

İSTANBUL TEKNİK ÜNİVERSİTESİ ★ FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

**DÜZENLİ BASAMAKLI METAL YÜZEYLERİN
YAPISAL VE YEREL KUVVET ALAN ÖZELLİKLERİ**

YÜKSEK LİSANS TEZİ

Handan YILDIRIM

Anabilim Dalı: FİZİK

Programı: FİZİK MÜHENDİSLİĞİ

MAYIS 2003

**DÜZENLİ BASAMAKLI METAL YÜZEYLERİN
YAPISAL VE YEREL KUVVET ALAN ÖZELLİKLERİ**

**YÜKSEK LİSANS TEZİ
Handan YILDIRIM
(509001165)**

**Tezin Enstitüye Verildiği Tarih : 5 Mayıs 2003
Tezin Savunulduğu Tarih : 26 Mayıs 2003**

**Tez Danışmanı : Yrd. Doç.Dr. Sondan DURUKANOĞLU FEYİZ
Diğer Jüri Üyeleri Prof. Dr. A. Nihat BERKER (İTÜ)
Prof. Dr. Zehra AKDENİZ (İÜ)**

MAYIS 2003

ÖNSÖZ

Tez çalışmamın her aşamasında bilgilerinden yararlandığım sayın hocam Yrd. Doç. Dr. Sondan DURUKANOĞLU FEYİZ'e teşekkür ederim. Sayın Prof. Dr. A. Nihat BERKER' e tezin kontrolü aşamasında yapıcı eleştirileri ile teze bulunduğu katkıdan ötürü teşekkür ederim. Hayatım boyunca bana destek veren aileme, bütün dostlarıma ve de arkadaşım, meslektaşım Duygu BALCAN' a minnettarım.

Mayıs 2003

Handan YILDIRIM

İÇİNDEKİLER

TABLO LİSTESİ	v
ŞEKİL LİSTESİ	vii
ÖZET	ix
SUMMARY	x
1. GİRİŞ	1
2. KRİSTAL YAPISI	5
2.1. Giriş	5
2.2. Yedi Kristal Sistemi ve Ondört Bravais Örgüsü	6
2.3. Kristalde Doğrultular	9
2.4. Kristalde Düzlemler ve Miller İndisleri	11
3. GEOMETRİ	14
3.1. Yüksek Miller İndisli (Vicinal-Komşu) Yüzeylerin Geometrisi	14
3.2. Çalışılan Yüzeylerin Geometrilere	17
4. KURAMSAL YÖNTEMLER	23
4.1. Gömülü Atom Yöntemi-GAY (Embedded Atom Method-EAM)	23
5. HESAPLAMALAR VE TARTIŞMALAR	26
5.1. Relaxationlar ve Kuvvet Sabitleri	26
5.2. Cu' n Yüksek Miller İndisli ve Gevşek İstiflenmiş Basamaklara Sahip Cu(210) ^a , Cu(210) ^b , Cu(10 1 0) ve Cu(10 9 0) Yüzeylerinin Tabakalar Arası Daralma ve Genişlemeleri	29
5.3. Cu(210) ^a , Cu(210) ^b , Cu(10 1 0) ve Cu(10 9 0) Yüzeylerinin Yerel Atomik Davranışları	33
5.4. Cu(210) ^a , Cu(210) ^b , Cu(10 1 0) ve Cu(10 9 0) Yüzeylerinin Kuvvet Sabitleri	39
5.5. Cu' n Yüksek Miller İndisli, Sıkı İstiflenmiş Basamaklara Sahip Cu(331), Cu(19 19 1), Cu(311) ve Cu(19 1 1) Yüzeylerinin Tabakalar Arası Daralma ve Genişlemeleri	44
5.6. Cu(331), Cu(19 19 1), Cu(311) ve Cu(19 1 1) Yüzeylerinin Yerel Atomik Davranışları	47
5.7. Cu(331), Cu(19 19 1), Cu(311) ve Cu(19 1 1) Yüzeylerinin Kuvvet Sabitleri	54

6. KIYASLAMALAR	58
6.1. Yüksek Miller İndisli Gevşek İstiflenmiş Basamaklı Dar ve Geniş Teraslı Yüzeylerinin Tabakalar Arası Daralma ve Genişlemeleri	58
6.2. Yüksek Miller İndisli Gevşek İstiflenmiş Basamaklı Dar ve Geniş Teraslı Yüzeylerinin Yerel Atomik Yer Değiştirmeleri	59
6.3. Yüksek Miller İndisli Sıkı İstiflenmiş Basamaklı Dar ve Geniş Teraslı Yüzeylerinin Tabakalar Arası Daralma ve Genişlemeleri	59
6.4. Yüksek Miller İndisli Sıkı İstiflenmiş Basamaklı Dar ve Geniş Teraslı Yüzeylerinin Yerel Atomik Yer Değiştirmeleri	60
6.5. Yüksek Miller İndisli Sıkı ve Gevşek İstiflenmiş Basamaklı Dar ve Geniş Teraslı Yüzeylerinin Tabakalar Arası Daralma ve Genişlemeleri	60
6.6. Yüksek Miller İndisli Sıkı ve Gevşek İstiflenmiş Basamaklı Dar ve Geniş Teraslı Yüzeylerinin Yerel Atomik Yer Değiştirmeleri	61
6.7. Yüksek Miller İndisli Sıkı ve Gevşek İstiflenmiş Basamaklı Dar ve Geniş Teraslı Yüzeylerinin Kuvvet Sabitleri	61
7. SONUÇLAR	64
KAYNAKLAR	66
EKLER	70
ÖZGEÇMİŞ	102

TABLO LİSTESİ

	<u>Sayfa No</u>
Tablo 2.1. Kristal sistemlerinin sınıflandırılması.....	7
Tablo 3.1. Yüzeylerin yapısal notasyonları (gösterimleri) ve özellikleri.....	21
Tablo 5.1. Cu' n yüksek Miller indisli ve gevşek istiflenmiş basamaklara sahip yüzeylerinin tabakalar arası mesafelerindeki daralma ve genişlemelerin yüzde değişimleri	30
Tablo 5.2. Cu' n yüksek Miller indisli ve gevşek istiflenmiş basamaklara sahip yüzeylerinin yüzey düzlemi içindeki atomlarının birbirlerine olan uzaklıklarının yüzde değişimi	32
Tablo 5.3. Basamak zinciri (SC) atomu ve en yakın komşu atomları arasındaki bağ uzunlukları.....	33
Tablo 5.4. Basamak zinciri atomunun (SC) en yakın komşu atomlara olan bağ uzunluğunun yüzde değişimi	34
Tablo 5.5. Cu(210) ^a , Cu(210) ^b , Cu(10 9 0) ve Cu(10 1 0) yüksek Miller indisli yüzeylerinin yüzey atomlarının komşu sayısı	35
Tablo 5.6. Cu(410), Cu(210) ^a ve Cu(10 1 0) yüzeyleri için yüzey atomlarının x ve z doğrultularındaki A° cinsinden yer değiştirme miktarları	39
Tablo 5.7. Cu(10 9 0) ve Cu(210) ^b yüzeyleri için yüzey atomlarının x ve z doğrultularındaki A° cinsinden yer değiştirme miktarları	39
Tablo 5.8. Cu(210) ^a yüzeyinde basamak atomu SC ile en yakın komşu atomlar arasındaki etkileşmeler için kuvvet sabiti matrisleri $k_{\alpha\beta}$	41
Tablo 5.9. Cu(210) ^b yüzeyinde basamak atomu SC ile en yakın komşu atomlar arasındaki etkileşmeler için kuvvet sabiti matrisleri $k_{\alpha\beta}$	42
Tablo 5.10. Cu(10 1 0) yüzeyinde basamak atomu SC ile en yakın komşu Atomlar arasındaki etkileşmeler için kuvvet sabiti matrisleri $k_{\alpha\beta}$	42
Tablo 5.11. Cu(10 9 0) yüzeyinde basamak atomu SC ile en yakın komşu atomlar arasındaki etkileşmeler için kuvvet sabiti matrisleri $k_{\alpha\beta}$	43
Tablo 5.12. Cu' n yüksek Miller indisli ve sıkı istiflenmiş basamak yönelimine sahip yüzeylerinin tabakalar arası daralma ve genişlemeleri	45
Tablo 5.13. Cu' n yüksek Miller indisli ve sıkı istiflenmiş basamak yönelimine sahip yüzeylerinin yüzey düzlemi içindeki daralma ve genişlemeleri	46
Tablo 5.14. Yüzey ve yakınındaki atomların yerel yer değiştirmeleri	48
Tablo 5.15. Basamak zinciri atomu ve en yakın komşu atomları arasındaki bağ uzunlukları	48
Tablo 5.16. Basamak zinciri atomu ve en yakın komşu atomları arasındaki bağ uzunluğunun yüzde değişimi	49
Tablo 5.17. Cu(331) ve Cu(311) yüzeyleri için yüzey atomlarının x ve z doğrultularındaki A° cinsinden yer değiştirme miktarları	53

Tablo 5.18.	Cu(19 19 1) ve Cu(19 1 1) yüzeyleri için yüzey atomlarının x ve z doğrultularındaki A° cinsinden yer değiştirme miktarları	53
Tablo 5.19.	Cu(331) yüzeyinde SC ve en yakın komşu atomlar arasındaki etkileşmeler için kuvvet sabiti matrisleri $k_{\alpha\beta}$	54
Tablo 5.20.	Cu(311) yüzeyinde SC ve en yakın komşu atomlar arasındaki etkileşmeler için kuvvet sabiti matrisleri $k_{\alpha\beta}$	55
Tablo 5.21.	Cu(19 19 1) yüzeyinde SC ve en yakın komşu atomlar arasındaki etkileşmeler için kuvvet sabiti matrisleri $k_{\alpha\beta}$	56
Tablo 5.22.	Cu(19 1 1) yüzeyinde SC ve en yakın komşu atomlar arasındaki etkileşmeler için kuvvet sabiti matrisleri $k_{\alpha\beta}$	57
Tablo C.1	Yüzeylerin Miller indisleri, kesim doğrultuları ve açıları. Burada $h_k k_k l_k$ ve $h_b k_b l_b$ sırasıyla kesim doğrultusunun ve basamak doğrultusunun Miller indisleridir.....	101

ŞEKİL LİSTESİ

	<u>Sayfa No</u>
Şekil 1.1 : Mg(1 0 $\bar{1}$ 0) yüzeyi için yük yoğunluğunun tabakalara bağlı değişimi.	2
Şekil 2.1 : Tüm atomları periyodik şekilde düzenli iki boyutlu bir kristal yapı....	5
Şekil 2.2 : Kenar uzunlukları a,b,c olan bir paralelyüz.....	6
Şekil 2.3.a : Basit kübik-simple cubic (sc)	8
Şekil 2.3.b : Cisim merkezli kübik-body-centered cubic(bcc)	8
Şekil 2.3.c : Yüzey merkezli kübik-face-centered cubic (fcc)	8
Şekil 2.3.d : Hekzagonal sıkı paket (hcp)	8
Şekil 2.4.a : Kübik kristalde birkaç örgü doğrultu indisleri [120] doğrultusu.....	9
Şekil 2.4.b : [$\bar{2}$ $\bar{1}$ 0] doğrultusu.....	10
Şekil 2.4.c : [$\bar{1}$ 2 0] doğrultusu.....	10
Şekil 2.5.a : (100) düzlemi.....	11
Şekil 2.5.b : (110) düzlemi.....	11
Şekil 2.5.c : (111) düzlemi.....	12
Şekil 2.6 : (122) düzlemi.....	12
Şekil 3.1 : Düzenli basamaklı yüzeyin elde edilmesi.....	14
Şekil 3.2 : Düzenli bir şekilde basamaklarla ayrılan çok teraslı bir yüzey.....	15
Şekil 3.3 : Rasgele basamak dağılımı gösteren bir yüzey.....	15
Şekil 3.4 : Fcc(100) yüzeyinin üstten görünüşü.....	16
Şekil 3.5 : Fcc(110) yüzeyinin üstten görünüşü.....	16
Şekil 3.6.a : Cu(210) ^a yüzeyinin önden görünüşü.....	17
Şekil 3.6.b : Cu(10 1 0) yüzeyinin önden görünüşü.....	17
Şekil 3.7 : Cu(10 1 0) yüzeyinin yandan görünüşü.....	18
Şekil 3.8.a : Cu(210) ^b yüzeyinin önden görünüşü.....	19
Şekil 3.8.b : Cu(10 9 0) yüzeyinin önden görünüşü.....	19
Şekil 3.9.a : Cu(19 1 1) yüzeyinin yandan görünüşü.....	20
Şekil 3.9.b : Cu(19 1 1) yüzeyinin önden görünüşü	20
Şekil 3.10 : Cu(19 19 1) yüzeyinin önden görünüşü	22
Şekil 3.11 : Cu(331) yüzeyinin önden görünüşü	22
Şekil 3.12 : Cu(311) yüzeyinin önden görünüşü	22
Şekil 5.1.a : Genişleme (Expansion)	27
Şekil 5.1.b : Daralma (Contraction)	27
Şekil 5.1.c : Yeniden yapılanma (Reconstruction)	27
Şekil 5.2 : Basamaklı bir yüzeyde doğrultular	28
Şekil 5.3 : Basamaklı bir yüzeyde tabakalar arası boşluk tanımı(yandan görünüş)	28
Şekil 5.4.a : Cu(210) ^a için yerel atomik yer değiştirmeler	36
Şekil 5.4.b : Cu(10 1 0) için yerel atomik değiştirmeler.....	37
Şekil 5.4.c : Cu(10 9 0) için yerel atomik değiştirmeler.....	38

Şekil 5.4.d	: Cu(210) ^b için yerel atomik yer değiştirmeler.....	38
Şekil 5.5.a	: Cu(331) yüzeyinin yerel atomik yer değiştirmesi.....	50
Şekil 5.5.b	: Cu(311) yüzeyinin yerel atomik yer değiştirmesi	51
Şekil 5.5.c	: Cu(19 19 1) yüzeyinin yerel atomik değiştirmesi.....	52
Şekil 5.5.d	: Cu(19 1 1) yüzeyinin yerel atomik değiştirmesi.....	53
Şekil A.1	: $f(x)$ ' n quadratik biçimi. Yüzeyin minimum noktası $Ax = b$ ' nin çözümüdür.....	71
Şekil A.2	Quadratik biçimin eş yükselti eğrileri (konturleri).....	72
Şekil A.3	$x(0)$ noktasından başlanarak f' n en dik iniş yönü boyunca alınan adım.	74
Şekil A.4	Çizgi boyunca birkaç noktanın gradyanı ve gradyan izdüşümleri.....	74
Şekil A.5	Steepest Descent yöntemi.....	76
Şekil A.6	Dik doğrultular yöntemi.....	77
Şekil A.7	Eşlenik vektör çiftleri.....	78
Şekil A.8	Eşlenik doğrultular yöntemi.....	79
Şekil A.9	İki vektörün Gram-Schmidt eşleştirmesi.	80
Şekil A.10	Eşlenik Gradyan Yöntemi.	82
Şekil A.11	Eşlenik Gradyan Yönteminin çalışma mantığı.....	84
Şekil A.12	Lineer olmayan Eşlenik Gradyan Yönteminin yakınsaması.....	87
Şekil C.1	Yüzeye dik doğrultu $[abc]$ ' nin belirlenmesi.....	99

DÜZENLİ BASAMAKLI METAL YÜZEYLERİN YAPISAL VE YEREL KUVVET ALAN ÖZELLİKLERİ

ÖZET

Bu çalışmada Cu(100) ve Cu(110)' n bir kaç sıkı ve gevşek istiflenmiş basamaklı yüksek Miller indisli yüzeylerinin tabakalar arası daralma ve genişlemeleri, basamaklar civarındaki atomik yer değiştirmeleri ve yerel kuvvet alan özellikleri Gömülü Atom Yönteminden-GAY üretilen çok cisimli yarı deneysel potansiyel kullanılarak çalışıldı.

Her bir yüzey için tabakalar arası daralma ve genişlemeler, yerel atomik yer değiştirmeler ile yüzey ve yüzeye yakın atomlar arasındaki kuvvet sabitleri hesaplandı. Tabakalar arası daralma ve genişleme verileri daha önceki bir çok fcc yüzeyleri için yapılan deneysel ve kuramsal çalışmaların sonuçları ile uyumlu bulunmuş, bu daralma ve genişlemelerin içe doğru inildikçe düzgün bir şekilde azalma davranışı gözlenmemiştir. Ayrıca çalışılan yüzeyin geometrisi ve terasındaki atomik zincir sayısının tabakalar arası daralma ve genişlemelere ve de yerel atomik yer değiştirmelere olan etkisi incelenmiştir. Basamak atomunun (step chain-SC) yerel yer değiştirmesi yüzey geometrisinden bağımsız olarak çalışılan her bir yüzey için yaklaşık olarak 0.1 Å° olarak bulunmuştur.

Yüzeye yakın atomlar arasında hesaplanan kuvvet sabitlerinin içteki karşılıklarına göre değiştiği ve bununda basamaklar civarındaki atomlar arası bağ uzunluklarında önemli değişimlere ve de fark edilebilir atomik yer değiştirmelere neden olduğu görüldü.

STRUCTURAL AND LOCAL FORCE FIELD PROPERTIES OF REGULARLY STEPPED METAL SURFACES

SUMMARY

In this study, multilayer relaxations and local atomic relaxations in the vicinity of steps, and the properties of local force fields for several high Miller index surfaces of Cu(100) and Cu(110), with closely and loosely packed steps, are studied using by a semi-empirical potential extracted from the embedded atom method.

For each surface, interlayer relaxations, local atomic relaxations, and force constant matrices between the atoms near / or at the surface are calculated. The data of interlayer relaxations are found to be compatible with the results of the earlier experimental and theoretical studies performed for several fcc surfaces. However, the uniformly damped behaviour of the interlayer relaxations into the bulk is not observed. Additionally, the effects of varying surface geometry, the number of atomic chains on these surface terraces, on the interlayer and local atomic relaxations are examined. The local relaxation of step chain atoms (SC) along the z- direction is found to be approximately $0.1 \text{ \AA}^\circ$ for each surface, independent of the surface geometry.

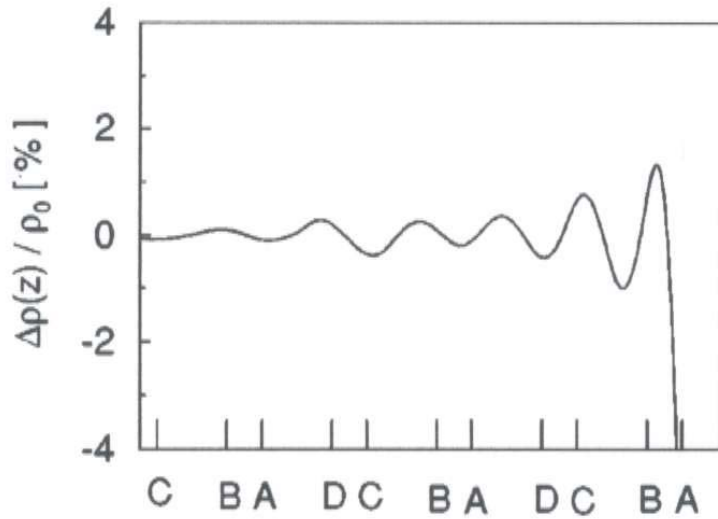
It is observed that the calculated force constants matrices between the atoms near the surface are modified as compared to their counterparts in the bulk, yielding perceptible atomic relaxations and noteworthy variations in the bond-lengths between the atoms in the vicinity of steps.

1. GİRİŞ

Kristalde herhangi bir kusurun varlığı; bir yüzeyin varlığı, yüzeyde basamakların, kinklerin veya boşlukların varlığı, ek atom gibi kusurların varlığı kristalin sahip olduğu iç simetrisinin azalmasına neden olur. Simetride oluşan bu azalma, kristalin yapısal, titreşimsel ve termodinamik gibi bir çok özelliğini değiştirmektedir [1]. Yüzeyde gerçekleşen bir çok fiziksel ve kimyasal olayda yüzeyin aktif olan rolü nedeniyle, yüzeyin yapısal özelliklerinin kapsamlı olarak anlaşılması önemlidir.

Bu doğrultuda bir çok deneysel ve kuramsal çalışma yapılmıştır ve halen yapılmaktadır. Kristalde yüzey oluşturulduğunda, yüzey ve yüzeye yakın yerel elektronik dağılım ihmal edilemeyecek ölçüde yenilenir. Yüzey ya da yüzeye yakın atomlar, elektronların yeniden dağılımı sonucu oluşan yeni kuvvetlerin etkisiyle sistemin enerjisini en düşük kılacak yeni atomik konumlar alırlar. En düşük enerji durumuna indirgenme süreci, yüzeydeki atomik düzlemlerin yüzeye dik içeriye veya dışarıya doğru yada yüzeye paralel bir şekilde yer değiştirmelerine neden olur. Basit durumlarda bir yüzey, içindeki iki boyutlu simetriyi korurken daha karmaşık durumlarda (yüzeyde kusur varlığı, ek atom varlığı, yada kirlilik varlığı durumunda) ise yüzeye paralel yeni bir simetri oluşabilir (yeniden yapılanma). Çoğu metal basamaklı yüzeyler için en düşük enerji düzenine geçişleri karakterize eden iki genel özellik vardır. Bunlardan birincisi, ilk tabakalar arası boşlukta bir daralma, ikincisi ise daha derindeki tabakalar arası mesafelerdeki daralma ve genişlemelerdir [2]. İlk tabakalar arası daralmalar Smoluchowski yük yumuşamasıyla açıklanabilir [3]. Bir basamak etrafındaki elektronların yük yoğunluğu Smoluchowski yük yumuşamasına göre; elektronlar, iyonik ve elektronik yapıların yerel olarak yeniden düzenlenimini sağlayarak, basamak köşesinden daha düşük teras hareket ederler. Bu yeniden yük dağılımının bir sonucu olarak, bu kusur bölgelerindeki kuvvet alanları, tüm yüzey tabakasının yer değiştirmesine ek olarak basamaklar civarındaki atomların yerel yer değiştirmelerini sağlayacak şekilde yenilenir. Yerel kuvvet alanlarındaki değişim aynı zamanda yüzeyin titreşim özelliklerini de değiştirir. Yüzey kusurlarının civarında yerleşmiş modlar söz konusu olur [23].

Çok tabakalı yer deęiřtirmelerin en genel ve önemli özellięi salınımlı bir doğaya sahip olmalarıdır [2]. Yüzeyin varlığı yüzeye normal doğrultudaki simetriyi bozar ve bu kusurun yansıması da elektron yoğunluğunun ie doğru azalan büyüklükte salınımlı bir davranış göstermesi şeklinde sonuçlanır. Bu uzun erimli yoğunluk salınımları Friedel Osilasyonları olarak adlandırılır. İe doğru azalan büyüklükte ve Fermi dalga boyu tarafından belirlenen bir periyodiklik göstermektedirler. Şekil 1.1’ de Mg(1 0 $\bar{1}$ 0) yüzeyi iin yüzeye dik doğrultudaki yük yoğunluğunun tabakalara baęlı olarak deęişimi görülmektedir. A, B, C, ve D harfleri atomik tabakalara karşılık gelmektedir. Şekilde sağdan sola doğru gidildike A ilk tabaka, B ikinci tabaka, C üçüncü,ve D dördüncü tabaka şeklinde sıralanmıştır.



Şekil 1.1. Mg(1 0 $\bar{1}$ 0) yüzeyi iin yük yoğunluğunun tabakalara baęlı olarak deęişimi.

Şekil 1.1’ de elektronik yüklerin birikmesi ve azalmasının ie doğru azalan bir salınımlı davranış gösterdiği görülyor [29]. İlk tabakanın bulunduğu bölgede elektronların azalımı fazladır ve bu nedenle bölge pozitif bir şekilde yüklenir, benzer şekilde ikinci tabakadaki net yük, elektronların birikimi nedeniyle negatiftir. Daha derin tabakalardaki net yük işaretleri ise, üçüncü tabakada negatif, dördüncü tabakada pozitif, beşinci tabakada pozitif ve altıncı tabakada negatiftir. Böylece tabakaların net yük işaretleri +---+- şeklindedir. Bu salınımlı davranış göstermektedir ki, birinci ve ikinci tabakalar arasındaki çekici kuvvetten dolayı d_{12} daralır, ikinci ve üçüncü tabakalar arasındaki itici kuvvetten dolayı d_{23} genişler, benzer şekilde d_{34} daralır, d_{45} genişler ve d_{56} ’ ın daralması beklenir.

Atomik ölçekteki deneysel ve kuramsal ilerlemelerle birlikte, yüksek Miller indisli (vicinal) yüzeylerin yapısal ve titreşimsel özellikleri ile ilgili çalışmalar son yıllarda daha kapsamlı olarak yapılabilmektedir. Birkaç elektronik yapı hesaplamaları hariç [4], yüksek Miller indisli yüzeylerin yapılarının kuramsal çalışmaları basit model potansiyellere dayanır [5]. Yapı belirlemede kullanılan deneysel yöntemler ise; Low Energy Electron Diffraction (LEED) [6] ve Low Energy Ion Scattering (LEIS) [7] yöntemleridir. Bu deneysel çalışmalarla açık yüzeyler olarak adlandırılan fcc(210) yüzeyleri için son yıllarda yapılan çalışmalar; örneğin Al(210) yüzeyi için tabakalar arası mesafe daralma-genişleme davranışı (--++-..) olacak şekilde gözlenmiştir [8]. Cu(210) yüzeyi için bu davranış (--++-..) şeklinde ve yüzeyden içe doğru azalan büyüklükte [9], Pt(210) yüzeyi için (--+-..) [8] ve Pd(210) yüzeyi için (-++-..) [10] şeklinde gözlenmiştir. Her bir yüzeydeki basamak atomunun (SC; step-chain) metalin içine doğru yaklaşma göstermesi, basamak civarındaki yük yumuşama etkisi görüşünü doğrulamaktadır.

Bu tezde Cu' n birkaç yüksek Miller indisli yüzeylerinin yapısal ve yerel kuvvet alan özelliklerinin çalışılması amaçlandı. Çalışmada kullanılan yüzeyler; (100) ve (110) yüzeylerinin sıkı ve gevşek istiflenmiş basamak yönelimi gösteren komşu yüzeylerdir. (100)' n sıkı ve gevşek istiflenmiş basamak yönelimi içeren yüksek Miller indisli (vicinal) birinci tip yüzeyleri sırasıyla (311), (19 1 1), ve (10 1 0), (210)^a dır. (110)' n ise sıkı ve gevşek istiflenmiş basamak yönelimi içeren yüksek Miller indisli (vicinal) ikinci tip yüzeyleri (331), (19 19 1) ve (210)^b, (10 9 0)' dır. Aynı basamak ve teras yönelimi içeren birinci tip gevşek istiflenmiş basamak yönelimine sahip yüzeylerden (210)^a ve (10 1 0) yüzeyleri farklı teras genişlikleri gösterirler. Aynı şekilde birinci tip sıkı istiflenmiş (311) ve (19 1 1) yüzeylerinin de basamak ve teras yönelimleri aynı fakat farklı teras genişliklerine sahiptirler. İkinci tip yüzeylerin sıkı ve gevşek istiflenmiş basamak yönelimi gösteren yüzeylerinde de aynı özellik söz konusudur. Bu yüzeylerin çalışılması ile farklı teras genişliğinin yüzeylerin tabakalar arası daralma ve gevşeme davranışlarını nasıl etkilediğinin incelenmesi amaçlandı. Bu çalışma içinde bu yüzeylerin çok tabakalı yer değiştirme şekilleri, yerel yer değiştirmeler ve basamak köşeleri boyunca kuvvet sabitleri değişimleri her bir yüzey için incelendi. Sıkı ve gevşek istiflenmiş basamak yönelimi içeren yüzeylerin hesapları birbirleriyle karşılaştırıldı. Böylece basamak kenarı

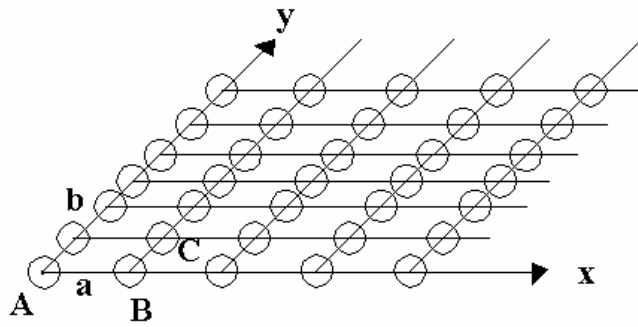
boyunca atomların sıralanışının basamaklı yüzeylerin yer deęiřtirmelerine etkilerinin de incelenmesi saęlanmış oldu.

Çalıřtıęımız model sistemde atomlar arası etkileřimleri tanımlamak için GAY potansiyeli kullanılmıştır. Bu etkileřim potansiyeli kullanılarak iç atomik konumlarında üretilen sistemin 0 K denge konumlarını elde etmek için Conjugate Gradient Yöntemi (Eřlenik Gradyan Yöntemi) kullanılmıştır (bakınız EK A). Atomlar arası kuvvet sabitleri ise GAY potansiyellerinin ikinci kısmi türevlerinin analitik ifadelerinden elde edilmiştir (bakınız EK B). Tezin geri kalan bölümünde ise; bölüm 2’ de kristal yapısı, bölüm 3’ de çalışılan yüzeylerin geometrileri, bölüm 4’ de kullanılan kuramsal yöntemlere deęinilerek, sonuçlar ve analizler bölüm 5’ de sunuldu.

2. KRİSTAL YAPISI

2.1. Giriş

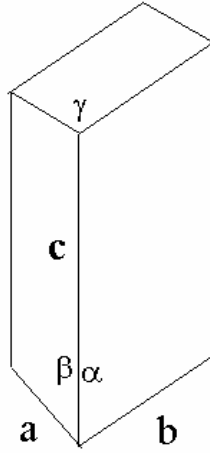
Kristalleşmiş katı yapıyı maddenin diğer hallerinden (sıvı, gaz, plazma gibi) ayıran en temel özelliği, malzemeyi oluşturan temel birimlerin (atomlar, moleküller ve iyonlar) malzeme içinde rasgele dağılımları yerine periyodik bir düzen içinde sıralanmalarıdır. Şekil 2.1. Bu temel birimlerin dağılım geometrisinin oluşturduğu yapıya kristal örgü denir. Kristal örgü, örgüyü oluşturan noktaların (atomik konumlar) tekrarlanabilirliğine göre Bravais ve Bravais olmayan örgü olmak üzere ikiye ayrılırlar. Bravais örgüde tüm örgü noktaları özdeş iken, Bravais olmayan örgüde özdeş olmayan örgü noktaları vardır.



Şekil 2.1. Tüm atomları periyodik bir şekilde düzenlenmiş iki boyutlu bir kristal yapı. Bu periyodikliği takiben A, B, C atomları özdeşdir. Bu bir başka deyişle kristalin kısıtlı öteleme işlemleriyle değişmez (invariant) kalmasını ifade eden öteleme (translational) simetrisine sahip olması demektir.

2.2. Yedi Kristal Sistemi Ve Ondört Bravais Örgü

Her bir kristal yapı kendi içinde tanımlanabilecek en küçük hacimli bir hücrenin uygun doğrultularda ötelenmesi sonucu oluşturulabilir. Temsil ettiği kristalin simetrisini ve biçimini-geometrisini- tanımlayan hücreye birim hücre denir. Kristal yada örgü sistemleri birim hücrenin bir paralelyüz olması koşulu altında birim hücrenin boyut uzunlukları ve boyut eksenleri arasındaki açılara bağlı olarak yedi ayrı sisteme ayrıştırılırlar. Bu sistemler aşağıdaki tabloda görüldüğü gibi triklinik, monoklinik, ortorombik, tetragonal, kübik, hekzagonal ve trigonaldir. Bu yedi ayrı kristal yapı içinde atomların dağılım biçimlerine göre de ondört ayrı örgü tipi oluşur [16]. Bu kristal yapı ve örgü sistemleri Tablo 2.1’de görülmektedir. Tablodaki her bir durumda bir paralelyüz olan birim hücrenin boyut uzunlukları a , b , c ve boyut eksenleri arasındaki açılar; α - b ve c arasındaki açı, β - a ve c arasındaki açı ve γ - a ve b arasındaki açıdır Şekil 2.2.

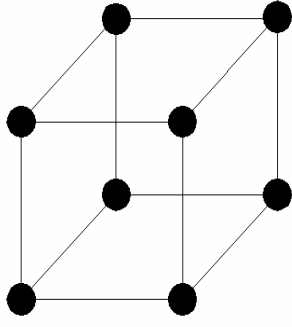


Şekil 2.2. Kenar uzunlukları a , b , c olan bir paralelyüz.

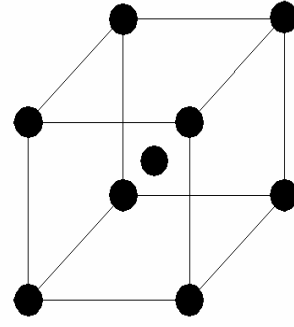
Tablo 2.1. Kristal sistemlerinin sınıflandırılması.

Kristal Sistemi	Birim Hücre Uzunlukları Ve Açıları	Örgü Birim Hücresi
Kübik	$a = b = c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	Basit Kübik Cisim Merkezli Kübik Yüzey Merkezli Kübik
Tetragonal	$a = b \neq c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	Basit Tetragonal Cisim Merkezli Tetragonal Basit Ortorombik Cisim Merkezli Ortorombik
Ortorombik	$a \neq b \neq c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	Taban Merkezli Ortorombik Yüzey Merkezli Ortorombik
Trigonal	$a = b = c, \alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$	Basit Trigonal
Hekzagonal	$a = b \neq c, \alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$	Basit Hekzagonal
Monoklinik	$a \neq b \neq c, \alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$	Basit Monoklinik Cisim Merkezli Monoklinik
Triklinik	$a \neq b \neq c, \alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$	Basit Triklirik

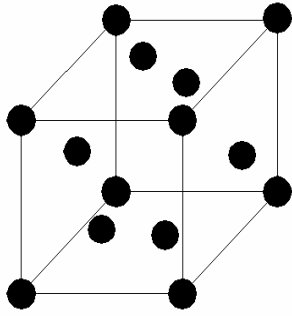
Metallerin çoğu üç tip sıkı istiflenmiş kristal yapısına sahiptirler: Cisim merkezli kübik yapı- body-centered cubic (bcc), yüzey merkezli kübik yapı- face-centered cubic (fcc) ve hekzagonal sıkı paket yapı- hexagonal close packed (hcp) Şekil 2.3. Bu tezin inceleme konusu olan Bakır, fcc kristal yapısına sahiptir. Fcc yapıda, malzemeyi oluşturan iyonlar ya da atomlar hem kübik birim hücrenin her bir köşesinde hem de birim hücrenin her bir yüzey merkezinde konumlanırlar.



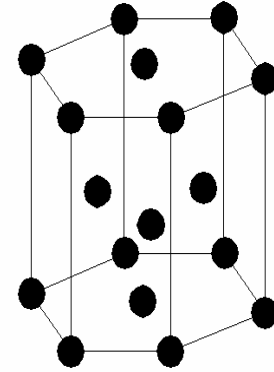
(a)



(b)



(c)

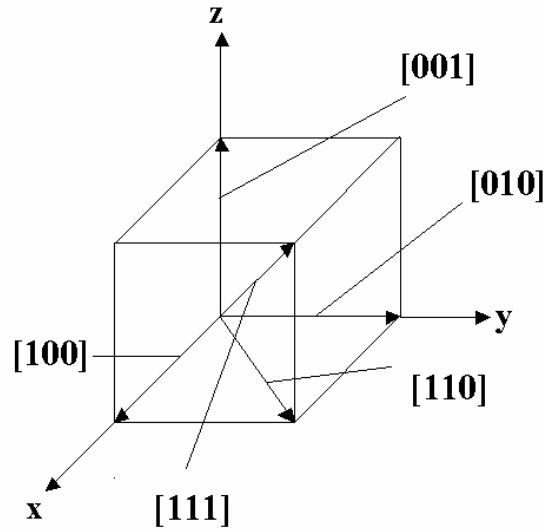


(d)

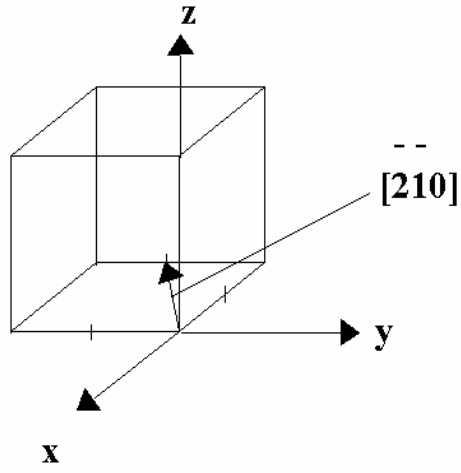
Şekil 2.3. Kristal Yapılar: (a) basit kübik- simple cubic (sc), (b) cisim merkezli kübik- body centered cubic (bcc), (c) yüzey merkezli kübik- face-centered cubic (fcc), (d) hekzagonal sıkı paket (hcp)

2.3. Kristalde Doğrultular

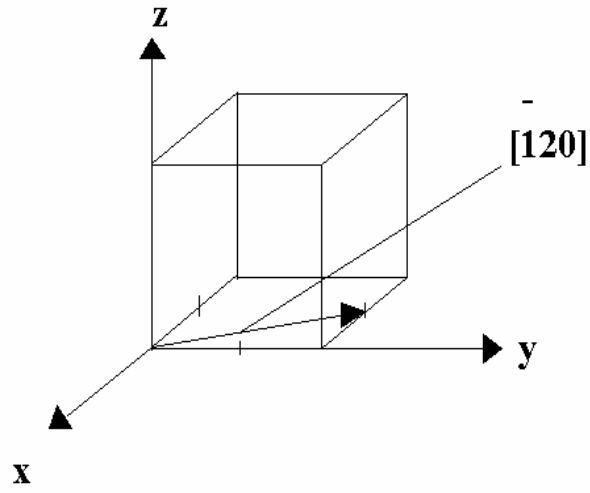
Kristalleşmiş malzemelerde fiziksel olaylar genelde anizotropik özellik gösterir. Bu nedenle kristal yapıda belirli doğrultular ve düzlemler tanımlanır. Kübik kristaller için kristalografik doğrultular, doğrultu indisleri ile tanımlanırlar. Bu doğrultu indisleri, ilgili doğrultu vektörünün en küçük mümkün tam sayıya indirgenmiş koordinat bileşenleridir. Kristal yada örgü doğrultuları bu indislerin köşeli parantezler içinde ve de virgül ile ayrılmadan yazılması ile gösterilirler. Kübik bir sistemde, kübik eksen boyunca (1,0,0) koordinat bileşenleri ile tanımlı bir doğrultu, kristalografide $[100]$ doğrultusu olarak adlandırılır (Şekil 2.4). Aynı şekilde x , y ve z koordinat bileşenleri (-2,-1,0) ve (-1/2,+1,0) olan doğrultular için kristalografik indisler sırasıyla $[\bar{2} \bar{1} 0]$ ve $[\bar{1} 2 0]$ şeklindedir. Burada negatif doğrultu indisleri, indis üzerine bir çizgi çekilerek ifade edilir. En son örnekte koordinatları en küçük tamsayılara indirgemek için bileşenler iki ile çarpıldı. Şekil 2.4'te kübik kristaller için birkaç örgü doğrultuları görülüyor. Eğer örgü doğrultuları kristalin simetrisi altında özdeş iseler örgü doğrultu ailesi oluştururlar. Örneğin aşağıdaki kübik kenar doğrultuları kristalografik açıdan özdeş olduklarından bir doğrultu ailesi oluştururlar ve $\langle 100 \rangle$ doğrultu ailesinin birer elemanıdırlar.



(a)



(b)

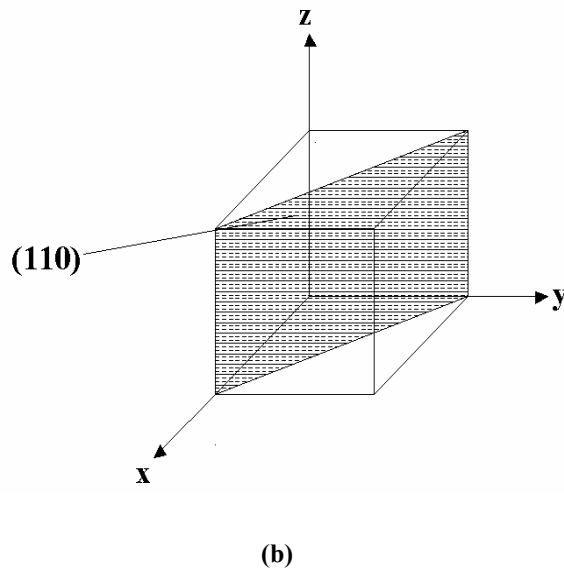
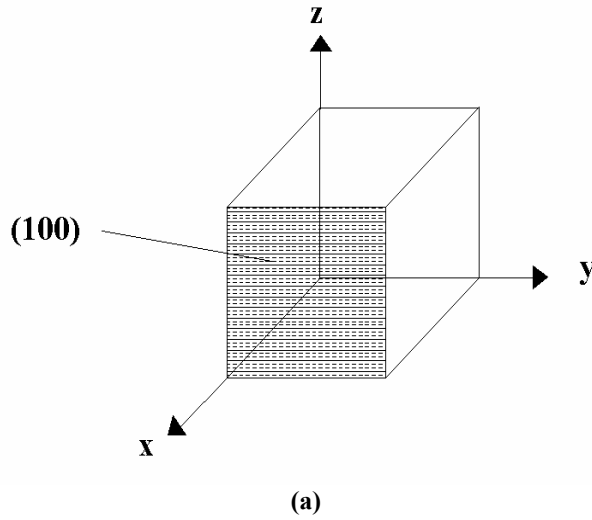


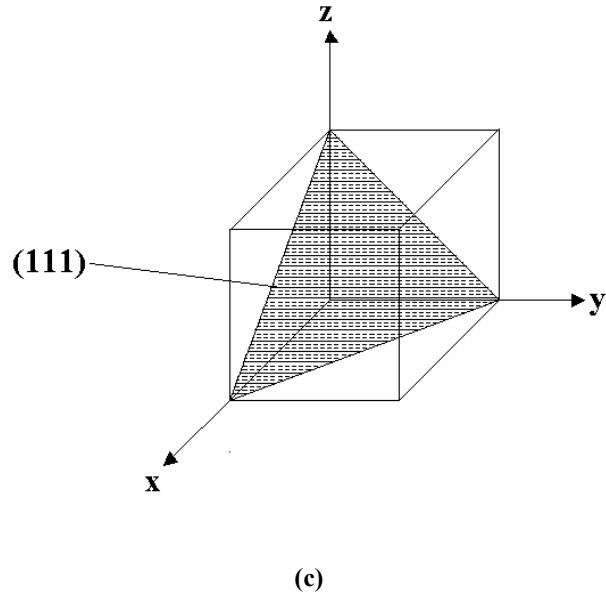
(c)

Şekil 2.4. (a) Kübik kristalde birkaç örgü doğrultu indisleri. (b) $[\bar{2} \bar{1} 0]$ doğrultusu. (c) $[\bar{1} 2 0]$ doğrultusu.

2.4. Kristalde Düzlemler Ve Miller İndisleri

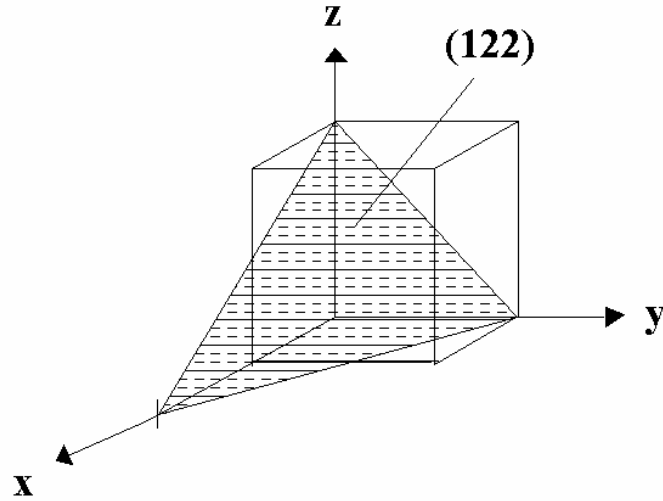
Örgü düzlemleri genellikle parantezler içinde düzlemin Miller indisleri ile tanımlanırlar. Kübik sistemde, herhangi bir kristal düzlemin Miller indisleri o düzlemin x , y , z eksenlerini kesme noktalarının terslerinin tamsayılaştırılmış değerleridir. Düzlemleri belirleyen bu indisler parantez içerisinde virgül ile ayrılmadan yazılırlar. Kübik bir sistemde kübik eksenleri $(1, \infty, \infty)$, $(1, 1, \infty)$ ve $(1, 1, 1)$ noktalarında kesen düzlemler sırasıyla (100) , (110) ve (111) Miller indisleri ile tanımlanırlar. Bu düzlemler seti;





Şekil 2.5. Kübik kristalde birkaç örgü düzleminin Miller indisleri. (a) (100) (b) (110) (c) (111) düzlemleri.

Aynı şekilde x, y, z eksenlerini kesme noktaları $(1/2, 1, 1)$ olan düzlemin Miller indisleri (122) şeklindedir. Kesirli değerlere izin verilmediğinden bu indisler 2 ile çarpılarak 1/2 kesri kaldırılmıştır. Şekil 2.6’ da (122) düzlemi görülmektedir.



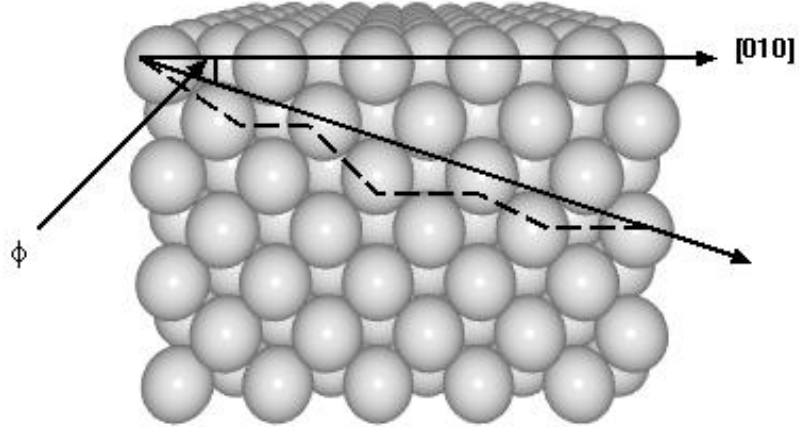
Şekil 2.6. (122) Düzlemi.

Örgü doğrultularında olduğu gibi, kristalografik olarak özdeş düzlemler bir örgü düzlemi ailesi oluştururlar. Örneğin (100), (010) ve (001) düzlemleri kristal simetrisi altında bir kübik kristalde özdeşirler ve de $\{100\}$ düzlemleri ailesi olarak tanımlanırlar.

3. GEOMETRİ

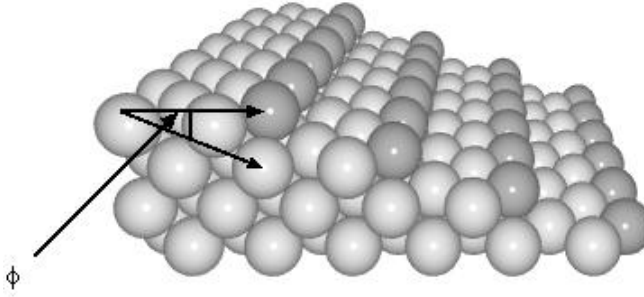
3.1. Yüksek Miller İndisli (Vicinal-Komşu) Yüzeylerin Geometrisi

Yüksek miller indisli yüzeyler, kristalin daha düşük miller indisli [(100), (110), (111)] yüzeyleri ile belirli bir açı yapacak şekilde kesilmeleri sonucu elde edilirler (Şekil 3.1). Yanlış kesim açısının büyüklüğüne bağlı olarak periyodik terasları oluşturan atomik zincir sayısı ve dolayısıyla teras genişliği değişecektir.

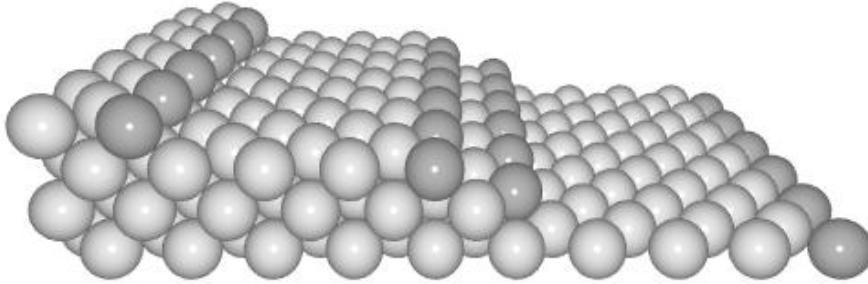


Şekil 3.1. Düzenli basamaklı yüzeylerin elde edilmesi. Burada Φ yanlış kesim açısıdır. Kristal [010] doğrultusundan Φ açısı kadar sapacak şekilde kesilirse, yanlış kesim doğrultusu üstündeki atomlar gider ve sadece kesikli çizgilerin oluşturduğu basamaklı yüzey geriye kalır.

Böyle bir kesim sonucunda, geometrik olarak pürüzsüz (düz) yüzey yerine düzenli bir şekilde sıralanmış basamaklarla ayrılan çok teraslı bir yüzey elde edilir (Şekil 3.2). Bu tür bir düzen içinde sıralanmış basamaklar içeren yüzeylere yüksek Miller indisli ya da düzenli basamaklı yüzeyler denir. Ayrıca basamakların belli bir düzen içinde dağılımı yerine rasgele dağılım gösterdiği yüzeyler de vardır ve bu tür yüzeyler düzensiz basamaklı yüzeyler olarak adlandırılırlar (Şekil 3.3).



Şekil 3.2. Düzenli bir şekilde sıralanmış basamaklarla ayrılan çok teraslı bir yüzey. Her bir teras 3 atomik zincirden (sıradan) oluşuyor.

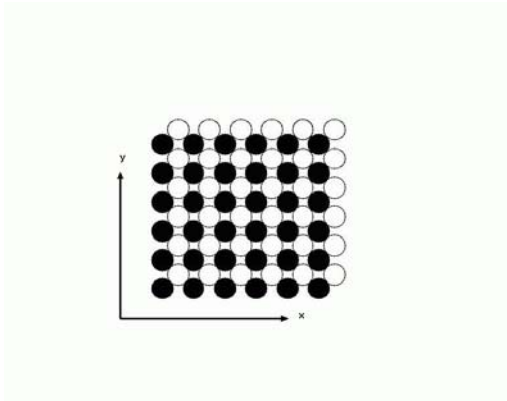


Şekil 3.3. Rasgele basamak dağılımını gösteren bir yüzey. Her bir terastaki atomik zincir sayısı eşit değil.

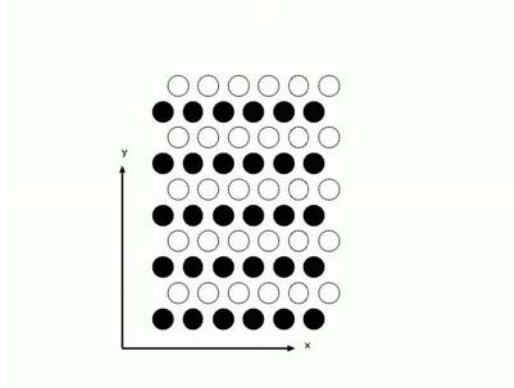
Bu çalışmada fcc(n+1,1,0) olarak sınıflandırılan fcc(100) yüzeyinin bir kaç komşu yüzeyleri ile fcc(n+1,n,0) grubunda bulunan fcc(110) düzlemine komşu bazı yüksek Miller indisli yüzeylerin incelenmesi amaçlanmıştır. Bu yüzeylerin teraslarını oluşturan fcc(100) ve fcc(110)'ın üstten görünüşleri sırayla Şekil 3.4 ve Şekil 3.5'de görülmektedir. İlk sınıf yüzeyler (100) yönelimli teraslar ve tek atom yükseklikli (110) yönelimli basamaklarla ayrılırken, ikinci sınıf düzenli basamaklı yüzeyler (110) yönelimli teraslar ve tek atom yükseklikli (100) yönelimli basamaklardan oluşurlar. Ayrıca her iki teras yönelimleri için (100) ve (110), kapalı ve tek atom yükseklikli (111) basamak yönelimine sahip yüzeyler de çalışıldı. Lang, Joyner ve Smorjai yüksek Miller indisli (düzenli basamaklı) yüzeylerin yapısal-geometrik ya da görsel diye özetleyebileceğimiz- özellikleri konusunda daha doğrudan bilgi verebilecek basit bir gösterim (notasyon) geliştirdiler [11]. Bu gösterime göre basamaklı bir yüzey yapısı şu şekilde gösterilir ;

$$El(S)-[m(h_1k_1l_1) \times n(h_s k_s l_s)] \quad (3.1)$$

Burada El(S); Pt, Cu gibi elementleri ya da yüzeyi oluşturan malzemeyi temsil ederken, $(h_1k_1l_1)$ teras düzleminin Miller indisini ve $(h_s k_s l_s)$ ise basamak düzleminin Miller indisini göstermektedir. m terastaki atomik sıra sayısı iken, n basamak yüksekliğindeki atom sayısını ifade eder. Tek atom yükseklikli basamaklara n=1 durumu karşılık gelmektedir.



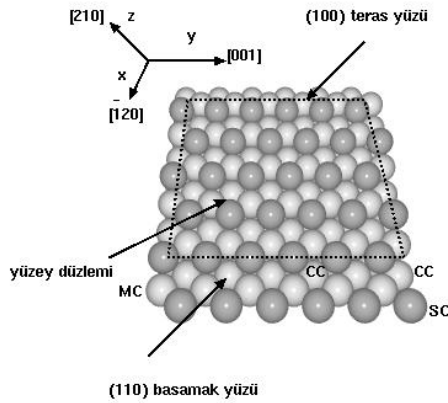
Şekil 3.4. fcc(100) yüzeyinin üstten görünüşü. x ve y doğrultusu boyunca atomlar arası mesafe sırayla 2.556 Å, 2.556 Å şeklindedir.



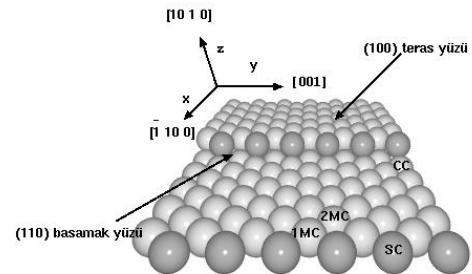
Şekil 3.5. fcc(110) yüzeyinin üstten görünüşü. x ve y doğrultusu boyunca atomlar arası mesafe sırayla 2.556 Å, 3.615 Å'dur.

3.2. Çalışılan Yüzeylerin Geometrileri

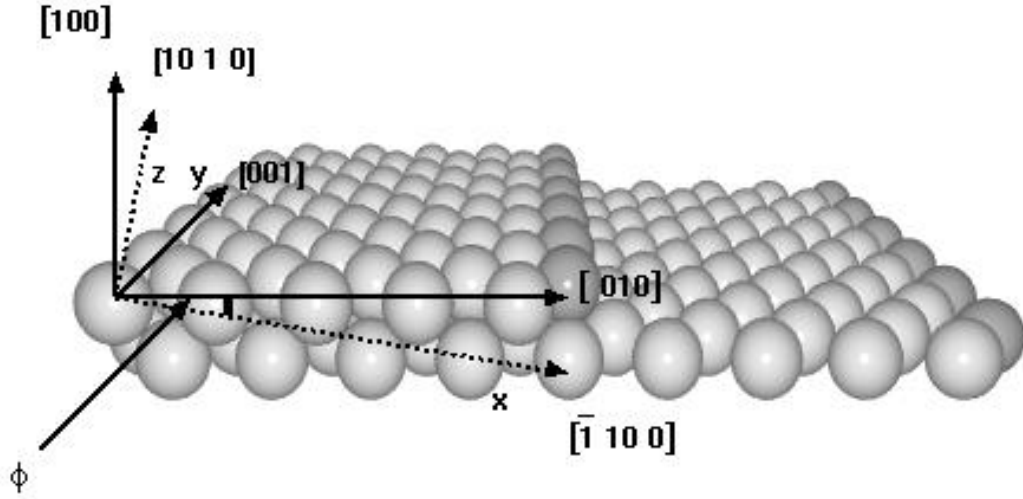
Bu tezde fcc(100) ve fcc(110) kristalinin sıkı ve açık istiflenmiş basamaklı yüzeyleri incelenmiştir. Bunlar (210), (10 9 0), (10 1 0), (331), (311), (19 19 1) ve (19 1 1) yüzeyleridir. (210) yüzeyi iki farklı tip teras ve basamak yönelimine sahiptir. Birinci tip (210) yüzeyi (100) teras yönelimli ve açık bir şekilde istiflenmiş (110) basamak yönelimine sahipken, ikinci tip (210) yüzeyi ise (110) teras yönelimi ve (100) basamak yönelimine sahiptir. Bu yüzeylerden birinci tip (210)^a ve (10 1 0) yüzeyleri aynı komşu yüzey ailesindendir (teras ve basamak yönelimleri aynı). Şekil 3.6.a ve Şekil 3.6.b bu iki yüzeyin önden görünüşüdür. Geniş teraslı (10 1 0) yüzeyinin yandan görünüşü Şekil 3.7’de görülmektedir. Bu yüzeyler (100) düzlemlerinin komşu yüzeyleri iken, farklı teras genişlikleri içermektedir. İkinci tip (210)^b ve (10 9 0) yüzeyleri de aynı komşu yüzey ailesinden olup farklı teras genişlikleri içermektedir. Şekil 3.8.a ve Şekil 3.8.b bu iki yüzeyin önden görünüşüdür. Aynı şekilde (331) ve (19 19 1) yüzeyleri aynı komşu yüzey ailesindendir (teras ve basamak yönelimleri aynı). Şekil 3.9.a ve Şekil 3.9.b bu iki yüzeyin önden görünüşüdür. Geniş teraslı (19 19 1) yüzeyinin yandan görünüşü Şekil 3.10’da görülmektedir. Bu yüzeyler (110) düzlemlerinin komşu yüzeyleri iken, kapalı bir şekilde istiflenmiş (111) basamak yönelimi gösterirler. (311) ve (19 1 1) yüzeyleri de aynı komşu yüzey ailesindendir ve farklı teras genişlikleri içermektedir. Şekil 3.11.a ve Şekil 3.11.b bu iki yüzeyin önden görünüşüdür. Bu yüzeyler (100) düzlemlerinin komşu yüzeyleri iken, kapalı bir şekilde istiflenmiş (111) basamak yönelimi gösterirler.



Şekil 3.6.a. Cu(210)^a yüzeyinin önden görünüşü

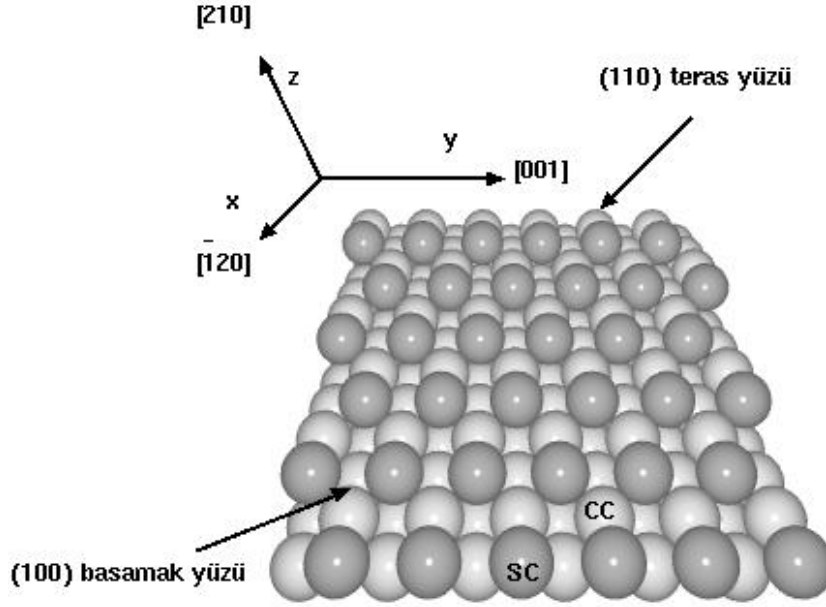


Şekil 3.6.b. Cu(10 1 0) yüzeyinin önden görünüşü.

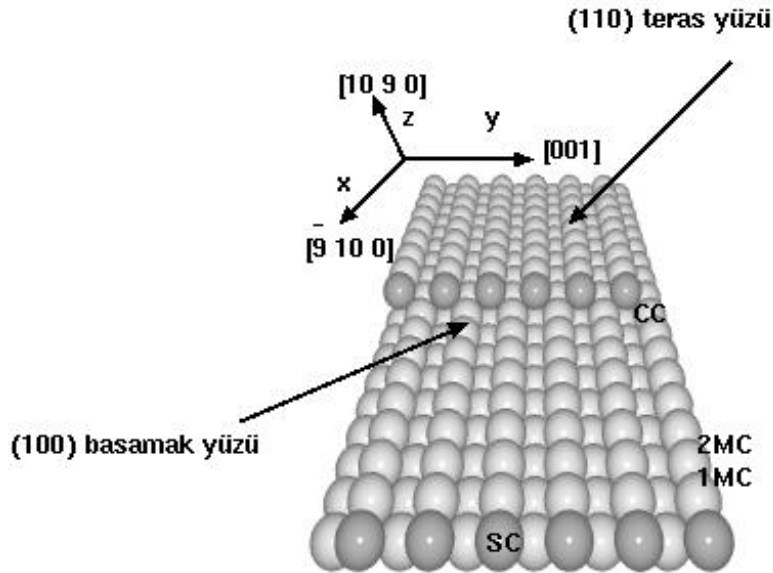


Şekil 3.7. Cu(10 1 0) yüzeyinin yandan görünüşü.

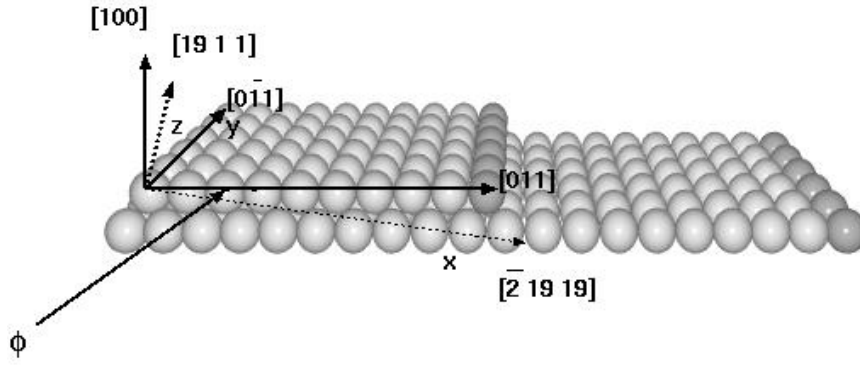
Hesaplamalarda kullanılan bütün model hücrelerde x ve y eksenleri yüzey düzleminde iken, z -ekseni yüzey düzlemine normal doğrultuda alınmıştır. Burada x -ekseni ardışık basamakları birleştiren doğrultu boyunca, y -ekseni ise basamak boyuncadır. Şekil 3.6 ve Şekil 3.8’de görüldüğü gibi (210) yüzeyi için terasları oluşturan atom zincirleri; basamak zinciri-step chain-(SC), köşe zinciri-corner chain-(CC) ve orta zincir-middle chain-(MC) olarak adlandırılmış iken, (1010) ve (1090) yüzeyleri için terasları oluşturan atom zincirleri; basamak zinciri-step chain-(SC), ilk orta zincir-first middle chain-(1MC), ikinci orta zincir-second middle chain-(2MC) şeklinde zincir sayısı ile orantılı olarak yedinci orta zincir-seventh middle chain-(7MC)’ e kadar giderken, terastaki en son zincir, köşe zinciri-corner chain-(CC) olarak adlandırılmıştır.



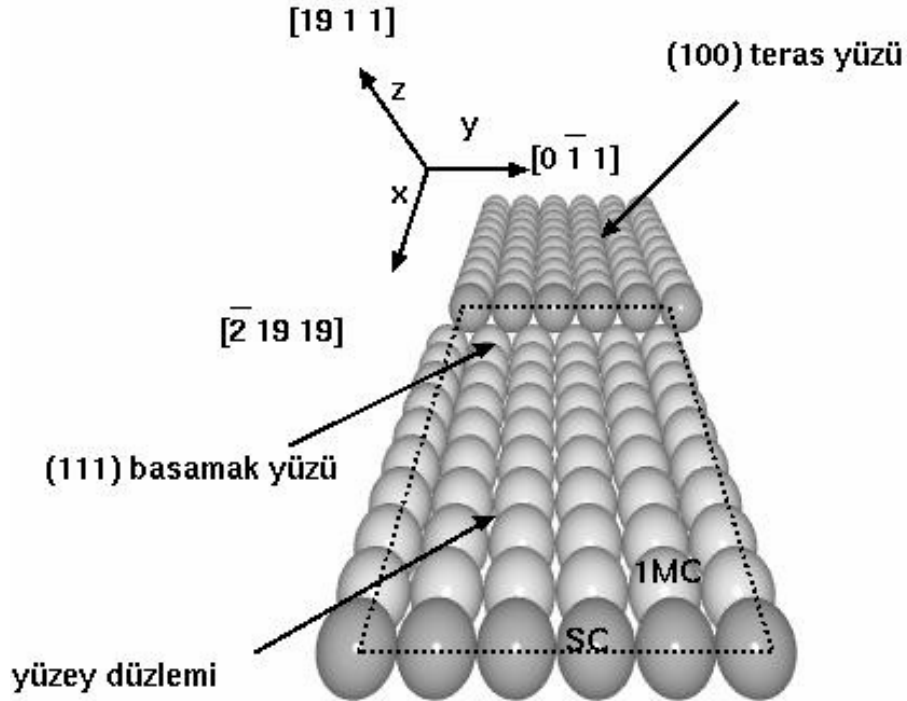
Şekil 3.8.a. Cu(210)^b yüzeyinin önden görünüşü.



Şekil 3.8.b. Cu(10 9 0) yüzeyinin önden görünüşü.



Şekil 3.9.a. Cu(19 1 1) yüzeyinin yandan görünüşü.

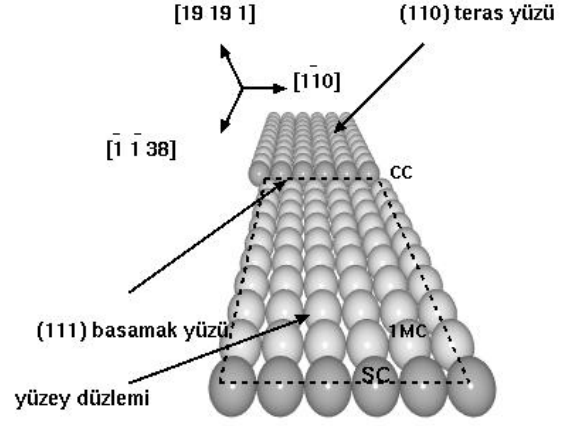


Şekil 3.9.b. Cu(19 1 1) yüzeyinin önden görünüşü.

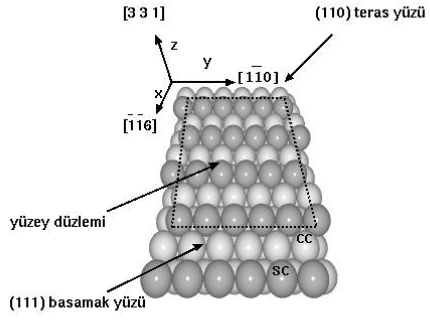
Bu yüzeyler için yapılan hesaplamalarda model hücreler kullanılmıştır. Model hücrelerinin z -ekseni boyunca hücre uzunluğunu belirleyen tabaka sayısı alt ve üst yüzeylerinin birbirleriyle etkileşmelerini önleyecek şekilde belirlendi. Yüzeylerin süper hücre boyutları $N_x \times N_y$ seklindedir ve burada N_x yüzeyin teras sayısı, N_y ise basamak doğrultusu boyunca atomların sayısını göstermektedir. Örneğin süper hücre boyutları (210) yüzeyi için 8×6 (8 teras ve her bir zincirde 6 atom) olacak şekilde seçildi. Simulasyonlarda x ve y eksenleri boyunca periyodik sınır koşulları uygulanmışken z -doğrultusunda böyle bir bağ koşulu uygulanmadı. Çalışılan tüm yüzeylerin yapısal gösterimleri (notasyonları), kristalografik özellikleri ve de hücre boyutları Tablo 3.1’de görülmektedir. Ayrıca yüzeylerin Miller indislerinin belirlenimi Ek C’ de ayrıntılı olarak verilmiştir.

Tablo 3.1. Yüzeylerin yapısal gösterimleri (notasyonları) ve özellikleri.

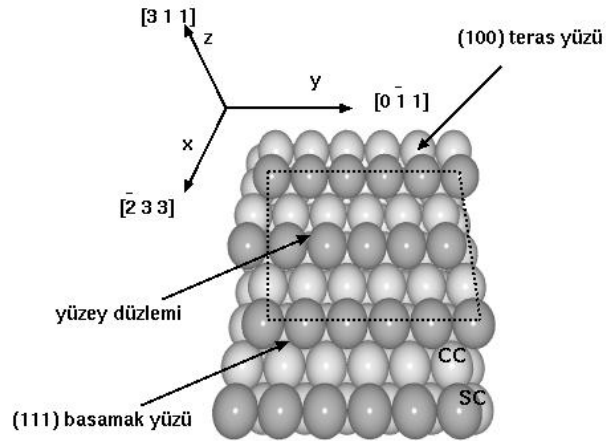
Miller İndisi (hkl)	Basamak Gösterimi (Notasyonu) El(Cu)-[m(h _t k _t l _t) x n(h _s k _s l _s)]	Basamak Köşesi	Kesme Açısı (derece)	Süper Hücre Boyutları $N_x \times N_y$	Tabaka Sayısı
(210) ^a	2(100) x (110)	[001]	26.5	8x6	48
(210) ^b	2(110) x (100)	[001]	18.4	8x6	32
(10 1 0)	9(100) x (110)	[001]	6.3	2x6	160
(10 9 0)	9(110) x (100)	[001]	3.4	2x6	144
(331)	2(110) x (111)	[1 $\bar{1}$ 0]	13.26	8x6	32
(1919 1)	10(110) x (111)	[1 $\bar{1}$ 0]	2.13	2x6	144
(311)	2(100) x (111)	[0 $\bar{1}$ 1]	25.23	8x6	32
(19 1 1)	10(100) x (111)	[0 $\bar{1}$ 1]	4.25	2x6	144



Şekil 3.10. Cu(19 19 1) yüzeyinin önden görünüşü.



Şekil 3.11. Cu(331) yüzeyinin önden görünüşü.



Şekil 3.12. Cu(311) yüzeyinin önden görünüşü.

4. KURAMSAL YÖNTEMLER

4.1. Gömülü Atom Yöntemi-GAY(Embedded Atom Method-EAM)

Katışkılı-kirli metaller, yüzey ya da başka kusur içeren metallerin yapısal özellikleri ve de değişik enerji değerleri (kusur enerjisi, katışkı enerjisi, boşluk enerjisi, yüzey enerjisi) bu tezin konusu olduğu gibi, yoğun madde fiziği çevresinde de fazlaca ilgi kaynağı olagelmıştır [15]. Bu alanlardaki deneysel bulgular sık sık kapsamlı kuramsal çalışmalarla desteklenmektedir. Bu tür çalışmaların sonuçları tamamıyla sistemin enerjisinin nasıl hesaplandığına bağlıdır. Bant kuramları [13] genellikle periyodikliğin gerekliliği ve baz sabiti büyüklüğü tarafından sınırlandırıldığından [24, 25] kalıtsal kısıtlamalar içerir. Aynı şekilde Cluster yöntemleri [13] de kümelerin büyüklüğü yada bilgisayarlarca izin verilen temel sabitler tarafından sınırlandırıldığından uygulamaya bağlı kısıtlamalar içerir. Hem Bant kuramı hem de Cluster yaklaşımında toplam enerji birçok tek elektron enerjisinin toplamı olarak verilir. Bu yöntemlerde, kişi sonuçta sadece bir sayı elde etmek için bir çok özdeğer problemi çözer. Bu da uygulamaya dönük sorun demektir. Alternatif olarak, iki cisim etkileşim potansiyelleri en temel kuramsal hesaplama yöntemleri [26] ya da deneysel yöntemlerle [27] elde edilir. Temel hesaplama yöntemleri iyonlar arası etkileşim potansiyelinin tamamıyla elektronik yapı hesaplamaları ile belirlenmesini içerirken, deneysel yöntemlerde Morse ya da Lennard-Jones gibi ikili potansiyeller seçilerek, bu potansiyelleri, parametreleri deneysel olarak ölçülmüş örgü sabiti, elastik sabitler, boşluk oluşturma ve uzaklaştırma enerjisi gibi değerleri yeniden üretecek şekilde belirlenmesini (fitlenmesini) içerir. Bu şekilde elde edilen ikili potansiyel yöntemleri, toplam enerjiyi doğrudan elde ederken, bir metalin elastik özelliklerini tespit etmek için eşlik eden hacme bağlı enerji [28] kullanımı gerekir. Hacme bağlı herhangi bir belirsizlik ikili potansiyel hesabının sonuçlarını otomatik olarak geçersiz kılar. Çünkü katının elastik özellikleri tam olarak belirtilmemiştir. Böyle belirsizlikler yüzeyler içeren hesaplarda artar, örneğin yüzeyde atomik ölçekte hacmin sona erışı

belirsizdir. Yüzeydeki yer deęiřtirmeler, yeniden yapılanma veya kusurlar bu belirsizlięi daha belirgin yapar.

İřte yukarıda açıklanan tüm sorunların üstesinden gelebilecek ve de aranılan büyüklükleri, olan bilgisayar hesaplama yöntemleri ile en kısa sürede verecek etkileřim potansiyeli gereksinimini karřılamak için Foiles, Daw ve Baskes 1986 yılında Gömülü Atom Yöntemini-GAY [12] geliřtirmişlerdir. GAY sistemi oluřturan her bir atomun enerjisini elektron yoğunluęuna baęlı olarak tanımladıęından ve de yoğunluk her zaman tanımlanabilir olduęundan, kusur varlıęında hacmin tanımlanamama problemini ortadan kaldırır. Sistemimizdeki atomlar arası etkileřimleri tanımlayan Gömülü Atom potansiyeli çok-cisimli yarı deneysel bir potansiyeldir. Atomlar arası etkileřimi tanımlayan bu yöntem birçok probleme uygulanarak oldukça iyi sonuçlar vermiştir. Kusur varlıęında, örneęin bir yüzey varlıęında uygulanınca yüzey enerji deęerleri ve geometrileri için gerçeķci deęerler elde edilmiştir [13]. Bu potansiyel 6 tip fcc metalleri Cu, Ag, Au, Ni, Pd, Pt ve de bunların alařımları için iç ve yüzey sistemlerinin birçoęunun karakteristiklerini oluřturmada deneysel sonuçlarla uyum göstermiştir [12]. Ayrıca Hidrojenin metallerle etkileřmesi çalışmasında da kullanılmıştır [15]. Yapılan çalışmalar göstermiştir ki, bu potansiyel özellikle Cu' n düz ve komřu-vicinal yüzeylerinin enerji deęerlerinin tanımlanmasında azımsanmayacak başarı göstermiştir [14]. GAY fonksiyonları 6 tip fcc metalleri ve alařımları için deneysel olarak, tahmin edilen iç örgü sabiti, elastik sabitler, boşluk oluřturma enerjisi gibi fonksiyonlara fitleyerek belirlenir. Bu da potansiyelin yarı deneysellięinin kaynaęıdır.

Kırıklar, yüzeyler, katıřkılar gibi kusurları içeren metalik sistemlerin atomları arasındaki etkileřmelerin tanımlanabilmesi için ortaya atılan bu yöntem, daha önce ortaya konan Quasiatom Yöntemine dayanır. Bu yöntem ortamda bulunan katıřkının enerjisini ortam uyarılmadan (perturbe edilmeden) önceki elektron yoğunluęunun bir fonksiyoneli olduęunu ispatlar. Buna göre, katıřkının enerjisi;

$$E = F_z \left(\rho_h(R) \right) \quad (4.1)$$

řeklinde verilir [13]. Burada $\rho_h(R)$, ortamın katıřkının bulunduęu konumda katıřkı konmadan önceki elektron yoğunluęu, z ve R katıřkının tipi ve konumunu belirler.

İşte GAY ise bir katıyı oluşturan her bir atomu, katının diğer tüm atomlarını içeren bölgeye (host) gömülü bir katışkı olarak görür. Katışkının bu bölgeye (host) gömülme enerjisini (embedding energy) Quasiatom Yöntemini kullanarak elektron yoğunluğuna bağlı kılar.

Gömülü Atom Yönteminde her bir atomun enerjisi, metali oluşturan diğer atomlar tarafından sağlanan yerel elektron yoğunluğuna atomu gömmek için gerekli enerjiden hesaplanır. Böylece diğer atomların oluşturduğu bölgeye gömülü olarak kabul edilen her bir atomun (katışkı) enerjisi şu şekilde verilir;

$$E_i = F_i(\rho_{h,i}) + \frac{1}{2} \sum_j \varphi(R_{i,j}) \quad (4.2)$$

Burada $\rho_{h,i}$ atomunun bulunduğu bölgede (i atomu olmadan) elektron yoğunluğudur ve bu yoğunluğa katkı yapan komşu atomların atomik yük yoğunluklarının (ρ_j^a) üst üste bildirilmesi olarak tanımlanır, j atomunun elektron yoğunluğu, merkezinden uzaklığın bir fonksiyonu olarak;

$$\rho_{h,i} = \sum_{j \neq i} \rho_j^a(R_{i,j}) \quad (4.3)$$

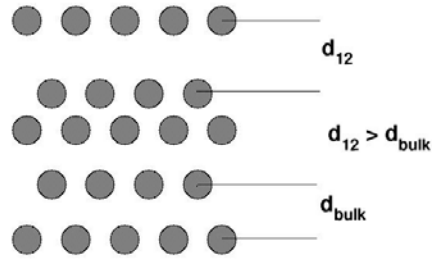
$R_{i,j}$, i ve j atomları arasındaki mesafe iken, $F_i(\rho_{h,i})$ i atomunu elektron yoğunluğu $\rho_{h,i}$ olan yere gömmek için gerekli enerji, φ ise i ve j atomları arasındaki kısa erimli ikili potansiyeldir. E_i ifadesindeki F_i , etkileşim potansiyelinin çekici kısmını tanımlarken, φ itici parçasını tanımlar. Böylece bir katının toplam enerjisi basitçe, katıdaki tüm atomlar üzerinden toplamla verilir;

$$E_{toplam} = \sum_i F_i(\rho_{h,i}) + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \varphi(R_{i,j}) \quad (4.4)$$

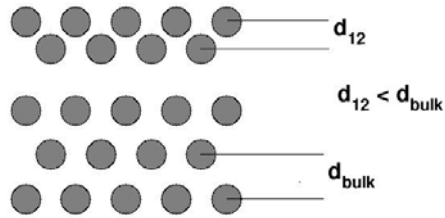
5. HESAPLAMALAR VE TARTIŞMALAR

5.1. Relaxationlar Ve Kuvvet Sabitleri

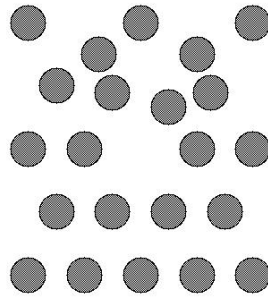
Bir kristal belirlenen bir doğrultuda kesilerek yüzey oluşturulduğunda, yüzey ve yüzeye yakın atomlar kesimden önce yüzey üzerindeki atomlarla var olan bağlarını kaybederler. İçteki atomlara göre farklı olan bu atomik çevre içerisinde oluşan yeni yerel kuvvet alanlarının etkisiyle, yüzeyde ve yüzeye yakın atomlar yeni denge konumlarını alırlar. Yüzey etrafındaki atomların konumlarında içteki atomlara göre olan bu değişimlere relaxation adı verilir. Konumlardaki yer değiştirmelerin özelliklerine göre relaxation olayı ayrı şekillerde olabilir. Yüzey civarındaki atomik düzlemler yüzeye dik doğrultuda içeriye ya da dışarıya doğru hareket ederlerse buna düzlemler arası relaxation (daralma ve genişlemeler) denir. Bundan farklı olarak yüzey atomları yüzey içinde içte var olan simetriyi bozmayacak şekilde yer değiştirerek yeni denge konumlarını buluyorlarsa buna da düzlem içi relaxation (yer değiştirme) adı verilir. Eğer yüzeydeki ardışık düzlemler arası mesafe içteğine göre küçük ise düzlemler arası yer değiştirmelerin bir daralma-contraction şeklinde olduğu söylenir (Şekil 5.1.b). Diğer durumlarda, bu mesafe iç karşılığındaki mesafeden büyük ise düzlemler arası yer değiştirmelerin bir genişleme-expansion ile sonuçlandığı söylenir (Şekil 5.1.a). Bu tür yer değiştirmelerde yüzeye normal doğrultuda simetri kaybolurken, yüzeye paralel doğrultuda simetri korunur. Çoğu metal yüzeylerde bu atomik yer değiştirmeleri karakterize eden iki genel özellik vardır. Bunlardan biri ilk tabakalar arası mesafede genelde bir daralma ve diğeri de daha derin tabakalara doğru yayılan salınımlı daralma ve genişlemelerdir. Bu daralma ve genişlemelerin katının derinliklerine doğru yayılması davranışı ilk kez Cu(110) yüzey yapısının belirlenmesi için Davis ve arkadaşlarının yaptığı LEED çalışmalarında ortaya çıkarılmıştır [18].



Şekil 5.1.a. Genişleme (Expansion)



Şekil 5.1.b. Daralma (Contraction)

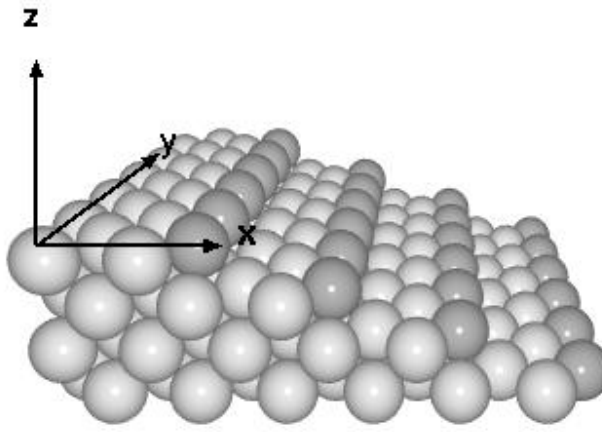


Şekil 5.1.c. Yeniden yapılanma (Reconstruction)

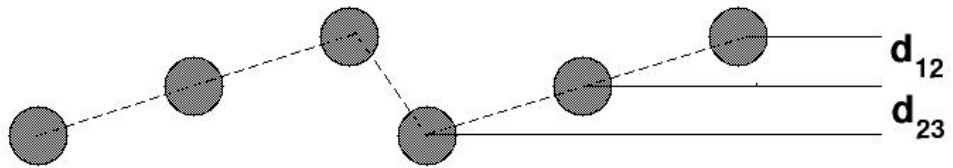
Bazı durumlarda ise, yüzeyin oluşturulması ile sisteme yapılan uyarı öyle güçlü olur ki, yüzey atomları içte var olan yüzeye paralel simetriden tamamıyla farklı bir simetri ile konuşlandırılır. Buna da yeniden yapılanma (reconstruction) adı verilir (Şekil 5.1.c).

Bu tür relaxationlarda yüzey bölgesinde içte var olan yüzeye normal doğrultuda hem de yüzeye paralel doğrultudaki simetri kaybolur.

Basamaklı yüzeylerde ise, yüzey atomları hem x hem de z doğrultularındaki komşu atomlarını kaybetmelerinden dolayı (Şekil 5.2), her iki doğrultu boyunca değişen kuvvet alanları etkisiyle yüzey atomları yeni denge konumlarını alırlar. Bu yer değiştirmelerin yüzeye dik bileşenleri (z) düzlemler arası daralma ve genişlemeye yol açarken, yüzeye paralel bileşenleri düzlem içi (intralayer registry) yer değiştirmeye sebep olurlar. Basamaklı yüzeyler için atomik düzlemler (tabakalar) ve düzlemler arası mesafeler Şekil 5.3.' de gösterilmiştir.



Şekil 5.2. Basamaklı bir yüzeyde doğrultular.



Şekil 5.3. Basamaklı bir yüzeyde tabakalar arası boşluk tanımı (yandan görünüş)

Yüzey kusurları (basamaklar, kinkler, ek atom, boşluklar, vb.) varlığında oluşan simetri azalması ile elektronik ve iyonik yük dağılımının yeniden düzenlenmesi sonucu, bu kusurlar civarındaki kuvvet sabitlerinin içteki değerlerine göre değişimine neden olurlar. İki atom arasındaki kuvvet sabiti matris elemanı $k_{\alpha,\beta}(i,j)$, i atomu üzerinde α -doğrultusunda j atomunun β doğrultusundaki birim yer değiştirmesinden kaynaklanan kuvvetin ölçütüdür. Yüzey atomları arasındaki kuvvet sabitlerinin içtekilerle karşılaştırılması yüzey etrafındaki atomların yerel yer değiştirmeleri hakkında bilgilendirici olabilir.

5.2. Cu' n Yüksek Miller İndisli Ve Gevşek İstiflenmiş Basamaklara Sahip Cu(210)^a, Cu(210)^b, Cu(10 1 0) ve Cu(10 9 0) Yüzeylerinin Tabakalar Arası Daralma Ve Genişlemeleri

Çalışılan her bir Cu yüksek Miller indisli (vicinal) ve gevşek istiflenmiş basamaklara sahip yüzeyler için yüzey normali doğrultusunda (z -bileşen) tabakalar arası mesafelerdeki içe göre olan daralma ve genişlemelerin yüzde değişimi ve yüzeye paralel doğrultuda (x -bileşen) atomlar arası mesafelerdeki (in-plane relaxation) yüzde değişim değerleri hesaplandı ve sonuçlar sırasıyla Tablo 5.1 ve Tablo 5.2'de verildi. Tablo 5.1' de GAY potansiyeli kullanarak yaptığımız çalışmada Cu(210)^a, Cu(210)^b, Cu(10 1 0) ve Cu(10 9 0) yüzeyleri için elde edilen veriler ayrıca Cu(210)^a yüzeyi için LEED deneysel çalışmasının verileri ile Cu(410) ve Cu(310) yüzeyleri için var olan kuramsal veriler sunulmuştur. Cu(210)^a, Cu(310), Cu(410) ve Cu(10 1 0) yüzeyleri aynı komşu (vicinal) yüzey ailesinden olup (100) teras ve (110) basamak yönelimine sahipken, terasta dizilen atomik zincir sayılarında farklılık gösterirler. Bu yüzeylerin teraslarındaki atomik zincir sayıları sırasıyla iki, üç, dört ve on şeklindedir. Cu(210)^b ve Cu(10 9 0) yüzeyleri ise teras yönelimleri (110) ve basamak yönelimleri (100) olan yüzey ailesi üyeleri iken teraslarındaki atomik zincir sayıları sırasıyla iki ve on dur. Tablolardaki yüzde değişim değerleri hesaplanırken yüzeye normal (z -bileşen) doğrultudaki yüzde değişim değerleri için $d_{i,i+1} = 100 \times [(z_i - z_{i+1}) - d_b] / d_b$ kullanılmışken, yüzeye paralel doğrultudaki yüzde değişim değerleri için $r_{i,i+1} = 100 \times [(r_i - r_{i+1}) - r_b] / r_b$ ifadesi kullanılmıştır. Burada z_i , z_{i+1} ardışık tabakaların z konum değerlerini gösterirken, d_b ve r_b sırasıyla iç haldeki tabakalar arası mesafenin değeri ve içteki halde yüzeye paralel doğrultudaki atomların birbirlerine

Tablo 5.1. Cu'n yüksek Miller indisli ve gevşek istiflenmiş basamaklara sahip yüzeylerinin tabakalar arası mesafelerindeki daralma ve genişlemelerinin yüzde değişimleri. Cu(310) ve Cu(410) yüzeyleri için veriler [22]' den ve Cu(210)^a-LEED verisi [9]' dan alınmıştır.

	Cu(210) ^a	Cu(210) ^a -LEED	Cu(310)	Cu(410)	Cu(10 1 0)	Cu(210) ^b	Cu(10 9 0)
d ₁₂	% -12.14	% -11.12(+/-2.0)	% -12.06	% -12.67	% -19.3	% -12.18	% -29.8
d ₂₃	% -1.28	% -5.68 (+/-2.3)	% -11.24	% -8.74	% -8.4	% -1.28	% -6.89
d ₃₄	% +3.07	% +3.83 (+/-2.5)	% +2.79	% -11.63	% -5.51	% +3.07	% -5.06
d ₄₅	% -3.38	% +0.06 (+/-3.0)	% +5.86	% +6.16	% -4.36	% -3.38	% -4.46
d ₅₆	% +0.41	% -0.66 (+/-3.5)	% -4.16	% +9.16	% -4.41	% +0.41	% -4.0
d ₆₇	% +0.82		% -4.24	% -4.6	% -5.51	% +0.82	% -3.6
d ₇₈	% -0.69		% +2.33	% -5.54	% -8.76	% -0.69	% -7.73
d ₈₉	% +0.17		% +2.17	% -3.64	% -19.98	% +0.16	% -19.07
d _{9 10}					% +19.83		% +19.4
d _{10 11}					% +23.81		% -12.66
d _{11 12}					% -3.33		% -5.73
d _{12 13}					% -5.98		% -4.86
d _{13 14}					% -4.93		% -4.4
d _b	0.8083 Å	0.8079 Å	0.572 Å	0.438 Å	0.199 Å	0.8083 Å	0.1501 Å

olan uzaklıklardır. Tablo 5.1' den görüldüğü gibi her bir yüzey için ilk iki tabaka arasındaki mesafe daralmaya uğramıştır. Bu davranış ilk olarak Jepsen, Marjus ve Jona'nın 1972 yılında yaptıkları LEED deneysel çalışmasıyla ortaya çıkarılmıştır [19]. Bu çalışmada Al(110) yüzeyinin ilk iki tabakası arasındaki mesafede iç değerine nazaran daralma gözlenmiştir ve daha sonra yapılan bir çok yüksek Miller indisli fcc metallerinin yüzey çalışmalarında bu davranış doğrulanmıştır [9, 8, 20, 21]. LEED çalışmaları ilk tabakalar arası mesafedeki daralmanın genellikle açık metal yüzeylerde daha belirgin olduğunu göstermiştir.

Tablo 5.1'deki hesaplarımızdan görüldüğü gibi içe doğru inildikçe ardışık tabakalar arasında da ihmal edilemeyecek daralma ve genişlemeler görülmektedir. Bu fark edilir etki özellikle geniş teraslı Cu(10 1 0) ve Cu(10 9 0) yüzeylerinde çok belirgin bir şekilde ortaya çıkıyor. Tablo 5.1' de Cu(210)^a, Cu(310) ve Cu(410) yüzeylerinde tabakalar arası mesafelerin daralma ve genişleme değerlerinin birbirlerine yakın olduğu görülmektedir. Bu yüzeylerin ilk iki tabakalar arası mesafelerindeki daralma ve genişleme değerleri yaklaşık % 12 civarındadır. Cu(210)^b yüzeyi için hesaplanan daralma ve genişleme değerleri farklı teras ve basamak yönelimi içeren Cu(210)^a yüzeyi ile aynı olması ilgi çekicidir. Daha geniş teraslı Cu(10 1 0) ve Cu(10 9 0) yüzeylerinin ilk iki tabakalar arası mesafelerindeki daralma ve genişleme değerleri sırasıyla % 20 ve % 30 civarındadır. Cu(10 1 0) yüzeyinde d₈₉ tabakaları arasındaki daralma değeri, d_{9 10} tabakaları arasındaki

genişleme değeri ve $d_{10\ 11}$ tabakaları arasında gözlenen genişleme değeri d_{12}' den daha büyük bulunmuştur. Bu davranışlar bu tabakalara karşılık gelen (CC, SSC, BNN) atomların yerel atomik yer değiştirmeleri incelendiğinde anlaşılabilir. Cu(10 9 0) yüzeyinde $d_{9\ 10}$ tabakaları (BNN ve CC atomları) arasındaki mesafede gözlenen genişleme değeri d_{12}' den küçük bulunmuştur. Diğer tabakalar arası mesafelerde daralmalar gözlenmiştir. Yine bu davranışlar bu tabakalara karşılık gelen atomların yerel atomik yer değiştirmeleri ile uyum içindedir. Bu atomların yerel atomik yer değiştirme davranışları bir sonraki bölümde ayrıntılı olarak verilmiştir.

Tablo 5.1'den görüldüğü gibi Cu(210)^a yüzeyi için tabakalar arası mesafedeki daralma ve genişlemelerin yüzde değişimleri nitelik olarak dördüncü tabakaya kadar LEED deneysel çalışmasından elde edilen verilerle uyum içindedir [9]. Hesaplarımız sonucunda elde ettiğimiz verilere göre dördüncü ve beşinci tabakalar arası boşlukta bir daralma gözlenmekte iken, LEED ölçümünde bir genişleme söz konusudur. LEED ölçümlerinde tabakalar arası bu daralma ve genişleme değerleri derinlere doğru gidildikçe yüzeyden içe doğru düzgün olarak azalan büyüklükte kendini göstermekteyken ($|d_{12}| > |d_{23}| > |d_{34}|$), hesaplarımız ($|d_{45}| > |d_{34}|$ ve $|d_{34}| > |d_{23}|$) düzgün olmayan karakter göstermektedir. Hesaplarımızda çıkan bu davranış daha önceki bir çok LEED deneylerinde de gözlendi. Örneğin Al(210) için ($|d_{34}| > |d_{23}|$) şeklinde [8], Pd(210) yüzeyinde ise ($|d_{23}| > |d_{12}|$) olacak şekilde [10] gözlenmiştir. Ayrıca yukarıda söz konusu edilen LEED çalışmasında yazarlar basit bir modelleme ile yük dağılımının z doğrultusundaki değişimini belirleyerek bulunan deneysel sonuçların doğruluğunu göstermeye çalıştılar. Kuramsal bulgularımız bu deneysel sonuçlarla uyummadığına göre bu yüzey için basit modelleme ile yük dağılımının belirlenmesi yerine, kapsamlı elektronik yapı hesaplamalarının gereğinin doğduğuna inanıyoruz.

Tabakalar arası mesafelerdeki daralma ve genişlemelerin salınımlı davranışı bizim çalışmamızda her iki tip Cu(210) yüzeyleri için (-,-,+,-,+,-,+) olacak şekilde yüzeyden içe doğru zaman zaman artan-azalan büyüklüklerde gözlenmiştir. Yakın zamanda Cu(210)^a yüzeyi için yapılan deneysel çalışmada (LEED) [9] ise bu salınımlı davranış doğası (-,-,+,-,-) olacak şekilde kaydedilmiştir. Bu salınımlı davranış Al(210) yüzeyi için (-,-,+,-) [8], Pt(210) yüzeyinde (-,-,+,-,-) ve içe doğru inildikçe azalan değerler

şeklinde [6], Fe(210) yüzeyi için (-,-,+, -) [8] ve Na(210) yüzeyinde (-,-,+, -) olacak şekilde ölçülmüştür [5]. Cu(10 1 0) ve Cu(10 9 0) yüzeylerinde tabakalar arası mesafelerdeki daralma ve genişlemelerin salınımlı davranışları sırayla (-,-,-, ..., +, +, -, -) ve (-,-,-, ..., +, -, -, -) olacak şekilde gözlenmiştir. Çalışılan bu geniş teraslı yüzeyler için karşılaştırma yapabileceğimiz deneysel bir çalışma bulunamamıştır.

Cu(210)^a yüzeyi için yapılan deneysel çalışmada yüzeye paralel doğrultudaki (x-bileşen) atomların birbirlerine olan uzaklıklarının içe göre yüzde değişimi verilerine bakıldığında (in-plane relaxation) genel olarak oldukça küçük değerler ölçülmüştür [9]. Bu veriler deneysel hata sınırları içinde bizim hesaplarımızla uyum içindedir. Tablo 5.2'ye bakıldığında Cu(210)^a, Cu(10 1 0) ve Cu(10 9 0) yüzeyleri için yüzeye paralel doğrultudaki (x-bileşen) atomların birbirlerine olan uzaklıklarının (in-plane relaxation) yüzde değişimi ilk iki tabaka arasında daralma gösterirken, Cu(210)^b yüzeyinde bir genişleme görülmektedir. Dar teraslı Cu(210)^b yüzeyinde yüzey düzlemine paralel doğrultuda atomlar arası mesafelerdeki daralma ve genişlemelerin salınım davranışı (+, +, -, +, +, -, +, +) olacak şekilde görülmüştür. Cu(210)^a yüzeyinde ise bu salınımlı davranış (-, -, +, -, -, +, -, -, +) halindedir. Cu(10 1 0) geniş teraslı yüzeyinde yüzey düzlemine paralel doğrultuda atomlar arası mesafeler (in-plane relaxation), yüzeyden içe doğru zaman zaman artan-azalan büyüklükte gözlenmiştir.

Tablo 5.2. Cu'n yüksek Miller indisli ve gevşek istiflenmiş basamaklara sahip yüzeylerinin yüzey düzlemi içindeki atomlarının birbirlerine olan uzaklıklarının yüzde değişimleri (In-plane relaxations). Cu(310) ve Cu(410) yüzeyleri için veriler [22]' den ve Cu(210)^a -LEED verisi [9]' dan alınmıştır.

	Cu(210) ^a	Cu(210) ^a -LEED	Cu(310)	Cu(410)	Cu(10 1 0)	Cu(210) ^b	Cu(10 9 0)
r ₁₂	% -0.77	% -1.83 (+/-3.0)	% -1.74	% -2.08	% -2.23	% +0.52	% -0.91
r ₂₃	% -1.44	% -2.51 (+/-3.2)	% -1.06	% -1.63	% -1.59	% +0.96	% -0.06
r ₃₄	% +0.74	% +1.68 (+/-3.5)	% -0.5	% -0.27	% -0.61	% -0.49	% -0.05
r ₄₅	% 0.00	% -0.48 (+/-3.7)	% +1.52	% -0.3	% -0.41	% +0.01	% 0.00
r ₅₆	% -0.15	% +0.06 (+/-4.0)	% -0.48	% +1.79	% -0.37	% +0.10	% 0.00
r ₆₇	% +0.29		% -0.47	% -0.06	% -0.37	% -0.19	% 0.00
r ₇₈	% -0.06		% 0.00	% +0.9	% -0.31	% +0.05	% -0.10
r ₈₉	% 0.00		% 0.00	% -0.4	% +0.01	% +0.03	% +0.13
r _{9 10}					% +0.19		% +0.32
r _{10 11}					% +2.21		% -0.02
r _{11 12}					% -0.03		% -0.04
r _{12 13}					% -0.45		% -0.03
r _{13 14}					% -0.38		% -0.03
r _b	1.6166 Å	1.6158 Å	1.715 Å	1.753 Å	1.796 Å	2.425 Å	2.551 Å

Cu(10 9 0) yüzeyi de aynı davranışı göstermektedir. Bir sonraki bölümde çalışılan yüzeylerin yüzey tabakalarında yerel atomik davranışlar incelenecek ve var olan değerlerle karşılaştırmalar yapılacaktır.

5.3. Cu(210)^a, Cu(210)^b, Cu(10 1 0) ve Cu(10 9 0) Yüzeylerinin Yerel Atomik Davranışları

Çalışılan Cu(210)^a, Cu(210)^b, Cu(10 1 0) ve Cu(10 9 0) yüzeylerindeki yerel atomik yer değiştirmelere bakarak, yerel atomik çevrenin bu atomların yerel yer değiştirmeleri üzerine etkisini belirleyebilmek için basamak zinciri atomu ve komşuluğundaki atomların tek tek yer değiştirmeleri hesaplandı. Basamak kenarındaki düşük koordinasyonlu bölge varlığı basamak zinciri atomunun (step chain-SC) ve civarındaki atomlarla olan bağ uzunluğunun değişimine yol açacaktır. Basamak zinciri ve çevresindeki en yakın komşu atomlar arası bağ uzunluklarının içe göre yüzeyde nasıl değiştiği hesaplanarak Tablo 5.3’de verilmiştir.

Tablo 5.3’ den görülüyor ki; yüzey varlığı, atomlar arasındaki bağ uzunluklarının en çok z-bileşeninde etkisini hissettirmektedir. Basamak zinciri atomunun (step chain-SC) ve bu atoma en yakın komşu atomlar arasındaki bağların yüzey ve içteki değerlerinden bu bağların yüzde değişimleri hesaplanarak bu değerler Tablo 5.4’ de sunuldu.

Tablo 5.3. Basamak zinciri atomu (SC) ve en yakın komşu atomları arasındaki bağ uzunlukları

Yüzey	Atomlar	Yüzey			İç		
		<i>dx</i>	<i>dy</i>	<i>dz</i>	<i>dx</i>	<i>dy</i>	<i>dz</i>
Cu(10 9 0)	SC-1MC	2.528	0.000	0.105	2.552	0.000	0.150
	SC-CC	1.377	1.807	1.079	1.350	1.807	1.200
	SC-BNN	1.182	1.807	1.259	1.200	1.807	1.350
Cu(10 1 0)	SC-1MC	1.756	1.807	0.161	1.796	1.807	0.199
	SC-SSC	0.302	1.807	1.683	0.199	1.807	1.796
	SC-BNN	1.534	0.000	1.930	1.596	0.000	1.996
Cu(210) ^a	SC-CC	1.604	1.807	0.709	1.616	1.807	0.808
	SC-BNN	0.784	0.000	2.340	0.808	0.000	2.425
	SC-SSC	0.844	1.807	1.507	0.808	1.807	1.616
Cu(210) ^b	SC-CC	2.436	0.000	0.709	2.425	0.000	0.808
	SC-BNN	0.844	1.807	1.507	0.808	1.807	1.616

Tablo 5.4. Basamak zinciri atomunun (step chain-SC) en yakın komşu atomlara olan bağ uzunluğunun iç değerlerine göre olan yüzde değişimi.

Bağ	Cu(210) ^a	Cu(10 1 0)	Cu(10 9 0)	Cu(210) ^b
SC-BNN	% -3.47	% -3.26	% -6.8	% -6.73
SC-CC	% -12.17	—	% -10.1	% -12.19
SC-SSC	% -6.74	% -6.27	—	—
SC-1MC	—	% -19.28	% -29.8	—

Tablo 5.4’ den görüleceği gibi Cu(210)^a yüzeyindeki atomlar arası bağ uzunluğunda gözlenen en fazla değişim, basamak zinciri ve köşe zinciri (SC-CC) atomları arasındaki bağda % 12.17’ lik daralma şeklinde görülmüştür. Bunu takiben basamak zinciri ve basamak altı zinciri (SC-SSC) atomları arasındaki bağ uzunluğunda % 6.74, basamak zinciri ve içteki en yakın komşu (SC-BNN) atomları arasındakinde ise % 3.47’ lik daralmalar görülmüştür. Yüzey varlığı ile z doğrultusu boyunca bozulan simetriye ek olarak x doğrultusu boyunca bozulan simetri, bağ uzunluklarının x - bileşeninin de değişimine neden olmaktadır Tablo 5.3. Cu(210)^a yüzeyinde bu değişimler basamak zinciri ve (SC-SSC) basamak altı zinciri atomları arasında % 4.4’lük artışa, SC-BNN arasında % 2.9’ luk ve SC-CC arasında ise % 0.7’ lik bir azalmaya neden olmuştur. Diğer dar teraslı yüzey olan Cu(210)^b yüzeyinde ise yine en fazla bağ uzunluğu değişimi SC-CC atomları arasındaki bağda % 12.19’ luk daralma şeklinde görülmüştür.

Cu(10 9 0) ve Cu(10 1 0) geniş teraslı yüzeyleri için bağ uzunluğundaki değişim en çok basamak zinciri ve onun hemen yanındaki ilk orta zincir (first middle chain-1MC) atomları (SC-1MC) arasındaki bağ uzunluğunda sırasıyla % 29.8 ve % 19.28 değerlerinde, daha sonraki en büyük değişim Cu(10 1 0) yüzeyinde basamak zinciri ve basamak altı zinciri (SC-SSC) atomları arasındaki bağda % 6.27 ve Cu(10 9 0) yüzeyinde ise % 10.1 değerinde SC-CC atomları arasındaki bağda görülmüştür. Bu atomlar (SC-BNN) arasında ise sırasıyla % 6.8 ve % 3.26 değerlerinde daralmalar gözlenmiştir. Bu bağ uzunluklarının x -bileşenlerindeki değişimleri ise Cu(10 9 0) yüzeyi için SC-1MC arasındaki bağın x -bileşenindeki değişim % 0.9’ luk azalmaya, SC-CC arasındaki bağda % 1.9’luk artışa ve SC-BNN arasında ise % 1.5’lik azalmaya neden olmuştur. Bu x doğrultusundaki simetri azalması Cu(10 1 0) yüzeyinde ise SC-1MC arasındaki bağın x -bileşenindeki değişim % 2.2’ lik azalmaya, SC-SSC arasındaki bağda

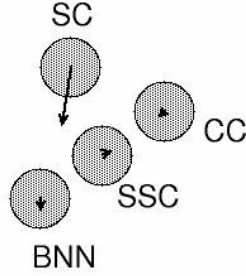
Tablo 5.5. Cu(210)^a, Cu(210)^b, Cu(10 9 0) ve Cu(10 1 0) yüksek Miller indisli yüzeylerinin yüzey atomlarının komşu sayısı.

Yüzey	SC	CC	MC	SSC
Cu(210) ^a	6	8	—	11
Cu(1010)	6	8	8	11
Cu(210) ^b	6	9	—	—
Cu(1090)	6	9	7	—

% 51.4' lük artışa ve SC-BNN arasında ise % 3.9' luk bir azalmaya neden olmuştur.

Tabakalar arası daralma ve genişlemeler ile basamak atomu ve çevresindeki atomlar arası bağlardaki değişimin daha iyi anlaşılabilmesi için yüzey ve yüzey yakınındaki her bir atomun relaxation sürecinde yer değiştirmeleri hesaplanarak; Şekil 5.4.a, Şekil 5.4.b, Şekil 5.4.c ve Şekil 5.4.d'de sırasıyla Cu(210)^a, Cu(10 1 0), Cu(10 9 0) ve Cu(210)^b yüzeylerinde yüzey ve yüzeye yakın atomlarının yerel yer değiştirmeleri çizilmiştir. Şekillerden görüldüğü gibi bütün yüzeyler için yüzey atomları arasında metalin içine doğru hareketi en belirgin olan basamak zinciri (step chain-SC) atomudur. Yerel atomik relaxationları betimleyen 5.4' teki tüm şekiller, atomların koordinasyon sayılarının kendi yerel relaxationlarına etkisini açıkça gösteriyor. Örneğin tüm bu yüzeylerde (Tablo 5.5) altı atomik koordinasyon sayısına sahip SC atomu kendi efektif koordinasyon sayısını arttırabilmek için relaxation sürecinde koordinasyonu en yüksek BNN atomuna doğru hareket etmektedir.

Şekil 5.4.a' da Cu(210)^a yüzeyinde relaxation sürecinde basamak zinciri (SC) atomu koordinasyon sayısını arttırmak için içe doğru -0.1 Å° büyüklükte içeriye hareket ederken, BNN atomu (4. tabaka atomu) içeriye, CC atomu da düşük -0.007 Å° büyüklükte içeriye doğru ve SSC (3. tabaka atomu) ise içten uzaklaşacak şekilde ve oldukça küçük bir değerle ($+ 0.0034 \text{ Å}^\circ$) yukarıya hareket etmektedir. İşte bu relaxation sürecinde BNN ve SSC atomlarının bu şekilde yer değiştirmeleri yani BNN atomunun aşağıya ve SSC atomunun ise yukarıya olan hareketleri bu atomların bulunduğu tabakalar (d_{34}) arasında hesaplanan % 3.07' lik genişlemeyi (Tablo 5.1) açıklamaktadır. Ayrıca SC ve SSC atomlarının yer değiştirme davranışları, SC atomunun içe doğru SSC atomunun ise içten yukarıya doğru ve SC' e göre daha küçük bir değerde gözlenen yer değiştirmeleri bu atomlar arasındaki bağın (SC-SSC) z-bileşeninin % 6.74' lük daralmasının da nedenini ortaya koymaktadır (bakınız Tablo 5.4.).

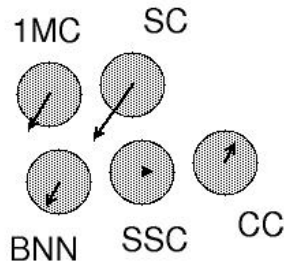


Şekil 5.4.a. Cu(210)^a yüzeyi için yerel atomik yer değiştirmeler.

SSC atomunun içten uzaklaşacak şekilde yukarıya doğru olan hareketi, BNN atomunun içe doğru hareketinden daha küçüktür. CC (2. tabaka atomu)' in içeriye doğru hareketi ile SSC atomunun (3. tabaka atomu) hareketi birleştirildiğinde bu atomların bulunduğu (d_{23}) tabakaları arasındaki daralma anlaşılır. SC (1. tabaka atomu) içeriye doğru hareketi CC' den (2. tabaka atomu) daha fazladır. Bu da bu atomların bulunduğu (d_{12}) tabakaları arasında daralmaya neden oluyor. Bu daralma SC-CC atomları arasındaki bağ uzunluğunun z -bileşeninin % 12.17' lik daralmasını da açıklar.

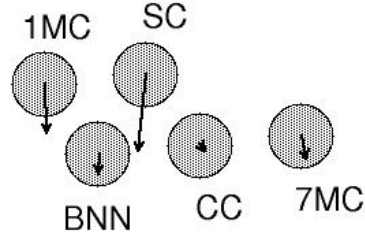
Şekil 5.4.b' de Cu(10 1 0) yüzeyinde relaxation sürecinde SC atomu içe doğru hareket ederken, onu takiben IMC ve BNN atomları da içeriye, CC ve SSC atomları içten uzaklaşacak şekilde dışarıya doğru hareket etmektedirler. BNN ve SC atomlarındaki içeriye olan hareket SC-BNN arasındaki bağın z -bileşenindeki % 3.26' lık daralmasını açıklarken, BNN atomunu (11. tabaka atomu) takiben basamak altı zinciri SSC atomunun (10. tabaka atomu) içten dışarıya olan hareketi bu atomların bulunduğu ($d_{10\ 11}$) tabakaları arasındaki % 23.81' lik genişlemeyi, ve aynı şekilde köşe zinciri CC (9. tabaka atomu) atomunun $+ 0.041 \text{ Å}^\circ$ büyüklüğünde ve SSC atomunun yer değiştirmesine ($+ 0.0011 \text{ Å}^\circ$) nazaran daha büyük olan bu yer değiştirmesi ($d_{9\ 10}$) tabakaları arasındaki % 19.83' lük genişlemeyi açıklar. SC (1. tabaka atomu) atomunun -0.1 Å° büyüklüğündeki içe doğru hareketi, IMC atomunun ($- 0.044 \text{ Å}^\circ$) yer değiştirmesine göre büyük olduğundan (d_{12}) tabakaları arasındaki daralmaya neden olur

ve de SC-1MC atomları arasındaki bağın z-bileşenindeki % 19.28' lik daralmanın sebebidir. SSC atomunun dışarıya doğru ve SC atomunun içeriye olan hareketi SC-SSC arasındaki bağın z-bileşeninin % 6.27' lik daralmasını açıklar.



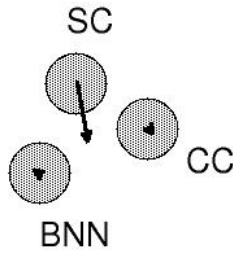
Şekil 5.4.b. Cu(10 1 0) yüzeyi için yerel atomik yer değiştirmeler.

Yine Şekil 5.4.c' ye bakıldığında Cu(10 9 0) yüzeyinde relaxation sürecinde SC atomu içe doğru hareket etmekte, SC atomu gibi 1MC, BNN, CC ve 7MC atomları da içeriye doğru hareket etmektedirler. SC ve BNN atomlarının içeriye doğru hareketi SC-BNN atomları arasındaki bağın z-bileşenindeki % 6.8' lik daralmayı açıklarken, BNN (10. tabaka atomu) atomunun içeriye olan - 0.0383 Å büyüklüğündeki hareketine nazaran onu takiben CC (9. tabaka atomu) atomunun - 0.0092 Å büyüklüğündeki içeriye doğru daha küçük olan yer değiştirmesi ($d_{9\ 10}$) tabakaları arasındaki % 19.4' lük genişlemeyi, yine aynı şekilde 7MC (8. tabaka atomu) atomunun CC atomuna göre daha büyük olan içeriye hareketi (d_{89}) tabakaları arasındaki % 19.07' lik daralmayı açıklar. SC (1. tabaka atomu) atomunun - 0.13 Å büyüklüğündeki ve 1MC atomuna göre içeriye doğru daha büyük olan hareketi (d_{12}) tabakaları arasındaki daralmaya sebep olur ve de SC-1MC atomları arasındaki bağın z-bileşenindeki % 29.8' lik daralmayı anlatır. SC atomunun CC' e göre daha büyük bir değerle içeriye olan hareketi SC-CC arasındaki bağın z-bileşenindeki % 10.1' lik daralmayı gösterir.



Şekil 5.4.c. Cu(10 9 0) yüzeyi için yerel atomik yer değiştirmeler.

Cu(210)^b yüzeyinde SC atomu içe doğru hareket ederken, BNN atomu içten uzaklaşacak şekilde yukarıya ve CC atomu içeriye doğru hareket etmektedirler. BNN (3. tabaka atomu) atomunun yukarıya olan + 0.0034 Å büyüklüğündeki hareketi CC (2. tabaka atomu)' e göre küçüktür. Bu da (d₂₃) tabakaları arasındaki % 1.28' lik daralmayı açıklarken, SC ve CC atomlarının içeriye olan hareketleri ise SC-CC atomları arasındaki bağ uzunluğunun z-bileşeninin % 12.19' luk daralmasını anlatır. Basamak zinciri (SC) atomunun içeriye olan hareketi - 0.1 Å, CC (2. tabaka atomu) atomunun daha küçük içeriye olan - 0.007 Å hareketinden daha büyüktür. Bu da SC ve CC atomlarının bulunduğu tabakalar arasında (d₁₂) gözlenen daralmanın nedenidir.



Şekil 5.4.d. Cu(210)^b yüzeyi için yerel atomik yer değiştirmeler

Tablo 5.6. Cu(410), Cu(210)^a ve Cu(1010) yüzeyleri için yüzey atomlarının x ve z doğrultularındaki A° cinsinden yer değiştirmeleri. Cu(410) verileri [22]' den alınmıştır.

Yüzey	x_{sc}	x_{mc}	x_{cc}	x_{ssc}	z_{sc}	z_{mc}	z_{cc}	z_{ssc}
Cu(210) ^a	-0.02	—	-0.01	0.01	-0.1	—	-0.007	0.003
Cu(410)	-0.08	-0.03	0.02	—	-0.1	-0.05	0.02	—
Cu(1010)	-0.084	-0.04	0.02	0.018	-0.1	-0.04	0.04	0.001

Her bir yüzey atomunun x ve z doğrultularındaki yer değiştirme miktarları hesaplanarak sonuçlar çalıştığımız Cu(210)^a ve Cu(10 1 0) yüzeyleri ile aynı yapıya sahip Cu(410) yüzeyi için var olan kuramsal değerlerle birlikte Tablo 5.6' da, Cu(210)^b ve Cu(10 9 0) yüzeyleri için ise hesaplanan değerler de Tablo 5.7'de verilmiştir.

Tablo 5.6 ve Tablo 5.7' den aktarılabilecek ilk çarpıcı bulgu, bu tip yüzeyler için teras genişliğinin basamak atomunun (SC) z doğrultusundaki yer değiştirmesine hemen hemen hiç bir etkisinin olmamasıdır. Ayrıca basamak atomunun x doğrultusunda yer değiştirme miktarı Cu(210)^a yüzeyi hariç terası oluşturan diğer atomların z doğrultusundaki yer değiştirme miktarlarından büyük olması ilgi çekicidir. Bu da yüzeyde basamakların varlığından kaynaklanan uyarımın en belirgin olarak basamak zinciri atomu (SC) tarafından hissedildiğini gösterir. Tablo 5.6' ya bakıldığında Cu(210)^a yüzeyindeki atomların yer değiştirmelerindeki diğer yüzeylere nazaran gözlenen farklılığın, bu yüzeyin terasındaki atomik zincir sayısının diğer yüzeylere oranla daha az olması ve bunun sonucunda basamak- basamak etkileşmesinin bu yüzeyde daha belirgin olabileceğini öngörüyoruz.

Tablo 5.7. Cu(1090) ve Cu(210)^b yüzeyleri için yüzey atomlarının x ve z doğrultularındaki A° cinsinden yer değiştirmeleri.

Yüzey	x_{sc}	x_{mc}	x_{cc}	z_{sc}	z_{mc}	z_{cc}
Cu(210) ^b	0.02	—	0.01	-0.105	—	-0.007
Cu(10 9 0)	-0.02	0.003	0.007	-0.13	-0.085	-0.009

5.4. Cu(210)^a, Cu(210)^b, Cu(10 1 0) ve Cu(10 9 0) Yüzeylerinin Kuvvet Sabitleri.

Basamak atomları civarındaki yerel kuvvet alanlarındaki değişimleri analiz etmek yoluyla, atomlar arası mesafelerde ölçtüğümüz değişimleri daha iyi yorumlayabiliriz. Bunun için, basamak civarındaki atomlar arası kuvvet sabitleri matrisi $k_{\alpha\beta}$ ları her bir

yüzey için hesapladık ve bu değerleri içteki karşılıkları ile kıyasladık. Bu hesaplanan kuvvet sabitleri $\text{Cu}(210)^a$, $\text{Cu}(210)^b$, $\text{Cu}(10\ 1\ 0)$ ve $\text{Cu}(10\ 9\ 0)$ yüzeyleri için sırasıyla Tablo 5.8, Tablo 5.9, Tablo 5.10 ve Tablo 5.11’de sunulmuştur.

$\text{Cu}(210)^a$ yüzeyi için Tablo 5.8’deki verilerden hesaplanan değerlere göre basamak zinciri (step chain- SC) atomu ile köşe zinciri (corner chain- CC) atomu ve içteki en yakın komşu (bulk nearest neighbor- BNN) atomları arasındaki kuvvet sabiti k_{zz} iç karşılıklarına göre sırasıyla % 70 ve % 54 oranında sertleşmişlerdir (stiffened). Bu değişimin yerel atomik relaxationlara olan yansıması SC-CC atomları arasındaki bağın z - bileşenindeki % 12.17’lik ve de SC-BNN atomları arasındaki bağın z - bileşenindeki % 3.47’lik daralmalar olarak ortaya çıkıyor. Aynı kuvvet sabiti matrisi elemanı, SC atomu ve basamak altı zinciri (sub step chain- SSC) atomları arasında % 31 oranında sertleşmiştir. Tablo 5.8’den görüldüğü gibi yüzeyde basamakların varlığı sadece yüzey atomlarının kuvvet sabiti matrislerinin köşegen elemanlarını değiştirmekle kalmıyor aynı zamanda köşegen dışı elemanlarında da değişimler gözlenmesine yol açıyor. Örneğin $\text{Cu}(210)^a$ yüzeyinde BNN-SC ve SC-CC atomları arasındaki kuvvet sabiti matrisinin k_{yz} elemanı sırasıyla % 38 ve % 40 oranlarında sertleşirken, SSC-SC atomları arasındaki de % 10 oranında sertleşmiştir. BNN-SC atomları arasındaki bu kuvvet sabiti matrisi elemanı k_{xz} , SC atomunun z doğrultusundaki birim yer değiştirmesinden dolayı x doğrultusunda BNN atomu üzerine birim kütle başına kuvveti gösterir. Relaxation sürecinde SC atomu aşağıya hareket ettiğinde SC atomunun bu hareketinden dolayı BNN atomu, üzerine etkiyen kuvvetin x - bileşeninde büyük bir artış hisseder. Bu sertleşme BNN-SC atomları arasındaki bağın x -bileşeninin daralmasını yansıtır. Bunlara ek olarak, SC-CC atomları arasındaki kuvvet sabitinin k_{yz} elemanı % 40 oranında sertleşmiştir. Fakat basamak köşesi (y) boyunca yer değiştirmeler bu doğrultudaki simetriden dolayı yasak olduğundan bu kuvvet sabiti elemanındaki k_{yz} değişim, y doğrultusu boyunca bir yer değiştirmeyeyle sonuçlanmamıştır.

$\text{Cu}(210)^b$ yüzeyi için Tablo 5.9’deki verilere göre basamak zinciri atomu SC ve köşe zinciri CC atomları ile SC ve BNN atomları arasındaki kuvvet sabiti k_{zz} iç karşılıklarına göre sırasıyla % 51 ve % 31 oranlarında sertleşmiştir. Bu değişim bu atomlar arasındaki

Tablo 5.8. Cu(210)^a yüzeyinde basamak zinciri atomu SC ile en yakın komşu atomlar arasındaki etkileşimler için kuvvet sabiti matrisleri $k_{\alpha\beta}$.

Atomlar		Yüzey			İç		
		x	y	z	x	y	z
SC-CC	x	-0.798	-0.948	-0.584	-0.735	-0.925	-0.420
	y	-0.927	-1.006	-0.647	-0.923	-0.945	-0.462
	z	-0.279	-0.313	-0.179	-0.420	-0.462	-0.106
SSC-SC	x	-0.159	-0.585	0.459	-0.106	-0.462	0.420
	y	-0.599	-1.146	0.990	-0.462	-0.945	0.924
	z	0.599	1.264	-0.960	0.420	0.924	-0.735
BNN-SC	x	-0.155	0.000	-0.857	-0.120	0.000	-0.619
	y	0.000	0.160	0.000	0.000	0.104	0.000
	z	-0.952	0.000	-2.726	-0.619	0.000	-1.771

bağların SC-CC, SC-BNN z - bileşenlerindeki % 12.19 ve de % 6.73' lük daralmaların göstergesi olarak görülebilir. Yine bu yüzeyde SC-CC atomları arasındaki kuvvet sabiti matrisinin k_{xx} elemanı % 42 oranında yumuşarken, BNN-SC atomları arasında kuvvet sabiti matrisinin aynı elemanı % 43 oranında sertleşmiştir. SC-CC atomları arasındaki kuvvet sabiti matrisinin köşegen dışı k_{xz} elemanı % 28, BNN-SC atomları arasında ise % 10 oranında sertleşmiştir.

Tablo 5.10' da ise Cu(210)^a ile aynı yapıda fakat terasında daha fazla sayıda atomik zincire sahip Cu(10 1 0) yüzeyi için kuvvet sabitleri matrisi verilmiştir. Bu yüzeyde basamak zinciri atomu SC ile ilk orta zincir atomu 1MC, BNN atomu ve SSC atomları arasındaki kuvvet sabiti k_{zz} sırasıyla % 12, % 60 ve % 32 oranlarında sertleşmiştir. Bu atomlar arasındaki bağların z - bileşenlerindeki sırasıyla % 19.28, % 3.26 ve de % 6.27 değerlerindeki daralmalar yukarıdaki kuvvet sabitlerindeki sertleşmelerin izi olarak gözlemlenebilir. SC-1MC atomları arasındaki kuvvet sabiti matrisinin köşegen dışı elemanı k_{xz} , iç karşılığına göre % 160' lık sertleşmeye, SSC-SC arasında % 12' lik yumuşamaya ve BNN-SC atomları arasında ise % 50' lik sertleşmeye maruz kalmıştır. SC-1MC atomları arasındaki kuvvet sabiti matrisinin köşegen dışı elemanı k_{xz} , 1MC atomunun z doğrultusundaki birim yer değiştirmesinden dolayı x doğrultusunda SC atomu üzerine birim kütle başına kuvveti gösterdiği hatırlanırsa, relaxation sürecinde 1MC atomu aşağıya hareket ettiğinde SC atomu, 1MC' in bu hareketinden dolayı

Tablo 5.9. Cu(210)^b yüzeyinde basamak zinciri atomu SC ile en yakın komşu atomlar arasındaki etkileşmeler için kuvvet sabiti matrisleri $k_{\alpha\beta}$.

Atomlar		Yüzey			İç		
		x	y	z	x	y	z
SC-CC	x	-1.649	0.000	-0.790	-1.771	0.000	-0.619
	y	0.000	0.030	0.000	0.000	0.104	0.000
	z	-0.359	0.000	-0.180	-0.619	0.000	-0.119
BNN-SC	x	-0.159	0.585	-0.460	-0.106	-0.462	-0.420
	y	0.599	-1.146	0.990	-0.462	-0.945	-0.924
	z	-0.599	1.264	-0.960	-0.420	-0.924	-0.735

üzerine etkiyen kuvvetin x - bileşeninde büyük bir artış hissedecektir. Bu da SC-1MC atomları arasındaki bağın x - bileşenindeki azalmayı yansıtır. BNN-SC atomları arasındaki kuvvet sabiti matrisi elemanı k_{xz} ' in sertleşmesi, relaxation sürecinde SC atomunun z doğrultusundaki hareketinden dolayı, BNN atomu üzerine etkiyen kuvvetin x - bileşeninde artış hisseder. Bu artış SC-BNN atomları arasındaki bağın x - bileşenindeki daralmayı da yansıtabilir. Bu yüzey için SC-1MC atomları arasındaki kuvvet sabiti matrisinin köşegen dışı elemanı k_{zx} , iç karşılığına göre % 65 yumuşarken, SSC-SC ve BNN-SC atomları arasındaki aynı eleman sırasıyla % 110, % 57 oranlarında sertleşmiştir.

Cu(10 9 0) yüzeyi için kuvvet sabitleri matrisi Tablo 5.11' de sunulmuştur. Bu yüzey için basamak zinciri atomu SC ile 1MC, BNN atomları arasındaki kuvvet sabiti k_{zz} iç karşılığına göre sırasıyla % 95 oranında yumuşama, % 35 oranında sertleşme ve SC-CC atomları arasındaki % 70 oranında yumuşama görülmüştür.

Tablo 5.10. Cu(10 1 0) yüzeyinde basamak zinciri atomu SC ile en yakın komşu atomlar arasındaki etkileşmeler için kuvvet sabiti matrisleri $k_{\alpha\beta}$.

Atomlar		Yüzey			İç		
		x	y	z	x	y	z
SC-1MC	x	-0.982	-0.970	-0.303	-0.920	-1.009	-0.116
	y	-1.027	-0.953	-0.308	-1.009	-0.928	-0.115
	z	0.041	0.051	0.009	-0.116	-0.114	0.008
SSC-SC	x	0.096	0.152	0.106	0.094	0.119	0.120
	y	0.263	-1.220	-1.204	0.119	-0.965	-1.046
	z	0.252	-1.460	-1.247	0.120	-1.046	-0.945
BNN-SC	x	-1.036	0.000	-1.494	-0.721	0.000	-1.009
	y	0.000	0.174	0.000	0.000	0.105	0.000
	z	-1.584	0.000	-1.871	-1.009	0.000	-1.172

Tablo 5.11. Cu(10 9 0) yüzeyinde basamak zinciri atomu SC ile en yakın komşu atomlar arasındaki etkileşmeler için kuvvet sabiti matrisleri $k_{\alpha\beta}$.

Atomlar		Yüzey			İç		
		x	y	z	x	y	z
SC-1MC	x	-1.871	0.000	-0.365	-1.969	0.000	-0.116
	y	0.000	0.016	0.000	0.000	0.104	0.000
	z	0.164	0.000	-0.004	-0.116	0.000	0.081
CC-SC	x	-0.566	-0.757	0.385	-0.478	0.765	0.520
	y	-0.855	-1.023	0.546	0.765	-0.937	-0.681
	z	0.673	0.848	-0.415	0.52	-0.681	-1.358
BNN-SC	x	-0.441	0.885	-0.592	-0.363	-0.694	-0.525
	y	0.830	-1.150	0.817	-0.694	-0.955	-0.778
	z	-0.716	1.070	-0.652	-0.525	-0.778	-0.484

SC-BNN arasındaki bağın z bileşenindeki % 7 oranındaki daralma yukarıdaki kuvvet sabitlerindeki sertleşmenin yansımasıdır. Bu yüzeyde SC-1MC atomları arasındaki kuvvet sabiti matrisinin köşegen dışı elemanı k_{xz} , iç karşılığına göre % 200 ve BNN-SC atomları arasındaki ise % 12 oranlarında sertleşmişken, CC-SC arasındaki % 26 oranında yumuşamıştır. SC-1MC atomları arasındaki kuvvet sabiti matrisinin köşegen dışı elemanı k_{xz} , 1MC atomunun z doğrultusundaki birim yer değiştirmesinden dolayı x doğrultusunda SC atomu üzerine birim kütle başına kuvveti gösterdiği hatırlanırsa, relaxation sürecinde 1MC atomu aşağıya hareket ettiğinde SC, 1MC' in bu hareketinden dolayı, üzerine etkiyen kuvvetin x - bileşeninde büyük bir artış hissedecektir. Bu da SC-1MC atomları arasındaki bağın x bileşenindeki azalmanın da yansıması olur. Bu yüzeyde SC-1MC atomları arasındaki kuvvet sabiti matrisinin k_{zx} elemanı iç karşılığına göre % 41 oranında sertleşmiştir. BNN-SC atomları arasındaki aynı eleman % 36 oranında, CC-SC atomları arasındaki ise % 29 oranında sertleşmiştir. CC-SC atomları arasındaki kuvvet sabiti elemanı k_{zx} , SC atomunun x doğrultusunda yer değiştirmesinden dolayı z doğrultusunda CC atomu üzerine birim kütle başına kuvveti göstermektedir. Relaxation sürecinde SC atomu x doğrultusunda hareket ettiğinde CC atomu, SC atomunun bu hareketinden dolayı üzerine etkiyen kuvvetin z - bileşeninde bir artma hissedecektir. Bu da bu atomlar arasındaki bağın z bileşeninde daralma olarak yansır.

Sistemin uyarılma sonucu en düşük enerji değerini arama süreci sistemi oluşturan tüm atomlar tarafından ortaklaşa yapılır. Bu nedenle atomların yerel relaxationları tüm komşu atomlarla paylaşılan bir süreçtir. Bundan dolayı bir atom çevresindeki yerel

kuvvet alanındaki değişim, relaxation sürecinde o atomun yer değiştirme olayının tanımlanması için tek başına belirleyici etken olmadığı da hatırlanmalıdır.

5.5. Cu' n Yüksek Miller İndisli Ve Sıkı İstiflenmiş Basamaklara Sahip Cu(331), Cu(19 19 1), Cu(311) ve Cu(19 1 1) Yüzeylerinin Tabakalar Arası Daralma Ve Genişlemeleri

Bu bölümde, çalışılan her bir Cu yüksek Miller indisli (vicinal) yüzeyleri içinde sıkı istiflenmiş basamaklara sahip Cu(331), Cu(19 19 1), Cu(311) ve Cu(19 1 1) yüzeylerinin tabakalar arası daralma ve genişlemeleri, yerel atomik yer değiştirmeleri ve de yerel kuvvet alan özellikleri incelendi ve gevşek istiflenmiş basamaklı yüzeylerle kıyaslanarak basamak istiflenme şeklinin bu özellikler üzerindeki etkisinin gözlemlenmesi amaçlandı. Tüm bu yüzeyler için yüzey normali doğrultusunda (z- bileşen) tabakalar arası daralma ve genişlemelerin ve yüzeye paralel doğrultuda (x- bileşen) atomlar arası mesafelerdeki (in-plane relaxation) içe göre yüzde değişim değerleri hesaplanarak, elde edilen sonuçlar Tablo 5.12 ve Tablo 5.13' de sunulmuştur. Cu(331) ve Cu(19 19 1) yüzeyleri aynı komşu (vicinal) yüzey ailesinden olup (110) teras ve (111) basamak yönelimine sahipken, teraslarındaki atomik zincir sayılarında farklılık gösterirler. Cu(331) yüzeyinin terasındaki atomik zincir sayısı iki iken, Cu(19 19 1) yüzeyinde on tanedir. Cu(311) ve Cu(19 1 1) yüzeyleri ise teras yönelimleri (100) ve basamak yönelimleri (111) olan yüzey ailesi üyeleridir. Yine bu yüzeylerin teraslarındaki atomik zincir sayıları sırasıyla iki ve on' dur. Tablolardaki yüzde değişim değerleri hesaplanırken yüzeye normal doğrultudaki yüzde değişim değerleri için $d_{i,i+1} = 100 \times [(z_i - z_{i+1}) - d_b] / d_b$ kullanılmışken, yüzeye paralel doğrultudaki (x- bileşen) yüzde değişim değerleri için ise $r_{i,i+1} = 100 \times [(r_i - r_{i+1}) - r_b] / r_b$ ifadesi kullanılmıştır. Burada z_i , z_{i+1} ardışık tabakaların z konum değerlerini gösterirken, d_b ve r_b sırasıyla iç haldeki tabakalar arası mesafenin değeri ve iç halde yüzeye paralel doğrultudaki atomların birbirlerine olan uzaklıklarıdır.

Tablo 5.12' den görüleceği gibi her bir yüzey için ilk iki tabaka arasındaki mesafe çalışılan diğer yüzeylerde (gevşek istiflenmiş basamaklara sahip açık yüzeyler) de gözlemlendiği gibi daralmaya uğramıştır. Tablo 5.12' den görüldüğü gibi tabakalar arası mesafenin ilk iki tabaka arasında daralma göstermesi özelliğine ek olarak içe doğru inildikçe gevşek istiflenmiş basamaklara sahip yüzeylerde olduğu gibi ardışık tabakalar

Tablo 5.12. Cu' n yüksek Miller indisli ve sıkı istiflenmiş basamaklara sahip yüzeylerinin tabakalar arası daralma ve genişlemeleri.

	Cu(311)	Cu(19 11)	Cu(331)	Cu(19 19 1)
d ₁₂	% -9.18	% -18.55	% -10.52	% -11.01
d ₂₃	% +3.95	% -4.00	% +1.77	% -4.09
d ₃₄	% -3.76	% -2.95	% -4.65	% -1.86
d ₄₅	% +2.29	% -2.47	% -0.24	% -0.89
d ₅₆	% -1.37	% -2.42	% -0.36	% -0.59
d ₆₇	% +1.01	% -2.85	% +0.60	% -0.81
d ₇₈	% -0.46	% -4.06	% -0.36	% -1.93
d ₈₉	% +0.49	% -8.32	% +0.24	% +5.20
d _{9 10}	% -0.18	% -22.76	% 0.00	% -41.96
d _{10 11}	% +0.28	% +42.31	% +0.12	% +26.63
d _{11 12}	% -0.83	% -5.42	% 0.00	% -16.74
d _{12 13}		% -3.32		% -2.67
d _{13 14}		% -2.84		% -1.71
d _{14 15}		% -2.58		% -0.59
d _{15 16}		% -2.63		% -0.27
d _b	1.089 Å°	0.1897 Å°	0.829 Å°	0.1344 Å°

arasındaki mesafede ihmal edilemeyecek daralma ve genişlemeler mevcuttur. Bu özellikli davranış geniş teraslı Cu(19 19 1) ve Cu(19 1 1) yüzeylerinde daha belirgin görülmektedir. Cu(331) ve Cu(311) yüzeylerinde tabakalar arası mesafedeki daralma ve genişleme değerleri nitelik olarak birbirlerine yakın bulunmuştur. Tablo 5.12' ye bakıldığında Cu(331) ve Cu(311) yüzeyleri için tüm daralma ve genişleme değerleri içinde ilk iki tabaka arasındaki mesafedeki daralma her iki yüzey için de en büyüktür. Bu yüzeylerin ilk iki tabakalar arası mesafelerindeki daralma ve genişleme değerleri yaklaşık % 10 civarındadır. Cu(311) yüzeyinde tabakalar arası daralma ve genişleme değerleri d₇₈'e kadar yüzeyden içe doğru inildikçe düzgün azalan büyüklükte gözlenmiş d₈₉'a gelindiğinde bir miktar artış göstermiştir. Daha sonraki tabakalar arası mesafelerde ise zaman zaman artan-azalan davranış gözlenmiştir. Bu yüzey için tabakalar arası daralma ve genişleme değerleri daha önce yapılmış olan modified point ion model [30] ve EAM verileri ile uyumlu bulunmuştur [31]. Cu(331) yüzeyinde ise ($|d_{34}| > |d_{23}|$) olduğu ve sonraki tabakalar arası mesafelerde ise zaman zaman artan azalan büyüklükte değerler görülmüştür. Cu(311) yüzeyinde Cu(331) yüzeyine nazaran daha derinlerde daha belirgin daralma ve genişlemeler söz konusudur. Cu(331) yüzeyinde d_{9 10} ve d_{11 12} tabakaları arasındaki mesafede herhangi bir daralma veya genişleme kaydedilmemişken, Cu(311) yüzeyinde aynı tabakalar arası mesafelerde az da olsa daralmalar görülmüştür.

Çalışılan daha geniş teraslı Cu(19 1 1) ve Cu(19 19 1) yüzeylerinde ise ilk iki tabakalar arası mesafelerdeki daralma ve genişleme değerleri sırasıyla % 19 ve % 11 civarında görülmektedir. Cu(19 1 1) yüzeyinde $d_{9\ 10}$ tabakaları arasındaki daralma değeri ve $d_{10\ 11}$ tabakaları arasında gözlenen genişleme değeri d_{12} 'den daha büyük bulunmuştur. Diğer tabakalar arası mesafelerde daralmalar görülmüştür. Bu davranışlar bu tabakalara karşılık gelen atomların (CC, BNN, 8MC) relaxation sürecinde yerel atomik yer değiştirmelerinin yansımalarının sonucu olduğunu ilerideki bölümlerde göstereceğiz. Cu(19 19 1) yüzeyinde ise $d_{9\ 10}$ (CC, 8MC atomları) tabakaları arasındaki daralma değeri, $d_{10\ 11}$ (BNN, CC atomları) tabakaları arasında gözlenen genişleme değeri ve $d_{11\ 12}$ tabakaları arasındaki daralma değeri d_{12} 'den daha büyük bulunmuştur. Bu atomların yerel yer değiştirmeleri bir sonraki bölümde ayrıntılı olarak verilmiştir.

Tabakalar arası mesafelerdeki daralma ve genişlemelerin salınımlı davranışı bizim çalışmamızda Cu(331) yüzeyi için (-,+, -, -, -, +, -, +, -) olacak şekilde gözlenirken, Cu(311) yüzeyinde ilk iki tabaka arasında daralma olarak daha sonraki tabaka genişleme olarak ortaya çıkmış ve sonra tekrar daralma ve genişleme (-,+, -, -, -, +, -, +, -) olacak şekilde görülmüştür. Cu(19 19 1) ve Cu(19 1 1) geniş teraslı yüzeylerinde ise bu tabakalar arası mesafelerdeki daralma ve genişlemelerin salınımlı davranışları sırasıyla (-, -, -, -, -, -, -, +, -, +, -, -, -, -) ve (-, -, -, -, -, -, -, +, -, -, -, -, -) olacak şekilde görülmüştür.

Tablo 5.13. Cu' n yüksek Miller indisli ve sıkı istiflenmiş basamaklara sahip yüzeylerinin yüzey düzlemi içindeki daralma ve genişlemeleri (in-plane relaxation).

	Cu(311)	Cu(19 1 1)	Cu(331)	Cu(19 19 1)
r_{12}	% -0.95	% -1.99	% -0.51	% -1.27
r_{23}	% +0.22	% -0.58	% +0.48	% -0.03
r_{34}	% -0.09	% -0.38	% -0.45	% -0.01
r_{45}	% +0.26	% -0.27	% +0.34	% +0.02
r_{56}	% -0.13	% -0.23	% -0.09	% +0.01
r_{67}	% +0.09	% -0.22	% +0.03	% -0.02
r_{78}	% -0.04	% -0.24	% 0	% -0.04
r_{89}	% +0.04	% -0.27	% +0.03	% -0.24
$r_{9\ 10}$	% 0	% 0.00	% 0	% +0.42
$r_{10\ 11}$	% 0	% +1.88	% +0.03	% +0.42
$r_{11\ 12}$	% 0	% -0.16	% +0.03	% -0.42
$r_{12\ 13}$		% -0.23		% -0.03
$r_{13\ 14}$		% -0.24		% 0.00
$r_{14\ 15}$		% -0.2		% +0.02
$r_{15\ 16}$		% -0.16		% 0.00
r_b	2.312 Å°	2.5491 Å°	3.518 Å°	3.6124 Å°

Tablo 5.13'den görüldüğü gibi her bir yüzeyin yüzeye paralel doğrultudaki (x-bileşen) atomların birbirlerine olan uzaklıklarının (in-plane relaxation) içe göre yüzde değişimi ilk iki tabaka arasında daralma göstermektedir. Ve genel olarak elde edilen yüzde değişim değerleri diğer fcc yüzeylerinin deneysel ve kuramsal çalışmaları sonucunda olduğu gibi oldukça küçük bulunmuştur. Bu özellik daha önceki bölümlerde gevşek istiflenmiş basamaklara sahip yüzeyler için elde ettiğimiz sonuçlarda da gözlenmişti. Yüzeye paralel doğrultudaki atomların birbirlerine olan uzaklıklarının (in-plane relaxation) içe göre yüzde değişimi değerleri her bir yüzeyde yüzeyden içe doğru gidildikçe zaman zaman artan azalan büyüklükte gözlenmiştir. Cu(311) yüzeyinde r_{45} ' e kadar azalma görülmüş daha sonra r_{45} ' de bir miktar artış ve devamında tekrar azalma görülmüştür. Cu(331) yüzeyinde ise daha alt tabakalara doğru inildikçe azalma gözlenmiştir. Cu(19 19 1) ve Cu(19 1 1) yüzeylerinde ise yüzey düzlemine paralel doğrultuda atomlar arası mesafeler, yüzeyden içe doğru zaman zaman artan-azalan büyüklükte görülmüştür.

5.6. Cu(331), Cu(19 19 1), Cu(311) Ve Cu(19 1 1) Yüzeylerinin Yerel Atomik Davranışları

Gevşek istiflenmiş basamaklara sahip yüzeylerde olduğu gibi yine bu sıkı istiflenmiş Cu(331), Cu(311), Cu(19 19 1) ve Cu(19 1 1) yüzeylerin atomlarının yerel atomik yer değiştirmelerine bakarak yerel atomik çevrenin bu atomların yerel yer değiştirmeleri üzerine etkisi incelendi. Ayrıca atomlar arası bağ uzunluklarının değişimleri her bir atomun yerel yer değiştirmesi ile ilişkili olduğundan bu yerel yer değiştirmeler bağ uzunluklarındaki daralma ve genişlemeler hakkında bilgilendirici olacaktır. Tablo 5.14'de çalışılan her bir yüzey için yüzeyde ve yakınındaki atomların yüzey ve içteki pozisyonlarının değişimi verilmiştir. Tablo 5.14' den görüldüğü gibi her bir yüzeyde en fazla yer değiştirme basamak zinciri atomunun (step chain-SC) yüzey normali doğrultusunda (z-bileşen) gözlenmiştir. Yine Tablo 5.14' de her bir yüzey için basamak zinciri atomunun (SC) metalin içine doğru hareketi görülebilmektedir. Basamak atomunun bu davranışı daha önceki bölümde çalışılan gevşek istiflenmiş basamaklara

Tablo 5.14. Yüzey ve yakınındaki atomların yerel yer değiştirmeleri.

Yüzey		x	y	z	x	y	z
Cu(311)	SC	6.536	1.278	1.004	6.551	-1.278	1.089
	CC	4.245	1.278	0.015	4.238	-1.278	0.000
	BNN	1.928	1.278	-1.117	1.926	-1.278	-1.089
Cu(19 1 1)	SC	47.201	1.278	1.618	47.293	-1.278	1.708
	1MC	44.711	1.278	1.463	44.744	-1.278	1.518
	8MC	26.924	1.278	0.187	26.9	-1.278	0.181
	CC	24.376	1.278	0.040	24.351	-1.278	0.000
	BNN	21.779	1.278	-0.221	21.802	-1.278	-0.181
Cu(331)	SC	9.078	1.278	0.741	9.089	1.278	0.829
	CC	5.579	1.278	-0.002	5.571	1.278	0.000
	BNN	2.043	1.278	-0.845	2.052	1.278	-0.829
Cu(19 19 1)	SC	66.833	1.278	1.121	66.879	1.278	1.201
	1MC	62.261	1.278	1.002	62.266	1.278	1.076
	8MC	37.992	1.278	0.082	37.979	1.278	0.134
	CC	34.365	1.278	0.004	34.366	1.278	0.000
	BNN	30.737	1.278	-0.167	30.754	1.278	-0.134

sahip yüzeylerde de aynı şekilde görülmüştür. Çalışılan dar teraslı yüzeylerde içe göre en fazla değişim SC, BNN ve CC atomlarında görülüyor. Basamak zinciri atomunun içe göre en yakın komşu atomlara olan uzaklığının iç ve yüzeyde nasıl değiştiği hesaplanarak elde edilen sonuçlar Tablo 5.15’ de sunulmuştur. Basamak zinciri atomunun (SC) ve bu atoma en yakın komşu atomlar arasındaki yüzey ve içteki bağ değerlerinden yararlanarak bu atomlar arasındaki bağların yüzde değişimleri hesaplandı.

Tablo 5.15. Basamak zinciri atomu ve en yakın komşu atomları arasındaki bağ uzunlukları.

Yüzey	Bağlar	Yüzey			İç		
		dx	dy	dz	dx	dy	dz
Cu(311)	SC-CC	2.291	0.000	0.989	2.313	0.000	1.089
	SC-BNN	0.369	1.278	2.121	0.386	1.278	2.178
Cu(19 1 1)	SC-1MC	2.498	0.000	0.155	2.549	0.000	0.181
	SC-CC	1.517	1.278	1.578	1.409	1.278	1.708
	SC-BNN	1.079	1.278	1.848	1.140	1.278	1.897
Cu(19 19 1)	SC-1MC	3.563	0.000	0.119	3.613	0.000	0.134
	SC-CC	1.898	1.278	1.118	1.854	1.278	1.201
	SC-BNN	1.730	1.278	1.288	1.759	1.278	1.344
Cu(331)	SC-CC	3.499	0.000	0.743	3.518	0.000	0.829
	SC-BNN	1.464	1.278	1.586	1.466	1.278	1.658

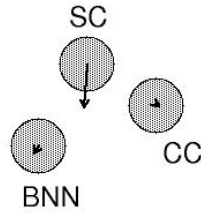
Tablo 5.16. Basamak zinciri atomunun (SC) yakın komşu atomlara olan bağ uzunluğunun yüzde değişimi

Bağ	Cu(331)	Cu(311)	Cu(19 19 1)	Cu(19 1 1)
SC-BNN	% -4.34	% -2.62	% -4.2	% -2.62
SC-CC	% -10.4	% -9.2	% -7.62	% -7.6
SC-SSC	—	—	—	—
SC-1MC	—	—	% -11.01	% -18.55

Tablo 5.15’ den görülüyor ki yüzeyin varlığı bağ uzunluklarının z - bileşenini azaltmaktadır. Cu(331) yüzeyinde en fazla değişim (SC-CC) atomları arasındaki bağda % 10.4 ve bunu takiben SC-BNN arasında % 4.34 değerlerinde daralmalar görülmüştür. Buna ek olarak x doğrultusu boyunca bozulan simetri bağ uzunluklarının x -bileşeninin değişimine de neden olmaktadır. Cu(331) yüzeyinde bu değişimler (SC-CC) arasında % 0.54’ lük ve SC-BNN arasında ise % 0.14’ lük bir azalma görülmektedir. Diğer dar teraslı Cu(311) yüzeyinde bağ uzunluklarının z -bileşenindeki en fazla değişim SC-CC atomları arasındaki bağda % 9.2, bunu takiben SC-BNN arasında % 2.62 değerlerinde daralmalar şeklinde görülmüştür. Bu yüzey için x -bileşenindeki yüzde değişim SC-CC arasında % 5.3 ve SC-BNN arasında ise % 4.4’ lük bir azalma olarak görülmektedir. Yine Tablo 5.16’ dan görüldüğü gibi Cu(19 19 1) ve Cu(19 1 1) geniş teraslı yüzeyleri için bağ uzunluğundaki değişim en çok basamak zinciri atomu (step chain- SC) ve onun hemen yanında bulunan ilk orta zincir (first middle chain-1MC) atomları arasındaki bağ uzunluğunda gözlenmiştir. Cu(19 19 1) yüzeyinde en fazla değişim sırasıyla SC-1MC arasında % 11.01, SC-CC arasında % 7.62 ve SC-BNN arasında % 4.2’ lik değerlerinde daralmalar görülmektedir. Cu(19 1 1) yüzeyinde ise yine en fazla değişim % 18.55’ lik daralma ile SC-1MC arasındaki bağ uzunluğunda, % 7.6’ lık daralma ile SC-CC bağ uzunluğu ve % 2.62’ lik daralma ile SC-BNN arasındaki bağ uzunluğu takip ediyor. Bu yüzeylerde atomlar arası bağların x -bileşeni değişimleri ise Cu(19 19 1) yüzeyi için SC-1MC atomları arasında % 1.37’ lik azalma, SC-BNN arasında % 1.63 oranında azalma ve SC-CC arasındaki bağda ise % 2.4’ lük artış görülmüştür. Cu(19 1 1) yüzeyinde ise bağ uzunluklarında (SC-1MC) ve (SC-BNN) sırasıyla % 1.99, % 5.32’ lik azalma ve SC-CC arasında ise % 7.68’ lik bir artış görülmüştür.

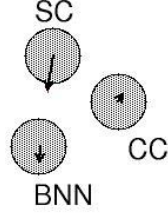
Tabakalar arası daralma ve genişlemelerin, basamak zinciri atomu (SC) ve çevresindeki atomlar arası bağlardaki değişimin daha iyi anlaşılması için yüzey ve yüzey yakınındaki her bir atomun yer değiştirmeleri hesaplandı ve Şekil 5.5’ de Cu(19 19 1) Cu(331),

Cu(311) ve Cu(19 1 1) yüzeylerinin terasındaki ve içteki en yakın komşu atomlarının yerel yer değiştirmeleri gösterildi.



Şekil 5.5.a. Cu(311) yüzeyinin yerel atomik yer değiştirmesi.

Şekil 5.5' den görüldüğü gibi bütün yüzeylerde yüzey atomları arasında metalin içine doğru yer değiştirmesi en belirgin olan atom, gevşek istiflenmiş basamaklara sahip yüzeylerde de gözlemlendiği gibi basamak zinciri (step chain-SC) atomudur. Şekil 5.5.a' da Cu(311) yüzeyinde basamak zinciri atomu (SC) içe doğru -0.088 Å büyüklüğünde hareket etmekte, onu takiben köşe zinciri atomu CC (2.tabaka atomu), SC atomuna göre çok daha küçük bir büyüklükle (-0.0018 Å) içeriye ve BNN (3.tabaka atomu) atomu da -0.016 Å büyüklükle yine içeriye doğru hareket etmektedir. SC ve CC (2. tabaka atomu) atomlarının davranışı, SC-CC atomları arasındaki bağın % 10.4' lük daralmasını açıklarken, d_{12} tabakaları arasındaki % 10.52' lik daralmayı da anlatmaktadır. Yine SC ve BNN (3. tabaka atomu) atomlarının davranışı, yani SC atomunun BNN' e göre içeriye olan daha büyük hareketi SC-BNN atomları arasındaki bağın % 4.34' lük daralmasını ifade etmektedir. BNN (3. tabaka atomu) atomunun içeriye olan hareketi CC' ye nazaran daha büyüktür bu davranış d_{23} tabakaları arasındaki % 1.77' lik genişlemeyi açıklar.

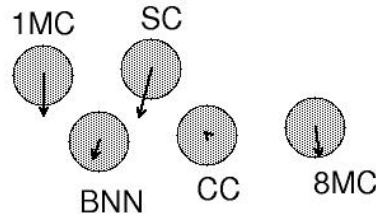


Şekil 5.5.b. Cu(311) yüzeyinin yerel atomik yer değiştirmesi.

Şekil 5.5.b' de Cu(311) yüzeyinde SC atomu içe doğru -0.085 Å° büyüklükle, CC atomu içten uzaklaşacak şekilde $+0.015 \text{ Å}^\circ$ büyüklükle yukarı hareket ederken, BNN atomu da -0.028 Å° büyüklükle içeriye doğru hareket etmektedir. SC ve CC atomlarının (1. ve 2. tabaka atomları) relaxation sürecindeki bu yerel yer değiştirmeleri SC-CC atomları arasındaki bağın z -bileşeninde $\% 9.2'$ lik daralmasını ve d_{12} tabakaları arasındaki $\% 9.18'$ lik daralmayı açıklamaktadır. SC ve BNN (3. tabaka atomu) atomlarının şekildeki yerel davranışları ise SC-BNN atomları arasındaki bağın z bileşenindeki $\% 2.62'$ lik daralmasını doğrulamaktadır. CC (2. tabaka atomu) atomunun yukarı hareketi BNN atomunun içeriye hareketinden küçüktür. BNN ve CC atomlarının bu davranışı d_{23} tabakaları arasındaki $\% 3.9'$ luk genişlemeyi anlatmaktadır.

Şekil 5.5.c' den görüldüğü gibi Cu(19 19 1) yüzeyinde SC atomu içe doğru hareket ederken (-0.089 Å°), 1MC, BNN ve 8MC atomları sırasıyla -0.074 Å° , -0.032 Å° ve -0.046 Å° büyüklükleri ile içeriye hareket ediyorlar. Bu süreç içinde CC atomu da yukarı hareket etmektedir ($+0.0035 \text{ Å}^\circ$). 1MC (2. tabaka atomu) atomunun içeriye hareketi SC atomunun hareketinden daha küçüktür. Bu atomların bu yer değiştirme davranışları d_{12} tabakaları arasındaki daralmayı açıklarken, aynı zamanda SC-1MC atomları arasındaki bağın z - bileşenindeki $\% 11.01'$ lik daralmayı anlatmaktadır. Ayrıca SC atomunun içeriye hareketi CC atomunun yukarı hareketi ile birleştirildiğinde SC-CC atomları arasındaki bağın z - bileşenindeki $\% 7.62'$ lik daralma anlaşılır. CC atomunun yukarı hareketi 8MC atomunun içeriye hareketinden oldukça küçüktür. Bu davranış CC (10.

tabaka atomu) ve 8MC (9. tabaka atomu) atomlarının bulunduğu d_{9-10} tabakaları arasındaki büyük % 42 oranındaki daralmayı ifade eder. CC ve BNN (11. tabaka atomu) atomlarının davranışı ise d_{10-11} tabakaları arasındaki % 26.6 oranındaki genişlemeyi açıklar. SC-BNN atomları arasındaki bağdaki % 4.2' lik daralma da, BNN ve SC atomlarının yerel atomik davranışları ile uyum içindedir.



Şekil 5.5.c. Cu(19 19 1) yüzeyinin yerel atomik yer değiştirmesi.

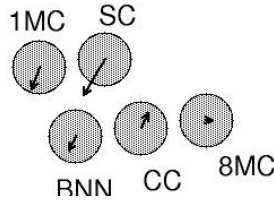
Şekil 5.5.d' de ise Cu(19 1 1) yüzeyinde SC atomu ve en yakın komşu atomların yerel atomik yer değiştirmeleri görülmektedir. Yine bu yüzeyde de SC atomu içe doğru -0.089 Å büyüklükte içeriye hareket göstermekteyken, 1MC, BNN ve 8MC atomları sırasıyla -0.054 Å , -0.04 Å ve -0.0028 Å büyüklükleriyle içeriye hareket etmektedirler. Bu süreçte CC atomu da yukarı hareket etmektedir ($+0.04 \text{ Å}$). SC ve 1MC atomlarının davranışı SC-1MC arasındaki bağın % 18.55' lik oranda daralmasını anlatır. CC (10. tabaka atomu) ve 8MC (9. tabaka atomu) atomlarının davranışı d_{9-10} tabakaları arasındaki % 22 oranındaki daralmayı açıklarken, CC ve BNN (11. tabaka atomu) atomlarının davranışı ise d_{10-11} tabakaları arasındaki % 42.3 oranındaki genişlemeyi ifade etmektedir. SC ve CC atomlarının davranışı ise SC-CC atomları arasındaki bağın % 7.6' lik oranda daralmasını doğrulamaktadır.

Her bir yüzey atomunun x ve z doğrultularındaki yer değiştirme miktarları hesaplandı. Ve sonuçlar Cu(331) ve Cu(311) yüzeyleri için Tablo 5.17, Cu(19 19 1) ve Cu(19 1 1)

Tablo 5.17. Cu(331) ve Cu(311) yüzeyleri için yüzey atomlarının x ve z doğrultularındaki A° cinsinden yer değiştirmeleri.

Yüzey	x_{sc}	x_{mc}	x_{cc}	z_{sc}	z_{mc}	z_{cc}
Cu(331)	-0.011	—	0.008	-0.088	—	-0.001
Cu(311)	-0.015	—	0.007	-0.085	—	0.015

yüzeyleri için ise Tablo 5.18’ de verilmiştir. Bu tablolarda ilk göze çarpan bulgu, çalışılan diğer yüzeylerde (gevşek istiflenmiş basamaklara sahip yüzeyler) olduğu gibi teras genişliğinin basamak zinciri atomunun (SC) z - doğrultusundaki yer değiştirmesine herhangi bir etkisinin olmamasıdır. Basamak zinciri atomunun (SC) hem x hem de z doğrultusunda gösterdiği yer değiştirme miktarı diğer atomların yer değiştirme miktarlarına nazaran daha fazladır.



Şekil 5.5.d. Cu(19 1 1) yüzeyinin yerel atomik yer değiştirmesi.

Tablo 5.18’ de ise daha geniş teraslı Cu(19 19 1) ve Cu(19 1 1) yüzeylerinin yüzey atomlarının x ve z doğrultularındaki yer değiştirme miktarları görülmektedir. Yine her iki yüzeyde de SC atomunun yer değiştirmesi hem x ve hem de z doğrultularında diğer atomlara göre daha belirgin ve iki yüzey için de benzer değerler göstermektedir.

Tablo 5.18. Cu(19 19 1) ve Cu(19 1 1) yüzeyleri için yüzey atomlarının x ve z doğrultularındaki A° cinsinden yer değiştirmeleri.

Yüzey	x_{sc}	x_{mc}	x_{cc}	x_{8mc}	z_{sc}	z_{mc}	z_{cc}	z_{8mc}
Cu(19 19 1)	-0.046	0.003	-0.002	0.014	-0.088	-0.074	0.004	-0.046
Cu(19 1 1)	-0.083	-0.032	0.024	0.024	-0.089	-0.054	0.040	-0.003

5.7. Cu(331), Cu(19 19 1), Cu(311) Ve Cu(19 1 1) Yüzeylerinin Kuvvet Sabitleri

Gevşek istiflenmiş basamaklı yüzeylerde yaptığımız gibi, yüzey atomlarının yerel relaxationlarını daha iyi anlayabilmek için bu bölümde, çalışılan yüzeyler için basamak civarındaki atomlar arası kuvvet sabitlerini hesapladık. Ve bu değerleri iç karşılıkları ile birlikte Tablo 5.19, Tablo 5.20, Tablo 5.21 ve Tablo 5.22’ de sunduk.

Tablo 5.19’ daki verilerden yararlanarak Cu(331) yüzeyi için hesaplanan değerlere göre basamak zinciri atomu (step chain- SC) ile içteki en yakın komşu BNN ve CC atomları arasındaki kuvvet sabiti k_{zz} iç karşılığına göre sırasıyla % 26, % 160 oranlarında sertleşmiştir. Bu değişim BNN-SC, SS-CC atomları arasındaki bağların z bileşenlerindeki % 4.34 ve % 10.4 oranlarındaki daralmalar olarak yansır. Yine bu yüzeyde basamakların varlığı sadece yüzey atomlarının kuvvet sabiti matrislerinin köşegen elemanlarını değiştirmekle kalmıyor aynı zamanda köşegen dışı elemanlarında da değişimler gözleniyor. Tablo 5.19’ dan görüleceği gibi Cu(331) yüzeyinde BNN-SC atomları arasında kuvvet sabiti matrisinin k_{zx} elemanı % 30 oranında sertleşirken, SC-CC atomları arasındaki aynı eleman % 224 oranında sertleşmiştir. Bu atomlar SC-CC arasındaki kuvvet sabiti matrisinin k_{zx} elemanındaki sertleşme, CC atomunun x doğrultusundaki hareketinden dolayı SC atomu üzerindeki kuvvetin z - bileşeninde bir artmaya yol açar. SC-CC atomları arasındaki kuvvet sabiti matrisi k_{xz} içe göre % 56 oranında yumuşarken, BNN-SC atomları arasındaki ise % 2,7 oranında sertleşmiştir. SC-CC atomları arasındaki bu kuvvet sabiti matrisi elemanı k_{xz} , CC atomunun z doğrultusunda birim yer değiştirmesinden dolayı x doğrultusunda SC atomu üzerine

Tablo 5.19. Cu(331) yüzeyinde SC ve en yakın komşu atomlar arasındaki etkileşmeler için kuvvet sabiti matrisleri $k_{\alpha\beta}$.

Atomlar		Yüzey			İç		
		x	y	z	x	y	z
SC-CC	x	0.183	0.000	-0.011	0.105	0.000	0.025
	y	0.000	-0.016	0.000	0.000	-0.0006	0.000
	z	0.081	0.000	-0.013	0.025	0.000	0.005
BNN-SC	x	-0.691	0.668	-0.788	-0.589	0.587	-0.767
	y	0.719	-0.487	0.741	0.587	-0.419	0.675
	z	-0.991	0.871	-0.973	-0.767	0.675	-0.772

birim kütle başına kuvveti gösterir. Relaxation sürecinde CC atomu aşağı hareket ettiğinde CC atomunun bu hareketinden dolayı SC atomu, üzerine etkiyen kuvvetin x bileşeninde büyük bir azalma hisseder. Bu da SC-CC atomları arasındaki bağın x bileşenindeki değişimin yansıması olur. BNN ve SC atomları arasındaki kuvvet sabiti matrisinin k_{xz} elemanının sertleşmesi, SC atomunun z doğrultusundaki hareketinden dolayı BNN atomu, üzerine düşen kuvvetin x - bileşeninde bir artış hisseder. Bu durum SC-BNN atomları arasındaki bağın x - bileşenindeki daralmanın izi olarak görülebilir.

Cu(311) yüzeyinde ise basamak zinciri atomu SC ile, içteki en yakın komşu BNN ve köşe zinciri CC atomları arasındaki kuvvet sabiti k_{zz} iç karşılığına göre sırasıyla % 31 ve % 34 oranında sertleşmiştir. Bu kuvvet sabitinin köşegen elemanındaki bu değişimlerin bu atomların relaxationlarına yansımaları, bu atomlar arasındaki bağların z - bileşenlerindeki sırasıyla % 2.62 ve % 9.2 oranlarındaki daralmaları olarak görebiliyoruz. Bu yüzeyde kuvvet sabiti matrisinin köşegen dışı elemanı k_{zx} , SC ve CC atomları arasında % 2.3 oranında yumuşarken, BNN ve SC atomları arasındaki aynı eleman ise % 27 oranında sertleşmiştir. SC ve CC atomları arasındaki kuvvet sabiti matrisi elemanı k_{xz} iç karşılığına göre % 40 oranında sertleşirken, SC-BNN arasındaki ise % 10 oranında sertleşmiştir. SC-CC atomları arasındaki kuvvet sabiti matrisi elemanı k_{xz} ' n iç karşılığına göre % 40 oranında sertleşmesi, CC atomunun z doğrultusunda hareketi SC atomunun üzerine etkiyen kuvvetin x - bileşeninde bir artışa neden olacaktır. Kuvvet sabitindeki bu artış bu iki atomun (SC ve CC) relaxation sürecinde x doğrultusunda birbirlerine yaklaşıp, aralarındaki bağın bu doğrultuda kısılmasının sebebi olabilir.

Tablo 5.20. Cu(311) yüzeyinde SC ve en yakın komşu atomlar arasındaki etkileşmeler için kuvvet sabiti matrisleri $k_{\alpha\beta}$.

Atomlar		Yüzey			İç		
		x	y	z	x	y	z
SC-CC	x	-1.941	0.000	-1.115	-1.604	0.000	-0.805
	y	0.000	0.083	0.000	0.000	0.088	0.000
	z	-0.787	0.000	-0.368	-0.805	0.000	-0.274
BNN-SC	x	0.065	-0.188	-0.288	0.047	0.163	-0.262
	y	-0.200	-0.504	-1.083	0.163	-0.419	0.882
	z	-0.333	-1.171	-1.843	-0.262	0.882	-1.409

BNN-SC atomları arasındaki kuvvet sabitinin aynı elemanın sertleşmesi ise SC atomunun z doğrultusundaki hareketi ile BNN atomu üzerine etkiyen kuvvetin x -bileşeninde bir artış hisseder. SC-BNN atomları arasındaki bağın x -bileşeninde daralması kuvvet sabitindeki bu artışın yansıması olarak gözlenebilir.

Tablo 5.21’ de ise daha geniş teraslı Cu(19 19 1) yüzeyinde kuvvet sabiti matrisinin köşegen ve köşegen dışı elemanlarının değişimi görülmektedir. Bu yüzeyde kuvvet sabiti matrisinin köşegen elemanı k_{zz} iç karşılığına göre SC atomu ile CC ve BNN atomları arasında sırasıyla % 3 ve % 35 oranlarında sertleşmişlerdir. Bu değişimler bu atomlar arasındaki SC-BNN ve SC-CC bağlarının z -bileşenlerindeki sırasıyla % 4.2 ve % 7.6 oranlarındaki daralmaları, bu kuvvet sabitlerinin sertleşmesinin izi olarak görülebilir. Yine kuvvet sabiti matrisinin köşegen dışı elemanı k_{xz} iç karşılığına göre CC-SC atomları arasında % 31 oranında sertleşirken, BNN-SC atomları arasındaki % 5 oranında sertleşmiştir. Kuvvet sabiti matrisinin BNN-SC atomları arasındaki elemanı k_{xz} SC atomunun z doğrultusundaki birim yer değiştirmesinden dolayı x doğrultusunda BNN atomu üzerine birim kütle başına etkiyen kuvvettir. Relaxation sürecinde SC atomu aşağıya hareket ettiğinde SC atomunun bu hareketinden dolayı BNN atomu, üzerine etkiyen kuvvetin x -bileşeninde büyük bir artış hisseder. Bu da SC-BNN atomları arasındaki bağın x -bileşenin daralmasının nedeni olarak açıklanabilir. Bu yüzeyde CC ve SC atomları arasındaki kuvvet sabiti matrisinin k_{zx} elemanı % 12 oranında, BNN ve SC atomları arasındaki ise % 33 oranında sertleşmişlerdir.

Tablo 5.21. Cu(19 19 1) yüzeyinde SC ve en yakın komşu atomlar arasındaki etkileşmeler için kuvvet sabiti matrisleri $k_{\alpha\beta}$.

Atomlar		Yüzey			İç		
		x	y	z	x	y	z
SC-1MC	x	0.195	0.000	-0.048	0.110	0.000	0.004
	y	0.000	-0.017	0.000	0.000	0.000	0.000
	z	0.061	0.000	-0.021	0.004	0.000	0.000
CC-SC	x	-1.019	-0.688	0.488	-0.992	-0.743	0.704
	y	-0.739	-0.387	0.358	-0.743	-0.417	0.493
	z	0.790	0.531	-0.374	0.704	0.493	-0.365
BNN-SC	x	-1.029	0.829	-0.789	-0.894	0.713	-0.750
	y	0.853	-0.491	0.611	0.713	-0.422	0.553
	z	-0.997	0.748	-0.644	-0.750	0.553	-0.476

Tablo 5.22' de ise diğer geniş teraslı Cu(19 1 1) yüzeyinde kuvvet sabiti matrisinin köşegen ve köşegen dışı elemanlarının değişimi verilmiştir. Bu yüzeyde ise basamak zinciri atomu SC ve ilk orta zincir 1MC atomları arasındaki kuvvet sabiti matrisinin k_{zz} elemanı iç karşılığına göre % 58 oranında yumuşarken, SC ve BNN arasındaki % 42 sertleşmiş, CC ile SC arasındaki % 3 oranında yumuşamıştır. Bu değişimler bu atomlar arasındaki SC-1MC, SC-CC ve SC-BNN bağların z - bileşenlerindeki sırasıyla % 18.55, % 7.6 ve % 2.6 oranlarındaki daralmaların yansıması olarak görülebilir. Kuvvet sabiti matrisinin köşegen dışı elemanı k_{xz} , SC ve 1MC atomları arasında % 150, BNN ve SC atomları arasında % 32 oranlarında sertleşirken, CC ile SC arasında ise % 18 oranında yumuşamıştır. SC-1MC atomları arasındaki kuvvet sabitinin k_{xz} elemanının sertleşmesi, relaxation sürecinde 1MC atomunun z doğrultusunda hareketinden dolayı SC atomu üzerine etkiyen kuvvetin x - bileşeninde artış hissedecektir. SC-1MC atomları arasındaki bağın x - bileşeninde hesaplanan daralmayı bu artışın yansıması olarak görebiliriz. Bu yüzeyde BNN-SC atomları arasındaki kuvvet sabitinin k_{xz} elemanındaki % 32 sertleşme, relaxation sürecinde SC atomunun z doğrultusunda hareketi BNN atomunun üzerine düşen kuvvetin x - bileşeninde artışa neden olur. Bu artış relaxation sürecinde SC ve BNN atomlarının aralarındaki bağın x - bileşenindeki daralma olarak yansır. Bu yüzeyde kuvvet sabiti matrisinin köşegen dışı elemanı k_{zx} , SC ve 1MC atomları arasında % 65 oranında yumuşarken, BNN ve SC atomları arasında % 37 oranında, CC ile SC arasında ise % 15 oranında sertleşmişlerdir.

Tablo 5.22. Cu(19 1 1) yüzeyinde SC ve en yakın komşu atomlar arasındaki etkileşmeler için kuvvet sabiti matrisleri $k_{\alpha\beta}$.

Atomlar		Yüzey			İç		
		x	y	z	x	y	z
SC-1MC	x	-2.246	0.000	-0.385	-1.959	0.000	-0.156
	y	0.000	0.059	0.000	0.000	0.087	0.000
	z	0.055	0.000	0.039	-0.156	0.000	0.092
CC-SC	x	-0.646	0.571	0.636	-0.543	0.588	0.772
	y	0.649	-0.420	-0.607	0.588	-0.427	-0.697
	z	0.889	-0.739	-0.816	0.772	-0.697	-0.839
BNN-SC	x	-0.372	-0.625	-0.888	-0.313	-0.463	-0.675
	y	-0.597	-0.533	-1.002	-0.463	-0.415	-0.756
	z	-0.924	-1.091	-1.473	-0.675	-0.756	-1.038

6. KIYASLAMALAR

6.1.Yüksek Miller İndisli Gevşek İstiflenmiş Basamaklı Dar ve Geniş Teraslı Yüzeylerinin Tabakalar Arası Daralma ve Genişlemeleri

Çalışılan her bir yüzey için ilk iki tabaka arasındaki mesafede daralma gözlenmiştir. İçeride doğru inildikçe tabakalar arası mesafedeki daralma ve genişlemeler düzgün olmayan salınımlı bir karakter sergilemektedir. $\text{Cu}(210)^a$, $\text{Cu}(210)^b$, $\text{Cu}(10\ 1\ 0)$ ve $\text{Cu}(10\ 9\ 0)$ yüzeylerinin yüzey normali doğrultusundaki (z- bileşen) tabakalar arası mesafelerdeki içeride göre olan daralma ve genişlemelerin yüzde değişimleri $\text{Cu}(210)^a$ ve $\text{Cu}(210)^b$ yüzeyleri için ilk iki tabaka arasında % 12 değerindedir. Bu iki yüzey için yapısal farklı farklılığa rağmen aynı daralma ve genişlemeler görülmüştür. İçeride doğru inildikçe tabakalar arası mesafelerde zaman zaman artan- azalan daralma ve genişlemeler görülmüştür. Bu yüzeylerle aynı yapıya sahip sırasıyla $\text{Cu}(10\ 1\ 0)$ ve $\text{Cu}(10\ 9\ 0)$ geniş teraslı yüzeylerinde ise yine ilk iki tabaka arasında sırasıyla % 19 ve % 30 oranlarında daralmalar görülmüş iken bu yüzeylerin relaxation davranışlarında dar teraslı yüzeylere göre bir takım farklılıklar söz konusudur. Dar teraslı yüzeylerde daha alt tabakalara inildikçe hesaplanan daralma ve genişlemelerin yüzde değişimleri geniş teraslı yüzeylere nazaran küçük bulunmuştur. Örneğin $\text{Cu}(210)^a$ yüzeyinde üçüncü (SSC atomunun bulunduğu tabaka) ve dördüncü tabakalar (BNN atomunun bulunduğu tabaka) arası mesafe % 3 oranında genişlemektedirken, $\text{Cu}(10\ 1\ 0)$ yüzeyinde ise onuncu tabaka (SSC atomunun bulunduğu tabaka) ve on birinci tabakaları (BNN atomunun bulunduğu tabaka) arasındaki mesafe % 23.8 oranında genişlemektedir. Özellikle $\text{Cu}(10\ 1\ 0)$ 'da ilk iki tabaka arasındaki mesafe % 19 oranında daralırken, (8MC- CC) d_{89} , (CC- SSC) $d_{9\ 10}$ ve (SSC- BNN) $d_{10\ 11}$ tabakaları arasındaki mesafelerde hesaplanan daralma ve genişlemelerin yüzde değişim değerleri sırasıyla % 19.98, % 19.83 ve % 23.81 oranlarında bulundu ve bu değerler ilk iki tabaka arasında hesaplanan daralmaya nazaran daha büyüktür.

6.1. Yüksek Miller İndisli Gevşek İstiflenmiş Basamaklı Dar ve Geniş Teraslı Yüzeylerinin Yerel Atomik Yer Değiştirmeleri

Bu yüzeylerin basamak zinciri (SC) atomu ve çevresindeki atomların yerel atomik yer değiştirme davranışlarına bakıldığında her bir yüzeyde, koordinasyon sayısı en düşük olan basamak zinciri atomunun (SC) içe doğru hareket ettiği ve bu hareketinin büyüklüğünün de yüzeyin geometrisi ve terasındaki atomik zincir sayısından bağımsız olarak yaklaşık -0.1 Å° olduğu bulunmuştur.

Aynı basamak ve teras yönelimine (100) teras ve (110) basamak yönelimine sahip yapının $\text{Cu}(210)^a$ ve $\text{Cu}(10 \ 1 \ 0)$ yüzeylerinde köşe zinciri (CC) atomunun yerel yer değiştirme davranışının farklı olduğu görülmüştür. Dar teraslı $\text{Cu}(210)^a$ yüzeyinde CC atomu içe doğru (içeriye) hareket ederken ($- 0.007 \text{ Å}^\circ$), $\text{Cu}(10 \ 1 \ 0)$ yüzeyinde ise aynı atomun içten uzaklaşacak şekilde (dışarıya) hareket ettiği ($+ 0.04 \text{ Å}^\circ$) görülmüştür. Her iki yüzeyde de SSC ve BNN atomlarının yerel yer değiştirme davranışları benzer bulunmuştur. SSC atomu dışarı ve BNN atomu içe doğru içeriye doğru hareket etmektedir. Diğer gevşek istiflenmiş $\text{Cu}(210)^b$ ve $\text{Cu}(10 \ 9 \ 0)$ yüzeylerinde ise CC atomu sırasıyla ($- 0.007 \text{ Å}^\circ$) ve (-0.009 Å°), içe doğru (içeriye) hareket ederken, BNN atomu $\text{Cu}(210)^b$ yüzeyinde içten uzaklaşacak şekilde (dışarıya), $\text{Cu}(10 \ 9 \ 0)$ yüzeyinde ise içeriye doğru hareket etmektedir.

6.2. Yüksek Miller İndisli Sıkı İstiflenmiş Basamaklı Dar ve Geniş Teraslı Yüzeylerinin Tabakalar Arası Daralma ve Genişlemeleri

Sıkı istiflenmiş basamaklı yüzeylerde tabakalar arası mesafelerdeki daralma ve genişleme davranışlarına bakıldığında, dar teraslı $\text{Cu}(311)$ ve $\text{Cu}(331)$ yüzeylerinde ilk iki tabakalar arası mesafedeki daralmanın yüzde değişimi yaklaşık % 11 civarındadır. $\text{Cu}(311)$ yüzeyinde tabakalar arası daralma ve genişleme değerleri d_{89} 'a kadar azalma göstermiş, daha sonraki tabakalarda zaman zaman artan- azalan davranış sergilemiştir. Bu yüzeyin tabakalar arası daralma ve genişleme davranışı salınımlı bir doğa sergilemektedir ($-, +, -, +, -, \dots$). Geniş teraslı yüzeyler $\text{Cu}(19 \ 1 \ 1)$ ve $\text{Cu}(19 \ 19 \ 1)$ ' de ilk iki tabaka arasındaki mesafedeki daralma değerleri sırasıyla % 18.55 ve % 11 civarındadır. $\text{Cu}(19 \ 1 \ 1)$ ' de (8MC- CC) $d_{9 \ 10}$ ve (CC- BNN) $d_{10 \ 11}$ tabakaları arasındaki mesafede hesaplanan daralma ve genişleme değerleri sırasıyla

% 22.8 ve % 42 değerlerindedir. Bu değerler bu yüzeyin ilk iki tabakası arasında hesaplanan daralma değerine nazaran daha büyüktür. Benzer davranış Cu(19 19 1) yüzeyinde ise $d_{9\ 10}$ (8MC- CC), $d_{10\ 11}$ (CC- BNN) tabakaları arasındaki mesafelerde hesaplanan daralma ve genişleme değerlerinde sırasıyla % 41 ve % 26.6 civarında görülmüştür.

6.3. Yüksek Miller İndisli Sıkı İstiflenmiş Basamaklı Dar ve Geniş Teraslı Yüzeylerinin Yerel Atomik Yer Değiştirmeleri

Aynı basamak ve teras yönelimine (110) teras ve (111) basamaklı sahip sıkı istiflenmiş Cu(331) ve Cu(19 19 1) yüzeylerinde köşe zinciri (CC) atomunun yerel yer değiştirme davranışının farklı olduğu görülmüştür. Dar teraslı Cu(331) yüzeyinde CC atomu içe doğru (içeriye) hareket ederken ($- 0.002\ \text{\AA}^\circ$), Cu(19 19 1) yüzeyinde ise içten uzaklaşacak şekilde (dışarıya) hareket ettiği ($+ 0.004\ \text{\AA}^\circ$) görülmüştür. Her iki yüzeyde de içteki en yakın komşu (BNN) atomları içe doğru (içeriye) hareket etmektedir. Cu(311) ve Cu(19 1 1) yüzeylerinin yerel atomik yer değiştirme davranışları aynı bulunmuştur. Her iki yüzeyde de CC atomu sırasıyla ($+ 0.015\ \text{\AA}^\circ$) ve ($+ 0.04\ \text{\AA}^\circ$) içten uzaklaşacak şekilde (dışarıya) ve BNN atomu da içe doğru ($- 0.028\ \text{\AA}^\circ$) ve ($- 0.039\ \text{\AA}^\circ$) hareket etmektedir.

6.4. Yüksek Miller İndisli Sıkı ve Gevşek İstiflenmiş Basamaklı Dar ve Geniş Teraslı Yüzeylerinin Tabakalar Arası Daralma ve Genişlemeleri

Sıkı ve gevşek istiflenmiş basamaklara sahip geniş teraslı yüzeylerin tabakalar arası mesafelerindeki daralma ve genişleme davranışlarına bakıldığında, bu daralma ve genişlemelerin benzerlik gösterdiği söylenebilir. Cu(10 1 0) yüzeyinin d_{89} , $d_{9\ 10}$, $d_{10\ 11}$ tabakaları arasındaki mesafelerde hesaplanan daralma ve genişlemelerin yüzde değişim değerlerinin ilk iki tabaka arasında hesaplanan daralmaya nazaran daha büyük bulundu ve bu davranış, sıkı istiflenmiş Cu(19 19 1) ve Cu(19 1 1) yüzeylerinde de sırasıyla $d_{9\ 10}$, $d_{10\ 11}$, $d_{11\ 12}$ ve $d_{9\ 10}$ ve $d_{10\ 11}$ tabakaları arasındaki mesafelerin daralma ve genişlemelerinin yüzde değişim değerleri, bu yüzeylerin ilk iki tabakası arasındaki hesaplanan daralmaya nazaran daha büyük olduğu durumla benzer bulunmuştur. Fakat bu davranış sıkı istiflenmiş basamaklı yüzeylerde daha belirgindir.

Dar teraslı yüzeylerde ise tabakalar arası mesafelerdeki daralma ve genişleme davranışları arasında benzerlik görülmüştür. Bu yüzeylerde ilk tabakalar arası daralma ve genişlemelerde bir daralma gözlenirken, daha alt tabakalara doğru zaman zaman artan- azalan büyüklükte daralma ve genişlemeler gözlenmiştir.

6.5. Yüksek Miller İndisli Sıkı ve Gevşek İstiflenmiş Basamaklı Dar ve Geniş Teraslı Yüzeylerinin Yerel Atomik Yer Değiştirmeleri

Gevşek ve sıkı istiflenmiş basamaklı yüzeylerin yerel atomik yer değiştirme davranışlarına bakılırsa, aynı teras yönelimine sahip Cu(10 1 0) ve Cu(19 1 1) yüzeylerinde CC atomu içten uzaklaşacak şekilde dışarıya doğru hareket ederken, her iki yüzeyde de BNN ve 1MC atomları içeriye doğru hareket etmektedir. Yine Cu(10 9 0) ve Cu(19 19 1) yüzeylerinde CC atomu ilk yüzeyde içeriye, ikincisinde ise dışarıya doğru hareket etmekteyken, BNN, 7MC ve 8MC atomlarının davranışları her iki yüzeyde de içeriye doğru görülmüştür. Yine bu geniş teraslı yüzeylerde 1MC atomunun yerel yer değiştirmesi içeriye doğru hareket ettiği görülmüştür. Cu(210)^a, Cu(210)^b, Cu(331) dar teraslı yüzeylerinde CC atomu içe doğru (içeriye) hareket ederken, Cu(311) yüzeyinde bu atom içten uzaklaşacak şekilde dışarıya doğru hareket etmektedir. BNN atomunun bu yüzeylerdeki davranışı Cu(210)^b yüzeyi hariç içeriye doğru gözlenmiştir.

6.6. Yüksek Miller İndisli Sıkı ve Gevşek İstiflenmiş Basamaklı Dar ve Geniş Teraslı Yüzeylerinin Kuvvet Sabitleri

Gevşek istiflenmiş basamaklara sahip dar teraslı Cu(210)^a yüzeyinde SC-CC ve BNN-SC atomları arasındaki kuvvet sabiti matrisinin k_{zz} elemanı iç karşılığına göre sırasıyla % 70 ve % 54 oranlarında sertleşmiştir. Yine gevşek istiflenmiş basamaklı ve dar teraslı Cu(210)^b yüzeyinde ise SC-CC ve BNN-SC atomları arasındaki aynı eleman sırasıyla % 51 ve % 31 oranlarında sertleşmiştir. Bu yüzeylere nazaran daha geniş teraslı Cu(10 1 0) ve Cu(10 9 0) yüzeylerinin kuvvet sabiti elemanlarındaki değişimlere bakıldığında ise, Cu(10 1 0) yüzeyinde SC-1MC ve SC-BNN atomları arasındaki kuvvet sabitinin k_{zz} elemanı iç karşılığına göre sırasıyla % 12, % 60 oranlarında sertleşirken, Cu(10 9 0) yüzeyinde aynı atomlar SC-1MC ve SC-BNN arasındaki k_{zz} elemanı sırasıyla % 95 yumuşama ve % 35 sertleşme göstermiştir.

Cu(210)^a ve Cu(210)^b yüzeyleri için kuvvet sabitinin köşegen dışı elemanı k_{xz} ' in değişimine bakılırsa, Cu(210)^a yüzeyi için SC-CC ve BNN-SC atomları arasındaki eleman sırasıyla % 40 ve % 38 oranlarında sertleşmiştir. Cu(210)^b yüzeyi için ise aynı elemanın % 28 ve % 10 oranlarında sertleştiği görülmüştür. Cu(10 1 0) yüzeyinde SC-1MC atomları arasındaki kuvvet sabitinin bu elemanı % 160 oranında sertleşirken, BNN-SC atomları arasındaki % 50 oranında sertleşmiştir. Cu(10 9 0) yüzeyinde ise SC-1MC ve SC-BNN atomları arasındaki kuvvet sabitinin k_{xz} elemanı sırasıyla % 200, % 12 oranlarında sertleşirken, SC-CC atomları arasındaki % 26 oranında yumuşamıştır.

Sıkı istiflenmiş basamaklı ve dar teraslı Cu(331) yüzeyinde BNN-SC ve SC-CC atomları arasındaki kuvvet sabitinin k_{zz} elemanı iç karşılığına göre sırasıyla % 26 ve % 160 oranlarında sertleşmiştir. Cu(311) yüzeyinde ise BNN-SC ve SC-CC atomları arasındaki kuvvet sabitinin köşegen elemanı içe göre sırasıyla % 31 ve % 34 oranlarında sertleşmiştir. Daha geniş teraslı Cu(19 1 1) yüzeyinde ise SC-1MC, SC-CC ve SC-BNN atomları arasındaki kuvvet sabitinin k_{zz} elemanı sırasıyla % 58 ve % 3 yumuşama ve de % 42 sertleşme göstermiştir. Cu(19 191) yüzeyinde ise aynı eleman sırasıyla % 2, % 3 ve % 35 oranlarında sertleşmiştir.

Kuvvet sabitinin köşegen dışı elemanı k_{xz} ' de gözlenen değişimler ise Cu(331) yüzeyinde SC-CC atomları arasındaki sabit % 56 oranında yumuşama, SC-BNN arasındaki ise % 2,7 oranında sertleşme şeklinde görülürken, Cu(311) yüzeyi için SC-CC atomları arasındaki aynı eleman % 10, SC-BNN atomları arasındaki ise % 40 oranlarında sertleşmiştir. Daha geniş teraslı Cu(19 1 1) yüzeyinde SC-1MC, SC-CC ve SC-BNN atomları arasındaki kuvvet sabitinin k_{xz} elemanı iç karşılığına göre sırasıyla % 150 sertleşme, % 18 yumuşama ve % 32 oranında sertleşmeye maruz kalmıştır. Cu(19 191) yüzeyinde ise SC-CC ve SC-BNN atomları arasındaki kuvvet sabitinin k_{xz} elemanı iç karşılığına göre sırasıyla % 31 ve % 5 oranlarında sertleşmiştir.

Aynı teras yönelimine sahip geniş teraslı sıkı ve gevşek istiflenmiş basamaklı Cu(19 1 1) ve Cu(10 1 0) yüzeyleri için kuvvet sabitinin k_{xz} elemanındaki değişimler benzerlik göstermektedir. Cu(10 1 0) yüzeyinde SC-1MC, SC-SSC ve SC-BNN atomları arasındaki eleman sırasıyla % 160 sertleşme, % 12 yumuşama ve % 50 sertleşme gösterirken, Cu(19 1 1) yüzeyinde ise SC-1MC, SC-CC ve SC-BNN

atomları arasındaki aynı eleman sırasıyla % 150 sertleşme, % 18 yumuşama ve % 32 sertleşme göstermiştir.

Yine aynı teras yönelimi gösteren sıkı ve gevşek istiflenmiş basamaklı Cu(311) ve Cu210)^a yüzeylerinde SC-BNN atomları arasındaki k_{xz} elemanındaki değişimler benzerlik göstermektedir. Cu(311) yüzeyinde SC-BNN atomları arasındaki bu eleman % 40 oranında, Cu210)^a yüzeyinde % 38 oranında sertleşmiştir. Cu(331) ve Cu210)^b yüzeylerine bakıldığında ise, SC-BNN ve SC-CC atomları arasındaki kuvvet sabitinin k_{xz} elemanı Cu210)^b yüzeyi için sırasıyla % 10 ve % 28 sertleşirken, Cu(331) yüzeyinde bu eleman sırasıyla % 2.7 sertleşmiş ve % 56 oranında yumuşamıştır.

7. SONUÇLAR

Bu çalışmada Cu' n yüksek Miller (Vicinal) indisli sıkı ve gevşek istiflenmiş basamaklara sahip, dar ve geniş teraslı bir kaç yüzeyi için yapısal ve yerel kuvvet alan özellikleri gömülü atom yönteminden çıkan yarı deneysel potansiyel kullanılarak sunuldu. Yüzeyde basamak varlığı ile sisteme yapılan uyarının yüzey atomları ve civarındaki bölgede yapısal değişimlere neden olduğu ve bunun da atomik çevre ile ilişkili olduğu görüldü. Ayrıca basamaklar civarındaki kuvvet alanlarının içe göre değiştiği ve bu değişimin sonucunda yüzey ve yakınındaki atomların karakteristik relaxationlarına neden olduğu görüldü. Çalışılan yüzeylerde gözlenen özellikler aşağıda özetlenmiştir.

i.) Çalışılan her bir yüzey için hesaplanan tabakalar arası daralma ve genişleme değerleri içe doğru inildikçe düzgün olmayan davranış sergilemektedir. Cu(210)^a, Cu(210)^b, Cu(331) ve Cu(311) dar teraslı, sıkı ve gevşek istiflenmiş basamaklara sahip yüzeylerinde tabakalar arası daralma ve genişleme değerleri ilk tabakalar arasında en fazla, içe doğru inildikçe bu daralma ve genişleme değerleri, düzgün olmayan bir şekilde artma ve azalma göstermektedir. Geniş teraslı yüzeylerin Cu(10 1 0), Cu(10 9 0), Cu(19 1 1) ve Cu(19 19 1) tabakalar arası daralma ve genişlemeleri dar teraslı yüzeylere nazaran farklılık göstermektedir. Bu yüzeylerde içe doğru inildikçe hala önemli daralma ve genişlemeler bulunmuştur. Bu yüzeylerde gözlenen önemli bulgulardan biri ise çok derindeki bir kaç tabakalar arası mesafede hesaplanan daralma ve genişleme değerleri ilk iki tabaka arasında hesaplanan değerlerden daha büyük bulunmuştur.

ii.) Dar teraslı ve gevşek istiflenmiş basamaklara sahip Cu(210)^a ve Cu(210)^b. yüzeyleri farklı yapıya sahip olmalarına rağmen, bu yüzeyler için hesaplanan yüzey düzlemine dik doğrultuda tabakalar arası daralma ve genişleme değerleri aynı bulunmuştur. Bu davranış bize bu yüzeylerin elektronik yapılarının benzerliğini işaret etmektedir. Bu yüzeylerin elektronik yapılarının anlaşılabilmesi için kapsamlı elektronik yapı hesaplamaları gerekmektedir.

iii.) Çalışılan her bir yüzey için basamak zinciri atomunun (SC) z - doğrultusundaki yerel yer değiştirme yüzeyin geometrisinden ve terasındaki atomik zincir sayısından bağımsız olarak yaklaşık -0.1 Å° bulunmuştur. Köşe zinciri atomunun (CC) daha önce yapılan deneysel ve kuramsal çalışmalarda gözlenen yerel yer değiştirme davranışı genellikle içten dışarıya doğru iken, bu çalışmada bazı yüzeyler $(10 \ 9 \ 0)$, (331) , $\text{Cu}(210)^a$ ve $\text{Cu}(210)^b$ için gözlenen bu yerel yer değiştirme davranış gözlenmemiştir. Bu yüzeyler için CC atomunun bu davranışına açıklık getirilmesi için kapsamlı elektronik yapı hesaplamaları gerekmektedir.

iv.) Kusur bölgesinde kuvvet alanlarının değişimi ile birlikte kuvvet sabitlerinde ortaya çıkan değişimler, basamak atomu ve çevresindeki atomlar arasındaki bağ uzunluklarında daralmalar olarak ortaya çıkmaktadır. Ve bu daralmaların bu bölgedeki atomların koordinasyon sayıları ile ilişkili olduğu görülmüştür.

KAYNAKLAR

- [1] **Williams, E.D.**, 1994. Surface Steps and Surface Morphology: Understanding Macroscopic Phenomena from Atomic Observations, *Surf. Sci.*, **209/300**, 502.
- [2] **Landman, U., Hill, R.N., ve Mostoller, M.**, 1980. Lattice Relaxation at Metal Surfaces, *Phys. Rev. B*, **21**, 448.
- [3] **Smoluchowski, R.**, 1941. Anisotropy of Electronic Work Functions of Metals, *Phys. Rev. B*, **60**, 661.
- [4] **Nelson, J.S., ve Feibelman, P.J.**, 1992. Calculation of the Structure of the Al(331) Stepped Surface, *Phys. Rev. Lett.*, **68**, 2188.
- [5] **Barnett, R.N., Landmann, U., ve Cleveland, C.L.**, 1983. Multilayer Relaxation of Interlayer Registry and Spacing at High-Index Metal Surfaces, *Phys. Rev. Lett.*, **51**, 1359.
- [6] **Zhang, X.-G., Van Hove, M.A., Somorjai, G.A., Rous, P.J., Tobin, D., Gonis, A., Maclaren, J.M., Heinz, K., Michl, M., Linder, H., Muller, K., Ehsasi, M., ve Block, J.H.**, 1991. Efficient Determination of Multilayer Relaxation in the Pt(210) Stepped and Densely Kinked Surface, 1991. *Phys. Rev. Lett.*, **67**, 1298.
- [7] **Visscher, B., Boers, A.L., Verheij, L.K., ve Poelsema, B.**, 1986. Relaxation of the Edge Atoms of a Stepped Cu(410) Surface, *Appl. Surf. Sci.*, **26**, 121.
- [8] **Adams, D.L., Jensen, V., Sun, X.F., ve Vollesen, H.J.**, 1988. Multilayer Relaxation of the Al(210) Surface, *Phys. Rev., B*, **38**, 7913.
- [9] **Ismail, Chandravakar, S., ve Zehner, D.M.**, 2002. Multilayer Relaxation of the Cu(210) Surface, *Surf. Sci.*, **504**, L201-L207.

- [10] Kolthoff, D., Pfnür, H., Fedorus, A.G., Koval, V., ve Naumovets, A.G., 1999. Multilayer Relaxation of the Pd(210) and Mo(211), *Surf. Sci.*, **439**, 224-234.
- [11] Lang, B., Joyner, W.R., Somorjai, G.A., 1972. Low Energy Electron Diffraction Studies of High Index Crystal Surfaces of Platinum, *Surf. Sci.*, **30**, 440-453.
- [12] Foiles, S.M., Baskes, M.I., ve Daw, M.S., 1986. Embedded-Atom-Method Functions for the fcc Metals Cu, Ag, Ni, Pd, Pt, and Their Alloys, *Phys. Rev. B*, **33**, 7983.
- [13] Daw, M.S., ve Baskes, M.I., 1984. Embedded-Atom-Method: Derivation and Application to Impurities, Surfaces, and Other Defects in Metals, *Phys. Rev. B*, **29**, 6443.
- [14] Yang, L., Rahman, T.S., ve Daw M. B., 1991. Surface Vibrations of Ag(100) and Cu(100): A Molecular-Dynamics Study, *Phys. Rev. B*, **44**, 13725.
- [15] Daw, M.S., ve Baskes, M.I., 1983. Semiempirical, Quantum Mechanical Calculation of Hydrogen Embrittlement in Metals, *Phys. Rev. Lett.*, **50**, 1285.
- [16] Omar, M.A., 1975. Elementary Solid State Physics, pp. 2-24, Addison-Wesley, Massachusetts.
- [17] Stott, M.J., ve Zaremba, E., 1980. Qasiatoms: An Approach to Atoms in Nonuniform Electronic Systems, *Phys. Rev. B*, **22**, 1564.
- [18] Noonan, J.R., ve Davis, H.L., 1980. Limitations in Specular Beam Leed Analysis due to Measurement of the Scattering Angle: Examples from a Study of Cu(110), *Surf. Sci.*, **99**, L424-428.
- [19] Jepsen, D.W., Marcus, M.P., Jona, F., 1972. Low Energy Electron Diffraction from Several Surfaces of Aluminum, *Phys. Rev. B*, **6**, 3684.
- [20] Durukanoğlu, S., ve Rahman, T.S., Structure of Ag(410) and Cu(320) baskıda.
- [21] Durukanoğlu, S., ve Rahman, T.S., 1998. Atomic Relaxations and Thermodynamics of Cu(410), *Surf. Sci.*, **409**, 395-402.

- [22] **Durukanoglu, S.**, 1999. Structural, Vibrational, And Thermodynamical Properties Of Metal Vicinal Surfaces, *PhD Thesis*, Department Of Physics College Of Arts And Sciences. Kansas State University, Kansas, USA.
- [23] **İbach, H., ve Bruchmann, D.**, 1978. Surface Phonons on Stepped Pt(111) surfaces, *Phys. Rev. Lett.*, **41**, 958.
- [24] **Switendick, A.C.**, 1970. Electronic Band Structures of Metal Hydrides, *Solid State Comm.*, **8**, 1463.
- [25] **Gellat, C.D., Ehrenreich, H., ve Weiss, J.A.**, 1978. Transition-metal hydrides: electronic structure and the heats of formation, *Phys. Rev. B*, **17**, 1940.
- [26] **Manninen, M., Jena, P., Nieminen, R.M., ve Lee, J.K.**, 1981. Ab Initio Calculation of Interatomic Potentials and Electronic Properties of a Simple Metal –Al, *Phys. Rev. B*, **24**, 7057.
- [27] **Baskes, M.I., ve Melius, C.F.**, 1979. Pair Potentials for fcc Metals, *Phys. Rev. B*, **20**, 3197.
- [28] **Johnson, R.A.**, 1972. Relationship Between Two-Body Interatomic Potentials in a Lattice Model and Elastic Constants, *Phys. Rev. B*, **6**, 2094.
- [29] **Cho, J-H., İsmail, Zhang, Z., ve Plummer, E.W.**, 1999. Oscillatory Lattice Relaxation at Metal Surfaces, *Phys. Rev. B*, **59**, 1677.
- [30] **Jiang, P., Jona, F., ve Marcus, P.M.**, 1987. Step Profiles Predicted with the Modified Point-Ion Model for Eight Face-Centered –and Body-Centered-Cubic Surfaces, *Phys. Rev. B*, **35**, 7952.
- [31] **Tian, Z.- J., ve Rahman, T.S.**, 1993. Energetics of Stepped Cu Surfaces, *Phys. Rev. B*, **47**, 9751.
- [32] **Shewchuk, R., J.**, 1994. An Introduction to Conjugate Gradient Method Without Agonizing Pain,
- [33] **Nelson, J., S., Daw, M., S., ve Sowa, E., C.**, 1989. Cu(111) and Ag(111) Surface-Phonon Spectrum: The Importance of Avoided Crossing, *Phys. Rev. B*, **40**, 1465.

- [34] **Arfken, G., B.**, 1966. Mathematical Methods For Physicists, pp596-599. Harcourt/Academic Press, Burlington.
- [35] **Mei, J., Davenport, J., W., ve Fernando, G., W.**, 1991. Analytic Embedded-Atom Potentials For fcc Metals: Application to Liquid and Solid Copper, *Phys. Rev. B*, **43**, 4653-4658.

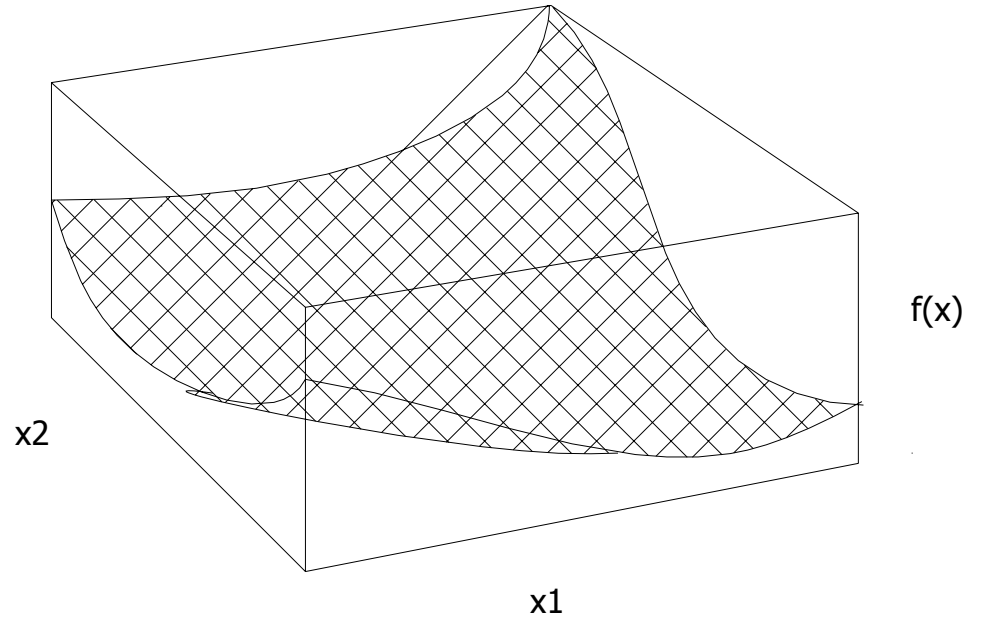
EKLER

EK A. Fonksiyonların Minimum Ve Maksimum Değerleri

Bir veya daha fazla bağımsız değişkene bağlı çok boyutlu bir fonksiyonun maksimum ve minimum değerlerini bulmak için bir çok sayısal yöntem geliştirilmiştir. Bu tür hesaplamalarda beklenen şey, minimumlaştırma işlemini en hızlı, mümkün olan en ucuz ve en küçük bellekte yapacak yöntemlerin kullanılmasıdır. Çok boyutlu minimumlaştırma, bağımsız bir tek değişkenden daha fazla değişken içeren bir fonksiyonun minimum noktasını belirlemek olarak tanımlanabilir. Steepest Descent (SD) ve Conjugate Gradient (CG) yöntemleri çok boyutlu sistemler için kullanılan minimum buldurma yöntemleri içinde iki tanesidir. Bu iki yöntem içerisinde Steepest Descent, Conjugate Gradient Yöntemi ile bir takım benzerlikler göstermekte fakat daha yavaş çalışmakta ve bu nedenle de minimum noktaya ulaşmakta daha fazla zaman gerektirdiğinden tercih edilmemektedir.

EK A.1. Quadratic Biçim

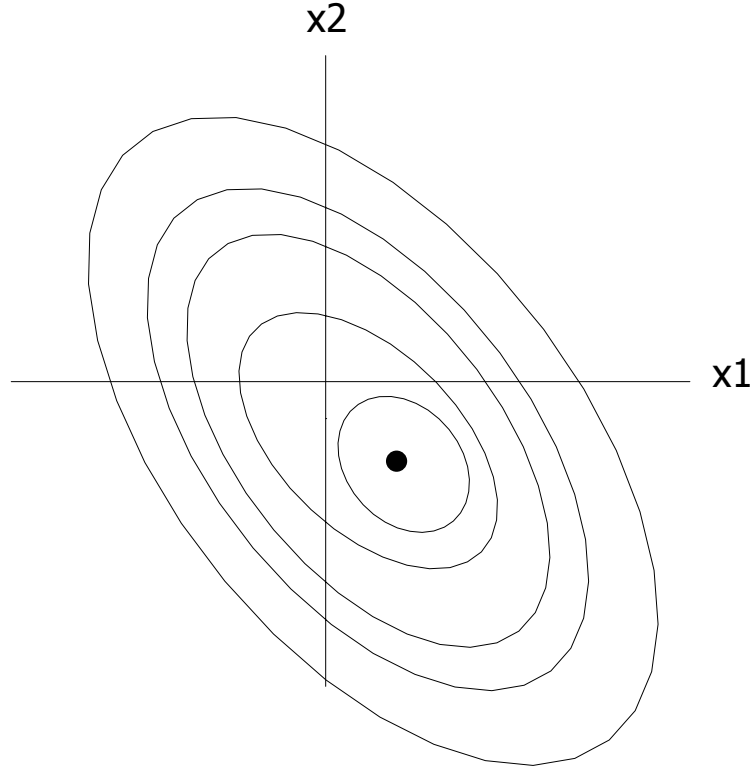
Quadratic bir biçim basitçe, biçimi $f(x) = \frac{1}{2}x^T Ax - b^T x + c$ olan bir vektörün quadratic fonksiyonudur. Burada A bir matris, x, b vektörler ve c bir sabittir. Eğer A simetrik ve pozitif-belirli bir matris ise, yani 0 olmayan her x vektörü için $x^T Ax > 0$ koşulunu sağlıyorsa, $Ax = b$ 'nin çözümü $f(x)$ fonksiyonunun minimumudur. A matrisi pozitif-belirli bir matris olduğundan $f(x)$ fonksiyonun belirlediği yüzey parabolit bir kase şeklindedir. $f(x)$ fonksiyonun quadratic biçimi (Şekil A.1) ve eş yükselti eğri planı ise (Şekil A.2)' de görülmektedir.



Şekil A.1. $f(x)$ ' in quadratic biçimi. Yüzeyin minimum noktası $Ax = b$ ' in çözümüdür.

$$f'(x) = \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial x_1} f(x) \\ \frac{\partial}{\partial x_2} f(x) \\ \frac{\partial}{\partial x_n} f(x) \end{bmatrix} \quad (\text{A.1})$$

Quadratic biçimin gradyanıdır;



Şekil A.2. Quadratic biçimin eş yükselti eğrileri (konturları).

Gradyan, verilen bir x noktası için $f(x)$ fonksiyonun en büyük artış yönü içindeki noktaların oluşturduğu bir vektör alanıdır. $f(x)$ fonksiyonun tanımladığı bu parabolit kassenin dibinde gradyan 0 olacaktır. Böylece $f'(x)$, 0' a eşitlenerek $f(x)$ fonksiyonu minimumlaştırılır.

$$f'(x) = \frac{1}{2} A^T x + \frac{1}{2} Ax - b . \quad (A.2)$$

A simetrik ise (A.2) denklemi aşağıdaki biçimi alır.

$$f'(x) = Ax - b . \quad (A.3)$$

Bu gradyan 0'a eşitlenerek $Ax - b$ lineer sistemin çözümü aranır. $Ax - b$ nin çözümü $f(x)$ fonksiyonunun kritik noktasıdır.

EK A.2. Steepest Descent Yöntemi

Minimum nokta buldurma yöntemlerinden biri olan bu yöntemde öncelikle rasgele bir noktadan $x_{(0)}$ başlanarak, paraboloidin dibine doğru hareket edilir. Bu bölgeye ulaşabilmek için bir çok $x_{(1)}, x_{(2)}, \dots$ adımları alınarak çözüme (x) gelinceye kadar adımlamaya devam edilir. Bir adım alındığında f' nin en hızlı düşeceği yön belirlenir ki bu yön de $f'(x_{(i)})'$ e zıt olan yöndür. Denklem (A.3)' e göre bu yön $f'(x_{(i)}) = b - Ax_{(i)}$ şeklindedir.

Çözümünden ne kadar uzakta olduğumuzu gösteren hata terimi ifadesi $e_{(i)} = x_{(i)} - x$ şeklinde tanımlanır. Doğru b değerinden ne kadar uzakta olduğumuzu veren artık (arta kalan) ifadesi ise $r_{(i)} = b - Ax_{(i)}$ şeklindedir. Aynı zamanda $r_{(i)} = f'(x_{(i)})$, ve bu artık değeri en dik iniş yönü olarak düşünülebilir.

Minimum noktanın aranma basamakları aşağıdaki gibi gerçekleşir.

1. **Basamak:** Herhangi bir rasgele $x_{(0)}$ noktasından başlanır. İlk basamakta en dik iniş yönü boyunca ilerlenerek çizgi üzerinde herhangi bir noktaya gelinir (Şekil A.3). Bir nokta seçilir ve konumu belirlenir.

$$x_{(1)} = x_{(0)} + \alpha r_{(0)}, \quad (A.4)$$

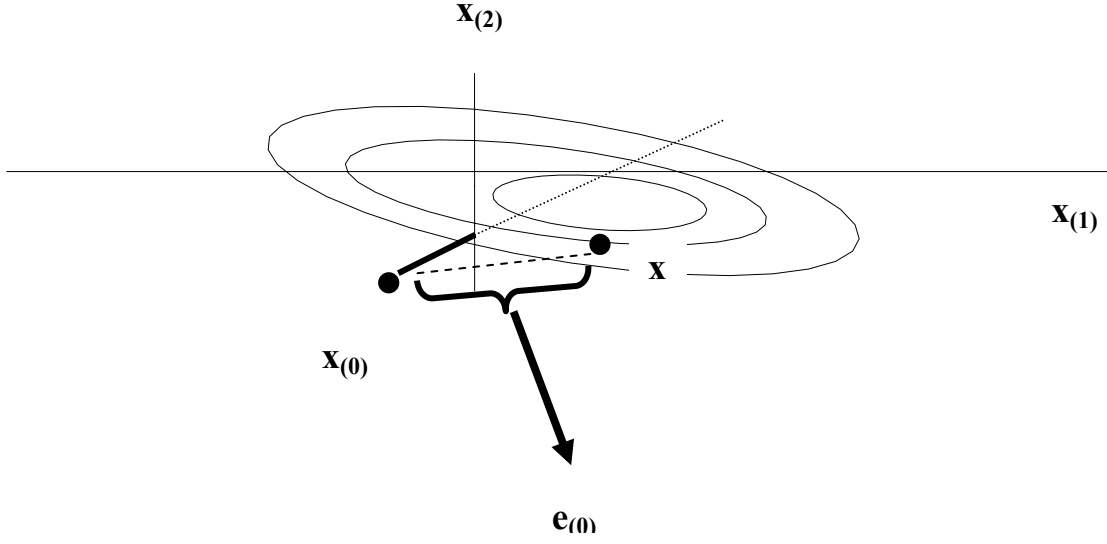
2. **Basamak:** Alınacak adımın (α) büyüklüğünün belirlenmesi. Bu çizgi boyunca fonksiyonu minimum yapan α değeri, geline nokta da fonksiyonun doğrultu türevini 0 yapan değerdir. Zincir kuralı yardımıyla bu ifade (A.5)' deki gibi yazılarak, doğrultu türevi 0' a eşitlenirse,

$$\frac{d}{d\alpha} f(x_{(1)}) = f'(x_{(1)})^T \frac{d}{d\alpha} x_{(1)} = f'(x_{(1)})^T r_{(0)} = 0 \quad (A.5)$$

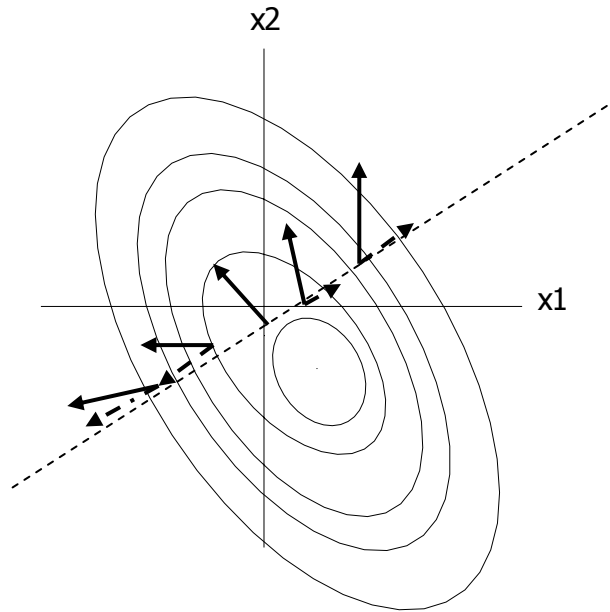
(A.5) eşitliği elde edilir. Bu denklemden $r_{(0)}$ ve $f'(x_{(1)})'$ in birbirlerine dik olmaları gereği ortaya çıkar.

Bu durum çizgi üzerindeki her bir nokta gradyanın izdüşümü çizilerek anlaşılabilir.

İzdüşümün 0 olduğu yerde gradyan çizgiye diktir (Şekil A.4).



Şekil A.3. $x_{(0)}$ noktasından başlanarak f ' in en dik iniş yönü boyunca alınan adım.



Şekil A.4. Çizgi boyunca bir kaç noktanın gradyanı ve gradyan izdüşümleri.

α ' yı belirlerken $f'(x_{(1)}) = -r_{(1)}$ olduğu hatırlanarak yapılan matematiksel hesaplarla,

$$r_{(1)}^T r_{(0)} = 0 \quad (\text{A.6})$$

$$(b - A x_{(1)})^T r_{(0)} = 0 \quad (\text{A.7})$$

$$(b - A (x_{(0)} + \alpha r_{(0)}))^T r_{(0)} = 0 \quad (\text{A.8})$$

$$(b - A x_{(0)})^T r_{(0)} - \alpha (A r_{(0)})^T r_{(0)} = 0 \quad (\text{A.9})$$

$$(b - A x_{(0)})^T r_{(0)} = \alpha (A r_{(0)})^T r_{(0)}, \quad (\text{A.10})$$

$$r_{(0)}^T r_{(0)} = \alpha r_{(0)}^T (A r_{(0)}), \quad (\text{A.11})$$

$$\alpha = \frac{r_{(0)}^T r_{(0)}}{r_{(0)}^T A r_{(0)}}. \quad (\text{A.12})$$

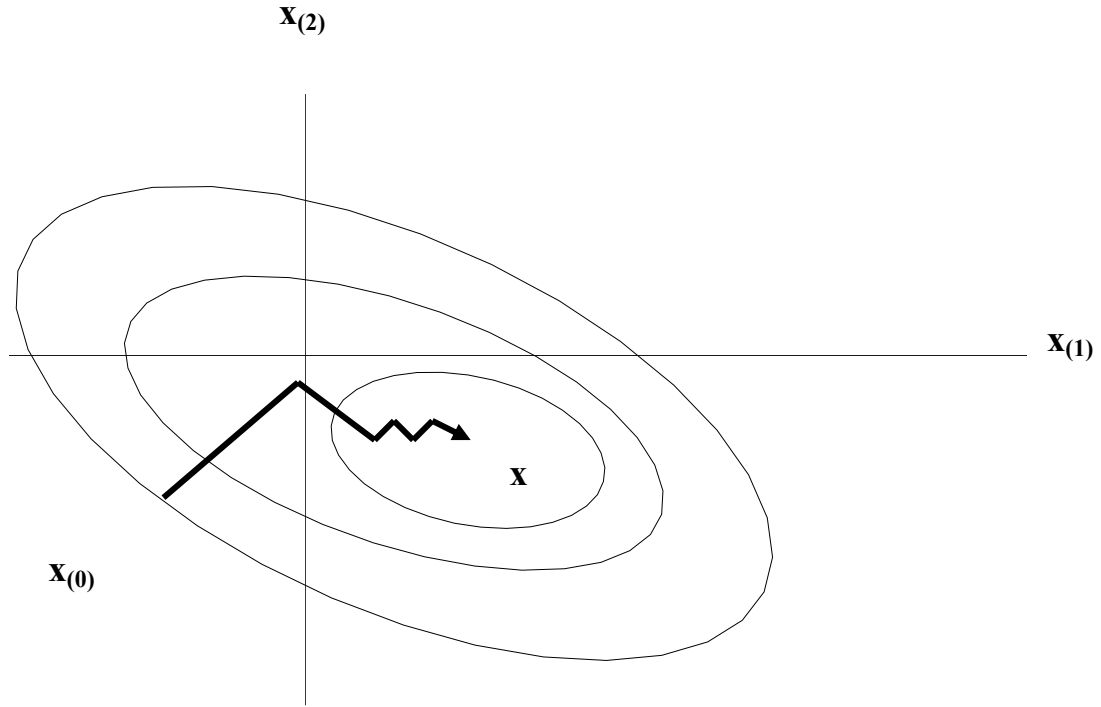
α değeri (A.12)' de olduğu gibi elde edilir.

3. Basamak: α değeri belirlendikten sonra gelinecek noktanın konumu,

$$x_{(i+1)} = x_{(i)} + \alpha r_{(i)} \quad (\text{A.13})$$

ifadesi ile belirlenir. Bu yöntem (Şekil A.5)' de görüldüğü gibi işlemektedir. Buradaki zig zag yol her bir gradyanın bir önceki gradyana dikliğini ifade etmektedir. (Şekil A. 5)' den görüldüğü gibi her bir gradyan arama yönüne diktir. Yeni arama yönü gradyana zıt doğrultuda belirlenir. Bu da her bir basamak sonrası bir sağ aç dönüşü

gerektirdiğinden bu yöntem fazladan bir hesaplama zamanı gerektirmektedir. Bu da bu yöntemin diğer minimumlaştırma yöntemlerine göre daha yavaş çalışmasına neden olarak uygulamaya yönelik bir problem oluşturur.



Şekil A.5. Steepest Descent Yöntemi.

Bu yöntemin detaylı yakınsama analizi Jonathan Richard Shewchuk tarafından yazılmış olan An Introduction to the Gradient Method Without Agonizing Pain (School of Computer Science Carnegie Mellon University, PA 15213) adlı kitapta bulunabilir [32].

EK B. KUVVET SABİTLERİNİN TAYİNİ

Gömülü atom yönteminde (GAY) daha önce de belirtildiği gibi toplam enerji anlatımı çok cisimli etkileşimleri içermektedir. GAY kuramsal anlamda ikili potansiyelleri kullanmaktan daha pahalı değildir. GAY’ de atomların rasgele bir düzenlenişinin toplam enerjisi,

$$E_{toplam} = \sum_i F_i(\rho_i) + \frac{1}{2} \sum_{i,j}^{(i \neq j)} \phi_{ij}(R_{ij}). \quad (B.1)$$

Bu ifadede, ρ_i sistemin diğer atomları tarafından i atomunun bulunduğu yerdeki elektron yoğunluğu iken, F_i , i atomunu elektron yoğunluğu ρ_i olan bölgeye gömmek için gereken enerjidir. $\phi_{ij}(R_{ij})$ ise aralarında R_{ij} mesafe olan i ve j atomları arasındaki kısa erimli elektrostatik çekim potansiyelidir. Gömme enerjisi bir atomun diğer atomlar tarafından oluşturulan yerel elektron gaz yoğunluğu ile olan etkileşimidir. Yukarıdaki denklemde elektron yoğunluğu ρ_i için bir yaklaşım yapılarak bu yoğunluk diğer tüm atomlar tarafından gelen yoğunluk katkılarının toplamı olarak yazılabilir,

$$\rho_i = \sum_{j(\neq i)} f_j(R_{ij}). \quad (B.2)$$

Burada $f_j(R_{ij})$, j atomundan dolayı i atomunun bulunduğu konumda elektron yoğunluğudur. Denklem B.1’ deki fonksiyonlar malzemelerin denge örgü sabiti, elastik sabitler, boşluk oluşturma enerjileri gibi katının iç sabitlerine fitlenmeleri sonucu elde edilirler.

j atomunun dR_{ij} kadar hareket ettirilmesi sonucu i atomu üzerine etkiyen kuvvet F_i , kuvvet sabiti K_{ij} ile verilir. Sonuçta kuvvet sabiti ifadesi enerjinin ikinci türevi yardımıyla elde edilir:

$$K_{ij} = \frac{\partial^2 E_{toplam}}{\partial R_i \partial R_j} . \quad (B.3)$$

Denklem (B.1) ve (B.2)' i kullanarak toplam enerjinin önce birinci türev sonra ikinci türevler alınır. Bu işlem için özelden genele gidiş yöntemini uyguladık. Denklem (B.1)' n birinci bölümü (gömme enerjisinin bulunduğu) ilk üç terim için açıldığında sağlanan ifade ψ olarak tanımlanarak;

$$F_1(\rho_1) + F_2(\rho_2) + F_3(\rho_3) = \psi . \quad (B.4)$$

Denklem (B.1)' den görüldüğü gibi gömme enerjisi yerel elektron yoğunluğu ρ ' a bağlıdır. Bunu da toplam üzerinde açtığımızda bu yerel yoğunluk ifadeleri aşağıdaki gibi yazılabilir.

$$\begin{aligned} \rho_1 &= f_2(R_{12}) + f_3(R_{13}), \\ \rho_2 &= f_1(R_{21}) + f_3(R_{23}), \\ \rho_3 &= f_1(R_{31}) + f_2(R_{32}). \end{aligned} \quad (B.5)$$

Enerji ifadesinin oluşturan birinci terimin birinci türevi alındığında,

$$\frac{\partial \psi}{\partial R_1} = \frac{\partial F}{\partial \rho_1} \frac{\partial \rho_1}{\partial R_1} + \frac{\partial F_2}{\partial \rho_2} \frac{\partial \rho_2}{\partial R_1} + \frac{\partial F_3}{\partial \rho_3} \frac{\partial \rho_3}{\partial R_1} \quad (B.6)$$

$$= \frac{\partial F_1}{\partial \rho_1} \left(\frac{\partial f_2}{\partial R_{12}} \frac{\partial R_{12}}{\partial R_1} + \frac{\partial f_3}{\partial R_{13}} \frac{\partial R_{13}}{\partial R_1} \right) + \frac{\partial F_2}{\partial \rho_2} \left(\frac{\partial f_1}{\partial R_{21}} \frac{\partial R_{21}}{\partial R_1} + 0 \right) + \frac{\partial F_3}{\partial \rho_3} \left(\frac{\partial f_1}{\partial R_{31}} \frac{\partial R_{31}}{\partial R_1} + 0 \right), \quad (B.7)$$

$$R_{12} = \sqrt{\left(\vec{R}_1 - \vec{R}_2 \right)^2} \quad \text{şeklindedir. Buradan türevler alındığında,}$$

$\frac{\partial R_{12}}{\partial R_1} = \frac{\vec{k}_1 - \vec{k}_2}{R_{12}}$ şeklinde elde edilir. Bu türevler denklem (B.7)'de yerine yerleştirildiğinde

(B.8) numaralı denklem elde edilir.

$$\begin{aligned} \frac{\partial \psi}{\partial R_1} = & \frac{\partial F_1}{\partial \rho_1} \left(\frac{\partial f_2}{\partial R_{12}} \left(\frac{\vec{k}_1 - \vec{k}_2}{R_{12}} \right) + \frac{\partial f_3}{\partial R_{13}} \left(\frac{\vec{k}_1 - \vec{k}_3}{R_{13}} \right) \right) + \frac{\partial F_2}{\partial \rho_2} \left(\frac{\partial f_1}{\partial R_{21}} \left(\frac{\vec{k}_2 - \vec{k}_1}{R_{21}} \right) \right) + \\ & \frac{\partial F_3}{\partial \rho_3} \left(\frac{\partial f_1}{\partial R_{31}} \left(\frac{\vec{k}_3 - \vec{k}_1}{R_{31}} \right) \right). \end{aligned} \quad (B.8)$$

(B.1) denkleminin birinci bölümünün türevi (B.8)' deki gibi belirlendikten sonra denklem (B.1)' n ikinci terimi olan elektrostatik çekim potansiyeli ifadesi ise g olarak tanımlanarak türevi alındığında,

$$g = \frac{1}{2} \sum_{i,j} \phi_{ij}(R_{ij}), \quad (B.9)$$

$$g = \phi_{12}(R_{12}) + \phi_{13}(R_{13}) + \phi_{21}(R_{21}) + \phi_{23}(R_{23}) + \phi_{31}(R_{31}) + \phi_{32}(R_{32}). \quad (B.10)$$

R_1 ' e göre birinci türev alınarak (B.11) denklemi elde edilir:

$$\frac{\partial g}{\partial R_1} = \frac{1}{2} \left[\frac{\partial \phi_{12}}{\partial R_1} \frac{\partial R_{12}}{\partial R_1} + \frac{\partial \phi_{13}}{\partial R_1} \frac{\partial R_{13}}{\partial R_1} + \frac{\partial \phi_{21}}{\partial R_1} \frac{\partial R_{21}}{\partial R_1} + \frac{\partial \phi_{31}}{\partial R_1} \frac{\partial R_{31}}{\partial R_1} \right] \quad (B.11)$$

$$= \frac{\partial \phi_{12}}{\partial R_1} \left(\frac{\vec{k}_1 - \vec{k}_2}{R_{12}} \right) + \frac{\partial \phi_{13}}{\partial R_1} \left(\frac{\vec{k}_1 - \vec{k}_3}{R_{13}} \right) + \frac{\partial \phi_{21}}{\partial R_{21}} (-) \left(\frac{\vec{k}_2 - \vec{k}_1}{R_{21}} \right) + \frac{\partial \phi_{31}}{\partial R_1} (-) \left(\frac{\vec{k}_3 - \vec{k}_1}{R_{31}} \right) \quad (B.12)$$

şeklinde bulunur. Bu denklemler yardımıyla ikinci türevler hesaplandığında ise aşağıdaki şekilde elde edilir:

$$\begin{aligned}
K_{12} = & \frac{\partial^2 F_1}{\partial \rho_1^2} \frac{\partial f_2}{\partial R_{12}} \frac{\partial R_{12}}{\partial R_2} \left[\frac{\partial f_2}{\partial R_{12}} \left(\frac{\overset{P}{R}_1 - \overset{P}{R}_2}{R_{12}} \right) + \frac{\partial f_3}{\partial R_{13}} \left(\frac{\overset{P}{R}_1 - \overset{P}{R}_3}{R_{13}} \right) \right] + \frac{\partial F_1}{\partial \rho_1} \left[\frac{\partial^2 f_2}{\partial R_{12}^2} \frac{\partial R_{12}}{\partial R_2} \left(\frac{\overset{P}{R}_1 - \overset{P}{R}_2}{R_{12}} \right) + 0 \right] + \\
& \frac{\partial F_1}{\partial \rho_1} [0 + 0] + \frac{\partial^2 F_2}{\partial \rho_2^2} \left[\frac{\partial f_1}{\partial R_{21}} \frac{\partial R_{21}}{\partial R_2} + \frac{\partial f_3}{\partial R_{23}} \frac{\partial R_{23}}{\partial R_2} \right] \left(\frac{\partial f_1}{\partial R_{21}} \left(\frac{\overset{P}{R}_2 - \overset{P}{R}_1}{R_{21}} \right) \right) + \frac{\partial F_2}{\partial \rho_2} \left[\frac{\partial^2 f_1}{\partial R_{21}^2} \frac{\partial R_{21}}{\partial R_2} \left(\frac{\overset{P}{R}_2 - \overset{P}{R}_1}{R_{21}} \right) + 0 \right] + \\
& \frac{\partial^2 F_3}{\partial \rho_3^2} \frac{\partial f_2}{\partial R_{32}} \frac{\partial R_{32}}{\partial R_2} \left[\frac{\partial f_1}{\partial R_{31}} \left(\frac{\overset{P}{R}_3 - \overset{P}{R}_1}{R_{31}} \right) \right] + \frac{\partial F_3}{\partial \rho_3} [0 + 0].
\end{aligned} \tag{B.13}$$

$R_{21}, R_{23}, R_{32}, R_{12}$ ifadelerinin yerlerine yazılıp R_2 'e göre türevleri alınarak gerekli sadeleştirmeler yapıldığında denklem 1' n birinci terimi için elde edilen ikinci türev ifadesi (B.14) denkleminde olduğu gibi elde edilir:

$$\begin{aligned}
= & \frac{\partial^2 F_1}{\partial \rho_1^2} \frac{\partial f_2}{\partial R_{12}} \left[\frac{\partial f_2}{\partial R_{12}} + \frac{\partial f_3}{\partial R_{13}} \left(\frac{\overset{P}{R}_{12} \overset{P}{R}_{13}}{R_{12} R_{13}} \right) \right] + \frac{\partial F_1}{\partial \rho_1} \left[\frac{\partial^2 f_2}{\partial R_{12}^2} \right] + \frac{\partial^2 F_2}{\partial \rho_2^2} \frac{\partial f_1}{\partial R_{21}} \left[\frac{\partial f_1}{\partial R_{21}} + \frac{\partial f_3}{\partial R_{23}} \left(\frac{\overset{P}{R}_{23} \overset{P}{R}_{21}}{R_{23} R_{21}} \right) \right] + \\
& \frac{\partial F_2}{\partial \rho_2} \left[\frac{\partial^2 f_1}{\partial R_{21}^2} \right] + \frac{\partial^2 F_3}{\partial \rho_3^2} \frac{\partial f_2}{\partial R_{32}} \left[\frac{\partial f_1}{\partial R_{31}} \left(\frac{\overset{P}{R}_{32} \overset{P}{R}_{31}}{R_{32} R_{31}} \right) \right].
\end{aligned} \tag{B.14}$$

Bu ifadeden yararlanarak terimler üzerinden toplama genelleştirerek ikinci türev ifadesi aşağıdaki gibi elde edilir:

$$\begin{aligned}
= & \sum_{i,j} \frac{\partial^2 F_{ij}}{\partial \rho_i^2} \left(\frac{\partial f_j}{\partial R_{ij}} \right)^2 + \sum_{i,j,k} \frac{\partial^2 F_i}{\partial \rho_i^2} \frac{\partial f_j}{\partial R_{ij}} \frac{\partial f_k}{\partial R_{ik}} \frac{\overset{P}{R}_{ij} \overset{P}{R}_{ik}}{R_{ij} R_{ik}} + \sum_{i,j} \frac{\partial F_{ij}}{\partial \rho_i} \frac{\partial^2 f_j}{\partial R_{ij}^2}.
\end{aligned} \tag{B.15}$$

$(i \neq j) \qquad (k \neq i, j) \qquad (i \neq j)$

Denklem (B.12)' den yararlanarak enerji ifadesini oluşturan ikinci terimin ikinci türevi alındığında elde edilen türev ifadesi aşağıdaki gibi olacaktır:

$$= \frac{\partial^2 \phi_{12}}{\partial R_1^2} \frac{\partial R_{12}}{\partial R_2} \left(\frac{\overset{P}{R}_1 - \overset{P}{R}_2}{R_{12}} \right) + \frac{\partial^2 \phi_{21}}{\partial R_1^2} \frac{\partial R_{21}}{\partial R_2} (-1) \left(\frac{\overset{P}{R}_2 - \overset{P}{R}_1}{R_{21}} \right)$$

$$\begin{aligned}
&= -\frac{\partial^2 \phi_{12}}{\partial R_1^2} - \frac{\partial^2 \phi_{21}}{\partial R_1^2} \\
&= -\sum_j \frac{\partial^2 \phi_{ij}}{\partial R_i^2} \cdot \\
&\quad (j \neq i)
\end{aligned} \tag{B.16}$$

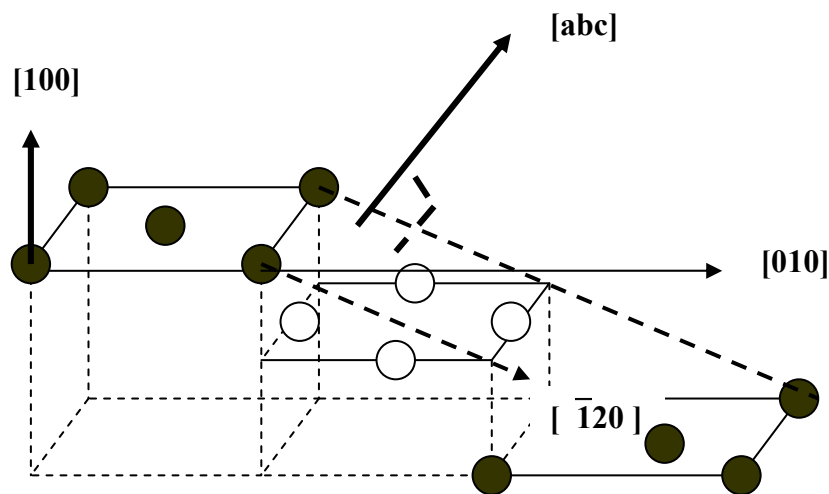
Birinci ve ikinci bölüm ifadeleri bir araya toplanarak elde edilen ikinci türev ifadesi yardımıyla kuvvet sabitleri hesaplanır [33, 35].

$$\begin{aligned}
K_{ij} &= \frac{\partial^2 E_{toplam}}{\partial R_i \partial R_j} = \\
&\sum_{i,j} \frac{\partial^2 F_{ij}}{\partial \rho_i^2} \left(\frac{\partial f_j}{\partial R_{ij}} \right)^2 + \sum_{i,j,k} \frac{\partial^2 F_i}{\partial \rho_i^2} \frac{\partial f_j}{\partial R_{ij}} \frac{\partial f_k}{\partial R_{ik}} \frac{\hat{R}_{ij} \hat{R}_{ik}}{R_{ij} R_{ik}} + \sum_{i,j} \frac{\partial F_{ij}}{\partial \rho_i} \frac{\partial^2 f_j}{\partial R_{ij}^2} - \sum_j \frac{\partial^2 \phi_{ij}}{\partial R_i^2} \cdot \\
&\quad (i \neq j) \quad (k \neq i, j) \quad (i \neq j) \quad (j \neq i)
\end{aligned} \tag{B.17}$$

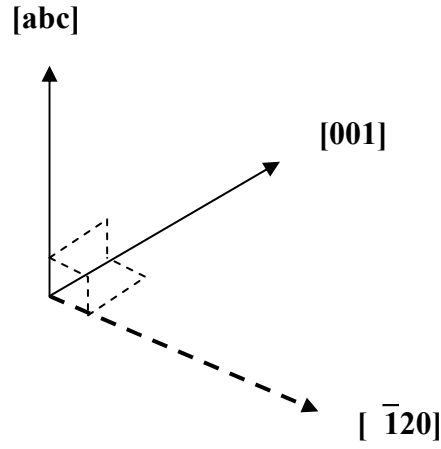
EK C. ÇALIŞILAN YÜZEYLERİN MİLLER İNDİSLERİNİN BELİRLLENMESİ

Katı hal fiziğinde düzlemler (h, k, l) Miller indisleri ile tanımlanırlar. Bu indislerden herhangi bir tanesinin birden büyük olması durumunda bu indisler komşu ya da yüksek Miller indisli yüzeyleri ifade ederler. Bu yüzeyler kristalin düşük Miller indisli yüzeylerinden ((100), (110), (111)) seçilen bir doğrultu boyunca kesilmeleri sonucu elde edilirler. Düz yüzeylerden farklı düzenli olarak dağılım gösteren teraslar ve basamaklar içermeleridir. Komşu yüzeylerin Miller indislerini belirlerken vektörlerin dikliğinden yararlanılır. (210) yüzeyi için bu işlemlerin nasıl yapıldığı ayrıntılı bir şekilde aşağıda verilerek diğer yüzeyler için süreç tablolştırılmıştır.

(210)^a yüzeyi (100) teras ve (110) basamak yönelimine sahiptir. Bu yüzey öncelikle (100) düzleminden terasında iki atomik zincir olacak şekilde $[\bar{1}20]$ doğrultusu boyunca- [010] doğrultusu ile 26.5° yapacak şekilde- kesilmesi sonucu elde edilir. Şekil C.2’den görüldüğü gibi elimizde birbirine dik olan üç tane vektör vardır. Diklik kuralından yararlanarak yüzey düzlemine dik olan doğrultu ve böylece de bu doğrultunun dik olduğu yüzeyin Miller indisleri belirlenir.



Şekil C.1. Yüzeye dik doğrultu $[abc]$ 'nin belirlenmesi.



Şekil C.2. Birbirlerine dik üç vektör. Yüzeye dik aranan $[abc]$ doğrultusunun belirlenmesi.

Vektörel çarpım ifadesinden yararlanarak $\vec{A} \times (\vec{B} \times \vec{C}) = (\vec{A} \times \vec{C}) \cdot \vec{B} - (\vec{A} \times \vec{B}) \cdot \vec{C}$, bu üç vektörün dikliği sonucu 0 yapacaktır. $\vec{A} = [a, b, c]$, $\vec{B} = [\bar{1} 2 0]$, $\vec{C} = [0 0 1]$ alınarak,

$$(\vec{A} \times \vec{C}) \cdot \vec{B} - (\vec{A} \times \vec{B}) \cdot \vec{C} = 0 \quad (C.1)$$

$$= \begin{vmatrix} i & j & k \\ a & b & c \\ 2 & 1 & 0 \end{vmatrix} = \{i(-c) - j(-2c) + k(a - 2b)\} = 0, \quad (C.2)$$

$$\begin{aligned} c &= 0, & a - 2b &= 0, \\ a &= 2b, \end{aligned} \quad (C.3)$$

$$(\vec{A} \times \vec{C}) = [2b \ b \ 0] = [210]. \quad (C.4)$$

Böylece yüzeye dik aranan $[abc]$ doğrultusu sıfırdan farklı en küçük katsayılar kullanılarak $[210]$ olarak bulunur. Sadece kübik sistemlerde olan önemli bir ilişki, bir kristal düzlemine dik doğrultunun doğrultu indisleri düzlemin Miller indisleri ile aynıdır. Böylece bu doğrultunun dik olduğu yüzeyin Miller indisi (210) olarak bulunur.

Çalışılan tüm yüzeyler için bu hesaplar yapılmıştır. Her bir yüzeyin Miller indisleri, kesim doğrultuları ve açıları Tablo C.1’ de verilmiştir.

Tablo C.1. Yüzeylerin Miller indisleri, kesim doğrultuları ve açıları. Burada $h_k k_k l_k$ ve $h_b k_b l_b$ sırasıyla kesim doğrultusunun ve basamak doğrultusunun Miller indisleridir.

Miller İndisi (hkl) = ($h_k k_k l_k$)x($h_b k_b l_b$)	Basamak Gösterimi (Notasyonu) El(Cu)-[$m(h_t k_t l_t) \times n(h_s k_s l_s)$]	Kesim Doğrultusu $h_k k_k l_k$	Basamak Köşesi $h_b k_b l_b$	Kesme Açısı (derece)
$(210)^a$	$2(100) \times (110)$	$[\bar{1}20]$	$[001]$	26.5
$(210)^b$	$2(110) \times (100)$	$[\bar{1}20]$	$[001]$	18.4
(311)	$2(100) \times (111)$	$[\bar{2}33]$	$[0\bar{1}1]$	25.23
(331)	$2(110) \times (111)$	$[\bar{1}\bar{1}6]$	$[1\bar{1}0]$	13.26
$(10\bar{1}0)$	$9(100) \times (110)$	$[\bar{1}100]$	$[001]$	6.3
$(10\bar{9}0)$	$9(110) \times (100)$	$[\bar{9}100]$	$[001]$	3.4
$(1919\bar{1})$	$10(110) \times (111)$	$[\bar{1}\bar{1}38]$	$[1\bar{1}0]$	2.13
$(19\bar{1}1)$	$10(100) \times (111)$	$[\bar{2}1919]$	$[0\bar{1}1]$	4.25

ÖZGEÇMİŞ

1977’de Artvin’ de doğdu. Orta öğrenimini İzmir Selma Yiğitalp Lisesinde tamamladıktan sonra 1994 yılında ULUDAĞ Üniversitesi Fen-Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümüne kayıt oldu. 1998 yılında mezun oldu. 1999 yılında YÖK’ün açmış olduğu “Yurt İçinde Lisansüstü Eğitim Yapmak Üzere Araştırma Görevliliği” sınavını kazandı. ODTÜ’de 6 ay İngilizce hazırlık gördükten sonra Kafkas Üniversitesi adına 35. madde ile İTÜ’ ye lisansüstü eğitim yapmak için geldi. Şu anda İTÜ Fizik bölümünde çalışmalarına devam etmektedir.