

7.5.1

Cu_n "cluster"larının moleküler-dinamik
bilgisayar simülasyonu ile yapıları, enerjileri ve
erimesinin incelenmesi

Cem Özdoğan* ve Şakir Erkoç

Fizik Bölümü, Orta Doğu Teknik Üniversitesi, 06531 Ankara

Cu_n ($n = 13 - 135$) küre şeklinde yapılmış "cluster"ların yapıları ve enerjileri $T = 1 K$ ve $T = 300 K$ sıcaklıklarında Moleküler-Dinamik bilgisayar simülasyonu metodu ile incelendi. Simülasyonda Erkoç tarafından teklif edilen ikili atomik etkileşmelerden oluşan ampirik bir potansiyel enerji fonksiyonu kullanıldı. "Cluster"ların atom sayısının (küresel kabuk sayısının) artmasıyla ortalama atom başına düşen etkileşme enerjisinin asimtotik olarak düştüğü görülmüştür.

$n = 13$ ve $n = 55$ "cluster"larının erimesi incelenmiştir. "Cluster" büyüklüğünün artmasıyla erime sıcaklığının düştüğü ve çok kabuklu yapılarda erimenin en dıştaki kabuktan başladığı görülmüştür. Cu_{13} 'ün yaklaşık $1350 K$ 'de, Cu_{55} 'ün ise yaklaşık $1200 K$ 'de, erimeye başladığı görülmüştür.

*Devamlı adresi: Fizik Bölümü, Kırıkkale Üniversitesi, Kırıkkale