



ISSN:1306-3111  
e-Journal of New World Sciences Academy  
2007, Volume: 2, Number: 2  
Article Number: A0024

**NATURAL AND APPLIED SCIENCES**  
**TURKISH (Abstract: ENGLISH)**

Received: December 2006  
Accepted: April 2007  
© 2007 www.newwsa.com

**Fatih Ahmet Çelik**  
**Sefa Kazanç**  
University of Firat  
facelik@firat.edu.tr  
Elazig-Türkiye

**AMORF FAZDA BAKIRDAKİ ICOSAHEDRAL DÜZENİN**  
**MOLEKÜLER DİNAMİK ÇALIŞMASI**

**ÖZET**

Moleküler dinamik (MD) simülasyon yöntemlerindeki hızlı gelişmeler atomik küme özelliklerinin anlaşılmasında ve bu kümelerin yapısal farklılıklarını ayırt etmede büyük katkılar sağlamıştır. Bu çalışmada, amorf bakır (Cu) model sisteminin 0 ve 7 GPa basınç altında yapısal özellikleri Parrinello-Rahman tarafından önerilen MD yöntemi kullanılarak incelendi. Atomlar arasındaki kuvvet etkileşimleri Gömülmüş Atom Metodunun (Embedded Atom Method-EAM) Sutton-Chen yapısı kullanılarak hesaplandı.  $4 \times 10^{13}$  K/s soğutma hızı için model sistemin farklı sıcaklık anlarındaki yapısal özellikleri radyal dağılım fonksiyonu (RDF) kullanılarak analiz edildi. 0 ve 7 GPa basınç altında bakırın yapısal özellikleri bağ yönelim düzeni (BYD) parametreleri kullanılarak incelendi ve daha düşük sıcaklık değerlerinde amorf bakırdaki icosahedral (ICOS) düzenin basıncın artmasıyla azaldığı tespit edildi.

**Anahtar Kelimeler:** Yerel Düzen, Bağ Yönelim Düzeni, Amorf Bakır, Moleküler Dinamik Simülasyon.

**MOLECULAR DYNAMICS STUDY OF ICOSAHEDRAL ORDER IN COPPER**  
**AT AMORPHOUS PHASE**

**ABSTRACT**

The molecular dynamic (MD) simulation methods have provided very important contributions in understanding cluster properties and distinguish the structural difference of atomic clusters. In this study, the structural properties of amorphous Cu model system under 0 and 7 GPa pressure have been investigated by means of MD method proposed by Parrinello-Rahman. The force interactions between atoms were calculated by using Sutton-Chen type of Embedded Atom Method. The structural properties of model system at different temperature times for cooling rate of  $4 \times 10^{13}$  K/s are analysed with radial distribution function (RDF). The structural properties of copper is examined by using the bond orientational order parameters at 0 and 7 GPa pressures and it is determined that the glassy copper at lower temperature values has weakened icosahedral (ICOS) order with increasing the pressure.

**Keywords:** Local Order, Bond Orientational Order, Amorphous Copper, Molecular Dynamics Simulation



## 1. GİRİŞ (INTRODUCTION)

20. yüzyılın başlarında kendini gösteren ve günümüze kadar gelen sanayi ve teknolojideki çok hızlı ilerlemeler, kristal yapıların bilinmesinin yanı sıra amorf yapılar üzerindeki çalışmaları da hızlandırmıştır. Amorf yapılar üzerindeki gelişmeler dikkate alındığında, bu yapılar hakkında teorik ve deneysel olarak yapılan çalışmaların henüz istenilen seviyede olduğu söylenemez. Çünkü bu sistemlerin sahip oldukları düzensizlikler veya karmaşıklıklar geliştirilebilecek matematiksel bağıntılara dayalı, güçlü ve kesin teorik metotların üretilmesine büyük bir engel teşkil etmektedir [1 ve 2]. Ancak, günümüzde artık güçlü bilgisayarların geliştirilmesi ile beraber yarı-deneysel tekniklerin veya metotların (benzetimlere dayanan) kullanılması sonucu bu zorlukların kısmen giderilmesinde büyük bir mesafe alınmıştır.

Kümler, farklı şartlar altında bir arada tutulan atom ya da molekül topluluğu olmakla beraber, bulk maddeler ve küçük moleküller arasında bir köprü görevi yapan atom grupları şeklinde tanımlanabilir [3 ve 4]. Kümlerin büyüklük olarak sınıflandırılmasında; küçük, orta ve büyük boy küme şeklinde kullanışlı bir ayırım yapılabilir. Bunun yanı sıra kümler sıcaklık, basınç, hacim gibi dış koşullar altında farklı davranışlar gösterebilirler [4].

Son yıllarda bilgisayar teknolojisindeki hızlı gelişmelerin sonucu olarak hem teorik yaklaşımları hem de deneysel metotları içine alan ve düzenli yapılarla düzensiz yapıları incelemede pek çok kolaylıklar sağlayan bilgisayar benzetim metotları geliştirilmiştir. Moleküler Dinamik (MD) Simülasyonları, en çok kullanılan metotlardan biri olup maddelerin hem mekanik hem de termodinamik (sıcaklık, basınç gibi) özelliklerinin incelenmesinde zamanın bir fonksiyonu olarak güvenle kullanılabilir [5 ve 6].

Bu çalışmada, 1024 atomlu bakır için atomlar arasındaki etkileşimler Sutton-Chen [7] EAM ile modellenmiş ve hesaplamalarda Parinello-Rahman [8] MD yöntemi kullanılmıştır.  $4 \times 10^{13}$  K/s soğutma hızı uygulanarak farklı sıcaklıklardaki sistemin yapısal özellikleri RDF ile incelenmiştir. Bağ yönelim düzeni parametreleri kullanılarak sıvı ve amorf fazda oluşan ideal icosahedral (ICOS) kümelere bağlı olarak ICOS düzenin uygulanan basınçla nasıl değiştiği incelenmiştir.

## 2. ARAŞTIRMANIN ÖNEMİ (RESEARCH SIGNIFICANCE)

Temel olarak, bulk (hacimli) katılardan ve moleküllerden farklı olan özelliklerinden dolayı atomik kümlerin yeni bir madde türü oluşumunda önemli bir yere sahip olduğu söylenebilir. Özellikle son yıllarda kümler üzerine yapılan çalışmalarda artış gözlenmiş ve bugün yalnızca kimya bilimi değil aynı zamanda pek çok bilim alanında kümler ile ilgili çalışmalar yapılmaya başlanmıştır. Elektronik, kataliz, kristal büyütme teknikleri, karbon kimyası mühendisliği ve bunun gibi birçok alanda yapılan çalışmalar buna örnek olarak verilebilir. Bununla beraber, ilerleyen teknolojiye paralel olarak, hesaplama tekniğindeki hızlı gelişmeler küme dinamiğinin bilgisayar benzetim çalışmalarıyla incelenmeye başlanmasına olanak kılmış ve faz geçişlerinin incelenmesi, maddelerin atomik yapılarını belirlemede ve buna benzer pek çok çalışma ile birlikte maddeler hakkında yeni bilgilerin edinilmesinde atomik kümlerin önemli rol oynadığı görülmüştür. Bütün bunların sonucunda, özellikle amorf yapının temel atomik küme gruplarından ICOS kümlerinin fiziksel özelliklerinin bilinmesi bu açıdan önemli bir yere sahiptir.



### 3. TEMEL BAĞINTILAR (BASIC RELATIONS)

#### 3.1. Potansiyel Fonksiyonu (Potential Function)

SCEAM metodunda her bir atom diğer atomların oluşturduğu elektron gazına gömülmüş olarak düşünülür. Buna göre, toplam kristal enerjisi,

$$E_T = \varepsilon \sum_{i=1}^N \left[ \frac{1}{2} \sum_{j \neq i}^N \left( \frac{a}{r_{ij}} \right)^n - c \sqrt{\bar{\rho}_i} \right] \quad (1)$$

$$\bar{\rho}_i = \sum_{j \neq i}^N \left( \frac{a}{r_{ij}} \right)^m \quad (2)$$

olarak hesaplanır [7]. Burada  $r_{ij}$  atomlar arasındaki mesafe,  $c$  ise pozitif boyutsuz bir parametredir.  $\varepsilon$  enerji boyutunda bir parametre,  $a$  ise örgü sabitidir. Bu potansiyel parametreleri örgü sabiti, kohesif enerji ( $E_c$ ) ve bulk modülü ( $B_m$ ) gibi maddenin deneysel özelliklerinden belirlenir. Burada kullanılan potansiyel parametreleri yapılan diğer çalışmalardan referans alınarak kullanılmıştır [9].

Statik ve dinamik çalışmalarda sistemin yapısal özelliklerini incelemek için, atomik konumların izlenmesinin yanı sıra, deneysel veriler ile karşılaştırılabilir olması nedeniyle RDF da kullanılabilir. Mono atomik bir sistem için RDF,

$$g(r) = \frac{\Omega}{N^2} \left\langle \frac{\sum_i n_i(r)}{4\pi r^2 \Delta r} \right\rangle \quad (3)$$

şeklinindedir. Burada,  $r$  radyal uzaklık,  $n_i(r)$   $i$  atomundan  $r$  kadar uzaklıktaki  $\Delta r$  kalınlığında bir küresel hacim içindeki koordinasyon sayısıdır.

#### 3.2. Bağ Yönelim Düzeni Parametreleri (Bond Orientational Order Parameters)

Bağ yönelim düzeni, merkezi bir parçacık ve onun en yakın komşuları arasındaki ilişkilere bağlıdır. Her bir merkezi atomun en yakın komşuları RDF nun birinci ve ikinci maksimum piki arasında kalan bir bölgeye karşılık gelen kesim (cut-off) uzaklığı ile belirlenir. Merkez atomdan her biri bir  $\mathbf{r}_{ij}$  uzaklıkta bulunan bu komşu atomlar merkez atomla bir bağ yapmış olarak kabul edilir ve her bir bağ küresel harmonikler ile temsil edilir. Bundan dolayı, BYD parametreleri atomik kümelerin farklı yönelim simetrilerine duyarlı olup sıvı, kristal ve camlarda meydana gelen bu kümelenmelerin türlerini belirlemede kullanılan en önemli yöntemlerden biridir [10]. Merkez atomdan her biri bir  $\mathbf{r}_{ij}$  uzaklıkta bulunan komşu atom bir bağ olarak tanımlanır ve bu bağ,

$$Q_{lm}(\mathbf{r}) = Y_{lm}(\theta_{ij}(\hat{\mathbf{r}}), \phi_{ij}(\hat{\mathbf{r}})) \quad (4)$$

şeklinde bir ifade ile temsil edilir. Burada  $Y_{lm}$  küresel harmonikler ve  $\hat{\mathbf{r}}$  ise her bir bağa paralel olan birim vektördür.  $\theta_{ij}$  ve  $\phi_{ij}$  ise sırasıyla polar ve azimuthal açılarıdır. Merkezi atomun yerel çevresi yerel bağ yönelim düzeni parametresiyle

$$\bar{Q}_{lm} = \frac{1}{N_{kom}} \sum_{j=1}^{N_{kom}} Q_{lm}(\mathbf{r}) \quad (5)$$

şeklinde verilir. Burada  $N_{kom}$  cut-off uzaklığı içinde kalan yakın komşu atom sayısıdır. Quadratic ya da ikinci mertebeden değişmezlik [10] (second order invariant),

$$Q_l = \left[ \frac{4\pi}{2l+1} \sum_{m=-l}^l |\bar{Q}_{lm}|^2 \right]^{1/2} \quad (6)$$

ve üçüncü mertebeden dönme değişmezliği (third order invariant)

$$W_l = \sum_{\substack{m_1, m_2, m_3 \\ m_1+m_2+m_3=0}} \begin{bmatrix} l & l & l \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{bmatrix} \times \bar{Q}_{lm_1} \bar{Q}_{lm_2} \bar{Q}_{lm_3} \quad (7)$$

dir. Burada,

$$\begin{bmatrix} l & l & l \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{bmatrix} \text{ Wigner } 3j \text{ katsayılarıdır [10],}$$

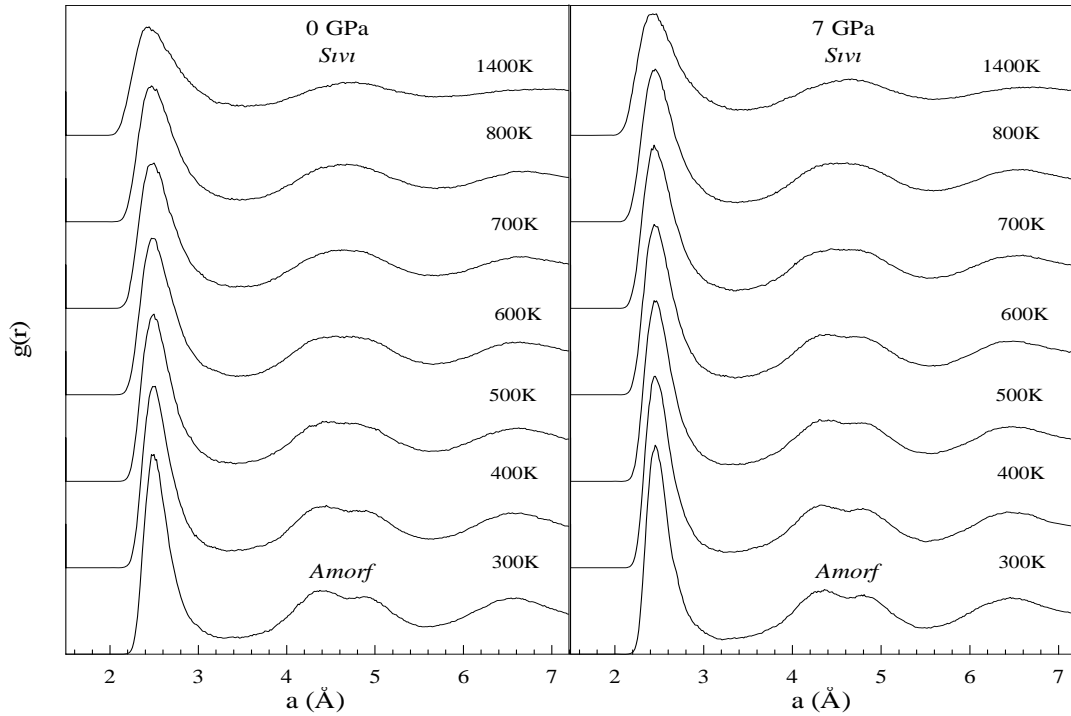
İndirgenmiş değişmezlik ise,

$$\hat{W}_l = \frac{W_l}{\left[ \sum_{l=-m}^m |\bar{Q}_{lm}|^2 \right]^{3/2}} \quad (8)$$

şeklinde yazılabilir.

#### 4. BULGULAR VE TARTIŞMA (RESULTS AND DISCUSSIONS)

Maddelerin yapısal özelliklerinin belirlenmesinde büyük bir öneme sahip olan RDF atomların uzayda dizilişleri ve atomlar arasındaki uzaklık ilişkilerine bağlıdır. RDF kullanılarak, iki ve daha fazla cins atom bulunduran sistemlerde, aynı cins atomlar arasındaki veya farklı cins atomlar arasındaki atom-atom korelasyonunun incelenmesi mümkündür.

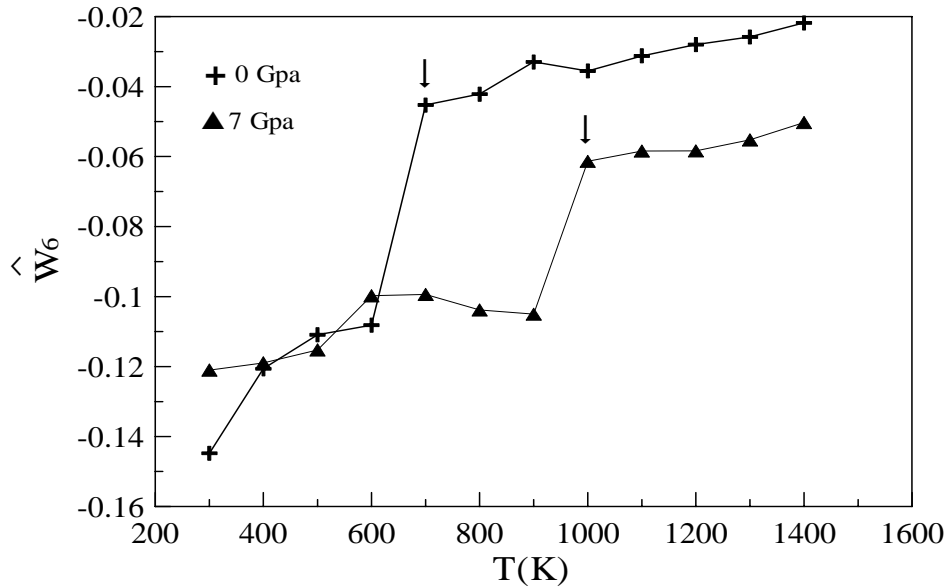


Şekil 1. Model bakır sisteminin 0 ve 7 GPa basınç altında farklı sıcaklık değerlerindeki RDF eğrileri

(Figure 1. The RDF curves of model copper system at different temperature values under 0 and 7 GPa pressures)

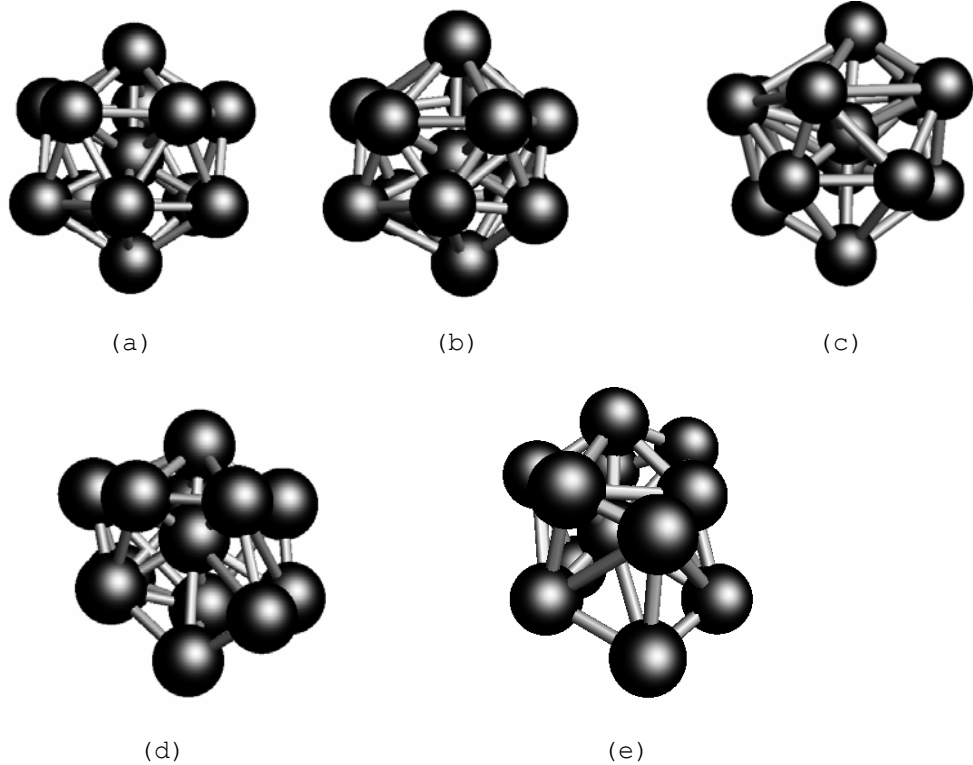
Model sistemin  $4 \times 10^{13}$  K/s soğutma hızı ve 0 ile 7 GPa basınç değerleri için elde edilen RDF eğrileri Şekil 1'den görülmektedir. RDF eğrileri incelendiğinde sıcaklığın azalması ile birlikte eğrilerin ikinci pikindeki yarılma artmakta ve sistem sıvı yapıdan amorf yapıya doğru bir faz dönüşümüne uğramaktadır. Aynı zamanda RDF eğrilerinin ilk pik yüksekliklerinin sıcaklığın azalması ile birlikte arttığı görülmektedir. Bu durum bakırın katılaşma süreci ile birlikte merkez atomun çevresindeki yakın komşu atom sayısının arttığını gösterir. 7 GPa basınç değerinde 0 GPa basınçla karşılaştırıldığında RDF eğrisinin ilk pikinin daha fazla olması basınç artışının yakın komşu sayısı üzerinde etkili olduğu sonucunu verir. Bununla birlikte, 0 GPa basınç altında ikinci pikteki yarılma 400K sıcaklık değerinde belirgin olmaya başlarken 7 GPa basınç altında ise 600K sıcaklık değerinde belirgin olmaktadır. Basınç artışı ile birlikte model sistemin amorf yapıda kalma eğilimi artmaktadır.

Yerel (local) BYD parametreleri sıvı ve amorf fazda meydana gelen atomik kümelerin yapısal özelliklerini belirlemede kullanıldığından, sistem içinde hangi tür atomik kümelenmelerin oluştuğunu belirlemek için bu parametrelerden yararlanılabilir. Bundan dolayı, bu parametreler ile sıvı ve amorf fazdaki diğer atomik kümeleri belirlemenin yanı sıra ICOS düzenini de tayin etmek mümkündür [11 ve 12]. ICOS kümeler genellikle süper-soğutulmuş sıvılarda ya da amorf fazda gözlenir [12 ve 13]. En ideal 13 atomlu (1 merkez atom ve 12 yakın komşu atom) bir ICOS kümesi için  $\hat{W}_6$  parametresinin değeri -0.169754'dür ve bu ICOS kümesi ideal yapısından bozulmaya (deforme olmaya) başladıkça bu değer mutlak olarak daha küçük değerlere doğru gitmektedir [12, 13 ve 14]. Şekil 2, BYD parametresinin ( $\hat{W}_6$ ) sıcaklığa karşı değişimini göstermektedir. Burada  $\hat{W}_6$ 'nın değerleri sistem içindeki tüm ICOS kümelerin sayısı üzerinden ortalama alınarak hesaplanmıştır. Sistem içindeki ideal ICOS kümelerini belirlemek amacıyla  $\hat{W}_6$ 'nın değerleri  $-0.17 < \hat{W}_6 < -0.1$  şeklinde bir değer aralığı belirlenmiştir.



Şekil 2. Baş yönlem düzeni parametresi  $\hat{W}_6$ 'nın sıcaklık ile değişimi  
(Figure 2. The variation of bond orientational order parameter  $\hat{W}_6$  with temperature)

Buna göre, yüksek sıcaklıklarda sistemin sıvı fazda olduğu RDF eğrilerinden bilinmektedir. 0 GPa basınçta 600K'e kadar  $\hat{W}_6$  değerleri -0.1 değerinden mutlak olarak küçüktür ve bu belirli bir sıcaklığa kadar  $\hat{W}_6$  değerlerinin  $-0.17 < \hat{W}_6 < -0.1$  sayı aralığı içinde olmadığını gösterir. Bu sonuç 600K'den önce sistem içinde çok fazla ideal ICOS kümelerinin bulunmadığını, bu kümelerin yerine daha çok bozulmuş ICOS kümelerinin mevcut olduğunu ifade etmektedir. 600K'den sonra sıcaklığın düşmesi ile birlikte  $\hat{W}_6$  değerleri azalmaktadır (mutlak olarak artmaktadır) ve oda sıcaklığında  $\hat{W}_6$  değeri ideal ICOS değeri olan -0.169754 değerine yaklaşmaktadır. Sıcaklığın azalmasıyla birlikte sistem amorf yapıya doğru gitmektedir ve buna bağlı olarak ICOS düzeni güçlenmektedir. Bu durum Şekil 1'deki RDF eğrileri ile tutarlıdır. 0 GPa basınç altında 600K de ideal ICOS düzeni oluşmaya başlarken, 7 GPa basınçta 900K den sonra ideal ICOS düzeni oluşmaya başlamaktadır. Basıncın artmasıyla birlikte yüksek sıcaklıklarda daha ideal ICOS kümeleri görülmektedir. Bu durum basınç artışının yüksek sıcaklıklarda ICOS düzeni üzerinde etkili olduğunu gösterir. Düşük sıcaklıklarda ise, özellikle oda sıcaklığında 0 GPa basınçta  $\hat{W}_6$  değeri 7 GPa basınçtaki  $\hat{W}_6$  değerinden daha büyüktür. Bir başka ifadeyle, düşük sıcaklıklarda basıncın artmasıyla birlikte bazı ICOS kümeleri yapısal olarak bozulmaya başlamaktadır ve bu ICOS kümelerinin amorf fazı oluşturan diğer atomik kümelere dönüştüğü düşünülmektedir. Elde edilen sonuçların gerek Cu gerekse farklı metaller için yapılan literatürdeki diğer çalışmalarla uyumlu olduğu tespit edilmiştir [15, 16 ve 17].



Şekil 3. Farklı sıcaklıklardaki bir ICOS kümesinin üç boyutta şematik gösterimi. a) ideal b) 300K c) 400K d) 600K e) 800K

(Figure 3. Three dimensional schematic projection of a ICOS cluster at different temperatures. a) ideal b) 300K c) 400K d) 600K e) 800K)



Şekil 3'de, 0 GPa basınç altında farklı sıcaklıklarda atomik koordinatları kaydedilmiş bir ICOS kümesinin üç boyutlu bir şekli görülmektedir. Şekil 3(a) hiçbir şekilde deforme olmamış (en ideal) 13 atomlu ICOS kümesine aittir. Bundan sonra sırasıyla Şekil 3 (b-e)'de bu ICOS kümesinin 300K, 400K, 600K ve 800K sıcaklık değerlerinde şematik gösterimi verilmiştir. Şekil 3 incelendiğinde 300K de  $\hat{W}_6$ 'nın en yakın komşu sayısı üzerinden alınan ortalama değeri -0.14479 dur. Bu değer en ideal olan -0.169754 değerine en yakın değerdir ve 300K de çok daha fazla ideal ICOS kümelerinin oluşumu ile tutarlıdır. Sıcaklığın artması ile birlikte  $\hat{W}_6$ 'nın değeri -0.169754 değerinden uzaklaşmakla beraber ICOS kümeleri yapı olarak ideallikten sapmakta ve sistemde daha çok bozulmuş ICOS kümeleri hakim olmaya başlamaktadır. 800K de deforme olmuş bir ICOS kümesi görülmektedir ve bu kümenin  $\hat{W}_6$  değerinin -0.04582 olması bu sonucu doğrulamaktadır. Sistemin sıvı faz bölgesinde atomik koordinatları belirlenen bu ICOS kümesinin üç boyutlu görüntüsünün yanı sıra bu kümenin  $\hat{W}_6$  değerinin de -0.169754 değerinden mutlak olarak küçük olması sıvı fazda daha fazla yapısal olarak bozulmuş ICOS kümelerinin var olduğunu kanıtlamaktadır. Bu sonucun Şekil 2'deki sonuçlarla karşılaştırıldığında uyumlu olduğu söylenebilir.

##### 5. SONUÇ (CONCLUSION)

Moleküler dinamik simülasyonu yöntemi kullanılarak elde edilen sonuçlardan model Cu sistemindeki ICOS kümelerinin yapısal özellikleri, bağ yönelim düzeni parametreleri kullanılarak incelendi. Model sistemin yapısal analizi radyal dağılım fonksiyonları kullanılarak yapıldı. İki farklı basınç değeri için  $4 \times 10^{13}$ K/s soğutma hızının farklı sıcaklık anlarındaki yapısal özellikleri belirlendi. Sistemin amorf ile sıvı fazdaki ICOS düzeni, bağ yönelim düzeni parametreleri kullanılarak tespit edildi. Sıcaklığın azalmasıyla birlikte amorf yapıda ICOS kümelerinin sayısının artmasına bağlı olarak ICOS düzeninin arttığı görüldü. Ayrıca basıncın artmasıyla birlikte düşük sıcaklıklarda ICOS düzeninin azaldığı tespit edildi. Bu sonuçlar doğrultusunda, ilerideki çalışmalarda modellenen alaşım sistemleri için de atomik kümelerin yapısal özelliklerini belirlemede bağ yönelim düzeninin tamamlayıcı bir yöntem olduğu söylenebilir.

##### KAYNAKLAR (REFERENCES)

1. Yildiz, A., (1995). A new technique to calculate the electronic structure of disordered and quasicrystals in two dimensions. Doktora Tezi. England: University of Leicester.
2. Liu, R.S., Dong, K.J., Li, J.Y., Yu, A.B., and Zou, R.P., (2002). Molecular dynamics simulation of microstructure transitions in a large-scale liquid metal al system during rapid cooling processes. Chin. Phys. Lett: Cilt:19, Sayı:8, ss:1144-1147.
3. Eryürek, M., (1996). Moleküler dinamik simülasyonları ile  $ni_n$  ( $n=4,5,6$ ) Kümelerinin Katı-sıvı Faz Geçişleri. Yüksek Lisans Tezi. Zonguldak Karaelmas Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü.
4. Haberland, H., (1994). Clusters of Atoms and Molecules I. Berlin: Springer Verlag.
5. Haile, J.M., (1992). Molecular dynamics simulation. Canada: Elementary Methods. John Wiley & Sons, Inc..
6. Özgen, S., (1997). Sayısal hesaplama yöntemlerinin şekil hatırlamalı alaşımlarda difüzyonsuz dönüşümlere uygulanması. Doktora Tezi.Elazığ: Fırat Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü.



7. Sutton, A.P., and Chen, J., (1990). Long-range finnis-sinclair potentials. *Philos. Mag. Letters: Cilt:61*, ss:139-146.
8. Parrinello, M., and Rahman, A., (1980). Polymorphic transitions in single crystals: a new molecular dynamics method. *J. Appl. Phys: Cilt:52*, ss:1196-1199.
9. Çagin, T., Dereci, G., Uludogan, M. and Tomak, M., (1999). Thermal and mechanical properties of some fcc transition metals. *Phys. Rev. B:59* ss:3468-3473.
10. Nelson, D.R., (1983). Order, frustration, and defect in liquids and glasses. *Phys. Rev. B: Cilt:28*, ss:5515-5535.
11. Nelson, D.R., and Toner, J., (1981). Bond-orientational order, dislocation loops, and melting of solids and smectic-a liquid crystals. *Phys. Rev. B: Cilt:24*, ss:363.
12. Hui, L., and Pederiva, F., (2004). Structural study of local order in quenched lead under high pressures. *Chemical Physics: Cilt:304*, SS:261-271.
13. Dong, K.J., Liu, R.S., Yu, A.B., Zou, R.P., and Li, J.Y., (2003). Simulation study of the evolution mechanism of clusters in a large-scale liquid al system during rapid cooling processes. *J. Phys.: Condens. Matter: Cilt:15*, ss:743-753.
14. Celik, F.A., Ozgen, S., and Yildiz, A.K., (2006). A molecular dynamics study on intermediate structures during transition from amorphous to crystalline state. *Molecular Simulation: Cilt:32*, ss:443-449.
15. Liu, J., Zhao, J.Z., and Hu, Z.Q., (2005). Pressure effect on the formation and thermal stability of glassy cu. *Computational Materials Science: Cilt:37*, ss:234-238.
16. Zhang, Y., Wang, L., Wang, W., X, Liu., Tian, X., Zhang, P., (2004). Pressure effect on the structural transition of liquid au. *Physics Letters A: Cilt:320*, ss:452-458.
17. Wang, Y., Teitel, S., and Dellago, C., (2004). Melting and equilibrium shape of icosahedral gold nanoparticles. *Chemical Physics Letters: Cilt:394*, ss:257-261.