

T.C.  
SAKARYA ÜNİVERSİTESİ  
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

**Au - Ag- Pd ÜÇLÜ ALAŞIMLARININ MEKANİK VE  
TERMODİNAMİK ÖZELLİKLERİNİN MOLEKÜLER  
DİNAMİK İNCELENMESİ**

**YÜKSEK LİSANS TEZİ**

**Güven AYDIN**

**Enstitü Anabilim Dalı : FİZİK**

**Tez Danışmanı : Yrd. Doç. Dr. ALİ ÇORUH**

**Haziran 2009**

**Au - Ag- Pd ÜÇLÜ ALAŞIMLARININ MEKANİK VE  
TERMODİNAMİK ÖZELLİKLERİNİN MOLEKÜLER  
DİNAMİK İNCELENMESİ**

**YÜKSEK LİSANS TEZİ**

**Güven AYDIN**

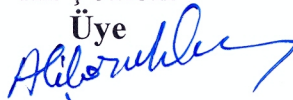
**Enstitü Anabilim Dalı : FİZİK**

**Bu tez 19 / 06 / 2009 tarihinde aşağıdaki jüri tarafından oybirliği ile kabul edilmiştir.**

**Prof. Dr.  
Cuma BİNDAL  
Jüri Başkanı**

**Yrd. Doç. Dr.  
Ali ÇORUH  
Üye**

**Yrd. Doç. Dr.  
Sadık BAĞCI  
Üye**



## ÖNSÖZ

Fcc yapısındaki geçiş metalleri ve bunlardan oluşan alaşımların havacılık, tıp, dişhekimliği ve askeri alanlarda geniş bir uygulama alanı bulmuştur. Yüksek kalitede ve istenen özelliklere haiz (sıcaklık, yoğunluk, oksitlenme v.b.) metal ve alaşım arayışı yukarıda sayılan nedenlerden dolayı geçiş metali ve alaşımlarına yönelime sebep olmuştur. Bu nedenle bu malzemelerin özelliklerinin saptanması ve hızlı bir çalışma için MD simülasyonlar geliştirilmiştir. Biz bu çalışmamızda MD simülasyon kullanarak oksit yapıya sahip olmayan Au, Ag, Pd metal ve alaşımlarının katı faz özellikleri araştırılmıştır.

Yüksek lisans eğitimim boyunca ve tez çalışmalarım süresince yaptığı yardım ve katkılardan dolayı ve özellikle göstermiş olduğu sabırdan dolayı sayın hocamız Yrd. Doç. Dr. Ali ÇORUH'a teşekkürlerimi sunarım.

Çalışmalarım sırasında bana yapmış oldukları maddi ve manevi destekten dolayı ailemin tüm fertlerine müteşekkirim.

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

# İÇİNDEKİLER

ÖNSÖZ.....	ii
İÇİNDEKİLER.....	iii
SİMGELER VE KISALTMALAR.....	v
ŞEKİLLER LİSTESİ.....	vii
TABLolar LİSTESİ.....	x
ÖZET.....	xii
SUMMARY.....	xiii
BÖLÜM 1. GİRİŞ.....	1
BÖLÜM 2. MOLEKÜLER DİNAMİK SİMÜLASYON.....	4
2.1. Moleküler Simülasyonlar İçin Modeller.....	4
2.2. Moleküler Dinamik.....	6
2.3. Mikrokanonik Çerçeve (EVN) .....	8
2.4. İzobarik-İzoentalpik Çerçeve (HPN).....	8
2.5. İzotermal-İzobarik Çerçeve(TPN).....	10
2.6. Moleküler Dinamikler İçin Algoritmalar.....	11
2.7. Gear'ın Öngörme-Düzeltilme Algoritması.....	12
2.8. Periyodik Sınır Koşulları.....	14
BÖLÜM 3. ETKİLEŞİM POTANSİYELİ.....	17
3.1. Quantum-Sutton Chen Potansiyeli.....	17
3.2. Rastgele Alaşım Modeli.....	19
3.3 Quantum-Sutton Chen Potansiyeli Parametrizasyonu.....	21

BÖLÜM 4. SONUÇLAR.....	27
4.1. Elastik Sabitler.....	27
4.2. Yoğunluk, Örgü Parametresi Ve Bağlanma Enerjisi.....	34
4.3 Termal Genleşme katsayısı.....	39
4.4. Isı Sığası.....	40
4.5. Erime Sıcaklıklarının Belirlenmesi.....	43
4.6 Tartışma Ve Öneriler.....	52
KAYNAKLAR .....	53
ÖZGEÇMİŞ.....	56

## SİMGELER VE KISALTMALAR

V	: Hacim
a	: Örgü parametresi
MD	: Moleküler dinamik
N	: Atom sayısı
E	: Enerji
$F_i$	: i Atomu Üzerine Gelen Kuvvet
P	: Basınç
W	: Piston kütlesi
G	: Metrik tensor
H	: Entalpi
$\Delta H$	: Karışımın entalpisi
s	: Serbestlik derecesi
$P_v$	: v'nin eşlenik momentum
$P_{ex}$	: Dış basınç
$R_c$	: Kesme yarıçapı
$E_{tot.}$	: Toplam enerji
$\rho_i$	: Yoğunluk
$\alpha$	: Uzunluk ölçü parametresi
c	: Çekici terimlerin boyutsuz ölçü parametresi
$\varepsilon$	: Enerji boyutlu parameter
n,m	: Elastik kararlılığı sağlayan tamsayı parametreleri
$E_{coh.}$	: Bağlanma enerjisi
f.c.c.	: Yüzey merkezli kübik örgü yapısı
$r_s$	: s. Kordinasyon kabuğunun yarıçapı
$Z_s$	: Kordinasyon sayısı
$E^r$	: Rastgele alaşımların enerjisi

- $S_m^{AA}$  : Boyutsuz parametreler  
 $S_n^{AA}$   
 $\Omega$  : Atomik hakim  
SC : Sutton-Chen  
Q-SC : Quantum-Sutton Chen  
 $W_x^T, W_x^L$  : Fonon frekansları  
 $E^A, E^B$  : Saf A ve B atomlarının bağlanma enerjileri  
 $U(r_{ij})$  : i ve j atomları arasındaki potansiyel enerji

## ŞEKİLLER LİSTESİ

Şekil 2.1	Simülasyon modeli .....	4
Şekil 2.2	Moleküler dinamik simülasyonda hiyerarşi ilkesi .....	7
Şekil 2.3	Periyodik sınır koşullarının iki boyutta gösterimi .....	15
Şekil 4.1	Pd, Au, $Au_{0.40}Ag_{0.20}Pd_{0.40}$ , $Au_{0.33}Ag_{0.33}Pd_{0.33}$ ve Ag için simülasyon sonucu bulunan sıcaklığa bağlı $C_{11}$ elastik sabitleri ve fit grafikleri.....	28
Şekil 4.2	Pd, Au, $Au_{0.25}Ag_{0.25}Pd_{0.50}$ , $Au_{0.50}Ag_{0.25}Pd_{0.25}$ ve Ag için simülasyon sonucu bulunan sıcaklığa bağlı $C_{11}$ elastik sabitleri ve fit grafikleri	28
Şekil 4.3	Pd, Au, $Au_{0.20}Ag_{0.40}Pd_{0.40}$ , $Au_{0.40}Ag_{0.40}Pd_{0.20}$ ve Ag için simülasyon sonucu bulunan sıcaklığa bağlı $C_{11}$ elastik sabitleri ve fit grafikleri	29
Şekil 4.4	$Au_{0.33}Ag_{0.33}Pd_{0.33}$ , $Au_{0.25}Ag_{0.25}Pd_{0.50}$ , $Au_{0.20}Ag_{0.40}Pd_{0.40}$ , $Au_{0.50}Ag_{0.25}Pd_{0.25}$ , $Au_{0.40}Ag_{0.20}Pd_{0.40}$ ve $Au_{0.40}Ag_{0.40}Pd_{0.20}$ için simülasyon sonucu bulunan sıcaklığa bağlı $C_{11}$ elastik sabitleri ve fit grafikleri.....	29
Şekil 4.5	Pd, Au, $Au_{0.40}Ag_{0.20}Pd_{0.40}$ , $Au_{0.33}Ag_{0.33}Pd_{0.33}$ ve Ag için simülasyon sonucu bulunan sıcaklığa bağlı $C_{12}$ elastik sabitleri ve fit grafikleri	30
Şekil 4.6	Pd, Au, $Au_{0.50}Ag_{0.25}Pd_{0.25}$ , $Au_{0.25}Ag_{0.25}Pd_{0.50}$ ve Ag için simülasyon sonucu bulunan sıcaklığa bağlı $C_{12}$ elastik sabitleri ve fit grafikleri	31
Şekil 4.7	Pd, Au, $Au_{0.40}Ag_{0.40}Pd_{0.20}$ , $Au_{0.20}Ag_{0.40}Pd_{0.40}$ ve Ag için simülasyon sonucu bulunan sıcaklığa bağlı $C_{12}$ elastik sabitleri ve fit grafikleri	32
Şekil 4.8	$Au_{0.33}Ag_{0.33}Pd_{0.33}$ , $Au_{0.25}Ag_{0.25}Pd_{0.50}$ , $Au_{0.20}Ag_{0.40}Pd_{0.40}$ ,	32



	$Au_{0.50}Ag_{0.25}Pd_{0.25}$ , $Au_{0.40}Ag_{0.20}Pd_{0.40}$ ve $Au_{0.40}Ag_{0.40}Pd_{0.20}$ için simülasyon sonucu bulunan sıcaklığa bağlı $C_{12}$ elastik sabitleri ve fit grafikleri.....	
Şekil 4.9	Ag, Au, Pd, $Au_{0.40}Ag_{0.20}Pd_{0.40}$ ve $Au_{0.33}Ag_{0.33}Pd_{0.33}$ için simülasyon sonucu hesaplanmış örgü parametreleri ve fit grafiği.....	35
Şekil 4.10	Ag, Au, Pd, $Au_{0.50}Ag_{0.25}Pd_{0.25}$ ve $Au_{0.25}Ag_{0.25}Pd_{0.5}$ için simülasyon sonucu hesaplanmış örgü parametreleri ve fit grafiği.....	36
Şekil 4.11	Ag, Au, Pd, $Au_{0.40}Ag_{0.40}Pd_{0.20}$ ve $Au_{0.20}Ag_{0.40}Pd_{0.40}$ için simülasyon sonucu hesaplanmış örgü parametreleri ve fit grafiği.....	36
Şekil 4.12	$Au_{0.33}Ag_{0.33}Pd_{0.33}$ , $Au_{0.25}Ag_{0.25}Pd_{0.50}$ , $Au_{0.20}Ag_{0.40}Pd_{0.40}$ , $Au_{0.50}Ag_{0.25}Pd_{0.25}$ , $Au_{0.40}Ag_{0.20}Pd_{0.40}$ ve $Au_{0.40}Ag_{0.40}Pd_{0.20}$ için simülasyon sonucu hesaplanmış örgü parametreleri ve fit grafiği	37
Şekil 4.13	Au, Ag, $Au_{0.33}Ag_{0.33}Pd_{0.33}$ , $Au_{0.25}Ag_{0.25}Pd_{0.50}$ , $Au_{0.20}Ag_{0.40}Pd_{0.40}$ , $Au_{0.50}Ag_{0.25}Pd_{0.25}$ , $Au_{0.40}Ag_{0.20}Pd_{0.40}$ , $Au_{0.40}Ag_{0.40}Pd_{0.20}$ ve Pd için simülasyon sonucu hesaplanmış yoğunluk değerleri.....	37
Şekil 4.14	Ag, $Au_{0.33}Ag_{0.33}Pd_{0.33}$ , $Au_{0.40}Ag_{0.20}Pd_{0.40}$ , Au ve Pd için Q-SC kuvvet alanı kullanılarak hesaplanmış entalpinin sıcaklıkla değişim değerleri ve fit grafiği.....	40
Şekil 4.15	Ag, $Au_{0.40}Ag_{0.40}Pd_{0.20}$ , $Au_{0.20}Ag_{0.40}Pd_{0.40}$ , Au ve Pd için Q-SC kuvvet alanı kullanılarak hesaplanmış entalpinin sıcaklıkla değişim değerleri ve fit grafiği.....	39
Şekil 4.16	Ag, $Au_{0.50}Ag_{0.25}Pd_{0.25}$ , $Au_{0.25}Ag_{0.25}Pd_{0.50}$ , Au ve Pd için Q-SC kuvvet alanı kullanılarak hesaplanmış entalpinin sıcaklıkla değişim değerleri ve fit grafiği.....	42
Şekil 4.17	$Au_{0.33}Ag_{0.33}Pd_{0.33}$ , $Au_{0.25}Ag_{0.25}Pd_{0.50}$ , $Au_{0.20}Ag_{0.40}Pd_{0.40}$ , $Au_{0.50}Ag_{0.25}Pd_{0.25}$ , $Au_{0.40}Ag_{0.20}Pd_{0.40}$ ve $Au_{0.40}Ag_{0.40}Pd_{0.20}$ için Q-SC kuvvet alanı kullanılarak hesaplanmış entalpinin sıcaklıkla değişim değerleri ve fit grafiği.....	42
Şekil 4.18	Ag, $Au_{0.33}Ag_{0.33}Pd_{0.33}$ , $Au_{0.50}Ag_{0.25}Pd_{0.25}$ , $Au_{0.40}Ag_{0.20}Pd_{0.40}$ , Au ve Pd için entalpinin sıcaklıkla değişim	44

	grafığı.....	
Şekil 4.19	Au, Au <sub>0.40</sub> Ag <sub>0.20</sub> Pd <sub>0.40</sub> , Pd ve Au için yoğunluğun sıcaklıkla değişim grafığı.....	45
Şekil 4.20	Au'nun simüle edilen erime noktası civarındaki yerel ortalama kare yerdeğiřtirmesi.....	45
Şekil 4.21	Ag'nin simüle edilen erime noktası civarındaki yerel ortalama kare yerdeğiřtirmesi.....	46
Şekil 4.22	Pd'nin simüle edilen erime noktası civarındaki yerel ortalama kare yerdeğiřtirmesi.....	46
Şeki 14.23	Au <sub>0.33</sub> Ag <sub>0.33</sub> Pd <sub>0.33</sub> 'ün erime noktası civarındaki yerel ortalama kare yerdeğiřtirmesi.....	47
Şekil 4.24	Au <sub>0.25</sub> Ag <sub>0.25</sub> Pd <sub>0.50</sub> 'nin erime noktası civarındaki yerel ortalama kare yerdeğiřtirmesi.....	47
Şekil 4.25	Au <sub>0.20</sub> Ag <sub>0.40</sub> Pd <sub>0.40</sub> 'ın erime noktası civarındaki yerel ortalama kare yerdeğiřtirmesi.....	48
Şekil 4.26	Au <sub>0.50</sub> Ag <sub>0.25</sub> Pd <sub>0.25</sub> 'in erime noktası civarındaki yerel ortalama kare yerdeğiřtirmesi.....	48
Şekil 4.27	Au <sub>0.40</sub> Ag <sub>0.20</sub> Pd <sub>0.40</sub> 'ın erime noktası civarındaki yerel ortalama kare yerdeğiřtirmesi.....	49
Şekil 4.28	Au <sub>0.40</sub> Ag <sub>0.40</sub> Pd <sub>0.20</sub> 'nin erime noktası civarındaki yerel ortalama kare yerdeğiřtirmesi.....	49
Şekil 4.29	Au <sub>0.40</sub> Ag <sub>0.40</sub> Pd <sub>0.20</sub> 'nin erime sıcaklığını tespit eden radyal dagılım fonksiyonu.....	51

## TABLolar LİSTESİ

Tablo 2.1	Öngörme-düzeltilme algoritmasının $\alpha_i$ değerleri .....	14
Tablo 3.1	Pd, Au ve Ag için Q-SC parametreleri.....	26
Tablo 4.1	Pd, Au ve Ag saf metalleri ve alaşımları için $C_{11}$ ve $C_{12}$ 'nin sıcaklığa bağlı birinci dereceden fit fonksiyonunun "a" ve "b" sabitleri.....	33
Tablo 4.2	Pd, Ag ve Au için 0 ve 300 K'deki sıcaklıklarda Q-SC kuvvet alanı kullanılarak simülasyon sonucunda $C_{11}$ , $C_{12}$ ve $B$ 'ler için hesaplanmış teorik, deneysel değerler ve % bağıl hatalar.....	34
Tablo 4.3	Pd, Ag, Au alaşımları için 0 ve 300 K'deki sıcaklıklarda Q-SC kuvvet alanı kullanılarak simülasyon sonucunda $C_{11}$ , $C_{12}$ ve $B$ için hesaplanmış teorik değerler.....	34
Tablo 4.4	Pd, Ag, Au saf metalleri için 0 ve 300 K'deki sıcaklıklarda Q-SC kuvvet alanı kullanılarak hesaplanmış ( $a$ ) örgü parametresi, ( $E_c$ ) bağlanma enerjisi ve yoğunluk için teorik, deneysel değerler ve % bağıl hatalar.....	38
Tablo 4.5	Pd, Ag ve Au'dan oluşan alaşımlar için 0 ve 300 K'deki sıcaklıklarda Q-SC kuvvet alanı kullanılarak hesaplanmış ( $a$ ) örgü parametresi ve deneysel değerleri, ( $E_c$ ) bağlanma enerjisi ve yoğunluk için teorik değerler.....	39
Tablo 4.6	Pd, Ag, Au saf metalleri ve alaşımları için 0 ve 300 K'deki sıcaklıklarda Q-SC kuvvet alanı kullanılarak hesaplanmış $\alpha(T)$ termal genleşme katsayısı için teorik ve deneysel değerler.....	40
Tablo 4.7	Pd, Ag, Au saf metalleri ve alaşımlar için 0 ve 300 K'deki sıcaklıklarda Q-SC kuvvet alanı kullanılarak hesaplanmış $C_p$ ısı sığası için teorik ve deneysel değerler.....	43

Tablo 4.8	Au, Ag, Pd saf metalleri için Q-SC kuvvet alanı kullanılarak hesaplanmış teoriksel ve deneysel erime sıcaklığı noktası.....	50
Tablo 4.9	Au, Ag, Pd'dan oluşan alaşımlar için Q-SC kuvvet alanı kullanılarak hesaplanmış teorik erime sıcaklığı noktası.....	50

## ÖZET

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

Paladyum (Pd), Altın (Au) ve Gümüş (Ag) 'ün ve bu metallerin farklı konsantrasyondaki alaşımlarının ( $Au_{33}Ag_{33}Pd_{33}$ ,  $Au_{25}Ag_{25}Pd_{50}$ ,  $Au_{20}Ag_{40}Pd_{40}$ ,  $Au_{50}Ag_{25}Pd_{25}$ ,  $Au_{40}Ag_{20}Pd_{40}$ ,  $Au_{40}Ag_{40}Pd_{20}$ ) örgü sabiti, yoğunluğu, enthalpisi, elastik sabitleri, ısı sığası gibi mekanik özellikleri Quantum Sutton-Chen (Q-SC) potansiyeli kullanılarak, moleküler dinamik simülasyon yöntemi ile incelenmiştir. Yapılan hesaplamalar katı yapı için gerçekleşmiştir.

Araştırmalarımıza göre, bugüne kadar moleküler dinamik simülasyon ile f.c.c. yapıdaki iki metalden oluşan alaşımlar incelenirken, bu çalışmada ve üç f.c.c. metalden oluşan alaşımlar incelenmiştir. Simülasyon için gerekli bir özellik olan Rafii-Tabar birleştirme kuramının üçlü metal alaşımları içinde uygulanabilirliği görülmüştür. Ayrıca farklı konsantrasyondaki alaşımların mekanik özelliklerinin sıcaklığa bağlılığı araştırılmıştır.

# **MOLECULAR DYNAMICS INVESTIGATION OF MECHANIC AND THERMODYNAMIC PROPERTIES OF Au - Ag - Pd TERNARY ALLOYS**

## **SUMMARY**

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

Mechanical properties of palladium (Pd), gold (Au) and silver (Ag) and their ternary alloys in the following concentrations ( $\text{Au}_{33}\text{Ag}_{33}\text{Pd}_{33}$ ,  $\text{Au}_{25}\text{Ag}_{25}\text{Pd}_{50}$ ,  $\text{Au}_{20}\text{Ag}_{40}\text{Pd}_{40}$ ,  $\text{Au}_{50}\text{Ag}_{25}\text{Pd}_{25}$ ,  $\text{Au}_{40}\text{Ag}_{20}\text{Pd}_{40}$ ,  $\text{Au}_{40}\text{Ag}_{40}\text{Pd}_{20}$ ) are studied by using by using molecular dynamics with Quantum Sutton-Chen (Q-SC) potential. Cell constants, densities, enthalpies, elastic constants and heat capacities are investigated. Calculations are performed in the solid phase.

To the out best of our knowledge, this is the first ternary alloy study by molecular dynamics. To realize this aim, Ruffi-Tabar combination rules are used and it is showed that these combination rules are valid for ternary alloys also. Additionally, temperature dependence of mechanical properties of alloys is investigated.

## BÖLÜM 1. GİRİŞ

Paladyum teknoloji ve bilimde çok önemli bir materyaldir. Paladyum üzerinde birçok teorik ve deneysel çalışmalar gerçekleştirilmiştir. Paladyum çok önemli fiziksel özelliklere sahiptir. Atomik ağırlığı normal koşullarda 106.7 g/mol, yoğunluğu 293 K de  $12,02 \text{ gr/cm}^3$ , erime noktası 1827.15 K 'dir [1].

Palladyum, bütün soy grubundaki elementler gibi nispeten düşük özdirenç, yüksek sıcaklık direnç katsayısına sahiptir. Palladyum, önemli bir geçiş metalidir. Çünkü tıp, nanoteknoloji, eletronik, yarıiletken, kimya teknolojisi, mücevhercilik, otomotiv ve uzay endüstrisinde geniş bir kullanım alanı vardır. Palladyum'un izotopları, hidrojene yüksek bir kimyasal ilgisi olduğu için medikal ilaçlarda katalizör olarak kullanılmaya başlanmıştır[2]. Paladyum tıp teknolojisinde, akciğer kanser hücreleri, hücre farklılaşması ve hemeostaside kullanılır[3,4,5]. Diğer önemli bir kullanım alanı prostat kanser tedavisidir[6,7,8].

Altın (Au) çok inert olduğundan, büyük bir kısmı doğal halde metalik olarak bulunur. Altın yüksek derecede dövülebilen, yani levha haline getirilebilen bir metaldir. 1g altından  $1\text{m}^2$  yüzeyli yaprak (varak) veya 2 km uzunlukta bir tel hazırlanabilir. Altının atom numarası 79, sembolü Au, elektron dizilişi  $5d^{10}6s^1$ , erime noktası 1064 C , kaynama noktası 2807 C ve yoğunluğu  $19,28 \text{ g.cm}^3$  'dür [9].

Altın elektrokimyasal seride hidrojenin oldukça üst tarafında yer aldığından, nitrik asit gibi kuvvetli yükseltgen maddelerle bile reaksiyona girmeyecek kadar soy bir metaldir [9].

Gümüş (Ag) doğal halde nadiren bulunur. Gümüşün aton numarası 47, sembolü Ag, elektron dizilişi  $4d^{10}5s^1$ , erime noktası 962 C, kaynama noktası 2807 C ve yoğunluğu  $10,50\text{g.cm}^{-3}$  'dür [9].

Teknolojinin hızla gelişmesi ve yaklaşık son yirmi beş yıl içerisinde günlük hayatımızda bilgisayar sistemlerinin daha da artması dikkatleri bilgisayar hesaplamalarına çekmiştir.

Bilimsel çalışmalar da bilgisayar ortamlarında modellenerek simülasyon tekniği gelişmiş ve fiziksel sistemler gerçeğine benzeştirilerek çalışılmıştır. Deney ve Teorinin yetersiz kaldığı hallerde bilgisayar simülasyonlarından faydalanmak çok yararlı çözümler sunmuştur [10].

Bilimsel alanda MD yöntemiyle daha önceki yıllara ait birçok çalışmalar olmuştur. Bunlardan biri Kart ve arkadaşlarının, Pd-Ni alaşımının  $Pd_{1-x}Ni_x$  formundaki farklı konsantrasyonlarını sabit basınç-sabit sıcaklık sistemi olan TPN'de ve sabit hacim-sabit sıcaklık sistemi TVN'de hızlı soğutma ile atomik alandaki cam oluşumunu inceledikleri çalışmadır [11].

Çoruh A., MD Simülasyon yöntemi ile TPN ve EVN çerçevelerde Pd-Al alaşımının değişik konsantrasyonlarda yapısal ve dinamik yapı fiziksel özelliklerini çalışmıştır. Katı alaşım için elastik sabitler, hacim modülü, alaşım yapma isteği yanında sıvı yapı araştırması olarak erime noktası tayini, difüzyon, viskosite ve dinamik yapı faktörü hesaplamaları yapmıştır [12,13].

Çoruh ve Saribek  $Pd_{0.085}Cu_{0.44}Ag_{0.475}$  üçlü alaşımının katı yapı fiziksel özelliklerini TPN ve EVN çerçeve kullanarak MD Simülasyon yöntemi ile çalışmış, elastik sabitler, hacim modülü, örgü parametreleri, ısıl genleşme, ısı sığası ve erime noktası tayini yapmıştır [14].

Qi ve arkadaşları sabit basınç ve sabit sıcaklıkta MD Simülasyon yöntemi ile  $Cu_4Ag_6$  sıvı metalinin cam dönüşüm yeteneğini ve yapısını çok farklı soğutma hızlarında denemişlerdir [15].

Yine Qi ve arkadaşları EAM'ni kullanarak sabit sıcaklık ve sabit basınç altında moleküler dinamik tekniğiyle cam formundaki Pd-Ni alaşımının farklı soğutma hızlarında atomik boyuttaki bir açıklamasını vermişlerdir [16].

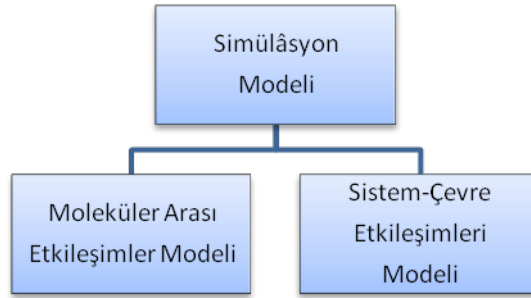


Kart ve arkadaşları saf Paladyum (Pd) ve Gümüőü (Ag) ve Pd-Ag alaőımlarını  $Pd_{1-x}Ag_x$  formunda Moleküler Dinamik yöntemiyle, mekaniksel ve termodinamiksel özelliklerini Sutton-Chen (SC) ve Quantum Sutton-Chen (Q-SC) potansiyel fonksiyonlarını kullanarak ele almıőlardır. Kart ve arkadaşlarının bu çalışmasında Q-SC potansiyeli ile elde edilen simölasyon sonuçlarının, SC potansiyeli ile elde edilen simölasyon sonuçlarına göre deneysel verilere daha uygun olduėu ortaya çıkmıőtır [17].

## BÖLÜM 2. MOLEKÜLER DİNAMİK SIMÜLASYON

### 2.1. Moleküler Simülasyonlar İçin Modeller

Bir bilgisayar simülasyonu değerlidir. Çünkü kesin olarak tanımlanmış ilgilenilen materyalin tam tanımlanmış modellemesidir. Aslında model iki bileşenlidir: biri, moleküller arası etkileşim için bir model oluşturma, diğeri moleküller ve çevresi arasındaki etkileşim için yani sistem ve çevresi arasındaki etkileşim için model oluşturmadır [10].



Şekil 2.1 Simülasyon modeli

Moleküler etkileşimler modeli moleküller arası kuvvet kanunlarını veya eşdeğeri olarak moleküller arası potansiyel enerji fonksiyonunu içerir. Bu potansiyel fonksiyon tam olarak birbirinden ayrı moleküllerin geometrik şekillerini ya da daha kesin olarak onların elektron bulutlarını tanımlar. Bu yüzden potansiyel fonksiyonunu tanımladığımız zaman moleküllerin simetrisini ve onların katı veya esnek olup olmadığını saptarız. Her bir molekül etkileşim mesafesinde yer işgal eder. Bir moleküler modelde, potansiyel fonksiyonun sayısal bir şekli kesin olarak tanımlanmalıdır. Bu işlemde, molekül ve atomları küresel simetrik olarak düşünürüz. Böyle  $N$  atom için moleküller arası potansiyel fonksiyonu  $U(r^N)$  olarak temsil

edilir.  $r^N$  gösterimi vektör kümelerini temsil eder ki  $r^N = \{r_1, r_2, r_3, \dots, r_N\}$  atomik kütle merkezlerinin yeridir.  $r^N$  kümesinin değerlerini saptadığımız zaman bir sistemin biçimini (konumunu) kesin olarak tanımlarız. Makroskobik özellikler sadece ortalamalardır.  $r^N$  konuma bağlı özellikleri ifade eder[10].

Çoğu simülasyonda moleküller arası potansiyel enerji izole edilmiş çift etkileşmelerin katkısı olarak adlandırılır. Bu katkı aşağıdaki gibi ifade edilir.

$$U = \sum_{i < j} u(r_{ij}) \quad (2.1)$$

Burada  $u(r_{ij})$  bir çift potansiyel enerji fonksiyonudur.  $r_{ij}$ ;  $i$  ve  $j$  molekülleri arasındaki mesafenin bir ölçüsüdür. Moleküller arasındaki kuvvetler korunumludur, ve bu yüzden  $i$  molekülü üzerindeki kuvvet potansiyelle

$$F_i = -\frac{\partial U(r^N)}{\partial r_i} \quad (2.2)$$

olarak ilişkilidir. Burada  $\partial/\partial r$  gradient işlecini temsil eder. Çiftleşme potansiyeli ve onun bileşke kuvveti şekil'de gösterilmiştir. Kural olarak itici kuvvetler pozitif çekici kuvvetler negatiftir [10].

Simüle edilmiş modelin ikinci kısmı moleküllerin çevreleri ile etkileşmeleri olarak tanımlanan sınır şartlarını kapsar. Bu, molekülün sınırlarla nasıl etkileştiğini tanımlar. Yinede sınır koşullarında genellikle bazı serbestlikler var olur. Örnek olarak küçük sistemlerde hacimsel-akışkanı engellemek için katı sınır şartlarından sakınmak isteriz. Sıvı-sıvı ve sıvı-katı ara yüzleri gibi düzensiz bölgeler simüle edilirken sonra sınır koşullarında benzer şartlara ihtiyaç vardır. Sistemlerin sınırları izole edilmiş kabul edilir, bundan dolayı sistem ve çevresi arasındaki etkileşmeleri yok sayılır [10].

## 2.2. Moleküler Dinamik

Moleküler dinamik iki genel biçimi kapsar: biri dengedeki sistem için, bir başkası dengeden uzak sistemler için. 1950'lerin sonlarında Alder ve Wainwright tarafından tanımlandığı gibi[25], denge durumu moleküler dinamik sistemleri sabit  $V$  hacminde molekül sayısı sabit  $N$  olan, toplam enerjisi sabit izole edilmiş bir sisteme uygulamıştır. Burada  $E$  moleküler kinetik ve potansiyel enerjilerin toplamıdır. Bu yüzden  $N$ ,  $V$  ve  $E$  değişkenleri termodinamik durumu belirtir [10].

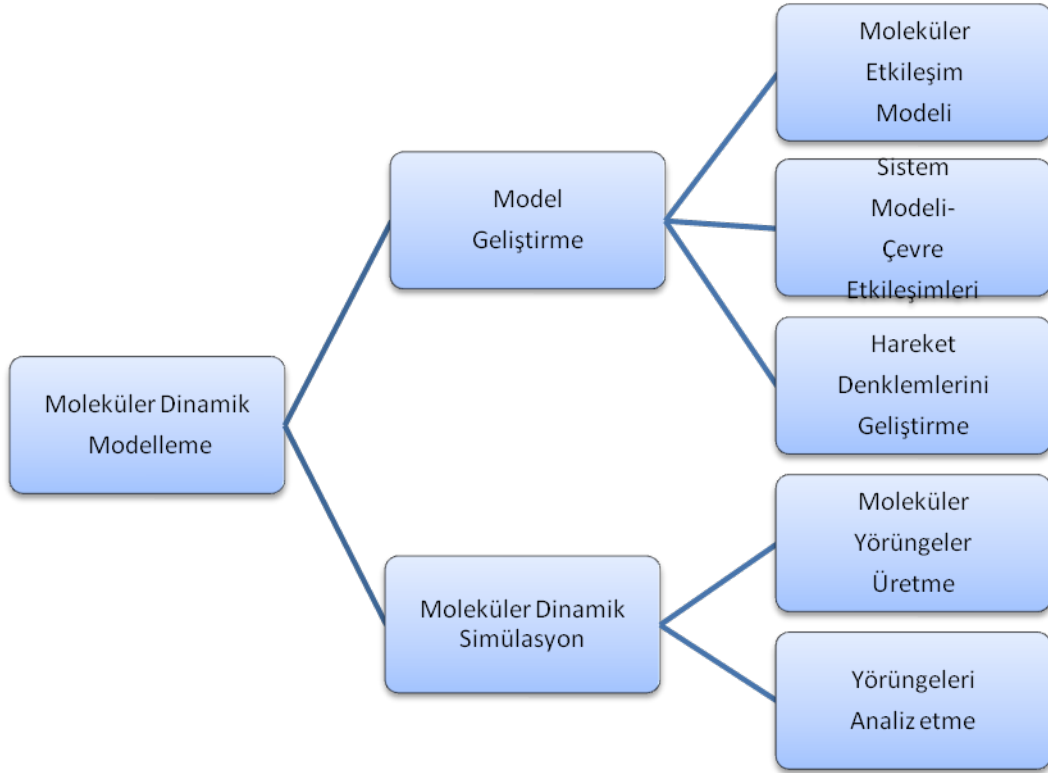
$NVE$ - moleküler dinamiklerinde  $r^N$ , Newton'un hareket denklemlerinin çözümünden elde edilmiştir.

$$F_i(t) = m \ddot{r}_i(t) = -\frac{\partial U(r^N)}{\partial r_i} \quad (2.3)$$

Burada  $F_i$   $i$  üzerindeki kuvvet,  $N-1$  diğer moleküllerin neden olduğu kuvvettir. Noktalar zamana göre türevi belirtir ve  $m$  ise moleküler küttedir. (2.3)'deki yazım moleküller arasındaki potansiyel enerji ile kuvvet ilişkisini kullanılmıştır. (2.3)'de bir kez integral alma atomik momenti, ikinci bir kez integral alma atomik konumları üretir. Makroskopik özelliklerin zamana göre ortalaması  $\langle A \rangle$ ;

$$\langle A \rangle = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \int_{t_0}^{t_0+t} A(\tau) d\tau \quad (2.4)$$

Dengede bu ortalama, başlangıç zamanı  $t_0$ 'a bağlı olamaz. Pozisyonlar ve momentum ortalama zamandan elde edilir(2.4). Termodinamik ve dinamik özellikler, difüzyon katsayısı grubu şekilde betimlenir



Şe

kil 2.2 Moleküler dinamik simülasyonda hiyerarşi ilkeleri

Moleküler dinamikler (2.4)'deki ortalama zaman hipotezi tarafından sağlanmalıdır. Aynı Monte Carlo tarafından sağlanan grup ortalaması gibi. Ergodik hipotezinin sadece katı gaz küreler için güçlü kanıtları olmasına rağmen moleküler dinamik sonuçları ile Monte- Carlo sonuçlarının kıyaslanarak test edilmiş olmalıdır. Böyle bir kıyaslama bölümün sonunda sunulmuştur.

Aşağıdaki şemada dinamik modelleme problemi iki büyük kısma ayrılmış olarak gösterilir: eldeki probleme uygun bir model geliştirme ve o modele moleküler dinamiği uygulama. Simülasyon problemi iki kısma ayrılır: moleküler yörüngeler üretmek için hareket denkleminin çözümü ve sonra ilgili özellikler için o yörüngeleri analiz etme. Şekil bu başlıca kısımların yerlerini düzenleyip bize gösterir.

Moleküler dinamik simülasyonlar mevcut bilgisayarların hız ve hafıza sınırları yüzünden sınırlanmıştır[10].

### 2.3. Mikrokronik Çerçeve (EVN)

Yalıtılmış bir sistemin moleküler dinamik izlerinin incelenmesinde temel metod mikrokronik çerçevedir. EVN topluluğunda toplam parçacık sayısı  $N$ , sitem hacmi  $V$  ve toplam enerji  $E$  sabit olarak kabul edilir. Bu değişkenler mikrokronik çerçeveyi sabit tutmak içindir. Mikrokronik çerçevede dağılım fonksiyonu aşağıda verildiği gibidir [18].

$$\langle F \rangle = \frac{1}{h^{3N} N! W} \int d_T d_P^N F(r^N, P^N) \delta[E - H] \quad (2.5)$$

### 2.4. İzobarik-İzoentalpik Çerçeve (HPN)

Çalışmış olduğumuz sistemi ısıtmak ve dengelemek için HPN çerçeveyi kullanılmıştır. Genişletilmiş Hamiltonyen formalizmi Andersen'in çalışması ile başlatır [19]. Sabit basınç yöntemine yeni bir değişken olarak hareketli hacim değişkenini katmıştır. İç ve dış basınç arasındaki fark hacimdeki değişmeyi ayarlar. İç basınç virial'a göre kinetik enerjisinin bir ortalaması olarak hesaplandı. Dışarıdaki sabit dış basınç, iç basıncın değişmesiyle sistemin dengeye gelmesini sağlar. Bu dış taraftan etki eden bir hareketli piston kütlesi tarafından sağlanır. İç basınç, dış basınçtan büyük olduğu zaman piston hareket eder ve iç basınç düşer [20,21].

Sabit basınç yöntemi, moleküler dinamik birim hücrenin şekil değişikliği içerecek şekilde Parinello ve Rahman tarafından genişletilmiştir. Bu sayede bir katıda yapı değişikliğinin simülasyonu mümkün olmuştur. Parçacıkların sabit pozisyonlarını ayarlayabilecekleri şekilde formüle bağlanmıştır. Andersen'in formülü dinamik hücrenin yalnızca hacim değişikliğini olanaklı kılıp, şekil değişikliğini olanaklı kılmaz. Rahman ve Parinello bu formalizmi bir gelişme sağlar.[19,13,14,12,22]

HPN çerçevede sistem uzayı doldururken, periyodik olarak kendini tekrar eden, bir hücrede  $N$  tane parçacıktan oluşan bir sistemden oluşur. HPN çerçevede hücre rasgele şekle ve hacme sahip olabilir.  $\vec{a}$ ,  $\vec{b}$ ,  $\vec{c}$  vektörleri farklı uzunluklara sahip

olabilir. Vektörler  $h = (\vec{a}, \vec{b}, \vec{c})$  şeklinde gösterilip,  $3 \times 3$ 'lük bir matrisle gösterilir.

Hacim;

$$\Omega = \|\vec{h}\| = a.(b \times c) \quad (2.6)$$

şeklinde gösterilir. Yalnızca, hidrostatik basınç uygulandığında; dinamik hücrenin şekline ve büyüklüğündeki değişme; aşağıda Parinello ve Rahman tarafından ifade edilir. N tane parçacığın yerlerini tespit eden  $3N$  değişkenin seti  $\vec{h}$ 'nin dokuz bileşeni tarafından artırıldı. Aşağıdaki Lagrange kullanılarak  $3N+9$  değişken elde edilmiştir.

$$L = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N m_i \dot{s}_i G \dot{s}_i - \sum_{i=1}^N \sum_{j>i}^N \phi(r_{ij}) + \frac{1}{2W} Tr[\dot{h} \dot{h}] - P\Omega \quad (2.7)$$

P sistem üzerine uygulanan basınç, W piston kütlesi ve G metrik tensördür ( $G = \dot{h} \dot{h}$ ). i parçacığının  $\vec{r}_i$  konumu H cinsinden  $\epsilon_i$ ,  $\eta_i$  ve  $\zeta_i$  bileşenleri cinsinden aşağıdaki gibi yazılır.

$$r_i = h s_i \epsilon_i + \eta_i b + \zeta_i c \quad (2.8)$$

2.7 denklemi kullanılarak mekaniğin genel yasaları kullanılarak hamiltonyen denklemi türetilir. Sistem zamanla dış kuvvetlere maruz kalmadığı için hamiltonyen aşağıdaki gibi türetilir.

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{1}{2m_i v_i^2} + \sum_{i=1}^N \sum_{j>i}^N \phi(r_{ij}) + \frac{1}{2W Tr[\dot{h} \dot{h}]} + P\Omega \quad (2.9)$$

$$H = E + p\Omega \quad (2.10)$$

Buradan;

$$E = \sum_{i=1}^N \frac{1}{2m_i v_i^2} + \sum_{i=1}^N \sum_{j>i}^N \phi(r_{ij}) \quad (2.11)$$

HPN dinamiğini 2.7'deki Langrange denklemi ifade eder.

## 2.5. İzotermal-İzobarik Çerçeve(TPN)

Üretim hesaplarını gerçekleştirmek için Nose [23,24] tarafından moleküler dinamiğe katılan TPN çerçeve kullanılmıştır. Sabit sıcaklıkta fiziksel sisteme yeni bir serbestlik derecesi Nose tarafından katıldı. Bu serbestlik ısı kaynağıdır. Isı kaynağı ile temas halinde olduğundan enerji ısı kaynağından sisteme ve sistemden ısı kaynağına akar. Hareketli piston kullanılarak sistemin hacmi düzenlenilir. Dış sistem olarak etki eden ek serbestlik derecesi "s" ile gösterilir. TPN çerçevesinde  $(q_i, p_i, s, V, t')$  sanal değişkenleri  $V^{1/3}$  ve s ile ilişkili olarak  $(\dot{q}_i, \dot{p}_i, s, V, t')$  gerçek değişkenleri ile ilişkilendirilmiştir.

$$\dot{q}_i = V^{1/3} q_i \quad (2.12)$$

$$\dot{p}_i = \frac{p_i}{V^{1/3} s} \quad (2.13)$$

$$t' = \int_0^t \frac{dt}{s} \quad (2.14)$$

$\bar{q}_i$  bileşenleri 0-1 aralığında sınırlanmış. Sistemin Hamiltonyeni aşağıdaki gibidir.

$$H = \sum_i \left( V \frac{p_i^2}{2m_i V^{2/3} s^2} + g k T^{*3} s + \frac{P_{s^2}}{2Q} + P \ln \frac{p_v^2}{2W} \right)_{ex} \quad (2.15)$$

V'nin eşlenik momentumu  $p_v$ 'dir, hacim hareketi için bir kütle W,  $p_{ex}$  ise dış basınctır.  $g = 3N + 1$ 'li sanal zaman için denge dağılım fonksiyonu aşağıdaki gibidir.



$$\rho(p', q', V) = \exp\left[-(H_0(p', q') + P_{ex}V)/kT\right] \quad (2.16)$$

$p'$ ,  $q'$  ve  $V$  izlerinden hesaplanan bir fonksiyonun ortalaması bunların TPN çerçevesindeki halleri ile özdeştir.

$$\begin{aligned} \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t_0} \int_0^{t_0} F\left(P/V^{1/3}s, V^{1/3}q, V\right) dt &= \left\langle \left(P/V^{1/3}s, V^{1/3}q, V\right) \right\rangle \\ &= \left\langle F(p', q'V) \right\rangle \\ &= F_{TPN}(N, P_{ex}, T) \end{aligned} \quad (2.17)$$

Daha fazla bilgi için Nose'un makelesine bakılabilir [24].

## 2.6. Moleküler Dinamikler İçin Algoritmalar

Yaygın olarak kullanılan sonlu-fark metotlarının büyük çoğunluğu Runge-Kutta tarafından bulunmuştur. Bu metotlar Euler metodunun yapısındadır.

$$x(t + \Delta t) = x(t) + \dot{x} \Delta t \quad (2.18)$$

Çeşitli RK metotları birbirinden farklı eğimleri  $\dot{x}$  tahmin etmiştir. Her bir RK algoritması,  $\Delta t$  süresince noktalar boyunca eğimi tahmin eder ve sonra (2.19)'de kullanılan tek değeri ağırlıklı ortalamayı hesap eder. Düşük derece RK algoritmaları için bir adım boyunca eğim değerlerinin sayısı metot derecesine eşittir. Bu nedenle 4. derece RK algoritması ilerleyen çözüm işlemlerinde her bir adım için 4 eğim tahmini yapar.

Runge-Kutta metotları iyi dengelenmiş özelliklerine sahiptir. Buna rağmen; moleküler dinamikte az kullanılmıştır. Çünkü RK algoritması moleküllerin büyük

çoğunluğu için çok yavaştır. Moleküler dinamikte moleküller arası kuvvetleri tespit etme çok zaman harcayan hesaplamalardan uzak olmalıdır. Bu nedenle dördüncü derece RK algoritması adım ve atom başına dördüncü üstel hesaplama gerektirir. Böyle bir algoritma, adım ve atom başına yalnızca bir üstel değerlendirme gerektiren bir metottan 4 kez daha yavaş çalışır. Runge-Kutta metotları çok küçük özgürlük derecesi içeren simülasyon sistemlerinde kullanılmıştır.

RK metotları yalnızca şu andaki zamandan daha ziyade; çeşitli noktalardan pozisyonları ve hızları kullanarak o metodun derecesi azaltılmasını önerdi. Bu işlemi yaparken atomlar arası kuvvetleri her bir atom için her bir adımda bir kereden fazla kullanmak istenmez. Bu çelişki iki genel yolla çözülebilir: (a) önceden hesaplanmış adımlardan pozisyon ve hızları kullanmak (Verlet algoritması olarak bu yaklaşımın ana örneğidir) veya (b) gelecek adımlar için pozisyonları ve hızları tahmin etme. İkinci bahsedilen şey önceden öngörme-düzeltilme algoritmasıdır [10].

## 2.7. Gear'ın Öngörme-Düzeltilme Algoritması

Öngörme-düzeltilme algoritmaları ilk kez Rahman tarafından moleküler dinamiğe tanıştırılmıştır. Çoğunlukla moleküler dinamikte kullanılmış olan bu algoritmalar, Gear tarafından bulunmuş olan metotların toplamından alınmıştır[10].

$t$  zamanındaki pozisyonlar ve onların türevlerini temel alan beşinci derece Taylor serisi kullanılarak  $t + \Delta t$  zamanındaki  $r_i$  molekülünün pozisyonun öngörür. Bu nedenle her bir adımda  $\dot{r}_i$ ,  $\ddot{r}_i$ ,  $r_i^{(iii)}$ ,  $r_i^{(iv)}$  ve  $r_i^{(v)}$  türevlere ihtiyaç duyulmuştur. Ayrıca bunlar  $t$  zamanında Taylor açılımına uygulanarak  $t + \Delta t$  zamanında  $r_i(t + \Delta t)$  öngörülür.

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

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

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

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

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

$$r_i^{(v)}(t + \Delta t) = r_i^{(v)}(t) \quad (2.19)$$

Öngörülen pozisyonlar kullanılarak  $t + \Delta t$  zamanında her bir molekül üzerindeki  $F_i$  moleküller arası kuvveti hesaplanır.  $i$  ve  $j$  atomları arasındaki sürekli potansiyel enerji fonksiyonları  $u(r_{ij})$  dir. Her bir molekül üzerindeki kuvvet (2.26) ile bulunur.

$$F_i = -\sum_{i \neq j} \frac{\partial u(r_{ij})}{\partial r_{ij}} \hat{r}_{ij} \quad (2.20)$$

Burada  $\hat{r}_{ij}$ ,  $r_{ij}$  yönündeki birim vektördür. Kuvvetlerin hesaplanması zaman alır. Çünkü (2.26) denklemi sistem içindeki her bir  $i$  moleküle uygulanmalıdır. Zaman kazanmak için hesabı yarıya düşürmek amacıyla Newton'un 3. kanununu (etki-tepki prensibi) uygulanır.

$$F(r_{ij}) = -F(r_{ji}) \quad (2.21)$$

Newtonun 2. kanunu ve (2.27)'den elde edilen  $t + \Delta t$  anındaki kuvvetlerle  $\ddot{r}_i(t + \Delta t)$  ivmeleri hesaplanır. Öngörülen ivmeler ve hesaplanmış ivmeler arasındaki fark;

$$\Delta \ddot{r}_i = [\ddot{r}_i(t + \Delta t) - \ddot{r}_i^p(t + \Delta t)] \quad (2.22)$$

dir.

$$r_i = r_i^P + \alpha_0 \Delta R^2 \quad (2.23)$$

$$\dot{r}_i \Delta t = \dot{r}_i^P \Delta t + \alpha_1 \Delta R^2 \quad (2.24)$$

$$\frac{\ddot{r}_i (\Delta t)^2}{2!} = \frac{\ddot{r}_i^P (\Delta t)^2}{2!} + \alpha_2 \Delta R^2 \quad (2.25)$$

$$\frac{r_i^{(iii)} (\Delta t)^3}{3!} = \frac{r_i^{(iii)P} (\Delta t)^3}{3!} + \alpha_3 \Delta R^2 \quad (2.26)$$

$$\frac{r_i^{(iv)} (\Delta t)^4}{4!} = \frac{r_i^{(iv)P} (\Delta t)^4}{4!} + \alpha_4 \Delta R^2 \quad (2.27)$$

$$\frac{r_i^{(v)} (\Delta t)^5}{5!} = \frac{r_i^{(v)P} (\Delta t)^5}{5!} + \alpha_5 \Delta R^2 \quad (2.28)$$

$$\Delta R^2 = \frac{\Delta \ddot{r}_i (\Delta t)^2}{2!} \quad (2.29)$$

Tablo 2.1 Öngörme-düzeltilme algoritmasının  $\alpha_i$  değerleri[10]

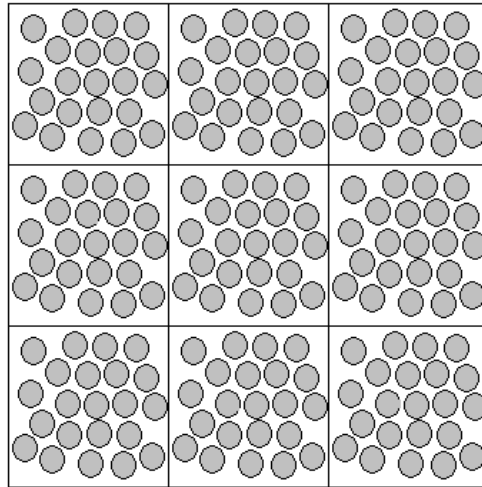
$\alpha_i$	$q = 3$	$q = 4$	$q = 5$
$\alpha_0$	$\frac{1}{6}$	$\frac{19}{20}$	$\frac{3}{16}$
$\alpha_1$	$\frac{5}{6}$	$\frac{3}{4}$	$\frac{251}{360}$
$\alpha_2$	$\frac{1}{3}$	1	1
$\alpha_3$	-	$\frac{1}{2}$	$\frac{11}{18}$
$\alpha_4$	-	$\frac{1}{12}$	$\frac{1}{6}$
$\alpha_5$	-	-	$\frac{1}{60}$

## 2.8. Periyodik Sınır Koşulları

Sınırlı ve sınırsız sistemler çok farklıdır. Küçük bir sistem sınırlı bir sistemin davranışlarına benzer sorunlara yol açar. Simülasyon bir tür kap içinde meydana

gelir. Kabın duvarları, çarpışarak simülasyon bölgesinden kaçmaya çalışan atomlara karşı koyar. Makroskobik bir sistemde atomların çok küçük bir kısmı duvarlara yeterince yakındır. Sıvı yoğunlukta  $N_m=10^{21}$  parçacıktan oluşan üç boyutlu bir sistem düşünelim. Duvara yakın atomların sayısı  $N_m^{2/3}$  'dür. Bu  $10^{14}$  atom eder. Fakat tipik bir moleküler dinamikte atom sayısı  $N_m=1000$  'dir. Kabaca 500 atom duvarların hemen bitişiğinde yer alır. Bu yüzden simülasyon içerdeki atomların durumunu zapt etmekte başarısız olacak ve bu gerçek hesaplamalarda yansıtacak. Gerçek bir duvarın yakınlarındaki davranışları amaçlamıyorsak, duvarları eleyebiliriz [25].

Fiziksel duvarları olmayan bir sistem inşa edilebilir. Son çare şekilde gösterilen olarak periyodik sınır koşullarına başvurmak. Periyodik sınır şartlarını tanımlamak simülasyon bölgesinin eş kopyaları ile düzenli dolu sınırsız bir sistemi düşünmeye eşdeğerdir.



Şekil 2.3 Periyodik sınır koşullarının iki boyutta gösterimi

Bu periyodiklik iki sonuca neden olur. Simülasyon bölgesi boyunca bir atom ayrılırken yüzeyin karşı tarafından aynı doğrultuda ve yönde bir başka atom aynı zamanda simülasyon bölgesine girer. İkinci olarak atomlar sistemin komşu kopyalarındaki atomlarla bir  $r_c$  mesafesinde etkileşir.

Periyodik sınır etkileri, hem hareket denklemlerini hem de etkileşim hesaplamalarını dikkate almalıdır. Eğer bir atom bölge dışına hareket ettiği bulunursa onun koordinatları tekrar içeride olacak şekilde ayarlanmalıdır.

Örneğin  $x$  koordinatları  $-L_x/2$  ve  $L_x/2$  arasında belirlenmiş olsun. Burada  $L_x$   $x$  yönünde bölge boyutudur.

Eğer  $r_{ix} \geq L_x/2$ , onu  $r_{ix} - L_x/2$  olarak değiştirir. Aksi takdirde  $r_{ix} < -L_x/2$ , onu  $r_{ix} + L_x$  olarak değiştirir.

Etkileşim hesaplamaların da periyodikliğin etkisi çift olarak etkileşen atomların bileşenlerini hesaplamada görülür.

Eğer  $r_{ijx} \geq L_x/2$ , onu  $r_{ijx} - L_x/2$  olarak değiştirir. Aksi takdirde  $r_{ijx} < -L_x/2$ , onu  $r_{ijx} + L_x$  olarak değiştirir [25].

## BÖLÜM 3. ETKİLEŞİM POTANSİYEL

### 3.1.Quantum-Sutton Chen Potansiyeli

Sutton ve Chen'in çalışmasında(1990), saf metallerin toplam iç enerjisi FS formunda aşağıdaki gibi ifade edilmiştir.

$$E_{\text{FS}}^{\text{SC}} = \left[ \frac{1}{2} \sum_i \sum_{i \neq j} \zeta_{ij} - \rho \sum_i r_i^{1/2} \right] \quad (3.1)$$

Burada

$$V(r) = \left( \frac{a}{r} \right)^n \quad (3.2)$$

ve

$$\rho_i = \sum_{j \neq i} \left[ \frac{a}{r_{ij}} \right]^m \quad (3.3)$$

Burada  $n$  ve  $m$  pozitif tamsayılar,  $a$  ise f.c.c. kafes sabitidir ve  $\varepsilon$  enerji boyutunda bir parametredir.  $\varepsilon$ ,  $c$ ,  $n$  ve  $m$  parametreleri, on f.c.c. metal: Ni, Cu, Rh, Pd, Ag, Ir, Pt ve Al için aşağıda Sutton ve Chen tarafından verilmiştir[18].

İki ve dört denklemleri, aşağıda FS formundaki Hamiltonyenle ifade edilerek; ikili AB alaşımlarına genelleştirilmiştir.

$$\begin{aligned}
H = & \frac{1}{2} \left[ \sum_i \sum_{i \neq j} \hat{p}_i \hat{p}_j V^{AA}(r_{ij}) + (1 - \hat{p}_i)(1 - \hat{p}_j) V^{BB}(r_{ij}) + [\hat{p}_i(1 - \hat{p}_j) + \hat{p}_j(1 - \hat{p}_i)] V^{AB}(r_{ij}) \right] \\
& - d^{AA} \sum_i \hat{p}_i \left[ \sum_{j \neq i} \hat{p}_j \phi^{AA}(r_{ij}) + (1 - \hat{p}_j) \phi^{AB}(r_{ij}) \right]^{1/2} \\
& - d^{BB} \sum_i (1 - \hat{p}_i) \left[ \sum_{j \neq i} (1 - \hat{p}_j) \phi^{BB}(r_{ij}) + \hat{p}_j \phi^{AB}(r_{ij}) \right]^{1/2} \quad (3.4)
\end{aligned}$$

Yer işgal operatörü  $\hat{p}_i$  aşağıdaki gibi tanımlanmıştır.

$$\hat{p}_i = \begin{cases} 1, & \text{eğer } i \text{ yeri bir A atomu tarafından işgal edilmiş ise,} \\ 2, & \text{eğer } i \text{ yeri bir B atomu tarafından işgal edilmiş ise.} \end{cases} \quad (3.5)$$

$V^{AA}$ ,  $V^{BB}$ ,  $V^{AB}$ ,  $\phi^{AA}$ ,  $\phi^{BB}$ ,  $\phi^{AB}$  fonksiyonlar aşağıdaki gibi tanımlanmıştır.

$$V^{AA}(r) = \left[ \frac{a^{AA}}{r} \right]^{n^{AA}} \quad V^{BB}(r) = \left[ \frac{a^{BB}}{r} \right]^{n^{BB}} \quad V^{AB}(r) = \left[ \frac{a^{AB}}{r} \right]^{n^{AB}} \quad (3.6)$$

$$\phi^{AA}(r) = \left[ \frac{a^{AA}}{r} \right]^{m^{AA}} \quad \phi^{BB}(r) = \left[ \frac{a^{BB}}{r} \right]^{m^{BB}} \quad \phi^{AB}(r) = \left[ \frac{a^{AB}}{r} \right]^{m^{AB}} \quad (3.7)$$

Sabitler  $d^{AA}$  ve  $d^{BB}$  aşağıdaki gibi tanımlanmıştır.

$$d^{AA} \varepsilon = c^{AA} \quad \text{ve} \quad d^{BB} \varepsilon = c^{BB} \quad (3.8)$$

Sutton ve Chen tarafından tablolaştırılmış olarak, saf A metalinin  $\varepsilon$ ,  $a$ ,  $c$ ,  $n$  ve  $m$  parametreleriyle  $\varepsilon^{AA}$ ,  $c^{AA}$ ,  $a^{AA}$ ,  $m^{AA}$  ve  $n^{AA}$ 'lar eşleştirilmiştir. Benzer bir şekilde, saf B metalinin  $\varepsilon$ ,  $a$ ,  $c$ ,  $n$  ve  $m$  parametreleriyle  $\varepsilon^{BB}$ ,  $c^{BB}$ ,  $a^{BB}$ ,  $m^{BB}$  ve  $n^{BB}$ 'ler eşleştirilmiştir. Böylece kalan dört parametre  $\varepsilon^{AB}$ ,  $a^{AB}$ ,  $m^{AB}$  ve  $n^{AB}$  tanımlanmış



olmaktadır. Bu parametreler aşağıdaki gibi ifade edilen  $V^{AB}$  ve  $\phi^{AB}$  fonksiyonlarıyla varsayarak saptanmıştır.

$$V^{AB} = (V^{AA}V^{BB})^{1/2} \quad \text{ve} \quad \phi^{AB} = (\phi^{AA}\phi^{BB})^{1/2} \quad (3.9)$$

Bu bağıntılar kalan parametreler için aşağıdaki ifadelere yol açar.

$$m^{AB} = \frac{1}{2}(m^{AA} + m^{BB})$$

$$n^{AB} = \frac{1}{2}(n^{AA} + n^{BB})$$

$$a^{AB} = (a^{AA}a^{BB})^{1/2}$$

$$\varepsilon^{AB} = (\varepsilon^{AA}\varepsilon^{BB})^{1/2} \quad (3.10)$$

Bu yüzden, hamiltonyen denklemindeki tüm parametreler Sutton ve Chen tarafından tablolaştırılmış saf metallerin parametrelerinden elde edilmiştir. Denklem 3.9 tarafından verilen  $V^{AB}$  ve  $\phi^{AB}$  sadece deneysel temellere dayandırılmıştır. Örnek olarak, alaşımların kübik parametreleri için çok tatmin edici olmayan tahminlere yol açmış düzenlemeler  $\varepsilon^{AB} = (\varepsilon^{AA} + \varepsilon^{BB})/2$  bulunmuştur. A-B etkileşimlerinin aritmetik ve geometrik ortalamaları müzakerelerinin bir toerisi, Calvin, Reed ve diğerleri tarafından verilmiştir.

### 3.2.Rastgele Alaşım Modeli

A ve B atomları ile tamamiyle rastgele olarak yerleşmiş rastgele f.c.c. alaşım modeline adapte oluruz. Böyle alaşımlar gerekli ortalama konsantrasyona sahiptir. Atomik pozisyonlarda gevşemeyi dikkate almayarak, sadece sıfır kelvinde Entalpi hesaplanmıştır. Bu rastgele alaşım modellerinde bir standarttır. Ackland ve Vitek tarafından 1990'da ele alınmıştır.

Bir  $A_{c_A}B_{c_B}$  alařımının denklem beř tarafından verilen Hamiltonyenin her atom bařına  $E^r$  beklenti deęeri 3.11 denklemi tarafından verilir. Burada  $c_A + c_B = 1$  dir.

$$\begin{aligned}
E^r &= \frac{1}{2} \left\{ \sum_s Z_s \left[ c_{A^2} V^{AA}(r_s) + c_{B^2} V^{BB}(r_s) + 2c_A c_B V^{AB}(r_s) \right] \right\} \\
&- c_A d^{AA} \varphi \left\{ \sum_s Z_s \left[ c_A \varphi^{AA}(r_s) \quad B \quad AB \quad s \right] \right\}^{1/2} \\
&- c_B d^{BB} \varphi \left\{ \sum_s Z_s \left[ c_B \varphi^{BB}(r_s) \quad A \quad AB \quad s \right] \right\}^{1/2} \tag{3.11}
\end{aligned}$$

$r_s$  s.kordinasyon kabuęunun yarıçapıdır ve  $Z_s$  kordinasyon sayısına karřılık gelir. Herbir  $r_s$  ve  $a^{AA}$ ,  $a^{BB}$  ve  $a^{AB}$  üç parametre aynı uzunluk ölçeęinde ifade edilmiř olmalıdır. Bu yaygın uzunluk ölçeęi gibi, rastgele alařımların denge kafes parametresini  $a^*$  olarak seęilir. Rastgele alařımların  $E^r$  enerjisi bu tarzda,  $a^*$ 'nın ařaęıdaki fonksiyonu gibi ifade edilmiřtir:

$$\begin{aligned}
E^r &= \frac{1}{2} c_A^2 S_{n^{AA}} \left[ \frac{a^{AA}}{a^*} \right]^{n^{AA}} + \frac{1}{2} c_B^2 S_{n^{BB}} \left[ \frac{a^{BB}}{a^*} \right]^{n^{BB}} + c_A c_B S_{n^{AB}} \left[ \frac{a^{AB}}{a^*} \right]^{n^{AB}} \\
&- c_A d^{AA} \left( c_A S_{m^{AA}} \left[ \frac{a^{AA}}{a^*} \right]^{m^{AA}} + c_B S_{m^{AB}} \left[ \frac{a^{AB}}{a^*} \right]^{m^{AB}} \right)^{1/2} \\
&- c_B d^{BB} \left( c_B S_{m^{BB}} \left[ \frac{a^{BB}}{a^*} \right]^{m^{BB}} + c_A S_{m^{AB}} \left[ \frac{a^{AB}}{a^*} \right]^{m^{AB}} \right)^{1/2} \tag{3.12}
\end{aligned}$$

$S_{n^{AA}}$ ,  $S_{n^{BB}}$  parametreleri boyutsuzdur. F.c.c. kafes hesabı için ařaęıdaki gibi tanımlanmıřtır.

$$S_{nAA} = \sum_s Z_s \left[ \frac{a^*}{r_s} \right]^{nAA} \quad (3.13)$$

Her bir alařım konsantrasyonunda  $a^*$  deęiřen Őartlara baęlı olarak aŐaęıdaki tanımlanmıŐtır.

$$\frac{\partial E^r}{\partial a^*} = 0 \quad (3.14)$$

Rastgele alařımlar iin dengedeki kafes parametreleri tanımlanmıŐ olarak, elastik sabitleri  $c_{11}^r$ ,  $c_{12}^r$  ve  $c_{44}^r$  hesaplayabiliriz. Bu hesaplar (3.14) tarafından verilir.

$$c_{11}^r = \frac{1}{\Omega} \frac{\partial^2 E^r}{\partial e_{11}^2} \quad c_{12}^r = \frac{1}{\Omega} \frac{\partial^2 E^r}{\partial e_{11} \partial e_{22}} \quad c_{44}^r = \frac{1}{4\Omega} \frac{\partial^2 E^r}{\partial e_{12}^2} \quad (3.15)$$

Burada  $\Omega$  atomik hacim  $(a^*)^3/4$ , ve  $e_{11}$ ,  $e_{22}$  ve  $e_{12}$  gerilme tensörünün bileŐenleridir. 0 K'de atom baŐına karıŐımın entalpisi  $\Delta H$ ,  $a^*$ 'den elde edilmiŐ olmalıdır.

$$\Delta H = E^r - c_A E^A - c_B E^B \quad (3.16)$$

Burada  $E^A$  ve  $E^B$ , saf A ve B metallerinin atom baŐına kohesiv enerjileridir.

### 3.3.Kuantum Sutton -Chen Parametrizasyonu

Bu sayfada, metalik sistemlerde MC simülasyonları ve MD iin kullanılmıŐ olan Sutton-Chen (SC) FF'nına odaklanılır. SC ile metallerin toplam potansiyel denklem (3.17)'den alınmıŐtır[19].

$$U_{tot} = \sum_i U_i = \sum_i \varepsilon \left[ \sum_{j \neq i} \frac{1}{2} V(r_{ij}) - c \rho_i^{1/2} \right] \quad (3.17)$$

Burada,  $V(r_{ij})$  denklem (3.18) tarafından tanımlanmış olan ikili potansiyel enerjidir.

$$V(r_{ij}) = \left( \frac{a}{r_{ij}} \right)^n \quad (3.18)$$

$i$  ve  $j$  atomları arasındaki itici hesaplamadır.  $\rho_i$ , denklem (3.19) tarafından tanımlanmış olan  $i$  atomuna bağlı olan yapışma yerel yoğunluğudur.

$$\rho_i = \sum_{j \neq i} \phi(r_{ij}) = \sum_{j \neq i} \left( \frac{a}{r_{ij}} \right)^m \quad (3.19)$$

(3.17)-(3.18) denklemlerinde  $r_{ij}$ ,  $i$  ve  $j$  atomları arasındaki mesafedir. Tüm aralıkları ölçme  $a$  uzunluk parametresi iledir (  $V$  ve  $\rho$  'nun boyutsuzluğuna sebep olur).  $c$ , boyutsuz bir çekici terim parametresidir.  $\varepsilon$  tüm enerji ölçeğini belirtir ve  $n$  ve  $m$  tamsayı parametresidir öyledir ki  $n > m$  dir. Üstleri veren  $(n, m)$ ,  $c$  denge kafes parametresi olarak belirlenmiştir. Ve  $\varepsilon$  toplam yapışma enerjisi ( $E_{coh}$ ) olarak belirlenmiştir. İlk önce hacim modülü sonra elastik sabitlerle en yakın uyuşma veren integral güç indisleri olarak kullanılan  $m$ ; 6'dan daha büyük olarak Sutton ve Chen tarafından sınırlandırdı.  $n$  ve  $m$  tamsayılardan oluşmalıdır. Hacim modülü, Cauchy farklılığı veya basınç ( $P_c = C_{12} - C_{44}$ ) sayısal çözümlerle (3.20-3.21) tam bir uyum içinde olmalıdır.

$$n = 3 \sqrt{\left( \frac{\Omega B}{E_{coh}} \right) \left( \frac{B}{2P_c} + 1 \right)} \quad (3.20)$$

$$m = 6 \sqrt{\frac{\left(\frac{\Omega B}{E_{coh}}\right)}{\left(\frac{B}{2P_c} + 1\right)}} \quad (3.21)$$

Burada  $\Omega$  atom başına hacimdir.

Yüzeyler ve yüzeyler arası kusurları içeren özellikleri tahmin etme ile ilgilenilir. Orijinal parametrizasyon ile SC potansiyeli iyi tanımlanmamıştır. Ek olarak SC hesaplamalarına fononların quantum tanımlamasını dahil etmemiştir. Burada sıfır noktası enerjisini dikkate alınarak quantum düzeltmeleri sunulur. Özelliklerin sıcaklığa bağımlılığını hesaplamada daha faydalı olmak için bu hesaba katılır. İlave deneysel özellikleri hesaba alarak parametreleri en iyi hale getiren quantum Sutton-Chen (Q-SC) klasik potansiyelini kullanınız [fonon frekansı (X noktasında), boşluk oluşturma enerjisi ve yüzey enerjileri]. Elastik özelliklerle tam olarak tutmasına rağmen kusur ve yüzey özelliklerini saptayan yeni parametreler bulunur.

Denklem 3.17'de  $T = 0$ 'de deneye tamamiyle uyan kafes parametreleri isteniliyor.

$$\Omega P = -\frac{\varepsilon}{6} \sum_i \left[ \sum_{j \neq i} V'_{ij} - \frac{c}{\rho_i^{1/2}} \sum_{j \neq i} \phi'_{j \neq i} \right] \quad (3.22)$$

$$f' = r \frac{\partial f}{\partial r}$$

$$f'' = r^2 \frac{\partial^2 f}{\partial r^2}$$

Denklem 3.22 sıfır basınç denge şartında;

$$P_0 = -\frac{\varepsilon}{6\Omega} \sum_i \left[ \sum_{j \neq i} V'_{ij} - \frac{c}{\rho_i^{1/2}} \sum_{j \neq i} \phi'_{j \neq i} \right] = 0 \quad (3.23)$$

Bu  $P_0$  harici basınçla tutarlı bir kafes parametresine ve hal denklemine doğruca götürür.

Potansiyelin parametrelerini saptamak için bizim yöntemimiz aşağıdaki gibidir:

1)  $a$ 'yı 0 K'de deneysel kafes parametresi olarak belirlenir (Sutton ve Chen;  $a$ 'yı oda sıcaklığında kafes parametresi olarak belirledi.).  $c$  parametresi; sıfır basınç denge şartı denkleminde tanımlanmış olmalıdır.  $\varepsilon$  parametresi, 3.22 denkleminde elde edilerek seçilmiş olmalıdır.

$$U_{tot} = -E_{coh} \quad (3.24)$$

Burada,  $E_{coh}$  0 K'de deneysel kohesiv enerjidir.

2) Denklem 3.25 ve 3.28'yi kullanarak 0 K'de elastik sabitleri ( $c_{11}$ ,  $c_{12}$ ,  $c_{44}$ ) ve bulk ( $B$ ) modülünü hesaplanır.

$$B = \frac{\varepsilon}{18\Omega} \sum_i^N \left\{ \sum_i (V_{ij}'' - V_{ij}') \right. \quad (3.25)$$

$$\left. - \frac{c}{\rho_i^{1/2}} \left[ \sum_{j \neq i} (\phi_{ij}'' - \phi_{ij}') - \frac{1}{2\rho_i} \left( \sum_{j \neq i} \phi_{ij}' \right)^2 \right] \right\}$$

$$C_{11} = \frac{\varepsilon}{2\Omega} \sum_i^N \left\{ \sum_{j \neq i} \frac{x_{ij}^4}{r_{ij}^4} (V_{ij}'' - V_{ij}') \right. \quad (3.26)$$

$$\left. - \frac{c}{\rho_{ij}^{1/2}} \left[ \sum_{j \neq i} \frac{x_{ij}^4}{r_{ij}^4} (\phi_{ij}'' - \phi_{ij}') - \frac{1}{2\rho_i} \left( \sum_{j \neq i} \frac{x_{ij}^2}{r_{ij}^2} \phi_{ij}' \right)^2 \right] \right\}$$

$$C_{12} = \frac{\varepsilon}{2\Omega} \sum_i^N \left\{ \sum_{j \neq i} \frac{x_{ij}^2}{r_{ij}^2} \frac{y_{ij}^2}{r_{ij}^2} (V_{ij}'' - V_{ij}') \right. \quad (3.27)$$

$$\begin{aligned}
& -\frac{c}{\rho_i^{1/2}} \left[ \sum_{j \neq i} \frac{x_{ij}^2}{r_{ij}^2} \frac{y_{ij}^2}{r_{ij}^2} (\phi_{ij}'' - \phi_{ij}') - \frac{1}{2\rho_i} \left( \sum_{j \neq i} \frac{x_{ij}^2}{r_{ij}^2} \phi_{ij}' \right) \left( \sum_{j \neq i} \frac{y_{ij}^2}{r_{ij}^2} \phi_{ij}' \right) \right] \Bigg\} \\
C_{44} = & \frac{\varepsilon}{2\Omega} \sum_i^N \left\{ \sum_{j \neq i} \frac{y_{ij}^2}{r_{ij}^2} \frac{z_{ij}^2}{r_{ij}^2} (V_{ij}'' - V_{ij}') \right. \\
& \left. - \frac{c}{\rho_i^{1/2}} \left[ \sum_{j \neq i} \frac{y_{ij}^2}{r_{ij}^2} \frac{z_{ij}^2}{r_{ij}^2} (\phi_{ij}'' - \phi_{ij}') - \frac{1}{2\rho_i} \left( \sum_{j \neq i} \frac{y_{ij} z_{ij}}{r_{ij}^2} \phi_{ij}' \right) \left( \sum_{j \neq i} \frac{y_{ij} z_{ij}}{r_{ij}^2} \phi_{ij}' \right) \right] \right\} \quad (3.28)
\end{aligned}$$

3) Genellikle oda sıcaklığında mevcut deneysel değerler kullanılarak,  $k$ -uzayında, brilloun bölgesinde, X noktasında  $(w_x^T, w_x^L)$  fonon frekansları hesaplanır. Şu andan itibaren, fononları hesaplamak için oda sıcaklığında deneysel kafes aralığını kullanılır.

4) 1 ve 3 adımları  $(n, m)$ 'in geniş bir aralığı için uygulanmıştır. 2. ve 3. adımlardaki sayılar için deney ve hesaplamalar arasında iyi uyuşmaya sebep olan çeşitli aday kümeleri seçilmiştir.

5) Adım 4'den her bir aday kümesi  $(c, \varepsilon, n, m)$  için; boşluk oluşturma enerjisi, yüzey enerjisi ve hal denkleminde değerlendirilir. Bu özelliklerle en iyi uyuşan sonuç parametrelerini seçilir.

6)  $a$  parametresini, 0 K'de deneysel kafes parametresi olarak tutulur.

7) 0 K'de kafes parametreleri için fonon modlarını hesapla ve brilloun bölgesi üzerinden toplama yaparak toplam ZPE'yi elde edilir.  $c$  ve  $\varepsilon$  parametrelerini en iyi duruma getirilir öyle ki;

$$F_{0K} = -E_{coh} \quad (3.25)$$

quantum sıfır basınç denge koşuluyla aynı zamanda;

$$P_0 + P_{vib} = 0 \quad (3.26)$$

Burada;

$$P_0 + P_{vib} = -\frac{\varepsilon}{6\Omega} \sum_i \left( \sum_{j \neq i} V_{ij}^{\square} - c \frac{1}{\rho_i^{1/2}} \sum_{j \neq i} \phi_{ij}^{\square} \right) - \frac{\partial F_{vib}}{\partial \Omega} \quad (3.27)$$

8) Adım 3'deki gibi deney ile karşılaştırmak için; oda sıcaklığı kafes parametresini kullanarak fonon dağılım eğrisini hesaplanır. Sıcaklığın bir fonksiyonu olarak entropi, entalpi, özgül ısı ve serbest enerji; her bir sıcaklıkta denge kafes parametresi kullanılarak hesaplanır.

9) Diğer fiziksel özellikleri (boşluk oluşturma enerjisi, yüzey enerjisi, hal denklemi ve özgül ısı 8.adımdan fonon düzeltmeleri kullanarak sıcaklığın bir fonksiyonu olarak hesaplanır.

10) Özellikleri tahmin etmek için en iyi parametre kümesini seçilir.

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

Tablo 3.1 Pd, Au ve Ag için Q-SC parametreleri[19,20]

Metal	n	m	$\varepsilon(eV)$	c	a (Å)
Pd	12	6	3.2864e-3	148.205	3.8813
Au	11	8	7.8052e-2	53.581	4.065
Ag	11	6	3.9450e-5	96.524	4.0691



## BÖLÜM 4. SONUÇLAR

### 4.1 Elastik Sabitler

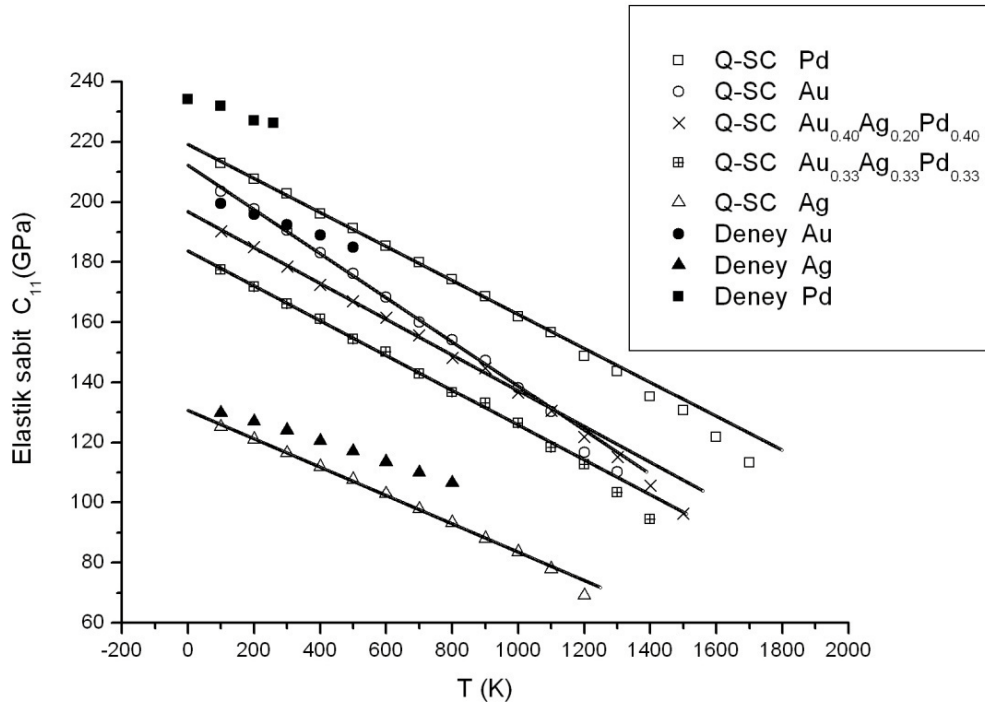
Katıların elastik sabitleri o katının sertliği ve kırılabilirliği hakkında bize bilgi verir. Çalışmamızda 1372 tane atom için mikrokronik çerçevede (EVN) 50000 zaman adımında aşağıdaki eşitlik kullanılarak hesaplanmıştır[28].

$$C_{ij}^T = \frac{\Omega_0}{k_B T} \left( \langle P_{ij} P_{kl} \rangle - \langle P_{ij} \rangle \langle P_{kl} \rangle \right) + \frac{2Nk_B T (\delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk})}{\Omega_0} + \langle \chi_{ijkl} \rangle \quad (4.1)$$

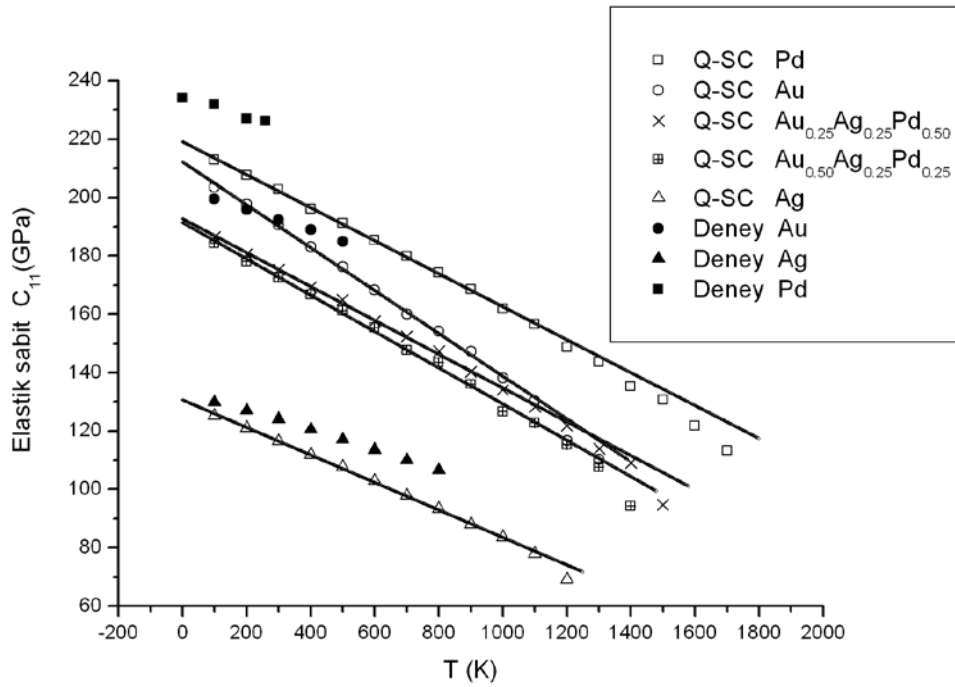
Au, Ag, Pd ve diğer altı alaşım olan  $Au_{0.33}Ag_{0.33}Pd_{0.33}$ ,  $Au_{0.25}Ag_{0.25}Pd_{0.50}$ ,  $Au_{0.20}Ag_{0.40}Pd_{0.40}$ ,  $Au_{0.50}Ag_{0.25}Pd_{0.25}$ ,  $Au_{0.40}Ag_{0.20}Pd_{0.40}$ ,  $Au_{0.40}Ag_{0.40}Pd_{0.20}$ 'nin  $C_{11}$  ve  $C_{12}$  elastik sabitleri grafik halinde fit parametreleri ise tablo halinde gösterilmiştir.

$C_{11}$  için sıcaklığa bağlı olarak Şekil 4.1, Şekil 4.2, Şekil 4.3'de üç saf metal teorik ve deneysel değerleri ile alaşımlar ise sadece ikişerli olarak teorik değerleri ile karşılaştırılmıştır. Şekil 4.4'de ise sadece simülasyon sonucu elde edilen alaşımlara ait  $C_{11}$  elastik sabit değerleri fit grafikleri ile birlikte verilmektedir. Şekil 4.1, Şekil 4.2, Şekil 4.3'de  $C_{11}$  için simülasyon sonucu saf metaller için elde edilen değerleri ile deneysel değerlerinin çok iyi uyduğu görülmüştür. Elimizde alaşımlar için deneysel değerler olmadığı için sadece simülasyon sonucu elde edilen değerler gösterilmiştir.

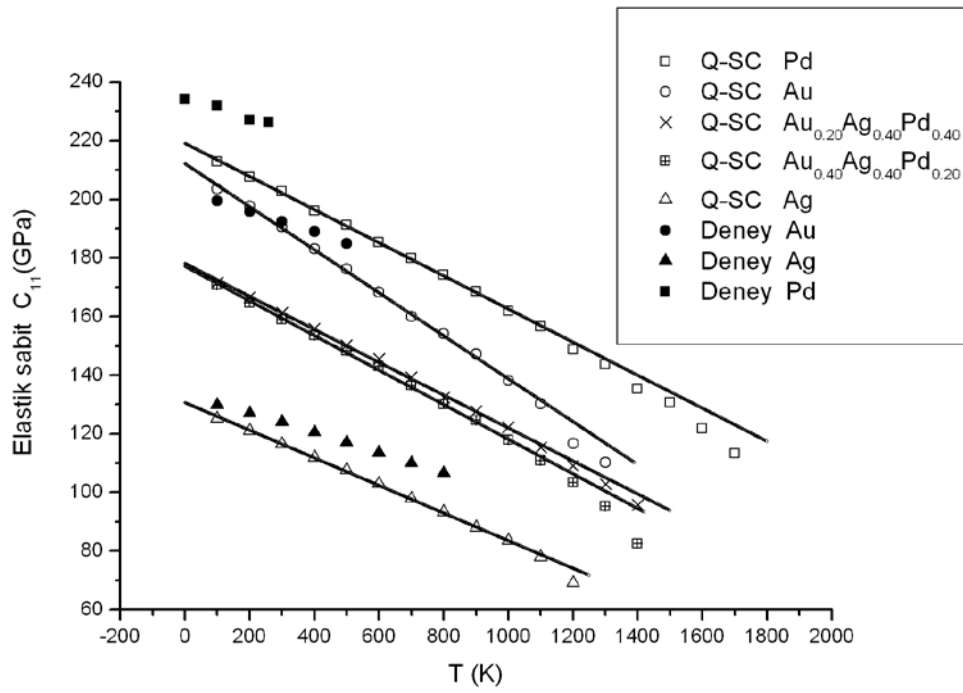
Grafiklerden Pd'nin  $C_{11}$  değerinin en yüksek olduğu ve Ag'nin ise en düşük  $C_{11}$  elastik sabit değerine sahip olduğu görülmüştür. Bu ise Pd'nin en sert Ag'nin ise en yumuşak metal olduğunu işaret etmektedir. Daha doğru bir ifade ile Pd'nin çekmeye karşı mukavemetinin en yüksek Ag'nin ise en düşük olduğu bilgisini vermektedir.



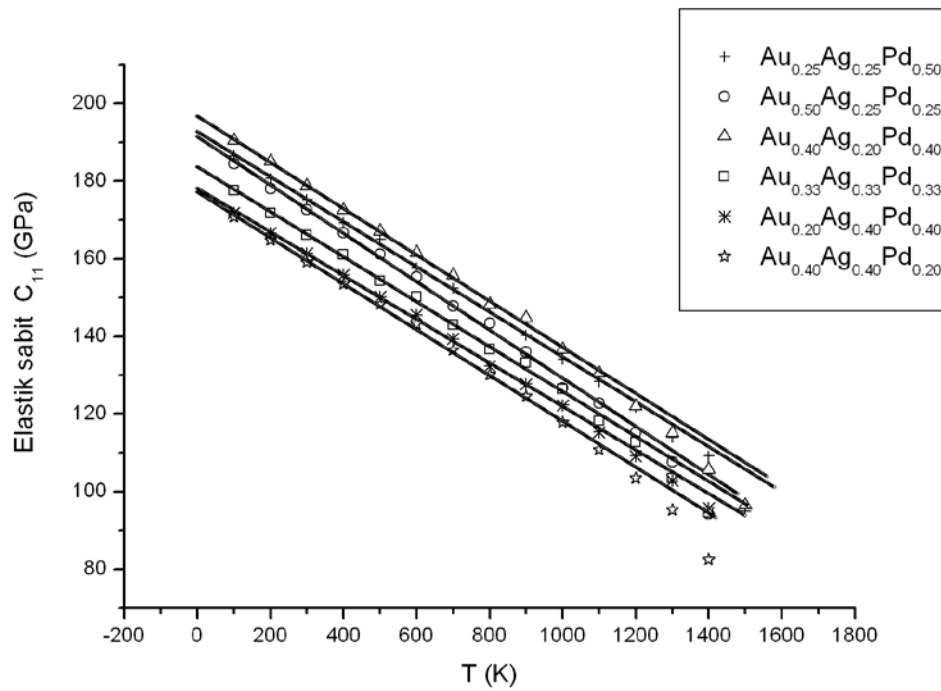
Şekil.4.1 Pd, Au,  $Au_{0.40}Ag_{0.20}Pd_{0.40}$ ,  $Au_{0.33}Ag_{0.33}Pd_{0.33}$  ve Ag için simülasyon sonucu bulunan sıcaklığa bağlı  $C_{11}$  elastik sabitleri ve fit grafikleri



Şekil.4.2 Pd, Au,  $Au_{0.25}Ag_{0.25}Pd_{0.50}$ ,  $Au_{0.50}Ag_{0.25}Pd_{0.25}$  ve Ag için simülasyon sonucu bulunan sıcaklığa bağlı  $C_{11}$  elastik sabitleri ve fit grafikleri

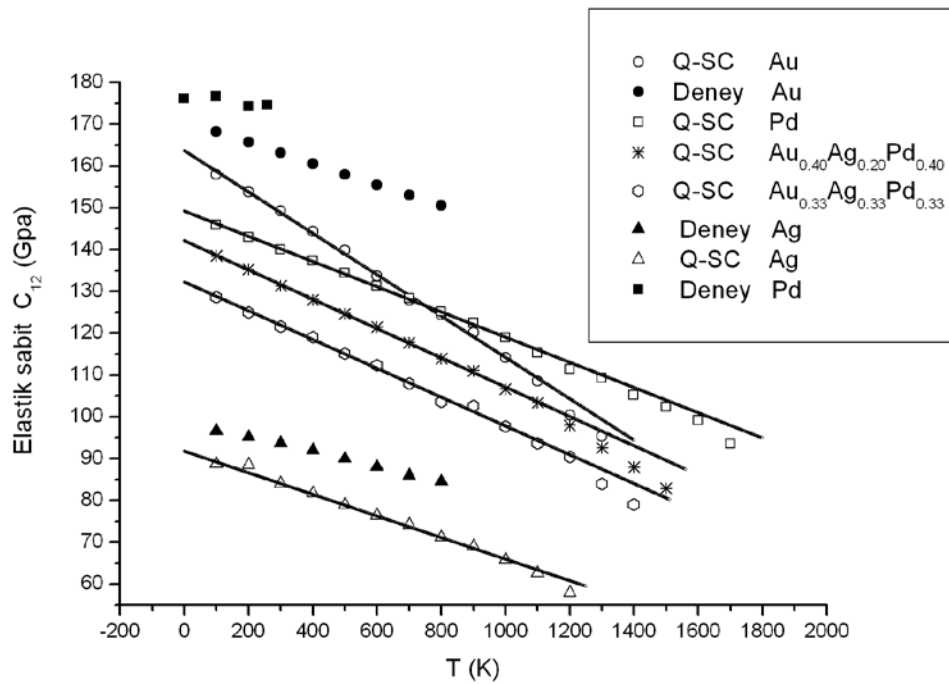


Şekil.4.3 Pd, Au,  $Au_{0.20}Ag_{0.40}Pd_{0.40}$ ,  $Au_{0.40}Ag_{0.40}Pd_{0.20}$  ve Ag için simülasyon sonucu bulunan sıcaklığa bağlı  $C_{11}$  elastik sabitleri ve fit grafikleri



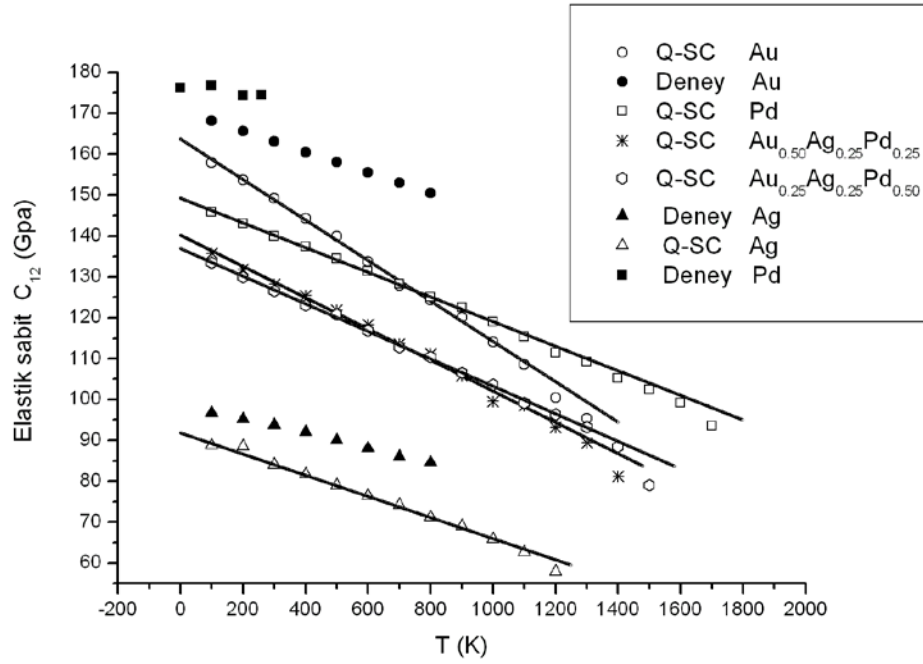
Şekil.4.4  $Au_{0.33}Ag_{0.33}Pd_{0.33}$ ,  $Au_{0.25}Ag_{0.25}Pd_{0.50}$ ,  $Au_{0.20}Ag_{0.40}Pd_{0.40}$ ,  $Au_{0.50}Ag_{0.25}Pd_{0.25}$ ,  $Au_{0.40}Ag_{0.20}Pd_{0.40}$  ve  $Au_{0.40}Ag_{0.40}Pd_{0.20}$  için simülasyon sonucu bulunan sıcaklığa bağlı  $C_{11}$  elastik sabitleri ve fit grafikleri

Grafiklerde alaşımların  $C_{11}$  elastik sabit değerlerinin Pd ve Ag arasında sıralandığı görülmüyor. Alaşımlarda ise  $C_{11}$  için  $Au_{0.40}Ag_{0.20}Pd_{0.40} > Au_{0.25}Ag_{0.25}Pd_{0.50} > Au_{0.50}Ag_{0.25}Pd_{0.25} > Au_{0.33}Ag_{0.33}Pd_{0.33} > Au_{0.20}Ag_{0.40}Pd_{0.40} > Au_{0.40}Ag_{0.40}Pd_{0.20}$  sıralanmanın olduğu görülmektedir.  $Au_{0.25}Ag_{0.25}Pd_{0.50}$  ve  $Au_{0.50}Ag_{0.25}Pd_{0.25}$  alaşımlarıyla  $Au_{0.20}Ag_{0.40}Pd_{0.40}$  ve  $Au_{0.40}Ag_{0.40}Pd_{0.20}$  alaşımlarının  $C_{11}$  elastik sabit değerlerinin düşük sıcaklıklarda birbirine çok yakın olduğu saptanmaktadır. Pd metalinin oranı arttıkça alaşımların sertleştiği Ag metalinin oranı arttıkça alaşımların yumuşadığı görülmüştür.



Şekil.4.5 Pd, Au,  $Au_{0.40}Ag_{0.20}Pd_{0.40}$ ,  $Au_{0.33}Ag_{0.33}Pd_{0.33}$  ve Ag için simülasyon sonucu bulunan sıcaklığa bağlı  $C_{12}$  elastik sabitleri ve fit grafikleri

$C_{12}$  için ise; Şekil 4.5, Şekil 4.6 ve Şekil 4.7'de benzer şekilde üç saf metal ve deneysel değerleri ile alaşımlar ikişerli olarak teorik değerleri ile karşılaştırılmıştır. Şekil 4.8'de ise simülasyon sonucu elde edilen alaşımlara ait  $C_{12}$  elastik sabit değerleri ve fit grafikleri verilmektedir. Saf metallerde  $C_{12}$  için simülasyon sonucu elde edilen değerler ile deneysel değerlerin altın ve gümüş için iyi uyduğu Pd için ise nispeten iyi uyduğu görülmüştür. Literatürde alaşımlar için deneysel değerler bulunmadığı için sadece simülasyon sonucu elde edilen  $C_{12}$  değerleri sunulmuştur.

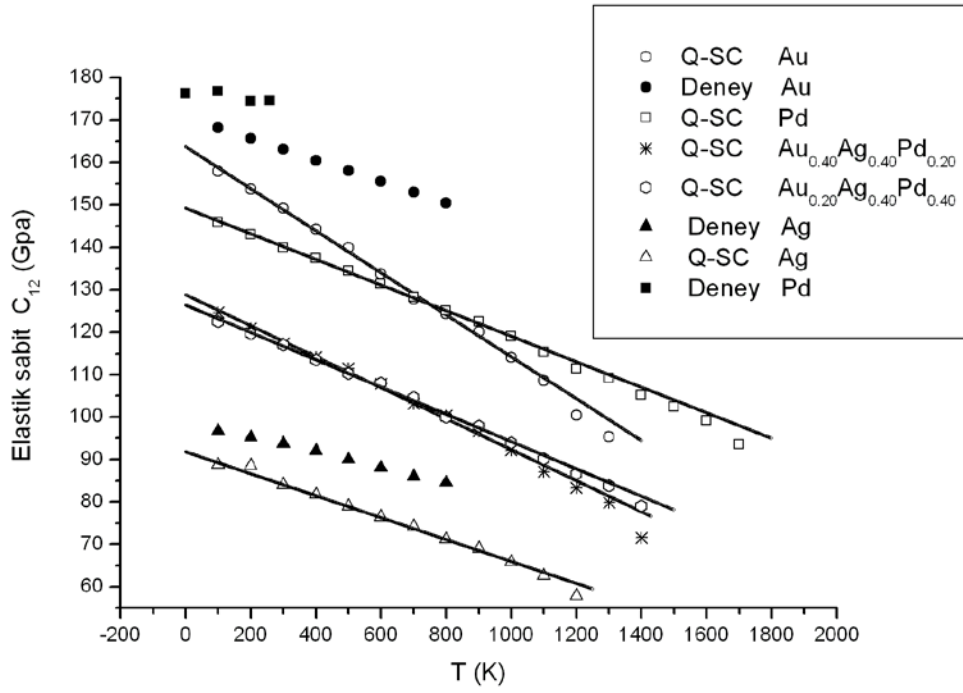


Şekil.4.6 Pd, Au,  $Au_{0.50}Ag_{0.25}Pd_{0.25}$ ,  $Au_{0.25}Ag_{0.25}Pd_{0.50}$  ve Ag için simülasyon sonucu bulunan sıcaklığa bağlı  $C_{12}$  elastik sabitleri ve fit grafikleri

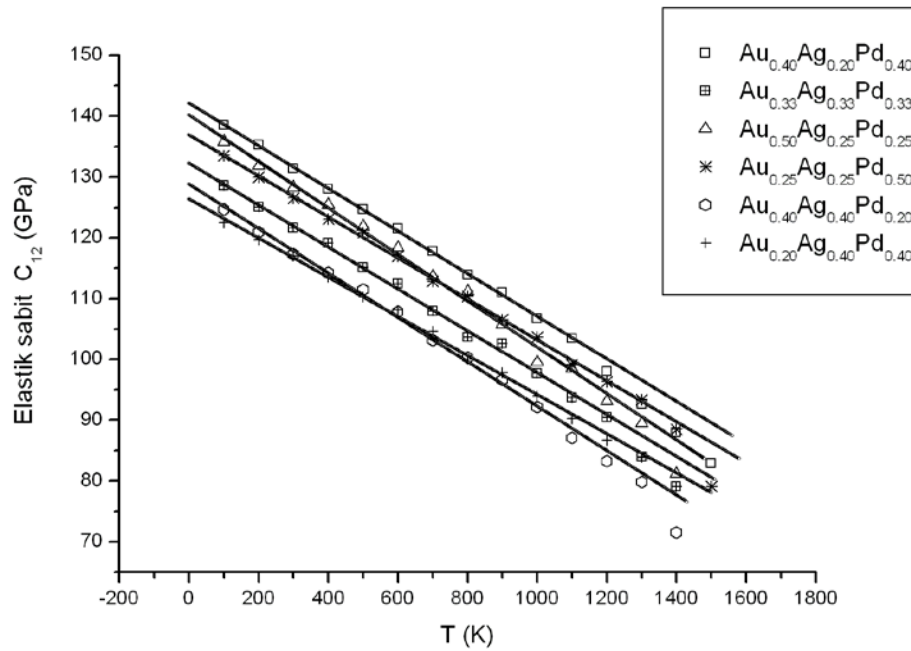
Simülasyon sonucu elde edilen değerlerden düşük sıcaklıkta altının  $C_{12}$  değerinin paladyumdan daha yüksek olduğu Ag metalinin ise en düşük  $C_{12}$  elastik sabit değerine sahip olduğu görülmüştür.

Yüksek sıcaklıklarda ise paladyumun altından daha yüksek  $C_{12}$  değerine sahip olduğu görülmüştür. Bu grafikler altının düşük sıcaklıklarda 12 doğrultusunda çekme veya itmeye karşı paladyumdan daha mukavemetli olduğunu yüksek sıcaklıklarda ise çekmeye karşı paladyumun altına göre daha yüksek dayanım gösterdiği öngörülmüştür.

Şekil 4.8'de alaşımlarda düşük sıcaklıklarda  $C_{12}$  değeri için  $Au_{0.40}Ag_{0.20}Pd_{0.40} > Au_{0.50}Ag_{0.25}Pd_{0.25} > Au_{0.25}Ag_{0.25}Pd_{0.50} > Au_{0.33}Ag_{0.33}Pd_{0.33} > Au_{0.40}Ag_{0.40}Pd_{0.20} > Au_{0.20}Ag_{0.40}Pd_{0.40}$  sıralanmasının olduğu görülmektedir.  $Au_{0.25}Ag_{0.25}Pd_{0.50}$  ve  $Au_{0.50}Ag_{0.25}Pd_{0.25}$  alaşımlarıyla  $Au_{0.20}Ag_{0.40}Pd_{0.40}$  ve  $Au_{0.40}Ag_{0.40}Pd_{0.20}$  alaşımlarının  $C_{12}$  elastik sabit değerlerinin birbirine çok yakın olduğu saptanmaktadır.



Şekil.4.7 Pd, Au,  $Au_{0.40}Ag_{0.40}Pd_{0.20}$ ,  $Au_{0.20}Ag_{0.40}Pd_{0.40}$  ve Ag için simülasyon sonucu bulunan sıcaklığa bağlı  $C_{12}$  elastik sabitleri ve fit grafikleri



Şekil.4.8  $Au_{0.33}Ag_{0.33}Pd_{0.33}$ ,  $Au_{0.25}Ag_{0.25}Pd_{0.50}$ ,  $Au_{0.20}Ag_{0.40}Pd_{0.40}$ ,  $Au_{0.50}Ag_{0.25}Pd_{0.25}$ ,  $Au_{0.40}Ag_{0.20}Pd_{0.40}$  ve  $Au_{0.40}Ag_{0.40}Pd_{0.20}$  için simülasyon sonucu bulunan sıcaklığa bağlı  $C_{12}$  elastik sabitleri ve fit grafikleri

Simülasyon sonunda 0 °K değerinden erime noktasına kadar bulunmuş olan  $C_{11}$  ve  $C_{12}$  elastik sabitlerinin birinci dereceden bir fonksiyona uyum sağladığı görülmüştür.

$$C_{xx}(T) = ax + b \quad (4.2)$$

Alaşım ve metaller için hesaplanmış olan fit değerleri aşağıdaki Tablo 4.1’de verilmiştir.

Tablo 4.1 Pd, Au ve Ag saf metalleri ve alaşımları için  $C_{11}$  ve  $C_{12}$  ‘nin sıcaklığa bağlı birinci dereceden fit fonksiyonunun “a” ve “b” sabitleri

	$C_{11}$		$C_{12}$	
	a	b	a	b
Pd	-0.056	219.08	-0.030	149.20
Au	-0.073	212.16	-0.049	163.68
Ag	-0.047	130.58	-0.025	91.755
Au <sub>0.40</sub> Ag <sub>0.20</sub> Pd <sub>0.40</sub>	-0.059	196.70	-0.035	142.13
Au <sub>0.33</sub> Ag <sub>0.33</sub> Pd <sub>0.33</sub>	-0.057	183.67	-0.034	132.25
Au <sub>0.25</sub> Ag <sub>0.25</sub> Pd <sub>0.50</sub>	-0.058	192.71	-0.033	136.89
Au <sub>0.50</sub> Ag <sub>0.25</sub> Pd <sub>0.25</sub>	-0.062	191.40	-0.038	140.18
Au <sub>0.20</sub> Ag <sub>0.40</sub> Pd <sub>0.40</sub>	-0.056	178.13	-0.032	126.38
Au <sub>0.40</sub> Ag <sub>0.40</sub> Pd <sub>0.20</sub>	-0.059	177.18	-0.036	128.81

$B$  hacim modülü saf metaller ve alaşımlar için  $C_{11}$  ve  $C_{12}$  değerlerinden faydalanılarak (4.3) ifadesinden hesaplanmıştır.

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

Tablo 4.2’de  $C_{11}$  elastik sabitlerinde 0 °K için Pd, Ag ve Au saf elementlerinin bağıl hata oranları sırasıyla %6.56, %2.12 ve %4.21’dir. 300 °K için ise sırasıyla %11.69, %6.20 ve %0.91 olarak hesaplanmıştır.  $C_{12}$  elastik sabitlerinde 0 °K için Pd, Ag ve Au elementlerinin yüzde bağıl hataları sırasıyla %15.38, %6.006 ve %3.145 olarak hesaplanmıştır. 300 °K için ise sırasıyla %22.37, %8.552 ve %8.51 olarak hesaplanmıştır.  $B$  hacim modülü için 0 °K’de yine aynı sırayla %7.47, %4.50, %1.12 ve 300 °K içinde %11.01, %6.25 ve %5.88 olarak hesaplanmıştır.

Tablo 4.2 Pd, Ag ve Au için 0 ve 300 K'deki sıcaklıklarda Q-SC kuvvet alanı kullanılarak simülasyon sonucunda  $C_{11}$ ,  $C_{12}$  ve  $B$ 'ler için hesaplanmış teorik, deneysel değerler ve % bağıl hataları

	T	$C_{11}$ (GPa)			$C_{12}$ (GPa)			Bulk		
		Q-SC	Den.	%	Q-SC	Den.	%	Q-SC	Den.	%
Pd	0	218.72	234.1 <sup>[29]</sup>	6.56	149.00	176.1 <sup>[29]</sup>	15.38	172.4	195.4 <sup>[29]</sup>	7.47
	300	200.69	227.1 <sup>[29]</sup>	11.69	139.97	176.1 <sup>[29]</sup>	22.37	160.88	180.8 <sup>[29]</sup>	11.01
	300		248.3 <sup>[30]</sup>			176.2 <sup>[30]</sup>			200.2 <sup>[30]</sup>	
	300		232.0 <sup>[31]</sup>			178.0 <sup>[31]</sup>				
Ag	0	128.7	131.5 <sup>[29]</sup>	2.12	91.4	97.3 <sup>[29]</sup>	6.006	103.8	108.7 <sup>[29]</sup>	4.50
	300	116.3	124.0 <sup>[29]</sup>	6.20	839	93.7 <sup>[29]</sup>	8.552	94.4	100.7 <sup>[29]</sup>	6.25
	300		141.0 <sup>[30]</sup>			96.1 <sup>[30]</sup>			110.5 <sup>[30]</sup>	
	300		132.0 <sup>[31]</sup>			97.0 <sup>[31]</sup>			108.0 <sup>[31]</sup>	
Au	0	210.10	201.6 <sup>[32]</sup>	4.21	162.42	169.7 <sup>[32]</sup>	3.145	178.31	180.33 <sup>[32]</sup>	1.12
	300	190.55	192.3 <sup>[32]</sup>	0.91	149.22	163.1 <sup>[32]</sup>	8.51	163.00	172.8 <sup>[32]</sup>	5.88

Yapabildiğimiz en iyi araştırmalara göre alaşımların elastik sabitleri için deneysel değer veya herhangi bir teorik yayın bulunmadığından Tablo 4.3'de sadece simülasyon sonucu elde edilen değerler verilmiştir.

Tablo 4.3 Pd, Ag, Au alaşımları için 0 ve 300 K'deki sıcaklıklarda Q-SC kuvvet alanı kullanılarak simülasyon sonucunda  $C_{11}$ ,  $C_{12}$  ve  $B$  için hesaplanmış teorik değerler

Metal	T (K)	$C_{11}$ (GPa)	$C_{12}$ (GPa)	$B$
		Q-SC	Q-SC	Q-SC
Au <sub>0.33</sub> Ag <sub>0.33</sub> Pd <sub>0.33</sub>	0	180.12	130.75	147.21
	300	166.03	121.62	136.42
Au <sub>0.25</sub> Ag <sub>0.25</sub> Pd <sub>0.50</sub>	0	188.77	134.38	152.21
	300	175.23	126.54	142.77
Au <sub>0.50</sub> Ag <sub>0.25</sub> Pd <sub>0.25</sub>	0	188.38	138.73	155.28
	300	172.60	128.23	143.02
Au <sub>0.20</sub> Ag <sub>0.40</sub> Pd <sub>0.40</sub>	0	173.40	123.50	14.013
	300	161.42	116.98	131.79
Au <sub>0.40</sub> Ag <sub>0.40</sub> Pd <sub>0.20</sub>	0	175.07	127.71	143.49
	300	159.09	117.34	131.25
Au <sub>0.40</sub> Ag <sub>0.20</sub> Pd <sub>0.40</sub>	0	193.89	141.36	158.87
	300	178.66	131.31	147.09

## 4.2 Yoğunluk, Örgü Parametresi ve Bağlanma Enerjisi

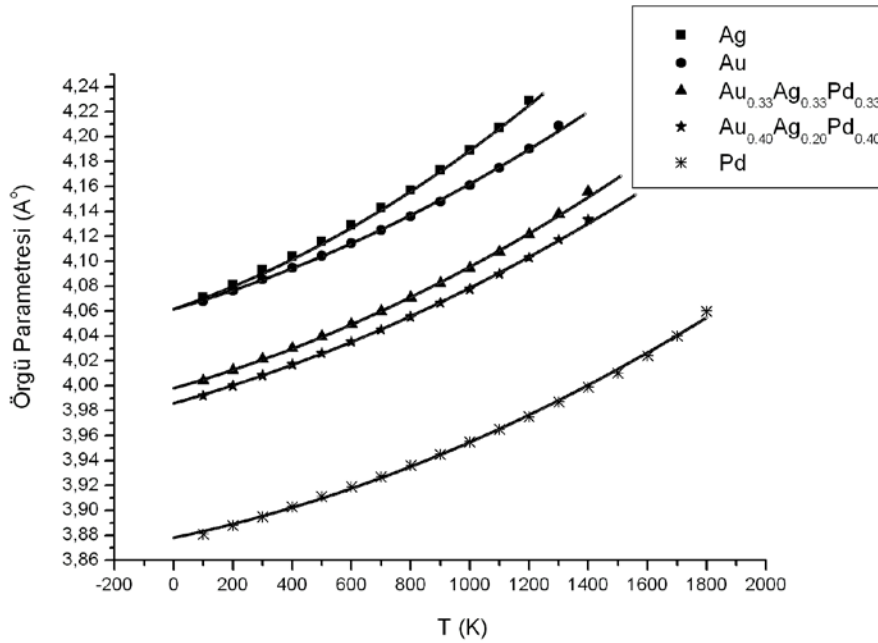
Bilgisayar simülasyonlarının geçerliliğinin anlaşılabilmesi için yoğunluğun doğru bir biçimde hesaplanması çok önemlidir. Yoğunluk hesabı 20000 adımlık TPN istatistik çerçevesinde elde edilmiştir. Erime noktasının belirlenmesinde yoğunluk bir ölçü olarak kullanılabilir. Metallerin katı-sıvı faz geçişlerinde yoğunluktaki büyük değişikliklerden faydalanılır.



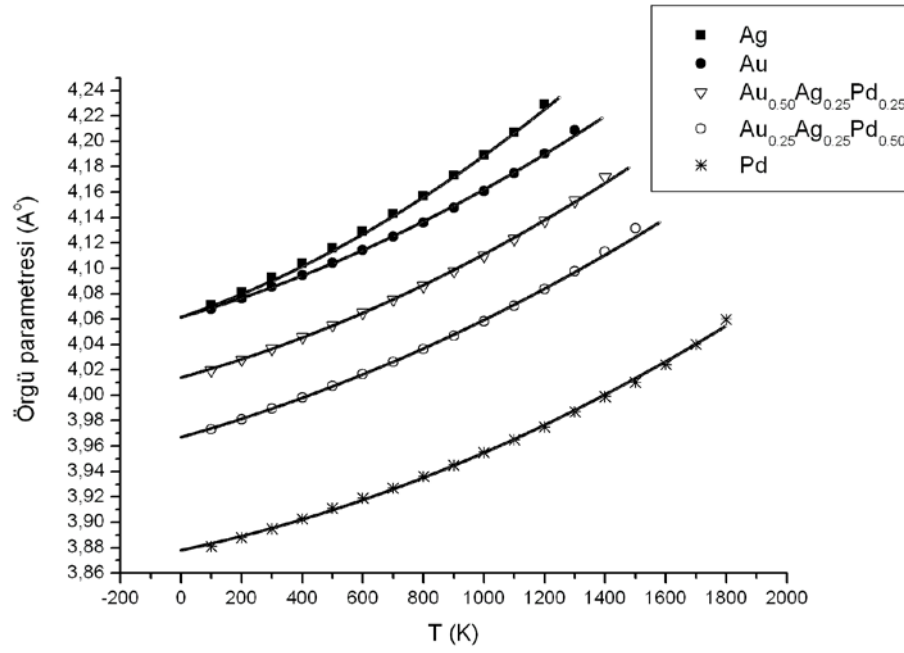
Örgü parametreleri incelenen materyalin termal özellikleri hakkında önemli bilgiler verir. Yapı kusurlarının analizi açısından çok önemlidir. Bu çalışmada örgü sabitlerini hesaplamak için yine 20000 adımlık aynı TPN çerçeve kullanılmıştır. Simülasyon sonucu elde edilen örgü sabitleri 0 °K değerinden erime noktasına kadar ikinci dereceden bir denkleme fit edilmiştir.

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

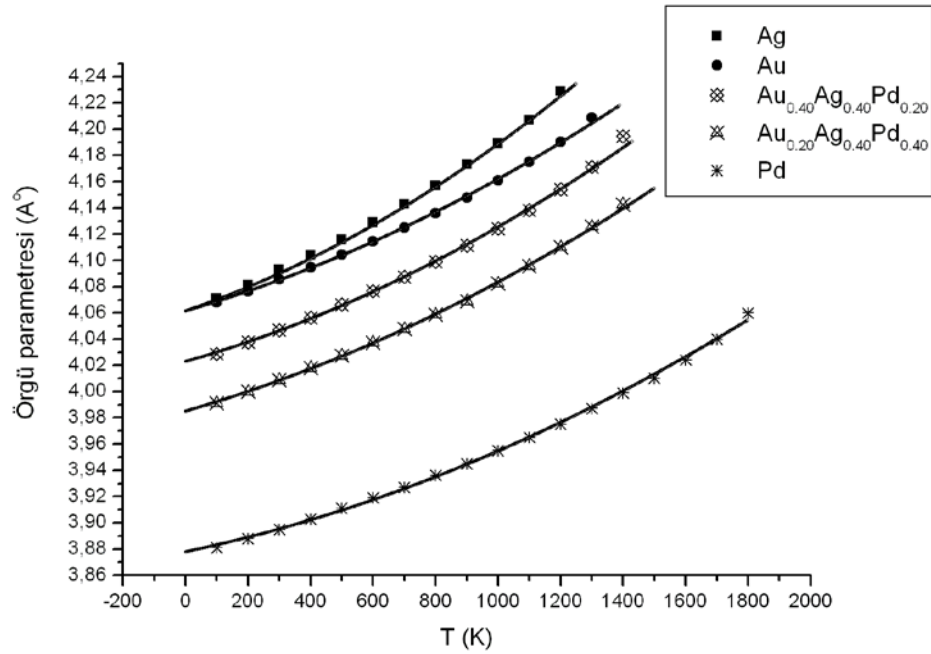
Şekil 4.9, Şekil 4.10, Şekil 4.11 ve Şekil 4.12’de ise simülasyon sonucu elde edilmiş metal ve alaşımlara ait örgü parametreleri verilmektedir. Şekil 4.13’de ise simülasyon sonucu elde edilmiş olan metal ve alaşımlara ait yoğunluk değerlerini veren grafikler verilmektedir. Grafiklerin incelenmesinden oda sıcaklığında örgü sabiti en büyük olan metal gümüş aksine en küçük olan ise Paladyumdur. Alaşımların örgü sabiti gümüş ve paladyumun arasında yer almaktadır. Oda sıcaklığında alaşımlar arasında sıralama yapıldığında  $Au_{0.40}Ag_{0.20}Pd_{0.40} > Au_{0.50}Ag_{0.25}Pd_{0.25} > Au_{0.33}Ag_{0.33}Pd_{0.33} > Au_{0.20}Ag_{0.40}Pd_{0.40} > Au_{0.40}Ag_{0.20}Pd_{0.40} > Au_{0.25}Ag_{0.25}Pd_{0.50}$  olduğu görülmektedir.



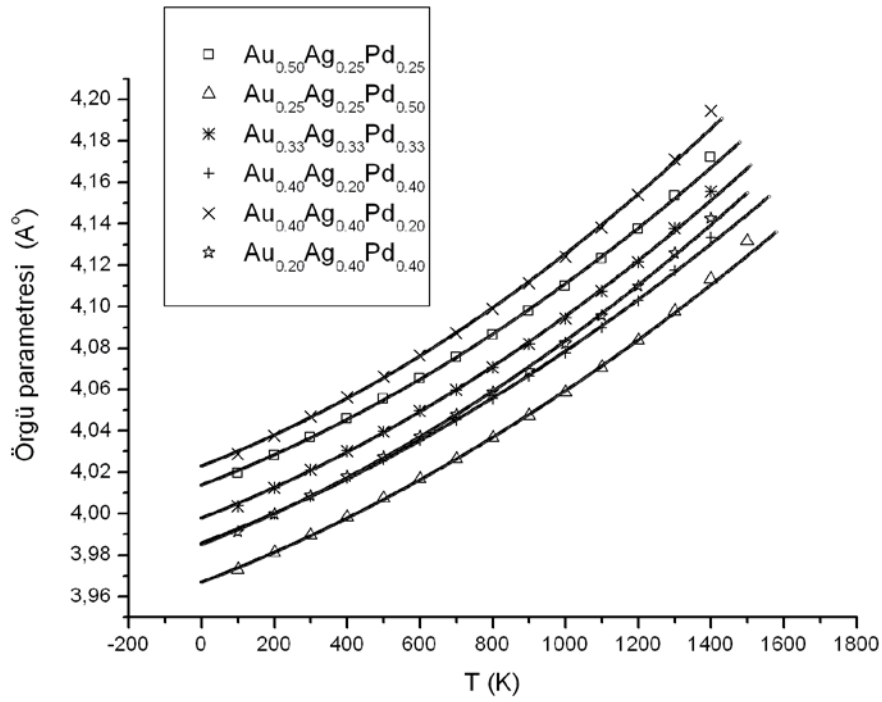
Şekil 4.9 Ag, Au, Pd,  $Au_{0.40}Ag_{0.20}Pd_{0.40}$  ve  $Au_{0.33}Ag_{0.33}Pd_{0.33}$  için simülasyon sonucu hesaplanmış örgü parametreleri ve fit grafiği



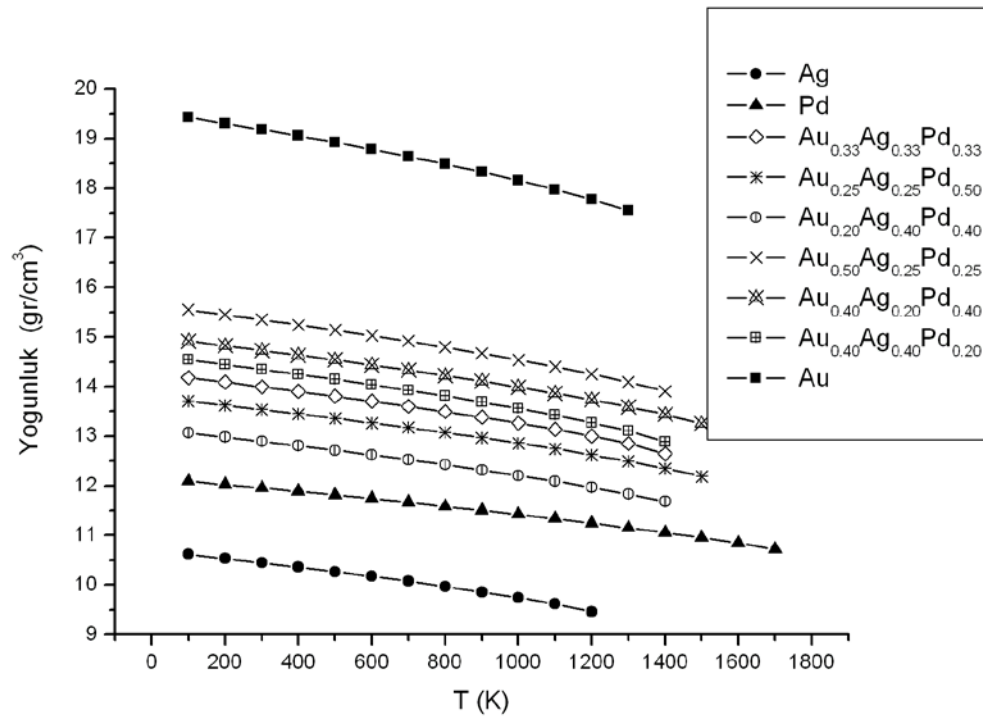
Şekil 4.10 Ag, Au, Pd, Au<sub>0.50</sub>Ag<sub>0.25</sub>Pd<sub>0.25</sub> ve Au<sub>0.25</sub>Ag<sub>0.25</sub>Pd<sub>0.50</sub> için simülasyon sonucu hesaplanmış örgü parametreleri ve fit grafiği



Şekil 4.11 Ag, Au, Pd, Au<sub>0.40</sub>Ag<sub>0.40</sub>Pd<sub>0.20</sub> ve Au<sub>0.20</sub>Ag<sub>0.40</sub>Pd<sub>0.40</sub> için simülasyon sonucu hesaplanmış örgü parametreleri ve fit grafiği



Şekil 4.12  $Au_{0.33}Ag_{0.33}Pd_{0.33}$ ,  $Au_{0.25}Ag_{0.25}Pd_{0.50}$ ,  $Au_{0.20}Ag_{0.40}Pd_{0.40}$ ,  $Au_{0.50}Ag_{0.25}Pd_{0.25}$ ,  $Au_{0.40}Ag_{0.20}Pd_{0.40}$  ve  $Au_{0.40}Ag_{0.40}Pd_{0.20}$  için simülasyon sonucu hesaplanmış örgü parametreleri ve fit grafiği



Şekil 4.13 Au, Ag,  $Au_{0.33}Ag_{0.33}Pd_{0.33}$ ,  $Au_{0.25}Ag_{0.25}Pd_{0.50}$ ,  $Au_{0.20}Ag_{0.40}Pd_{0.40}$ ,  $Au_{0.50}Ag_{0.25}Pd_{0.25}$ ,  $Au_{0.40}Ag_{0.20}Pd_{0.40}$ ,  $Au_{0.40}Ag_{0.40}Pd_{0.20}$  ve Pd için simülasyon sonucu hesaplanmış yoğunluk değerleri

Şekil 4.13'den alaşımlar arasında yoğunluk sıralamasının  $Au_{0.50}Ag_{0.25}Pd_{0.25} > Au_{0.40}Ag_{0.20}Pd_{0.40} > Au_{0.40}Ag_{0.40}Pd_{0.20} > Au_{0.33}Ag_{0.33}Pd_{0.33} > Au_{0.25}Ag_{0.25}Pd_{0.50} > Au_{0.20}Ag_{0.40}Pd_{0.40}$  olduğu belirlenmektedir.

Grafiklerde gümüş ve altın'ın düşük sıcaklıklardaki örgü sabitleri neredeyse aynı iken yüksek sıcaklıklarda gümüş'ün örgü sabiti değerinin hızla yükseldiği ve altın'ı geçtiği görülmektedir. Paladyuma yaklaştıkça sıcaklığa bağlı olarak örgü sabiti değerinin daha yavaş değiştiğini göstermektedir. Örgü sabitinin sıcaklığa bağlı olarak değişimi bu malzemenin elastik sabitleri hakkında bize bilgi verir.

Tablo 4.4'de 0 ve 300 °K sıcaklık değerleri için simülasyon sonucu hesaplanan örgü sabiti, yoğunluk ve bağlanma enerjisi değerleri ile deneysel değerler verilmiştir. Pd, Ag ve Au elementlerinin 300 °K'de örgü sabitleri için deneysel değerlere göre yapılan yüzde bağıl hata oranları sırasıyla %0.12, %0.73 ve %0.12 olarak çıkmıştır. Pd, Ag ve Au elementlerinin 300 °K'de yoğunluk için deneysel değerlere göre yapılan yüzde bağıl hata oranları sırasıyla %12.91, %0.47 ve %0.62 olarak bulunmuştur. Yine aynı tablodan Pd, Ag ve Au elementlerinin 0 °K'de bağlanma enerjisi için bağıl hata oranları sırasıyla %0.51, %0.89 ve %0.32 olarak hesaplanmıştır. Yapılan her üç bağıl hata hesabında da simülasyon hesaplamalarının bulunabilen deneysel değerlerle çok uyumlu olduğunu görülmektedir.

Tablo 4.4 Pd, Ag, Au saf metalleri için 0 ve 300 K'deki sıcaklıklarda Q-SC kuvvet alanı kullanılarak hesaplanmış ( $a$ ) örgü parametresi, ( $E_c$ ) bağlanma enerjisi ve yoğunluk için teorik, deneysel değerler ve % bağıl hatası

T (K)	$a$ (Å)			$\rho$ (g/cm <sup>3</sup> )			$E_c$ (kJ/mol)			
	Q-SC	Den.	%	Q-SC	Den.	%	Q-SC	Den.	%	
Pd	0	4.06		10.71	12.13 <sup>[29]</sup>	11.7	377.93	376.00 <sup>[29]</sup>	0.51	
	300	3.895	3.89 <sup>[29]</sup>	0.12	10.45	12.00 <sup>[29]</sup>	12.91	370.23		
	300		3.89 <sup>[30]</sup>					380.15 <sup>[30]</sup>		
	300		3.89 <sup>[31]</sup>					379.77 <sup>[31]</sup>		
Ag	0	4.06		10.71	10.63 <sup>[29]</sup>	0.75	286.55	284.00 <sup>[29]</sup>	0.89	
	300	4.09	4.06 <sup>[29]</sup>	0.73	10.45	10.50 <sup>[29]</sup>	0.47	289.51		
	300		4.09 <sup>[30]</sup>					285.60 <sup>[30]</sup>		
	300		4.09 <sup>[31]</sup>					285.60 <sup>[31]</sup>		
Au	0	4.06	4.07 <sup>[29]</sup>	0.24	19.54	19.48 <sup>[29]</sup>	0.30	369.21	368.00 <sup>[29]</sup>	0.32
	300	4.085	4.08 <sup>[29]</sup>	0.12	19.18	19.30 <sup>[29]</sup>	0.62	361.58	363.91 <sup>[29]</sup>	0.64

Tablo 4.5'de alaşımlar için 0 ve 300 °K sıcaklığında simülasyon sonucu hesaplanan örgü sabiti, yoğunluk ve bağlanma enerjisi değerleri ile sadece 300 °K sıcaklığında

örgü sabiti deneysel değerleri verilmiştir. 300 °K'de  $\text{Au}_{0.33}\text{Ag}_{0.33}\text{Pd}_{0.33}$ ,  $\text{Au}_{0.25}\text{Ag}_{0.25}\text{Pd}_{0.50}$ ,  $\text{Au}_{0.50}\text{Ag}_{0.25}\text{Pd}_{0.25}$ ,  $\text{Au}_{0.20}\text{Ag}_{0.40}\text{Pd}_{0.40}$ ,  $\text{Au}_{0.40}\text{Ag}_{0.40}\text{Pd}_{0.20}$ ,  $\text{Au}_{0.40}\text{Ag}_{0.20}\text{Pd}_{0.40}$  alaşımlarının örgü sabitleri için deneysel değerlere göre yapılan yüzde bağıl hata oranları sırasıyla %0.09, %0.35, %0.22, %0.0, %0.57, %0.2 olarak çıkmıştır.

Tablo 4.5 Pd, Ag ve Au'dan oluşan alaşımlar için 0 ve 300 K'deki sıcaklıklarda Q-SC kuvvet alanı kullanılarak hesaplanmış ( $a$ ) örgü parametresi ve deneysel değerleri, ( $E_c$ ) bağlanma enerjisi ve yoğunluk için teorik değerler

Alaşım	T (K)	$a$ (Å)		%Hata	$\rho$ (g/cm <sup>3</sup> )		$E_c$ (kJ/mol)	
		Q-SC	Den.		Q-SC	Q-SC		
$\text{Au}_{0.33}\text{Ag}_{0.33}\text{Pd}_{0.33}$	0	3.996			14.258		345.228	
	300	4.021	4.025 <sup>[33]</sup>	0.09	14.000		337.541	
$\text{Au}_{0.25}\text{Ag}_{0.25}\text{Pd}_{0.50}$	0	3.966			13.777		353.681	
	300	3.989	3.975 <sup>[33]</sup>	0.35	13.536		346.154	
$\text{Au}_{0.50}\text{Ag}_{0.25}\text{Pd}_{0.25}$	0	4.012			15.630		351.687	
	300	4.036	4.027 <sup>[33]</sup>	0.22	15.350		344.041	
$\text{Au}_{0.20}\text{Ag}_{0.40}\text{Pd}_{0.40}$	0	3.983			13.536		339.912	
	300	4.008	4.008 <sup>[33]</sup>	0.0	12.896		332.275	
$\text{Au}_{0.40}\text{Ag}_{0.40}\text{Pd}_{0.20}$	0	4.021			14.628		338.296	
	300	4.0146	4.038 <sup>[33]</sup>	0.57	14.353		330.70	
$\text{Au}_{0.40}\text{Ag}_{0.20}\text{Pd}_{0.40}$	0	3.985			14.991		357.455	
	300	4.008	4.000 <sup>[33]</sup>	0.2	14.773		349.791	

### 4.3 Termal Genleşme Katsayısı

Metaller sıcaklığa bağlı olarak büyük miktarda termal genleşme gösterirler. Bilimsel ve mühendislik çalışmalarında metallerin kullanılması esnasında termal genleşme katsayılarının bilinmesi gerekir. Metallerin ve alaşımların termal genleşme katsayıları aşağıdaki denklemlerle belirlenir.

$$\alpha(T) = \frac{1}{a_0} \left[ \frac{\partial a(T)}{\partial T} \right] \quad (4.5)$$

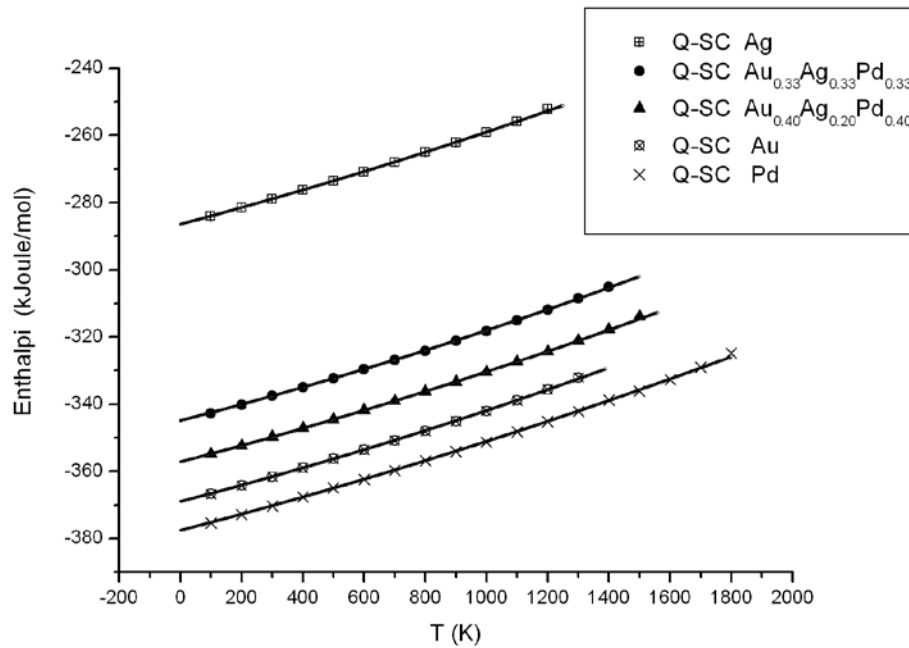
Burada  $a(T)$  örgü sabiti değerlerinin fit edilmesinden elde edilen ikinci dereceden bir denklemdir. Pd, Ag ve Au metalleri için termal genleşme katsayıları deneysel değerlerle karşılaştırıldığında üstel katsayılar da hata çıkmamış olup çarpan sabitlerinde bağıl hata oranları sırasıyla %46.29, %40.73 olarak hesaplanmıştır.

Tablo 4.6 Pd, Ag, Au saf metalleri ve alaşımları için 0 ve 300 K'deki sıcaklıklarda Q-SC kuvvet alanı kullanılarak hesaplanmış  $\alpha(T)$  termal genleşme katsayısı için teorik ve deneysel değerler

Metal	c	$b \times 10^{-5}$	$a \times 10^{-8}$	$\alpha(T) \times 10^{-5}$		%Hata
				Q-SC	Den.	
Pd	3.887	4.958	2.703	1.697	1.16 <sup>[34]</sup>	46.29
Ag	4.063	8.115	4.585	2.674	1.90 <sup>[34]</sup>	40.73
Au	4.061	6.877	3.159	2.160		
$Au_{0.33}Ag_{0.33}Pd_{0.33}$	3.997	6.743	3.008	2.138		
$Au_{0.25}Ag_{0.25}Pd_{0.50}$	3.966	6.714	2.529	2.075		
$Au_{0.50}Ag_{0.25}Pd_{0.25}$	4.013	6.676	3.047	2.119		
$Au_{0.20}Ag_{0.40}Pd_{0.40}$	3.984	6.877	2.965	2.172		
$Au_{0.40}Ag_{0.40}Pd_{0.20}$	4.022	6.787	3.462	2.203		
$Au_{0.40}Ag_{0.20}Pd_{0.40}$	3.985	6.659	2.610	2.063		

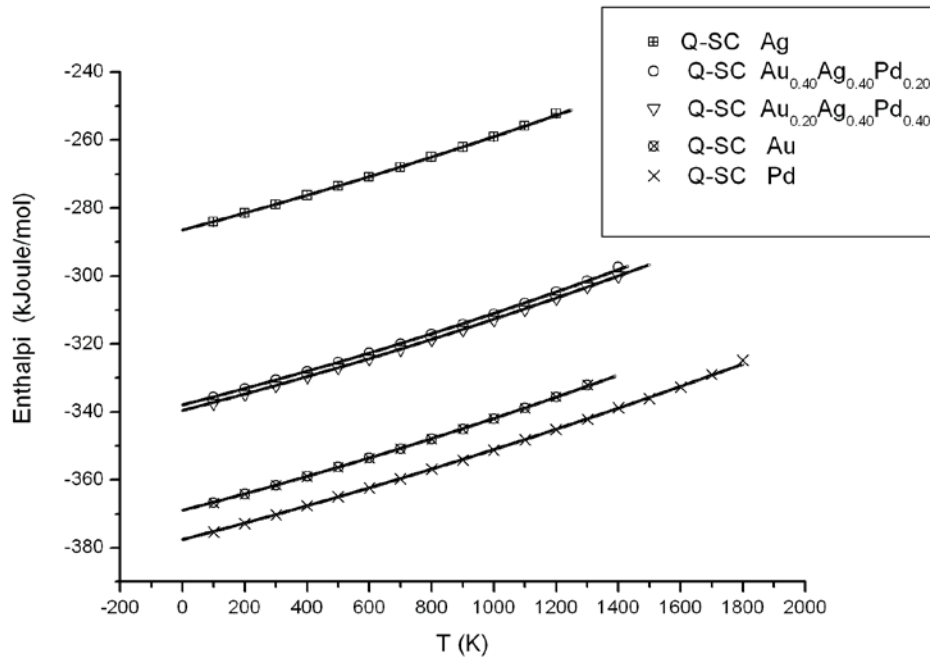
#### 4.4 Isı Sığası

Saf metallerin ve alaşımların enthalpi değişimleri TPN çerçeve kullanılarak hesaplanmıştır. Simülasyon sonunda oluşan entalpi grafikleri Şekil 4.14, Şekil 4.15, 4.16 ve Şekil 4.17'de verilmektedir.



Şekil 4.14 Ag,  $Au_{0.33}Ag_{0.33}Pd_{0.33}$ ,  $Au_{0.40}Ag_{0.20}Pd_{0.40}$ , Au ve Pd için Q-SC kuvvet alanı kullanılarak hesaplanmış entalpinin sıcaklıkla değişim değerleri ve fit grafiği

Şekil 4.14, Şekil 4.15, Şekil 4.16, Şekil 4.17'deki grafiklerde entalpisi en yüksek malzemenin Ag metali olduğunu en düşük metalinde Pd metali olduğunu göstermektedir. Grafiklere göre atomları arasında en sıkı bağ olan metal Paladyum metalidir. En uzun bağ yapılı metal ise gümüştür. Bütün alaşımların entalpi değerleri gümüş ve paladyum arasında çıkmaktadır. Alaşımlarda paladyum miktarı arttıkça entalpide düşüş gümüş miktarı arttıkça entalpide yükselme görülmüştür. Süpriz bir sonuçla karşılaşılmamaktadır.

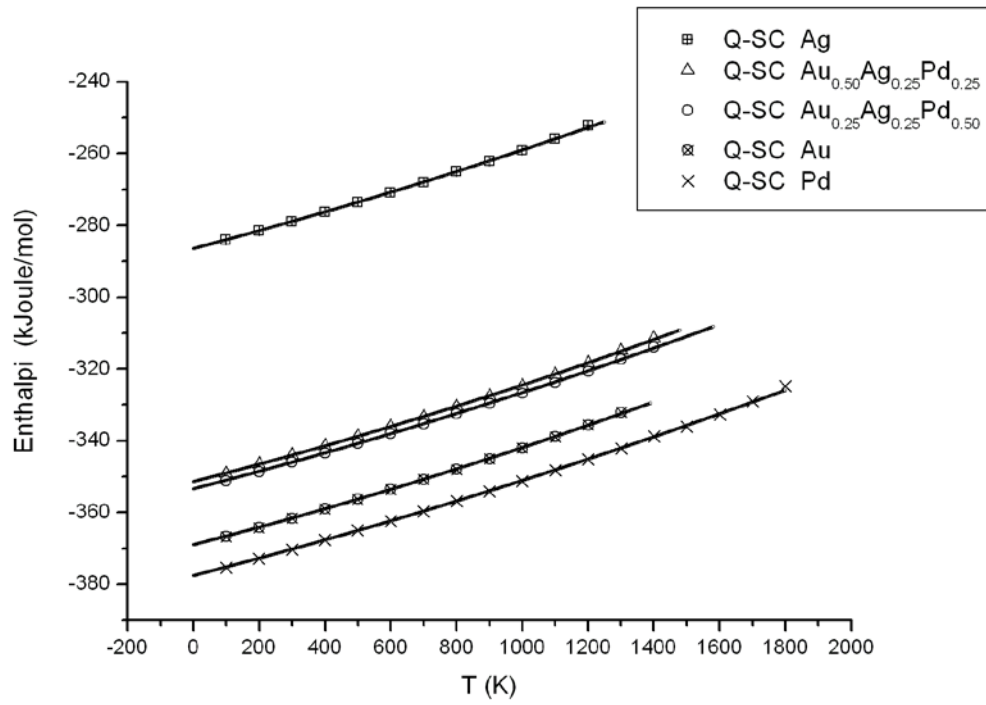


Şekil 4.15 Ag,  $Au_{0.40}Ag_{0.40}Pd_{0.20}$ ,  $Au_{0.20}Ag_{0.40}Pd_{0.40}$ , Au ve Pd için Q-SC kuvvet alanı kullanılarak hesaplanmış entalpinin sıcaklıkla değişim değerleri ve fit grafiği

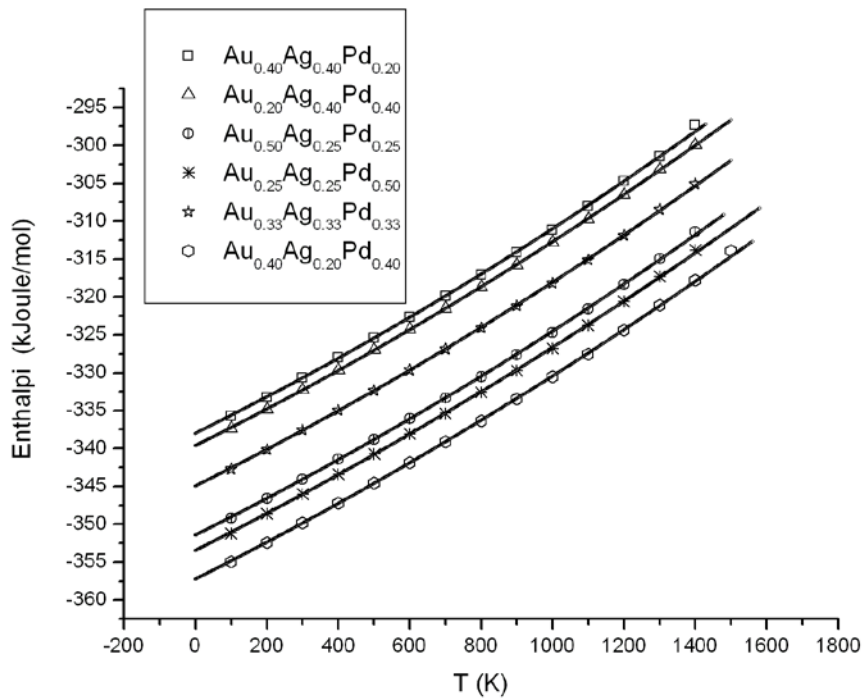
Alaşımların ve alaşımları oluşturan metallerin erime sıcaklığı altındaki entalpi değerleri (4.6)'daki ikinci dereceden denkleme fit edilmiştir.

$$H(T) = aT^2 + bT + c \quad (4.6)$$

Şekil 4.17'den alaşımlar arasında entalpi değerindeki sıralanma  $Au_{0.40}Ag_{0.40}Pd_{0.20}$  >  $Au_{0.20}Ag_{0.40}Pd_{0.40}$  >  $Au_{0.33}Ag_{0.33}Pd_{0.33}$  >  $Au_{0.50}Ag_{0.25}Pd_{0.25}$  >  $Au_{0.25}Ag_{0.25}Pd_{0.50}$  >  $Au_{0.40}Ag_{0.20}Pd_{0.40}$  olarak belirlenmiştir.



Şekil 4.16 Ag,  $Au_{0.50}Ag_{0.25}Pd_{0.25}$ ,  $Au_{0.25}Ag_{0.25}Pd_{0.50}$ , Au ve Pd için Q-SC kuvvet alanı kullanılarak hesaplanmış entalpinin sıcaklıkla değişim değerleri ve fit grafiği



Şekil 4.17  $Au_{0.33}Ag_{0.33}Pd_{0.33}$ ,  $Au_{0.25}Ag_{0.25}Pd_{0.50}$ ,  $Au_{0.20}Ag_{0.40}Pd_{0.40}$ ,  $Au_{0.50}Ag_{0.25}Pd_{0.25}$ ,  $Au_{0.40}Ag_{0.20}Pd_{0.40}$  ve  $Au_{0.40}Ag_{0.40}Pd_{0.20}$  için Q-SC kuvvet alanı kullanılarak hesaplanmış entalpinin sıcaklıkla değişim değerleri ve fit grafiği



Isı sığasını hesaplamak için yukarıda verdiğimiz entalpi grafiklerinden ortaya çıkan ve (4.7) ile gösterilen ısı sığası denklemi kullanılmıştır.

$$C_p(T) = \left[ \frac{\partial H(T)}{\partial T} \right]_p \quad (4.7)$$

Buna göre ortaya çıkan (4.7) eşitliğinden faydalanarak 300 °K için hesaplanan ısı sığası değerleri ve bulunabilen deneysel değerler Tablo 4.5 'de gösterilmiştir.

Deneysel değerler ile hesaplanan ısı sığası değerleri karşılaştırıldığında sonuçların uyumlu olduğu görülmüştür. Bulunan deneysel değerlere göre Pd, Ag ve Au metalleri için ısı sığalarının bağıl hata yüzdeleri sırasıyla %2.41, %1.71 ve % 1.32 olarak çıkmıştır.

Tablo 4.7 Pd, Ag, Au saf metalleri ve alaşımlar için 0 ve 300 K'deki sıcaklıklarda Q-SC kuvvet alanı kullanılarak hesaplanmış  $C_p$  ısı sığası için teorik ve deneysel değerler

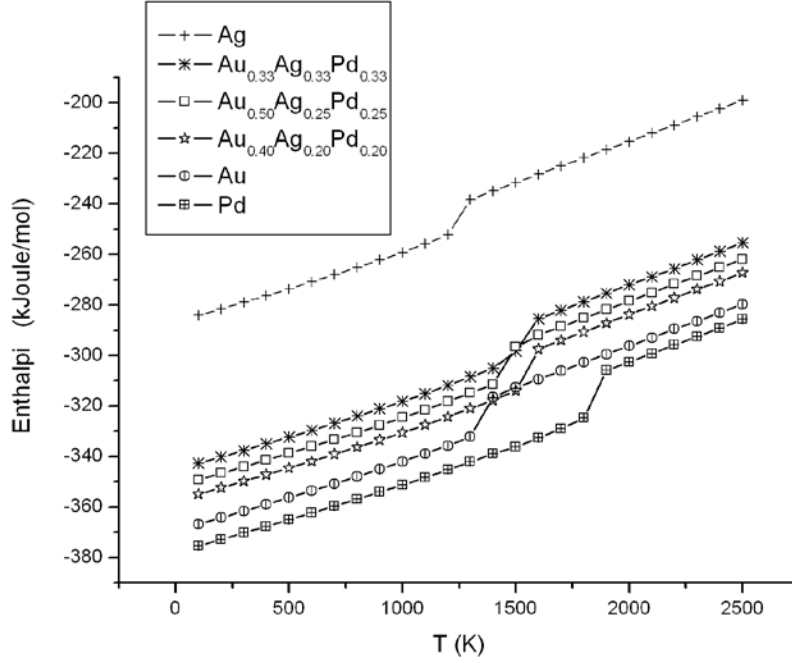
Metal	$c$	$b \times 10^{-4}$	$a \times 10^{-4}$	$C_p$ (kJmol <sup>-1</sup> K <sup>-1</sup> )		%Hata
				Q-SC	Den.	
Pd	-377.64	236.973	3.514	0.025367	0.025995 <sup>[34]</sup>	2.41
Ag	-286.481	241.423	3.104	0.026100	0.025367 <sup>[34]</sup>	1.71
Au	-369.035	236.071	3.504	0.025660	0.025325 <sup>[35]</sup>	1.32
Au <sub>0.33</sub> Ag <sub>0.33</sub> Pd <sub>0.33</sub>	-334.971	233.709	3.514	0.025479		
Au <sub>0.25</sub> Ag <sub>0.25</sub> Pd <sub>0.50</sub>	-353.467	236.891	3.104	0.025551		
Au <sub>0.50</sub> Ag <sub>0.25</sub> Pd <sub>0.25</sub>	-351.439	233.859	3.504	0.025488		
Au <sub>0.20</sub> Ag <sub>0.40</sub> Pd <sub>0.40</sub>	-339.653	234.301	3.482	0.025519		
Au <sub>0.40</sub> Ag <sub>0.40</sub> Pd <sub>0.20</sub>	-338.02	233.398	3.659	0.025525		
Au <sub>0.40</sub> Ag <sub>0.20</sub> Pd <sub>0.40</sub>	-357.248	236.359	3.159	0.025531		

#### 4.5 Erime Sıcaklıklarının Belirlenmesi

Erime noktaları entalpideki ve yoğunluk grafiklerindeki ani değişme, radyal dağılım fonksiyonu, ortalama kare yer değiştirme ve ya elastik sabitlerdeki ani değişmeden tespit edilebilir. Bunlar arasında ortalama kare yer değiştirme erime sıcaklığının en güvenilir değerini verir.

Entalpi TPN istatistik çerçevesinde Moleküler Dinamik yöntemi ile hesaplanmıştır. Enthalpi grafiğindeki sıçrama bölgesi bize erime noktası hakkında yaklaşık bilgi

verir. Katı ve sıvı halleri arasında sıçrama gösterir. Bu bölge bize erime aralığını verir. Şekil 4.18’de bu görülmektedir.

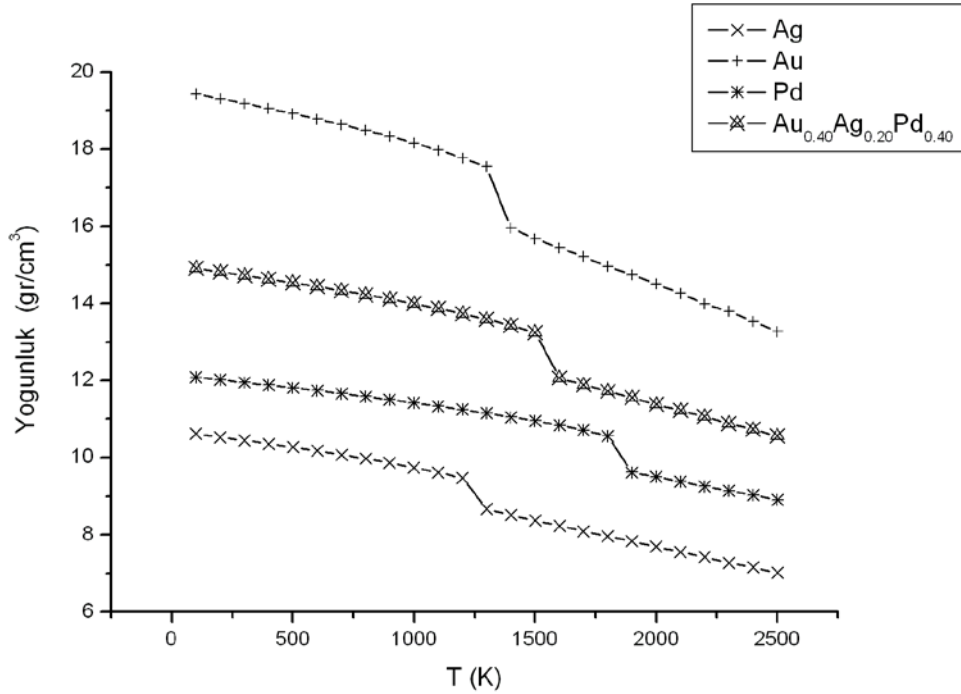


Şekil 4.18 Ag,  $Au_{0.33}Ag_{0.33}Pd_{0.33}$ ,  $Au_{0.50}Ag_{0.25}Pd_{0.25}$ ,  $Au_{0.40}Ag_{0.20}Pd_{0.40}$ , Au ve Pd için enthalpinin sıcaklıkla değişim grafiği

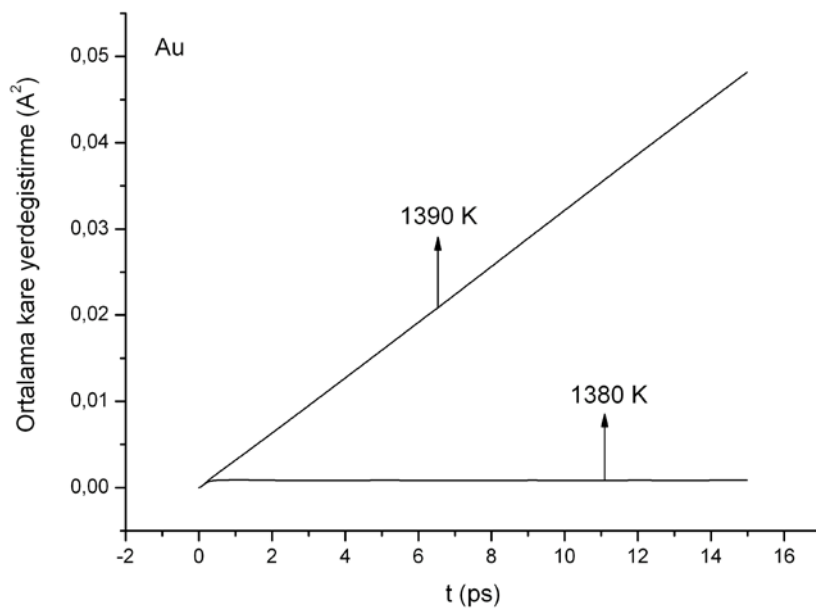
Şekil 4.19’de Ag,  $Au_{0.40}Ag_{0.20}Pd_{0.40}$ , Pd ve Au metalleri için erime sıcaklığının yaklaşık tayininde sıcaklığa bağlı olarak yoğunluğun değişim grafikleri kullanılabilir. Yoğunluktaki ani değişme noktaları bize metalin erimeye başladığını bildirir. Erime sıcaklığının tayininde yoğunluk değişim grafiği güvenli bir araçtır. Grafikte görülen kırık çizgiler faz geçişlerini yani erimenin başladığı ve metalin tamamıyla sıvı hale geçiş aralığını göstermektedir. Grafikte birinci bölge katı, ikinci bölge ise sıvı haldeki yoğunlukları gösterir.

Keskin bir erime noktası tayini yapabilmek için ortalama kare yer değiştirmenin zamana göre zamana göre grafiğinden yorumlanmalıdır. Erime sıcaklığı ortalama kare yer değiştirmelerin sürekliliğinden ve sıvılaşıma ile artan difüzyon katsayılarındaki büyük değişikliklerden belirlenir. Ortalama kare yer değiştirme hesaplamaları Moleküler Dinamikte TPN çerçevesinde yapılmıştır. Şekillerde görülen düz çizgi difüzyonun sürekli arttığını göstermektedir. Şekil 4.20 ve Şekil 4.28

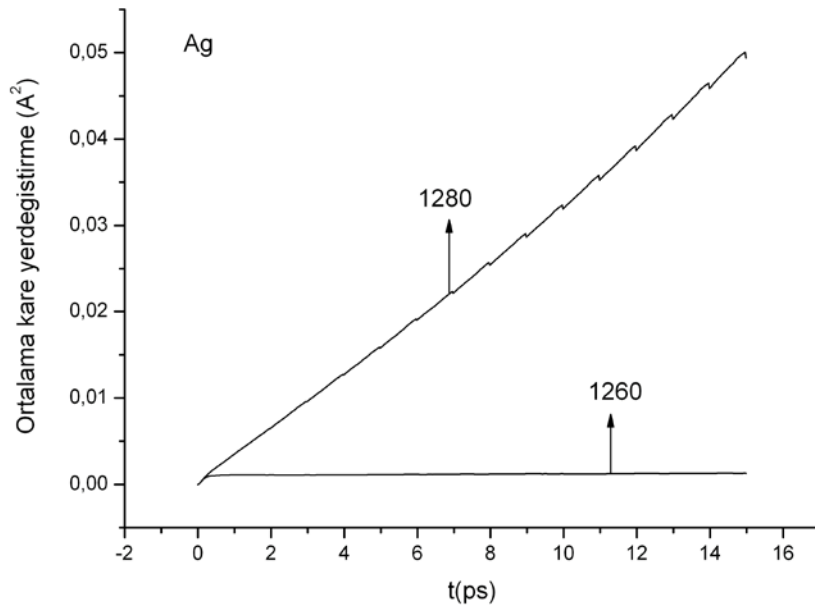
arasındaki şekillerde erime sıcaklıklarının tespiti için iki farklı ortalama kare yerdeğiştirme verilmektedir.



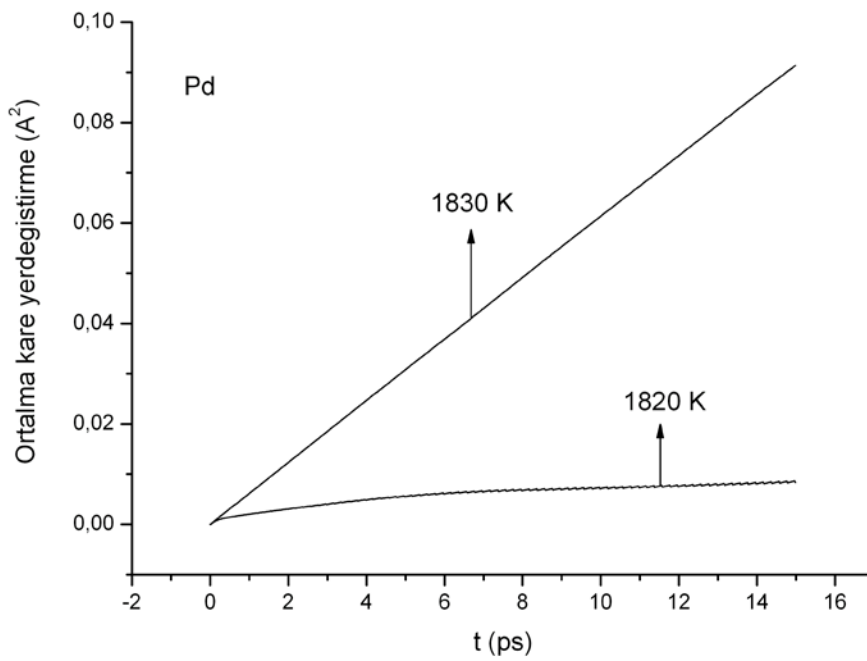
Şekil 4.19 Ag,  $\text{Au}_{0.40}\text{Ag}_{0.20}\text{Pd}_{0.40}$ , Pd ve Au için yoğunluğun sıcaklıkla değişim grafiği



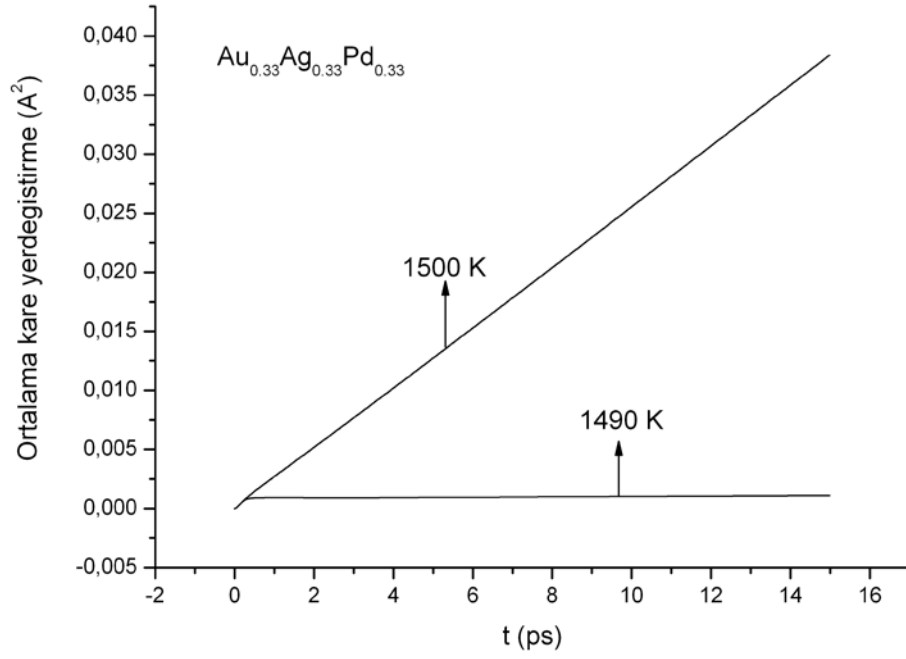
Şekil 4.20 Au'nun simüle edilen erime noktası civarındaki yerel ortalama kare yerdeğiştirme



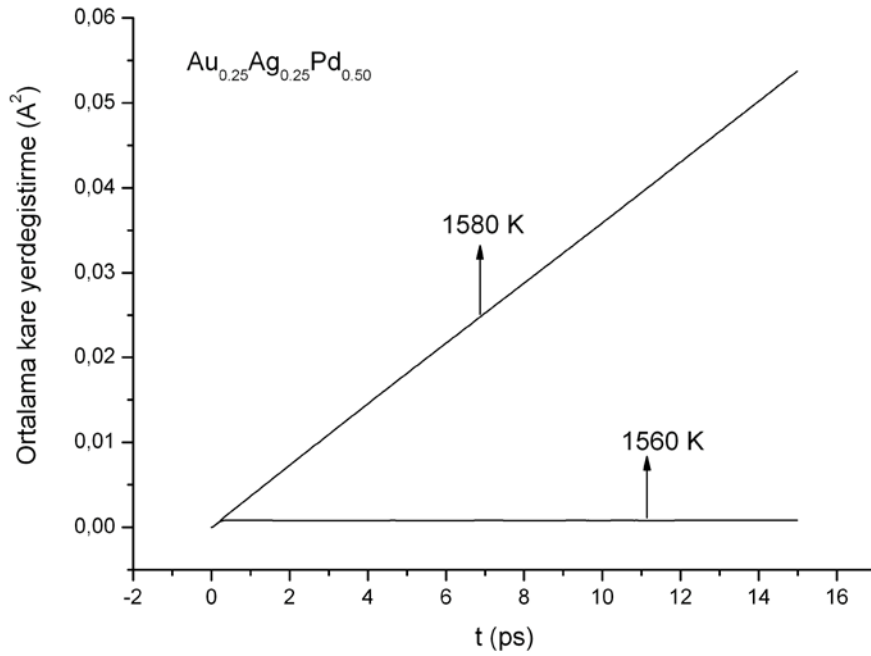
Şekil 4.21 Ag'nin simüle edilen erime noktası civarındaki yerel ortalama kare yerdeğiřtirmesi



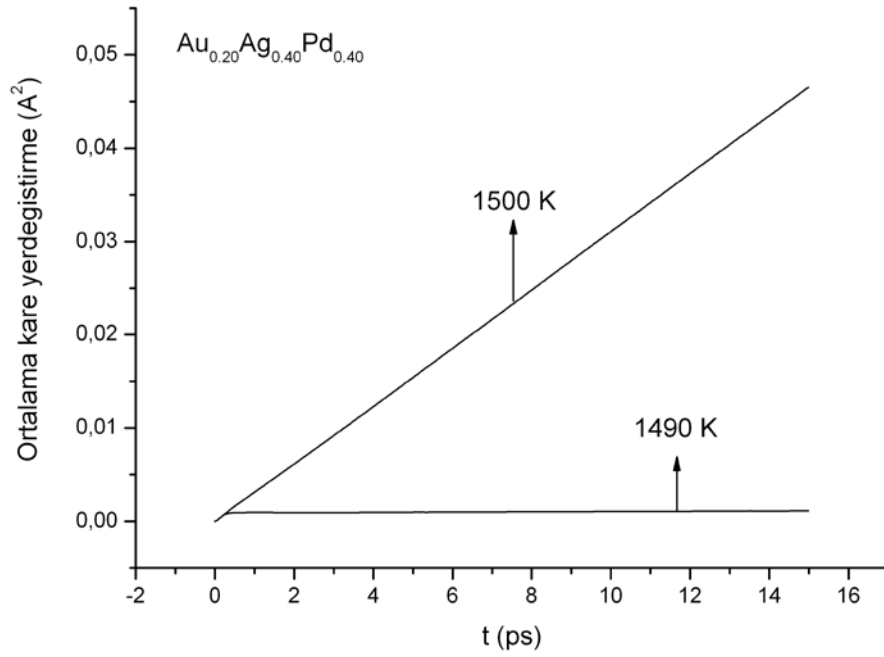
Şekil 4.22 Pd'nin simüle edilen erime noktası civarındaki yerel ortalama kare yerdeğiřtirmesi



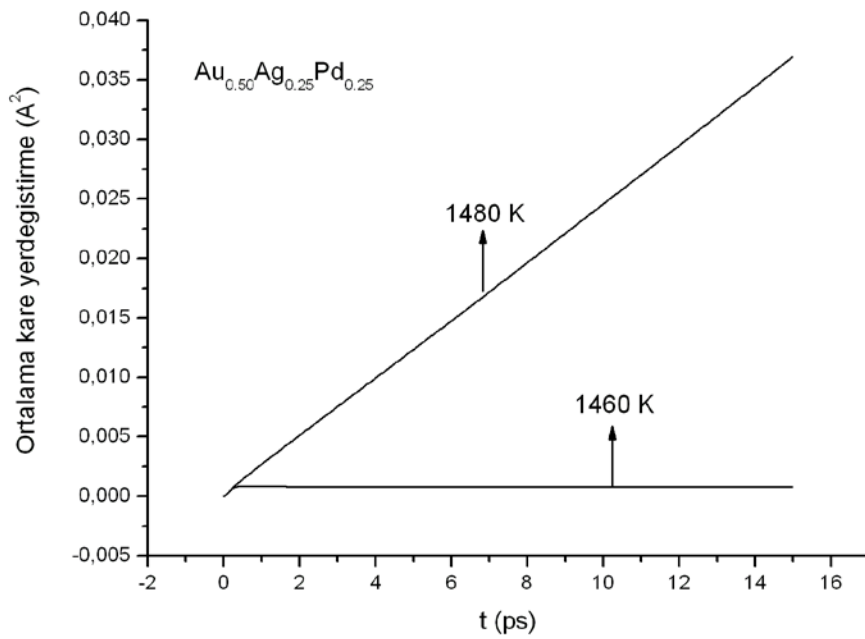
Şekil 4.23  $\text{Au}_{0.33}\text{Ag}_{0.33}\text{Pd}_{0.33}$ 'ün erime noktası civarındaki yerel ortalama kare yerdeğiřtirmesi



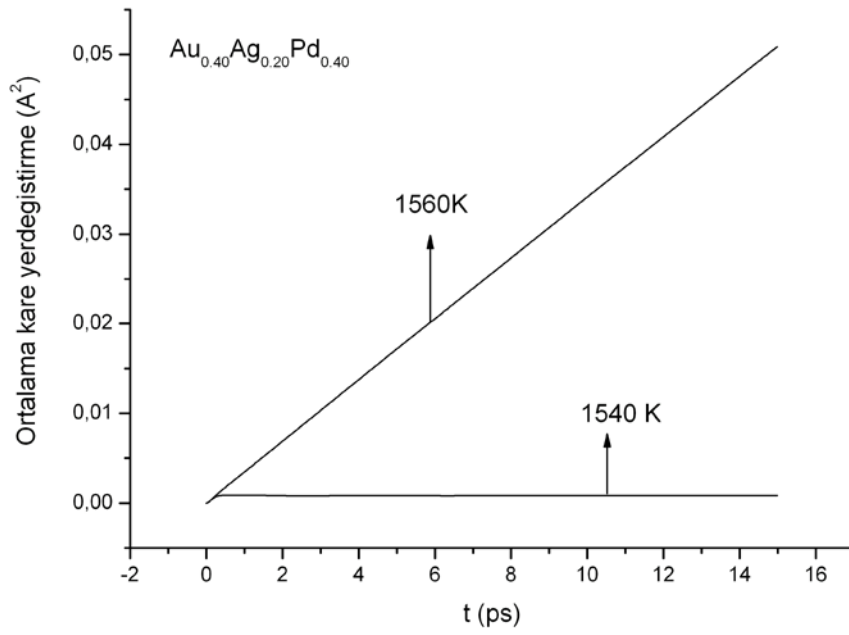
Şekil 4.24  $\text{Au}_{0.25}\text{Ag}_{0.25}\text{Pd}_{0.50}$ 'nin erime noktası civarındaki yerel ortalama kare yerdeğiřtirmesi



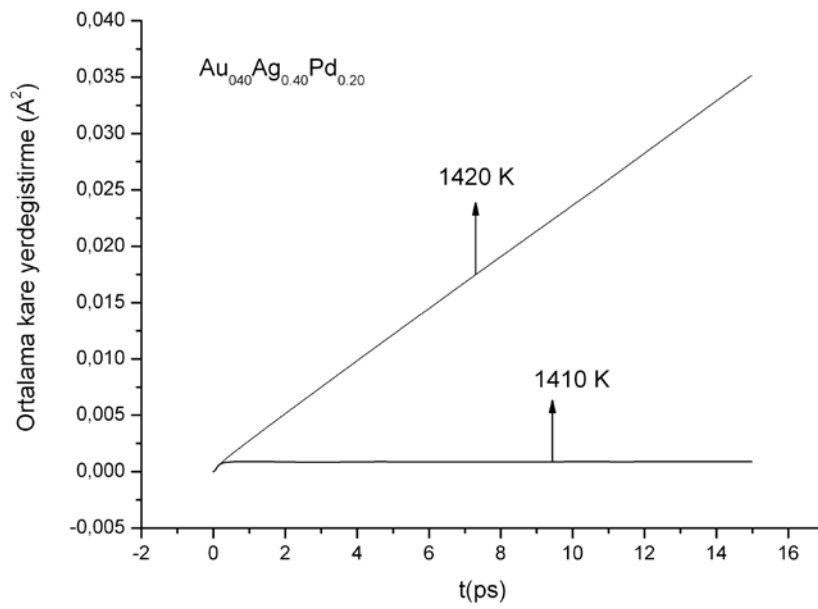
Şekil 4.25  $\text{Au}_{0.20}\text{Ag}_{0.40}\text{Pd}_{0.40}$  'in erime noktası civarındaki yerel ortalama kare yerdeğiştirmesi



Şekil 4.26  $\text{Au}_{0.50}\text{Ag}_{0.25}\text{Pd}_{0.25}$  'in erime noktası civarındaki yerel ortalama kare yerdeğiştirmesi



Şekil 4.27  $\text{Au}_{0.40}\text{Ag}_{0.20}\text{Pd}_{0.40}$ 'in erime noktası civarındaki yerel ortalama kare yerdeğiřtirmesi



Şekil 4.28  $\text{Au}_{0.40}\text{Ag}_{0.40}\text{Pd}_{0.20}$ 'nin erime noktası civarındaki yerel ortalama kare yerdeğiřtirmesi

Tablo 4.8 'de simülasyonla tespit edilmiş olan erime noktaları ile deneysel değerleri ve yüzde bağıl hataları verilmiştir. Au, Ag ve Pd için yüzde bağıl hataları sırası ile %4.041, %2.10, %0.273 'dir. Deney ve simülasyon sonuçlarının çok iyi uyduğu görülmüştür.

Tablo 4.8 Au, Ag, Pd saf metalleri için Q-SC kuvvet alanı kullanılarak hesaplanmış teoriksel ve deneysel erime sıcaklığı noktası

Metal	Teorik	Deneysel	%Hata
Au	1390 K	1336 K	%4.041
Ag	1260 K	1234 K	%2.10
Pd	1830 K	1825 K	%0.273

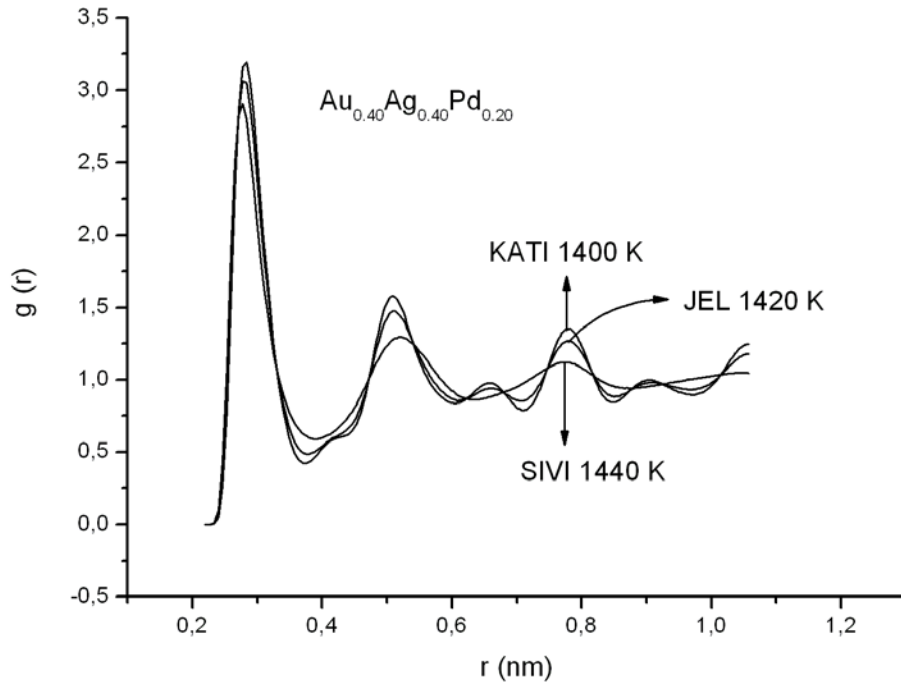
Tablo 4.9'de alaşımlar için simülasyon sonucu bulunmuş erime sıcaklığı verilmiştir. Deneysel değerlerle ilgili bir veri bulunamamıştır

Tablo 4.9 Au, Ag, Pd'dan oluşan alaşımlar için Q-SC kuvvet alanı kullanılarak hesaplanmış teorik erime sıcaklığı noktası

Alaşım	T(K) Q-SC
Au <sub>33</sub> Ag <sub>33</sub> Pd <sub>33</sub>	1500 K
Au <sub>25</sub> Ag <sub>25</sub> Pd <sub>50</sub>	1580 K
Au <sub>50</sub> Ag <sub>25</sub> Pd <sub>25</sub>	1480 K
Au <sub>20</sub> Ag <sub>40</sub> Pd <sub>40</sub>	1500 K
Au <sub>40</sub> Ag <sub>40</sub> Pd <sub>20</sub>	1420 K
Au <sub>40</sub> Ag <sub>20</sub> Pd <sub>40</sub>	1560 K

Erime noktalarının tespitinde kullanılacak başlıca yöntemlerden biride radyal dağılım fonksiyonudur. Şekil 4.29'de Au<sub>0.40</sub>Ag<sub>0.40</sub>Pd<sub>0.20</sub> alaşımını 1400 K'de katı halde, 1420 K'de jel halinde ve 1440 K'de ise alaşım sıvı hale geçmeye başlamıştır. Yani erime sıcaklığına ulaşmıştır. Erime sıcaklığını tespit etmekte başvurulan ilk yöntem radyal dağılım fonksiyonunu çizdirmektir.





Şekil 4.29  $Au_{0.40}Ag_{0.40}Pd_{0.20}$ 'nin erime sıcaklığını tespit eden radyal dağılım fonksiyonu

#### 4.6. Tartışma ve Öneriler

1. Bölümde metallerin temel fiziksel özellikleri anlatıldı ve literatür taraması yapılarak bugüne kadar metaller ve alaşımlar üzerine MD simülasyonu yöntemi ile yapılan çalışmaların genel bir dökümü verildi. Ayrıca çalışmanın içeriği hakkında bilgi sunuldu. 2. ve 3. Bölümler MD simülasyon yöntemi, Quantum Sutton-Chen potansiyeli ve alaşımlara uygulanması hakkında detaylı bilgiler verildi.

4. bölümde Pd, Au, Ag ve  $Au_{0.33}Ag_{0.33}Pd_{0.33}$ ,  $Au_{0.25}Ag_{0.25}Pd_{0.50}$ ,  $Au_{0.20}Ag_{0.40}Pd_{0.40}$ ,  $Au_{0.50}Ag_{0.25}Pd_{0.25}$ ,  $Au_{0.40}Ag_{0.20}Pd_{0.40}$ ,  $Au_{0.40}Ag_{0.40}Pd_{0.20}$  alaşımlarının simülasyon sonucu hesaplanan elastik sabitler, örgü parametreleri, yoğunluk, bağlanma enerjisi, termal genleşme katsayısı, enthalpi, ısı sıçması ve erime sıcaklığı gibi teknolojik olarak son derece önemli mekanik ve termodinamik özellikleri hesaplanarak bulunabilen deneysel ve diğer hesaplama yöntemleri ile elde edilmiş sonuçlarla karşılaştırıldı.

Sonuç olarak Quantum Sutton-Chen potansiyeli ile yapılan MD simülasyonunun son derece güvenilir sonuçlar ürettiği görülmektedir. Deneysel çalışmaların bulunamadığı durumda, veya bulunabildiği durumda dahi deneysel çalışmaların yanında güvenli bir yöntem olarak kullanılabileceği öngörülmektedir.

Yapılan çalışma  $Au_{0.33}Ag_{0.33}Pd_{0.33}$ ,  $Au_{0.25}Ag_{0.25}Pd_{0.50}$ ,  $Au_{0.20}Ag_{0.40}Pd_{0.40}$ ,  $Au_{0.50}Ag_{0.25}Pd_{0.25}$ ,  $Au_{0.40}Ag_{0.20}Pd_{0.40}$ ,  $Au_{0.40}Ag_{0.40}Pd_{0.20}$  alaşımları hakkında bu güne kadar literatürde var olmayan birçok bilimsel veri üretmiştir.

Bu çalışmanın devamı olarak:

1. Alaşımların oranları çok düşükten başlatılıp yükseltilerek her bir metalin alaşımın özelliklerine etkisi incelenebilir.
2. Çalışma sıcaklığı artırılarak erimiş durumda alaşımın özellikleri araştırılabilir.
3. Yüksek sıcaklıktan farklı hızlarda soğutarak maddenin faz geçişleri ve bu fazlarda ki yapısal özellikleri incelenebilir.

## KAYNAKLAR

- [1] SAVITSKII, E.M., Palladium Alloys, Monument Press, New York, 1996
- [2] MONG, T.K.K., LEE, H.K., et al. , Pnas 100, 797, 2003
- [3] CHAMBON, P., FASEB, J., 10 940, 1996
- [4] DE LUCA, L. M., FASEB, J., 5, 2924, 1991
- [5] KASTNER, P., MARK, M., CHAMBON, P., Cell 83, 859, 1995
- [6] WALLNER, K., ROY, J., HARRISON, L., CLIN, J., Oncol. 14, 449, 1996
- [7] D' AMICO, A.V., COLEMAN, C. N., CLIN, J., Oncol. 14, 304, 1996
- [8] RAGDE, H., BLASKO, J. C., GRIMM, P.D., et al., Cancer 80, 442, 1997
- [9] ATKINS, P., JONES, L., Chemistry: Molecules, Matter, and Change , W. H. Freeman And Company, New York, 1992
- [10] HAILE, J.M., Molecular Dynamics Simulation, John Wiley and Sons, Inc., New York, 1992
- [11] QI, L., ZHANG, H.F., HU, Z.Q., LIAW, P.K. "Molecular dynamic simulation studies fo glass formation and atomic-level structures in Pd-Ni alloy", Phys. Lett., A 327-506.-511, 2004
- [12] 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
- [13] ÇORUH, A., TOMAK, M., ÇAGIN, T., ULUDOGAN, M., Temperature dependent investigation of technological properties of Pd-Al noble metal alloys, BalkanPhysics Letters, Bogazici University Press BPL, 15 (1), 151002, 2009
- [14] SARIBEK, Y., ”Pd<sub>0.085</sub>Cu<sub>0.44</sub>Ag<sub>0.475</sub> Alařımının Katı Faz Fiziksel Özelliklerinin Moleküler Dinamik İncelenmesi, Yüksek Lisans Tezi, Sakarya Üniversitesi, 2007

- [15] QI, L., ZHANG, H.F., HU, Z. Q., 2004. Molecular dynamic simulation of glass formation in binary liquid metal: Cu–Ag using EAM, *Intermetallics*, 12, No.10-11, 1191-1195
- [16] QI, L., ZHANG, H.F., HU, Z.Q., LIAW, P.K. "Molecular dynamic simulation studies fo glass formation and atomic-level structures in Pd-Ni alloy", *Phys. Lett., A* 327 (2004) 506.-511
- [17] KART, H.H., ULUDOĞAN, M., ÇAĞIN, T., TOMAK, M., Thermodynamically and mechanical properties of Pd–Ag alloys. *Computational Materials Science* 32, 107–117, 2004
- [18] HANSEN, J. P., MCDONALD, I. R., *Theory of Simple Liquids*, Academic Press, London, 1986
- [19] ANDERSEN, H. C., CHEM, J., *Phys.* 72, 2384, 1980
- [20] PARINELLO, M., RAHMAN, A., *Phys. Rev.lett.* 45, 1196, 1980
- [21] PARINELLO, M., RAHMAN, A., *J. Appl. Phys.* 52, 7182, 1981
- [22] ULUDOĞAN, M., *Molecular-Dynamics Computer Simulations of Pure Metals and Metal Alloys*, M. Sc. Thesis, Middle East Technical University, 1996
- [23] NOSE, S., *Mol. Phys.* 52, 255, 1984a
- [24] NOSE, S., CHEM, J., *Phys.* 81 511, 1984b
- [25] RAPAPORT, D.C., *The Art Of Moluculer Dynamics Simulation*, Cambridge Univ. Press, England, 400-402, 2002
- [26] RAFII-TABAR, H., SUTTON, A. P., MAG., P., *Lett.* 63, 217, 1991
- [27] KIMURA, Y., ÇAĞIN,T., W. GODDARD, A., III (unpablish)
- [28] ÇAĞIN, T., DERELİ, G., ULUDOĞAN, M., TOMAK, M., *Phys. Rev. B* Volume 59, number 5-I, 1999
- [29] KITTLE, C., *Introduction to Solid State Physics*, 7.th edition, J. Wiley and Sons,Inc., NY, 1996
- [30] SUTTON, A.P., CHEN, J., MAG, P., *Lett.* 61, 139, 1990
- [31] CLERI, F., RASATO, V., *Phys. Rev, B* 48, 1993
- [32] SIMMONS G., WANG H., *Single Crystal, Elastic Constant and calculated Aggrate Properties: A Handbook* 2nd edn., Cambridge, MA: MIT Pres, 1991

- [33] ZIYA, A.B., OHSIMA, K., Journal of Alloys and Compounds. 425, 123-124, 2006
- [34] RAZNJEVÝC, K., Handbook of Thermodynamic Tablos and Charts, MC Graw Hill Company, 1976
- [35] BRAIN, I., Thermochemical data of pure substance, Weinheim, germany: VCH, 1989

## ÖZGEÇMİŞ

Güven Aydın, 7.1.1974'de Ankara'da doğdu. İlk, orta ve lise eğitimini Ankara'da tamamladı. 1999 yılında Kafkas Üniversitesi Fen Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümünü kazandı. 2003 yılında Fizik bölüm birincisi ve Fen-Edebiyat fakültesi üçüncüsü olarak fizik bölümünü başarıyla tamamladı. 2006 yılında Sakarya Üniversitesi Fizik bölümü Katıhal Fiziği anabilim dalında yüksek lisans öğrenimine başladı. Halen aynı bölümde öğretimine devam etmektedir.