

T.C.
SAKARYA ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

**Ni-Au ALAŞIMLARINA PALADYUM KATKISININ
TERMODİNAMİK VE MEKANİK ÖZELLİKLERE
ETKİSİNİN MOLEKÜLER DİNAMİK İNCELENMESİ**

YÜKSEK LİSANS TEZİ

Hasan KARAGÖZ

Enstitü Anabilim Dalı : FİZİK

Tez Danışmanı : Yrd. Doç. Dr. ALİ ÇORUH

Ocak 2010

T.C.
SAKARYA ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

Ni-Au ALAŞIMLARINA PALADYUM KATKISININ
TERMODİNAMİK VE MEKANİK ÖZELLİKLERE
ETKİSİNİN MOLEKÜLER DİNAMİK İNCELENMESİ

YÜKSEK LİSANS TEZİ

Hasan KARAGÖZ

Enstitü Anabilim Dalı : FİZİK

Bu tez 21 / 01 /2010 tarihinde aşağıdaki jüri tarafından Oybirliği ile kabul edilmiştir.



Yrd. Doç. Dr.
Ali ÇORUH
Jüri Başkanı



Prof. Dr.
Fatih ÜSTEL
Üye



Yrd. Doç. Dr.
Erdoğan ŞENTÜRK
Üye

ÖNSÖZ

Geçiş metalleri yada soylu metaller, esas olarak sertlikleri, yüksek yoğunlukları, iyi ısı iletkenlikleri, yüksek erime-kaynama sıcaklıkları, asit ve bazlara karşı dayanıklılıkları gibi birçok özellikleri nedeniyle ileri teknoloji, uzay ve mikroçip teknolojilerinde yaygın olarak kullanılan önemli metallerdir. Ekonomik açıdan da önemli bir yere sahip olması bu metaller üzerinde geniş olarak birçok araştırma yapılmasının önemli sebeplerindendir. Moleküler Dinamik yöntemi de atomik yapılarıdaki fiziksel özelliklerin incelenmesinde yaygın olarak kullanılan yöntemlerden biridir. Bu nedenle hazırlanan bu çalışmada Moleküler Dinamik simülasyon yöntemi kullanılmıştır. Malzemelerin özelliklerinin ortaya çıkarılması için yapılan bu çalışma, bilim ve teknoloji uygulamaları için faydalı olacak niteliktedir.

Yüksek lisans tezimin her aşamasında bana yol gösteren ve hiçbir konuda yardımını esirgemeyen, saygıdeğer danışman hocam Yrd. Doç. Dr. Ali ÇORUH'a teşekkürlerimi sunarım.

Bu çalışmam süresince her türlü sorumu cevaplayan ve karşılaştığım sorunlara çözümler bulan değerli arkadaşım Zeki Çıplak'a teşekkür ederim.

Ayrıca, tez çalışmalarım ve bütün hayatım boyunca her zaman maddi ve manevi anlamda destek ve ilgilerini üzerimde hissettiğim sevgili aileme sonsuz teşekkürlerimi bir borç bilirim.

Bu çalışma Sakarya Üniversitesi Rektörlüğü'nün 2007-02-02-004 numaralı araştırma projesi "Paladyum, platin, altın, gümüş, bakır, nikel değerli metallerin teknolojik özelliklerinin araştırılması ve bu metallere kritik teknolojik özelliklere sahip olabilecek yeni alaşımların türetilmesi" tarafından desteklenerek yapılmıştır.

İÇİNDEKİLER

ÖNSÖZ.....	ii
İÇİNDEKİLER	iii
SİMGELER VE KISALTMALAR LİSTESİ.....	v
ŞEKİLLER LİSTESİ	vii
TABLolar LİSTESİ.....	xi
ÖZET.....	xiii
SUMMARY.....	xiv
BÖLÜM 1.	
GİRİŞ.....	1
BÖLÜM 2.	
MOLEKÜLER DİNAMİK SİMÜLASYON.....	6
2.1. Tanım.....	6
2.2. Yöntem.....	9
2.3. Algoritma.....	10
2.3.1. Gear üretici-düzenleyici algoritması.....	11
2.4. İstatiksel Çerçeveler.....	14
2.4.1. İzobarik ve İzoentalpik çerçevede moleküler dinamik (HPN çerçeve).....	14
2.4.2. İzobarik ve İzotermal çerçevede moleküler dinamik (TPN çerçeve)	16
2.4.3. Mikrokanonik çerçeve (EVN çerçeve).....	17
2.5. Periyodik Sınır Şartları, Kesme Yarıçapı ve Minimum Görüntü Yöntemi.....	18

BÖLÜM 3.	
ETKİLEŞİM POTANSİYELLERİ.....	20
3.1. Sutton –Chen Potansiyeli.....	20
3.2. Quantum Sutton-Chen Parametizasyonu.....	24
3.3. Simülasyon Detayları.....	28
BÖLÜM 4.	
SONUÇLAR VE DEĞERLENDİRMELER.....	29
4.1. Elastik Sabitler.....	29
4.1.1. Sıcaklığa göre elastik sabitlerin analizi.....	29
4.1.2. Konsantrasyona göre elastik sabitlerin analizi.....	40
4.2. Yoğunluk Analizi.....	42
4.2.1. Sıcaklığa göre yoğunluk analizi.....	42
4.2.2. Konsantrasyona göre yoğunluk analizi.....	44
4.3. Örgü Parametreleri.....	44
4.3.1. Sıcaklığa göre örgü parametreleri analizi ve bağlanma enerjisi.....	44
4.3.2. Konsantrasyona göre örgü parametreleri analizi.....	49
4.4. Termal Genleşme Katsayısı Hesabı.....	50
4.5. Entalpi Değerleri Analizi ve Isı Sığası Hesabı.....	51
4.5.1. Sıcaklığa göre entalpi değerleri analizi.....	51
4.5.2. Konsantrasyona göre entalpi analizi.....	54
4.5.3. Isı sığası hesabı.....	55
4.6. Erime Noktalarının Belirlenmesi.....	56
4.6.1. Konsantrasyona göre erime noktaları.....	62
4.7. Tartışma ve Değerlendirmeler.....	64
KAYNAKLAR.....	67
ÖZGEÇMİŞ.....	73

SİMGELER VE KISALTMALAR LİSTESİ

Pd	: Paladyum
Ni	: Nikel
Au	: Altın
C_{11}, C_{12}	: Elastik sabitler
B	: Hacim modülü
ε	: Enerji boyutunda bir parametre
F_i	: i atomu üzerine uygulanan kuvvet
Ω	: Hacim sabiti
G	: Metrik tensör
W	: Piston kütlesi
H	: Hamiltoniel hareket sabiti
p_{ex}	: Dış basınç
p_v	: V'nin eşlenik momentumu
N	: Parçacık (atom) sayısı
a,b,c	: Fit parametreleri
R_c	: Kesme yarıçapı
$\bar{\rho}_i$: i atom civarındaki yerel yük yoğunluğu
c	: Kristal özelliklerden elde edilen boyutsuz bir sabit
E_T	: Toplam enerji
a	: Örgü parametresi
n,m	: Elastik kararlılığı sağlayan tamsayı parametreleri
Φ	: Etkileşim potansiyeli
r_{ij}	: i ve j parçacıkları arası mesafe
k_B	: Boltzam sabiti
T	: Sıcaklık
$U(r_{ij})$: i ve j atomları arasındaki potansiyel enerji

W_x^T, W_x^L	: x noktasındaki fonon frekansları
E^A, E^B	: Saf A ve B atomlarının bağlanma enerjileri
$\alpha(T)$: Termal genleşme katsayısı
C_p	: Isı sığası sabiti
MD	: Moleküler Dinamik
SC	: Sutton Chen
Q-SC	: Kuantum Sutton Chen
HPN	: Sabit; Entalpi, basınç ve parçacık sayısı
TPN	: Sabit; Sıcaklık, basınç ve parçacık sayısı
TVN	: Sabit; Sıcaklık, hacim ve parçacık sayısı
EVN	: Sabit; Enerji, hacim ve parçacık sayısı
EAM	: Embedded Atom Model-Gömülmüş Atom Modeli
FCC	: Yüzey merkezli kübik yapı
PEF	: Potansiyel enerji fonksiyonu
MC	: Monte Carlo
FS	: Finnis-Sinclair
VC	: Voter- Chen
PR	: Parninello-Rahman
RK	: Runge-Kutta
FF	: Sutton-Chen deneysel çok parçacık kuvvet alanları

ŞEKİLLER LİSTESİ

Şekil 4.1.	Pd, Ni, Au, $Pd_{0.05}Ni_{0.47}Au_{0.48}$ ve $Pd_{0.33}Ni_{0.33}Au_{0.33}$ için bulunan C_{11} değerleri ve fit parametreleri grafiği.....	29
Şekil 4.2.	Pd, Ni, Au, $Pd_{0.1}Ni_{0.45}Au_{0.45}$, $Pd_{0.2}Ni_{0.4}Au_{0.4}$ ve $Pd_{0.5}Ni_{0.25}Au_{0.25}$ için bulunan C_{11} değerleri ve fit parametreleri grafiği.....	30
Şekil 4.3.	Pd, Ni, Au, $Pd_{0.5}Ni_{0.5}$ ve $Ni_{0.5}Au_{0.5}$ için bulunan C_{11} değerleri ve fit parametreleri grafiği.....	31
Şekil 4.4.	$Pd_{0.05}Ni_{0.47}Au_{0.48}$, $Pd_{0.1}Ni_{0.45}Au_{0.45}$, $Pd_{0.2}Ni_{0.4}Au_{0.4}$, $Pd_{0.33}Ni_{0.33}Au_{0.33}$, $Pd_{0.5}Ni_{0.25}Au_{0.25}$ için bulunan C_{11} değerleri ve fit parametreleri grafiği.....	31
Şekil 4.5.	Pd, Ni, Au, $Pd_{0.05}Ni_{0.47}Au_{0.48}$ ve $Pd_{0.33}Ni_{0.33}Au_{0.33}$ için bulunan C_{12} değerleri ve fit parametreleri grafiği.....	32
Şekil 4.6.	Pd, Ni, Au, $Pd_{0.1}Ni_{0.45}Au_{0.45}$, $Pd_{0.2}Ni_{0.4}Au_{0.4}$ ve $Pd_{0.5}Ni_{0.25}Au_{0.25}$ için bulunan C_{12} değerleri ve fit parametreleri grafiği.....	33
Şekil 4.7.	Pd, Ni, Au, $Pd_{0.5}Ni_{0.5}$ ve $Ni_{0.5}Au_{0.5}$ için bulunan C_{12} değerleri ve fit parametreleri grafiği.....	33
Şekil 4.8.	$Pd_{0.05}Ni_{0.47}Au_{0.48}$, $Pd_{0.1}Ni_{0.45}Au_{0.45}$, $Pd_{0.2}Ni_{0.4}Au_{0.4}$, $Pd_{0.33}Ni_{0.33}Au_{0.33}$, $Pd_{0.5}Ni_{0.25}Au_{0.25}$ için bulunan C_{12} değerleri ve fit parametreleri grafiği.....	34
Şekil 4.9.	Pd, Ni, Au saf metalleri ve $Pd_{0.5}Ni_{0.5}$ ve $Ni_{0.5}Au_{0.5}$ ikili alaşımları için elde edilen B hacim modülü değerleri grafiği.....	36
Şekil 4.10.	Pd, Ni, Au saf metalleri, $Pd_{0.05}Ni_{0.47}Au_{0.48}$, $Pd_{0.2}Ni_{0.4}Au_{0.4}$, $Pd_{0.5}Ni_{0.25}Au_{0.25}$ üçlü alaşımları için elde edilen B hacim modülü değerleri grafiği.....	37
Şekil 4.11.	Pd, Ni, Au saf metalleri ve $Pd_{0.1}Ni_{0.45}Au_{0.45}$, $Pd_{0.33}Ni_{0.33}Au_{0.33}$, üçlü alaşımları için elde edilen B hacim modülü değerleri grafiği.....	37

Şekil 4.12.	$\text{Ni}_{0.5}\text{Au}_{0.5}$ ikili alaşımı ve $\text{Pd}_{0.05}\text{Ni}_{0.47}\text{Au}_{0.48}$, $\text{Pd}_{0.1}\text{Ni}_{0.45}\text{Au}_{0.45}$, $\text{Pd}_{0.2}\text{Ni}_{0.4}\text{Au}_{0.4}$, $\text{Pd}_{0.33}\text{Ni}_{0.33}\text{Au}_{0.33}$, $\text{Pd}_{0.5}\text{Ni}_{0.25}\text{Au}_{0.25}$ üçlü alaşımları için elde edilen B hacim modülü değerleri grafiği.....	38
Şekil 4.13.	$\text{Ni}_{0.5}\text{Au}_{0.5}$ (a), $\text{Pd}_{0.05}\text{Ni}_{0.47}\text{Au}_{0.48}$ (b), $\text{Pd}_{0.1}\text{Ni}_{0.45}\text{Au}_{0.45}$ (c), $\text{Pd}_{0.2}\text{Ni}_{0.4}\text{Au}_{0.4}$ (d), $\text{Pd}_{0.33}\text{Ni}_{0.33}\text{Au}_{0.33}$ (e), $\text{Pd}_{0.5}\text{Ni}_{0.25}\text{Au}_{0.25}$ (f) alaşımları için bulunan C_{11} değerlerinin % Pd miktarlarına göre değişim grafiği.....	40
Şekil 4.14.	$\text{Ni}_{0.5}\text{Au}_{0.5}$ (a), $\text{Pd}_{0.05}\text{Ni}_{0.47}\text{Au}_{0.48}$ (b), $\text{Pd}_{0.1}\text{Ni}_{0.45}\text{Au}_{0.45}$ (c), $\text{Pd}_{0.2}\text{Ni}_{0.4}\text{Au}_{0.4}$ (d), $\text{Pd}_{0.33}\text{Ni}_{0.33}\text{Au}_{0.33}$ (e), $\text{Pd}_{0.5}\text{Ni}_{0.25}\text{Au}_{0.25}$ (f) alaşımları için bulunan C_{12} değerlerinin % Pd miktarlarına göre değişim ve fit parametreleri grafiği.....	41
Şekil 4.15.	$\text{Ni}_{0.5}\text{Au}_{0.5}$ (a), $\text{Pd}_{0.05}\text{Ni}_{0.47}\text{Au}_{0.48}$ (b), $\text{Pd}_{0.1}\text{Ni}_{0.45}\text{Au}_{0.45}$ (c), $\text{Pd}_{0.2}\text{Ni}_{0.4}\text{Au}_{0.4}$ (d), $\text{Pd}_{0.33}\text{Ni}_{0.33}\text{Au}_{0.33}$ (e), $\text{Pd}_{0.5}\text{Ni}_{0.25}\text{Au}_{0.25}$ (f) alaşımları için bulunan B hacim modülü değerlerinin % Pd miktarlarına göre değişim ve fit parametreleri grafiği.....	41
Şekil 4.16.	Pd, Ni, Au saf metalleri ve $\text{Pd}_{0.5}\text{Ni}_{0.5}$, $\text{Ni}_{0.5}\text{Au}_{0.5}$, $\text{Pd}_{0.05}\text{Ni}_{0.47}\text{Au}_{0.48}$, $\text{Pd}_{0.1}\text{Ni}_{0.45}\text{Au}_{0.45}$, $\text{Pd}_{0.2}\text{Ni}_{0.4}\text{Au}_{0.4}$, $\text{Pd}_{0.33}\text{Ni}_{0.33}\text{Au}_{0.33}$, $\text{Pd}_{0.5}\text{Ni}_{0.25}\text{Au}_{0.25}$ alaşımları için bulunan sıcaklığa bağlı yoğunluk değerleri grafiği.....	42
Şekil 4.17.	$\text{Ni}_{0.5}\text{Au}_{0.5}$ (a), $\text{Pd}_{0.05}\text{Ni}_{0.47}\text{Au}_{0.48}$ (b), $\text{Pd}_{0.1}\text{Ni}_{0.45}\text{Au}_{0.45}$ (c), $\text{Pd}_{0.2}\text{Ni}_{0.4}\text{Au}_{0.4}$ (d), $\text{Pd}_{0.33}\text{Ni}_{0.33}\text{Au}_{0.33}$ (e), $\text{Pd}_{0.5}\text{Ni}_{0.25}\text{Au}_{0.25}$ (f) alaşımları için bulunan yoğunluk değerlerinin % Pd miktarlarına göre değişim ve fit parametreleri grafiği.....	44
Şekil 4.18.	Pd, Ni, Au saf metalleri ve $\text{Pd}_{0.5}\text{Ni}_{0.5}$, $\text{Ni}_{0.5}\text{Au}_{0.5}$, $\text{Pd}_{0.05}\text{Ni}_{0.47}\text{Au}_{0.48}$, $\text{Pd}_{0.2}\text{Ni}_{0.4}\text{Au}_{0.4}$, $\text{Pd}_{0.5}\text{Ni}_{0.25}\text{Au}_{0.25}$ alaşımları için bulunan sıcaklığa bağlı örgü parametresi ve fit parametreleri grafiği.....	45
Şekil 4.19.	Pd, Ni, Au saf metalleri ve $\text{Pd}_{0.5}\text{Ni}_{0.5}$, $\text{Ni}_{0.5}\text{Au}_{0.5}$, $\text{Pd}_{0.1}\text{Ni}_{0.45}\text{Au}_{0.45}$, $\text{Pd}_{0.33}\text{Ni}_{0.33}\text{Au}_{0.33}$, $\text{Pd}_{0.5}\text{Ni}_{0.25}\text{Au}_{0.25}$ alaşımları için bulunan sıcaklığa bağlı örgü parametresi ve fit parametreleri grafiği.....	45
Şekil 4.20.	$\text{Pd}_{0.05}\text{Ni}_{0.47}\text{Au}_{0.48}$, $\text{Pd}_{0.2}\text{Ni}_{0.4}\text{Au}_{0.4}$, $\text{Pd}_{0.33}\text{Ni}_{0.33}\text{Au}_{0.33}$, $\text{Pd}_{0.5}\text{Ni}_{0.25}\text{Au}_{0.25}$ alaşımları için bulunan sıcaklığa bağlı örgü parametresi ve fit parametreleri grafiği.....	46

Şekil 4.21.	$Pd_{0.1}Ni_{0.45}Au_{0.45}$, $Pd_{0.2}Ni_{0.4}Au_{0.4}$, $Pd_{0.33}Ni_{0.33}Au_{0.33}$, $Pd_{0.5}Ni_{0.25}Au_{0.25}$ alaşımları için bulunan sıcaklığa bağlı örgü parametresi ve fit parametreleri grafiği.....	46
Şekil 4.22.	$Ni_{0.5}Au_{0.5}$ (a), $Pd_{0.05}Ni_{0.47}Au_{0.48}$ (b), $Pd_{0.1}Ni_{0.45}Au_{0.45}$ (c), $Pd_{0.2}Ni_{0.4}Au_{0.4}$ (d), $Pd_{0.33}Ni_{0.33}Au_{0.33}$ (e), $Pd_{0.5}Ni_{0.25}Au_{0.25}$ (f) alaşımları için bulunan örgü parametreleri değerlerinin %Pd miktarlarına göre değişim grafiği.....	49
Şekil 4.23.	Pd, Ni, Au saf metalleri ve $Pd_{0.5}Ni_{0.5}$, $Pd_{0.05}Ni_{0.47}Au_{0.48}$, $Pd_{0.2}Ni_{0.4}Au_{0.4}$, $Pd_{0.33}Ni_{0.33}Au_{0.33}$, $Pd_{0.5}Ni_{0.25}Au_{0.25}$ alaşımları için hesaplanan entalpi değerleri ve fit parametreleri grafiği.....	52
Şekil 4.24.	Pd, Ni, Au saf metalleri ve $Pd_{0.5}Ni_{0.5}$, $Ni_{0.5}Au_{0.5}$, $Pd_{0.10}Ni_{0.45}Au_{0.45}$, $Pd_{0.2}Ni_{0.4}Au_{0.4}$, $Pd_{0.33}Ni_{0.33}Au_{0.33}$, $Pd_{0.5}Ni_{0.25}Au_{0.25}$ alaşımları için hesaplanan entalpi değerleri ve fit parametreleri grafiği.....	52
Şekil 4.25.	$Pd_{0.05}Ni_{0.47}Au_{0.48}$, $Pd_{0.10}Ni_{0.45}Au_{0.45}$, $Pd_{0.2}Ni_{0.4}Au_{0.4}$, $Pd_{0.33}Ni_{0.33}Au_{0.33}$, $Pd_{0.5}Ni_{0.25}Au_{0.25}$ alaşımları için hesaplanan entalpi değerleri ve fit parametreleri grafiği.....	53
Şekil 4.26.	$Ni_{0.5}Au_{0.5}$ (a), $Pd_{0.05}Ni_{0.47}Au_{0.48}$ (b), $Pd_{0.1}Ni_{0.45}Au_{0.45}$ (c), $Pd_{0.2}Ni_{0.4}Au_{0.4}$ (d), $Pd_{0.33}Ni_{0.33}Au_{0.33}$ (e), $Pd_{0.5}Ni_{0.25}Au_{0.25}$ (f) alaşımları için bulunan entalpi değerlerinin % Pd miktarlarına göre değişim ve fit parametreleri grafiği.....	54
Şekil 4.27.	Pd metali için erime noktası civarında ortalama kare yer değiştirmenin zamana bağlı grafiği.....	57
Şekil 4.28.	Ni metali için erime noktası civarında ortalama kare yer değiştirmenin zamana bağlı grafiği.....	58
Şekil 4.29.	Au metali için erime noktası civarında ortalama kare yer değiştirmenin zamana bağlı grafiği.....	58
Şekil 4.30.	$Pd_{0.5}Ni_{0.5}$ alaşımı için erime noktası civarında ortalama kare yer değiştirmenin zamana bağlı grafiği.....	59
Şekil 4.31.	$Ni_{0.5}Au_{0.5}$ alaşımı için erime noktası civarında ortalama kare yer değiştirmenin zamana bağlı grafiği.....	59
Şekil 4.32.	$Pd_{0.05}Ni_{0.47}Au_{0.48}$ alaşımı için erime noktası civarında ortalama kare yer değiştirmenin zamana bağlı grafiği.....	60

Şekil 4.33.	$\text{Pd}_{0.1}\text{Ni}_{0.45}\text{Au}_{0.45}$ alaşımı için erime noktası civarında ortalama kare yer değiştirmenin zamana bağlı grafiği.....	60
Şekil 4.34.	$\text{Pd}_{0.2}\text{Ni}_{0.4}\text{Au}_{0.4}$ alaşımı için erime noktası civarında ortalama kare yer değiştirmenin zamana bağlı grafiği.....	61
Şekil 4.35.	$\text{Pd}_{0.33}\text{Ni}_{0.33}\text{Au}_{0.33}$ alaşımı için erime noktası civarında ortalama kare yer değiştirmenin zamana bağlı grafiği.....	61
Şekil 4.36.	$\text{Pd}_{0.5}\text{Ni}_{0.25}\text{Au}_{0.25}$ alaşımı için erime noktası civarında ortalama kare yer değiştirmenin zamana bağlı grafiği.....	62
Şekil 4.37.	$\text{Ni}_{0.5}\text{Au}_{0.5}$ (a), $\text{Pd}_{0.05}\text{Ni}_{0.47}\text{Au}_{0.48}$ (b), $\text{Pd}_{0.1}\text{Ni}_{0.45}\text{Au}_{0.45}$ (c), $\text{Pd}_{0.2}\text{Ni}_{0.4}\text{Au}_{0.4}$ (d), $\text{Pd}_{0.33}\text{Ni}_{0.33}\text{Au}_{0.33}$ (e), $\text{Pd}_{0.5}\text{Ni}_{0.25}\text{Au}_{0.25}$ (f) alaşımlarının bulunan erime noktalarının % Pd miktarlarına göre değişim grafiği.....	62

TABLolar LİSTESİ

Tablo 2.1.	Üretici-düzenleyici algoritmasının α_i değerleri	13
Tablo 3.1.	Pd, Ni, Au için Q-SC parametrelerin değerleri	27
Tablo 4.1.	Pd, Ni, Au saf metalleri ve Pd _{0.05} Ni _{0.47} Au _{0.48} , Pd _{0.1} Ni _{0.45} Au _{0.45} , Pd _{0.2} Ni _{0.4} Au _{0.4} , Pd _{0.33} Ni _{0.33} Au _{0.33} , Pd _{0.5} Ni _{0.25} Au _{0.25} , Pd _{0.5} Ni _{0.5} , Ni _{0.5} Au _{0.5} için C_{11} ve C_{12} fit parametreleri.....	35
Tablo 4.2.	Pd, Ni, Au saf metalleri ve Pd _{0.5} Ni _{0.5} , Ni _{0.5} Au _{0.5} , Pd _{0.05} Ni _{0.47} Au _{0.48} , Pd _{0.1} Ni _{0.45} Au _{0.45} , Pd _{0.2} Ni _{0.4} Au _{0.4} , Pd _{0.33} Ni _{0.33} Au _{0.33} , Pd _{0.5} Ni _{0.25} Au _{0.25} alaşımları için bulunan C_{11} ve C_{12} değerleri ve diğer çalışmalarda hesaplanan değerler.....	39
Tablo 4.3.	Pd, Ni, Au saf metalleri ve Pd _{0.5} Ni _{0.5} , Ni _{0.5} Au _{0.5} , Pd _{0.05} Ni _{0.47} Au _{0.48} , Pd _{0.1} Ni _{0.45} Au _{0.45} , Pd _{0.2} Ni _{0.4} Au _{0.4} , Pd _{0.33} Ni _{0.33} Au _{0.33} , Pd _{0.5} Ni _{0.25} Au _{0.25} alaşımları için 0K ve 300K'deki deneysel yoğunluk değerleri ve hesaplanan yoğunluk değerleri.....	43
Tablo 4.4.	Pd, Ni, Au saf metalleri ve Pd _{0.5} Ni _{0.5} , Ni _{0.5} Au _{0.5} , Pd _{0.05} Ni _{0.47} Au _{0.48} , Pd _{0.1} Ni _{0.45} Au _{0.45} , Pd _{0.2} Ni _{0.4} Au _{0.4} , Pd _{0.33} Ni _{0.33} Au _{0.33} , Pd _{0.5} Ni _{0.25} Au _{0.25} alaşımları için a, b, c örgü denklemi fit parametreleri.....	47
Tablo 4.5.	Pd, Ni, Au saf metalleri ve Pd _{0.5} Ni _{0.5} , Ni _{0.5} Au _{0.5} , Pd _{0.05} Ni _{0.47} Au _{0.48} , Pd _{0.1} Ni _{0.45} Au _{0.45} , Pd _{0.2} Ni _{0.4} Au _{0.4} , Pd _{0.33} Ni _{0.33} Au _{0.33} , Pd _{0.5} Ni _{0.25} Au _{0.25} alaşımları için 0K ve 300K'de hesaplanan örgü sabiti α ve E_c bağlanma enerjisi değerleri, deneysel değerler ve referans alınan bilimsel çalışmaların değerleri.....	48
Tablo 4.6.	Pd, Ni, Au saf metalleri ve Pd _{0.5} Ni _{0.5} , Ni _{0.5} Au _{0.5} , Pd _{0.05} Ni _{0.47} Au _{0.48} , Pd _{0.1} Ni _{0.45} Au _{0.45} , Pd _{0.2} Ni _{0.4} Au _{0.4} , Pd _{0.33} Ni _{0.33} Au _{0.33} , Pd _{0.5} Ni _{0.25} Au _{0.25} alaşımları için 300K'de hesaplanan $\alpha(T)$ termal genleşme katsayıları ve deneysel değerler.....	51

Tablo 4.7.	Pd, Ni, Au saf metalleri ve $Pd_{0.5}Ni_{0.5}$, $Ni_{0.5}Au_{0.5}$, $Pd_{0.05}Ni_{0.47}Au_{0.48}$, $Pd_{0.1}Ni_{0.45}Au_{0.45}$, $Pd_{0.2}Ni_{0.4}Au_{0.4}$, $Pd_{0.33}Ni_{0.33}Au_{0.33}$, $Pd_{0.5}Ni_{0.25}Au_{0.25}$ alařımları iin a, b, c entalpi deęerleri fit parametreleri.....	54
Tablo 4.8.	Pd, Ni, Au saf metalleri ve $Pd_{0.5}Ni_{0.5}$, $Ni_{0.5}Au_{0.5}$, $Pd_{0.05}Ni_{0.47}Au_{0.48}$, $Pd_{0.1}Ni_{0.45}Au_{0.45}$, $Pd_{0.2}Ni_{0.4}Au_{0.4}$, $Pd_{0.33}Ni_{0.33}Au_{0.33}$, $Pd_{0.5}Ni_{0.25}Au_{0.25}$ alařımları iin hesaplanan 300K sıcaklıktaki ısı sıęası ve bulunabilen deneysel deęerleri.....	56
Tablo 4.9.	Pd, Ni, Au saf metalleri ve $Pd_{0.5}Ni_{0.5}$, $Ni_{0.5}Au_{0.5}$, $Pd_{0.05}Ni_{0.47}Au_{0.48}$, $Pd_{0.1}Ni_{0.45}Au_{0.45}$, $Pd_{0.2}Ni_{0.4}Au_{0.4}$, $Pd_{0.33}Ni_{0.33}Au_{0.33}$, $Pd_{0.5}Ni_{0.25}Au_{0.25}$ alařımları iin hesaplanan erime noktası deęerleri ve bulunabilen deneysel deęerler.....	63

ÖZET

Anahtar Kelimeler: Moleküler Dinamik, Quantum Sutton-Chen potansiyeli, üçlü alaşımlar ve soy-metaller

Bu çalışmada moleküler dinamik yöntemi ile Quantum Sutton-Chen (Q-SC) etkileşim potansiyeli kullanılarak 0'dan başlatılıp üçlü alaşım içinde %50'ye kadar çıkartılarak Pd katkısının maddenin mekanik özelliklerine etkisi araştırılmıştır. Ayrıca Paladyum (Pd), Nikel (Ni), Altın (Au) ve bu geçiş metallerinin farklı konsantrasyondaki üçlü ve ikili alaşımlarının ($Pd_{0.5}Ni_{0.5}$, $Ni_{0.5}Au_{0.5}$, $Pd_{0.05}Ni_{0.47}Au_{0.48}$, $Pd_{0.1}Ni_{0.45}Au_{0.45}$, $Pd_{0.2}Ni_{0.4}Au_{0.4}$, $Pd_{0.33}Ni_{0.33}Au_{0.33}$, $Pd_{0.5}Ni_{0.25}Au_{0.25}$) katı faz fiziksel özellikleri sıcaklığa bağlı olarak incelenmiştir.

MD simülasyon yöntemi kullanılarak Quantum Sutton-Chen potansiyel parametrelerinin ve model için gerekli bir özellik olan Ruffi-Tabar birleştirme kuramının üçlü ve ikili metal alaşımların artan sıcaklıklarda davranışı araştırılmıştır.

MOLECULAR DYNAMICS INVESTIGATIONS OF THE THERMODYNAMICAL AND MECHANICAL EFFECTS OF PALLADIUM ADDITION INTO Ni-Au ALLOYS

SUMMARY

Key words: Molecular Dynamics, Quantum Sutton Chen Potential, Ternary Alloy, Noble Metals.

The Thermodynamical and mechanical effects of Pd addition in to Ni-Au alloy is investigated by using MD simulation and Quantum Sutton-Chen (Q-SC) inter-atomic potential. Pd addition started from 0% concentration and ended at 50% concentration. Besides, Pd, Ni, Au and their different concentrations ($\text{Pd}_{0.5}\text{Ni}_{0.5}$, $\text{Ni}_{0.5}\text{Au}_{0.5}$, $\text{Pd}_{0.05}\text{Ni}_{0.47}\text{Au}_{0.48}$, $\text{Pd}_{0.1}\text{Ni}_{0.45}\text{Au}_{0.45}$, $\text{Pd}_{0.2}\text{Ni}_{0.4}\text{Au}_{0.4}$, $\text{Pd}_{0.33}\text{Ni}_{0.33}\text{Au}_{0.33}$, $\text{Pd}_{0.5}\text{Ni}_{0.25}\text{Au}_{0.25}$) are investigated due to temperature in the solid state.

Validity of Quantum Sutton-Chen potential parameters and applicability of Rafii-Tabar Combination Rules to binary and ternary alloys are investigated.

BÖLÜM 1. GİRİŞ

Teorik ve deneysel gelişmelerin yanında, 1960'tan sonra bilgisayarın kullanım alanına girmesiyle bilgisayar dünyasındaki gelişmeler, deneysel olarak ortaya konması çok zor ve açıkça anlaşılamayan bir çok teorik arařtırmaların bilgisayar ortamında simülasyon teknikleri kullanılarak yapılmasına olanak sağlamıştır. Teorik fizik alanında ortaya atılan varsayımların gerçekte olan tutarlılıkları simülasyon hesaplarıyla kolayca ispatlanabilir [1].

Bilgisayar simülasyonları yardımı ile analitik bir çözümleri bulunamayan problemlerin sayısal çözümleri yapılmaktadır. Ayrıca deney ve teorinin yeterli olmadığı durumlarda, bilgisayar benzetiminden faydalanmak çok yararlı çözümler ortaya koymuştur. Böyle durumlarda bilgisayar yardımıyla yapılan simülasyonlar sistemdeki niceliklerin hesaplanmasına yardımcı olur [1].

Fiziksel bir sistemin bilgisayar ortamında benzetimi bu sistemin küçük bir modelini oluşturmaktır. Çünkü bilgisayar simülasyonları sistemde gerçek olaylar üzerine değil, gerçeği ifade eden modeller üzerine kurulur [2]. Sisteme en yakın benzetimin elde edilebilmesi için sistemin, makroskobik özelliklerini yansıtacak kadar büyük ve simülasyon zamanının fiziksel özellikleri gözleyebilecek kadar uzun olması gereklidir.

Bilim dünyasında atomlar arasındaki etkileşimleri modellemek için çok hassas kuantum mekaniksel hesaplama yöntemlerinden, daha basit yarı deneysel yöntemlere kadar bir çok simülasyon yöntemleri geliştirilmiştir.

Katı, sıvı ve gaz gibi değişik fazlarda bulunan maddelerin birçok fiziksel özelliğinin deneysel olarak belirlenmesinin yanında son yıllarda benzetim tekniklerinin gelişmesi sonucunda teorik çalışmaların sayısı da hız kazanmıştır. Moleküler

Dinamik (MD), Monte Carlo (MC), Enerji Minimizasyonu (EM) gibi atomik benzetim teknikleri deęişik kristal kusurlarının (boşluklar, dislokasyonlar, tane sınırları) yapı ve enerjilerinin belirlenmesinden anharmonik davranış gösteren yapısal faz dönüşümlerine kadar malzeme doğasının geniş bir alanında kullanılmaktadır [3,4].

Hazırlanan bu çalışmada moleküler dinamik yönteminden yararlanılmıştır. Bu yöntem sistemdeki parçacıkların zamana baęlı deęişimlerinin incelenmesine izin verir. Ayrıca bu yöntem sistemdeki parçacıkların Newton hareket denklemlerinin sayısal integrasyonu yapılarak uygulanır.

Moleküler dinamik (MD) simülasyonları, metal veya alaşımların yapısal özelliklerinin incelenmesinde sıkça kullanılır. Ayrıca model sisteminin yapısal ve termodinamik özelliklerini, sıcaklığın, basıncın ve zamanın fonksiyonu olarak açıklayabildięi için amorf sistemlerin incelenmesinde güvenle kullanılabilir [5].

Moleküler dinamik yönteminin temeli istatistiksel mekanięe dayanır. Mikroskobik simülasyonla makroskobik özellikler arasındaki ilişki istatistiksel mekanik yardımı ile yapılır [6].

Moleküler dinamik yönteminin bilim ve teknoloji alanlarındaki bazı uygulama alanları, moleküler kaos'un denenmesi, kinetik teori, difüzyon, dengelenme (equilibration), transport özellikleri, boyuta baęlılık, modellerin ve potansiyel fonksiyonların tespit edilmesidir [7].

Moleküler dinamik (MD) yöntemiyle yapılan önceki yıllara ait bilimsel alanda birçok çalışmalar olmuştur. Bunlardan bazıları, moleküler dinamik simülasyon yöntemi ile TPN ve EVN sistem çerçevelerinde Pd-Al alaşımının deęişik konsantrasyonlarında yapısal ve dinamik fiziksel özelliklerini, katı alaşım için elastik, hacim modülü, sıvı yapı araştırması olarak erime noktası tayini, difüzyon, vizkosite ve dinamik yapı faktörü hesaplamalarıdır [8,9].

Çoruh ve Sarıbek, Pd_{0.085}Cu_{0.44}Ag_{0.475} üçlü alaşımının katı yapı fiziksel özelliklerini TPN ve EVN sistem çerçevesi kullanarak moleküler dinamik simülasyon yöntemi ile

çalışmışlardır. Bu çalışmada elastik sabitler, hacim modülü, ısı genleşme, örgü parametresi, ısı sığası ve erime noktası tayini yapılmıştır [10,11].

Aydın, Au-Ag-Pd üçlü alaşımların farklı konsantrasyonlarının katı faz fiziksel özelliklerini TPN ve EVN sistem çerçeveleri kullanarak moleküler dinamik simülasyon yöntemi ile çalışmıştır. Bu çalışma sonucunda erime noktası, ısı sığası, elastik sabitler, hacim modülü, yoğunluk ve örgü parametresi tayini yapılmıştır [12].

Çıplak, Ni-Ag alaşımlarına Pd katkısını ve bunların farklı konsantrasyonlarının katı faz fiziksel özelliklerini TPN ve EVN sistem çerçevesinde moleküler dinamik simülasyon yöntemi ile incelemiştir. Bu çalışma sonucunda malzemeler için elastik sabitler, hacim modülü, örgü parametresi, yoğunluk, ısı sığası, erime noktası ve ısı genleşme tayini yapılmıştır [13].

Kart ve arkadaşları, Pd-Ni alaşımının $Pd_{1-x}Ni_x$ formundaki farklı konsantrasyonları için TPN'de (sabit sıcaklık, sabit basınç ve sabit atom sayısı) ve diğer bir sistem çerçevesi olan TVN'de (sabit sıcaklık, sabit hacim ve sabit atom sayısı) soğutma ile atomik alandaki cam oluşumunu incelemişlerdir [14].

Yine Kart ve arkadaşları, saf paladyum (Pd), gümüş (Ag) ve özellikle de $Pd_{1-x}Ag_{x-1}$ tipindeki ikili alaşımların mekanik ve termodinamik özelliklerini moleküler dinamik simülasyon yöntemiyle Sutton-Chen ve Quantum Sutton-Chen potansiyellerini kullanarak incelemişlerdir. Yapılan bu çalışmada geçiş elementlerinin termodinamik, statik ve dinamik özellikleri incelenmiştir. Elde edilen sonuçların deneysel verilerle büyük oranda uyumlu olduğu gözlenmiştir. Özellikle Pd, Ag ve ikili alaşımları için Quantum Sutton-Chen potansiyel parametrelerinin deneysel sonuçlarla uyumluluğunun, Sutton-Chen potansiyel parametreleri ile olan uyumundan daha iyi olduğu sonucu saptanmıştır [15].

Qi ve arkadaşları, moleküler dinamik simülasyon metoduyla, Quantum Sutton-Chen potansiyelini kullanarak farklı soğutma ve ısıtma hızlarında Cu, Ni ve CuNi alaşımlarının kristalizasyonunu incelemiş ve soğutma hızına bağlı olmaksızın kristal yapıda oldukları sonucuna varmışlardır [16].

Çağın ve arkadaşları, altı fcc geçiş metalinin (Ni, Cu, Ag, Au, Pt, Rh) termodinamik ve mekanik özelliklerini moleküler dinamik yöntemiyle ve Sutton-Chen potansiyelini kullanarak incelemişlerdir. 0-1500K arasında Sutton-Chen potansiyeli için sabit parametreleri elde etmişler ve sonuçları deneysel verilerle karşılaştırmışlardır [17].

Çakmak ve arkadaşları EAM'i (Gömülmüş Atom Modeli) kullanarak Ni saf metalinin moleküler dinamik incelemesini araştırmışlardır. Çalışmada Sutton-Chen parametrelerinin uygunluğu, Parinello-Rahman moleküler dinamik simülasyonu ile denenmiştir [18].

Cong ve arkadaşları, CuNi alaşımının farklı konsantrasyonlardaki alaşımlarını moleküler dinamik simülasyonu ve gömülmüş atom yöntemi kullanarak tek soğutma hızı ile incelemişlerdir. Kullanılan soğutma hızı sonucunda Cu₂₀Ni₈₀ alaşımının diğer CuNi alaşımlarından farklı bir yapıya sahip olduğu gözlenmiştir [4].

Hazırlanan bu çalışmada Pd-Ni-Au saf metallere oluşan ikili ve üçlü alaşımlarının farklı konsantrasyonları incelendi ve üçlü alaşımlar için Pd miktarı artırılıp, Ni ve Au miktarları bir alaşım dışında (Pd_{0.05}Ni_{0.47}Au_{0.48}) eşit olarak alınmıştır. Ayrıca Pd_{0.5}Ni_{0.5} ve Ni_{0.5}Au_{0.5} ikili alaşımları da çalışıldı.

Pd miktarı %0, %5, %10, %20, %33, %50 olarak alındı ve geriye kalan oranlar bir alaşım dışında Ni-Au oranları eşit olacak şekilde moleküler dinamik simülasyon yöntemiyle Quantum Sutton-Chen (Q-SC) parametrizasyonu kullanılarak incelenmiştir. 1372 atomlu FCC örgü baz alınarak çalışılmıştır.

Bu çalışmada Pd_{0.5}Ni_{0.5}, Ni_{0.5}Au_{0.5}, Pd_{0.05}Ni_{0.47}Au_{0.48}, Pd_{0.10}Ni_{0.45}Au_{0.45}, Pd_{0.20}Ni_{0.40}Au_{0.40}, Pd_{0.33}Ni_{0.33}Au_{0.33} ve Pd_{0.50}Ni_{0.25}Au_{0.25} alaşımları incelenmiştir. Pd miktarı arttırıldıkça oluşan her bir yeni alaşımında yeni dinamik, termodinamik ve çeşitli fiziksel özellikler araştırılmış ve değişimler gösterilmeye çalışılmıştır.

Bölüm 2'de MD simülasyonun tanımı yapıldı, MD yöntemi hakkında bilgi verildi ve kullanılan algoritmalar teori ve formüllerle açıklanmıştır. Daha sonra çalışma içerisinde kullanılan istatistiksel sistemler olan HPN, TPN ve EVN çerçeveler hakkında detaylı bilgi verilmiştir. İkinci bölümün son kısmında MD simülasyonunda kullanılan

periyodik sınır şartları, kesme yarıçapı ve minimum görüntü yöntemi hakkında bilgi verilmiştir.

Bölüm 3'te çalışma içerisinde kullanılan etkileşim potansiyelleri hakkında bilgi verilmiştir. Üçüncü bölümün son kısmında ise MD simülasyonunun detaylarından bahsedilmiştir.

Bölüm 4'te hazırlanan çalışmanın sonuçları grafikler yardımıyla değerlendirilmiştir. Çalışma sonucunda her bir alaşım için, elastik sabitler (C_{11} , C_{12}) ve hacim modülü B , yoğunluk değerleri, örgü parametreleri, entalpi, erime noktası ve ortalama kare yer değiştirme değerleri hesaplanmıştır. Ayrıca oda sıcaklığında (300K) malzemelerin elastik sabitleri, entalpi, yoğunluk ve örgü parametreleri alaşımlardaki % Pd değerlerine göre değişimi incelenmiştir. Simülasyon sonuçları, bulunan diğer deneysel değerlerle karşılaştırılıp yüzde bağıl hataları hesaplanmıştır.

BÖLÜM 2. MOLEKÜLER DİNAMİK SİMİLASYON

2.1. Tanım

Moleküler dinamik simülasyonu, Newton yasalarını ve hareket denklemlerini esas alır. Çünkü atomun ivmesinin belirlenmesi, atomun üzerine etkiyen kuvvetin bilinmesiyle olur. Atomların her biri ulaşılmak istenen sıcaklığa göre ortalama kinetik enerjiyi sağlayan gelişi güzel bir hız kazanır.

Newton hareket kanunlarına göre her bir atomun üzerine etkiyen kuvvetin hesaplanmasıyla atomların hareketine izin verilir. Atomlar arasındaki kuvvetler, atomik etkileşmeleri sağlayan potansiyel enerji fonksiyonlarının (PEF) gradyanı ile belirlenir.

Moleküler dinamik simülasyonu, N atomdan oluşan sistemdeki her bir atom için yazılan Newton'un ikinci kanunu ile başlar.

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

Burada m_i , atomun kütlesi, $a_i = d^2r/dt^2$ atomun ivmesi ve F_i , atomlar arası etkileşmesi nedeniyle etkiyen kuvvettir. Büyük bir faz uzayından ziyade konfigürasyon uzayı üzerinden çalışan, zamana bağlı nicelikler hakkında herhangi bir bilgi vermediğinden, dinamik özellikler hakkında da bilgi alınamayan Monte Carlo (MC) metodunun aksine, moleküler dinamik her şeyin neden-sonuç ilişkisiyle birbirine bağlı olduğunu söyleyen bir tekniktir [19]. İlk kanunlar ile hızlar verildiğinde zamana göre değişim prensip olarak belirlenebilir. Moleküler Dinamik yöntemi daha açık bir ifadeyle tanımlanacak olursa, incelenen sistemin atomları bilgisayar içine doğru "hareket edecekler", bunun ardından birbirleri ile çarpışacaklar, eğer sistem sıvı ise çevreleri ile etkileşime girecekler, komşu atomlar ile uyumlu bir şekilde salınacaklar,

serbest yüzey varsa sistemden buharlaşma sonucunda uzaklaşma olasılığı ortaya çıkacaktır. Yani, gerçek bir maddedeki atomlarının davranışlarıyla aynı hareketleri yapacaklardır [20].

Dolayısıyla moleküler dinamik simülasyonları, termodinamik özellikleri ölçmek için kullanılabilir. MD simülasyonları ile kinetik enerji, potansiyel enerji, hacim, basınç, entalpi, sabit basınç veya sabit hacim altında ısı kapasiteleri doğrudan hesaplanabilir. Bunun bir sonucu olarak MD simülasyonu ile birçok geçiş metali ve bunların alaşımlarının yapısal özelliklerini inceleyen çok sayıda çalışma bulunmaktadır [21, 22].

MD simülasyonlarında modelleme çok önemlidir. İyi tasarlanmış modeller kullanılarak doğru ve güvenilir sonuçlar elde edilebilir. Modelleme işlemi süresince parçacıklar arasındaki etkileşmelerin sonucunu veren bir ifade oluşturulur. Atomlar arası potansiyel, farklı deneysel verilerin OK yada oda sıcaklığında fit edilmesi sonucunda bulunur [23].

MD simülasyonu, modellerin deneysel çalışmalar ile karşılaştırılmasını amaçlar. Doğru sonuçların bulunması için sistemin denge konumu minimum enerjiye getirilmelidir. Çünkü böyle bir sistem içerisinde gerçek sistem modellenebilir ve gerçek fiziksel sistem hakkında doğru bilgiler elde edilebilmesine olanak sağlar.

MD simülasyonunda hesaplanan değerler, gerçek deney koşullarında bulunan sayısal değerlerle uyumlu olduğundan önemlidir. Ayrıca moleküler dinamik fizik/ optik/ fotonik yöntemler bütünü olan spektroskopi analiz yöntemleri ile veya moleküler ışınım teknikleriyle çalışıldığında gerçek moleküllerin hareketleri de görülebilir [2,24].

Metalik sistemleri modellemek için çok cisim etkileşmeleri kullanılmıştır. Araştırmacıların çok cisim potansiyeli kullanmaya yönelmelerinde, iki cisim etkileşme potansiyellerinin kolayca yorumlanabilmesi, hız hesaplarının yapılabilmesine olanak sağlaması ve küresel simetrik etkileşmelere uygulanma gibi bir takım sınırlamalar olması göz önünde bulundurulmuştur. Çok cisim potansiyellerinin en büyük avantajı, metalik sistemlerin elastik sabitleri ve kohesif enerji gibi temel özelliklerini en iyi

şekilde tanımlayabilmesidir.

MD simülasyonu ile elde edilen sonuçlar değerlendirildiğinde, atomlar arası etkileşimlerin karakteri görülmektedir. Bu hesaplamalar için kullanılan birçok potansiyel enerji fonksiyonu vardır. Bunlardan biri EAM (Gömülmüş Atom modeli-Embedded Atom Model) modelidir. Bu yöntem ilk olarak 1984 yılında Daw ve Baskes tarafından (fcc) yüzey merkezli atomlar arası etkileşmelerini hesaplamak için kurulmuş ve geliştirilmiş bir yöntemdir [25].

EAM yöntemi özellikle metaller için uygundur ve metalik sistemlerin hacim, yüzey, ara-yüzey gibi pek çok özelliklerinin analiz etmek mümkündür. Günümüzde EAM'nin en yaygın kullanılan tipleri, Finnis-Sinclair (FS) [26], Voter-Chen (VC) [27] ve Sutton Chen (SC) [28] modelleridir.

MD simülasyonları belirli bir maddenin faz diyagramlarını hesaplayabilir [20]. Bu faz diyagramlarının moleküler dinamik simülasyonu ile hesaplanmasında potansiyel enerji seçimi önemlidir. Çalışmalarda potansiyel fonksiyonun hem doğru sonuçlar üretmesi hem de hızlı çalışması istenir. Sistem büyüdükçe integral işlemleri binlerce adımdan oluşur ve bunun sonucunda simülasyonun gerçek bir sistem için sorunlara çözüm getirmekten çok, sürekli yeni sorunlar üretebilecek hale gelmesi kaçınılmaz bir sonuç olur. Bu nedenle entropi ve serbest enerji değerleri moleküler dinamik hesaplamalarıyla doğrudan hesaplanamaz. MD simülasyonlarıyla doğrudan hesaplanamamasının diğer sebebi de, büyük işlem yoğunluğunun ortaya çıkması sonucunda büyük miktarda veri çıkışıyla karşılaşılabileceğinden, büyük ve kompleks bir simülasyon yapısı oluşturmak, daha ileri imkanlar ve depolama kapasiteleri gerektirir [9]. Bu nedenle çeşitli yaklaşımlar yapılır.

Bilinen iyi modeller uzun süreli hesaplamalar gerektirir. Çünkü hızlı çalışan modellerde doğru ve güvenilir sonuçların ortaya çıkması zordur. Bu hesaplamalar, deneysel yarı ampirik tahminlere yaklaştırılır. Genellikle sıcaklığa ve basınca bağlı sabitlere dayanması nedeniyle hesaplanan faz bölgesi deneysel sonuçlarla sınırlı kalmaktadır. Bu nedenle Gibbs ve Helmutz gibi serbest enerji kavramları faz diyagramlarını değerlendirmek için kullanılmaktadır [29,30].

MD simülasyon uygulanması için belli sınırlamaları vardır. Bu sınırlamalar bilgisayarın sahip olduğu hız ve kapasitesi için geçerlidir. Sınırlamalara bağlı olarak sistem büyüklüğü için $10-10^6$ tane atom içeren ve simülasyon süresi 10^{-12} ile 10^{-3} saniye aralığı sistem simülasyonları için araştırma yapmaya uygundur [31]. Hızlı ve daha doğru sonuçlar üretecek potansiyel fonksiyon arayışları halen günümüzde devam etmektedir.

2.2. Yöntem

Moleküler Dinamik simülasyon yöntemi ilk olarak 1950'lerin sonlarında Alde ve Wainwright tarafından sert küre yaklaşımında etkileşmeleri araştırmak için kullanılmıştır. Aynı hızda fakat farklı yönelimli 100 bilyanın hareketine, iki ve üç boyutlu çözümler getirdiler. Bu çalışmalarıyla moleküler dinamik simülasyon yöntemini kullanarak termodinamik özelliklerin hesaplanabilirliğini gösterdiler [32].

1964 yılına gelindiğinde ise Rahman sıvı argon için gerçekçi bir potansiyel kullanarak ilk simülasyon metodunu gerçekleştirmiştir [33].

1980 yılında Parninello ve Rahman (PR), anizotropik sistemlere uygulanabilecek bir moleküler dinamik yöntem geliştirmişlerdir. Bu yöntemde, yalıtılmış N parçacıklı sistem için iç enerji ve moleküler dinamik hücre hacmi bağımsız değişkenler olarak alınır ve kristal sistemlerin birçok özelliğini açıklamada başarıyla kullanılır [5,34].

Moleküler dinamik simülasyonda yapılması gereken ilk şey, genel olarak potansiyel enerji fonksiyonu (PEF) adı verilen bu fonksiyonların ve fonksiyon parametrelerin, deneysel, yarı deneysel ve teorik olarak belirlenmesidir.

Moleküler dinamik yöntemi, model sistemin yapısal ve termodinamik özelliklerini sıcaklığın, basıncın ve zamanın fonksiyonu olarak üretebilir. MD, bir bilgisayar simülasyon tekniği olması nedeniyle, burada etkileşen atomların zaman içindeki gelişimi bu atomların hareket denklemlerinin integrasyonu ile izlenir [20]. Moleküler dinamik yöntemi genel olarak çözümü tam olarak bulunamayan problemlerin sayısal çözümlerini elde etmeyi ve belirli sistemler için kurulan modellerin deneysel veriler

ile karşılaştırılmasını amaçlar.

MD hesaplamalarında iyi tasarlanmış yöntemler kullanmak, sistemdeki deneysel olarak gözlenmesi zor veya mümkün olmayan davranışları yani fiziksel özellikler ve parametrelerini incelemek mümkündür.

MD hesaplamalarında doğru sonuçların elde edilmesi atomlar arasındaki etkileşimlerin gerçeğe uygun olarak modellenmesine bağlıdır. Atomik etkileşmelerin modellenmesinde birçok matematiksel fonksiyonlar kullanılır.

2.3. Algoritma

Moleküler dinamik simülasyonlarında sistem içi etkileşimlerin hesaplaması çoğunlukla uzun zaman alır ve bu işlemin yapılması yoğun bir çaba gerektirir. Bu durumun zorluk derecesi sistemdeki atom sayısının artışıyla doğru orantılı değişim gösterir.

Etkileşimlerin doğru değerlendirilmesi ve kesin hesaplama yapılabilmesi için sürenin optimum seçilmesi gereklidir. Hareket denklemlerini tanımlamak için kullanılan çok sayıda sayısal algoritma metodu vardır. Moleküler dinamik simülasyonlarında kullanılan algoritmalar sürelerin büyük oranda azaltılmasına katkıda bulunurlar.

Bu algoritmalarda yaygın olarak kullanılan sonlu-fark metodlarının çoğu 1900'lü yıllarda Runge-Kutta tarafından bulunmuştur [35]. Bu metodlar Euler metodu yapısındadır [36].

Runge-Kutta algoritması, iyi dengelenmiş özelliklere sahip olmasına rağmen, moleküler dinamikte çok az tercih edilmiştir. Çünkü böyle bir algoritma adım ve atom başına exponansiyel değerlendirme gerektiren bir metottan dört kat yavaş hareket eder.

Bu nedenle RK algoritması moleküllerin büyük çoğunluğu için yavaş bir metottur ve çok küçük özgürlük derecesine sahip sistemlerde kullanılmıştır [35].

Geliştirilen diğer bir algoritma olan Verlet algoritmasında, t anındaki konumlarla hızları kullanır ve $(t - \delta t)$ anındaki konumlardan $(t + \delta t)$ anındaki yeni konumlara hesaplanır. Bu algoritmada hızlar açıkça değil, kapalı biçimde kullanılır. Formüllerin doğrudan kullanılması ve yüklenen şartların basit olması bu algoritmanın avantajlarıdır [37]. Ancak sonuçların doğruluk derecesi çok iyi değildir.

Moleküler dinamik simülasyonu, moleküller arası kuvvetleri daha doğru tahmin etmek için uzun zaman gerektiren hesaplamalardan uzak olmalıdır. Kullanılan metotların çoğu, bilgisayar ortamında hesaplamaların yapılması ile işlemin zorluk derecesinin büyük oranda artacağı ve doğru sonuçların bulunması zorlaşacağından göz ardı edilmiştir. Ayrıca kuvvet hesapları izlerin yerlerini belirlemek için kesin sonuçlar vermelerine rağmen, izlerin yerlerini kesin bilmek fazla bir önem taşımadığından bu yöntemlerden vazgeçilmiştir [7].

Hazırlanan bu çalışmada, matematik iterasyonların yapılması için Gear üretici-düzenleyici (predictor-corrector) algoritmaları tercih edilmiştir.

2.3.1. Gear üretici-düzenleyici algoritması

Gelecek adımlar için konumları ve hızları tahmin etme, üretici-düzenleyici algoritmaların temelini oluşturur [38]. Bu algoritmalar çok iyi bilinen algoritmalar [39] ve moleküler dinamikte ilk kez Rahman tarafından kullanılmıştır [40]. Genelde moleküler dinamikte kullanılmış olan bu algoritmalar, Gear tarafından bulunan metotlardan alınmıştır [38].

Hazırlanan bu çalışmada, kuvvetten yola çıkarak hesaplama yapmak yerine parçacıkların t zamanında konumlar ve onların türevlerini içeren beşinci dereceye kadar sürdürülen Taylor serileri kullanıldı.

Gear algoritmasında $t + dt$ zamanında r_i kristalindeki atomların konumları tahmin edildi ve her bir adımda $\dot{r}_i, \ddot{r}_i, r_i^{iii}, r_i^{iV}$ ve r_i^V türevleri hesaplandı. Ayrıca bu türevler t zamanında Taylor genişlemesine uygulanarak $t + dt$ zamanında, $r(t + dt)$ konumları tahmin edildi.

$$\begin{aligned}
r_i(t + dt) &= r_i(t) + \dot{r}_i(t)dt + \ddot{r}_i(t)\frac{(dt)^2}{2!} + \dots + r_i^V(t)\frac{(dt)^5}{5!} \\
\dot{r}_i(t + dt) &= \dot{r}_i(t) + \ddot{r}_i(t)dt + r_i^{iii}(t)\frac{(dt)^2}{2!} + r_i^{iV}(t)\frac{(dt)^3}{3!} + r_i^V(t)\frac{(dt)^4}{4!} \\
\ddot{r}_i(t + dt) &= \ddot{r}_i(t) + r_i^{iii}dt + r_i^{iV}(t)\frac{(dt)^2}{2!} + r_i^V(t)\frac{(dt)^3}{3!} \\
r_i^{iii}(t + dt) &= r_i^{iii}(t) + r_i^{iV}(t)dt + r_i^V(t)\frac{(dt)^2}{2!} \\
r_i^{iV}(t + dt) &= r_i^{iV}(t) + r_i^V(t)dt \\
r_i^V(t + dt) &= r_i^V(t)
\end{aligned} \tag{2.2}$$

Tahmin edilen konumlar kullanılarak $t + dt$ zamanında her bir moleküldeki atomlar arası kuvvet F_i hesaplanabilir. Sürekli potansiyel enerji fonksiyonlar $U(r_{ij})$ için i ve j atomları arası bu hareketlerde her bir moleküldeki kuvvet;

$$F_i = - \sum_{i \neq j} \frac{\partial U(r_{ij})}{\partial r_{ij}} \hat{r}_{ij} \tag{2.3}$$

olarak bulunur. (2.2) formülüne Newton'un üçüncü yasası uygulanırsa;

$$F(r_{ij}) = -F(r_{ij}) \tag{2.4}$$

eşitliği yazılmış olur. Bu durumda ij, ji etkileşmelerinde birinin hesaplanmasında diğerinin ters işaretli değeri alacağından hesaplama süresi yarıya düşürülmüş olur. Böylece her atom için kuvvetler elde edilmiş olur. Taylor serisi yardımıyla $\ddot{r}_i(t + dt)$ ivmeleri Newton'un ikinci kanunu kullanılarak hesaplanabilir. Tahmin edilen ivmeler ve hesaplanmış ivmeler arasındaki fark;

$$d\ddot{r}_i = [\ddot{r}_i(t + dt) - \ddot{r}_i^P(t + dt)] \tag{2.5}$$

$$r_i = r_i^P + \alpha_0 dR^2 \tag{2.6}$$

$$\dot{r}_i dt = \dot{r}_i^P dt + \alpha_1 dR^2 \tag{2.7}$$

$$\frac{\ddot{r}_i(dt)^2}{2!} = \frac{\dot{r}_i^{(p)}(dt)^2}{2!} + \alpha_2 dR2 \quad (2.8)$$

$$\frac{r_i^{(iii)}(dt)^3}{3!} = \frac{r_i^{(iii)P}(dt)^3}{3!} + \alpha_3 dR2 \quad (2.9)$$

$$\frac{r_i^{(iv)}(dt)^4}{4!} = \frac{r_i^{(iv)P}(dt)^4}{4!} + \alpha_4 dR2 \quad (2.10)$$

$$\frac{r_i^{(v)}(dt)^5}{5!} = \frac{r_i^{(v)P}(dt)^5}{5!} + \alpha_5 dR2 \quad (2.11)$$

$$dR2 = \frac{d\ddot{r}_i(dt)^2}{2!} \quad (2.12)$$

olarak bulunur.

Üç, dört ve beşinci dereceden üreticiler için α_i değerleri Tablo 2.1’de verilmiştir [38].

Tablo 2.1 Üretici-düzenleyici algoritmasının α_i değerleri [38]

α_i	$q = 3$	$q = 4$	$q = 5$
α_0	1/6	19/20	3/16
α_1	5/6	3/4	251/360
α_2	1/3	1	1
α_3	-	1/2	11/18
α_4	-	$\frac{1}{12}$	1/6
α_5	-	-	1/60

q . dereceden bir düzeltme için α_i değerleri, $O(dt^{q+1})$ 'e kadar kesme hatasını verecek şekilde seçilmiştir. Böylece metot $O(dt^{q+1-2}) = O(dt^{q-1})$ olarak genel hata kesmesi ile ikinci dereceden diferansiyel denklemleri için sabitleştirilmiş olacaktır.

Hoover [41,42], Haile [38], Allen ve Tildesley [43], Rapaport [7], Evans ve Morris [44] sıvılarda moleküler dinamik simülasyonları için denge ve denge dışı uygulamalarını açıklamışlardır.

2.4. İstatistik Çerçeveler

2.4.1. İzobarik ve İzoentalpik çerçevede moleküler dinamik (HPN çerçeve)

Moleküler dinamik simülasyonlarında, ilk olarak Anderson tarafından hazırlanan çalışmalarla genişletilmiş hamiltoniyel formüller kullanılmaya başlandı. Anderson çalışmasında, sabit dış basınç yöntemine sürekli değişim halindeki hacim değişkenleri ekledi [45].

HPN olarak adlandırılan sabit dış basınç ve sabit entalpi altındaki sistem çerçevesi, sistemin ısıtılması ve dengelenmesi için kullanıldı. HPN çerçevede bulunan veriler kullanılarak TPN çerçevede üretim işlemleri uygulandı ve bunun sonucunda bazı fiziksel ve termodinamik özellikler hesaplandı.

HPN çerçevede hacimdeki değişim, iç ve dış basınç arasındaki farklılıkla ayarlanır. Dış basınç, iç basınçtaki değişimleri dengeye getirir ve HPN çerçeve dışarıdan etki edilen bir piston tarafından kontrol edilir. İç basınç, dış basınçtan büyük olduğu zaman hacim genişler ve iç basıncın düşmesiyle denge basınca gelmiş olur [5,34].

HPN çerçevenin TPN çerçeveden ayıran özelliği, sistem içerisindeki şekil değişikliğini incelemesidir. Çünkü TPN çerçeve şekil değişikliğini incelemeyiz. Bu nedenle ısıtma ve dengeleme işlemleri HPN'de yapılmalıdır. Sabit basınç yöntemi, basınç altında moleküler dinamik birim hücresinde meydana gelen şekil değişikliğini içerecek şekilde Parinello ve Rahman tarafından genişletilmiştir [5,34]. Sistemde meydana gelen bu genişletme sayesinde, hacim değişiklikleriyle birlikte şekil değişiklikleri de hesaplandı. Bu hesaplama sonucu, bir katı için yapı değişikliğinin doğrudan simülasyonu yapılabilir [45].

HPN çerçevede sistem uzayı doldurulması, periyodik olarak tekrar eden bir hücre

içindeki N tane parçacığın oluşturduğu sistem ile oluşur. Fakat bu çerçevede \vec{a} , \vec{b} ve \vec{c} vektörleri farklı uzunluklara ve rastgele yer değiştirmelere sahip olabilirler. Vektörler, $h=(\vec{a}, \vec{b}, \vec{c})$ şeklinde 3×3 'lük bir matris olacak şekilde düzenlenmesiyle,

$$\Omega = \|h\| = a.(bxc) \quad (2.13)$$

denklemi yardımı ile hacim hesaplanabilir. N tane parçacığın yerlerini gösteren $3N$ dinamik değişkenlerinin genel ifadesi, h 'ın dokuz bileşeni ile arttırıldı ve $3N+9$ olarak bir değişken Lagrange denklemi kullanılarak;

$$L = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N m_i \dot{s}_i' G \dot{s}_i - \sum_{i=1}^N \sum_{j>1}^N \Phi(r_{ij}) + \frac{1}{2} WTr[\dot{h}'\dot{h}] - p\Omega \quad (2.14)$$

olarak elde edildi [34]. Burada p sistem üzerine uygulanan basınç, W piston kütlesi ve G metrik tensördür. ($G = hh'$)

Sistem zamana bağlı dış kuvvetlere maruz kalmadığından hamiltonyen;

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{1}{2} m_i v_i^2 + \sum_{i=1}^N \sum_{j>1}^N \Phi(r_{ij}) + \frac{1}{2} WTr[\dot{h}'\dot{h}] + p\Omega \quad (2.15)$$

olarak yazılır ve denge durumunda hamiltoniyenin hareket sabiti olan H entalpiyi verir.

$$H = E + p\Omega \quad (2.16)$$

ve buradan E ;

$$E = \sum_{i=1}^N \frac{1}{2} m_i v_i^2 + \sum_{i=1}^N \sum_{j>1}^N \Phi(r_{ij}) \quad (2.17)$$

şeklinde yazılır ve (2.14) denklemindeki Lagrange HPN dinamiğini tanımlar.

2.4.2. İzobarik ve İzotermal çerçevede moleküler dinamik (TPN çerçeve)

TPN çerçeve, üretim basamaklarını gerçekleştirmek için Nosé tarafından moleküler dinamiğe katılmıştır. Nosé, Anderson'un TPN çerçevedeki moleküler dinamik yöntemini genişletmiş ve fiziksel sisteme sabit sıcaklıkla ilişkili bir serbestlik derecesi eklemiştir [46,47]. Bu serbestlik ısı kaynağıdır.

TPN çerçeve ısı kaynağı ile temas halinde olduğundan, dış kaynak sistemdeki basıncın ve sıcaklığın sabit kalmasını sağlar. Hareketli piston kullanılarak sistemin hacmi düzenlenir.

TPN çerçevede (q_i, p_i, s, V, t') sanal değişkenleri $V^{1/3}$ ve s ile bağlantılı olarak;

$$q'_i = V^{1/3} q_i \quad (2.18)$$

$$p'_i = \frac{p_i}{V^{1/3} s} \quad (2.19)$$

$$t' = \int_0^t \frac{dt}{s} \quad (2.20)$$

$(\dot{q}'_i, \dot{p}'_i, \dot{s}, V, t')$ gerçek değişkenleriyle ilişkilendirilmiştir [47]. Burada s , dış sisteme etki eden serbestlik derecesidir. q_i bileşenleri 0-1 aralığında sınırlandırılmıştır. Genişletilmiş sistemin hamiltonyeni;

$$H = \sum_i \frac{p_i^2}{2m_i V^{2/3} s^2} + \Phi \left(V^{1/3} q \right) + \frac{p_s^2}{2Q} + gkT \ln s + \frac{p_v^2}{2W} + P_{ex} \quad (2.21)$$

olarak verilir [47]. Burada p_v , V 'nin eşlenik momentumu, W hacim hareketi için bir kütle ve p_{ex} dış basınçtır. $g=3N+1$ 'li sanal zaman için denge dağılım fonksiyonu;

$$\rho(p', q', V) = \exp[-(H_0(p', q') + P_{ex}V)/kT] \quad (2.22)$$

olarak gösterilir. p' , q' ve V izlerinden hesaplanan herhangi bir fonksiyonun ortalaması bunların TPN çerçevesindeki halleriyle özdeşdir.

$$\begin{aligned}
\lim_{t_0 \rightarrow \infty} \frac{1}{t_0} \int_0^{t_0} F\left(\frac{p}{V^{1/3}}, V^{1/3}q, V\right) dt &= \left\langle \left(\frac{p}{V^{1/3}}, V^{1/3}q, V\right) \right\rangle \\
&= \langle F(p', q', V) \rangle \\
&= F_{TPN}(N, P_{ex}, T)
\end{aligned} \tag{2.23}$$

TPN'deki büyüklükler günlük hayatta kullanılan makro boyuttur. Bu açıdan TPN, günlük hayat için en uygun istatistik mekanik çerçevedir.

HPN'den ısıtma ve dengeleme işlemleri sonucunda elde edilen veriler ile TPN çerçevedeki üretim işlemleri sonucunda bazı fiziksel özellikler hesaplanabilir.

Çalışmamızda, TPN çerçeve 20000 adımda gerçekleştirildi. Elde edilen veriler ile alaşımların ve saf metallerin erime noktaları, örgü parametreleri, yoğunluk ve entalpi değerleri hesaplanmıştır.

2.4.3. Mikrokanonik çerçeve (EVN çerçeve)

EVN çerçeve olarak isimlendirilen mikrokanonik çerçevede, toplam enerji, hacim ve atom sayısı sabit kabul edilmiştir. Mikrokanonik çerçeve, yalıtılmış sistem içerisinde moleküler izlerin analizinde kullanıldı. EVN çerçeve mikro boyutta çalışarak atomik boyutta ve enerjiye dayalı sonuçlar verir.

Termodinamik durumun sabitlenmesi için mikrokanonik çerçeve ortalaması;

$$\langle F \rangle = \frac{1}{h^{3N} N! W} \int d_T^N d_p^N F(r^N, p^N) \delta[E - H] \tag{2.24}$$

olarak yazılır [48].

Hazırlanan bu çalışmada, N toplam atom sayısı, V hacmindeki E toplam enerjili izole bir sistem ele alındı. Sürekli bir yalıtım halinde tutulan sistemde hacim ve parçacık sayısı sabit olarak ayarlandı. EVN çerçevede ısıtma, dengeleme ve üretim işlemleri (run) uygulanmıştır. Sistemde, malzemeler ısıtma işlemi sırasında 100K'lik farklarla erime noktalarına kadar ısıtılmıştır. 5000 adımda tüm atomların aynı sıcaklık değerine ulaşması ve sistemin dengeye varması için beklenmiştir. 50000 adımlık üretim

işleminde sistemin tam olarak dengeye ulaşması amaçlanmıştır. Aynı zamanda EVN çerçevesinde elastik sabitler ve hacim modelleri gibi mikrokronik özellikler hesaplanmıştır.

2.5. Periyodik Sınır Şartları, Kesme Yarıçapı ve Minimum Görüntü Yöntemi

MD simülasyonda yaygın olarak kullanılan örnekler $N= 32, 108, 256, 500, 864$ tane atom içerir [49]. Bu çalışmada 1372 atom kullanılmıştır. Bu sayı normal madde boyutu ile karşılaştırıldığında çok küçüktür. Yüzey atomlarının etkisi hacim atomlarına kıyasla çok fazla olacağından gerçek bir sisteme benzetebilmek için bu etkileri en aza indirmek gerekir. Bu işlem için periyodik sınır şartları kullanılır.

Periyodik sınır şartları ile N atomlu ve hücre şeklinin seçiminin merkezi hücredeki atomlara uygun şekilde ayarlanmasıyla fiziksel sisteme uygun bir örgü oluşturulmuş olur. Pd, Ni ve Au yüzey merkezli (fcc) kübik yapıda kristalleşir ve $V = 4n^3$ değeri olan kübik hücre kullanılır. Burada n bir tamsayıdır.

Sistem ikili etkileşimlerin toplamı olarak düşünüldüğünde, bu ikili etkileşimler özel olarak hesaplanır, ancak aralarında birçok etkileşme vardır. Bu nedenle başlangıç olarak bir atom belirlenmeli ve bu atomu çevreleyen i tane atomun bu atomla olan etkileşimleri hesaplanmalıdır. Yani ikinci atom ve takibindeki $(N - 1)$ atom içinde aynı işlem yapılacak ve bu işlemler çok sayıda hesaplama gerektirecektir. Bu nedenle bir kısa mesafe potansiyel fonksiyonuna uygun yaklaşımlar yapılarak toplam işlem yapılandırılmalıdır. Çünkü bu etkileşme bölgesini temel simülasyon kutusu içinde düşündüğümüzde merkezde bulunan bir atom diğer atomlarla etkileşeceğinden, bu etkileşme $(N - 1)$ tane atomdan en yakın olanları ile sınırlandırılmalıdır. Bunun sonucunda etkileşme bölgesi temel simülasyon kutusunun sınırları doğrultusunda genişletilir. Bu sayede etkileşim bölgesinin kenarlarında bulunan diğer kutularda hesaba katılmış olur. Buna minimum 'görüntü kuralı' denir.

Minimum görüntü kuralında, çift katlı etkileşmelerden kaynaklanan potansiyel enerji hesaplaması $\frac{1}{2}N(N - 1)$ tane terim içerir. Bu durum 1372 parçacıklı bir sistem için çok sayıda hesap gerektirir.

Diğer yöntem ise, kesme yarıçap kullanmaktır. R_c olarak gösterilen kesme yarıçapı kullanıldığında, i . parçacığın etrafında toplanmış R_c yarıçaplı kürenin içindeki komşular bu parçacık üzerine etki eden kuvvete katkı sağlar.

Kesme yarıçapı $R_c < L/2$ şartını sağlamalıdır. Burada L , L_x , L_y ve L_z 'nin boyutlarının en küçüğü ile aynı boydadır. Kesme yarıçapı içindeki parçacıkların sayılarının hesaplanması için i . parçacıkla etkileşen her bir parçacık simülasyon içinde olması gereklidir. Böylece özdeş etkileşmeler bir kere hesaplanır ve hesap sayısı azaltılır.

BÖLÜM 3. ETKİLEŞİM POTANSİYELLERİ

3.1. Sutton –Chen Potansiyeli

Günümüzde gömülmüş atom yöntemlerinden en yaygın olarak kullanılan çeşitlerinden biri Finnis ve Sinclair potansiyel yöntemidir. Bu yöntemde, yarı ampirik yaklaşıma göre sıkı bağ teorisinde ikinci moment yaklaşımı kullanılır. Elde edilen sonuçlar üzerine kurulu gömme enerji fonksiyonu;

$$G_i(\bar{\rho}_i) = -c \sqrt{\bar{\rho}_i} \quad (3.1)$$

şeklindedir [27]. Formüldeki $\bar{\rho}_i$, i atom civarındaki yerel yük yoğunluğu, c , kristal özelliklerden elde edilen boyutsuz bir sabittir. i atomunu çevreleyen komşu atomların atomik yük yoğunluklarının i noktasındaki toplamı;

$$\bar{\rho}_i = \sum_{j \neq i} \rho(r_{ij}) \quad (3.2)$$

olarak gösterilir. EAM yaklaşımı için, iki cisim etkileşmesini temsil eden potansiyel enerji fonksiyonu (PEF) $\Phi(r_{ij})$ ve yük yoğunluğu fonksiyonu $\rho(r_{ij})$ olmak üzere nükleer koordinatlara bağlı iki fonksiyon tanımlanması gereklidir.

Sutton ve Chen, uzun mesafe Finnis-Sinclair potansiyellerinde bilgisayar simülasyon sonuçlarını elde etmek için çalıştılar ve atomlar arasındaki mekaniksel etkileşmeleri modellediler. Pethica ve Sutton, atom kümeleri arasındaki etkileşimleri modellemek için Lennard-Jones potansiyelini kullandılar. Materyal tabakaları bir araya getirildiğinde mekanik dengesizlik oluştuğu sonucuna vardılar. Böylece potansiyelin mesafesine kritik olarak bağlı etkileşmeleri keşfettiler [50]. Sutton ve Chen, Finnis-Sinclair potansiyeli ile bir uzun mesafe etkileşmesini geliştirdiler [28]. SC modeli ile belirlenen bir kristaldeki toplam enerji;

$$E_T = \epsilon \sum_i^N \left[\frac{1}{2} \sum_{j \neq i}^N \left(\frac{a_0}{r_{ij}} \right)^n - c \sqrt{\bar{\rho}_i} \right] \quad (3.3)$$

olarak hesaplanır ve yerel yük yoğunluğu;

$$\bar{\rho}_i = \sum_{j \neq i}^N \left(\frac{a_0}{r_{ij}} \right)^m \quad (3.4)$$

ile ifade edilir. Burada ϵ , enerji boyutunda bir parametre, r_{ij} , i ve j atomları arasındaki mesafe, a_0 , kristal için örgü sabiti, c , boyutsuz bir sayı, n ve m sayıları ($n > m$) da elastik kararlılık sağlayan birer tam sayılardır.

(3.3) formülünden hareketle ikili bir alaşım için a ve b atomlarından oluşan bir sistemde toplam potansiyel enerji;

$$E_T = \sum_{i^A} G^A(\bar{\rho}_i) + \frac{1}{2} \sum_{i^A j^B} \Phi^{AA}(r_{ij}) + \frac{1}{2} \sum_{i^A j^B} \Phi^{AB}(r_{ij}) + \sum_{i^B} G^B(\bar{\rho}_i) + \frac{1}{2} \sum_{i^B j^B} \Phi^{BB}(r_{ij}) + \frac{1}{2} \sum_{i^B j^A} \Phi^{BA}(r_{ij}) \quad (3.5)$$

olacak şekilde yeniden düzenlendi [51]. Böylece (3.1)-(3.5) arasında alaşımlar için birleştirme kuralları uygulanmıştır. Burada i^A ve i^B sırasıyla A ve B türünden atomlar üzerinden toplamı ifade eder.

Yapılan bu çalışmada üçlü alaşımlarda incelendiği için (3.5) ifadesi A , B ve C atomlarından oluşan üçlü bir alaşım için yeniden düzenlendi. G^A ve G^B 'li terimlere ek olarak G^C teriminin de eklenmesiyle ikili etkileşim terimlerine CC , CA , AC , BC ve CB tipinde beş tane daha etkileşim terimleri eklendi ve üçlü bir alaşım için enerjiyi verecek formül yeniden düzenlendi.

$$E_T = \sum_{i^A} G^A(\bar{\rho}_i) + \frac{1}{2} \sum_{i^A j^B} \Phi^{AA}(r_{ij}) + \frac{1}{2} \sum_{i^A j^B} \Phi^{AB}(r_{ij}) + \sum_{i^B} G^B(\bar{\rho}_i) + \frac{1}{2} \sum_{i^B j^B} \Phi^{BB}(r_{ij}) + \frac{1}{2} \sum_{i^B j^A} \Phi^{BA}(r_{ij}) + \frac{1}{2} \sum_{i^B j^C} \Phi^{AC}(r_{ij}) + \frac{1}{2} \sum_{i^C j^B} \Phi^{CA}(r_{ij}) + \frac{1}{2} \sum_{i^C j^C} \Phi^{CC}(r_{ij}) + \frac{1}{2} \sum_{i^B j^C} \Phi^{BC}(r_{ij}) + \frac{1}{2} \sum_{i^C j^B} \Phi^{CB}(r_{ij}) + \sum_{i^C} G^C(\bar{\rho}_i) \quad (3.6)$$

Düzenlenen bu yeni formül farklı atomlardan oluşan üçlü alaşım için toplam enerji değerini verecektir.

Gömülmüş atom yönteminde (EAM), tek atomlu sistem ile alaşım sistemlerinde kullanılan gömme fonksiyonları aynı değere sahip olduğundan (3.1) ve (3.4) denklemleri dikkate alınarak;

$$\rho^Y(r) = \left(\frac{a^Y}{r}\right) m^Y \quad (3.7)$$

formülü yardımıyla ρ yük yoğunluğu ikili ve üçlü alaşımlar için bulunabilir. (3.7) formülündeki Y yerine ikili alaşımlar için; AA, BB ve AB ayrı ayrı yazıldığında;

$$\rho^{AA}(r) = \left(\frac{a^{AA}}{r}\right) m^{AA}$$

$$\rho^{BB}(r) = \left(\frac{a^{BB}}{r}\right) m^{BB}$$

$$\rho^{AB}(r) = \left(\frac{a^{AB}}{r}\right) m^{AB} \quad (3.8)$$

olarak üç ayrı yük yoğunluğu hesaplanabilir. (3.7) formülü yardımıyla üçlü alaşımlar için etkileşime bağlı olarak Y değeri yerine ikili alaşımlardaki terimlere ek olarak CC, AC ve BC terimleri eklenmesiyle;

$$\rho^{AC}(r) = \left(\frac{a^{AC}}{r}\right) m^{AC}$$

$$\rho^{BC}(r) = \left(\frac{a^{BC}}{r}\right) m^{BC}$$

$$\rho^{CC}(r) = \left(\frac{a^{CC}}{r}\right) m^{CC} \quad (3.9)$$

formülleri ile üçlü alaşımlar için de altı ayrı yük yoğunluğu bulunabilir. Bu yöntemi kullanarak Φ ifadesi içinde;

$$\Phi^Y(r) = \varepsilon^Y \left(\frac{a^Y}{r}\right)^{n^Y} \quad (3.10)$$

formülü olarak yazılabilir. (3.10) formülündeki Y yerine aynı şekilde ikili alaşımlar için AA, BB ve AB ayrı ayrı yazılarak etkileşim potansiyelleri;

$$\begin{aligned} \Phi^{AA}(r) &= \varepsilon^{AA} \left(\frac{a^{AA}}{r}\right)^{n^{AA}} \\ \Phi^{BB}(r) &= \varepsilon^{BB} \left(\frac{a^{BB}}{r}\right)^{n^{BB}} \\ \Phi^{AB}(r) &= \varepsilon^{AB} \left(\frac{a^{AB}}{r}\right)^{n^{AB}} \end{aligned} \quad (3.11)$$

şeklinde hesaplanabilir [53]. Aynı şekilde Y yerine AC, BC ve CC eklenerek üçlü alaşımlar için;

$$\begin{aligned} \Phi^{AC}(r) &= \varepsilon^{AC} \left(\frac{a^{AC}}{r}\right)^{n^{AC}} \\ \Phi^{BC}(r) &= \varepsilon^{BC} \left(\frac{a^{BC}}{r}\right)^{n^{BC}} \\ \Phi^{CC}(r) &= \varepsilon^{CC} \left(\frac{a^{CC}}{r}\right)^{n^{CC}} \end{aligned} \quad (3.12)$$

formülleri ile etkileşim potansiyelleri hesaplanabilir. Bununla beraber alaşım sistemlerinde aynı tür atomlar arasındaki etkileşimler, tek atomlu sistemler ile aynı olduğundan, sırayla ε^{AA} , c^{AA} , a^{AA} , m^{AA} ve n^{AA} parametreleri saf bir A metalinin ε , c , a , m ve n parametrelerine eşit olur. Aynı şekilde ε^{BB} , c^{BB} , a^{BB} , m^{BB} ve n^{BB} parametreleri saf bir B elementinin ε , c , a , m ve n parametrelerine eşittir [53].

Farklı tür atomlar arasındaki ikili etkileşimler için;

$$\Phi^{AB} = \sqrt{\Phi^{AA}, \Phi^{BB}} \quad (3.13)$$

ve,

$$\rho^{AB} = \sqrt{\rho^{AA}, \rho^{BB}} \quad (3.14)$$

formüllerini yazabiliriz. Bu fonksiyonları kullanarak ε^{AA} , c^{AA} , a^{AA} , m^{AA} ve n^{AA} parametreleri,

$$\begin{aligned} m^{AB} &= \frac{1}{2}(m^{AA} + m^{BB}) \\ n^{AB} &= \frac{1}{2}(n^{AA} + n^{BB}) \\ a^{AB} &= \sqrt{a^{AA}, a^{BB}} \\ \varepsilon^{AB} &= \sqrt{\varepsilon^{AA}, \varepsilon^{BB}} \end{aligned} \quad (3.15)$$

olarak hesaplanır [51,52]. Bu eşitlikler yukarıdaki işlemlerde olduğu gibi üçlü alaşımlara uygulanarak kullanılmıştır.

3.2. Quantum Sutton-Chen Parametrizasyonu

Sutton-Chen deneysel çok parçacık kuvvet alanları (FF) , Kimura ve arkadaşları tarafından fcc metaller için, yoğunluk, fonon frekansı, bağlanma enerjisi ve bulk modülü gibi deneysel özellikler 0K'de fit edildi ve Quantum Sutton-Chen parametrizasyonu (Q-SC) olarak adlandırıldı [23,54].

Sutton-Chen potansiyeli yalnızca deneysel örgü parametresine, bağlanma enerjisine ve hacim modülüne bağlıdır [55]. Kimura ve arkadaşları, Sutton-Chen potansiyeli ile iyi açıklanmayan yüzeyler, ara yüzeyler ve örgü kusurları üzerinde çalıştılar ve kuantum düzeltmeleri yapabilmek için 0 nokta enerjisini hesaplamalara eklediler.

Potansiyel hesaplanırken, X noktasındaki fonon frekansı, boşluk oluşturma enerjisi ve yüzey enerjileri hesaba katılmıştır. Ayrıca kristalin sıcaklığa bağlı değişimleri daha doğru bir şekilde tayin edilmiştir [23,54].

Sutton ve Chen, ilk önce hacimlerle sonra elastik sabitlerle en yakın uyumu veren

integral güç indisleri olan m ve n terimlerinin değerlerini altıdan daha büyük olarak sınırladılar.

EAM yaklaşımında saf metal simülasyonları için Quantum Sutton Chen (Q-SC) potansiyel parametreleri kullanılmıştır.

Kimura ve arkadaşları (3.3) denkleminde verilen Sutton-Chen ϵ , c , n ve m parametreleri için yeni değerler ürettiler ve n , m değerleri için;

$$n = \sqrt[3]{\left(\frac{\Omega B}{E_{coh}}\right) \left(\frac{B}{2P_c} + 1\right)} \quad (3.16)$$

$$m = \sqrt[6]{\frac{\left(\frac{\Omega B}{E_{coh}}\right)}{\left(\frac{B}{2P_c} + 1\right)}} \quad (3.17)$$

formüllerini buldular. Burada Ω atom başına hacimdir.

Kimura ve arkadaşları, Sutton-Chen potansiyelin ϵ, c, n ve m parametrelerini belirlemek için aşağıdaki işlemleri uygulamışlardır;

i. a, 0K'de deneysel örgü parametresinden alındı. (Sutton ve Chen oda sıcaklığında deneysel a parametresini kullandılar). c parametresi;

$$E_T = E_{coh} \quad (3.18)$$

olacak şekilde seçildi ve sıfır basınç denge şartı denkleminde tanımlandı. Burada, E_{coh} 0K'de deneysel kohesiv enerjidir.

ii. 0K'de elastik sabitleri (C_{11} , C_{12} , C_{44}) ve B hacim modülü deneysel değerlere fit edildi ve bu terimler;

$$B = \frac{\epsilon}{18\Omega} \sum_i^N \left\{ \sum_i (V_{ij}'' - V_{ij}') - \frac{c}{\rho_i^{1/2}} \left[\sum_{j \neq i} (\Phi_{ij}'' - \Phi_{ij}') - \frac{1}{2\rho_i} (\sum_{j \neq i} \Phi_{ij}')^2 \right] \right\} \quad (3.19)$$

$$C_{11} = \frac{\varepsilon}{2\Omega} \sum_i^N \left\{ \sum_{j \neq i} \frac{x_{ij}^4}{r_{ij}^4} (V_{ij}'' - V_{ij}') - \frac{c}{\rho_{ij}^2} \left[\sum_{j \neq i} \frac{x_{ij}^4}{r_{ij}^4} (\Phi_{ij}'' - \Phi_{ij}') - \frac{1}{2\rho_i} \left(\sum_{j \neq i} \frac{x_{ij}^2}{r_{ij}^2} \Phi_{ij}' \right)^2 \right] \right\} \quad (3.20)$$

$$C_{12} =$$

$$\frac{\varepsilon}{2\Omega} \sum_i^N \left\{ \sum_{j \neq i} \frac{x_{ij}^2 y_{ij}^2}{r_{ij}^2 r_{ij}^2} (V_{ij}'' - V_{ij}') - \frac{c}{\rho_{ij}^2} \left[\sum_{j \neq i} \frac{x_{ij}^2 y_{ij}^2}{r_{ij}^2 r_{ij}^2} (\Phi_{ij}'' - \Phi_{ij}') - \frac{1}{2\rho_i} \left(\sum_{j \neq i} \frac{x_{ij}^2}{r_{ij}^2} \Phi_{ij}' \right) \left(\sum_{j \neq i} \frac{y_{ij}^2}{r_{ij}^2} \Phi_{ij}' \right) \right] \right\} \quad (3.21)$$

$$C_{44} =$$

$$\frac{\varepsilon}{2\Omega} \sum_i^N \left\{ \sum_{j \neq i} \frac{y_{ij}^2 z_{ij}^2}{r_{ij}^2 r_{ij}^2} (V_{ij}'' - V_{ij}') - \frac{c}{\rho_{ij}^2} \left[\sum_{j \neq i} \frac{y_{ij}^2 z_{ij}^2}{r_{ij}^2 r_{ij}^2} (\Phi_{ij}'' - \Phi_{ij}') - \frac{1}{2\rho_i} \left(\sum_{j \neq i} \frac{y_{ij} z_{ij}}{r_{ij}^2} \Phi_{ij}'' \right) \left(\sum_{j \neq i} \frac{y_{ij} z_{ij}}{r_{ij}^2} \Phi_{ij}' \right) \right] \right\} \quad (3.22)$$

olarak hesaplandı [23].

iii. K -uzayında, brilloun bölgesinin X noktasındaki (W_x^T, W_x^L) fonon frekansları, fonon dağılım eğrilerini hesaplamak için genel olarak oda sıcaklığında deneysel örgü aralığı kullanılarak fit edildi.

iv. i ve iii adımları n, m 'in geniş bir aralığı için uygulanmış ve farklı n, m kümeleri deney ve hesaplamalar arasında iyi uyuma olacak şekilde belirlendi.

v. Bir önceki adımdan her bir aday kümesi c, ε, n, m için boşluk oluşturma enerjisi, yüzey enerjisi ve hal denklemi elde edilir. Bu özelliklerle en iyi uyuşan sonuç parametrelerini seçildi.

vi. a parametresi, $0K$ 'deki deneysel örgü parametresi olarak tutulur.

vii. $0K$ 'de örgü parametreleri için fonon modları hesaplandı, toplam 0 noktası enerjisi, brillouin bölgesi üzerinden toplama yaparak elde edildi, c ve ε parametreleri en iyi duruma getirildiğinde kuvvet ve kohesif enerji arasındaki bağıntı;

$$F_{0K} = -E_{coh} \quad (3.23)$$

olarak yazılır. Quantum sıfır basınç denge koşuluyla aynı zamanda;

$$P_0 + P_{vib} = 0 \quad (3.24)$$

ve;

$$P_0 + P_{vib} = -\frac{\varepsilon}{6\Omega} \sum_i \left(\sum_{j \neq i} V_{ij}^g - c \frac{1}{\rho_i^{1/2}} \sum_{j \neq i} \Phi_{ij}^g \right) - \frac{\partial F_{vib}}{\partial \Omega} \quad (3.25)$$

olarak formülize edildi.

viii. Oda sıcaklığı örgü parametresini kullanarak fonon dağılım eğrileri hesaplandı. Sıcaklığın bir fonksiyonu olarak entropi, entalpi, özgül ısı ve serbest enerji her bir sıcaklıkta denge örgü parametresi kullanılarak hesaplandı. iii. adımdaki gibi deneysel verilerle karşılaştırıldı.

ix. Fiziksel özelliklerden boşluk oluşturma enerjisi, yüzey enerjisi, hal denklemi, ısı genleşme ve öz ısı sıcaklığı bir önceki adımdaki fonon düzeltmeleri kullanarak hesaplandı.

x. Özellikleri veren en iyi parametre kümesi seçildi.

Tablo 3.1'de Pd, Au ve Ag için Q-SC parametreleri verilmiştir. Burada n, m üst parametreleri tamsayı değerleri alırlar. ε enerji boyutunda bir parametre, a örgü sabiti ve c ise boyutsuz bir parametredir.

Tablo 3.1. Pd, Ni, Au için Q-SC parametrelerin değerleri [5, 45, 54,55,56]

Metal	n	m	$\varepsilon(eV)$	c	a (Å)
Pd	12	6	3.2864e-3	148.205	3.8813
Ni	10	5	7.3767e-2	84.745	3.5157
Au	11	8	7.8052e-2	53.581	4.065

3.3. Simülasyon Detayları

Hazırlanan bu çalışmada, 1372 atomluk fcc ideal örgüdeki sistemler incelenmiştir. Bu nedenle simülasyon kutusu sınırları en yakın 7. atoma genişletilmiştir. 1372 atomluk sistem, moleküler dinamik yöntem için en uygun sistemlerden biridir. Başarılı sonuçlar verdiği için birçok çalışmada 1372 atomluk sistemler kullanılmıştır.

HPN (sabit entalpi, sabit basınç) çerçevede run'lar sistem 0.1K' den başlanarak 100K farklarla malzemeler erime noktalarına kadar ısıtıldı. Her 100K ısıtma sonunda 2000 adımlık dengeleme yapıldı ve sistem dengeye gelebilmesi için bekletildi. Yani sıcaklık sabit tutularak 2000 adımlık istatistik yapıldı. HPN çerçevedeki denge işleminden sonra TPN (sabit sıcaklık, sabit basınç) çerçeve kullanıldı ve 20000 adımlık üretim simülasyonları yapıldı. Buradan elde edilen verilerle malzemelerin yoğunluk, entalpi, erime noktası ve örgü parametreleri hesaplandı. Bundan sonraki aşamada EVN (sabit enerji, sabit hacim) çerçeve kullanıldı ve sistemin basınca bağlı fiziksel özellikleri hesaplandı. EVN çerçevede malzemelerin hacim modülleri ve elastik sabitleri hesaplandı. Bunun için TPN çerçevede hesaplanan hacim temel alınarak 100K'lik ısıtmalar ve ardından 5000 adımlık dengelemeler yapıldı. Denge runları ardından 50000 adımlık (100ps süreli) üretim runları atıldı.

Matematik hesaplamalarda beşinci dereceden Taylor serisi, Gear üretici-düzenleyici algoritma içerisinde $\Delta t = 0.002 \text{ ps}$ 'lik aralıklarla kullanıldı.

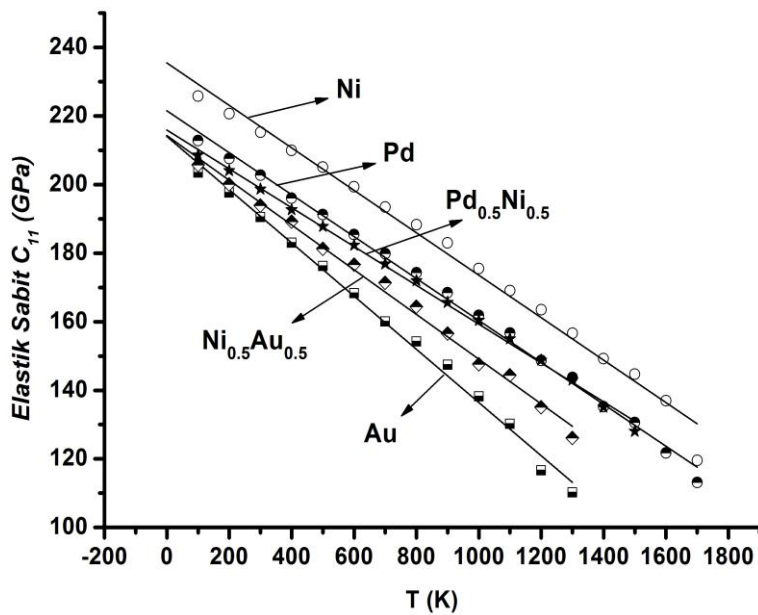
BÖLÜM 4. SONUÇLAR VE DEĞERLENDİRMELER

4.1. Elastik Sabitler

4.1.1. Sıcaklığa göre elastik sabitlerin analizi

Malzemelerin elastik sabitlerinin bilinmesi, malzemeler hakkında birçok mikrokronik özellikleri belirlenmesine olanak sağlar. Bunlardan en önemlileri katı malzemelerin sertlikleri ve kırılmalıkları ile ilgili bilgiler vermesidir. Ayrıca C_{ij} elastik sabitlerinin bilinmesi, yoğunluğunda hesaba katılmasıyla madde içindeki sesin dağılma hızının bulunmasını sağlar.

Pd, Ni, Au saf metalleri ve diğer yedi alaşım için hesaplanan C_{11} ve C_{12} elastik sabitleri grafiklerle ve bu malzemelerin fit parametreleri tablolar halinde gösterilmiştir.

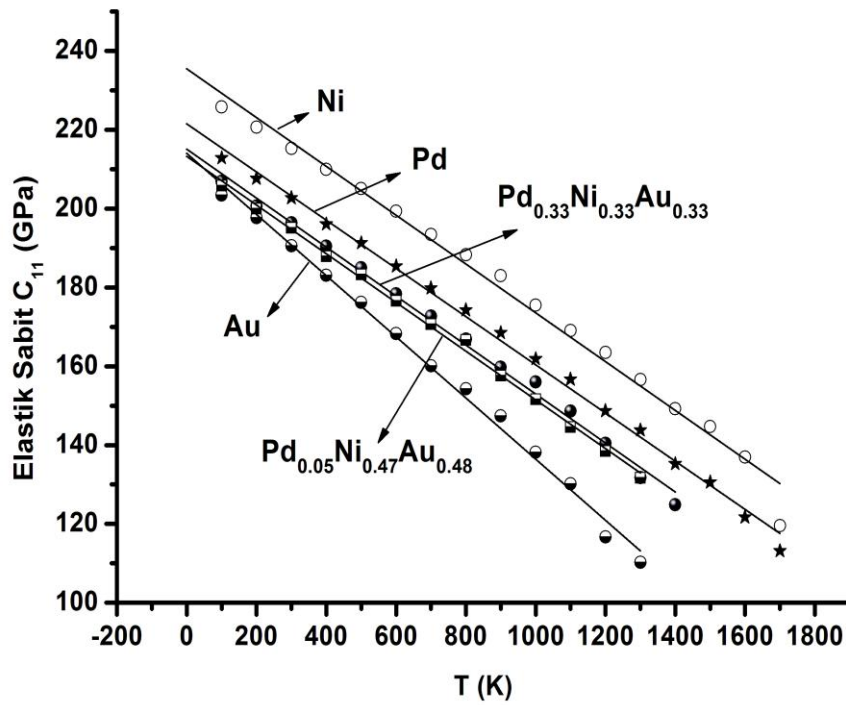


Şekil 4.1. Pd, Ni, Au, $Pd_{0.5}Ni_{0.5}$ ve $Ni_{0.5}Au_{0.5}$ için bulunan C_{11} değerleri ve fit parametreleri

Şekil 4.1’de Pd, Ni, Au metalleri ve $Pd_{0.5}Ni_{0.5}$ ve $Ni_{0.5}Au_{0.5}$ alaşımları için C_{11} elastik sabitleri verilmiştir. Böylece paladyum eklenmemiş durumda $Ni_{0.5}Au_{0.5}$ süper alaşımının ve $Pd_{0.5}Ni_{0.5}$ yüksek elastik sabitli metal alaşımının C_{11} elastik sabitleri ile saf metallerin elastik sabitleri karşılaştırılmıştır. Ni, en yüksek C_{11} elastik sabit değerine, Au ise en düşük değere sahiptir.

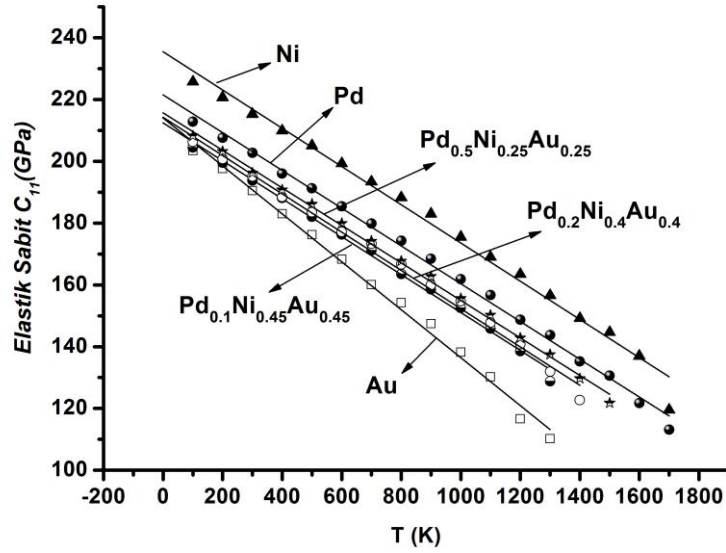
Grafikte göze çarpan durum, $Pd_{0.5}Ni_{0.5}$ alaşımının C_{11} değerlerinin kendini oluşturan metallere göre daha düşük olmasıdır. Benzer olarak $Ni_{0.5}Au_{0.5}$ alaşımının C_{11} değerlerinin Ni ile Au değerleri arasında orta noktalarda bir yerde olması beklenirken Au metaline daha yakın olduğu görülmüştür.

Şekil 4.2 ve Şekil 4.3’e bakıldığında en yüksek C_{11} elastik sabite sahip olan malzemenin Ni saf metali olduğu görülmüştür. Au saf metalinin ise en düşük C_{11} elastik sabitine sahip olduğu ve oda sıcaklığına yaklaştıkça elastik sabitinin hızlı bir şekilde azaldığı gözlenmiştir. Bu nedenle Ni metalinin diğer saf metaller olan Pd ve Au’ya göre daha elastik bir malzeme olduğu görülür.



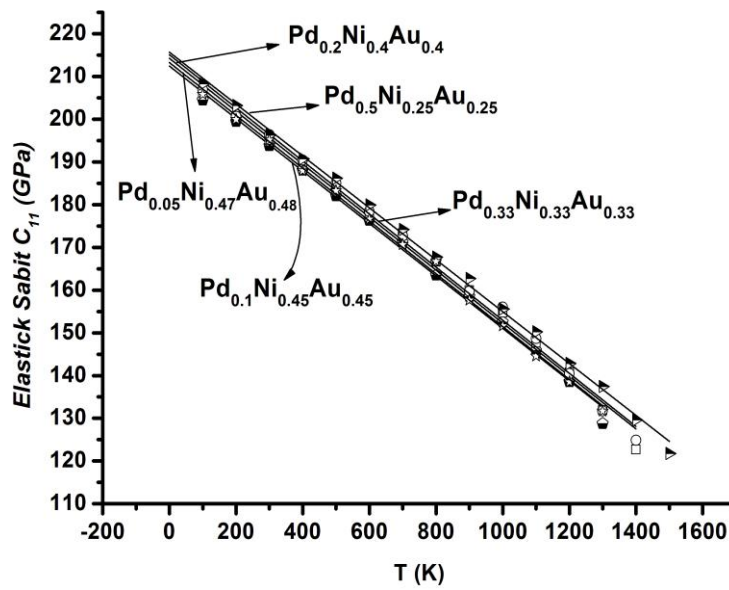
Şekil 4.2. Pd, Ni, Au, $Pd_{0.05}Ni_{0.47}Au_{0.48}$ ve $Pd_{0.33}Ni_{0.33}Au_{0.33}$ için bulunan C_{11} değerleri ve fit parametreleri grafiği.

Şekil 4.2’de $\text{Pd}_{0.05}\text{Ni}_{0.47}\text{Au}_{0.48}$ ’nin yüksek Ni konsantrasyonuna ve dolayısıyla yüksek C_{11} elastiklik katsayısına sahip olmasına rağmen $\text{Pd}_{0.33}\text{Ni}_{0.33}\text{Au}_{0.33}$ ’a kıyasla Au konsantrasyonu daha yüksek olduğu için daha yumuşak yapıda olduğu görülmektedir.



Şekil 4.3. Pd, Ni, Au, $\text{Pd}_{0.1}\text{Ni}_{0.45}\text{Au}_{0.45}$, $\text{Pd}_{0.2}\text{Ni}_{0.4}\text{Au}_{0.4}$ ve $\text{Pd}_{0.5}\text{Ni}_{0.25}\text{Au}_{0.25}$ için bulunan C_{11} değerleri ve fit parametreleri grafiği.

Şekil 4.3’de yükselen Pd konsantrasyonu $\text{Pd}_{0.1}\text{Ni}_{0.45}\text{Au}_{0.45}$, $\text{Pd}_{0.2}\text{Ni}_{0.4}\text{Au}_{0.4}$, $\text{Pd}_{0.5}\text{Ni}_{0.25}\text{Au}_{0.25}$ alaşımlarında C_{11} elastiklik katsayısını artırmıştır.

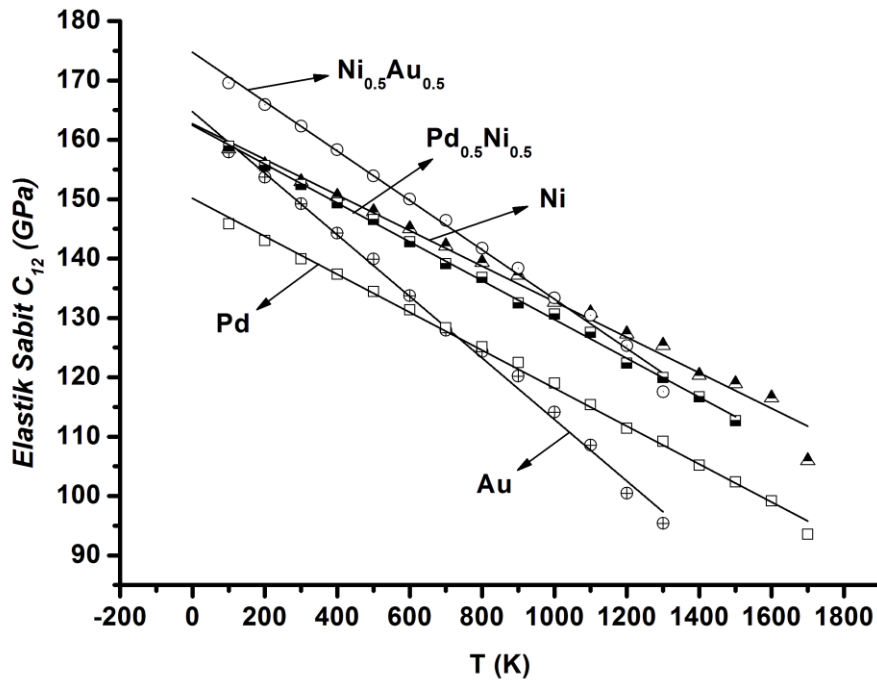


Şekil 4.4. $\text{Pd}_{0.05}\text{Ni}_{0.47}\text{Au}_{0.48}$, $\text{Pd}_{0.1}\text{Ni}_{0.45}\text{Au}_{0.45}$, $\text{Pd}_{0.2}\text{Ni}_{0.4}\text{Au}_{0.4}$, $\text{Pd}_{0.33}\text{Ni}_{0.33}\text{Au}_{0.33}$, $\text{Pd}_{0.5}\text{Ni}_{0.25}\text{Au}_{0.25}$ için bulunan C_{11} değerleri ve fit parametreleri grafiği.

Şekil 4.4'te ilginç bir durumla karşılaşmıştır. Alaşımlardaki Pd konsantrasyonunun arttırılmasıyla alaşımların sertlik oranlarının azaldığı ancak, Pd'un %5 katkısının bulunduğu alaşımların, Pd'un %10 katkısı olan alaşımdan daha yüksek bir C_{11} elastik sabitine sahip olduğu görülmektedir.

Ayrıca grafiklere bakıldığında Au'nun düşük elastik sabiti nedeniyle en yumuşak malzeme olduğu ve alaşımların Ni-Au aralığında değerler aldığı görülür. Yani bu alaşımlar Ni kadar elastik, Au kadar yumuşak malzemeler olmadığı saptanmıştır.

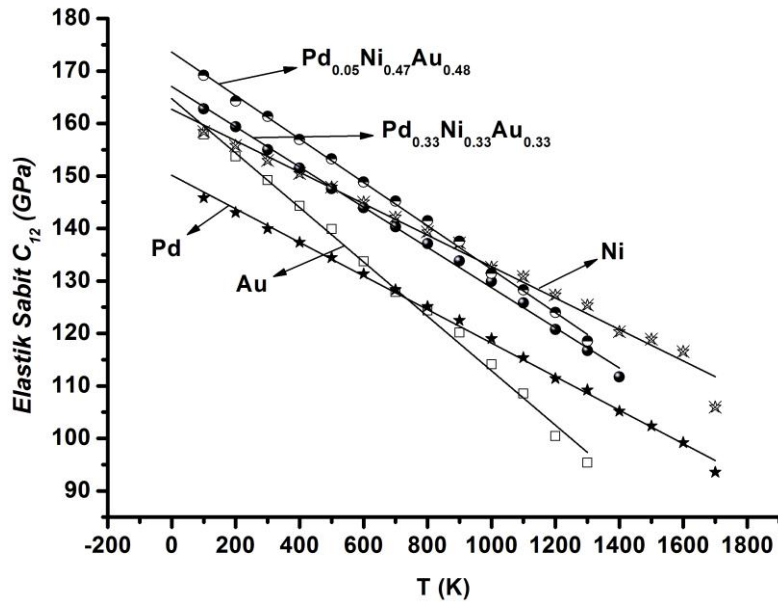
C_{12} değerleri için saf metaller, üçlü ve ikili alaşımlar Şekil 4.5, Şekil 4.6, Şekil 4.7 ve Şekil 4.8'de birbirleri ile karşılaştırılmıştır.



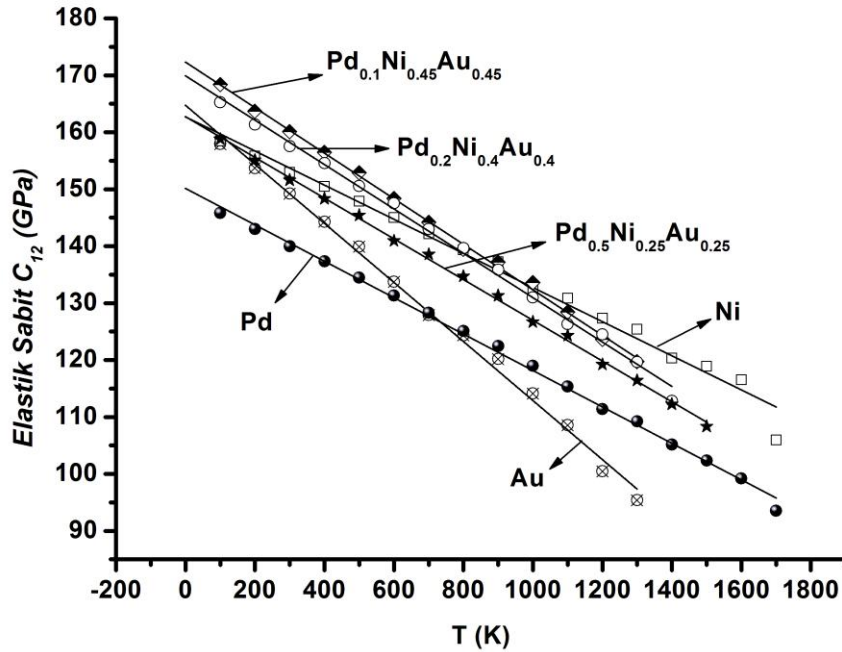
Şekil 4.5. Pd, Ni, Au, $Pd_{0.5}Ni_{0.5}$ ve $Ni_{0.5}Au_{0.5}$ için bulunan C_{12} değerleri ve fit parametreleri grafiği.

Şekil 4.5'te $Ni_{0.5}Au_{0.5}$ alaşımının kendini oluşturan Ni ve Au metallerinden daha yüksek C_{12} elastik sabit değerlerine sahip olduğu görülmüştür. $Pd_{0.5}Ni_{0.5}$ alaşımının C_{12} değeri de beklenenden yüksek çıkarak Ni metalinin değerine yaklaşmıştır.

Şekil 4.6 ve Şekil 4.7'de saf metaller ve üçlü alaşımlar karşılaştırılmıştır.



Şekil 4.6. Pd, Ni, Au, $Pd_{0.05}Ni_{0.47}Au_{0.48}$ ve $Pd_{0.33}Ni_{0.33}Au_{0.33}$ için bulunan C_{12} değerleri ve fit parametreleri grafiği.

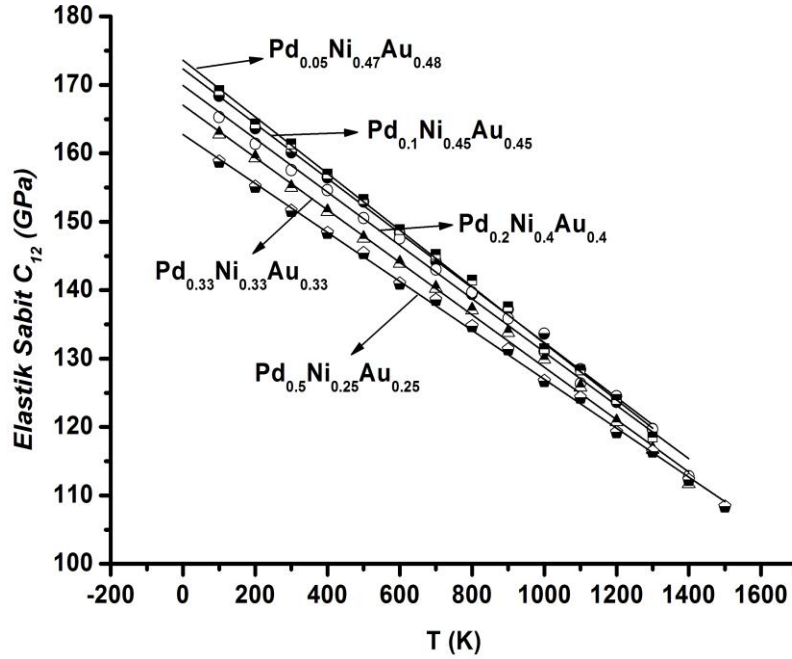


Şekil 4.7. Pd, Ni, Au, $Pd_{0.1}Ni_{0.45}Au_{0.45}$, $Pd_{0.2}Ni_{0.4}Au_{0.4}$ ve $Pd_{0.5}Ni_{0.25}Au_{0.25}$ için bulunan C_{12} değerleri ve fit parametreleri grafiği.

Şekil 4.6 ve Şekil 4.7’de görüldüğü gibi Au düşük sıcaklıklarda Ni ile aynı olabilecek yüksek C_{12} elastik sabit değerlerine sahipken sıcaklığın artmasıyla Au değerleri hızla azalmaktadır. $Pd_{0.05}Ni_{0.47}Au_{0.48}$, $Pd_{0.1}Ni_{0.45}Au_{0.45}$, $Pd_{0.2}Ni_{0.4}Au_{0.4}$, $Pd_{0.33}Ni_{0.33}Au_{0.33}$ ve

$\text{Pd}_{0.5}\text{Ni}_{0.25}\text{Au}_{0.25}$ alaşımları ise düşük sıcaklıklarda kendilerini oluşturan metallere göre yüksek C_{12} elastik sabitlerine sahip olmakta, bu durum sıcaklıkla değişmektedir.

Şekil 4.8’de üçlü alaşımların C_{12} elastik sabitleri gösterilmiştir. Pd katkısı arttıkça C_{12} elastik sabitinin büyüklüğü düşmektedir.



Şekil 4.8. $\text{Pd}_{0.05}\text{Ni}_{0.47}\text{Au}_{0.48}$, $\text{Pd}_{0.1}\text{Ni}_{0.45}\text{Au}_{0.45}$, $\text{Pd}_{0.2}\text{Ni}_{0.4}\text{Au}_{0.4}$, $\text{Pd}_{0.33}\text{Ni}_{0.33}\text{Au}_{0.33}$, $\text{Pd}_{0.5}\text{Ni}_{0.25}\text{Au}_{0.25}$ için bulunan C_{12} değerleri ve fit parametreleri grafiği.

Şekil 4.8’de C_{12} elastik sabitlerinde sıcaklığa bağlı azalma şiddeti Pd katkısı arttıkça azalma eğilimindedir. Yani alaşımların elastik sabitleri büyükten küçüğe doğru, $\text{Pd}_{0.05}\text{Ni}_{0.47}\text{Au}_{0.48} > \text{Pd}_{0.1}\text{Ni}_{0.45}\text{Au}_{0.45} > \text{Pd}_{0.2}\text{Ni}_{0.4}\text{Au}_{0.4} > \text{Pd}_{0.33}\text{Ni}_{0.33}\text{Au}_{0.33} > \text{Pd}_{0.5}\text{Ni}_{0.25}\text{Au}_{0.25}$ olarak sıralanır.

Simülasyon sonunda 0.1K değerinden başlayarak erime noktasına kadar bulunan elastik sabitler;

$$C_{XX}(T) = aT + b \quad (4.2)$$

şeklinde birinci dereceden bir fonksiyona fit edilmiştir. Her malzeme için bulunan fit parametreleri (a ve b) Tablo 4.1’de gösterilmiştir.

Tablo 4.1 Pd, Ni, Au saf metalleri ve Pd_{0.05}Ni_{0.47}Au_{0.48}, Pd_{0.1}Ni_{0.45}Au_{0.45}, Pd_{0.2}Ni_{0.4}Au_{0.4}, Pd_{0.33}Ni_{0.33}Au_{0.33}, Pd_{0.5}Ni_{0.25}Au_{0.25}, Pd_{0.5}Ni_{0.5}, Ni_{0.5}Au_{0.5} için C_{11} ve C_{12} fit parametreleri.

Malzeme	Elastik Sabit	a (GPa/K)	b (GPa)
Pd	C_{11}	-0.06294	222.653
Ni		-0.06190	235.469
Au		-0.07300	212.160
Pd _{0.5} Ni _{0.5}		-0.05660	215.891
Ni _{0.5} Au _{0.5}		-0.06521	214.297
Pd _{0.05} Ni _{0.47} Au _{0.48}		-0.06178	213.259
Pd _{0.10} Ni _{0.45} Au _{0.45}		-0.06139	212.440
Pd _{0.2} Ni _{0.4} Au _{0.4}		-0.06196	214.253
Pd _{0.33} Ni _{0.33} Au _{0.33}		-0.06212	215.084
Pd _{0.5} Ni _{0.25} Au _{0.25}		-0.06072	215.691
Pd		C_{12}	-0.03197
Ni	-0.02996		162.705
Au	-0.04900		163.680
Pd _{0.5} Ni _{0.5}	-0.03270		162.447
Ni _{0.5} Au _{0.5}	-0.04157		174.746
Pd _{0.05} Ni _{0.47} Au _{0.48}	-0.04136		173.600
Pd _{0.10} Ni _{0.45} Au _{0.45}	-0.03998		172.324
Pd _{0.2} Ni _{0.4} Au _{0.4}	-0.03896		169.916
Pd _{0.33} Ni _{0.33} Au _{0.33}	-0.03829		167.037
Pd _{0.5} Ni _{0.25} Au _{0.25}	-0.03576		162.743

Grafiklerde alaşım içerisindeki Pd miktarının artmasıyla, alaşımların grafik çizgilerinin saf Pd metalinin grafik çizgisine yaklaştığı görülür. Yani alaşımdaki Pd miktarı %100'e yaklaştırıldığında, Pd saf metalinin grafik çizgisiyle üst üste geleceği grafiklere bakılarak söylenebilir.

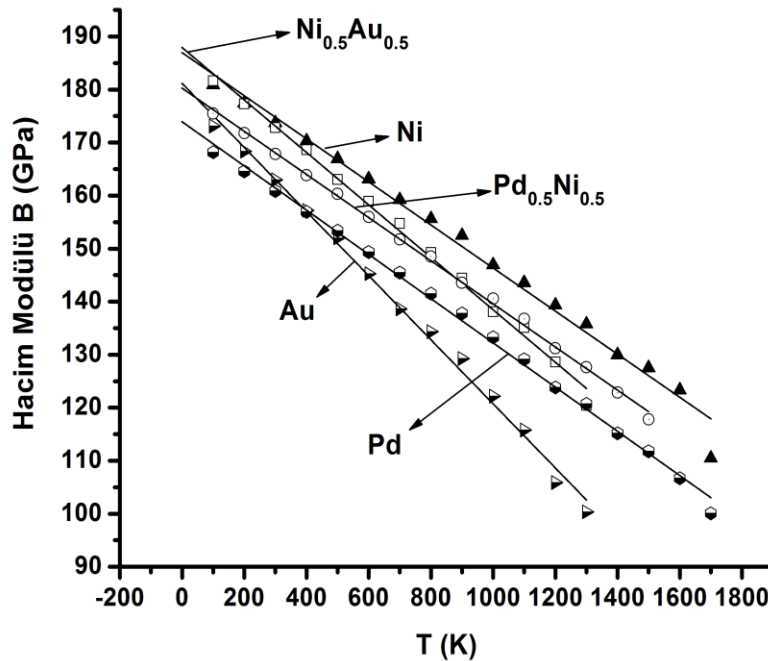
Saf metaller, ikili ve üçlü alaşımlar için B hacim modülleri;

$$B = \frac{1}{3}(C_{11} + 2C_{12}) \quad (4.3)$$

eşitliği kullanılarak hesaplanmıştır.

B hacim modülü değerlerinin grafikleri Şekil 4.9, Şekil 4.10, Şekil 4.11 ve Şekil 4.12’de verilmiştir.

Şekil 4.9’ta saf metallerin ve ikili alaşımların B hacim modülü grafiği çizildi ve karşılaştırma yapıldı.

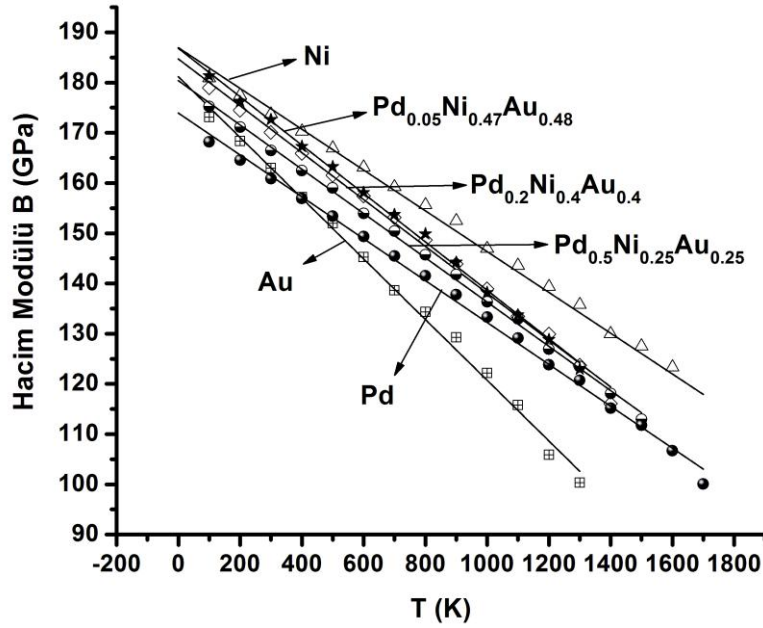


Şekil 4.9. Pd, Ni, Au saf metalleri ve Pd_{0.5}Ni_{0.5} ve Ni_{0.5}Au_{0.5} ikili alaşımları için elde edilen B hacim modülü değerleri grafiği.

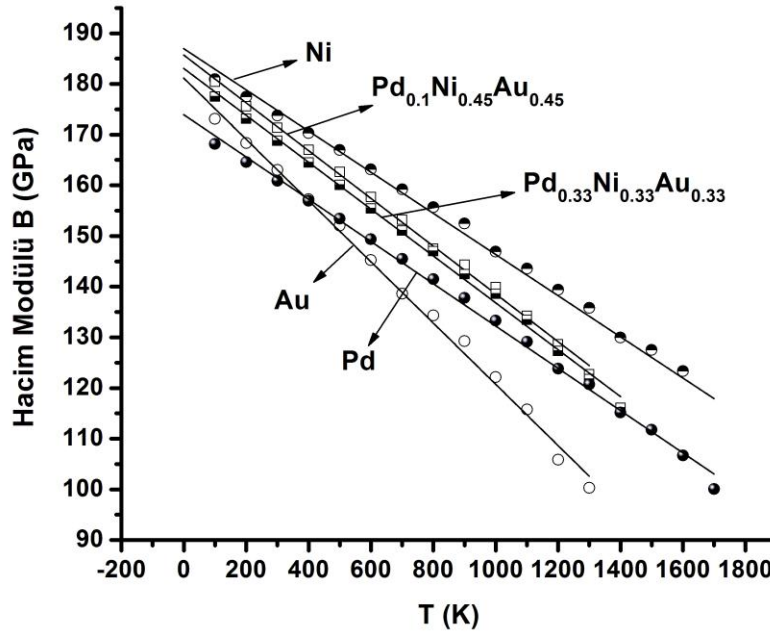
Şekil 4.9’da Ni_{0.5}Au_{0.5} ikili alaşımın en yüksek hacim modülü değerine, Pd saf metalinin ise en düşük hacim modülü değerine sahip olduğu görülmektedir. Ancak sıcaklığın artmasıyla Ni saf metali en yüksek hacim modülü değerini, Au ise en düşük hacim modülü değerini aldığı görülmüştür.

Pd_{0.5}Ni_{0.5} ikili alaşımı kendini oluşturan Pd ve Ni saf metalleri arasında hacim modülü değerini aldığı saptanmıştır.

Şekil 4.10 ve Şekil 4.11’de saf metallerin B hacim modülü değerleri üçlü alaşımlarla karşılaştırılmıştır.



Şekil 4.10. Pd, Ni, Au saf metalleri, $Pd_{0.05}Ni_{0.47}Au_{0.48}$, $Pd_{0.2}Ni_{0.4}Au_{0.4}$, $Pd_{0.5}Ni_{0.25}Au_{0.25}$ üçlü alaşımları için elde edilen B hacim modülü değerleri grafiği.

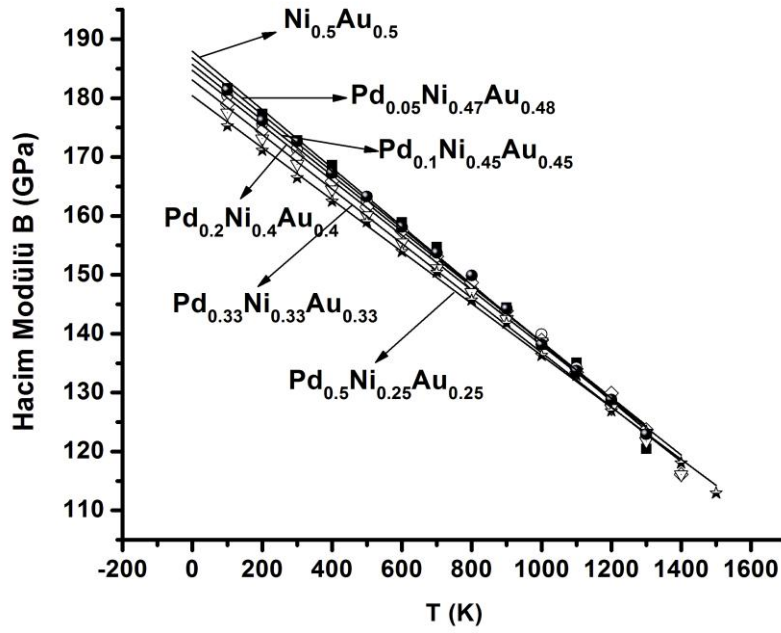


Şekil 4.11. Pd, Ni, Au saf metalleri ve $Pd_{0.1}Ni_{0.45}Au_{0.45}$, $Pd_{0.33}Ni_{0.33}Au_{0.33}$, üçlü alaşımları için elde edilen B hacim modülü değerleri grafiği.

Şekil 4.10 ve Şekil 4.11'e bakıldığında Ni saf metalin en büyük hacim modülü değerini aldığı ve Pd'nin en düşük hacim modülü değerine sahip olduğu anlaşılmaktadır. Ancak sıcaklığın artmasıyla Au saf metali en düşük hacim modülü

değeri almıştır. Üçlü alaşımların saf metaller arası hacim modülü değerleri aldığı görülmektedir.

Şekil 4.12’de $\text{Ni}_{0.5}\text{Au}_{0.5}$ ikili alaşımı ve üçlü alaşımların hacim modülü değerleri gösterilmiştir.



Şekil 4.12. $\text{Ni}_{0.5}\text{Au}_{0.5}$ ikili alaşımı ve $\text{Pd}_{0.05}\text{Ni}_{0.47}\text{Au}_{0.48}$, $\text{Pd}_{0.1}\text{Ni}_{0.45}\text{Au}_{0.45}$, $\text{Pd}_{0.2}\text{Ni}_{0.4}\text{Au}_{0.4}$, $\text{Pd}_{0.33}\text{Ni}_{0.33}\text{Au}_{0.33}$, $\text{Pd}_{0.5}\text{Ni}_{0.25}\text{Au}_{0.25}$ üçlü alaşımları için elde edilen B hacim modülü değerleri grafiği.

Şekil 4.12 incelendiğinde, Ni-Au alaşımına Pd eklenmesiyle hacim modülü değerlerinin düştüğü görülmüştür. Yani grafipteki alaşımlar küçükten büyüğe doğru, $\text{Ni}_{0.5}\text{Au}_{0.5} > \text{Pd}_{0.05}\text{Ni}_{0.47}\text{Au}_{0.48} > \text{Pd}_{0.1}\text{Ni}_{0.45}\text{Au}_{0.45} > \text{Pd}_{0.2}\text{Ni}_{0.4}\text{Au}_{0.4} > \text{Pd}_{0.33}\text{Ni}_{0.33}\text{Au}_{0.33} > \text{Pd}_{0.5}\text{Ni}_{0.25}\text{Au}_{0.25}$ olarak sıralanmaktadır.

Elde edilen Q-SC elastik sabit ve hacim modülü değerlerinin deneysel değerlerle uyumlu olduğu görülmüştür.

Bu çalışmada elde edilen C_{11} , C_{12} ve B değerleri ve bilimsel çalışmalarda bulunan değerler Tablo 4.2’de karşılaştırıldı ve yapılan inceleme sonunda bilimsel çalışmalarda bulunan değerlerle çalışmamızda bulunan değerlerin uyum içinde olduğu görüldü.

Tablo 4.2. Pd, Ni, Au saf metalleri ve $Pd_{0.5}Ni_{0.5}$, $Ni_{0.5}Au_{0.5}$, $Pd_{0.05}Ni_{0.47}Au_{0.48}$, $Pd_{0.1}Ni_{0.45}Au_{0.45}$, $Pd_{0.2}Ni_{0.4}Au_{0.4}$, $Pd_{0.33}Ni_{0.33}Au_{0.33}$, $Pd_{0.5}Ni_{0.25}Au_{0.25}$ alaşımları için bulunan C_{11} ve C_{12} değerleri ve diğer çalışmalarda hesaplanan değerler.

	T (K)	Referans	C_{11} (GPa)	C_{12} (GPa)	B (GPa)
Pd	0	Q-SC	217.3	149.7	172.2
	300		202.7	140.7	161.0
	0	[57]	234.1	176.1	195.4
		[58]	234.2	176.1	195.4
		[59]	242.0	174.0	196.6
		[60]	156.8	113.4	127.8
		[Den. 20]	234.1	176.1	195.4
	300	[Den. 20]	227.1	176.1	193.1
		[28]	248.3	176.2	200.2
		[61]	232.2	178.0	196.0
Ni	0	Q-SC	230.7	161.2	184.3
	300		215.2	152.9	173.7
	0	[57]	261.2	150.8	187.6
		[58]	261.2	150.8	187.6
		[59]	243.8	164.0	190.6
		[60]	170.3	55.7	93.9
		[62]	329.0	218.0	255.0
	300	[Den. 20]	261.2	150.8	187.6
		[Den. 20]	250.8	150.0	183.6
	Au	0	Q-SC	210.1	162.4
300		190.5		149.2	163.0
0		[Den. 57]	201.6	169.7	180.3
300			192.3	163.1	172.8
$Pd_{0.5}Ni_{0.5}$	0	Q-SC	213.7	162.6	179.7
	300		198.6	152.4	167.8
$Ni_{0.5}Au_{0.5}$	0		211.2	173.8	186.3
	300		193.8	162.3	172.8
$Pd_{0.05}Ni_{0.47}Au_{0.48}$	0		211.9	173.4	186.2
	300		195.1	161.3	172.6
$Pd_{0.10}Ni_{0.45}Au_{0.45}$	0		209.8	172.9	185.2
	300		193.8	160.1	171.3
$Pd_{0.2}Ni_{0.4}Au_{0.4}$	0		212.4	169.8	184.0
	300		195.1	157.5	170.1
$Pd_{0.33}Ni_{0.33}Au_{0.33}$	0		212.4	166.9	182.1
	300		196.3	155.0	168.7
$Pd_{0.5}Ni_{0.25}Au_{0.25}$	0		213.3	162.4	179.4
	300		196.2	151.5	166.4

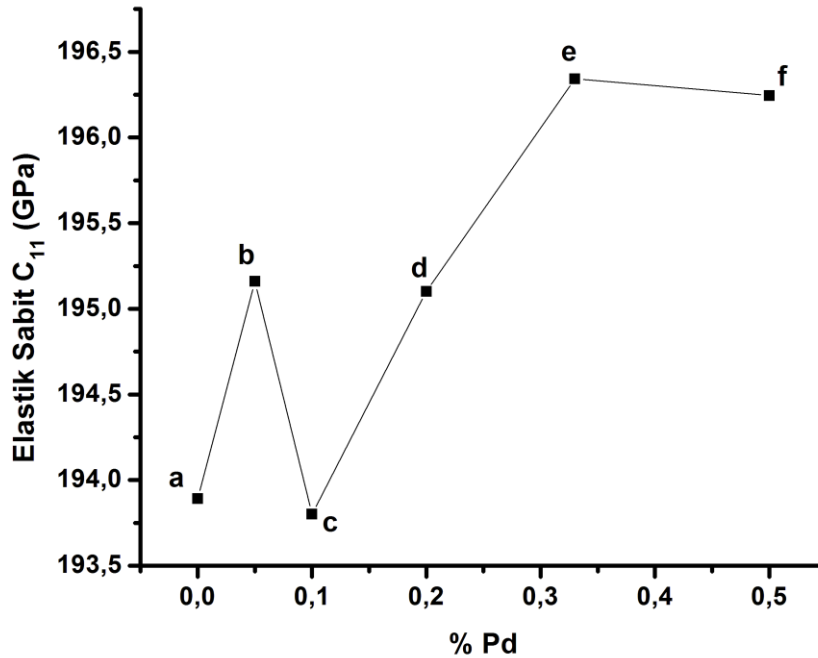
Deneysel değerlendirme için [20,57] numaralı referanslar kullanılmıştır. Ayrıca Pd ve Ni için çalışmada bulunan değerler, diğer [28, 57, 58, 59, 60, 61, 62] referans numaralı çalışmalarda bulunan sonuçlarla karşılaştırılarak yakın sonuçların bulunduğu görüldü.

Tablo 4.2'e yardımı ile saf metallerin C_{11} , C_{12} ve B değerleri için 0K ve 300K'deki yüzde bağıl hataları hesaplanmıştır. C_{11} elastik sabitlerinde 0K'de Pd, Ni ve Au saf metalleri için yüzde bağıl hata oranları sırayla %7.17, %11.6 ve %4.21'dir. 300K için ise sırasıyla, %10.7, %14.19, %0.91 olarak hesaplanmıştır.

C_{12} elastik sabitlerinde 0K için Pd, Ni ve Au metallerinin yüzde hataları sırasıyla, %14.9, %6.8 ve %3.145 ve 300K'de ise sırasıyla, %20.1, %1.89 ve %8.51 olarak hesaplanmıştır. B hacim modülü içinse, 0K'de yine sırasıyla, %11.87, %1.75 ve %1.12 olarak ve 300K'de %16.6, %5.39 ve %5.88 olarak yüzde bağıl hataları hesaplanmıştır.

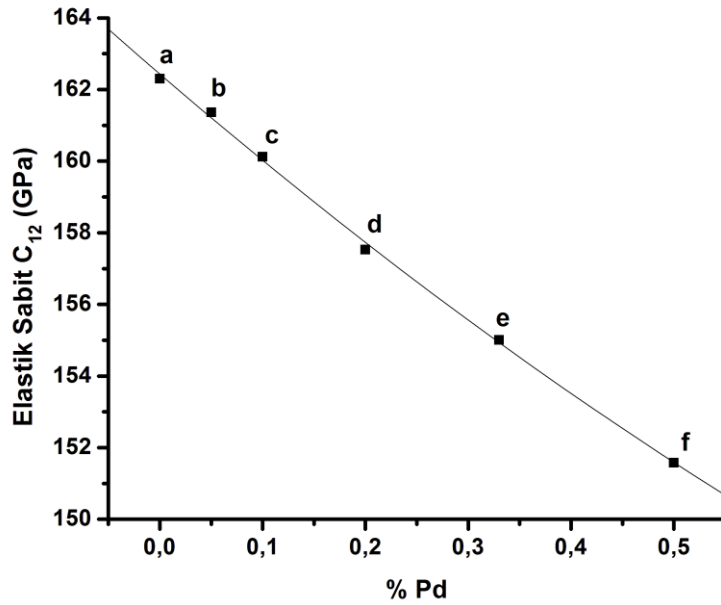
4.1.2. Konsantrasyona göre elastik sabitlerin analizi

Bu kısımda malzemelerin elastik sabitleri ve hacim modüllerinin oda sıcaklığında yani yaklaşık 300K'de Palladyumun katkısıyla alaşımların nasıl değişim gösterdiği incelenmiş, bu değişimler Şekil 4.13, Şekil 4.14 ve Şekil 4.15'te gösterilmiştir.

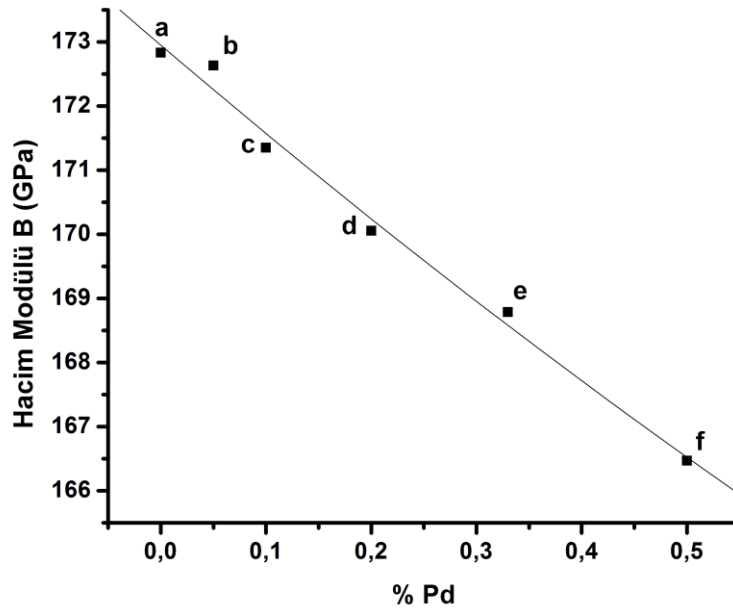


Şekil 4.13. $Ni_{0.5}Au_{0.5}$ (a), $Pd_{0.05}Ni_{0.47}Au_{0.48}$ (b), $Pd_{0.1}Ni_{0.45}Au_{0.45}$ (c), $Pd_{0.2}Ni_{0.4}Au_{0.4}$ (d), $Pd_{0.33}Ni_{0.33}Au_{0.33}$ (e), $Pd_{0.5}Ni_{0.25}Au_{0.25}$ (f) alaşımları için bulunan C_{11} değerlerinin % Pd miktarlarına göre değişim grafiği.

Şekil 4.13’de göze çarpan durum %10 Pd katkıli alaşımın $\text{Ni}_{0.5}\text{Au}_{0.5}$ ’ya göre daha düşük C_{11} elastik sabit değeri alması ve ayrıca %50 Pd katkıli alaşımın %33 Pd katkıli alaşıma göre daha düşük C_{11} değere sabit olmasıdır.



Şekil 4.14. $\text{Ni}_{0.5}\text{Au}_{0.5}$ (a), $\text{Pd}_{0.05}\text{Ni}_{0.47}\text{Au}_{0.48}$ (b), $\text{Pd}_{0.1}\text{Ni}_{0.45}\text{Au}_{0.45}$ (c), $\text{Pd}_{0.2}\text{Ni}_{0.4}\text{Au}_{0.4}$ (d), $\text{Pd}_{0.33}\text{Ni}_{0.33}\text{Au}_{0.33}$ (e), $\text{Pd}_{0.5}\text{Ni}_{0.25}\text{Au}_{0.25}$ (f) alaşımları için bulunan C_{12} değerlerinin % Pd miktarlarına göre değişim ve fit parametreleri grafiği.



Şekil 4.15. $\text{Ni}_{0.5}\text{Au}_{0.5}$ (a), $\text{Pd}_{0.05}\text{Ni}_{0.47}\text{Au}_{0.48}$ (b), $\text{Pd}_{0.1}\text{Ni}_{0.45}\text{Au}_{0.45}$ (c), $\text{Pd}_{0.2}\text{Ni}_{0.4}\text{Au}_{0.4}$ (d), $\text{Pd}_{0.33}\text{Ni}_{0.33}\text{Au}_{0.33}$ (e), $\text{Pd}_{0.5}\text{Ni}_{0.25}\text{Au}_{0.25}$ (f) alaşımları için bulunan B hacim modülü değerlerinin % Pd miktarlarına göre değişim ve fit parametreleri grafiği.

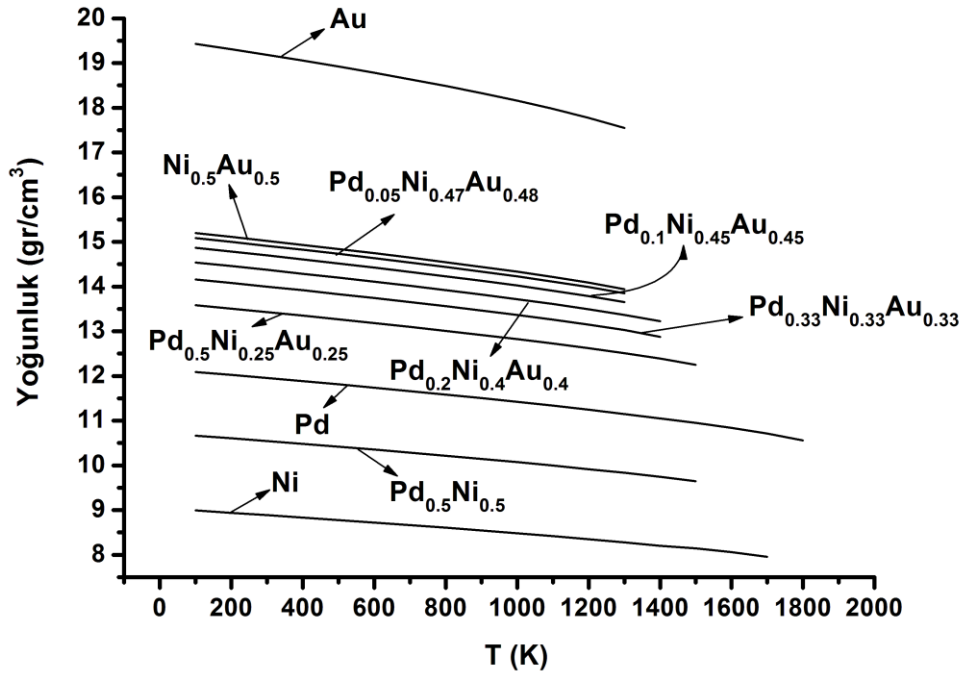
Şekil 4.14 ve Şekil 4.15'te alaşımlardaki Pd miktarlarının artırılmasıyla 300K' de C_{12} elastik sabitlerinin ve B hacim modülü değerlerinin yaklaşık olarak parabolik azalma gösterdiği saptanmıştır.

4.2. Yoğunluk Analizi

4.2.1. Sıcaklığa göre yoğunluk analizi

Malzemelerin önemli fiziksel özelliklerinden biri yoğunluktur. Simülasyonun tutarlılığın kanıtlanması, malzemenin bilimsel ve endüstriyel alanlarda kullanımı açısından yoğunluk değerlerinin doğru hesaplanması önemlidir. Yoğunluk erime noktasını belirlemek için bir ölçü olarak kullanılabilir. Metallerdeki katı-sıvı faz geçişleri, yoğunluktaki ani değişikliklerden yararlanır.

Bu çalışmada malzemelerin yoğunluk değerleri 20000 adımlık TPN çerçevesinde elde edilmiştir. Simülasyon sonucunda oluşan sıcaklığa bağlı yoğunluk grafiği Şekil 4.16'de gösterilmiştir.



Şekil 4.16. Pd, Ni, Au saf metalleri ve Pd_{0.5}Ni_{0.5}, Ni_{0.5}Au_{0.5}, Pd_{0.05}Ni_{0.47}Au_{0.48}, Pd_{0.1}Ni_{0.45}Au_{0.45}, Pd_{0.2}Ni_{0.4}Au_{0.4}, Pd_{0.33}Ni_{0.33}Au_{0.33}, Pd_{0.5}Ni_{0.25}Au_{0.25} alaşımları için bulunan sıcaklığa bağlı yoğunluk değerleri grafiği.

Şekil 4.16'e bakıldığında sıcaklık arttıkça saf metallerin, ikili ve üçlü alaşımların yoğunluklarının azaldığı görülür. Yoğunluğu en yüksek olan saf Au metali ve yoğunluğu en düşük değere sahip malzemenin saf Ni metali olduğu görülür. Ni-Au alaşımına Pd eklenmesi ve Pd miktarının her bir alaşım için artmasıyla yoğunluk değerleri düşüşe geçmiştir.

Ayrıca Pd_{0.5}Ni_{0.5} ikili alaşımının kendini oluşturan Pd ve Ni saf metallerinin arasında bir yoğunluk değeri almaktadır. Ayrıca Ni_{0.5}Au_{0.5} ikili alaşımı kendini oluşturan Ni saf metaline daha yakın yoğunluk değeri almıştır.

Çalışılan malzemelerin yoğunluk değerlerinin, deneysel verilerle uyumlu olduğu görülmüştür. Pd, Ni ve Au elementleri için 0K'deki yüzde bağıl hataları sırasıyla %0.32, %0.89 ve %0.3 olarak ve 300K'de yüzde bağıl hatalar ise %0.41, %0.31 ve %0.62 olarak hesaplanmıştır.

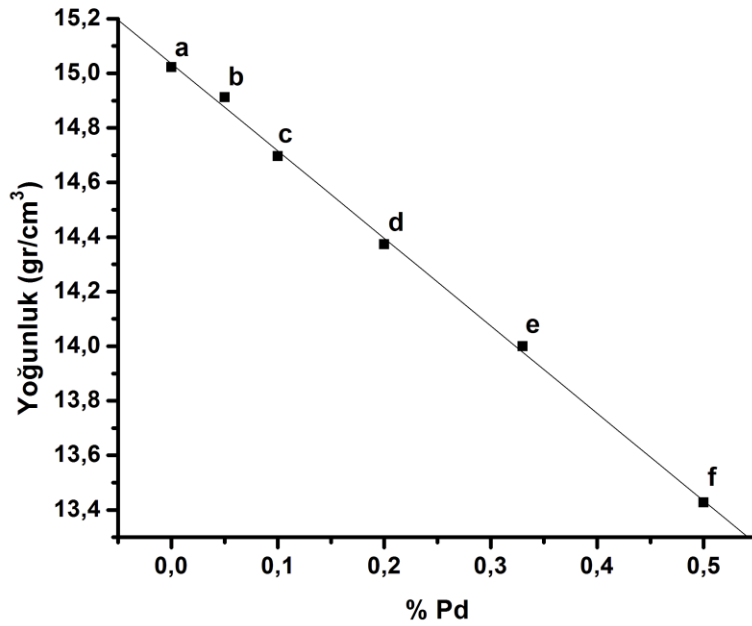
Çalışmamızda hesaplanan 0K ve 300K'deki yoğunluk değerleri, deneysel değerlerle birlikte Tablo 4.3'te verilmiştir.

Tablo 4.3. Pd, Ni, Au saf metalleri ve Pd_{0.5}Ni_{0.5}, Ni_{0.5}Au_{0.5}, Pd_{0.05}Ni_{0.47}Au_{0.48}, Pd_{0.1}Ni_{0.45}Au_{0.45}, Pd_{0.2}Ni_{0.4}Au_{0.4}, Pd_{0.33}Ni_{0.33}Au_{0.33}, Pd_{0.5}Ni_{0.25}Au_{0.25} alaşımları için 0K ve 300K'deki deneysel yoğunluk değerleri ve hesaplanan yoğunluk değerleri, (Birimler gr/cm³ cinsindedir) a: [20], b: [63].

Malzemeler	0 K	300 K	0 K Deneysel	300 K Deneysel
Pd	12.17	11.95	12.13 ^a	12.00 ^b
Ni	9.04	8.88	8.96 ^b	8.908 ^b
Au	19.54	19.18	19.48 ^a	19.30 ^a
Pd _{0.5} Ni _{0.5}	10.72	10.54	-	-
Ni _{0.5} Au _{0.5}	15.27	15.02	-	-
Pd _{0.05} Ni _{0.47} Au _{0.48}	15.15	14.91	-	-
Pd _{0.10} Ni _{0.45} Au _{0.45}	14.93	14.69	-	-
Pd _{0.2} Ni _{0.4} Au _{0.4}	14.59	14.37	-	-
Pd _{0.33} Ni _{0.33} Au _{0.33}	14.20	14.0	-	-
Pd _{0.5} Ni _{0.25} Au _{0.25}	13.63	13.42	-	-

4.2.2. Konsantrasyona göre yoğunluk analizi

Ni-Au ikili alaşımına Pd katkısıyla sabit sıcaklıkta (300K), Pd'nin farklı konsantrasyonlarının bulunduğu alaşımlardan elde edilen yoğunluk değerlerinin değişimi Şekil 4.17'te gösterilmektedir.



Şekil 4.17. Ni_{0,5}Au_{0,5}(a), Pd_{0,05}Ni_{0,47}Au_{0,48} (b), Pd_{0,1}Ni_{0,45}Au_{0,45} (c), Pd_{0,2}Ni_{0,4}Au_{0,4} (d), Pd_{0,33}Ni_{0,33}Au_{0,33}(e), Pd_{0,5}Ni_{0,25}Au_{0,25} (f) alaşımları için bulunan yoğunluk değerlerinin % Pd miktarlarına göre değişim ve fit parametreleri grafiği.

Şekil 4.17'e bakıldığında sabit sıcaklıkta alaşımlardaki Pd miktarının artırılması ve buna bağlı olarak Au saf metali oranının azaltılmasıyla yoğunluk değerlerinin yaklaşık doğrusal olarak azaldığı gözlenmiştir.

4.3. Örgü Parametreleri

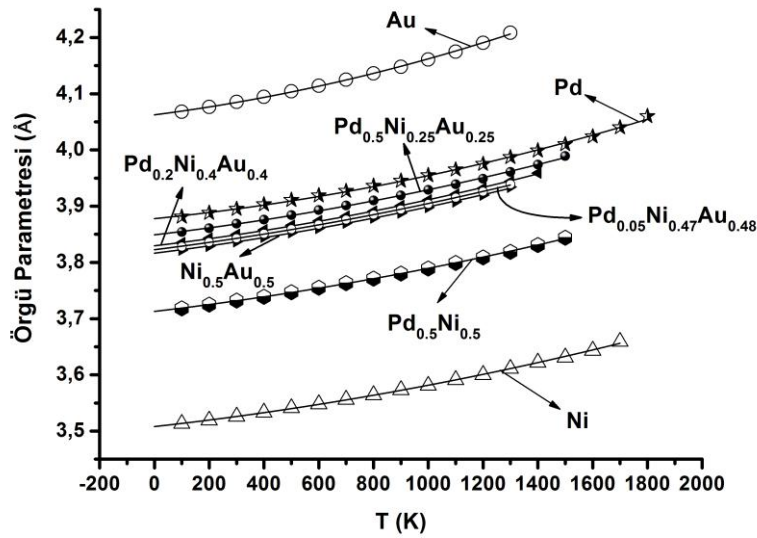
4.3.1. Sıcaklığa göre örgü parametreleri analizi ve bağlanma enerjisi

Örgü parametrelerinin hesaplanması, incelenen malzemenin termal özellikleri hakkında önemli bilgiler verir. Ayrıca örgü parametreleri, zorlanmanın ölçülmesi ve malzemelerdeki yapı kusurlarının belirlenmesi açısından önemlidir.

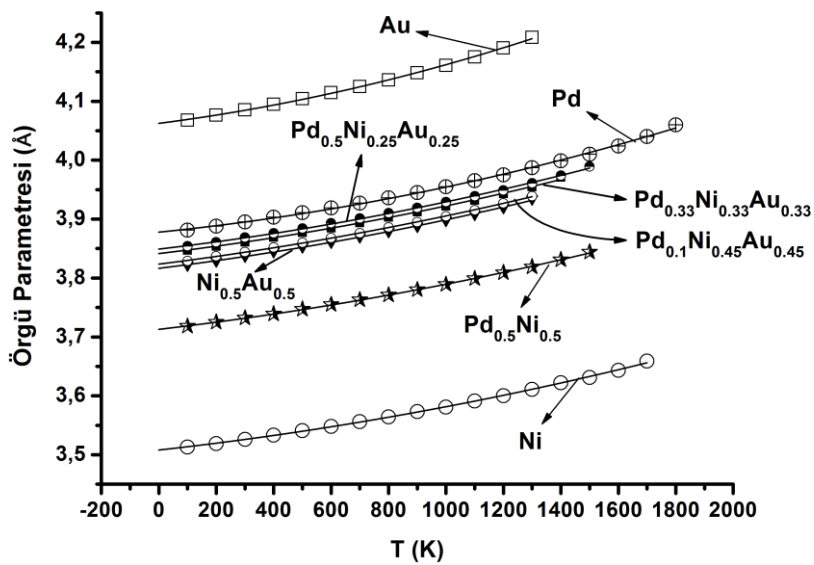
Bu çalışmada örgü parametrelerini hesaplamak için 20000 adımlık TPN çerçeve kullanılmıştır. 0K'den erime noktasına kadar bulunan örgü parametreleri değerleri,

$$\alpha(T) = \alpha T^2 + bT + c \quad (4.4)$$

şeklinde ikinci dereceden bir fonksiyona fit edilmiştir. Elde edilen verilere göre çizilen grafikler Şekil 4.18, Şekil 4.19, Şekil 4.20 ve Şekil 4.21'de verilmiştir.

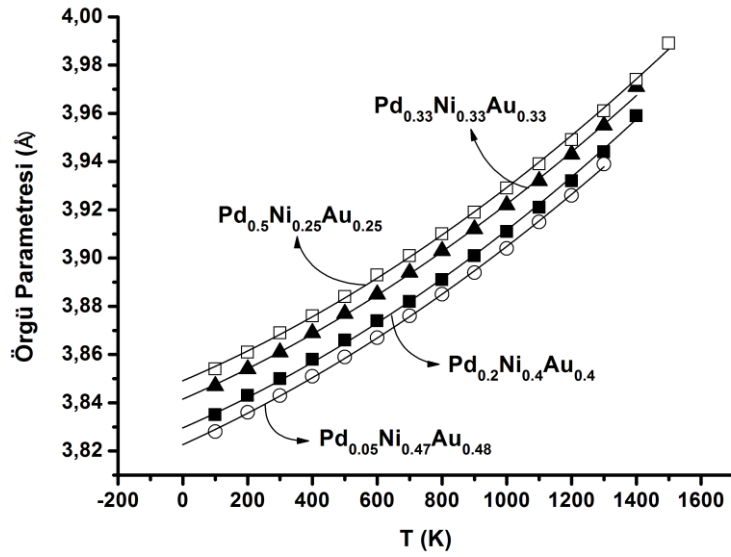


Şekil 4.18. Pd, Ni, Au saf metalleri ve Pd_{0.5}Ni_{0.5}, Ni_{0.5}Au_{0.5}, Pd_{0.05}Ni_{0.47}Au_{0.48}, Pd_{0.2}Ni_{0.4}Au_{0.4}, Pd_{0.5}Ni_{0.25}Au_{0.25} alaşımları için bulunan sıcaklığa bağlı örgü parametresi ve fit parametreleri grafiği.

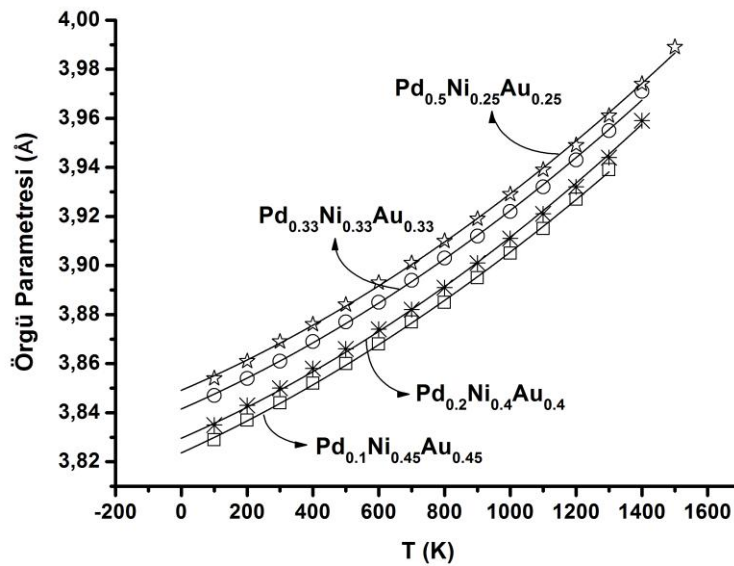


Şekil 4.19. Pd, Ni, Au saf metalleri ve Pd_{0.5}Ni_{0.5}, Ni_{0.5}Au_{0.5}, Pd_{0.1}Ni_{0.45}Au_{0.45}, Pd_{0.33}Ni_{0.33}Au_{0.33}, Pd_{0.5}Ni_{0.25}Au_{0.25} alaşımları için bulunan sıcaklığa bağlı örgü parametresi ve fit parametreleri grafiği.

Şekil 4.18 ve Şekil 4.19’de Pd, Ni, Au saf metalleri, ikili ve üçlü alaşımların örgü parametreleri birbirleri ile karşılaştırılmıştır. Çalışma içerisindeki örgü parametresi en yüksek olan malzemenin saf Au metali, örgü parametresi en düşük olan malzemenin saf Ni metali olduğu ve ayrıca saf Pd metalinin örgü sabitinin Ni metalinden daha büyük olduğu görülmektedir. $\text{Pd}_{0.5}\text{Ni}_{0.5}$ ve $\text{Ni}_{0.5}\text{Au}_{0.5}$ ikili alaşımlarının üçlü alaşımlara göre daha yüksek örgü parametreleri değeri aldığı görülmektedir. Örgü parametreleri sıcaklığa bağlı parabolik değişme göstermektedir.



Şekil 4.20. $\text{Pd}_{0.05}\text{Ni}_{0.47}\text{Au}_{0.48}$, $\text{Pd}_{0.2}\text{Ni}_{0.4}\text{Au}_{0.4}$, $\text{Pd}_{0.33}\text{Ni}_{0.33}\text{Au}_{0.33}$, $\text{Pd}_{0.5}\text{Ni}_{0.25}\text{Au}_{0.25}$ alaşımları için bulunan sıcaklığa bağlı örgü parametresi ve fit parametreleri grafiği.



Şekil 4.21. $\text{Pd}_{0.1}\text{Ni}_{0.45}\text{Au}_{0.45}$, $\text{Pd}_{0.2}\text{Ni}_{0.4}\text{Au}_{0.4}$, $\text{Pd}_{0.33}\text{Ni}_{0.33}\text{Au}_{0.33}$, $\text{Pd}_{0.5}\text{Ni}_{0.25}\text{Au}_{0.25}$ alaşımları için bulunan sıcaklığa bağlı örgü parametresi ve fit parametreleri grafiği.

Şekil 4.20 ve Şekil 4.21’de, Ni-Au alaşımına Pd katkısının eklenmesiyle daha büyük Pd katkısının olduğu üçlü alaşımlarda örgü parametre değerlerinin daha yüksek olduğu saptandı. Ayrıca bu artışa yüksek örgü sabiti değerine sahip olan Au oranının üçlü alaşımlar içinde azaltılmasının da etkili olduğu görüldü.

Grafiklerde de görüldüğü gibi Pd miktarı artmasıyla alaşımların grafik çizgileri Pd metaline yaklaşır. Çalışmamızda Au elementinin örgü parametresinin büyük çıkması, bu malzemenin diğer malzemelere göre daha işlenebilir olduğunu gösterir. Bu özelliği sayesinde metaller arasında Au metali, sanayide çekiçle dövülerek şekil verilebilen en kolay metaldir. Yani altın çekiçle dövülerek ince bir tabaka haline getirilebilir. Örneğin, bir gram altın dövülerek 180 cm^2 ’lik bir tabaka haline getirilebilir. Başka bir deyişle, bir altın yaprağının kalınlığı 1 cm’nin milyonda biri kadar olabilir; bu kalınlık 1000 atomun kalınlığı kadardır [64].

0K ve 300K sıcaklık değerleri için E_c değerleri Q-SC potansiyelindeki toplam enerji ifadesinden hesaplanmış ve Tablo 4.5’te gösterilmiştir. Bulunan toplam enerji 1372’ye bölünerek atom başına düşen E_c değeri hesaplanmıştır.

Tablo 4.4. Pd, Ni, Au saf metalleri ve $\text{Pd}_{0,5}\text{Ni}_{0,5}$, $\text{Ni}_{0,5}\text{Au}_{0,5}$, $\text{Pd}_{0,05}\text{Ni}_{0,47}\text{Au}_{0,48}$, $\text{Pd}_{0,1}\text{Ni}_{0,45}\text{Au}_{0,45}$, $\text{Pd}_{0,2}\text{Ni}_{0,4}\text{Au}_{0,4}$, $\text{Pd}_{0,33}\text{Ni}_{0,33}\text{Au}_{0,33}$, $\text{Pd}_{0,5}\text{Ni}_{0,25}\text{Au}_{0,25}$ alaşımları için a, b, c örgü denklemi fit parametreleri.

Malzeme	$a \times 10^{-8} (\text{Å/K}^2)$	$b \times 10^{-5} (\text{Å/K})$	$c (\text{Å})$
Pd	2.703	4.958	3.877
Ni	1.942	5.409	3.508
Au	3.159	6.877	4.061
$\text{Pd}_{0,5}\text{Ni}_{0,5}$	1.950	5.714	3.712
$\text{Ni}_{0,5}\text{Au}_{0,5}$	2.177	6.060	3.816
$\text{Pd}_{0,05}\text{Ni}_{0,47}\text{Au}_{0,48}$	2.132	6.085	3.822
$\text{Pd}_{0,10}\text{Ni}_{0,45}\text{Au}_{0,45}$	2.082	6.100	3.823
$\text{Pd}_{0,2}\text{Ni}_{0,4}\text{Au}_{0,4}$	2.355	5.839	3.829
$\text{Pd}_{0,33}\text{Ni}_{0,33}\text{Au}_{0,33}$	2.245	5.842	3.841
$\text{Pd}_{0,5}\text{Ni}_{0,25}\text{Au}_{0,25}$	2.301	5.710	3.849

Simulasyon içindeki etkileşmenin olduğu genişlik aralığında, enerji denkleminin çözülmesinden elde edilen kuvvetin integrali alınarak denge durumundaki konumlar elde edilmiştir. Ayrıca denge mesafesi konumlarından fcc yapıya göre a örgü

parametre değerleri hesaplanmıştır.

Simulasyon sonucu hesaplanan örgü sabiti (α) ve bağlanma enerjisi değerleri, deneysel değerler ve diğer bilimsel çalışmalardan örnek değerlerle karşılaştırılarak Tablo 4.5'te gösterilmiştir.

Tablo 4.5. Pd, Ni, Au saf metalleri ve Pd_{0.5}Ni_{0.5}, Ni_{0.5}Au_{0.5}, Pd_{0.05}Ni_{0.47}Au_{0.48}, Pd_{0.1}Ni_{0.45}Au_{0.45}, Pd_{0.2}Ni_{0.4}Au_{0.4}, Pd_{0.33}Ni_{0.33}Au_{0.33}, Pd_{0.5}Ni_{0.25}Au_{0.25} alaşımları için 0K ve 300K'de hesaplanan örgü sabiti α ve E_c bağlanma enerjisi değerleri, deneysel değerler ve referans alınan bilimsel çalışmaların değerleri.

	T (K)	Referans	α (Å)	E_c (eV/mol)
Pd	0	Q-SC	3.87	-376.01
	300		3.89	-384.3
	0	[58]	-	-391.0
		[Den. 20]	-	-376.0
	300	[Den. 20]	3.89	-389.0
		[28]	3.89	-380.15
		[7]	3.89	-379.77
Ni	0	Q-SC	3.50	-431.866
	300		3.52	-433.989
	0	[58]	-	-445.00
		[62]	3.421	-
		[65]	3.523	-
		[Den. 20]	-	-428.00
	300	[Den. 20]	3.52	-
Au	0	Q-SC	4.06	-369.21
	300		4.085	-316.58
	0	[Den. 20]	4.07	-368.0
	300		4.08	-363.91
Pd _{0.5} Ni _{0.5}	0	Q-SC	3.71	-402.159
	300		3.73	-400.537
Ni _{0.5} Au _{0.5}	0	Q-SC	3.81	-400.111
	300		3.83	-392.643
Pd _{0.05} Ni _{0.47} Au _{0.48}	0	Q-SC	3.82	-398.597
	300		3.84	-391.220
Pd _{0.10} Ni _{0.45} Au _{0.45}	0		3.82	-397.695
	300		3.84	-390.394
Pd _{0.2} Ni _{0.4} Au _{0.4}	0		3.83	-395.462
	300		3.85	-388.268
Pd _{0.33} Ni _{0.33} Au _{0.33}	0		3.84	-392.044
	300		3.86	-385.005
Pd _{0.5} Ni _{0.25} Au _{0.25}	0		3.849	-388.754
	300		3.869	-381.535

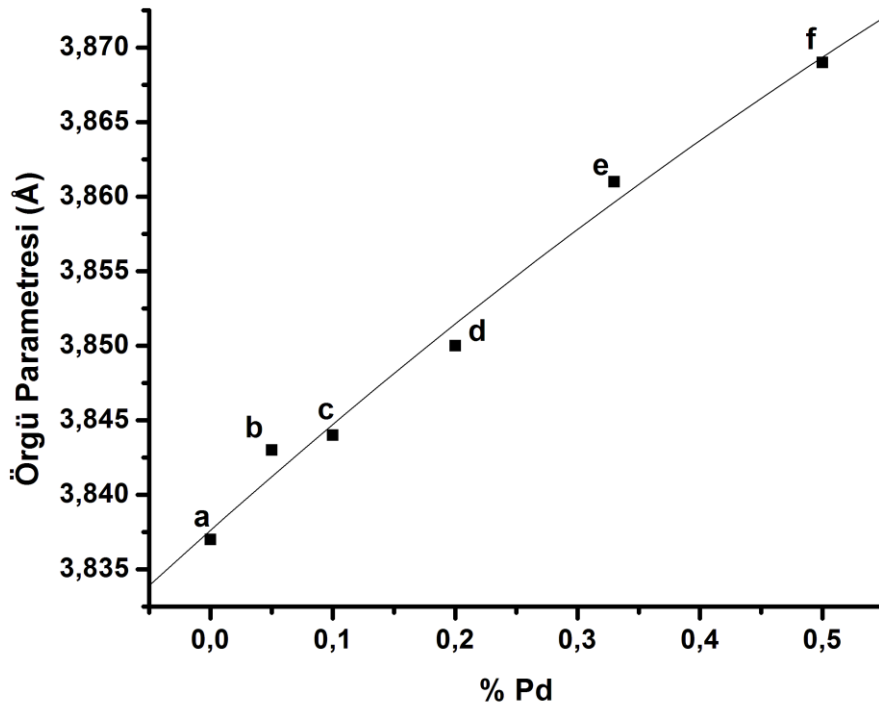
Pd, Ni metalinin deneysel değeri bulunamadığı için yalnızca Au metalin 0K'deki örgü sabiti için yüzde bağıl hata oranı %0.24 olarak ve Pd, Ni, Au saf metallerinin 300K için yüzde bağıl hata oranları ise %0, %0, %0.12 olarak bulunmuştur.

Aynı şekilde tablodan hareketle Pd, Ni, Au metallerinin 0K'deki bağlanma enerjisi için yüzde bağıl hataları sırasıyla, %0.002, %0.9, %0.32 olarak ve Pd ile Au metallerin 300K'deki yüzde bağıl hataları ise % 1.24 ve %0.64 olarak bulunmuştur.

Yapılan her iki bağıl hata hesabının sonucuna bakarak hesaplanan simülasyon değerleri ile deneysel değerlerin çok uyumlu olduğu görülmüştür.

4.3.2. Konsantrasyona göre örgü parametreleri analizi

Ni-Au ikili alaşımına Pd eklenmesiyle sabit sıcaklıkta (300K), Pd'nin farklı konsantrasyonlarının bulunduğu alaşımlardaki örgü parametreleri değerlerinin değişim grafiği Şekil 4.22'de verilmiştir.



Şekil 4.22. Ni_{0,5}Au_{0,5}(a), Pd_{0,05}Ni_{0,47}Au_{0,48} (b), Pd_{0,1}Ni_{0,45}Au_{0,45} (c), Pd_{0,2}Ni_{0,4}Au_{0,4} (d), Pd_{0,33}Ni_{0,33}Au_{0,33}(e), Pd_{0,5}Ni_{0,25}Au_{0,25} (f) alaşımları için bulunan örgü parametreleri değerlerinin % Pd miktarlarına göre değişim ve fit parametreleri grafiği.

Şekil 4.22'e bakıldığında, Pd katkısının artmasıyla alaşımların örgü parametre değerlerinin daha yüksek değerler aldığı görülmektedir.

Pd'un %5 ve %10 katkının olduğu alaşımlarda oda sıcaklığındaki örgü parametresi değerlerinin çok az değiştiği ancak Pd katkısının %20 ve daha fazla arttırılmasıyla grafik çizgisinin hemen hemen doğrusal bir değişim gösterdiği saptandı.

4.4. Termal Genleşme Katsayısı Hesabı

Metaller sıcaklığın etkisiyle belli bir miktarda termal genleşme gösterirler. Bu özellik geçiş metalleri için de önemlidir. Bilimsel ve mühendislik çalışmalarında, binalarda, köprülerde ve hatta demiryollarında sıcaklık nedeniyle meydana gelen termal genleşme kontrol altında tutulmalıdır. Bu nedenle metallerin ve alaşımların termal genleşme katsayıları bilinmesi önemlidir.

Termal genleşme katsayısını hesaplamak için, örgü parametrelerinden elde edilen fit denklemi (4.4) yardımıyla formüldeki fonksiyonun türevi alınarak bulunabilir.

$$\alpha(T) = \frac{1}{\alpha_0} \left[\frac{\partial \alpha(T)}{\partial T} \right] \quad (4.5)$$

(4.5) ifadesinde türev sonucu yerine yazıldığında,

$$\alpha(T) = \frac{1}{\alpha_0} (2\alpha T + b) \quad (4.6)$$

eşitliği ile elde edilir. Bu eşitlik yardımı ile Tablo 4.6'da simülasyon sonucunda hesaplanan değerlerle, saf metaller için bulunan deneysel değerler gösterilmiştir.

Tablo 4.6 yardımı ile Pd, Ni ve Au saf metalleri için bulunan termal genleşme katsayıları için bağıl hata oranları %45.68, %43.84 ve %52.11 olarak bulunmuş ve deneysel değerlere göre üstel katsayılarında hata çıkmadığı görülmüştür.

Tablo 4.6. Pd, Ni, Au saf metalleri ve Pd_{0,5}Ni_{0,5}, Ni_{0,5}Au_{0,5}, Pd_{0,05}Ni_{0,47}Au_{0,48}, Pd_{0,1}Ni_{0,45}Au_{0,45}, Pd_{0,2}Ni_{0,4}Au_{0,4}, Pd_{0,33}Ni_{0,33}Au_{0,33}, Pd_{0,5}Ni_{0,25}Au_{0,25} alaşımları için 300K'de hesaplanan $\alpha(T)$ termal genişleme katsayıları ve deneysel değerler [63, 66].

Malzemeler	$\alpha(T) \times 10^{-5}$	$\alpha(T) \times 10^{-5}$ Deneysel
Pd	1.689 K ⁻¹	1.16 K ⁻¹
Ni	1.864 K ⁻¹	1.30 K ⁻¹
Au	2.160 K ⁻¹	1.42 K ⁻¹
Pd _{0,5} Ni _{0,5}	1.844 K ⁻¹	-
Ni _{0,5} Au _{0,5}	1.920 K ⁻¹	-
Pd _{0,05} Ni _{0,47} Au _{0,48}	1.916 K ⁻¹	-
Pd _{0,10} Ni _{0,45} Au _{0,45}	1.912 K ⁻¹	-
Pd _{0,2} Ni _{0,4} Au _{0,4}	1.884 K ⁻¹	-
Pd _{0,33} Ni _{0,33} Au _{0,33}	1.862 K ⁻¹	-
Pd _{0,5} Ni _{0,25} Au _{0,25}	1.832 K ⁻¹	-

4.5. Entalpi Değerleri Analizi ve Isı Sığası Hesabı

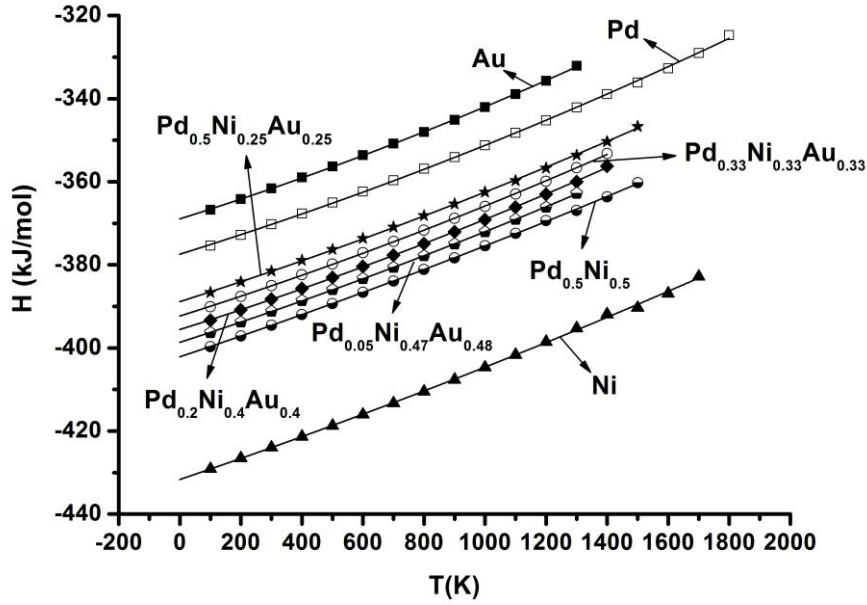
4.5.1. Sıcaklığa göre entalpi değerleri analizi

Hazırlanan bu çalışmada entalpi değerleri TPN çerçeve kullanılarak hesaplanmıştır. Çalışmada bulunan entalpi değerleri,

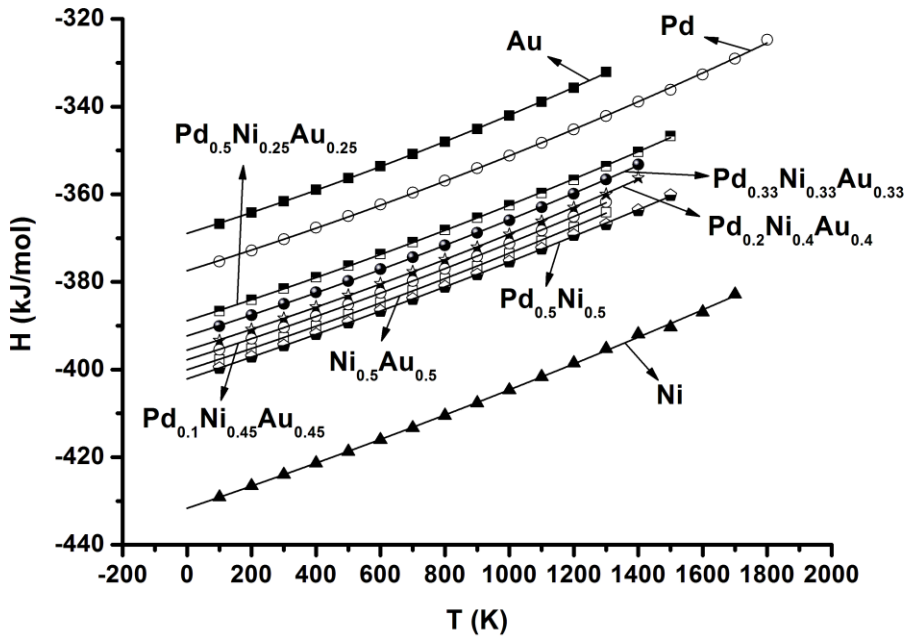
$$H(T) = \alpha T^2 + bT + c \quad (4.7)$$

olacak şekilde ikinci dereceden bir fonksiyona fit edilmiştir.

Şekil 4.23 ve Şekil 4.24'de saf metaller, ikili ve üçlü alaşımların entalpi değerlerinin sıcaklıkla değişimi gösterilmiş ve tüm malzemeler birbirleri ile karşılaştırılmıştır.



Şekil 4.23. Pd, Ni, Au saf metalleri ve $Pd_{0.5}Ni_{0.5}$, $Pd_{0.05}Ni_{0.47}Au_{0.48}$, $Pd_{0.2}Ni_{0.4}Au_{0.4}$, $Pd_{0.33}Ni_{0.33}Au_{0.33}$, $Pd_{0.5}Ni_{0.25}Au_{0.25}$ alaşımları için hesaplanan entalpi değerleri ve fit parametreleri grafiği.

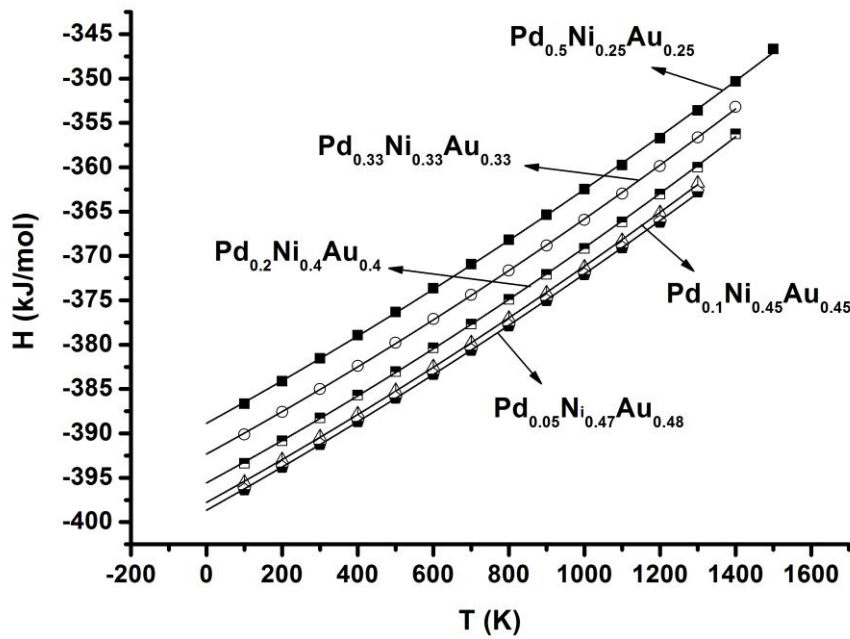


Şekil 4.24. Pd, Ni, Au saf metalleri ve $Pd_{0.5}Ni_{0.5}$, $Ni_{0.5}Au_{0.5}$, $Pd_{0.10}Ni_{0.45}Au_{0.45}$, $Pd_{0.2}Ni_{0.4}Au_{0.4}$, $Pd_{0.33}Ni_{0.33}Au_{0.33}$, $Pd_{0.5}Ni_{0.25}Au_{0.25}$ alaşımları için hesaplanan entalpi değerleri ve fit parametreleri grafiği.

Şekil 4.23 ve Şekil 4.24’de entalpi değeri en büyük olan malzemenin saf Au metali olduğu ve en düşük entalpi değerine sahip malzemenin Ni metali olduğu görülür. Bu

sonuçta bize Ni metalinin çalışılan diğer malzemeler arasında en güçlü bağlanma enerjisine sahip olduğunu gösterir.

Çalışmadaki tüm ikili ve üçlü alaşımlar Pd-Ni aralığında entalpi değerleri aldığı görülmüştür. $\text{Pd}_{0.5}\text{Ni}_{0.5}$ ve $\text{Ni}_{0.5}\text{Au}_{0.5}$ ikili alaşımların üçlü alaşımlara göre daha düşük entalpi değerlerine sahip olduğu ve sıcaklığın artmasıyla entalpi değerlerinin arttığı görülmüştür.



Şekil 4.25. $\text{Pd}_{0.05}\text{Ni}_{0.47}\text{Au}_{0.48}$, $\text{Pd}_{0.10}\text{Ni}_{0.45}\text{Au}_{0.45}$, $\text{Pd}_{0.2}\text{Ni}_{0.4}\text{Au}_{0.4}$, $\text{Pd}_{0.33}\text{Ni}_{0.33}\text{Au}_{0.33}$, $\text{Pd}_{0.5}\text{Ni}_{0.25}\text{Au}_{0.25}$ alaşımları için hesaplanan entalpi değerleri ve fit parametreleri grafiği.

Şekil 4.25'te ise üçlü alaşımlar birbirleri ile karşılaştırılmıştır. Pd miktarının artırılmasıyla alaşımların entalpi değerlerinin doğrusal olarak arttığı görüldü.

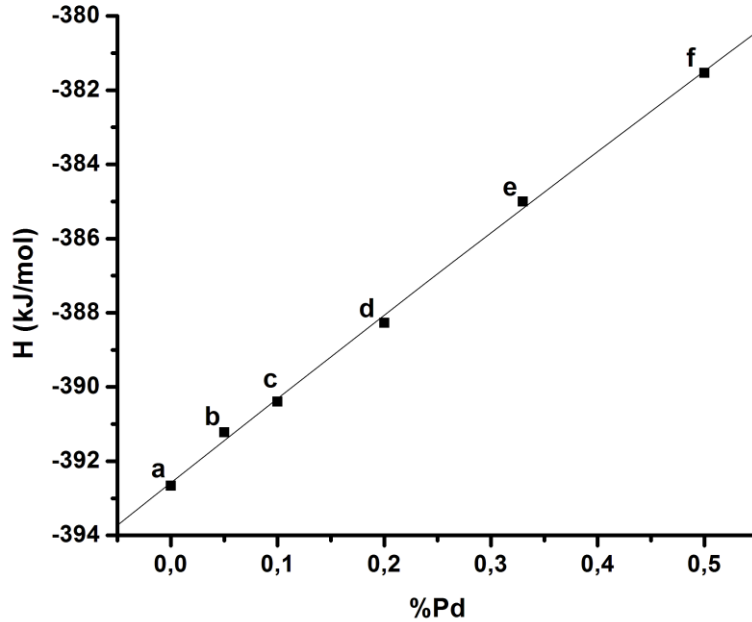
Üçlü alaşımların entalpi değerleri büyükten küçüğe doğru $\text{Pd}_{0.5}\text{Ni}_{0.25}\text{Au}_{0.25} > \text{Pd}_{0.33}\text{Ni}_{0.33}\text{Au}_{0.33} > \text{Pd}_{0.2}\text{Ni}_{0.4}\text{Au}_{0.4} > \text{Pd}_{0.10}\text{Ni}_{0.45}\text{Au}_{0.45} > \text{Pd}_{0.05}\text{Ni}_{0.47}\text{Au}_{0.48}$ olarak sıralanır.

Simulasyon sonucunda entalpi değerleri için hesaplanan fit parametreleri Tablo 4.7'de verilmiştir.

Tablo 4.7. Pd, Ni, Au saf metalleri ve Pd_{0,5}Ni_{0,5}, Ni_{0,5}Au_{0,5}, Pd_{0,05}Ni_{0,47}Au_{0,48}, Pd_{0,1}Ni_{0,45}Au_{0,45}, Pd_{0,2}Ni_{0,4}Au_{0,4}, Pd_{0,33}Ni_{0,33}Au_{0,33}, Pd_{0,5}Ni_{0,25}Au_{0,25} alaşımları için a, b, c entalpi değerleri fit parametreleri.

Malzeme	$a \times 10^{-6}$ (kJ/molK ²)	$b \times 10^{-4}$ (kJ/molK)	c (kJ/mol)
Pd	3.328	228.799	-377.432
Ni	2.108	249.317	-431.659
Au	3.504	236.071	-369.035
Pd _{0,5} Ni _{0,5}	2.200	244.890	-402.128
Ni _{0,5} Au _{0,5}	2.979	236.137	-400.039
Pd _{0,05} Ni _{0,47} Au _{0,48}	2.851	237.786	-398.654
Pd _{0,10} Ni _{0,45} Au _{0,45}	3.127	234.924	-397.772
Pd _{0,2} Ni _{0,4} Au _{0,4}	3.355	231.639	-395.572
Pd _{0,33} Ni _{0,33} Au _{0,33}	3.234	232.597	-392.323
Pd _{0,5} Ni _{0,25} Au _{0,25}	2.982	233.862	-388.856

4.5.2. Konsantrasyona göre entalpi analizi



Şekil 4.26. Ni_{0,5}Au_{0,5}(a), Pd_{0,05}Ni_{0,47}Au_{0,48} (b), Pd_{0,1}Ni_{0,45}Au_{0,45} (c), Pd_{0,2}Ni_{0,4}Au_{0,4} (d), Pd_{0,33}Ni_{0,33}Au_{0,33}(e), Pd_{0,5}Ni_{0,25}Au_{0,25} (f) alaşımlarının hesaplanan entalpi değerlerinin % Pd miktarlarına göre değişim ve fit parametreleri grafiği.

Ni-Au ikili alařımına Pd eklenmesiyle farklı konsantrasyonlardaki alařımların sabit sıcaklıktaki (300K) entalpi deęerleri deęiřimi Őekil 4.26'te gsterilmiřtir.

Őekil 4.26'da oda sıcaklıęında alařımlardaki Pd miktarının artmasıyla entalpi deęerlerinin arttıęı ve doęrusal bir artıř gsterdięi saptanmıřtır.

Buna gre alařımların oda sıcaklıęındaki entalpi deęerleri bykten kye doęru $Pd_{0.5}Ni_{0.25}Au_{0.25} > Pd_{0.33}Ni_{0.33}Au_{0.33} > Pd_{0.2}Ni_{0.4}Au_{0.4} > Pd_{0.10}Ni_{0.45}Au_{0.45} > Pd_{0.05}Ni_{0.47}Au_{0.48} > Ni_{0.5}Au_{0.5}$ olarak sıralanmıřtır.

4.5.3. Isı sığası hesabı

(4.7) denkleminin sıcaklıęa gre trevi,

$$C_p(T) = \left[\frac{\partial H(T)}{\partial T} \right]_p \quad (4.8)$$

řeklinde alındıęında (4.7) denklemini deęiřinin doęrusal olduęu gz nne alınarak, grafik ařaęıdaki doęrusal denkleme fit edilmiřtir.

$$C_p(T) = 2\alpha T + b \quad (4.9)$$

forml ile gsterilir. (4.9) denklemini ve Tablo 4.7'deki a ve b deęerleri kullanılarak her bir sıcaklık deęeri iin malzemelerin ısı sıęaları hesaplanabilir.

Buna gre (4.9) denkleminde faydalanarak alıřılan malzemelerin 300K iin hesaplanan ısı sıęası deęerleri ve deneysel deęerler Tablo 4.8'de verilmiřtir.

Tablo 4.8'deki deneysel deęerler ve hesaplanan deęerlerle karřılařtırıldıęında, Pd, Ni ve Au saf metalleri iin baęıl yzde hatası sırasıyla %3.32, %0.59 ve %1.32 olarak ıkmıřtır.

Bu sonu bize deneysel deęerlerle hesaplanan deęerlerin ok uyumlu olduęunu gstermektedir.

Tablo 4.8. Pd, Ni, Au saf metalleri ve Pd_{0,5}Ni_{0,5}, Ni_{0,5}Au_{0,5}, Pd_{0,05}Ni_{0,47}Au_{0,48}, Pd_{0,1}Ni_{0,45}Au_{0,45}, Pd_{0,2}Ni_{0,4}Au_{0,4}, Pd_{0,33}Ni_{0,33}Au_{0,33}, Pd_{0,5}Ni_{0,25}Au_{0,25} alaşımları için hesaplanan 300K sıcaklıktaki ısı sığası ve bulunabilen deneysel değerleri(Pd ve Ni için [63,64], Au için [67])

Malzemeler	C_p ($kJmol^{-1}K^{-1}$)	C_p ($kJmol^{-1}K^{-1}$)
		Deneysel
Pd	0.024876	0.025995
Ni	0.026196	0.026041
Au	0.025415	0.025325
Pd _{0,5} Ni _{0,5}	0.025809	-
Ni _{0,5} Au _{0,5}	0.025401	-
Pd _{0,05} Ni _{0,47} Au _{0,48}	0.025489	-
Pd _{0,10} Ni _{0,45} Au _{0,45}	0.025369	-
Pd _{0,2} Ni _{0,4} Au _{0,4}	0.025177	-
Pd _{0,33} Ni _{0,33} Au _{0,33}	0.025200	-
Pd _{0,5} Ni _{0,25} Au _{0,25}	0.025175	-

4.6. Erime Noktalarının Belirlenmesi

Erime noktaları, malzemelerin birçok fiziksel özelliğine bakılarak belirlenebilir. Yani çalışmamızda incelenen malzemelerin, entalpi, yoğunluk, elastik sabitler ve örgü parametreleri grafiklerine bakılarak erime noktaları tespit edilebilir. Çünkü erime noktasının olduğu sıcaklık aralığında grafiklerde ani düşüş ya da çıkışlar görülmektedir. Buda bize o sıcaklık aralığında malzemelerin tamamen eridiğini gösterir.

Malzemelerin tam anlamıyla erime noktalarının tayini için ortalama kare yer değiştirmeden faydalanılmıştır.

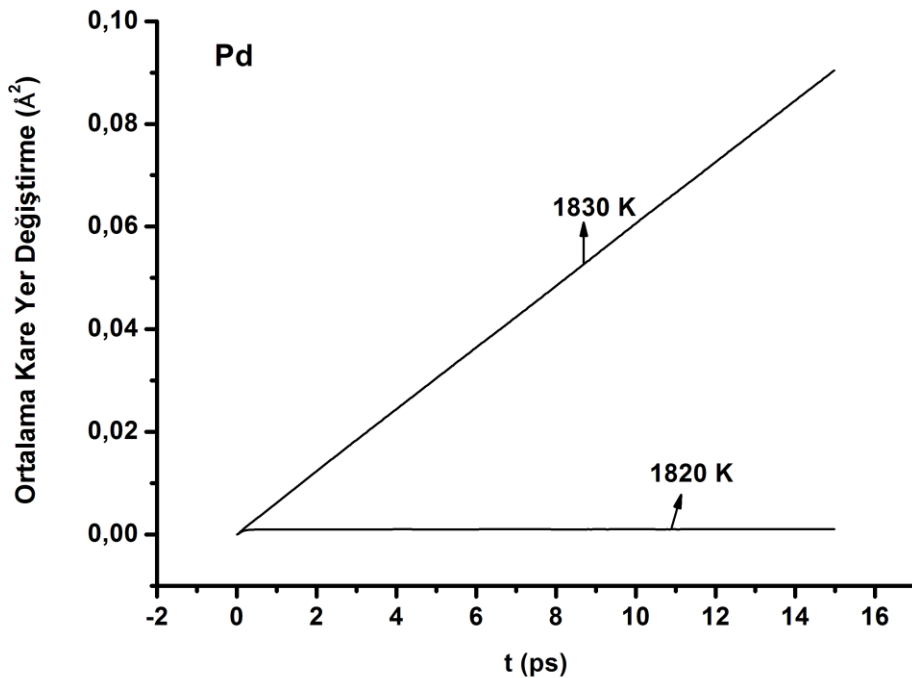
Ortalama kare yer değiştirmeler TPN çerçeve kullanılarak hesaplanmış ve grafiklerle gösterilmiştir. Ortalama kare yer değiştirmenin zamana bağlı grafiklerine bakıldığında sıcaklığın artmasıyla malzeme içindeki atomların birbirinden uzaklaşma ölçüleri hakkında bilgi alınabilir.. Yani katı halde olan malzemelerde, malzeme içi ileri-geri titreşimler vardır ve grafiklerde yan yana düzensiz pikler görülür. Malzeme erimeye

başladığında, atomların birbirinden düzenli hızlarla uzaklaşmasıyla düzensiz piklerin azaldığı, daha düzgün eğriler ortaya çıktığı görülmüştür. Malzeme tamamen eridikten sonra da düzensiz piklerin ortadan kaybolduğu ve düzgün eğrilerin oluştuğu görülmüştür.

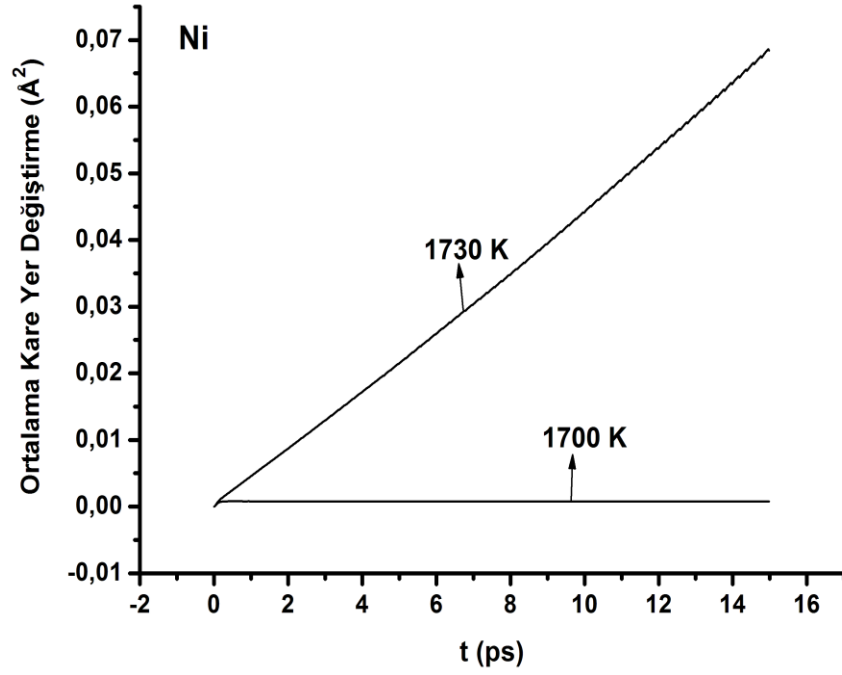
Erime sıcaklıkları, ortalama kare yer değişirmelerin sürekliliğinden ve sıvılaşıma ile artış gösteren difüzyon katsayılarındaki büyük değişimlerden belirlenir.

Çalışılan malzemelere ait ortalama kare yer değişirmenin zamana bağlı değişimleri grafiklerle, Şekil 4.27'den Şekil 4.36'a kadar grafiklerle gösterilmiştir.

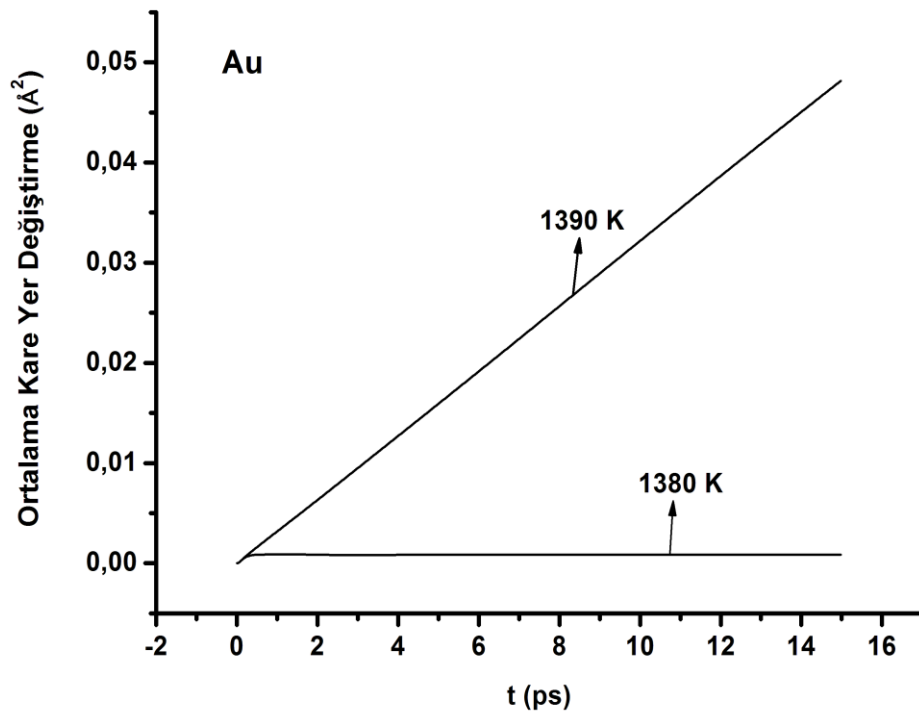
Ayrıca Şekil 4.37'de alaşımların konsantrasyona göre erime noktaları karşılaştırılmıştır.



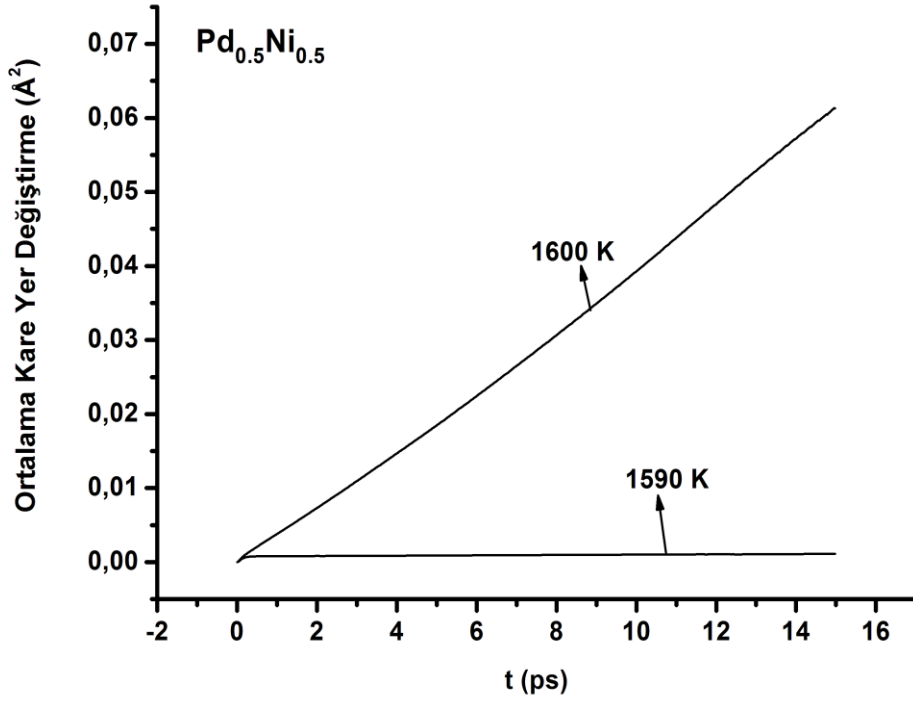
Şekil 4.27. Pd metali için erime noktası civarında ortalama kare yer değişirmenin zamana bağlı grafiği.



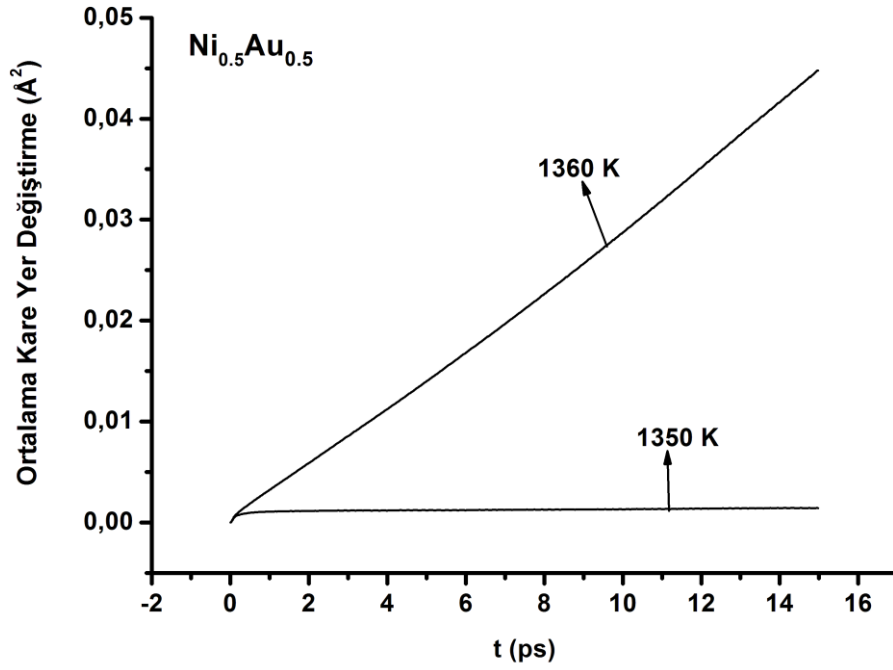
Şekil 4.28. Ni metali için erime noktası civarında ortalama kare yer değişirmenin zamana bağlı grafiği.



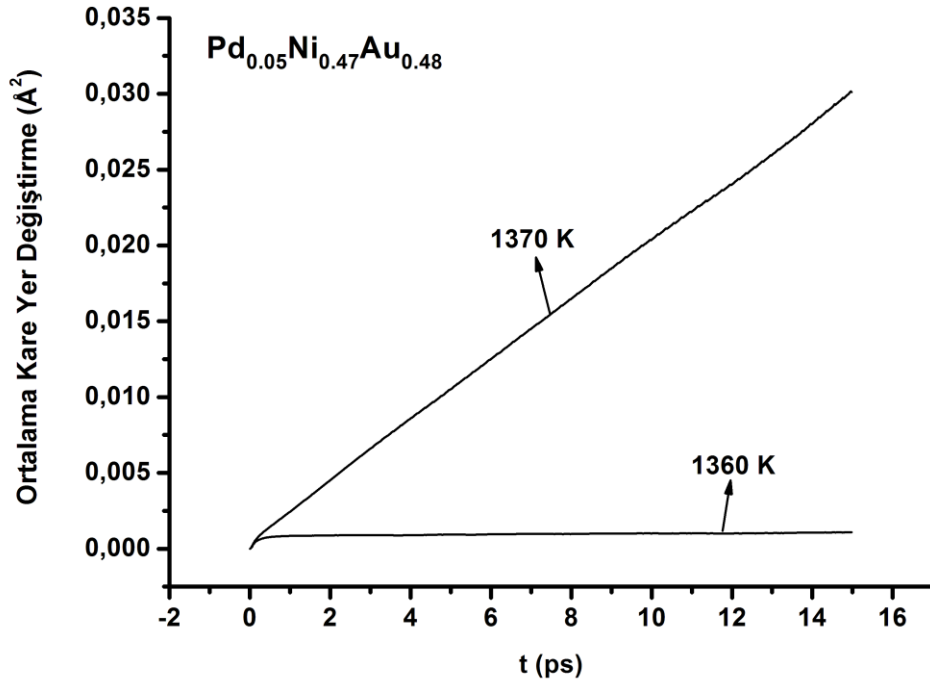
Şekil 4.29. Au metali için erime noktası civarında ortalama kare yer değişirmenin zamana bağlı grafiği.



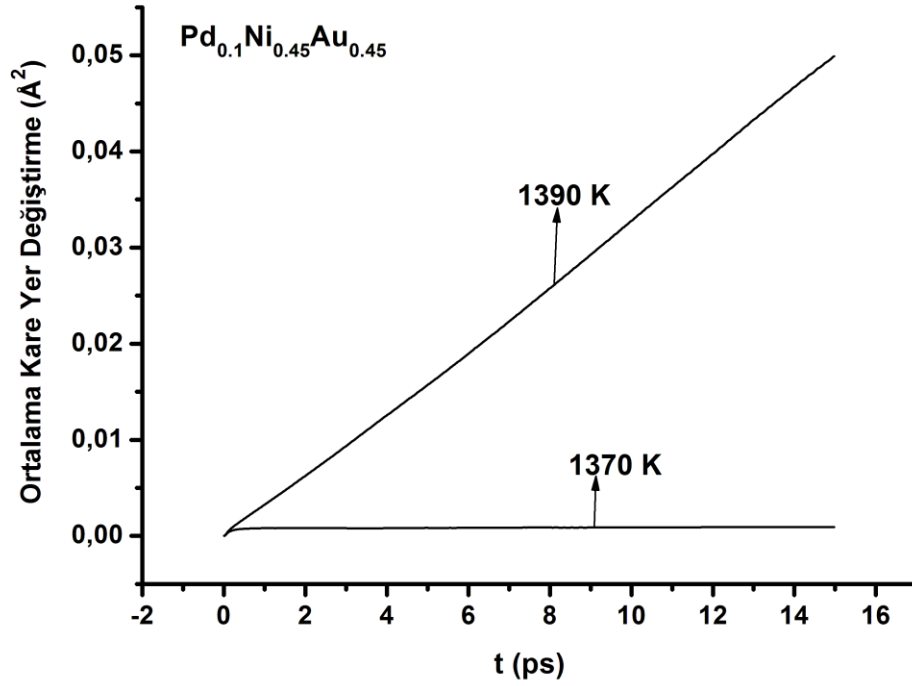
Şekil 4.30. Pd_{0.5}Ni_{0.5} alaşımı için erime noktası civarında ortalama kare yer değişirmenin zamana bağlı grafiği.



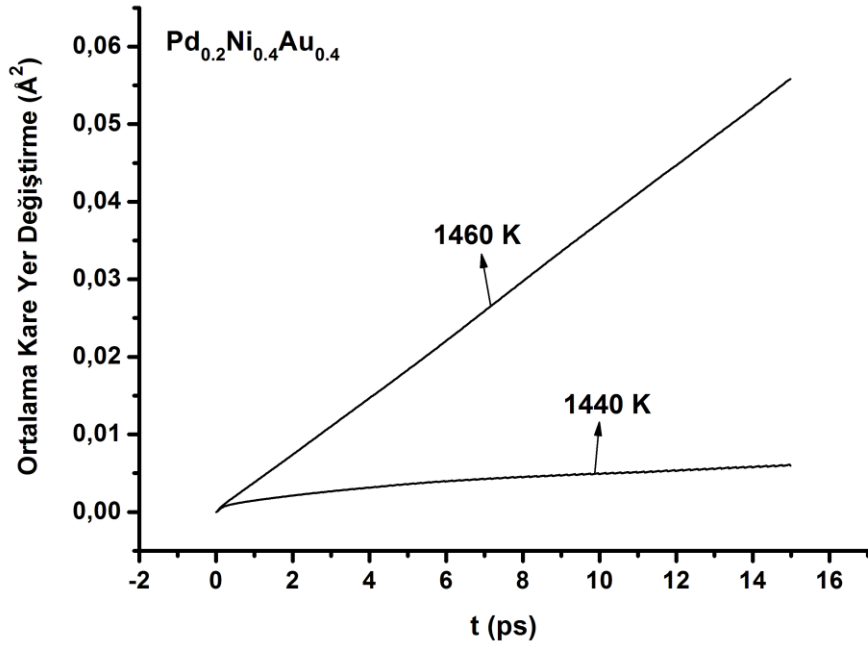
Şekil 4.31. Ni_{0.5}Au_{0.5} alaşımı için erime noktası civarında ortalama kare yer değişirmenin zamana bağlı grafiği.



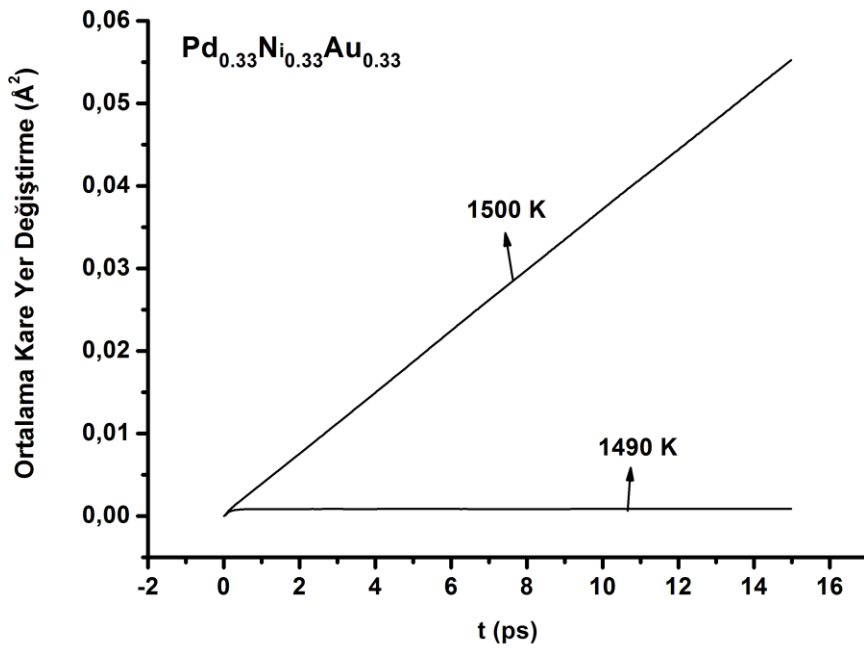
Şekil 4.32. $\text{Pd}_{0.05}\text{Ni}_{0.47}\text{Au}_{0.48}$ alaşımı için erime noktası civarında ortalama kare yer deęiřtirmenin zamana baęlı grafięi.



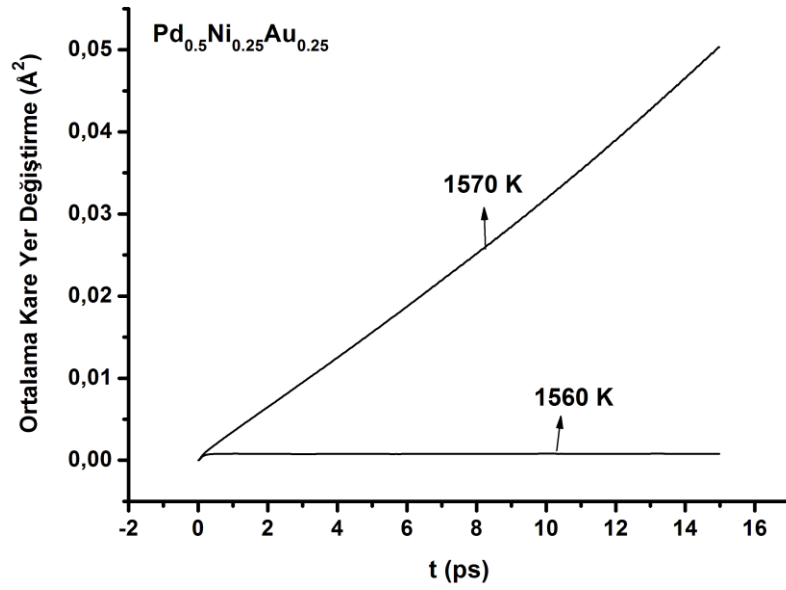
Şekil 4.33. $\text{Pd}_{0.1}\text{Ni}_{0.45}\text{Au}_{0.45}$ alaşımı için erime noktası civarında ortalama kare yer deęiřtirmenin zamana baęlı grafięi.



Şekil 4.34. Pd_{0.2}Ni_{0.4}Au_{0.4} alaşımı için erime noktası civarında ortalama kare yer değişirmenin zamana bağlı grafiği.

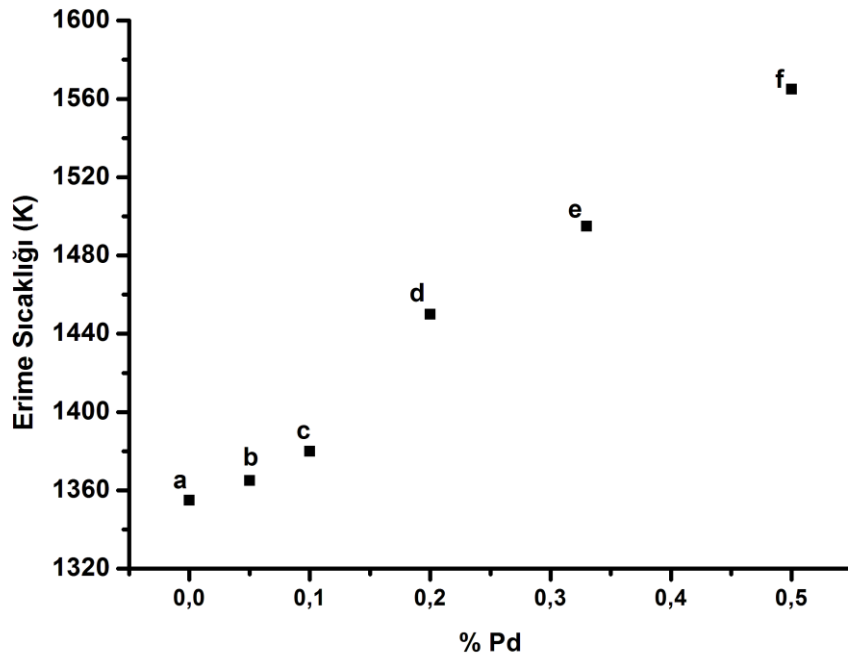


Şekil 4.35. Pd_{0.33}Ni_{0.33}Au_{0.33} alaşımı için erime noktası civarında ortalama kare yer değişirmenin zamana bağlı grafiği.



Şekil 4.36. Pd_{0.5}Ni_{0.25}Au_{0.25} alaşımı için erime noktası civarında ortalama kare yer değişiminin zamana bağlı grafiği.

4.6.1. Konsantrasyona göre erime noktaları



Şekil 4.37. Ni_{0.5}Au_{0.5}(a), Pd_{0.05}Ni_{0.47}Au_{0.48} (b), Pd_{0.1}Ni_{0.45}Au_{0.45} (c), Pd_{0.2}Ni_{0.4}Au_{0.4} (d), Pd_{0.33}Ni_{0.33}Au_{0.33}(e), Pd_{0.5}Ni_{0.25}Au_{0.25} (f) alaşımlarının bulunan erime noktalarının % Pd miktarlarına göre değişim grafiği.

$Ni_{0.5}Au_{0.5}$ ikili alaşımı ile bu ikili alaşıma Pd katkıyla elde edilen üçlü alaşımların erime noktaları Şekil 4.37’de karşılaştırılmıştır.

Grafiklere bakıldığında $Pd_{0.5}Ni_{0.5}$, $Ni_{0.5}Au_{0.5}$, $Pd_{0.05}Ni_{0.47}Au_{0.48}$, $Pd_{0.10}Ni_{0.45}Au_{0.45}$ alaşımlarının kendini oluşturan bütün malzemelerden daha düşük sıcaklıkta eridiği görülüyor. Yani bu alaşımlar ötektiklik (eutectic) özelliğine sahiptirler [68,69]. Bu malzemeler, sanayide birçok kullanım alanına sahiptirler. Düşük erime noktaları nedeniyle fiziksel olarak daha az enerjiyle daha uygun işleme ve kullanılabilirleri olanağı vardır. Bu tür malzemelerin hafızalı alaşım olma olasılıkları diğerlerinden daha fazladır [70, 71].

Çizilen bu grafiklerde saptanan saf metaller, ikili ve üçlü alaşımlar için erime noktaları Tablo 4.9’da verilmiştir. Ayrıca saf metaller için bulunan deneysel değerlerde tabloda gösterilerek karşılaştırma yapılmıştır.

Tabloya bakarak saf Pd, Ni ve Au metalleri için ortalama yer değiştirme yüzde bağlı hataları sırasıyla, %0, %0.63 ve %4.041 olarak hesaplanmıştır ve deneysel değerler ile bulunan değerlerin çok uyumlu olduğu görülmüştür.

Tablo 4.9. Pd, Ni, Au saf metalleri ve $Pd_{0.5}Ni_{0.5}$, $Ni_{0.5}Au_{0.5}$, $Pd_{0.05}Ni_{0.47}Au_{0.48}$, $Pd_{0.10}Ni_{0.45}Au_{0.45}$, $Pd_{0.2}Ni_{0.4}Au_{0.4}$, $Pd_{0.33}Ni_{0.33}Au_{0.33}$, $Pd_{0.5}Ni_{0.25}Au_{0.25}$ alaşımları için hesaplanan erime noktası değerleri ve bulunabilen deneysel değerler [63].

Malzeme	Hesaplanan Erime Noktaları	Deneysel Erime Noktaları
Pd	~1825 K	~1825 K
Ni	~1715 K	~1726 K
Au	~1390 K	~1336 K
$Pd_{0.5}Ni_{0.5}$	~1595 K	-
$Ni_{0.5}Au_{0.5}$	~1355 K	-
$Pd_{0.05}Ni_{0.47}Au_{0.48}$	~1365 K	-
$Pd_{0.10}Ni_{0.45}Au_{0.45}$	~1380 K	-
$Pd_{0.2}Ni_{0.4}Au_{0.4}$	~1450 K	-
$Pd_{0.33}Ni_{0.33}Au_{0.33}$	~1495 K	-
$Pd_{0.5}Ni_{0.25}Au_{0.25}$	~1565 K	-

4.7. Tartışma ve Değerlendirmeler

Bu çalışmada Pd, Ni, Au saf metalleri, bu saf metallere gelen iki farklı ikili alaşımın ve beş farklı üçlü alaşımın fiziksel özellikleri moleküler dinamik yöntemi kullanılarak incelenmiştir. Hesaplanan değerler daha önceki yıllara ait moleküler dinamik çalışmaları ile karşılaştırılmıştır.

Bu çalışmamızda MD simülasyon yöntemi, moleküler dinamik için kullanılan algoritmalar, Sutton Chen, Quantum Sutton-Chen potansiyelleri ve malzemeler hakkında bilgi alınmasını sağlamak için kullanılan istatistiksel çerçeveler hakkında detaylı bilgi verilmiştir.

Hazırlanan bu çalışmada Pd, Ni, Au saf metalleri ve $Pd_{0.5}Ni_{0.5}$, $Ni_{0.5}Au_{0.5}$, $Pd_{0.05}Ni_{0.47}Au_{0.48}$, $Pd_{0.10}Ni_{0.45}Au_{0.45}$, $Pd_{0.2}Ni_{0.4}Au_{0.4}$, $Pd_{0.33}Ni_{0.33}Au_{0.33}$, $Pd_{0.5}Ni_{0.25}Au_{0.25}$ alaşımları için simülasyon sonucunda elastik sabitler, hacim modülü, örgü parametreleri, yoğunluk, ısı sığası, bağlanma enerjisi, termal genişleme katsayısı, entalpi ve erime noktaları tayini yapılmıştır. Hesaplanan değerler bulunabilen deneysel değerlerle karşılaştırılmış ve elde edilen değerlerle uyum içinde olduğu görülmüştür.

Elastik sabitler hesaplanırken Şekil 4.1’de görüldüğü gibi $Pd_{0.5}Ni_{0.5}$ ikili alaşımı kendini oluşturan Pd ve Ni saf metallereinden daha düşük C_{11} elastik sabitine sahip olması $Ni_{0.5}Au_{0.5}$ alaşımın hafızalı metal özelliğinin $Pd_{0.5}Ni_{0.5}$ alaşımında da var olduğu düşünülmektedir. Benzer durum oda sıcaklığında $Ni_{0.5}Au_{0.5}$ alaşımının Au’nun C_{11} değerine yakın çıkması yine bu özelliğın bir sonucu olarak düşünülebilir.

C_{11} elastik sabitleri üçlü alaşımlardaki Pd katkısının arttıkta daha büyük değerler almaktadır. Bu durum Pd katkısının maddenin elastikliğini arttırdığını göstermektedir.

Şekil 4.4’te $Pd_{0.05}Ni_{0.47}Au_{0.48}$ alaşımının $Pd_{0.10}Ni_{0.45}Au_{0.45}$ alaşımından daha yüksek C_{11} elastik sabitine sahip olması $Pd_{0.10}Ni_{0.45}Au_{0.45}$ üçlü alaşımında $Ni_{0.5}Au_{0.5}$ ’ya benzer bir nokta yakaladığını yani hafızalı malzeme özelliğine sahip olabileceğini düşündürmektedir.

C_{12} elastik sabitlerinde $Ni_{0.5}Au_{0.5}$ ’nun en yüksek C_{12} değerine sahip olması, hafızalı

alaşımlardaki asıl etken olan C_{12} elastik sabitinin büyük çıkmasıyla örtüşmektedir. Bu durum $Pd_{0.5}Ni_{0.5}$ 'de doğrulanmaktadır.

Şekil 4.9'da $Ni_{0.5}Au_{0.5}$ alaşımının en yüksek hacim modülüne sahip olması $Pd_{0.5}Ni_{0.5}$ 'nin ise Ni ile çok yakın hacim modülüne sahip olması $Ni_{0.5}Au_{0.5}$ alaşımının çok baskın hacim modülüne sahip olduğunu ve dolayısıyla her zaman eski hallerine dönme eğiliminde olduklarını göstermektedir. Bu ise ikili alaşımın hafızalı alaşım olabilme özelliklerini desteklemektedir. Saf metaller içinde Au en yumuşak metal olmasına rağmen $Ni_{0.5}Au_{0.5}$ ve $Pd_{0.5}Ni_{0.5}$ alaşımlarının kendilerini oluşturan metallere daha sert yapıya sahip olmaktadır. $Ni_{0.5}Au_{0.5}$ yapısına Pd eklendikten sonra yani alaşımlardaki %50'lik oran bozuldukça hacim modülü azalmakta madde yumuşamaktadır.

Şekil 4.13'te %5'lik Paladyum katkısının C_{11} sabitini dikkate değer seviyede arttırmıştır. Pd katkısı %10'a çıktığında C_{11} elastik sabiti $Ni_{0.5}Au_{0.5}$ alaşımının aldığı değer altına düşmektedir. Bu durum başka etkenlerin sonucu da olabilir fakat daha önce söylendiği gibi $Pd_{0.10}Ni_{0.45}Au_{0.45}$ alaşımında yeni bir hafızalı alaşım noktası oluşmuş olabileceği anlaşılmıştır.

Şekil 4.17'de sabit sıcaklıkta Pd miktarının artırılmasıyla yoğunluk değerlerinin yaklaşık parabolik olarak azaldığı izlenmektedir. Ancak bu yoğunluk azalmasına yalnız Pd miktarının artması değil, yüksek yoğunluk değerine sahip saf Au metalinin üçlü alaşımlarda katkısının azaltılmasının da etkili olduğu görülmektedir.

Şekil 4.18 ve Şekil 4.19'da örgü parametresi en yüksek olan malzemenin saf Au metali, örgü parametresi en düşük olan malzemenin saf Ni metali ve ayrıca saf Pd metalinin örgü sabitinin Ni metalinden daha büyüktür. Ancak yoğunluk analizinde Au'nun Pd'den ve Pd'nin Ni'den daha yoğun olduğu bulunmuştur. Au'nun daha yoğun olmasına rağmen hem Pd hem de Ni'den daha büyük örgü sabitine sahip olması, Au metalinin atom numarasının, dolayısıyla atomik yarıçapının diğer saf metallere göre daha büyük olması ile açıklanır. Bu durum Pd ve Ni arasında da geçerlidir. Örgü parametrelerinin sıcaklıkla parabolik olarak değişmesi yayınlanmış diğer çalışmalarla uygunluk göstermektedir.

Entalpi'den elde edilen sonuçlara bakıldığında, Ni saf metalinin en düşük entalpi değerine sahip olduğu görülmüştür. Buda Ni metalinin en zayıf bağlanma enerjisine sahip olduğunu doğrulamaktadır. Ayrıca Pd miktarının arttırılmasıyla alaşımlardaki bağlanma enerjisi arttırmaktadır.

Ortaya çıkan sonuçlara göre Pd'nin %10 ve daha az katkısının olduğu $Ni_{0.5}Au_{0.5}$, $Pd_{0.05}Ni_{0.47}Au_{0.48}$, $Pd_{0.10}Ni_{0.45}Au_{0.45}$ alaşımlarının kendilerini oluşturan saf metallere göre daha düşük sıcaklıkta eridiği görülmüştür. Bu üç alaşımın ötektik malzeme özelliği gösterdiği gözlenmiştir. Paladyum miktarının eklenmesi ötektiklik özelliğini bozmaktadır.

Bu çalışmanın devamı olarak;

1. Alaşımlardaki Pd oranları yükseltilerek her bir alaşımın özelliklerinde meydana gelen değişim incelenebilir.
2. Farklı hızlarda malzemeler soğutularak faz geçişleri ve bu fazlarda meydana gelen yapısal özellikler incelenebilir.
3. Alaşım eritilerek MD simülasyon yöntemiyle viskozite ve difüzyon katsayıları bulunabilir.
4. Bu alaşımlar deneysel yöntemlerle çalışılarak aranan özellikte yeni alaşımlar elde edilebilir.
5. Farklı çalışmalarda katkı atomunun yeri değiştirilerek diğer kombinasyonlarda araştırılabilir.

KAYNAKLAR

- [1] ÖZDAMAR K., Bilgisayar ile Benzetim yöntemleri (Benzetime Giriş) , Anadolu Üniversitesi Yayınları, No.281, ESKİŞEHİR 1988.
- [2] EVANS, M., EVANS, G. J., COFFEY, W.T., GRIGOLINI P., “Molecular Dynamics and Theory of Broad Band Spectroscopy”, Wiley Inc., New York, 1982.
- [3] GRUJICIC, M. and DANG, P., “Computer Simulation of Martensitic Transformation in Fe – Ni Face-Centered Cubic Alloys”, Materials Science and Engineering, A(201): 194-204 1995.
- [4] CONG, H. R., BIAN, X. F., ZHANG, J. X. and LI, H., “Structure Properties of Cu- Ni Alloys at the Rapid Cooling Rate Using Embedded-Atom Method”, Materials Science and Engineering, A326: 343-347, 2002.
- [5] PARRINELLO, M., RAHMAN, A., ” Crystal structure and pair potentials” A molecular dynamics study, Phys. Rev. Lett., 45, No.11, 1196-1199, 1980.
- [6] ERCOLESSI F., “Sprenger Collage in Computational Physics”, ICTP, Trieste, Italy,24-78, 1997.
- [7] RAPAPORT, D. C. “The Art of Molecular Dynamics Simulation”, Cambridge Univ. Press., 8, 2002.
- [8] ÇORUH, A., TOMAK, M., ÇAĞIN, T., ULUDOĞAN, M., "Temperature dependent investigation of technological properties of Pd-Al noble metal alloys" BALKAN PHYSICS LETTERS, Bogazici University Press BPL, 15 (1), 151002, 2009.
- [9] ÇORUH, A., “Molecular Dynamics Investigation of the Dynamic Properties of Pd and Al metals, and their alloys” Doctorate Thesis, Middle East Technical University Graduate School of Natural and Applied Sciences, Ankara-Turkey, 2003.
- [10] ÇORUH, A., SARIBEK, Y., TOMAK, M., ÇAĞIN, T. "Structural properties of bulk Pd_{0.085}Cu_{0.44}Ag_{0.475} ternary alloy" SIXTH INTERNATIONAL CONFERENCE OF THE BALKAN PHYSICAL UNION. AIP Conference Proceedings, Volume 899, pp. 243-244, 2007.

- [11] SARIBEK Y., "Pd_{0.085}Cu_{0.44}Ag_{0.475} Alařımının Katı Faz Fiziksel Özelliklerinin Moleküler Dinamik İncelenmesi" Yüksek Lisans Tezi, Sakarya Üniversitesi 2007.
- [12] AYDIN G., "Au-Ag-Pd üçlü alařımlarının mekanik ve termodinamik özelliklerinin Moleküler Dinamik incelenmesi" Yüksek Lisans Tezi, Sakarya Üniversitesi 2009.
- [13] ÇIPLAK Z., "Ni-Ag alařımlarına Paladyum katkısının termodinamik ve mekaniksel özelliklere etkisinin Moleküler Dinamik incelenmesi" Yüksek lisans Tezi, Sakarya Üniversitesi 2009.
- [14] KART, Ö.S., TOMAK, M., ULUDOĞAN M., ÇAĞIN, T., "Molecular Dynamics Studies on Glass Formation of Pd-Ni Alloys by Rapid Quenching", Turk J. Phys., 30, 319-327, 2006.
- [15] KART, H.H., ULUDOĞAN, M., ÇAĞIN, T., TOMAK, M., Thermodynamically and mechanical properties of Pd-Ag alloys, Computational Materials Science 32, 107-117, 2004.
- [16] QI, Y., ÇAĞIN, T., KIMURA, Y., Gooddard III, W. A., Molecular dynamics simulation of glass formation and crystallization in binary liquid metals ; Cu-Ag and Cu-Ni. Phy. Rev. B, 59, 3527-3533 1999.
- [17] ÇAĞIN, T., DERELİ, G., ULUDOĞAN, M., TOMAK, M., Thermal and mechanical properties of some fcc transition metals Physical Rev. B, 3468-3473, 1999.
- [18] ÇAKMAK, S., ERTUNÇ, E., KARA, ÇAKMAKTEPE, S., Gömülmüş atom potansiyeli kullanarak Nikelin moleküler dinamik simülasyonu, S.D.Ü. Fen Bilimleri Enstitüsü Dergisi, 9, 2, 2004.
- [19] VIYENARD, G., H., GIBSON, J. B., GOLAND, A., N., Miligram, M., "Temperature Dependence of Elastic Constants of EAM of Metals", Phys. Rev., 120-1229, 1960.
- [20] KITTEL, C., "Introduction To Solid State Physics", Wiley, New York, 142-149, 1996.
- [21] FOLIES, S.M., Application of the embedded-atom method to liquid transition metals. Phys. Rev. B. Vol.32, No.6, pp.3409-3415, 1985.
- [22] ITAMI T., MUNAJIRI S., MASAKI, T., AOKI H., ISHII Y., KAMIYAMA T., SENDA Y., SHIMOJIO, F., HOSHINO, K., Structure of liquid Sn over a wide temperature range from neutron scattering experiments and first principal molecular dynamics simulation: A comparison to liquid Pb. Phys. Rev. B. Vol. 67, No. 064201 pp. 1-12, 2003.

- [23] KARIMI, M., STAPAY, G., KAPLAN, T., MOSTALLER, M., "Temperature dependence of the elastic constants on Ni: reliability of EAM in predicting thermal properties", *Modelling Simul. Mater. 2nd ed, Sci. Eng., England*, 337-346, 1997.
- [24] W., H., MILLER, ED., *Dynamics of Molecular Collisions, Parts A and B*, Plenum, New York, 1976.
- [25] DAW, M.S., BASKES, M.I., "Embedded atom method: derivation and application to impurities, surfaces, and other defects in metals", *Phys. Rev. B*, 12: 6443-6453, 1984.
- [26] FINNIS, M. W. and SINCLAIR, J. E., "A Simple empirical N-body potential for transition metals", *Philosophical Magazine A*, 50(1): 45-55, 1984.
- [27] 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., Materials Rev. Science*, 82: 175-180, 1987.
- [28] SUTTON, A. P., CHEN, J., "Long-range Finnis-Sinclair potentials", *Philos. Mag.Lett.*, 61: 139-146, 1990.
- [29] HAASEN, P., "Physical Metallurgy 2nd ed.", Cambridge Univ. Press , UK., 192-200, 1992.
- [30] PORTER, D.A., EASTERLING, K.E., "Phase Transformation In Metals And Alloys 1 2nd ed.", Press Padstow , UK., 57-62, 1992.
- [31] SWOPE, W.C., ANDERSEN, H.C., *Phys. Rev. B* 41, 7042, 1990.
- [32] ALDER, B. J. and WAINWRIGHT, T. E., "Temperature Dependent Lattice Mechanical Properties of some fcc transition Metals", *Journal, Chem. Phys.*, 27-1207, 1957.
- [33] RAHMAN, A., "Embedded-Atom Method ", *Phys. Rev.A* : 136-405, 1964.
- [34] PARRINELLO, M. and RAHMAN, A., "Polymorphic transitions in single crystals: a new molecular dynamics method", *Journal Appl. Phys.*, 52(12): 7182-7190, 1981.
- [35] CARTWRIGHT, J. H. E. and PIRO, O. "The Dynamics of Runge-Kutta Methods." *Int. J. Bifurcations Chaos* 2, 427-449, 1992.
- [36] ASCHER, URI M.; Petzold, Linda Ruth. *Computer methods for ordinary differential equations and differential-algebraic equations*. SIAM, 1998.
- [37] WERLET, L., "Computer Experiments on Classical Fluids. I. Thermodynamical Properties of Lennard-Jones Molecules", *Physical Review*, 159: 98, 1967.

- [38] HAILE, J.M., Molecular Dynamics Simulation, John Wiley and Sons, Inc., New York, 1992.
- [39] GEAR, C.W., Numerical Initial Value Problems in Ordinary Differential Equations:Chapter 9, Prentice Hall, Englewood Cliffs, NJ, 1971.
- [40] RAHMAN A., "Correlations in the Motion of Atoms in Liquid Argon," Phys. Rev., 136 (2A), 405, 1964.
- [41] HOOVER, W.G., Molecular Dynamics, Lecture notes in Physics, (p-258) (Springer-Verlag, Berlin), 1986.
- [42] HOOVER, W.G., Computational Statistical Mechanics, Elsevier, Amsterdam, 1991.
- [43] ALLEN, M.P., DESLEY, D.J., Computer Simulation of Liquids, (Clarendon Press – Oxford), 1997.
- [44] EVANS, D.J. and MORRIS, G., Statistical Mechanics of Nonequilibrium Liquids, Academic, New York, 1990.
- [45] ANDERSEN, H. C., CHEM, J., Phys. 72, 2384, 1980.
- [46] NOSÉ, S., Mol. Phys. 52, 255, 1984a.
- [47] NOSÉ, S., J. Chem. Phys. 81 511, 1984b.
- [48] HANSEN, J.P., MCDONALD, I.R., Theory of Simple Liquids, (Academic Press, London), 1986.
- [49] ADAMS, D.J., Chem. Phys. Lett. 62, 629, 1979.
- [50] ADAMS, D.J., Chem. Phys. Lett. 62, 629, 1979.
- [51] SUTTON, A.P., PETHICA, J.B., RAFAII-TABAR, H., NIEMINEN, J.A., Mechanical properties of metals at the nanometer scale in Electron theory in alloy design, Ed. Pettifor D.G. and Cottrell A.H., Institute of materials, The Alden Press Ltd., Oxford, 191-233, 1992.
- [52] ÖZGEN, S., DURUK, E., Molecular dynamics simulation of diffusionless phase transformation in quenched NiAl alloy model, J. Physics and Chemistry of Solids, 64, No.3, 459-464, 2003.
- [53] PARINELLO M., RAHMAN A., 1982, J. Chem. Phys. 76 2662; RAY J R 1988 Comput. Phys. Rep. 8 109; RAY R., 1982 J. Appl. Phys. 53 6441; WOLF R J., MANSOUR K A., LEE M W. and RAY J R 1992 Phys. Rev. B 46 8027.

- [54] YUE Qi, ÇAĞIN T., KIMURA Y., GODDARD, W.A. III, Phys. Rev. B 59, 3527, 1999.
- [55] M. T. DOVE, Introduction to Lattice Dynamics, (Cambridge, New York), 1993.
- [56] ÇAĞIN, T., RAY, J.R., Phys. Rev. A 37, 247, 1988.
- [57] SIMMONS, G., WANG, H., Single Crystal Elastic Constants and Calculated Aggregate Properties: A Handbook, 2nd ed., MIT Press, Cambridge, MA, 1971.
- [58] LEE B.J., Shim J.H., M. I. Baskes, Phys. Rev. B 68, 144112, 2003.
- [59] PANDYA, C.V., et al., Physical B 307, 138-149, 2001.
- [60] ANTONOV, V.N., YU., V., MILMAN, V.V. NEMOSHKALENKO, A.V. ZHALKO-TITARENKO, Z., Phys. B: Condens. Matter 79, 223, 1990.
- [61] CLERI, F. and ROSATO, V., Phys. Rev. B 48, 22, 1993.
- [62] PAPANICOLAOU, N.I., CHAMATI, H., EVANGELAKIS, G.A., PAPACONSTANTOPOULOS, D.A., Computational Materials Science 27, 191-198, 2003.
- [63] RAZNJEVIC, K. Handbook of Thermodynamic Tablos and Charts, MC Graw Hill Company, 1976.
- [64] HODDESON, L., HENRIKSEN, P.W., MEADE, R.A., WESTFALL, C. , Critical Assembly-A Technical History of Los Alamos during the Oppenheimer Years 1993-1995. Cambridge University Press, 1993.
- [65] PEARSON, W.B., A Handbook of Lattice Spacings and Structures of Metals and Alloys, Pergamon, Oxford, 1967.
- [66] Dwight E. Gray, coordinatng editor, ‘American Institute of Physic Handbook, third edition, McGraw-Hill, Inc, USA 1972.
- [67] BRAIN, I., Thermochemical data of pure substance, Weinheim, germany: VCH, 1989.
- [68] JIN-SHYONG, L., CHIEN-CHON, C., WEI-GUANG D. E., Tzeng-Feng Liu journal of materials processing technology 206, 425–430, 2008.
- [69] BORISOV, D. B., et. al., Powder Metallurgy and Metal Ceramics, Vol. 46, Nos. 3-4, 2007.

- [70] WANG, et al., "Application of Au-Sn Eutectic Bonding in Hermetic Radio-Frequency Microelectromechanical System Wafer LevelPackaging", Journal of Electronic Materials, 2006.
- [71] GRUMMONA, D. S., SHAWB, J. A., FOLTZ, J., Materials Science and Engineering A 438–440, 1113–1118, 2006.

ÖZGEÇMİŞ

Hasan Karagöz, 01.10.1985’de Zonguldak’ta doğdu. İlk, orta ve lise eğitimini Zonguldak’ta tamamladı. 2003 yılında Kilimli Süper Lisesinden mezun oldu. Aynı yıl Karadeniz Teknik Üniversite Fizik bölümünü kazandı. 2004 yılında Uludağ Üniversitesi fizik bölümüne yatay geçiş yaptı. 2007 yılında Fizik Bölüm ikincisi olarak fizik bölümünü başarıyla tamamlamıştır. Aynı yıl Sakarya Üniversitesi Fizik bölümü Katıhal Fiziği anabilim dalında yüksek lisans öğrenimine başladı. Halen aynı bölümde öğretimine devam etmektedir.