



**T.C.
ATATÜRK ÜNİVERSİTESİ**

BİLİMSEL ARAŞTIRMA PROJELERİ KOORDİNASYON BİRİMİ

**Bazı İkili Alaşımların Compton Profile Ölçümleri ve Yük Transferlerinin
Belirlenmesi**

Proje No:
FDK-2019-7465

Proje Türü
Temel Araştırma Projesi

SONUÇ RAPORU

Proje Yürütücüsü:
Prof. Dr. Yakup KURUCU
Fen Fakültesi / Fizik Bölümü

Araştırmacılar:
Prof. Dr. Demet YILMAZ
Fen Fakültesi / Fizik Bölümü
Prof. Dr. Ali GÜROL
Fen Fakültesi / Fizik Bölümü

Eylül 2021

ERZURUM

ÖNSÖZ

Atatürk Üniversitesi Bilimsel Araştırma Projeleri Koordinatörlüğü'nce FDK-2019-7465 proje numarası ile Doktora tez projesi olarak desteklenen bu projede Bazı FeNi alaşımlarının Compton Profilleri Ölçülmüş ve yük transferleri hesaplanmıştır.



ATATÜRK
ÜNİVERSİTESİ

İÇİNDEKİLER

ÖNSÖZ	3
İÇİNDEKİLER	4
TABLolar DİZİNİ	5
ŞEKİLLER DİZİNİ	6
ÖZET	7
ABSTRACT	8
1. GİRİŞ	9
2. GENEL BİLGİLER	11
2.1. Compton Profile	11
2.2. Compton Profile Ölçümleri	12
3. BULGULAR	16
4. TARTIŞMA VE SONUÇ	20
5. KAYNAKLAR	23

TABLÖLAR DİZİNİ

Tablo 3.1 Fe ve Ni için teorik ve deneysel Compton profile değerleri.	16
Tablo 3.2 $\text{Fe}_{0,20}\text{Ni}_{0,80}$ ve $\text{Fe}_{0,45}\text{Ni}_{0,55}$ alaşımlarının teorik ve deneysel Compton profilleri. “%fark” ise bunların Fe’in Compton profillerine göre bağlı değişimlerini yüzde olarak göstermektedir.	17
Tablo 3.3 $\text{Fe}_{0,52}\text{Ni}_{0,48}$ ve $\text{Fe}_{0,55}\text{Ni}_{0,45}$ alaşımlarının teorik ve deneysel Compton profilleri. “%fark” ise bunların Fe’in Compton profillerine göre bağlı değişimlerini yüzde olarak göstermektedir.	18
Tablo 3.4 $\text{Fe}_{0,58}\text{Ni}_{0,42}$, $\text{Fe}_{0,61}\text{Ni}_{0,39}$ ve $\text{Fe}_{0,64}\text{Ni}_{0,36}$ alaşımlarının teorik ve deneysel Compton profilleri. “%fark” ise bunların Fe’in Compton profillerine göre bağlı değişimlerini yüzde olarak göstermektedir.	19



ATATÜRK
ÜNİVERSİTESİ

ŞEKİLLER DİZİNİ

Şekil 2.1 Fotonun hareketli elektrondan Compton saçılması.	11
Şekil 2. Compton profile ölçme geometrisi.	13



ATATÜRK
ÜNİVERSİTESİ

ÖZET

Manyetik $\text{Fe}_x\text{Ni}_{1-x}$ alaşımları, şiddetli mıknatıslanma, düşük zorlayıcılık (low coercivity), yüksek manyetik geçirgenlik, düşük termal genleşme ve çok iyi korozyon direncine sahip yumuşak (soft) bir manyetik malzeme olduğundan dolayı temel ve uygulamalı araştırmalarda önemli bir rol oynamaktadırlar. Yaygın kullanımı nedeniyle $\text{Fe}_x\text{Ni}_{1-x}$ alaşımlarının fiziksel ve kimyasal özelliklerinin tam olarak anlaşılması gereklidir. Özellikle 4s ve 3d elektronlarının momentum dağılımlarının ve yük transferlerinin belirlenmesi gereklidir.

Compton Profile katı, sıvı ve gazların elektronik özelliklerini irdelemek için emsalsiz ve güçlü bir teknik tekniktir. Bu nedenle bu çalışmada $\text{Fe}_x\text{Ni}_{1-x}$ alaşımlarının Compton Profile ölçümleri sadece $x=0,51$ olan alaşımlar üzerine gerçekleştirilmiş olup literatürde alaşımdaki Fe miktarının değişiminin elektron momentum dağılımlarına ve yük transferlerine etkisi detaylı bir biçimde inceleyen bir çalışma bulunmamaktadır. Bu yüzden bu çalışmada $\text{Fe}_x\text{Ni}_{1-x}$ ($x=0,20; 0,52; 0,55; 0,58; 0,61; 0,64$ ve $0,80$) alaşımlarında Fe miktarının değişiminin elektron momentum dağılımlarına ve yük transferlerine etkisi incelenmiştir. Compton Profile değerlerindeki değişimin alaşımdaki Fe miktarının azalması ile arttığı bulunmuştur. Bu değişimin önemli olduğu kısım ise valans elektronlarının baskın bir şekilde Compton saçılmasına neden olduğu $q < 0,2$ bölge olduğu tespit edilmiştir.

ABSTRACT

Magnetic $\text{Fe}_x\text{Ni}_{1-x}$ alloys have an important role in fundamental and applied research, as they are a soft magnetic material with strong magnetization, low coercivity, high magnetic permeability, low thermal expansion and very good corrosion resistance. Due to its widespread use, a complete understanding of the physical and chemical properties of these alloys is required. In particular, it is necessary to determine the momentum distributions and charge transfers of 4s and 3d electrons.

The Compton Profile was a unique and powerful technique for investigating the electronic properties of solids, liquids and gases. For this reason, in this study, Compton Profile measurements of $\text{Fe}_x\text{Ni}_{1-x}$ alloys were carried out only on alloys with $x=0.51$, and there is no study in the literature that examines the effect of change in Fe content in the alloy on electron momentum distributions and charge transfers in detail. Therefore, in this study, the effect of variation of Fe content on electron momentum distributions and charge transfers in $\text{Fe}_x\text{Ni}_{1-x}$ ($x=0.20$; 0.52; 0.55; 0.58; 0.61; and 0.64) alloys was investigated. It was found that the change in Compton Profile values increased with decreasing Fe amount in the alloy. The part where this change is important is the $q<0.2$ region where the valence electrons cause predominantly Compton scattering.

1. GİRİŞ

$\text{Fe}_x\text{Ni}_{1-x}$ alaşımları, şiddetli mıknatıslanma, düşük zorlayıcılık (low coercivity), yüksek manyetik geçirgenlik, düşük termal genleşme ve mükemmel korozyon direncine sahip yumuşak (soft) bir manyetik malzemedir. Bu özelliklerinden dolayı, FeNi alaşımlar elektronik cihazlar ve endüstri alanında (lazer boşluk yapısı, boyutsal stabilizatörler, süper tankerlerin yapısı, vb.) geniş çapta kullanılır ve demir konsantrasyonu %60-70 arasında değiştiğinde fiziksel özelliklerinde ortaya çıkan anormalliklerden dolayı araştırmacıların yoğun ilgisini çekmektedir [1-2].

$\text{Fe}_x\text{Ni}_{1-x}$ alaşımlarının kristal yapısı Fe ve Ni oranlarına göre değişkenlik göstermektedir. Fe zenginliğine sahip alaşımlar ($x < 0,5$) için cisim merkezli kübik (bcc) yapıda ve Ni konsantrasyonu fazla olan alaşımlar ($x = 0,5$) için ise yüzey merkezli kübik (fcc) yapıda olmaktadır. Diğer yandan, $\text{Fe}_x\text{Ni}_{1-x}$ alaşımlarının manyetik momenti başlangıçta bcc fazında Slater-Pauling eğrisini izlerken, fcc yapının kararlı hale gelmesinden sonra neredeyse sıfır olan manyetik moment Ni konsantrasyonunun artmasıyla hızla artmaktadır. Yüksek Ni konsantrasyonlarında, manyetik moment yine Slater-Pauling eğrisine uymaktadır. Kristal yapısının değişmesi ve manyetik momentin karmaşık davranışının, Invar alaşımına karşılık gelen alaşım konsantrasyonlarında değişmesi, değişmeyen termal genleşmenin açıklamasının çok önemli yönleri olduğu tahmin edilmektedir [3]. Invar alaşımları, optik ve lazer ölçüm sistemleri, bimetalik şeritler, gölge maskeleri ve sıvılaştırılmış doğal gaz için depolama kapları gibi sayısız uygulamada kullanılmaktadır [4].

Oda sıcaklığında, %30- 40 oranında Ni'ye sahip $\text{Fe}_x\text{Ni}_{1-x}$ alaşımları, saf Fe ve Ni'den (sırasıyla 12 ve 13 ppm / °C) daha düşük bir termal genleşme katsayısına (CTE) sahiptir. Özellikle, %36 Ni'e sahip alaşım en düşük hemen hemen hiç termal genleşme (1 ppm / °C); göstermemektedir ki bu 1897 yılında Guillaume tarafından keşfedilen Invar etkisi olarak bilinir; bu nedenle "Invar alaşımları" olarak adlandırılır [4]. Demir nikel alaşımlarının endüstriyel kullanımı yaklaşık 100 yıl önce başlamıştır. Taşımacılıkta,

otomotiv sanayinde, havacılık, denizcilik ve iletişim endüstrisinde demir/nikel alařımları yaygın biçimde kullanılmaktadır [5].

Demir nikel alařımlarının fiziksel ve manyetik özelliklerini incelemeye yönelik birçok alıřma yapılmıřtır [1-11]. Bütün bu alıřmalarda, alařımların fiziksel, kimyasal ve tribolojik özellikleri detaylı bir řekilde incelenmiřtir. Ancak Fe_xNi_{1-x} alařımlarının bu özelliklerinin tam olarak anlařılabilmesi için onların elektronik özelliklerinin detaylı bir řekilde incelenmesi gereklidir. Literatürde materyallerin elektronik yapılarının incelenmesi için kullanılan en önemli yöntem Compton Profile spektrometreleridir [12].

Fe_xNi_{1-x} alařımlarından biri olan $Fe_{0.51}Ni_{0.49}$ alařımı Pal ve Padhi [13] tarafından Compton Profile teknięi ile incelenmiřtir. alıřmada elde edilen verilere dayanarak her iki metalin 3d orbitalleri arasında yük transferi olup olmadıęına dair yorum yapmanın mümkün görölmedięi belirtilmiřtir [13]. ilaveten Compton saçılma teknięini kullanarak $Fe_{0.64}Ni_{0.36}$ (Invar) ve $Fe_{0.50}Ni_{0.50}$ alařımlarının elektron momentum daęılımları Ahuja et al. [14] tarafından ölçölmüřtür. Her iki alařım için elde edilen verilerin, alařımları oluřturan saf ana metallerin Compton profillerinin üst üste binmeleri (süper pozisyonu) ile iyi bir uyum içerisinde olduęu, bunun da yük transferinin olmadıęını gösterdięi vurgulanmıřtır [14].

Fe_xNi_{1-x} alařımlarının elektron momentum daęılımlarının belirlenmesi yönelik alıřmalarındaki eksiklięi gidermek için Fe_xNi_{1-x} alařımlarının için literatürde bu iki alıřma dıřında kapsamlı ve sistematik deneysel bir alıřmaya rastlanmamıřtır. Bu alıřmadaki amacımız eřitli Fe_xNi_{1-x} ($x=0,20; 0,52; 0,55; 0,58; 0,61; ve 0,64$) alařımlarının Compton Profile deęerlerinin ölçölmesi bu alıřmanın kapsamını oluřturmaktadır.

2. GENEL BİLGİLER

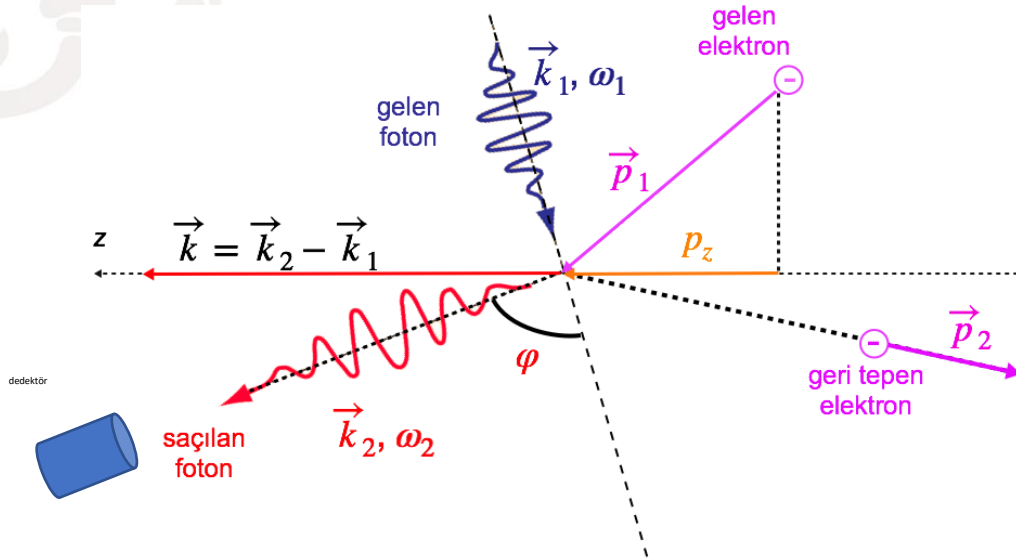
Bu çalışmada kullanılacak yöntem inelastik saçılan fotonların ölçülmesi esasına dayanmaktadır. Compton saçılması olarak da aktarılan bu saçılmaya dayalı spektrometreler "Compton Profile" Spektrometreleri olarak adlandırılmaktadır. Compton Profile, saçılma esnasında saçılan elektronun hareketinden dolayı Doppler genişlemesinden kaynaklanmaktadır. Compton Profile tam olarak saçılmadan önce atomdaki elektronların saçılma doğrultusu üzerindeki elektron momentum dağılımının izdüşümünü vermektedir.

2.1. Compton Profile

Tipik olarak bir X-ışınının enerjisi momentumu ile kıyaslandığında çok daha yüksektir yani ışığın hızı saçıcı içerisindeki parçacıkların karakteristik hızlarından daha büyüktür. Bu durum $|\vec{k}_1| \approx |\vec{k}_2|$ ilk yaklaşımını ima eder, böylece momentum transferi $k = |\vec{k}_1 - \vec{k}_2|$ saçılma açısı θ kullanılarak oldukça doğru bir şekilde tespit edilebilir. Yani

$$k = 2k_1 \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \quad (1)$$

olur. Bu denklemden $\vec{k}_1$ gelen fotonun dalga vektörü ve θ ise saçılma açısıdır. Böylece



şekil 2.1 fotonun hareketli elektrondan Compton saçılması.

j açısı taranarak, ileri yöndeki sıfır momentum transferinden geri yöndeki maksimum momentum transferine gitmek mümkündür. Şekil 1'de Compton Saçılmasında temsili olarak göstermektedir.

Compton saçılması, fotonların elektronlarla rölativistik olarak çarpışmaları sonucunda enerji kaybettikleri yada enerji kazandıkları bir süreçtir. Böyle bir süreçte enerjisi w_1 ve dalga vektörü $\vec{k}_1$ olan gelen radyasyon j açısında w_2 enerjisi ve $\vec{k}_2$ dalga vektörüyle saçılır. Saçılma süresince yüksek doğrulukta sisteme aktarılan enerji ($w = w_1 - w_2$) ve momentum ($k = |\vec{k}_1 - \vec{k}_2|$) ile karakterize edilir. $k = 2k_1 \sin(j/2)$ olmak üzere sisteme aktarılan enerji;

$$\omega = \frac{(\vec{p} + \vec{k})^2}{2m} - \frac{p^2}{2m} = \frac{k^2}{2m} + \frac{\vec{k} \cdot \vec{p}}{m} \quad (2)$$

bağıntısı ile verilir. Burada p ve m sırasıyla elektronun momentumu ve kütlesidir. Be eşitliğin sağ tarafındaki ilk terim Compton kayması ve ikinci terim ise Doppler genişlemesidir ve gelen elektronun momentumundan kaynaklanmaktadır.

Dumond 1929 yılında ilk kez Doppler genişlemesinden dolayı, Compton saçılmasında elektron hareketlerinin bir sonucu olarak Compton çizgisinin genişlediğini açıkladı. Elektron hareketleri Compton kayması

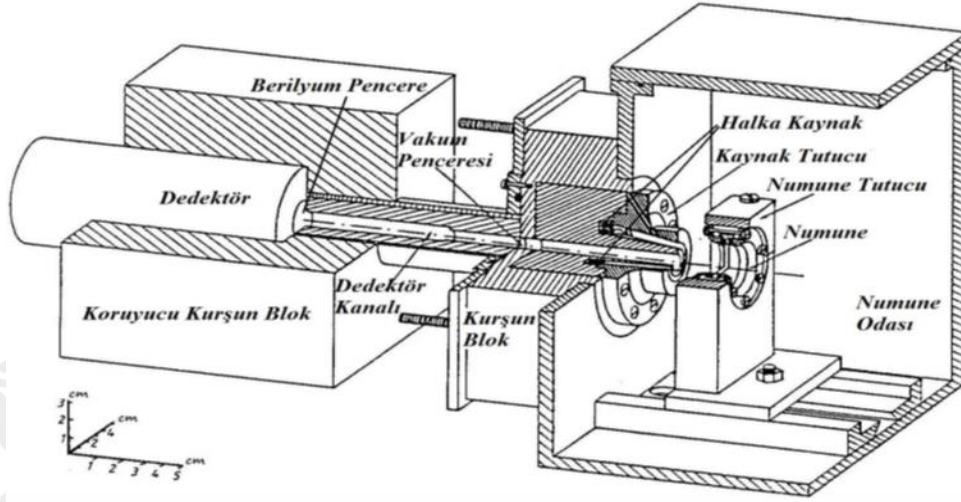
$$Df = \frac{2h}{mc^2} \sin^2(j/2) + 2 \left(I_1 / I_2 \right)^{1/2} \frac{p_z}{mc} \sin(j/2) \quad (3)$$

Compton saçılması deneylerinde ölçülen nicelik, fotonlar için direk olarak Compton Profilleri ($J(p_z)$) ile ilgili olan çift diferansiyel saçılma tesir kesitidir. Compton Profile iki boyutlu elektron gazının elektron momentum yoğunluğu ile ilgilidir. p_z 'nin doğrultusu saçılma vektörü ($k = |\vec{k}_1 - \vec{k}_2|$) ile tespit edilebilir. Burada k_1 ve k_2 sırasıyla gelen ve saçılan fotonların dalga vektörüdür.

2.2. Compton Profile Ölçümleri

Bu çalışmanın Fen Fakültesi Fizik Bölümü Prof. Dr. Wolf WEYRICH Yüksek Enerji Spektroskopisi Araştırma Laboratuvarında, bir yarı iletken dedektör, bir radyoaktif

kaynak ve numuneden oluşan ve ölçme geometrisi aşağıdaki Şekil 2.'de verilen özel tasarımlı Compton spektrometresi kullanılarak gerçekleştirilmiştir.



Şekil 2. Compton profile ölçme geometrisi.

Compton Profile, Compton çift saçılma diferansiyel tesir kesiti

$$\frac{d^2s}{d\Omega dw_2} = C(w_1, j, p_z) J(p_z) \quad (4)$$

ile verilir. Bu denklemde $c(w_1, j, p_z)$ Compton saçılma ihtimaliyeti, $J(p_z)$ Compton Profile, s saçılma tesir kesiti, w ise katı açıdır. Compton Profile değeri teorik olarak,

$$J(p_z) = \int \int_{p_x p_y} n(\vec{p}) dp_x dp_y = \int \int_{p_x p_y} \chi^*(\vec{p}) \chi(\vec{p}) dp_x dp_y \quad (5)$$

ile verilir. Bu değer p_z momentum bileşenine sahip bir elektronun bulunma ihtimaliyetini temsil etmektedir. Burada $\chi(\vec{p})$ momentum uzayında elektronların dalga fonksiyonlarıdır ve konum uzayındaki $\psi(\vec{r})$ ile Dirac dönüşümü ile ilişkilendirilir:

$$\chi(\vec{p}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int \psi(\vec{r}) e^{-i\vec{p} \cdot \vec{r}} d\vec{r} \quad (6)$$

Yani elektronun momentum dağılımı,

$$n(\vec{p}) = \chi^*(\vec{p}) \chi(\vec{p}) \quad (7)$$

dir. Eğer elektron momentum dağılımı $n(\vec{p})$ küresel simetrik ise Compton Profile,

$$I(p_z) = \iint_{p_x p_y} \chi^*(\vec{p}) \chi(\vec{p}) dp_x dp_y = 2\pi \int_{|q|}^{\infty} p n(p) dp \quad (8)$$

biçimini alır.

Net Compton Profile'ini bulmak için ölçümler sonucunda elde edilen ham verilerin (raw data) birkaç sistematik veri düzeltmesi gerekmektedir. Bu düzeltmeler; temel sayma düzeltmesi, dedektör verimi düzeltmesi, numune soğurma düzeltmesi, enstrümantal çözünürlük, Compton saçılma tesir kesiti, çoklu saçılma düzeltmesi vb olarak sayılabilir.

Deneysel düzeltmelerden sonra bu sonuçlar normalize edilerek Compton Profile elde edilir. Tipik bir Compton Spektrometrisinde yapılan ölçüm işleminde elde edilen ham veriler $M(w)$ olmak üzere düzeltilmiş şiddet,

$$I(w) = \frac{M(w_2) - B(w_2)}{G(w_2) C(w_1, j, p_z) A(w_2)} \quad (9)$$

Burada $G(w_2)$ dedektör verimi, $C(w_1, j, p_z)$ rölativistik Compton saçılma tesir kesiti düzeltmesi, $A(w_2)$ numunenin özsoğurma düzeltmesi ve $B(w_2)$ temel saymadır. Eş. (4) ve (9) birleştirilirse deneysel olarak Compton Profiller belirlenmiş olur. Ölçülen $I(p_z)$ değerleri elektron sayısına göre normalize edilir:

$$\oint_{-\infty}^{+\infty} I(p_z) dp_z = \frac{1}{T} \oint_{-\infty}^{+\infty} (K(w) * R(w)) dw \frac{dp_z}{dw} = Z \quad (10)$$

Burada $R(w)$ dedektörün çözünürlük fonksiyonudur ve $(*)$ konvolusyonu gösterir.

Bu çalışmada, $\text{Fe}_x\text{Ni}_{1-x}$ ($x=0,20; 0,52; 0,55; 0,58; 0,61; 0,64$ ve $0,80$) alaşımlarının Compton Profile ölçümleri Fizik Bölümü Prof. Dr. Wolf WEYRICH Yüksek Enerji Spektroskopisi Laboratuvarında mevcut Compton Profile Spektrometresi ile ölçülmüştür. Numuneler vakumda $\sim 5,0$ Ci aktiviteli bir Am-241 radyoizotop kaynağından yayınlanan 59,537 keV enerjili γ -ışınları ile bombardıman edilmektedir. Saçılan fotonlar çözünürlüğü 122 keV'de ~ 450 eV olan bir HPGe dedektör ile kaydedilmiştir. Compton Profile hesaplamaları Warwick group (İngiltere) tarafından

geliştirilen FORTRAN Code'un MATLAB'a dönüştürülerek gerçekleştirilmiştir. Teorik hesaplamalar için Crystal 14.0 programı kullanılmıştır.



ATATÜRK
ÜNİVERSİTESİ

3. BULGULAR

Fe ve için hesaplanmış ve ölçülmüş Compton Profile değerleri Tablo 3.1’de listelenmiştir.

Tablo 3.1 Fe ve Ni için teorik ve deneysel Compton Profile değerleri.

q	Fe		Ni	
	J(q)		J(q)	
	Teorik	Deneysel	Teorik	Deneysel
0,00	7,06	7,48	6,90	7,21
0,05	6,99	7,33	6,85	6,51
0,10	6,78	7,18	6,66	6,69
0,15	6,47	6,63	6,38	6,41
0,20	6,09	6,09	6,05	6,35
0,30	5,31	5,63	5,34	5,34
0,40	4,67	4,67	4,74	4,98
0,50	4,25	4,00	4,32	4,53
0,60	3,99	3,99	4,05	4,13
0,70	3,83	3,83	3,89	3,70
0,80	3,71	3,63	3,78	3,67
1,00	3,50	3,29	3,59	3,59
1,20	3,24	3,13	3,39	3,56
1,40	2,96	3,14	3,15	2,99
1,60	2,66	2,50	2,88	2,84
1,80	2,37	2,37	2,61	2,48
2,00	2,09	2,11	2,35	2,23
2,40	1,64	1,54	1,89	1,80
3,00	1,16	1,09	1,36	1,36
4,00	0,738	0,694	0,869	0,826
5,00	0,533	0,565	0,595	0,625
6,00	0,405	0,405	0,446	0,424
7,00	0,314	0,295	0,346	0,363
8,00	0,244	0,229	0,271	0,257
10,0	0,150	0,141	0,170	0,162

Fe_{0,20}Ni_{0,80} ve Fe_{0,45}Ni_{0,55} alaşımlarının teorik ve deneysel Compton Profilleri Tablo 3.2’de verilmiştir.

Tablo 3.2 $\text{Fe}_{0,20}\text{Ni}_{0,80}$ ve $\text{Fe}_{0,45}\text{Ni}_{0,55}$ alaşımlarının teorik ve deneysel Compton Profilleri. “%fark” ise bunların Fe’in Compton profillerine göre bağıl değişimlerini yüzde olarak göstermektedir.

q	$\text{Fe}_{0,20}\text{Ni}_{0,80}$			$\text{Fe}_{0,45}\text{Ni}_{0,55}$		
	J(q)			J(q)		
	Teorik	Deneysel	%fark	Teorik	Deneysel	%fark
0,00	6,93	7,28	2,69	6,97	7,23	3,29
0,05	6,88	6,93	5,39	6,91	7,03	4,05
0,10	6,68	6,86	4,46	6,71	6,81	4,89
0,15	6,40	6,40	3,50	6,42	6,42	2,80
0,20	6,06	5,76	5,50	6,07	6,37	-3,76
0,30	5,33	5,33	5,23	5,33	5,59	0,478
0,40	4,73	4,83	-3,34	4,71	4,71	-0,515
0,50	4,31	4,31	-7,78	4,29	4,50	-6,79
0,60	4,04	4,04	-1,20	4,02	4,02	-0,441
0,70	3,88	4,07	-6,32	3,86	3,86	-0,441
0,80	3,77	3,95	-8,93	3,75	3,56	0,921
1,00	3,57	3,50	-6,38	3,55	3,43	-1,87
1,20	3,36	3,19	-1,98	3,32	3,32	-2,57
1,40	3,11	3,11	0,82	3,06	3,06	0,977
1,60	2,84	2,58	-3,10	2,78	2,64	-1,89
1,80	2,56	2,43	-2,70	2,50	2,50	-1,76
2,00	2,30	2,30	-8,86	2,23	2,12	-0,140
2,40	1,84	1,55	-0,42	1,78	1,78	-3,15
3,00	1,32	1,19	-8,77	1,27	1,27	-2,40
4,00	0,843	0,743	-7,07	0,81	0,810	-1,56
5,00	0,583	0,583	-3,12	0,57	0,567	-0,0283
6,00	0,438	0,416	-2,69	0,43	0,406	-0,0157
7,00	0,340	0,304	-2,98	0,33	0,315	-0,266
8,00	0,266	0,233	-1,38	0,26	0,259	-0,394
10,0	0,166	0,146	-3,38	0,16	0,161	-0,267

$\text{Fe}_{0,52}\text{Ni}_{0,48}$ ve $\text{Fe}_{0,55}\text{Ni}_{0,45}$ alaşımlarının teorik ve deneysel Compton Profilleri Tablo 3.3’te verilmiştir.

Tablo 3.3 $\text{Fe}_{0,52}\text{Ni}_{0,45}$ ve $\text{Fe}_{0,55}\text{Ni}_{0,45}$ alaşımlarının teorik ve deneysel Compton Profilleri. “%fark” ise bunların Fe’in Compton profillerine göre bağlı değişimlerini yüzde olarak göstermektedir.

q	$\text{Fe}_{0,52}\text{Ni}_{0,45}$			$\text{Fe}_{0,55}\text{Ni}_{0,45}$		
	J(q)			J(q)		
	Teorik	Deneysel	%fark	Teorik	Deneysel	%fark
0,00	6,93	7,28	2,69	6,97	7,23	3,29
0,05	6,88	6,93	5,39	6,91	7,03	4,05
0,10	6,68	6,86	4,46	6,71	6,81	4,89
0,15	6,40	6,40	3,50	6,42	6,42	2,80
0,20	6,06	5,76	5,50	6,07	6,37	-3,76
0,30	5,33	5,33	5,23	5,33	5,59	0,478
0,40	4,73	4,83	-3,34	4,71	4,71	-0,515
0,50	4,31	4,31	-7,78	4,29	4,50	-6,79
0,60	4,04	4,04	-1,20	4,02	4,02	-0,441
0,70	3,88	4,07	-6,32	3,86	3,86	-0,441
0,80	3,77	3,95	-8,93	3,75	3,56	0,921
1,00	3,57	3,50	-6,38	3,55	3,43	-1,87
1,20	3,36	3,19	-1,98	3,32	3,32	-2,57
1,40	3,11	3,11	0,82	3,06	3,06	0,977
1,60	2,84	2,58	-3,10	2,78	2,64	-1,89
1,80	2,56	2,43	-2,70	2,50	2,50	-1,76
2,00	2,30	2,30	-8,86	2,23	2,12	-0,140
2,40	1,84	1,55	-0,42	1,78	1,78	-3,15
3,00	1,32	1,19	-8,77	1,27	1,27	-2,40
4,00	0,843	0,743	-7,07	0,81	0,810	-1,56
5,00	0,583	0,583	-3,12	0,57	0,567	-0,0283
6,00	0,438	0,416	-2,69	0,43	0,406	-0,0157
7,00	0,340	0,304	-2,98	0,33	0,315	-0,266
8,00	0,266	0,233	-1,38	0,26	0,259	-0,394
10,0	0,166	0,146	-3,38	0,16	0,161	-0,267

$\text{Fe}_{0,58}\text{Ni}_{0,42}$, $\text{Fe}_{0,61}\text{Ni}_{0,39}$ ve $\text{Fe}_{0,64}\text{Ni}_{0,36}$ alaşımlarının teorik ve deneysel Compton Profilleri

Tablo 3.4’te verilmiştir.

Tablo 3.4 $\text{Fe}_{0,58}\text{Ni}_{0,42}$, $\text{Fe}_{0,61}\text{Ni}_{0,39}$ ve $\text{Fe}_{0,64}\text{Ni}_{0,36}$ alaşımlarının teorik ve deneysel Compton Profilleri. "%fark" ise bunların Fe'in Compton profillerine göre bağlı değişimlerini yüzde olarak göstermektedir.

$\text{Fe}_{0,58}\text{Ni}_{0,42}$				$\text{Fe}_{0,61}\text{Ni}_{0,39}$			$\text{Fe}_{0,64}\text{Ni}_{0,36}$		
J(q)				J(q)			J(q)		
q	Teorik	Deneysel	% fark	Teorik	Deneysel	%fark	Teorik	Deneysel	%fark
0,00	6,99	6,97	6,82	7,00	7,12	4,81	7,00	7,38	-5,88
0,05	6,93	6,91	5,72	6,94	7,08	3,33	6,94	7,13	-2,94
0,10	6,73	6,77	5,71	6,73	6,97	2,87	6,74	6,80	-0,40
0,15	6,43	6,11	7,83	6,43	6,57	0,80	6,44	6,76	-8,68
0,20	6,07	6,38	-4,71	6,07	5,77	4,27	6,08	5,97	5,44
0,30	5,32	5,59	0,71	5,32	5,36	3,59	5,32	5,05	7,14
0,40	4,70	4,46	4,40	4,70	4,93	-3,50	4,70	4,66	-2,61
0,50	4,28	4,07	-1,76	4,28	4,06	-0,91	4,28	4,28	-2,80
0,60	4,02	3,81	4,40	4,01	4,10	-1,44	4,01	4,01	-2,64
0,70	3,86	4,05	-5,69	3,85	3,96	-1,74	3,85	3,66	5,20
0,80	3,74	3,55	2,14	3,74	3,83	-2,67	3,74	3,65	-1,30
1,00	3,54	3,36	-2,16	3,54	3,71	-5,64	3,53	3,51	-1,99
1,20	3,30	3,01	3,71	3,30	3,46	-4,46	3,29	3,13	-1,54
1,40	3,04	2,99	4,77	3,03	3,19	-0,64	3,03	3,18	-2,57
1,60	2,75	2,39	4,26	2,75	2,88	-5,12	2,74	2,74	-4,61
1,80	2,47	2,29	3,19	2,46	2,46	-1,25	2,46	2,46	-2,17
2,00	2,20	2,12	-0,47	2,19	2,30	-2,54	2,18	2,07	0,62
2,40	1,75	1,57	-1,70	1,74	1,82	-3,78	1,73	1,82	-3,33
3,00	1,24	1,10	-0,81	1,24	1,30	-2,80	1,23	1,17	-0,95
4,00	0,793	0,734	-5,76	0,789	0,750	-0,748	0,785	0,824	-1,213
5,00	0,559	0,587	-3,90	0,557	0,529	0,477	0,555	0,555	0,423
6,00	0,422	0,414	-2,30	0,421	0,400	0,068	0,420	0,399	0,208
7,00	0,327	0,299	-1,32	0,326	0,343	-0,637	0,326	0,309	-0,136
8,00	0,255	0,231	-0,58	0,255	0,255	-0,336	0,254	0,241	-0,138
10,0	0,158	0,142	-0,45	0,158	0,158	-0,225	0,157	0,149	-0,103

Tablo 3.2-3.4'te ise her bir alaşımın deneysel Compton Profile değerlerinin Fe'in ölçülmüş Compton Profile değerlerine yüzde bağlı farkları da verilmektedir. Şekil 3.1-3.3'te ise bu farkların q'a bağlı değişimleri görülmektedir.

4. TARTIŞMA ve SONUÇ

Şekil 2'deki deney geometrisinde 30 mm çaplı numunelerden ölçülmüş Compton Profile değerleri Tablo 3.1-3.4'te sunulmuştur. Tablo 3.1'de Fe ve Ni için ölçülmüş Compton Profile değerlerinin hesaplanan Compton Profile değerleri ile karşılaştırıldığında bağıl hatalarının maksimum $\sim$ %6 olduğu bulunmuştur. Deneysel olarak, sayma istatistiği, Compton tesir kesiti düzeltilmesi, normalizasyon hatası gibi çeşitli kaynaklardan kaynaklanan deneysel hatanın $\sim$ %5 civarında olması teorik ve deneysel ölçümlerimizin birbiri ile uyum içerisinde olduğunu göstermektedir.

Bu projede asıl çıktısı Fe'in ölçülmüş Compton Profillerine göre Fe-Ni alaşımlarının Compton Profile değerlerinin belirlenmelidir. Çünkü bu değerler Fe ve Ni'nin elektronlarının momentum dolayısıyla hız dağılımlarının hesaplanmasında, Fe'den Ni'e (ya da tersi) yük transferlerinin belirlenmesinde, farklı kuantum mekaniksel yöntemlerle hesaplanan dalga fonksiyonlarının test edilmesinde, Form faktörlerinin belirlenmesinde ve ters örgü Form faktörlerinin elde edilmesinde belirlenmesi gereken temel parametredir.

Fe'in alaşımdaki değerinin 0,20'den 0,64'e kadar değiştiği Fe-Ni alaşımlarının teorik ve ölçülmüş Compton Profile değerleri Tablo 3.2-3.4'de verilmiştir. Bu tablolarda ayrıca her bir alaşımın Fe'in Compton Profile değerlerine göre yüzde bağıl değişimleri (Tablolarda %fark olarak gösterilmiştir) hesaplanmıştır. Fe içeriği azaldıkça bu değişim değeri artmakta ve düzensizleşmekte iken Fe konsantrasyonu arttıkça farkın azalması ve değişimlerin daha dar bir aralıkta değişmesi özellikle $q > 0,2$ bölgesinde deneysel hata sınırları içerisinde kabul edilemeyecek büyüklükte değişimler ortaya koymaktadır.

Yapılan bu çalışmada, ölçümlerden önce MCA 4096 kanala ayarlanmıştır. İncelenen alaşımların her birinin Compton Spektrumları 2.300.000 s ($\sim$ 27 gün) Compton Profile değerleri ölçülmüştür. Böylelikle, Compton Profile hesaplamalarında dikkate alınan spektrum bölgesinde, ki bu Compton pik tepesinin hem düşük hem de yüksek enerjili bölgesinde 512 kanaldır, yer alan bütün kanallarda sayım en az 100 000 yapılmıştır. Böylelikle bir Compton Profile çalışmasının temelini teşkil eden sayma istatistiğinden kaynaklanan hata binde 3 ya da daha küçük mertebelere indirilmiştir.

Özellikle Compton pik tepelerinde bu hata değeri on binde 1'den daha küçük olması deneysel hataların çok azalmasını neden olmuştur.

Sistemin çözünürlük fonksiyonunu belirlemek için Am-241 10 μ Ci noktasal test kaynağı ile 59,537 keV enerjili gama ışını 2.300.000 s ölçüldü. Ölçülen bu rezölasyon fonksiyonu ise Compton profile değerlerine konvule edilmiştir. Spektrometrenin çözünürlüğünün 0,597 a.u. olduğu belirlenmiştir.

Projenin öngörülen çıktıları şunlardır;

1. Çözünürlüğü 0,6 a.u. olan bir Compton Profile Spektrometresi ile $\text{Fe}_x\text{Ni}_{100-x}$ ($x=20; 45; 52; 55; 61; 0,64$ ve $0,80$) alaşımlarının hassas Compton Profillerini ölçmektir.
2. Fe ve Ni'in 3d orbitalleri arasındaki yük transferleri belirlenecek parametreler tespit edilecektir.

İlk çıktıda $x=80$ olan alaşımın Compton Profilleri ölçülememiştir. Çünkü Bölüm envanterinde kayıtlı olan $\text{Fe}_{80}\text{Ni}_{20}$ alaşımının saflığı ambalajı üzerinde %99,999 olarak belirtilmesine rağmen yapılan ölçümlerde ortaya çıkan anormalliklerin sebebi araştırıldığında bu değerin doğru olmadığı ve ambalajdaki alaşımın başka bir alaşım olduğu anlaşılmıştır. Proje planlanması esnasında mevcut bir alaşım olarak görüldüğü için Proje bütçesine eklenmemiştir. Yeniden alınmak istenildiğinde ise tedarikçi firmaların bu alaşımı üretmediği tespit edilmiş ve çalışmada kullanılmaktan vazgeçilmiştir.

Ölçülmüş değerlerden hesaplanan Tablo 3.2-3.4'teki "% fark" değerleri bu yük transferlerini belirlemek için gerekli temel parametrelerdir.

Compton Profile değerleri tek boyutlu elektron momentum dağılımları olup bu parametre ölçülerek kristalografide önemli bir parametre olan Paterson fonksiyonunu, üç boyutlu elektron momentum dağılımları, Form faktörü ve ters örgü form faktörü, konum ve momentum uzayında dalga fonksiyonları gibi pekçok parametre belirlenebilmektedir.

Ayrıca alaşımların kristal yapıda olduğu için özellikle yük transferini hatasız belirlenebilmesi için farklı kristal doğrultusuna bağlı olarak ölçülmelidir. Çünkü kristal doğrultusuna bağlı olarak elektron momentum dağılımları dolayısıyla da tek boyutlu elektron momentum dağılımı olan Compton Profile değerleri değişmektedir. Buda tek doğrultuda ölçülmüş Compton Profile değerlerini kullanarak yük transferinin hatalı

olabileceğini dolayısıyla farklı dođrultularda Compton Profillerin ölçölmesini zorunlu hale getirmektedir.



ATATÜRK
ÜNİVERSİTESİ

5. KAYNAKLAR

- [1] M. Kadziołka-Gaweł, W. Zarek, E. Popiel and A. Chrobak, The Crystal Structure and Magnetic Properties of Selected fcc FeNi and Fe₄₀Ni₄₀B₂₀ Alloys, *Acta Physica Polonica A* Vol. 117 (2010).
- [2] Denisa Olešáková, Peter Kollár, Ján Füzér, Structure and magnetic properties of powdered and compacted FeNi alloys, *Journal of Electrical Engineering*, Vol 68 (2017), No2, 163–166.
- [3] I.A. Abrikosov, O. Eriksson, and P. Soderlind, Theoretical aspects of the Fe_cNi_{1-c} Invar alloy, *Physical Review B* Volume 51, Number 2 pp. 1058-1063.
- [4] Tomio Nagayama, Takayo Yamamoto, Toshihiro Nakamura, Thermal expansions and mechanical properties of electrodeposited Fe–Ni alloys in the Invar composition range, *Electrochimica Acta* 205 (2016) 178–187.
- [5] S S Acharya and V R R Medicherl, Structure and Resistivity of FeNi Binary Alloys, *Orissa Journal of Physics* ol. 22, No.1 February 2015 pp. 99-102
- [6] S. K. Karna, S. R. Mishra, E. Gunapala, I. Dubenko, V. Malagareddy, G. K. Marasinghe, and N. Ali, Polymer Assisted Synthesis of FeNi Nanoparticles *J. Nanosci. Nanotechnol.* 10, 5879-5884 (2010).
- [7] W. Tang, Ch. Gerhards, J. Heise, H. Zabel, Thermal expansion behavior of FeNi alloy layers in Fe1-xNi_x/Cu superlattices, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* 191 (1999) 45-53
- [8] Ju-Hwan Kim, Tai Hong Yim, Jae-Ho Lee, Effects of bath and operating conditions on the composition of NiFe alloy electroplating for solar cell substrate, *Current Applied Physics* 13 (2013) S108eS110.
- [9] Eunju Sim, Van-Duong Dao, Ho-Suk Choi, Pt-free counter electrode based on FeNi alloy/reduced graphene oxide in liquid junction photovoltaic devices, *Journal of Alloys and Compounds* 742 (2018) 334-341
- [10] X. Zheng, J. Deng, N. Wang, D. Deng, W.H. Zhang, X. Bao, C. Li, Podlike N-doped carbon nanotubes encapsulating FeNi alloy nanoparticles: high-performance counter electrode materials for dye-sensitized solar cells, *Angew. Chem. Int. Ed.* 53 (2014) 7023-7027.
- [11] N. Barakat, M.S. Akhtar, I.M.A. Mohamed, Y.A. Dakka, R. Hamdan, A.G. El-Deen, K. Elsaid, M. Obaid, S. Al-Meer, Effective and stable FeNi@N-doped graphene counter electrode for enhanced performance dye sensitized solar cells, *Mater. Lett.* 191 (2017) 80-84.
- [12] Chu-Nan Chang, Loo Kok Ngai and Bey-Bey Li, The experimental Compton profile of Cu, Zn, Cd, Ta, and Au, *Chinese Journal of Physics* Vol. 27, No. 6.
- [13] B. L. Ahuja, M. D. Sharma, B. K. Sharma, S. Hamouda and M. J. Cooper, Compton Study of the Electronic State in Fe–Ni Alloys *Physica Scripta*. Vol. 58, 185-188, 1998
- [14] D. Pal, H. C. Padhi, Compton Profile Measurement on Fe and Fe_{0.51}Ni_{0.49} Alloy *Physica Status Solidi (b)*, Vol. 165, Issue 2, pp. K101-K104.