

T.C
FIRAT ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

**DÜZENSİZ ALAŞIMLARIN ELEKTRONİK
YAPILARININ İNCELENMESİ**

F. Ahmet ÇELİK

YÜKSEK LİSANS TEZİ
FİZİK ANABİLİM DALI

150084

ELAZIĞ, 2004

T.C.
FIRAT ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

DÜZENSİZ ALAŞIMLARIN ELEKTRONİK YAPILARININ İNCELENMESİ

F. Ahmet ÇELİK

Yüksek Lisans Tezi
Fizik Anabilim Dalı

Bu tez, 15.01.2006 tarihinde aşağıda belirtilen jüri tarafından oybirliği /oyçokluğu ile başarılı / başarısız olarak değerlendirilmiştir.

Danışman:

Üye: Doç. Dr. Abdulkadir YILMAZ

Üye: Doç. Dr. Dejan KAMIA

Üye: Yrd. Doç. Dr. Soner ÖZGEN

Üye:

Bu tezin kabulü, Fen Bilimleri Enstitüsü Yönetim Kurulu'nun 21.01.2006 tarih ve 3/4 sayılı kararıyla onaylanmıştır.

TEŞEKKÜR

Bu tez çalışmasında bana her türlü yardımlarını esirgemeyen ve hiçbir fedakarlıktan kaçınmayan sayın hocam Doç.Dr.Abdulkadir YILDIZ'a ve bilgisayar programlama konusunda değerli fikirlerinden yararlandığım sayın hocam Yrd.Doç.Dr. Soner ÖZGEN'e şükranlarımı sunarım.

F. Ahmet ÇELİK



İÇİNDEKİLER

İÇİNDEKİLER	I
ŞEKİLLER LİSTESİ	III
SİMGELER LİSTESİ	IV
KISALTMALAR LİSTESİ	V
ÖZET.....	VI
ABSTRACT	VII
1. GİRİŞ.....	1
2. DÜZENSİZ SİSTEMLER.....	4
2.1 Düzensiz Sistemlerin Sınıflandırılması	5
2.1.1 Mevkiyel Düzensiz Sistemler	5
2.1.2 Yapısal Düzensiz Sistemler.....	7
2.1.3 Hem Yapısal Hem Mevkiyel Düzensizliği	
İhtiva Eden Düzensiz Sistemler.....	8
2.1.3.1 Sıvı Alaşımlar	8
2.1.3.2 Radyal Dağılım Fonksiyonu ile Sıvı Metallerin	
ve Amorf Alaşımların Atomik Yapısı Arasındaki İlişki	9
2.1.4 Kuasikristaller.....	14
2.1.4.1 Kuasikristallerin Elektronik Yapıları.....	16
3. DÜZENSİZ SİSTEMLERİN ELEKTRONİK YAPISI VE TEORİK METOTLAR	18
3.1 Band Teorisi ve Elektronik Yapılar	18
3.2 En Yaygın Kullanılan Teorik Metotlar	20
3.2.1 Koherent Potansiyel Yaklaşımı	20
3.2.2 Moleküler Dinamik (MD) Yöntemi	21
3.3 Beeby-Hayes (BH) Metodu.....	23
3.3.1 Çoklu Saçılma metodunun Temel Bağıntıları.....	24
3.4 Dirac-Delta Potansiyeli ve $s_0(\mu)$ ve $s_0(k)$ 'ın Belirlenmesi.....	30

4. BİR MODEL ALAŞIMIN DURUM YOĞUNLUĞUNUN HESAPLANMASI.....	34
5. SONUÇLAR VE TARTIŞMA	49
KAYNAKLAR	51
ÖZGEÇMİŞ	54



ŞEKİLLER LİSTESİ

Şekil 2.1 Değişik hallerde atomların dizilişi [5].....	5
Şekil 2.2 a) Düzenli alaşım, b) Mevkiyel düzensiz alaşım	6
Şekil 2.3 AuCu ₃ alaşımının (a) düzenli ve (b) düzensiz şeklinin birim hücreleri.....	7
Şekil 2.4 (a) Topolojik (yapısal) düzensizlik, (b) Hem yapısal hem de mevkiyel düzensizlik	8
Şekil 2.5 Gaz , sıvı, amorf katı ve kristal için radyal dağılım fonksiyonları [15]	11
Şekil 2.6 O ve M atomlarından saçılan x-ışını	12
Şekil 2.7 Beş katlı yada on katlı öteleme simetrisi gösteren bir kuasikristalin difraksiyon deseni.....	15
Şekil 2.8 (a) İkosahedral, (b) Pensore örgüsü	16
Şekil 4.1 İki boyutta A _x B _{1-x} yapısındaki bir alaşım modelinin kare örgü üzerinde olası dağılımlarını gösteren diyagram	35
Şekil 4.2 A _c B _{1-c} alaşımının elektronik durum yoğunluğunun bağ uzunluklarına göre değişimi; (a) (c=0.5; R _{AA} =2.0(a.b), R _{BB} =2.2(a.b)); (b) (c=0.5; R _{AA} =2.0(a.b), R _{BB} =2.4(a.b)).....	44
Şekil 4.3 A _c B _{1-c} alaşımının elektronik durum yoğunluğunun bağ uzunluklarına göre değişimi; (a) (c=0.5; R _{AA} =2.0(a.b), R _{BB} =2.6(a.b)); (b) (c=0.5; R _{AA} =2.0(a.b), R _{BB} =2.75(a.b)).....	45
Şekil 4.4 A _c B _{1-c} alaşımının elektronik durum yoğunluğunun atomik konsantrasyonlara göre değişimi; (a) (R _{AA} =2.0(a.b), R _{BB} =2.0(a.b), c=0.2)); (b) (R _{AA} =2.0(a.b), R _{BB} =2.0(a.b), c=0.4))	46
Şekil 4.5 A _c B _{1-c} alaşımının elektronik durum yoğunluğunun atomik konsantrasyonlara göre değişimi; (a) (R _{AA} =2.0(a.b), R _{BB} =2.0(a.b), c=0.5)); (b) (R _{AA} =2.0(a.b), R _{BB} =2.0(a.b), c=0.6))	47
Şekil 4.6 A _c B _{1-c} alaşımının elektronik durum yoğunluğunun atomik konsantrasyonlara göre değişimi; (R _{AA} =2.0(a.b), R _{BB} =2.0(a.b), c=0.8));.....	48

SİMGELER LİSTESİ

K : Kelvin

s : Saniye

a.b : Atomik birim



KISALTMALAR LİSTESİ

- ATA** : T-matris yaklaşımı
BH : Beeby-Hayes metodu
CPA : Koherent potansiyel yaklaşımı
ÇST : Çoklu saçılma teoremi
DOS : Durum yoğunluğu
EAM : Gömülmüş atom modeli
MDS : Moleküler dinamik simülasyonları
PEF : Potansiyel enerji fonksiyonu
RDF : Radyal dağılım fonksiyonu



ÖZET

YÜKSEK LİSANS TEZİ

DÜZENSİZ ALAŞIMLARIN ELEKTRONİK YAPILARININ İNCELENMESİ

F. Ahmet ÇELİK
Fırat Üniversitesi
Fen Bilimleri Enstitüsü
Fizik Anabilim Dalı
2004, Sayfa : 54

Bu tez çalışmasında, yapısal olarak düzensiz sistemler için geliştirilen ve çok parçacık saçılmasına dayanan Beeby&Hayes metodunu kullanarak iki boyutta bir kare örgü üzerinde istatistiksel bir düzene göre dağılmış $A_x B_{1-x}$ şeklindeki bir alaşımın elektronik durum yoğunluğunun farklı bir çözüm tekniği ile hesaplanması amaçlanmıştır.

Çalışmanın ilk aşamasında, teorik metodun matematiksel bağıntıları tanımlanan sistem için geliştirilerek sisteme uygulanabilir dinamik denklemleri elde edildi. Çalışmada kullanılan model sistem, başlangıçta %50 A ve %50 B atomik konsantrasyona sahip olacak şekilde seçilip bir kare örgü üzerinde olası dağılımları diyagramlarla izah edildi. Görünüşte mevkisel düzensiz alaşım gibi davranan model sistem yapısal düzensizlik özelliğini de ihtiva etmesi nedeniyle bu sistemi tanımlayacak yapısal faktörler belirlendi. Toplam on iki tane dağılım diyagramına sahip sisteme teorik metodun uygulanması sonucu kompleks bir blok matris elde edildi. Bu matris uygulanan bazı matematiksel işlemler sonucu 48×48 mertebesinde bir hermityen blok matris'e indirgendi.

İkinci aşamada elde edilen dinamik matrisin çözümü; konsantrasyon ve bağ uzunlukları gibi bir kaç yapısal faktörlere göre yapıldı ve elektronik durum yoğunlukları hesaplandı. Ayrıca, spektral fonksiyonun momentum dalga vektörüne göre değişimi de araştırıldı.

Anahtar Kelimeler : Düzensiz sistemler, Çoklu saçılma, Durum yoğunluğu, Beeby&Hayes metodu

ABSTRACT

MASTER THESIS

INVESTIGATION OF ELECTRONIC STRUCTURE OF DISORDERED ALLOYS

F. Ahmet ÇELİK
Firat University
Graduate School of Science and Technology
Department of Physics
2004, Page : 54

In this study, it is aimed to calculate the electronic density of states for an A_xB_{1-x} alloy model distributed on a square lattice in a two dimensional lattice according to a statistical order using Beeby&Hayes method, which was developed for structural disordered systems, based on the multiple scattering theory.

In the study, first, the dynamic equations applicable to the model system are evaluated from the formal relations of the theoretical method. The possible distributions of patterns of the model system having 50% A and 50% B atomic concentrations on a square lattice are illustrated explicitly on diagrams. Though the model system appears on the diagram like a substitutional disordered alloy, it is treated as a structural disordered one so that the structural factors need to be determined. As the result of twelve possible distributions on the lattice, a complex block matrix is obtained, which is then reduced to 48x48 hermitian block matrix .

In the last step, the matrix reduced to a solvable form is evaluated for several structural factors such as concentrations and bond distances, and then the density of electronic states is calculated. Moreover, variation of the spectral function to the momentum is investigated.

Keywords: Disordered systems, Multiple scattering, Density of states, Beeby&Hayes Method

1. GİRİŞ

20. yüzyılın başlarında kendini gösteren ve günümüze kadar gelen sanayi ve teknolojiye çok hızlı ilerlemeler, kristal yapıların bilinmesinde teoriksel ve deneysel çalışmaları hızlandırmıştır. Öte yandan, kristallerin aksine düzenlilik ve simetri özelliği göstermeyen amorf yapılar üzerindeki çalışmalar kristallere göre daha az olmuştur. Özellikle, bu maddeler üzerindeki bilimsel çalışmaların geçmişi çok uzun olmamakla beraber, amorf yapıda üretilen bazı yeni maddeler ilginç çalışmalara ve teknolojik gelişmelere neden olmuştur. Bu nedenle, amorf yarı iletkenlerin keşfinden bu yana, sıvı metaller ve camlar gibi amorf yapılar üzerindeki ilgi giderek artmaktadır [1].

Katıhal fiziğinin başlangıcı, 20. yüzyılın başlarında x - ışınlarının kırınımı olayının keşfedilmesi ve kristal özelliklerini başarıyla öngören bir dizi basit model hesapların yayınlanmasıyla başlamıştır. Kısaca kristal yapı; atomların üç boyutlu uzayda belirli bir düzene ve temele göre dizilmeleri sonucu oluşan düzenli yapı olarak tanımlanır. Başka bir deyişle, düzenli diziliş üç boyutlu uzayda tekrarlanan karaktere sahiptir. Düzenli yapının en küçük hacimsel birimi olarak kabul edilen *birim hücrenin (Wigner-Seitz hücresi)* yan yana dizilmesinden kristal yapının tamamı elde edildiği iyi bilinmektedir. Bir kristal kararlı bir ortamda büyümeye başladığında meydana gelen yapı, birbirine özdeş yapıtaşlarının ard arda eklenmesiyle oluşmaktadır [2].

Basit kristallerde (bakır, gümüş, altın, alkali metal vb.) en küçük yapısal birimler tek atomlardır. Atomların yerleşiminin geometrisine bağlı olarak değişen birçok kristal yapı tipi olmasına rağmen bütün katılar kristal yapıya sahip değildir (cam gibi). Tüm kristallerin yapısı bir örgü ile tanımlanır ve bu örgü a_1, a_2, a_3 gibi üç temel öteleme vektörü ile kolayca temsil edilir. Ancak, düzensiz sistemlerde aynı geometriler içinde sıkı paket oluşturulurken bütün sistem için tek yapı veya aynı tipte bir birim hücre oluşturulması mümkün değildir. Düzensiz sistemleri düzenli sistemlerden (kristal) ayıran en önemli özelliklerden biri olan bu hücreler sistem içinde birden fazla olup birbirlerinden farklıdır. Bu hücrelere *Voronoi* çokgenleri denir [3]. Her *Voronoi* hücresinin çevresi farklı olduğundan sistem hakkında bilgi sahibi olmak için bunların ayrı ayrı hesaplanması gerekir. Bu da kristallerdeki gibi kolay ve pratik değildir, çünkü bir kristali oluşturan atomların en dış yörüngelerindeki elektronlar serbest oldukları kabul edildiğinde, bu elektronlar kristal içinde her yerde eşit ihtimalle bulunabilirler. Sonsuz bir sistemi tek birim hücreye indirgeyip *Bloch* Teoreminin bu en küçük birime uygulanması durumunda sistem hakkındaki tüm fiziksel özellikler kolayca hesaplanabilir. Ancak, bir elektron her yerde eşit olasılıkla bulunmayacağı için düzensiz sistemlerde Brillouin sınırı, birim hücre, dalga numarası, simetri gibi fiziksel nicelikler geçerliliğini kaybeder ve *Bloch* Teoreminin en

küçük birime uygulanması zorlaşır. Düzensiz sistemler üzerindeki gelişmeler ve çalışmalar, kristal sistemlerle karşılaştırıldığında; düzensiz yapılar hakkında teorik ve deneysel çok az bilginin olduğu sonucu ortaya çıkar. Bunun en önemli nedenlerinden biri, bu sistemlerin sahip olduğu düzensizlik veya periyodik olmayan yapısından dolayı ortaya çıkan matematiksel zorluklar, diğeri deneysel olarak yapılan çalışmalardaki karşılaşılan zorluklardır.

Amorf metalik alaşımlar, uzun mesafeli atomik düzene sahip olmayan metaller ve metal alaşımlarından oluşur ve bunlara cam alaşımları veya kristal olmayan alaşımlar da denilir [4]. Düzenli ve düzensiz maddeler arasındaki en önemli farklılıklardan birisi uzun ve kısa mesafe düzeniyle açıklanır. Mükemmel bir kristalde, uzun mesafe düzeni de mükemmeldir ve kristal yapının içinde bir atom konumundan yola çıkarak diğeri tüm atomların konumları belirlenebilir. Amorf maddede ise düzenlilik en yakın komşular arasında olduğu için, bir atomun bulunma olasılığı belli bir nokta civarında kendini gösterir. Birinci komşu atomunu temsil eden pikten sonra olasılık yine azalır ve itici kuvvet birinci pikteki atomun çok yakınında başka bir atom bulunmasını engeller. Merkezden (referans olarak seçilen atomdan) uzaklaştıkça atomların konumu giderek daha düzensiz hale gelir ve olasılık yoğunluğu sabit bir değere yaklaşır. Bu durum, amorf maddelerde mevcut olan kısa-mesafe düzenliliğidir [5].

Son yıllarda düzensiz yapıların elektronik yapılarını hesaplamada bir çok yöntem geliştirilmiştir. Mevkiyel düzensiz alaşımların elektronik yapılarını teorik olarak (zayıf saçılma potansiyel limitinde) hesaplamada en çok kullanılan yaklaşım Koherent Potansiyel Yaklaşımı (CPA) dır. Bunun yanında Recursion Metodu, Çoklu Saçılma Teorisi ve T-Matrix Yaklaşımı (ATA) gibi yaklaşımlar da düzensiz maddelerin elektronik yapılarını hesaplamada kullanılan yaklaşımlardır [6]. Özellikle son yıllarda bilgisayar teknolojisindeki hızlı gelişmelerin sonucu olarak, 1950’li yıllardan bu yana, hem teorik yaklaşımları hem de deneysel metotları içine alan ve düzenli yapılarla düzensiz yapıları incelemede pek çok kolaylıklar sağlayan bilgisayar simülasyon metotları geliştirilmiştir. Monte-Carlo ve Moleküler Dinamik Simülasyonları (MDS), en çok kullanılan metotlardan olup maddelerin hem mekanik hem de termodinamik (sıcaklık, basınç gibi) özelliklerinin incelenmesinde zamanın bir fonksiyonu olarak güvenle kullanılabilmektedir. Bir MDS genel olarak hazırlık, integrasyon ve dengeleme, sonuçların analizi olmak üzere üç adımda planlanır. Ayrıca, MDS cam geçiş özelliklerini araştırmada da çok geniş bir şekilde kullanılmaktadır. Gelişigüzel dağılmış model sistemleri hesaplayabilecek bilgisayar sistemlerinin gelişmesi sonucu, bunlara bağlı olarak farklı bilgisayar simülasyonları ve fiziksel model tasarımları kullanılarak rasgele-dizilim yapısını anlamada önemli gelişmeler sağlanmıştır.

Bu tez çalışmasında, Beeby-Hayes metodu olarak bilinen ve çoklu saçılma esasına dayanan teorik bir yaklaşım kullanılarak, iki-boyuttaki hem örgü yapısı hem de örgü üzerindeki dağılım olasılıkları belli olan A_xB_{1-x} şeklindeki statik bir alaşım modelinin elektronik durum yoğunluğu farklı atomik konsantrasyon ve farklı bağ uzunlukları değerleri için incelenmiştir. Ayrıca, spektral fonksiyon $\rho(\mathbf{k},E)$ 'nin momentuma göre davranışı da grafiksel olarak araştırılmıştır. Spektral fonksiyondaki hermityen matrisin özdeğerlerinin ve özvektörlerinin hesaplanmasında fortran bilgisayar dili kullanılmıştır.

2. DÜZENSİZ SİSTEMLER

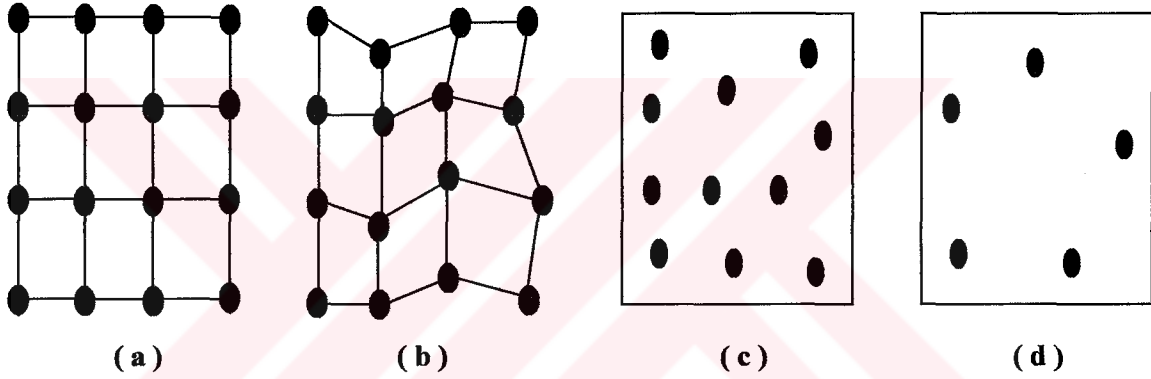
Düzensiz sistemler, en genel anlamıyla periyodik özelliği olmayan ve uzayda atomik yapıların gelişigüzel yerleşmesi sonucu meydana gelen sistemlere denir. Kelime anlamı ise, düzenliliğe sahip olmayan veya istatistiksel olarak gelişigüzel, önceden tahmin edilemeyen ve rasgelelik şeklindedir [6]. Düzensiz sistemler içinde en yaygın olan yapı amorf yapılardır. Bir tür düzensiz yapı olan sıvılarda atomlar yine rasgele bir dağılım gösterirler. Zaman içinde, sıvıdaki atomlar bir yandan öte yana hareket ederler, fakat onların rasgele dağılmış olmalarının özelliği değişmez. Katılardaki atomlar hareket etmeseler de, sıvı ile amorf katı arasında büyük benzerlikler vardır. Cam gibi katılara aşırı soğutulmuş sıvı denilmesinin sebebi budur [1]. Amorf yapılara sıvı ve cam dışında; çelik alaşımları, amorf yarıiletkenler, sıvı metaller, fotovoltaiik uygulamalarda kullanılan ince film aygıtları örnek olarak verilebilir. Sıvı metaller ve alaşımları ile spin camları henüz bir çok yönü ile bilinmeyen sistemlerdir.

Metaller ve metal alaşımları genellikle katı fazda kristal özelliği gösterir. Birçok katı madde, hazırlanış koşullarına göre ya kristal ya da amorf yapıda olabilirler. Sıvı halden itibaren yavaşça soğutulan bir madde kristal yapıda katılaşıır. Atomlar yavaş soğutma sırasında en düşük enerjili kristal konumlarına geçebilme olanağı bulurlar. Fakat aynı madde hızlı bir şekilde soğutulduğunda amorf yapıda katılaşıır. Yani, maddelere sıvı fazdayken kristalleşmeye izin vermeyecek büyüklükte bir soğutma hızı uygulandığında sıvı metal içerisindeki atomlar düzenliliğin atomun sadece en yakın komşuluklarına kadar uzandığı kısa mesafe düzenine sahip atomik kümeler oluşturma eğiliminde olurlar. Pek çok metal ve metal alaşımına, hızlı soğutma teknikleri kullanılarak amorf özelliği kazandırılmakta ve bu şekilde üretilen malzemeler, kristal yapıli sistemlerden daha farklı fiziksel özelliklere sahip olmaktadır. Bu yöntemde soğutma hızı $\sim 10^6 \text{K/s}$ mertebesindeir [7]. Bu şekilde elde edilen metalik malzemelerin mikro yapıları düzensizdir ve küçük atomik kümelerden oluşur.

Klasik çekirdeklenme teorisine göre; camsı fazdaki atomik kümeler, sıvı fazdaki çekirdek birimlerine atomların birer ikişer eklenmesiyle oluşur [8]. Desre ve Cini ve Vinet tarafından öne sürülen bir teoriye göre, bu atomik kümelenmelerin aynı faz çekirdeklerinin ortamdaki dalgalanmalar sonucunda bir araya gelerek katı faz embriyolarını meydana getirdiği düşünülür [9]. Bu teorilere göre, katıdaki atomik kümeler, gerçekte sıvı faz içinde önceden var olan çekirdek yapıları hazır alır. Böylece, yeni malzemeler üretmede ve malzeme özelliklerinin açıklanmasında, atomik kümelerin oluşum mekanizmalarının bilinmesi önem kazanır. Bu sayede endüstriyel amaçlı bol miktarda amorf alaşımlar üretilmektedir. Üretilen bu amorf alaşımların kolay ve zor mıknatıslanma doğrultularının olmayışı magnetik kayıpları önler ve yüksek manyetik geçirgenlik sağlar. Buna bağılı olarak pek çok amorf maddenin yapısal

özelliklerine bağlı olarak farklı manyetik, mekaniksel, elektriksel, korozyon, vs. gibi davranışlar sergilerler. Örneğin, amorf alaşımlar demir ya da nikel alaşımlarından 2-3 kat daha fazla elektriksel ve aynı zamanda çok iyi korozyon direncine sahiptirler.

Düzenli ve düzensiz sistemler ile ilgili çeşitli model çizimleri literatürde mevcut olmakla beraber, Şekil 2.1 de verilen modeller bunlardan sadece birisini göstermektedir. Burada Şekil 2.1a ideal bir *kristali*, Şekil 2.1b atomların az çok düzenli bir örgüde fakat periyodik olmayan bir şekilde dizilişle oluşan *amorf katı*, Şekil 2.1c bir katı yeterince ısıtıldığında erimeye başlayan ve bu durumda atomlar birbirinin kuvvet alanı içinde olduğu halde artık düzgün bir örgü düzenini kaybeden bir *sıvı* ve Şekil 2.1d de ise daha da ısıtılan sıvının *gaz* haline dönüştüğü yapıyı göstermektedir. Gaz yapılarında atomlar arası uzaklık daha da büyük olup daha hızlı hareket ederler ve ancak birbirlerine çarptıklarında kısa bir süre etkileşirler.



Şekil 2.1 Değişik hallerde atomların dizilişi: (a) Kristal, (b) Amorf katı, (c) Sıvı, (d) Gaz [5].

2.1 Düzensiz Sistemlerin Sınıflandırılması

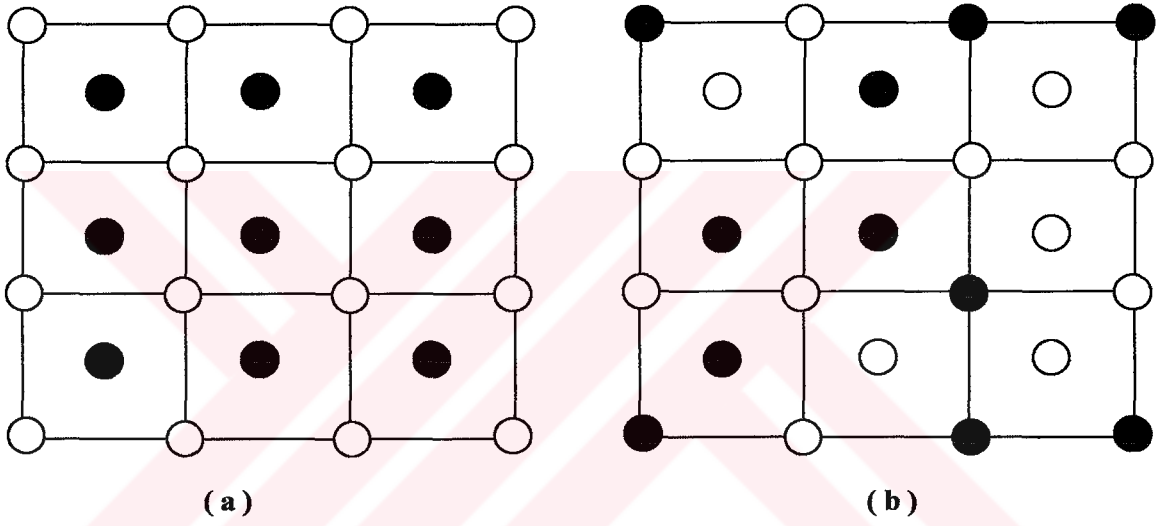
Düzensizlik değişik şekillerde meydana gelebilir: Topolojik, spin, mevkisel (substitutional) ve titreşim düzensizlikleri bunların en önemlilerindendir [10]. Düzensizlik bu şekilde çok farklı gruplarda sınıflandırılmış olmasına rağmen, türleri ve yapılarındaki düzensizlik derecesine bağlı olarak genelde iki grup altında toplamak mümkündür.

2.1.1 Mevkisel Düzensiz Sistemler

En zayıf düzensizlik mevkisel düzensizliğe sahip alaşımlarda görülür [3]. Mevkisel düzensizlik, düzgün bir örgüye sahip olan bir yapının örgü noktalarını işgal eden atomların örgüde rasgele yerleşmesi sonucu oluşan sistemlerdir ve en az iki farklı atomdan oluşurlar. Düzenli örgüdeki örgü noktalarına yerleşen farklı atomların mevkileri (yerleri) arasında bir

düzensizlik olduğundan bu tür sistemlere en genel anlamda mevkisel düzensiz alaşımlar denir. Şekil 2.2b de gösterildiği gibi, $A_{1-x}B_x$ şeklinde gösterilen ve farklı konsantrasyona sahip ikili alaşımların sahip olduğu A ve B atomları örgü noktalarında birbirlerinin yerine geçebilirler [11].

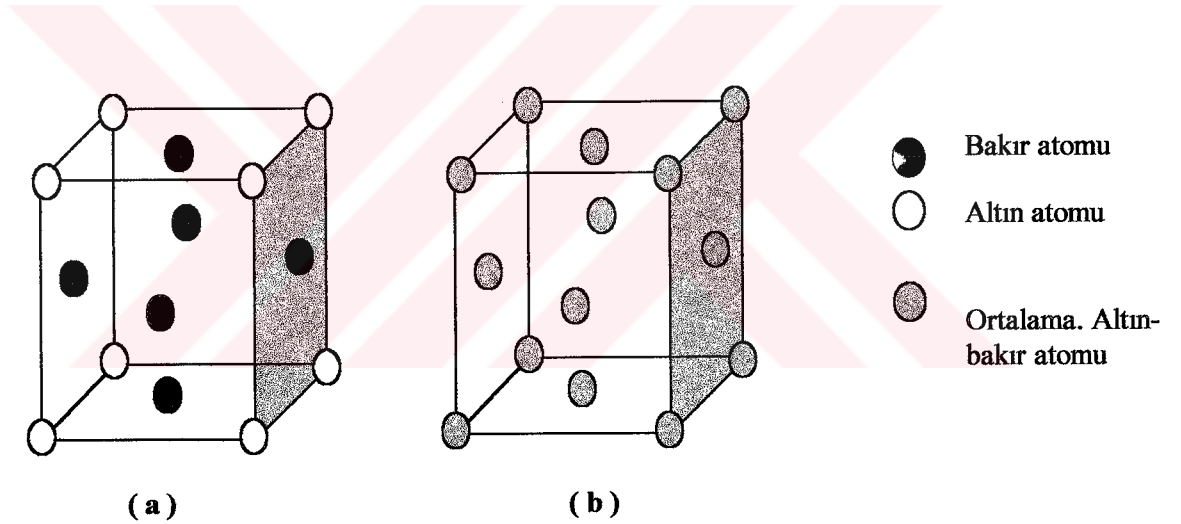
Mevkisel düzensiz sistemlerde bir r noktasından $r + k$ noktasına öteleme yapıldığında başka bir atoma varılır fakat bu atomun aynı atom olup olmadığı belli değildir. Yani, sistemde gelişigüzel bir düzen olduğundan asıl atomlar yerine başka atomlar yerleşmiş olabilir ve teorik hesaplamalar buna göre yapılır. Mevkisel düzensiz sistemlerde bir A atomu ile bir B atomunun yer değiştirmesi meydana gelmesine rağmen kristal örgü bozulmaz. Bu durum metallerde, yarıiletkenlerde ve iyonik kristallerde çok farklı elementler için meydana gelebilir.



Şekil 2.2 (a) Düzenli alaşım, (b) Mevkisel düzensiz alaşım.

Bir alaşım metalik özelliklere sahip bir maddedir ve en az birisi metal olmak üzere iki ya da daha fazla kimyasal element içerir. Bir alaşım sistemi mümkün olan tüm oranlarda farklı elementlerin birleşimi ile oluşabilen tüm alaşımları içerir. Eğer sistem iki elementten oluşuyorsa; bu bir ikili alaşım (binary alloy), üç element içeriyorsa; üçlü alaşım (ternary alloy) adını alır. Bununla birlikte, her sistemde büyük sayıda farklı alaşımlar mümkün olabilir. Alaşımlar yapılarına göre sınıflandırılabilirler gibi, tüm alaşım sistemleri faz diyagramları ya da dengelerinin türüne göre de sınıflandırılır. Alaşımlar homojen (homogeneous) ise tek faz içerip, karışım ise değişik fazların bir bileşimi olacaktır. Her birim örgü hücresinde olduğu gibi, bir alaşım fazının değişmezliği bir atomik ölçek üzerinde belirlenemez. Fiziksel olarak olası mikroskobik her yapı bir faz olarak düşünülebilir.

Katı halde üç mümkün olan faz vardır: 1. Saf metal, 2. Ara alaşım fazı 3. Katı çözelti. Denge şartları altında, tüm *saf metaller* sabit bir erime ve donma noktasına sahiptir. *Ara alaşım fazında*, kimyasal bileşiklerin çoğu pozitif ve negatif değerlikli elementlerin bileşimidir. Değişik türden atomlar belirli oranlarda birleşerek kimyasal formüllerle gösterilen bileşikler oluştururlar. Bileşikler kendilerini oluşturan elementlerden farklı özelliklere sahiptirler ve bileşiklerin çoğu, saf metallerde olduğu gibi belirli bir erime noktasına sahiptir. Bir *katı çözelti* basit olarak katı halde bir çözeltidir ve bu tür uzay örgüsünde iki tür atom ihtiva eder. Denge şartları altında saf bir metalin sabit bir erime ve donma noktası vardır. Fakat farklı elementlerden oluşmuş bir alaşımın erime ve donma noktaları kendisini oluşturan saf elementlerin erime ve donma noktasından farklı olur ve alaşım sabit bir erime ve donma noktasına sahip olmaz. İki tür katı çözelti mevcuttur. a) yerine geçen (substitutional) b) arayer (interstitial) katı çözelti. Şekil 2.3 düzenli ve düzensiz $AuCu_3$ alaşımının birim hücre şeklini göstermektedir.



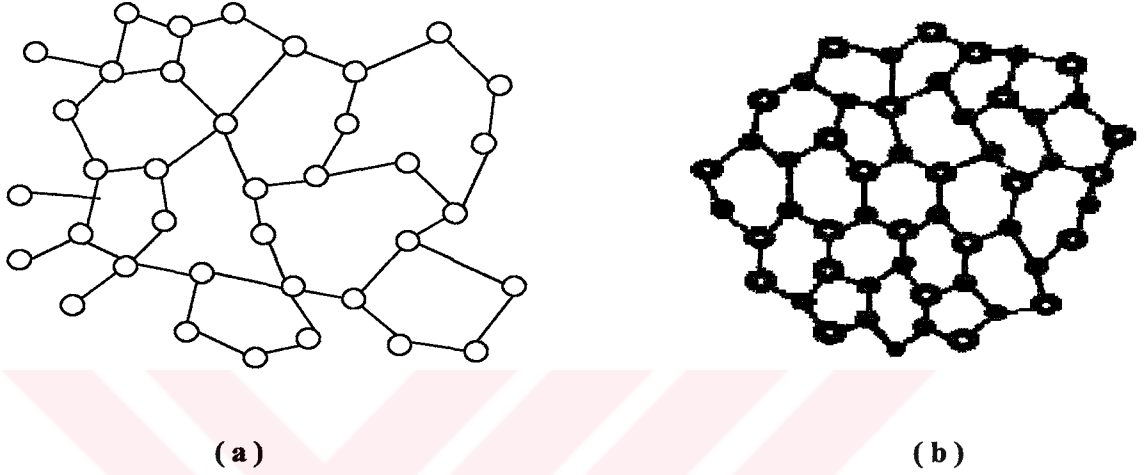
Şekil 2.3 $AuCu_3$ alaşımının (a) düzenli ve (b) düzensiz şeklinin birim hücreleri.

2.1.2 Yapısal Düzensiz Sistemler

Bu tür düzensiz sistemler, düzensizliği daha çok örgü yapısında bulunduran sistemler olup bunlara topolojik ya da yapısal düzensiz sistemler denir [12]. Bu sistemlerde artık düzenli örgünün hiçbir izi kalmamasının sonucu olarak atomlar ya da moleküller sistem içinde örgü noktalarında veya uzayda tamamen rasgele dağılmışlardır (Şekil 2.4a). Bu tür düzensiz sistemlere sıvılar, amorf alaşımlar ve gazlar örnek verilebilir.

2.1.3 Hem Yapısal Hem Mevkiyel Düzensizliği İhtiva Eden Düzensiz Sistemler

Mevkiyel düzensiz alaşımlar ve yapısal düzensiz sistemler birlikte yepyeni bir düzensiz yapı oluşturabilirler. Bu tür düzensiz sistemlerde hem atomlar örgüye rasgele dağılmıştır hem de örgü düzeni tamamen düzensizdir. Özellikle bu gruba giren ve birçok özelliği henüz bilinmeyen sıvı metaller ve alaşımlar bu tür düzensizlik sistemi içine girerler (Şekil2.4b).



Şekil 2.4 (a) Topolojik (yapısal) düzensizlik, (b) Hem yapısal hem de mevkiyel düzensizlik.

2.1.3.1 Sıvı Alaşımlar

Bir kristalde görülen uzun-mesafe düzeninin aksine camsı maddeler ve sıvı metallerdeki atomik kümelenmeler kısa-mesafe düzeni gösterirler [13]. Sıvı metal içerisinde görülen atomik kümelenmeler, sıvı metallerin ana ve temel yapısını oluşturmaktadır. Sıcaklık düşürüldüğünde sıvı metal içerisindeki bu atomik kümelerin sayısı da artmaktadır. Bu özel yapısal karakteristikler, ne atom ve molekül ne de katı maddelerdeki yapılara benzerler. Bu nedenle, yüksek kalitedeki numunelerin hazırlanması için atomik kümelerin yapısını anlamak çok önemlidir. Sıvı metallerin yapısal özellikleri üzerindeki çalışmaların sonuçları hem deneysel hem de teorik olarak elde edilmiştir. Deneysel araştırmalar, metalik maddelerin makroskopik yapısının bu maddelerin aynı zamanda mikroskobik yapısına da bağlı olduğunu ve mikroyapının katılaşmadan önceki sıvı yapıya bağlı olduğunu göstermiştir. Bu nedenle, farklı sıcaklıklardaki sıvı metallerin yapısal özelliklerini araştırarak maddelerin özelliklerini elde etmek ve katılaşma tekniklerini incelemek büyük bir öneme sahiptir. Bununla birlikte, normal şartlardaki sıcaklıklardan çok daha yüksek sıcaklıklardaki sıvıların çalışılması oldukça zor olduğu kabul edilen bir gerçektir.

Yüksek sıcaklıklardaki sıvı metallerin anlaşılması ile ilgili termodinamik özelliklerinden bazıları; entalpi artışı, fisyon ısıları, ısı kapasiteleri, dielektrik sabitleri, yüzey tensörleri, viskozite ve termal genleşme katsayıları olarak verilebilir. Bu özelliklerin doğru olarak belirlenmesi için geniş bir sıcaklık aralığında hızlı soğuma-ısıtma teknikleri kullanılır [14]. Sıvı metallerdeki ısı kapasitesi ve Radyal Dağılım Fonksiyonu (RDF), sıvı metallerin yapısal özelliklerinin belirlenmesinde önemli bir rol oynar. Şimdiye kadar, deneysel ölçümler ve teknikler sıvı metallerin bu yapısal özelliklerini elde etmede ana metot olarak hala kullanılmaktadır. Bununla birlikte, bu ölçümlerin zorluğu başka metotların gelişmesini sağlamıştır.

Bunlardan yarı deneysel bir metot olan Moleküler Dinamik Simülasyonlarının (MDS), katı ve sıvıların termodinamik ve yapısal özelliklerini önceden belirlemede güvenilir bir metot olduğu gerçeği günümüzde ispatlanmıştır. Sıkı Bağ Modeli (tight-binding), Pseudo-Potansiyeli ve Gömülmüş Atom Modeli (EAM) gibi çok değişik potansiyel model yaklaşımları; maddelerin atomlar arası etkileşimlerini tanımlamak amacıyla geliştirilmiş olup geniş bir şekilde kullanılmaktadır. Genel olarak EAM yaklaşımı, metalik sistemlerin katı faz yapılarını incelemek amacıyla tasarlanmıştır ve Potansiyel Enerji Fonksiyonlarının (PEF) parametrelerinin belirlenmesinde model sistemin katı faz özelliklerinden yararlanır. Bununla birlikte metalik sistemlerin sıvı fazlarına uygulanması son yıllarda hız kazanmıştır.

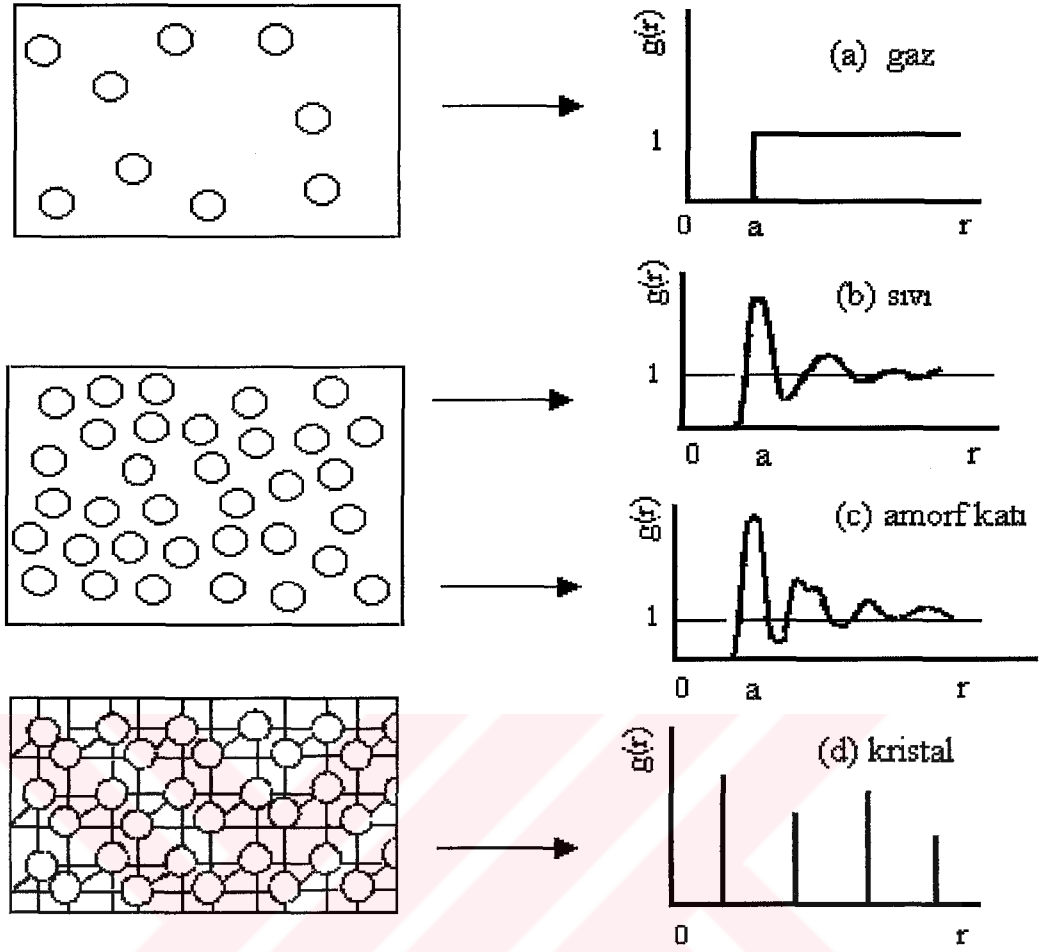
Bir elektronun ya da bir dalganın çok parçacık ihtiva eden kuantumsal bir sistemle etkileşmesi çok cisimli saçılma (many-body) problemi olarak ele alınabilir. Dalganın veya elektronun çoklu sistemle yaptığı saçılmanın süreci *çoklu saçılma* olarak tanımlanmaktadır. 1960'lardan başlayarak son 10-15 yıl öncesine kadar kullanılan ve bazı yaklaşımlara dayanan Çoklu Saçılma Teorisi (ÇST) gibi bazı yaklaşımlara dayanan teorik metotlar kullanılırken, son yıllarda bilgisayar teknolojisinin gelişmesi sonucu deneysel sonuçlara daha yakın değerler veren MDS'lerinin kullanılması büyük önem kazanmıştır.

2.1.3.2 Radyal Dağılım Fonksiyonu ile Sıvı Metallerin ve Amorf Alaşımların Atomik Yapısı Arasındaki İlişki

Bir kristal eritildiği zaman, periyodik örgü tamamen ortadan kalkar ve atomik dağılım gelişigüzel bir hal alır [15]. 1984'de Shecttman vd. $Al_{86}Mn_{14}$ alaşımını eritip soğuttuklarında, öteleme simetrisi ile birbirine uymayan iki, üç ve beş katlı simetri gösteren yapılar elde ettiler ve bu yapıların kristalden farklı yeni bir madde olduğunu gözlemlediler ve bu maddeleri kuasikristaller olarak tanımladılar [15]. Öteleme simetrisi ile birbirine uymayan beş-katlı simetriye sahip olmalarından dolayı, bu tür maddelerde Bloch teoreminin kullanımını geçersiz kılmıştır.

Bir kristalin atomik yapısını belirleyebilmek için, basit simetri özellikleri altında atomların küresel olarak biraraya gelmesiyle kristallerin oluştuğu kabul edilir. Fakat küresel atomlar tüm hacmi işgal etmezler (fcc ve hcp de bile). Kalan ara bölgeler de dikkate alınarak her atom için bir çokgen oluşturulur (Weigner-Seitz hücresi). Kristaller, bu hücrelerin tekrarlanarak oluşmasına karşın; amorf maddelerde ve sıvı metallerdeki düzensiz atom dağılımı aynı tanımını mümkün kılmaz. Ancak, benzer yaklaşım altında sıkı-paket oluşturulabilir. Bu çokgenlere Voronoi çokgenleri denir ve özdeş değildirler.

Maddelerin yapısal özelliklerinin belirlenmesi için kullanılan radyal dağılım fonksiyonunu, çoğu zaman maddenin üç halini mukayese etmek amacıyla aynı şekil üzerinde bir arada vermek daha uygundur. Örneğin, Şekil 2.5 de sıvı metallerin ve amorf katıların, kristal ve bir gazın atomik dağılım fonksiyonu verilmiştir. Burada, orijinde bulunan atomların herhangi biri seçilerek, orijinden $r+dr$ kadar uzaklıkta bulunan r yarıçaplı çember içinde kalan atomların sayısına bakılır. Bir gaz sisteminde bulunan atom sayısı çok az olduğundan bu atomların dağılımı r uzaklığından bağımsızdır, yani komşu atomlar geometrik olarak örtüşmezler. Bu durum sıvı metaller ve amorf katılar için geçerli değildir, çünkü yoğunluk yüksektir. Sıvı metallerin ve amorf alaşımların en yakın komşu uzaklığında bir pik mevcut olup bu pik bu uzaklıkta atomların bulunma olasılığının yüksek olduğunu gösterir. Daha sonraki piklerin, r uzaklığı arttıkça, ikinci, üçüncü, komşu uzaklıklara bağlı olarak şiddetlerinde azalma olur ve sonunda ortalama yoğunluk bir noktada sabitleşir.

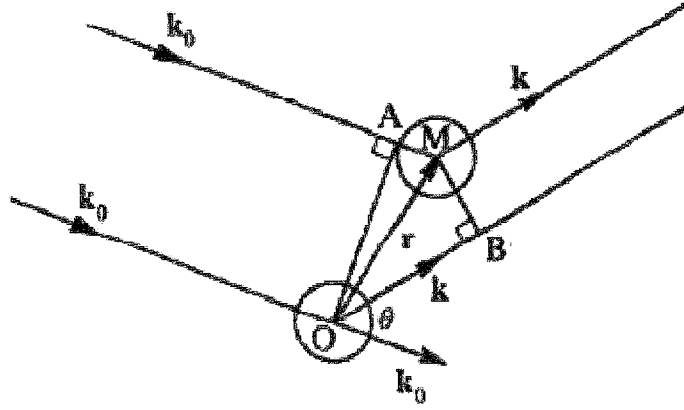


Şekil 2.5 Gaz, sıvı, amorf katı ve kristal için radyal dağılım fonksiyonları [15].

Radyal dağılım fonksiyonu, $g(r)$, x -ışınlarını kullanarak deneysel olarak elde edilebilir. Bir düzensiz sistemin yapısal analizi farklı deneysel metotlar ile yapılabilir. Örneğin, x -ışınlarının kullanılması durumunda Şekil 2.6 da görüldüğü gibi $\mathbf{k}_0$ dalga vektörüne sahip, gelen bir x -ışını O ve M konumlarında bulunan iki atom ile etkileşerek, bir θ açısıyla ve $\mathbf{k}$ dalga vektörlü bir dalga ile saçılacaktır. Basit bir geometrik düşünce ile, iki saçılma dalgasının yol farkı bulunabilir ve yapı faktörü kolayca hesaplanabilir.

$$OB - AM = r(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) \quad (2.1)$$

Burada, r iki atom arasındaki uzaklıktır. K saçılım vektörü $\mathbf{K} = \mathbf{k} - \mathbf{k}_0$ olarak tanımlanır. Bu saçılım vektörünün büyüklüğü $|\mathbf{K}| = (4\pi/\lambda)\sin(\theta/2)$ olup, λ gelen x -ışınının dalga boyudur.



Şekil 2.6. O ve M atomlarından saçılan x -ışını

M konumundaki bir atom ile etkileşen x -ışınının $A_M(\mathbf{K})$ genliği, O konumundaki atomlarla etkileşmesi ile oluşan $A_O(\mathbf{K})$ genliği ile orantılı olacaktır.

$$A_M(\mathbf{K}) = A_O(\mathbf{K}) \exp(-i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}) \quad (2.2)$$

N tane özdeş atomdan saçılan x -ışınının $I(\mathbf{K})$ şiddeti hesaplanırsa,

$$\begin{aligned} I(\mathbf{K}) &= |A(\mathbf{K})|^2 = |A_O(\mathbf{K})|^2 \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \exp(-i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}_i) \exp(i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}_j) \\ &= f^2 \left\{ N + \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \exp[-i\mathbf{K} \cdot (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)] \right\} \end{aligned} \quad (2.3)$$

olarak bulunur. Burada, $f = A_O(\mathbf{K})$ ifadesi saçılım genliği ya da atomik saçılma faktörü olarak tanımlanır ve $\mathbf{K}$ 'nın büyüklüğü ile saçılma açısına bağlıdır. Sıvı metal ve amorf metallerdeki atom dağılımı küresel simetri ya da izotropik olarak varsayılır. Bundan dolayı, hem $I(\mathbf{K})$ şiddeti ve hem de f atomik saçılma vektörü $\mathbf{K}$ saçılan dalga vektörünün büyüklüğüne bağlı olur. Bu durumda, bir önceki denklem,

$$S(\mathbf{K}) \equiv \frac{I(\mathbf{K})}{Nf^2} = 1 + \left(\frac{1}{N}\right) \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \exp[-i\mathbf{K} \cdot (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)] \quad (2.4)$$

şeklinde yeniden yazılabilir. Burada, $S(\mathbf{K})$ yapı faktörüdür ve N tane atomdan dolayı, koherent saçılma şiddeti $I(\mathbf{K})$ nın Nf^2 girişim yapmayan saçılım şiddetine oranı olarak tanımlanır. Bu durumda radyal dağılım fonksiyonu $g(\mathbf{r})$, aşağıdaki gibi,

$$\rho(\mathbf{r}) = \rho_0 g(\mathbf{r}) = \left(\frac{1}{N}\right) \left\langle \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \delta(\mathbf{r} - (\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i)) \right\rangle - \delta(\mathbf{r}) \quad (2.5)$$

ifade edilir. Burada, $\rho(\mathbf{r})$ toplam yoğunluk fonksiyonu, ρ_0 ortalama yoğunluk olarak tanımlanır. $\delta(\mathbf{r})$ ise delta fonksiyonudur. $\langle \dots \rangle$ parantezi, V hacmi içindeki birbirinden $\mathbf{r}$ uzaklığı ile ayrılmış i - j atom çiftleri üzerinden işlem alındığı anlamında kullanılmıştır. $\lim_{r \rightarrow \infty} (1/N) \left\langle \sum_{j=1}^N \sum_{i=1}^N \delta(\mathbf{r} - (\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i)) \right\rangle_V = \rho_0$. Denklem (2.5)'in her iki tarafı $\exp(-i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r})$ çarpılıp V hacmi üzerinden integral alınırsa,

$$\left(\frac{1}{N}\right) \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \exp[-i\mathbf{K} \cdot (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)] = 1 + \rho_0 \int g(\mathbf{r}) \exp(-i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad (2.6)$$

denklemini elde edilir. Denklemin sol tarafındaki kısım yapı faktörünü temsil eder. Böylece yapı faktörü radyal dağılım fonksiyonuna bağlı olarak yazılır,

$$S(\mathbf{K}) = 1 + \rho_0 \int g(\mathbf{r}) \exp(-i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad (2.7)$$

Amorf metaller ve sıvılar için izotropik atom dağılımından dolayı, $g(\mathbf{r}) = g(r)$ ifadesi kullanılabilir. Denklem (2.7)'deki hacim integrali polar koordinatları cinsinden

$$S(K) = 1 + 4\pi\rho_0 \int_0^\infty [g(r) - 1] r^2 \left(\frac{\sin Kr}{Kr} \right) dr \quad (2.8)$$

yeniden yazılır.

Böylece radyal dağılım fonksiyonu, $g(r)$, denklem (2.8)' den Fourier dönüşümü ile

$$g(r) = 1 + \left(\frac{1}{2\pi^2 \rho_0} \right) \int_0^\infty [S(K) - 1] K^2 \left(\frac{\sin Kr}{Kr} \right) dK \quad (2.9)$$

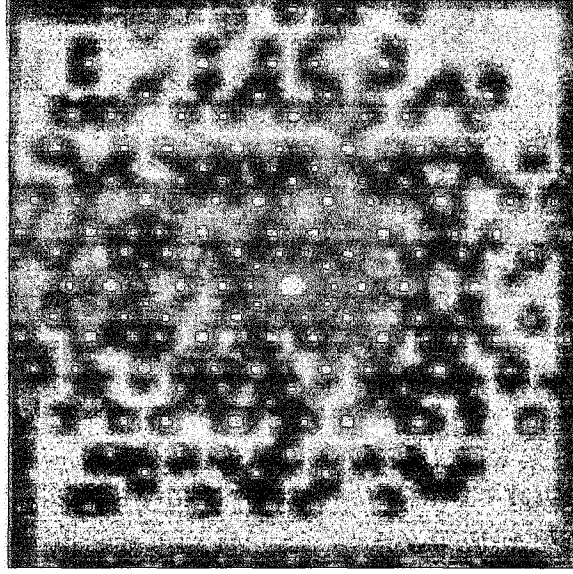
elde edilir.

Deneyssel olarak radyal dağılım fonksiyonu şöyle belirlenir: $I(K)$ koherent saçılma şiddeti ilk olarak difraksiyon spektrumundan inelastik saçılmada olduğu gibi koherent olmayan dağılımların çıkartılmasıyla elde edilir. N tane atomdan dolayı yapı faktörü $S(K)$, $I(K)$ şiddetinin Nf^2 girişim yapmayan saçılma fonksiyonuna oranı alınarak hesaplanır. Radyal dağılım fonksiyonu ise, denklem (2.9) da $S(K)$ 'nın yerine konulması ile elde edilir.

2.1.4 Kuasikristaller

Kuasikristaller uzun mesafe düzenine sahip, genellikle 5 katlı veya 10 katlı öteleme simetrisi gösteren, periyodik olmayan katılardır [16]. Diğer bir tanımla; kuasikristaller, bir yandan kendilerine has kristal yapıya benzer uzun mesafe düzeni gösterirken diğer yandan amorf yapıya benzer öteleme simetrisi göstermeyen yapılardır. Yapıdaki bu özellik de bilinen düzenli ve düzensiz maddelerden farklı yeni bir durumudur. Kuasikristaller periyodik olmadığından yönelimsel düzenlilik kristalografinin temel terimleri ile sınırlandırılması veya tanımlanması mümkün değildir [6]. Bu nedenle, uzun mesafe düzeni bu maddeleri amorf yapıdan, kuasiperiyodikliği ise kristalden ayırır. Kuasikristallerin periyodikliğinin olmamasından dolayı bunların öteleme simetrisi kristalografide alışagelinmiş teoremler ile sınırlandırılmaz.

Kuasikristaller, 1980'li yılların başında Al-Mn ve Fe-Cr gibi ikili alaşımların hızlı bir şekilde katılaştırılmasıyla keşfedildi [17]. Elde edilen bu yapının difraksiyon deseninin parlak noktalar göstermesi bir kristal özelliği göstermekte, ancak kristal yapılarıdaki bilinen 2, 3, 4 ve 6 katlı simetrilerin dışında 5 katlı ya da 10 katlı yasak simetri göstermektedir ve bu parlak noktaların pozisyonları da uzun-mesafe düzenliliğini göstermektedir (Şekil 2.7). Ancak, bu düzenlilik bir kristal düzenliliğinden farklı olmaktadır. Bu kristal olmayan alaşımların, yani; ikosahedral, yapıların keşfinden sonra, yoğun madde fiziğinde kuasiperiyodik düzenliliğin bir sistemin çeşitli özelliklerini ve o sisteme özgü elektronik yapıyı nasıl etkilediği problemi bilim adamları tarafından merak konusu olmuştur ve bundan dolayı teorik tekniklerin ve yeni yöntemlerin öncüsü olmuştur. En yaygın olarak bilinen kuasikristal türleri; tek boyutta Fibonacci zinciri, iki boyutta Pensore örgüsü ve üç boyutta ikosahedraldir [18].

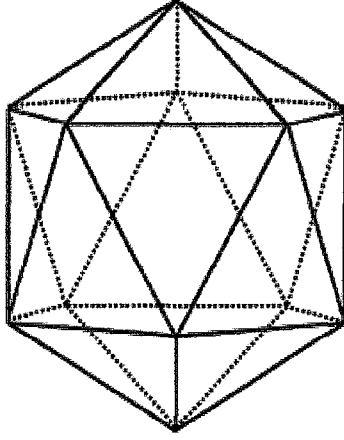


Şekil 2.7 Beş katlı ya da on katlı öteleme simetrisi gösteren bir kuasikristalin difraksiyon deseni [18].

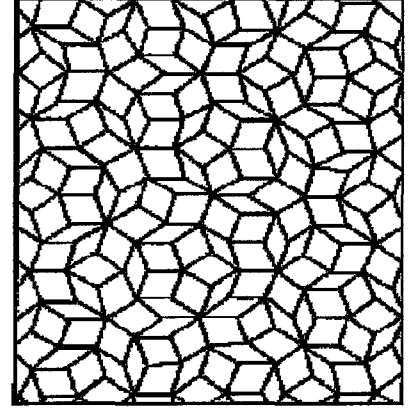
Kristalografinin tarihindeki çok önemli olaylardan biri beş katlı simetri gösteren metalik alaşımların bir başka ifadeyle ikosahedral simetrisinin keşfidir. İkosahedral simetri gösteren metalik alaşımlar, yani kuasikristal katılar yeni bir faz olarak nitelenirler. Sıvının hızlı bir şekilde katılaşma süreci ile hazırlanan ve bu nedenle kristal yapıda olmayan bu tür yapılar için yoğun madde fizikçileri kuasikristal ya da son zamanlarda ortaya atılmış bir kavram olan ‘ikosahedral cam’ kavramını kullanmayı tercih ederler. Düzenli ikosahedronun üçgen şeklinde 20 yüzü, 30 kenarı ve 12 köşesi bulunmaktadır. Yönelim düzeni çok iyi tanımlanmış, mükemmel bir uzun mesafe düzeni gösteren ve mükemmel periyodikliğe göre kuasiperiyodiklik gösteren böyle bir örgü iki-boyutta tanımlanan Pensore örgüsüdür. Şekil 2.8a da bir ikosahedral yapı, Şekil 2.8b de ise Penrose örgüsü verilmiştir.

Kuasiperiyodik yapıların bir boyuttaki örnekleri bu yapıların nokta grup simetrilerine bağlıdır. Bir kuasikristalin uygulanmasındaki temel nedenler aşağıdaki gibi özetlenebilir.

1. Kuasiperiyodik öteleme düzeni: Yoğunluk fonksiyonu kuasiperiyodiktir ve bu oransız periyotlar ile periyodik fonksiyonların bir işlemi gibi ifade edilebilir.
2. Atomlar arasındaki minimum uzaklık: Atomik konumların tek tek belirlenerek seçilen kuasikristal oranları bu oransız periyodlar ile iki periyodik örgünün üst üste koyulması ile elde edilir.
3. Yönelim düzeni: Kümelenmeler ya da en yakın komşular arasındaki bağ açıları uzun-mesafe düzenine sahiptir ve bunlar aynı zamanda yönelimlidirler.



(a)



(b)

Şekil 2.8 (a) İkosahedral, (b) Pensore örgüsü.

İkosahedral koordinasyon bir ikosahedronun bütün köşelerini işgal eden komşu atomlarla çevrenmesi sonucunda oluşur. Merkezindeki atomu çevreleyen komşu atomlar birbirleriyle kimyasal olarak etkileştiklerinden, ikosahedral gruplaşmalar atomik koordinasyonlarla ilişkili kimyasal kuvvetlerden kaynaklanır. Günümüzde dört tip kuasikristal daha keşfedildiği ifade edilmektedir. Bunlardan, on kenarlı (decagonal), oniki kenarlı (dodecagonal) ve sekiz kenarlı (octagonal) fazları sayabiliriz.

2.1.4.1 Kuasikristallerin Elektronik Yapıları

Birçok deneysel ve teorik çalışma kuasikristallerin akım taşıma özelliklerinin diğer metalik sistemlerden üç bakımdan farklı olduğunu göstermiştir. a) kuasikristaller normal olmayan bir biçimde yüksek dirence sahiptir. AlPdRe kararlı icosahedral fazın direnci 1 ohm.cm'ye ulaştığı tespit edilmiştir [18]. b) Bu sistemlerdeki elektriksel direnç Matthiessen Kuralının (kusurlar ve safsızlık arttıkça elektriksel direnç artar) tersine kuasiperiyodik yapısal düzenlilik (kusursuzluk) arttıkça artar. Bu özellik normal metallerin davranışına tamamen zıttır. Benzer bileşenli amorf metalik alaşımlar bile kuasikristal sistemlerden daha düşük direnç gösterirler. c) İletkenliğin sıcaklığa bağlı olması; ki, sıcaklık arttıkça iletkenliğin artıyor olması, kuasikristalleri keskin difraksiyon piklerine rağmen kristallerden ayırmaktadır. Kuasikristaller kristallerle karşılaştırıldığında düşük sıcaklıklarda çok yüksek dirence sahip oldukları görülür.

Saf haldeyken çok iyi iletken olan elementlerin oluşturduğu bir kuasikristal yapının iletkenliđi oldukça zayıftır. Bu özelliklerin sebepleri tam olarak bilinmemekle beraber yüksek direncin birinci sebebinin Fermi enerjisinde *pseudogapların* varlığından kaynaklandığı teorik olarak gözlenmiştir [18]. Bir kuasikristalin yapısındaki uzun-mesafe yapısal uyum ve büyük birim hücreler, düşük ısı iletkenliđi için arzu edilen yapıdadır. Kuasikristaller düşük ısı iletkenliđine sahiptir.

Kuasikristaller aynı zamanda potansiyel olarak çok yararlı fiziksel özelliklere de sahiptir. Örnek olarak: Dayanıklılık, sağlamlık, düşük yapışkanlık gibi. Düşük sıcaklıkta çok kırılğan olmalarına rağmen yüksek sıcaklıkta çok kolay şekil alabilme özelliđine sahiptirler.



3. DÜZENSİZ SİSTEMLERİN ELEKTRONİK YAPISI VE TEORİK METOTLAR

3.1 Band Teorisi ve Elektronik Yapılar

Katıların elektronik yapıları, bu maddelerdeki atomlara bağlı elektronların davranışları ile belirlenir. Yoğunlaştırılmış madde teorisinin önemli amaçlarından birisi, katılardaki elektronik yapıları hesaplamaktır. Elektronik yapı teorisi yalnızca deneysel sonuçları anlamamıza yardımcı olmaz aynı zamanda madde bilimi hakkında fikirler yürütmemizi sağlar [19]. Teorik çalışmalarda maddelerin özelliklerini ve elektronik yapıları hakkında bazı temel özellikleri anlamak için serbest elektron yaklaşımı, tight-binding (sıkı-bağlanma) yaklaşımları gibi basit modeller kullanılmaktadır. Örneğin, serbest elektron yaklaşımı metallerin ısı ısıtması, termal iletkenlik, elektriksel iletkenlik, magnetik geçirgenlik ve elektrodinamiği hakkında iyi bilgiler verebilmektedir. Ancak bu model diğer bazı soruları yanıtsız bırakmaktadır. Metal, yarımetal, yarıiletken ve yalıtkanlar arasındaki farklar, Hall katsayısının pozitif değerler alabilmesi, serbest atomlardaki valans elektronlarıyla metaldeki iletkenlik elektronları arasındaki ilişki gibi pek çok konuları cevaplamakta yetersiz kalmaktadır.

Band teorisinin amacı, kristallerin band yapılarını hesaplamak için teoriler geliştirmektir. Bunun için de atomik enerjilerin (E) k dalga vektörüne göre değişimini araştırmak gerekir. Bununla birlikte, gerçek maddelerin band yapılarının hesaplanması oldukça zordur. Bu nedenle band yapısı hesaplamalarında bazı yaklaşımlara dayanan metotlar ve bir çok hesaplama teknikleri kullanılmıştır [20]. Örneğin; *serbest elektron yaklaşımında* elektronun içinde hareket ettiği ortamdaki kristal potansiyelinin etkisi sıfır kabul edilerek elektronun kristal örgüde serbest olarak hareket etmesi üzerine kurulmuştur. Elektronun alabileceği enerji değerleri sıfırdan sonsuza kadar dağılmıştır. Bloch tarafından öne sürülen *hemen hemen serbest elektron yaklaşımında*, her iletim elektronunun kristalin bütünü içerisinde hareket serbestliğine sahip olduğu kabul edilmektedir. Bu durumdaki elektron, atomik potansiyellerin ayrı ayrı etkilerinden ziyade, periyodik örgü potansiyeli ile diğer tüm elektronların ortalama potansiyellerin etkisinde bulunur. Elektronlar ile iyon potansiyelleri arasındaki zayıf bir etkileşme mevcuttur. Öte yandan, bir kristalin ya da molekülün dalga fonksiyonunu tek tek atomların dalga fonksiyonlarının toplamı olarak hesaplayan yaklaşım ise *sıkı-bağ* yaklaşımıdır. Bu yaklaşıma göre, her elektron atoma sıkı şekilde bağlıdır ve diğer atomlardaki elektronlarla etkileşmeleri ihmal edilmektedir. Bu durumda elektronların kendi atomlarındaki yerlerini korumuş olurlar. Bir diğer yaklaşım olan *Pseudopotansiyel* yaklaşımında; valans ve iletim elektronlarının durumları iç bölgedeki elektronların (kor elektronları) durumlarına göre almaktadır.

Enerji bantlarının oluşumu ise basitçe şu şekilde açıklanabilir: Bir katıyı oluşturmak için yalıtılmış atomlar birleştikleri zaman, bir atomun belirli enerji durumlarındaki elektronlar özellikle de çekirdekten en uzakta olan hareketli elektronlar (valans elektronları) diğer atomlardaki elektronlarla etkileşirler. Bu etkileşme atomik durumların genişlemesine ve enerji bandları olarak tanımlanan birbirlerine yakın enerji seviyelerinin oluşmasına neden olur. Birbirleriyle etkileşecek şekilde, N tane atom birbirine yaklaştırılırsa, atomik enerji seviyelerinin her biri birbirine yakın N alt seviyeye ayrılır. N çok büyük bir sayı olduğundan alt seviyeler birbirine o kadar yakındır ki artık kesikli enerji seviyelerinin yerine sürekli bir enerji bandı meydana gelir. Bazen bir bandın üst kenarı bir sonraki bandın alt kenarından daha yukarıda olabilir. Bu durumda iki bandın örtüştüğü söylenir. Fakat genellikle iki komşu band örtüşmez ve bandlar arasında band aralığı denilen yasak enerjili bölgeler oluşur. Bu band aralıklarının genişliği katıların iletkenlik özelliklerini belirleyici faktörlerden birisidir.

Band teorisinde önemli bir anlamı ve yeri olan temel fiziksel kavramlardan biri, belli bir enerji aralığındaki elektronik durumlarının sayısının bilinmesidir. Belli bir enerji aralığındaki elektronik durumların sayısı, durum yoğunluğu fonksiyonu olarak tanımlanan $N(E)$ in hesaplanması ile belirlenir. Hem kristallerde hem de düzensiz sistemlerde geçerliliğini koruyan fiziksel bir kavram olduğu için maddelerin bir çok elektronik özelliklerinin bilinmesinde önemli bir yeri vardır [21].

Elektronik Durum Yoğunluğu, (DOS), $N(E)d(E)$ şeklinde verilirse; bu gösterim birim hacim başına E ve E+dE aralığında bulunabilecek enerji seviyelerin sayısı olarak tanımlanır. Elektronik enerji seviyeleri, mükemmel kristallerde $E = E(k)$ şeklindeki dağıtkanlık bağıntısını veren enerjinin kuasi-momentumun bir fonksiyonu olarak tanımlanır. Bu ifadelerin kristaller için taşıdığı fiziksel anlam: Durum yoğunluğu sadece $E = E(k)$ fonksiyonunun ekseni boyunca sıfırdan farklıdır ve sadece Bloch dalga fonksiyonunun her değeri için değil sadece uygun bileşenlerini veren k değerleri bu fonksiyona katkı yapar [20]. $N(E)$ in dağıtkanlık bağıntısı cinsinden ifadesi matematiksel olarak

$$N(E) \equiv -\frac{1}{\pi} \text{Im Tr} [G^+(E)] = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \delta(E - E(\mathbf{k})) \quad (3.1)$$

verilir. Burada $G^+(E)$, $E + i0^+$ enerjisi için Hamiltonyenin Green fonksiyonudur.

Düzensiz sistemlerde kuasi-momentum ifadesi geçerliliğini kaybettiği için bu sistemlerde genellikle fiziksel kavram; spektral fonksiyon ($\rho(k,E)$) ya da lokal yoğunluk (yoğunluk fonksiyonu) fonksiyonu ($\rho(r,E)$) hesaplanır. *Spektral fonksiyon $\rho(k,E)$ 'un tanımı ise, bir elektronun sistem içinde gerçek k momentumu ve E enerjisinde bulunma olasılığı olarak*

tanımlanır. Düzensiz sistemlerde $\rho(\mathbf{k}, E)$, $\mathbf{k}$ ve E uzayının oluşturduğu bölgede gelişigüzel dağılmıştır. Herhangi bir E enerjisinde durum yoğunluğuna bütün momentlerden (veya $\mathbf{k}$ değerlerinden) katkı vardır. Durum yoğunluğunu veren $[n(E)]$ bağıntısı ise,

$$n(E) = \sum_{\mathbf{k}} \rho(\mathbf{k}, E) = \frac{1}{2\pi} \Omega_0 \int \rho(\mathbf{k}, E) d\mathbf{k} \quad (3.2)$$

ile verilir. Burada Ω_0 tüm sistemin hacmidir [6].

Elektronik durum yoğunluklarının bilinmesi fiziğin bir çok dalı için önemlidir. Örneğin, band kenarlarında durum yoğunluğunun şeklinin verdiği fiziksel anlamlar, iki ve üç boyutta elektron lokalizasyonun limit durumu, lokalizasyondan serbest duruma geçişin yapısı, saçılma genlikleri, uzun mesafe düzenliliğin olmadığı durumda band aralığının varlığı gibi olaylarda oldukça önemli rol oynar. Son yıllarda düzensiz sistemlerin elektrik ve termodinamik özellikleri (iletkenlik, mobility, v.s) üzerindeki çalışmalar daha yoğun olmasına rağmen; elektronik durum yoğunluğu üzerinde henüz bilinmeyen bir çok problem olduğu bilinmektedir.

3.2 En yaygın kullanılan Teorik Metotlar

Maddelerin elektronik yapılarını incelemek için bir çok metot geliştirilmiş olması, bu tür fiziksel özelliklerinin ne kadar önemli olduğunun bir kanıtıdır. En uygun kullanılan teorik metotlar aşağıdaki gibidir.

- 1) CPA (Koherent Potansiyel Yaklaşımı),
- 2) Recursion Metodu,
- 3) Simülasyon Metotları,
- 4) Beeby-Hayes Metodu.

3.2.1 Koherent Potansiyel Yaklaşımı

Özellikle teorik bir yaklaşım olan *Koherent Potansiyel Yaklaşımı* (CPA) ilk kez Soven tarafından düzensiz sistemlere ve çok çeşitli alaşımlara uygulandı [22]. CPA yaklaşımında atomlar arasındaki koordinasyon etkisi pek dikkate alınmaz ve mevkisel düzensiz alaşımlar için en güçlü tekniklerden biri olarak kabul edilir. Bir başka ifadeyle, CPA metotları en yakın komşulukların dışında yerel yapısal bağıntıların tüm yayılım hesaplarını almadan çevre ile olan bağıntılarını kullanır. Bununla beraber, amorf maddelerde ve sıvılarda çevre atomlar ile olan

bağıntılar herhangi bir yerel atomik çevreden daha az yapıya sahiptir. Bu nedenle CPA, lokal geometrik yapıya bağlı elektronik yapıların özelliklerini belirlemede yetersiz kalır.

3.2.2 Moleküler Dinamik (MD) Yöntemi

İzotropik olmayan sistemlere uygulanabilecek şekilde MD hücresinin şekil ve hacimce değişimine izin veren bir MD yöntemi, 1980 yılında Parinello ve Rahman (PR) [23] tarafından geliştirilmiştir. Basıncın sabit tutulduğu bu yöntemde, yalıtılmış N parçacıklı sistem için toplam iç enerji ve MD hücre hacmi bağımsız değişkenler olarak alınır. Burada korunumlu olan nicelik $H = E + P_{dış} V$ şeklinde tanımlanan entalpidir. Anizotropik (NPH) topluluğu için bu yöntemde, MD hücre (MDH) kenarları birbirinden lineer bağımsızdır ve zamanın fonksiyonu olarak değişmektedir. Andersen, hacim değişiminin parçacık konumları üzerindeki etkisini dikkate alarak, kübik MDH içindeki bir i parçacığının konumunu hücre kenarlarına lineer bağımlı olarak

$$\mathbf{r}_i = L \mathbf{s}_i = V^{1/3} \mathbf{s}_i \quad (3.3)$$

şeklinde tanımlamıştır. Burada L , MDH kenar uzunluğudur ve $\mathbf{s}_i$, elemanları 0 ile 1 aralığında ($0 \leq \xi_i, \eta_i, \zeta_i \leq 1$) birimsiz sayılardan meydana gelen bir skala vektördür. Böylece PR MD yönteminde parçacık konumları

$$\mathbf{r}_i = \mathbf{A}(t)\xi_i + \mathbf{B}(t)\eta_i + \mathbf{C}(t)\zeta_i \quad (3.4)$$

olarak tanımlanır. Burada $\mathbf{A}(t)$, $\mathbf{B}(t)$ ve $\mathbf{C}(t)$ vektörlerinin kartezyen koordinat sistemindeki bileşenlerinin tanımladığı $\mathbf{h} = (\mathbf{A}, \mathbf{B}, \mathbf{C})$ şeklindeki matris ve T transpoz olmak üzere $\mathbf{s}_i = (\xi_i, \eta_i, \zeta_i)^T$ sütun vektörü dikkate alınarak parçacık konumları

$$\mathbf{r}_i = \mathbf{h} \mathbf{s}_i \quad (3.5)$$

şeklinde yazılır. Böylece $\mathbf{r}_i = \mathbf{h} \mathbf{s}_i$ ve $\mathbf{r}_j = \mathbf{h} \mathbf{s}_j$ konumlarında bulunan iki parçacık arasındaki uzaklık

$$(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)^2 = (\mathbf{s}_i - \mathbf{s}_j)^T \mathbf{h}^T \mathbf{h} (\mathbf{s}_i - \mathbf{s}_j)^T \mathbf{G} (\mathbf{s}_i - \mathbf{s}_j) \quad (3.6)$$

ifadesinden hesaplanır. Burada $\mathbf{G} = \mathbf{h}^T \mathbf{h}$ şeklinde bir hesaplanan metrik bir tensör olarak kullanılır. Böylece, MDH hacmi $V = A(\mathbf{B} \otimes \mathbf{C}) = \det(\mathbf{h})$ ve ters örgü uzayındaki eksenleri

$$\mathbf{A}^* = \frac{2\pi}{V}(\mathbf{B} \otimes \mathbf{C}), \quad \mathbf{B}^* = \frac{2\pi}{V}(\mathbf{C} \otimes \mathbf{A}), \quad \mathbf{C}^* = \frac{2\pi}{V}(\mathbf{A} \otimes \mathbf{B}) \quad (3.7)$$

ile verilir. Bu bağıntıdan MD hücresinin yüzey büyüklükleri ve yönelimleri $\sigma = (\mathbf{B} \otimes \mathbf{C}, \mathbf{C} \otimes \mathbf{A}, \mathbf{A} \otimes \mathbf{B})$ şeklinde bir matris tanımlar. PR MD yönteminde şekil ve hacimce değişebilen (NPH) topluluğunun Lagrange fonksiyonu,

$$L_{PR}(\mathbf{r}^N, \dot{\mathbf{r}}^N, \mathbf{h}, \dot{\mathbf{h}}) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N m_i (\dot{\mathbf{s}}_i^T \mathbf{G} \dot{\mathbf{s}}_i) - \sum_{i=1}^N \sum_{j>i}^N \phi(|\mathbf{h} \mathbf{s}_{ij}|) + \frac{1}{2} M \text{Tr}(\dot{\mathbf{h}}^T \dot{\mathbf{h}}) - P_{dış} V \quad (3.8)$$

ile verilir. Burada, m_i i atomunun kütlesidir. $\text{Tr}(\dots)$ tensör izi (trace) anlamında kullanılmıştır. $|\mathbf{h} \mathbf{s}_{ij}|$, i ve j atomları arasındaki uzaklıktır. M kütle boyutunda keyfi bir sabit, $P_{dış}$ sisteme uygulanan dış basıncıdır. Böyle bir sistem için hareket denklemleri,

$$\ddot{\mathbf{s}}_i = -\frac{1}{m_i} \mathbf{F}_i - \mathbf{G}^{-1} \dot{\mathbf{G}} \dot{\mathbf{s}}_i \quad (3.9)$$

$$\ddot{\mathbf{h}} = M^{-1}(\Pi - I P_{dış}) \sigma \quad (3.10)$$

ile tanımlanır [23]. Burada $\mathbf{F}_i$, i parçacığı üzerine etkiyen kuvvettir, I ise birim matristir. $\ddot{\mathbf{s}}$ zamana göre iki defa türev almayı ifade eder. Π mikroskobik zor tensörü olarak adlandırılır ve diyardik formda

$$\Pi = V^{-1} \left[\sum_{i=1}^N m_i \mathbf{v}_i \cdot \mathbf{v}_i - \sum_{i=1}^N \sum_{j>i}^N \frac{d\phi(r_{ij})}{dr_{ij}} \mathbf{r}_i \cdot \mathbf{r}_i \right] \quad (3.11)$$

şeklinde verilir.

3.3 Beeby-Hayes (BH) Metodu

Düzensiz sistemlerin teorik incelenmesi düzenli sistemlerin aksine matematiksel zorluklar gösterdiğinden tanımlanması kolay değildir. Örneğin, Bloch teoremi kristal özelliği gösteren maddelerin band teorilerini açıklamada güçlü bir yöntem iken, düzensiz maddelerin band yapılarını hesaplamada yetersiz kalır. Buna rağmen, bu düzensiz sistemlerde kullanılan matematiksel yaklaşımların tamamen yok sayılacağı anlamına gelmemelidir.

Düzensiz sistemlerin elektronik yapılarını hesaplamak için geliştirilen metot veya yaklaşımlardan birisi de Beeby ve Hayes tarafından geliştirilen *Beeby-Hayes* [24] metodu olup, yapısal düzensiz sistemlerin elektronik yapılarını hesaplamak için sıkı bağ elektron yaklaşımını kullanarak makul sonuçlar veren bir metottur ve kullandığı model potansiyel *muffin-tin* potansiyelidir. Kuantumsal bir parçacığın elektronik yapılarını incelemek amacıyla başvuru alan temel denklem olan Schrödinger dalga denkleminin doğrudan çözümü yerine aynı sınır şartlarını sağlayan *Green* fonksiyonu yaklaşımı, toplam saçılma fonksiyonuna bağlı olarak çözüm arayan bir yaklaşımdır.

Aslında, düzensiz sistemlerin elektronik özelliklerini hesaplayan uygun bir teori kuşkusuz oldukça karmaşıktır. Çünkü doğal olarak gerçek potansiyellerin kullanılması yanında çok değişkenli karmaşık bir problemi çözme esasına dayanır. Örneğin, yapısal düzensiz sistemlerdeki hesaplamalarda farklı sayıda ve çeşitte komşu atomlar, bunlar arasındaki uzaklık değişimleri, açısız dağılımlar v.s gibi parametrelerin hesaba katılması gerekir. Bu sistemlere uygulama amacına yönelik olarak geliştirilen Beeby-Hayes (BH) metodu, bazı yönleriyle esnek ve güçlü olmasına rağmen aslında cebirsel olarak da oldukça karmaşıktır. Ancak, bu karmaşık bağıntılar bazı makul yaklaşımlar altında çözülebilir bağıntılar şekline indirgenebilme özelliğine sahiptirler. Bu özelliğin en büyük avantajı, metodun bir sistemin elektronik yapısı hakkında yaklaşık çözüm getirmesi bakımından sistemlere uygulanabilir olmasıdır.

Bu çalışmada kullanılan BH metoduna göre, elektronik durumların hesaplanmasında durum yoğunluğuna her atomdan bir elektronun katkı yapması şeklinde öngörüler olmakla beraber aynı zamanda bu katkı komşu atomların konumlarına bağlı olarak değişir. Ayrıca, bu katkıya uzak atomlardan daha çok yakın komşu atomların konumları daha etkilidir. Bu nedenle, kısa mesafe düzenlilik (short-range order) gösteren sistemlere uygulanması daha uygun olan bir metottur. Örneğin, başlangıç atom olarak seçilen herhangi bir atomun durum yoğunluğunu hesaplarken, merkezi atoma yakın komşularının bütün özelliklerinin hesaplamalarda değerlendirilmesi gerekmektedir. Bu özellikler, seçilen referans koordinat sistemine göre komşu atomların sayısı, tipi, bağ uzunlukları, konumları, v.s gibi değişkenleri ihtiva eder. Her atom için bu özellikler biliniyorsa sistemdeki her atom kendi komşu atomları cinsinden bunları yansıtacak

şekilde tanımlanır ve toplam t- matris fonksiyonları elde edilir. Toplam saçılma ise bütün sistem üzerinde ortalama toplamı alınarak elde edilir. Ayrıca, yapısal özellikleri ihtiva eden bir olasılık dağılım fonksiyonu ile de atomların konumları belirlenir.

Yapısal özelliklerin durum yoğunluğu üzerine olan etkisi iki şekilde kendini gösterir. Birincisi, düzensiz sistemi tanımlamak için kullanılan tüm sistem üzerine seçilen parametrelere bağlı olasılık dağılım fonksiyonundan gelen etkidir. İkincisi, komşu atomlar ile alakalı parametre değerlerine bağlı olarak tanımlanan olasılık dağılımında gelen etkidir. Metodun, hesaplamada dikkate aldığı bir başka yaklaşım ise, sistem içindeki özdeş parametrelere sahip olan özdeş atomlar durum yoğunluğuna özdeş katkı yapması durumudur.

3.3.1 Çoklu Saçılma metodunun Temel Bağlılıkları

Bir elektronun ya da dalganın çok parçacık ihtiva eden kuantumsal bir sistemle etkileşmesi çok cisimli (many-body) saçılma problemi olarak ele alınır. Bu birbirini izleyen saçılma süreçleri çoklu saçılma olarak tanımlanır ve aynı zamanda kuantum fiziğinin uygulama alanına girer. Çoklu saçılma, saçılmanın özelliklerini belirleyen kompleks bir problemi ifade etmede bir çok avantaja sahiptir. Bu nedenle; elektronlar, nötronlar, ses ve x-ışını gibi kuantumsal nicelikleri içine alan değişik problemlere uygulanmaktadır. Özellikle *Çoklu Saçılma Teoremi* (ÇST) genel olarak amorf maddeler, sıvılar ve alaşımlar gibi düzensiz yapıların elektronik yapılarını incelemeye yaygın olarak kullanılan teorik bir yaklaşımdır [6]. ÇST’de kullanılan en yaygın iki operatörler sırasıyla Green fonksiyonunu ve toplam saçılma matris operatörüdür. Bu metot kapsamında $T(z)$, çok sayıda saçıcı merkezden oluşan bir sistem üzerine gelen belirli bir momentumu ve enerjisi olan elektronun saçılmasını tanımlar ve bu merkezler tarafından meydana gelen potansiyeller içinde hareket ederken bu potansiyellerin elektron üzerine olan etkilerini verir. $G(z)$ fonksiyonu ise, en genel anlamıyla sistem içerisinde yayılan elektronu ya da dalga fonksiyonunu temsil eder [6]. Örnek olarak, tek-parçacık Schrödinger dalga denkleminin Green fonksiyonu cinsinden çözümü sistemin durum yoğunluğu hakkında bilgiler verirken, iki-parçacık için elde edilen Green fonksiyonu geçiş (iletkenlik) özellikleri hakkında da bilgiler verir.

Çok sayıda saçıcı merkezlere sahip ortalama bir potansiyel ($V(r)$) etkisinde hareket eden bir parçacığın (elektron gibi) bu potansiyel ile etkileşme sonucu meydana gelen fiziksel olayların kuantum mekaniksel olarak matematiksel bağıntısı Green fonksiyonu cinsinden,

$$\left[E + \nabla^2 + i\varepsilon - V(r) \right] G(r, r') = -\delta(r - r') \quad (3.12)$$

olarak yazılır. $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$, $\mathbf{r}$ ve $\mathbf{r}'$ nün bir fonksiyonu olup saçılan parçacığın dalga fonksiyonu ile aynı sınır şartlarını taşımaktadır. Verilen sınır şartları içinde bu denklemin çözümü enerji özdeğerleri ve özfonksiyonları cinsinden bulunabilir. Ayrıca toplam saçılma, sistemi oluşturan saçıcı merkezlerin ayrı ayrı saçılma matrisleri cinsinden tanımlanabilir. N tane farklı saçıcı merkez için toplam saçılma fonksiyonu $T(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ olarak tanımlanırsa, bu fonksiyon tek saçıcı merkezin toplam saçılma matrisi ($t_i(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$) ve bu merkezler arasında saçılan parçacığın yayılımını temsil eden Green fonksiyonu G cinsinden

$$T = \sum_{\alpha} t_{\alpha} + \sum_{\alpha \neq \beta} t_{\alpha} G^{\alpha, \beta} t_{\beta} + \sum_{\alpha \neq \beta \neq \gamma} t_{\alpha} G^{\alpha, \beta} t_{\beta} G^{\beta, \gamma} t_{\gamma} + \dots \quad (3.13)$$

bağıntısı ile verilir. Görüldüğü gibi bu denklem fiziksel olarak ÇST ilgili saçılma sürecini göstermektedir ve denklemin sadeliği için fonksiyonlar kapalı şekilde verilmiştir. Burada, t_{α} bir α atomundan saçılan toplam saçılmayı temsil eder. G ise, serbest uzayda, düzensiz bir sistemdeki i atomundan j atomuna yayılan dalgayı temsil etmektedir. $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq \dots$ aynı potansiyeldeki saçılmanın dahil edilmediğini göstermektedir.

Elektronik durum yoğunluğu ile ilgili temel kavramlar daha önce tartışılmıştı. Düzensiz sistemler için toplam durum yoğunluğu $n(E)$ 'in spektral fonksiyon $\rho(k, E)$ 'ya bağlı bir fonksiyon olduğu denklem (3.2)'de gösterilmişti. BH metoduna göre spektral fonksiyon, denklem (3.13)'ün sanal kısmı cinsinden tanımlanır ve

$$\rho(\mathbf{k}, E) = -(\pi A_0)^{-1} (E - k^2)^{-2} \text{Im} \langle T(\mathbf{k}) \rangle \quad (3.14)$$

bağıntısı ile verilir [6]. $\langle \dots \rangle$ tüm sistemin toplam saçılma fonksiyonunun ortalamasını Im ise T 'nin sanal kısmını temsil eder.

Denklem (3.14)'de görüldüğü gibi spektral fonksiyonun momentuma bağlı olarak tanımlanan toplam saçılma fonksiyonu üzerinden hesaplanması gerekir. Bu nedenle, denklem (3.13)'ün momentum uzayına dönüştürülmesi gerekir. Bunu gerçekleştirmek için Fourier dönüşümü yapılırsa,

$$\begin{aligned}
T(\mathbf{k}) &= \int e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} T(\mathbf{r}, \mathbf{r}') d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \\
&= \int e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} \left\{ \sum_{\alpha} t_{\alpha}(\mathbf{r}-\mathbf{R}_{\alpha}, \mathbf{r}'-\mathbf{R}_{\alpha}) + \int \sum_{\alpha \neq j} t_i(\mathbf{r}-\mathbf{R}_{\alpha}, \mathbf{r}''-\mathbf{R}_{\alpha}) \right. \\
&\quad \left. G(\mathbf{r}''-\mathbf{r}''') t_{\beta}(\mathbf{r}''-\mathbf{R}_{\beta}, \mathbf{r}'-\mathbf{R}_{\beta}) d\mathbf{r}'' + \dots \right\} d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \quad (3.15)
\end{aligned}$$

eşitliği elde edilir. Burada α, β indisleri sırasıyla $\mathbf{R}_{\alpha}$ ve $\mathbf{R}_{\beta}$ konumlarındaki atomları göstermektedir. Tek atomdan toplam saçılma fonksiyonu olan t-matrisinin açıl momentum cinsinden açılımı ise

$$t(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{1}{2\pi} \sum_{m, m'} e^{im\theta_r} t_{mm'}(r, r') e^{-im'\theta_{r'}} \quad (3.16)$$

dir. Burada, m açıl momentum olup, $m = 0, \pm 1, \pm 2$, gibi tam sayı değerleri alır. denklem (3.15) 'in Fourier dönüşümü,

$$\begin{aligned}
T(\mathbf{k}) &= \frac{1}{2\pi} \sum_{m, m'} (-i)^{m-m'} \exp[i(m-m')\theta_k] \{ t(k, k) + \sum_{\beta(\neq \alpha)} t(k, \kappa) G^{\alpha\beta}(\kappa, k) t(\kappa, k) \\
&\quad + \sum_{\beta(\neq \alpha), \gamma(\neq \beta)} t(k, \kappa) G^{\alpha\beta}(\kappa, k) t(\kappa, \kappa) G^{\beta\gamma}(\kappa, \kappa) t(\kappa, k) + \dots \} \quad (3.17)
\end{aligned}$$

şeklinde elde edilir [6]. Burada $\mathbf{k}$ momentum ve $\kappa = (E)^{1/2}$ dir. t ve G matrislerin elemanları m ve m' indisleriyle belirlenir. Eğer enerji negatif alınırsa, bu son denklemde enerji ifadesini tek bir sembolle göstermek için $\kappa = i\mu$ olarak alınmıştır ($\mu=E$). Bu denklemin en önemli özelliği bir atomdan diğer atoma (α atomundan β atomuna) saçılmayı temsil eden $G^{\alpha\beta}$ matrisi atomik düzenleme ile ilgili tüm bilgileri ihtiva etmesidir. Tek tip potansiyel kullanılırsa tüm G ler birbirine eşit olur ve sonsuz seri ortak parantezle,

$$\begin{aligned}
T(k) &= \frac{1}{2\pi} N \sum (-i)^{(m-m')} e^{i(m-m')\theta_k} \{ t_{mm'}(k, k) \} \delta_{mm'} \\
&\quad + \left[t(k, \sqrt{E}) G \{ 1 - t(\sqrt{E}, \sqrt{E}) G \}^{-1} t(\sqrt{E}, k) \right]_{mm'} \quad (3.18)
\end{aligned}$$

ifade edilir. Burada seri içindeki $\{\dots\}^{-1}$ kısmı sonsuz seriyi sonlu yapan kısım olup sistemin tüm özelliklerini ihtiva eden band yapısı ile ilgili bilgileri verir. Denklem (3.18) deki G fonksiyonu ise,

$$G_{mm'}^{\alpha,\beta}(r, r') = 2\pi \sum_{\nu m''} (-i)^{\nu} J_{\nu}(kR) K_{m''}(\mu R) e^{i(m''-\nu)\theta_{\beta}} \delta(m'' + m - m') \quad (3.19)$$

olarak tanımlanmıştır [6]. Burada, R tüm bağlar için alınan ve merkez atomdan uzaklığını temsil eden $R_{\beta} - R_{\alpha}$ nın büyüklüğünü, ν bir tam sayıyı gösterir. J ise Bessel fonksiyonunu ifade eder.

Tüm sistem içinde toplam T-matrisini değerlendirmek yerine, her atom için yeni bir saçılma fonksiyonu tanımlanabilir. Bu düşünceyle, T saçılma fonksiyonunun kullanımından ziyade uygulanabilir yeni bir fonksiyon tanımlanabilir. Eğer orijin atomu olarak α atomu seçilirse, o zaman yeni fonksiyon F^i şeklinde yazılır ve her atomun $N(E)$ 'ye katkısı yalnızca atomların özelliklerine bağlı olmadığını, aynı zamanda en yakın komşu ve diğer atomların özelliklerine de bağlı olduğunu gösterir. Denklem (3.15)'in sistemlere uygulanabilir şekli,

$$F^{\alpha}(\kappa, k) = 1 + \sum_{\alpha \neq \beta} t(\kappa, \kappa) G^{\alpha\beta}(\kappa, k) F^{\beta}(\kappa, k). \quad (3.20)$$

Denklem (3.20), saçılmanın α atomundan başlayıp en yakın komşu olan β atomuna doğru ilerlediğini gösterir. $G^{\alpha\beta}$ ise bu saçılmayı sağlayan elektronun yayılmasını temsil eden Green fonksiyonudur.

Bu denklemleri tanımladıktan sonra, spektral fonksiyon T-fonksiyonun sanal kısmı ile alakalı olduğu için, sanal kısım aşağıdaki gibi yazılabilir,

$$\begin{aligned} Im < T(k) > &= 2\pi Im \sum (-i)^{m-m'} \exp[i(m-m')\theta_k] [t_m(k, \kappa) / t_m(\kappa, \kappa)] t_{m'}(\kappa, \kappa) \\ &< F^{\alpha}(k, \kappa) >_{mm'} [t_{m'}(\kappa, k) / t_{m'}(\kappa, \kappa)]. \end{aligned} \quad (3.21)$$

şeklinde verilir [6]. Burada potansiyel ile ilgili olan tek atom saçılma fonksiyonlarının belirlenmesi gerekir. Bunun için; t- fonksiyonları seçilen potansiyel cinsinden kolayca elde edilir.

$E > 0$ için; küresel simetrik potansiyel içinde,

$$t_m(r, r') = v(r) \delta(r - r') / r + \int v(r) J_m(kr) \left[E - k^2 + i\epsilon \right]^{-1} k dk \cdot t(r'', r') r'' dr'' \quad (3.22)$$

$E < 0$ için,

$$t_m(k, i\kappa) / t_m(i\kappa, i\kappa) = t_m(k) / t_m(i\kappa) = t_m(i\kappa, k) / t_m(i\kappa, i\kappa) \quad (3.23)$$

yazılır. Burada potansiyel ile ilgili olan tek atom saçılma fonksiyonlarının belirlenmesi gerekir. Bunun için; bir model potansiyel seçilir ve bu potansiyel üzerine gelen serbest parçacığa tekabül eden Schrödinger dalga denkleminin radyal kısmı çözülerek bu terimler belirlenir. Hesaplamalarda sadece s-dalga saçılması dikkate alınacağından bu t matrisi tek bir indise bağlı bir fonksiyon olur.

Sonuç olarak durum yoğunluğunu bulmak için, denklem (3.21)'i denklem (3.14)'de yazarsak spektral fonksiyon,

$$\rho(k, E) = - \left[E - k^2 \right]^{-2} \text{Im} \sum (-i)^{m-m'} \exp[i(m-m')\theta_k] \cdot [t_m(k, \kappa) / t_m(\kappa, \kappa)] t_{m'}(\kappa, \kappa) \cdot \langle F^a(k, \kappa) \rangle_{mm'} [t_{m'}(\kappa, k) / t_{m'}(\kappa, \kappa)] \quad (3.24)$$

olarak bulunur. Burada, önemli olan enerji ve momentuma bağlı olan t-saçılma fonksiyonlarının bilinmesidir. Denklem (3.22)'deki t-saçılma fonksiyonu r ve r' ye bağlı olduğundan bunun sanal kısmı aşağıdaki formda

$$\text{Im } t(r, r') = s(r) b(r') \quad (3.25)$$

yeniden yazılabilir [6]. Burada, denklem (3.23)'teki t-fonksiyonları yerine s-fonksiyonları kullanılmıştır. Fiziksel anlam olarak aynı olup sadece notasyon değişikliği yapılmıştır [6].

Bu durumda, momentum ve enerji cinsinden s-fonksiyonlarını aşağıdaki şekilde

$$s(k) = -\frac{(\pi/2)Rt(\mathbf{k}, i\mu)}{[1 + (\pi/2)lm t(i\mu, i\mu)]}$$

$$s(E) = -\frac{(\pi/2)Rt(i\mu, i\mu)}{[1 + (\pi/2)lm t(i\mu, i\mu)]} \quad (3.26)$$

şeklinde yazılır [6]. Bu durumda, t -fonksiyonlarının sanal kısmının reel kısmına bağlı gösterimi aşağıdaki şekilde yazılabilir,

$$lm t(\mathbf{k}, \mathbf{k}) = s(\mathbf{k})Rt(i\mu, \mathbf{k})$$

$$lm t(\mathbf{k}, i\mu) = s(\mathbf{k})Rt(i\mu, i\mu)$$

$$lm t(i\mu, \mathbf{k}) = s(i\mu)Rt(i\mu, \mathbf{k})$$

$$lm t(i\mu, i\mu) = s(i\mu)Rt(i\mu, i\mu) \quad (3.27)$$

olarak yazılır [6].

Denklem (3.27)'deki ifadeleri denklem (3.24)'de kullanılırsa sonuç olarak spektral fonksiyon aşağıdaki şekilde yazılabilir,

$$\rho(\mathbf{k}, E) = \frac{1}{\pi} [E - k^2]^{-2} \sum \left[\frac{s_m(\mathbf{k})}{s(i\mu)} \right] \left[\frac{s_{m'}(k)}{s_{m'}(i\mu)} \right] \left[\frac{s_m}{\pi/2} \right] \exp[i(m - m')\theta_k]$$

$$Im \left\{ \left\langle \sum_a F^a(i\mu, \mathbf{k}) \right\rangle_{m m'} \right\} \quad (3.28)$$

olur. Buradan da durum yoğunluğu $n(E)$ ise,

$$n(E) = \frac{A_0}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^0 \rho(\mathbf{k}, E) d\mathbf{k} \quad (3.29)$$

bağıntısından hesaplanabilir.

3.4 Dirac-Delta Potansiyeli ve $s_0(i\mu)$ ve $s_0(k)$ 'ın Belirlenmesi

Denklem (3.28)'deki $s_0(k)$ ve $s_0(i\mu)$ fonksiyonların saçıcı potansiyelin fonksiyonlarından belirlenmesi gerekir. Bunun için model potansiyel olarak $V(\rho) = \lambda\delta(\rho - a)$ şeklinde Dirac-Delta potansiyel fonksiyonu kullanılacaktır. Burada, s-dalga saçılması için hesaplama yapılacağından potansiyel tabiatıyla dairesel simetriktir. Böyle bir potansiyel etkisinde hareket eden bir elektron için radyal dalga denklem,

$$\left[-\frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} + \lambda\delta(\rho - a) \right] R(\rho) = k^2 R(\rho), \quad \lambda < 0 \quad (3.30)$$

ile verilir. Burada $k = \sqrt{-(E + V(\rho))}$ ve λ bir sabittir. Enerji aralığı ise $V(\rho) < E < 0$ dir. Denklem (3.30)'un çözümü için $\rho < a$ ve $\rho > a$ bölgelerinde denklemin çözüm değerleri sırasıyla,

$$\begin{aligned} R(\rho) &= AJ_0(i\mu\rho); & \rho < a \\ R(\rho) &= BJ_0(i\mu\rho) + CN_0(i\mu\rho); & \rho > a \end{aligned} \quad (3.31)$$

olur. Burada J_0 ve N_0 Bessel fonksiyonlarıdır. Bu denklemlerde A, B ve C katsayılarının belirlenmesi için $a-\epsilon$ dan $a+\epsilon$ na sınır değerlerinde bu denklemin kendisi ve türevinin sıfır olması gerekir. Yani,

$$\left. \frac{dR}{d\rho} \right|_{a-\epsilon} - \left. \frac{dR}{d\rho} \right|_{a+\epsilon} + \lambda R(a) = 0 \quad (3.32)$$

Bu durumda sınır şartlarından dolayı aşağıdaki eşitlikler yazılabilir,

$$\begin{aligned} AJ_0(i\mu a) &= BJ_0(i\mu a) + CN_0(i\mu a) \\ Ai\mu J'_0(i\mu a) - [Bi\mu J'_0(i\mu a) + Ci\mu N'_0(i\mu a)] &= -\lambda AJ_0(i\mu a) \end{aligned} \quad (3.33)$$

Ayrıca $s(\rho)/V(\rho)$ radyal dalga fonksiyonu ile orantılı olduğundan,

$$\frac{s(\rho)}{V(\rho)} \propto R(\rho) \quad (3.34)$$

bağıntısı yazılabilir. Bu durumda,

$$\begin{aligned} \frac{s(\rho)}{V(\rho)} &= -\frac{\pi}{2} J_0(i\mu a) - \frac{i\pi}{2} [J_0(i\mu a) + iN_0(i\mu a)] s_0(i\mu) \\ &= \left[-\frac{\pi}{2} - \frac{i\pi}{2} s_0(i\mu) \right] J_0(i\mu a) + \frac{\pi}{2} s_0(i\mu) N_0(i\mu a) \end{aligned} \quad (3.35)$$

dir. Denklem (3.35) den A, B ve C katsayıları çözümleri,

$$B = -\frac{\pi}{2} [1 + i s_0(i\mu)], \quad A = -\frac{\pi}{2} (1 + i s_0(i\mu)) + \frac{\pi}{2} s_0(i\mu) \cdot \frac{N_0(i\mu a)}{J_0(i\mu a)}, \quad C = \frac{\pi}{2} s_0(i\mu)$$

şeklinde hesaplanır. $s_0(i\mu)$ aşağıdaki gibi belirlenebilir,

$$A[i\mu J'_0(i\mu a) + \lambda J_0(i\mu a)] = B i\mu J'_0(i\mu a) + C i\mu N'_0(i\mu a) \quad (3.36)$$

A, B ve C katsayıları denklem (3.36)'da yerine yazılırsa,

$$\begin{aligned} &\left\{ -\frac{\pi}{2} (1 + i s_0(i\mu)) + \frac{\pi}{2} s_0(i\mu) \frac{N_0(i\mu a)}{J_0(i\mu a)} \right\} [i\mu J'_0(i\mu a) + \lambda J_0(i\mu a)] = \\ &-\frac{\pi}{2} (1 + i s_0(i\mu)) i\mu J'_0(i\mu a) + \frac{\pi}{2} s_0(i\mu) (i\mu) N'_0(i\mu a) \end{aligned} \quad (3.37)$$

$$\begin{aligned} &\frac{i\pi}{2} \mu \frac{N_0(i\mu a) s_0(i\mu a)}{J_0(i\mu a)} J'_0 - \frac{\pi}{2} \lambda J_0 (1 + i s_0(i\mu a)) + \frac{\pi}{2} \lambda N_0(i\mu a) s_0(i\mu) \\ &= \frac{\pi}{2} i\mu N'_0(i\mu a) s_0(i\mu) \end{aligned} \quad (3.38)$$

Ayrıca, Bessel fonksiyonlarının 1. tür Hankel fonksiyonlarına ve modifiye edilmiş (modified) Bessel fonksiyonlarına göre eşitlikleri bulunur ve kullanılırsa,

$$\begin{aligned}
 J'_0(i\mu a) &= -iI_1(\mu a), \\
 N'_0(i\mu a) &= I_1(\mu a) = \frac{2i}{\pi} K_1(\mu a), \\
 J_0(i\mu a) &= I_0(\mu a), \\
 N_0(i\mu a) &= iI_0(\mu a) - \frac{2}{\pi} K_0(\mu a),
 \end{aligned} \tag{3.39}$$

denklemleri elde edilir. Denklik dönüşümleri kullanıldığında,

$$\begin{aligned}
 & -i^2 \frac{\pi}{2} \mu \left(iI_0(\mu a) - \frac{2K_0(\mu a)}{\pi} \right) \frac{I_1 s_0(i\mu)}{I_0} - \frac{\pi}{2} \lambda I_0 s_0(i\mu) + \frac{\pi}{2} \lambda \left(iI_0 - \frac{2}{\pi} K_0(\mu a) \right) s_0(i\mu) \\
 &= \frac{\pi}{2} i\mu \left[I_1 - \frac{2i}{\pi} K_1(\mu a) \right] s_0(i\mu)
 \end{aligned} \tag{3.40}$$

denklemleri elde edilir ve sonuçta s_0 fonksiyonu,

$$\begin{aligned}
 s_0(i\mu) &= \frac{-\lambda I_0^2(\mu a)}{\left\{ \frac{2}{\pi} \mu [K_0(\mu a)I_1(\mu a) + I_0(\mu a)K_1(\mu a)] + \frac{2}{\pi} \lambda K_0(\mu a)I_0(\mu a) \right\}} \\
 &= \frac{-\pi/2 I_0^2(\mu a)}{\mu [K_0(\mu a)I_1(\mu a) + I_0(\mu a)K_1(\mu a)] + \lambda K_0(\mu a)I_0(\mu a)}
 \end{aligned} \tag{3.41}$$

olarak hesaplanır.

$$K_0(\mu a)I_1(\mu a) + I_0(\mu a)K_1(\mu a) = \frac{1}{\mu a} \text{ olduğundan,}$$

$$s_0(i\mu) = \frac{-\frac{\pi}{2} I_0^2(\mu a)}{\frac{1}{a\lambda} + K_0(\mu a)I_0(\mu a)} \tag{3.42}$$

olarak bulunur, II. yol olarak, $s_0(i\mu)$ ve $s_0(k)$

$$\begin{aligned}
 s_0(i\mu) &= \int \rho J_0(i\mu) s_0(\rho) d\rho \\
 &= A \int_0^a \rho J_0(i\mu) \lambda \delta(\rho - a) J_0(i\mu) d\rho \\
 &= Aa J_0^2(i\mu) \lambda
 \end{aligned} \tag{3.43}$$

ve

$$\begin{aligned}
 s_0(k) &= \int \rho J_0(k\rho) S_0(\rho) d\rho \\
 &= A \int \rho J_0(k\rho) \lambda \delta(\rho - a) J_0(i\mu\rho) d\rho \\
 &= a J_0(k\rho) \lambda J_0(i\mu a) A = \frac{J_0(k\rho)}{J_0(i\mu a)} s(i\mu)
 \end{aligned} \tag{3.44}$$

olarak hesaplanır.

$$\frac{s_0(k)}{s_0(i\mu)} = \frac{J_0(k\rho)}{J_0(i\mu a)} \tag{3.45}$$

eşitliği elde edilir. Sonuç olarak, denklem (3.45), denklem (3.28)' de yerine yazılırsa spektral fonksiyon $\rho(\mathbf{k}, E)$ elde edilir. $S_0(i\mu)$ fonksiyonu her atomu temsil eden toplam saçılma fonksiyonu olduğu için potansiyelin bağlı durumunda bir tekillik değerine (singularity) sahiptir. Bağ genişliği W bu fonksiyonun E ye göre eğrisi çizilerek eğiminden bulunabilir. Ayrıca potansiyel zayıf ise W genişliği sıkı bağ yaklaşımında $t_0(i\mu, i\mu) \cong W/(E-E_0)$ olarak yazılabilir.

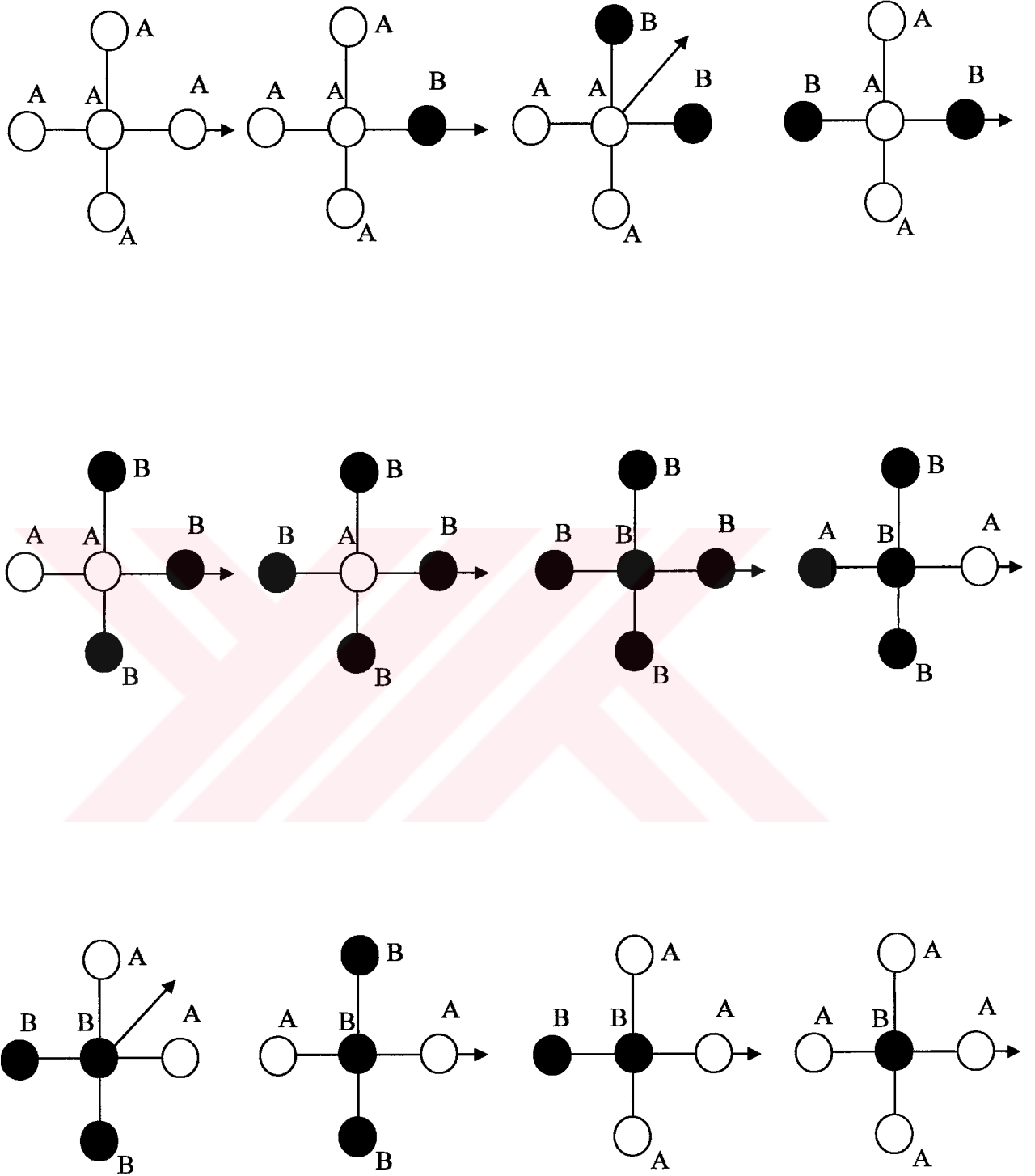
4. BİR MODEL ALAŞIMIN DURUM YOĞUNLUĞUNUN HESAPLANMASI

Bu bölümde, iki boyutta $A_x B_{1-x}$ yapısındaki bir alaşım modelinin kare örgü üzerinde olası dağılımları diyagramlarla izah edilerek bu olası yerleşmelerin yapısal özellikleri sayısal olarak hesaplanacak ve farklı bir hesaplama tekniği ile BH metodunun uygulaması bu sistemde gösterilecektir. Özellikle, farklı A ve B oranlarına ve birbirlerine göre bağ değişimlerine göre elektronik durum yoğunluğunun değişimi araştırılacaktır. Bu hesaplamada kullanılacak model potansiyel, bir önceki bölümde tanımlanan Dirac-delta potansiyeli olup sadece s-dalga saçılması için durum yoğunluğu hesaplanacaktır. Ayrıca, sistemin A ve B bağ uzunlukları, konsantrasyon oranları, her örnek dağılımın sistemdeki bulunma olasılıkları gibi yapısal özellikler de hesaplanacaktır. Bu çalışmada hesaplamalar sadece s- saçılması olduğu için, iki saçıcı arasındaki yayılım fonksiyonu $G_{ij}(R)$ iki boyuttaki bir sistem için,

$$G_{ij}(R) = -i\pi^2 H_0^{(1)}(i\mu R) e^{ikR_{ij}} = -2\pi K_0(\mu R) e^{iv(\theta_R - \theta_k)} \quad (4.1)$$

Şeklinde tanımlanır. Burada, $e^{ikR_{ij}} = \sum_v (i)^v J_v(kR) e^{iv(\theta_R - \theta_k)}$ açılımı kullanılabilir. T-fonksiyonun sanal kısmı için $\theta_k = 0$ seçilirse θ_i , k ekseninden ölçülen açı değeri olur. Yani, $\theta_{Rij} - \theta_k = \theta_{Rij} = \theta_i + \theta_{bağ}$ yazılırsa, $\theta_{bağ}$, i deki atomun seçilen eksenden olan dönmesidir. Benzer şekilde $\theta_{Rji} = \theta_{Rji} - \pi = \theta_j + \theta_{bağ}$ olur. Bu durumda T-fonksiyonundaki $G_{AB} T_B$ terimi $e^{iv(\theta_i + \theta_{bağ})} e^{iv(\theta_j + \theta_{bağ} - \theta_{bağ} - \pi)}$ şeklinde üstel bir katsayı verir.

Bir atomun komşu atomların yapısal özellikleri üzerinde toplamı komşu atomların bağ sayısına eşittir ve olası tüm dağılımların toplamı bire eşittir. Yani, $\sum_i C_A P_{AB} = \sum_i C_B P_{BA}$ eşitliği her zaman geçerlidir. Eğer $A_c B_{1-c}$ şeklinde iki alaşımlı sistemin eşit oranda verilmesi durumunda; bu alaşımın iki boyutta bir kare örgü üzerindeki dağılımı Şekil 4.1'deki gibi 12 tane farklı yapının dağılım olasılığı elde edilir. Bu dağılımda her şeklin bulunma olasılıkları hesaplanırsa; $P_1 = c^5$, $P_2 = 4c^4(1-c)$, $P_3 = 4c^3(1-c)^2$, $P_4 = 2c^3(1-c)^2$, $P_5 = 4c^2(1-c)^3$, $P_6 = c(1-c)^4$, $P_7 = (1-c)^5$, $P_8 = 4c(1-c)^4$, $P_9 = 4c^2(1-c)^3$, $P_{10} = 2c^2(1-c)^3$, $P_{11} = 4c^3(1-c)^2$ ve $P_{12} = c^4(1-c)$ şeklinde olacaktır. Bu dağılıma sahip bir sistem için A atomunun konsantrasyonunu c (veya x) ve B atomunun konsantrasyonunu da (1-c) (veya y) olarak alınmıştır.



Şekil 4.1 İki boyutta A_xB_{1-x} yapısındaki bir alaşım modelinin kare örgü üzerinde olası dağılımlarını gösteren diyagram.

Bu olasılıkların toplamı hesaplanırsa; $P_1 + P_2 + P_3 + P_4 + P_5 + P_6 + P_7 + P_8 + P_9 + P_{10} + P_{11} + P_{12} = 1$ olduğu görülebilir. Eğer merkezi atomdan komşu atomlara bağ cinsinden oranları hesaplanabilirse, diyagramdaki dağılımlardan bağ oranları da kolayca hesaplanabilir. A atomundan A atomuna bağların sayısı $N_{AA} = 4P_1 + 3P_2 + 2P_3 + 2P_4 + P_5 = 4c^2$, benzer olarak $N_{BB} = 4P_7 + 3P_8 + 2P_9 + 2P_{10} + P_{11} = 4(1-c)^2$ ve $N_{AB} = N_{BA} = 4c(1-c)$ olarak elde edilir. Burada, $c = 0.5$ değeri kullanılırsa, her biri bağ sayısının toplamı 1'e eşit olduğu açıkça görülür. Diyagramda ilk 1-6 şekillerinde merkezi saçılma atomu t_A iken, sonraki 7-12 deki merkezi atom t_B olduğu görülebilir. Kısaca, buradaki alaşım yapısının tipi, bilinen mevkisel düzensiz sistem olmayıp bir düzene göre oluşmuş yapısal bir model sistem olarak tanımlanmaktadır.

Yapısal özellikler belirlendikten sonra metodun uygulanması kolayca yapılabilir. Bunun için toplam t-matris fonksiyonun uygulanılabilir şekli olan denklem (3.20) deki F-fonksiyonu her şekil için sırasıyla yazılırsa,

$$F_{1A}(\theta_b) = 1 + t_0 [G(\theta_b)P_{AA}F_A(\theta_b) + G(\theta_b + \pi/2)P_{AA}F_A(\theta_b - \pi/2) + G(\theta_b - \pi)P_{AA}F_A(\theta_b - \pi) + G(\theta_b - 3\pi/2)P_{AA}F_A(\theta_b - 3\pi/2)] \quad (4.3a)$$

$$F_{2A}(\theta_b) = 1 + t_0 [G(\theta_b)P_{AB}F_B(\theta_b) + G(\theta_b + \pi/2)P_{AA}F_A(\theta_b - \pi/2) + G(\theta_b - \pi)P_{AA}F_A(\theta_b - \pi) + G(\theta_b - 3\pi/2)P_{AA}F_A(\theta_b - 3\pi/2)] \quad (4.3b)$$

$$F_{3A}(\theta_b) = 1 + t_0 [G(\theta_b + \pi/4)P_{AB}F_B(\theta_b + \pi/4) + G(\theta_b + 3\pi/4)P_{AA}F_A(\theta_b + 3\pi/4) + G(\theta_b - \pi/4)P_{AB}F_B(\theta_b - \pi/4) + G(\theta_b - 3\pi/4)P_{AA}F_A(\theta_b - 3\pi/4)] \quad (4.3c)$$

$$F_{4A}(\theta_b) = 1 + t_0 [G(\theta_b)P_{AB}F_B(\theta_b) + G(\theta_b + \pi/2)P_{AA}F_A(\theta_b + \pi/2) + G(\theta_b - \pi)P_{AA}F_A(\theta_b - \pi) + G(\theta_b - 3\pi/2)P_{AA}F_A(\theta_b - 3\pi/2)] \quad (4.3d)$$

$$F_{5A}(\theta_b) = 1 + t_0 [G(\theta_b)P_{AB}F_B(\theta_b) + G(\theta_b + \pi/2)P_{AA}F_A(\theta_b - \pi/2) + G(\theta_b - \pi)P_{AB}F_B(\theta_b - \pi) + G(\theta_b - 3\pi/2)P_{AA}F_A(\theta_b - 3\pi/2)] \quad (4.3e)$$

$$F_{6A}(\theta_b) = 1 + t_0 [G(\theta_b)P_{AB}F_B(\theta_b) + G(\theta_b + \pi/2)P_{AB}F_B(\theta_b - \pi/2) + G(\theta_b - \pi)P_{AB}F_B(\theta_b - \pi) + G(\theta_b - 3\pi/2)P_{AB}F_B(\theta_b - 3\pi/2)] \quad (4.3f)$$

$$F_{1B}(\theta_b) = 1 + t_0 [G(\theta_b)P_{BB}F_B(\theta_b) + G(\theta_b + \pi/2)P_{AB}F_B(\theta_b - \pi/2) + G(\theta_b - \pi)P_{AB}F_B(\theta_b - \pi) + G(\theta_b - 3\pi/2)P_{AB}F_B(\theta_b - 3\pi/2)] \quad (4.3g)$$

$$F_{2B}(\theta_b) = 1 + t_0 [G(\theta_b)P_{BA}F_A(\theta_b) + G(\theta_b + \pi/2)P_{BB}F_B(\theta_b - \pi/2) + G(\theta_b - \pi)P_{BB}F_B(\theta_b - \pi) + G(\theta_b - 3\pi/2)P_{BB}F_B(\theta_b - 3\pi/2)] \quad (4.3h)$$

$$F_{3B}(\theta_b) = 1 + t_0 [G(\theta_b + \pi/4)P_{BA}F_A(\theta_b + \pi/4) + G(\theta_b + 3\pi/4)P_{BB}F_B(\theta_b + 3\pi/4) + G(\theta_b - \pi/4)P_{BA}F_A(\theta_b - \pi/4) + G(\theta_b - 3\pi/4)P_{BB}F_B(\theta_b - 3\pi/4)] \quad (4.3i)$$

$$F_{4B}(\theta_b) = 1 + t_0 [G(\theta_b)P_{BA}F_A(\theta_b) + G(\theta_b + \pi/2)P_{BB}F_B(\theta_b - \pi/2) + G(\theta_b - \pi)P_{BA}F_A(\theta_b - \pi) + G(\theta_b - 3\pi/2)P_{BB}F_B(\theta_b - 3\pi/2)] \quad (4.3j)$$

$$F_{5B}(\theta_b) = 1 + t_0 [G(\theta_b)P_{BA}F_A(\theta_b) + G(\theta_b + \pi/2)P_{BA}F_A(\theta_b - \pi/2) + G(\theta_b - \pi)P_{BB}F_B(\theta_b - \pi) + G(\theta_b - 3\pi/2)P_{BA}F_A(\theta_b - 3\pi/2)] \quad (4.3k)$$

$$F_{6B}(\theta_b) = 1 + t_0 [G(\theta_b)P_{BA}F_A(\theta_b) + G(\theta_b + \pi/2)P_{BA}F_A(\theta_b - \pi/2) + G(\theta_b - \pi)P_{BA}F_A(\theta_b - \pi) + G(\theta_b - 3\pi/2)P_{BA}F_A(\theta_b - 3\pi/2)] \quad (4.3l)$$

olarak yazılabilir. Yukarıdaki denklemlerin daha genel bir gösterimi,

$$F_m^a(\theta) = 1 + \sum_{komş.} P_{a,komş.} \cdot t \sum_{komş.} G^{\alpha,\beta} F_{m'}^{\beta}(\theta) \quad (4.4)$$

şeklinde olup, polar açı üzerinde Fourier transformu kolayca alınabilir. Burada, α ve β atom cinslerini gösterirler. Bu denklemlerin Fourier transformasyonları kutupsal açılar üzerinde,

$$\begin{aligned} \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} F_m^a(\theta) e^{im\theta} d\theta &= \delta_{m,0} + \sum_{komş.} P_{a,komş.} \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\theta \sum e^{im\theta} t_0 G_v(R) e^{i\theta(\pm n)} F_{m'}^b(\theta \pm n) \end{aligned} \quad (4.5)$$

bağıntısıyla kısaca gösterilebilir. Böylece, (4.3) denklemlerinin Fourier dönüşümü alındıktan sonra,

$$F_{1A,m} = 1\delta_{m,0} + t_0 \sum_{komş.} K_0(\mu R)(i)^v J_v(kR) \Gamma_A^A(m, \theta) \frac{P_1}{N_{AA}} F_{Am'} \delta_{m,m'+v} \quad (4.6a)$$

$$F_{2A,m} = 1\delta_{m,0} + t_0 K_0(\mu R)(i)^v J_v(kR) \left(\sum_{komş} \Gamma_A^A(m, \theta) \frac{P_2}{N_{AA}} F_{Am'} + \sum_{komş} \Gamma_A^B(m, \theta) \frac{P_2}{N_{AB}} F_{Bm'} \delta_{m,m'+v} \right) \quad (4.6b)$$

$$F_{3A,m} = 1\delta_{m,0} + t_0 K_0(\mu R)(i)^v J_v(kR) \left(\sum_{komş} \Gamma_A^A(m, \theta) \frac{P_3}{N_{AA}} F_{Am'} + \sum_{komş} \Gamma_A^B(m, \theta) \frac{P_3}{N_{AB}} F_{Bm'} \delta_{m,m'+v} \right) \quad (4.6c)$$

$$F_{4A,m} = 1\delta_{m,0} + t_0 K_0(\mu R)(i)^v J_v(kR) \left(\sum_{komş} \Gamma_A^A(m, \theta) \frac{P_4}{N_{AA}} F_{Am'} + \sum_{komş} \Gamma_A^B(m, \theta) \frac{P_4}{N_{AB}} F_{Bm'} \delta_{m,m'+v} \right) \quad (4.6d)$$

$$F_{5A,m} = 1\delta_{m,0} + t_0 K_0(\mu R)(i)^v J_v(kR) \left(\sum_{komş} \Gamma_A^A(m, \theta) \frac{P_5}{N_{AA}} F_{Am'} + \sum_{komş} \Gamma_A^B(m, \theta) \frac{P_5}{N_{AB}} F_{Bm'} \delta_{m,m'+v} \right) \quad (4.6e)$$

$$F_{6A,m} = 1\delta_{m,0} + t_0 \sum_{komş.} K_0(\mu R)(i)^v J_v(kR) \Gamma_A^B(m, \theta) \frac{P_6}{N_{AA}} F_{Bm'} \delta_{m,m'+v} \quad (4.6f)$$

$$F_{1B,m} = 1\delta_{m,0} + t_0 \sum_{komş.} K_0(\mu R)(i)^v J_v(kR) \Gamma_B^B(m, \theta) \frac{P_7}{N_{BB}} F_{Bm'} \delta_{m,m'+v} \quad (4.6g)$$

$$F_{2B,m} = 1\delta_{m,0} + t_0 K_0(\mu R)(i)^v J_v(kR) \left(\sum_{komş} \Gamma_B^B(m, \theta) \frac{P_8}{N_{AA}} F_{Bm'} + \sum_{komş} \Gamma_B^A(m, \theta) \frac{P_8}{N_{BA}} F_{Am'} \delta_{m,m'+v} \right) \quad (4.6h)$$

$$F_{3B,m} = 1\delta_{m,0} + t_0 K_0(\mu R)(i)^\nu J_\nu(kR) \left(\sum_{komş} \Gamma_B^B(m, \theta) \frac{P_9}{N_{AA}} F_{Bm'} + \sum_{komş} \Gamma_B^A(m, \theta) \frac{P_9}{N_{BA}} F_{Am'} \delta_{m,m'+\nu} \right) \quad (4.6i)$$

$$F_{4B,m} = 1\delta_{m,0} + t_0 K_0(\mu R)(i)^\nu J_\nu(kR) \left(\sum_{komş} \Gamma_B^B(m, \theta) \frac{P_{10}}{N_{AA}} F_{Bm'} + \sum_{komş} \Gamma_B^A(m, \theta) \frac{P_{10}}{N_{BA}} F_{Am'} \delta_{m,m'+\nu} \right) \quad (4.6j)$$

$$F_{5B,m} = 1\delta_{m,0} + t_0 K_0(\mu R)(i)^\nu J_\nu(kR) \left(\sum_{komş} \Gamma_B^B(m, \theta) \frac{P_{11}}{N_{AA}} F_{Bm'} + \sum_{komş} \Gamma_B^A(m, \theta) \frac{P_{11}}{N_{BA}} F_{Am'} \delta_{m,m'+\nu} \right) \quad (4.6k)$$

$$F_{6B,m} = 1\delta_{m,0} + t_0 \sum_{komş} K_0(\mu R)(i)^\nu J_\nu(kR) \Gamma_B^A(m, \theta) \frac{P_{12}}{N_{BA}} F_{Am'} \delta_{m,m'+\nu} \quad (4.6l)$$

ifadeleri elde edilir. Burada Γ_i^j fonksiyonları açık şekli sırasıyla;

$$\Gamma_A^A = (1 + e^{im\pi/2} + e^{im\pi} + e^{im3\pi/2}), \quad (4.7a)$$

$$\Gamma_A^A = (e^{im\pi/2} + e^{im\pi} + e^{im3\pi/2}), \Gamma_A^B = 1.0, \quad (4.7b)$$

$$\Gamma_A^A = e^{3im\pi/4} + e^{-3im\pi/4}, \Gamma_A^B = e^{im\pi/4} + e^{-im\pi/4}, \quad (4.7c)$$

$$\Gamma_A^A = e^{im\pi/2} + e^{-im\pi/2}, \Gamma_A^B = 1 + e^{im\pi}, \quad (4.7d)$$

$$\Gamma_A^A = e^{im\pi}, \Gamma_A^B = 1 + e^{im\pi/2} + e^{-im\pi/2} \quad (4.7e)$$

$$\Gamma_A^B = 1 + e^{im\pi/2} + e^{im\pi} + e^{im3\pi/2} \quad (4.7f)$$

$$\Gamma_B^B = 1 + e^{im\pi/2} + e^{im\pi} + e^{im3\pi/2} \quad (4.7g)$$

$$\Gamma_B^B = e^{im\pi/2} + e^{im\pi} + e^{im3\pi/2}, \Gamma_B^A = 1.0 \quad (4.7h)$$

$$\Gamma_B^B = e^{3im\pi/4} + e^{-3im\pi/4}, \Gamma_B^A = e^{im\pi/4} + e^{-im\pi/4} \quad (4.7i)$$

$$\Gamma_B^B = e^{im\pi/2} + e^{-im\pi/2}, \Gamma_B^A = 1 + e^{im\pi} \quad (4.7j)$$

$$\Gamma_B^B = e^{im\pi}, \Gamma_B^A = 1 + e^{im\pi/2} + e^{-im\pi/2} \quad (4.7k)$$

$$\Gamma_B^A = 1 + e^{im\pi/2} + e^{im\pi} + e^{im3\pi/2} \quad (4.7l)$$

olarak verilir. Bu fonksiyonların açılımları yapılırsa sanal kısımları yok olur ve sadece reel kısımlar denklemler içine yansır.

Böylece, (4.7) denklemlerinin genel şekline bakılırsa m ve m' açısai momentlere bağlı 12x12 blok matris olduğu görülür. Bu denklemler matris şeklinde yeniden yazılırsa,

$$\mathbf{F}_m = \mathbf{e} + \mathbf{M}_{mm'} \mathbf{F}_{m'} \quad (4.8)$$

Yazılır ve burada $\mathbf{e}$ birim matristir. Durum yoğunluğunu hesaplamak için bu özdeğer ve özvektörler tanımlanır. Burada, $\mathbf{F}$ bir blok vektörü olarak düşünülebilir ve bu bloğun her elemanı m ve m' katsayılarıyla ile belirlenir. $\mathbf{M}$ matrisi kompleks ve simetrik olmayan blok bir matristir. Fiziksel olarak özdeğerlerin reel olması gerekir ve bu matematiksel olarak ispatlanmıştır. Durum yoğunluğunun hesaplanması için matrisin sanal kısmının tanımlanması gerekir. Bunun için

$$\mathbf{F} = (\mathbf{1} - \mathbf{M}_{mm'})^{-1} \cdot \mathbf{e} \quad (4.9)$$

olarak yazılabilir. Bu denklemin özdeğer ve özvektörler cinsinden durum yoğunluğuna olan katkı,

$$Im\mathbf{F}_0 = -\pi \sum_i \left(\sum_j^{12} \eta_j \mathbf{u}_{ij} \right) \delta(1 - \lambda_i) \left(\sum_j^{12} \eta_j \mathbf{u}_{ij}^T \right) \cdot \mathbf{e} \quad (4.10)$$

bağıntısı ile verilebilir. Burada matris simetrik olmadığından $\mathbf{u}_i$ ve $\mathbf{u}_i^T$ sırasıyla matrisin ve tranpozunun (veya matrisin sağdan ve soldan) özvektörleri, λ_i özdeğerleridir. Matris simetrik olmadığından hem normal haliyle çözmek hem de transposunu alıp çözmek gerekir. Çünkü simetrik olmayan matrisin özvektörleri birbirinden farklıdır. Ancak bu işlem oldukça hantal bir çözüm olduğu için matrisi simetrik hale getirmek mümkündür. Simetrik bir matrise indirgemek için

$$\sqrt{\eta_a} \mathbf{F}_m^a = \sqrt{\eta_a} \mathbf{e} + \sqrt{\eta_a} \mathbf{M}_{mm'} \frac{\sqrt{\eta_\beta}}{\sqrt{\eta_\beta}} \mathbf{F}_{m'}^\beta \quad (4.11)$$

işlemleri yapıldıktan sonra matris,

$$\Lambda_m = e + M'_{mm} \Lambda_m \quad (4.12)$$

şeklinde yeniden yazılır. Burada, η_α ve η_β bağların bulunma sayılarını temsil etmektedir. M' $N \times N$ matrisinin reel ve simetrik bir matristir. Bu denklemin açık formda yazılımı aşağıdaki gibi olacaktır,

$$\begin{bmatrix} \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & M_3^T & M_3^T & M_1 & M_2 & M_3 & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & M_3^T & M_2^T & M_1 & M_2 & M_3 & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & M_3^T & M_2^T & M_1 & M_2 & M_3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \cdot \\ \Lambda_{-1} \\ \Lambda_0 \\ \Lambda_1 \\ \cdot \end{bmatrix} = \lambda \begin{bmatrix} \cdot \\ \Lambda_{-1} \\ \Lambda_0 \\ \Lambda_1 \\ \cdot \end{bmatrix} \quad (4.13)$$

Burada $M_1, M_2, M_3, \dots$ 48×48 boyutundaki bir matrisin elemanlarıdır ve bu matrisler simetriktir.

$$M_1 = \begin{bmatrix} J_0 \mathbf{m}_{00} & J_1 \mathbf{m}_{01} & J_2 \mathbf{m}_{02} & J_3 \mathbf{m}_{03} \\ J_1 \mathbf{m}_{01}^T & J_0 \mathbf{m}_{11} & J_1 \mathbf{m}_{01} & J_2 \mathbf{m}_{02} \\ J_2 \mathbf{m}_{02}^T & J_1 \mathbf{m}_{01}^T & J_0 \mathbf{m}_{22} & J_1 \mathbf{m}_{01} \\ J_3 \mathbf{m}_{03}^T & J_2 \mathbf{m}_{02}^T & J_1 \mathbf{m}_{01}^T & J_0 \mathbf{m}_{33} \end{bmatrix} \quad (4.14)$$

$$M_2 = \begin{bmatrix} J_4 \mathbf{m}_{00} & J_5 \mathbf{m}_{01} & J_6 \mathbf{m}_{02} & J_7 \mathbf{m}_{03} \\ J_5 \mathbf{m}_{01}^T & J_4 \mathbf{m}_{11} & J_5 \mathbf{m}_{01} & J_6 \mathbf{m}_{02} \\ J_6 \mathbf{m}_{02}^T & J_5 \mathbf{m}_{01}^T & J_4 \mathbf{m}_{22} & J_5 \mathbf{m}_{01} \\ J_7 \mathbf{m}_{03}^T & J_6 \mathbf{m}_{02}^T & J_5 \mathbf{m}_{01}^T & J_4 \mathbf{m}_{33} \end{bmatrix} \quad (4.15)$$

olup benzer şekilde diğerleri de yazılabilir. Ayrıca, matris içindeki her $\mathbf{m}_{ii}$ 12×12 boyutunda birer blok matristir. Dolayısıyla, her M_i matrisi 4×12 büyüklüğünde 48×48 mertebesinde birer blok matris olup birbirinden sadece bir faz farkı büyüklüğündeki Bessel fonksiyonu ile farklıdır. Böyle sonlu bir problemi tam olarak zor olduğundan, bu sonsuz limit değerinde çözülebilir. Sonsuz limit probleminde, Bessel fonksiyonlarının birinci mertebeden olmasından dolayı, bir

faz faktörü yazabiliriz. Örnek olarak, $\Lambda_{-1} = e^{-i\alpha} \Lambda_0, \Lambda_1 = e^{i\alpha} \Lambda_0$ eşitlikleri kullanılabilir. Böylece, çözüm için gerekli olan determinantın matris şekli

$$\begin{aligned} \mathbf{M}_1 \Lambda_0 + (\mathbf{M}_2 e^{i\alpha} + \mathbf{M}_2^T e^{-i\alpha}) \Lambda_0 + (\mathbf{M}_3 e^{i2\alpha} + \mathbf{M}_3^T e^{-i2\alpha}) \Lambda_0 + \dots \\ + (\mathbf{M}_N e^{iN\alpha} + \mathbf{M}_N^T e^{-iN\alpha}) \Lambda_0 = \lambda \Lambda_0 \end{aligned} \quad (4.16)$$

şeklinde yazılabilir. Böyle bir matrisi çözmeden önce normalizasyon yapılması gerekmektedir. Bundan dolayı, $(\Lambda_{n+N} = \Lambda_n)$ vektörüne $\alpha = 2\pi j / N$ ($j = 0, 1, \dots, N-1$). Normalizasyon şartı, $\Lambda_0^*(\alpha = 2\pi j / N) \Lambda_0(\alpha = 2\pi j / N) = 1 / N$. Böylece, denklem (4.11),

$$[\mathbf{M}_1 + (\mathbf{M}_2 e^{i\alpha} + \mathbf{M}_2^T e^{-i\alpha}) + \dots] \cdot \Lambda_0 = \lambda \Lambda_0 \quad (4.17)$$

olarak yazılabilir. Burada, Λ_0 ve λ sırasıyla matrisin özvektör ve özdeğerlerini göstermektedir. α ise bir faz faktörüdür ($\alpha = 2\pi j / N$ ve $j = 0, 1, 2, \dots, N-1$). Sonuç olarak, denklem (4.17) yeni bir matris formunda yazılabilir,

$$\Lambda_m = 1 + \mathbf{M}_{mm'}^* \Lambda_{m'} \quad (4.18)$$

Bu denklemin sanal kısmı toplam durum yoğunluğuna olan katkıyı verir,

$$\text{Im} \Lambda_0 = -\frac{\pi}{N} \sum_i \left(\sum_j^{12} \eta_j \mathbf{u}_{ij}^2 \delta(1 - \lambda_i) \right) \cdot \mathbf{e} \quad (4.19)$$

N normalizasyon faktörüdür. 48×48 'lik matris N defa çözüldüğünden hesaplamalardaki N faktörünün matrisin boyutlarına etkisi yoktur. Böylece, toplam durum yoğunluğu atom başına $1/N$ faktörü ile çarpılmış olur.

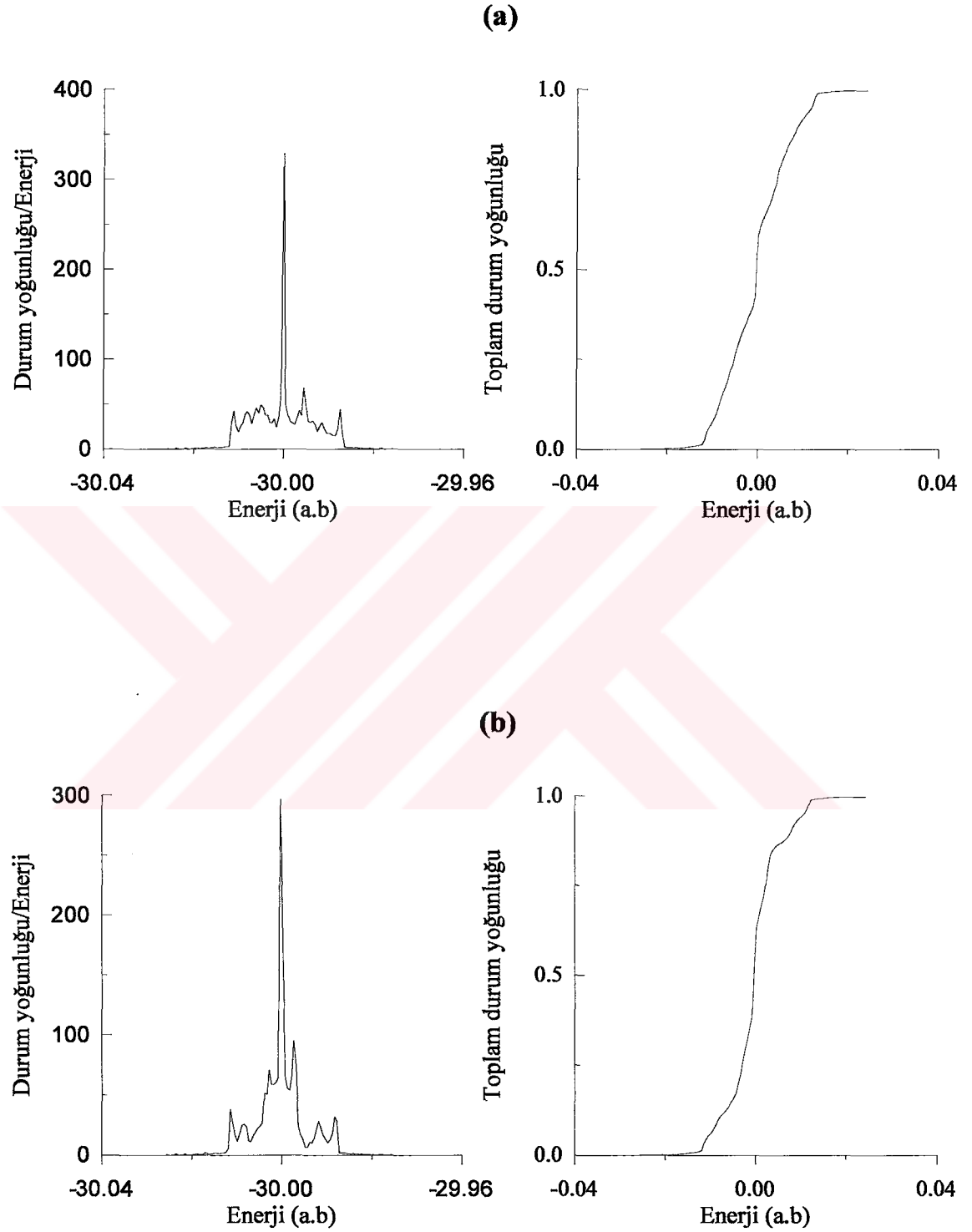
Tüm bu sonuçlardan durum yoğunluğu ile alakalı olan spektral fonksiyon

$$\rho(\mathbf{k}, E) = \frac{1}{\Omega_0} \frac{1}{[E - k^2]^2} \sum_{mm'} \left[\frac{s_0(\mathbf{k})}{s_0(i\mu)} \right]^2 \left[\sum_i \left(\sum_j^{12} \eta_j \mathbf{u}_{ij}^2 \right) \delta(1 - \lambda_i) \cdot \mathbf{e} \right] \quad (4.20)$$

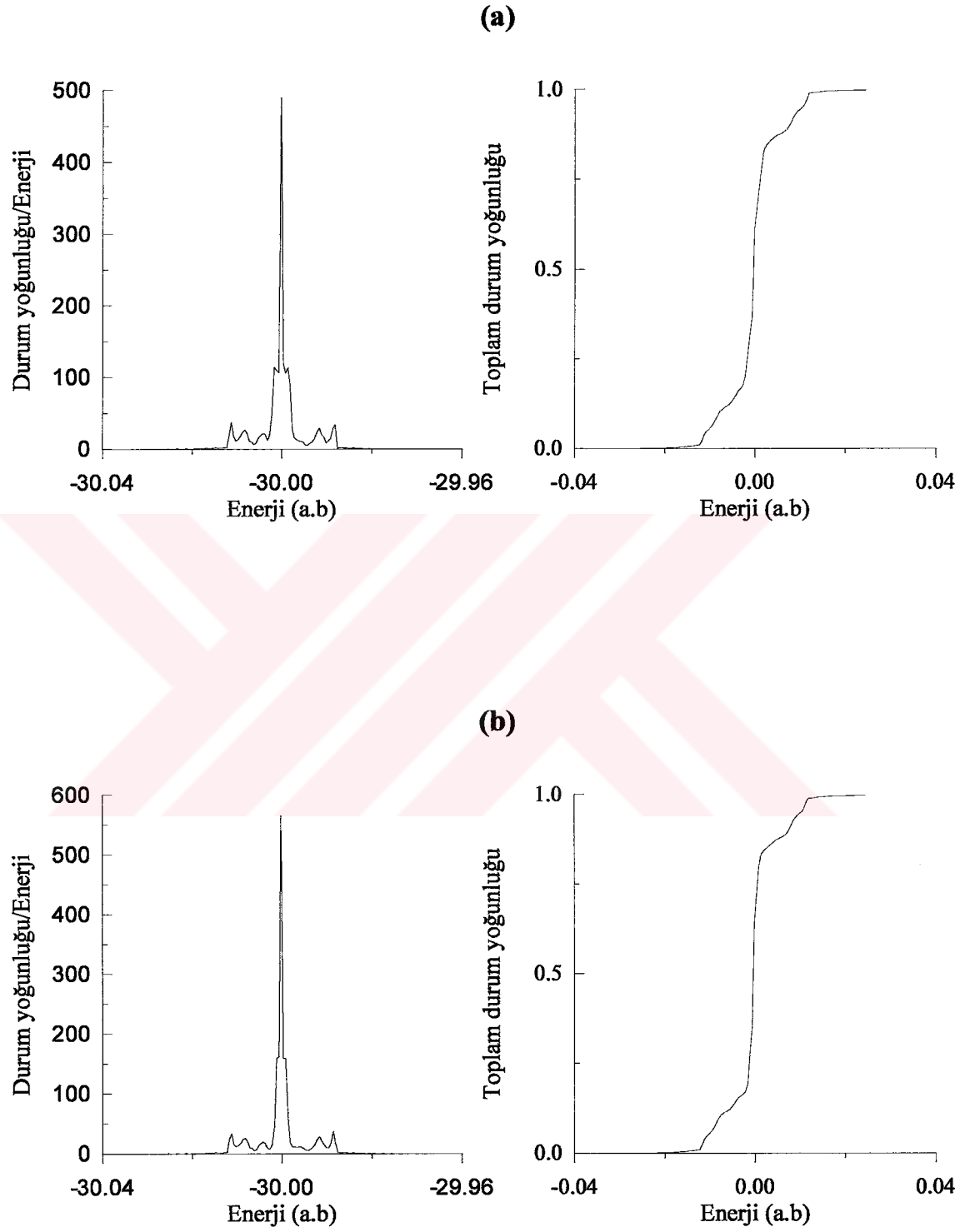
şeklinde son halini alır. Bu fonksiyondan momentum davranışını da grafiksel olarak inceleyeceğiz. Sonuç olarak, iki boyutta farklı bileşenlere sahip bir A_xB_{1-x} alaşım modelinin elektronik özelliklerinin hesaplanması ve bağ uzunluklarına ve konsantrasyonlarına göre davranışını incelemek için denklem (4.20)'deki spektral fonksiyonumuzu aşağıdaki denklemde yerine

$$n(E) = \frac{A_0}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^0 \rho(\mathbf{k}, E) d\mathbf{k} \quad (4.21)$$

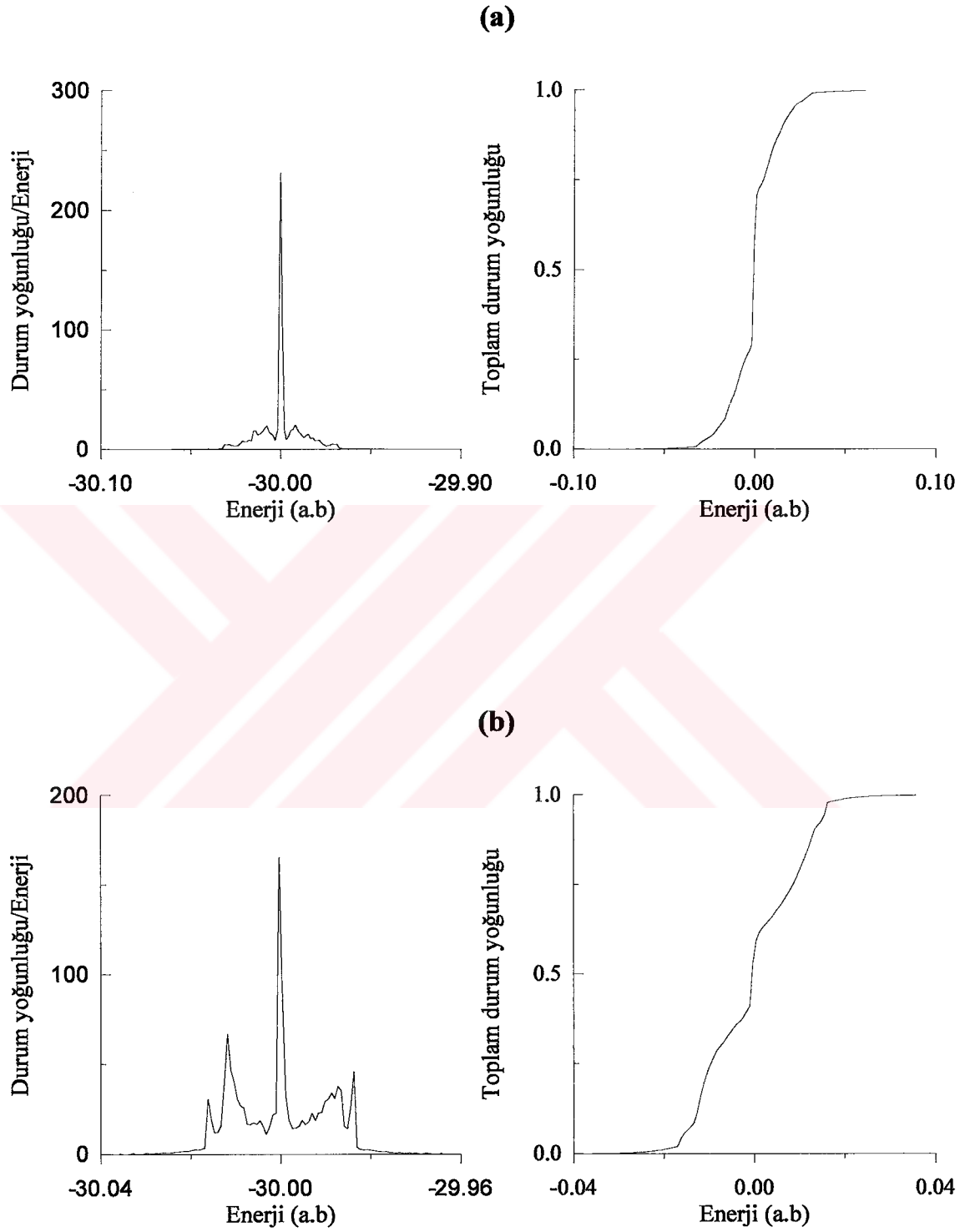
yazarız. Bundan sonra, durum yoğunluğunun kare örgüdeki atomların bağ uzunluklarına ve konsantrasyonlarına göre değişimlerini grafiksel olarak inceleyeceğiz.



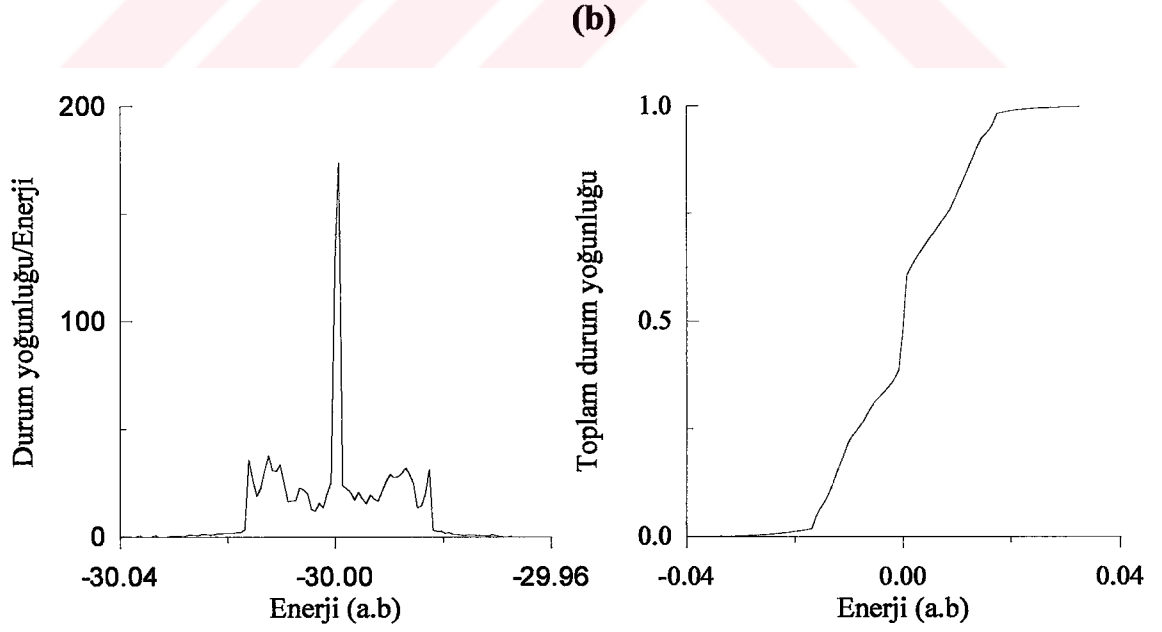
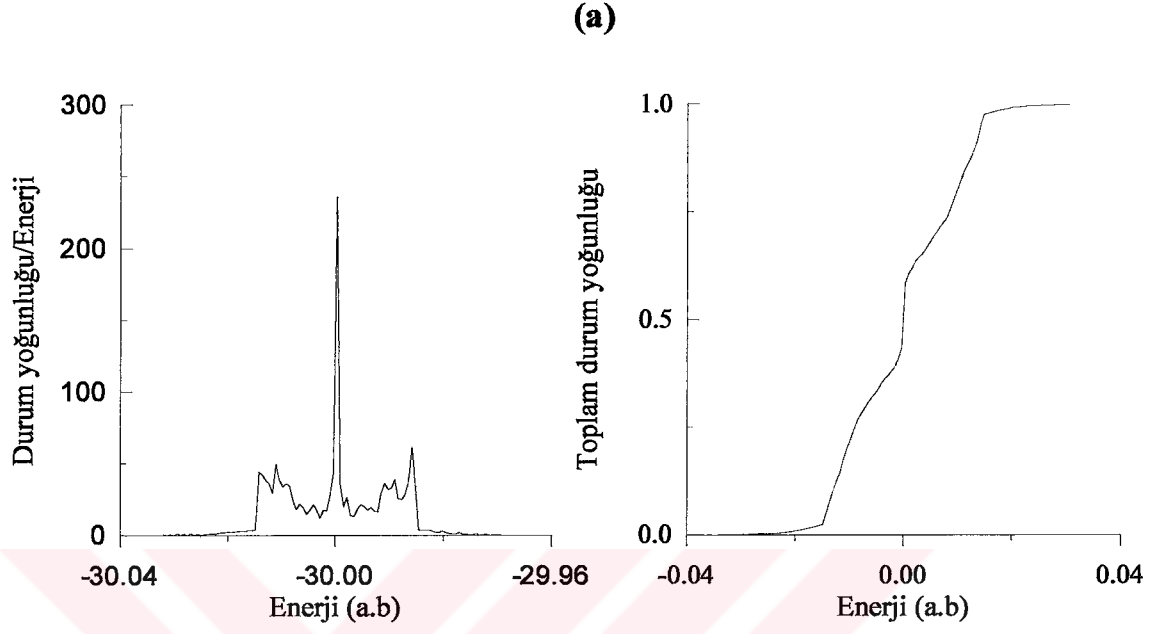
Şekil 4.2 A_cB_{1-c} alaşımının elektronik durum yoğunluğunun bağ uzunluklarına göre değişimi; (a) ($c=0.5$; $R_{AA}=2.0$ (a.b), $R_{BB}=2.2$ (a.b)), (b) ($c=0.5$; $R_{AA}=2.0$ (a.b), $R_{BB}=2.4$ (a.b))



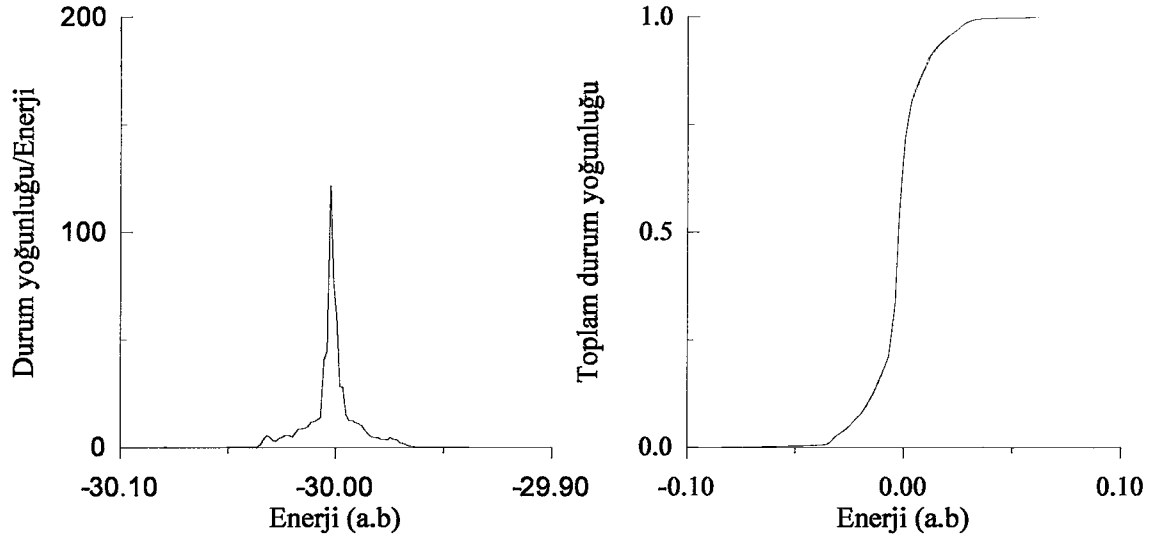
Şekil 4.3 A_cB_{1-c} alaşımının elektronik durum yoğunluğunun bağ uzunluklarına göre değişimi; (a) ($c=0.5$; $R_{AA}=2.0$ (a.b), $R_{BB}=2.6$ (a.b)), (b) ($c=0.5$; $R_{AA}=2.0$ (a.b), $R_{BB}=2.75$ (a.b))



Şekil 4.4 A_cB_{1-c} alaşımının elektronik durum yoğunluğunun atomik konsantrasyonlara göre değişimi; (a) ($R_{AA}=2.0$ (a.b), $R_{BB}=2.0$ (a.b), $c=0.2$), (b) ($R_{AA}=2.0$ (a.b), $R_{BB}=2.0$ (a.b), $c=0.4$)



Şekil 4.5 A_cB_{1-c} alaşımının elektronik durum yoğunluğunun atomik konsantrasyonlara göre değişimi; (a) ($R_{AA}=2.0$ (a.b), $R_{BB}=2.0$ (a.b), $c=0.5$), (b) ($R_{AA}=2.0$ (a.b), $R_{BB}=2.0$ (a.b), $c=0.6$)



Şekil 4.6 A_cB_{1-c} alaşımının elektronik durum yoğunluğunun atomik konsantrasyonlara göre değişimi;
($R_{AA}=2.0$ (a.b), $R_{BB}=2.0$ (a.b), $c=0.8$)

5. SONUÇ VE TARTIŞMA

Bu tez çalışmasında, çoklu saçılma esasına dayanan teorik bir yaklaşım kullanılarak, iki-boyuttaki bir kare örgü üzerinde belli bir istatistiksel dağılıma göre yerleşen $A_x B_{1-x}$ şeklindeki statik bir alaşım modelinin elektronik durum yoğunluğu hesaplandı. Böyle bir sistemin elektronik yapısını hesaplarken, aynı zamanda kullanılan metod için farklı çözüm teknikleri geliştirilmiş ve bu tekniklerin nasıl sonuçlar verdiği gösterilmiştir.

Bu işlemler için öncelikle daha önceki çalışmalarda da olduğu gibi metodun matematiksel bağıntıları kullanılan model sistem için yeniden geliştirildi ve sisteme uygulanır şekle indirgendi. Sıkı-bağ yaklaşımı kapsamın saçıcı potansiyel olarak zayıf bir potansiyel (Dirac-delta) model potansiyeli kullanılarak spektral fonksiyon bağıntısındaki potansiyel fonksiyonları belirlendi. Bu şekilde ki bir potansiyelin beklenildiği gibi dar bir band aralığı verdiği hesaplamalarda elde edilen şekillerde görüldü. İkinci aşamada ise, spektral fonksiyonda incelenen sistemle doğrudan ilgili olan ve sistemin bütün özelliklerini ihtiva eden toplam saçılma matrisinin sanal kısmı belirlendi. Bunu belirlemek için %50 A ve % 50 B oranındaki iki alaşımın yapısal özellikleri hesaplandı ve toplam saçılma fonksiyonu sisteme uygulanarak her blok 12×12 mertebesinde olan sanal bir blok matris elde edildi. Çalışmasının diğer bir aşamasını oluşturan bu kompleks matrisin çözümü ise, 48×48 büyüklüğünde bir hermityen matrisine dönüştürülmesi ile basitleştirildi. Matrisin determinantının bilgisayarda çözümü ile elde edilen özdeğer ve özvektörler hesaplanarak durum yoğunluğu ile alakalı olan spektral fonksiyon hesaplandı.

Çalışmanın son aşamasını oluşturan durum yoğunlukların hesaplanması ise, farklı örgü bağ uzunluklarına ve alaşımı oluşturan atomların konsantrasyonlarına göre hesaplandı. Bağ uzunluklarının değişimi ile durum yoğunluğunun değişimi Şekil 4.2-4.3'de açıkça görülmektedir. Şekillerde görüldüğü gibi bağ uzunluklarının büyümesi durumunda dar bir band, küçülmesi ile de geniş bir band elde ediliyor. Bu sonuç beklenen bir sonuçtur. Çünkü bağ uzunluklarının uzaması ile atomlar arasındaki etkileşme zayıflar ve her atom sahip olduğu dar bir band oluşturur. Öte yandan, bağ uzunluklarının kısalması durumunda ise, iki atom arasındaki etkileşmeden dolayı band genişlemesi meydana gelecektir. Ayrıca, atomların konsantrasyonlarının değişmesi sonucu durum yoğunluğunda değişme olduğu bariz bir şekilde Şekil 4.3-5'de görülmektedir. Buradaki değişim ise durum yoğunluklarında simetrik yapıda bir değişme olduğu açıkça görüldü. Bu da beklenen fiziksel bir olaydır. Çünkü her atom bulunduğu oranda durum yoğunluğuna katkı yapacağı metodun özelliklerinden birisi olduğu daha önceki bölümde açıklanmıştı. Eğer bu değişim şekiller üzerinde bariz bir şekilde belli değil

ise, bunun sebebi her atom için kullanılan bağılı enerji deęerinin eřit deęerde alınmasından kaynaklanmıřtır.

Sonu olarak, bu alıřmada yapısal dzensiz bir sistem olarak seilen A_xB_{1-x} alařım modeli iin hesapladıęımız elektronik durum yoęunluęunun sergiledięi davranıř fiziksel anlamda ilgin sonular vermekle beraber, kullandıęımız metodun farklı bir dzensiz sisteme de uygulanabilirlięini gstermiř oldu.



KAYNAKLAR

1. Dikici, M., 1993, *Katıhal Fiziğine Giriş*, Ondokuz Mayıs Üniversitesi Yayınları, Samsun
2. Kittel, C., 1986, *Introduction to Solid State Physics*, John Wiley & Sons, Inc., New York.
3. Ziman, J.M., 1979, *Models of Disorder*, Cambridge University Press, Cambridge.
4. Duruk, E., Özgen, S., 2002, Amorf Metalik Sistemlerin Moleküler Dinamik Benzetimi, Türk Fizik Derneği 21. Fizik Kongresi, Süleyman Demirel Üniversitesi, Isparta.
5. Taylor, J.R., Zafaritos, C., 1996, *Fizik ve Mühendislikte Modern Fizik*, Güven Yayıncılık, İstanbul.
6. Yıldız, A., 1995, A New Technique to Calculate the Electronic Structure of Disordered and Quasicrystals in Two Dimensions, Doktora Tezi, University of Leicester, England.
7. Palumbo, M., Cacciamani, G., Bosco, E., Baricco, M., 2002, Thermodynamic analysis of glass formation in Fe-B system, *Calphad*, 25(4), 625–637.
8. Christian, J.W., 1975, *Transformations in Metals and Alloys*, Oxford, Pergamon Press Ltd.
9. Desré, P.J., Cini, E., Vinet, B., 2001, Homophase-fluctuation-mediated mechanism of nucleation in multicomponent liquid alloys and glass-forming ability, *J. Non-Crys. Sol.*, 288, 210–217.
10. Elliott, S.R., 1990, *Physics of Amorphous Materials*, University of Cambridge, John Wiley & Sons, Inc., New York.
11. Morigaki, K., 1999, *Physics of Amorphous Semiconductors*, Imperial College Press and World Scientific, Japan.
12. Sringo, F., 1996, On the conductivity of topologically disordered systems, *J. Phys., Condes. Matter*, 8, 1169.

13. Wang, L., Bian, X., Yang, H., 2002, Structural simulation of clusters in liquid Ni-Al alloy, *Phys. Letters A*, 302, 318-324.
14. Margrave, J.L., 1994, Determination of thermophysical properties of liquid metals at high temperatures by levitation methods, *Materials Science and Engineering*, A178, 83-88.
15. Mizutani, U., 2001, *Introduction to The Electron Theory of Metals*, Cambridge University Press.
16. Fournier, V., Andereg, J.W., Ross, A.R., Lograsso, T.A., Thiel, P.A., 2002, Electronic structure of quasicrystals deduced from Auger and x-ray photoelectron spectroscopies, *J. Phys., Condes. Matter*, 14, 2691-2703.
17. Swenson, C.A., Fisher, I.R., Anderson, N.E., Confield, P.C., 2002, Icosahedral quasicrystal $Al_{71}Pd_{21}Mn_{08}$ and its ξ' approximant: linear expansivity, specific heat, magnetic susceptibility, electrical resistivity and elastic constants, *Phys.Rev. B*, 65, 184-206.
18. Tekin, A., 2002, Kuasikristallerin Elektronik Yapılarının Teorik Olarak Hesaplanması, Yüksek Lisans Tezi, Fırat Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Elazığ.
19. Turek, I., Drchal, V., Kudrnovsky, J., Sob, M., Weinberger, P., 1997, *Electronic Structure of Disordered Alloys, Surfaces and Interfaces*, Kluwer Academic Publishers.
20. Tatar, C., 2002, Düzensiz Sistemlerin Elektronik Yapılarının Yeni Bir Teknikle Hesaplanması, Doktora Tezi, Fırat Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Elazığ.
21. Yıldız, A., 2003, Düzensiz Sistemlerde Elektronik Durum Yoğunluğunun Düzensizlik Derecesine Göre Davranışı, Düzensiz Sistemler Teori ve Uygulamalar, III. Ulusal Sempozyum.
22. Soven, P., 1967, Coherent potential models of substitutional disordered alloys, *Phys. Rev.*, 156, 809.

23. Özgen, S., Sayısal Hesaplama Yöntemlerinin Şekil Hatırlamalı Alaşımlarda Difüzyonsuz Dönüşümlere Uygulanması, Doktora Tezi, Fırat Üniversitesi Fen Bilimleri Enst., Elazığ, 1997.

24. Beeby, J. I., Hayes, T. M., 1994, Calculation of density of states for a disordered system, Phys. Rev., B, 34, 3567.



ÖZGEÇMİŞ

Arş.Gör. F. Ahmet ÇELİK

Fırat Üniversitesi
Fen-Edebiyat Fakültesi
Fizik Bölümü
23169, ELAZIĞ

Tel: (424)2370000/6010
Fax: (424) 2330062
e-mail: facelik@firat.edu.tr

Kişisel Bilgiler :

Doğum Tarihi : 15.03.1979
Doğum Yeri : Elazığ
Uyruğu : T.C.
Medeni Hali : Bekar

Eğitim :

İlköğretim :

1985-1990 Elazığ Namık Kemal İlköğretim Okulu

Ortaöğretim :

1990-1993 Elazığ Mezre Ortaokulu

Lise:

1993-1996 Elazığ Atatürk Lisesi

Yüksek Lisans :

2001-2003 Fırat Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Elazığ.

Tez: Düzensiz Alaşımın Elektronik Yapılarının İncelenmesi

Danışman: Doç. Dr. Abdulkadir YILDIZ

Lisans:

1997-2001 Fırat Üniversitesi, Fen Edebiyat Fakültesi, Fizik Bölümü, Elazığ.

Çalıştığı Kurumlar :

1. 2002-, Fırat Üniversitesi, Fen-Edebiyat Fakültesi, Fizik Bölümü, Arş. Gör.