T.C.

TRAKYA ÜNİVERSİTESİ

FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

RODYUM NANOTELLERİNİN MEKANİK ÖZELLİKLERİNİN MOLEKÜLER DİNAMİK SİMÜLASYONLARIYLA İNCELENMESİ

ALPER KORAY GÜNER

YÜKSEK LİSANS TEZİ

FİZİK ANABİLİM DALI

Tez Danışmanı: Doç. Dr. Sedat ŞENGÜL

EDİRNE-2021

ALPER KORAY GÜNER'in hazırladığı "**RODYUM NANOTELLERİNİN MEKANİK ÖZELLİKLERİNİN MOLEKÜLER DİNAMİK SİMÜLASYONLARIYLA İNCELENMESİ**" başlıklı bu tez, tarafımızca okunmuş, kapsam ve niteliği açısından **FİZİK** Anabilim Dalında bir **Yüksek lisans tezi** olarak kabul edilmiştir.

Jüri Üyeleri **İmza**

Doç. Dr. Sedat ŞENGÜL (Danışman) ……
(Trakya Üniversitesi – Fen Fakültesi – Fizik A.B.D)

Prof. Dr. Selim KARA ……
(Trakya Üniversitesi – Fen Fakültesi – Fizik A.B.D)

Doç. Dr. Burhan COŞKUN ……
(Kırklareli Üniversitesi – Fen Fakültesi – Fizik A.B.D)

Tez Savunma Tarihi:
28/01/2021

Bu tezin Yüksek Lisans tezi olarak gerekli şartları sağladığını onaylarım.

Doç. Dr. Sedat ŞENGÜL

Trakya Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü onayı

Prof.Dr. Hüseyin Rıza Ferhat KARABULUT
Fen Bilimleri Enstitüsü Müdürü

TRAKYA ÜNİVERSİTESİ FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ
FİZİK ANABİLİM DALINI YÜKSEK LİSANS PROGRAMI

DOĞRULUK BEYANI

Trakya Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, tez yazım kurallarına uygun olarak hazırladığım bu tez çalışmasında, tüm verilerin bilimsel ve akademik kurallar çerçevesinde elde edildiğini, kullanılan verilerde tahrifat yapılmadığını, tezin akademik ve etik kurallara uygun olarak yazıldığını, kullanılan tüm literatür bilgilerinin bilimsel normlara uygun bir şekilde kaynak gösterilerek ilgili tezde yer aldığını ve bu tezin tamamı ya da herhangi bir bölümünün daha önceden Trakya Üniversitesi ya da farklı bir üniversitede tez çalışması olarak sunulmadığını beyan ederim.

28/01/2021
Alper Koray GÜNER
İmza

Yüksek Lisans Tezi

Rodyum Nanotellerinin Mekanik Özelliklerinin Moleküler Dinamik Simülasyonlarıyla İncelenmesi

Trakya Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü

Fizik Anabilim Dalı

ÖZET

Nanotellerin, aynı cins atomlardan oluşmuş iri hacimli (bulk) malzemelere göre çok daha farklı elektronik, optik ve yapısal özellikler gösterdiği bilinmektedir. Bu nedenle nanotellerin kullanıldığı yeni elektro-mekanik cihazların tasarımı ve üretimi bu sistemlerin dayanım, esneklik ve kırılma gibi mekanik özelliklerinin bütünüyle anlaşılmasını gerektirmektedir. Ayrıca, sonlu ve boyuta bağlı mekanik özeliklerinin karakterizasyonu öne sürülen teorik önermelerin geçerliliğinin anlaşılması için de önemli bir dayanaktır. Bu çalışma ile çeşitli alanlarda kullanımı yaygın olan rodyum nanotellerinin mekanik özelliklerinin bilgisayar destekli moleküler dinamik simülasyonları ile belirlenmesi ve deformasyon süreci ile ilişkisinin yorumlanması hedeflenmiştir. Rh nanotellerinin gerilim-gerinim davranışının bulk sisteme kıyasla radikal değişikliğe sahip olduğu görülmüş olup nanotellerin mekanik özelliklerinin belirlenmesinde germe oranına kıyasla boyut etkilerinin söz sahibi olmasının yanında düşük boyutlarda yüksek germe oranı kullanıldığında daha sünek ve kırılmaya dayanıklı Rh nanotellerin elde edilebileceği gözlenmiştir.

Nanotelin mekanik özelliklerinin anlaşılması ve karakterizasyonu üzerine odaklanarak, deformasyon mekanizması ile ilişkisini ortaya koyması planlanan bu çalışma, benzer sistemler üzerine yapılacak deneysel ve teorik önermelere zemin oluşturacaktır.

Yıl : 2021

Sayfa Sayısı : 77

Anahtar Kelimeler : Mekanik özellikler, deformasyon mekanizması, nanoteller, moleküler dinamik simülasyonları

Master Thesis

Investigation of the Mechanical Properties of Rhodium Nanowires by Molecular Dynamics Simulations

Trakya University Institute of Natural Sciences

Department of Physics

ABSTRACT

Nanowires are known to exhibit much different electronic, optical and structural properties than their bulk counterparts. The design and manufacture of new electro-mechanical devices using nanowires require a full understanding of the mechanical properties of these systems, such as strength, flexibility and fracture. In addition, the characterization of the finite and size dependent mechanical properties is an important basis for understanding the validity of the proposed theoretical propositions. The aim of this study is to determine the mechanical properties of rhodium (Rh) nanowires, which are widely used in various fields, by means of computer-aided molecular dynamic simulations and to interpret their relationship to the deformation process. It has been observed that the stress-strain behavior of Rh nanowires radically different with respect to the bulk material. It is observed that the size of nanowire is more effective to determine desired mechanical properties with respect to the strain rate and the ductile and break-proof Rh nanowires can be obtained by using the high strain rate and small size of nanowires.

This study focuses on the understanding and characterization of the mechanical properties of nanowires and is intended to form the basis for experimental and theoretical statements on similar systems.

Year : 2021

Number of Pages : 77

Keywords : Tensile Deformation of Metallic Nanowires by Molecular Dynamics Simulations

TEŞEKKÜR

Yüksek lisans eğitimimin başladığı ilk günden son güne kadar yaşadığım tüm aksaklıklarda beni cesaretlendiren, elimden tutan, bana yol gösteren, liderliğini, bilgisini, maddi manevi tüm gücünü benimle paylaşan, tüm aşamalarda bana hoşgörü ve sabır gösteren nihayetinde mutlu sona ulaşmamı sağlayan kendisiyle çalışmaktan dolayı onur duyduğum değerli danışman hocam Doç. Dr. Sedat ŞENGÜL'e,

Çalışmamın yapım, yazım ve bilimum her aşamalarında yaptığı sayısız yardımlardan dolayı Arş. Gör. Dr. Vildan GÜDER'e,

Çalışmalarım sırasında yardımını hiç esirgemeyen arkadaşım, dostum, nikah şahidim ve kardeşim Sezgin AKALIN'a,

Bugünlere gelmemde pay sahibi olan, insani ve ahlaki değerleri öğreten aileme ve aile büyüklerime,

Her anımda yanımda olan, bana inanan, beni cesaretlendiren, yol arkadaşım sevgili eşim Bilge GÜNER'e

sonsuz teşekkürlerimi sunarım.

Bu çalışma, Trakya Üniversitesi Bilimsel Araştırma Projeleri birimi tarafından 2020/130 numaralı proje kapsamında desteklenmiştir.

İÇİNDEKİLER

DOĞRULUK BEYANI ..... **iii**

ÖZET ..... **iv**

ABSTRACT ..... **v**

TEŞEKKÜR ..... **vi**

SİMGELER DİZİNİ ..... **viii**

KISALTMALAR DİZİNİ ..... **ix**

ŞEKİLLER DİZİNİ ..... **x**

ÇİZELGELER DİZİNİ ..... **xii**

GİRİŞ **1**

TEORİ **5**

2.1. Moleküler Dinamik Simülasyonları **5**

2.1.1. Gömülü Atom Modeli (GAM) 7

2.1.2. Moleküler Dinamik Simülasyonları İşleyişi 9

2.1.3. Zaman İntegrasyonu ve Verlet – Hız Algoritması 11

2.1.4. Sınırlamalar 12

2.1.5. İstatiksel Topluluklar 13

2.2. Germe Deformasyonu ve Mekanik Özellikler **14**

3.3. SONUÇLAR VE TARTIŞMA **17**

3.1. Model Testi 17

3.2. Germe Deformasyonu Simülasyonları 21

3.2.1. Deformasyon sürecinde enerji değişimi 29

3.2.2. Deformasyon sürecinde Gerilim – Gerinim ilişkisi 32

KAYNAKÇA **49**

ÖZGEÇMİŞ **56**

EKLER **57**

SİMGELER DİZİNİ

η_i	: Von Mises akma kriteri
E	: Elastisite Modülü
E_P	: potansiyel enerji
ε	: Gerinim
σ_K	: Kopma dayanımı
T	: Sıcaklık
a_o	: Örgü sabiti
T_m	: Erime sıcaklığı
β	: Yüzey ve çekirdek gerilimlerinin oranı
D_{kritik}	: Yüzey ve çekirdek katkılarının dengeli olduğu kritik nanotel kalınlığı

KISALTMALAR DİZİNİ

BCC	: Cisim merkezli kübik yapı
D	: Nanotel enine kesit uzunluğu
FCC	: Yüzey merkezli kübik yapı
GAM	: Gömülü Atom Metodu
HCP	: Altıgen kapalı yapı
ICO	: İkozahedral yapı
L	: Nanotel boyu
LAMMPS	: Large Atomic Molecular Massively Parallel Simulator
NPT	: Sabit parçacık sayısı, basınç ve sıcaklık topluluğu
NT	: Nanotel
NVE	: Sabit parçacık sayısı, hacim ve enerji topluluğu
NVT	: Sabit parçacık sayısı, hacim ve sıcaklık topluluğu
OVITO	: Open Visualization Tool (Bilimsel görüntüleme ve analiz yazılımı)
PE	: Potansiyel enerji
Rh	: Rodyum elementi
SC	: Basit kübik yapı

ŞEKİLLER DİZİNİ

Şekil 2.1. MD yaklaşımının özeti 10
Şekil 2.2. Velocity-Verlet algoritmasını uygulama adımları 12
Şekil 2.3. Mühendislik alanında Gerilme - Uzama (Gerilim-Gerinim) ilişkisi. 14
Şekil 2.4. Nano sistemlerde Gerilim-Gerinim ilişkisi. 15
Şekil 3.1. FCC - Rh için T = 0 K' de hesaplanan taban durum enerji-örgü hacmi ilişkisi 18
Şekil 3.2.FCC - Rh için T = 0 K' de hesaplanan taban durum enerji-örgü hacmi ilişkisi 19
Şekil 3.3. FCC Rh'ın potansiyel enerjisinin sıcaklık ile değişimi 21
Şekil 3.4. 2.2 nm Rh nanotel için atomik modelin a) yandan ve b) üstten görünüşü. 23
Şekil 3.5. 300 K' de 0.001 ps-1 germe oranında FCC bulk Rh için gerilim – gerinim ilişkisi. 24
Şekil 3.6. 300 K' de 0.001 ps-1 germe oranında FCC bulk Rh için %2 gerinim için lineer fit ile birlikte gerilim –gerinim ilişkisi. 25
Şekil 3.7. 300 K' de 0.001 ps-1 germe oranında 2.2 nm kalınlıklı nanotelin gerinime bağlı gerilim ve atom başına PE ilişkisi. 28
Şekil 3.8. 300 K' de 0.001 ps-1 germe oranında 2.2 nm kalınlıklı nanotel için %0.2 ofset metodu ile birlikte gerilim-gerinim ilişkisi. 28
Şekil 3.9. 300 K' de 0.001 ps-1 germe oranında 2.2 nm kalınlıklı nanotelin elastik geri kazanımı. 29
Şekil 3.10. 2.2 nm kalınlıklı nanotelin PE – gerinim ilişkisinin germe oranı ile değişimi 31
Şekil 3.11. 0.001 ps-1 germe oranında PE - boyut ilişkisi. 31

Şekil 3.12. FCC 300 K' de ve 0.001 ps-1 germe oranı altında 2.2 nm boyutlu nanotelin atomların potansiyel enerjisine göre (a) 0, (b) 0.09 (c) 0.26 gerinim değerlerindeki atomik konfigürasyonları. 32
Şekil 3.13. FCC-Rh NT' leri için elde edilen germe oranına gerilim-gerinim değişimi 33
Şekil 3.14. a) FCC-Rh NT' leri için elde edilen boyuta gerilim-gerinim değişimi ve b) Aynı eğrinin %1 gerinime kadar gösterimi. 35
Şekil 3.15. 300 K' de ve 0.001 ps-1 germe oranı altında 2.2 nm boyutlu nanotelin en yakın komşu analizi (a) 0, (b) 0.04, (c) 0.08, (d) 0.18, (e) 0.25 ve (f) 0.26 gerinim değerlerindeki atomik konfigürasyonları. Etiket 0.08 gerinim için verilmiştir. 37
Şekil 3.16. 2.2 nm boyutlu NT için (a) 0, (b) 0.046, (c) 0.084 ve (d) 0.26 gerinimde hesaplanan von Mises akma gerilimi 39
Şekil 3.17. 4.1 nm boyutlu NT için (a) 0, (b) 0.044, (c) 0.084, (d) 0.39 gerinimde hesaplanan von Mises akma gerilimi 40
Şekil 3.18. Rh NT' lerin 300 K ve 0.001 ps-1 germe oranında başlangıç geriliminin boyuta bağlı değişimi. 42
Şekil 3.19. Rh NT' lerin 300 K ve 0.001 ps-1 germe oranında akma geriliminin boyuta bağlı ilişkisi. 43
Şekil 3.20. Rh NT' lerin 300 K ve 0.001 ps-1 germe oranında akma geriniminin boyuta bağlı ilişkisi. 44
Şekil 3.21. Rh NT' lerin 300 K ve 0.001 ps-1 germe oranında maksimum (tepe) geriliminin boyuta bağlı ilişkisi. 45
Şekil 3.22. FCC –Rh NT için boyuta bağlı çekirdek ile yüzey geriliminin katkısı. 46
Şekil 3.23. FCC-Rh NT' lerin 300 K ve 0.001 ps-1 germe oranında Elastisite Modülleri. 47

ÇİZELGELER DİZİNİ

Çizelge 3.1.Rh için T = 0 K' de hesaplanan fiziksel nicelikler 19
Çizelge 3.2. FCC - Rh için T = 0 K' de hesaplanan elastik sabitler 20
Çizelge 3.3. Bulk ve nanotel Rh sistemi için öteleme ve bu ötelemeye karşılık gelen atom sayıları. 22
Çizelge 3.4. Bulk Rh için germe oranına bağlı Elastisite Modülleri 26
Çizelge 3.5. 2.2nm NT için germe oranına bağlı hesaplanan mekanik özellikler. 34
Çizelge 3.6. FCC-Rh NT' leri için boyuta bağlı mekanik özellikler. 36

BÖLÜM 1

GİRİŞ

İnşaat, havacılık ve otomotiv endüstrileri de dâhil olmak üzere çeşitli endüstrilerde yaygın olarak kullanılan anahtar malzemeler olmaları sebebiyle metalik sistemlerin mekanik özelliklerinin ve esnekliklerinin (plastisite) anlaşılması sadece mühendislik projelerinin yapısal bütünlüğünü anlamak için değil, onların endüstriyel uygulamaları için de önemlidir. Metallerin işlenmesi, özellikle otomotiv ve havacılık endüstrileri olmak üzere birçok endüstri için kritik bir süreçtir. Birçok işleme sürecinde, bir metal parçanın yüzeyi bir kesme aleti ile yüksek hızda kazınır. Malzeme, bu işlemler sırasında son derece yüksek gerilmelere, gerilme hızlarına ve sıcaklıklara maruz kalır. Metal içinde deformasyonun gelişimi oldukça hızlıdır ve metalin o kadar küçük kısımlarında gerçekleşir ki, mikroskobik plastisite davranışı deneysel olarak dahi zor araştırılabilir.

Metalik nanoteller, nano-elektronik, nano-optoelektronik ve nano-mekaniğin çeşitli uygulamalarında fiziksel dış parametrelere karşı benzersiz duyarlılıkları, güç ve kararlılıkları nedeniyle yaygın olarak kullanılmaktadır (Geng, Yan, Dong, & An, 2019; Lieber, 2003). Örneğin, taramalı tünelleme mikroskobunda (STM) ve atomik kuvvet mikroskobunda (AFM) uç ve örnek arasındaki nano ölçekli etkileşimler için yararlı uygulamalara sahiptirler (Zhang & Huang, 2009). Yüksek yüzey/hacim oranı ile birlikte, ikizlenmiş düzlemlerin oluşumunun metalik nanotellerin mekanik özelliklerini etkilediği gösterilmiştir (Deb Nath & Kim, 2012). Metalik nanotellerin süneklik, elastisite ve akma dayanımının maruz kaldıkları dış etkiye ve boyuta göre değişiklik gösterdiğini rapor eden deneyler ve simülasyonlar, metalik nanotellerin bulk (hacimsel) muadillerinden daha güçlü olabileceğini göstermiştir: Gümüş nanoteller ve altın nanoteller için yapılan çalışmalarda nanotellerin akma dayanımının bulk sistemden daha yüksek olduğunu

gösterilmiştir (Lucas vd., 2008; Wu, Heidelberg & Boland, 2005). Ayrıca gümüş nanotellerde 10 nm'den küçük çaplar için nanotel çapları azaldıkça, akma dayanımının artarken 10 nm'den büyük çaplarda akma noktası boyut arttıkça bulk değerlerine yaklaştığı rapor edilmiştir (Deb Nath ve Kim, 2012; Lucas vd., 2008s)'in altın nanotelleri üzerindeki deneyi boyut - akma dayanımı ilişkisi benzer davranış göstermektedir.

Nanotelin dayanımını ölçmenin bir başka yolu, metal tellerin elastisite modüllerini karşılaştırmaktır. Yapılan deneysel çalışmalarda gümüş nanoteller için elastisite modülünün nanotel çapı ile ters orantılı olduğunu göstermişlerdir (Jing vd., 2006; Zhu vd., 2012). Bu eşsiz özellikler, nano ölçekli malzemelerde yüzey / hacim oranının büyük olmasına atfedilebilir: iç atomlardan daha düşük koordinasyon sayılarına sahip olan yüzey atomları daha yüksek bir gerilim üretir. Küçük boyutlu nanotellerde, yüzey atomlarına göre daha az sayıdaki iç atomlar, bulk sistemde olduğu gibi, yüzey gerilimine karşı koyamaz (Jing vd., 2006; Liang, Upmanyu, & Huang, 2005; Zhu vd., 2012). Yüzeyin hacme oranı ne kadar büyük olursa, cisim üzerindeki yüzey gerilimi o kadar fazla etkili olur ve böylece daha yüksek akma dayanımı sağlar.

Deneysel alanda optik, termal, mekanik ve elektronik özelliklerini konu alan çeşitli çalışmalar olmasına rağmen karmaşık yüzey morfolojisi ve küçük boyut sebebiyle kullanılan deneysel yöntemlerin bu malzemeler hakkında sunduğu bilgiler oldukça sınırlı kaldığından, nanotelin germe oranı, boyut gibi dış değişkenlere bağlı deformasyon mekanizmasının anlaşılması endüstriyel ve elektronik uygulamalar için gerekli ve halen araştırılması gereken bir konudur (Hu & Chen, 2007; Wen vd., 2005; Sofiah, Samykano, Kadirgama, Mohan, & Lah, 2018; Iijima vd., 2002; Zhu & Li, 2010). Günümüz hesaplamalı bilimi bilgisayar simülasyonları kullanarak deformasyon altındaki metalin davranışını detaylı bir şekilde öngörebilmektedir. Dış etkilerin kontrol edilmesi moleküler dinamikler (MD) simülasyonları için bir problem değildir. Bu özellik MD simülasyonlarını nano sistemlerin mekanik özelliklerini incelemek için çok güçlü bir araç haline getirir. Öyle ki, germe hızı, boyut, sıcaklık gibi dış etkilerin metalik nanotelin mekanik özelliklerine etkilerini incelemiş pek çok MD çalışması yapılmıştır: 2 – 6 nm kalınlıklı Au ve Pt nanotellerin germe hızı ve boyut ile değişen elastik özellikleri ve platin nanotellerinin mekanik özelliklerine sıcaklığın etkisi araştırılmıştır (Koh & Lee, 2006; Koh, Lee, Lu, & Cheng, 2005). Boyut ve germe oranına bağlı etkileri üzerine yapılan çalışmalarda nanotelin Elastisite Modülünün bulk sistemden daha büyük olduğunu

gösterilmiştir (Wu, Soh, Wang, & Sun, 2004). Nikel nanotelin germe oranı ve boyuta bağlı deformasyonunu tanımlayan bir formül seti önerilmiştir (Huang, Zhang, & Qiao, 2011). Altın nanotelin elastisite modülünün boyut azaldıkça azalırken gümüş nanotelde ise nanotelin oryantasyonuna bağlı olarak bulk değere yaklaşacak şekilde artma-azalma (<110> yönü için azalma ve <100> için artma) rapor edilmiştir (McDowell, Leach, & Gall, 2008; Wang, Yi, & Ma, 2013).

Platin grubu üyesi bir soy metal olan rodyum (Rh) doğada nadir görülen, gümüşümsü beyaz, sert, korozyona dayanıklı bir metal olması sebebiyle otomotivden nükleer enerjiye pek çok farklı alanda kullanılan ideal bir elementtir. Yüksek maliyetinden dolayı kısıtlı kullanımına rağmen, sıra dışı katalitik özellikleri ile öne çıkan Rh elektronik aygıtlarda düşük direnç, dekorasyon, nanoresonator gibi uygulamaları ile hala ilgi çekicidir (Baek vd., 2020; Moghimian, Sam, & Bhiladvala, 2013). Genellikle platin ya da paladyum ile birlikte yüksek sıcaklık ve korozyona dirençli kaplama uygulamalarında kullanılır (Morcalı & Aktaş, 2014). Bulk Rh, cisim merkezli kübik (BCC) ve yüzey merkezli kübik (FCC) yapılarda kristalize olabilir. Rh atomundaki manyetizmanın hacim ile ilişkisini birinci – prensipten toplam enerji hesaplamaları ile incelemiş ve FCC Rh için bulk modülünü 278 GPa hesaplanmıştır (Moruzzi & Marcus, 1989). Son yıllarda yapılmış çalışmalarda kristal simetrinin değişimi ile manyetik düzenin değişimi incelenmiş ferromanyetik düzen ile örgü genişlemesi gözlenmiştir (Hüger & Osuch, 2004). Rh ve hidritlerinin yapısal kararlılıkları hakkındaki bir başka çalışmada “düşük manyetik moment-küçük hücre hacmi” ‘nden “yüksek manyetik moment-büyük hücre hacmi” durumuna geçişe bağlı kuvvetli manyeto-hacim etkisi rapor edilmiştir (Xin, Jian-Tao, Xi-Xia, & Guo-Zhong, 2010).

Yüzey alanını genişleterek maliyeti azaltmanın en uygun yöntemi düşük boyutlu malzeme tasarımı olduğundan, nano-ölçekte Rh yapıları üzerine yapılan çalışmalar oldukça önem kazanmıştır (Zhang vd., 2017). Bulk modülü, örgü sabiti gibi mekanik niceliklerin malzemenin özelliklerini belirlemede önemli rol üstlenmelerine rağmen, Rh üzerine yapılmış çalışmalar nispeten azdır. Boyutlar, nano-ölçek seviyesine küçüldüğünde ise bu çalışmalar malzemenin spesifik özelliğine odaklanmaktan öteye gitmemektedir.

Bu çalışma, FCC Rh atomları arasındaki etkileşmeleri tanımlamak için bulk Rh' a ait taban durum fiziksel özelliklerinin klasik moleküler dinamik simülasyonlarıyla hesaplanmasında ve metaller üzerine yapılmış diğer uygulamalarında yüksek başarı elde etmiş olan gömülü atom metoduna dayalı etkileşme potansiyelleri (GAM) kullanarak (Daw & Baskes, 1984; Celtek, Sengul, Domekeli, & Canan, 2016; Cheng, Ma, & Sheng, 2009; Guder & Sengul, 2020), farklı boyutlardaki Rh nanotellerinin germe oranına bağlı dayanım, kırılma, esneklik, elastik ve plastik davranışı gibi mekanik özelliklerinin incelenmesini amaçlamaktadır.

BÖLÜM 2

TEORİ

2.1. Moleküler Dinamik Simülasyonları

Sistemdeki parçacıkların sayısı arttığında ilgilenilen özelliğin hesaplanması için kullanılacak analitik çözüm yetersiz kalabilir. Böyle durumlarda yaklaşık çözümler devreye girer. Bir tarafta problemleri çözmek için giriş ve olasılık olarak rastgele sayıların kullanıldığı Monte Carlo simülasyonları öne çıkarken diğer yanda parçacıkların birbiriyle etkileşime girdiği bir cisim sistemi için klasik hareket denklemlerini çözerek parçacıkların zamana bağlı hareketi konfigürasyonlar üzerinden üreten Moleküler dinamik simülasyonları göze çarpar. Moleküler dinamik (MD) atomik etkileşimi modelleyen bir bilgisayar simülasyon tipidir ve bilinen fiziksel yaklaşımları ve istatistik mekaniği kullanarak sistemdeki atomların her birinin hareketinin bir görüntüsünü zamana bağlı şekilde verebilir. Başka bir deyişle, moleküler dinamikler, etkileşen bir dizi atomun Newton'un hareket denklemlerini entegre ederek zaman evrimi ile dengeleme ve taşıma özelliklerini hesaplayan bir bilgisayar simülasyon tekniği olarak tanımlanabilir (Bystrzejewski & Pyrzyńska, 2011; Frenkel & Smit, 1996). Sistemin dinamik davranışının zamana bağlılığı, Monte Carlo yöntemine kıyasla MD yönteminin en önemli avantajıdır. Moleküler dinamik ilkesi ilk olarak 1959'da tarafından tasarlanmış ve kullanılmıştır (Alder & Wainwright, 1959). Temelinde zaman devinimi boyunca sistemin toplam istatistik ortalamalarının ergodik hipotez olarak bilinen zaman ortalamalarına eşit olması yatar.

Son zamanlarda MD, süper bir bilgisayara ihtiyaç duymadan lokal simülasyonlar gerçekleştirebilen güçlü kişisel bilgisayar işlemcilerinin maliyetinin azalmasıyla popülerlik kazanmıştır. Hatta MD simülasyonları ile paralel bir bilgisayar sistemi ile tamamlanması birkaç ay veya yıl süren büyük çaplı hesaplamalar, gelişen algoritmalar ve donanımlar sayesinde, daha küçük birimlere ayrılarak ve farklı donanımlara dağıtılarak, saatler ya da birkaç gün içinde çözüme ulaştırılabilir. Böyle bir paralel hesaplama için üç tip ayrıştırma önermiştir: atom ayrışması, kuvvet ayrışması ve uzamsal (bölgesel) ayrışma (Plimpton, 1995). Her yöntemin artıları ve eksileri vardır, ancak hepsi işlemci zamanının birden fazla işlemciye dağıtılmasına izin verir. Diğer atomistik yaklaşımların aksine, MD uygun hesaplama maliyeti, yüksek hassasiyet ve büyük sistemleri simüle etme yeteneği nedeniyle avantajlı bir tekniktir. Tipik bir MD simülasyonu yaklaşık binlerce hatta milyonlarca parçacığı ($10^4 – 10^7$) içerir ve simülasyon süresi pikosaniye veya birkaç yüz nanosaniye ($10^{-12} – 10^{-9}$) mertebesindedir.

Moleküler dinamik simülasyonlarda süreci üç ana adımda incelenebilir: önişleme, analiz ve son-işleme. İlk olarak basınç, sıcaklıklar vb. başlangıç koşulları belirlenir. Sayısal integrasyonlarda, sistemdeki her bir atomun mevcut konumu ve hızı Newton dinamiği kullanılarak belirlenir. Ardından, çeşitli termodinamik koşullar altında uygun atomlar arası potansiyeller kullanılarak enerji ve kuvvet hesaplamaları yapılır (Ercolessi, 1997; Frenkel, Attig, Binder & Grubmüller, 2004; Bystrzejewski & Pyrzyńska, 2011; Frenkel & Smit, 1996). Son olarak, ölçülen miktarların ortalama değerleri hesaplanır.

Moleküler dinamik simülasyonlara başlamak için dikkate alınması gereken bazı temel noktalar vardır. İlki, simülasyondaki tüm moleküller ve atomlar, etkileşen parçacıklar sistemi olarak tanımlanmasıdır. Newton' un ikinci yasası elektron ve çekirdekten oluşan atomun hareketini ifade etmek için uygun değildir. Bu noktada Borh-Oppenheimer yaklaşımının sonucu olarak çekirdeklerin elektronlardan çok daha ağır ve yavaş olduğu ve elektronların çekirdeğin hareketlerine hemen tepki verdiği kabul edildiğinden, elektronun hareketini ihmal ve hareketi çekirdeğin hareketi ile sınırlamak makul olur ve böylece hareket Newton' un ikinci yasasına uygun hale gelir. Parçacıkların her biri, kendi konum ve hız vektörleri ile ifade edilir. İkinci ise simülasyon sırasında sistemde herhangi bir kütle değişikliği yoktur, böylece simülasyon kutusuna hiç atom girmez veya çıkmaz. Bu nedenle sistemin toplam enerjisi sabit kalır. Sonuncusu ise sistemin gelişiminin, Newton' un klasik hareket denklemlerinin istenen sayıda zaman

adımı için ve/veya bazı yakınsama kriterleri yerine getirilene kadar entegre edilerek hesaplanmasıdır.

Potansiyel enerji fonksiyonları MD simülasyonlarında önemli bir rol oynar. MD simülasyonlarında, atomlar, Newton' un ikinci hareket yasasında açıklandığı gibi, onlara etki eden kuvvet altında hareket eder:

$$\vec{F} = m\vec{a} = m\frac{d\vec{v}}{dt} = m\frac{d^2\vec{r}}{dt^2} \tag{2.1}$$

Her bir atom üzerindeki kuvvet, atomun pozisyonunun fonksiyonu olan potansiyel enerjinin türevi ile

$$\vec{F} = -\nabla V(r) \tag{2.2}$$

şeklinde yazılır. MD simülasyonunda kullanılan potansiyelin seçimi, simülasyon sürecinin en temel parçasıdır. Potansiyelin hem hesaplama maliyetini düşürecek ve aynı zamanda güvenilir sonuçlar vermesi için ele alınacak sistemin göz önünde bulundurulması gerekmektedir. Kuantum mekanik özelliklere dayanan potansiyeller en güçlü olmakla birlikte, aynı zamanda hesaplama maliyeti en yüksek olanlardır.

2.1.1. Gömülü Atom Modeli (GAM)

Yerel ortam, tümüyle aynı niteliği gösteren/üniform bulktan farklı olduğunda çiftler potansiyellerinin kullanılmasıyla ilgili yüzeyler, yüzey sınırları gibi bazı sorunlar ortaya çıkar. Bu problemler, materyalin ait olduğu grup özelliğine göre farklı yaklaşımlarla üstesinden gelinebilir. Lennard Jones tipi potansiyeller atomlarla ilgili çekici ve itici doğanın net bir resmini verir, ancak metalik etkileşimlerde daha karmaşık elektron alanlarını etkili bir şekilde tahmin etmek için gerekli detaydan yoksundur. Gömülü atom yöntemi (GAM) genellikle metalik sistemler için kullanılan çok cisimli potansiyeldir (Foiles, Baskes, & Daw, 1986; Daw & Baskes, 1984). Bu yöntem kırıkları, tane sınırlarını, kusur özelliklerini, materyallerin dinamik davranışını vb. analiz ve tahmin etmek için kullanılmaktadır. GAM potansiyelleri genellikle sıfır derece Kelvin'de bir malzeme için birinci prensibe ve/veya deneysel verilere dayalı verilerin türetilmesi ile oluşturulur. Tipik olarak bu veriler denge kafes parametresi a_0, kohezyon enerjisi E_0 , üç

elastik sabit ve boşluk oluşturma enerjisi E_v^f sayılabilir (Mishin, Farkas, Mehl, & Papaconstantopoulos, 1999). 0 derece Kelvin özelliklerinde olası bir adaptasyonun yüksek sıcaklıklara aktarılabileceği veya sistemin tüm faz diyagramının çoğaltılabileceği önceden görülmemekte olup bu tip potansiyellerin önemli bir özelliği, farklı konfigürasyonlar ve/veya simülasyon türleri üzerinden potansiyelin doğruluğu yani taşınabilirlik olarak öne çıkmaktadır (Williams, Mishin, & Hamilton, 2006). Bu modelde her bir atomun, tüm komşu atomlar tarafından oluşturulan elektron bulutuna gömüldüğü varsayılır ve her bir atomun enerjisi atomun metal atomları tarafından sağlanan lokal elektron yoğunluğuna gömülmesi için gereken enerjiden hesaplanır (Foiles vd., 1986) Bu elektron yoğunluğu, atomik elektron yoğunluğuna bir yaklaşımdır.

Çok cisimli bir potansiyelde, her atomun potansiyel enerjisi, atom ile simülasyondaki diğer her atom arasındaki potansiyel enerjinin katkısının toplanmasıyla bulunur:

$$E_i = \sum_{j=1 i j \neq i}^{N} V_{ij} \tag{2.3}$$

Burada E_i atomun potansiyel enerjisidir, N toplam atom sayısıdır ve V_{ij} i atomunun çevresindeki j atomlarından doğan potansiyel enerjidir. Sistemin toplam potansiyel enerjisi, tüm bu potansiyellerin bir araya getirilmesiyle belirlenir:

$$E_{total} = \sum_{i=1}^{N} \sum_{j=1 i j \neq i}^{N} V_{ij} \tag{2.4}$$

Buna göre sistemdeki *i.* atomun potansiyel enerjisi;

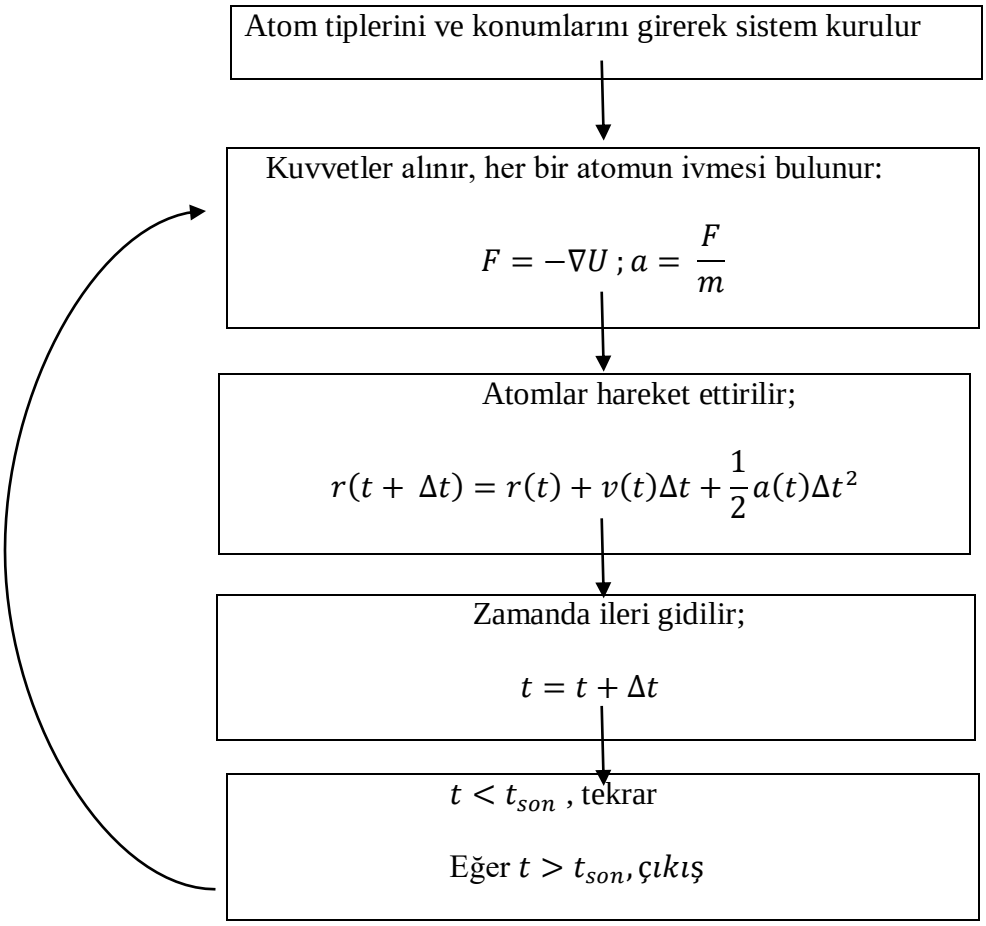
$$V_{i,j} = F_\alpha \left(\sum_{i \neq j} \rho_\beta (r_{ij}) \right) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \phi_{\alpha\beta} (r_{ij}) \tag{2.5}$$

olarak yazılır. Burada r_{ij}, i ve j atomları arasındaki mesafe, $\phi_{\alpha\beta}$, çiftler etkileşmesini ifade eden potansiyel fonksiyonudur. ρ_{β}, atom i. konumundaki atomun elektron yoğunluğuna β tipindeki j. atomdan gelen katkı ve F, α tipi i. atomu elektron bulutuna yerleştirmek için gereken enerjiyi temsil eden bir gömme fonksiyonudur. Aynı gömme fonksiyonu, alaşımdaki ve aynı zamanda saf malzemedeki bir atomun enerjisini hesaplamak için kullanılabilir. Çiftler etkileşimi terimi tamamen iticidir ve iki tip arasındaki etkileşme terimi saf tür atom tiplerinin çiftler etkileşiminin geometrik bir ortalaması olarak tanımlanabilir.

Tek elementli bir atom sistemi için, üç skaler fonksiyonun belirtilmesi gerekir: gömme fonksiyonu, çiftler etkileşmesi ve elektron bulutu katkı fonksiyonu. Genel olarak, bu fonksiyonlar çizelge biçiminde sağlanır ve kübik spline yardımıyla çoğaltılarak simülasyonlarda kullanıma uygun hale getirilir. Moleküler dinamikler için, genellikle kusurlar ve yüzeyler etrafında oluşan düşük simetri ve geniş gerilmeler, çok sayıda atom için hesaplanabilen teknikler gerektirir. Bu nedenle, hem doğru hem de hesaplama açısından ucuz olan sağlam bir model gereklidir (Foiles vd., 1986). Ampirik veya yarı ampirik (deneysel) interatomik potansiyellerin kullanımı, 10^7 ve 10^8 atomlu sistemlerin simülasyonunu mümkün kılar. Bu plastik deformasyon, kırık veya atom difüzyonu gibi problemleri araştırma fırsatı sunar (Mishin vd., 1999).

2.1.2. Moleküler Dinamik Simülasyonları İşleyişi

MD simülasyonunun iki ana bileşeni vardır: her bir atomun üzerine etkiyen kuvvet vektörünü hesaplamada kullanılacak olan potansiyel enerji fonksiyonu ve atomun hareketini hesaplamak için bu kuvvetlerin zaman integrasyonu. MD simülasyonlarının işleyiş süreci üç ana adımda incelenebilir: ön-işleme, analiz ve son-işleme. Şekil 2.2 MD yaklaşımını özetleyen akış şemasını göstermektedir.



Şekil 2.1. Moleküler Dinamik Simülasyonları yaklaşımının özeti

Ön-işleme sürecinde; ilk olarak başlangıç ortam değişkenleri sıcaklık, basınç, parçacık sayısı, hacim, kimyasal potansiyel vb. belirlenir. Simülasyonu başlatmak için sistemdeki tüm parçacıklara başlangıç konumları ve hızlar atanır. Periyodik sınır koşulları ve atomlar arası potansiyeller tanımlanır. Analiz kısmında, çeşitli termodinamik koşullar altında uygun atomlar arası potansiyeller kullanılarak enerji ve kuvvet hesaplamaları yapılır (Ercolessi, 1997; Frenkel, Attig, Binder, Grubmüller, 2004; Bystrzejewski & Pyrzyńska, 2011; Frenkel & Smit, 1996). Hesaplanan kuvvet doğrultusunda Δt gibi küçük bir zaman aralığı boyunca hareket eden parçacığın ilk atomik konum ve hızından yeni konum ve hızı hesaplanır. Yeni pozisyonlar ve hızların hesaplama maliyetini düşürecek şekilde belirlenmesi için geliştirilmiş integrasyon algoritmaları kullanılır (en popüleri Verlet, Verlet-Hız, tahmin-yanılma dır). Bu yeni konumda kuvvetler tekrar

hesaplanır ve bir sonraki konum-hız seti elde edilir. Bu işlem istenen sayıda zaman adımı için tekrarlanarak, son-işlem adımında, istenen termodinamik büyüklüklerin ortalamaları elde edilir ve simülasyon sonlanır.

2.1.3. Zaman İntegrasyonu ve Verlet – Hız Algoritması

MD simülasyonunda atomların hareket edebilmesi için her zaman adımında atom üzerine etkiyen kuvvetlerin hesaplanması gerekir. MD simülasyonu milyonlarca atom içerebilir; milyonlarca atoma sahip sistemlerin analitik olarak çözülmesi zordur. Bu nedenle, sayısal bir integrasyon yöntemi uygulanmaktadır. Ortak sayısal entegrasyon teknikleri Verlet algoritması, sıçrama algoritması, Velocity-Verlet ve Beeman'ın algoritmasını içerir. Bu tezde kullanılan moleküler dinamik yazılımı LAMMPS, Verlet-Hız integrasyonunu kullanır.

Verlet-Hız algoritması, temel Verlet entegrasyonunun bir uzantısıdır. Temel Verlet kullanımında, ilk olarak konum fonksiyonları Taylor serisi ile, bir zaman adımı ileri ve bir zaman adımı geriye doğru yazarak aşağıdaki gibi türetilir:

$$\begin{aligned} r(t+\Delta t) &= r(t) + v(t)\Delta t + \frac{1}{2}a(t)\Delta t^2 + \frac{1}{6}b(t)\Delta t^3 + O(\Delta t^4) \\ r(t-\Delta t) &= r(t) - v(t)\Delta t + \frac{1}{2}a(t)\Delta t^2 - \frac{1}{6}b(t)\Delta t^3 + O(\Delta t^4) \end{aligned} \tag{2.6}$$

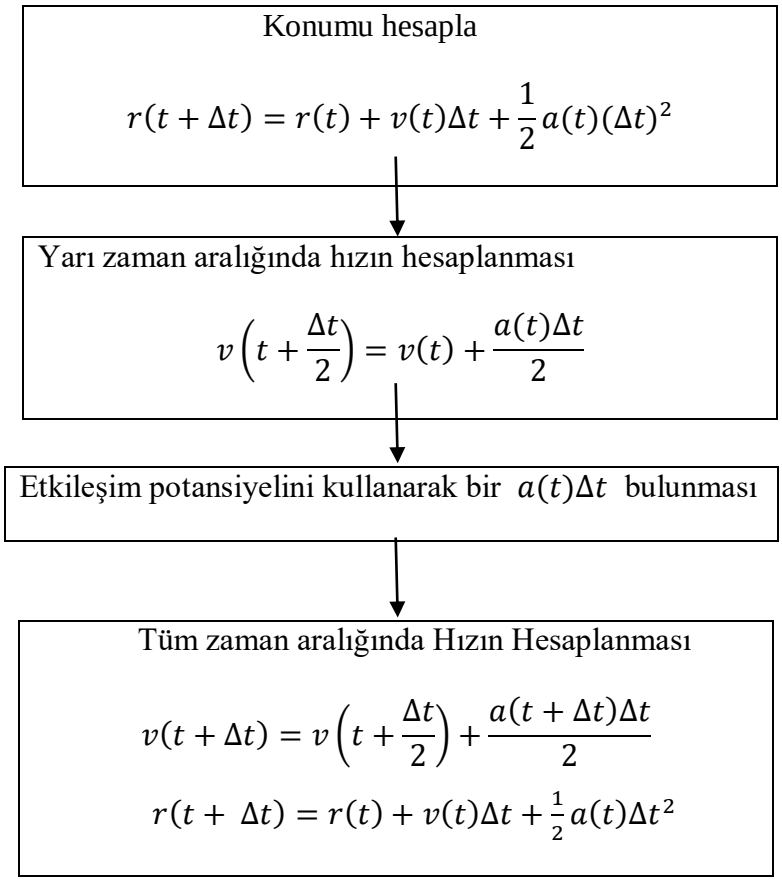
iki denklem taraf tarafa toplanırsa

$$r(t+\Delta t) = 2r(t) - r(t-\Delta t) + a(t)\Delta t^2 + O(\Delta t^4) \tag{2.7}$$

elde edilir. Denk. 2.7 güncel konumun bir fonksiyonu olarak t zamanından sonraki konumu, önceki zaman aralığı konumunu ve Δt^4 mertebesinde bir kesme hatası ile verir.

Temel Verlet integrasyonu ile ilgili bir konu, başlangıç öncesi ilk konum olan $r(t-\Delta t)$'nun ilk zaman aralığı için tanımlanmamış olmasıdır. Şekil 2.1' de temel adımları gösterilen Verlet-Hız algoritması, atomların hızlarını açıkça dâhil ederek bu sorunu çözer:

$$r(t+\Delta t) = r(t) + v(t)\Delta t + \frac{1}{2}a(t)(\Delta t)^2$$
$$v(t+\Delta t) = v(t) + \frac{a(t)+a(t+\Delta t)}{2}\Delta t \qquad (2.8)$$



Şekil 2. 2. Velocity-Verlet algoritmasını uygulama adımları

2.1.4. Sınırlamalar

MD simülasyonlarının temel kısıtı, bir simülasyonun tamamlanması için harcanan işlemci saatidir. Simülasyon süresini azaltmak için bazı teknikler kullanılmaz ise, simülasyon zamanı atom sayısının karesiyle orantılıdır. Bu, simülasyon sistemi büyüdükçe harcanacak zamanın katlanarak artmasına neden olur.

Simülasyonun zamanına katkıda bulunan bir başka faktör de doğru sonuçlar elde etmek için gereken küçük zaman dilimi yani zaman adımıdır. Zaman adımları, ayrıklaştırma hatalarından kaçınmak için genellikle femtosaniyedir. Bu tezin

uygulanmasında, zaman aralığı bir femtosaniye olarak seçilmiştir. Zaman adımı çok küçük olduğundan, zamana bağlı değişkenlerin, makul bir zamanda istenen değerini elde etmek için bazen normal değerlerden daha büyük olması gerekir.

2.1.5. İstatiksel Topluluklar

MD simülasyonları, atomik konumlar, hızlar ve ivmeler dahil olmak üzere sistemin mikroskopik durumu hakkında bilgi sağlar. İstatistik mekaniği, sistemin mikroskopik durumunu basınç, sıcaklık veya enerji durumu gibi gözlemlenebilir makroskopik verilerle bütünleştiren bir köprü görevi görür. Bu şekilde bir atomik sistemin makroskopik koşulları moleküler açıdan incelenebilir.

Simülasyonlarda, sistem belirli bir sıcaklıkta, basınçta, yoğunlukta, toplam enerjide veya belirli sayıda parçacıkta belirtilebilir (Frenkel, Attig, Binder, Grubmüller, 2004). Bu parametreler sistemin termodinamik durumunu tanımlar ve istatistiksel topluluklar tarafından kontrol edilir.

Bir topluluk, N-özdeş parçacık sisteminin tüm olası kuantum durumları olarak tanımlanır. En önemli istatistiksel topluluklar aşağıdaki gibi belirtilebilir:

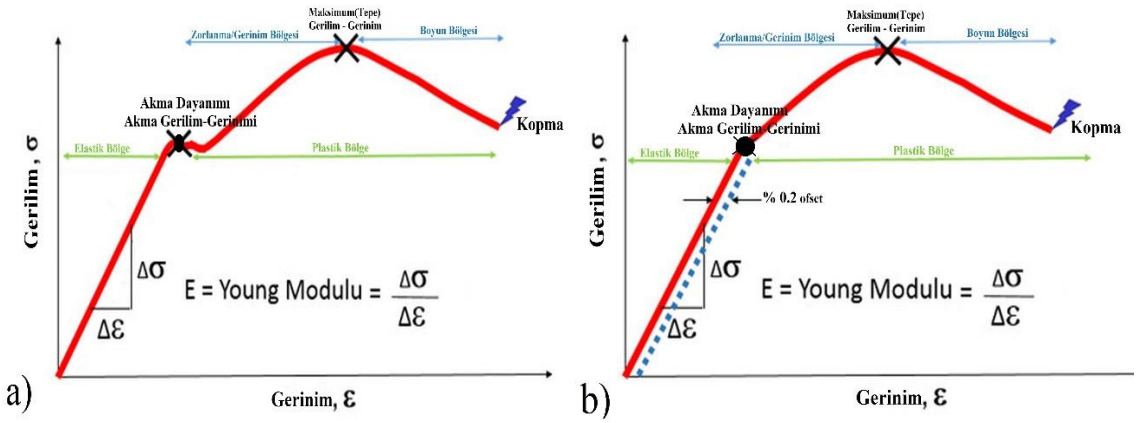
- **Mikro-Kanonik Topluluk (NVE):** Sistemin olası her durumu aynı enerjiye, aynı hacme ve aynı sayıda parçacığa sahiptir. Simülayon boyunca N-V-E sabittir.
- **Kanonik Topluluk (NVT):** Sistemin olası her durumu aynı sıcaklığa, aynı hacme ve aynı sayıda parçacığa sahiptir. Topluluk, N-V-T'nin sabit miktarlar olduğunu belirtir.
- **İzotermal-İzobarik Topluluk (NPT):** Sistemin olası her durumu aynı sıcaklık, basınç ve parçacık sayısına sahiptir. Simülayon boyunca N-P-T sabittir.
- **İzoenthalpik-İzobarik Topluluk (NPH):** Sistemin olası her durumu aynı entalpiye, aynı basınca ve aynı sayıda parçacığa sahiptir. Simülayon boyunca, N-P-H sabittir.
- **Büyük Kanonik Topluluk (μVT):** Sistemin olası her durumu aynı kimyasal potansiyele, hacime ve partikül sayısına sahiptir. Simülayon boyunca, μ-V-T sabittir.

Bu çalışmada, nanoyapıların zamana bağlı davranışlarını tahmin etmek için moleküler dinamik simülasyonları yoğun bir şekilde kullanılmıştır. Simülasyonlar boyunca 0.001ps zaman adımı seçilmiş olup bu değer rodyum atomunun fonon titreşimlerini göz ardı etmeyecek kadar küçüktür. Simülasyonlarda atomik etkileşmeler parametrize edilen GAM metodu ile ifade edilmiştir (Sheng, Kramer, Cadien, Fujita, & Chen, 2011). Tüm simülasyonlar Large-Scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator (LAMMPS) paket yazılımı ile yapılmıştır (Plimpton, 1995).

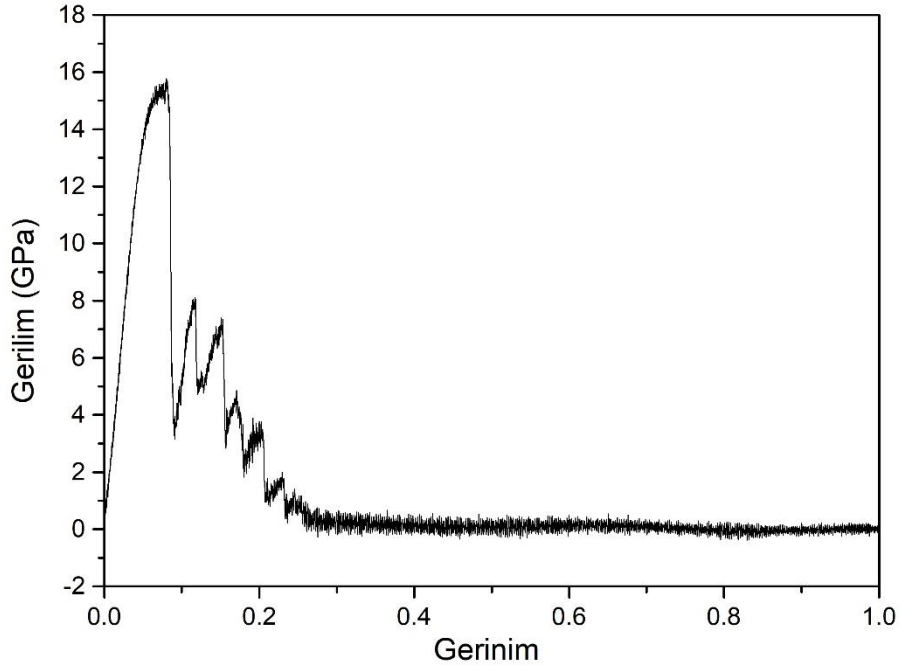
2.2. Germe Deformasyonu ve Mekanik Özellikler

Malzemenin mekanik özelliklerini hesaplamak için germe deneyi kullanılır. Bu deney sonucunda kuvvet (F) ve Uzama (Δl) eğrisi elde edilir. Bu nedenle uygulanan kuvvet, numunenin ilk kesit alanına bölünerek ($\sigma=F/A_0$), kuvvet değerleri gerilime dönüştürülür ve gerilme-uzama veya gerilim-gerinim grafiği elde edilir. Bu deneyden elde edilen sonuçlar mühendislik ve nanosistem hesaplamalarında kullanılır.

Mühendislik alanında gerilim- gerinim (gerilme-uzama) ilişkisi Şekil 2.3' te verilirken nanosistem de gerilim- gerinim ilişkisi şekil 2.4' te verilmiştir. Ayrıca şekil 2.3 (b)'de elastik sınır limitini belirlemek için %0.2 ofset metodu gösterilmiştir.



Şekil 2.3. Mühendislik alanında Gerilme - Uzama (Gerilim-Gerinim) ilişkisi.



Şekil 2.4. Nano sistemlerde Gerilim-Gerinim ilişkisi.

Çekme deneyi sonucunda malzemenin, akma dayanımı, Elastisite Modülü, gerinim, sünme ve kopma dayanımı gibi değerleri belirlenir. Elde ettiğimiz bu özellikler malzemenin kimyasal yapısına, cinsine, bileşimine bağlıdır. Bunlardan önemli olanları aşağıda açıklanmıştır. Germe deformasyonu sonucunda ortaya çıkan mekanik özellikler şunlardır:

i. Akma Dayanımı (σ_a)

Malzeme gerilirken gerilimin artması ile birlikte gerinim artar. Fakat öyle bir nokta gelinir ki, belli bir yerde gerilim artmasa bile malzemenin gerinim miktarı devam eder. Bu noktaya akma noktası denir. Akma dayanımı sınırına kadar malzeme elastik deformasyona uğrar. Akma dayanımı sınırında sistem üzerinde gerilim kaldırıldığında sistemdeki bağlar uzar kısar ve sistem eski haline döner. Akma dayanımından sonra sistem plastik bölgeye geçer ve malzeme geri döndürülemez kalıcı deformasyona uğrar. Bu nedenle malzemelerin elastik dayanma sınırı akma gerilmesi ile ifade edilir.

$$\sigma_a = \frac{F_a}{A_0} \tag{2.9}$$

Düşük karbonlu yumuşak çeliklerde bu nokta bariz olarak gözle görülebilirken, yüksek karbonlu sert çeliklerde bu nokta görülemez. Bu nedenle akma dayanımı % 0.2 ofset metodu kullanılarak belirlenir.

ii. Elastisite Modülü

Elastisite modülü, malzemenin dayanımının bir ölçüsüdür. Gerilim ile gerinimin doğru orantılı olduğu bu ilişkiye "Hooke Kanunu" da denmektedir. Yani gerilim gerinim doğrusunun eğimi Elastisite modülü değerini verir. Elastisite modülü şu formülle tanımlanır:

$$\text{Elastisite Modülü} = \frac{\text{Gerilim } (\sigma)}{\text{Gerinim } (\varepsilon)} \tag{2.10}$$

iii. Gerinim (ε)

Malzemeye kuvvet uygulandığı zaman oluşan boy değişiminin kuvvet uygulanmadan önceki ilk boya oranıdır.

$$\varepsilon = \frac{\Delta L}{L_0} \tag{2.11}$$

iv. Sünme

Test sırasında numunenin gerilim-gerinim eğrisinde maksimum noktasından sistemin koptuğu bölge arasındaki gerinim miktarı sistemin sünme değeridir. Daha genel olarak, malzeme ne kadar sünekse, kopma o kadar geç oluşur.

v. Kopma Dayanımı (σ_K)

Mühendislik uygulamalarında malzemenin kopuncaya veya kırılıncaya kadar dayanabildiği en yüksek çekme gerilmesi, kopma Dayanımı olarak adlandırılır. Tüm dayanımlarda alan olarak ilk kesit alanı (A_0) alınır.

$$\boldsymbol{\sigma}_K = \frac{F_{maks}}{A_0} \tag{2.12}$$

Nano-ölçekte kopma dayanımı noktası gerilim gerinim eğrisinde gerilimin sıfır olduğu noktadır.

BÖLÜM 3

SONUÇLAR VE TARTIŞMA

MD simülasyonlarının sonuçlarının tutarlılığı kullanılan atomlar arası potansiyele yüksek ölçüde bağlıdır. Potansiyel seçimi aynı malzeme için tamamen farklı sonuçlara yol açabilir. Bu çalışma bulk formda ve farklı ebatlardaki Rh nanotellerinin germe deformasyonu altında mekanik özelliklerinin değişimi üzerine yapılmış geniş kapsamlı MD simülasyon sonuçlarını ve analizini içermektedir. Germe simülasyonlarından önce, etkileşmeleri betimlemede kullanılacak olan çiftler potansiyelinin sistemin temel fiziksel özelliklerini açıklamada geçerliliğinin ve doğruluğunun gözden geçirilmesi gerekmektedir.

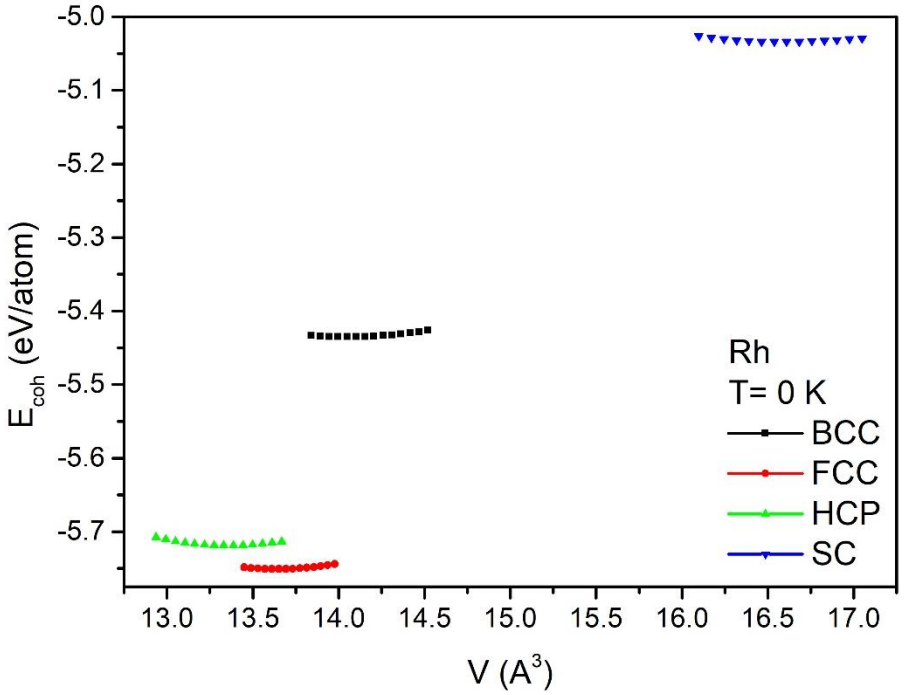
3.1. Model Testi

Çalışmada tüm simülasyonlar Large-Scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator (LAMMPS) paket yazılımı ile yapılmıştır (Plimpton, 1995). Rh atomları arasındaki etkileşmeleri tanımlamak için ab initio moleküler dinamik hesaplamalara dayalı force-matching yöntemi ile parametrize edilmiş GAM potansiyeli kullanılmıştır (Sheng vd., 2011). Rh atomları için potansiyel datası, LAMMPS paketinin formatına uygun olarak Sheng vd., (2011) tarafından hazırlanmış ve yazarlara ait olan https://sites.google.com/site/eampotentials/Rh adresinden temin edilmiştir. Rh elementinin FCC yapıda kristalize olduğu bilinmektedir. Öne sürülen her potansiyeli modelinin ilgili atomik sistemin temel fiziksel özelliklerini başarılı şekilde açıklaması, aynı sistem üzerine yapılacak ileri hesaplamalar için büyük önem taşır. Şekil 3.1’ de

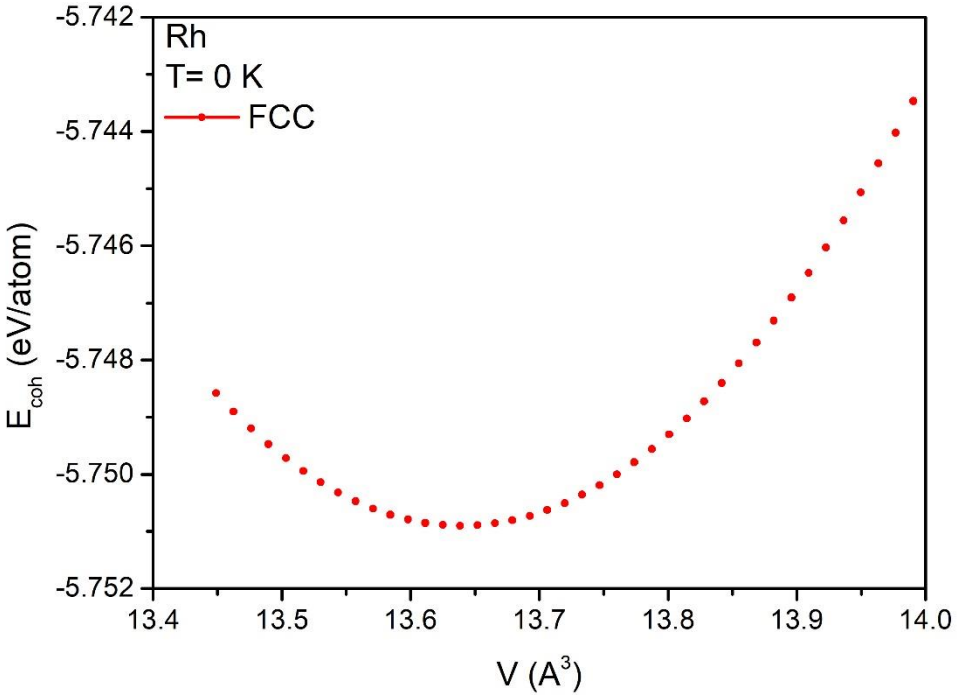
GAM potansiyelinin Rh' ın temel fiziksel özelliklerini hangi ölçüde açıklayabildiğini görmek amacıyla yapılmış hesaplama sonuçları sunulmaktadır. Şekil 3.2 FCC - Rh için enerji – hacim ilişkisini daha detaylı göstermektedir. Tüm temel örgüler için hesaplanan bağlanma enerjileri ve örgü hücre hacimleri, örgü sabitleri ve hacim modülleri ile birlikte Çizelge 3.1' de listelenmiştir. Hacim modülü, atomik kohesif enerjinin atomik hacme göre ikinci türevi ;

$$B = \Omega \frac{d^2 E_c}{dt^2} \tag{3.1}$$

ve Brich-Murnaghan Durum Denklemi ile hesaplanmış olup, fit işlemine ait B' değeri de çizelgeye eklenmiştir. Şekil 3.1' den, Rh için en kararlı yapının FCC olduğu görülmektedir (Kittel, 2004). Bu durum söz konusu potansiyelin temel fiziksel hesaplamalarda ve simülasyonlarda kullanılması için olumlu bir veridir.



Şekil 3.1. FCC - Rh için T = 0 K' de hesaplanan taban durum enerji-örgü hacmi ilişkisi



Şekil 3.2.FCC - Rh için T = 0 K' de hesaplanan taban durum enerji-örgü hacmi ilişkisi

Çizelge 3.1.Rh için T = 0 K' de hesaplanan fiziksel nicelikler

Yapı	$V(A^3)$	$a_o(A)$	$E_c(eV/atom)$	B(GPa)	B
SC	16.577	2.550	-5.034	136	24
FCC	13.640	3.793	-5.751	273	3.1
HCP	13.355	2.663	-5.719	256	6.3
BCC	14.039	3.039	-5.435	168	0.6

Elastik sabitleri de öne sürülen potansiyelin geçerliliğinin test etmek açısından önemli büyüklüklerdir. Çizelge 3.2' te, Rh için GAM potansiyeli kullanılarak hesaplanan C_{11}, C_{12} ve C_{44} elastik sabitleri farklı çalışma sonuçları ile birlikte listelenmektedir. Çizelge'ye örgü sabiti ve bağlanma enerjisinin deneysel değerleri de karşılaştırma amacıyla eklenmiştir.

Çizelge 3.2. FCC - Rh için T = 0 K' de hesaplanan elastik sabitler

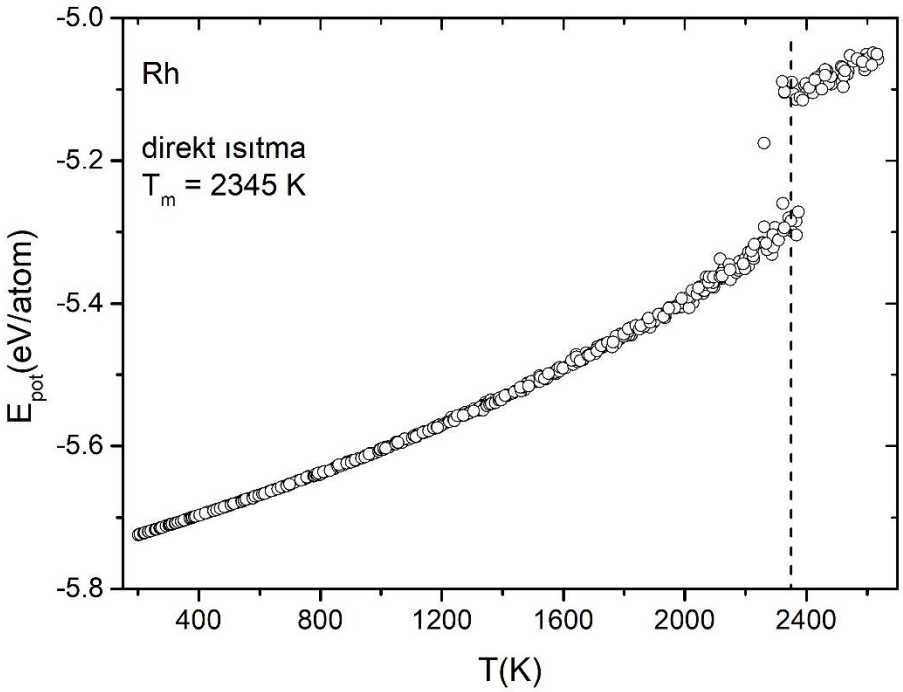
Yapı	GAM	Deneysel (veya teorik)
a_o (A)	3.793	3.80 [a]
E_c (eV/atom)	5.751	5.75 [a]
B (GPa)	273	269 [a] 278 [c]
C_{11} (GPa)	421	422 [b]
C_{12} (GPa)	199	192 [b]
C_{44} (GPa)	193	194 [b]

[a] (Kittel, 2004) , [b](Simmons & Wang, 1971), [c](Moruzzi & Marcus, 1989)

Erime noktası

FCC Rh' ın erime noktasının belirlenmesi için a_0=3.793 A örgü uzunluğu kullanılarak oluşturulan ve 2048 atom içeren kübik simülasyon kutusu, zaman adımı 1 fs alınarak 20000 MD adımı boyunca 200 K sıcaklıkta tavlanmış ve sonrasında deneysel erime sıcaklığı olan 2237 K' in yukarısındaki 2600 K sıcaklığa 500 000 MD adımı boyunca ısıtılmıştır (Nordberg, Fowler, Monica, Bruce ve Lars, 2015) Isıtma sürecinde izlenen kalorik değerlerdeki değişim faz geçişini işaret eder. Bu değişimler katıdan - katıya şeklinde olabileceği gibi katıdan –sıvıya şeklinde de olabilir. Son geçiş türü "erime" olarak adlandırılır. Bu çalışmada faz geçişi sistemin potansiyel enerjisinin sıcaklığa bağlı değişiminden belirlenmiştir. Şekil 3.3' de FCC Rh sisteminde sıcaklığın fonksiyonu olarak potansiyel enerjideki değişimi göstermektedir. Düşük sıcaklıklarda enerji sıcaklık ile lineer bir değişim gösterirken, artan sıcaklıkla bu değişimin eğimi artmaktadır. Enerji eğrisi, belirli bir sıcaklık noktasında süreksiz olmuş ve ani bir sıçrama göstermiştir. Sıçramanın hemen öncesindeki sıcaklık "erime sıcaklığı" hemen sonrasındaki sıcaklık ise sistemin "sıvılaşma sıcaklığıdır". Bu çalışmada belirlenen erime noktası 2345 K' dir. Çalışmamızda erime noktasının deneysel değerden %5 büyük olduğu gözlenmiş olup, simülasyonlarda kullanılan ısıtma hızının deneysel çalışmalara göre çok daha yüksek ($\sim 10^6$ kat) olduğu hesaba katıldığında, simülasyon sonucu belirlenen

termodinamik niceliğin deneysele oranla yüksek çıkması makul görülebilir (Ercolessi, Tosatti, & Parrinello, 1986).



Şekil 3.3. FCC Rh' ın potansiyel enerjisinin sıcaklık ile değişimi

3.2. Germe Deformasyonu Simülasyonları

Yukarıda bahsedilen bulgular, simülasyonlarda kullanılan GAM potansiyelinin Rh elementinin alçak ve yüksek sıcaklıklardaki özelliklerini hesaplamada oldukça başarılı olduğunu ve dolayısıyla Rh atomları arasındaki etkileşmeleri tutarlı bir şekilde temsil edebildiğini göstermektedir. Buna göre, GAM potansiyelinin aynı sistemin nano-ölçekli çalışmalarında da ve/veya farklı etkilerin ele alındığı simülasyonlarda kullanılabileceği görülmüştür.

Potansiyelin geçerliliği görüldükten sonra, Rh nanotellerinin germe deformasyonu için yapılan simülasyonlarda iki dış parametrenin etkisi göz önüne alınmıştır: germe oranı ve nanotel ebadı. İlkinde, 0.01 ps^{-1} ' den 0.0001 ps^{-1} ' kadar değişen altı farklı germe oranı kullanılmıştır. Boyut etkisini gözlemek için nanotel boyu (L) ' nun enine kesit uzunluğunun (D) üç katı olacak (L/D= 3) 1.1 nm' den 15.1 nm' ye kadar değişen on üç

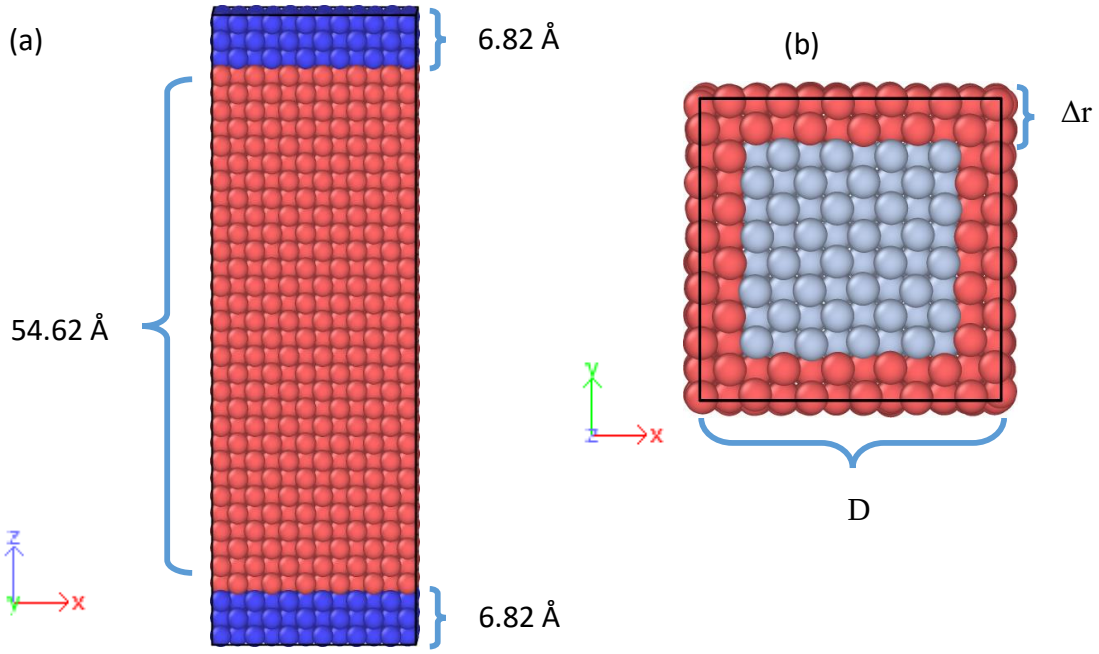
farklı kalınlıkta nanotel kullanılmıştır. Çizelge 3.3' te simulasyonlarda kullanılan bulk ve nanotel sistemlerinin kalınlık, öteleme çarpanları (süper hücreleri) ve atom sayıları listelenmektedir.

Çizelge 3.3. Bulk ve nanotel Rh sistemi için öteleme ve bu ötelemeye karşılık gelen atom sayıları.

Sistem	Öteleme (xa_0^3)	Atom sayısı	Sistem	Öteleme (xa_0^3)	Atom sayısı
Bulk	15x15x15	13500	7.2 nm	19x19x57	82308
1.1 nm	3x3x9	324	8.3 nm	22x22x66	127776
2.2 nm	6x6x18	2592	9.1 nm	24x24x72	165888
3 nm	8x8x24	6144	10.2 nm	27x27x81	236196
4.1 nm	11x11x33	15972	11.4 nm	30x30x90	324000
5.3 nm	14x14x52	32928	12.1 nm	32x32x96	393216
6 nm	16x16x48	49152	15.1 nm	40x40x120	768000

Oluşturulan nanotel modelleri, atomik etkileşme ile ayrılan iki bölgeden oluşmaktadır. Şekil 3.4 (a) simülasyonlarda kullanılan tipik Rh nanotelini temsil etmektedir. Nanoteller (NT) asal z ekseni doğrultusunda uzanmaktadır. Periyodik sınır koşulları nanotel ekseni boyunca uygulanırken yan yüzeyler serbest bırakılmıştır. Nanotelin uzunluğunun % 20' sine karşılık gelen konumlara yerleşmiş olan her iki uçtaki atomlar birbiriyle etkileşmeyecek şekilde sabitlenmiştir (Şekil 3.4' te mavi renkli atomlar). Yanal yüzeylerde nanotelin serbestçe daralması veya genişlemesi için orta bölgedeki Rh atomları (kırmızı ve gri) birbirleri ile etkileşime girebilecek şekilde serbest bırakılmıştır. Germe deformasyonuna yüzey etkilerini gözlemek amacıyla orta bölgedeki hareketli atomlar çekirdek (gri) ve yüzey atomları (kırmızı) olarak etiketlenmiştir. Şekil 3.4 (b)' da çekirdek ve yüzey atomları için yapılan etiketleme NT' nin üstten görünüşü ile ve sabit atomlar kaldırılarak gösterilmektedir. Her NT için dıştan itibaren $\Delta r = \sim 3.5$ A kalınlıktaki kabuk içindeki atomlar yüzey atomları olarak seçilmiştir.

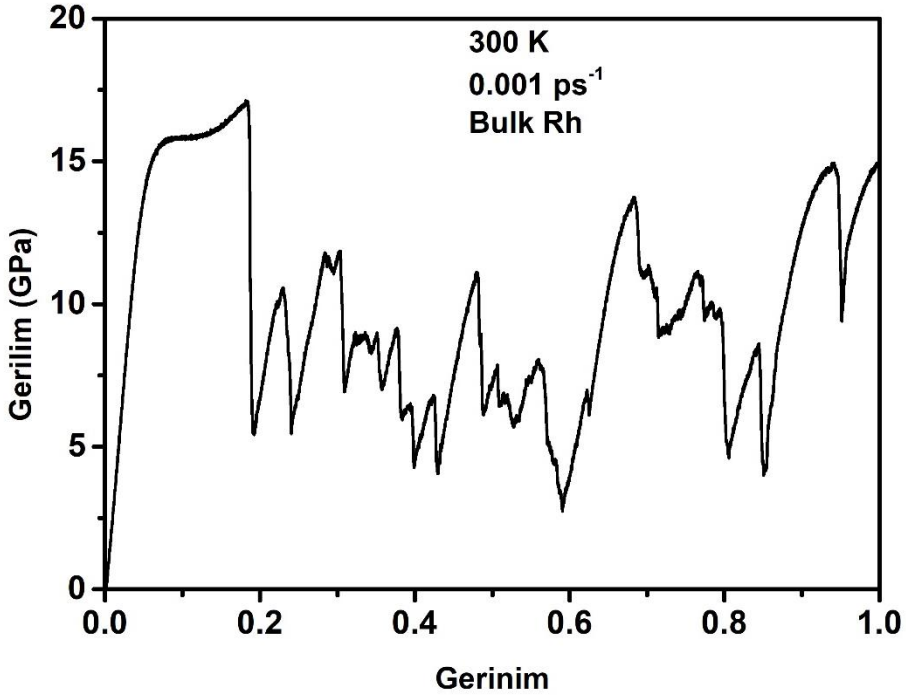
Deformasyon öncesi sistemde var olan dengesizliği gidermek için enerji minimizasyonu yapılmış ve elde edilen kararlı sistem sabit atom sayısı, hacim ve enerji (NVE) topluluğu sınırlamaları içinde 10 ps boyunca dengelenmiştir. Dengeleme sürecinden sonra sistem %100 deformasyon oluşuncaya dek sabit atom sayısı, hacim ve sıcaklık (NVT) topluluğuna uygun olarak germe işlemi uygulanmıştır. Newton' un hareket denklemlerinin integrasyonu Verlet-hız algoritması ile yapılmıştır. Deformasyon sırasında basınç ve sıcaklık Nosé-Hoover barostat ve termostatı ile kontrol edilmiştir (Nosé, 1984). Nanotelden farklı olarak bulk sistem germe aşamasında izotermal-izobarik (NPT) topluluk sınırları içinde ele alınmıştır. Tüm simülasyonlarda zasman adımı 0.001 ps seçilmiştir.



Şekil 3.4. 2.2 nm Rh nanotel için atomik modelin a) yandan ve b) üstten görünüşü. Mavi atomlar sabit atomları, kırmızı ve gri atomlar hareketli olup sırasıyla hareketli yüzey ve çekirdek atomlarını temsil etmektedir. D enine kesit uzunluğu ve Δr yüzey kalınlığıdır

Malzemenin mekanik özellikleri hakkında bilgi sahibi olmak için germe deformasyonu sırasında elde edilen gerilim-gerinim eğrileri kullanılır. Şekil 3.5' de 300

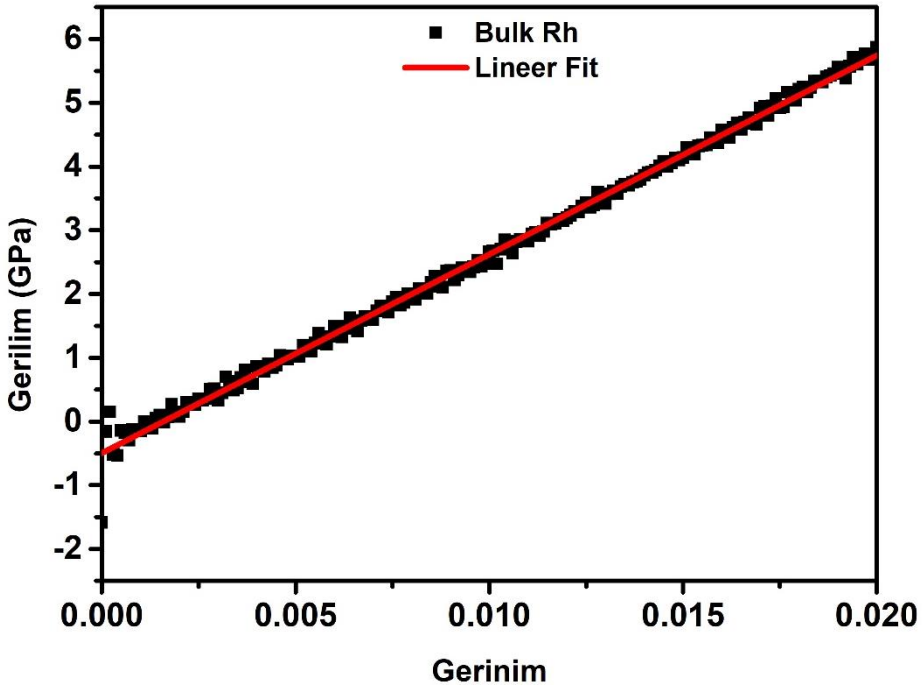
K'de 0.001 ps^{-1} germe oranında bulk FCC-Rh sistem için gerilim-gerinim ilişkisi verilmiştir. Elastik bölgenin limitini gösteren akma gerilimi-gerinimi %0.2 ofset metodu kullanılarak belirlenmiştir. Gerilim-gerinim eğrisinde gerilimin 12.539 GPa (akma gerilimi) değerine kadar lineer arttığı bölge 0.045 akma gerinimine denk gelen ilk yükleme bölgesi olup, bu aşamada deformasyonun elastik özelliğe sahip olduğunu gösterir. Akma geriliminden sonra plastik bölgenin başlamasıyla birlikte gerilim 17.128 GPa maksimum noktasına ulaştıktan sonra sert bir düşüş gözlenir. Daha sonra dislokasyonların artması ile birlikte gerilim zikzak şeklinde artan azalan bir davranış sergiler.



Şekil 3.5. 300 K' de 0.001 ps-1 germe oranında FCC bulk Rh için gerilim – gerinim ilişkisi.

Sistemin elastikliğini gösteren Elastisite Modülü gerilim-gerinim eğrisinde gerilimin lineer arttığı bölgede lineer fit prosedürü uygulanarak grafik metodu ile hesaplanmıştır. Şekil 3.6' da germe deformasyonu sırasında 300 K' de 0.001 ps^{-1} germe oranında FCC bulk Rh için lineer fit ile birlikte gerilim – gerinim ilişkisi verilmiştir. Bulk ve NT sistemler için lineer fit alma işleminde gerilim-gerinim eğrisinde elastik davranışı

garanti altına alabilmek adına eğrisinin tamamını kullanmak yerine yalnızca % 2' lik gerinim göz önüne alınmıştır. Bu uygulama hem bulk hem NT sistemleri için aynı şekilde yapılmıştır.



Şekil 3.6. 300 K' de 0.001 ps-1 germe oranında FCC bulk Rh için %2 gerinim için lineer fit ile birlikte gerilim –gerinim ilişkisi.

Çizelge 3.4' te bulk Rh için farklı germe oranları altında ve 300 K sıcaklıkta hesaplanan Elastisite Modülleri listelenmektedir. Hesaplanan değerler ile deneysel veri uygun makul uyum içinde olup modül değerinin artan germe oranı ile hafifçe arttığı görülmektedir. En büyük ve en küçük değerler arasında sapma miktarı ~% 0.7 olduğundan germe oranının Elastisite Modülü üzerinde baskın olmadığı söylenebilir. Bu sonuca bağlı olarak Rh nanotellerinin germe deformasyonunda ortalama germe oranı olarak 0.001 ps^{-1} seçilmiştir.

Çizelge 3.4. Bulk Rh için germe oranına bağlı Elastisite Modülleri

Germe oranı (ps^{-1})	Bu Çalışma (GPa)	Deneysel Çalışma (GPa)
0.01	312.377	373 *
0.003	313.450	
0.002	312.540	
0.001	311.840	
0.0005	311.395	
0.0001	311.880	

*(Merker, Lupton, Töpfer, & Knake, 2001)

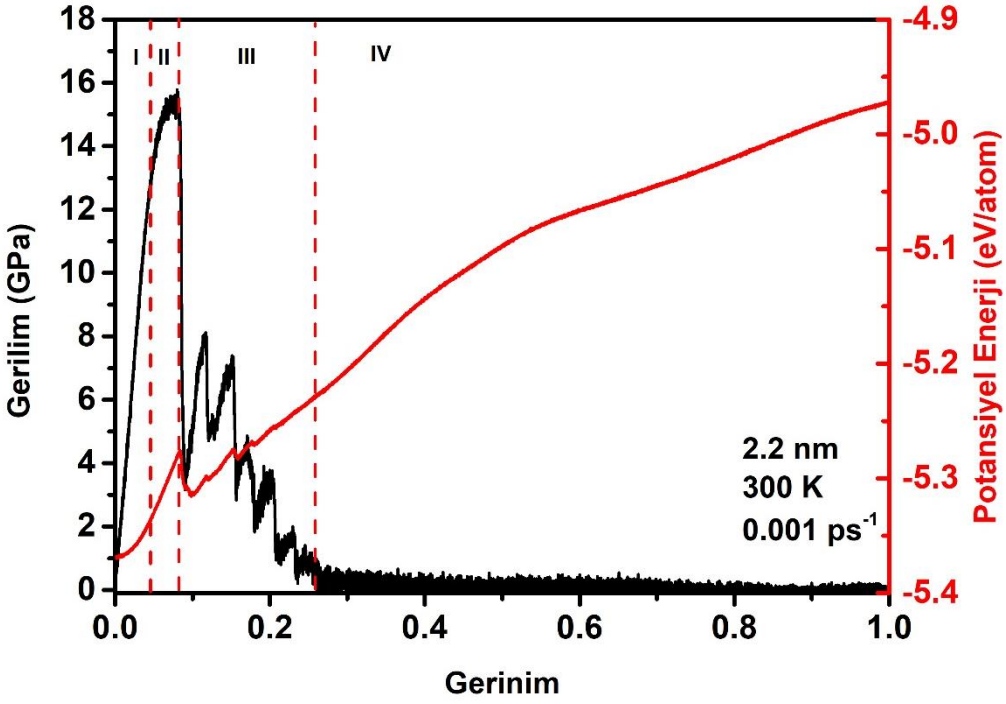
Malzemelerin elastik, plastik, gerinim zorlanması, zayıflama ve kırılma davranışları gibi mekanik özellikleri hakkında derinlemesine bilgi gerilim ve potansiyel enerji (PE)' nin gerinime bağlı değişiminden yararlanarak elde edinilebilir. PE ve gerilim arasındaki ilişkiyi daha iyi anlayabilmek için, Şekil 3.7' de 2.2 nm boyutlu nanotel için 300 K ve 0.001 ps^{-1} germe oranı altındaki gerilim ve atom başına PE'nin gerinime bağlı değişimleri bir arada verilmiştir.

Tekrardan kaçınmak için diğer nanotellere ait sonuçlar bu grafikte gösterilmemiştir. Şekilde gerilim, yüklemenin ilk aşamalarında gerinimle lineer artarken, eğim değiştirerek maksimum noktaya ulaşır. Bu değerden sonra gerilimdeki ani düşüş ve sonrasında artan/azalan döngüsel değişimle sıfır değerine yaklaşır. Şekilde gerilim-gerinim eğrisinin değişiminden elastik (I) ve plastik bölgeler görülmektedir. Ayrıca plastik bölgedeki eğri davranışı gerinim zorlanması (II), süneklik (III) ve kırılma (IV) olmak üzere üç kısma ayrılabilir. Elastik deformasyonun sınırındaki (I. bölge sınırı) gerilim ve gerinim sırasıyla akma gerilimi ve akma gerinimi olarak adlandırılır. Şekilde elastik zorlanma bölgesinin limitinde oluşan eğim değişimi açıkça belli olmadığından, akma gerinimi ve karşılık gelen akma gerilimi % 0.2 ofset metodu ile belirlenmiştir. Şekil 3.8, 2.2 nm kalınlıklı NT için ofset metodunun uygulanışını elastik bölgede çizilen lineer fit ile birlikte göstermektedir. Bu metot ile aynı NT için belirlenen akma gerinimi 0.046 (% 4.6) olup akma gerilimi 12.864 GPa olarak belirlenmiştir. Elastik bölgede atomlar arası bağlar gerinim ile birlikte homojen olarak uzar, uygulanan kuvvet veya yük kaldırıldığında atomlar arası bağlar kısalır ve sistem ilk haline geri döner. Akmanın gerçekleşmesi için

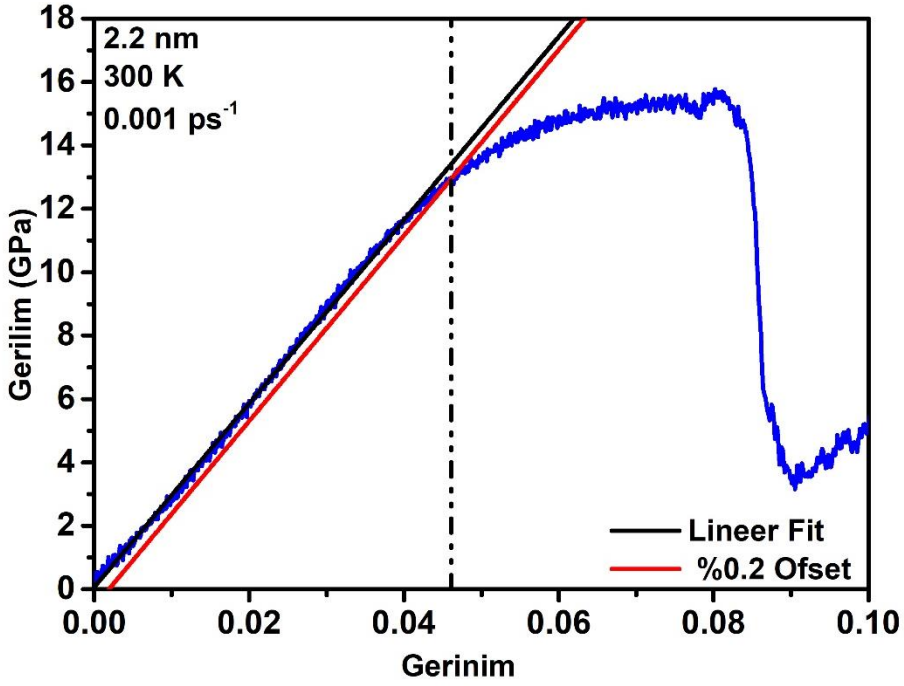
yüksek PE'li atomların NT yüzeyine yerleşmek için hareket etmesi gereklidir (Guder & Sengul, 2020). Aynı bölgede, uygulanan gerilim atomların örgü noktalarından uzaklaştıracak şiddette olmadığından, PE I. bölgenin başında düşük genlikli salınım yaparken, atomların örgü noktalarındaki hareketliliği nedeniyle atom başına PE -5.335 eV/atom değerlerine kadar artmaktadır. Elastik sınırdan sonra malzemeye yükleme uygulanması ile atomlar arası bağların uzaması ve atomların konumları değişmesi neticesinde düzlemler arası kayma başlar. Malzeme üzerindeki yük kaldırılması ile kayma düzlemleri oluşmaya devam eder ve sistem başlangıç formuna geri dönmez bu durumda geri döndürülemez kalıcı plastik deformasyon gerçekleşir.

II. bölgede sistem uygulanan gerilim karşısında zorlanmaya girer ve farklı bir eğim ile maksimum 15.775 GPa gerilime ve atom başına -5.298 eV/atom PE değerlerine kadar artar. II. bölgenin sınırında malzemenin yerel deformasyonun çekirdeklenme bariyerini aşmak için gereken ekstra enerji nedeniyle gerilimde ve PE' de sert düşüş gözlenmektedir. Bu noktada, 2.2 nm NT için yüzeye yakın bölgedeki kaymalar nedeniyle telin kesit alanında daralma ile birlikte 0.835 gerinim değerinde (boyun gerinimi) boyun (düzensiz şekilli) oluşumu gözlenmiştir. Daha kalın NT 'ler için bu bölgede gerilimin sert düşüşü boyun oluşumundan farklı bir sebeple de gözlenebilir. Çalışmanın devamında bu kısım tartışılacaktır. Şekil bozunumu ile başlayan III. bölgede gerilim malzemenin zayıflamasıyla birlikte sünerek % 26 kırılma geriniminde sıfır değerine düşerken, PE limit değerine ulaşmak için artışını sürdürmektedir. Bu bölgenin sınırında gerinim NT'nin iki küçük kümeye ayrılarak kopmasıyla sıfır değerine düşer.

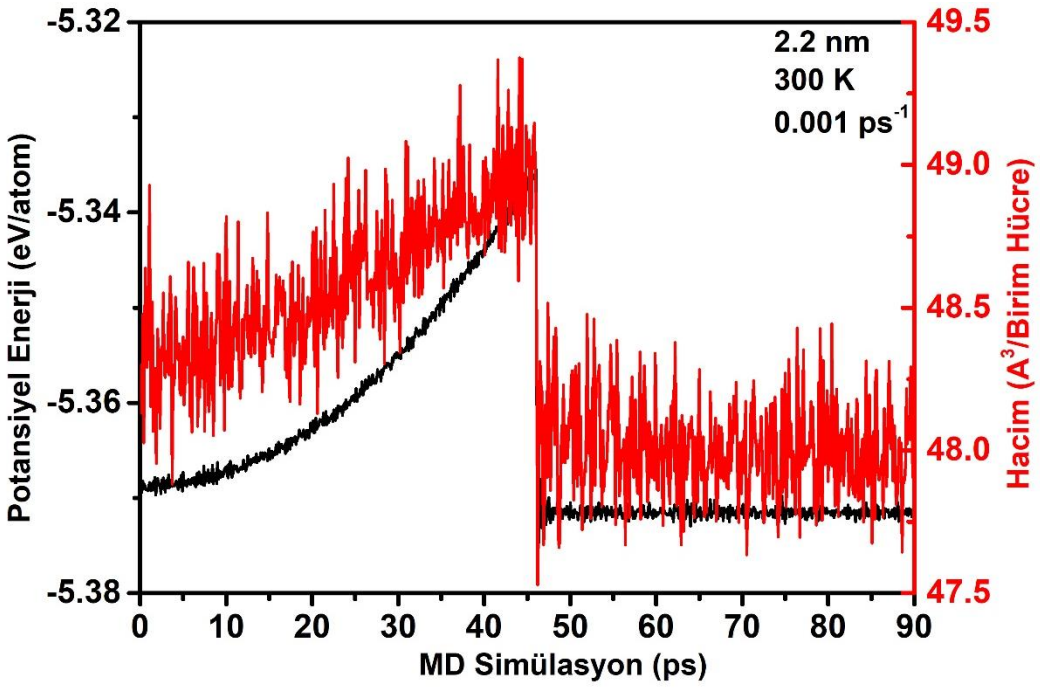
Elastik geri dönüşüm MD simülasyon süresinin fonksiyonu olarak atom başına PE ve sistem hacminin değişiminden gözlenebilir. Şekil 3.9, 2.2 nm kalınlıklı nanotelin 300 K' de 0.001 ps^{-1} germe oranında elastik geri dönüşümünü göstermektedir. Şekilde 0.046 gerinim (yani 46 ps MD simülasyon süresi) elastik bölge limitini göstermektedir. Elastik bölge limitinde sisteme uygulanan yükün kaldırılmasıyla NPT topluluğu içinde sistem minimum enerji durumuna ulaşmaya çalışmakta ve PE (~-5.37 eV/atom) ve hacim (~48 $Å^3$/birim hücre) başlangıç değerlerine geri dönmektedir.



Şekil 3.7. 300 K' de 0.001 ps-1 germe oranında 2.2 nm kalınlıklı nanotelin gerinime bağlı gerilim ve atom başına PE ilişkisi.



Şekil 3.8. 300 K' de 0.001 ps-1 germe oranında 2.2 nm kalınlıklı nanotel için %0.2 ofset metodu ile birlikte gerilim-gerinim ilişkisi.



Şekil 3.9. 300 K' de 0.001 ps-1 germe oranında 2.2 nm kalınlıklı nanotelin elastik geri kazanımı.

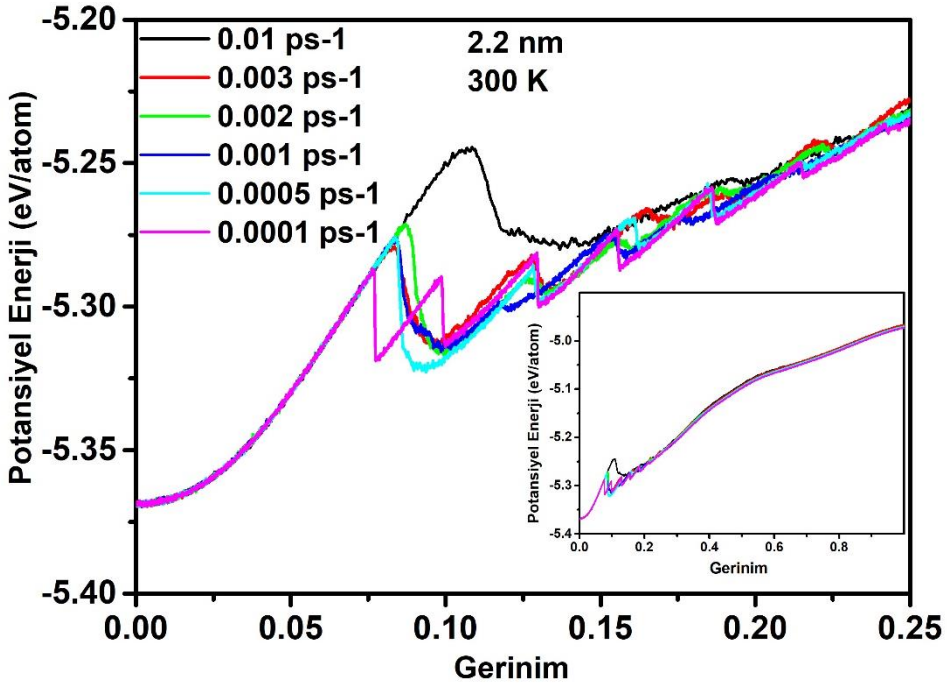
3.2.1. Deformasyon sürecinde enerji değişimi

Bu kısımda, germe deformasyonu sürecinde germe oranı veya boyut değişkenleri ile sistemde oluşan değişimler enerji açısından ele alınarak açıklanmıştır. Anlatım sırasında germe oranı için 2.2 nm kalınlık NT üzerinden referans alınmış ve boyut etkisi incelenirken 0.001 ps-1 germe oranı temel alınmıştır.

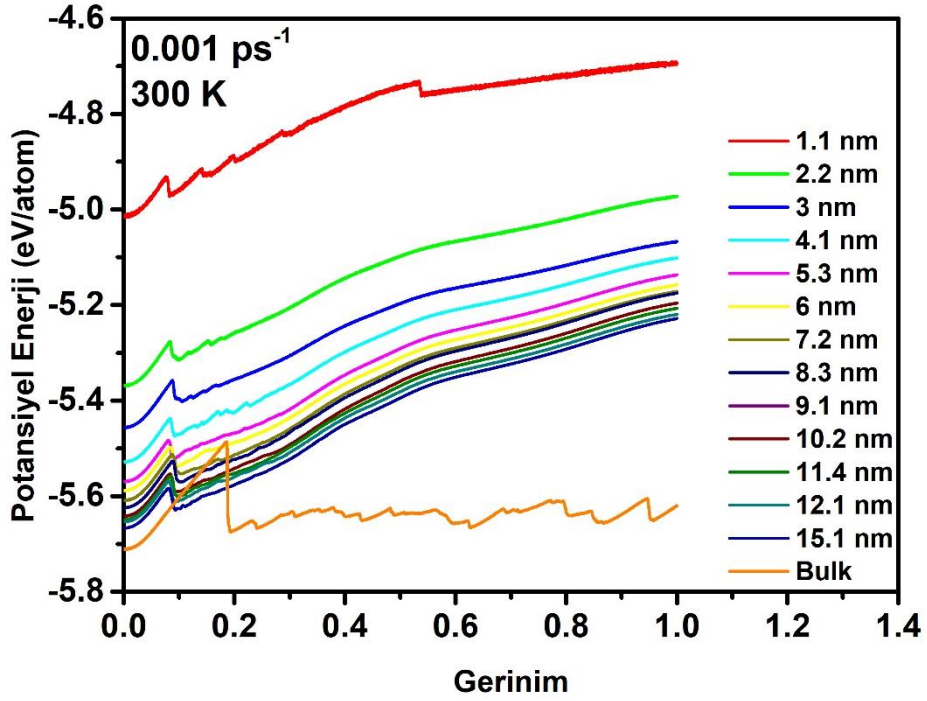
2.2 nm kalınlıklı nanotelin farklı germe oranları için atom başına PE-gerinim eğrileri Şekil 3.10' da ve farklı boyutlardaki nanotellerin 0.001 ps^{-1} germe oranı altındaki atom başına PE-gerinim eğrilerini Şekil 3.11' de gösterilmiştir. Her iki şekilde de germe deformasyonu sırasında 300 K' de hesaplanmış olan eğriler gösterilmektedir. Germe oranı sistemin boyun verdiği (PE'nin birinci düşüş yaptığı) gerinime kadar PE-gerinim ilişkisini etkilemezken, boyun oluşumundan sonra sistem üzerinde kayda değer değişikliğe sahiptir. Germe esnasında atomlar arası bağların kırılmasıyla açığa çıkan enerji atomların kinetik enerjiye dönüşerek NT' deki bir bölgeye ait atomların hareketliliğini artırır ve ilgili bölgede kristal düzenin bozulmasına sebep olur. Bu durum PE' de ani düşüş olarak gözlenir. PE' nin ilk düşme miktarı germe oranı ile azalırken,

birinci düşüşün gerinim değeri daha küçük değere doğru kayar. Bunun anlamı sistem daha yavaş gerildiğinde daha önce boyun oluşmasıdır. Şekil 3.10' da verilen küçük resim ile PE nin tüm germe oranları için yaklaşık aynı eğim ile arttığı ve aynı limite ulaştığı görülmektedir. Boyuta bağlı PE-gerinim ilişkisi yukarıda tartışılan germe oranına bağlılığına oldukça benzerdir: yine şekil 3.7' de gösterilen I., II. ve IV. bölgelerde belirgin bir farklılık gözlenmezken, III. bölgede ise farklılıklar gözlenmiştir. III. bölgedeki bu farklı davranışları şu şekilde açıklamak mümkün olabilir; eksik komşu sayısına sahip yüzey atomlarının PE' ye katkısının daha fazla olduğu ince nanotellerde PE' nin değerindeki düşme daha keskindir. Bulk sistem için ise PE-gerinim eğrisi, kırılma olmadan belirli bir doygunluk seviyesi (lütfen Şekil 3.5' e bakınız) etrafında salınmaktadır. Genel olarak; germe deformasyonu sürecinde, nanotelin boyutu arttıkça, nanotelin PE azalmış ve aynı germe koşulları altında bulk malzeme değerine doğru yaklaşmıştır.

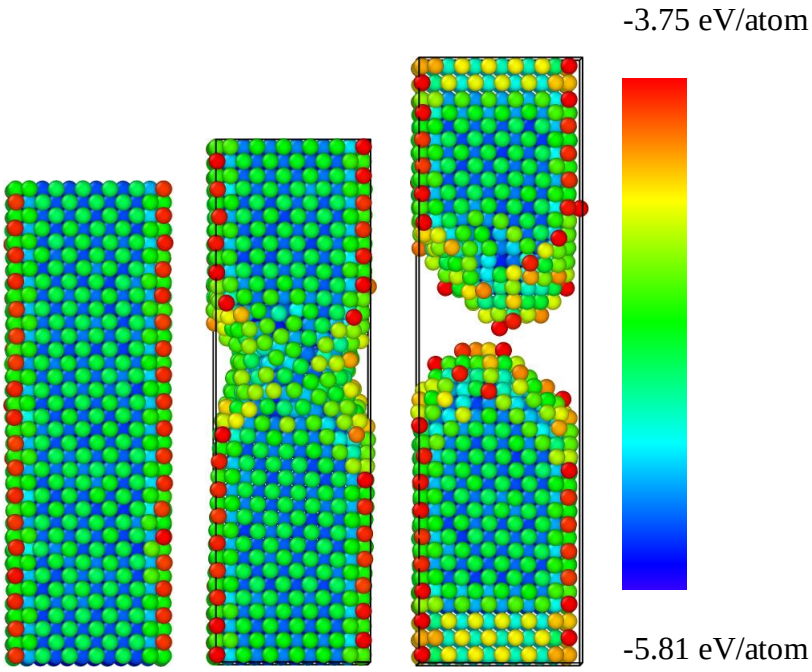
Boyut ile PE'nin arasındaki ilişkiyi göstermek için Şekil 3.12' de 2.2 nm kalınlıklı nanotelin germe deformasyonu esnasında elastik, ve plastik bölgelerden alınmış anlık simülasyon görüntüleri PE değerine göre ölçekli olarak renklendirilmiş şekilde görülmektedir. Şekilde kırmızı ve yeşil atomlar yüzey atomlarını ve mavi atomlar ise çekirdek atomlarını temsil etmektedirler. Yüzey atomlarının komşu sayıları eksik olduğundan daha yüksek PE' ye (düşük bağlanma enerjisi) sahip olurlar. İnce NT' lerde yüzey atomlarının sayısı çekirdek atomlarına oranı fazla olduğundan NT'nin PE'si daha yüksek olur. Bu davranış önceki şekilde boyut PE ilişkisini açıklamaktadır.



Şekil 3.10. 2.2 nm kalınlıklı nanotelin PE – gerinim ilişkisinin germe oranı ile değişimi



Şekil 3.11. 0.001 ps-1 germe oranında PE - boyut ilişkisi.



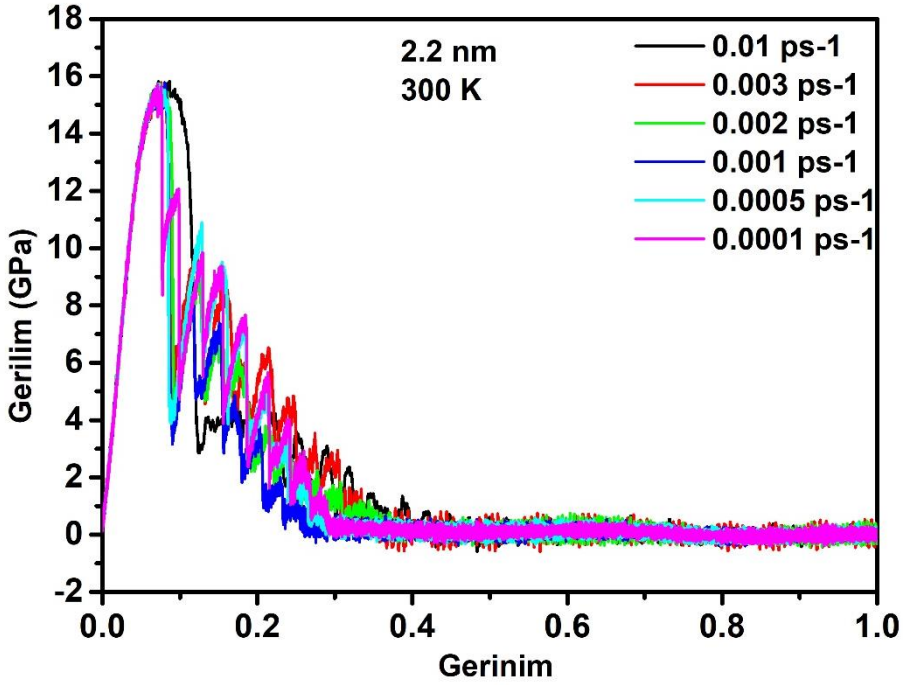
Şekil 3.12. FCC 300 K' de ve 0.001 ps-1 germe oranı altında 2.2 nm boyutlu nanotelin atomların potansiyel enerjisine göre (a) 0, (b) 0.09 (c) 0.26 gerinim değerlerindeki atomik konfigürasyonları.

3.2.2. Deformasyon sürecinde Gerilim – Gerinim ilişkisi

Bu kısımda, germe deformasyonu sürecinde germe oranı veya boyut değişkenleri ile sistemde oluşan değişimler gerilim-gerinim ilişkisi üzerinden açıklanacaktır. Anlatımı bozmamak adına önceki kısımda olduğu gibi germe oranı için 2.2 nm kalınlık NT ve boyut etkisi için 0.001 ps^{-1} germe oranı temel alınmıştır.

Şekil 3.13 0.01 ps^{-1} ile 0.0001ps^{-1} arasındaki altı farklı germe oranı için hesaplanmış gerilim-gerinim eğrilerini göstermektedir. Elastik bölgede ortak bir eğri davranışı gözlenmekle birlikte eğriler maksimum noktaya kadar neredeyse üst üstedir. Germe oranına bağlı büyük çaplı farklılık boyun gerinimi sonrasında ani düşüş ile birlikte ortaya çıkmıştır. En yavaş germe hızı (0.0001 ps^{-1}) en küçük boyun gerinimi gözlenirken, en yüksek germe hızında (0.01 ps^{-1}) en büyük boyun gerinimi gözlenmiştir. Kalan germe hızları arasındaki MD simülasyon süreleri farkı az olduğu için boyun geriniminde belirgin fark gözlenmemiştir.

Çizelge 3.5' te, 2.2 nm kalınlıklı NT'nin şekil 3.13' ten elde edilen germe oranına bağlı mekanik özellikleri (akma gerilimi ve gerinimi, maksimum gerilim, boyun ve kırılma gerilimi, süneklik ve Elastisite Modülü) listelenmiştir. Elastisite Modülü gerilim-gerinim eğrisinin lineer değişimini garanti altına almak amacıyla eğrinin ilk % 2 lik germe değerine kadar çizilen fit eğrisinin eğiminden hesaplanmıştır. Elastik bölgede eğri eğimlerinin neredeyse aynı olması sebebiyle Elastisite modülü germe oranından bağımsızdır. Rh NT lerin elastisite modüllerinin bulk değerinden daha düşük olduğu görülmüş olup, nano-ölçekte Elastisite Modülünün bulk sistemlerden daha farklı olduğunu rapor eden deneysel çalışmalar mevcuttur (Jing vd., 2006; Li, Ono, Wang, & Esashi, 2003; Liu vd., 2006; Nam vd., 2006; Nilsson, Borrisé, & Montelius, 2004; Nysten, Fretigny, & Cuenot, 2005). Akma ve maksimum gerilim, 0.001 ps-1 germe oranı dışında, azalan germe oranıyla düşmektedir. Boyun ile kırılma gerinimleri arasındaki gerinim miktarı kullanılarak NT' nin sünekliği hesaplanmıştır. Genel olarak en yüksek ve en düşük germe oranları karşılaştırıldığında, 2.2 nm Rh NT için yüksek germe oranıyla, akma ve boyun gerinimleri ile süneklik artmış ve kırılma gecikmiştir.



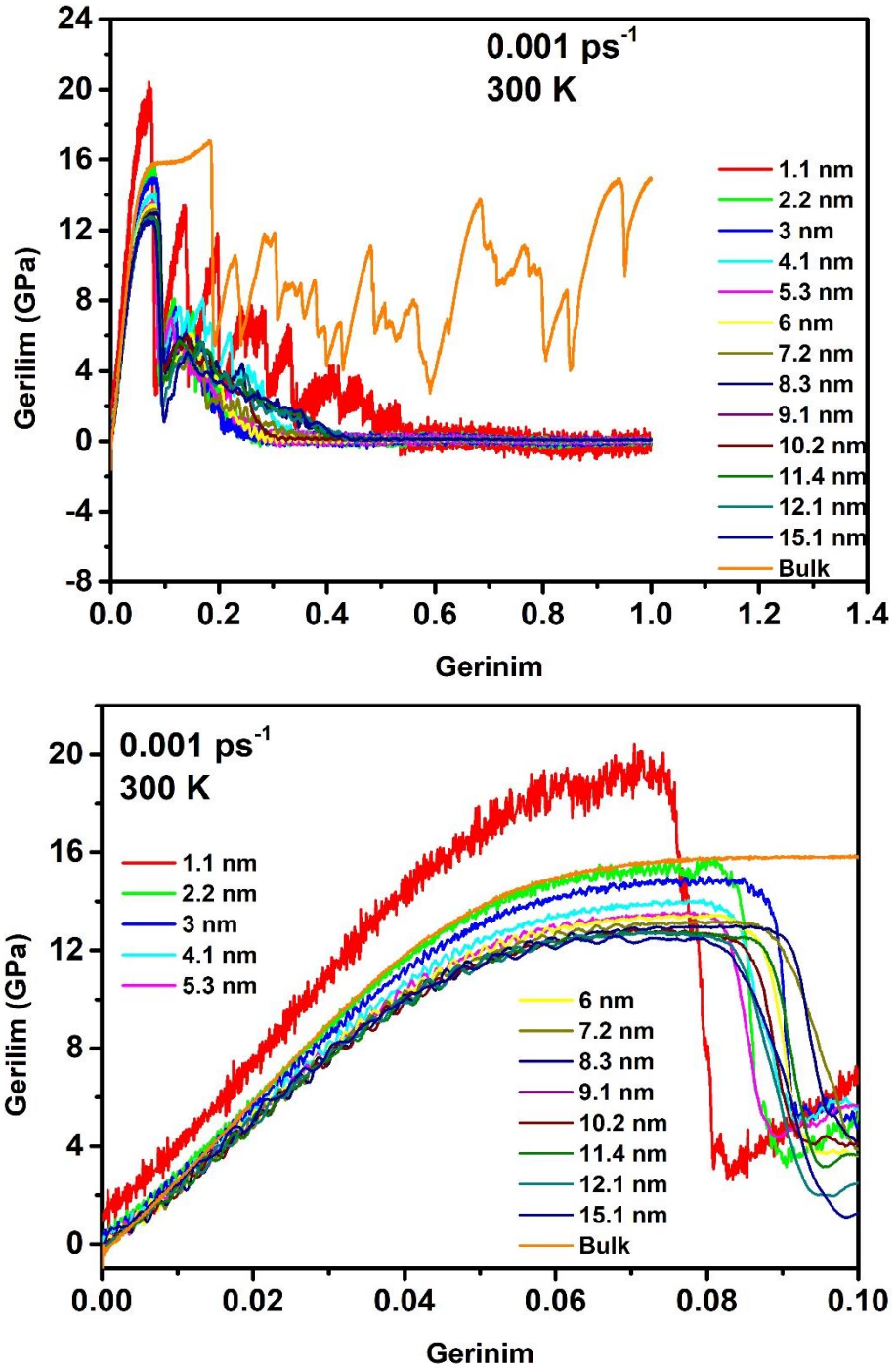
Şekil 3.13. FCC-Rh NT' leri için elde edilen germe oranına gerilim-gerinim değişimi

Çizelge 3.5. 2.2nm NT için germe oranına bağlı hesaplanan mekanik özellikler.

Germe Oranı	Akma		Maksimum Gerilim (GPa)	Gerinim		Süneklik (%)	Elastisite Modülü (GPa)
	Gerilimi (GPa)	Gerinimi		Boyun	Kırılma		
0.01	13.463	0.0486	15.827	0.1080	0.43	32.2	279.5
0.003	13.415	0.0486	15.776	0.0828	0.33	24.7	278.6
0.002	13.390	0.0486	15.737	0.0876	0.38	29.2	276.3
0.001	12.864	0.0461	15.775	0.0845	0.26	17.6	276.7
0.0005	13.034	0.0467	15.729	0.0845	0.27	18.6	278.0
0.0001	12.768	0.0456	15.714	0.0770	0.29	21.3	277.5

Gerilim-gerinim davranışı, nanotellerde boyuta bağlı deformasyon mekanizmasını tahmin etmek için simüle edilmiştir. Şekil 3.14 (a) Rh NT' nin germe deformasyonunda boyut bağlılığını yorumlayabilmek için 300 K sıcaklık ve 0.001 ps-1 germe oranında 1.1 nm den 15.1 nm'ye kadar değişen on üç farklı kalınlıktaki NT' ler için hesaplanan gerilim-gerinim eğrilerini göstermektedir. Şekil 3.14 (b), (a)' daki eğim değişimini yakından daha yakından göstermek amacıyla verilmiştir. Karşılaştırma amacıyla şekillere bulk sisteme ait hesaplama sonuçları da eklenmiştir. Bulk sistemin gerilim-gerinim davranışı NT'lere kıyasla daha radikal değişikliğe sahiptir. Şekil 3.7' de bahsedildiği üzere NT sistemler dört farklı kısma sahiptir: elastik, gerinim zorlanması, süneklik ve kırılma. Daha önce basedilen PE-gerinim ilişkisinden de gözlendiği üzere, 1.1 nm kalınlıklı NT' nin sahip olduğu yüksek PE sebebiyle en yüksek dayanıma sahip olurken kalınlık artması ile dayanım düşmektedir. Ayrıca, aynı sistem yüzey etkilerinden dolayı kırılmakta ve en fazla sünmektedir. 1.1 nm NT'nin gerilimi, diğer büyük kalınlıklı NT' lere kıyasla yüzey atomlarının sayısının fazla olmasından dolayı büyük dalgalanmaya neden olur ve bu nedenle gerilim kırılmadan önce daha hızlı azalmış ve önemli miktarda büyük plastik deformasyon bölgesine sahiptir. Plastik deformasyonun sonunda gerilimin düşüş oranı daha küçük boyutlu nanotellerde daha büyüktür. Kesit alanı daha büyük olan

kalın NT' lerde dislokasyonların hareketini engelleyen dinamik dalga etkisi veya fonon sürüklemesi nedeniyle daha az istatistiksel sapmalara verir (Liang & Zhou, 2003).



Şekil 3.14. a) FCC-Rh NT' leri için elde edilen boyuta gerilim-gerinim değişimi ve b) Aynı eğrinin %1 gerinime kadar gösterimi.

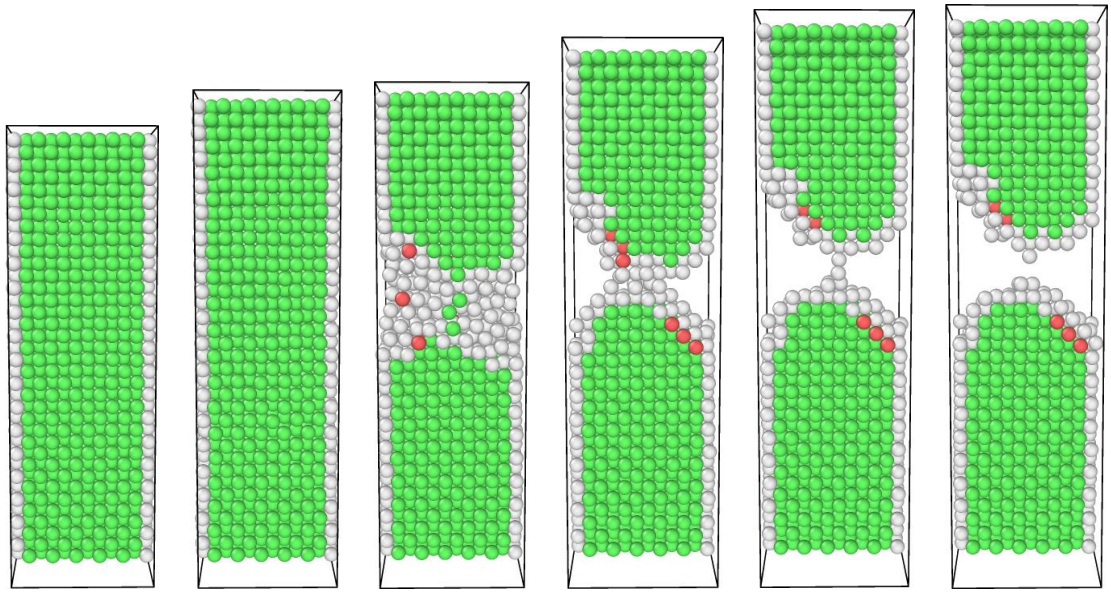
Gerinim-gerilim eğrilerinden elde edilen mekanik özellikler (sünme, boyun ve kırılma gerinimi) Çizelge 3.6' da listelenmiştir. NT'nin boyuta bağı özelliklerinin incelenmesi sırasında genellikle tek bir ayrıtın değişimi temel alınarak inceleme yapan çalışmalar mevcuttur. Bu sayede ilgilenilen mekanik özelliğin seçilen ayrıta göre değişimi için kesin bir ifade söylemek mümkün olabilir (Guder & Sengul, 2020). Bu çalışmada ele alınan tüm NT sistemlerinde boy/kalınlık oranının sabit bir sayıya seçilmesinden dolayı ($L/D = 3$), boyut ile ile bahsedilen özellikler arasında ilişki gözlenmemiştir. 1.1 nm NT hariç genel olarak her bir mekanik nicelik belli bir ortalama değer etrafında değerler almaktadır.

Çizelge 3.6. FCC-Rh NT' leri için boyuta bağlı mekanik özellikler.

	Boyun Gerinimi	Kırılma Gerinimi	Sünme(%)
1.1 nm	0.0760	0.54	46.40
2.2 nm	0.0845	0.26	17.55
3 nm	0.0890	0.28	19.10
4.1 nm	0.0846	0.39	30.54
5.3 nm	0.0830	0.29	20.70
6 nm	0.0880	0.31	22.20
7.2 nm	0.0900	0.40	31.00
8.3 nm	0.08980	0.46	43.80
9.1 nm	0.0900	0.40	31.00
10.2 nm	0.0860	0.32	23.40
11.4 nm	0.0880	0.47	38.20
12.1 nm	0.0832	0.45	36.68
15.1 nm	0.0829	0.45	36.71

İdeal kristal sistemler sonucu katı-katı faz geçişi yaparak mekanik direncini önemli ölçüde değiştirir. Böyle bir etki komşu analizi ile ortaya çıkarılabilir. Şekil 3.15 2.2 nm kalınlıklı Rh NT' nin OVITO kullanılarak yapılmış komşu analizine ait sonuçları anlık simülasyon görüntüleri ile birlikte göstermektedir. Şekildeki beyaz renkli küreler, yüzey

atomlarını gösterirken yeşil renkli küreler örgü noktalarına FCC düzeninde yerleşmiş atomları göstermektedir. Sistemde çekirdeklenmesi muhtemel temel yapıların oranları şekil altında 0.08 gerinim için verilmiştir. Buna göre deformasyon öncesinde ve sırasında FCC düzenin yüksek orandaki varlığı Rh NT' lerinde katı-katı geçişinin söz konusu olmadığını göstermektedir.



(a) (b) (c) (d) (e) (f)

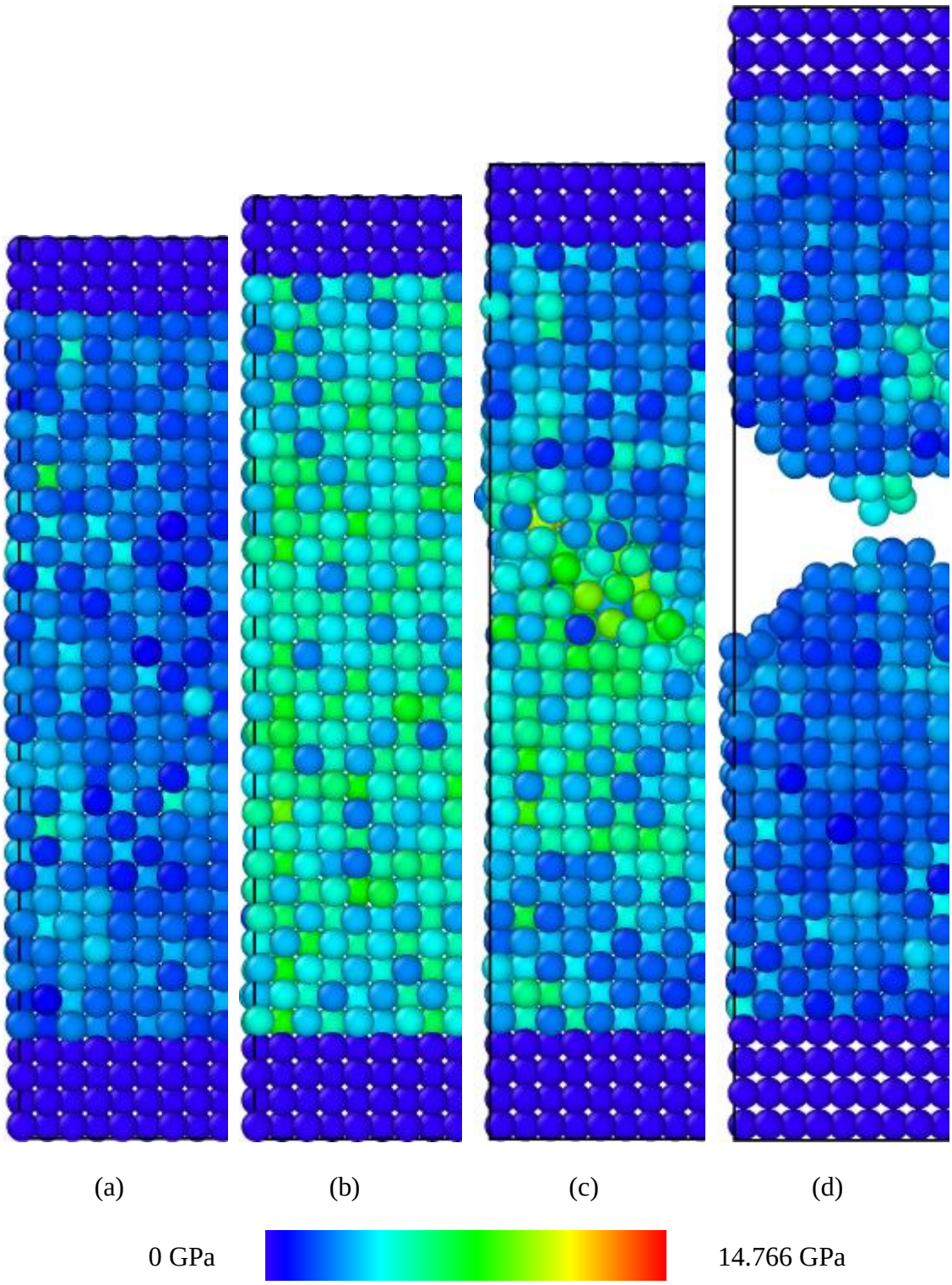
Structure	Count	Fraction
Other	939	36.2%
FCC	1611	62.2%
HCP	42	1.6%
BCC	0	0.0%
ICO	0	0.0%

Şekil 3.15. 300 K' de ve 0.001 ps-1 germe oranı altında 2.2 nm boyutlu nanotelin en yakın komşu analizi (a) 0, (b) 0.04, (c) 0.08, (d) 0.18, (e) 0.25 ve (f) 0.26 gerinim değerlerindeki atomik konfigürasyonları. Etiket 0.08 gerinim için verilmiştir.

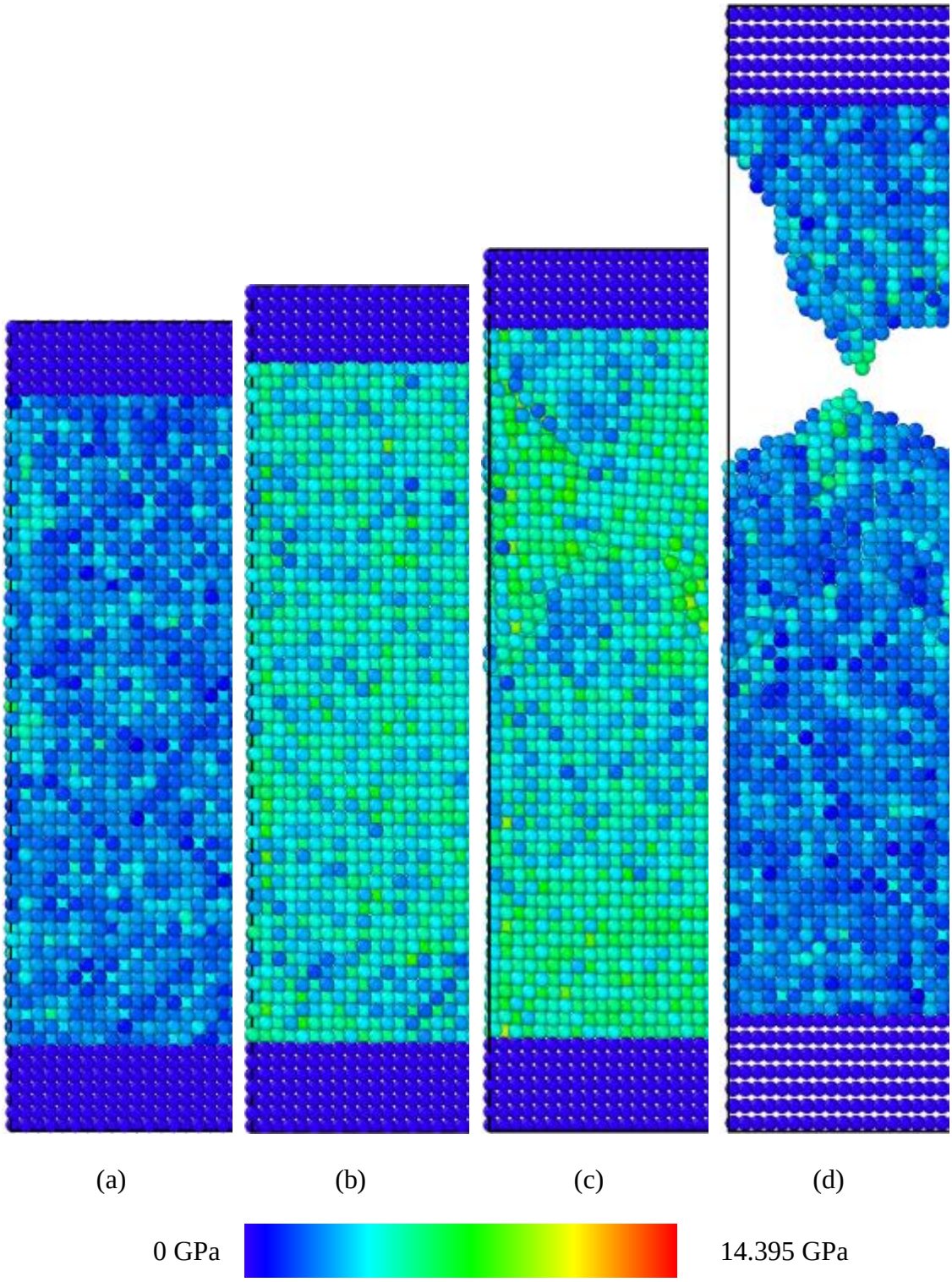
Deformasyon sırasında oluşacak yerel kayma (şekil değiştirme) von Mises kriteri ile gözlenebilir. i atomu için bu kriter

$$\eta_i = \sqrt{0.5\left[\left(\sigma_{xx}-\sigma_{yy}\right)^2+\left(\sigma_{yy}-\sigma_{zz}\right)^2+(\sigma_{zz}-\sigma_{xx})^2+6\left({\sigma_{xy}}^2+{\sigma_{yz}}^2+{\sigma_{zx}}^2\right)\right]} \tag{3.2}$$

ile verilir (von Mises, 1913). Şekil 3.16 ve 17 sırasıyla 2.2 nm ve 4.1 nm Rh NT' ler için deformasyon sırasında alınan anlık simülasyon görüntülerini göstermektedir. Renklendirme ölçeği her iki NT' için boyun gerinimi olan 0.09 içindir. Her iki şekilde (a) dengeleme sonrası (b) akma (c) boyun ve (d) kırılma gerinimlerine karşılık gelmektedir. Şekil 16 (a) ve 17 (a) dan $\eta_i = 0$ GPa gerilime sahip (mavi) atomların çokluğu kristal düzendeki sistemde dengeleme sonrasında (yükleme öncesinde) gerilimin yok denecek düzeyde olduğu göstermektedir. Artan gerinim ve atom konumlarının değişmesi sonucu plastik bölgeye geçiş (b) ve sonrasında düzlem kayması ile birlikte boyun oluşumu gözlenmiştir (c). Her iki şekilde (d) gösterimi NT'nin iki ayrı kümeye ayrıldığını göstermektedir.



Şekil 3.16. 2.2 nm boyutlu NT için (a) 0, (b) 0.046, (c) 0.084 ve (d) 0.26 gerinimde hesaplanan von Mises akma gerilimi



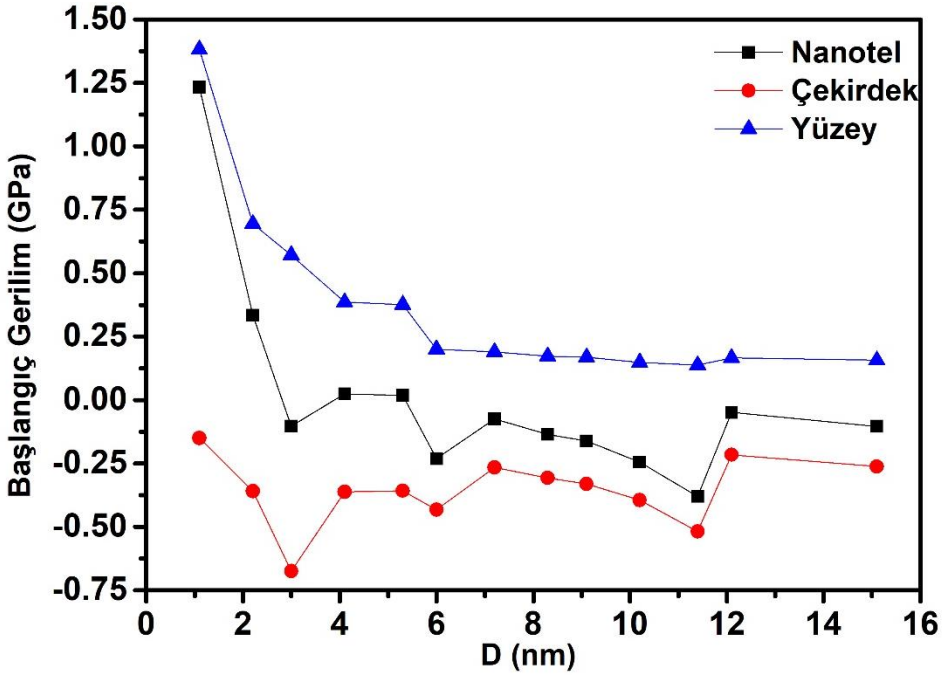
Şekil 3.17. 4.1 nm boyutlu NT için (a) 0, (b) 0.044, (c) 0.084, (d) 0.39 gerinimde hesaplanan von Mises akma gerilimi

Mekanik özelliklerinin değişiminde yüzey etkilerinin rolünü anlamak amacıyla bazı temel nicelikler (başlangıç, akma, maksimum gerilimleri, akma gerinimi) NT' yi oluşturan çekirdek ve yüzey atomlarından gelen katkıları ayrı ayrı ele alınarak hesaplanmıştır. Şekil 3.18-21' de sırasıyla başlangıç gerilimi, akma gerilimi ve gerinimi ile son olarak maksimum gerilimin NT boyutu ile değişimi gösterilmiştir. Şekillerde NT yüzeyinden itibaren 3.5 A kalınlıklı bölgedeki kabuk atomları "yüzey" atomu olarak etiketlenmiştir. "Çekirdek" ise yüzey atomu dışında kalan atomlar olup "nanotel" tanımı ortak sistemi temsil etmektedir.

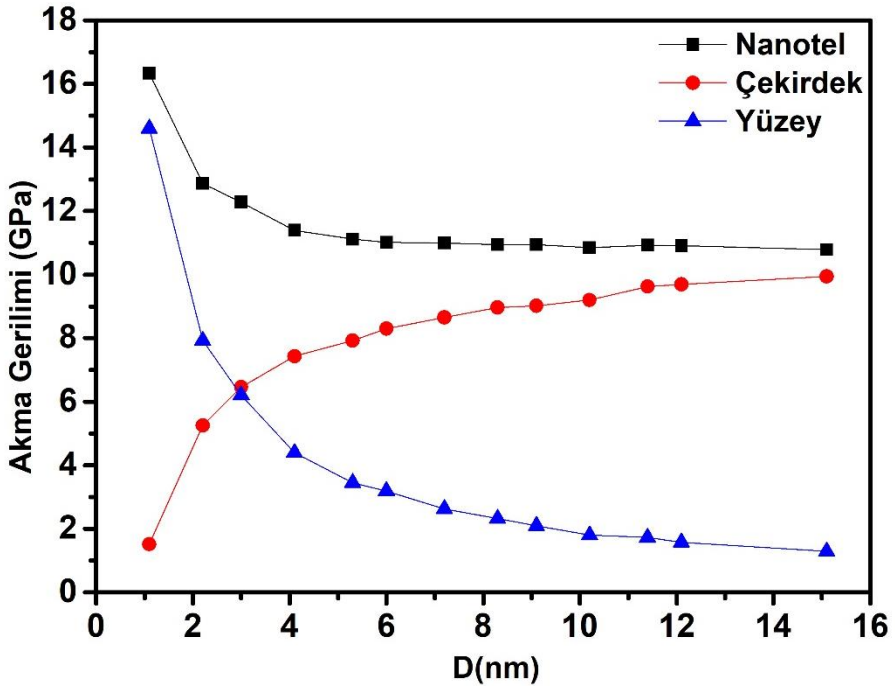
Başlangıç gerilimi, NT sistemlerinin dengeleme sonrası yüklemeye başlamadan önce sahip olduğu gerilim olarak adlandırılır. Bu gerilim diğer mekanik özelliklerin değişimi ile doğrudan ilişkilidir. Şekil 3.18' de tüm boyutlar için NT yüzeyinin pozitif (uzama) ve çekirdeğinin ise negatif başlangıç gerilimi (sıkışma) altında olduğu görülmektedir. Hiçbir açık yüzeyi ve atom dizilim kusuru olmayan bulk sistemde başlangıç gerilim değeri -1.6 GPa olup bu değer bulk sistemin sıkışma gerilimi altında olduğunu ifade eder. Deformasyonu başlatmak için gereken dış gerilim, NT sistemlerinin başlangıç geriliminden yüksek olmalıdır. Başlangıç gerilimi, küçük boyutlu NT'lerde hızlı bir azalma sergiler ve tüm NT yüzey atomlarının pozitif başlangıç gerilimi etkisi altındadır. 2 ve 3 nm için yüzey ve çekirdek atomlarının başlangıç gerilimi dengeli iken boyut arttıkça yüzey gerilimi etkisini kaybederek tüm NT çekirdeğin sıkışma gerilimi etkisi altında hareket eder. Başlangıç geriliminin artan boyut ile ters ilişkili davranışı tüm NT göz önüne alındığında hesaplanan diğer mekanik özelliklerde de ortaktır.

Şekil 3.19' da Akma gerilimi – boyut değişimi gösterilmektedir. Akma geriliminin boyuta bağlı davranışı deneysel verilerle doğrulanan Hall-Petch ilişkisi ile ifade edilebildiği gözlenmektedir. Artan boyut ile azalan yüzey atom/çekirdek atom sayısı nedeniyle, yüzey atomlarının akma gerilimi düşerken, çekirdek atomlarının akma gerilimi artmış ve başlangıç geriliminde olduğu gibi, NT' nin gerilimi 3 nm ye kadar artan boyut ile yüzey atomları ile belirlenirken sonrasında çekirdek atomları baskın hale gelmiştir. Nanotelin akma geriliminin boyut bağlılığı PE cinsinden de açıklanabilir. Boyut arttıkça başlangıç gerilimi yavaş yavaş aşamalı azalmaktadır (Şekil 3.18). Buna göre, daha yüksek başlangıç gerilimine ve daha yüksek potansiyel enerjiye sahip ince NT' ler, kalın NT' lere göre daha yüksek akma gerilimine sahip olmuştur. Akma gerilimi, başlangıç gerilimi NT'lerde ortaya çıkacak boşluk ve dislokasyon çekirdeklenmesi ile ilişkilidir (Diao, Gall,

Dunn, & Zimmerman, 2006; Zhu, Li, Samanta, Leach, & Gall, 2008; Jennings vd., 2013). İnce NT' lerin sınırlı aktivasyon hacmi nedeniyle kusur çekirdeklenmesi için gereken olası konumların sayısı kısıtlıdır (Sainath, Choudhary, & Jayakumar, 2015). Bu durum ince NT'nin yüksek akma ve başlangıç gerilimine sahip olmasını ve bu gerilimdeki büyük payın yüzey atomlarına ait olmasını açıklar. Yüzey gibi hiçbir kusuru olmayan bulk malzemeler, dislokasyon olmadan 12.539 GPa'ya kadar elastik davranışı korur. Şekil 3.19'da nanotel için hesaplanan akma gerilimi artan kalınlık ile bulk limiti civarındadır.

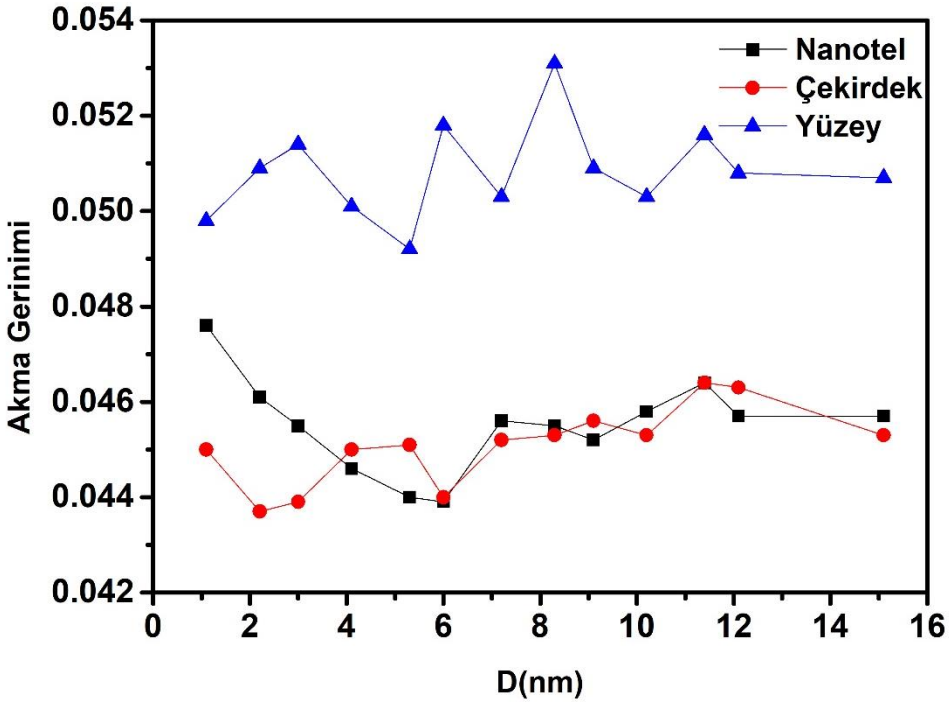


Şekil 3.18. Rh NT' lerin 300 K ve 0.001 ps-1 germe oranında başlangıç geriliminin boyuta bağlı değişimi.



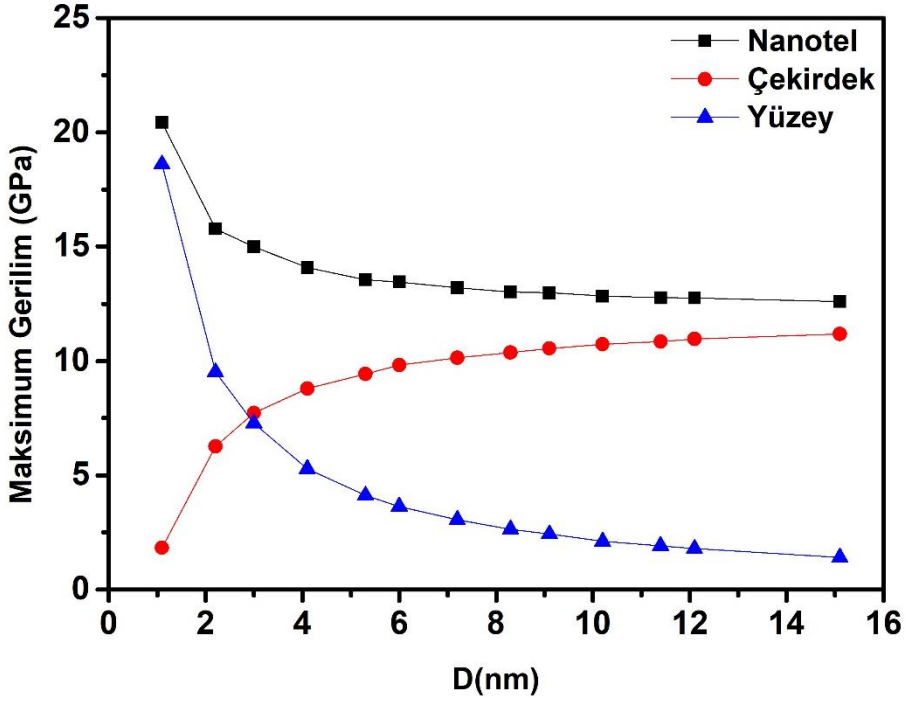
Şekil 3.19. Rh NT' lerin 300 K ve 0.001 ps-1 germe oranında akma geriliminin boyuta bağlı ilişkisi.

Gerilim cinsinden büyüklüklerin boyut ilişkisi hem enerjik hem de atomlar arasındaki kusur çekirdeklenmesi ile açıklanabilirken, gerinim – boyut ilişkisini de gözden geçirmek gereklidir. Rh NT'ler için 300 K ve 0.001 ps^{-1} germe oranında akma geriniminin boyuta bağlı değişimi Şekil 3.20'de verilmiştir. FCC kristal düzen 3 asal eksen boyunca ([100], [010] ve [001] kristalografik doğrultuları boyunca) kararlı yüzeyleri olduğu için akma geriniminin boyuta bağlılığı oldukça zayıftır. Daha yüksek PE ve başlangıç gerilimine sahip olan yüzey atomları daha yüksek akma gerinimine sahiptir. Daha yüksek bağlanma enerjisine sahip çekirdek atomlarının akma gerinimi, bulk akma gerinim değeri olan 0.045 civarında salınım yapmaktadır.



Şekil 3.20. Rh NT' lerin 300 K ve 0.001 ps-1 germe oranında akma geriniminin boyuta bağlı ilişkisi.

Gerinim ekseninde boyut bağlılığı gözlenmezken Şekil 3.21' de başlangıç ve akma gerilimde olduğu gibi maksimum gerilimin boyut bağlılığı gözlenmiştir. Tek büyük fark çekirdeğe ait başlangıç gerilimi değişiminde gözlenmiştir. Çekirdek atomlarında başlangıç gerilimi boyuta göre neredeyse sabitken akma ve maksimum gerilim hızla artarak 3 nm den sonra tüm NT'nin genel davranışını belirlemiş ve 12.5 GPa limitine doğru artmaya devam etmiştir. Bulk sistem için elde edilen maksimum gerilim 17.1 GPa olduğu göz önünde tutulmalıdır. Aynı ölçekte yüzey atomlarının maksimum gerilimi hızla azalmış ve sıfıra yaklaşmıştır.

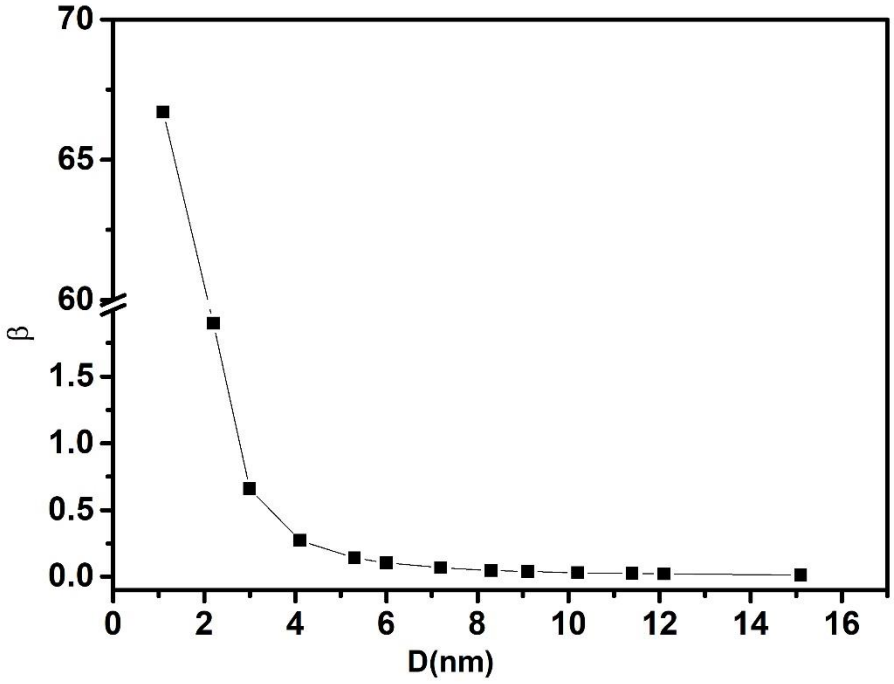


Şekil 3.21. Rh NT'lerin 300 K ve 0.001 ps-1 germe oranında maksimum (tepe) geriliminin boyuta bağlı ilişkisi.

Nanotel sistemi içerisinde yüzey gerilimin çekirdek gerilimine göreceli ilişkisini belirlemek için Şekil 3.22' te FCC–Rh NT için çekirdek ile yüzey geriliminin boyuta bağlı katkısı gözlenmiştir. Katkı oranını belirlemek için $\beta = x_{yüzey}\,\sigma_{yüzey}/\,x_{çekirdek}\,\sigma_{çekirdek}$ parametresi kullanılmıştır (Zhang, Li & Li, 2017). Burada $x_{yüzey} = \frac{V_{yüzey}}{V_{NT}}$ ve $x_{çekirdek} = \frac{V_{çekirdek}}{V_{NT}}$ sırasıyla yüzey ve çekirdek hacim oranlarını, $\sigma_{yüzey}$ ve $\sigma_{çekirdek}$ sırasıyla maksimum yüzey ve maksimum çekirdek gerilimini ifade etmektedir. $\sigma_{yüzey}$, NT'nin dış yüzeyinden itibaren 3.5 A kalınlıklı kabuk içindeki atomların ve $\sigma_{çekirdek}$ ise yüzey atomları dışında kalan atomların atomik gerilimlerinin toplamıdır.

Kalın Rh NT' ler için β değeri 0.01' den 4.1 nm 'de 0.27' ye lineer olmayan şekilde yükselmişken keskin bir artış ile 1.1 nm' de 66.7'ye ulaşmıştır. Farklı bir deyişle, β 'nın 1.1 nm' deki değeri 4.1 nm' ye göre yaklaşık 250 kat artmıştır. 2.2 nm' de yüzey katkısı çekirdek katkısından daha fazla iken, 3 nm' de yüzey katkısı çekirdek katkısının %66' sına karşılık gelmektedir. Grafikten, yüzey ve çekirdek katkılarının dengeli olduğu kritik

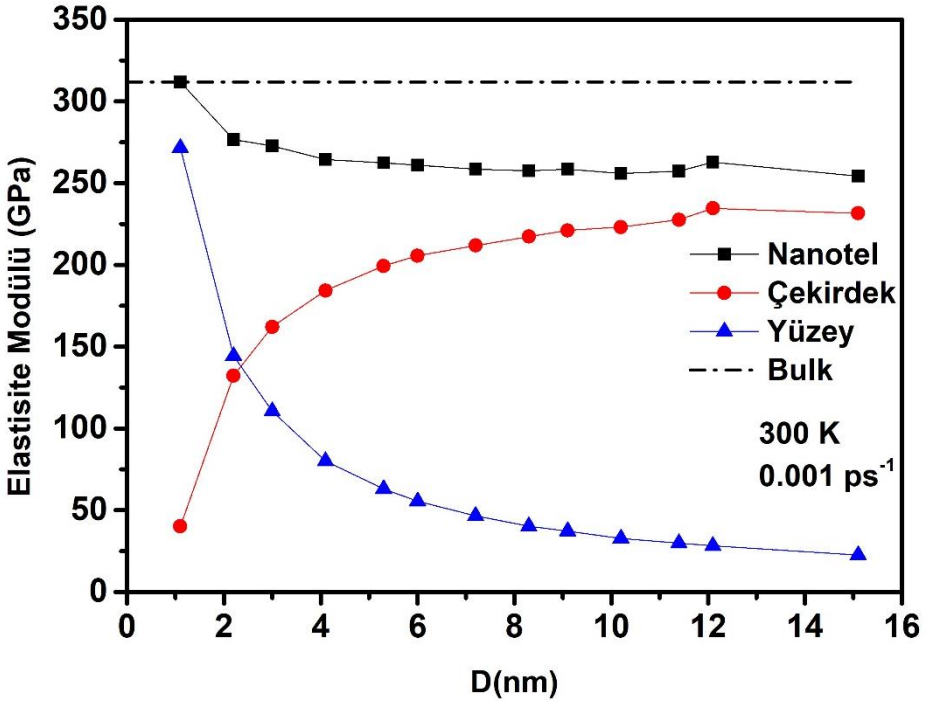
NT kalınlığı D_{kritik} ~ 2.8 nm olarak belirlenmiş olup artan boyut ile çekirdek katkısının daha baskın hale geldiği gözlenmiştir.



Şekil 3.22. FCC –Rh NT için boyuta bağlı çekirdek ile yüzey geriliminin katkısı.

Çalışmanın bu kısmında, Elastisite Modülü'nün boyut ile olan ilişkisine odaklanacağız. Şekil 3.23, 300 K ve 0.001 ps^{-1} germe oranında elde edilen gerilim-gerinim eğrilerinin elastik bölgedeki eğimlerinden hesaplanmış olan farklı boyutlardaki Elastisite Modüllerini göstermektedir. Yukarıda belirtildiği gibi, yüzey gerilimi sırasıyla başlangıç, akma ve maksimum gerilimleri ve ardından Elastisite Modülü'nü değiştirmede tetikleyici bir etkendir. Şekilde modülün bulk değerden başlayarak 3-4 nm boyuta kadar sınır değere ulaşmak üzere hızla düştüğü ve ardından boyutun artması ile ~250 GPa civarına aşamalı azalıp doygunluğa ulaştığı görülmektedir. Bu azalma, gerilim-gerinim eğrilerinin elastik bölgedeki eğiminden görülebilir (lütfen Şekil 3.14' e bakınız). Modül, genel olarak daha önce bahsedilen gerilim türü özellikler ile benzer davranış sergilemektedir ve değişimi yüzey gerilimi cinsinden ifade edilebilir (Cuenot, Frétigny, Demoustier-Champagne, & Nysten, 2004): boyut azaldıkça, ince NT' lerde daha baskın olan pozitif (çekme) yüzey gerilimi modülün büyümesine sebep olurken, negatif

(sıkıştırma) yüzey gerilimi azalmaya sebep olur. Yüzey etkilerinin aktif rol oynadığı $D < 3$ nm bölgesinde, daha yüksek potansiyel enerji daha yüksek başlangıç ve akma gerilimlerine yol açar ve sonuç Elastisite Modülünün artması şeklinde ortaya çıkar. Doygunluk bölgesinde ise negatif (çekirdek) gerilim baskın hale gelir ve modülün değerini azaltır.



Şekil 3.23. FCC-Rh NT' lerin 300 K ve 0.001 ps-1 germe oranında Elastisite Modülleri.

Bu çalışmada, FCC kristal düzene sahip Rh nanotellerinin germe deformasyonu sırasında mekanik özelliklerinin değişimi incelenmiştir. İlk olarak nanotel sistemlerinin simülasyonlarında kullanılacak olan GAM potansiyeli Rh'ın katı durum düşük ve yüksek sıcaklıkları için bilinen özelliklerinin MD simülasyonları ile yeniden üretilmesi ile test edilmiştir. Örgü sabiti, bulk modülü, bağlanma enerji ve erime sıcaklığının yanında yüksek sıcaklıklara ait çiftler dağılım fonksiyonlarını deneysel veri ile uyumlu üretmesi sebebiyle önerilen GAM potansiyeli başarılı bulunmuş ve Rh nanotellerinin germe deformasyon simülasyonlarında kullanılmıştır. Deformasyona bağlı mekanik özellikler

germe oranı ve boyut olmak üzere iki dış etki altında ele alınmıştır. Aşağıda bu çalışmada incelenen mekanik özelliklerin bu iki dış etkiyle ilişkileri yorumlanmıştır:

i) Germe oranı: deformasyon esnasında kopan bağlar ile açığa çıkan enerji kinetik enerjiye dönüşür ve NT' nin bazı atomlarının hareketliliği artarak ilgili bölgede kristal düzeni bozulur. Bunun sonucunda enerjide ani düşüş gözlenir ve germe oranı düştükçe NT'de boyun oluşumu daha erken ortaya çıkmaktadır. 2.2 nm NT nin en yüksek dayanıma ve sünekliğe çalışmada kullanılan en hızlı germe oranı 0.01 ps^{-1} germe oranında sahip olduğu gözlenmiş olmasına rağmen elastik bölgede germe oranına bağlı gerilim - gerinim eğrilerinin neredeyse aynı eğimde olduğu görülmüştür. Akma - maksimum gerilim, süneklik ve bu eğimlerden hesaplanan Elastisite modülü, değerleri göz önüne alındığında Rh NT' lerin germe oranı ile mekanik özellikler arasında genel ilişki kurulamamıştır.

ii) Yüksek potansiyel enerji(PE) ve başlangıç gerilimine sahip olmasından dolayı 1.1 nm Rh NT' nin akma gerilimi ve gerinimi, maksimum gerilimi ve Elastisite modülü en yüksektir. Boyut arttıkça başlangıç gerilimi, akma ve maksimum gerilim ve Elastisite modülü aşamalı azalarak her nicelik için farklı bir limit değere ulaştığı gözlenmiştir. Genel olarak Rh NT' lerin elastisite modülleri bulk değerinden daha düşük hesaplanmıştır. . 3.5 A yüzey kalınlığı temel alınarak belirlenen kritik NT kalınlığı D_{kritik} ~ 2.8 nm olup, kritik değerden daha kalın NT' lerde yüzey etkilerinin baskınlığını yitirdiği ve çekirdek atomlarının kararlığı (yüksek bağlanma enerjisi) nedeniyle tüm NT sistemlerinin akma ve maksimum gerilimleri, akma gerinimi ve Elastisite modülünün çekirdek atomlarının davranışına uyacak şekilde davrandığı görülmüştür.

Özetle, yüksek germe oranı ve düşük boyutlu Rh NT' ler elastik zorlanmaya en fazla dayanırlar ve yüksek maksimum gerilime sahip olduklarından dolayı daha fazla sünektirler ve daha geç kırılırlar.

KAYNAKÇA

Alder, B. J., & Wainwright, T. E. (1959). Studies in molecular dynamics. I. General method. *The Journal of Chemical Physics*. https://doi.org/10.1063/1.1730376

Baek, H., Kashimura, K., Fujii, T., Tsubaki, S., Wada, Y., Fujikawa, S., Yamada, Y. M. A. (2020). Production of Bio Hydrofined Diesel, Jet Fuel, and Carbon Monoxide from Fatty Acids Using a Silicon Nanowire Array-Supported Rhodium Nanoparticle Catalyst under Microwave Conditions. *ACS Catalysis*, *10*(3), 2148–2156. https://doi.org/10.1021/acscatal.9b04784

Bystrzejewski, M., & Pyrzyńska, K. (2011). Kinetics of copper ions sorption onto activated carbon, carbon nanotubes and carbon-encapsulated magnetic nanoparticles. *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects*. https://doi.org/10.1016/j.colsurfa.2011.01.041

Celtek, M., Sengul, S., Domekeli, U., & Canan, C. (2016). Molecular dynamics study of structure and glass forming ability of Zr70Pd30 alloy. *European Physics Journal B 89*, 65–65. https://doi.org/10.1140/epjb/e2016-60694-5

Cheng, Y. Q., Ma, E., & Sheng, H. W. (2009). Atomic Level Structure in Multicomponent Bulk Metallic Glass. *Physical Review Letters*, *102*(24), 245501. https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.102.245501

Cuenot, S., Frétigny, C., Demoustier-Champagne, S., & Nysten, B. (2004). Surface tension effect on the mechanical properties of nanomaterials measured by atomic force microscopy. *Physical Review B*, *69*(16), 165410. https://doi.org/10.1103/PhysRevB.69.165410

Daw, Murray S., & Baskes, M. I. (1984). Embedded-atom method: Derivation and application to impurities, surfaces, and other defects in metals. *Physical Review B*, *29*(12), 6443–6453. https://doi.org/10.1103/PhysRevB.29.6443

Deb Nath, S. K., & Kim, S.-G. (2012). On the elastic, elastic-plastic properties of Au

nanowires in the range of diameter 1-200 nm. *Journal of Applied Physics*, *112*(12), 123522. https://doi.org/10.1063/1.4770356

Diao, J., Gall, K., Dunn, M. L., & Zimmerman, J. A. (2006). Atomistic simulations of the yielding of gold nanowires. *Acta Materialia*, *54*(3), 643–653. https://doi.org/10.1016/j.actamat.2005.10.008

Ercolessi, F. (1997). Introductory Molecular Dynamics, A Molecular Dynamics Primer. *Spring College in Computational Physics, ICTP, Trieste*.

Ercolessi, F., Tosatti, E., & Parrinello, M. (1986). Au (100) Surface Reconstruction. *Physical Review Letters*, *57*(6), 719–722. https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.57.719

Foiles, S. M., Baskes, M. I., & Daw, M. S. (1986). Embedded-atom-method functions for the fcc metals Cu, Ag, Au, Ni, Pd, Pt, and their alloys. *Physical Review B*, *33*(12), 7983–7991. https://doi.org/10.1103/PhysRevB.33.7983

Frenkel, D., & Smit, B. (1996). *Understanding molecular simulation: From algorithms to applications*. *Understanding molecular simulation: From algorithms to applications*.

Frenkel, N. A., Binder K., Grubmüller H., (2004). *Computational Soft Matter: From Synthetic Polymers to Proteins, Lecture Notes,*. *NIC Series*. https://doi.org/ISBN 3-00-012641-4

Geng, L., Yan, F., Dong, C., & An, C. (2019). Design and Regulation of Novel MnFe2O4@C Nanowires as High Performance Electrode for Supercapacitor. *Nanomaterials*, *9*(5), 777. https://doi.org/10.3390/nano9050777

Guder, V., & Sengul, S. (2020). Tensile strength and failure mechanism of hcp zirconium nanowires: Effect of diameter, temperature and strain rate. *Computational Materials Science*, *177*, 109551. https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2020.109551

Hu, L., & Chen, G. (2007). Analysis of Optical Absorption in Silicon Nanowire Arrays for Photovoltaic Applications. *Nano Letters*, *7*(11), 3249–3252. https://doi.org/10.1021/nl071018b

Huang, D., Zhang, Q., & Qiao, P. (2011). Molecular dynamics evaluation of strain rate and size effects on mechanical properties of FCC nickel nanowires. *Computational Materials Science*, *50*(3), 903–910.

https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2010.10.028

Hüger, E., & Osuch, K. (2004). Ferromagnetism in body centred cubic Rh. *Solid State Communications*. *Solid State Communications*, 131, 175-179. https://doi.org/10.1016/j.ssc.2004.05.013

Iijima, S., Qin, L. C., Hong, B. H., Bae, S. C., Youn, S. J., & Kim, K. S. (2002). Electron Microscopic Characterization of Silver Nanowire Arrays. *Science*, *296*(5568), 611a – 611. https://doi.org/10.1126/science.296.5568.611a

Jennings, A. T., Weinberger, C. R., Lee, S.-W., Aitken, Z. H., Meza, L., & Greer, J. R. (2013). Modeling dislocation nucleation strengths in pristine metallic nanowires under experimental conditions. *Acta Materialia*, *61*(6), 2244–2259. https://doi.org/10.1016/j.actamat.2012.12.044

Jing, G. Y., Duan, H. L., Sun, X. M., Zhang, Z. S., Xu, J., Li, Y. D., … Yu, D. P. (2006). Surface effects on elastic properties of silver nanowires: Contact atomic-force microscopy. *Physical Review B*, *73*(23), 235409. https://doi.org/10.1103/PhysRevB.73.235409

Kittel, C. (2004). Introduction to Solid State Physics, 8th edition. *Wiley & Sons, New York, NY*.

Koh, S. J. A., & Lee, H. P. (2006). Molecular dynamics simulation of size and strain rate dependent mechanical response of FCC metallic nanowires. *Nanotechnology*, *17*(14), 3451–3467. https://doi.org/10.1088/0957-4484/17/14/018

Koh, S. J. A., Lee, H. P., Lu, C., & Cheng, Q. H. (2005). Molecular dynamics simulation of a solid platinum nanowire under uniaxial tensile strain: Temperature and strain-rate effects. *Physical Review B*, *72*(8), 085414. https://doi.org/10.1103/PhysRevB.72.085414

Li, X., Ono, T., Wang, Y., & Esashi, M. (2003). Ultrathin single-crystalline-silicon cantilever resonators: Fabrication technology and significant specimen size effect on Young's modulus. *Applied Physics Letters*, *83*(15), 3081–3083. https://doi.org/10.1063/1.1618369

Liang, H., Upmanyu, M., & Huang, H. (2005). Size-dependent elasticity of nanowires: Nonlinear effects. *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, *71*(24), 1–4. https://doi.org/10.1103/PhysRevB.71.241403

Liang, W., & Zhou, M. (2003). Size and Strain Rate Effects in Tensile Deformation of

Cu Nanowires. Içinde *2003 Nanotechnology Conference and Trade Show - Nanotech* (C. 2, ss. 452–455). https://doi.org/10.2514/6.2003-1612

Lieber, C. M. (2003). Nanoscale Science and Technology: Building a Big Future from Small Things. *MRS Bulletin*, *28*(7), 486–491. https://doi.org/10.1557/mrs2003.144

Liu, K. H., Wang, W. L., Xu, Z., Liao, L., Bai, X. D., & Wang, E. G. (2006). In situ probing mechanical properties of individual tungsten oxide nanowires directly grown on tungsten tips inside transmission electron microscope. *Applied Physics Letters*. https://doi.org/10.1063/1.2397547

Lucas, M., Leach, A. M., McDowell, M. T., Hunyadi, S. E., Gall, K., Murphy, C. J., & Riedo, E. (2008). Plastic deformation of pentagonal silver nanowires: Comparison between AFM nanoindentation and atomistic simulations. *Physical Review B*, *77*(24), 245420. https://doi.org/10.1103/PhysRevB.77.245420

McDowell, M. T., Leach, A. M., & Gall, K. (2008). Bending and tensile deformation of metallic nanowires. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, *16*(4), 045003. https://doi.org/10.1088/0965-0393/16/4/045003

Merker, J., Lupton, D., Töpfer, M., & Knake, H. (2001). High temperature mechanical properties of the platinum group metals: Elastic properties of platinum, rhodium and iridium and their alloys at high temperatures. *Platinum Metals Review*, *45*(2), 74–82.

Mishin, Y., Farkas, D., Mehl, M. J., & Papaconstantopoulos, D. A. (1999). Interatomic potentials for monoatomic metals from experimental data and ab initio calculations. *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*. https://doi.org/10.1103/PhysRevB.59.3393

Moghimian, N., Sam, M., & Bhiladvala, R. B. (2013). Rhodium nanowires: Synthesis and nanostructure tailoring by controlling hydrogen evolution. *Materials Letters*, *113*, 152–155. https://doi.org/10.1016/j.matlet.2013.09.080

Morcalı, S., & Aktaş, S. (2014). Atık Rodyum Kaplama Çözeltilerinden Rodyum Geri Kazanımı. *Marmara University Journal of Science*, *26*(3), 56. https://doi.org/10.7240/mufbed.05698

Moruzzi, V. L., & Marcus, P. M. (1989). Magnetism in fcc rhodium and palladium. *Physical Review B*, 39, 471. https://doi.org/10.1103/PhysRevB.39.471

Nam, C.-Y., Jaroenapibal, P., Tham, D., Luzzi, D. E., Evoy, S., & Fischer, J. E. (2006).

Diameter-Dependent Electromechanical Properties of GaN Nanowires. *Nano Letters*, *6*(2), 153–158. https://doi.org/10.1021/nl051860m

Nilsson, S. G., Borrisé, X., & Montelius, L. (2004). Size effect on Young's modulus of thin chromium cantilevers. *Applied Physics Letters*, *85*(16), 3555–3557. https://doi.org/10.1063/1.1807945

Nordberg, G., Fowler, B., Monica, N., Bruce, N., Lars F., Handbook on the Toxicology of Metals. (2015). Elsevier. https://doi.org/10.1016/C2011-0-07884-5

Nosé, S. (1984). A unified formulation of the constant temperature molecular dynamics methods. *The Journal of Chemical Physics*, *81*(1), 511–519. https://doi.org/10.1063/1.447334

Nysten, B., Fretigny, C., & Cuenot, S. (2005). Elastic modulus of nanomaterials: resonant contact-AFM measurement and reduced-size effects (Invited Paper). *Testing, Reliability, and Application of Micro- and Nano-Material Systems III*, *5766*(May 2005), 78. https://doi.org/10.1117/12.604981

Plimpton, S. (1995). Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics. *Journal of Computational Physics*, *117*(1), 1–19. https://doi.org/10.1006/JCPH.1995.1039

Sainath, G., Choudhary, B. K., & Jayakumar, T. (2015). Molecular dynamics simulation studies on the size dependent tensile deformation and fracture behaviour of body centred cubic iron nanowires. *Computational Materials Science*, *104*, 76–83. https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2015.03.053

Sheng, H. W., Kramer, M. J., Cadien, A., Fujita, T., & Chen, M. W. (2011). Highly optimized embedded-atom-method potentials for fourteen fcc metals. *Physical Review B*, *83*(13), 134118. https://doi.org/10.1103/PhysRevB.83.134118

Simmons, G., & Wang, H. (1971). *Single Crystal Elastic Constants and Calculated Aggregate Properties* (2. baskı). Cambridge,MA: M.I.T. Press.

Sofiah, A. G. N., Samykano, M., Kadirgama, K., Mohan, R. V., & Lah, N. A. C. (2018). Metallic nanowires: Mechanical properties – Theory and experiment. *Applied Materials Today*, *11*, 320–337. https://doi.org/10.1016/j.apmt.2018.03.004

von Mises, R. (1913). Mechanik der festen Körper im plastisch-deformablen Zustand. *Nachrichten von der Gesellschaft der Wissenschaften zu Göttingen, Mathematisch-Physikalische Klasse*.

Wang, W., Yi, C., & Ma, B. (2013). Molecular dynamics simulation on the tensile behavior of gold nanowires with diameters between 3 and 6 nm. *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part N: Journal of Nanoengineering and Nanosystems*.227(3), 135-141. https://doi.org/10.1177/1740349913481591

Wen, X., Xie, Y., Choi, C. L., Wan, K. C., Li, X.-Y., & Yang, S. (2005). Copper-Based Nanowire Materials: Templated Syntheses, Characterizations, and Applications. *Langmuir*, *21*(10), 4729–4737. https://doi.org/10.1021/la050038v

Williams, P. L., Mishin, Y., & Hamilton, J. C. (2006). An embedded-atom potential for the Cu–Ag system. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, *14*(5), 817–833. https://doi.org/10.1088/0965-0393/14/5/002

Wu, B., Heidelberg, A., & Boland, J. J. (2005). Mechanical properties of ultrahigh-strength gold nanowires. *Nature Materials*, *4*(7), 525–529. https://doi.org/10.1038/nmat1403

Wu, H. A., Soh, A. K., Wang, X. X., & Sun, Z. H. (2004). Strength and Fracture of Single Crystal Metal Nanowire. *Key Engineering Materials*, *261–263*, 33–38. https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/KEM.261-263.33

Xin, C., Jian-Tao, W., Xi-Xia, L., & Guo-Zhong, Z. (2010). Mechanical and Magnetic Properties of Rh and RhH: First-Principles Calculations. *Chinese Physics Letters*, *27*(2), 027101. https://doi.org/10.1088/0256-307X/27/2/027101

Zhang, L., Liu, L., Wang, H., Shen, H., Cheng, Q., Yan, C., & Park, S. (2017). Electrodeposition of Rhodium Nanowires Arrays and Their Morphology-Dependent Hydrogen Evolution Activity. *Nanomaterials*, *7*(5), 103. https://doi.org/10.3390/nano7050103

Zhang, Q., Li, Q.-K., & Li M. (2017), Key factors affecting mechanical behavior of metallic glass nanowires, *Scientific Reports* 7, 41365. https://doi.org/10.1038/srep41365.

Zhang, Y., & Huang, H. (2009). Do Twin Boundaries Always Strengthen Metal Nanowires? *Nanoscale Research Letters*, *4*(1), 34–38. https://doi.org/10.1007/s11671-008-9198-1

Zhu, T., & Li, J. (2010). Ultra-strength materials. *Progress in Materials Science*, *55*(7), 710–757. https://doi.org/10.1016/j.pmatsci.2010.04.001

Zhu, T., Li, J., Samanta, A., Leach, A., & Gall, K. (2008). Temperature and Strain-Rate

Dependence of Surface Dislocation Nucleation. *Physical Review Letters*, *100*(2), 025502. https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.100.025502

Zhu, Y., Qin, Q., Xu, F., Fan, F., Ding, Y., Zhang, T., Wang, Z. L. (2012). Size effects on elasticity, yielding, and fracture of silver nanowires: In situ experiments. *Physical Review B*, *85*(4), 045443. https://doi.org/10.1103/PhysRevB.85.045443

ÖZGEÇMİŞ

Adı Soyadı	: **Alper Koray GÜNER**
Yabancı Dil	: **İngilizce**
Doğum Yeri ve Yılı	: **Sivas, 1987**
e-posta	: alperkorayguner@hotmail.com alperkorayguner@gmail.com
Cep Telefonu	: **+90 555 607 3887**

Eğitim(Mezuniyetler)

- Trakya Üniversitesi - Eğitim Fakültesi - Pedagojik Formasyon – *Edirne*
- Trakya Üniversitesi - Fen Fakültesi - Fizik Anabili Dalı - *Edirne*
- E.C.A Elginkan Anadolu Lisesi - *İstanbul*
- Güzin Dinçkök Ortaokulu - *İstanbul*
- Yılmaz Soyak İlköğretim Okulu - *İstanbul*

Uzmanlık, Sertifika ve Eğitici Eğitmenlikleri

B sınıfı İş Güvenliği Uzmanı, C sınıfı İş Güvenliği Uzmanı, Yangın Eğitici Eğitmeni, Yüksekte Çalışma Eğitici Eğitmeni, Acil Durum Kriz Yönetimi Eğitici Eğitmeni, Eğiticinin Eğitimi Uzmanı, İç Denetim Eğitmeni, İlk Yardımcı, Sistem ve Ağ Uzmanı, Web & Grafik Tasarımı Uzmanı, Google Tag Manager

Mesleki Tecrübe

İş Güvenliği ve iç denetim işlerinde sorumlu müdürlük ve uzmanlık görevlerini ifa edip 20 farklı iş kolunda 300 iş yeri denetimi/kontrolü yaptım, 350 risk analizi yazdım, yaklaşık 16bin insana Temel İş Sağlığı ve Güvenliği, Yangın, Acil Durum Kriz Yönetimi ve Yüksekte Çalışma eğitimleri verdim. Öğretmenlikte yaklaşık 250 özel öğrenciye ders verip, 2 MEB okulu ve 3 özel kolejde Fizik öğretmenliği görevlerini yerine getirdim.

EKLER

EK 1

Germe simülasyonlarında kullanılan betik aşağıda sunulmuştur.

```
units       metal
dimension   3
boundary    s s p
atom_style  atomic
atom_modify map array

# ---------------------- DATA ---------------------------
read_data data.Rh
mass 1 106.42

# ---------------------- POTANSIYEL ---------------------
pair_style eam/alloy
pair_coeff * *  Rh.lammps.eam Rh
neighbor  0.3 bin
neigh_modify delay 10
# ---------- SIMULASYON KUTUSU TANIMLARI--------------------
thermo 100
velocity all create 300 16723
thermo_style custom step temp etotal vol press pxx pyy pzz lx ly lz
shell mkdir dump
shell cd dump

variable L equal  68.2696792777673
variable dz equal ${L}*0.1
variable z1 equal -0.10
variable z2 equal ${dz}

region Lower block INF INF INF INF ${z1} ${z2} units box
group Lower region Lower

variable z3 equal ${L}-${dz}
variable z4 equal ${L}
region Upper block INF INF INF INF ${z3} ${z4} units box
group Upper region Upper
```

```
group boundary union Lower Upper
group middle_atoms subtract all boundary
#------------ONEMLI: ----------------------------------------------
#--datadan okudugun xlo ve ylo- yani   xmin = xlo+3.5---------------
#----- yani   xmax = xhi-3.5 olsun ---------------------------------
#---  kor kisminin xmin xmax  ymin ymax  degerleri : ---------------

region core block   2.58 18.336   2.58 18.336    ${z2} ${z3}
group  core_atoms region core
group shell_atoms subtract middle_atoms core_atoms
#---------------ENERJI DENGELEME-----------------------------------
reset_timestep 0
fix 1 middle_atoms nve
fix 2 middle_atoms temp/rescale 10 300 300 1.0 0.5
dump 1 all custom 1000 dump.equilibrate.* id type x y z

run 10000
unfix 1
unfix 2

undump 1
shell cd ..
shell mkdir deform
shell cd deform
#--------------------GERME BASLANGICI-----------------------------
variable tmp equal "lz"
variable L0 equal ${tmp}
print "Initial Length, L0: ${L0}"
variable strain equal "v_srate/1e12"
variable strain equal "(lz - v_L0)/v_L0"

#------------DEFORMASYON-----------------------------------------

reset_timestep 0
fix 1 all deform 1 z erate 0.001 units box
fix 2 middle_atoms nvt temp 300 300 10.0
fix 3 middle_atoms temp/rescale 10 300 300 0.05 1.0

compute csym all centro/atom 12
compute        peratom all pe/atom
compute        pe all reduce sum c_peratom
#----------------orta bolgedeki tum atomlar: kor+shell ----------
compute  peratom1 middle_atoms pe/atom
compute  pe1      middle_atoms reduce sum c_peratom1
compute 1 middle_atoms stress/atom NULL pair bond
compute 2 middle_atoms temp
compute 3 middle_atoms reduce sum c_1[1]
compute 4 middle_atoms reduce sum c_1[2]
compute 5 middle_atoms reduce sum c_1[3]

variable p1 equal c_3/(vol)/10000
```

```
variable p2 equal c_4/(vol)/10000
variable p3 equal c_5/(vol)/10000

#-------------------------------------------------------------------
#-----------------kor bolgesindeki atomlar icin---------------------
compute  peratom11 core_atoms pe/atom
compute  pe11      core_atoms reduce sum c_peratom11

compute 11 core_atoms stress/atom NULL pair bond
compute 21 core_atoms temp
compute 31 core_atoms reduce sum c_11[1]
compute 41 core_atoms reduce sum c_11[2]
compute 51 core_atoms reduce sum c_11[3]
variable p11 equal c_31/(vol)/10000
variable p21 equal c_41/(vol)/10000
variable p31 equal c_51/(vol)/10000

#-------------------------------------------------------------------
#-----------------shell bolgesindeki atomlar icin-------------------
compute  peratom12 shell_atoms pe/atom
compute  pe12      shell_atoms reduce sum c_peratom12
compute 12 shell_atoms stress/atom NULL pair bond
compute 22 shell_atoms temp
compute 32 shell_atoms reduce sum c_12[1]
compute 42 shell_atoms reduce sum c_12[2]
compute 52 shell_atoms reduce sum c_12[3]
variable p12 equal c_32/(vol)/10000
variable p22 equal c_42/(vol)/10000
variable p32 equal c_52/(vol)/10000
#-------------------------------------------------------------
thermo 100
thermo_style    custom step v_strain v_p3 v_p31 v_p32 temp c_2 c_21
c_22 vol  pe etotal c_pe1 c_pe11 c_pe12

thermo_modify line one flush yes format 1 "OUTPUT  %8lu" format float
"%16.10g"
#dump 2 middle_atoms custom 10000 dump.mid.* id type x y z
#dump 21 core_atoms custom 10000 dump.cor.* id type x y z
#dump 22 shell_atoms custom 10 dump.she.* id type x y z
dump 4 all xyz 10000 dump.all.xyz
dump 20 all custom 10000 dump.* id type x y z c_csym
run 1000000
```

```
# ---------------------- DATA --------------------------
read_data data.Rh
mass 1 106.42

# --------------------- POTANSIYEL --------------------
pair_style eam/alloy
pair_coeff * *  Rh.lammps.eam Rh
neighbor  0.3 bin
neigh_modify delay 10
# ---------- SIMULASYON KUTUSU TANIMLARI--------------------
thermo 100
velocity all create 300 16723
thermo_style custom step temp etotal vol press pxx pyy pzz lx ly lz
shell mkdir dump
shell cd dump

variable L equal  68.2696792777673
variable dz equal ${L}*0.1
variable z1 equal -0.10
variable z2 equal ${dz}

region Lower block INF INF INF INF ${z1} ${z2} units box
group Lower region Lower

variable z3 equal ${L}-${dz}
variable z4 equal ${L}
region Upper block INF INF INF INF ${z3} ${z4} units box
group Upper region Upper

group boundary union Lower Upper
group middle_atoms subtract all boundary
#------------ONEMLI: ------------------------------------------------
#--datadan okudugun xlo ve ylo- yani   xmin = xlo+3.5---------------
#----- yani   xmax = xhi-3.5 olsun ---------------------------------
#---  kor kisminin xmin xmax  ymin ymax  degerleri : ---------------

region core block   2.58 18.336   2.58 18.336    ${z2} ${z3}
group  core_atoms region core
group shell_atoms subtract middle_atoms core_atoms
#---------------ENERJI DENGELEME---------------------------------
reset_timestep 0
fix 1 middle_atoms nve
fix 2 middle_atoms temp/rescale 10 300 300 1.0 0.5
dump 1 all custom 1000 dump.equilibrate.* id type x y z

run 10000
unfix 1
unfix 2

undump 1
shell cd ..
shell mkdir deform
```

```
shell cd deform
#-------------------GERME BASLANGICI-----------------------------
variable tmp equal "lz"
variable L0 equal ${tmp}
print "Initial Length, L0: ${L0}"
variable strain equal "v_srate/1e12"
variable strain equal "(lz - v_L0)/v_L0"

#------------DEFORMASYON-----------------------------------------

reset_timestep 0
fix 1 all deform 1 z erate 0.001 units box
fix 2 middle_atoms nvt temp 300 300 10.0
fix 3 middle_atoms temp/rescale 10 300 300 0.05 1.0

compute csym all centro/atom 12
compute        peratom all pe/atom
compute        pe all reduce sum c_peratom
#----------------orta bolgedeki tum atomlar: kor+shell ----------
compute  peratom1 middle_atoms pe/atom
compute  pe1      middle_atoms reduce sum c_peratom1
compute 1 middle_atoms stress/atom NULL pair bond
compute 2 middle_atoms temp
compute 3 middle_atoms reduce sum c_1[1]
compute 4 middle_atoms reduce sum c_1[2]
compute 5 middle_atoms reduce sum c_1[3]

variable p1 equal c_3/(vol)/10000
variable p2 equal c_4/(vol)/10000
variable p3 equal c_5/(vol)/10000

#-----------------------------------------------------------------
#-----------------kor bolgesindeki atomlar icin-------------------
compute  peratom11 core_atoms pe/atom
compute  pe11      core_atoms reduce sum c_peratom11

compute 11 core_atoms stress/atom NULL pair bond
compute 21 core_atoms temp
compute 31 core_atoms reduce sum c_11[1]
compute 41 core_atoms reduce sum c_11[2]
compute 51 core_atoms reduce sum c_11[3]
variable p11 equal c_31/(vol)/10000
variable p21 equal c_41/(vol)/10000
variable p31 equal c_51/(vol)/10000

#-----------------------------------------------------------------
#-----------------shell bolgesindeki atomlar icin-----------------
compute  peratom12 shell_atoms pe/atom
compute  pe12      shell_atoms reduce sum c_peratom12
compute 12 shell_atoms stress/atom NULL pair bond
compute 22 shell_atoms temp
compute 32 shell_atoms reduce sum c_12[1]
```

```
compute 42 shell_atoms reduce sum c_12[2]
compute 52 shell_atoms reduce sum c_12[3]
variable p12 equal c_32/(vol)/10000
variable p22 equal c_42/(vol)/10000
variable p32 equal c_52/(vol)/10000
#------------------------------------------------------------
thermo 100
thermo_style    custom step v_strain v_p3 v_p31 v_p32 temp c_2 c_21
c_22 vol  pe etotal c_pe1 c_pe11 c_pe12

thermo_modify line one flush yes format 1 "OUTPUT  %8lu" format float
"%16.10g"
#dump 2 middle_atoms custom 10000 dump.mid.* id type x y z
#dump 21 core_atoms custom 10000 dump.cor.* id type x y z
#dump 22 shell_atoms custom 10 dump.she.* id type x y z
dump 4 all xyz 10000 dump.all.xyz
dump 20 all custom 10000 dump.* id type x y z c_csym
run 1000000


# ----------------------- DATA ----------------------------
read_data data.Rh
mass 1 106.42

# ---------------------- POTANSIYEL ---------------------
pair_style eam/alloy
pair_coeff * *  Rh.lammps.eam Rh
neighbor  0.3 bin
neigh_modify delay 10
# ---------- SIMULASYON KUTUSU TANIMLARI--------------------
thermo 100
velocity all create 300 16723
thermo_style custom step temp etotal vol press pxx pyy pzz lx ly lz
shell mkdir dump
shell cd dump

variable L equal  68.2696792777673
variable dz equal ${L}*0.1
variable z1 equal -0.10
variable z2 equal ${dz}

region Lower block INF INF INF INF ${z1} ${z2} units box
group Lower region Lower

variable z3 equal ${L}-${dz}
variable z4 equal ${L}
region Upper block INF INF INF INF ${z3} ${z4} units box
group Upper region Upper

group boundary union Lower Upper
group middle_atoms subtract all boundary
#------------ONEMLI: ----------------------------------------------
```

```
#--datadan okudugun xlo ve ylo- yani   xmin = xlo+3.5---------------
#----- yani   xmax = xhi-3.5 olsun --------------------------------
#---  kor kisminin xmin xmax  ymin ymax  degerleri : ---------------

region core block   2.58 18.336   2.58 18.336    ${z2} ${z3}
group  core_atoms region core
group shell_atoms subtract middle_atoms core_atoms
#---------------ENERJI DENGELEME---------------------------------
reset_timestep 0
fix 1 middle_atoms nve
fix 2 middle_atoms temp/rescale 10 300 300 1.0 0.5
dump 1 all custom 1000 dump.equilibrate.* id type x y z

run 10000
unfix 1
unfix 2

undump 1
shell cd ..
shell mkdir deform
shell cd deform
#--------------------GERME BASLANGICI-----------------------------
variable tmp equal "lz"
variable L0 equal ${tmp}
print "Initial Length, L0: ${L0}"
variable strain equal "v_srate/1e12"
variable strain equal "(lz - v_L0)/v_L0"

#------------DEFORMASYON-----------------------------------------

reset_timestep 0
fix 1 all deform 1 z erate 0.001 units box
fix 2 middle_atoms nvt temp 300 300 10.0
fix 3 middle_atoms temp/rescale 10 300 300 0.05 1.0

compute csym all centro/atom 12
compute        peratom all pe/atom
compute        pe all reduce sum c_peratom
#----------------orta bolgedeki tum atomlar: kor+shell ----------
compute  peratom1 middle_atoms pe/atom
compute  pe1      middle_atoms reduce sum c_peratom1
compute 1 middle_atoms stress/atom NULL pair bond
compute 2 middle_atoms temp
compute 3 middle_atoms reduce sum c_1[1]
compute 4 middle_atoms reduce sum c_1[2]
compute 5 middle_atoms reduce sum c_1[3]
compute  peratom1 middle_atoms pe/atom
compute  pe1      middle_atoms reduce sum c_peratom1
compute 1 middle_atoms stress/atom NULL pair bond
compute 2 middle_atoms temp
compute 3 middle_atoms reduce sum c_1[1]
compute 4 middle_atoms reduce sum c_1[2]
```

```
compute 5 middle_atoms reduce sum c_1[3]


variable p1 equal c_3/(vol)/10000
variable p2 equal c_4/(vol)/10000
variable p3 equal c_5/(vol)/10000

#------------------------------------------------------------------------
#-----------------kor bolgesindeki atomlar icin-----------------------
compute  peratom11 core_atoms pe/atom
compute  pe11      core_atoms reduce sum c_peratom11

compute 11 core_atoms stress/atom NULL pair bond
compute 21 core_atoms temp
compute 31 core_atoms reduce sum c_11[1]
compute 41 core_atoms reduce sum c_11[2]
compute 51 core_atoms reduce sum c_11[3]
variable p11 equal c_31/(vol)/10000
variable p21 equal c_41/(vol)/10000
variable p31 equal c_51/(vol)/10000
compute 11 core_atoms stress/atom NULL pair bond
compute 21 core_atoms temp
compute 31 core_atoms reduce sum c_11[1]
compute 41 core_atoms reduce sum c_11[2]
compute 51 core_atoms reduce sum c_11[3]
variable p11 equal c_31/(vol)/10000
variable p21 equal c_41/(vol)/10000
variable p31 equal c_51/(vol)/10000


#------------------------------------------------------------------------
#-----------------shell bolgesindeki atomlar icin---------------------
compute  peratom12 shell_atoms pe/atom
compute  pe12      shell_atoms reduce sum c_peratom12
compute 12 shell_atoms stress/atom NULL pair bond
compute 22 shell_atoms temp
compute 32 shell_atoms reduce sum c_12[1]
compute 42 shell_atoms reduce sum c_12[2]
compute 52 shell_atoms reduce sum c_12[3]
variable p12 equal c_32/(vol)/10000
variable p22 equal c_42/(vol)/10000
variable p32 equal c_52/(vol)/10000
compute  peratom12 shell_atoms pe/atom
compute  pe12      shell_atoms reduce sum c_peratom12
compute 12 shell_atoms stress/atom NULL pair bond
compute 22 shell_atoms temp
compute 32 shell_atoms reduce sum c_12[1]
compute 42 shell_atoms reduce sum c_12[2]
compute 52 shell_atoms reduce sum c_12[3]
variable p12 equal c_32/(vol)/10000
variable p22 equal c_42/(vol)/10000
variable p32 equal c_52/(vol)/10000
```

```
#-----------------------------------------------------------------
thermo 100
thermo_style    custom step v_strain v_p3 v_p31 v_p32 temp c_2 c_21
c_22 vol  pe etotal c_pe1 c_pe11 c_pe12

thermo_modify line one flush yes format 1 "OUTPUT  %8lu" format float
"%16.10g"
#dump 2 middle_atoms custom 10000 dump.mid.* id type x y z
#dump 21 core_atoms custom 10000 dump.cor.* id type x y z
#dump 22 shell_atoms custom 10 dump.she.* id type x y z
dump 4 all xyz 10000 dump.all.xyz
dump 20 all custom 10000 dump.* id type x y z c_csym
run 1000000
```