

## Fe elementindeki $\alpha \rightarrow \gamma \rightarrow \delta$ Katı-Katı Faz Geçişlerinin Moleküler Dinamik Benzetimi ile İncelenmesi

Sefa KAZANÇ<sup>1</sup>, Canan Aksu CANBAY<sup>2\*</sup>

<sup>1</sup>Matematik ve Fen Bilimleri Eğitimi, Eğitim Fakültesi, Fırat Üniversitesi, 23119, Elazığ/TÜRKİYE

<sup>2</sup>Fizik Bölümü, Fen Fakültesi, Fırat Üniversitesi, 23119, Elazığ/TÜRKİYE

<sup>1</sup>skazanc@firat.edu.tr, <sup>2\*</sup>caksu@firat.edu.tr

(Geliş/Received: 15/09/2020;

Kabul/Accepted: 16/11/2020)

**Öz:** Fe elementinin faz diyagramı incelendiğinde erime sıcaklığının altında farklı sıcaklıklarda farklı kristal yapılara sahip olduğu görülmektedir. Bu çalışmada 4000 atomdan oluşan Fe model sisteminde farklı sıcaklıklarda meydana gelen katı-katı faz dönüşümleri moleküler dinamik benzetim yöntemi kullanılarak incelenmeye çalışıldı. Çok cisim etkileşmelerini içeren Gömülmüş Atom Metodu(GAM) atomlar arasındaki etkileşmeleri hesaplamak için kullanıldı. Fe elementi için erime sıcaklığının altında oluşan  $\alpha$ ,  $\gamma$  ve  $\delta$  fazları ve bu fazlar için dönüşüm sıcaklıkları belirlenerek sonuçlar deneysel değerlerle karşılaştırıldı. Model sistemin yapısal analizlerinde radyal dağılım fonksiyonu, termodinamik niceliklerde değişimler ve Ackland-Jones analiz yöntemi kullanıldı. Erime sıcaklığına kadar olan faz geçişlerinin gözlenmesi, hesaplamalarda kullanılan potansiyel fonksiyonunun Fe'nin sistemin modellenmesinde başarılı bir şekilde kullanılabileceğini göstermektedir.

**Anahtar kelimeler:** Fe elementi, moleküler dinamik benzetimi, katı-katı faz dönüşümü, gömülmüş atom metodu.

## The Investigation with Molecular Dynamic Simulation of $\alpha \rightarrow \gamma \rightarrow \delta$ Solid-Solid Phase Transformation in Fe

**Abstract:** When the phase diagram of the element Fe is examined, it is seen that it has different crystal structures at different temperatures below its melting temperature. In this study, the solid-solid phase transformations occurring at different temperatures in the Fe model system consisting of 4000 atoms were investigated using molecular dynamic simulation method. The Embedded Atom Method(EAM), which includes many body interactions, was used to calculate interactions between atoms. For the element Fe, the  $\alpha$ ,  $\gamma$  and  $\delta$  phases formed below the melting temperature and the transformation temperatures for these phases were determined and the results were compared with the experimental values. Radial distribution function, changes in thermodynamic quantities and Ackland-Jones analysis method were used in the structural analysis of the model system.

**Keywords:** Element Fe, molecular dynamics simulation, solid-solid phase transformation, embedded atom method.

### 1. Giriş

Sıcaklık ve basınç gibi dış etkenler maddelerin farklı denge fazlarında bulunmalarında oldukça etkili faktörlerdir. Bu duruma iyi bir örnek Fe elementi verilebilir. Fe farklı sıcaklıklarda farklı kristal yapılara sahip katı-katı faz dönüşümü sergileyen poliformik (çok şekilli) elementlerden biridir. Sıfır basınç değerinde 911 °C'ye kadar Fe bcc yapıya sahiptir. Bu yapıdaki Fe,  $\alpha$ -Fe olarak bilinmektedir. 911 - 1407 °C sıcaklık aralığında ise Fe elementi bir önceki yapıya göre daha sıkı paket yapıya sahip fcc birim hücreli yapıya dönüşür ve  $\gamma$ -Fe olarak adlandırılmaktadır [1, 2]. Fe için ve özellikle çelik için soğutma esnasında fcc yapıdan bcc yapıya faz dönüşümü (martensitik faz dönüşümü olarak adlandırılır) oldukça önem taşımaktadır [3]. Fe in erimesinden önce 1407 -1536 °C sıcaklık aralığında ise yeniden bcc faza bir dönüşüm gerçekleşmektedir. Bu faz da  $\delta$ -Fe olarak adlandırılmaktadır. Fe elementinin ısıtılması esnasında 768 °C'de bir dönüşüm daha meydana gelmektedir. Ancak bu sıcaklıkta kristal yapıda herhangi bir değişim meydana gelmemekte sadece bu sıcaklık değerinde Fe ısıtma veya soğutma esnasında kaybettiği manyetik özelliklerine yeniden kavuşmaktadır. Bu nokta Curie noktası olarak bilinmektedir [2, 4]. Faz geçişleri, malzemelerin mikro yapıları üzerinde önemli bir rol oynamakta ve böylece akma dayanımı ve sertlik gibi materyallerin makroskobik özellikleri kontrol edilebilmektedir. Fe elementinde meydana gelen bu katı-katı faz dönüşümü büyük bir öneme sahiptir ve Fe elementindeki katı-katı faz geçişlerinin incelenmesi için birçok deneysel çalışma yapılmıştır. Yapılan ısıtma veya soğutma işlemleri ile Fe istenilen faz bölgesinde tutularak, özelliklerinin belirli sınırlar içinde kalması sağlanmaktadır [4-9].

\* Sorumlu yazar: [caksu@firat.edu.tr](mailto:caksu@firat.edu.tr). Yazarların ORCID Numarası: <sup>1</sup> 0000-0002-8896-8571, <sup>2</sup> 0000-0002-5151-4576

Fe'in manyetik özelliklerinden dolayı oldukça karmaşık bir faz diyagramı vardır. Manyetik özellikleri iletim elektronlarını ve dolayısıyla bağlanma özelliklerini etkilemektedir [10, 11]. Bununla birlikte benzetim yöntemleri Fe deki faz dönüşümlerinin belirlenmesinde başarılı bir şekilde kullanılmaktadır [12-14]. Son yıllarda Fe deki faz geçişlerini belirlemek için birçok yeni potansiyel fonksiyonu geliştirilmiştir. Bunlardan birisi bağ yönelimlerini içeren Müller ve arkadaşları tarafından önerilen potansiyeldir. Bu potansiyel sadece  $\alpha$ - $\gamma$  dönüşümünü değil aynı zamanda  $\gamma$ - $\delta$  dönüşümünü de modellemede kullanılmaktadır [15]. Tateyama ve arkadaşları elektron yoğunluğu aralığını değiştirmiş ve Finnis-Sinclair potansiyelini modifiye ederek Fe deki katı-katı faz dönüşümlerini çalışmıştır [16]. Lee ve arkadaşları modifiye gömülmüş atom metodu geliştirerek meydana gelen katı-katı faz dönüşümlerini gözlemleniler [17]. Ayrıca Finnis-Sinclair [18] ve Johnson-Oh [19] potansiyelleri 0 ile 1800 K sıcaklık aralığında fcc fazından daha düşük enerjili bir bcc fazı üretmektedir.

Bilgisayar benzetimleri son 40 yılda maddelerin atomik seviyede yapı ve özelliklerinin anlaşılmasında önemli bir rol oynamaktadır. Özellikle atomlar arası etkileşmeleri ifade eden potansiyel enerji fonksiyonunun incelenen sistem için uygun olarak tanımlanması malzemelerin yapı ve özelliklerinin gerçeğe en yakın olarak belirlenmesinde en önemli faktördür [20-22]. Literatürde farklı sistemlerin modellenmesinde kullanılan birçok potansiyel enerji fonksiyonu mevcuttur [23-26]. En çok kullanılan potansiyel enerji fonksiyonlarından birisi çok cisim etkileşmelerini içeren ve basit bir matematiksel ifadeye sahip olan GAMdır [27]. Bu potansiyel fonksiyonunun Vother-Chen [28], Finnis-Sinclair [29] and Sutton-Chen (SC) [30] tarafından geliştirilen farklı türleri bulunmaktadır. Bununla birlikte atomik etkileşmeleri tanımlamaya yönelik mevcut en iyi yaklaşım kuantum mekaniksel etkileşmeleri içeren ilk prensip (first principles) metotlarıdır. Fakat bu metodun kullanılmasında düşük parçacık sayısına ve yüksek işlem gücüne sahip bilgisayarlara ihtiyaç duyulmaktadır. Sonuç olarak atom sayısının fazla olduğu ve uzun bir zaman ölçeği gerektiren benzetim çalışmalarının çoğu, deneysel ve yarı deneysel olarak tanımlanan atomlar-arası etkileşmeleri içerir [21, 22].

Bu çalışmada 4000 atomdan meydana gelen Fe tek atomlu model sisteminde oda sıcaklığından erime noktasına kadarki sıcaklık aralığında oluşan  $\alpha \rightarrow \gamma \rightarrow \delta$  fazları moleküler dinamik benzetimi ile incelendi. Çalışmalarda LAMMPS açık kaynak kodlu moleküler dinamik benzetim programı kullanıldı. Model sistemin yapısal analizlerinde radyal dağılım fonksiyonu, termodinamik niceliklerde değişimler ve Ackland-Jones analiz yöntemi kullanılmıştır. Elde edilen dönüşüm sıcaklıkları deneysel değerlerle karşılaştırılmış ve sonuçların deneysel değerlerle uyum içinde olduğu görülmüştür.

## 2. Materyal ve Metot

MD benzetim yöntemi analitik olarak çözümü zor veya imkansız olan problemlerin sayısal çözümünü amaçlar. Atomlar arası etkileşmelerin bir potansiyel enerji fonksiyonu ile temsil edildiği  $N$  atomdan meydana gelen bir sistemin Lagrange fonksiyonu

$$L_{PR}(\mathbf{r}^N, \dot{\mathbf{r}}^N, \mathbf{h}, \dot{\mathbf{h}}) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N m_i (\dot{\mathbf{s}}_i^t \mathbf{G} \dot{\mathbf{s}}_i) - \sum_{i=1}^N \sum_{j>i}^N \phi(|\mathbf{h} \mathbf{s}_{ij}|) + \frac{1}{2} M \text{Tr}(\dot{\mathbf{h}}^t \dot{\mathbf{h}}) - P_{ext} V \quad (1)$$

şeklinde ifade edilmektedir. Burada  $i$  parçacığının kütlesi  $m_i$ ,  $i$  atomunun koordinatı  $s_i$ , MD hücre eksenleri  $\mathbf{h}$ ,  $\mathbf{h}^t \mathbf{h}$  değerine sahip metrik tensörü  $\mathbf{G}$ , MD hücresinin kütlesini temsil eden keyfi bir sabit  $M$ , dış basınç değeri  $P_{ext}$  ve hesaplama hücresinin hacmi  $V$  ile ifade edilmektedir. Sistem için hareket denklemleri (1) ifadesi kullanılarak parçacıklar ve MD hücresi için aşağıdaki şekilde elde edilmiştir.

$$\ddot{\mathbf{s}}_i = -\frac{1}{m_i} \mathbf{F}_i - \mathbf{G}^{-1} \dot{\mathbf{G}} \dot{\mathbf{s}}_i \quad (2)$$

$$\ddot{\mathbf{h}} = M^{-1} (\mathbf{\Pi} - \mathbf{I} P_{ext}) \sigma \quad (3)$$

burada  $\sigma = V(\mathbf{h}^t)^{-1}$  olarak verilmekte ve mikroskobik zor tensörü  $\mathbf{\Pi}$  aşağıdaki şekilde ifade edilmektedir [31-32].

$$\mathbf{\Pi} = V^{-1} \left[ \sum_{i=1}^N m_i \mathbf{v}_i \cdot \mathbf{v}_i - \sum_{i=1}^N \sum_{j>i}^N \frac{F_{ij}}{r_{ij}} \mathbf{r}_i \cdot \mathbf{r}_i \right] \quad (4)$$

Hesaplamalarda büyük ölçekli atomic/moleküler kitlesel paralel simülatör (Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator-LAMMPS) açık kaynak kodu moleküler dinamik benzetimini kullanıldı [33]. MD

hücre, 4000 Fe atomunun başlangıç konumları olarak seçilen fcc örgü noktalarına yerleştirilmesiyle oluşturuldu. Parçacık sayısının, basıncın ve sıcaklığın sabit tutulduğu *NPT* istatistiksel topluluğu kullanıldı. MD hücreindeki Fe atomlarının başlangıç hızları Maxwell-Boltzman hız dağılımına uyularak rasgele belirlendi. Parçacık hızları her iki adımda bir yeniden hesaplanarak sistemin sıcaklığı kontrol altında tutuldu. Bütün hesaplama süresince periyodik sınır şartları *x*, *y* ve *z* eksenleri doğrultusunda uygulandı. Hareket denklemlerini sayısal olarak integre edebilmek için Verlet'in hız algoritması kullanıldı. Potansiyel etkileşmesinin kesilim mesafesi olan cut-off değeri  $2a_{Fe}$  olarak seçildi. MD zaman adımı hesaplamalarda 1 fs olarak alındı.

## 2.1 Potansiyel enerji fonksiyonu

Potansiyel enerji fonksiyonları malzemelerin geniş bir aralıkta özelliklerini belirlemede kullanılmaktadır. *N* atomdan meydana gelmiş atomik sistemlerin toplam enerjisi GAM [28-30];

$$E_T = \frac{1}{2} \sum_{i,j}^{N} \phi(r_{ij}) + \sum_i^N F(\bar{\rho}_i) \quad (5)$$

şeklinde ifade edilmektedir. Denklem sırasıyla itici etkileşmeleri içeren ikili etkileşme fonksiyonu ve çekici etkileşmeleri içeren gömme enerjisi fonksiyonundan oluşmaktadır. Literatür incelendiğinde itici ve çekici etkileşmeleri ifade eden fonksiyonların farklı şekilde tanımlanması GAM'ın farklı türlerini oluşturmaktadır [28, 29]. Literatürde Fe elementinin modellenmesi için kullanılan birçok potansiyel fonksiyonu bulunmaktadır [20-22]. Bununla birlikte hiçbir potansiyel kristal ve sıvı yapıdaki Fe in geniş bir aralıkta özelliklerini tam olarak açıklamaya yeterli değildir. Bu çalışmada Ackland ve arkadaşları tarafından Fe elementi için geliştirilen GAM potansiyeli ve deneysel verilerle yeniden fit edilmesinden elde edilen parametreleri kullanıldı [22].

Maddelerin fazlarını atomların birbirleriyle etkileşmesi ve dizilmeleri belirler. Model sistemde aynı ve farklı tür atomlar arasındaki ilişkinin incelenmesinde radyal dağılım fonksiyonu (RDF) en çok kullanılan analiz tekniklerinden biridir. Bu teknikte seçilen bir *i* atomundan herhangi bir *r* mesafesinde  $\Delta r$  küre kabuğu içerisine giren atomların sayısı *n*(*r*) olmak üzere *g*(*r*) radyal dağılım fonksiyonu;

$$g(r) = \left\langle \frac{V}{N^2} \frac{\sum_i n_i(r)}{4\pi r^2 \Delta r} \right\rangle \quad (6)$$

ifadesi ile verilir [34].

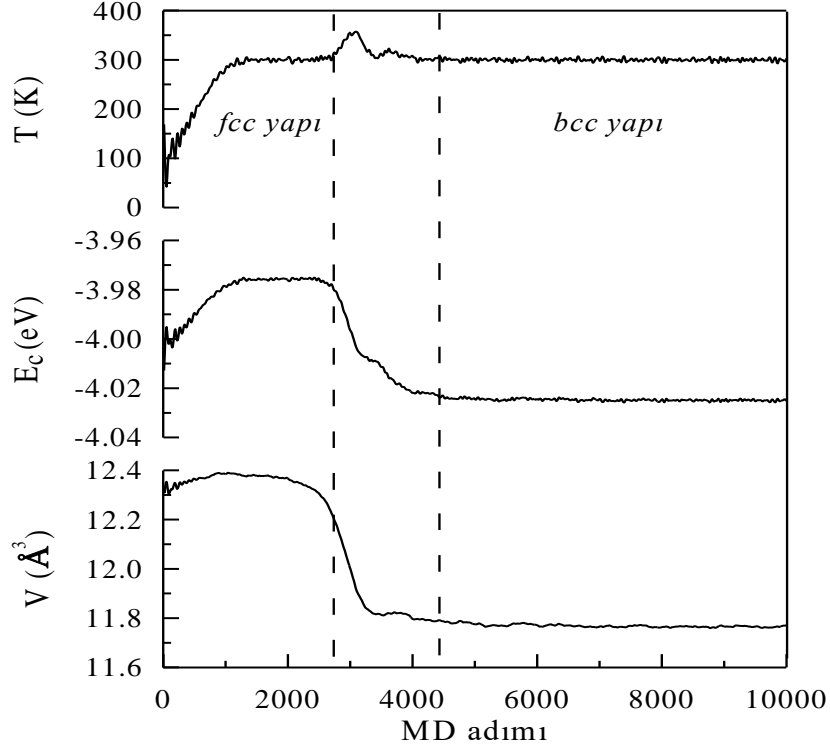
Benzetim çalışmalarında önemli problemlerden birisi de yapı içerisinde belirlenmesi zor olan fcc, hcp, bcc gibi sıkı paket yapıların tespit edilmesidir. Bu çalışmada MD hücreleri içerisinde var olan bu birim hücreli yapıların yüzdeleri Ackland-Jones analiz yöntemi kullanılarak belirlenmeye çalışıldı [35].

## 3. Bulgular

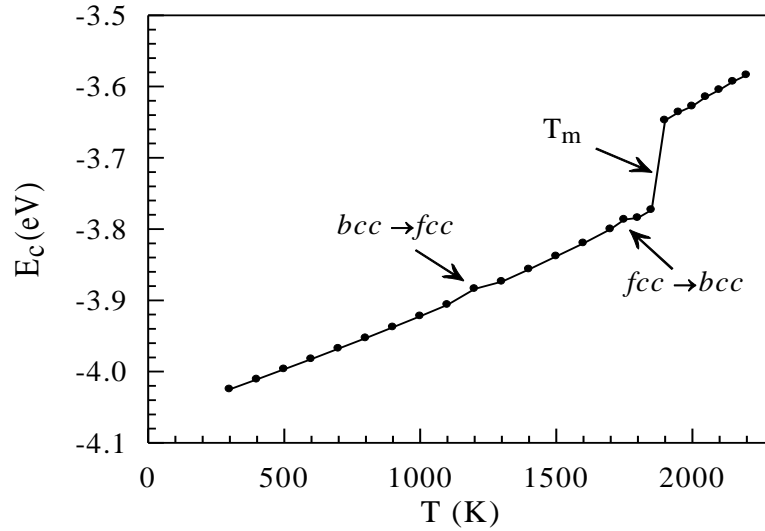
Fe, katı faz bölgesinde farklı sıcaklık aralıklarında farklı kristal örgü yapısına sahip bir elementtir. Bu çalışmada Fe elementindeki faz geçişleri ve bu geçişlerin meydana geldiği sıcaklık aralıkları belirlenmeye çalışılmıştır. Benzetim çalışmasına başlamadan önce 4000 Fe atomu başlangıç konumları olarak seçilen fcc örgü noktalarına yerleştirildi. Başlangıç sıcaklığı olarak 300 K seçilmiştir. Benzetim çalışmasının ilk 10000 adımı için sıcaklık, birim atom başına enerji ve hacim değişimleri Şekil 1'de görülmektedir. Hesaplama sürecinin başlangıcından itibaren ilk 1000 MD adımında niceliklerde bir yükselme meydana gelmekte ve bu adımın sonunda sistem fcc yapıda dengeye ulaşmaktadır. Model sistem fcc fazdaki bu kararlı denge yapısını yaklaşık 2800. MD adımına kadar korumaktadır. Bu adımdan sonra niceliklerde bir değişimin meydana geldiği Şekil 1'de açıkça görülmektedir. Sıcaklık değerinde ani bir artışa karşılık enerji ve hacim değerlerinde bir azalma meydana gelmektedir. Bu durumda MD hücrelerinde fcc birim hücreli yüksek enerjili fazdan bcc birim hücreli düşük enerjili faza yapısal bir faz dönüşümünün meydana geldiği söylenebilir. 4400. MD adımında ise niceliklerin tekrardan denge durumuna geldiği belirlenmiştir. Deneysel olarak 300 K sıcaklıkta Fe in bcc birim hücreli  $\alpha$  fazında olduğu bilinmektedir [1]. Başlangıçta Fe atomlarının fcc örgü noktalarına yerleştirildiği MD hücrelerinin kısa bir süre sonra aynı sıcaklık değerinde bcc birim hücreli faza dönüşüm sergilemesi, kullanılan potansiyel enerji fonksiyonunun Fe sistemini gerçekçi bir şekilde modelleyebileceğini göstermektedir.

Katı-katı faz geçişlerini ve erime sıcaklığını belirlemek amacı ile 4000 atomdan meydana gelen model sistem 300 K sıcaklığında 100000 MD adımı dengeye getirilerek bcc birim hücreli yapıya sahip  $\alpha$ -Fe elde edildi. Daha sonra sistemin sıcaklığı 300 K den 2200 K'e 100 K sıcaklık aralıklarıyla artırıldı. Her sıcaklık değerinde

50000 MD adımı sistem dengeletildi. Çalışma sonunca her sıcaklık değeri için birim atom başına bağlanma enerjisi olan  $E_c$  nin son 5000 MD adımı üzerinden ortalaması alındı. Elde edilen sonuçlar Şekil 2’de gösterildiği gibi verilmiştir. Şekil 2 incelendiğinde 1100 K sıcaklık değerine kadar enerji değerinin doğrusal bir artış içinde olduğu görülmektedir. 1200 K sıcaklık değerinde enerjide küçüğe olsa bir artış olduğu belirlenmiştir. Enerjideki bu artış yapısal bir faz dönüşümüne işaret etmektedir. Daha sonra yapılan diğer analizlerde de bu sıcaklık değerinde Fe model sisteminin bcc birim hücreli bir fazdan fcc birim hücreli bir faza dönüşüm yaptığı görülmektedir.



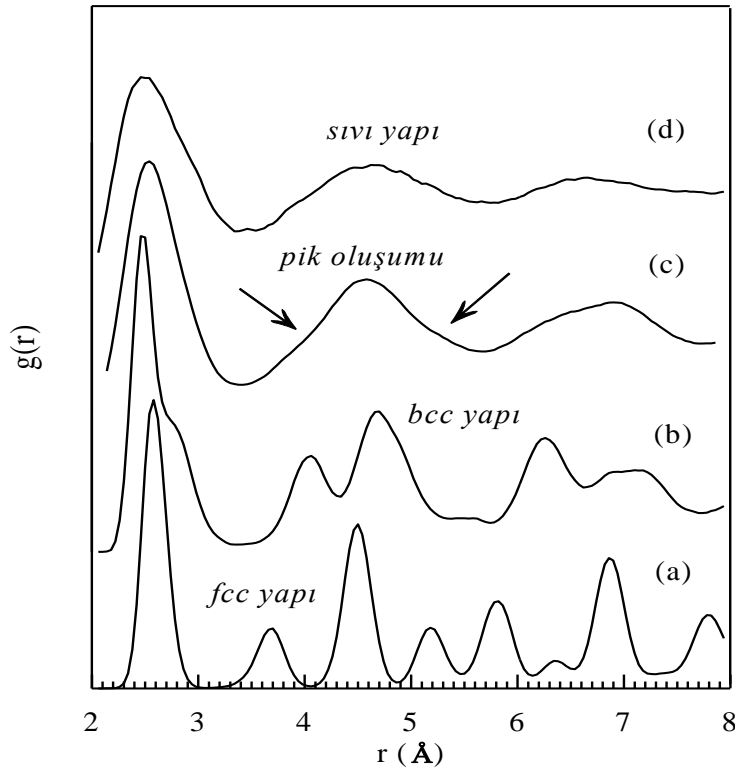
Şekil 1. 300 K sıcaklık değerinde ilk 10000 adım için sıcaklık, enerji ve hacimdeki değişim.



Şekil 2. 0 basınç değerinde sıcaklıkla birim atom başına bağlanma enerjisinin değişimi.

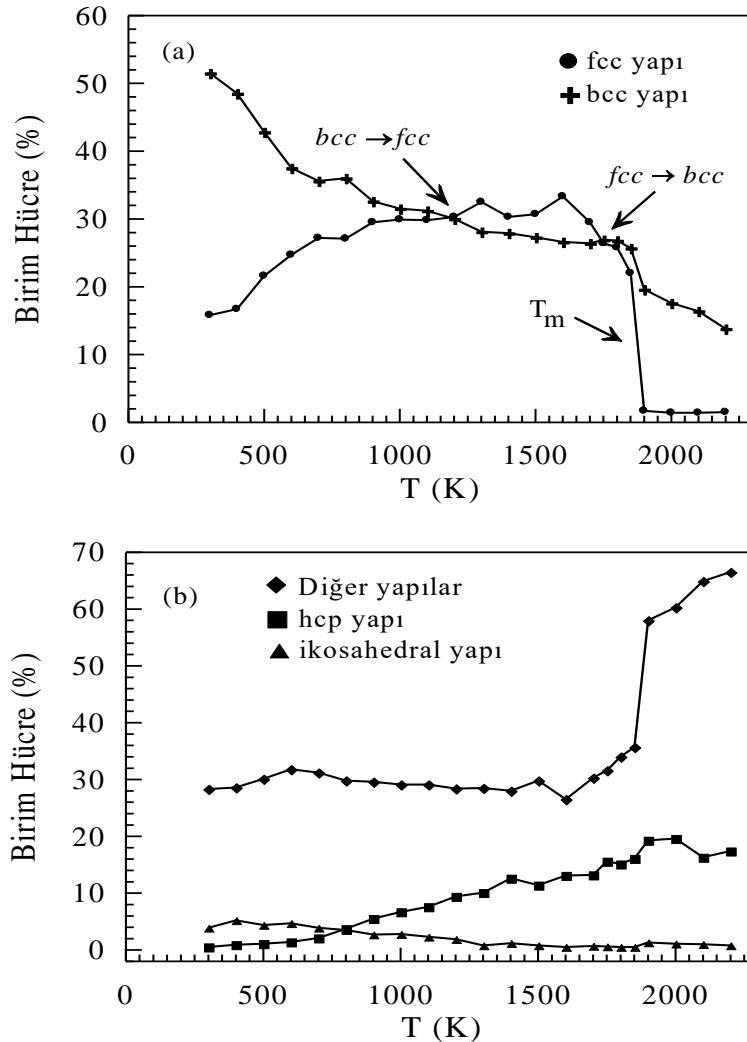
Deneysel olarak Fe elementi 1184 - 1680 K sıcaklık aralığında fcc faza sahip olan  $\gamma$ -Fe olarak bilinmektedir [2]. Yaptığımız çalışmada fcc faza geçiş sıcaklığının deneysel değerlerle uyum içinde olduğu ve belirlenen değer deneysel değerden yaklaşık %1,3 değerinde saptığı görülmüştür. fcc faza sahip  $\gamma$ -Fe kararlı yapısını yaklaşık 1750 K sıcaklık değerine kadar korumaktadır. 1750 K sıcaklık değerine ulaşıldığında enerjide yeniden bir artış belirlenmiştir. Bu sıcaklık değerinde yapı bir kez daha katı-katı faz dönüşümüne uğrayarak fcc birim hücreli  $\gamma$ -Fe den bcc birim hücreli  $\delta$ -Fe'e bir dönüşüm meydana gelmiştir. bcc birim hücreli  $\delta$ -Fe kararlı yapısını 1850 K sıcaklığına kadar korumaktadır. Deneysel olarak  $\delta$ -Fe 1680 - 1809 K sıcaklık aralığında oluşmaktadır [2]. Elde edilen MD sonuçların deneysel dönüşüm sıcaklıklarıyla uyum içerisinde olduğu görülmektedir. Sıcaklık 1850 K'ne ulaştığında enerjide bir süreksizlik meydana gelmektedir. Kohesif enerjide meydana gelen bu süreksizlik yapının katı fazdan sıvı faza geçişinin bir göstergesidir [36]. Model Fe sistemi için erime sıcaklığı  $1875 \pm 25$  K olarak belirlenmiştir. Deneysel olarak Fe elementini erime sıcaklığı 1809 K'dir [6]. Belirlenen erime sıcaklığı yaklaşık %3,6 lık bir sapma miktarı ile deneysel değerlerle uyum içerisindedir.

Şekil 3'de gösterildiği gibi farklı sıcaklıklarda elde edilen RDF eğrileri verilmiştir. 300 K sıcaklığında 2000. MD adımında elde edilen RDF eğrisi Şekil 3(a)'da gösterildiği gibidir. Buradan model sistemin benzetim çalışmasının başlangıcında fcc yapıya sahip olduğu söylenebilir. Model sistemin bu sıcaklık değerinde yarı kararlı bir faza sahip olduğu ve bcc birim hücreli kararlı  $\alpha$ -Fe fazına dönüştüğü 8000. MD adımında elde edilen RDF eğrisinden Şekil 3(b)'de gösterildiği gibi açıkça görülmektedir. RDF eğrisindeki ikinci pik örgü parametresine karşılık gelmektedir ve 2,84 Å olarak belirlenmiştir. Literatürde  $\alpha$ -Fe'in 300 K sıcaklığındaki örgü parametresi 2,856 Å verilmektedir [6]. MD hesaplamalarından elde edilen örgü parametresinin deneysel değerlerle uyum içerisinde olduğu görülmektedir. Şekil 3(c)'de 1600 K sıcaklık değerinde elde edilen RDF eğrisi verilmiştir. 1200 K - 1750 K sıcaklık aralığında Fe model sistemi fcc birim hücreli  $\gamma$ -fazında bulunmaktadır. RDF eğrisi incelendiğinde oklarla gösterilen noktalarda pik oluşumları görülmektedir. Oluşan piklerin baskın bir şekilde görülmemesine rağmen bu piklerin varlığı yapının fcc birim hücreli bir faza sahip olduğunun bir göstergesidir. 1750 K - 1850 K sıcaklık aralığında model sistem bcc birim hücreli  $\delta$ -Fe fazına dönüşmesine rağmen bu dönüşüm RDF eğrilerinde açıkça görülmediği için bu faz ile ilgili RDF eğrisi verilmemiştir. Şekil 3(d)'de gösterildiği gibi 2000 K'de elde edilen RDF eğrisi çizilmiştir. Bu eğriden model sistemin sıvı fazda olduğu görülmektedir.



Şekil 3. (a) 300 K, (b) 300 K, (c) 1600 K ve (d) 2000 K sıcaklık değerlerinde elde edilen RDF eğrileri.

Şekil 4'te gösterildiği gibi Ackland-Jones analiz yönteminden elde edilen ve sıcaklık değişimine bağlı olarak 4000 atomlu Fe sisteminde oluşan farklı birim hücreli yapıların yüzde değerleri verilmiştir. Analiz yönteminden bcc, fcc, hcp, ikosahedral ve bu yapıların haricindeki diğer yapıların yüzdeleri belirlenmiştir. Şekil 4 (a)'da gösterildiği gibi sıcaklık değişimine karşılık yapı içerisindeki bcc ve fcc birim hücrelerin yüzde miktarları verilmiştir. 300 K'den başlayarak sıcaklık artırıldığında bcc yapıların azaldığı buna karşılık fcc birim hücreli yapıların arttığı açıkça görülmektedir. Yapı içerisinde fcc ve bcc yapıların birbirine eşit olduğu 1200 K sıcaklık değerinden sonra fcc miktarının arttığı bcc miktarının azaldığı belirlenmiştir. Bu sıcaklık değerinde model sistemde bcc  $\rightarrow$  fcc katı-katı faz dönüşümünün meydana geldiği söylenebilir. 1750 K sıcaklık değerine kadar fcc birim hücrelerin sayısının fazlalığı yapının daha düşük enerjili bu fazda kararlı kaldığını göstermektedir. Model sistem içerisinde fcc ve bcc fazlarının yüzdelerinin eşit olduğu bir diğer nokta 1750 K sıcaklık değeridir. Bu sıcaklık değerinden sonra sistem erime noktasına ulaşana kadar kısa sürelide olsa bcc birim hücreli yapıların baskın olduğu  $\delta$ -Fe' e dönüşmektedir. 1875 K sıcaklık değerinde model sistemin sıvı faza dönüştüğü fcc ve bcc yüzde miktarlarındaki ani düşüşlerden açıkça görülmektedir. Bu sıcaklık değerinden sonra yapı içerisinde fcc yüzde miktarı oldukça azalmıştır. Buna karşılık bcc yüzde miktarında da bir azalma meydana gelmekle birlikte yine bir miktar bcc birim hücreli yapının bulunduğu görülmektedir. Sıcaklık değerinin artmasıyla birlikte bcc birim hücreli yapılar da giderek azalmaktadır. Sıcaklık değerinin yükseltilmesinin veya uzun süre yüksek sıcaklıkta bekletmenin bu yapıların sayısını daha da düşüreceği söylenebilir.



Şekil 4. Sıcaklık artışıyla Fe model sisteminde bulunan (a) fcc, bcc, (b) hcp, ikosahedral ve diğer birim hücre yapıların yüzdelerinin sıcaklıkla değişimi.

Şekil 4(b)'de gösterildiği gibi hcp, ikosahedral ve diğer yapılara ait yüzde değişimleri verilmiştir. Şekil 4(b)'de gösterilen model sistemde meydana gelen dönüşüm sıcaklıklarında bu yapılarda da küçük de olsa meydana gelen değişimler görülmektedir. Sıcaklığın artırılmasıyla birlikte diğer yapılar adı altındaki tamamen düzensiz dizilimdeki atomlardan oluşan sistemlerin sayısının giderek arttığı açıkça görülmektedir.

#### 4. Sonuçlar

Yapılan bu çalışmada 4000 atomdan meydana gelen Fe model sistemi Gömülmüş Atom Metodu potansiyel fonksiyonu kullanılarak modellendi. Model sisteme uygulanan ısıtma işlemi esnasında farklı sıcaklıklarda meydana gelen katı-katı faz dönüşümleri gözlemlenmeye çalışıldı. Isıtma işlemi boyunca Fe elementinde  $\alpha \rightarrow \gamma \rightarrow \delta$  faz geçişlerinin meydana geldiği gözlemlendi ve benzetim çalışmalarından belirlenen dönüşüm sıcaklıkların deneysel değerlerle uyum içerisinde olduğu tespit edildi. Ayrıca etkileşmelerin belirlenmesi için kullanılan potansiyel enerji fonksiyonunun da Fe model sistemindeki katı-katı faz geçişlerini modellemede oldukça başarılı olduğu ve birçok çalışmada model sistemin yapısal ve termodinamik özelliklerinin incelenmesinde kullanılabileceği söylenebilir.

#### Kaynaklar

- [1] Engin C., Urbassek H.M., Molecular-dynamics investigation of the fcc-bcc phase transformation in Fe. *Computational Materials Science* 2008, 41: 297–304.
- [2] Weissavach W., Malzeme Bilgisi ve Mayenesi, Birsen Yayın evi. 5. Baskı, İstanbul, 2009.
- [3] Karewar S., Sietsma J., Santofimia M.J., Effect of pre-existing defects in the parent fcc phase on atomistic mechanisms during the martensitic transformation in pure Fe: A molecular dynamics study. *Acta Materialia* 2018, Vol.142: 71-81.
- [4] Singh S.B., Mechanisms of bainite transformation in steels. *Phase Transformations in Steels* 2012; Vol 1: 385-416.
- [5] Porter D.A., Easterling K.E., *Phase Transformations in Metals and Alloys*, 2nd ed., Chapman & Hall, London, 1992.
- [6] Pepperhoff W., Acet M., *Constitution and Magnetism of Iron and its Alloys*, Springer, Berlin, 2001.
- [7] Pereloma E., Edmonds D. V., *Phase transformations in steels: Vol. 2 Diffusionless transformations, high strength steels, modelling and advanced analytical techniques*. Oxford: Woodhead, 2012.
- [8] Gandhi K.R.K., Singru R.M., Effect of bcc-fcc phase transition on the compton profiles of iron. *Appl. Phys. A* 1982, 28: 119–122.
- [9] Cuenya B.R., et al., Observation of the fcc-to-bcc Bain transformation in epitaxial Fe ultrathin films on Cu<sub>3</sub>Au(001), *Surface Science*, 2001, vol. 493(1–3): pages 338-360.
- [10] Haasen P., *Physikalische Metallkunde*, 3rd ed., Springer Berlin, 1994.
- [11] Entel P., Meyer R., Kadau K., Herper H.C., Hoffmann E., Martensitic transformations: first-principles calculations combined with molecular-dynamics simulations. *Eur. Phys. J. B* 1998, vol.5: 379-388.
- [12] Porter D.A., Easterling K.E., *Phase transformations in metals and alloys* (2nd ed.), Chapman & Hall, London, 1992.
- [13] Pepperhoff W., Acet M., *Constitution and magnetism of iron and its alloys*, Springer, Berlin, 2001.
- [14] Pereloma E., Edmonds D.V. (Eds.), *Phase transformations in steels, Diffusionless transformations, high strength steels, modelling and advanced analytical techniques*, vol. 2, Woodhead Publishing Limited, Cambridge, 2012.
- [15] Lee B., Shim J., Baskes M.I., Semiempirical atomic potentials for the fcc metals Cu, Ag, Au, Ni, Pd, Pt, Al, and Pb based on first and second nearest-neighbor modified embedded atom method. *Phys. Rev. B*, 2003, 68B: 144112.
- [16] Tateyama S., Shibuta Y., Kumagai T., Suzuki T., A Molecular Dynamics Study of Bidirectional Phase Transformation between bcc and fcc Iron. *ISIJ Int.* 2011, vol.51(10): 1710-1716.
- [17] Lee T., et al, Atomistic modeling of thermodynamic equilibrium and polymorphism of iron. *J. Phys.: Condens. Matter* 2012, vol.24: 225404.
- [18] Finnis M.W., Sinclair J.E., A simple empirical N-body potential for transition metals. *Philosophical Magazine A* 1984, vol.50(1): 45-55.
- [19] Johnson R., Oh D., Analytic embedded atom method model for bcc metals. *Journal of Materials Research* 1989, vol.4(5), 1195-1201.
- [20] Etesami S.A., Asadi E., Molecular dynamics for near melting temperatures simulations of metals using modified embedded-atom method. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, 2018, vol.112: 61–72.
- [21] Chamati H., et al., Embedded-atom potential for Fe and its application to self-diffusion on Fe(100). *Surface Science* 2006, vol.600: 1793–1803.
- [22] Mendeleev M. I., et al., Development of new interatomic potentials appropriate for crystalline and liquid iron. *Philosophical Magazine* 2003, vol. 83, No. 35: 3977–3994.
- [23] Cagin T., Dereli G., Uludogan M., Tomak, M., Thermal and mechanical properties of some fcc transition metals. *Phys. Rev. B* 1999, vol.59(4): 3468-3472.
- [24] Zhang X.J., Chen C.L., Phonon dispersion in the Fcc metals Ca, Sr and Yb. *J. Low Temp. Phys.* 2012, vol.169: 40-50.
- [25] Tolpin K.A., Bachurin V.I., Yurasova, V.E., Features of energy dependence of NiPd sputtering for various ion irradiation angles. *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B* 2012, vol.273: 76-79.

- [26] Louail L., Maouche D., Roumili A., Hachemi, A., Pressure effect on elastic constants of some transition metals. *Mat. Chem. Phys.* 2005, vol.91: 17-20.
- [27] Daw, M.S., Hatcher, R.D., Application of the embedded atom method to phonons in transition metals. *Solid State Comm.* 1985, vol.56: 697-699.
- [28] Voter A.F., Chen S.P.. Accurate Interatomic Potentials for Ni, Al, and Ni<sub>3</sub>Al. *Mat. Res. Soc. Symp. Proc.* 1987, vol.82: 175.
- [29] Finnis M.W., and Sinclair, J.E. 1984. A simple empirical N-body potential for transition metals. *Philosophical Magazine*, 1984; 50: 45-55.
- [30] Sutton, A.P., Chen, J.. Long-range Finnis-Sinclair potentials. *J. Philosophical Magazine Letter*, 1990; 61: 139-146.
- [31] Parrinello, M., and Rahman, A.. Crystal Structure and Pair Potentials: A Molecular-Dynamics Study. *Phys. Rev. Lett.*, 1980; 45: 1196-1201.
- [32] Parrinello M., and Rahman, A.. Polymorphic transitions in single crystals: A new molecular dynamics method. *J. Appl. Phys.*, 1981; 52: 7182-7190.
- [33] <http://lammmps.sandia.gov/>. LAMMPS Molecular Dynamics Simulator (Access Date:10.09.2020)
- [34] Rigby, M., Smith, E. B., Wakeham, W. A., Maitland, G. C., *The Forces Between Molecules*, 144, Oxford University Press, Clarendon Press, 1986.
- [35] Ackland G. J., and Jones A. P., Applications of local crystal structure measures in experiment and simulation. *Physical Review B*, 2006, vol.73: 054104.
- [36] Karimi M., Stapay G., Kaplan T., Mostoller M., Temperature dependence of the elastic constants of Ni: reliability of EAM in predicting thermal properties. *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.* 1997, vol.5: 337.