

**PAMUKKALE ÜNİVERSİTESİ FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

**BAKIR METALİ NANOPARÇACIKLARIN MOLEKÜLER DİNAMİK  
SİMÜLASYONU**

**YÜKSEK LİSANS TEZİ  
Hüseyin YILDIRIM**

**Anabilim Dalı : Fizik**

**Programı : Katıhal Fiziği**

**Tez Danışmanı: Doç. Dr. Hasan Hüseyin KART**

**MAYIS 2012**



## YÜKSEK LİSANS TEZ ONAY FORMU

Pamukkale Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü 091401002'nolu öğrencisi Hüseyin YILDIRIM tarafından hazırlanan "BAKIR METALİ NANOPARÇACIKLARIN MOLEKÜLER DİNAMİK SİMÜLASYONU" başlıklı tez tarafımızdan okunmuş, kapsamı ve niteliği açısından bir Yüksek Lisans Tezi olarak kabul edilmiştir.

Jüri Üyesi :  
(Jüri Başkanı)

Prof. Dr. Ersen METE

Jüri Üyesi :

Doç. Dr. Orhan KARABULUT

Tez Danışmanı :

Doç. Dr. Hasan Hüseyin KART

Pamukkale Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Yönetim Kurulu'nun 30/06/2012 tarih ve 16/15 sayılı kararıyla onaylanmıştır.

Fen Bilimleri Enstitüsü Müdürü  
Prof. Dr. Nuri KOLSUZ

Bu tezin tasarımı, hazırlanması, yürütülmesi, arařtırmalarının yapılması ve bulgularının analizlerinde bilimsel etięe ve akademik kurallara özenle riayet edildiđini; bu çalıřmanın doğrudan birincil ürünü olmayan bulguların, verilerin ve materyallerin bilimsel etięe uygun olarak kaynak gösterildiđini ve alıntı yapılan çalıřmalara atfedildiđine beyan ederim.

İmza



Öğrenci Adı Soyadı : Hüseyin YILDIRIM

## ÖNSÖZ

Gerçekleştirilen bu tez çalışmasında, tez konusunun belirlenmesinden tezin tamamlanmasına kadar emeğini ve yardımlarını esirgemeyen danışmanım, değerli hocam Doç.Dr Hasan Hüseyin KART'a teşekkürlerimi sunarım.

Bu tezin gerçekleşmesinde katkıda bulunan ve problemlerin çözümünde yardımcı olan Prof.Dr Tahir ÇAĞIN'a teşekkürlerimi sunarım.

Bu çalışma, Pamukkale Üniversitesi Fizik Bölümü, Malzeme Fiziği Simülasyon Laboratuvarında gerçekleşmiş ve Pamukkale üniversitesi 2010FBE076 nolu BAP projesi tarafından desteklenmiştir. Makine, teçhizatlar ve ihtiyaçların karşılanmasında destek sağlayan BAP'a ve simülasyon grubu ekibine teşekkürü bir borç bilirim.

Tezin başlamasından ve yazılmasına kadar her aşamada katkılarda bulunan değerli hocam Yard. Doç. Dr. Sevgi ÖZDEMİR KART'a teşekkürü bir borç bilirim.

Ayrıca, bugüne kadar maddi manevi desteklerini esirgemeyen ve hep yanımda olan aileme sonsuz teşekkürlerimi sunuyorum.

Mayıs 2012

Hüseyin YILDIRIM

# İÇİNDEKİLER

## Sayfa

<b>1. GİRİŞ.....</b>	<b>1</b>
<b>2.MATERYAL VE METHOD.....</b>	<b>4</b>
2.1 Moleküler Dinamik Simülasyon Metodu.....	5
2.1.1 Moleküler dinamik simülasyon metodu tarihçesi.....	7
2.1.2 Literatür.....	8
2.1.3 Moleküler dinamik simülasyon metodu uygulama alanları.....	10
2.1.4 Newton dinamiği.....	11
2.1.5 Hamiltoniyen dinamiği.....	11
2.1.6 Verlet algoritması.....	13
2.1.7 Leap-Frog algoritması.....	14
2.1.8 Genişletilmiş hamiltoniyen metodu.....	16
2.2 Atomik Etkileşmeler.....	17
2.2.1 İki cisim etkileşmeleri.....	18
2.2.1.1 Lenard-Jones potansiyeli.....	18
2.2.2 Finnis-Sinclair etkileşim potansiyeli.....	20
2.2.3 Sutton-Chen etkileşim potansiyeli.....	21
<b>3.HESAPLAMA YÖNTEMLERİ.....</b>	<b>23</b>
3.1 Termodinamiksel Özellikler.....	24
3.1.1 Erime noktası.....	24
3.1.2 Isı kapasitesi.....	25
3.2 Yapısal Özellikler.....	26
3.2.1 Radyal dağılım fonsiyonu.....	26
3.2.2 Birinci koordinasyon sayısı.....	28
3.2.3 Honeycutt-Andersen indeksi.....	28
3.2.4 Lindeman kriteri.....	29
3.3 Dinamiksel Özellikler.....	31
3.3.1 Ortalama kare yerdeğiştirme.....	31
3.3.2 Difüzyon katsayısı.....	31
<b>4. BULGULAR VE YORUM.....</b>	<b>33</b>
4.1 Termodinamiksel Özellikler.....	33
4.1.1 Erime noktası.....	33
4.1.2 Isı kapasitesi.....	35
4.2 Yapısal Özellikler.....	37
4.2.1 Radyal dağılım fonksiyonu.....	37
4.2.2 Birinci koordinasyon sayısı.....	41
4.2.3 Honeycutt-Andersen indeks.....	42
4.2.4 Lindeman kriteri.....	44
4.3 Dinamik Özellikler.....	47
4.3.1 Ortalama kare yerdeğiştirme.....	47
4.3.2 Difüzyon katsayısı.....	49
<b>5. SONUÇLAR.....</b>	<b>52</b>
<b>6. KAYNAKLAR.....</b>	<b>53</b>
<b>EKLER.....</b>	<b>61</b>

## **KISALTMALAR**

<b>Cu</b>	: Bakır
<b>BCC</b>	: Cisim Merkezli Kübik yapı
<b>HCP</b>	: Hegzagonal Sıkı Paket
<b>MM</b>	: Moleküler Mekanik
<b>MC</b>	: Monte Carlo
<b>EM</b>	: Enerji Minimizasyonu
<b>EAM</b>	: Embeded Atom Modeli
<b>FCC</b>	: Yüzey Merkezli Kübik Yapı
<b>FS</b>	: Finnis-Sinclair
<b>Ag</b>	: Gümüş
<b>Au</b>	: Altın
<b>Ni</b>	: Nikel
<b>Pd</b>	: Paladyum
<b>Pt</b>	: Platin
<b>Al</b>	: Alimünyum
<b>Rh</b>	: Rodyum
<b>LJ</b>	: Lennard-Jones
<b>MD</b>	: Moleküler Dinamik
<b>MPISIM</b>	: Massively Paralel Simulation Program
<b>OVITO</b>	: Open Visualization Tool
<b>HA</b>	: Honeycutt-Andersen İndeksi
<b>nm</b>	: Nanometre
<b>ps</b>	: Pico saniye
<b>SC</b>	: Sutton-Chen
<b>TVN</b>	: Kanonik İstatistik Topluluk
<b>Q-SC</b>	: Kuantum Sutton-Chen

## TABLO LİSTESİ

<b>Tablolar</b>	<b><u>Sayfa</u></b>
<b>2.1</b> : Cu atomu için Q-SC potansiyel parametreleri.....	22
<b>4.1</b> : Toplam enerji-sıcaklık grafiğinden elde edilen erime sıcaklığı değerleri.....	34
<b>4.2</b> : 2 nm, 4 nm ve 6 nm boyutlarında Cu nanoparçacıkların $D_0$ [ $\text{nm}^2/\text{ns}$ ] difüzyon katsayısı, $E_a$ [eV] aktivasyon enerjisi ve farklı sıcaklıklarda $D$ [ $\text{nm}^2/\text{ns}$ ] difüzyon sabiti değerleri.....	51

## ŞEKİL LİSTESİ

Şekiller	Sayfa
2.1 : Simülasyon ölçeği.....	5
2.2 : Verlet algoritmasının değişimi.....	15
2.3 : Lennard-Jones etkileşim potansiyeli.....	19
3.1 : a) 2 nm, b) 4 nm, c) 6 nm, d) 8 nm ve e) 10 nm Cu nanoparçacıkların başlangıç görünümü.....	23
3.2 : Merkezi atomdan $r_1, r_2, r_3$ kadar uzaklıkta olan kabukların görünümü.....	27
3.3 : Honeycutt-Andersen metodunun gösterimi.....	29
4.1 : Farklı boyutlardaki Cu nanoparçacıklarının toplam enerji-sıcaklık grafiği.....	33
4.2 : Cu nanoklastırların erime sıcaklıklarının parçacık boyutuna göre değişimi.....	34
4.3 : 2 nm Cu nanoklastırın $C_v$ molar ısı kapasitesi grafiği.....	36
4.4 : 4 nm Cu nanoklastırın $C_v$ molar ısı kapasitesi grafiği.....	36
4.5 : 6 nm Cu nanoklastırın $C_v$ molar ısı kapasitesi grafiği.....	37
4.6 : 2 nm Cu nanoparçacıkların radyal dağılım fonksiyonunun bazı sıcaklıklarda değişimi grafiği.....	38
4.7 : Bulk Cu nanoparçacıkların radyal dağılım fonksiyonunun bazı sıcaklıklarda değişimi grafiği.....	39
4.8 : Farklı boyuttaki Cu nanoparçacıklarının radyal dağılım fonksiyonunun 300 K' de değişim grafiği.....	39
4.9 : Farklı boyuttaki Cu nanoparçacıklarının radyal dağılım fonksiyonunun 1200 K' de değişim grafiği.....	40
4.10 : Farklı boyuttaki Cu nanoparçacıkların birinci koordinasyon sayılarının sıcaklıkla değişim grafiği.....	41
4.11 : a) 2 nm b) 4 nm c) 6 nm boyutundaki Cu nanoparçacıkların 1421 ve 1422 çiftlerinin sıcaklıkla değişiminin gösterimi.....	42
4.12 : Farklı boyutlardaki Cu nanoparçacıkların 1421 bağlı çiftlerinin sıcaklıkla yüzdesel olarak değişimi.....	43
4.13 : 2 nm Cu nanoparçacığının Lindeman kriterinin sıcaklıkla değişim grafiği.....	44
4.14 : 2 nm boyutundaki bakır nanoparçacığının her katmandaki Lindeman kriterinin sıcaklığa göre değişimi grafiği.....	46
4.15 : 4 nm boyutundaki bakır nanoparçacığının her katmandaki Lindeman kriterinin sıcaklığa göre değişimi grafiği.....	46
4.16 : 6 nm boyutundaki bakır nanoparçacığının her katmandaki Lindeman kriterinin sıcaklığa göre değişimi grafiği.....	47
4.17 : 2 nm Cu nanoparçacığının bazı sıcaklıklarda ortalama kare yerdeğiştirmenin (MSD) zamana göre değişimi.....	48
4.18 : 4 nm Cu nanoparçacığının bazı sıcaklıklarda ortalama kare yerdeğiştirmenin (MSD) zamana göre değişimi.....	48
4.19 : 2 nm Cu nanoparçacığının $D$ ( $\text{nm}^2/\text{ns}$ ) difüzyonun $T$ (K) sıcaklığına göre değişimi.....	49
4.20 : 4 nm Cu nanoparçacığının $D$ ( $\text{nm}^2/\text{ns}$ ) difüzyonun $T$ (K) sıcaklığına göre değişimi.....	50
A.1 : Farklı boyut ve sıcaklıklardaki Cu nanoparçacıkların radyal dağılım fonksiyonu grafikleri.....	61



## SEMBOL LİSTESİ

$C_v$	Isı kapasitesi
$g(r)$	Çift dağılım fonksiyonu
$D$	Difüzyon
$x$	Nanoparçacığın büyüklüğü
$T_{cm}$	Erime sıcaklığı
$T_{CM}$	bulk bakır metalinin erime sıcaklığı
$r_i$	i. parçacığın konumu
$\vartheta_i$	i. parçacığın hızı
$p_i$	i. parçacığın momentumu
$H$	Hamiltonyen
$N$	Parçacık sayısı
$T$	Sıcaklık
$V$	Hacim
$m$	kütle
$F_i$	i. parçacığa etkiyen kuvvet
$U(r)$	Potansiyel enerji
$\ddot{r}(t)$	İvme
$t$	Zaman
$s$	İlave serbestlik derecesi
$g$	Toplam serbestlik derecesi
$Q$	Efektif kütle
$\epsilon$	Lennard-Jones Potansiyel parametresi
$\rho_i$	çoklu parçacıklardan gelen katkı
$\Phi_i$	Kısa mesafe etkileşim potansiyeli
$k_B$	Boltzman sabiti
$\langle \dots \rangle$	İstatistiksel ortalama
$t_0$	Zaman merkezi
$N_0$	Toplam zaman merkezi sayısı
$a_{ij}$	Örgü parametresi
$m$	Tam sayı potansiyel parametresi
$n$	Tam sayı potansiyel parametresi
$c$	Boyutsuz sabit
$\epsilon_{ij}$	Sutton-Chen potansiyel parametresi
fs	Femto saniye
MSD	Ortalama Kare Yer Değiştirme

## ÖZET

### BAKIR METALİ NANOPARÇACIKLARIN MOLEKÜLER DİNAMİK SİMÜLASYONU

Bu çalışmada, bakır metalî nanoparçacıkların fiziksel özellikleri Moleküler Dinamik (MD) simülasyonu kullanarak araştırılmıştır. Bu yöntem geniş zaman aralığında büyük sistemlerin modellenmesi için yaygın olarak kullanılmaktadır. Bu çalışmada, bakır metalî nanoparçacıkların Moleküler Dinamik simülasyonu MPiSiM kodu yardımıyla yapılmıştır. Atomlar arasındaki etkileşimleri tanımlamak için çok cisimli Q-SC etkileşim potansiyeli kullanılmıştır. Model olarak seçilen bakır metallerinin yarıçapı 2 nm'den 10 nm'ye kadar değişmektedir. Bakır metalî nanoparçacıkların sıvı ve katı özelliklerini çalışmak için nanoparçacıkların MD simülasyonu düşük ve yüksek sıcaklıkta yapılmıştır. Erime noktası, radyal dağılım fonksiyonu gibi simülasyondan elde edilen sonuçlar deneysel bulk sonuçlarla karşılaştırılmıştır. Ayrıca, erime noktasını tahmin etmek için radyal dağılım fonksiyonu, birinci koordinasyon sayısı, Lindeman kriteri, difüzyon katsayısı ve Honeycutt-Andersen indeks gibi fiziksel özellikler çalışılmıştır.

**Anahtar Kelimeler:** Moleküler Dinamik Simülasyon, Sutton-Chen Potansiyeli, Bakır Metalî Nanoparçacıklar, Difüzyon Katsayısı, Erime Sıcaklığı, Isı Kapasitesi.

## **ABSTRACT**

### **MOLECULAR DYNAMICS SIMULATION OF COPPER METAL NANOPARTICLES**

In this study, the physical properties of copper nanoparticles are investigated by using Molecular Dynamics (MD) simulations. This method is suitable for modeling large systems for a very long time scales. In this work, molecular dynamics simulations of the copper nanoparticles are performed by means of the MPiSiM codes. Quantum Sutton-Chen (Q-SC) many-body force potential is used to define interaction between the atoms. The diameters of the copper nanoparticles are varied from 2 nm to 10 nm. MD simulation of nano-particles are carried out at low and high temperatures to study solid and liquid properties of copper metal nanoparticles. Simulation results such as melting point, radial distribution function are compared with the available experimental bulk results. Also, radial distribution function, first coordination number, Lindeman criteria, diffusion coefficient and Honeycutt-Andersen index are calculated for estimating the melting points of the nanoparticles.

**Key Words:** Molecular Dynamics Simulations, Sutton-Chen Potential, Copper Metal Nanoparticles, Diffusion Coefficient, Melting Temperature, Heat Capacity.

## 1. GİRİŞ

Geçmişte fiziksel bilimler sadece deney ve teori olarak karakterize ediliyordu. Deneyde sistem ölçümlere maruz bırakılıp sayısal biçiminde ifade edilen sonuçlar elde edilirdi. Teoride ise, matematik denklem takımları ile sistemin bir modeli kurulur, daha sonra model sistemin davranışını tasvir eden denklemlerin çözümünü kolaylaştıracak şekilde geçerli hale getirilirdi. Ancak hem teorinin hemde deneyin olumsuz yanları vardı. Bu nedenle hızlı bilgisayarların gelişimi ile birlikte teori ile deney arasına bilgisayar deneyi olarak adlandırılan yeni bir çalışma alanı girdi [1]. Bilgisayar dünyasındaki bu gelişmeler, deneysel olarak ortaya konması çok zor ve açıkça anlaşılamayan birçok teorik araştırmaların bilgisayar ortamında simülasyonlarla çalışılmasının yolu açılmış ve bilgisayar simülasyonlarına dayalı hesap yöntemleri geliştirilmiştir [2,3].

Bilgisayar simülasyon (benzetim) yöntemleri, genellikle analitik çözümü tam olarak yapılamayan problemlerin sayısal çözümlerini elde etmeyi ve belirli sistemler için kurulan modellerin deneyler ile karşılaştırılması gibi bilimsel çalışmalarda kullanılmaktadır [4]. Ayrıca deney ve teorinin yeterli olmadığı durumlarda, bilgisayar simülasyonundan faydalanmak çok yararlı çözümler ortaya koymuştur [2].

Bir sisteme en yakın benzetimi elde edebilmek için sistemin gereksinimlerini karşılayacak en doğru yöntemi oluşturmak gereklidir [1,3]. Bilim dünyasında atomların davranışlarını modellemek için kuantum mekaniksel hesaplama yöntemlerinden, yarı deneysel yöntemlere kadar birçok simülasyon yöntemleri geliştirilmiştir [2,5]. Moleküler Dinamik (MD), Moleküler Mekanik (MM), Monte Carlo (MC), Örgü Optimizasyonu, Enerji Minimizasyonu (EM) gibi yöntemler bunlara örnek gösterilebilir [6,7,8]. Bu metodların ortak özelliği, klasik etkileşmeleri dikkate alarak bilgisayar üzerinde bir dizi hesaplama yaptıktan sonra sistemin mikroskobik veya makroskobik yapısı hakkında bilgi sağlamaktır [9]. Özellikle Moleküler Dinamik (MD) simülasyon yöntemi en çok kullanılan yöntemlerden biri olup maddenin mekaniksel, termodinamiksel ve yapısal özelliklerinin incelenmesinde deneysel çalışmalara öncülük yapmaktadır [4,10,11].

Moleküler Dinamik yöntemi, sistemdeki parçacıkların zamana bağlı değişimlerini inceleyerek, sistemin faz uzayındaki yörüngesini elde etmeyi amaçlar [10,12]. Ayrıca bu yöntem, sistemdeki parçacıkların Newton hareket denklemlerinin sayısal integrasyonu yapılarak uygulanır [2].

Endüstrideki birçok maddenin gelişimi ile bu maddelerin deneysel ortamlarda kullanılabilirliğinin zorluğu da göz önünde bulundurularak atomik düzeyde simülasyon nano biliminde gittikçe önem kazanan bir araç haline gelmiştir [1].

Nanobilim, hem küçük moleküler olan, hem de tüm boyutlarıyla makroskopik olan sistemlerinkinden çok farklı (genellikle yararlanılabilecek sıradışı ve beklenmeyen yönlerde) dinamik özelliklere neden olan nanoskopik (1–100 nm) boyutların en az birine sahip olan sistemlerin yapılarını, dinamiklerini ve özelliklerini inceleyen bilim dalı olarak tanımlanmaktadır. Önemi ise, nanometre ölçeğinde fizik kurallarının farklı işlemlerinden kaynaklanmaktadır [13]. Ayrıca nano ölçek seviyesinde malzemelerin özellikleri makroskopik ölçekten tamamen farklı olup nano ölçeğe yaklaştıkça birçok özel ve yararlı özellikler ortaya çıkmaktadır. Örneğin, malzemenin optik, elektronik, manyetik, ve kimyasal özellikleri klasik değil kuantum olarak tanımlanır [14]. Bu yüzden nano, günümüz bilim ve teknoloji alanında en çok heyecan yaratan alanlardan biridir [15]. Birçok nano yapı malzemenin özellikle klastırların uygulama ve özellikleri heyecan vericidir [16,17,18,].

Klastırlar, tek tek moleküllerin her birinden büyük, ama sonsuz sayıda gibi düşününebilecek kadar çok atomdan oluşmuş, gözlemediğimiz bulk malzemeden ise küçük yapılardır [19]. Dolayısıyla klastırlar, genellikle makroskopik katılar ile atom yada moleküller gibi parçacıklar arasında bulunan bir faz biçimi olarak dikkate alınabilen ve katı fazda birbiriyle farklı şartlar altında bir arada bulunan ve birbiriyle etkileşebilen atom veya molekül kümeleri olarak tanımlanabilir [20-23]. Genel olarak, klastırlar karakteristik özelliklerinden dolayı, pek çok önemli kimyasal reaksiyonların oluşmasında, katalizör mekanizmasının temel özelliklerinin bilinmesinde, maddelerin elektronik, manyetik, ve moleküler seviyedeki davranışlarının anlaşılmasında çok önemli bilgiler sağlamaktadır [24, 25]. Dolayısıyla, ele alış tarzına bağlı olarak klastırların zaman içinde gözlenebilir büyüklüklerini takip etmek mümkündür. Böylece, kendilerini oluşturan atomlar türünden hemen hemen tüm ayrıntıları ile incelenebilmektedir [26]. Bu nedenle, bugün sadece fizikçiler değil, fen ve mühendislik bilim dallarında klastırlar üzerine

yapılan teorik çalışmalar maddelerin özelliklerini anlamada önemli rol oynamaktadır [24, 25]. Özellikle geçiş metali klastırların boyuta bağlı olarak fiziksel, kimyasal ve elektronik özelliklerindeki değişim, teknolojik olarak çok önemlidir [20, 27, 28].

Geçiş metalleri sertlikleri, yüksek yoğunlukları, iyi ısı iletkenlikleri ve yüksek erime-kaynama sıcaklıklarıyla tanınırlar. Özellikle sertlikleri nedeniyle, saf halde ya da alaşım halinde yapı malzemesi olarak kullanılırlar [29]. Geçiş metali klastırlarının faz geçişi sırasındaki termodinamik özellikleri ve bu özelliklerin klastırların boyutuna ve bulk malzemeye göre farklılık göstermesi çok geniş bir çalışma alanıdır ve teknolojik ve bilimsel olarak çok önemlidir [21, 30, 31]. Örneğin, bakır (Cu) nanoklastırların çok ilginç bir yapısı vardır ve birçok farklı endüstriyel uygulamada kullanılmaktadırlar [32, 33]. Nano bakır klastırlar algaecide (yosun önleyici), fungicide (mantar ilacı) ve bilgisayarların ara bağlantısında, nanoçubuklarda ve nanodisklerde kullanılır [32, 34]. Ayrıca gelecekte de mikroelektrik, ısı transfer sistemleri, gaz ayrımları, hidrojen depolama ve süper güçlü malzemelerde kullanılabileceklerdir. Bu yüzden bakır nanoparçacığı temel alan yeni malzemelerin gelişimi için bakır nanoparçacığının özelliklerini anlamak önemlidir [32].

Bu çalışmada, 369 atom ile 44403 atomdan oluşan bakır nanoparçacıklarının sıcaklığa bağlı katı, erime ve sıvı süreçlerini simüle etmek için, Q-SC atomlar arası etkileşim potansiyelini kullanarak Moleküler Dinamik simülasyon yöntemi uygulanmıştır. Erime noktası değerini bulmak için, sabit hacimde ısı sığasının, radyal dağılım fonksiyonunun, Lindeman kriterinin, ortalama kare yer değiştirmenin, difüzyon katsayısının ve Honeycutt-Andersen indeksinin sıcaklıkla ve klastır boyutuyla nasıl değiştiği incelendi.

Bölüm 2’de Moleküler Dinamik simülasyon yönteminin detayları tanıtıldı ve kullanılan algoritmaların detayı teori ve formüllerle açıklandı. Daha sonra çalışma içerisinde kullanılan istatistik sistem olan Kanonik küme (TVN) ve etkileşim potansiyelleri hakkında bilgi verilmiştir.

Bölüm 3’ de hesaplama yöntemleri ve Bölüm 4’de de elde edilen veriler yorumlanarak deneysel verilerle erime mekanizması karşılaştırılmıştır. Son olarak 5. bölümde de sonuçlar ve tartışmaya yer verilmiştir.

## 2. MATERYAL VE METOD

Bir fiziksel sistemde, bilmek istediğimiz en önemli bilgi parçacıkların hareketidir [35]. Bu yüzden belirli şartlar altında çok parçacıklı bir sistemin hareketinin denklemleri nümerik olarak çözülür.

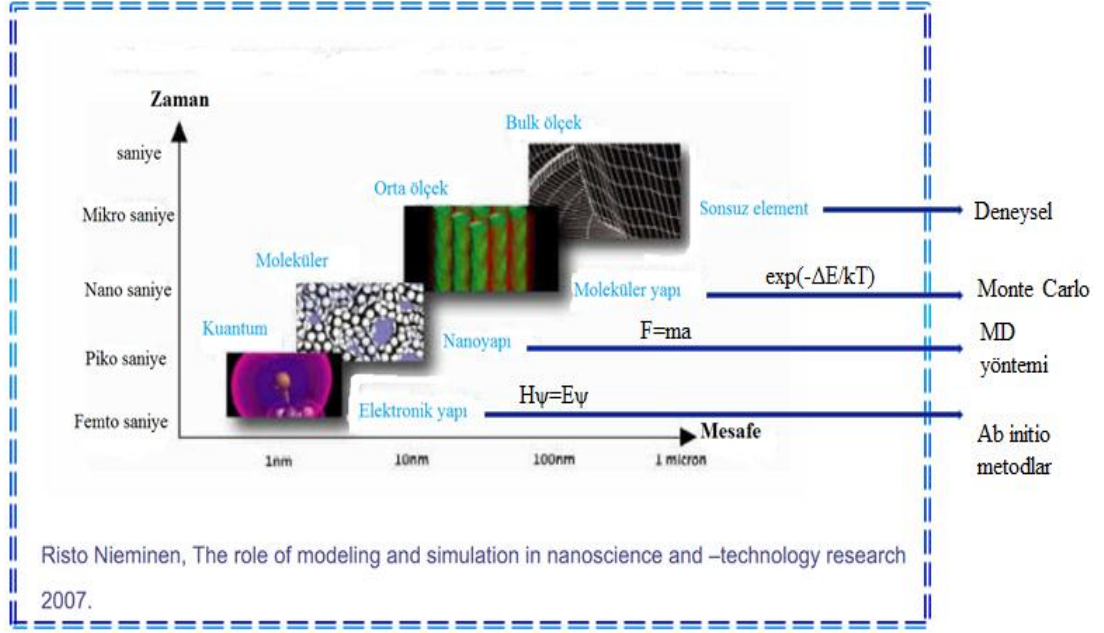
Bilgisayar simülasyonlarının bazı avantajları aşağıdaki gibi listenebilir;

- i. Fiziksel özelliklerin birçok çeşidi ölçülebilir. Örneğin simüle edilen bir sistemdeki bütün parçacıkların hızları ve pozisyonları hakkındaki bütün bilgiyi elde edebilir ve ortalama kare yer değiştirme, hız oto korelasyonu ve durumların yoğunluğu gibi istenen herhangi bir mikroskopik büyüklüğü elde edebiliriz.
- ii. Bazı özel şartları (çok yüksek ve çok düşük sıcaklık, çok yüksek basınç, çok hızlı soğuma) laboratuvarında üretmek pahalı ve zordur. Bu şartları simülasyon ile daha kolay gerçekleştirebiliriz.
- iii. Giriş şartları tam olarak kontrol altındadır. Sonuç olarak, giriş ve sonuç verileri arasındaki sebep ve sonuç gözlenebilir ve net bir şekilde karşılaştırabilir.
- iv. Gerçek sistemin bozulmadan, tehlikeye atılmadan denenmesini sağlar.

Bilgisayar simülasyonunun bu özellikleri ve avantajları ile bilgisayar teknolojisindeki gelişmeler ve çok hızlı ilerlemeler, modern teknoloji alanında birbirinden farklı pek çok fiziksel olayın anlaşılmasının yanı sıra teknolojide kullanılan malzemelerin iç yapısını meydana getiren atomların özelliklerinin anlaşılmasında ve çeşitli hesapların yapılmasında çok büyük katkı sağlamıştır [19, 36]. Bunun sonucu olarak, atomların hareketleri ve birbirleri ile olan etkileşimlerini kullanan bir çok simülasyon metodu bulunmaktadır.

Bunların en yaygın kullanılanları, Şekil 2.1’de görüldüğü üzere atom sayısı az olan sistemlerden başlayarak sistemin boyutunun ve zamanının ölçeklendirilmesine göre değişmektedir. Şekil 2.1’e göre 1 nm ve 1 fs boyutlarında sistemin kuantumsal etkileri belirgin bir şekilde sistemi etkilediği için parçacıklar arasındaki etkileşimi kuantumsal Schrödinger denklemini çözerek sistemin davranışını tayin eden ab initio simülasyon metodları, çok parçacıklı sistemlerin simülasyonlarını, Newton hareket denklemlerini çözerek statik ve dinamik özelliklerini ortaya koyan moleküler dinamik simülasyon metodu, sistemin belli bir statik durumundaki davranışını inceleyen Monte Carlo (MC) simülasyon metodu ve parçacığın boyutu arttıkça

deneysel çalışma metodlarını içeren sonsuz element metodları bulunmaktadır. Moleküler dinamik simülasyon metodu diğer metodlara göre çok atomlu sıvıların, katıların ve moleküllerin simülasyonlarının zamana göre davranışlarının irdelenmesine imkan vermesinden dolayı önem arz etmektedir.



Şekil 2.1: Simülasyon ölçeği.

## 2.1 Moleküler Dinamik Simülasyon Metodu

Moleküler dinamik çok parçacıklı sistemlerin faz uzayında gösterilen noktalar boyunca, klasik mekanik yasaları temel alınarak elde edilmiş hareket denklemlerinin bir bilgisayar yardımıyla çözülmesini sağlayan bilgisayar simülasyon tekniğidir [1,37,38].

Moleküler dinamik simülasyon yöntemi, klasik etkileşimleri dikkate alarak bilgisayar üzerinde bir dizi hesaplama yaptıktan sonra sistemin mikroskopik veya makroskopik yapısı hakkında bilgi sağlar [39].

MD simülasyon metodunun başlangıç noktası, fiziksel bir sistemin mikroskopik yapısının çok iyi bir şekilde tanımlanmasıdır. Sistemin tanımlanması Hamiltoniyen, Lagrangien veya Newton hareket denklemleriyle yapılır ve sistemin dinamik veya statik özellikleri her adımda veya belirli zaman aralıklarında gözlenebilir [26, 35]. Dolayısıyla fiziksel süreçte incelemeye alınan fiziksel büyüklükleri oluşan yörünge boyunca takip edebiliriz.



MD simülasyon yönteminde sistemin iyi tanımlanması, simülasyon sonuçlarını deneysel sonuçlarıyla uyumlu hale getirir. Bunun için,

- 1.Sistemin hangi atomlardan oluştuğu,
- 2.Bu atomların başlangıç konumları ve momentumları,
- 3.Bu atomlar arasındaki etkileşim potansiyeli iyi tanımlanmış olmalıdır [38].

Bir MD simülasyonu genel olarak; hazırlık, integrasyon ve dengeleme, sonuçların alınması ve analizi olmak üzere üç adımda planlanır [11,39]. İlk adımda, bir başlangıç değer problemi haline getirilmiş kuvvet denklemleri için; parçacıkların ilk konumları, ilk hızları tanımlanır ve sistemin başlangıç şartları (sistemin içinde bulunduğu hacim, periyodiklik vb. koşullar) oluşturulur. İkinci adımda, çözülmeye hazır hareket denklemleri, çeşitli sayısal integrasyon algoritmaları yardımıyla bilgisayarda çözümlenerek, sistemin başlangıçta tanımlanan termodinamik şartları için faz uzayında minimum enerjili noktaya hareket etmesi ve orada durulması sağlanır. Son adımda ise dengeye yerleşmiş sistem üzerinde çeşitli ölçümler yapılarak veriler elde edilir [36, 38].

Moleküler Dinamik simülasyon yöntemi, Newton'un ikinci yasasını veya hareket denklemlerini esas alır [2, 3, 40, 41]. Her bir atom üzerindeki kuvvet bilgisinden, sistemdeki atomların ivmeleri belirlenir. Hareket denkleminin integrasyonu parçacığın zaman içinde değişen ivmesi, hızını ve yerini belirten yörüngesini verir. Bu yörüngeden istenilen özelliklerin ortalama değerleri belirlenebilir. Bu metod belirleyicidir; herhangi bir anda her atomun yeri ve hızı biliniyorsa, sistemin durumu geçmişte veya gelecekte herhangi bir anda belirlenebilir [41].

Newton'un hareket denklemi;

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

Burada,  $m_i$  atomun kütlesi,  $a_i$  atomun ivmesi ve  $F_i$  atomlar arası etkileşmesi nedeniyle etkiyen kuvvettir. Kuvvet, potansiyel enerjinin gradyanı olarak ifade edilebilir.

$$F_i = -\vec{\nabla}_i U \quad (2.2)$$

Bu iki denklem birleştirilirse;

$$\frac{-dU}{dr_i} = m_i \frac{d^2 r_i}{dt^2} \quad (2.3)$$

elde edilir. Hareket denkleminin en basit çözümünden;

$$a = \frac{F}{m} \quad (2.4)$$

$$v = at + v_0 \quad (2.5)$$

$$x = \frac{1}{2}at^2 + v_0 t + x_0 \quad (2.6)$$

denklemleri elde edilir. Bu denklemlerden görüleceği gibi yörüngenin hesaplanması için atomların başlangıç yerlerinin, başlangıç hız dağılımlarının ve potansiyel enerjinin gradyantından belirlenebilen ivmelerin bilinmesine ihtiyaç vardır [41]. Yani moleküler dinamik herşeyin neden-sonuç ilişkisiyle birbirine bağlı olduğunu söyleyen bir tekniktir [42].

### 2.1.1 Moleküler dinamik simülasyon metodu tarihçesi

Moleküler Dinamik simülasyon metodu ilk kez Alder ve Wainwright tarafından 1950'nin sonlarında sert küre yaklaşımında etkileşmeleri incelemek için kullanılmıştır. Aynı anda fakat farklı yönelimli 100 katı kürenin (bilye) hareketini, iki veya üç boyutlu çözümler getirdiler. Yaptıkları çalışmada bu yöntemle termodinamik özelliklerin hesaplanabilirliğini gösterdiler [43]. Viyenard ve arkadaşları MD yöntemini kullanarak itici kısa erişimli potansiyel ve buna ek olarak seçilen kristale ait sabit bir iç kuvvet eklenmesi ile elde edilen potansiyel kullanarak yüksek kinetik enerjili tek atomun kristal üzerine olan etkisini inceledi [42]. En büyük sıçrama ise 1964'te gerçekleşti. Rahman, 864 atomlu sıvı argon için sürekli bir potansiyel kullanarak Lennard-Jones (L-J) potansiyelini CDC 3600 makinesi üzerinde denemiştir. Böylelikle periyodik sınır şartında ilk simülasyonu gerçekleştirdi [44]. Bu yöntemle termal özelliklerin araştırabileceği gösterilmiştir. Rahman'ın bilgisayar kodu pek çok MD programında hala kullanılmaktadır. L. Verlet 1967 de L- J yi kullanarak argonun faz diyagramını hesapladı ve sıvı hale ait teorileri test etmek amacı ile korelasyon fonksiyonlarını hesapladı. Dahası, "Verlet zaman integrasyon algoritması" nı kullandı. Aynı sistemdeki faz geçişi daha sonra Hansen – Verlet [45] tarafından incelendi. Bununla birlikte MD yöntemi, 1981 yılında Parrinello ve Rahman tarafından sistemin hacim ve şekilce değişimi dikkate alınarak geliştirilmiştir [46,47]. Özet olarak Moleküler dinamiğin tarihçesini şöyle özetleyebiliriz;

1957 Alder ve Wainwright tarafından ilk kez kullanıldı [43],  
1960 Viyenard'ın bakırda radyasyon hasar MD simülasyonu [42],  
1971 Rahman ve Stillinger'in ilk moleküler sıvı (H<sub>2</sub>O) MD simülasyonu [48],  
1973 Hoover'in dengede olmayan MD simülasyonu [49],  
1977 İlk protein modellemesi [50],  
1981 Parrinello ve Rahman'ın sabit basınç MD simülasyonu [47],  
1984 Nose'in sabit sıcaklık MD simülasyonu [51],  
1984 Daw-Baskes'in gömülü atom MD simülasyonu [52],  
1985 Car ve Parrinello'nun elektronik yapı hesaplama ab initio MD simülasyonu [53],  
1986 Sankey ve Allen'in sıkı bağ MD simülasyonu [54],  
1993 Lomdahl'ın 250 milyon atom ile MD simülasyonu [55],  
2004 19 milyar atom ile MD simülasyon [56].  
2008 Hesaplamalı enzim dizaynı ile Keep eliminasyon katalizörler [57].  
Günümüzde MD simülasyon metodu ile yapılan çalışmaların yoğun bir şekilde devam ettiği görülmektedir.

### **2.1.2 Literatür**

1986'da Foiles ve arkadaşları Cu, Ag, Au, Ni, Pd, Pt metalleri ve diğer alaşımları gömülü atom metodu (EAM) kullanarak MD yöntemiyle araştırdılar [58].  
1988'de Stephan M. ve arkadaşları bazı fcc metallerinin termal genişleme katsayısını EAM yöntemini kullanarak MD yöntemiyle hesaplamış ve bulunan değerleri deneysel değerler arasında kıyaslama yapmıştır [59].  
1989'da Erkoç ve arkadaşları MD simülasyon metoduyla, Ni<sub>n</sub> (n=3-459) klastırlarının kararlı durumlarını çalışmışlardır [60].  
1997'de Lewis altın nanoklastırların erimesini ve donmasını MD kullanarak araştırmıştır [61].

1999'da Çağın ve arkadaşları altı fcc metalinin (Ni, Cu, Ag, Au, Pt, Rh) termodinamik ve mekanik özelliklerini, Sutton-Chen (SC) potansiyeli kullanarak MD simülasyon metoduyla incelediler [62].

2002'de Shim ve arkadaşları Au nanoparçacıkların termal dengesini EAM potansiyelini kullanarak MD yöntemiyle araştırmışlardır [63].

2004'de Kart ve arkadaşları MD simülasyon metoduyla, Kuantum Sutton-Chen (Q-SC) potansiyelini kullanarak Pd-Ag alaşımının kristal özelliklerini ve amorf oluşumlarının soğutma hızı ve konsantrasyona bağlı olarak incelemişlerdir [64].

2004'de Kart ve arkadaşları saf Pd, Ag ve özellikle  $Pd_xAg_{x-1}$  tipindeki ikili alaşımlarının mekanik ve termodinamik özelliklerini MD simülasyon yöntemiyle SC ve Q-SC potansiyellerini kullanarak incelemişlerdir. Elde ettikleri sonuçların deneysel verilerle oldukça uyumlu olduğunu belirtmişlerdir. Özellikle Pd, Ag ve ikili alaşımları için Q-SC potansiyel parametrelerinin deneysel sonuçlarla uyumunun SC potansiyel parametreleri ile olan uyumundan daha iyi olduğu sonucuna ulaşmışlardır [65].

2004'de Özgen ve Duruk, EAM yöntemiyle SC potansiyelini kullanarak Al metalini modellemişlerdir. Radyal dağılım fonksiyonunu kullanarak katı ve sıvı fazda buldukları sonuçları analiz etmişlerdir [66].

2005'te Çakmak ve arkadaşları, EAM potansiyelini kullanarak moleküler dinamik simülasyon yöntemiyle Ni incelemişlerdir [67].

2005'te Subramanian K. ve arkadaşları Pd-Pt nanoparçacıkların erime özelliklerini Q-SC potansiyeli kullanarak araştırdılar [68].

2006'da Saman A. ve arkadaşları Al nanoparçacıkların erime özelliklerini MD yöntemiyle araştırdılar [69].

2006'da Sebetçi ve arkadaşları Pt klastırlarının termodinamik özelliklerini EAM potansiyeli kullanarak MD simülasyon yöntemiyle incelemişlerdir [70].

2008'de Yang ve arkadaşları SC potansiyeli kullanarak MD simülasyon yöntemiyle Pt-Au nanoparçacıkları çekirdek-kabuk yapısının erime davranışlarını incelemişlerdir [71].

2009'da Tian ve arkadaşları Au nanoçubukların MD simülasyonunu Q-SC potansiyeli kullanarak incelemişlerdir [72].

2010'da Zhang ve Sun  $Cu_N$  klastırlarının farklı erime davranışlarını EAM potansiyeli kullanarak MD simülasyonu ile çalışmışlardır [73].

2010'da Yhang ve arkadaşları sıvı geçiş metallere difüzyon ve yapısal özelliklerinin sıcaklıkla nasıl değiştiğini MD simülasyon yöntemiyle çalışmışlardır [74].

2010'da Watanabe ve arkadaşları bcc Fe katı-sıvı arayüzeyinin termodinamik ve kinetik özelliklerini MD simülasyon yöntemiyle incelemişlerdir [75].

2011'de L. Zhang ve Q. Fan erimiş  $Cu_{411}$  klastırlarının yapısal değişimlerinde sıcaklığın etkisini EAM potansiyeli kullanarak MD simülasyonu ile incelediler [76].

2011'de Shibuta ve Suzuki metal nano parçacıkların katılaşmasında soğuma hızının etkisini MD simülasyon yöntemi kullanarak incelemişlerdir [77].

### **2.1.3 Moleküler dinamik simülasyonu uygulama alanları**

Moleküler Dinamik simülasyon yöntemi bilimin her dalında çeşitli molekülleri modellemede ve modellenen moleküllerin özelliklerini analiz etme amacıyla birçok çalışma alanında kullanılmaktadır. Bu çalışma alanlarının bazıları aşağıda verilmiştir.

Temel araştırmalar: Dengelenme, moleküler kaosu denemesi, kinetik teori, difüzyon, transport özellikleri, boyuta bağlılık, modellerin ve potansiyel fonksiyonlarının test edilmesi.

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

Kollektif davranışlar: Uzay-zaman-korelasyon fonksiyonunun bozunması, dönme ve ötelenmenin eşleşmesi, titreşim, spektroskopik ölçümler, yönelme mertebesi, dielektrik özellikler.

Karmaşık sıvılar: Camların yapısı ve dinamiği, moleküler sıvılar, saf su ve sulu çözeltiler, sıvı kristaller, iyonik sıvılar, sıvı arayüzeyleri, filmler ve çok ince tabakalar.

Polimerler: Zincirler, halkalar ve dallanmış moleküller, zarlar, denge konfigürasyonları ve taşınma süreçleri.

Katılar: Kristal kusur oluşumu ve hareketi, kırılma, tane sınırları, yapısal dönüşümler, radyasyon zararları, elastik ve plastik mekaniksel özellikler, sürtünme, şok dalgaları, moleküler kristaller, klastırlar, epitaksiyel büyüme.

Biyomoleküller: Protein yapısı ve dinamiği.

Akışkan dinamiği: Laminer akış, sınır tabakaları, Newtonian olmayan sıvıların reolojisi, kararsız akış [12].

#### 2.1.4 Newton dinamiği

Newton dinamiğinde bir  $i$  parçacığının öteleme hareketinin kaynağı olarak, parçacık üzerine etkiyen dış etkenli bir  $F_i$  kuvveti gösterilir. Buna göre parçacığın hareketi ile uygulanan kuvvet arasındaki ilişki,

$$F_i = m r_i \quad (2.7)$$

şeklinde Newton'un 2. kanunu ile tanımlanmaktadır. Burada  $m$  parçacığın kütesini temsil etmektedir ve konumdan, hızdan ve zamandan bağımsız bir sabit olduğu kabul edilmektedir. Buna göre parçacığın ivmesi,

$$\ddot{r}_i(t) = \frac{d^2 r_i}{dt^2} \quad (2.8)$$

şeklinde verilmektedir. Burada  $r_i$  sabit bir koordinat sistemine göre parçacığın konumunu veren bir vektördür. Parçacık üzerine kuvvet etkilemiyorsa ikinci kanun,

$$\ddot{r}_i(t) = \text{sabit} \quad (2.9)$$

olarak yazılmaktadır. Bu ifade bir parçacığın üzerine herhangi bir kuvvet etkilemediği sürece, parçacığın belirli hızla sürekli hareket edeceği anlamına gelmektedir ki buda Newton'un 1. kanunudur.

#### 2.1.5 Hamiltoniyen dinamiği

Moleküler kuvvetlerin ve konumların zamanla değişmesine rağmen, Newton'un ikinci kanunu zamandan bağımsızdır.  $F_i = m r_i$  formu zaman ötelemesi halinde bir sabittir. Bu nedenle, zamanla sabit olan pozisyonların ve hızların zamana bağlı bir fonksiyonunun olmasını isteriz. Bu fonksiyonlardan birisi Hamiltonyen  $H$  [78] olarak adlandırılmaktadır;

$$H(r_N, p_N) = \text{sabit}. \quad (2.10)$$

Burada, i. parçacığın momentumu  $p$ , parçacığın hızına göre,

$$p_i = m\dot{r}_i \quad (2.11)$$

şeklinde tanımlanmaktadır.

Yalıtılmış bir sistemde toplam enerji Hamiltonyen olarak alınır ve N tane parçacık için;

$$H(r_N, p_N) = \frac{1}{2m_i} \sum_i p_i^2 + U(r_N) = \text{sabit} \quad (2.12)$$

şeklinde yazılmaktadır. Burada U potansiyel enerjisi, moleküller arası etkileşimlerden kaynaklanmaktadır. Hareket denklemlerini elde etmek için ilk önce genel Hamiltoniyen'in türevi alınır:

$$\frac{dH}{dt} = \sum_i \frac{\partial H}{\partial p_i} \dot{p}_i + \sum_i \frac{\partial H}{\partial r_i} \dot{r}_i + \frac{\partial H}{\partial t}. \quad (2.13)$$

Eğer (2.12) de olduğu gibi H açıkça zamana bağlı değilse (2.13)'ün sağındaki son terim sıfır olur ve,

$$\frac{dH}{dt} = \sum_i \frac{\partial H}{\partial p_i} \dot{p}_i + \sum_i \frac{\partial H}{\partial r_i} \dot{r}_i = 0 \quad (2.14)$$

şeklinde genel bir sonuç elde edilir. Yalıtılmış sistemin (2.12)'de verilen Hamiltoniyen'in zamana göre türevi alınır;

$$\frac{dH}{dt} = \frac{1}{m} \sum_i p_i \dot{p}_i + \sum_i \frac{\partial U}{\partial r_i} \dot{r}_i = 0 \quad (2.15)$$

elde edilir. (2.14) ve (2.15) beraber çözümlerse her bir i parçacığı için,

$$\frac{\partial H}{\partial p_i} = \frac{p_i}{m} = \dot{r}_i \quad (2.16)$$

ve

$$\frac{\partial H}{\partial r_i} = \frac{\partial U}{\partial r_i} \quad (2.17)$$

ifadeleri elde edilir. (2.16) ifadesi (2.14)'de kullanılırsa;

$$\sum_i \dot{r}_i \dot{p}_i + \sum_i \frac{\partial H}{\partial r_i} \dot{r}_i = 0 \quad (2.18)$$

$$\sum_i \left( \dot{p}_i + \frac{\partial H}{\partial r_i} \right) \dot{r}_i = 0 \quad (2.19)$$

elde edilir. Parçacık hızlarının birbirlerinden bağımsız olması nedeniyle (2.19) bağıntısı herhangi bir parçacık için ,

$$\frac{\partial H}{\partial r_i} = -\dot{p}_i \quad (2.20)$$

şeklinde yazılabilir.

(2.16) ve (2.20) denklemleri Hamiltoniyen hareket denklemleridir. N parçacıklı bir sistem için (2.16) ve (2.20) denklemleri 6N tane birinci mertebeden diferansiyel denklem tanımlar. Bunlar Newton'un 3N tane ikinci mertebeye denklemlerine eşdeğerdir. Bunu göstermek için (2.11) denkleminin her iki tarafının zamana göre türevi alınır ve (2.20)' de  $\dot{p}_i$  yerine yazılırsa;

$$\frac{\partial H}{\partial r_i} = -m\ddot{r}_i \quad (2.21)$$

elde edilir ve buradan ,

$$F_i = -\frac{\partial H}{\partial r_i} = -\frac{\partial U}{\partial r_i} \quad (2.22)$$

elde edilir. (2.22) denklemini korunumlu bir kuvvet için genel bir bağıntıdır ve korunumlu kuvvet, bir potansiyel fonksiyonunun negatif grandyenti olarak yazılabilir. Bu denklemler Newton mekaniği ile Hamiltoniyen mekaniği arasındaki ilişkiyi göstermektedir.

### 2.1.6 Verlet algoritması

Fiziksel bir sistemin matematik modeli kurulup hareket denklemleri elde edildikten sonra sayısal çözüm yapılır. (2.10) denkleminin sayısal olarak çözülmesinde Verlet algoritması kullanılmaktadır.

Verlet algoritması [10, 19, 31, 78-83] MD simülasyon yönteminde hareket denklemlerinin çözümü için yaygın olarak kullanılan, enerji korunumunu sağlayan ve Moleküler Dinamik simülasyon süresini kısaltan geniş kullanıma sahip basit bir algoritmadır. Bu algoritmada temel fikir birim sürede konumlar için zamana göre üçüncü dereceden Taylor açılımlarını  $r(t+dt)$  ve  $r(t-dt)$  olacak şekilde yazmaktır. Burada  $r_i(t)$ , i. parçacığın konumudur.



Böylece MD simülasyonu boyunca gerekli olan hız ve konum ifadeleri, başlangıç konum ve zaman ifadelerinden yararlanılarak bir sonraki adım için nümerik olarak hesaplanmış olmaktadır.

$$r(t + dt) = r(t) + dt\vartheta(t) + \frac{dt^2}{2}\dot{r}(t) + \frac{dt^3}{6}\ddot{r}(t) + O(dt^4), \quad (2.23)$$

$$r(t - dt) = r(t) - dt\vartheta(t) + \frac{dt^2}{2}\dot{r}(t) - \frac{dt^3}{6}\ddot{r}(t) + O(dt^4), \quad (2.24)$$

hesaplanır. Bu iki denklemin toplanmasıyla;

$$r(t + dt) = 2r(t) - r(t - dt) + dt^2\ddot{r}(t) + O(dt^4) \quad (2.25)$$

denklemini elde edilir. Burada,  $\vartheta(t)$  ifadesi konumun ilk türevi olarak hızı temsil etmektedir.  $dt$  ifadesi t zamanından sonraki küçük zaman adımımızdır.  $r(t + dt)$  ifadesi i. parçacığın  $dt$  zaman adımı sonrasındaki,  $r(t - dt)$  ifadesi ise  $dt$  zaman adımı öncesindeki konumlarıdır. Ayrıca,  $\ddot{r}(t)$  ivmesi bir sonraki konum için potansiyel enerji fonksiyonlarından hesaplanmaktadır. Bu eşitlik Newton'un ikinci dereceden hareket denklemlerinin çözümü ve atomik pozisyonlara sahip simülasyonlar için gerekli olan fiziksel niceliklerin hesaplanması açısından çok avantajlıdır.

Enerji korunumu ve sabit enerjii verecek olan atom pozisyonlarının  $dt$  zaman adımına göre değişimi simülasyonların analizlerinin yapılabilmesi açısından önem taşımaktadır. Özellikle Moleküler Dinamik simülasyonu gibi çok fazla simülasyon adımından oluşan sistemler için hassas hesaplama ve zamanın verimli kullanılması simülasyonlar için önemlidir. Böylece deneysel sistemlere daha yakın sonuçlar ve gerçekçi simülasyonlar gerçekleştirilecektir.

### 2.1.7 Leap-Frog algoritması

Simülasyon için gereken t anındaki hız ve konumların bulunmasında kullanılan bir diğer algoritma Verlet leap-frog algoritmasıdır. Bu algoritma aynı adımdaki konum ve ivme ile yarım zaman adımı gerideki hızın bilinmesini gerektirir [84]. Bu algoritmada, önce  $(t + \frac{1}{2}dt)$  anında hızlar hesaplanmaktadır. Bu hızlardanda  $(t + dt)$  anındaki konumlar hesaplanır. Yani, bu algoritmada hızlar konumların üzerine sıçrar, konumlar hızların üzerine sıçrar (şekil 1). Bu algoritmanın amacı hızların açık bir şekilde hesaplanabilmesidir [85].

İlk adım,  $(t + \frac{1}{2} dt)$  anındaki hızı,

$$v\left(t + \frac{1}{2} dt\right) = v\left(t - \frac{1}{2} dt\right) + a(t)dt \quad (2.26)$$

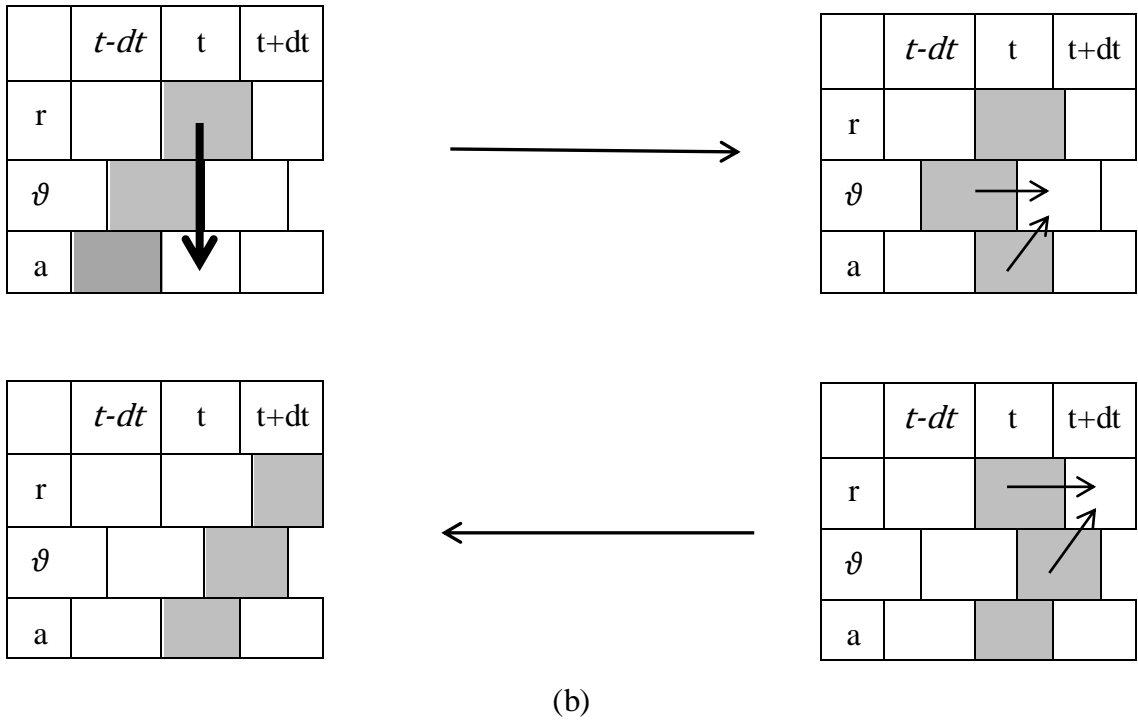
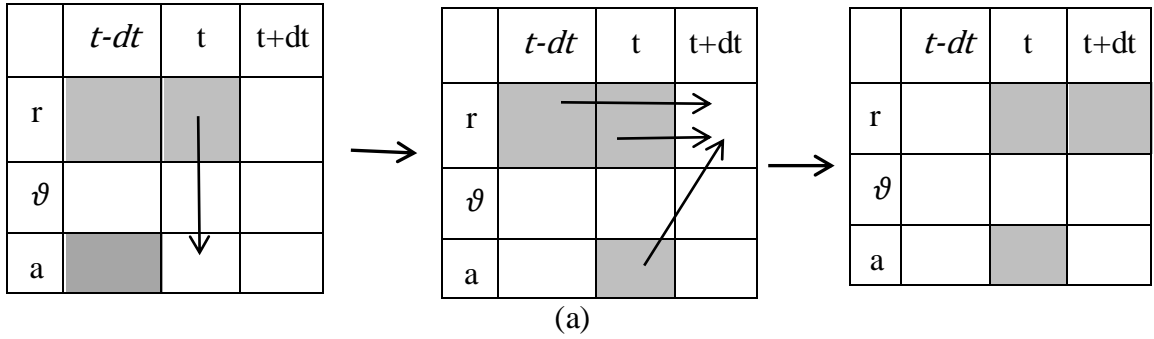
İfadesi ile belirlenmektedir. Bulunan yeni hızlar,

$$r(t + dt) = r(t) + v\left(t + \frac{1}{2} dt\right) dt \quad (2.27)$$

İfadesinde kullanılarak yeni konumların elde edilmesini sağlamaktadır. Bu algoritmada t anındaki hız yarım adım ileride ve gerideki hızların aritmetik ortalaması ile,

$$v(t) = \frac{1}{2} \left[ v\left(t + \frac{1}{2} dt\right) + v\left(t - \frac{1}{2} dt\right) \right] \quad (2.28)$$

ifadesinden bulunmaktadır.



Şekil 2.2: Verlet algoritmasının değişimi. (a) Orijinal Verlet algoritması. (b) Verlet leap-frog algoritması.

### 2.1.8 Genişletilmiş Hamiltoniyen Metodu

MD simülasyonlarını gerçekleştirmek için genellikle uygun istatistik koşullar kullanılır. Kanonik istatistik kümesinde, özel bir sıcaklıkta simülasyon yapabilmek için sistemde ısı banyosunun sıcaklığını sabit tutmak gereklidir. Bunun için sistemde bir termostata ihtiyaç duyulmaktadır. Bu ihtiyacı karşılayabilmek için yapılan çalışmalarda, 1980' lerde sıcaklık kontrolü niteliksel bir değişim geçirdi. Nose termostat için çok kullanışlı, hatta çığır açan sıcaklığa bağlı Hamiltoniyen serbestlik derecesini keşfetti [86]. Nose tarafından ortaya konulan genişletilmiş hamiltoniyen metodu Hoover tarafından geliştirildi ve Nose-Hoover metodu olarak adlandırıldı [87, 88]. Nose-Hoover metodunda amaç ısı banyosunu, s serbestlik dereceleri ekleyerek sistemin bir parçası gibi dikkate almak ve kanonik istatistik kümesinde (TVN) ısı banyosunun sıcaklığını sabit tutmaktır [87-89].

Buna göre genişletilmiş sistemde zaman ölçeği s faktörü tarafından uzatılmaktadır.

$$dt = sdt \quad (2.29)$$

Atomik koordinatlar iki sistemde de aynıdır;

$$r = r, \dot{r} = s^{-1}\dot{r}, s = s \text{ ve } \dot{s} = s^{-1}\dot{s}. \quad (2.30)$$

Genişletilmiş sistem için Hamiltoniyen denklemi;

$$L = \sum_i \frac{m_i}{2} s^2 \dot{r}_i^2 - U(r) - \frac{1}{2} \mathbb{Q} \dot{s}^2 - g k_B T_0 \ln s \quad (2.31)$$

formunda ifade edilmektedir. Hamiltoniyen'in ilk iki terimi gerçek sistemin kinetik enerjisi ile potansiyel enerjisinin farkıdır. Ekteki terimler ısı banyosunun kinetik ve potansiyel enerjisidir. Genişletilmiş sistem yalıtıldığı için toplam enerjisi korunur. Bu denklemde g toplam serbestlik derecesini ve  $k_B$  Boltzman sabitini göstermektedir.  $\mathbb{Q}$  ise efektif kütle temsil etmektedir.

Nose-Hoover metodunda ilave serbestlik derecesinin eklenmesiyle denklem;

$$m_i \ddot{r}_i = - \left[ \frac{\partial U}{\partial r_i} + \frac{\dot{s}}{s} p_i \right], \quad (2.32)$$

$$p_i = m_i \dot{r}_i, \quad (2.33)$$

$$\dot{p}_s = \left( \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{m_i} - gk_B T \right) / \mathbb{Q}, \quad (2.34)$$

$$P_s = \mathbb{Q} \frac{\dot{s}}{s} \quad (2.35)$$

şeklinde yazılmaktadır. Böylece Nose-Hoover metodunda Hamiltoniyen ifadesi ,

$$H_{Nose-Hoover} = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{m_i} + U(r) + gk_B T_0 \ln s + \frac{p_s^2}{2\mathbb{Q}} \quad (2.36)$$

haline gelmektedir. Nose-Hoover analizinin en önemli özelliği kanonik dağılımda hareket denklemlerinden başka diğer denklemlerin çözümüne izin vermemesi ve Newton hareket denklemlerinin sistemin tanımlanması için vazgeçilemez olmasıdır. Sisteme katkısı olan serbestlik dereceleri Hamiltonyene dahil edilerek sistemin davranışı istatistiksel olarak daha anlaşılabilir hale gelmiş olur. Sonuç olarak, istatistik kümelerin, atomik boyuttaki simülasyonlar için fiziksel özelliklere göre seçilmesi daha geniş alanlarda simülasyon yapılabilmesine imkan sağlamaktadır.

## 2.2 Atomik Etkileşmeler

Bilgisayar simülasyonları, çoğu araştırma projelerinin ayrılmaz bir parçası haline gelmektedir ve atomik seviyede çeşitli problemleri anlamamıza yardımcı olmaktadır [31]. Bilgisayar simülasyon tekniklerinin en önemli noktalarından biri atomik seviyede her bir parçacığın birbirleriyle olan etkileşmelerinin tanımlanmasıdır. Sistemin davranışının etkileşim potansiyeli cinsinden iyi temsil edilmesi, MD simülasyonlarından elde edilen verilerin deneysel sonuçlarla uyumlu olmasını sağlamaktadır.

Potansiyel fonksiyonları N atomdan oluşan bir sistemin potansiyel enerjisinin atom koordinatlarına göre nasıl değiştiğini tanımlamaktadır. Bir sisteme dış kuvvetlerin etki etmediği varsayılırsa bu potansiyel model anlayışı Born-Oppenheimer yaklaşımını temel almaktadır [31].

$$U_{top}(r_1, r_2, \dots, r_N) = \sum_i U_1(r_i) + \sum_i \sum_{j>i} U_2(r_{ij}) + \sum_i \sum_{j>i} \sum_{k>j} U_3(r_i, r_j, r_k) \dots \quad (2.37)$$

burada  $U_1$  dış alandan dolayı tek cisim terimidir,  $U_2$  iki cisim veya çift potansiyelidir,  $U_3$  ise üçüncü bir atomun varlığında atom çiftlerinin etkileşimleri yeniden düzenlendiğinde ortaya çıkan çoklu cisim terimidir. Bu açılım atomlararası potansiyellerin iki sınıfta toplanmasına olanarak sağlar;

İki cisim potansiyeli (sadece  $U_1$  ve  $U_2$ ) ve çok cisim potansiyelleri ( $U_3$  ve daha yüksek terimleri) içerir [31].

Malzeme fiziğinde kullanılmak üzere son yıllarda ileri sürülen çok cisim etkileşme modellerinin bilgisayar simülasyonlarındaki hesaplama sürelerinin uzun olması araştırmacıları iki cisim etkileşme potansiyellerini iyileştirme yoluna sevk etmiştir [10].

### 2.2.1 İki cisim etkileşmeleri

MD simülasyonlarında birden fazla atomla hesaplamalar yapıldığı için her bir atomun etkileşimi diğer atomla olan uzaklığına bağlıdır. Böylece sistemin potansiyel enerjisi iki parçacık etkileşmelerinin toplamının fonksiyonu şeklinde tanımlanır;

$$U = U(r_{12}) + U(r_{13}) + U(r_{14}) + \dots + U(r_{23}) + \dots = \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=i+1}^N U(r_{ij}). \quad (2.38)$$

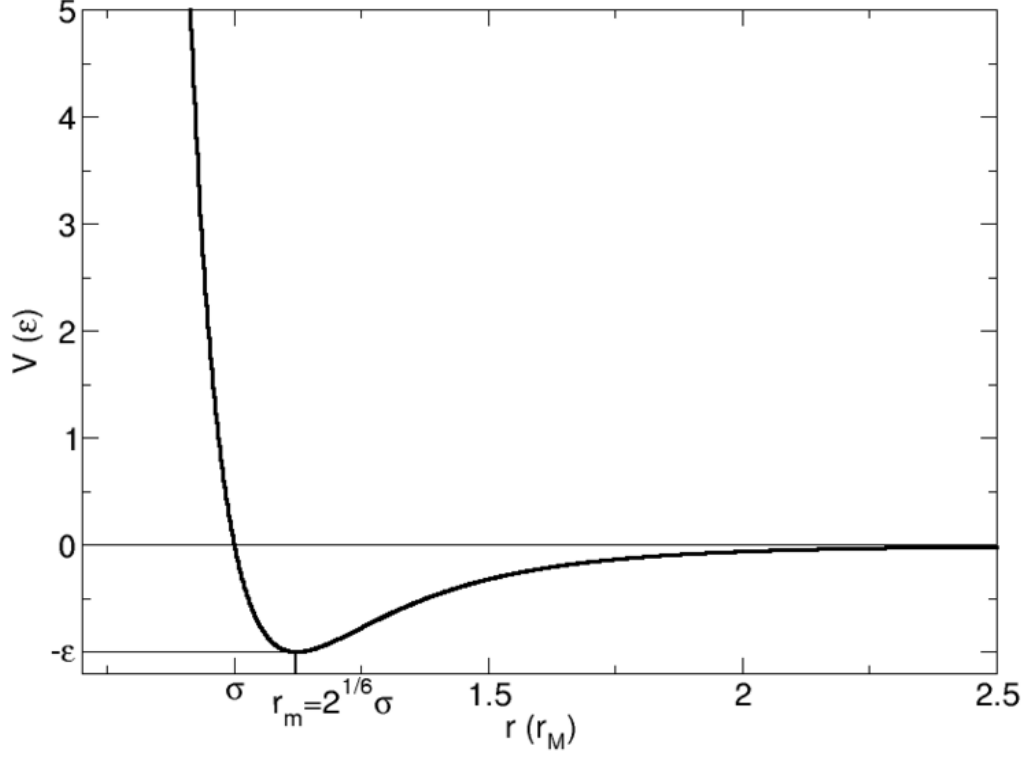
Burada  $r_{ij}$ ,  $i$  ve  $j$  atomları arasındaki mesafedir. İkili cisim etkileşmelerinin en önemli özelliği, küçük  $r$  mesafeleri için güçlü itici kuvvet ve büyük  $r$  mesafesi için zayıf çekici kuvvetin olmasıdır. Bu tanımlamanın en yaygın kullanımı Lennard-Jones etkileşim potansiyelidir [90].

#### 2.2.1.1 Lenard-Jones potansiyeli

Sir John Edward Lennard-Jones tarafından önerilen Lennard-Jones potansiyeli, moleküllerin ayrılma uzaklığı temeline dayanan veya bağlanmamış iki atom arasındaki etkileşmenin enerjisini gösteren matematiksel bir yaklaşımdır [91]. Bu yaklaşım itici kuvvetler ile çekici kuvvetler arasındaki farkı dikkate alır. Lennard-Jones fonksiyonu;

$$U(r) = 4\varepsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] \quad (2.39)$$

eşitliği ile verilmektedir. Burada,  $\epsilon$  kuyu derinliği, iki parçacığın birbirini çekmesinin ne kadar güçlü olduğunu gösterir.  $\sigma$  ise iki parçacık arasındaki potansiyel sıfır olduğundaki uzaklıktır.  $\sigma$  bağlanmamış iki parçacık birbirine ne kadar yakın olduğunun bir ölçümünü verir ve böylece Van der Waals çapı olarak adlandırılır.  $r$  ise iki parçacık arasındaki ayrılma uzaklığıdır (Şekil 2.2).



Şekil 2.3: Lennard-Jones etkileşim potansiyeli.

Lennard-Jones potansiyel ifadesinde ilk terim atomlar birbirine yakın hale geldiğinde, atomların birbirine karışmasını önleyen itici kuvettir. Bu terimin temeli Pauli prensibine dayanır. Atomları çevreleyen elektron dağılımları üst üste gelmeye başladığında, sistemin enerjisi aniden artar ve iki elektronun kuantum sayıları eşit olamaz. İkinci terim ise uzak mesafelerde egemen olan, atomların birbirinden uzaklaşmasını engelleyen çekici kuvettir. Çekici etkileşim terimi Van der Waals etkileşimi olarak da tanımlanmaktadır. Van der Waals bağlanma kohesif enerjiye sahip olan oldukça zayıf etkileşimlerdir. Kohesif enerji, serbest atomların toplam kristal (veya katı) enerjisinin farkıdır [92, 93].

Metalik bağlarla bağlı sistemlerde parçacıklar, elektronlarını paylaştıklarından dolayı sisteme çok parçacıkların etkilerinin dahil edilmesi gerektiği için ikili etkileşim potansiyelleri bir sistemin tanımlanmasında yeterli olamamaktadır. Örneğin bu etkilerin dahil edilmemesi sonucunda, simülasyonu gerçekleştirilen sistemin, erime noktası analizi deneysel çalışmalarla %20 oranında farklılık göstermektedir [52, 94-100].

Literatürde çok cisim etkilerini gösteren birçok potansiyel çeşidi vardır. Bu potansiyeller, metaller ve onların alaşımlarını içeren birçok çalışmada kullanılan gömülü atom metodu (EAM) [52, 101, 102], bcc metalleri için kullanılan [99] ve soy metalleri için geliştirilen [103] Finnis-Sinclair (FS) potansiyeli, on tane fcc metali için geliştirilen Sutton-Chen (SC) potansiyeli [104] ve rastgele ikili fcc alaşımlarının çalışmalarında kullanılan Ruffi-Tabar ve Sutton potansiyelleridir [62, 105-109].

Bu çalışmada hesaplama verimliliği nedeniyle SC potansiyelini kullandık. Bu potansiyel FS potansiyelle aynı formdadır. Bu nedenle SC potansiyelinin arka planını tanımlamak uygun olacaktır.

### 2.2.2 Finnis-Sinclair etkileşim potansiyeli

Son yıllarda yapılan çalışmalarda ikili etkileşim potansiyellerinin sistemi yeterince temsil edemediği bu yüzden uzun menzilli etkileşimleri tanımlayan çok parçacık etkileşimlerinin sisteme dahil edilmesinin gerektiği ortaya çıkmıştır [104, 110]. Bu eksikliği gidermek için bcc örgü yapısına sahip geçiş metallerinin davranışını tanımlamak ve yüzey özelliklerine uygulamak için Finnis-Sinclair (FS) etkileşim potansiyeli tanımlanmıştır [99, 110].

Finnis ve Sinclair tarafından geliştirilen bu potansiyel basitçe bir analitik forma sahiptir ve nokta kusurlarının, tanecik sınırlarının, metal ve alaşımlar için yüzey simülasyonlarında çok iyi sonuçlar verir [111-115]. FS potansiyelinde N atomlu bir sistemin toplam enerjisi [99];

$$U_{top} = \frac{1}{2} \sum_i^N \sum_{j \neq i}^N V(r_{ij}) + \sum_i^N f(\rho_i) , \quad (2.40)$$

$$f(\rho_i) = \sqrt{\rho_i} , \quad (2.41)$$

$$\rho_i = \sum_i^N \phi_i(r_{ij}) \quad (2.42)$$

şeklinde verilmiştir. Burada,  $V(r_{ij})$  fonksiyonu  $i$  ve  $j$  atomları arasındaki ikili itici etkileşimdir.  $f(\rho_i)$  fonksiyonu da genelleştirilmiş koordinatlar ( $\rho$ ) cinsinden atomların enerjisini belirtmektedir.  $\rho_i$  fonksiyonu ise  $i$  durumunda yerel elektronik yük yoğunluğu olarak tanımlanmaktadır [101].  $\phi_i(r_{ij})$  kısa mesafeli etkileşim fonksiyonudur.

Denklem (2.40) ve Denklem (2.42)' de bu iki potansiyel ifadesi aynı analitik şekle sahip olsalar bile fiziksel yorumları farklıdır. Bu sebeple  $V(r)$ ,  $\phi(r)$  ve  $\rho(r)$  fonksiyonları farklı sonuçları vermektedir. Bu sonuçlar FS potansiyelinde kısa menzilli itici etkileşmelerde uygun sonuçlar vermektedir. Fakat uzun menzilli çekici etkileşmeleri yeteri kadar temsil edememektedir. Uzun menzilli çekici etkileşimlerin etkisi göz önüne alınarak Sutton-Chen etkileşim potansiyeli, fcc kübik yapıdaki metal atomları için geliştirilmiştir.

### 2.2.3 Sutton-Chen etkileşim potansiyeli

Sutton-Chen (SC) potansiyelleri on tane fcc metalinin enerjisini tanımlamaktadır [116]. SC çok cisim potansiyelleri gömülü atom modelinin formuna benzer ve FS potansiyeli şeklindedir [52].

Bu potansiyel ifadesinde metalin toplam enerjisi, çift etkileşmeleri tanımlayan itici terim ve çok cisimli etkileşmeleri tanımlayan yoğunluk fonksiyonunu veren çekici bir terimle ifade edilmektedir.

Çekici terim yüzey gevşemesini elde etmek amacıyla kısa erişimli etkileşmelerin katkısını, itici terim ise uzun erişimli etkileşmelerin katkısını içermektedir. Metallerin ve onların ikili alaşımlarının toplam enerjisi [104, 106, 107, 117];

$$U_{top} = \sum_i U_i = \sum_i \left[ \sum_{j \neq i} \epsilon_{ij} \frac{1}{2} V(r_{ij}) - c_i \epsilon_{ii} (\rho_i)^{1/2} \right], \quad (2.43)$$

şeklinde tanımlanır. Burada,  $V(r_{ij})$  ikili etkileşmeleri tanımlayan terimdir ve

$$V(r_{ij}) = \left( \frac{a_{ij}}{r_{ij}} \right)^{n_{ij}} \quad (2.44)$$



şeklinde verilir.  $\rho_i$  ise  $i$  atomunun kısa mesafede çekici çoklu cisim etkileşmesini veren bölgesel enerji yoğunluğudur. Bu enerji yoğunluğunun kare kökü şeklindeki fonksiyonu SC potansiyelinde çekici terimi tanımlamaktadır;

$$\rho_i = \sum_i^N \phi(r_{ij}) , \quad (2.45)$$

$$\phi(r_{ij}) = \left( \frac{a_{ij}}{r_{ij}} \right)^m . \quad (2.46)$$

Denklemler (2.43), (2.44) ve (2.45)' deki  $r_{ij}$ ,  $i$ . atom ile  $j$ . atom arasındaki mesafeyi,  $a_{ij}$  örgü sabitini,  $c$  itici terime bağlı kohesif terimin pozitif boyutsuz parametresini ve  $\epsilon$  enerji boyutunda bir parametreyi tanımlamaktadır.  $n$  ve  $m$  ise  $n > m$  olmak üzere pozitif tam sayılardır. SC potansiyel parametreleri ( $\epsilon, c, m, n$ ) deneysel örgü parametresi, bulk modülü ve kohesif enerji gibi deneysel katı özelliklere fit edilerek elde edilmiş parametrelerdir.

Son zamanlarda Çağın ve arkadaşları SC potansiyel parametrelerine bazı kuantum düzeltmeleri ilave ederek, parametreleri deneysel fonon frekanslarına, boşluk oluşturma enerjisine, yüzey enerjisine ve sıfır nokta enerjisine fit ederek tekrar parametrize etmişler ve Kuantum Sutton-Chen (Q-SC) potansiyel parametrelerini elde etmişlerdir [118].

Bu çalışmada da Q-SC potansiyel parametreleri kullanılmıştır. Tablo 2.1'de çalışılan malzemeler için kullanılan Q-SC potansiyel parametreleri verilmiştir [119].

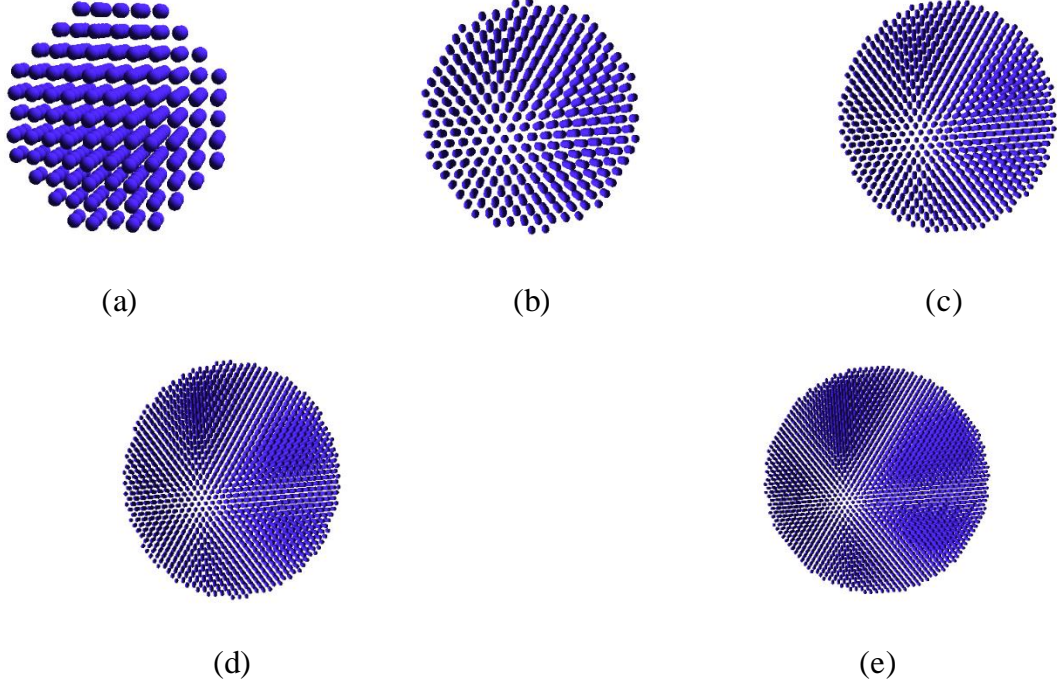
Tablo 2.1 : Cu atomu için Q-SC potansiyel parametreleri.

Metal	Model	$n$	$m$	$\epsilon$ (eV)	$c$	$a$ (Å)
Cu	Q-SC	10	5	5.7921E-3	84.8430	3.60300

SC potansiyel parametreleri sadece deneysel örgü sabiti, kohesif enerji ve bulk modülüne dayalı olduğundan kusurları, yüzeyleri ve ara yüzeyleri içeren özellikleri iyi tanımlayamamaktadır. Buna karşılık, Q-SC potansiyeli sıfır nokta enerjisini de hesaplamak için kuantum düzeltmeleri içermektedir. Ayrıca Q-SC potansiyeli çeşitli fiziksel özelliklerin sıcaklığa bağlılığını daha doğru hesaplamaktadır. Bundan dolayı, son yıllarda bazı bulk ve nanoparçacık metallere ve alaşımların katı, sıvı ve camsı SC ve Q-SC potansiyelleri kullanarak çalışılmış ve özellikle Q-SC potansiyel parametrelerinin yüksek sıcaklıkta daha iyi çalıştığı gözlemlenmiştir [64, 65, 107, 120-130].

### 3. HESAPLAMA YÖNTEMLERİ

Bu çalışmada, bakır (Cu) nanoparçacıklarını (TVN) kanonik istatistik küme dinamiğinde, termal ve dinamik özellikleri kuantum Sutton-Chen (Q-SC) potansiyel parametreleri kullanılarak MD simülasyon yöntemiyle incelenmiştir. Nanoparçacıklar beş farklı büyüklükte 2 nm, 4 nm, 6 nm, 8 nm ve 10 nm yüzey merkezli kristal yapı korunacak şekilde küresel olarak oluşturulmuştur (Şekil 3.1).



Şekil 3.1 : a) 2 nm, b) 4 nm, c) 6 nm, d) 8 nm ve e) 10 nm Cu nanoparçacıklarının başlangıç görünümü.

Bu çalışmada, 2 nm boyutundaki küresel nanoparçacık toplam 369 atom içerirken, 4 nm boyutundaki küresel nanoparçacık 2899 atom, 6 nm boyutundaki küresel nanoparçacık 9693 atom, 8 nm boyutundaki küresel nanoparçacık 22831 atom, 10 nm boyutundaki küresel nanoparçacık 44403 atom içermektedir.

Bu simülasyon çalışmasında MPiSiM (Massively Parallel Simulation Program) [131] moleküler dinamik simülasyon programı kullanılmıştır. Bu programa girdi olarak parçacıkların ilk konumları ve etkileşim potansiyeli verilmektedir. Verlet algoritmasını kullanarak her bir simülasyon adımı için konumları belirlemektedir. Simülasyonlarda her bir MD adımında 2 fs zaman dilimi kullanılarak, toplam 100000 MD adımı ile gerçekleştirilmiştir. Bu çalışmada atomların simülasyon sonucu yeni konumları her 25 MD adımında yazılmakta olup atomların zamana göre konumları

belirlenmektedir. Her bir küresel nanoparçacık sistemi kanonik istatistik dinamiğinde simülasyon yöntemi kullanılarak 0 K sıcaklıktan 1500 K sıcaklığa kadar 100 K sıcaklık artışı sağlanarak ısıtılmıştır. Erime bölgesi civarında erime noktasını tayin etmek için 10 K sıcaklık artışı ile simülasyonlar gerçekleştirilmiştir. Isıtma işlemi esnasında ısı banyosunun sıcaklığını sabit tutmak gereklidir. Bunun için Nose-Hoover termostatı kullanılmıştır. Her sıcaklıktaki parçacıkların hızları Maxwell-Boltzman sıcaklık dağılımı ile sağlanmaktadır.

Isıtma simülasyonları sonucunda, her bir MD adımında sistemin kinetik enerjisi, potansiyel enerjisi, toplam enerjisi, Hamiltonyeni ve basıncı elde edilmektedir. MD sonucu yeni konumlarının zamana göre analizleri gerçekleştirilerek her bir nanoparçacığın erime sıcaklığı ve erime detayları toplam enerji, radyal dağılım fonksiyonu, Lindeman kriteri, Honeycutt-Andersen indeksi, birinci koordinasyon sayısı ve difüzyon katsayısı gibi fiziksel özelliklerin sıcaklıkla değişimi incelenerek irdelenmiştir. Termal özellik olarak da ısı kapasiteleri bulunmuştur. Erime sıcaklığı tayininde kullanılan bu fiziksel nicelikler, sistemin enerjisinin dengeye ulaştığı son 50000 MD adımı üzerinden ortalama alınarak elde edilmiştir. Radyal dağılım fonksiyonu, Lindeman kriteri, birinci koordinasyon sayısı, difüzyon katsayısı ve ısı kapasitesini veren analiz programları FORTRAN 90'da yazdığımız programlarla gerçekleştirilmiştir. Honeycutt-Andersen indeks analizi ise OVITO (Open Visualization Tool) [132] programı yardımıyla irdelenmiştir.

Simülasyon çalışmaları ve analiz programları Pamukkale Üniversitesi Bilimsel Araştırma Projesi Birimi (BAP) tarafından desteklenmiş BAP-2010FBE076 nolu proje katkılarından elde edilen iş istasyonunda çalışılmıştır. Takip edilen bölümlerde, hesaplamalarımızda kullandığımız bazı fiziksel özellikler açıklanacaktır.

### **3.1 Termodinamiksel Özellikler**

#### **3.1.1 Erime noktası**

Bir katının erime noktası, katı halden sıvı hale geçtiği sıcaklıktır. Erime noktasında sıvı ve katı faz dengesi vardır. Bu nedenle erime bir maddenin spesifik bir özelliğidir ve onu tanımlamak için kullanılmaktadır [133].

Toplam enerji TE ve sıcaklık T, farklı termodinamik durumlara karşılık gelen farklı sıcaklıklarla ölçüldüklerinde kalorik bir eğri elde edilmektedir. Bu eğri, faz geçişini ekrandan izleyebilmek açısından çok faydalı olmaktadır. Elde edilen kalorik eğrinin grafiği simülasyon yoluyla kolayca elde edilmektedir. Sistem kristal yapıdan sıvı hale geçtiğinde kalorik eğride bir sıçrama gözlenir. Kalorik eğrideki bu sıçrama hal değiştirme ısısına karşılık gelmektedir.

Bu çalışmada farklı boyuttaki Cu nanoparçacıkların erime noktasını tespit etmek için toplam enerjideki ani değişimin yanı sıra radyal dağılım fonksiyonu, Lindeman kriteri, birinci koordinasyon sayısı ve difüzyon katsayısı gibi birçok fiziksel özellik incelenmiştir. Simülasyon sonucunda elde edilen erime noktası değerleri, bulk Cu metalinin deneysel sonuçları ile karşılaştırılmıştır.

Ayrıca farklı büyüklükteki Cu nanoparçacıkların erime noktalarını tahmin edebilmek için simülasyon sonucu elde edilen erime noktası değerleri,

$$1 - \frac{T_{cm}}{T_{CM}} = \frac{Z\beta}{x - 2\delta} \quad (3.1)$$

formuyla tanımlanan [134] fonksiyona fit edilmiştir. Bu fonksiyonda  $T_{CM}$  bulk bakır metalinin erime sıcaklığı,  $x$  nanoparçacıkların büyüklüğü,  $\beta = 2V(\gamma_{sv} - \gamma_{lv})/\Delta H_f$ ,  $\Delta H_f$  erime ısısı,  $\gamma_{sv}$  malzemenin katı ve gaz arayüzeylerinin yüzey enerjisi,  $\gamma_{lv}$  malzemenin sıvı ve gaz arayüzeylerinin yüzey enerjisidir.

### 3.1.2 Isı kapasitesi

Sabit hacimde ısı kapasitesi  $C_v$ , bir maddenin sıcaklığını 1°C değiştirmek için gerekli ısı miktarıdır. Bu tanıma göre, cisme Q birimlik bir ısı verildiğinde, cismin sıcaklığı  $\Delta T$  kadar değişmektedir. Bir başka deyişle sistemin aldığı ısının sıcaklığa göre türevidir. Benzer şekilde atomik boyuttaki simülasyonlarda sistemin enerjisi aldığı ısıyla değişeceği için istatistiksel olarak sabit hacimde ısı kapasitesi ( $C_v$ );

$$C_v = \left( \frac{\partial E}{\partial T} \right)_v \quad (3.2)$$

şeklinde tanımlanmaktadır. Bu denklemde, E enerji ve T sıcaklıktır.

Isı kapasitesi ısıtma işlemi gerçekleştirilen atomik boyuttaki simülasyonlarda sistemin erime noktasını belirtmesi açısından önemlidir. Çünkü ısıtma işlemi gerçekleşirken termodinamiksel olarak faz geçişi esnasında ne kadar ısı verilirse

verilsin, sistemin alacağı ısı sabittir ve o yüzden faz geçişi esnasında sistemin alacağı maksimum enerji erime noktasının tayin edilmesi noktasında faydalı olacaktır.

TVN istatistik kümesi dinamiğine göre eş bölüşüm fonksiyonu [80],

$$Z = \frac{1}{c} \int e^{\frac{-H}{k_B T}} (d_p d_r)^N \quad (3.3)$$

formalizmi ile tanımlanmaktadır. Bu denklemde H sistemin toplam hamiltoniyenidir. Hamiltoniyenin küme ortalaması toplam enerjiyi vermektedir. Böylece;

$$\langle H \rangle = E = \frac{\frac{1}{c} \int H e^{\frac{-H}{k_B T}} (d_p d_r)^N}{\frac{1}{c} \int e^{\frac{-H}{k_B T}} (d_p d_r)^N} \quad (3.4)$$

formalizmi elde edilmektedir. Denklem (3.2)'yi uygularsak;

$$\left( \frac{\partial E}{\partial T} \right) = c_v = \frac{1}{k_B T^2} \langle H^2 \rangle - \frac{1}{k_B T^2} \langle H \rangle^2 \quad (3.5)$$

ifadesi elde edilmektedir. Her iki tarafı  $Nk_B$  ifadesine böldüğümüzde;

$$\frac{c_v}{Nk_B} = \frac{1}{Nk_B^2 T^2} \langle H^2 \rangle - \langle H \rangle^2 \quad (3.6)$$

eşitliği elde edilmektedir. TVN kümesi istatistiğine göre, kinetik enerjiden gelen terim sabit  $\left(\frac{3}{2}k_B\right)$  olup ısı kapasitesi potansiyel enerjideki değişmeden [135] kaynaklanmaktadır. Buna göre, sabit hacimde  $C_v$  ifadesi aşağıdaki şekilde ifade edilebilir [136];

$$\frac{C_v}{k_B} = \frac{1}{Nk_B^2 T^2} (\langle PE^2 \rangle - \langle PE \rangle^2) + \frac{3}{2}. \quad (3.7)$$

Burada,  $k_B$  Boltzman sabiti,  $C_v$  ısı kapasitesi,  $N$  toplam atom sayısı,  $T$  sıcaklık ve  $PE$  potansiyel enerji ifadesidir. Burada  $\langle PE^2 \rangle$  ifadesi, her bir MD adımından elde edilen potansiyel enerji ifadesinin karesinin istatistiksel olarak ortalamasıdır.

## 3.2 Yapısal Özellikler

### 3.2.1 Radyal dağılım fonksiyonu

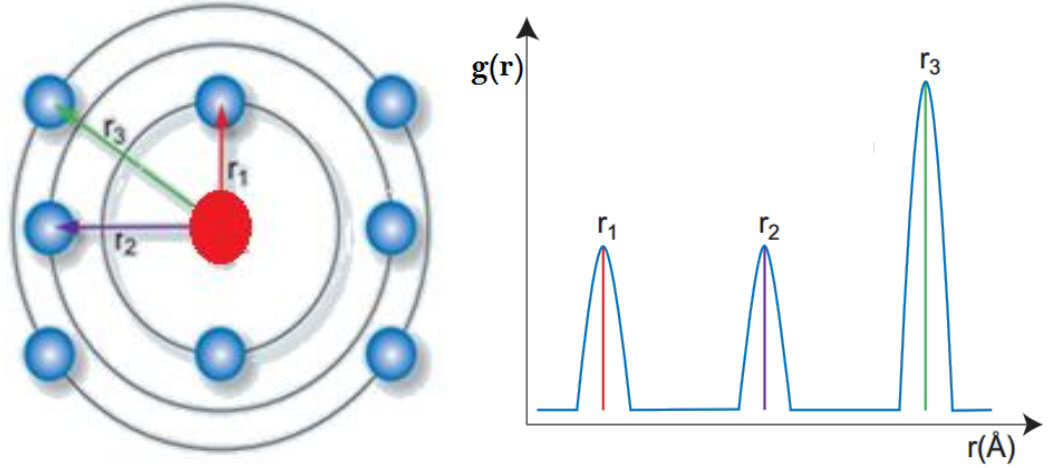
Maddelerin fazları, atomların uzayda sıralanışı ve birbirleri arasındaki korelasyonlar ile belirlenebilir. Radyal dağılım fonksiyonu  $g(r)$  [10, 74, 80, 137], bir korelasyon

fonksiyonudur ve yapısal ve termodinamik özelliklerin statik olarak tanımlanmasını ve karakterize edilmesini sağlayan bir fiziksel niceliktir.

Atomları uzayda periyodik olarak dizilen kristal yapıları katıların herhangi bir atomu radyal doğrultularda periyodik uzaklıklı komşulara sahiptir. Radyal dağılım fonksiyonu  $g(r)$  referans noktası olarak seçilen bir atomdan başka bir atomun  $r$  mesafesinde  $dr$  kabuğunda bulunma olasılığı olarak tanımlanmaktadır. Matematiksel olarak  $g(r)$ ;

$$g(r) = \frac{V}{N} \frac{n(r)}{4\pi r^2 \Delta r} \quad (3.8)$$

formalizmi ile ifade edilmektedir [10, 74]. Burada,  $V$  sistemin hacmi,  $N$  toplam atom sayısı,  $n(r)$  koordinasyon sayısı,  $4\pi r^2 \Delta r$  ise kabuğun hacmidir. Bu yöntem bir atomla sınırlandırılmaz, sistemdeki tüm atomlara uygulanabilir ve böylece tüm atomlar üzerinden ortalama olarak radyal dağılım fonksiyonundan elde edilen sonuçlar daha uygun hale gelmektedir.



Şekil 3.2 : Merkezi atomdan  $r_1$ ,  $r_2$ ,  $r_3$  kadar uzaklıkta olan kabukların görünümü.

(Şekil 3.2)'de  $g(r)$  tüm parçacık çiftleri için hesaplanmıştır. Fakat daha iyi yorumlamak için (Şekil 3.2)'de kırmızı renk ile gösterilen bir referans atom alalım. Referans atomu çevreleyen atomlar mesafeye bağlı olarak gösterilmiştir. Örneğin,  $r_1$  mesafesindeki iki atom  $r_1$  mesafesinde öne çıkan tepeye karşılık gelmektedir. Bu örnekleri çoğaltmak mümkündür.

Radyal dağılım fonksiyonları (Şekil 3.2)'deki gibi bütün sistem hacmi üzerinden elde edilebileceği gibi yerel sistem özelliklerinin incelenmesinde de kullanılabilir. Ayrıca, iki veya daha fazla farklı cins atom bulunduran sistemlerde, aynı cins atomlar arasındaki veya farklı cins atomlar arasındaki atom-atom korelasyonun incelenmesi de mümkün olmaktadır [11, 138]. Bu nedenle, atom-atom korelasyon fonksiyonu özellikle alaşım ve klastır yapılarının incelenmesinde oldukça güvenilir bir analiz tekniğidir.

### 3.2.2 Birinci koordinasyon sayısı

Radyal dağılım fonksiyonu grafiklerini inceleyerek ortaya konulan faz geçişlerini bir başka statik özellik olan ve  $g(r)$  fonksiyonu yardımıyla bulunan birinci koordinasyon sayısı hesabını kullanarak inceleyebiliriz.  $g(r)$ 'in birinci maksimumun altında kalan alan hesaplanarak birinci yakın komşu atomların sayısı  $Z(r)$  elde edilir. En yakın komşu atomların sayısı olarak da adlandırılan  $Z(r)$ , sıvıların özelliklerinin ifade edilmesinde önemli bir parametre olup radyal dağılım fonksiyonu kullanılarak ;

$$Z(r) = 4\pi\rho \int_0^R r^2 g(r) dr \quad (3.9)$$

şeklinde ifade edilmektedir [139]. Burada  $\rho$  birim hacimdeki atom sayısını,  $R$ ,  $g(r)$ 'deki birinci minimumun konumunu göstermektedir. Simülasyon bitiminde hesaplanan radyal dağılım fonksiyonu kullanılarak eşitliğin sağ tarafındaki integral Simpson'un 1/3 kuralı [140-142] ile hesaplanmıştır.

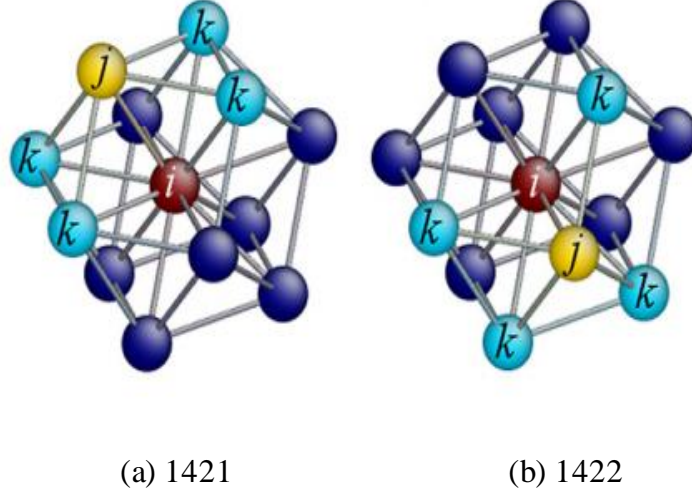
### 3.2.3 Honeycutt-Andersen indeksi

J. D. Honeycutt ve H. C. Andersen tarafından önerilen, en yakın komşu atomları temeline dayanan Honeycutt-Andersen (HA) indeksi yapı analizi için en çok kullanılan metodlar arasındadır [143, 144]. Bu methodda atomik topaktaki yerel yapı (ijkl) şeklinde dört temel indis ile tanımlanmaktadır (şekil 3.3) [143-147].

1. İlk i indisi, A-B şeklinde bir atom çifti varsa ve bu atomlar arasında bağlanma varsa 1 bağlanma yok ise 2 değerini alır.
2. İkinci indis j, bu atom çifti tarafından paylaşılan yakın komşu sayısıdır.
3. Üçüncü indis k, yakın komşular arasında paylaşılan bağ sayısıdır.



4. Dördüncü indis 1, eğer ilk üç indis aynı fakat bağ geometrileri farklı ise bu durumlar arasındaki farklılığı (özel ayırt edici indis) belirtir.



Şekil 3.3 Honeycutt-Andersen metodunun gösterimi. Kırmızı (i) ve sarı (j) atomlar birbiriyle bağ yapan kök çiftini, açık mavi atomlar ise i ve j çiftinin ortak komşularını göstermektedir.

Şekil 3.3 (a) 1421 diagramını göstermektedir. En yakın komşu atomları çifti dört ortak komşuyu paylaştığında fcc kristal yapısında olmaktadır. Şekil 3.3 (b) ise 1422 diagramını göstermektedir.

HA analizine göre; 1421 karakteristik yüzey mekezli kübik (FCC), 1422 hegzagonal sıkı paket (HCP) yapısıyla karakterize edilir. Tüm bu sınıflandırmalarda, iki atomun bağ yapıp yapmadığı ya da kök çift (root-pair) olması ve bu bağ yapan atomların komşu atomlarla olan ilişkisi,  $g(r)$ 'in birinci maksimum ve ikinci maksimum arasında kalan bir bölgeye karşılık gelen kesim (cut-off) uzaklığı ile belirlenir. 1421 bağlı çiftler kristal türlü yapılarda oldukça çok görüldüğünden, bu çiftlerin sistem içerisindeki durumları OVITO programı yardımıyla incelenmiştir.

### 3.2.4 Lindeman kriteri

Birinci derece faz geçişi sırasındaki faz geçiş sıcaklığı, gizli ısıdan dolayı entalpideki ani değişimin sıcaklığı olarak tanımlanmaktadır. Bununla birlikte, böyle bir ani değişimin oranı yüzey etkisinden dolayı bulk sistemle karşılaştırıldığında parçacık boyutuyla azalmaktadır. Bu yüzden ortalama kare yerdeğiştirmenin bağ dalgalanması Lindeman kriteri olarak tanımlanmaktadır ve erime mekanizmasının detaylarını

inceleyen önemli niceliklerden biridir. [30, 148]. Bir sistemdeki erime, o sistemi oluşturan atomlar arasındaki titreşimlerin istikrarsızlığıyla meydana gelir. Diğer bir deyişle, titreşim yapan atomların titreşim genliklerinin değişmesiyle gerçekleşir. Simülasyon adımlarından elde edilen konumlara göre atomların daha önceki adımlara göre genliklerinin değişimi Lindeman erime kriterini verir. Bir atomun Lindeman kriteri  $\delta_i$  aşağıda verilen denklem ile tanımlanır [30, 136, 149];

$$\delta_i = \frac{2}{N(N-1)} \sum_{i \neq j} \frac{\sqrt{\langle r_{ij}^2 \rangle - \langle r_{ij} \rangle^2}}{r_{ij}} . \quad (3.10)$$

Burada,  $N$  toplam atom sayısı,  $i$  sistemdeki her bir atomu,  $j$  ise her bir atomun en yakın komşu atomlarını temsil etmektedir.  $r_{ij}$  parametresi  $i$  atomunun en yakın komşu atomları ile arasındaki mesafe ve  $\langle r_{ij} \rangle$  ifadesi de mesafelerin istatistiksel ortalaması anlamına gelmektedir. Denklem (3.10) ile sistemdeki her bir atomun lindeman kriteri belirlenmiş olmaktadır. Sistemin Lindeman kriteri, bütün atomların Lindeman kriterlerinin ortalaması alınarak elde edilir. Ayrıca, klastır nanoparçacık model sistemlerdeki erimenin, dış bölgesinden mi yoksa iç bölgesindeki atomlardan mı başladığını belirleyebilmek için Lindeman kriterini katman şeklinde incelemek önemli bir rol oynamaktadır. Çalışmamızda küresel nanoparçacıkların erime davranışı katman şeklinde lindeman kriteri aşağıda verilen denklem [150];

$$\delta_{L(i)} = \frac{2}{N_{L(i)}(N_{L(i)}-1)} \sum_{i \neq j} \frac{\sqrt{\langle r_{ij}^2 \rangle - \langle r_{ij} \rangle^2}}{r_{ij}} \quad (3.11)$$

ile hesaplanarak incelendi : Burada,  $L(i)$   $i$ . katman ve  $N_{L(i)}$  ise katmandaki atom sayısını vermektedir. Çalışmalarımızda model sistemlerin lindeman kriteri 3 katman (2 nm boyutundaki nanoparçacık için her bir katman bir örgü sabiti boyutunda, 4 nm boyutundaki nanoparçacık için iki örgü sabiti boyutunda, 6 nm boyutundaki nanoparçacık için üç örgü sabiti boyutunda oluşturulmuştur) olacak şekilde 3 bölgede incelendi.

### 3.3 Dinamiksel Özellikler

#### 3.3.1 Ortalama kare yerdeğiştirme

Ortalama kare yerdeğiştirme (MSD), bir parçacığın 0 ile  $t$  zaman aralığındaki yerdeğiştirmesinin karesine karşılık gelmektedir. MSD atomik hareketliliğin incelenmesinde kullanılan bir bağıntıdır ve özellikle sistemin dinamik yapısı hakkında bilgi vermektedir. MSD ;

$$R(t) = \frac{1}{N_0} \sum_{n_0=1}^{N_0} \sum_{i=1}^N (r_i(t + t_0) - r_i(t_0))^2 \quad (3.12)$$

ifadesi ile tanımlanmaktadır [133, 151-153]. Burada,  $t$  MPISIM MD programından elde edilen zaman,  $t_0$  zaman adımları içerisinde belirlenen zaman merkezleri,  $N_0$  toplam zaman merkezi sayısı ve  $r_i(t + t_0)$  ifadesi  $i$  atomunun  $t + t_0$  zamanındaki  $i$  merkez atoma olan uzaklığıdır. Bu tez çalışmasında her bir simülasyon toplam  $N_0 = 1800$ ,  $t_0 = 20$  ve  $t = 1800$  olacak şekilde seçilerek difüzyon hesabı gerçekleştirilmiştir. Ayrıca, her bir  $t$  simülasyon adımı için geçen süre 25 MD adımına karşılık gelmektedir. Her bir adım 2 fs süreye karşılık geldiği için  $t$  zamanı 0.05 ps olmaktadır.

MSD, atomik difüzyon hakkında bilgi vermesinden dolayı simülasyon sisteminin özelliklerini anlamakta önemli bir dinamiksel özelliktir.

#### 3.3.2 Difüzyon katsayısı

Atomların difüzyonunun araştırılması, atomik boyutta gerçekleştirilen simülasyonlarda sistemin sıcaklıkla olan davranışını karakterize eden önemli bir özelliktir.

Difüzyon  $D_i$ , sistemdeki atom veya moleküllerin kütle taşınımı anlamına gelmektedir. Kütle taşınımı esnasında atomlar aldıkları enerji ile titreşmeye başlarlar. Dolayısıyla, atomların katı durumdayken titreşimlerinin artması ve onları birarada tutan enerjiyi aşarak difüze olması, sistemin faz değişimini ortaya koymaktadır [154-156]. Denklem (3.11)'de Einstein ilişkisine göre atomların ortalama kare yerdeğiştirmesinin uzun zaman limiti difüzyon sabitini ( $D$ ) verecektir [10, 52, 74, 80, 81, 92, 94, 95, 157, 158];

$$D = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{R(t)}{6t} . \quad (3.13)$$

Burada,  $D$  difüzyon ve  $R(t)$  ortalama kare yer deęiřtirmediir. Difüzyonun sıcaklıkla deęiřimi kullanılarak difüzyon aktiflik enerjisi  $E_a$  Arrhenius eřitlięinden hesaplanabilmektedir [141, 159]. Difüzyon için Arrhenius eřitlięi;

$$D(T) = D_0 \exp\left(-\frac{E_a}{k_B T}\right) \quad (3.14)$$

formülüyle ifade edilmektedir. Burada  $D_0$  difüzyon çarpanı,  $E_a$  aktivasyon enerjisi,  $k_B$  Boltzman sabiti ,  $T$  ise sıcaklıktır.

Bu çalıřmada difüzyon katsayısı erime sıcaklıęının üstünde geniř bir sıcaklık aralıęında incelenmiřtir. Sıvı ve katı arasındaki difüzyona bakıldıęında aralarında çok yüksek bir farkın bulunduęu görölmektedir. Katılarda difüzyon boşluklar veya kusurlar olduęunda söz konusu olmasına raęmen, sıvılarda difüzyon doęrudan her bir atomun buldukları konumdan uzaklařarak yerdeęiřtirilmesiyle gerçekteřmektedir. Bundan dolayı difüzyon bir maddenin bütün hallerinde farklı hızda ve özellikte görölmektedir. Dolayısıyla difüzyon, bir maddenin katı ve sıvı fazını ayırt edilmesini, bir bařka deyiřle erime noktasının belirlenmesini saęlayan önemli bir özelliktir.

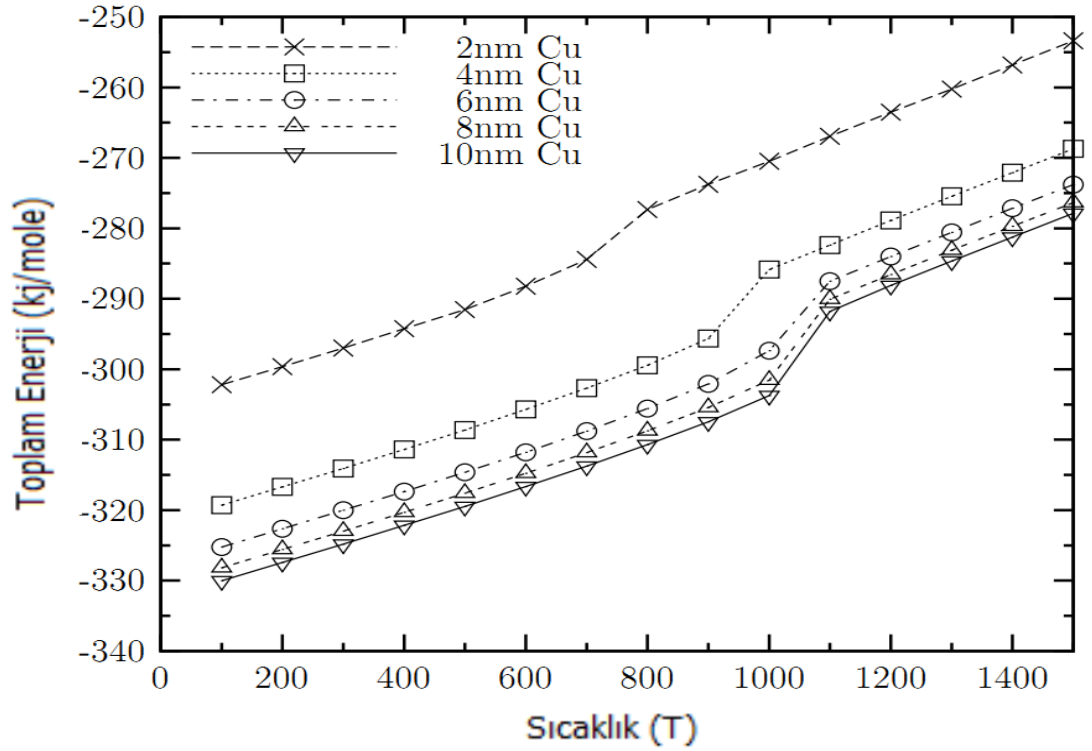
## 4. BULGULAR VE YORUM

Nano boyutlarda tasarlanmış klastır yapılarının fiziksel davranışları bulk sistemlerle kıyaslandığında termodinamik, yapısal ve dinamik özellikleri klastır yapının büyüklüğüne göre farklılıklar göstermektedir. Bu sebeble, bu çalışmada MD simülasyon yöntemi kullanılarak bakır nanoklastır yapıları farklı büyüklükte tasarlanmış termodinamiksel, yapısal ve dinamik özellikleri incelenmiştir.

### 4.1 Termodinamiksel Özellikler

#### 4.1.1 Erime noktası

Nanoklastır yapıların erime noktasını belirlemenin çeşitli yolları bulunmaktadır. MD simülasyon yönteminde kullanılan en yaygın metod, çeşitli sıcaklıklarda model sistemin toplam enerjisini belirleyerek sıcaklığın fonksiyonu olarak çizmektir. Böylece toplam enerjinin süreksiz olduğu sıcaklık, erime sıcaklığını göstermektedir ve böylece incelenen model sistemin erime sıcaklık bölgesi bir aralık olarak gösterilebilmektedir.



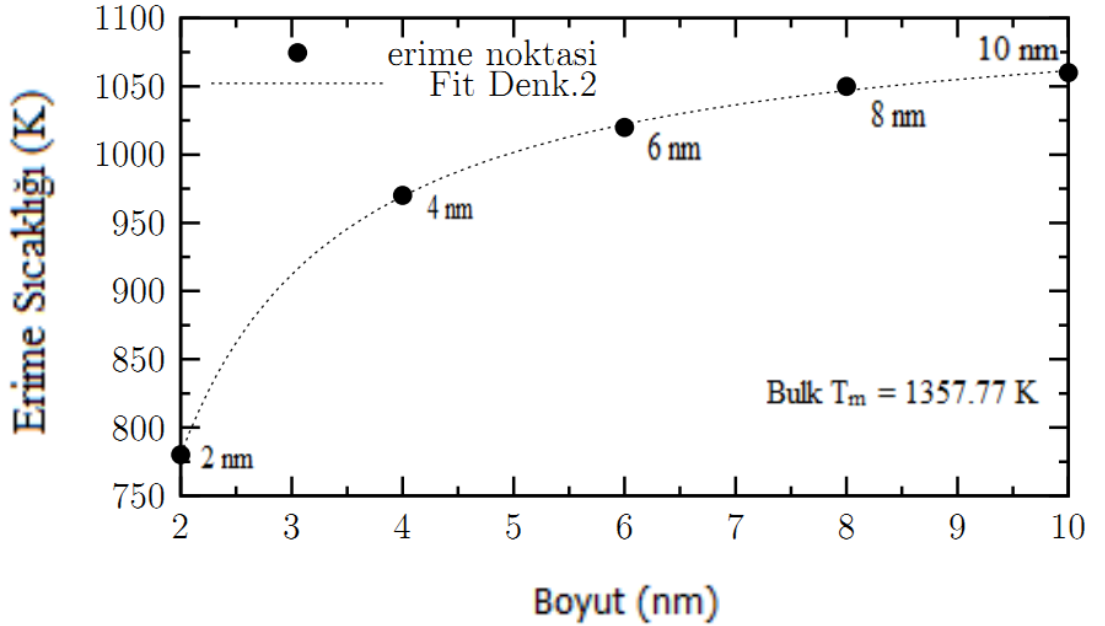
Şekil 4.1: Farklı boyutlardaki Cu nanoparçacıklarının toplam enerji-sıcaklık grafiği.

Toplam enerji-sıcaklık ilişkisinden bulduğumuz farklı büyüklükteki bakır nanoklastırların erime noktası değerlerini desteklemek için radyal dağılım fonksiyonu, Lindeman kriteri, ısı kapasitesi ve difüzyon katsayısının sıcaklığa bağlı davranışları incelenmiştir. Toplam enerji-sıcaklık grafiği her büyüklükteki Cu nanoklastır için Şekil 4.1’ de verilmiştir. Ayrıca bu grafikten elde ettiğimiz erime noktası değerleri Tablo 4.1’ de verilmiştir.

Tablo 4.1:Toplam enerji-sıcaklık grafiğinden elde edilen erime sıcaklığı değerleri.

Boyut (nm)	Erime sıcaklığı (K)
2 nm (369)	780±10
4 nm (2899)	970±10
6 nm (9693)	1020±10
8 nm (22831)	1050±10
10 nm (44403)	1060±10

Ayrıca Tablo 4.1’ deki verileri Denklem 3.1’ e fit ederek elde ettiğimiz fit grafiği Şekil 4.2’ de verilmiştir.

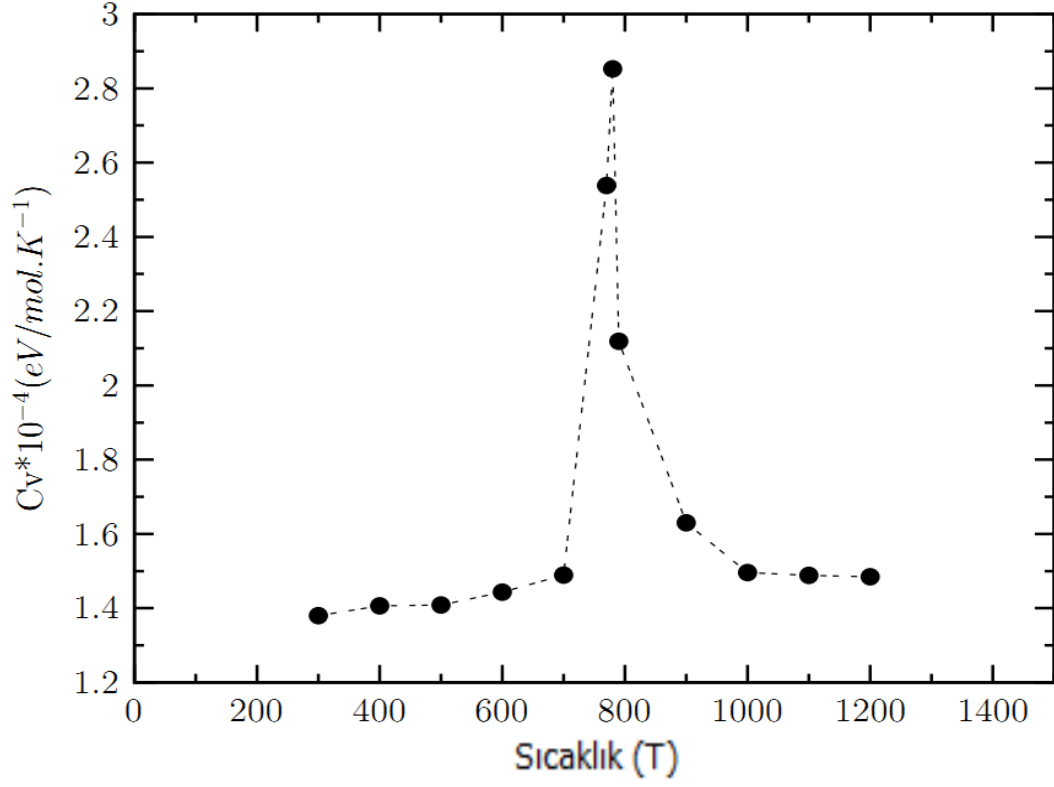


Şekil 4.2:Cu nanoklastırların erime sıcaklıklarının parçacık boyutuna göre değişimi.

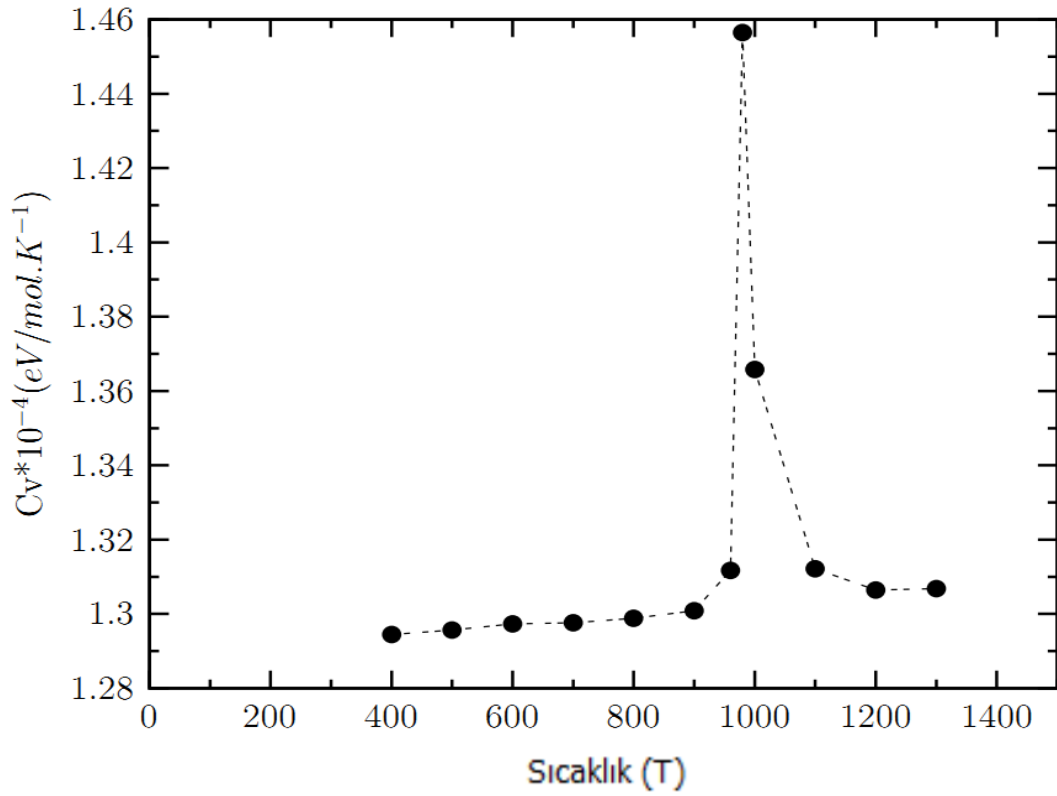
Şekil 4.1’ de her bir nanoklastır büyüklüğü için toplam enerjinin sıcaklığa bağlı değişimi görülmektedir. Bu grafiğe göre artan sıcaklıklarda sistemin toplam enerjisi artmaktadır. Lineer iki eğri arasında gözle görülür bir artış görülmektedir. Bu artış aralığında belli bir erime sıcaklığında sistemin alabileceği maksimum enerjiyi alarak erimeye geçmiş olduğunu gösterir. Keskin artışdan önceki lineer eğri üzerinde nanoklastırlar katı fazda bulunmaktadır. Keskin artışdan sonraki lineer eğri üzerinde ise sıvı fazda bulunmaktadır. Nanoklastırların büyüklüğü arttırıldığında yani, atom sayısı arttırıldığında nanoklastırın enerji olarak daha kararlı olduğu ve daha geç eridiği gözlemlenmektedir. Elde edilen erime sıcaklığı değerleri bulk Cu metalinin erime sıcaklığı (1357.77) değeriyle karşılaştırılmış ve beklendiği üzere bulk sisteme göre daha düşük olduğu görülmüştür. Ayrıca Şekil 4.2’ de erime noktası değerlerinin nanoklastırların büyüklüğü arttıkça, bulk Cu metalinin erime sıcaklığı değerine yaklaştığı görülmektedir.

#### **4.1.2 Isı kapasitesi**

Isı kapasitesi, Denklem (3.7) kullanılarak her bir sıcaklıkta potansiyel enerjinin ortalaması alınarak hesap edilmiştir. Sistemin her bir sıcaklıkta hacmi sabit olduğu için kinetik enerjiden gelen katkı sabit olup,  $\frac{3}{2}k_B$  kadardır. Farklı büyüklükteki Cu nanoklastırların sıcaklığa bağlı sabit hacimde ısı kapasiteleri Şekil 4.3, Şekil 4.4 ve Şekil 4.5’ de verilmiştir. Şekillerden görüldüğü üzere, erime noktasına kadar ısı kapasitesi yaklaşık olarak aynı değeri alırken, erime noktasında yüksek sıçramalar yapmaktadır. Isı kapasitesindeki bu yüksek sıçrama noktaları Cu nanoklastırların erime noktasını göstermektedir.

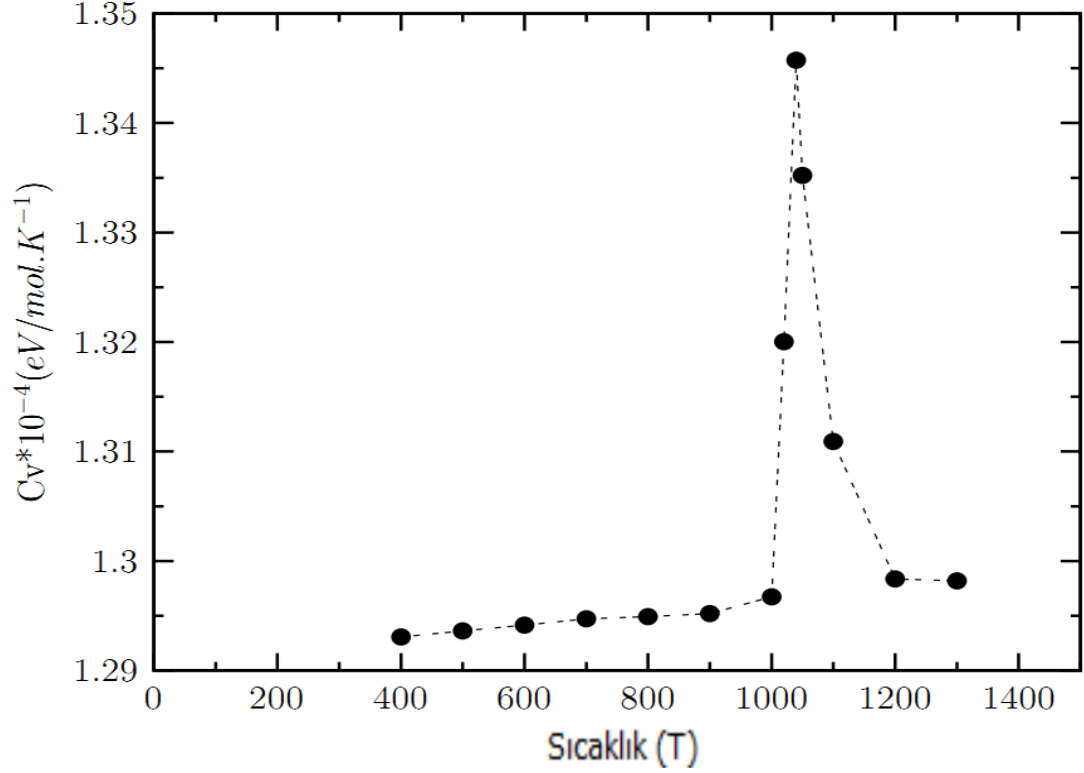


Şekil 4.3: 2 nm Cu nanoklastırın  $C_v$  molar ısı kapasitesi grafiği.



Şekil 4.4: 4 nm Cu nanoklastırın  $C_v$  molar ısı kapasitesi grafiği.





Şekil 4.5: 6 nm Cu nanoklastırın  $C_v$  molar ısı kapasitesi grafiği.

Sabit hacimde ısı kapasitesinden elde edilen erime sıcaklıkları Tablo 4.1’de verilen erime sıcaklıklarıyla uyum içerisindedir. Şekil 4.3, Şekil 4.4 ve Şekil 4.5’ den görüldüğü üzere nanoklastırın büyüklüğü arttıkça ısı kapasitesi düşmektedir. Küçük sistemlerde, yüzey atomlarının hacim atomlarına göre oranı büyük veya bulk sistemlere göre daha yüksek olduğu için, yüzey enerjileri daha baskındır. Bu nedenle yüzeydeki atomların erimesi için daha fazla enerji soğuracağından küçük sistemlerin ısı kapasitesinin büyük olması beklenen bir sonuçtur.

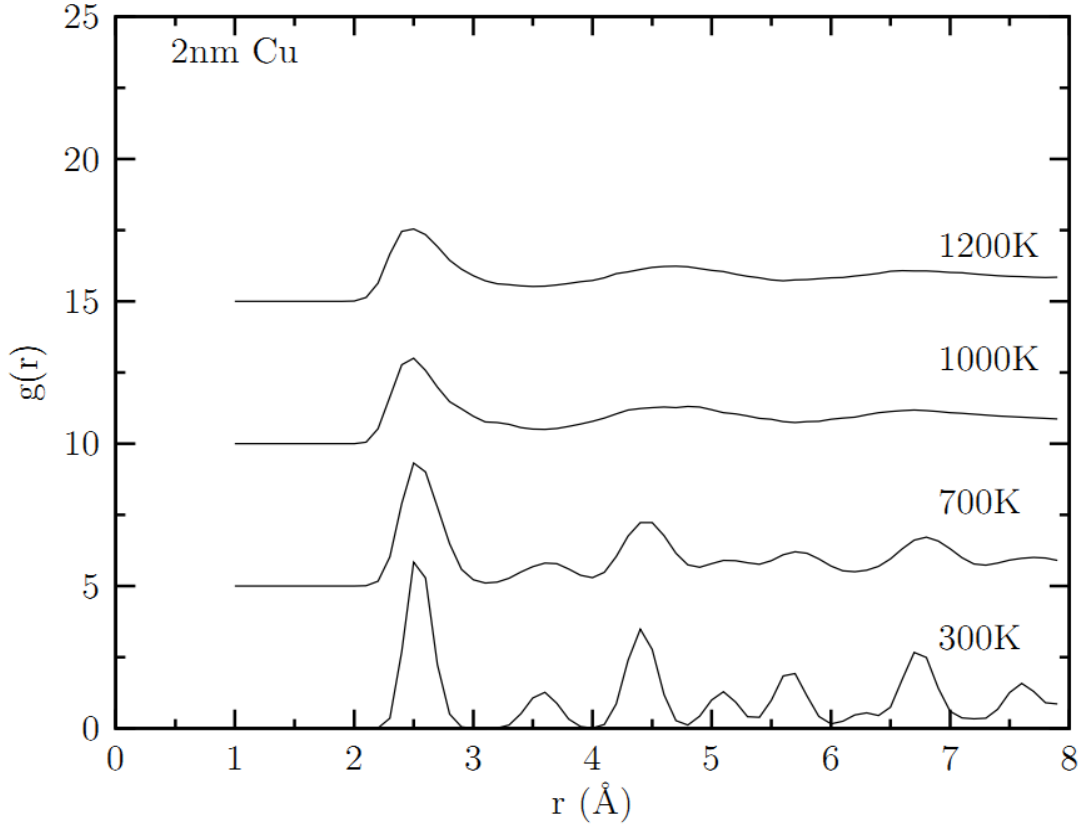
## 4.2 Yapısal Özellikler

### 4.2.1 Radyal dağılım fonksiyonu

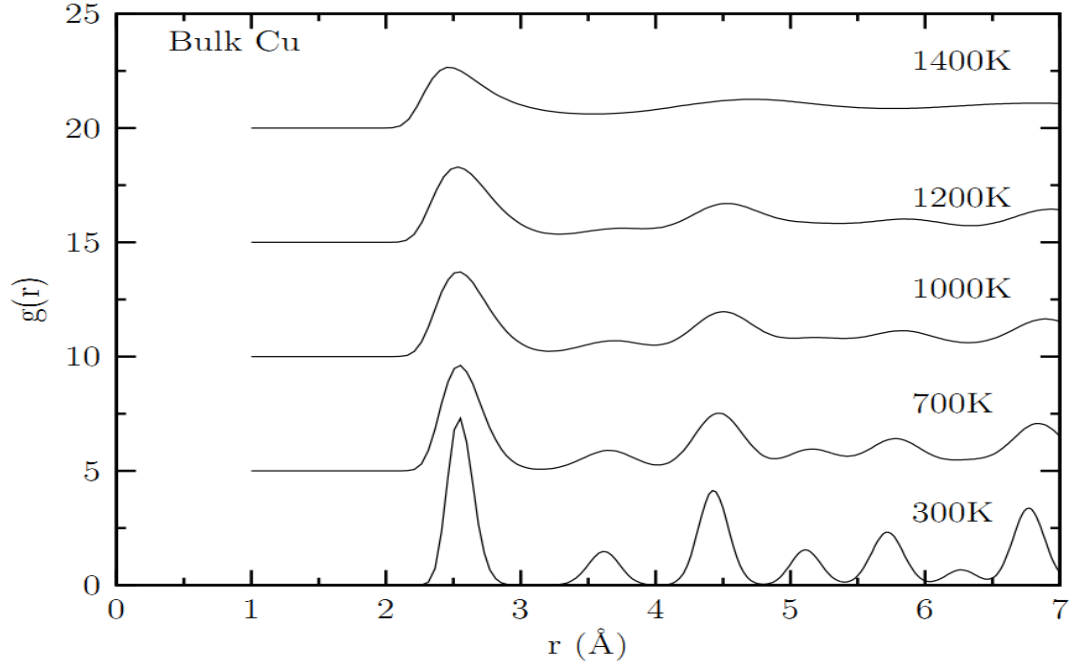
Şekil 4.6 ve Şekil 4.7’ de sırasıyla 2 nm ve bulk Cu nanoklastırının radyal dağılım fonksiyonlarının sıcaklıkla değişimi gösterilmiştir. Düşük sıcaklıkta (300 K) nanoklastırının  $g(r)$  fonksiyonu keskin pikler göstermektedir. Bunun anlamı, bu sıcaklıkta atomlar buldukları konuma sıkı sıkıya bağlıdır. Her büyüklükteki nanoklastırın erime noktası civarında ve yüksek sıcaklıkta (1500 K) ise pikler genişlemekte ve miktarları azalmakta, bazıları ise kaybolmaktadır. Bu durumda

termal hareketlilik söz konusudur ve sıvı dinamiğinin başladığını göstermektedir. Bir başka deyişle, atomlar buldukları nokta etrafında daha geniş genliklerle titreşim hareketi yaparlar. Genliğin artması malzemenin hal değiştirmesinin bir habercisi olarak görülmektedir.

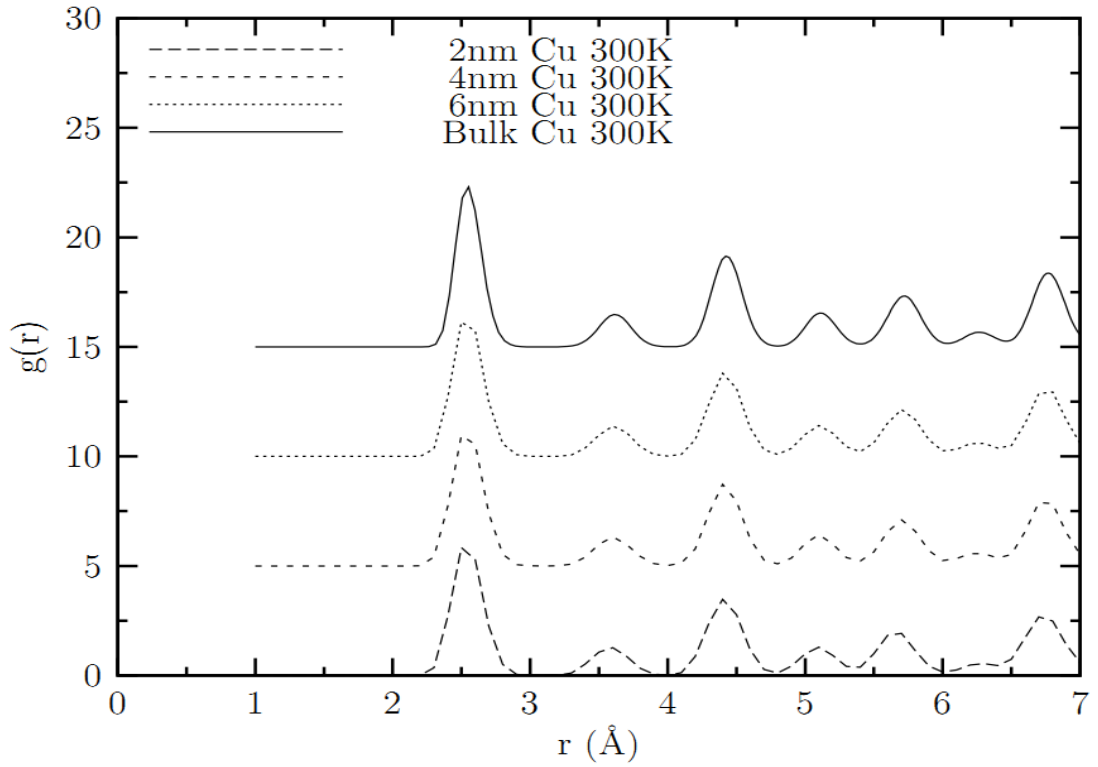
Şekil 4.6 ve Şekil 4.7’ de düşük sıcaklıkta (300 K) gözlenen üçüncü ve dördüncü maksimum pikler sıcaklık artıktça yayvanlaşarak kaybolduğu görülmektedir. Bu değişimi daha açık olarak görebilmek için eğriler sıcaklık artışı yönünde, sabit aralıklarla yukarı kaydırılmıştır. Bakırda sıcaklıkla birlikte gözlenen bu davranış radyal dağılım fonksiyonunun genel karakteristiğidir. Diğer boyutlardaki Cu nanoklastırların davranışı EKLER A1’de verilmiştir.



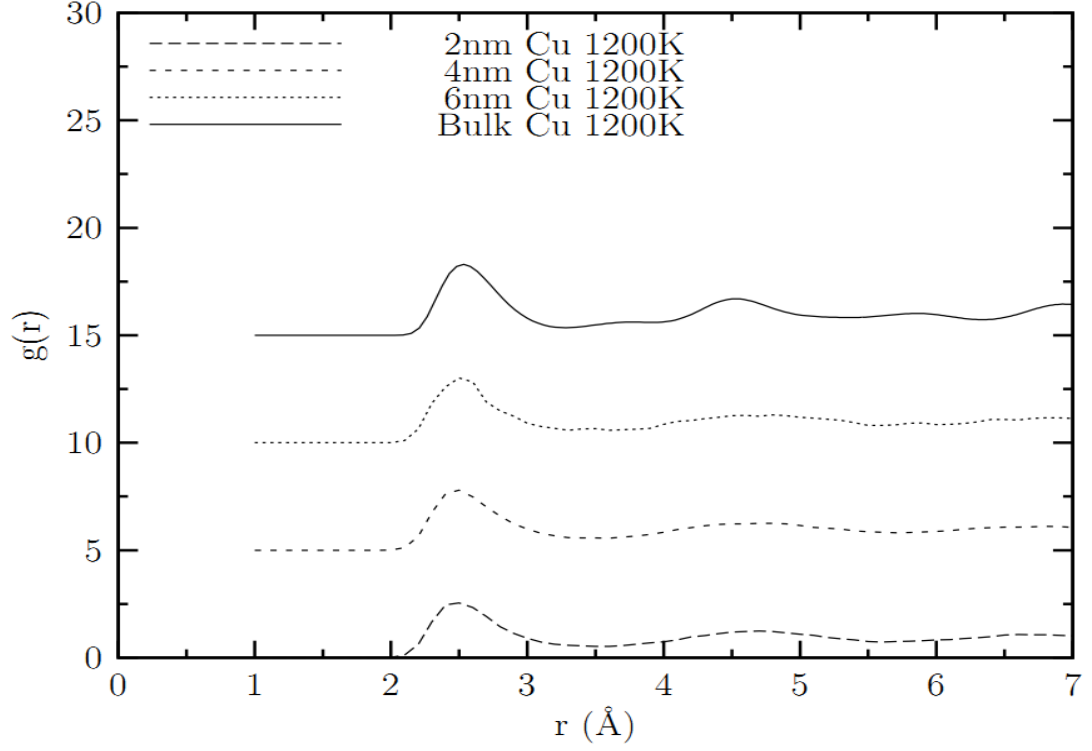
Şekil 4.6:2 nm Cu nanoparçacıkların radyal dağılım fonksiyonunun bazı sıcaklıklarda değişimi grafiği.



Şekil 4.7: Bulk Cu nanoparçacıkların radyal dağılım fonksiyonunun bazı sıcaklıklarda değişimi grafiği.



Şekil 4.8: Farklı boyuttaki Cu nanoparçacıklarının radyal dağılım fonksiyonunun 300 K'de değişim grafiği.



Şekil 4.9: Farklı boyuttaki Cu nanoparçacıklarının radyal dağılım fonksiyonunun 1200 K’de değişim grafiği.

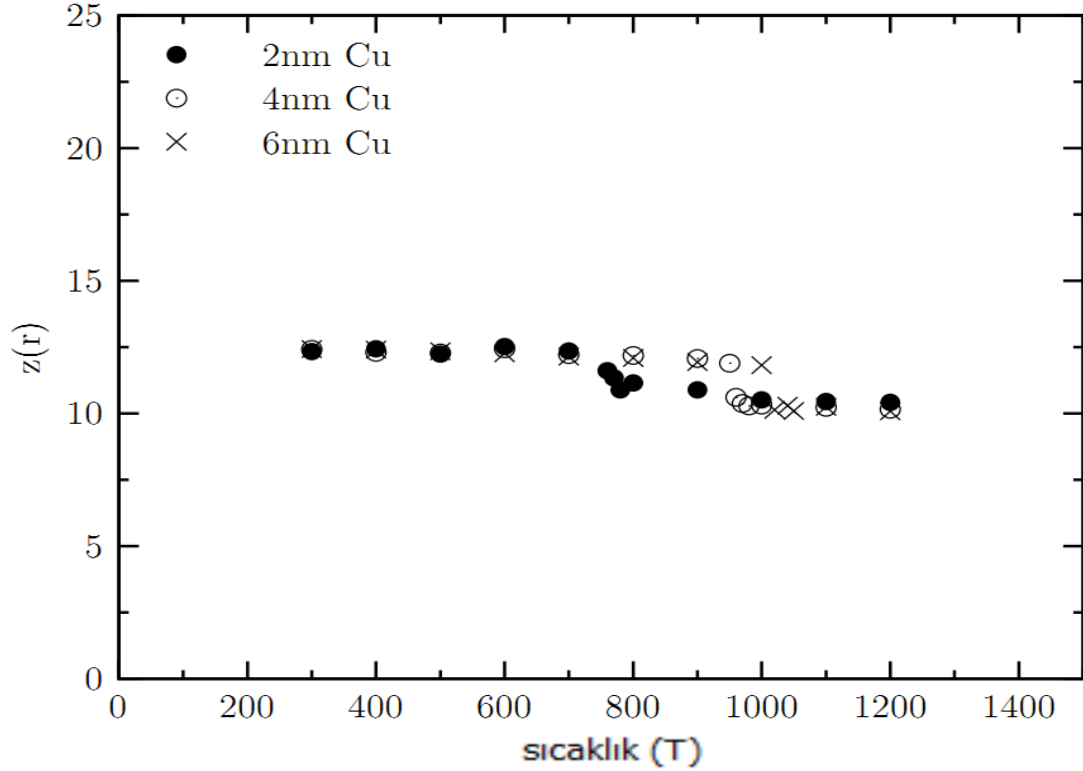
Ayrıca Şekil 4.8’ de düşük sıcaklıkta (300K) görülen keskin pikler bakır metali nanoparçacığın ideale yakın fcc yapıda bulunduğunu ifade etmektedir. Bir başka deyişle atomların merkez atom etrafında belirli kabuklar içinde paketlendiğini göstermektedir. Şekil 4.9’ da görüleceği gibi sıcaklık artıktıkça (1200K) merkez atomdan daha uzakta olan atomlar arasındaki ilgi kaybolacağı ve komşuluk sayıları azalacağı için radyal dağılım fonksiyonu sıcaklık artıktıkça bire yakınsar. Şekil 4.9’ da dikkat edeceğimiz başka bir nokta ise, sıcaklığı 1200 K olarak aldığımızda sadece bulk Cu nanoparçacığın erimediğini görürüz. Bunun sebebi 1200 K sıcaklığının, bulk nanoparçacığın sıcaklığından küçük, diğer boyuttaki Cu nanoparçacıklarının sıcaklığından büyük olmasıdır. Ek olarak küçük r mesafelerinde radyal dağılım fonksiyonu sifıra eşittir. Bu durum bir atomun etkin genişliğini göstermektedir. Yani, diğer atomlar bu mesafeden daha yakına yaklaşamazlar. Diğer sıcaklıklarda Cu nanoklastırların davranışları EKLER A1’ de verilmiştir.

Sonuç olarak radyal dağılım fonksiyonundan elde edilen erime sıcaklığı değerleri ile toplam enerji-sıcaklık grafiğinden elde edilen sıcaklık değerlerinin uyumlu olduğu görülmektedir.

#### 4.2.2 Birinci koordinasyon sayısı

Denklem (3.9) kullanılarak radyal dağılım fonksiyonunun birinci maksimumunun altındaki alanın hesaplanmasıyla bulunan koordinasyon sayısının sıcaklıkla değişimi Şekil 4.10’ da gösterilmiştir. MD simülasyonu ile birinci koordinasyon sayısı hesaplanan geçiş elementlerinden Cu, fcc yapıdadır. FCC yapıdaki katı örgülerde birinci koordinasyon sayısı 12 olmaktadır. Erime sıcaklığı öncesinde Cu için yaptığımız hesaplamalarda fcc örgü ile yaklaşık olarak aynı koordinasyon sayısına sahip olduğu görülmektedir. Bu durumda Cu için geçerli olan koordinasyon sayısının korunduğunu söyleyebiliriz.

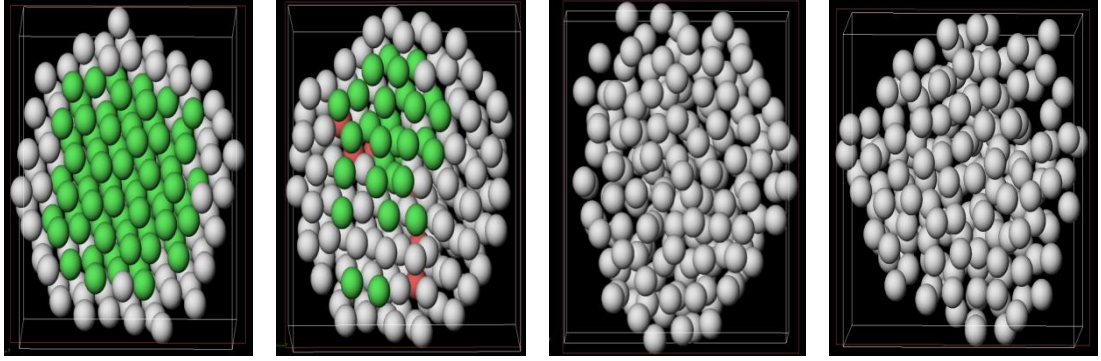
Şekil 4.10 incelendiğinde farklı büyüklükteki Cu nanoklastırların koordinasyon sayılarının erime sıcaklığı öncesinde sabit kaldığı, erime sıcaklığında ise azalmaya başladığı görülmektedir. Bunun sebebi malzeme katı halde örgü yapısını korurken, sıcaklık arttıkça örgü yapısından uzaklaşmaya başlamasıdır. Birinci koordinasyon sayısından elde edilen erime sıcaklığı değerleri hem radyal dağılım fonksiyonu hemde toplam enerji-sıcaklık grafiğinden elde edilen değerlerle uyumlu olduğu görülmektedir.



Şekil 4.10: Farklı boyuttaki Cu nanoparçacıkların birinci koordinasyon sayılarının sıcaklıkla değişim grafiği.

### 4.2.3 Honeycutt-Andersen indeksi

Malzemelerin yapıları hakkında bize fikir veren özelliklerden bir tanesinde HA indeksidir. Bu çalışmada 1421 ve 1422 çiftlerinin sıcaklıkla değişimi OVITO programı yardımıyla incelenmiştir.



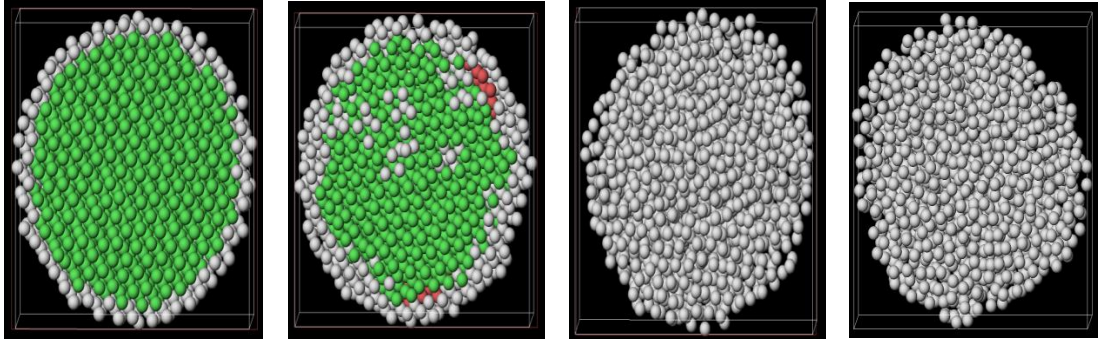
300 K

700 K

1000 K

1200 K

a) 2 nm Cu nanoparçacık



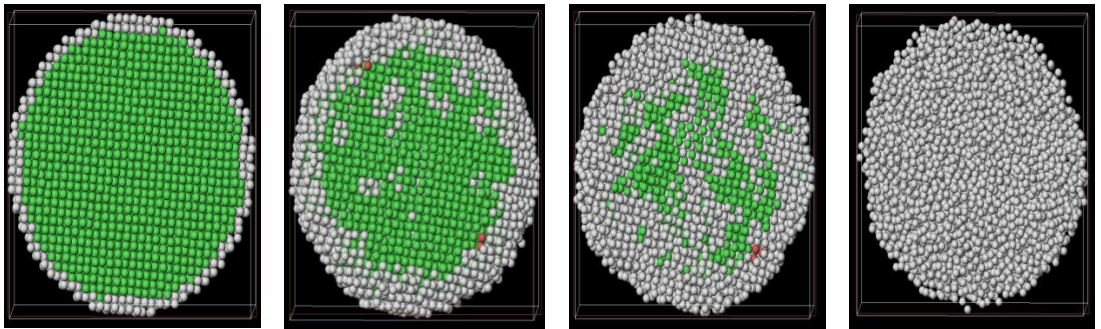
300 K

700 K

1000 K

1200 K

b) 4 nm Cu nanoparçacık



300 K

700 K

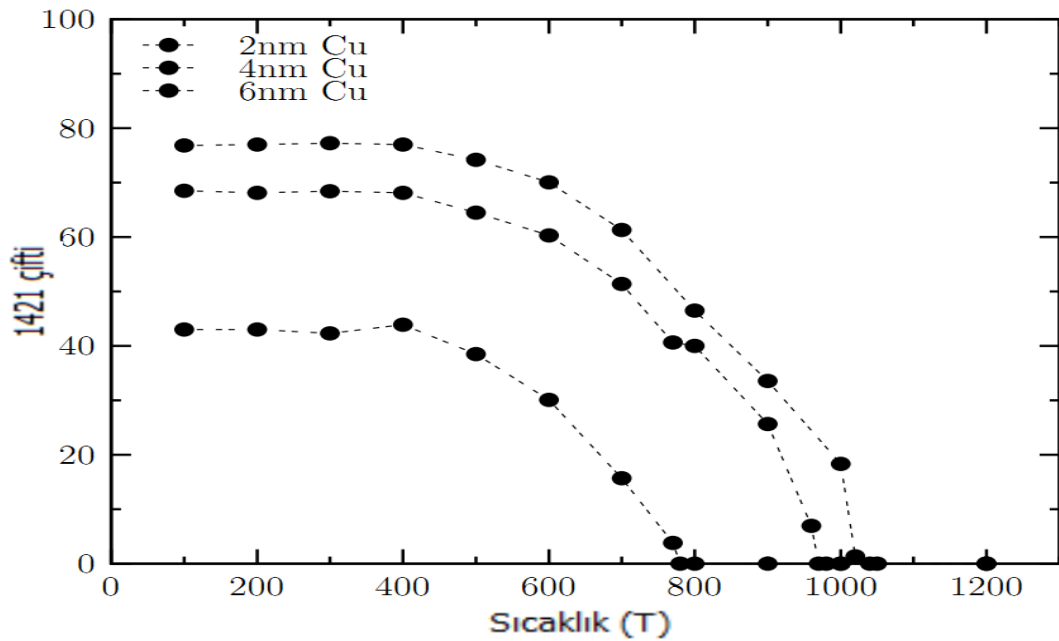
1000 K

1200 K

c) 6 nm Cu nanoparçacık

Şekil 4.11: a) 2 nm b) 4 nm c) 6 nm boyutundaki Cu nanoparçacıkların 1421 ve 1422 çiftlerinin sıcaklıkla değişiminin OVITO programı yardımıyla kesitten görünüşü. Yeşil renkli atomlar fcc atomları, kırmızı renkli atomlar hcp atomları ve beyaz atomlar ise diğer atomları göstermektedir.

Şekil 4.11' de sırasıyla 2 nm, 4 nm ve 6 nm büyüklüğündeki Cu nanoklastırların içinde var olan 1421 ve 1422 çiftlerinin sıcaklıkla değişimi gösterilmiştir. Cu nanoklastırlar fcc birim hücrelerine sahip yapılardır ve başlangıç MD hücresi fcc örgüde kurulmuştur. 300 K sıcaklıkta model sistemlerde fcc topaklarının çok büyük bir yüzde ile bulunması atomların büyük oranda fcc örgü noktalarına yerleştiğinin göstergesidir. Sıcaklığın artması ile birlikte fcc topaklarının sayısında azalma gözlenirken, hcp topakların sayısında artış gözlemlenmektedir. Model sistemlerin erime noktası sıcaklıklarında atomlar buldukları örgü noktası çevresinde daha geniş bir alanda titreşmeye başlamıştır ve artık tamamıyla rastgele yönlerde hareket etmeye başlamışlardır. Bu durum, kristal yapıdaki topakların sayısının ani bir şekilde düşmesi ve erime sıcaklığı sonrasında sayılarının sıfır değerine doğru yaklaşması ile birlikte açıkça görülebilir. 1200 K' de kristal yapıdaki topakların tamamen kaybolması atomları birarada tutan bağların kopması sonucunda merkezi atomun etrafındaki komşu atomların sayısının azalıp geliş güzel dağılım sergilediği ve yapısal olarak düzensiz atomik topakların oluşumu anlamına gelmektedir.



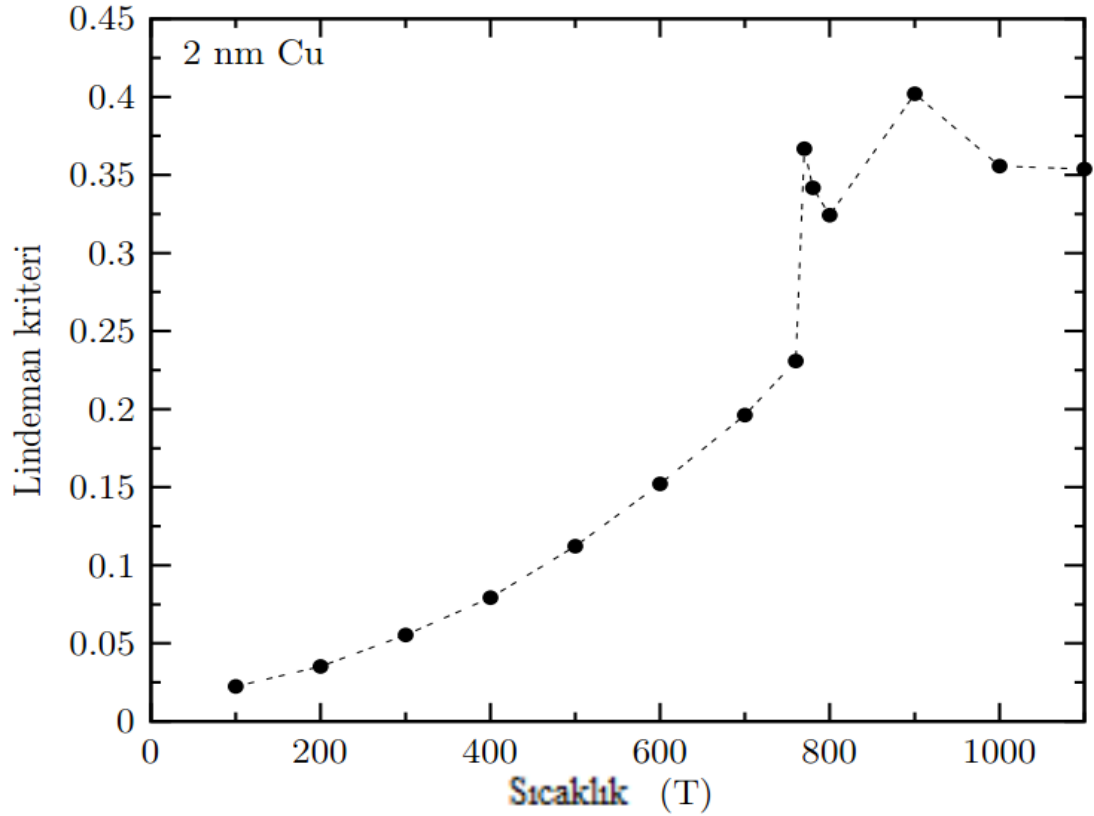
Şekil 4.12: Farklı boyutlardaki Cu nanoparçacıkların 1421 bağlı çiftlerinin sıcaklıkla yüzdesel olarak değişimi.

Ayrıca, Şekil 4.12’de görüldüğü gibi HA metodunda 1421 bağlı çiftlerin artık oluşmadığı görülmekte ve sıcaklık erime sıcaklığıdır. Bu erime sıcaklığı değerleri toplam enerji-sıcaklık grafiğinden elde edilen erime sıcaklığı değerleriyle uyumludur.

#### 4.2.4 Lindeman kriteri

Lindeman kriteri, nanoparçacıkların erimeye geçiş detaylarını karakterize etmek için yaygın olarak kullanılan bir analiz yöntemidir. Lindeman kriteri Denklem (3.10)’da verilmiş olup, farklı boyutlardaki bakır nanoparçacıklarının erime mekanizması analizinde kullanılmıştır. Bu kriterle nanoparçacıkların erimesinin merkezdeki atoma göre hangi katmanlarda başladığı ve katmanlardaki atomların davranışları irdelenebilmektedir.

Lindeman kriterinin %15’ine karşılık gelen değerde sistemin erimeye başladığı bilinmektedir [148]. 2 nm boyutundaki bakır nanoparçacık için sıcaklıkla Lindeman kriterinin değişimi Şekil 4.13’de gösterilmiştir.



Şekil 4.13: 2 nm Cu nanoparçacığının Lindeman kriterinin sıcaklıkla değişim grafiği.

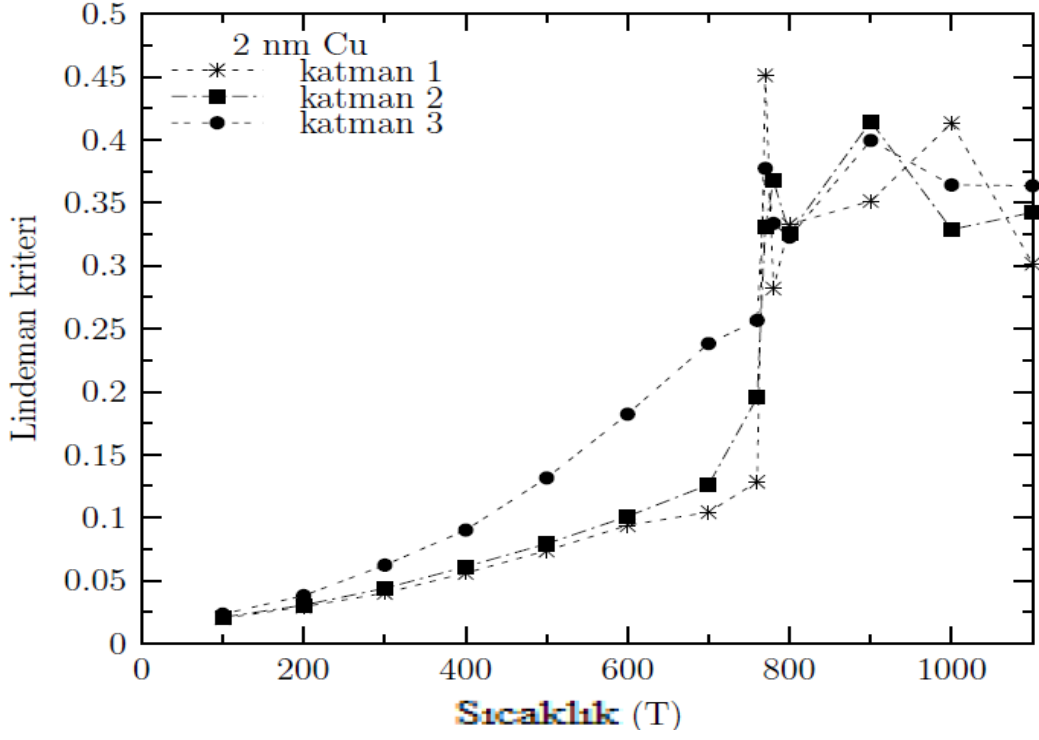


Şekil 4.13 2 nm bakır nanoparçacığının sıcaklıkla değişimini göstermektedir. Grafikten görüldüğü üzere grafikte görülen ani değişimin olduğu sıcaklık (780 K) nanoklastırın erime sıcaklığı olarak kabul edilmektedir. Grafiği, birinci bölge  $T < 500$  K, ikinci bölge  $500 \text{ K} < T < 780 \text{ K}$  ve üçüncü bölge  $T > 780 \text{ K}$  olacak şekilde üç parçaya ayırırsak, birinci bölgede sıcaklık 500 K 'den küçüktür ve Lindeman kriteri sıcaklıkla yavaş ve lineer bir şekilde artmaktadır. İkinci bölgede ise Lindeman kriterindeki artış, hızlı ve lineer değildir. Üçüncü bölge yüksek sıcaklık bölgesidir ve bu bölgede nanoklastır tamamen erimekte ve Lindeman kriterinin değeri 0.35 değerine ulaşmaktadır.

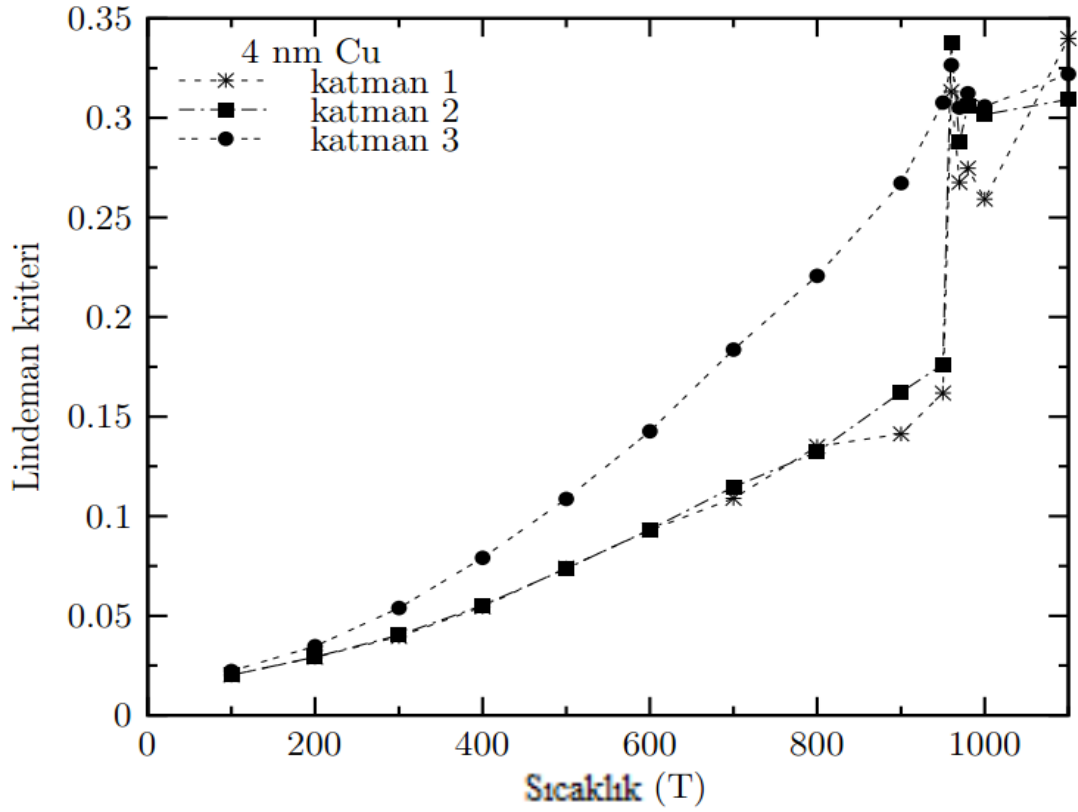
İlk bölge boyunca Lindeman kriterindeki lineer artış sıcaklıkla atomik kinetik enerjideki lineer artışa bağlıdır. Bu bölge boyunca Lindeman kriterinin değeri, klastırın yüzeyleri ve merkez kısmında dahil olmak üzere çoğu klastır atomu için çok küçüktür. Çünkü bu bölgede klastır katı haldedir ve dolayısıyla büyük genlikli harekete sahip değildir ve sadece sahip oldukları örgü pozisyonları etrafında genişirler.

Yüzey erimesi ikinci bölgenin başlangıç kısımlarında meydana gelmektedir. Bu sıcaklık aralığında klastırın merkez kısmındaki atomlar yaklaşık olarak başlangıç fcc örgü yapısına sahip olurlar ve böylece yüzey atomları sahip oldukları başlangıç konumlarından uzağa difüze olurlar. Sıvı ve katı faz arasındaki bu bölgede dinamik birlikteliğin başlamasıyla Lindeman kriterinin değeri sıvı fazdan gelen katkılardan dolayı artmaktadır. Bu nedenle, üçüncü bölgede yüzey atomları bağlanma enerjisinin üstesinden gelmek için yeterli kinetik enerjiye sahip olurlar ve yüzey boyunca difüze olabilirler. Bu yüzden, klastırın Lindeman kriterinde büyük bir artış olmaktadır.

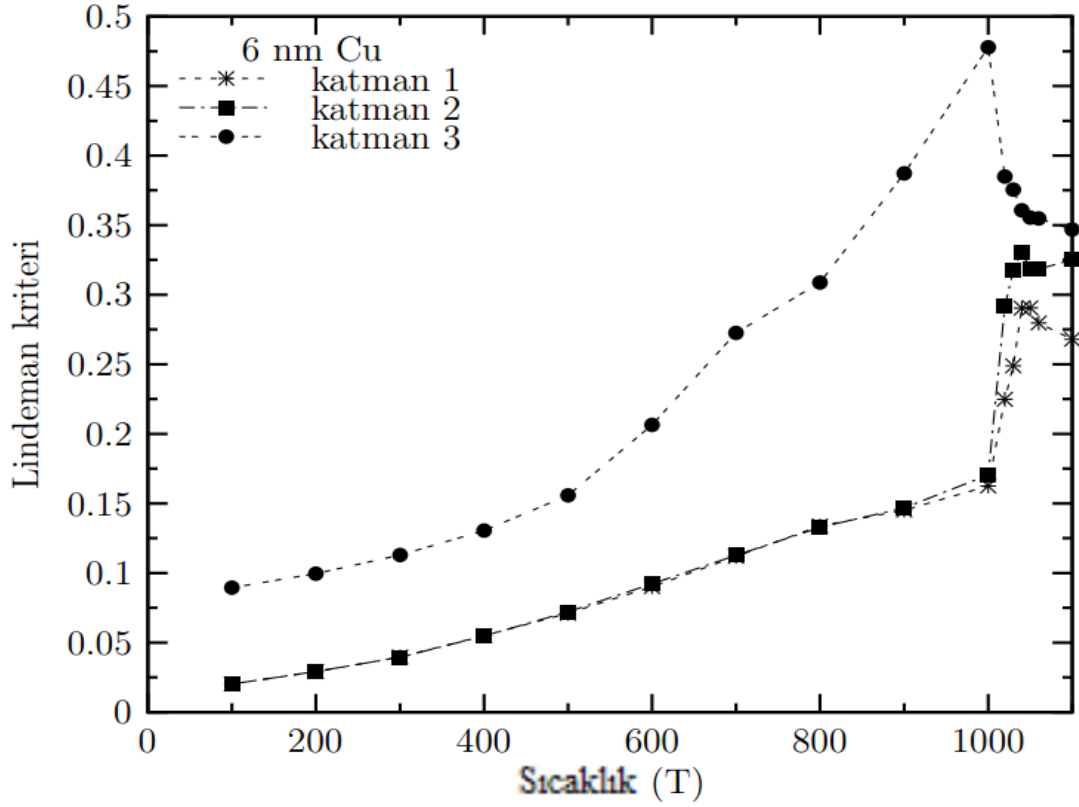
Ayrıca Şekil 4.14, Şekil 4.15 ve 4.16 'da sırasıyla 2 nm, 4 nm ve 6 nm bakır nanoparçacıkların Lindeman kriterinin sıcaklıkla değişimi 3 katmanda incelenmiştir. Erime noktasının altındaki sıcaklıklarda klastır yüzeyindeki atomlar (katman 3) merkezdeki atomlara (katman 1) göre daha büyük Lindeman kriterine sahiptir. Çünkü merkezdeki atomlar yaklaşık olarak başlangıç konumlarını korurken, yüzeydeki atomlar başlangıç konumlarından uzağa büyük genlikli difüzyona uğrarlar. Sıcaklık arttıkça merkezdeki atomlarda başlangıç konumlarından uzağa difüze olduğu için yüzey atomlarının sayısı artar. Genel olarak bakıldığında ise, nanoparçacıklar beklendiği üzere dış katmandan içe doğru erimektedir.



Şekil 4.14: 2 nm boyutundaki bakır nanoparçacığının her katmandaki Lindeman kriterinin sıcaklığa göre değişimi grafiği.



Şekil 4.15: 4 nm boyutundaki bakır nanoparçacığının her katmandaki Lindeman kriterinin sıcaklığa göre değişimi grafiği.

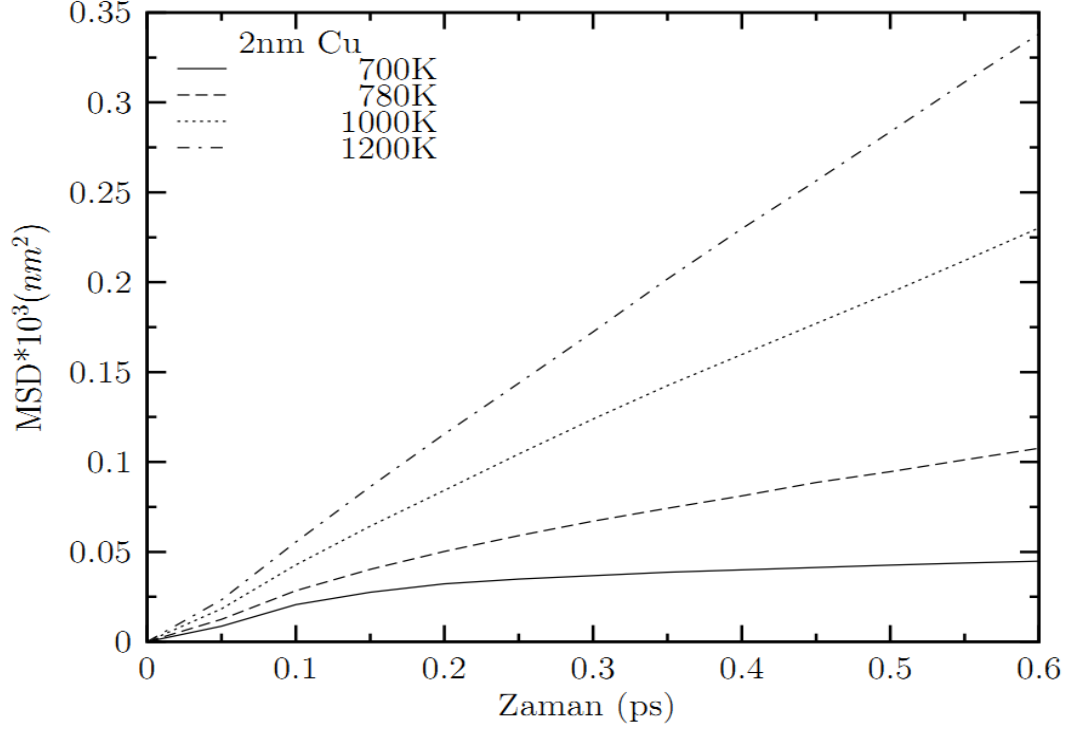


Şekil 4.16: 6 nm boyutundaki bakır nanoparçacığının her katmandaki Lindeman kriterinin sıcaklığa göre değişimi grafiği.

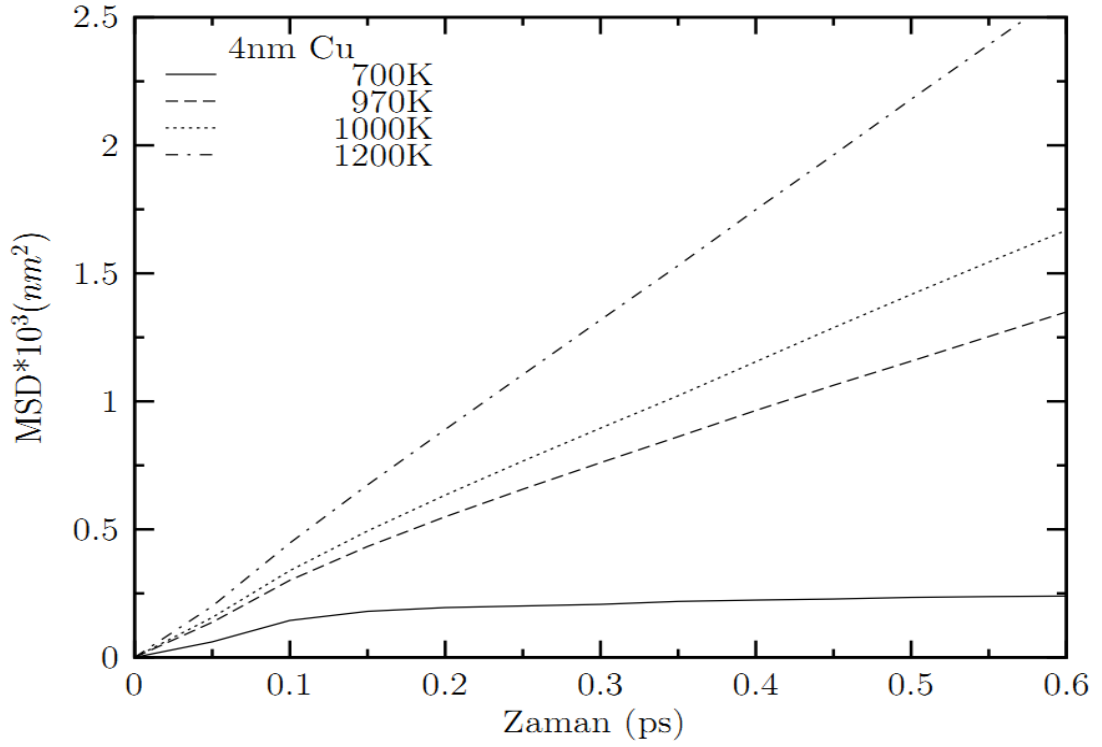
### 4.3 Dinamik Özellikler

#### 4.3.1 Ortalama kare yerdeğiştirme

Ortalama kare yerdeğiştirmenin zamana bağlı grafikleri bize malzeme içerisindeki atomların birbirinden uzaklaşma ölçülerini vermektedir. Şekil 4.13 ve Şekil 4.14’ de sırasıyla 2 nm Cu nanoklastır ve 4 nm Cu nanoklastır için dört farklı sıcaklıkta ortalama kare yerdeğiştirmenin zamana göre değişimini göstermektedir.



Şekil 4.17: 2 nm Cu nanoparçacığın bazı sıcaklıklarda ortalama kare yerdeğiştirmenin (MSD) zamana göre değişimi.

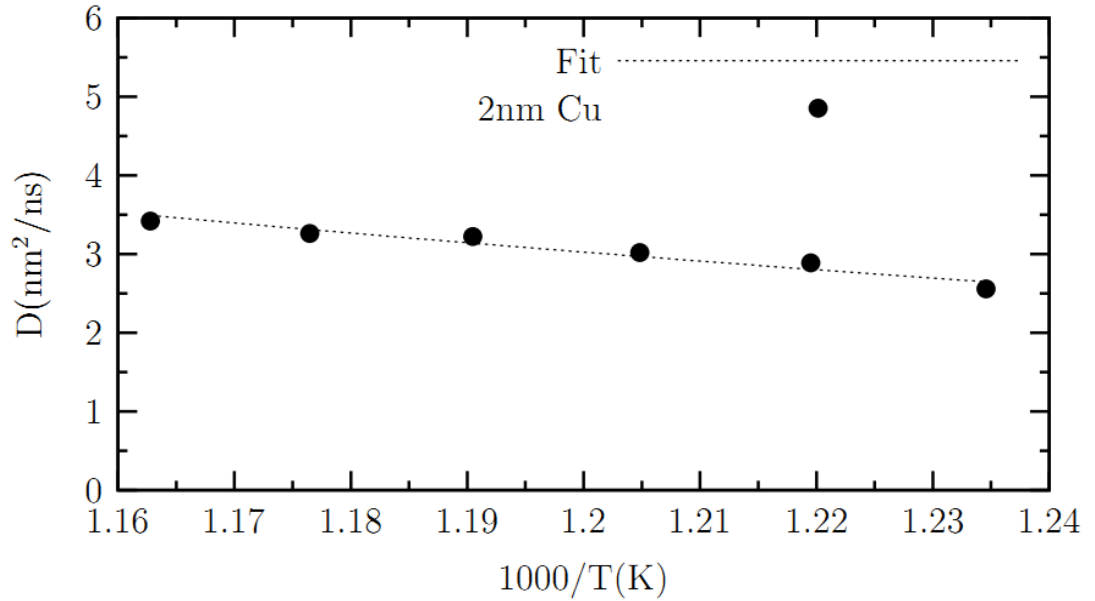


Şekil 4.18: 4 nm Cu nanoparçacığın bazı sıcaklıklarda ortalama kare yerdeğiştirmenin (MSD) zamana göre değişimi.

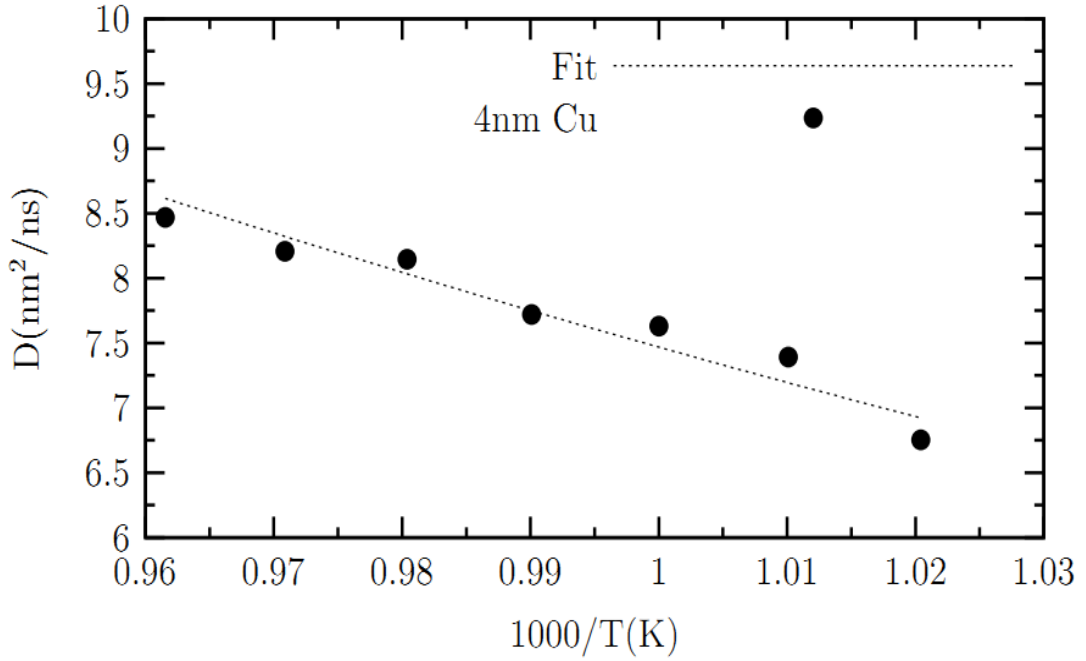
Şekillerde görüldüğü gibi katı fazda (700 K) daha çok malzeme içi ileri geri titreşimler söz konusu olmasından dolayı yaklaşık olarak değişmeyen bir davranış göstermektedir. Diğer taraftan, zaman ilerledikçe malzemelerin erime sıcaklığında (780 K ve 970 K) malzemeler sıvılaşmaya başladığı için atomlar birbirlerinden daha fazla uzaklaşmaya başlamaktadırlar. Erime sıcaklığı üzerinde (1000 K ve 1200 K) malzemeler sıvılaştığı için atomlar düzgün hızlarla birbirlerinden uzaklaşmaya başlamaktadırlar ve bu anda ortalama kare yerdeğiştirmenin zamana bağlı grafiği lineer bir davranış göstermektedir. Bu lineer davranış aynı zamanda difüzyonun da sürekli arttığını göstermektedir. Bir başka deyişle, düşük sıcaklıklarda her bir atom, yakın komşulukları tarafından oluşturulan kafesin etkisinde olup atom bu bölgeden kurtulup difüzyona maruz kalmaz. Yüksek sıcaklıklarda ise atomlar arası mesafe arttığı için, kafes etkisi zayıflamakta ve kolaylıkla bir atom bir bölgeden başka bir bölgeye taşınabilmekte ve difüzyon yapabilmektedir.

#### 4.3.2 Difüzyon Katsayısı

Difüzyon katsayısını hesaplamak için ortalama kare yerdeğiştirme kullanılmaktadır (Denklem 3.11). Difüzyon katsayısının  $10^{-3} \text{nm}^2 \text{ps}^{-1}$  mertebesindeki değeri katı fazı sıvı fazdan ayıran bir özellik olduğu için difüzyon katsayısını hesaplayarak toplam enerji-sıcaklık grafiğinden (Şekil 4.1) bulduğumuz erime noktası değerlerini doğrulayabiliriz.



Şekil 4.19: 2 nm Cu nanoparçacığının  $D$  ( $\text{nm}^2/\text{ns}$ ) difüzyonunun  $T$  (K) sıcaklığına göre değişimi.



Şekil 4.20: 4 nm Cu nanoparçacığının  $D$  ( $\text{nm}^2/\text{ns}$ ) difüzyonunun  $T$  (K) sıcaklığına göre değişimi.

(Denklem 3.12) ile verdiğimiz Arrhenius denklemini yeniden yazalım.

$$D(T) = D_0 \exp\left(-\frac{E_a}{k_B T}\right)$$

Burada  $D_0$  difüzyon çarpanı ve  $E_a$  ise difüzyon aktivasyon enerjisiydi. 2 nm Cu ve 4 nm Cu nanoklastırlarının, Denklem (3.11)' den bulunan değerlerinin sıcaklığa bağımlılığının Arrhenius bağıntısına uyduğu Şekil 4.15 ve 4.16' da gösterilmiştir. Bu şekillerde içi dolu yuvarlak veriler 2 nm Cu ve 4 nm Cu' nun Einstein denkleminde elde edilen difüzyon değerlerini verirken, kesikli çizgi bu verilerin Arrhenius denklemine uyarlanmış eğrilerdir. Farklı boyutlardaki Cu nanoparçacıklarının Arrhenius parametleri üç boyut için Tablo 4.2'de verilmektedir. Beklendiği üzere, 800 K'de 2 nm Cu nanoklastırının difüzyon değerlerinin 4 nm ve 6 nm Cu nanoklastırlara göre daha büyük olduğu açıkça bellidir. Çünkü 2 nm Cu nanoklastırını 4 nm ve 6 nm Cu nanoklastırlara göre daha erken eridiği için daha önce sıvı faza geçmekte ve difüzyona maruz kalmaktadır.

Tablo 4.2: 2 nm, 4 nm ve 6 nm boyutlarında Cu nanoparçacıkların  $D_0$  [ $\text{nm}^2/\text{ns}$ ] difüzyon katsayısı,  $E_a$  [eV] aktivasyon enerjisi ve farklı sıcaklıklarda  $D$  [ $\text{nm}^2/\text{ns}$ ] difüzyon sabiti değerleri.

Boyut (nm)	$D_0$ ( $\text{nm}^2/\text{ns}$ )	$E_a$ (eV)	D (300 K) ( $\text{nm}^2/\text{ns}$ )	D (800 K) ( $\text{nm}^2/\text{ns}$ )	D (1000 K) ( $\text{nm}^2/\text{ns}$ )	D (1200 K) ( $\text{nm}^2/\text{ns}$ )
2	306.4	0.0310824	$2.964 \times 10^{-5}$	2.937	4.876	6.617
4	306.4	0.0310115	$9.313 \times 10^{-2}$	0.537	7.631	13.511
6	306.4	0.0310143	$5.854 \times 10^{-2}$	0.304	1.806	14.451

## 5. SONUÇLAR

Bu tez çalışmasında, teorik olarak tasarlanan küresel bakır nanoparçacıklarının farklı büyüklük ve sıcaklıklarda moleküler dinamik simülasyon yöntemi ile termodinamik, yapısal ve dinamik özellikleri detaylı bir şekilde incelendi. Küresel bakır nanoparçacıkları 2 nm, 4 nm, 6 nm, 8 nm ve 10 nm boyutlarında ele alınmıştır. Atomlar arası etkileşimleri tanımlamak için çok cisimli, kuantum etkileşmeli Sutton-Chen potansiyeli kullanılmıştır. Bu çalışmada elde edilen ana sonuçlar aşağıda belirtilmiştir;

- Nanoparçacığın boyutu küçüldükçe, yani yüzey alanının sistemin hacmine oranı büyüdükçe, erime noktasının değeri düşmekte olup, bulk sistemlerinin erime noktasından uzaklaşmaktadır.
- Lindeman kriteri ile açık bir şekilde ifade edildiği gibi, nanoparçacıklarda erime mekanizmasının dış kabuktan başladığı görülmektedir.
- Bu çalışmada tasarlanan küresel bakır nanoparçacıkları için Einstein ilişkisi denkleminde elde edilen difüzyon katsayıları, sıcaklığa bağlı olarak difüzyonun davranışını temsil eden Arrhenius denklemine uymaktadır. Elde edilen Arrhenius parametreleri kullanılarak farklı sıcaklıklarda nanoparçacıkların difüzyon sabitleri elde edilebilir.
- Toplam enerji, ısı kapasitesi ve Lindeman kriterinin sıcaklığa bağımlılığında erime sıcaklığı civarında keskin sıçramalar gözlenmektedir. Radyal dağılım fonksiyonunda ise ilk tepe yüksekliği düşmekte olup, ikinci ve daha sonraki düzleşmektedir. Toplam enerji, ısı kapasitesi, difüzyon sabiti, radyal dağılım fonksiyonu, Lindeman kriteri, birinci koordinasyon sayısı ve Honeycutt-Andersen indeksi ile bulunan erime sıcaklıkları yaklaşık aynı değerlerde elde edilmiştir.
- Isı kapasitesinin değişimi, nanoparçacık sisteminde atom sayısına bağlıdır. Örneğin, 2 nm Cu kullanıldığında ısı kapasitesi 4 nm Cu'nun ısı kapasitesine göre yüksek çıkmaktadır.
- Bu çalışmada kullanılan MD yöntemi onbinler mertebesinde atom içeren nano malzemelerin mikroskobik özelliklerinden makroskopik özelliklerinin elde edilmesine olanak sağlamaktadır. Ayrıca, statik özelliklerin yanında dinamik özelliklerde sıcaklığa bağlı olarak elde edilebilmektedir.



## 6. KAYNAKLAR

- [1] **G. Aydın**, 2009 Nikel-Rodyum alařımının bazı termodinamik ve termoelastik özelliklerinin moleküler dinamik simülasyon yöntemi ile incelenmesi, Yüksek lisans Tezi, Ankara.
- [2] **H. Karagöz**, 2010, Ni-Au Alařımlarına Paladyum Katkısının Termodinamik Ve Mekanik Özelliklere Etkisinin Moleküler Dinamik İncelenmesi, Yüksek Lisans Tezi, Sakarya.
- [3] **N. Uğurluođlu**, 2006, Altın Ve Aliminyumun Bazı Termoelastik Özelliklerinin Moleküler Dinamik Simülasyon Tekniđi İle İncelenmesi, Yüksek Lisans Tezi, Ankara.
- [4] **D. W. Heermann**, 1986, Computer Simulation Methods in Theoretical Physics, Springer-Verlag, Berlin.
- [5] **H. H. Kart, M. Tomak, M. Uludođan, T. Çađın**, 2005, Thermodynamical and mechanical properties of Pd-Ag alloys, Computational Materials Science 32 , 107-117
- [6] **E. Fruio, Çeviri K.Çolakođlu, C. Kara** ,1997, Moleküler Dinamik El-Kitabı, Springer College in Computational Physics, ICTP, Trieste, June, 65.
- [7] **M. Grujicic, ve P. Dang**, 1995, Computer Simulation of Martensitic Transformation in Fe – Ni Face-Centered Cubic Alloys, Materials Science and Engineering, A(201), 194-204.
- [8] **H. R. Cong, X. F. Bian, J.X. Zhang ve H. Li**, 2002, Structure Properties of Cu-Ni Alloys at the Rapid Cooling Rate Using Embedded-Atom Method, Materials Science and Engineering, A326\_343-347.
- [9] **C. R. A. Catlow**, 1990, Computer Modelling of Fluids Polymers and Solids, 1-28, eds. C. R. A. Catlow et al, Kluwer Academic Publishers, USA
- [10] **J. M. Haile**, 1992, Molecular Dynamics Simulation, Wiley & Sons Publication, Canada.
- [11] **S. Özgen**, 1997, Sayısal hesaplama yöntemlerinin Őekil hatırlamalı alařımlarda difüzyonsuz faz dönüşümlerine uygulanması, Doktora Tezi, Elazıđ.
- [12] **D. C. Rapaport**, The Art Of Moluculer Dynamics Simulation, Cambridge Univ. Press, 400-402 (2002), England.
- [13] **TÜSİAD Rekabet Stratijeleri Dizisi-11**, 2008.
- [14] **Nanobilim Ve Nanoteknoloji Stratejileri**, 2004.
- [15] **G. A. Ozin, A. C. Arsenault**, 2005, RSC Publishing, Cambridge.
- [16] **L. Ding, R. L.Davidchack ve J. Pan**, 2009, Comp. Mat. Sci. 45 247-256.
- [17] **P. Moriarty**, 2001, Rep. Prog. Phys. 64, 297-381.
- [18] **Z.Lin, L. Wei, ve W. S. Qing**, 2010, Chin. Phys. B Vol. 19 No.7, 073601.
- [19] **Ő. Çakmaktepe**, 2001, Moleküler Dinamik Simülasyon Metodu ile Ni<sub>n</sub> klastırlarının yapısal özelliklerinin incelenmesi, Yüksek lisans tezi, Isparta.

- [20] **R. L. Johnston**, 2002, Atomic and Molecular Clusters.
- [21] **M. L. Cohen, ve W. D. Knight**, 1990, Amer. Inst. Phys.
- [22] **T. Halicioğlu ve C. W Bauschlicher**, 1988, Physics of microclusters, Rep. Prog. Phys. 51, 883-921.
- [23] **H. Haberland**, 1994, Clusters of Atoms and Molecules Theory, Experiment and Clusters of Atoms , Springer-Verlag.
- [24] **Y. Kawazoe, T. Kondow ve K. Ohno**, 2002, Clusters and nanomaterials, Spinger Verlag Berlin Heidelberg, New York.
- [25] **S. A. Claridge, Jr. A. W. Castleman, S. N. Khanna, C. B. Murray, A. Sen, ve P. S. Weiss**, 2009. Cluster-Assembled materials, Acs Nano 3, 244-255.
- [26] **O. Şahin**, 2001, Moleküler Dinamik Simülasyon Metodu İle Lin Klastirlerinin Yapısal Özelliklerinin İncelenmesi, Yüksek Lisans Tezi, Isparta.
- [27] **R. Ferrando, J. Jellinek, ve R. Johnston**, 2008, Amer. Chem. Soc. Vol. 108 No. 3.
- [28] **P. Nayebi, ve E. Zaminpayma**, 2009, J. Clust. Sci. 20, 661-670.
- [29] [http://tr.wikipedia.org/wiki/Ge%C3%A7i%C5%9F\\_metalleri](http://tr.wikipedia.org/wiki/Ge%C3%A7i%C5%9F_metalleri)
- [30] **Y. Shibuta, ve T. Suzuki**, 2008, The J. Chem. Phys. 129, 144102.
- [31] **H. H. Kart**, 2004, Molecular Dynamics Study of Random and Ordered Metals and Metal Alloys, Doktora Tezi, Ankara
- [32] **H. H. Kart, G. Wang, I. Karaman, ve T.Çağın**, 2009, J. Mod. Phys. C Vol. 20 No. 2, 179-196.
- [33] **J. Torres, C. V. Landauro, J. Rojas, S. Reategui, A. Guzman, L. Medrano, ve J. Arroyo**, 2009, ICAM.
- [34] **G. Fracasso**, 2010, Synthesis and Physical-Chemical characterization of metallic Nanoparticles, Doktora Tezi, Bologna.
- [35] **A. Çoruh**, 2003, Molecular-Dynamics Investigation of the Dynamic Properties of Pd and Al Metals, and Their alloys, Doktora Tezi.
- [32] **F. A. Çelik**, 2010, Geçiş Metali Alaşımalarında Amorf Yapıdan Kristal Yapıya Dönüşümün Moleküler Dinamik Yöntemi İle İncelenmesi, Doktora Tezi, Elazığ.
- [37] **C. Kittel**, 1986, Introduction To Solid State Physics, Wiley, 142-149, New York.
- [38] **Ü. Akıncı**, 2005, Moleküler Dinamik.
- [39] **S. Kazanç**, 2004. Bakır bazlı alaşımlarda termoelastik dönüşümlerin moleküler dinamik benzetimi, Doktora Tezi, Elazığ.
- [40] **G. Ferah**, 2006, Platin Ve İridyum Elementlerinin Bazi Termo-Elastik Özelliklerinin Basınç Ve Sıcaklığa Bağlı Olarak Moleküler Dinamik Yöntemle İncelenmesi, Yüksek Lisans Tezi, Ankara.

- [41] **İ. Koçoğlu**, 2006, Çok cisimli analitik gömülü atom potansiyellerini kullanılarak sıvı bcc metal ve alaşımlarının moleküler dinamik simülasyonu, Doktora Tezi, Edirne.
- [42] **G.H. Vignard, J. B. Gibson, A. N. Goland, ve M. Milgram**, 1960, Temperature Dependence of Elastic Constants of EAM of Metals, Phys. Rev, 120-1229.
- [43] **B. J. Alder ve T. E. Wainwright**, 1957, Temperature Dependent Lattice Mechanical Properties of some fcc transition Metals, Journal, Chem. Phys., 27-1207.
- [44] **A. Rahman**, 1964, Embedded-Atom Method, Phys. Rev.A, 136–405
- [45] **J. P. Hansen, ve L. Verlet**, 1969, Phase transitions of the Lennard-Jones system, Phys. Rev.,184 151.
- [46] **M. Parrinello ve A. Rahman**, 1980, Crystal structure and pair potentials: a molecular-dynamics study, Phys. Rev. Lett. 45, 1196-1199.
- [47] **M. Parrinello ve A. Rahman**, 1981, Polymorphic transitions in single crystals: a new molecular dynamics method, Journal Appl. Phys. 52(12), 7182–7190.
- [48] **A. Rahman ve F. H. Stillinger**, 1971, Molecular Dynamics of. Liquid Water, J. Chem. Phys. 55,3336.
- [49] **W. T. Ashurst ve W. G. Hoover**, 1973, Argon shear viscosity via a Lennard-Jones Potential with equilibrium and nonequilibrium molecular dynamics, Phys. Rev. Lett. 31, 206-208.
- [50] **J. A. McCammon, B. R. Gelin, ve M. Karplus**, 1977, Nature (Lond.) 267, 585.
- [51] **S. A. Nose** , 1984, Molecular dynamics method for simulation in the canonical ensemble, Molec. Phys. Vol.52, pp.255-268.
- [52] **M. S. Daw ve M. I. Baskes**, 1984, Embedded-atom method: Derivation and application to impurities and other defects in metals, Phys Rev B29, 6443.
- [53] **R. Car, M. Parrinello**, 1985, Phys. Rev. Lett. 55, 2471.
- [54] **O.F.Sankey ve R.E. Allen**, 1986, Phys. Rev. B 33, 7164.
- [55] **P. S. Lomdahl, P. Tamayo, N. Grønbech-Jensen ve D. M. Beazley**, 1993, 50 GFlops molecular dynamics on the Connection Machine 5, 520-527.
- [56] **K. Kadau, T. C. Gemann, P. S. Lomdahl**, 2004, Modern Physics C Vol. 15 No 1, 193,201.
- [57] **D. Röthlisberger, O. Khersonsky, A. M. Wollacott, L. Jiang, J. DeChancie, J. Betker, J. L. Gallaher, E. A. Althoff, A. Zanghellini, O. Dym, S. Albeck, K. N. Houk, D. S. Tawfik ve D. Baker**, 2008, Nature International Weekly Journal of Science, 190-195.
- [58] **S. M. Foiles, M. I. Baskes ve M. S. Daw**, 1986, Embedded-atom-method functions for the fcc metals Cu, Ag, Au, Ni, Pd, Pt, and their alloys. Physical Review B 33, 7983–7991.

- [59] **S. M. Foiles ve M. S. Daw**, 1988, Calculation of the thermal expansion of metals using the EAM, *Phys. Rev. B* 17 (38), 663 – 664.
- [60] **Ş. Erkoç**, 1989, A New Empirical Many-Body Potential Energy Function: Application to Microcluster, *Phys. Stat. Sol. (B)*, 152, 447.
- [61] **L. J. Lewis, P. Jensen ve J. L. Barrat**, 1997, Melting, freezing, and coalescence of gold nanoclusters. *Physical Review B* 56, 2248–2257.
- [62] **T. Çağın, G. Dereli, M. Uludoğan ve M. Tomak**, 1999, Thermal and mechanical properties of some fcc transition metals. *Physical Rev. B*, 3468-3473.
- [63] **J. H. Shim, B. J. Lee ve Y. W. Cho**, 2002, *Surf. Sci.* 512, 262.
- [64] **H. H. Kart, M. Uludoğan, T. Çağın ve M. Tomak**, 2004, Simulation of Crystallization and Glass Formation Processes for Binary Pd-Ag Metal alloys., *J. Noncryst. Sol.* 342, 6-11.
- [65] **H. H. Kart, M. Uludoğan, T. Çağın ve M. Tomak**, 2004, Thermodynamically and mechanical properties of Pd–Ag alloys, *Computational Materials Science* 32, 107–117.
- [66] **S. Özgen ve E. Duruk**, 2004, Molecular dynamics simulation of solidification kinetics of aluminium using Sutton-Chen version of EAM, *Materials Letters* 58, 1071-1075.
- [67] **S. Çakmak, E. Artunç, İ. Kara ve Ş. Çakmaktepe**, 2005, Gömülmüş atom potansiyeli kullanarak Nikelin Moleküler Dinamik Simulasyonu. *S.D.Ü. Fen Bilimleri Dergisi*, 9(2), 28-32.
- [68] **S. KRSS, V. R. Bhethanabotla ve Babu Joseph**, 2005, *Phys. Rev. B* 71, 195415.
- [69] **S. Alavi ve D. L. Thompson**, 2006, *J. Phys. Chem. A* 110 (4), pp 1518–1523.
- [70] **A. Sebetçi, Z. B. Güvenç ve H. Kökten**, 2006, *Computational Materials Science* 35, 192–197.
- [71] **Z. Yang, X. Yang ve Z. Xu**, 2008, *J. Phys. Chem. C* 112, 4937-4947.
- [72] **Z. Tian, R. Liu, P. Peng, Z. Hou, H.Liu, C. Zheng, K. Dong ve A. Yu**, 2009, *Physics Letters A* 373,1667–1671.
- [73] **L.Zhang ve H. Sun**, 2010, *Phys. Status Solidi A* 207 , No. 5, 1178–1182.
- [74] **S. Yang, X. Su, J. Wang, F. Yin, Z. Li, S. Chen ve C. Liu**, 2010, *Journal of Non-Crystalline Solids* 356, 1061–1069.
- [75] **Y. Watanabe, Y. Shibuta ve T. Suzuki**, 2010, *ISIJ International* 50, 8, 1158-1164.
- [76] **L. Zhang ve Q. Fan**, 2011, *Phys. Scr.*84, 045303 (5pp).
- [77] **Y. Shibuta ve T. Suzuki**, 2011, *Chemical Physics Letters* 502, 82–86.
- [78] **V. G. Mavrantzas**, 2006, *Molecular Simulations, Chemical Engineering and Chemical Process Technology*, Vol. 1.

- [79] **L. Verlet**, 1967, Computer Experiments on Classical Fluids. I. Thermodynamical Properties of Lennard-Jones Molecules, *Physical Review*, 159:98.
- [80] **M. P. Allen and D. J. Tildesley**, 1987, *Computer Simulation of Liquids*, Oxford Science Publications, New York.
- [81] **D. Frenkel and B. Smit**, 1996, *Understanding Molecular Simulation from Algorithms to Applications*, Academic Press, San Diego.
- [82] **T. Dumitrica, D. James Richard**, 2007, Objective Molecular Dynamics, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 55, 2206-2236.
- [83] **J. P. Hansen, and I. R. McDonald**, (1986), *Theory of Simple Liquids*, Academic Press, London.
- [84] **S. Şengül**, 2008, Atomik simülasyon yöntemleri ile sıvı hcp metal ve metal alaşımlarının incelenmesi, Doktora Tezi, Edirne.
- [85] **D. W. Heermann**, 1990, *Computer Simulation Methods*, Springer-Verlag 99.
- [86] **W. G. Hoover**, 2007, *Molecular Simulation*, Vol. 33, Nos. 1–2, 13–19.
- [87] **S. Nose**, 1984, *J. Chem Physics* 81, 511.
- [88] **W. G. Hoover**, 1985, *Phys. Rev. A* 31, 1695.
- [89] **V. Rühle**, 2007, Berendsen and Nose-Hoover thermostats.
- [90] **L. Jones**, (1924), On the Determination of Molecular Fields, *Proc. R. Soc. Lond. A* 106, (738): 463–477.
- [91] **R. Naeem**, The Regents of the University of California.
- [92] **Ş. Erkoç**, 1997, *Phys Rep.* 278, 79-105.
- [93] **L. Zhigilei**, Introduction to Atomistic Simulations, University of Virginia, MSE 4270/6270.
- [94] **M. Finnis**, 2004, *Prog. in Mat. Science* 49, 1-18.
- [95] **Z. Yang, X. Yang, ve Z. Xu and S. Liu**, 2009, Structural evolution of Pt-Au nanoalloys during heating process: Comparison of random and core-shell orderings, Supplementary Material (ESI) for PCCP.
- [96] **S. Alavi**, 1994, Steacie Institute for Molecular Sciences, National Research Council of Canada, *Molecular Dynamics Simulations of the Melting of Aluminum Nanoparticles*, Ottawa.
- [97] **H. Rafii-Tabar ve A. Chirazi**, 2002, *Phys. Rep.* 365, 145-249.
- [98] **H. Rafii-Tabar**, 2000, *Phys.Rep.* 325, 239-310.
- [99] **M.W. Finnis ve J.E. Sinclair**, 1984, *Phil. Mag.* A 50, 45-55.
- [100] **F.Ercolassi, M. Parrinello ve E. Tosatti**, 1988, *Phil. Mag.* A 58, 213.
- [101] **M. S. Daw ve M.I. Baskes**, 1984, *Phys. Rev. Lett.* 50, 1285.
- [102] **M. S. Daw, S. M. Foiles ve M. I. Baskes**, 1993, *Mat. Sci. Rep.* 9, 251-310.
- [103] **G. J. Ackland ve V. Vitek**, 1990, *Phys. Rev. B* 41, 10324.

- [104] **A. P. Sutton and J. Chen**, 1990, Long-range Finnis-Sinclair potentials, Philosophical Magazine Letters 61, pp. 139-146.
- [105] **Y. Qi, T. Çağın, Y. Kimura ve W. A. Goddard III**, 2002, J. Comp. Aid. Mat. Des. 8, 233-243.
- [106] **H. Raffi-Tabar ve A.P. Sutton**, 1991, Phil. Mag. Lett. 63, 217.
- [107] **G. Dereli, T. Çağın, M. Uludoğan and M. Tomak**, 1999, Philos. Mag. Letters 75, 209.
- [108] **Y. Qi, T. Çağın, Y. Kimura ve W. A. Goddard III**, 1999, Phys. Rev. B 59, 3527-3533.
- [109] **H. J. Lee, T. Çağın, W. L. Johnson ve W. A. Goddard III**, 2003, J. Chem. Phys. 119, 9858.
- [110] **M. W. Finnis**, (1984), A simple empirical N-body potential for transition metals, Phil. Mag. A 50, (1): 45.
- [111] **W. Maysenhoelder**, 1986, Phil. Mag.A, 53783.
- [112] **M. Yan, V. Vitek ve S. P. Chen**, 1996, Acta Mater., 444351.
- [113] **D. D. Koleske ve S. J. Sibener**, 1993, Surf. Sci. 290 , 179.
- [114] **A. Landa, P. Wynblatt, A. Girshich, V. Vitek, A. Ruban ve H. Skriver**, 1988, Acta Mater. 463027.
- [115] **Q. Zhang, W. S. Lai ve B. X. Liu**, 1998, Phys. Rev.B 5814020.
- [116] **H. Raffi-Tabar ve G. A. Mansoori**, 2003, Encyclopedia of Nanoscience and Nanotechnology Vol. X,1-17.
- [117] **W.Gans ve J.C. A Boeyens, Eds.**, 1998, Intermolecular Interaction, Plenum ,New York.
- [118] **T. Çağın, Y. Qi, H. Li, Y. Kimura, H. Ikeda, W. L. Johnson ve W. A. Godder III**, 1999, MRS Symp. Ser. 554, 43.
- [119] **Y. Kimura, Y. Qi, T. Çağın ve W Goddard III**, 1998, The Quantum Sutton-Chen Many Body Potential for Properties of fcc Metals, Caltech ASCI Technical Report 003, Texas.
- [120] **V. Molinero, T. Çağın ve W.A. Goddard**, 2004, Translational diffusion in concentrated glucose-water mixtures close to the glass transition: a coarse grain molecular simulation study, J. Phys. Chem. A 108, 3699-3712.
- [121] **Y. Qi, T. Cagin, W. L. Johnson ve W. A. Goddard III**, 2001, Melting and crystallization in Ni nanoclusters: The mesoscale regime, J. Chem. Phys. 115, 385.
- [122] **H. H. Kart, M. Uludogan, T. Çağın ve M. Tomak**, 2004, Comparison of structural and dynamical properties of liquid Pd, Ag and the binary alloys modelled by Sutton-Chen, Pd-Ag metal alloys, Nanoengineering Nanofibrous Materials, pp 485- 92.
- [123] **H. H. Kart, M. Tomak ve T. Çağın**, 2005, Thermal and Mechanical Properties of Cu-Au intermetallik alloys, Model. Sim. Mater. Sci. Eng. 13, 657-669.

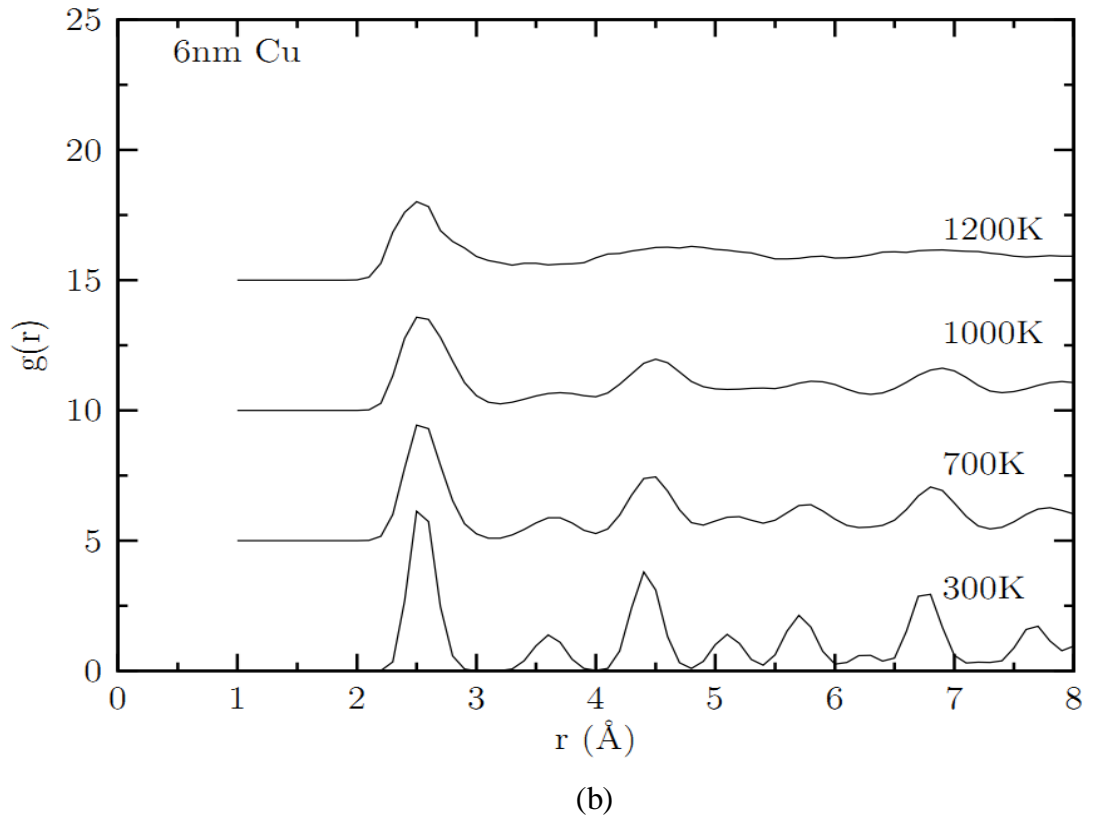
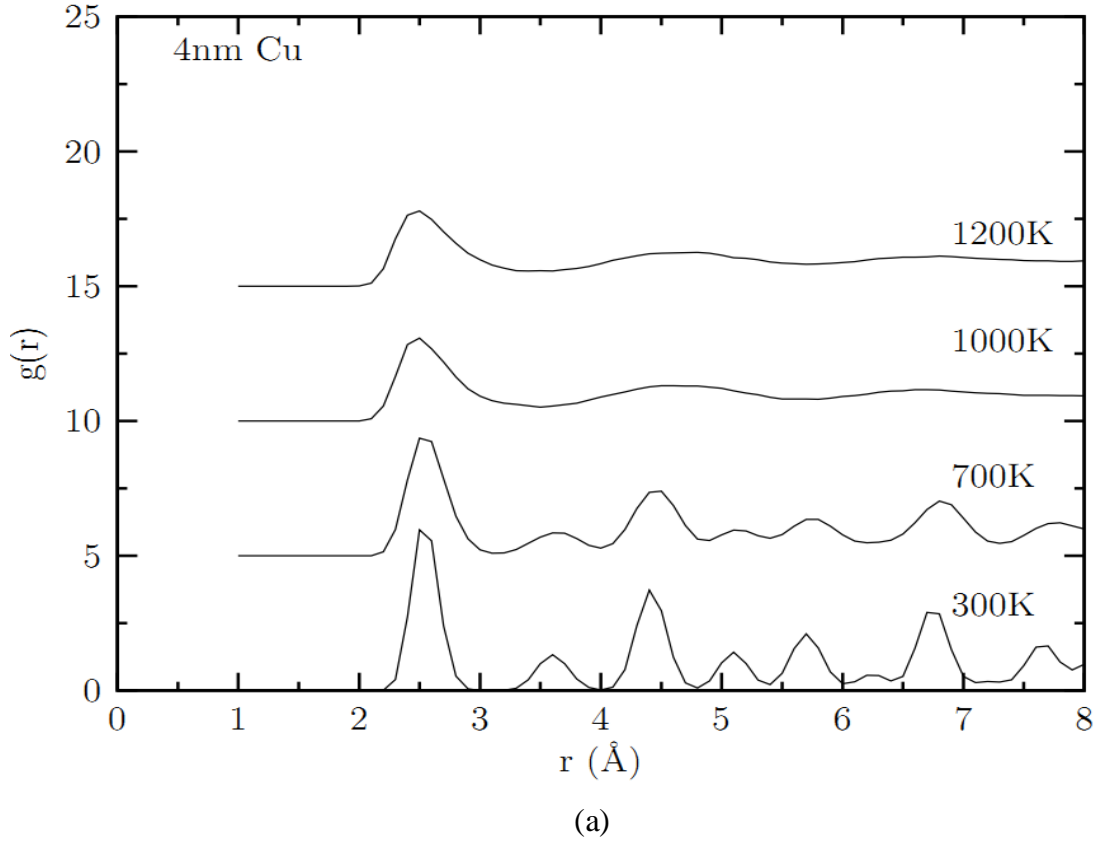
- [124] **H. H. Kart, M. Tomak, M. Uludogan ve T. Cagin**, 2004, Structural and dynamical properties of liquid Pd-Ag alloys, *Int. J. Mod. Phys. B* 18, 2257.
- [125] **S. Özdemir Kart, M. Tomak, M. Uludogan ve T. Cagin**, 2006, Structural, thermodynamical and transport properties of undercooled binary Pd-Ni alloys, *Material Science Engineering A*, 435-436.
- [126] **S. Özdemir Kart, M. Uludogan, T. Cagin ve M. Tomak**, 2004, Solid and liquid properties of Pd-Ni alloys using the quantum Sutton-Chen Potential, *Nanoengineering Nanofibrous Materials*, pp 531-536.
- [127] **S. Özdemir Kart, M. Tomak ve T. Çağın**, 2004, Phonon Dispersion and Elastic Constants of Pd-Ni Metal Alloys, *Physica B* 355, 382-391.
- [128] **S. Özdemir Kart, M. Tomak, M. Uludogan ve T. Cagin**, 2004, Liquid properties of Pd-Ni alloys, *J. Noncryst. Sol.* 337, 101-108.
- [129] **S. Özdemir Kart, M. Tomak, M. Uludogan ve T. Cagin**, 2004, Simulation of crystallization and glass formation of binary Pd-Ag metal alloys, *Journal of Non-Crystalline Solids* 342, 6-11.
- [130] **S. Özdemir Kart, A. Erbay, H. Kılıç, T. Cagin ve M. Tomak**, 2008, Molecular dynamics study of Cu-Pd ordered alloys, *Journal of Achievements in Materials and Manufacturing Engineering*, Vol. 31, Issue 1.
- [131] **Y. Qi, T. Çağın ve W. A. Gaddard III**, 2001, *J. Comp-Aided Mater Design* 8, 185-195.
- [132] **A. Stukowski**, 2010, *Mod. Sim. Mater. Sci. Eng.*18, 015012.
- [133] **A. A. Shvartsburg ve M. F. Jarrold**, 2000, *Phys. Rev. Lett.* 85, 12.
- [134] **K. K. Nanda**, 2009, *Pramana J. Phys.* Vol. 72 No. 4, 617-628.
- [135] **C. E. Bottani, A. L. Bassi, B. K. Tanner, A. Stella, P. Tognini, P. Cheyssac ve R. Kofman**, 1999, Melting in metallic Sn nanoparticles studied by surface Brillouin scattering and synchrotron-x-ray diffraction, *Phys. Rev. B* 59, R15601.
- [136] **A. Bagrets, R. Werner, F. Evers, G. Schneider, D. Schooss ve P. Wölfle**, 2010, Lowering of surface melting temperature in atomic clusters with a nearly closed shell structure, *Physical Rev. B* 81, 075435.
- [137] <http://www.compsoc.man.ac.uk/~lucky/Democritus/Theory/rdf.html>.
- [138] **M. S. Rigby, E. B. Smith, W. A. Wakeham ve G. C. Maitland**, 1986, *The Forces Between Molecules*, Published by Oxford University Press, Clarendon Press , 144, New York.
- [139] **D. Alfe, G. Kresse ve M. J. Gillan**, 2000, *Phys. Rev. B* 61, 61132-61142.
- [140] **J. F. Epperson**, 2007, *An Introduction to numerical methods and analysis*, 261-272.
- [141] **J. Schroder**, 2006, Lecture 24: Simpson's Rule, UIUC.
- [142] **L. A. Talman**, 2006, *Math. Assoc. Amer.*, Monthly 113.
- [143] **J. D. Honeycutt ve H. C. Andersen**, 1980, *J. Chem. Phys.* 72, 2384-2393.

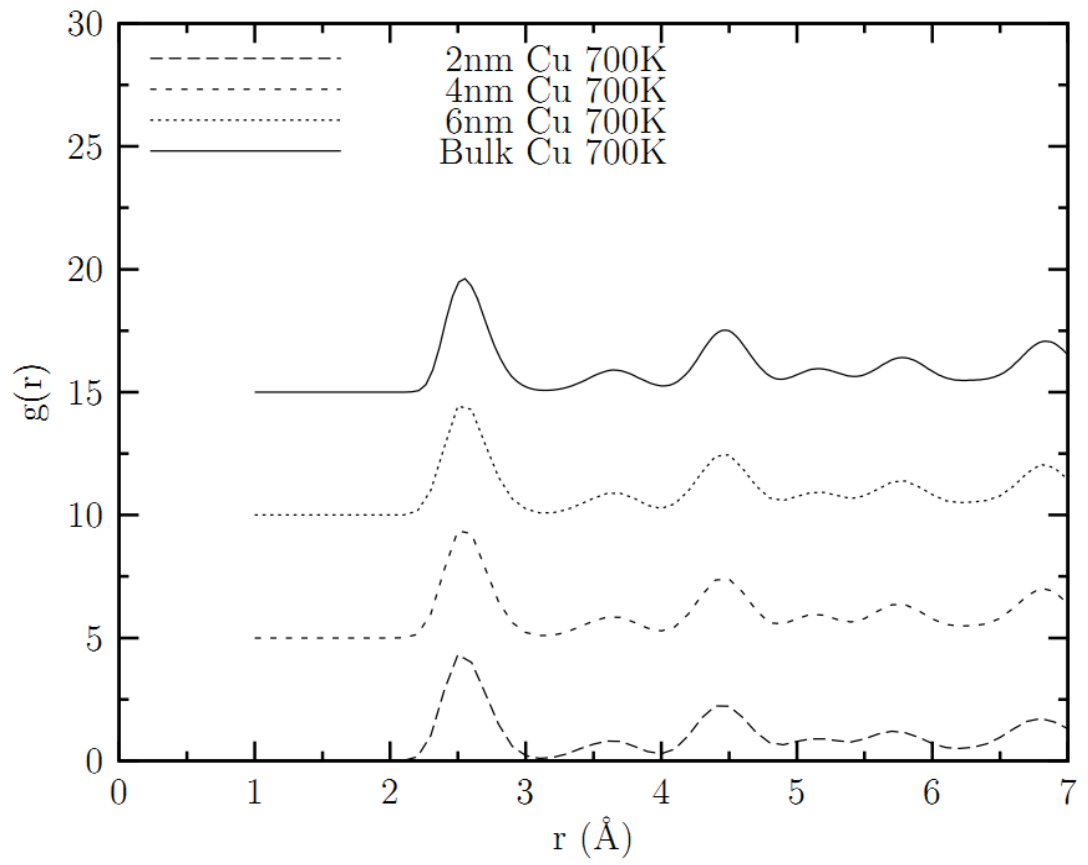
- [144] **H. Tsuzuki, P. S. Branicio ve J. P. Rino** 2007, *Comp. Phys. Comm.* 177, 518-523.
- [145] **G. Zhang, Q. An ve W. A. Goddard, III**, 2011, *J. Phys. Chem.* 115, 2320-2331.
- [146] **T. H. Kim ve K. F. Kelton**, 2007, *J. Chem. Phys.* 126 054513.
- [147] **F. A. Çelik, ve S. Kazanç**, 2011, *J. Sci. Eng.* Vol. 8 No. 1, 63-73.
- [148] **F. A. Lindemann**, 1910, The calculation of molecular vibration frequencies, *Physik. Z.* 11, 609–612.
- [149] **F. Ding, K. Bolton ve A. Rosen**, 2005, Molecular dynamics study of the surface melting of iron clusters, *Eur. Phys. J. D* 34, 275–277.
- [150] **S. Kaya**, 2012, Metal nanoparçacıkların termal özellikleri: Moleküler Dinamik simülasyonu, Yüksek Lisans Tezi, Denizli.
- [151] [http://matdl.org/matdlwiki/index.php/softmatter:Mean\\_Squared\\_Displacement](http://matdl.org/matdlwiki/index.php/softmatter:Mean_Squared_Displacement).
- [152] <http://www.etomica.org/app/modules/sites/Ljmd/Background2.html>.
- [153] <http://isaacs.sourceforge.net/phys/msd.html>.
- [154] **M. Bishop**, 1984, The pair correlation function: A probe of molecular order, *Americ. Journal Phys.* 52(12).
- [155] **E. Matteoli and G. Ali Mansoori**, 1995, A simple expression for radial distribution functions of pure fluids and mixtures, *The Journal of chemical physics* 11, Vol. 103, 4672.
- [156] **E. G. Noya, C. Rey and L. J. Gallego**, 2002, Amorphization of Ni-Al alloys by fast quenching from the liquid state: a molecular dynamics study, *Jour. of Non-crystalline Solids* 298, 60-66.
- [157] [http://matdl.org/matdlwiki/index.php/softmatter:Mean\\_Squared\\_Displacement](http://matdl.org/matdlwiki/index.php/softmatter:Mean_Squared_Displacement).
- [158] **L. Wei-Zhang, C. Cong, ve Y. Jian**, 2008, *Heat Transfer-Asian Research* 37(2).
- [159] **L. Zhigilei**, Phase Diagrams and Kinetics, MSE 3050, University of Virginia.



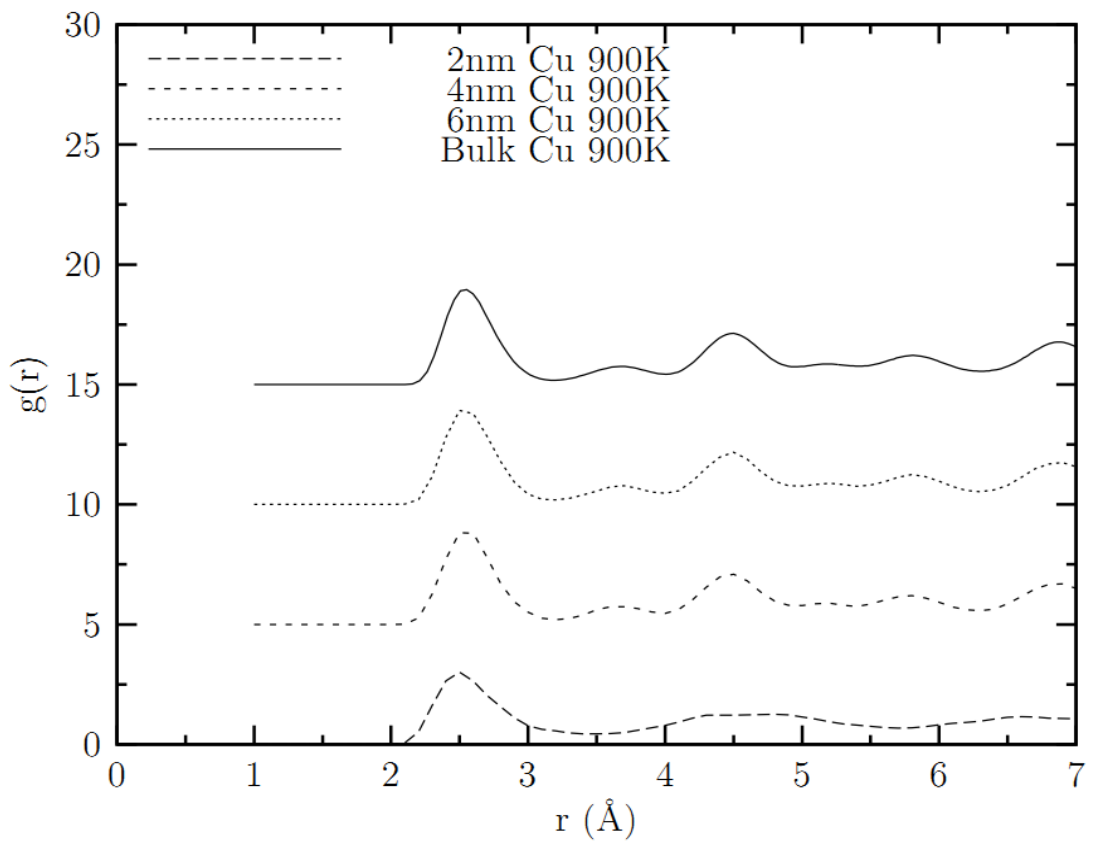
## EKLER

**EK A.1** Farklı boyut ve sıcaklıklardaki Cu nanoparçacıkların radyal dağılım fonksiyonu grafikleri.

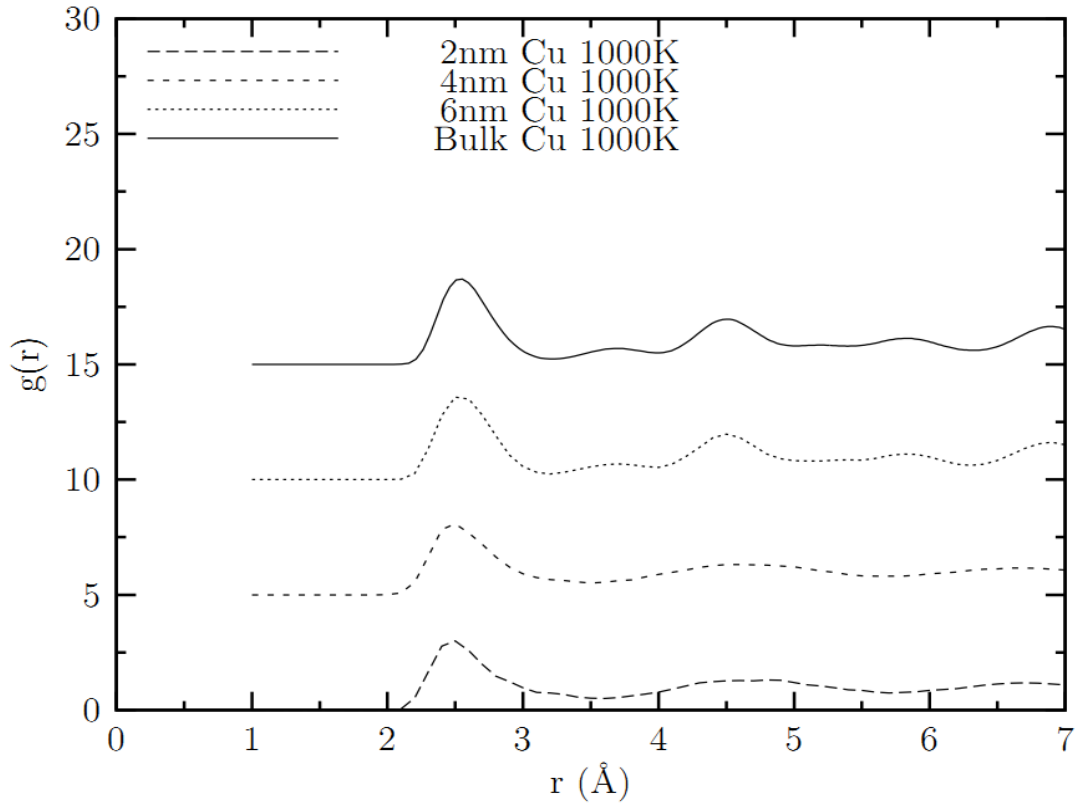




(c)



(d)



(e)

(a) 4 nm ve (b) 6 nm Cu nanoparçacıkların radyal dağılım fonksiyonunun bazı sıcaklıklarda değişimi grafiği ve Cu nanoparçacıklarının radyal dağılım fonksiyonunun c) 700 K d) 900 K ve e) 1000 K'de değişim grafiği.



## ÖZGEÇMİŞ

**Ad Soyad:** Hüseyin YILDIRIM

**Doğum Yeri ve Tarihi:** Acıpayam - 30. 10. 1986

**Adres:** Topraklık Mah. Halk Cad. Birlikkardeşler Apt. 115/4 DENİZLİ

**Lisans Üniversitesi:** Pamukkale Üniversitesi

### Yayın Listesi:

- **H. Yıldırım, H. H. Kart, T. Çağın, Adım Fizik Günleri – I, 'Moleküler Dinamik Simülasyon Yöntemiyle Cu nanoparçacıkların fiziksel özelliklerinin incelenmesi'** başlıklı sözlü sunum, 21-22 Mayıs 2010, Afyon, Türkiye.
- **H. Yıldırım, H. H. Kart, ve T. Çağın, İzmir Yüksek Tek. Enstitüsü Nano TR-VI, 'Physical Properties of Cu Nanoparticles: A Molecular Dynamics Study'** başlıklı poster sunumu , 15-18 Haziran 2010, Çeşme, Türkiye.
- **H. Yıldırım, H. H. Kart, ve T. Çağın, Pamukkale Üniversitesi, 13 th International Materials Symposium (IMSP'2010), 'Physical Properties of Cu Nanoparticles: A Molecular Dynamics Study'** başlıklı poster sunumu , 13-15 Ekim 2010, Denizli, Türkiye.
- **H. Yıldırım, H. H. Kart, T. Çağın, Adım Fizik Günleri – II, Cu nanoparçacıkların fiziksel özelliklerinin Moleküler Dinamik Simülasyon yöntemiyle incelenmesi'** başlıklı sözlü sunum, 25-27 Nisan 2012, Denizli, Türkiye.

### Gönderilme aşamasında:

- **H. Yıldırım, H. H. Kart, ve T. Çağın, 'Physical Properties of Cu Nanoparticles: A Molecular Dynamics Study'** isimli makale.