

Cu_n (n=3, 4, 5) MİKROKÜMELERİNİN AYRIŞMA SICAKLIKLARI

**Pamukkale Üniversitesi
Fen Bilimleri Enstitüsü
Yüksek Lisans Tezi
Fizik Anabilim Dalı**

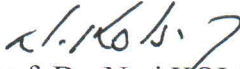
Bilge YILDIRIMOĞLU

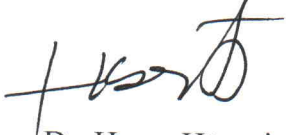
Danışman: Prof. Dr. Nuri KOLSUZ

**Ağustos, 2007
DENİZLİ**

YÜKSEK LİSANS TEZİ ONAY FORMU

Bilge KARAKILINÇ tarafından Prof. Dr. Nuri KOLSUZ yönetiminde hazırlanan “**Cu_n (n=3, 4, 5) Mikrokümlerinin Ayrışma Sıcaklıkları**” başlıklı tez tarafımızdan okunmuş, kapsamı ve niteliği açısından Yüksek Lisans Tezi olarak kabul edilmiştir.


Prof. Dr. Nuri KOLSUZ
Jüri Başkanı (Danışman)


Yard. Doç. Dr. Hasan Hüseyin KART
Jüri Üyesi


Yard. Doç. Dr. İzzet KARA
Jüri Üyesi

Pamukkale Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Yönetim Kurulunun 19/9/2007 tarih ve 17-22 sayılı kararıyla onaylanmıştır.

Prof. Dr. Mehmet Ali SARIGÖL
Müdür

TEŞEKKÜR

" Cu_n ($n = 3,4,5$) Mikrokümelerinin Ayrışma Sıcaklıkları" adlı yüksek lisans tezimin hazırlanmasında ilgi ve yardımlarını esirgemeyen değerli hocam Prof. Dr. Nuri KOLSUZ'a saygı ve şükranlarımı sunarım.

Başta yüksek lisans eğitimimde emeği geçen Fizik Bölümü hocalarıma, öğrenim hayatım boyunca her zaman beni destekleyen aileme, yardımlarından dolayı Pamukkale Üniversitesi Mühendislik Fakültesi Elektrik-Elektronik Mühendisliği Bölümünde Araştırma Görevlisi olan abim, Özgür Önder KARAKILINÇ'a çok teşekkür ederim.

Bu tezin tasarımı, hazırlanması, yürütülmesi, araştırılmalarının yapılması ve bulgularının analizlerinde bilimsel etiğe ve akademik kurallara özenle riayet edildiğini; bu çalışmanın doğrudan birincil ürünü olmayan bulguların, verilerin ve materyallerin bilimsel etiğe uygun olarak kaynak gösterildiğini ve alıntı yapılan çalışmalara atfedildiğini beyan ederim.

İmza



Öğrenci Adı Soyadı

Bilge YILDIRIMOĞLU

ÖZET

Cu_n (n=3, 4, 5) MİKROKÜMELERİNİN AYRIŞMA SICAKLIKLARI

Yıldırımoglu, Bilge
Yüksek Lisans Tezi, Fizik ABD
Tez Yöneticisi: Prof. Dr. Nuri KOLSUZ

Ağustos 2007, 56 Sayfa

Bu çalışmada; 3,4 ve 5 atomdan oluşan bakır mikrokümelerinin yapısal özellikleri sıcaklığa bağlı olarak Moleküler Dinamik Simülasyon Metodu kullanılarak incelendi. Bakır atomları arasındaki etkileşmeler iki ve üç cisim etkileşmelerini kapsayan yarı deneysel bir Potansiyel Enerji Fonksiyonu (PEF) kullanılarak temsil edildi. Cu_3 mikrokümesinde; 1 K'den başlayarak 4250 K sıcaklığına Cu_4 mikrokümesinde 1 K'den başlayarak 6200 K sıcaklığına, Cu_5 mikrokümesinde 1 K'den başlayarak 7950 K sıcaklığına kadar değişik sıcaklıklarda sistem kararlı yapıya geldiğinde atomlar arası uzaklıklar, sistemin etkileşme potansiyel enerjisi ve parçacıkların hızları hesaplandı. Elde edilen sonuçlar tablolar ve grafikler halinde verildi. Üç atomdan oluşan mikrokümede ilk kopmanın 4150 K civarında, dört atomdan oluşan mikrokümede ilk kopmanın 3950 K civarında, beş atomlu mikrokümede ise 4500 K civarında olduğu tespit edildi. Özellikle üç atomdan oluşan mikrokümede kararlı yapının her sıcaklıkta eşkenar üçgen şeklinde olduğu tespit edildi.

Anahtar Kelimeler: Mikrokümeler, Bakır Mikrokümeleri, Moleküler Dinamik Simülasyon

Prof. Dr. Nuri KOLSUZ
Yard. Doç. Dr. Hasan Hüseyin KART
Yard. Doç. Dr. İzzet KARA

ABSTRACT

DISSOCIATION TEMPERATURES OF Cu_n ($n=3, 4, 5$) MICROCLUSTER

Yıldırımoglu, Bilge
M. Sc. Thesis in Fizik
Supervisor: Prof. Dr. Nuri Kolsuz

Ağustos 2007, 56 Sayfa

In this work, the structural parameters of copper microclusters composed of 3, 4, 5 atoms were investigated by using Molecular Dynamics Simulations Method on a function of temperature. The interactions among copper atoms were presented by using semi empirical Potential Energy Function (PEF) included two and three body interactions. At various temperatures that is from 1 K to 4250 K for Cu_3 microcluster, 1 K to 6200 K for Cu_4 and from 1 K to 7950 K, when the system becomes steady state, distances between atoms, interaction potential energy of system and particle velocity were calculated and results were given in tables and graphics. It was determined significantly that the break down of one of the atoms from microcluster with three atoms observed at approximately 4150 K the first break down from of microcluster with four atoms occurred at near 3950 K, and that at the five atoms occurred near 4500 K. It was determined significantly that the stable structure of microcluster with three atoms for all temperature was in the form of equilateral triangle.

Keywords: Microclusters, Copper Microcluster, Molecular Dynamics Simulation

Prof. Dr. Nuri KOLSUZ
Assoc. Prof. Dr. Hasan Hüseyin KART
Assoc. Prof. Dr. İzzet KARA

İÇİNDEKİLER

	Sayfa
İçindekiler	VI
Şekiller Dizini.....	VII
Tablolar Dizini.....	VIII
Simgeler Dizini.....	IX
1. GİRİŞ.....	1
2. MATERYAL VE METOD.....	5
2.1.Moleküler Dinamik Simülasyon Metodu.....	5
2.1.1 Bir Simülasyonun Planlanması.....	6
2.1.2 Konum ve Hızların Belirlenmesi.....	7
2.2.Potansiyel Enerji Fonksiyonu ve Kuvvet İfadelerinin Türetilmesi.....	13
2.2.1.İkili Etkileşme Potansiyel Enerji Fonksiyonu ve Kuvvet İfadelerinin Türetilmesi.....	15
2.2.2.Üçlü Etkileşme Potansiyel Enerji Fonksiyonu ve Kuvvet İfadelerinin Türetilmesi.....	20
3. VERLET ALGORİTMASI VE PROGRAMIN UYGULANMASI.....	27
4. SONUÇ VE DEĞERLENDİRME.....	40
EKLER.....	42
KAYNAKLAR.....	55
ÖZGEÇMİŞ.....	57

ŞEKİLLER DİZİNİ

Sayfa

Şekil 3.1 Cu_3 Mikrokümesinin 1050 K Sıcaklığında, Etkileşme Potansiyel Enerjisinin Adım Sayısına Göre Değişimi.....	29
Şekil 3.2 Cu_3 Mikrokümesinin 1050 K Sıcaklığında, Kinetik Enerjisinin Adım Sayısına Göre Değişimi.....	30
Şekil 3.3 Cu_3 Mikrokümesinin 1050 K Sıcaklığında, Toplam Enerjisinin Adım Sayısına Göre Değişimi.....	30
Şekil 3.4 Cu_3 Mikrokümesinin 4175 K Sıcaklığında, Etkileşme Potansiyel Enerjisinin Adım Sayısına Göre Değişimi.....	31
Şekil 3.5 Cu_3 Mikrokümesinin 4175 K Sıcaklığında, Kinetik Enerjisinin Adım Sayısına Göre Değişimi.....	31
Şekil 3.6 Cu_3 Mikrokümesinin 4175 K Sıcaklığında, Toplam Enerjisinin Adım Sayısına Göre Değişimi.....	32
Şekil 3.7 Cu_4 Mikrokümesinin 1800 K Sıcaklığında, Etkileşme Potansiyel Enerjisinin Adım Sayısına Göre Değişimi.....	32
Şekil 3.8 Cu_4 Mikrokümesinin 1800 K Sıcaklığında, Kinetik Enerjisinin Adım Sayısına Göre Değişimi.....	33
Şekil 3.9: Cu_4 Mikrokümesinin 1800 K Sıcaklığında, Toplam Enerjisinin Adım Sayısına Göre Değişimi.....	33
Şekil 3.10 Cu_5 Mikrokümesinin 1400 K Sıcaklığında, Etkileşme Potansiyel Enerjisinin Adım Sayısına Göre Değişimi.....	34
Şekil 3.11 Cu_5 Mikrokümesinin 1400 K Sıcaklığında, Kinetik Enerjisinin Adım Sayısına Göre Değişimi.....	34
Şekil 3.12 Cu_5 Mikrokümesinin 1400 K Sıcaklığında, Toplam Enerjisinin Adım Sayısına Göre Değişimi.....	35

Şekil 3.13 Cu_3 Mikrokümesinin Etkileşme Potansiyel Enerjisinin Sıcaklığa göre Değişimi.....	35
Şekil 3.14 Cu_4 Mikrokümesinin Etkileşme Potansiyel Enerjisinin Sıcaklığa göre Değişimi.....	36
Şekil 3.15 Cu_5 Mikrokümesinin Etkileşme Potansiyel Enerjisinin Sıcaklığa göre Değişimi.....	36
Şekil 3.16 Cu_3 Mikrokümesindeki Girişteki Ortalama Hız ve Hesaplanan Ortalama Hızın Sıcaklığa Göre Değişimi.....	37
Şekil 3.17 Cu_4 Mikrokümesindeki Girişteki Ortalama Hız ve Hesaplanan Ortalama Hızın Sıcaklığa Göre Değişimi.....	37
Şekil 3.18 Cu_5 Mikrokümesindeki Girişteki Ortalama Hız ve Hesaplanan Ortalama Hızın Sıcaklığa Göre Değişimi	38
Şekil 3.19 Cu_3 Mikrokümesinin Atomlar Arası Ortalama Uzaklığın Sıcaklığa Göre Değişimi.....	38

TABLÖLAR DİZİNİ

	Sayfa
Tablo 3.1 Hesaplarda Kullanılan Parametreler.....	29
Tablo Ek1 Cu_3 Mikrokümesinde; Değişik Sıcaklıklarda Hesaplanan Değerler.....	42
Tablo Ek2 Cu_4 Mikrokümesinde; Değişik Sıcaklıklarda Hesaplanan Değerler.....	44
Tablo Ek3 Cu_5 Mikrokümesinde; Değişik Sıcaklıklarda Hesaplanan Değerler.....	50

SİMGELER VE KISALTMALAR DİZİNİ

B	İhmal Edilen çoklu etkileşme terimlerinden toplam etkileşme enerjisine gelecek katkıyı temsil etmek üzere düzeltme terimi
$f_{ijk}, f_{ikj}, f_{jki}$	Gaussian faktörleri
$(F_{ix})_2$	i'ninci parçacık üzerine ikili etkileşmelerden dolayı etkiyen kuvvetin x bileşeni
$(F_{ix})_3$	i'ninci parçacık üzerine üçlü etkileşmelerden dolayı etkiyen kuvvetin x bileşeni
h	Moleküler dinamik zaman adımı
k	Denge kuvvet sabiti
k_B	Boltzmann sabiti
m	Bakır atomun kütlesi
r_{ij}	i ve j atomları arasındaki uzaklık
r_0	Diatomik molekülün denge uzunluğu
U_{ij}	İki-cisim potansiyel enerji fonksiyonu
w_{ijk}	Üç-cisim potansiyel enerji fonksiyonu
$\mathcal{E}_0$	Diatomik molekülün bağlanma enerjisi
MDSM	Moleküler Dinamik Simülasyon Metodu
PEF	Potansiyel Enerji Fonksiyonu

1. GİRİŞ

Mikroküme çalışmalarında, atomlar arasındaki etkileşme potansiyeli belirlenerek her atom için ayrı ayrı hareket denklemleri çözülür. Her atom için ayrı ayrı hareket denklemini çözmek ise atom sayıları arttıkça daha yüksek kapasiteli bilgisayarlar ve çok daha uzun bilgisayar zamanı gerektirir.

Mikroküme çalışmalarının nihai amacı; bir katıyı yada sıvıyı temsil edebilecek sayıda parçacık arasındaki etkileşmelerin incelenerek, deney yapmadan, yapılabilecek bir deneyin sonuçları hakkında öngöründe bulunulmasıdır.

Deneyisel uygulama ve tekniklerin pahalı oluşu, bunun yanında geçiş metalleri ve bunların alaşımlarının yüksek erime sıcaklığına sahip olmaları deneyisel çalışmaların yapılmasını zorlaştırmakta, sıvı metallerin yapısal veya taşıma özelliklerinin yüksek sıcaklıklarda ölçülmesi sürecinde taşıma duvarları ile malzemenin etkileşmesi bu tür büyüklüklerin doğrulukla ölçülmesini engellemektedir. Yüksek erime sıcaklığına sahip metallerin geniş bir sıcaklık aralığında sıvı halde bulunmaları, bu tür metallerin yapısal özelliklerine sıcaklığın etkisinin incelenmesini sağlamaktadır. Deneyisel tekniklerin yüksek sıcaklıklardaki sınırlılıkları nedeniyle yapısal ve taşıma özelliklerini veren deneyisel sonuç bulmak zordur (Irmak ve Tomak 2005). Bu yüzden maddelerin fiziksel özelliklerinin atomik ölçekte teorik olarak çalışılmasında bilgisayar simülasyon yöntemleri kullanılır.

Bilgisayar simülasyonları mikroskobik uzunluk, zaman ölçekleri ve laboratuvarın mikroskobik dünyası arsında bir köprü oluşturur. Bu yöntemler moleküller arasındaki etkileşimleri tahmin etmemizi sağlar. Bu tahminlerin tam olabilmesi bilgisayar ayarlarımıza yüklenen sınırlara bağlıdır. Ayrıca bilgisayar simülasyonları teorik ile deneyisel sonuçları karşılaştırmamıza olanak verir. Laboratuvarda uygulanması zor veya

imkansız olan ortamları bilgisayar simülasyonları ile uygulayabiliriz. Bu yöntemler arasında yer alan Moleküler Dinamik Simülasyon yöntemi, sistemdeki parçacıkların zamana bağlı davranışlarının incelenmesine izin vermesiyle diğer yöntemlerden önemli bir ayrıcalığa sahiptir (Allen 2004).

Moleküler Dinamik Simülasyon Metodu, sistemi oluşturan parçacıkların davranışlarını çok kısa zaman aralıklarında ($\approx 10^{-15} - 10^{-17}$) adım adım inceler. Her adımda hareket denklemleri çözerek sistem kararlı bir yapıya ulaşmaya kadar zaman adımlarının sayısını artırır. Moleküler Dinamik Simülasyon Metoduyla yapılan hesaplamalarda doğru sonuçların elde edilmesi atomlar arasındaki fiziksel etkileşmelerin gerçeğe uygun olarak modellenmesine bağlıdır. Atomik etkileşmelerin modellenmesinde çeşitli parametrik fonksiyonlardan yararlanılır. Genel olarak Potansiyel Enerji Fonksiyonu (PEF) olarak adlandırılan bu fonksiyonlar ve fonksiyon parametreleri, deneysel, yarı deneysel ve teorik olarak belirlenmekte olup, modellenecek sistemin özelliklerine bağlıdır (Çakmak vd 2005).

Moleküler Dinamik Simülasyon Metodu ile ilgili literatürde çeşitli çalışmalar vardır. Bu çalışmalardan bazıları şunlardır.

Katırcıoğlu ve Erkoç (1989), 3-7 atomdan oluşan altın mikrokümelerinin kararlı yapılarını Moleküler Dinamik Simülasyon Metodu ile incelemişler ve üçgen yapıda Td simetrileri en kararlı yapı olarak bulmuşlardır.

Brown ve Clarve (1984), üçlü noktaya en yakın yoğunluk ve sıcaklıktaki Lennard-Jones (LJ) sıvısının dinamik ve statik özelliklerini topluluk için tanımlayıp, Moleküler Dinamik Simülasyon Metodu ile çözerek sonuçları karşılaştırmışlardır. Farklı durumlarda tanımlanan topluluğun, termodinamik özelliklerinin uyum içinde olduğu sonucuna varmışlardır.

Erkoç (1989), iki ve üç cisim etkileşmelerini kapsayan yeni bir deneysel çok cisim potansiyel enerji fonksiyonu (PEF) teklif etmişlerdir. Bu potansiyel enerji fonksiyonu BCC, FCC ve elmas yapılarda çeşitli elementler için parametrize edilerek mikrokümelerin enerji ve yapısal kararlılıklarının incelenmesinde kullanılmıştır.

Kolsuz , Erkoç (1993) ve Kolsuz, Çivi ve Erkoç(1995), potansiyel enerji fonksiyonu (PEF) ile BCC ve FCC farklı simetrilerinde 3-10 atomlu lityum mikrokümelerinin yapılarını ve enerjilerini incelemişlerdir.

Verlet (1967), bir Lennard–Jones potansiyeli içinde etkileşen 864 parçacıklı bir sistemin denklemini çeşitli sıcaklık ve yoğunluk değerleri için Moleküler Dinamik Simülasyon Metodu ile incelemiştir.

Alder (1959), tasarladıkları bir metotla birkaç yüz parçacığın etkileşmesini klasik olarak doğru bir şekilde hesaplamının mümkün olduğunu göstermiştir.Yaptıkları çalışmalarda parçacıkların başlangıç konumlarını ve hızlarını belirledikten sonra her parçacığın daha sonraki davranışlarını simülasyon metoduyla incelemişlerdir.

Kantani (1984), La Budde ve Greenspan tarafından teklif edilen klasik denkleminin sayısal çözüm şemalarını tartışmış ve bu şemaların yüksek derecedeki doğruluklarını göstermiştir.

Erkoç (1990), FCC metal elementlerinde 3-7 atom içeren mikrokümelerin yapısal kararlılığını ve enerjilerini incelemişlerdir. Burada FCC metal kümelerinde üç atomlu kümelerin üçgen formu ve 4-7 atomlu kümelerin üç-boyutlu konfigürasyonun enerjik olarak en kararlı olduğu sonucuna varmıştır.

Halıcıoğlu ve arkadaşları (1988), deneyler ve teoriler arasındaki mevcut durumun yanı sıra değişik araştırma tekniklerinin sınırlamaları ve başarılarını tartışmışlardır. Potansiyel modele dayanan simülasyon tekniği ve “ab initio” metodları gözden geçirilmiş ve son zamandaki literatürlerden belirli örnekler sunulmuştur.

Bu çalışmada $n=3,4,5$ atomdan oluşan bakır mikrokümelerinin atomları arasındaki etkileşmeler, 1 K sıcaklıktan başlanılarak ve sıcaklık düzenli olarak artırılarak, belli sıcaklıklarda, atomlar arası uzaklıklar, sistemin etkileşme potansiyel enerjisi, parçacıkların ortalama hızları ve en sonunda mikrokümelerden hangi sıcaklıklarda atomların ayrılmaya başladığı tespit edildi.

2. MATERYAL VE METOD

N parçacıktan oluşmuş bir sistemin yapısal özelliklerini anlayabilmek için teorik olarak her parçacığa ait hareket denklemlerini çözmek gerekir. Eğer hareket denklemleri analitik olarak çözülemiyorsa simülasyon metotları kullanılır. Böylece sistemi oluşturan atomların etkileşim özelliklerini daha kolay anlayabiliriz. Simülasyon tekniğinin iki ana kolu vardır. Bunlar Monte Carlo ve Moleküler Dinamik Simülasyon tekniğidir. Moleküler Dinamik Simülasyon Metodunun Monte Carlo metoduna göre en büyük avantajı sistemin dinamik özelliklerine yol göstermesidir. Bu çalışmada 3, 4 ve 5 atomdan oluşmuş bakır mikrokümelerinin yapısal özellikleri Moleküler Dinamik Simülasyon Metoduyla incelendi.

2.1. Moleküler Dinamik Simülasyon Metodu

Moleküler Dinamik Simülasyon Metodu daha önce de belirtildiği gibi sistemin hareket denklemlerini kullanarak sistemin dinamik özellikleri ve statik durumu hakkında bilgi verir.

Moleküler Dinamik Simülasyon Metoduyla yapılan bir simülasyonda, hareket denklemleri bilgisayar yardımıyla sayısal olarak çözülür. Bunun için denklemler, bilgisayarda sayısal değerlendirmeye uygun şemalara dönüştürülür. Genel olarak, diferansiyel operatörlere sahip sürekli değişkenlere dayanan bir tanımlamadan, sonlu fark operatörleri ve kesikli değişkenlere dayanan bir tanımlamaya geçilir. Bu aşamada doğan hatanın büyüklüğü seçilen yaklaşıma bağlıdır. Teorik olarak hata, bilgisayarın hız ve hafızasına bağlı olarak çok küçük seviyelere çekilebilir (Şahin 2001).

Sistemin temel fiziksel davranışı, bu çalışmada potansiyel enerji fonksiyonuna bağlıdır. Moleküler Dinamik Simülasyon Metotlarıyla hesaplamalarda, kümenin davranışı her adımda veya belli zaman aralıklarında gözlenebilir (Kafalı 2002).

Simülasyon metodunun uygulama aşamasında üç temel adım vardır:

- 1) Sistem içerisindeki atomik etkileşimleri tamamen tanımlayan bir potansiyel enerji fonksiyonunun seçilmesi,
- 2) Sistemde ölçülebilen nicelikleri yada ölçmek istediğimiz nicelikleri hesaplayabilecek bilgisayar programının hazırlanıp işletilmesi,
- 3) Bilgisayarda elde edilen sonuçların deneysel verilerle karşılaştırılarak yorumlanması.

2.1.1. Bir simülasyonun planlanması

Moleküler Dinamik Simülasyon Metodunun başlangıç noktası, fiziksel bir sistemin mikroskobik yapısının çok iyi bir şekilde tanımlanmasıdır. Sistem birkaç veya çok parçacıklı olabilir. Sistemin Hamiltoniyen, Lagrangien veya Newton hareket denklemleriyle tanımlanabilir (Çakmaktepe 2001).

Bir simülasyonu başlatmak için aşağıdaki ifadeler belirlenmelidir:

- Parçacık sayısı
- Başlangıç sıcaklığı
- Başlangıç koordinatları ve parçacıkların hızları
- İntegrasyon için zaman adımı

Bu aşamalar belirlendikten sonra eğer sistem dengede değilse (ki genelde değildir) sistem dengeye ulaşıncaya kadar zaman adım sayısı düzenli olarak artırılır. Sistem dengeye ulaştıktan sonra, sistemin etkileşme potansiyel enerjisi ve kinetik enerjisi sabit kalır (Hasbihon 2002).

2.1.2. Konum ve hızların belirlenmesi

Moleküler Dinamik Simülasyon Metodunda,

$$\frac{du(t)}{dt} = K(u(t), t) \quad (2.1.1)$$

şeklindeki denklemler ele alınır.

Burada, u bilinmeyen bir değişken (hız, açı veya konum vb.) K ise u ve t 'ye bağlı bir operatördür. t değişkeni genellikle zamanı ifade eder. $u(t)$ 'de geliş güzel sayı değişkenidir.

Tek atomlu sistemlerde atomik etkileşmeler, atomların yönelimlerinden bağımsızdır. Genel olarak, i ve j parçacıkları arasındaki uzaklık r_{ij} ve i . parçacığın çizgisel momentumu P_i olmak üzere N parçacıktan oluşmuş bir sistemin hamiltoniyeni;

$$H = \frac{1}{2} \sum_i \frac{P_i^2}{m_i} + \sum_{i < j} U(r_{ij}) \quad (2.1.2)$$

ile tanımlanır. Burada, denklem (2.1.2)'nin sağ tarafındaki ikinci terim

$$U = \sum_i U(r_{ij}) \quad (2.1.3)$$

şeklinde olup sistemin iç enerjisini yani etkileşme potansiyel enerjisini gösterir.

Moleküler Dinamik Simülasyon Metodu bir başlangıç değer problemidir. Algoritmaların bir çoğu, fiziksel problemlerin şartları içerisinde tam olarak uygulanamayan bir problem için geliştirilir. Bundan dolayı

$$m \frac{dr_i}{dt} = P_i \quad (2.1.4a)$$

$$\frac{dP_i}{dt} = F_i(r_{ij}), i \neq j$$

(2.1.4b)

şeklinde yazabiliriz.

Bilgisayarla hareket denklemini çözmek için mümkün olan en yüksek mertebeli diferansiyel denklemlerden sonlu fark şemaları kurulur. Fark denklemlerinden yararlanılarak, konum ve hızların bulunması için yeni denklemler türetilir. Bu algoritmalar adım adım ilerleyerek kurulur. Hız ve konumlar için her bir adımdaki uygulamada, ikinci adımdaki t_2 zamanı birinci adımdaki t_1 zamanından büyük seçilir. Böylece integrasyon zaman doğrultusunda ilerlemiş olur.

Klasik mekanikte Hamiltoniyen, çeşitli formlarda hareket denklemini verir. Seçime bağlı olarak denklem çözümü için algoritma belli özelliklere sahip olur. Sürekli ve kesikli hareket denklemleri matematiksel olarak eşdeğerse de sayısal olarak eşdeğer değildir. Bu durumda ,

$$\frac{d^2 r_i}{dt^2} = \frac{F_i(r_{ij})}{m}, \quad i \neq j \quad (2.1.5)$$

şeklinde Newton denklemi kurulabilir.

Analitik olarak ikinci mertebeden diferansiyel denklemlere sahip sistemin çözümü, ilk önce hızları ve sonra konumları verecek şekilde sıfırdan t anına kadar iki kere integral alınarak elde edilir. Başlangıç konumları potansiyel enerjinin toplam enerjiye katkısını ve hızlar da kinetik enerjiye olan katkıyı belirler. Başlangıç şartlarının belirtilmesiyle sistem faz uzayındaki sabit enerji yolu boyunca hareket eder.

(2.1.5) denklemi analitik olarak çözülebiliyorsa sistemle ilgili bilgiler bu denklemin çözümünden elde edilebilir. (2.1.5) denkleminin sağ tarafındaki kuvvet ifadesi parçacıklar arası mesafeye bağlı olduğundan ve parçacıklar arası mesafe sürekli olarak

değiştirdiğinden bu denklemin analitik çözümü zordur. Analitik çözüm yerine fonksiyonun Taylor açılımından yararlanabiliriz. Böylece sürekli olan bir diferansiyel denklemi kesikli hale getirip, çok kısa zaman aralıklarında denklemi sayısal olarak çözebiliriz. Moleküler Dinamik Simülasyon Metodunun altında yatan temel düşünce budur. Herhangi bir $u(t)$ fonksiyonu h çok küçük bir zaman dilimi olmak üzere $(t+h)$ ve $(t-h)$ anındaki değeri Taylor açılımından ;

$$u(t+h) = u(t) + h \frac{du(t)}{dt} + \frac{1}{2} h^2 \frac{d^2 u(t)}{dt^2} + R \quad (2.1.6)$$

$$u(t-h) = u(t) - h \frac{du(t)}{dt} + \frac{1}{2} h^2 \frac{d^2 u(t)}{dt^2} + R^* \quad (2.1.7)$$

şeklinde ifade edilir. (2.1.6) ve (2.1.7) denklemlerini taraf tarafa toplayıp farkını alırsak;

$$u(t+h) + u(t-h) = 2u(t) + h^2 \frac{d^2 u(t)}{dt^2} + (R + R^*) \quad (2.1.8a)$$

$$u(t+h) - u(t-h) = 2h \frac{du(t)}{dt} + (R - R^*) \quad (2.1.9a)$$

elde edilir. Burada h zaman adımını yeterince küçük seçerek $R+R^*$ da ve $R-R^*$ dan gelen katkılar diğer terimlerin yanında ihmal edilebilir. Böylece (2.1.8a) ve (2.1.9a) ifadeleri ;

$$u(t+h) + u(t-h) = 2u(t) + h^2 \frac{d^2 u(t)}{dt^2} \quad (2.1.8b)$$

$$u(t+h) - u(t-h) = 2h \frac{du(t)}{dt} \quad (2.1.9b)$$

şekline gelir.

Yalıtılmış bir sistemde herhangi bir t anında i 'nci parçacık üzerine etkiyen kuvveti $F_i(r_{ij})$ olarak gösterirsek;

$$F_i(r_{ij}) = m_i a_i \quad (2.1.10)$$

diğer taraftan;

$$a_i = \frac{d^2 r_i(t)}{dt^2} \quad (2.1.11)$$

tanımını kullanarak; i'ninci parçacığın t anındaki ivmesi;

$$\frac{d^2 r_i(t)}{dt^2} = \frac{1}{m} F_i(r_{ij}) \quad (2.1.12)$$

(2.1.8a) ifadesindeki $u(t)$ 'yi $r_i(t)$ ile yer değiştirerek;

$$\frac{d^2 r_i(t)}{dt^2} = \frac{1}{h^2} [r_i(t+h) - 2r_i(t) + r_i(t-h)] \quad (2.1.13)$$

elde edilir. Bu ifadeye dikkat edersek i'ninci parçacığın t anındaki ivmesi (t+h) , t ve (t-h) anındaki konum koordinatları cinsinden ifade edilebilmektedir. N parçacıktan oluşan bir sistemde t anında i'ninci parçacık üzerine etkiyen toplam kuvveti $F_i(t)$ olarak gösterirsek;

$$F_i(t) = \sum_{i \neq j}^N F_i(r_{ij}) \quad (2.1.14)$$

(2.1.10) ve (2.1.14) bağıntılarını birleştirirsek;

$$\begin{aligned} \frac{d^2 r_i(t)}{dt^2} &= \frac{1}{h^2} [r_i(t+h) - 2r_i(t) + r_i(t-h)] \\ &= \frac{1}{m} F_i(t) \end{aligned} \quad (2.1.15)$$

ifadesinden;

$$r_i(t+h) = 2r_i(t) - r_i(t-h) + \frac{h^2}{m} F_i(t) \quad (2.1.16)$$

böylece t , $(t-h)$ anlarında i 'inci parçacığın konumlarını ve t 'ninci anda i 'ninci parçacık üzerine etkiyen kuvveti biliyorsak $(t+h)$ anında parçacığın konumunu hesaplayabiliriz. Benzer şekilde (2.1.9b) ifadesinde $u(t)$ yazarak; t anında i 'ninci parçacığın hızını ;

$$\frac{d^2 r_i(t)}{dt^2} = \frac{1}{2h} [r_i(t+h) - r_i(t-h)] \quad (2.1.17)$$

şeklinde yazabiliriz. Şimdi n 'inci zaman adımı $t_n = nh$ şeklinde göstererek n 'inci zaman adımında parçacığın koordinatlarını $r_i^n = r_i(t_n)$ ve n 'inci zaman adımında i 'nci parçacık üzerine etkiyen kuvveti $F_i^n = F_i(t_n)$ şeklinde tanımlayarak i 'inci parçacığın $(n+1)$ 'inci zaman adımındaki konumunu ve n 'inci zaman adımındaki hızını;

$$r_i^{n+1} = 2r_i^n - r_i^{n-1} + \frac{h^2}{m} F_i^n \quad (2.1.18)$$

$$v_i^n = \frac{1}{2h} [r_i^{n+1} - r_i^{n-1}] \quad (2.1.19)$$

şeklinde ifade edebiliriz. Bu şekilde elde edilen algoritmaya *Verlet Algoritması* denir. (2.1.18) ifadesine dikkat edersek $(n+1)$ 'nci zaman adımındaki i 'nci parçacığın konumunu hesaplamak istersek n 'inci ve $(n-1)$ zaman adımlarında parçacığın konumlarını ve n 'inci zaman adımında parçacık üzerine etkiyen kuvveti bilmek gerekir. Benzer şeyler hız ifadesi için de söylenebilir. Burada $(n+1)$ 'nci zaman adımında parçacığın konum koordinatı hesaplanırken n 'inci zaman adımında hızı hesaplanmaktadır. Parçacıkların herhangi bir anda konum koordinatlarının hesaplanması o anda sistemin etkileşme potansiyel enerjisinin hesaplanmasına, hızlarının hesaplanması ise sistemin momentumunun ve kinetik enerjisinin hesaplanmasına imkan tanımaktadır. Fakat burada $(n+1)$ 'inci adımda konum hesaplanırken n 'inci adımda hızın hesaplanması sistemin etkileşme potansiyel enerjisinin farklı zaman adımlarında hesaplanması sonucunu ortaya çıkarmaktadır. Bu ise biraz çelişkili bir durumdur. Aynı

anda sistemin kinetik ve potansiyel enerjilerini hesaplayabilmek için; n'inci zaman adımındaki ortalama hızı konum koordinatları ve zaman adımı cinsinden;

$$z_i^n = \frac{1}{h}(r_i^{n+1} - r_i^n) \quad (2.1.20)$$

şeklinde tanımlayarak (n+1)'inci zaman adımındaki koordinatı

$$r_i^{n+1} = r_i^n + h z_i^n \quad (2.1.21)$$

şeklinde tanımlayarak (n+1)'inci zaman adımındaki hızı kuvvet ve (n-1)'inci zaman adımındaki hız cinsinden

$$z_i^n = z_i^{n-1} + h \frac{F_i^n}{m} \quad (2.1.22)$$

olarak ifade edebiliriz. Bu tanımları (2.1.18) ve (2.1.19) bağıntılarıyla birleştirirsek Verlet Algoritmasının Hız Formunu elde ederiz. Buna göre (n+1)'inci zaman adımındaki hız ve koordinat ifadeleri;

$$r_i^{n+1} = r_i^n + h v_i^n + \frac{1}{2m} F_i^n h^2 \quad (2.1.23)$$

$$v_i^{n+1} = v_i^n + \frac{1}{2m} (F_i^{n+1} + F_i^n) h \quad (2.1.24)$$

olarak tanımlanır. Bu ifadelere göre n'inci zaman adımında parçacıkların başlangıç konumlarını ve hızlarını biliyorsak (n+1)'inci zaman adımındaki konumlarını ve hızlarını hesaplayabiliriz.

Herhangi bir anda N parçacıktan oluşmuş sistemin kinetik enerjisi

$$\begin{aligned} E_k &= \sum_{i=1}^N \frac{1}{2} m |v_i^2| \\ &= \frac{1}{2} m \sum_{i=1}^n (v_{ix}^2 + v_{iy}^2 + v_{iz}^2) \end{aligned} \quad (2.1.25)$$

ifadesi ile hesaplanabilir. Diğer taraftan T sıcaklığındaki bir sistemde (2.1.25) ifadesindeki her kareli terim $\frac{1}{2}k_B T$ 'lik bir enerjiye sahip olduğundan (2.1.25) ifadesini k_B ve T cinsinden

$$E_k = \frac{3}{2} N k_B T \quad (2.1.26)$$

şeklinde yazabiliriz. Buradan E_k kinetik enerjisine sahip sistemin sıcaklığı

$$T = \frac{2}{3} \frac{E_k}{N k_b} \quad (2.1.27)$$

olarak hesaplanır.

2.2.Potansiyel Enerji Fonksiyonu ve Kuvvet İfadelerinin Türetilmesi

Bir sistem üzerine dış kuvvetler etkimiyorsa; N parçacıktan oluşmuş sistemin toplam etkileşme potansiyel enerjisi bir çok cisim açılımı olarak ifade edilebilir.

$$\phi = \phi_2 + \phi_3 + \dots + \phi_N \quad (2.2.1)$$

Burada, ϕ_2, ϕ_3 ve ϕ_N sırasıyla toplam iki-cisim, üç-cisim ve N-cisim etkileşmelerini ifade ederler. Bu çalışmada; bakır atomları arasındaki etkileşmeleri ifade etmek için Şakir Erkoç (1989) tarafından verilen, iki-cisim ve üç-cisim etkileşmelerini ihtiva eden yeni bir potansiyel enerji fonksiyonu seçtik. Buna göre $U_{ij}(r_{ij})$ iki-cisim potansiyel enerji fonksiyonu ve $w_{ijk}(r_{ij}, r_{ik}, r_{jk})$ üç-cisim potansiyel enerji fonksiyonu olmak üzere;

$$\phi_2 = \sum_{i < j}^N U_{ij}(r_{ij}) \quad (2.2.2)$$

$$\phi_3 = \sum_{i < j < k}^N w_{ijk}(r_{ij}, r_{ik}, r_{jk}) \quad (2.2.3)$$

şeklinde tanımlanmaktadır

N atomdan oluşmuş sistemin toplam etkileşme enerjisi (2.2.1) denkleminde ifade edildiği gibi ikili, üçlü ve nihayet N'li etkileşmelerin toplamı olarak ifade edilir. Şu anda en çok üç cisim arasındaki etkileşmeyi karakterize eden potansiyel enerji fonksiyonları mevcuttur. Bu nedenle çoklu etkileşmelerden toplam enerjiye gelecek katkılar ifade edilememektedir. Bu çalışmada çoklu etkileşme terimlerinden gelecek katkıları temsil etmek üzere üçlü etkileşme terimi bir B parametresi ile çarpıldı. Böylece toplam etkileşme potansiyeli;

$$\phi = \phi_2 + B\phi_3 \quad (2.2.4)$$

şeklinde ifade edildi.

Toplam etkileşme enerjisini ikili ve üçlü etkileşme fonksiyonları cinsinden yazarsak:

$$\phi = \sum_{i < j}^N U_{ij}(r_{ij}) + B \sum_{i < j < k}^N w_{ijk}(r_{ij}, r_{ik}, r_{jk}) \quad (2.2.5)$$

şeklinde ifade edilir. i ve j atomları arasındaki etkileşme potansiyel ifadesi;

$$U_{ij}(r_{ij}) = A \left[\left(\frac{r_0}{r_{ij}} \right)^{2n} e^{-2\alpha \left(\frac{r_{ij}}{r_0} \right)^2} - \left(\frac{r_0}{r_{ij}} \right)^n e^{-\alpha \left(\frac{r_{ij}}{r_0} \right)^2} \right] \quad (2.2.6)$$

şeklindedir. Bu durumda, toplam potansiyel enerjiye iki-cisim etkileşmesinden gelen katkı,

$$\phi_2 = \sum_{i < j}^N A \left[\left(\frac{r_0}{r_{ij}} \right)^{2n} e^{-2\alpha \left(\frac{r_{ij}}{r_0} \right)^2} - \left(\frac{r_0}{r_{ij}} \right)^n e^{-\alpha \left(\frac{r_{ij}}{r_0} \right)^2} \right] \quad (2.2.7)$$

şeklinde olur. Denklem (2.2.6)'nın sağ tarafındaki ilk terim potansiyel enerji fonksiyonunun itici kısmını, ikinci terimde çekici kısmını belirtir. r_{ij} , i ve j atomları arasındaki bağ uzunluğudur. r_0 ise i ve j atomlarının denge bağ uzunluğudur. A, α ve n potansiyel parametreleri olup aşağıdaki değerlere sahiptir;

$$A = -4 \varepsilon_0 \quad (2.2.8a)$$

$$\alpha = \ln 2 \quad (2.2.8b)$$

$$n = \sqrt{\frac{r_0^2 k}{2|\varepsilon_0|}} - 2\alpha \quad (2.2.8c)$$

Denklem (2.2.8c)'de; k, denge kuvvet sabiti, r_0 , denge bağ uzunluğu, ε_0 , ise molekülün taban durum bağ enerjisidir.

Üç-cisim etkileşimleri, iki-cisim etkileşimleri vasıtasıyla ifade edilir. Buna göre, üç-cisim etkileşme potansiyel enerji fonksiyonu aşağıdaki denklemle ifade edilir.

$$w_{ijk} = u_{ij} f_{ijk} + u_{ik} f_{ikj} + u_{jk} f_{jki} \quad (2.2.9)$$

Burada,

$$f_{ijk} = e^{-\frac{(r_{ik}^2 + r_{jk}^2)}{r_0^2}} \quad (2.2.10a)$$

$$f_{ikj} = e^{-\frac{(r_{ij}^2 + r_{jk}^2)}{r_0^2}} \quad (2.2.10b)$$

$$f_{jki} = e^{-\frac{(r_{ij}^2 + r_{ik}^2)}{r_0^2}} \quad (2.2.10c)$$

Gaussian faktörlerdir. Toplam üç-cisim etkileşme potansiyeli ise;

$$\phi_3 = \sum_{i < j < k}^N w_{ijk}(r_{ij}, r_{ik}, r_{jk}) \quad (2.2.11)$$

şeklindedir.

2.2.1. İkili etkileşme potansiyel enerji fonksiyonu ve kuvvet ifadelerinin türetilmesi

Toplam iki-cisim potansiyel enerji ifadesi genel olarak N parçacıktan oluşmuş yalıtılmış bir sistemin toplam etkileşme potansiyeli U ise, herhangi bir i. parçacığa etkiyen kuvvet ifadesi;

$$\vec{F}_i = -\vec{\nabla}_i \phi \quad (2.2.12)$$

ile verilmektedir.

Buradan N parçacıktan oluşmuş yalıtılmış bir sistemin toplam etkileşme potansiyelini,

$$\begin{aligned} \phi &= \phi_2 + B\phi_3 \\ \phi &= \sum_{i<j}^N U_{ij}(r_{ij}) + B \sum_{i<j<k}^N w_{ijk}(r_{ij}, r_{ik}, r_{jk}) \end{aligned} \quad (2.2.13)$$

şeklinde ifade etmek mümkündür. Buradan i'nci parçacığa etkiyen kuvvet bileşenlerini

$$\begin{aligned} (F_{ix}) &= -\frac{\partial}{\partial x_i} \left[\sum_{i<j}^N U_{ij}(r_{ij}) + B \sum_{i<j<k}^N w_{ijk}(r_{ij}, r_{ik}, r_{jk}) \right] \\ &= (F_{ix})_2 + (F_{ix})_3 \end{aligned} \quad (2.2.14)$$

$$\begin{aligned} (F_{iy}) &= -\frac{\partial}{\partial y_i} \left[\sum_{i<j}^N U_{ij}(r_{ij}) + B \sum_{i<j<k}^N w_{ijk}(r_{ij}, r_{ik}, r_{jk}) \right] \\ &= (F_{iy})_2 + (F_{iy})_3 \end{aligned} \quad (2.2.15)$$

$$\begin{aligned} (F_{iz}) &= -\frac{\partial}{\partial z_i} \left[\sum_{i<j}^N U_{ij}(r_{ij}) + B \sum_{i<j<k}^N w_{ijk}(r_{ij}, r_{ik}, r_{jk}) \right] \\ &= (F_{iz})_2 + (F_{iz})_3 \end{aligned} \quad (2.2.16)$$

şeklinde hesaplanabilir. Burada $(F_{ix})_2, (F_{ix})_3$ terimleri sırasıyla x doğrultusunda i'nci parçacığa etkiyen $(F_{ix})_2$ kuvvetinin ikili etkileşmelerinden kaynaklanan kuvvet bileşeni ve $(F_{ix})_3$ ise üçlü etkileşmelerden kaynaklanan kuvvet bileşenini temsil etmektedir. Diğer kuvvet bileşenlerini ve diğer parçacıklara etkiyen kuvvet ifadelerini benzer şekilde açıklayabilir ve hesaplayabiliriz. Böylece i'nci parçacığa etkiyen kuvvetin büyüklüğü;

$$F_i = \sqrt{(F_{ix})^2 + (F_{iy})^2 + (F_{iz})^2} \quad (2.2.17)$$

şeklinde ifade edilir.

Şimdi i. ve j. parçacık üzerine etkiyen ikili etkileşmelerin kuvvet ifadesini türetmeye çalışalım.

$$(F_{ix})_2 = -\sum_{i < j}^N \frac{\partial}{\partial x_i} (U_{ij}(r_{ij})) \quad (2.2.18a)$$

$$(F_{iy})_2 = -\sum_{i < j}^N \frac{\partial}{\partial y_i} (U_{ij}(r_{ij})) \quad (2.2.18b)$$

$$(F_{iz})_2 = -\sum_{i < j}^N \frac{\partial}{\partial z_i} (U_{ij}(r_{ij})) \quad (2.2.18c)$$

olmak üzere j'nci parçacık üzerine x, y ve z doğrultularında etki eden kuvvet bileşenlerini $(F_{jx})_2, (F_{jy})_2$ ve $(F_{jz})_2$ ile gösterirsek;

$$(F_{jx})_2 = -\sum_{i < j}^N \frac{\partial}{\partial x_j} (U_{ij}(r_{ij})) \quad (2.2.19a)$$

$$(F_{jy})_2 = -\sum_{i < j}^N \frac{\partial}{\partial y_j} (U_{ij}(r_{ij})) \quad (2.2.19b)$$

$$(F_{jz})_2 = -\sum_{i < j}^N \frac{\partial}{\partial z_j} (U_{ij}(r_{ij})) \quad (2.2.19c)$$

denklemleri ile ifade edilebilir.

$U_{ij}(r_{ij})$ ifadesini, i ve j atomlarının (x, y, z) koordinatlarına bağlı olarak yazarsak;

$$U_{ij}(r_{ij}) = A \left[(r_0)^{2n} (r_{ij})^{-2n} e^{-2\alpha \left(\frac{r_{ij}}{r_0} \right)^2} - (r_0)^n (r_{ij})^{-n} e^{-\alpha \left(\frac{r_{ij}}{r_0} \right)^2} \right] \quad (2.2.20)$$

$$r_{ij} = \left[(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2 + (z_i - z_j)^2 \right]^{1/2} \quad (2.2.21)$$

$$\begin{aligned} r_{ij}^{-2n} &= \left\{ \left[(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2 + (z_i - z_j)^2 \right]^{1/2} \right\}^{2n} \\ &= \left[(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2 + (z_i - z_j)^2 \right]^n \end{aligned} \quad (2.2.22)$$

$$\begin{aligned} r_{ij}^{-n} &= \left\{ \left[(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2 + (z_i - z_j)^2 \right]^{1/2} \right\}^n \\ &= \left[(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2 + (z_i - z_j)^2 \right]^{n/2} \end{aligned} \quad (2.2.23)$$

olmak üzere;

$$\begin{aligned} U_{ij}(r_{ij}) &= A \left\{ r_0^{2n} \left[(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2 + (z_i - z_j)^2 \right]^n \exp \left(-\frac{2\alpha}{r_0^2} \left[(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2 + (z_i - z_j)^2 \right] \right) \right. \\ &\quad \left. - r_0^n \left[(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2 + (z_i - z_j)^2 \right]^{n/2} \right. \\ &\quad \left. \exp \left(-\frac{\alpha}{r_0^2} \left[(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2 + (z_i - z_j)^2 \right] \right) \right\} \end{aligned} \quad (2.2.24)$$

şeklinde yazabiliriz. Bu açılımlardan sonra, denklem (2.2.18a), (2.2.18b) ve (2.2.18c)'deki her terimi tekrar yazdığımızda;

$$\begin{aligned} \frac{\partial U_{ij}(r_{ij})}{\partial x_i} &= -\frac{2A}{r_0^2} (x_i - x_j) \left[n \left(\frac{r_0}{r_{ij}} \right)^{n+2} + 2\alpha \left(\frac{r_0}{r_{ij}} \right)^n \right] \exp \left(-\alpha \left(\frac{r_{ij}}{r_0} \right)^2 \right) \\ &\quad \left[\left(\frac{r_{ij}}{r_0} \right)^n \exp \left(-\alpha \left(\frac{r_{ij}}{r_0} \right)^2 \right) - \frac{1}{2} \right] \end{aligned} \quad (2.2.25a)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial U_{ij}(r_{ij})}{\partial y_i} = & -\frac{2A}{r_0^2} (y_i - y_j) \left[n \left(\frac{r_0}{r_{ij}} \right)^{n+2} + 2\alpha \left(\frac{r_0}{r_{ij}} \right)^n \right] \exp \left(-\alpha \left(\frac{r_{ij}}{r_0} \right)^2 \right) \\ & \left[\left(\frac{r_{ij}}{r_0} \right)^2 \exp \left(-\alpha \left(\frac{r_{ij}}{r_0} \right)^2 \right) - \frac{1}{2} \right] \end{aligned} \quad (2.2.25b)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial U_{ij}(r_{ij})}{\partial z_i} = & -\frac{2A}{r_0^2} (z_i - z_j) \left[n \left(\frac{r_0}{r_{ij}} \right)^{n+2} + 2\alpha \left(\frac{r_0}{r_{ij}} \right)^n \right] \exp \left(-\alpha \left(\frac{r_{ij}}{r_0} \right)^2 \right) \\ & \left[\left(\frac{r_{ij}}{r_0} \right)^2 \exp \left(-\alpha \left(\frac{r_{ij}}{r_0} \right)^2 \right) - \frac{1}{2} \right] \end{aligned} \quad (2.2.25c)$$

halini alır. Aynı şekilde, denklem (2.2.19a), (2.2.19b) ve (2.2.19c)'yi parçacığına göre yazarsak;

$$\begin{aligned} \frac{\partial U_{ij}(r_{ij})}{\partial x_j} = & -\frac{2A}{r_0^2} (x_i - x_j) \left[n \left(\frac{r_0}{r_{ij}} \right)^{n+2} + 2\alpha \left(\frac{r_0}{r_{ij}} \right)^n \right] \exp \left(-\alpha \left(\frac{r_{ij}}{r_0} \right)^2 \right) \\ & \left[\left(\frac{r_{ij}}{r_0} \right)^2 \exp \left(-\alpha \left(\frac{r_{ij}}{r_0} \right)^2 \right) - \frac{1}{2} \right] \end{aligned} \quad (2.2.26a)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial U_{ij}(r_{ij})}{\partial y_j} = & -\frac{2A}{r_0^2} (y_i - y_j) \left[n \left(\frac{r_0}{r_{ij}} \right)^{n+2} + 2\alpha \left(\frac{r_0}{r_{ij}} \right)^n \right] \exp \left(-\alpha \left(\frac{r_{ij}}{r_0} \right)^2 \right) \\ & \left[\left(\frac{r_{ij}}{r_0} \right)^2 \exp \left(-\alpha \left(\frac{r_{ij}}{r_0} \right)^2 \right) - \frac{1}{2} \right] \end{aligned} \quad (2.2.26b)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial U_{ij}(r_{ij})}{\partial z_j} = & -\frac{2A}{r_0^2} (z_i - z_j) \left[n \left(\frac{r_0}{r_{ij}} \right)^{n+2} + 2\alpha \left(\frac{r_0}{r_{ij}} \right)^n \right] \exp \left(-\alpha \left(\frac{r_{ij}}{r_0} \right)^2 \right) \\ & \left[\left(\frac{r_{ij}}{r_0} \right)^2 \exp \left(-\alpha \left(\frac{r_{ij}}{r_0} \right)^2 \right) - \frac{1}{2} \right] \end{aligned} \quad (2.2.26c)$$

i parçacığı üzerine x, y ve z doğrultularında etki eden iki-cisim etkileşmesinden kaynaklanan toplam kuvvet ifadelerini,

$$(F_{ix})_2 = \frac{2A}{r_0^2} \sum_{i < j}^N (x_i - x_j) \left[n \left(\frac{r_0}{r_{ij}} \right)^{n+2} + 2\alpha \left(\frac{r_0}{r_{ij}} \right)^n \right] \exp \left(-\alpha \left(\frac{r_{ij}}{r_0} \right)^2 \right) \left[\left(\frac{r_{ij}}{r_0} \right)^2 \exp \left(-\alpha \left(\frac{r_{ij}}{r_0} \right)^2 \right) - \frac{1}{2} \right] \quad (2.2.27a)$$

$$(F_{iy})_2 = \frac{2A}{r_0^2} \sum_{i < j}^N (y_i - y_j) \left[n \left(\frac{r_0}{r_{ij}} \right)^{n+2} + 2\alpha \left(\frac{r_0}{r_{ij}} \right)^n \right] \exp \left(-\alpha \left(\frac{r_{ij}}{r_0} \right)^2 \right) \left[\left(\frac{r_{ij}}{r_0} \right)^2 \exp \left(-\alpha \left(\frac{r_{ij}}{r_0} \right)^2 \right) - \frac{1}{2} \right] \quad (2.2.27b)$$

$$(F_{iz})_2 = \frac{2A}{r_0^2} \sum_{i < j}^N (z_i - z_j) \left[n \left(\frac{r_0}{r_{ij}} \right)^{n+2} + 2\alpha \left(\frac{r_0}{r_{ij}} \right)^n \right] \exp \left(-\alpha \left(\frac{r_{ij}}{r_0} \right)^2 \right) \left[\left(\frac{r_{ij}}{r_0} \right)^2 \exp \left(-\alpha \left(\frac{r_{ij}}{r_0} \right)^2 \right) - \frac{1}{2} \right] \quad (2.2.27c)$$

şeklinde yazabiliriz. Aynı şekilde j parçacığı üzerine x,y,z doğrultularında etkiyen iki-cisim etkileşmesinden kaynaklanan toplam kuvvet ifadelerini,

$$(F_{jx})_2 = \frac{2A}{r_0^2} \sum_{i < j}^N (x_i - x_j) \left[n \left(\frac{r_0}{r_{ij}} \right)^{n+2} + 2\alpha \left(\frac{r_0}{r_{ij}} \right)^n \right] \exp \left(-\alpha \left(\frac{r_{ij}}{r_0} \right)^2 \right) \left[\left(\frac{r_{ij}}{r_0} \right)^2 \exp \left(-\alpha \left(\frac{r_{ij}}{r_0} \right)^2 \right) - \frac{1}{2} \right] \quad (2.2.28a)$$

$$(F_{jy})_2 = \frac{2A}{r_0^2} \sum_{i < j}^N (y_i - y_j) \left[n \left(\frac{r_0}{r_{ij}} \right)^{n+2} + 2\alpha \left(\frac{r_0}{r_{ij}} \right)^n \right] \exp \left(-\alpha \left(\frac{r_{ij}}{r_0} \right)^2 \right) \left[\left(\frac{r_{ij}}{r_0} \right)^2 \exp \left(-\alpha \left(\frac{r_{ij}}{r_0} \right)^2 \right) - \frac{1}{2} \right] \quad (2.2.28b)$$

$$(F_{jz})_2 = \frac{2A}{r_0^2} \sum_{i < j}^N (z_i - z_j) \left[n \left(\frac{r_0}{r_{ij}} \right)^{n+2} + 2\alpha \left(\frac{r_0}{r_{ij}} \right)^n \right] \exp \left(-\alpha \left(\frac{r_{ij}}{r_0} \right)^2 \right) \left[\left(\frac{r_{ij}}{r_0} \right)^2 \exp \left(-\alpha \left(\frac{r_{ij}}{r_0} \right)^2 \right) - \frac{1}{2} \right] \quad (2.2.28c)$$

olarak yazabiliriz.

2.2.2. Üçlü etkileşme potansiyel enerji fonksiyonu ve kuvvet ifadelerinin türetilmesi

Üç cisim etkileşmeleri iki-cisim etkileşmeleri vasıtasıyla ifade edilirler. Buna göre, üçlü etkileşme fonksiyonu;

$$\phi_3 = \sum_{i < j < k}^N W_{ijk}(r_{ij}, r_{ik}, r_{jk}) \quad (2.2.29)$$

ile ifade edilir. Burada W_{ijk} , üçlü etkileşme fonksiyonudur. Açılımı ise,

$$W_{ijk} = U_{ij}(r_{ij})f_{ijk} + U_{ik}(r_{ik})f_{ikj} + U_{jk}(r_{jk})f_{jki} \quad (2.2.30)$$

şeklindeir. Üç cisim etkileşme kuvveti, iki-cisim etkileşme kuvvetine benzer şekilde üç cisim etkileşme potansiyel enerji fonksiyonundan elde edilir. Buna göre, i'nci parçacık üzerine x, y ve z doğrultularında etkiyen kuvvet bileşenlerini $(F_{ix})_3$, $(F_{iy})_3$, ve $(F_{iz})_3$ ile tanımlarsak bunları, N parçacıktan oluşmuş bir sistem için:

$$\begin{aligned} (F_{ix})_3 &= -B \frac{\partial \phi_3}{\partial x_i} = -B \sum_{i < j < k}^N \frac{\partial}{\partial x_i} (W_{ijk}(r_{ij}, r_{ik}, r_{jk})) \\ &= -B \sum_{i < j < k}^N \left[\frac{\partial U_{ij}(r_{ij})}{\partial x_i} f_{ijk} + U_{ij}(r_{ij}) \frac{\partial f_{ijk}}{\partial x_i} + \frac{\partial U_{ik}(r_{ik})}{\partial x_i} f_{ikj} + \right. \\ &\quad \left. \frac{\partial U_{jk}(r_{jk})}{\partial x_i} f_{jki} + \frac{\partial U_{ik}(r_{ik})}{\partial x_i} f_{ikj} + \frac{\partial U_{jk}(r_{jk})}{\partial x_i} f_{jki} + \frac{\partial U_{ij}(r_{ij})}{\partial x_i} f_{ijk} \right] \end{aligned} \quad (2.2.31a)$$

$$\begin{aligned}
(F_{iy})_3 &= -B \frac{\partial \phi_3}{\partial y_i} = -B \sum_{i < j < k}^N \frac{\partial}{\partial y_i} (W_{ijk}(r_{ij}, r_{ik}, r_{jk})) \\
&= -B \sum_{i < j < k}^N \left[\frac{\partial U_{ij}(r_{ij})}{\partial y_i} f_{ijk} + U_{ij}(r_{ij}) \frac{\partial f_{ijk}}{\partial y_i} + \frac{\partial U_{ik}(r_{ik})}{\partial y_i} f_{ikj} + \right. \\
&\quad \left. \frac{\partial U_{ik}(r_{ik})}{\partial y_i} \frac{f_{ikj}}{\partial y_i} + \frac{\partial U_{jk}(r_{jk})}{\partial y_i} f_{jki} + \frac{\partial U_{jk}(r_{jk})}{\partial y_i} \frac{f_{jki}}{\partial y_i} \right] \quad (2.2.31b)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
(F_{iz})_3 &= -B \frac{\partial \phi_3}{\partial z_i} = -B \sum_{i < j < k}^N \frac{\partial}{\partial z_i} (W_{ijk}(r_{ij}, r_{ik}, r_{jk})) \\
&= -B \sum_{i < j < k}^N \left[\frac{\partial U_{ij}(r_{ij})}{\partial z_i} f_{ijk} + U_{ij}(r_{ij}) \frac{\partial f_{ijk}}{\partial z_i} + \frac{\partial U_{ik}(r_{ik})}{\partial z_i} f_{ikj} + \right. \\
&\quad \left. \frac{\partial U_{ik}(r_{ik})}{\partial z_i} \frac{f_{ikj}}{\partial z_i} + \frac{\partial U_{jk}(r_{jk})}{\partial z_i} f_{jki} + \frac{\partial U_{jk}(r_{jk})}{\partial z_i} \frac{f_{jki}}{\partial z_i} \right] \quad (2.2.31c)
\end{aligned}$$

şeklinde yazabiliriz. i. parçacık için bu ifadeleri,

$$\begin{aligned}
\frac{\partial U_{ij}(r_{ij})}{\partial x_i} &= -\frac{2A}{r_0^2} (x_i - x_j) \left[n \left(\frac{r_0}{r_{ij}} \right)^{n+2} + 2\alpha \left(\frac{r_0}{r_{ij}} \right)^n \right] \exp \left(-\alpha \left(\frac{r_{ij}}{r_0} \right)^2 \right) \\
&\quad \left[\left(\frac{r_{ij}}{r_0} \right)^2 \exp \left(-\alpha \left(\frac{r_{ij}}{r_0} \right)^2 \right) - \frac{1}{2} \right] \\
C_1 &= \left[n \left(\frac{r_0}{r_{ij}} \right)^{n+2} + 2\alpha \left(\frac{r_0}{r_{ij}} \right)^n \right] \exp \left(-\alpha \left(\frac{r_{ij}}{r_0} \right)^2 \right) \left[\left(\frac{r_{ij}}{r_0} \right)^2 \exp \left(-\alpha \left(\frac{r_{ij}}{r_0} \right)^2 \right) - \frac{1}{2} \right] \\
\frac{\partial U_{ij}(r_{ij})}{\partial x_i} &= -\frac{2A}{r_0^2} (x_i - x_j) C_1 \quad (2.2.32a)
\end{aligned}$$

$$\frac{\partial f_{ijk}}{\partial x_i} = -\frac{2}{r_0^2} (x_i - x_k) f_{ijk} \quad (2.2.32b)$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial U_{ij}(r_{ij})}{\partial x_i} &= -\frac{2A}{r_0^2} (x_i - x_k) \left[n \left(\frac{r_0}{r_{ik}} \right)^{n+2} + 2\alpha \left(\frac{r_0}{r_{ik}} \right)^n \right] \exp \left(-\alpha \left(\frac{r_{ij}}{r_0} \right)^2 \right) \\
&\quad \left[\left(\frac{r_{ik}}{r_0} \right)^2 \exp \left(-\alpha \left(\frac{r_{ik}}{r_0} \right)^2 \right) - \frac{1}{2} \right]
\end{aligned}$$

$$C_2 = \left[n \left(\frac{r_0}{r_{ik}} \right)^{n+2} + 2\alpha \left(\frac{r_0}{r_{ik}} \right)^n \right] \exp \left(-\alpha \left(\frac{r_{ij}}{r_0} \right)^2 \right) \left[\left(\frac{r_{ik}}{r_0} \right)^2 \exp \left(-\alpha \left(\frac{r_{ik}}{r_0} \right)^2 \right) - \frac{1}{2} \right]$$

$$\frac{\partial U_{ik}(r_{ik})}{\partial x_i} = -\frac{2A}{r_0^2} (x_i - x_k) C_2 \quad (2.2.32c)$$

$$\frac{\partial f_{ikj}}{\partial x_i} = -\frac{2}{r_0^2} (x_i - x_j) f_{ikj} \quad (2.2.32d)$$

$$\frac{\partial U_{jk}(r_{jk})}{\partial x_i} = 0 \quad (2.2.32e)$$

$$\frac{\partial f_{ikj}}{\partial x_i} = -\frac{2}{r_0^2} [(x_i - x_j) + (x_i - x_k)] f_{ikj} \quad (2.2.32f)$$

şeklinde açabiliriz. i'nci parçacığın üzerine x doğrultusunda etkiyen üç-cisim kuvvet bileşenlerini,

$$(F_{ix})_3 = \frac{2}{r_0^2} B [A(x_i - x_j) C_1 f_{ijk} + (x_i - x_k) U_{ij}(r_{ij}) f_{ijk} + A(x_i - x_k) C_2 f_{ikj} + A(x_i - x_j) U_{ik}(r_{ik}) f_{ikj} + [(x_i - x_j) + (x_i - x_k)] U_{jk}(r_{jk}) f_{jki}] \quad (2.2.33a)$$

olarak yazabiliriz. Benzer şekilde i'nci parçacık üzerine y ve z doğrultularında etkiyen üç-cisim kuvvet bileşenleri de;

$$(F_{iy})_3 = \frac{2}{r_0^2} B \left[A(y_i - y_j) C_1 f_{ijk} + (y_i - y_k) U_{ij}(r_{ij}) f_{ijk} + A(y_i - y_k) C_2 f_{ikj} + A(y_i - y_j) U_{ik}(r_{ik}) f_{ikj} + [(y_i - y_j) + (y_i - y_k)] U_{jk}(r_{jk}) f_{jki} \right] \quad (2.2.33b)$$

$$(F_{iz})_3 = \frac{2}{r_0^2} B \left[A(z_i - z_j) C_1 f_{ijk} + (z_i - z_k) U_{ij}(r_{ij}) f_{ijk} + A(z_i - z_k) C_2 f_{ikj} + A(z_i - z_j) U_{ik}(r_{ik}) f_{ikj} + [(z_i - z_j) + (z_i - z_k)] U_{jk}(r_{jk}) f_{jki} \right] \quad (2.2.33c)$$

şeklindedir. Aynı şekilde denklem (2.2.32a)'yı, j'ninci parçacığı için;

$$\frac{\partial U_{ij}(r_{ij})}{\partial x_j} = \frac{2A}{r_0^2} (x_i - x_j) \left[n \left(\frac{r_0}{r_{ij}} \right)^{n+2} + 2\alpha \left(\frac{r_0}{r_{ij}} \right)^n \right] \exp \left(-\alpha \left(\frac{r_{ij}}{r_0} \right)^2 \right) \left[\left(\frac{r_{ij}}{r_0} \right)^2 \exp \left(-\alpha \left(\frac{r_{ij}}{r_0} \right)^2 \right) - \frac{1}{2} \right]$$

$$\frac{\partial U_{ij}(r_{ij})}{\partial x_j} = \frac{2A}{r_0^2} (x_i - x_j) C_1 \quad (2.2.34a)$$

$$\frac{\partial f_{ijk}}{\partial x_j} = -\frac{2}{r_0^2} (x_j - x_k) f_{ijk} \quad (2.2.34b)$$

$$\frac{\partial U_{ik}(r_{ik})}{\partial x_j} = 0 \quad (2.2.34c)$$

$$\frac{\partial f_{ikj}}{\partial x_j} = -\frac{2}{r_0^2} [-(x_i - x_j) + (x_i - x_k)] f_{ikj} \quad (2.2.34d)$$

$$\frac{\partial U_{jk}(r_{jk})}{\partial x_j} = \frac{2A}{r_0^2} (x_j - x_k) \left[n \left(\frac{r_0}{r_{jk}} \right)^{n+2} + 2\alpha \left(\frac{r_0}{r_{jk}} \right)^n \right] \exp \left(-\alpha \left(\frac{r_{jk}}{r_0} \right)^2 \right) \left[\left(\frac{r_{jk}}{r_0} \right)^2 \exp \left(-\alpha \left(\frac{r_{jk}}{r_0} \right)^2 \right) - \frac{1}{2} \right]$$

$$C_2 = \left[n \left(\frac{r_0}{r_{jk}} \right)^{n+2} + 2\alpha \left(\frac{r_0}{r_{jk}} \right)^n \right] \exp \left(-\alpha \left(\frac{r_{jk}}{r_0} \right)^2 \right) \left[\left(\frac{r_{jk}}{r_0} \right)^2 \exp \left(-\alpha \left(\frac{r_{jk}}{r_0} \right)^2 \right) - \frac{1}{2} \right]$$

$$\frac{\partial U_{jk}(r_{jk})}{\partial x_j} = -\frac{2A}{r_0^2} (x_j - x_k) C_3 \quad (2.2.34e)$$

$$\frac{\partial f_{jki}}{\partial x_j} = -\frac{2}{r_0^2} (x_i - x_j) f_{jki} \quad (2.2.34f)$$

şeklinde açabiliriz. j'ninci parçacığın üzerine x doğrultusunda etkiyen üç cisim kuvvet bileşenini,

$$\begin{aligned} (F_{jx})_3 = \frac{2}{r_0^2} B \left[A(x_i - x_j)C_1 f_{ijk} + (x_j - x_k)U_{ij}(r_{ij})f_{ijk} + A[-(x_i - x_j) + \right. \\ \left. (x_i - x_k)]U_{ik}(r_{ik})f_{ikj} + A(x_j - x_k)C_3 f_{jki} - (x_i - x_j)U_{jk}(r_{jk})f_{ikj} \right] \quad (2.2.35a) \end{aligned}$$

şeklinde yazabiliriz. j'inci parçacığın üzerine y ve z doğrultusunda etkiyen üç cisim kuvvet bileşenini de;

$$\begin{aligned} (F_{jy})_3 = \frac{2}{r_0^2} B \left[A(y_i - y_j)C_1 f_{ijk} + (y_j - y_k)U_{ij}(r_{ij})f_{ijk} + A[-(y_i - y_j) + \right. \\ \left. (y_i - y_k)]U_{ik}(r_{ik})f_{ikj} + A(y_j - y_k)C_3 f_{jki} - (y_i - y_j)U_{jk}(r_{jk})f_{ikj} \right] \quad (2.2.35b) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} (F_{jz})_3 = \frac{2}{r_0^2} B \left[A(z_i - z_j)C_1 f_{ijk} + (z_j - z_k)U_{ij}(r_{ij})f_{ijk} + A[-(z_i - z_j) + \right. \\ \left. (y_i - y_k)]U_{ik}(r_{ik})f_{ikj} + A(y_j - y_k)C_3 f_{jki} - (y_i - y_j)U_{jk}(r_{jk})f_{ikj} \right] \quad (2.2.35c) \end{aligned}$$

şeklinde ifade edilir. Aynı şekilde denklem (2.2.31a)'yı k'nıncı parçacık için yazarsak ;

$$\frac{\partial U_{ij}(r_{ij})}{\partial x_k} = 0 \quad (2.2.36a)$$

$$\frac{\partial f_{ijk}}{\partial x_k} = -\frac{2}{r_0^2} [-(x_i - x_k) - (x_j - x_k)f_{ijk}] \quad (2.2.36b)$$

$$\frac{\partial U_{ik}(r_{ik})}{\partial x_k} = \frac{2A}{r_0^2} (x_i - x_k)C_2 \quad (2.2.36c)$$

$$\frac{\partial f_{ikj}}{\partial x_k} = \frac{2}{r_0^2} (x_j - x_k)f_{ikj} \quad (2.2.36d)$$

$$\frac{\partial U_{jk}(r_{jk})}{\partial x_k} = \frac{2A}{r_0^2} (x_j - x_k)C_3 \quad (2.2.36e)$$

$$\frac{\partial f_{jki}}{\partial x_k} = \frac{2}{r_0^2} (x_i - x_k) f_{jki} \quad (2.2.36f)$$

şeklinde açabiliriz. k'nıncı parçacık üzerine x doğrultusunda etkiyen üç-cisim kuvvet bileşenini;

$$(F_{kx})_3 = \frac{2}{r_0^2} B \left[\begin{aligned} &-(x_i - x_k) + (x_j - x_k) U_{ij}(r_{ij}) f_{ijk} - (x_i - x_k) C_2 f_{ikj} \\ &-(x_j - x_k) U_{ik}(r_{ik}) f_{ikj} - A(x_j - x_k) C_3 f_{jki} - (x_i - x_k) U_{jk}(r_{jk}) f_{jkj} \end{aligned} \right] \quad (2.2.37a)$$

denklemleriyle yazabiliriz. k'nci parçacık üzerine y ve z doğrultusunda etkiyen üç -cisim kuvvet bileşenleri de;

$$(F_{ky})_3 = \frac{2}{r_0^2} B \left[\begin{aligned} &-(y_i - y_k) + (y_j - y_k) U_{ij}(r_{ij}) f_{ijk} - (y_i - y_k) C_2 f_{ikj} \\ &-(y_j - y_k) U_{ik}(r_{ik}) f_{ikj} - A(y_j - y_k) C_3 f_{jki} - (y_i - y_k) U_{jk}(r_{jk}) f_{jkj} \end{aligned} \right] \quad (2.2.37b)$$

$$(F_{kz})_3 = \frac{2}{r_0^2} B \left[\begin{aligned} &-(z_i - z_k) + (z_j - z_k) U_{ij}(r_{ij}) f_{ijk} - (z_i - z_k) C_2 f_{ikj} \\ &-(z_j - z_k) U_{ik}(r_{ik}) f_{ikj} - A(z_j - z_k) C_3 f_{jki} - (z_i - z_k) U_{jk}(r_{jk}) f_{jkj} \end{aligned} \right] \quad (2.2.37c)$$

denklemler ile ifade edilebilir.

Böylece, i'nci parçacık üzerine etkiyen toplam kuvvet bileşenleri iki cisim ve üç cisim etkileşmelerinden meydana gelen kuvvet bileşenlerinin toplamıdır. Eğer, x, y ve z yönlerindeki toplam kuvvetlerin sırasıyla $(F_{ix})_T$, $(F_{iy})_T$ ve $(F_{iz})_T$ ile gösterilmesi durumunda ;

$$(F_{ix})_T = (F_{ix})_2 + (F_{ix})_3 \quad (2.2.38a)$$

$$(F_{iy})_T = (F_{iy})_2 + (F_{iy})_3 \quad (2.2.38b)$$

$$(F_{iz})_T = (F_{iz})_2 + (F_{iz})_3 \quad (2.2.38c)$$

olacaktır. Bu denklemlerden yararlanarak i'inci parçacık üzerine x, y ve z yönünde etkiyen toplam kuvvet bileşenlerini, N parçacıktan oluşmuş bir sistem için genelleştirirsek;

$$(F_{ix})_T = \sum_{i < j}^N \left[-\frac{\partial U_{ij}(r_{ij})}{\partial x_i} \right] + B \sum_{i < j < k}^N \left[-\frac{\partial w_{ijk}(r_{ij}, r_{ik}, r_{jk})}{\partial x_i} \right] \quad (2.2.39a)$$

$$(F_{iy})_T = \sum_{i < j}^N \left[-\frac{\partial U_{ij}(r_{ij})}{\partial y_i} \right] + B \sum_{i < j < k}^N \left[-\frac{\partial w_{ijk}(r_{ij}, r_{ik}, r_{jk})}{\partial y_i} \right] \quad (2.2.39b)$$

$$(F_{iz})_T = \sum_{i < j}^N \left[-\frac{\partial U_{ij}(r_{ij})}{\partial z_i} \right] + B \sum_{i < j < k}^N \left[-\frac{\partial w_{ijk}(r_{ij}, r_{ik}, r_{jk})}{\partial z_i} \right] \quad (2.2.39c)$$

şeklinde yazabiliriz. Benzer şekilde denklem (2.2.38a), (2.2.38b), (2.2.38c) ve denklem (2.2.39a), (2.2.39b), (2.2.39c) j'inci ve k'inci parçacıklar için de aynı şeyi yapmaktayız.

(2.1.15), türetilen kuvvet bileşenleri ve (2.1.17) bağıntısı dikkate alındığında;

$$\frac{1}{h^2} = \frac{2A}{mr_0^2} \quad (2.2.40)$$

olduğu görülür. Burada h moleküler dinamik zaman adımı,

$$h = \left(\frac{mr_0^2}{2A} \right)^{1/2} \quad (2.2.41)$$

olarak hesaplanır.

3. VERLET ALGORİTMASI VE PROGRAMIN UYGULANMASI

Burada; N parçacık arasındaki etkileşmeyi Verlet Algoritmasının hız formunu kullanarak incelendi. Verlet algoritmasının hız formuna göre aşağıdakilerin yapılması gerekir;

1. Başlangıç anında her parçacığın $r_i(x_i, y_i, z_i)$ konumlarının belirlenmesi
2. Başlangıç anında her parçacığın v_i hızlarının belirlenmesi
3. Başlangıç anındaki konumları biliyorsak herhangi bir (n+1)'inci (n=0,1,2,...) zaman adımında i'nci parçacığın konumu;

$$r_i^{n+1} = r_i^n + h v_i^n + \frac{1}{2m} h^2 F_i^n \quad (3.1)$$

bağıntısıyla hesaplanır.

4. Başlangıç anındaki hızları biliyorsak (n+1)'inci (n=1,2,...) zaman adımında i'nci parçacığın hızı;

$$v_i^{n+1} = v_i^n + \frac{h}{2m} (F_i^{n+1} + F_i^n) \quad (3.2)$$

bağıntısıyla hesaplanır.

(3.1) bağıntısına göre (n+1)'inci zaman adımında parçacığın konumunu hesaplayabilmek için n'inci zaman adımında parçacığın konumunu, hızını ve n'inci zaman adımında parçacık üzerine etkiyen kuvveti hesaplamak gerekmektedir. n'inci zaman adımındaki kuvveti hesaplayabilmek için n'inci zaman adımında konumlarından hareketle parçacıklar arası mesafeyi ve buna bağlı olarak parçacıklar arası etkileşme potansiyel enerjisini hesaplamak gerekir.

(3.2) bağıntısına göre (n+1)'inci zaman adımında parçacığın hızını, n'inci ve (n+1)'inci zaman adımlarında parçacık üzerine etkiyen kuvvetleri, tabii ki kuvvetleri

hesaplayabilmek için de n 'inci ve $(n+1)$ 'inci zaman adımlarında parçacıklar sisteminin etkileşme potansiyel enerjisini hesaplamak gerekmektedir.

Sonuçta her zaman adımında, her parçacık için konum koordinatları, hız bileşenleri, etkileşme potansiyel enerjisi, parçacıklar üzerine etkiyen kuvvetleri hesaplamak gerekir. Ayrıca her adımda sistemin toplam kinetik ve toplam enerjilerini hesaplamak gerekir. Örneğin üç parçacıktan oluşmuş bir mikrokümede üç tane U_{ij} potansiyel enerji terimi vardır. Potansiyel enerji terimleri mikrokümedeki parçacık sayısına göre türetilir.

Bu çalışmada; her giriş sıcaklığında Cu_n ($n = 3,4,5$) mikrokümesinde atomların başlangıç koordinatları, başlangıç hızları (Maxwell-Boltzmann hız dağılımından) girilerek her moleküler etkileşme zaman adımında atomların konumları, hızları hesaplanarak sistemin toplam etkileşme potansiyel enerjisi, toplam kinetik enerjisi, ayrıca atomlar arası ortalama uzaklıklar hesaplandı. Hesaplar yapılırken Cu_n mikrokümesi için moleküler dinamik zaman adımı

$$\Delta t = \left(\frac{mr_0^2}{2A} \right)^{1/2} = 4,4959 \times 10^{-16} s \text{ olarak hesaplandı. Hesaplardan gelecek hatayı}$$

minimumu düşürebilmek için bu değer $h = \frac{1}{50} \Delta t \cong 8,99 \times 10^{-16} s$ olarak alındı. Sistemin kararlı yapıya ulaşabilmesi için ortalama ilk 40.000 adımda hızlar skalandırıldı. İlk 40.000 adımdan sonra 20.000-25.000 adım sistem serbest bırakılarak her adımda hesaplanan etkileşme potansiyel enerjisi, kinetik enerji ve toplam enerjinin zaman adımına göre değişim grafikleri çizilerek sistemin kararlı yapıya ulaşıp ulaşmadığı kontrol edildi.

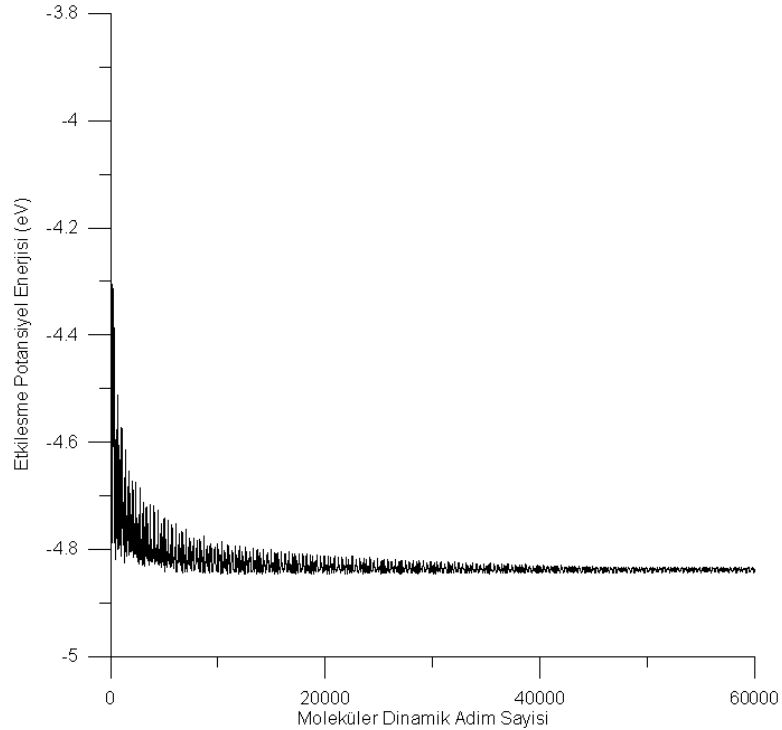
Etkileşme potansiyel enerjinin zaman adımına göre değişimi hızların skalandırılmasından sonra düz bir çizgi yada çok küçük dalgalanmalar gösteriyorsa; bu durum sistemin kararlı yapıya ulaştığını, dalgalanmalar büyük ise bu da sistemin kararlı yapıya ulaşmadığını ifade etmektedir. Sistem kararlı yapıya ulaşmamış ise bazı giriş parametrelerini daha çok da moleküler dinamik zaman adımlarının sayısını artırarak sistemin kararlı yapıya ulaşması sağlandı. Kararlı yapıdaki sistemde skalandırma işlemi bittikten sonra etkileşme potansiyel enerjisi, kinetik enerji, toplam enerji, atomlar arası

uzaklıkların ve hızların ortalama değeri hesaplandı. Ayrıca giriş sıcaklığını test etmek için son durumda sistemin ortalama sıcaklığı hesaplandı.

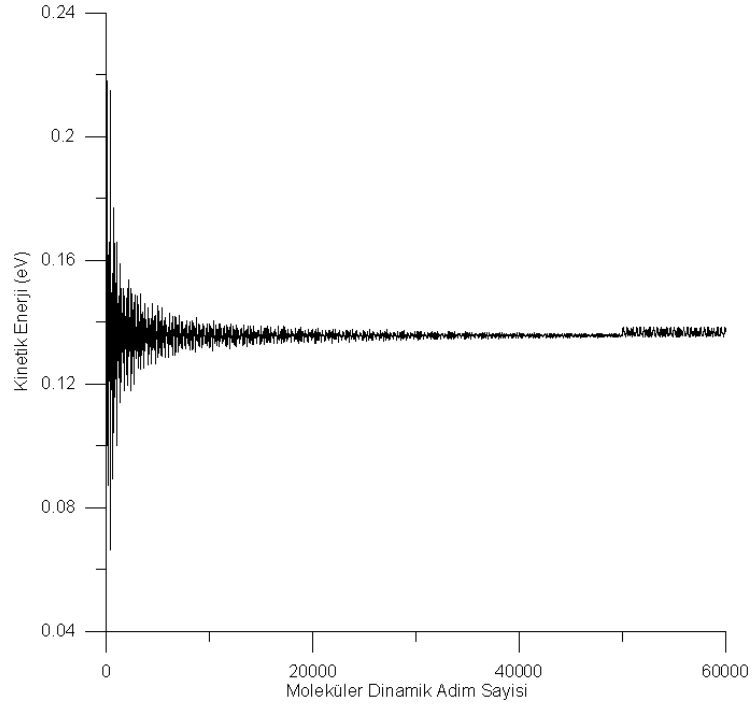
Tablo 3.1 : Hesaplarda Kullanılan Parametreler (Erkoç 1989)

$r_0 (A^\circ)$	$-\epsilon_0 (Ev)$	n	-B
2,22	2,01	1,801698	1,619242

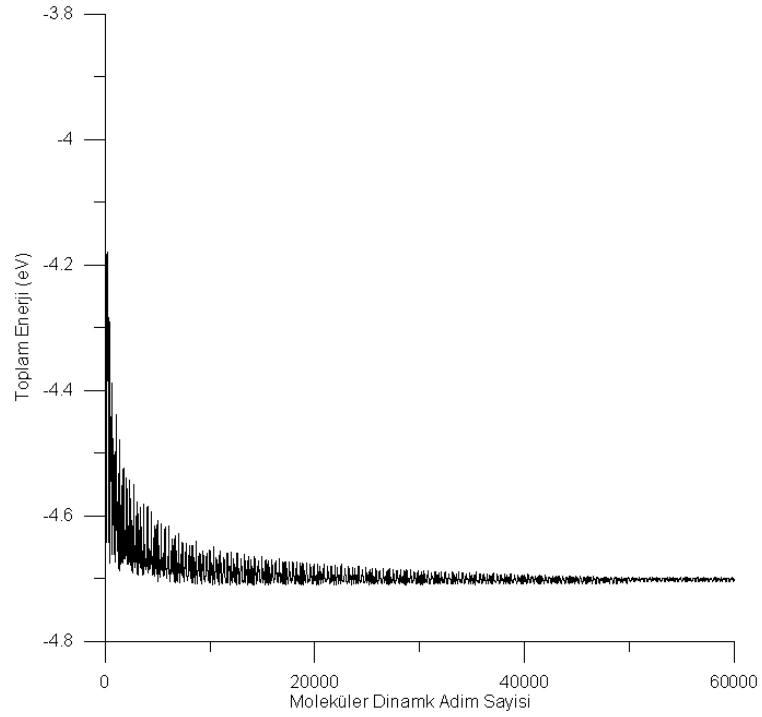
Cu_3 mikrokümesi için 1050 K ve 4175 K sıcaklığında; Cu_4 mikrokümesi için 1800K sıcaklığında; Cu_5 mikrokümesi için 1400K sıcaklığında etkileşme potansiyel enerjisinin, kinetik enerjisinin ve toplam enerjinin moleküler dinamik zaman adımına göre değişim grafikleri, Cu_3 , Cu_4 , Cu_5 mikrokümelerinin etkileşme potansiyel enerjilerinin sıcaklığa göre değişim grafikleri verildi. Ayrıca her giriş sıcaklığı için; etkileşme potansiyel enerjisi (EPOT), ortalama potansiyel enerjisi (TPOT), hesaplanan ortalama sıcaklık (HES.T), girişteki ortalama hız ($G.v_{art}$), hesaplanan hız (Hes. v), hesaplanan ortalama hız (Hes. v_{art}) ve atomlar arası ortalama uzaklıklar tablolar halinde verildi.



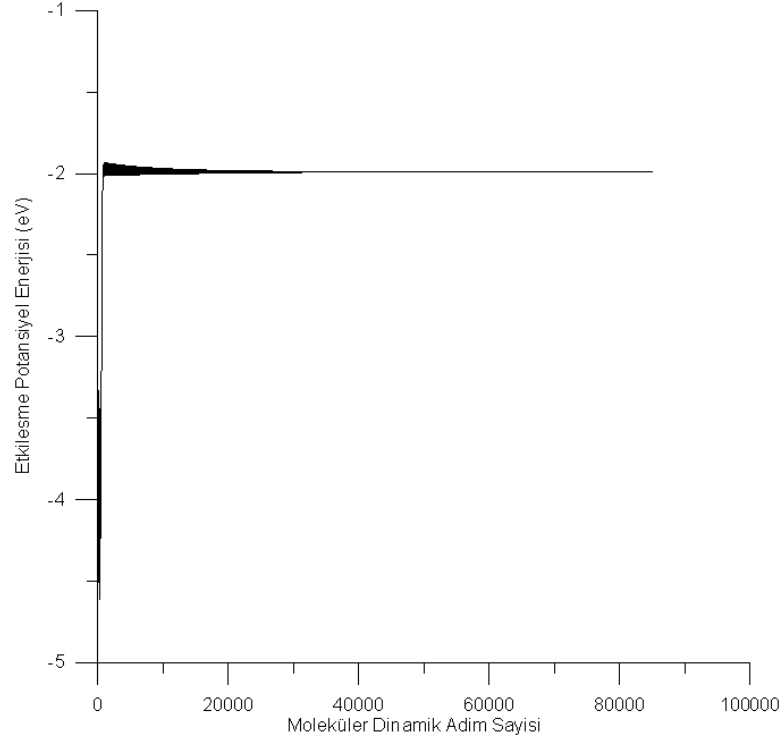
Şekil 3.1: Cu_3 Mikrokümesinin, 1050 K Sıcaklıkta, Etkileşme Potansiyel Enerjisinin Adım Sayısına Göre Değişimi



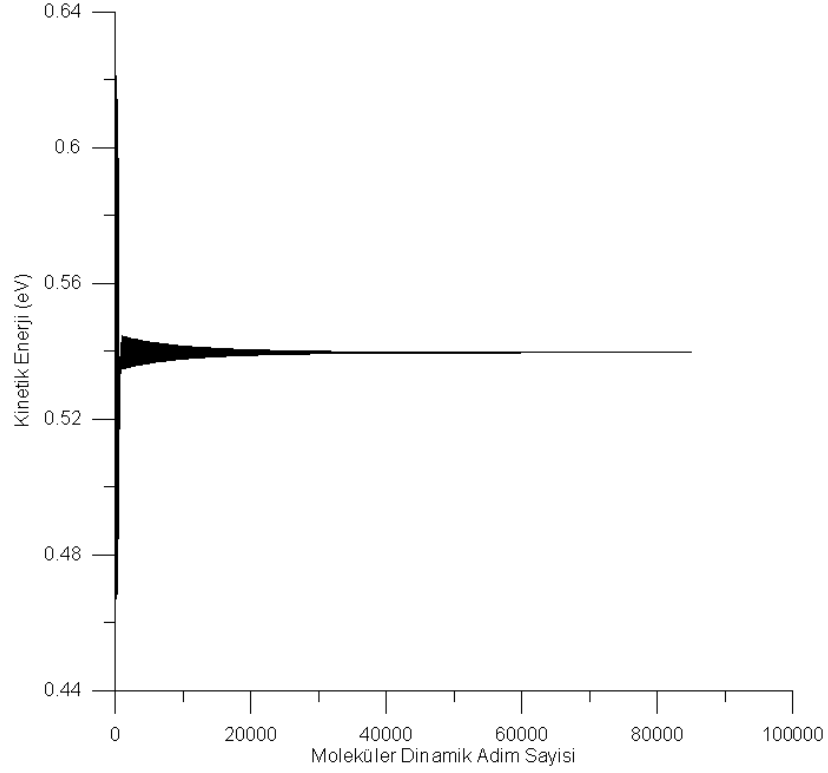
Şekil 3.2: Cu_3 Mikrokümesinin, 1050 K Sıcaklıkta, Kinetik Enerjisinin Adım Sayısına Göre Değişimi



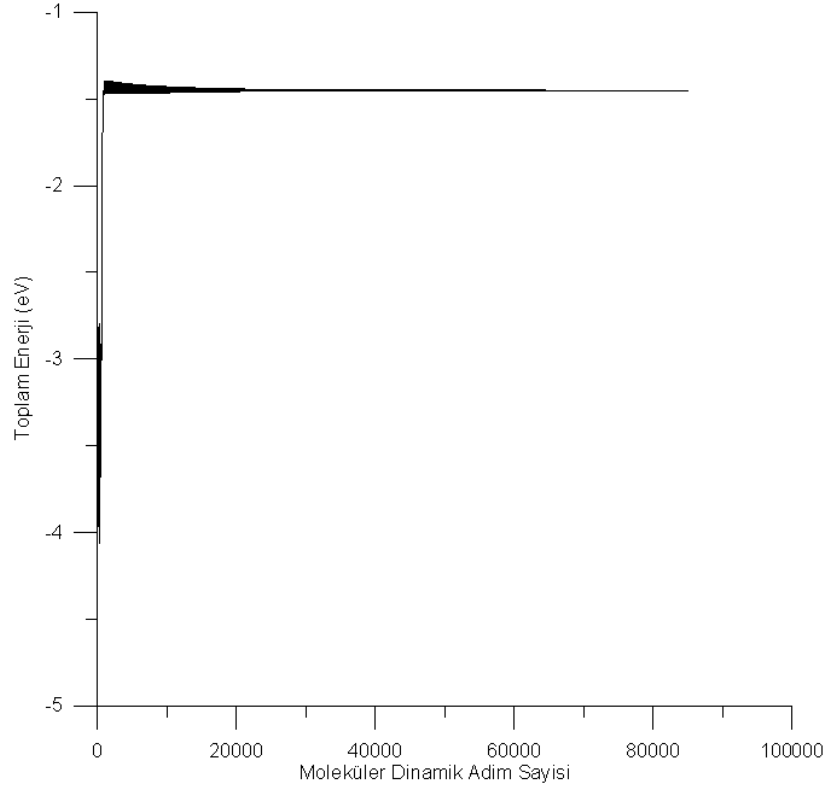
Şekil 3.3: Cu_3 Mikrokümesinin, 1050 K Sıcaklıkta, Toplam Enerjisinin Adım Sayısına Göre Değişimi



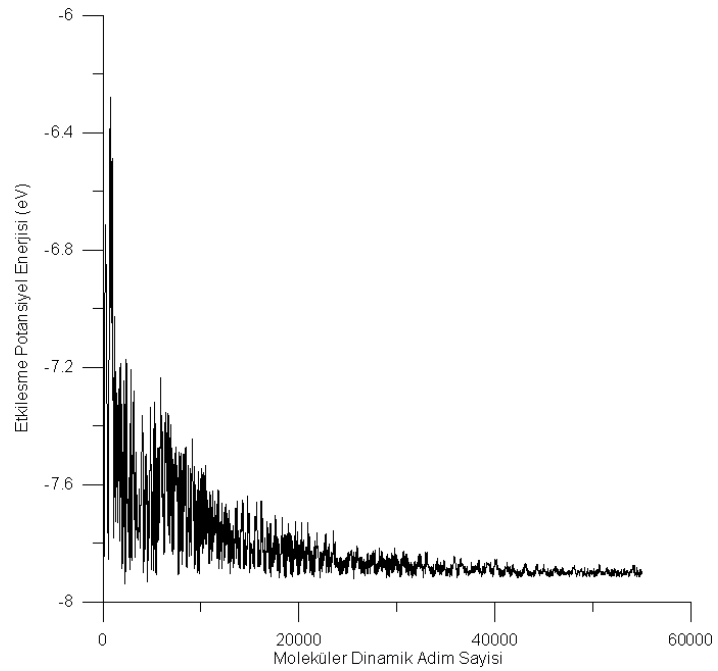
Şekil 3.4: Cu_3 Mikrokümesinin, 4175 K Sıcaklıkta, Etkileşme Potansiyel Enerjisinin Adım Sayısına Göre Değişimi



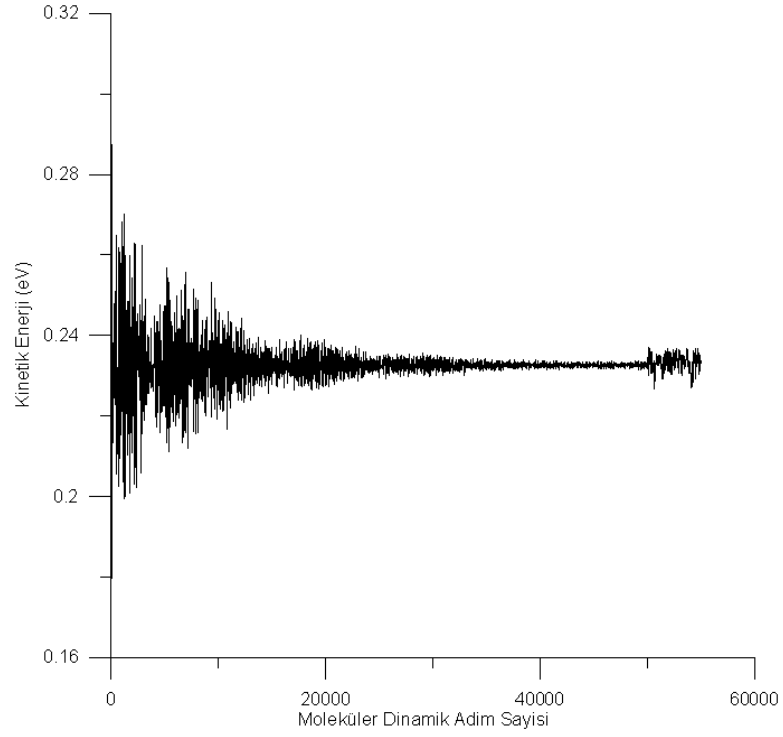
Şekil 3.5: Cu_3 Mikrokümesinin, 4175 K Sıcaklıkta, Kinetik Enerjisinin Adım Sayısına Göre Değişimi



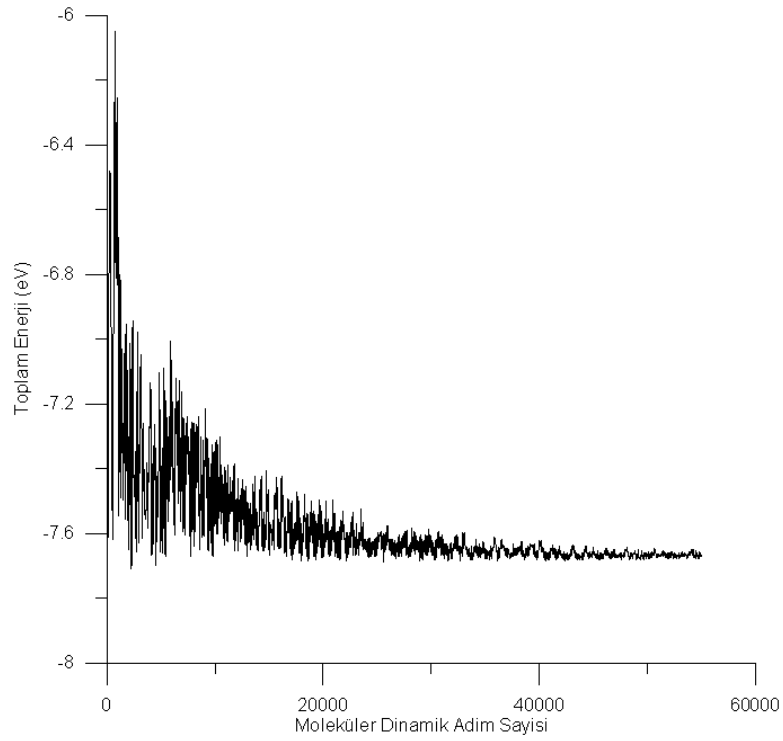
Şekil 3.6: Cu_3 Mikrokümesinin, 4175 K Sıcaklıkta, Toplam Enerjisinin Adım Sayısına Göre Değişimi



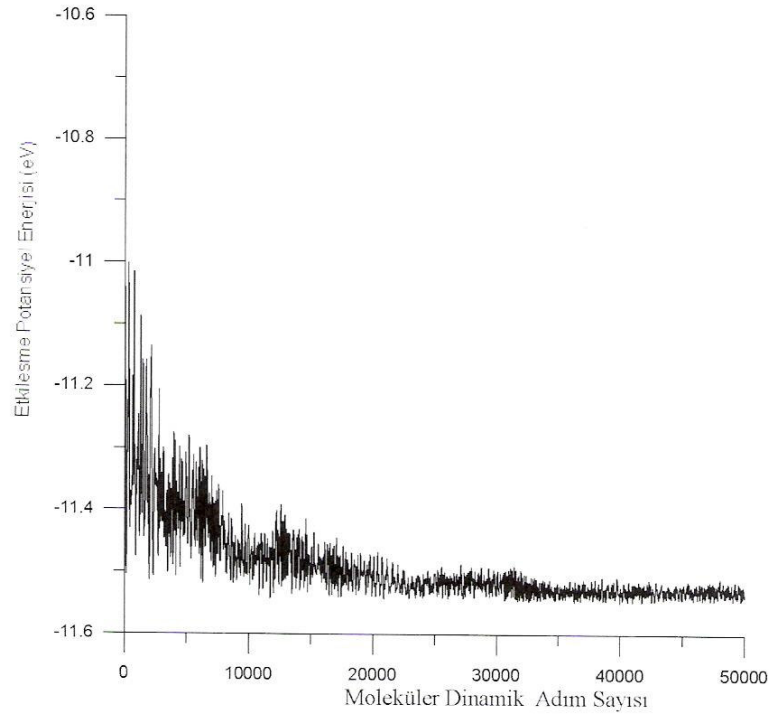
Şekil 3.7: Cu_4 Mikrokümesinin, 1800 K Sıcaklıkta, Etkileşme Potansiyel Enerjisinin Adım Sayısına Göre Değişimi



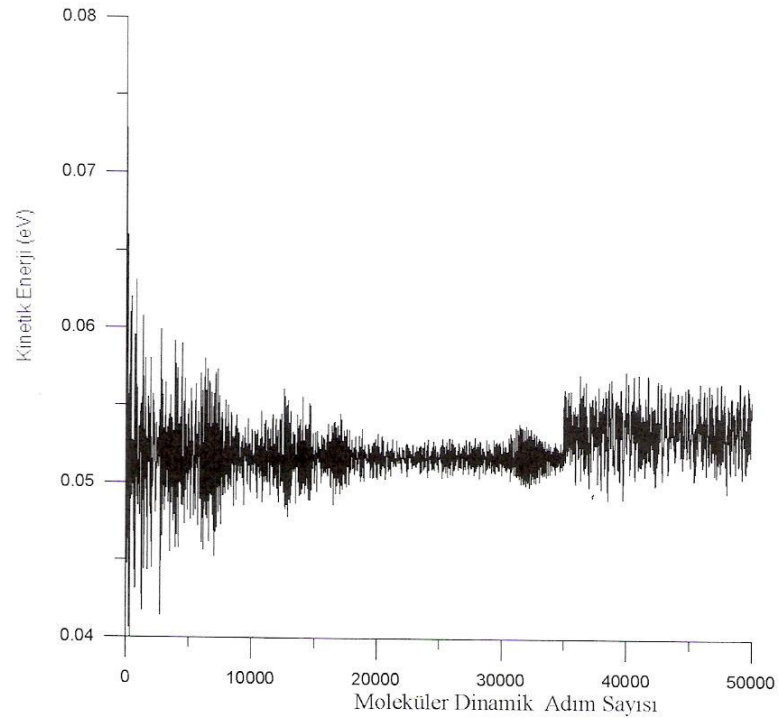
Şekil 3.8: Cu_4 Mikrokümesinin, 1800 K Sıcaklıkta, Kinetik Enerjisinin Adım Sayısına Göre Değişimi



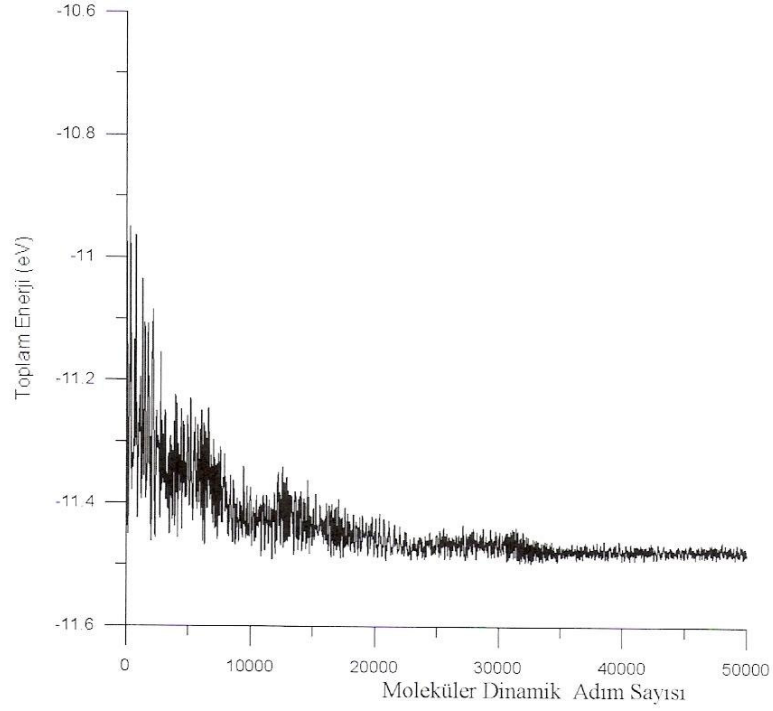
Şekil 3.9: Cu_4 Mikrokümesinin, 1800 K Sıcaklıkta, Toplam Enerjisinin Adım Sayısına Göre Değişimi



Şekil 3.10: Cu_5 Mikrokümesinin, 1400 K Sıcaklıkta, Etkileşme Potansiyel Enerjisinin Adım Sayısına Göre Değişimi

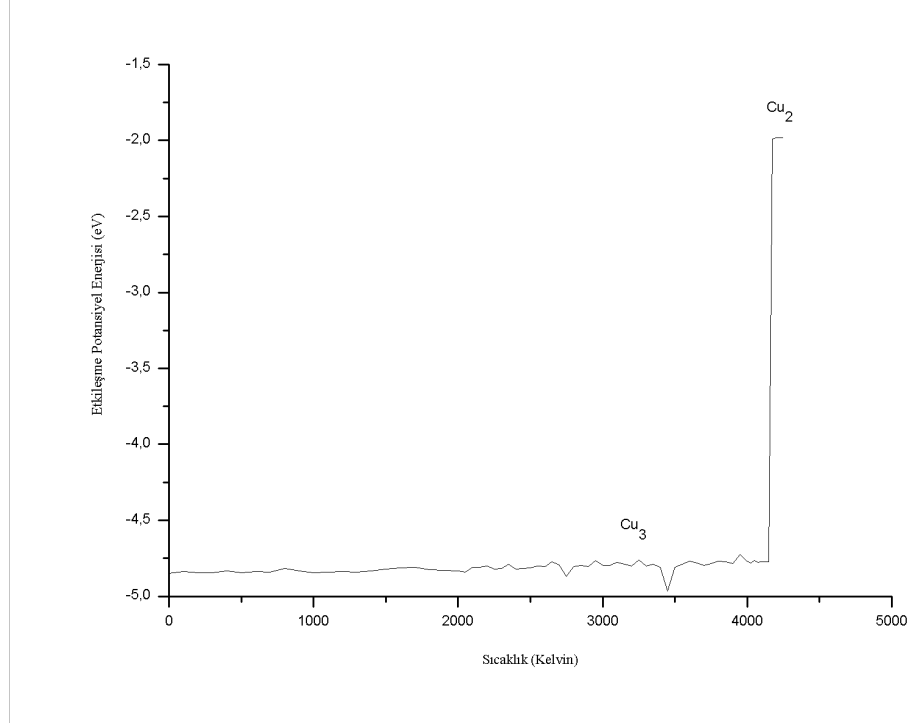


Şekil 3.11: Cu_5 Mikrokümesinin, 1400 K Sıcaklıkta, Kinetik Enerjisinin Adım Sayısına Göre Değişimi

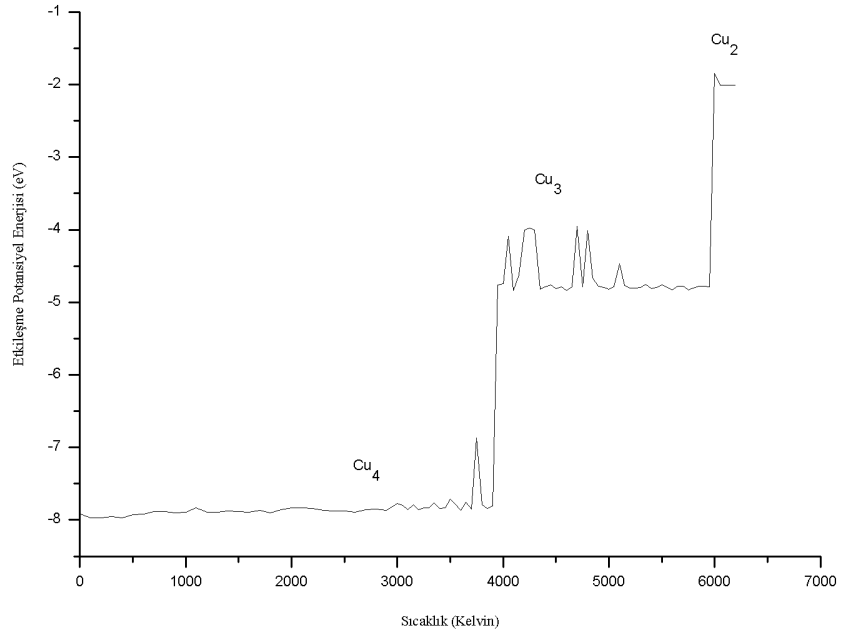


Şekil 3.12: Cu_5 Mikrokümesinin, 1400 K Sıcaklıkta, Toplam Enerjisinin Adım Sayısına Göre Değişimi

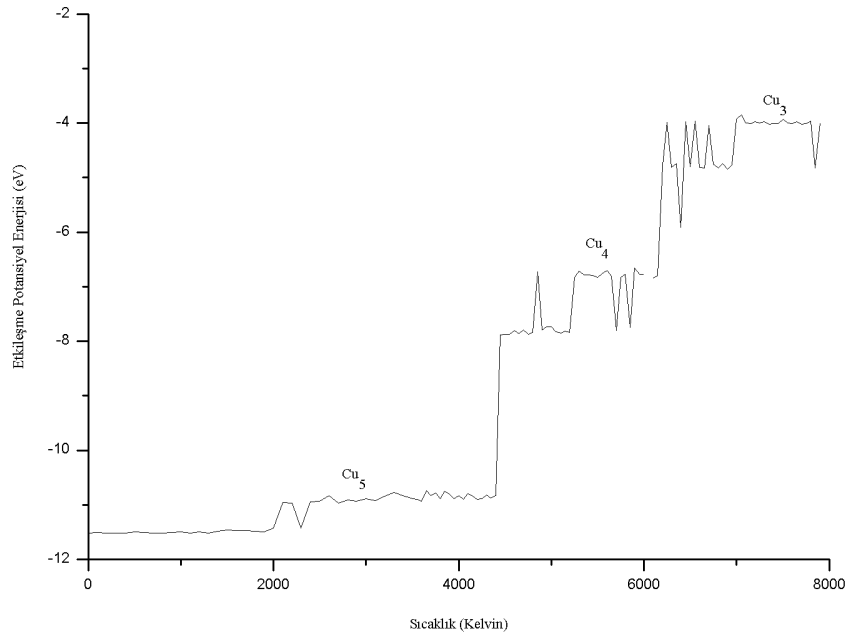
Değişik giriş sıcaklıklarına göre; Cu_3 , Cu_4 ve Cu_5 mikrokümelerinin etkileşme potansiyel enerjilerinin değişim grafikleri aşağıda verilmiştir.



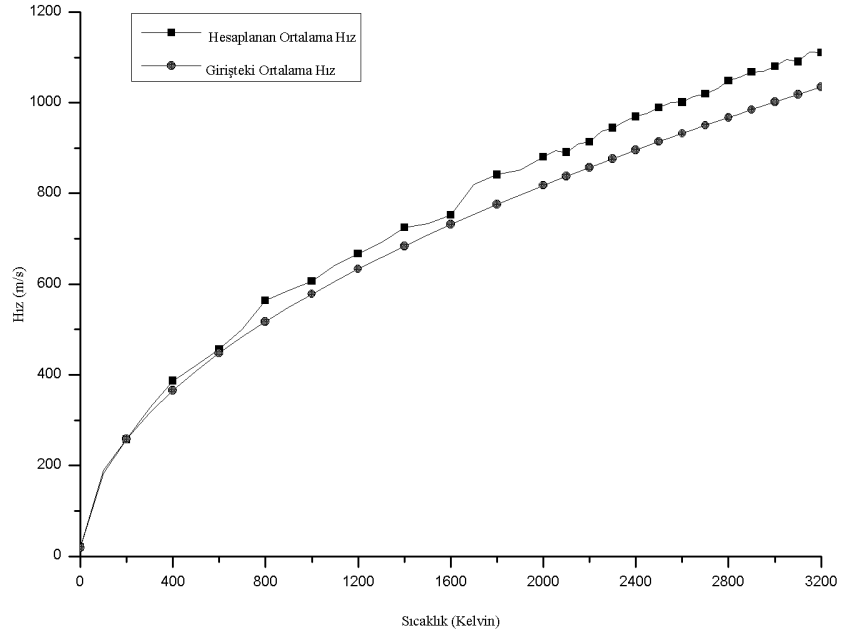
Şekil 3.13: Cu_3 Mikrokümesinin Etkileşme Potansiyel Enerjisinin Sıcaklığa göre değişimi



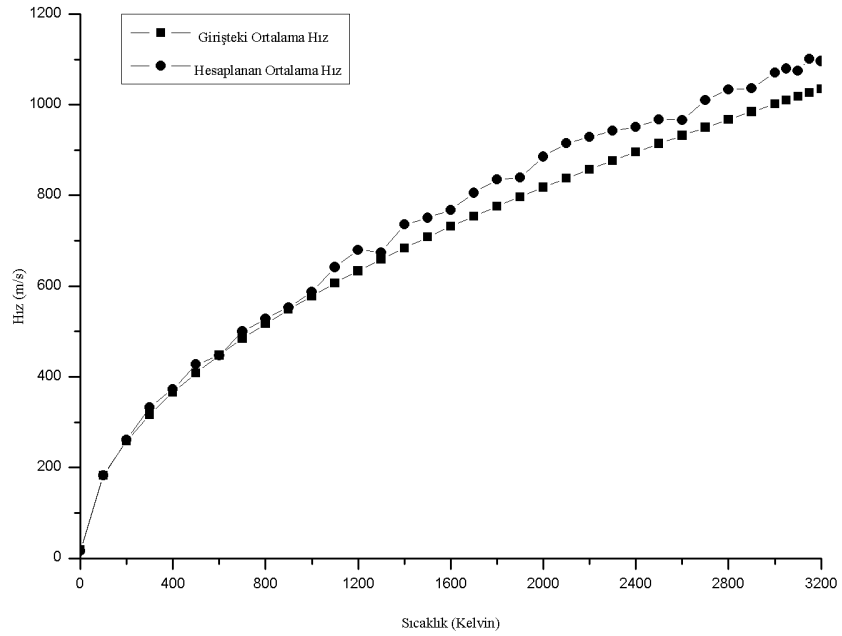
Şekil 3.14: Cu_4 Mikrokümesinin Etkileşme Potansiyel Enerjisinin Sıcaklığa göre değişimi



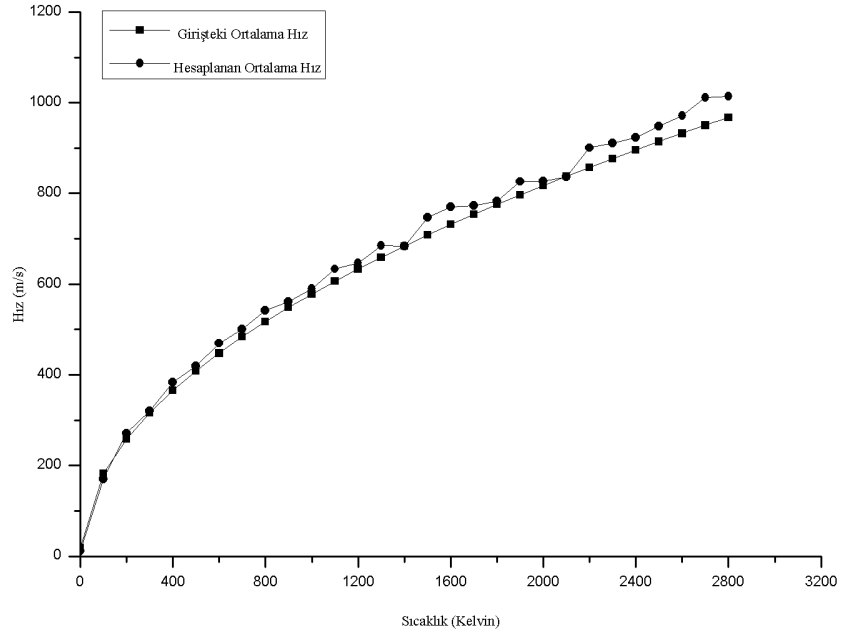
Şekil 3.15: Cu_5 Mikrokümesinin Etkileşme Potansiyel Enerjisinin Sıcaklığa göre Değişimi



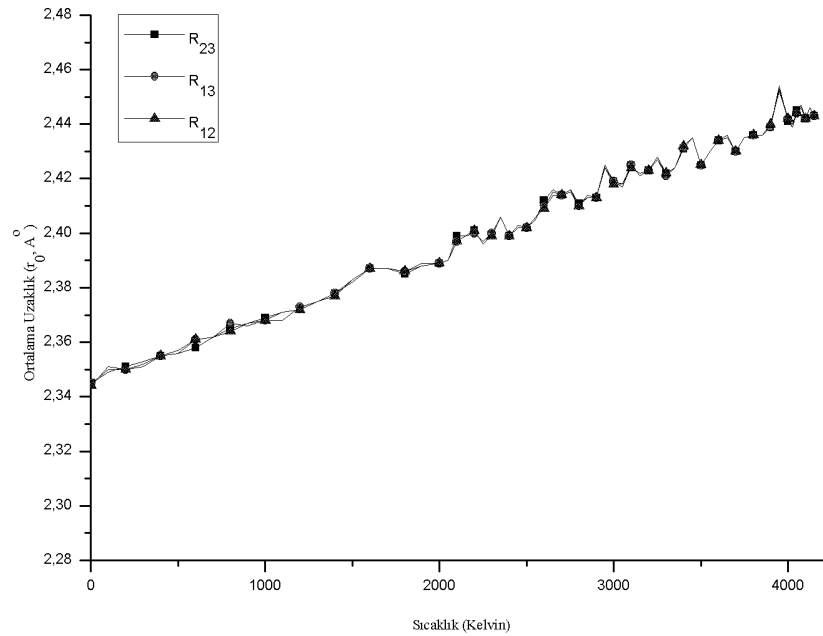
Şekil 3.16: Cu₃ mikrokümesinde; Girişteki Ortalama Hız ve Hesaplanan Ortalama Hızın Sıcaklığa Göre Değişimi



Şekil 3.17: Cu₄ mikrokümesinde; Girişteki Ortalama Hız ve Hesaplanan Ortalama Hızın Sıcaklığa Göre Değişimi



Şekil 3.18: Cu₅ mikrokümesinde; Girişteki Ortalama Hız ve Hesaplanan Ortalama Hızın Sıcaklığa Göre Değişimi



Şekil 3.19: Cu₃ mikrokümesinde; Atomlar Arası Ortalama Uzaklığın Sıcaklığa Göre Değişimi

4. SONUÇ VE DEĞERLENDİRME

Tablo Ek1 incelendiğinde, 1 K ile 3550 K sıcaklık aralığında, Cu_3 mikrokümesinin toplam etkileşme potansiyel enerjisi ve atomlar arası uzaklıklar sırasıyla -4,848 eV ile -4,762 eV aralığında ve $2,350 A^\circ$ ile $2,430 A^\circ$ aralığında değişirken, 3600 K ve 4150 K sıcaklık aralığında ise enerji -4,775 eV ile -4,105 eV ve atomlar arası uzaklıklar $4,458 A^\circ$ - $2,297 A^\circ$ aralığında değişmektedir. Yine tablodan görüleceği gibi 1 K ile 3550 K sıcaklık aralığında Cu_3 mikrokümesi eşkenar üçgen yapıda iken, 3600 K-4150 K aralığında üçgen yapı bozulmakta, atomlar arası ortalama uzaklıklar farklı değerler alabilmektedir. 4150 K ile 4200 K aralığında sistemin etkileşme potansiyel enerjisi -1,989 eV değerine ulaşırken, atomlardan biri mikrokümeden ayrılmakta ve diğer iki atom arasındaki uzaklık $2,30 A^\circ$ civarında bulunmaktadır. Etkileşme potansiyel enerjisinin sıcaklığa göre değişimi Şekil 3.13'te görülmektedir.

Tablo Ek2 incelendiğinde, Cu_4 mikrokümesinde; toplam etkileşme potansiyel enerjisi 1 K-3900 K sıcaklık aralığı için -7,900 eV ile -7,800 eV aralığında değişirken, 3950 K civarında -4,770 eV değerine ulaşmaktadır. Bu sıcaklık civarında Cu_4 mikrokümesindeki atomlardan biri kümeden ayrılarak küme 3 atomlu bir küme haline gelmektedir. 1 K-3900 K aralığında atomlar arası uzaklıklar incelendiğinde Cu_4 mikrokümesinde kararlı yapının kabaca düzgün dörtyüzlü yapı olduğu söylenebilir.

3950 K-5950 K sıcaklık aralığında Cu_3 mikrokümesinin etkileşme potansiyel enerjisi -4,770 eV civarında salınımlar yaprak değişmektedir. 6000 K civarında etkileşme potansiyel enerjisi -1,84eV civarına ulaşmaktadır. 3950 K-5950 K sıcaklık aralığında Cu_3 mikrokümenin de atomlar arası ortalama uzaklıklar incelendiğinde kararlı yapının ortalama $2,40 A^\circ$ kenar uzunluklu bir eşkenar üçgen yapı olduğu görülür.

Tablo Ek3 incelendiğinde 1 K-4450 K sıcaklık aralığında Cu_5 mikrokümesinde toplam etkileşme potansiyel enerjisi -11.550 eV ile -10,850 eV arasında değişirken 4500 K civarında -7,840eV'a ulaşmaktadır. Bu bize Cu_5 mikrokümesinden bir atomun ayrıldığını ve Cu_4 mikrokümesinin oluştuğunu ifade etmektedir. 4500 K ile 6700 K aralığında etkileşme potansiyel enerjisi -7,840 eV ile -6,750 eV aralığında değişirken 6250K civarında etkileşme potansiyel enerjisi -4,760 eV civarına ulaşmakta ve sıcaklık artarken etkileşme potansiyel enerjisi -4,760 eV civarında değişmektedir. Sonuç olarak; Cu_5 mikrokümesinde ilk atom 4500 K civarında ikinci atom 6250 K civarında kümeden ayrılmaktadır.

Ayrıca Şekil 3.16, 3.17, ve 3.18'den görüldüğü gibi Cu_3 , Cu_4 , Cu_5 mikrokümelerinde Maxwell-Boltzmann dağılımından hesaplanan başlangıç hız değerleri ile programda hesapladığımız ortalama hız değerleri birbirine yakın olmakla birlikte sıcaklık arttıkça hız değerleri arasındaki fark düzgün olarak artmaktadır.

Şekil 3.19'a bakıldığında ise Cu_3 mikrokümesinde atomlar arası ortalama uzaklıkların sıcaklıkla doğru orantılı olarak değiştiği görülmektedir. Buna göre atomlar, sıcaklık arttıkça birbirinden uzaklaşmaktadır. Atomlar arası uzaklıklar (R_{12} , R_{13} , R_{23}) birbirine eşittir. Cu_3 mikrokümesi 4150 K sıcaklık civarına kadar eşkenar üçgen yapısını korumaktadır. Tablo Ek1'den de görüldüğü gibi 4175 K sıcaklık civarında ikinci atom ile üçüncü atom arasındaki ortalama uzaklık (R_{23}) aynı kalırken, birinci ile üçüncü atom arasındaki ortalama uzaklık (R_{13}) ve birinci ile ikinci atom arasındaki ortalama uzaklık (R_{12}), çok yüksek değerlere ulaşmıştır. Buna göre 4175 K civarında birinci atom mikrokümeden ayrılmaktadır.

(Kafalı,2002) Ag_3 mikrokümesinde ilk atomun kopma sıcaklığını 1250 K, Ag_4 mikrokümesinde ilk kopmanın 1150 K, ikinci kopmanın 1350 K civarında olduğu bulmuştu.

(Erkoç ve Katırcıoğlu, 1989) Au_3 mikrokümesinde ilk kopmanın 3150 K sıcaklığında, Au_4 mikrokümesinde ilk kopmanın 3500 K sıcaklığında, ikinci kopmanın 3900K sıcaklığında olduğunu bulmuştu.

Sonuç olarak, Cu_3 mikrokümesinde ilk kopmanın 4175 K civarında, Cu_4 mikrokümesinde ilk kopmanın 3950 K civarında, ikinci kopmanın 6000 K civarında, Cu_5 mikrokümesinde ilk kopmanın 4500 K civarında, ikinci kopmanın 6250 K civarında olduğu bulunmuştur.

EKLER

Cu_n (3, 4, 5) Mikrokümelerinde Değişik Sıcaklıklarda Hesaplanan Değerler

Tablo Ek1: Cu₃ mikrokümesinde; değişik sıcaklıklarda hesaplanan değerler

T (K)	TPOT (ev)	EPOT (ev)	HES.T (K)	$G.\vartheta_{ort}$ $\left(\frac{m}{s}\right)$	$Hes.\vartheta$ $\left(\frac{m}{s}\right)$	$Hes.\vartheta_{ort}$ $\left(\frac{m}{s}\right)$	R_{12} (A°)	R_{13} (A°)	R_{23} (A°)
1	-4,847	-4,848	1,000	18,281	19,635	19,609	2,344	2,345	2,345
100	-4,835	-4,837	102,670	182,815	186,117	189,940	2,351	2,350	2,349
200	-4,841	-4,846	200,300	258,539	233,166	257,730	2,350	2,350	2,351
300	-4,843	-4,843	296,190	316,645	331,302	326,495	2,351	2,352	2,353
400	-4,841	-4,834	400,320	365,630	381,661	386,718	2,355	2,355	2,355
500	-4,842	-4,845	508,860	408,787	427,731	421,207	2,357	2,356	2,356
600	-4,836	-4,838	596,950	447,804	464,164	456,170	2,361	2,361	2,358
700	-4,835	-4,840	694,070	483,683	501,157	499,871	2,362	2,362	2,362
800	-4,833	-4,818	799,080	517,079	552,890	564,283	2,364	2,367	2,650
900	-4,836	-4,832	908,010	548,445	575,213	586,409	2,367	2,366	2,367
1000	-4,835	-4,843	1014,120	578,112	605,906	606,799	2,368	2,368	2,369
1100	-4,836	-4,839	1111,530	606,329	636,615	641,767	2,371	2,368	2,371
1200	-4,835	-4,837	1201,420	633,290	669,544	667,309	2,372	2,373	2,372
1300	-4,833	-4,839	1302,800	659,149	694,418	692,374	2,375	2,375	2,375
1400	-4,831	-4,833	1404,670	684,032	730,110	725,210	2,377	2,378	2,378
1500	-4,820	-4,820	1494,110	708,040	739,625	732,625	2,383	2,382	2,383
1600	-4,811	-4,815	1602,900	731,260	737,703	751,883	2,387	2,387	2,387
1700	-4,818	-4,808	1709,220	753,766	817,052	820,192	2,387	2,387	2,387
1800	-4,831	-4,827	1804,590	775,619	840,488	841,229	2,386	2,386	2,385
1900	-4,825	-4,830	1895,610	796,873	853,075	851,448	2,388	2,389	2,388
2000	-4,829	-4,833	1993,660	817,574	884,485	881,024	2,389	2,389	2,389
2050	-4,829	-4,839	2052,830	827,730	896,667	893,980	2,390	2,390	2,390
2100	-4,807	-4,809	2107,120	837,764	894,045	890,852	2,397	2,397	2,399
2150	-4,804	-4,807	2142,070	847,679	905,536	908,834	2,399	2,399	2,399
2200	-4,803	-4,800	2195,000	857,479	911,277	913,136	2,401	2,400	2,401
2250	-4,822	-4,822	2251,850	867,168	937,569	937,210	2,396	2,397	2,396
2300	-4,816	-4,819	2309,760	876,750	944,931	944,447	2,399	2,400	2,399
2350	-4,795	-4,787	2352,560	886,230	957,824	958,627	2,406	2,406	2,406
2400	-4,822	-4,820	2396,970	895,608	967,334	969,387	2,399	2,399	2,399
2450	-4,813	-4,816	2449,000	904,889	976,605	976,412	2,403	2,402	2,403
2500	-4,817	-4,815	2498,560	914,076	989,131	989,559	2,402	2,402	2,402
2550	-4,808	-4,801	2542,230	923,171	998,283	999,887	2,406	2,406	2,405
2600	-4,793	-4,803	2605,660	932,178	991,408	1001,010	2,409	2,410	2,412
2650	-4,780	-4,775	2646,660	941,098	1013,100	1014,477	2,414	2,415	2,416
2700	-4,786	-4,792	2693,890	949,935	1024,650	1019,092	2,414	2,414	2,414
2750	-4,785	-4,870	2745,660	958,691	1026,033	1030,509	2,415	2,416	2,416
2800	-4,809	-4,805	2801,540	967,367	1046,794	1048,506	2,410	2,410	2,411
2850	-4,800	-4,795	2844,680	975,966	1052,053	1056,350	2,413	2,414	2,413
2900	-4,806	-4,805	2906,470	984,490	1066,032	1067,491	2,413	2,413	2,413
2950	-4,767	-4,766	2951,890	992,940	1075,963	1068,401	2,424	2,424	2,425
3000	-4,791	-4,796	3002,220	1001,320	1079,695	1079,434	2,418	2,419	2,419
3050	-4,798	-4,796	3060,230	1009,630	1095,931	1094,862	2,418	2,417	2,418
3100	-4,773	-4,779	3098,180	1017,872	1101,841	1090,336	2,424	2,425	2,425
3150	-4,792	-4,788	3153,420	1026,048	1107,783	1111,676	2,422	2,421	2,421

Tablo Ek1'in devamı

T (K)	TPOT (eV)	EPOT (eV)	HES.T (K)	$G.v_{ort}$ $\left(\frac{m}{s}\right)$	$Hes.v$ $\left(\frac{m}{s}\right)$	$Hes.v_{ort}$ $\left(\frac{m}{s}\right)$	R_{12} (A°)	R_{13} (A°)	R_{23} (A°)
3200	-4,785	-4,802	3209,060	1034,159	1122,277	1110,721	2,423	2,423	2,423
3250	-4,777	-4,762	3241,810	1042,207	1117,765	1129,589	2,428	2,427	2,427
3300	-4,800	-4,801	3300,670	1050,193	1136,211	1136,539	2,422	2,421	2,422
3350	-4,794	-4,790	3346,230	1058,119	1142,746	1146,614	2,424	2,424	2,424
3400	-4,765	-4,809	3442,890	1065,987	1156,250	1136,398	2,432	2,431	2,431
3450	-4,960	-4,964	3461,910	1073,796	1156,652	1157,055	2,435	2,435	2,435
3500	-4,799	-4,808	3500,590	1081,549	1172,004	1168,021	2,425	2,425	2,425
3550	-4,785	-4,787	3556,470	1089,247	1100,970	1179,036	2,430	2,430	2,430
3600	-4,776	-4,771	3606,910	1096,891	1182,818	1188,730	2,434	2,434	2,434
3650	-4,773	-4,781	3657,270	1104,482	1192,593	1191,708	2,435	2,435	2,436
3700	-4,793	-4,796	3699,320	1112,021	1204,900	1203,955	2,430	2,430	2,430
3750	-4,778	-4,784	3742,640	1119,510	1211,758	1208,269	2,435	2,435	2,435
3800	-4,779	-4,771	3777,260	1126,948	1215,424	1219,903	2,436	2,436	2,436
3850	-4,784	-4,772	3857,500	1134,338	1230,560	1234,928	2,436	2,436	2,436
3900	-4,769	-4,785	3899,880	1141,680	1237,174	1228,771	2,440	2,439	2,439
3950	-4,725	-4,727	3956,870	1148,976	1228,949	1138,415	2,452	2,453	2,454
4000	-4,771	-4,769	3995,28	1156,225	1249,436	1252,377	2,442	2,442	2,441
4025	-4,781	-4,780	4016,570	1159,832	1255,378	1256,094	2,440	2,439	2,439
4050	-4,766	-4,763	4058,860	1163,429	1258,777	1262,180	2,444	2,444	2,445
4075	-4,755	-4,779	4082,410	1167,014	1265,091	1253,244	2,446	2,447	2,447
4100	-4,779	-4,774	4102,950	1170,588	1269,035	1270,680	2,442	2,442	2,442
4125	-4,763	-4,772	4131,61	1174,152	1271,765	1268,406	2,446	2,446	2,446
4150	-4,775	-4,775	4146,910	1177,704	1275,584	1275,252	2,443	2,443	2,443
4175	-1,989	-1,989	4175,290	1181,246	1272,618	1254,367	*****	*****	2,294
4200	-1,984	-1,984	4200,050	1184,778	1265,852	1271,596	*****	*****	2,304
4225	-1,983	-1,983	4224,880	1188,299	1272,529	1273,426	*****	*****	2,305
4250	-1,983	-1,983	4249,650	1191,809	1287,984	1271,763	*****	*****	2,306

Tablo Ek2: Cu_4 mikrokümesinde; değişik sıcaklıklarda hesaplanan değerler

T (K)	T POT (eV)	E POT (eV)	HES.T (K)	$G.\vartheta_{ort} \cdot \left(\frac{m}{s}\right)$	$Hes.\vartheta \left(\frac{m}{s}\right)$	$Hes.\vartheta_{ort} \left(\frac{m}{s}\right)$	R12 R13 R14 (A°)	R23 R24 R34 (A°)
1	-7,923	-7,924	1,19	18,280	21,650	15,702	3,259 2,309 2,309	2,309 2,309 3,258
100	-7,970	-7,972	98,29	182,815	192,690	182,100	2,508 2,513 2,496	2,497 2,512 2,506
200	-7,966	-7,971	197,81	258,530	260,330	261,250	2,502 2,519 2,502	2,509 2,515 2,493
300	-7,957	-7,951	302,69	316,640	332,340	332,370	2,509 2,523 2,516	2,504 2,536 2,483
400	-7,956	-7,967	396,37	365,630	382,750	372,790	2,467 2,607 2,478	2,465 2,607 2,470
500	-7,924	-7,925	507,03	408,780	435,090	427,980	2,430 2,764 2,433	2,431 2,798 2,445
600	-7,893	-7,916	594,26	447,800	457,480	446,440	3,092 2,364 2,364	2,367 2,364 3,060
700	-7,876	-7,887	708,98	483,680	503,670	500,030	2,375 2,376 3,070	3,075 2,372 2,373
800	-7,871	-7,886	792,12	517,080	530,830	528,540	2,371 3,068 2,371	2,369 3,110 2,370
900	-7,864	-7,905	904,76	548,450	571,510	553,060	2,386 2,995 2,387	2,380 3,026 2,387
1000	-7,856	-7,896	997,64	578,110	603,120	587,250	2,341 3,331 2,340	2,339 3,238 2,339
1100	-7,841	-7,834	1102,48	606,330	645,030	641,270	3,158 2,353 2,355	2,357 2,357 3,272
1200	-7,895	-7,893	1193,49	633,290	6789,780	679,580	2,339 3,215 2,339	2,339 3,239 2,340
1300	-7,864	-7,896	1297,43	659,150	699,170	674,430	2,363 3,177 2,365	2,364 3,157 2,367
1400	-7,882	-7,880	1407,10	684,030	742,810	735,540	2,340 2,340 3,052	3,509 2,340 2,340
1500	-7,877	-7,884	1493,69	708,040	749,510	750,320	2,349 3,283 2,349	2,349 3,294 2,349
1600	-7,867	-7,891	1595,29	731,260	782,140	767,890	2,359 2,359 3,242	3,273 2,360 2,359
1700	-7,864	-7,866	1713,37	753,760	814,560	805,300	2,361 2,360 3,249	3,287 2,360 2,360
1800	-7,897	-7,899	1804,29	775,620	837,170	835,100	3,252 2,348 2,348	2,347 2,348 3,235

Tablo Ek2'nin devamı

T (K)	T POT (eV)	E POT (eV)	HES.T (K)	$G.\vartheta_{ort} \cdot \left(\frac{m}{s}\right)$	$Hes.\vartheta \left(\frac{m}{s}\right)$	$Hes.\vartheta_{ort} \left(\frac{m}{s}\right)$	R12 R13 R14 (A°)	R23 R24 R34 (A°)
1900	-7,841	-7,860	1896,95	796,870	859,290	838,850	2,373 3,287 2,372	2,373 3,245 2,374
2000	-7,863	-7,832	1990,71	817,570	854,770	885,170	2,372 2,370 3,210	3,237 2,371 2,373
2100	-7,872	-7,834	2101,71	837,760	895,450	915,210	2,358 3,130 2,356	2,356 3,480 2,358
2200	-7,865	-7,842	2197,70	857,480	918,630	928,500	2,362 2,361 3,174	3,391 2,360 2,359
2300	-7,870	-7,866	2301,42	876,750	947,930	942,240	2,366 3,258 2,362	2,362 3,365 2,365
2400	-7,852	-7,874	2409,96	895,600	955,050	950,710	2,371 3,312 2,372	2,371 3,266 2,370
2500	-7,850	-7,876	2499,30	914,080	986,310	967,120	3,255 2,374 2,374	2,374 2,375 3,295
2600	-7,830	-7,895	2590,46	932,180	1005,400	966,040	2,377 2,378 3,318	3,315 2,377 2,376
2700	-7,846	-7,860	2694,86	949,930	983,820	1009,770	3,319 2,374 2,374	2,374 2,374 3,313
2800	-7,848	-7,849	2792,67	967,370	1034,580	1033,000	2,379 2,380 3,213	3,354 2,380 2,379
2900	-7,826	-7,865	2899,18	984,450	1059,140	1036,150	2,383 3,487 2,383	2,382 3,123 2,382
3000	-7,792	-7,774	2995,28	1001,320	1068,080	1070,780	2,388 3,295 2,389	2,389 3,370 2,388
3050	-7,806	-7,795	3045,22	1009,630	1077,760	1079,590	2,393 3,726 2,395	2,395 2,856 2,394
3100	-7,829	-7,857	3090,04	1017,870	1078,030	1074,450	2,388 2,388 2,946	3,698 2,388 2,388
3150	-7,813	-7,794	3159,99	1026,050	1096,200	1101,040	2,394 2,391 3,155	3,448 2,392 2,394
3200	-7,833	-7,856	3199,81	1034,160	1113,900	1096,150	2,389 3,785 2,386	2,386 2,386 2,842
3250	-7,815	-7,829	3258,14	1042,200	1111,680	1108,580	2,388 3,368 2,389	2,391 3,306 2,389

Tablo Ek2'nin devamı

T (K)	T POT (eV)	E POT (eV)	HES.T (K)	$G.\vartheta_{ort} \cdot$ $\left(\frac{m}{s}\right)$	$Hes.\vartheta$ $\left(\frac{m}{s}\right)$	$Hes.\vartheta_{ort}$ $\left(\frac{m}{s}\right)$	R12 R13 R14 (A°)	R23 R24 R34 (A°)
3300	-7,800	-7,829	3312,66	1050,190	1101,400	1106,880	2,403 2,403 2,705	3,957 2,403 2,402
3350	-7,794	-7,765	3348,00	1058,120	1131,150	1132,110	2,402 2,916 2,404	3,757 2,400 2,400
3400	-7,775	-7,838	3396,63	1065,990	1149,060	1110,750	2,398 3,342 2,400	2,403 3,314 2,402
3450	-7,819	-7,832	3458,69	1073,790	1122,140	1139,920	2,398 2,399 3,926	2,746 2,398 2,398
3500	-7,647	-7,715	3514,94	1081,550	1119,690	1114,520	2,436 3,356 2,424	2,430 3,327 2,248
3550	-7,789	-7,782	3544,13	1089,240	1175,470	1159,370	2,407 3,517 2,405	2,404 3,158 2,406
3600	-7,784	-7,870	3589,66	1096,890	1179,320	1136,790	2,401 2,400 3,316	3,354 2,401 2,403
3650	-7,785	-7,755	3647,75	1104,480	1131,630	1180,710	2,411 2,907 2,412	2,412 3,755 2,412
3700	-7,808	-7,852	3710,00	1112,020	1204,970	1172,220	2,402 2,909 2,402	2,401 3,778 2,402
3750	-6,899	-6,870	3754,00	1119,510	1068,600	1126,510	2,453 2,346 4,554	2,450 2,303 4,541
3800	-7,795	-7,788	3790,00	1112,690	1167,350	1194,830	2,415 2,416 4,017	2,675 2,675 2,416
3850	-7,796	-7,839	3844,74	1134,340	1215,290	1194,870	2,407 2,404 3,449	3,237 2,403 2,407
3900	-7,807	-7,805	3906,15	1141,680	1200,220	1222,110	2,400 3,594 2,401	2,401 3,112 2,400
3950	-4,771	-4,763	3956,36	1148,980	1191,910	1209,890	2,423 822,134 2,423	822,158 2,423 822,162
4000	-4,753	-4,743	4014,88	1156,220	1239,160	1237,010	2,448 2,449 663,468	2,445 663,499 663,535
4050	-4,067	-4,087	4052,81	1163,430	1136,250	1181,690	2,289 4,280 649,434	2,290 649,239 649,295
4100	-4,761	-4,839	4104,03	1170,590	1168,480	1089,720	***** ***** *****	2,379 2,380 2,379

Tablo Ek2'nin devamı

T (K)	T POT (eV)	E POT (eV)	HES.T (K)	$G.\vartheta_{ort} \cdot \left(\frac{m}{s}\right)$	$Hes.\vartheta \left(\frac{m}{s}\right)$	$Hes.\vartheta_{ort} \left(\frac{m}{s}\right)$	R12 R13 R14 (A°)	R23 R24 R34 (A°)
4150	-4,695	-4,623	4140,00	1177,700	1160,770	1178,530	555,312 2,415 2,424	555,300 555,307 2,413
4200	-3,997	-4,009	4201,14	1184,780	1269,180	1259,000	2,231 943,604 943,631	943,700 943,727 2,245
4250	-3,968	-3,977	4245,29	1191,800	1245,440	1207,540	2,292 700,772 700,765	700,748 700,741 2,307
4300	-4,003	-4,003	4294,00	1198,780	1218,360	1238,660	2,269 857,607 857,608	857,605 857,606 2,252
4350	-4,805	-4,819	4350,62	1205,750	1156,150	1189,200	2,389 ***** 2,388	***** 2,386 *****
4400	-4,808	-4,784	4406,00	1212,660	1180,370	1217,640	***** 2,394 2,394	***** ***** 2,394
4450	-4,797	-4,761	4448,18	1219,530	1219,330	1233,550	***** ***** *****	2,394 2,388 2,391
4500	-4,808	-4,815	4495,99	1226,360	1270,280	1261,010	***** 2,401 2,401	***** ***** 2,400
4550	-4,793	-4,785	4549,00	1233,150	1164,870	1185,810	***** 2,371 2,370	***** ***** 2,370
4600	-4,813	-4,839	4607,83	1239,910	1209,470	1183,550	2,369 ***** 2,369	***** 2,371 *****
4650	-4,784	-4,787	4652,00	1246,630	1265,810	1264,440	***** 2,391 2,392	***** ***** 2,391
4700	-3,926	-3,953	4713,00	1253,320	1156,620	1235,450	2,327 ***** *****	***** ***** 2,317
4750	-4,780	-4,788	4745,88	1259,970	1295,820	1292,710	2,420 ***** 2,421	***** 2,420 *****
4800	-4,065	-4,012	4790,00	1266,580	1273,920	1297,320	4,352 ***** 2,284	***** 2,284 *****
4850	-4,727	-4,664	4845,00	1273,160	1253,900	1302,390	***** 2,430 2,413	***** ***** 2,425
4900	-4,781	-4,775	4905,14	1279,700	1309,020	1299,450	2,412 ***** 2,411	***** 2,412 *****
4950	-4,787	-4,798	4946,55	1286,210	1269,140	1267,920	***** ***** *****	2,395 2,395 2,395

Tablo Ek2'nin devamı

T (K)	T POT (eV)	E POT (eV)	HES.T (K)	$G.\vartheta_{ort} \cdot \left(\frac{m}{s}\right)$	$Hes.\vartheta \left(\frac{m}{s}\right)$	$Hes.\vartheta_{ort} \left(\frac{m}{s}\right)$	R12 R13 R14 (A°)	R23 R24 R34 (A°)
5000	-4,806	-4,817	4997,39	1292,700	1328,270	1318,400	2,393 ***** 2,392	***** 2,392 *****
5050	-4,750	-4,787	5046,50	1299,140	1354,270	1334,770	2,434 ***** 2,434	***** 2,434 *****
5100	-4,614	-4,471	5095,23	1305,560	1352,480	1390,920	2,503 855,380 2,497	855,354 2,474 855,344
5150	-4,794	-4,771	5142,06	1311,950	1281,230	1302,200	2,401 ***** 2,400	***** 2,401 *****
5200	-4,820	-4,805	5203,00	1318,300	1333,540	1311,960	2,382 ***** 2,382	***** 2,382 *****
5250	-4,805	-4,808	5238,00	1324,620	1175,010	1272,730	2,417 ***** 2,411	***** 2,313 *****
5300	-4,785	-4,795	5303,50	1330,910	1331,260	1319,970	2,385 ***** 2,387	***** 2,385 *****
5350	-4,734	-4,750	5344,48	1337,180	1379,240	1407,920	2,438 ***** 2,439	***** 2,439 *****
5400	-4,806	-4,815	5409,00	1343,410	1302,420	1312,770	2,375 ***** 2,378	***** 2,381 *****
5450	-4,798	-4,795	5445,12	1349,620	1268,610	1270,730	2,363 ***** 2,362	***** 2,363 *****
5500	-4,744	-4,764	5503,00	1355,790	1427,730	1414,600	2,434 ***** 2,433	***** 2,432 *****
5550	-4,767	-4,795	5549,96	1361,940	1368,560	1375,440	2,405 ***** 2,407	***** 2,404 *****
5600	-4,782	-4,833	5605,29	1368,060	1338,820	1366,010	2,402 ***** 2,402	***** 2,397 *****
5650	-4,791	-4,781	5658,24	1374,160	1379,860	1378,560	2,394 ***** 2,393	***** 2,393 *****
5700	-4,764	-4,775	5701,37	1380,220	1359,320	1369,990	2,399 ***** 2,398	***** 2,398 *****
5750	-4,820	-4,834	5752,00	1386,260	1311,260	1304,900	2,362 ***** 2,356	***** 2,363 *****
5800	-4,782	-4,804	5799,82	1392,280	1371,200	1335,200	2,380 ***** 2,379	***** 2,381 *****

Tablo Ek2'nin devamı

T (K)	T POT (eV)	E POT (eV)	HES.T (K)	$G.\vartheta_{ort} \cdot \left(\frac{m}{s}\right)$	$Hes.\vartheta \left(\frac{m}{s}\right)$	$Hes.\vartheta_{ort} \left(\frac{m}{s}\right)$	R12 R13 R14 (A°)	R23 R24 R34 (A°)
5850	-4,801	-4,775	5854,67	1398,260	1320,350	1347,050	2,371 ***** 2,370	***** 2,369 *****
5900	-4,764	-4,775	5911,00	1404,230	1444,560	1434,600	2,412 ***** 2,412	***** 2,411 *****
5950	-4,805	-4,783	5952,34	1410,170	1315,520	1350,770	2,366 ***** 2,363	***** 2,367 *****
6000	-1,842	-1,843	6000,02	1416,080	1516,950	1515,520	***** ***** 2,458	***** ***** *****
6050	-2,003	-2,010	6052,02	1421,970	1341,910	1394,770	2,248 ***** 846,450	***** 856,492 *****
6100	-2,000	-2,008	6096,25	1427,780	1463,500	1420,360	2,249 ***** 876,180	***** 876,187 *****
6150	-2,002	-2,006	6151,00	1433,670	1435,630	1440,620	2,258 ***** 884,711	***** 884,730 *****
6200	-2,002	-2,008	6200,53	1439,490	1495,920	1447,780	2,257 ***** *****	***** ***** *****

Tablo Ek3: Cu_5 mikrokümesinde; değişik sıcaklıklarda hesaplanan değerler

T (K)	TPOT EPOT (eV)	Hes.T (K)	$G.\vartheta_{ort}$ $\left(\frac{m}{s}\right)$	$Hes.\vartheta$ $\left(\frac{m}{s}\right)$	$Hes.\vartheta_{ort}$ $\left(\frac{m}{s}\right)$	R_{12} R_{13} (A°)	R_{14} R_{23} (A°)	R_{24} R_{34} (A°)	R_{15} R_{25} (A°)	R_{35} R_{45} (A°)
1	-11,553 -11,554	1,07	18,28	18,54	11,79	2,601 2,421	2,421 2,598	2,598 3,424	3,418 2,601	2,421 2,421
100	-11,504 -11,504	98,96	182,812	191,27	169,88	2,528 2,898	2,799 2,503	2,505 2,893	2,554 3,300	2,492 2,502
200	-11,513 -11,506	194,50	258,53	261,96	271,30	2,934 2,890	2,461 2,834	2,482 2,496	2,474 2,478	2,486 3,459
300	-11,514 -11,516	292,01	316,65	327,55	319,88	2,478 3,323	2,563 2,447	2,691 2,671	2,478 3,323	2,457 2,662
400	-11,527 -11,523	401,75	365,63	381,90	383,56	2,596 2,610	2,602 3,430	2,436 2,433	2,594 2,439	2,435 3,436
500	-11,518 -11,516	504,65	408,78	413,78	418,78	2,596 3,447	2,441 2,595	2,605 2,441	2,440 2,607	2,440 3,420
600	-11,501 -11,493	592,00	447,80	466,552	469,45	3,382 2,445	2,605 2,438	2,655 2,607	2,451 2,444	3,449 2,589
700	-11,513 -11,510	700,62	483,68	510,22	501,07	2,444 3,440	2,608 2,451	2,603 2,592	2,444 3,427	2,446 2,613
800	-11,518 -11,513	798,79	517,08	542,27	541,40	2,449 3,422	2,443 2,451	3,452 2,445	2,617 2,586	2,607 2,606
900	-11,512 -11,522	898,47	548,45	566,52	560,69	2,446 3,458	2,596 2,449	2,631 2,588	2,454 3,415	2,458 2,595
1000	-11,512 -11,503	1003,07	578,12	575,05	589,86	2,589 2,455	2,458 2,597	2,587 3,458	3,467 2,587	2,455 2,457
1100	-11,502 -11,501	1102,50	606,32	643,97	633,37	2,460 2,460	2,584 3,413	2,622 2,622	3,456 2,452	2,455 2,617
1200	-11,506 -11,515	1201,15	633,29	650,48	646,77	2,597 2,456	2,476 2,596	2,584 2,460	2,460 2,585	3,470 2,462
1300	-11,485 -11,497	1301,29	659,15	695,56	685,15	2,467 2,457	3,426 3,461	2,466 2,453	2,625 2,581	2,629 2,623
1400	-11,478 -11,522	1396,10	684,03	699,74	683,34	2,471 2,470	3,472 3,475	2,466 2,468	2,594 2,595	2,596 2,600
1500	-11,486 -11,489	1508,54	708,04	735,96	747,24	2,881 2,817	2,488 2,465	2,468 3,208	2,548 3,094	2,453 2,804
1600	-11,487 -11,461	1594,83	731,260	760,03	769,89	2,467 3,469	2,466 2,478	3,493 2,474	2,616 2,590	2,580 2,601
1700	-11,473 -11,476	1709,84	753,76	753,12	773,40	2,480 3,497	2,482 2,475	3,498 2,478	2,548 2,590	2,604 2,582
1800	-11,481 -11,474	1799,20	775,62	771,07	782,71	2,485 2,491	2,566 3,500	2,593 2,574	3,506 2,476	2,483 2,592
1900	-11,488 -11,478	1908,06	796,87	822,85	826,02	2,478 3,504	2,492 2,473	3,501 2,487	2,577 2,609	2,593 2,564
2000	-11,479 -11,500	1998,37	817,57	845,92	827,05	2,486 2,480	3,497 3,509	2,500 2,491	2,597 2,566	2,590 2,571
2100	-11,410 -11,465	2093,54	837,76	868,72	836,34	2,499 3,512	2,587 2,496	2,598 3,600	2,495 3,505	2,503 2,588
2200	-10,941 -10,953	2206,54	857,48	913,37	900,68	3,728 3,498	2,339 2,340	3,339 2,439	2,339 3,804	2,341 3,652
2300	-10,933 -10,971	2308,83	876,75	928,07	910,65	2,346 3,139	2,337 2,346	3,973 3,418	3,581 4,054	2,339 2,339
2400	-11,443 -11,427	2399,33	895,60	940,95	923,06	3,532 2,521	2,504 2,496	2,499 3,535	2,568 2,608	2,562 2,585
2500	-10,915 -10,944	2490,03	914,07	969,43	947,59	3,607 2,354	2,358 2,344	3,245 3,382	3,972 2,346	3,926 2,352
2600	-10,920 -10,935	2593,04	932,17	957,10	971,79	2,356 3,948	2,352 3,026	2,937 2,342	4,408 2,351	2,347 2,351
2700	-10,896 -10,836	2702,30	949,93	1019,89	1011,25	3,819 2,357	3,332 3,986	2,367 2,364	2,356 2,360	3,737 3,280
2800	-10,934 -10,965	2808,03	967,36	1016,41	1013,89	3,806 2,345	3,769 2,345	2,352 3,595	2,351 3,539	3,463 2,355

Tablo Ek3'ün devamı

T (K)	TPOT EPOT (eV)	Hes.T (K)	$G.\vartheta_{ort}$ $\left(\frac{m}{s}\right)$	$Hes.\vartheta$ $\left(\frac{m}{s}\right)$	$Hes.\vartheta_{ort}$ $\left(\frac{m}{s}\right)$	R_{12} R_{13} (A°)	R_{14} R_{23} (A°)	R_{24} R_{34} (A°)	R_{15} R_{25} (A°)	R_{35} R_{45} (A°)
2900	-10,911 -10,907	2897,41	984,49	1015,70	1032,37	2,353 2,864	3,834 3,002	2,357 2,375	2,357 4,071	2,367 4,442
3000	-10,920 -10,929	2997,73	10001,32	1014,02	1048,88	2,344 2,871	2,349 2,757	3,921 2,365	4,081 2,357	2,371 4,592
3100	-10,875 -10,892	3101,06	1017,87	1071,92	1061,06	2,369 2,361	4,395 2,918	2,370 3,755	4,045 3,074	2,360 2,364
3200	-10,873 -10,923	3208,74	1034,41	1081,14	1072,44	2,367 3,646	3,467 3,744	2,369 2,367	2,361 3,753	2,366 3,545
3300	-10,869 -10,844	3301,61	1050,19	1102,70	1105,53	3,486 2,373	3,544 2,368	2,374 3,790	2,376 3,621	3,771 2,373
3400	-10,801 -10,777	3404,66	1065,598	1052,72	1115,57	3,020 2,395	3,009 3,973	2,378 2,374	2,390 2,373	4,366 3,937
3500	-10,842 -10,835	3503,38	1081,54	1130,50	1132,72	3,765 4,246	2,378 2,379	3,126 2,376	2,372 2,378	3,931 3,247
3550	-10,890 -10,882	3556,09	1089,24	1152,31	1146,25	2,788 2,386	2,926 3,888	2,365 2,364	2,385 2,366	4,548 4,104
3600	-10,826 -10,902	3605,36	1096,89	1158,46	1126,77	3,368 3,245	2,382 2,389	3,855 2,378	2,379 2,374	2,742 4,064
3650	-10,865 -10,931	3658,61	1104,48	1139,37	1142,38	3,542 4,236	2,379 2,375	2,972 2,376	2,369 2,377	4,155 3,367
3700	-10,750 -10,732	3690,19	1112,02	1177,28	1156,69	3,558 2,393	2,396 2,397	3,480 3,658	3,777 2,399	3,840 2,403
3750	-10,678 -10,831	3756,49	1119,51	1190,06	1120,04	3,362 3,476	2,405 2,420	3,672 2,408	2,386 2,389	3,839 4,034
3800	-10,838 -10,785	3799,43	1126,94	1189,63	1190,88	2,400 2,370	4,656 2,816	2,408 4,114	4,017 2,739	2,373 2,377
3850	-10,876 -10,890	3860,99	1134,33	1200,11	1187,87	2,377 2,375	3,797 3,466	2,384 3,535	3,893 3,641	2,377 2,384
3900	-10,815 -10,748	3908,67	1141,68	1220,53	1208,92	4,017 4,430	2,406 2,383	3,035 2,407	2,380 2,381	3,929 2,984
3950	-10,851 -10,807	3944,77	1148,97	1220,68	1211,40	3,928 2,380	3,648 2,381	2,395 3,450	2,386 3,780	3,544 2,396
4000	-10,871 -10,886	4004,71	1156,22	1218,73	1209,19	4,221 3,042	2,368 2,399	4,560 2,397	2,377 2,378	2,746 3,778
4050	-10,813 -10,836	4050,66	1163,42	1196,88	1209,04	4,690 2,372	3,961 4,176	2,384 2,383	2,415 2,418	2,857 2,698
4100	-10,809 -10,893	4106,54	1170,58	1217,33	1203,18	3,934 2,395	4,062 3,447	2,385 2,396	2,392 2,391	3,268 3,679
4150	-10,741 -10,799	4158,54	1177,70	1200,53	1211,81	3,701 2,402	2,393 3,406	2,405 3,520	3,960 2,404	2,409 3,856
4200	-10,846 -10,484	4207,95	1184,77	1220,61	1239,68	3,115 2,384	3,614 3,392	2,416 2,384	2,381 2,402	4,140 4,129
4250	-10,832 -10,900	4247,04	1191,80	1260,53	1229,41	3,244 3,891	2,385 2,406	3,223 2,385	2,384 2,402	4,195 3,862
4300	-10,754 -10,889	4304,91	1198,79	1231,77	1216,87	2,400 2,393	3,404 3,584	3,021 2,408	4,168 2,402	4,245 2,403
4350	-10,809 -10,815	4354,44	1205,74	1257,28	1256,46	4,062 3,054	2,388 2,419	4,484 2,417	2,400 2,389	2,919 3,881
4400	-10,778 -10,880	4392,92	1212,65	1291,75	1242,70	3,997 3,612	2,389 2,400	3,940 2,406	2,399 32,398	3,299 3,554
4450	-10,855 -10,835	4432,98	1219,52	1274,20	1280,01	3,919 2,377	2,400 3,511	2,414 3,300	4,110 2,393	2,382 3,605
4500	-7,847 -7,881	4504,01	1226,36	1282,30	1238,74	2,377 *****	2,378 *****	3,266 *****	3,285 2,378	***** 2,379
4550	-7,826 -7,869	4548,02	1233,15	1233,46	1250,44	3,385 2,382	***** 2,382	***** *****	2,382 2,382	3,262 *****
4600	-7,817 -7,872	4601,59	1239,91	1273,71	1248,17	3,214 *****	2,380 *****	2,380 *****	2,380 2,381	***** 3,414

Tablo Ek3'ün devamı

T (K)	TPOT EPOT (eV)	Hes.T (K)	$G.\vartheta_{ort}$ $\left(\frac{m}{s}\right)$	$Hes.\vartheta$ $\left(\frac{m}{s}\right)$	$Hes.\vartheta_{ort}$ $\left(\frac{m}{s}\right)$	R_{12} R_{13} (A°)	R_{14} R_{23} (A°)	R_{24} R_{34} (A°)	R_{15} R_{25} (A°)	R_{35} R_{45} (A°)
4650	-7,724 -7,803	4646,09	1246,63	1221,52	1222,14	2,404 3,343	2,397 2,397	3,258 2,399	***** *****	***** *****
4700	-7,876 -7,862	4708,08	1253,31	1116,25	1105,22	2,414 *****	2,423 *****	2,903 *****	2,872 2,422	***** 2,418
4750	-7,809 -7,786	4752,21	1259,96	1226,38	1214,28	***** *****	***** 2,375	3,260 2,374	***** 2,374	***** 2,329
4800	-7,643 -7,872	4802,58	1266,58	1259,21	1183,66	***** *****	***** 2,993	2,535 2,468	***** 2,475	***** 2,549
4850	-7,754 -7,841	4847,05	1273,16	1342,07	1302,71	***** *****	***** 2,413	3,391 2,410	***** 2,410	***** 3,241
4900	-6,753 -6,732	4895,01	1279,70	1328,29	1344,40	2,440 2,442	***** 2,442	***** *****	***** *****	***** 2,248
4950	-7,834 -7,791	4960,21	1286,21	1303,95	1308,70	***** *****	***** 3,208	2,382 2,382	***** 2,383	***** 2,381
5000	-7,648 -7,733	5018,82	1292,69	1271,66	1270,32	2,415 3,146	2,414 2,414	3,478 2,416	***** *****	***** *****
5050	-7,742 -7,739	5055,72	1299,14	1302,04	1254,40	***** *****	***** 2,654	3,001 2,398	***** 2,401	***** 2,863
5100	-7,831 -7,821	5096,98	1305,56	1275,74	1275,86	3,275 *****	2,371 *****	2,371 *****	2,371 2,370	***** 3,258
5150	-7,878 -7,851	5147,21	1311,94	1229,02	1245,31	2,357 2,359	3,180 3,162	2,357 2,357	***** *****	***** *****
5200	-7,776 -7,818	5189,45	1318,29	1311,83	1301,36	3,276 2,382	912,28 2,386	912,08 912,18	2,383 2,383	***** 912,14
5250	-7,812 -7,834	5251,02	1324,62	1368,10	1351,82	2,386 *****	2,384 *****	3,310 *****	3,318 2,385	***** 2,384
5300	-6,806 -6,828	5308,56	1330,91	1381,17	1370,68	***** *****	***** 2,394	2,393 2,392	2,242 *****	***** *****
5350	-6,759 -6,710	5351,20	1337,17	1274,92	1350,71	2,414 2,415	***** 2,414	***** *****	***** *****	***** 2,342
5400	-6,788 -6,784	5393,46	1343,41	1408,50	1430,57	2,245 *****	***** *****	***** 2,403	***** *****	***** 2,405
5450	-6,768 -6,780	5956,93	1349,61	1414,89	1416,31	2,321 957,23	957,26 957,24	957,27 2,399	957,25 957,26	2,399 2,399
5500	-6,776 -6,793	5492,63	1355,79	1377,94	1353,88	2,384 2,386	***** 2,384	***** *****	***** *****	***** 2,332
5550	-6,795 -6,829	5541,89	1361,94	14553,35	1448,03	2,406 *****	2,405 *****	2,406 *****	***** *****	***** 2,256
5600	-6,691 -6,758	5595,41	1368,06	1392,24	1372,53	897,48 2,440	2,459 897,48	897,48 2,458	897,48 2,264	897,48 897,48
5650	-6,743 -6,702	5659,36	1374,15	1429,05	1396,87	***** 2,397	2,395 *****	***** 2,394	***** 2,333	***** *****
5700	-6,788 -6,809	5709,84	1380,22	1387,17	1418,84	2,406 *****	2,405 *****	2,404 *****	***** *****	***** 2,239
5750	-7,824 -7,798	5750,61	1386,26	1405,54	1423,96	3,300 2,389	2,391 2,391	2,388 3,370	***** *****	***** *****
5800	-6,817 -6,827	5808,13	1392,27	1408,26	1419,15	***** *****	2,381 2,262	***** *****	2,380 *****	***** 2,381
5850	-6,753 -6,772	5845,34	1398,26	1485,32	1459,01	***** 2,224	***** *****	2,436 *****	***** 2,437	***** 2,437
5900	-7,734 -7,743	5905,74	1404,23	1500,72	1489,44	2,452 *****	2,451 *****	4,141 *****	2,613 2,450	***** 2,451
5950	-6,731 -6,776	5938,22	1410,17	1476,25	1472,20	***** *****	2,295 2,398	***** *****	***** 2,398	***** 2,400
6000	-6,764 -6,767	5996,72	1416,08	1486,72	1450,52	2,446 *****	2,446 *****	2,446 *****	***** *****	***** 2,282
6050	-6,762 -6,774	6045,99	1421,97	1482,25	1473,87	2,452 2,452	***** 2,452	***** *****	***** *****	***** 2,263

Tablo Ek3'ün devamı

T (K)	TPOT EPOT (eV)	Hes.T (K)	$G.v_{ort} \cdot \left(\frac{m}{s}\right)$	$Hes.v \left(\frac{m}{s}\right)$	$Hes.v_{ort} \left(\frac{m}{s}\right)$	R_{12} R_{13} (A°)	R_{14} R_{23} (A°)	R_{24} R_{34} (A°)	R_{15} R_{25} (A°)	R_{35} R_{45} (A°)
6100	-3,972 -4,019	6105,42	1427,78	1528,42	1480,38	886,86 *****	2,289 902,67	886,84 *****	***** 902,70	2,265 *****
6150	-6,787 -6,838	6146,67	1433,67	1500,55	1438,94	***** *****	2,247 2,247	***** *****	***** 2,426	2,425 *****
6200	-6,770 -6,790	6199,27	1439,48	1448,61	1435,69	***** *****	***** 2,430	2,429 2,429	***** *****	***** *****
6250	-4,765 -4,768	6246,74	1445,28	1399,89	1439,20	***** 2,405	2,407 *****	***** 2,404	***** *****	***** *****
6300	-3,988 -3,981	6297,99	1451,05	1555,77	1561,62	***** *****	2,247 868,05	***** *****	***** 868,04	2,296 *****
6350	-4,804 -4,807	6347,51	1456,79	1424,94	1439,71	2,382 *****	2,381 *****	2,381 *****	914,37 914,31	***** 914,34
6400	-4,693 -4,746	6391,24	1462,52	1512,86	1463,47	2,433 *****	821,20 *****	821,21 *****	2,434 2,422	***** 821,19
6450	-5,933 -5,912	6448,35	1468,22	1428,67	1489,39	2,365 *****	2,364 *****	4,516 *****	***** *****	2,280 *****
6500	-4,018 -3,979	6496,39	1473,90	1544,26	1526,38	2,313 *****	954,29 *****	954,29 *****	4,470 2,313	***** 954,32
6550	-4,792 -4,794	6552,98	1479,56	1465,93	1477,44	***** *****	***** 2,415	***** *****	***** 2,415	2,415 *****
6600	-3,962 -3,964	6605,94	1485,19	1382,48	1386,10	2,340 969,52	***** 969,52	***** *****	969,53 969,54	2,229 *****
6650	-4,741 -4,812	6643,41	1490,81	1563,76	1537,06	2,414 *****	2,415 *****	2,415 *****	***** *****	***** *****
6700	-4,724 -4,823	6710,19	1496,40	1498,72	1447,67	***** *****	***** 2,428	2,433 2,437	***** *****	***** *****
6750	-4,039 -4,040	6754,88	1501,98	1477,72	1466,38	913,65 913,72	***** 4,310	***** *****	913,54 2,282	2,280 *****
6800	-4,742 -4,755	6791,06	1507,53	1501,16	1487,62	2,397 2,397	***** 2,396	***** *****	***** *****	***** *****
6850	-4,800 -4,822	6853,92	1513,06	1433,74	1490,46	***** 2,,396	***** *****	***** *****	2,400 *****	2,394 *****
6900	-4,789 -4,743	6908,03	1518,57	1599,62	1591,56	2,399 *****	***** *****	***** *****	2,400 2,398	***** *****
6950	-4,717 -4,840	6955,32	1524,06	1554,41	1476,00	***** *****	***** 960,533	2,415 960,522	***** 2,411	960,533 2,417
7000	-4,743 -4,767	7004,62	1529,54	1633,35	1596,60	2,454 *****	2,455 *****	2,455 *****	***** *****	785,718 *****
7050	-3,912 -3,932	7058,52	1534,99	1531,26	1530,55	963,734 565,210	2,280 *****	963,734 565,211	963,749 2,384	***** 963,749
7100	-3,856 -3,842	7098,11	1540,43	1586,50	1603,39	955,936 *****	2,228 *****	956,211 *****	955,935 2,442	***** 956,210
7150	-3,999 -3,997	7144,32	1545,84	1667,15	1663,27	***** *****	2,280 *****	***** *****	***** 2,224	***** *****
7200	-4,003 -4,011	7191,18	1551,23	1657,86	1657,51	***** *****	2,244 *****	***** *****	***** 2,225	***** *****
7250	-3,974 -3,971	7244,91	1556,61	1644,10	1631,22	***** *****	2,310 *****	***** *****	***** 2,263	***** *****
7300	-3,983 -3,998	7307,99	1561,97	1593,03	1612,98	939,680 *****	2,266 *****	939,644 *****	939,675 2,263	***** 939,659
7350	-3,988 -3,969	7351,30	1567,31	1629,29	1622,86	***** *****	2,262 *****	***** *****	***** 2,248	***** *****
7400	-3,988 -4,017	7399,85	1572,63	1641,98	1576,73	***** *****	2,266 *****	***** *****	***** 2,282	***** *****
7450	-3,999 -4,006	7444,63	1577,94	1636,73	1635,58	***** *****	2,285 *****	***** *****	***** 2,247	***** *****

Tablo Ek3'ün devamı

T (K)	TPOT EPOT (eV)	H.T (K)	$G.\vartheta_{ort}$ $\left(\frac{m}{s}\right)$	$Hes.\vartheta$ $\left(\frac{m}{s}\right)$	$Hes.\vartheta_{ort}$ $\left(\frac{m}{s}\right)$	R_{12} R_{13} (A°)	R_{14} R_{23} (A°)	R_{24} R_{34} (A°)	R_{15} R_{25} (A°)	R_{35} R_{45} (A°)
7500	-4,003 -4,009	7503,70	1583,22	1626,17	1631,34	***** *****	***** *****	2,240 *****	2,226 *****	***** *****
7550	-3,933 -3,932	7546,54	1588,49	1556,77	1559,13	***** *****	***** *****	2,377 *****	2,277 *****	***** *****
7600	-4,003 -3,993	7608,78	1593,74	1676,29	1679,44	***** *****	***** *****	2,230 *****	2,233 *****	***** *****
7650	-4,004 -4,003	7654,07	1598,98	1671,84	1670,21	***** *****	***** *****	2,233 *****	2,249 *****	***** *****
7700	-3,961 -3,974	7703,74	1604,19	1680,97	1675,00	***** *****	***** *****	2,239 *****	2,240 *****	***** *****
7750	-3,997 -4,019	7756,36	1609,39	1564,49	1596,93	***** *****	***** *****	2,263 *****	2,230 *****	***** *****
7800	-3,999 -4,003	7802,33	1614,58	1609,83	1606,35	***** *****	***** *****	2,268 *****	2,264 *****	***** *****
7850	-3,991 -3,966	7844,33	1619,74	1571,20	1617,03	***** *****	2,274 *****	***** *****	***** 2,242	***** *****
7900	-4,805 -4,826	7907,87	1624,89	1587,15	1573,02	2,374 *****	2,374 *****	2,374 *****	***** *****	***** *****
7950	-3,977 -3,992	7945,06	1630,03	1635,55	1641,94	***** *****	2,242 *****	***** *****	***** 2,241	***** *****

KAYNAKLAR

- Alder, B. J., (1959), Studies in Molecular Dynamics I General Method, *The Journal of Chemical Physics*, 31: (2) 459-466.
- Allen P. M. (2004). Introduction to Molecular Dynamics Simulation, *John von Neumann Institute for Computing, Nic Series, Jülich*, 23: 1-28.
- Brown, D., and Clarve, S. H. R., (1984), A Comparison of Constant Energy, Constant Temperature and Constant Pressure Ensembles in Molecular Dynamics Simulation of Atomic Liquids, *Molecular Physics*, 51: (5) 1243-1252.
- Çakmak S., Ertunç E. , Kara İ. , Çakmaktepe Ş. (2005), Molecular Dynamics Simulation of Nickel Using Embedded Atom Potential, *Süleyman Demirel Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Dergisi*, 9: (2) 28-32
- Çakmaktepe Ş. (2001), Moleküler Dinamik Simülasyon Metodu ile Ni_n Klastırlarının Yapısal Özelliklerinin İncelenmesi, Yüksek Lisans Tezi, *Süleyman Demirel Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü*, Isparta, 58s.
- Erkoç Ş. (1989), A New Empirical Many Body Potantial Energy Function, Application to Microclusters, *Phys. Stat. Sol. (b)* 152, 447.
- Erkoç Ş. (1989), A New Empirical Many Potantial Energy Function, *Phys. Stat. Sol. (b)* 155, 461.
- Erkoç Ş. (1990), Structural Stability and Energetics of FCC Metal Microclusters: Empirical Many-Body Potential Energy Function Calculation, *Physica Status Solidi (b)*, 161: (1) 161-221.
- Halıcıoğlu, T. and Baschlicher Jr, C. W., (1988), Physics of Microcluster, *Rep. Prog. Phys.*, 51: 883-921.
- Hashibon A. (2002), Atomistic Study of Structural Correlations at a Model Solid/Liquid-Metal Interface, *Israel Institute of Technology*, 4: (1) 27-28.
- Irmak E. Ali ve Tomak M (2005), Sıvı Nikel ve Bakırın Yapısal Özelliklerinin Moleküler Dinamik Simülasyon İle İncelenmesi, *Zonguldak Karaelmas Üniversitesi Teknoloji Dergisi*, 8: (2) 207-214.
- Kafalı.S. (2002) Ag_n (n=3,4) Mikrokümelerinin Yapısal Özelliklerinin Sıcaklığa Bağlı Olarak İncelenmesi, Yüksek Lisans Tezi, *Pamukkale Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü*, Denizli, 49s.

- Kantani, K., (1984), The Accuracy and The Preservation Property of The Discrete Mechanics, *Journal of Computational Physics*, 53: 181-187.
- Katırcıoğlu Ş. ve Erkoç Ş. (1989), Dissociation of Au_n (n=3,4) Microclusters: Molecular Dynamics Simulation, Master Thesis, *Middle East Technical University Department of Physics*, Ankara, 250s.
- Kolsuz, N., Çivi, M. And Erkoç, Ş., (1995), Empirical Many - Body Potential Energy Function Calculation for Lithium Cluster in BCC and FCC Surface Symmetries and Chemisorptions Energy of Atomic Oxygen on lithium BCC Cluster, *Modern Physics Letters A*, 10: 125-131.
- Kolsuz, N., and Erkoç, Ş., (1993), Empirical Many - Body Potential Energy Function Calculation for The Chemisorptions Energy of Atomic Hydrogen on Lithium in BCC and FCC Clusters, *F.Ü. Fen ve Müh. Bilimleri Dergisi*, Elazığ, 5: (1) 89-100.
- Şahin O. (2001), Moleküler Dinamik Simülasyon Metodu ile Li_n Klastırlarının Yapısal Özelliklerinin İncelenmesi, Yüksek Lisans Tezi, *Süleyman Demirel Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü*, Isparta, 48s.
- Verlet, L., (1967), Computer - Experiments on Classical Fluids I. Thermodynamical Properties of Lennard - Jones Molecules, *Physical Review*, 159: (1) 98-103.

ÖZGEÇMİŞ

Adı Soyadı	: Bilge YILDIRIMOĞLU
Ana Adı	: Kamile
Baba adı	: Mustafa
Doğum Yeri ve Tarihi	: DENİZLİ -06/06/1981
Lisans Eğitimi ve Mezuniyet Tarihi	: Balıkesir Üniversitesi Necatibey Eğitim Fakültesi Fizik Eğitimi Bölümü 06/07/2001
Çalıştığı Yer:	: Milli Eğitim Müdürlüğü, Edirne
Bildiği Yabancı Dil	: İngilizce
Mesleki Etkinlik	: Fizik Öğretmeni