

**ALÜMİNYUM İRİDYUM ve ALÜMİNYUM RODYUM
ALAŞIMLARININ BAZI TERMOELASTİK ÖZELLİKLERİNİN
MOLEKÜLER DİNAMİK SİMÜLASYON YÖNTEMİ İLE
İNCELENMESİ**

Zühre DEMİRCİOĞLU

**YÜKSEK LİSANS TEZİ
FİZİK**

**GAZİ ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

**TEMMUZ 2007
ANKARA**

Zühre DEMİRCİOĞLU tarafından hazırlanan ALÜMİNYUM İRİDYUM ve ALÜMİNYUM RODYUM ALAŞIMLARININ BAZI TERMOELASTİK ÖZELLİKLERİNİN MOLEKÜLER DİNAMİK SİMÜLASYON TEKNİĞİ İLE İNCELENMESİ adlı bu tezin Yüksek Lisans tezi olarak uygun olduğunu onaylarım.

Prof. Dr. Kemal ÇOLAKOĞLU
Tez Yöneticisi

Bu çalışma, jürimiz tarafından Fizik Anabilim Dalında Yüksek lisans/Doktora tezi olarak kabul edilmiştir.

Başkan: : Prof. Dr. Kemal ÇOLAKOĞLU

Üye : Prof. Dr. Bora ALKAN

Üye : Yrd. Doç. Dr. Yasemin ÇİFTÇİ

Tarih : 09.07.2007

Bu tez, Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü tez yazım kurallarına uygundur.

TEZ BİLDİRİMİ

Tez içindeki bütün bilgilerin etik davranış ve akademik kurallar çerçevesinde elde edilerek sunulduğunu, ayrıca tez yazım kurallarına uygun olarak hazırlanan bu çalışmada orijinal olmayan her türlü kaynağa eksiksiz atıf yapıldığını bildiririm.

Zühre DEMİRCİOĞLU

**ALÜMİNYUM İRİDYUM VE ALÜMİNYUM RODYUM
ALAŞIMLARININ BAZI TERMOELASTİK ÖZELLİKLERİNİN
MOLEKÜLER DİNAMİK SİMÜLASYON TEKNİĞİ İLE
İNCELENMESİ
(Yüksek Lisans Tezi)**

Zühre DEMİRCİOĞLU

**GAZİ ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ
Temmuz 2007**

ÖZET

Bu çalışmada, Al-Ir ve Al-Rh alaşımlarının faz diyagramları (P-T eğrileri), bazı elastik ve termodinamik özellikleri ile metalik glas (camsı yapı) oluşumu, Gömülmüş-Atom Metod (EAM) Moleküler dinamik yöntem kullanılarak çeşitli sıcaklık ve basınç altında incelenmiştir. Elde edilen sonuçların mevcut teorik ve deneysel değerlerle uyum içinde olduğu gözlenmiştir.

Bilim Kod : 202.01.073
Anahtar Kelimeler : Moleküler Dinamik Simülasyon, SC-EAM, termoelastik özellikler, Al-Ir, Al-Rh, alaşım, metalik cam
Sayfa Adedi : 104
Tez Yöneticisi : Prof.Dr. Kemal ÇOLAKOĞLU

**THE INVESTIGATIONS OF SOME THERMO-ELASTIC
PROPERTIES OF ALUMINIUM -IRIDIUM AND ALUMINIUM-
RHODIUM ALLOYS USING SUTTON CHAN-MOLECULAR
DYNAMICAL SIMULATIONS METHOD**

(M.Sc. Thesis)

Zühre DEMİRCİOĞLU

**GAZİ UNIVERSITY
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

July 2007

ABSTRACT

In this work, the phase diagrams(P-T curves), some thermo-elastic properties ,and the formation of metallic –glass ,for Al-50%Ir and Al-50%Rh alloys, are investigated at various temperatures and pressures by using Embedded –Atom Method (EAM) molecular dynamic simulation. Our reasonable results are in agreement with the available experimental and other theoretical findings.

Science Code	: 202.01.073
Key Words	:Molecular Dynamics Simulations, SC-EAM, thermoelastik properties, Al-Ir, Al-Rh, alloy, metallic glass
Page Number	: 104
Adviser	: Prof.Dr. Kemal ÇOLAKOĞLU

TEŞEKKÜR

Bu çalışmanın hazırlanmasında bana yol gösteren ve hiçbir konuda yardımını esirgemeyen, saygıdeğer danışman hocam Prof. Dr. KEMAL ÇOLAKOĞLU 'na teşekkürlerimi sunarım.

Ayrıca, çalışmalarım sırasında her zaman beni destekleyen ,sorunlarıma çözüm üreten Yrd. Doç. Dr. Yasemin ÇİFTÇİ' ye ve Dr. Ülkü BAYHAN'a, Fırat Üniversitesi'nden Doç. Dr. Soner ÖZGEN' e ve Hacı ÖZİŞİK' a teşekkür ederim. Yine, bugüne kadar bana maddi ve manevi her konuda destek veren sevgili aileme sonsuz teşekkürlerimi borç bilirim.

İÇİNDEKİLER

	Sayfa
ÖZET.....	iv
ABSTRACT.....	v
TEŞEKKÜR.....	vi
İÇİNDEKİLER.....	vii
ÇİZELGELERİN LİSTESİ.....	x
ŞEKİLLERİN LİSTESİ.....	xi
SİMGELER VE KISALTMALAR	xiii
1.GİRİŞ.....	1
2. MOLEKÜLER DİNAMİK SİMÜLASYON.....	5
2.1. Moleküler Dinamik	5
2.2. Moleküler Dinamiğin Tarihi Gelişimi.....	6
2.3. Moleküler Dinamik Simülasyon Yönteminin Bazı Uygulama Alanları.....	7
2.4. MD Hesaplama Yönetimi	8
2.4.1. (NVE)topluluğu için moleküler dinamik yöntemi.....	10
2.4.2. Parrinello-Rahman molekül dinamik yöntemi.....	12
2.5. Termodinamik Faz Diyagramları.....	13
2.5.1. İki bileşenli sistemler.....	13
2.5.2. Faz diyagramları.....	15
2.6. Potansiyel Enerji Fonksiyonu.....	17
2.6.1. Gömülmüş (Embedded) atom metodu (EAM).....	17
2.6.2. SC-EAM'nin ikili alaşım sistemlerine uygulaması.....	19
2.7. Moleküler Dinamik Simülasyon Adımları	21

	Sayfa
2.7.1. Hazırlık aşaması.....	21
2.7.2. Dengeleme aşaması.....	22
2.7.3. Sonuç analizi.....	23
3. BULGULAR VE TARTIŞMALAR.....	35
3.1. Al Metalinin İncelenmesi.....	35
3.1.1. Al elementinin termodinamik özelliklerinin sıcaklıkla değişimi.....	36
3.1.2. Al elementinin termodinamik özelliklerinin basınçla değişimi.....	44
3.1.3. Al elementinin için erime sıcaklığının basınçla değişimi.....	47
3.1.4. Al elementinin faz yapılarının belirlenmesi.....	50
3.1.5. Al elementinin termo-elastik özelliklerinin basınçla değişimleri.....	56
3.2. Al-Ir ve Al-Rh Alaşımlarının SC-EAM Modeli ile İncelenmesi.....	58
3.2.1. Al-Ir ve Al-Rh alaşımlarının termodinamik özelliklerinin sıcaklıkla değişimi.....	60
3.2.2. Al-Ir ve Al-Rh alaşımlarının termodinamik özelliklerinin basınçla değişimi.....	70
3.2.3. Al-Ir ve Al-Rh alaşımlarının için erime sıcaklığının basınçla değişimi.....	76
3.2.4. Al-Ir ve Al-Rh Alaşımları için Elastik sabiti hesabı.....	79
3.2.5. Al-Ir ve Al-Rh alaşımlarının katı-sıvı faz yapılarının belirlenmesi.....	79
3.2.6. Al-Ir ve Al-Rh alaşımları için farklı hızlarda ısıtma ve soğutmalar	83
4. SONUÇLAR VE DEĞERLENDİRME.....	96
KAYNAKLAR.....	99

	Sayfa
ÖZGEÇMİŞ.....	104

ÇİZELGELERİN LİSTESİ

Çizelge	Sayfa
Çizelge 2. 1. Elastik sabiti tensörünün matris şeklinde gösterimi.....	32
Çizelge 3.1. Deneysel veriler.....	35
Çizelge 3.2. Potansiyel parametreler.....	35
Çizelge 3.3. Al için termodinamik niceliklerin sıcaklıkla değişimi ($P=0\text{GPa}$).....	39
Çizelge 3.4. Al için hesaplanan termodinamik niceliklerin sıcaklıkla değişimi ($P=0\text{GPa}$).....	40
Çizelge 3.5. $T=300\text{K}$ sıcaklıkta basınca bağlı elde edilen Al için termodinamik nicelikler	38
Çizelge 3.6. Al için elde edilen basit termodinamik niceliklerin basınçla değişimi($T=300\text{K}$)	44
Çizelge 3.7. Al-Ir için $P=0\text{ GPa}$ basınçta sıcaklığa bağlı elde edilen termodinamik nicelikler.....	58
Çizelge 3.8. Al için elde edilen basit termodinamik niceliklerin basınçla Değişimi ($T=300\text{K}$).....	54
Çizelge 3.9. Al-Rh $T=300\text{K}$ sıcaklıkta basınca bağlı elde edilen termodinamik nicelikler.....	59
Çizelge 3.11. Al-Rh için $P=0\text{ GPa}$ basınçta sıcaklığa bağlı hesaplanan termodinamik nicelikler.....	59

ŞEKİLLERİN LİSTESİ

Şekil	Sayfa
Şekil 2.1 <i>fcc</i> kübik <i>MD</i> hücresi.....	18
Şekil 2.2. <i>fcc</i> baz atomları.....	18
Şekil 2.3. Maddenin çeşitli fazları için radyal dağılım fonksiyonları.....	24
Şekil 3.1. Al elementi için termodinamik niceliklerin adım sayısına göre değişimi (sıcaklık, iç basınç, atomik hacim, potansiyel enerji, entalpi, örgü parametresi, bütün atomlar üzerinden kare ortalama yer değiştirme yer değiştirme).....	36
Şekil 3.2. Al için hacmin sıcaklıkla değişimi ($P=0$ GPa).....	38
Şekil 3.3. Al için basınç Entalpinin sıcaklıkla değişimi ($P=0$ GPa).....	39
Şekil 3.4. Al için şartlarda elde edilen basit termodinamik nicelikler (potansiyel enerji, toplam enerji, kinetik enerji, atomik hacim, örgü parametresi, entalpi, sabit basınçta ısı kapasitesi, ısı kapasitesi/sıcaklık).....	41
Şekil 3.5. Al için MSD değerinin sıcaklıkla değişimi ($P=0$ GPa).....	42
Şekil 3.6. Al için P - V diyagramları ($T=300$ K).....	43
Şekil 3.7. Al için basit termodinamik niceliklerin basınçla değişimi (potansiyel enerji, toplam enerji, entalpi, hacim.).....	45
Şekil 3.8. Al için Bulk modülünün basınçla değişimi ($T=300$ K).....	47
Şekil 3.9. Al için sıcaklığa karşı toplam enerji değişimleri.....	48
Şekil 3.10. Al için potansiyel enerjinin toplam enerjiyle değişimi ($P=0$ GPa).....	48
Şekil 3.11. Al için entalpinin sıcaklıkla değişimi ($P=0$ GPa).....	49
Şekil 3.12. Al için radyal dağılım fonksiyonunun sıcaklıkla Değişimi ($P=0.0$ GPa).....	51
Şekil 3.13. Al için radyal dağılım fonksiyonunun basınçla değişimi ($T =300$ K).....	51
Şekil 3.14. Al için P - T diyagramı	52

Şekil	Sayfa
Şekil 3.15. Al için MSD değerinin sıcaklıkla değişimi ($P=0$ GPa).....	52
Şekil 3.16. Al için P-V diyagramı ($T=300K$).....	54
Şekil 3.17. Al için örgü parametresinin basınçla değişimi($T=300K$).....	55
Şekil 3.18. Al için Entalpinin basınçla değişimi($T=300K$).....	56
Şekil 3.19. Al-Rh alaşımı için termodinamik niceliklerin md step adım sayısı ile göre değişimi (iç basınç, atomik hacim, potansiyel enerji, entalpi).....	57
Şekil 3.20. Al-Ir alaşımı için termodinamik niceliklerin md step adım sayısı ile göre değişimi (sıcaklık, iç basınç, atomik hacim, potansiyel enerji, entalpi, örgü parametresi, bütün atomlar üzerinden kare ortalama yer değiştirme	58
Şekil 3.21. Al-Ir ve Al-Rh alaşımları için potansiyel enerjinin örgü parametresine göre değişimi.....	59
Şekil 3.22. Al-Ir ve Al-Rh alaşımları için hacmin sıcaklıkla değişimi($P=0$ GPa).....	61
Şekil 3.23. Al-Ir ve Al-Rh alaşımları için entalpinin sıcaklıkla değişimi($P=0$ GPa).....	62
Şekil 3.24. Al-Ir için elde edilen basit termodinamik nicelikler ($P=0$ GPa) (potansiyel enerji, toplam enerji, kinetik enerji, atomik hacim, örgü parametresi, entalpi, sabit basınçta ısı kapasitesi,ısı kapasitesi/sıcaklık).....	67
Şekil 3.25. Al-Rh için elde edilen basit termodinamik nicelikler ($P=0$ GPa) (potansiyel enerji, toplam enerji, kinetik enerji, atomik hacim, örgü parametresi, entalpi, ısı kapasitesi/sıcaklık).....	68
Şekil 3.26. Al-Ir ve Al-Rh alaşımları için P-V diyagramı.....	71
Şekil 3.27. Al-Ir için entalpinin basınçla değişimi ($T=300K$).....	73
Şekil 3.28. Al-Rh için entalpinin basınçla değişimi ($T=300K$).....	74
Şekil 3.29. Al-Rh alaşımı için potansiyel enerjinin basınçla değişimi ($T=300K$).....	74
Şekil 3.30. Al-Ir alaşımı için potansiyel enerjinin basınçla değişimi ($T=300K$).....	75
Şekil 3.31. Al-Ir ve Al-Rh Bulk modülünün basınçla değişimi ($T=300K$).....	76

Şekil	Sayfa
Şekil 3.32. a) Al-Ir için 0 GPa ve b) Al-Rh için sıcaklığa karşı toplam enerji değişimleri.....	77
Şekil 3.33. Al-Ir ve Al-Rh için log msd'nin sıcaklıkla değişimi	78
Şekil 3.34. Al-Ir ve Al-Rh için entalpinin sıcaklığa göre değişimleri.....	79
Şekil 3.35. Al-Rh ve Al-Ir için radyal dağılım fonksiyonunun sıcaklıkla değişimi (P=0.0GPa)	80
Şekil 3.36. Al-Ir ve Al-Rh için radyal dağılım fonksiyonunun basınçla değişimi (T=300K).....	82
Şekil 3.37. Al(%50)-Rh Alaşımı için çizilen P–T diyagramı.....	84
Şekil 3.38. ($\Delta T / \Delta t = 2,373326 \times 10^{13} K / s$) hızıyla Al-Ir için ısıtma ve soğutma da sıcaklıkla basınç değişimi.....	87
Şekil 3.39. ($\Delta T / \Delta t = 2,3733 \times 10^{13} K / s$) hızıyla Al-Rh için ısıtma ve soğutma da sıcaklıkla basınç değişimi.....	88
Şekil 3.40. ($T / t = 1,898657 \times 10^{13} K/s$) Al-Ir için hızıyla ısıtma ve soğutma da sıcaklıkla basınç değişimi.....	89
Şekil 3.41. ($T / t = 1,898657 \times 10^{13} K/s$) Al-Rh için hızıyla ısıtma ve soğutma da sıcaklıkla basınç değişimi.....	89
Şekil 3.42. Al-Ir alaşımının farklı hızlarda soğutmada sıcaklıkla birlikte hacim değişimleri.....	91
Şekil 3.43. Al-Rh alaşımının farklı hızlarda soğutmada hacmin sıcaklıkla değişimi.....	91
Şekil 3.44. Al-Ir ve Al-Rh için farklı soğutma hızlarında radyal dağılım fonksiyonları.....	92
Şekil 3.45. Al-Ir ve Al-Rh için g_{min}/g_{max} değerlerinin sıcaklıkla değişimi.....	93
Şekil 3.46. Al-Ir için (T / t) _{Al-Rh} = $1,898657 \times 10^{13} K/s$ hızında (300,2400,3000K sıcaklık değerleri) radyal dağılım fonksiyonları.....	94
Şekil 3.47. Al-Rh için (T / t) _{Al-Ir} = $1,89863 \times 10^{13} K/s$ hızında (300,2400,3000K sıcaklık değerleri) radyal dağılım fonksiyonları.....	95

SİMGELER VE KISALTMALAR

Bu çalışmada kullanılmış bazı simgeler ve kısaltmalar, açıklamaları ile birlikte aşağıda sunulmuştur.

Simgeler	Açıklama
$A(t), B(t)$ ve $C(t)$	Moleküler dinamik hücresinin zamana bağlı eksen vektörleri
A	Helmholtz serbest enerjisi
a, m, n , ve c	Sutton-Chen Gömülmüş atom metodunda üst parametreleri
a_0	Denge örgü sabiti
B_m	Hacim modülü
C_p	Sabit basınçta ısı kapasitesi
C_v	Sabit hacimde ısı kapasitesi
E_{kin}	Kinetik enerji
F_i	i atomu üzerine etkiyen toplam kuvvet
G	$h^T h$ ile tanımlanan bir metrik tensör
G	Gibbs serbest enerjisi
G_I	Karışım önce Gibbs serbest enerjisi
G_i^e	Gömülmüş atom metodunda gömme enerjisi terimi
$g(r)$	Radyal dağılım fonksiyonu
H	Entalpi
h	Parrinello-Rahman moleküler dinamik hücre matrisi

Simgeler	Açıklama
k_B	Boltzman sabiti
L	Lagrange fonksiyonu
m_i	i atomunun kütlesi
N	Atom sayısı
$n(r)$	Koordinasyon sayısı
P	Basınç
$\langle R^2 \rangle$	Kare ortalama yerdeğiřtirme
r_0	Denge baę uzunluęu
$\mathbf{r}$	Konum vektörü
$\dot{r}_i$	i atomunun hızı
$\ddot{r}_i$	i atomunun ivmesi
$\hat{r}_{ij}$	i ve j atomları arasındaki vektörün birim vektörü
S	Entropi
$\mathbf{s}_i$	Parrinello-Rahman moleküler dinamik hücresinde konum skalama vektörü
T	Sıcaklık
T_m	Erime sıcaklığı
T_{ref}	Moleküler dinamikte referans sıcaklığı
U	İç enerji
V	Hacim
v	Atomik hız

Simgeler**Açıklama**

$\Phi(r_{ij})$

i ve j atomları arasındaki etkileşme potansiyel enerjisi

Lineer termal genleşme katsayısı

Termostat işleminde hız skalama faktörü

Δt

İntegrasyon adım büyüklüğü

Enerji boyutunda bir potansiyel parametresi

$\bar{}_i$

Atomunun bulunduğu konumdaki elektron yoğunluğu

${}^a(r_{ij})$

j atomunun 1 atomu konumunda oluşturduğu elektronik yoğunluk fonksiyonu

Π

Mikroskopik zor tensörü

Moleküler dinamik hücrenin yüzey tensörü

Fonon titreşim frekansı

Kısaltmalar**Açıklama**

bcc

cisim merkezli kübik birim hücre

EAM

Gömülmüş atom metodu (EAM)

fcc

Yüzey merkezli kübik birim hücre

LJ

Lennard-Jones

Kısaltmalar	Açıklama
MD	Moleküler dinamik
MDH	Moleküler dinamik hücresi
MSD	Kare ortalama yer değıştirme
(NPH)	Parçacık sayısı, basınç ve entalpinin sabit olduğu bir istatistik topluluk
(NPT)	Parçacık sayısı, basınç ve sıcaklığın sabit olduğu bir istatistik topluluk
(NVE)	Parçacık sayısı, hacim ve enerjinin sabit olduğu bir istatistik topluluk
PEF	Potansiyel enerji fonksiyonu
RDF	Radyal dağılım fonksiyonu

1.GİRİŞ

Günümüzde, iki cisim etkileşmesi gibi yalın bir fiziksel problemten yola çıkılarak doğada meydana gelen karmaşık olaylar modellenmeye çalışılmaktadır. İki veya daha fazla elementin birleşmesiyle oluşan alaşım sistemlerinin günümüz teknolojisinde büyük öneme sahip olması nedeniyle, bu tür malzemelerin modellenmesi önemli olmaktadır. Önerilen modellerin en önemli uygulama alanı ise, fiziksel sistemlerin özelliklerini anlamaya yöneliktir.

İki veya daha fazla elementin belirli oranlarda karıştırılmasıyla daha dayanıklı malzeme yapma düşüncesi, ilk çağlardan beri bilinmektedir. Günümüzde de teknolojik malzemelere istenilen özellikleri kazandırmak için, alaşım sistemleri üzerinde çeşitli çalışmalar yapılmaktadır. İkili alaşım sistemlerine üçüncü, dördüncü ve hatta beşinci bir 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 gösterdiği birçok ilginç özellik günümüzde tam olarak açıklanamamaktadır[1].

Maddenin aynı özelliklerine sahip ve fiziksel olarak diğer bölgelerinden ayırt edilebilen kısımları Faz olarak tanımlanmaktadır. Üzerinde hiçbir etki bulunmayan bir maddenin içindeki atomların düzenlenişi termal denge durumuna karşı gelir. Madde üzerindeki çevre şartlarının değişmesi durumunda atomların düzenlenişi değişir ve madde denge haline geri dönmeye çalışır. Bu olay faz dönüşümü olarak bilinir [2].

Moleküler dinamik (MD) yöntemi, belirli bir sistem için tanımlanan Newton'un hareket denklemlerinin sayısal integrasyonu yardımıyla, sistemin faz uzayındaki yörüngesini elde etmeyi amaçlar[3, 4]. Hareket denklemleri içinde yer alan kuvvet terimleri, parçacıklarının birbiri ile etkileşmesini temsil eden bir model potansiyel enerji fonksiyonundan türetilir. Moleküler dinamik hesaplarında sistemin faz uzayında minimum enerjili bir konuma yerleşmesi ve burada dengelenmesi amaçlanır. Faz uzayında denge durumuna yerleşen sistem, gerçek bir fiziksel

sistemin pek çok özelliğini doğru olarak yansıtır. Moleküler dinamik yönteminin bu özelliğinden yararlanılarak bilgisayar üzerinde gerçek deneylere benzer sayısal deneyler yapılabilir. Sanal deneyler veya bilgisayar deneyleri olarak adlandırılabilen bu deneylerde, bilgisayar teknolojisindeki ilerlemelerin de katkısıyla günümüzde oldukça sık rastlanmaktadır. Alaşımların fazların arasındaki serbest enerji farkı hesaplamalarında MD benzetim yöntemi kullanılmaktadır. Bunlara; nikelin fcc ve hcp yapıları arasındaki serbest enerji farkının hesaplanması [1,5], faz diyagramlarının çekici moleküler kuvvetlere bağlılığının incelenmesi [6], Mg-RE(RE=Sc, Y, Pr) alaşımlarının termodinamik özelliklerinin belirlenmesi [7], hafniyumun P-T faz diyagramının hesaplanması [8], ve termodinamik parametrelerin ilk prensipleri yöntemiyle belirlenmesi [9] gibi çalışmalar örnek gösterilebilir.

MD yöntemi ile çalışılacak sistemler için atomlar arasındaki etkileşme kuvvetlerinin ve bağ tipinin tam olarak bilinmesi gereklidir. Ancak saf bir metal kristali içindeki bir atom üzerine etkiyen toplam kuvvetin bir çok bileşene sahip olduğu bilinmektedir. Bu nedenle, kesin çözümler yerine çeşitli yaklaşımlar kullanılmaktadır. Pertürbasyon nedeniyle çok karmaşık olan bir kristalin çok cisim problemi Born Oppenheimer tarafından nükleer ve elektronik olmak üzere iki kısma ayrılmıştır. Bununla birlikte, Coulomb ve Van der Waals etkileşimleri gibi, sadece nükleer koordinatlar boyunca etkiyen kuvvetler (merkezi etkileşme kuvvetleri) dikkate alınarak yapılan yaklaşımlar da problemin karmaşık doğası sadeleştirilmiştir. Merkezi olan ve merkezi olmayan etkileşmeler sırasıyla *İki Cisim Etkileşmesi* ve *Çok Cisim Etkileşmesi* şeklinde isimlendirilir. Bu etkileşmeleri modellemek için kullanılan matematiksel ifadeler *Potansiyel Enerji Fonksiyonu* (PEF) adı verilir[10].

Son yıllarda metalik sistemlerin MD benzetimleri ile incelemesinde kullanılan en önemli PEF uygulamalarından birisi, 1984 yılında Daw ve Baskes [11,12] tarafından geliştirilmiş olan Gömülmüş Atom metodudur(Embedded Atom Method-EAM). Gömülmüş Atom metodu; itici ikili bir PEF ve buna eklenen, çekici ve sistemin yoğunluğuna bağlı çok cisim etkileşme fonksiyonundan oluşmaktadır. Özellikle geçiş metallerinin modellemesinde oldukça başarılı sonuçlar kaydetmiş olan EAM günümüze kadar farklı bakış açılarıyla geliştirilmiştir[12,13]. Bu gelişmeler genel

olarak itici ve çekici etkileşme fonksiyonlarının yapısındaki değişikliği içermektedir. İtici ve çekici fonksiyonların en sade biçimde kullanıldığı EAM yapısı Sutton ve Chen tarafından önerilmiştir(SC-EAM) [15]. SC-EAM ile modellenen çeşitli metalik alaşım sistemlerinden başarılı sonuçlar elde edilmiştir[15].

Bu tez çalışmasında Al-Ir ve Al-Rh alaşımlarının termodinamik özelliklerinin MD ve EAM yöntemleri kullanılarak bilgisayar ortamında modellenmesi amaçlanmıştır. Bu amaçla SC-EAM kullanılarak Al, Ir tek atomlu sistemleri ve Al-Ir (%50 Al-%50Ir) ve Al-Rh (%50Al-%50Rh) alaşım sistemleri incelenmiştir.

Alüminyum (Al), yumuşak ve hafif bir metal olup mat gümüşümsü renktedir. Bu renk, havaya maruz kaldığında üzerinde oluşan ince oksit tabakasından ileri gelir. Alüminyum, zehirleyici ve manyetik değildir. Kıvılcım çıkarmaz. Saf alüminyumun çekme dayanımı yaklaşık 49 megapascal (MPa) iken alaşımlandırıldığında bu değer 700 MPa'a çıkar. Yoğunluğu, çeliğin veya bakırın yaklaşık üçte biri kadardır. Kolaylıkla dövülebilir, makinede işlenebilir ve dökülebilir. Çok üstün korozyon özelliklerine sahip olması, üzerinde oluşan oksit tabakasının koruyucu olmasındandır. Doğada genellikle boksit cevheri halinde bulunur ve oksidasyona karşı üstün direnci ile tanınır. Endüstrinin pek çok alanında milyonlarca farklı ürün yapımında kullanılmakta olup dünya ekonomisi içinde çok önemli bir yere sahiptir. Alüminyumdan üretilmiş yapısal bileşenler uzay havacılık sanayi için vazgeçilmezdir. Hafiflik ve yüksek dayanım özellikleri taşımacılık ve inşaat sanayinde geniş kullanım alanı bulur[16].

İridyum (Ir) elementi, oda koşullarında beyaz renkli katı bir metaldir. Periyodik çizelgede d blok elementi olarak adlandırılır. İridyum metali 1803 yılında Smithson Tennant tarafından keşfedilmiştir. Paladyum, rodyum, iridyum, osmiyum, rutenyum, platin elementleri, *Platin elementleri* olarak adlandırılır. İridyum metalinin kendi minerali olmayıp platin elementleri birlikte az miktarda bulunur. Mineralindeki altın, paladyum, platin metalleri uzaklaştırılır. Geriye kalan kalıntı sodyum bisülfat ile eritilerek su ile çözündürülerek $Rh_2(SO_4)_3$ çözeltisi elde edilir. Çözeltide çözünmeden kalan kısım iridyum içerir. Bu kalıntının Na_2O_2 ile eritilip su ile çözündürülmesi ile

IrO_2 elde edilir. Oluşan oksidin kral suyunda ($\text{HNO}_3:\text{HCl}$ 1:3) çözünmesi ile saf $(\text{NH}_4)_3\text{IrCl}_6$ çözeltisi elde edilir. Çözücünün kuruluğa kadar evaporatör ile uzaklaştırılması ile geriye kalan kalıntının hidrojen gazı altında yakılması sonucunda saf iridyum elde edilir. Kullanım alanlarını sıralarsak, Elektrik kontaklarında, Platini sertleştirici ajan olarak, yüksek sıcaklığa dayanıklılığı nedeniyle laboratuvar aletlerinin yapımında, Deri altı iğnelerinde kullanılmaktadır[1].

Rodyum (Rh); oda koşullarında metalik beyaz renkte sert ve kırılgan bir elementtir. 1803 yılında William Hyde Wollaston tarafından keşfedilmiştir. Rodyum metalinin kendi minerali olmayıp platin elementleri birlikte az miktarda bulunur. Mineralindeki altın, paladyum, platin metalleri uzaklaştırılır. Geriye kalan kalıntı sodyum bisülfat ile eritilerek su ile çözdürülerek $\text{Rh}_2(\text{SO}_4)_3$ çözeltisi elde edilir. Bu çözeltiye NaOH eklenerek rodyum hidroksit olarak çöktürülür. Çökelek üzerine HCl asit eklenerek H_3RhCl_6 çözeltisi elde edilir. NaNO_2 ve NH_4Cl eklenerek rodyum kompleksi elde edilir $(\text{NH}_4)_3[\text{Rh}(\text{NO}_2)_6]$. Bu oluşan çökeleğin HCl asit ile çözünmesiyle saf $(\text{NH}_4)_3\text{RhCl}_6$ çözeltisi elde edilir. Evaporasyon ile çözücü uzaklaştırılır. Kalan kalıntı hidrojen gazı altında yakılarak saf rodyum elde edilir.

2. MOLEKÜLER DİNAMİK SİMÜLASYON

2.1. Moleküler Dinamik

İlk bilgisayarlar, istatistik mekaniğin özel problemleri için kullanılmıştır. Metropolis ve arkadaşları [1] bilgisayar simülasyonu ile yoğun madde araştırmalarında bu konuda öncü olmuşlardır. Bunların ilk çalışmaları “Metropolis Monte Carlo” olarak bilinir ve bu metod “Monte Carlo” (MC) metodu olarak isimlendirilir. Bu metod büyük bir faz uzayından ziyade konfigürasyon uzayı üzerinde çalışmıştır. Zamana bağlı nicelikler hakkında herhangi bir ipucu olmadığından dinamik özellikler hakkında bilgi MC metodu ile elde edilememiştir.

Diğer bir önemli metod ise Moleküler dinamik (MD) bir bilgisayar simülasyon tekniğidir. Faz uzayında gösterilen noktalar boyunca hareket denklemlerinin çözümlerinin yapılabilmesini sağlamaktadır. İlk MD hesaplamalar Alder ve Wainwright tarafından çalışılmıştır. Aynı hızda fakat farklı yönelimli 100 hard spheres (bilya)’nın hareketini, iki veya üç boyutlu çözümler getirdiler. Ve momentum dağılımının dengeye ulaşıldığı görülmektedir. Yaptıkları çalışmada bu yöntemle termodinamik özelliklerin hesaplanabilirliğini gösterdiler. Vineyard ve arkadaşları Md yöntemini kullanarak itici kısa erişimli potansiyel ve buna ek olarak seçilen kristale ait sabit bir iç kuvvet eklenmesi ile elde edilen potansiyel kullanılarak, yüksek kinetik enerjili tek atomun kristal üzerine olan etkisine bakıldı. Anees Rahman [18] ise sürekli bir potansiyel kullanarak periyodik sınır şartındaki 864 atomlu sıvı argon sistemi üzerinde çalışmıştır. Bu yöntemle termal özelliklerin hesaplanabileceğini göstermişlerdir. MD yöntemi Çok parçacıklı sistemlerin hareket denklemlerini nümerik olarak çözer. Burada etkileşen atomların zaman içinde gelişimi, bunların hareket denklemlerinin integrasyon vasıtası ile izlenir. Buradaki moleküler dinamikte klasik mekanik yasaları kullanılıyor; bunlardan en önde geleni, N tane atomdan oluşan bir sistemdeki her bir atom için yazılan Newton’un

$$F_i = m_i a_i \quad (2.1)$$

yasasıdır. Burada m_i atomun kütlesi, $a_i := d^2 r_i / dt^2$ ivmesi, F_i ise o atom üzerine öteki atomlarla olan etkileşme yüzünden etkiyen kuvvettir. O halde, Monte Carlo[17] metodunun tersine, moleküler dinamik deterministik bir tekniktir: ilk konumlarla hızlar verildiğinde daha sonraki zaman içindeki gelişimi prensip olarak belirlenebilir. Daha tasviri bir söyleyişle, atomlar bilgisayarın içine doğru “hareket edecekler” birbiriyle çarpışacaklar çevrelerini merak edecekler (sistem sıvı ise), komşuları ile uyum halinde dalga içinde sallanacaklar, serbest bir yüzey varsa belkide buharlaşarak sistemden uzaklaşacaklar vs, gerçek bir maddedeki atomların yaptıklarını yapacaklar.

Bilgisayar, 6-N boyutlu faz uzayında (3N tanesi konumlar, 3N tanesi momentumlar için) bir yörünge hesaplar. Fakat böyle bir yörünge, ekseriya tek başına maksada uygun olmaz. Moleküler dinamik istatistik mekaniksel bir metottur. Moleküler dinamik simülasyonu, atomik düzeyde (konumlar ve hızlar dahil) pek çok bilgi verir. Bu mikroskobik bilgilerin basınç, enerji, ısı kapasitesi v.s gibi mikroskobik gözlenebilirliklere çevrilmesi istatistik mekanik yasalarını kullanmayı gerektirir. Yani istatistik mekanik, moleküler dinamiğin temelidir. Moleküler dinamik simülasyonunda, mikroskobik simülasyonlar ile bir sistemin makroskobik özellikleri keşfedilmeye çalışılır. Mikroskobik simülasyonla makroskobik özellikler arasındaki ilişki istatistik mekanik yardımı ile yapılır. MD Simülasyonunda parçacıkların hareket denklemleri çözülür. MD simülasyonu ile termodinamik özellikler, zamana bağlı (kinetik) veya zamandan bağımsız olarak incelenebilir [19].

2.2.Tarihi Gelişimi

MD tekniğinin gelişimini ayrıntılarıyla tartışmak bir dökümanın amacı dışındadır. Burada sadece 1950 ve 1960 larda yayınlanan ve moleküler dinamiğin kilometre taşları olarak bilinen birkaç makaleden özetle bahsedilecektir, burada aynı yıllarda ortaya çıkan MC tekniğinden bahsedilmeyecektir ilgilenen okuyucu ilk elden Wood [20] a bakabilir.

- Moleküler dinamik simülasyonu ile ilgili ilk makale Alder-Wainwright [17,20] tarafından 1957 de yazılmıştır. Makalenin amacı, bir sert küre sisteminin katı

ve sıvı bölgeleriyle ilgili faz diyagramını incelemektir. Sert küre sisteminde parçacıklar ani çarpışma yolu ile etkileşirler ve iki çarpışma arasında serbestçe hareket edebilirler. O zaman ki hesaplamalar, UNIVAC ve IBM 704 makineleri ile yapılmıştır.

- Dynamics of radiation damage adlı Gibson J.B. et al (1960) tarafından yayınlanan makale belki de sonlu farklar zaman integrasyonu yöntemine dayanan sürekli potansiyellerle ilk moleküler dinamik simülasyon örneğiydi. 500 atomlu sistemde yapılan hesaplamalar IBM 704 makinesi ile yapıldı ve her bir time- step yaklaşık bir dakika sürdü. Makale, radyasyon tahribatı yolu ile yaratılan defect (kristal kusuru)ları ile ilgiliydi.
- Argonne National Laboratory den A. Rahman, moleküler dinamiğin tanınmış bir öncüsüdür. “Correlations in the motion of atoms in liquid argon“ (1964) adlı meşhur makalesinde sıvı argonun bir çok özelliğini inceledi; bunun için 864 atom içeren bir sistemde L- J potansiyelini CDC 3600 makinesi üzerinde denedi. Rahman’ın bilgisayar kodu, pek çok MD programında hala kullanılmaktadır.

L. Verlet 1967 de L-J yi kullanarak argonun faz diyagramını hesapladı ve sıvı hale ait teorileri test etmek amacı ile korelasyon fonksiyonlarını hesapladı. O makalelerde kayıtlara gecen araç, Verlet neibor list olarak bilinir. Dahası, “Verlet time integration algoritması” nı kullandı. Aynı sistemdeki faz geçişi daha sonra Hansen–Verlet tarafından incelendi.

2.3. Moleküler Dinamik Simülasyon Yönteminin Bazı Uygulama Alanları [22]

Temel araştırmalar: Dengelenme(equilibration), Moleküler kaos(chaos)un denenmesi, testi, kinetik teori, difüzyon, transport özellikleri, boyuta (size) bağlılık, modellerin ve potansiyel fonksiyonlarının test edilmesi.

Faz geçişleri: Birinci ve ikinci-mertebeden faz geçişleri, aynı anda (bir arada /coexistence) olan fazlar, düzen (order) parametreleri, kritik olaylar.

Kollektif davranışlar: Uzay-zaman korelasyon fonksiyonunun bozunması (decay), dönme ve ötelemenin eşleşmesi (çiftlenmesi/coupling), titreşim (vibration), spektroskopik ölçümler, Yönelme mertebesi (orientation order) , dielektrik özellikler

Karmaşık sıvılar (complex fluids): Camların yapısı ve dinamiği, moleküler sıvılar, saf su ve sulu çözeltiler, sıvı kristaller(liquid crystals), iyonik sıvılar, sıvı ara yüzeyleri (interfaces), filmler ve çok ince tabakalar(monolayers) .

Polimerler: Zincirler, halkalar ve dallanmış moleküller, zarlar (membrans), denge konfigürasyonları, rölaksasyon ve taşınma süreçleri.

Katılar: Kristal kusuru oluşumu ve hareketi (defect formation and migration) , kırılma (fracture), tane sınırları (grain boundaries) , yapısal dönüşümler (structural transformations), radyasyon zararları (radiation damages), elastik ve plastik mekaniksel özellikler, sürtünme (friction), şok dalgaları, moleküler kristaller, cluster'lar, epitaksiyel büyüme.

Biyomoleküller: Proteinlerin yapısı ve dinamiği, docking of molecules,

Akışkan dinamiği: laminar akış, sınır tabakaları (boundary layers), Newtonian olmayan sıvıların reolojisi (rheology), kararsız akış vs.

2.4. MD Hesaplama Yöntemi

Moleküler dinamik yöntemi, genellikle analitik çözümü tam olarak yapılamayan problemlerin sayısal çözümlerini elde etmeyi ve belirli sistemler için kurulan modellerin deneysel çalışmalar ile karşılaştırılmasını amaçlar. Moleküler dinamik hesaplamalarında iyi tasarlanmış modeller kullanılarak, bir sistemin deneysel olarak gözlenmesi zor veya imkânsız davranışlarını incelemek de mümkündür.

Bir moleküler dinamik simülasyonu genel olarak üç adımda planlanır: i) hazırlık, ii) integrasyon ve dengeleme, iii) sonuçların alınması ve analizi [3]. Birinci adımda, bir

başlangıç değeri problemi haline getirilmiş hareket denklemleri için; parçacıkların ilk konumları, ilk hızları tanımlanır ve sisteminin başlangıç şartları oluşturulur. İkinci adımda, çözülmeye hazır hareket denklemleri, çeşitli sayısal integrasyon algoritmaları yardımıyla bilgisayarda çözülerek, sistemin başlangıçta tanımlanan termodinamik şartları için faz uzayında minimum enerjili bir noktaya hareket etmesi ve orada durulması sağlanır. Üçüncü ve son adımda, dengelenmiş sistem üzerinde çeşitli ölçümler yapılarak veriler elde edilir.

Bir sistemin ‘termodinamik durumu’ genellikle, sıcaklık(T), basınç(P) ve parçacık sayısı(N) gibi parametreler ile tanımlanır. Diğer termodinamik özellikler ‘hal denklemi’ ve temel termodinamik denklem bağıntılarından türetilir.

Bir sistemin ‘mekanik’ veya ‘mikroskobik durumu’ atomik konumlar(q) ve momentumlar (p) yardımı ile tanımlanır. p ve q ya faz uzayı denilen çok boyutlu uzayda koordinatlar olarak da bakılır. N parçacıklı sistemde bu uzay $6N$ boyutlu olur. Γ ile belirtilebilen faz uzayında tek bir nokta, sistemin durumunu tasvir eder. Bir ‘ensemble’ belirli bir termodinamik durumu sağlayan faz uzayındaki noktalar topluluğudur. M.D. simülasyonları faz uzayında zamanın fonksiyonu olarak noktalar dizisi oluşturur. Bu noktalar aynı ‘ensemble’ e ait olur ve sistemin farklı yapılarına ve momentumlarına karşılık gelir. Aşağıda çeşitli ‘ensemble’ lar özetlenecektir.

Bir ‘ensemble’, farklı mikroskobik durumlara sahip olan fakat makroskobik veya termodinamik durumları özdeş olan sistemler topluluğudur. Farklı ‘ensemble’ lar farklı karakteristiklere sahip olur.

- Mikroskobik ensemble (NVE): Termodinamik durum sabit sayıda atomu (N) sabit hacim (V), ve sabit enerjilidir (E). Bu izole bir sisteme karşılık gelir[24].
- Kanonik ensemble (NVT): Bu termodinamik durumun sabit atom sayısı (N) sabit hacim (V) ve sabit sıcaklık (T) ile karakterize edilen bir sistemler topluluğudur[21,24].
- İzobarik- izotermal ensemble (NPT): Burada N, P ve T ler sabittir[24].

- Grand Kanonik ensemble(μVT): Burada da termodinamik durum $V=st$, $T=st$ μ (kimyasal potansiyel) ile karakterize edilir.

2.4.1 (NVE) Topluluğu için moleküler dinamik yöntemi

Sabit V hacmi içinde bulunan N parçacıklı sabit E enerjili bir sistemin (NVE topluluğu) atomlararası etkileşme enerjisi $\Phi(r_{ij})$ ile modellenmek üzere (NVE) topluluğunun Lagrange fonksiyonu,

$$L = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N m_i \dot{r}_i^2 + \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j>i}^N \Phi(r_{ij}) \quad (2.2)$$

şeklinde yazılır. Burada, i parçacığının hızı, $r_{ij}=|\mathbf{r}_{ij}|=|\mathbf{r}_i-\mathbf{r}_j|$ ise i ve j parçacıkları arasındaki uzaklıktır. Eş.(2.22) ile verilen Lagrange fonksiyonunun çözülmesi sonucunda, herhangi bir i parçacığının hareket denklemi,

$$m_i \ddot{r}_i = F_i = - \sum_{j \neq i}^N \frac{\partial \Phi(r_{ij})}{\partial r_i} \hat{r}_{ij} \quad (2.3)$$

olarak elde edilir. Burada, m_i ve $\ddot{r}_i$, i parçacığının sırasıyla kütlesi ve ivmesi r_{ij} ise $\mathbf{r}_i-\mathbf{r}_j$ yerdeğiştirme vektörünün birim vektörüdür. Fiziksel sistemin matematik modeli kurulup hareket denklemleri elde edildikten sonra sayısal çözüm yapılır. Eş.2.3 denkleminin sayısal olarak çözülmesinde; Euler, Runga-Kutta, Gear ve Verlet gibi çeşitli algoritmalar bulunmaktadır[24,25]. Bunlardan en yaygın kullanılanı Verlet algoritmasının hız formudur:

$$x_i^{n+1} = x_i^n + h \dot{x}_i^n + \frac{h^2}{2m_i} F_{ix}^n \quad (2.4)$$

$$\dot{x}_i^{n+1} = \dot{x}_i^n + \frac{h}{m_i} [F_{ix}^{n+1}] \quad (2.5)$$

Burada, Verlet algoritması sadece hareket denklemlerinin x bileşenlerine uygulanmıştır. Aynı ifadeler konum ve hız vektörlerinin diğer bileşenlerine de uygulanarak çözüm yapılır. Burada F_{ix} kuvvetleri potansiyel enerji fonksiyonundan hesaplanır. Eş.2.24 ve Eş.2.25 bağıntılarıyla çözüme başlanabilmesi için başlangıç ($n=0$) konum ve hızlarının tanımlanması gerekir. Bu işlem, sistemin içinde bulunduğu fiziksel şartlar dikkate alınarak gerçekleştirilir. Bu nedenle, başlangıç şartlarının hazırlanması, incelenecek sisteme bağlı olarak değişiklik gösterebilir.

Başlangıç şartlarının hazırlanması durumunda Eş.2.4 ve Eş.2.5 denklemleri aşağıdaki algoritma yardımıyla bilgisayarda çözülebilir:

Algoritma NVE

- 1) $n = 0$ için, x_i^0 ve v_i^0 başlangıç değerlerini tanımla ve F_{ix}^0 ifadesini hesapla.
- 2) (2.4) ifadesini kullanarak konumları h kadar ilerlet.
- 3) x_i^{n+1} konumlarını kullanarak F_{ix}^{n+1} kuvvetlerini hesapla.
- 4) (2.5) ifadesini kullanarak hızları h kadar ilerlet.
- 5) $n \leftarrow n+1$ alarak (yani n yi 1 artırarak) 2. basamağa geri dön.

Algoritma NVE, $h=\Delta t$ zaman adımı aralığına bağlı olarak konumları ve hızları istenilen süre (n) boyunca hesaplayacaktır. Bu algoritmanın işleyebilmesi için doğru hesaplanmış bir Δt zaman adımı büyüklüğünün kullanılması gerekir. Bu değer, atomlar arasındaki çarpışma periyodunun 1/100 oranında bir değer olarak seçilir [3]. Bunların dışında, hesaplamalarda sıcaklık kontrolü yapılacaksa, algoritma içinde kinetik enerji sınırlama işlemi tanımlanır.

2.4.2. Parrinello-Rahman moleküler dinamik yöntemi

1980 yılında Parinello ve Rahman (PR) [26,27] tarafından anizotropik sistemlere uygulanabilecek bir MD yöntemi geliştirilmiştir. Bu yöntemde, yalıtılmış N parçacıklı sistem için toplam iç enerji ve MD hücre hacmi bağımsız değişkenler olarak alınır. Bu yöntemde korunumlu olan nicelik $H=E+P_{dış}V$ şeklinde tanımlanan

entalpidir ve MD hücresi (MDH) kenarları $h=(A, B, C)$ şeklinde bir matris oluşturacak biçimde $A(t)$, $B(t)$ ve $C(t)$ ile tanımlanan lineer bağımsız ve zamanın fonksiyonu olan üç vektörle ifade edilir. Böylece, MDH içindeki bir i atomunun konumu,

$$\mathbf{r}_i = A(t)\xi_i + B(t)\eta_i + C(t)\zeta_i \quad (2.6)$$

şeklinde yazılır. $s_i = (\xi_i, \eta_i, \zeta_i)^T$ ve $0 \leq \xi_i, \eta_i, \zeta_i \leq 1$ olan bir skala vektörü kullanarak atom konumları $\mathbf{r}_i = \mathbf{h}s_i$ şeklinde ifade edilir. Buna göre (NPH) topluluğunun Lagrange fonksiyonu

$$L_{PR} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N m_i (\dot{s}_i^T G S_i) - \sum_{i=1}^N \sum_{j>i}^N \Phi(h s_{ij}) + \frac{1}{2} M T_r (\dot{h}^T \dot{h}) - P_{dış} v \quad (2.7)$$

şeklinde yazılır [32]. Burada, m_i i atomunun kütlesidir. $G = h^T h$ şeklinde hesaplanan metrik bir tensördür. $\text{Tr}(\dots)$ tensör izi anlamında kullanılmıştır. $|h s_{ij}|$, i ve j atomları arasındaki uzaklıktır. M kütle boyutunda keyfi bir sabit, $P_{dış}$ sisteme uygulanan dış basıncıdır. Böyle bir sistem için hareket denklemleri,

$$\ddot{s}_i = -\frac{1}{m_i} \mathbf{F}_i - \mathbf{G}^{-1} \dot{\mathbf{G}} \dot{s}_i \quad (2.8)$$

$$\ddot{\mathbf{h}} = M^{-1} (\Pi - I P_{dış}) \sigma \quad (2.9)$$

ile tanımlanır [27]. Burada F_i , i parçacığı üzerine etkiyen kuvvettir, I ise birim matristir. $\sigma = (B \times C, C \times A, A \times B)$ şeklinde bir matris tanımlar. Π mikroskobik zor tensörü olarak adlandırılır ve diydik formda

$$\Pi = V^{-1} \left[\sum_{i=1}^N m_i v_i v_i - \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \frac{d\phi(r_{ij})}{dr_{ij}} r_i r_j \right] \quad (2.10)$$

şeklinde verilir. PR MD yönteminde Eş.2.8 ve Eş.2.9 bağıntılarıyla verilen hareket denklemleri Verlet algoritmasının hız formuyla çözülebilir [24].

2.5. Termodinamik Faz Diyagramları

Faz dönüşümleri denge değişimi ile ilgili olup, termodinamikte birçok uygulama alanı bulur. Denge değişimlerinin sadece yukarıda değinilen termodinamik kavramlarla açıklanabilmesi mümkün değildir. Başlangıç durumu son durumuna göre nispeten kararsız olan bir element ya da alaşım, neden bir faz dönüşümüne uğrar? Bu sorular termodinamikle açığa çıkarılabilir. Aynı zamanda faz diyagramlarının yardımıyla maddenin termodinamik tüm özellikleri hakkında bilgi edinilebilir.

2.5.1. İki bileşenli sistemler

Tek bileşenli sistemlerde bütün fazlar aynı bileşime sabittir ve denge basit olarak basınç ve sıcaklık değişimlerini içermektedir. Alaşımlarda ise denge, özellikle kompozisyona bağlı olarak önemli değişimler gösterir.

A ve B atomlarından oluşan ikili katı çözeltisinin Gibbs serbest enerjisi, saf A ve saf B nin serbest enerjilerinden hesaplanabilir. A nın X_A molü ve B nin X_B molü karıştırılmasıyla, 1 mol homojen katı çözelti yapılırsa, 1 mol çözelti toplamı $X_A + X_B = 1$ şeklinde gösterilir. Böyle bir alaşımın serbert enerjisi,

$$G_1 = X_A G_A + X_B G_B \text{ J mol}^{-1} \quad (2.11)$$

şeklinde yazılır. Burada G_A ve G_B sırasıyla saf A ve saf B' nin, deneysel olarak gözlenebilecek değerlerinden daha yüksek değerlere sahip molar serbest enerjileridir. Şekil 2.1 de verilen molar serbest enerji diyagramında en verimli nokta G_1 olarak gösterilmektedir. A ve B atomlarının karışımı süresince sistemin serbest enerjisi sabit kalmayacak ve daha sonra katı çözeltinin serbest enerjisi $G_2 = G_1 + \Delta G_{kar}$ olacaktır.

Burada ΔG_{kar} karışımın gibbs serbest enerji değişimi olarak tanımlanır [18]. Bunun dışında $G_1 = h_1 - TS_1$ ve $G_2 = h_2 - TS_2$ ifadeleri kullanılarak,

$$\Delta H_{kar} = H_2 - H_1 \text{ ve } \Delta S_{kar} = S_2 - S_1 \quad (2.12)$$

İfadelerini yazmak da mümkündür. Böylece, karışımın serbest enerji değişimi,

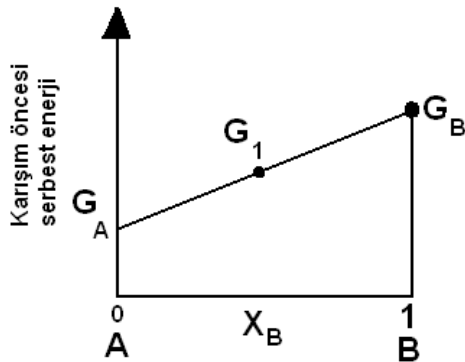
$$\Delta G_{kar} = \Delta H_{kar} - T\Delta S_{kar} \quad (2.13)$$

şeklinde elde edilir. Karışım sürecinde, çözeltinin ısısı soğrulur veya atılır.

Basit bir karışımında $\Delta H_{kar} = 0$ olduğu zaman çözeltinin ideal olduğu söylenir ve karışımdaki serbest enerji değişimi sadece entropi değişimine bağlı kalır:

$$\Delta G_{kar} = -T\Delta S_{kar} \quad (2.14)$$

Burada ΔS_{kar} karışabilen ve karışmayan durumlar arasındaki entropi farkıdır. Katı çözeltilerde entropi terimi; termal katkı S_{term} ve konfigürasyonel katkı S_{konf} olarak iki kısımda incelenebilir.



Şekil 2.1. G_1 (karışım öncesi serbest enerji) enerjinin alaşım kompozisyonu ile değişimi[29].

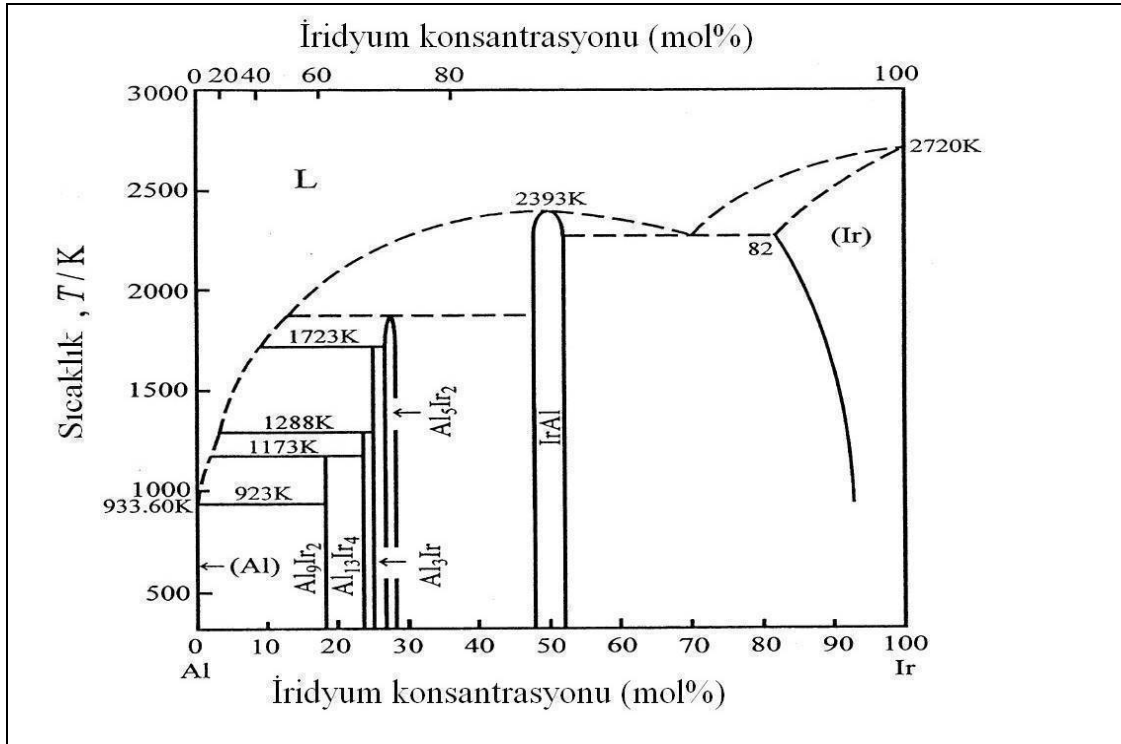
2.5.2 Faz Diyagramları

Gerçekte faz diyagramları; yavaş soğuma koşullarında (dengede) farklı sıcaklıklarda ve bileşenlerde hangi fazların bulunduğunu, bir elementin ve ya bileşiğin bir diğer biçimdeki denge durumundaki katı çözünürlüğünü, denge koşullarında soğumakta olan alaşımın katılaşmaya başladığı sıcaklık ile katılaşmanın devam ettiği sıcaklık aralığını ve farklı fazların hangi sıcaklıklarda erimeye başladığını gösteren eğridir[28]. Bu nedenle, denge diyagramları, sadece alaşım kompozisyonuna karşı denge sıcaklıkları olarak değil, aynı zamanda sıcaklığa karşı basınç diyagramları olarak da verilebilirler.

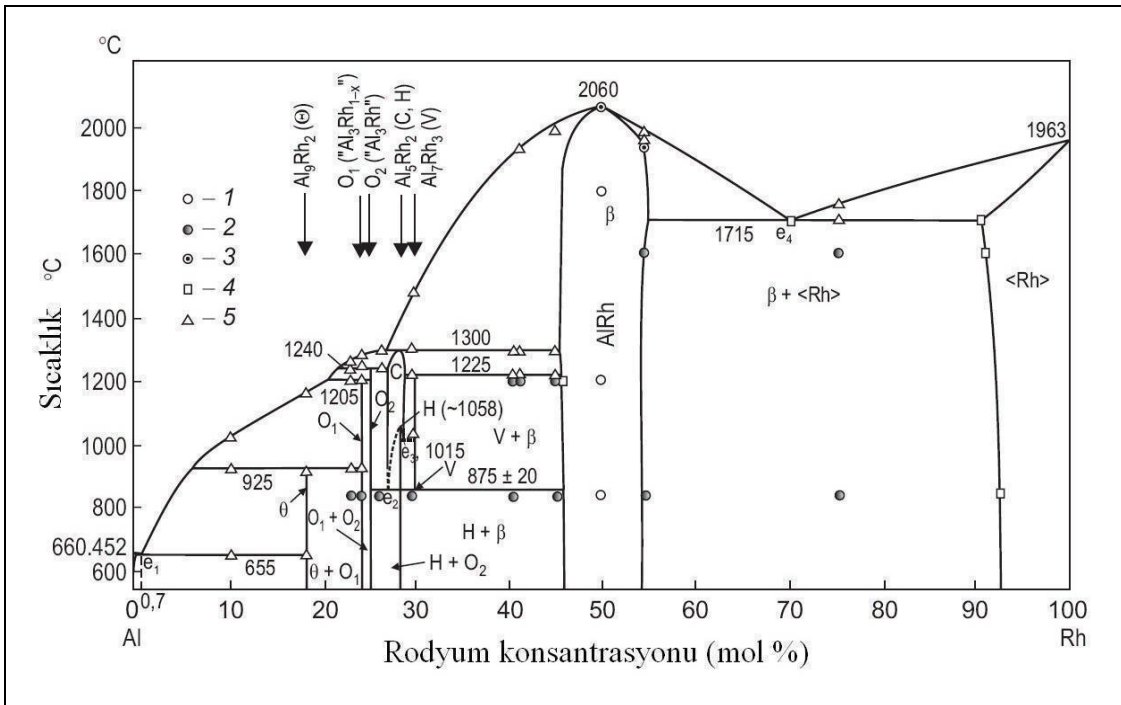
Katı ve sıvıda A ve B'nin tamamı karıştığı zaman en basit durum oluşur. Sıcaklığın değişmesiyle saf A ve B'nin serbest enerjisi değişecektir. Saf bileşenler için denge erime sıcaklığına gelindiğinde $T_m(A)$ ve $T_m(B)$ sıcaklıklarında $G_{\text{Katı}} = G_{\text{Sıvı}}$ durumu gözlenir. Her iki durum fazda serbest enerji, sıcaklığın artması ile alır. A-B alaşımları için bu değişimler önemlidir.

Düzenli bir katı çözeltide $\Delta H_{\text{Kar}} < 0$ olduğunda, karşı tür atomlar arası bağ kuvvetleri artar. Bu tip alaşımlarda, düşük sıcaklıklarda süper örgü gibi düzenli yapılanma eğilimi görülür. Farklı atomlar arasında çok güçlü bir çekme kuvveti varsa, düzenli faz erime noktasına kadar gözlenebilir.

Bu çalışmada kullanılan Al-Ir ve Al-Rh alaşımlarının faz diyagramları Şekil 2.2 ve Şekil 2.3 de verilmiştir.



Şekil 2.2. Alüminyum iridyum Faz diyagramı [30]



Şekil 2.3. Al-Rh alaşımı faz diyagramı [31]

2.6 Potansiyel Enerji Fonksiyonu

2.6.1. Gömülmüş atom metodu (EAM)

Metalik sistemleri modellemek amacıyla kullanılan iki cisim etkileşme potansiyellerinin kolayca yorumlanabilme ve hızlı hesaplama avantajları yanında küresel simetrik etkileşmelere uygulanması gibi birtakım sınırlamalarının olması, araştırmacıları çok cisim potansiyellerini kullanmaya yöneltmiştir. Son on beş yıl içinde geliştirilen ve pek çok metalik sistemin termodinamik ve yapısal özelliklerini doğru olarak belirleyen çok cisim potansiyelleri bulunmaktadır [11]. Çok cisim potansiyelinin en büyük avantajı, metalik sistemlerin elastik sabitleri ve kohesif enerjisi gibi temel özelliklerini en iyi şekilde tanımlayabilmesidir. Bu çalışmadaki metalik sistemler, çok cisim potansiyeli olarak bilinen gömülmüş atom metodu ile modellenmiştir.

EAM yaklaşımında kristal içindeki bir atomun enerjisi, elektrostatik itici (merkezi etkileşmeler) enerjilerin toplamı ile atomun bulunduğu koordinattaki elektronik yük yoğunluğundan kaynaklanan gömme enerjisi terimlerinin toplamı olarak tanımlanır. Bu metoda göre, N atomlu bir kristalin toplam enerjisi,

$$E_T = \sum_{i=1}^N \left[\frac{1}{2} \sum_{j=1}^N \phi(r_{ij}) + G_i^e(\bar{\rho}_i) \right] \quad (2.15)$$

şeklinde verilir [7]. Burada, $\phi(r_{ij})$ ikili etkileşme fonksiyonu, $G_i^e(\bar{\rho}_i)$ ise gömme enerjisini tanımlayan bir fonksiyon olup çekici etkileşmeleri tanımlar. Bu iki tip etkileşmeleri tanımlayan fonksiyonlara bağlı olarak EAM yaklaşımının çeşitli kullanımlarını görmek mümkündür. Günümüzde EAM nin en yaygın kullanılan tipleri Finnis–Sinclair (FS) [32], Voter–Chen (VC) [39] ve Sutton–Chen (SC) [34] modelleridir. İkili etkileşmeleri tanımlamak için; Lennard–Jones (LJ), Mei, Morse veya Buckingham gibi ampirik fonksiyonlar kullanılabildiği gibi kuantum mekanik katkılı elektrostatik itici potansiyel fonksiyonları da kullanılabilmektedir [41]. Gömme fonksiyonu için de ampirik ve teorik tanımlamalar bulunmaktadır. Ancak,

bilgisayar benzetimlerinde ampirik tanımlamalar daha yaygın kullanılmaktadır. FS tarafından yapılan yarı ampirik bir yaklaşıma göre, sıkı bağ teorisinde ikinci momentler kullanılarak elde edilen sonuçlar üzerine kurulu gömme fonksiyonu

$$G_i^s(\rho_i) = -c\sqrt{\bar{\rho}_i} \quad (2.16)$$

şeklinde tanımlanır [31]. Burada c kristal özelliklerinden elde edilen boyutsuz bir sabittir. Orijinal EAM yaklaşımında, gömme fonksiyonunun argümanı, $\bar{\rho}_i$, i noktasındaki elektronik yük yoğunluğu olarak tanımlanır ve i atomunu çevreleyen komşu atomların atomik yük yoğunluklarının i noktasındaki toplamı şeklinde hesaplanır:

$$\bar{\rho}_i = \sum_{j \neq i}^N \rho^a(r_{ij}) \quad (2.17)$$

Böylece, EAM yaklaşımında ikili PEF $\phi(r_{ij})$ ve yük yoğunluk fonksiyonu $\rho^a(r_{ij})$ olmak üzere nükleer koordinatlara bağlı iki fonksiyonun tanımlanması gereklidir. Bu fonksiyonlar, FS yaklaşımı çerçevesinde SC tarafından LJ modeli ile tanımlanarak kristal toplam enerjisi,

$$E_T = \varepsilon \sum_{i=1}^N \left[\frac{1}{2} \sum_{j \neq i}^N \left(\frac{a}{r_{ij}} \right)^n + c\sqrt{\bar{\rho}_i} \right] \quad (2.18)$$

ve

$$\bar{\rho}_i = \sum_{j \neq i}^N \left(\frac{a}{r_{ij}} \right)^m \quad (2.19)$$

şeklinde ifade edilmiştir [34]. Burada; ε enerji boyutunda bir parametre, a kristalin örgü sabiti, c boyutsuz bir sayı, n ve m değerleri ise tamsayılardır. Bu dört potansiyel parametresi, maddenin deneysel örgü sabiti, kohesif enerjisi ve hacim modülü (B_m)

değerleri kullanılarak belirlenmektedir [34]. Böylece, Eş. 2.34 ile verilen ifadede bir i atomu üzerine etkiyen kuvvet

$$F_i = - \sum_{j \neq i} \left[\frac{\partial G_i}{\partial \rho_i} \cdot \frac{\partial \rho_j}{\partial r_{ij}} + \frac{\partial G_j}{\partial \rho_j} \cdot \frac{\partial \rho_i}{\partial r_{ij}} + \frac{\partial \phi(r_{ij})}{\partial r_{ij}} \right] \hat{r}_{ij} \quad (2.20)$$

şeklinde elde edilir.

2.6.2. SC- EAM'nin ikili alaşım sistemlerine uygulanması

Gömülmüş Atom Metodu teknolojik öneme sahip birçok alaşım sistemine de uygulanmaktadır. a ve b türü atomlardan oluşan ikili alaşım sistemi için toplam potansiyel enerji ifadesi;

$$E_{top} = \sum_i^a F^a(\rho_i) + \frac{1}{2} \sum_{i^a j^b} \phi^{aa}(r_{ij}) + \frac{1}{2} \sum_{i^a j^b} \phi^{ab}(r_{ij}) + \frac{1}{2} \sum_{i^a j^b} F^b(\rho_i) + \frac{1}{2} \sum_{i^a j^b} t^b j^a \phi^{bb}(r_{ij}) + \frac{1}{2} \sum_{i^a j^b} t^b j^a \phi^{ba}(r_{ij}) \quad (2.21)$$

şeklinde verilmektedir[35,36]. i^a ve j^b sırasıyla a ve b türündeki atomlar üzerinden toplamı göstermektedir. Alaşım sistemleri için gömme fonksiyon ifadeleri, tek atomlu sistemlerdeki yapı ile aynıdır ve aynı parametre takımları kullanılır. Bir alaşımdaki aynı tip atomlar arasındaki ikili etkileşme potansiyeli ile de tek atomlu sistemde kullanılan ile aynıdır, fakat farklı tür atomlar arasındaki ikili etkileşme potansiyelinin tanımlanmasında çeşitli yöntemler bulunmaktadır. Bu yöntemlerinden birisi Johnson tarafından

$$\phi^{ab} = \frac{1}{2} \left[\frac{\rho^b}{\rho^a} \phi^{aa}(r) + \frac{\rho^a}{\rho^b} \phi^{bb}(r) \right] \quad (2.22)$$

şeklinde verilmiştir[36].

SC-EAM de ikili alařım sistemi iin toplam potansiyel enerji ifadesi ve fonksiyon parametreleri teorik olarak ařağıdaki řekilde hesaplanabilmektedir[37].

$$E_{top} = \sum_a \left[\sum_{b \neq a} \frac{1}{2} D_{ab} \phi(r_{ab}) - c_a D_{aa} \sqrt{\rho_a} \right] \quad (2.23)$$

$$\phi^{ab}(r_{ab}) = \left(\frac{a^{ab}}{r_{ab}} \right)^{n_{ab}} \quad (2.24)$$

$$\rho^f(r_{ab}) = \left(\frac{a^{ab}}{r_{ab}} \right)^{n_{ab}} \quad (2.25)$$

$$\rho_a = \sum_{b \neq a} \rho^f(r_{ab}) \quad (2.26)$$

$$D_{ab} = \sqrt{D_a D_b} \quad (2.27)$$

$$m_{ab} = \frac{m_a + m_b}{2} \quad (2.28)$$

$$n_{ab} = \frac{n_a + n_b}{2} \quad (2.29)$$

$$a_{ab} = \frac{a_a + a_b}{2} \quad (2.30)$$

Bununla birlikte alařım sistemleri iin Eř.3.46 ve Eř.3.49 ifadeleriyle belirlenen PEF parametrelerinin her zaman doęru sonular retmedięi bilinmektedir. Bu tr durumlarda, alařımın deneysel verileri kullanılarak, bilgisayar benzetim yntemleri ile optimizasyon alıřmaları yapılmaktadır[38,39].

a ve b türü atomlardan oluşmuş bir alaşım sisteminde a türündeki bir atom üzerine x doğrultusu boyunca etki eden net kuvvet ifadesi

$$f_a^b = - \left(\sum_b^* D_{ab} \phi(r) \frac{r_{ab}^x}{r_{ab}} - \frac{c_a D_{ab}}{2} \frac{\sum_b^* \rho^f(r) \frac{r_{ab}^x}{r_{ab}}}{\rho_a} + \sum_b^* \frac{c_b D_{ba}}{2 \rho_a} \rho^u(r) \frac{r_{ab}^x}{r_{ab}} \right) \quad (2.31)$$

şeklinde elde edilir. Burada ϕ sembolü Θ/Θ_r , $*$ işareti $a \neq b$ olduğunu göstermektedir[37].

2.7. Moleküler Dinamik Simülasyon Adımları

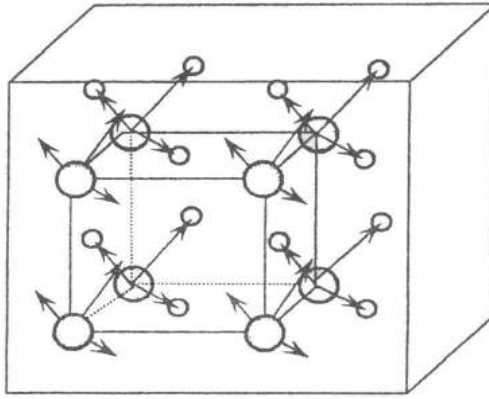
2.7.1. Hazırlık aşaması

N atomlu bir sistemde algoritma başlangıç konumlarının sayısı $3N$ dir. Çok sayıda atom için yapılan çalışmalarda ($N \sim 1000$), atom konumlarının elle programa girilmesi mümkün değildir. Bunun yerine, başlangıç değer olarak, atomların ideal kristal örgü noktalarında bulundukları kabul edilebilir ve örgü noktaları, bir alt program yardımıyla bilgisayarla hesaplatılabilir. Buna örnek olarak, 32 atomluk bir simülasyon çalışmasında, atomların kübik fcc örgü noktalarında bulundukları düşünülürse, Şekil 3.1 deki gibi bir yapı oluşturulabilir. Oluşturulan hücre sistemin yoğunluğuna uygun kenar uzunluklarına sahip olmalıdır. Seçilen başlangıç durumunun uygun olmaması, simülasyon için büyük bir zaman kaybına sebep olur[2].

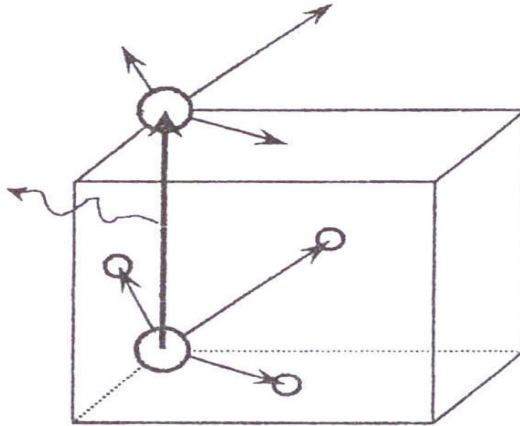
Başlangıç konum şartlarında olduğu gibi, başlangıç atom hızlarının tanımlanmasında da çeşitli yöntemler kullanılabilir. T sıcaklığında dengedeki bir parçacık topluluğu için parçacık hızlarının Maxwell hız dağılımına uyması, başlangıç atom hızlarının belirlenmesinde büyük kolaylık sağlar. Böyle bir topluluk için Maxwell hız dağılımı ifadesi

$$P(v_x) = \sqrt{\frac{m}{2\pi k_B T}} \exp\left[-\frac{mv_x^2}{2k_B T}\right] \quad (2.32)$$

şeklinde verilir [42]. Bu bağıntı, $\langle v_x \rangle = 0$ ortalama değeri civarında $\sigma = (k_B T/m)^{1/2}$ standart sapmaya sahip bir Gauss dağılımıdır. Böylece, başlangıç atom hızlarının türetilmesinde bu özel şartları sağlayan bir Gauss dağılımından yararlanılabilir.



Şekil 2. 4. *fcc* kübik *MD* hücresi[1]



Şekil 2.5. *fcc* baz atomları[1]

2.7.2. Dengeleme aşaması

Başlangıç şartları sistemin faz uzayındaki beklenen yörünge konumu civarında olabilir, fakat genellikle tam üzerinde olmaz. Sistemin istenilen enerji değerine (faz

uzayındaki yörüngesine) ayarlanması, sisteme enerji vererek veya sistemden enerji olarak sağlanır. Bu işlemin yapıldığı süreç, moleküler dinamikte *Dengeleme Süreci* (veya *termalizasyon*) olarak isimlendirilir ve bu bölgedeki sisteme *Dengeleme Fazı* denir [2]. Enerji verme veya alma işlemi genellikle, termostat parametresi olarak tanımlanan bir değerle atom hızlarının çarpılmasıyla sağlanır. Hızların bu şekilde ayarlanması işlemine ise *Hız Skalalama* denilmektedir. Sistem enerjisini ölçmenin en genel yolu sıcaklık ölçümüdür. Sıcaklığın ölçülmesinde eşbölüşüm teoreminden yararlanılabilir. Eş bölüşüm teoremine göre,

$$\langle E_{kin} \rangle = \frac{3}{2} N k_B T \quad (2.32)$$

ve

$$\frac{\left(\frac{1}{2} \sum_i^N m_i v_i^2 \right)}{(2/3N)} = k_B T \quad (2.33)$$

dir. Eğer T sıcaklığı T_{ref} sıcaklığına eşit değilse, bütün v_i hızları aynı termostat parametresiyle çarpılarak $T=T_{ref}$ olması sağlanır. Buna göre, termostat parametresi β olmak üzere,

$$(\beta v_i)^2 = \overline{v_i^2} \quad \Rightarrow \quad \beta^2 \sum_i m_i v_i^2 = 3(N-1) k_B T_{ref} \quad (2.34)$$

$$\beta = \sqrt{\frac{3(N-1) k_B T_{ref}}{\sum_i m_i v_i^2}} \quad (2.35)$$

şeklinde elde edilir.

2.8.3. Sonuç analizi

Herhangi bir MD benzetim çalışmasının sonuçları kullanılarak sistemin; *i*) Termodinamik nicelikleri, *ii*) Radyal dağılım fonksiyonu, *iii*) Kare ortalama yer değiştirmesi gibi temel özellikleri hesaplanabilir.

Termodinamik analizler

Fiziksel bir sisteme istatistik mekanik açısından bakıldığında, herhangi bir A gözlenebilir faz uzayı hacmi üzerinden topluluk ortalaması olarak değerlendirilir. Faz uzayındaki yolun yeterince uzun tutulması halinde topluluk ortalaması zaman ortalamasına eşit kabul edilebilir. MD benzetimlerinde kinetik enerji, potansiyel enerji, basınç, hacim, entalpi, sabit basınç veya sabit hacim altında ısı kapasiteleri gibi termodinamik nicelikler doğrudan hesaplanabilir. Ancak, entropi, serbest enerji ve kimyasal potansiyel enerji gibi nicelikler doğrudan hesaplanamaz. Bu niceliklerin elde edilmesinde çeşitli yaklaşımlar yapılmalıdır.

Dengedeki bir istatistik topluluğun basıncı, virial teoreminden hesaplanabilir [3]:

$$P = \frac{2}{3V} \left[\langle E_{kin} \rangle - \left\langle -\frac{1}{2} \sum_{i < j}^N \mathbf{r}_{ij} \cdot \mathbf{F}_{ij} \right\rangle \right], \quad E_{kin} = \frac{1}{2} m v^2 = \frac{3N}{2} k_B T(t) \quad (2.36)$$

Bir sistemin E , P , ve V değerleri biliniyorsa, $H = \langle E \rangle + P \langle V \rangle$ şeklinde entalpisi kolayca hesaplanabilir. Ayrıca, sabit hacim altında C_V öz ısı [3],

$$C_V = \left. \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T} \right|_V = \frac{1}{kT^2} \langle (\delta E)^2 \rangle \quad \text{burada} \quad \delta E = E - \langle E \rangle \quad (2.37)$$

ve sabit basınç altında C_p öz ısı sayısal türev işlemiyle hesaplanabilir [41]:

$$C_p(T) = \left(\frac{\partial H}{\partial T} \right)_p \approx \left[\frac{H(T + \Delta T) - H(T)}{\Delta T} \right]_p \quad (2.38)$$

Benzer şekilde lineer termal genleşme katsayısı ve hacim modülü sırasıyla,

$$\alpha_p(T) = \frac{1}{3V} \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_p \approx \frac{1}{3V(T)} \left[\frac{V(T + \Delta T) - V(T)}{\Delta T} \right]_p \quad (2.39)$$

$$B_{m,T}(T) = \frac{1}{\kappa_T} \quad , \quad \kappa_T = -\frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial P} \right)_T \approx -\frac{1}{V(T,P)} \left[\frac{V(P + \Delta P) - V(P)}{\Delta P} \right]_T \quad (2.40)$$

şeklinde hesaplanabilir [41].

Burada öz ısı kavramı daha ayrıntılı olarak incelersek, bir katının mol başına C öz ısısı, sıcaklık küçük bir ΔT kadar arttırıldığında, katı tarafından yutulan ΔQ ısısı ölçülerek

$$C = \frac{\Delta Q}{\Delta T} \quad (2.41)$$

bulunur. Buna göre, sıcaklığı arttırmak için bir katıya verilmesi gereken Kelvin başına ısı miktarına özısı denir.

Katıların oldukça iyi kontrol edilebilen birçok özelliği ısıtma- soğutma sırasında değişebilir. Örnek olarak; ısıtılan cisim çevresine karşı iş yapabilir. Yine ısıtma sırasında örneğin mıknatıslanması veya elektriksel kutuplanması değişebilir. Böylece de, elektromagnetik alanda depo edilen enerji değişir. Sonuç olarak her madde için değişik birkaç özısı tanımlamak mümkündür. Yaygın şekilde, sabit hacim altındaki özısı ve sabit basınç altındaki özısı kavramları kullanılmaktadır.

Sadece salınım ve elektron enerjileri değişebilen bir cisim alalım. Böylece bir cismin sabit basınç ve hacim altındaki özısı, sırasıyla aşağıdaki gibidir.

$$C_p = \left(\frac{dQ}{dT} \right)_p \quad (2.42)$$

dır. Bir cisim ısıtılırken onun hacmini sabit tutmak güç olduğundan, genellikle sabit hacim altında özısı ölçülmez. Öte yandan, mod frekansları ve elektron enerji seviyeleri atomlar arası uzaklığa bağlı olduğundan, sabit basınç altındaki özısıyı da hesaplamak zordur. Sonuç olarak, sabit basınç altında özısı ölçülür ve sabit hacim altındaki hesaplanır.

Deneysel ve teorik özısı değerlerini karşılaştırmak için

$$C_p - C_v = \frac{V_0^2 T}{K} \quad (2.43)$$

eşitliği kullanılır.

Termodinamiğin birinci yasasına göre; bir cismin yuttuğu dQ ısısı,

$$dQ = dE_T + PdV$$

eşitliği ile verilir. Burada, eşitliğin sağındaki ilk terim cismin toplam enerjisindeki artmayı ikinci terim ise cisim tarafından yapılan işi göstermektedir. Sabit hacim altındaki özısı, parçacıkların hareketlerine çok sabit bir şekilde bağlanabildiğinden, yukarıdaki eşitlikte son terim sıfır seçilerek, sabit hacim altında,

$$C_v = T \sum \left(\frac{dS}{dT} \right)_v = \left(\frac{dE}{dT} \right)_v \quad (2.44)$$

veya

$$C_v = \left(\frac{dQ}{dT} \right)_v = \left(\frac{dE}{dT} \right)_v \quad (2.45)$$

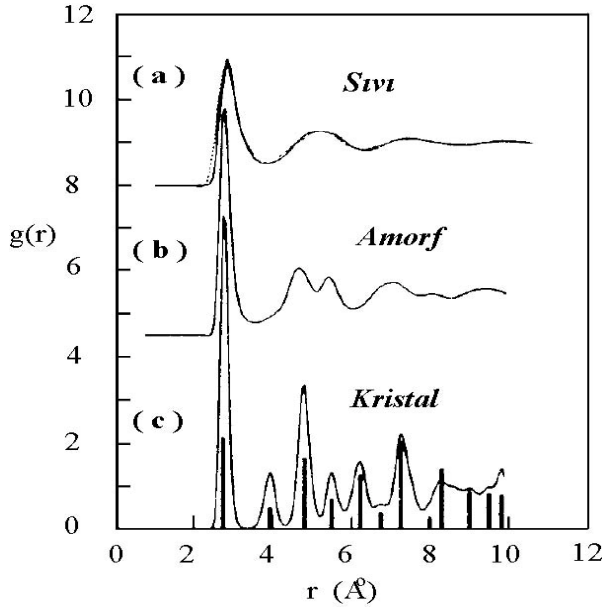
elde edilir. Burada S entropiyi, E sistemin iç enerjisini ve T Kelvin cinsinden sıcaklığı göstermektedir [42].

Radyal dağılım fonksiyonları

Maddelerin fazları, büyük ölçüde atomlarının uzayda sıralanışı ve birbirleri arasındaki korelasyonlar ile belirlenebilir. Kristal yapı katıların atomları uzayda periyodik olarak dizilmiştir. Böyle bir katının herhangi bir atomu radyal doğrultularda periyodik uzaklıklı komşulara sahiptir. Referans noktası olarak seçilen bir atomdan r kadar uzakta ve Δr kalınlığında küresel bir hacim elemanı içindeki parçacık sayısı $n(r)$ (koordinasyon sayısı) ile gösterilmek üzere, $g(r)$ radyal dağılım fonksiyonu (RDF)

$$g(r) = \frac{V}{N^2} \frac{\sum_i^N n_i(r)}{4 \pi r^2 \Delta r} \quad (2.46)$$

şeklinde tanımlanır. $g(r)$, aynı yoğunluktaki parçacıkların rastgele dağılımlarından beklenene göre, bir çiftin birbirinden r uzaklığında bulunma olasılığıdır. Bu fonksiyon sistemin yapısı hakkında bilgi verir. Numune bir kristal ise, verilen atomun etrafındaki tabakalara karşılık gelen konumlarda bir takım pikler oluşur. Piklerin konumları ve büyüklükleri, sistemin kristal yapısının (fcc, hcp, bcc...) hangi durumda olduğunu gösterir. Radyal dağılım fonksiyonu, ideal bir fcc yapı için $1, \sqrt{2}, \sqrt{3}, \sqrt{4}, \dots$ uzaklıklarda ve ideal bir bcc yapı için ise $1, \sqrt{4/8}, \sqrt{8/3}, \sqrt{11/3}, \dots$ uzaklıklarda keskin piklere sahiptir. Atomik titreşim genliklerinin artması halinde piklerin keskinliği kaybolur. Katı, sıvı ve amorf maddeler için radyal dağılım fonksiyonları da Şekil 3.2 de görülmektedir[38].



Şekil 2.2 Maddenin çeşitli fazları için radyal dağılım fonksiyonları [43].

Kare ortalama yer değiştirmeler

Atomik hareketliliğin incelenmesinde kullanılan bağıntılardan birisi kare ortalama yer değiştirme (MSD) dır. Özellikle sistemin dinamik yapısı hakkında bilgi veren bu bağıntı,

$$\langle R^2 \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N [r_i(t) - r_i(0)]^2 \quad (2.47)$$

ifadesiyle hesaplanır [50,46]. Burada $r_i(0)$, i atomunun sistem dengeye yerleştikten sonraki konum vektörü ve $r_i(t)$ aynı atomun zamana bağlı konum vektörüdür.

Konuyu biraz daha genişletecek olursak, Bir simülasyonda atomların yer değiştirmelerinin karelerinin ortalaması (MSD) aşağıdaki tanımından kolayca hesaplanabilir.

$$\text{MSD} = \langle |r(t) - r(0)|^2 \rangle \quad (2.48)$$

Buradaki $\langle \dots \rangle$ işareti bütün atomlar üzerinden alınan ortalamayı temsil eder. Burada periyodik sınır şartını kullanırken parçacıkların tekrar kutu içine atlamalarını önlemek için dikkat edilmelidir.

MSD atomik difüzyon hakkında bilgi verir, sistem bir katı ise, sistem sonlu bir değerde doyuma ulaşır fakat sıvı bir sistem ise MSD zamanla doğrusal olarak artar. Bu durumda sistemin davranışını eğim vasıtası ile karakterize etmek yararlı olur ki bu eğim bildiğimiz difüzyon katsayısı D olmuş olur.

Ergime Sıcaklığını Ölçümü

Toplam enerji (E) ve sıcaklık (T), farklı termodinamik durumlara karşılık gelen farklı çalışmalarda ölçüldüklerinde kalorik eğri ($E(T)$) elde edilebilir[1]. Bu eğri, faz geçişini ekrandan anında izlemek bakımından çok faydalı bir araçtır. Çünkü $E(T)$ 'nin aniden artışı birinci mertebeden geçişin varlığının olduğunu gösterir. Yani sıvıdan katıya geçiş gibi bir durum söz konusudur. Fakat bu yaklaşım ergime sıcaklığı (T_m) in güvenilir bir şekilde tahmin edilebilmesi için uygun değildir. En yaygın olan birinci mertebeden geçiş ergimedir. Bu simülasyon yolu ile kolayca gözlenebilir. Sistem kristalik yapıyı bırakıp sıvı hale geldiğinde $E(T)$ bir sıçrama gözlenir ve bu durum hal değiştirme ısısına karşılık gelir. Bu olay ekseriya modelin gerçek ergime sıcaklığının daha üstünde bir sıcaklıkta ortaya çıkar. Sadece birkaç atom içeren sıvı çekirdeklenmesi oluştuğunda, daha genel ifade ile sıvılaşıma başladığında katı kısımların hacmi azalarak sıvı faz büyümeye başlar. Tipik bir MD Zaman skalasında ergime olayını görmek için, hedefin ötesine geçerek sıcaklık T_m nin %20–30 daha yukarısına ayarlanmalıdır.

MSD nin zamanın fonksiyonu olarak davranışı katı ve sıvı faz arasındaki ayırımı kolayca izin verir. O halde simüle ettiğimiz bir sistemin ergime sıcaklığını bulmak istiyorsak kristalik sistemin sıcaklığını difüzyon görülene kadar arttırmamız gerekiyor ayrıca kalorik eğrinin de hal değiştirme ısısını absorbladığını gösteren bir artış sergilemesi gerekiyor. Bunlar gerçekten katıdan sıvıya olan geçişin göstergesi olmasına rağmen MD de bunların ortaya çıktığı sıcaklık kaçınılmaz olarak ergime

sıcaklığından daha yüksektir. Gerçekte ergime sıcaklığı tanıma göre katı ve sıvı fazın birlikte bulunduğu sıcaklıktır. Bu anda fazlar aynı serbest enerjiye sahip olurlar fakat sıvının çekirdeklenme ve büyümesinin başladığı yerdeki sıvı çekirdeklerinin azlığı yüzünden genellikle ergime beklenenin daha üstündeki bir sıcaklıkta oluşur. Bu bölgede sistem termodinamik olarak yarı karalı durumdadır, buna rağmen simülasyon süresi içinde sistem kararlı görünür, aşırı derecede ısıtılmış bir kristalik numune mekaniksel kararsızlık noktasına ulaştığında bozulur, çöker ve kırılır.

Bu nokta maddenin kayma modüllerinden birinin yok olmasına ve benzer bir kararsızlığa karşılık gelir ve T_m den tipik olarak %20- 30 daha büyüktür. Mekaniksel kararsızlık ergime sıcaklığının kabaca tahmin etmek için çok yararlı olmasına rağmen daha hassas yöntemler de vardır, bunlardan biri numuneyi % 50 katı % 50 sıvı olarak almaktır ve numune bu durumda katı/sıvı bölgesi arasında bir ara yüze sahip olacaktır. O zaman katı ve sıvının birlikte bulunduğu bir denge durumu kurmaya çalışmalıyız. Kurabildiğimiz takdirde, bu denge durumunun sıcaklığı tanıma göre T_m olmalıdır.

Sistem mikroskobik olarak E enerjili halde gelişimini sürdürürken, ergime noktası civarında bu sıcaklıkta kalorik eğride bir sıçrama olur. Bu sıçrama ani artış şeklindedir. Sistemin ilk başlangıçtaki sıcaklığına T_o denilirse bu sıcaklık enerjinin bilinmeyen bir fonksiyonu olur ve genellikle T_m den farklı olur. $T_o > T_m$ olduğunda ise sıvı katıya tercih edilmiş olur ve sistemde ortaya çıkan katı sıvı ara yüzeyleri, azalan katı tarafındaki sıvı miktarını arttırmak üzere hareket edecektir yani maddenin bir kısmı eriyecektir. Bu durum olurken ergimeye ait hal değiştirme ısısı sistem tarafından soğurulacaktır. Toplam enerji korunduğundan, hal değiştirme ısısının soğurulması otomatik olarak kinetik enerjinin azalmasına yol açacaktır bu nedenle de sıcaklık düşmesi olur. Katı sıvı ara yüzünün hareketini süren kuvvette azalacak ve zaman ilerledikçe ara yüzün konumu ve sıcaklık exponansiyel olarak denge durumuna ulaşacaktır. O zamanda sıcaklık T_m olmuş olacaktır.

$T_o < T_m$ ise gerekçenin tersi uygulanır: Hal değiştirme ısısı yükselir, kinetik enerjiye dönüşür ve sıcaklık yine exponansiyel olarak aşağıdan yukarıya doğru T_m ye

yaklaşır. Ergime sıcaklığı sistemin basıncına bağlı olur. Bir sistemi termodinamik olarak karakterize etmek için sistemin nihai durumu üzerindeki basınç ölçümü de gereklidir.

Elastik Sabitlerin Belirlenmesi

Elastik sabit, uygulanan zora karşı malzemenin gösterdiği direnç olarak bilinmektedir. Elastik sabitleri, katıların 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. En genel şekilde elastik sabitleri,

$$C_{ij} = \frac{\partial^2 E}{\partial x_i \partial x_j} \quad (2.49)$$

ile hesaplanır [2]. Buna göre, elastik sabitleri, maddenin birim esnemesi başına düşen enerji miktarı olarak yorumlanabilir. Kristal maddeler için belirli temel doğrultulardaki kristal esnekliklerin bilinmesi, maddenin teknolojik uygulaması açısından önemlidir.

Parrinello ve Rahman MD yöntemiyle elastik sabitlerini hesaplamak için ortalama denge zorlanma dalgalanmaları ile ilişkili bir formül türetmiştir[44,45].

$$C_{ijkl} = -\frac{V_0}{k_B T} \left(\langle P_{ij} P_{km} \rangle - \langle P_{ij} \rangle \langle P_{km} \rangle \right) + \frac{2Nk_B T}{V_0} \left(\delta_{ik} \delta_{jm} + \delta_{im} \delta_{jk} \right) + \langle B1_{ijkl} \rangle + \langle B2_{ijkl} \rangle + \langle B3_{ijkl} \rangle \quad (2.50)$$

Burada P_{ij} mikroskobik zor tensorüdür. δ_{ij} dirac delta gösterimidir ve $i=j$ için 1, $i \neq j$ için 0 değerini almamaktadır. Eş.2.47 deki ilk terim dalgalanma terimi, ikinci terim ise sıcaklık düzeltme terimi ve son terim Born terimi olarak adlandırılmaktadır. İkili

etkileşme katkıları B1 ve B2 den, çok cisim katkısı B3 ten gelmektedir. Born terimleri Eam fonksiyonları için

$$B1_{ijkm} = \frac{1}{V_0} \sum_{\substack{a,b=1 \\ a \neq b}} \left[\frac{''}{ab} - \frac{'}{ab} \frac{1}{r_{ab}} \right] \frac{x_{abi} x_{abj} x_{abk} x_{abm}}{r_{ab}^2} \quad (2.51)$$

$$B2_{ijkm} = \frac{1}{V_0} \sum_{\substack{a,b=1 \\ a \neq b}} F_a'' \left[\frac{''}{ab} - \frac{'}{ab} \frac{1}{r_{ab}} \right] \frac{x_{abi} x_{abj} x_{abk} x_{abm}}{r_{ab}^2} \quad (2.52)$$

$$B3_{ijkm} = \frac{1}{V_0} \sum_{a=1}^N F_a'' g_{aij} g_{akm} \quad (2.53)$$

$$g_{aij} = \sum_{\substack{b=1 \\ b \neq a}} \frac{'}{b} \frac{x_{abi} x_{abj}}{r_{ab}} \quad (2.54)$$

şeklinde ifade edilir [49].

Elastik sabit tensörü C_{ijkl} Voigt notasyonu kullanılarak matris şeklinde Çizelge 3.1 de gösterilmiştir

Çizelge 2. 1 Elastik sabiti tensörünün matris şeklinde gösterimi [3,49].

Tensör gösterimi	11	22	33	23	13	21
Matris gösterimi	1	2	3	4	5	6

Bulk modülü; bir malzemenin hidrostatik basınç altında sıkıştırılması halinde onun hacminde oluşacak değişime karşı gösterdiği direnci tanımlayan bir özelliğidir. Bu yüzden hem teorik hem de deneysel açıdan, bir malzemenin, özellikle kübik kristallerin, sertliğini temsil eden yegane malzeme özelliğidir. Elastik sabitleri yardımı ile bulk modülü;

$$B = \frac{c_{11} + 2c_{12}}{3} \quad (2.55)$$

Tetragonal shear modülü; hacmi koruyan tetragonal shear zorlanması (strain) altında kristalin gösterdiği tepkinin bir ölçüsüdür. Mesela; ZrN ve ZrC için, metal –N ve –C bağlarının gerilmesini ve metal-metal bağlarının bükülmesini temsil eder.

$$C' = \frac{1}{2}(C_{11} + C_{12}), \quad (2.56)$$

Buradaki C' 'ye de *tetragonal (shear) kayma modülü* denir.

Trigonal shear modülü; sertlik ölçüsünü belirleyen en önemli parametredir. Bir malzemenin sertliği, onun yüzeyi üzerine başka bir malzemenin gerginliğine karşı gösterdiği direncin bir ölçüsüdür.

$$G = C_{44}, \quad (2.57)$$

Buradaki G 'e de *trigonal kayma modülü (sabiti)* denir.

Poisson oranı (ν); serbest yanal yüzeye (lateral surface) sahip bir numunenin, tek yönlü bir stres altında iken kesit çapındaki azalma olarak tanımlanır. Eş.2.58

Anizotropi faktörü (A); elastik anizotropi derecesinin bir ölçüsüdür. Madde elastik olarak izotrop ise A 'nın değeri bir, değilse birden farklı olur. Eş.2.59

Uygulamalar için ilginç elastik özellikler olan *Zener anisotropy faktörü* A , *Poisson oranı* ν ve *Young's Modülü* (Y) aşağıdaki eşitliklerden hesaplanabilir [51].

$$= \frac{1}{2} \left[\frac{(B - \frac{2}{3}G)}{(B + \frac{1}{3}G)} \right] \quad (2.58)$$

$$A = \frac{2C_{44}}{C_{11} - C_{12}} \quad (2.59)$$

$$Y = \frac{9GB}{G + 3B} \quad (2.60)$$

3. BULGULAR VE TARTIŞMALAR

Bu çalışmada, SC-EAM yaklaşımı kullanılarak Al için, 1372 atomlu ideal *fcc* kristal örgü yapısı için, anizotropik bir MD benzetim yöntemi kullanılmıştır. Sistemlerin *P-V* diyagramları ($T=300K$ 'de) ve *P-T* diyagramları hesaplanmıştır. Sonraki aşamada ise katı faz durumu için hacim modülleri ve termal genleşme katsayıları belirlenmiş ve elde edilen sonuçlar literatürlerle karşılaştırılmıştır. Daha sonra metallerin basit termodinamik nicelikleri MDH (moleküler dinamik hücre) kullanılarak incelenmiştir. Bu metaller için erime sıcaklıkları farklı basınç değerleri için hesaplanmıştır. Ayrıca sıcaklık ve basınçla radyal dağılım grafikleri incelenmiştir.

AlIr (%50Al-%50Ir) ve AlRh (%50Al-%50Rh) alaşımları için ilk olarak statik örgü enerjilerinin kristal örgü parametresiyle değişimleri hesaplanmıştır. İdeal bcc kristal örgü yapısı için, anizotropik bir MD benzetim yöntemi kullanılmıştır. Sistemlerin *P-V* diyagramları ($T=300K$ 'de) ve *P-T* diyagramları hesaplanmıştır. Sonraki aşamada ise katı faz durumu için hacim modülleri ve termal genleşme katsayıları belirlenmiştir. Daha sonra metallerin basit termodinamik nicelikleri MDH (moleküler dinamik hücre) kullanılarak incelenmiştir. Ayrıca sıcaklık ve basınçla radyal dağılım grafikleri incelenmiştir. Bu metaller için erime sıcaklıkları farklı basınç değerleri için hesaplanmıştır. İncelenen alaşımların camı yapı oluşumunu daha iyi anlamak için, faz geçişleri esnasındaki camı yapı geçiş sıcaklıkları incelenmiştir.

3.1. Al Metalinin EAM Modeli ile İncelenmesi

Burada yapılan hesaplamalarda kullanılan SC-EAM PEF Al ile Ir için bazı madde özellikleri Çizelge 4.1 da verilmiştir. Modelde 4 parametre vardır. ϵ ve C iki cisim potansiyelindeki terimlerdir, m ve n ise seçimli sabitlerdir. m ve n sabitlerinin seçilmiş değerleri; Al, Ir ve Rh için alttaki Çizelge 3.2.'de verilmiştir. Potansiyel fonksiyonu; Bu dört potansiyel parametresi, maddenin deneysel örgü sabiti, kohesif enerjisi ve hacim modülü (B_m) değerleri kullanılarak belirlenmektedir [33].

Çizelge 3.1. Deneysel veriler

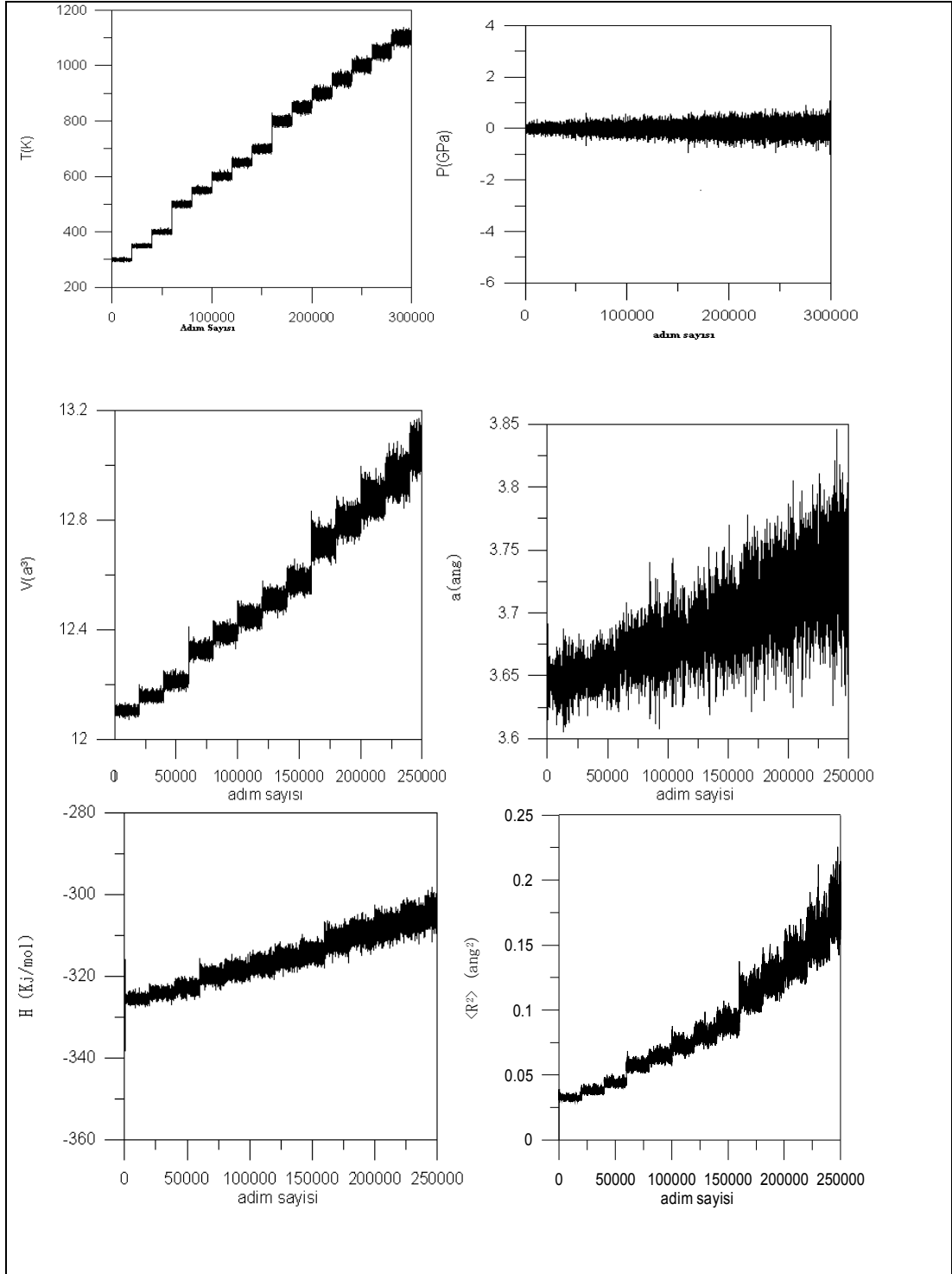
	a_0 (Å)	r_0 (Å)	E_c (eV)	E_v^f (eV)	B_m (GPa)	C_{11} (GPa)	C_{12} (GPa)	C_{44} (GPa)	T_m (K)	α (K ⁻¹)	C_p (J/molK)
Al	4.05	2.8637	3.39	0.67	72.2	122.96	70.80	30.90	933.5	2.22×10^{-5}	24.4

Çizelge 3.2. Potansiyel Parametreleri

	a_0 (Å)	r_{cut}	ϵ (eV)	C	n	m	m(kg)
Al	4.05	$2 \times a_0$	3.314×10^{-2}	16.399	7	6	4.48×10^{-26}
Ir	3.84	$2 \times a_0$	2.4489×10^{-3}	334.94	14	6	3.1916×10^{-25}
Rh	3.80	$2 \times a_0$	4.9371×10^{-3}	144.41	12	6	$1,7087 \times 10^{-25}$

3.1.1. Al elementinin termodinamik özelliklerinin sıcaklıkla değişimi

Aşağıdaki grafiklerle adım sayısına bağlı olarak termodinamik niceliklerin durumları hakkında bilgi edinilmektedir. Şekil 3.1’de incelersek, sıcaklığa karşı adım sayısı grafiği çizilmiştir. Sıcaklığın artışı adım sayısında dalgalanmalar meydana getirmektedir. Sıcaklık yükseldikçe bu dalgalanmalar fazlalaşmaktadır. Buna bağlı olarak aynı dalgalanmalar diğer grafiklerde de belirgin şekilde görülmektedir. Bu durumun bütün grafiklerde birbiri ile uyumlu davranış gösterdiği anlaşılmaktadır.



Şekil 3.1. Al elementi için termodinamik niceliklerin md step adım sayısına göre değişimi. (sıcaklık, iç basınc, atomik hacim, potansiyel enerji, entalpi, örgü parametresi, bütün atomlar üzerinden alınan kare ortalama yer değiştirme

P=0 GPa sabit basınç altında saf Al için (0-400K) sıcaklık aralığındaki lineer termal genleşme katsayısını hesaplamak için kullanılan molar hacmin sıcaklıkla değişimi Şekil 3.2 verilmiştir.

değerini hesaplarken Eş 3.1.'den yararlanılmıştır.

$$\alpha = \frac{1}{3V} \left(\frac{V - V_0}{T - T_0} \right) \quad (3.1)$$

değerleri hesaplanarak bu değerlerin ortalaması alınmış ve Al için

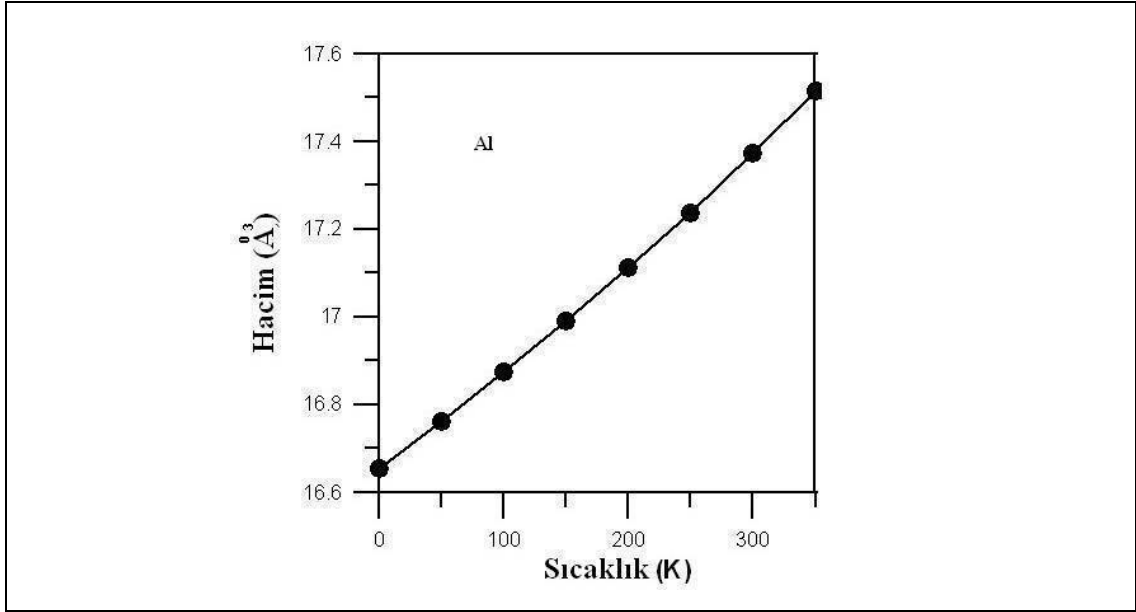
$$\alpha = \frac{1}{3V} \left(\frac{\Delta V \left(\frac{\text{\AA}^3}{\text{atom}} \right)}{\Delta T \left(\text{K} \right)} \right) \cong 2,44 \times 10^{-4} \text{ K}^{-1} \text{ ve}$$

Grafikten de görüldüğü gibi termal genleşme katsayısı sıcaklıkla artmaktadır. Sıcaklık artıkça atomik hareketler artmakta ve anharmonik etkileşmeler daha baskın hale gelmektedir.

Al için teorik olarak bulunmuş olan değer; $\alpha_{Al} = 2,44 \times 10^{-4} \text{ K}^{-1}$ idi. Teorik olarak bulunan değerle deneysel değer arasındaki % hata değeri;

$$\%Hata = \frac{teori - exp}{exp} \quad (3.2)$$

formülünden yaklaşık olarak hesaplanmıştır. Al için deneysel olarak $\alpha_{Al} = 2,22 \times 10^{-5} \text{ K}^{-1}$ bulunmuş ve teorik değerle deneysel değer arasındaki hata oranı; Al için % 9.9 değerinde bulunmuştur. Sonuç olarak; teorik sonuçlar ile deney arasında sapma mevcuttur. Bu farklılığın MD programında kullanılan keyfi kütle sabiti ve alınan sıcaklık değişiminin erime sıcaklığına yakın olmasından kaynaklandığı düşünülmektedir.

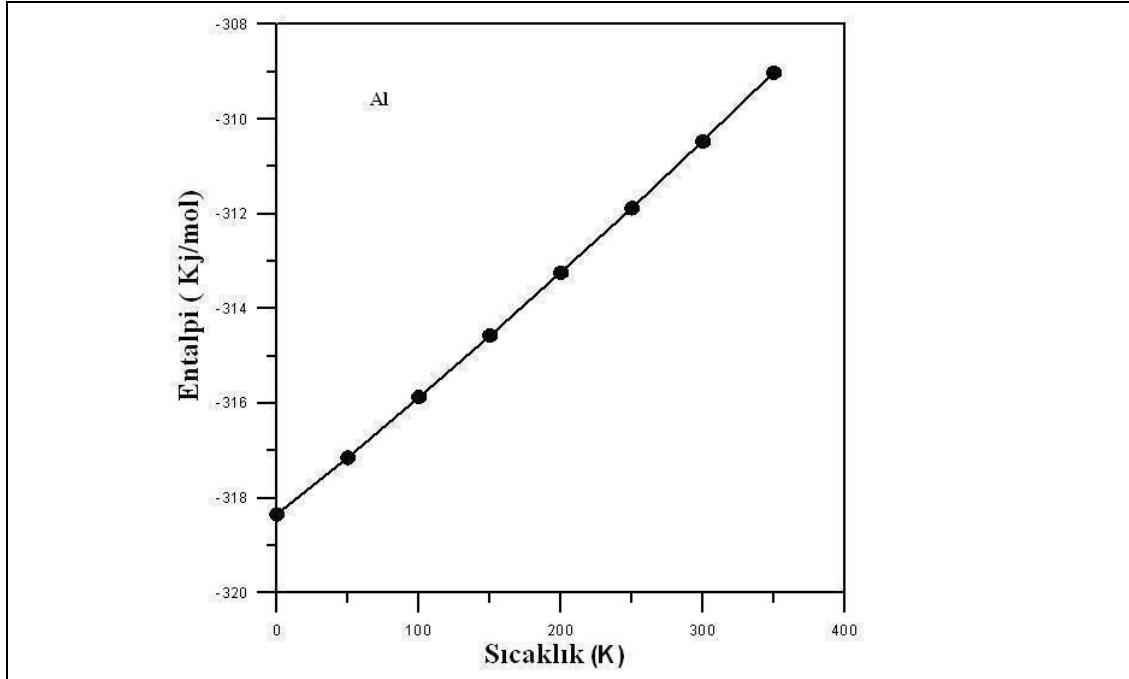


Şekil 3.2. Al için hacmin sıcaklıkla değişimi (P=0 GPa)

Şekil 3.3.'te Al için entalpinin sıcaklıkla değişimleri görülmektedir. P= 0GPa basınç değeri alınmış ve sıcaklığa bağlı H (entalpi) değişimi incelenerek teorik olarak elde edilen C_p değeri Al için ;

$$C_{p,Al} = \frac{\Delta H(kJ/mol)}{\Delta T(K)} = 29,62 \text{ J/mol.K}$$

olarak hesaplanmıştır. Hesaplanan bu değer Çizelge 3.1.'deki deneysel değeri ile uyum içindedir ve Al için % 17,6 hata değerindedir ki bu değer anlamlıdır.



Şekil 3.3. Al için basınç Entalpinin sıcaklıkla değişimi (P=0 GPa).

Aşağıdaki Çizelge 3.3.'de P=0 GPa altında Al için basit termodinamik niceliklerin sıcaklıkla değişimleri gösterilmiştir. Çizelgedeki bu değerler kullanılarak elde edilen sabit basınçta ısı kapasitesi, entalpinin sıcaklıkla değişimleri de Çizelge 3.4.'de gösterilmiştir.

Çizelge 3.3. Al için termodinamik niceliklerin sıcaklıkla değişimi (P=0 GPa)

T (K)	E_p (eV)	E_k (meV)	E_t (kJ/mol)	a $(\text{\AA})$	V $(\text{\AA}^3)$	MSD $(\times 10^2 \text{\AA}^2)$
0	-3.30053	0	-318.3399	4.053932567	16.65598	0
50	-3.29460	0.00649	-317.1419	4.061991976	16.76230	0.01558579
100	-3.28782	0.01297	-315.8627	4.071945657	16.87525	0.05024371
150	-3.28085	0.01946	-314.5650	4.081363698	16.99103	0.15899786
200	-3.27357	0.02594	-313.2367	4.089804946	17.11174	0.47153828
250	-3.26588	0.03243	-311.8695	4.098575696	17.23877	1.26607908
300	-3.25781	0.03892	-310.4656	4.115296121	17.37248	3.10519808
350	-3.24921	0.04540	-309.0109	4.124673429	17.51516	7.03433827

Çizelge 3.4. Al için hesaplanan termodinamik niceliklerin sıcaklıkla değişimi (P= 0GPa).

T (K)	H (kJ/mol)	C _p (J/mol.K)	C _p /T (mJ/mol.K ²)
0	-318.344112		
50	-317.141923	24.044	4.81x10 ⁻⁴
100	-315.8654343	12.765	1.28 x10 ⁻⁴
150	-314.5681333	8.649	5.77 x10 ⁻⁵
200	-313.240414	6.639	3.32 x10 ⁻⁵
250	-311.877254	5.453	2.18 x10 ⁻⁵
300	-310.470493	4.689	1.56 x10 ⁻⁵
350	-309.016450	4.154	1.19 x10 ⁻⁵

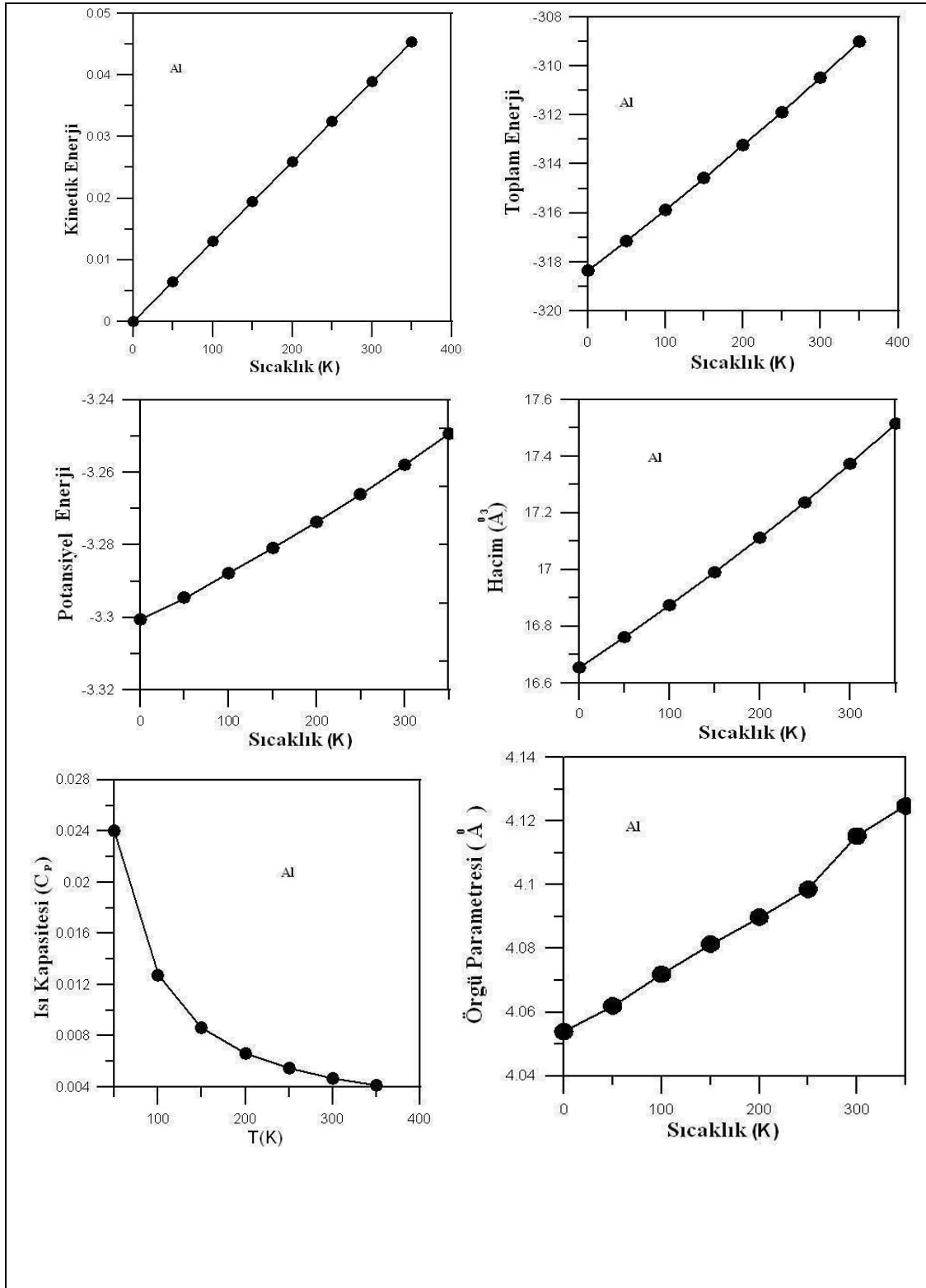
Yukarıdaki çizelgelerden C_p değeri aşağıdaki şekilde bulunur;

$$C_p(T) = \left[\frac{\Delta H}{\Delta T} \right] \approx \left[\frac{H(T + \Delta T) - H(T)}{\Delta T} \right] \quad (3.4)$$

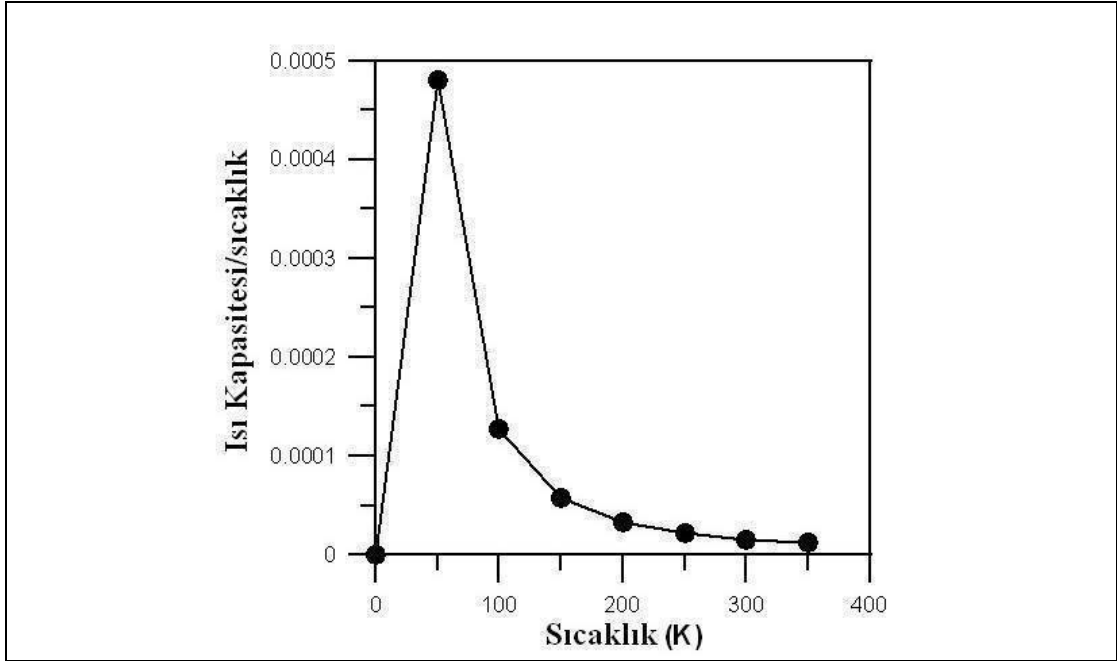
$$C_p = \frac{\Delta H}{\Delta T} = \frac{H_2 - H_1}{T_2 - T_1} \quad (3.5)$$

Sonuçta elde edilen ısı kapasitesi değerleri T ye bölünmesiyle de C_p/T değişimi elde edilmiştir. Bu yolla belirlenen C_p/T oranının sıcaklıkla değişim verileri elde edilmiştir. Aşağıdaki grafiklerde ilk olarak P=0 GPa basınçta termodinamik niceliklerin sıcaklıkla değişim grafikleri verilecektir. E_p-T ,E_r-T ,V-T grafiklerinde aşağıda görüldüğü gibi sıcaklık artışıyla birlikte zaman içinde bir artışın olduğu görülmektedir. Bunun sebebi ise maddenin artık katı fazdan sıvı faza geçmeye başlamasıdır. Yani madde artık erimeye başlayacaktır ve de daha sonraki bölümde erime grafiklerinde görülecek olduğu gibi erime sıcaklığında faz dönüşümü gerçekleşecektir. a(A⁰) örgü sabitinde de sıcaklıkla birlikte lineer bir artış vardır.

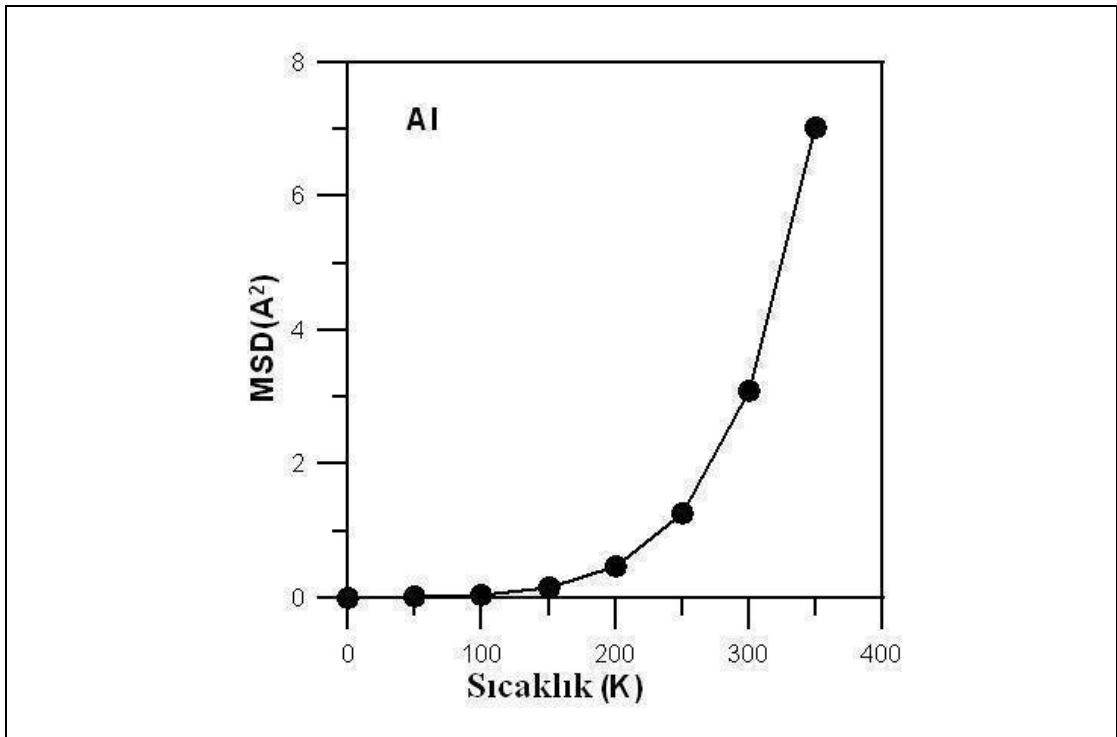
Aşağıdaki şekilde görülen entalpi-sıcaklık grafiğinde; entalpinin sıcaklık arttıkça zamanla arttığı görülmektedir. Bunun sebebi ise atomik hareketlerin artması olarak değerlendirilebilir ve faz dönüşümünden kaynaklanır.



Şekil 3.4. Al için şartlarda elde edilen basit termodinamik nicelikler ($P=0$ GPa) potansiyel enerji, toplam enerji, kinetik enerji, örgü parametresi hacim sabit basınçta ısı kapasitesi ısı kapasitesi/sıcaklık.)



Şekil 3.4. (Devam) Al için şartlarda elde edilen basit termodinamik nicelikler ($P=0$ GPa) potansiyel enerji, toplam enerji, kinetik enerji, örgü parametresi hacim sabit basınçta ısı kapasitesi ısı kapasitesi/sıcaklık.)



Şekil 3.5. Al için MSD değerinin sıcaklıkla değişimi ($P=0$ GPa)

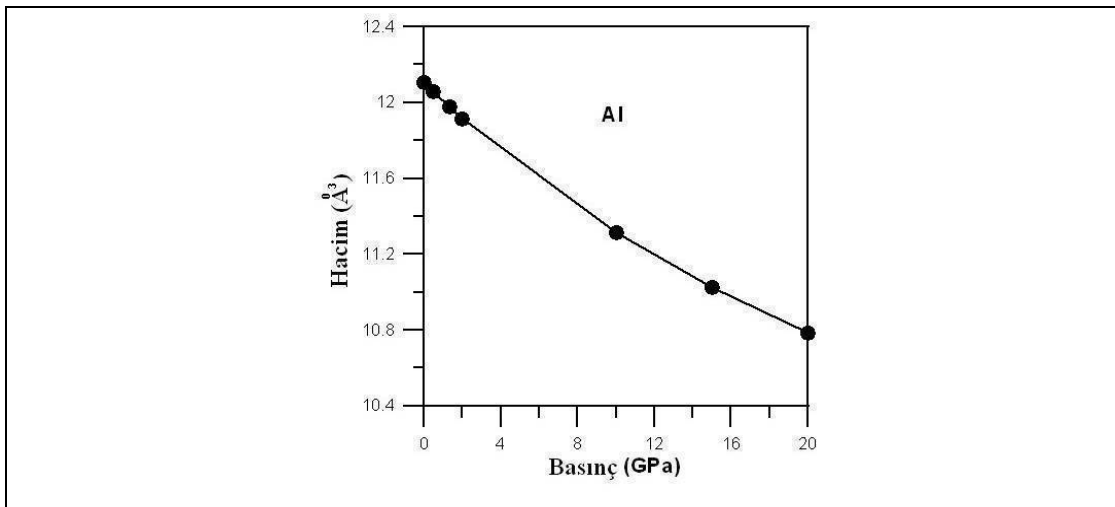
Yukarıda görülen MSD değerlerinin sıcaklıkla değişimlerinden, katı bölgedeki atomik hareketlilikler hakkında bilgi elde edilebilir ve anharmonikliğin başladığı bölgeler tespit edilebilir. Buna göre, katı bölgedeki MSD değerlerinde ani değişimler olmadığından herhangi bir katı-katı faz dönüşümü olmadığı söylenebilir.

3.1.2. Al elementinin termodinamik özelliklerinin basınçla değişimi

Al metalinin 300K sabit sıcaklıkta uygulanan çeşitli basınç değerlerine karşı hacim değişimleri Şekil 3.6'da verilmiştir. Şekil 3.6'de görülen Al için P - V grafiğinden hesaplanan hacim modülü;

$$B = -\frac{1}{V_0} \frac{(P - P_0)}{(V - V_0)} \quad (3.6)$$

formülü kullanılarak, $B_{m,Al}=67.54$ GPa bulunmuştur. Çizelge 3.1.'de Al için verilen deneysel hacim modülü değerleri ile kıyaslanırsa; Al için % 6.44 hata payı olduğu ve sonuçların literatür ile uyumlu olduğu görülür. PEF parametrelerinin belirlenmesinde, büyük ölçüde maddelerin hacim modüllerinden (ya da elastik sabitlerinden) yararlanılmış olması ve PEF içinde özellikle yapısal davranışların tanımlanması gereklidir.

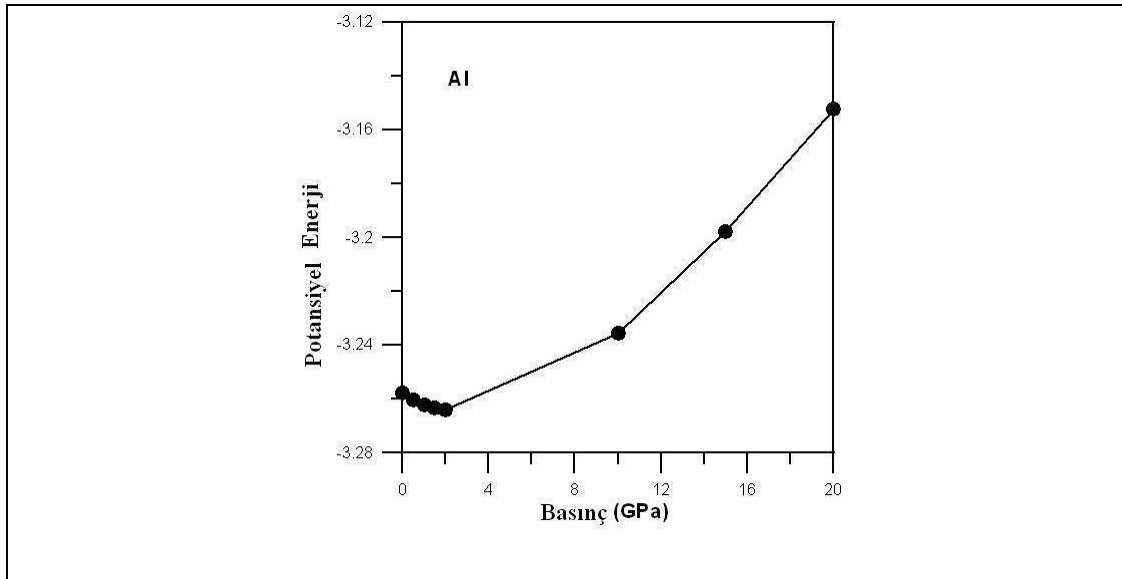


Şekil 3.6. Al için P - V diyagramları (T=300K)

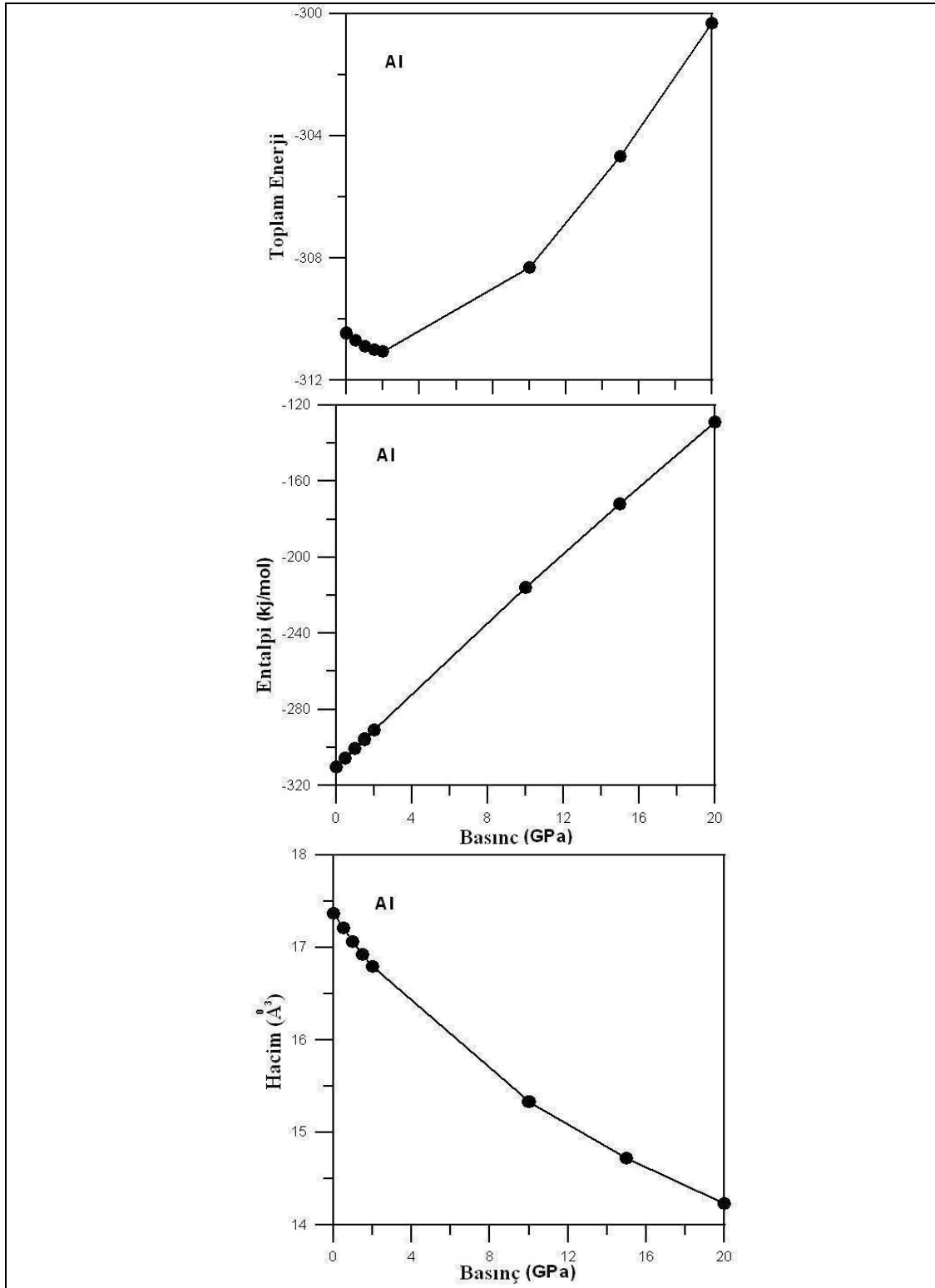
Bu bölümde yapılacak olan hesaplamalarda; Al atomları $T=300$ K sabit sıcaklık altında ve $P=0-20$ GPa basınç değerleri altında tutulmuştur. Bu değerlendirmeler altında bazı termodinamik parametrelerin aşağıdaki çizelgedeki gibi değiştiği gözlenmiştir. Basınç değişimi ile birlikte E_p değerlerinde çok fazla bir değişim gözlenmiştir. E_t 'de ise zamanla az bir artış ve bunun sonucunda da entalpide de bir artış bulunmuştur. Yine artan basınç değerleri ile birlikte örgü sabitinde ve hacimde de zamanla artış olduğu görülmektedir.

Çizelge 3.7. Al için elde edilen basit termodinamik niceliklerin basınçla değişimi $T=300$ K.

P(GPa)	E_p (eV)	E_k (meV)	E_t (kJ/mol)	H (kJ/mol)	a (Å)	V (Å ³)	MSD (Å ²)	B(GPa)
0	-3.2577	3.89×10^{-2}	-310.4653	-310.4622	4.115	17.3741	0.11561	69.1456
0,5	-3.2603	3.89×10^{-2}	-310.7079	-305.5305	4.103	17.2138	0.10400	71.8267
1,0	-3.2621	3.89×10^{-2}	-310.8788	-300.6071	4.089	17.0660	0.10067	74.4708
1,5	-3.2633	3.89×10^{-2}	-311.0036	-295.7233	4.076	16.9271	0.08907	77.0764
2,0	-3.2641	3.89×10^{-2}	-311.0684	-290.8509	4.068	16.7976	0.08893	79.6402
10	-3.2354	3.89×10^{-2}	-308.3051	-216.0044	3.946	15.3318	0.04957	117.786
15	-3.1977	3.89×10^{-2}	-304.6641	-171.7136	3.891	14.7235	0.04026	140.033
20	-3.1525	3.89×10^{-2}	-300.3018	-128.9371	3.847	14.2333	0.03408	161.596

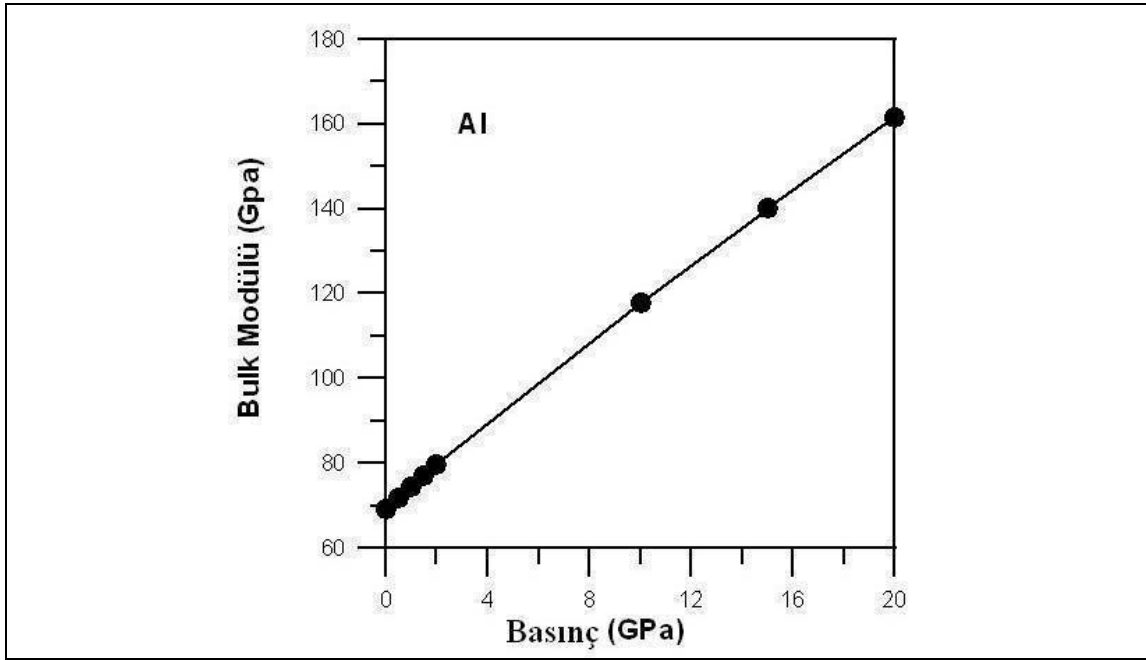


Şekil 3.7. Al için basit termodinamik niceliklerin basınçla değişimi (potansiyel enerji, toplam enerji, entalpi, hacim.) $T=300$ K



Şekil 3.7. Al için basit termodinamik niceliklerin basınçla değişimi (potansiyel enerji, toplam enerji, entalpi, hacim.) T=300K

Aşağıdaki grafiklerde Bulk (hacim) modülünün $T=300K$ 'de farklı basınç değerleri altındaki davranışları gösterilmiştir. Her iki grafikten de görüldüğü gibi zaman içinde artan basınç değerleri ile birlikte Bulk modülü değerlerinde bir artış olduğu gözlenmektedir. Bu olayın sebebi ise artan basınç ile birlikte hacminde artmış olmasıdır. Atomik hareketlilikte artış oluşmaktadır.



Şekil 3.8. Al için Bulk modülünün basınçla değişimi ($T=300K$).

3.1.3. Al metalinin erime sıcaklığının basınçla değişimi

Bir kristalin erime sıcaklığını belirlemenin çeşitli yolları bulunmaktadır. MD benzetimlerinde kullanılan en yaygın metot, çeşitli sıcaklıklarda model sistemin toplam enerjisini belirleyerek sıcaklığın fonksiyonu olarak çizmekten ibarettir. Böylece, toplam enerjinin süreksiz olduğu sıcaklık erime sıcaklığı olarak alınır. Bazı çalışmalarda [59] ise, bu metoda benzer şekilde kalorik eğri (kinetik enerjiye karşı toplam enerji değişimi) kullanılmaktadır. Gerçekte, metallerin termodinamik erime noktası, katı ve sıvı fazların serbest enerjilerinin eşit olduğu sıcaklık değeri olarak alınmalıdır. Bununla birlikte, serbest enerjinin doğru hesaplanması entropi teriminin belirlenmesini gerektirir. MD benzetim çalışmalarından entropi niceliği doğrudan

hesaplanamaz ve bunun için de bazı yaklaşımlar yapılır.

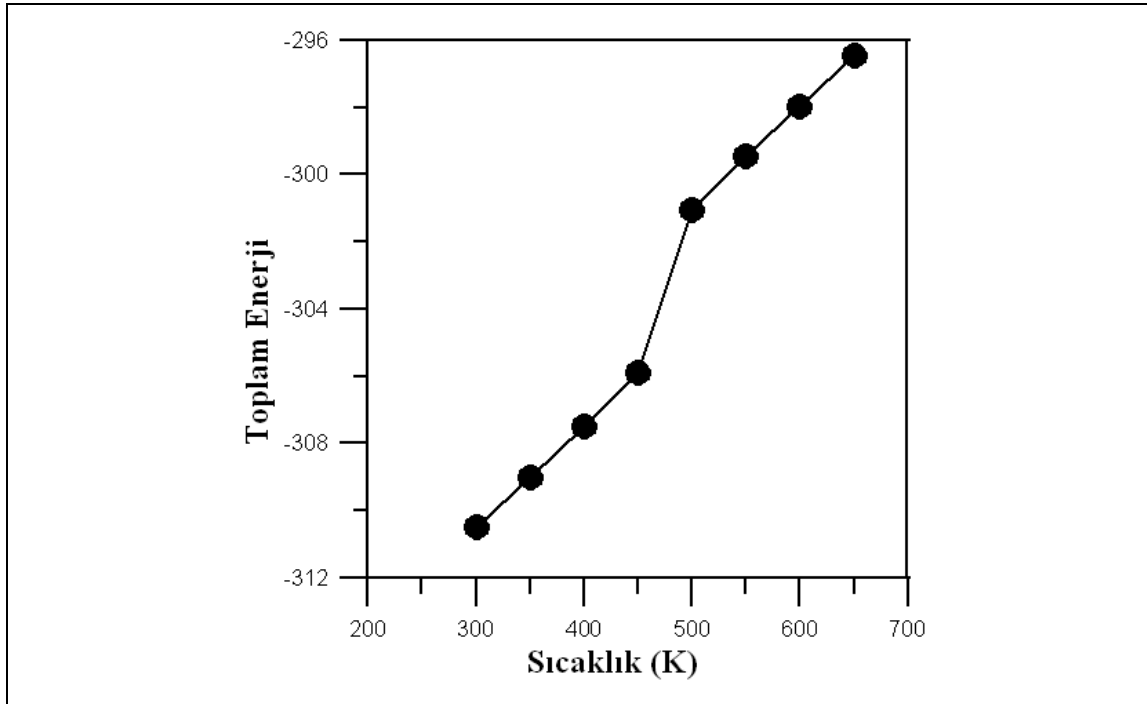
Erime noktası belirleme metotlarından birisi de, katı-sıvı ara yüzey benzetimi yapmaktır[44].

Biz ergime sıcaklığı hesabı yaparken değişik yollardan en uygun sonucu elde etmeye çalıştık. Bunlar sırası ile şunlardır:

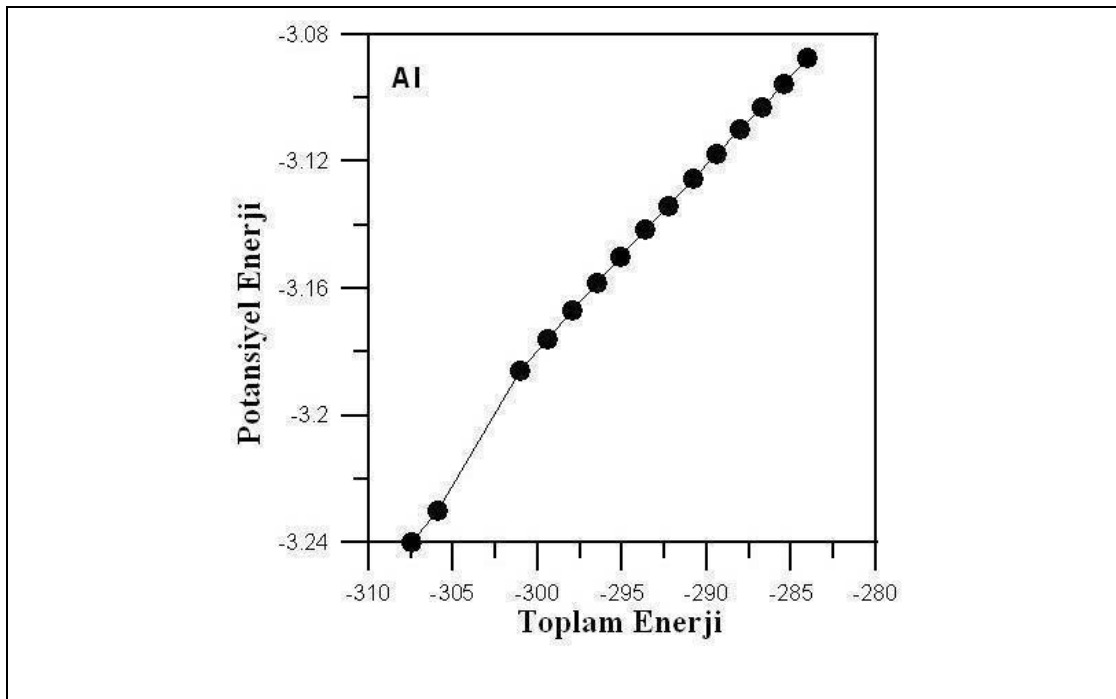
Benzetim çalışmalarında her ne kadar $N > 256$ parçacık sayısı hacimsel madde gibi düşünülse de, PEF için kullanılan r_c yarıçaplı küre içinde etkileştiği kabul edilen parçacık sayısı 40–70 civarında kalmakta ve bu sayıda parçacığa sahip sistemler küçük kümeler olarak değerlendirilmektedir [44]. Nano-kalorimetrik ölçümlerin geliştirilmesiyle birlikte, az sayıda parçacıktan oluşan kümeli yapıların erime sıcaklıklarının hacimli yapılara göre önemli ölçüde azaldığı tespit edilmiştir [44]. Böylece, erime olayının atomik ölçekte incelenmesinde, yüksek dereceden anharmonik etkiler yanında, artan sıcaklıkla birlikte atomlar arası bağların yönelime bağlı özellikler kazanmasının da dikkate alınması gerektiği sonucuna ulaşılmaktadır

Ergime sıcaklığını belirlemede kullanılan diğer bir yol potansiyel enerjinin toplam enerjiye karşı çizilen grafiğidir. Burada şekil Şekil 3.10 e bakıldığında sıfır basınç altında Al için toplam enerjinin -305 kJ/mol olduğu değerde sıcaklık 500K dir, ve bu değerden sonra ergime gerçekleştiği görülmektedir.

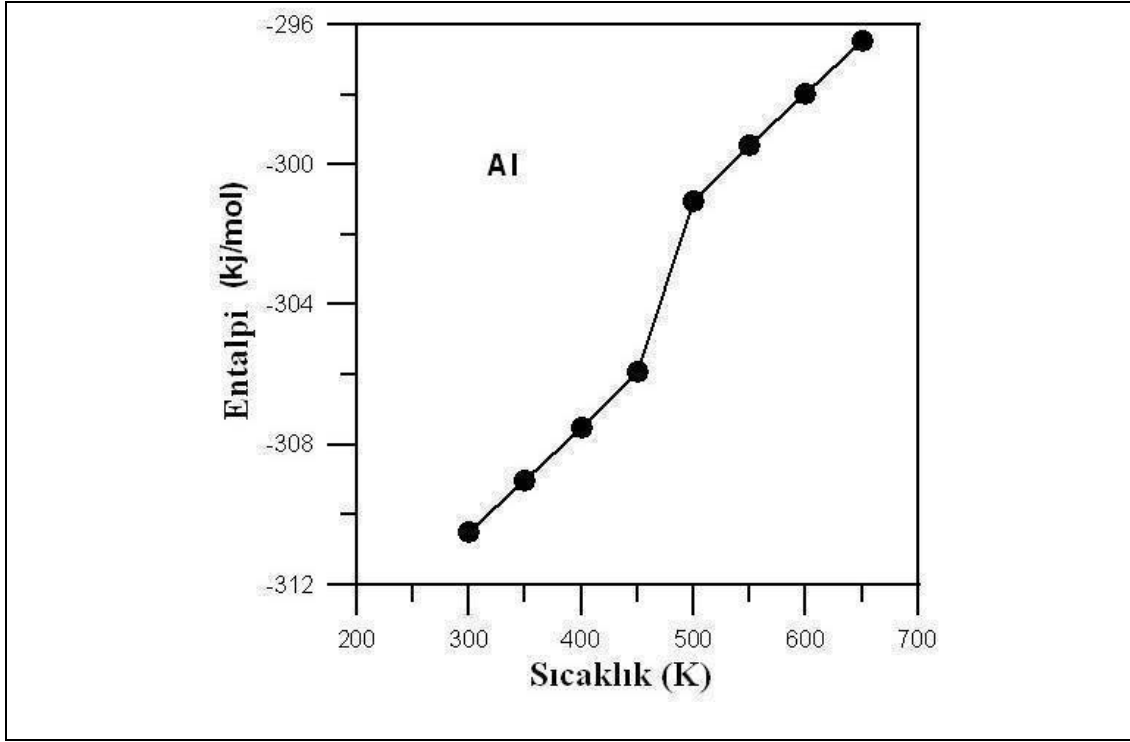
Ergime sıcaklıklarını belirlediğimiz üçüncü yol ise Şekil 3.11’de görülen sıcaklığa karşı entalpi değerleridir. Şekle bakıldığında Al için 500K- 600K aralığında ergimenin başladığı görülmektedir. Yaptığımız tüm bu çalışmalarda bütün ergime aralıkları aynı değerde çıkmaktadır. Bu da yaptığımız çalışmanın doğruluğunun birkaç kez tekrarladığını göstermektedir.



Şekil 3.9. Al için toplam enerjinin sıcaklıkla değişimi.



Şekil 3.10. Al için potansiyel enerjinin toplam enerjiyle değişimi



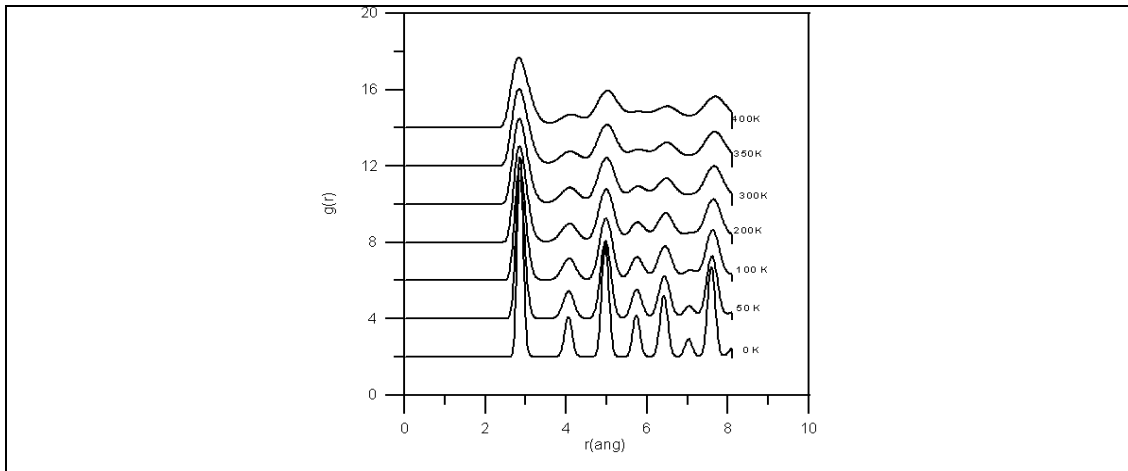
Şekil 3.11. Al için entalpinin sıcaklıkla değişimi ($P=0$ GPa)

3.1.4 Al metalinin katı-sıvı faz yapılarının belirlenmesi

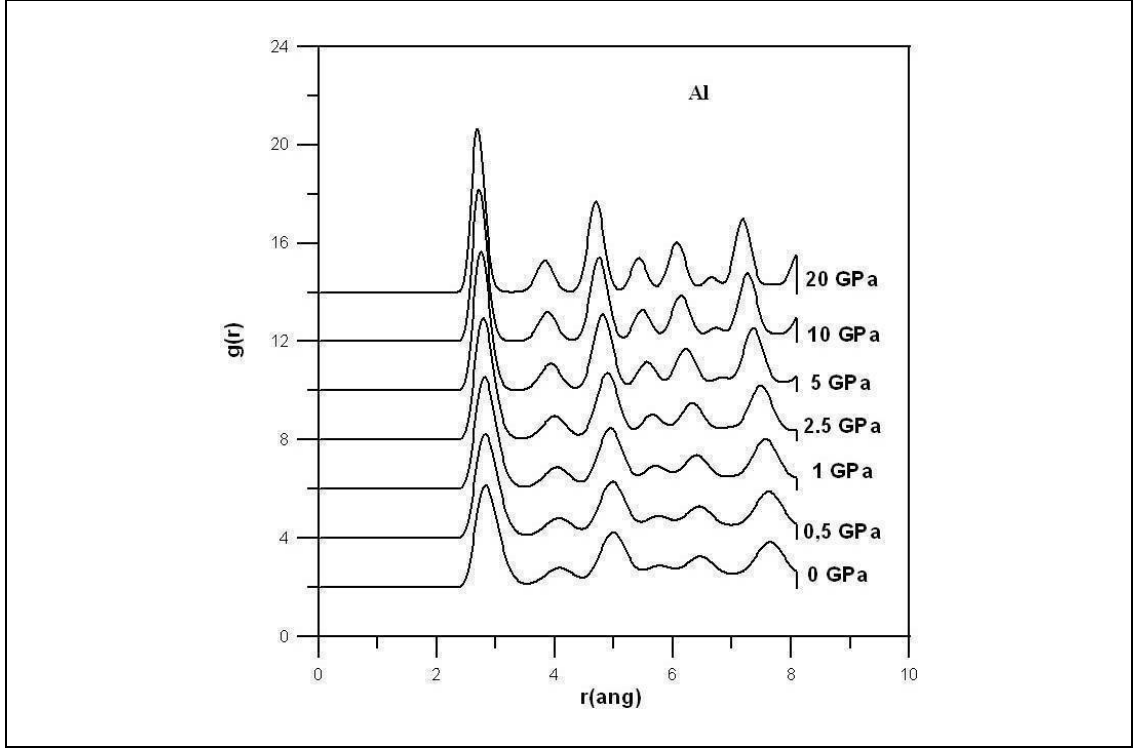
Katı ve sıvı fazların yapısal özelliklerinin incelenmesinde radyal dağılım fonksiyonlarından yararlanılmıştır. Saf Alüminyumun sıcaklıkla RDF eğrilerindeki değişimler Şekil 3.12 de verilmiştir. Bu değişimlerden Alüminyum sistemi için 400 K sıcaklığına kadar RDF eğrileri üzerinde belirgin piklerin bulunduğu görülmektedir. Radyal dağılım eğrisinin ilk piki en yakın komşu atom uzaklığını tanımlar. Bu piklerin yatay eksen üzerindeki konumları incelendiğinde, 300K sıcaklık değerinde Al için, ilk pik konumu $2,85 \text{ \AA}$, değerinde olduğu belirlenmiştir. Bu değer Çizelge 3.1 ile karşılaştırıldığında literatür değeri ile tam uyumludur. İkinci pik konumu ise fcc kristaller için örgü parametresine karşılık gelmektedir ve bunun değeri alüminyum için $4.05 \text{ \AA}$ olarak belirlenmiştir. Bu değer Çizelge 3.1 ile karşılaştırıldığında, sırasıyla Al için deneysel literatüre değeri olan $4.05 \text{ \AA}$ değerine eşittir.

Sıcaklığın artmasıyla ilk pik konumunun önce sağa doğru ilerlediği ve erime ile birlikte daha sola kaydığı görülmektedir. Bunun yanı sıra, ikinci pik konumu

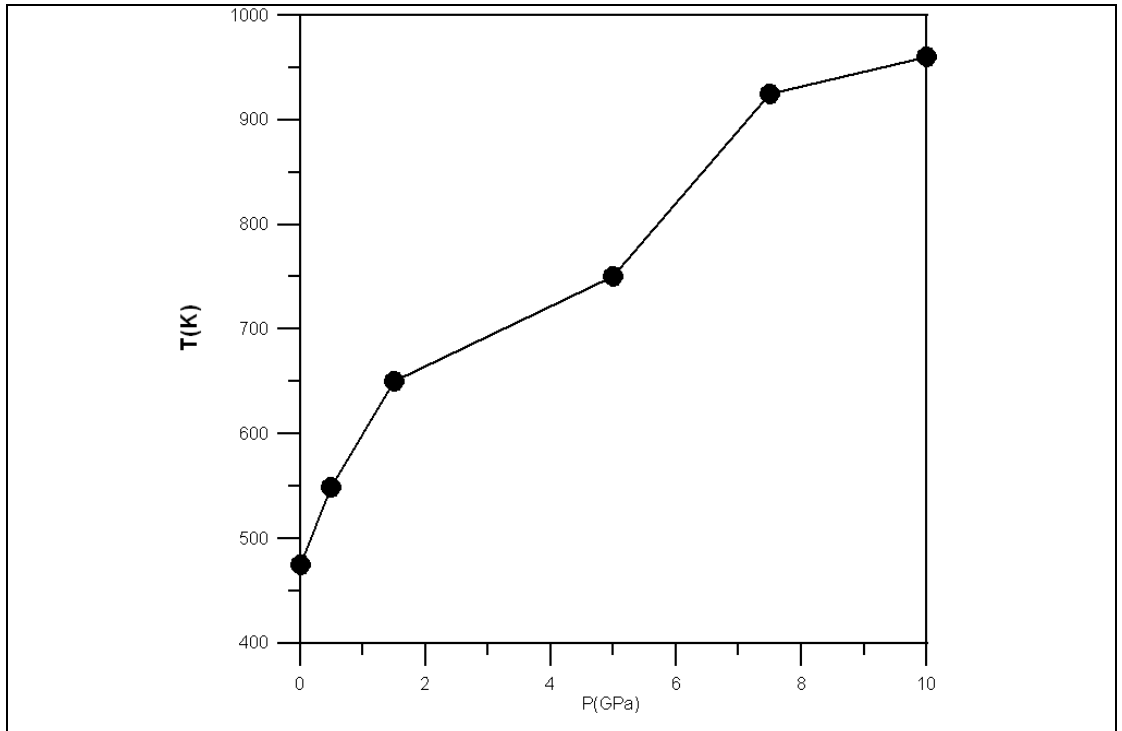
sıcaklıkla sola doğru belirgin bir kayma göstermiş ve sonra erime ile birlikte ortadan kaybolmuştur. Bu durum, sıvı fazda atomların birbirleri etrafında kümелendiğini, ancak ikinci komşulukların daha uzaklaştığını göstermektedir. Şekil 3.13 de RDF eğrilerinin basınçla değişimleri verilmiştir. 300K sabit sıcaklıkta elde edilen bu eğrilerden, düşük basınç değerlerinde RDF piklerinin daha geniş olduğu, fakat basıncın artmasıyla birlikte pik genişliklerinin azaldığı görülmektedir. Bu durum, basıncın artmasıyla atomik hareketlerin daha dar bölgelerde gerçekleştiği, yani atomik hareketlerin kısıtlandığı anlamına gelmektedir. Ayrıca, basınç artışıyla birlikte bütün pik konumlarının sola doğru kaydığı da bu grafiklerden görülmektedir. Bunun nedeni ise, basınç artışıyla birlikte hacimde bir daralmanın olması olarak değerlendirilebilir. İdeal fcc örgüye sahip katı sistemler için radyal dağılım eğrisi, r_0 değerinin katları olmak üzere $1, \sqrt{2}, \sqrt{3}, \sqrt{4}, \sqrt{5}, \dots$ uzunluklarda keskin piklere sahiptir. Şekil 3.12 ve Şekil 3.13 de görülen pik konumları bu özelliğe tam olarak uyduğu için her iki sistemin fcc yapıda olduğu söylenebilir. Bununla birlikte, sıcaklık ve basınç değişimine karşı yaptığımız radyal dağılım analizlerinde fcc dışında bir faza rastlanmamıştır. Şekil 3.15 de görülen MSD değerlerinin sıcaklıkla değişimlerinden, katı bölgedeki atomik hareketlilikler hakkında bilgi sağlanabilir ve anharmonikliğin başladığı bölgeler tespit edilebilir. Buna göre, katı bölgede MSD değerlerinde ani değişimler olmadığından herhangi bir katı-katı faz dönüşümü olmadığı söylenebilir. Ayrıca metalin katı faz analizinde fcc dışında farklı bir faza rastlanmamıştır.



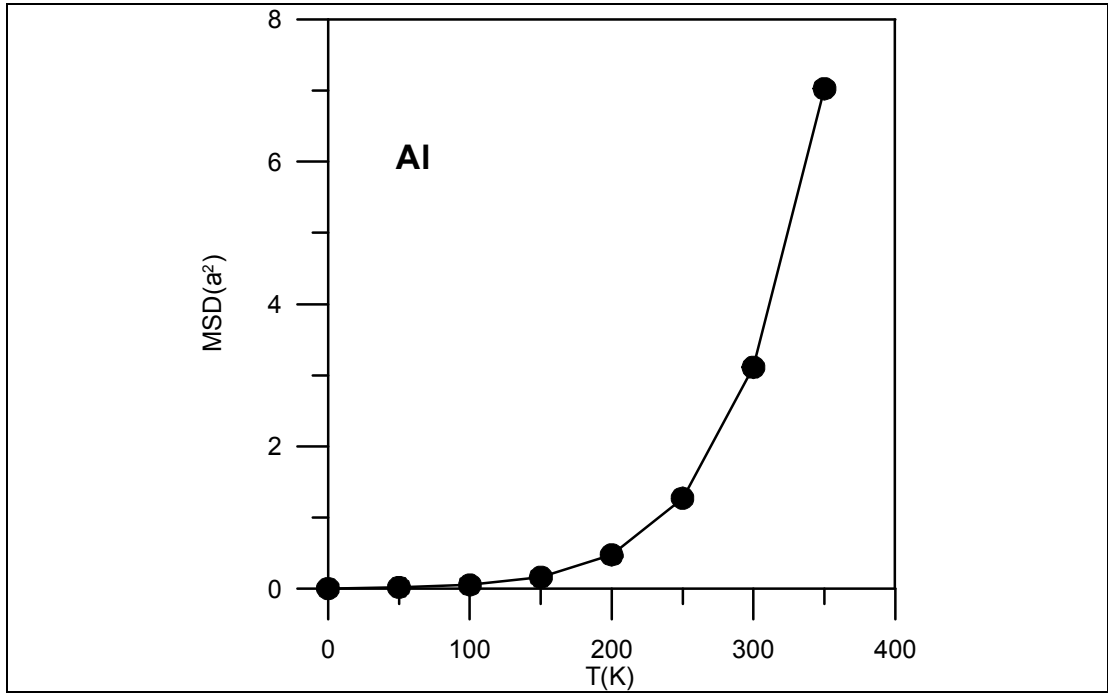
Şekil 3.12. Al için radyal dağılım fonksiyonunun sıcaklıkla değişimi ($P=0.0\text{GPa}$)



Şekil 3.13. Al için radyal dağılım fonksiyonunun basınçla değişimi ($T = 300$ K)



Şekil 3.14. Al için çizilen P-T diyagramları



Şekil 3.15. Al için MSD değerinin sıcaklıkla değişimi ($P = 0$)

3.1.5 Al sistemlerinin termo-elastik özelliklerinin basınçla değişimleri

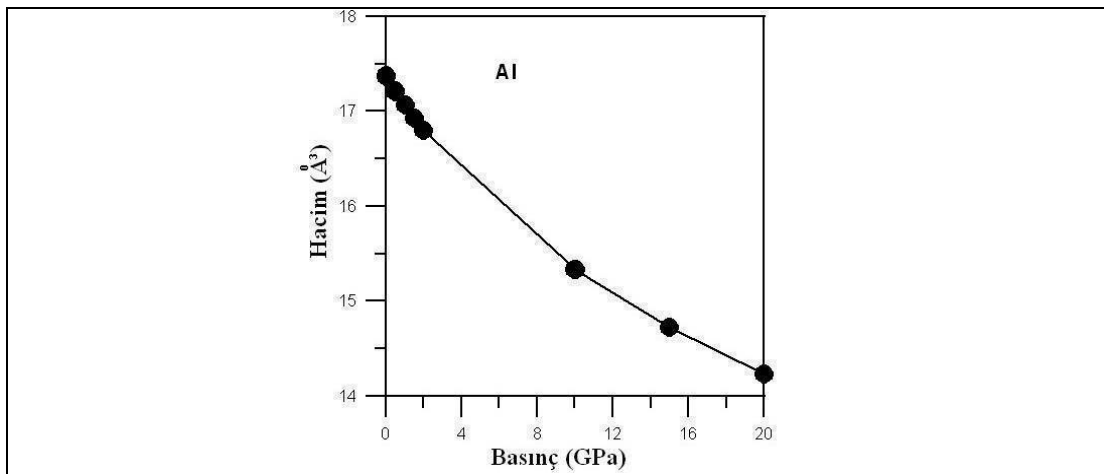
Bu kısımda, 300K sıcaklık şartlarında Al için basit termodinamik niceliklerin basınçla değişimleri çizelge 3.8 de verilmiştir. Bu çizelgelerdeki değerler kullanılarak çizilen grafikler sırasıyla Şekil 3.16, Şekil 3.17 ve Şekil 3.18 de verilmiştir. Şekil 3.16 de 300K sabit sıcaklıkta molar hacmin değişen basınç değerlerine karşılık grafiğini incelemiştir. Şekle bakıldığında molar hacmin basınçla ters orantılı olduğu bir kez daha gösterilmektedir. Şekil 3.18 incelendiğinde; 300K sabit sıcaklık değerinde değişen basınca karşılık örgü sabiti grafiği görülecektir. 0.0 GPa değerinde Al elementi için örgü sabit değeri $4.115\text{\AA}^0$ bulunmuştur. Çizelge 3.1 deki deneysel değer ile kıyasladığımızda Al elementi için hata oranı % 1.20 bulunup literatür ile uyumludur. Şekil 3.17'e baktığımızda basıncın artışı örgü sabitinin azalışını göstermektedir. Şekil 3.18 de ise 300K sabit sıcaklıkta entalpinin değişen basınç değerlerine karşılık grafiğini incelenerek; basınç artışının entalpi değerini arttırdığı görülmüştür. Çizelge 3.8' e bakıldığında ise 300K de saf Al elementi için termodinamik niceliklerin değişen basınçla ilgili sonuçlarını görülmektedir. Aynı zamanda bu değerlerin grafiksel çizimleri de yapılmıştır.

Çizelge 3.8 Al için elde edilen basit termodinamik niceliklerin basınçla değişimi
T=300K.

P(GPa)	Ep(eV)	Ek(meV)	Et(kJ/mol)	H(kJ/mol)	$a_0(\text{\AA})$	$V_0(\text{\AA}^3)$	$MSD_0(\text{\AA}^2)$	B(GPa)
0	-3.2577	3.89×10^{-2}	-310.4653	-310.4622	4.115	17.3741	0.11561	69.1456
0,5	-3.2603	3.89×10^{-2}	-310.7079	-305.5305	4.103	17.2138	0.10400	71.8267
1,0	-3.2621	3.89×10^{-2}	-310.8788	-300.6071	4.089	17.0660	0.10067	74.4708
1,5	-3.2633	3.89×10^{-2}	-311.0036	-295.7233	4.076	16.9271	0.08907	77.0764
2,0	-3.2641	3.89×10^{-2}	-311.0684	-290.8509	4.068	16.7976	0.08893	79.6402
10,0	-3.2354	3.89×10^{-2}	-308.3051	-216.0044	3.946	15.3318	0.04957	117.786
15,0	-3.1977	3.89×10^{-2}	-304.6641	-171.7136	3.891	14.7235	0.04026	140.033
20,0	-3.1525	3.89×10^{-2}	-300.3018	-128.9371	3.847	14.2333	0.03408	161.596

Hacim basınç ilişkisi

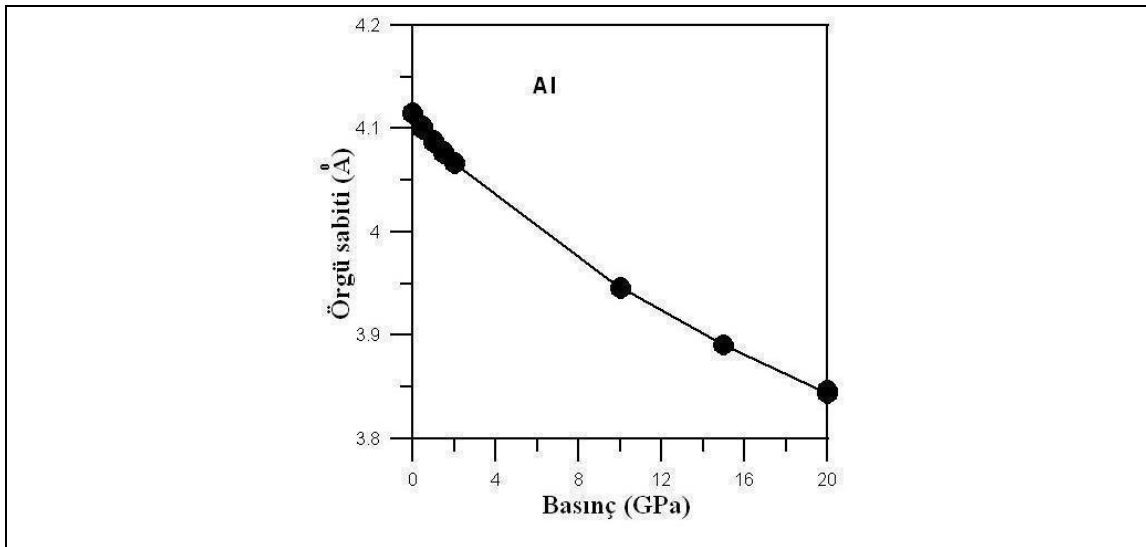
Al maddesinin 300K sabit sıcaklıkta uygulanan çeşitli basınç değerlerine karşı hacim değişimleri Şekil 3.16 da verilmiştir. Al için $P-V$ grafiğinden hesaplanan hacim modülü $B_{m,Al} = 90.78$ GPa değerindedir. Çizelge 3.9 da Al için verilen deneysel hacim modülü değerinin 72.2 GPa olduğu dikkate alındığında yapılan hesaplama hatasının %25.73 olduğu görülür. PEF parametrelerinin belirlenmesinde, büyük ölçekte maddelerin hacim modüllerinden yararlanılmış olması sonuçların olumlu olmasını sağlamaktadır.



Şekil 3.16. Al için $P-V$ diyagramları.

Örgü sabiti basınç ilişkisi

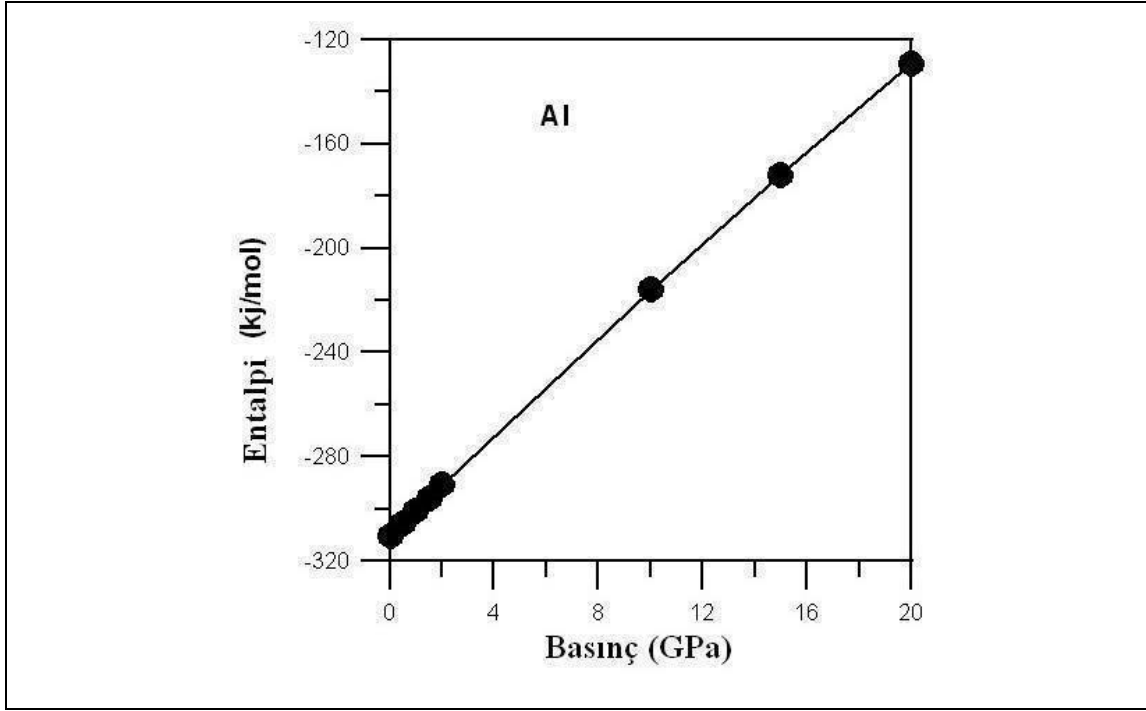
Burada örgü sabitinin basınçla ilişkisi görülmektedir. Şekil 3.17'ye bakıldığında 300 K sabit sıcaklıkta basıncın artması ile örgü sabitinde azalma meydana gelmektedir. Basınçla hacim ters orantılı olduklarına göre, basıncın artması hacmi azaltacağından ve hacmin azalması ise örgü sabitini azaltacağından gösterilen grafik bizim istediğimiz sonuçla uyumludur.



Şekil 3.17. Al için örgü sabitinin basınçla değişimi (T=300K)

Entalpi basınç ilişkisi

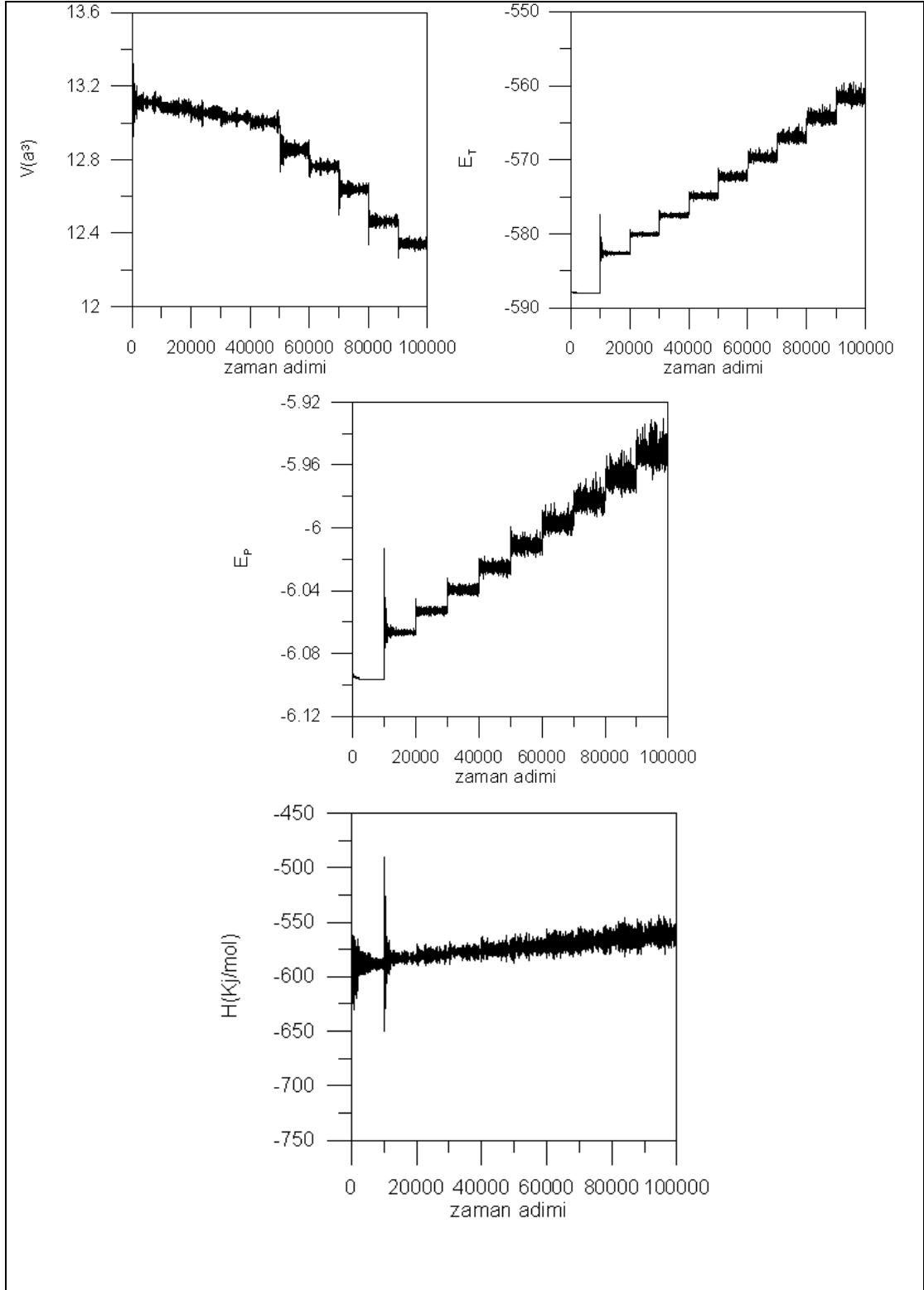
Burada entalpi değişiminin basınçla ilişkisi görülmektedir. Şekil 3.18' e bakıldığında 300 K sabit sıcaklıkta basıncın artması ile entalpi değerlerinde meydana gelmektedir. Entalpi ile basınç doğru orantılıdır. Şekil 3.18 de gösterilen grafik bizim istediğimiz bir durumdur.



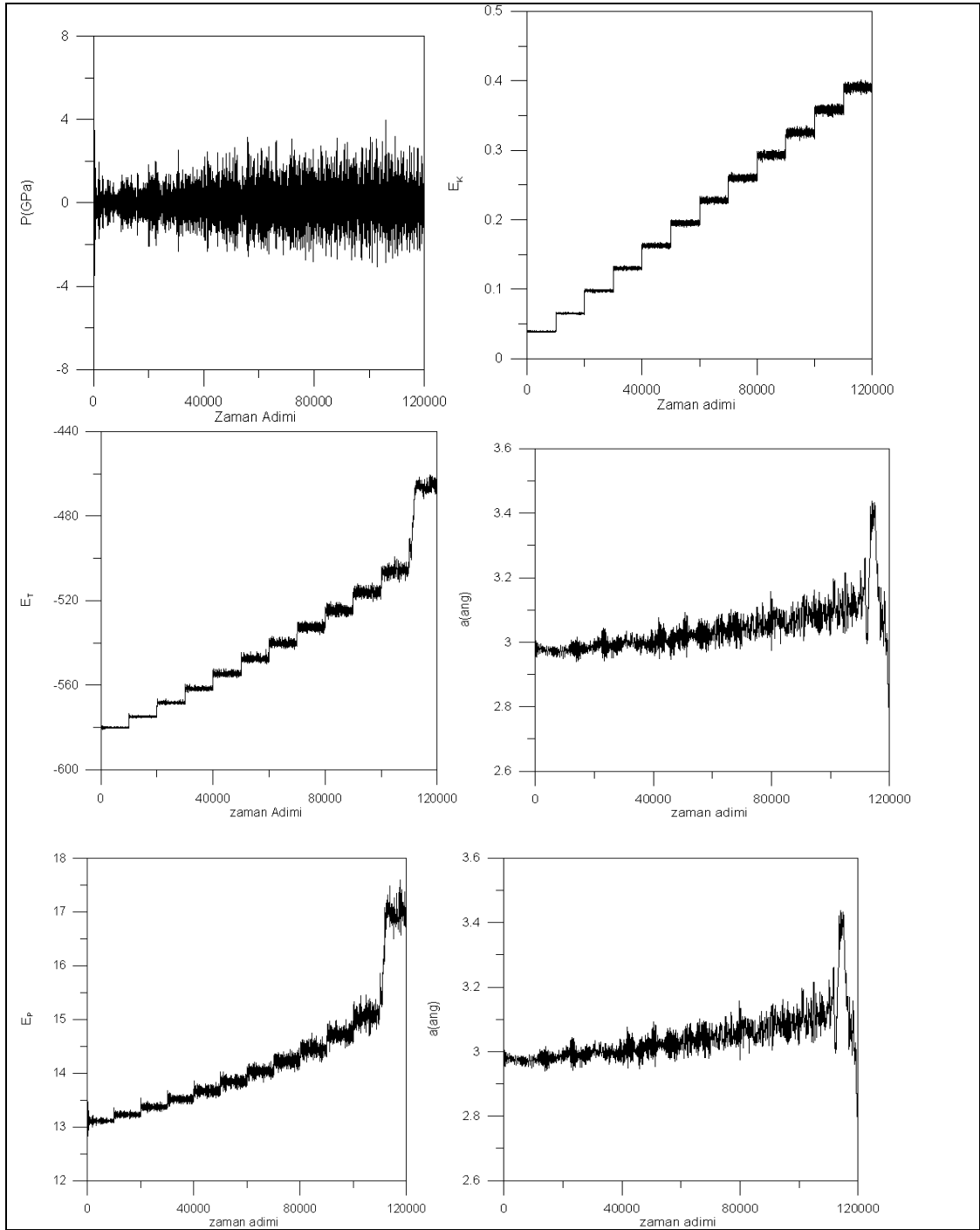
Şekil 3.18. Al için entalpinin basınçla değişimi ($T=300K$)

3.2 Al-Ir ve Al-Rh Alaşım EAM Modeli ile İncelenmesi

Aşağıdaki grafiklerle adım sayısına bağlı olarak termodinamik niceliklerin durumları hakkında bilgi edinilmektedir. Şekil 3.19ve şekil 3.20’i incelendiğinde, sırası ile Alüminyum(%50)-İridyum(Ir%50)alaşımı ve Alüminyum(%50)-Rodyum(%50) için bazı termodinamik niceliklere karşı adım sayısı grafiği çizilmiştir. Bu grafiklerde dalgalanmalar meydana gelmiş ve tüm grafiklerde aynı dalgalanmalar belirgin şekilde görülmektedir. Bu durumun bütün grafiklerde birbiri ile uyumlu davranış gösterdiği anlaşılmaktadır. Aynı incelemeyi şekil 3.20 Alüminyum(Al%50)-rodyum(%50) için yapılarak bir birlerine benzer şekillerin oluştuğu görülmüştür.

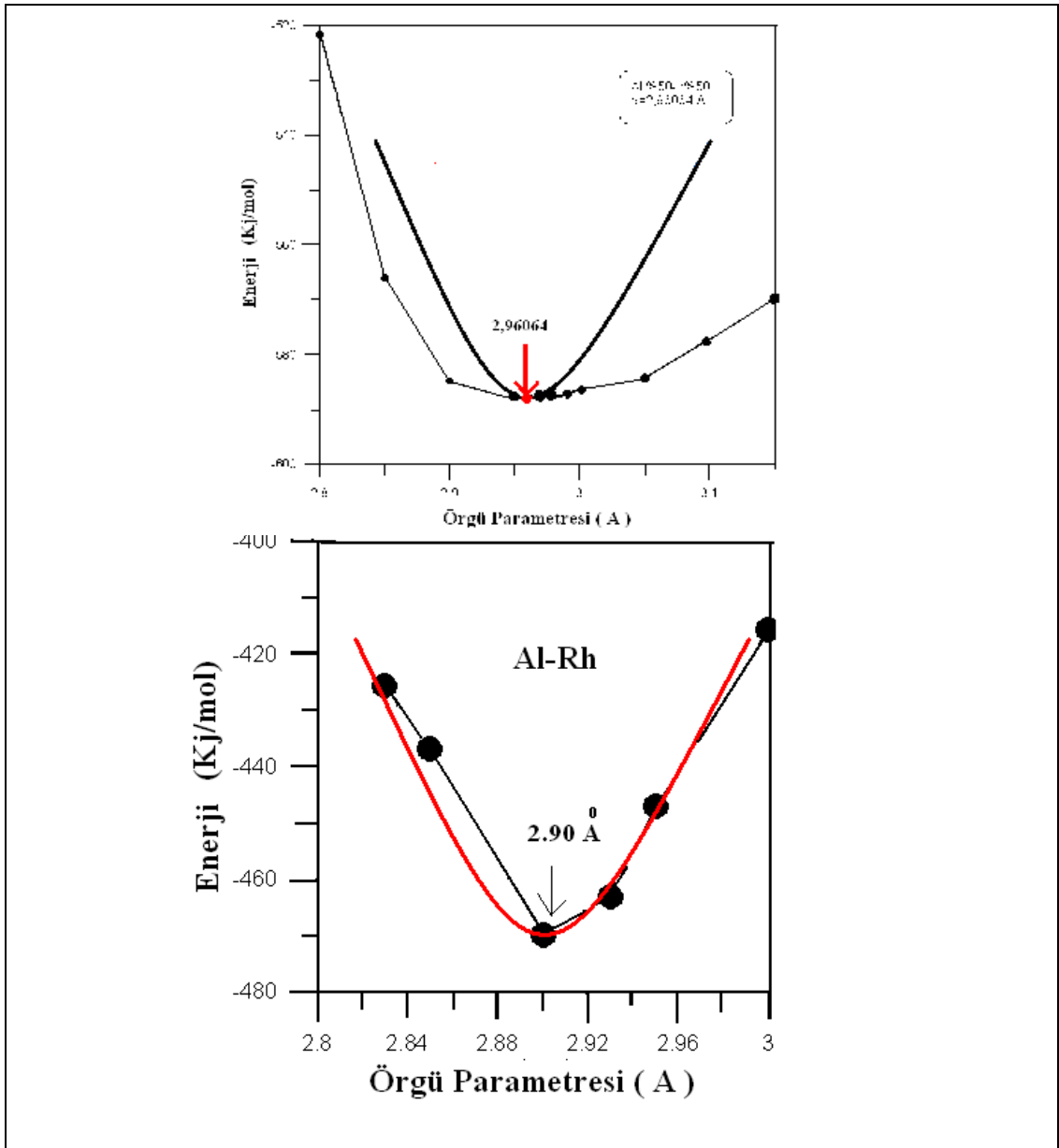


Şekil 3.19. Al-Rh alaşıımı için termodinamik niceliklerin md step adım sayısı ile göre değişimi. (iç basınc, atomik hacim, potansiyel enerji, entalpi)



Şekil 3.20. Al-İr alaşımı için termodinamik niceliklerin md step adım sayısıya göre değişimi(sıcaklık, iç basınç, atomik hacim, potansiyel enerji, entalpi, örgü parametresi, bütün atomlar üzerinden alınan kare ortalama yer değiştirme

SC-EAM enerji fonksiyonu ile deneysel değerler kullanılarak hesaplanan a ($\text{\AA}$) nin enerjinin minimum olduğu örgü parametresi değerlerinde; Al-Ir için ortalama 2,960464 Al-Irsak %0,06496 lük bir hata, Al-Rh için ortalama 2.90 Al-Ir % 0,023 lük bir hata oluşuyor. Bu hata oranları çok küçük olduğundan literatür ile uyumludur deriz.



Şekil 3.21. Al-Ir alaşıımı ve Al-Rh alaşıımı için; Potansiyel enerjinin örgü sabitlerine göre değişimi

3.2.1. Al-Ir ve Al-Rh alaşımlarının termodinamik özelliklerinin sıcaklıkla değişimi

P=0 GPa sabit basınç altında %50Al-%50Ir alaşımı (0-800K) ve %50Al-%50Rh alaşımı (0-1000 K) için sıcaklık aralığındaki lineer termal genleşme katsayısını hesaplamak için kullanılan hacim parametresinin sıcaklıkla değişimi Şekil 3.22 verilmiştir.

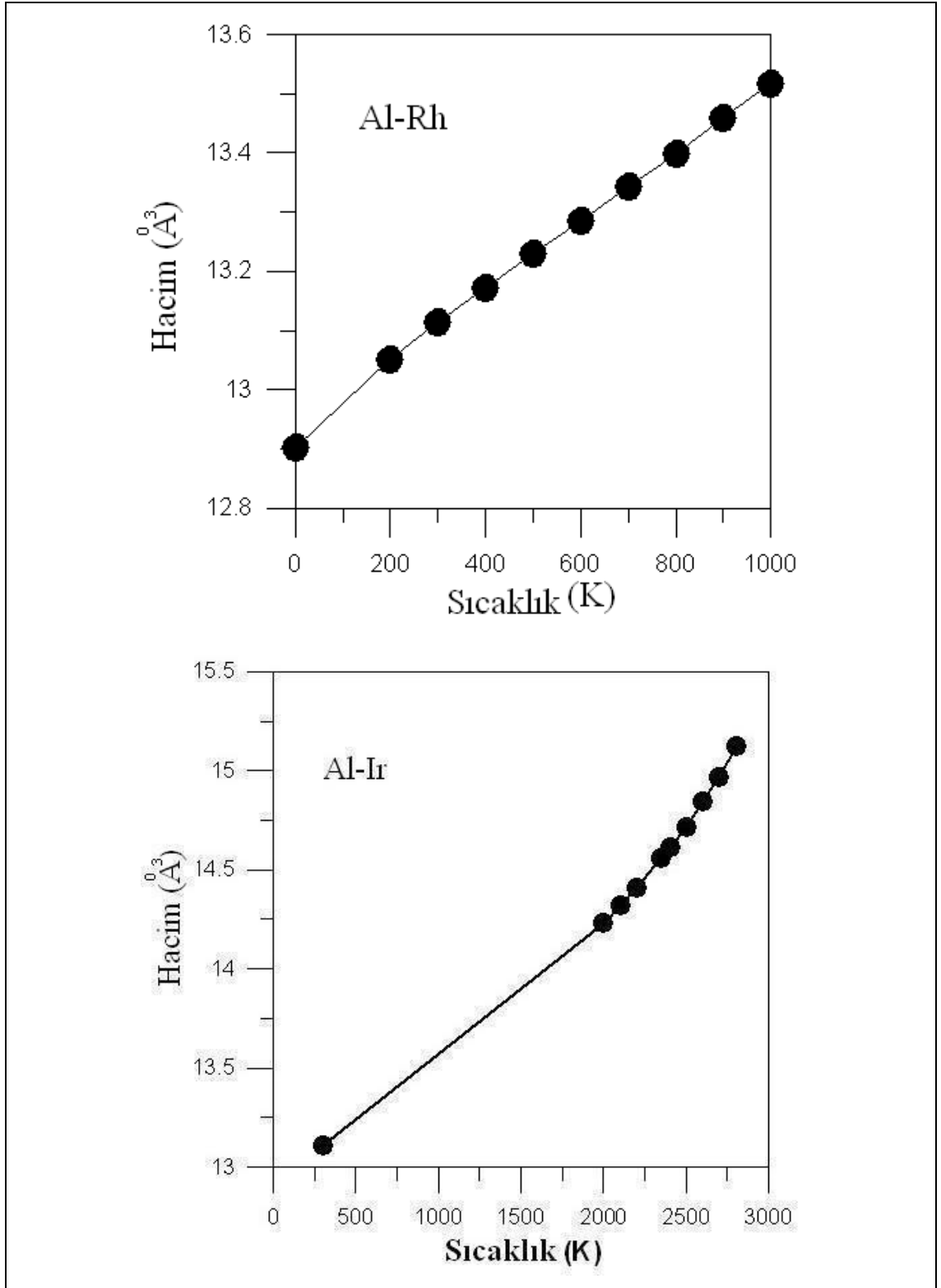
değerini hesaplarken Eş 3.1.'den yararlanılmıştır.

$$\alpha = \frac{1}{3v} \left(\frac{v-v_0}{T-T_0} \right) \quad (3.1)$$

değerleri hesaplanarak bu değerlerin ortalaması alınmış ve Al-Ir için

$$\alpha = \frac{1}{3v} \left(\frac{\Delta v \left(\frac{K}{G} \right)}{\Delta T (K)} \right) \cong 12,074 \times 10^{-4} K^{-1} \text{ ve Al-Rh içinde; } \alpha_{AlRh} = 6.510 \times 10^{-2} K^{-1} \text{ olarak}$$

bulunmuştur.



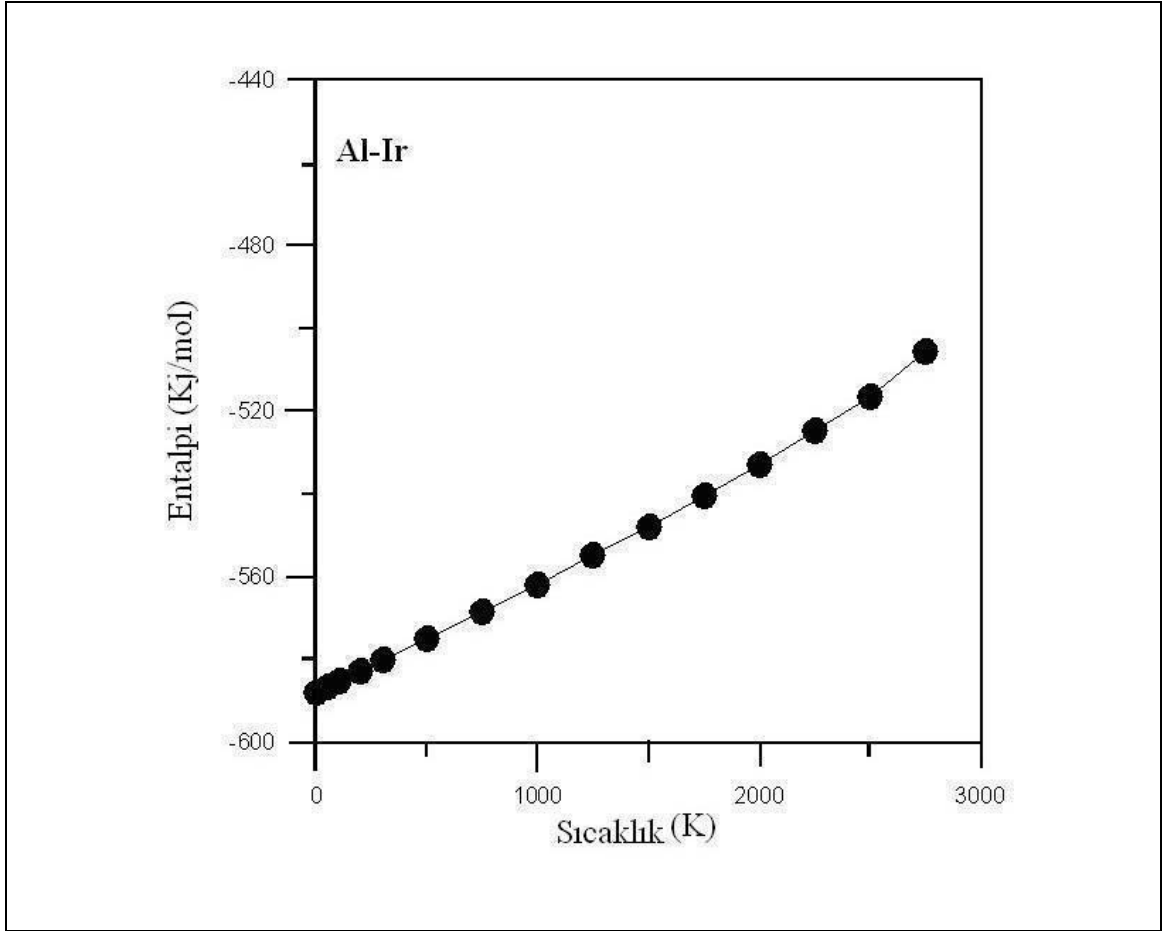
Şekil 3.22. Al-Rh ve Al-Ir için sıfır basınçta sıcaklığa bağlı hacim değişimleri

Şekil 3.23.'de Al-Ir ve Al-Rh için entalpinin sıcaklıkla değişimleri görülmektedir. P=0GPa basınç değeri alınmış ve sıcaklığa bağlı H (entalpi) değişimi incelenerek teorik olarak elde edilen C_p değeri Al-Ir için;

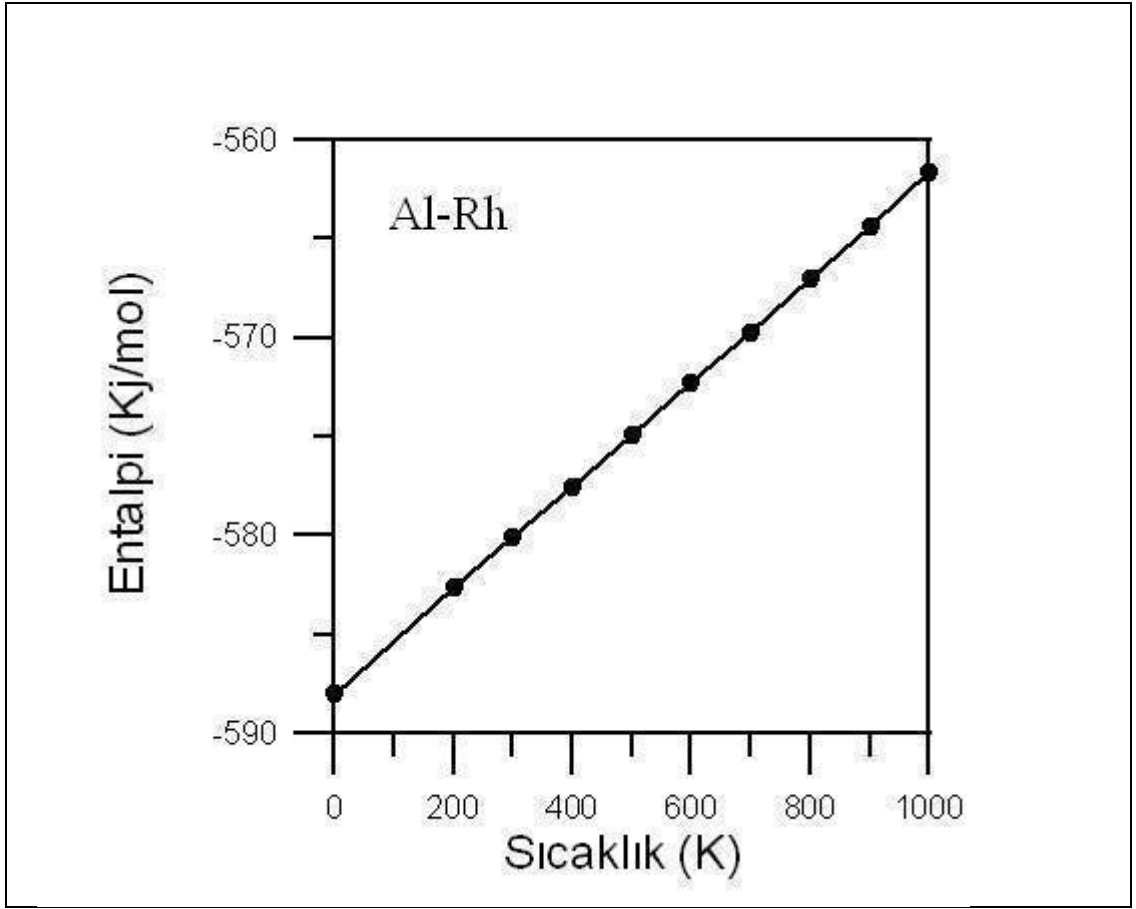
$$C_{p,Al-Ir} = \frac{\Delta H(kJ/mol)}{\Delta T(K)} = 11,952 \text{ J/mol.K}$$

ve Al-Rh için

$$C_{p,Al-Rh} = \frac{\Delta H(kJ/mol)}{\Delta T(K)} = 12,211 \text{ J/mol.K} \quad \text{olarak hesaplanmıştır.}$$



Şekil 3.23. Al-Ir alaşımı için P=0GPa basınç altında sıcaklığa bağlı H (entalpi) değişimleri



Şekil 3.23. (Devam) Al-Rh alaşımı için entalpinin sıcaklıkla değişimi ($P=0$ GPa)

Aşağıdaki Çizelge 3.7’de $P=0$ GPa altında Al-Ir için basit termodinamik niceliklerin sıcaklıkla değişimleri gösterilmiştir. Çizelgedeki bu değerler kullanılarak elde edilen sabit basınçta ısı kapasitesi, entalpinin sıcaklıkla değişimleri de Çizelge 3.7’de gösterilmiştir.

Çizelge 3.7. Al-Ir için P=0 GPa basınçta sıcaklığa bağlı elde edilen termodinamik nicelikler

T (K)	E_p (eV)	E_k (meV)	E_t (kJ/mol)	a_0 (Å)	V_0 (Å ³)	MSD_0 (×10 ² Å ²)	α (×10 ⁻⁴ K ⁻¹)
0,001	-6.0916	8.8×10 ⁻⁰⁷	-587.54	2.94936	12.9423	1.1×10 ⁻⁰⁷	10.2112874
50	-6.087	0.00651	-586.47	2.93993	12.9583	0.206	22.63725
100	-6.08	0.01302	-585.17	2.96353	12.9845	0.459	28.90729
200	-6.0666	0.02604	-582.61	2.96943	13.0513	0.936	13.16992
300	-6.053	0.03906	-580.05	2.97085	13.1119	1.423	16.85601
500	-6.0255	0.06509	-574.89	2.97849	13.2276	2.489	12.61433
750	-5.9901	0.09763	-568.33	2.99324	13.3707	3.852	8.63402
1000	-5.9533	0.13017	-561.64	2.99611	13.516	5.473	6.99285

Çizelge 3.8. Al-Ir için P=0 GPa basınçta sıcaklığa bağlı hesaplanan termodinamik nicelikler.

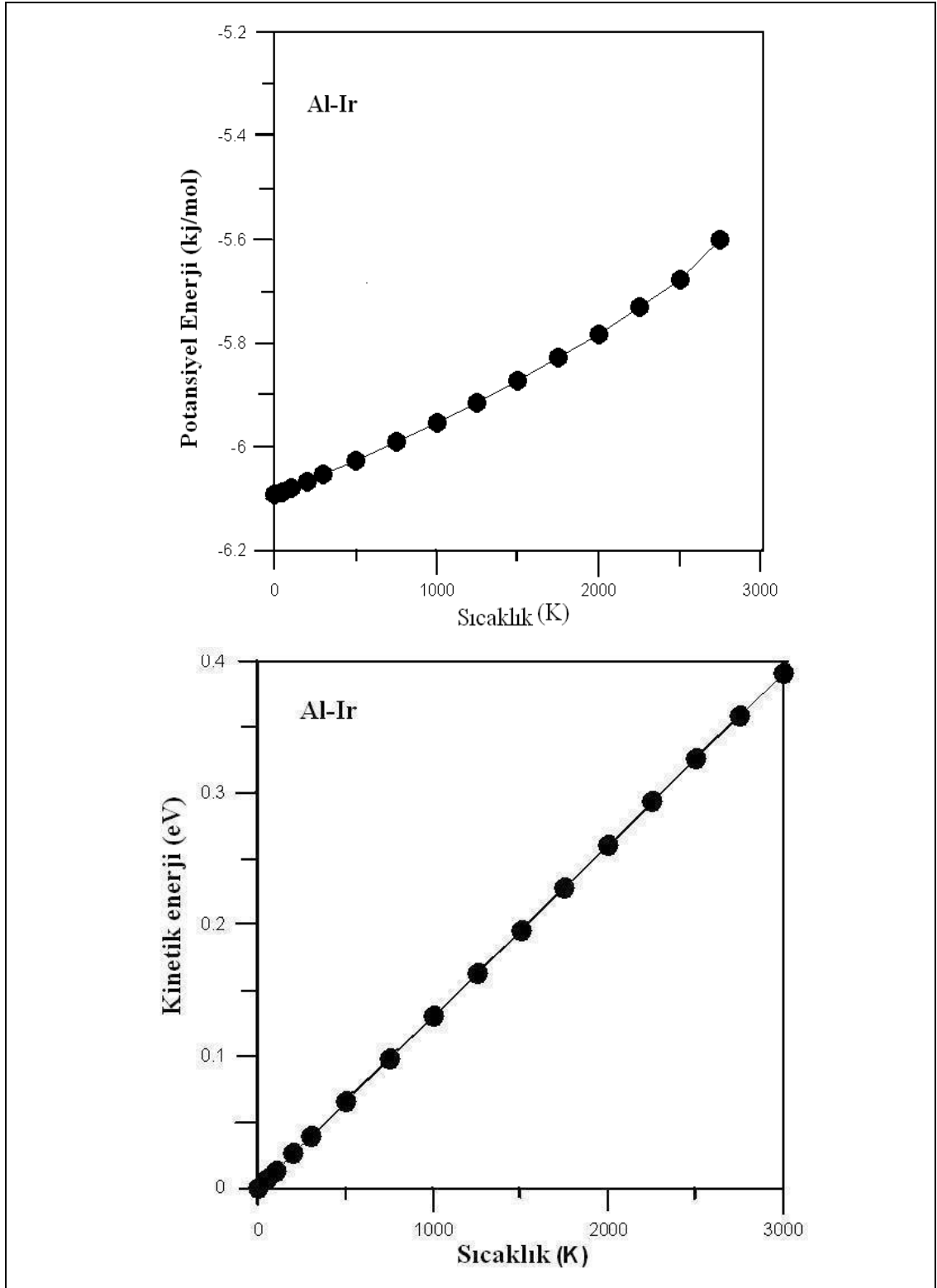
T (K)	H (kJ/mol)	C _p (J/mol.K)	C _p /T (kJ/mol.K ²)
0,001	-587.649	0	0
50	-586.465	23.679	0.000473
100	-585.166	25.979	0.00026
200	-582.636	25.297	0.000126
300	-580.056	25.803	8.6×10 ⁻⁰⁵
500	-574.862	25.966	5.19×10 ⁻⁰⁵
750	-568.412	25.804	3.44×10 ⁻⁰⁵
1000	-561.724	26.75	2.67×10 ⁻⁰⁵

Aşağıdaki Çizelge 3.9.'de P=0 GPa altında Al-Rh için basit termodinamik niceliklerin değişimleri gösterilmiştir. Çizelgedeki bu değerler kullanılarak elde edilen sabit basınçta ısı kapasitesi, entalpinin sıcaklıkla değişimleri Çizelge 3.6.'da gösterilmiştir.

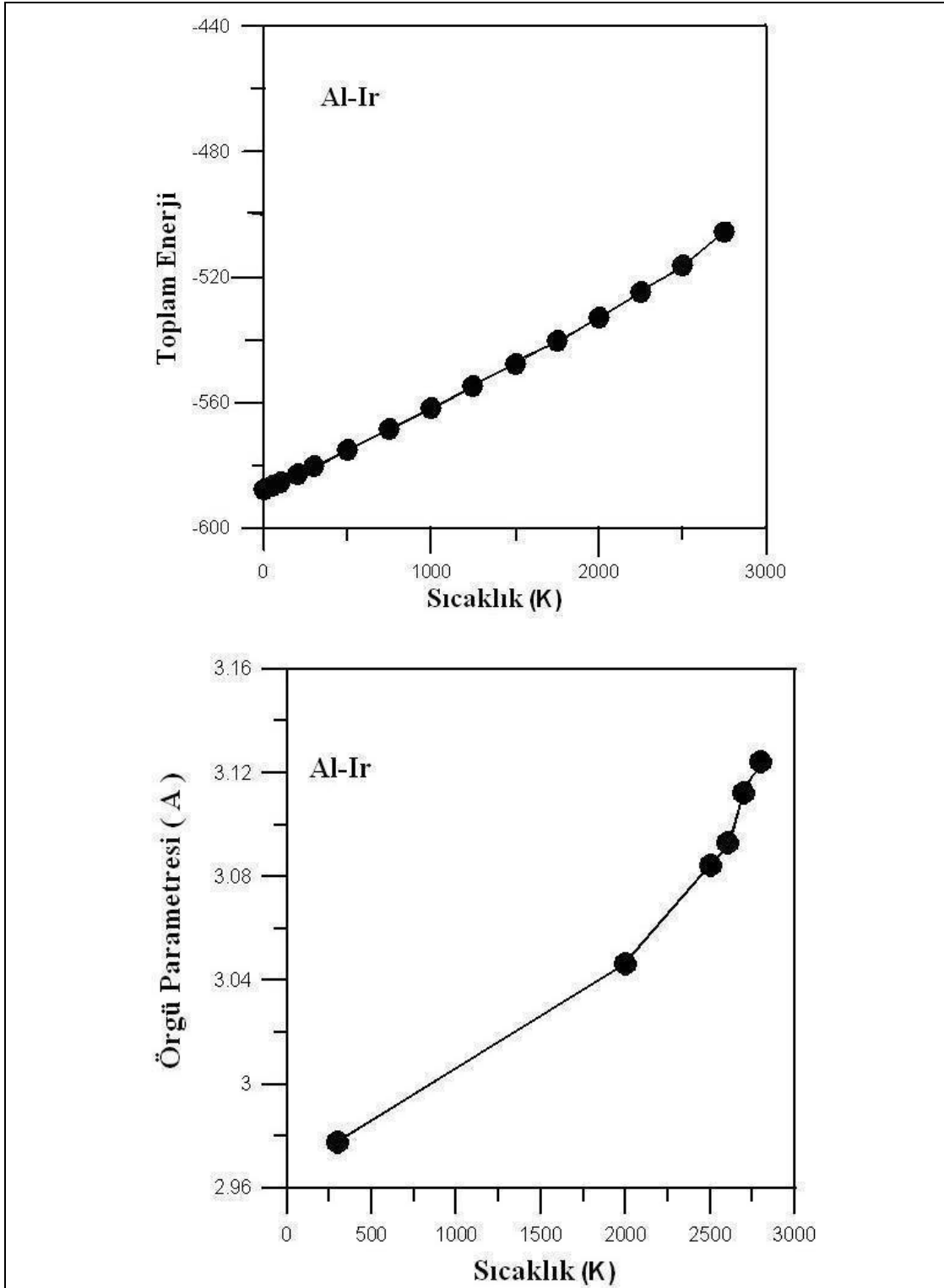
Çizelge 3.9. Al-Rh için T=300K sıcaklıkta basınca bağlı elde edilen termodinamik nicelikler.

T (K)	E_p (eV)	E_k (meV)	E_t (kJ/mol)	a_0 (Å)	V_0 (Å ³)	MSD_0 (×10 ² Å ²)	α (×10 ⁻⁴ K ⁻¹)
100	-6.1	0	-588	2.96	12.9	0	64.72851
200	-6.07	0.026	-583	2.97	13.05053	0.931	13.63005
300	-6.05	0.0391	-580	2.97	13.1132	1.43	8.45882
400	-6.04	0.0521	-577	2.98	13.17125	1.93	6.29783
500	-6.03	0.0651	-575	2.98	13.22863	2.4	4.94131
600	-6.01	0.0781	-572	2.98	13.28466	3.01	4.23749
700	-6	0.0911	-570	2.99	13.34207	3.51	3.65036
800	-5.98	0.104	-567	2.99	13.39953	3.95	3.25314
900	-5.97	0.117	-564	2.99	13.4578	4.54	2.10353

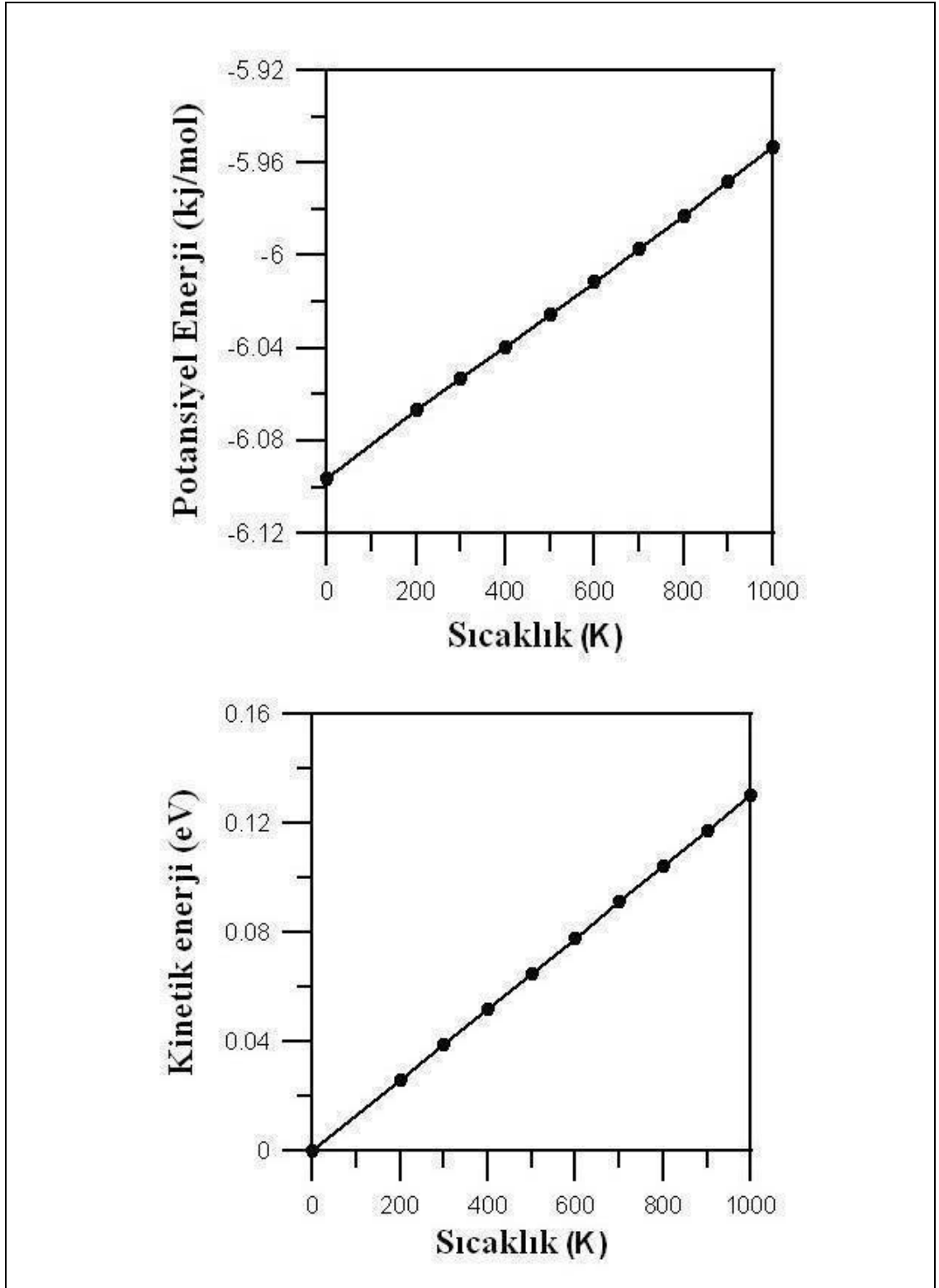
Aşağıdaki grafiklerde ilk olarak P=0 GPa basınçta termodinamik niceliklerin sıcaklıkla değişim grafikleri verilecektir. E_p-T , E_t-T , $V-T$ grafiklerinde aşağıda görüldüğü gibi sıcaklık artışıyla birlikte zaman içinde bir artışın olduğu görülmektedir. Bunun sebebi ise maddenin artık katı fazdan sıvı faza geçmeye başlamasıdır. Yani madde artık erimeye başlayacaktır ve de daha sonraki bölümde erime grafiklerinde görülecek olduğu gibi erime sıcaklığında faz dönüşümü gerçekleşecektir. $a(A^0)$ örgü sabitinde de sıcaklıkla birlikte lineer bir artış vardır.



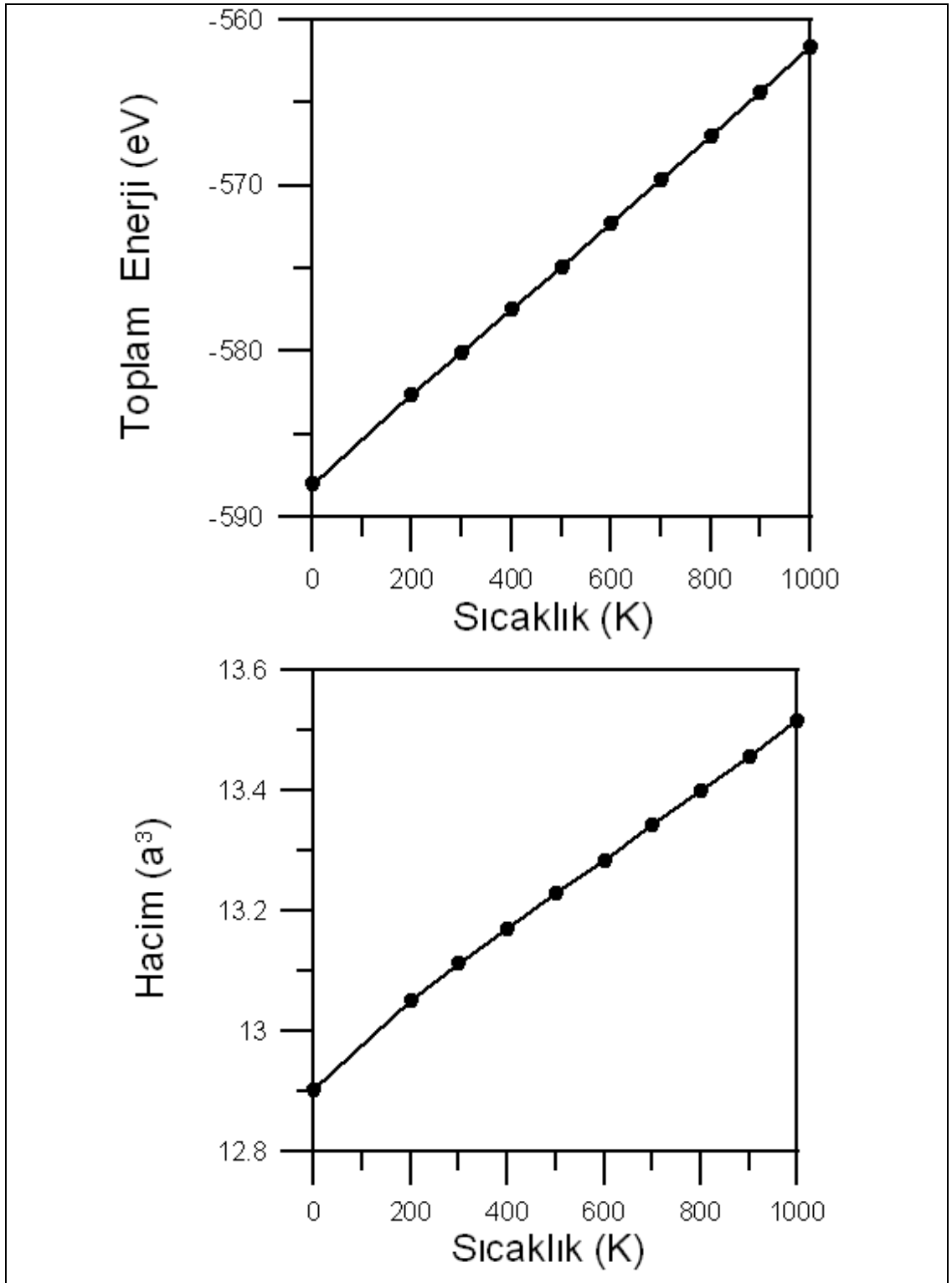
Şekil 3.24. Al-Ir alaşımı için $P=0$ GPa şartlarda elde edilen basit termodinamik nicelikler (kinetik enerji, potansiyel enerji, toplam enerji, örgü parametresi, sabit basınçta ısı kapasitesi, ısı kapasitesi/sıcaklık)



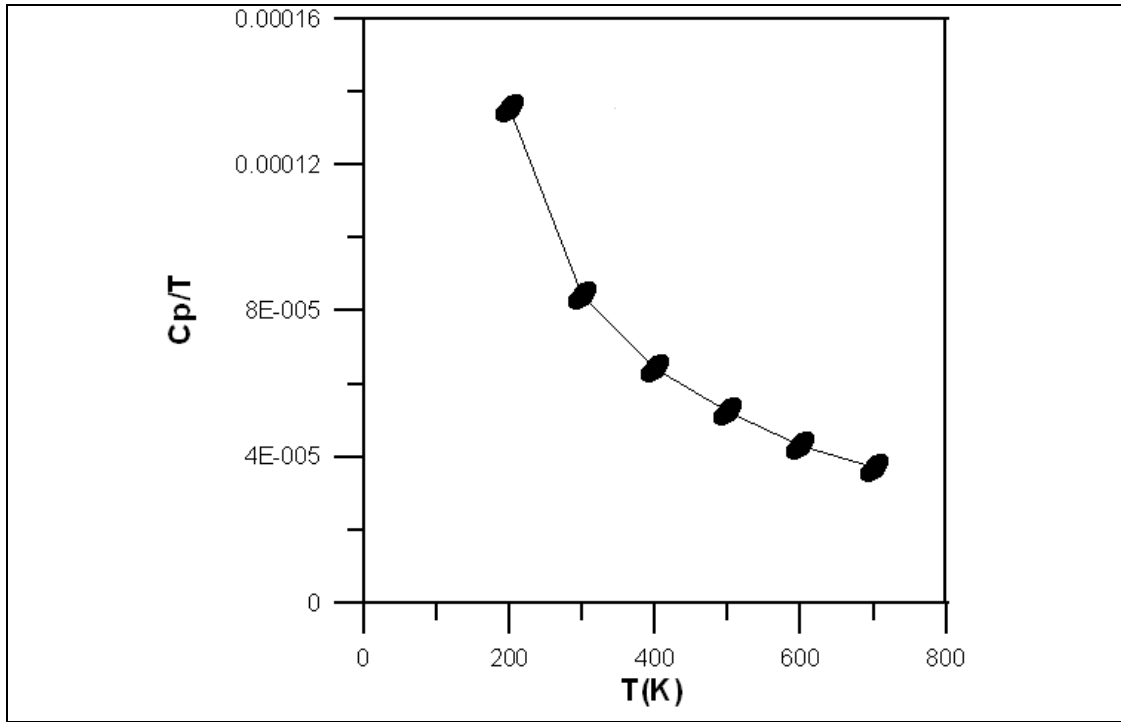
Şekil 3.24. (Devam) Al-Ir alaşımı için $P=0$ GPa şartlarda elde edilen basit termodinamik nicelikler (kinetik enerji, potansiyel enerji, toplam enerji, örgü parametresi, sabit basınçta ısı kapasitesi, ısı kapasitesi/sıcaklık)



Şekil 3.25 Al-Rh alaşımı için elde edilen basit termodinamik nicelikler $P=0$ GPa (kinetik enerji, potansiyel enerji, toplam enerji, hacim ısı kapasitesi\sıcaklık)



Şekil 3.25 (Devam) Al-Rh alaşıımı için elde edilen basit termodinamik nicelikler (kinetik enerji, potansiyel enerji, toplam enerji, hacim ısı kapasitesi\sıcaklık) $P=0$ GPa



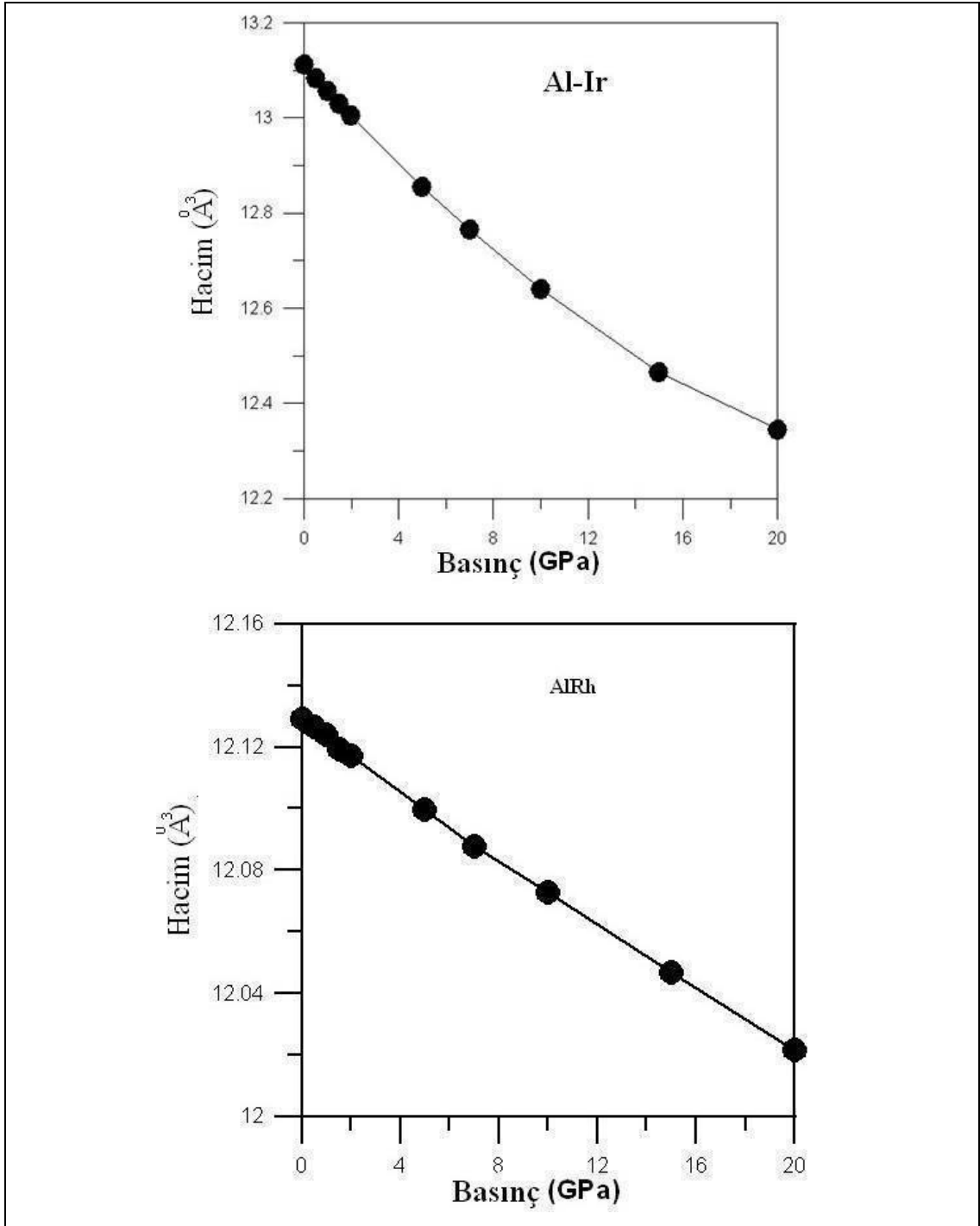
Şekil 3.25. (Devam) Al-Rh alaşıımı için elde edilen basit termodinamik nicelikler (kinetik enerji, potansiyel enerji, toplam enerji, hacim ısı kapasitesi\sıcaklık) P=0 GPa

3.2.2. Al-Ir ve Al-Rh alaşımlarının termodinamik özelliklerinin basınçla değişimi

Al-Ir ve Al-Rh alaşımlarının 300K sabit sıcaklıkta uygulanan çeşitli basınç değerlerine karşı hacim değişimleri Şekil 3.26’da verilmiştir. Şekil 3.26’da görülen Al-Ir ve AlRh için P - V grafiğinden hesaplanan hacim modülü;

$$B = -\frac{1}{V_0} \frac{(P - P_0)}{(V - V_0)} \quad (3.6)$$

formülü kullanılarak, $B_{m,AlIr}=182,458$ GPa bulunmuştur. Al-Rh içinse $B_{m,Al-Rh}=181,739$ GPa değerindedir. Al-Ir ve Al-Rh için deneysel hacim modülü değerleri ile kıyaslanırsa; Al-Ir için %18 ve Al-Rh içinse %3,4 hata payı olduğu görülür ve sonuçların literatür ile uyumlu olduğu görülür



Şekil 3.26. Al-Ir ve Al-Rh için P - V diyagramları ($T=300K$)

Bu bölümde yapılacak olan hesaplamalarda; Al-Ir ve Al-Rh alaşımları $T=300$ K sabit sıcaklık altında ve $P=0-20$ GPa basınç değerleri altında tutulmuştur. Bu değerlendirmeler altında bazı termodinamik parametrelerin aşağıdaki çizelgedeki gibi değiştiği gözlenmiştir. Basınç değişimi ile birlikte E_k nin hem Al-Ir hem de

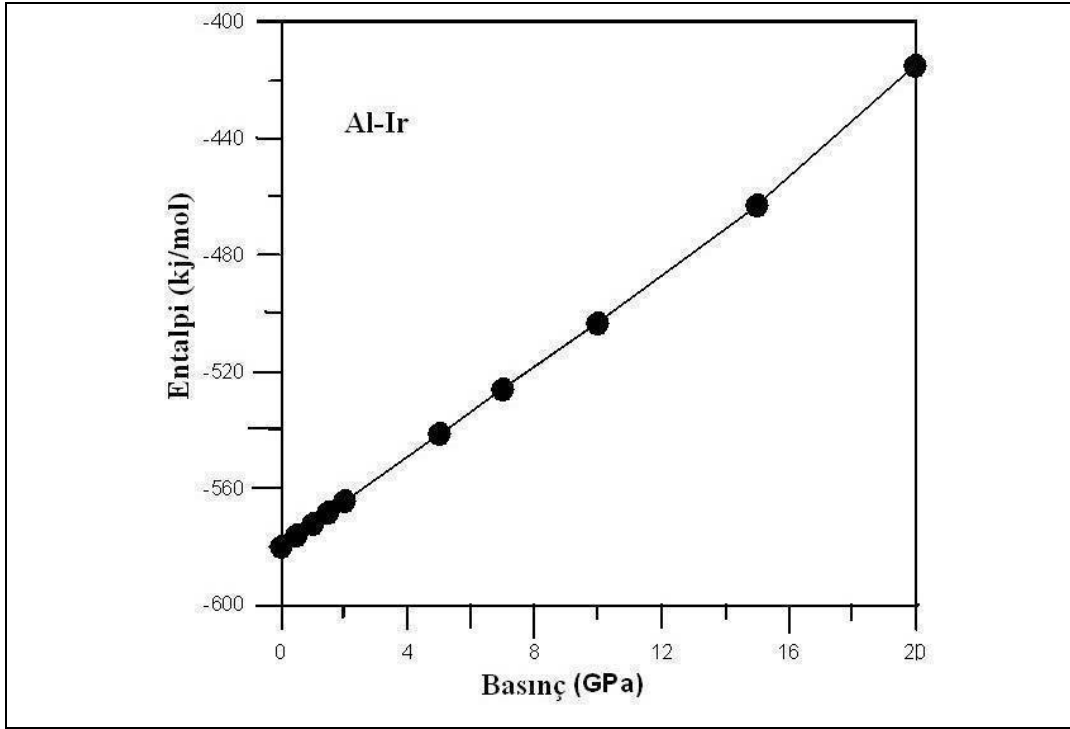
AIRh için sabit kaldığı gözlenmiştir. E_f 'de ise zamanla az bir artış ve bunun sonucunda da entalpide de bir artış bulunmuştur. Yine artan basınç değerleri ile birlikte örgü sabitinde ve hacimde de zamanla artış olduğu görülmektedir.

Çizelge 3.7. T=300K sıcaklıkta basınca bağlı elde edilen Al-Ir için basit termodinamik nicelikler.

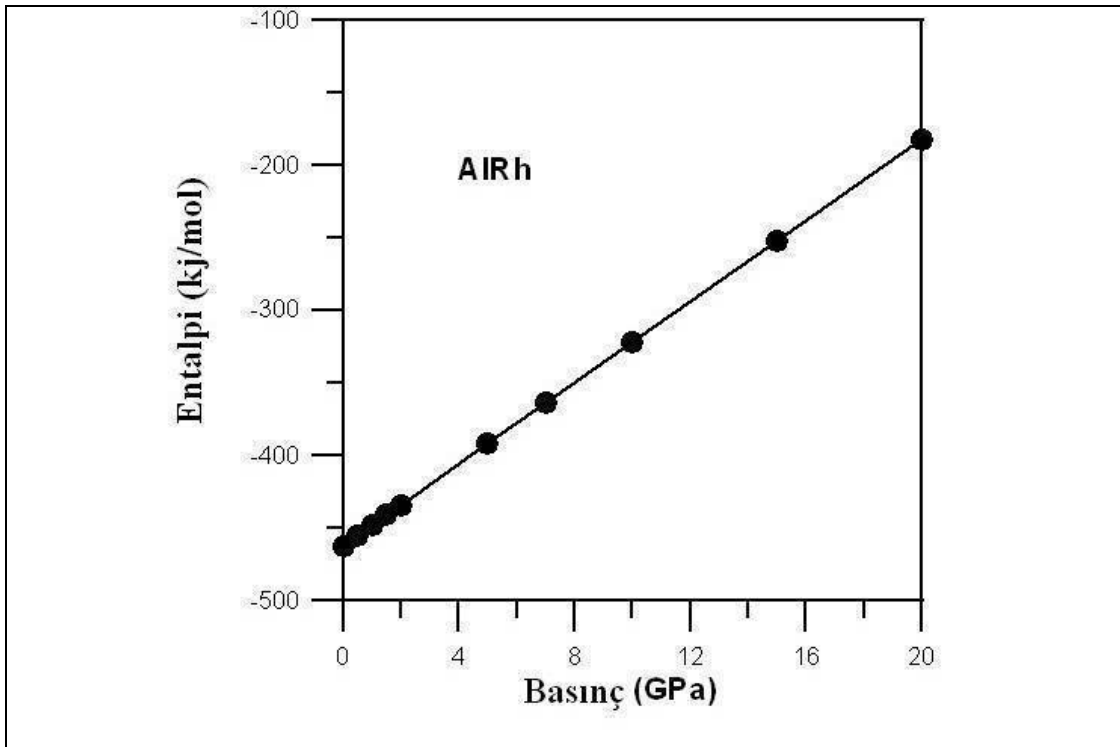
P(GPa)	E_p (eV)	E_k (meV)	E_t (kJ/mol)	H (kJ/mol)	a ($\text{\AA}$)	V ($\text{\AA}^3$)	MSD($\text{\AA}^2$)	B(GPa)
0	6.053	39.05	-580.0572	-580.0496	2.9777	13.11195	0.014827	252.99
0,5	-6.053	39.05	-580.1011	-576.1583	2.9661	13.08365	0.013948	248.84
1	-6.053	39.06	-580.1452	-572.2947	2.9577	13.05747	0.014455	252.89
1,5	-6.054	39.06	-580.1695	-568.4210	2.9629	13.03057	0.014189	271.00
2	-6.054	39.06	-580.1918	-564.5702	2.9634	13.00487	0.014395	275.06
5,0	-6.054	39.06	-580.1621	-541.4766	2.9533	12.85465	0.012177	292.49
7,0	-6.052	39.06	-579.9685	-526.1917	2.9449	12.76561	0.011550	317.61
10,0	-6.046	39.06	-579.3869	-503.3044	2.9325	12.6406	0.010630	326.45
15,0	-6.005	39.06	-575.5061	-462.9610	2.9207	12.46651	0.009165	360.90
20,0	-5.882	39.06	-563.6165	-415.0038	2.9124	12.34422	0.007767	385.61

Çizelge 3.8. T=300K sıcaklıkta basınca bağlı elde edilen Al-Rh için basit termodinamik nicelikler.

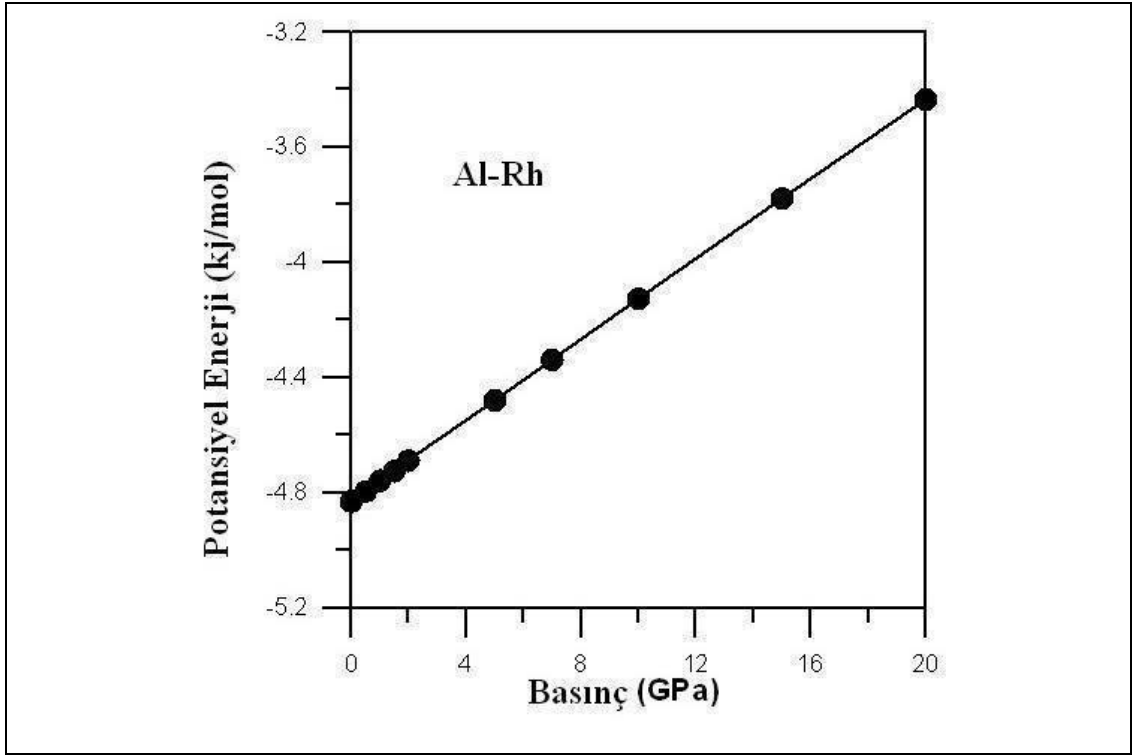
P(GPa)	E_p (eV)	E_k (meV)	E_t (kJ/mol)	H (kJ/mol)	a ($\text{\AA}$)	V ($\text{\AA}^3$)	MSD($\text{\AA}^2$)	B(GPa)
0	-4.83	39.2	-462.081	-462.1020	2.8950	12.1290	0.01177	217.91
0,5	-4.79	39.2	-458.676	-455.055	2.8947	12.1267	0.01150	219.60
1	-4.76	39.2	-455.124	-447.835	2.8941	12.1239	0.01125	224.76
1,5	-4.73	39.2	-451.971	-441.054	2.8943	12.1194	0.01107	230.46
2,0	-4.69	39.2	-448.462	-433.898	2.8935	12.1171	0.01103	223.08
5,0	-4.48	39.2	-428.158	-391.775	2.8922	12.0996	0.01028	233.30
7,0	-4.34	39.2	-414.664	-363.761	2.8915	12.0879	0.00995	231.49
10,0	-4.13	39.2	-394.255	-321.622	2.8907	12.0730	0.00926	242.55
15,0	-3.78	39.2	-360.642	-251.929	2.8886	12.0468	0.00853	253.19
20,0	-3.43	39.2	-327.372	-182.688	2.8859	12.0215	0.00799	260.87



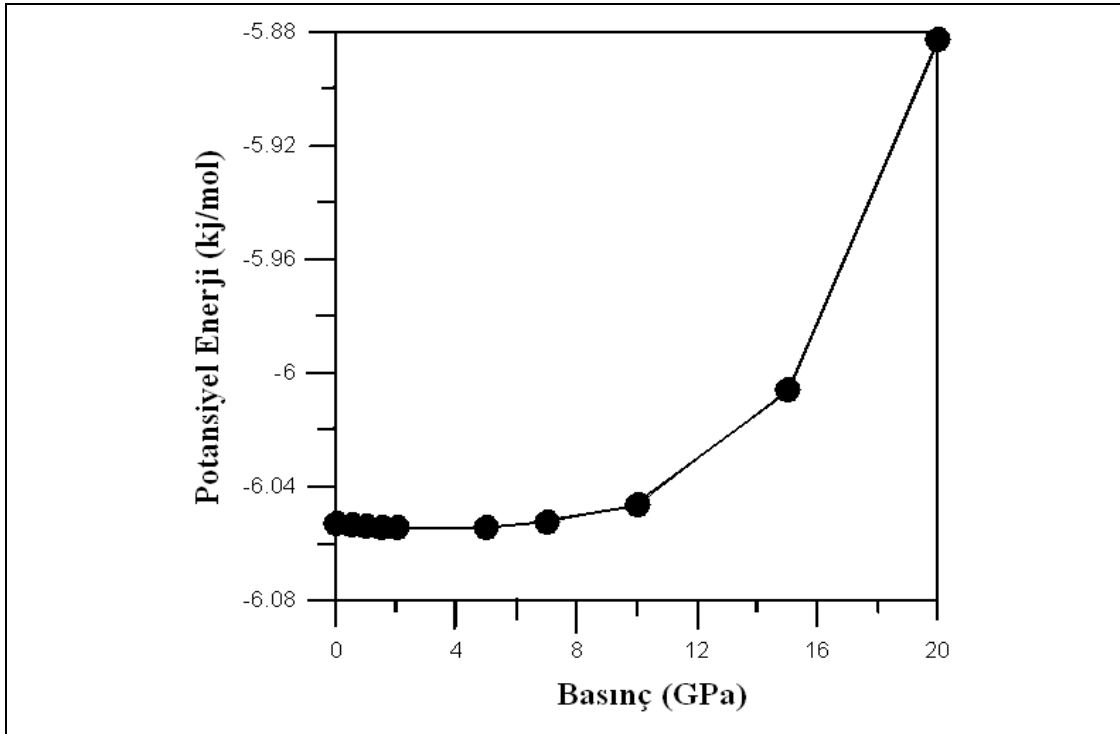
Şekil 3.27. Al-Ir alaşımı için entalpinin basınçla değişimi ($T=300\text{K}$)



Şekil 3.28. Al-Rh alaşımı için entalpinin basınçla değişimi ($T=300\text{K}$)

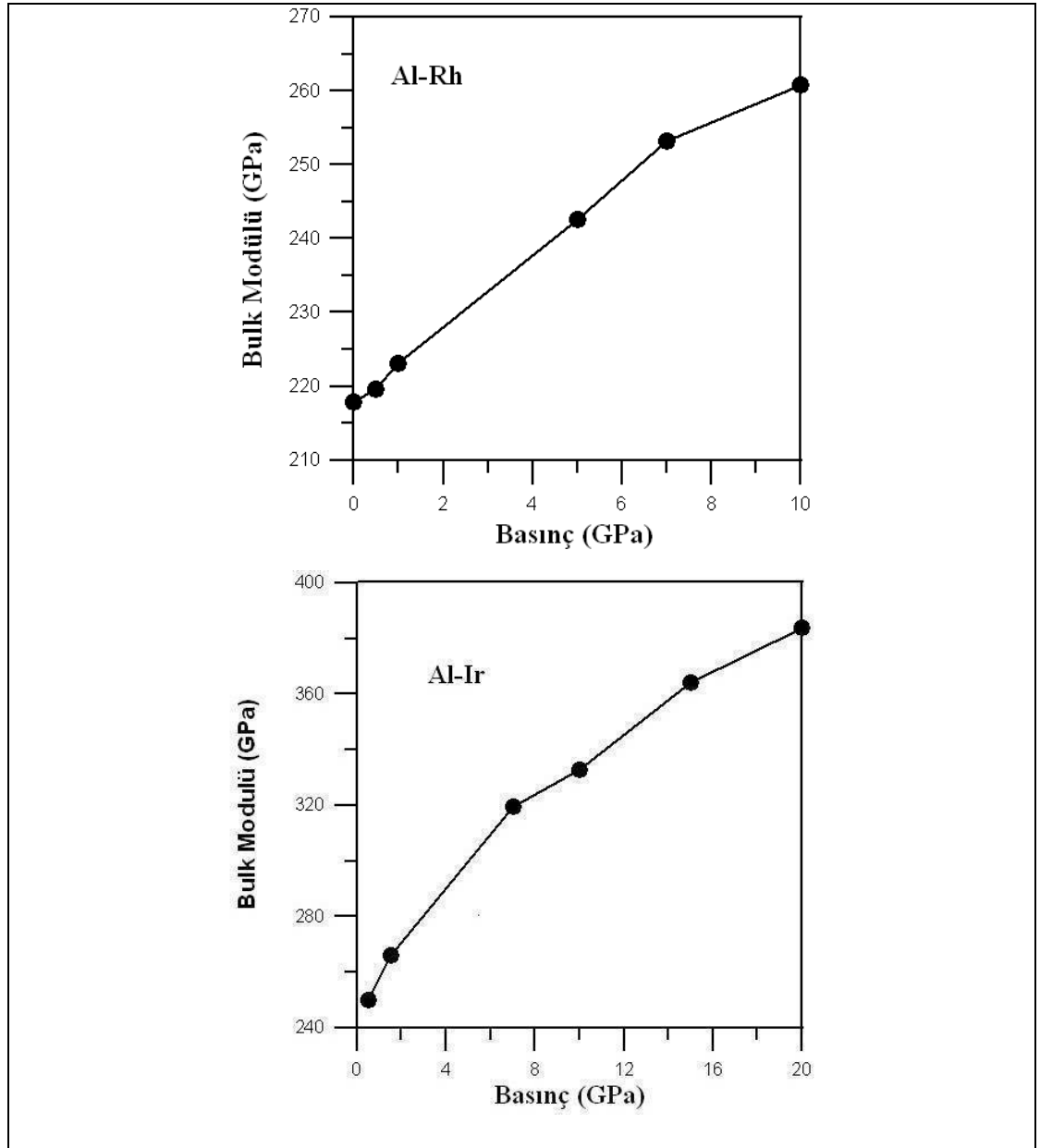


Şekil 3.29. Al-Rh alaşımı için potansiyel enerjinin basınçla değişimi (T=300K)



Şekil 3.30. Al-Ir alaşımı için potansiyel enerjinin basınçla değişimi (T=300K)

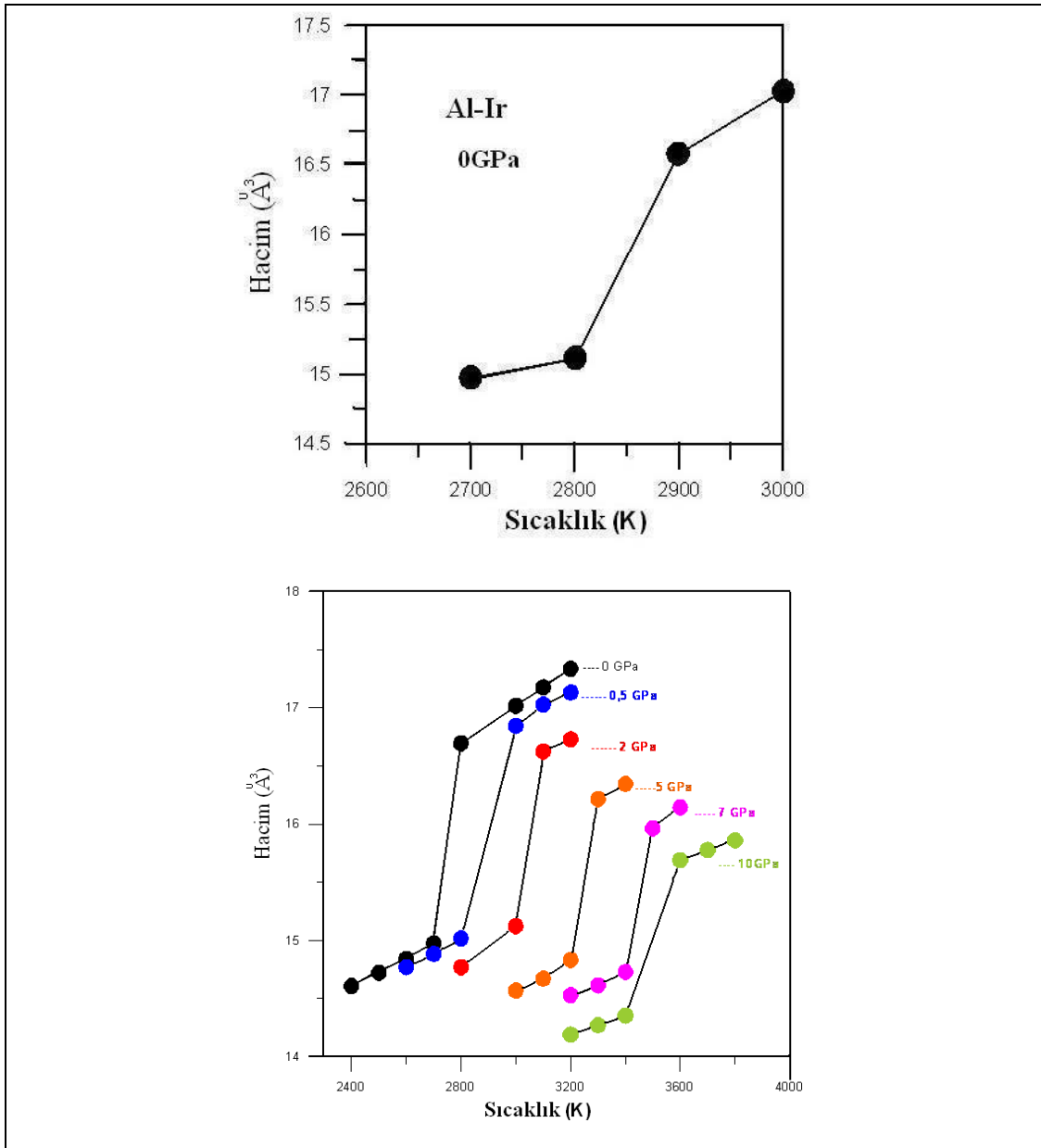
Aşağıdaki grafiklerde Bulk (hacim) modülünün $T=300\text{K}$ 'de farklı basınç değerleri altındaki davranışları gösterilmiştir. Her iki grafikten de görüldüğü gibi zaman içinde artan basınç değerleri ile birlikte Bulk modülü değerlerinde bir artış olduğu gözlenmektedir. Bu olayın sebebi ise artan basınç ile birlikte hacminde artmış olmasıdır. Atomik hareketlilikte artış oluşmaktadır.



Şekil 3.31. Al-Ir ve Al-Rh alaşımları için Bulk modülünün basınçla değişimi ($T=300\text{K}$).

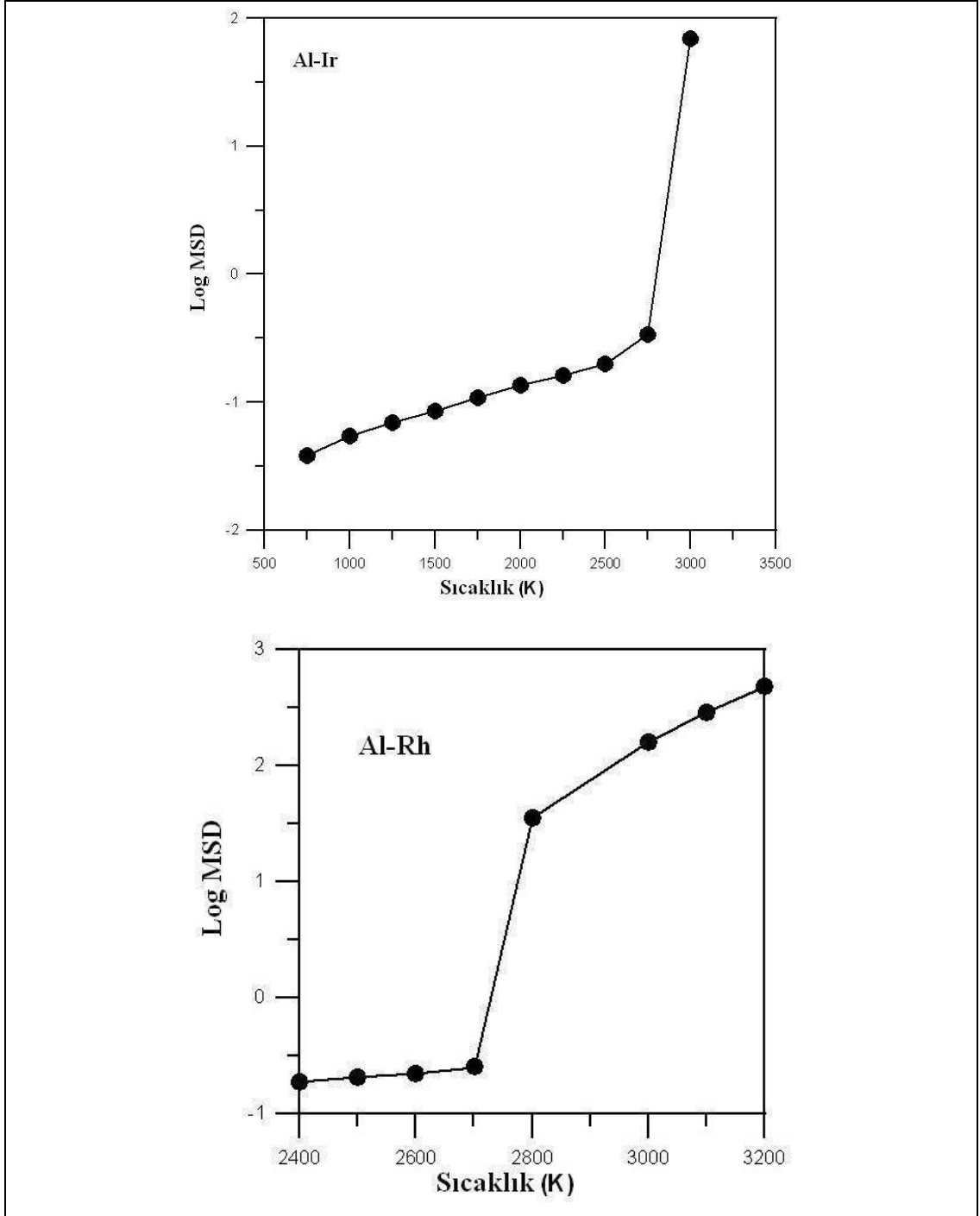
3.2.3 Al-Ir ve Al-Rh alařımlarının erime sıcaklıęının basınla deęiřimi

eřitli sabit basın deęeri iin sıcaklıęı deęiřtirerek elde ettięimiz hacim deęiřimleri řekil 3.32’de grlmektedir. Bu deęiřimlerden sıfır basınta belirlenen erime sıcaklıęı deęerleri Al-Ir ve Al-Rh alařımları iin sırasıyla $2850 \pm 50\text{K}$ ve $3000 \pm 50\text{K}$ řeklinde-dir.



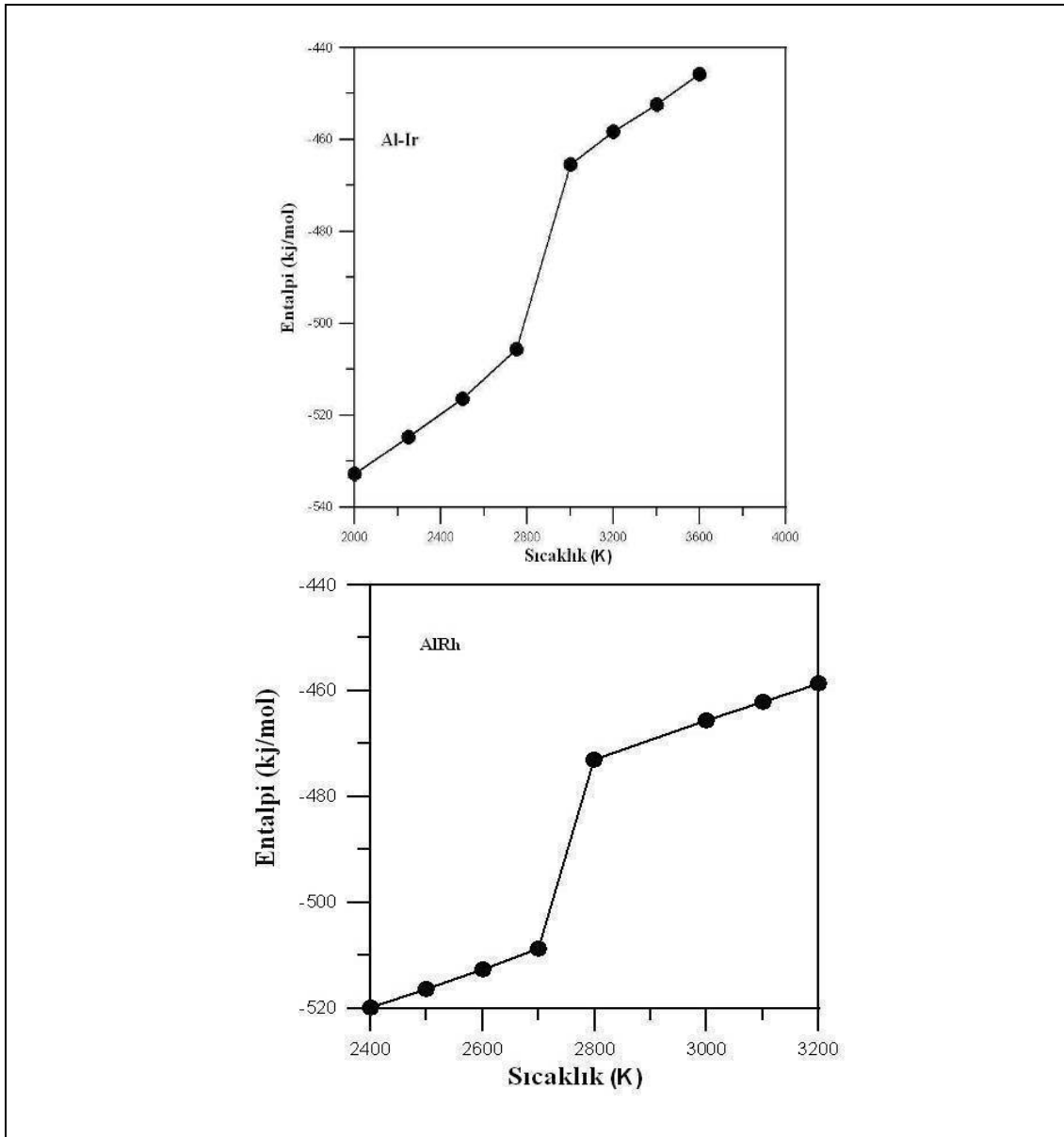
řekil 3.32. Al-Ir ve) Al-Rh iin sıcaklıęa karřı hacim deęiřimleri. (0; 0.5; 2,5; 5,0; 7,5 ve 10 GPa) basın deęerlerini gstermektedir.

Ergime sıcaklığını belirlediğimiz diğer yol ise, yine sabit basınç olan 0.0 GPa altında değişen sıcaklık değerlerine karşı log msd değerlerine karşılık çizilen grafik şekil 3.33’de belirtilmiştir. Al-Ir ve Al-Rh için sırasıyla $2850 \pm 20\text{K}$ ve $2800 \pm 20\text{K}$ şeklindedir.



Şekil 3.33. Al-Ir ve Al-Rh için log msd’nin sıcaklıkla değişimi ($P=0$ GPa)

Ergime sıcaklıklarını belirlediğimiz bir diğer yol ise Şekil 3.34’de görülen sıcaklığa karşı entalpi değerleridir. Şekle bakıldığında Al-Ir için 2800K-2900K aralığında ergimenin başladığı görülmektedir. Al-Rh için bu 2700K–2900K aralığında ergimenin başladığı görülmektedir. Yaptığımız tüm bu çalışmalarda bütün ergime aralıkları yaklaşık olarak beklendiği gibi aynı değerde çıkmaktadır. Bu da kullandığımız modelin uygunluğunu göstermektedir.



Şekil 3.34 Al-Ir ve Al-Rh için entalpinin sıcaklığa göre değişimi (P=0 GPa)

3.2.4. Al-Ir ve Al-Rh alařımları iin elastik sabit hesabı

Burada Al-Ir ve Al-Rh alařımlarının 0 GPa basın altında oda sıcaklıęında (300K) Cij elastik sabit deęerleri hesaplanmıřtır. Bu deęerler sırasıyla Eř.2.52-Eř.2.56'da yerine konularak bulk modl, tetragonal kayma(shear) modl, trigonal kayma(shear) modl, zener anizotropi faktr ve young's modl hesaplanmıřtır. Elde edilen deęerler izelge 3.9'da yer almaktadır.

izelge 3.9. Al-Ir ve Al-Rh alařımlarının hesaplanan bazı elastik zellikleri (300K, 0 GPa)

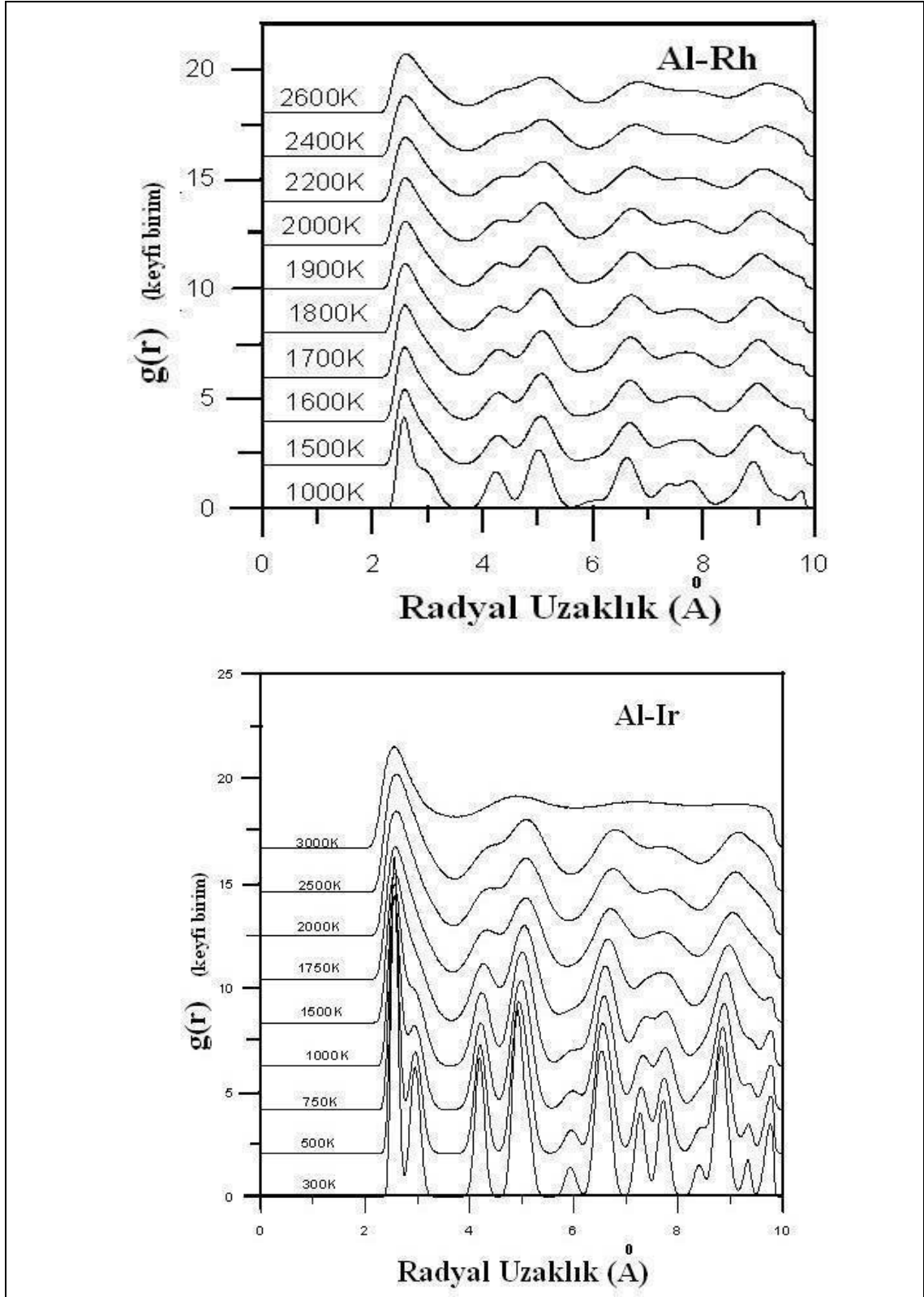
Alařım	C ₁₁ (GPa)	C ₁₂ (GPa)	C ₄₄ (GPa)	B(GPa)	C'	G	A	ν	Y
Al-Ir	172,789	172,465	62,36	173,573	172,63	62,36	5196.6	0,34	167,1
Al-Rh	147,5787	132,6647	44,99	137,636	140,12	44.99	6.033	0.35	121,7

3.2.5. Al-Ir ve Al-Rh sistemlerinin katı-sıvı faz yapılarının belirlenmesi

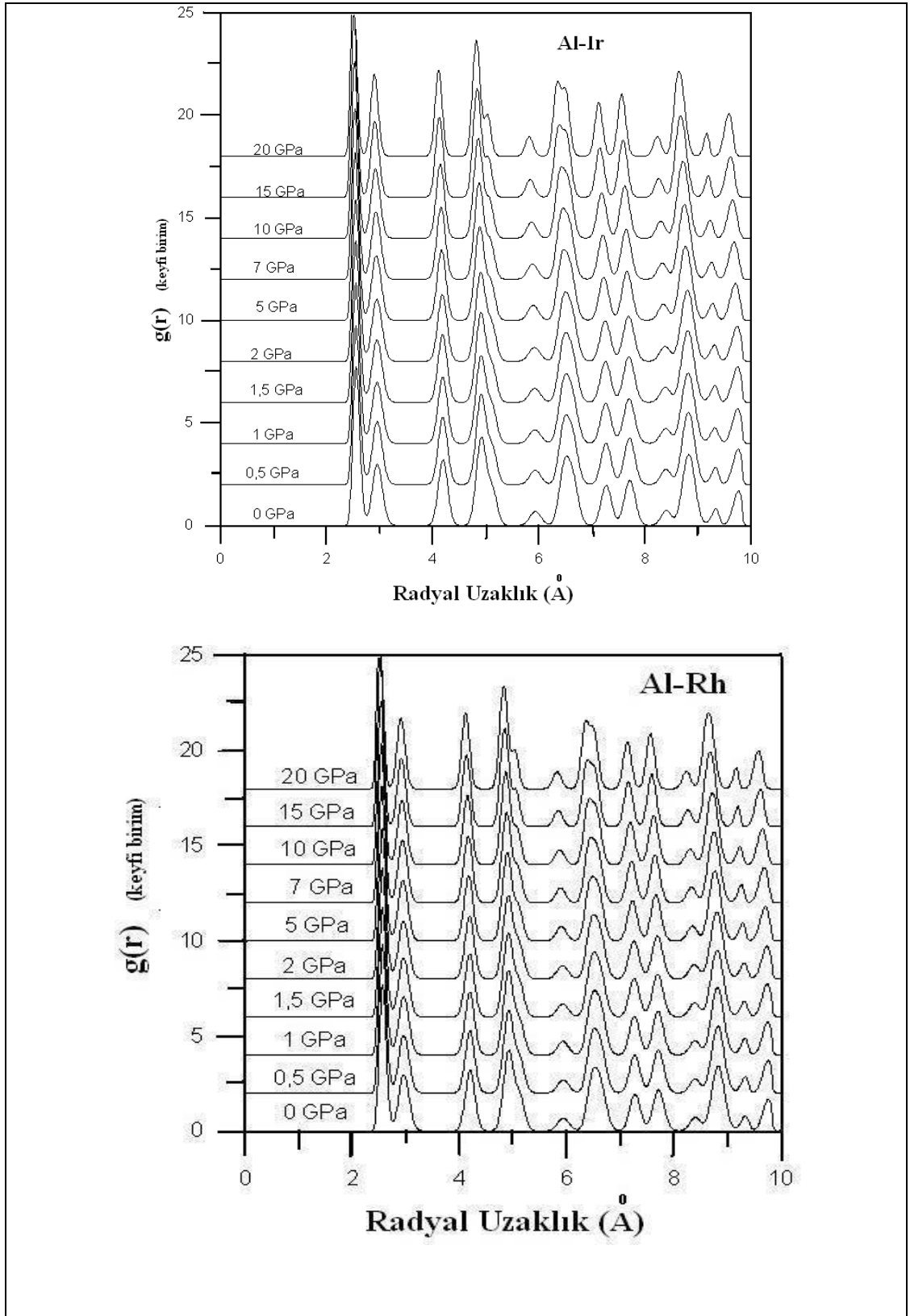
Katı ve sıvı fazların yapısal zelliklerinin incelenmesinde radyal daęılım fonksiyonlarından yararlanılmıřtır. Alminyum(%50)-İridyum ve Alminyum(%50)-Rodyum alařımlarının sıcaklıkla RDF eęrilerindeki deęiřimler sırasıyla řekil 3.36 ve řekil 3.37 de verilmiřtir. Bu deęiřimlerden Alminyum-iridyum alařımı iin 2500 K, Alminyum-rodyum alařımı iin 2600 K sıcaklıęına kadar RDF eęrileri zerinde belirgin piklerin bulunduęu grlmektedir. Radyal daęılım eęrisinin ilk piki en yakın komřu atom uzaklıęını tanımlar. Bu piklerin yatay eksen zerindeki konumları incelendięinde, 300K sıcaklık deęerinde Al-Ir iin, ilk pik konumu 2,91 Å⁰, Al-Rh ilk pik konumu 2,90Å deęerinde olduęu belirlenmiřtir. İkinci pik konumu ise bcc kristaller iin rg parametresine karřılık gelmektedir ve bunun deęeri belirlenmiřtir. Bu deęer Al, Ir ve Rh elementlerinin rg parametrelerinin kombinasyonu řeklinde hesaplanan Al-Ir iin iin 3,945Å, Al-Rh iin 3,95 Å⁰ deęerleri ile karřılařtırıldığında olduka uygun olduęu grlmektedir.

Sıcaklıęın artmasıyla ilk pik konumunun nce saęa doęru ilerledięi ve erime ile birlikte daha sola kaydığı grlmektedir. Bunun yanı sıra, ikinci pik konumu

sıcaklıkla sola doğru belirgin bir kayma göstermiş ve sonra erime ile birlikte ortadan kaybolmuştur. Bu durum, sıvı fazda atomların birbirleri etrafında kümелendiğini, ancak ikinci komşulukların daha uzaklaştığını göstermektedir. Şekil 3.35de RDF eğrilerinin basınçla değişimleri verilmiştir. 300K sabit sıcaklıkta elde edilen bu eğrilerden, düşük basınç değerlerinde RDF piklerinin daha geniş olduğu, fakat basıncın artmasıyla birlikte pik genişliklerinin azaldığı görülmektedir. Bu durum, basıncın artmasıyla atomik hareketlerin daha dar bölgelerde gerçekleştiği, yani atomik hareketlerin kısıtlandığı anlamına gelmektedir. Ayrıca, basınç artışıyla birlikte bütün pik konumlarının sola doğru kaydığı da bu grafiklerden görülmektedir. Bunun nedeni ise, basınç artışıyla birlikte hacimde bir daralmanın olması olarak değerlendirilebilir. İdeal bcc örgüye sahip katı sistemler için radyal dağılım eğrisi, r_0 değerinin katları olmak üzere $1, \sqrt{4/8}, \sqrt{8/3}, \sqrt{11/3}, \dots$ uzunluklarda keskin piklere sahiptir. Şekil 3.35 ve Şekil 3.36'da görülen pik konumları bu özelliğe tam olarak uyduğu için her iki sistemin bcc yapıda olduğu söylenebilir. Bununla birlikte, sıcaklık ve basınç değişimine karşı yaptığımız radyal dağılım analizlerinde bcc dışında bir faza rastlanmamıştır.

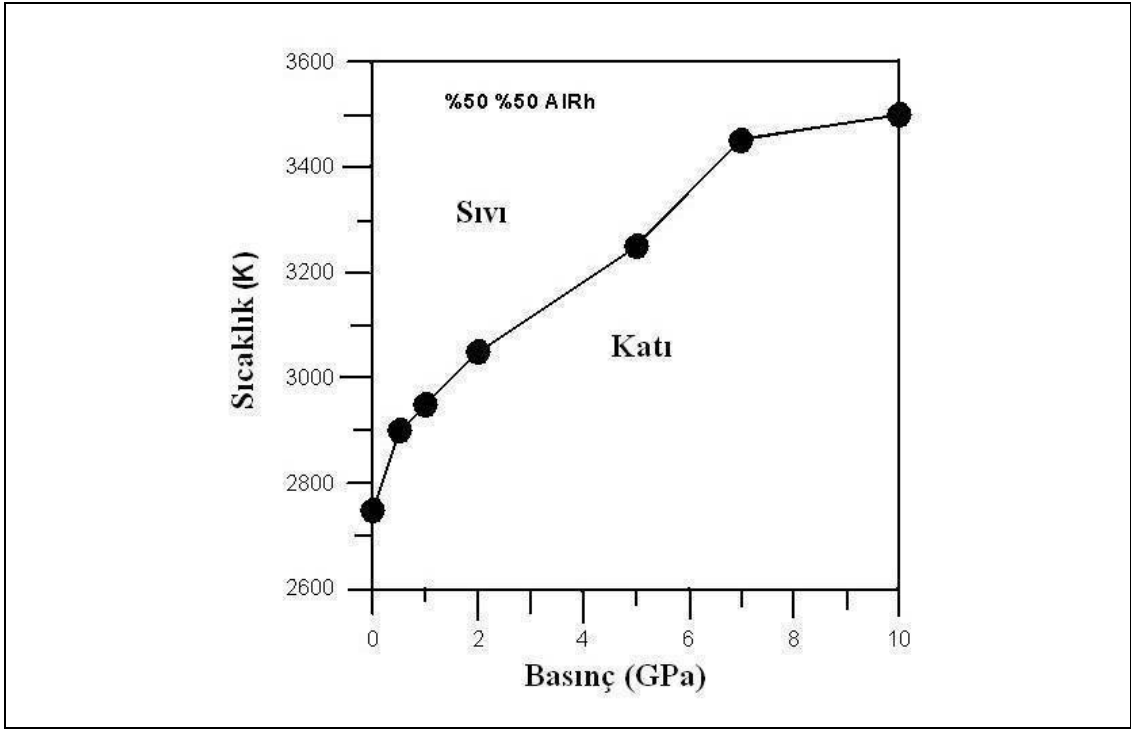


Şekil 3.35. Al-Rh ve Al-Ir için radyal dağılım fonksiyonunun sıcaklıkla değişimi ($P=0.0\text{GPa}$)



Şekil 3.36. Al-Ir ve Al-Rh için radyal dağılım fonksiyonunun basınçla değişimi (300K)

Al-Rh için katı faz analizlerinde bcc dışında farklı bir faza rastlanmadığından, P - T diyagramlarının çizilmesinde sadece Şekil 3.32 den elde edilen erime sıcaklığı değerleri kullanılmıştır. Bu şekilde çizilen diyagramlar Şekil 3.37 de verilmiştir.



Şekil 3.37. Al(%50)-Rh Alaşımı için çizilen P-T diyagramları

3.2.6. Al-Ir ve Al-Rh için farklı hızlarda ısıtma ve soğutmalar

Metalik yapıların; sıvı alaşımları çok hızlı soğutulduğunda oluşan amorf katı evreler çok sayıda fiziksel özellik içermektedir. Hem temel yapı hem uygulama açısından bu yarı kararlı (metastable) maddelerin yapısının ve termal dengesinin anlaşılması çok önemlidir [49-50]. Asıl önemli olan kararlılık (denge) halindeki sistemin yapısını ve atomik özelliklerini tarif edebilmektir [51-52]. Bunların kararlılığı ve oluşumu, elektronik etkileri [50], metal alaşımın kimyası ve düşük ergime ısıları yapıları ile ilişkilidir [54].

Metallerin ısıtma ve soğutma işlemleri sırasında metalik camsı yapılar ilk kez; 1960 yıllarında, Caltech'teki Duwez grubu tarafından incelenmiştir [55]. Bu çalışmada

kolay eriyen; 10^6 K/s hızıyla CuAg soğutularak incelenmiştir[56]. Soğutma sırasında rol oynayan önemli faktörler; atomik büyüklükler bakımından uyumlu değildirler ve bağ karakterinde de uyumsuzdurlar. Bu şekildeki amorf metal camısı yapıların çok iyi özellikleri vardır; örneğin, son derece yumuşak ve aşınmaya (paslanmaya) dayanıklıdır [57]. TiZr tabanlı amorf metalleri (şu anda ticari alanda kullanılmaktadır) üretmedeki ilerlemeye rağmen, her biri sayısız kullanım kolaylığı sağlayacak olan Fe, Al, Cu' ya dayalı amorf metal camısı yapılar geliştirmek mümkündür.

Moleküler dinamik simülasyonları, daha önceleri Lennard-Jones sisteminde ve bir çok değişik güç alanlı gerçekçi sistemlerde sıvı fazdan geçiş sırasında camısı yapı oluşumunu incelemek için kullanıldı [53-54]. Bunlar arasında; sodyum, potasyum, rubidyum, nikel ve demir gibi saf metaller ve camısı yapının iyi olarak gözlemlendiği; Ni-Zr, Ti-Al, $Ni_{33}Y_{67}$ ikili metal alaşımları bulunmaktadır.

Ergime, kristalizasyon ve camısı yapı oluşumu ile ilgili daha önceki simülasyonlarda, örnek potansiyeller kullanılmıştır. Yakın geçmişteki çalışmalarda; çoğu geçiş metallerinin yapısal özelliklerinde ve doğru olarak termodinamik parametreleri üretmede gerekli ampirik ve yarı ampirik potansiyellerin gelişmesinde, büyük ilerlemeler sağlanmıştır [58]. Daha basit olan ikili etkileşim potansiyellerine göre, çok-cisim potansiyellerin başlıca avantajı, metalik sistemlerin bazı temel özelliklerini daha iyi üretmesidir. Ayrıca çok-cisim potansiyelleri bir özelliği de bilgisayar simülasyonlarına kolaylık getirir.

Bu bölümde yapılan ısıtma ve soğutma işlemlerinde atomların katı fazdan sıvı faza geçiş esnasındaki camısı yapıya geçişleri gözlemlenmiştir. Her iki atoma da ısıtma ve soğutma işlemleri farklı hız değeriyle uygulanmıştır. Al-Ir ve Al-Rh için ısıtma soğutma hızları aşağıdaki şekilde tanımlanmıştır.

Al-Ir; 1MD adımı: $1,580066 \times 10^{-15}$ s ve Al-Rh; 1 MD adımı: $1,580066 \times 10^{-15}$ s şeklindedir.

Al-Ir için hız değerleri;

$$\frac{\Delta T}{\Delta t} = \Gamma_{Allr} = 1,5833 \times 10^{13} \text{ K/s ve } \frac{\Delta T}{\Delta t} = \Gamma_{Allr} = 2,373326 \times 10^{13} \text{ K/s}$$

Al-Rh için hız değerleri;

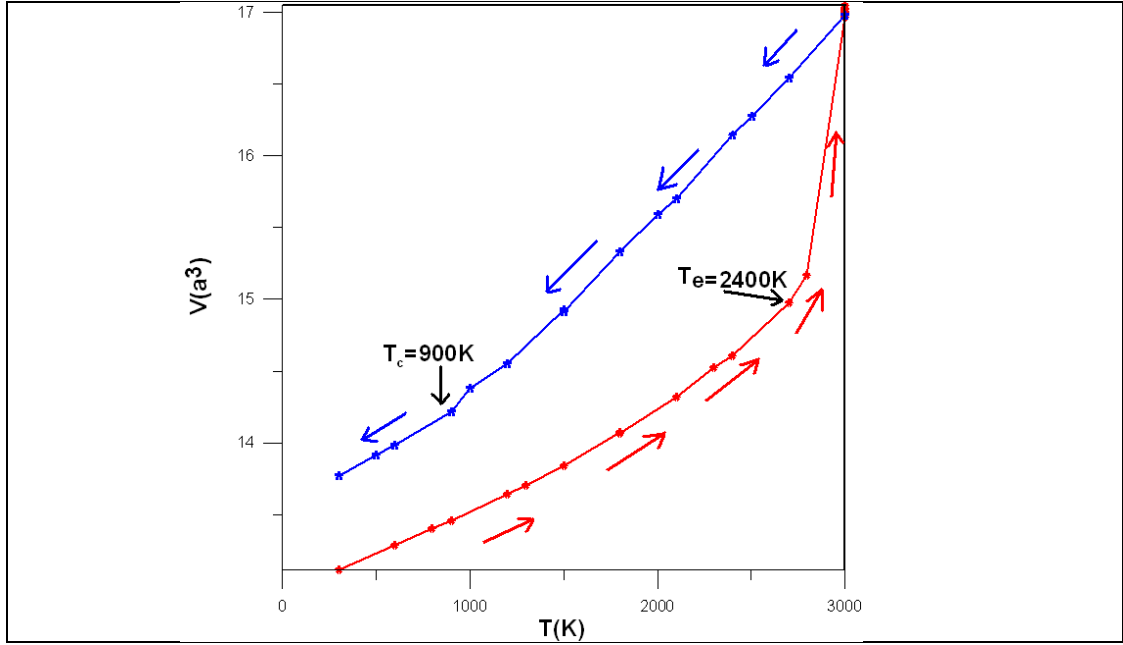
$$\frac{\Delta T}{\Delta t} = \Gamma_{AlRh} = 1,5833 \times 10^{13} \text{ K/s ve } \frac{\Delta T}{\Delta t} = \Gamma_{AlRh} = 2,373326 \times 10^{12} \text{ K/s}$$

Al-Ir için Şekil 3.38. ve 3.39. ve Al-Rh için Şekil 3.40. ve 3.41.'de sırasıyla sıcaklığın fonksiyonu olarak hacim değişiklikleri; farklı soğuma ve ısınma oranlarında gösterilmiştir. Burada görüldüğü gibi, ısıtma ve soğutma sırasında ani bir sıçrama vardır. Bu ani çıkış ve düşüş ergime ve kristalleşme gibi birincil evre geçişten kaynaklanmaktadır. Al-Ir' un çalışma sonucu elde edilen erime noktası $2550 \pm 150 \text{ K}$ 'dir bu değer diğer çalışmalarımız da elde ettiğimiz değerlerle uyumludur. Al-Rh için ise erime sıcaklığı 2400 K olarak bulunmuş ve bu değerde hesaplama sonucu elde edilen diğer değerlerle uyumludur.

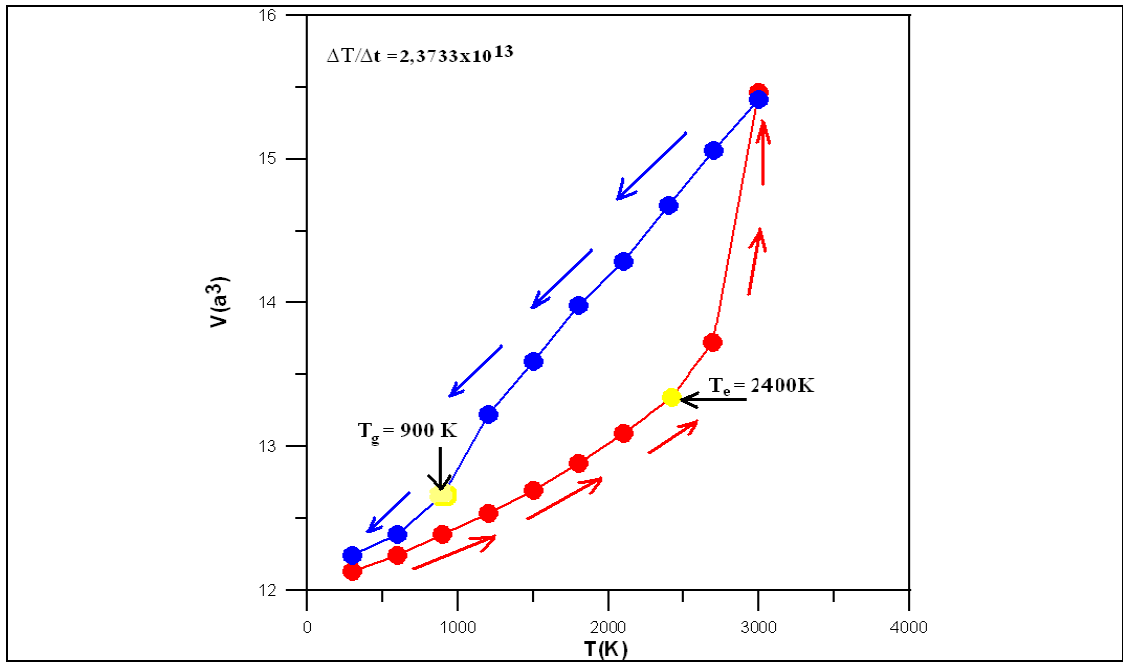
Erime ısı değerinin deneysel erime değerinden düşük olmasının nedenleri; sistemin hiç boş yüzey olmaksızın homojen olarak kabul edilmesi ve bizim simülasyona kusursuz bir kristalle başlamış olmamızdır. Sistem bozuk bir dağılımını yeniden düzenlemek için zaman bulamamış olabilir. Bu sebepten erime ısısının deneysel değerlerden farklı olmasına yol açmış olabilir. Sistemin erime ısısı, büyük ölçüde sistemin büyüklüğüne bağlıdır. Sistemin büyüklüğü arttıkça ısı artar. Erime noktası, aynı zamanda, sistemin serbest yüzeyinin bulunup bulunmamasına da bağlıdır. Bu çalışmanın daha önceki bölümlerinde de hesaplanan tüm fiziksel özellikler yaklaşık olarak aynı erime noktasında sonuç vermiştir.

Aşağıdaki $T/t = 2,37332 \times 10^{13} \text{ K/s}$ hızıyla yapılan ısıtma-soğutma Şekil 3.38.'de Al-Ir için 900 K 'de faz değişimi görülmektedir ve camsı(glass) yapıya geçiş $T_g = 900 \text{ K}$ olarak bulunur. Soğutma ve ısıtmanın birbirine paralel olduğu da ortaya çıkmıştır.

Şekil 3.39.'de ($T/ t=2,37332\times 10^{13}$ K/s) hızında Al-Rh için kristalizasyon sıcaklığı $T_c=900$ K değerindedir.



Şekil 3.38. ($\Delta T / \Delta t = 2,373326\times 10^{13}$ K/s) hızıyla Al-Ir için ısıtma ve soğutma da hacmin sıcaklıkla değişimi

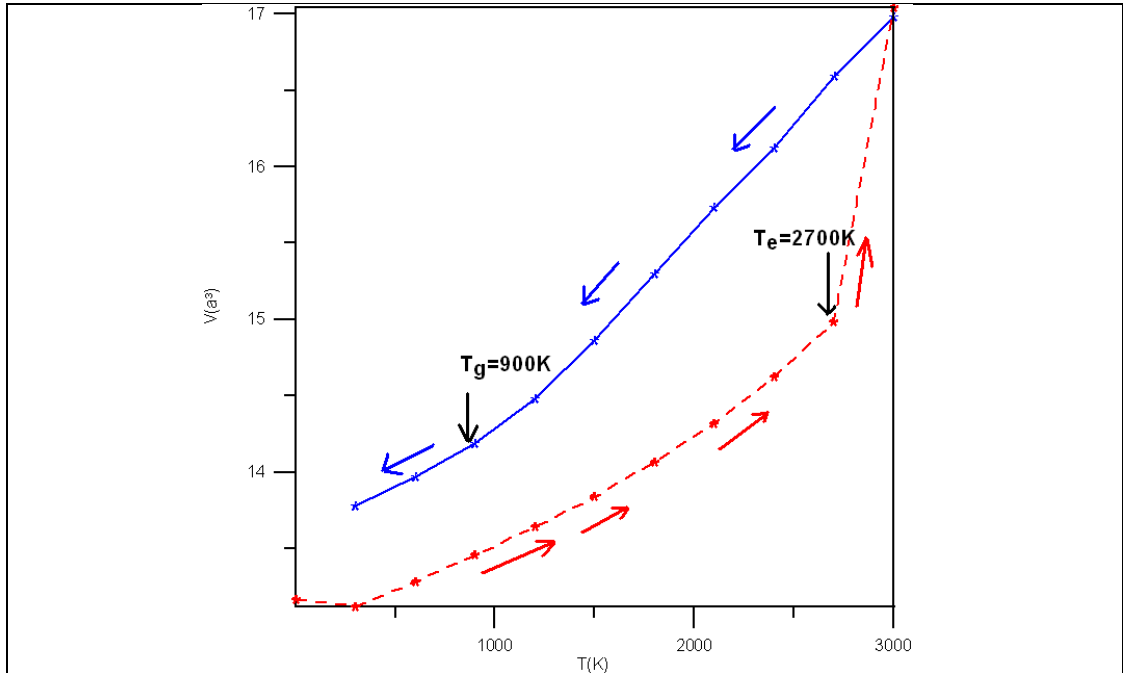


Şekil 3.39. ($\Delta T / \Delta t = 2,3733\times 10^{13}$ K/s) hızıyla Al-Rh için ısıtma ve soğutma da sıcaklıkla basınç değişimi

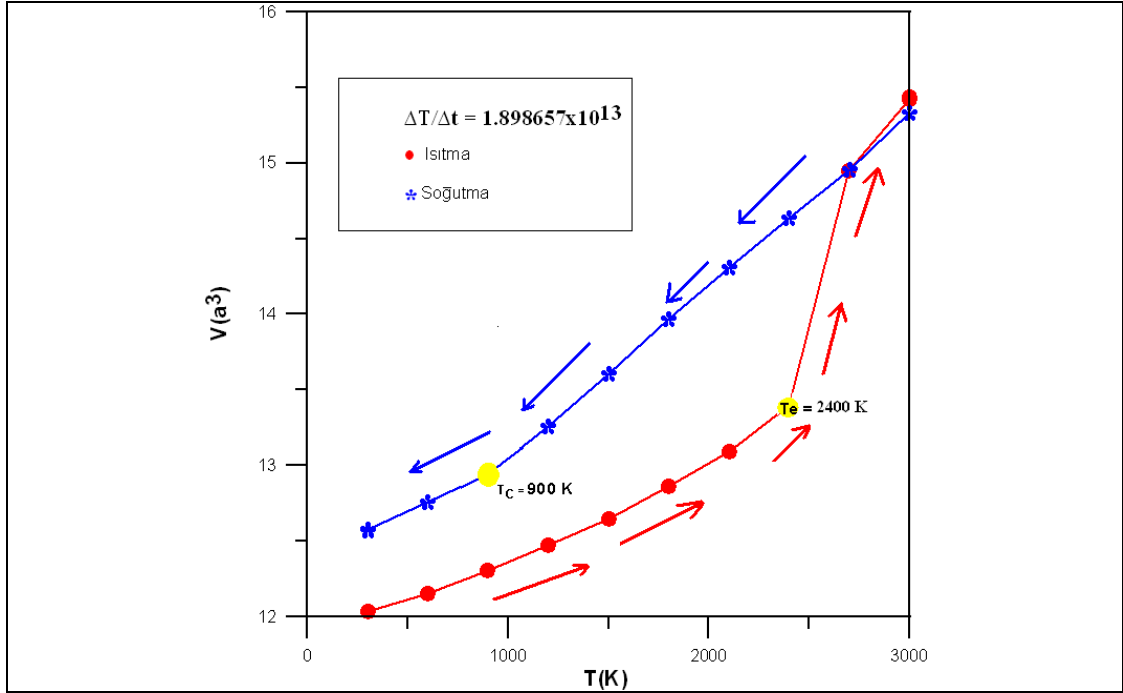
Isınmanın tersine, soğumanın devamlı bir hacim değişikliğine yol açtığı görülmektedir. Ancak, hacim-sıcaklık eğrisinin eğimi Al-Ir için farklı soğutma hızlarında 1200K' ve 900K'nin altında Al-Rh içinse 900'nin altında azaldığı görülür. Bu camsı yapı oluşumunun bir göstergesidir. Camsı yapı donmuş bir sıvı olduğu için, konumsal entropideki değişiklikler kaybolur. Bu yüzden, basınca göre entropinin türevi sıcaklığa göre hacmin türevidir.

Al-Ir için Şekil 3.44.'deki ($T/t = 2,3725017 \times 10^{13}$ K/s) hızıyla yapılan soğutma grafiğinde camsı yapıya geçiş $T_g = 1500K$ 'de gerçekleşmiştir. Şekil 3.45.'de ise ($T/t = 1,898657 \times 10^{13} K$) hızıyla yapılan soğutma işlemi sırasında ise; kristalizasyon sıcaklığı $T_c = 1200K$ olarak bulunmuştur.

Bu sonuçlar Al-Ir için Şekil 3.27.'de ve Al-Rh için Şekil 3.28.'de toplanmıştır. Bu şekillerde camsı yapı geçişleri daha ayrıntılı olarak görülmektedir. Artan sıcaklık değerleri ile birlikte farklı hızlardaki soğutma işlemindeki hacim artışlarında da paralel bir yükseliş olduğu görülmüştür.



Şekil 3.40. ($T/t = 1.898657 \times 10^{13}$ K/s) Al-Ir için hızıyla ısıtma ve soğutma da sıcaklıkla basınç değişimi

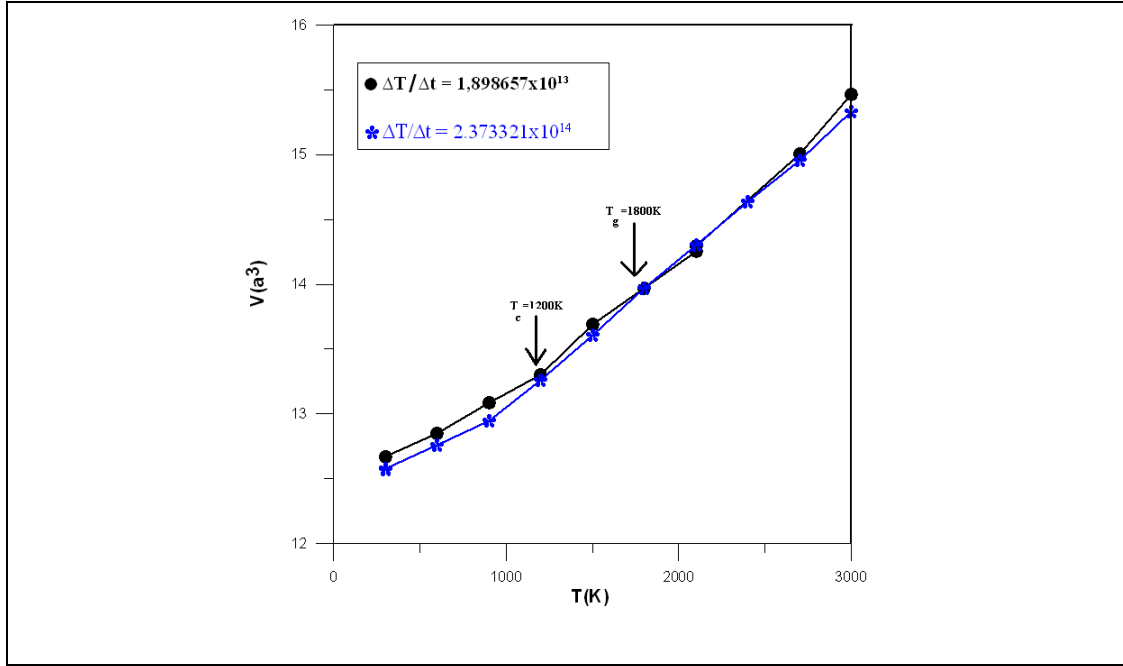


Şekil 3.41. ($T/\dot{t} = 1,898657 \times 10^{13}$ K/s) Al-Rh için hızıyla ısıtma ve soğutma da sıcaklıkla basınç değişimi

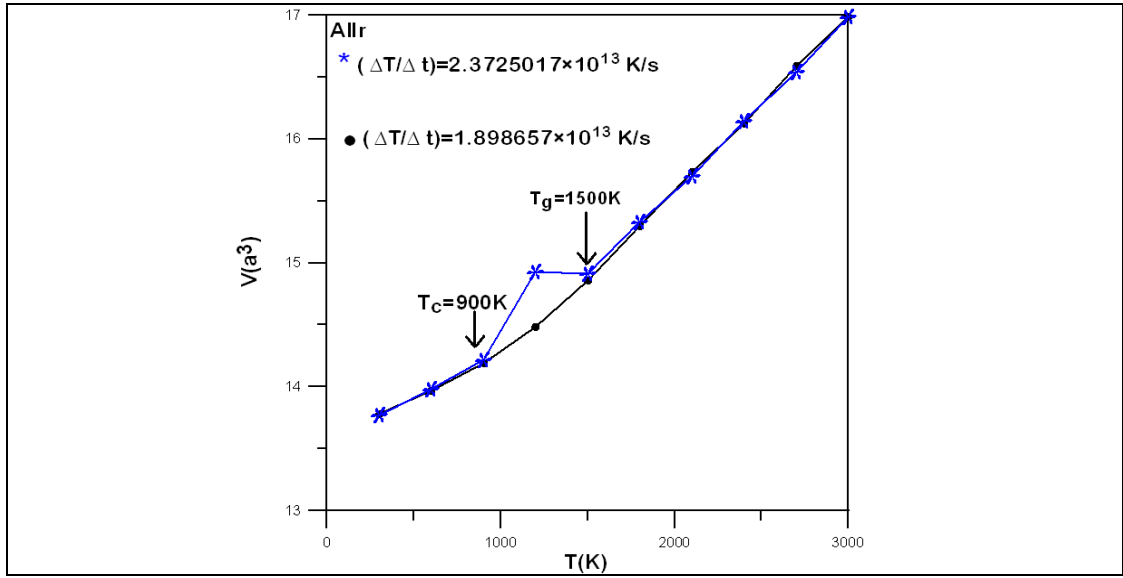
Farklı hızlarda ısıtma ve soğutma grafiklerinden soğutma sırasında 1200K' den 900K'e geçiş sırasındaki faz değişimi görülmektedir. Isıtma sırasında ise erime noktası 2400K ile 2700K arasında bulunmuştur.

Farklı soğutma hızlarında ve ısıtma işlemleri sırasında radyal dağılım fonksiyonları Al-Ir ve Al-Rh üzerine soğutma hızlarının etkilerinin araştırılması için farklı hızlarda incelenmiştir. Her iki şekilde radyal dağılım fonksiyonları; ($T/\dot{t}_{\text{Al-Ir}} = 2,3732 \times 10^{13}$ K/s ve ($T/\dot{t}_{\text{Al-Rh}} = 2,333268 \times 10^{13}$ K/s ile yapılan soğutma hızlarında sert bir çıkış göstermektedir. Aynı zamanda bu hızda camı yapıya geçişlerde gözlenmiştir. Daha yavaş hızlarda; ($T/\dot{t}_{\text{Al-Rh}} = 1,898657 \times 10^{13}$ K/s ve ($T/\dot{t}_{\text{Al-Ir}} = 1,898657 \times 10^{13}$ K/s hızlarında ise kristalizasyon olayı gözlenmiştir. İncelenen sistemin bu hızlarda soğutulmasından sonra, sistem tekrar kristalleşir ve ısıtma evresinde gözlemlenen aynı yapıyı gösterir. Diğer soğutma hızında sistemde camı yapı oluştuğu gözlenmektedir. Ayrıca daha hızlı soğutma oranları camı yapı oluşumuna yol açar, yani; Al için 1200K ya da 900K de hacim grafiklerinde bir azalış vardır ve buda metalik camı yapının özelliğidir.

Camsı yapıya geçiş ve kristalleşme sıcaklıkları; büyük ölçüde seçilen soğutma hızlarına bağlıdır. Kristalize olan sistemlerde simülasyonun uzun zaman aralıklarına ihtiyacı vardır. Isıtma ve soğutma işlemleri sırasında difüzyon katsayıları da hesaplanabilir. Soğutma ve ısıtma işlemleri sonucunda elde edilen erime noktasının deneysel değerlerle uyum içinde olması da güzel bir sonuçtur. Simülasyon sisteminin zamanındaki artışla birlikte sistemin kristalleşme sıcaklığında da bir artış beklenebilir. Bu çalışmalar sonucu elde edilecek olan sonuçlarla; sıvı, kristal ya da camsı yapıların temel özellikleri daha kolay ve daha iyi anlaşılabilir. Bu sonuçlar aynı zamanda gerçek potansiyel sistemleri geliştirmek için yol gösterirler.

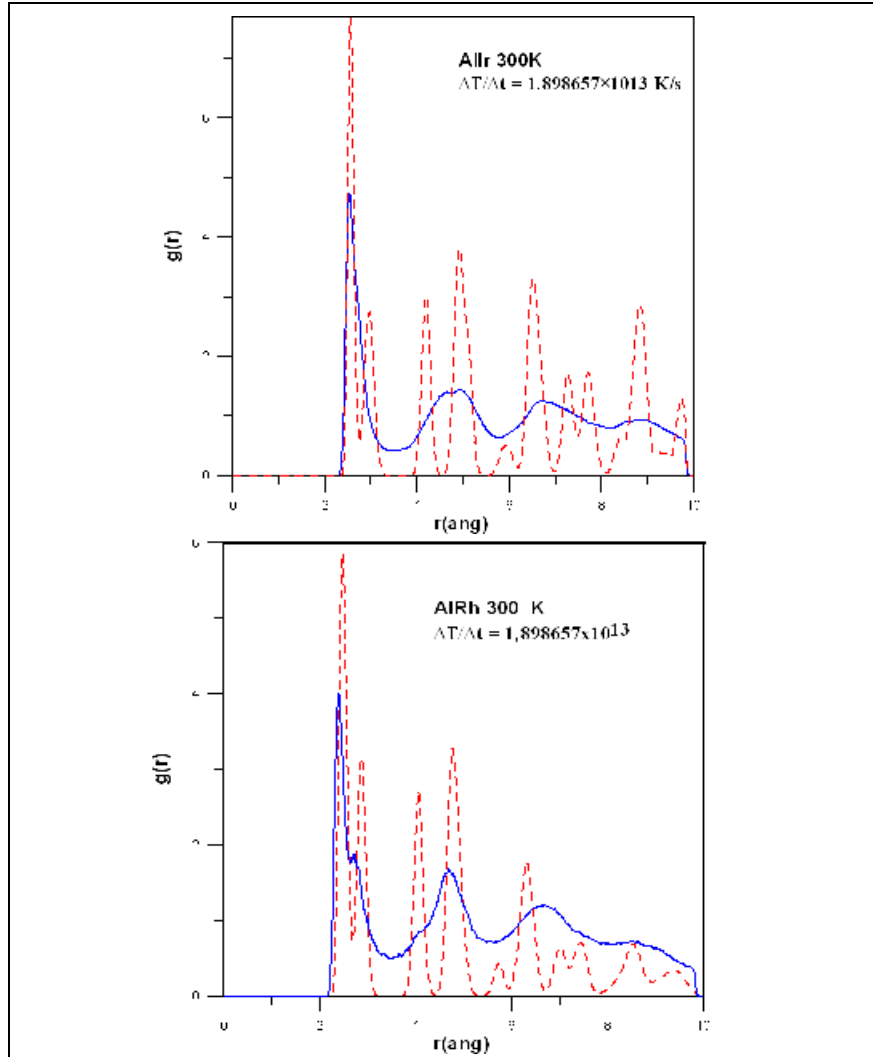


Şekil 3.42. Al-Rh için $\Delta T / \Delta t$ hızlarında soğutmada sıcaklıkla birlikte hacim değişimleri



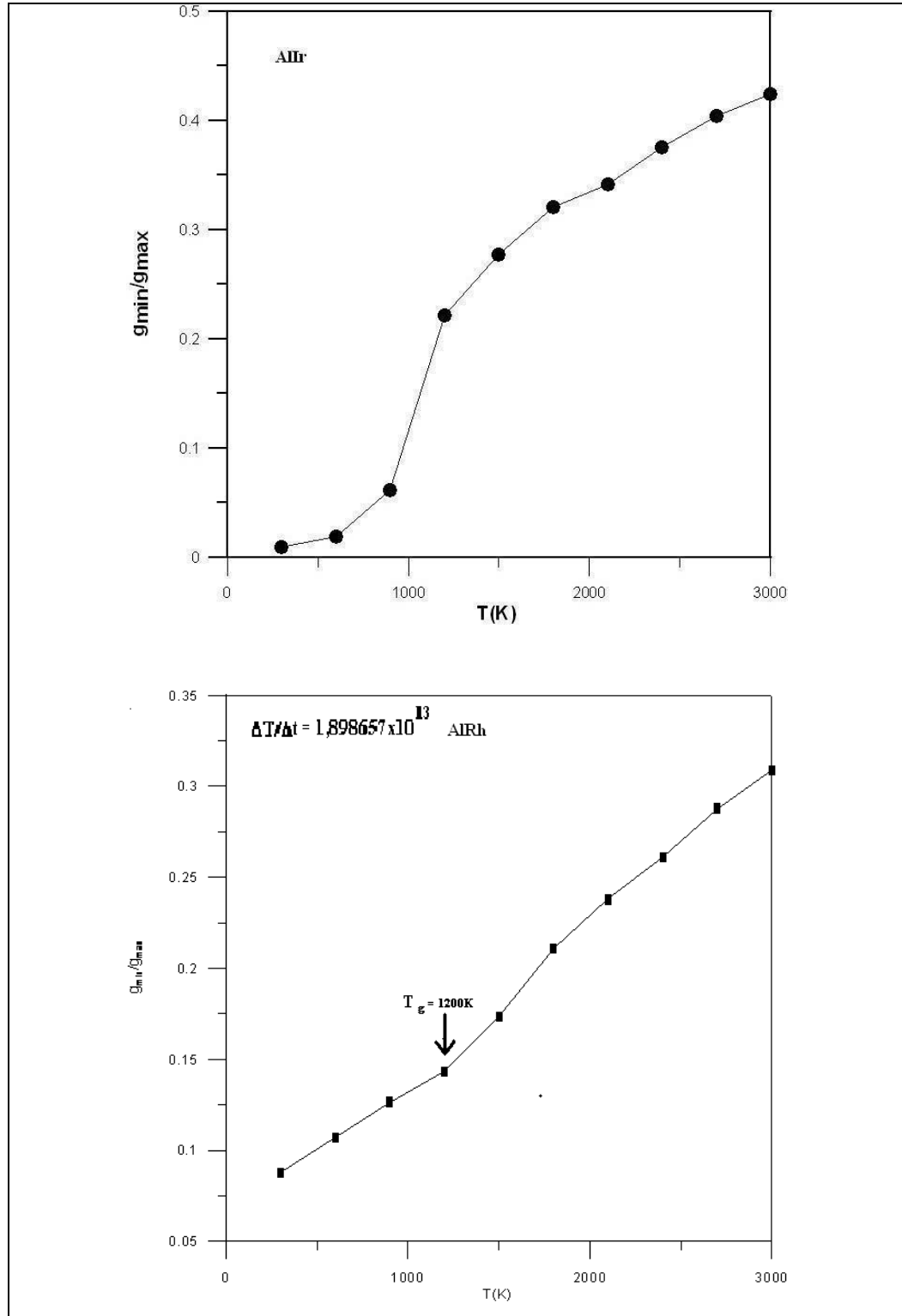
Şekil 3.43. Al-Ir' nun farklı hızlarda soğutmada hacmin sıcaklıkla değişimi

Şekil 3.46.'da Al-Ir ve Al-Rh için ısıtma ve soğutma işlemleri esnasındaki radyal dağılım fonksiyonları verilmiştir. Radyal dağılım fonksiyonları da *bcc* yapı özelliğini taşımaktadır. Isıtma sırasındaki radyal dağılım fonksiyonu $T=300\text{K}$ de yapılan ve Al-Al-Ir ve Al-Rh için Şekil 3.44.'deki radyal dağılım fonksiyonuyla benzerdir. Soğutma işlemi sonucunda sadece ilk pik değerinde bir ani çıkış olduğu görülmektedir. RDF grafiklerinde görülen ikinci pik ise camı yapının karakteristik özelliğini taşımaktadır.

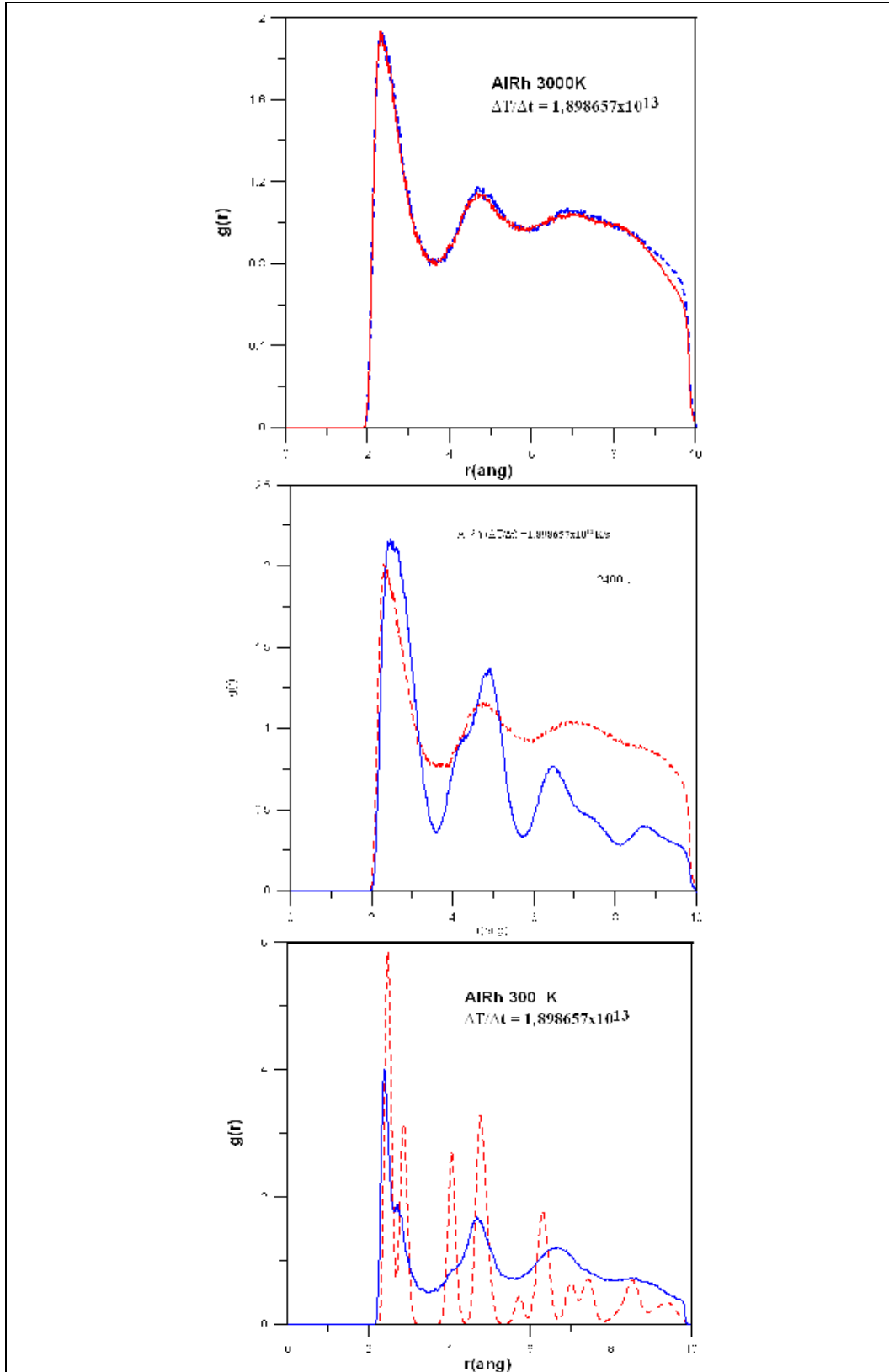


Şekil 3.44. Al-Ir ve Al-Rh için farklı soğutma hızlarında radyal dağılım fonksiyonları

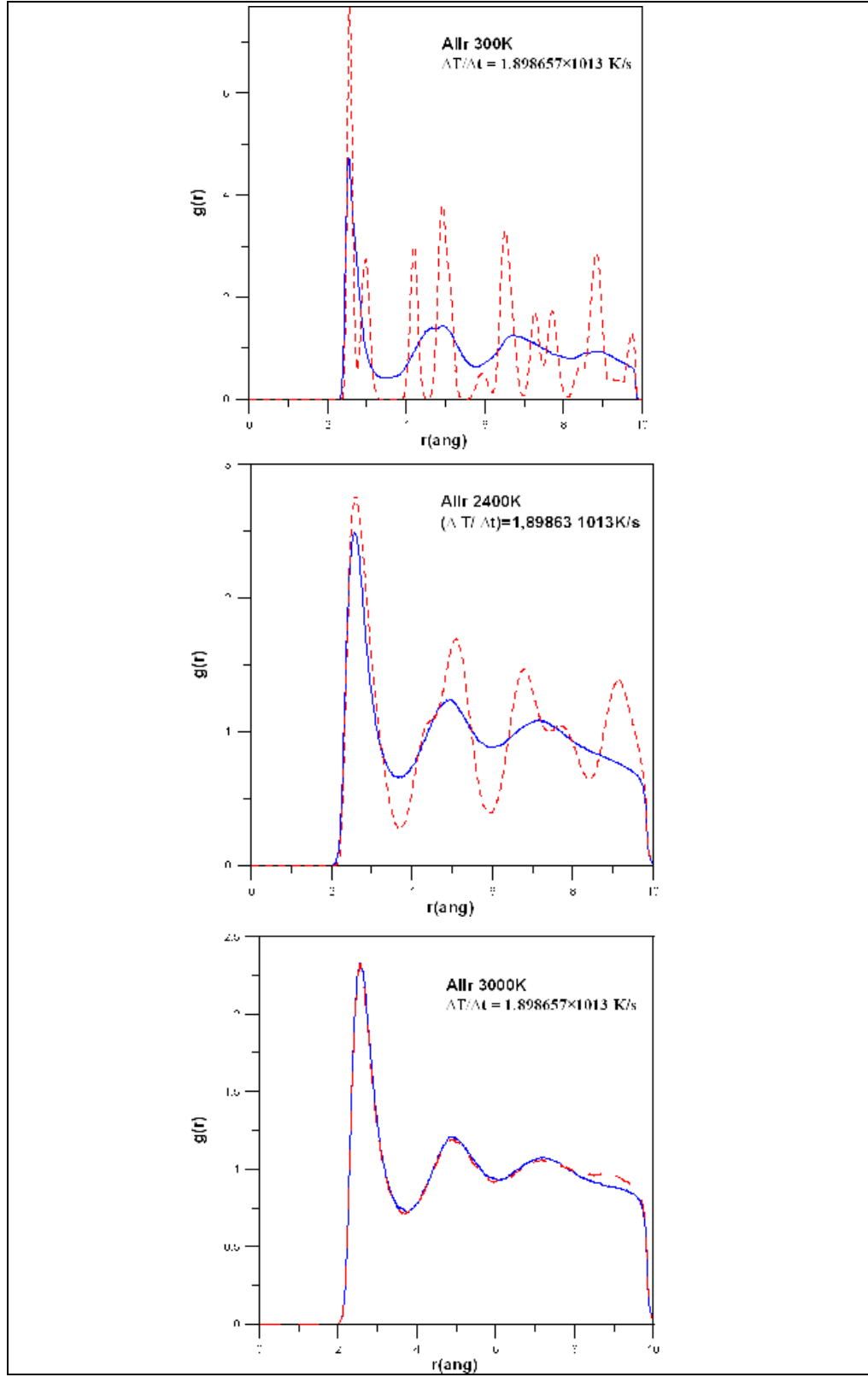
Şekil 3.45.'de $g_{\min}/g_{\max}$ değerlerinin sıcaklıkla değişimleri verilmiştir. Al-Ir için camsı yapıya geçiş sıcaklığı $T_g=900K$ 'de gözlenmiştir. Al-Rh için ise $T_g=1200K$ 'de bulunmuştur. Bu değerler hacim-sıcaklık değişim grafiklerindekiyle aynı sonuçları vermiştir.



Şekil 3.45. Al-Ir ve Al-Rh için $g_{\min}/g_{\max}$ değerlerinin sıcaklıkla değişimi.



Şekil 3.46. Al-Rh için $(-T/t)_{\text{Al-Rh}} = 1.898657 \times 10^{13} \text{ K/s}$ hızında (300, 2400, 3000 K sıcaklık değerleri) radyal dağılım fonksiyonları.



Şekil 3.47. Al-Ir için $(\Delta T/\Delta t)_{\text{Al-Ir}} = 1,89863 \times 10^{13} \text{ K/s}$ hızında (300,2700,3000K sıcaklık değerleri) radyal dağılım fonksiyonları.

Şekil 3.46.'de Al-Ir için 300, 2700, 3000 K'de $(T/t)_{Al-Ir}=1,583 \times 10^{13}$ K/s hızı ve Şekil 3.47.'de Al-Rh için ise $(T/t)_{Al-Rh}=1,8986 \times 10^{13}$ K/s ısıtma ve soğutma hızında radyal dağılım fonksiyonları grafikleri incelenmiştir. 300K sıcaklıkta ısıtma ve soğutma işlemleri sırasındaki farklılık belirgin bir şekilde görülmektedir. Yüksek sıcaklıklara çıkıldıkça 2400K'de olduğu gibi faz geçişleri birbirine benzer özellikler göstermektedir. Nitekim 3000K sıcaklık değerinde görüldüğü gibi; artık hem soğutma hem de ısıtma esnasında aynı kristal yapıların gözlemlendiği görülmüştür. Atomik hareketlilik yüksek sıcaklık değerlerinde maksimum değerlerine ulaşmaktadır. Erime sıcaklık değerlerine ulaşılmış olmaktadır.

5. SONUÇLAR VE DEĞERLENDİRME

Günümüzde içinde bulunduğumuz şartların zorluğu, kullandığımız imkanların kısıtlı olması nedeniyle deneysel çalışmalar oldukça zorlaşmaktadır. Bu sebeptendir ki zor şartlarda gerçekleştirilen deney sonuçları teorik fizik ile birleştirme yoluna gidilmektedir. Bu amaçla en yaygın olarak kullanılan teorik metotlar bilgisayarlar ile yapılmaktadır. Bilgisayar desteği ile yapılan simülasyon çalışmaları gerçek deneylere oldukça yakın olmakta ve bir çok benzer yanlarının olması nedeni ile elde edilen bulgular literatür ile karşılaştırılmaktadır.

Bu tez çalışmasında saf Al, Al-Ir ve Al-Rh alaşımları için termo-elastik özelliklerinin sıcaklık ve basınca bağımlılığını, moleküler dinamik benzetim yöntemi ile incelenmesi amaçlanmıştır. Bu amaçla, önce Al tek atomlu sistemleri ve daha sonra Al-Ir ve Al-Rh alaşım sistemlerini gönülmüş atom metodu kullanılarak modellenmeye çalışılmıştır. Çalışmada önce, Al elementlerinin genel özellikleri ve Al-Ir, Al-Rh alaşımları için yapılan çalışmalar bölüm 1 de kısaca değinildikten sonra konunun ana kısımları, bilgisayar simülasyonunun önemi, tarihçesi, simülasyonda kullanılan ortalama hesaplamaları, algoritmalar, MD. hesaplama yöntemleri ve kullandığımız potansiyel enerji fonksiyonuna Bölüm 2 de verilmiştir. Bölüm 3 de termodinamik analizler hakkında bilgi verildikten sonra radyal dağılım fonksiyonları, kare ortalama yer değiştirmeler, ergime sıcaklığının ölçümü anlatılıp yaptığımız çalışmaya geçilmiştir. Yani çalışmalar da elde edilen bulgular ve tartışmalara bölüm 4 de yer verilmiştir.

Genel hatları yukarıda verilen çalışmanın sonuçları aşağıda sıralanmıştır.

1. Al-Ir ve Al-Rh saf maddeleri için Kohesif enerjinin örgü sabitine bağlı değişimi belirlendi. Buna göre maddelerin kohesif enerjileri, Al-Ir için -5.90 eV, Al-Rh için -4.70eV olarak hesaplandı.
2. Al-Ir ve Al-Rh elementlerini farklı yollardan ergime sıcaklığını hesapladık ve ergime sıcaklıkları değerlerinin birbirleriyle ve literatür ile uyumunu inceledik.

Çeşitli sabit basınç değeri için sıcaklığı değiştirerek elde ettiğimiz kohesif enerjinin sıcaklığa bağlı değişiminden ergimeyi görmek kullanılan en yaygın yollardan bir tanesidir. Bunun dışında potansiyel enerjinin toplam enerjiye karşı çizilen grafikte (Şekil 4.3) ergimeyi görmek mümkündür. Ergimeyi belirlemede kullandığımız üçüncü yol ise sabit basınç altında değişen sıcaklıklarda çizilen log msd grafiğidir. Dördüncü bir yol ise yol ise değişen sıcaklıklarda görülen entalpi değerleridir. Farklı yollardan hesapladığımız ergime sıcaklığı değerleri birbiri ile kıyaslandığında aralarında dikkate alınmayacak kadar küçük farkların olduğu görülmektedir.

3. Al-Ir ve Al-Rh alaşımlarının faz yapıları hakkında bilgi almaya çalıştık. Bunun için sabit sıcaklık ve sabit basınç altında radyal dağılım fonksiyonları(RDF) eğrilerini oluşturduk. RDF eğrilerinde meydana gelen piklerin durumlarını açıkladık. Literatür ile kıyaslama yaptık.

4. Al-Ir ve Al-Rh alaşımlarının sıcaklığa ve basınca bağlı termodinamik niceliklerin hesaplanmasına geçildi. Burada önce basınca bağlı termodinamik nicelikler hesaplandı. Hacim basınç ilişkisinden bulk modülü bulundu. Hesaplanan bulk modülü literatür ile uyumlu olduğu görülmektedir. Molar hacmi, örgü sabiti ve entalpi değerlerinin basınçla ilişkisi incelendi. Daha sonra sıcaklığa bağlı termodinamik niceliklerin hesaplanmasına geçildi. Örgü sabiti sıcaklık ilişkisinden termal genleşme katsayısı belirlendi. Literatürle uyumuna bakıldı. Hacim sıcaklık ilişkisi, entalpi sıcaklık ilişkileri gözlemlendi. Literatür ile uyumlu olduğu görüldü.

5. Termodinamik niceliklerin adım sayısına göre değişimleri incelendi. Burada amaç yaptığımız bu çalışmanın doğruluğu hakkında bize bilgi vermesidir.

6. Al-Ir ve Al-Rh elementlerinin sıcaklığa ve basınca bağlı bulk modülüne bakıldı. Literatür ile kıyaslamalar yapıldı. Buradan da istenilen sonuca ulaşıldı.

7. Alaşımların camsı yapı oluşumunu kontrol eden faktörleri daha iyi anlamak için, kristalizasyon ve camsı yapı oluşumu arasındaki dengeyi kontrol eden faktörleri açıklayabilecek bir atomik simülasyon programı hazırlanmıştır ve incelenen

atomlarının faz geişleri esnasındaki camsı yapıları incelenmiştir. Isıtma hızlarında yapılacak olan hız artışıyla birlikte camsı faza geiş sıcaklığının da arttığı gözlemlenmiştir.

KAYNAKLAR

1. Ferah, G., “Platin Ve Iridyum Elementlerinin Bazı Termo-Elastik Özelliklerinin Basınç Ve Sıcaklığa Bağlı Olarak Moleküler Dinamik Yöntemle İncelenmesi Yüksek Lisans Tezi”, *Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü*, Ankara, 117 (2006).
2. Dikici, M., Kristallerin Elastik Özellikleri, *On dokuz Mayıs Üniversitesi Yayınları*, Samsun ,98 (1993).
3. Haile, J. M., Molecular dynamics Simulation, Elementary Methods, *John Wiley& Sons*, INC., Canada (1992).
4. Rapaport, D. C., The Art of Molecular Dynamics Simulation, *Cambridge University Pres*, U.K., 400 (2002).
5. Moody, M.C. ve Ray, J. R., Free energy difference calculations comparing fcc and hcp structures using molecular dynamics simulations, *J. Cem. Phys.*, 84(3):1795-1802 (1986).
6. Hesagawa, M. Ve Ohno, K., The dependence of the phase diagram on the range of the attractive intermolecular forces, *J.Phys.: Condens. Matter*, 9: 3361-3370 (1997).
7. Hu, W., Xu, H., Shu, X., Yuan, X., Gao, B., ve Zhang, B., , Calculation of thermodynamic properties of Mg-Re (RE = Sc,Y, Pr, Nd, Gd, Tb, Dy, Ho or Er) alloys by an analytic modified embedded atom method, *J.Phys. D: Appl. Phys.*, 33: 711-718 (2000).
8. Ostanin, S.A. ve Trubitsin, V. Y., , Calculation of P-T phase diagram of hafnium, *Computational Materials Science*, 17: 174-177 (2000).
9. Wolverton, C., Yan, X.Y., Vijayaraghavan, R. Ve Ozolin V., Incorporating first-principles energetic in computational thermodynamics approaches, *Acta Materials*, 50: 2187-2197 (2002).
10. Erkoç, Ş., , Empirical many- body potential energy functions usedin computer simulations of condensed matter properties, *Physics Reports*, 278: 79-105 (1997).
11. Daw, M.S., and Baskes, M.I., , Semiempirical, Quantum Mechanical Calculation of Hydrogen Embrittlement in Metals, *Physical Review Letters*, 50(17): 1285-1288 (1983).
12. Daw, M.S., and Baskes, M.I., Embedded Atom Method: Derivation And Application to Impurities, Surfaces, and Other Defects in Metals, *Phys. Rev. B*, 29 (12): 6443-6453 (1984).

13. Baskies, M.I., , Determination of modified Emdedded Atom Method Parameters for Nİckel, **Materials Chemistry Physics**, 50: 152-158 (1997).
14. Sutton, A.P., Chen, J., , Long-Range Finnis-Sinclair Potentials, **Phil. Mag. Lett.**, 61: 139-146 (1990).
15. Qi, Y., Çağın, T., Kimura, Y. And Goddard III, W.A., , Moleculer Dynamics Simulation of Glass Formation and Crystallization in Binary Liquid Metals: Cu-Ag and Cu-Ni, **Physical Review B**, 59(5): 3527-3533 (1999).
16. Uğurlu, N., Altın ve Aliminyumun Bazı Termoelastik Özelliklerinin Moleküler Dinamik Simülasyon Tekniği İle İncelenmesi, Yüksek Lisans Tezi”,**Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü**, Ankara, 78 (2006).
17. Metropolis, N., Rosenbluth, A.W., Rosenbluth, M.N., Teller, A.H., and Teller, E., **J. Chem. Phys.**, 47: 21-1987 (1953).
18. Haasen, P.,” PhysicalMetallurgy”, SecondEd.,**Cambridge University Pres**, UK, 172 (1972).
19. Ercolessi F., “Sprenger Collage in Computational Physics”, **ICTP**, Trieste (1997).
20. G. Ciccotti and W. G. Hower (Eds.). “Moleculer dynamics computer simulation of statical- mechanical systems, Contains chapters written by experts of the field on many aspects of simulation. A. Phace to dig in into specific topics, with plenty of technical details”. P.3. **North- Holland** (1986).
21. Allen, M.P., and Tildesley, D.J., “Computer simulation of liquids, This is a classic how to book, containing a large number of technical details on a vast array of techniques”. **Oxford** (1992).
22. Rapaport, D.C. “The Artof Molecular Dynamics Simulation”,**Cambridge Univ. Press.**,8 (2002).
23. Heermann, D.W., Computer Simulation Methods, **Springer - Verlag** (1990).
24. Verlet, L., “Computer Experiments on Classical Fluids. I. Thermodynamical Properties of Lennard-Jones Molecules”, **Physical Review**, 159: 98 (1967).
25. Evans, D. J. ve Morriss, G. P., “Non-Newtonian Molecular Dynamics”, **North Holland Physics Publishing**, Amsterdam (1984).
26. Parrinello, M. and Rahman, A., “Crystal structure and pair potentials: a Molecular-Dynamics study”, **Phys. Rev. Lett.**, 45(11): 1196–1199 (1980).

27. Parrinello, M. and Rahman, A., “Polymorphic transitions in single crystals: a new molecular dynamics method”, *J. Appl. Phys.*, 52(12): 7182–7190 (1981).
28. Morris, J.R. and Ho, K.M., Calculating accurate free energies of solids directly from simulations, *Phys. Rev. Lett.*, 74: 940-944 (1995).
29. Y. Gürler, Termodinamik Faz Diyagramlarının Moleküler Dinamik Bilgisayar Benzetişimi ile Elde Edilmesi yüksek lisans tezi, *Firat Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü*, (2004).
30. H. Hosoda, S. Miyazaki, S. Hanada., “Potential of IrAl base alloys as ultrahigh-temperature smart coatings”, *Intermetallics*, 8: 1081-1090, (2000).
31. V. G. Khoruzhaya, K. E. Kornienko, P. S. Martsenyuk and T. Ya. Velikanova., Powder Metallurgy and Metal Ceramics, *Physicochemical Materials Research Phase Equilibria*, 45: 5-6 (2006).
32. Finnis, M.W., and Sinclair, J.E., “A Simple empirical N-body potential for transition metals”, *Philosophical Magazine A*, 50(1): 45-55 (1984).
33. Voter, A. F., and Chen, S. P., “Accurate interatomic potentials for Ni, Al and Ni₃Al”, *Mat. Res. Soc. Symp. Proc.*, Eds.: Siegel, R. W., Weertman, J. R., and Sinclair, R., *MRS*–82: 175-180 (1987).
34. Sutton, A.P., Chen, J., “Long-range Finnis-Sinclair potentials”, *Philos. Mag. Lett.*, 61: 139-146 (1990).
35. Johnson R.A., , Alloys Models with the Embedded- Atom Method, *Physical Review B*, 39 (17): 12554-12559, (1989).
36. Kuiying, C., Xianwei, S., Xiumu, Z., Yiyi., , Rapid Solidification of Cu-25 at. % Ni Alloy: Molecular Dynamics Simulations Using Embedded Atom Method, *Materials Science and Engineering*, A214: 139-145 (1996).
37. Çağın, T., Dereli, G., Uludoğan, M. And Tokmak., Thermal and Mechanical Properties of some fcc Transition metals, *Physical Review B*, 59(5): 3468-3473 (1999).
38. Kazanc, S., Ozgen, S. and Adıgüzel, O., Pressure Effects on Martensitic Transformation Under Quenching Process in a Molecular Dynamics model of NiAl Alloy, *Physica B*, 334:375-381,(2003).
39. Kazanc, S., Ozgen, S. and Adıgüzel, O., The role Of Hydrostatic Pressure on the Characteristics of Thermoelastic Phase Transformation: A molecular Dynamics Simulation, *Balkan Physic Letters*, 12(2): 98-108 (2004).

40. Özgen, S., “Sayısal Hesaplama Yöntemlerinin Şekil Hatırlamalı Alaşımlarda Difüzyonsuz Faz Dönüşümlerine Uygulanması Dr. Tezi”, **Fırat Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü**, Elazığ, 117 (1997).
41. Alper, H.E. and Politzer, P., “Molecular dynamics simulation of the temperature-dependent behavior of solid copper”, **J. Molec. Struc. (Theochem)**, 478: 117-125 (1999).
42. M. Dikici, “Katıhal Fiziğine Giriş”, **Ondokuz Mayıs Üniversitesi Eğitim Fakültesi**, Samsun(1993).
43. J. ve Szpunar, J. A., “Molecular-Dynamics Simulation of Rapid Solidification of Aluminum”, **Acta Metall. Mater.**, 41(8): 2291-2295(1995).
44. Miracle, D.B., “The Physical and Mechanical Properties of Ni-Al”, **Acta Metall. Mater.**, 41(3): 649-684 (1993).
45. Kaimi, M., Stapay, G., Kaplan, T. and Mostoller, M., “Temparature Dependence of the Elastic Contants of Ni: Reliabilityof EAM in Predicting Thermal Properties”, **Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.**, 5: 337-346 (1997).
46. Ralpy, J.W., Mansour, K.A. and Lee, M.W., “Temperature Dependence of Elastic Contants of EAM of Palladium”, **Physical Review B**, 46(13): 8027-8035 (1992).
47. MacDonald, W., Dworzecka, M., Ehrlich, R., “Solid State Physics Simulations The Consortium for Upper-Level Physics Software”, **John Wiley&Sons**, NewYork, 67 (1996).
48. Kart, H. H., Tomak M., “Thermodynamical and mechanical properties of Pd-Ag alloys”, **Computational Materials Science.**, 32: 107-117 (2005).
49. Guntherodt, H.I., Beck, H., “Glassy Metals I”, **Springer**, New York, 256-263 (1981).
50. Guntherodt, H.I., Beck, H., “Glassy Metals II”, **Springer**, Heidelberg, 113-124 (1994).
51. Götze, W., Sjögren, L., “Relaxation process in supercooled liquids”, **Rep. Prog. Phys.**, 55: 241-376 (1992).
52. Ediger, M.D., Angell, C.A., Sidney, R., “Supercooled liquids and glasses”, **J. Phys. Chem.**, 100: 13200-13212 (1996).

53. Nagel, S.R., Tauc, J., “Nearly free electron approach to the theory of metallic glasses” *Phys.Rev.Lett.*, 35: 380-383 (1975).
54. Hafne, J., “Theory of the formation of metallic glasses”, *Phys. Rev. B*, 21: 406-426 (1980).
55. Duwez, P., Willens, R.H., “Characteristics of laser surface melted aluminum alloys”, *J. Appl. Phys.*, 31: 1137-1148 (1960).
56. Peker, A., Johnson, W.L., “Time-temperature transformation diagram of highly processable metallic-glass”, *Materials Science And Engineering A*, 179: 173-175 (1994).
57. Choi-Yim, H., Johnson, W.L., “Bulk metallic glass matrix composites”, *Applied Physics Letters*, 71 (26): 3808-3810 (1997).
58. Raxi, H.T., Sutton, A.P., “Modelling the nano-scale phenomena in, condensed matter physics via computer-based numerical simulations” *Physics Reports*, 325: 239-310 (2000).
59. Nayak, S.K., Khanna, S.N., Rao, B. K., and Jena, P., “Thermodynamics of small nickel clusters”, *J. Phys.: Condens. Matter*, 10: 10853–10862 (1998).

ÖZ GEÇMİŞ

Kişisel Bilgiler

Soyadı, adı : DEMİRCİOĞLU, Zühre
 Uyuğu : T.C.
 Doğum tarihi ve yeri : 24.03.1983 RİZE
 Medeni hali : Bekar
 Telefon : 0 (533) 7200983 , 0(554) 3037355
 e-mail : zuhredem@gmail.com.tr, zuhredem@hotmail.com

Eğitim

Derece	Eğitim Birimi	Mezuniyet tarihi
Yüksek lisans	Gazi Üniversitesi /Fizik Bölümü	2007
Lisans	Gazi Üniversitesi/ Fizik Bölümü	2004
Lise	Halide Edip Lisesi/ Ankara	2000

İş Deneyimi

Yıl	Yer	Görev
2005- ...	Kalem Yayınları	Yazar

Deneyim Sahibi Olunan Bilgisayar Programları

Microsoft Office Yazılımları (Word, Excel, Powerpoint, Outlook),

Yabancı Dil

İngilizce

Yayınlar

1. Fcc Ag üzerinde Moleküler Dinamik Çalışması, Ankara Üniversitesi Yoğun Madde Fiziği Ankara Toplantısı (2005).
2. Milli Eğitim Bakanlığı Talim Terbiye Kurulu onaylı İlköğretim Fen ve Teknoloji 4 Ders, Öğretmen Kılavuz ve öğrenci çalışma kitabı (2005)