

Moleküler Dinamik Benzetim Yönteminde Atom Sayısının Kristalleşme Süreci Üzerine Etkisi

Fatih Ahmet Çelik^{1,*} ve Sefa Kazanç²

¹Bitlis Eren Üniversitesi, Fizik Bölümü, 13000 Bitlis, Türkiye

²Fırat Üniversitesi, Orta Öğretim Fen ve Matematik Alanları Bölümü, 23169 Elazığ, Türkiye

*Corresponding author: facelik@bitliseren.edu.tr

Özet. Bu çalışmada, Parinello-Rahman moleküler dinamik (MD) metodu kullanılarak CuAlNi üçlü alaşım sistemi modellenmiş ve model sistemin yapısal özellikleri amorf fazdan kristal faza dönüşüm sürecinde incelenmiştir. Bu dönüşüm sürecinde, MD hücrelerini oluşturan atomların sayısının kristalleşme zamanı üzerine olan etkisi araştırılmış ve alaşımdaki 1421 bağlı çiftlerin sayısı Honeycutt ve Andersen (HA) metodu kullanılarak analiz edilmiştir.

Anahtar Kelimeler. Kristalleşme, moleküler dinamik benzetim, Honeycutt-Andersen metodu.

Abstract. This study has modelled CuAlNi ternary alloy system through the use of the Parinello-Rahman molecular dynamic simulation method and examined the structural characteristics of this model during transition from amorphous phase to the crystal one. Furthermore, the effect of the quantity of atoms constituting MD cells on the crystallization time of this process has been investigated. Then, the number of 1421 bonded pairs has been analyzed by the Honeycutt-Andersen method.

Keywords. Crystallization, molecular dynamics simulation, Honeycutt-Andersen (HA) method.

1. Giriş

Teknolojik açıdan birçok alanda yeni gelişmelere ışık tutan metaller ve alaşımları üzerindeki temel çalışmalar, onların fiziksel özelliklerini belirlemeyi amaçlamaktadır. Bu metaller ve alaşımlar üzerinde yürütülen en önemli çalışmalardan biri malzemele-
rin ısı işlem süreçlerindeki fiziksel davranışlarının incelenmesidir. Bu davranışların incelenmesi gereken en önemli basamaklarından biri malzemelerin yeniden kristalleşme sürecidir [1,2].

Received December 18, 2010; accepted March 28, 2011.

Metal ve alaşımlarda meydana gelen yeniden kristalleşme olayının deformasyon miktarına, deformasyon sıcaklığına, ısı işlem zamanına oldukça bağlı olduğu bilinmektedir [3,4]. Malzeme içerisinde küçük atomik grupların buldukları bölgelerde birbirleriyle etkileşimlerinin çekirdeklenme ve büyüme hızı gibi kristalleşme kinetiklerini ne derecede etkilediğini bilmek oldukça önemlidir. Kristalleşme süreçleri boyunca beklenen fiziksel davranışların gerçekleşmesinde malzemelerin başlangıç fazının çok büyük bir önemi vardır. Sıvı fazdan itibaren yüksek soğutma hızıyla soğutulan malzemeler ilk önce amorf fazda katılaşır ve daha sonra birçok parametreye bağlı olarak amorf fazdan kristal faza dönüşüm gerçekleşir [1,4,5].

MD benzetim yöntemi, klasik etkileşimleri göze alarak bilgisayar üzerinde bir dizi hesaplama yaptıktan sonra sistemin mikroskobik veya makroskobik yapısı hakkında bilgiler sağlar [6]. Klasik MD yöntemi, sabit hacimli (V), sabit parçacık sayılı (N) ve sabit enerjili (E) sistemlere uygulanmaktadır. Bu yöntem; kübik bir hesaplama hücresi (MD hücresi) içine yerleştirilen atomların birbirleri üzerindeki kuvvetleri, potansiyel enerji fonksiyonları yardımıyla hesaplayarak, sistemin hareket denklemlerini sayısal olarak çözmekten ibarettir [7,8]. Bununla birlikte MD yöntemi, 1981 yılında Parrinello ve Rahman (PR) tarafından sistemin hacim ve şekilce değişimi dikkate alınarak geliştirilmiştir [9].

Bu çalışmada, bakır bazlı CuAlNi (Cu-%26,8Al-%2,5Ni) üçlü model alaşım sisteminde amorf fazdan kristal faza dönüşüm sürecinde, deneysel olarak gözlenmesi oldukça zor olan nano boyutundaki atom gruplarının (bağlı çiftlerin) bilgisayar ortamında yapısal olarak oluşturulması amaçlanmıştır. Amorf fazdan itibaren (300K) model alaşım sisteminin sıcaklığı sırasıyla 400K ve 500K değerlerine çıkartılmış ve bu sıcaklıklarda bekletilerek kristal faza dönüşüm süreci belirlenmiştir. Amorf fazdan kristal faza dönüşüm sürecinde, yapısal analizler radyal dağılım fonksiyonları (RDF) ile 1421 bağlı çiftlerin sayısı Honeycutt-Andersen (HA) metodu kullanılarak belirlenmeye çalışılmıştır. Model sistemde kullanılan atom sayısının yeniden kristalleşme sürecini nasıl etkilediğini gözlemek amacı ile PR şekil ve hacimce değişebilir MD hücresi, sırasıyla 5488 ile 54000 atomlu olacak şekilde kurularak incelenmiştir.

MD yöntem ile modellenen üçlü alaşım sistemin potansiyel enerji fonksiyonlarının belirlenmesi, atomların deneysel olarak bilinen faz bölgesindeki BCC tabanlı DO_3 tipi süper örgü yapısının örgü noktasma yerleştirilmesi, alaşımın kompozisyonuna bağlı olarak belirli bir atom sayısı için MD hesaplama hücresinin oluşturularak bu atomların Cu, Al ve Ni atomlarını temsil edecek şekilde farklı numaralandırılmış alt

örgü noktalarına yerleştirilmesi işlemleri daha önce yapılan çalışmalardan referans alınarak yapılmıştır [6].

2. Materyal ve Metot

2.1. Şekil ve hacimce değişebilir moleküler dinamik yöntemi. Hacim değişimine bağlı madde parametrelerinin veya davranışlarının MD simülasyonları ile incelenmesi, ilk defa Andersen [10] tarafından ileri sürülen izotropik hacim değişiminin sağlandığı MD yöntemi ile mümkün olmuştur. Andersen, hacim değişiminin parçacık konumları üzerindeki etkisini dikkate alarak, kübik MD hücresi içindeki bir i parçacığının konumunu hücre kenarlarına lineer bağımlı olarak tanımlamıştır. Parrinello ve Rahman MD hücre eksenlerini birbirinden bağımsız zamanın fonksiyonu olan $A(t)$, $B(t)$, $C(t)$ şeklinde üç vektörle tanımlamışlardır [9]. Bu çalışmada Parrinello ve Rahman tarafından ileri sürülen ve MD hücresinin şekil ve hacimce değişimine izin veren MD metodu kullanılmıştır.

2.2. Radyal dağılım fonksiyonları. Maddelerin yapısal özelliklerinin belirlenmesinde büyük bir öneme sahip olan radyal dağılım fonksiyonunu (RDF) madde fazları, atomların uzayda dizilişleri ve atomlar arasındaki uzaklık ilişkilerine bağlı olduğundan, çoğu zaman maddenin üç halini mukayese etmek amacıyla aynı şekil üzerinde bir arada vermek daha uygundur. Orijinde bulunan atomların herhangi biri seçilerek, orijinden $r + dr$ kadar uzaklıkta bulunan r yarıçaplı çember içinde kalan atomların sayısına bakılır. Böylece Δr kalınlığında küresel bir hacim elemanı içindeki parçacık sayısı (koordinasyon sayısı) $n(r)$ olmak üzere,

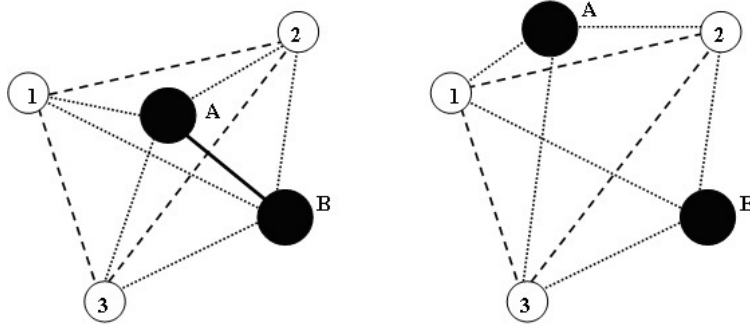
$$g(r) = \frac{\Omega}{N^2} \left\langle \frac{\sum_i n_i(r)}{4\pi r^2 \Delta r} \right\rangle \quad (1)$$

şeklinde tanımlanır [11].

2.3. Honeycutt-Andersen (HA) metodu. Genellikle 2-7 atom sayısına sahip bu tür topakların mikroskobik ölçekte incelenmesi ve bunların farklı şartlardaki davranışlarının gözlenmesi oldukça zordur. Özellikle, uzun-mesafe düzeni göstermeyen camı yapılar ve sıvılarda bu tür topakların yapı analizini yapmak için Honeycutt ve Andersen [12] tarafından geliştirilen bir metot mevcuttur. Bu metotta atomik topaktaki yerel yapı $(ijkl)$ şeklinde dört temel indis ile tanımlanır (Şekil 1).

1. İlk i indisi, A-B (mono-atomik sistemde A-A) şeklinde bir atom çifti varsa ve bu atomlar arasında bağlanma varsa 1 bağlanma yok ise 2 değerini alır.

2. İkinci indis j , bu atom çifti tarafından paylaşılan yakın-komşu sayısıdır.
3. Üçüncü indis k , yakın komşular arasında paylaşılan bağ sayısıdır.
4. Dördüncü indis l , eğer ilk üç indis aynı fakat bağ geometrileri farklı ise bu durumlar arasındaki farklılığı (özel ayırt edici indis) belirtir.



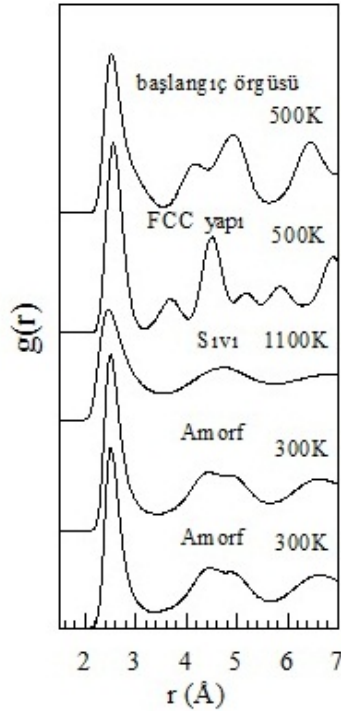
ŞEKİL 1. Honeycutt-Andersen metodunun gösterimi; kalın düz çizgi birbiriyle bağ yapan (A ve B atomu) kök çiftini (root pair), noktali çizgiler kök çiftle bağ yapan komşu atomları ve kesikli çizgiler komşu atomların kendi aralarında yaptıkları bağları temsil etmektedir: a) 1331 bağlı (bonded) çifti ve b) 2331 bağısız (non-bonded) çifti.

HA analizine göre, 1551 ideal Icosahedral (ICOS) yapısını, 1541 ve 1431 ise sıvı ve amorf yapıdaki defekte olmuş (ideal olmayan) ICOS düzenin belirlenmesinde kullanılır. 1421 karakteristik yüzey merkezli kübik (FCC), 1422 hegzagonal sıkı paket (HCP) yapısı ile karakterize edilir. 1661 ve 1441 cisim merkezli kübik (BCC) yapısını temsil ederler. 1201, 1211, 1301, 1311, 1321, 1331 vb. yapılar ise kısa-mesafe düzene sahiptirler ve bu nedenle sıvı faz içindeki temel mikro-topakları temsil ederler [12,13]. Tüm bu sınıflandırmalarda, iki atomun bağ yapıp yapmadığı ya da kök çift (root-pair) olması ve bu bağ yapan atomların komşu atomlarla olan ilişkisi, RDF'nun birinci maksimum ve ikinci maksimum arasında kalan bir bölgeye karşılık gelen kesim (cut-off) uzaklığı ile belirlenir. 1421 bağlı çiftler kristal türü yapılarda oldukça çok görüldüğünden, amorf fazdan kristal faza dönüşüm sürecinde bu çiftlerin sistem içinde bulunma sayısı (yüzdesele olarak) incelenmiştir.

3. Bulgular

Bu çalışmada, ilk olarak model alaşım sistemine katı fazdan itibaren ısıtma - sıvı fazdan itibaren hızlı soğutma işlemi uygulanmış ve sistemin amorf faza dönüşümü sağlanmıştır. Amorf fazdan itibaren ise belirli sıcaklıklarda bekletilerek kristal faza

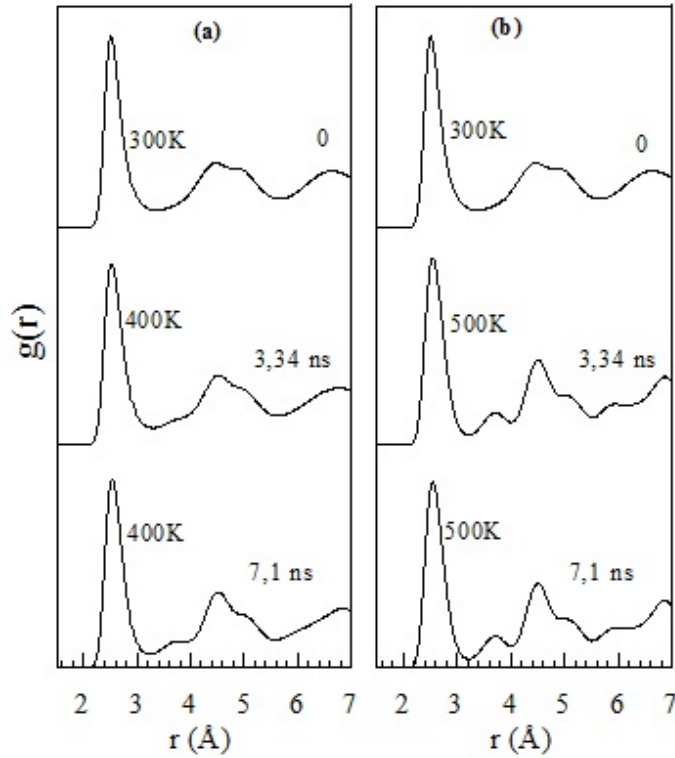
dönüşüm süreci incelenmeye çalışılmıştır. Model alaşım sistemine uygulanan sıcaklık değişim programı uygulanmış ve basınç tüm çalışma boyunca 0 GPa değerinde sabit tutulmuştur. Sistemin sıcaklığı 500K'den başlayarak MD metotla belirlenen erime sıcaklığına (1100K) kadar 100K aralıklarla ısıtılmıştır ve sıvı fazda 1×10^4 MD adımı bekletilmiştir. Daha sonra, amorf fazın meydana gelebilmesi için 300K sıcaklığına kadar yine 100K aralıklarla hızlı soğutma uygulanarak (1×10^{13} K/s) sistem soğutulmuştur. Bu soğutma süreci sonunda sistemin 300K sıcaklıkta amorf fazda kararlı kaldığı ve bu sıcaklıkta uzun süre bekletilmesine rağmen kristal faza dönüşümün gerçekleşmediği görülmüştür. 300K sıcaklıkta RDF'nun ikinci pikindeki yarıлма Şekil 2'de açıkça görülmektedir ve ikinci pikteki bu yarıлма amorf fazın genel bir özelliği olarak bilinmektedir [14]. Daha sonra 5488 ve 54000 atomlu model sistemin sıcaklığı, tavlama olarak bilinen ısı işlem uygulanarak amorf fazdan itibaren sırasıyla 400K ile 500K sıcaklıklarına çıkarılmıştır.



ŞEKİL 2. Model alaşım sistemi için uygulanan ısıtma-soğutma çevriminde bazı sıcaklık değerlerinde elde edilen RDF eğrileri.

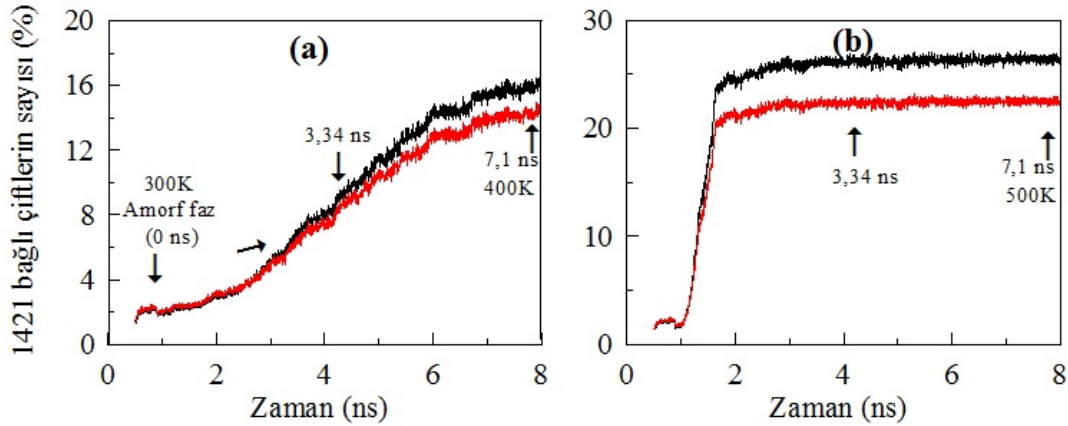
Şekil 3, 54000 atomlu model sisteminin amorf fazdan itibaren ısıtılarak farklı sıcaklıklarda elde edilen RDF eğrilerini göstermektedir. Sistem ilk olarak 300K'de amorf fazda iken sıcaklık 400K değerine yükseltilmiştir. Bu sıcaklıkta 5×10^5 MD

adımı (yaklaşık 3,34ns) bekletildiğinde belirli atomik mesafelere karşılık gelen piklerinin şiddetlerinin (keskinliği) az olması sistemde yapısal olarak ideal bir kristal fazın meydana gelmediği şeklinde yorumlanmıştır. Kristal pik şiddetlerinin daha iyi gözlenebilmesi için, model sistem aynı sıcaklıkta ekstra $5,5 \times 10^5$ MD adımı daha bekletilmiş ve bu zaman sonunda RDF eğrilerine ait pik şiddetlerinin biraz daha belirgin olduğu görülmüştür. Model alaşım sistemi için düşük tavlama sıcaklığında daha ideal kristal fazın oluşabilmesi için bekleme zamanının uzun tutulması gerektiği sonucuna varılmıştır. 54000 atomlu model alaşım sisteminin amorf fazdan itibaren sıcaklığı 500K'ne çıkarıldıktan sonra elde edilen RDF eğrileri Şekil 3b'de gösterilmiştir. 400K tavlama sıcaklığı ile karşılaştırıldığında, 500K sıcaklığında 3,34ns ve 7,1ns zaman değerlerinde RDF eğrilerindeki belirli atomik mesafelere karşılık gelen kristal pik şiddetlerinin arttığı ve böylelikle daha kararlı bir kristal fazın meydana geldiği sonucuna varılmıştır. Tavlama sıcaklığının artmasıyla birlikte yeniden kristalleşme için gerekli olan zamanın azaldığı tespit edilmiştir.

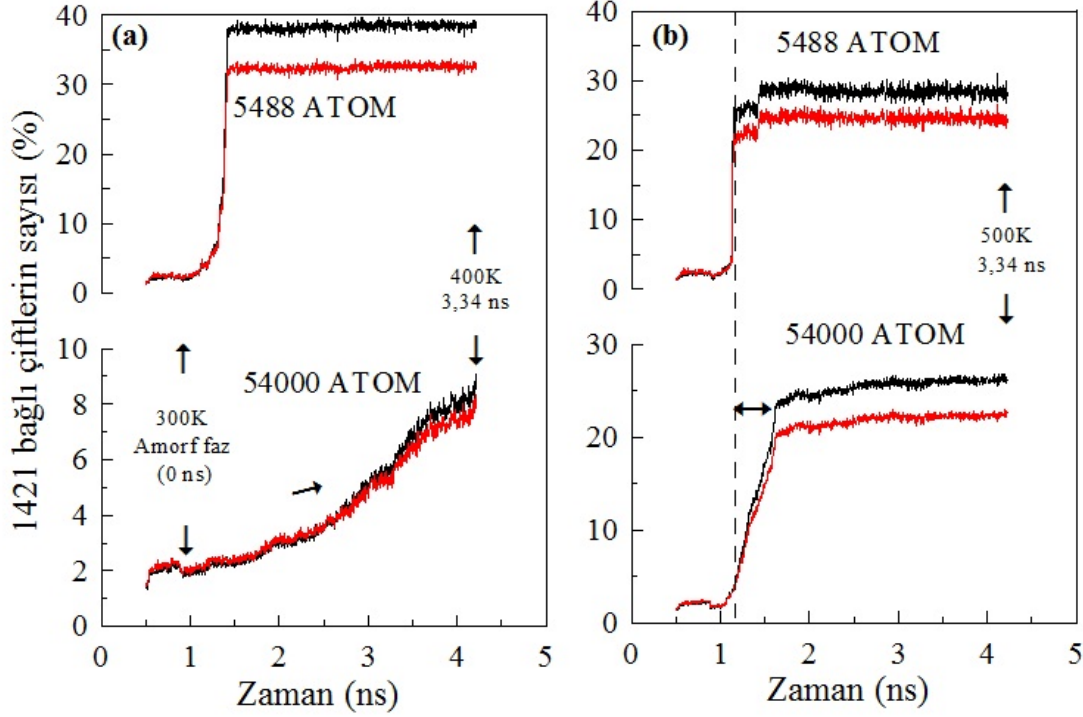


ŞEKİL 3. 54000 atomlu model üçlü alaşım sisteminin amorf fazdan itibaren farklı tavlama sıcaklıklarında belirli zaman bekletilmesi ile elde edilen RDF eğrileri: a) 400K ve b) 500K tavlama sıcaklıkları (Amorf faz (300K) başlangıç zamanı olarak alınmıştır).

Yeniden kristalleşme sürecine 1421 bağlı çiftlerin etkisini görmek için, 54000 atomlu model alaşım sistemi 400K ve 500K tavlama sıcaklıklarında amorf fazdan itibaren 5×10^5 MD adımı (3,34 ns) bekletildikten sonra ekstra $5,5 \times 10^5$ MD adımı daha bekletilmiştir. Tüm bu bekleme süresine bağlı olarak 1421 bağlı çiftlerin sayısındaki değişim Şekil 4'te gösterilmiştir. 3,34ns sonunda 1421 bağlı çiftlerin sayısı (kök çiftin atomunun Cu-Cu, Al-Al ve Ni-Ni atom türü ve Cu-Al atom türü olması durumlarının toplamı) yaklaşık %18 iken 7,1 ns sonunda ise bu oranın yaklaşık %30 değerine çıktığı belirlenmiştir. Bu durum, 400K sıcaklıkta zamanla birlikte RDF eğrisindeki kristal piklerinin şiddetinin artması ile uyumlu bir sonuçtur. Yaklaşık 2 kat arttırılan bekleme zamanının düşük tavlama sıcaklığında 1421 bağlı çiftlerin sayısının artma miktarında etkili olduğu görülmüştür. Bunun yanı sıra, 500K sıcaklıkta 7,1ns sürenin sonunda 1421 bağlı çiftlerin sayısının 400K tavlama sıcaklığındaki değerler ile karşılaştırıldığında çok daha fazla olduğu görülmektedir. 1421 bağlı çiftlerin sayısındaki bu artış sistemin daha düzenli bir kristal yapıya (yüzey merkezli örgü) doğru gittiği anlamına gelmektedir. Şekil 3'te görüldüğü üzere, 500K sıcaklık ve 7,1ns deki RDF'nun belirli atomik uzaklıklara karşılık gelen pik şiddetlerinin 400K sıcaklık ve aynı zamandaki pik şiddetlerine oranla çok daha fazla olması bu düzenli kristal yapıya dönüşümün göstergesidir.



ŞEKİL 4. 54000 atomlu model üçlü alaşım sistemi için ekstra 55×10^5 MD adımı bekletilerek elde edilen 1421 bağlı çiftlerin sayısının zamana karşı grafiği: a) 400K ve b) 500K tavlama sıcaklıkları (siyah eğriler kök çiftin Cu-Cu, Al-Al, Ni-Ni; kırmızı eğriler ise kök çiftin Cu-Al atom türünde olması durumunu gösterir).



ŞEKİL 5. Farklı atom sayılarında kurulan üçlü alaşım sistemindeki 1421 bağlı çiftlerin zamana karşı grafiği: a) 400K ve b) 500K tavlama sıcaklıkları (siyah eğriler kök çiftin Cu-Cu, Al-Al, Ni-Ni; kırmızı eğriler ise kök çiftin Cu-Al atom türünde olması durumu gösterir).

Şekil 5, model sistemin amorf fazdan itibaren farklı tavlama sıcaklıklarında kullanılan atom sayısının 1421 bağlı çiftlerin sayısına (sistem içinde bulunma yüzdesi) olan etkisini göstermektedir. Şekil 5 incelendiğinde, atom sayısının artması ile birlikte 400K sıcaklığında amorf fazdan itibaren kristalleşme tam olarak meydana gelmemiştir ve bu durum 1421 bağlı çiftlerin sayısının sistem içinde oldukça az olması, atomların düzenli yerleşerek kristal birim hücreli örgüleri daha az oluşturduğu anlamına gelir. Tavlama sıcaklığı 500K değerine arttırıldığında, sistemde 1421 bağlı çiftlerin sayısında da önemli derecede artış gözlenmiştir. 1421 bağlı çiftlerin sayısında bu artış, kristal birim hücrelerin oluşarak daha ideal bir kristal fazın meydana geldiğine işaret eder. 500K sıcaklığında ise 5488 atomlu sistem ile karşılaştırıldığında, 1421 bağlı çiftlerin sayısının sistemde daha az olduğu belirlenmiştir. Bununla birlikte, 1421 bağlı çiftlerin sayısındaki değişim göz önüne alındığında,

500K tavlama sıcaklığında 5488 atomlu sistemde çok kısa bir sürede artış gerçekleşirken, 54000 atomlu sistemde bu artış belirli bir zaman aralığında ve daha uzun bir sürede gerçekleşmiştir. Atom sayısının artması sistemde paketlenme ve yığılma kusurlarına bağlı olarak, düzensiz bölgelerin daha çok oluşmasına sebep olmuş ve bu durum atom sayısı fazla olan sistemde yeniden kristalleşme sürecinin daha uzun zamanda gerçekleştiği şeklinde yorumlanmıştır.

4. Tartışma ve Sonuç

Amorf fazın termodinamik olarak kararsızlığının ve içinde farklı türde kusurları barındırmasının kristalleşme sürecine olumsuz etki ettiği bilinmektedir [15]. Model üçlü alaşım sistemi için, 300K'de hızlı soğutma koşullarında oluşup amorf fazda mevcut olan iç zorlanmalar ile yapısal kusurların çok fazla olduğu ve bu düzensizliklerin yeniden kristalleşme sürecini olumsuz şekilde engellediği düşünülmüştür. 300K sıcaklıkta amorf fazda 5×10^4 MD adımı bekletilme sürecinde mevcut olan kristal ve amorf yapılarda görülen bağlı çiftlerin sayısının belirlenmesi ile daha iyi anlaşılabilir. 300K sıcaklıkta, amorf fazın başlangıç durumundan 5×10^4 MD adımı sürecinde kristal yapılarda görülen bağlı çiftlerin (1421, 1422, 1441, 1661) ortalama sayısı %24,3 iken, amorf yapılarda görülen bağlı çiftlerin (1541, 1551, 1431) ortalama sayısı %75,7'dir. Amorf fazda görülen bağlı çiftlerin sayısının çok fazla olması, atomların düzensiz yerleşimleri sonucu meydana gelen kusurlu (defect) bölgelerin varlığı anlamına gelmektedir.

Model üçlü alaşım sistemi, amorf fazdan itibaren daha yüksek sıcaklarda ısıtılarak, amorf faz meydana gelen iç zorlanmalar/gerilmeler ve kusurları azaltacak bir yeniden yapılanma süreci meydana gelmiştir. Bu durum, 400K ve 500K sıcaklıklarında belirli bir zaman aralığındaki kristal yapılarda görülen bağlı çiftlerin sayısı incelenerek yorumlanabilir. 400K sıcaklıkta 0,5ns'lik bir zaman aralığında, kristal bağlı çiftlerin ortalama yüzdesi %26,1'dir. 500K sıcaklıkta ise aynı zaman aralığındaki bu çiftlerin ortalama yüzdesi ise %32,7 olarak hesaplanmıştır. Tavlama sıcaklığının artması ile kristal yapılarda görülen bağlı çiftlerin sayısının artması ve buna bağlı olarak amorf yapıda görülen bağlı çiftlerin sayısının azalması, sistem içinde meydana gelen kusurların (yapısal düzensizliğin) azaldığının bir göstergesidir. Sistemin düzeninin artmasıyla birlikte, birim hacme düşen kristal bağlı çiftlerin sayısı artmıştır ve böylece kristal örgüye ait birim hücrelerin sayısı da artarak daha kısa zamanda amorf fazdan itibaren kristal büyümesi gerçekleşmiştir.

Sonuç olarak, tavlama sıcaklığının artması ile yeniden kristalleşme zamanının azaldığı belirlenmiştir ve bu durum bilinen kristalleşme kinetikleri ile uyumlu bir sonuçtur [1,16,17]. Bununla birlikte, model sistem için kullanılan atom sayısının da kristalleşme zamanını etkileyen bir faktör olduğu sonucuna varılmıştır. Bu tür MD çalışmalarında, benzetimin çok daha güvenilir sonuçlar vermesi için kullanılan atom sayısının fazla tutulması gerektiği bilinmektedir [18]. Özellikle yukarıda tartışıldığı üzere, daha fazla atomlu sistemin yeniden kristalleşme süreci daha uzun bir zaman aralığında gerçekleşmiştir ve bu durum yapılan çalışmalar göz önüne alındığında bilinen yeniden kristalleşme olayına daha uygun bir fiziksel davranıştır [2,16].

Teşekkür. Bu çalışma Fırat Üniversitesi Bilimsel Araştırma Projeleri Koordinasyon Birimi (FÜBAP) 1496 no.'lu proje kapsamında desteklenmiştir.

Kaynaklar

- [1] F. J. Humphreys and M. Hatherly, *Recrystallization and Related Annealing Phenomena*, Elsevier Ltd., Oxford 2004.
- [2] W. F. Smith, *Malzeme Bilimi ve Mühendisliği*, Literatür Yayıncılık, İstanbul 2001.
- [3] Y.B. Zhang, A. Godfrey, Q. Liu, W. Liu and D. Juul Jensen, Analysis of the growth of individual grains during recrystallization in pure nickel, *Acta Materialia* **57** (2009), 2631–2639.
- [4] L. Liu, Z. F. Wu and J. Zhang, Crystallization kinetics of Zr₅₅Cu₃₀Al₁₀Ni₅ bulk amorphous alloy, *Journal of Alloys and Compounds* **339** (2002), 90–95.
- [5] D. M. Herlach (ed.), *Solidification and Crystallization*, Wiley-VCH, Weinheim 2004.
- [6] S. Kazanç, *Bakır Bazlı Alaşımlarda Termoelastik Dönüşümlerin Moleküler Dinamik Benzetim*, Doktora Tezi, Fırat Üniversitesi, Elazığ 2004.
- [7] D. W. Heermann, *Computer Simulation Methods in Theoretical Physics*, Springer-Verlag, Berlin 1986.
- [8] S. Özgen, *Sayısal Hesaplama Yöntemlerinin Şekil Hatırlamalı Alaşımlarda Difüzyonsuz Faz Dönüşümlerine Uygulanması*, Doktora Tezi, Fırat Üniversitesi, Elazığ 1997.
- [9] M. Parrinello and A. Rahman, Crystal structure and pair potentials: A molecular-dynamics study, *Physical Review Letters* **45** (1980), 1196–1199.
- [10] H. C. Andersen, Molecular dynamics simulations at constant pressure and/or temperature, *Journal of Chemical Physics* **72** (1980), 2384–2393.
- [11] J. M. Haile, *Molecular Dynamics Simulation: Elementary Methods*, Wiley and Sons Inc., Canada 1992.
- [12] J. D. Honeycutt and H. C. Andersen, Molecular dynamics study of melting and freezing of small Lennard-Jones clusters, *The Journal of Physical Chemistry* **91** (1987), 4950–4963.

- [13] Y. Qi, T. Çağın, Y. Kimura and W. A. Goddard, Molecular-dynamics simulations of glass formation and crystallization in binary liquid metals: Cu-Ag and Cu-Ni, *Physical Review B* **59** (1999), 3527–3533.
- [14] C. A. Schuh, T. C. Hufnagel and U. Ramamurty, Mechanical behavior of amorphous alloys, *Acta Materialia* **55** (2007), 4067–4109.
- [15] L. Z. Zhou, J. T. Guo, G. S. Li, L. Y. Xiong, S. H. Wang and C. G. Li, Investigation of annealing behavior of nanocrystalline NiAl, *Materials and Design* **18** (1997), 373–377.
- [16] Q. X. Pei, C. Lu and H. P. Lee, Crystallization of amorphous alloy during isothermal annealing: a molecular dynamics study, *Journal of Physics: Condensed Matter* **17** (2005), 1493–1504.
- [17] C. Desgranges and J. Delhommelle, Molecular simulation of cross-nucleation between polymorphs, *The Journal of Physical Chemistry B* **111** (2007), 1465–1469.
- [18] P. Richard, L. Oger, J. P. Troadec and A. Gervois, Geometrical characterization of hard-sphere systems, *Physical Review E* **60** (1999), 4551–4558.

