

THE CHANGES OF BARRIER ENERGY IN FCC→BCC PHASE TRANSFORMATION BY SHEAR STRESSES

Sefa KAZANÇ*, Soner ÖZGEN

Fırat Üniversitesi, Fen Edebiyat Fakültesi, Fizik Bölümü, 23169, Elazığ, TÜRKİYE
e-mail: skazanc@firat.edu.tr

ABSTRACT

The Lattice energy of a cubic nickel crystal has been calculated by using the embedded atom method. The embedding energy has been determined by means of quantum mechanical approximations. The lattice energy changes of the static structure including 864 atoms with Bain and shear stresses have been obtained. The energies of the fcc and bcc phases caused by Bain stress have been compared. The variation of the barrier energy required for the transition between these structures has been investigated as a function of shear stress intensity. As a conclusion, we have determined that the barrier energy of fcc→bcc transition rises in shear stress fields.

Key Words: Phase Transition, Barrier Energy, Embedded Atom Method, Stress Fields.

FCC→BCC FAZ DÖNÜŞÜMÜNDE BARIYER ENERJİSİNİN KESME ZORU İLE DEĞİŞİMİ

ÖZET

Kübik bir nikel kristalinin örgü enerjisi, gömülmüş atom metodu kullanılarak hesaplandı. Gömme enerjisi kuantum mekanik yöntemler yardımıyla belirlendi. 864 atomlu statik kübik yapının örgü enerjisinin Bain ve kesme zorlarıyla değişimi elde edildi. Bain zoru uygulanarak elde edilen fcc ve bcc yapılı fazların enerjileri karşılaştırıldı. Bu yapılar arasında geçiş için gerekli bariyer enerjisinin kesme zoru şiddeti ile değişimi incelendi. Sonuçta, fcc→bcc bariyer enerjisinin kesme zoru alanlarında azalacağı tespit edildi.

Anahtar Kelimeler: Faz Dönüşümü, Bariyer Enerjisi, Gömülmüş Atom Metodu, Zor Alanları.

1. GİRİŞ

Kristal yapılı metal ve alaşımlar sıcaklık, zor veya bunların çeşitli kombinasyonları altında mikro yapı değiştirme eğilimindedir. Katı-katı faz dönüşümü olarak bilinen bu yapısal değişim, termodinamik açıdan sistemin bulunduğu yapıya göre daha düşük enerjili başka bir yapıya geçmesi şeklinde yorumlanır. Katı-katı faz dönüşümleri, malzemenin mikro yapısını ve dolayısıyla makroscopic özelliklerini etkilediği için, metalürjide ve bilimde önemli bir araştırma konusudur (1, 2).

Bain tarafından 1924 yılında ortaya atılmış örgü uygunluğu (Bain zorlanması), yüzey merkezli kübik (fcc) örgüden cisim merkezli kübik (bcc) örgü üretmenin basit bir kurgusudur. fcc→bcc dönüşümleri için bu kurgu, fcc örgüsünün (001) eksenini boyunca ~%20 kısaltmayı, (110) ve (1 $\bar{1}$ 0) eksenleri boyunca ~%12 genişlemeyi öngörür. Bain zorlanması fcc→bcc dönüşümleri için genel bir model olarak kabul edilir (3). Bu model, kristal örgü enerjilerinin hesaplanmasında yapılan yaklaşımların

1. INTRODUCTION

Metals and alloys tend to change their microstructure with temperature, stress or their various combinations. This structural variation, which is known as solid-solid phase transformation, is explained by the way that the microstructure of a system transforms from one structure to another which has lower free energy. This kind of transformation is an important research topic in metallurgy and solid state physics because of its effects on macroscopic properties of the system (1,2).

Bain lattice convenience, or Bain strain, suggested by E.C. Bain in 1924 is a simple scheme to produce body-centred cubic (bcc) lattice from the face-centred cubic (fcc) one. According to the scheme, an fcc→bcc transformation is achieved by contracting the fcc lattice 20% in (001) direction and expanding 12% along (110) and (1 $\bar{1}$ 0) directions. This lattice convenience has been accepted as a general model for fcc→bcc transformations (3). This model can also be used in the examinations of

geçerliliğini incelemek için de kullanılmaktadır.

Bir kristalin toplam örgü enerjisi, atomlar arasındaki fiziksel etkileşmelerin matematiksel modelleri yardımıyla hesaplanabilir. Bu amaçla, iki cisim etkileşmelerini ve çok cisim etkileşmelerini temsil eden çeşitli potansiyel enerji fonksiyonları (PEF) kullanılmaktadır (4). İlk defa Daw ve Baskes (5) tarafından ileri sürülen gömülmüş atom metodu (Embedded Atom Method –EAM), çok cisim etkileşmelerini temsil eden ve metaller için oldukça iyi sonuçlar üreten bir PEF türüdür. Bununla birlikte, orijinal EAM nin kuantum mekanik fonksiyonlar içermesi, araştırmacıları deneysel fonksiyonlar türetmeye yöneltmiştir (6, 8).

Bu çalışmada, 864 atomlu kübik bir nikel kristalinin toplam örgü enerjisi, kuantum mekanik fonksiyonlar kullanılarak gömülmüş atom metodu ile hesaplanmıştır. Statik örgüye Bain zoru uygulanarak örgü enerjisindeki değişim belirlenmiştir. Bu değişimden fcc ve bcc yapıların minimum enerjileri hesaplanmıştır. Bu işlemler, farklı değerlerdeki kesme zorları için tekrarlanarak, kesme zoruna bağlı enerji değişimleri elde edilmiştir. Enerji değişimlerinin incelenmesi sonucunda, Bain zorlanması altındaki bir fcc kristale kesme zoru uygulanmasının bariyer enerjisini azalttığı tespit edilmiştir.

2. TEORİ

2.1. Gömülmüş atom metodu (EAM)

EAM yaklaşımında, N atomlu kristal örgü sistemin toplam potansiyel enerjisi,

$$E_{top} = \sum_i^N F_i(\rho_i) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \Phi(r_{ij}) \quad [1]$$

ile tanımlanır (5). Burada $F_i(\rho_i)$, ρ_i elektron yoğunluğu bulunan bir uzay noktasına i atomunu gömmek için gerekli enerjiyi, $\Phi(r_{ij})$, aralarında r_{ij} mesafesi bulunan i ve j atomları arasındaki iki cisim etkileşme enerjisini belirtmektedir. ρ_i elektron yoğunluğu, sistemdeki diğer atomların ortalama atomik elektron yoğunluklarının lineer olarak üst üste gelmesi yaklaşımıyla

$$\rho_i = \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \rho_j^a(r_{ij}) \quad [2]$$

şeklinde ifade edilir. Atomik elektron yoğunlukları, kuantum mekanik yaklaşımlar içeren Hartree-Fock teorisine göre,

validity of the approach made for the calculations of crystal lattice energy.

Total energy of a crystal can be calculated by means of mathematical models of interatomic interactions. Various potential energy functions (PEFs) which represent two-body or many-body interactions between atoms or molecules have been used for this purpose (4). The embedded atom method (EAM) suggested by Daw and Baskes firstly (5), includes many-body interactions and produces satisfactory results for metallic systems. However, because its original form contains some quantum mechanical functions, researchers have been compelled to derive empirical functions (6-8).

In this research, the total lattice energy of model nickel system with 864 atoms in a cubic cell has been calculated by means of EAM using quantum mechanical functions. The energy change of the model system with applied Bain strain has been determined. The minimum energy values of fcc and bcc lattices have been estimated. Repeating these calculations for different values of shear stress, the lattice energy changes with respect to shear stress values have also been obtained. From the findings, it has been concluded that the shear application on an fcc crystal lattice under Bain strain reduces the barrier energy of the fcc→bcc transformation.

2. THEORY

2.1. Embedded Atom Method

In the EAM approach, total potential energy of a crystal with N atoms is given by

where $F_i(\rho_i)$ is a function representing the energy required to embed atom i into the electron density ρ_i . $\Phi(r_{ij})$ denotes the two-body interaction energy between atoms i and j separated by the distance r_{ij} . The electron density ρ_i is defined as a summation of average atomic electron densities, $\rho_j^a(r_{ij})$, of other atoms in neighbours of atom i :

According to Hartree-Fock theory as in (5), the atomic electron densities are also given by

$$\rho_k^a(r) = \left[\sum_i C_{ki} \frac{(2\zeta_{ki})^{(n_{ki}+1/2)}}{[(2n_{ki})!]^{1/2}} r^{n_{ki}-1} e^{-\zeta_{ki}r} \right]^2 / 4\pi \quad [3]$$

yazılır (5). Burada $k = s, p, d, \dots$ şeklinde elektronik kabukları temsil eder. Burada C ve ζ elektron yörüngelerine bağlı sabitlerdir. n ve n_s sırasıyla valans elektronu sayısı ve dış kabuktaki s elektronları sayısı olmak üzere, atomik elektron yoğunluğu

$$\rho^a(r) = n_s \rho_s^a(r) + (n - n_s) \rho_k^a(r) \quad k = d, p, \dots \quad [4]$$

şeklinde ifade edilir (5).

Gömme enerjisi ($F_i(\rho_i)$) terimini belirlemek için ampirik ve teorik olmak üzere çeşitli yaklaşımlar kullanılmaktadır. Johnson (8) gömme enerjisi terimini,

$$F(\rho) = -E_c(1 - \ln x)x - 6\phi_e y \quad [5]$$

olarak tanımlamıştır. Burada $x = (\rho/\rho_e)^{\alpha/\beta}$, $y = (\rho/\rho_e)^{\gamma/\beta}$ ve $\alpha = 3(\Omega B/E_c)^{1/2}$ şeklindedir ve E_c deneysel kohesif enerjisi, Ω denge atomik hacmini, B hacim modülünü, ρ_e ise denge durumunda elektronik yük yoğunluğunu ifade eder. Johnson, iki cisim potansiyelini

$$\Phi(r_{ij}) = \phi_e \exp[-\gamma(r_{ij}/r_e - 1)] \quad [6]$$

şeklinde kabul etmiştir (8). Burada r_e denge bağ uzunluğu, ϕ_e enerji boyutunda bir sabit ve $\gamma \text{ \AA}^{-1}$ boyutlu bir sabittir.

Nikel için PEF parametreleri Çizelge 1 ve 2 de verilmiştir.

Here, k denotes the electron shell, $k=s, p, d, \dots$. C and ζ are constants related to the electron shell. n and n_s are the number of electrons in valence band and outer shell s . Hence, atomic electron density is rewritten as

In order to obtain the embedding energy, ($F_i(\rho_i)$), various empiric and non-empiric functions have been used. As based on some experimental findings, Johnson (8) described the embedding energy as

where $x = (\rho/\rho_e)^{\alpha/\beta}$, $y = (\rho/\rho_e)^{\gamma/\beta}$ and $\alpha = 3(\Omega B/E_c)^{1/2}$. Where E_c is the cohesive energy, Ω is the equilibrium atomic volume, B is the bulk modulus and ρ_e is the electronic charge density in equilibrium.

Also, Johnson (8) assumed the two-body interaction energy as

where r_e is the bond length in equilibrium condition, ϕ_e is a constant in unit of energy, and γ is an adjustable parameter in \AA^{-1} .

All parameters of the functions for nickel are listed in Table 1 and Table 2.

Table 1. The parameters of electron density functions for nickel (5)

Çizelge 1. Nikel için elektron yoğunluğu fonksiyon parametreleri (5)

Shell/ Kabuk	i	n_i	$\zeta_i (\text{\AA}^{-1})$	$C_i (\text{eV})$
s	1	1	54.8888	-0.00399
	2	1	38.4843	-0.02991
	3	2	27.4270	-0.03189
	4	2	20.8820	0.15289
	5	3	10.9571	-0.20048
	6	3	7.31958	-0.05423
	7	4	3.92650	0.49292
	8	4	2.15299	0.61875
d	1	3	12.6758	0.42120
	2	3	5.43253	0.70658

Table 2. The parameters of two-body and embedding energy functions for nickel (8)

Çizelge 2. Nikel için iki cisim ve gömme enerjisi fonksiyon parametreleri (8)

$E_c (\text{eV})$	$\Omega B (\text{eV/\AA})$	$\phi_e (\text{eV})$	α	β	γ
4.45	12.28	0.74	4.98	6.41	8.86

Burada uygulanan EAM yaklaşımında elektronik yük yoğunluğu Eş.3 ve Eş.4 ile kuantum mekanik olarak belirlenmiş ve gömme enerjisi Eş.5 ile hesaplanmıştır. İki cisim potansiyeli olarak Johnson tarafından önerilen Eş.6

In this study, the functions of electronic charge density in equations 3 and 4 and embedding energy in equation 5 are adopted for the calculations based on quantum mechanical concepts. The equation 6 proposed by Johnson

kullanılmıştır. Böylece, burada yapılan yaklaşım bir karma EAM oluşturmaktadır. Hesaplamalarda $r_c=5,787\text{Å}$ değerinden büyük uzaklıklar için PEF sıfır değerinde alınmıştır.

2.2. Bain zorlanması

fcc→bcc dönüşümleri için genel bir model olarak kabul edilen Bain zorlanmasına göre; kristal hücre eksen uzunlukları birbirlerine eşit ($a=b=c$) ise bcc, $a=b$ ve $c=\sqrt{2}a$ ise fcc birim hücreleri tanımlanabilir. Böylece, fcc→bcc dönüşümü sadece fcc hücrenin c/a oranındaki değişimle gösterilebilir. Kristal hacminin sabit olduğu düşünülerek, $c/a=1,4142$ şartı fcc yapıyı, $c/a=1$ şartı bcc yapıyı karakterize eder (9). Bain zorlanma mekanizması, sadece örgü noktalarının koordinat dönüşümü düşünülerek; $x'=x(1+\varepsilon)$, $y'=y(1+\varepsilon)$, $z'=z/(1+\varepsilon)^2$ şeklinde de ifade edilebilir (10). Burada, x , y ve z orijinal fcc örgüsündeki atomik koordinatlar, x' , y' ve z' değerleri ise dönüşümden sonraki koordinatlardır. Bu durumda, $\varepsilon=0$ fcc örgüyü, $\varepsilon=0,1225$ ise bcc örgüyü temsil eder (10).

2.3. Kesme zorlanması

Katı-katı faz dönüşümlerinin kristalografisi üzerine yapılan deneysel çalışmalar, bu tip faz dönüşümlerinin sadece Bain zorlanmasıyla açıklanamayacağını, Bain mekanizmasıyla birlikte kesme ve dönme tipi mekanizmaların da bulunması gerektiğini ortaya koymuştur (11, 12). Bilinen basit kesme zorlanmalarından ikisi Şekil 1 de görülmektedir. Bain mekanizmasında olduğu gibi, sadece geometri değişimi sonucunda elde edilebilecek kararlı yapıyı belirlemek amacıyla, kesme zorlanmalarında da kristal hacminin sabit kaldığı kabul edilir. Böylece, hacim değişimi nedeniyle enerjide meydana gelecek değişimler önlenir ve bir fcc→bcc dönüşümünde enerji değişiminin sadece kristal geometrisine bağlı kalması sağlanır.

Buradaki hesaplamalarda kristal hacmi sabit tutulmuş ve Şekil 1a da gösterilen s kesme vektörü büyüklüğünün fonksiyonu olarak kristal enerjisinin değişimi incelenmiştir.

is used as two-body potential function. Hence, the EAM approach here constitutes a mixed form of various EAM functions. Besides these assumptions, the values of potential energy functions are neglected at the distances which are greater than a cut-off range (r_c) of 5.787Å , equalizing it to zero.

2.2. Bain Convenience

According to Bain convenience which is adopted as a general model for fcc→bcc transformations, it can be defined a bcc cell if the axis lengths of the cell are equal ($a=b=c$), or an fcc cell if the lengths a and b are equal, and c equals to $\sqrt{2}a$. Hence, the fcc→bcc transformation is described by using only one parameter of fcc cell, c/a . Therefore, the values 1.4142 and 1 of c/a characterize an fcc and a bcc cell, respectively (9). Bain strain mechanism is also clarified by considering the geometric transformations of the lattice site coordinates: $x'=x(1+\varepsilon)$, $y'=y(1+\varepsilon)$, $z'=z/(1+\varepsilon)^2$ (10), where x , y and z are the atomic coordinates in the original fcc cell, and x' , y' and z' are the coordinates after the transformation. In this case, the conditions $\varepsilon=0$ and $\varepsilon=0.1225$ denote the fcc and the bcc cells, respectively (10).

2.3. Shear Strain

The experimental studies on the crystallography of solid-solid phase transformations show that this type of phase transformations cannot be explained by only Bain strain mechanism but also, besides it, there must be shear and rotation mechanisms (11, 12). Two of the known simple shear strains are shown in Figure 1. As in the Bain strain mechanism, in order to determine the stable structure as a result of only geometric change, it has been assumed that the crystal lattice has a constant volume. Therefore, the energy changes due to the volume variation during the fcc→bcc transformation is prevented and it has been ensured that the energy changes depends only on lattice geometry.

In our calculations, the lattice volume has been accepted as a constant in an equilibrium structure of fcc cell and the lattice energy changes has been obtained as a function of the strength of the shear S as is shown in Figure 1a.

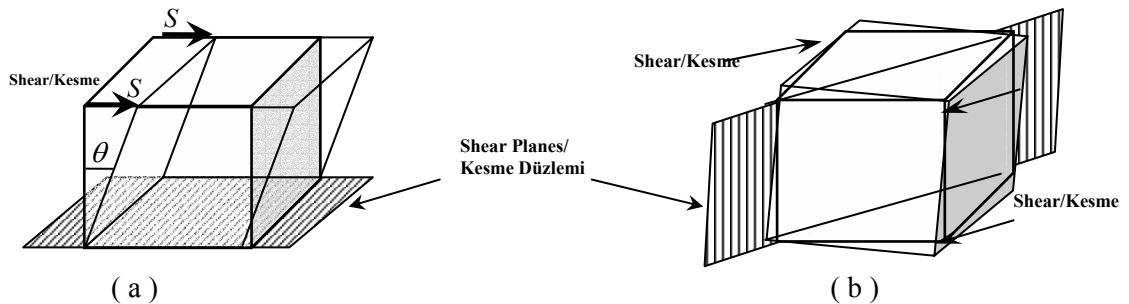


Figure 1. Applications of various shear stresses
Şekil 1. Farklı kesme zoru uygulamaları

3. SONUÇLAR VE TARTIŞMA

Kesme zorunun fcc→bcc dönüşüm bariyer enerjisi üzerindeki etkilerini incelemeye başlamadan önce, potansiyel enerji fonksiyonunun ve nikel için kullanılan parametrelerin, model örgüde kullanılan atom sayısına bağlılığı incelenmiştir. Bu amaçla, Eş.1 ile verilen toplam kristal örgü enerjisi, kübik hesaplama hücresinin yoğunluğu sabit tutularak atom sayısına bağlı hesaplanmış ve sonuçlar Çizelge 3 de verilmiştir. 864 ve daha fazla atomla yapılan çalışmalarda enerjinin atom sayısı ile fazla değişmediği belirlenmiştir (Çizelge 3). Ayrıca, 864 atom kullanarak toplam kristal enerjisinin hacme bağlı değişimi elde edilmiş ve bu enerji değişimi, kübik kristaller için genelleştirilmiş durum denklemi olarak bilinen ve kristal örgü parametresine bağlı kristal enerjisini veren Rose enerjisi (13) ile karşılaştırılmıştır (Şekil 2). (1) bağıntısıyla hesaplanan sonuçların Rose enerjisi ile uyumlu olduğu Şekil 2 den görülmektedir. Ayrıca, Şekil 2 deki enerji değişiminin minimumu $a=3,52\text{Å}$ değerindeki örgü parametresine karşılık gelmektedir ki bu değer 300K deki nikelin deneysel örgü parametresidir (14). Enerjinin minimum değeri ise; Rose enerjisi için 4,445eV, EAM için 4,410eV olarak belirlenmiştir. Bu enerji değerleri, 4,45eV olan nikelin deneysel kohesif enerjisi ile uyumludur (14). Buradan, potansiyel enerji fonksiyonu ve nikel parametrelerinin çalışmanın amacına uygun olduğu sonucuna varılmıştır.

Bain zorlanmasının örgü enerjisi üzerindeki etkilerini incelemek için, 864 atomlu hücreye $s=0$ kesme zoru şartı altında $-0,05 \leq \varepsilon \leq 0,20$ aralığında Bain zorlanması uygulanmıştır. Bain zorlanması sonucunda sistemin iki enerji minimumuna sahip olduğu gözlenmiştir (Şekil 3). Enerji minimumlarından birincisi $\varepsilon=0$ noktasında diğeri ise $\varepsilon=0,134$ noktasında bulunmaktadır. $\varepsilon=0$ noktası sistemin fcc birim hücreli yapısına karşılık gelirken diğeri deforme olmuş bir bcc birim hücreli yapıya karşılık gelmektedir.

Table 3. The lattice energy depending on the number of atoms in the model lattice
Çizelge 3. Parçacık sayısına bağlı enerji değerleri

N	E_c (eV)
32	-4.2511
108	-4.3785
256	-4.3794
500	-4.3797
864	-4.3798
1372	-4.3798
2048	-4.3798

3. RESULTS and DISCUSSIONS

Before starting to study the effects of shear strain on the barrier energy of fcc→bcc transformation, firstly, the dependency of the potential energy functions and its parameters on the number of atoms used in the model for nickel have been investigated. For this aim, total lattice energy given by equation 1 has been calculated for various numbers of atoms in the model system, using a constant atomic volume, and the results have been given in Table 3. It has been observed that, for numbers of atoms over 864, the energy does not change importantly as seen from Table 3. Also, the energy changes with variation of the atomic volume have been obtained for the system of 864 atoms and these energy changes have been compared with the Rose energy (13) which is known as a generalized state equation for cubic crystals and gives the crystal energy with respect to crystal lattice parameter, in Figure 2. From Figure 2, it has been shown that the results obtained from equation (1) agree with Rose energies. Also, the minimum value of the lattice energy obtained from the EAM, in Figure 2, occurs at the value of $a=3.52\text{Å}$ which is the experimental lattice parameter of nickel at 300K (14). In addition to these conformations, the minimum energy values for Rose and the EAM are calculated to be 4.445eV and 4.410eV, respectively, which agree with the experimental value of the cohesive energy, 4.45eV (14). From these results, it has been realized that the functions and its parameters can be used in the present study.

In order to examine the effects of Bain strain on the lattice energy, the Bain strain from -0.05 to 0.20 has been applied to the model lattice with 864 atoms under the zero shear stress condition. As a result of this application, it has been observed that the system has two energy minimums, in Figure 3. One of the minimum values is located in $\varepsilon=0$ and the other is in $\varepsilon=0.134$. The former value of the Bain strains accords with an ideal fcc cell, the latter value produces a deformed bcc cell.

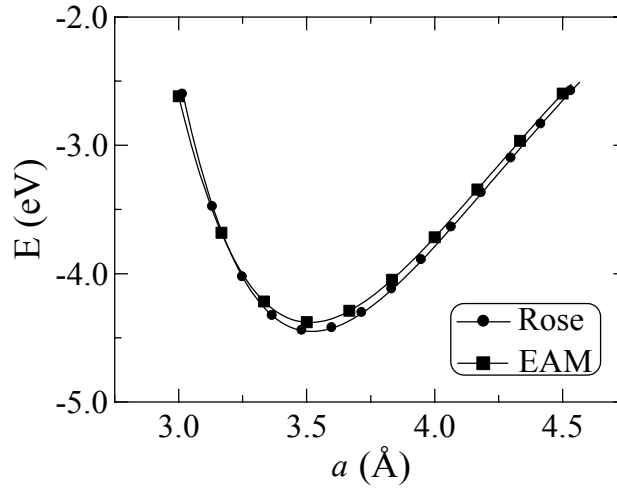


Figure 2. The EAM and Rose energy changes with lattice parameter
Şekil 2. Rose ve EAM örgü enerjilerinin örgü parametresiyle değişimi

fcc yapı için enerji değeri $E^f=4,3798\text{eV}$, bcc yapı için $E^b=4,3243\text{eV}$ olarak belirlenmiştir (Şekil 2). Bu yapılar arasındaki enerji farkı ise $E^f - E^b = \Delta E=0,0555\text{eV}$ şeklindedir. Buna göre, saf Bain zorlanması durumunda sistemin fcc yapıda kararlı olduğu, zorlanmanın $\varepsilon=0,134$ değerine ulaşması halinde sistemin yarı kararlı bir bcc yapıya geçiş yapabileceği söylenebilir. Bu durum, farklı enerji fonksiyonları kullanan çeşitli araştırmacılar tarafından da gözlenmiş ve nikel için fcc→bcc enerji farkının $\sim\%1-5$ aralığında değiştiği kaydedilmiştir (10, 15). bcc yapının bulunduğu $\varepsilon=0,134$ değerinin ideal değerden (0,1225) sapması sistemin bct (tetragonal) yapıya zorlandığını göstermektedir.

Bain zorlanmasıyla oluşan enerji değişimi üzerine kesme zorunun etkisini incelemek amacıyla, sistem üzerine Şekil 1a da görülen (010) doğrultulu kesme zoru uygulanmıştır. Kesme zoru uygulamalarında atomik düzlemler arasındaki mesafeler korunmuştur ve sade düzlemlerin birbirleri üzerinde kaymasına izin verilmiştir. Sadece kesme zoru altında sistemin ikinci bir minimum enerji üretmediği belirlenmiştir. $\%0-20$ aralığında 20 farklı kesme zoru altındaki sisteme Bain zoru uygulanarak enerji değişimleri elde edilmiştir (Şekil 3). Şekil 3 deki her bir enerji eğrisinde kesme zoru aşağıdan yukarıya doğru $\%0,01$ adımlarla artmaktadır. Bain deformasyonunun sıfır olduğu bölgede sistem fcc örgüye sahiptir. İdeal bcc örgü, Bain zorlanmasının 0,1225 değerinde beklenir. Ancak, kesme zorunun artması, sistemi ideal bcc örgüden uzaklaştırır ve $\varepsilon=0,185$ değerinde kararlı bct yapıya doğru sürüklenmesine neden olur.

From Figure 2, the fcc and bcc lattice energies are obtained as $E^f=4.3798\text{eV}$ and $E^b=4.3243\text{eV}$, respectively. The energy difference between these structures is 0.0555eV , $\Delta E=E^f - E^b$. According to this finding, it can be concluded that the model system under pure Bain stress condition can be stable in an fcc lattice for $\varepsilon=0$ but it could be transformed into an unstable bcc lattice when the Bain strain reaches a value of $\varepsilon=0.134$. Here, the fact that the value of Bain strain associated with the bcc lattice deviates from the ideal value of 0.1225 indicates that the Bain strain compels the system to transform a lattice with bct (tetragonal) cell. Similar results have been observed by the other researchers, using different potential energy functions, and they have noted that the energy discrepancy between fcc and bcc lattices of nickel changes in a region of $\sim\%1-5\%$ (10,15).

The shear stress along (010) direction, as is shown in Figure 1a, has been applied on the system in order to investigate its effects on the energy of the system under the Bain strain. In this application, spaces between atomic layers have been conserved and it has been allowed the layers to slip on each other. It has been determined that there is no secondary minimum in the energy changing curve for the system under the condition with only shear stress application, $\varepsilon=0$. After that, it has been calculated the energy changes of the system under the Bain strain for twenty different shear values from 0 to 20 in increment of 0.01%. These energy changes are shown in Figure 3 and the shear stress values for each curve in the figure increase towards upper side in an increment with 0.01. The system has a lattice with fcc cell in the region of zero Bain strain. While a lattice with an ideal bcc cell can be expected in its value of 0.1225, an increasing in shear stress takes the system away from the ideal bcc cell and causes it to drift toward a stable lattice with bct cell at $\varepsilon=0.185$.

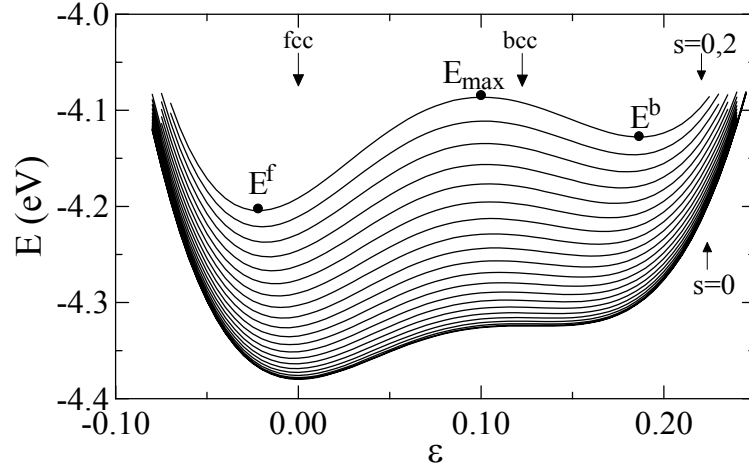


Figure 3. The changes of the lattice energy with Bain strain for different shear stress
Şekil 3. Farklı kesme zoru şiddetlerine göre örgü enerjisinin Bain zoru ile değişimi

Kesme zoru şiddetine bağlı olarak, Şekil 3 de görülen E_{max} değerinin, ΔE enerjisinin ve bariyer enerjisinin ($E_{bar} = E_{max} - E^b$) değişimleri Şekil 4 de verilmiştir. $s = 0,17$ lik kesme zoru için örgü enerjileri $E^f = -4,2042\text{eV}$ ve $E^b = -4,1276\text{eV}$ olarak elde edilmiştir. Bu iki örgü için enerji farkı $E^f - E^b = \Delta E = 0,0766\text{eV}$ şeklindedir. Bu fark, saf Bain zorlanması sonucu elde edilen değerden ($\Delta E = 0,0555\text{eV}$) yüksektir. Böylece, kesme zoru altındaki bir sistemde, fcc→bcc dönüşümü için daha büyük bir sürücü enerjisine ihtiyaç duyduğu sonucuna ulaşılır. Ayrıca, Şekil 4 de görülen bariyer enerjisi değişiminden, kesme zoru altındaki sistemin bcc örgüde daha karalı olabileceği ve bcc→fcc ters dönüşümü için daha fazla sürücü enerji gerektireceği sonucuna ulaşılmaktadır.

E_{max} , the energy differences ΔE and the barrier energy ($E_{bar} = E_{max} - E^b$) values denoted in Figure 3 are plotted as a solid line with respect to the shear stress values S , in Figure 4. The lattice energies for fcc and bcc cells are calculated as $E^f = -4.2042\text{eV}$ and $E^b = -4.1276\text{eV}$ for $S = 0.17$. The energy discrepancy for these lattices is $E^f - E^b = \Delta E = 0.0766\text{eV}$. This difference is bigger than the value ($\Delta E = 0.0555\text{eV}$) obtained for pure Bain stress application. From this result, it can be concluded that more energy is required to produce an fcc→bcc transformation with Bain stress in a system under shear stress. From the barrier energy change in Figure 4, on the other hand, it has been found out that the system under shear stress may be more stable in the lattice with bcc cell and, for a reverse transformation from bcc to fcc, more driving energy can be needed.

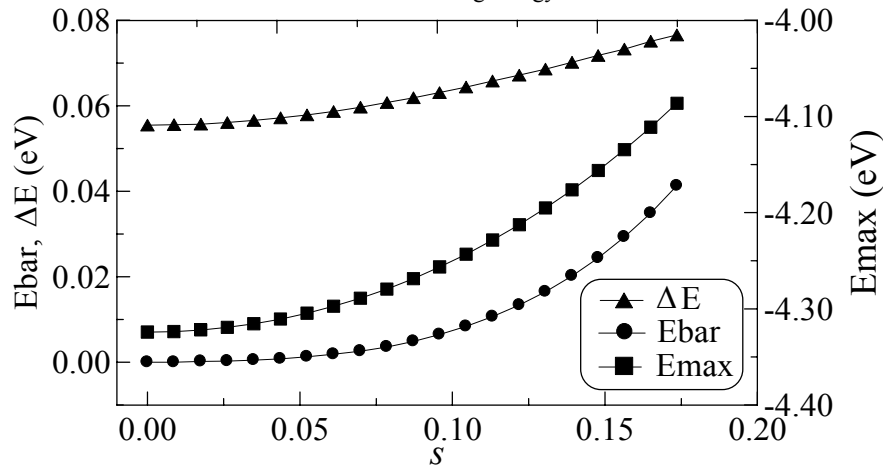


Figure 4. The change of energy difference between structures, and barrier energy versus shear stress
Şekil 4. Yapılar arasındaki enerji farkının ve bariyer enerjisinin kesme zoru ile değişimleri

Sonuç olarak, hesaplamalarda kullanılan parçacık sayısının 864 ve üzerinde olması halinde sistemin hacimsel (bulk) özelliklerinin elde edilebileceği belirlenmiştir. EAM yaklaşımının, fcc→bcc veya fcc→bcc

In conclusion, it has been estimated that when using 864 or more atoms in the model, the bulk properties of the system could be determined from the presented EAM approach. Also, it has been shown that the EAM functions

dönüşümlerini, katı-katı faz dönüşümlerinin temel teorileri ve deneysel bulguları ile uyumlu olarak sağlayabildiği gözlenmiştir. Bu tür faz dönüşümlerinde sistemin kesme zoru alanlarında bulunması halinde bariyer enerjisinin ve iki faz arasındaki denge enerjisi farkının artacağı sonucuna ulaşılmıştır.

used in this study could provide the conditions for fcc→bcc or fcc→bct transformations in atomic scale, within satisfactory agreement with the fundamental principles and the experimental findings of solid-solid phase transformations. As another result driven here, it has been reached that, in the case of the system under shear stress, the barrier energy and the difference of the equilibrium energies between two phases could rise in these types of phase transformations.

REFERENCES/ KAYNAKLAR

1. Donato, M.G., Ballone, P. and Giaquinta, P.V., "Bain transformation in CuxPd1-x (x~0.5) alloys: An embedded-atom study", *Phys. Rev. B*, 61(1): 24-27 (2000).
2. Jona, F. and Marcus, P.M., "Structural and elastic properties of α -brass", *J. Phys.: Condens. Matter*, 13: 5507-5514 (2001).
3. Wayman, C.M., "The phenomenological theory of martensite crystallography: Interrelationships," *Metall. and Mater. Trans. A*, 25: 1787-1795 (1994).
4. Erkoç, Ş., "Empirical many-body potential energy functions used in computer simulations of condensed matter properties", *Physics Reports*, 278: 79-105 (1997).
5. Daw, M.S. and Baskes, M.I., "Embedded-atom method: Derivation and application to impurities, surfaces, and other defects in metals", *Phys. Rev. B*, 29(12): 6443-6453 (1984).
6. Voter, A.F. and Chen, S.P., "Accurate interatomic potentials for Ni, Al and Ni3Al", Proc. of Mat. Res. Soc. Symp., (Eds.) R.W. Siegel, J.R. Weertman, *R. Sinclair*, MRS-82: 175-180 (1987).
7. Finnis, M.W. and Sinclair, J.E., "A simple empirical N-body potential for transition metals", *Philosophical Magazine A*, 50(1): 45-55 (1984).
8. Johnson, R.A., "Alloy models with the embedded-atom method", *Phys. Rev. B*, 39(17): 12554-12559 (1989).
9. Schwarz, K., Mohn, P., Sliwko, V.L. and Blaha, P., "Calculations for martensitic phase transformations by quantum mechanics and thermodynamics", *J. de Physique. IV*, 5(C2): 47-52 (1995).
10. Suzuki, T., Shimono, M. and Kajiwara, S., "On the mechanism for martensitic transformation from fcc to bcc", *Mater. Sci. and Engin.*, A312: 104-108 (2001).
11. Çakmak, S., "Bakır bazlı alaşımlarda martensit varyantlarının grup kombinezonları", Doktora Tezi, *Firat Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü*, Elazığ, 125 (1992).
12. Delaey, L. and Chandrasekaran, M., "Comments on 'New Description of Long Period Stacking Order Structures of Martensites in β -Phase Alloys' by K. Otsuka, T. Ohba, M. Tokonami and C. M. Wayman", *Scripta Metall. et Mater.*, 30(12): 1605-1610 (1994).
13. Rose, J.H., Smith, J.R., Guinea, F. and Ferrante, J., "Universal features of the equation of state of metals", *Phys. Rev. B*, 29(6): 2963-2969 (1984).
14. Kittel, C., *Introduction to Solid State Physics*, 7. ed., New York, *John Wiley & Sons, Inc.* (1996).
15. Özgen, S., "Sayısal hesaplama yöntemlerinin şekil hatırlamalı alaşımlarda difüzyonsuz dönüşümlere uygulanması", Doktora Tezi, *Firat Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü*, 145 (1997).