

**T.C.
PAMUKKALE ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ
FİZİK ANABİLİM DALI**

**DEMİR-KROM BAZLI KOR-KABUK YAPILI
NANOTELLERİN BAZI TERMAL VE MEKANİK
ÖZELLİKLERİNİN İNCELENMESİ**

YÜKSEK LİSANS TEZİ

ALPAY ÜZEL

DENİZLİ, TEMMUZ - 2021

**T.C.
PAMUKKALE ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ
FİZİK ANABİLİM DALI**



**DEMİR-KROM BAZLI KOR-KABUK YAPILI
NANOTELLERİN BAZI TERMAL VE MEKANİK
ÖZELLİKLERİNİN İNCELENMESİ**

YÜKSEK LİSANS TEZİ

ALPAY ÜZEL

DENİZLİ, TEMMUZ - 2021

**Bu tez çalışması Pamukkale Üniversitesi Bilimsel Araştırma Projesi
Birimi tarafından BAP-2019FEBE51 nolu proje ile desteklenmiştir.**

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

ALPAY ÜZEL

ÖZET

DEMİR-KROM BAZLI KOR-KABUK YAPILI NANOTELLERİN BAZI TERMAL VE MEKANİK ÖZELLİKLERİNİN İNCELENMESİ

YÜKSEK LİSANS TEZİ

ALPAY ÜZEL

PAMUKKALE ÜNİVERSİTESİ FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

FİZİK ANABİLİM DALI

(TEZ DANIŞMANI: PROF. DR. SEVGİ ÖZDEMİR KART)

DENİZLİ, TEMMUZ - 2021

Bu tez çalışmasında, iki farklı boyutta ve farklı katman kalınlıklarında Fe-Cr bazlı kor@kabuk nanotelleri silindir yapıda tasarlanmıştır. Bunların termodinamik özellikleri kanonik (NVT) istatistik topluluğunda ve mekaniksel özellikleri de izobarik (NPT) istatistik topluluğunda moleküler dinamik (MD) simülasyon yöntemi ile incelenmiştir. Çok cisimli etkileşimleri referans alan gömülü atom modeli (EAM) kullanılarak atomlararası etkileşimler tanımlanmıştır. Nanotellerin toplam enerji, ısı kapasitesi, çift dağılım fonksiyonu, Lindemann kriteri ve ortalama kare yerdeğiştirmenin sıcaklığa göre davranışı analiz edilerek erime mekanizmalarının detayı incelenmiştir. Nanotellere aksenal çekme işlemleri uygulanarak, zor-zorlanma ilişkisinden akma ve çekme dayanımı, kopma uzaması, elastik modülü ve Poisson oranı gibi mekaniksel özellikleri belirlenmiştir. Elde edilen sonuçlar literatürde ilk olup, deneysel çalışmalara öncülük edecek niteliktedir.

ANAHTAR KELİMELER: Moleküler Dinamik Simülasyonu, Kor@Kabuk Nanotel, Gömülü Atom Modeli, LAMMPS Paket Programı, Lindemann Kriteri, Poisson Oranı, Elastik Modülü, Erime Sıcaklığı

ABSTRACT

INVESTIGATION OF SOME THERMAL AND MECHANICAL PROPERTIES OF IRON-CHROMIUM BASED CORE-SHELL NANOWIRES

MSC THESIS

ALPAY ÜZEL

**PAMUKKALE UNIVERSITY INSTITUTE OF SCIENCE
PHYSICS**

(SUPERVISOR:PROF. DR. SEVGİ ÖZDEMİR KART)

DENİZLİ, JULY 2021

In this thesis study, Fe-Cr-based core@shell nanowires have been designed in the cylindrical structures with two different sizes and different layer thicknesses. Their thermodynamic properties are investigated in the canonical (NVT) statistical ensemble and their mechanical properties are analysed in the isobaric (NPT) statistical ensemble by using molecular dynamics (MD) simulation method. Interatomic interactions are described by using the embedded atom model (EAM) which includes many body interactions. The melting mechanisms of the nanowires are investigated by analyzing the behaviour of the total energy, heat capacity, pair distribution function, Lindemann criteria and the mean square displacement as a function of temperature. By examining the axial pulling processes applied on nanowires, mechanical properties such as yield and tensile strengths, breaking elongation, elastic modulus and Poisson ratio are determined from the stress-strain relationship. The results obtained from this study are the first time in the literature and are expected to lead to experimental studies.

KEYWORDS: Molecular Dynamics Simulation, Core@Shell Nanowire, Embedded Atom Method, LAMMPS Package Program, Lindemann Criteria, Poisson's Ratio, Elastic Modulus, Melting Temperature

İÇİNDEKİLER

Sayfa

ÖZET.....	i
ABSTRACT	ii
İÇİNDEKİLER	iii
ŞEKİL LİSTESİ	v
TABLO LİSTESİ	vii
SEMBOL LİSTESİ	viii
ÖNSÖZ.....	ix
1. GİRİŞ.....	1
2. NANOTELLER.....	8
2.1 Üretim Teknikleri	10
2.2 Nanotellerin Fiziksel Özellikleri	11
3. MATERYAL VE METHOT	12
3.1 Moleküler Dinamik Simülasyonu	12
3.1.1 Newton Dinamiği.....	13
3.1.2 Hamiltonyen Dinamiği	14
3.1.3 Algoritmalar	16
3.1.3.1 Verlet Algoritması.....	16
3.1.3.2 Hız-Verlet Algoritması	17
3.2 Atomlararası Etkileşim Potansiyeli	18
3.2.1 Lennard-Jones Potansiyeli	19
3.2.2 Gömülü Atom Modeli (EAM)	20
3.2.2.1 Finnis-Sinclair Potansiyeli	23
3.2.2.2 Sutton-Chen (SC) Potansiyeli	24
3.3 İstatistik Kümeler	25
3.3.1 NVT Moleküler Dinamik Yöntemi.....	26
3.3.2 NPT Moleküler Dinamik Yöntemi	28
3.4 Moleküler Dinamik Paket Programları	29
3.4.1 LAMMPS Paket Programı.....	30
3.5 Hesaplama Yöntemi	33
3.6 Termodinamik, Yapısal ve Dinamik Özellikler	36
3.6.1 Isı Kapasitesi.....	36
3.6.2 Lindemann Kriteri.....	37
3.6.3 Çift Dağılım Fonksiyonu	38
3.6.4 Ortalama Kare Yerdeğiştirme	39
3.6.5 Difüzyon Katsayısı	40
3.7 Mekanik Özellikler	40
3.7.1 Elastik Modülü.....	42
3.7.2 Akma ve Çekme Dayanımı ile Kopma Uzaması	44
3.7.3 Poisson Oranı.....	47
4. VERİLER VE BULGULAR.....	49
4.1 Termal ve Dinamiksel Özellikler	50
4.1.1 Toplam Enerji	50
4.1.2 Isı Kapasitesi.....	55
4.1.3 Çift Dağılım Fonksiyonu	58
4.1.4 Lindemann Kriteri.....	60

4.1.5 Ortalama Kare Yerdeğiřtirme	61
4.1.6 Difüzyon Katsayısı	65
4.2 Mekanik Özellikler	68
4.2.1 Akma ve Çekme Dayanımı ile Kopma Uzaması	68
4.2.2 Elastik Modülü	71
4.2.3 Poisson Oranı	76
5. SONUÇ VE ÖNERİLER	78
6. KAYNAKLAR	80
7. EKLER	88
EK A	88
EK B	95
8. ÖZGEÇMİŐ	102

ŞEKİL LİSTESİ

Sayfa

Şekil 1.1: Simülasyon ölçeği.....	3
Şekil 3.1: Lennard-Jones etkileşim potansiyeli.....	20
Şekil 3.2: EAM etkileşim fonksiyonları.....	22
Şekil 3.3: LAMMPS paket programı çalıştırmak için iş akış şeması	31
Şekil 3.4: Cr ₂ @Fe ₆ kor-kabuk nanotelinin genel görünümü	33
Şekil 3.5: MD simülasyonu gerçekleştirilen Fe-Cr bazlı kor@kabuk nanoteller.	34
Şekil 3.6: a) Merkez atomdan r ₁ , r ₂ , r ₃ uzaklığındaki kabukların görünümü b) g(r) çift dağılım fonksiyonunun uzaklığa göre değişimi.....	38
Şekil 3.7: Çekme yükü altında oluşan uzama ve şekil değişimi (b) basma yükü altında oluşan kısılma ve şekil değişimi	41
Şekil 3.8: Yükün uygulanması ve ardından kaldırılması sırasında doğrusal elastik şekil değişimini gösteren şematik zor-zorlanma diyagramı.43	
Şekil 3.9: Elastik ve plastik deformasyonu gösteren tipik bir zor-zorlanma eğrisi.	45
Şekil 3.10: Çekme işlemi uygulanan bir teldeki zor-zorlanma bağıntısı.	45
Şekil 3.11: Gevrek ve sünek malzemelere ait zor-zorlanma eğrisi.	46
Şekil 3.12: Çekme işlemi sırasındaki boydaki uzamaya karşı endeki kısılmanın gösterimi.	48
Şekil 4.1: a) 2,5 nm ve b) 4,5 nm çapındaki Fe@Cr kor@kabuk nanotellerin toplam enerjisinin sıcaklığa bağımlılığı	51
Şekil 4.2: a) 2,5 nm ve b) 4,5 nm çapındaki Cr@Fe kor@kabuk nanotellerin toplam enerjisinin sıcaklığa bağımlılığı	52
Şekil 4.3: Cr ₂ @Fe ₆ nanotelinin farklı sıcaklıklardaki simülasyon görüntüleri 54	
Şekil 4.4: a) 2,5 nm ve b) 4,5 nm çapındaki Fe@Cr kor@kabuk nanotellerin molar ısı kapasitesinin sıcaklığa bağımlılığı	56
Şekil 4.5: a) 2,5 nm ve b) 4,5 nm çapındaki Cr@Fe kor@kabuk nanotellerin molar ısı kapasitesinin sıcaklığa bağımlılığı	57
Şekil 4.6: 2,5 nm çapındaki Fe ₁ @Cr ₃ kor-kabuk nanotelin çift dağılım fonksiyonunun sıcaklığa göre davranışı.....	59
Şekil 4.7: 2,5 nm çapındaki Cr ₁ @Fe ₃ kor-kabuk nanotelin çift dağılım fonksiyonunun sıcaklığa göre davranışı.....	59
Şekil 4.8: Fe ₁ @Cr ₃ nanoteli için a) kor, kabuk ve bütün bölgelere, ve b) katmanlara göre Lindemann kriterinin sıcaklığa bağımlılığı	62
Şekil 4.9: Cr ₁ @Fe ₃ nanoteli için a) kor, kabuk ve bütün bölgelere, ve b) katmanlara göre Lindemann kriterinin sıcaklığa bağımlılığı	63
Şekil 4.10: a) Fe@Cr ve b) Cr@Fe silindir nanotellerin Lindemann davranışı64	
Şekil 4.11: Cr ₁ @Fe ₃ nanotelinin bazı sıcaklıklarda ortalama kare yerdeğiştirmenin (MSD) zamana göre değişimi	66
Şekil 4.12: Fe ₁ @Cr ₃ nanotelinin bazı sıcaklıklarda ortalama kare yerdeğiştirmenin (MSD) zamana göre değişimi	66
Şekil 4.13: 2,5 nm çapındaki Fe ₂ @Cr ₂ ve Cr ₂ @Fe ₂ nanotelinin difüzyonun sıcaklığa göre değişimi.....	68
Şekil 4.14: Cr ₂ @Fe ₆ nanotelinin çekme işlemi esnasında aldığı zorlanma durumundaki görüntüleri.....	69

Şekil 4.15: 300K sıcaklığında 2.5 nm ve 4.5 nm çapındaki saf Fe ve Cr zor - zorlanma ilişkisi	70
Şekil 4.16: 4 katmanlı Cr nanotelinin 300K, 500K ve 700K sıcaklıklarında zor-zorlanma ilişkisi	70
Şekil 4.17: a) Fe1@Cr3 ve b) Cr3@Fe1 nanotellerinin 300K, 500K ve 700K sıcaklıklarında elastik sınırları içinde zor-zorlanma ilişkisi.....	74

TABLO LİSTESİ

Sayfa

Tablo 3.1: Bazı moleküler dinamik simülasyonu paket programları.....	29
Tablo 3.2: LAMMPS paket programının sıklıkla kullanılan komutları.....	32
Tablo 4.1: Üretilmiş olan nanotellerin atom sayıları ve oranları.	50
Tablo 4.2: Nanotellerin simülasyon sonucu erime sıcaklıklarıyla deneysel verilerin karşılaştırılması.....	53
Tablo 4.3: Fe-Cr bazlı kor@kabuk nanotellerinin katı ve sıvı durumdaki ısı kapasitesi değerleri.....	58
Tablo 4.4: 2,5 nm boyutlarında Fe-Cr nanotellerin difüzyon katsayısı, aktivasyon enerjisi ve 2000 K sıcaklığında difüzyon sabiti değerleri.....	67
Tablo 4.5: Dört katmanlı Fe-Cr kor@kabuk nanotellerinin akma ve çekme dayanımı ile kopma uzaması değerleri.....	72
Tablo 4.6: Sekiz katmanlı Fe-Cr kor@kabuk nanotellerinin akma ve çekme dayanımı ile kopma uzaması değerleri.....	73
Tablo 4.7: Fe, Cr ve Fe-Cr kor-kabuk nanotellerinin 300K, 500K ve 700K sıcaklıklarındaki elastik modülü değerleri.	75
Tablo 4.8: Fe, Cr ve Fe-Cr nanotellerinin 300K, 500K ve 700K sıcaklıklarındaki Poisson oranları	76

SEMBOL LİSTESİ

m	:	Kütle
\ddot{r}	:	İvme
t	:	Zaman
F	:	Kuvvet
H	:	Hamiltonyen
L	:	Lagrange
p	:	Momentum
r	:	Konum
$U(r)$:	Potansiyel Enerji
k_B	:	Boltzman sabiti
N	:	Toplam atom sayısı
T	:	Sıcaklık
ϑ	:	Hız
ρ_i	:	i durumunda yerel elektronik yük yoğunluğu fonksiyonu
Φ_i	:	Kısa mesafeli etkileşim fonksiyonu
C_V	:	Isı Kapasitesi
PE	:	Potansiyel enerji
$n(r)$:	Koordinasyon sayısı
δ_i	:	Lindemann Kriteri
$g(r)$:	Çift dağılım fonksiyonu
MSD	:	Ortalama kare yerdeğiştirme
D	:	Difüzyon
σ	:	Gerilme
ε	:	Gerinim
E	:	Young Modülü
ν	:	Poisson oranı
$V(r_{ij})$:	Çiftler potansiyeli
a_{ij}	:	Örgü sabiti
$\Phi(r_{ij})$:	Atomlararası etkileşim enerjisi
l	:	Uzunluk

ÖNSÖZ

Çalışma sürem boyunca bilimsel katkıları ile bana destek olan, danışmanlığımı üstenen ve her aşamada emeğini ve yardımını esirgemeyen sayın hocam Prof. Dr. Sevgi ÖZDEMİR KART'a teşekkürlerimi sunarım.

Tezin başından sonuna kadar her aşamada katkılarda bulunan değerli hocam Prof. Dr. Hasan Hüseyin KART'a teşekkürlerimi sunarım.

Çalışma sürem boyunca her zaman maddi manevi desteklerini esirgemeyen değerli hocam Doç. Dr. Pınar TUNAY TAŞLI'ya teşekkürü borç bilirim.

Çalışmanın yapım ve yazım aşamalarında bir çok konuda yardımcı olan arkadaşım Ahmet Yesevi KARABACAK'a teşekkürlerimi sunuyorum.

Bu süreçte bir çok zorluğu aşmamda yardımcı olan ve her zaman yanımda duran canım arkadaşlarım Ecem ERCAN OCAK ve Esin ARSLAN'a çok teşekkür ederim.

Ayrıca, bugüne kadar her an yanımda olup, maddi manevi desteklerini esirgemeyen aileme ve yeğenlerime sonsuz teşekkürlerimi sunuyorum.

Temmuz 2021

Alpay ÜZEL

1. GİRİŞ

Günümüz teknolojisinin ilerlemede önemli bir rol oynayan nanobilim ve nanoteknoloji, atom ve molekül mertebesinde 1 ile 100 nm büyüklük ölçeğindeki yapıların fiziksel, kimyasal ve biyolojik özelliklerini araştıran bilim dalıdır. Bir fiziksel büyüklüğün milyarda biri anlamına gelen nano, eski Yunanca'da cüce manasına gelen "nanos" kelimesinden türetilmiştir. Başlarda temel bilimlerde ağırlıklı olarak çalışılan nanoteknoloji, zamanla tıp, mühendislik gibi birçok bilimde yoğun çalışmalar yapıldığı ve elde edilen sonuçları günlük hayatta kullanılabilir hale getiren önemli teknoloji alanı olmuştur. Malzemelerin atomsal boyutta değiştirilip işlenmesine olanak sağlamaktadır. Malzemelerde nanometre boyutlarına inildiğinde makro durumlardaki klasik davranışlarının yerine kuantum davranışları sergilemesi malzemenin yeni özelliklerini ortaya çıkarmaktadır (Golovnev ve diğ. 2006).

Nobel ödüllü fizikçi Richard Feynman, 1959 yılında Kaliforniya Teknoloji Enstitüsünde gerçekleştirilen toplantıda "Altında kullanılacak daha çok yer var" sözü ile nanoteknoloji adı hiç geçmeden ortaya koyduğu yaklaşımla bir çığır açmıştır (Feynman 1959). Bu konuşma 21. yüzyılın Nanoteknoloji Çağı olarak adlandırılmasını sağlamıştır. Feynman'ın öngördüğü düşünceler 1980'li yıllara kadar teknolojik yetersizlikten dolayı gerçekleşemedi. 1980'li yılların başlarında nano boyutta yapı üretmek ve nanomalzemelerin büyüklüklerini ölçmek amacıyla kullanılacak bazı aygıtlar elde edilmesiyle ilk adım atılmış oldu. Bu gelişmeler ile birlikte bilgisayar sistemlerinin de gelişmesiyle atomsal boyutta simülasyon modellerinin kullanılması yeni nanomalzemelerin fiziksel özelliklerinin araştırılmasının önü de açılmıştır. Deneylem mümkün olmadığı veya deney şartları zor olan durumlarda bilgisayar simülasyon hesapları önemli bilgi sağlamaktadır.

Aynı maddeden oluşan nano yapıdaki malzemelerin fiziksel ve kimyasal özelliklerinin, makro yapısındakinden farklı en önemli sebebi yüzey ile hacim oranındaki farklılıktır. Yüzeylerde bulunan atomların atomlararası etkileşimlerinin daha kuvvetli olması, yüzey gerilimi ve enerjilerinin yüksek olması, nano yapıdaki malzemelerin fiziksel özelliklerini önemli ölçüde değiştirmektedir. Bu yüzden nano

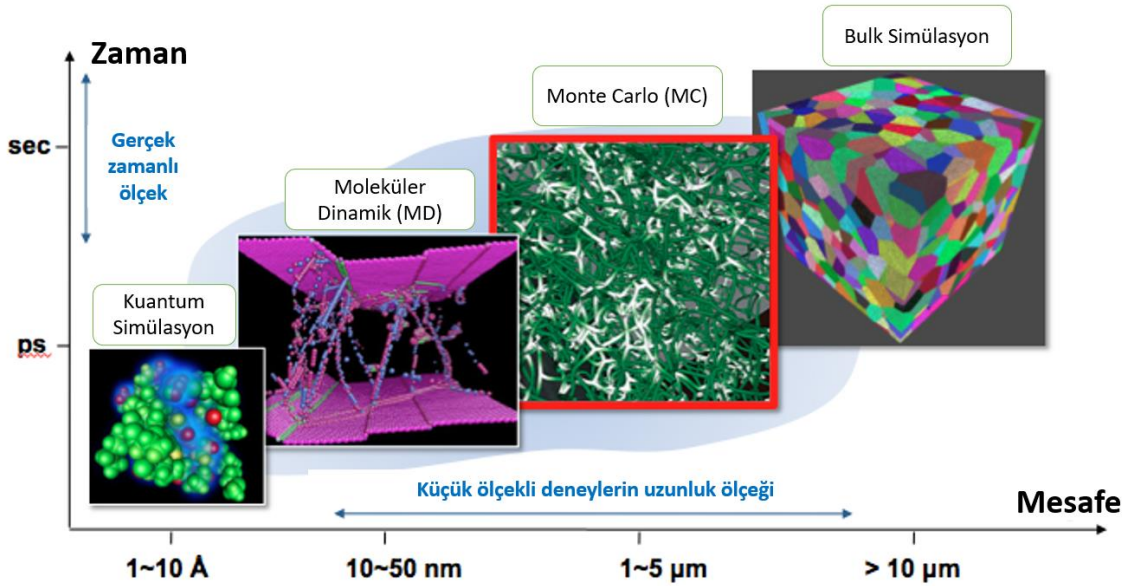
yapıların fiziksel davranışları incelerken makroskobik yapıda uygulanan bilimsel yaklaşımlardan daha farklı yöntemlerin ele alınması gerekmektedir (Golovnev ve diğ. 2006; Dresselhaus ve diğ. 2010).

Nanomalzemeler yeni, faydalı ve farklı optik, manyetik ve mekanik özellikleri sergilemelerinden dolayı katalizör, sensör, manyetik, optoelektronik ve tıp uygulamalarında önemli bir yer almaktadır. Bu uygulamalarda, nanomalzemelerin kimyasal, termal özelliklerinin bilinmesi önem arz etmektedir. Nanomalzemeler kullanılacağı alan için elverişli ve faydalı özellikler göstermesi istenir. Isıya karşı dayanıklılık göstermesi en önemli termal özelliklerdendir. Ayrıca, nanomalzemeler ısınınca yapısının bozulmaması beklenmektedir. Bazı durumlarda yapı içerisinde atomların yer değiştirmesi nanomalzemelerin bazı fiziksel ve mekanik özelliklerini değiştirmektedir. Yeni nanomalzemelerin erime sıcaklıklarının tayin edilmesi uygulama alanlarında kullanılabilirliği mümkün kılar. Nanomalzemeler bulk sistemlere göre farklı erime davranış sergilemektedir. Bulk malzemeler ebatına ve şekline bağlı olmaksızın belli bir erime noktası değerine sahipken, nanomalzemeler şekil ve boyutuna göre farklı erime noktası göstermektedir. Nanomalzemelerde erime yüzeyden başlayıp iç kısma doğru yayılmaktadır. Yüzeyin erime sıcaklığı nanomalzemenin tamamının erime sıcaklığından düşüktür. Bunun sebebi yüzeydeki atomların iç bölgedeki atomlara göre daha az komşu atoma sahip ve zayıf bağlı olmasından dolayı erken erime davranışı göstermektedir. Bu yüzden yüzey atomlarının oranı erime ile doğrudan ilişkili olmaktadır. Nanomalzemelerin yüzey atom oranları şekline ve boyutuna göre değişiklik gösterdiği için, erime sıcaklığı aynı zamanda şekil ve boyutunun bir fonksiyonu olmaktadır.

Özellikle katalizör ve optik uygulama alanlarında ilgi toplayan kor@kabuk tipi nanoyapılar, son yıllarda en hızlı gelişen yapılardandır. Bu nanoparçacıklar, kor malzemesinin bir başka malzeme ile kaplanıp (kabuk) oluşturulmasıyla elde edilen nanoyapılardır. Kor@kabuk nanoyapıları, bulk yapıların fiziksel özelliklerine göre manyetik, elektronik, optik özellikleri yönünden çok değişik fonksiyonel özellik gösteren malzemelerdir. Kor@kabuk yapıdaki malzemelerde görülen fiziksel özellikler, kor ya da kabuktaki malzemelerden her birinin kendi özelliklerinden çok daha farklı özellik gösterebilmektedir. Nanoyapının büyüklüğü ve şeklinin önemi yanında, kor yarıçapı ve kabuk kalınlığı yapıların fiziksel özellikleri oldukça

değiştirebilmektedir. Dolayısıyla kor@kabuk nanoyapılarının oluşturulmasıyla kendi karakteristik özelliklerinden farklı, faydalı ve amacına yönelik kullanımlı yapılar elde edilebilme imkanı sunmaktadır.

Deformasyona karşı nanomalzemelerin gösterdiği esneklik ve dayanıklılık davranışı en çok merak edilen mekanik özelliklerdir. Young modülü ve kopma esnekliğini elde etmek için çekme deneyleri uygulanmaktadır. Makroskobik boyutta bu deneylerin yapılması kolay olmaktadır, fakat deneysel şartlarda mekaniksel detayları ölçmedeki zorluklardan dolayı, yeteri kadar nanomalzemelerin mekaniksel ölçümleri literatürde yer almamaktadır. Bilgisayar simülasyon hesaplamaları yardımıyla nanomalzemelerin çekme deneyleri teorik olarak rahatlıkla yapılabilmektedir. Diğeryandan, nano ve piko çentik deneyleri yapılabilmektedir. Burada malzeme manyetik ve elektrik alanlar yardımıyla titreşim etkisi altına alınır. Geçirmeli ve taramalı elektron mikroskoplarıyla (TEM, SEM) malzemenin doğal titreşim frekansları belirlendikten sonra nanomalzemelerin esneklik modülü hesaplanır. Nano yapılarda yeterli atomik tabakanın oluşmamasından dolayı iç zorlanmanın üretilmemesi nedeniyle elastik modülünün yükseldiği görülmektedir. Bu yönden bakıldığında, küçülen malzeme boyutlarıyla birlikte mekanik özelliklerin de önemli ölçüde değiştiği sonucuna varılmaktadır (Zhu ve diğ. 2012; Li ve diğ. 2014).



Şekil 1.1: Simülasyon ölçeği.

Atomların hareketlerini ve birbiriyle etkileşimlerini kullanan simülasyon yöntemleri bulunmaktadır. Bunlar sistemlerin boyutunun ve zamanının ölçeklendirilmesine göre farklılık göstermektedir. Şekil 1.1'de en sık kullanılan yöntemler simülasyon ölçeğinde verilmiştir. Sırasıyla bakıldığında ilk olarak sistemlerin 1 nm ve daha küçük boyutlarında kuantumsal etkileri belirgin şekilde sistemi etkilediği için parçacıklar arası etkileşimi Schrödinger denklemini çözerek sistemin davranışını belirleyen ab-initio simülasyon yöntemleri bulunmaktadır. Devamında 1-50 nm boyutlarında çok parçacıklı sistemlerin simülasyonlarını, Newton hareket denklemlerini çözümüyle statik ve dinamik özelliklerini elde eden Moleküler Dinamik (MD) simülasyon yöntemi bulunmaktadır. Sonrasında sistemlerin bir statik durumundaki davranışlarını inceleyen Monte Carlo (MC) simülasyon yöntemi ve parçacıkların boyutları arttıkça deneysel çalışma yöntemlerini içeren sonsuz element metotları bulunmaktadır.

MD simülasyon yöntemi diğer yöntemlere göre çok atomlu katılar, sıvılar ve moleküllerin simülasyonlarının zamana göre davranışlarının araştırılmasına olanak sağlamasından dolayı önem taşımaktadır. Bu yöntemi bir sistemin statik özellikleri yanında dinamik özelliklerinin de çalışılmasına olanak sağlamaktadır. Genellikle analitik çözümü tam olarak yapılamayan problemlerin sayısal çözümlerini elde etmeyi ve deneysel çalışmalar ile karşılaştırılmasını amaçlamaktadır (Haile 1992).

MD simülasyon yönteminde, atomlararası etkileşimleri iyi bir şekilde tanımlayan potansiyel fonksiyonları ve oluşturulan sistemdeki atomların ilk hız ve konumlarını tanımlayarak başlanmaktadır. Nümerik metotlar kullanılarak hareket denklemlerinin çözümlenmesiyle de sistemin davranışının anlaşılması sağlanmaktadır.

Metal ve alaşımları için atomlararası etkileşimleri modellemek için çok cisimli etkileşim potansiyel fonksiyonları kullanılmaktadır. Metaller için gerçek deneylere en uyumlu sonuçları bu fonksiyonlar vermektedir. En yaygın kullanılan çok cisimli etkileşimleri dikkate alan potansiyel yaklaşım gömülü atom metodu (EAM) (Daw ve Baskes 1984) olarak bilinmektedir. EAM yaklaşımında kristal içerisindeki bir atomun enerjisi, çekici etkileşimi tanımlayan gömme enerjisi ile elektrostatik itici enerjinin toplamı olarak ifade edilmektedir.

Çok eski zamanlardan itibaren demir metali işlenerek insanlığın kullanımı için çalışmalar yapılmıştır. Zamanla bu maddeden yararlanabilmek için ısıtılmış, şekil verilmiş ve işlenmiştir. 19. yy. sonlarında demir metalinin üzerine yapılan laboratuvar çalışmaları sonucunda kristal yapısındaki önemli değişiklikler ortaya çıkarılmıştır. İlerleyen zamanlarda ise demir alaşımları akademik olarak üzerinde yoğunlaşılacak bir konu haline gelmiştir. Demirin farklı metaller ile alaşımı elde edilerek dayanıklılık, hafiflik, iletkenlik, sertlik, korozyon, yüksek sıcaklığa dayanım, imalatta kolaylık gibi özelliklerinde değişimler sağlanabilmektedir. Fe metali Cr metaliyle alaşım yapıldığında yorulma ve aşınma dayanımında, korozyon dayanımı ve yüksek sıcaklıklara dayanımında artış sağlamaktadır.

Yüksek oranlı krom bazlı ferritik ve martensit çelikler iyi termal özellikler, mükemmel mekaniksel davranışlar ve radyasyona yüksek direnç göstermelerinden dolayı nükleer güç ve yağ rafineri uygulamalarında yaygın bir şekilde kullanılmaktadır (Baluc 2006; Garner diğ. 2000). Nükleer reaktörlerde kullanılan malzemeler ışınlama altında yapısal geçişlere maruz kalmaktadır. Bu da malzemelerin mekaniksel ve aşınma özelliklerini yıpratmaktadır. Özellikle, nötron radyasyonuna maruz kalan malzemede şişme gözlenmektedir (Grammatikopoulos ve diğ. 2014). Saf Fe malzemesine Cr'un eklenmesi ışınlama ile uyarılmış şişme büyük bir oranda azaldığı gözlenmiştir (Little ve Stow 1979). % 3-9 oranında Cr' un içerdiği Fe-Cr alaşımlarında bu şişmenin minimum düzeyde olduğu diğer bir çalışmada rapor edilmiştir (Fry ve diğ. 2002).

Verimli çalışan ve yapısal olarak iyi tasarlanmış yapısal malzemeyi seçmek, nükleer güç fabrikalarında güvenli ve gerçek operasyonları sağlayabilmek için önemlidir. Işınlama altında, yapısal faz dengesizliği FeCr sisteminde de gözlenmektedir (Costa ve diğ. 2006): yüksek oranlı Cr α' fazı ve yüksek oranlı Fe α fazı denilen iki bcc yapıya faz geçişi (Danoix ve Auger 2000) veya σ Fe-Cr fazı adı verilen çökeltme (precipitation) (Kubachewski 1982; Dubiel ve Inden 1987). Fakat, ışınlamanın etkisi ile bu alaşımlarda oluşan bu yapısal değişimler, kümelenme ve kusur gibi etmenler oluşmakta, bunlar da malzemenin gevrekliğini artırmaktadır. Malzemenin mekaniksel davranışı radyasyon altında kümelenme ve kusur çeşitlerine bağlı olacaktır. Bu mekaniksel davranışların altında yatan mikroskobik etmenleri iyi tanımlamak önemlidir. Deneysel çalışmalar bu konuda zaman ve kaynak açısından

maliyetli, hatta ekstreme durumlarda gerçekleştirilmesi mümkün olmadığı için, teorik simülasyon çalışmaları FeCr alaşımlarının radyasyona cevabı konusunda iyi bir araçtır. Son yıllarda, FeCr alaşımında yüksek oranlı krom kümelenmelerin oluşumu ve büyümesine yönelik bir çok atomik simülasyon çalışmaları gerçekleştirilmiştir. Vörtler ve arkadaşları (2008) 5 nm büyüklüğündeki %95 oranındaki Cr içeren kümelerin Fe-Cr içindeki çökeltme özelliklerini moleküler dinamik simülasyon yöntemi ile incelemişlerdir. Tikhonchev ve arkadaşları (2013) ise, küresel yüksek oranlı Cr içeren farklı büyüklükteki kümelerin (1-5 nm) 15 keV enerjili döküm (cascade) etkisinde kusurların arttırdığını rapor etmişlerdir. Daha sonraki yıllarda, aynı çalışma grubu % 9 Fe içeren Fe-Cr sistemine farklı basınç değerlerinde ve farklı yönlerde mekaniksel yükleme uygulayarak, noktasal kusur enerjilerine etkilerini incelemiştir (Caro ve diğ. 2005). Ayrıca konsantrasyon bağımlı model (Concentration Dependent Model, CDM) potansiyelin (Tikhonchev ve diğ. 2017) yeni biçimi farklı Cr oranlarında Fe-Cr sistemindeki noktasal kusur oluşma enerjilerini incelemek için geliştirilmiş (Rio ve diğ. 2011) ve sonuçları farklı noktasal kusur konfigürasyonları için elde edilen Yoğunluk Fonksiyonel Teori (Density Functional Teori, DFT) hesap sonuçları (Elhart ve diğ. 2008) ile uyumlu olduğu rapor edilmiştir.

Yapılan bu bulk hesapları yanında, son yıllarda nano-boyuttaki Fe ve Fe-Cr alaşımların mekaniksel özelliklerin araştırılması önemli hale gelmiştir. Nanomalzemeler, özellikle bir boyuttaki nanoyapılarda, yüksek yüzey-hacim oranına sahip oldukları için, bulk özelliklere göre daha farklı ve verimli özellikler göstermektedir. Lee ve arkadaşları (2003) farklı oran Cr (% 0-20 oranında) konsantrasyonunda 8-20 nm çapında ferromagnetik FeCr nanotellerini üretmişler ve Cr oranının yapısal özelliklerine etkisini araştırmışlardır. Bu deneysel çalışmanın üzerine, Sandoval ve Urbassek (2009) Fe nanotellerin aksenal gerilme altında oluşan katı-katı faz geçişlerini farklı sıcaklıklarda (Victoria ve diğ. 1984), çaplarda (Scott ve diğ. 1999) ve kristal oryantasyonlarında (Dong ve diğ. 2000) MD simülasyon hesapları ile incelemişlerdir. Farklı MD simülasyon çalışmaları, Fe nanotellerin çiftlenme mekanizmasından doğan superelastik özellikleri (Li ve diğ. 2010) ve sabit veya farklı (Li ve Han 2017) gerilme hızlarında oryantasyona bağımlı çekme (tensile) deformasyon cevaplarını incelemişlerdir. Son yıllarda, Fe ve dört farklı (% 5, 10, 15 ve 20) Cr konsantrasyon oranındaki FeCr alaşım nanotelleri 2, 4 ve 6 nm

çaplarında silindir yapıda modellenip, farklı iki potansiyel modelinde MD simülasyon çalışması gerçekleştirilmiştir. Cr oranının ve telin büyüklüğünün elastik ve plastik özelliklerine etkisi, ve ikizlenme mekanizmasının potansiyel cinsine ve Cr konsantrasyonuna bağımlı olmadığı gösterilmiştir (Byggmästar ve diğ. 2015). Anlaşıldığı üzere, FeCr nanotellerin kor@kabuk yapısındaki termal ve mekaniksel özellikleri literatürde araştırılmamıştır.

Bu tez çalışmasında, FeCr bazlı kor@kabuk yapısındaki silindir nanotellerin termal ve mekanik özellikleri, EAM potansiyel (Daw ve diğ 1984) parametreleri kullanılarak MD simülasyon yöntemi ile incelenmiştir. Nanotellerin çapları 2,5 nm ve 4,5 nm civarı ve uzunlukları çaplarının dört katı olacak tarzda bcc kristal yapıda silindirik olarak tasarlanarak, nanotellerin büyüklüğünün termal ve mekaniksel özellikleri araştırıldı. İç kısımda (kor) Fe, dış katmanda (kabuk) ise Cr olacak şekilde Fe@Cr tarzında oluşturulan nanotellerin yanında, kor ve kabuktaki malzemeler yer değiştirilerek aynı yöntemle elde edilen sonuçlar karşılaştırılıp, kor veya kabuk bölgesindeki malzemenin etkisi de araştırıldı. Aynı zamanda, aynı büyüklüklerde saf Fe ve Cr nanotellerin özellikleri karşılaştırma açısından çalışıldı. Tez çalışmasında düşünülen sistemlerin toplam enerji, ısı kapasitesi, çift dağılım fonksiyonu, Lindemann kriteri ve difüzyon sabitleri sıcaklığa göre davranışları incelenerek, nanotellerin erime sıcaklığı belirlendi. Nanotellere çekme işlemi uygulanarak, zorlanma bağıntısından akma ve çekme dayanımı, elastik modülü ve Poisson sabiti gibi mekaniksel özellikleri tayin edildi. Bu çalışmada elde edilen MD simülasyon sonuçları literatürde ilk olup, deneysel çalışmalara öncülük edecek niteliktedir.

Bu tez çalışmasında; 2. Bölümde nanoteller hakkında bilgi verilmiş olup, üretim teknikleri ve fiziksel özellikleri anlatılmıştır. 3. Bölümde MD simülasyon yöntemi ile ilgili detaylı bilgi verilmiş olup, hareket denklemleri, algoritmalar, atomlararası etkileşim potansiyel fonksiyonları, termodinamik, yapısal, dinamik ve mekanik özellikler anlatılmıştır. 4. Bölümde ise elde edilen veriler sunulmuş olup, detaylıca sonuçlar tartışılmıştır. Son bölümde ise tezin önemi ve sonucu verilmiştir.

2. NANOTELLER

Nanoteller, 1 – 100 nm aralığında çapa sahip deęişik uzunluklarda, iletken ya da yarı iletken olan tellerdir. Kısaca nanotellerin genişlięi nanometre boyutlarında olup, uzunlukları ise istenilen deęerde olabilmektedir. Yapılar nano mertebesine inildikçe kuantum mekanik özellikleri arttığı için bu tellere kuantum telleri de denilmektedir. Uzunluk-genişlik oranı çok yüksek olduęu için genellikle tek boyutlu gibi kabul edilmektedirler. Nanoteller sahip oldukları manyetik, kimyasal, optik, elektriksel ve termoelektrik özellikleri bakımından önemli kullanım yeri bulmuş olup dięer nanomalzemelerden öne çıkmıştır.

Son yıllarda metalik nanoteller nanoteknoloji alanında büyük ilgi toplamıştır. Elektronik sistemlerin moleküler seviyelere küçültülmesi (Moore 1965; Rodrigues ve Ugarte 2001), mükemmel elektriksel iletkenlik sergileyen nano ölçekli temaslar gerektirmektedir. Geçiş metali nanotelleri bu amaç için mükemmel adaylar olarak gösterilmiştir (Kondo ve Takayanagi 2000). Ayrıca, kuvvetler, elektrik ve ısı gibi fiziksel uyarılara karşı yüksek hassasiyetleri ve ultra yüksek frekanslar altında çalışabilme yetenekleri nedeniyle, metalik nanoteller aynı zamanda nanoelektromekanik sistemler (NEMS) olarak da yaygın olarak kullanılmıştır (Husain ve dię. 2003). Au nano parçacıklar tarafından sergilenen mükemmel biyoyumluluk ve katalizör uygulamalar için kullanılan Pt nanomalzemelerin olağanüstü yüzey reaktivite özellikleri, biyomedikal ve biyokimyasal alanlarda faydalı uygulamalar oluşturmuştur. Metalik nanotellerin muazzam uygulama potansiyelinden dolayı elektriksel (Dubois ve dię. 1999), termal (Kang ve Hwang 2002), mekanik (Finbow ve dię. 1997; Mehrez ve Ciraci 1997), manyetik (Reich ve dię. 2003) ve optik (Mock ve dię. 2002) özellikleri konusunda önemli bilimsel araştırmaları gerçekleştirilmiştir.

Özellikle elektronik özellikleri, mekanik özellikleri ve termal özellikleri üzerinde odaklanan metalik nanoteller üzerinde kapsamlı deneysel çalışmalar yapılmıştır. Helis yapıda ultra ince altın ve platin nanoteller veya nanotüpler, elektron ışınlanması ile oluşturulmuştur (Oshima ve dię. 2002). 2 nm'den küçük metalik nanotellerin tavlama sonrasında fcc örgüsünden helis veya çok kabuklu

yapıya geçtiği gözlemlenmiştir (Wang ve diğ 2001). Özellikle Au, Cu ve Ni nanotellerin ultra ince (Kang ve Hwang 2001) ve monatomik zincirler (Burki ve diğ. 2003) yapısı oluşturularak, mekanik özellikleri üzerine geniş çalışmalar yapılmıştır.

Nanotellerin boyutu çok küçük olması nedeniyle, onları deneylerle hassas bir şekilde işlemek, konumlarını belirlemek ve görüntülemek zordur. Aynı zamanda, büyük gerilme hızlarında şok dalgaları ile deneysel olarak oluşturulan dinamik yapısal değişiklikler hakkında ayrıntılı bilgi elde etmek neredeyse mümkün değildir. Şimdiye kadar nanotellerin plastik deformasyonu üzerine birçok çalışma atomistik simülasyonlar yoluyla yapılmıştır. Alevi ve arkadaşları (2010) MD simülasyonlarını kullanarak çeşitli yükleme koşulları altında Ni-Al nanotellerin mekanik özelliklerini yürütmüşlerdir. Zhu ve Shi (2011), Fe nanotellerinde sıkıştırma zoru tarafından indüklenen yeniden yönlendirme ve psödo-elastisiteyi sunmuş olup, yeniden yönlendirmenin karmaşık bir sıcaklık bağımlılığını bulmuşlardır. Sandoval ve arkadaşları (2009) Fe nanotellerinin ilk yönelime bağlı olarak yeniden yönelime ve faz dönüşümüne uğradığını rapor etmişlerdir. Li ve arkadaşları (2010), MD simülasyonlarını kullanarak sabit bir gerilme altında yükleme/boşaltma yoluyla tersinir bir ikizleme mekanizmasıyla W, V, Fe ve Mo bcc nanotellerinde oluşan süper-esnekliğe dair detaylı bilgiler vermişlerdir. Wang ve arkadaşları (2011), MD simülasyonları ile bcc Mo nanotellerindeki deformasyon mekanizmalarını incelemişlerdir. Hem aksenal yönelimin hem de tel kalınlığının deformasyon yollarının belirlenmesinde önemli roller oynadığını bildirmişlerdir. Son yıllarda, Sainath ve arkadaşları (2015), MD simülasyonlarını kullanarak $1 \times 10^8 \text{ s}^{-1}$ sabit gerilme hızında bcc Fe nanotelinin boyuta ve oryantasyona bağlı çekme deformasyonunu araştırmışlardır.

Byggmaster ve ark. (2015) saf Fe ve FeCr nanotellerin akma dayanımı ve Young modülünü Cr yoğunluğuna bağlı olarak değişimini incelemek için MD simülasyonu yapmışlardır. Yapılan simülasyon çalışmasında, [001] doğrultusunda tasarlanan yapılar çekme işlemi sırasında [110] doğrultusuna yöneldiği görülmüştür. Sonuçta, akma dayanımı, ince Fe nanoteller için en yüksek olduğu ve Cr konsantrasyonunu veya çapını arttırmak zayıflatıcı bir etkiye neden olduğu anlaşılmıştır.

2.1 Üretim Teknikleri

Nanomalzemelerin iki farklı üretim yöntemi bulunmaktadır. Bunlar;

- Yukarıdan aşağı doğru
- Aşağıdan yukarı doğru

şeklindedir. Yukarıdan aşağı doğru üretim yönteminde katı bir maddenin heykeltraş gibi yontulmasıyla elde edilmektedir. Aşağıdan yukarı doğru üretim yönteminde ise parçacıkların birleştirilmesiyle elde edilmektedir. Yukarıdan aşağı doğru üretim yönteminde zaman alıcı, pahalı ve büyük miktarlar için uygun değildir. Fakat aşağıdan yukarı ise atomsal seviyeden başlayıp nano mertebesine ulaşılmaktadır. Üretim yöntemi maliyet olarak uygun olmaktadır. Bu yüzden çoğunlukla aşağıdan yukarı yöntemi kullanılmaktadır. Aşağıdan yukarı yaklaşımında maddenin sahip olduğu faz haline göre sınıflandırılmaktadır. Bunlar gaz fazı yöntemi ve sıvı fazı yöntemi şeklindedir. Gaz fazı yöntemleri buharlaştırma ve kimyasal buhar çökmesi şeklinde gruplandırılmaktadır. Sıvı fazı yönteminde de en önemlisi Sol-jel yöntemidir (Kayır ve Baççıl 2010; Nouailhat 2008).

2.2 Nanotellerin Fiziksel Özellikleri

Nanoteller genellikle uzunluk-genişlik oranı 1000'in üzerinde olduğu için bir boyutlu olarak kabul edilmektedir. Bulk ve üç boyutlu malzemelere göre çok farklı ve ilginç özellikler göstermektedir. Metalik ve yarı iletken malzemelerde üretilmiş nanoteller farklı cihaz uygulamalarında kendine özgü fiziksel özellik göstermesinden dolayı bir çok araştırmaya konu olmuştur. Yüksek hacim-yüzey oranları, yüksek bağlanma enerjileri, elektron basamaklarının yoğunluğu gibi özelliklerinden dolayı benzersiz termal, mekanik, optik, elektriksel ve kimyasal özellikler göstermektedir (Bear ve diğ. 2004; Xiang ve diğ. 2006).

Nanotellerin elektron iletim özellikleri elektronik uygulamalar için oldukça önemlidir. Nanotelin yüzey özellikleri, kristal yapısı, kimyasal kompozisyonu, çapı gibi değişkenler elektron taşınımını etkileyen durumlardır.

Nanotellerin ısı iletkenlikleri de bulk malzemeye göre değişiklik göstermektedir. Yapılan çalışmalarda nanotellerin çapının değişimi termal iletkenliği direkt etkilediği görülmüştür. Bunun nedeni artan çap ile birlikte yapının boyunun büyümesi, taşıyıcı elektronların sınırlarla ve birbiriyle olan saçılmalarının azalmasıdır.

Nanotellerin optik özellikleri şekline, boyutuna ve kompozisyona bağlı olarak değişiklik göstermektedir. Yapı üzerine elektromanyetik dalga gelmesiyle ortaya çıkan elektrik alanı, yüzey iletim elektronlarının belli bir frekansta ortaklaşa salınımlarıyla cevap vermesi ile oluşan etkiye yüzey plazmon rezonansı denmektedir. Bu etkiye örnek olarak; altın metalinin bulk yapıda iken üzerine düşen ışığın yansınmasıyla sarı görünmesi, nano yapıda iken ise mavi renkte görünmesi verilebilir.

3. MATERYAL VE METHOT

3.1 Moleküler Dinamik Simülasyonu

Moleküler dinamik, atomların ve moleküllerin faz uzayında gösterilen noktalar boyunca, klasik mekanik yasaları temel alınarak oluşturulmuş hareket denklemlerinin çözülmesini sağlayan simülasyon yöntemidir.

Moleküler dinamik metodu ilk kez Alder ve Wainwright tarafından 1957'de yazılan bir makalede sert küre sisteminin katı ve sıvı bölgeleriyle ilgili faz diyagramını incelemek için kullanılmıştır. Moleküler dinamik metodunda asıl önemli gelişme 1964'te Rahman'ın sıvı argonun birçok özelliğinin incelenmesiyle yaşandı. Rahman, 864 atomlu sıvı argon için sürekli bir potansiyel kullanarak Lennard-Jones potansiyelini (Jones, 1924) CDC 3600 makinesi üzerinde denemiştir. Böylelikle periyodik sınır şartında ilk simülasyonu gerçekleştirdi (Rahman 1964). Rahman'ın bu çalışmada kullanmış olduğu bilgisayar kodu halen pek çok moleküler dinamik programında kullanılmaktadır. Verlet (1967), Andersen (1980), Nose (1984), Carr ve Parrinello (1985), Allen ve Tildesly (1987), Haile (1992) gibi isimlerin yapmış oldukları katkı ile moleküler dinamik simülasyon yöntemi oldukça önemli bir yöntem haline gelmiştir. Günümüzde nanobilim alanında pek çok problemin çözümünde önemli rol oynamaktadır.

Son yıllarda, bilim insanları bilgisayar sistemlerinin teori ile deney arasında bir köprü görevi gördüğünün farkına vardılar. Bilgisayar simülasyonu ile elde edilen veriler daha önceki uygulanan sistemlerden daha gerçekçi şekilde elde edilmesini sağlamaktadır.

Moleküler dinamik, birbiriyle etkileşen atomların zamana bağlı durumlarını klasik mekanik yasaları kullanılarak hareket denklemlerinin çözümüyle elde edilen bir bilgisayar simülasyon tekniğidir. Bu tekniğin prensibinde ilk konumları ve hızları verilen bir sistemin daha sonraki durumları, zaman içerisindeki gelişimini elde etmektir. Bu yöntemle sistemlerin hem statik hem de dinamik özellikleri elde edilir. MD yöntemi, çok parçacıklı sistemlerin etkileşmesini izah eden ve teori ile deney

arasında köprü görevi üstlenen verimli bir simülasyon yöntemidir. MD simülasyonları üç aşamada gerçekleşir; ilk olarak sistemlerin başlangıç koşullarının belirlenmesi, ikincisi sistemlerin integrasyonu ve enerjinin dengelenmesi, ve son olarak sonuçların alınması ve analizlerin gerçekleştirilmesi şeklindedir. Bu yöntemlerde hareket denklemlerinin çözülebilmesi için başlangıç şartlarının verilmesi gerekmektedir. Her bir parçacığın konumu, ilk hızı ve etkileşim potansiyelinin tayin edilmesi ile MD simülasyonlarına başlanabilir. Bu bilgilerin verilmesinin ardından sistemi meydana getiren parçacıkların faz-uzay yörüngeleri Newton yasaları ile zamana bağlı olarak hesaplanır. Sistemin hareket denklemleri Lagranjiyen veya Hamiltonyen dinamiğinde tanımlanır. Sonlu farklar metotları kullanılarak hareket denklemleri nümerik olarak çözümlenerek, her bir dt küçük zaman aralığında parçacıkların yörüngeleri (konum, hız, ivme vb.) elde edilir. Bu nümerik metotlardan en yaygın kullanılanı Verlet algoritmasıdır. Bir çok MD adımı ile uygun istatistik kümelerinde sistem dengeye getirilir. Parçacıkların denge durumundaki yörüngeleri kullanılarak statik ve/veya dinamik özellikleri elde edilir.

3.1.1 Newton Dinamiği

Newton dinamiğinde bir parçacığın yaptığı hareketin sebebi olarak o parçacığın üzerine bir F_i kuvveti gösterilmektedir. Bu parçacığın hareketi ile uygulanan kuvvet arasındaki ilişki Newton'un ikinci yasası ile tanımlanmaktadır;

$$\vec{F}_i = m\ddot{\vec{r}}_i \quad . \quad (3.1)$$

Burada, m parçacığın kütlesi, \vec{r}_i parçacığın ivmesidir. Parçacığa etkiyen net kuvvet ve parçacığın kütlesi bilindiği için ivmeleri bulunabilmektedir. Parçacığın kütlesi hızdan ve zamandan bağımsız olduğu için parçacığın ivmesi;

$$\ddot{\vec{r}}_i(t) = \frac{d^2\vec{r}_i}{dt^2} \quad (3.2)$$

şeklinde tanımlanmaktadır. Burada, r_i bir koordinat sistemine göre parçacığın konumunu temsil eden bir vektördür. Parçacık üzerine etkiyen net kuvvet sıfır ise parçacığın hızı sabit, ivmesi de sıfır olmaktadır.

3.1.2 Hamiltonyen Dinamiği

Newton'un ikinci yasası zamana açıkça bağlı değildir, ama moleküler kuvvetler ve konumlar zamana bağlı olarak değişmektedir. Bu nedenle zamandan bağımsız hızların ve konumların fonksiyonu Hamiltonyen (Mavrantzas 2006) olarak isimlendirilmektedir.

$$H(r_N, p_N) = E = \text{sabit} \quad . \quad (3.3)$$

Burada, i. parçacığın momentumu p_i ,

$$p_i = m\dot{r}_i = m \frac{dr_i}{dt} \quad (3.4)$$

şeklinde verilmektedir. Buna göre yalıtılmış bir sistemde toplam enerji Hamiltonyen olarak bilinir ve N parçacık sayısı için;

$$H(r_N, p_N) = \frac{1}{2m_i} \sum_i p_i^2 + U(r_N) = \text{sabit} \quad (3.5)$$

şeklinde yazılmaktadır. Burada $U(r_N)$ potansiyel enerjidir ve moleküller arasındaki etkileşmeden meydana gelmektedir. Hareket denklemlerine ulaşılması için öncelikle Hamiltonyen'in zamana göre türevi alınmaktadır;

$$\frac{dH}{dt} = \sum_i \frac{\partial H}{\partial p_i} \dot{p}_i + \frac{\partial H}{\partial r_i} \dot{r}_i + \frac{\partial H}{\partial t} \quad . \quad (3.6)$$

Hamiltonyen açıkça zamana bağlı değilse, sabit olduğu için türevi alındığında sıfır olmaktadır ve

$$\frac{dH}{dt} = \sum_i \frac{\partial H}{\partial p_i} \dot{p}_i + \frac{\partial H}{\partial r_i} \dot{r}_i = 0 \quad (3.7)$$

şeklinde genel bir çözüm elde edilmektedir. Yalıtılmış bir sistemde Hamiltonyen'in zamana göre türevi alındığında,

$$\frac{dH}{dt} = \frac{1}{m} \sum_i p_i \dot{p}_i + \frac{\partial U}{\partial r_i} \dot{r}_i = 0 \quad (3.8)$$

sonucu elde edilmektedir. Bu denklemler birlikte çözüldüğünde her i parçacığı için,

$$\frac{\partial H}{\partial p_i} = \frac{p_i}{m} = \dot{r}_i \quad (3.9)$$

ile

$$\frac{\partial H}{\partial r_i} = \frac{\partial U}{\partial r_i} \quad (3.10)$$

bağıntıları elde edilir. Eşitlik (3.9) ve (3.10)'u Denklem (3.7)'de yerine yerleştirdiğimizde,

$$\sum_i \dot{r}_i \dot{p}_i + \frac{\partial H}{\partial r_i} \dot{r}_i = \sum_i \left(\dot{p}_i + \frac{\partial H}{\partial r_i} \right) \dot{r}_i = 0 \quad (3.11)$$

bağıntısı elde edilir. Parçacıkların hızları birbirinden bağımsız olmasından dolayı Denklem (3.11)'deki bağıntı herhangi bir parçacık için,

$$\frac{\partial H}{\partial r_i} = -\dot{p}_i \quad (3.12)$$

şeklinde yazılabilmektedir. Denklem (3.4)'te verilen momentumun türevini alıp, Denklem (3.12)'de yerine koyduğumuzda,

$$\frac{\partial H}{\partial r_i} = -m\ddot{r}_i \quad (3.13)$$

haline gelmektedir. Bu denklem Newton'un ikinci yasaını vermektedir;

$$\vec{F}_i = -\frac{\partial H}{\partial r_i} = -\frac{\partial U}{\partial r_i} \quad (3.14)$$

Bu bağıntı Newton dinamiği ve Hamiltonyen dinamiği arasındaki ilişkiyi göstermektedir.

3.1.3 Algoritmalar

Hareket denklemlerinde kullanılacak potansiyel enerji fonksiyonlarının karmaşık yapısından dolayı hareket denklemlerinin analitik çözümünü bulmak mümkün olmayabilmektedir. Bu sebepten dolayı hareket denklemlerinin nümerik olarak çözülme ihtiyacı oluşmuştur. Bu denklemlerin nümerik olarak integrasyonu için bir çok algoritma geliştirilmiştir. Bu algoritmalar arasında Verlet (Verlet, 1967), Leap-frog Verlet, Hız Verlet (Swope ve diğ. 1982), Beeman (Beeman, 1976) ve önerme-düzelme (Rapaport, 1997) integral yöntemleri moleküler dinamikte en yaygın kullanılan metotlardır.

3.1.3.1 Verlet Algoritması

Verlet algoritması, Newton hareket denklemlerinin sayısal olarak çözümlenmesini, enerji korunumunu ve simülasyonların süresinin kısılmasını sağlayan bir algoritmadır. Algoritma ilk defa 1791'de Delambre tarafından kullanılmıştır ve sonrasında birçok defa geliştirilmiştir (Verlet, 1967). Son olarak 1960'larda Loup-Verlet tarafından moleküler dinamik simülasyonlarında kullanılmak üzere yeniden geliştirilmiştir. Bu algoritmada Taylor seri açılımını konum zamana göre $r(t + dt)$ ve $r(t - dt)$ olacak şekilde yapılır. Bu şekilde moleküler dinamik simülasyonunda gerekli başlangıç konum ve zaman ifadelerinden yararlanılarak, sayısal olarak bir sonraki adım,

$$r(t + dt) = r(t) + dtv(t) + \frac{dt^2}{2}\ddot{r}(t) + \frac{dt^3}{6}\dddot{r}(t) + O(dt^4) \quad (3.15)$$

ve bir önceki adım;

$$r(t - dt) = r(t) - dtv(t) + \frac{dt^2}{2}\ddot{r}(t) - \frac{dt^3}{6}\dddot{r}(t) + O(dt^4) \quad (3.16)$$

şeklinde hesaplanmaktadır. Bu denklemlerin toplanmasıyla,

$$r(t + dt) = 2r(t) - r(t - dt) + dt^2\ddot{r}(t) + O(dt^4) \quad (3.17)$$

denklemini elde edilmektedir. Burada dt küçük zaman adımı, $r(t + dt)$ parçacığın t zamanından dt zaman sonraki yeni konumu, $r(t - dt)$ parçacığın dt zaman önceki konumu, $\vartheta(t)$ konumun birinci türevi olan hızı, $\ddot{r}(t)$ ifadesi ivmeyi temsil etmektedir. Bu denklem Newton'un ikinci dereceden hareket denklemlerini çözmek ve atomik konumları mevcut simülasyonlar için gerekli fiziksel özelliklerini hesaplamak için çok avantaj oluşturmaktadır.

Moleküler dinamik simülasyonlarında simülasyon adım sayısının artırılması hesaplamaların daha hassas ve doğru yapılmasını sağlamaktadır. Fakat bu durum işlem süresinin uzamasına neden olmaktadır. Bu algoritmalar işlem süresinin daha az ve verimli kullanılması açısından önem arz etmekte olup, daha gerçekçi ve deneysel verilere yakın sonuçlar elde etmemizi sağlamaktadır.

3.1.3.2 Hız - Verlet Algoritması

Hız Verlet algoritması aynı anda hem atomik konumların hem de hızların hesaplanmasını sağlamaktadır. Bu sebeple Verlet algoritmasının en eksiksiz şekli olarak kabul edilmektedir. Algoritmalar arasında daha yaygın olarak kullanılan Hız-Verlet algoritması ilk olarak 1982 yılında kullanılmıştır (Swope ve diğ. 1982). Verlet algoritmasındaki ilk zaman adımı Denklem (3.18) çözüldüğünde aşağıdaki hız denklemini (3.19) elde edilmektedir;

$$r(t + dt) = r(t) + dt\vartheta(t) + \frac{dt^2}{2}\ddot{r}(t) \quad (3.18)$$

$$\vartheta(t + dt) = \vartheta(t) + \frac{dt}{2}[\ddot{r}(t) + \ddot{r}(t + dt)] \quad (3.19)$$

Bu ifadeye Hız-Verlet algoritması denilmektedir. Verlet algoritmasına göre basit, uygulaması kolay ve doğruluk oranı daha yüksektir. İntegrasyon döngüsünde aşağıdaki yol izlenir:

1. Sistemin verilen ilk durumundan başlanılır.
2. Yeni pozisyon hesaplanır;

$$r(t + dt) = r(t) + dt\vartheta(t) + \frac{dt^2}{2}\ddot{r}(t) \quad . \quad (3.20)$$

3. Ara hız hesaplanır;

$$\vartheta\left(t + \frac{dt}{2}\right) = \vartheta(t) + \frac{dt}{2}\ddot{r}(t) \quad . \quad (3.21)$$

4. Yeni ivme hesaplanır.
5. Sonuçta, yeni hız hesaplanır;

$$\vartheta(t + dt) = \vartheta\left(t + \frac{dt}{2}\right) + \frac{\ddot{r}(t)}{2}(t + dt)dt \quad . \quad (3.22)$$

3.2 Atomlararası Etkileşim Potansiyelleri

MD simülasyonlarında küçük sayıdaki atomlardan milyonluk atomlara kadar oluşan nanomalzemelerin fiziksel durumlarını iyi tanımlamanın yolu atomlararası etkileşimleri doğru veren potansiyelleri belirlemek gerekir. Atomlararası potansiyeller; sistemin doğasını, simülasyon ve modelleme sonuçlarının tutarlılığını belirlemekle birlikte nanomalzemelerin gerçek davranışlarını farklı şartlar altında tasvir eder. Bu potansiyeller matematiksel bir fonksiyonla örgü sabiti gibi birçok değişkenin düzenlenmesiyle bir dizi yaklaşım kullanılarak elde edilir. Sistemin potansiyeli doğru bir şekilde karakterize edildiğinde, oluşan sistemin mekanik, termal, yapısal ve dinamiksel gibi birçok özelliği doğru ifade edilmesine olanak verir. Atomlararası potansiyel fonksiyonunun sistemin davranışını iyi temsil etmesi, MD simülasyon sonucundan elde edilen verilerin deneysel verilerle uyumluluk içinde olmasını sağlar. Elde edilen sonuçların doğruluğunu sağlamak için atomlararası potansiyeller esneklik, doğruluk, transfer edilebilirlik, hesaplama verimliliği özelliklerini taşıması gerekmektedir (Kart 2004).

MD simülasyonu sistemde oluşturulan her bir atom birbiriyle olan etkileşimi incelendiği için atomlararası mesafe önemlidir. 0,5 nm'den daha uzun atomlararası mesafede Van der Waals kuvvetleri baskın hale gelir. Sistemin toplam potansiyel enerjisi atomların ikili etkileşimlerinin toplam fonksiyonu şeklinde elde edilir. Buna göre temel olarak ikili etkileşimleri tanımlayan potansiyel enerji (U);

$$U = U(r_{12}) + U(r_{13}) + U(r_{14}) + \dots + U(r_{23}) + \dots = \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=i+1}^N U(r_{ij}) \quad (3.23)$$

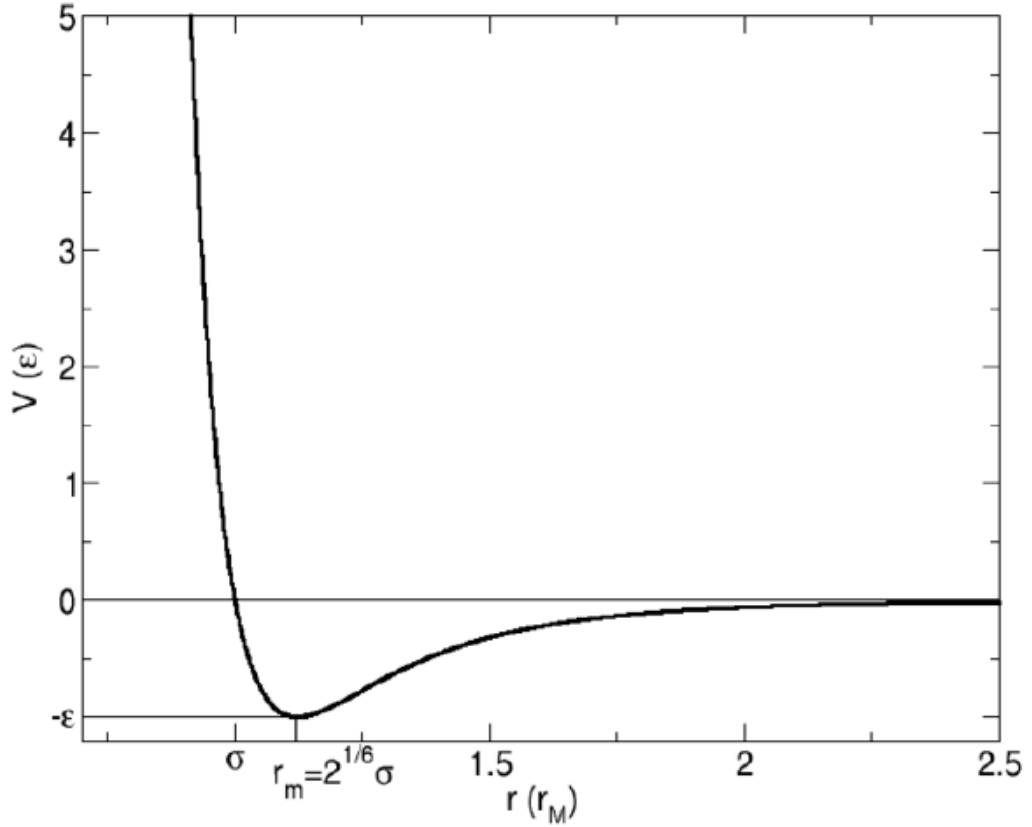
şeklinde ifade edilir. Burada N toplam atom sayısı, r_{ij} ise i . ve j . atomlararası mesafedir.

3.2.1 Lennard-Jones Potansiyeli

İkili etkileşimlerde temel alınan Van der Waals kuvveti r mesafeleri için zayıf çekici kuvvet ile güçlü itici kuvvetin olmasıdır. İkili etkileşimlerde en çok kullanılan ve en temel etkileşim potansiyeli Lennard-Jones potansiyelidir (Jones, 1924). Aşağıdaki denklem ile tanımlanır;

$$U(r) = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] \quad (3.24)$$

Burada ε enerji kuyu derinliği, σ ise iki parçacık arasındaki potansiyelin sıfır olduğu uzaklıktır. Bu ifadede ilk terim atomların birbirine karışmasını engelleyen itici potansiyel etkileşmesini tanımlarken, ikinci terim ise atomların birbiri arasındaki mesafeyi açmayı engelleyen çekici etkileşmeyi verir. Denklem (3.24)'deki ε ve σ ifadeleri potansiyel parametrelerdir ve Şekil 3.1'de gösterilmiştir.



Şekil 3.1: Lennard-Jones etkileşim potansiyeli.

Lennard-Jones etkileşim potansiyeli ikili etkileşimlerde itici ve çekici kuvvetleri çok iyi tanımlayan en temel potansiyeldir, fakat sadece ikili etkileşim bir sistemi tanımlamak için yeterli değildir. Özellikle metalik bağlarda sistemin elektronlarını paylaşması nedeniyle tüm parçacıkların bulunduğu etki sisteme dahil edilmelidir. Böyle sistemlerde Lennard-Jones etkileşim potansiyeli çok verimli olmamaktadır.

3.2.2 Gömülü Atom Model Potansiyeli

Metal ve alaşımların sistemdeki elektronlarını paylaşması nedeniyle atomlararası etkileşimleri modellemek için çok cisim etkileşim potansiyel fonksiyonlarını kullanmak deneylerle uyumlu sonuçlar vermesini sağlamaktadır. Çok cisim etkileşimlerini referans alan en çok kullanılan potansiyel yaklaşımı EAM (Daw ve diğ. 1984) olarak bilinmektedir. Temeli atom topluluğunun enerjisi ve elektron

yoğunluğunun bir fonksiyonu olarak ifade eden Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi (DFT)'ne dayanır.

EAM potansiyeline göre kristal içindeki bir atomun toplam enerjisi, elektrostatik itici potansiyel enerjilerin toplamı ile atomun bulunduğu koordinattaki elektronik yük yoğunluğundan kaynaklanan çekici etkileşimleri tanımlayan gömme enerjisi terimlerinin toplamına eşittir. Böylece, N atomdan oluşan bir sistemin toplam potansiyel enerjisi (Daw ve Baskes 1983) aşağıdaki gibi verilir:

$$E_T = \sum_{i=1}^N E_i \quad (3.25)$$

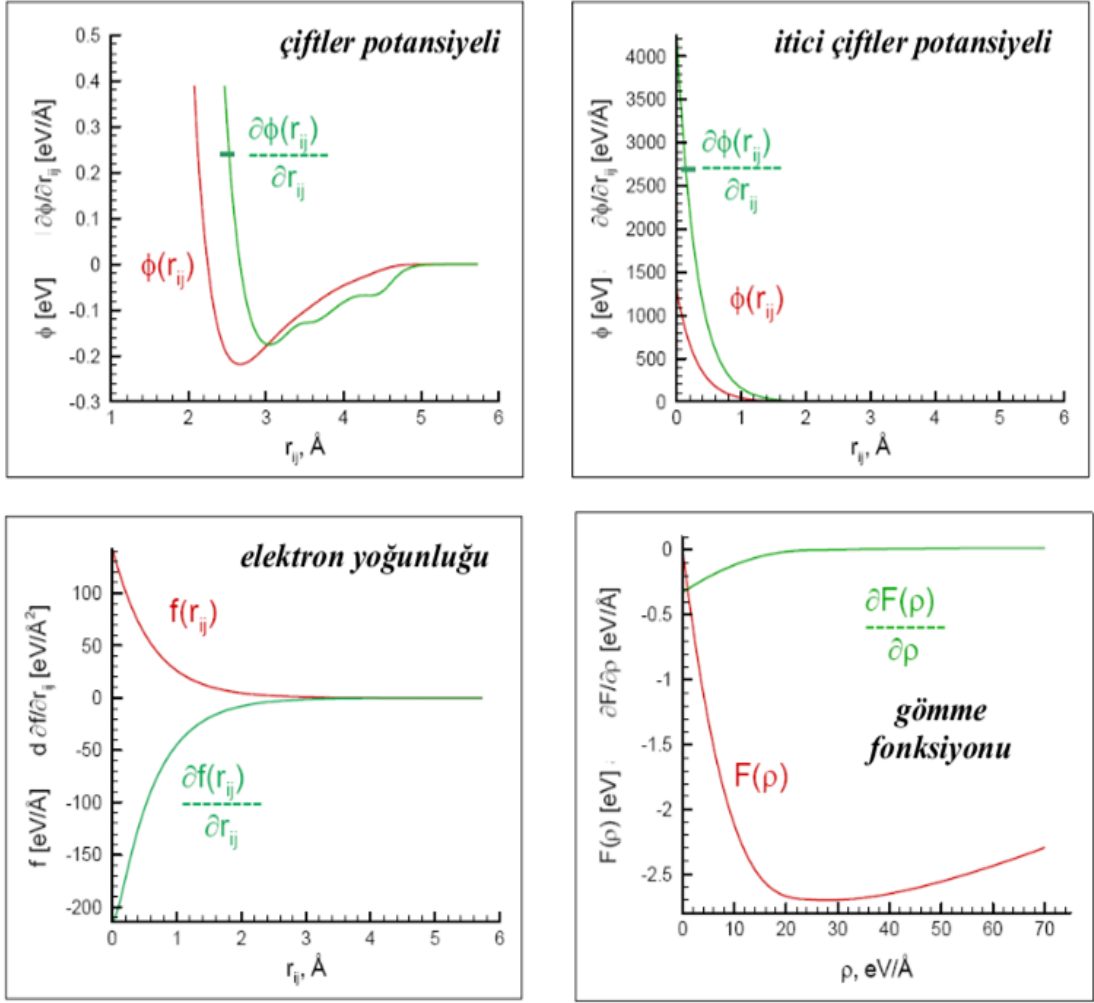
$$E_i = \frac{1}{2} \sum_{j \neq i}^N \phi(r_{ij}) + F_i(\bar{\rho}_i) \quad (3.26)$$

Burada, $\phi(r_{ij})$ çift etkileşmeyi veren potansiyel fonksiyonu ve $F_i(\bar{\rho}_i)$ ise gömme enerjisini tanımlayan bir fonksiyondur. i atomunun bulunduğu koordinattaki diğer j komşusu atomların oluşturduğu $\rho(r_{ij})$ yük yoğunluğunun toplamı şeklinde tanımlanır;

$$F_i(\bar{\rho}_i) = \sum_{j \neq i}^N \rho(r_{ij}) \quad (3.27)$$

$$\rho_i = \sum_{j \neq i}^N f_j(r_{ij})$$

Bu EAM etkileşim fonksiyonları Şekil 3.2'de verilmiştir. $\phi(r_{ij})$ ve $f(r_{ij})$ fonksiyonlarının konuma göre ve $F_i(\bar{\rho}_i)$ fonksiyonunda elektron yoğunluğuna göre davranışları verilmektedir. Şekilde görüldüğü gibi çiftler potansiyel fonksiyonunun iki tipi bulunmaktadır. Birincisi sadece atomlararası itici etkileşimleri içermektedir. İkincisi ise atomlararası hem itici hem de çekici terimleri açıklamaktadır.



Şekil 3.2: EAM etkileşim fonksiyonları (Dökmeli 2011).

EAM modelinin farklı çeşitleri bulunmaktadır. Bunlardan en sık kullanılanları Finnis-Sinclair (FS) (Finnis ve Sinclair 1984), Johnson (Johnson 1988), Voter-Chen (VC) (Voter ve Chen 1987), Sutton-Chen (SC) (Sutton ve Chen 1990) modelleridir.

Bu çalışmada, atomlararası etkileşimler Bonny ve ark. (2011) tarafından parametrelendirilmiş EAM tipi potansiyel ile tanımlandı. Bu Fe-Cr atomlararası etkileşim potansiyeli yüksek Cr ferritik alaşımlarını modellemek için oluşturulmuştur. DFT hesaplamaları sonuçları ve deneylerden elde edilen katı fiziksel ölçümler potansiyel enerji fonksiyonuna fit edilerek potansiyel parametreleri elde edilmiştir. Bu parametreler, ilgili malzemenin düşük ve yüksek sıcaklıklarda fiziksel özelliklerinin incelenmesinde kullanılabilir.

3.2.2.1 Finnis-Sinclair Etkileşim Potansiyeli

Etkileşim potansiyeli çalışmalarında sadece ikili etkileşimlerin sistemi tam anlamıyla temsil edemediği anlaşılmıştır. Özellikle metalik bağların bulunduğu sistemlerde elektron etkileri ve kuantumsal etkilerin sistemin davranışında önemli ölçüde etki ettiği ortaya çıkmıştır. Hacim merkezli kübik yapı (*bbc*)'ya sahip geçiş metallere davranışlarını tanımlamak için Mike Finnis ve Jim Sinclair pragmatik bir yaklaşımla Finnis-Sinclair (FS) etkileşim potansiyelini tanımlamıştır (Finnis ve Sinclair 1984). FS etkileşim potansiyeli metal ve alaşımlar için yüzey özellikleri hesaplarında çok başarılı sonuçlar vermektedir. N atomdan oluşan bir sistemin toplam enerjisi, i ve j atomları arasındaki ikili itici etkileşim $V(r_{ij})$ ve $f(\rho_i)$ genelleştirilmiş koordinatlar fonksiyonlarından oluşmaktadır;

$$U_{top} = \frac{1}{2} \sum_i^N \sum_{j \neq i}^N V(r_{ij}) + \sum_i^N f(\rho_i) \quad . \quad (3.28)$$

Burada;

$$f(\rho_i) = \sqrt{\rho_i} \quad (3.29)$$

ve

$$\rho_i = \sum_i^N \Phi_i(r_{ij}) \quad (3.30)$$

şeklinde tanımlanmaktadır. Burada, $\Phi_i(r_{ij})$ kısa mesafeli etkileşim fonksiyonu ve ρ_i i durumunda yerel elektronik yük yoğunluğu fonksiyonudur.

FS etkileşim potansiyeli kısa menzilli itici etkileşimlerde doğru sonuçlar vermektedir, fakat uzun menzilli çekici etkileşimlerde pek doğru sonuçlar verememektedir. Yüzey merkezli kübik yapı (*fcc*)'a sahip metal atomlarında uzun menzilli çekici etkileşimlerinin daha etkili olmasından dolayı Sutton-Chen etkileşim potansiyeli geliştirilmiştir (Sutton ve Chen 1990).

3.2.2.2 Sutton-Chen Etkileşim Potansiyeli

Sutton-Chen (SC) potansiyeli FS potansiyelinin geliştirilmiş hali olup, uzun menzilli çok cisimli EAM potansiyelleri olarak da tanımlanır. SC potansiyeli yüzey merkezli kübik yapıya sahip geçiş metalleri için yaygın olarak kullanılmaktadır. SC potansiyeli iki terimden elde edilmektedir. Bu terimlerden ilki olan itici terim, atomlararası geri tepkimeyi temsil eden çiftler potansiyelidir. İkinci terim ise çekici terim olup, yerel yoğunluğun yani elektronlardan dolayı kohesif enerjiye gelen katkının karekökü ile orantılıdır. Metaller ve alaşımlar için SC potansiyellerinde toplam potansiyel enerji (Sutton ve Chen 1990);

$$U_{top} = \sum_i U_i = \sum_i \left[\sum_{i \neq j} \epsilon_{ij} \frac{1}{2} V(r_{ij}) - c_i \epsilon_{ii} (\rho_i)^{1/2} \right] \quad (3.31)$$

şeklinde tanımlanmaktadır. Burada, $V(r_{ij})$ çiftler potansiyeli olup,

$$V(r_{ij}) = \left(\frac{a_{ij}}{r_{ij}} \right)^{n_{ij}} \quad (3.32)$$

şeklinde tanımlanmaktadır. ρ_i ise yerel yoğunluk fonksiyonu olup,

$$\rho_i = \sum_{j(i \neq j)} \phi(r_{ij}) \quad (3.33)$$

ve

$$\phi(r_{ij}) = \left(\frac{a_{ij}}{r_{ij}} \right)^{m_{ij}} \quad (3.34)$$

bağıntılarıyla elde edilmektedir. Denklemlerdeki r_{ij} i ve j atomları arasındaki mesafe, a_{ij} örgü sabiti, c_i çekici terimin itici terime oranla elde edilen bir parametre, ϵ_{ij} enerji boyutunda bir parametre, n ve m ise $n > m$ olmak üzere elastik kararlılık sağlayan tamsayı parametreleridir. Alaşımlarda ise farklı türdeki atomlararası etkileşmeler için;

$$\varepsilon_{ij} = \sqrt{\varepsilon_i \varepsilon_j} \quad (3.35)$$

$$m_{ij} = \frac{m_i + m_j}{2} \quad (3.36)$$

$$n_{ij} = \frac{n_i + n_j}{2} \quad (3.37)$$

$$a_{ij} = \frac{a_i + a_j}{2} \quad (3.38)$$

şeklindeki parametreler kullanılarak kombinasyon bağıntılarıyla hesaplanmaktadır. SC potansiyeli geçiş fcc metalleri için bu parametreleri deneysel kohesif enerji ve örgü sabiti fit edilerek tanımlanmıştır.

İlerleyen yıllarda, Çağın ve arkadaşları (Çağın ve diğ. 1999) ampirik çok cisimli SC kuvvet alanını 0 K sıcaklıkta kohesif enerji, yoğunluk, örgü sabiti, elastik sabitleri, hacim modülü, boşluk oluşturma enerjisi, yüzey enerjisi ve fonon frekansı gibi deneysel özelliklere fit ederek yeniden parametrize etmişler ve bu parametreler Kuantum Sutton-Chen (Q-SC) potansiyel parametreleri olarak tanımlanmıştır. Q-SC parametrizasyonu kullanarak erime sıcaklığı, örgü kusuru, elastik sabitler, yüzey enerjisi gibi birçok fiziksel özellikleri hesaplamada daha verimli sonuçlar elde edilmiştir (Özdemir Kart ve diğ. 2004^{a,b,c,d}; Kart ve diğ. 2004^{a,b,c,d}; 2005).

3.3 İstatistik Kümeler

MD simülasyonunda, N parçacık sayılı ve sabit MD hücreli V hacmindeki bir sistemin Newton hareket denklemleri nümerik integrasyon algoritmaları ile çözülür. Dışarıdan sisteme bir etki olmadığı sürece, sistemin toplam enerjisi E ve lineer momentumu P korunur. Böylelikle sistemin yörüngesi mikrokanonik veya NVE istatistik topluluğunda elde edilmiş olur. Fakat mikrokanonik topluluğu sistemin basınç veya sıcaklık değişkenlerine göre davranışını incelemek için uygun değildir. Sistemin araştırılması istenen özelliklerine göre uygun istatistik koşullar altında MD simülasyonlarının gerçekleştirilmesi gerekir.

Elverişli istatistik koşullar oluşturabilmek için bazı termodinamik değişkenler bazı sınırlamalar getirilir. Örneğin, NVE mikrokanonik topluluğunda, parçacık sayısı (N), sistemin hacmi (V) ve sistemin toplam enerjisi (E) sabit tutulur. Bunun dışında çeşitli istatistik toplulukları da literatürde mevcuttur: izoenthalpik-izobarik (NHP), izotermal-izobarik (NPT), kanonik (NVT) ve büyük kanonik (μ VT) toplulukları. Burada, N, H, P, T, V ve μ sırasıyla parçacık sayısı, entalpi, basınç, sıcaklık, hacim ve kimyasal potansiyeli tanımlamaktadır. Bu çalışmada, simülasyonlar NVT ve NPT istatistik kümelerinde gerçekleştirilmiştir.

Dinamiksel MD simülasyonlarını farklı istatistik kümelerinde gerçekleştirebilmek için bir çok metot geliştirilmiştir. Bunlardan birisi genişletilmiş Hamiltonyen metodudur. Makro boyuttaki sistemin termodinamik özelliklerini tanımlayacak serbestlik derecesi sisteme ilave edilir. Örneğin, sistemin sıcaklığını sabit tutmak için sisteme ısı banyosu veya sistemin basıncını kontrol etmek için de sisteme basınç pistonu ilave edilir. İlave serbestlik derecelerinin katkıları sistemin hareket denklemlerinde tanımlanır.

3.3.1 NVT Moleküler Dinamik Simulasyonu

Kanonik istatistik kümesinde, özel bir sıcaklıkta sistemin sıcaklığını sabit tutabilmek için, sisteme termostat ilave edilir. Çeşitli sabit sıcaklık MD simülasyon yöntemleri geliştirilmiştir. En verimli ve kullanışlı yöntemlerden birisi Nosé (1984; 1991) ve Hoover (1985) tarafından oluşturulmuştur.

Nosé (1984), sistemin sıcaklığını kontrol etmek için sisteme serbestlik derecesi s olan ısı banyosunu ilave ederek, dinamiksel bir yöntem geliştirmiştir. Simüle edilecek sistem T sıcaklığındaki ısı banyosuna yerleştirilerek genişletilmiş sistem oluşturulur. Sisteme parçacık alışverişi engellenirken sadece enerji alışverişine izin verilir. Sistemin sıcaklığı ısı banyosunun T sıcaklığına ulaştığında termodinamik denge sağlanmış olur. Genişletilmiş sistem izole edildiği için toplam enerjisi korunumludur, fakat sistemin enerjisinde dalgalanmalar oluşur. Böylece kanonik topluluğun (NVT) oluşması sağlanır. Isı banyosunun kinetik ve potansiyel enerjileri sırasıyla aşağıdaki gibi tanımlanır;

$$E_{kin} = \frac{1}{2} Q \left(\frac{ds}{dt} \right)^2 = \frac{P_s^2}{2Q} \quad (3.39)$$

ve

$$E_{pot} = g k_B T \ln(s) \quad . \quad (3.40)$$

Burada, P_s konjüge momentumu ve Q enerji x (zaman)² boyutunda bir parametre olup, s serbestlik derecesinden gelen hareketin kütlesi gibi davranır. k_B ise Boltzmann sabiti, T dışarıdan ayarlanabilen sıcaklık ve g ise toplam serbestlik derecesidir.

Hoover (1985), banyonun termodinamik sürtünme katsayısını $\eta = sP_s/Q$ şeklinde tanımlayarak, Nosé tarafından oluşturulan yöntemdeki denklemler oldukça basit hale gelmiştir. Hareket denklemleri aşağıdaki ifadeleri almıştır;

$$\vec{\ddot{r}}_i = \frac{\vec{\dot{P}}_i}{m_i} \quad , \quad (3.41)$$

$$\vec{\dot{P}}_i = \vec{F}_i - \eta \vec{P}_i \quad , \quad (3.42)$$

ve

$$\dot{\eta} = \frac{\sum_i \frac{P_i^2}{m_i} - g k_B T}{Q} \quad . \quad (3.43)$$

Sürtünme katsayısı sabit olmayıp, pozitif veya negatif değerleri olarak termostat görevini üstlenir. Denklem (3.43)'deki terim ısı banyosunun fonksiyonunu kontrol eder. Eğer toplam kinetik enerji $g k_B T$ değerinden büyük olursa, $\dot{\eta}$ ifadesi pozitif değeri alır. Bu durumda ısı banyosunda bir sürtünme oluşur. Bu durumda, ısı banyosunda oluşan sürtünme ısı banyosunun kinetik enerjisinden daha küçük olacak şekilde atomların hareketini yavaşlatır. Diğer taraftan, atomların kinetik enerjisi ısı banyosunun $g k_B T$ enerjisinden daha küçükse, $\dot{\eta}$ ifadesi negatif olur. Bu durumda atomlar ısı banyosunun kinetik enerjisine ulaşana kadar ivmelenir. Eşitlik (3.41, 3.42, 3.43)'de verilen denklem seti Nosé-Hoover termostadı olarak bilinir.

3.3.2 NPT Moleküler Dinamik Simulasyon

Sabit basınç altında MD simülasyon çalışmaların öncülüğünü Andersen (1980) yapmıştır. Simüle edilecek sisteme V hacimli kutuyu (piston) temsil eden serbestlik derecesi ilave edilir. Bu serbestlik derecesi kinetik ve potansiyel enerjileri sırasıyla aşağıda verilmiştir;

$$E_{kin} = \frac{1}{2} W \dot{V}^2 \quad (3.44)$$

ve

$$E_{pot} = P_{ex} V \quad . \quad (3.45)$$

Burada, W pistonun kütesini ve P_{ex} 'de istenilen basıncı temsil etmektedir. Sistemin hacmi simülasyon boyunca, sistemin iç basıncı ile istenilen dış basınç (pistonun basıncı) arasında denge sağlanana kadar değişkenlik gösterir. İlgilenilen sistem artı pistondan oluşan genişletilmiş sistemin hareket denklemleri entalpi sabit olacak şekilde oluşturulur. Bu metotta simülasyon kutusunun şekli ve büyüklüğü basınç altında değişmektedir. Parinello ve Rahman (1985) bu değişiklikleri sağlayan h dinamik matriksini tanımlayarak, Andersen'in sabit basınç metodunu geliştirmiştir. Daha sonraları Ray ve Rahman (1985) tarafından bu metoda Nosé'un sabit sıcaklık teorisini eklenerek de NPT küme istatistiğinin MD temelleri oluşturulmuştur. NPT dinamiğinin Hamiltonyeni aşağıdaki gibidir (Nosé 1984);

$$H = \sum_i \frac{P_i^2}{2m_i V^{2/3} s^2} + U(V^{-1/3} \vec{r}) + \frac{P_V^2}{2W} + P_{ex} V + \frac{P_s^2}{2Q} + g k_B T \ln(s) . \quad (3.46)$$

Burada, (r_i, P_i) i . parçacığın konumu ve momentumu, (V, P_V) Parinello ve Rahman tanımından gelen moleküler dinamik hücrenin hacmi ve momentum koordinatlarını ve (s, P_s) ise Nosé termostatını ifade eden faz uzayı parametreleridir. Denklem (3.46)'daki ilk iki terim N parçacıklı sistemin Hamiltonyenini, ikinci iki terim moleküler dinamik hücrenin ve son iki terim de Nosé sabit sıcaklık teorisinin katkılarını vermektedir.

3.4 Moleküler Dinamik Simülasyonu Paket Programları

Moleküler dinamik simülasyon çalışmalarının gerçekleştirilmesi için çalışma yapılacak sistemdeki atomlararası etkileşimleri tanımlayacak potansiyel enerji fonksiyonu seçilerek gerçekleştirilebilir. Moleküler dinamik simülasyon çalışmalarının gerçekleştirilmesi için literatürde ticari ve açık kaynak kodlu paket programlar mevcuttur. Bu programların güvenilirlikleri birçok çalışmada test edilmiştir. Bu programların bazıları Tablo 3.1’de listelenmiş olup, kullanım alanları verilmiştir. Bu çalışmada LAMMPS paket programı MD simülasyonu için kullanılmıştır.

Tablo 3.1: Bazı moleküler dinamik simülasyonu paket programları (Wikipedia, 2021).

KOD İSMİ	KULLANIM ALANI	LİSANS	ERİŞİM
LAMMPS	Katıhal ve yumuşak malzemeler için potansiyel fonksiyonlarına sahip	Ücretsiz, açık kaynak kodlu. (GNU GPLv2)	Sandia
AMBER	Moleküler yapılara ait potansiyel enerji fonksiyonlarının üretilmesi.	Ticari	ambermd.org
CP2K	Katıhal, sıvılar ve biyolojik sistemler için atomistik ve moleküler dinamik simülasyon yapabilir.	Ücretsiz (GNU GPLv2)	CP2K
NAMD+ VMD	Hızlı, Paralel MD, CUDA	Açık kaynak, Akademik kullanım	Beckman Institute
GROMACS	Yüksek Performanslı MD	Ücretsiz (GNU GPLv2)	gromacs.org
BOSS	OPLS	Ticari	Yale University
ACEMD	CHARMM veya AMBER kuvvet alanlarını kullanarak MD simülasyonu yapar. Yüksek dereceden optimize edilmiş CUDA kullanarak NVIDIA GPU üzerinde çalışabilir.	Basit sürümü ücretsizdir ve Ticari sürümü bulunmaktadır.	Acellera Ltd
CHARMM	Moleküler yapılara ait potansiyel enerji fonksiyonlarının üretilmesi.	Ticari	charmm.org
ABALONE	Özellikle biyomoleküler sistemlerin ve protein katlanımının çalışılmasına yöneliktir.	Ücretsiz	Agile Molecule

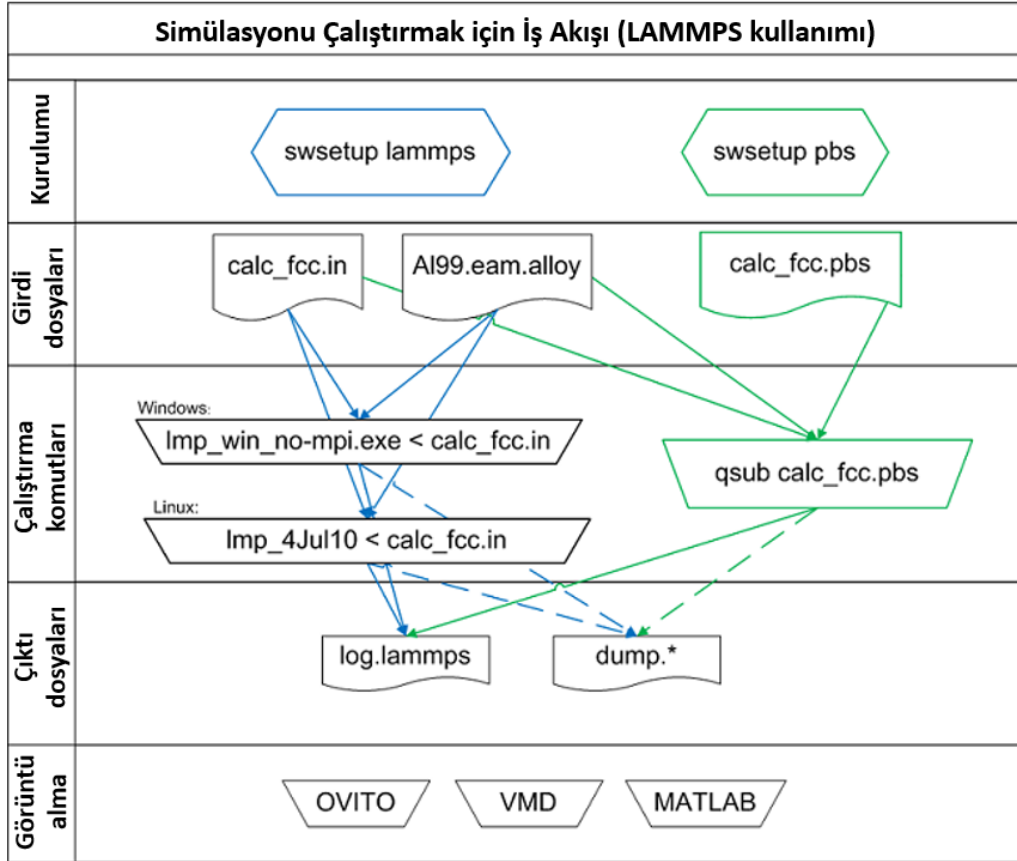
3.4.1 LAMMPS MD Paket Programı

LAMMPS (Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator) MD paket programı 1990'ların ortalarında CRADA adı verilen Sandia ve LLNL laboratuvarları ile Cray, Bristol Myers Squibb ve Dupont şirketleri arasında yapılan bir araştırma ve geliştirme anlaşması sonucunda Steve Plimpton öncülüğünde yazılmaya başlanmıştır (LAMMPS 2021). Büyük ölçekli paralel klasik moleküler dinamik kodu geliştirmek asıl hedefidir. Öncelikle Fortran-77 programlama diliyle yazılan LAMMPS sonrasında F90 kodları ile güncellenmiş ve günümüzde C++ sürümü ile ücretsiz ve açık kaynak kodlu olarak kullanıma sunulmaktadır. Moleküler dinamik hesaplamalarında ortaya çıkan tüm gelişmeler kodlara eklenip bu şekilde kodların güncel kalması sağlanmıştır. Açık kaynak kodlu olmasından dolayı kodu kullanıp üzerinde yenilikler sağlayan kullanıcıların eklentileri bir havuzda toplanıp, kodun geliştirilmesi sağlanmaktadır. MD simülasyonunda LAMMPS kodları kullanılabilmesi için potansiyel enerji fonksiyonu, başlangıç atom konumları ve simülasyon parametrelerini bir dosya üzerinde tanımlamak yeterli olmaktadır. Hangi niceliklerin hesaplanacağı, hangi sonuç dosyalarının oluşturulacağı kullanan tarafından belirlenebilmektedir. LAMMPS paket programı ile milyonlarca parçacığa sahip sistemlerin MD simülasyonları yapılabilmektedir. Paralel işlemci kullanılabilirdiği için problemler hızlı şekilde çözülebilmektedir.

LAMMPS paket programı, Tersoff, EAM, MEAM (Modified Embedded Atom Method), ReaxFF gibi karmaşık yapıda olan potansiyel enerji fonksiyonlarının rahatlıkla kullanılabilmesini sağlamaktadır. Bu durum LAMMPS kodlarını daha avantajlı hale getirmektedir. Programdan elde edilen sonuçları OVITO (2021) ve VMD (2021) gibi yardımcı programları kullanarak sistemin incelenmesi, analiz edilmesi, animasyonları oluşturulması sağlanmaktadır.

Şekil 3.3'de LAMMPS paket programının çalışma iş akış şeması verilmiştir. LAMMPS paket programını çalıştırırken öncelikle simülasyon şartlarını ve neler hesaplamak istendiğini tanımlamak için giriş (input) dosyası oluşturulur. Bu giriş dosyasında atomlararası potansiyel etkileşimi tanımlayan dosya da tanımlanır. Oluşturulan giriş dosyası LAMMPS paket programında çalıştırılarak istenilen sonuçların yazdırıldığı "log.lammps" ve atom konumlarının yazdırıldığı "dump"

dosyası çıktı olarak alınmaktadır. Elde edilen bu çıktı dosyaları farklı programlar kullanılarak görüntü alınabilmekte ve analiz yapılabilmektedir.



Şekil 3.3: LAMMPS paket programı çalıştırmak için iş akış şeması (Mississippi State Uni. 2021).

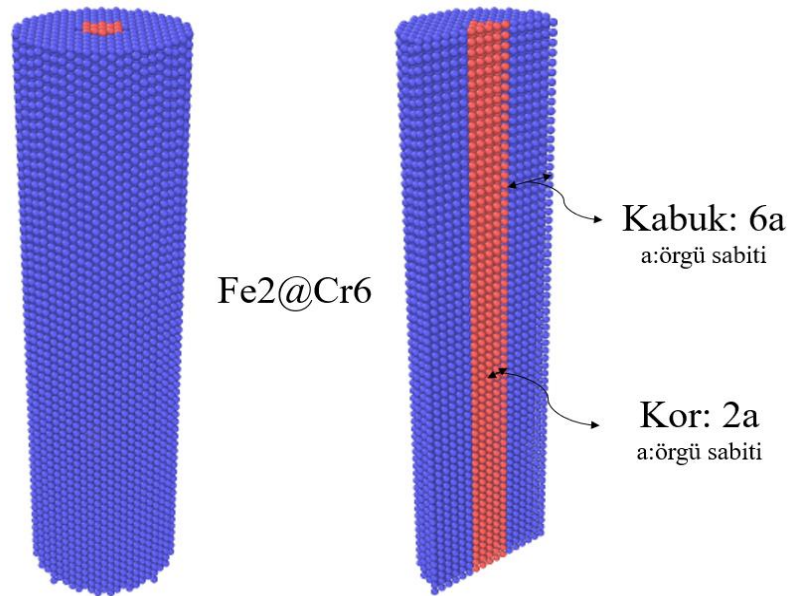
LAMMPS paket programında kullanılan bazı komutlar ve kullanım amaçları Tablo 3.2’de özetlenmiştir.

Tablo 3.2: LAMMPS paket programının sıklıkla kullanılan komutları (LAMMPS 2021).

units	Kullanılacak birim sistemin tanımlanması
dimension	Kaç boyutta hesap yapılacağını tanımlanması
boundary	Periyodik sınır şartı uygulanacak doğrultuların belirlenmesi
atom_style	Atomların tipinin kullanılacağını belirlemesi
lattice	Örgü modeli ve örgü sabitinin tanımlanması
mass	Atomun kütesinin tanımlanması
pair_style	Potansiyel enerji fonksiyonunun tipinin seçilmesi
pair_coeff	Potansiyel enerji fonksiyonu parametreleri ve etkileşim dosyasının tanımlanması
velocity	Başlangıç atom hızlarının oluşturulması ve sıcaklık tanımı
timestep	İntegrasyon için zaman adım büyüklüğünün tanımlanması
run	Hesaplamanın yapılacak adım sayısı
fix	Moleküler dinamik parametrelerini tanımlama
thermo	Sonuçların yazdırılma sıklığını tanımlama
thermo_style	Elde edilmek istenen parametreleri tanımlama
dump	Atom koordinatlarını ve nicelikleri dosyaya yazdırma seçeneği

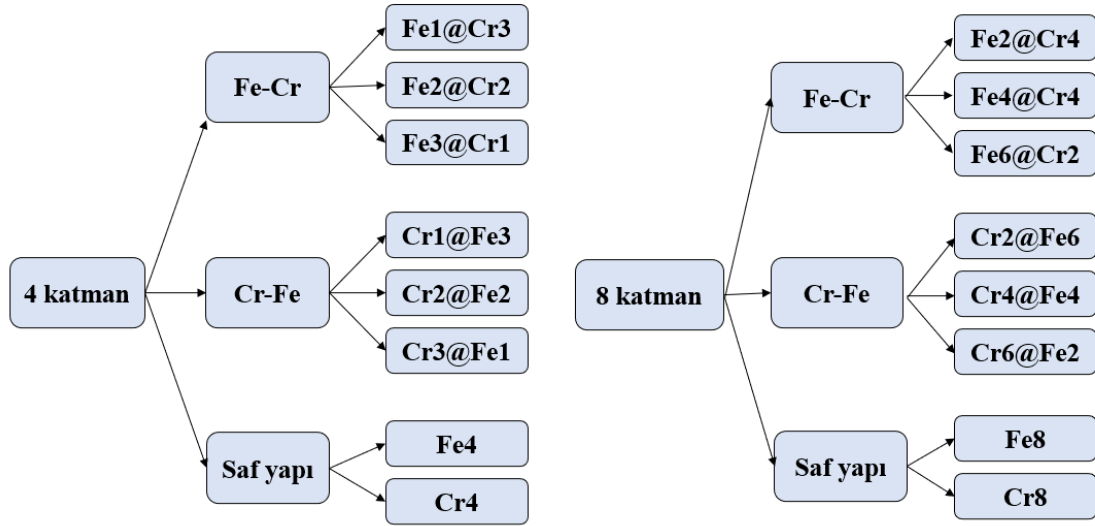
3.5 Hesaplama Yöntemi

Bu tez çalışmasında, FeCr bazlı kor@kabuk yapısındaki silindir nanotellerin termal ve mekanik özellikleri MD simülasyon yöntemi ile incelendi. Atomlararası etkileşim Bonny ve arkadaşları (2011) tarafından parametrelendirilmiş EAM tipi (Daw ve diğ. 1984) potansiyel ile tanımlandı. Silindir nanoteller, çapları 2,5 nm ve 4,5 nm civarı ve boyları çaplarının dört katı olacak tarzda ve atomlar bcc kristal yapıda dizilerek tasarlandı. Şekil 3.4’de görüldüğü üzere, (n-x) katman yarıçapındaki kor kısmına Fe ve onu saran (x) katman kalınlığındaki kabuk bölgesine de Cr yerleştirilerek Fe(n-x)@Cr(x) şeklinde kor-kabuk yapısında nanoteller oluşturuldu. Küçük çaplı nanoteller 4 n katmanından oluşmakta ve her katmanın kalınlığı Fe ve Cr atomlarının örgü sabitlerinin değerinde alındı. Bu durumda x ifadesi 1, 2 ve 3 değerlerini aldığıında, sırasıyla, Fe3@Cr1, Fe2@Cr2 ve Fe1@Cr3 şeklinde kor@kabuk nanotelleri kabuk kalınlığının etkisini görebilmek için oluşturuldu. Kabuk bölgesindeki malzeme cinsinin fiziksel özelliklerine etkisini görebilmek için de, kor ve kabuktaki kullanılan malzemeler yer değiştirilerek Cr@Fe kor@kabuk sistemleri oluşturuldu: Cr1@Fe3, Cr2@Fe2 ve Cr3@Fe1. Nanotellerin büyüklüğünün termal özelliklere etkisini görebilmek için de, 8 katmandan oluşan farklı kabuk kalınlığında 4,5 nm çaplı Fe-Cr bazlı kor@kabuk sistemleri de aynı yöntemle oluşturuldu (n=8; x=2, 4 ve 6): Fe2@Cr6, Fe4@Cr4, Fe6@Cr2, Cr2@Fe6, Cr4@Fe4 ve Cr6@Fe2.



Şekil 3.4: Fe2@Cr6 kor-kabuk nanotelinin genel görünümü.

Şekil 3.4’de Fe₂@Cr₆ kor@kabuk nanoteli yapısı model olarak verildi. Ayrıca kor@kabuk yapıları Fe-Cr bazlı nanotellerin sonuçlarını karşılaştırmak için saf malzemeden oluşan Fe ve Cr bazlı nanotelleri de çalışıldı. Sonuç olarak, Şekil 3.5’de verilen 16 farklı nanotel sistemi için farklı sıcaklık ve basınç altında MD simülasyonları gerçekleştirildi.



Şekil 3.5: MD simülasyonu gerçekleştirilen Fe-Cr bazlı kor@kabuk nanoteller.

Bu MD simülasyon çalışmasında LAMMPS hazır paket programı kullanıldı. Nanotellerin başlangıç yapıları 200 x 200 x h dikdörtgen simülasyon kutusunun merkezine yerleştirilmiş olup, sadece z ekseni boyunca periyodik sınır koşulları uygulandı. Burada, h nanotelin boyunu vermekte olup, küçük sistemler için h = 92 Å ve büyük sistemler için h = 186 Å alındı. Sistemi minimum enerji konfigürasyonuna getirebilmek için konjuge-gradyent algoritması kullanıldı. Daha sonra termal, dinamik ve yapısal özelliklerin sıcaklığa bağımlılığını araştırmak için, sistemleri NVT kanonik istatistik kümesinde 1 K’den başlayarak 2500 K’e kadar 100 K sıcaklık aralıklarıyla ısıtıldı. Erime sıcaklığını daha net tayin edebilmek için erime yakınlığında bu aralık 10 K’e düşürüldü.

Hareket denklemlerini çözmek için integrasyon yöntemi olarak hız-Verlet algoritması kullanıldı. Her bir MD simülasyon adımında 1 fs zaman aralığı seçilerek, 500000 MD adımı ısıtma ve 500000 MD adımı da dengeleme işlemi her bir hedef

sıcaklık için yapıldı. Isıtma işlemi esnasında ısı banyosunun sıcaklığını sabit tutmak için Nose-Hoover termostadı kullanıldı. Bu çalışmada atomların yörüngeleri simülasyon zamanı boyunca her 50 MD adımında kaydedilip, bu bilgiler sistemin fiziksel özelliklerinin analizinde kullanıldı. Her bir hedef sıcaklık ve her 50 MD adımında, sistemin sıcaklığı, toplam enerjisi, kinetik enerjisi, potansiyel enerjisi, entalpisi, hacmi ve basıncı tespit edildi. Sistemin dengeye ulaştığı son 100000 MD adımı üzerinden ortalama değerleri bulunarak bu fiziksel özellikler her bir sıcaklık için tayin edildi. Sistemlerin ısı kapasitesi, çift dağılım fonksiyonu, Lindemann kriteri, ortalama kare yerdeğiştirme ve difüzyon sabiti gibi özellikleri veren MD simülasyon çıktıları kullanılarak PYTHON yazılım dilinde analiz programı yazıldı. Nanotellerin erime sıcaklığı ve mekanizması, toplam enerji, ısı kapasitesi, çift dağılım fonksiyonu, Lindemann kriteri ve difüzyon sabiti gibi fiziksel özelliklerin sıcaklıkla bağımlılığı incelenerek belirlendi.

Nanotellerin mekaniksel özelliklerini araştırmak için NPT istatistik kümesinde her bir sisteme çekme işlemi uygulandı. Önce teller 1 ns boyunca 1 K sıcaklığında dengeye getirildikten sonra, 10^{-8} fs^{-1} zorlanma hızı ile sistemin z doğrultusuna doğru çekme uygulandı. Sistemde basıncı sabitleyebilmek için Parinello-Rahman barometresi kullanıldı. Simülasyon çıktıları olarak, her bir zorlanmaya karşılık zorlar elde edildi. Zor-zorlanma ilişkisi eğrisinden nanotellerin akma ve çekme dayanımı, kopma uzaması, Young modülü elde edildi. Ayrıca atomların yörüngeleri kullanılarak PYTHON yazılım dilinde yazılmış analiz programı ile Poisson oranları elde edildi.

MD simülasyon ve analiz çalışmaları Pamukkale Üniversitesi (PAÜ) Bilimsel Araştırma Projesi Birimi tarafından desteklenmiş BAP-2019FEB051 nolu proje kapsamında elde edilen iş istasyonu ve PAÜ Fizik Bölümü Malzeme Fiziği Simülasyon Laboratuvarı olanakları ile gerçekleştirildi. Analizlerde kullanılan bazı fiziksel özelliklerin detayı takip edilen bölümlerde açıklanacaktır.

3.6 Termodinamik, Yapısal ve Dinamik Özellikler

3.6.1 Isı Kapasitesi (Özgül Isı)

Isı kapasitesi sıvıların termodinamik davranışlarını analiz etmek için önemlidir. Temel olarak ısı kapasitesi, bir cismin sıcaklığının 1 °C değiştirilmesi için gerekli olan ısı miktarına karşılık gelmektedir. Isıtma işlemi uygulanan atomik boyutlardaki simülasyonlarda sistemin erime noktasını tespit etmek için kullanılabilir. Isı kapasitesinin hesaplanmasında genellikle iki yöntem uygulanmaktadır. Sabit hacimde ısı kapasitesi sisteme alınan ısının sıcaklığa göre türevi şeklinde tanımlanmaktadır. İstatistiksel olarak sabit hacimde ısı kapasitesi (C_V);

$$C_V = \left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_V \quad (3.47)$$

bağıntısıyla elde edilmektedir. Burada E enerji, T ise sıcaklık değeridir. İkinci yöntemi ise ısı kapasitesi enerji dalgalanmalarının istatistiksel ortalamasıdır (Allen ve Tidesley 1987).

NVT kanonik küme istatistiğine göre, kinetik enerjiden gelen kısım sabit olduğu için ısı kapasitesini potansiyel enerjideki değişim oluşturmaktadır. Buna göre sabit hacimde ısı kapasitesi (C_V) (Allen ve Tidesley 1987);

$$\frac{C_V}{k_B} = \frac{1}{Nk_B^2 T^2} (\langle PE^2 \rangle - \langle PE \rangle^2) + \frac{3}{2} \quad (3.48)$$

bağıntısıyla elde edilmektedir. Burada k_B Boltzman sabiti, N toplam atom sayısı, T sıcaklık, PE potansiyel enerjiyi ifade etmektedir.

Bu çalışmada termal özellikler NVT kanonik istatistik kümesinde hesaplandığı için ısı kapasitesi Denklem (3.48)'deki gibi hesaplanmıştır.

3.6.2 Lindemann Kriteri

Cisimlerin erime davranışlarını incelenebileceği diğer bir nicelik de Lindemann kriteridir. Lindemann kriteri ortalama kare yer değiştirmenin bağ dalgılanması olarak tanımlanır. Bir sistemde erime, o sistemdeki atomlar arasında oluşan titreşimlerin genliklerinin değişmesiyle meydana gelir. Bu genliklerin değişimi Lindemann erime kriterini elde etmemizi sağlar.

Atomik boyutta simülasyon tekniği ile Lindemann kriteri kolaylıkla incelenebilmektedir. Sistemde erimenin başlaması atomlar arası mesafenin %15-%20 arası değişim gösterdiği yerde yaşanmaktadır. Bir atomun Lindemann kriteri (δ_i) (Bagrets ve diğ. 2010);

$$\delta_i = \frac{2}{N(N-1)} \sum_{i \neq j} \frac{\sqrt{\langle r_{ij}^2 \rangle - \langle r_{ij} \rangle^2}}{r_{ij}} \quad (3.49)$$

şeklindeki bağıntıyla tanımlanmaktadır. Burada N toplam atom sayısı, i sistemdeki her bir atomu, j her bir atomun en yakın komşu atomlarını, r_{ij} i atomu ile j en yakın komşu atomlar arasındaki mesafe, $\langle r_{ij} \rangle$ mesafelerin istatistiksel ortalaması olarak ifade edilmektedir.

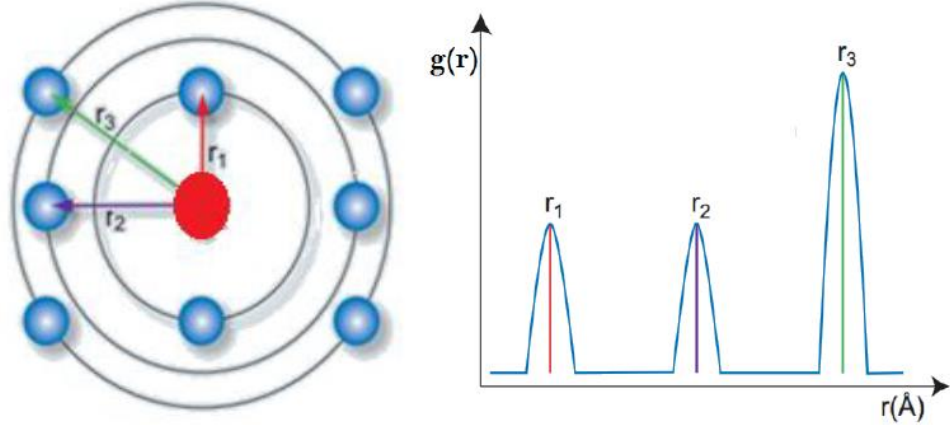
Sistem katmanlar halinde incelenmek istendiğinde Lindemann kriteri ($\delta_{L(i)}$);

$$\delta_{L(i)} = \frac{2}{N_{L(i)}(N_{L(i)}-1)} \sum_{i \neq j} \frac{\sqrt{\langle r_{ij}^2 \rangle - \langle r_{ij} \rangle^2}}{r_{ij}} \quad (3.50)$$

bağıntısıyla tanımlanmaktadır. Burada, $L(i)$ i . katman, $N_{L(i)}$ ise katmanlardaki atom sayısını temsil etmektedir.

3.6.3 Çift Dağılım Fonksiyonu

Çift dağılım fonksiyonu “ $g(r)$ ”, katı sistemlerin ve nanomalzemelerin yapısal özelliklerinin incelenmesinde önemli rol oynar. Bu fonksiyon, verilen bir atomdan belli bir uzaklıkta başka bir atomun bulunma olasılığıdır. Şekil 3.6’de görüldüğü üzere referans aldığımız merkezi bir atom ve etrafını çevreleyen atomları düşündüğümüzde, çift dağılım fonksiyonunun mesafeye göre değişimindeki tepeler çevreleyen atomların uzaklığına denk gelmektedir.



Şekil 3.6: a) Merkez atomdan r_1, r_2, r_3 uzaklığındaki kabukların görünümü b) $g(r)$ çift dağılım fonksiyonunun uzaklığa göre değişimi (Yıldırım 2012).

Şekil 3.6’da tek atom için gösterilen işlemler her bir atom için hesaplanmaktadır. Çift dağılım fonksiyonu birden fazla cins atom için incelenmesi mümkündür. $g(r)$, yoğunluk – yoğunluk korelasyon fonksiyonu şeklinde (Hwang ve Lee 2005) tanımlanır;

$$g(r) = \frac{V}{N^2} \left\langle \sum_i \sum_{i \neq j} \delta(r - r_{ij}) \right\rangle \quad . \quad (3.51)$$

Matematiksel olarak $g(r)$ (Haile 1992);

$$g(r) = \frac{V}{N} \frac{n(r)}{4\pi r^2 \Delta r} \quad (3.52)$$

bağıntısıyla ifade edilmektedir. Burada N atom sayısı, V sistemin hacmi, $n(r)$ koordinasyon sayısı, $4\pi r^2 \Delta r$ kabuğun hacmidir.

3.6.4 Ortalama Kare Yerdeğiştirme

Ortalama kare yerdeğiştirme (Mean Square Deviation, MSD), sistemin dinamik yapısını incelememizde önemli rol oynar. Yapısal özelliklerden farklı olarak atomik hareketliliği incelemektedir. Bir parçacığın t_0 ile t zaman aralığında yapmış olduğu yerdeğiştirmenin karesine karşılık gelmektedir. Atomların ortalama kare yerdeğiştirmesi, atomların doğrudan difüzyonu ile alakalıdır ve

$$MSD(t) = \langle r(t)^2 \rangle = \langle (\vec{r}_i(t + t_0) - \vec{r}_i(t_0))^2 \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N |\vec{r}_i(t + t_0) - \vec{r}_i(t_0)|^2 \quad (3.53)$$

olarak yazılmaktadır (Shvartsburg ve Jarrold 2000). Burada N toplam zaman merkezi sayısı, t simülasyonda elde edilen zaman, t_0 zaman adımlarından belirlenen zaman merkezleri, $\vec{r}_i(t + t_0)$ i atomunun $t + t_0$ zamanındaki merkez atoma olan uzaklığıdır.

MSD çok kısa zaman aralığında t^2 ile orantılı davranır. Bu davranış sistemde atomik çarpışma gerçekleşmediği, atomların herhangi bir etki altında kalmaksızın hareket ettiğini göstermektedir. Zaman ilerledikçe erime sıcaklığının ve üzerindeki sıcaklıklarda grafik lineer bir davranış gösterirken, erime sıcaklığı altında yaklaşık olarak değişmeyen bir davranış göstermektedir. Katı fazda olan yapılardaki her bir atom, çevreleyen komşulukları tarafından bir kafes etkisinde bulunmaktadır. Buradan kurtulup difüzyona maruz kalamamaktadır. Fakat cismin sıvı fazına geçtiği yüksek sıcaklıklarda atomlararası mesafe artmasından dolayı kafes etkisi azalmaktadır. Kolaylıkla bir atom bir bölgeden farklı bir bölgeye difüzyon yapabilmektedir.

3.6.5 Difüzyon Katsayısı

Difüzyon, atomların kinetik enerji etkisiyle rastgele hareket etmesi olarak tanımlanabilir. Maddenin bütün hallerinde farklı özelliklerde ve farklı hızlarda görülebilmektedir. Bu yüzden maddenin katı fazı ile sıvı fazı arasındaki farkı anlamamız için önemli bir özelliktir. İki faz arasındaki difüzyon farkına bakıldığında açıkça ayırt edilebilmektedir. Difüzyon sabitinin değerinin $1 \text{ nm}^2\text{ns}^{-1}$ mertebesindeki değeri katı fazı ile sıvı fazını birbirinden ayıran bir özelliktir (Liada ve Guthire 1998). Difüzyon, sistemde bulunan atomların veya moleküllerin kütle taşınımı anlamına gelmektedir. Katı cisimlerde difüzyon boşluklarda ve örgü kusurlarında mevcut iken, sıvılarda atomların konumları değiştiği için sürekli difüzyon mevcuttur.

Difüzyon katsayısı moleküler dinamik simülasyonlarında çalışma süresince oluşturulan atomların konum ve hızlarından elde edilebilmektedir. Difüzyon katsayısı parçacığın t zamanı boyunca ilerlediği yol ile bağlantılı olması beklenmektedir. Yüksek t değerleri için ortalama kare yerdeğiştirme ile difüzyon doğrusal şekilde bağlantılı olduğu görülmektedir. Difüzyon katsayısı, ortalama kare yerdeğiştirmenin bir fonksiyonu olarak ;

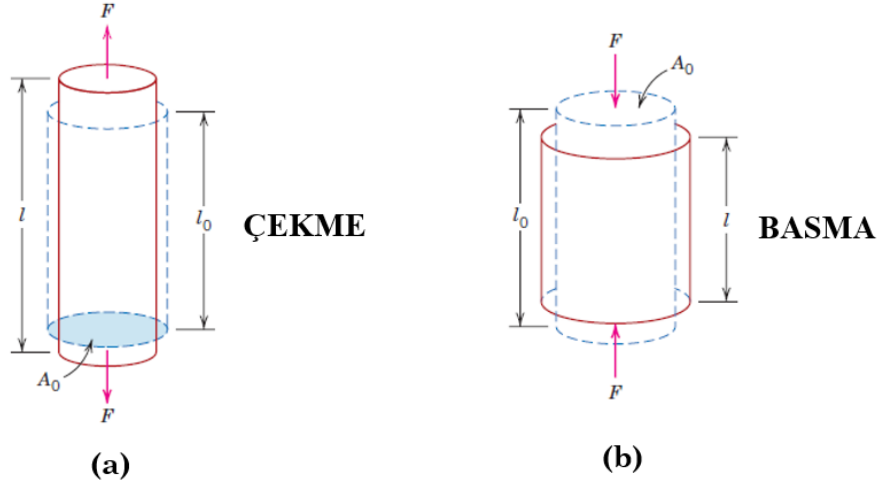
$$D = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\langle r^2(t) \rangle}{6t} \quad (3.54)$$

Einstein bağıntısından (Allen ve Tildesly 1987) hesaplanabilmektedir.

3.7 Mekanik Özellikler

Malzemelerin mekanik davranışı, uygulanmakta olan yüke veya kuvvete karşı malzemenin göstermiş olduğu direnci veya deformasyonu yansıtmaktadır. Mukavemet, sertlik, rijitlik ve süneklik tasarımda kullanılan temel parametreleri oluşturmaktadır. Malzemelerin mekanik özellikleri, laboratuvar deneyleriyle elde edilebildiği gibi bilgisayar simülasyonları yardımıyla da belirlenebilmektedir. Uygulanan yükün türü, uygulanma süresi ve çevre durumları dikkate alınmaktadır. Yükün türü, çekme, basma veya kayma türünde olabilmekte ve büyüğü sabit veya değişken olabilmektedir. Ayrıca çalışma koşullarındaki ortam sıcaklığı da önem arz etmektedir.

Malzemeye uygulanan kuvvet, sabit veya zamanla çok az değişiyor ve parçanın kesit alanına veya yüzeyine eşit şekilde uygulanıyorsa malzemenin mekanik davranışı zor-zorlanma elde edilebileceği basit bir deneyle belirlenebilmektedir. Yapılan deneylerde yük, Şekil 3.7’de görüldüğü gibi basma veya çekme şeklinde uygulanabilmektedir.



Şekil 3.7: (a) Çekme yükü ve (b) basma yükü altında oluşan kısılma ve şekil değişimi.

Çekme deneyi, zor-zorlanma verilerinin elde edilmesi için en sık uygulanan deneylerden biridir. Bu deneyle tasarımda önemli olan birçok mekanik özelliğin tespit edilmesini sağlamaktadır. Deney aşamasında malzeme, eksenî doğrultusunda yavaş bir şekilde artan kuvvet etkisi altında genellikle kırılana kadar şekil değiştirmektedir. Malzemelerin kesit alanı dikdörtgen olabilmekle birlikte, genellikle dairesel kullanılmaktadır. Uygulanan kuvvet kesit şekline ve büyüklüğüne göre farklılık göstermektedir. Bu farklılıkları aza indirmek için yük ve uzama, zor ve zorlanma olarak normalize edilmektedir. Zor (σ),

$$\sigma = \frac{F}{A_0} \quad (3.55)$$

denklemleriyle tanımlanmaktadır. Burada, F malzemenin kesit alanına uygulanan dik kuvvet, A_0 ise malzemenin ilk kesit alanıdır. Zorlanma (ε) ise,

$$\varepsilon = \frac{l_i - l_0}{l_0} = \frac{\Delta l}{l_0} \quad (3.56)$$

şeklinde tanımlanmaktadır. Burada, l_0 ilk boy, l_i ise çekme işlemi sonrasında ölçülen boydur.

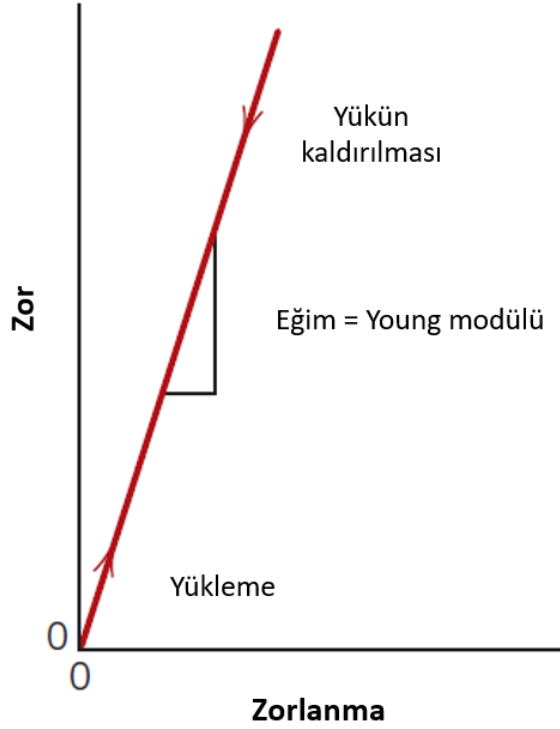
3.7.1 Elastik Modülü

Bir malzemedeki oluşan deformasyon veya şekil değiştirme miktarı uygulanmakta olan zorun büyüklüğüne bağlıdır. Metallerin geneli küçük zorlara maruz kaldığında, oluşan zor ve zorlanma arasında aşağıda verilen denklem gibi doğrusal bir ilişki oluşmaktadır;

$$\sigma = E\varepsilon \quad (3.57)$$

Bu denklem Hooke Kanunu olarak bilinmekte olup, burada E orantı sabiti Young modülü veya elastik modülü olarak adlandırılmaktadır. Zor ile orantılı olarak değişen zorlanmaya elastik şekil değişimi adı verilmektedir. Şekil 3.8'de görüldüğü gibi zor-zorlanma arasında doğrusal bir ilişki söz konusudur. Doğrusal olan bu kısmın eğimi Young modülüne karşılık gelmektedir. Young modülü, bir malzemenin rijitliğe karşı gösterdiği direnç olarak da ifade edilebilmektedir. Young modülünün büyük olması, malzemenin rijit olduğu anlamına gelmektedir. Elastik şekil değişimi kalıcı olmayıp, uygulanan yük kalktığında malzemenin ilk haline geri döneceği anlamına gelmektedir.

Atomal mertebede elastik şekil değişimi, atomlararası mesafede meydana gelen çok küçük miktarda değişmelerle, buna bağlı olarak da atomlararası bağların gerilmesiyle kendini göstermektedir. Elastik modülünün büyüklüğü, komşu atomların birbirinden ayrılmaya karşı göstermiş oldukları direncin yani atomlararası bağ kuvvetinin bir ölçütü olmaktadır.



Şekil 3.8: Yükün uygulanması ve ardından kaldırılması sırasında doğrusal elastik şekil değişimini gösteren şematik zor-zorlanma diyagramı.

MD simülasyon hesaplarında atomlararası kuvvetler doğrudan hesaplandığı için elastik modülü kolaylıkla hesaplanabilmektedir. Oluşturulan bir sistem belirli bir doğrultuda çekilerek zorlanma oluşturulur. Buna bağlı olarak atomlararası kuvvet yardımıyla zor ve zorlanma hesaplanmaktadır.

Şekil değişimi, kabul edilmiş bir referans uzunluğa göre cisim içindeki atomların yerdeğiştirilmesine karşılık gelen deformasyonun normalize edilmiş bir ölçüsüdür. Kuvvetin uygulanma doğrultusuna göre zorlanma değişmektedir. Cismin uzunluğu boyunca sıkıştırılması veya gerilmesi durumunda normal zor, cismin düzlemlerinin birbirine göre kaymasını tanımlayan duruma ise kesme zoru denilmektedir. MD simülasyon hesaplarında virial gerilme yöntemi en yaygın kullanılan yöntemlerdendir. Belirli bir atomik topluluk için virial gerilme yöntemi (Allen ve Tildesly 1987),

$$\Pi^{\alpha\beta} = \frac{1}{\Omega} \left\{ - \sum_i m_i v_i^\alpha v_i^\beta + \frac{1}{2} \sum_i \sum_{i \neq j} F_{ij}^\alpha r_{ij}^\beta \right\} \quad (3.58)$$

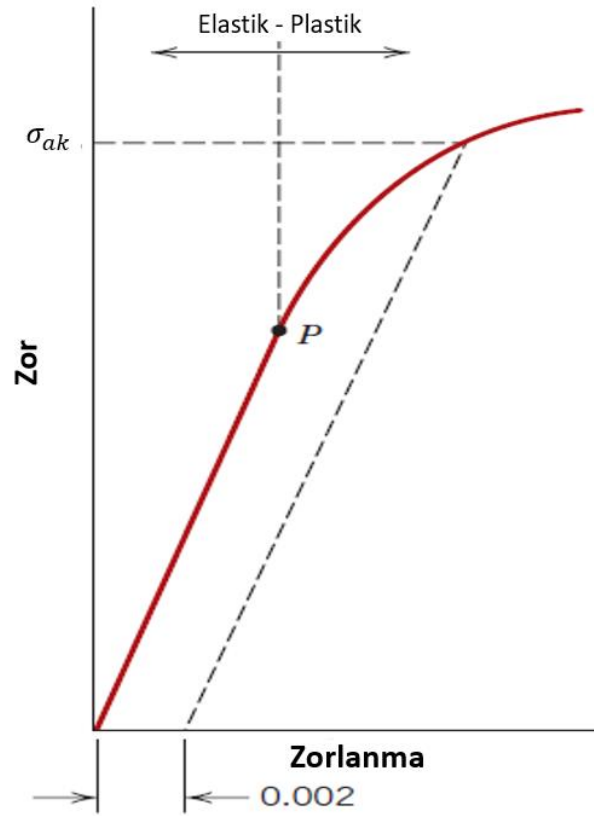
bağıntısıyla tanımlanmaktadır. Burada Ω sistemin hacmi, m_i parçacığın kütlesi, v_i parçacığın hızı, F_{ij} i ile j atomları arasındaki kuvvet, r_{ij} i ile j atomları arasındaki uzaklık, α ve β indisleri kartezyen bileşenleridir.

3.7.2 Akma ve Çekme Dayanımı ile Kopma Uzaması

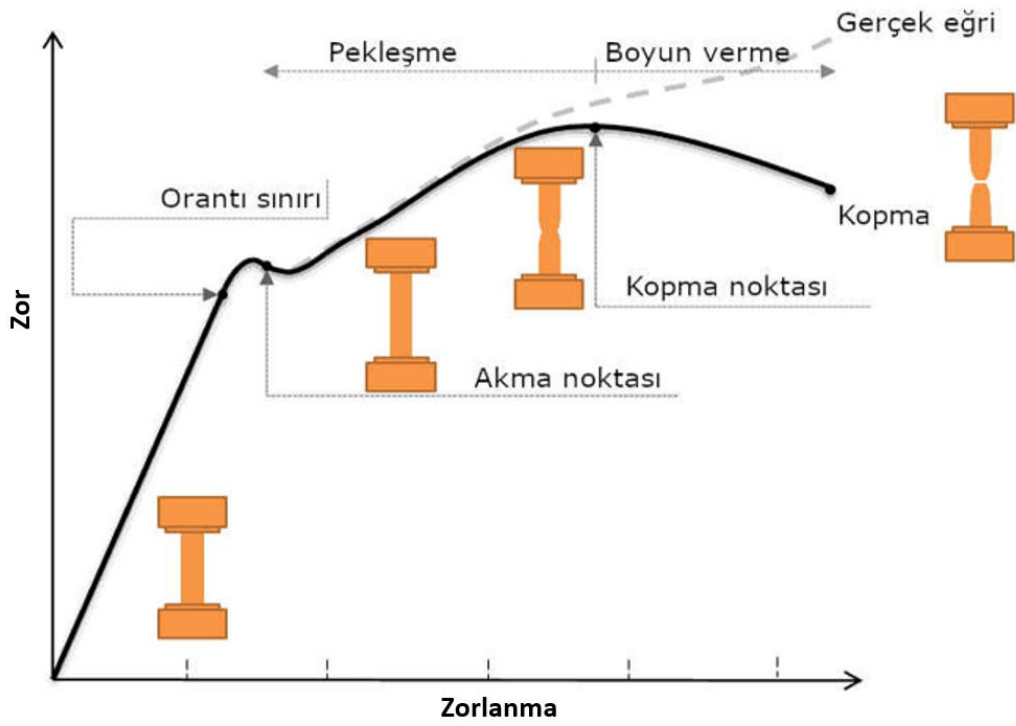
Metalik malzemelerde genellikle elastik davranış yaklaşık olarak 0,05 zorlanma miktarına kadar devam etmektedir. Malzeme bu noktadan daha fazla deforme edildiğinde zor-zorlanma arasındaki Hooke kanunu ortadan kalmakta ve plastik deformasyon oluşmaktadır. Atomsal mertebede ise plastik deformasyon, çok sayıda atomun veya molekülün birbirine göre yapmış oldukları hareketleri sırasında komşuları ile yapmış oldukları bağları koparıp, yeni komşularıyla yeni bağ kurmaları anlamına gelmektedir.

Sistemler çoğunlukla zor altında sadece elastik şekil değiştirecek şekilde tasarlanmaktadır. Bundan dolayı, plastik deformasyonun başladığı zorun, yani akmanın nerede başlamış olduğu bilinmek istenmektedir. Elastik-plastik geçişinin olduğu noktaya karşılık gelen zor değerine akma dayanımı (σ_{ak}) denilmektedir. Şekil 3.9'da görüldüğü gibi, akma dayanımına karşılık gelen P noktasının yerini tespit etmenin zor olduğu durumlarda, genellikle 0,002 zorlanma değerinden, eğriye paralel çizilen doğrunun kestiği noktaya karşılık gelen zor değeri akma dayanımı olarak kabul edilmektedir.

Akma olayından sonra, plastik deformasyonun devam edebilmesi için gerekli gerilme miktarı, Şekil 3.10'da görüldüğü gibi kopma noktasına kadar artmakta ve sonra ani kopmanın olduğu kopma noktasına kadar azalmaktadır. Çekme dayanımı (σ_c), bu eğrideki maksimum noktaya karşılık gelmektedir. Bu çekme işleminin altında bir sistemin taşıyabileceği maksimum zora karşılık gelmektedir.

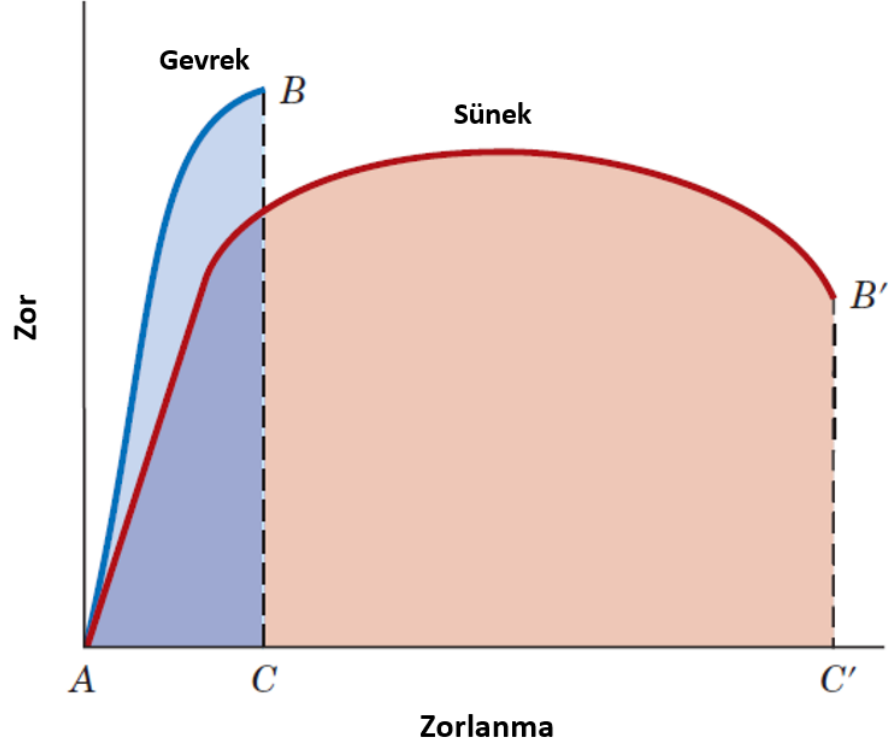


Şekil 3.9: Elastik ve plastik deformasyonu gösteren tipik bir zor-zorlanma eğrisi.



Şekil 3.10: Çekme işlemi uygulanan bir teldeki zor-zorlanma bağıntısı.

Süneklik, bir başka önemli mekanik özellik olup, kırılma durumuna kadar malzemede oluşan plastik deformasyonun miktarının bir ölçüsüdür. Kırılma durumuna kadar çok az ya da hiç plastik deformasyon göstermiyorsa malzemeler gevrek olarak adlandırılmaktadır. Sünek ve gevrek malzemelerin zor altında zorlanma davranışı Şekil 3.11’de gösterilmektedir.



Şekil 3.11: Gevrek ve sünek malzemelere ait zor-zorlanma eğrisi.

Sünekliğin tasarımcıya malzemenin hasara uğramadan önce ne ölçüde deformasyona uğrayacağı hakkında bilgi vermesi önem arz etmektedir. Ayrıca imalat esnasında malzemeye verilebilecek deformasyon miktarı hakkında bilgi vermektedir. Süneklik sayısal olarak kopma uzaması (ϵ_k) olarak da ifade edilmektedir;

$$\epsilon_k = \left(\frac{l_k - l_0}{l_0} \right) \cdot \quad (3.59)$$

Burada, l_k kopma boyu, l_0 ise ilk boyudur.

3.7.3 Poisson Oranı

Çekme ya da basma kuvveti uygulanan bir malzeme Şekil 3.12’de gösterildiği gibi yükün uygulandığı doğrultuda uzamakta veya kısalmaktadır. Bununla birlikte şekil değiştirmeye karşılık gelen bir yanıl daralma veya genişleme olmaktadır. Bu aksene ve yanıl şekil değıştirme arasındaki ilişki Poisson oranı olarak adlandırılmaktadır ve ν ile gösterilmektedir. z yönünde uygulanan (σ_z) zorun sebep olduđu Poisson oranı ařağıdaki ifade ile verilir;

$$\nu = -\frac{\varepsilon_x}{\varepsilon_z} \quad (3.60)$$

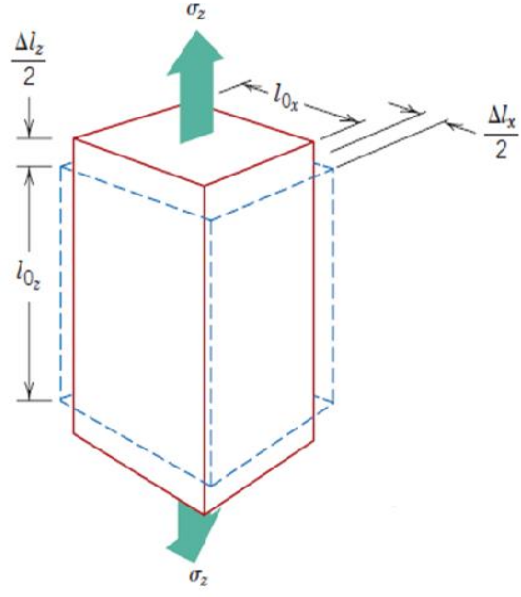
Burada z ve x yönünde oluşlan zorlanmalar sırasıyla,

$$\varepsilon_z = \frac{\Delta l_z}{l_{0z}} \quad (3.61)$$

ve

$$-\varepsilon_x = \frac{\Delta l_x}{l_{0x}} \quad (3.62)$$

bağıntılarıyla elde edilir. Burada l_{0z} malzemenin z doğrultusundaki ilk boyu iken, Δl_z ise aynı yöndeki uzamasını vermektedir. Aynı şekilde, l_{0x} malzemenin x doğrultusundaki ilk eni iken, Δl_x ise x doğrultusunda kısıalma miktarını verir. Eğer sistem izotropik malzeme ise, x ve y doğrultusundaki zorlanmalar birbirine eşit olmaktadır.



Şekil 3.12: Çekme işlemi sırasındaki boydaki uzamaya karşı endeki kısılmanın gösterimi.

4. VERİLER VE BULGULAR

Nano yapıdaki sistemlerin bulk yapıdaki sistemlere göre fiziksel davranışları farklılık göstermektedir. Bu çalışmada tasarlanan nanomalzemeler kor@kabuk olarak adlandırılan iç bölgeye yerleştirilen A malzemesinin diğer bir B malzemesi tarafından sarmasıyla oluşan nanotellerdir. Bu tür malzemeler tek tip malzemedan oluşan nanotellere göre çok daha farklı özellikler göstermektedir. Kor@kabuk nanotellerin büyüklüğü, malzeme çeşidi, kabuk kalınlığı ve geometrik yapısı bu malzemelerin fiziksel özelliklerini değiştirmekte önemli rol oynamaktadır. Bu sebeple, uygun boyutlarda seçilen nanotelin kor çapı veya kabuk kalınlığının ayarlanması ile hedeflenen özelliklere ulaşılabilir ve nanotelin performansını arttırılabilir. Bu sebeple, çalışmada moleküler dinamik simülasyon yöntemi kullanılarak farklı boyutta ve farklı kabuk kalınlığında tasarlanmış nanotellerin termodinamiksel, yapısal, dinamiksel ve mekanik özellikleri incelenmiştir. Bu çalışmada, model sistemlerimiz Fe@Cr ve Cr@Fe nanotellerinden oluşmaktadır. Aynı zamanda, karşılaştırma yapabilmek için saf Fe ve Cr nanotellerin fiziksel özellikleri de incelenmiştir. Tablo 4.1’de model sistemler, atom sayıları ve, kor ve kabuk bölgesindeki atomların yüzdelik oranları verilmiştir. İki büyüklükte kor@kabuk nanoteli çalışılmıştır. İlki Cr veya Fe malzemesinin örgü sabitinin 8 katı çapında (yaklaşık 2,5 nm) olup, diğeri ise 16 katı çapında (yaklaşık 4,5 nm) büyüklüğündedir. Silindir nanotellerin boyları ise çaplarının 4 katı uzunluğunda alınmıştır. Küçük yapıdaki sistemler 3200 civarı atom içermekte iken, büyük yapıdaki sistemler 25700 civarı atomdan oluşmaktadır. Nanotellerin erime davranışı toplam enerji, ısı kapasitesi, çift dağılım fonksiyonu, Lindemann kriteri ve difüzyon sabiti gibi termal ve dinamik özelliklerin sistem büyüklüğüne ve kor çapı ya da kabuk kalınlığı bağımlılığına göre araştırılmıştır. Ayrıca model sistemlere z yönünde çekme kuvveti uygulanarak, akma ve çekme dayanımı, kopma uzaması, elastik modülü ve Poisson oranı gibi mekaniksel özelliklerine kor çapı ya da kabuk kalınlığının etkisi irdelenmiştir.

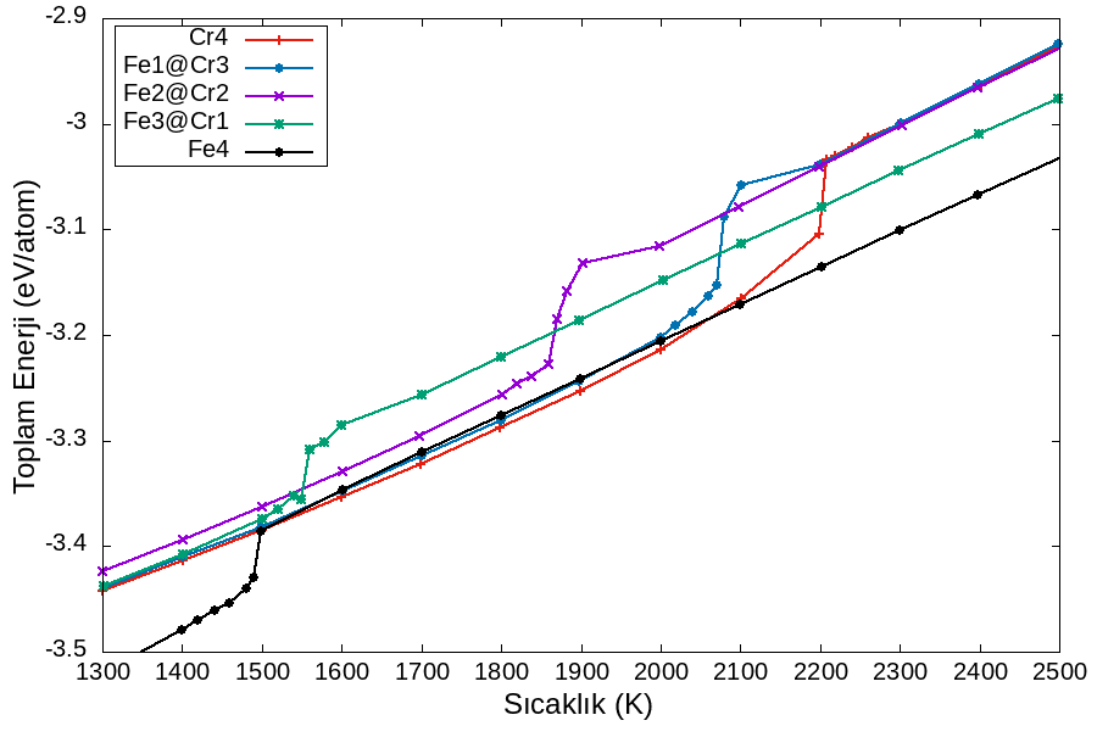
Tablo 4.1: Fe-Cr bazlı kor@kabuk nanotellerin atom sayıları ve oranları.

	Malzeme Adı	Atom Sayıları		Toplam Atom Sayısı	Oranları	
		Fe	Cr		%Fe	%Cr
8a-32a	Fe1@Cr3	293	2944	3237	9,1	90,9
	Fe2@Cr2	813	2304	3117	26,1	73,9
	Fe3@Cr1	1981	1036	3017	65,7	34,3
	Fe4	3281	0	3281	100,0	0,0
	Cr1@Fe3	2988	288	3276	91,2	8,8
	Cr2@Fe2	2048	800	2848	71,9	28,1
	Cr3@Fe1	1024	1952	2976	34,4	65,6
	Cr4	0	3232	3232	0,0	100,0
16a-64a	Fe2@Cr6	1613	24064	25677	6,3	93,7
	Fe4@Cr4	6513	18944	25457	25,6	74,4
	Fe6@Cr2	14513	10496	25009	58,0	42,0
	Fe8	26117	0	26117	100,0	0,0
	Cr2@Fe6	23552	1588	25140	93,7	6,3
	Cr4@Fe4	18688	6412	25100	74,5	25,5
	Cr6@Fe2	10496	14288	24784	42,3	57,7
	Cr8	0	25712	25712	0,0	100,0

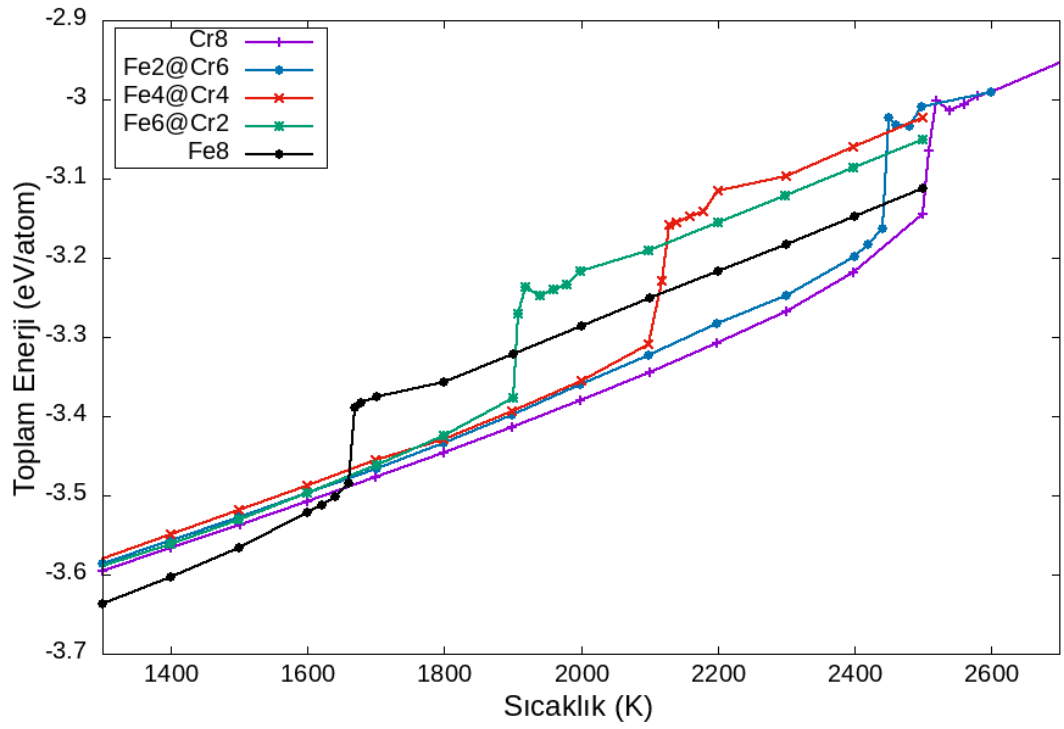
4.1 Termal ve Dinamiksel Özellikler

4.1.1 Toplam Enerji

Nanomalzemelerin erime noktalarını bulmak için birçok seçenek mevcuttur. Bunlardan en sık kullanılan yöntem, sistemin farklı sıcaklıklardaki toplam enerjilerini hesaplayıp, sıcaklığın fonksiyonu olarak incelemektir. Toplam enerjinin doğrusallığının bozulduğu, ani yükseldiği bölge erime sıcaklığını belirlemektedir. Her bir malzeme için bu işlemler ayrı ayrı yapıлып, toplam enerji grafiğinden erime sıcaklık bölgeleri tespit edilmiştir. Toplam enerji – sıcaklık ilişkisi 2,5 nm ve 4,5 nm çapındaki Fe@Cr ve Cr@Fe nanoteller için sırasıyla Şekil 4.1 ve Şekil 4.2’de verilmektedir.

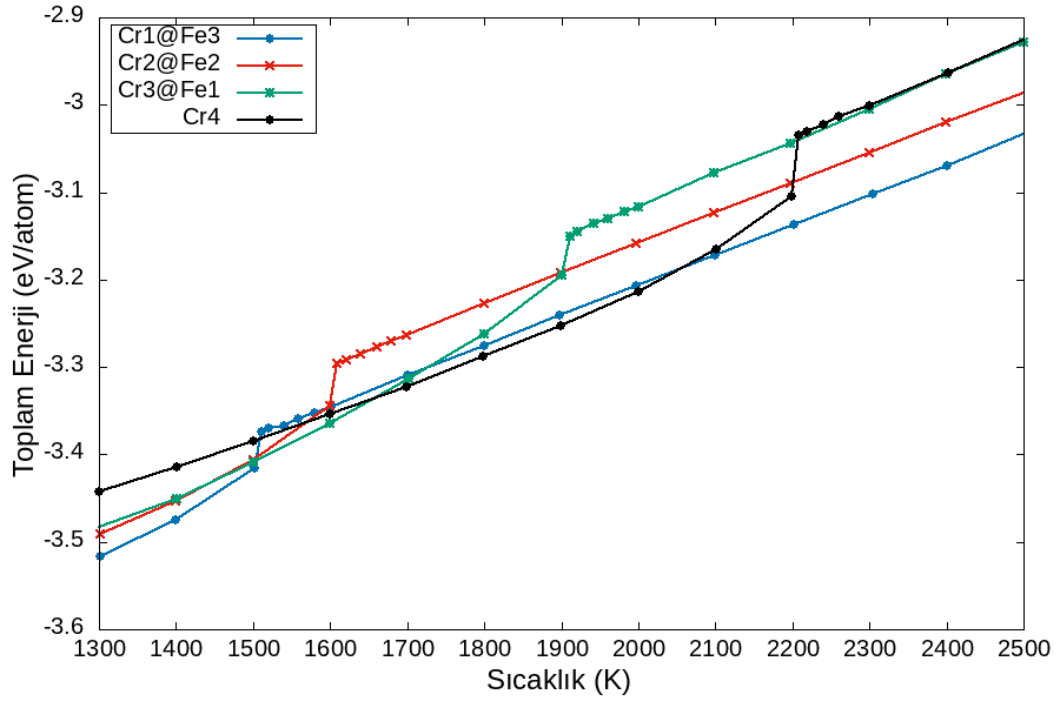


a)

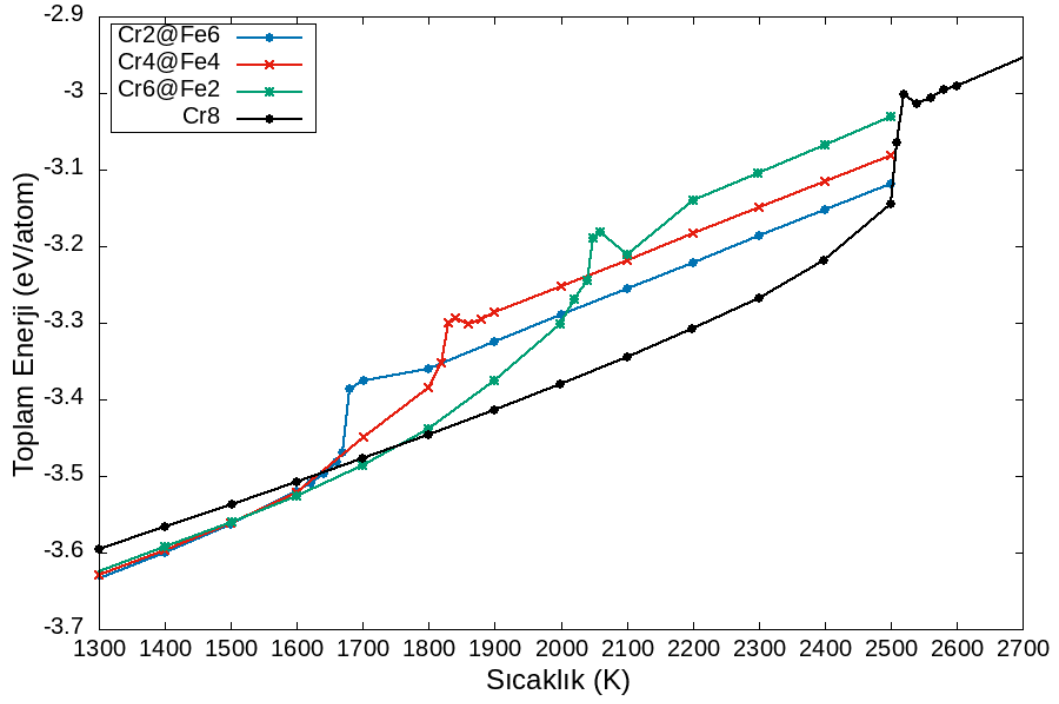


b)

Şekil 4.1: a) 2,5 nm ve b) 4,5 nm çapındaki Fe@Cr kor-kabuk nanotellerin toplam enerjisinin sıcaklığa bağımlılığı.



a)



b)

Şekil 4.2: a) 2,5 nm ve b) 4,5 nm çapındaki Cr@Fe kor-kabuk nanotellerin toplam enerjisinin sıcaklığa bağımlılığı.

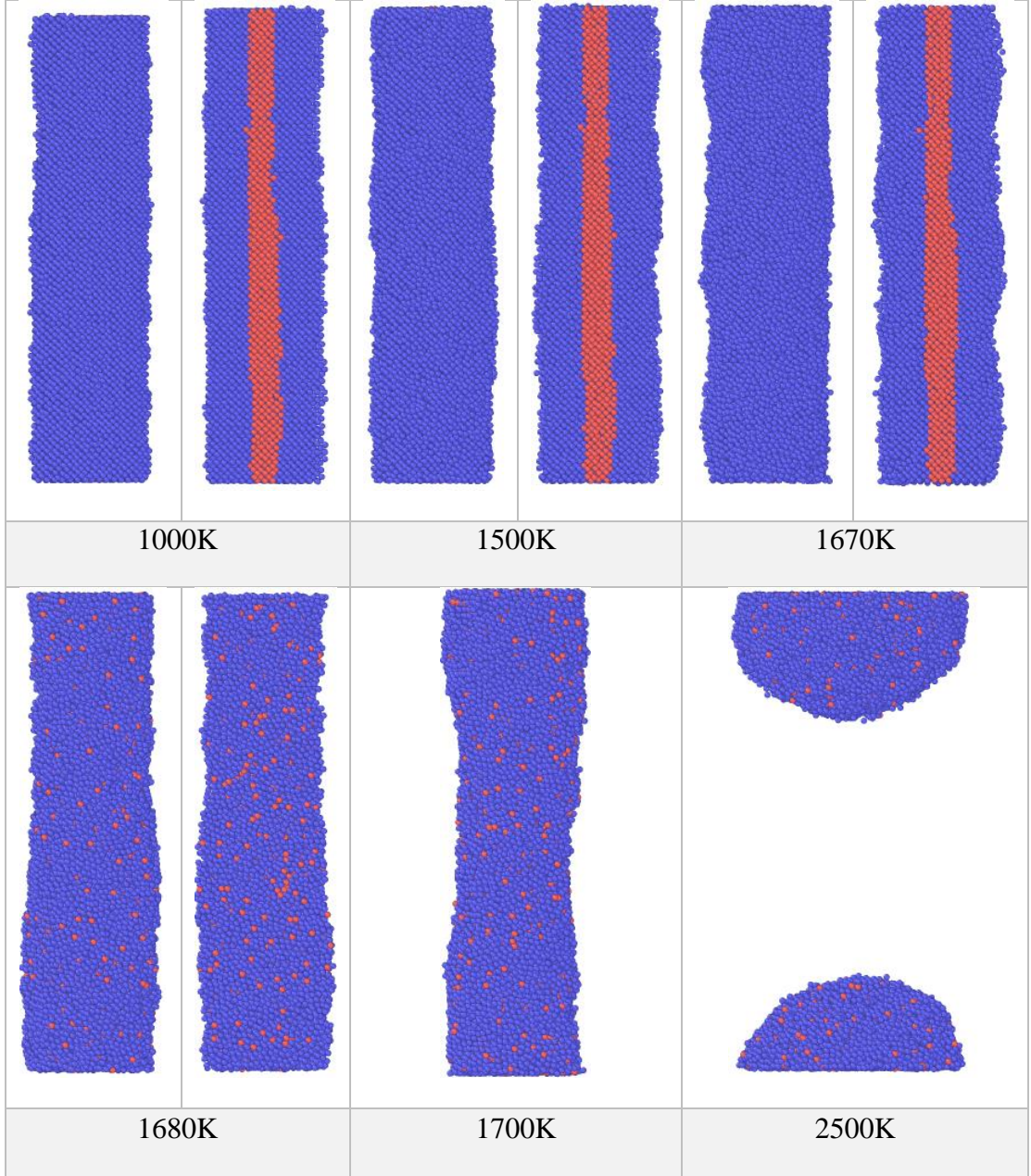
Şekillerde görüldüğü gibi, sistemin toplam enerjisi sıcaklık arttıkça belirli bir sıcaklığa kadar doğrusal artmakta olup, o noktada sistemin enerjisi birden keskin çıkış yapmaktadır. Bu sıcaklığa kadar nanoteller katı fazda bulunurlar.

Tablo 4.2: Nanotellerin simülasyon sonucu erime sıcaklıklarıyla deneysel verilerin karşılaştırılması.

Malzeme	T_m(K) Simülasyon	Malzeme	T_m(K) Simülasyon	T_m(K) Deneysel (bulk)
Cr4	2210±10 K	Cr8	2520±10 K	2180 K
Fe1@Cr3	2080±10 K	Fe2@Cr6	2450±10 K	2065 K
Fe2@Cr2	1900±10 K	Fe4@Cr4	2130±10 K	1919 K
Fe3@Cr1	1560±10 K	Fe6@Cr2	1920±10 K	1781 K
Fe4	1500±10 K	Fe8	1670±10 K	1811 K
Cr1@Fe3	1510±10 K	Cr2@Fe6	1680±10 K	1779 K
Cr2@Fe2	1610±10 K	Cr4@Fe4	1830±10 K	1778 K
Cr3@Fe1	1910±10 K	Cr6@Fe2	2060±10 K	1877 K

Sistemi ısıtmaya devam ettiğimizde, enerjisi yine doğrusal artış göstermekte olup, artık bu bölgede sistem sıvı faza geçmiştir. Enerjinin ani artış yaptığı sıcaklık o malzemenin erime sıcaklığını vermektedir. Şekil 4.1’de görüldüğü üzere, saf Fe’den oluşan nanotel, saf Cr bazlı nanotelden daha erken eridiği için, Fe’nin bulunduğu kor bölgesinin katman sayısı arttığında, erime sıcaklığı düşmektedir. Diğer bir yanda, kor bölgesine Cr malzemesi yerleştirdiğimizde ve kor bölgesinin katman sayısını arttırdığımızda, erime sıcaklığının yükseldiği Şekil 4.2’de görülmektedir. Sistemlerin enerjisinde birden tavan yaptığı durumdaki sıcaklığı erime sıcaklığı olarak belirlendi ve sonuçlar deneysel bulk erime noktaları ile birlikte Tablo 4.2’de verilmiştir. Saf Cr bulk malzemesinin erime sıcaklığı 2900 K olarak hesaplandı. Bu değerde deneysel veri 2180 K ile karşılaştırıldığında yüksek çıktığı görülmektedir. Kullanmış olduğumuz potansiyel parametreleri Cr malzemesinin erime sıcaklığının yüksek çıkmasına sebep vermektedir. Fe için teorik bulk değeri (2000 K) deneysel veri (1811 K) ile uyuşmaktadır. Beklendiği üzere, 2,5 nm büyüklüğündeki saf Fe ve Fe oranının yüksek olduğu kor@kabuk nanotellerin sıcaklıkları da bulk deneysel

sonuçlardan daha düşük olup, bu nanotellerin boyutu arttırıldığında bulk deneysel erime noktalarına yaklaşmaktadır.



Şekil 4.3: Cr₂@Fe₆ nanotelinin farklı sıcaklıklardaki simülasyon görüntüleri.

Şekil 4.3'de çapı $D=4,6$ nm ve yüksekliği $L=18,4$ nm olan Cr₂@Fe₆ kor-kabuk nanotelinin ısıtılmasında elde edilen simülasyon görüntüleri görülmektedir. Düşük sıcaklıklarda atomlar yoğunlukla bcc yapıda bulunduğu gözlenirken, erime sıcaklığına kadar atom hareketliliğinden kaynaklı olarak bazı atomların yapıdaki bozulmaları dikkat çekmektedir. Erime sıcaklığında (1680K) bcc yapının tamamen

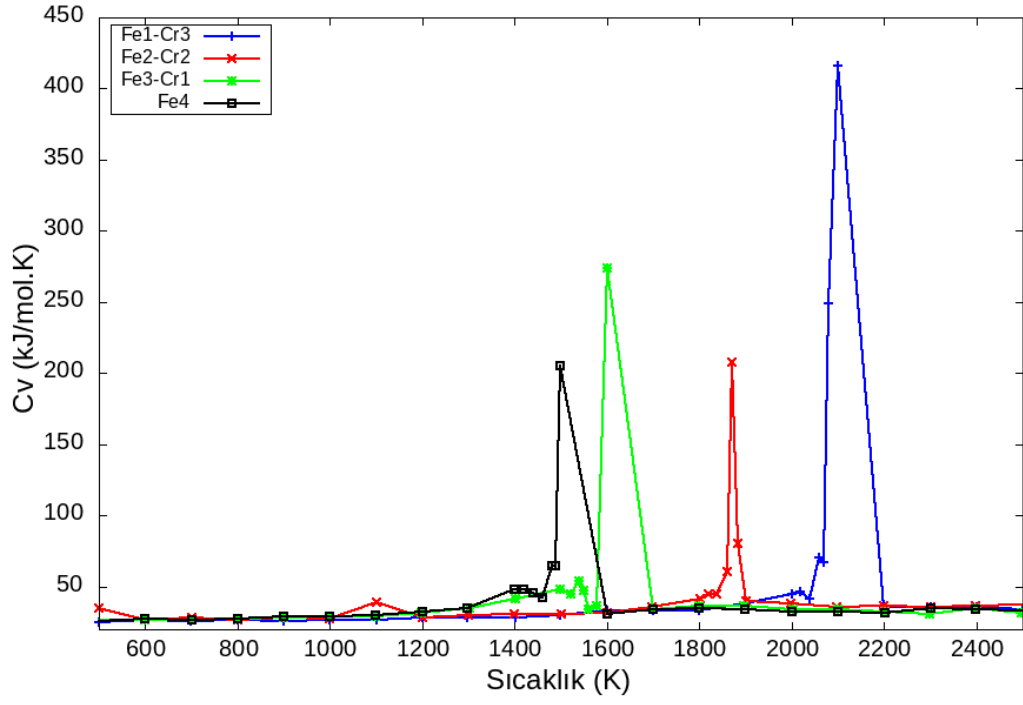
bozulup atomların karıştığı görülmektedir. Daha yüksek sıcaklıklarda ise nanotelin kırılıp ikiye ayrıldığı görülmektedir.

4.1.2 Isı Kapasitesi

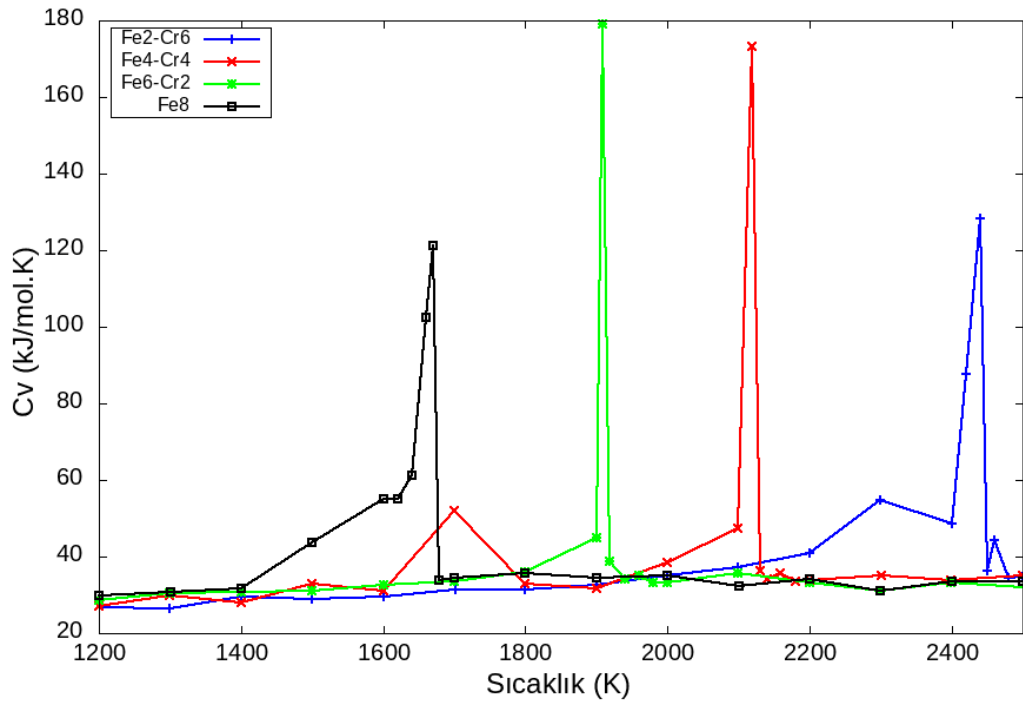
Isı kapasitesi, potansiyel enerji ortalamasının her bir sıcaklıkta hesaplanmasıyla elde edilmektedir. Sistemin hacmi sabit tutulduğunda her bir sıcaklıkta kinetik enerjiden gelen katkı $\frac{3}{2}k_B$ kadar sabit gelmektedir. Fe@Cr ve Cr@Fe nanotellerin sabit hacimde ısı kapasitesi Denklem (3.48) kullanılarak sıcaklığa bağlı olarak hesaplandı ve sırasıyla Şekil 4.4 ve Şekil 4.5’de gösterildi.

Şekillerde görüldüğü üzere, farklı kabuk kalınlığındaki Fe-Cr bazlı kor@kabuk nanotellerinin sıcaklığa bağlı molar ısı kapasitesi, erime noktasına kadar belirli aralıkta devam ederken erime noktasında yüksek sıçramalar yapmaktadır. Erime sıcaklığı üzerindeki sıcaklıklarda ise öncesine göre biraz daha yukarıda ve yine belirli aralıkta seyrettiği gözlemlenmektedir. Isı kapasitesindeki bu yüksek sıçramaların olduğu bölge erime noktasını göstermekte olup, toplam enerji-sıcaklık ilişkisinden elde edilen erime sıcaklıkları ile aynı sonuç elde edilmiştir.

Sıvı ve katı fazdaki nanotellerin ısı kapasitesine kabuk bölgesindeki malzeme çeşidinin etkisini görebilmek için 1000 K ve 2500 K sıcaklıklardaki sabit hacimdeki ısı kapasiteleri Tablo 4.3’te listelendi. Her malzeme için sıvı durumdaki ısı kapasitesi katı durumdakine göre daha yüksek olduğu görülmektedir. Cr malzemesi Fe ile kaplandığında ve boyutu arttığında ısı kapasitesinin değeri düşmektedir. Yüzey alanının hacime oranı küçük sistemlerde daha büyük olduğu için, yüzey enerjileri daha büyüktür. Bu sistemlerin erime için daha fazla enerji soğurması gerekir. Sonuçta, küçük sistemlerin ısı kapasitesinin büyük olması beklenen bir durumdur. Fakat büyük boyutlu nanotellerin kabuk bölgesine Cr yerleştirildiğinde ise küçük boyutlu duruma göre ısı kapasitesi artış göstermektedir. Bu durum, yüzeyde bulunan Cr malzemesinin özgül ısısının iç kısımda bulunan Fe malzemesinkinden yüksek olmasından kaynaklanabilir. Diğer bir yanda; Fe@Cr kor@kabuk nanotellerinin kor malzemesi ile kabuk malzemesi yer değiştirdiğinde, yüzey bölgesindeki Fe malzemesinin yüzey enerjisi daha büyük olduğu için ısı kapasitesinde az da olsa artış gözlenmektedir.

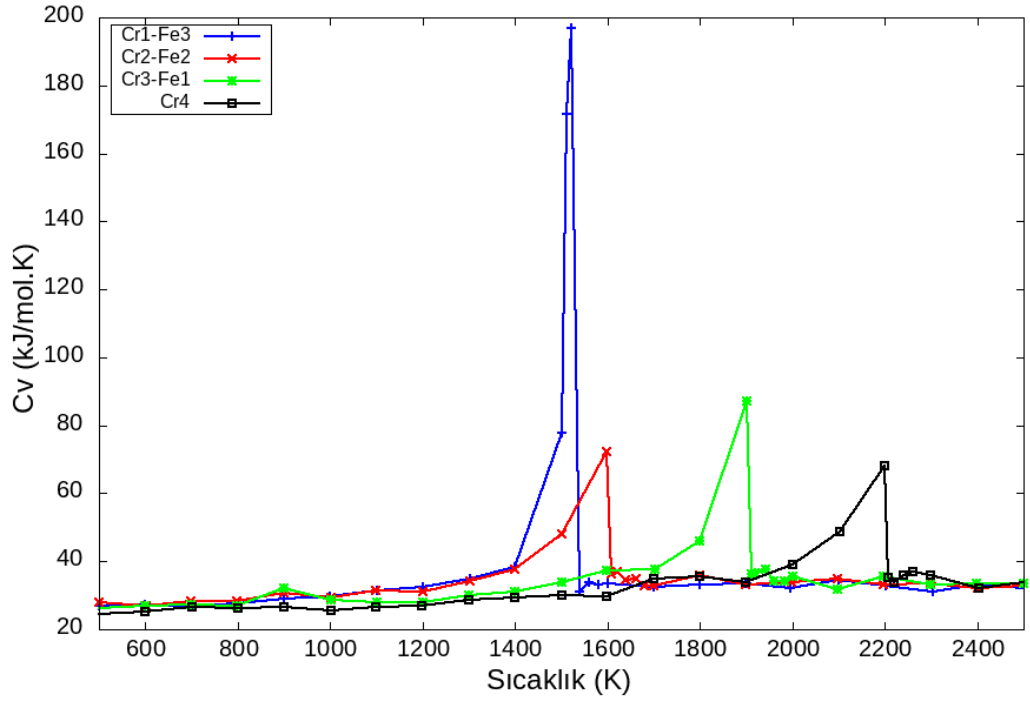


a)

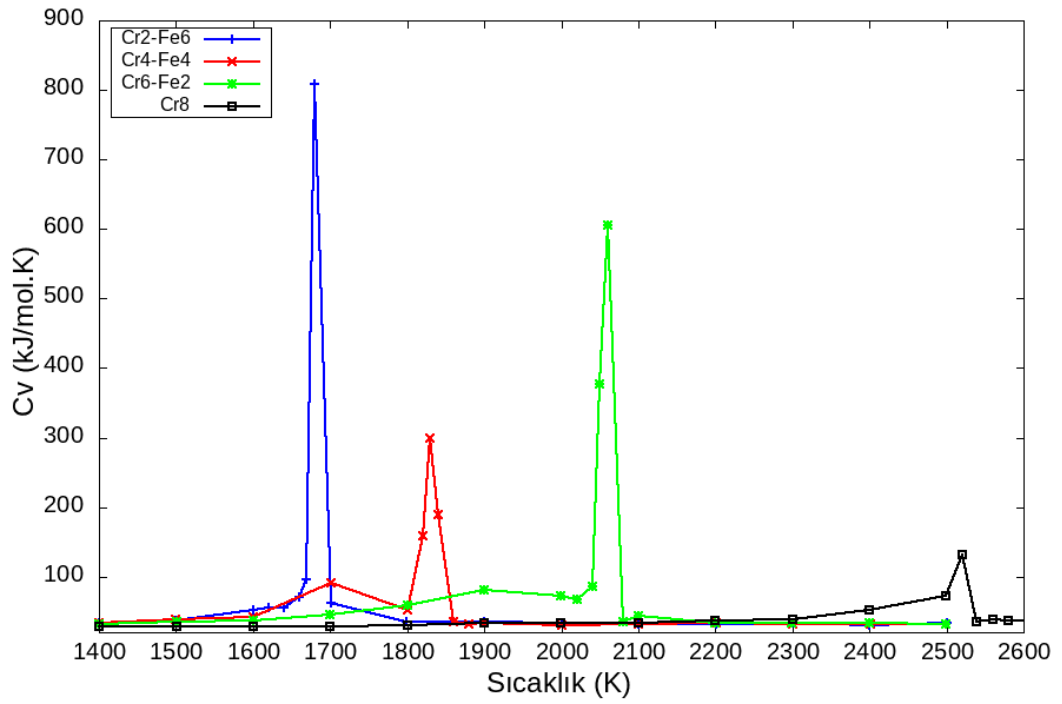


b)

Şekil 4.4: a) 2,5 nm ve b) 4,5 nm çapındaki Fe@Cr kor-kabuk nanotellerin molar ısı kapasitesinin sıcaklığa bağlılığı.



a)



a)

Şekil 4.5: a) 2,5 nm ve b) 4,5 nm çapındaki Cr@Fe kor-kabuk nanotellerin molar ısı kapasitesinin sıcaklığa bağlılığı.

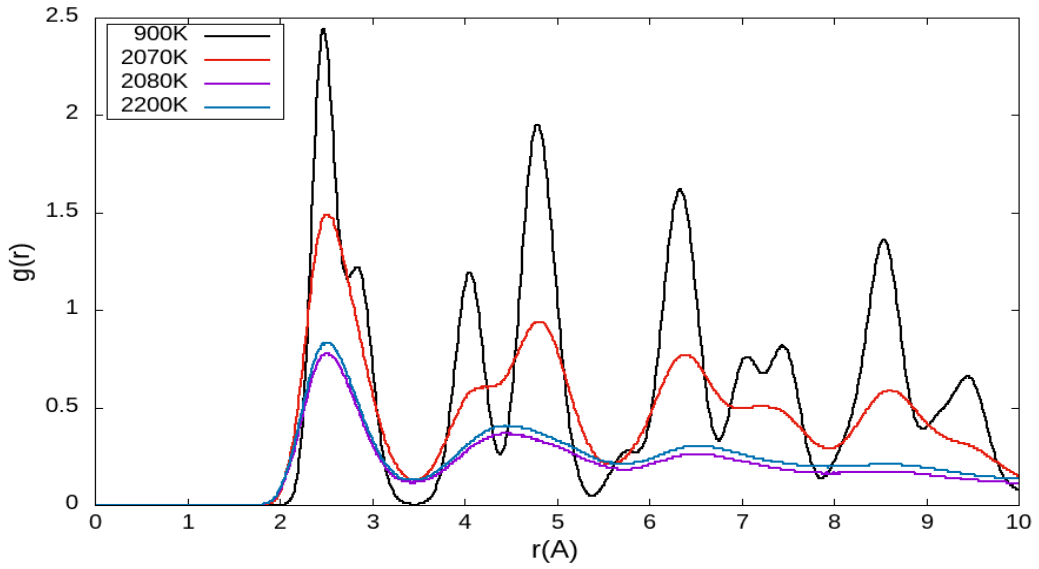
Tablo 4.3: Fe-Cr bazlı kor@kabuk nanotellerinin katı ve sıvı bölgelerindeki ısı kapasitesi değerleri.

	C_v (J/mol.K)		C_v (J/mol.K)		
	KATI (1000K)	SIVI (2500K)	KATI (1000K)	SIVI (2500K)	
Fe1@Cr3	26,36	34,41	Fe2@Cr6	27,17	34,92
Fe2@Cr2	27,48	37,09	Fe4@Cr4	27,89	35,09
Fe3@Cr1	29,29	31,37	Fe6@Cr2	35,72	32,1
Fe4	28,73	33,34	Fe8	28,94	33,64
Cr1@Fe3	29,73	32,24	Cr2@Fe6	28,99	33,41
Cr2@Fe2	29,36	32,86	Cr4@Fe4	27,97	31,68
Cr3@Fe1	28,75	33,65	Cr6@Fe2	27,28	32,64
Cr4	25,41	34,36	Cr8	26,54	37,26

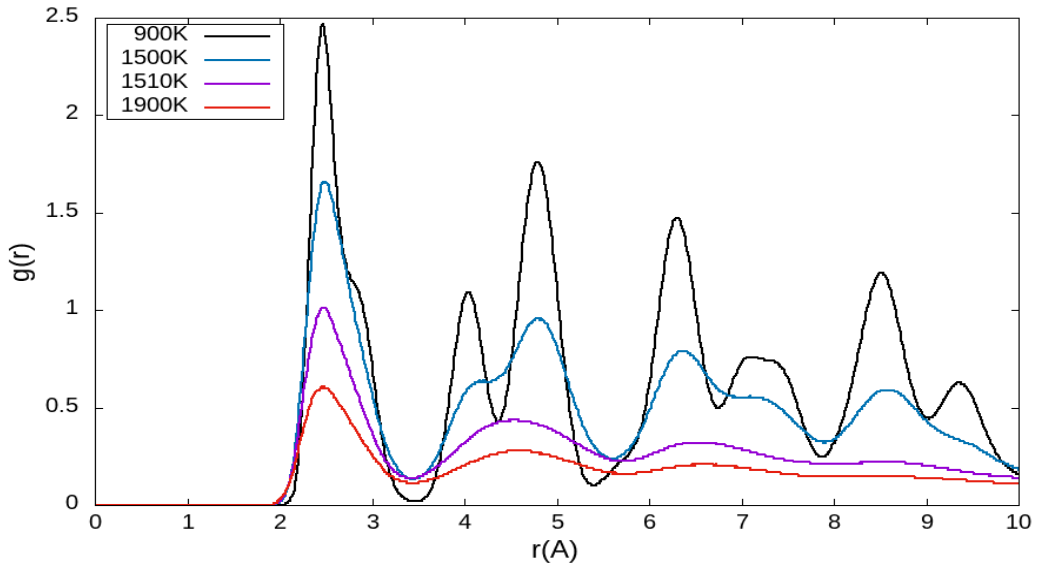
4.1.3 Çift Dağılım Fonksiyonu

MD simülasyonları sonucunda elde edilen atom konumlarını kullanarak, Python komutlarında kendi yazmış olduğumuz analiz programı ile nanotellerin çift dağılım fonksiyonları elde edilmiştir. Erime sıcaklığını tayin etmek için, düşük ve yüksek sıcaklıklarda atomların birbirine göre koordinasyon davranışları incelendi. Şekil 4.6 ve Şekil 4.7’de sırasıyla 2,5 nm boyutunda Fe1@Cr3 ve Cr1@Fe3 silindir nanotellerin çift dağılım fonksiyonu bazı sıcaklıklar için verilmiştir. Şekillerde görülen pikler merkezde bulunan atomun yakın komşuluklar koordinasyonunu ifade etmektedir. Her bir tepe noktasının altında kalan alan yakın komşu atom sayısını vermektedir. Düşük sıcaklıklarda (900 K) $g(r)$ fonksiyonunda keskin pikler görülmekte olup, nanotellerin ideale yakın bcc yapıda bulunduğunu ifade etmektedir. Fakat erime sıcaklığı ve yukarısında bazı piklerin keskinliği ve miktarları azalmakta hatta kaybolmaktadır. Boylarının azalması ve yok olması komşuluk sayılarının azaldığını göstermektedir. Bu durum nanotellerin sıvı dinamiğinin başladığına işaret etmektedir (Fe1@Cr3 için 2080 K; Cr1@Fe3 için 1510 K). Bu sıcaklığın üzerinde nanoteller artık sıvı durumda bulunmaktadır. İlk pikten sonra $g(r)$ eğrisi belirli bir değer etrafında salınması sıvıların karakteristik özelliğidir.

Sonuçlar incelendiğinde, Şekil 4.6’da $g(r)$ fonksiyonu verilen Fe1@Cr3 nanotelinin 2080 K sıcaklığında ve Şekil 4.7’de $g(r)$ fonksiyonu verilen Cr1@Fe3 nanotelinin 1510 K sıcaklığında eridiği görülmektedir. Bu yöntemle, diğer kor@kabuk malzemelerin erime sıcaklıkları tespit edilmiştir. $g(r)$ - sıcaklık ilişkisinden elde edilen erime sıcaklıkları, toplam enerjinin sıcaklığa bağlı davranışından elde edilen ve Tablo 4.2’de verilen erime sıcaklıklarıyla aynı değerde olduğu teyitlenmiştir.



Şekil 4.6: 2,5 nm çapındaki Fe1@Cr3 kor-kabuk nanotelin çift dağılım fonksiyonunun sıcaklığa göre davranışı.



Şekil 4.7: 2,5 nm çapındaki Cr1@Fe3 kor-kabuk nanotelin çift dağılım fonksiyonunun sıcaklığa göre davranışı.

4.1.4 Lindemann Kriteri

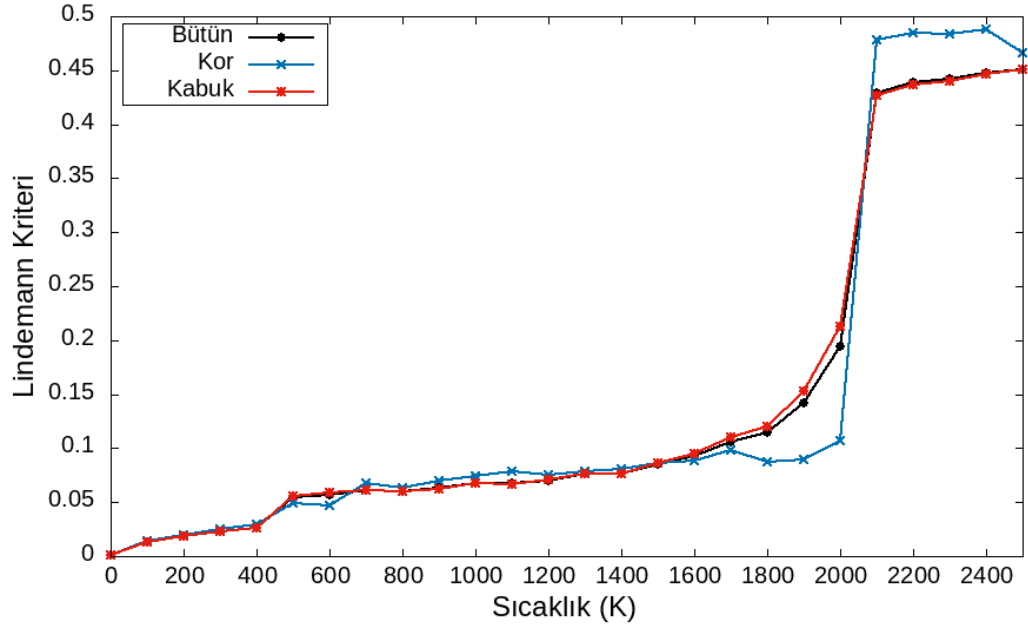
Lindemann kriteri, malzemelerin katı-sıvı faz geçiş durumlarını tespit edebilmek için kullanılan bir analiz yöntemidir. Lindemann erime kuralı, sıcaklık arttıkça atomların termal titreşimlerin ortalama genliğinin artması temeline dayalıdır. Bu kurala göre, malzeme erimeye başladığında, atomun denge örgü noktasından uzaklaşma titreşim genliği o kadar büyüktür ki, atom yakın komşu atomun bulunduğu yeri işgal edebilmektedir. Bu durumda Lindemann parametresi belli bir kritik değer almaktadır. Bu değer, malzemenin kristal yapısı, diğer iç parçacıklarla etkileşim doğası ve bazı kuantum etkilere bağlı olarak %5 ile %20 arasında değişkenlik göstermekte olup, bu değer genelde %15 olarak alınır (Stillinger ve Weber 1980; Agrawal ve Kofke 1995; Chakravarty 2002; Luo ve diğ. 2005). Lindemann kriteri atomların denge örgü noktasından kök ortalama kare (rms) dalgalanmanın en yakın komşu uzaklığına oranı olarak tanımlanmakta olup, Denklem (3.49) kullanılarak, PYTHON komutları bazında analiz programı ile elde edilmiştir. Lindemann kriteri, bu tez çalışmasında düşünülen tüm nanotellerin erime mekanizmasını irdelemek için kullanılmıştır. Örnek olarak, Fe1@Cr3 ve Cr1@Fe3 nanotellerin kor, kabuk ve bütün sistemin Lindemann kriterinin sıcaklığa göre değişimi sırasıyla Şekil 4.8a ve Şekil 4.9a'da verilmiştir. Beklendiği üzere, önce kabuk bölgesi, daha sonra kor bölgesindeki malzemeler erimiştir. Cr malzemesinin erime sıcaklığı daha yüksek olduğu için ve erime kabuk bölgesinden başladığı için Fe1@Cr3 nanoteli Cr1@Fe3 nanoteline göre daha geç erimektedir. Ayrıca, nanosistemlerin erimesinin hangi katmanlardan başladığı ve katmanlardaki erime davranışını irdeleyebilmek için de örnek nanotellerin her bir katman için Lindemann kriterinin sıcaklığa göre değişimi Şekil 4.8b ve Şekil 4.9b'de çizilmiştir. Şekil 4.8b'de görüldüğü üzere, Cr atomlarının bulunduğu en dıştaki katman 1700 K civarında erime gösterirken, diğer içteki üç katman hemen hemen birbirine yakın sıcaklıklarda (2000 K civarında) erimişlerdir. Hatta en iç katmandaki Cr bölgesi erir erimez, kor bölgesindeki Fe atomları da aynı anda erimeye başlamaktadır. Diğer bir yanda, Şekil 4.9b'deki Cr1@Fe3 nanotelini incelediğimizde belirli bir sıcaklık aralıkları ile dıştan başlayarak içe doğru erime göstermektedir. Yine en içteki Fe katmanı ile kor bölgesindeki Cr malzemesi aynı anda erime göstermektedir.

Ayrıca, Fe₂@Cr₂, Fe₃@Cr₁, Cr₂@Fe₂ ve Cr₃@Fe₁ nanotellerin hem kor ve kabuk bölgeleri, hem de katmanlara ayrılmış şekilde Lindemann davranışı Ek-A'da verilmiştir.

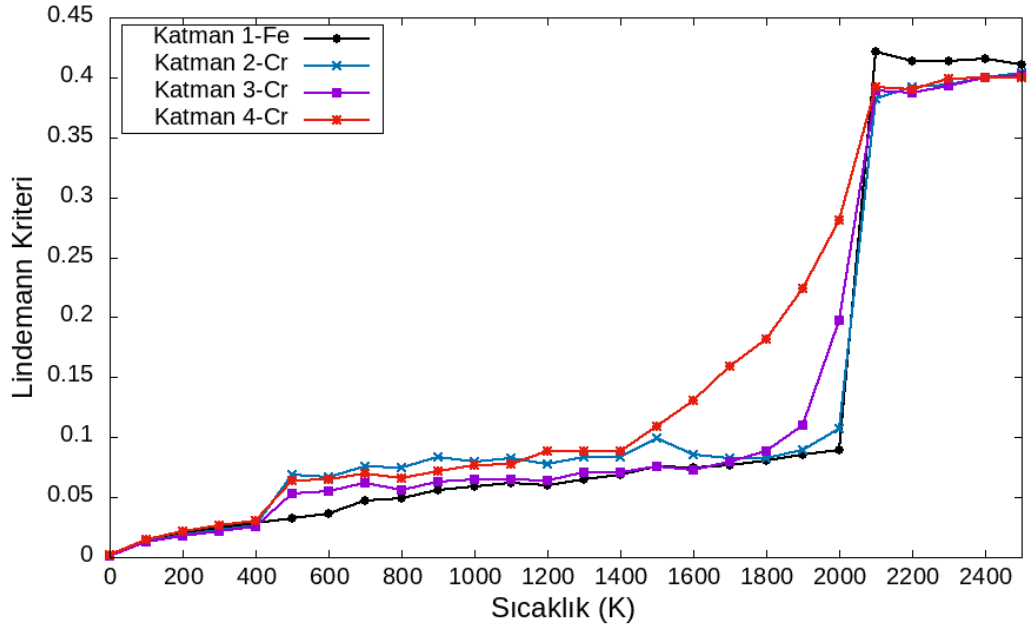
Kabuk bölgesi kalınlığının (diğer bir deęişle katman sayısının) erime sıcaklığına etkisini inceleyebilmek için de; Fe@Cr ve Cr@Fe nanotellerin toplam Lindemann kriterinin sıcaklığa bağımlılığı Şekil 4.10'da gösterilmiştir. Kabuk bölgesindeki Fe katmanlarını artırdıkça erime sıcaklığı düşmekte olup, Cr katmanlarını artırdığımızda erime sıcaklığında artış görülmektedir. Tek (ince) kabuk kalınlığındaki nanoteller diğerine göre oldukça farklı sıcaklıkla erime davranışı sergilemektedirler. Şekillerde görüldüğü üzere, Cr₁@Fe₃ ve Cr₂@Fe₂ hemen hemen aynı sıcaklık aralıklarında erirken, Fe₁@Cr₃ ve Fe₂@Cr₂ nanotelleri de benzer davranışı göstermektedir. Son olarak, bu tez çalışmasında ele alınan bütün nanotel sistemlerin Lindemann kriteri incelendiğinde, %15-%20 kriterine karşılık gelen sıcaklık, toplam enerji-sıcaklık ilişkisinden elde edilen erime sıcaklığını doğrulamaktadır.

4.1.5 Ortalama Kare Yerdeęiştirme

Ortalama kare yerdeęiştirme (MSD), sistemin difüzyon ve erime mekanizmasını incelememize olanak vermektedir. Şekil 4.11'da Cr₁@Fe₃ kor kabuk nanotelinin farklı sıcaklıklarda zamana göre MSD davranışı gösterilmiştir. Görüldüğü üzere, MSD kısa zaman aralığında kuadratik davranış göstermektedir. Zaman ilerledikçe erime sıcaklığının (1510 K) ve üzerindeki sıcaklıklarda grafik lineer bir davranış gösterirken, erime sıcaklığı altında yaklaşık olarak deęişmeyen bir davranış göstermektedir. Katı fazda olan yapılarıdaki her bir atom, çevreleyen komşulukları tarafından bir kafes etkisinde bulunmaktadır. Buradan kurtulup difüzyona maruz kalamamaktadır. Fakat cismin sıvı fazına geçtiği yüksek sıcaklıklarda atomlararası mesafe artmasından dolayı kafes etkisi azalmaktadır. Kolaylıkla bir atom bir bölgeden farklı bir bölgeye difüzyon yapabilmektedir.

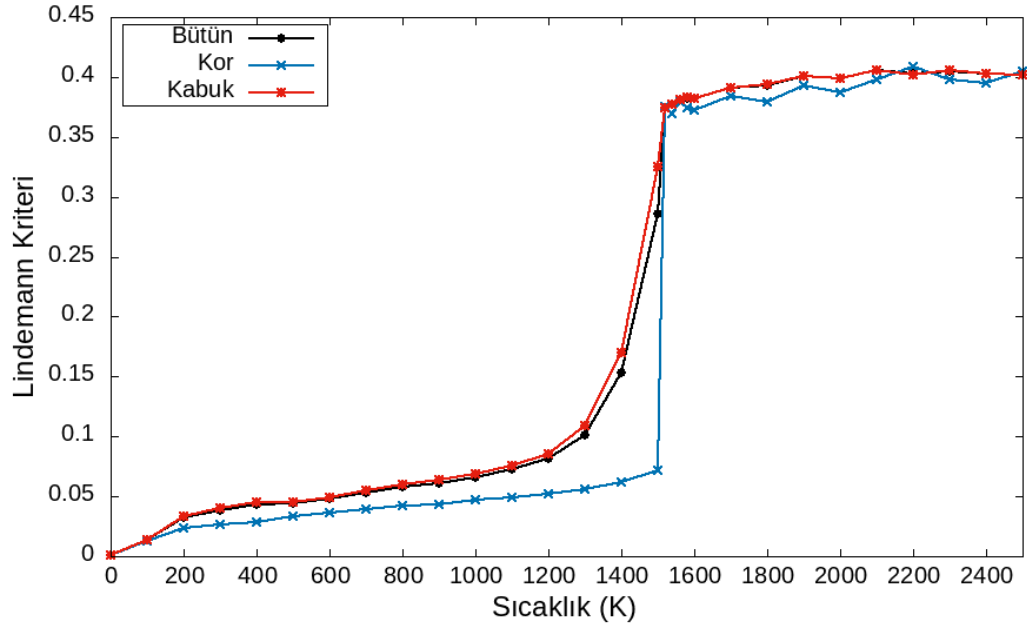


a)

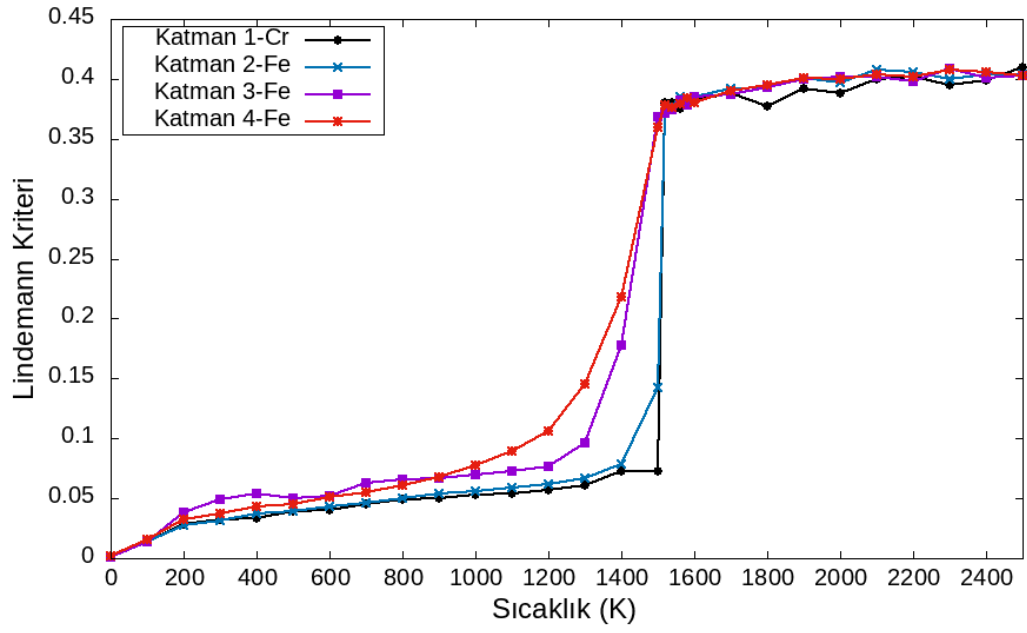


b)

Şekil 4.8: Fe1@Cr3 nanoteli için a) kor, kabuk ve bütün bölgelere, ve b) katmanlara göre Lindemann kriterinin sıcaklığa bağımlılığı.

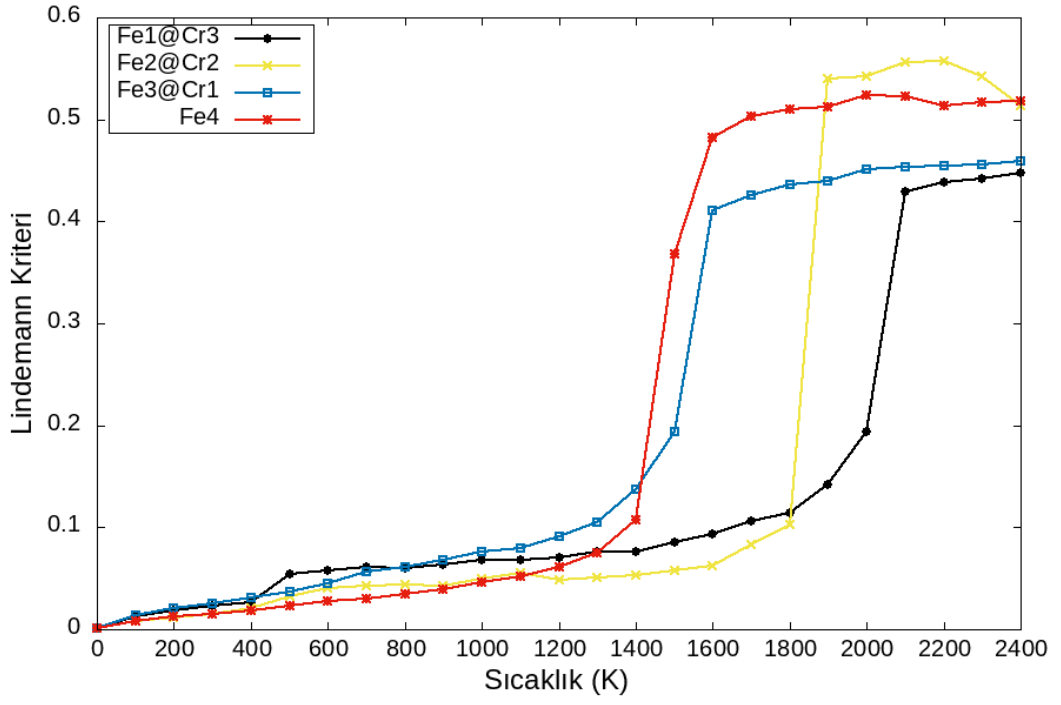


a)

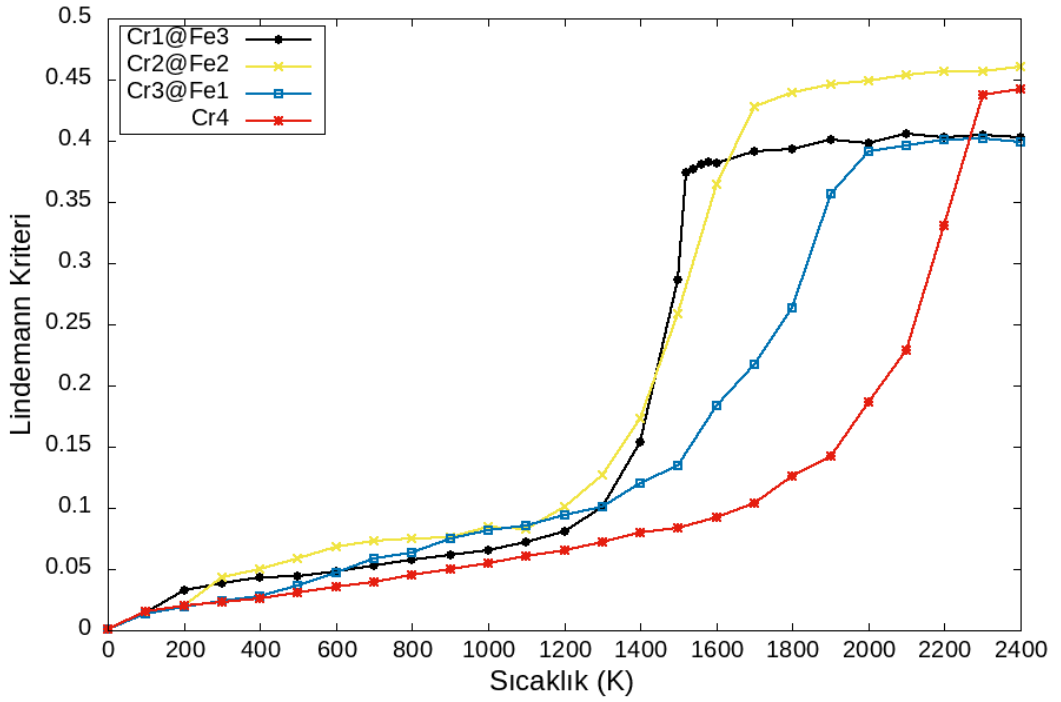


b)

Şekil 4.9: Cr1@Fe3 nanoteli için a) kor, kabuk ve bütün bölgelere, ve b) katmanlara göre Lindemann kriterinin sıcaklığa bağımlılığı.



a)



b)

Şekil 4.10: a) Fe@Cr ve b) Cr@Fe silindir nanotellerin Lindemann davranışı.

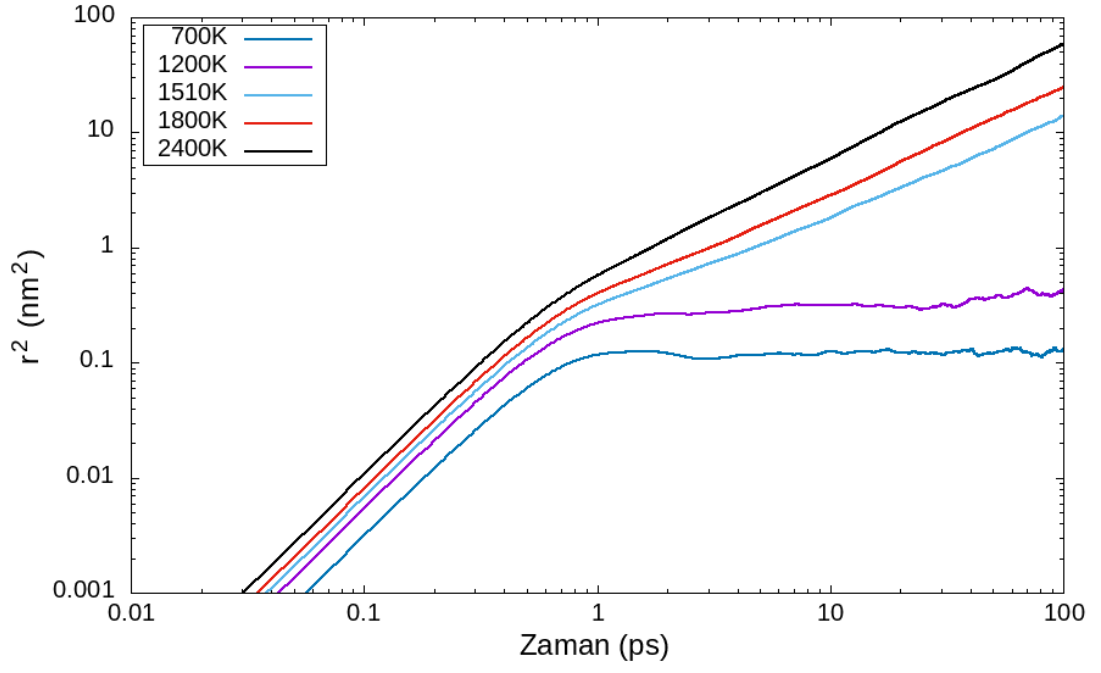
Şekil 4.11’de 1510 K altındaki sıcaklıklarda atomlar sınırlı hareket ettiği, 1510 K ve üstündeki sıcaklığında atomlar kafes etkisinden kurtulup difüzyon yapabildikleri görülmekte olup, bu durumda Cr1@Fe3 nanotelin sıvı faza geçtiği tespit edilebilmektedir. Şekil 4.12’de ise aynı durum Fe1@Cr3 nanotelinin 2080K sıcaklığında görülmektedir. Bu durumda Fe1@Cr3 nanoteli sıvı faza geçtiği tespit edilebilmektedir. Diğer Fe@Cr ve Cr@Fe nanotel sistemlerin MSD davranışları sıcaklığa bağlı olarak incelenmiş ve difüzyona başladığı sıcaklıklar tayin edilmiştir. Elde edilen erime sıcaklıkları Tablo 4.2’de verilen değerleri desteklemektedir.

4.1.6 Difüzyon Sabiti

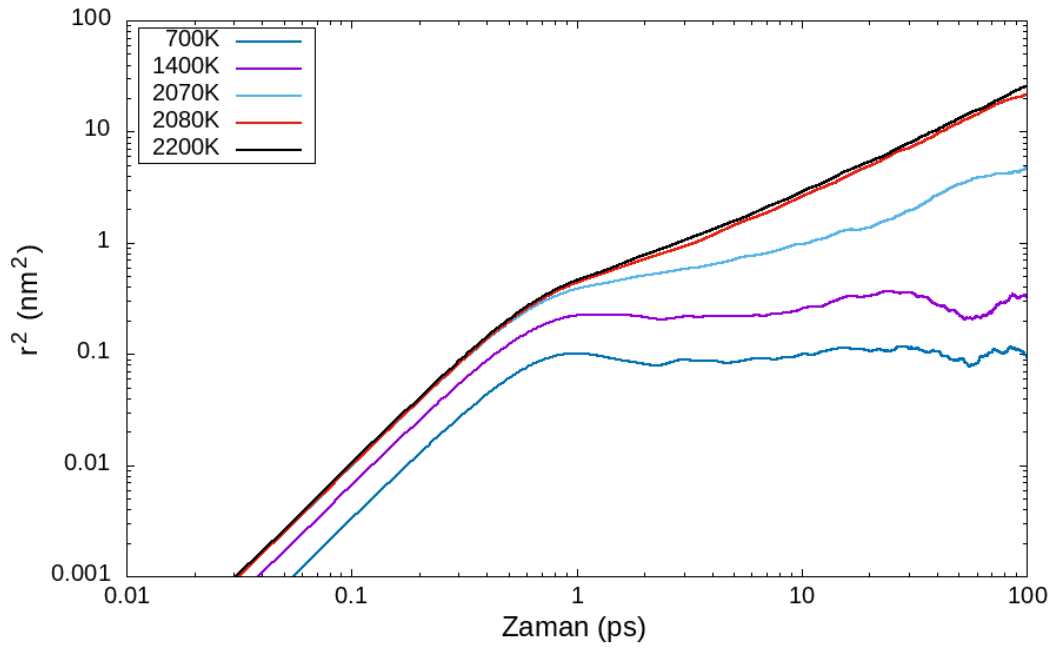
Difüzyon sabitinin $1 \text{ nm}^2\text{ns}^{-1}$ mertebesindeki değeri, katı fazı sıvı fazından ayıran bir özelliktir (Liada ve Guthire 1998). Bu mertebeye karşılık gelen sıcaklık, sistemin erime sıcaklığını vermektedir. MSD, difüzyon sabitinin elde edilmesinde kullanılmaktadır. Difüzyon sabitinin parçacığın t zamanı boyunca aldığı yolla bağlantılı olması beklenmektedir. Bu durum, büyük zaman değerleri için MSD ile doğrusal bağlı olduğunu göstermektedir. Bu tez çalışmasında, kor@kabuk nanotellerin her bir sıcaklık için difüzyon sabiti Einstein bağıntısından (Denklem 3.54) elde edildi ve sıcaklığa bağımlılıkları Arrhenius bağıntısı ile incelendi;

$$D(T) = D_0 \exp\left(-\frac{E_a}{k_B T}\right) \quad . \quad (4.1)$$

Burada, D_0 difüzyon katsayısı ve E_a ise difüzyon aktivasyon enerjisidir. 2,5 nm çapındaki Fe@Cr ve Cr@Fe nanotel sistemlerin Arrhenius parametreleri ve 2000 K’de Denklem (4.1)’den elde edilen difüzyon katsayıları Tablo 4.4’de listelenmiştir. Örnek olarak, Fe2@Cr2 ve Cr2@Fe2 nanotellerin Einstein bağıntısından elde edilen difüzyon sabitlerinin sıcaklığa bağımlılığı Arrhenius tipi davranış gösterdiği Şekil 4.13’de sergilenmektedir. Burada boş yuvarlak veriler Fe2@Cr2 nanotelin, dolu yuvarlak veriler ise Cr2@Fe2 nanotelin Einstein bağıntısından hesaplanan difüzyon sabitlerini temsil ederken, düz çizgiler ise bu değerlerin Arrhenius denklemine fit (uyarlama) edilmiş eğrileridir.



Şekil 4.11: Cr1@Fe3 nanotelinin bazı sıcaklıklarda ortalama kare yerdeğiřtirmenin (MSD) zamana göre deęiřimi.

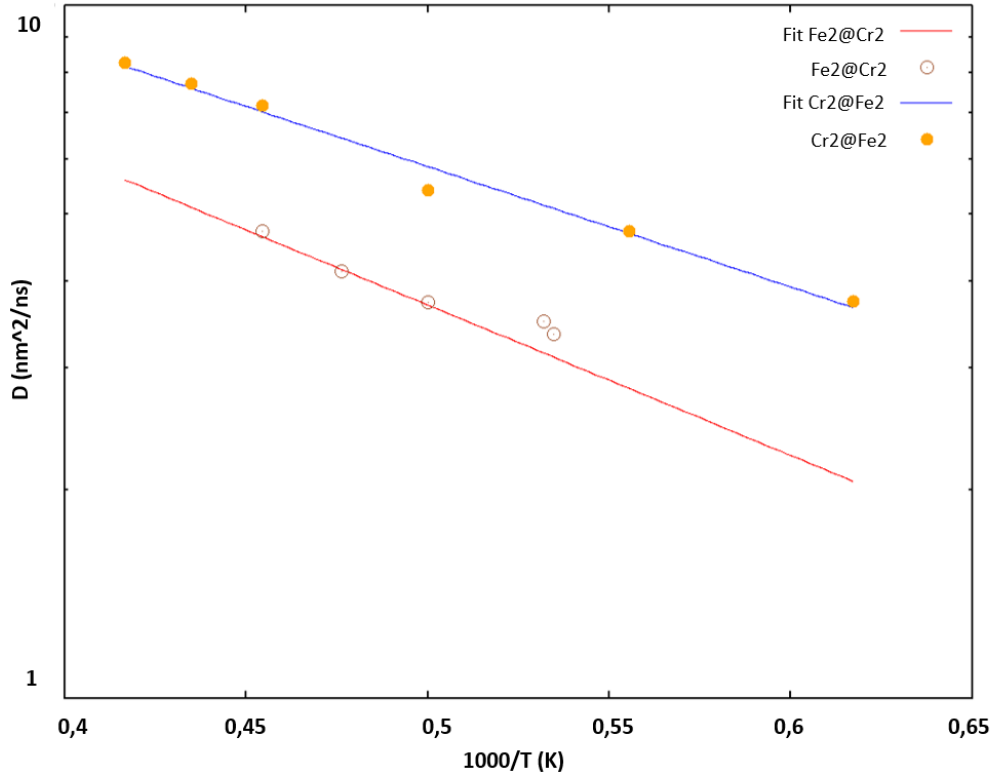


Şekil 4.12: Fe1@Cr3 nanotelinin bazı sıcaklıklarda ortalama kare yerdeğiřtirmenin (MSD) zamana göre deęiřimi.

Şekilde, Cr2@Fe2 nanotelin difüzyon değerleri Fe2@Cr2 nanoteline göre daha büyük çıktığı açıkça görülmektedir. Bunun neden ise, Cr2@Fe2 nanoteli daha erken eridiği için, daha önce difüzyon mekanizmasını yaşamaktadır. Tablo 4.4'ü incelediğimizde, Cr malzemesini Fe ile kaplayınca ve Fe konsantrasyonunu artırdığımızda 2000 K'de hesaplanan Arrhenius tipi difüzyon sabiti artmaktadır. Benzer şekilde, kor bölgesindeki Fe malzemesini Cr ile sardığımızda ve Fe konsantrasyonunu artırdığımızda difüzyon sabiti artış sergilemektedir. Fe'nin atomik büyüklüğü Cr'a göre daha küçük olduğu için, kor@kabuk nanotel sistemlerde Fe konsantrasyonunun artışı kütle taşınımını hızlandırmaktadır.

Tablo 4.4: 2,5 nm boyutlarında Fe-Cr nanotellerin difüzyon katsayısı, aktivasyon enerjisi ve 2000 K sıcaklığında difüzyon sabiti değerleri.

MALZEME	D₀ (nm ² /ns)	E_a (eV)	D (nm ² /ns)
Fe1@Cr3	75,278	0,526	3,555
Fe2@Cr2	44,895	0,415	4,032
Fe3@Cr1	94,972	0,471	6,150
Fe4	177,326	0,571	6,468
Cr1@Fe3	120,125	0,050	6,589
Cr2@Fe2	43,271	0,332	6,279
Cr3@Fe1	263,124	0,678	5,141



Şekil 4.13: 2,5 nm çapındaki Fe2@Cr2 ve Cr2@Fe2 nanotelinin difüzyonun sıcaklığa göre değişimi.

4.2 Mekanik Özellikler

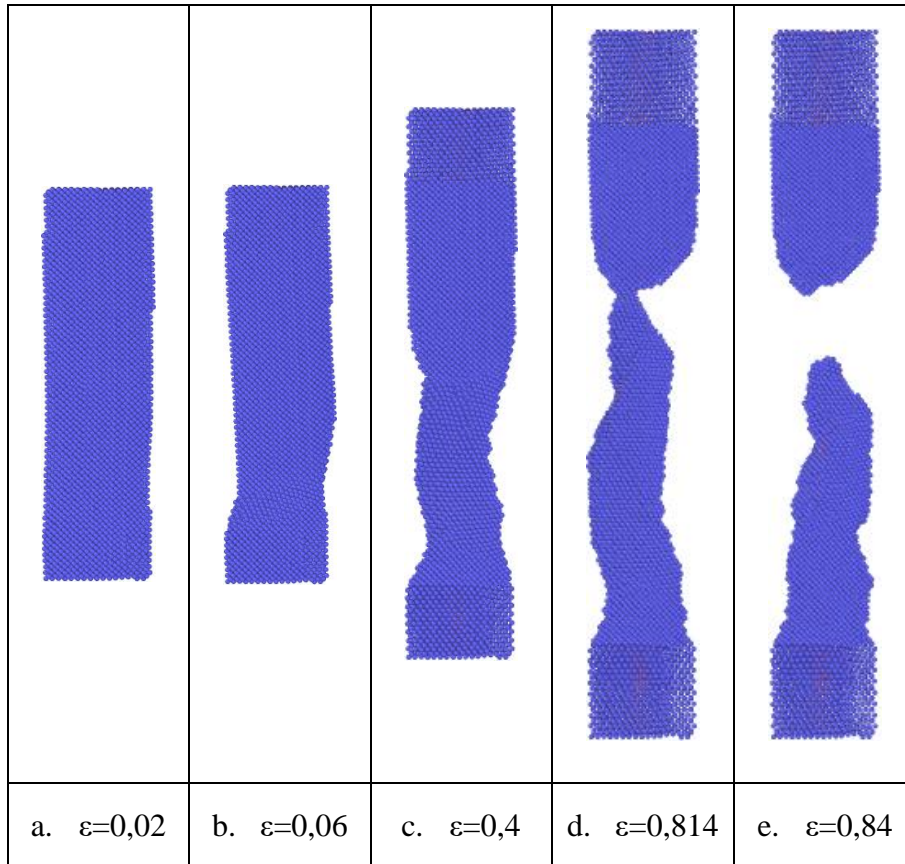
4.2.1 Akma ve Çekme Dayanımı ile Kopma Uzaması

Bu tez çalışmasında ele alınan bütün nanotellerin boylarının hem alt, hem de üst bölgelerinin %10'luk kısımları sabit tutularak, geriye kalan orta kısımları esneyecek şekilde çekme deneyleri MD simülasyonları ile gerçekleştirilmiştir. Çekme işlemi, 10^{-8} fs⁻¹ aksenal zorlanma hızı ile şekil değişimi %100 olana kadar uygulanmıştır. Bu işlemler 300 K, 500 K ve 700 K olmak üzere üç farklı sıcaklıkta yapılmış olup, mekanik özelliklere sıcaklığın etkisi araştırılmıştır. MD simülasyonları boyunca, Fe ve Cr saf, ve Fe-Cr bazlı kor@kabuk nanotellere [001] yönünde aksenal zorlanma uygulanmış olup, akma dayanımı sırasında malzemenin [110] yönünde dizilime yöneldiği görülmüştür.

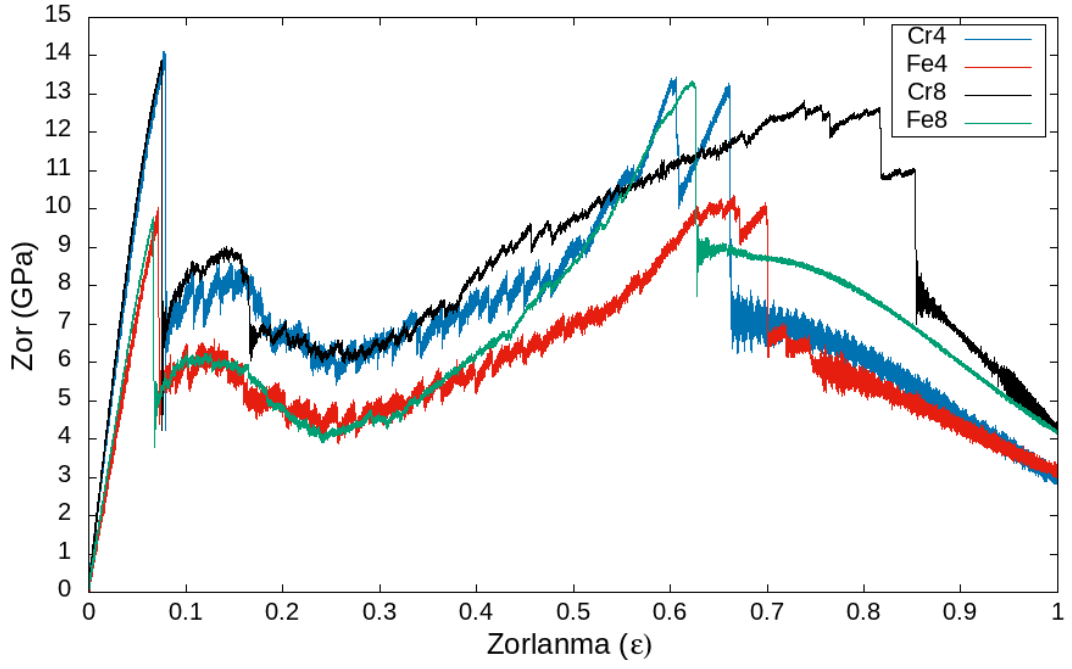
Şekil 4.14'de Cr2@Fe6 nanotele uygulanan çekme işlemi esnasında zaman içinde aldığı zorlanma durumuna göre malzemenin şekil değişimi görülmektedir.

Şekil 4.14 a)'da $\epsilon=0,02$ zorlanmasında bulunan nanotel, akma dayanımı sonrasında b) şıkında görüldüğü gibi atomların diziliş yönelimleri değişmeye başlamaktadır. Sonra, plastik deformasyona uğradığı görülmekte (c şıkkı) ve devamında boyuna uzayıp, kopmak üzere olduğu görülmektedir (d şıkkı). Sonunda nanotel $\epsilon=0,84$ zorlanmasına ulaştığında tamamen kopmaktadır (e şıkkı).

2,5 nm ve 4,5 nm çaplarındaki saf Fe ve Cr nanotellerinin 300 K sıcaklığında zorun zorlanmaya karşı değişimi Şekil 4.15'de verilmiştir. Şekilde görüldüğü üzere zorlanma $\epsilon=[0:0,05]$ aralığında lineer olup, bu bölgede malzemeler elastik deformasyon konumundadır. Daha sonraki zorlanmalarda malzemeler plastik bozulum içinde olup, 0,6-0,9 aralığı civarındaki zorlanmalarında Fe ve Cr nanotelleri kopmaktadır. Cr nanotellerinin akma dayanımı Fe nanotellerine göre daha büyük olduğu görülmektedir. Bu durum, plastik deformasyona karşı Cr malzemesinin daha dayanıklı olduğunu belirtmektedir. Şekilde görüldüğü üzere, sekiz katmanlı Cr nanotelinin kopma uzamasının daha yüksek olması, bu malzemenin daha sünek olduğunu ifade etmektedir.

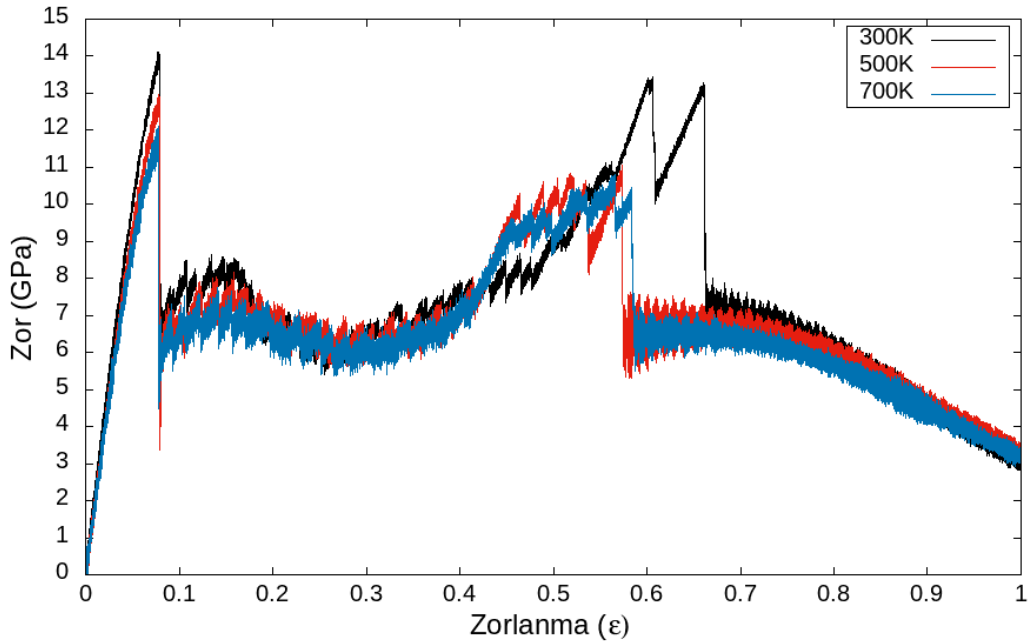


Şekil 4.14: Cr₂@Fe₆ nanotelinin çekme işlemi esnasında aldığı zorlanma durumundaki görüntüleri.



Şekil 4.15: 300K sıcaklığında 2,5 nm ve 4,5 çapındaki saf Fe ve Cr nanotillerin zor-zorlanma ilişkisi.

Sıcaklığın mekaniksel davranışlara etkisini görebilmek için, saf ve kor@kabuk nanotellere 300K, 500K ve 700K sıcaklıklarda MD eksenel çekme işlemi uygulandı. Şekil 4.16'da 2,5 nm çapındaki Cr nanotelinin zor-zorlanma ilişkisinin sıcaklığa göre değişimi verilmiştir. Sıcaklık arttıkça akma ve çekme dayanımlarının azaldığı açıkça görülmektedir. Cr ve Fe saf ve Fe-Cr bazlı kor@kabuk nanotellerin zor-zorlanma bağıntı grafikleri EK-B'de verilmiştir.



Şekil 4.16: 4 katmanlı Cr nanotelinin 300K, 500K ve 700K sıcaklıklarında zor-zorlanma ilişkisi.

2,5 nm ve 4,5 nm çapındaki nanotellerin bazı sıcaklıklara göre σ_{ak} akma dayanımı, σ_c çekme dayanımı ve ε_k kopma uzaması sırasıyla Tablo 4.4 ve Tablo 4.5’de listelenmiştir. Tabloları incelediğimizde, genel olarak, hem küçük hem de büyük boyuttaki saf ve kor@kabuk nanotelleri sıcaklık arttıkça akma ve çekme dayanımı azalmakta, kopma uzaması değişkenlik göstermektedir. Saf Cr malzemesinin akma ve çekme dayanımları saf Fe nanotelinden daha yüksek olduğu için, Fe@Cr kor@kabuk sistemlerde Cr kabuk katman sayısı arttıkça bu dayanım değerleri beklendiği üzere artış göstermektedir. Saf Fe (4 katmanlı) nanotelin kopma uzaması 0,7 iken Fe malzemesini Cr ile kaplayınca ve Cr katman sayısı arttıkça sırasıyla 0,99, 0,64 ve 0,60 değerlerini almaktadır. Fe malzemesini Cr ile kaplayınca kopma uzaması beklendiği gibi artarken, Cr katman sayısı arttıkça kopma uzaması azalmaktadır. Byggmaster ve arkadaşlarının (2015) yaptığı MD çalışmasında, Fe malzemesine %5 - %20 arası oranlarda Cr ekleyerek farklı boyutlarda Fe-Cr alaşım nanoteli oluşturarak bu değerleri incelemiş olup, benzer sonuç ve yorumları rapor etmişlerdir. Diğer bir yanda, Cr malzemesini Fe ile kapladığımızda, değerler değişkenlik göstermekte olup, belli bir eğilim bulunmamaktadır. Nanotelleri iki katına artırdığımızda, çok büyük değişiklik gözlenmemekte olup, genellikle düşük bir oranda azalma görülmektedir.

4.2.2 Elastik Modülü

Nanotele uygulanan aksenal çekme işleminde, malzemenin yaklaşık olarak $\varepsilon=0,05$ zorlanmasına kadar zor-zorlanma ilişkisi doğrusal bir bağıntı alır (elastik deformasyon bölgesi). Örnek olarak, Cr1@Fe3 ve Fe1@Cr3 kor@kabuk nanotellerin elastik sınırları içinde zor-zorlanma ilişkisi Şekil 4.17’de verilmiştir. Bu bölgedeki zor-zorlanma ilişkisinin eğimi bize elastik modülünü vermektedir. Saf Fe ve Cr, ve Fe-Cr kor@kabuk nanotellerin 300 K, 500 K ve 700 K sıcaklıklarında elastik modülleri hesaplanmış olup, Tablo 4.6’da sergilenmiştir. Byggmaster ve arkadaşlarının (2015) yaptığı çalışmada rapor edildiği gibi, nanotellerin büyüklüğü iki katına çıkarıldığında elastik modülü artmaktadır. Cr malzemesinin Fe’e göre elastik modülü daha yüksek olduğu için, Cr malzemesi Fe ile kaplandığında ve Fe oranı artırıldığında beklendiği üzere elastik modülü azalmaktadır. Aynı şekilde, kor bölgesindeki Fe, Cr ile kaplandığında ve kabuk bölgesini kalınlığı (Cr atom sayısı)

arttıkça elastik modülü artarak, malzemenin dayanıklılığını artırmıştır. Bu sonuç, diğer MD simülasyon çalışması ile çelişmektedir; Cr konsantrasyonu %20'ye kadar çıkarıldığında FeCr alaşım nanotellerin elastik modülünün azaldığı belirtilmiştir. Genel olarak, Fe'in korda olması ve Cr'nin kabuk bölgesinde bulunması, malzemeyi daha dayanıklı hale getirmesini sağlamaktadır.

Tablo 4.4: 4 katmanlı Fe-Cr kor@kabuk nanotellerinin akma ve çekme dayanımı ile kopma uzaması değerleri.

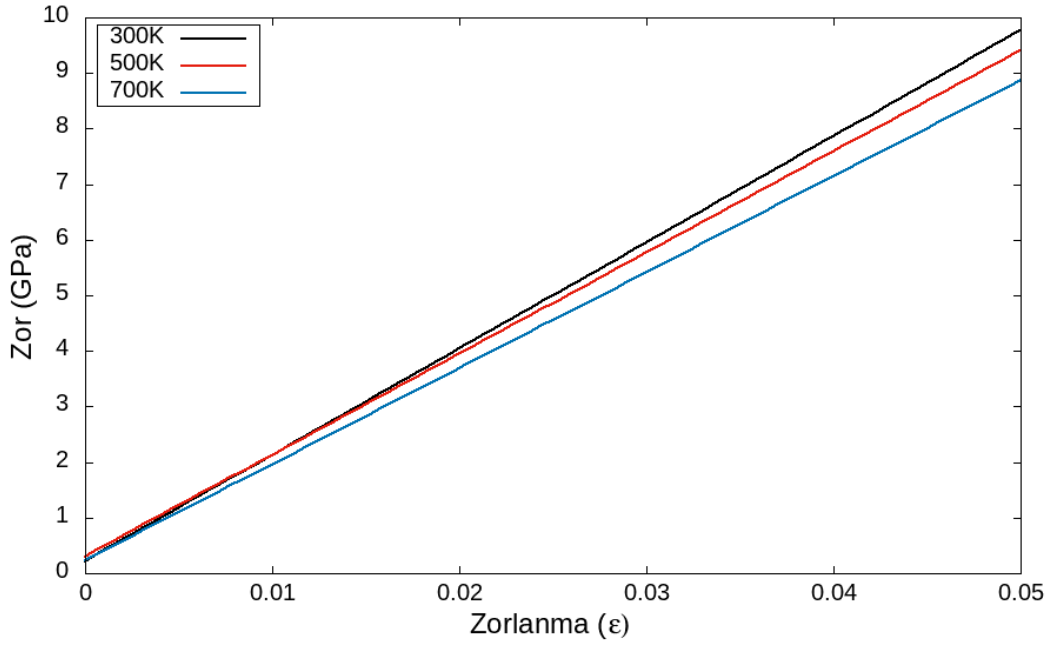
Malzeme	Sıcaklık (K)	Akma Dayanımı σ_{ak} (GPa)	Çekme Dayanımı σ_{ζ} (GPa)	Kopma Uzaması ϵ_k
Fe1@Cr3	300	14,32	13,50	0,602
	500	13,05	11,12	0,551
	700	11,89	10,31	0,567
Fe2@Cr2	300	13,89	10,83	0,645
	500	11,35	9,76	0,571
	700	9,51	9,75	0,834
Fe3@Cr1	300	9,83	7,94	0,995
	500	8,18	5,88	0,570
	700	7,24	7,14	0,328
Fe4	300	10,03	10,36	0,701
	500	7,91	9,21	0,580
	700	6,92	8,32	0,602
Cr1@Fe3	300	9,99	10,40	0,594
	500	9,23	9,61	0,609
	700	7,68	8,89	0,607
Cr2@Fe2	300	9,08	8,90	0,580
	500	8,01	8,56	0,609
	700	6,7842	7,981	0,588
Cr3@Fe1	300	11,42	10,31	0,555
	500	10,23	9,86	0,603
	700	9,47	9,25	0,573
Cr4	300	14,10	13,46	0,663
	500	12,97	11,06	0,574
	700	12,12	10,80	0,585

Tablo 4.5:8 katmanlı Fe-Cr kor-kabuk nanotellerinin akma ve çekme dayanımı ile kopma uzaması değerleri.

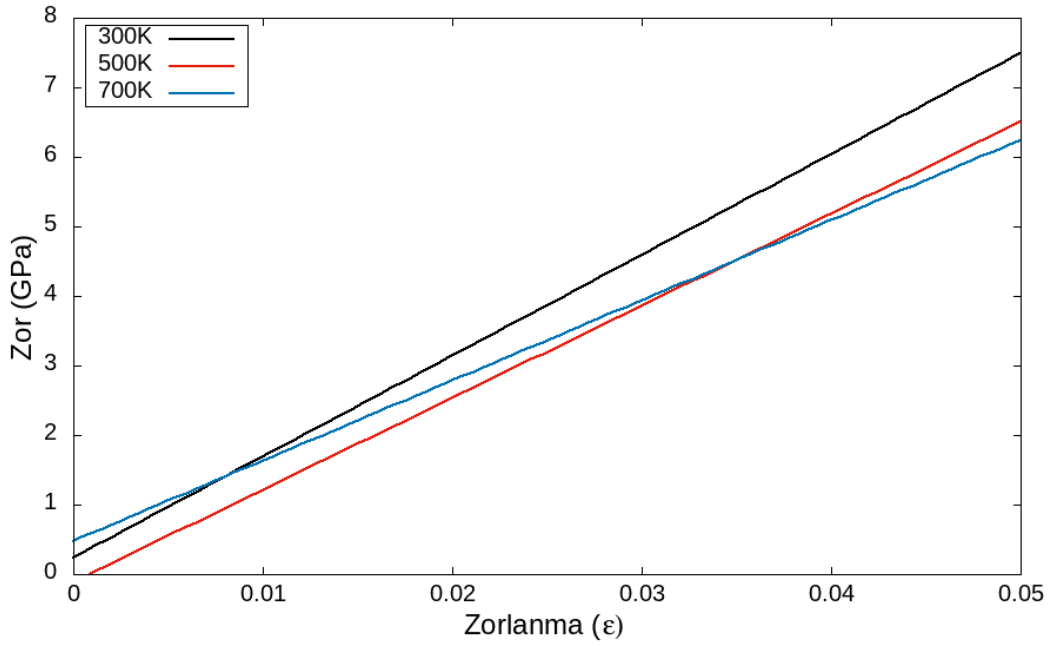
Malzeme	Sıcaklık (K)	Akma Dayanımı σ_{ak} (GPa)	Çekme Dayanımı σ_{ζ} (GPa)	Kopma Uzaması ϵ_k
Fe2@Cr6	300	14,78	14,94	0,652
	500	12,25	13,10	0,580
	700	12,24	12,34	0,554
Fe4@Cr4	300	13,29	11,86	0,742
	500	12,04	14,20	0,736
	700	9,16	12,50	0,635
Fe6@Cr2	300	10,73	12,60	0,828
	500	9,55	10,28	0,972
	700	7,20	9,20	0,942
Fe8	300	9,78	13,33	0,628
	500	8,43	10,52	0,652
	700	6,78	9,58	0,698
Cr2@Fe6	300	8,28	9,81	0,817
	500	8,40	10,14	0,591
	700	6,88	9,71	0,568
Cr4@Fe4	300	10,01	12,64	0,694
	500	9,12	12,28	0,585
	700	7,82	10,69	0,587
Cr6@Fe2	300	10,98	13,72	0,529
	500	9,80	12,80	0,504
	700	9,13	10,95	0,499
Cr8	300	13,89	12,82	0,854
	500	12,98	15,29	0,577
	700	11,68	13,64	0,692

Bu diğer MD çalışmasında (Byggmaster ve diğ. 2015) iki tür potansiyel kullanılmıştır: Tersoff ve EAM potansiyelleri. Yapılan çalışmada mekaniksel sonuçlara potansiyel parametrelerinin etkili olduğu rapor edilmiş olup, elastik modülü 2 nm çapındaki Fe için 178,2 GPa (Tersoff) ve 123,0 GPa (EAM)

hesaplarken, biz bu tez çalışmasında 2,5 nm çapındaki Fe nanoteli için 140,7 GPa olarak elde ettik.



a)



b)

Şekil 4.17: a) Fe1@Cr3 ve b) Cr3@Fe1 nanotellerinin 300K, 500K ve 700K sıcaklıklarında elastik sınırları içinde zor-zorlanma ilişkisi.

Tablo 4.6: Fe ve Cr saf, ve Fe-Cr kor@kabuk nanotellerinin 300 K, 500 K ve 700 K sıcaklıklarındaki elastik modülü E (GPa) değerleri.

Malzeme	Sıcaklık (K)	Elastik Modülü E (GPa)	Malzeme	Sıcaklık (K)	Elastik Modülü E (GPa)
Fe1@Cr3	300	191,05	Fe2@Cr6	300	201,89
	500	182,06		500	188,56
	700	172,78		700	180,76
Fe2@Cr2	300	166,81	Fe4@Cr4	300	188,52
	500	160,56		500	175,19
	700	149,08		700	158,32
Fe3@Cr1	300	134,52	Fe6@Cr2	300	165,35
	500	126,54		500	152,94
	700	117,6		700	139,67
Fe4	300	140,7	Fe8	300	153,79
	500	127,09		500	138,09
	700	111,05		700	199,31
Cr1@Fe3	300	144,99	Cr2@Fe6	300	151,55
	500	132,35		500	137,51
	700	115,28		700	117,5
Cr2@Fe2	300	130,36	Cr4@Fe4	300	161,82
	500	119,75		500	148,2
	700	107,73		700	132,45
Cr3@Fe1	300	152,55	Cr6@Fe2	300	173,1
	500	140,67		500	161,78
	700	128,75		700	148,57
Cr4	300	196,36	Cr8	300	205
	500	188,6		500	196,08
	700	178,7		700	185,35

4.3 Poisson Oranı

Çekme kuvveti uygulanan bir malzemeye yükün uygulandığı doğrultuda uzamaktadır. Bununla birlikte şekil değiştirmeye karşılık gelen bir yanal daralma olmaktadır. Bu eksenel ve yanal bölgelerden gelen zorlanma arasındaki ilişki Poisson oranı olarak adlandırılmaktadır. Saf ve kor@kabuk nanotellerin Poisson oranları Tablo 4.7’de listelenmiştir.

Tablo 4.7: Fe, Cr ve Fe-Cr nanotellerinin 300 K, 500 K ve 700 K sıcaklıklarındaki Poisson oranları.

Malzeme	Sıcaklık (K)	Poisson Oranı	Malzeme	Sıcaklık (K)	Poisson Oranı
Fe1@Cr3	300	0,249	Fe2@Cr6	300	0,247
	500	0,301		500	0,287
	700	0,324		700	0,306
Fe2@Cr2	300	0,283	Fe4@Cr4	300	0,268
	500	0,305		500	0,296
	700	0,284		700	0,288
Fe3@Cr1	300	0,311	Fe6@Cr2	300	0,288
	500	0,212		500	0,264
	700	0,284		700	0,29
Fe4	300	0,314	Fe8	300	0,292
	500	0,329		500	0,319
	700	0,368		700	0,342
Cr1@Fe3	300	0,306	Cr2@Fe6	300	0,224
	500	0,239		500	0,268
	700	0,288		700	0,296
Cr2@Fe2	300	0,290	Cr4@Fe4	300	0,260
	500	0,283		500	0,286
	700	0,402		700	0,315
Cr3@Fe1	300	0,273	Cr6@Fe2	300	0,305
	500	0,289		500	0,313
	700	0,312		700	0,297
Cr4	300	0,264	Cr8	300	0,251
	500	0,276		500	0,284
	700	0,281		700	0,279

Elde edilen sonuçlara bakıldığında sıcaklığın ve kalınlığın Poisson oranına dikkate alınır bir etki etmediği gözlemlenmiştir. Aynı zamanda kor ile kabuktaki atomların yer değiştirmesi de Poisson oranına belirgin etki etmediği tespit edilmiştir. Cr ve Fe atomlarının yoğunluklarına göre değiştiği görülmektedir. Bu sonuç diğer MD çalışması (Byygmaster ve diğ. 2015) ile de desteklenmektedir.

Bulk demirin 300 K sıcaklığında deneysel Poisson değeri $\nu = 0,368$ iken (Adams ve diğ. 2006), bu tez çalışmasında elde edilen sonuç $\nu = 0,314$ ile uyum göstermektedir.

5. SONUÇ VE ÖNERİLER

Bu tez çalışmasında, teorik olarak tasarlanan silindirik kor@kabuk nanotelleri farklı büyüklük, katman kalınlığı ve sıcaklıklarda MD simülasyon yöntemi ile yapısal, dinamik, termal ve mekanik özellikleri detaylı bir şekilde incelendi. Silindirik kor@kabuk nanotelleri 2,5 ve 4,5 nm boyutlarında Fe@Cr ve Cr@Fe sistemleri model olarak ele alındı. Ayrıca, karşılaştırmak için bu sistemleri oluşturan saf silindirik Fe ve Cr nanotellerinin de simülasyonu yapıldı. Atomlar arası etkileşim fonksiyonlarını tanımlamak için çok cisim etkileşimlerini referans alan EAM potansiyeli kullanıldı. Bu tez çalışmasında çıkmış sonuçlar aşağıda maddeler halinde sıralanmıştır:

- ✓ Nanotellerin boyutu büyüdükçe sistemin erime sıcaklığı artmakta olup, deneysel bulk erime sıcaklığına doğru yaklaşmaktadır.
- ✓ Kor@kabuk yapısındaki Fe@Cr ve Cr@Fe nanotellerin erime davranışını kor ve kabuk bölgelerindeki atomların cinslerine, kor çapına ve kabuk kalınlığına bağlı değiştiği gözlemlenmiştir. Fe malzemesi Cr ile kaplandığında, saf Fe ve Cr@Fe nanotellerine göre daha geç erimektedir.
- ✓ Fe-Cr bazlı kor@kabuk nanotellerin dış katmanı tek katman olarak Fe ile kaplandığında sistemde yüzey ayrışması oluşmaktadır. Diğer bir yanda dış kabuk tek katman şeklinde Cr ile kaplandığında, böyle bir durum gözlenmemektedir.
- ✓ Nanotellerde erime mekanizması dış kabuktan başladığı Lindemann kriteri – sıcaklık bağıntısından açıkça görülmektedir. Özel olarak, kor kısmında Fe bulunan kor@kabuk nanotellerde, Cr'un bulunduğu en dış katman eridikten sonra, iç katmanlardaki Cr malzemesi erirken kor bölgesindeki Fe de aynı anda erimektedir. Diğer bir yanda, Fe kabuk bölgesinde olduğunda, erime dış bölgeden kor bölgesine doğru düzenli bir şekilde erime olmaktadır.
- ✓ Einstein bağıntısından elde edilen difüzyon sabitleri Arrhenius tipi sıcaklığa bağlı difüzyon davranışı sergilemektedir. Bu çalışmada elde edilen Arrhenius parametreleri kullanılarak Fe-Cr bazlı nanotellerin difüzyon sabiti herhangi bir sıcaklık için bulunabilir.

- ✓ Nanotellerde Fe konsantrasyonu arttıkça ısı kapasitesinin de yavaşça arttığı gözlemlenmekte olup, kor ve kabuk bölgesindeki malzeme çeşidine bağlı olmadığı izlenmektedir.
- ✓ Sistemi ısıttığımızda, toplam enerjide görünen keskin piklere karşılık gelen sıcaklıkta, malzemeler erimeye başlamaktadır. Isı kapasitesi çift dağılım fonksiyonu, Lindemann kriteri ve MSD (veya difüzyon sabiti) değerlerin sıcaklığa bağımlılığı ilişkisinden elde edilen erime sıcaklığı değerleri toplam enerji – sıcaklık bağıntısından elde edilen sonuçları desteklemektedir.
- ✓ Tez konusu malzemelere [001] yönünde uygulanan çekme işlemi sonucunda, elastik deformasyon sınırları içinde nanoteller [110] yönünde dizilime yöneldiği gözlemlenmiştir.
- ✓ $\dot{\epsilon} = 10^{-8} \text{ f s}^{-1}$ çekme hızı ile deformasyona uğratan nanotellerin zorlanma bağıntısından, akma ve çekme dayanımı, kopma uzaması, elastik modülü ve Poisson oranı gibi mekaniksel özellikleri tayin edilmiştir. Sıcaklık arttıkça mekaniksel özelliklerin beklendiği üzere zayıfladığı görülmektedir. Plastik deformasyona karşı Cr nanoteli daha dayanıklı olduğu MD simülasyon sonuçları ile teyitlenmiştir. Kordaki Fe malzemesi Cr malzemesi ile kaplanınca ve Cr'un konsantrasyonu artırıldıkça mekanik özellikleri daha iyileşmektedir. Cr@Fe nanotellerini incelediğimizde, mekaniksel özelliklere herhangi bir eğilim vermemekte, değerler değişkenlik göstermektedir.
- ✓ Fe@Cr ve Cr@Fe silindirik nanotellerin erime mekanizması ve mekaniksel özellikleri bu çalışmada ilk defa verilmiştir. Elde edilen sonuçlar deneysel çalışmalara önderlik edeceği beklenmektedir.

6. KAYNAKLAR

- Adams, J. J., Agosta, D. S., Leisure, R. G., Ledbetter, H., *J. Appl. Phys.* 100, 113530, (2006).
- Agrawal, R. ve Kofke, D. A., *Mol. Phys.* 85, 23, (1995).
- Alavi, A., Mirabbaszadeh, K., Nayebi, P., “Molecular dynamics simulation of mechanical properties of Ni–Al nanowires”, *Comp. Mater. Sci.* 50, 10–14, (2010).
- Alder, B. J. ve Wainwright, T. E., “Temperature Dependent Lattice Mechanical Properties of some fcc transition Metals”, *Journal, Chem. Phys.*, 27-1207, (1957).
- Allen, M. P. ve Tildesly, D. J., “Computer Simulation of Liquids”, Clarendon Press, Oxford, (1987).
- Andersen, H.C., “Molecular dynamics simulations at constant pressure and/or temperature” *J. Chem. Phys.* 72, 2384–2393, (1980).
- Baer, R., Neuhauser, D., Weiss, S., “Enhanced absorption induced by a metallic nanoshell”, *Nano Lett.* 4, 85, (2004).
- Bagrets, A., Werner, R., Evers, F., Schneider, G., Schooss, D. ve Wölfle, P., “Lowering of surface melting temperature in atomic clusters with a nearly closed shell structure”, *Physical Rev. B* 81, 075435, (2010).
- Baluc, N., “Plasma Physics, Control Fusion 48”, B165 (2006).
- Baskes, M.I., “Modified embedded-atom potentials for cubic materials and impurities”, *Phys. Rev. B* 46, 2727, (1992).
- Beeman, D., “Some multistep methods for use in molecular Dynamics calculations.”, *J. Comput. Phys.*, 20, 130, (1976).
- Bonny, G., Pasianot, R.C., T. D., M. L., “Iron chromium potential to model highchromium ferritic alloys”, *Philosophical Magazine*, A 1724–1746, (2011).
- Burki, J., Goldstein, R.E. ve Stafford, C.A., *Phys. Rev. Lett.* 91 254501, (2003).
- Byggmästar, J., Granberg, F., Kuronen, A., Nordlund, K., Henriksson K.O., “Tensile testing of Fe and FeCr nanowires using molecular dynamics simulations”, *Journal of Applied Physics* 117, 014313, (2015).

Caro, A., Crowson, D.A., Caro, M., ‘Classical Many-Body Potential for Concentrated Alloys and the Inversion of Order in Iron-Chromium Alloys’, *Phys. Rev. Lett.* 95 (2005) 075702.

Carr, R., Parrinello, M., “Unified approach for molecular dynamics and densityfunctional theory”, *Phys. Rev. A* 55, 2471, (1985).

Chakravarty, C., *J. Chem. Phys.* 116, 8938, (2002).

Costa, B.F.O., Le Caer, G., Loureiro, J.M., Amaral, V.S., ‘Mechanically induced phase transformations of the sigma phase of nanograined and of coarse-grained near equiatomic FeCr alloys’, *Journal of Alloys and Compounds* 424 , 131–140 (2006).

Danoix, F., Auger, P., ‘Atom Probe Studies of the Fe–Cr System and Stainless Steels Aged at Intermediate Temperature: A Review’, *Mater. Charact.* 44, 177–201 (2000).

Daw, S.M., Baskes, M.I., “Embedded-Atom Method: Derivation and Application to Impurities”, *Surfaces, and Other Defects in Metals*, *Physical Review B*, 29, 6443- 6453, (1984).

Dereli, G., Çağın, T., Uludoğan, M. ve Tomak, M., *Philos. Mag. Letters* 75, 209. 58, (1999).

Dong, X. L., Zhang, Z. D., Jin, S. R., Kim, B. K., *J. Magn. Magn. Mater.* 210, 143 (2000).

Dökmeli, Ü., “Nanomateriyallerin Erime Sürecindeki Fiziksel Özelliklerinin Moleküler Dinamik Simülasyonu ile İncelenmesi”, *Doktora Tezi*, Edirne, (2011).

Dresselhaus, M.S., Lin, Y.M., Rabin, O., Black, M.R., Kong, J., Dresselhaus, G., “Nanowires: in *Springer Handbook of Nano-technology*”, Ed.: B. Bhushan, 3rd Edition, Springer-Verlag. New York, (2010).

Dubiel, S.M., Inden G., “On the miscibility gap in the Fe–Cr System: a Mössbauer study on long. term annealed alloys”, *Z. Metallkd.* 78, 544–549 (1987).

Dubois, S., Piraux, L., George, J.M., Ounadjela, K., Duvail, J. L., Fert, A., *Phys. Rev. B* 60 477, (1999).

Del Rio, E., Sampedro, J. M., Dogo, H., Caturla, M. J., Caro, M., Caro, A., Perlado, J.M., “Formation energy of vacancies in FeCr alloys: Dependence on Cr concentration”, *Journal of Nuclear Materials* 408, 18–24,(2011).

- Erhart, P., Caro, A., Caro, M., Sadigh, B., ‘Short-range order and precipitation in Fe-rich Fe-Cr alloys: Atomistic off-lattice Monte Carlo simulations’, *Phys. Rev. B* 77, 134206 (2008).
- Feynman, R.P., “There’s plenty of room at the bottom an invitation to enter a new field of physics”, <http://www.zyvex.com/nanotech/>, (1959).
- Finbow, G.M., Lynden-Bell, R.M. ve McDonald, I.R., *Mol. Phys.* 92 705, (1997).
- Finnis, M.W. ve Sinclair, J.E., “A Simple empirical N-body potential for transition metals”, *Philos. Mag., A*, 50(1), 45-55, (1984).
- Fry, A., Osgerby, S., Wright, M., National Physics Laboratory Report NPL MATC(A) 90, Teddington, England, (2002).
- Garner, F., Toloczko, M., Sencer, B., ‘Comporison of swelling and irradiation creep behavior of fcc-austenetic and bcc-ferritic/martensitic alloys at high neutron exposure’, *J. Nucl. Mater* 276 (1), 123-142 (2000).
- Golovnev, I.F., Golovneva, E.I., Fomin, V.M., “The influence of a nanocrystal size on the results of molecular-dynamics modeling”, *Comp. Matter. Sci.*, 36, 176-179, (2006).
- Grammatikopoulos, P., Nordlund, K., ‘Molecular Dynamics simulation of Cr-precipitate demixing in FeCr alloys’, *Radiation Effects & Defects in Solids* 169, 7, 646-654 (2014).
- Haile, J.M., “Molecular Dynamics Simulations: Elementary Methods”, Wiley, New York, (1992).
- Hoover, W. G., “Canonical Dynamics - Equilibrium Phase-Space Distributions”, *Phys. Rev. A* 31, 1695, (1985).
- Husain, A., Hone, J., Postma, H.W.C., Huang, X.M.H., Drake, T., Barbic, M., Scherer, A. ve Roukes, M L., *Appl. Phys. Lett.* 83 1240, (2003).
- Hwang, S.J. ve Lee, J.H., “Mechanochemical synthesis of Cu-Al₂O₃ nanocomposites”, *Mater. Sci. Eng. A* 405, 140-146, (2005).
- Johnson, R.A., “Analytic nearest-neighbor model for fcc metals”, *Phys. Rev. B*, 37, 3924, (1988).
- Jones, L., “On the Determination of Molecular Fields”, *Proc. R. Soc. Lond. A* 106, (738): 463–477, (1924).
- Kang, J.W. ve Hwang, H. J., *J. Korean Phys. Soc.* 40 946, (2002).
- Kang, J.W. ve Hwang, H.J., *Nanotechnology* 12 295, (2001).

Kart, H. H., “Molecular Dynamics Study of Random and Ordered Metals and Metal Alloys”, Doktora Tezi, Ankara, (2004^d).

Kart, H. H., Tomak M. ve Cagin T., “Thermal and Mechanical Properties of Cu-Au intermetallik alloys”, Model. Sim. Mater. Sci. Eng. 13, 657-669, (2005).

Kart, H. H., Tomak M., Uludogan M., ve Cagin T., “Structural and dynamical properties of liquid Pd-Ag alloys”, Int. J. Mod. Phys. B 18, 2257, (2004^e).

Kart, H. H., Uludogan M., Cagin T. ve Tomak M., “Simulation of Crystallization and Glass Formation of Pd-Ag metal alloys”, J. Noncryst. Sol. 342, 6-11, (2004^b).

Kart, H. H., Uludogan, M., Cagin, T., ve Tomak, M., “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, (2004^a).

Kart, H. H., Uludogan, M., Cagin, T., ve Tomak, M., “Thermodynamical and mechanical properties of Pd-Ag alloys”, Comput. Mat. Scie. 32, 107- 117, (2005).

Kayır, Y.Z. ve Baççıl E.G., “Nano teknoloji nedir?”, 15. Uluslararası Metalurji ve Malzeme Kongresi, 11-13 Kasım 2010, İstanbul, (2010).

Kondo, Y. ve Takayanagi, K., Science 289 606, (2000).

Kubachewski, O., “Iron-Binary Phase Diagrams”, Springer, Berlin, 1982, pp.185.

LAMMPS, (8Haziran 2021), <https://www.lammps.org>, (2021).

Lee, G. H., Huh, S. H., Jeong, J. W., Kim, S. H., Choi, B. J., ‘Arrays of ferromagnetic FeCo and FeCr binary nanocluster wires’, J. Appl. Phys. 94, 4179 (2003).

Li, S., Ding, X., Deng, J., “Superelasticity in bcc nanowires by a reversible twinning mechanism”, Phys. Rev. B 82, 205435, (2010).

Li, Xian-Fang, Zhang, H., Lee, K. Y., “Dependence of Young's modulus of nanowires on surface effect”, International Journal of Mechanical Sciences, 81,120–125, (2014).

Liada, T. ve Guthire, R. I. L., “The Physical Properties of Liquid Metals”, Clarendon Press, Oxford, (1998).

Little, E.A., Stow, D.A., J. Nucl. Mater 87, 87, 25–39 (1979).

- Luo, S.N., Strachan, A., Swift, D. C., J. Chem. Phys. 122, 194709, (2005).
- M. Yu. Tikhonchev, V. V. Svetukhin, ‘Primary Radiation Damage of an FeCr Alloy under Pressure: Atomistic Simulation’, Russian Metallurgy 5, 397–405 (2017).
- Mavrantzas, V.G., “Molecular Simulations, Chemical Engineering and Chemical Process Technology”, Vol. 1, (2006).
- mediawiki/index.php/ LAMMPS_Tutorial_1.html, (2021).
- Mehrez, H. ve Ciraci, S., *Phys. Rev. B* 56 12632, (1997).
- Mississippi State University, (5 Haziran 2021), <https://icme.hpc.msstate.edu/>
- Mock, J.J., Oldenburg, S.J., Smith, D.R., Schultz, D.A. ve Schultz, S., *Nano Lett.* 2 465, (2002).
- Molinero, V., Cagin, T., Goddard, W.A., “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, (2004).
- Moore, G.E., *Electronics* 38, 114, (1965).
- Nosé, S., “A molecular dynamics method for simulation in the canonical ensemble”, *Mol. Phys.* 52, 255–268, (1984).
- Nosé, S., “A Unified Formulation of The Constant Temperature Molecular-Dynamics Methods”, *J. Chem. Phys.* 81, 511, (1984).
- Nosé, S., “Constant Temperature Molecular-Dynamics Methods”, *Prog. Theor. Phys. Suppl.* 103 1, (1991).
- Nouailhat, A., “An Introduction to Nanoscience and Nanotechnology”, ISTE Ltd and John Wiley & Sons, Inc. Britain and the United States, (2008).
- Oshima, Y., Koizumi, H., Mouri, K., Hirayama, H. ve Takayanagi, K., *Phys. Rev. B* 65 121401(R), (2002).
- OVITO, (5 Haziran 2021), <http://www.ovito.org/index.php>, (2021).
- Özdemir Kart, S., “Physical Properties of Pd, Ni Metals and Their Binary Alloys”, Doktora Tezi, Ankara, (2004^d).
- Özdemir Kart, S., Tomak, M. ve Çağın, T., “Phonon Dispersion and Elastic Constants of Pd-Ni Metal Alloys”, *Physica B* 355, 382-391, (2004^a).
- Özdemir Kart, S., Tomak M., Uludogan, M., ve Cagin, T., “Liquid properties of Pd-Ni alloys”, *J. Noncryst. Sol.* 337, 101-108, (2004^b).

- Özdemir Kart, S., Tomak, M., Uludogan, M., ve Cagin, T., “Simulation of crystallization and glass formation of binary Pd-Ag metal alloys”, *Journal of Non-Crystalline Solids* 342, 6-11, (2004^c).
- Özdemir Kart, S., Tomak, M., Uludogan, M., ve Cagin, T., “Structural, thermodynamical and transport properties of undercooled binary Pd-Ni alloys”, *Material Science Engineering A*, 435-436, (2006).
- Qi, Y., Cagin, T., Johnson, W. L., Goddard, III W. A., “Melting and crystallization in Ni nanoclusters: The mesoscale regime”, *J. Chem. Phys.* 115, 385, (2001).
- Rahman, A., “Embedded-Atom Method”, *Phys. Rev.A*, 136–405, (1964).
- Rapaport, D. C., “The Art of Molecular Dynamics Simulation”, Cambridge University Press, London, (1997).
- Ray, J. R. ve Rahman, A., *J. Chem. Phys.*, 82, 4243, (1985).
- Reich, D.H., Tanase, M., Hultgren, A., Bauer, L A., Chen, C.S. ve Meyer, G.J., *J. Appl. Phys.* 93 7275, (2003).
- Rodrigues, V. ve Ugarte, D., *Phys. Rev. B* 63 073405, (2001).
- Sainath, G., Choudhary, B., Jayakumar, T., “Molecular dynamics simulation studies on the size dependent tensile deformation and fracture behavior of body centred cubic iron nanowire”, *Comp. Mater. Sci.* 104, 76–83 (2015).
- Sandoval, L., Urbassek, H.M., “Transformation pathways in the solid-solid phase transitions of iron nanowire”, *Appl. Phys. Lett.* 95, 191909, (2009).
- Scott, J. H., Chowdary, K., Turgut, Z., Majetich, S. A., McHenry, M. E., *J. Appl. Phys.* 85, 4409 (1999).
- Shvartsburg, A. A. ve Jarrold, M. F., *Phys. Rev. Lett.* 85, 12, (2000).
- Stillinger, F. H. ve Weber, T. A., *Phys. Rev. B* 22, 3790 (1980).
- Sutton, A.P., Chen, J., “Long-range Finnis-Sinclair potentials”, *Philos. Mag. Lett.*,61, 139-146, (1990).
- Swope, W. C., Andersen, H. C., Berens, P. H., ve Wilson, K. R., “A Computer Simulation Method For The Calculation of Equilibrium Constants For The Formation of Physical Clusters of Molecules: Application To Small Water Clusters”, *J. Chem. Phys.* 76, 637, (1982).
- Tikhonchev, M., Svetukhin, V., Gaganidze, E., ‘MD simulation of atomic displacement cascades near chromium-rich clusters in FeCr alloy’, *Journal of Nuclear Materials* 442, S618–S623 (2013).

Verlet, L., “Computer experiments on classical fluids. I. Thermodynamical properties of Lennard-Jones molecules”, *Phys. Rev.* 159 , 98–103, (1967).

Victora, R. H., Falicov, L. M., Ishida, S., ‘Calculated surface electronic structure of ferromagnetic iron and the ferromagnetic ordered iron-cobalt alloy’, *Phys. Rev. B* 30, 3896 (1984).

VMD, (5Haziran 2021), <http://www.ks.uiuc.edu/Research/vmd/>, (2021).

Vortler, K., Bjorkas, C., Terentyev, D., Malerba, L., Nordlund, K., “The effect of Cr concentration on radiation damage in Fe–Cr alloys,” *J. Nucl. Mater.* 382, 24–30 (2008).

Voter, A.F. ve Chen, S.P., “Accurate interatomic potentials for Ni, Al and Ni₃Al”, *Mat. Res. Soc. Symp. Proc.*, Eds.: Siegel, R. W., Weertman, J. R., and Sinclair, R., MRS–82,175-180, (1987).

Wang, B.L., Yin, S.Y., Wang, G.H., Buldum, A. ve Zhao, J.J., *Phys. Rev. Lett.* 86 2046, (2001).

Wang, P., Chou, W., Nie, A., “Molecular dynamics simulation on deformation mechanisms in body-centered-cubic molybdenum nanowires”, *J. Appl. Phys.* 110, 093521, (2011).

Wikipedia, (4Haziran 2021), https://en.wikipedia.org/wiki/List_of_software_for_molecular_mechanics_modeling, (2021).

Xiang, J., Lu, W., Hu, Y. J., Wu, Y., Yan, H., Lieber, C. M., “Ge/Si nanowire heterostructures as high-performance field-effect transistors”, *Nature* 441, 489, (2006).

Yang, Z., Lu, Z., Zhao, Y.P., “Atomistic simulation on size-dependent yield strength and defects evolution of metal nanowires”, *Computational Materials Science*, 46, 142-150, (2009).

Yıldırım, H., “Bakır Metali Nanoparçacıklarının Moleküler Dinamik Simülasyonu”, Doktora Tezi, Denizli, (2012).

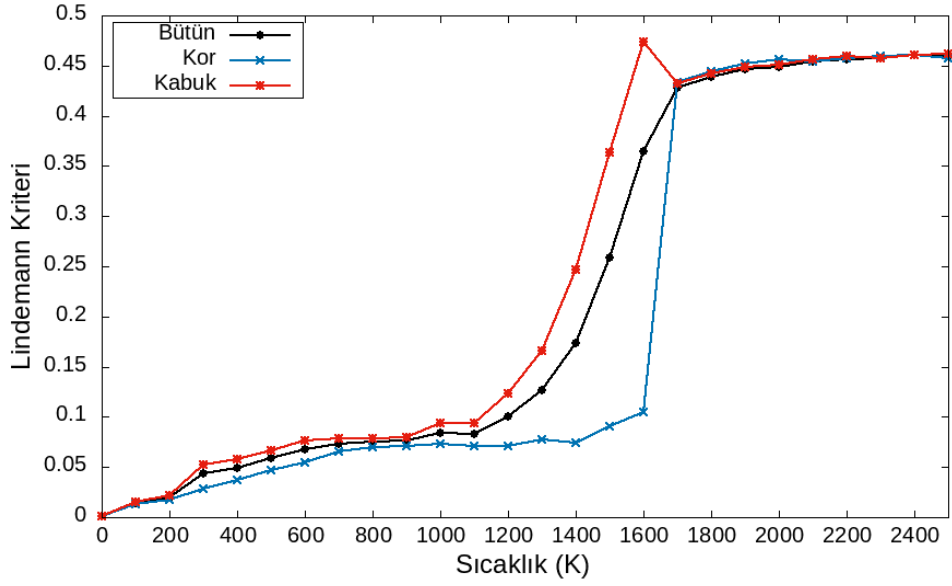
Zhu, J. ve Shi, D., “Reorientation mechanisms and pseudoelasticity in iron nanowires”, *J. Phys. D Appl. Phys.* 44, 055404, (2011).

Zhu, T., ve Gao, H., “Plastic deformation mechanism in nanotwinned metals: An insight from molecular dynamics and mechanistic modeling”, *Scripta Materialia*, 66, 843–848, (2012).

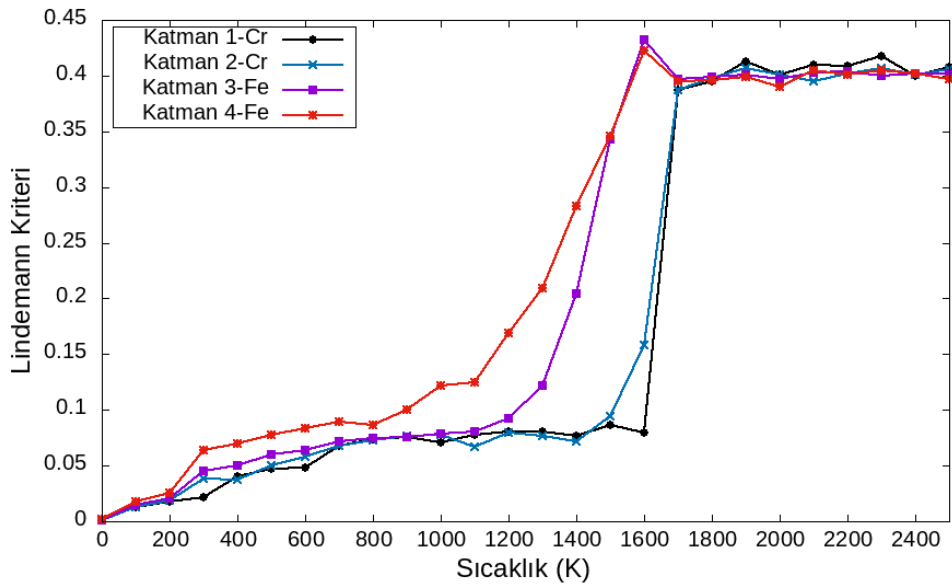
EKLER

7. EKLER

EK A

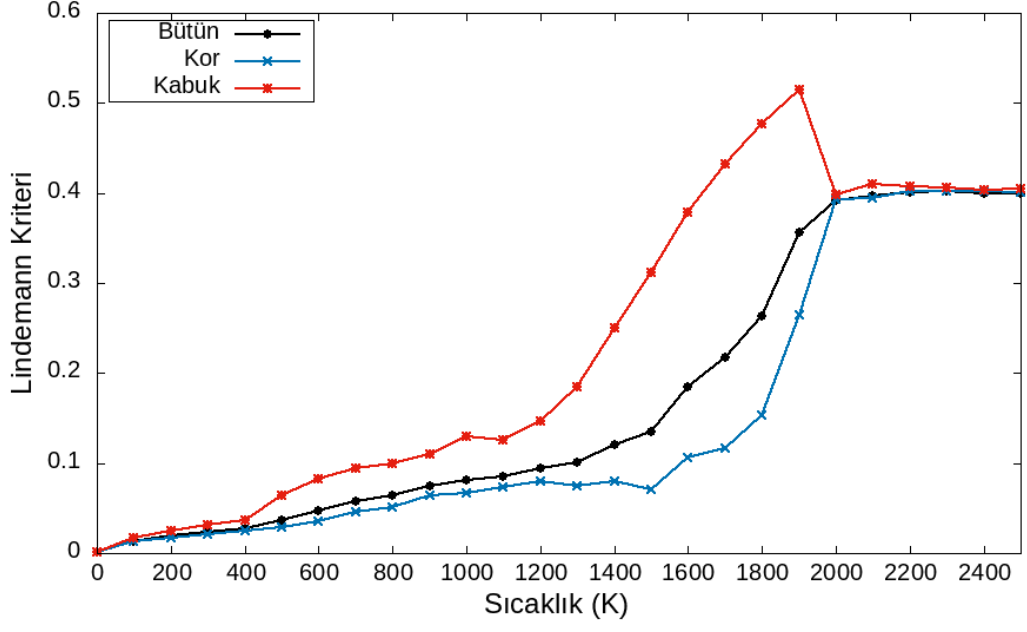


a)

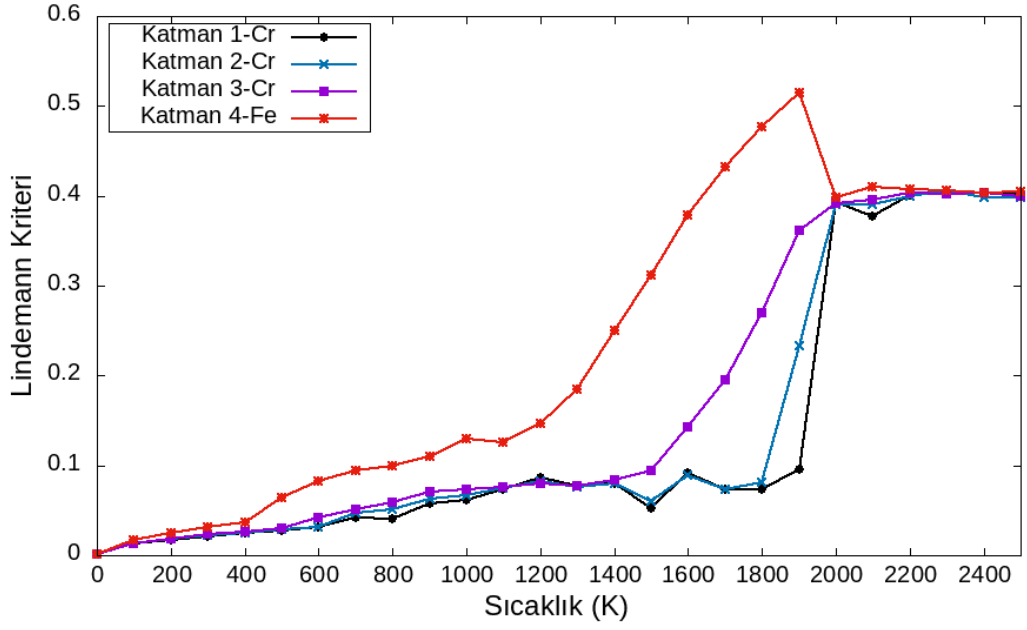


b)

Şekil A.1: Cr₂@Fe₂ nanoteli için a) kor, kabuk ve bütün bölgelere, ve b) katmanlara göre Lindemann kriterinin sıcaklığa bağımlılığı.

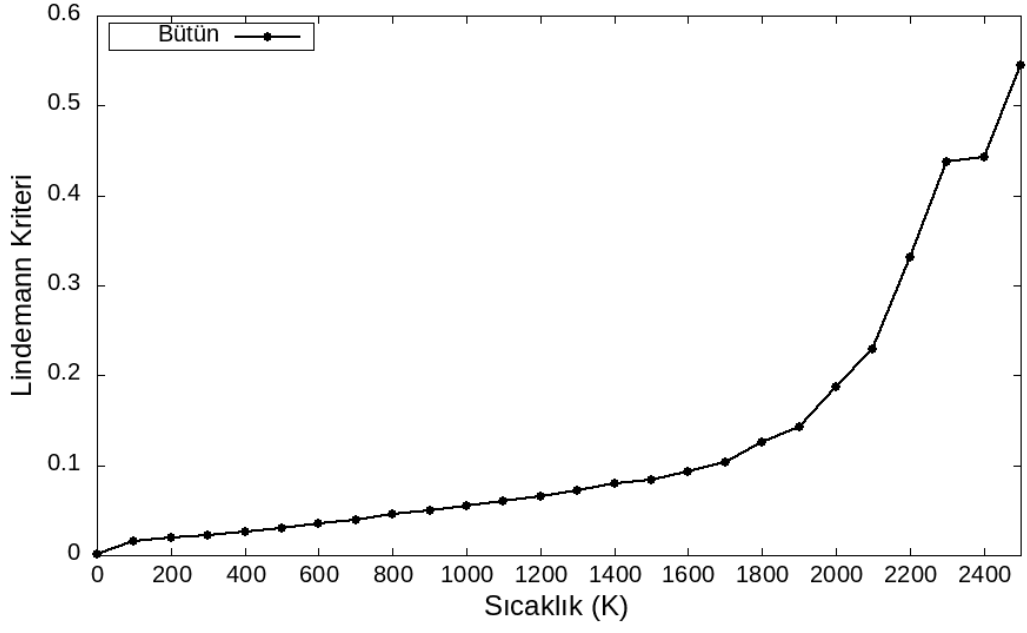


a)

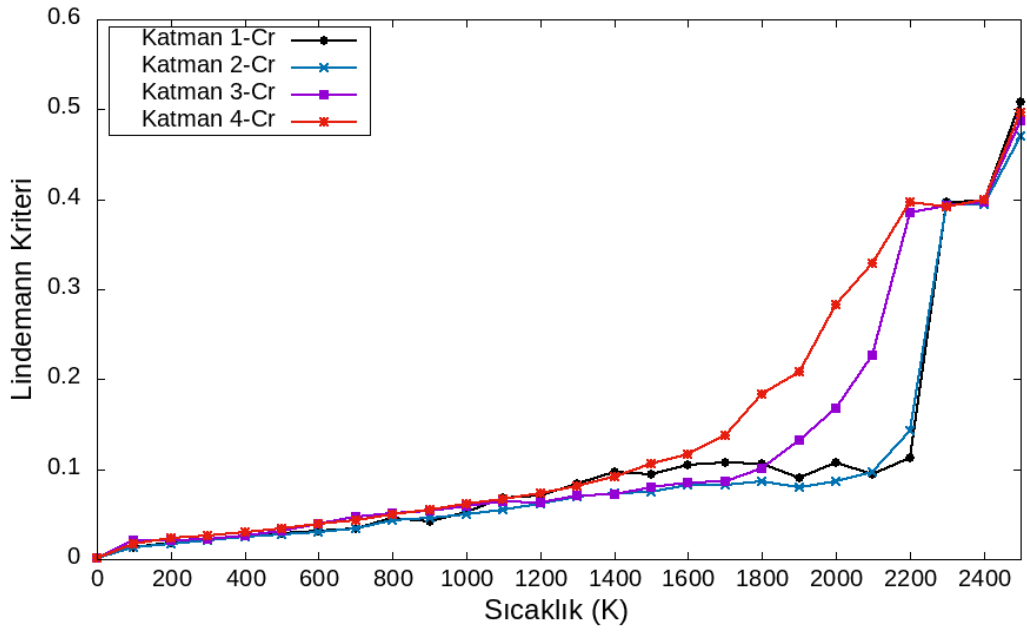


b)

Şekil A.2: Cr₃@Fe₁ nanoteli için a) kor, kabuk ve bütün bölgelere, ve b) katmanlara göre Lindemann kriterinin sıcaklığa bağımlılığı.

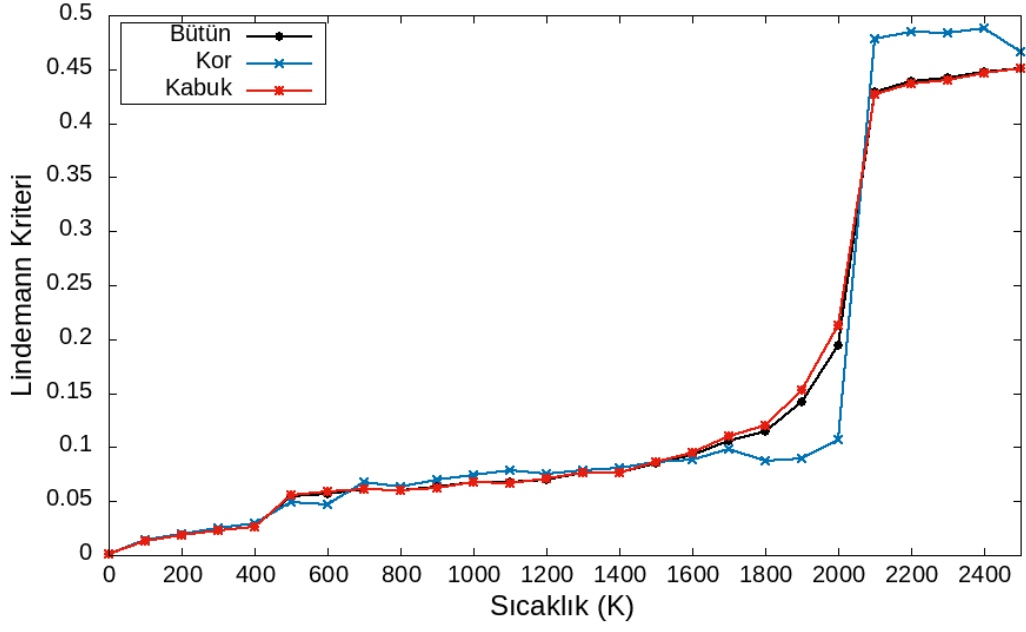


a)

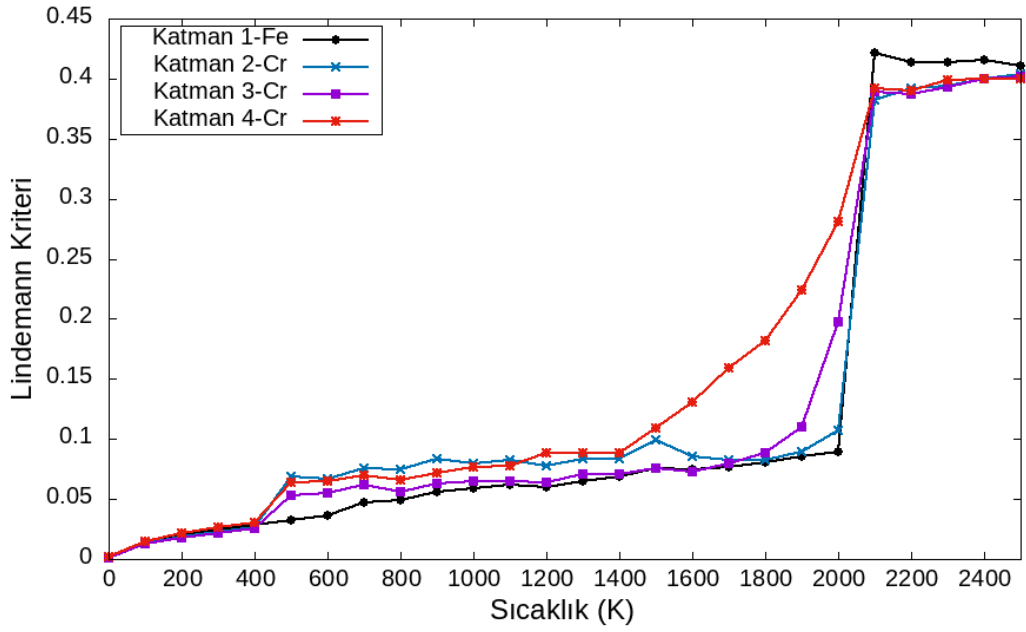


b)

Şekil A.3: Cr4 nanoteli için a) kor, kabuk ve bütün bölgelere, ve b) katmanlara göre Lindemann kriterinin sıcaklığa bağımlılığı.

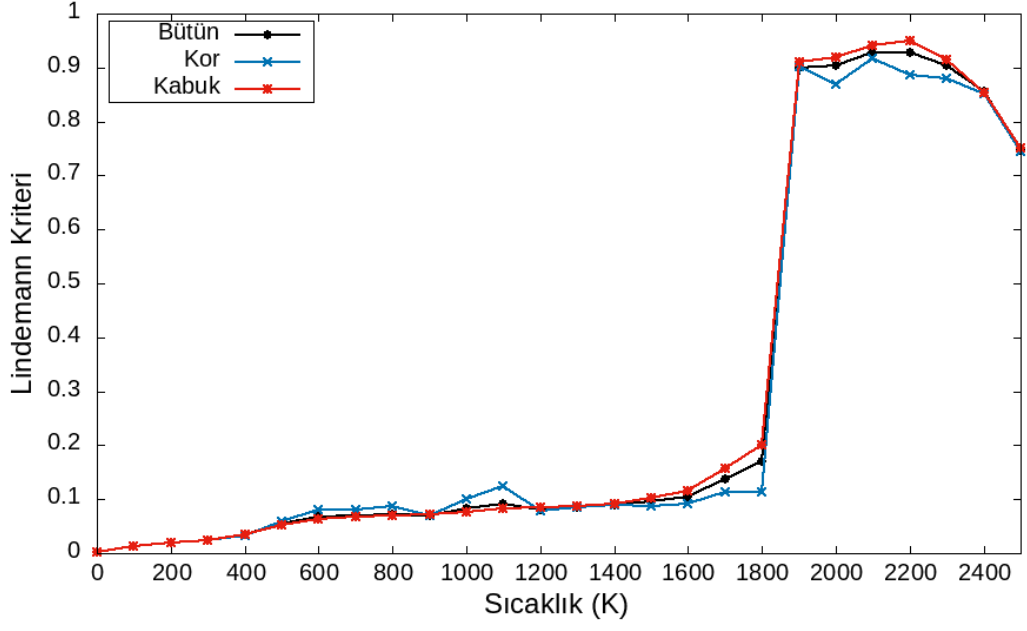


a)

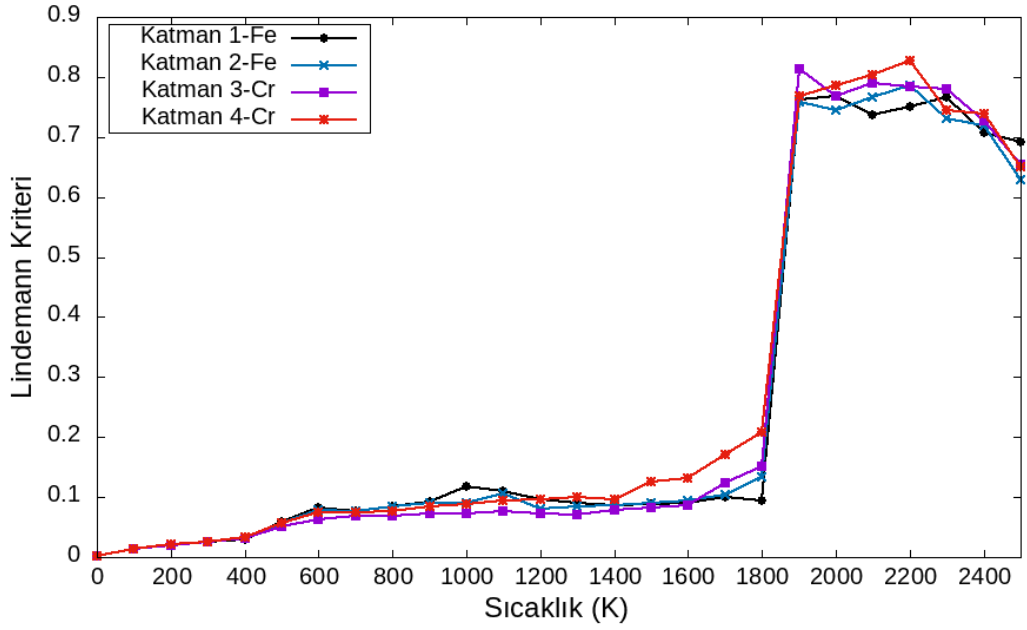


b)

Şekil A.4: Fe1@Cr3 nanoteli için a) kor, kabuk ve bütün bölgelere, ve b) katmanlara göre Lindemann kriterinin sıcaklığa bağımlılığı.

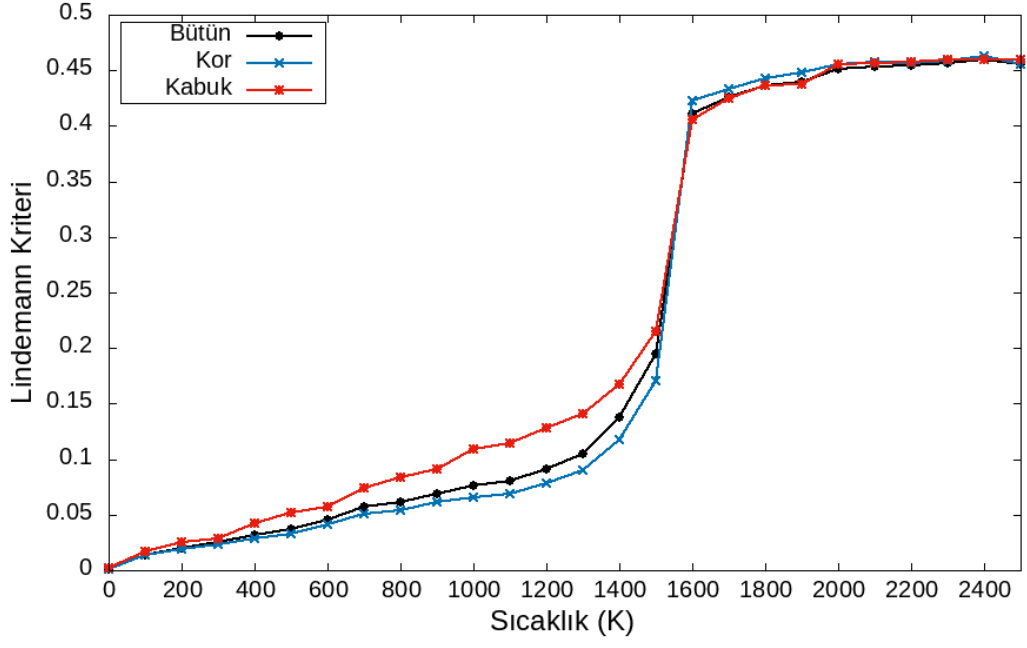


a)

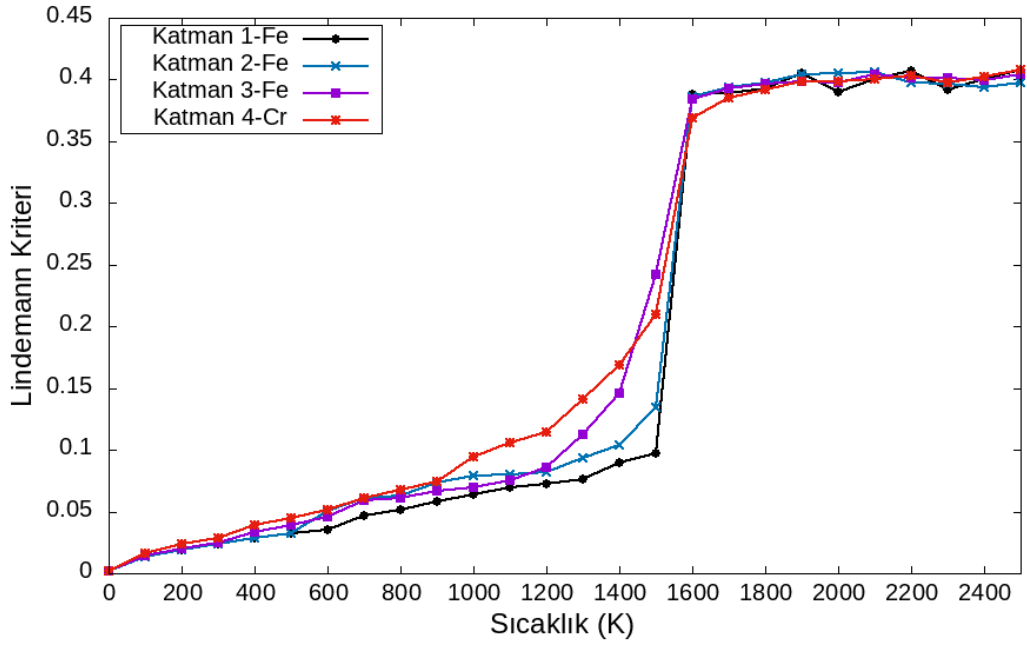


b)

Şekil A.5: Fe₂@Cr₂ nanoteli için a) kor, kabuk ve bütün bölgelere, ve b) katmanlara göre Lindemann kriterinin sıcaklığa bağımlılığı.

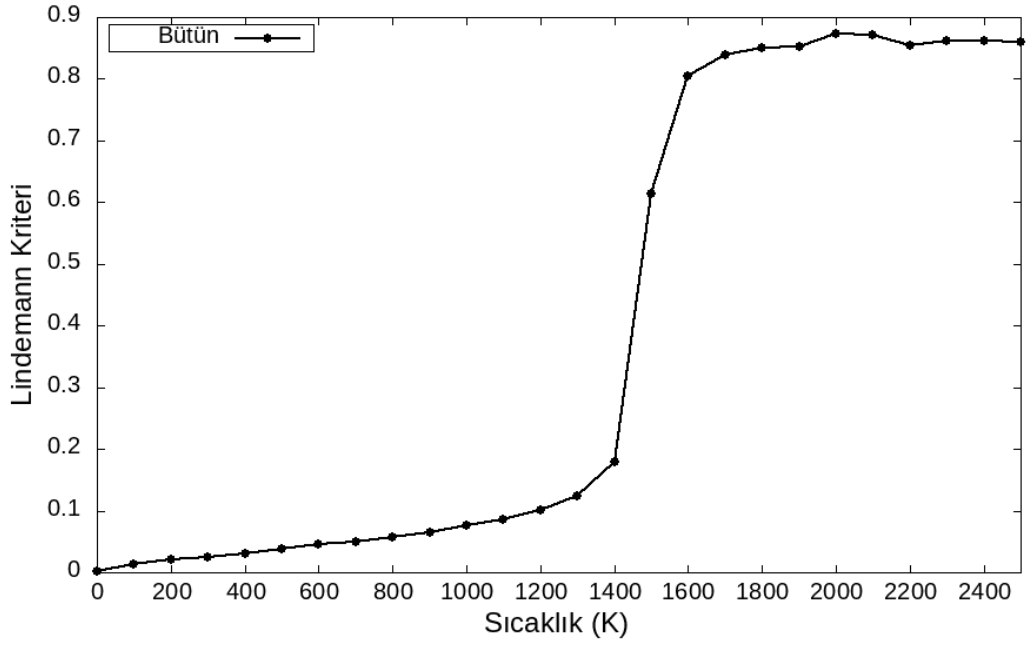


a)

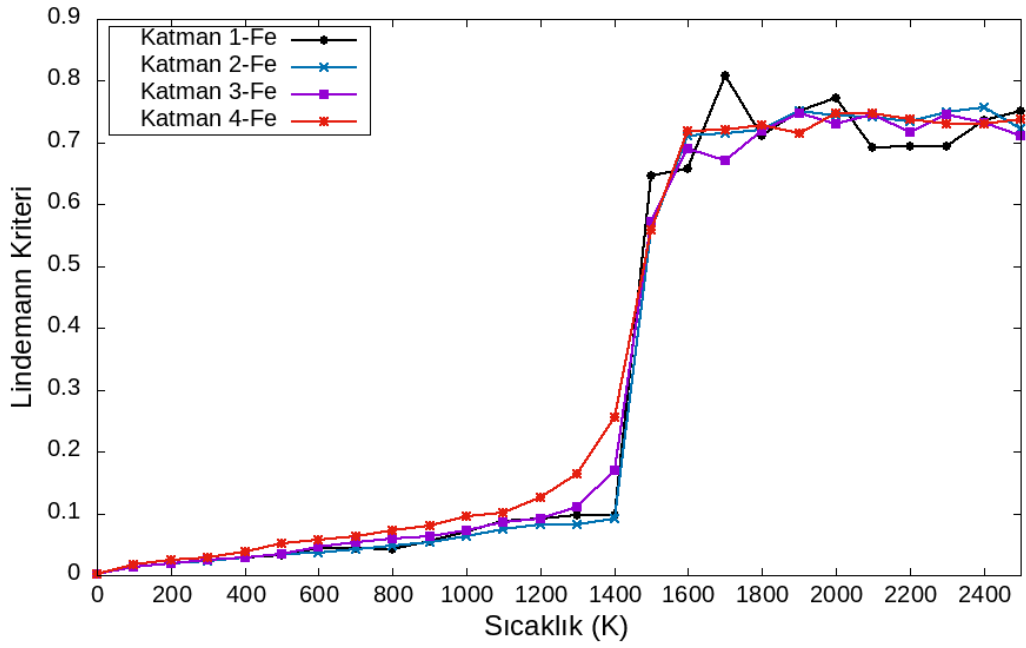


b)

Şekil A.6: Fe₃@Cr₁ nanoteli için a) kor, kabuk ve bütün bölgelere, ve b) katmanlara göre Lindemann kriterinin sıcaklığa bağımlılığı.



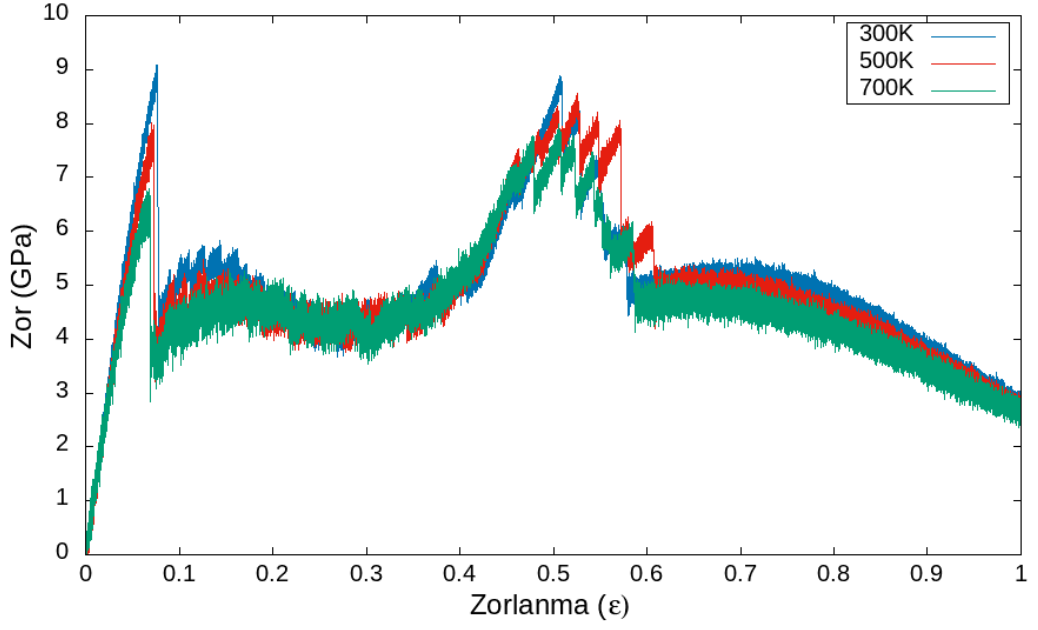
a)



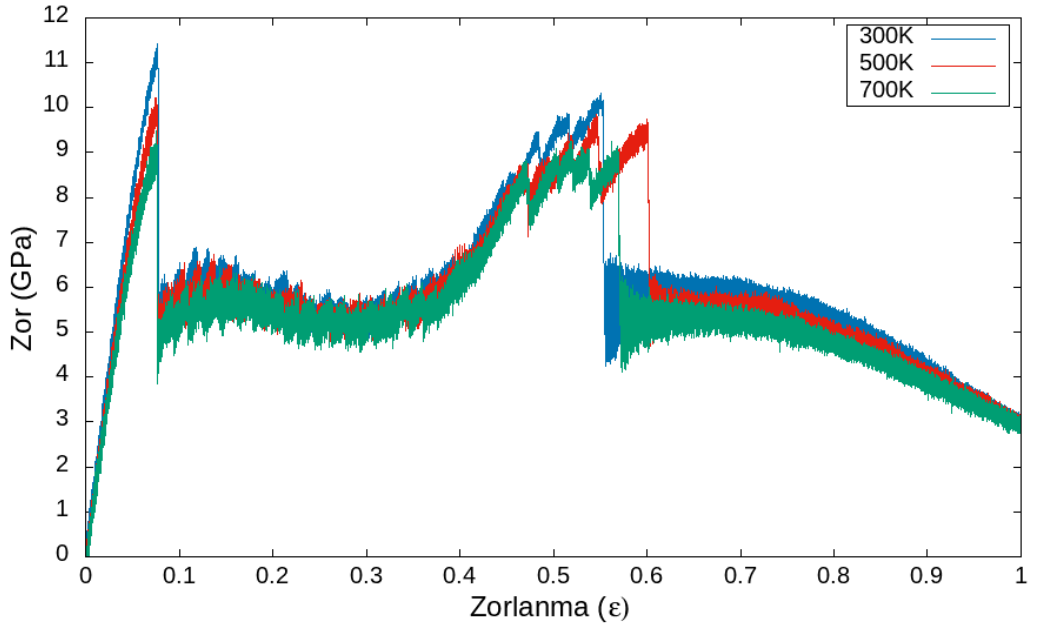
b)

Şekil A.7: Fe₄ nanoteli için a) kor, kabuk ve bütün bölgelere, ve b) katmanlara göre Lindemann kriterinin sıcaklığa bağımlılığı.

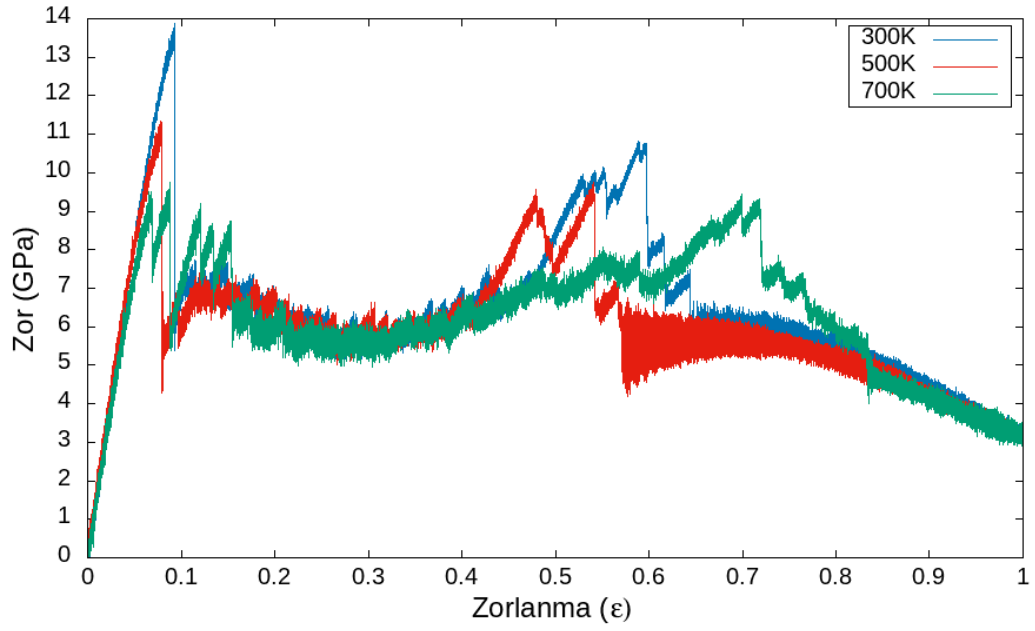
EK B



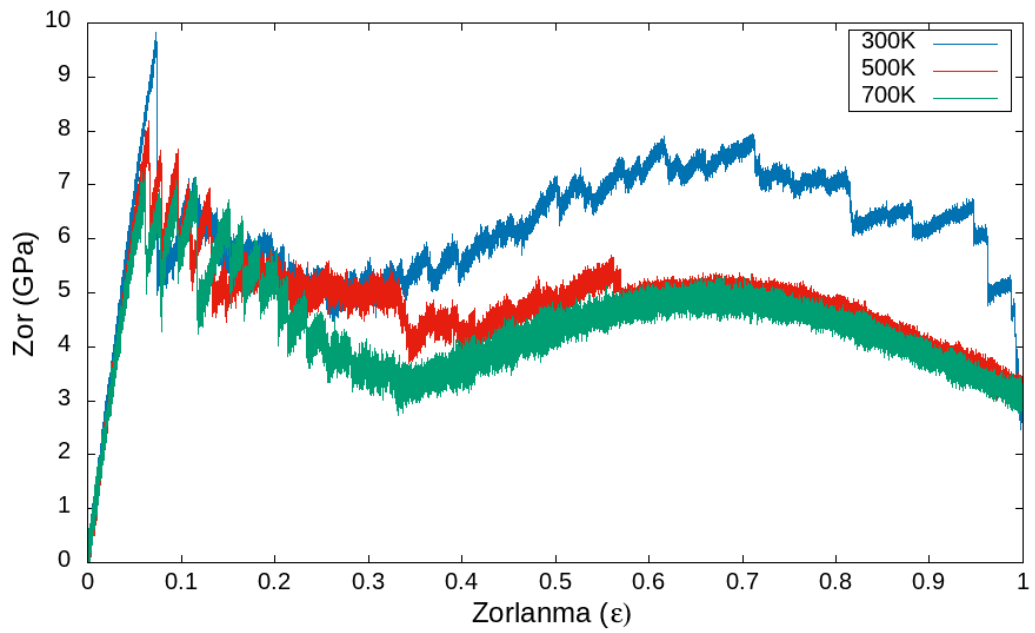
Şekil B.1: Cr₂@Fe₂ nanotelinin 300K, 500K ve 700K sıcaklıklarında zor-zorlanma ilişkisi.



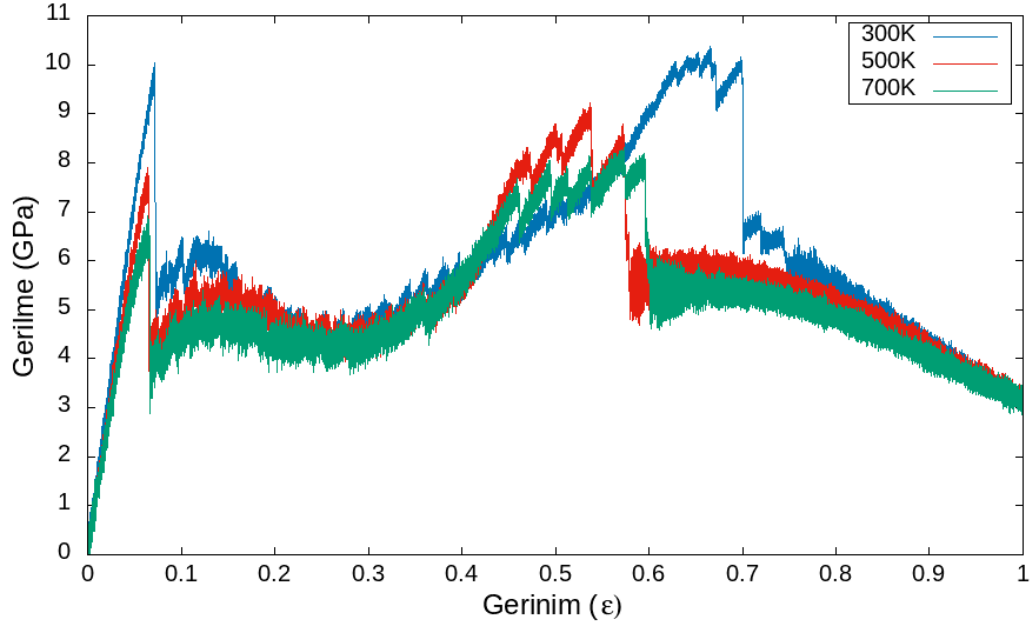
Şekil B.2: Cr₃@Fe₁ nanotelinin 300K, 500K ve 700K sıcaklıklarında zor-zorlanma ilişkisi.



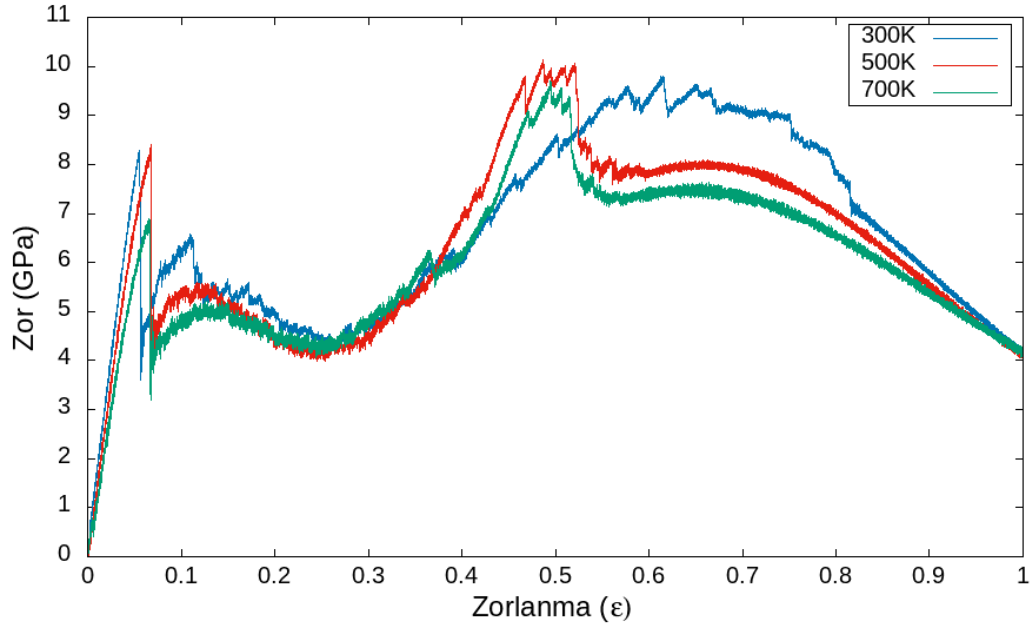
Şekil B.3: Fe₂@Cr₂ nanotelinin 300K, 500K ve 700K sıcaklıklarında zor-zorlanma ilişkisi.



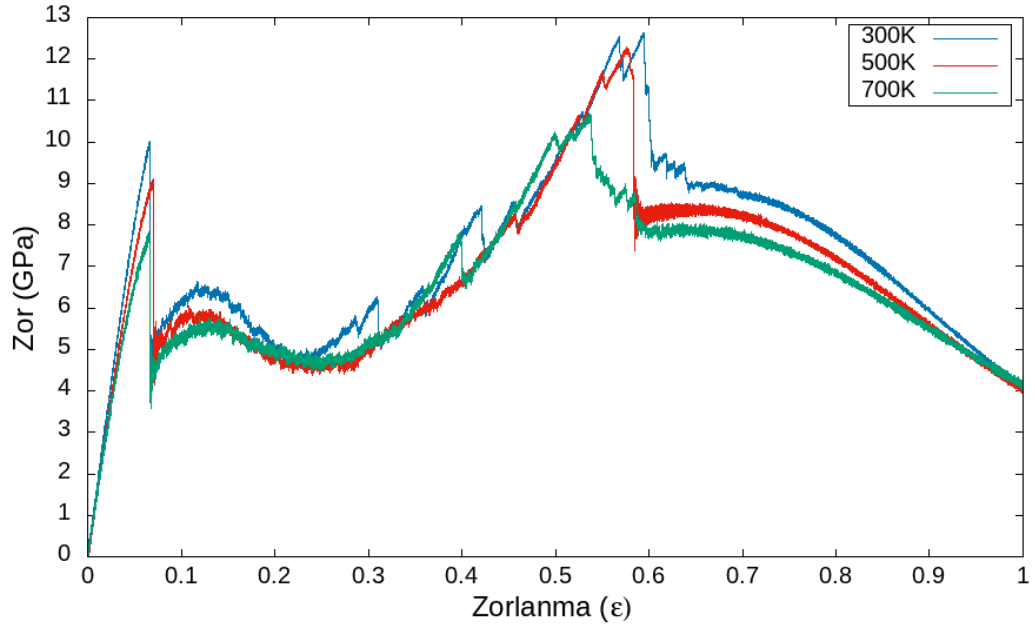
Şekil B.4: Fe₃@Cr₁ nanotelinin 300K, 500K ve 700K sıcaklıklarında zor-zorlanma ilişkisi.



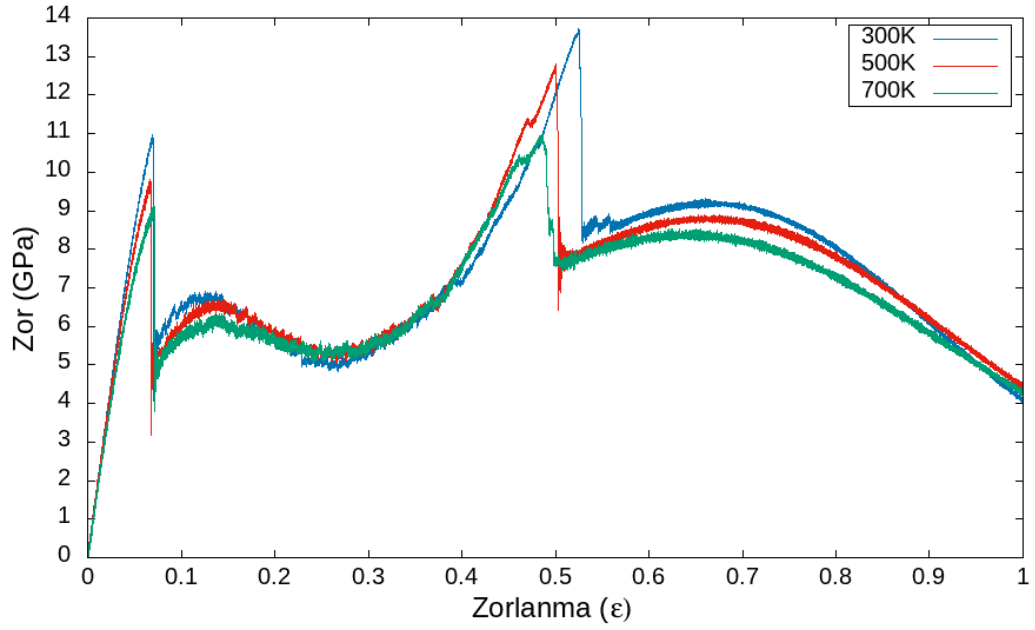
Şekil B.5: Fe₄ nanotelinin 300K, 500K ve 700K sıcaklıklarında zor-zorlanma ilişkisi.



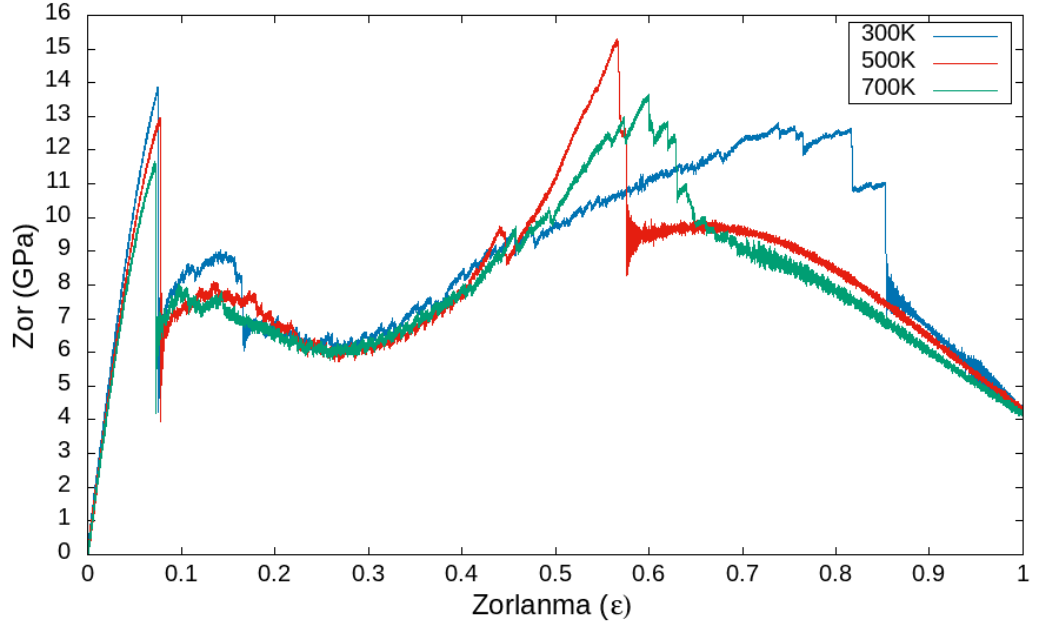
Şekil B.6: Cr₂@Fe₆ nanotelinin 300K, 500K ve 700K sıcaklıklarında zor-zorlanma ilişkisi.



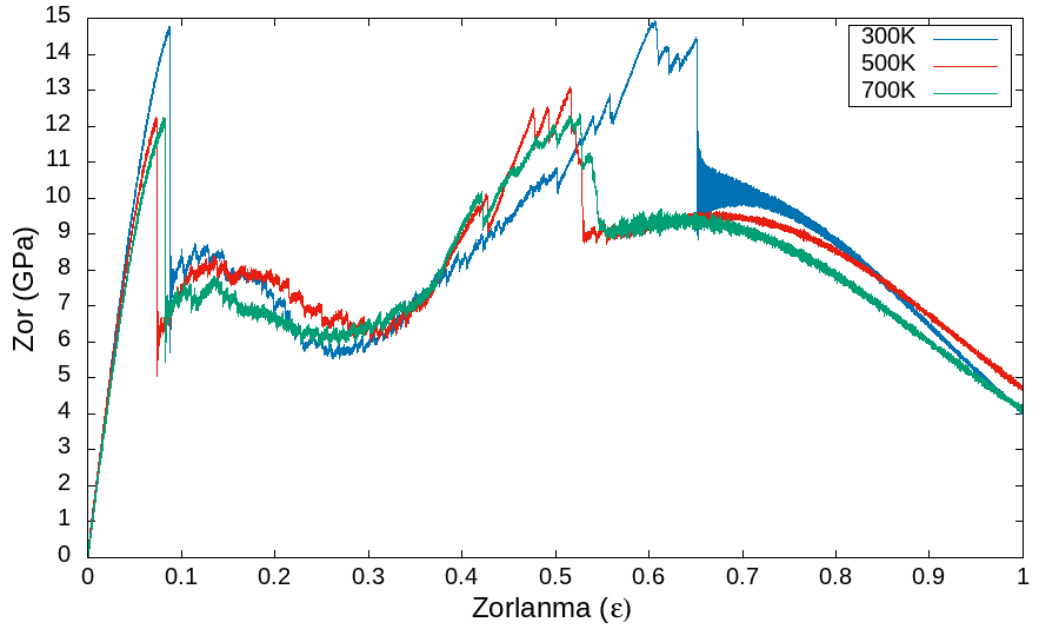
Şekil B.7: Cr4@Fe4 nanotelinin 300K, 500K ve 700K sıcaklıklarında zor-zorlanma ilişkisi.



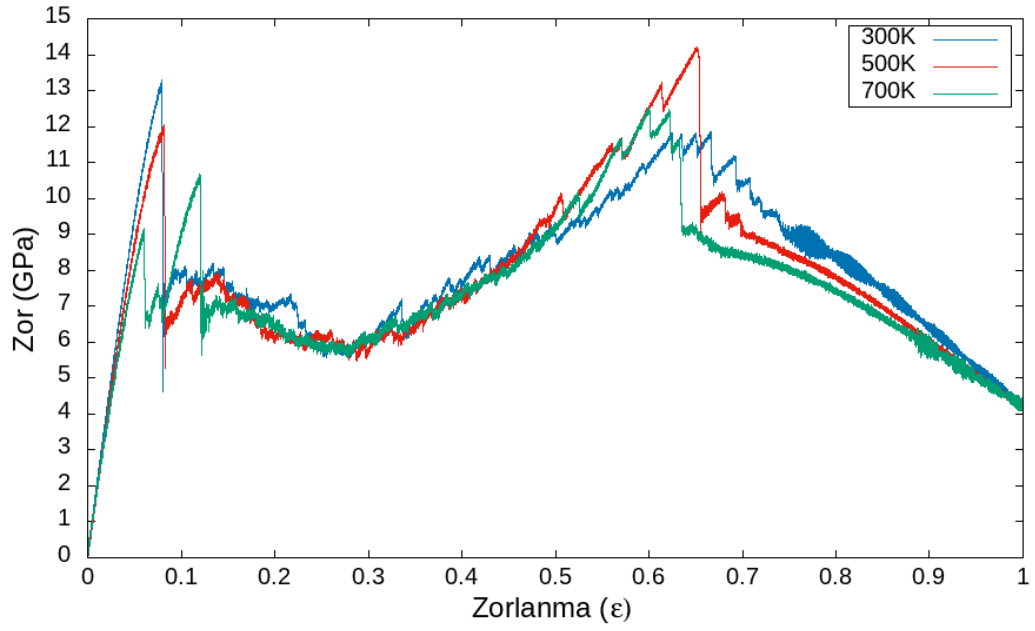
Şekil B.8: Cr6@Fe2 nanotelinin 300K, 500K ve 700K sıcaklıklarında zor-zorlanma ilişkisi.



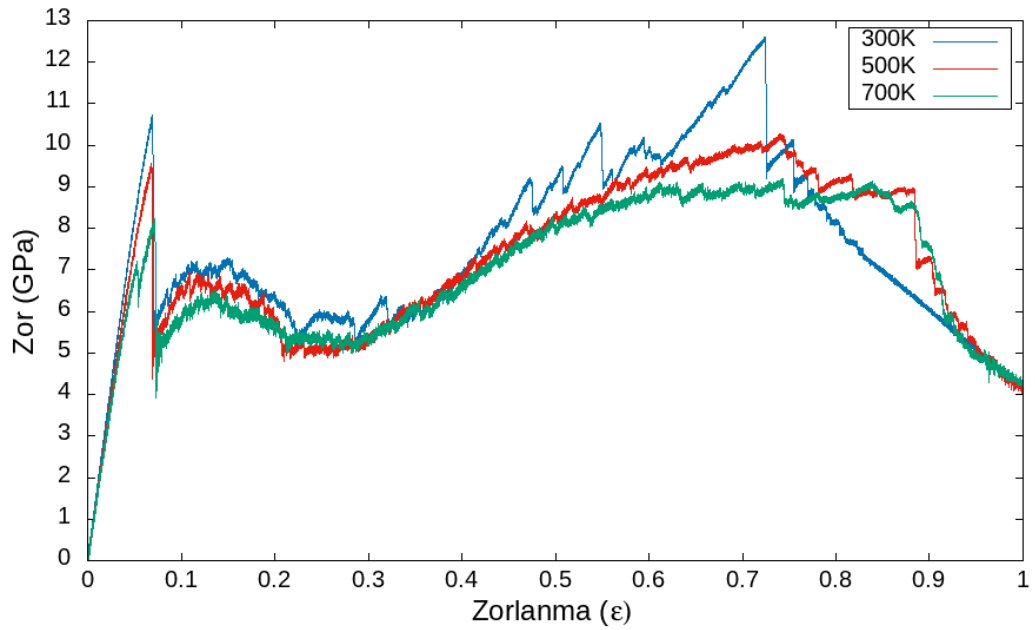
Şekil B.9: Cr8 nanotelinin 300K, 500K ve 700K sıcaklıklarında zor-zorlanma ilişkisi.



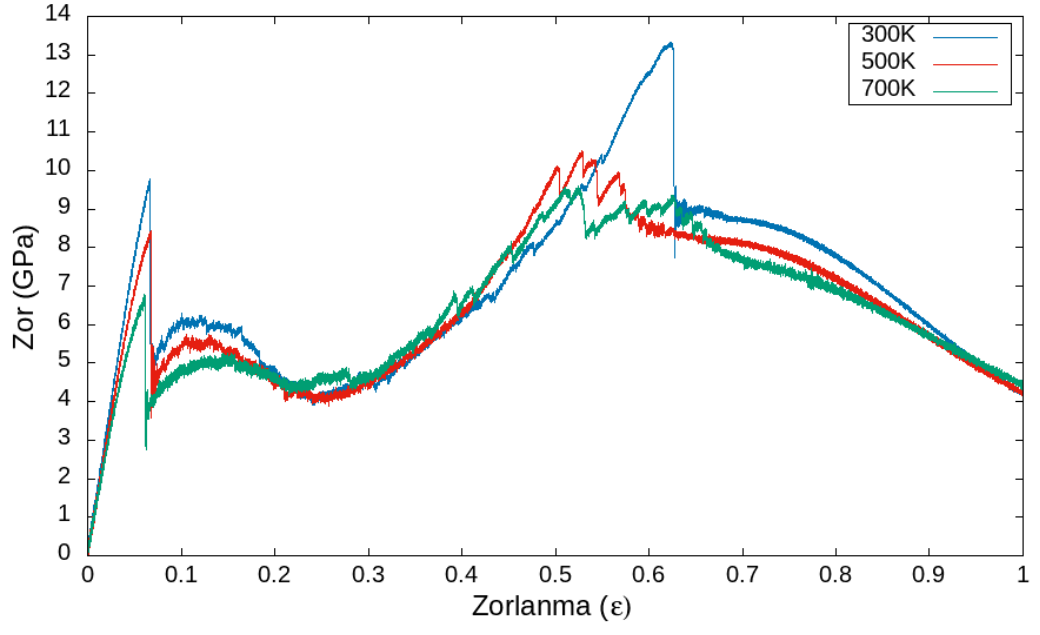
Şekil B.10: Fe2@Cr6 nanotelinin 300K, 500K ve 700K sıcaklıklarında zor-zorlanma ilişkisi.



Şekil B.11: Fe4@Cr4 nanotelinin 300K, 500K ve 700K sıcaklıklarında zor-zorlanma ilişkisi.



Şekil B.12: Fe6@Cr2 nanotelinin 300K, 500K ve 700K sıcaklıklarında zor-zorlanma ilişkisi.



Şekil B.13: Fe8 nanotelinin 300K, 500K ve 700K sıcaklıklarında zor-zorlanma ilişkisi.