

Üniversitesi	: İstanbul Teknik Üniversitesi
Enstitüsü	: Bilişim Enstitüsü
Anabilim Dalı	: Hesaplamalı Bilim ve Mühendisliği
Programı	: Hesaplamalı Bilim ve Mühendisliği
Tez Danışmanı	: Prof. Dr. Sondan DURUKANOĞLU FEYİZ
Tez Türü ve Tarihi	: Doktora – Haziran 2013

ÖZET

NANOYAPILI İKİLİ METAL ALAŞIMLARIN ÖZELLİKLERİ

Berk ONAT

Bu Tez çalışmasında, Gömülü Atom Yöntemi (GAY) kullanılarak Cu-Ni alaşımları için yük yoğunluğu tanımlamaları yeniden düzenlenmiş ve bu tanım kullanılarak yarı deneysel çok cisimli model potansiyeller üretilmiştir. Cu ve Ni saf elementleri için yük yoğunluğu tanımı, 3d valans elektron yoğunluğuna 4s elektron yoğunluğunun katkısı eklenerek sağlanmıştır. Potansiyel fonksiyon parametrelerinin ayarlanması için uyumlu parçacık sürüsü optimizasyon (APSO) yönteminden yararlanılmış, yöntemin hesaplama süresinin kısaltılması için ise MPI tabanlı paralel dağıtık algoritmalar kullanılmıştır. Ayrıca, APSO yönteminde yerel minimum durumlarından kaçınılmasını sağlayan 'Elit Öğrenme' süreci paralel programlama algoritmaları yardımıyla hem dağıtık mimaride geliştirilmiş hem de birden fazla sayıda alınarak yakınsama hızının artırılması sağlanmıştır. Potansiyel fonksiyonlarının hem saf Cu ve Ni, hem de Cu-Ni alaşımları için eğri ayarlanarak belirlenmesinde örgü sabiti, hacim modülü, elastik sabitler, boşluk oluşturma enerjisi, ikili bağ uzunluğu ve enerjisi gibi deneysel ve ilk-ilke değerleri kullanılmıştır. Üretilen potansiyellerin sınanması için ise saf Cu, Ni ve çeşitli Cu-Ni alaşımlarının özellikleri hesaplanmıştır. Bu özellikler; erime sıcaklıkları, alaşım oluşturma entalpisi, titreşim termodinamik fonksiyonları, denge durumu örgü yapıları, alaşım boşluk oluşturma enerjisi, istifleme hatası ve çatlak oluşma enerjileri ile (100) ve (111) yüzeylerinde Cu ve Ni ekatomları için hesaplanan bir çok difüzyon engel değerleridir.

Anahtar Kelimeler: Bakır-Nikel, Cu-Ni alaşımlar, Etkileşim potansiyeli, Gömülü Atom Yöntemi, Termodinamik özellikler, Cu(111) yüzeyinde Ni büyütme, nanoyapılar, Cu nanoteller

University : İstanbul Technical University
Institute : Institute of Informatics
Science Programme : Computational Science and Engineering
Programme : Computational Science and Engineering
Supervisor : Prof. Dr. Sondan DURUKANOĞLU FEYİZ
Degree Awarded and Date : PhD – June 2013

ABSTRACT

THE PROPERTIES OF NANOSTRUCTURED BINARY METAL ALLOYS

Berk ONAT

In this Thesis, a new semi-empirical and many-body type model potential for Cu-Ni alloys was developed using embedded atom method (EAM) formalism based on a modified charge density profile with an improved optimization technique. In the process, the charge density profile for pure Cu and Ni elements was modified by incorporating the 4s charge density contribution within the optimization. The adaptive particle swarm optimization (APSO) method was utilized to search the parameter space of the EAM functions. The technique was further optimized by implementing MPI based parallel algorithms. The potential was furnished by fitting to experimental and first-principle data for Cu, Ni, and Cu-Ni binary compounds, such as lattice constants, cohesive energies, bulk modulus, elastic constants, diatomic bond lengths, and bond energies. The generated potentials were then tested through computing a variety of properties of pure elements and the alloy of Cu, Ni: the melting points, alloy mixing enthalpy, vibrational thermodynamical functions, equilibrium lattice structures, vacancy formation, stacking and interstitial formation energies, various diffusion barriers on the (100) and (111) surfaces of Cu and Ni, and the growth mechanisms of Ni, Cu nanostructures on the Cu(111) surface both using molecular dynamic (MD) simulations and total energy calculations.

Keywords: copper, nickel, Cu-Ni, alloys, interatomic potential, embedded-atom method, elastic constants, deformation, phonons, vibrational thermodynamics, nanostructure, nanocluster, nanowire, growth, Cu(111) surface