

**BAZI Cu BAZLI DÜZENLİ VE DÜZENSİZ METAL
ALAŞIMLARININ MOLEKÜLER DİNAMİK
SİMÜLASYON YÖNTEMİ İLE İNCELENMESİ**

**MEHMET AKİF ERSOY ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ
YÜKSEK LİSANS TEZİ
FİZİK ANABİLİM DALI**

Çiğdem Şükriye GÜÇLÜ

**DANIŞMAN
Yrd. Doç. Dr. Ülkü BAYHAN**

Haziran, 2012

BURDUR



YÜKSEK LİSANS JÜRİ ONAY FORMU

ÇİĞDEM ŞÜKRİYE GÜÇLÜ tarafından Yrd. Doç. Dr. ÜLKÜ BAYHAN yönetiminde hazırlanan ‘BAZI Cu BAZLI DÜZENLİ VE DÜZENSİZ METAL ALAŞIMLARININ MOLEKÜLER DİNAMİK SİMÜLASYON YÖNTEMİ İLE İNCELENMESİ’ başlıklı tez tarafımızdan okunmuş, kapsamı ve niteliği açısından bir Yüksek Lisans tezi olarak kabul edilmiştir.

Tez Savunma Tarihi 21/06/2012

Prof. Dr. Mehmet ÇİVİ
Gazi Üniversitesi Fen Fakültesi
Başkan

Yrd. Doç. Dr. Fatma GÖDE
Mehmet Akif Ersoy Üniversitesi
Jüri Üyesi

Yrd. Doç. Dr. Ülkü BAYHAN
Mehmet Akif Ersoy Üniversitesi
Jüri Üyesi

ONAY

Bu tez, Enstitü Yönetim Kurulu’ nun.....tarih vesayılı kararı ile kabul edilmiştir.

Yrd. Doç. Dr. İsmail KAYAĞİL
Müdür Vekili
Fen Bilimleri Enstitüsü

İÇİNDEKİLER

	<u>Sayfa</u>
İÇİNDEKİLER	i
ÖZET	iii
ABSTRACT	iv
TEŞEKKÜR	v
ŞEKİLLER DİZİNİ	vi
ÇİZELGELER DİZİNİ	viii
SİMGELER ve KISALTMALAR DİZİNİ	ix
1. GİRİŞ	1
2. MATERYAL ve YÖNTEM	7
2.1. Moleküler Dinamik Simülasyon Metodu	8
2.1.1. Genişletilmiş Hamiltonyen Metodu	11
2.1.2. Gear Tahmin Et-Düzeltil (Predictor-Corrector) Algoritması	16
2.2. Etkileşme Potansiyeli	18
2.2.1. Çok Cisim Etkileşmeli Finnis-Sinclair (FS) Potansiyeli	21
2.2.2. Sutton-Chen (SC) Potansiyeli	22
2.3. Hesaplama Yöntemleri	26
2.3.1. Çift Dağılım Fonksiyonu	28
2.3.2. Elastik Sabitler	30
2.3.3. Fonon Dağılım İlişkisi	31
3. ARAŞTIRMA BULGULARI	36
3.1. Cu, Ag Saf Metalleri ve İkili Düzenli Alaşımları	36
3.1.1. Toplam Enerji/ Hacim/ Yoğunluğun Sıcaklıkla Değişimi	37
3.1.2. Çift Dağılım Fonksiyonu Eğrileri	40
3.1.3. Elastik Sabitler	46
3.2. Cu, Pt Saf Metalleri ve İkili Düzenli Alaşımları	51
3.2.1. Toplam Enerji/ Hacim/ Yoğunluğun Sıcaklıkla Değişimi	52

3.2.2. Çift Dağılım Fonksiyonu Eğrileri	55
3.2.3. Elastik Sabitler	59
3.3. Cu, Ni Saf Metalleri ve İkili Düzensiz Alaşımları	63
3.3.1. Toplam Enerji/ Hacim/ Yoğunluğun Sıcaklıkla Değişimi	64
3.3.2. Çift Dağılım Fonksiyonu Eğrileri	67
3.3.3. Elastik Sabitler	72
3.4. Cu İçin Fonon Dağılım Eğrileri	77
4. TARTIŞMA ve SONUÇ	78
5. KAYNAKLAR	80
ÖZGEÇMİŞ	85

ÖZET

Yüksek Lisans Tezi

BAZI Cu BAZLI DÜZENLİ VE DÜZENSİZ METAL ALAŞIMLARININ MOLEKÜLER DİNAMİK SİMÜLASYON YÖNTEMİ İLE İNCELENMESİ

Çiğdem Şükriye GÜÇLÜ
Mehmet Akif Ersoy Üniversitesi
Fen Bilimleri Enstitüsü
Fizik Anabilim Dalı

Bu tez çalışmasında Sutton-Chen (SC) tarafından geliştirilen çok cisim potansiyelinden faydalanarak fcc bulk yapıdaki bazı geçiş metalleri ve alaşımları için mekanik ve termodinamik özellikler Moleküler Dinamik (MD) simülasyon yöntemi ile incelendi. Çalışmada genişletilmiş Hamiltonyen formuna dayalı MD simülasyon algoritması kullanıldı. Simülasyonlar HPN, TPN ve EVN istatistik kümelerinde gerçekleştirildi. Sıcaklığın ve konsantrasyonun Cu, Ag, Pt, Ni saf geçiş metalleri ile Cu bazlı bazı düzenli ve düzensiz ikili alaşımlarına mekaniksel ve termodinamik etkileri analiz edildi. Geçiş metalleri ile metal alaşımlarının termodinamik, statik ve dinamik özelliklerini incelemek için atomlar arası etkileşimleri tanımlayan Kuantum Sutton-Chen (q-SC) çok cisim potansiyeli kullanıldı. Toplam enerji, hacim, yoğunluk, elastik sabitler, bulk modülü, çift dağılım fonksiyonları ve erime noktaları söz konusu saf metaller ve Cu bazlı ikili alaşımları için elde edildi. İlave olarak Cu metalinin fonon dağılım eğrileri çizildi. Sonuçlar genelde mevcut deneysel veriler ve diğer teorik çalışmalarla uyumludur.

Anahtar Kelimeler: Moleküler Dinamik (MD), Geçiş Metalleri, Düzensiz ve Düzenli İkili Alaşımlar, Termal ve Mekanik Özellikler, Fonon Dağılım İlişkisi.

Danışman: Yrd. Doç. Dr. Ülkü BAYHAN, Mehmet Akif Ersoy Üniversitesi, Fen Edebiyat Fakültesi, Fizik Bölümü.

ABSTRACT

M.Sc. Thesis

MOLECULAR DYNAMICS SIMULATION STUDY OF ORDERED AND RANDOM SOME Cu BASED ON METALLIC ALLOYS

Çiğdem Şükriye GÜÇLÜ
Mehmet Akif Ersoy University
Institute of Science
Department of Physics

This work investigated the many-body potentials developed by Sutton and Chen (SC) study the bulk properties of some fcc metals and metallic alloys mechanical and thermodynamical properties in Molecular Dynamics (MD) simulations. The MD algorithm of this work is based on the extended Hamiltonian formalism. Simulations are performed in the HPN, TPN and EVN ensembles. The effects of temperature and concentration on the physical properties of Cu, Ag, Pt, Ni pure metals and Cu based on some ordered and random binary alloys are analyzed. Quantum Sutton-Chen (q-SC) many-body potentials are used as interatomic interactions which enable one to investigate the thermodynamic, static and dynamical properties of transition metals and metallic alloys. The simulation results such as total energy, volume, density, elastic constants, bulk modulus, pair distribution functions and melting points obtained for Cu and Cu based on binary alloys. In addition, phonon dispersion curves for copper is also drawn. The results are in good agreement generally with experimental data and other calculations.

Keywords: Molecular Dynamics (MD), Transition Metals, Random and Ordered Binary Alloys, Thermal and Mechanical Properties, Phonon Dispersion Relation.

Advisor: Asisst. Prof. Dr. Ulku BAYHAN, Mehmet Akif Ersoy University, Faculty of Arts and Sciences, Department of Physics.

TEŞEKKÜR

Yüksek lisans eğitimim boyunca ilgisini, sevgisini, desteğini, tecrübesini ve tüm imkanlarını seferber etmiş; en önemlisi bana inanıp güvenmiş olan danışmanım canım hocam Yrd. Doç. Dr . Ülkü BAYHAN'a sonsuz sevgi ve teşekkürlerimi sunarım.

Bu tezin laboratuvar çalışmaları Pamukkale Üniversitesi Fen-Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümü' nün Malzeme Fiziği Simülasyon Laboratuvarındaki iş istasyonlarında gerçekleştirildi. Öncelikle bu imkandan faydalanabilme olanağı sağlayan YÖK FARABİ DEĞİŞİM PROGRAMI YÖNETİCİLERİ'ne, Pamukkale Üniversitesi FİZİK BÖLÜMÜ'ne; hoşgörüsü, sabrı, tecrübe ve bilgi paylaşımı için Farabi Danışmanım canım hocam Yrd. Doç. Dr. Sevgi ÖZDEMİR KART'a ve yine yardımseverliği ve sakin kişiliği ile bana büyük destek olan Doç. Dr. Hasan Hüseyin KART'a şükranlarımı ve teşekkürlerimi sunarım.

Çalışmalarımın her aşamasında var olan, büyük emekleri ve manevi destekleri ile beni yüreklendiren ekip arkadaşlarım; başta Cengiz SOYKAN, Serkan KAYA ve Hüseyin YILDIRIM olmak üzere Malzeme Fiziği Simülasyon Laboratuvarındaki tüm meslektaşlarıma, ayrıca tezin yazım aşamasındaki desteklerinden dolayı Lütfi ARISOY'a teşekkür ederim.

Ve son olarak annem, babam ve ağabeyim, canımsınız.. iyi ki benim ailemsiniz..

Çiğdem Şükriye GÜÇLÜ
BURDUR, 2012

ŞEKİLLER DİZİNİ

	Sayfa
Şekil 2.1. Simülasyon ölçeği.....	7
Şekil 2.2. Lennard Jones (LJ) potansiyeli	20
Şekil 2.3. Birim hücredeki cisim merkezli (bcc) kübik yapı.....	21
Şekil 2.4.a. Birim hücredeki yüzey merkezli (fcc) kübik yapı.....	27
Şekil 2.4.b. L_{12} düzenli yapısı.....	28
Şekil 2.4.c. $CuAg_3$ alaşımı için L_{12} düzenli yapısı.....	28
Şekil 2.5. Merkezi atomdan r kadar mesafede dr kalınlığındaki kabuğun görünümü..	29
Şekil 2.6. Bulk modülü.....	31
Şekil 3.1.1.a. Sıcaklık-toplam enerji grafiği (Cu-Ag)	37
Şekil 3.1.1.b. Sıcaklık-hacim grafiği (Cu-Ag).....	38
Şekil 3.1.1.c. Sıcaklık-yoğunluk grafiği (Cu-Ag).....	39
Şekil 3.1.2.a. Cu saf metali için çift dağılım fonksiyonu eğrileri.....	41
Şekil 3.1.2.b. Cu_3Ag alaşımı için çift dağılım fonksiyonu eğrileri.....	42
Şekil 3.1.2.c. $CuAg_3$ alaşımı için çift dağılım fonksiyonu eğrileri.....	43
Şekil 3.1.2.d. Ag saf metali için çift dağılım fonksiyonu eğrileri.....	44
Şekil 3.1.3.a. Cu saf metalinin elastik sabitlerinin sıcaklıkla değişimi.....	46
Şekil 3.1.3.b. Cu_3Ag alaşımının elastik sabitlerinin sıcaklıkla değişimi.....	47
Şekil 3.1.3.c. $CuAg_3$ alaşımının elastik sabitlerinin sıcaklıkla değişimi.....	48

Şekil 3.1.3.d. Ag saf metalinin elastik sabitlerinin sıcaklıkla değişimi.....	49
Şekil 3.2.1.a. Sıcaklık-toplam enerji grafiği (Cu-Pt).....	52
Şekil 3.2.1.b. Sıcaklık-hacim grafiği (Cu-Pt).....	53
Şekil 3.2.1.c. Sıcaklık-yoğunluk grafiği (Cu-Pt).....	54
Şekil 3.2.2.a. Pt saf metali için çift dağılım fonksiyonu eğrileri.....	55
Şekil 3.2.2.b. Cu ₃ Pt alaşımı için çift dağılım fonksiyonu eğrileri.....	56
Şekil 3.2.2.c. CuPt ₃ alaşımı için çift dağılım fonksiyonu eğrileri.....	57
Şekil 3.2.3.a. Pt saf metalinin elastik sabitlerinin sıcaklıkla değişimi.....	59
Şekil 3.2.3.b. Cu ₃ Pt alaşımının elastik sabitlerinin sıcaklıkla değişimi.....	60
Şekil 3.2.3.c. CuPt ₃ alaşımının elastik sabitlerinin sıcaklıkla değişimi.....	61
Şekil 3.3.1.a. Sıcaklık-toplam enerji grafiği (Cu-Ni).....	64
Şekil 3.3.1.b. Sıcaklık-hacim grafiği (Cu-Ni).....	65
Şekil 3.3.1.c. Sıcaklık-yoğunluk grafiği (Cu-Ni).....	66
Şekil 3.3.2.a. Ni saf metali için çift dağılım fonksiyonu eğrileri.....	67
Şekil 3.3.2.b. Cu _{0.75} Ni _{0.25} alaşımı için çift dağılım fonksiyonu eğrileri.....	68
Şekil 3.3.2.c. Cu _{0.50} Ni _{0.50} alaşımı için çift dağılım fonksiyonu eğrileri.....	69
Şekil 3.3.2.d. Cu _{0.25} Ni _{0.75} alaşımı için çift dağılım fonksiyonu eğrileri.....	70
Şekil 3.3.3.a. Ni saf metalinin elastik sabitlerinin sıcaklıkla değişimi.....	72
Şekil 3.3.3.b. Cu _{0.75} Ni _{0.25} alaşımının elastik sabitlerinin sıcaklıkla değişimi.....	73
Şekil 3.3.3.c. Cu _{0.50} Ni _{0.50} alaşımının elastik sabitlerinin sıcaklıkla değişimi.....	74
Şekil 3.3.3.d. Cu _{0.25} Ni _{0.75} alaşımının elastik sabitlerinin sıcaklıkla değişimi.....	75
Şekil 3.4. Cu için fonon dağılım eğrileri.....	77

ÇİZELGELER DİZİNİ

	Sayfa
Çizelge 2.1. Geçiş metallerinin Kuantum Sutton-Chen (q-SC) parametreleri.....	24
Çizelge 3.1. Cu, Ag ve ikili alaşımlarının erime noktası sonuçlarının.....	45
deneysel değer ve diğer teorik çalışmalarla karşılaştırılması	
Çizelge 3.2. Cu, Ag ve ikili alaşımlarının elastik sabitlerinin.....	50
deneysel değer ve diğer teorik çalışmalarla karşılaştırılması	
Çizelge 3.3. Cu, Pt ve ikili alaşımlarının erime noktası sonuçlarının.....	58
deneysel değer ve diğer teorik çalışmalarla karşılaştırılması	
Çizelge 3.4. Cu, Pt ve ikili alaşımlarının elastik sabitlerinin.....	62
deneysel değer ve diğer teorik çalışmalarla karşılaştırılması	
Çizelge 3.5. Cu, Ni ve ikili alaşımlarının erime noktası sonuçlarının.....	71
deneysel değer ve diğer teorik çalışmalarla karşılaştırılması	
Çizelge 3.6. Cu , Ni ve ikili alaşımlarının elastik sabitlerinin deneysel.....	76
değer ve diğer teorik çalışmalarla karşılaştırılması	

SİMGELER VE KISALTMALAR DİZİNİ

Ag	Gümüş
Cu	Bakır
Ni	Nikel
Al	Alüminyum
Au	Altın
Pt	Platin
Pd	Paladyum
Pb	Kurşun
Rh	Rodyum
Ir	İridyum
LJ	Lennard-Jones
FS	Finnis-Sinclair
SC	Sutton-Chen
q-SC	Kuantum Sutton-Chen
PEF	Potansiyel Enerji Fonksiyonu
RDF	Radyal Dağılım Fonksiyonu
EAM	Embedded Atom Method
MIM	Moving Interface Method
MEAM	Modified Embedded Atom Method
MD	Moleküler Dinamik

TB	Tight Binding
SM-TBM	Secong-Moment Tight Binding Method
sn	Saniye
ps	Pikosaniye
fs	Femtosaniye
nm	Nanometre
MC	Monte Carlo
N	Parçacık sayısı
m	Atomik kütle
U	Potansiyel enerji
U(\mathbf{r}_{12})	İkili etkileşimleri tanımlayan potansiyel enerji terimi
\mathbf{r}_i	i.parçacığın konumu
$\ddot{\mathbf{r}}_i(\mathbf{t})$	t anında \mathbf{r}_i parçacığının ivmesi
V	Hacim
T	Sıcaklık
P	Basınç
E	Enerji
H	Entalpi
W	Piston kütlesi
H	Matris
s	Isı banyosunun serbestlik derecesi
TVN	Kanonik topluluk
HPN	İzoentalpik-izobarik topluluk
TPN	İzotermal-izobarik topluluk

EVN	Mikro-kanonik topluluk
Q	Etkin kütle
p_s	Konjuge momentum
k_B	Boltzmann sabiti
η	Termodinamiksel sürtünme katsayısı
(r_i', p_i')	Ölçeklendirilmiş koordinat
(h, Π)	Parinello-Rahman dinamik hücrenin koordinat ve momentumu
(s, p_s)	Ölçeklendirilmiş kütle değişkeni
G	Metrik tensör
V_0	Referans sisteminin hacmi
T_0	Isı banyosunun sıcaklığı
$r_i - r_j$	Yerdeğiştirme vektörünün birim vektörü
$\Phi(r_{ij})$	Atomlar arası etkileşme enerjisi
c_a	Gear katsayısı
ϵ, σ	Potansiyel parametreleri
$V(r_{ij})$	i ve j atomları arasındaki kısa menzilli itici terim
ρ	Komşu atom katkılarının toplamı
$f(\rho_i)$	Genelleştirilmiş koordinatlar cinsinden atomların enerjisi
α	Örgü sabiti
c	Boyutsuz parametre
ϵ	Enerji boyutundaki parametre
m	Pozitif tam sayı
n	Pozitif tam sayı
Å	Angstrom

I	Bir boyutta birim hücre
bcc	Cisim merkezli kübik yapı
fcc	Yüzey merkezli kübik yapı
Δt	Zaman adımı
K	Kelvin
E_{pot}	Potansiyel enerji
E_{kin}	Kinetik enerji
r	Atomlar arası uzaklık
$g(r)$	Çift dağılım fonksiyonu
$n(r)$	Koordinasyon sayısı
Δr	dr kalınlığındaki kabuğun hacmi
P_{ij}	Zorlanma tensörünün dalgalanmasından gelen katkı terimi
X_{ijkl}	Born terimi
C_{11}	Elastik sabit
C_{12}	Elastik sabit
C_{44}	Elastik sabiti
B	Bulk modülü
U_{top}	Toplam potansiyel enerji
$\delta_{\alpha\beta}$	Kronocker sembol
m_λ	λ .atomun kütlesi
l	Referans alınan birim hücre
l'	Komşu birim hücre
λ	Referans atomu
v	Referans atomu

α	Yön bileşeni
β	Yön bileşeni
ω	Açısal frekans
$\mathbf{D}_{\alpha\beta,\lambda\nu}$	Dinamik matris
\vec{q}	Kristal titreşimi dalga vektörü
$\Phi_{\alpha\beta}$	Dinamik matriste kuvvet sabitleri terimi
TB-SMA	Tight Binding Second Moment Approximation
LA	Longitudinal Acoustic
TA	Transverse Acoustic

1. GİRİŞ

Malzemenin teknolojik olarak üstün özellik gösterebilmesi yeterli mukavemete ve sertliğe sahip olabilmesi ile yakından ilişkilidir. Bunu sağlamanın en iyi yolu alaşım elemanları ile takviye edilip sertleştirme yapılmasıdır.

İki veya daha fazla elementin belirli oranlarda karıştırılmasıyla daha dayanıklı malzeme oluşturulabileceği ilk çağlardan beri bilinmektedir. Günümüzde de teknolojik malzemelere istenilen özellikleri kazandırmak için alaşım sistemleri üzerinde çeşitli çalışmalar yapılmaktadır. İkili alaşım sistemlerine üçüncü, dördüncü hatta beşinci elementin katılması bu alaşımların mikro yapısı ve makroskobik özellikleri üzerinde önemli değişikliklere yol açmaktadır. Ayrıca sıcaklık ve basınç gibi dış şartların değişmesi sonucu bu tür malzemelerin kazandığı yeni birçok ilginç özellik günümüzde tam olarak açıklanamamaktadır.

Nümerik metotlar ve son zamanlarda bilgisayar teknolojisindeki ilerlemeler metal alaşımlarının fiziksel özelliklerini inceleme girişimlerini pekiştirmiştir. Malzeme araştırmaları onların endüstriyel uygulamalarına ilgiyi büyük ölçüde arttırmaktadır. İlgi çekici konulardan biri teorik ve deneysel olarak metaller ve alaşımlarının örgü dinamiği özelliklerinin çalışılmasıdır. Dinamik özelliklerden kolay test edilebilir hesaplama yolu deneysel ölçümlere de uygun olan fonon dağılım eğrileridir (Özdemir Kart, 2004a).

Gelişmiş yüksek performanslı malzemenin endüstri dünyasındaki tanınırlığı teorik ve hesaplamaya dayalı modellemelerle sınanarak artış göstermektedir. Bu süreçte araştırma alanları yaratıcı gelişmelerle bazı materyaller üzerine odaklanmıştır. Yüksek performanslı metalik alaşımlar malzemenin çeşitli bölümlerinde ve kimya endüstrisinde de katalizör olarak kullanılan düşük ağırlığa yüksek dayanıklılığa sahip yapısal materyallerdir. Teori ve hesaplamalardaki çabalar metallerin ve alaşımlarının üst düzey özelliklerinin belirlenmesi, işlenir durumlarının modeli, simülasyonu ayrıca metal ve alaşımlarının performans karakteristiklerinin incelenmesi için gereklidir. Bu gibi üstün özellikli gelişmiş malzemelerin zaman, fiyat ve çevresel olarak uyumlu gelişimi son derece önemlidir.

Hesaplama hızı ve hesaplama algoritmalarındaki gelişmelerle yenilikçi sürecin ortasında teori ve bilgisayar simülasyonlarının yeri belirlenmiştir (Çağın ve diğ., 1999a).

Endüstride kullanılan birçok malzemenin gelişimi ile birlikte seçilen malzemenin deneysel ortamlarda kullanılma zorluğu ve maliyetler de göz önünde bulundurularak bilgisayar simülasyonları sonuçlarına olan ihtiyaç artmıştır. Fiziksel alanda da mikro yapıda değişiklik yaratan kimyasal olayların ve sonuçta ortaya çıkan fiziksel özelliklerin simülasyon tekniği ile incelenmesi oluşum mekanizmalarının anlaşılmasında önemli bir adım olmuştur. Günümüzde özellikle atomik düzeyde olan simülasyon, yoğun madde fiziği ve malzeme biliminin birçok alanında gittikçe önem kazanan bir araç haline gelmiştir (Kart ve diğ., 2005a).

Fiziksel sistemin bilgisayar ortamındaki simülasyonu onun en basit modelidir. Gerçeğe en yakın sistem benzetimini elde edebilmek için sistemin gereksinimlerini karşılayacak en doğru yöntemi oluşturmak gerekir. Bilgisayar temelli simülasyonda karşılaşılan en büyük problem maddenin yapısal özellikleri ve sistemi tam doğrulukta tarif eden bir termodinamik ile çok hızlı oluşabilen atomik etkileşmeler için uygun yöntemi bulabilmektir. Deneysel yaklaşımlardan bağımsız olarak oluşturulmuş bu yöntemler maddelerin yapısal, termodinamik ve dinamik özelliklerinin hesaplanabilmesi için uygun olmalıdır. Moleküler Dinamik (MD) simülasyon metodu malzemenin bu özelliklerini ve eğilimlerini belirlemeye imkan veren klasik yaklaşımı temel prensip olarak kabul etmiş birçok metottan biridir (Fruiro, 1997).

MD simülasyonlarında atomlar arası etkileşmeler uygun matematiksel fonksiyonlar model alınarak hesaplanır. Potansiyel enerji fonksiyonunun gradyenti de atomlar arası kuvveti verir (Uğurluoğlu, 2006). Faz uzayında denge noktasında minimum enerjide tutulan bir sistemin davranışı Newton hareket denklemleri kullanılarak sayısal olarak çözülebilir. MD simülasyonu sonuçlarından elde edilen veriler değerlendirildiğinde atomlar arası etkileşimlerin karakteri de görülmektedir. Bu durumda MD sistemler için atomlar arası etkileşme kuvvetlerinin ve bağ tipinin tam olarak bilinmesi gerekir. Ancak saf bir metal kristali içindeki bir atom üzerine etkiyen toplam kuvvetin birçok bileşene sahip olduğu bilinmektedir. Bu nedenle kesin çözümler yerine çeşitli yaklaşımlar kullanılmaktadır. Bu yaklaşımlar empirik, yarı empirik ve teorik yaklaşımlardır. Karmaşık sistemlerde çok cisim problemi Born-Oppenhemier tarafından nükleer ve elektronik olmak üzere iki kısma ayrılmıştır. Bununla birlikte Coulomb ve Van der Waals etkileşmeleri gibi sadece çekirdek koordinatları boyunca etkiyen kuvvetler (merkezi etkileşme kuvvetleri) dikkate alınarak yapılan yaklaşımlar

da problemin karmaşık doğasını sadeleştirmiştir. Merkezi olan ve merkezi olmayan etkileşmeler sırasıyla İki Cisim Etkileşmesi ve Çok Cisim Etkileşmesi şeklinde isimlendirilir. Bu etkileşmeleri modellemek için kullanılan matematiksel ifadelere 'Potansiyel Enerji Fonksiyonu (PEF)' adı verilir. Çeşitli sistemlerin modellenmesi amacıyla kurulan ve çok cisim etkileşmelerini tanımlayan birçok PEF bulunmaktadır. Örneğin Lennard-Jones (LJ), Morse, Sutton-Chen (SC), Finnis-Sinclair (FS) ve Gömülmüş Atom Potansiyeli metallerin modellenmesinde kullanıldığında bu yapılarda iyi sonuç veren fonksiyonlardır (Özgen, 1997).

İlk prensip (First principle) moleküler dinamik yoğunluk fonksiyonel teorisi tabanlı uygulamalarda Car ve Parinello (1985)'nin metodu kullanılmakla birlikte sistemde çalışılan bu metodun detayları ve ihtiyaçları atomik etkileşimler hakkında en doğru bilgileri verir. Öte yandan bilgisayar gücü, ihtiyaçları ve zamanın doğru kullanımı göz önünde bulundurulursa sonuçların elde edilmesi için geçen süre önem kazanmaktadır. Bu yöntemde bilgisayar sınırlamaları sadece birkaç yüz atomu tasvir edebilecek düzeydedir. Diğer taraftan deneysel ve daha geniş pratik yaklaşımlar bütçe açısından çoklu sistemler ve fiziksel sistemin eğilimlerini inceleyebilmek için uygundur. Fazla atom içeren sistemler deneysel potansiyellerle kısa sürede ve tatmin edici kesinlikte çalışılabilmektedir. Metalik sistemler için kullanılan metotlardan bazıları Effect-Medium Teori (Norskov, 1982), The Embedded Atom Method (Gömülmüş Atom Metodu) (Daw ve Baskes, 1984) ve Finnis-Sinclair (1984) potansiyelidir. Son zamanlarda Tight- Binding (TB) yaklaşımı, Sutton ve Chen (SC) (1990) tarafından geliştirilen çok cisim potansiyeli kullanılmaktadır. Bu metot fcc metalleri iyi temsil eder. Çünkü hesaplamaya dayalı sayısal analizlerde ve uzun menzilli etkileşimlerde etkili olmuştur. Bu metot birçok çalışmada bir dizi hesaplamaya başarılı bir şekilde uygulanmıştır (Lyndenbell, 1991; Uppenbring ve diğ., 1992; Hammonds ve Lyndenbell, 1992; Todd ve Lyndenbell, 1995; Wales ve Munro, 1996; Dereli ve diğ., 1997a; Çağın ve diğ., 1999b). Son yıllarda Çağın ve arkadaşları tarafından SC tipi potansiyellere kuantum düzeltmeleri ilave edilerek potansiyeller yeniden yapılandırılmıştır (Çağın ve diğ., 1999b). SC potansiyeli alaşımlara, metal camlara, kristallere, metal topaklara (cluster), nanotellere, saf metallerin tek kristal esnekliğine, örgü dinamiği ve fcc geçiş metalleri ve onların ikili alaşımlarının geçiş özelliklerine uygulanmıştır (Qi ve diğ., 1999; Ikeda ve diğ., 1999; Qi ve diğ., 2001a; Strachan ve diğ., 2001; Qi ve diğ., 2002;

Özdemir Kart ve diğ., 2004b,c; Özdemir Kart ve diğ., 2005). Bu çalışmada MD simülasyonu kullanılarak SC potansiyeli ve yeniden yapılandırılmış potansiyel parametreleriyle Kuantum Sutton- Chen (q-SC) potansiyeli kullanılmıştır.

Foiles ve Adams (1989) tarafından Monte Carlo simülasyonları kullanılarak Cu, Ag, Au, Ni, Pd ve Pt'nin erime noktaları, katı ve sıvı serbest enerjileri belirlenmiştir. Erime noktaları Cu, Ag ve Ni için deneysel değerlere uygun, diğerleri için kullanılan model uygun değildir. Benzer metot Al için Mei ve Davenport (1992) tarafından MD simülasyon yöntemine uygulanmıştır. Bulunan erime noktası 130K civarındadır ve deneysel değer altında kalmıştır. Gömülmüş atom modeli kullanılarak Cu (Sadigh ve Grimvall, 1996) ve Ni (Alemany ve diğ., 1998) için erime noktaları sırasıyla 1370K ve 1705K bulunmuştur. Sonuçlar deneysel verilerle uyumludur.

Gomez ve arkadaşları tarafından fcc geçiş metalleri Second-Moment Tight-Binding Method (SM-TBM) ile incelenmiş ve sabit basınç MD simülasyonu kullanılmıştır. Ancak sonuçlar Pb hariç deneysel verilerle uyumlu değildir (Gomez ve diğ., 1997).

Çağın ve arkadaşları tarafından q-SC potansiyeli kullanılarak bazı fcc geçiş metallerinin (Cu, Ag, Au, Pt, Rh) termal ve mekanik özellikleri MD simülasyon yöntemi ile incelenmiştir (Çağın ve diğ., 1998).

Cherne ve Baskes (2001) tarafından Hareketli Yüzey Metoduyla (Moving Interface Method, MIM) Ni' nin erime sıcaklığı iki farklı Gömülmüş Atom Metodu (Embedded Atom Method, EAM) ve dört farklı Modifiye Edilmiş Gömülmüş Atom Metodu (Modified Embedded Atom Method, MEAM) kullanılarak hesaplanmıştır.

Çakmak ve arkadaşları tarafından gömülmüş atom potansiyeli kullanılarak Ni'nin MD simülasyonu gerçekleştirilmiştir. Çalışmada Sutton-Chen fonksiyonunun parametreleri kullanılarak parametrelerin geçerliliği Parinello-Rahman (1980) MD simülasyonu ile incelenmiştir (Çakmak ve diğ., 2005).

Kart H.H. ve arkadaşları tarafından MD simülasyon metoduyla SC ve q-SC potansiyeli kullanılmış, Pd, Ag ve özellikle de Pd_xAg_{x-1} tipindeki ikili alaşımların mekanik ve termodinamik özellikleri incelenmiştir. Elde edilen sonuçların deneysel verilerle oldukça uyumlu olduğu belirtilmiştir. Özellikle Pd, Ag ve ikili alaşımları için q-SC potansiyel parametreleri ile yapılan hesaplama sonuçlarının deneysel verilerle

uyumluluğunun, SC potansiyel parametreleriyle yapılarına göre daha iyi olduğu sonucuna ulaşılmıştır (Kart ve diğ., 2005a).

Kart H.H ve arkadaşları tarafından Cu, Au saf metalleriyle düzenli intermetalik alaşımlarının (Cu_3Au , $CuAu_3$) termal ve mekanik özellikleri yine q-SC potansiyeli kullanılarak MD simülasyon yöntemi ile incelenmiştir (Kart ve diğ., 2005b).

Özdemir Kart S. ve arkadaşları tarafından q-SC potansiyeli kullanılarak Cu, Pd saf metalleri ile onların Cu_3Pd ve $CuPd_3$ düzenli alaşımlarının termal ve mekanik özellikleri MD simülasyon yöntemi ile incelenmiştir (Özdemir Kart ve diğ., 2008).

Davoodi ve arkadaşları tarafından yine q-SC potansiyeli kullanılarak Cu-Pd düzensiz alaşımlarının MD simülasyonu gerçekleştirilmiştir (Davoodi ve diğ., 2010).

Bu tez çalışmasında incelenen Cu-Ni alaşımı tekstil endüstrinde geniş kullanım alanına sahiptir. Asidik boya ve solüsyonlar Cu-Ni' den yapılmış aside karşı dayanıklı büyük kaplarda tutulur. Cu metaline eklenen Ni, Cu metalinin erime sıcaklığını yükseltir. Cu-Ni alaşımı çevresel korozyona dirençli olduğundan çok yüksek sıcaklığa sahip ortamlarda bakır tellerin yerine kullanılabilir. Ayrıca iyi karakteristik özelliklerinin yanı sıra benzer alaşımlara göre daha ucuzdur (Cong ve diğ., 2002). Cu-Ni alaşımından yapılan tüpler deniz suyundan tatlı su elde edilen tesislerde de kullanılır.

Ag'nin en geniş kullanım alanı kuyumculuk ve gümüş işçiliğidir. Bu alanlarda kullanılan Ag %7,5 oranında Cu veya başka metal içerir. Ayrıca dışçilikte kullanılan alaşım yapısında, Cu katkılı lehim alaşımlarında Ag katkısı vardır. Ag ayrıca cam ya da metallerin üzerine boya ile kaplanarak ayna yapımında kullanılır. Yeni kaplanmış Ag, görünür ışığın en iyi yansıtıcısıdır (from <http://www.mta.gov.tr>). İlave olarak fotoğraf sanayi, elektronik, para ve pil imalatında, yapay yağmur yağdırma sistemleri gibi teknolojik alanlarda önemli katkı malzemesidir (from <http://www.biltek.gov.tr>).

Pt elementi yüksek sıcaklıktan etkilenmediği için çeşitli laboratuvar cihazlarının yapımında kullanılır. Saf Pt yumuşak olduğu için Cu, Ir, Pd gibi metallerle yaptığı alaşımlarla sertleştirilerek kullanılır. Pt'nin rezistans telleri yüksek sıcaklıklara dayanıklı olduğu için elektrik fırınlarının yapımı, arabaların hava kirliliğini engelleyici donanımlarının yapımı, diş protezlerinin yapımı, kuyumculuk, ilaç yapımı ve kanser tedavisinde kullanılmaktadır (from <http://www.dokumanlar.com/arama.asp>; from <http://www.kimyaevi.com/arama.asp>).

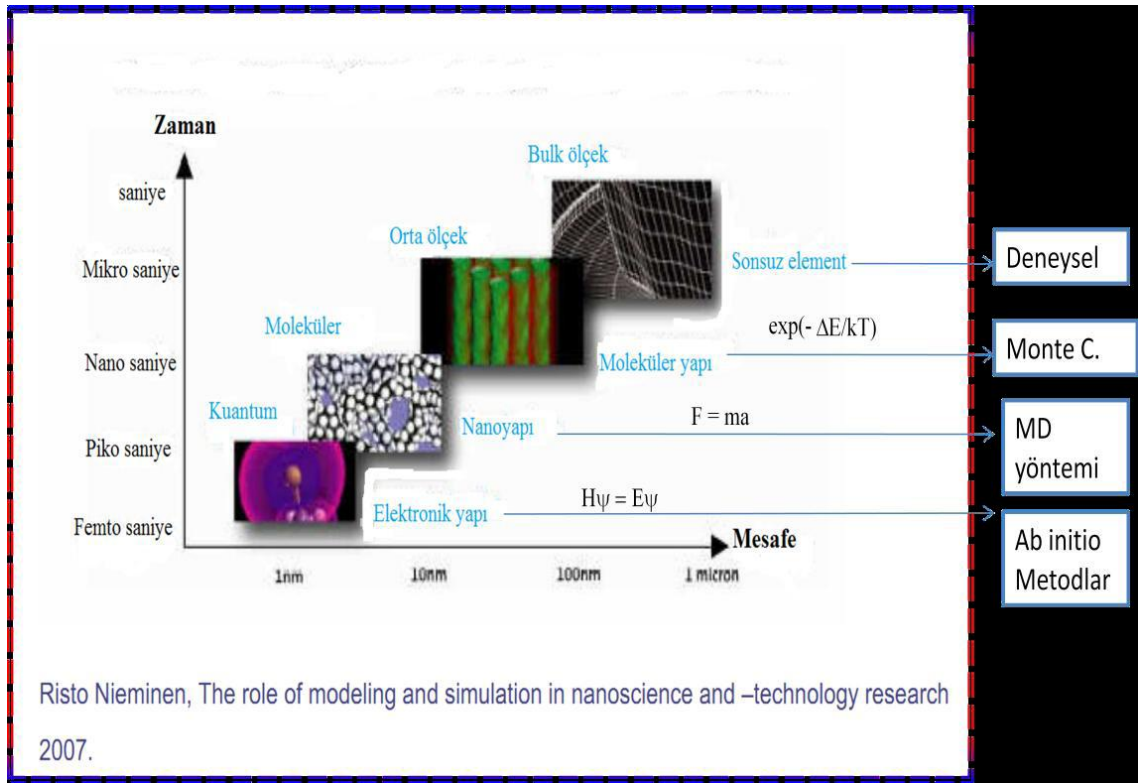
Cu ve alařımlarının endüstriyel önemi onların sertlik ve korozyona karşı dirençleriyle ilgilidir. Yapısal, termodinamik ve atomik geçiř özellikleri endüstriyel uygulamalarda önemli rol oynamıřtır (Özdemir Kart, 2004a). Bu çalışmada Cu bazlı alařımların erime, elastik sabitleri ve Cu için fonon dağılım eğrileri gibi katı ve sıvı özellikleri incelenmiřtir. Sıcaklıęa ve konsantrasyona baęlı olarak sistemin toplam enerjisi, hacmi ve yoğunluęu incelenmiř olup faz geçiřleri Radyal Daęılım Fonksiyonu (RDF) eğrileri ile tayin edilmeye çalışılmıřtır. Elastik sabitleri, fonon dağılımının uzun dalga boyunun limiti ve birim hücrenin statik deformasyonu yani toplam enerjisinin deformasyona göre ikinci türevi alınarak belirlenmiřtir. Potansiyel parametreleri genellikle katı fazda bazı deneysel ya da ilk prensip (First principle) sonuçlarına optimize edilmiřtir.

Bu tezin amacı Cu bazlı düzenli ve düzensiz (random) alařım sistemlerinin MD simülasyonu ile termal ve mekanik özelliklerinin incelenmesidir. Cu bazlı düzenli ve düzensiz ikili alařımların mekanik ve termodinamik özellikleri için MD simülasyon metodu ile q-SC çok cisim potansiyeli kullanılmıřtır. Saf Cu metaline farklı konsantrasyonlarda katılanan dięer geçiř metalleri Pt, Ag, ve Ni'dir. MD simülasyonunda bulk yapıdaki malzemenin atom diziliři Cu-Ag ve Cu-Pt ikili alařımları için düzenli, dięer metal atomları için düzensizdir. Önceki çalışmaların bu kadar geniş yelpazedeki geçiř metallerini ve ikili alařımlarını içermemesinden dolayı bu çalışmanın literatüre katkı sağlayacaęı düşünülebilir.

Bu tez çalışmasının 2. bölümünde MD simülasyon metodu ile ilgili teorik bilgiler ve hesaplama, 3. bölümde araştırma bulguları, son olarak 4. bölümde ise tartışma ve sonuçlara yer verilmiřtir.

2. MATERYAL ve YÖNTEM

Bilgisayar simülasyonları mikroskobik uzunluk ve zaman ölçeği ile makroskobik ölçümler arasında bir köprü görevi üstlenir. Moleküller arası etkileşimler tahmin edilerek malzemelerin ve sistemlerin özellikleri tayin edilir. Bilgisayar simülasyonları deneysel olarak ulaşılması zor şartlar için atomların hareketlerinden sistemlerin hareketlerini tahmin etmemize olanak sağlar. Bunun sonucu olarak atomların hareketlerini ve birbirleri ile olan etkileşimlerini kullanan birçok simülasyon metodu bulunmaktadır.



Şekil 2.1. Simülasyon ölçeği (Nieminen, 2007'den).

Bunlar arasında en yaygın kullanılanları Şekil 2.1.'de görüldüğü gibi atom sayısı az olan sistemlerden başlayarak sistemin boyutunun ve zamanının ölçeklendirilmesine göre sıralanmaktadır. Şekil 2.1'e göre 1nm ve 1fs boyutlarında sistemin kuantumsal simülasyonu belirgin bir şekilde sistemi etkilediğinden parçacıklar arası etkileşimi kuantumsal Schrödinger denklemini çözerek tayin eden Ab-initio simülasyon metotları; çok parçacıklı sistemlerin simülasyonlarını Newton'un hareket denklemlerini çözerek statik ve dinamik özellikleriyle ortaya koyan MD simülasyon metodu; sistemin belirli bir statik durumundaki davranışını inceleyen Monte Carlo (MC) simülasyon metodu ve parçacığın boyutu arttıkça deneysel çalışma metotlarını içeren sonsuz element metotları bulunmaktadır. MD simülasyon metodu diğer metotlara göre çok atomlu sıvıların, katıların ve moleküllerin simülasyonlarının zamana göre davranışlarının irdelenmesine imkan vermesinden dolayı önem arz etmektedir (Kaya, 2012).

2.1. Moleküler Dinamik Simülasyon Metodu

Ülkemizde ve dünyada endüstrinin büyük bir hızla gelişmesi ve elektroniğin yaygın kullanımı bilgisayar teknolojisinin kullanımını her sektörde zorunlu kılmıştır. Bu teknolojinin yaygınlaşmasındaki en önemli etkenlerden birisi de insanoğlunun kontrol altına almaya çalıştığı zamandır. Bu amaçla yapılan bilimsel çalışmalar sonucunda farklı teknikler ve yaklaşımlar geliştirilmiştir.

MD simülasyon metodu, fiziksel bir sistemin mikroskobik yapısını iyi şekilde tanımlayabilir. Tek veya çok parçacıklı sistemin tanımlanması, Hamiltoniyen, Lagrangien veya Newton hareket denklemleriyle doğrudan yapılabilir. MD simülasyon metodu hareket denklemlerinin kullanılması ile sistemin dinamik özellikleri kadar statik durumlarını da tasvir eder.

MD simülasyon metodu, genellikle analitik çözümü tam olarak yapılamayan problemlerin sayısal çözümlerini elde etmeyi ve belirli sistemler için kurulan modellerin deneysel çalışmalar ile karşılaştırılmasını amaçlar. MD hesaplamalarında iyi tasarlanmış modeller kullanılarak, bir sistemin deneysel olarak gözlenmesi zor veya imkansız davranışlarını incelemek de mümkündür. MD simülasyon metodu kullanılarak yapılan bir simülasyonda, hareket denklemleri bir bilgisayar vasıtasıyla sayısal olarak çözülür. Bunun için denklemler bilgisayarda sayısal değerlendirmeye uygun şemalara

dönüştürülür. Genel olarak, diferansiyel operatörlerle sürekli değişkenlere dayanan bir tanımlamadan, sonlu fark operatörleri ve kesikli değişkenlere sahip bir tanımlamaya geçilmesinden dolayı karmaşık bir hata meydana gelecektir. Bu hatanın büyüklüğü seçilen yaklaşıma bağlıdır. Teorik olarak hata, bilgisayarın hız ve hafızasına bağlı olarak çok küçük seviyelere çekilebilir. Fizikte bilgisayar simülasyon teknikleri bir potansiyel enerji fonksiyonu boyunca etkileşen atom topluluklarının özelliklerini hesaplamak için kullanılır.

Sistemin temel fiziksel davranışı potansiyel enerji fonksiyonuna bağlıdır. Atomik simülasyon metotları olarak tanımlanan geniş ölçekli hesaplamalarda etkileşen atomların yapısal, enerji ve dinamik davranışları her adımda veya belli zaman aralıklarında gözlenebilir. Atomik simülasyon metotlarının uygulanmasında üç temel kural izlenir (Kara, 1997).

- 1) Sistemin içerisindeki atomik etkileşimleri tamamen tanımlayan bir potansiyel enerji fonksiyonunun seçilmesi,
- 2) Sistemde ölçülebilen niceliklerin ya da ölçmek istediğimiz bilgisayar programının hazırlanıp işletilmesi,
- 3) Bilgisayarda elde edilen sonuçların deneysel verilerle karşılaştırılarak yorumlanması.

Moleküler sistemin gerçek bilgisayar simülasyonu üç kısma ayrılabilir:

- i) Başlangıç şartlarını hazırlama
- ii) İntegrasyon ve dengeleme
- iii) Sonuçların alınması ve analizi

Buna göre başlangıç şartlarının sisteme verilmesinin ardından MD yöntemi ile her bir MD zaman adımı için sonlu fark metodu algoritmaları kullanılarak denklem (2.1) deki hareket denklemi çözülebilir. Burada F_i , t anında i. atomun üzerine etkiyen kuvvet, N parçacık sayısı, m atomik kütle ve $U(r^N)$ potansiyel enerjidir.

$$F_i(t) = m\ddot{r}_i(t) = -\frac{\partial U(r^N)}{\partial r_i} \quad (2.1)$$

r_i , i .parçacığın konumu ve $\dot{r}_i(t)$, t anında parçacığın ivmesidir. Her bir MD adımı sonrası enerji değerleri hesaplanarak sistemin dengeye gelmesi sağlanacaktır. Sistemin dengeye gelmesi elde edilecek fiziksel analizler için önemlidir.

Sistemin davranışı en kararlı olduğu durumda daha anlaşılır olacaktır. Sistemi temsil eden hareket denklemlerini çözmek için farklı yöntemler bulunmaktadır. Bu denklemler Newton dinamiği ile veya Hamiltonyen dinamiği ile elde edilerek hesaplanır. Bu çalışmada Genişletilmiş Hamiltonyen Metodu kullanılarak sistemdeki parçacıkların hareket denklemleri çözülebilir. Bu yöntem sonraki bölümde detaylı olarak anlatılmıştır. Ayrıca bilgisayar hesaplamaları sırasında diferansiyel operatörler belli bir sonlu değer alacaktır. Hesaplamalarda kesme hatası, elde edilen verilerle ilgili yuvarlama hatalarının meydana gelmesine sebep olacaktır. MD metodu hareket denklemlerini nümerik hesaplamalardan Gear tahmin et-düzeltilmiş (Predictor-Corrector) algoritması aracılığı ile her bir adımda çözerek bu hataları en düşük seviyede tutabilir. Böylece deneysel sonuçlara yaklaşmak daha mümkün hale gelecektir.

Diğer bir deyişle bir simülasyonun ilk kısmında başlangıç şartları belirlenir. Bunun için algoritmaya bağlı olarak farklı ayarlar yapılmalıdır. Bir algoritma, birisi sıfır anında diğeri önceki zaman adımında olan iki koordinat takımına ihtiyaç duyar. Algoritmayı başlatmak için daima konumlara ve hızlara ihtiyaç duyulur. Genellikle atomların konumları bir koordinat sisteminde belirtilir ve başlangıç hızları Maxwell-Boltzmann hız dağılımından uygun bir sıcaklık değeri için bulunur. Atomların daha sonraki konum ve hızları hareket denklemleri yardımıyla hesaplanır. Başlangıç şartlarının kesin olarak belirlenmesi önemli değildir. Çünkü simülasyon başladıktan sonra atomlar başlangıç durumlarında bulunmazlar.

İkinci olarak, sistemin seçilen başlangıç durumu büyük ihtimalle denge durumuna karşılık gelmez. Sistemi dengeye getirmek için denge kurucu bir faza ihtiyaç duyulur. Bu fazda enerji, T mutlak sıcaklığındaki bir sistemin enerji değerine ulaşmaya kadar artırılabilir veya azaltılabilir. Sistem, belirli zaman aralıklarında hareket denklemlerinin çözülmesiyle dengeye ulaşır. Eğer sistem, kinetik ve potansiyel enerjilerin ortalama değerlerine ulaşmış ise denge kurulmuş olur.

İlk iki adımda ortaya çıkan problemler hemen tanımlanabilir. İlk problem sistemin zaman gevşemesi hakkındadır. Temel zaman adımı h , simülasyonun gerçek zamanını belirler. Eğer gevşeme zamanı uzun ise sistemin dengeye ulaşması için birçok adım gereklidir. Bazı sistemler için zaman adımının sayısı bilgisayarların mevcut hızı için

büyük bir engel olabilir. Değişkenlerin uygun bir ölçeklendirme işlemi ile güçlüğüne aşmak bazı durumlarda mümkündür. Sonuç olarak gevşeme zamanı, sistemin yarı-kararlı durumda tutulma ihtimaline dayanır. Uzun süren yarı-kararlı durumlar kinetik ve potansiyel enerjide uygun bir kayma göstermeyebilir.

İkinci problem; göz önüne alınan sistemin faz uzayının küçük bir bölümünde kurulmuş olmasıdır. Bu problem farklı başlangıç problemleri ve farklı zaman süreleriyle çalışan simülasyon programları ile aşılabılır.

Niceliklerin gerçek hesabı simülasyonun üçüncü aşamasında yapılabilir. Son aşamadaki bütün hesaplamalar faz uzayındaki sistem yörüngesi boyunca yapılmıştır (Sutton ve Chen, 1990).

2.1.1. Genişletilmiş Hamiltonyen Metodu

Genişletilmiş sistemin hareket denklemleri, standart hareket denklemlerinin çalışılan topluluktaki iç ve dış değişkenler cinsinden tanımlanmasıdır (Andersen, 1980). Sabit basınç simülasyon metodunun algoritmasında simülasyon kutusunun V hacmine karşılık gelen ekstra serbestlik derecesi sisteme ilave edilir. Bu serbestlik derecesinin kinetik ve potansiyel enerjileri sırasıyla aşağıda verilmiştir.

$$E_{kin} = \frac{1}{2} W \dot{V}^2 \quad (2.2)$$

$$E_{pot} = PV \quad (2.3)$$

Burada W pistonunun kütlesi ve P dışarıdan uygulanan basınçtır. Mekanik denge halinde iç basınç ile dış basınç birbirine eşittir. Sistemin V hacmi ise bu basınçlara karşılık gelen hacimlerin ortalamasıdır ve basınçla bağlantılı değişken olduğu için dalgalanır.

$\vec{r}_i = (V^{1/3}) \vec{r}'_i$ ölçekli koordinat sistemi tanımlanarak genişletilmiş sistemde piston hesaba katılarak ilgilenilen sistemin Newton hareket denklemleri sistemin toplam iç enerjisi korunmaksızın çözülür. Burada korunumlu nicelik entalpidir (H).

$$H=E+PV \quad (2.4)$$

İncelenen sistemde izobarik-izoentalpik toplulukta (HPN) Andersen (1980) ve Parinello-Rahman (1980) sabit basınç metodunu geliştirerek simülasyon hücresinin şeklinin ve büyüklüğünün değişmesini sağlamışlardır. Burada simülasyon hücresinin şeklini ve büyüklüğünü tanımlayan üç çeşit vektörden (h_1, h_2, h_3) oluşan bir dinamik matris $h = (\vec{h}_1, \vec{h}_2, \vec{h}_3)$ tanımlanmıştır. H matrisini metoda yerleştirmekle artık sistemin faz geçişleri ve elastik özelliklerini çalışmak daha kolay olmuştur. Konum vektörleri şu şekilde tanımlanır:

$$\vec{r}_i = h \vec{r}'_i \quad (2.5)$$

Hamiltonyen denklemindeki ek terimler şunlardır:

$$E_{kin} = \frac{W}{2} \sum_i \sum_j Tr \tilde{h} h \quad (2.6)$$

$$E_{pot} = PV \quad (2.7)$$

Burada V hücresinin hacmi:

$$V = |h| = \vec{h}_1 \cdot [\vec{h}_2 \times \vec{h}_3] \quad (2.8)$$

şeklinde hesaplanır.

Nose, serbestlik derecesi s ile tanımlanan ısı banyosunu sisteme ilave ederek sistemin sıcaklığını kontrol eden dinamik metodunu geliştirmiştir (Nose, 1984).

Sistem T sıcaklığındaki ısı banyosuna yerleştirilir. Sistem ile ısı banyosundan oluşan genişletilmiş sisteme parçacık girişine izin verilmezken enerji transferine izin verilir. Sistemin dengesi sağlandığında sıcaklığı T sıcaklığına ulaşır. Sistem ile ısı banyosu termal temasta bulunduğu için sistemin enerjisi dalgalanır. Genişletilmiş sistem yalıtıldığı için toplam enerjisi korunur. Bu genişletilmiş sistem, kanonik topluluğunu (TVN) oluşturur. Isı banyosunun kinetik ve potansiyel enerjileri denklem (2.9) ve (2.10) da tanımlanmıştır.

$$E_{kin} = \frac{1}{2} Q \left(\frac{ds}{dt} \right)^2 = \frac{p_s^2}{2Q} \quad (2.9)$$

$$E_{pot} = g k_B T \ln(s) \quad (2.10)$$

Burada, p_s , s deęişkeninin konjuge momentumu; Q , enerji x (zaman)² boyutunda bir parametre ve s ısı banyosunun serbestlik derecesidir. k_B Boltzmann sabiti, T dışarıdan verilen sıcaklık ve g ise fiziksel sistemin serbestlik derecesi sayısıdır. Bu genişletilmiş sistemin kullandığı koordinat sistemi (2.11) eşitliklerinde belirtilmiştir.

$$\begin{aligned}\vec{r}_i &= \vec{r}'_i \\ \vec{p}_i &= \frac{1}{s} \vec{p}'_i \\ dt &= \frac{1}{s} dt'\end{aligned}\tag{2.11}$$

Hoover (1985) termodinamiksel sürtünme katsayısını $\eta = sp_s / Q$ şeklinde tanımlayarak Nose (1984) tarafından türetilen denklemleri daha basit hale getirmiştir. Hareket denklemleri (2.12) eşitliklerinde tanımlanmıştır.

$$\begin{aligned}\dot{r}_i &= p_i / m_i \\ \dot{p}_i &= F_i - \eta p_i \\ \dot{\eta} &= \frac{\sum_i p_i^2 / m_i - gk_B T}{Q}\end{aligned}\tag{2.12}$$

Sürtünme katsayısı pozitif-negatif değerler olarak geri kazanım mekanizmasını oluşturur. Denklem (2.12)'deki son terim ısı banyosunun hareketini kontrol eder. Bu eşitlik bize toplam kinetik enerji $gk_B T$ 'den büyük olursa η 'nün pozitif olacağını söyler. Bu durumda atomlar ısı banyosunun kinetik enerjisinden daha düşük olana kadar kinetik enerjilerini düşürmek için η sürtünmesi sayesinde yavaşlar. Diğer bir yanda kinetik enerjisi $gk_B T$ den küçükse η negatif olur. Buna karşılık ısı banyosu ısıtılır ve atomlar hızlanır. Denklem (2.12) Nose-Hoover termostat denklemleri olarak da adlandırılır (Raffi-Tabar ve Sutton, 1991).

Simülasyonlarımızda TPN dinamiği için Ray (Ray ve Rahman, 1985) tarafından geliştirilmiş metod Nose (1984)'nin sabit sıcaklık teorisi ile Parinello-Rahman (1980) şekil-biçim değişken formunu birleştiren bir metottur. TPN dinamiği Hamiltonyen denklemi (2.13)'de gösterilmiştir.

$$H(r', p', h, \Pi, s, p_s) = \sum_i \frac{\tilde{p}_i G^{-1} \tilde{p}_i'}{2m_i s^2} + U + \frac{Tr(\tilde{\Pi}\Pi)}{2W} + V_0 P + \frac{p_s^2}{2Q} + (3N+1)k_B T_0 \ln(s) \quad (2.13)$$

Burada (r'_i, p'_i) ölçeklendirilmiş koordinatı ve onun konjuge momentumunu verir. Parçacıkların konumu cinsinden ve momentumu açısından sırasıyla $r_i = h r'_i$, $p_i = \tilde{h}^{-1} p'_i / s$ şeklinde tanımlanır. (h, Π) Parinello-Rahman (1980) tanımından doğan moleküler dinamik hücrenin koordinat ve momentumudur. (s, P_s) ise Nose (1984)'un ölçeklendirilmiş kütle değişkeni ve onun konjuge momentumudur. W ve Q parametreleri sırasıyla h ve s değişkenli dinamik denklemlerindeki kütle parametreleridir. U atomların potansiyel enerjisini, T_0 ise ısı banyosunun sıcaklığını verir. P uygulanan dış basınç, $G = (\tilde{h}h)$ metrik tensör ve V_0 ise referans sisteminin hacmidir. Denklem (2.13)'deki ilk iki terim N tane parçacığın Hamiltonyenini, ikinci iki terim moleküler dinamik hücrenin Hamiltonyenini ve son iki terim ise Nose (1984) sabit sıcaklık teorisinden gelen katkıyı

tanımlar. Eğer Nose (1984) değişkeni $\dot{s} = 0$ ve $s = 1$ değerlerini alırsa TPN dinamiği HPN dinamiğine dönüşür.

2.1.2. Gear Tahmin Et-Düzeltil (Predictor-Corrector) Algoritması

Newton'un hareket denklemi i parçacık için;

$$m_i \ddot{\vec{r}}_i = \vec{F}_i = - \sum_{i \neq j}^N \frac{d\phi(r_{ij})}{dr_i} \hat{r}_{ij} \quad (2.14)$$

olarak verilir. Burada $m_i, \ddot{r}_{ij}, \hat{r}_{ij}$ ve $\phi(r_{ij})$ parçacığın sırasıyla kütlesi, ivmesi, $r_i - r_j$ yer değiştirme vektörünün birim vektörü ve atomlar arası etkileşme enerjisidir. (2.14) denkleminin sayısal olarak çözülmesinde; Euler, Runge-Kutta, Verlet (1967) ve Gear (1971) gibi çeşitli integral algoritmaları kullanılır. Bunlardan en yaygın kullanılanı Gear Tahmin Et-Düzeltil (Gear Predictor-Corrector) algoritmasıdır.

Bu algoritma tahmin etme, elde etme ve düzeltme adımlarından oluşur. Atom hareketlerinin izlediği yol zamanın sürekli bir fonksiyonudur. Konum ve konumun $(t + \Delta t)$ zamanındaki türevlerinin Taylor serisi beşinci dereceye kadar açılmıştır.

$$r_i^P(t + \Delta t) = r_i(t) + \dot{r}_i(t)\Delta t + \frac{\ddot{r}_i(t)}{2!}(\Delta t)^2 + \frac{r_i^{(iii)}(t)}{3!}(\Delta t)^3 + \frac{r_i^{(iv)}(t)}{4!}(\Delta t)^4 + \frac{r_i^{(v)}(t)}{5!}(\Delta t)^5 ,$$

$$\dot{r}_i^P(t + \Delta t) = \dot{r}_i(t) + \ddot{r}_i(t)\Delta t + \frac{r_i^{(iii)}(t)}{2!}(\Delta t)^2 + \frac{r_i^{(iv)}(t)}{3!}(\Delta t)^3 + \frac{r_i^{(v)}(t)}{4!}(\Delta t)^4 ,$$

$$\ddot{r}_i^P(t + \Delta t) = \ddot{r}_i(t) + r_i^{(iii)}(t)\Delta t + \frac{r_i^{(iv)}(t)}{2!}(\Delta t)^2 + \frac{r_i^{(v)}(t)}{3!}(\Delta t)^3 \quad (2.15)$$

$$r_i^{(iii)P}(t + \Delta t) = r_i^{(iii)}(t) + r_i^{(iv)}(t)\Delta t + \frac{r_i^{(v)}(t)}{2!}(\Delta t)^2 ,$$

$$r_i^{(iv)P}(t + \Delta t) = r_i^{(iv)}(t) + r_i^{(v)}(t)\Delta t$$

$$r_i^{(v)P}(t + \Delta t) = r_i^{(v)}(t) .$$

$(t + \Delta t)$ zamanındaki sistemde \vec{F}_i kuvveti yeni tahmin edilen konumdaki potansiyelin gradiyenti alınarak elde edilir. Böylece sistemin $\ddot{r}_i^P(t + \Delta t)$ ivmesi de hesaplanır. Bu ivme, düzeltici faktör olarak kullanılarak tahmin edilen ivmedeki $\Delta\ddot{r}_i(t + \Delta t)$ hata bulunur.

$$\Delta\ddot{r}_i(t + \Delta t) = \Delta\ddot{r}_i^C(t + \Delta t) - \Delta\ddot{r}_i^P(t + \Delta t) \quad (2.16)$$

Bu hata terimi tahmin edilen değerlere eklenerek düzeltilmiş değerler elde edilir.

$$r_i^C(t + \Delta t) = r_i^P(t + \Delta t) + c_0\Delta\ddot{r}_i(t + \Delta t)$$

$$\dot{r}_i^C(t + \Delta t) = \dot{r}_i^P(t + \Delta t) + c_1\Delta\ddot{r}_i(t + \Delta t)$$

$$\ddot{r}_i^C(t + \Delta t) = \ddot{r}_i^P(t + \Delta t) + c_2 \Delta \ddot{r}_i(t + \Delta t) \quad (2.17)$$

$$r_i^{(iii)C}(t + \Delta t) = r_i^{(iii)P}(t + \Delta t) + c_3 \Delta \ddot{r}_i(t + \Delta t)$$

$$r_i^{(iv)C}(t + \Delta t) = r_i^{(iv)P}(t + \Delta t) + c_4 \Delta \ddot{r}_i(t + \Delta t)$$

$$r_i^{(v)C}(t + \Delta t) = r_i^{(v)P}(t + \Delta t) + c_5 \Delta \ddot{r}_i(t + \Delta t).$$

Burada c_α ($\alpha = 0,1,2,\dots,5$) Gear (1971) katsayılarıdır.

2.2. Etkileşme Potansiyeli

MD simülasyonlarının yapılabilmesi için gerekli olan ilk adım atomlar arası etkileşim potansiyelini tanımlamaktır. Sistemin davranışının etkileşim potansiyeli cinsinden iyi temsil edilmesi MD simülasyonlarından elde edilen verilerin deneysel sonuçlarla uyumluluk içinde olmasını sağlar. MD simülasyonlarının özelliği gereği yüzlerce hatta binlerce atomla hesaplamalar yapıldığı için her bir atomun etkileşimi bir diğer atomla olan uzaklığına bağlıdır. Böylece sistemin potansiyel enerjisi ikili parçacık etkileşimlerinin toplamının fonksiyonu şeklinde tanımlanır. Buna göre en genel anlamda ikili etkileşimleri tanımlayan potansiyel enerji (U);

$$U = U(r_{12}) + U(r_{13}) + U(r_{14}) + \dots + U(r_{23}) + \dots = \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=i+1}^N U(r_{ij}) \quad (2.18)$$

şeklinde ifade edilir.

Burada r_{ij} i. ve j. atomlar arası mesafedir ve N toplam atom sayısıdır. Bu ikili etkileşimlerin en önemli özelliği küçük r mesafeleri için güçlü itici kuvvet ve büyük r mesafesi için zayıf çekici kuvvetin (Van der Waals-London) olmasıdır. Bu tanımlamanın en önemli ve yaygın kullanımı olan potansiyel örneği aşağıda verilen parçacıklar arası Lennard-Jones potansiyelidir (Jones, 1924).

$$U(r) = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] \quad (2.19)$$

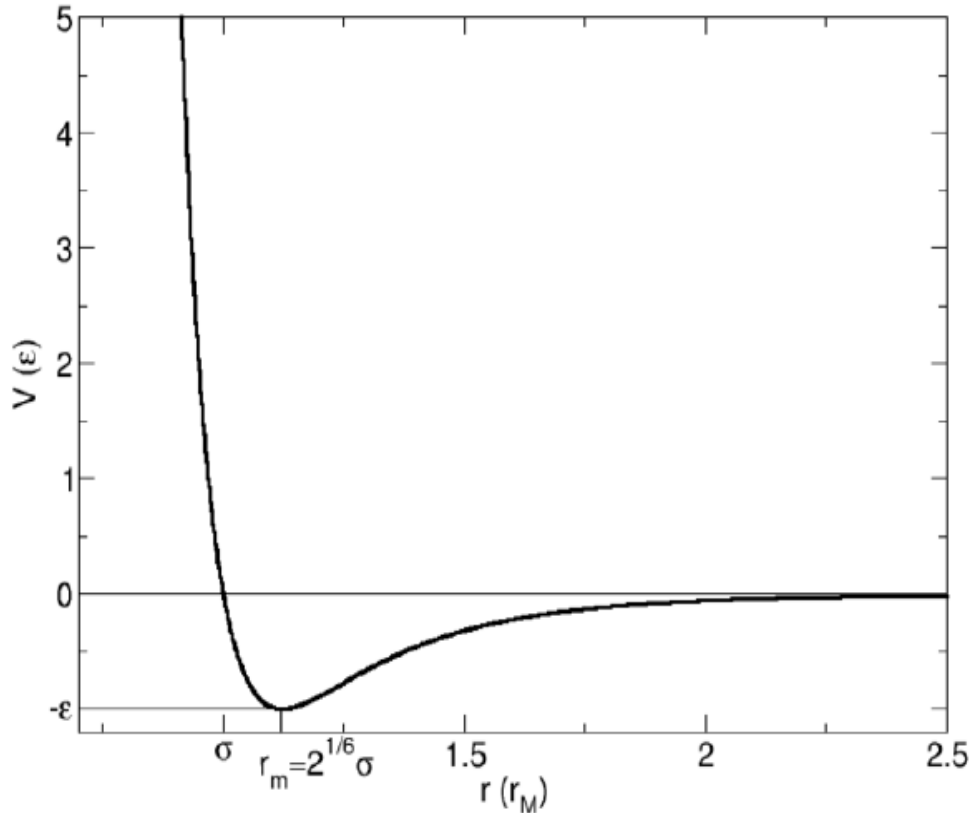
Bu ifade şu şekilde oluşturulmuştur: katının kararlı bir yapıya sahip olmasını sağlayan atomlar arası kuvvetler iki tiptir. Biri atomların birbirinden uzaklaşmasını önleyen çekici kuvvet diğeri ise atomların birbirine karışmasını önleyen itici kuvvettir.

Çekici etkileşmeyi gerçekleştiren Van der Waals bağlanma kohesif enerjiye sahip çok zayıf bir bağıdır. Kohesif enerji serbest atomların toplam kristal (veya katı) enerjisinin farkıdır. Yüksüz iki atom ele alalım; (+) yüklü çekirdek etrafında sürekli hareket halinde bulunan elektron bulutunun anlık dalgalanmaları normalde çakışık olan küresel simetrik (-) ve (+) yük dağılım merkezlerinin küçük miktarda kaymasına ve anlık dipollerin oluşmasına yol açar. Dipollerin birbirini çekmesiyle oluşan dipol-dipol etkileşmeleri (Van der Waals) nedeniyle bir çekim doğar. Bu çekme kuvveti toplam etkileşme potansiyel ifadesinde r^{-6} terimi ile belirtilmiştir. Çekici etkileşme sebebiyle iki atom birbirine doğru yaklaşırken belli bir mesafeden sonra atomların elektron dağılımları üst üste taşmaya başlar. Üst üste taşma sistemin elektrostatik enerjisini değiştirir. Atomların birbirine yeteri kadar yaklaşmaları halinde elektron dağılımlarının üst üste gelmesi yüzünden doğan enerji Pauli dışarlama ilkesinden dolayı iticidir. Pauli dışarlama ilkesi, iki atomunun kuantum sayılarının hepsinin aynı olamayacağını söyler. Toplam etkileşme potansiyeli ifadesindeki r^{-12} terimi bu ikili etkileşmeyi belirler

(Yaman, 2007). Denklem (2.19)'da yer alan ε ve σ ifadeleri potansiyel parametreleridir (Erkoç, 1997). Bu, Şekil 2.2.'de gösterilmiştir.

Lennard-Jones etkileşim potansiyeli iki atom arasındaki itici ve çekici etkileşimleri tanımlaması açısından etkileşim potansiyelleri arasında temel bir potansiyel olarak yerini almaktadır. Ancak ikili etkileşim potansiyeli bir sistemin tanımlanmasında yeterli değildir. Özellikle metalik bağ ile bağlı sistemlerde parçacıklar elektronlarını paylaştığından tüm parçacıkların etkisi sisteme dahil edilmelidir.

Bu etkilerin dahil edilmemesi simülasyonu gerçekleştirilen sistemin erime noktası analizlerinin deneysel çalışmalarla karşılaştırılmasında %20 oranında farklılığa neden olmaktadır (Daw ve Baskes, 1984; Alavi, 1994; Finnis, 2004; Yang ve diğ., 2009).

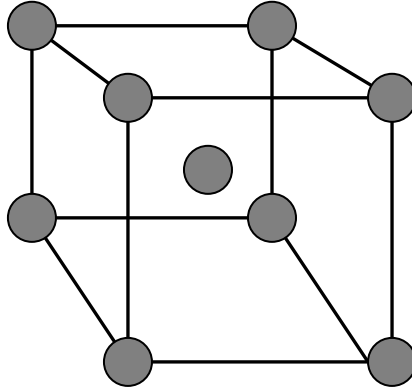


Şekil 2.2. Lennard-Jones potansiyeli (Jones, 1924'den).

2.2.1. Çok Cisim Etkileşmeli Finnis-Sinclair (FC) Potansiyeli

Lennard-Jones potansiyeli ikili etkileşim tanımlarında önemli bir yere sahiptir. Ancak son yıllarda literatürdeki çalışmalarda parçacıklar arasındaki etkileşimlerin sadece ikili etkileşimlerle sınırlı olmadığı, elektron ve kuantum etkilerinin de atomal sistemlerin davranışlarında etken olduğu belirtilmektedir (Finnis ve Sinclair, 1984; Sutton ve Chen, 1990).

Özellikle metalik bağlarla bağlanmış çok parçacıklı alaşım sistemlerinde atomların elektronlarını paylaşması sebebiyle uzun menzilli etkileşimlerin temsil edilebilmesi gerekir. Eksikliği gidermek amacıyla bcc örgü yapısına sahip (Şekil 2.3.) geçiş metallerinin davranışının anlaşılması için Finnis-Sinclair (FS) etkileşim potansiyeli tanımlanmıştır (Finnis ve Sinclair, 1984).



Şekil 2.3. Birim hücredeki cisim merkezli kübik yapı (bcc).

Finnis-Sinclair potansiyelinde N atomlu sistemin toplam enerjisi,

$$U_{top} = \frac{1}{2} \sum_i^N \sum_{j \neq i}^N V(r_{ij}) + \sum_i^N f(\rho_i) \quad (2.20)$$

$$f(\rho_i) = \sqrt{\rho_i} \quad (2.21)$$

Burada $V(r_{ij})$ fonksiyonu i ve j atomları arasındaki elektrostatik kısa menzilli itici terimin davranışını temsil etmektedir. $f(\rho_i)$ fonksiyonu da genelleştirilmiş koordinatlar (ρ) cinsinden atomların enerjisini belirtmektedir. ρ komşu atomların katkılarının toplamı şeklinde aşağıdaki gibi tanımlanır.

$$\rho_i = \sum_i^N \phi_i(r_{ij}) \quad (2.22)$$

Burada $\phi_i(r_{ij})$ kısa mesafeli etkileşim fonksiyonudur. Denklem (2.20) ve (2.22)'de bu iki potansiyel aynı analitik şekle sahip olsalar bile fiziksel yorumları farklıdır. Bu sebeple $V(r)$, $\phi(r)$ ve $\rho(r)$ fonksiyonları farklı sonuçlar vermektedir. Bu sonuçlar FS potansiyelinde kısa menzilli itici etkileşimlerde uygun sonuçlar vermektedir. Fakat uzun menzilli çekici etkileşimleri yeteri kadar temsil edememektedir. Uzun menzilli çekici etkileşimlerin etkisi göz önüne alınarak fcc kübik yapıdaki metal alaşımları için Sutton-Chen (SC) etkileşim potansiyeli geliştirilmiştir.

2.2.2. Sutton Chen (SC) Potansiyeli

Atomlar arası etkileşimleri tanımlamak için yüzey merkezli geçiş metalleri için yaygın olarak kullanılan SC potansiyeli uzun erişimli FS potansiyelinin geliştirilmiş halidir (Sutton ve Chen, 1990). Bu potansiyel ifadesinde metalin toplam enerjisi çift etkileşimleri tanımlayan itici terim ve çok cisimli etkileşimleri tanımlayan yoğunluk

fonksiyonunu veren çekici bir terimle ifade edilmektedir. Çekici terim yüzey gevşemesini elde etmek amacıyla uzun erişimli etkileşimlerin katkısını içermektedir. En genel anlamda fcc yapıdaki saf metaller ve alaşımları için SC potansiyeli;

$$U_{top} = \sum_i U_i = \left[\sum_{j \neq i} \frac{1}{2} \epsilon_{ij} V(r_{ij}) - c_i \epsilon_{ii} (\rho_i)^{1/2} \right] \quad (2.23)$$

şeklinde tanımlanır. Burada $V(r_{ij})$ ikili etkileşimleri tanımlayan terimdir.

$$V(r_{ij}) = \left(\frac{a}{r_{ij}} \right)^n \quad (2.24)$$

şeklinde verilir. ρ_i ise i atomunun kısa menzilde diğer çoklu cisimlerle etkileşmesini veren bölgesel enerji yoğunluğudur. Bu enerji yoğunluğunun karekökü şeklindeki fonksiyonu SC potansiyelindeki çekici terimi tanımlamaktadır.

$$\rho_i = \sum_{j \neq i} \phi(r_{ij}) = \sum_{j \neq i} \left(\frac{a}{r_{ij}} \right)^m \quad (2.25)$$

Denklem (2.23), (2.24) ve (2.25)'deki r_{ij} , i. ve j. atom arasındaki mesafeyi, a örgü sabitini, c pozitif boyutsuz parametreyi ve ϵ enerji boyutundaki bir parametreyi tanımlamaktadır. m ve n pozitif tam sayılar olup $n > m$ olmalıdır.

SC potansiyeli için tanımlanan potansiyel parametreleri, deneysel örgü parametresi, bulk modülü ve kohesif enerji gibi deneysel katı özelliklerine fit edilerek elde edilmiş parametrelerdir. Son zamanlarda Çağın ve arkadaşları tarafından sıfır enerjili veren kuantum düzeltmeleri SC potansiyel parametrelerine eklenerek; diğer bir deyişle deneysel fonon frekanslarına, boşluk oluşturma enerjisine, yüzey enerjisine ve sıfır nokta enerjisine fit edilerek q-SC potansiyel parametreleri elde edilmiştir. Potansiyel parametreleri kuantumsal etkileri içine alarak sistemin davranışını daha iyi temsil edebilmektedir. Çizelge 2.4.'de geçiş metalleri için kullanılan q-SC potansiyel parametreleri verilmiştir (Çağın ve diğ., 1999a).

Çizelge 2.1. Geçiş metallerinin q-SC parametreleri (Çağın ve diğ., 1999a'den).

Metal	n	m	ϵ (eV)	c	a (Å)
Al	7	6	3,3307E-2	16,460	4.0490
Ni	10	5	7,3767E-3	84,745	3,5157
Cu	10	5	5,7921E-3	84,843	3,6030
Ag	11	6	3,9450E-3	96,524	4,0691
Ir	13	6	3,7674E-3	224,815	3,8344
Pt	11	7	9,7894E-3	71,336	3,9163

Alaşımelerde atomlar arasındaki etkileşimi tanımlamak için Raffi-Tabar ve Sutton tarafından fcc kristal örgü yapısına sahip ikili atom alaşım modeli oluşturulmuş ve SC potansiyel parametreleri için geliştirilmiştir (Raffi-Tabar ve Sutton, 1991). Bu yaklaşımda atomlar, sisteme bütünüyle rastgele yerleşirler. Enerji ve alaşımın

parametreleri her iki bölgedeki metalin potansiyel parametrelerinin aritmetik ve geometrik ortalamaları alınarak elde edilmiştir (Raffi-Tabar, 2000).

$$V(r_{ij}) = \sqrt{V(r_{ii})V(r_{jj})} \quad (2.26)$$

$$\phi(r_{ij}) = \sqrt{\phi(r_{ii})\phi(r_{jj})} \quad (2.27)$$

$$\epsilon_{ij} = \sqrt{\epsilon_i \epsilon_j} \quad (2.28)$$

$$m_{ij} = \frac{m_i + m_j}{2} \quad (2.29)$$

$$n_{ij} = \frac{n_i + n_j}{2} \quad (2.30)$$

$$a_{ij} = \frac{a_i + a_j}{2} \quad (2.31)$$

q-SC etkileşim potansiyeli fcc yapılu geçiş metalleri ve alaşımlarının fiziksel özelliklerini iyi tanımlamaktadır. Bu sebeple son yıllarda bazı bulk ve nanoparçacık metaller ve alaşımlarının katı, sıvı ve camsı özellikleri SC ve q-SC potansiyelleri kullanılarak çalışılmış özellikle q-SC potansiyel parametrelerinin kullanıldığı yüksek sıcaklıklarda deney ile daha uyumlu sonuçlar verdiği görülmüştür (Allen ve Tildesley,

1987; Haile, 1992; Frenkel ve Smitt, 1996; Dereli ve diğ., 1997; Qi ve diğ., 2001b; Kart, 2004a,b; Molinero ve diğ., 2004; Özdemir Kart, 2004a,b,c; Özdemir Kart ve diğ., 2005; Özdemir Kart ve diğ., 2006).

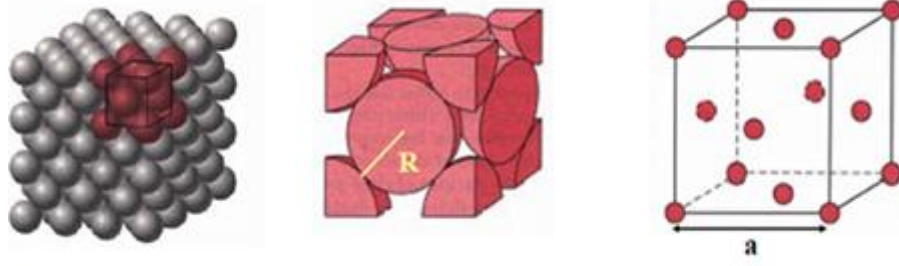
2.3. Hesaplama Yöntemleri

Bu tez çalışmasında SIMULATOR moleküler dinamik simülasyon programı kullanılmıştır. Program girdileri alaşım metallerinin hücre içindeki atom sayıları, yoğunlukları ve aralarındaki etkileşim potansiyeli q-SC'dir.

Kullanılan hesaplama programının algoritması Andersen (1980), Parinello-Rahman (1980), Nose (1984), Hoover (1985), ve Ray-Rahman (1985)'in çalışmalarından oluşan genişletilmiş Hamiltonyen formülizasyonuna dayalıdır. Çağın ve arkadaşları tarafından bazı kuantumsal düzeltmeler eklenerek SC potansiyeli tekrar parametrize edilmiştir. Bu çalışmada yeni oluşturulan q-SC potansiyeli kullanılmıştır. Alaşım potansiyel parametreleri için Raffi-Tabar ve ark., ile Sutton ve ark., (Sutton ve Chen, 1990; Raffi-Tabar ve Sutton, 1991) tarafından ikili fcc metal alaşımları için genelleştirilen model seçilmiştir. Potansiyel parametreleri, atom sayısı, sistemin yoğunluğu, sıcaklığı, integrasyon zaman aralığı, Parinello-Rahman (1980) piston ve Nose-Hoover (Nose, 1984; Hoover, 1985) termostat kütle parametreleri programın başlangıç şartlarını oluşturmaktadır. Fcc kübik örgüsünün yapısı Şekil 2.4. (a)'da ve onların L1₂ fcc düzenli alaşım yapısı Şekil 2.4. (b) ve Şekil 2.4. (c)'de gösterilmiştir. Bu atomlar ilk olarak periyodik sınır koşullarını sağlayan kübik simülasyon kutusuna yerleştirilir. Atomların ilk hızları da Maxwell-Boltzmann hız dağılımını sağlayacak şekilde rastgele seçilir.

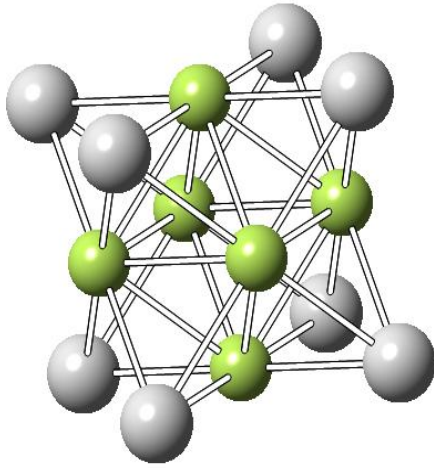
Bu çalışmada Newton Hareket Denklemi'ni $\Delta t = 0,002$ ps zaman aralıkları ile çözen beşinci derece Gear tahmin et-düzeltilen (Gear predictor-corrector) algoritması kullanılmıştır. Parinello-Rahman (1980) piston kütle ve Nose-Hoover (Nose, 1984; Hoover, 1985) termostat kütle parametreleri 400 ve 100 olarak seçilmiştir. Atomlar arası etkileşme uzaklığı (cut-off) iki örgü parametresi olarak alınmıştır. Simülasyon üç temel doğrultu boyunca periyodik sınır şartlarını sağlayan (8x8x8) kübik birim hücre ve N=2048 atom içeren sistemle gerçekleştirilmiştir. 2048 tane atom $N = 4I^3$ denklemini

sağlayacak şekilde MD simülasyon kübik örgüye yerleştirilmiştir. Burada N atom sayısını, I bir boyuttaki birim hücre sayısını vermektedir.

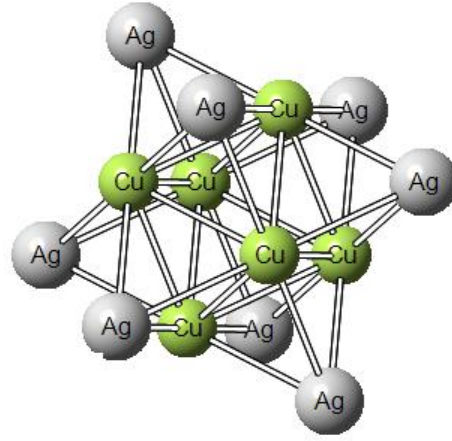


Şekil 2.4.(a) fcc yapısı.

Cu saf metali ile Cu bazlı ikili alaşım atomları sırasıyla düzenli A_xB_{4-x} ($x=0, 1, 2, 3, 4$); düzensiz A_xB_{1-x} ($x = 0, 0,25, 0,75, 1$) konsantrasyonlarında birbirini takip ederek gelen iki MD simülasyon modeli ile incelenmiştir. Sistem 0,1 K'den hedef sıcaklığa 100K aralıklarla HPN (sabit entalpi, sabit sıcaklık, sabit molekül sayısı) istatistik kümesinde ısıtılmıştır. Her malzeme 2000 veya 5000 MD adımında dengeye getirilmiştir. Sistemin hacmini, yoğunluğunu, enerjisini ve bazı termodinamiksel özelliklerini hesaplamak ve yapısını çift dağılım fonksiyonu cinsinden incelemek için 30000 veya 50000 adımlık TPN (sabit sıcaklık, sabit basınç, sabit molekül sayısı) istatistik kümesinde MD simülasyonları gerçekleştirilmiştir.



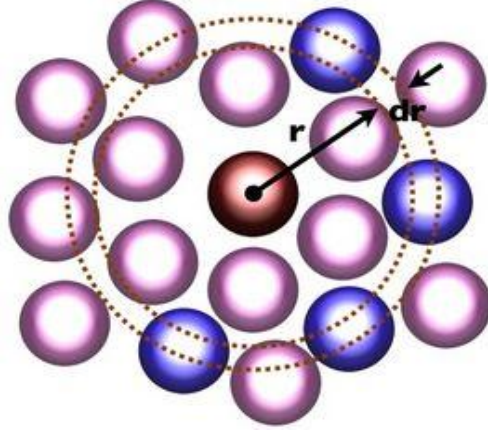
Şekil 2.4.(b). $L1_2$ düzenli yapısı.



Şekil 2.4.(c). $CuAg_3$ alaşımı için $L1_2$ düzenli yapısı.

2.3.1. Çift Dağılım Fonksiyonu

Çift dağılım fonksiyonu $g(r)$ (Allen ve Tildesley, 1987; Haile, 1992; Frenkel ve Smitt, 1996) yapısal ve termodinamiksel özelliklerin statik olarak tanımlanmasını ve karakterize edilmesini sağlayan bir fiziksel niceliktir. Bu büyüklük Şekil 2.5.'de görüldüğü gibi r uzaklığında dr kalınlığında oluşturulan kabuklardaki atomların sayısının bulunmasıyla elde edilir. Buna göre çift dağılım fonksiyonu, merkez seçilen bir atomun etrafında belirlenen mesafelerde atomların bulunabilme ihtimalini incelememize yardımcı olan yapısal analiz çeşididir. Çift dağılım fonksiyonu $g(r)$ ' nun r mesafesine bağlı olarak davranışı irdelendiğinde ilk tepe noktası altında kalan alan birinci yakın komşulukta bulunan atomların (1. koordinasyon) sayısını verir.



Şekil 2.5. Merkezi atomdan r kadar mesafedeki dr kalınlığındaki kabuğun görünümü.

Çift dağılım fonksiyonu $g(r)$ aşağıdaki gibi verilir (Maradudin ve diğ., 1971; Bruesch, 1982; Kart ve diğ., 2004c; Hwang ve Lee, 2005).

$$g(r) = \frac{V}{N^2} \left\langle \sum_i \sum_{i \neq j} \delta(r - r_{ij}) \right\rangle \quad (2.32)$$

Burada N , seçilen kabuk kısmındaki toplam atom sayısı; V , seçilen dr kalınlığındaki kabuğun hacmi ve r_{ij} , kabuğun içerisindeki atomların seçilen merkez atoma olan uzaklığıdır. Genel olarak $g(r)$ ifadesi parametrelere bağlı olarak şu hale gelir (Haile, 1992).

$$g(r) = \frac{V}{N} \frac{n(r)}{4\pi r^2 \Delta r} \quad (2.33)$$

Burada V , sistemin hacmi; $n(r)$, dr kalınlığındaki parçacıkların koordinasyon sayısı ve N toplam atom sayısıdır.

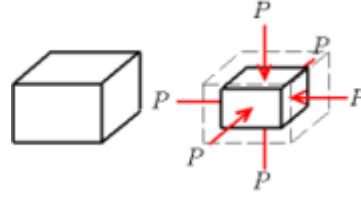
2.3.2. Elastik Sabitler

Elastik sabit, uygulanan zora karşı malzemenin gösterdiği direnç olarak bilinmektedir. Elastik sabitler katının mekanik ve dinamik özellikleri hakkında önemli bilgiler sağlar. Özellikle malzemenin kararlılığı ve sertliği hakkında bilgi verir. Katının değişik sıcaklıklardaki elastik sabitlerinin teorik ve deneysel değerlerinin karşılaştırılması model potansiyelin güvenilirliğinin testi için önemlidir.

Simülasyonlarda sıfır gerilme ile gerçekleştirilen TPN dinamiği ile birim hücrenin referans boyutunu ve şeklini elde etmek için sistemin sıfır burulma durumu h_0 belirlenir. Bu referans durum aşağıdaki formül ile belirtilen elastik sabitleri hesaplayabilmek için EVN (sabit enerji, sabit hacim, sabit molekül sayısı) aşamalarında kullanılır.

$$C_{ijkl} = \frac{V_0}{k_B T} \left(\langle P_{ij} P_{kl} \rangle - \langle P_{ij} \rangle \langle P_{kl} \rangle \right) + \frac{2Nk_B T}{V_0} \left(\delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk} \right) + \langle X_{ijkl} \rangle \quad (2.34)$$

Burada $V_0 = \det h_0$, sistem için referans hacimdir. İlk terim mikroskobik zorlanma tensörünün dalgalanmasından gelen katkıyı temsil eder (P_{ij}). İkinci terim kinetik enerji katkısını belirtir. Üçüncü terim (X_{ijkl}) Born terimini temsil eder (Çağın ve diğ., 1998; Çağın ve diğ., 1999c).



Şekil 2.6. Bulk modülü.

Bulk Modülü (B) malzemenin hidrostatik basınç altında sıkıştırılması halinde hacminde oluşacak değişime karşı gösterdiği direnci tanımlayan bir özelliğidir (Şekil 2.6.). Bu yüzden hem teorik hem de deneysel açıdan özellikle kübik kristallerin sertliğini temsil eden önemli malzeme özelliğidir. c_{11} ve c_{12} elastik sabitleri yardımı ile bulk modülü denklem (2.36) eşitliğinden hesaplanmıştır (Çağın ve diğ., 1999a,b).

$$B = -V \left(\frac{\partial P}{\partial V} \right) \quad (2.35)$$

$$B = \left(\frac{c_{11} + 2c_{12}}{3} \right) \quad (2.36)$$

2.3.3. Fonon Dağılım İlişkisi

Atomların denge pozisyonlarının küçük titreşimleri göz önünde bulundurulduğunda toplam potansiyel enerji (U_{top}) atomik yer değiştirme terimleriyle genişletilebilir.

Harmonik yaklaşımda kristalin toplam potansiyel enerjisi;

$$U = \frac{1}{2} \sum_{\lambda l} \sum_{\nu l'} \frac{\partial^2 U}{\partial u_{\alpha, \lambda l} \partial u_{\beta, \nu l'}} u_{\alpha, \lambda l} u_{\beta, \nu l'} \quad (2.37)$$

şeklinde yazılabilir (Maradudin ve diğ., 1971; Bruesch, 1982).

Burada $u_{\alpha, \lambda l}$, λ . atomun l . birim hücredeki denge pozisyonundan α yönündeki yer deđiştirmesidir. O halde kuvvet sabitleri aşığıdaki gibi ifade edilir.

$$\Phi_{\alpha\beta} \begin{pmatrix} l & l' \\ \lambda & \nu \end{pmatrix} = - \left[\frac{\partial^2 U}{\partial u_{\alpha, \lambda l} \partial u_{\beta, \nu l'}} \right]_0 \quad (2.38)$$

Hesaplanan U , toplam enerjinin terimlerinden doğrudan bulunabilir. Bu basitçe β yönünde birim mesafedeki l' birim hücreye yerleştiren ν atomun, α yönünde l birim hücredeki λ . atoma uyguladıđı kuvvet anlamına gelir. Denklem (2.38)'deki alt indis 0, denge pozisyonlarındaki türevler olarak deđerlendirilir.

Fononun titreşim frekansları sürekli denklemin çözümleri ile elde edilebilir.

$$\det |D_{\alpha\beta, \lambda\nu}(q) - \omega^2 \delta_{\alpha\beta} \delta_{\lambda\nu}| = 0 \quad (2.39)$$

Burada ω titreşimin açısal frekansı, $\delta_{\alpha\beta}$ Kronecker sembol ve $D_{\alpha\beta,\lambda\nu}$ elementin dinamik matrisidir (Dove, 1993). Bu matris denklem (2.40) eşitliğinde gösterilmektedir.

$$D_{\alpha\beta,\lambda\nu}(q) = \frac{1}{(m_\lambda m_\nu)^{1/2}} \sum_{l'} \Phi_{\alpha\beta} \begin{pmatrix} l & l' \\ \lambda & \nu \end{pmatrix} \exp(i\vec{q} \cdot [\vec{r}(\nu, l') - \vec{r}(\lambda, l)]) \quad (2.40)$$

Eşitlikte m_λ , λ atomun kütlesini, \vec{q} kristal titreşiminin dalga vektörünü; l referans alınan birim hücreyi, l' ise komşu birim hücre ile ilgili bir niceliği temsil eder.

i atomunun çoklu kuvveti $\alpha (= x, y, z)$ yönü boyunca potansiyelin denklem (2.23) gradyeni alınarak hesaplanabilir (Dereli ve diğ., 1997a; Çağın ve diğ., 1999b).

$$F_{i\alpha} = - \in \left[\sum_{i \neq j} V'(r_{ij}) \frac{r_{ij\alpha}}{r_{ij}} - \frac{c}{2} \frac{\sum_{i \neq j} \phi'(r_{ij}) \frac{r_{ij\alpha}}{r_{ij}}}{\rho_i} + \sum_{i \neq j} \frac{c}{2\rho_j} \phi'(r_{ij}) \frac{r_{ij\alpha}}{r_{ij}} \right] \quad (2.41)$$

Burada $\frac{\partial}{\partial r_{ij}}$ anlamına gelir. Bundan dolayı kuvvet sabiti, çoklu kuvvetin birinci türevi alınarak hesaplanabilir.

$$\begin{aligned}
\phi_{\alpha\beta(i,j)} = & - \in \left[\left(V_{ij}'' - V_{ij}' \right) \Delta r_{ij\alpha} \Delta r_{ij\beta} + V_{ij}' \frac{\delta_{\alpha\beta}}{r_{ij}^2} \right] \\
& - \frac{\in c}{4\rho_i^{3/2}} \left(\sum_{k \neq i} \phi_{ik}' \Delta r_{ik\alpha} \right) \phi_{ij}' \Delta r_{ij\beta} \\
& + \frac{\in c}{2\rho_i^{1/2}} \left[\left(\phi_{ij}'' - \phi_{ij}' \right) \Delta r_{ij\alpha} \Delta r_{ij\beta} + \phi_{ij}' \frac{\delta_{\alpha\beta}}{r_{ij}^2} \right] \\
& + \frac{\in c}{4\rho_j^{3/2}} \phi_{ij}' \Delta r_{ij\alpha} \left(\sum_{k \neq j} \phi_{jk}' \Delta r_{jk\beta} \right) \\
& + \frac{\in c}{2\rho_j^{1/2}} \left[\left(\phi_{ij}'' - \phi_{ij}' \right) \Delta r_{ij\alpha} \Delta r_{ij\beta} + \phi_{ij}' \frac{\delta_{\alpha\beta}}{r_{ij}^2} \right] \\
& + \frac{1}{4} \sum_{k \neq i,j} \left[\frac{\in c}{\rho_k^{3/2}} \left(\phi_{ik}' \Delta r_{ik\alpha} \phi_{jk}' \Delta r_{jk\beta} \right) \right]
\end{aligned} \tag{2.42}$$

Burada ' , $r_{ij} \frac{\partial}{\partial r_{ij}}$ ifadesini; " ise $r_{ij}^2 \frac{\partial^2}{\partial r_{ij}^2}$ ifadesini belirtir. λ atom için l kafes

hücresinin (λ, l) dizini i , ν atom için l' kafes hücresinin (ν, l') dizini j 'dir.

Δr_{ij} şu şekilde yazılır.

$$\Delta r_{ij\alpha} = \frac{r_{\alpha i} - r_{\alpha j}}{r_{ij}^2} \tag{2.43}$$

burada r_{ij} , i atomun pozisyonunun α bileşenidir.

Kuvvet sabitleri kısmi diferansiyelin komütasyonundan ve Newton'un üçüncü yasasından kaynaklanan, birbirini izleyen simetri koşullarını sağlamalıdır.

$$\phi_{\alpha\beta}(i, j) = \phi_{\beta\alpha}(j, i) \quad (2.44)$$

$$\phi_{\alpha\beta}(i, j) = -\sum_{j \neq i} \phi_{\alpha\beta}(i, j) \quad (2.45)$$

Bu birbirini takip eden iki kuraldan;

$$\sum_{j \neq i} \phi_{\alpha\beta}(i, j) = \sum_{j \neq i} \phi_{\beta\alpha}(i, j) \quad (2.46)$$

elde edilir.

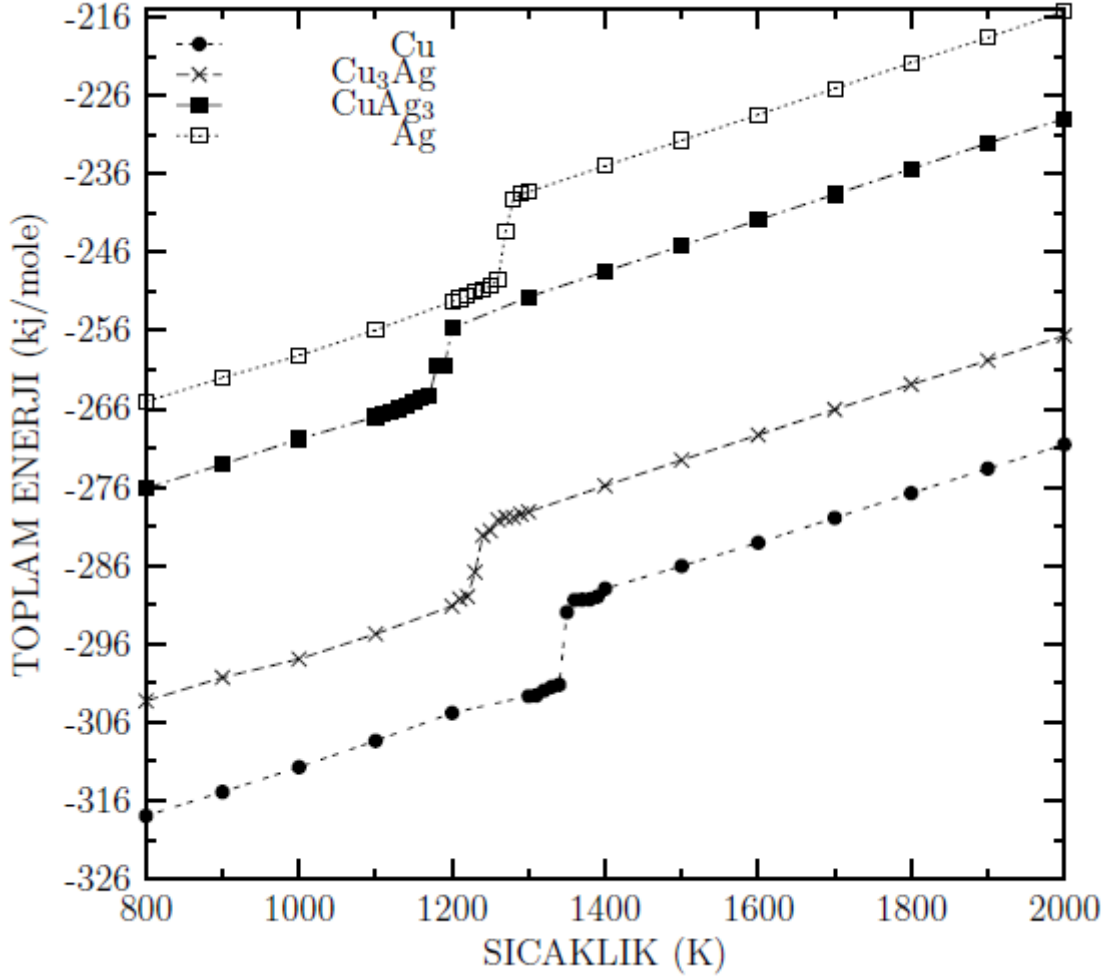
3. ARAŐTIRMA BULGULARI

3.1. Cu, Ag Saf Metalleri İle İkili Dzenli Alařımları

Cu, Ag saf metalleri ile L_{12} dzenli yapısındaki [Őekil 2.4.(b), Őekil 2.4.(c)] Cu_3Ag ve $CuAg_3$ alařımları 0.1K'den hedef sıcaklıęa (2000K) 100K aralıklarla ısıtılmıřtır. Bu sűreç HPN ve TPN istatistik kűmelerinde gerekleřtirilmiřtir. HPN istatistik kűmesinde ısıtma sűrecinde 100 MD adımı, dengelemede 2000 MD adımı kullanılmıřtır. Bu kűmedeki hesaplamaların sonucunda enerjide dalgalanmalar olduęu iin denge kurucu faza ihtiya duyulmuřtur. Bu yűzden TPN istatistik kűmesinde sistem 30.000 adımda dengeye getirilmiřtir.

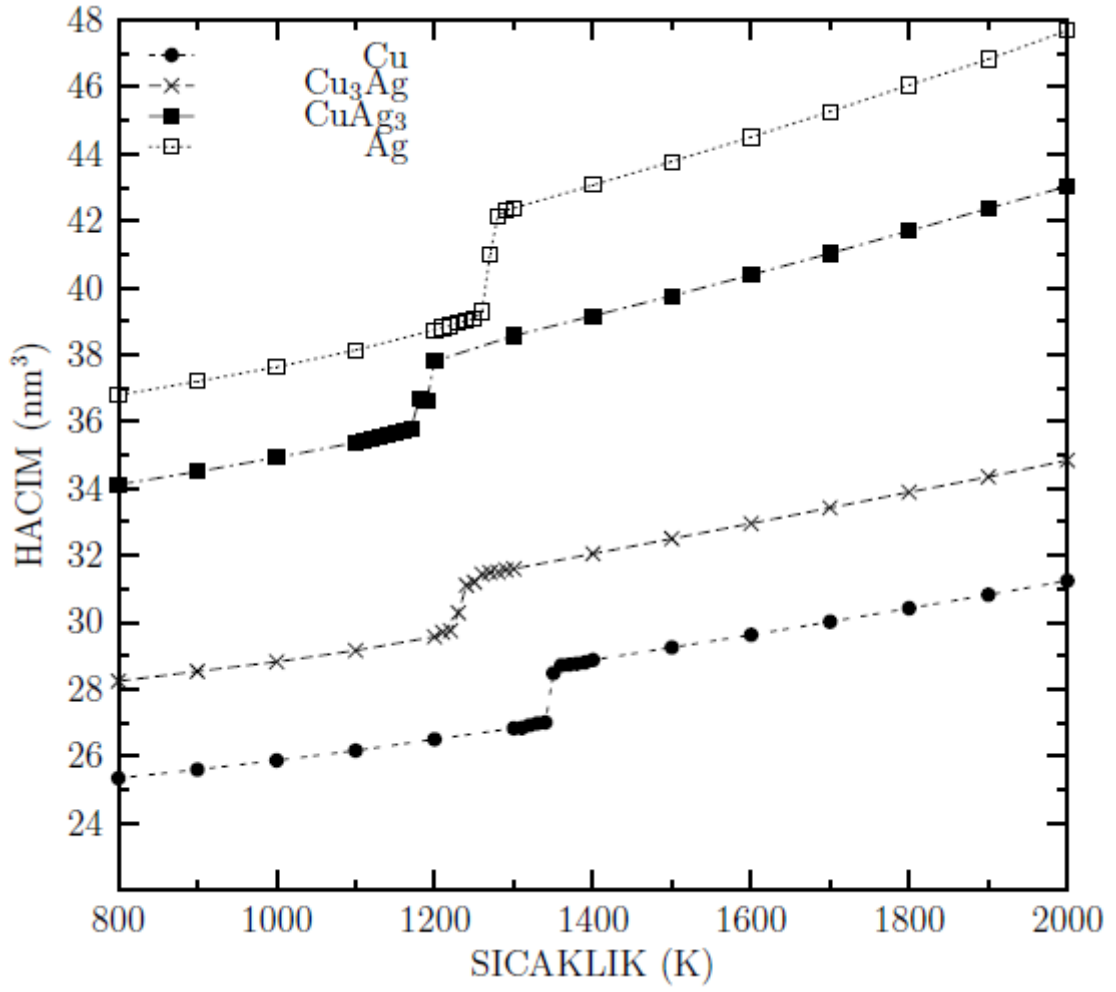
TPN istatistik kűmesindeki hesaplamalar sonucunda sistemin sıcaklık karřısında toplam enerji, hacim ve yoęunluk grafikleri elde edilmiřtir. Bunlar Őekil 3.1.1.(a, b, c)'de sırasıyla gűsterilmiřtir.

3.1.1. Toplam Enerji/ Hacim/ Yoğunluğun Sıcaklıkla Değişimi



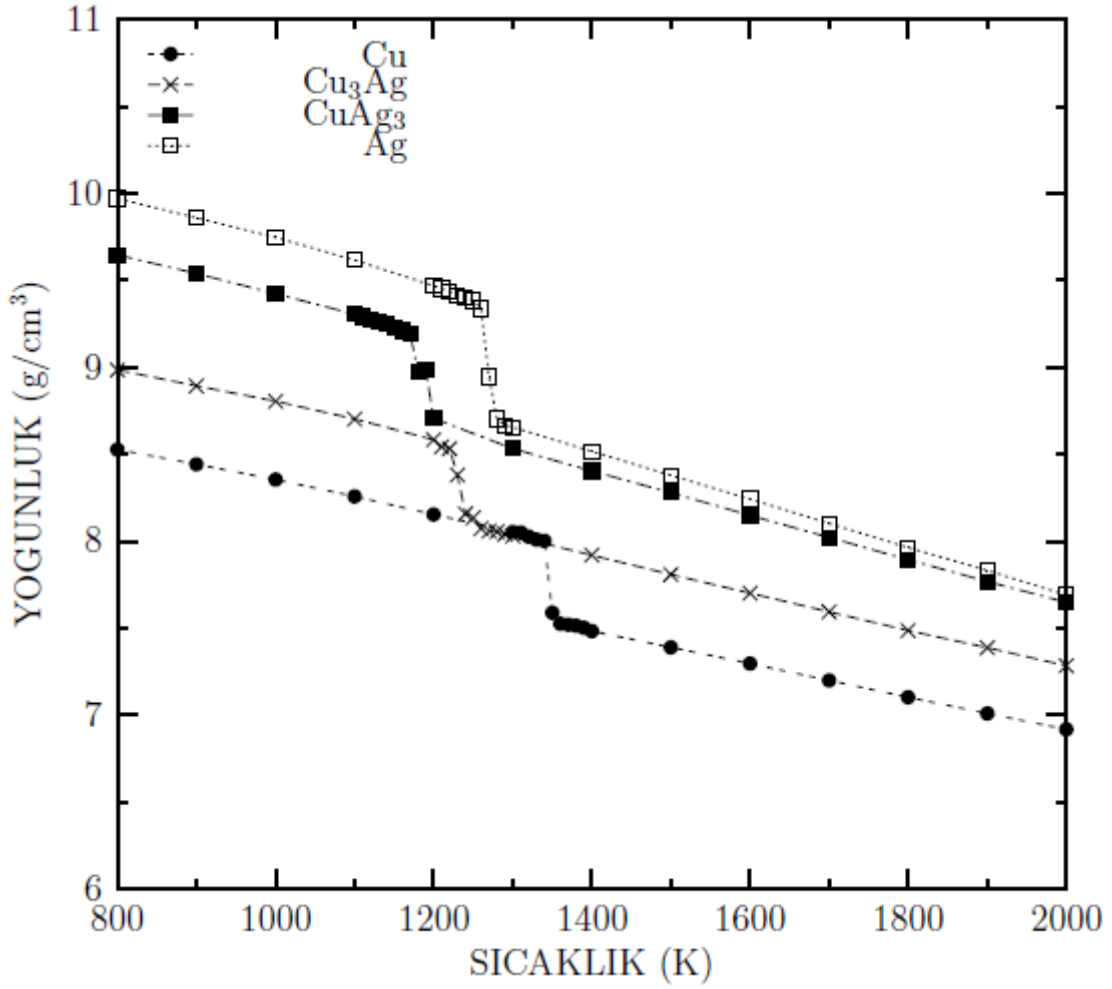
Şekil 3.1.1.a. Cu, Ag ve ikili düzenli alaşımlarının toplam enerjilerinin sıcaklıkla değişimi.

Şekil 3.1.1.a.'da görüldüğü gibi aşağıdan yukarı doğru Cu konsantrasyonu azalmıştır. Veriler değerlendirildiğinde Ag oranı arttıkça sistem enerjisinin arttığı gözlenmiştir. Cu için faz geçişi sıcaklığının $1350K \pm 50$, Cu₃Ag için $1250K \pm 50$, CuAg₃ için $1150K \pm 50$ ve Ag için $1250K \pm 50$ aralıklarında olduğu, genel olarak Ag konsantrasyonu arttıkça faz geçişinin daha düşük sıcaklıkta gerçekleştiği gözlenmiştir.



Şekil 3.1.1.b. Cu, Ag ve ikili düzenli alaşımlarının hacimlerinin sıcaklıkla değişimi.

Şekil 3.1.1.b. grafiğinde aşağıdan yukarı doğru Cu konsantrasyonunun azalışıyla sıcaklık karşısında hacimdeki değişimler çizilmiştir. Ag konsantrasyonu arttıkça beklendiği gibi sistem hacminin arttığı gözlenmiştir. Faz geçişi sıcaklığındaki değişimler yine Şekil 3.1.1.a.'daki gibi tespit edilmiştir.



Şekil 3.1.1.c. Cu, Ag ve ikili düzenli alaşımlarının yoğunluklarının sıcaklıkla değişimi.

Şekil 3.1.1.c.'de görüldüğü gibi yoğunluğun sıcaklıkla değişimi incelendiğinde ise saf Cu için faz geçiş sıcaklığında yoğunluk azalması olduğu ve bu azalmanın beklenen biçimde faz geçiş sıcaklığı civarında gerçekleştiği tespit edilmiştir.

Genel olarak grafiklerde görüldüğü gibi sıcaklık arttıkça toplam enerji ve hacim artmakta yoğunluk azalmaktadır. Hal değişimi sırasında da sıcaklık sabit kalmaktadır.

Başka bir değişle sıcaklığın etkisi ile atomların hızları ve enerjileri artmıştır. Zamanla malzeme ısındıkça atomları birbirinden uzaklaşarak daha geniş bir alana yayılmaktadır. Böylece hacim artmakta buna bağlı olarak da yoğunluk azalmaktadır.

Erime noktası civarında 100K olan sıcaklık artışı 10K'e düşürülerek malzeme için veri alma sıcaklığı arttırılmış, böylelikle ısıtılma hızı azaltılmıştır. Bu azaltmayla geçiş sıcaklığı daha sık aralıklarla tarandığından faz geçişi sırasında erime noktasını tespit etmek kolaylaşmıştır.

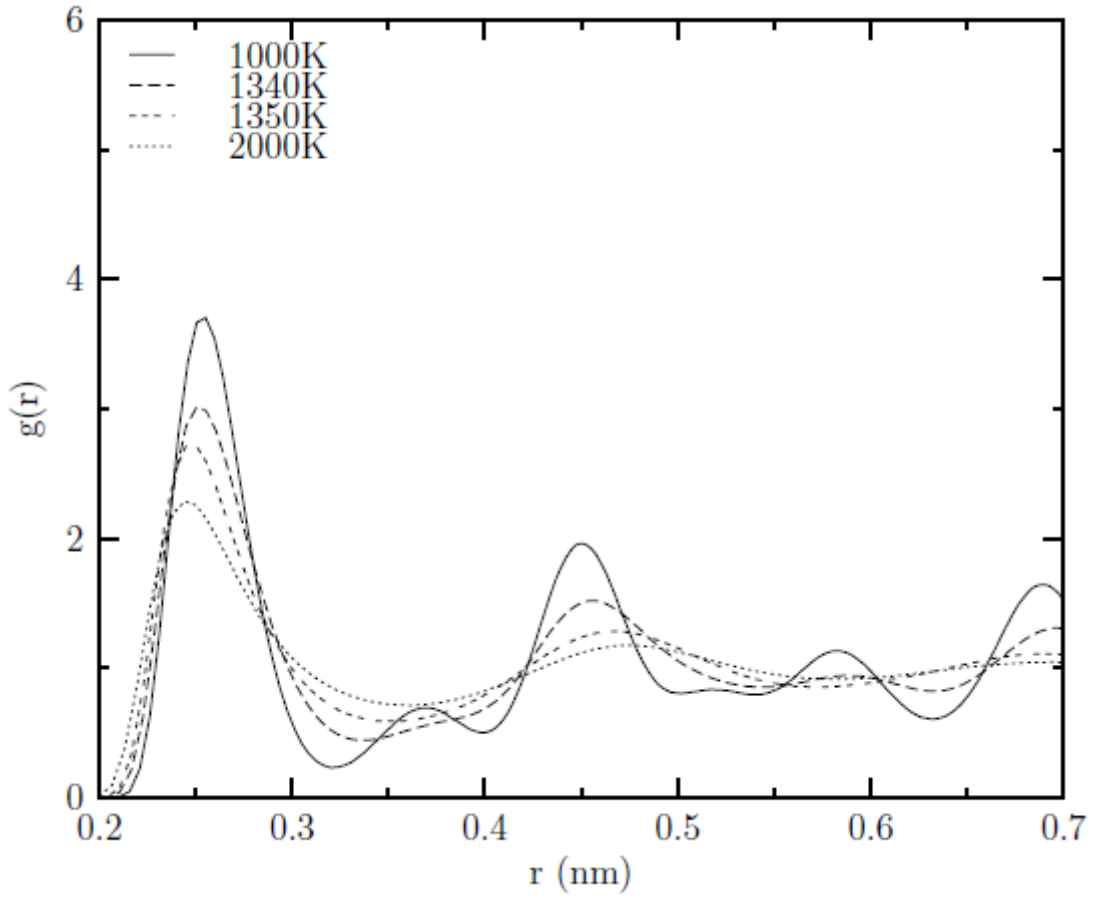
Bunun için malzemenin ısıtılmasında mikro-yapısal özelliklerinin nasıl değiştiğini etkin şekilde tarif eden çift dağılım fonksiyonu $g(r)$ kullanılmaktadır. Çift dağılım fonksiyonu eğrileri malzeme tamamen katı, tamamen sıvı ve erime noktası civarında çizilerek elde edilmiştir. Tüm malzemelerde toplam enerjinin, hacmin ve yoğunluğun sıcaklığa bağlı grafiklerinde her 10K sıcaklık artışı ile sıçramaların olduğu bölgelerde belirlenen sıcaklıklarda çift dağılım fonksiyonu eğrileri çizilmiştir. Böylece faz geçişinin olduğu sıcaklıklar belirlenmeye çalışılmıştır. Her 10K sıcaklık artışı için malzemenin yavaş ısıtılması ve böylelikle de daha hassas ölçüm yapılabilmesi sağlanmıştır.

3.1.2. Çift Dağılım Fonksiyonu Eğrileri

Çift dağılım fonksiyonu, sistemdeki atomların birbirinin etrafına nasıl dizildiğini anlamak için bir öngörü sağlamıştır. Merkezde bulunan bir atomdan r uzaklığındaki atomların bulunma olasılığını veren bir fonksiyondur. $g(r)$ 'nin birinci pikinin altında kalan alan ilk en yakın komşuluk sayısını verir. Piklerin keskinliğinin kaybolması malzeme atomlarının birbirinden uzaklaşmasını yani faz geçişini ifade eder.

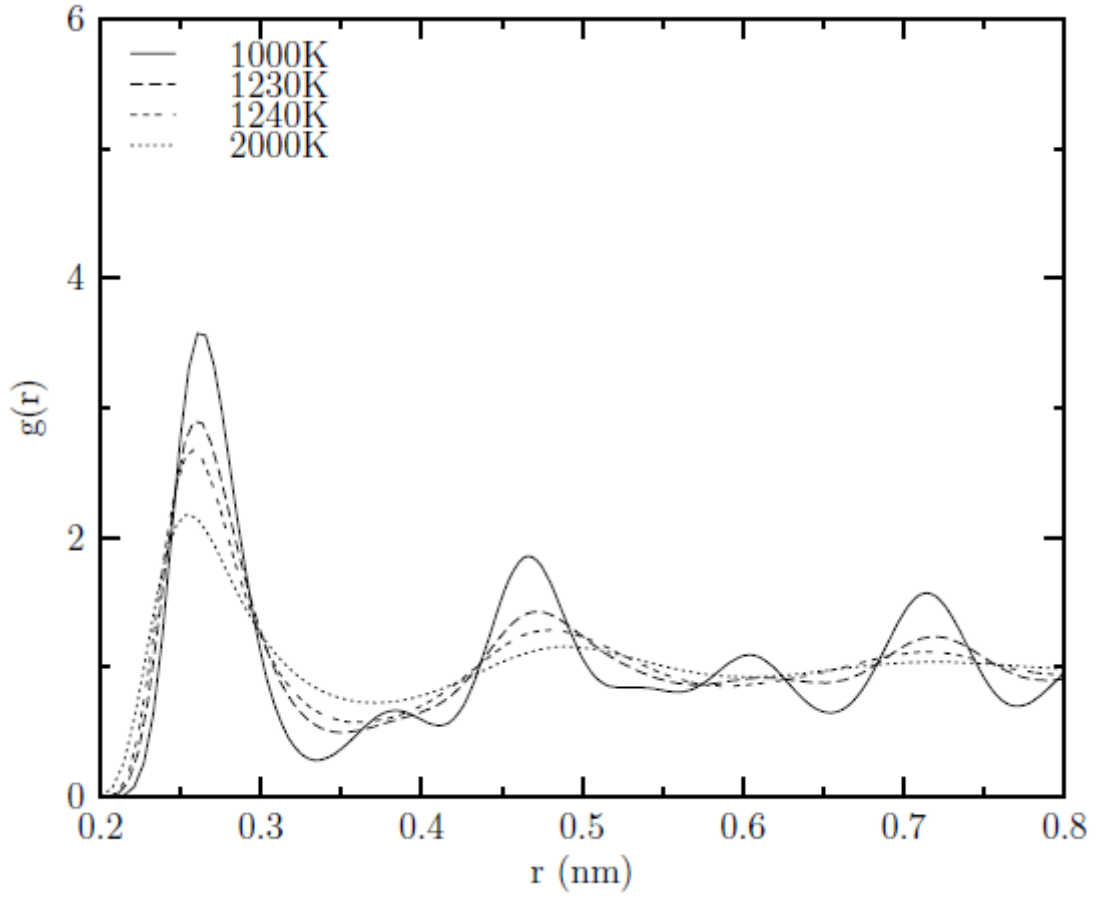
Şekil 3.1.2.(a, b, c, d)'de sırasıyla Cu, Cu₃Ag, CuAg₃ ve Ag'nin çift dağılım fonksiyon eğrileri görülmektedir. Hesaplamalar altıncı en yakın komşuluğa kadar gerçekleştirilmiştir.

Ayrıca Çizelge 3.1.'de çift dağılım fonksiyonlarından elde edilen erime noktaları mevcut deneysel ve diğer teorik çalışmalardan elde edilen verilerle karşılaştırılmıştır.



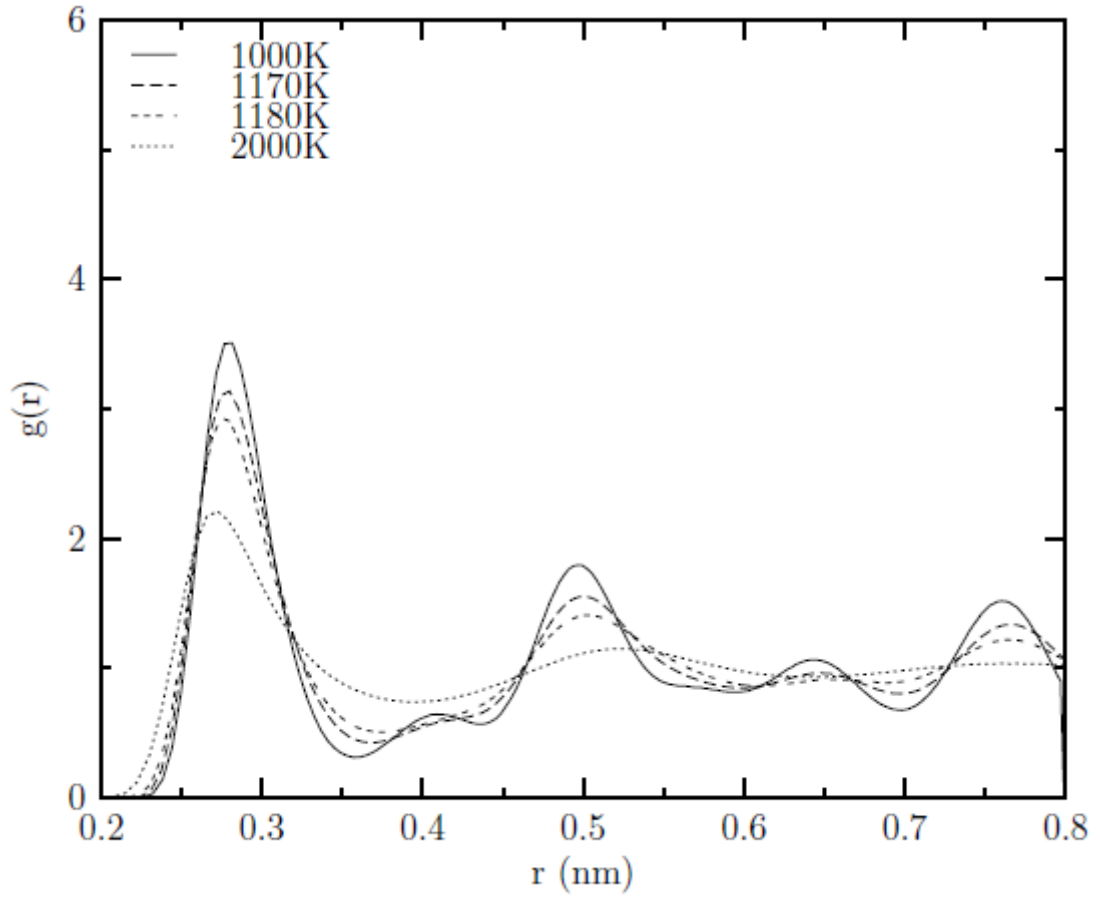
Şekil 3.1.2.a. Cu saf metali için çift dağılım fonksiyonu eğrileri.

Şekil 3.1.2.a'da eğri altında kalan alan etkileşen atomların sayısını verir. Bu çalışmada görüldüğü gibi 1000K'de katı halde bulunan Cu, 2000K'de piklerin keskinliği tamamen kaybolduğu için erimiş haldedir. 1000K-2000K aralığında erime sıcaklığı olarak belirlenen 1340K-1350K aralığında zamanla piklerin keskinliğinin kayboluşuna bakılarak faz geçişi gözlenmiştir. Tespit edilen erime noktasında sistemin sıvı halde olup olmadığı kontrol edildiğinde bu sıcaklık aralığında sıvı halde olduğu gözlenmiştir.



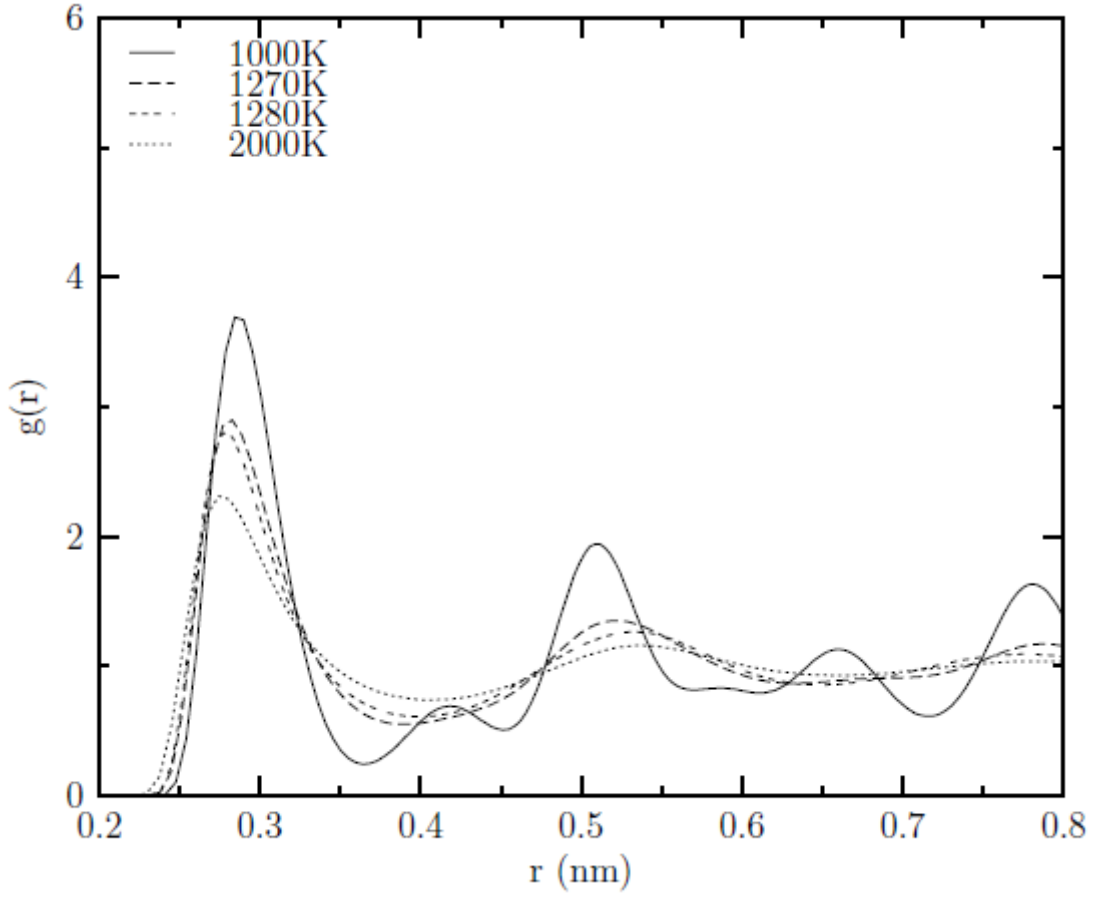
Şekil 3.1.2.b. Cu_3Ag alaşımı için çift dağılım fonksiyonu eğrileri.

Şekil 3.1.2.b.'de Cu_3Ag alaşımı için çift dağılım fonksiyonu eğrileri çizilmiştir. Erime noktası 1230K-1240K arasında tespit edilmiştir.



Şekil 3.1.2.c. CuAg₃ alaşımı için çift dağılım fonksiyonu eğrileri.

Şekil 3.1.2.c.'de CuAg₃ alaşımı için çift dağılım fonksiyonu eğrileri çizilmiştir. Erime noktası 1170K-1180K arasında tespit edilmiştir.



Şekil 3.1.2.d. Ag saf metali için çift dağılım fonksiyonu eğrileri.

Şekil 3.1.2.d.'de Ag saf metali için çift dağılım fonksiyonu eğrileri çizilmiştir. Erime noktası 1270K-1280K arasında tespit edilmiştir.

Bu tez çalışmasında kullanılan malzeme için çizilen çift dağılım fonksiyonu eğrilerinden elde edilen bilgiler ışığında tespit edilen erime noktalarının deneysel veri ve diğer teorik hesaplamalarla karşılaştırıldığı Çizelge 3.1. aşağıda verilmiştir.

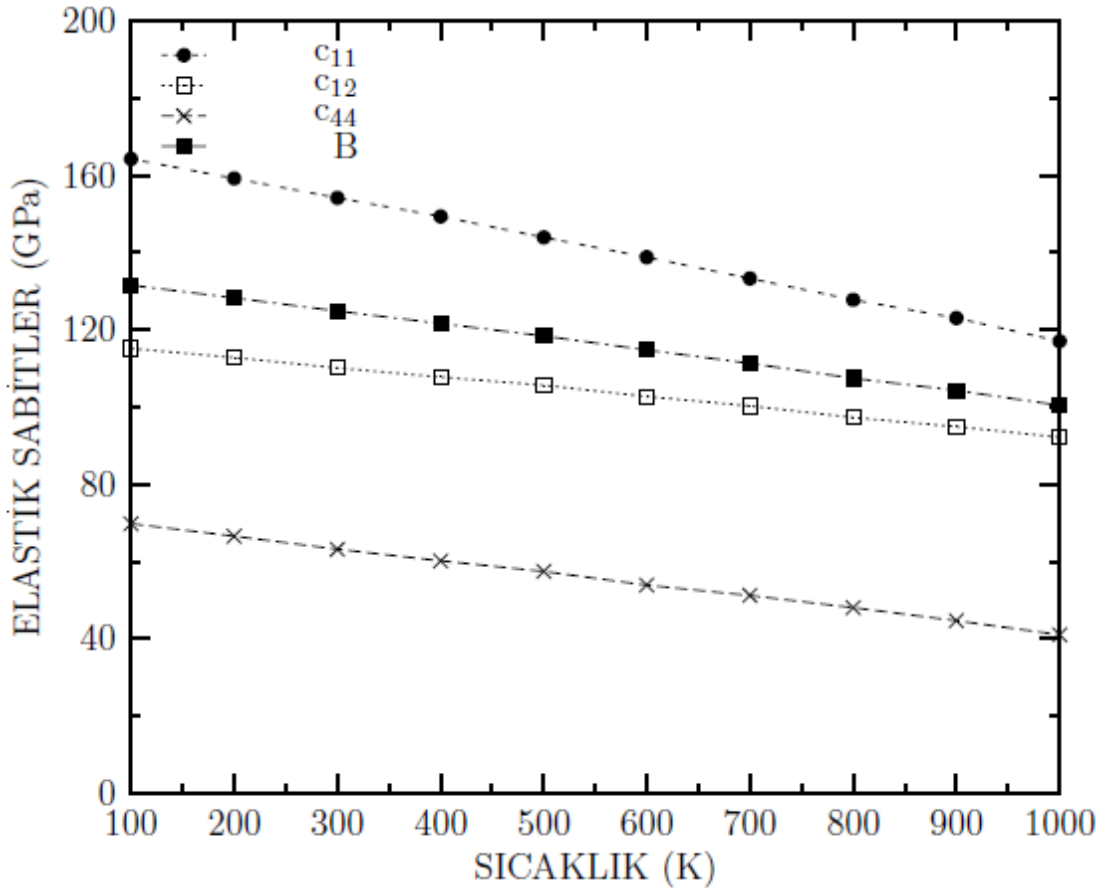
Çizelge 3.1. Cu, Ag ve ikili alaşımlarının erime noktası sonuçlarının deneysel değer (Massalski, 1986) ve diğer teorik çalışmalarla (LeSar ve diğ., 1991; Cai ve Ye, 1996; Gomez ve diğ., 1997; Zhou ve diğ., 2001; Han ve diğ., 2004; Kart ve diğ., 2005; Delogu, 2005; Hiyazi ve Park, 2009; Yong ve Chen, 2011) karşılaştırılması.

Malzeme	T_M Bu Çalışma (K)	T_M (Deneysel) (K)	DİĞER ÇALIŞMALAR (K)								
		Massalski, 1986	LeSar ve diğ., 1991 Variational	Cai ve Ye, 1996	Gomez ve diğ., 1997 TB	Zhou ve diğ., 2001	Han ve diğ., 2004 EAM	Kart ve diğ., 2005 SC	Delogu, 2005 SMA	Hiyazi ve Park, 2009 EAM	Yong ve Chen, 2011 MEAM
Cu	1340±10	1358	1290	---	1073±17	---	1320.5±1.5	1150±10	1250	---	1320.5±10
Cu ₃ Ag	1230±10	1153	---	---	---	---	---	---	---	---	---
CuAg ₃	1170±10	1133	---	---	---	---	---	---	---	---	---
Ag	1270±10	1235	---	1350	907±15	1300	---	1100	975	1350	---

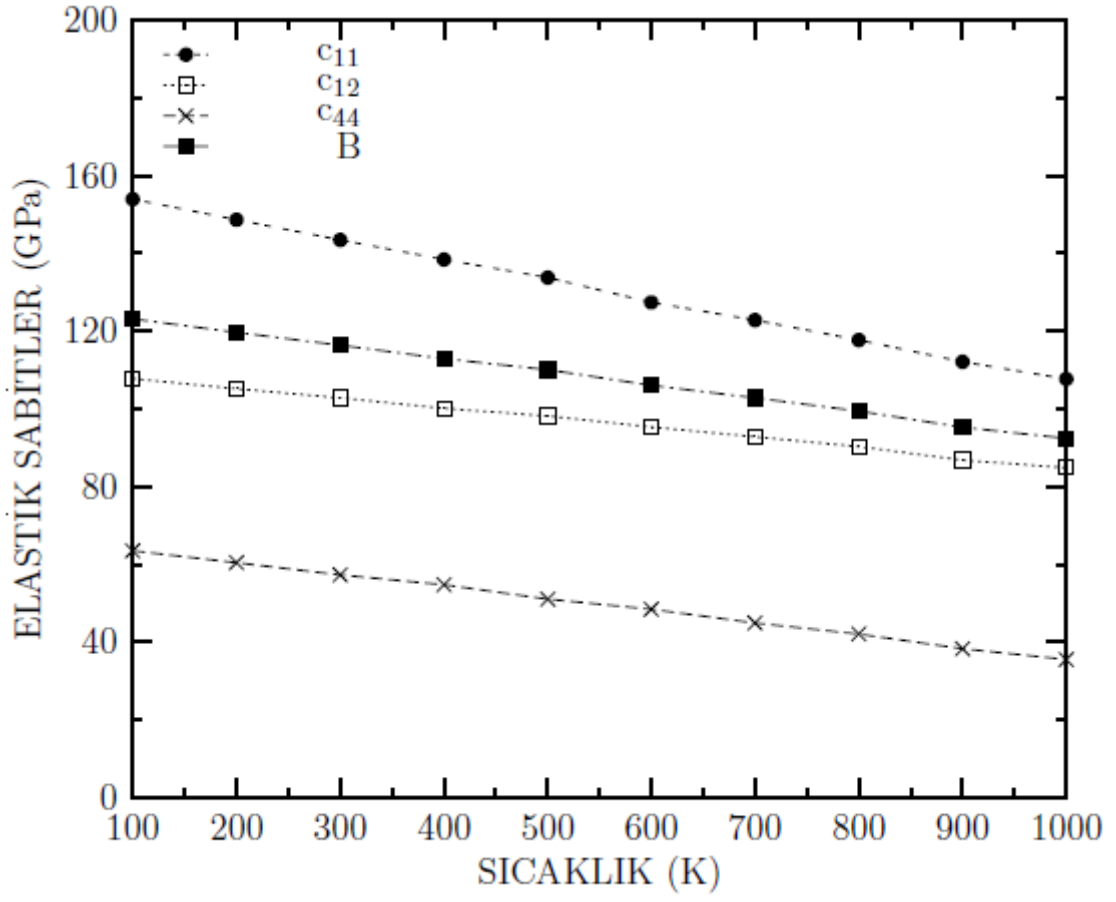
Bu çalışmada saf Cu ve Ag için bulunan erime noktası sonuçları diğer teorik çalışmalardan bulunan değerlere göre deneysel verilere daha yakındır. Cu için diğer teorik çalışmalardan elde edilen sonuçlarla deneysel değer karşılaştırıldığında en yakın sonucun 1320.5±10 (Yong ve Chen, 2011) MEAM çalışması olduğu görülmüştür. Çizelge 3.1.'de Ag için elde edilen sonuçlar karşılaştırıldığında deneysel erime noktasına en yakın teorik çalışmalar 1350K (Cai ve Ye, 1996) ile 1350K (Hiyazi ve Park, 2009) EAM çalışması olmuştur. Yine bu tez çalışmasında Ag için elde edilen sonuç deneysel değere daha yakın bulunmuştur. Cu₃Ag ve CuAg₃ alaşımları için literatürde teorik çalışmaya rastlanmamıştır. Ancak Cu-Ag ikili düzenli alaşımları için bu çalışmadan elde edilen erime noktaları deneysel değerlere yakın bulunmuştur. q-SC potansiyelinin bu bölümdeki malzemeler için uygun olduğu sonucuna varılmıştır.

3.1.3. Elastik Sabitler

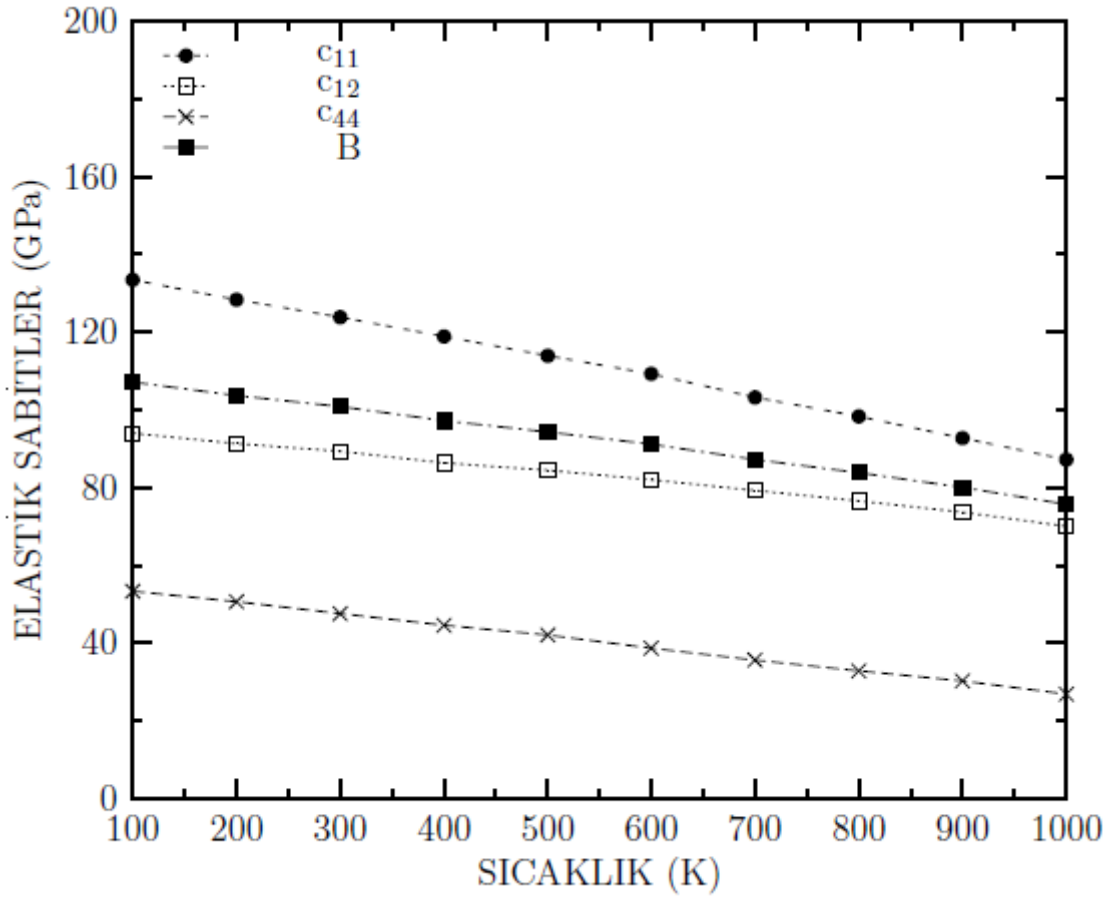
Elastik sabitler EVN istatistik kümesinde hesaplanmıştır. Burada ısıtma sürecinde 100 MD adımı, dengelemede 5000 MD adımı kullanılmıştır. 50.000 adımda elde edilen $\langle H_0 \rangle$ ortalama zorlanma matrisi EVN sisteminin basınca bağlı özelliklerinin hesaplanmasında kullanılmıştır. Herbir ısıtma aralığındaki dengeleme sürecinin sonunda bulunan elastik sabit matrisindeki C_{11} , C_{12} ve C_{44} değerlerinin ortalamaları alınarak C_{11} , C_{12} ve C_{44} elastik sabitleri ve (2.36) eşitliğinden bulk modülü hesaplanmıştır. Şekil 3.1.3. (a, b, c, d)'de beklendiği gibi sıcaklık arttıkça malzemenin elastik sabitleri azalmaktadır.



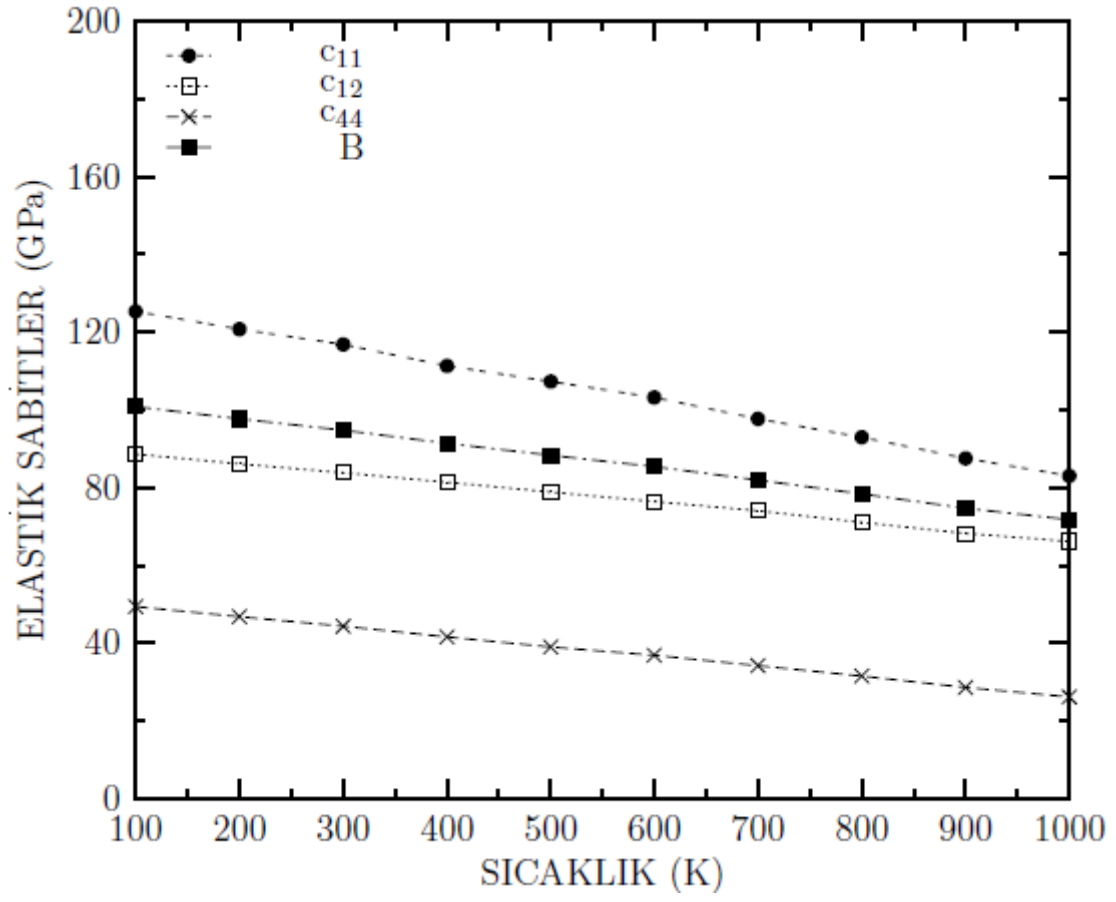
Şekil 3.1.3.a. Cu saf metalinin elastik sabitlerinin sıcaklıkla değişimi.



Şekil 3.1.3.b. Cu₃Ag alaşımının elastik sabitlerinin sıcaklıkla değişimi.



Şekil 3.1.3.c. CuAg₃ alaşıımının elastik sabitlerinin sıcaklıkla deęiřimi.



Şekil 3.1.3.d. Ag saf metalinin elastik sabitlerinin sıcaklıkla değişimi.

Çizelge 3.2. Cu, Ag ve ikili alaşımlarının elastik sabitlerin deneysel değer (OK) (Kittel, 1986; Simmons ve Wang, 1991) ve diğer teorik çalışmalarla (Kallinteris ve diğ., 1997; Kimura ve diğ., 1998; Dereli ve diğ., 1999; Pandya ve diğ., 2001; Kart ve diğ., 2005a; Kazanç ve diğ., 2006) karşılaştırılması.

Malzeme	T(K) (300K)	C ₁₁ (GPa)	C ₁₂ (GPa)	C ₄₄ (GPa)	B(GPa)
Cu	Bu Çalışma	154.200	110.167	63.225	124.845
	Deneysel (OK) Kittel, 1986	176.200	124.900	81.700	137.000
	Kallinteris ve diğ., 1997 TB-SMA	142.000	180.000	122.000	142.000
	Dereli ve diğ., 1999 SC	153.06±0.42	119.45±0.16	49.35±0.27	130.65±0.25
	Pandya ve diğ., 2001	136.100	119.800	66.500	125.300
	Kazanç ve diğ., 2006 EAM	160.200	112.300	72.000	-----
Cu ₃ Ag	Bu Çalışma	143.449	102.798	57.311	116.348
CuAg ₃	Bu Çalışma	123.836	89.339	47.603	100.838
Ag	Bu Çalışma	116.816	83.841	44.435	94.833
	Deneysel (OK) Simmons ve Wang, 1991	168.000	121.000	75.000	137.000
	Kallinteris ve diğ., 1997 TB-SMA	109.000	68.000	53.000	103.000
	Kimura ve diğ., 1998 SC	126.95±0.23	88.49±0.11	50.50±0.08	101.31±0.15
	Pandya ve diğ., 2001	88.200	79.100	44.200	82.000
	Kart ve diğ., 2005a SC	126.500	88.300	50.500	101.000

Çizelge 3.2’de malzemenin bu çalışmada 300K’deki elastik sabitleri, OK’deki deneysel değerler ve diğer teorik çalışmalardan (300K) elde edilen elastik sabit değerleri ile karşılaştırılmıştır.

Bu tez çalışmasında incelenen Cu, Ag saf metallerinin sıcaklık arttıkça elastik sabitlerinin azalması gerektiği göz önünde bulundurulduğunda bulunan değerler 0K'deki deneysel verilerin altında kalmıştır. Bu sonuç beklenen bir durumdur.

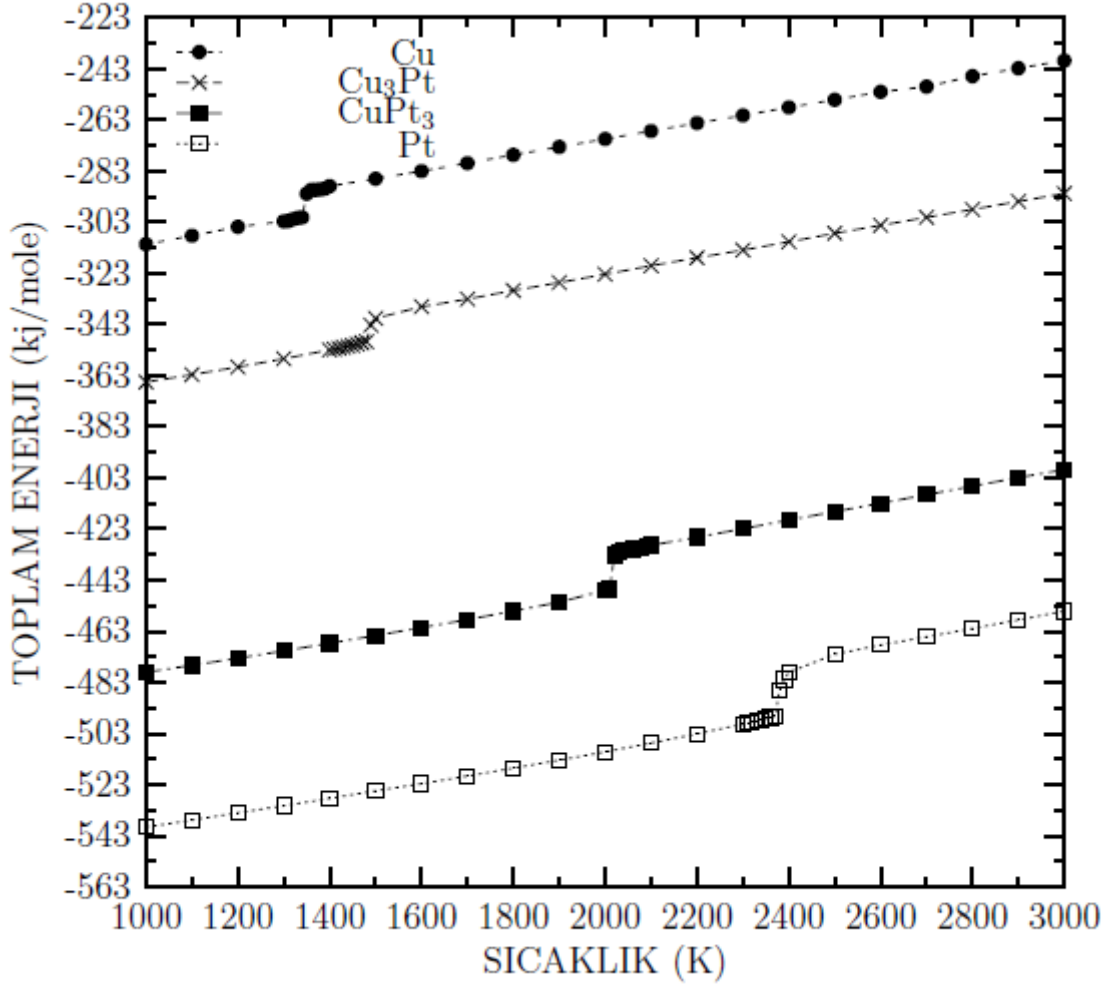
Cu-Ag düzenli alaşımları için de benzer sonuçlar elde edilmiş olup aynı özelliklerde deneysel veriye rastlanmadığı için karşılaştırma yapılamamıştır. Ayrıca Çizelge 3.2.'de 300K'deki elastik sabitler aynı sıcaklık değeri için diğer teorik çalışmalardan elde edilmiş elastik sabit değerleriyle karşılaştırılmıştır.

3.2. Cu, Pt Saf Metalleri İle İkili Düzenli Alaşımları

Cu, Pt saf metalleri ile $L1_2$ düzenli yapısındaki [Şekil 2.4.(b)] Cu_3Pt ve $CuPt_3$ alaşımları 0.1K'den hedef sıcaklığa (3000K) 100K aralıklarla ısıtılmıştır. Bu süreç HPN ve TPN istatistik kümelerinde gerçekleştirilmiştir. HPN istatistik kümesinde ısıtma sürecinde 100 MD adımı, dengelemede 2000 MD adımı kullanılmıştır. Bu kümedeki hesaplamaların sonucunda enerjide dalgalanmalar olduğu için denge kurucu faza ihtiyaç duyulduğundan TPN istatistik kümesinde sistem 30.000 adımda dengeye getirilmiştir.

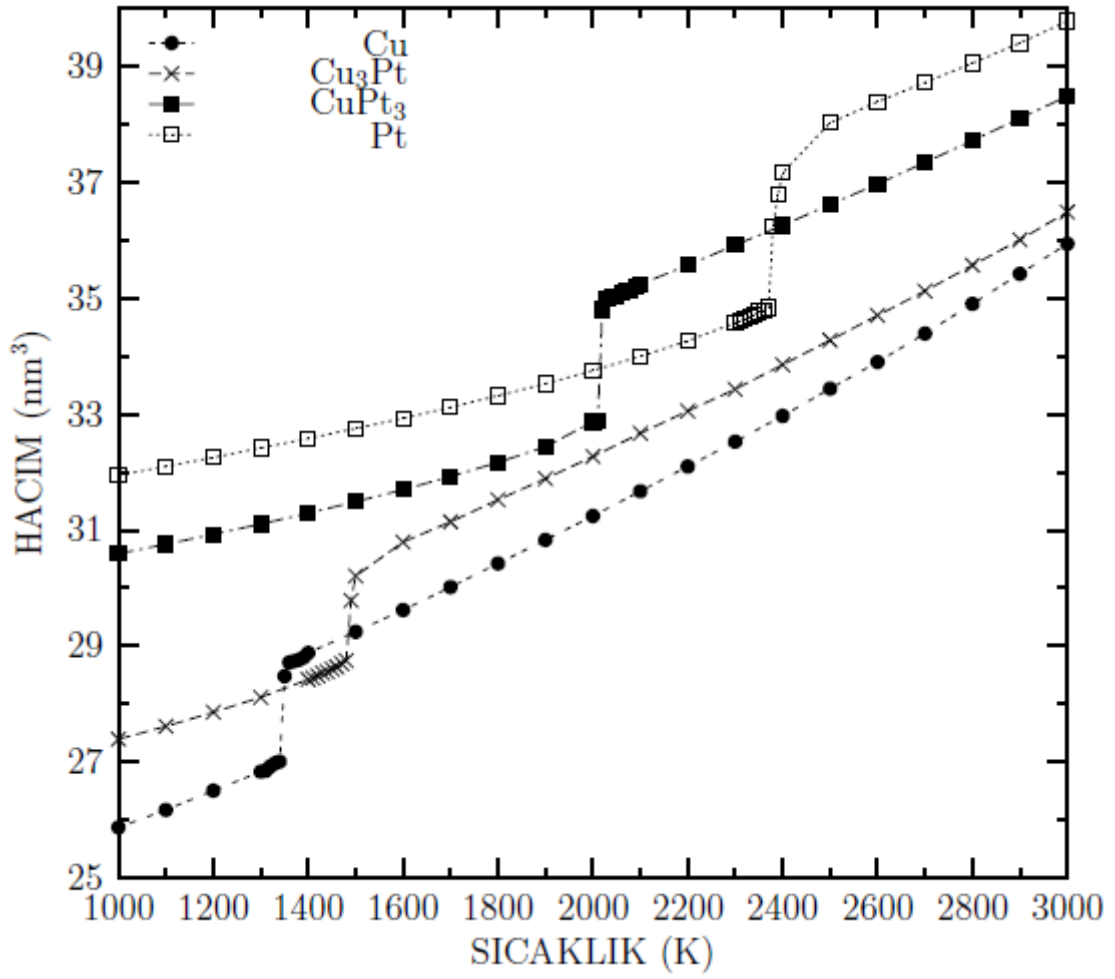
TPN istatistik kümesindeki hesaplamalar sonucunda sistemin sıcaklık artışıyla toplam enerji, hacim ve yoğunluk grafikleri elde edilmiştir. Bunlar Şekil 3.2.1.(a, b, c)'de sırasıyla gösterilmiştir.

3.2.1. Toplam Enerji/ Hacim/ Yoğunluğun Sıcaklıkla Değişimi



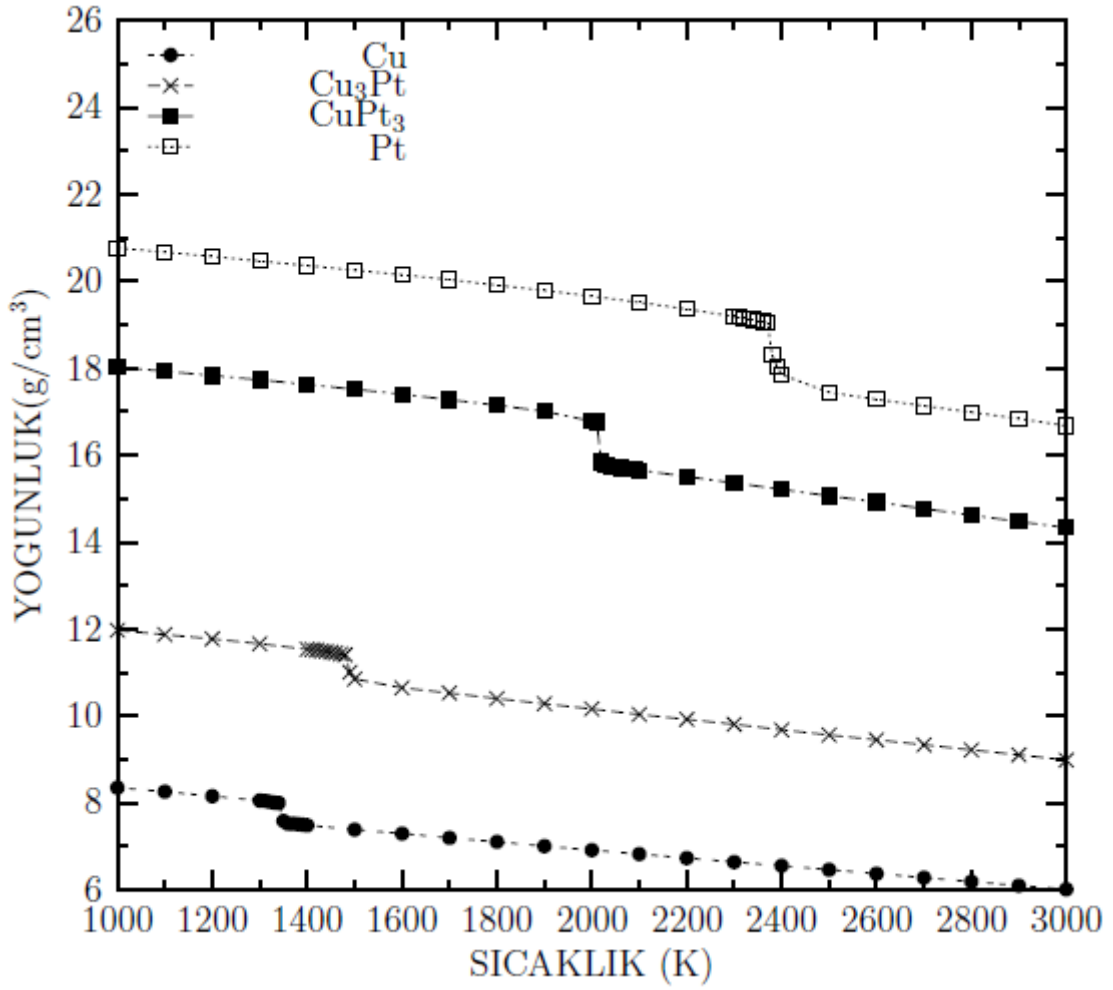
Şekil 3.2.1.a. Cu, Pt ve ikili düzenli alaşımlarının toplam enerjilerinin sıcaklıkla değişimi.

Şekil 3.2.1.a. incelendiğinde sıcaklıkla değişen toplam enerji grafiğinde aşağıdan yukarıya doğru Cu konsantrasyonu artmıştır. Veriler değerlendirildiğinde Cu oranı arttıkça sistemin enerjisinin arttığı gözlenmiştir. Cu₃Pt için faz geçiş sıcaklığının 1450K±50 , CuPt₃ için 2050K±50, Pt için ise 2350K±50 aralıklarında olduğu, genel olarak Pt konsantrasyonu arttıkça faz geçiş sıcaklığının arttığı gözlenmiştir.



Şekil 3.2.1.b. Cu, Pt ve ikili düzenli alaşımlarının hacimlerinin sıcaklıkla değişimi.

Şekil 3.2.1.b. grafiğinde aşağıdan yukarı doğru Cu konsantrasyonunun azalışıyla sıcaklık karşısında hacimlerin değişimi çizilmiştir. Pt konsantrasyonu arttıkça beklendiği gibi sistemin hacminin arttığı gözlenmiştir. Yine faz geçiş sıcaklığındaki değişimler Şekil 3.2.1.a'daki gibi gözlenmiştir.



Şekil 3.2.1.c. Cu, Pt ve ikili düzenli alaşımlarının yoğunluklarının sıcaklıkla değişimi.

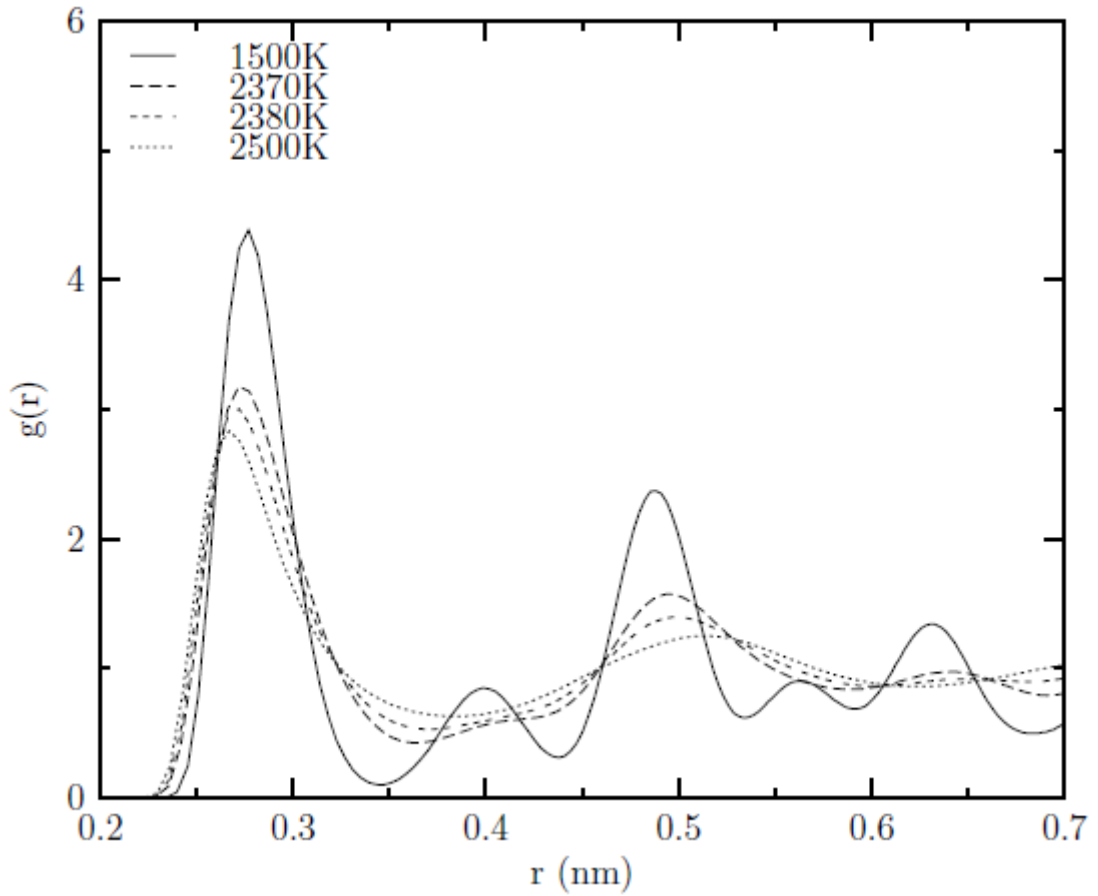
Grafiklerde görüldüğü gibi sıcaklık arttıkça toplam enerji ve hacim artarken yoğunluk azalmaktadır. Faz geçişi esnasında da sıcaklık sabit kalmaktadır.

Erime noktası civarında 100K olan sıcaklık artışları 10K'e düşürülerek malzemenin ısıtılma hızı azaltılmıştır. Bu azaltma erime noktasını tespit edebilmeyi kolaylaştırmıştır.

Erime noktalarını belirleyebilmek için erime noktası civarındaki sıçrama aralıklarında çift dağılım fonksiyonu eğrileri çizilmiştir. Hesaplama süreci bir önceki Cu, Ag saf metalleri ve ikili düzenli alaşımlarında olduğu gibi gerçekleştirilmiştir.

3.2.2. Çift Dağılım Fonksiyonu Eğrileri

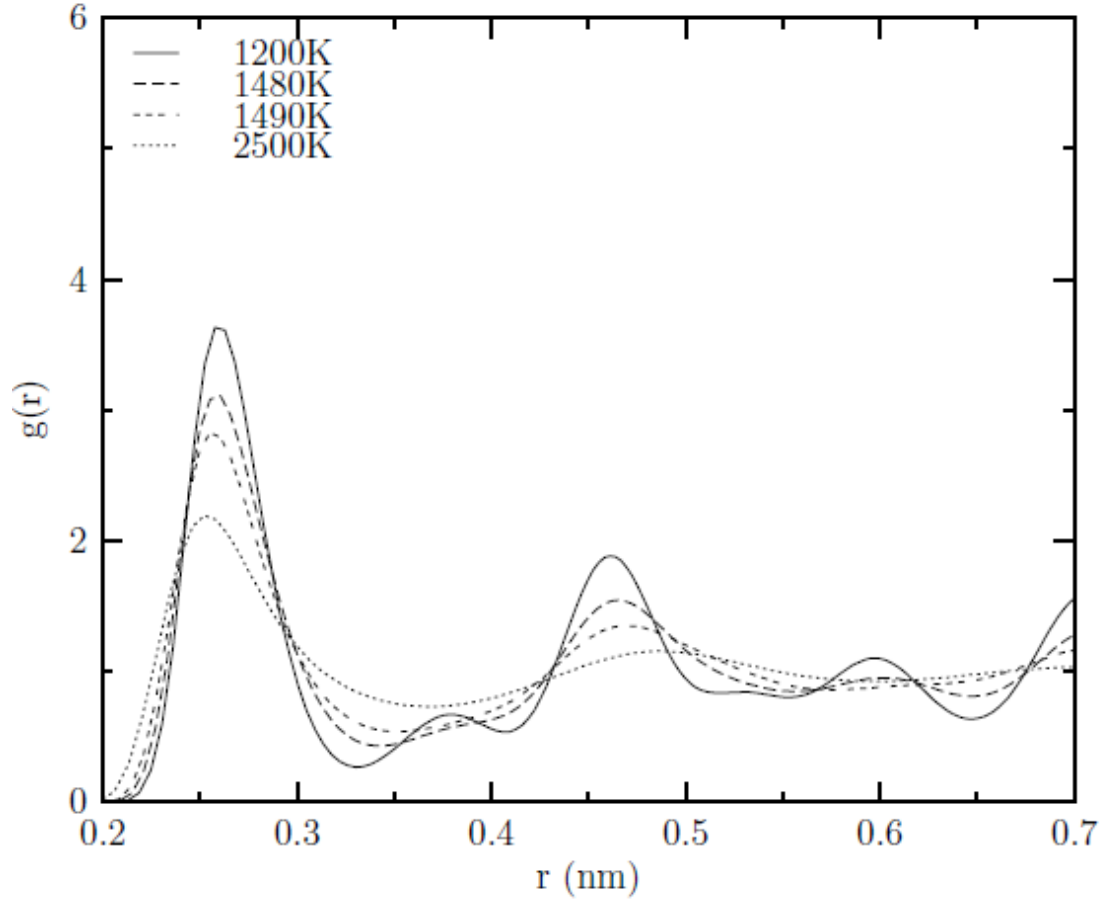
Pt saf metali ve Cu-Pt düzenli alaşımları için çizilen çift dağılım fonksiyonu eğrileri tüm malzemelerde malzeme tamamen katı, tamamen sıvı ve erime noktası civarında çizilmiştir. Bu eğrilerin tümü Şekil 3.2.2.(a,b,c)'de gösterilmiştir.



Şekil 3.2.2.a. Pt saf metali için çift dağılım fonksiyonu eğrileri.

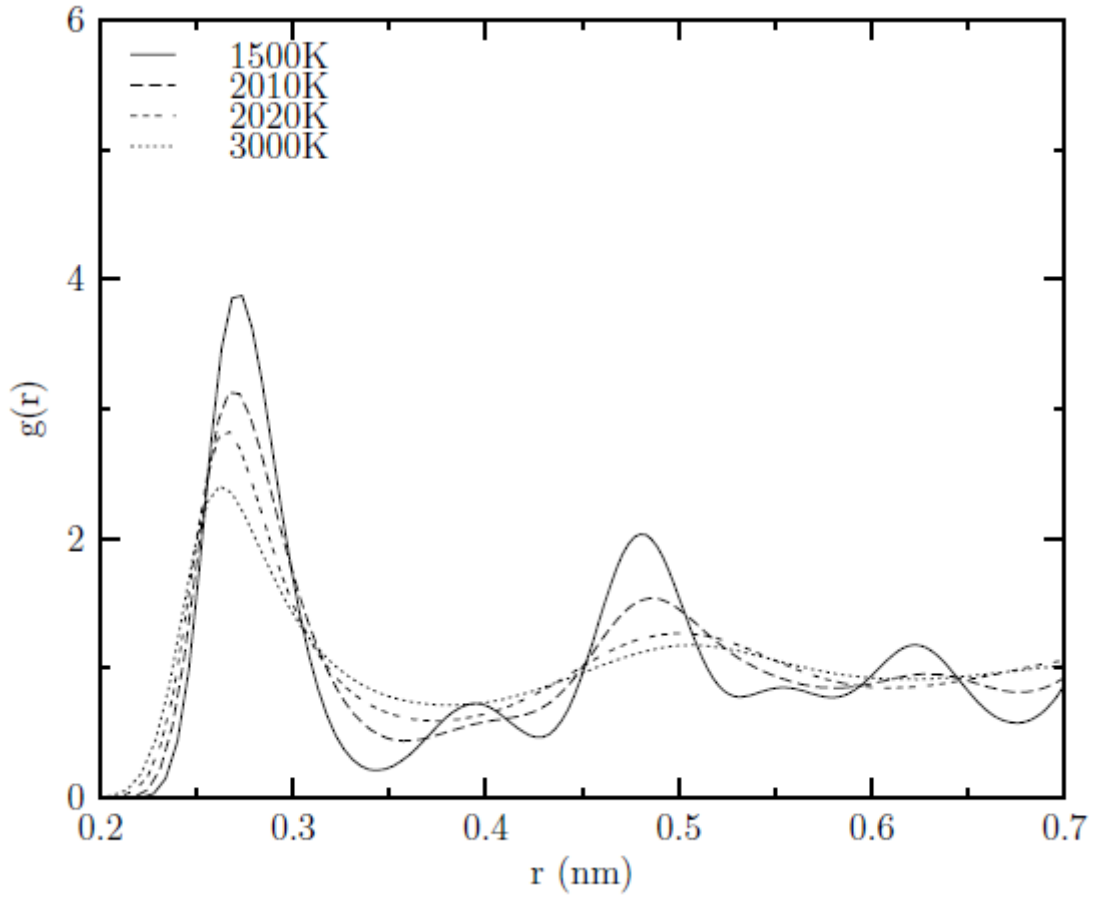
Pt saf metalinin erime noktasının deneysel değeri 2042K (Massalski,1986)'dir. Şekil 3.2.2.a.'da görüldüğü gibi 1500K'de katı halde bulunan Pt için 2500K'de piklerin keskinliği kaybolmuş, atomlar arası mesafenin artışına bakılarak tamamen sıvı hale

geçtiği gözlenmiştir. Erimenin gerçekleştiği sıcaklık aralığı 2370K-2380K olarak tespit edilmiştir.



Şekil 3.2.2.b. Cu₃Pt alaşımı için çift dağılım fonksiyonu eğrileri.

Şekil 3.2.2.b.'de Cu₃Pt alaşımı için çift dağılım fonksiyonu eğrileri çizilmiştir. Yine piklerin keskinliğinin arttığı hacimlerinin genişlediği sıcaklık aralığı belirlenerek (1480K-1490K) erime noktası tespit edilmeye çalışılmıştır.



Şekil 3.2.2.c. CuPt₃ alaşımı için çift dağılım fonksiyonu eğrileri.

Şekil 3.2.2.c.'de CuPt₃ alaşımı için çift dağılım fonksiyonu eğrileri çizilmiştir. Erime noktası 2010K-2020K arasında tespit edilmiştir.

Çizelge 3.3. Cu Pt ikili alaşımlarının erime noktası sonuçlarının deneysel değer (Massalski, 1986) ve diğer teorik çalışmalarla (LeSar ve diğ., 1991; Cai ve Ye, 1996; Gomez ve diğ., 1997; Zhou ve diğ., 2001; Delogu, 2005; Hiyazi ve Park, 2009) karşılaştırılması.

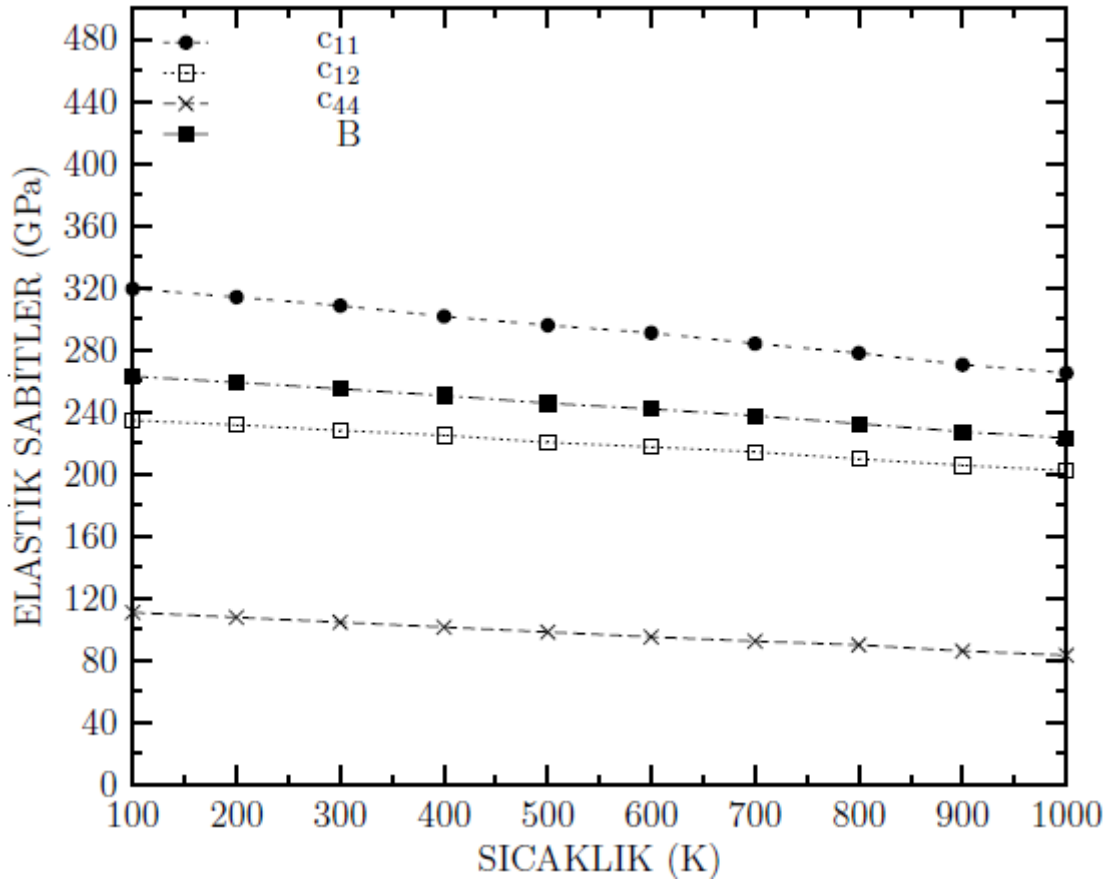
Malzeme	T_M Bu Çalışma (K)	T_M (Deneysel) (K)	DİĞER ÇALIŞMALAR (K)					
		Massalski, 1986	LeSar ve diğ., 1991 Variational	Cai ve Ye, 1996	Gomez ve diğ., 1997 TB	Zhou ve diğ., 2001	Delogu, 2005 SMA	Hiyazi ve Park, 2009 EAM
Cu_3Pt	1480±10	1573	---	---	---	---	---	---
$CuPt_3$	2010±10	1973	---	---	---	---	---	---
Pt	2370±10	2042	1740	1950	1794±29	1850	1825	2150

Çizilen çift dağılım fonksiyonu eğrilerinin piklerinin kaybolup genişliklerinin artışlarına bakılarak bulunan erime noktaları Çizelge 3.3.'de deneysel değer ve diğer teorik çalışmalarla karşılaştırılmıştır. Bu çalışmada Pt için bulunan erime noktası deneysel değer ve diğer teorik çalışmalardan elde edilen erime noktalarıyla karşılaştırıldığında beklenenin biraz üzerinde kalmıştır.

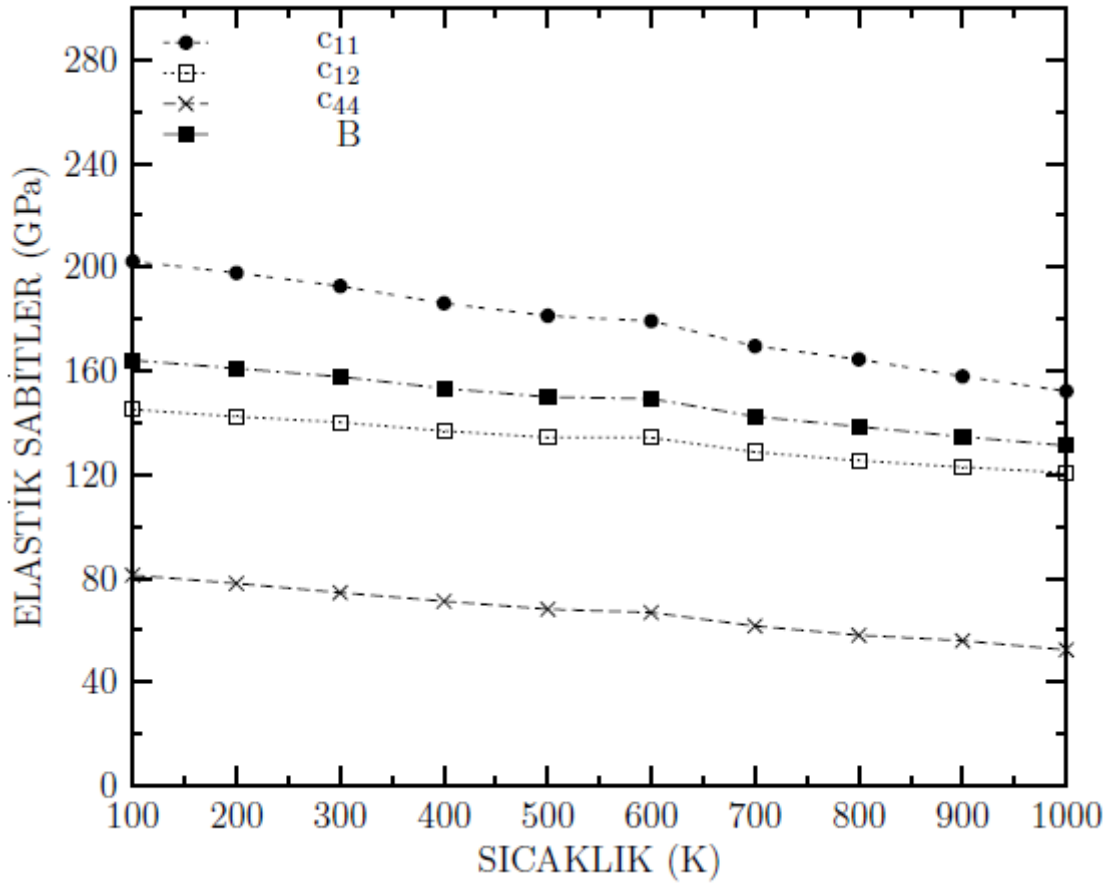
Cu_3Pt ve $CuPt_3$ alaşımlarının erime noktaları için literatürde teorik çalışmaya rastlanmadığından sadece Pt saf metali için bu çalışmadan elde edilen simülasyon sonucu diğer teorik çalışmalarla karşılaştırılabilmiştir. Teorik çalışmalardan deneysel değere en yakın veri 1950K ile Cai ve Ye (1996) tarafından elde edilmiştir.

3.2.3. Elastik Sabitler

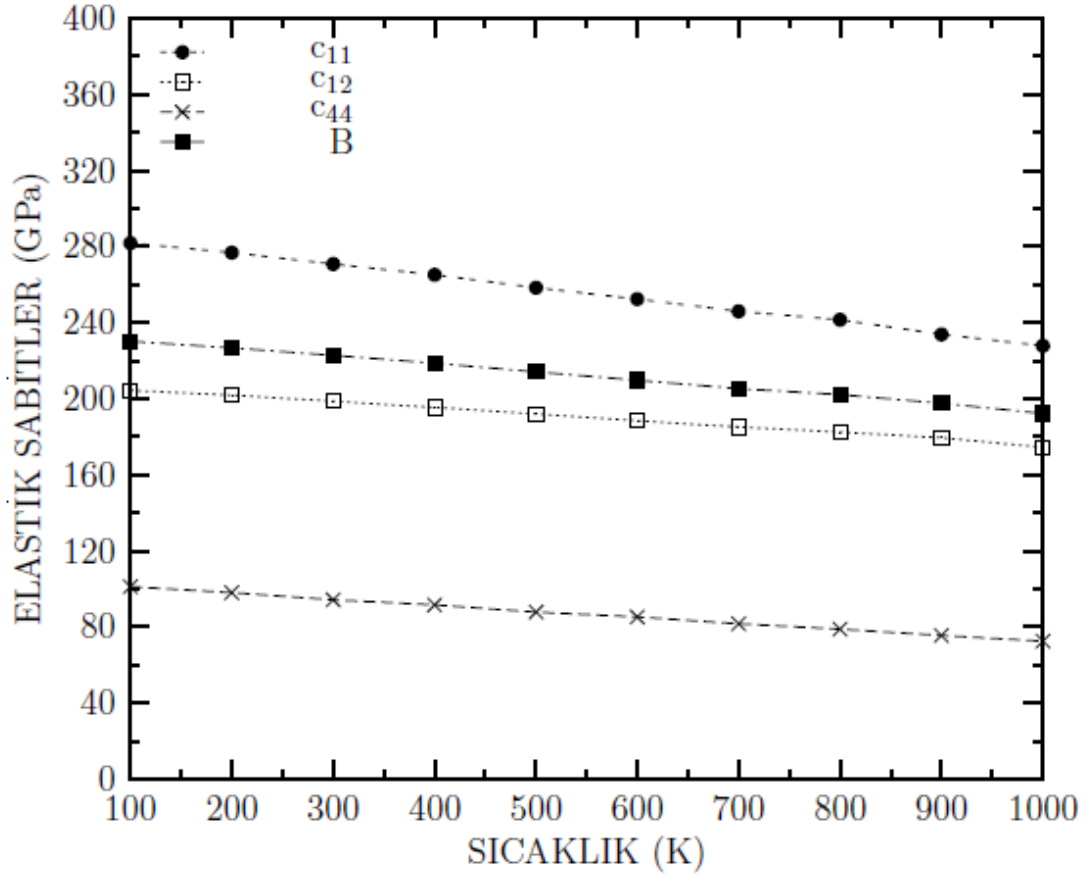
Pt saf metali ve Cu-Pt düzenli alaşımlarının elastik sabitlerinin sıcaklıkla değişimleri Şekil 3.2.3.(a,b,c)'de gösterilmiştir. Grafikler incelendiğinde beklendiği gibi sıcaklık arttıkça elastik sabitlerin azaldığı görülmüştür.



Şekil 3.2.3.a. Pt saf metalinin elastik sabitlerinin sıcaklıkla değişimi.



Şekil 3.2.3.b. Cu₃Pt alaşımının elastik sabitlerinin sıcaklıkla değişimi.



Şekil 3.2.3.c. CuPt₃ alaşımının elastik sabitlerinin sıcaklıkla değişimi.

Bulunan elastik sabitlerden 300K'deki değerler Çizelge 3.4.'de gösterilmiştir. Pt saf metali için bu çalışma, 0K'deki deneysel değer ve diğer teorik çalışmalardan (0K ve 300K) elde edilen sonuçlarla karşılaştırılmıştır. Çizelge 3.4. bu çalışmayla aynı ve farklı potansiyeller ile bulunmuş elastik sabitlerin teorik sonuçlarını karşılaştırabilme olanağı sağlamıştır.

Çizelge 3.4. Cu, Pt ve ikili alaşımlarının elastik sabitlerinin deneysel değer (0K) (Simmons ve Wang, 1991) ve diğer teorik çalışmalarla (Dereli ve diğ., 1997; Kimura ve diğ., 1998) karşılaştırılması.

Malzeme	T(K) (300K)	C ₁₁ (GPa)	C ₁₂ (GPa)	C ₄₄ (GPa)	B(GPa)
Cu ₃ Pt	Bu Çalışma	192.710	140.255	74.527	157.740
CuPt ₃	Bu Çalışma	270.837	198.745	94.377	222.776
Pt	Bu Çalışma	308.465	228.170	104.764	254.935
	Deneysel(0K) Simmons ve Wang, 1991	358.000	253.600	74.400	288.400
	Dereli ve diğ., 1997 SC	289.600	240.000	65.600	256.000
	Kimura ve diğ., 1998 EAM (0K)	303.000	273.000	68.000	283.000
	Kimura ve diğ., 1998 SC (0K)	308.100	252.500	72.410	271.030
	Kimura ve diğ., 1998 q-SC (0K)	321.930	235.770	112.720	264.490

Pt için elastik sabitlerin 0K'deki deneysel değeri ve diğer teorik çalışmalardan elde edilen sonuçlarına bakıldığında (Dereli ve diğ., 1997; Kimura ve diğ., 1998) bu çalışmadan elde edilen sonuçların beklendiği gibi 0K'deki deneysel değerinin altında kaldığı gözlenmiştir. Çünkü sıcaklık arttığından elastik sabitler beklendiği şekilde azalmıştır.

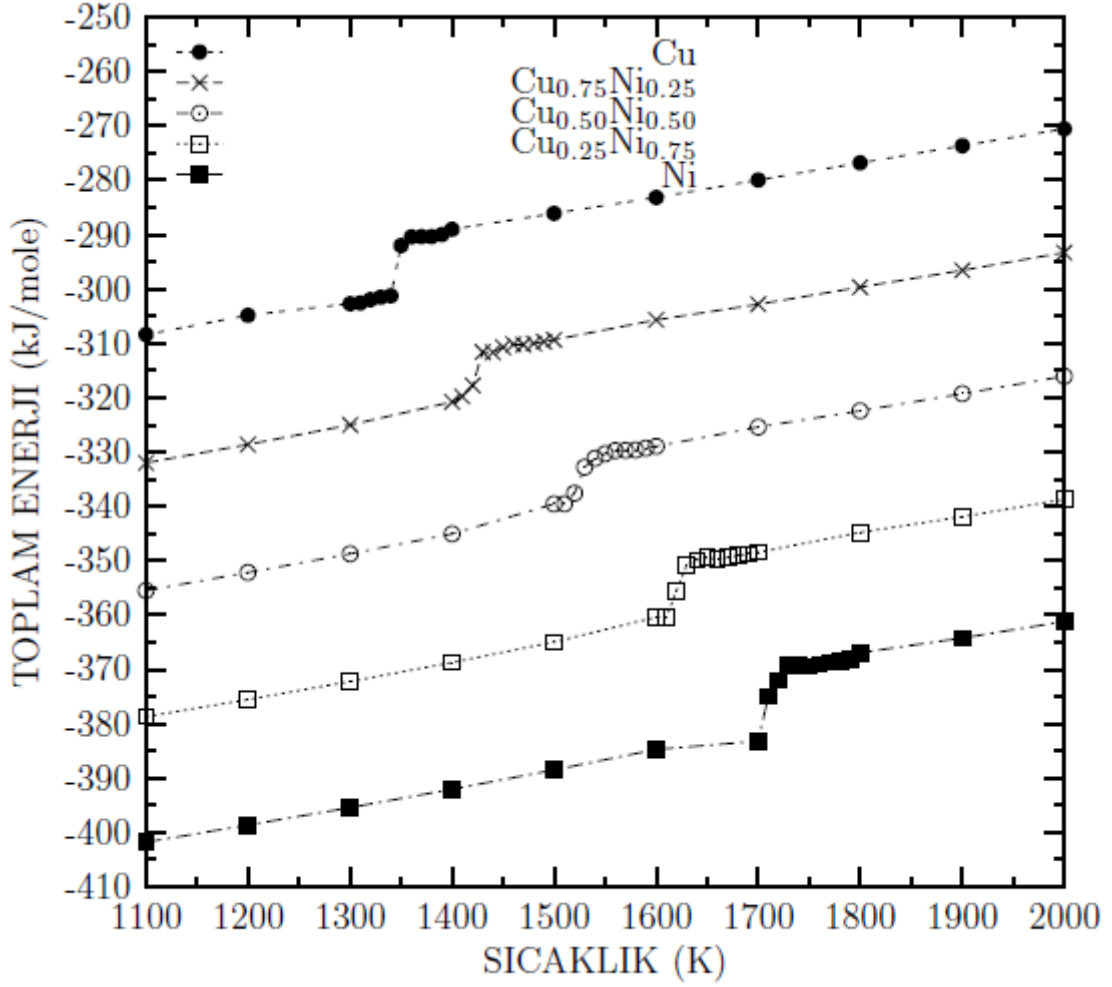
Cu₃Pt ve CuPt₃ alaşımları için ise literatürde karşılaştırma yapılacak deneysel veri ve teorik çalışma bulunamamıştır.

3.3. Cu, Ni Saf Metalleri İle İkili Düzensiz Alaşımları

Cu, Ni ve ikili düzensiz alaşımları için Cu ve Ni atomları periyodik sınır şartları altındaki MD hücre içerisine düzensiz (random) dağılmıştır. Sistemler 0.1K'den hedef sıcaklığa (2000K) 100K aralıklarla ısıtılmıştır. Bu süreç HPN ve TPN istatistik kümelerinde gerçekleştirilmiştir. HPN'de ısıtma sürecinde 100 MD adımı, dengelemede ise 5000 MD adımı kullanılmıştır.

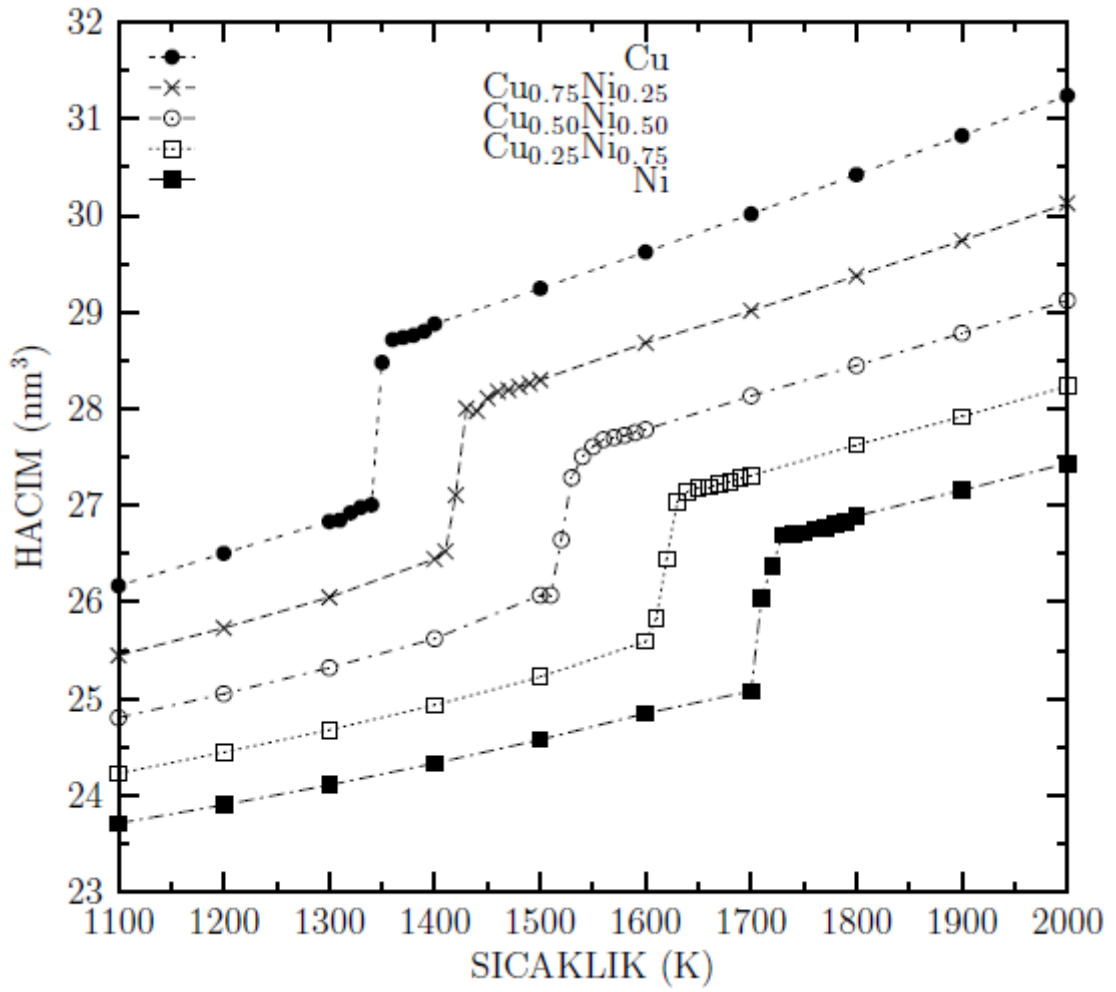
Bu kümedeki hesaplamalar sonucunda enerjideki dalgalanmalar nedeniyle denge kurucu faza ihtiyaç duyulmuştur. TPN istatistik kümesinde sistem 50.000 adımda dengeye getirilmiştir. Önceki bölümlerde çalışılan alaşım sistemlerindeki atomlar hücre içine düzenli dağılmıştır ve 30.000 adımda dengeye getirilebilmiştir. Burada ise sistem ancak 50.000 adımda dengeye getirilebilmiştir.

3.3.1. Toplam Enerji/ Hacim/ Yoğunluğun Sıcaklıkla Değişimi



Şekil 3.3.1.a. Cu, Ni ve ikili düzensiz alaşımlarının toplam enerjilerinin sıcaklıkla değişimi.

Şekil 3.3.1.a.'da görüldüğü gibi aşağıdan yukarıya Ni konsantrasyonu azalmakta malzemenin enerji değeri artmaktadır.

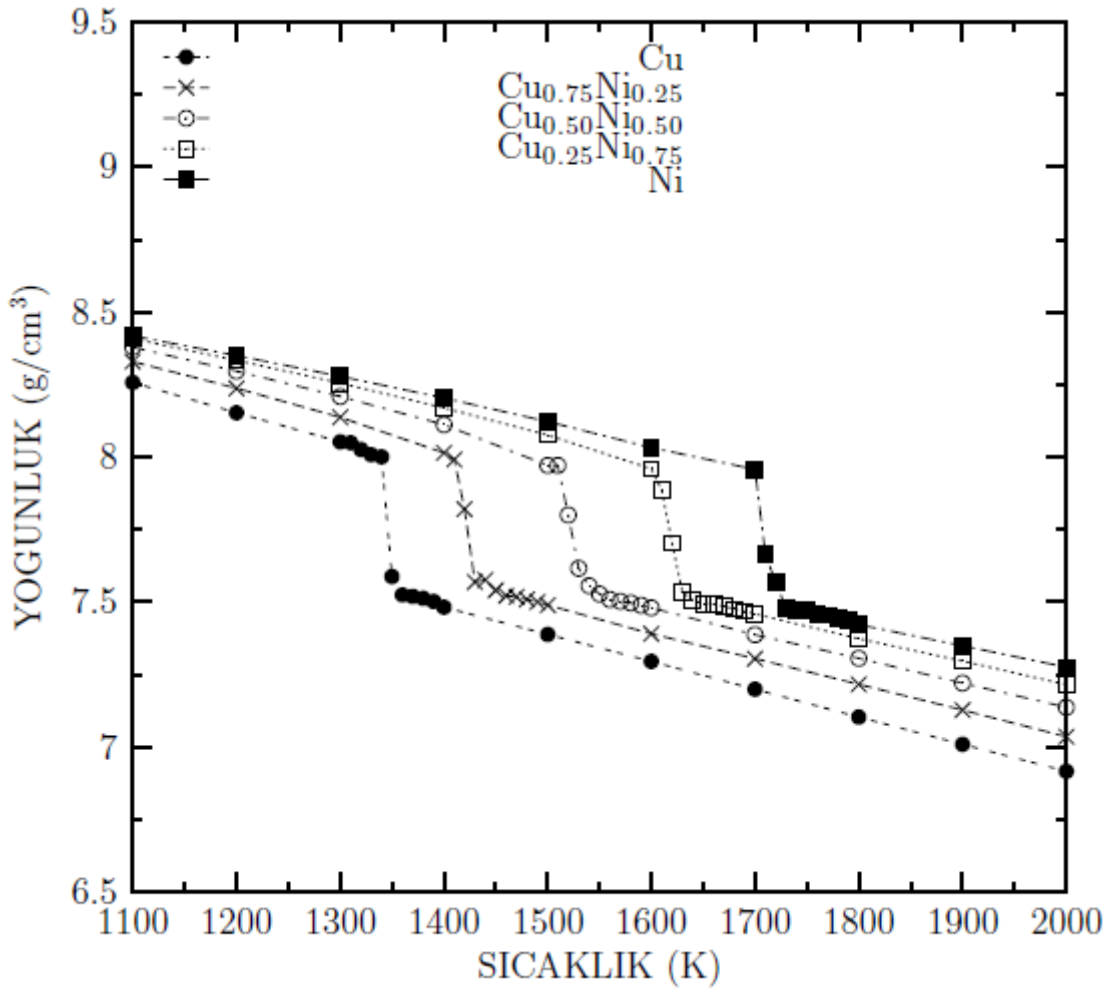


Şekil 3.3.1.b. Cu, Ni ve ikili düzensiz alaşımlarının hacimlerinin sıcaklıkla değişimi.

Şekil 3.3.1.b.'de ise yine aşağıdan yukarıya Ni konsantrasyonu azalmış malzemenin hacmi beklendiği gibi artmıştır.

Şekil 3.3.1.a. ve Şekil 3.3.1.b. birlikte incelendiğinde Cu_{0.75}Ni_{0.25} ikili alaşımı için faz geçiş sıcaklığının 1450K±50, Cu_{0.50}Ni_{0.50} için 1550K±50, Cu_{0.25}Ni_{0.75} için 1650K±50 ve Ni için 1750K±50 olduğu görülmüştür.

Genel olarak beklendiği gibi Cu konsantrasyonu arttıkça faz geçiş sıcaklığı azalmaktadır.



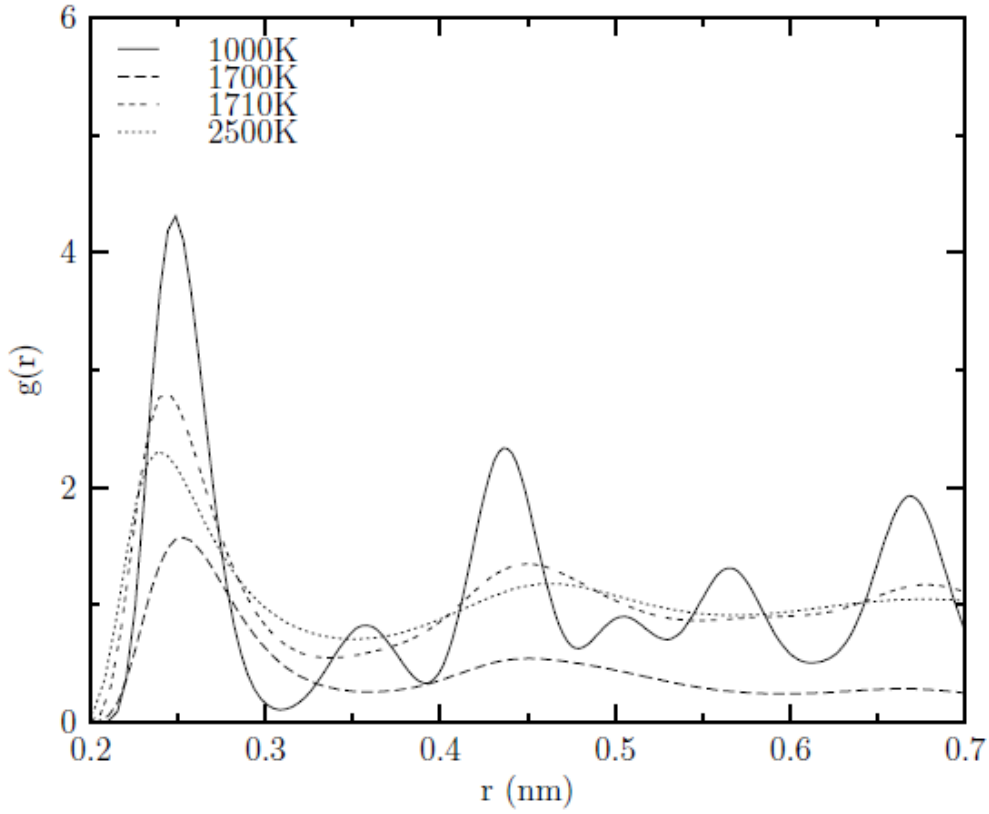
Şekil 3.3.1.c. Cu, Ni ve ikili düzensiz alaşımlarının yoğunluklarının sıcaklıkla değişimi.

Şekil 3.3.1.c.'de saf Cu metalinden saf Ni metaline doğru değişime bakıldığında erime sırasında yoğunluktaki ani azalmanın (1400K-1800K aralığında) bir kayma gösterdiği gözlenmiştir. Seçilen düzensiz alaşımlarda erime noktası için deneysel veriye rastlanmadığından sadece saf metallerin kayma aralığı dikkate alınarak alaşım durumunda bu değerlerle deneysel verilerin uyumlu davranış gösterdiği söylenebilir.

Genel olarak, Şekil 3.1.1.(a,b,c)'de beklendiği gibi sıcaklık arttıkça toplam enerji ve hacim artmış, yoğunluk azalmıştır. Yine diğer malzemelerde olduğu gibi erime noktası civarında sistemler 10K artışlarla ısıtılarak erime noktaları tespit edilmeye çalışılmıştır.

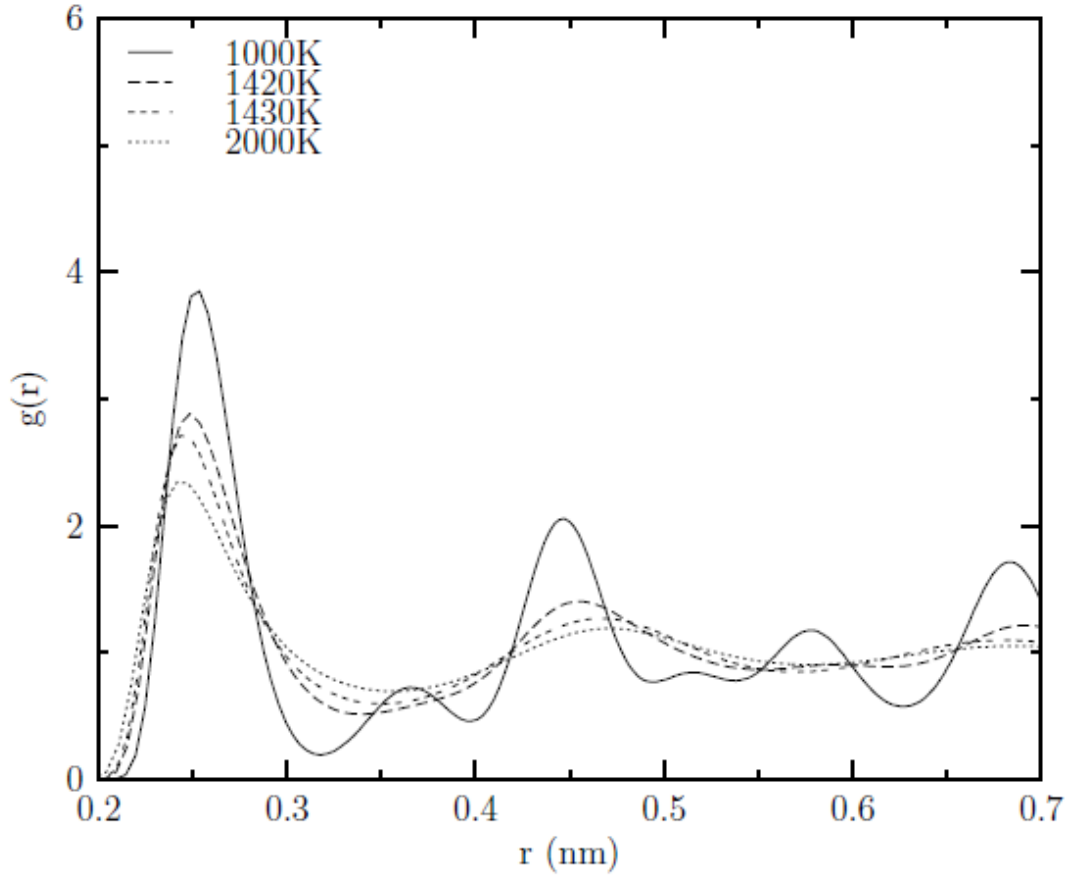
3.3.2. Çift Dağılım Fonksiyonu Eğrileri

Şekil 3.3.2.(a,b,c,d)'de Ni saf metali ile Cu-Ni düzensiz alaşımlarının çift dağılım fonksiyonu eğrileri görülmektedir. Malzemenin katı fazda, sıvı fazda ve erime noktası civarında çift dağılım fonksiyonu eğrileri çizilmiş, bulunan erime noktaları Çizelge 3.5.'de deneysel veri ve diğer teorik çalışmalardan elde edilen sonuçlarla karşılaştırılmıştır.



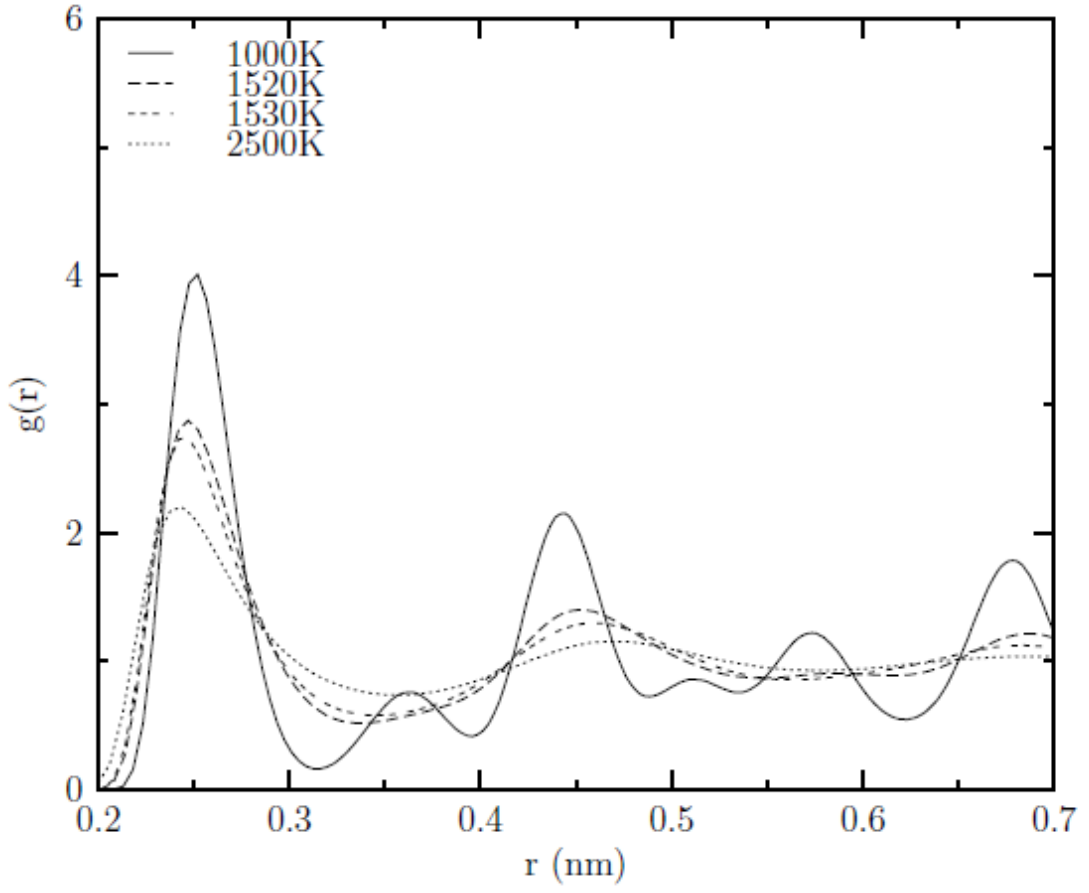
Şekil 3.3.2.a. Ni saf metali için çift dağılım fonksiyonu eğrileri.

Şekil 3.3.2.a incelendiğinde Ni saf metali için çift dağılım fonksiyonu eğrileri çizilmiştir. Erime noktası 1700K-1710K arasında tespit edilmiştir.



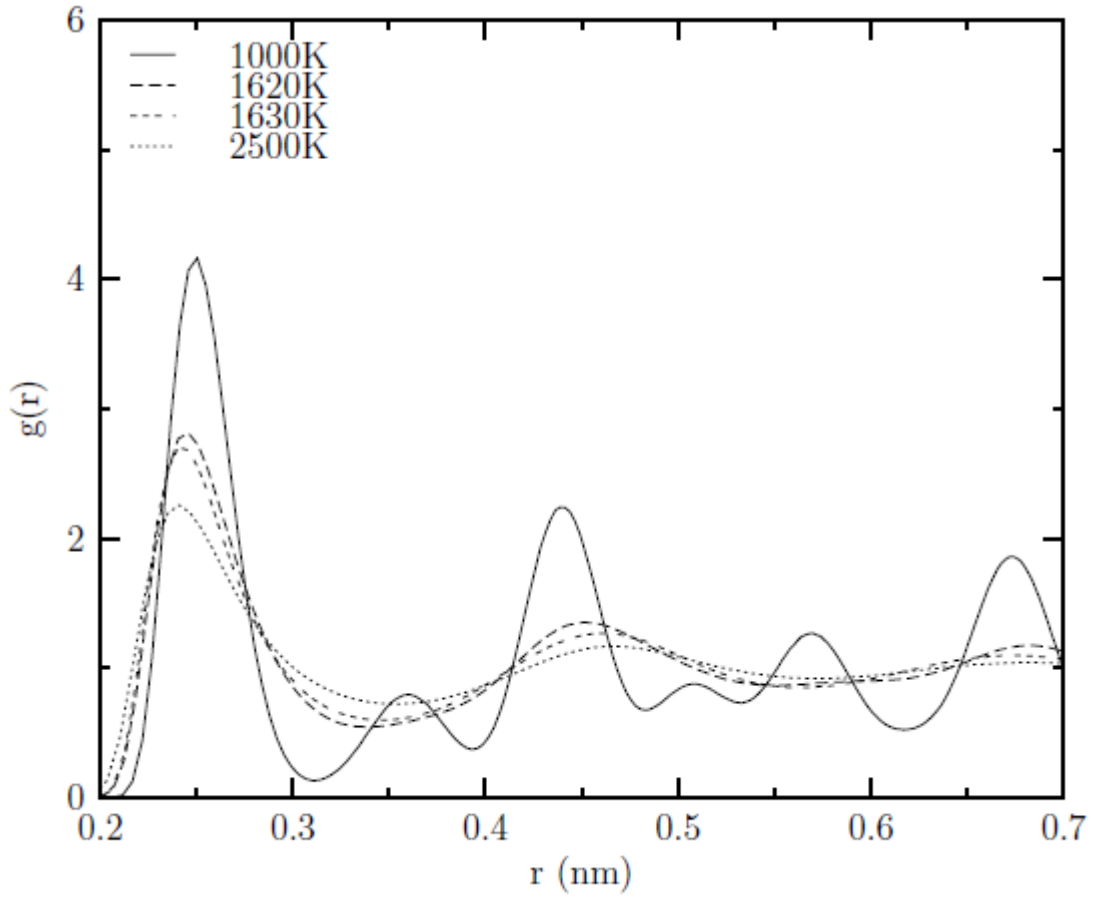
Şekil 3.3.2.b. $\text{Cu}_{0.75}\text{Ni}_{0.25}$ alaşımı için çift dağılım fonksiyonu eğrileri.

Şekil 3.3.2.b’de $\text{Cu}_{0.75}\text{Ni}_{0.25}$ alaşımı için çift dağılım fonksiyonu eğrileri çizilmiştir. Erime noktası 1420K-1430K arasında tespit edilmiştir.



Şekil 3.3.2.c. $\text{Cu}_{0.50}\text{Ni}_{0.50}$ alaşımı için çift dağılım fonksiyonu eğrileri.

Şekil 3.3.2.c'de $\text{Cu}_{0.50}\text{Ni}_{0.50}$ alaşımı için çift dağılım fonksiyonu eğrileri çizilmiştir. Erime noktası 1520K-1530K arasında tespit edilmiştir.



Şekil 3.3.2.d. $\text{Cu}_{0.25}\text{Ni}_{0.75}$ alaşımı için çift dağılım fonksiyonu eğrileri.

Şekil 3.3.2.d'de $\text{Cu}_{0.25}\text{Ni}_{0.75}$ alaşımı için çift dağılım fonksiyonu eğrileri çizilmiştir. Erime noktası 1620K-1630K arasında tespit edilmiştir.

Çizelge 3.5. Cu, Ni ve ikili alaşımlarının erime noktası sonuçlarının deneysel değer (OK) (Massalski, 1986; Martiensen ve Warlimont, 2005) ve diğer teorik çalışmalarla (LeSar ve diğ., 1991; Cai ve Ye, 1996; Gomez ve diğ., 1997; Zhou ve diğ., 2001; Delogu, 2005; Hiyazi ve Park, 2009) karşılaştırılması.

Malzeme	T_M Bu Çalışma (K)	T_M (Deneysel) (K)	DİĞER ÇALIŞMALAR (K)					
		Massalski, 1986	LeSar ve diğ., 1991 Variational	Cai ve Ye, 1996	Gomez ve diğ., 1997 TB	Zhou ve diğ., 2001	Delogu, 2005 SMA	Hiyazi ve Park, 2009 EAM
$Cu_{0.75}Ni_{0.25}$	1420±10	1473	---	---	---	---	---	---
$Cu_{0.50}Ni_{0.50}$	1520±10	1530 Martiensen ve Warlimont, 2005	---	---	---	---	---	---
$Cu_{0.25}Ni_{0.75}$	1620±10	1573	---	---	---	---	---	---
Ni	1700±10	1726	1665	2000	1359±22	1800	1675	2050

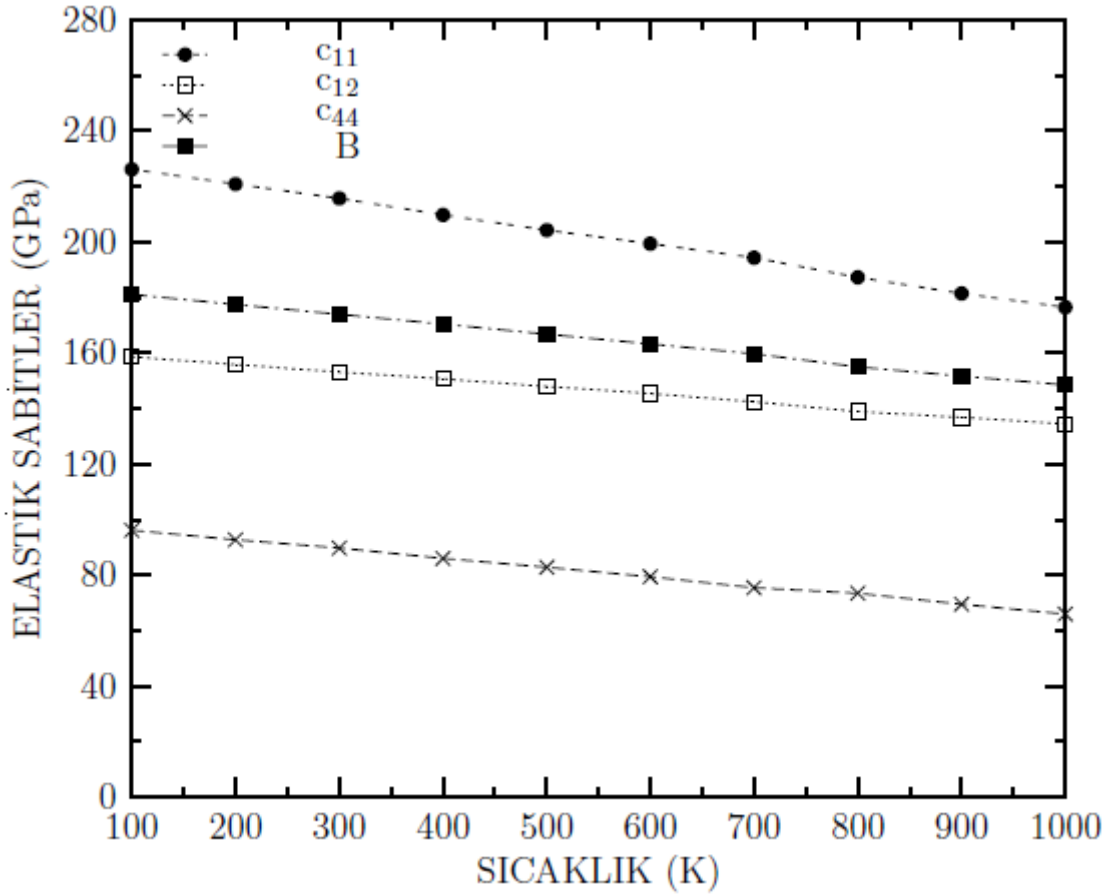
Çizelge 3.5.'de görüldüğü gibi bu çalışmada Ni saf metali için bulunan erime noktası diğer teorik çalışmalarla karşılaştırıldığında deneysel değere daha yakındır. Ayrıca $Cu_{0.50}Ni_{0.50}$ alaşımı için bulunan erime noktası değeri karşılaştırılan deneysel değere oldukça yakın bulunmuştur. Bu sonuç, simülasyonda kullanılan q-SC potansiyelinin $Cu_{0.50}Ni_{0.50}$ alaşımı için en uygun potansiyel olduğunu ve bu alaşım için karşılaştırılan deneysel veriyle (Martiensen ve Warlimont, 2005) tam bir uyum içerisinde olduğunu göstermiştir.

Bu çalışmada Cu-Ni düzensiz alaşımlarının erime noktaları literatürde teorik çalışmaya rastlanmadığından sadece deneysel verilerle (Massalski, 1986; Martiensen ve Warlimont, 2005) karşılaştırılmıştır. Ni saf metali için sırasıyla (LeSar ve diğ., 1991; Zhou ve diğ., 2001; Delogu, 2005) teorik çalışmaları deneysel veriye (Massalski, 1986)

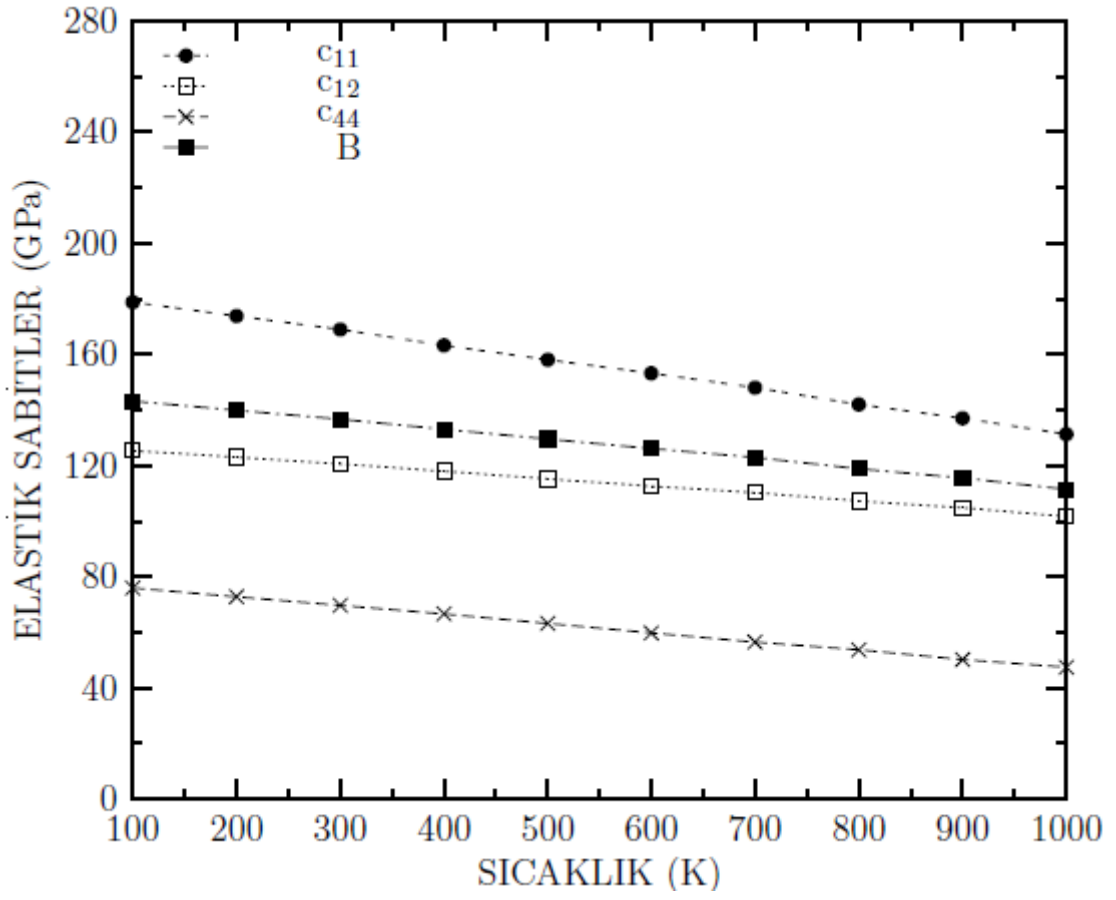
yakın olan çalışmalardır. Yine Çizelge 3.5’de görüldüğü gibi bu çalışmada Ni için tespit edilen erime noktası, diğer çalışmalara göre deneysel değere daha yakın bir sonuçtur.

3.3.3. Elastik Sabitler

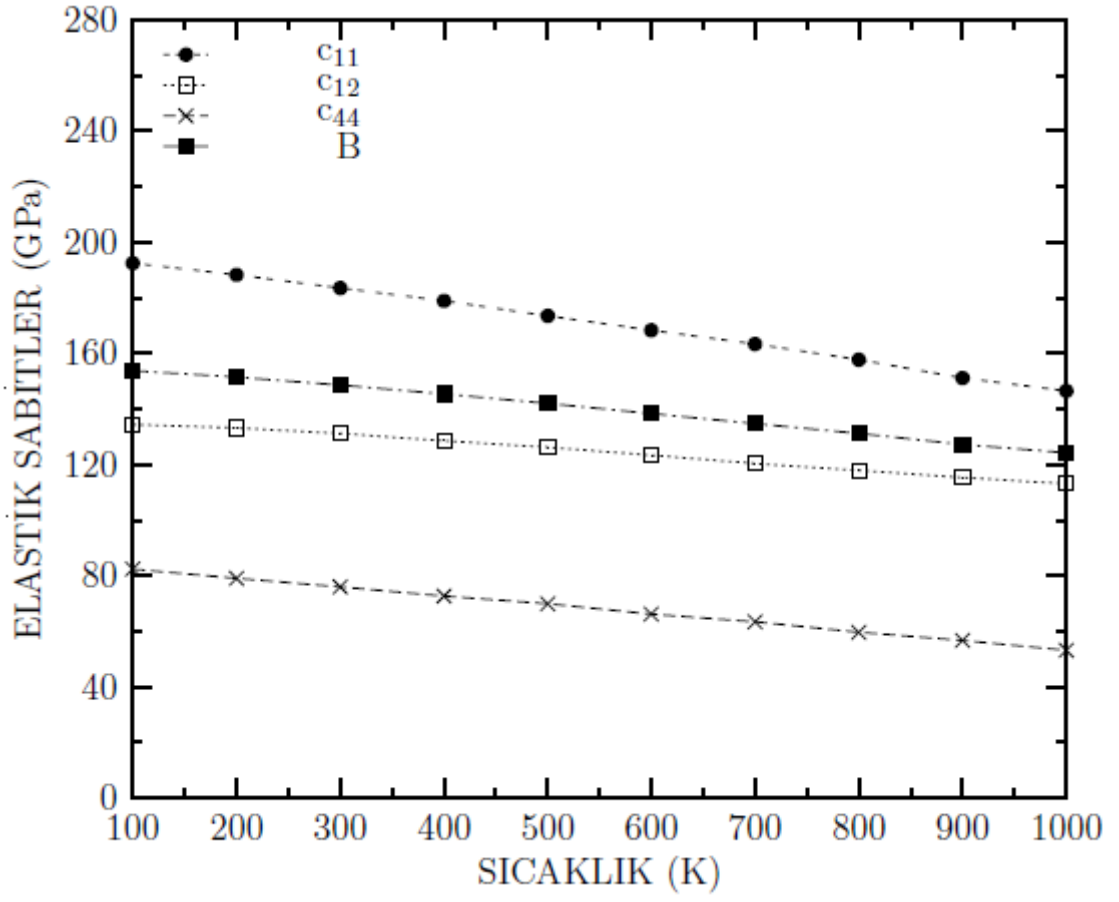
Şekil 3.3.3.(a,b,c,d)’de Ni saf metalinin ve Cu-Ni düzensiz alaşımlarının elastik sabitlerinin sıcaklıkla değişimleri gösterilmiştir. Beklendiği gibi sıcaklık arttıkça elastik sabitler azalmaktadır.



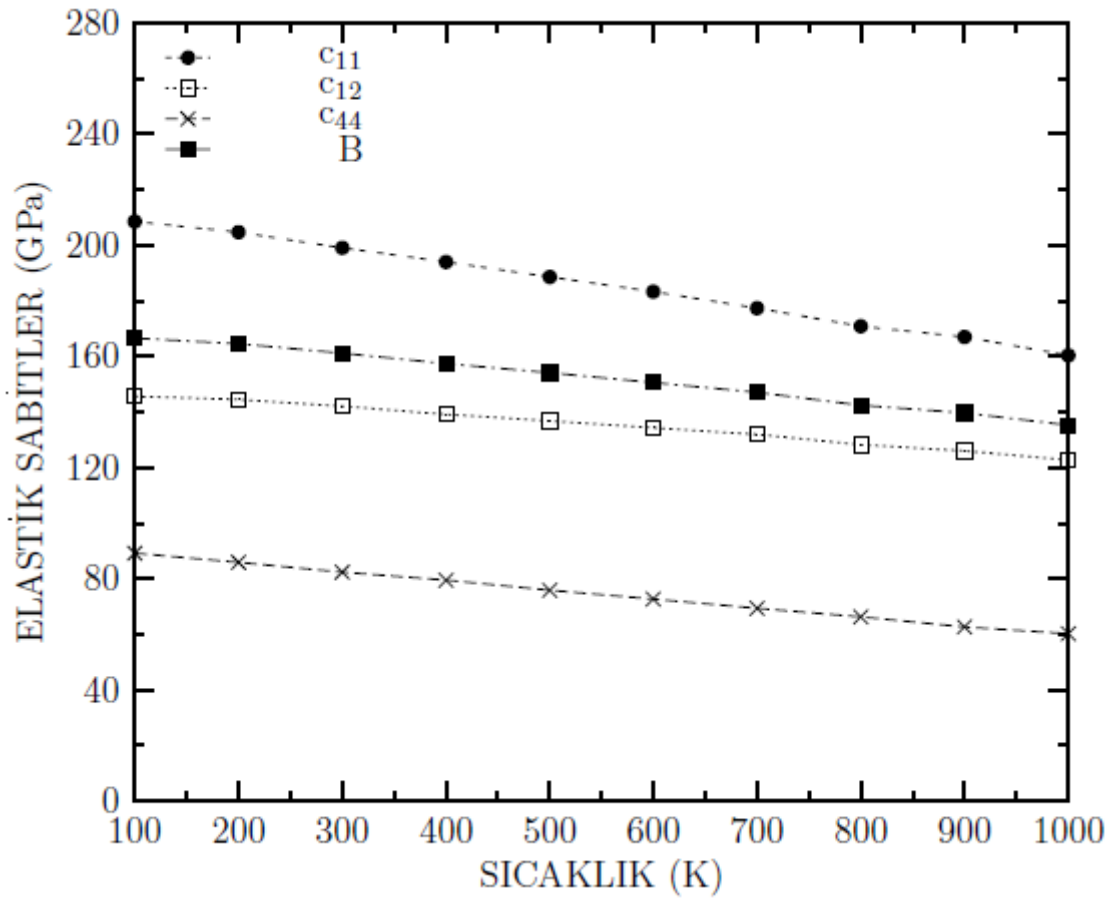
Şekil 3.3.3.a. Ni saf metalinin elastik sabitlerinin sıcaklıkla değişimi.



Şekil 3.3.3.b. Cu_{0.75}Ni_{0.25} alaşımmının elastik sabitlerinin sıcaklıkla değişimi.



Şekil 3.3.3.c. Cu_{0.50}Ni_{0.50} alaşımmının elastik sabitlerinin sıcaklıkla değişimi.



Şekil 3.3.3.d. Cu_{0.25}Ni_{0.75} alaşımmının elastik sabitlerinin sıcaklıkla değişimi.

Çizelge 3.6. Cu, Ni ve ikili alaşımlarının elastik sabitlerinin deneysel değer (0K) (Simmons ve Wang, 1991) ve diğer teorik çalışmalarla (Foiles ve diğ., 1986; Cleri ve Rosata, 1993; Dereli ve diğ., 1999; Özdemir Kart ve diğ., 2005) karşılaştırılması.

Malzeme	T(K) (300K)	C ₁₁ (GPa)	C ₁₂ (GPa)	C ₄₄ (GPa)	B(GPa)
Cu _{0.75} Ni _{0.25}	Bu Çalışma	168.999	120.569	69.711	136.713
Cu _{0.50} Ni _{0.50}	Bu Çalışma	183.576	131.176	75.926	148.643
Cu _{0.25} Ni _{0.75}	Bu Çalışma	199.129	142.122	82.388	161.124
Ni	Bu Çalışma	215.709	153.093	89.679	173.965
	Deneysel (0K)				
	Simmons ve Wang, 1991	261.200	150.800	131.700	188.00
	Foiles ve diğ., 1986	233.000	154.000	128.000	180.400
	EA M Cleri ve Rosata, 1993	257.000	155.000	136.000	189.000
	TB-SMA Dereli ve diğ., 1999	213.76±0.19	166.57±0.20	69.77±0.21	182.30±0.20
	SC Özdemir Kart ve diğ., 2005	226.610	178.770	79.240	194.730
SC Özdemir Kart ve diğ., 2005	219.590	165.340	99.570	183.620	
	q-SC				

Çizelge 3.6.'da Ni saf metal ile Cu-Ni düzensiz alaşımlarının 300K'deki elastik sabitleri gösterilmiştir. Ni saf metalinin 300K'deki elastik sabitleri 0K'deki deneysel değeri ve diğer teorik çalışmalardan (300K) elde edilen elastik sabit değerleriyle karşılaştırılmıştır. Bu çalışmada beklendiği gibi elastik sabitler 0K' deki deneysel değerlerin altında bulunmuştur.

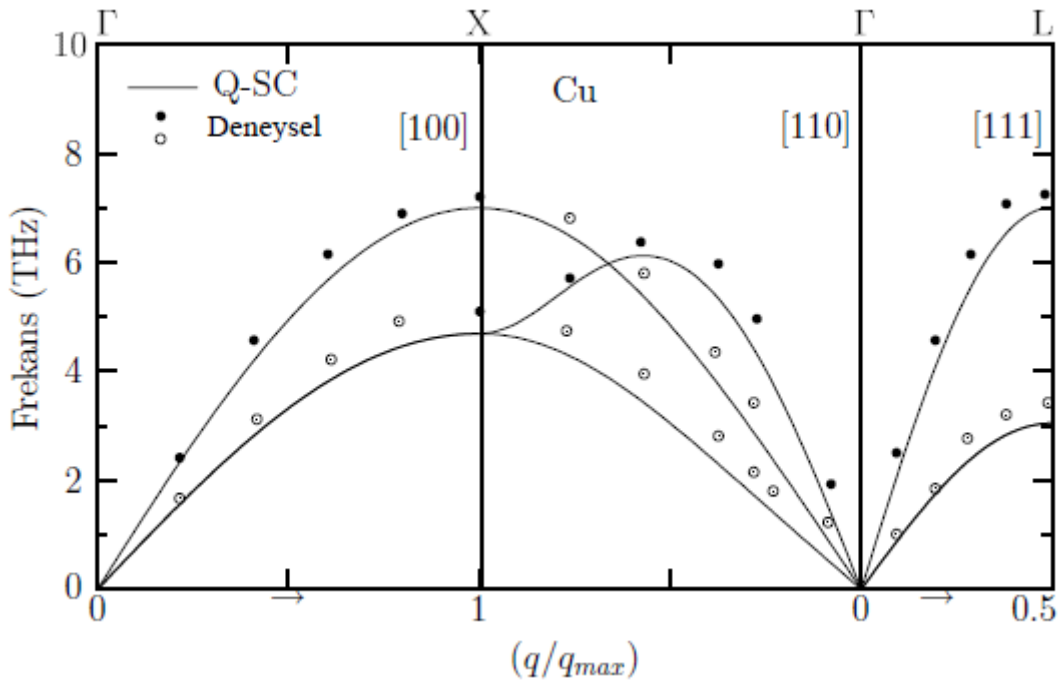
Çizelge 3.6. ayrıca 300K'de diğer teorik çalışmalardan elde edilen elastik sabitlerle bu çalışmanın karşılaştırılmasına olanak sağlamıştır. Örneğin q-SC (Özdemir Kart ve diğ., 2005) çalışması ile bu tez çalışması aynı potansiyel enerji fonksiyonu kullanılarak 300K'de gerçekleştirilmiştir. Bu çalışma daha fazla atom sayısı ile gerçek sistemleri daha iyi temsil etmektedir. Ayrıca daha yüksek donanımlı bilgisayar ekipmanı kullanılarak gerçekleştirilmesi üstünlüğü sebebiyle kapsamlı sonuçlar elde edildiği düşünülebilir.

3.4. Cu İçin Fonon Dağılım Eğrileri

EVN dinamiklerinde fonon dağılım eğrilerini elde etmek için yolak (trajectory) değerleri kullanılarak atomlar arası kuvvet sabitleri hesaplanmıştır. Bu çalışmada 2048 (8x8x8 kübik) atomlu sistemde simetri kuralları birinci Brillouin bölgesinde yüksek simetri yönlerinde düzenlenmiştir.

Dinamik matrisi köşegen haline getirebilmek için LAPACK alt programı kullanılmış, açılal hızın karesiyle özdeğerler elde edilmiştir.

Şekil 3.4'de Cu için [100], [110] ve [111] temel simetri doğrultuları boyunca fonon dağılım eğrileri görülmektedir. Simülasyonda q-SC potansiyel eğrileriyle nokta ile sembolize edilmiş deneysel veriler kıyaslanmıştır. Deneysel veriler simetri yönlerini ayırmak için gösterilmiştir. İçi dolu yuvarlakla sembolize edilen veriler boyuna (longitudinal) akustik kolları (LA), içi boş yuvarlakla sembolize edilen veriler ise enine (transverse) akustik kolları (TA) temsil etmektedir.



Şekil 3.4. Cu (300K) için temel simetri doğrultuları boyunca fonon dağılım eğrileri (Deneysel: Singh ve diğ., 1988).

4. TARTIŞMA ve SONUÇ

Bu tez çalışmasında Cu bazlı ikili metal (Ag, Pt, Ni) alaşımların MD simülasyon yöntemi ile fiziksel özellikleri ve erime özellikleri incelenmiştir. Cu-Ag ve Cu-Pt alaşımlarında Cu, Ag ve Pt atomları MD hücresi içine düzenli, Cu-Ni alaşımlarında ise Cu ve Ni atomları MD hücresi içerisine düzensiz dağılmışlardır. Elde edilen sonuçlar şöyle özetlenebilir:

MD simülasyon yöntemi kullanılarak bulunan erime sıcaklıkları deneysel veriler ile genelde uyumludur. MD simülasyonu SC tipi potansiyellerin kullanımıyla uzun menzilli etkileşmelerin hesaba katılarak gerçekleştirilmesi ve Ab-initio hesaplamalara göre daha az bilgisayar zamanı harcaması üstünlüğü sebebi ile birçok fcc geçiş metali ve alaşımlarının simülasyon çalışmalarında yaygın olarak kullanılmaktadır.

Fcc geçiş metalleri için q-SC potansiyeli kullanılarak yapılan hesaplamalarda söz konusu potansiyelin diğer teorik çalışmalara göre malzemeyi daha iyi temsil ettiği sonucuna varılabilir.

Sıcaklık arttıkça; fcc geçiş metali ve metal alaşımlarının hacim ve enerjilerinin arttığı, yoğunluklarının ve elastik sabitlerinin azaldığı gözlenmiştir. 300K'de bulunan elastik sabitler 0K'deki deneysel verilerin altında gözlenmiştir. Bu durum beklenen bir sonuçtur.

Her malzeme için 300K'de elastik sabit tabloları oluşturulmuş deneysel veri ve diğer teorik çalışmalardan elde edilen değerlerle karşılaştırılmıştır. Çift dağılım fonksiyonlarında (RDF), erime noktası civarında atomik genliklerin artması ile piklerin keskinliği kaybolmuş, malzemenin katı halden sıvı hale geçişi erime sıcaklığı civarında gözlenebilmiştir.

Cu bazlı Ag, Pt düzenli; Ni düzensiz alaşımları için faz geçişi ve erime noktası tayininde çok önemli bilgiler elde edilmiştir. Sonuçlardan $Cu_{0.50}Ni_{0.50}$ alaşımı için diğerlerine oranla erime noktasının daha başarılı şekilde tespit edildiği görülmüştür.

Pt saf metalinin erime noktası deneysel değerinin biraz üzerinde, Ag için ise deneysel değere oldukça yakın elde edilmiştir.

Cu saf metali için q-SC potansiyeli ile 300K'de fonon dağılım eğrileri çizilmiş, [100], [110] ve [111] temel simetri doğrultuları boyunca deneysel verilerle karşılaştırılmıştır.

Bu tez çalışması Cu bazlı metal alaşımlarının sanayi ve teknolojide kullanılabilirlik uygulamalarının yaygınlaştırılabileceğini göstermektedir. Tez sonuçlarının gelecekte Cu bazlı metal alaşımlarının kullanım alanlarına katkı sağlayacak bilgiler içerdiği düşünülmektedir. Üstün özellikli Cu bazlı malzeme kullanımının yaygınlaştırılmasında gerek maliyet gerekse malzeme kullanımı açısından gündemde tutulmasının gerekliliğine dikkat çekecektir. Tezin bu anlamda amacına ulaştığı söylenebilir.

KAYNAKLAR

- Alavi, S., 1994. Molecular Dynamics Simulations of the Melting of Aluminium Nanoparticles, *Steacie Institute for Molecular Sciences, National Research Council of Canada, Ottawa.*
- Aleman, M. M. G., Rey, C., Gallego, L. J., 1998. *J. Chem. Phys.*, 109, 3568.
- Allen, M.P., Tildesley, D.J. 1987. *Computer Simulation of Liquids*. Oxford Science Publications, New York.
- Andersen, H.C., 1980. Molecular dynamics simulations at constant pressure and/or temperature. *J. Chem. Phys.*, 72, 2384.
- Bruesch, P. 1982. *Phonons: Theory and Experiments I. Lattice Dynamics and Models of Interatomic Forces*. Springer-Verlag, New York.
- Cai, J., Ye, Y. Y., 1996. *Phys. Rev.* 54, 8398.
- Car, R., Parrinello, M. 1985. *Phys. Rev. Lett.*, 55, 2471.
- Cherne, F. J., Baskes, M. I., 2001. *Phys. Rev.*, B 65, 024209.
- Cleri, F., Rosato, V., 1993. *Physical Review B*, 48, 22.
- Cong, H.R., Bian, X.F., Zhang, J.X., Li, H., 2002. Structure properties of Cu-Ni alloys at the rapid cooling rate using embedded-atom method. *Material Science and Engineering A*, 326, 343-347.
- Çağın, T., Dereli, G., Uludoğan, M., Tomak M., 1998. Thermal and mechanical properties of some fcc transition metal. *Physical Review B*, volume 59, number 5.
- Çağın, T., Dereli, G., Uludoğan, M., Tomak, M., 1999. Physical properties of some fcc transition metals. *Phys. Rev. B*, 59, 3468.
- Çağın, T., Qi, Y., Li, H., Kimura, Y., Ikeda, H., Johnson, W. L., Goddard III W.A., 1999. Molecular dynamics simulations of supercooled liquid metals. *MRS Symp. Ser.*, 554: 43.
- Çağın, T., Kimura, Y., Qi, Yue., Li, Hao., İked, Hideyuki., Johnson, W.L., Goddard III, W.A., 1999. Calculation of Mechanical, Thermodynamical and Transport Properties of Metallic Glass formers. *MRS Symp. Ser.*, 554, 822-830.
- Çakmak, S., Artunç, E., Kara, İ., Çakmaktepe, Ş., 2005. Gmlm Atom Potansiyeli kullanarak Nikelin Molekler Dinamik Simasyonu. *S.D.. Fen Bilimleri Dergisi*, 9 (2), 28-32.
- Davoodi, J., Ahmadi, M., Raffi-Tabar, H., 2010. Molecular Dynamics simulation study of thermodynamic and mechanical properties of the Cu-Pd random alloy. *Elsevier Materials Science and Engineering A*, 527.
- Daw, M.S., Baskes, M. I. 1984. *Phys. Rev. B*, 29, 6443-6453.
- Delogu, F., 2005. On the relationship between the mechanical and the thermal instabilities of crystalline lattices. *Elsevier Mater. Sci. and Eng. A* 403, 48-56.

- Dereli, G., Çağın, T., Uludoğan, M., and Tomak, M., 1997. Thermal and mechanical properties of Pt-Rh alloys. *Philos. Mag. Letters*, 75, 209-217.
- Dereli, G., Uludoğan, M., Tomak, M., 1999. Thermal and mechanical properties of some fcc transition metals. *Physical Review B*, Vol. 59, Number 5, 3468-3473.
- Dove, M.T. 1993. *Introduction to Lattice Dynamics*. Cambridge University Press, New York.
- Erkoç Ş., 1997. *Phys Rep.* 278, 79-105.
- Finnis, M. W., Sinclair, J. E. 1984. A simple empirical N-body potential for transition metals. *Phil. Mag.*, A 50, 45.
- Finnis, M., 2004. *Prog. in Mat. Science.* 49, 1-18.
- Foiles, S. M., Adams, J. B., 1989. *Phys. Rev. B*, 40 5909.
- Foiles, S.M., Baskes, M.I., Daw, M.S., 1986. *Physical Review B*, 33, 7983.
- Frenkel, D., Smitt, B. 1996. *Understanding Molecular Simulation from Algorithms to Applications*. Academic Press, San Diego.
- from [http:// www.biltek.tubitak.gov.tr](http://www.biltek.tubitak.gov.tr).
- from [http:// www.dokumanlar.com /arama.asp](http://www.dokumanlar.com/arama.asp).
- from [http:// www.kimyaevi.com /arama.asp](http://www.kimyaevi.com/arama.asp).
- from [http:// www.mta.gov.tr](http://www.mta.gov.tr).
- Fruio, E., Çeviri Editörleri Çolakoğlu, K., Kara, C., 1997. *Moleküler Dinamik El Kitabı*. Springer College in Computational Physics, ICTP, Trieste, 65s.
- Gear, C.W., 1971. *Numerical Initial Value Problems in Ordinary Differential Equations*, Prentice-Hall, NJ.
- Gomez, L., Dorby, A., Diep, H. T., 1997. Melting properties of fcc metals using a tight-binding potentials. *Phys. Rev. B*, 55, 6265.
- Haile, J.M. 1992. *Molecular Dynamics Simulation*. Wiley & Sons Publication, Canada. 479p.
- Hammonds, K.D., Lyndenbell, R.M., 1992. *Surf. Sci.*, 278, 437.
- Han, X. J., Chen, M., Guo, Z. Y., 2004. Thermophysical properties of undercooled liquid Au-Cu alloys from Molecular Dynamics Simulation. *J. Phys. Matter.* 16, 705-713.
- Hiyazi, I. A., Park, Y. H., 2009. Consistent Analytic Embedded Atom Potential for Face-Centered Cubic Metals and Alloys. *J. Mater. Sci. Technol.* Vol. 25, No. 6, 835-846.
- Hoover, W. G., 1985. Canonical dynamics: Equilibrium phase-space distributions. *Phys. Rev A*, 31, 1695.
- Hwang, S.J., Lee, J.H., 2005. Mechanochemical synthesis of Cu-Al₂O₃ nanocomposites. *Mater. Sci. Eng. A*, 405, 140-146.
- Ikeda, H., Qi, Y., Çağın, T., Samwer, K., Johnson, W.L., GoddardIII, W.A., 1999. *Phys. Rev. Lett.*, 82, 822900.
- Jones, L., 1924. On the Determination of Molecular Fields, *Proc. R. Soc. Lond. A* 106, 738: 463–477.

- Kallinteris, G. C., Papanicolaou, N. I., Evangelakis, G. A., Papaconstantopoulos, D. A., 1997. Tight-binding interatomic potentials based on total-energy calculation: Application to noble metals using molecular-dynamics simulation. *Physical Review B*, Volume 55, Number 4.
- Kara, İ. 1997. Moleküler Dinamik Simülasyon Metodu ile Li_n , $Li-Li_n$, $O-Li_n$ ve $H-Li_n$ etkileşmelerinin incelenmesi (Doktora Tezi). Fırat Üniversitesi, Elazığ.
- Kart, H.H., Tomak, M., Uludoğan, M., Çağın, T., 2004. Structural and dynamical properties of liquid Pd-Ag alloys. *Int. J. Mod. Phys. B*, 18, 2257.
- Kart, H.H., Tomak, M., Uludoğan, M., Çağın, T., 2005. Thermodynamical and mechanical properties of Pd-Ag alloys. *Computational Materials Science*, 32, 107-117.
- Kart, H.H., Tomak, M., Çağın, T., 2005. Thermal and mechanical properties of Cu-Au intermetallic alloys. *IOP Science Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 13, 657-669.
- Kart, H.H., Uludogan, M., Çağın, T., Tomak, M., 2004. Comparison of structural and dynamical properties of liquid Pd, Ag and the binary alloys modelled by Sutton-Chen, Pd-Ag metal alloys. *Nanoengineering Nanofibrous Materials*, 485- 92.
- Kart, H.H., Uludoğan, M., Çağın, T., Tomak, M., 2004. Simulation of Crystallization and Glass Formation of Pd-Ag metal alloys. *J. Noncryst Sol.*, 342, 6-11.
- Kaya, S. 2012. Metal Nanoparçacıklarının Termal Özellikleri: Moleküler Dinamik Simülasyonu (Yüksek Lisans Tezi). Pamukkale Üniversitesi, Denizli.
- Kazanç, S., Çiftçi, Y. Ö., Çolakoğlu, K., Özgen, S., 2006. Temperature and pressure dependence of the some elastic and lattice dynamical properties of copper: a molecular dynamics study. *Elsevier Physica B*, 381, 96- 102.
- Kimura, Y., Qi, Y., Çağın, T., Goddard III, W. A., 1998. The Quantum Sutton-Chen Many-Body Potential for Properties of fcc Metals. *Caltech Tech. Report 003*.
- Kittel, C. 1986. *Introduction to Solid State Physics*, 6th Edn., John Wiley&Sons Inc., New York. 434p.
- LeSar, R., Najafabadi, R., Srolovitz, D.J., 1991. Thermodynamics of solid and liquid embedded-atom-method metals: A variational study. *J. Chem. Phys.* 94 (7).
- Lyndenbell, R.M. 1991. *Surf. Sci.*, 259, 129.
- Maradudin, A.A., Montroll, E.W., Weiss, G.H. 1971. *Theory of Lattice Dynamics in the Harmonic Approximation*. Academic Press.
- Martinsen, W., Warlimont, H. 2005. *Springer Handbook of Condensed Matter and Materials Data*. Springer, Germany.
- Massalski, T.B. 1986. *Binary Alloy Phase Diagrams (Volume1)*, American Society for Metals. Metals Park, Ohio. 44073.
- Mei, J., Davenport, J. W., 1992. *Phys. Rev. B*, 46, 21.
- Molinero, V., Çağın, T., Goddard, W.A., 2004. Translational diffusion in concentrated glucose-water mixtures close to the glass transition: a coarse grain molecular simulation study. *J. Phys. Chem. A*, 108, 3699-3712.
- Norskov, J. K. 1982. *Phys. Rev., B* 26, 2875.

- Nose, S., 1984. A unified formulation of the constant temperature molecular-dynamics methods. *J. Chem. Phys.*, 81, 511–519.
- Özdemir Kart, S., Tomak, M., Çağın, T., 2005. Phonon Dispersions and Elastic Constants of Disordered Pd-Ni Alloys. *Physica B*, 355, 382-391.
- Özdemir Kart, S., Tomak, M., Uludoğan, M., Çağın, T., 2004. Liquid Properties of Pd-Ni Alloys, *J. Non-Cryst. Solids*, 337, 101-108.
- Özdemir Kart, S., Uludoğan, M., Tomak, M., Çağın, T., 2004. *Solid and Liquid Properties of Pd-Ni Metal Alloys Using Quantum Sutton-Chen Many-Body Potential*, in press at *Nanoengineered Nanofibrous Materials*, Nato Science Series by Guceri, S., Gogotsi, Y., Kuzentsov, W., Kluwer Academic Book Publishers, 531-536, Netherlands.
- Özdemir Kart, S. 2004. Physical Properties of Pd, Ni Metals and Their Binary Alloys (Doktora Tezi). Ortadoğu Teknik Üniversitesi, Ankara.
- Özdemir Kart, S., Erbay, A., Kılıç, H., Çağın, T., Tomak, M., 2008. Molecular Dynamics Study of Cu-Pd ordered alloys. *Journal of Achievements in Materials and Manufacturing Engineering*, Volume 31, Issue 1.
- Özdemir Kart, S., Tomak, M., Uludogan, M., Çağın, T., 2006. Structural, thermodynamical and transport properties of undercooled binary Pd-Ni alloys. *Material Science Engineering A*, 435-436.
- Özgen, S., 1997. Sayısal Hesaplama Yöntemlerinin Şekil Hatırlamalı Alaşımlarda Difüzyonsuz Faz Dönüşümlerine Uygulanması (Doktora Tezi). Fırat Üniversitesi, Elazığ.
- Pandya, C.V., Vyas, P.V., Pandya, T.C., Rani, N., Gohel, V.B., 2001. *Phys. B: Condens. Matter*, 307, (1-4), 138.
- Parrinello, M., Rahman, A., 1980. Crystal Structure and Pair Potentials: A Molecular Dynamics Study. *Phys. Rev. Lett.*, 45, 1196-1199.
- Qi, Y., Çağın, T., Kimura, Y., Goddard III, W.A., 2002. *J. Comp. Aid. Mat.*
- Qi, Y., Çağın, T., Johnson, W.L., Goddard III, W.A., 2001. *J. Chem. Phys.*, 115, 385.
- Qi, Y., Çağın, T., Johnson, W.L., Goddard III, W.A., 2001. Melting and crystallization in Ni nanoclusters: The mesoscale regime. *J. Chem. Phys.*, 115, 385.
- Qi, Y., Çağın, T., Kimura, Y., Goddard III, W.A. 1999. *Phys. Rev., B* 59, 3527.
- Raffi-Tabar H., Sutton, A.P., 1991. *Philos. Mag. Lett.*, 63, 217.
- Raffi-Tabar, H., 2000. *Phys. Rep.*, 325-239; 2002. *Phys. Rep.*, 365,145.
- Ray, J.R., Rahman, A., 1985. *J. Chem. Phys.*, 82, 4243.
- Sadigh, B., Grimvall, G., 1996. *Phys. Rev. B* 54, 15742.
- Simmons, G., Wang, H. 1991. *Single Crystal Elastic Constant and Calculated Aggregate Properties: Handbook*, MIT Press, Cambridge.
- Singh, N., Banger, N.S., Singh, S. P., 1988. *Physical Review B*, 48, 22.
- Strachan, A., Çağın, T., Goddard III, W.A., 2001. *Phys. Rev., B*, 63, 0601103.
- Sutton, A. P., Chen, J. 1990. Longe-Range Finnis-Sinclair potentials. *Phil. Mag. Lett.*, 61, 139-146.

- Todd, B.D., Lyndenbell, R.M., 1995. *Surf. Sci.*, 328, 170.
- Ugurluođlu, N. 2006. Au ve Al'nin Bazı Termoelastik Özelliklerinin MDS Tekniđi ile İncelenmesi (Yüksek Lisans Tezi). Gazi Üniversitesi, Ankara.
- Uppenbrink, J., Wales, D.J., Kirkland, A. I., Jefferson, D.A., Urban, J. 1992. *Philos. Mag.*, B 65, 1079.
- Verlet, L., 1967. Computer Experiments on *Classical* Fluids. I. Thermodynamical Properties of Lennard-Jones Molecules. *Physical Review*, 159:98.
- Wales, D.J., Munro, L.J., 1996. *J. Phys. Chem.*, 100, 2053.
- Yaman, G.M., 2007. Metallerin Etkileşme Potansiyelleri (Bitirme Tezi). Pamukkale Üniversitesi, Denizli.
- Yang, Z., Yang, X., Xu, Z., Liu, S., 2009. Structural evolution of Pt-Au nanoalloys during heating process: Comparison of random and core-shell orderings. *Supplementary Material (ESI) for PCCP*.
- Yong, J. L., Chen, M., 2011. Thermophysical Properties of Undercooled Alloys: An Overview of the Molecular Simulation Approach. *Int. J. Sci.*, 12, 278-316.
- Zhou, X. W., Wadley, H. N. G., Johnson, R. A., Larson, D.J., Taba, N., Cerezo, A., Petford- Long, A. K., Smith, G. D. W., Clifton, P.H., Martens, R. L., Kelley, T.F., 2001. *Acta-Mater.* 49, 4005.

ÖZGEÇMİŞ

Adı ve Soyadı: Çiğdem Şükriye GÜÇLÜ

Doğum Yeri ve Yılı: Burdur, 1977

Medeni Hali: Bekar

Yabancı Dili: İngilizce



Eğitim Durumu

Lise: Burdur Cumhuriyet Lisesi (1994)

Lisans: SDÜ Fen Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümü (2000)

Yüksek Lisans: MAKÜ Fen Edebiyat Fakültesi Fen Bilimleri Enstitüsü (2012)

Çalıştığı Kurum / Kurumlar: Burdur Değişim Derşanesi (2002-2008)

Yayın Listesi:

Ç. Ş. GÜÇLÜ, Ü. BAYHAN, S. ÖZDEMİR KART, TFD27, ‘Liquid Properties of Cu₃Pt Alloy: MD Simulation Technique’ başlıklı poster sunumu, 14-17 /09/ 2010 (özet kitapçığı sayfa 448) , İstanbul/ Türkiye.

Ü. BAYHAN, Ç. Ş. GÜÇLÜ, S. ÖZDEMİR KART, TFD28, ‘Thermal and Mechanical Properties of Ordered Alloys: Cu₃Ag MD Study’ başlıklı poster sunumu, 6-9/ 09/ 2011 , Bodrum/ Türkiye.

Ç. Ş. GÜÇLÜ, Ü. BAYHAN, S. ÖZDEMİR KART, Adım Fizik Günleri II, ‘Cu Bazlı Alaşımların MD Simülasyonu’ başlıklı sözlü sunum, 25-27/ 04/ 2012 (özet kitapçığı sayfa 55) , Denizli/ Türkiye.

