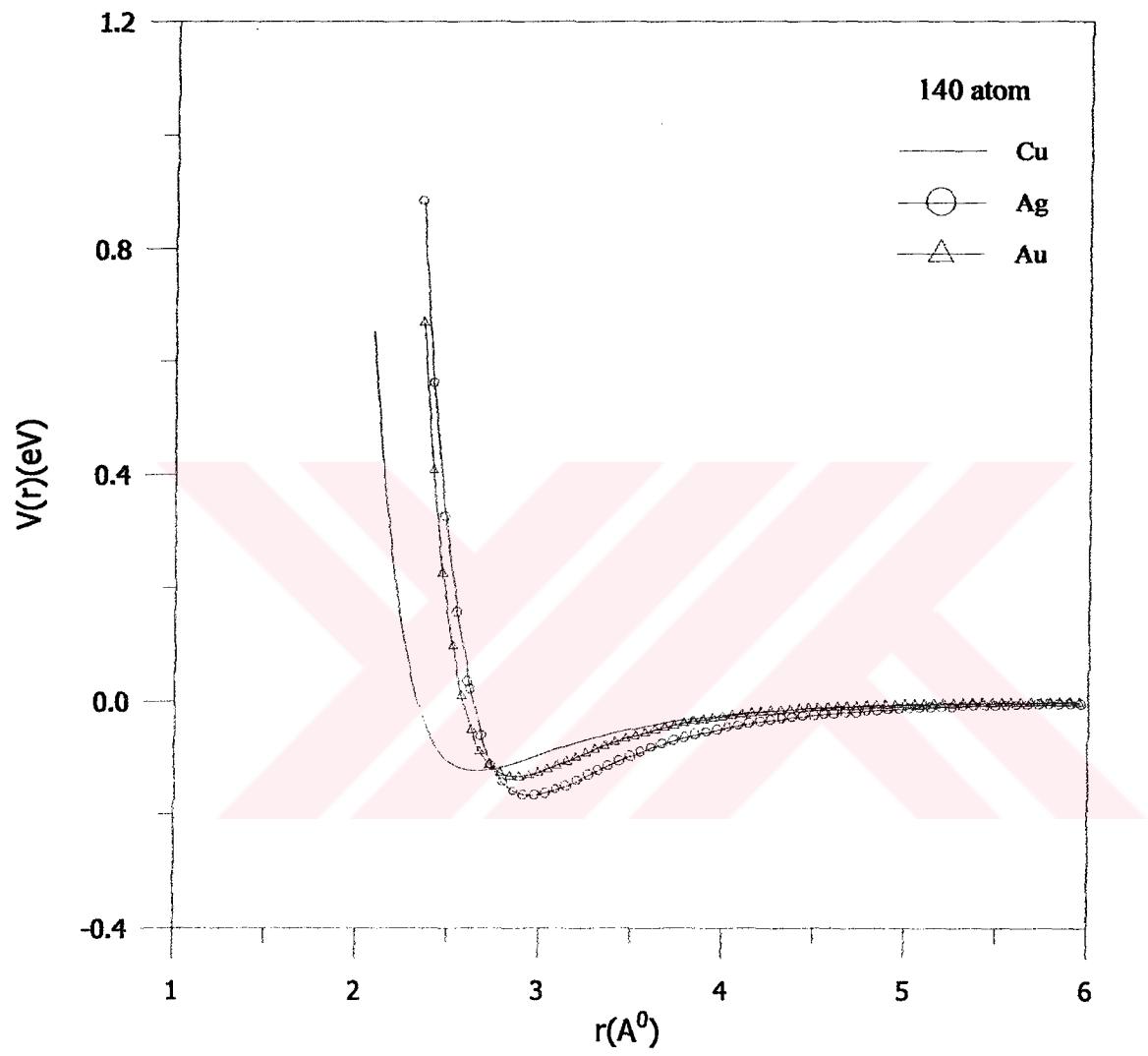
Metal	m	n	$\varepsilon (eV)$	C	$E_c^f (eV)$	a^f	$B^f (eVA^{-3})$	$r_{son} (A)$
Ni	6	9	1.8227×10^{-2} (1.5707×10^{-2})	38.54 (39.432)	4.44	3.52	1.22	7.778
Cu	6	9	1.6028×10^{-2} (1.2382×10^{-2})	34.98 (39.432)	3.50	3.61	0.89	7.887
Pd	7	12	4.2709×10^{-3} (4.1790×10^{-3})	116.986 (108.27)	3.94	3.89	1.25	8.533
Ag	6	12	3.3024×10^{-3} (2.5415×10^{-3})	130.654 (144.41)	2.96	4.09	0.69	8.953
Pt	8	10	2.3768×10^{-2} (1.9833×10^{-2})	32.3 (34.408)	5.86	3.92	1.73	8.624
Au	8	10	1.6560×10^{-2} (1.2793×10^{-2})	30.768 (34.408)	3.78	4.08	0.99	8.911
Pb	7	10	5.297×10^{-3} (5.5765×10^{-3})	50.443 (45.778)	2.04	4.95	0.26	10.658
Al	6	7	4.1927×10^{-2} (3.3147×10^{-2})	14.684 (16.399)	3.34	4.05	0.47	8.909

Hesaplanan etkin çiftler potansiyelleri periyodik tabloya uygun bir şekilde Ni,Pd,Pt için Şekil 5.1'de , Cu,Ag,Au için Şekil 5.2'de ve Pb,Al için Şekil 5.3'te gösterilmektedir.

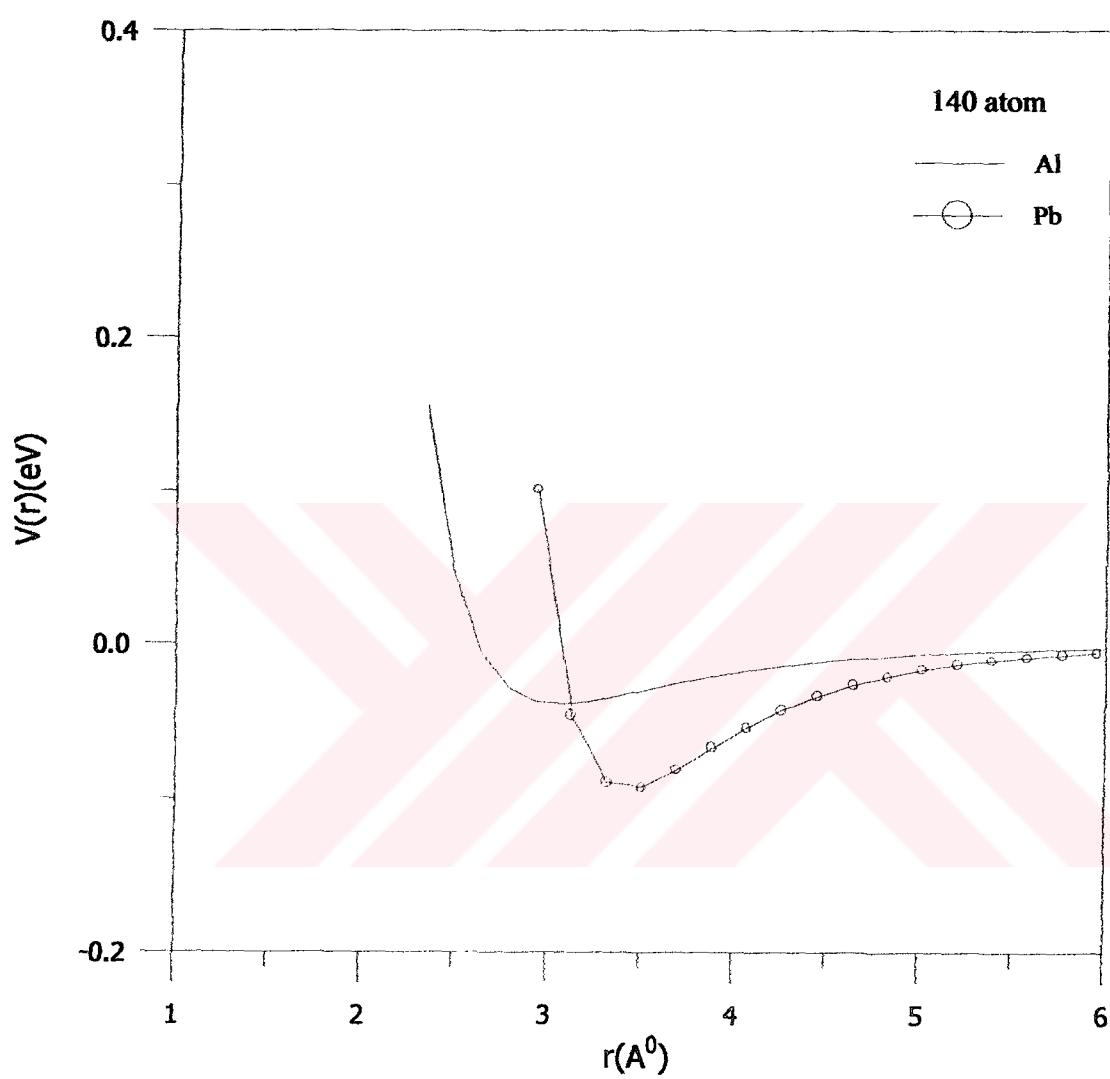
Şekil (5.1-5.3)'ten görüldüğü gibi 140 atoma karşılık gelen potansiyellerde r_{son} mesafesi arttıkça potansiyellerin minimumu büyük r değerlerine doğru kaymaktadır.



Şekil 5.1: 140 atom için Ni,Pd,Pt metallerinin etkin çiftler potansiyelleri



Şekil 5.2: 140 atom için Cu,Ag,Au metallerinin etkin çiftler potansiyelleri



Şekil 5.3: 140 atom için Al,Pb metallerinin etkin çiftler potansiyelleri

180 atom için

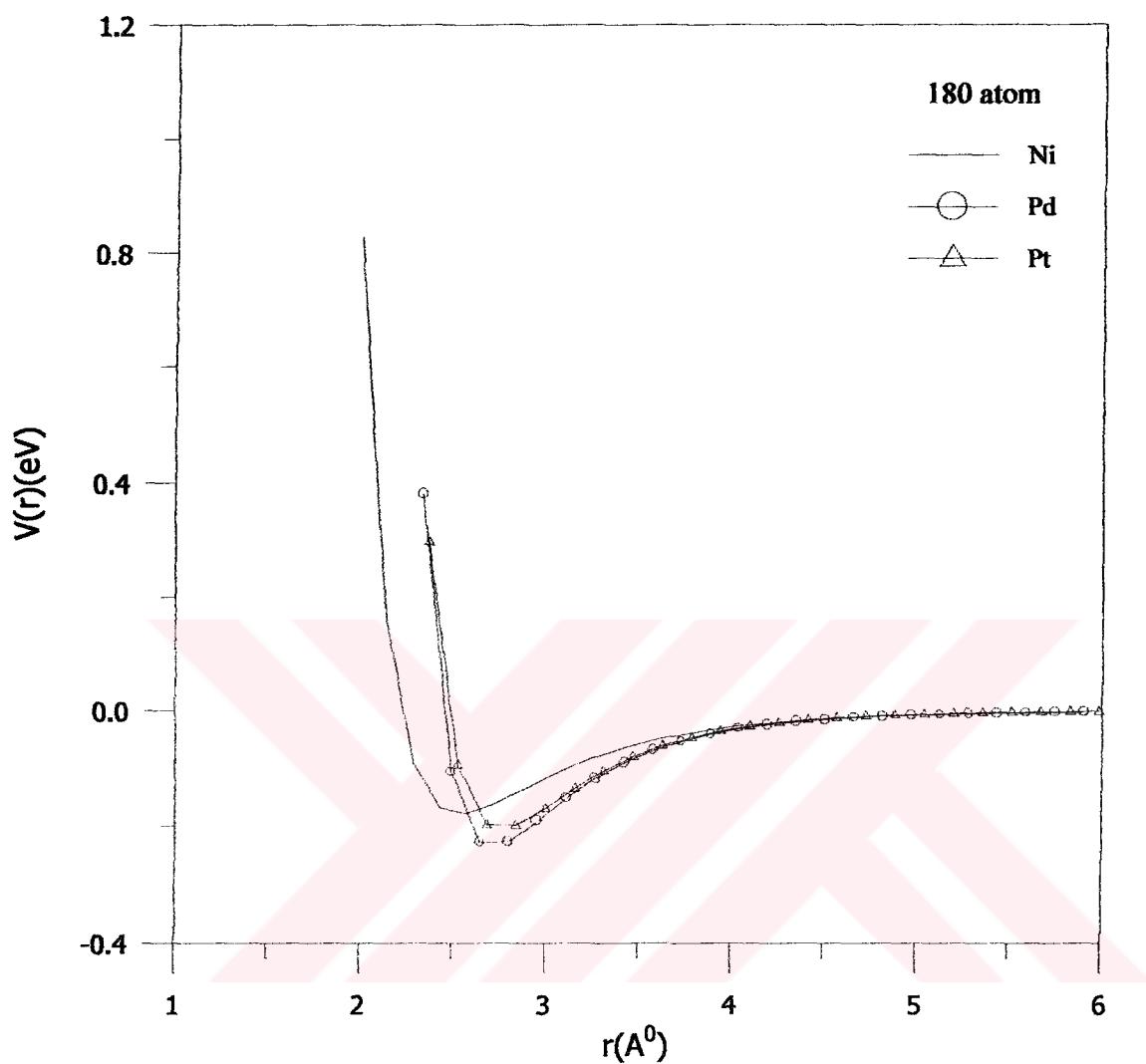
Ni,Cu,Pd,Ag,Pt,Au,Pb,Al sıvı metaller için koordinasyon sayıları 180 olan metallerin potansiyel parametreleri hesaplanmış ve S-C potansiyel parametreleri ile Tablo 5.4'te karşılaştırılmıştır. Aynı tabloda 180 atoma karşılık gelen kesme mesafesi r_{son} 'da verilmektedir. Tablo 5.4'ten görüldüğü gibi r_{son} mesafesi, periyodik tablodaki trende uygun olarak sütun boyunca uygun olarak artmaktadır sadece Au metalinde bir uyumsuzluk görülmektedir. Ayrıca periyodik tabloya uygun bir şekilde soldan sağa doğru gidildikçe r_{son} mesafesi artmaktadır.

Tablo 5.4. 180 atom için hesaplanan potansiyel parametrelerinin S-C parametreleri ile karşılaştırılması

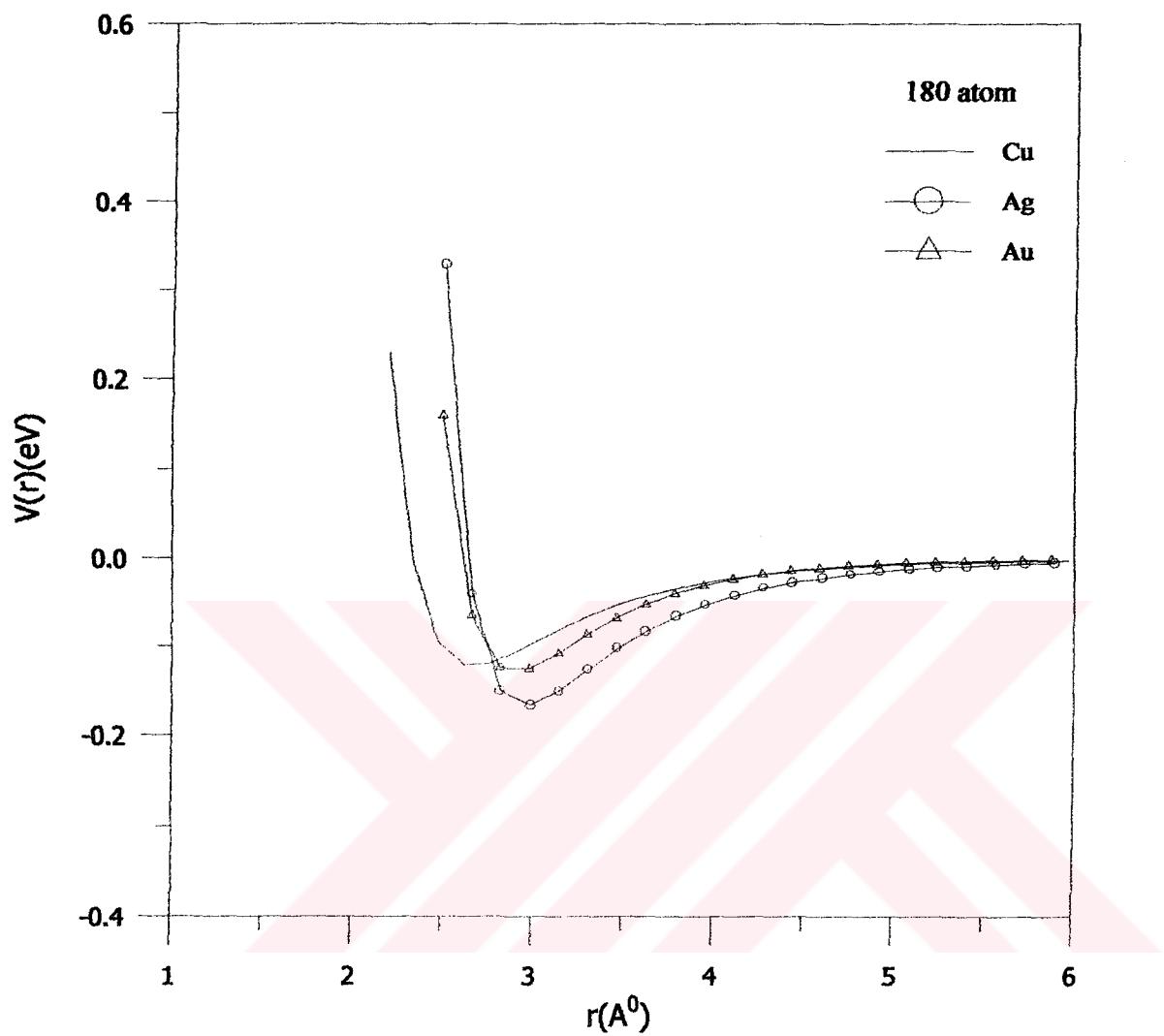
Metal	m	n	$\varepsilon (eV)$	C	$E_c^f (eV)$	a^f	$B^f (eVA^{-3})$	$r_{son} (A^0)$
Ni	6	9	1.8598×10^{-2} (1.5707×10^{-2})	37.972 (39.432)	4.44	3.52	1.22	8.478
Cu	6	9	1.6422×10^{-2} (1.2382×10^{-2})	34.361 (39.432)	3.50	3.61	0.89	8.609
Pd	7	12	4.3720×10^{-3} (4.1790×10^{-3})	114.888 (108.27)	3.94	3.89	1.25	9.318
Ag	6	12	3.3975×10^{-3} (2.5415×10^{-3})	127.709 (144.41)	2.96	4.09	0.69	9.770
Pt	8	10	2.4362×10^{-2} (1.9833×10^{-2})	31.828 (34.408)	5.86	3.92	1.73	9.415
Au	8	10	1.7008×10^{-2} (1.2793×10^{-2})	30.280 (34.408)	3.78	4.08	0.99	9.730
Pb	7	10	5.4833×10^{-3} (5.5765×10^{-3})	49.290 (45.778)	2.04	4.95	0.26	11.619
Al	6	7	4.2501×10^{-2} (3.3147×10^{-2})	14.552 (16.399)	3.34	4.05	0.47	9.692

Hesaplanan etkin çiftler potansiyelleri periyodik tabloya uygun bir şekilde Ni,Pd,Pt için Şekil 5.4'te , Cu,Ag,Au için Şekil 5.5'te ve Pb,Al için Şekil 5.6'da gösterilmektedir.

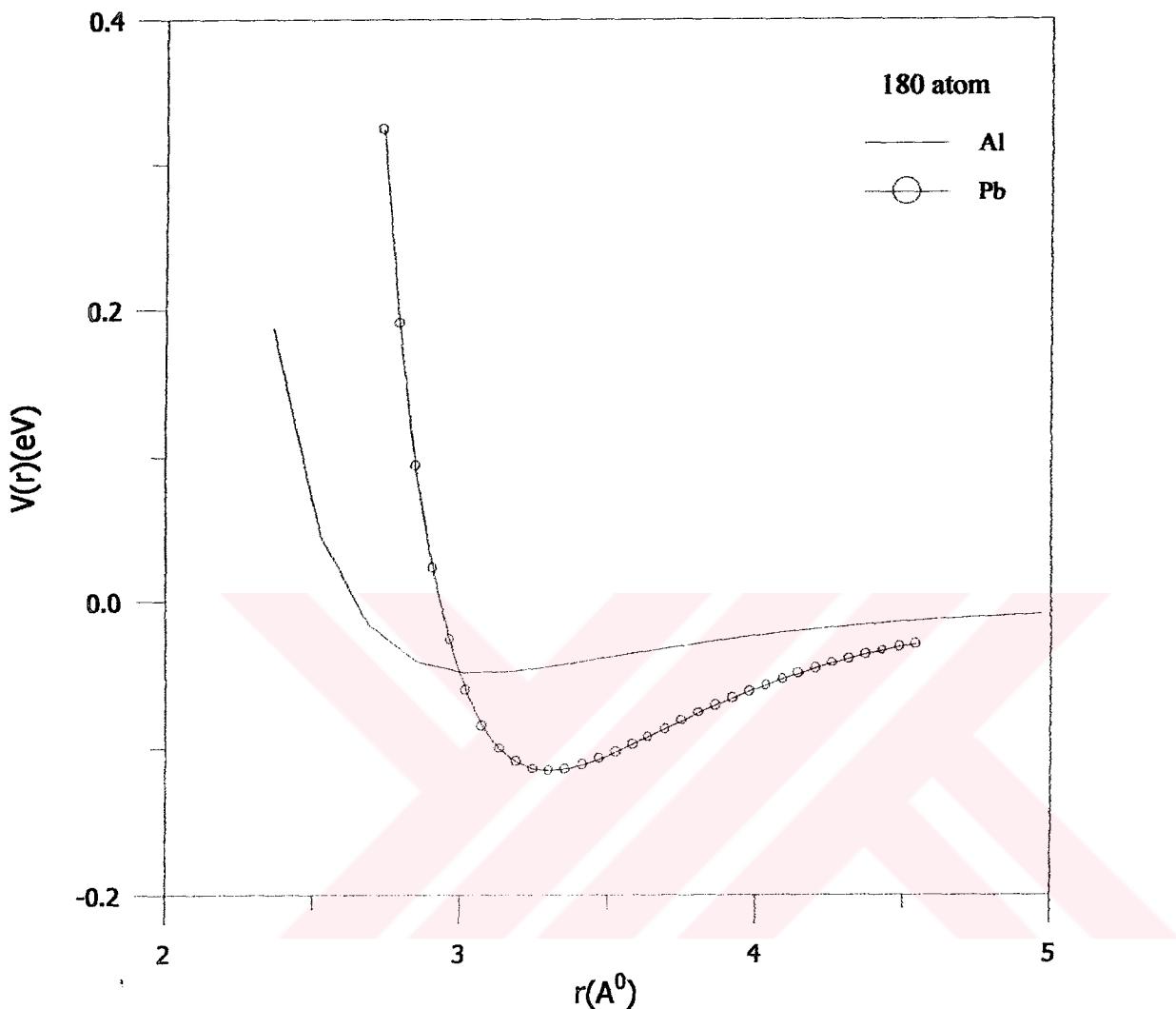
Şekil (5.4-5.6)'dan görüldüğü gibi 180 atoma karşılık gelen potansiyellerde r_{son} mesafesi arttıkça potansiyellerin minimumu büyük r değerlerine doğru kaymaktadır.



Şekil 5.4: 180 atom için Ni,Pd,Pt metallerinin etkin çiftler potansiyelleri



Şekil 5.5: 180 atom için Cu,Ag,Au metallerinin etkin çiftler potansiyelleri



Şekil 5.6: 180 atom için Al,Pb metallerinin etkin çiftler potansiyelleri

Kesme mesafesine göre

Bu bölümde bazı sıvı geçiş metallerinin kesme mesafesine göre yapılan parametrisasyon ile belirlenen S-C potansiyel parametreleri ile Finnis-Sinclair etkin çiftler potansiyel yaklaşımı kullanılarak hesaplanan atomlar arası etkin çiftler potansiyelleri verilmektedir.

$$r_{\text{son}}=2a^f$$

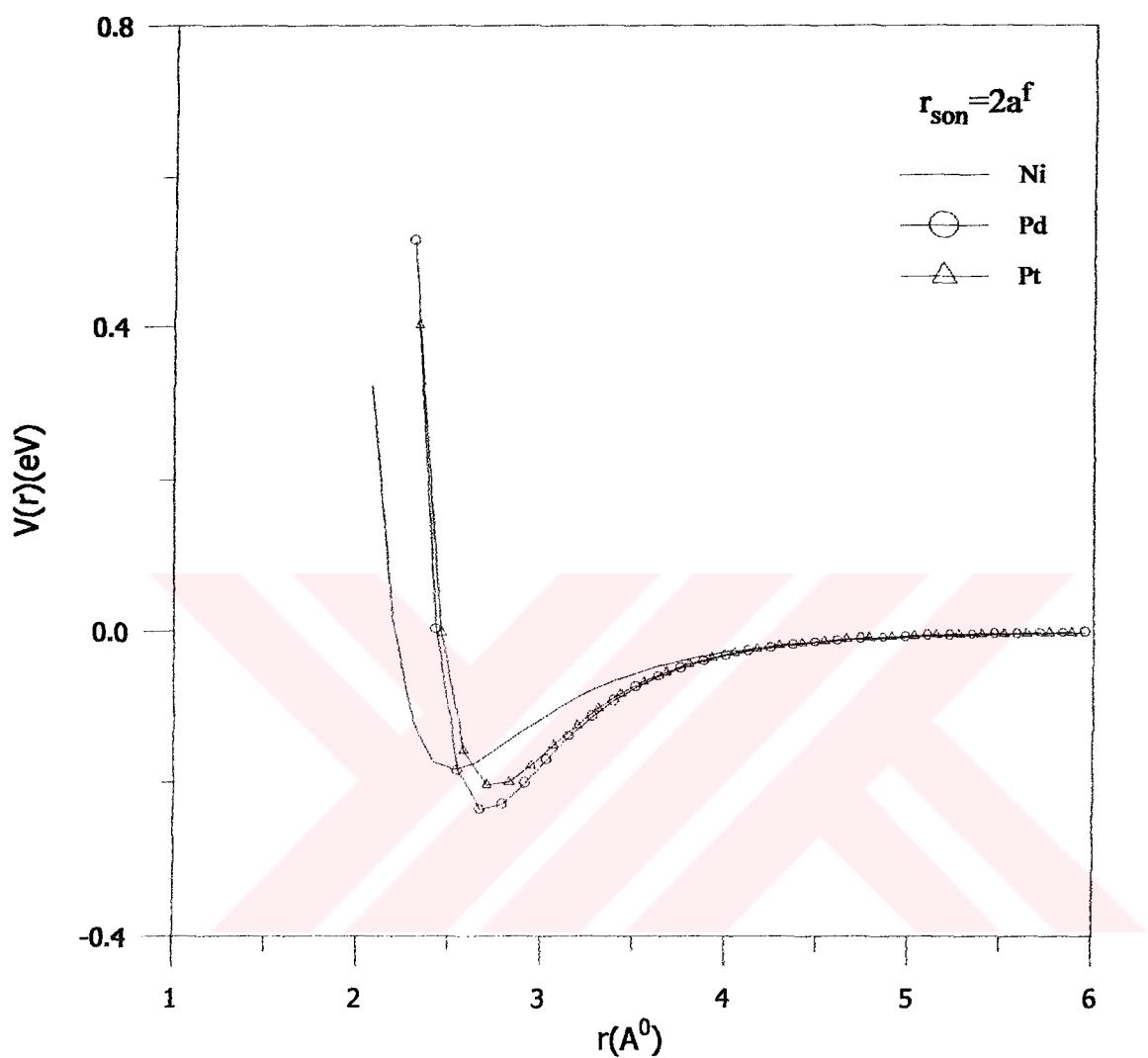
Ni,Cu,Pd,Ag,Pt,Au sıvı metaller için kesme mesafeleri $r_{\text{son}}=2a^f$ için metallerin potansiyel parametreleri hesaplanmış ve S-C potansiyel parametreleri ile Tablo 5.5'te karşılaştırılmıştır. Aynı tabloda $r_{\text{son}}=2a^f$ mesafesine karşılık gelen atom sayıları verilmektedir. Tablo 5.5'ten görüldüğü gibi r_{son} mesafesi, periyodik tablodaki trende uygun olarak bir sütun boyunca uygun olarak artmakta sadece Au metalinde bir uyumsuzluk görülmektedir. Ayrıca periyodik tabloya uygun bir şekilde soldan sağa doğru gidildikçe r_{son} mesafesi artmaktadır.

Tablo 5.5. $r_{\text{son}}=2a^f$ kesme mesafesine göre hesaplanan potansiyel parametrelerinin S-C parametreleri ile karşılaştırılması

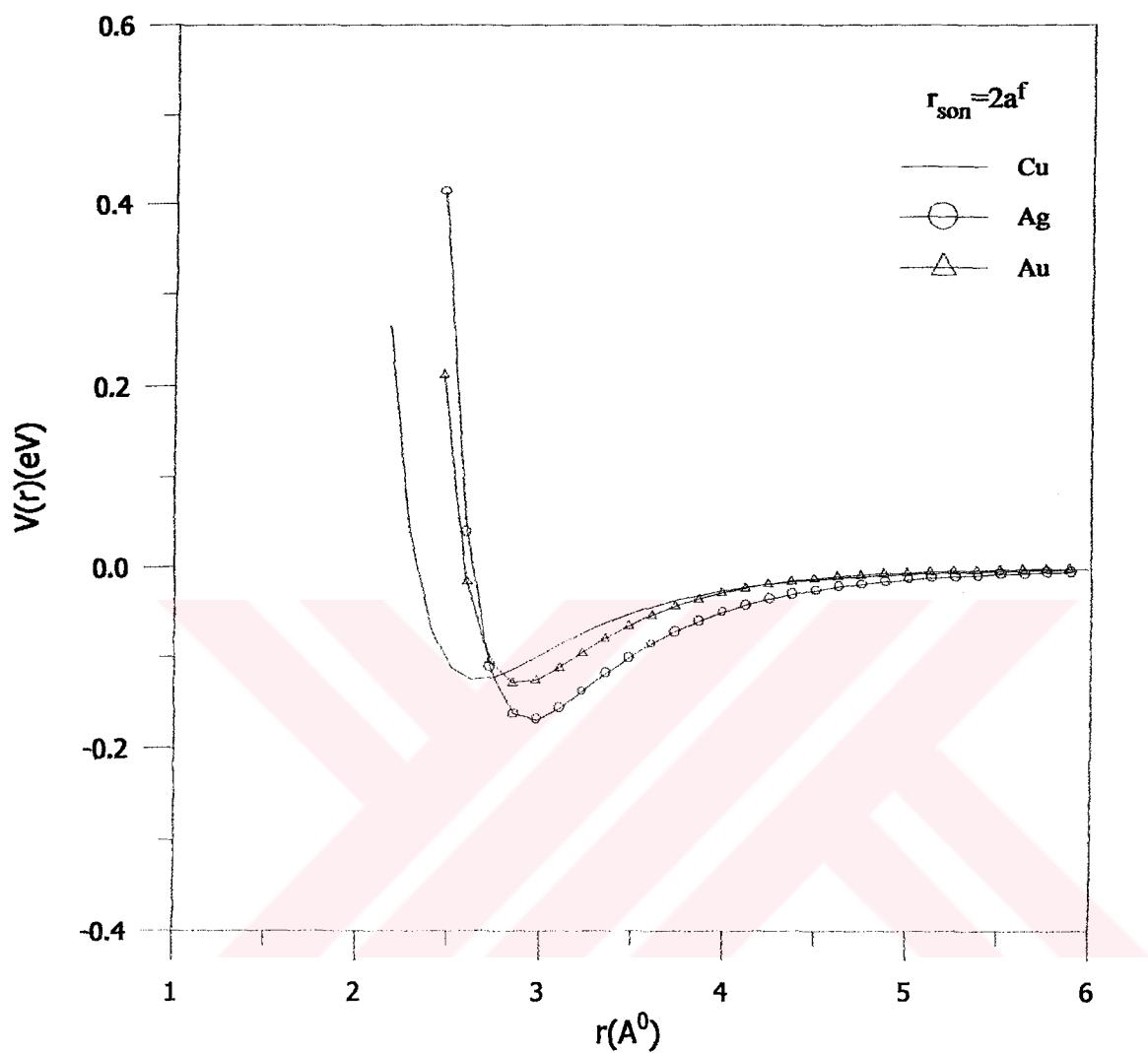
Metal	m	n	ε (eV)	C	E_c^f (eV)	a^f	B^f (eVA ⁻³)	r_{son} (Å ⁰)	Atom sayısı
Ni	6	9	1.5707×10^{-2} (1.7824×10^{-2})	39.432 (39.213)	4.44	3.52	1.22	7.04	104
Cu	6	9	1.2382×10^{-2} (1.5690×10^{-2})	39.432 (35.606)	3.50	3.61	0.89	7.22	107
Pd	7	12	4.1790×10^{-3} (4.1489×10^{-3})	108.27 (119.406)	3.94	3.89	1.25	7.78	106
Ag	6	12	2.5415×10^{-3} (3.2109×10^{-3})	144.41 (133.753)	2.96	4.09	0.69	8.18	106
Pt	8	10	1.9833×10^{-2} (2.3186×10^{-2})	34.408 (32.786)	5.86	3.92	1.73	7.84	105
Au	8	10	1.2793×10^{-2} (1.6154×10^{-2})	34.408 (31.235)	3.78	4.08	0.99	8.16	107

Hesaplanan etkin çiftler potansiyelleri periyodik tabloya uygun bir şekilde Ni,Pd,Pt için Şekil 5.7'de ve Cu,Ag,Au için Şekil 5.8'de gösterilmektedir.

Şekil (5.7) ve (5.8)'den görüldüğü gibi $r_{\text{son}}=2a^f$ kesme mesafesine karşılık gelen potansiyellerde r_{son} mesafesi arttıkça potansiyellerin minimumu büyük r değerlerine doğru kaymaktadır.



Şekil 5.7: $r_{\text{son}}=2a^f$ mesafesi için Ni,Pd,Pt metallerinin etkin çiftler potansiyelleri



Şekil 5.8: $r_{\text{son}} = 2a^f$ mesafesi için Cu, Ag, Au metallerinin etkin çiftler potansiyelleri

Bhuiyan-Silbert kesme mesafesine göre

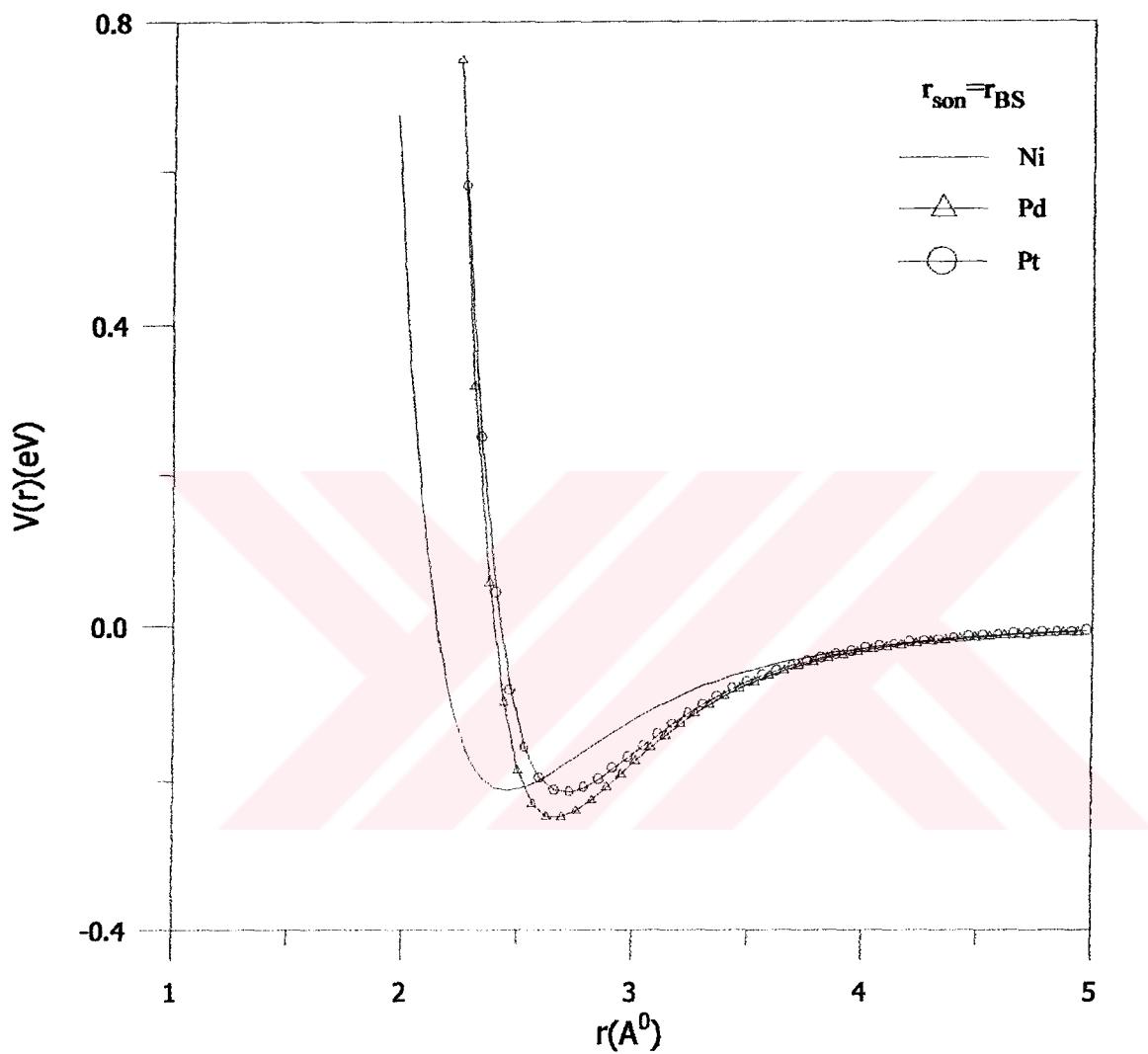
Ni,Cu,Pd,Ag,Pt,Au sıvı metaller için kesme mesafeleri $r_{\text{son}} = r_{\text{BS}}$ için metallerin potansiyel parametreleri hesaplanmış ve S-C potansiyel parametreleri ile Tablo 5.6'da karşılaştırılmıştır (Bhuiyan vd.1996). Aynı tabloda $r_{\text{son}} = r_{\text{BS}}$ mesafesine karşılık gelen atom sayıları verilmektedir. Tablo 5.6'dan görüldüğü gibi r_{son} mesafesi, periyodik tablodaki trende uygun olarak bir sütun boyunca uygun olarak artmakta sadece Au metalinde bir uyumsuzluk görülmektedir. Ayrıca periyodik tabloya uygun bir şekilde soldan sağa doğru gidildikçe r_{son} mesafesi artmaktadır.

Tablo 5.6: $r_{\text{son}} = r_{\text{BS}}$ kesme mesafesine göre hesaplanan potansiyel parametrelerinin S-C parametreleri ile karşılaştırılması

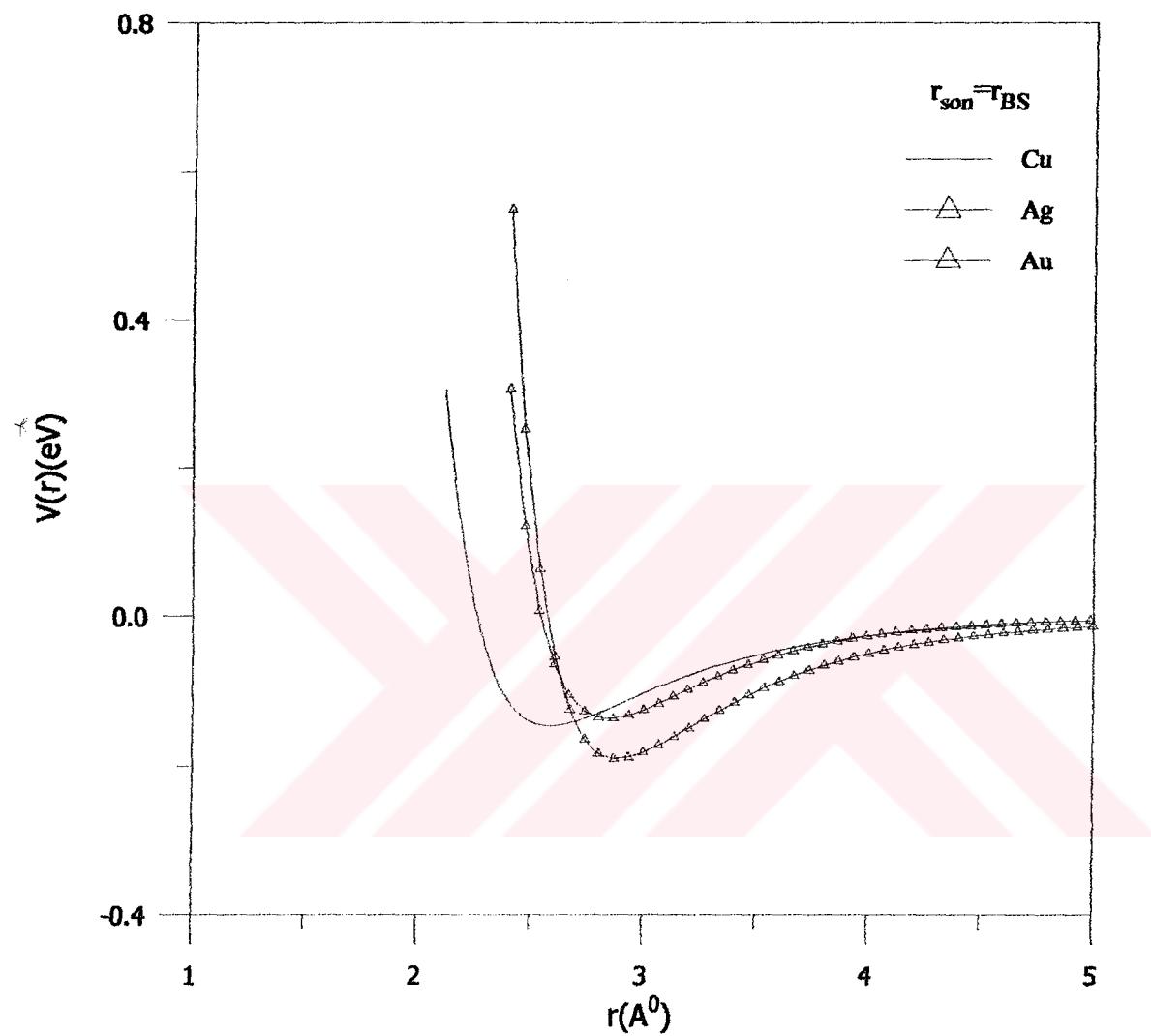
Metal	m	n	$\varepsilon (eV)$	C	$E_c^f (eV)$	a^f	$B^f (eVA^{-3})$	$r_{\text{son}} (\text{\AA}^0)$	Atom sayısı
Ni	6	9	1.6498×10^{-2} (1.5707×10^{-2})	42.267 (39.432)	4.44	3.52	1.22	4.645	31
Cu	6	9	1.447×10^{-2} (1.2382×10^{-2})	38.485 (39.432)	3.50	3.61	0.89	4.763	31
Pd	7	12	3.7222×10^{-3} (4.1790×10^{-3})	130.351 (108.27)	3.94	3.89	1.25	5.133	31
Ag	6	12	2.893×10^{-3} (2.5415×10^{-3})	148.75 (144.41)	2.96	4.09	0.69	5.397	30
Pt	8	10	2.125×10^{-2} (1.9833×10^{-2})	34.6921 (34.408)	5.86	3.92	1.73	5.172	31
Au	8	10	1.4764×10^{-2} (1.2793×10^{-2})	33.13 (34.408)	3.78	4.08	0.99	5.384	30

Hesaplanan etkin çiftler potansiyelleri periyodik tabloya uygun bir şekilde Ni,Pd,Pt için Şekil 5.9'da ve Cu,Ag,Au için Şekil 5.10'da gösterilmektedir.

Şekil (5.9) ve (5.10)'dan görüldüğü gibi $r_{\text{son}} = r_{\text{BS}}$ kesme mesafesine karşılık gelen potansiyellerde r_{son} mesafesi arttıkça potansiyellerin minimumu büyük r değerlerine doğru kaymaktadır.



Sekil 5.9. $r_{\text{son}} = r_{\text{BS}}$ mesafesi için Ni,Pd,Pt metallerinin etkin çiftler potansiyelleri



Şekil 5.10. $r_{\text{son}} = r_{\text{BS}}$ mesafesi için Cu,Ag,Au metallerinin etkin çiftler potansiyelleri

5.1.2 Sıvı fcc geçiş metallerinin yapısal özellikleri

Bu bölümde ergime noktaları civarında hesaplanan etkin çiftler potansiyellerin, Tablo 5.1'deki (Waseda 1981)'dan alınan sıcaklık ve deneysel yoğunluk değerleri ile Bölüm 4.1'deki VMHNC (Yeniden düzenlenmiş hypernetted chain) sıvı yapı teorisi kullanılarak hesaplanan sıvı yapı faktörlerinin deneysel değerler ile karşılaştırılması verilmektedir.

Önce 140 ve 180 atom için hesaplanan statik yapı faktörü ve çiftler dağılım fonksiyonlarını (Waseda 1981)'dan alınan deneysel değerler ile karşılatırdık. Periyodik tabloya uygun bir şekilde sırası ile Ni,Pd,Pt,Cu,Ag,Au,Al,Pb için hesaplan statik yapı faktör değerleri Şekil 11-18'de, çiftler dağılım fonksiyonları ise yine sırası ile Şekil 19-26'da gösterilmektedir. 140 atom için hesaplanan statik yapı faktörü ve çiftler dağılım fonksiyonlarının 180 atom için hesaplanan yapısal özelliklere oranla deneysel değerlere daha yakın sonuçlar verdiği görülmektedir.

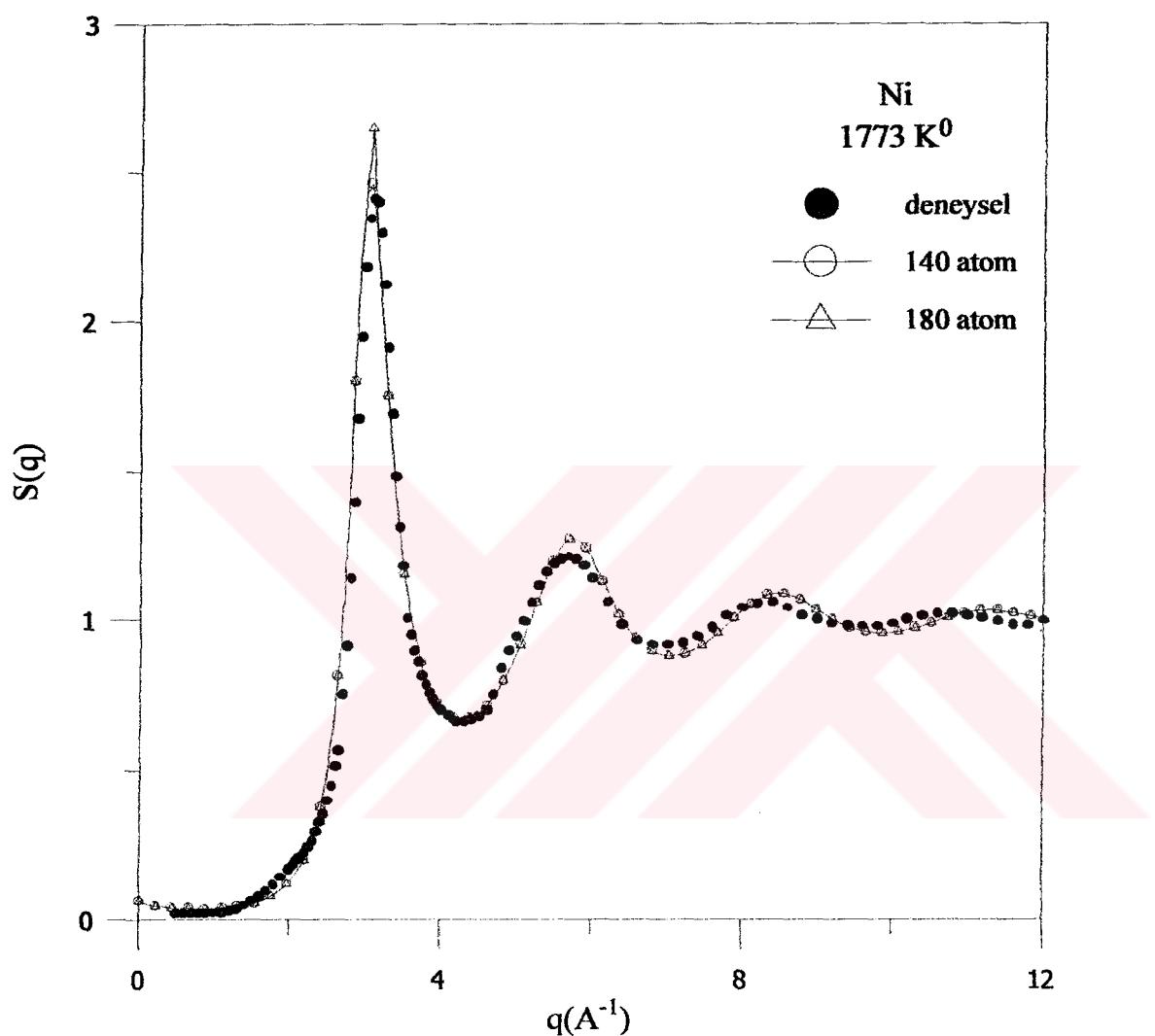
$r_{\text{son}}=2a^f$ ve $r_{\text{son}}=r_{\text{BS}}$ mesafelerine göre hesaplanan statik yapı faktörü ve çiftler dağılım fonksiyonlarını (Waseda 1981)'dan alınan deneysel değerler ile karşılatırdık. Periyodik tabloya uygun bir şekilde sırası ile Ni,Pd,Pt,Cu,Ag,Au için hesaplan statik yapı faktör değerleri Şekil 27-32'de, çiftler dağılım fonksiyonları ise yine sırası ile Şekil 33-38'de gösterilmektedir. $r_{\text{son}}=2a^f$ kesme mesafesine göre hesaplanan statik yapı faktörü ve çiftler dağılım fonksiyonlarının $r_{\text{son}}=r_{\text{BS}}$ için hesaplanan yapısal özelliklere oranla deneysel değerlere daha yakın sonuçlar verdiği görülmektedir.

140, 180 atom, $r_{\text{son}}=2a^f$ ve $r_{\text{son}}=r_{\text{BS}}$ için sırasıyla hesaplanan statik yapı faktörlerinin hepsi Şekil 39-44'de çiftler dağılım fonksiyonlarının hepsi Şekil 45-50'de karşılaştırılmıştır.

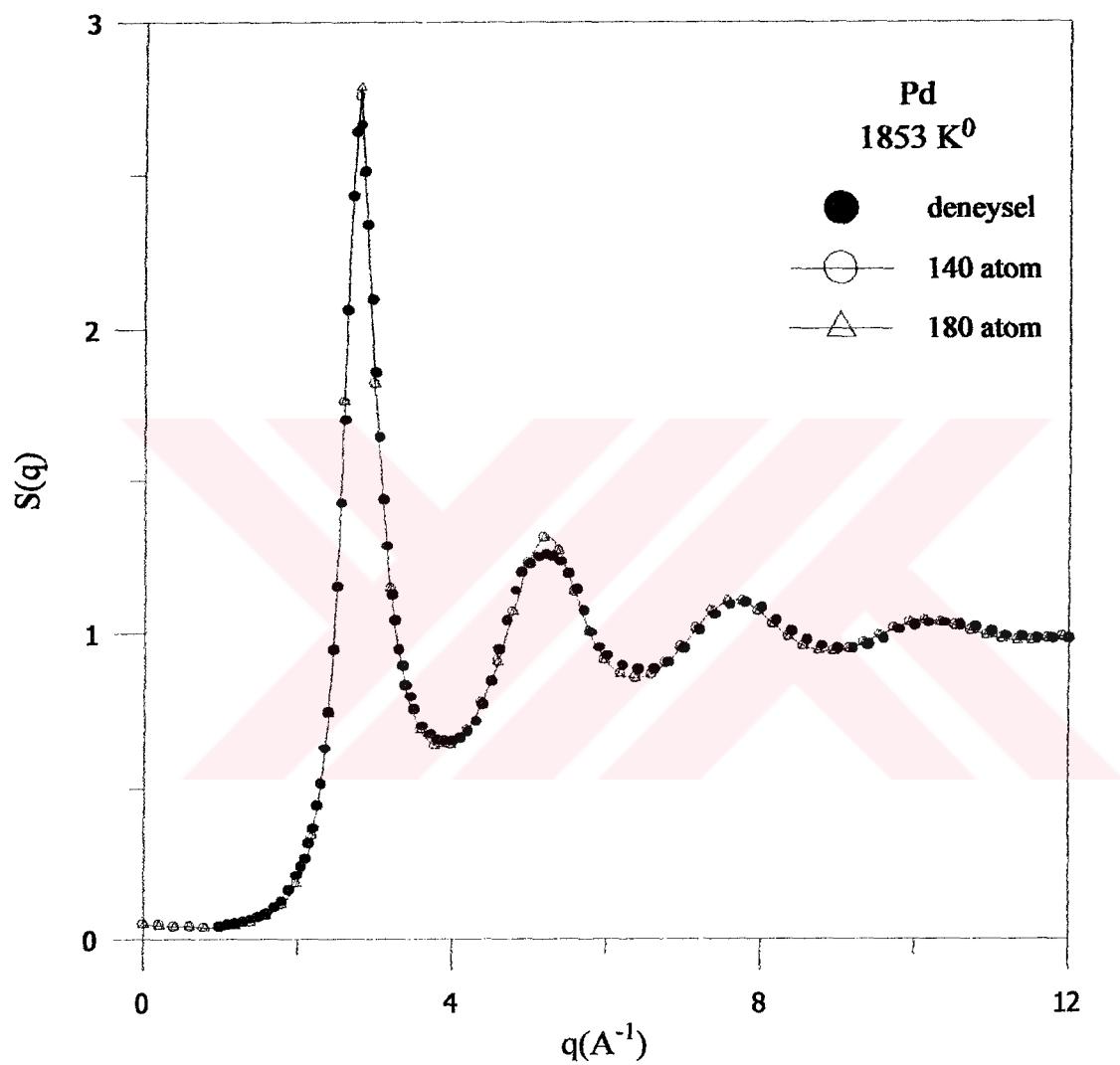
Statik yapı faktörlerin değişimi r_{son} mesafesi arttıkça 1.maximum değerleri artmakta, çiftler dağılım fonksiyonları ise azalmaktadır. Grafiklerden görüldüğü gibi hesaplanan yapı fonksiyonları ile deneysel veriler uyum içindedir. Ve $r_{\text{son}}=2a^f$ mesafesinde hesaplanan yapı fonksiyonları deneysel verilere en yakın sonuçlar elde edilmiştir.

Deneysel sonuçlar ile hesaplanan değerlerin birbirine uygun olması önerdiğimiz potansiyel modelinin, sıvı sistemler için geçerli bir model olabileceğini söyleyebiliriz.

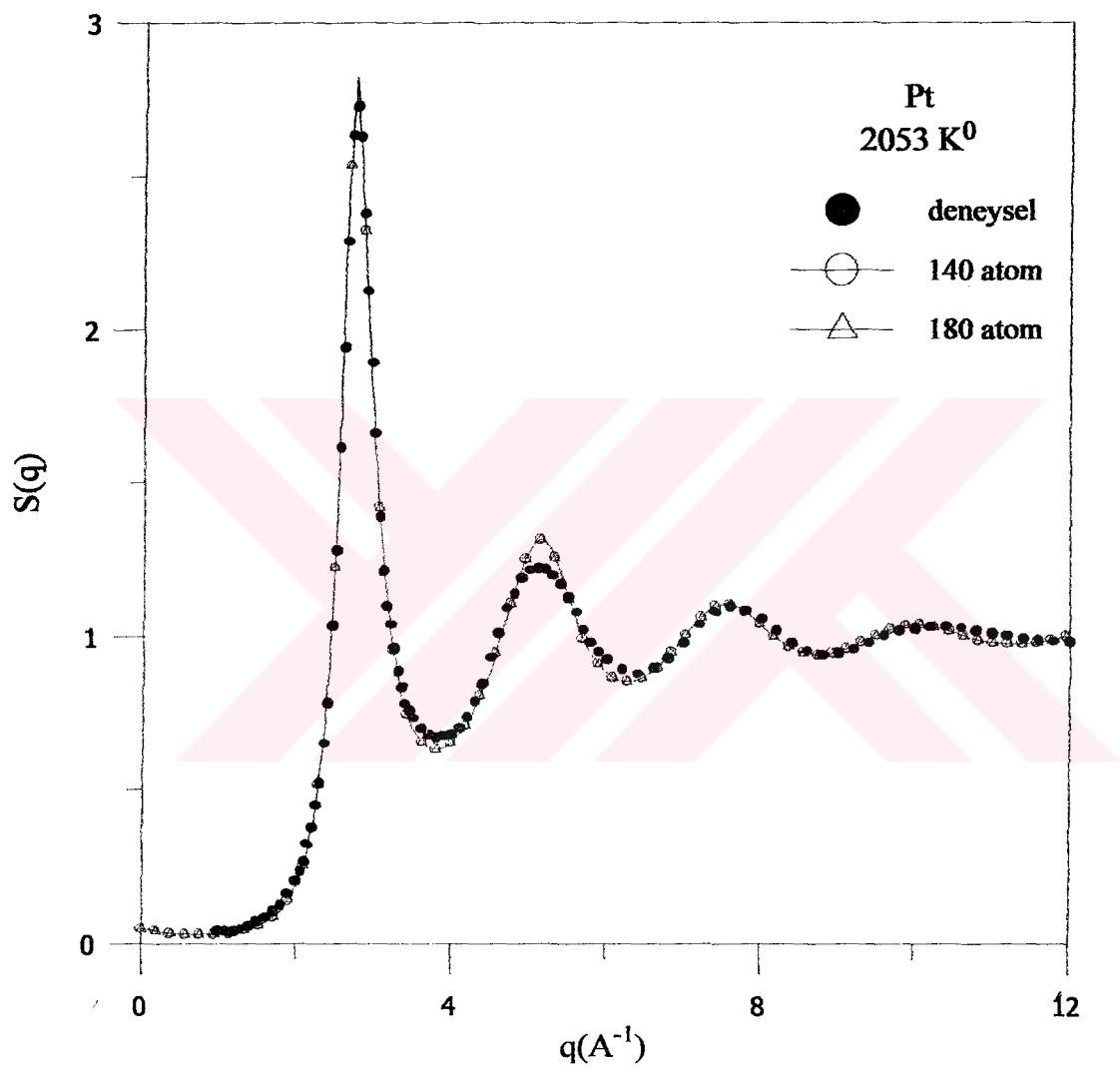




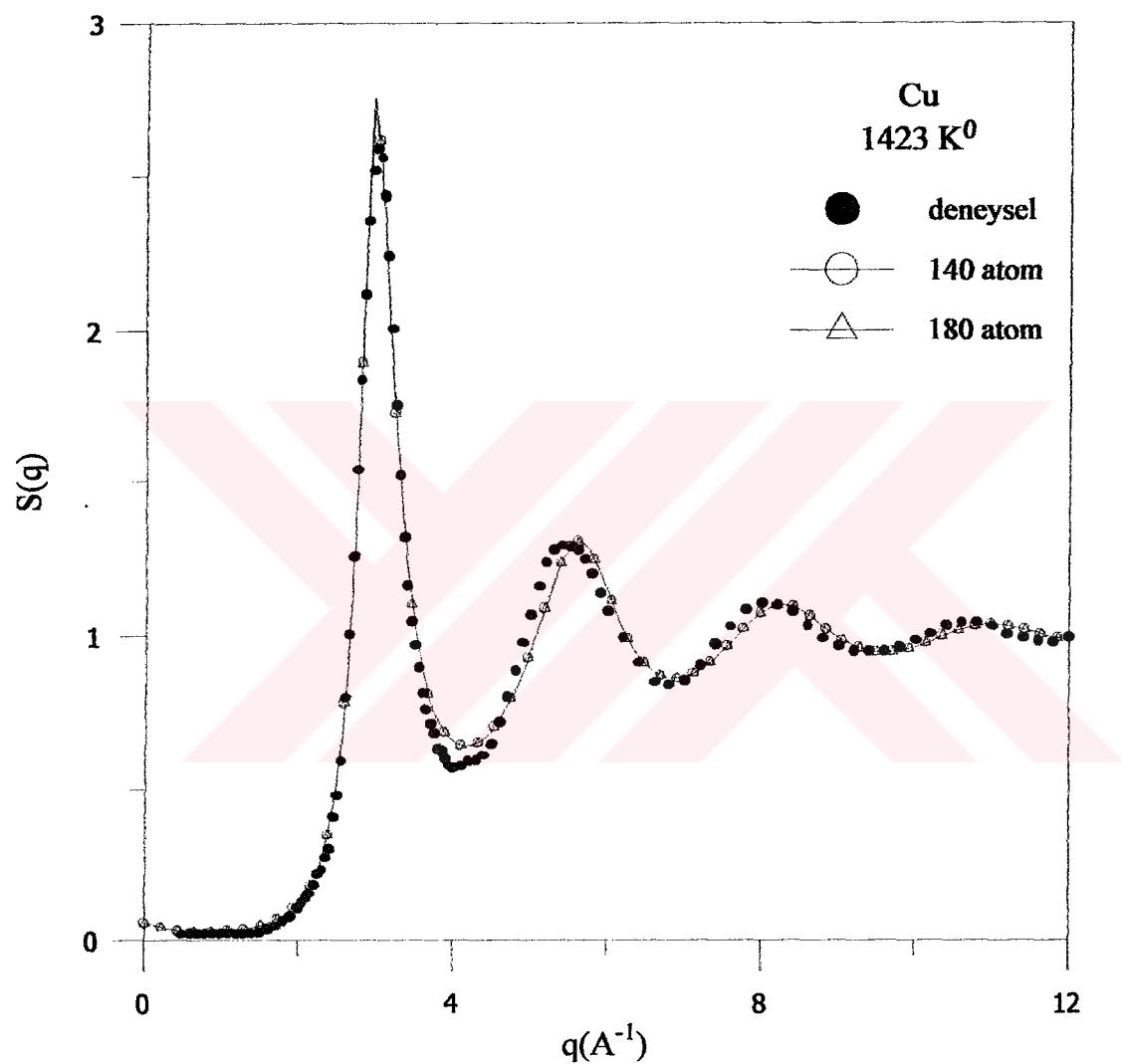
Şekil 5.11: Ni için 140 ve 180 atom sayısında hesaplanan $S(q)$ statik yapı faktörlerinin deneysel değer ile karşılaştırılması



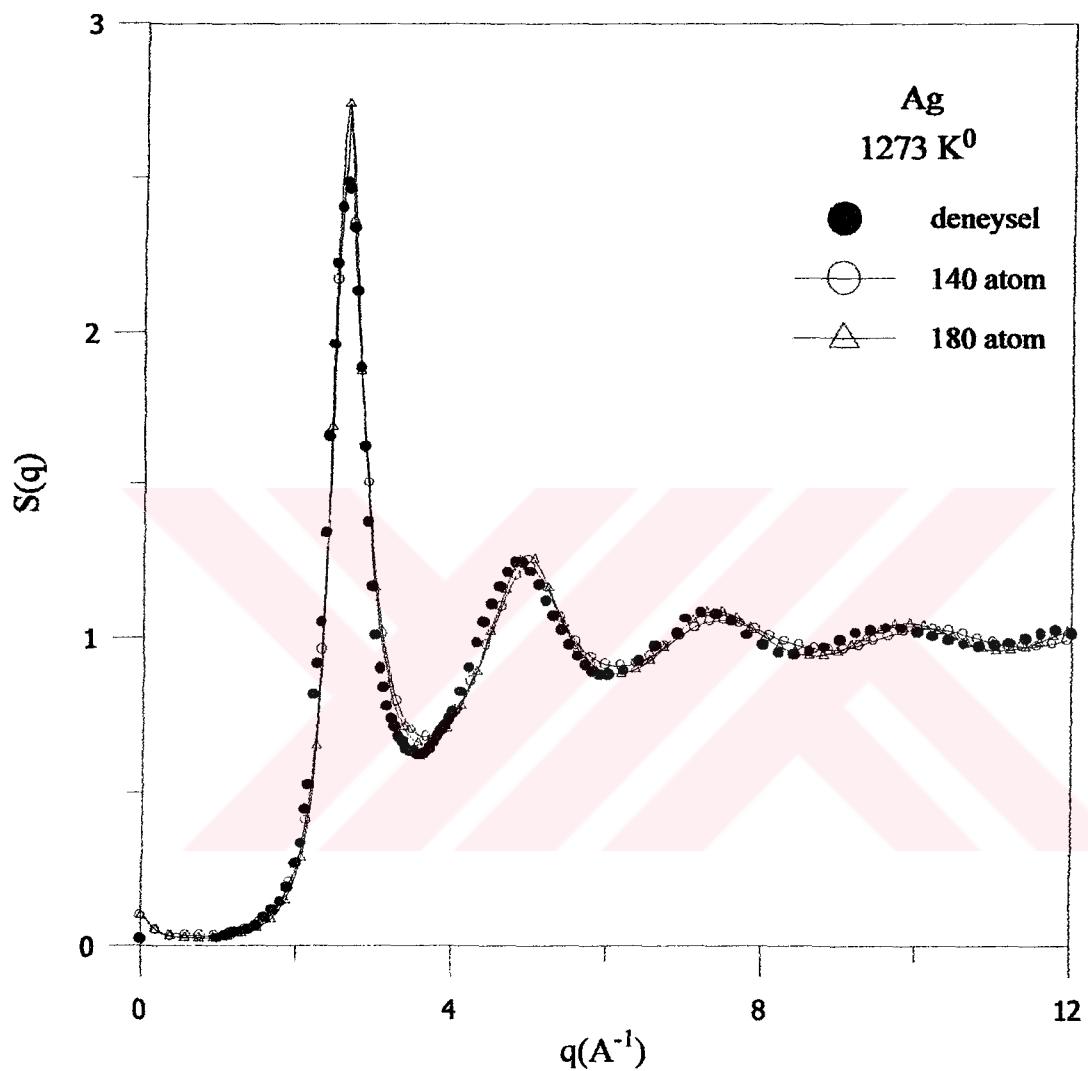
Şekil 5.12: Pd için 140 ve 180 atom sayısında hesaplanan $S(q)$ statik yapı faktörlerinin deneysel değer ile karşılaştırılması



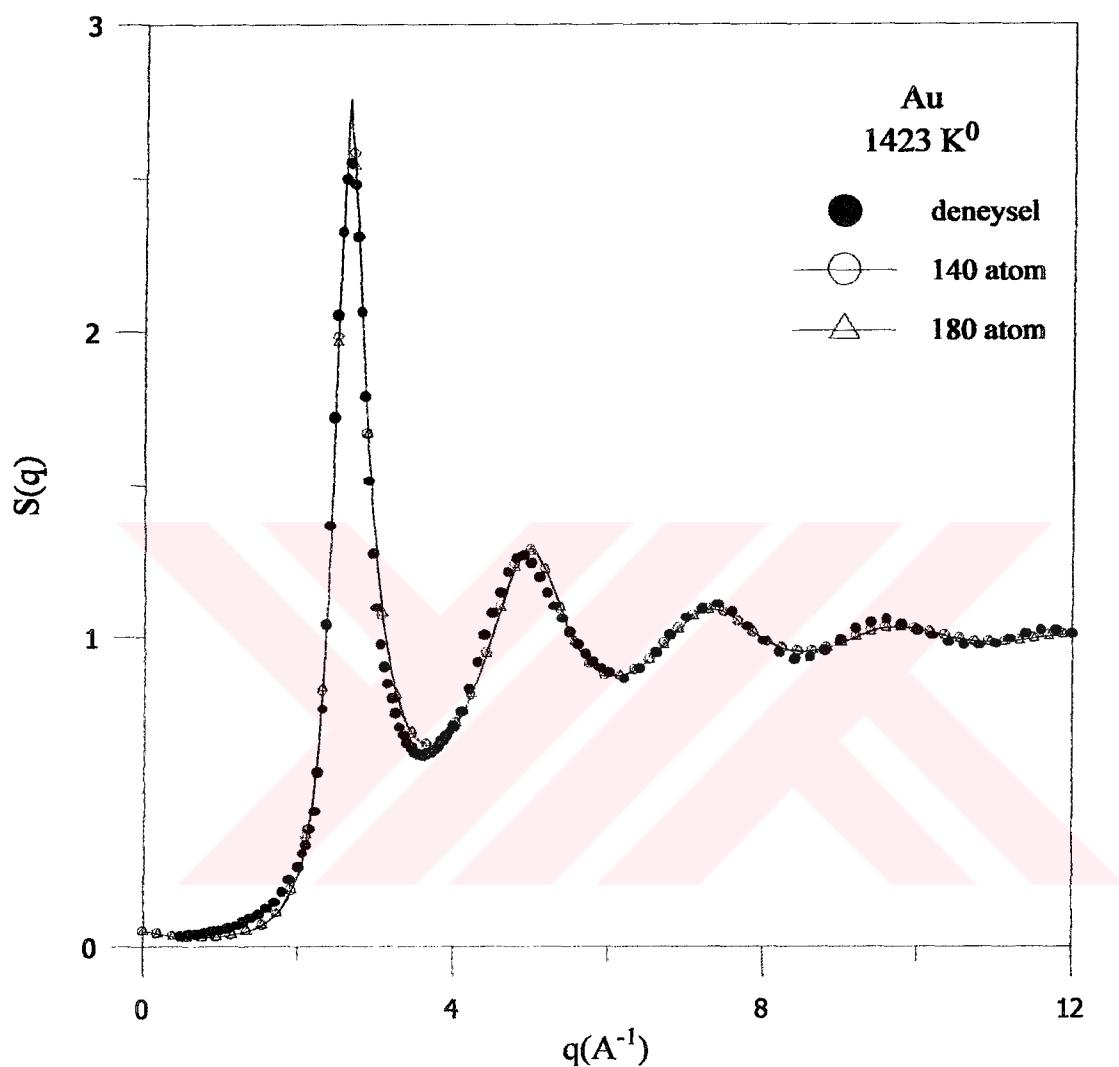
Şekil 5.13: Pt için 140 ve 180 atom sayısında hesaplanan $S(q)$ statik yapı faktörlerinin deneysel değer ile karşılaştırılması



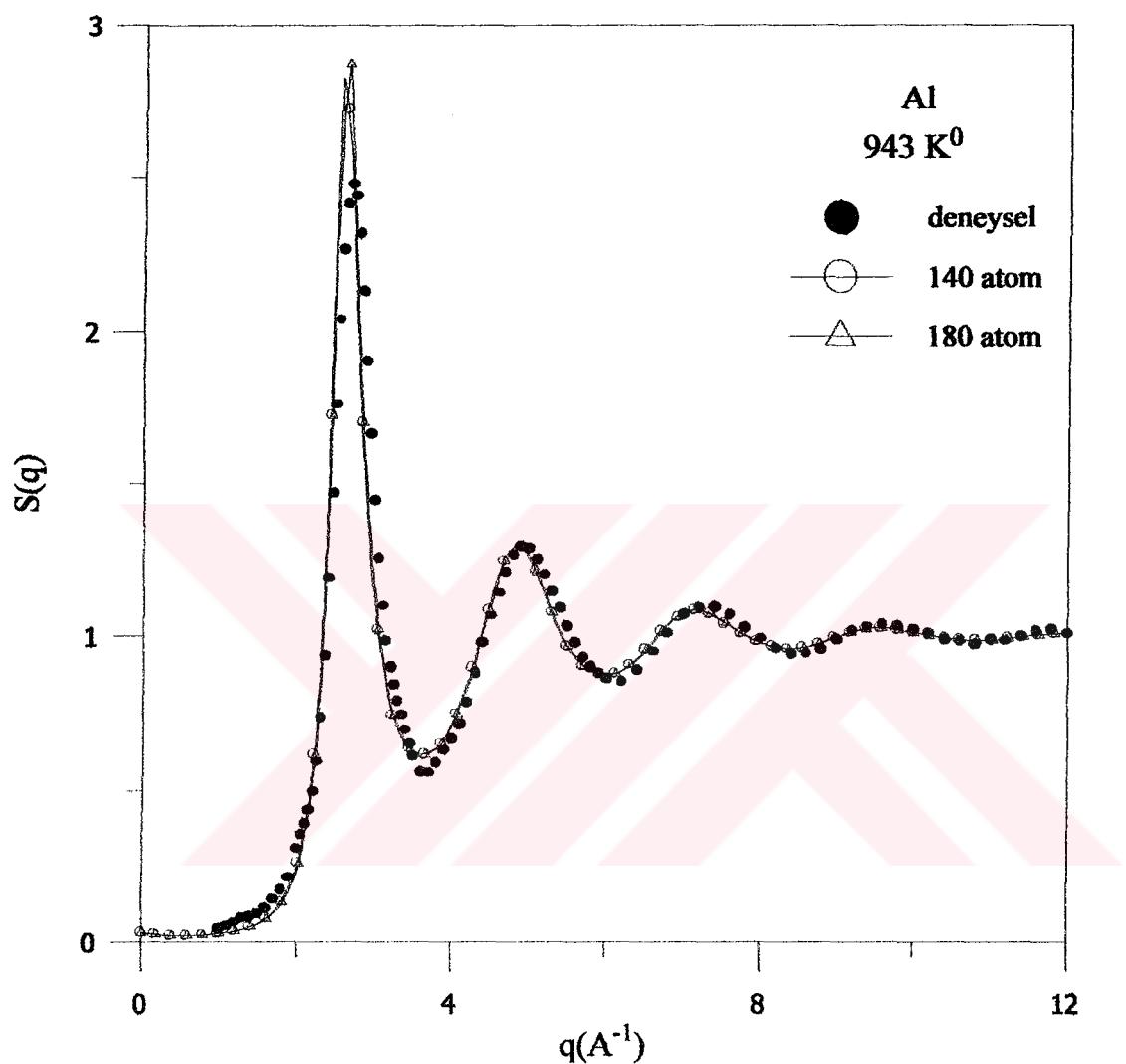
Şekil 5.14: Cu için 140 ve 180 atom sayısında hesaplanan $S(q)$ statik yapı faktörlerinin deneysel değer ile karşılaştırılması



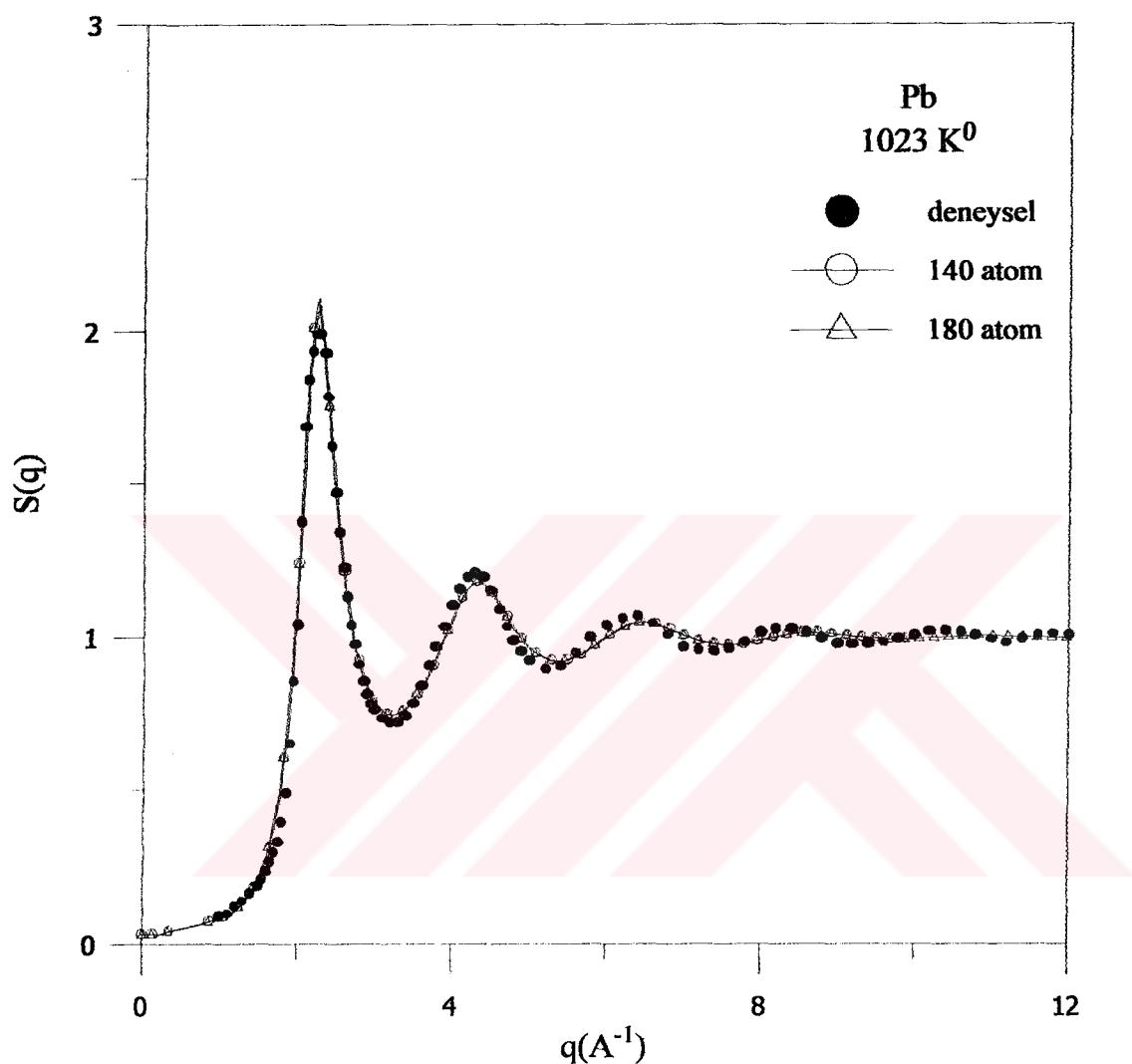
Şekil 5.15: Ag için 140 ve 180 atom sayısında hesaplanan $S(q)$ statik yapı faktörlerinin deneysel değer ile karşılaştırılması



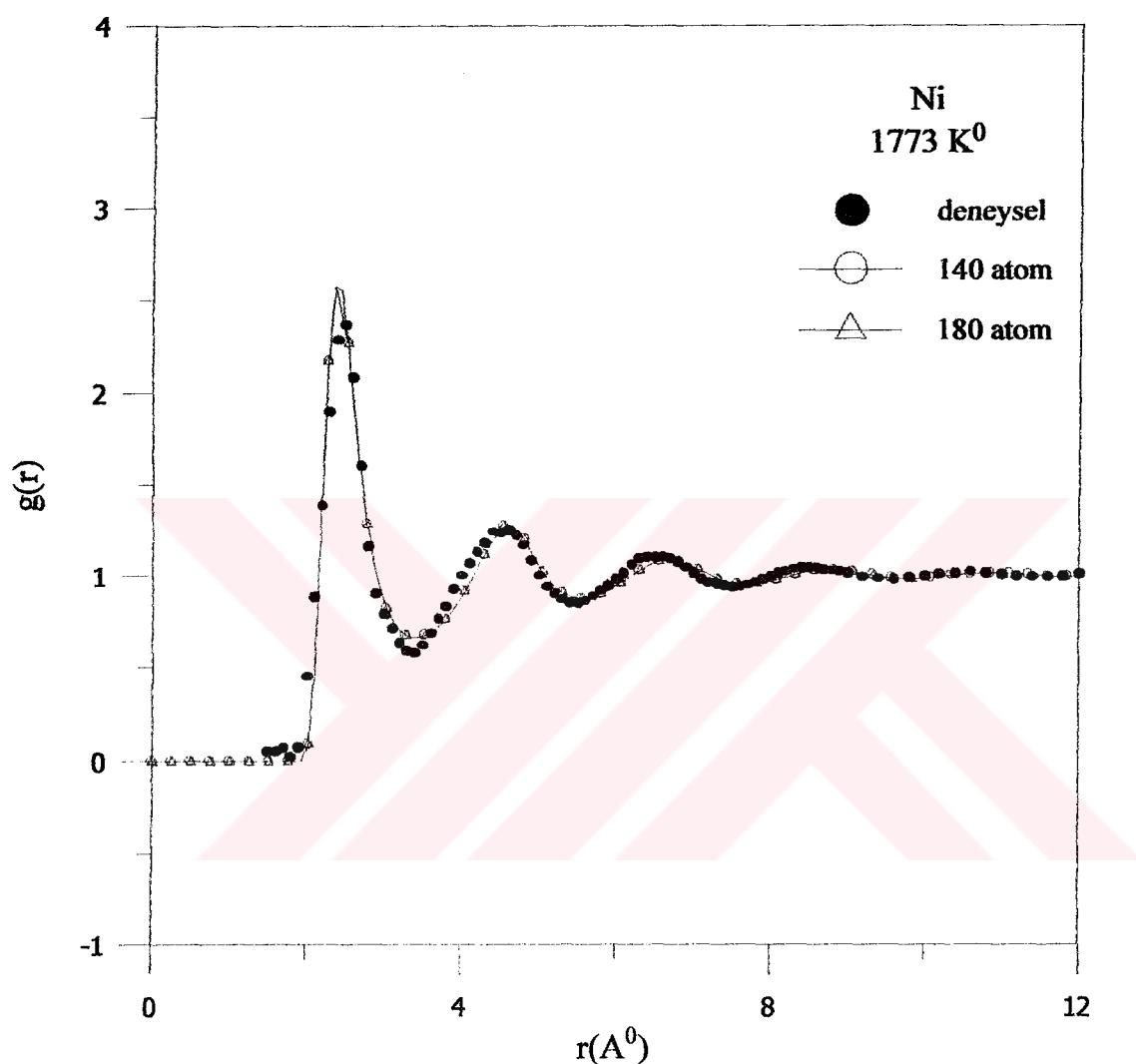
Şekil 5.16: Au için 140 ve 180 atom sayısında hesaplanan $S(q)$ statik yapı faktörlerinin deneysel değer ile karşılaştırılması



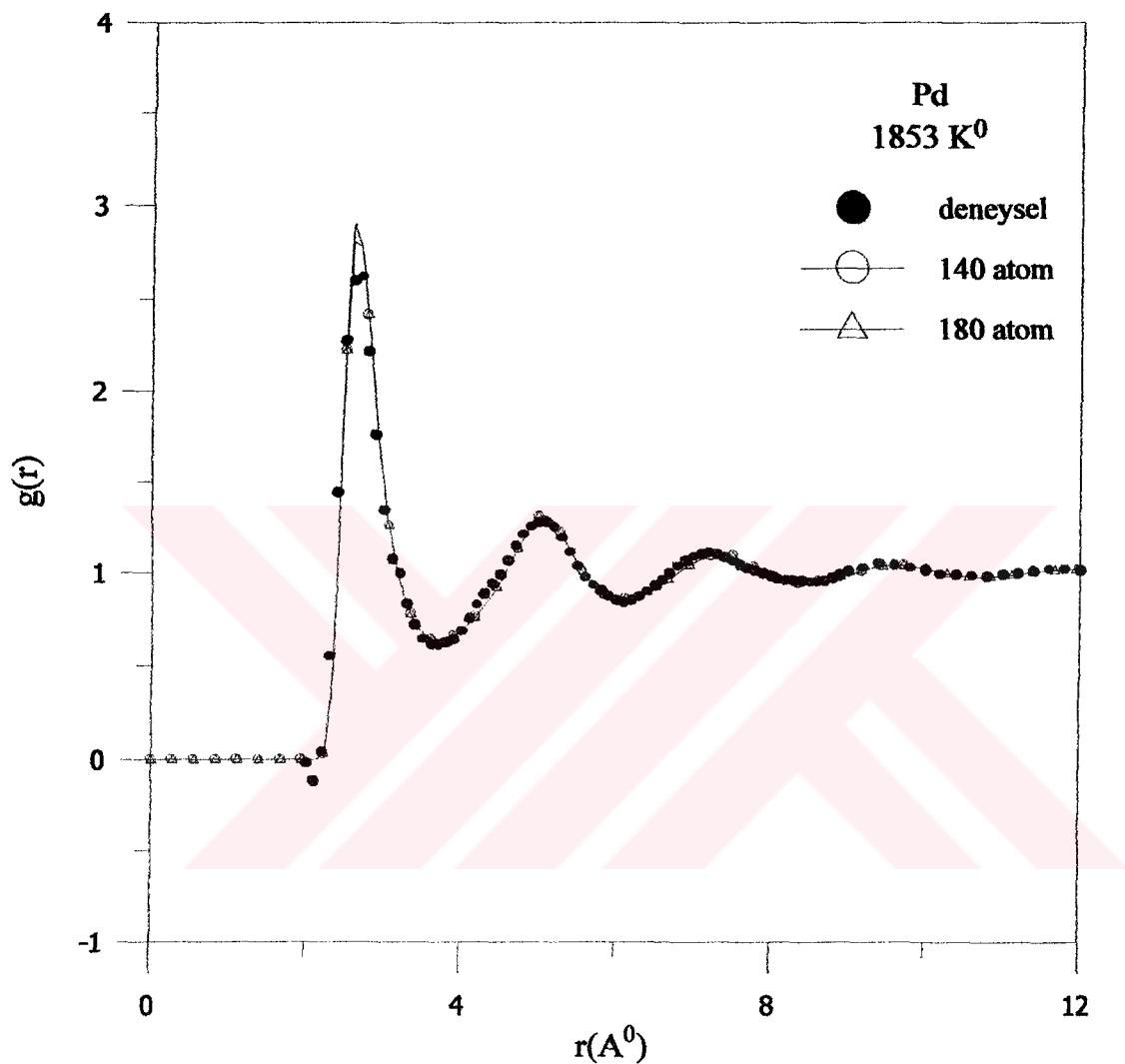
Şekil 5.17: Al için 140 ve 180 atom sayısında hesaplanan $S(q)$ statik yapı faktörlerinin deneysel değer ile karşılaştırılması



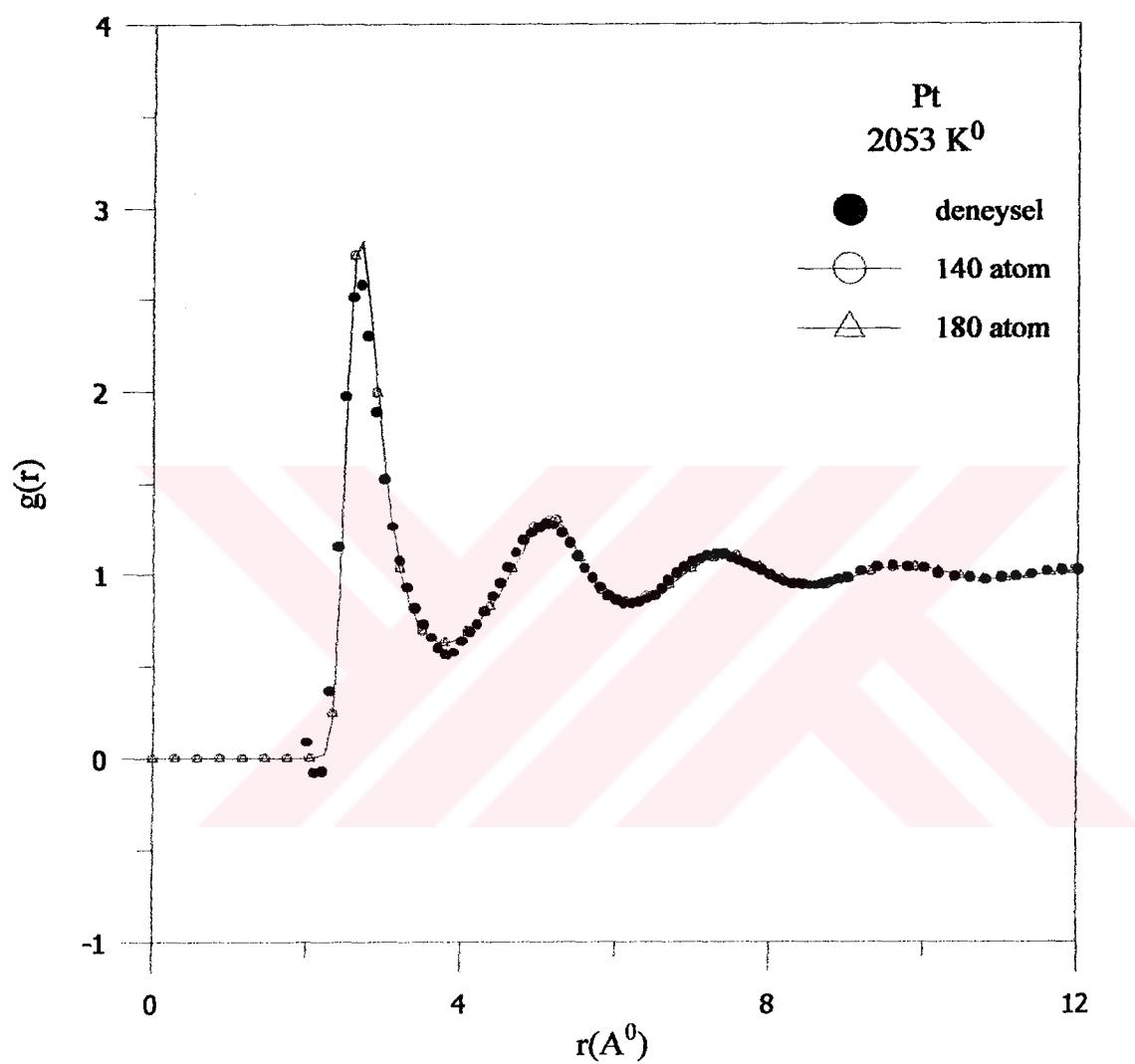
Şekil 5.18: Pb için 140 ve 180 atom sayısında hesaplanan $S(q)$ statik yapı faktörlerinin deneysel değer ile karşılaştırılması



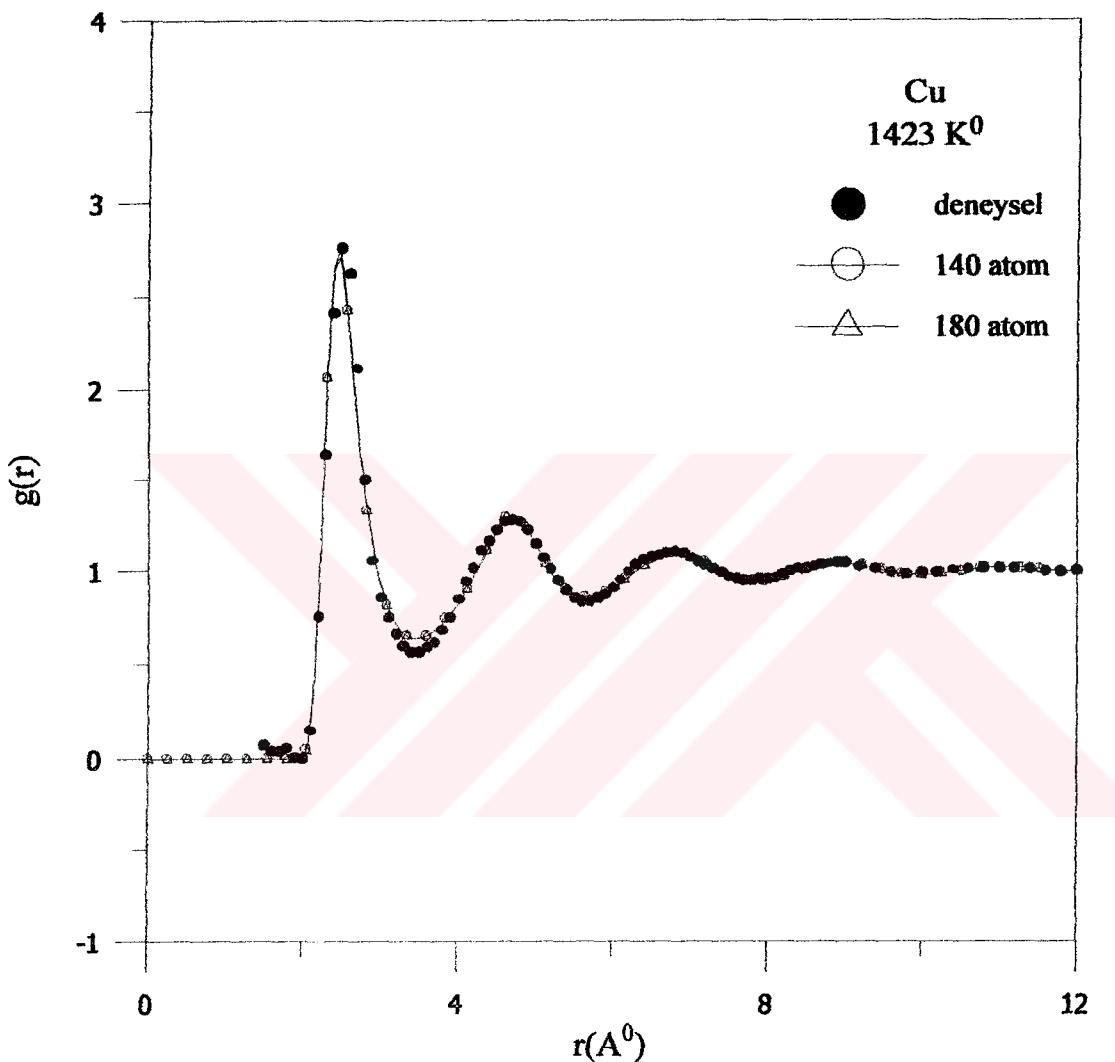
Şekil 5.19: Ni için 140 ve 180 atom sayısında hesaplanan $g(r)$ çiftler dağılım fonksiyonlarının deneysel değer ile karşılaştırılması



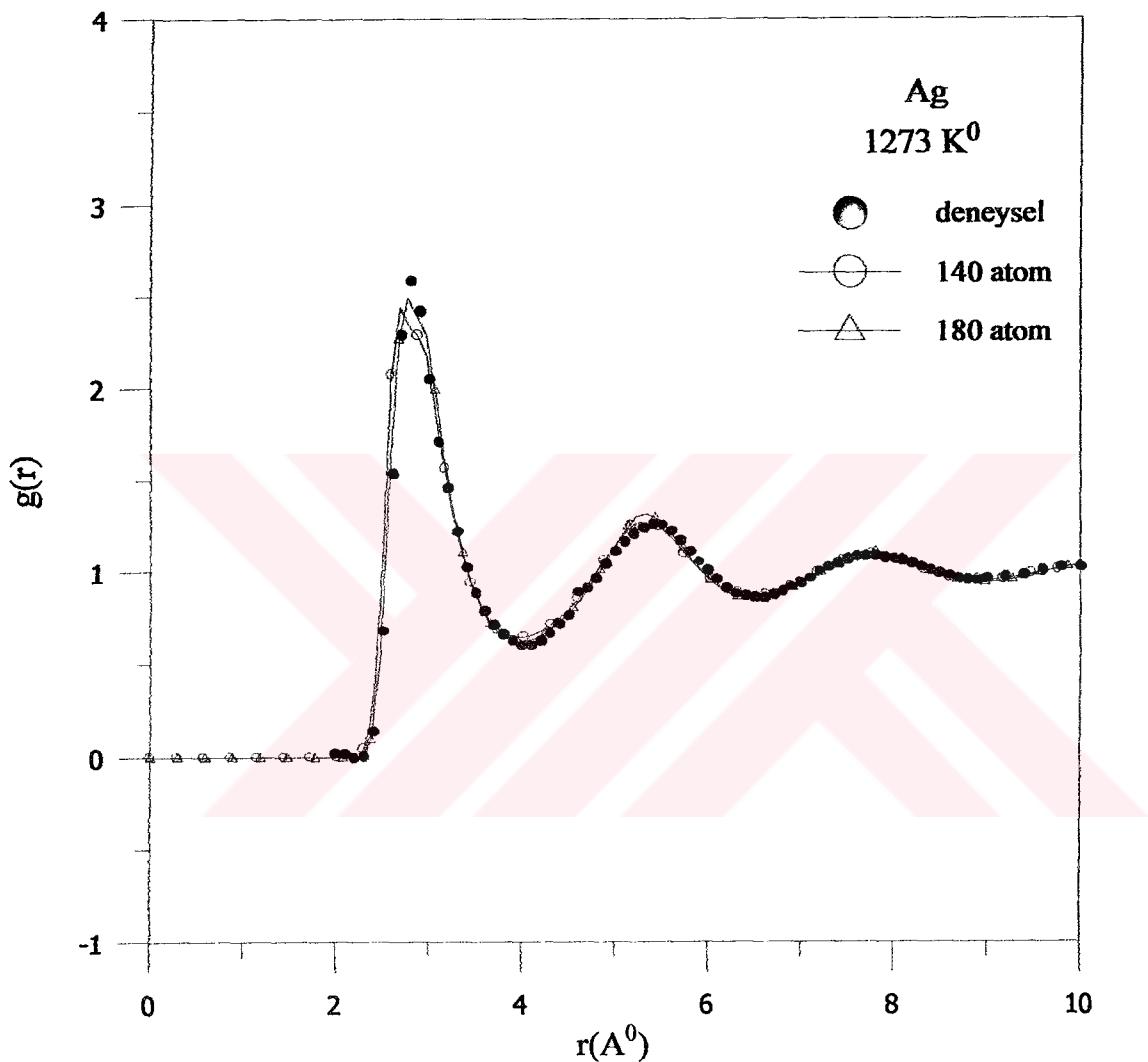
Şekil 5.20: Pd için 140 ve 180 atom sayısında hesaplanan $g(r)$ çiftler dağılım fonksiyonlarının deneysel değer ile karşılaştırılması



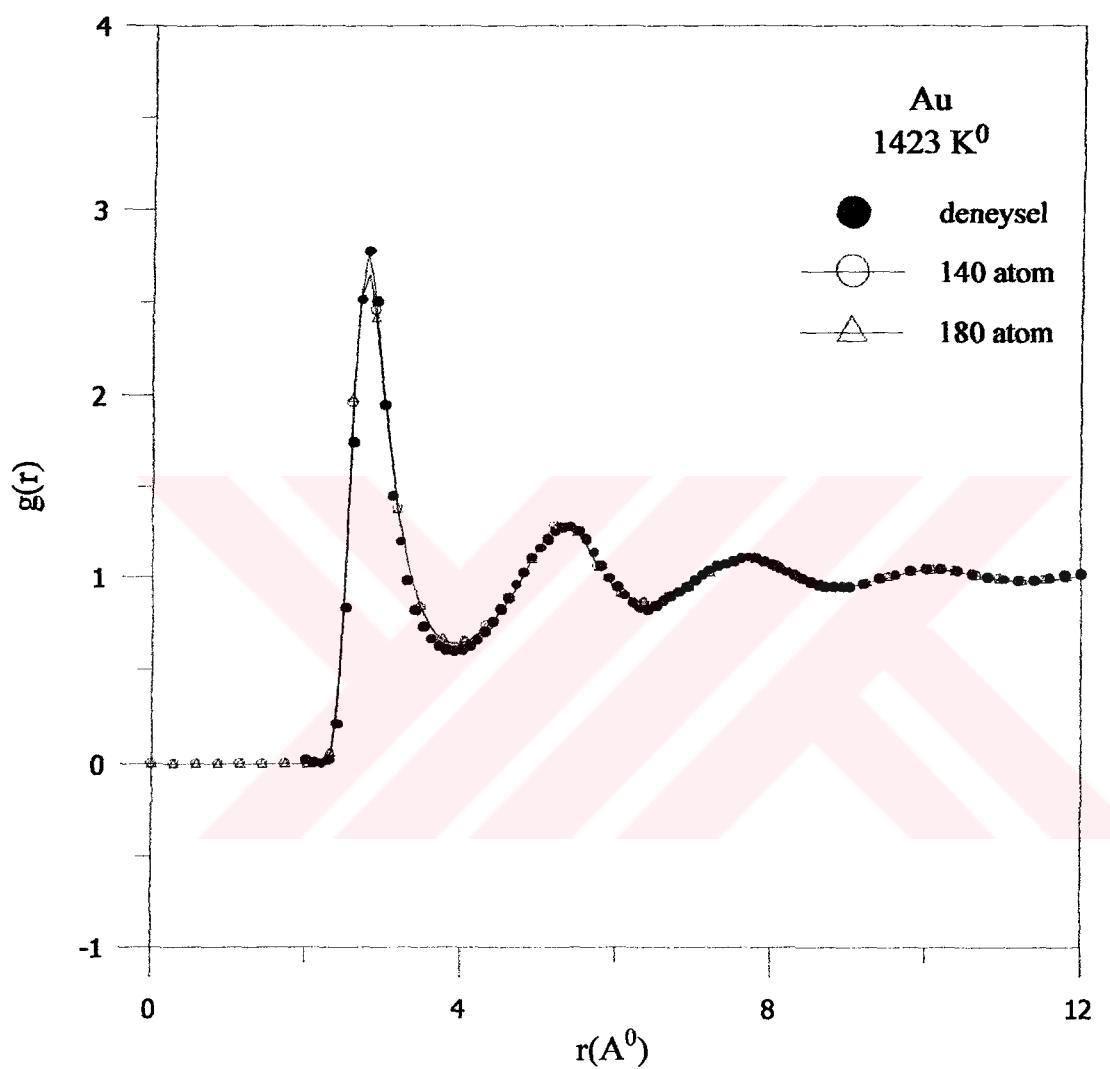
Şekil 5.21: Pt için 140 ve 180 atom sayısında hesaplanan $g(r)$ çiftler dağılım fonksiyonlarının deneysel değer ile karşılaştırılması



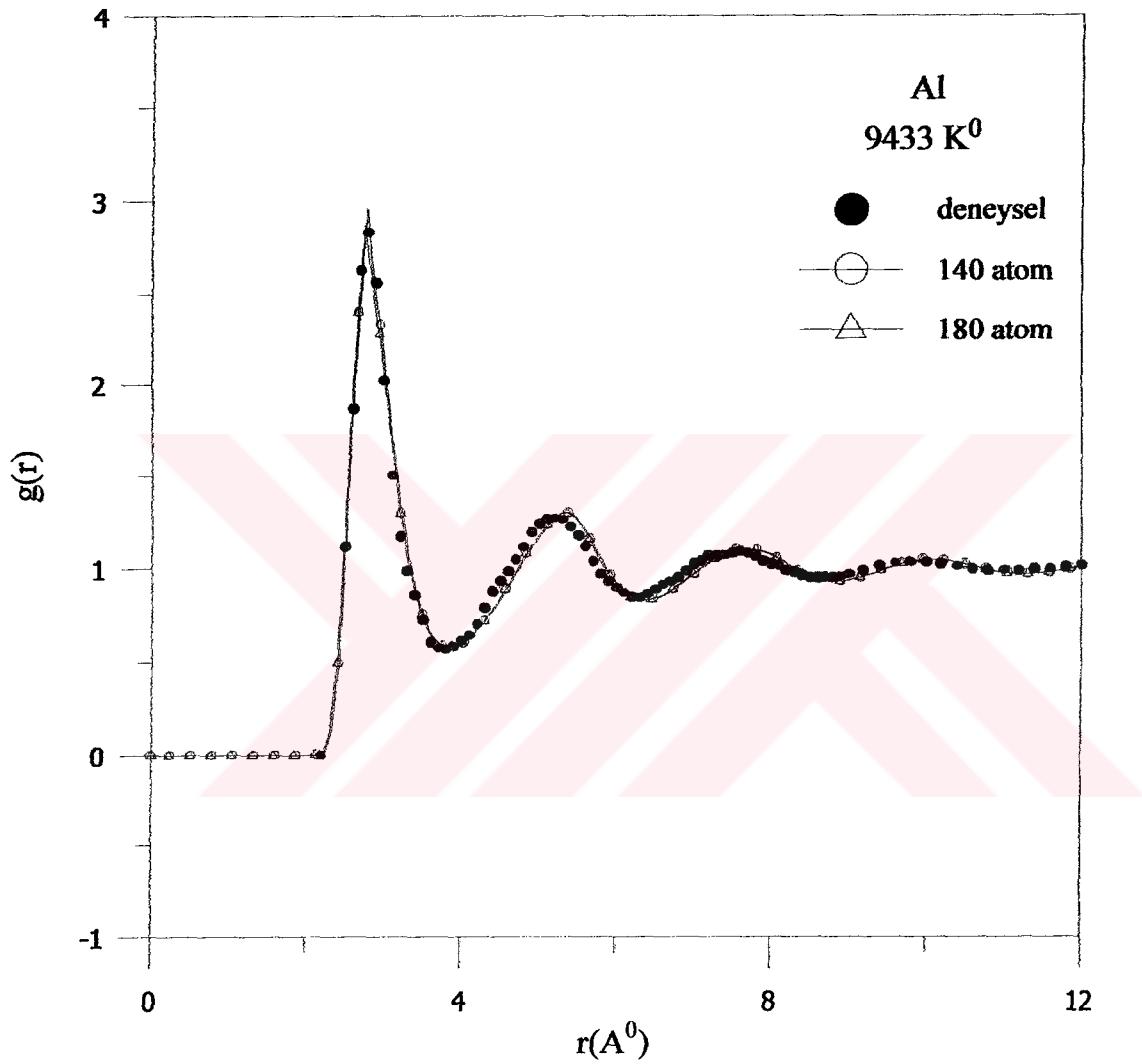
Şekil 5.22: Cu için 140 ve 180 atom sayısında hesaplanan $g(r)$ çiftler dağılım fonksiyonlarının deneysel değer ile karşılaştırılması



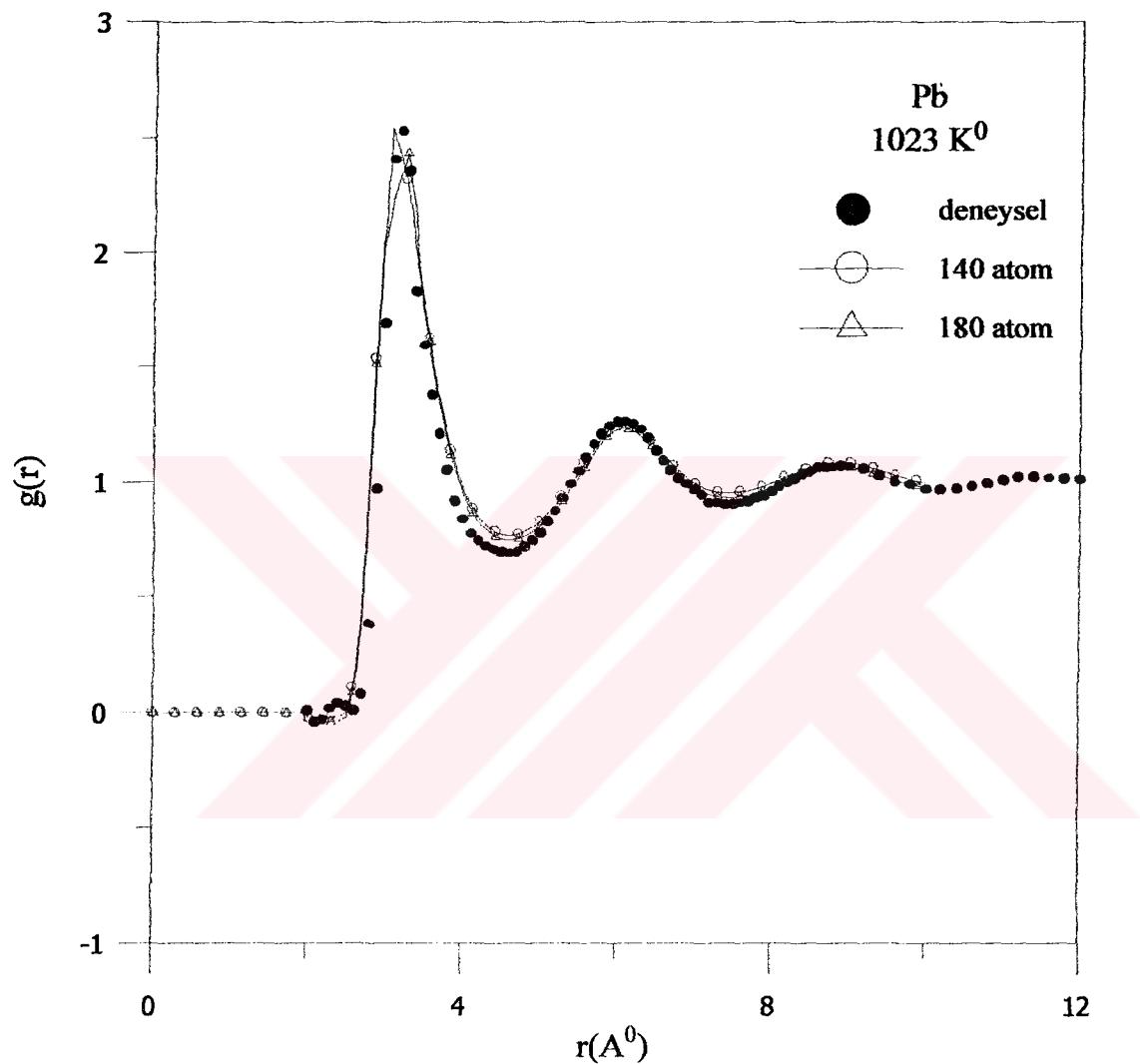
Şekil 5.23: Ag için 140 ve 180 atom sayısında hesaplanan $g(r)$ çiftler dağılım fonksiyonlarının deneysel değer ile karşılaştırılması



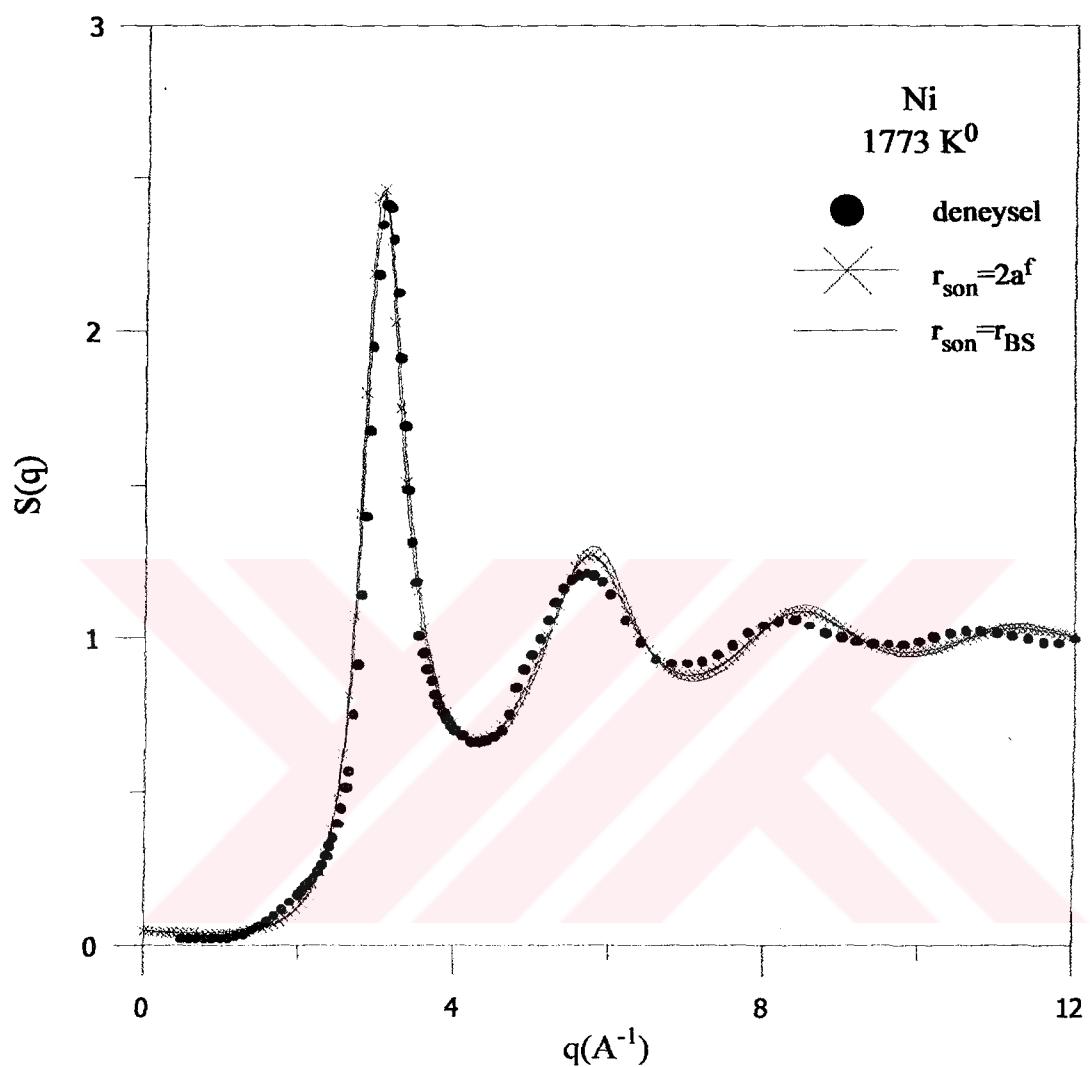
Şekil 5.24: Au için 140 ve 180 atom sayısında hesaplanan $g(r)$ çiftler dağılım fonksiyonlarının deneysel değer ile karşılaştırılması



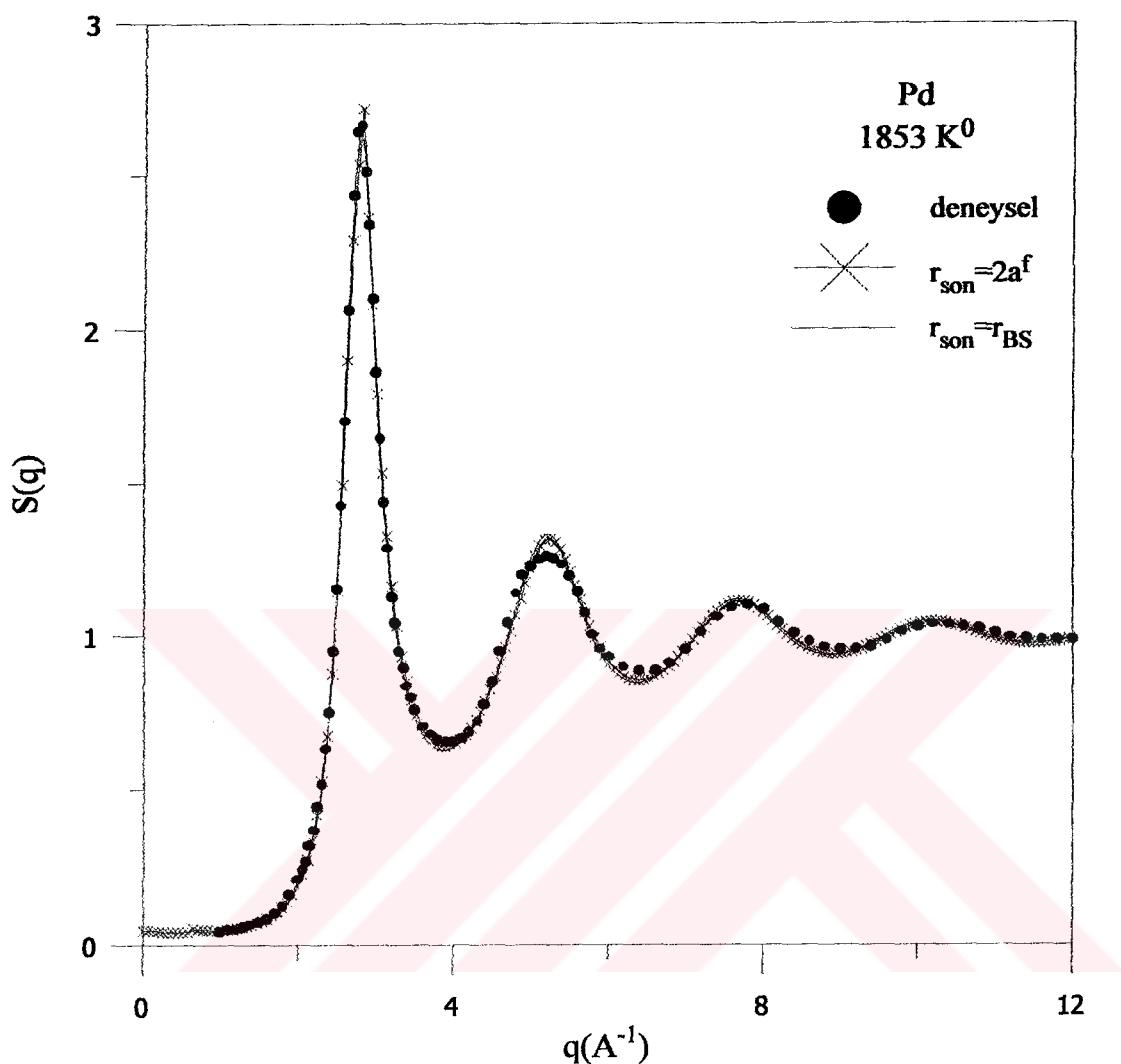
Şekil 5.25: Al için 140 ve 180 atom sayısında hesaplanan $g(r)$ çiftler dağılım fonksiyonlarının deneysel değer ile karşılaştırılması



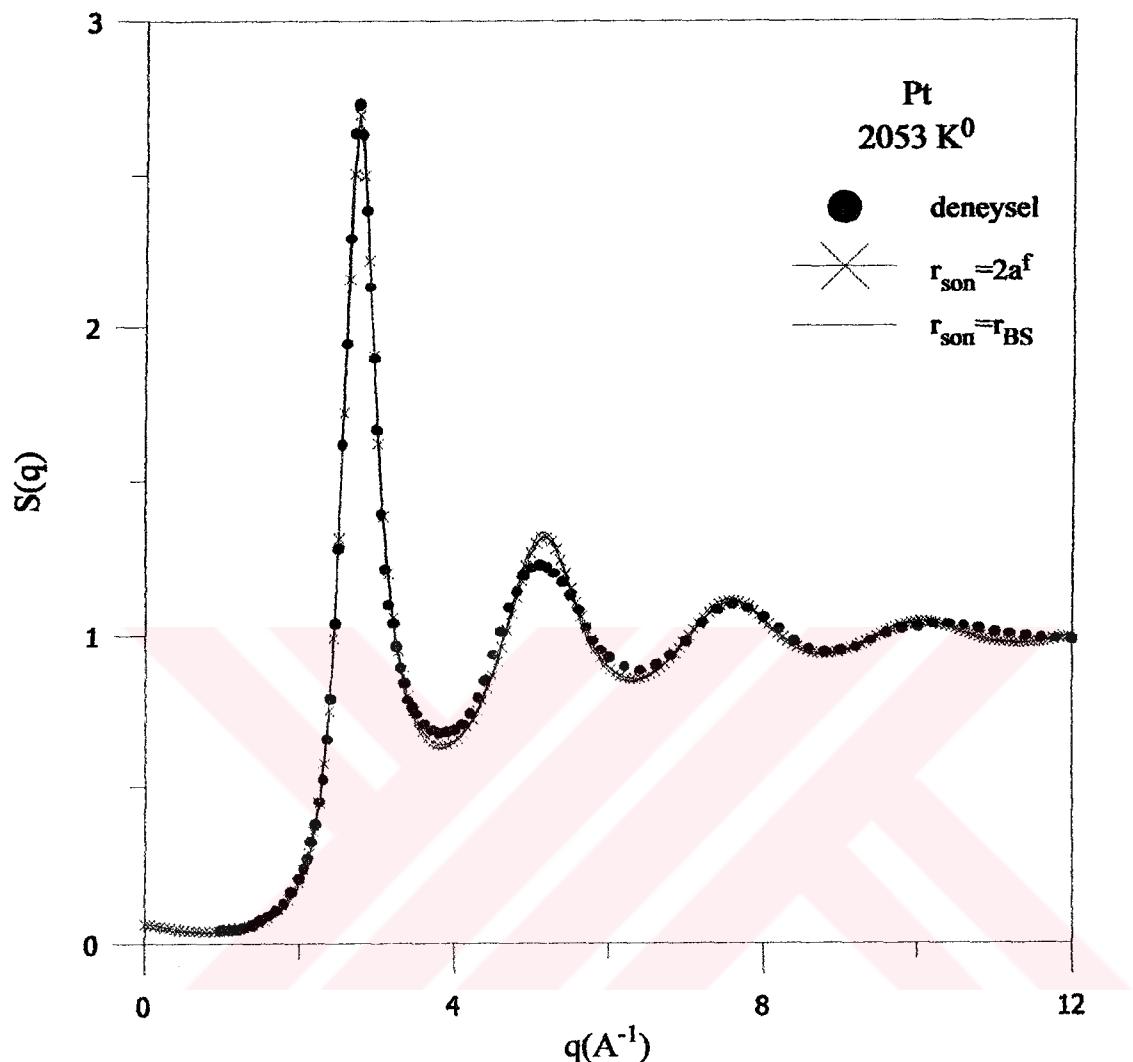
Şekil 5.26: Pb için 140 ve 180 atom sayısında hesaplanan $g(r)$ çiftler dağılım fonksiyonlarının deneysel değer ile karşılaştırılması



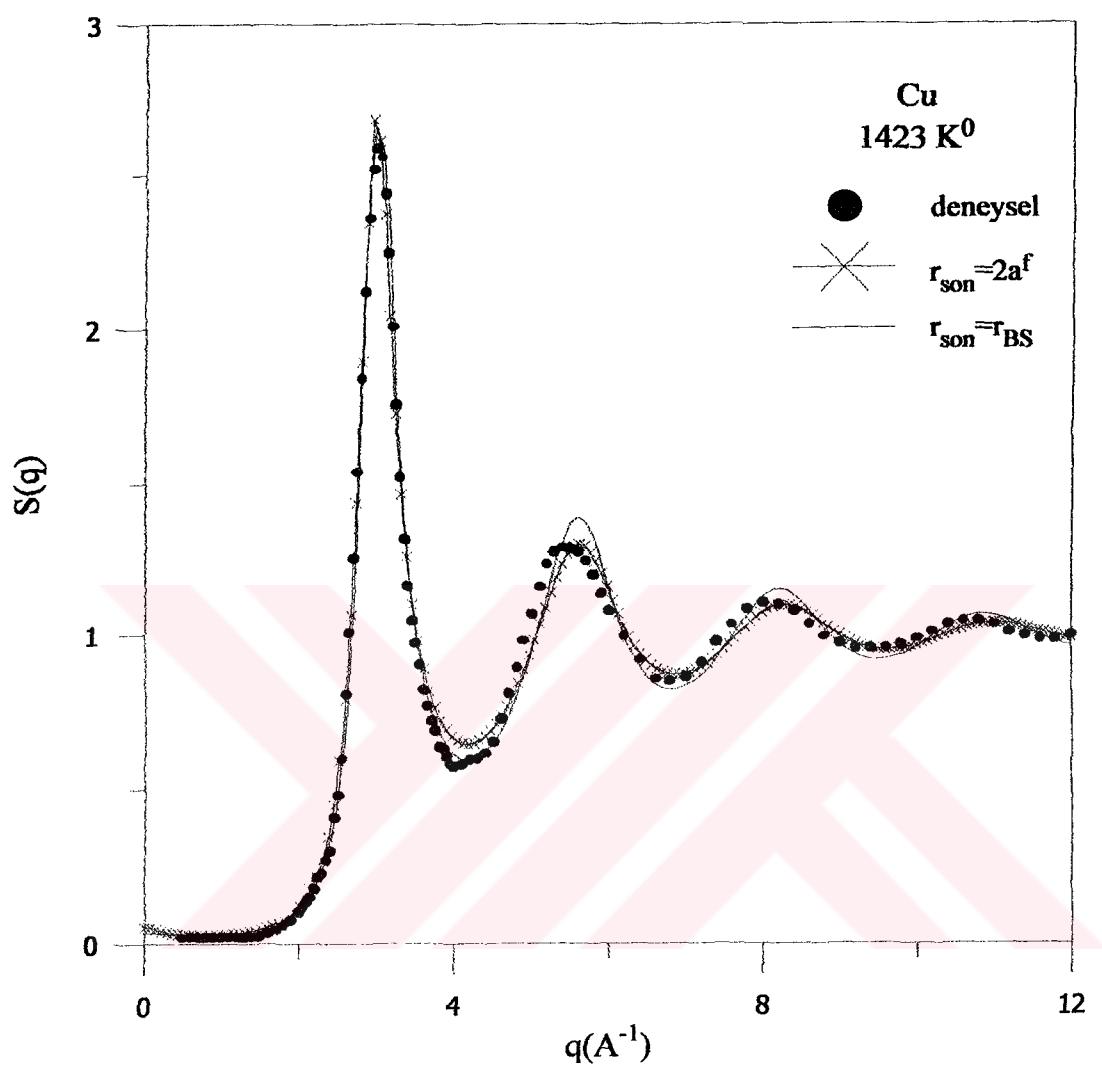
Şekil 5.27: Ni için $r_{\text{son}}=2a^f$ ve $r_{\text{son}}=r_{\text{BS}}$ mesafelerinde hesaplanan $S(q)$ statik yapı faktörlerinin deneysel değer ile karşılaştırılması



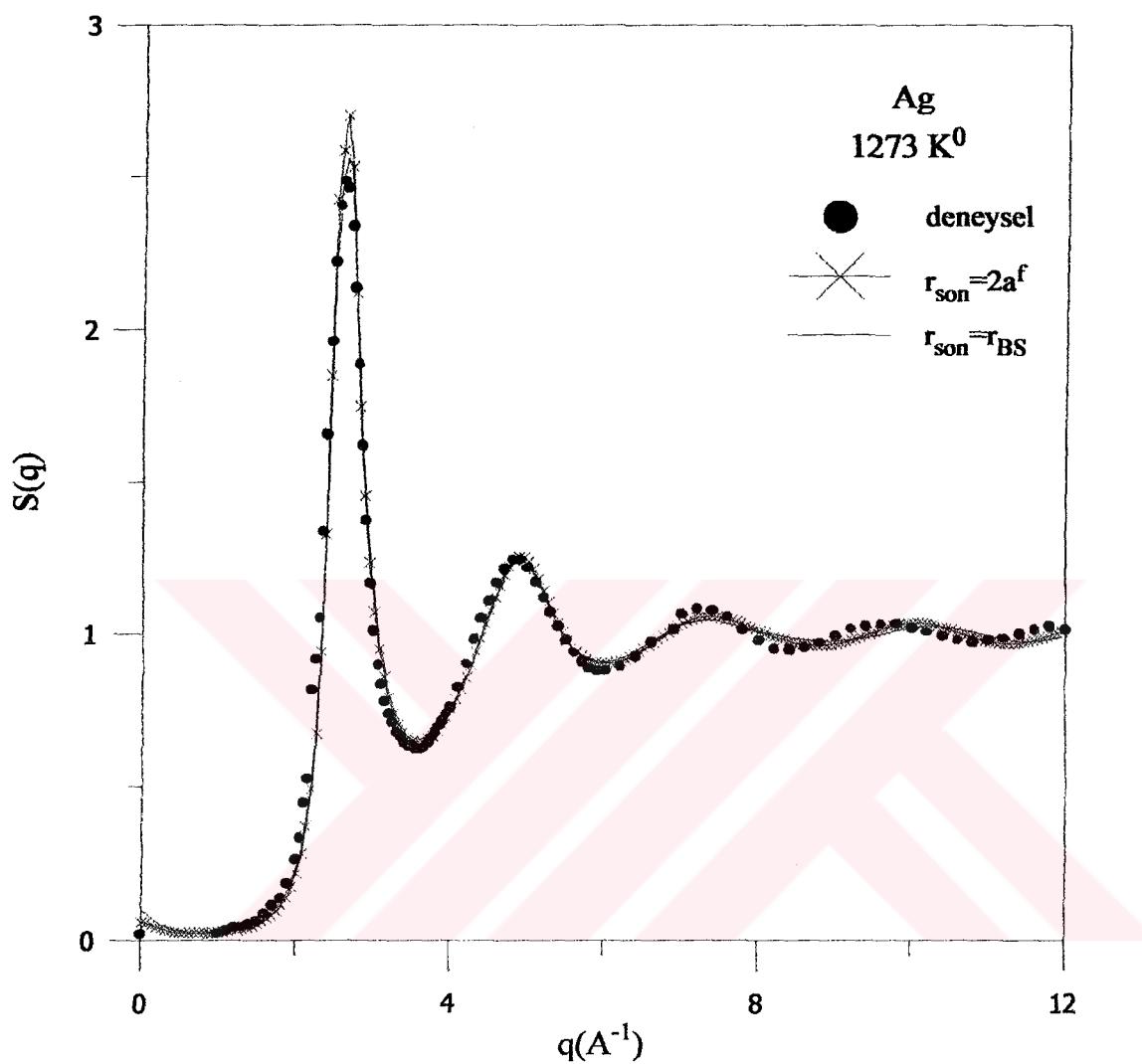
Şekil 5.28: Pd metali için $r_{son}=2a_f$ ve $r_{son}=r_{BS}$ mesafelerinde hesaplanan $S(q)$ statik yapı faktörlerinin deneysel değer ile karşılaştırılması.



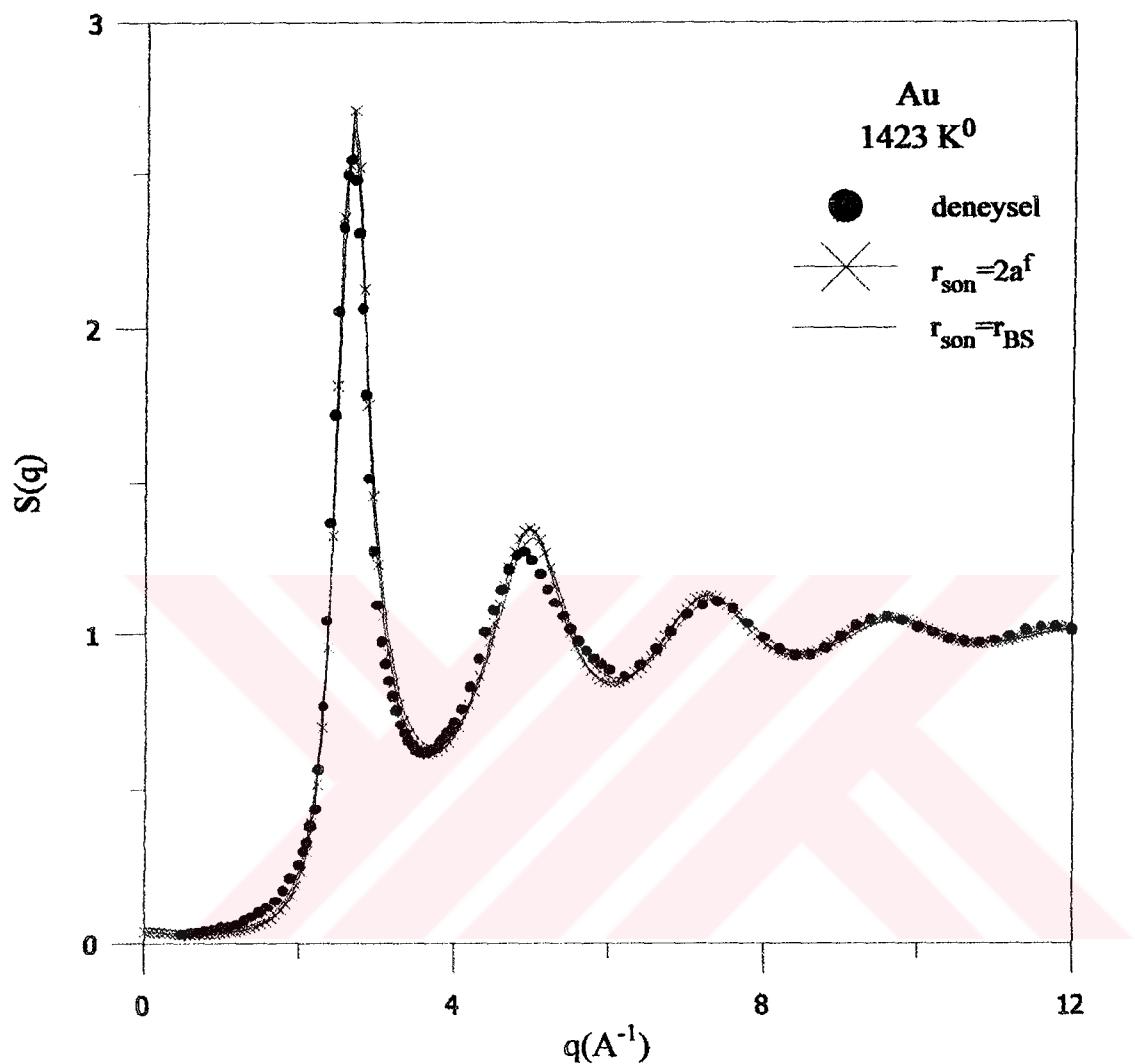
Şekil 5.29: Pt için $r_{\text{son}} = 2a^f$ ve $r_{\text{son}} = r_{\text{BS}}$ mesafelerinde hesaplanan $S(q)$ statik yapı faktörlerinin deneysel değer ile karşılaştırılması



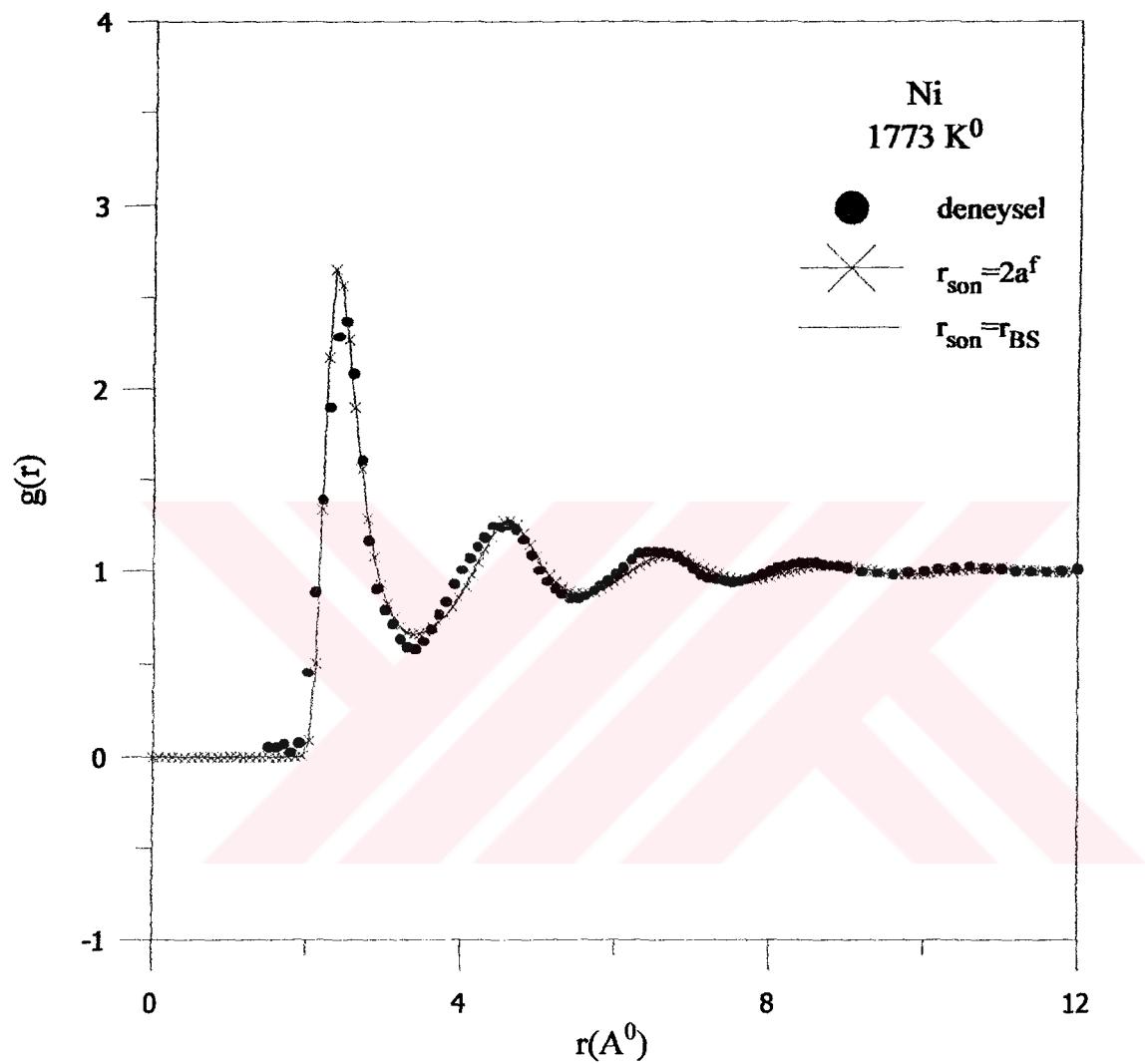
Şekil 5.30: Cu için $r_{son}=2a^f$ ve $r_{son}=r_{BS}$ mesafelerinde hesaplanan $S(q)$ statik yapı faktörlerinin deneysel değer ile karşılaştırılması



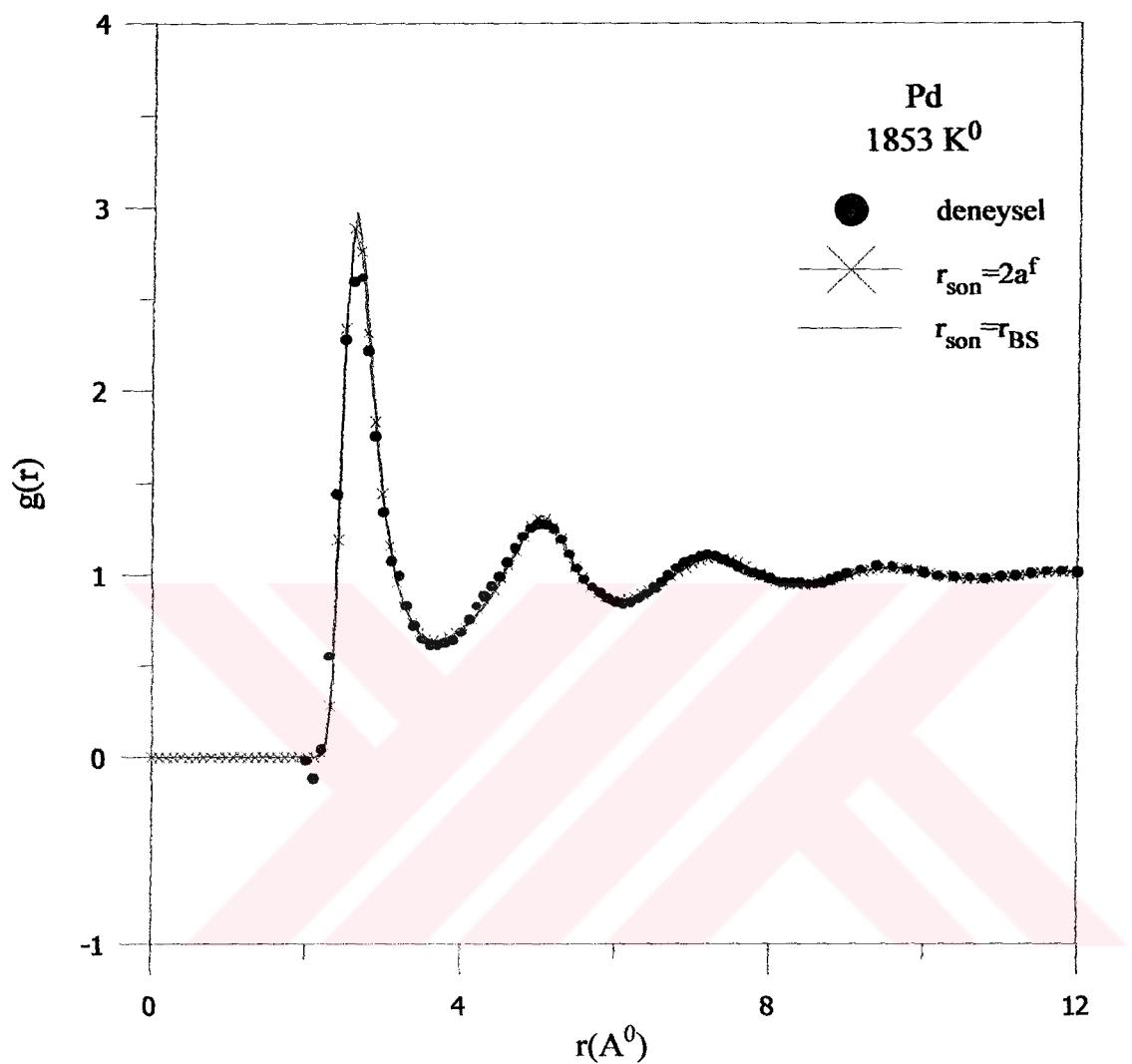
Şekil 5.31: Ag için $r_{\text{son}} = 2a^f$ ve $r_{\text{son}} = r_{\text{BS}}$ mesafelerinde hesaplanan $S(q)$ statik yapı faktörlerinin deneysel değer ile karşılaştırılması



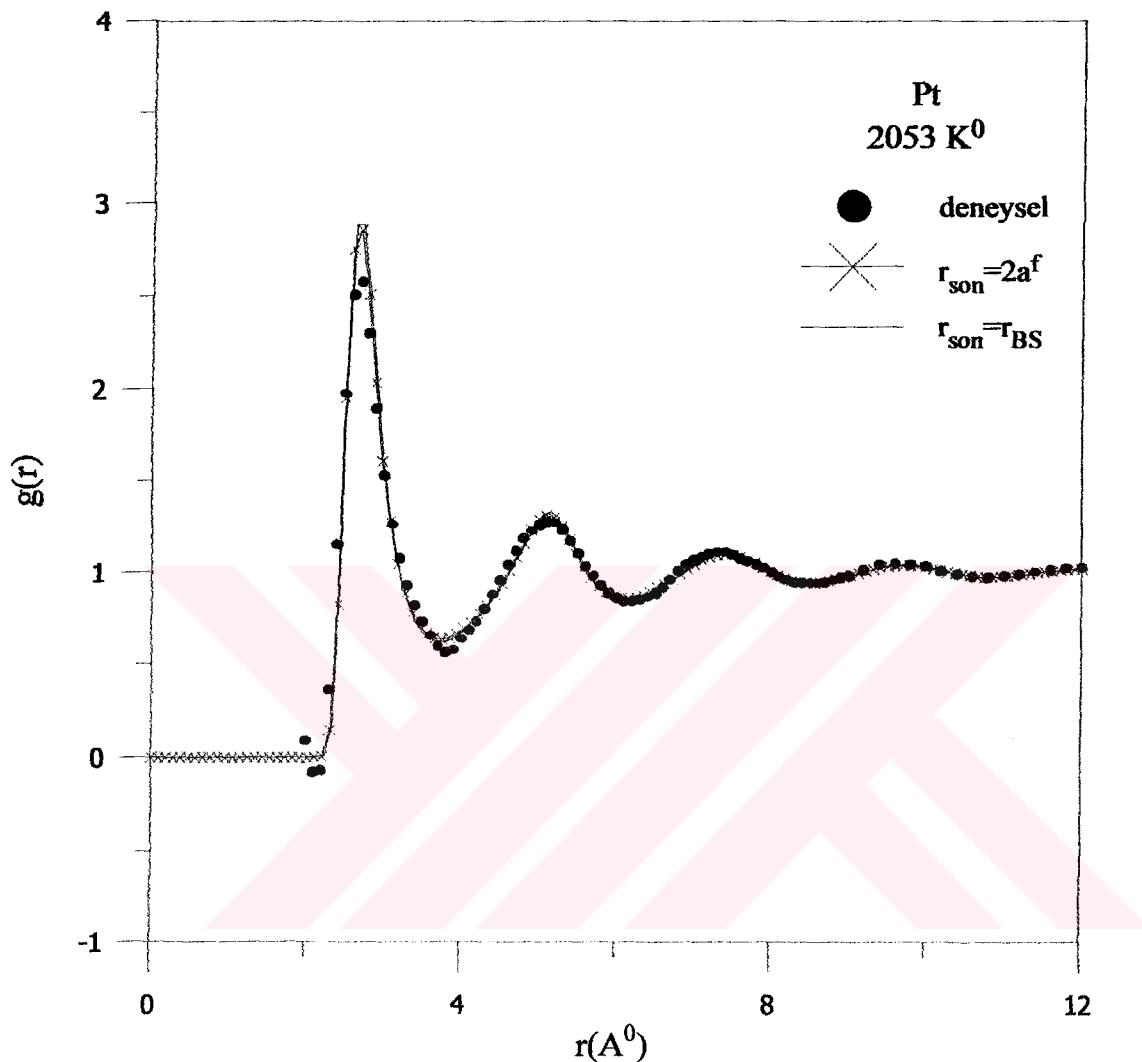
Şekil 5.32: Au için $r_{son}=2a^f$ ve $r_{son}=r_{BS}$ mesafelerinde hesaplanan $S(q)$ statik yapı faktörlerinin deneysel değer ile karşılaştırılması



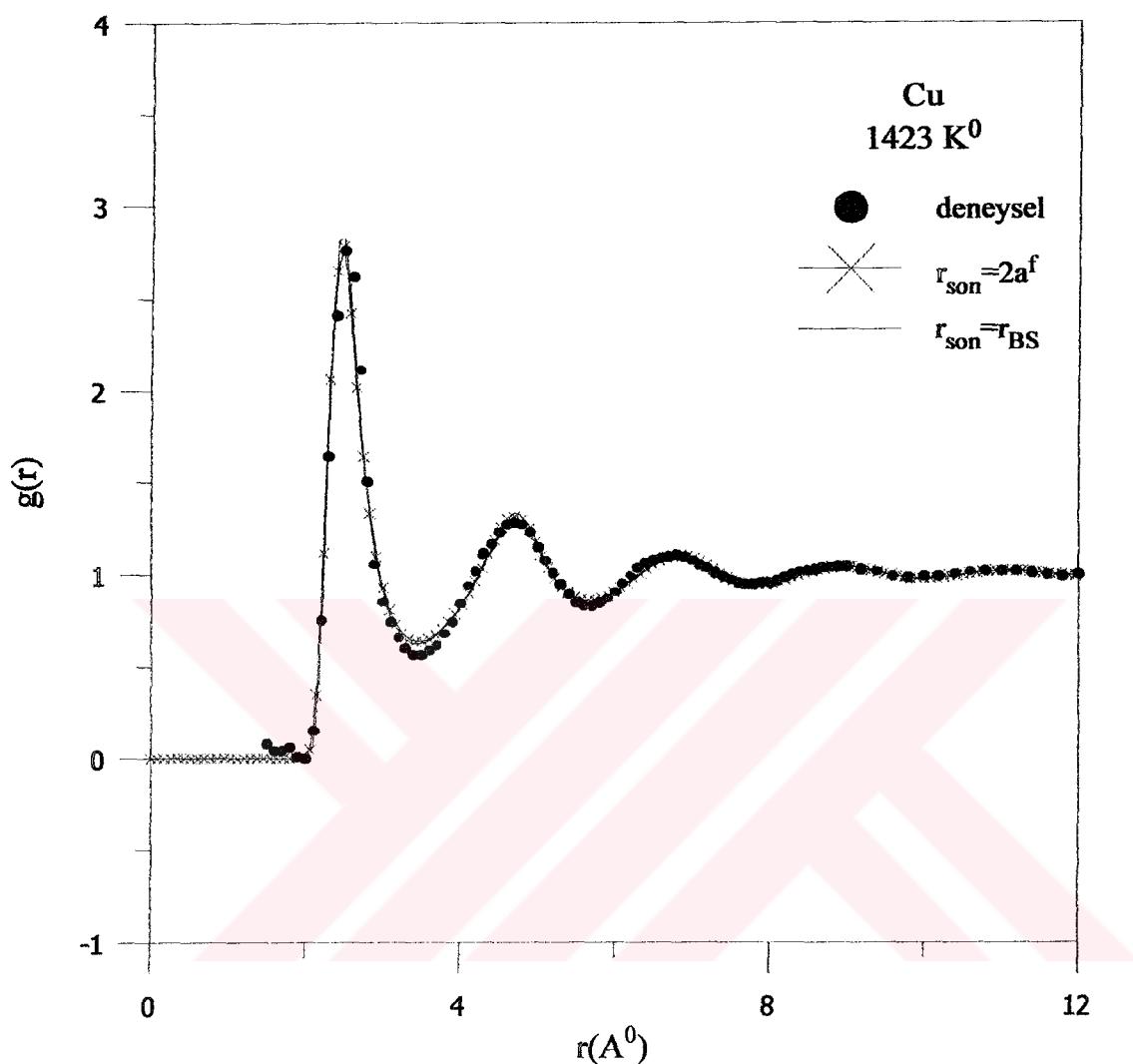
Şekil 5.33: Ni için $r_{son}=2a^f$ ve $r_{son}=r_{BS}$ mesafelerinde hesaplanan $g(r)$ çiftler dağılım fonksiyonlarının deneysel değer ile karşılaştırılması



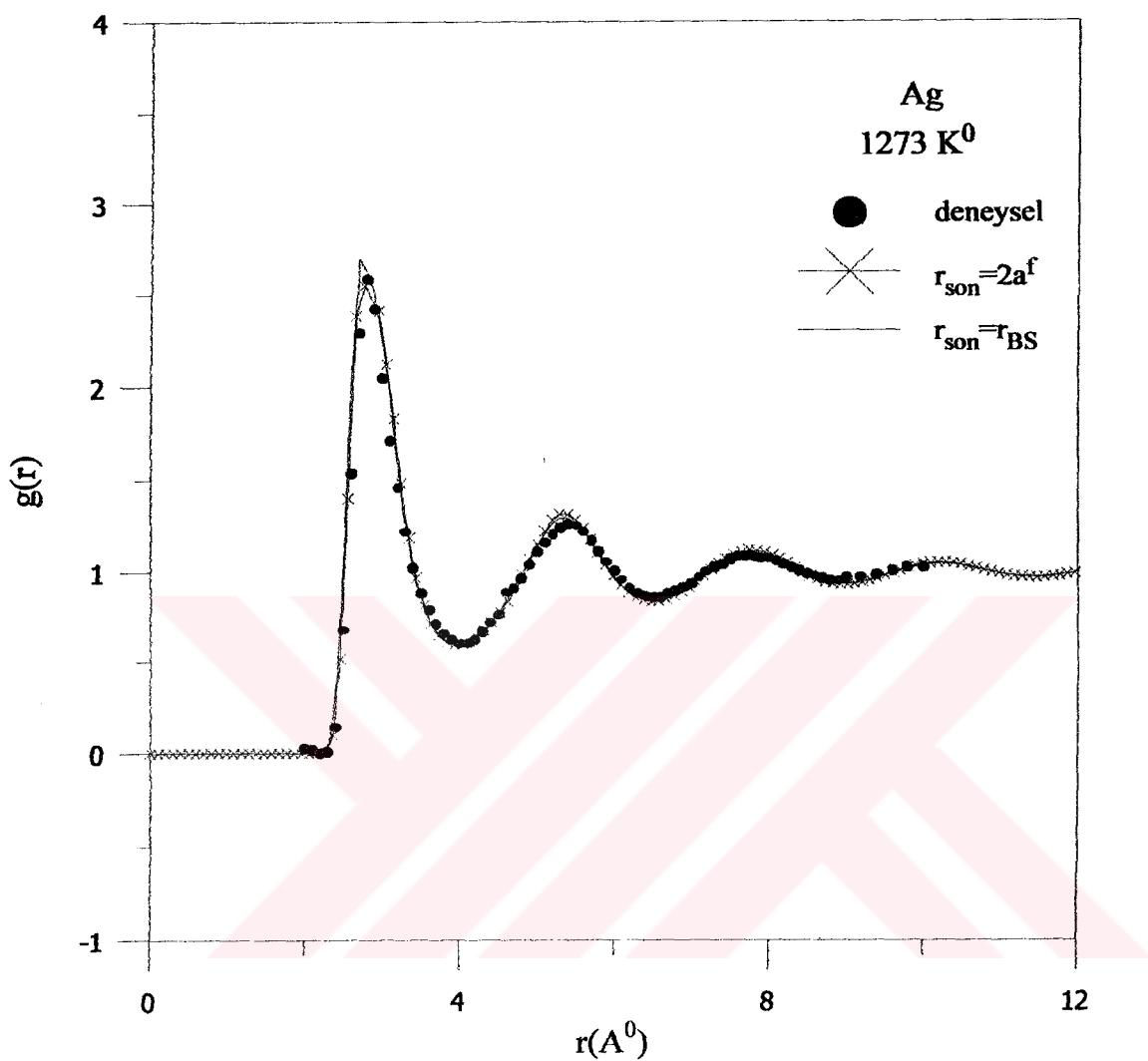
Şekil 5.34: Pd için $r_{son}=2a^f$ ve $r_{son}=r_{BS}$ mesafelerinde hesaplanan $g(r)$ çiftler dağılım fonksiyonlarının deneysel değer ile karşılaştırılması



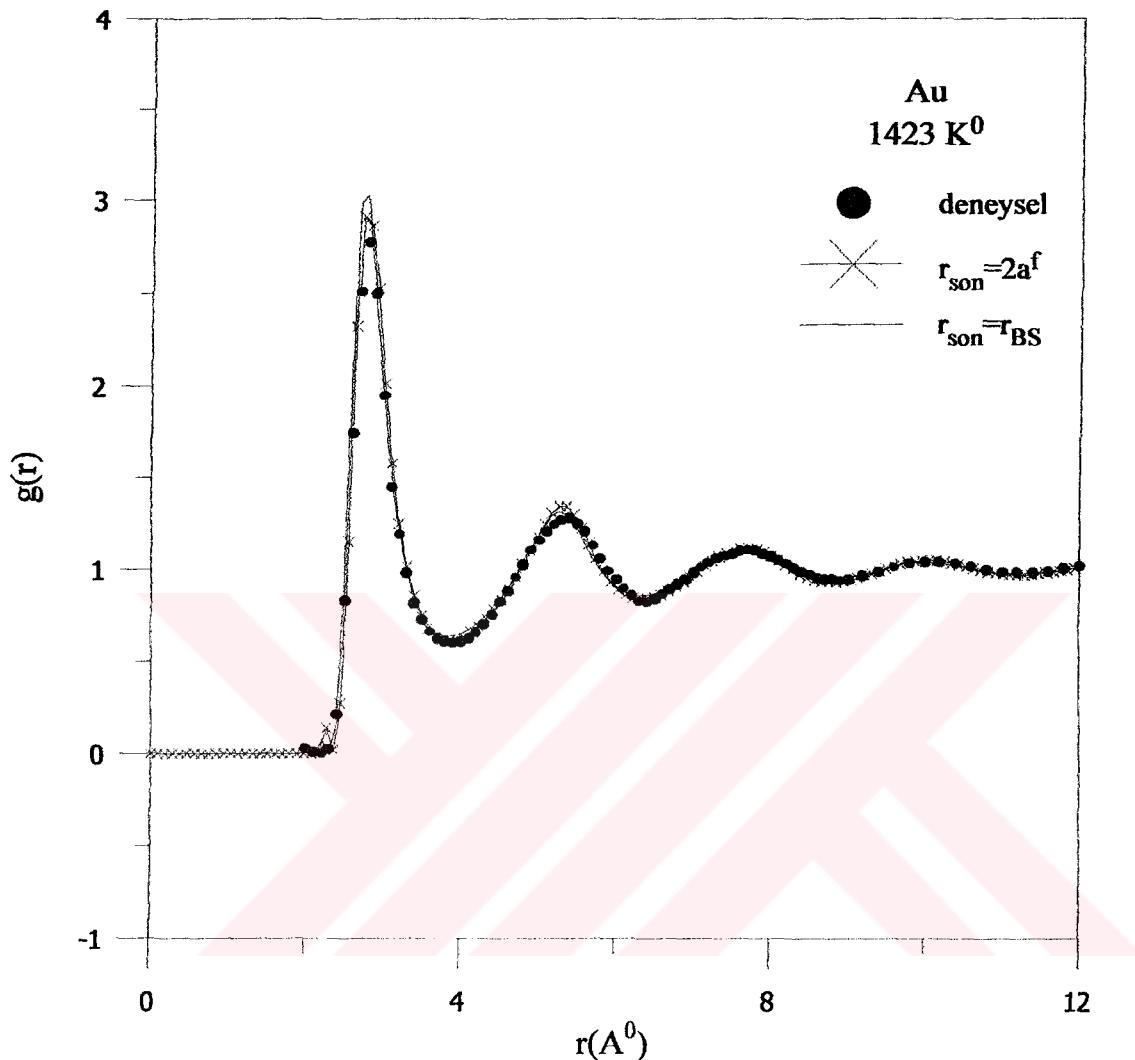
Şekil 5.35: Pt için $r_{\text{son}} = 2a^f$ ve $r_{\text{son}} = r_{\text{BS}}$ mesafelerinde hesaplanan $g(r)$ çiftler dağılım fonksiyonlarının deneysel değer ile karşılaştırılması



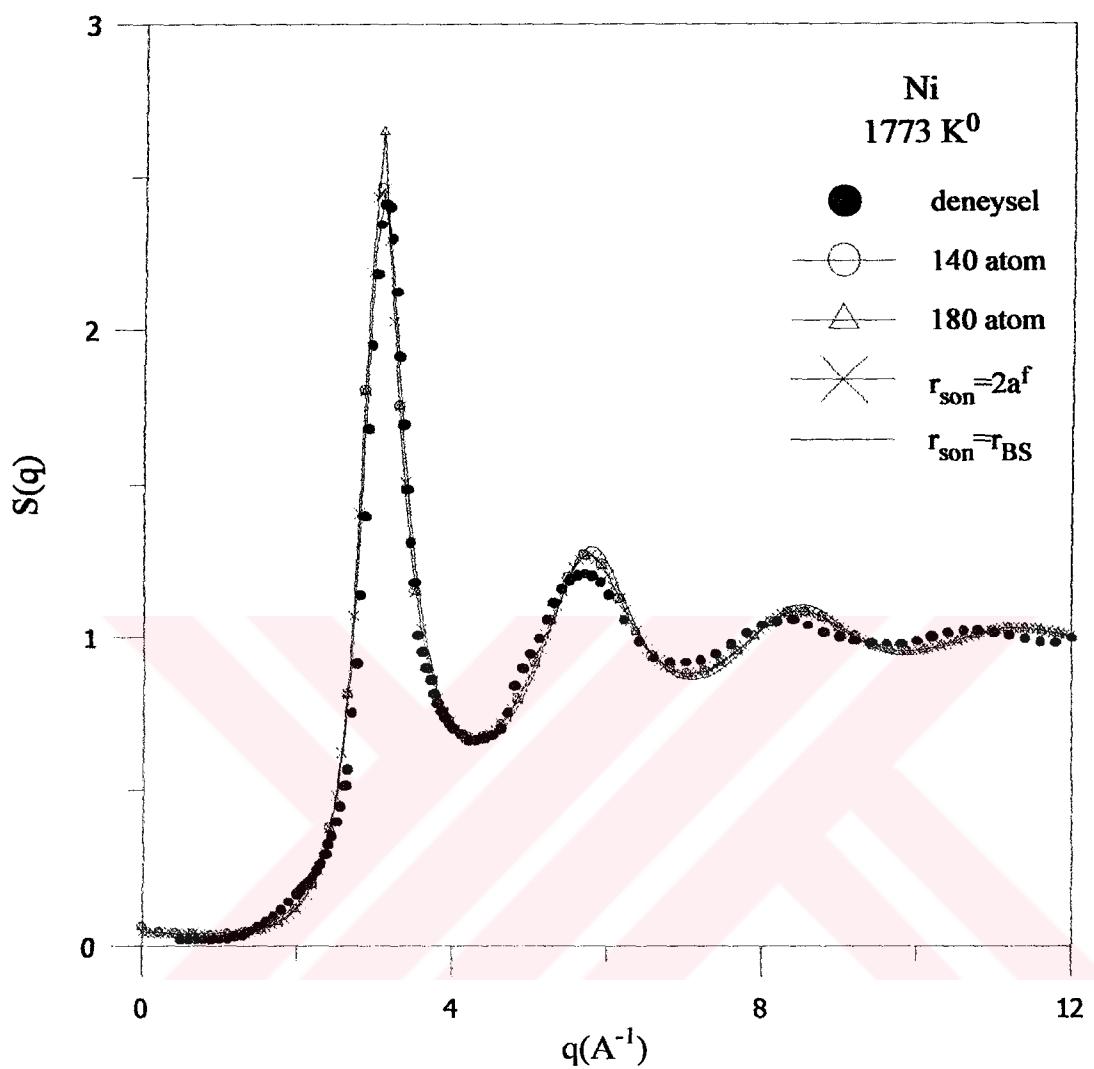
Şekil 5.36: Cu için $r_{son}=2a^f$ ve $r_{son}=r_{BS}$ mesafelerinde hesaplanan $g(r)$ çiftler dağılım fonksiyonlarının deneysel değer ile karşılaştırılması



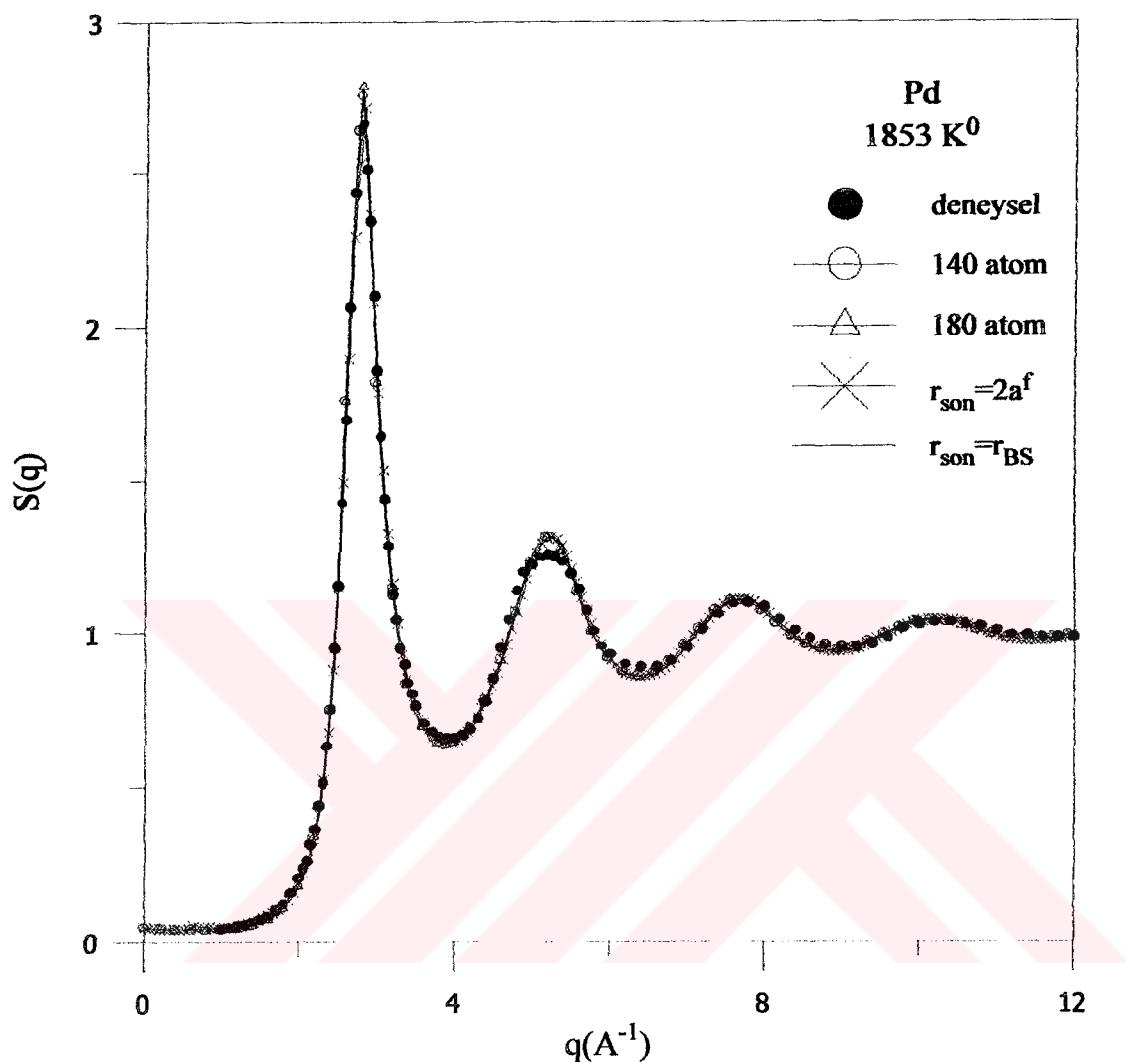
Şekil 5.37: Ag için $r_{son}=2a^f$ ve $r_{son}=r_{BS}$ mesafelerinde hesaplanan $g(r)$ çiftler dağılım fonksiyonlarının deneysel değer ile karşılaştırılması



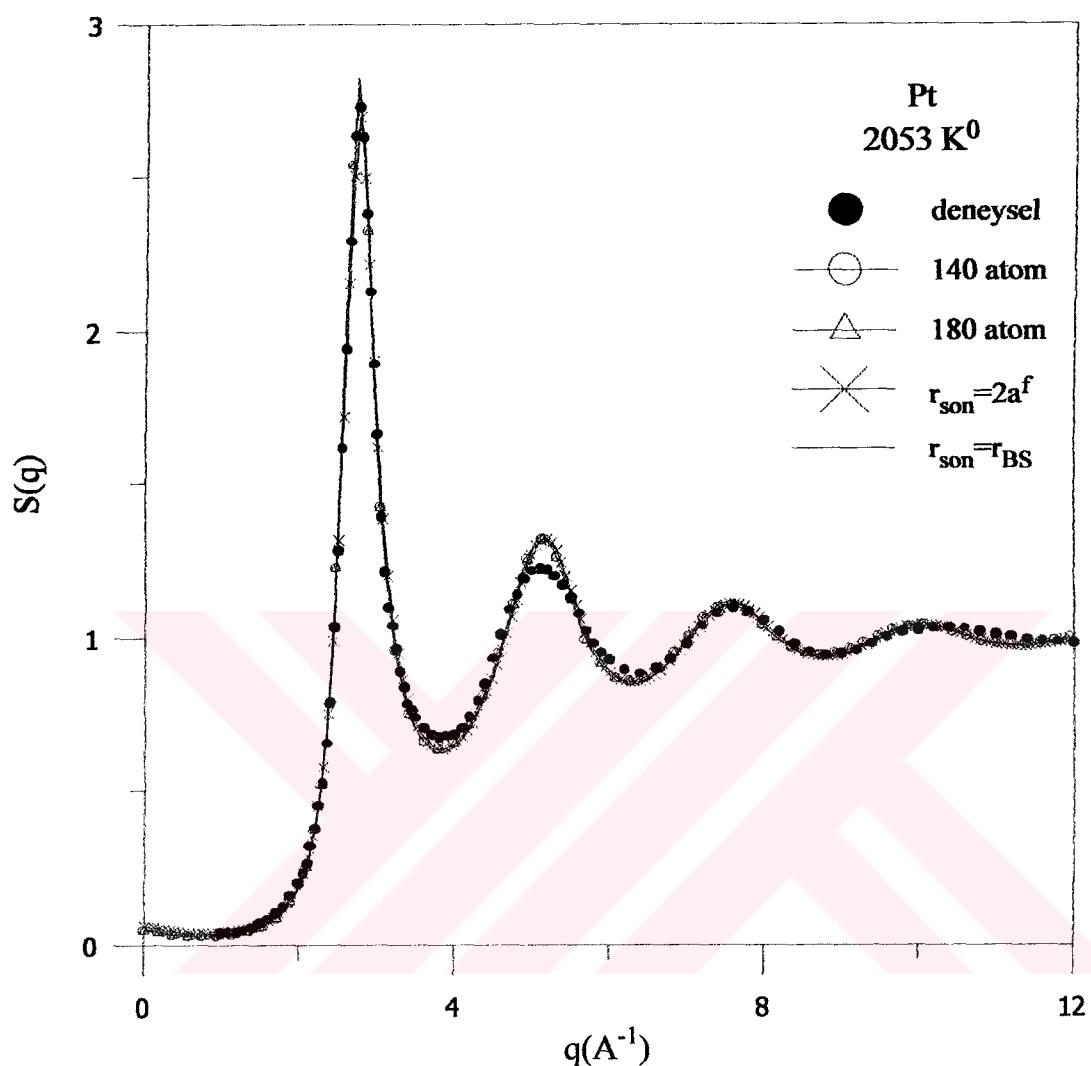
Şekil 5.38: Au için $r_{son}=2a^f$ ve $r_{son}=r_{BS}$ mesafelerinde hesaplanan $g(r)$ çiftler dağılım fonksiyonlarının deneysel değer ile karşılaştırılması



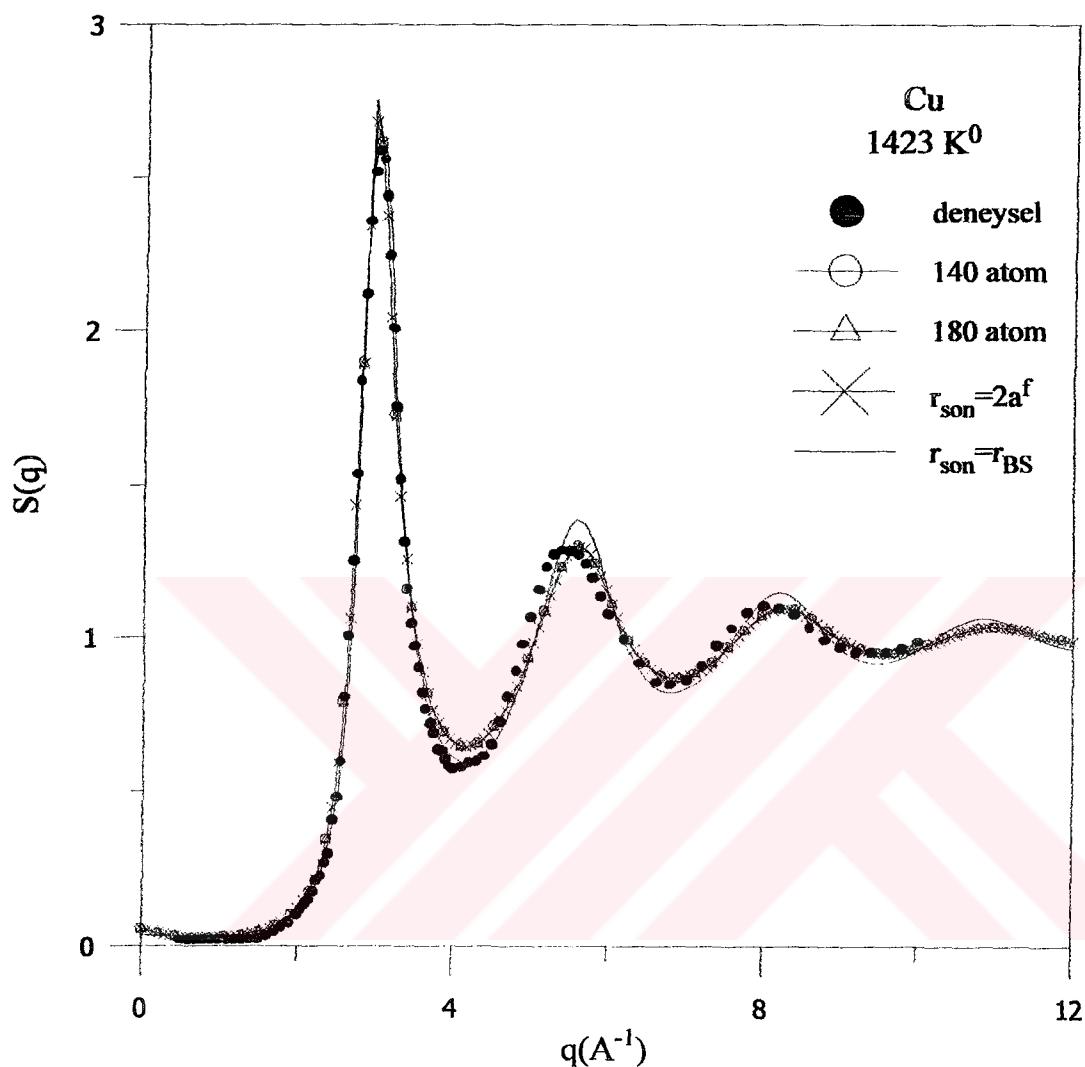
Şekil 5.39: Ni için 140, 180 atom, $r_{son}=2a^f$ ve $r_{son}=r_{BS}$ mesafelerinde hesaplanan $S(q)$ statik yapı faktörlerinin deneysel değer ile karşılaştırılması



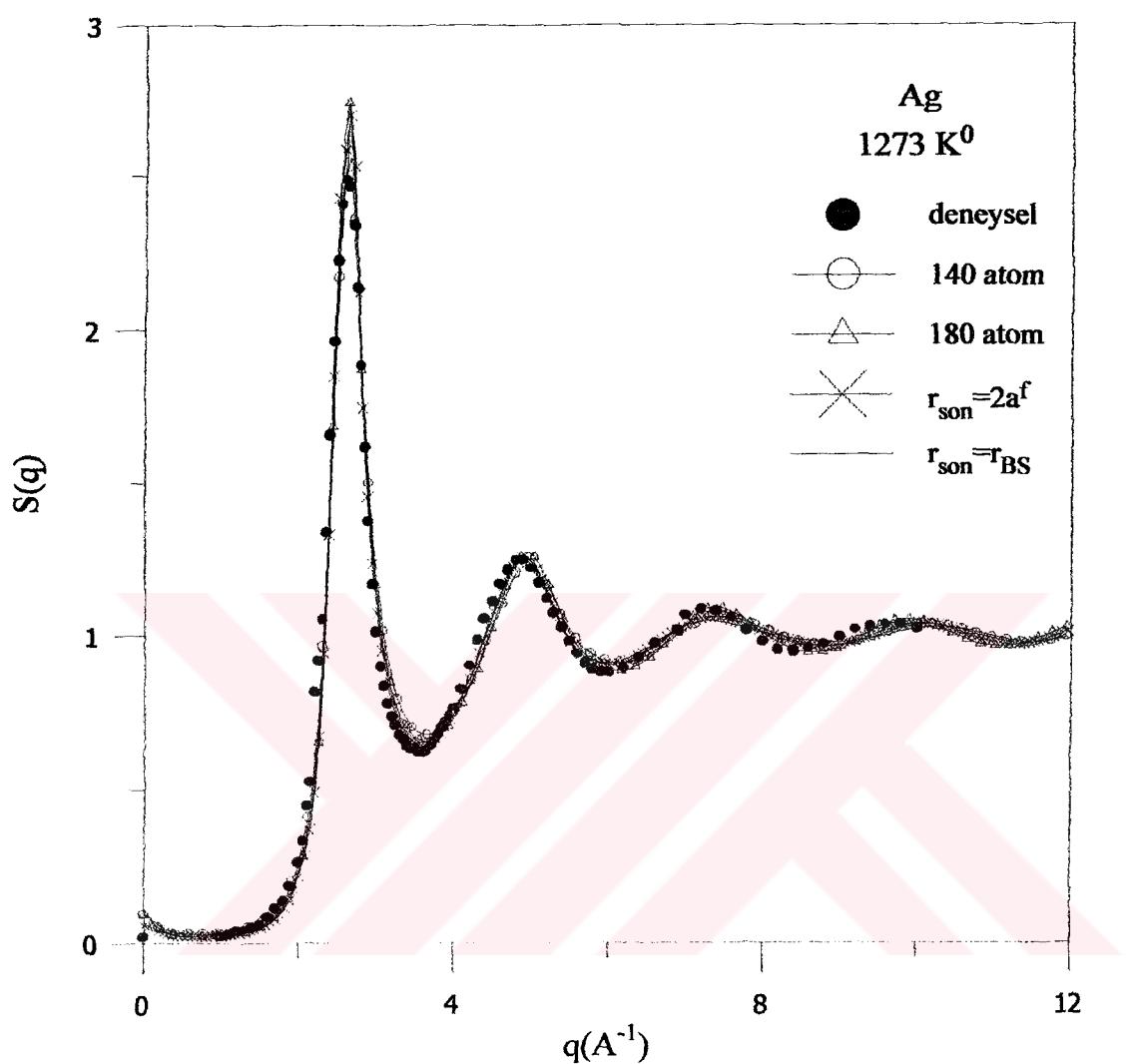
Şekil 5.40: Pd için 140, 180 atom, $r_{son}=2a^f$ ve $r_{son}=r_{BS}$ mesafelerinde hesaplanan $S(q)$ statik yapı faktörlerinin deneysel değer ile karşılaştırılması



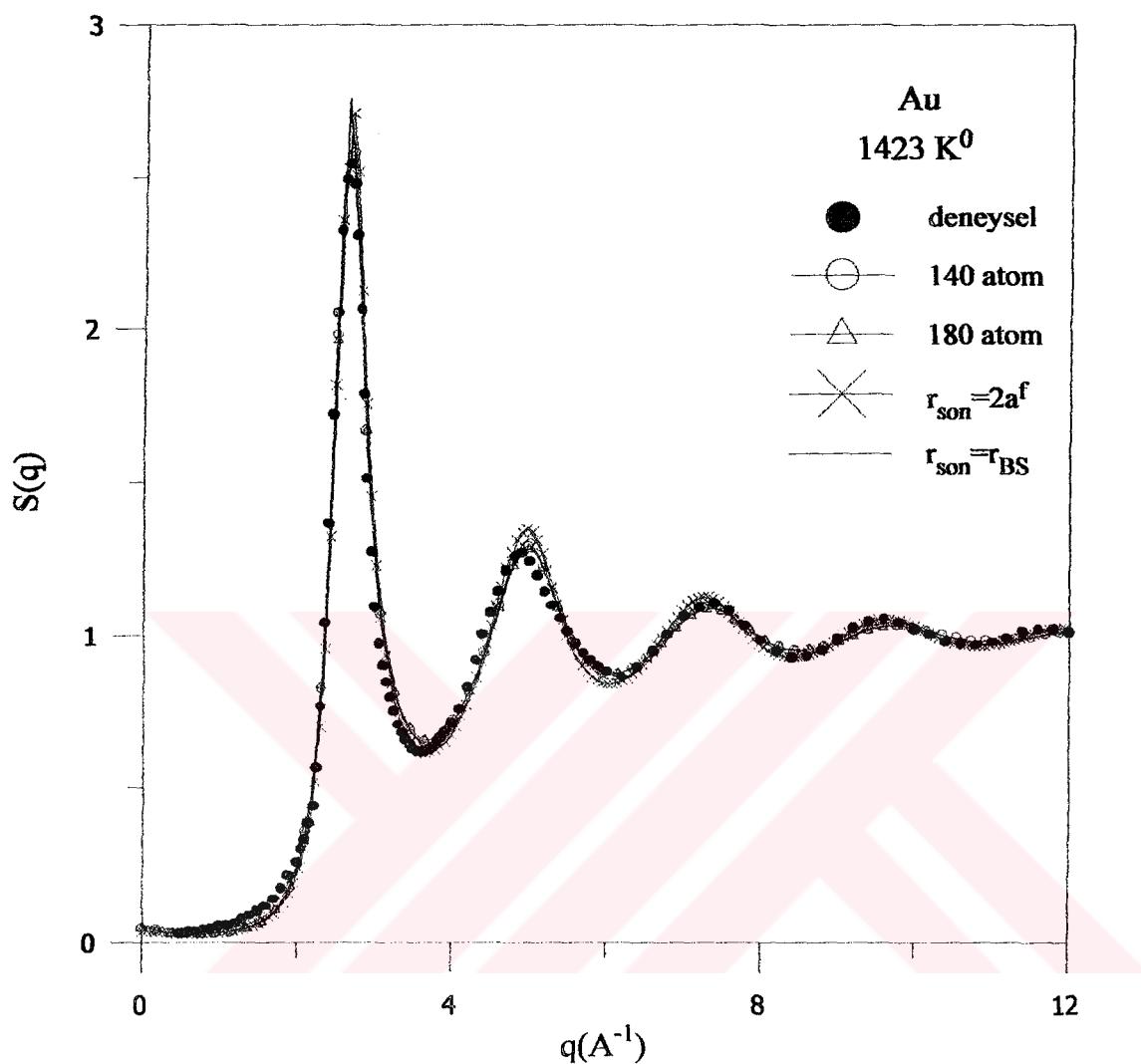
Şekil 5.41: Pt için 140, 180 atom, $r_{son}=2a^f$ ve $r_{son}=r_{BS}$ mesafelerinde hesaplanan $S(q)$ statik yapı faktörlerinin deneysel değer ile karşılaştırılması.



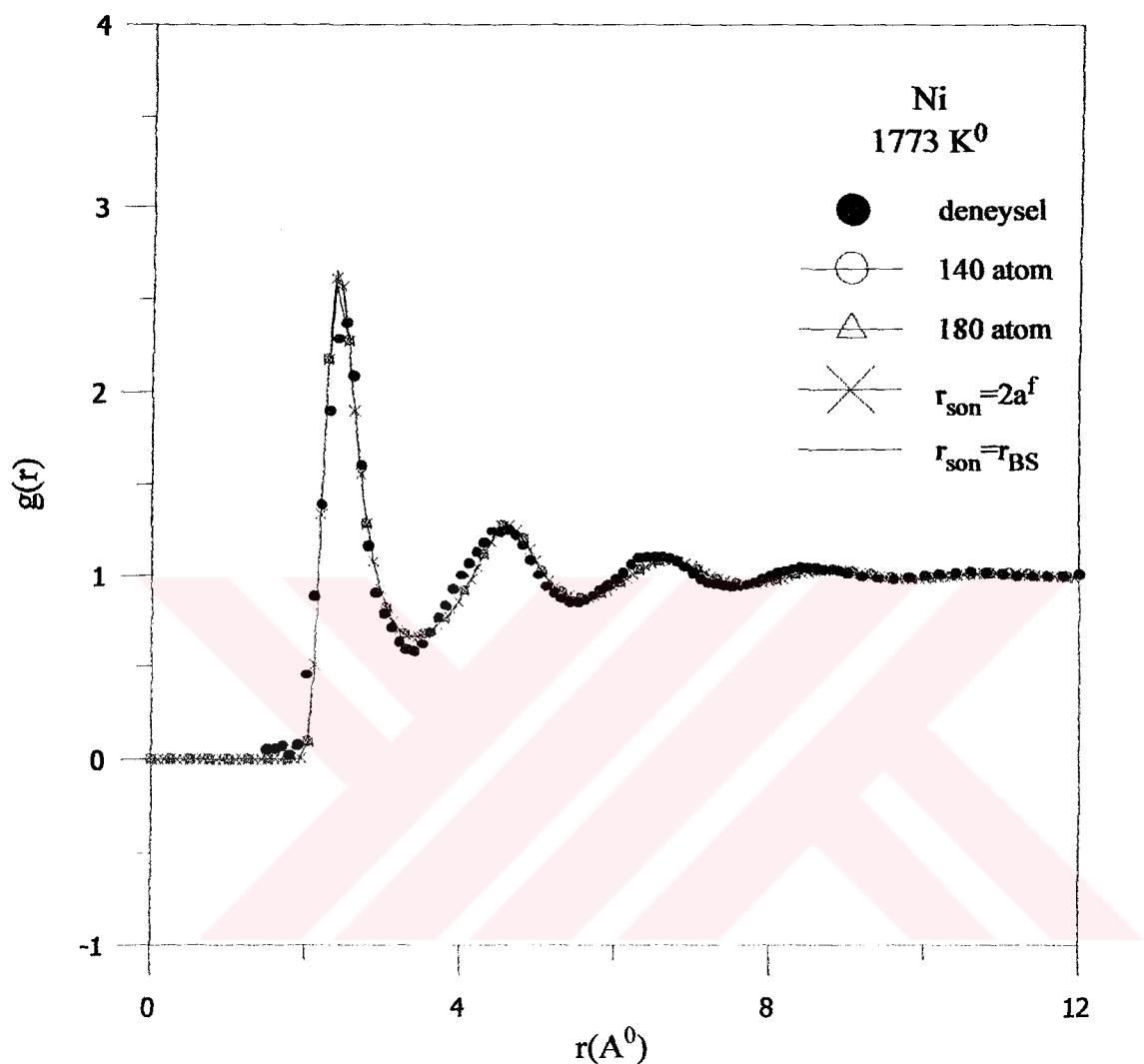
Şekil 5.42: Cu için 140, 180 atom, $r_{\text{son}} = 2a^f$ ve $r_{\text{son}} = r_{\text{BS}}$ mesafelerinde hesaplanan $S(q)$ statik yapı faktörlerinin deneysel değer ile karşılaştırılması



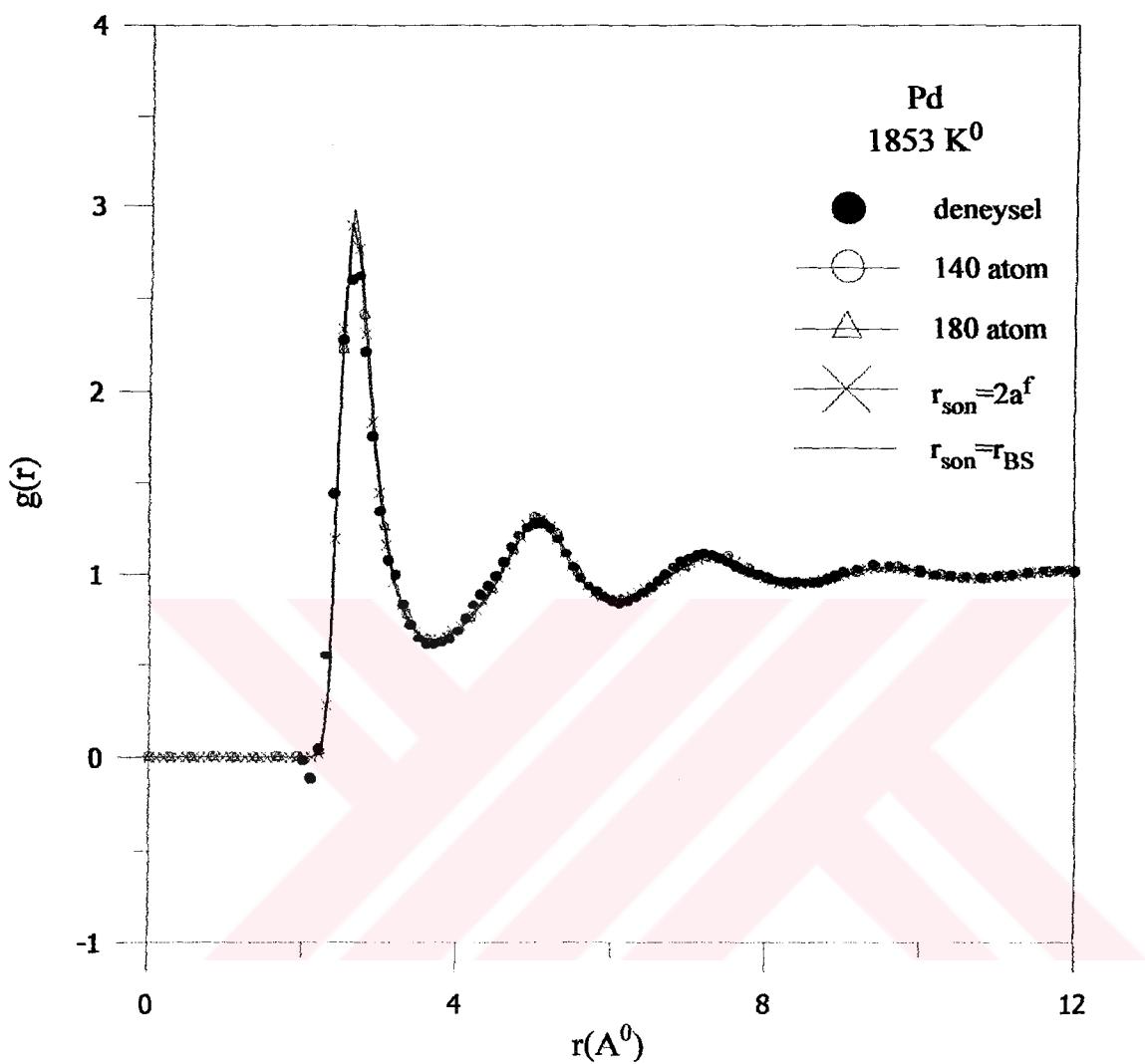
Şekil 5.43: Ag için 140, 180 atom, $r_{\text{son}} = 2a^f$ ve $r_{\text{son}} = r_{\text{BS}}$ mesafelerinde hesaplanan $S(q)$ statik yapı faktörlerinin deneysel değer ile karşılaştırılması



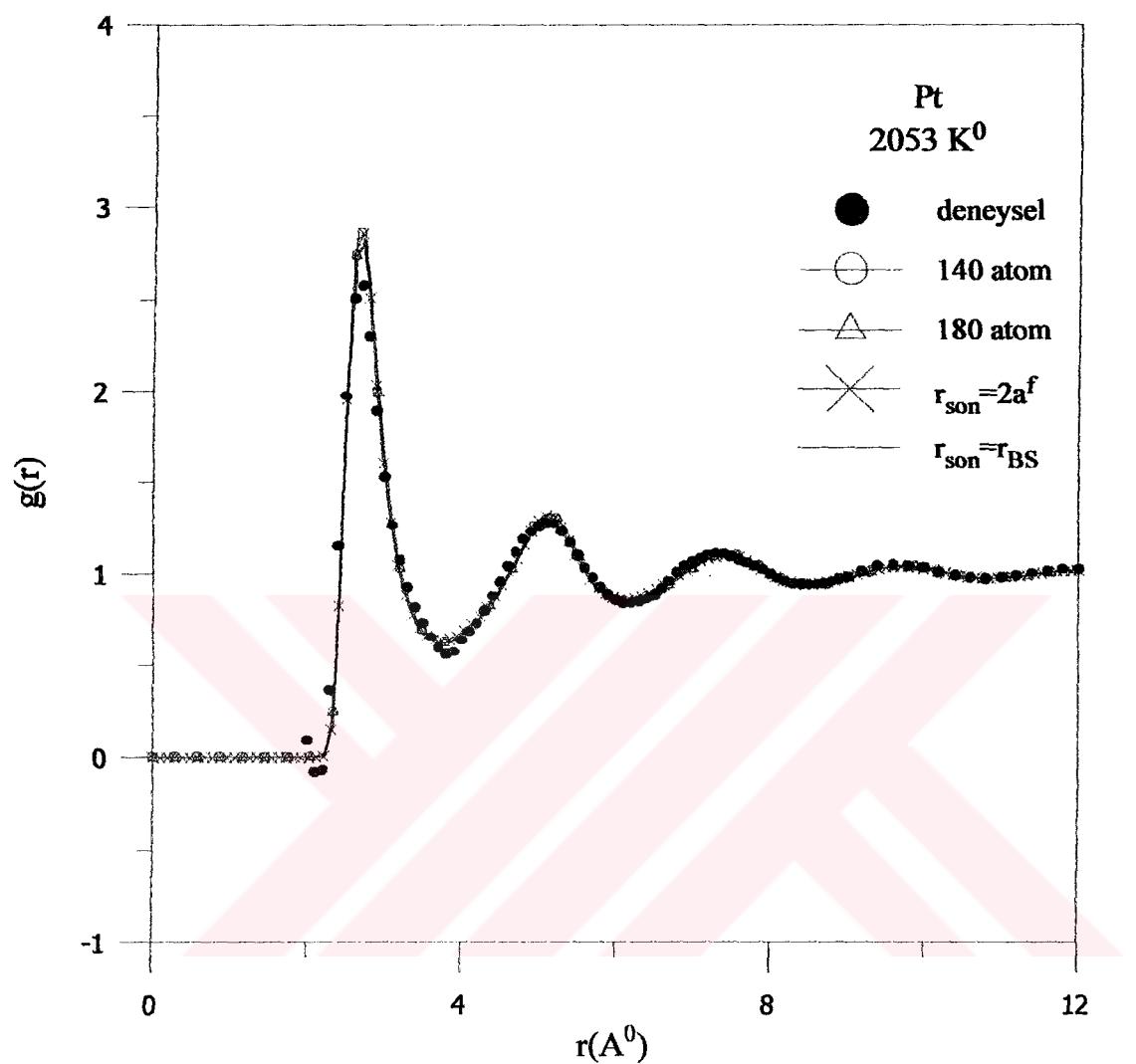
Şekil 5.44: Au için 140, 180 atom, $r_{son} = 2a^f$ ve $r_{son} = r_{BS}$ mesafelerinde hesaplanan $S(q)$ statik yapı faktörlerinin deneysel değer ile karşılaştırılması.



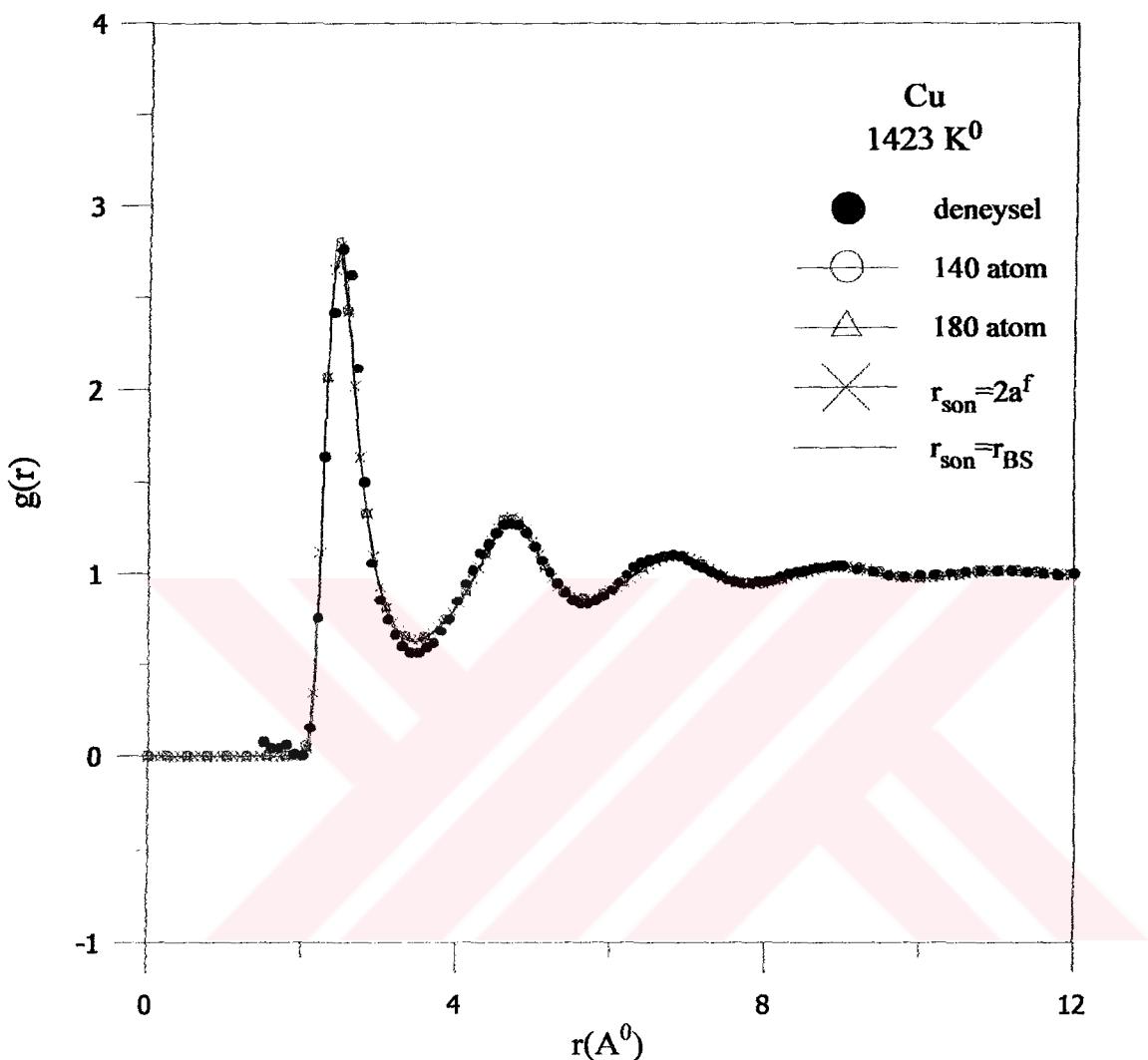
Şekil 5.45: Ni için 140, 180 atom, $r_{son}=2a^f$ ve $r_{son}=r_{BS}$ mesafelerinde hesaplanan $g(r)$ çiftler dağılım fonksiyonlarının deneysel değer ile karşılaştırılması.



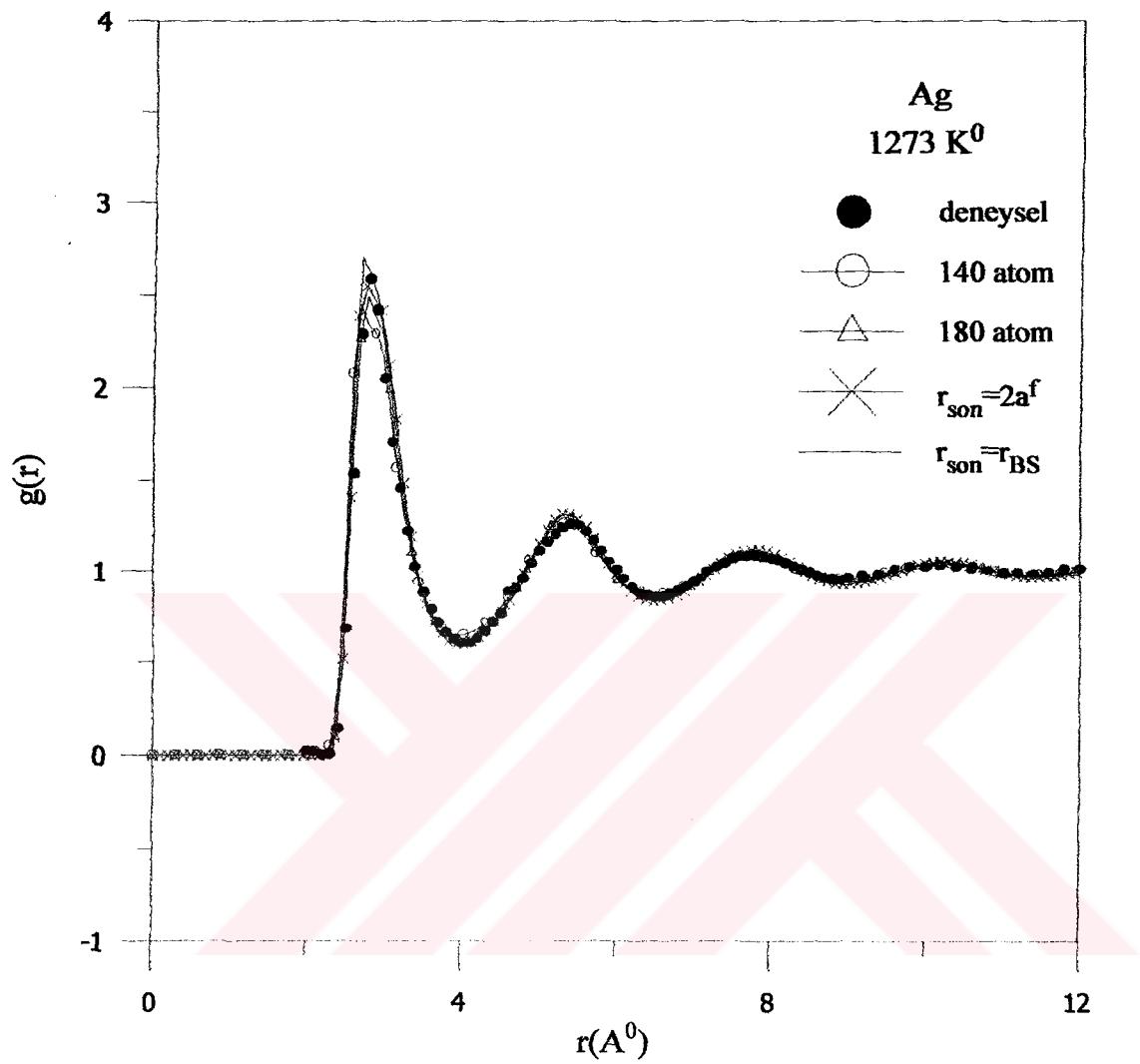
Şekil 5.46: Pd için 140, 180 atom, $r_{\text{son}} = 2a^f$ ve $r_{\text{son}} = r_{\text{BS}}$ mesafelerinde hesaplanan $g(r)$ çiftler dağılım fonksiyonlarının deneysel değer ile karşılaştırılması.



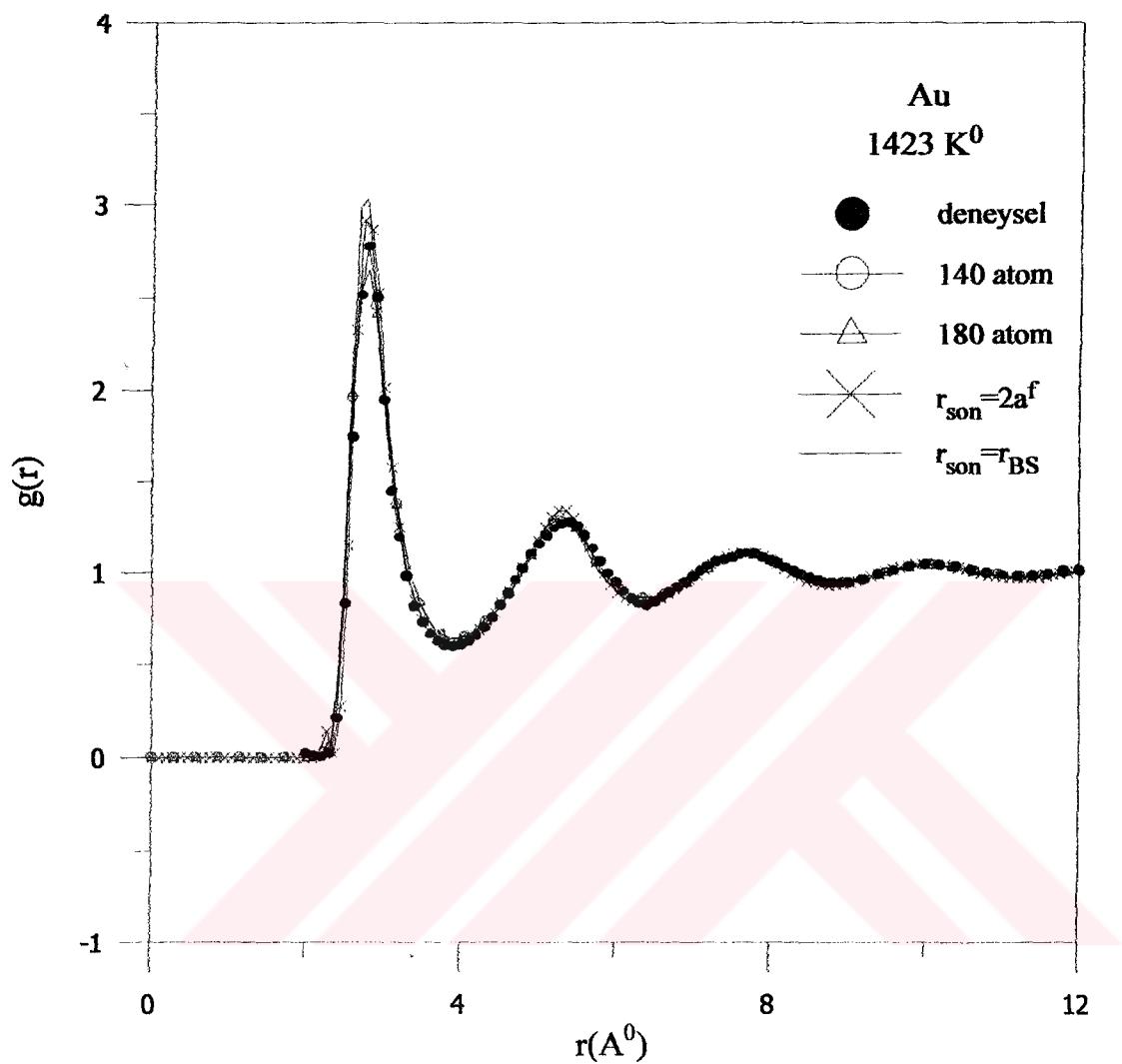
Şekil 5.47: Pt için 140, 180 atom, $r_{son}=2a^f$ ve $r_{son}=r_{BS}$ mesafelerinde hesaplanan $g(r)$ çiftler dağılım fonksiyonlarının deneysel değer ile karşılaştırılması.



Şekil 5.48: Cu için 140, 180 atom, $r_{son}=2a^f$ ve $r_{son}=r_{BS}$ mesafelerinde hesaplanan $g(r)$ çiftler dağılım fonksiyonlarının deneysel değer ile karşılaştırılması.



Şekil 5.49: Ag için 140, 180 atom, $r_{son}=2a^f$ ve $r_{son}=r_{BS}$ mesafelerinde hesaplanan $g(r)$ çiftler dağılım fonksiyonlarının deneysel değer ile karşılaştırılması.



Şekil 5.50: Au için 140, 180 atom, $r_{son}=2a^f$ ve $r_{son}=r_{BS}$ mesafelerinde hesaplanan $g(r)$ çiftler dağılım fonksiyonlarının deneysel değer ile karşılaştırılması.

Ayrıca Sutton-Chen etkin çiftler potansiyeli ve VMHNC kullanılarak elde edilen yapı faktörlerini uzun dalga boyu limiti $S(0)$ değerleri deneyel $S(0)$ değerleri ile Tablo 5.7'de karşılaştırılmıştır.

Tablo 5.7:Sıvı fcc geçiş metallerinin SC potansiyellerinin VMHNC ile hesaplanan uzun dalga boyu limitleri

Metal	Metod	$S_{\text{hesap}}(0)$	$S_{\text{deneyel}}(0)$
Ni	140 atom	0.0645	
	180 atom	0.0648	0.019
	$2a^f$	0.0478	
	r_{BS}	0.0479	
Cu	140 atom	0.0563	
	180 atom	0.0563	0.021
	$2a^f$	0.0563	
	r_{BS}	0.0362	
Pd	140 atom	0.0479	
	180 atom	0.0479	0.019
	$2a^f$	0.0478	
	r_{BS}	0.0479	
Ag	140 atom	0.0426	
	180 atom	0.0958	
	$2a^f$	0.0605	0.019
	r_{BS}	0.0968	
Pt	140 atom	0.0486	
	180 atom	0.0486	
	$2a^f$	0.0618	0.019
	r_{BS}	0.0518	
Au	140 atom	0.0486	
	180 atom	0.0494	
	$2a^f$	0.0394	0.020
	r_{BS}	0.0540	
Pb	140 atom	0.0296	
	180 atom	0.0296	
	$2a^f$	---	0.018
	r_{BS}	---	
Al	140 atom	0.0295	
	180 atom	0.0296	
	$2a^f$	---	0.021
	r_{BS}	---	

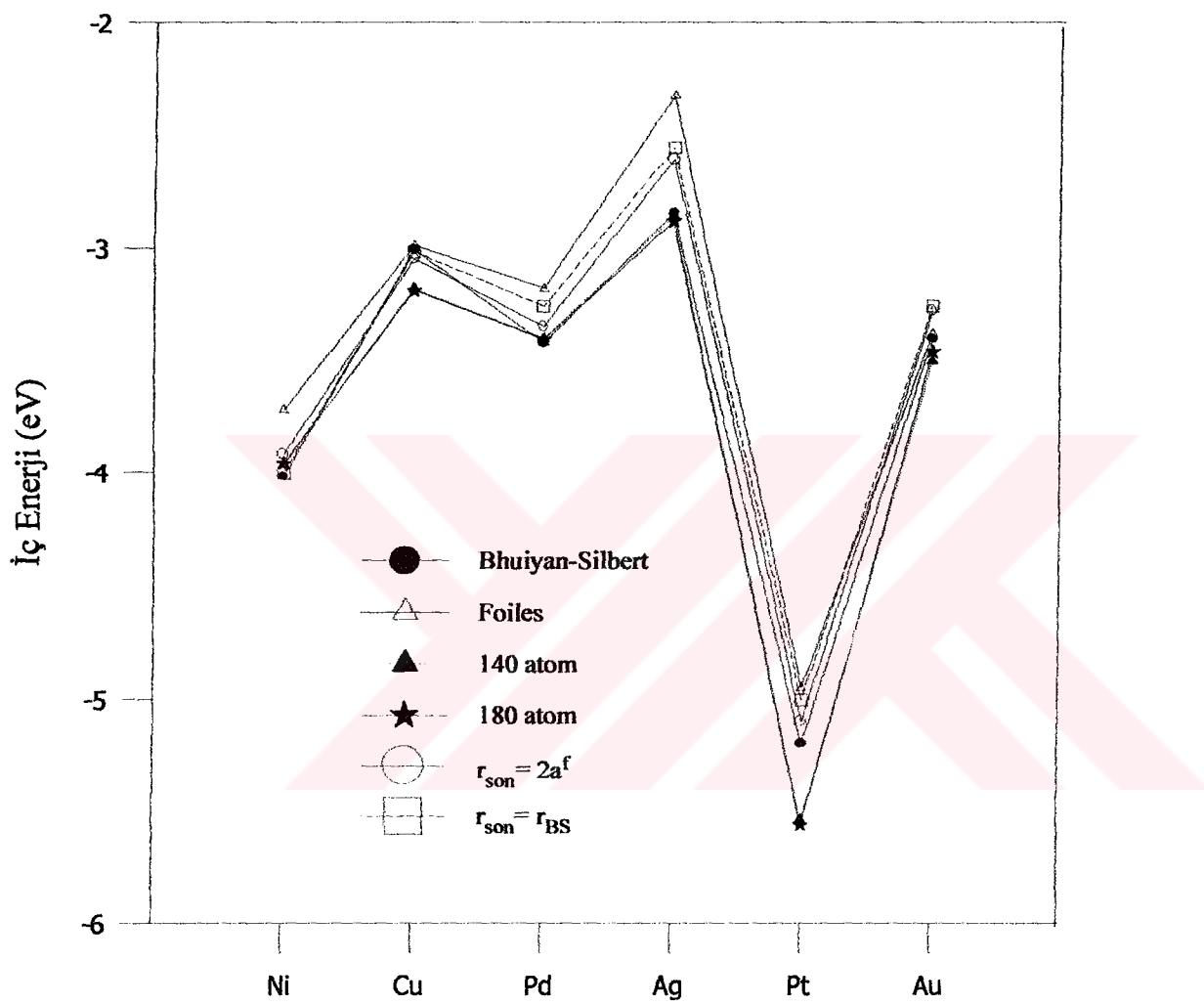
5.1.3 Sıvı fcc geçiş metallerinin termodinamik özellikleri

Bu bölümde bölüm 4.4.2'deki formüller kullanılarak, ergime noktaları civarında (Sutton ve Chen 1990) etkin çiftler potansiyellerin ve VMHNC integral teorisi kullanılarak elde edilen çiftler korelasyon fonksiyonları ile hesaplanan iç enerji değerleri sıvı Ni, Cu, Pd, Ag, Pt ve Au metalleri için hesaplanan iç enerjiler (Bhuiyan ve Silbert 1996) ve (Foiles 1985) deneysel değerler ile Tablo 5.8' de karşılaştırılmış ve Şekil 5.51'de verilmektedir.

Tablo 5.8 Ni,Cu,Pd,Ag,Pt ve Au metalleri için hesaplanan iç enerjiler

İç enerji (eV)						
Metal	Foiles	Bhuiyan-Silbert	140 atom	180 atom	$r_{\text{son}}=2a^f$	$r_{\text{son}}=r_{\text{BS}}$
Ni	-3.72	-3.9	-3.965	-3.962	-3.92	-4.02
Cu	-2.99	-3.02	-3.182	-3.189	-3.05	-3.01
Pd	-3.18	-3.26	-3.402	-3.406	-3.35	-3.42
Ag	-2.33	-2.56	-2.864	-2.889	-2.61	-2.85
Pt	-4.95	-5.005	-5.541	-5.564	-5.1	-5.2
Au	-3.38	-3.26	-3.502	-3.462	-3.28	-3.4

Tablo 5.8'den görüldüğü gibi sıvı sistemler için elde ettiğimiz iç enerjiler ile deneysel değerler uyum içindedir.



Şekil.5.51 Sıvı Ni,Cu,Pd,Ag,Pt ve Au için iç enerji değerleri

5.2. Sıvı Metal Alaşımları

Bu bölümde sıvı alaşımlar için S. Dalgıç tarafından öne sürülen Sutton-Chen tipi alaşım potansiyeli kullanılarak Cu-Ni, Ni-Al ve Cu-Ag alaşımlarının değişik konsantrasyon değerlerindeki atomlararası çiftler etkileşme potansiyelleri hesaplanmıştır. Ayrıca bu potansiyeller kullanılarak VMHNC yapı teorisi ile kısmi yapı faktörleri, karışım entalpileri hesaplanmış ve deneysel değerler ile karşılaştırılmıştır.

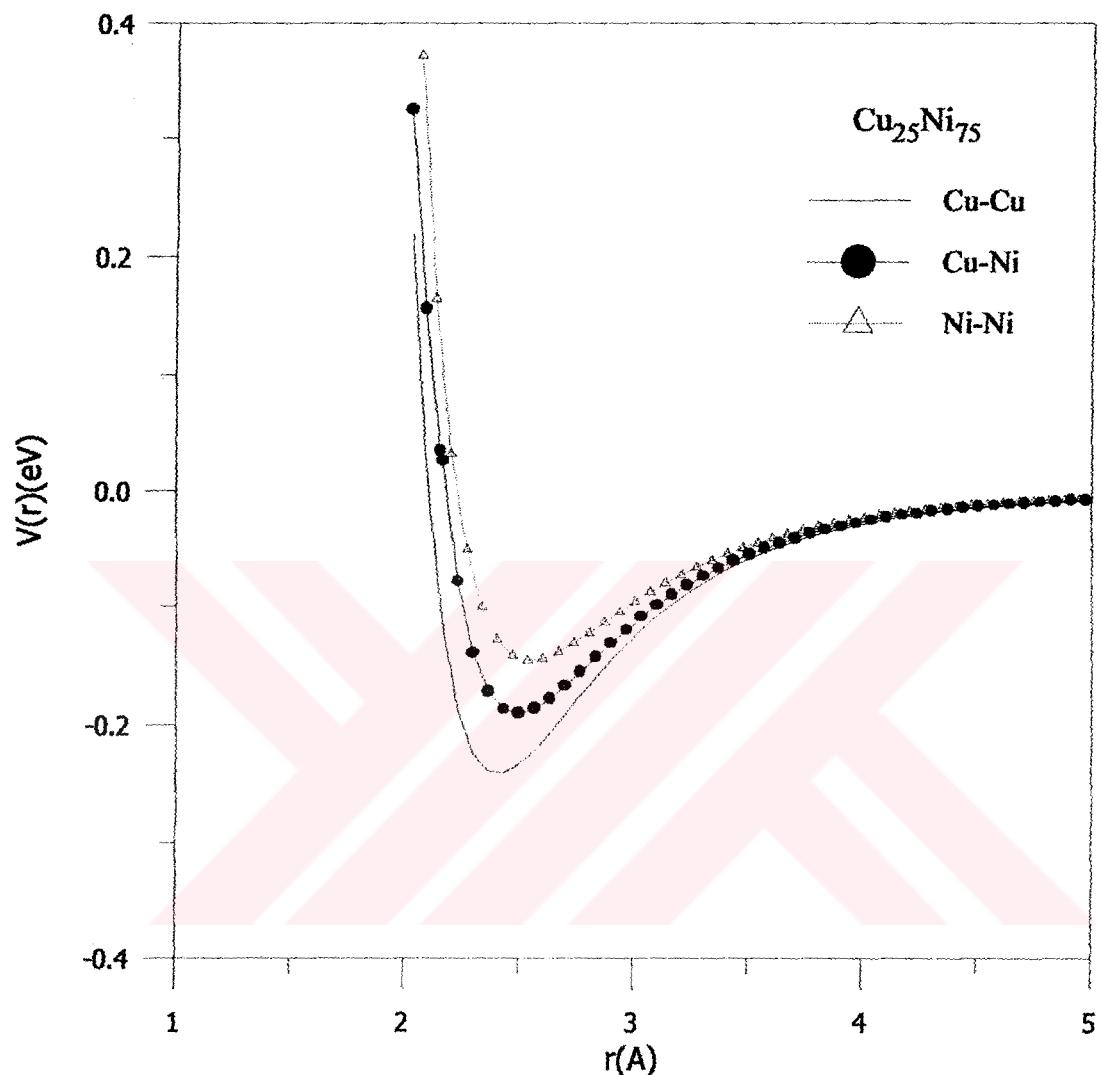
5.2.1 Cu-Ni Alaşımı

Cu-Ni alaşımının $\text{Cu}_{25}\text{Ni}_{75}$ kompozisyonu için iyonlar arası etkileşme potansiyelini kesme mesafesine göre hesaplamak için kullanılan parametreler Tablo 5.9'da verilmektedir. Termodinamik durum parametreler (Waseda 1981)'den alınmıştır. Bu tablodaki ϵ, c, m ve n potansiyel parametreleri olup Cu-Cu için saf Cu'nun ϵ, c ve E_c^f parametreleri ile Ni-Ni saf Ni'in ϵ, c ve E_c^f parametreleri SC'nin (Sutton-Chen 1990) makalesinden alınmıştır. E_c^f (Finnis ve Sinclair 1984) bağlanma enerjilerinin her bir etkileşmesi için fit edilmesiyle elde edilen a^f örgü parametresine göre hesaplanan potansiyeller Şekil 5.52'de verilmektedir.

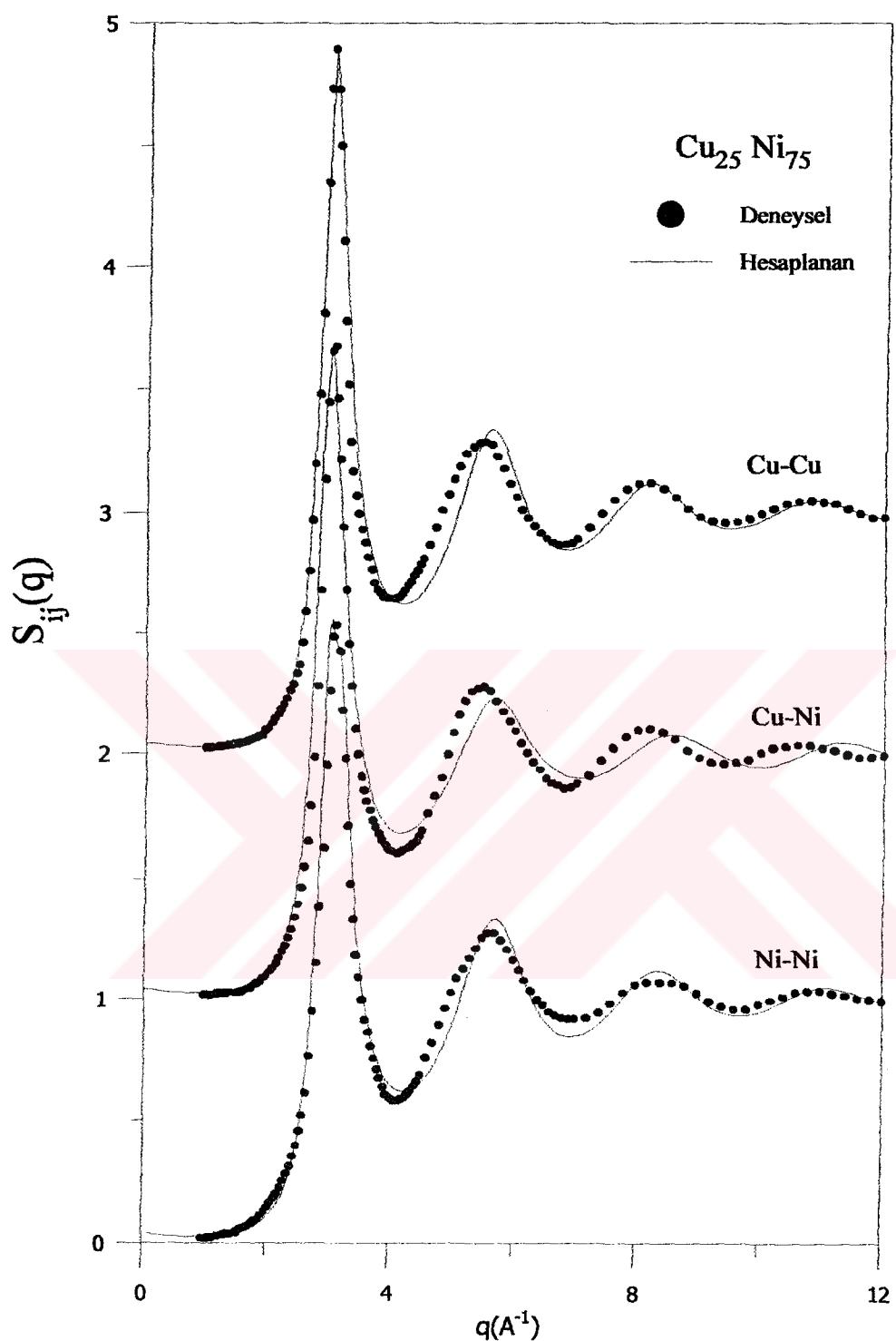
Tablo 5.9. Sıvı $\text{Cu}_{25}\text{Ni}_{75}$ alaşımı için potansiyel parametreleri

	T(K)	ρ (atom/ Å^3)	m	n	ϵ (eV)	C	E_c^f (eV)	a^f	r_c
Cu-Cu	1773	0.0776	6	9	1.2382×10^{-2}	39.432	3.50	3.56	5.34
Cu-Ni	1773	0.0776	6	9	1.3945×10^{-2}	39.432	-----	3.56	5.34
Ni-Ni	1773	0.0776	6	9	1.5707×10^{-2}	39.432	4.44	3.56	5.34

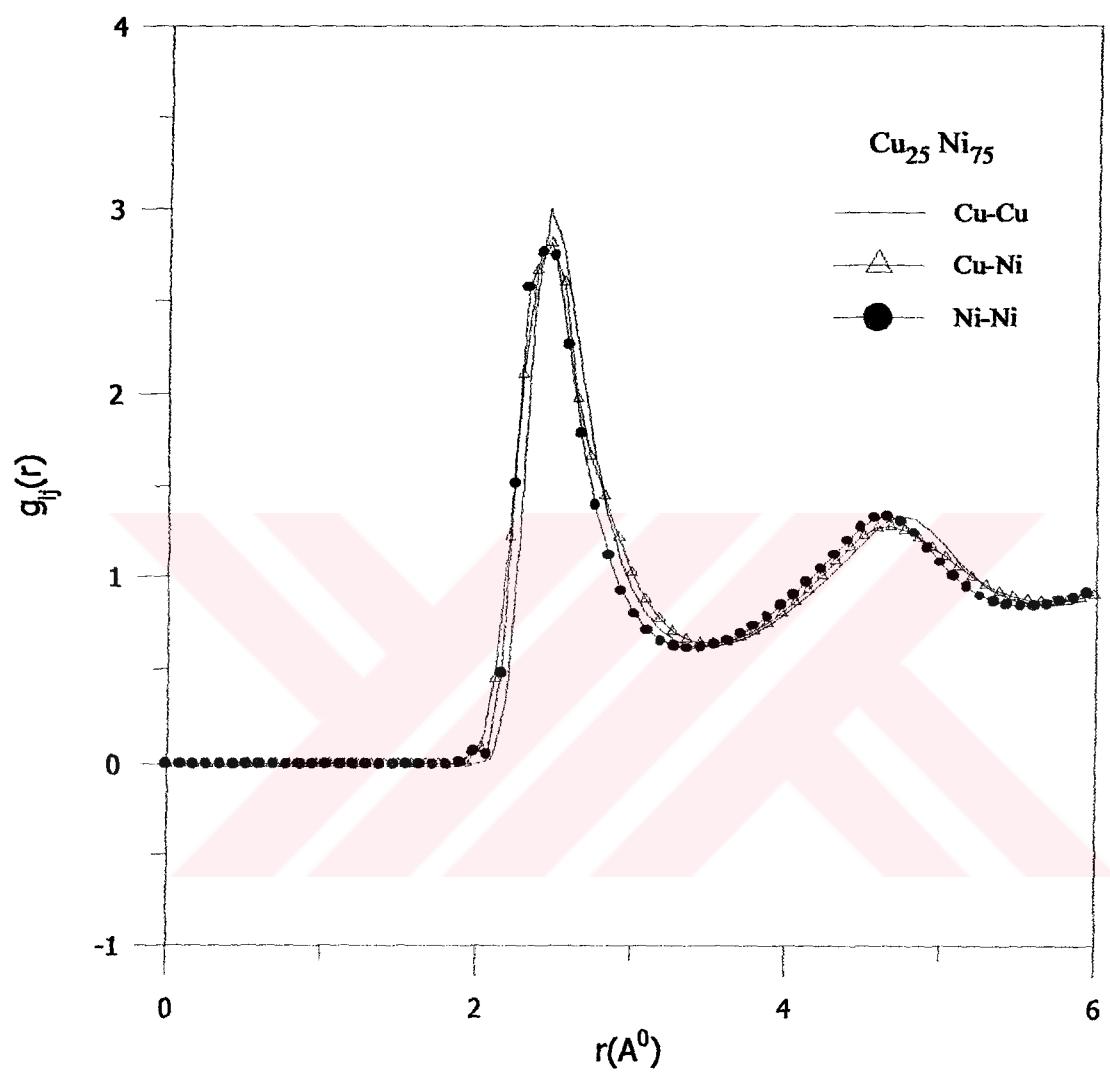
Cu-Ni alaşımı için hesaplanan sıvı potansiyellerin AL kısmi yapı faktörlerinin (Waseda 1981)'daki deneysel değerler ile karşılaştırılması, Şekil 5.53'te de verilmektedir. Şekil 5.53'ten görüldüğü gibi hesaplanan değerler genelde deneysel sonuçlarla uyum içindedir. Daha fazla ayrıntıya girersek, kısmi yapı faktörleri küçük q değerlerinde 1. Pik deneysel değerle uyum içinde, fakat büyük q değerlerine gidildikçe faz farklılarının olduğu görülmektedir. Şekil 5.54'te $\text{Cu}_{25}\text{Ni}_{75}$ için hesaplanan çiftler dağılım fonksiyonları verilmektedir. $\text{Cu}_{25}\text{Ni}_{75}$ alaşımı için hesaplanan S_{CC}, S_{NN} ve S_{NC} kısmi yapı faktörleri Şekil 5.55'te verilmektedir.



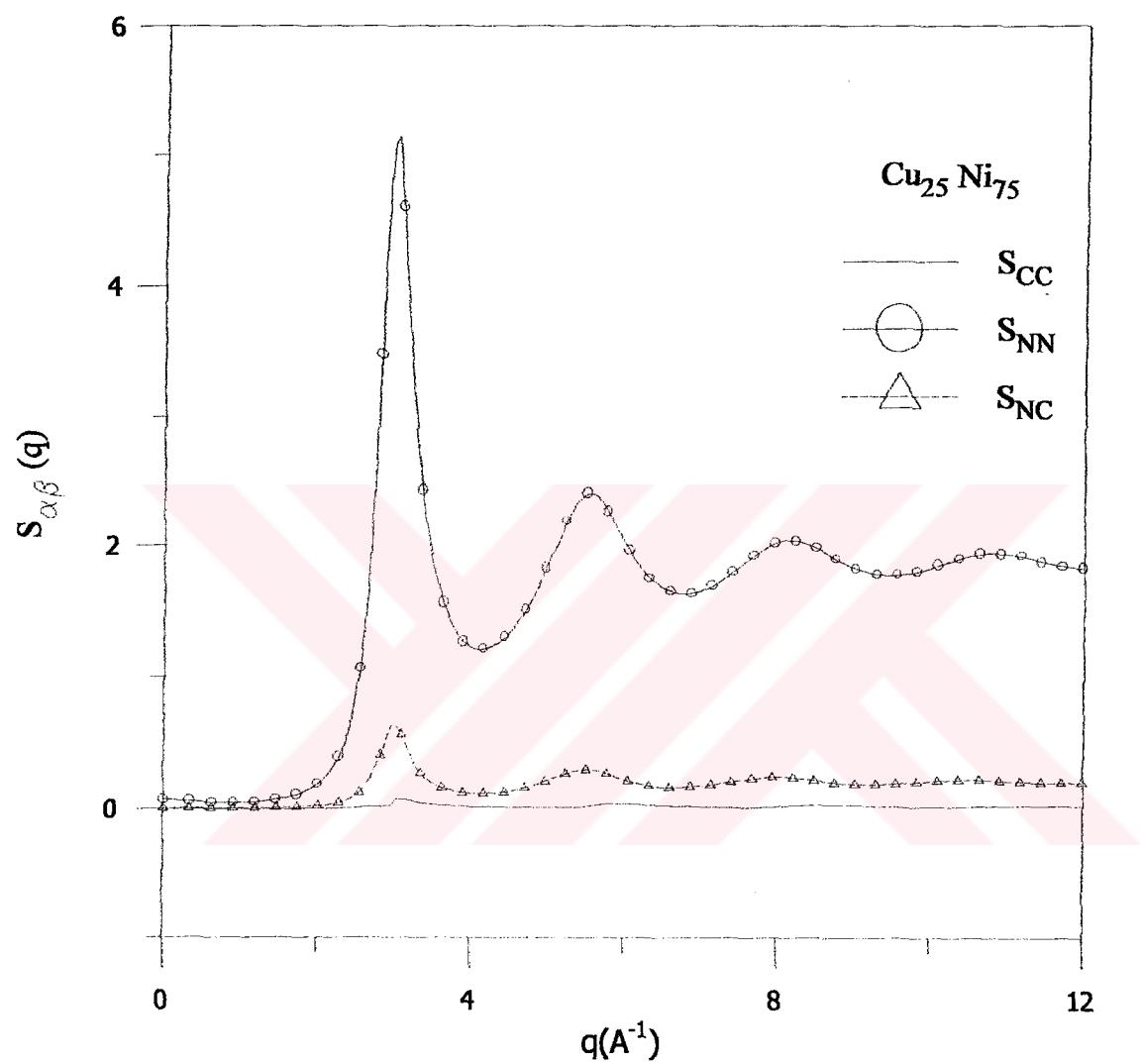
Şekil 5.52: $\text{Cu}_{25}\text{Ni}_{75}$ konsantrasyonunda elde edilen etkin çiftler potansiyelleri.



Şekil 5.53: $\text{Cu}_{25}\text{Ni}_{75}$ konsantrasyonunda hesaplanan AL kısmi yapı faktörlerinin deneysel değerler ile karşılaştırılması



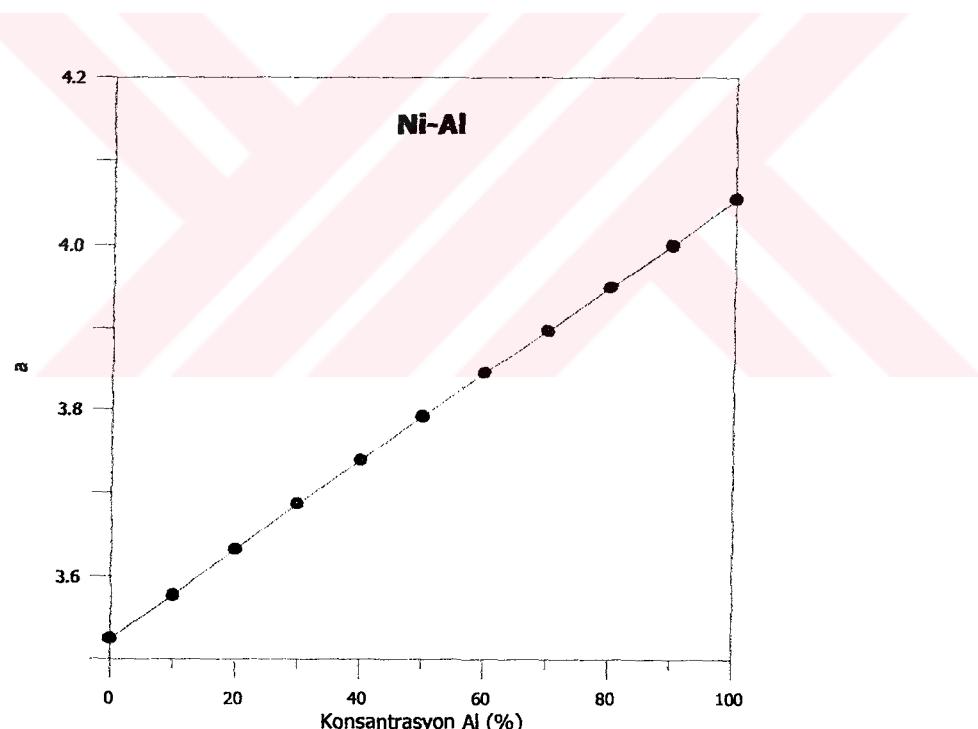
Şekil 5.54: $\text{Cu}_{25}\text{Ni}_{75}$ konsantrasyonunda hesaplanan çiftler dağılım fonksiyonları



Şekil 5.55: $\text{Cu}_{25}\text{Ni}_{75}$ alaşımı için hesaplanan S_{CC} , S_{NN} ve S_{NC} kısmi yapı faktörleri

5.2.2 Ni-Al Alaşımı

Ni-Al alaşımının $\text{Ni}_{20}\text{Al}_{80}$ ve $\text{Ni}_{80}\text{Al}_{20}$ konsantrasyonundaki potansiyellerini hesaplamak için kullanılan parametreler Tablo 5.10 ve 5.11'de verilmektedir. Tablolardaki Ni-Ni için saf Ni'in ε, c ve E_c^f parametreleri ile Al-Al saf Al'nin ε, c ve E_c^f parametreleri SC'nin (Sutton-Chen 1990) makalesinden alınmıştır ve a örgü parametresi, E_{bag} bağlanma enerjisi katı özelliktedir. a örgü parametresini bulmak için (Tabar ve Sutton 1991) tarafından verilen Şekil 5.56'da konsantrasyon grafiğini kullandık. Ve bu parametrelere göre hesaplanan potansiyeller sırasıyla Şekil 5.57 ve 5.58'de verilmektedir.



Şekil 5.56: Al konsantrasyonunda a örgü parametresi grafiği

Tablo 5.10 Sıvı Ni₂₀Al₈₀ alaşımı için potansiyel parametreleri

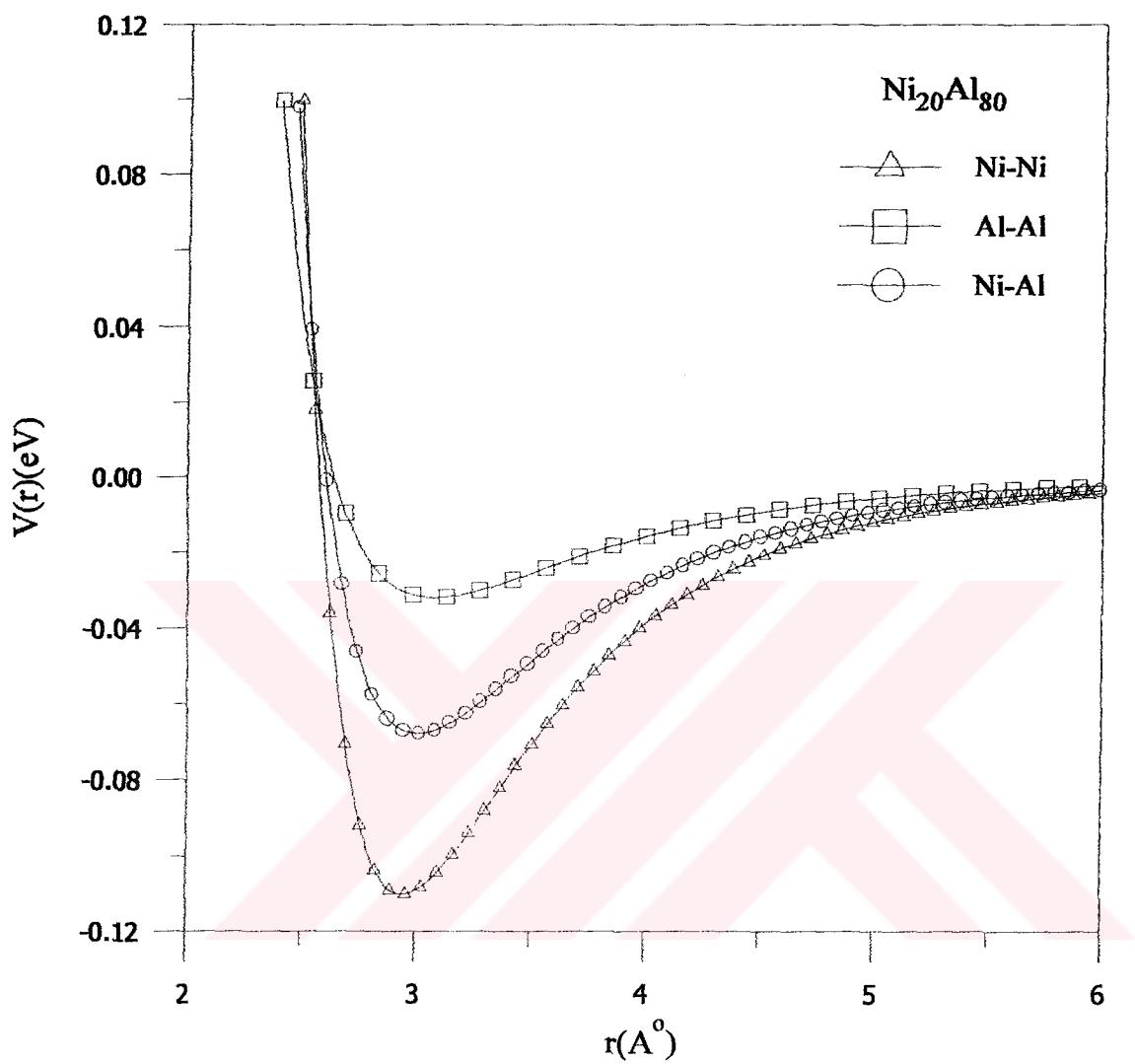
	T(K)	ρ (atom/A ³)	m	n	ε (eV)	C	E _c ^f (eV)	a^f	r _c
Ni-Ni	1300	0.0586	6	9	1.571x10 ⁻²	39.755	3.50	3.95	6.25
Ni-Al	1300	0.0586	6	8	2.287x10 ⁻²	25.58	----	3.95	6.25
Al-Al	1300	0.0586	6	7	3.330x10 ⁻²	16.46	4.44	3.95	6.25

Tablo 5.11 Sıvı Ni₈₀Al₂₀ alaşımı için potansiyel parametreleri

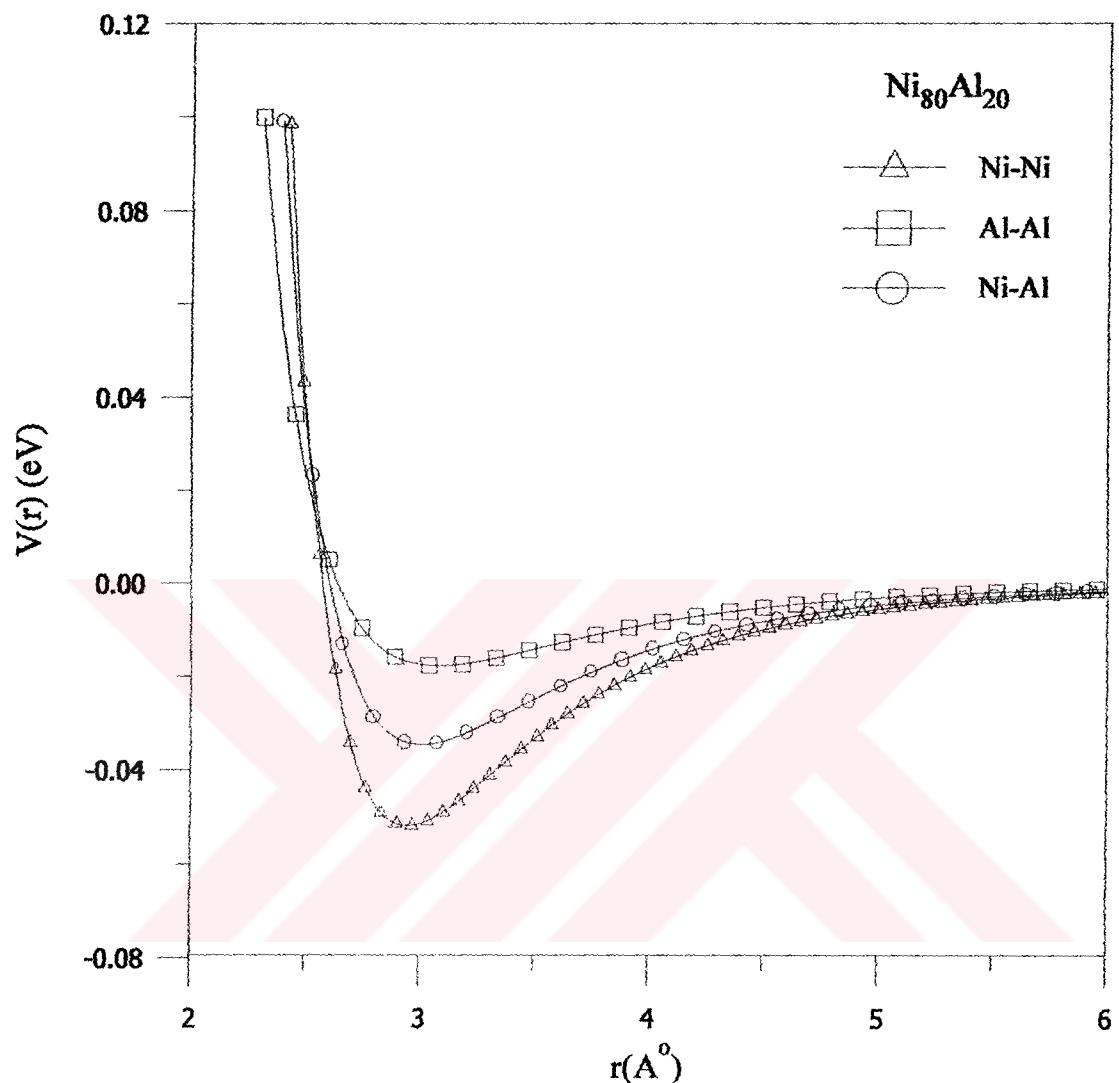
	T(K)	ρ (atom/A ³)	m	n	ε (eV)	C	E _c ^f (eV)	a^f	r _c
Ni-Ni	1300	0.0586	6	9	1.571x10 ⁻²	39.755	3.50	3.63	6.25
Ni-Al	1300	0.0586	6	8	2.287x10 ⁻²	25.58	----	3.63	6.25
Al-Al	1300	0.0586	6	7	3.330x10 ⁻²	16.46	4.44	3.63	6.25

Ni₂₀Al₈₀ alaşımı için SC potansiyellerinden VMHNC ile hesaplanan kısmi yapı faktörleri F-Z kısmi yapı faktörleri (Faber ve Zeman 1965) ile Şekil 5.59'da karşılaştırılmıştır.

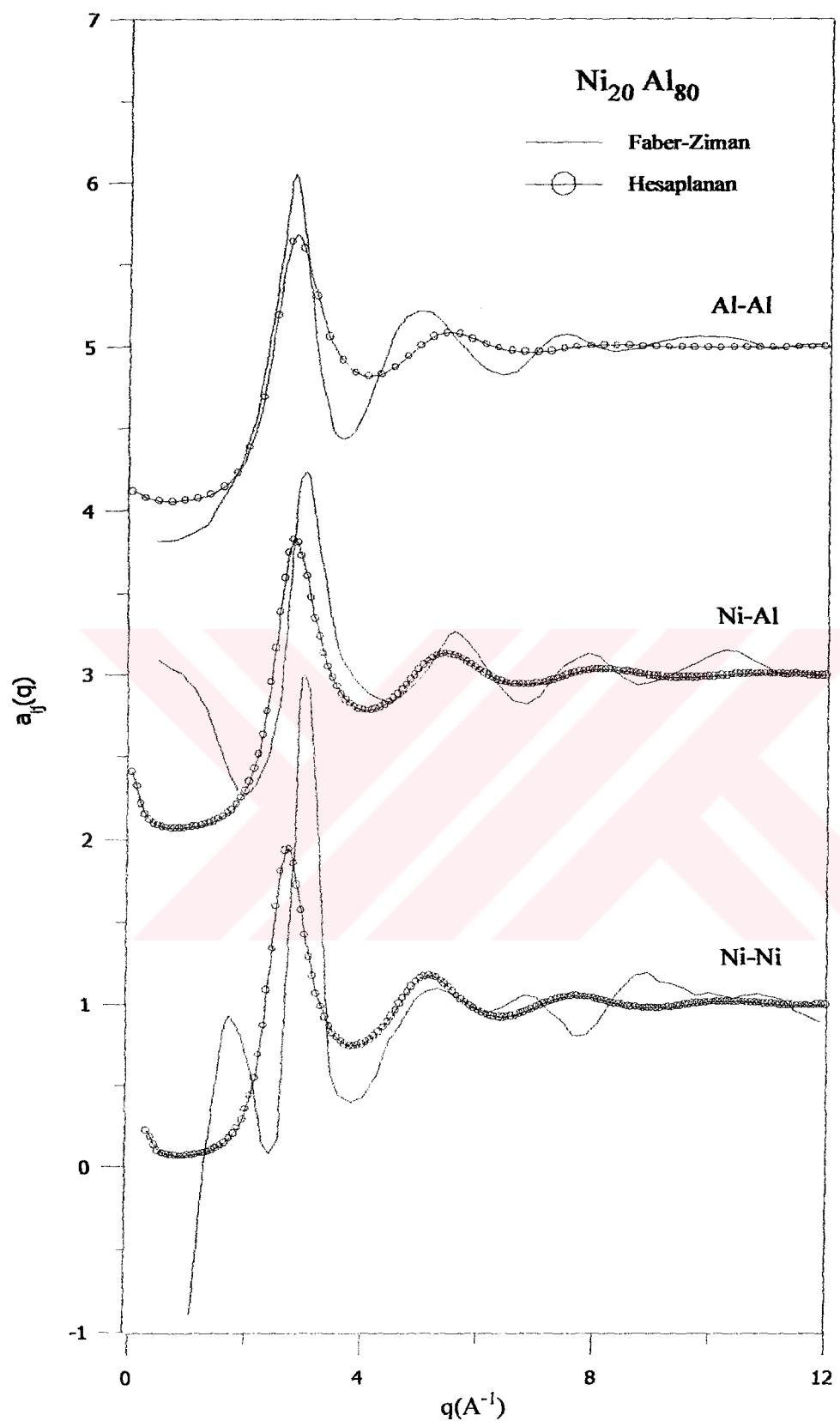
Şekil 5.60 ta Ni₈₀Al₂₀ alaşımı için hesaplanan kısmi yapı faktörleri ve Ni₂₀Al₈₀ ve Ni₈₀Al₂₀ alaşımı sırasıyla Şekil 5.61 ve 5.62'de hesaplanan çiftler dağılım fonksiyonları verilmektedir. Şekil 5.59'dan görüldüğü gibi hesaplanan değerler ile deneySEL sonuçların arasındaki ilk pikin dışında Al-Al ve Ni-Al için faz kaymasının olduğu Ni-Ni içinse küçük q değerlerinde fiziksel olmayan bir pik olduğu açıktır. Bu sonuçlar potansiyel formunda değil çalışılan VMHNC integral teorisinden kaynaklanabilir. Çünkü tek bileşenli sistemler için VMHNC teorisi alaşım parametreler ile çalıştırılarak yapı sonuçları elde edilmiştir. Ni₂₀Al₈₀ Ni₈₀Al₂₀ alaşımı için hesaplanan S_{CC},S_{NN} ve S_{NC} kısmi yapı faktörleri sırasıyla Şekil 5.63-5.64'te verilmektedir.



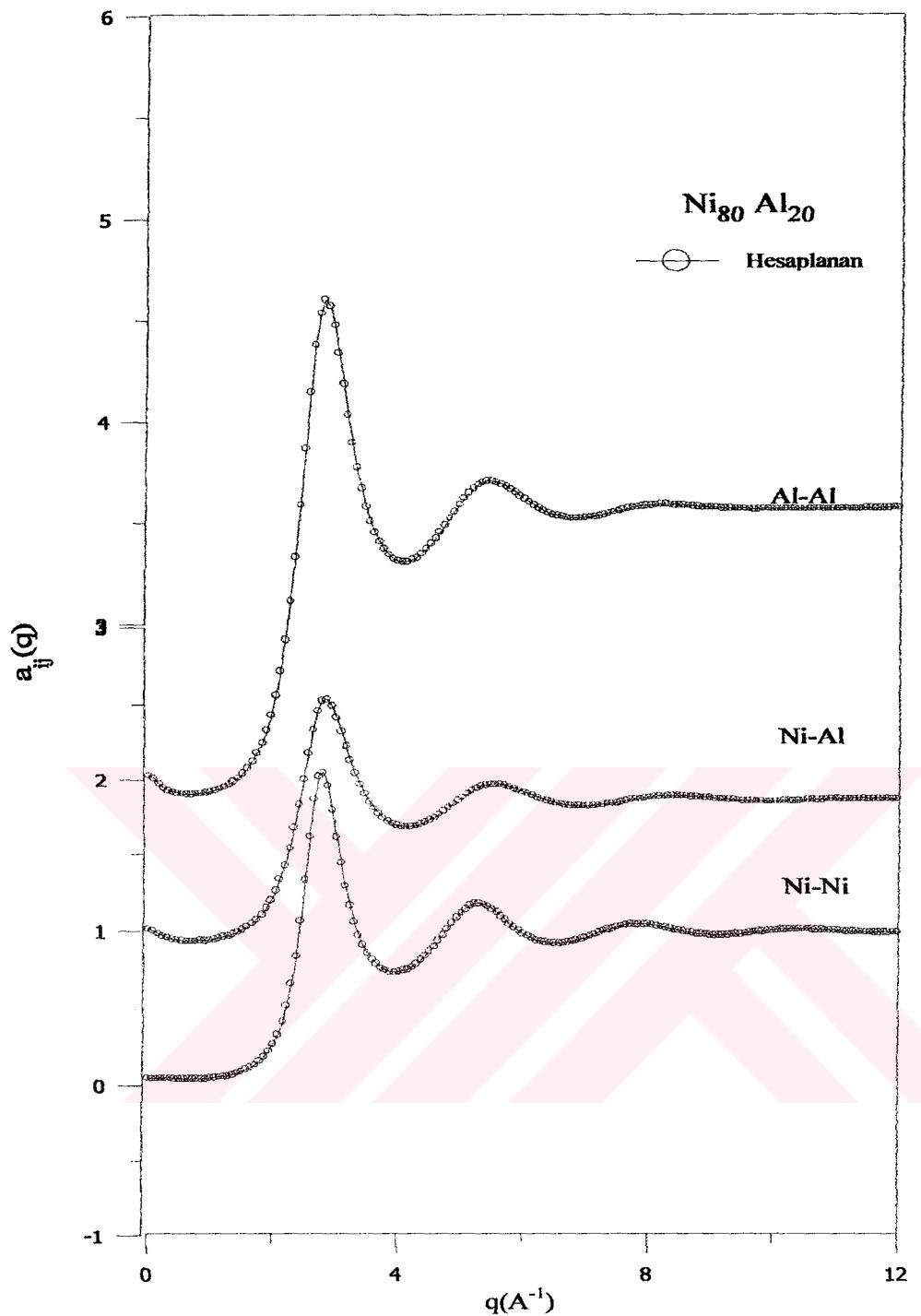
Şekil 5.57: Ni₂₀Al₈₀ için hesaplanan etkin çiftler potansiyelleri



Şekil 5.58: Ni₈₀Al₂₀ için hesaplanan etkin çiftler potansiyelleri

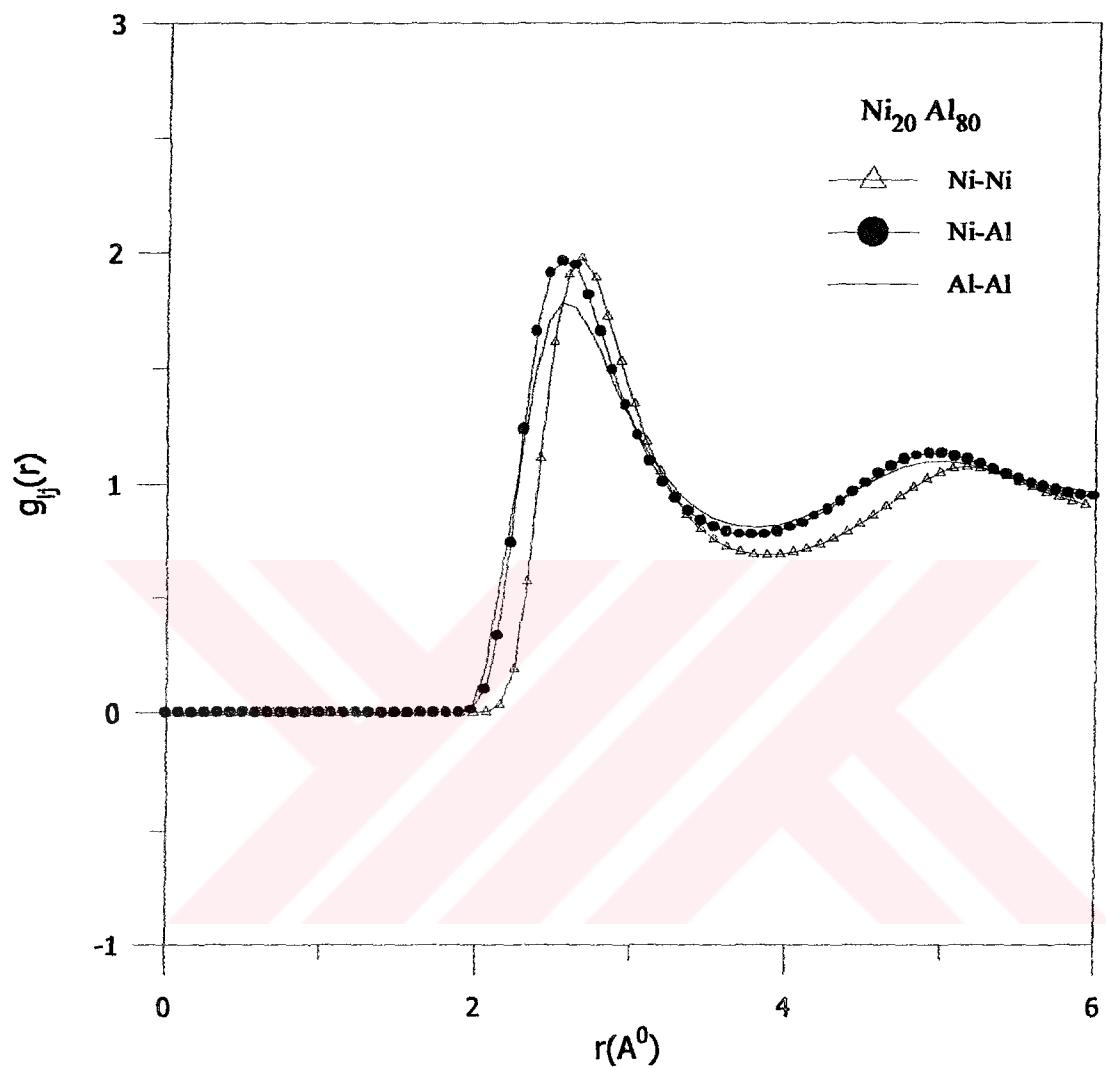


Şekil 5.59: $\text{Ni}_{20}\text{-Al}_{80}$ konsantrasyonunda hesaplanan AL kısmı yapı faktörlerinin deneysel değerler ile karşılaştırılması.

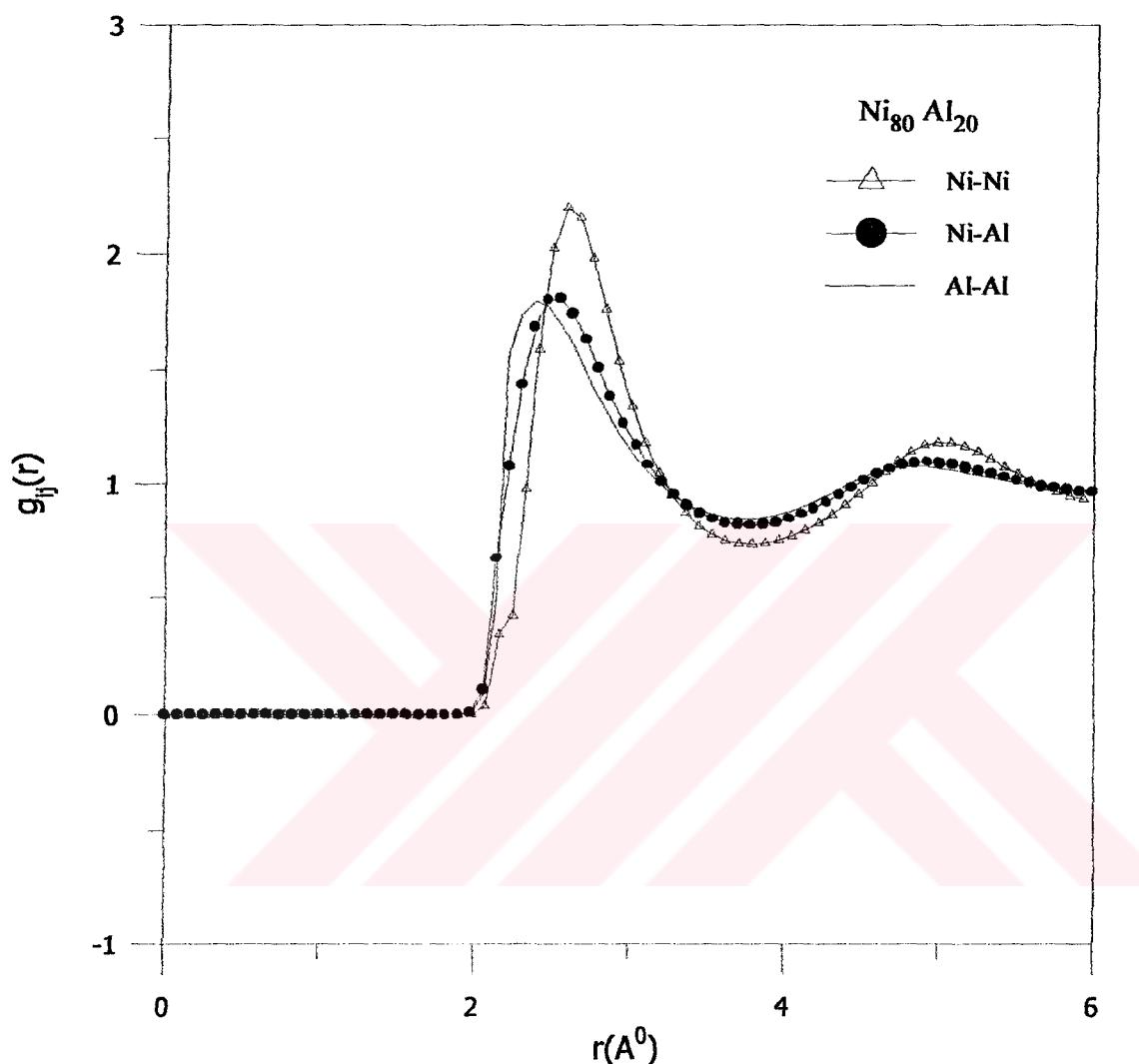


Şekil 5.60: Ni₈₀ Al₂₀ konsantrasyonunda hesaplanan statik yapı faktörleri

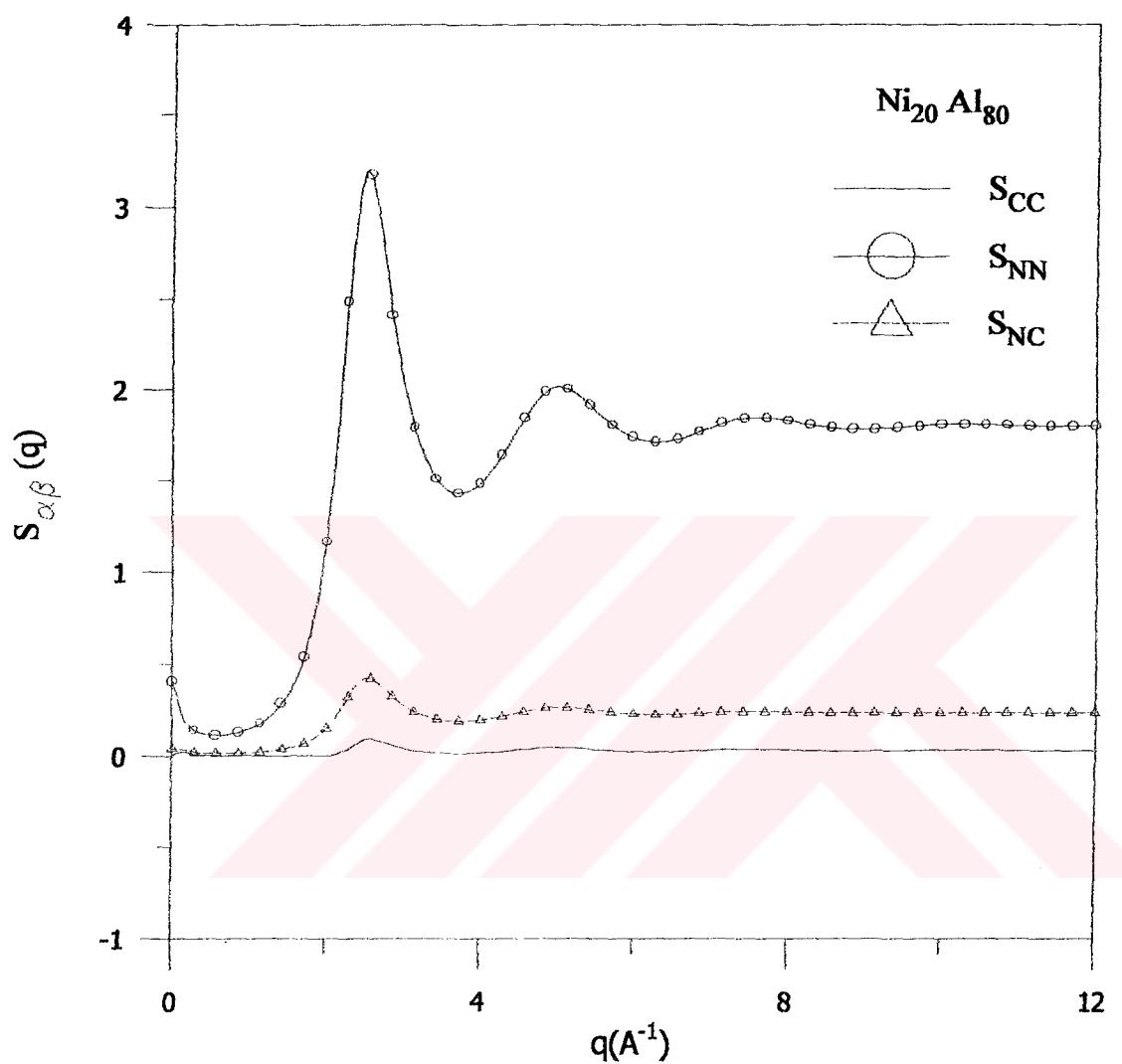
T.C. YÜKSEKOĞRETİM KURULU
DOKUMANTASYON MERKEZİ



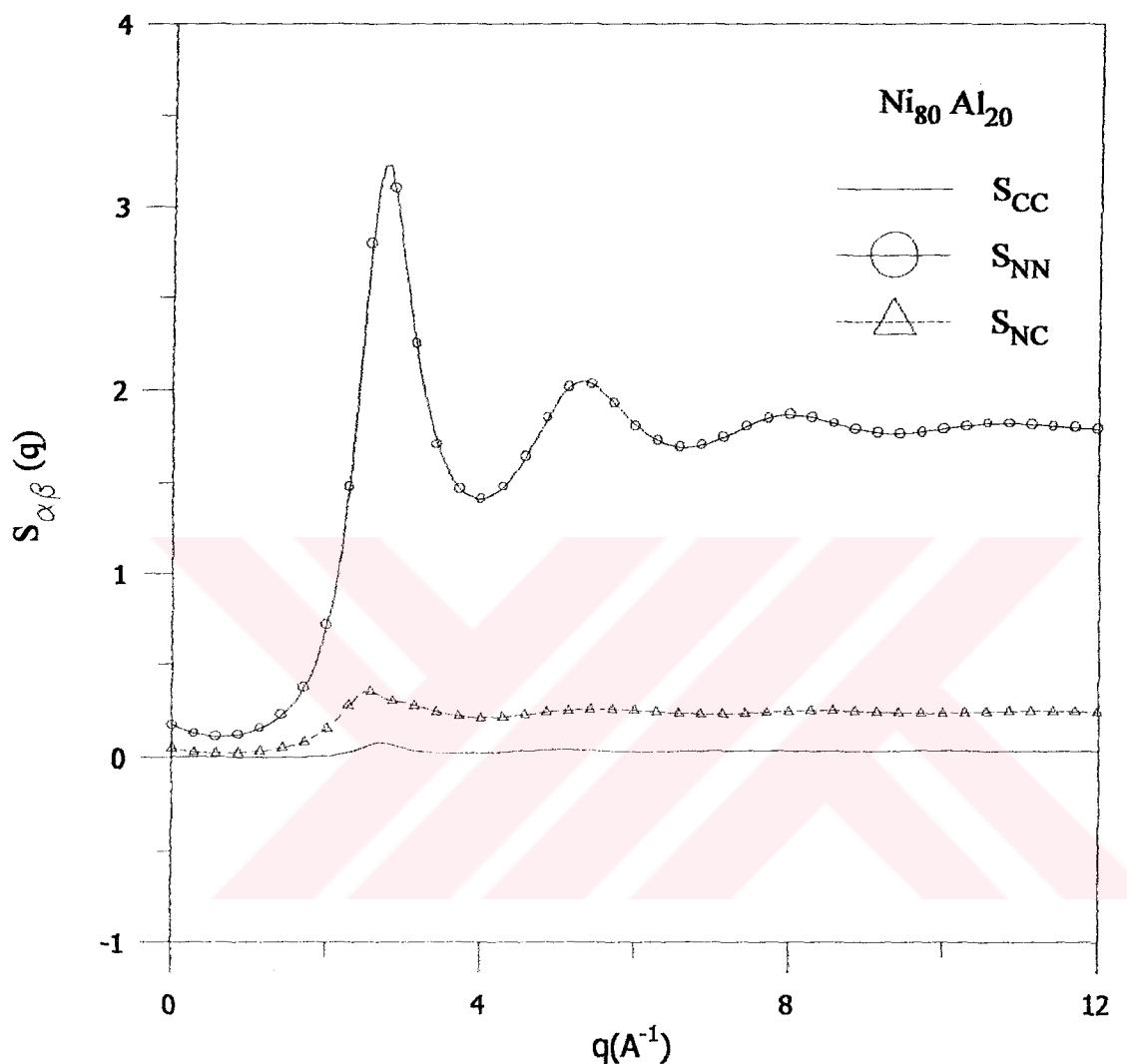
Şekil 5.61: $\text{Ni}_{20}\text{Al}_{80}$ konsantrasyonunda hesaplanan çiftler dağılım fonksiyonları.



Şekil 5.62: $\text{Ni}_{80} \text{Al}_{20}$ konsantrasyonunda hesaplanan çiftler dağılım fonksiyonları.



Şekil 5.63: $\text{Ni}_{20}\text{Al}_{80}$ alaşımı için hesaplanan S_{CC} , S_{NN} ve S_{NC} kısmi yapı faktörleri



Şekil 5.64: $\text{Ni}_{80}\text{Al}_{20}$ alaşımı için hesaplanan S_{CC} , S_{NN} ve S_{NC} kısmi yapı faktörleri

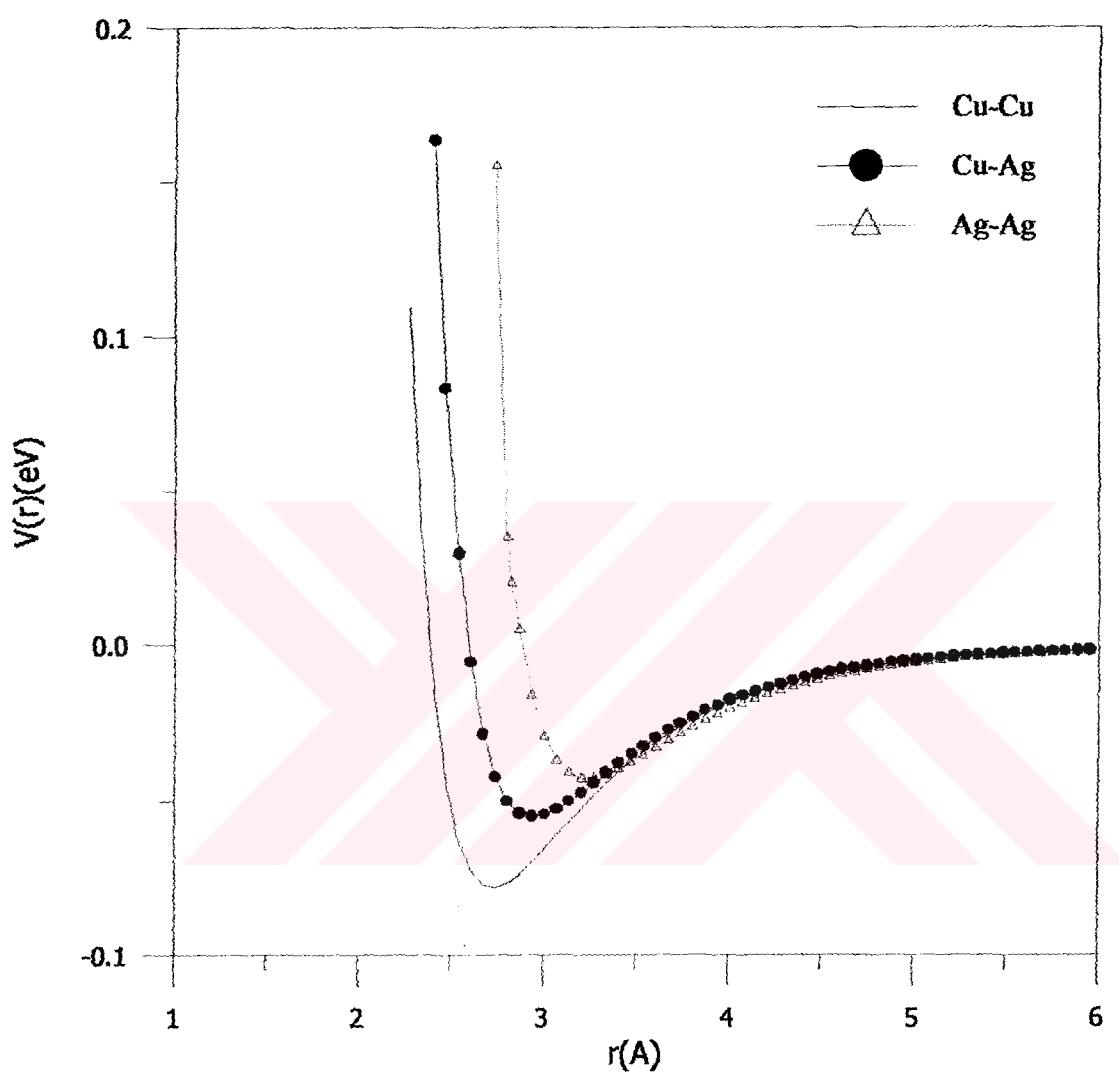
5.2.3 Cu-Ag Alaşımı

Cu-Ag alaşımının $\text{Cu}_{50}\text{Ag}_{50}$ kompozisyonu için iyonlararası etkileşme potansiyellerini kesme mesafesine göre hesaplamak için kullanılan parametreler Tablo 5.12'de verilmektedir. Termodinamik durum parametreler (Waseda 1981)'den alınmıştır. Bu tablodaki ε, c, m ve n potansiyel parametreleri olup, Cu-Cu için saf Cu'nun ε, c ve E_c^f parametreleri ile Ag-Ag saf Ag'nin ε, c ve E_c^f parametreleri SC'nin (Sutton-Chen 1990) makalesinden alınmıştır. E_c^f (Finnis ve Sinclair 1984) bağlanma enerjilerinin fit edilmesiyle elde edilen a^f örgü parametresine göre hesaplanan potansiyeller Şekil 5.65'te verilmektedir.

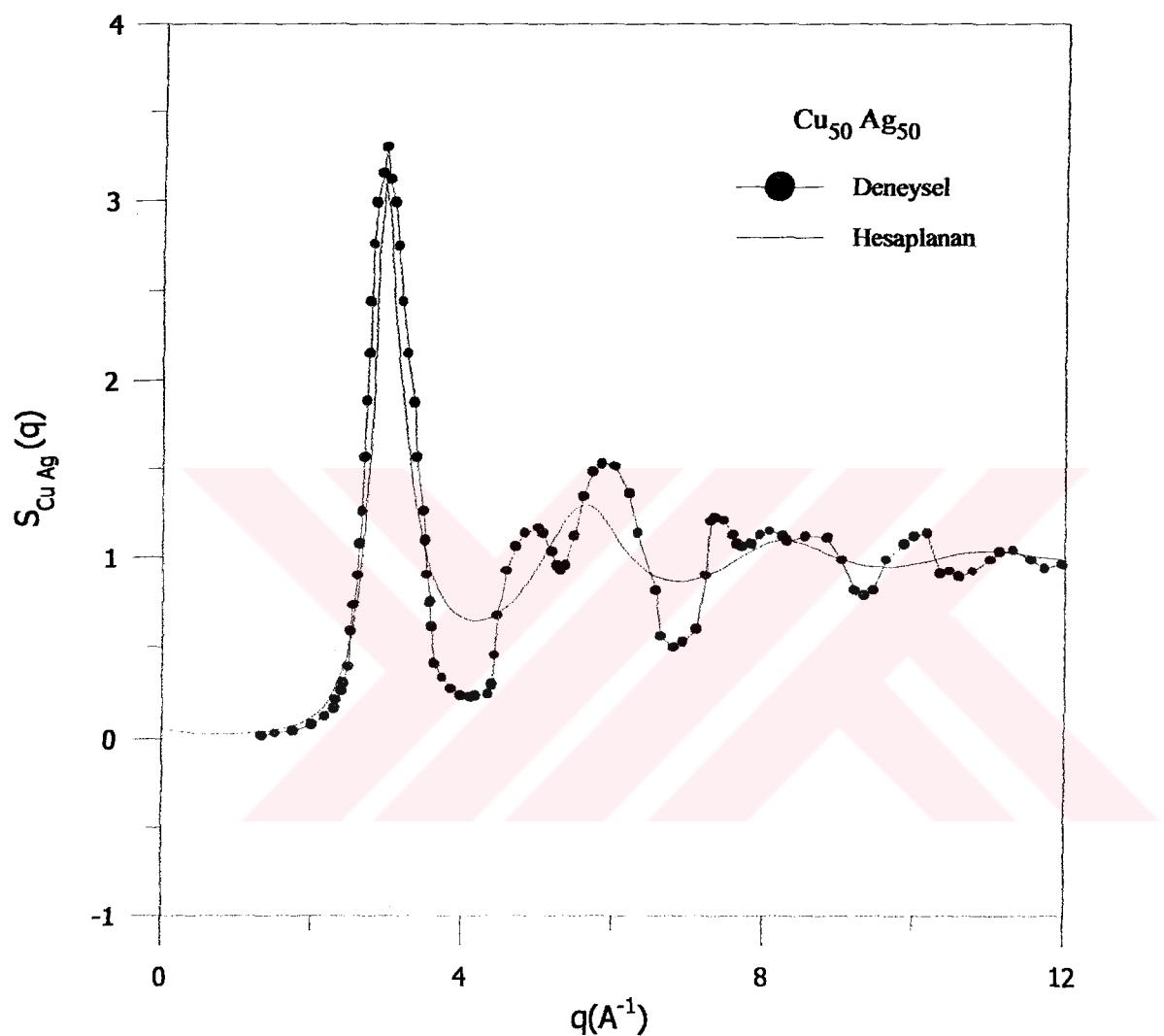
Tablo 5.12. Sıvı $\text{Cu}_{50}\text{Ag}_{50}$ alaşımı için potansiyel parametreleri

	T(K)	$\rho(\text{atom}/\text{A}^3)$	m	n	$\varepsilon(eV)$	c	$E_c^f(\text{eV})$	a^f	r_c
Cu-Cu	1273	0.0652	6	9	1.2382×10^{-2}	39.432	3.50	3.92	6.02
Cu-Ag	1273	0.0652	6	10	5.5765×10^{-3}	75.46	-----	3.92	6.02
Ag-Ag	1273	0.0652	6	12	2.5415×10^{-3}	144.41	2.96	3.92	6.02

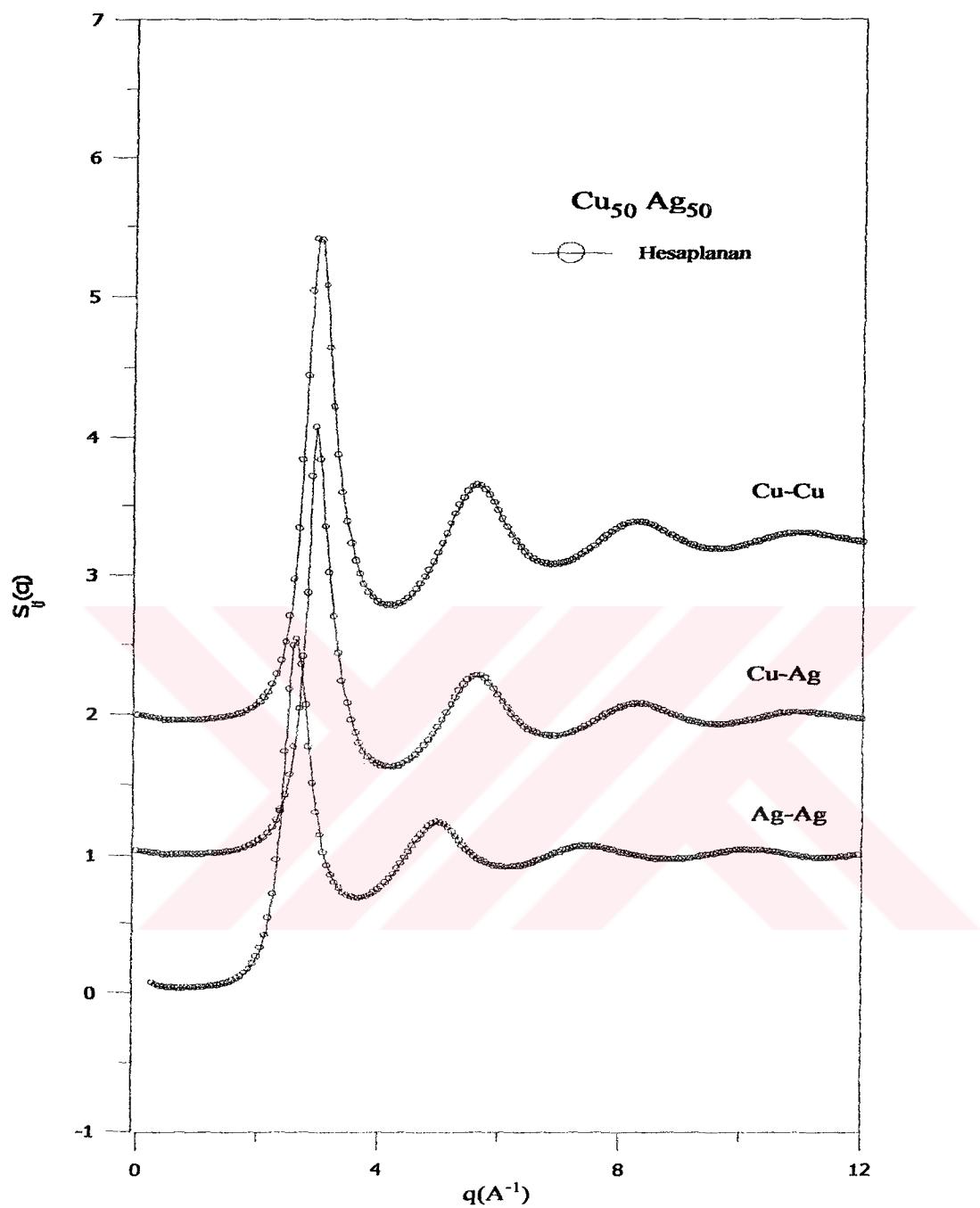
Cu-Ag alaşımı için hesaplanan sıvı potansiyellerin AL kısmi yapı faktörleri (Waseda 1981)'daki deneysel değerler ile karşılaştırılması, Şekil 5.66'da verilmektedir. Şekil 5.67'te hesaplanan kısmi yapı faktörleri ve Şekil 5.68'de hesaplanan çiftler dağılım fonksiyonu verilmektedir. Şekil 5.67'den görüldüğü gibi hesaplanan değer ile deneysel sonuç arasında farklılıklar göstermektedir. Bu sonuç potansiyel formunda değil çalışılan VMHNC integral teorisinden kaynaklanabilir. Çünkü tek bileşenli sistemler için VMHNC teorisi alaşım parametreler ile çalıştırılarak yapı sonucu elde edilmiştir. $\text{Cu}_{50}\text{Ag}_{50}$ alaşımı için hesaplanan S_{CC}, S_{NN} ve S_{NC} kısmi yapı faktörleri Şekil 5.69'da verilmektedir.



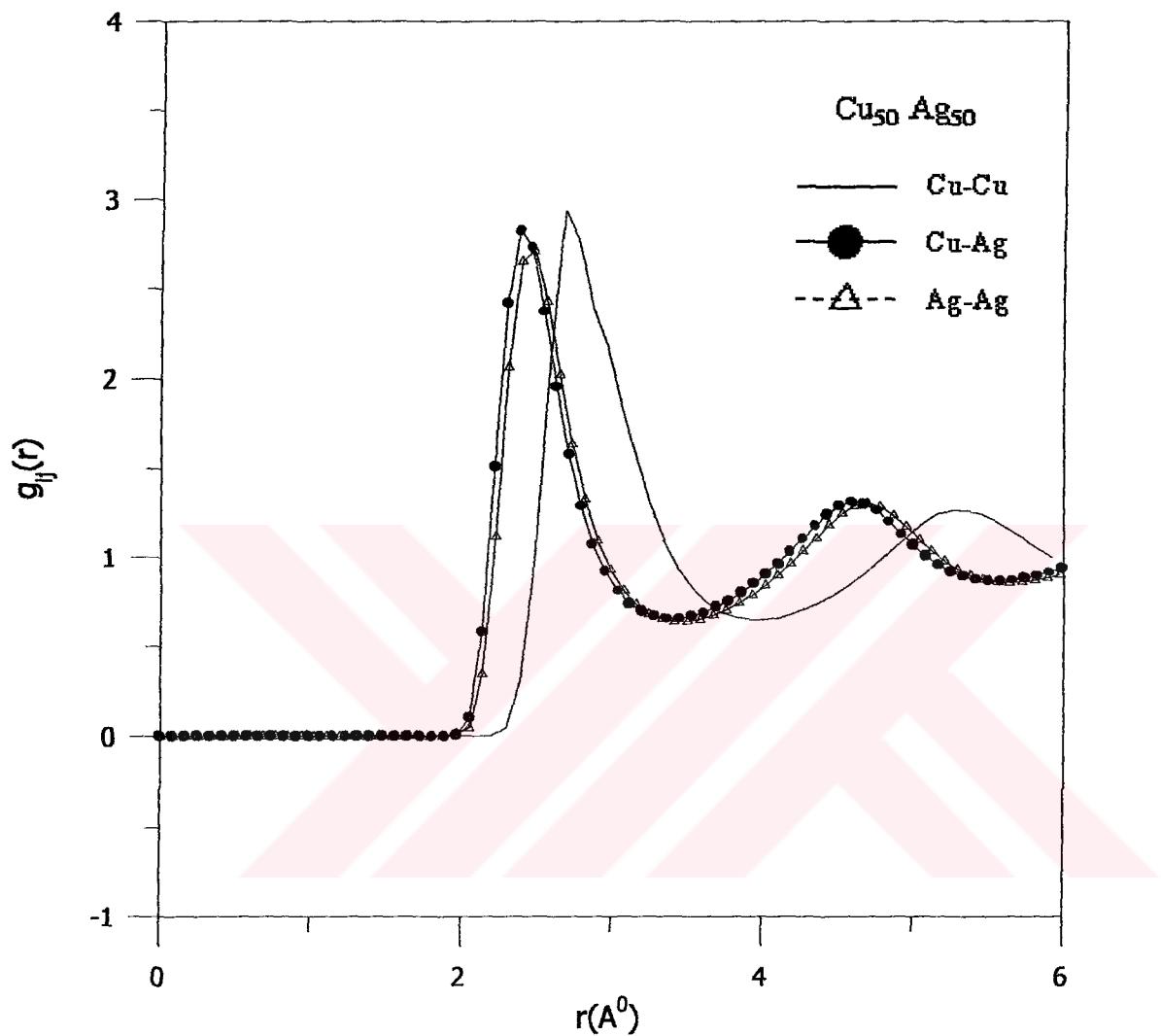
Şekil 5.65: $\text{Cu}_{50}\text{Ag}_{50}$ için hesaplanan etkin çiftler potansiyelleri



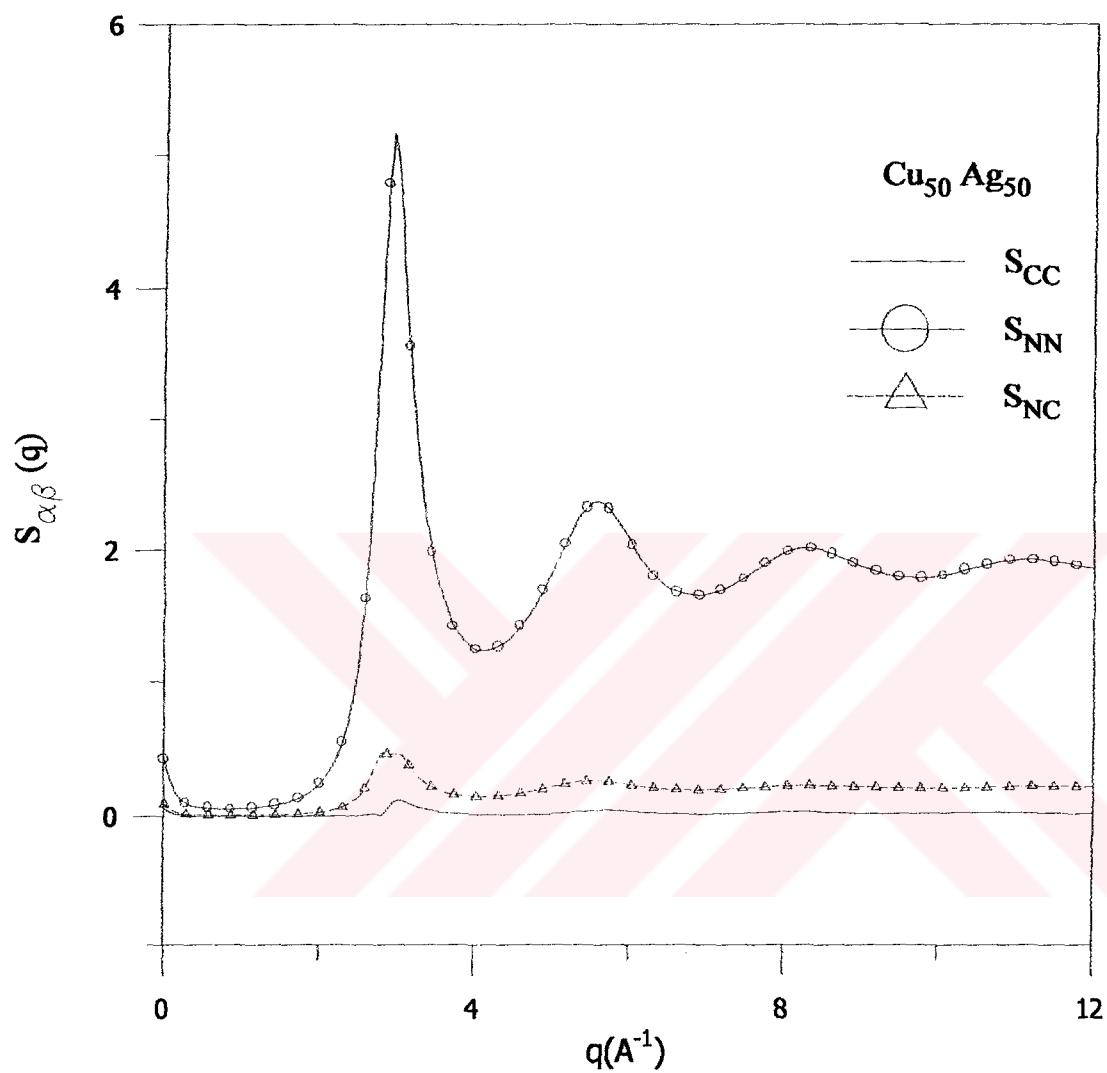
Şekil 5.66: Cu₅₀Ag₅₀ konsantrasyonunda hesaplanan AL kısmi yapı faktörünün deneysel değerler ile karşılaştırılması



Şekil 5.67: $\text{Cu}_{50}\text{Ag}_{50}$ konsantrasyonunda hesaplanan
kismi yapı faktörleri



Şekil 5.68: $\text{Cu}_{50}\text{Ag}_{50}$ konsantrasyonunda hesaplanan çiftler dağılım fonksiyonları



Şekil 5.69: $\text{Cu}_{50}\text{Ag}_{50}$ alaşımı için hesaplanan S_{CC} , S_{NN} ve S_{NC} kısmi yapı faktörleri

5.2.4 Sıvı Alaşımlarında Kısımlı Yapı Faktörlerinin Uzun Dalga Boyu Limitleri

$\text{Cu}_{25}\text{Ni}_{75}$ $\text{Ni}_{20}\text{Al}_{80}$ $\text{Ni}_{80}\text{Al}_{20}$ $\text{Cu}_{50}\text{Ag}_{50}$ sıvı alaşımı için (Ashcroft ve Langreth 1967) kısımlı yapı faktörleri $S_{ij}(r)$ 'lerin hesaplanması denklem 4.9'daki form kullanılarak elde edilen kısımlı yapı faktörlerinin $c(1-c)$ konsantrasyona göre $S_{ij}(0)$ daki değerleri Tablo 13'te verilmektedir.

Tablo 5.13: Alaşımın konsantrasyonlarına göre uzun dalga boyundaki $S_{CC}(0)$ değerleri

Alaşım	$S_{CC}(0)$ Hesaplanan	$S_{CC}(0)=c(1-c)$ Deneysel
$\text{Cu}_{25}\text{Ni}_{75}$	0.01	0.18
$\text{Ni}_{20}\text{Al}_{80}$	0.043	0.16
$\text{Ni}_{80}\text{Al}_{20}$	0.045	0.16
$\text{Cu}_{50}\text{Ag}_{50}$	0.05	0.25

5.2.5 Sıvı alaşımalar için Entalpi

Bölüm 4.4'teki formülleri kullanarak $\text{Cu}_{25}\text{Ni}_{75}$, $\text{Ni}_{20}\text{Al}_{80}$, $\text{Ni}_{80}\text{Al}_{20}$ ve $\text{Cu}_{50}\text{Ag}_{50}$ alaşımaları için hesaplanan entalpi değerleri Tablo 5.14'te verilmektedir. $\text{Cu}_{25}\text{Ni}_{75}$ için deneysel entalpi değeri (Cong vd. 2002), $\text{Ni}_{20}\text{Al}_{80}$ için deneysel entalpi değeri (Asta vd. 1998) ve $\text{Cu}_{50}\text{Ag}_{50}$ için deneysel entalpi değeri (Feraoun vd. 2002)'nın deneysel değerleri ile karşılaştırılmıştır.

Tablo 5.14 Sıvı $\text{Cu}_{25}\text{Ni}_{75}$, $\text{Ni}_{20}\text{Al}_{80}$ ve $\text{Cu}_{50}\text{Ag}_{50}$ alaşımaları için hesaplanan entalpi

	Deneysel	Hesaplanan
$\text{Cu}_{25}\text{Ni}_{75}$	-0.374	-0.381
$\text{Ni}_{20}\text{Al}_{80}$	-0.345	-0.352
$\text{Ni}_{80}\text{Al}_{20}$	-----	-0.345
$\text{Cu}_{50}\text{Ag}_{50}$	-0.441	-0.450

Tablo 5.14'ten de görüldüğü gibi hesaplanan entalpi değerleri deneysel veriler ile uyum içindedir.

5.3 Sonuç

Bu çalışmada gömülü atom metodu potansiyellerinden uzun-menzilli çok cisimli Sutton-Chen (SC) potansiyellerinin sıvı metal ve metal合金 sistemlerine uygulanabilirliği test edilmiştir. Öne sürülen parametrizasyon metodları içerisinde r_{son} mesafesinin $2a^f$ alındığı durumda hesaplanan sıvı geçiş metallerinin yapısal özellikleri diğer metodlara göre deneyel sonuçlar ile daha uyumludur.

Bu sonuç tezde yapılan fcc geçiş metallerinin Moleküler Dinamik çalışmalarına da ışık tutacaktır.

Ayrıca bu tezde öne sürülen SC合金 formunun da yapılan合金 sistemlerinin yapı faktörleri deneyel sonuçlarla karşılaştırıldığında ilk piklerini doğru verdiği fakat diğer pikler için faz kayması olduğu görülmektedir. Alloyların kimyasal düzeninin ise elde edilen çiftler dağılım fonksiyonları ile açıklanıldığı gösterilmiştir. Bu nedenle bu tezde yapılan SC合金 formunun sıvı fcc geçiş metali合金 sistemleri için uygulanıldığı açıkça görülmektedir.

Ek A:

$$B = \frac{1}{9\Omega} \left[R_1^2 \left[\phi'(R_1) + F'(\rho) \cdot \rho''(R_1) \right] - R_1 \left[\phi'(R_1) + F'(\rho) \cdot \rho'(R_1) \right] + F''(\rho) \cdot R_1^2 \left[\rho'(R_1) \right]^2 \right]$$

$$F(\rho) = -c\varepsilon\rho^2$$

$$\rho = S_m^f = \sum_j \left(\frac{a_f}{r_j} \right)^m$$

$$\phi = \frac{1}{2} V(R_i) = \frac{1}{2} \varepsilon S_n^f$$

$$B = \frac{1}{9\Omega} \left[R_1^2 \left[\frac{1}{2} n^2 \varepsilon S_n^f + \left(-\frac{1}{2} c \varepsilon \rho^{-\frac{1}{2}} \right) m^2 S_m^f \right] - R_1 \left[\frac{1}{2} n \varepsilon S_n^f + \left(-\frac{1}{2} c \varepsilon \rho^{-\frac{1}{2}} \right) m S_m^f \right] + \frac{1}{4} c \varepsilon \rho^{-\frac{3}{2}} R_1^2 m^2 (S_m^f)^2 \right]$$

$$B = \frac{1}{9\Omega} \left[R_1^2 \left[\frac{1}{2} n^2 \varepsilon S_n^f - \frac{1}{2} n m \varepsilon S_n^f \right] - R_1 \left[\frac{1}{2} n \varepsilon S_n^f - \frac{1}{2} n m \varepsilon S_n^f \right] + \frac{1}{4} n m R_1^2 \varepsilon S_n^f \right]$$

$$B = \frac{1}{36\Omega} \left[2 R_1^2 n^2 \varepsilon S_n^f - 2 R_1^2 n m \varepsilon S_n^f + R_1^2 n m \varepsilon S_n^f \right]$$

$$B = \frac{1}{36\Omega} n S_n^f \varepsilon [2n - m] R_1^2 = \frac{n(2n - m) \varepsilon S_n^f}{36\Omega}$$

$$R_1^2 = 1$$

KAYNAKLAR

- Acland G. J. ve Vitek V. , *Phys Rev B.* 41, 10324, 1990
- Alemany M. M. G., Rey C. ve Gallego L. J. *Phys. Rev. B* 58: 685, 1998.
- Ashcroft N.W. ve Langreth D.C., *Phys. Rev.*, 159, 500.,1967
- Ashcroft N.W. ve Langreth D.C., *Phys.Rev.*, 155, 682.,1967
- Asta M., Morgan D., Hoyt J. J., Sadigh B., Althoff J. D. , Fontaine D. D. ve Foiles S. M., *Phys. Rev B.* 59, 14271-14281,1998
- Bhatia A.B. ve Thornton D.E., *Phys. Rev. B*2, 3004.,1970
- Bhuiyan G. M., Silbert M. ve Stott M. J., *Phys. Rev. B.* 53, 636-645,1996
- Cagin T., Dereli G., Uludogan M., *Phys. Rev.* B59(5), 3468-3473 (1999)
- Cong H. R., Bian X. F., Zhang J. X.ve Li H., *Materials Science Engineering A*, 326, 343-347, 2002
- Copestake A.P. ve Evans R., Ruppersbreg H. ve Schirmacher W.,(1983).*J.Phys.*, F13,1983
- Dalgiç Ş.S., Dalgic S.,Aktaş Ş ve Tomak M. "N body Potentials of some Liquid Transition Metals obtained by the Inverse method, Poster Bildiri, 4th Liquid Matter Conference, Granada-İspanya 1999, Europhysics Conference Abstracts Vol 23c,P3-13
- Dalgiç Ş.S., Dalgic S., Sengül S, Çeltek M.,Tezgör G. *J.Opt .Elec.Adv.Mater.*3,537 (2001a)
- Dalgiç Şentürk S., S. Dalgiç ve E. Bağmen , "Many Body potentials for liquid metal alloys", *İTÜ 9. İstatistik Fizik Günleri*, Kongre Bildiri Özeti Kitabı, Sf 24, İstanbul, 2002a
- Dalgiç Ş.S., Dalgic S.,Tezgör G, *Phys.Chem.Liq.* 4,539,2002b
- Dalgiç Şentürk S., S. Dalgiç ve E. Bağmen , "The Sutton-Chen Many Body potential for Liquid Ni-Al alloy", *6. Ulusal Sıvıhal Fiziği Sempozyumu*, Konuşma ve Bildiri Özetleri Kitabı, Sf 5 İstanbul, 2002c
- Dalgiç Şentürk S.ve E. Bağmen , "Embedded Atom Method Potentials for Liquid FCC metallic Alloys", *7.Ulusal Sıvıhal Fiziği Sempozyumu*,İstanbul,2003
- Daw M. S. ve Baskes M. I., *Phys Rev Lett.* 50, 1285,1983
- Daw M. S. ve Baskes M. I., *Phys Rev B.*29, 1285, 1984
- Dereli G., Cagin T., Uludogan M., *Phill. Mag. Lett.* 75 (4) 209-217 (1997)
- Faber T. E.ve Ziman J. M., . *Philosophical Magazine* , 11, 153, 1965

- Faber T. E. ve Ziman J. M., *Philosophical Magazine*, 11, 153, 1965
- Feraoun H. ve Esling C., *Superlattices and Microstructures*, 31, 297-313, 2002
- Finnis M. W. ve Sinclair J. E., *Philosophical Magazine A*, 50, 45-55, 1984
- Foiles S. M., *Phys. Rev. B*, 32, 3309-3315, 1985
- Green M. S., *J. Chem. Phys.* 33, 1403, 1960
- Gonzalez L. E., Gonzalez D. J. ve Silbert M., *Physica* B168, 39, 1991
- Gonzalez L. E., Gonzalez D. J. ve Silbert M., *Phys. Rev. A* 45, 3803, 1992
- Gonzalez L. E., Dalgic S., Gonzalez D. J. ve Silbert M. *J. Non-Cryst Solids*, 205, 901
1996
- Gonzalez L. E., Silbert M., Gonzalez D. J. ve Dalgic S., *Physica* B103, 13, 1997
- Hafner J., Pasturel A. ve Hicter P., *J. Phys.*, F14, 1137., *J. Phys.*, F14, 2279, 1984
- Hansen J. P. ve McDonald I. R., *Theory of Simple Liquids*, Academic Press, New York, 1986
- Maeda K., Vitek V. ve Sutton A.P., *Acta Metall*, 30, 2001, 1982
- March N.H. ve Tosi M.P., *Atomic Dynamics in Liquids*, Mac Millan and Co. Ltd., London, 1966
- Masuda K. ve Sutton A.P., *Philosophical Magazine A*, 44, 779, 1981
- Meeron E., *J. Math. Phys.* 1, 192, 1960
- Morita T., Hiroike K., *Progr. Theor. Phys. (Kyoto)* 23, 1003, 1960
- Percus J. K. ve Yevick G. J., *Phys. Rev.* 110, 1 (1958). E. Thiele, *J. Chem. Phys.*
39, 474, 1963
- Pethica J. B. ve Sutton A. P., *J. Vac Science Techonol A*. 2A, 90, 1988
- Rosenfeld Y., *J. Stat. Phys.* 42, 437, 1986
- Ruppersberg H., ve Schirmacher W., *J. Phys.* F14, 2787, 1984
- Shimoji M., *Liquid Metals*, Academic Press, London, 1977
- Silbert M., *Physica* B168, 39, 1991
- Smith J. R., Bozzolo G., Banerjea A. ve Ferrante J., *Phys Rev Let*, 63, 1269, 1989
- Sutton A. P. ve Chen L., *Philosophical Magazine Letters*, 61, 139-146, 1990
- Tabar H. R. ve Sutton A. P., *Philosophical Magazine Letters*, 63, 221-225, 1991
- Todd B. D., Lyndenbell R. M., *Surf. Sci.*, 281, 191, 1993
- Todd B. D., Lyndenbell R. M., *Surf. Sci.*, 281, 170, 1995
- Van Leeuwen J. M. J., Groeneveld J., De Boer J., *Physica* 25, 792, 1959

Verlet L., *Nuovo Cim.* 18, 77 ,1960

Young W.H., *J. Physique.*, 46, C8-427,1985

Waseda Y., *The Structure of Non-Crystalline Materials-Liquids and Amorphous Solids*, McGraw-Hill, New York ,1981



T.C. YÖKSEKÖĞRETİM KURULU
DOĞUMANTASYON MERKEZİ

ÖZGEÇMİŞ

1977 yılında İnegöl'de doğdum.Uzunköprü Sultanşah ilkokulunu bitirdikten sonra Edirne Atatürk ortaokulunu ve 1994 yılında Edirne Lisesini bitirdim. 1996 yılında Trakya Üniversitesi Fen – Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümüne girdim. 2000 yılında Fizik Bölümünden mezun oldum. Eylül 2000 tarihinde yüksek lisans eğitimime başladım.

