



**KÜBİK YAPIDAKİ Os_2YPb ($\text{Y}=\text{Sc, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn}$)
HEUSLER BİLEŞİKLERİNİN YAPISAL, ELEKTRONİK,
ELASTİK ve TİTREŞİM ÖZELLİKLERİNİN
YOĞUNLUK FONKSİYONEL TEORİSİ İLE İNCELENMESİ**

Sadullah NAZLI

**YÜKSEK LİSANS TEZİ
FİZİK ANABİLİM DALI**

**GAZİ ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

HAZİRAN 2016

Sadullah NAZLI tarafından hazırlanan “KÜBİK YAPIDAKİ Os_2YPb ($\text{Y}=\text{Sc}, \text{Ti}, \text{V}, \text{Cr}, \text{Mn}, \text{Fe}, \text{Co}, \text{Ni}, \text{Cu}, \text{Zn}$) HEUSLER BİLEŞİKLERİNİN YAPISAL, ELEKTRONİK, ELASTİK ve TİTREŞİM ÖZELLİKLERİNİN YOĞUNLUK FONKSİYONEL TEORİSİ İLE İNCELENMESİ” adlı tez çalışması aşağıdaki jüri tarafından OY BİRLİĞİ ile Gazi Üniversitesi FİZİK Anabilim Dalında YÜKSEK LİSANS TEZİ olarak kabul edilmiştir.

Danışman: Doç. Dr. Şule UĞUR

Fizik Anabilim Dalı, Gazi Üniversitesi

Bu tezin, kapsam ve kalite olarak Yüksek Lisans Tezi olduğunu onaylıyorum

.....

Başkan : Prof. Dr. Ziya MERDAN

Fizik Anabilim Dalı, Gazi Üniversitesi

Bu tezin, kapsam ve kalite olarak Yüksek Lisans Tezi olduğunu onaylıyorum

.....

Üye : Prof. Dr. Hüseyin ÜNVER

Fizik Anabilim Dalı, Ankara Üniversitesi

Bu tezin, kapsam ve kalite olarak Yüksek Lisans Tezi olduğunu onaylıyorum

.....

Tez Savunma Tarihi: 22 / 07 / 2016

Jüri tarafından kabul edilen bu tezin Yüksek Lisans Tezi olması için gerekli şartları yerine getirdiğini onaylıyorum.

Prof. Dr. Hadi GÖKÇEN
Fen Bilimleri Enstitüsü Müdürü

ETİK BEYAN

Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Tez Yazım Kurallarına uygun olarak hazırladığım bu tez çalışmada;

- Tez içinde sunduğum verileri, bilgileri ve dokümanları akademik ve etik kurallar çerçevesinde elde ettiğimi,
- Tüm bilgi, belge, değerlendirme ve sonuçları bilimsel etik ve ahlak kurallarına uygun olarak sunduğumu,
- Tez çalışmada yararlandığım eserlerin tümüne uygun atıfta bulunarak kaynak gösterdiğimi,
- Kullanılan verilerde herhangi bir değişiklik yapmadığımı,
- Bu tezde sunduğum çalışmanın özgün olduğunu,

bildirir, aksi bir durumda aleyhime doğabilecek tüm hak kayıplarını kabullendiğimi beyan ederim.

Sadullah NAZLI

15 / 07 / 2016

KÜBİK YAPIDAKİ Os_2YPb ($\text{Y}=\text{Sc}, \text{Ti}, \text{V}, \text{Cr}, \text{Mn}, \text{Fe}, \text{Co}, \text{Ni}, \text{Cu}, \text{Zn}$)
HEUSLER BİLEŞİKLERİNİN YAPISAL, ELEKTRONİK, ELASTİK ve TİTREŞİM
ÖZELLİKLERİNİN YOĞUNLUK FONKSİYONEL TEORİSİ İLE İNCELENMESİ
(Yüksek Lisans Tezi)

Sadullah NAZLI

GAZİ ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

Haziran 2016

ÖZET

Bu tez çalışmasında, $L2_1$ fazındaki Os_2YPb ($\text{Y}=\text{Sc}, \text{Ti}, \text{V}, \text{Cr}, \text{Mn}, \text{Fe}, \text{Co}, \text{Ni}, \text{Cu}, \text{Zn}$) Heusler bileşiklerinin yapısal, elektronik, manyetik, elastik ve fonon özellikleri, pseudo-potansiyel dalga metodu içerisinde korelasyon ve değiş tokuş potansiyelleri için Yerel Yoğunluk Yaklaşımı (YYY) ve Genelleştirilmiş Gradyent Yaklaşımı (GGY) kullanılarak incelendi. Os_2YPb 'nin hesaplanan örgü sabitleri ve toplam manyetik momentleri literatürde bulunan teorik sonuçlarla uyumludur. Bulk modüllerinin ve elastik sabitlerinin hesaplanan değerleri verildi. GGY yaklaşımında elde edilen örgü sabitleri YYY yaklaşımından elde edilene göre daha büyük, Bulk modülleri ise daha küçük olarak bulundu. Elektronik bant yapısı ve durum yoğunluğunun sonuçlarına göre bu bileşikler iletkenlerdir. Aynı zamanda Os_2YPb ($\text{Y}=\text{Sc}, \text{Ti}, \text{V}, \text{Cr}, \text{Mn}, \text{Fe}, \text{Co}, \text{Ni}, \text{Cu}, \text{Zn}$) bileşiklerinin fonon spektrumları sunuldu.

Bilim Kodu : 20227
Anahtar Kelimeler : Heusler Alaşımları, Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi, Elektronik Bant Yapısı, Elastik Özellikler, Fonon
Sayfa Adedi : 93
Danışman : Doç. Dr. Şule UĞUR

THE INVESTIGATION OF THE STRUCTURAL, ELECTRONIC, ELASTIC AND
DYNAMICAL PROPERTIES OF Os_2YPb ($\text{Y}=\text{Sc, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn}$)
TRIPLE HEUSLER COMPOUNDS IN CUBIC STRUCTURE WITHIN THE DENSITY
FUNCTIONAL THEORY

(M. Sc. Thesis)

Sadullah NAZLI

GAZİ UNIVERSITY

GRADUATE SCHOOL OF NATURAL AND APPLIED SCIENCES

June 2016

ABSTRACT

In this thesis, the structural, electronic, magnetic, elastic and phonon properties of the Os_2YPb ($\text{Y}=\text{Sc, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn}$) compounds in L2_1 phase have been investigated using the pseudo-potential waves method within the Local Density Approximation (LDA) and the Generalized Gradient Approximation (GGA) for the exchange and correlation potential. The calculated lattice constants and total magnetic moments of Os_2YPb ($\text{Y}=\text{Sc, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn}$) are in good agreement with the available theoretical results. The calculated values of Bulk modulus and elastic constant are given. We have found that the GGA approximation yields larger lattice constants and a smaller Bulk modulus compared to LDA. Our results of the electronic band structure and density of states show that these compounds are conductors. We have also presented phonon spectrum for Os_2YPb ($\text{Y}=\text{Sc, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn}$).

Science Code : 20227

Key Words : Heusler Alloys, Density Functional Theory, Electronic Band Structure,
Elastic Properties, Phonon

Page Number : 93

Supervisor : Assoc. Prof. Dr. Şule UĞUR

TEŞEKKÜR

Bu tez çalışmam boyunca bana her konuda yardım ve katkılarını esirgemeyen ve beni karşılaştığım zorlukların çözümlenmesinde yönlendiren, değerli danışmanım Doç. Dr. Şule UĞUR'a, Yüksek Lisans Eğitimimi devam ettirip bitirme cesaretini bana veren, her konuda yardım ve desteğini esirgemeyen ve beni yönlendiren, çalışmalarımı daha verimli bir şekilde tamamlamamı sağlayan, değerli hocam Prof. Dr. Gökay UĞUR'a teşekkür ediyorum ve şükranlarımı sunuyorum.

Bu uzun ve meşakkatli süreçte her zaman yanımda bulunan, beni cesaretlendiren, desteğini hep üzerimde hissettiğim kıymetli eşim Olcay'a bu tez çalışmamı ithaf ederek gönülden teşekkür ediyorum.

Bu tez çalışmamda, tercümelerimde yardımcı olan Dokuz Eylül Üniversitesi 2016 Şubat Kimya mezunu oğlum Kimyager İbrahim Hanif'e ve Boğaziçi Üniversitesi Psikoloji ikinci sınıf öğrencisi oğlum Muhammed Yasir'e çok teşekkür ederim.

İÇİNDEKİLER

	Sayfa
ÖZET	iv
ABSTRACT.....	v
TEŞEKKÜR.....	vi
İÇİNDEKİLER	vii
ÇİZELGELERİN LİSTESİ.....	ix
ŞEKİLLERİN LİSTESİ.....	x
SİMGELER VE KISALTMALAR.....	xiv
1. GİRİŞ	1
2. KURAMSAL TEMELLER.....	5
2.1. Dalga Fonksiyonu Yaklaşımı	5
2.1.1. Hartree yaklaşımı.....	5
2.1.2. Hartree-Fock (HF) yaklaşımı.....	7
2.2. Born-Oppenheimer Yaklaşımı.....	8
2.3. Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi (YFT)	9
2.4. Yerel yoğunluk yaklaşımı (YYY)	9
2.5. Genelleştirilmiş gradyent yaklaşımı (GGY).....	10
2.6. Pseudo potansiyel metodu (PP)	10
2.7. Hohenberg ve Kohn Yaklaşımı	11
2.8. Kohn-Sham denklemleri	13
3. TEORİ VE METOTLAR.....	17
3.1. Heusler Alışimleri	17
3.1.1. Manyetik özellikler.....	18
3.1.2. Yarı metalik ferromanyetler.....	19

	Sayfa
3.1.3. Yüzey merkezli kübik (fcc) örgünün temel simetri noktaları.....	20
3.2. Materials Design (MedeA) Paket Programı	21
3.3. VASP Program Paketi	22
3.4. MT Modülü – Elastik Özellikler.....	23
3.4.1. Elastik sabitlerin tanımı.....	24
3.4.2. Elastik sabitlerinin hesaplanması.....	25
3.4.3. Yığın (Bulk) Modülü.....	26
4. ÖRGÜ TİTREŞİMLERİ VE ENERJİ BANTLARI	27
4.1. İki Atomlu Örgü Titreşimleri.....	28
4.2. Üç Boyutta Örgü Titreşimleri.....	33
4.3. Direkt (Doğrudan) Metot.....	35
4.4. Fonon Frekanslarının Durum Yoğunluğunu Hesaplama Metodu	38
4.5. Enerji Bantları.....	39
5. BULGULAR VE TARTIŞMA.....	41
5.1. Os ₂ YPb (Y=Sc, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn) Heusler Alaşımlarının Yapısal Özellikleri	41
5.2. Os ₂ YPb (Y=Sc, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn) Heusler Alaşımlarının Manyetik ve Elektronik Özellikleri.....	44
5.3. Os ₂ YPb (Y=Sc, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn) Heusler Alaşımlarının Elastik Özellikleri.....	70
5.4. Os ₂ YPb (Y=Sc, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn) Heusler Alaşımlarının Titreşim Özellikleri	73
6. SONUÇ VE ÖNERİLER.....	85
KAYNAKLAR	87
ÖZGEÇMİŞ	92

ÇİZELGELERİN LİSTESİ

Çizelge	Sayfa
Çizelge 5.1. Os ₂ YPb (Y= Sc, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn) Heusler alaşımlarının GGY ve YYY için hesaplanan kesme enerjisi (E_{kesme} , eV), smearing parametresinin değerleri (eV), k -noktaları, örgü sabiti (a_0 , Å) ve toplam manyetik momentleri (M_t, μ_B)	43
Çizelge 5.2. Os ₂ YPb (Y=Sc, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn) Heusler alaşımlarının Fermi enerjileri	45
Çizelge 5.3. Os ₂ YPb (Y=Sc, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn) Heusler alaşımlarının GGY ile hesaplanan kısmi manyetik momentleri	46
Çizelge 5.4. Os ₂ YPb (Y=Sc, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn) Heusler alaşımlarının YYY ile hesaplanan kısmi manyetik momentleri	47
Çizelge 5.5. Os ₂ YPb (Y=Sc, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn) Heusler alaşımlarının elastik sabitleri	71
Çizelge 5.6. Os ₂ YPb (Y=Sc, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn) Heusler alaşımlarının Bulk, Shear ve Young's Modülleri.....	72

ŞEKİLLERİN LİSTESİ

Şekil	Sayfa
Şekil 2.1. Pseudo potansiyel ve Pseudo dalga fonksiyonu	11
Şekil 3.1. Heusler alaşımlarının kristal yapısı a) yarı, b) tam ve c) dörtlü Heusler alaşımları	18
Şekil 3.2. Metal, yarıiletken ve yarı-metalik malzemelerin durum yoğunluğu	19
Şekil 3.3. fcc yapı için birinci Brillouin bölgesi ve temel simetri noktaları	20
Şekil 4.1. İki atomlu kristal yapıdaki atomik düzlemlerin yer değiştirmeleri	28
Şekil 4.2. İki atomlu çizgisel örgünün dağınım eğrileri.....	31
Şekil 4.3. İki atomlu çizgisel örgüde enine optik ve enine akustik mod	32
Şekil 4.4. Enerji bant yapısının yasak enerji aralıklarına göre sınıflandırılması	39
Şekil 5.1. GGY-Os ₂ ScPb Heusler alaşımının elektronik bant, kısmi ve toplam durum yoğunluğu eğrileri	50
Şekil 5.2. GGY-Os ₂ TiPb Heusler alaşımının elektronik bant, kısmi ve toplam durum yoğunluğu eğrileri	51
Şekil 5.3. GGY-Os ₂ VPb Heusler alaşımının elektronik bant, kısmi ve toplam durum yoğunluğu eğrileri	52
Şekil 5.4. GGY-Os ₂ CrPb Heusler alaşımının elektronik bant, kısmi ve toplam durum yoğunluğu eğrileri	53
Şekil 5.5. GGY-Os ₂ MnPb Heusler alaşımının elektronik bant, kısmi ve toplam durum yoğunluğu eğrileri	54
Şekil 5.6. GGY-Os ₂ FePb Heusler alaşımının elektronik bant, kısmi ve toplam durum yoğunluğu eğrileri	55
Şekil 5.7. GGY-Os ₂ CoPb Heusler alaşımının elektronik bant, kısmi ve toplam durum yoğunluğu eğrileri	56
Şekil 5.8. GGY-Os ₂ NiPb Heusler alaşımının elektronik bant, kısmi ve toplam durum yoğunluğu eğrileri	57
Şekil 5.9. GGY-Os ₂ CuPb Heusler alaşımının elektronik bant, kısmi ve toplam durum yoğunluğu eğrileri	58

Şekil	Sayfa
Şekil 5.10. GGY-Os ₂ ZnPb Heusler alaşıminın elektronik bant, kısmi ve toplam durum yoğunluğu eğrileri.....	59
Şekil 5.11. YYY-Os ₂ ScPb Heusler alaşıminın elektronik bant, kısmi ve toplam durum yoğunluğu eğrileri.....	60
Şekil 5.12. YYY-Os ₂ TiPb Heusler alaşıminın elektronik bant, kısmi ve toplam durum yoğunluğu eğrileri.....	61
Şekil 5.13. YYY-Os ₂ VPb Heusler alaşıminın elektronik bant, kısmi ve toplam durum yoğunluğu eğrileri.....	62
Şekil 5.14. YYY-Os ₂ CrPb Heusler alaşıminın elektronik bant, kısmi ve toplam durum yoğunluğu eğrileri.....	63
Şekil 5.15. YYY-Os ₂ MnPb Heusler alaşıminın elektronik bant, kısmi ve toplam durum yoğunluğu eğrileri.....	64
Şekil 5.16. YYY-Os ₂ FePb Heusler alaşıminın elektronik bant, kısmi ve toplam durum yoğunluğu eğrileri.....	65
Şekil 5.17. YYY-Os ₂ CoPb Heusler alaşıminın elektronik bant, kısmi ve toplam durum yoğunluğu eğrileri.....	66
Şekil 5.18. YYY-Os ₂ NiPb Heusler alaşıminın elektronik bant, kısmi ve toplam durum yoğunluğu eğrileri.....	67
Şekil 5.19. YYY-Os ₂ CuPb Heusler alaşıminın elektronik bant, kısmi ve toplam durum yoğunluğu eğrileri.....	68
Şekil 5.20. YYY-Os ₂ ZnPb Heusler alaşıminın elektronik bant, kısmi ve toplam durum yoğunluğu eğrileri.....	69
Şekil 5.20. GGY-Os ₂ ScPb Heusler alaşıminın temel simetri eksenleri boyunca Fonon dispersiyon eğrileri	74
Şekil 5.21. GGY-Os ₂ ScPb Heusler alaşıminın temel simetri eksenleri boyunca Fonon dispersiyon eğrileri.....	74
Şekil 5.22. GGY-Os ₂ TiPb Heusler alaşıminın temel simetri eksenleri boyunca Fonon dispersiyon eğrileri.....	74
Şekil 5.23. GGY-Os ₂ VPb Heusler alaşıminın temel simetri eksenleri boyunca Fonon dispersiyon eğrileri.....	75

Şekil	Sayfa
Şekil 5.24. GGY-Os ₂ CrPb Heusler alaşımasının temel simetri eksenleri boyunca Fonon dispersiyon eğrileri.....	75
Şekil 5.25. GGY-Os ₂ MnPb Heusler alaşımasının temel simetri eksenleri boyunca Fonon dispersiyon eğrileri.....	76
Şekil 5.26. GGY-Os ₂ FePb Heusler alaşımasının temel simetri eksenleri boyunca Fonon dispersiyon eğrileri.....	76
Şekil 5.27. GGY-Os ₂ CoPb Heusler alaşımasının temel simetri eksenleri boyunca Fonon dispersiyon eğrileri.....	77
Şekil 5.28. GGY-Os ₂ NiPb Heusler alaşımasının temel simetri eksenleri boyunca Fonon dispersiyon eğrileri.....	77
Şekil 5.29. GGY-Os ₂ CuPb Heusler alaşımasının temel simetri eksenleri boyunca Fonon dispersiyon eğrileri.....	78
Şekil 5.30. GGY-Os ₂ ZnPb Heusler alaşımasının temel simetri eksenleri boyunca Fonon dispersiyon eğrileri.....	78
Şekil 5.31. YYY-Os ₂ ScPb Heusler alaşımasının temel simetri eksenleri boyunca Fonon dispersiyon eğrileri.....	79
Şekil 5.32. YYY-Os ₂ TiPb Heusler alaşımasının temel simetri eksenleri boyunca Fonon dispersiyon eğrileri.....	79
Şekil 5.33. YYY-Os ₂ VPb Heusler alaşımasının temel simetri eksenleri boyunca Fonon dispersiyon eğrileri.....	80
Şekil 5.34. YYY-Os ₂ CrPb Heusler alaşımasının temel simetri eksenleri boyunca Fonon dispersiyon eğrileri.....	80
Şekil 5.35. YYY-Os ₂ MnPb Heusler alaşımasının temel simetri eksenleri boyunca Fonon dispersiyon eğrileri.....	81
Şekil 5.36. YYY-Os ₂ FePb Heusler alaşımasının temel simetri eksenleri boyunca Fonon dispersiyon eğrileri.....	81
Şekil 5.37. YYY-Os ₂ CoPb Heusler alaşımasının temel simetri eksenleri boyunca Fonon dispersiyon eğrileri.....	82

Şekil	Sayfa
Şekil 5.38. YYY-Os ₂ NiPb Heusler alaşıımının temel simetri eksenleri boyunca Fonon dispersiyon eğrileri.....	82
Şekil 5.39. YYY-Os ₂ CuPb Heusler alaşıımının temel simetri eksenleri boyunca Fonon dispersiyon eğrileri.....	83
Şekil 5.40. YYY-Os ₂ ZnPb Heusler alaşıımının temel simetri eksenleri boyunca Fonon dispersiyon eğrileri.....	83



SİMGELER VE KISALTMALAR

Bu çalışmada kullanılmış simgeler ve kısaltmalar, açıklamaları ile birlikte aşağıda sunulmuştur.

Simgeler	Açıklamalar
a_0	Örgü Sabiti
B	Bulk (Yığın) modülü
G	Shear (Kayma) modülü
E	Young modülü
M_t	Toplam manyetik moment
C_{ij}	Elastik sabiti
E_{cut}	Kesme enerjisi
E_F	Fermi enerjisi
$\hat{H}$	Hamiltonyen operatörü
$\rho(\vec{r})$	Elektron yoğunluğu
$T_0[\rho]$	Kinetik enerji fonksiyoneli
$V_{dış}(\vec{r})$	Dış potansiyel
V_{d-t}	Değiş-tokuş korelasyon potansiyeli
ψ	Dalga fonksiyonu
E_{d-t}	Değiş-tokuş bağlanma enerjisi
$\rho(\omega)$	Durum yoğunluğu
$\tilde{D}_{i,j}(\vec{R})$	Dinamik matris
$N(E_F), N(E_F) \uparrow, N(E_F) \downarrow$	Fermi seviyesindeki elektron yoğunluğu
$F_{HK}[\rho]$	Hohenberg-Kohn fonksiyoneli
$V_{Hartree}$	Hartree potansiyeli
$V_{K-S}(\vec{r})$	Kohn-Sham potansiyeli

Kısaltmalar	Açıklamalar
CASTEP	Cambridge Sequential Total Energy Package
fcc	Yüzey merkezli kübik örgü
GGA	Generalized Gradient Approximation
GGY	Genelleştirilmiş Gradyent Yaklaşımı
HF	Hartree-Fock metodu
KS	Kohn-Sham Denklemleri
LAMMPS	Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator
LDA	Local Density Approximation
MedeA	Materials Design Paket Programı
MT	Mechanical/Thermal
PAW	İz düşümsel birleştirilmiş dalga
PGM	Platinyum Grubu Metal
PP	Pseudo potansiyel
SCF	Öz uyumlu alan
TA	Enine akustik mod
TO	Enine optik mod
US-PP	Ultra-soft Vanderbilt Pseudo Potansiyel
VASP	The Vienna Ab initio Simulation Package
YFT	Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi
YYY	Yerel Yoğunluk Yaklaşımı

1. GİRİŞ

Doğal olarak oluşan platinyum ve platinyum zengini alaşımlar uzun zamandır bilinmektedir. Kimyasal olarak oldukça benzer, altı adet Platinyum Grubu Metal (PGM); İridyum(Ir), Osmiyum(Os), Paladyum(Pd), Platinyum(Pt) Rodyum(Rh) ve Rutenyum(Ro)'dur. Platinyum, İridyum ve Osmiyum en yoğun metaller olarak bilinir. Platinyum ve Paladyum yumuşak ve sünek özellik gösterirken Rutenyum ve Osmiyum sert ve kırılgandır. PGM'ler arasında en yoğun, en sert ve en yüksek erime sıcaklığı olan element Osmiyum'dur. Osmiyum diğer PGM'ler ile alaşım oluşturarak mekanik cihazlarda mil, kayıt iğnesi, kalem ucu ve yakıt hücresi olarak da kullanılır. Kararmazlık, matlaşmazlık özellikleri mücevher ve takı yapımı için oldukça uygundur. Ani kimyasal olaylara ve karşı dirençleri, mükemmel yüksek sıcaklık karakteristikleri ile kararlı elektriksel dirençleri endüstriyel uygulamalar için bu malzemeleri ön plana çıkarmıştır.

Tek kristal büyütmelerinde pota malzemesi olarak, kimya endüstrisinde katalizör olarak, otomobil endüstrisinde eksoz emisyonunu iyileştirmek için çok sık kullanılmaktadır. Isıl çift, fırın malzemesi, elektrot ve düşük voltaj gerektiren elektronik cihazlarda kontak malzemesi olarak, bilgisayar hard disklerinde cep telefonlarında, dişçilik malzemesi olarak pek çok kullanım alanı vardır.

Üçlü Heusler bileşiklerinin Stokiyometrik kompozisyonu X_2YZ şeklinde gösterilen bu alaşımlarda X ve Y genellikle iki farklı geçiş metali iken Z manyetik olmayan bir elementtir. Ferromanyetik yarı metal davranışlarının yanında, şekil hatırlama ve manyetik özellikleri nedeniyle son yıllarda Heusler alaşımları hem deneysel hem de teorik olarak pek çok araştırmacının ilgi odağı haline gelmiştir.

Bu tez çalışmasında üçlü Osmiyum bazlı $L2_1$ kristal yapıya sahip Heusler alaşımlar çalışılmıştır. $X_2YZ(L2_1)$ ve $XYZ(C1_b)$ kompozisyonunda kübik yapıda kristallenen Heusler alaşımlarının manyetik, şekil hafıza ve manyetokalorik özellikleri son yıllarda bu malzemeye olan ilgiyi artırmıştır. Os_2YPb ($Y=Sc, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn$) alaşımlarının yapısal, elastik, elektronik ve titreşim özelliklerinin belirlenmesi ve aralarındaki ilişkilerin ortaya konulması son derece önemlidir.

Literatürde bu tezde çalışılan Os_2YPb ($\text{Y}=\text{Sc, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn}$) alaşımlarının L2_1 yapısına ait sınırlı sayıda çalışma vardır. Gillaben [1] Vasp kodunu kullanarak bu malzemelerin teorik olarak sadece örgü parametrelerini ve toplam manyetik momentlerini hesaplamıştır.

Bu tez çalışmasında alaşımların;

- i) L2_1 yapıdaki yapısal parametrelerini hesaplamak,
- ii) Manyetik momentlerini hesaplamak,
- iii) Ferromanyetik bulunanlar için spin-aşağı ve spin-yukarı durumları için elektronik bant yapısı ve durum yoğunlukları eğrilerini elde etmek ve tartışmak,
- iv) Elastik özelliklerini incelemek,
- v) Fonon spektrumlarını simetri yönleri boyunca hesaplanması amaçlanmıştır.

Bu tez Os_2YPb ($\text{Y}=\text{Sc, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn}$) alaşımlarının L2_1 yapısı için yukarıda sayılan (iii), (iv) ve (v) özelliklerini sunan ve tartışan ilk çalışmadır. Özellikle elde edilen fonon spektrumlarının incelenmesi ısısal genleşme, ısı iletimi, ısı sığası ve elektron fonon etkileşimi için oldukça önemlidir. Ayrıca termal genleşme, ısı iletimi, öz ısı ve elektron-fonon etkileşimi gibi malzemeye ait fiziksel özelliklerin belirlenmesinde çok önemli olan fonon frekanslarını Os_2YPb ($\text{Y}=\text{Sc, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn}$) alaşımları için bulmak ve bunlara ait eğrileri çizdirmek ve bunları kendi aralarında değerlendirmektir.

Son yıllarda teknolojinin gelişmesiyle bilgisayarların hesaplama kapasiteleri artırılmıştır. Böylelikle malzemelerin birçok fiziksel özellikleri teorik olarak Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi (YFT) üzerine kurulu olarak temel ilke (First-principle) metoduyla araştırılmaktadır.

Bu tez çalışmasında kübik yapıdaki Heusler bileşiklerinin yapısal parametreleri hesaplanacak, elektronik bant yapıları belirlenecek, elastik ve titreşim özellikleri araştırılarak elastik sabitler ve fonon dağılım eğrileri çizdirilecektir. Bu işlemler, Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi'ni temel alan Material Desing (MedeA) paket programı kullanılarak, Genelleştirilmiş Gradyent Yaklaşımı (GGY) ve Yerel Yoğunluk Yaklaşımı (YYY) ile

yapılmıştır. Bu tez çalışmasında, bu metodu kullanan (MedeA ve Phonon) lisanslı bilgisayar programları kullanılmıştır.





2. KURAMSAL TEMELLER

N tane parçacık, ağır pozitif yüklü çekirdek ve hafif negatif yüklü elektronların birleşimini içeren sistemler, çok parçacık sistemi olarak bilinir. Çok parçacıklı sistemlerin durumu zamandan bağımsız Schrödinger dalga denkleminin çözümü ile dir.

$$H\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N, \vec{R}_1, \vec{R}_2, \dots, \vec{R}_N, s) = E\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N, \vec{R}_1, \vec{R}_2, \dots, \vec{R}_N, s) \quad (2.1)$$

Burada E sistemin enerjisi ve $\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N, \vec{R}_1, \vec{R}_2, \dots, \vec{R}_N, s)$, çok parçacıklı sistemin dalga fonksiyonudur. Bu problemin çözümünün zorluğundan dolayı, çözümü için teori ve yaklaşımlara ihtiyaç duyulmaktadır [2].

2.1. Dalga Fonksiyonu Yaklaşımı

Bu yaklaşımda molekül geometrisinin ve molekül frekanslarının hesaplanması için uygundur [3]. Dalga fonksiyonu yaklaşımında temel değişken olarak dalga fonksiyonu kullanılmaktadır. Hartree Teorisi ve Hartree-Fock (HF) Teorisi bu yaklaşımın temelini oluşturur [4].

2.1.1. Hartree yaklaşımı

Çok elektronlu sisteme ait Hamiltonyen denkleminin çözümünü öngören yöntemlerden biridir. Yöntem ilk olarak Hartree tarafından 1928 yılında ortaya atılmış [5], daha sonradan V. Fock ve J.C.Slater tarafından geliştirilmiştir [6].

Elektron dalga fonksiyonlarının her biri, çarpım şeklinde çok-elektron dalga fonksiyonunu oluşturur. Bu denklemler zamandan bağımsız Schrödinger denklemine oldukça benzer. Hartree, kristal içindeki elektronları yaklaşık olarak tek-parçacık halinde düşünür. Diğer elektronların hareketi sistemin elektron dağılımının zaman ortalamasıyla yakından ilgilidir. Bu önemli faktör, her bir elektronu tek parçacık olarak düşünülmesini ortaya koyar. Çok elektronlu sistemin Schrödinger denkleminin Hamiltonyeni,

$$-\frac{\hbar^2}{2} \sum_i^n \frac{\nabla_i^2}{m_e} + \frac{1}{8\pi\epsilon_0} \sum_i^n \sum_{j \neq i}^n \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_i^n \sum_j^n \frac{e^2 Z_j}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \quad (2.2)$$

şeklindedir. Hartree yaklaşımında [7, 8], çok elektronlu sistemin dalga fonksiyonu, tek elektron dalga fonksiyonlarının çarpımı olarak yazıldığında dalga fonksiyonu,

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) = \prod_{i=1}^N \psi_i(\vec{r}_i) \quad (2.3)$$

olur. Burada potansiyele, Hartree potansiyeli şeklinde bir katkı eklenir. Hartree potansiyeli,

$$V_H(\vec{r}) = - \int d\vec{r}' \frac{r(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \quad (2.4)$$

şeklindedir. Hartree potansiyelindeki herhangi bir i elektronuna etkiyen yoğunluk terimi,

$$\rho(\vec{r}) = \sum_{i \neq j} |\psi_j(\vec{r})|^2 \quad (2.5)$$

Şeklinde olur ve Hamiltonyen, Sonuç olarak

$$\left[-\frac{1}{2} \nabla_i^2 + V(\vec{r}) \right] \psi(\vec{r}) + \sum_i \int d\vec{r}' \frac{|\psi_j(\vec{r}')|^2}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \psi(\vec{r}) = \epsilon_i \psi(\vec{r}) \quad (2.6)$$

şeklini alır.

Hartree yaklaşımında dalga fonksiyonu, tek tek elektronların dalga fonksiyonlarının çarpımı olarak yazıldığı için herhangi iki elektronun yer değiştirmesi fark etmeyeceğinden,

simetrik kalır. Bu da Hartree yaklaşımının geçersiz kaldığının göstergesidir. Zira Pauli ilkesine göre bu durumda elektronik dalga fonksiyonu anti-simetrik olmalıdır.

2.1.2. Hartree – Fock yaklaşımı

Hartree yaklaşımının [7, 8] eksikliğinden yola çıkarak anti-simetrik dalga fonksiyonları kullanılmıştır. Bu önerinin başlamasıyla değişim ilkesi boyunca sistem için, Hamiltonyen denklemini açıklamak tekrar mümkün hale gelmiştir.

Sistemin dalga fonksiyonu, anti-simetri özelliğini sağlayacak şekilde seçilmelidir. Pauli ilkesi gereği, elektronlardan oluşan sistemin dalga fonksiyonları, iki elektronun yer değiştirmesi altında, anti-simetriktir.

$$\psi(\dots, \vec{r}_i, \dots, \vec{r}_j, \dots) = -\psi(\dots, \vec{r}_j, \dots, \vec{r}_i, \dots) \quad (2.7)$$

Bu yaklaşımda dalga fonksiyonu, Hartree dalga fonksiyonundan daha karmaşıktır. Fakat bu fonksiyon Slater determinantı [9] ile tanımlanabilir.

$$D(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_1(\vec{r}_1) & \psi_2(\vec{r}_1) & \dots & \psi_N(\vec{r}_1) \\ \psi_1(\vec{r}_2) & \psi_2(\vec{r}_2) & \dots & \psi_N(\vec{r}_2) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_1(\vec{r}_N) & \psi_2(\vec{r}_N) & \dots & \psi_N(\vec{r}_N) \end{vmatrix} \quad (2.8)$$

Slater determinantı [9] ile denklem değişken olacak ve toplam enerjiyi minimize eden bir deneme dalga fonksiyonu kullanılacaktır. Böylece denklem,

$$\left[-\frac{1}{2} \nabla_i^2 + V_i(\vec{r}) \right] \psi(\vec{r}) + \sum_i \int d\vec{r} \frac{|\psi_j(\vec{r})|^2}{|\vec{r}-\vec{r}'|} \psi(\vec{r}) - \sum_j \delta_{\alpha_i \alpha_j} \int d\vec{r} \frac{\psi_i(\vec{r}) \psi_j(\vec{r})}{|\vec{r}-\vec{r}'|} = \varepsilon_i \psi(\vec{r}) \quad (2.9)$$

olur. Burada son terim deęiş-tokuş terimidir, α_i ve α_j spinleri aynı olduęunda sıfırdan farklıdır.

Hartree-Fock metodu [10, 11] elektronlar arasındaki korelasyonu göz önüne almamıştır ve deęiş-tokuş terimi yerel deęildir. Hartree-Fock denkleminin çözümü oldukça zordur ve hesaplanması da Yoęunluk Fonksiyoneli Teorisine göre oldukça uzundur. Bu yüzden molekül özelliklerinin belirlenmesinde YFT daha kolaydır.

2.2. Born – Oppenheimer Yaklaşımı

1927 yılında yeni keşfedilmeye başlanan kuantum kimyasının ilk yıllarında Born ve Oppenheimer tarafından önerilmiştir [12, 13]. Elektron ve çekirdek kütleleri ayrı şekilde incelenir. Çekirdek kütlelerinin ağır olması, elektron kütlelerinin ise daha az olması yüzünden çekirdeęi sabit olarak, elektronu hareketli kabul etmemizi gerektirir.

Böylece Hamiltonyen ;

$$-\frac{\hbar^2}{2} \sum_i^n \frac{\nabla_i^2}{m_e} + \frac{1}{8\pi\epsilon_0} \sum_i^n \sum_{j \neq i}^n \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_i^n \sum_j^n \frac{e^2 Z_j}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \quad (2.10)$$

şeklindedir. Burada ilk terim elektronun kinetik enerjisi, ikinci terim Coulomb potansiyeli iken üçüncü terim ise, çekirdek potansiyelidir. Sonuç olarak Hamiltonyen,

$$H = T_{elektron} + V_{coulomb} + V_{çekirdek} \quad (2.11)$$

halini alır. Bu yaklaşım, elektron ile çekirdeğin hareketinin birbirinden bağımsız olduęu zamanlarda geçerli deęildir.

2.3. Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi (YFT)

Çok elektronlu sistemlerin temel durum özelliklerini belirleyebilmek için kolaylık sağlayan bir yaklaşım olan Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi'nin temeli, 1927'li yıllarda Thomas ve Fermi tarafından yapılan çalışmaları [14] temel alan Hohenberg ve Kohn teoremleri [15] ile onun devamı olan Kohn–Sham teoremlerine dayanmaktadır [16]. Teorem çok elektronlu sistemlerin taban durum özelliklerini belirlemek için dalga fonksiyonu yerine elektron yük yoğunluğunu temel değişken kabul eder. Özellikle Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi metallerin, yarıiletkenlerin ve yalıtkanların taban durum özelliklerini tanımlamak için oldukça başarılı bir yaklaşımdır.

Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi, temel durumdaki herhangi bir çok parçacık sisteminin dalga fonksiyonu yerine elektron yoğunluğunu kullanır. Bir dış potansiyelden elektron yoğunluğunu değerlendiren metot tanımlamak istendiğinde, sistemin Schrödinger denkleminin çözülmesi gerekmektedir. Böylece çok elektronlu sistemlerin serbestlik derecesi büyük olacağından, bu denklemin çözümü oldukça karmaşık olacaktır. Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi Schrödinger denkleminin çözümü dışında, taban durum özelliklerini açıklamak için de oldukça iyi bir teorik çerçevedir. Bu bölümde öncelikle çok cisim problemi Born-Oppenheimer ve Hartree-Fock yaklaşımları açıklanmıştır.

2.4. Yerel Yoğunluk Yaklaşımı (YYY)

Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisinde, değiş-tokuş bağlanma enerjisini belirlemek için kullanılan yöntemdir. Bu yöntemde hem kolay hesaplama hem de doğru sonuç söz konusudur.

Yerel Yoğunluk Yaklaşımında sistemdeki her bir noktanın, eşit elektron yoğunluğuna sahip olduğu ve birbirleri ile etkileştiği kabul edilir. Burada değiş-tokuş enerjisi,

$$E_{d-t}^{YYY} = \int \rho(r) E'_{d-t}(\rho) d^3r \quad (2.12)$$

şeklindedir.

ρ yoğunluklu sistemin parçacık başına düşen enerji E'_{d-t} olarak tanımlanır [17].

Yerel Yoğunluk Yaklaşımı, homojen yoğunluklu sistemlerde kullanılmış fakat homojen olmayan sistemlerde de doğruya yakın sonuç verdiği belirlenmiştir [18]. YYY' nın eksik olduğu yönleri,

- Uyarılmış enerji durumları, yarıiletkenlerde ve yalıtkanlarda yasak bant aralıkları gerçek değerinin altındadır. Bu sürpriz değildir. Çünkü YFT temel durum seviyesini baz alır.
- Kohesiv enerjiler gerçek değerinin üzerinde çıkarken örgü sabitleri gerçek değerinin altında çıkar. Bu yaklaşık olarak %3 kadardır.
- Bazı manyetik sistemler için gerçek olmayan uyarılmış durumlar belirlenir.
- Van der-Waals etkileşimleri YYY ile uygun bir şekilde tanımlanamaz, şekildedir.

2.5. Genelleştirilmiş Gradyent Yaklaşımı (GGY)

Moleküller içinde yoğunluk oldukça hızlı değişmektedir. Bu yüzden Yerel Yoğunluk Yaklaşımı ötesinde bir yaklaşım, Genelleştirilmiş Gradyent Yaklaşımı gerekir. Yoğunluğun boşluktaki değişimini de göz önüne alan yaklaşım şeklidir. Yerel Yoğunluk Yaklaşımına göre bağ uzunluğu ve toplam enerji hesabında daha iyi sonuçlar verir.

Genelleştirilmiş Gradyent Yaklaşımı, elektron yoğunluğunun artış yönüne göre değiş-tokuş enerjisinin durumunu belirler [19, 20, 21]. Spin-polarize etkileri göz önüne alınmayan bir sistem için GGY' de değiş-tokuş korelasyon enerjisi:

$$E_{d-t}^{GGY}[\rho] = \int f(r, \vec{\nabla}[\rho(r)])\rho(r)d^3r \quad (2.13)$$

İfadesi ile verilir [22].

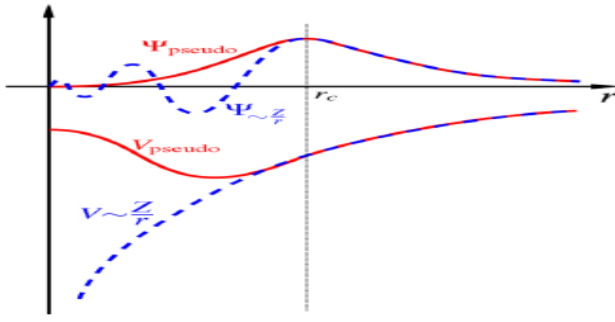
2.6. Pseudo Potansiyeli (PP)

İlk olarak 1966'da Harrison açıklamış [23] ve daha sonra 1970'de Cohen ve Heine tarafından araştırılmıştır [24]. Pseudo (Sanki) potansiyel metodu, dalga fonksiyonu hesabında oldukça kullanışlıdır [25]. Radyal Kohn-Sham denklemi çözülerek yapılır:

$$\left\{ -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{2r^2} + V[\rho; r] \right\} r R_{nl}(r) = \varepsilon_{nl}(r) R_{nl}(r) \quad (2.14)$$

$$V[\rho; r] = -\frac{Z}{r} + V_{Hartree}[\rho; r] + V_{d-t}^{YYY}[\rho(r)] \quad (2.15)$$

Burada $\rho(r)$, radyal dalga fonksiyonları için toplam elektron yoğunluğu, $V_{Hartree}$ Hartree potansiyeli, V_{d-t}^{YYY} Yerel Yoğunluk Yaklaşımı (YYY) altında değiş-tokuş potansiyelidir.



Şekil 2.1. Pseudo potansiyel ve Pseudo dalga fonksiyonu

2.7. Hohenberg ve Kohn Yaklaşımı

Hohenberg ve Kohn, 1964 yılında çok-cisim sistemini tam olarak çözen Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi'ni formüle etmişlerdir [15]. Bir dış potansiyel altında temel değişken olarak dikkate alınan elektron yoğunluğunun, tek parçacık probleminin temeli olan yük yoğunluğunun bir fonksiyonu olarak ifade edilebileceğini kanıtladılar.

YFT de, ana değişken $\rho(\vec{r})$ yoğunluğunun seçilmesi fikri, herhangi bir atom veya molekül sisteminin Hamiltonyenini, çekirdek yükleri (Z_k), uzaydaki çekirdeğin konumu (R_k) ve elektron sayısı (N) tarafından tanımlanmasıdır. M çekirdek ve N elektrondan oluşan bir sistem için, atomik birimler ($m = \hbar = e = 1$) cinsinden temel Hamilton

$$H = H_{elektron} + H_{çekirdek} \quad (2.16)$$

$$H_{elektron} = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \nabla_i^2 - \sum_{i=1}^N \sum_{k=1}^M \frac{Z_k}{r_{ik}} + \sum_{i=1}^N \sum_{j>i}^N \frac{1}{r_{ij}} \quad (2.17)$$

$$H_{\text{çekirdek}} = -\frac{1}{2} \sum_{k=1}^M \frac{1}{M_k} \nabla_k^2 + \sum_{k=1}^M \sum_{l>k}^M \frac{Z_k Z_l}{R_{kl}} \quad (2.18)$$

olarak yazılır.

Çekirdek kütlesi, elektron kütlesinden daha fazla olması nedeniyle çekirdek daha az hareketlidir. Bu nedenle elektronlar sabit çekirdek alanında hareket ediyormuş gibi düşünülebilir. Bu Born-Oppenheimer yaklaşımı olarak bilinir. Çekirdek uzayda hareketsiz ise kinetik enerjileri sıfırdır ve çekirdek-çekirdek itmelerinden dolayı potansiyel enerjileri sabittir. Sonuç olarak Hamiltonyen, $H_{elektron}$ elektronik Hamiltonyene indirgenir. Böylece sistemin çözümü sadece elektronik dalga fonksiyonudur. Bu durum öz değer problemine dönüşür

$$H_{elektron} \Psi_{elektron} = E_{elektron} \Psi_{elektron} \quad (2.19)$$

Tüm parçacıkların temel durum enerjisi elektron yük yoğunluğunun $\rho(\vec{r})$ 'nin bir fonksiyonu olduğu ortaya çıkıyor. Buradan temel durum enerjisi, $\rho(\vec{r})$ yük yoğunluğu terimine bağlı olarak iki kısma ayrılır.

$$E[\rho] = \int V(\vec{r}) \rho(\vec{r}) d\vec{r} + F[\rho] \quad (2.20)$$

Burada, $F[\rho] \equiv \langle \psi | T + U | \psi \rangle$ eşitliğindedir. $F[\rho]$, Hohenberg-Kohn fonksiyonu olarak adlandırılır. Herhangi bir dış potansiyel ve herhangi bir parçacıkların sayısı için geçerli olan genel bir fonksiyondur [16]. Sistemin temel durum enerjisini ortaya çıkarır.

2.8. Kohn – Sham Denklemleri

1965 yılında, Kohn ve Sham, Hamilton denklemlerinde düzenlemeye giderek yeniden yazmışlardır [16]. Bu denklemler, etkin bir potansiyel içinde hareket eden bağımsız parçacıkları ifade eden denklemlerdir .

Normalde birbirleri ile etkileşmeyen elektronları, sanki etkileşiyormuş gibi varsayan ve Shrödinger denklemlerinden elde edilen denklemlerdir. Kohn-Sham denklemlerinin çözümü, neredeyse tümü doğru kinetik enerjiyi içeren, birbiri ile etkileşmeyen parçacıklar için, tam kinetik enerjiyi verir. Sistemin temel durum özelliklerini içeren Schrödinger denklemi,

$$H\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) = E\psi \quad (2.21)$$

$$\left[-\sum_i \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2(\vec{r}_i) + V_{dış}(\vec{r}_i) + \frac{e^2}{2} \sum_{i \neq j} \frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \right] \psi = E\psi \quad (2.22)$$

ile verilir. Burada $\vec{r}_j$ parçacıkların koordinatlarını ve spinlerini belirtir. Temel durumda sistemin herhangi bir fiziksel özelliği, elektron yoğunluğunun fonksiyonu olarak,

$$E[\rho] = \min \left(F[\rho] + \int V_{dış}(\vec{r}) \rho(\vec{r}) d\vec{r} \right) \quad (2.23)$$

haline gelir. Burada $\int \rho(\vec{r}) d\vec{r} = N$ toplam elektron sayısını verir, sabit değerdir. $F[\rho]$, $V_{dış}(\vec{r})$ potansiyelinden bağımsız genel bir fonksiyondur. $\rho(\vec{r})$ yoğunluklu etkileşmeyen

elektron sisteminin kinetik enerjisi olarak tanımlanan $T_0[\rho]$ terimi cinsinden $F[\rho]$ fonksiyonu,

$$F[\rho] = T_0[\rho] + \frac{e^2}{2} \int \frac{\rho(\vec{r})\rho(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d\vec{r} d\vec{r}' + E_{d-t}[\rho] \quad (2.24)$$

Burada $E_{d-t}[\rho]$, deęiş tokuş baęlanma enerjisidir. Denklemler yerine konulduęunda Scrödinger denkleminin son hali,

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{K-S}(\vec{r}) \right] \psi_i(\vec{r}) = \varepsilon_i \psi_i(\vec{r}) \quad (2.25)$$

V_{K-S} , Kohn-Sham potansiyelidir, matematiksel olarak

$$V_{K-S}(\vec{r}) = V_{elektron}(\vec{r}) + e^2 \int \frac{\rho(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d\vec{r}' + v_{d-t}(\vec{r}) \quad (2.26)$$

şekildedir.

$$\rho(\vec{r}) = \sum_i |\psi_i(\vec{r})|^2 \quad (2.27)$$

$$v_{d-t}(\vec{r}) = \frac{\delta E_{d-t}(\rho)}{\delta \rho(\vec{r})} \quad (2.28)$$

Bu iki denklem, Kohn – Sham denklemleri [16] olarak bilinir. Etkileşmeyen parçacıkların sistemini tanımlar. Bu denklemler çok-elektron sistemlerinin özelliklerini tam olarak açıklar.





3. TEORİ VE METOTLAR

3.1. Heusler Alaşımları

Heusler alaşımları, geniş bir yelpazede ilginç fiziksel özellikler sergileyen malzemelerden oluşmaktadır. Ferromanyetik özellik gösteren bu alaşımlar, metal ya da yarı metalik özellik göstermektedirler. Bazı Heusler alaşımları kristalografik tersinir, ısısal esnek, Martensit geçiş gösterdiklerinden şekil hafıza alaşımları olarak da adlandırılmaktadırlar [26, 27]

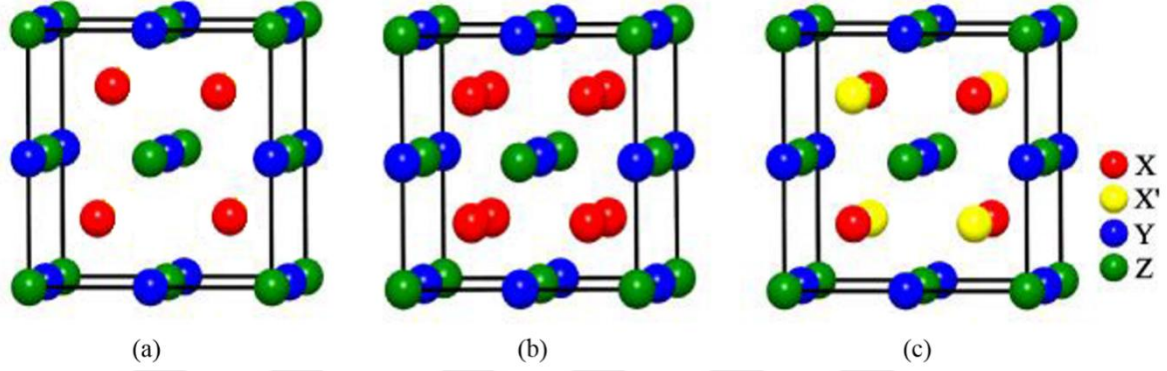
Heusler tipi alaşımlar, stokiyometrik kompozisyonu X_2YZ ve kristal yapısı $L2_1$ tipinde kübik yapı olan üçlü bileşiklerdir. Heusler alaşımlarını iki farklı gruba ayrılabilir. Bunlar X_2YZ formunda, $L2_1$ yapısındaki tam Heusler alaşımları ve XYZ formunda, $C1_b$ yapısındaki yarı-Heusler alaşımlarıdır. X ve Y elementleri periyodik tablonun geçiş metali grubundan iken Z elementleri periyodik tablonun III-V grubunun elementidir [26]. Heusler alaşımlarının birim hücresi, orijinleri $(0,0,0)$, $(1/4,1/4,1/4)$, $(1/2,1/2,1/2)$ ve $(3/4,3/4,3/4)$ noktalarında bulunan dört tane iç-içe girmiş fcc alt örgüsü şeklindedir.

Heusler sistemlerindeki alaşımların kristal yapıları L notasyonu ile gösterilmektedirler. $L2_1$ yapısındaki atomlar yüzey merkezli kübik örgüdeki atomların yerlerindedirler. Bu bileşikler metalik özellik göstermekle beraber manyetik momentleri de belli bir yönelimde olan manyetik alaşımlardır. Bu da dış manyetik alan tarafından alaşımların kristal yapısının ve boyutun değiştirilmesine olanak sağlamaktadır [27].

Yapısal geçiş sıcaklığı yakınlarında manyetik alanın etkisiyle alaşımların kristal yapısı değişmektedir. Manyetik ve yapısal geçiş sıcaklıkları birbirine yaklaştırıldığı zaman, manyetik ve yapısal faz geçişlerinin manyetik entropi değişimine katkısı olmaktadır. Manyetik ve yapısal faz geçişinin birleştiği bu olgu katı hal fiziğinde çok nadir görülen bir durumdur. Bu da malzemelerde ilginç özelliklerin ortaya çıkmasına önayak olmaktadır [28].

Heusler alaşımlarının birim hücresinde bulunan elementler; tam Heusler alaşımları için X atomu $(3/4, 3/4, 3/4)$ ve $(1/4, 1/4, 1/4)$, Y atomu $(1/2, 1/2, 1/2)$ ve Z atomu ise $(0, 0, 0)$ pozisyonlarında olacak şekilde iç içe geçmiş dörtlü fcc alt örgüden oluşur. Yarı Heusler

alaşımları için $(3/4, 3/4, 3/4)$ pozisyonları boştur ve dörtlü Heusler alaşımları için ise yarı Heusler alaşımlarındaki boş olan pozisyonlara X' atomu yerleşir. Şekil 3.1'de yarı, tam ve dörtlü Heusler tipi yapılar görülmektedir.



Şekil 3.1. Heusler alaşımlarının kristal yapısı a) yarı, b) tam ve c) dörtlü Heusler alaşımları.

3.1.1. Manyetik özellikler

Eksi yüklü parçacık olan elektronun spin hareketi nedeniyle elektron bir manyetik momente sahiptir. Elektronun spininden dolayı oluşan manyetik moment dış manyetik alandan etkilenir. Elektronların orbitallere dağılımı ise malzemelerin manyetik özelliğini belirlemede etkilidir.

Pauli ilkesine göre bir orbitalde aynı yönelime sahip iki elektron bulunamayacağından iki elektron zıt spinli olarak bulunur, çiftlenmiş elektronların spin manyetik momentleri karşıt yönlü olacağı için birbirinin etkisini yok eder.

Orbitallerinde çiftlenmemiş elektron bulunan maddeler paramanyetiktir ve dışarıdan uygulanan alanla aynı yönde hafif bir yönlenme oluşur.

Orbitallerindeki tüm elektronları çiftlenmiş olan maddeler ise diyamanyetik özellik gösterir ve dışarıdan uygulanan alana elektronların manyetik momentlerinden dolayı hafif ters yönde yönlenme oluşur.

Bir kristal yapıda paramanyetik atomların çiftlenmemiş elektronları paralel spinli olarak yönelirlerse, birbirlerine paralel olan spin manyetik moment vektörlerinin bileşkesi çok kuvvetli bir manyetik alan meydana getirir. Böyle maddelere ise ferromanyetik madde denir ve dışarıdan uygulanan manyetik alan kaldırıldığında manyetizasyon korunur.

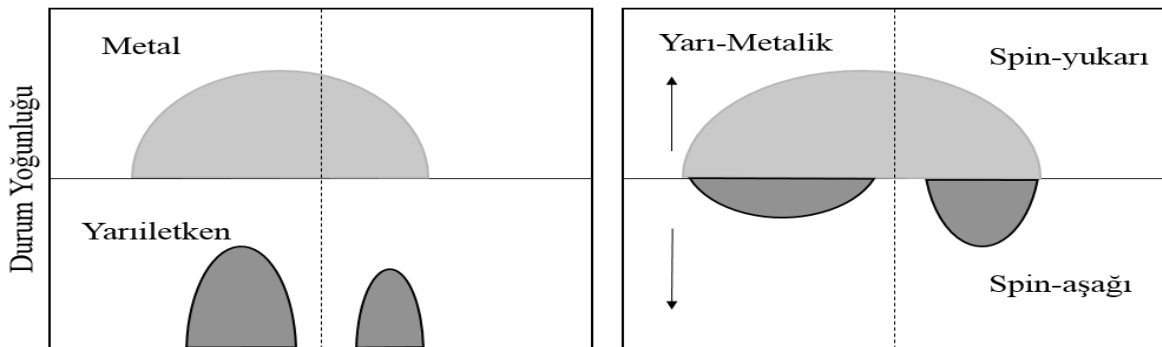
Kristal yapıdaki paramanyetik atomlar, spin manyetik momentleri birbirinin etkisini yok edecek şekilde dizilmişlerse, madde antiferromanyetik özellik gösterir ve net bir manyetizasyon oluşmaz. Geçiş metallerinin kısmen dolu d orbitallerindeki elektronlar bu özelliklere sahip maddelerin oluşmasına neden olur. Bir geçiş metalinin oluşturduğu yapının (bileşik veya alaşım) manyetik özelliğinin bilinmesi, maddenin yapısı hakkında bilgi verir [29].

3.1.2. Yarı metalik ferromanyetler

Yarı-metalik ferromanyetler, hem metalik hem de yalıtkan veya yarı iletken özellik gösteren malzemeler olarak nitelendirilir. Bu tür malzemelerin temel özelliği ise sahip oldukları iki spin bandının farklı davranışlara sahip olmasından kaynaklanmaktadır.

Örneğin; spin yukarı bandı tipik bir metalik davranış sergilerken spin aşağı bandı ise yarıiletken özellik sergiler bu durum Şekil 3.2’de açıkça görülmektedir. Bu nedenle, spin polarizasyonu Fermi seviyesinde %100’dür.

Yarı-metalik ferromanyetler bu özelliğinden dolayı araştırmacıların oldukça ilgisini çekmektedir. Çünkü yarı-metalik ferromanyetler spin-elektronuğu olarak da bilinen spintronik cihazlarındaki uygulamalar için uygun malzemelerdir [30].



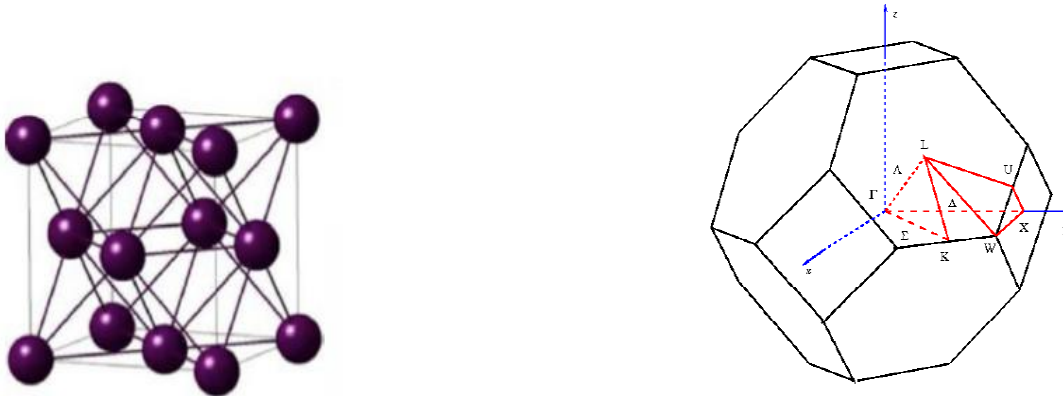
Şekil 3.2. Metal, yarıiletken ve yarı-metalik malzemelerin durum yoğunluğu

Şekil 3.2'deki gibi yarı-metalik ferromanyetler Fermi seviyesi civarında spin aşağı durumunki yasak enerji aralığından dolayı oldukça ilgi çekici özellikler gösterir. Bunlara, birim formül başına tam spin moment, iletkenlik Fermi seviyesinin bir özelliği olduğu için sadece spin yukarı elektronlarının iletkenliğe sahip olması ve manyetik alan ile bir bant kayması spin yukarı ve spin aşağı durumlarının dolumunu değiştirmeyeceği için boyuna spin doygunluğun sıfır olması gibi örnekler verilebilir [30].

3.1.3. Yüzey merkezli kübik (fcc) örgünün temel simetri noktaları

Ters örgünün orijininin çizilen ters örgü vektörlerini ortadan kesen düzlemlerin oluşturduğu en küçük hacim birinci Brillouin bölgesi olarak adlandırılır. Ayrıca, bu hacim ters örgüde Wagner-Seitz ilkel hücresi olarak bilinir. Bir örgü noktası ile en yakın komşularını birleştiren çizgileri dik olarak ortalarından kesen düzlemlerin oluşturduğu ve yalnızca merkezinde bir örgü noktası içeren yapılar Wagner-Seitz ilkel hücresi olarak adlandırılır [31].

Şekil 3.3'de fcc örgü için birinci Brillouin bölgesi ve temel simetri noktaları görülmektedir. Bu noktaların koordinatları ters örgüde aşağıdaki gibidir. İndirgenmiş Brillouin bölgesindeki temel simetri yönleri ise, " $\Delta = \Gamma - X$; $\Lambda = \Gamma - L$; $\Sigma = \Gamma - K$ " doğrultusundadır. Aynı zamanda, iç içe geçmiş fcc örgüleri içeren Heusler alaşımları için de buradaki durumlar geçerlidir.



Şekil 3.3. fcc yapı için birinci Brillouin bölgesi ve temel simetri noktaları.

Burada temel simetri noktaları; K: İki altıgen yüzeyin birleşme noktasının ortası, L: Altıgen yüzeyin merkezi, U: Bir altıgen, bir kare yüzeyin birleştiği kenarın orta noktası, W: Köşe nokta, X: Kare yüzeyin merkezidir. Bu noktaların koordinatları ters örgüde;

$\Gamma (0, 0, 0)$	$L (1/2, 1/2, 1/2)$
$X (0, 1/2, 1/2)$	$W (1/4, 1/2, 3/4)$
$K (3/8, 3/8, 3/4)$	$U (1/4, 5/8, 5/8)$

Noktalar (g_1, g_2, g_3) :

$$\Gamma(0,0,0); L\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right); X\left(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}\right); W\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{4}, \frac{3}{4}\right); K\left(\frac{3}{8}, \frac{3}{8}, \frac{3}{4}\right); U\left(\frac{1}{4}, \frac{5}{8}, \frac{5}{8}\right)$$

şeklindedir.

3.2. Materials Design (MedeA) Paket Programı

Genel olarak Materials Design (MedeA) paket programının kademeli mimarisi grafik kullanıcı ara yüzü (ana kademe), iş sunucusu (orta kademe) ve görev sunucusu (son kademe) olmak üzere üç kademedan oluşur [32].

Orta katman veya iş sunucusu, bilgisayarlı hesaplamanın iş kontrolü, iş önileme ve iş sonrası işleme merkezidir. İş sunucusu iş ile ilgili verilerin SQL veri tabanını ve varsayılan olarak hesaplamalı sonuçları makine üzerinde saklı tutar [32].

MedeA GUI ve görev sunucuları arasında doğrudan bir iletişim yoktur bunun yerine tüm veri akışları iş sunucusu üzerinden olur [32].

MedeA, iş sunucusu ve görev sunucuları hem Windows hem de Linux işletim sistemlerinde çalışabilen VASP, LAMMPS ve GIBBS gibi hesaplama kodlarını çalıştıran bir yükleme görüntüsü yüklemeye olanak tanır [32].

MedeA ortamı, materyallerin kısıtlı veya kısmen kullanılabilir deneysel ve teorik verilerin hesaplanması ve malzeme özelliklerine hızlı erişim sağlamak amacıyla tasarlanmıştır.

Ayrıca, deneysel verilerin araması ve geri alınması, yapı oluşturma, hesaplamaların kurulması, veri görselleştirme ve analiz gibi grafik kullanıcı ara yüzleri içerir [32].

Malzemelerin artan karmaşıklığı ve endüstriyel cihazlarda kullanılan sistemlerin azalan ölçeği göz önüne alındığında, belirleyici deneyler genellikle zaman alıcı ve pahalıdır. Bundan dolayı hesaplamalar tasarım ve deneyleri yorumlamada yardımcı olabilir. Ancak karmaşık bir deneyi gerçekleştirmek gibi hesaplamalarda, bilimsel ve teknik titizlik, hassasiyet ve dikkatli bir analiz gerektirir.

MedeA aşağıdaki nitelikleri elde etmede yardımcı olur,

- Hesaplamalar için başlangıç noktaları olarak deneysel verileri sağlar.
- Yapı analizi ve yapı oluşturma için endüstriyel nitelikli rutinelere erişim sağlar.
- Varsayılan ve yakınsama testlerinin tam bir setiyle üst düzey hesaplama kodları kullanır.
- Karmaşık çok adımlı hesaplamaları sırasıyla çözer.
- Güçlü bir iş yöntemi ve veri işleme paradigması kullanılarak binlerce hesaplama için olanak sağlar.

Bu tez çalışmasında yapılan tüm hesaplamalarda MedeA paket programı tarafından arka planda VASP [33, 34] kodları kullanıldı. Ayrıca elastik özelliklerini hesaplamada MT modülü [35] ve titreşim özelliklerini hesaplamada ise PHONON modülü [36] kullanıldı.

3.3. VASP Program Paketi

Yoğunluk fonksiyonel teorisine dayanan VASP program paketi [33, 37-39] ismini; Vienna Ab initio Simulation Package'in baş harflerinden almaktadır.

VASP'ın temeli Mike Payne tarafından oluşturulan bir programa dayanır [40].

Kısaca; VASP program paketi, yoğunluk fonksiyonel teorisi içerisinde pseudo potansiyeller, düzlem dalga temel setleri, PAW metodu ve iz düşümsel birleştirilmiş dalga

(Projector augmented-wave, PAW) kullanarak ab initio kuantum mekaniksel ve moleküler dinamik simülasyonları yapabilen kompleks bir paket programdır [41].

VASP program paketi diğer ab initio paket programlar (quantum-ESPRESSO, CASTEP, vb.) gibi yerel yoğunluk yaklaşımı (LDA) ve genelleştirilmiş gradyent yaklaşımına (GGY) göre oluşturulan pseudo potansiyelleri kullanır.

Ayrıca, elektron-iyon etkileşmelerinden kaynaklanan potansiyel ifadesini tanımlamak için PAW metodu veya ultra-soft vanderbilt pseudo potansiyeli (US-PP) kullanır. Kullanılan bu metotlar sayesinde atom başına düşen düzlem dalga sayısında büyük bir azalma sağlanır. Bunların yanı sıra, bir kristal sisteminin elektronik temel durumları bulurken geleneksel öz uyumlu alan (SCF) ve geometrik optimizasyon da en hızlı algoritma olarak kabul edilen RMM-DISS ve Blocked Davidson algoritmalarını kullanır [40].

VASP; yapısal, mekanik, dinamik, optik, termodinamik ve manyetik özellikler, moleküler dinamik, geçiş-durum araştırması, atomik kuvvetler, Born etkin yük tensörü, durgun dielektrik tensör, piezoelektrik tensör ve iç zorlama tensörü gibi temel fiziksel özellikleri başarılı bir şekilde hesaplayabilir.

VASP'ta hesaplama yapmak için INCAR, POSCAR, POTCAR ve KPOINTS olmak üzere, dört giriş dosyaya ihtiyaç vardır. INCAR; farklı özellikler için farklı giriş parametreleri, POSCAR; atomik pozisyonları, Bravais örgüsü ve periyodik sınır şartları, KPOINTS; paralelleştirme için kullanılacak k-noktaları değerleri, POSCAR; VASP için hesaplamada kullanılan pseudo potansiyelleri içerir.

Hesaplamadan sonra ise OUTCAR, OSZICAR, CONTCAR, CHGCAR, WAVECAR, EIGENVAL, PROCAR, XDATCAR, LOCPOT ve DOSCAR çıkış dosyaları oluşur.

3.4. MT Modülü – Elastik Özellikler

MT modülü; MedeA üzerine kurulu olan VASP program paketini kullanarak, elastik sabitleri, diğer mekanik özellikleri ve termodinamik özellikleri Debye modeline göre hesaplayan bir programdır [35]. MT modülü hesaplamalarda aşağıdaki üç adımı izler.

- Kristal simetrine uygun bir şekilde elastik sabitlerini elde etmek için uygulanacak olan zorlanmayı yönlerine göre üretir.
- Zorlamanın uygulandığı her bir hücre için VASP'ta hesaplamalar yapılır.
- Hesaplama sonuçlarına göre elastik sabitlerini analiz eder. Buna ek olarak elastik modülleri, ses hızları ve aynı zamanda Debye modeline göre termodinamik özellikleri rapor eder.

Hesaplama yaparken daha iyi sinyal almak için kullanılan en önemli parametre zorlanma miktarıdır [32]. Bu tez çalışmasında, zorlanma (stress) miktarı 0,005 olarak alınmıştır. Ayrıca k-noktaları 21x21x21 şeklinde kullanılmıştır.

3.4.1. Elastik sabitlerin tanımı

Bir kristalin elastik sabitlerini belirlemek için, bir gerilme matrisi kullanılarak bozulmamış $R = (a, b, c)$ değiştirilerek $R' = (a', b', c')$ bravais örgü vektörleri tarafından birim hücrenin deformasyonunu oluşturur [32].

$$R' = R \begin{pmatrix} 1 + e_{xx} & \frac{1}{2}e_{xy} & \frac{1}{2}e_{xz} \\ \frac{1}{2}e_{yx} & 1 + e_{yy} & \frac{1}{2}e_{yz} \\ \frac{1}{2}e_{zx} & \frac{1}{2}e_{zy} & 1 + e_{zz} \end{pmatrix} \quad (3.1)$$

Deformasyon kristalin toplam enerjisinde değişikliğe yol açar. Bu enerji birim hacim başına;

$$U = \frac{E_{tot} - E_0}{V_0} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^6 \sum_{j=1}^6 C_{ij} e_i e_j \quad (3.2)$$

olarak yazılabilir. Burada gerilme uygulanmamış örgünün toplam enerjisi E_0 , hacmi ise V_0 ve C_{ij} elastik sabitleri matrisidir [32].

i ve j 1'den 6'ya kadar uygulandığında, $\{xx, yy, zz, yz, xz, xy\}$ şeklinde toplam 36 tane elastik sabit ortaya çıkar fakat kristalin simetrisine göre en fazla 21 tane elastik sabit vardır. Bunlar; triklinik için 21, monoklinik için 13, ortorombik için 9, tetragonal ve rombohedral için 6 veya 7, hekzagonal için 5 ve kübik için 3 tanedir [32] .

3.4.2. Elastik sabitlerinin hesaplanması

Kübik sistemler için sadece C_{11} , C_{12} ve C_{44} olmak üzere üç bağımsız elastik sabiti vardır. Bu durumda eğer Eş. 3.2 deki matris elemanları için $e_{xx} = e$ ve diğer tüm elemanlar için ise sıfır alınırsa, enerji değişimi $U = C_{11} \frac{e^2}{2}$ olur. Bu ise bağımsız C_{11} ' in belirlenmesini sağlar. Eğer $e_{yz} = e_{zy} = \frac{e}{2}$ alınıp diğerleri sıfır alınırsa $U = C_{44} \frac{e^2}{2}$ ve bağımsız kararlılığa sahip C_{44} bulunur. Bulk modülü için kübik yapıda $e_{xx} = e_{yy} = e_{zz} = e$ gerilme alanı kullanılarak düzgün bir sıkıştırma ile $U = \frac{Be^2}{2}$ yoluyla hesaplanır. Benzer şekilde, kayma modülü için $e_{zz} = e$; $e_{xx} = e_{yy} = -\frac{e}{2}$ gerilme alanı kullanılarak $U = 3C' \frac{e^2}{2}$ hesaplanabilir. Son olarak aşağıdaki iki eşitliği kullanarak C_{12} elde edilir.

$$B = \frac{1}{3}(C_{11} + C_{12}) \quad (3.3)$$

$$C' = \frac{1}{2}(C_{11} - C_{12}) \quad (3.4)$$

Bu eşitliklerin her ikisini de kullanarak hesaplama doğrulunu kontrol etme yolunda bağımsız bir yarar sağlar. Bir simetrinin genel formülasyonu, toplam enerji hesaplamaları, elastik sabitlerinin hesaplanması Le Page ve Saxe dayanmaktadır [35, 42].

3.4.3. Yığın (Bulk) Modülü

Yığın modülü, bir malzemenin hidrostatik basınç altında sıkıştırılması halinde onun hacminde oluşacak değişime karşı gösterdiği direnci tanımlayan bir özelliktir. Başka bir söyleyişle bir deformasyon oluşturmak için gerekli enerjinin bir ölçüsüdür [43]. Bu nedenle hem teorik hem de deneysel açıdan, bir malzemenin sertliğini temsil eden önemli bir özelliktir. Bir katı maddenin yığın modülü,

$$B = -V \left(\frac{\partial P}{\partial V} \right)_T = \frac{1}{X} \quad (3.44)$$

şeklindeir. Burada X sıkıştırılabilirlik, P basınç ve V hacimdir. Mutlak sıfırda entropi sabit olduğundan,

$$\partial \varphi = -P \partial V \quad (3.45)$$

termodinamik eşitliğinden yararlanarak,

$$\frac{\partial P}{\partial V} = \frac{\partial^2 \varphi}{\partial V^2} \quad (3.46)$$

yazılır. Böylece yığın modülü,

$$B = V \frac{\partial^2 \varphi}{\partial V^2} \quad (3.47)$$

elde edilir. Yığın modülü, katıların örgü sabitinin bulunmasında da önemli bir parametredir.

4. ÖRGÜ TİTREŞİMLERİ VE ENERJİ BANTLARI

Örgü titreşimlerinin kuantumlanmasına fonon denir. Kristalde basit bir fonon modeli olarak, birbirine yaylarla bağlı parçacıklardan oluşan doğrusal bir örgü düşünebiliriz. m kütleli N adet parçacık, kuvvet sabitleri k ve eşit uzunluklu yaylarla birbirine bağlanmış olsun. Sınır koşullarını tespit etmek için, parçacıkların bir halka oluşturduğunu düşünelim. Parçacıklar halka düzlemine dik doğrultuda enine yer değiştirirler. Yer değiştirmesi x_i ve momentumu da p_i olan parçacığın oluşturduğu sistemin hamiltonyeni;

$$H = \sum_i^N \frac{p_i^2}{2m} + \frac{1}{2} k x_i^2 \quad (4.1)$$

Bu denklemin enerji öz değerleri,

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega \quad (n = 0, 1, 2, 3, \dots) \quad (4.2)$$

şeklindedir.

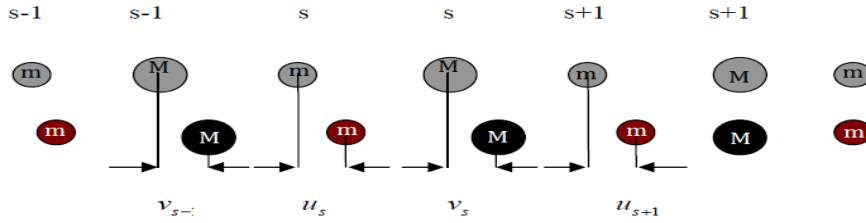
Bir örgü dalgasının enerjisi $\hbar \omega$ ile ifade edilir. Fononların enerjileri de $\hbar \omega$ katları şeklinde değişir [44]. Böylece kuantum mekaniği kapsamında değerlendirme yapabiliriz. Fononlar, Bose – Einstein istatistiklerine uyarlar, bozon parçacıklarıdır ve korunumsuzdur.

$$\bar{n} = \frac{1}{\left(e^{\frac{\hbar \omega}{k_B T}} - 1\right)} \quad (4.3)$$

Bu denklem k modundaki ortalama fonon sayısını verir [45].

4.1. İki Atomlu Örgü Titreşimleri

İkel hücresinde M ve m kütleli iki atom bulunduran bir kübik kristal düşünelim.



Şekil 4.1. İki atomlu kristal yapıdaki atomik düzlemlerin yer değiştirmeleri

Komşu atomlar arası kuvvet sabiti C, u ile v atomların denge konumlarından yer değiştirmeleri olmak üzere;

- i. M kütleli s durumundaki atom için hareket denklemi :

$$M \frac{d^2 v_s}{dt^2} = C(u_{s+1} - v_s) + C(u_s - v_s) = C(u_{s+1} + u_s - 2v_s) \quad (4.4)$$

- ii. m kütleli s durumundaki atom için hareket denklemi :

$$m \frac{d^2 u_s}{dt^2} = C(v_s - u_s) + C(v_{s-1} - u_s) = C(v_s + v_{s-1} - 2u_s) \quad (4.5)$$

şeklinde birbirlerine bağlı iki denklem yazılabilir. Ardışık düzlemlerde farklı u ve v genliklerine sahip ilerleyen dalgaları ;

$$u_s = u e^{-i\omega t} e^{isKa} \quad \text{ve} \quad v_s = v e^{-i\omega t} e^{-isKa} \quad (4.6)$$

şeklinde ifade edelim. Türevleri,

$$\frac{d^2 u_s}{dt^2} = -\omega^2 u_s \quad \text{ve} \quad \frac{d^2 v_s}{dt^2} = -\omega^2 v_s \quad (4.7)$$

ve

$$u_{s+1} = u e^{-i\omega t} e^{i(s+1)Ka} \quad \text{ve} \quad v_{s+1} = v e^{-i\omega t} e^{-i(s+1)Ka} \quad (4.8)$$

eşitlikleri yerlerine yazıldıktan ve gerekli düzenlemeler yapıldıktan sonra,

$$(2C - M\omega^2)u - C(1 + e^{-iKa})v = 0 \quad (4.9)$$

$$-C(1 + e^{iKa})u + (2C - m\omega^2)v = 0 \quad (4.10)$$

u ve v ye göre çizgisel olan bu denklemin çözümü katsayılar determinantını sıfır yaparak bulunur.

$$\begin{vmatrix} 2C - M\omega^2 & -C(1 + e^{-Ka}) \\ -C(1 + e^{Ka}) & 2C - M\omega^2 \end{vmatrix} = 0 \quad (4.11)$$

$$mM\omega^4 - 2C(m + M)\omega^2 + 2C^2[1 - \cos(Ka)] = 0 \quad (4.12)$$

Burada $2 \cos(Ka) = [e^{iKa} + e^{-iKa}]$ ifadesi kullanılmıştır.

$$\omega^2 = \frac{C(m + M)}{mM} \pm \frac{C\sqrt{(m + M)^2 + 2mM[1 - \cos(Ka)]}}{mM} \quad (4.13)$$

İki atomlu çizgisel örgü için dağınım bağıntısı elde edilir[46]. Bunlardan eksi işaretli olanı akustik, artı işaretli olanı optik moda karşılık gelir. Dağınım eğrilerinin sınırları :

a. Küçük Ka değerleri için,

$$\cos(Ka) \approx 1 - \left(\frac{1}{2}\right) K^2 a^2 + \dots \quad (4.14)$$

yazılır. Binom açılımı ile

$$\sqrt{\left[\frac{m+M}{mM}\right]^2 - \frac{K^2 a^2}{mM}} \approx \frac{m+M}{mM} + \frac{K^2 a^2}{2(m+M)} \quad (4.15)$$

Böylece,

$$\omega^2 \approx \frac{C(m+M)}{mM} \pm C \left[\frac{m+M}{mM} - \frac{K^2 a^2}{2(m+M)} \right] \quad (4.16)$$

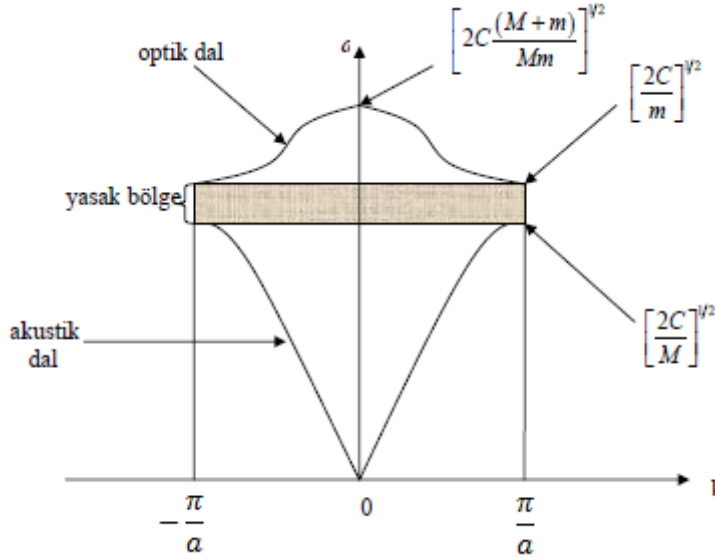
Bu eşitlikteki (+) işaretli durum için, Ka 'nın çok küçük olduğu bilindiğine göre;

$$\omega^2 \approx \frac{2C(m+M)}{mM}, \quad (optik\ kol) \quad (4.17)$$

(-) işaretli durum için,

$$\omega^2 \approx \frac{CK^2 a^2}{2(m+M)}, \quad (\text{akustik kol}) \quad (4.18)$$

bulunur [45,47].



Şekil 4.2. iki atomlu çizgisel örgünün dağılım eğrileri

b. İlk Brillouin bölgesi (a , aynı cins düzlemler arası uzaklık), $-\frac{\pi}{a} \leq K \leq \frac{\pi}{a}$

Bu bölgenin sınırlarında $K = \pm \pi/a$ ve $\cos(Ka) \approx -1$ olduğundan;

$$\omega^2 \approx \frac{C(m+M)}{mM} \pm \frac{C\sqrt{(m+M)^2 - 4mM}}{mM} \quad (4.19)$$

$m < M$ için,

$$\omega^2 \approx \frac{C(m+M)}{mM} \pm \frac{C(M-m)}{mM} \quad (4.20)$$

yazılabilir.

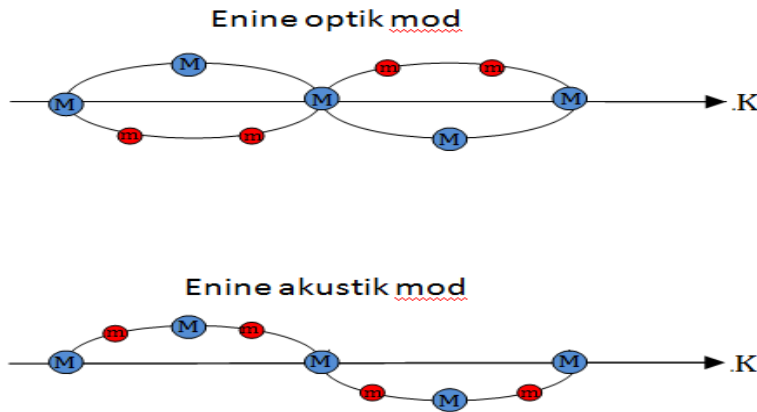
Sonuç olarak ilk Brillouin bölgesinin sınırlarında;

$$\omega^2 \approx \frac{2C}{m}, \quad (\text{optik kol}) \quad (4.21)$$

$$\omega^2 \approx \frac{2C}{M}, \quad (\text{akustik kol}) \quad (4.22)$$

elde edilir [47, 48].

Böylece ilk Brillouin bölgesi sınırlarında; optik kolun minimum ve akustik kolun maksimum olduğu görülür. Akustik kolların maksimumları ve optik kolların minimumları arasında kalan frekans aralığı tanımlı değildir ve bu aralığa yasaklanmış frekans bölgesi denir. Örgü bu frekans aralığındaki dalgaları geçirmez. Bu yüzden iki atomlu çizgisel örgü mekanik süzgeç (filtre) olarak kullanılabilir [48].



Şekil 4.3. İki atomlu çizgisel örgüde enine optik ve enine akustik mod

Akustik ve optik modlar arasındaki dinamik farklılık yukarıdaki şekilde açıkça görülmektedir. Burada her iki modun dalga boyu eşittir.

4.2. Üç Boyutta Örgü Titreşimleri

Fonon dispersiyon bağıntıları, denge konumundaki atomların klasik hareket denkleminin çözülmesiyle bulunur. Birim hücresinde n atom bulunan, N tane hücrenin üç boyutlu bir kristali oluşturduğu göz önüne alınırsa, kristal içindeki i . atomun konumu

$$\vec{R}_{L,i} = \vec{R}_L + \vec{\tau}_i \quad i = 1, 2, 3, \dots, n \quad (4.23)$$

olarak verilir. Her bir birim hücre; $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \text{ ve } \vec{a}_3$, olmak üzere baz vektörleri cinsinden lineer bağımsız vektörler olarak tanımlanır. $L = (0, 0, 0)$ orijin olmak üzere, örgü vektörü $\vec{R}_L$,

$$\vec{R}_L = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3 \quad L = \{n_1, n_2, n_3\} \quad (4.24)$$

şeklinde ifade edilebilir.

Burada n katsayıları tamsayı ve birim hücre içindeki i . atomun konumu şöyledir:

$$\vec{\tau}_i = x_{i1} \vec{a}_1 + x_{i2} \vec{a}_2 + x_{i3} \vec{a}_3 \quad 0 \leq x < 1 \quad (3.25)$$

Harmonik yaklaşımda, denge konumundan itibaren küçük yer değiştirmeler hesaba katılır. Bu yüzden kristalin toplam etkin potansiyel enerjisi, yer değiştirmelerin bir fonksiyonu olarak yazılabilir. Yer değiştirme;

$$\vec{R}_{L,i} = \vec{R}_L + \vec{u}_i(\vec{R}_L) \quad (4.26)$$

şeklinde dir. Kristalin toplam etkin potansiyel enerjisi Taylor serisine açılıp 2. dereceye kadar olan terimler dikkate alınır,

$$\varepsilon = \varepsilon_0 + \frac{1}{2} \sum_{L,L} \sum_{i,j} \vec{u}_i(\vec{R}_L) \cdot C_{i,j}(\vec{R}_L, \vec{R}_L) \cdot \vec{u}_j(\vec{R}_L) + \sigma(u^3) \quad (4.27)$$

elde edilir. Burada $C_{i,j}(\vec{R}_L, \vec{R}_L)$ kat sayıları atomlar arası kuvvet sabitleridir. R_i konumundaki bir atomun üzerine etkiyen kuvvet,

$$F_i(\vec{R}_L) = -\frac{d\varepsilon}{du_i(R_L)} = -\sum_{R',j} C_{i,j}(\vec{R}_L, \vec{R}_L') \cdot u_j(\vec{R}_L') + \sigma(u^2) \quad (4.28)$$

bulunur.

Atomik kuvvet sabitleri bağımsız nicelikler olmadığı gibi, kristalin simetri özelliklerinden dolayı birbirleriyle ilişki içindedir. Özellikle kristalin öteleme simetrisine sahip olması nedeniyle kuvvet sabitleri sadece $(\vec{R} - \vec{R}')$ farkına bağlıdır. Bu ilişki,

$$\sum_{R',j} C_j(\vec{R} - \vec{R}') = 0 \quad (4.29)$$

şeklindedir. Böylece kristalin öteleme simetrisi altında potansiyel enerjisinin değişmeyeceği görülür.

Klasik hareket denklemi,

$$M_i u''(\vec{R}) = -\sum_{R',j} C_j(\vec{R} - \vec{R}') \cdot u_j(\vec{R}') \quad (4.30)$$

şeklindedir ve bunun çözümü ise,

$$u_i(\vec{R}) = \frac{1}{\sqrt{M_i}} u_i e^{i\vec{q} \cdot \vec{R} - i\omega t} \quad (4.31)$$

formunda yazılabilir ve $\vec{q}'$ nun izinli değerleri Born-Von Karman periyodik sınır şartlarına göre seçilir.

$$\omega^2 u_i = \sum_{R,j} \widetilde{D}_{ij}(\vec{q}) \cdot u_j \quad (4.32)$$

sonucu elde edilir. Burada farklı bir Fourier dönüşümü tanımlanabilir:

$$\widetilde{D}_{ij}(\vec{R}) = \frac{1}{\sqrt{M_i M_j}} \sum_R c_{ij}(\vec{R}) e^{i\vec{q} \cdot \vec{R}} \quad (4.33)$$

$3n \times 3n$ boyutunda olan $\widetilde{D}_{ij}(\vec{R})$ matrisine, kristalin dinamik matrisi denir. Bu matris hermitiktir [49]. Öz değer problemi Brillouin bölgesinde her bir $\vec{q}$ noktasındaki ω^2 için, $3n$ çözüme sahiptir ve $\omega_m^2(\vec{q})$ ile gösterilir. $\widetilde{D}_{ij}(\vec{R})$ matrisinin hermitik olması nedeniyle $u_{i,q}^m$ öz vektörleri, ortogonalite ve kapalılık bağıntılarını,

$$\sum_i u_{i,q}^{m*} \cdot u_{i,q}^m = \delta_{mm'} \quad (4.34)$$

$$\sum_i (u_{\alpha i, q}^m)^* \cdot u_{\alpha' i, q}^m = \delta_{\alpha\alpha'} \delta_{mm'} \quad (4.35)$$

sağlayacak olanlar seçilir [49, 50].

4.3. Direkt (Doğrudan) Metot

Örgü dinamiğinde bir kristalin potansiyel enerjisi, atomik konumların fonksiyonu olarak kabul edilir. Kristalin potansiyel enerjisi, denge konumunun yer değiştirmelerine göre seriye açılabilir:

$$\begin{aligned}
\phi = \phi_0 + \sum_{l\kappa\alpha} \phi_\alpha(l\kappa)u_\alpha(l\kappa) + \frac{1}{2} \sum_{l\kappa\alpha} \sum_{l'\kappa'\beta} \phi_{\alpha\beta}(l\kappa; l'\kappa')u_\alpha(l\kappa)u_\beta(l'\kappa') \\
+ \frac{1}{6} \sum_{l\kappa\alpha} \sum_{l'\kappa'\beta} \sum_{l''\kappa''\gamma} \phi_{\alpha\beta\gamma}(l\kappa; l'\kappa'; l''\kappa'')u_\alpha(l\kappa)u_\beta(l'\kappa')u_\gamma(l''\kappa'') + \dots
\end{aligned} \tag{4.36}$$

Bu herhangi bir enerji modelinde kullanılan genel bir açılımdır. İkinci dereceye kadar açılım yapılırsa harmonik yaklaşım adını alır [51].

Bu yaklaşım ile fonon modları hakkında bilgi edinilir. ϕ_0 , denge konumundaki tüm atomların potansiyel enerjisidir. $u_\alpha(l\kappa)$, α kartezyen doğrultusunda l . İlkel birim hücrede κ . atomun denge konumundan olan yer değiştirmesidir. Toplamlar, birim hücredeki tüm atomlar üzerinden sonsuz birim hücre boyunca yapılmaktadır.

$\phi_\alpha(l\kappa)$, $\phi_{\alpha\beta}(l\kappa; l'\kappa')$ ve $\phi_{\alpha\beta\gamma}(l\kappa; l'\kappa'; l''\kappa'')$ katsayıları denge konumunun atomik yer değiştirmelere göre potansiyel enerjinin türevleridir.

$$\phi_\alpha(l\kappa) = \frac{\partial \phi}{\partial u_\alpha(l\kappa)} \tag{4.37}$$

sıfırdır, çünkü sistem dengededir. $\phi_{\alpha\beta}(l\kappa; l'\kappa')$ ve $\phi_{\alpha\beta\gamma}(l\kappa; l'\kappa'; l''\kappa'')$ ikinci ve üçüncü dereceden kuvvet sabiti matrislerdir. Denge konumundaki atomlar için hesaplanmıştır.

$$\phi_{\alpha\beta}(l\kappa; l'\kappa') = \left. \frac{\partial^2 \phi}{\partial u_\alpha(l\kappa) \partial u_\beta(l'\kappa')} \right|_0 \tag{4.38}$$

ve

$$\phi_{\alpha\beta\gamma}(l\kappa; l'\kappa'; l''\kappa'') = \frac{\partial^3 \phi}{\partial u_\alpha(l\kappa) \partial u_\beta(l'\kappa') \partial u_\gamma(l''\kappa'')} \Big|_0 \quad (4.39)$$

Literatürde, kuvvet sabitleri terimi genellikle ikinci dereceden kuvvet sabitleri matrisi ile ifade edilir. Örgü için hareket denklemi, her bir atom üzerindeki kuvvetler Newton'un temel dinamik ilkesinden hesaplanır :

$$F_\alpha(l\kappa) = m_{l\kappa} a_{l\kappa} = m_{l\kappa} \ddot{u}_\alpha(l\kappa) = - \sum_{l\kappa\beta} \phi_{\alpha\beta}(l\kappa; l'\kappa') u_\beta(l'\kappa') \quad (4.40)$$

Direkt metot, Eş.(3.38) ve Eş.(3.40) denklemlerinin doğrudan kullanımını gerektirir. Bu metot, atomların yer değiştirmesi ile κ . atoma etki eden kuvvetleri kullanır.

$$F_\alpha(l\kappa) = - \sum_{l\kappa\beta} \phi_{\alpha\beta}(l\kappa; l'\kappa') u_\beta(l'\kappa') \quad (4.41)$$

Direkt metotda, ilk olarak 230 adet kristalografik uzay grubundan biri kullanılarak kristal yapı kurulur ve kuvvet sabitlerinin matrisi bulunur daha sonra dinamik matris oluşturulur. Fonon frekansları ve fonon simetrileri (Γ -noktasında) ile fonon durum yoğunlukları üretilir. Bu tür hesaplamalar ile periyodik sınır şartları uygulanmış herhangi bir paralelkenar şekilli süper hücreler oluşturulur ve uygun pertürbasyon terimleri seçilir.

Süper hücrelerdeki pertürbasyonlar hesaplanarak, bilinmeyen kuvvet sabitleri ve atomlar üzerine etkiyen kuvvetler için lineer denklem seti oluşturulur. Kuvvet sabiti matrisinin değerleri Hellmann-Feynman kuvvetlerinden oluşturulur. Yani $\phi_{\alpha\beta}(l\kappa; l'\kappa'), u_\beta(l'\kappa')$ pertürbasyonlarından ve $F_\alpha(l\kappa)$ kuvvetlerinden elde edilir.

Direkt metot, fonon dispersiyon eğrilerinin hesabında daha iyi sonuç verir. Hesaplama esnasında kuvvet sabitlerinde yuvarlama yapılır [52]. Buna rağmen Lineer Tepki Yöntemi' ne yakın sonuçlar bulunur.

4.4. Fonon Frekanslarının Durum Yoğunluğunu Hesaplama Metodu

Birinci Brillouin bölgesinde seçilen $\vec{q}$ dalga vektörleri içinde frekans değerlerinden ne kadar bulunduğu durum yoğunluğu ile belirlenir. Bu durum, her frekansın durumyoğunluklarını gösteren eğrilerin bulunduğu bir grafikte ifade edilir. Hesaplamalarda öncelikle mümkün olduğu kadar çok sayıda fonon frekansının belirlenmesi gerekir [53, 54].

Daha sonra;

$$\rho(\omega) = \frac{N_0 \Omega_c}{8\pi^3} \sum_q \delta(\omega - \omega(\vec{q})) \quad (4.42)$$

denklemini kullanılarak durum yoğunluğu hesaplanır. Burada $\rho(\omega)$ durum yoğunluğu, N_0 kristaldeki birim hücre sayısı ve Ω_c ise birim hücre hacmidir. Yukarıda verilen denklem ile fonon dağılımından durum yoğunluğunu hesaplayabilmek için aşağıdaki şekilde bir deneme fonksiyonunu kullanmak uygundur.

$$\rho(\omega) = \frac{N_0 \Omega_c}{8\pi^3} \sum_q \theta(\omega - \omega(\vec{q})) \quad (4.43)$$

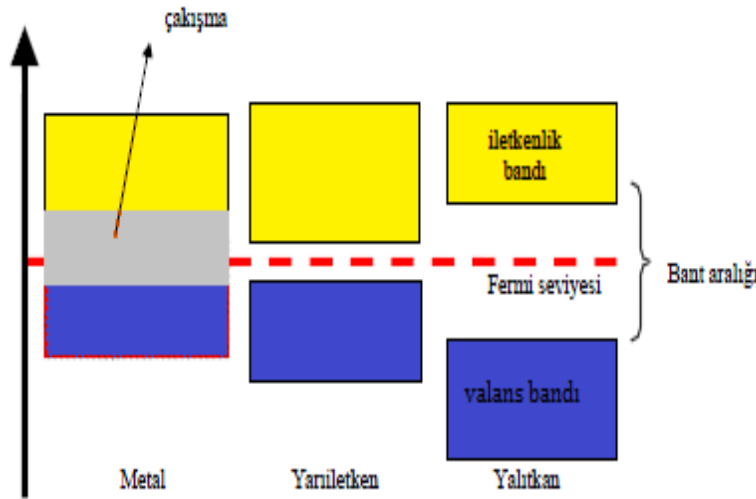
Bu ifadede hesaplanan frekans farkı; $|\omega - \omega(\vec{q})| \leq \Delta\omega/2$ ise, $\theta = 1$ olur, diğer durumlarda sıfırdır. Burada $\Delta\omega = 0,005 THz$ olarak alınır. Bu hesaplama her bir frekans değeri için yapıldığı için uzun zaman alır.

Hesaplamalar sonunda frekans farkının sabit kaldığı noktalarda bir pik oluşur. Bu pikler hesaplanan bütün frekans değerlerinin birinci Brillouin bölgesindeki durum yoğunluklarını gösterir [58].

4.5. Enerji Bantları

Kristali oluşturan atomlar birbirlerinden çok uzakta olduklarında birer uyarılmış atom gibi davranırlar, fakat birbirlerine yaklaştıklarında en dış yörüngedeki elektronları birbirleriyle etkileşmeye başlar. Bu etkileşim, elektronların gruplaşmasına ve enerji bandı oluşturmalarına neden olur. Ayrıca komşu bantlar arasında aralıklar oluşabilir ve bu aralıklarda elektron bulunmaz. Enerji seviyelerinin işgalinde de Pauli Prensipleri geçerlidir. Bu durum elektronların enerjilerini etkiler.

Bir kristalde atomların sayısı yaklaşık 10^{23} mertebesinde ve enerji seviyelerinin kapladığı aralık bir kaç eV civarındadır. Bunun sonucu olarak komşu seviyeler arasındaki mesafe o kadar küçüktür ki, sürekli enerji bandı oluşur. İç yörüngedeki elektronlar, kendi çekirdeklerine daha yakındır ve etkileşme çok zayıftır. Buna karşılık gelen bant daha küçük enerji aralığındadır [55].



Şekil 4.4. Enerji bant yapısının yasak enerji aralıklarına göre sınıflandırılması

Enerji bantlarını ayıran enerji bölgelerine yasak bölge veya yasak enerji aralığı adı verilir. Yasak bölgeler elektronlar tarafından işgal edilemez.



5. BULGULAR ve TARTIŞMA

Bu tezde çalışılan Os_2YPb ($\text{Y}=\text{Sc, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn}$) Heusler alaşımları, Şekil 3.1’de verilen Fm-3m uzay grubunda, stokiyometrik kompozisyonu X_2YZ türünde ve L2_1 tipi kübik yapıdadır.

Os_2YPb ($\text{Y}=\text{Sc, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn}$) alaşımlarının yapısal, elektronik, manyetik, elastik ve dinamik özellikleri teorik olarak yoğunluk fonksiyonel teorisini kullanan lisanslı bir program olan MedeA programı ile hesaplandı.

İlk olarak yapısal özellikler kapsamında yukarıda bahsedilen program ile örgü sabitleri belirlendi. Daha sonra elektronik bant yapısı ve durum yoğunlukları ile elastik özellikleri hesaplandı. Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi’ne dayalı Direkt Metot kullanılarak, titreşim özellikleri incelendi.

5.1. Os_2YPb ($\text{Y}=\text{Sc, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn}$) Heusler Alaşımlarının Yapısal Özellikleri

Bu tezde Pseudo-potansiyeller; Genelleştirilmiş Gradient Yaklaşımı (GGY) ve Yerel Yoğunluk Yaklaşımı (YYY) uygulanarak kullanıldı. Kohn-Sham tek parçacık fonksiyonları bir düzlem dalga seti içinde genişletildi. Kohn-Sham denklemlerinin öz-uyumlu çözümü kesme enerjisi değerleri alınarak yapıldı.

Çalışılan L2_1 tipi Heusler alaşımlarının kristal simetrisi sabit tutularak atomlar arası kuvvet 1×10^{-5} eV olana kadar hem GGY hem de YYY yaklaşımları altında geometrik optimizasyon yapıldı ve minimum enerjideki örgü sabiti değerleri hesaplandı. Programda geometrik optimizasyon ile birlikte kesme enerjisi, Methfessel-Paxton’a [56] göre smearing parametresi ve Monkhorst-Pack metodu [57] ile oluşturulan k-nokta değerleri yakınsama yolu ile test edilerek hesaplandı ve sonuçlar Çizelge 5.1’de verildi. Yapılan literatür araştırmasında, bu alaşımların GGY ile teorik olarak yapılan örgü sabiti ve toplam manyetizasyonu hesaplamaları [1] hariç başka bir çalışma bulunamamıştır. Bu tezde hesaplanan örgü sabiti değerlerinin, diğer teorik çalışma [1] ile oldukça uyumlu olduğu Çizelge 5.1’den açıkça görülmektedir. YYY için hesaplanan örgü sabitleri, GGY için

hesaplanan örgü sabitlerinden daha düşük olarak bulundu. GGY ve YYY için çalışılan alaşımlar arasında en büyük örgü sabiti değeri Os_2ScPb ve en küçük örgü sabiti değeri ise Os_2CoPb için hesaplandı.



Çizelge 5.1. Os₂YPb Y=(Sc, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn) Heusler alaşımlarının GGY ve YYY için hesaplanan kesme enerjisi (E_{kesme} , eV), smearing parametresinin değerleri (eV), **k**-noktaları, örgü sabiti (a_0 , Å) ve toplam manyetik momentleri (M_t , μ_B).

	Alaşım	Smearing parametresi (eV)	E_{kesme} (eV)	k -nokta	a_0 (Å)		$M_t(\mu_B)$	
					Bu Çalışma	Diğer[1]	Bu Çalışma	Diğer[1]
GGY	Os ₂ ScPb	0.225	277.072	6x6x6	6.5442	6.541	0.0000	0.00
	Os ₂ TiPb	0.225	277.072	6x6x6	6.4187	6.425	0.0000	0.00
	Os ₂ VPb	0.127	336.210	8x8x8	6.3587	6.377	1.0141	1.04
	Os ₂ CrPb	0.225	309.546	5x5x5	6.3431	6.361	2.0331	2.09
	Os ₂ MnPb	0.225	299.575	5x5x5	6.2980	6.363	3.0361	3.10
	Os ₂ FePb	0.169	312.112	6x6x6	6.2790	6.367	4.2212	4.20
	Os ₂ CoPb	0.127	326.955	9x9x9	6.2775	6.289	1.4146	0.00
	Os ₂ NiPb	0.225	299.213	8x8x8	6.2961	6.309	1.2776	0.00
	Os ₂ CuPb	0.225	303.304	5x5x5	6.3465	6.359	0.0004	1.07
	Os ₂ ZnPb	0.225	337.603	5x5x5	6.3886	6.408	0.0151	0.00
YYY	Os ₂ ScPb	0.225	277.057	6x6x6	6.4082		0.0005	
	Os ₂ TiPb	0.225	304.939	6x6x6	6.3040		0.0005	
	Os ₂ VPb	0.225	307.237	6x6x6	6.2511		0.0008	
	Os ₂ CrPb	0.169	324.160	6x6x6	6.2052		2.0477	
	Os ₂ MnPb	0.225	314.485	5x5x5	6.2316		3.0936	
	Os ₂ FePb	0.225	297.445	6x6x6	6.2185		3.4724	
	Os ₂ CoPb	0.225	297.542	6x6x6	6.1579		0.0155	
	Os ₂ NiPb	0.225	299.276	6x6x6	6.1762		0.0000	
	Os ₂ CuPb	0.225	334.283	6x6x6	6.2230		0.0048	
	Os ₂ ZnPb	0.225	307.299	6x6x6	6.2680		0.0032	

5.2. Os₂YPb (Y=Sc, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn) Heusler Alaşımlarının Manyetik ve Elektronik Özellikleri

Çalışılan Heusler alaşımlarının spin polarizasyonu hesaba katılarak bir önceki kesimde bahsedilen yapısal özellikleri kapsamında elde edilen örgü sabitleri ve diğer parametreler (k-noktaları, kesme enerjisi ve smearing parametresi) kullanılarak spin aşağı ve spin yukarı yönelimlerine göre yüksek simetri yönleri boyunca elektronik bant enerjileri, kısmi ve toplam durum yoğunlukları hesaplandı.

GGY için Şekil 5.1 - 5.2 - 5.3 - 5.4 - 5.5 - 5.6 - 5.7 - 5.8 - 5.9 - 5.10' da, YYY için ise Şekil 5.11 – 5.12 - 5.13 - 5.14 - 5.15 - 5.16 - 5.17 - 5.18 - 5.19 - 5.20' de verildi.

Şekillerde Fermi enerjisi değerleri tüm enerjilerden çıkartılarak Fermi enerji seviyesi sıfır olarak alınmıştır.

Hesaplanan Fermi enerjisi değerleri Çizelge 5.2' de verildi. GGY için hesaplanan Fermi enerjisi değerleri tüm alaşımlar için YYY için hesaplanan değerlerden daha düşük bulundu.

Tüm alaşımlar içinde en yüksek Fermi enerjisi değeri Os₂TiPb için hesaplanırken, en düşük Os₂ScPb olarak hesaplandı.

Çizelge 5.2. Os₂YPb (Y=Sc, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn) Heusler alaşımlarının Fermi enerjileri

	Alaşım	E _F (Fermi Enerjisi) (eV)
GGY	Os ₂ ScPb	7.7860
	Os ₂ TiPb	10.3659
	Os ₂ VPb	10.1035
	Os ₂ CrPb	9.6620
	Os ₂ MnPb	9.8264
	Os ₂ FePb	9.1645
	Os ₂ CoPb	9.6342
	Os ₂ NiPb	9.3441
	Os ₂ CuPb	8.8258
	Os ₂ ZnPb	7.8670
YYY	Os ₂ ScPb	8.3491
	Os ₂ TiPb	11.0047
	Os ₂ VPb	10.9168
	Os ₂ CrPb	10.5869
	Os ₂ MnPb	10.1745
	Os ₂ FePb	9.4326
	Os ₂ CoPb	10.3938
	Os ₂ NiPb	10.0734
	Os ₂ CuPb	9.4128
	Os ₂ ZnPb	8.3988

Çizelge 5.3. Os₂YPb (Y=Sc, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn) Heusler alaşımlarının GGY ile hesaplanan kısmi manyetik momentleri

Os ₂ YPb	Element	<i>s</i>	<i>p</i>	<i>d</i>	Toplam
Os ₂ ScPb	Os	0.000	0.000	0.000	0.000
	Os	0.000	0.000	0.000	0.000
	Sc	0.000	0.000	0.000	0.000
	Pb	0.000	0.000	0.000	0.000
Os ₂ TiPb	Os	0.000	0.000	0.000	0.000
	Os	0.000	0.000	0.000	0.000
	Ti	0.000	0.000	0.000	0.000
	Pb	0.000	0.000	0.000	0.000
Os ₂ VPb	Os	0.002	-0.001	0.087	-0.087
	Os	0.002	-0.001	0.087	-0.087
	V	-0.087	0.013	1.066	1.090
	Pb	0.017	-0.007	0.002	0.012
Os ₂ CrPb	Os	-0.004	-0.004	-0.193	-0.201
	Os	-0.004	-0.004	-0.193	-0.201
	Cr	0.015	0.015	2.231	2.261
	Pb	0.019	-0.003	-0.007	0.009
Os ₂ MnPb	Os	-0.007	-0.007	-0.028	-0.042
	Os	-0.007	-0.007	-0.028	-0.042
	Mn	0.018	0.016	3.008	3.042
	Pb	0.013	0.011	-0.007	0.017
Os ₂ FePb	Os	-0.003	-0.005	0.484	0.477
	Os	-0.003	-0.005	0.484	0.477
	Fe	0.014	0.009	3.072	3.094
	Pb	0.006	0.008	0.012	0.027
Os ₂ CoPb	Os	-0.003	-0.005	0.130	0.122
	Os	-0.003	-0.005	0.130	0.122
	Co	0.004	0.001	1.106	1.112
	Pb	-0.005	0.006	-0.002	-0.001
Os ₂ NiPb	Os	0.001	-0.001	0.300	0.300
	Os	0.001	-0.001	0.300	0.300
	Ni	-0.001	-0.002	0.452	0.449
	Pb	-0.004	-0.007	0.010	-0.002
Os ₂ CuPb	Os	0.004	0.003	0.516	0.523
	Os	0.004	0.003	0.516	0.523
	Cu	-0.005	-0.004	0.166	0.157
	Pb	-0.007	-0.016	0.018	-0.005
Os ₂ ZnPb	Os	0.000	0.000	0.001	0.001
	Os	0.000	0.000	0.001	0.001
	Zn	0.000	0.000	0.000	0.000
	Pb	0.000	0.000	0.000	0.000

Çizelge 5.4. Os₂YPb (Y=Sc, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn) Heusler alaşımlarının YYY ile hesaplanan kısmi manyetik momentleri

Os ₂ YPb	Element	<i>s</i>	<i>p</i>	<i>d</i>	Toplam
Os ₂ ScPb	Os	0.000	0.000	0.000	0.000
	Os	0.000	0.000	0.000	0.000
	Sc	0.000	0.000	0.000	0.000
	Pb	0.000	0.000	0.000	0.000
Os ₂ TiPb	Os	0.000	0.000	0.000	0.000
	Os	0.000	0.000	0.000	0.000
	Ti	0.000	0.000	0.000	0.000
	Pb	0.000	0.000	0.000	0.000
Os ₂ VPb	Os	0.000	0.000	0.000	0.000
	Os	0.000	0.000	0.000	0.000
	V	0.000	0.000	0.000	0.000
	Pb	0.000	0.000	0.000	0.000
Os ₂ CrPb	Os	-0.001	-0.002	-0.120	-0.124
	Os	-0.001	-0.002	-0.120	-0.124
	Cr	0.011	0.013	2.124	2.147
	Pb	0.019	-0.001	-0.004	0.013
Os ₂ MnPb	Os	-0.005	-0.006	-0.003	-0.013
	Os	-0.005	-0.006	-0.003	-0.013
	Mn	0.013	0.014	2.866	2.894
	Pb	0.013	0.010	-0.007	0.016
Os ₂ FePb	Os	-0.005	-0.004	0.308	0.299
	Os	-0.005	-0.004	0.308	0.299
	Fe	0.011	0.009	2.705	2.725
	Pb	0.006	0.015	0.004	0.026
Os ₂ CoPb	Os	0.000	0.000	0.003	0.003
	Os	0.000	0.000	0.003	0.003
	Co	0.000	0.000	0.026	0.026
	Pb	0.000	0.000	0.002	0.000
Os ₂ NiPb	Os	0.000	0.000	0.002	0.002
	Os	0.000	0.000	0.002	0.002
	Ni	0.000	0.000	0.002	0.002
	Pb	0.000	0.000	0.000	0.000
Os ₂ CuPb	Os	0.000	0.000	0.001	0.001
	Os	0.000	0.000	0.001	0.001
	Cu	0.000	0.000	0.000	0.000
	Pb	0.000	0.000	0.000	0.000
Os ₂ ZnPb	Os	0.000	0.000	0.000	0.000
	Os	0.000	0.000	0.000	0.000
	Zn	0.000	0.000	0.000	0.000
	Pb	0.000	0.000	0.000	0.000

Hesaplanan toplam manyetik momentlerde yine Çizelge 5.1' de verildi.

Toplam manyetik momentler GGY kullanıldığında Os_2ScPb ve Os_2TiPb için ve YYY kullanıldığında Os_2NiPb sıfır olarak bulundu. Bu durum Şekil 5.1 - 5.2 ile Şekil 5.18 tamamen simetrik olmasından da kolayca anlaşılmaktadır. Diğer alaşımların elektronik bant, toplam ve kısmi durum yoğunluğu eğrilerinden bu malzemelerin spin-aşağı ve spin-yukarı yönelimlerinin simetrik olmadığı ve bundan dolayı manyetik momente sahip oldukları açıkça görülmektedir.

Ayrıca toplam manyetik momente her bir elementin verdiği katkıyı ayrıntılı olarak görmek üzere Çizelge 5.3'te GGY ile hesaplanan ve Çizelge 5.4'te YYY ile hesaplanan kısmi manyetik momentler verildi. Net toplam manyetik momente sahip olan alaşımlarda hem GGY hem de YYY için d orbitallerinden gelen katkının daha büyük olduğu bu çizelgelerden görülmektedir. Çalışılan alaşımlar arasında en büyük manyetik momente sahip olan alaşımın Os_2FePb olduğu Çizelge 5.1'den açıkça görülmektedir.

Os_2YPb ($Y=\text{Sc, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn}$) Heusler alaşımlarının elektronik bant eğrilerinden (bkz. Şekil 5.1 - 5.20) spin aşağı ve spin yukarı yönelimlerinde hem valans hem de iletkenlik bantlarının Fermi seviyesini kestiği ve bundan dolayı metalik karakterde olduğu söylenebilir.

Tüm şekillerde Fermi seviyesi kesikli çizgilerle gösterilmiştir. Fermi seviyesinde iletkenliğe en büyük katkı $\text{Os}-d$, ve $Y=\text{Sc, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn}$ elementlerinin d orbitallerinin elektronlarından geldiği görülmektedir.

İncelenen Os_2YPb ($Y=\text{Sc, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn}$) Heusler alaşımlarının Fermi seviyesindeki durum yoğunluğu ($N(E_F)\uparrow$) değerleri spin yukarı durumlar ve GGY için sırasıyla 1.70, 0.21, 1.91, 2.11, 2.47, 4.01, 3.42, 3.52, 2.04 ve 2.81 DOS/Durum Hücre olurken spin aşağı durumlar ($N(E_F)\downarrow$) için 1.71, 0.21, 0.01, 0.01, 0.04, 0.01, 2.99, 1.95, 2.87 ve 2.82 DOS/Durum Hücre'dir.

Yine YYY için Os_2YPb ($Y=\text{Sc, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn}$) alaşımının bu değerleri spin yukarı durumlarda ($N(E_F)\uparrow$) 2.02, 0.32, 1.80, 2.20, 2.41, 2.82, 2.71, 2.98, 3.61 ve 2.34

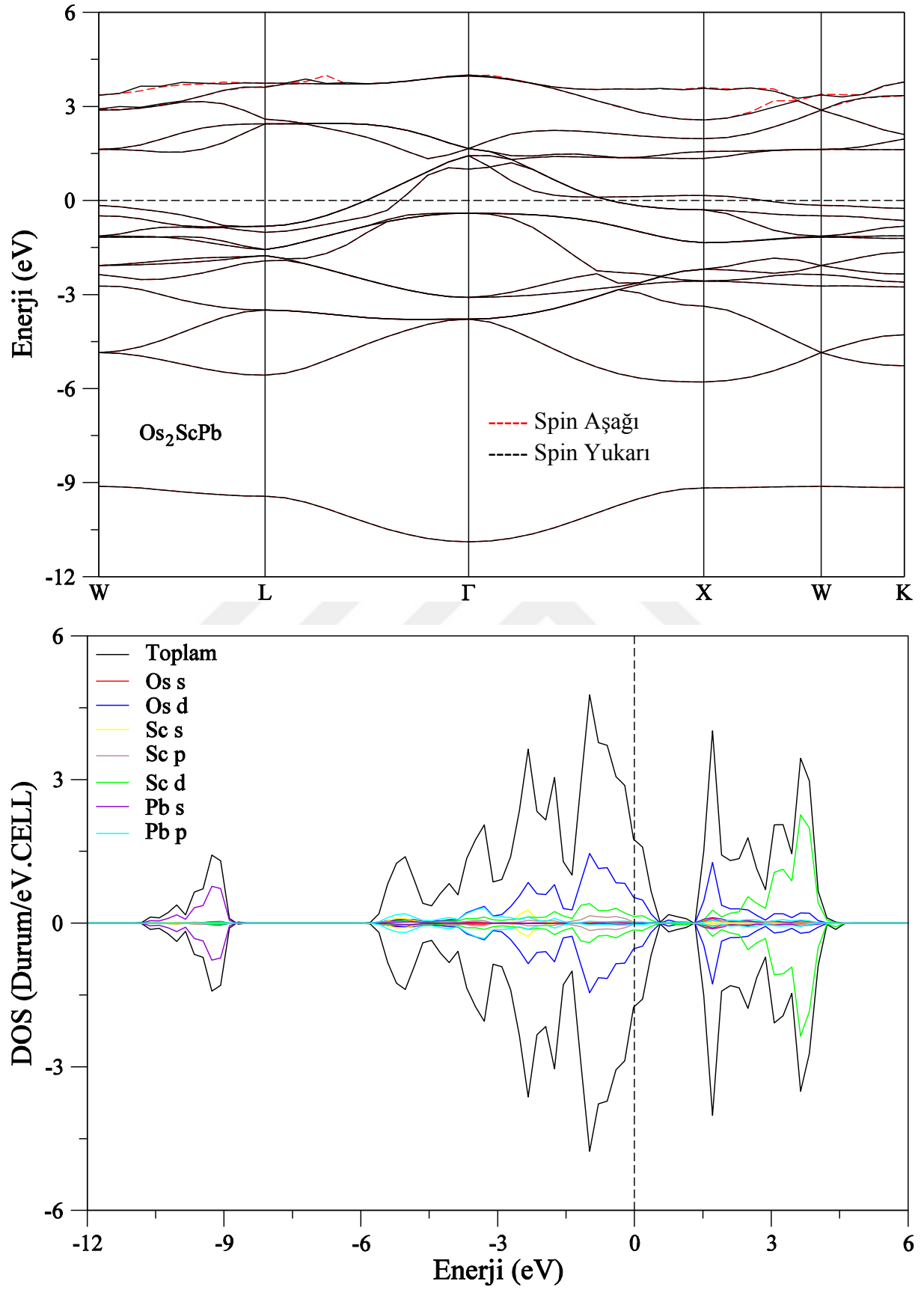
DOS/Durum Hücre ve spin aşağı durumlarda ($N(E_F)\downarrow$) 2.01, 0.31, 1.78, 0.11, 0.42, 2.01, 2.06, 2.97, 3.60 ve 2.32 DOS/Durum Hücre'dir.

Kısmi durum yoğunluğu eğrilerinden -12 eV ile -9 eV arasındaki bölgede her iki yönelim içinde Pb elementine ait s orbitalindeki elektronlarının çok büyük katkısı vardır.

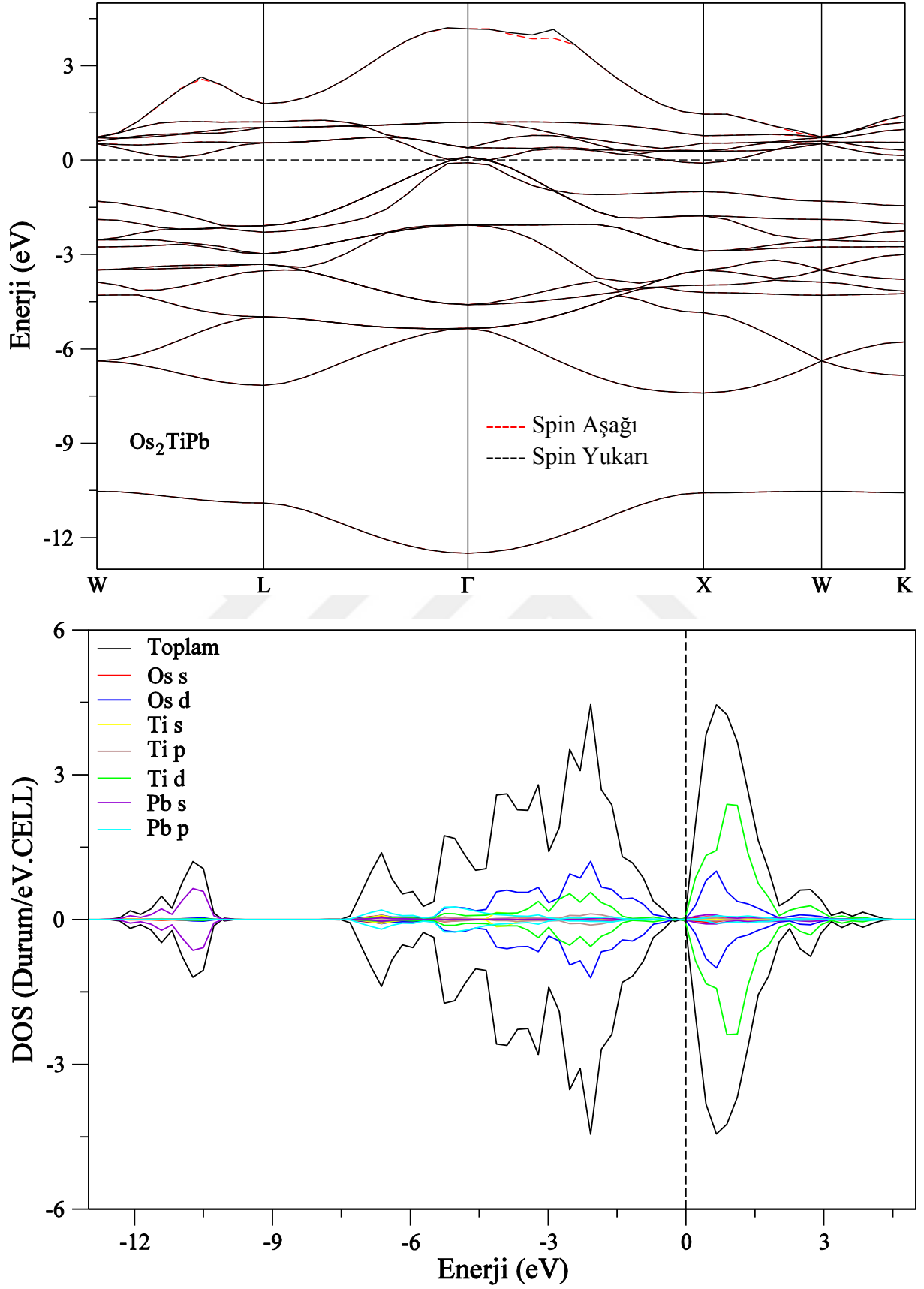
Fermi seviyesinin altında kalan -6 eV ile 0 eV arasındaki bölgede spin aşağı ve spin yukarı durumlar için Os ve Y=Sc, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn elementlerinin *d* orbitallerindeki elektronlar rol oynamaktadır.

Fermi seviyesinin üstündeki 0 eV ile 3 eV 'a kadar olan bölgede alaşımlar değişik durumlar sergilemektedir. Bu bölgede Os₂YPb (Y=Sc, Cu, Zn) için her iki yönelimde de Os elementinin *d* orbitalindeki elektronlarının ancak Os₂YPb (Y= Ti, V, Cr) için Y (Ti, V, Cr) elementinin *d* orbitalindeki elektronlarının baskın olduğu görülmektedir.

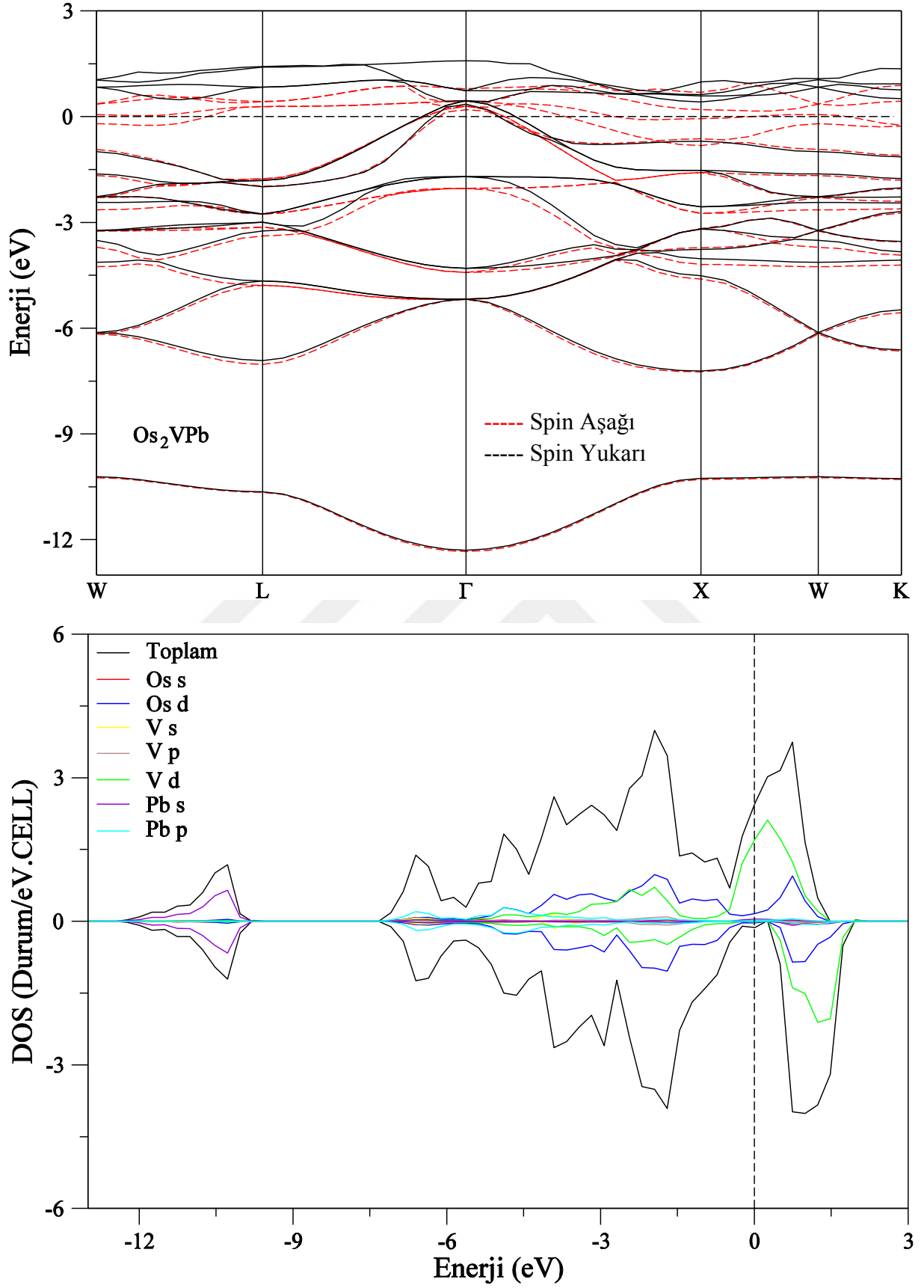
Geriye kalan Os₂YPb (Y= Mn, Fe, Co, Ni) için ise spin yukarı yönelimi için Os elementinin *d* orbitalindeki elektronları büyük katkı verirken spin aşağı yönelimi için için Y (Mn, Fe, Co, Ni) elementinin *d* orbitalindeki elektronları büyük katkı vermektedir.



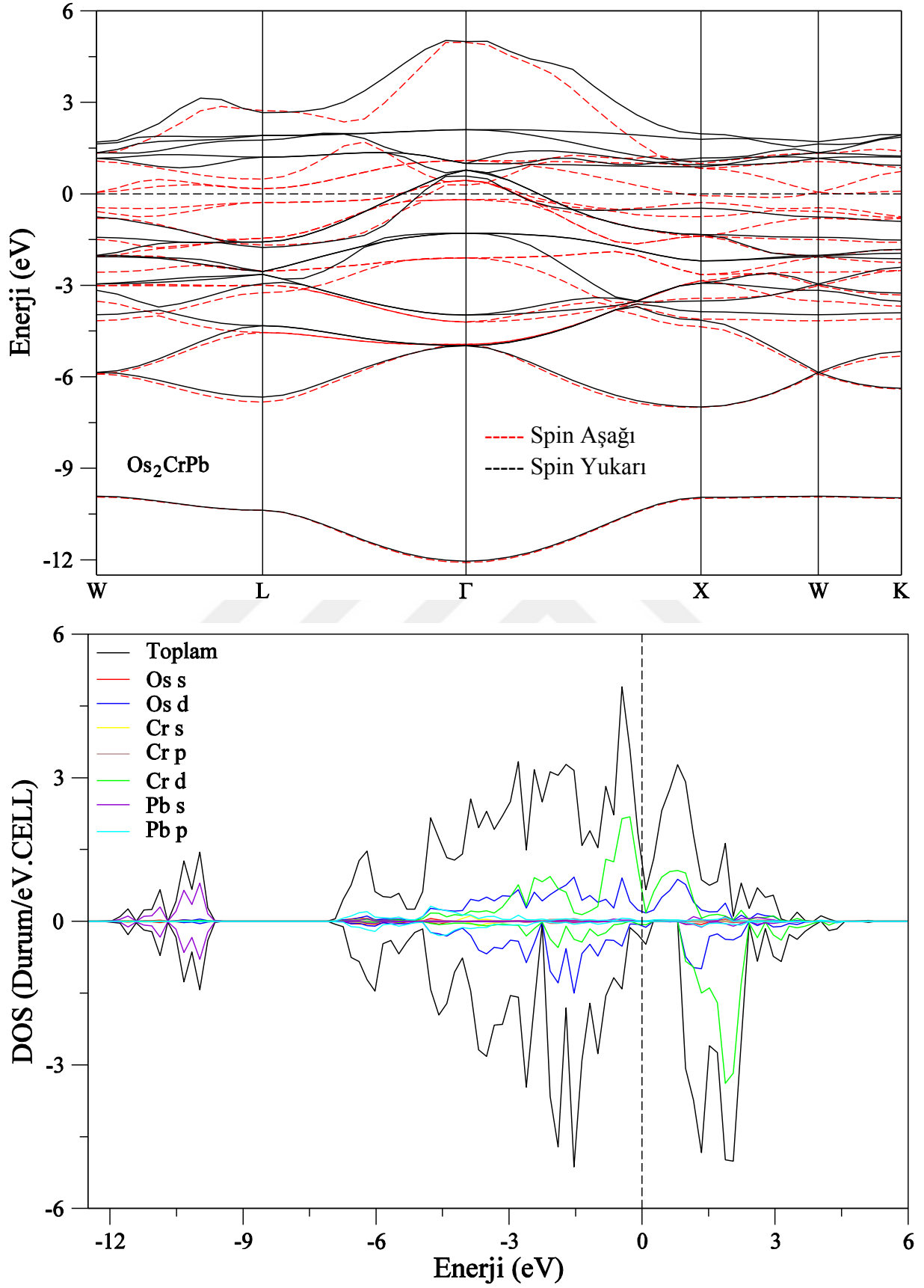
Şekil 5.1. GGY- Os_2ScPb Heusler alaşımlarının elektronik bant, kısmi ve toplam durum yoğunluğu eğrileri



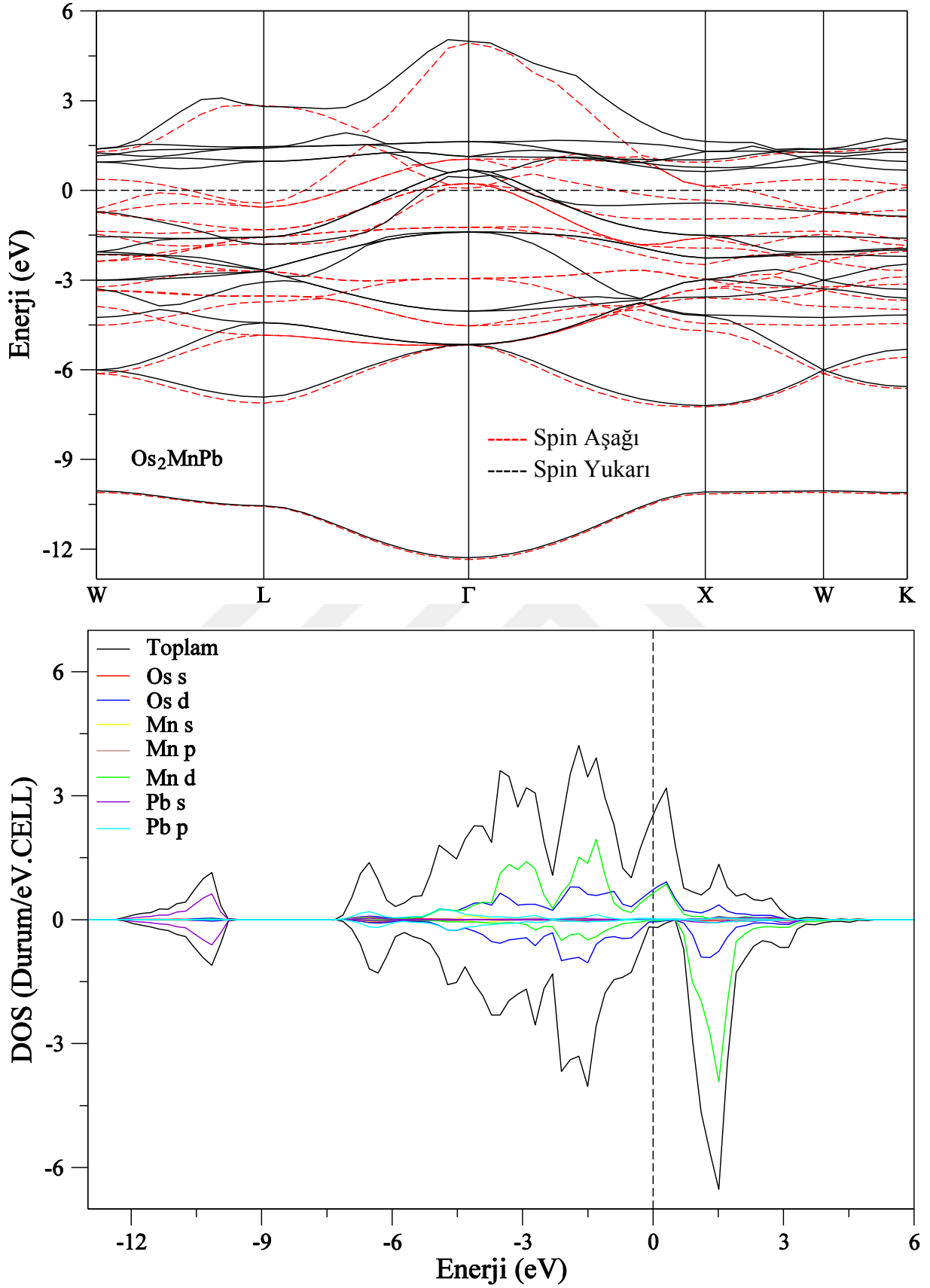
Şekil 5.2. GGY- Os_2TiPb Heusler alaşımasının elektronik bant, kısmi ve toplam durum yoğunluğu eğrileri



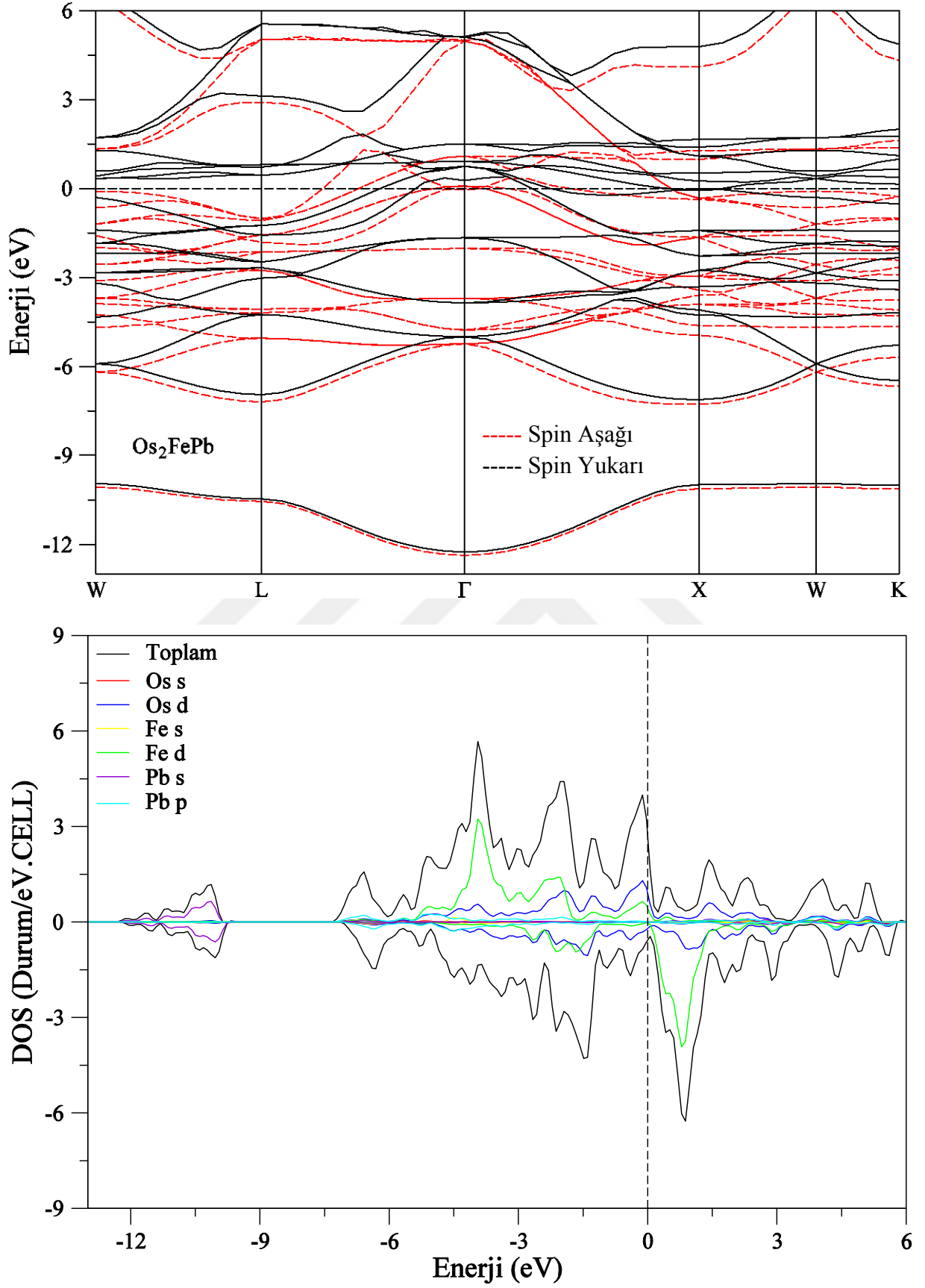
Şekil 5.3. GGY- Os_2VPb Heusler alaşımlarının elektronik bant, kısmi ve toplam durum yoğunluğu eğrileri



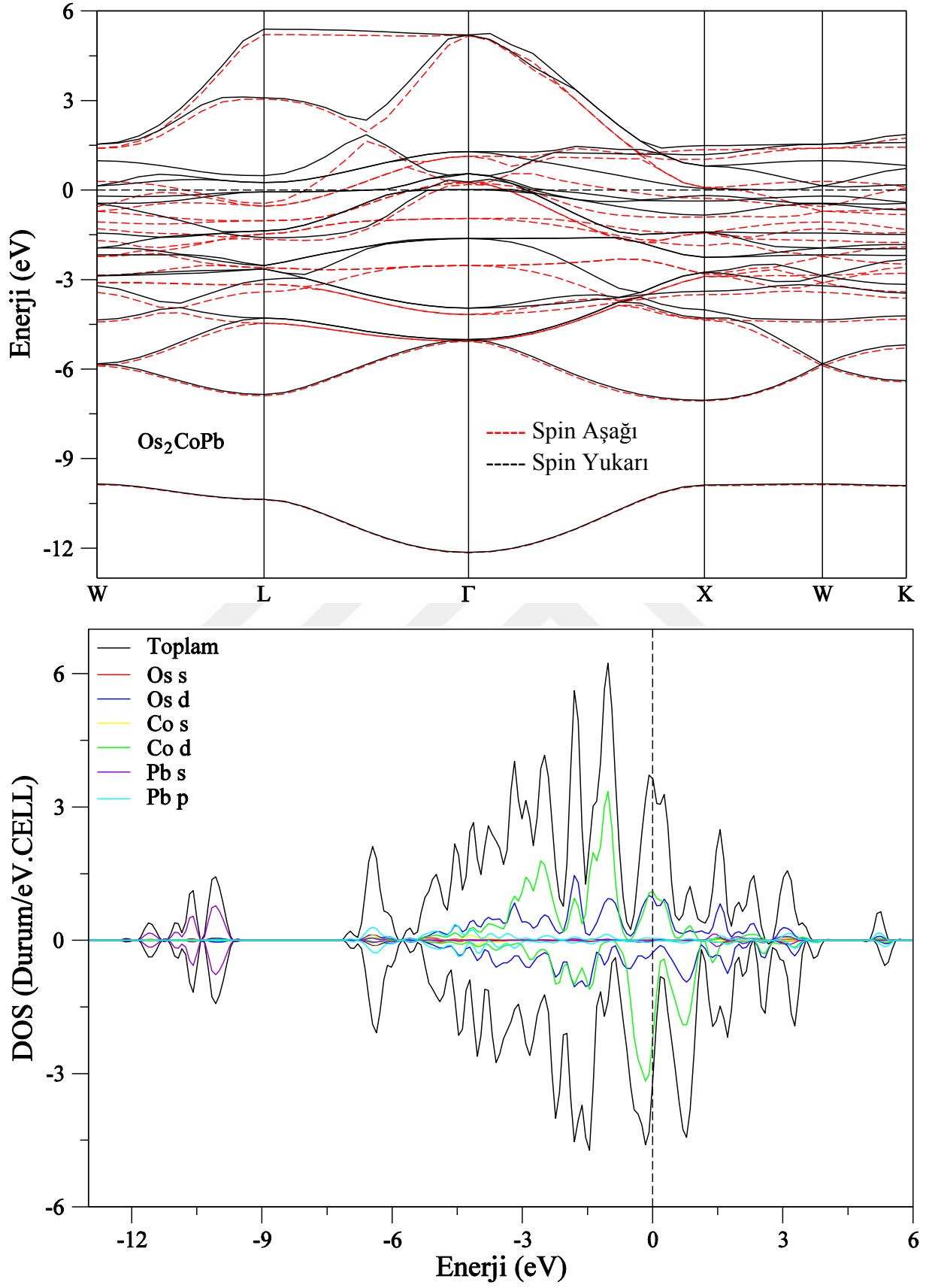
Şekil 5.4. GGY- Os_2CrPb Heusler alaşımlarının elektronik bant, kısmi ve toplam durum yoğunluğu eğrileri



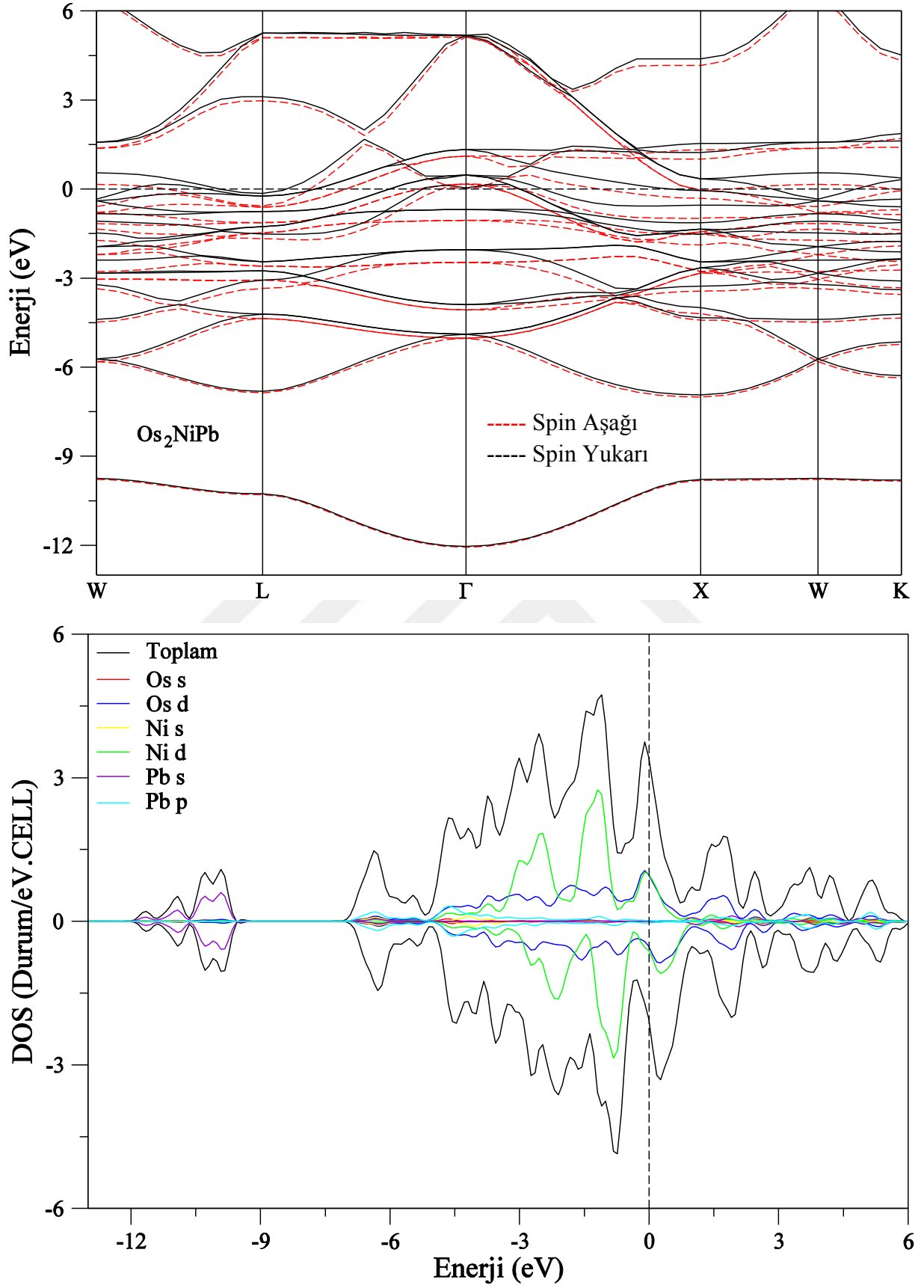
Şekil 5.5. GGY-Os₂MnPb Heusler alaşımlarının elektronik bant, kısmi ve toplam durum yoğunluğu eğrileri



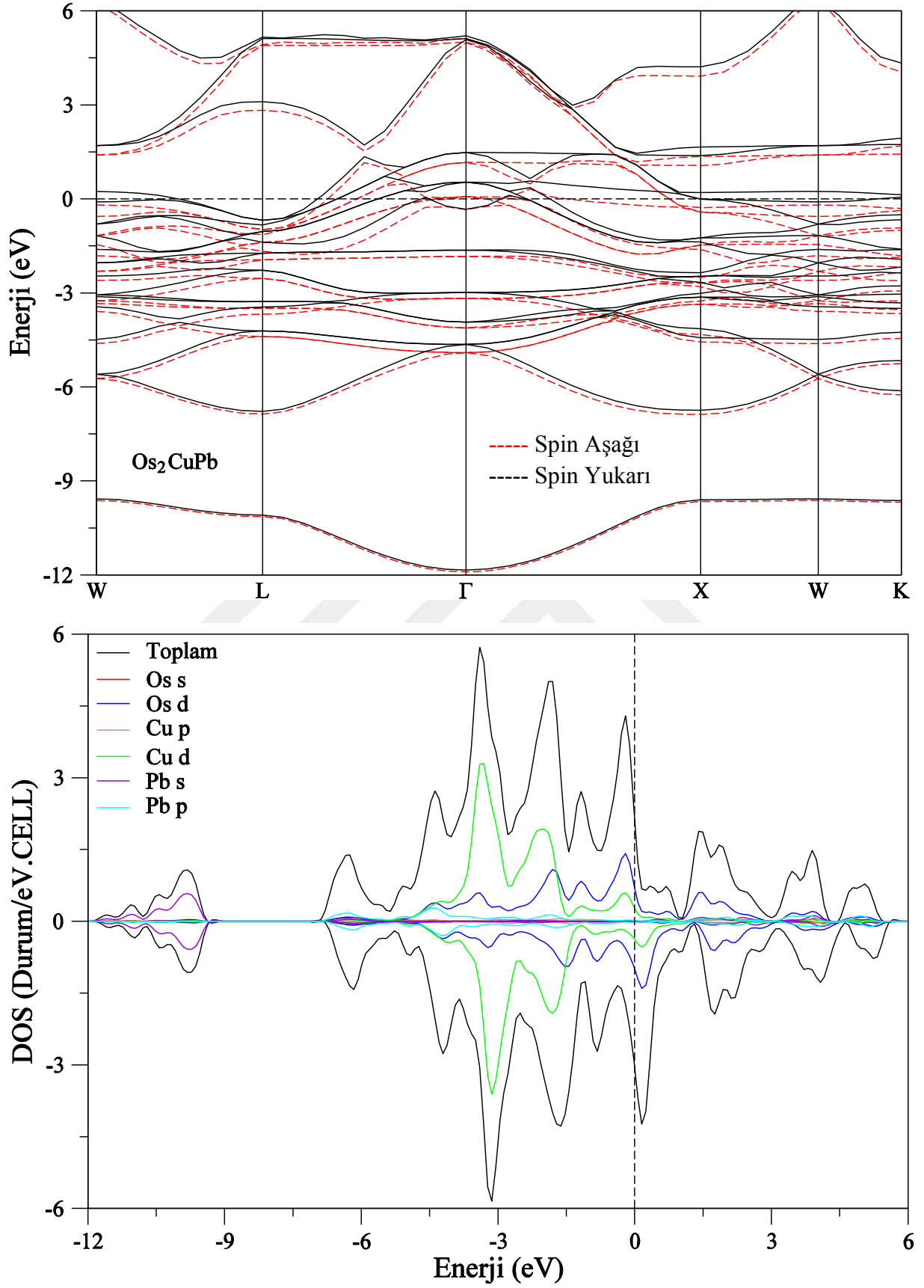
Şekil 5.6. GGY- Os_2FePb Heusler alaşımının elektronik bant, kısmi ve toplam durum yoğunluğu eğrileri



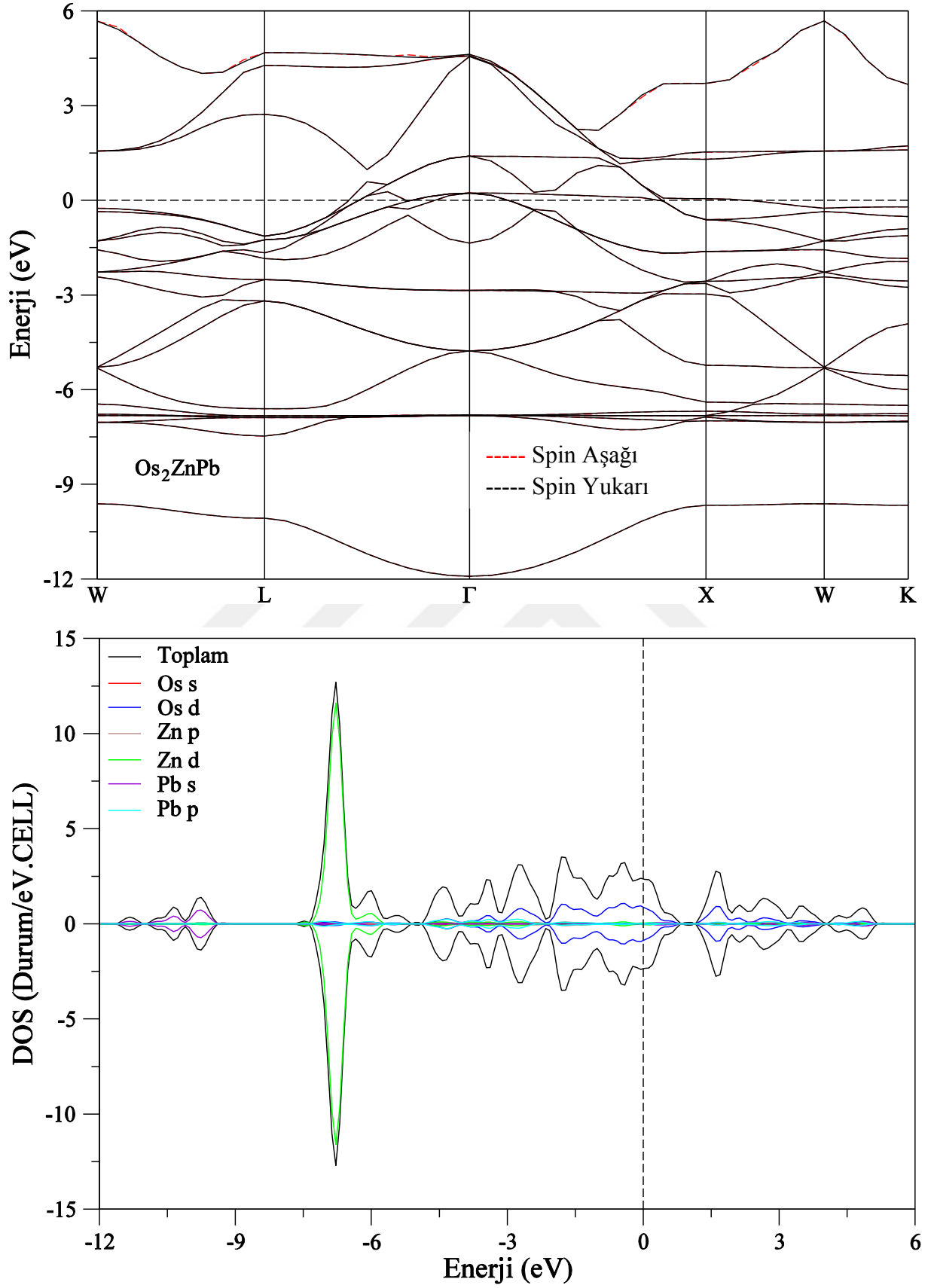
Şekil 5.7. GGY-Os₂CoPb Heusler alaşımlarının elektronik bant, kısmi ve toplam durum yoğunluğu eğrileri



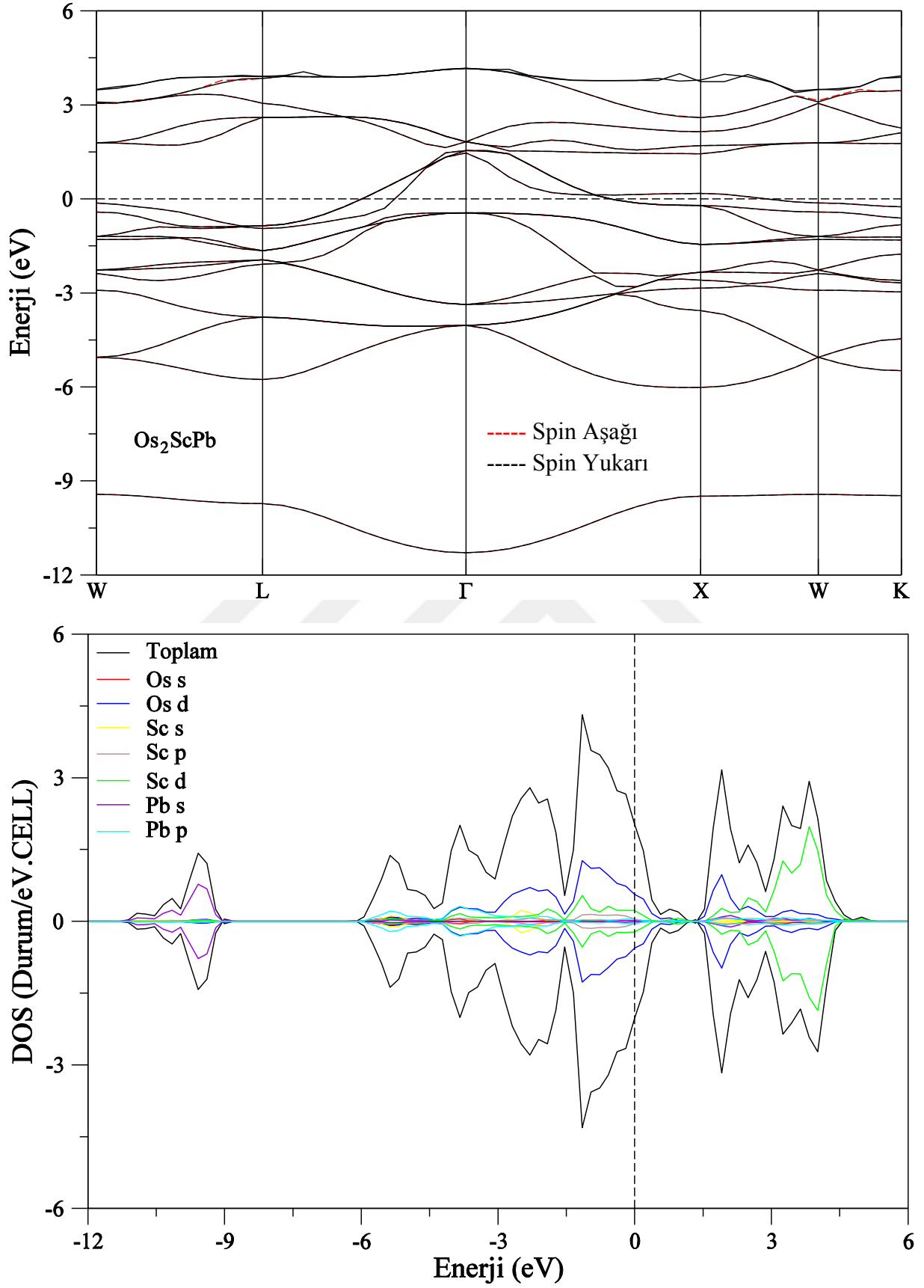
Şekil 5.8. GGY- Os_2NiPb Heusler alaşımlarının elektronik bant, kısmi ve toplam durum yoğunluğu eğrileri



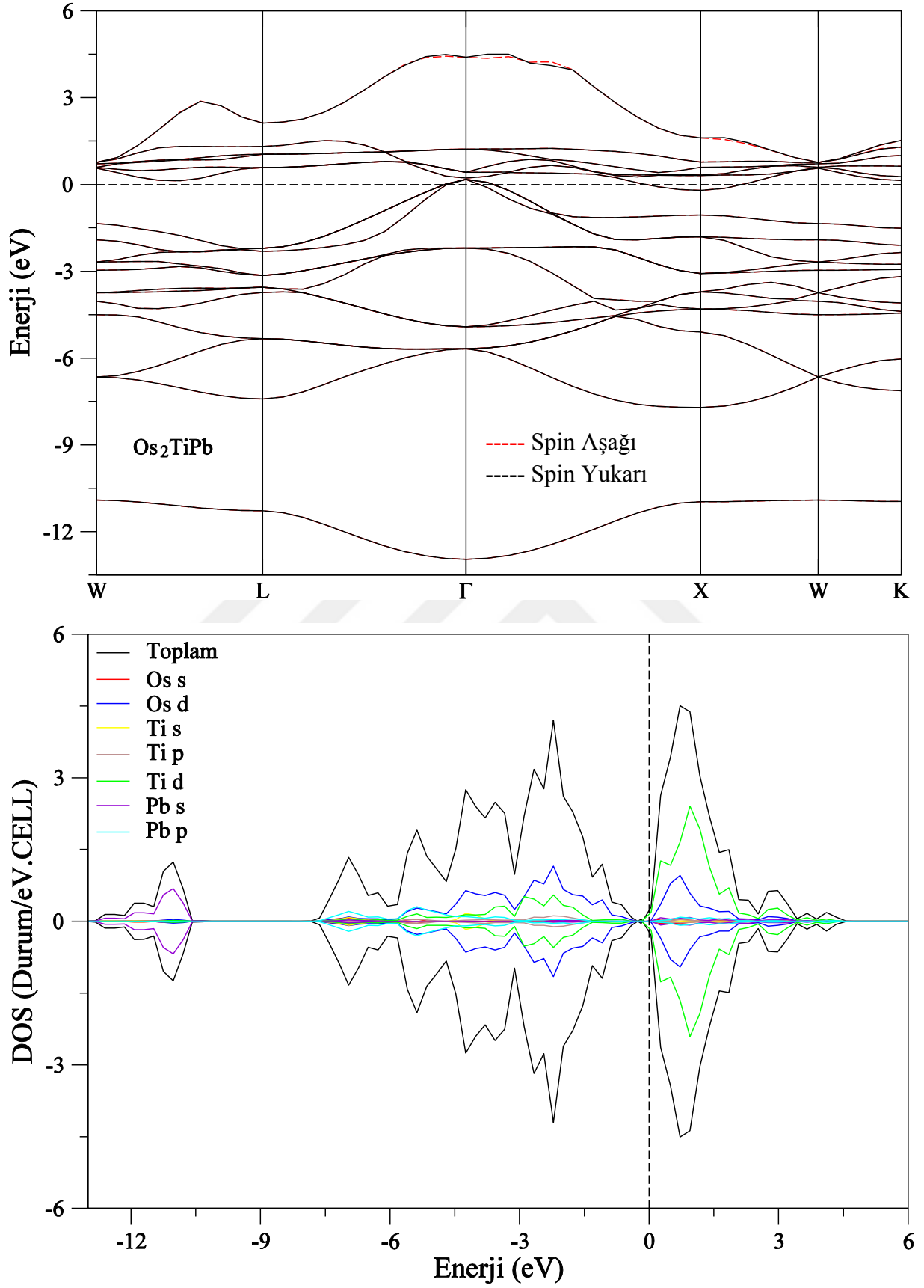
Şekil 5.9. GGY- Os_2CuPb Heusler alaşımlarının elektronik bant, kısmi ve toplam durum yoğunluğu eğrileri



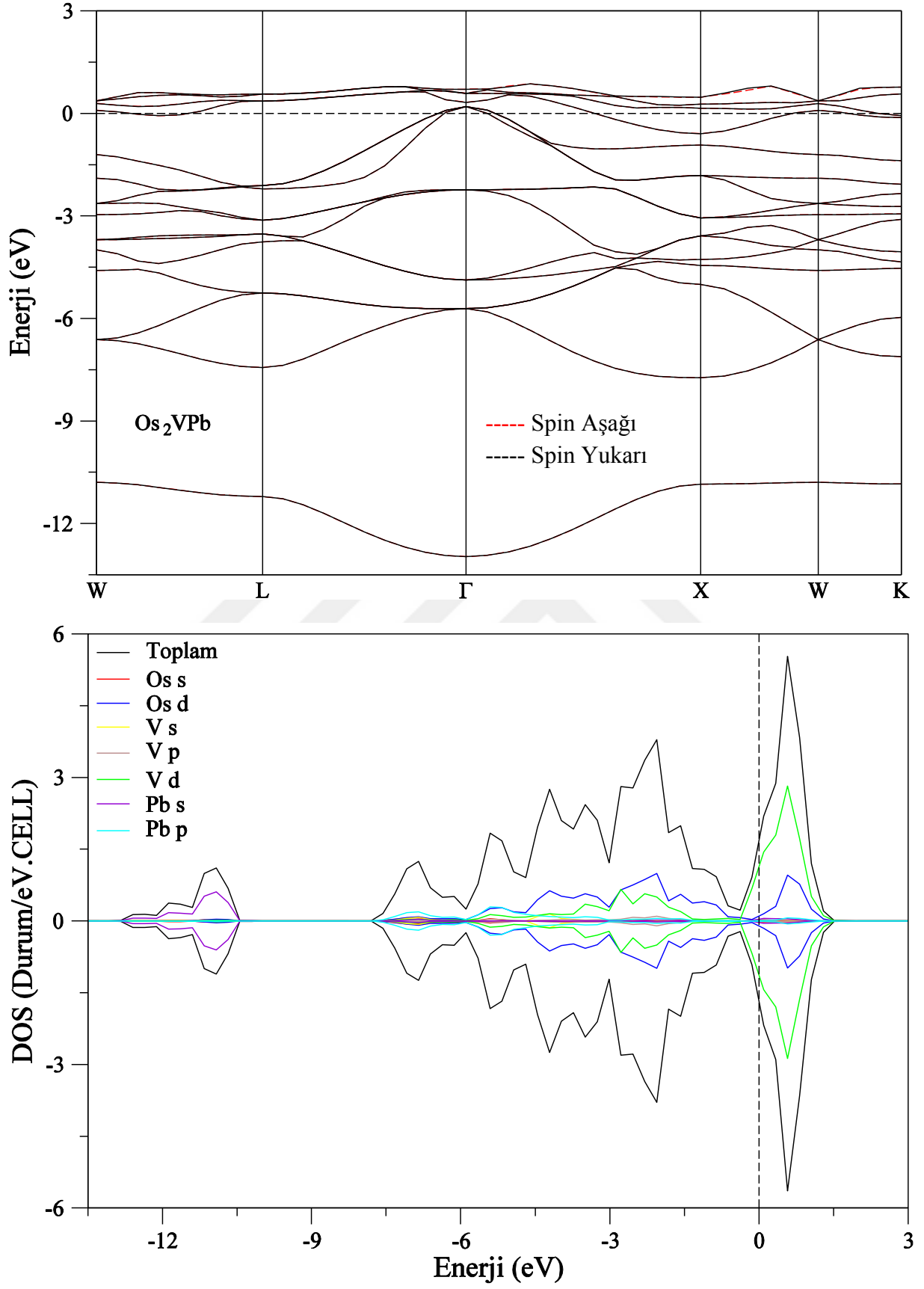
Şekil 5.10. GGY-Os₂ZnPb Heusler alaşımlarının elektronik bant, kısmi ve toplam durum yoğunluğu eğrileri



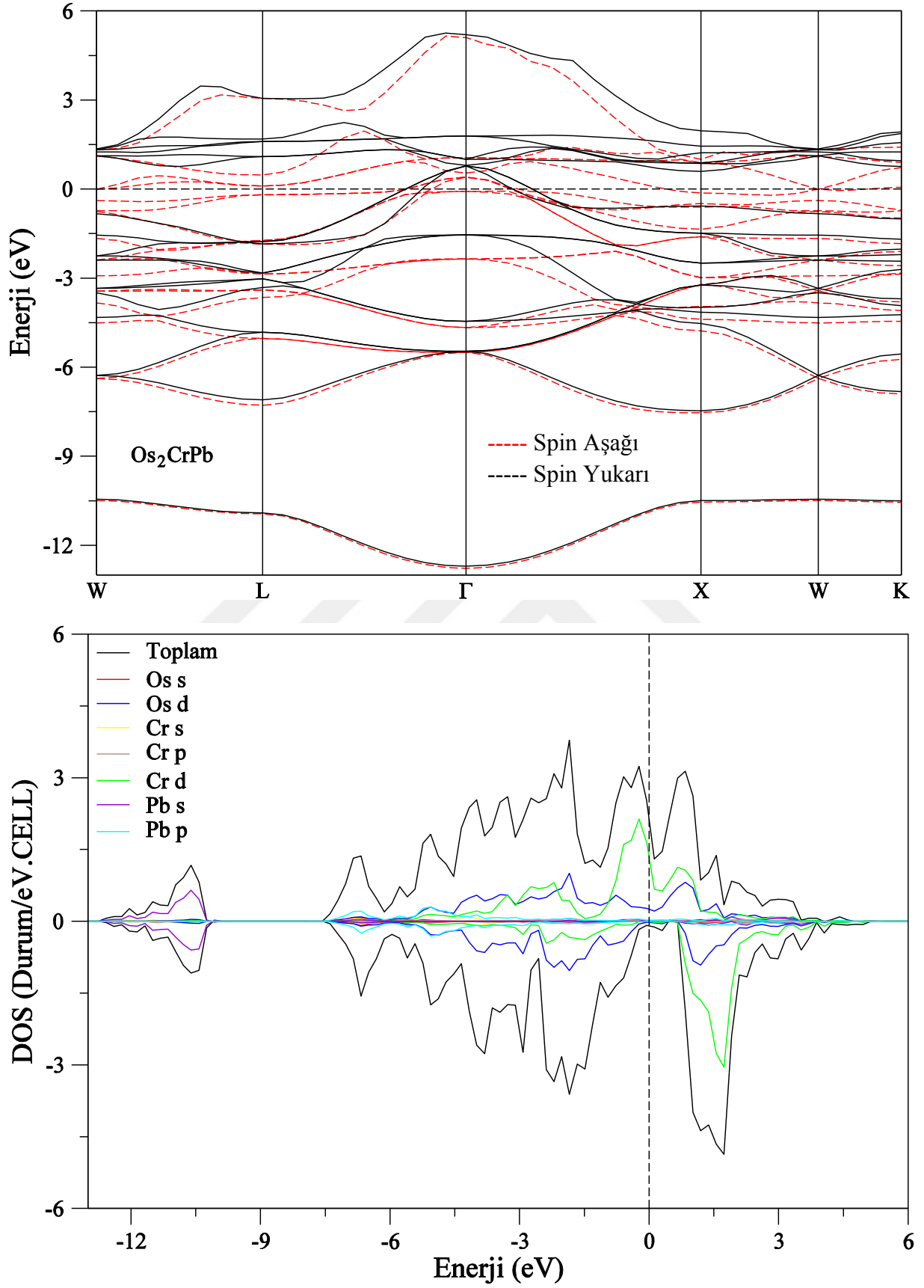
Şekil 5.11. YYY- Os_2ScPb Heusler alaşımasının elektronik bant, kısmi ve toplam durum yoğunluğu eğrileri



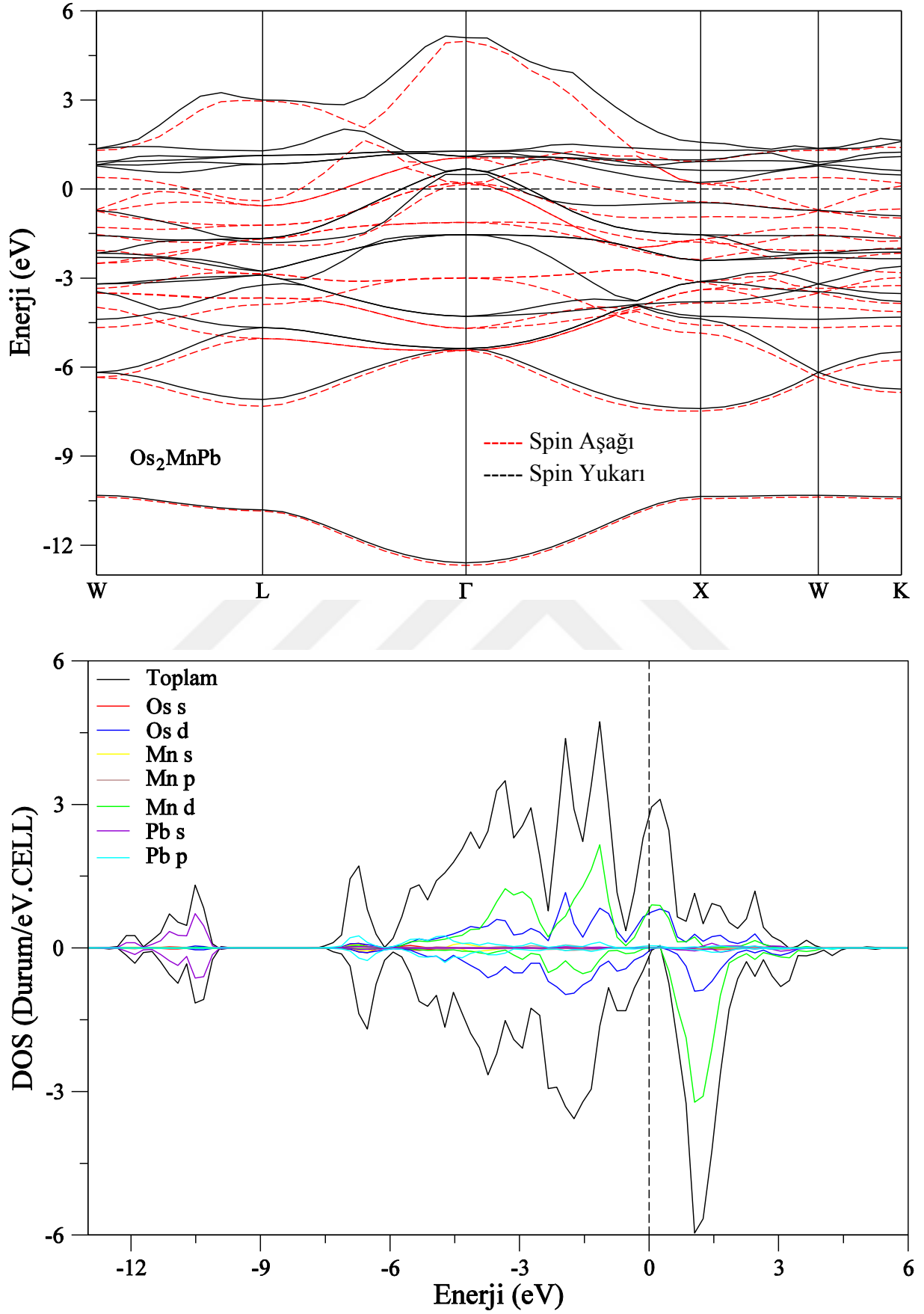
Şekil 5.12. Os_2TiPb Heusler alaşımasının elektronik bant, kısmi ve toplam durum yoğunluğu eğrileri



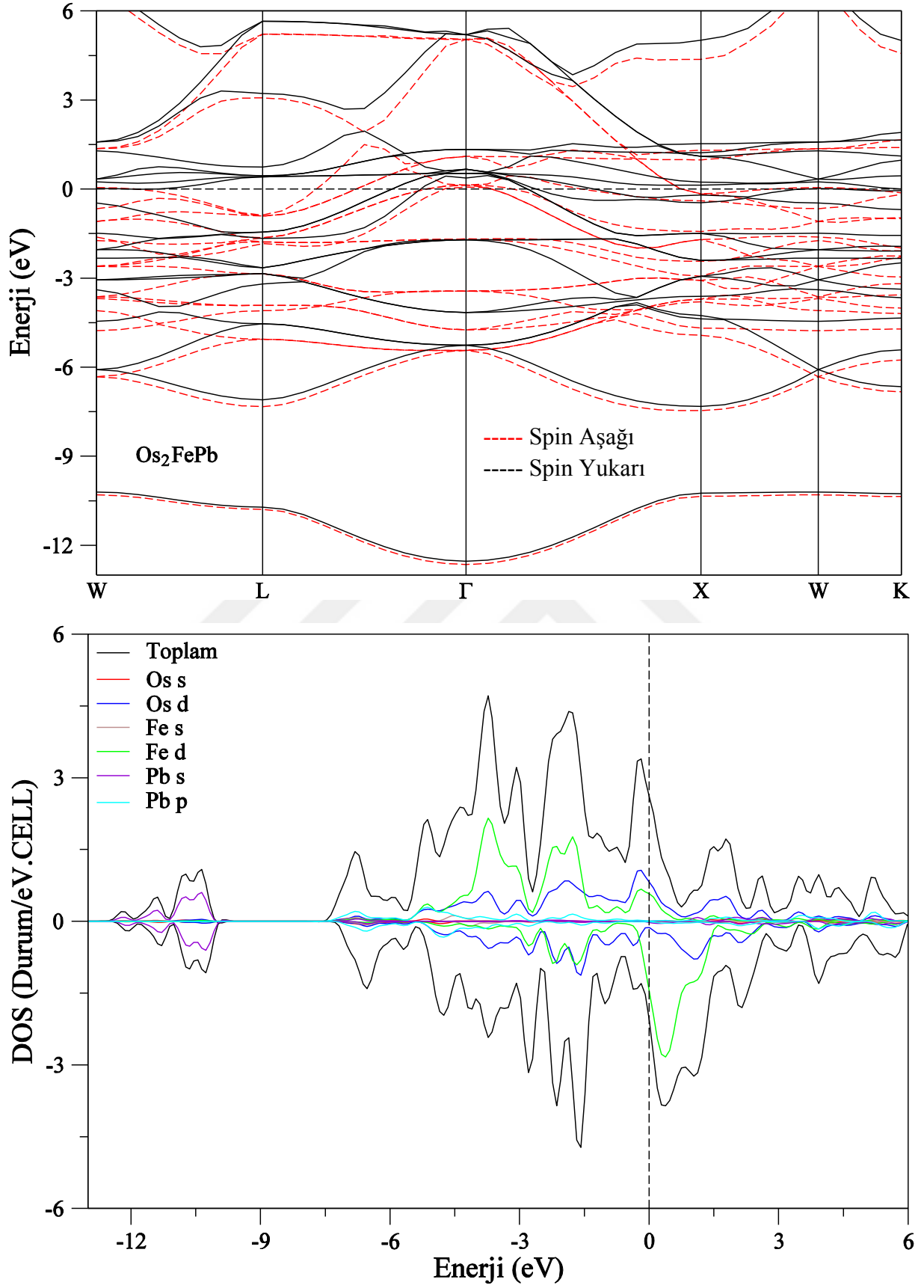
Şekil 5.13. Os_2VPb Heusler alaşımının elektronik bant, kısmi ve toplam durum yoğunluğu eğrileri



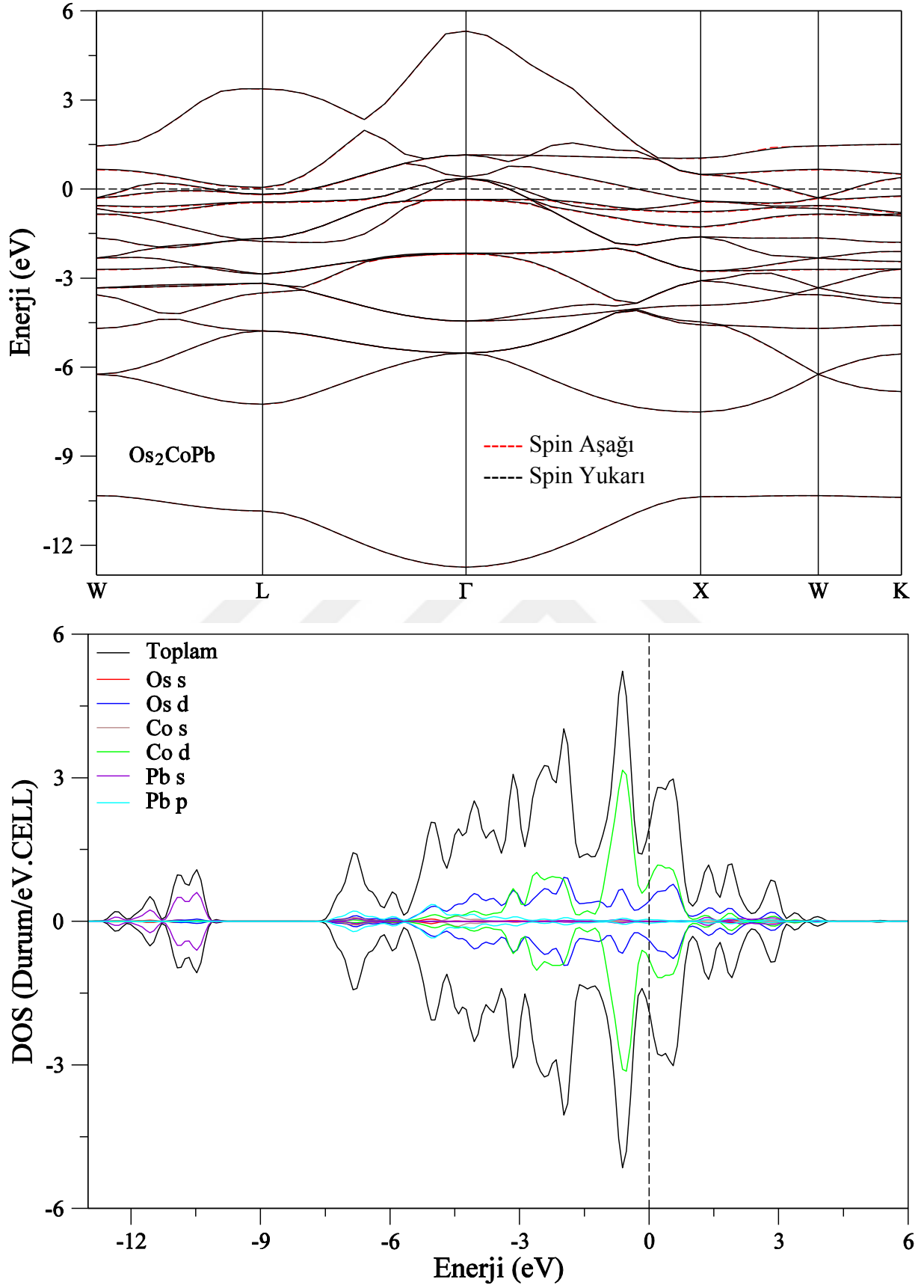
Şekil 5.14. Os_2CrPb Heusler alaşımının elektronik bant, kısmi ve toplam durum yoğunluğu eğrileri



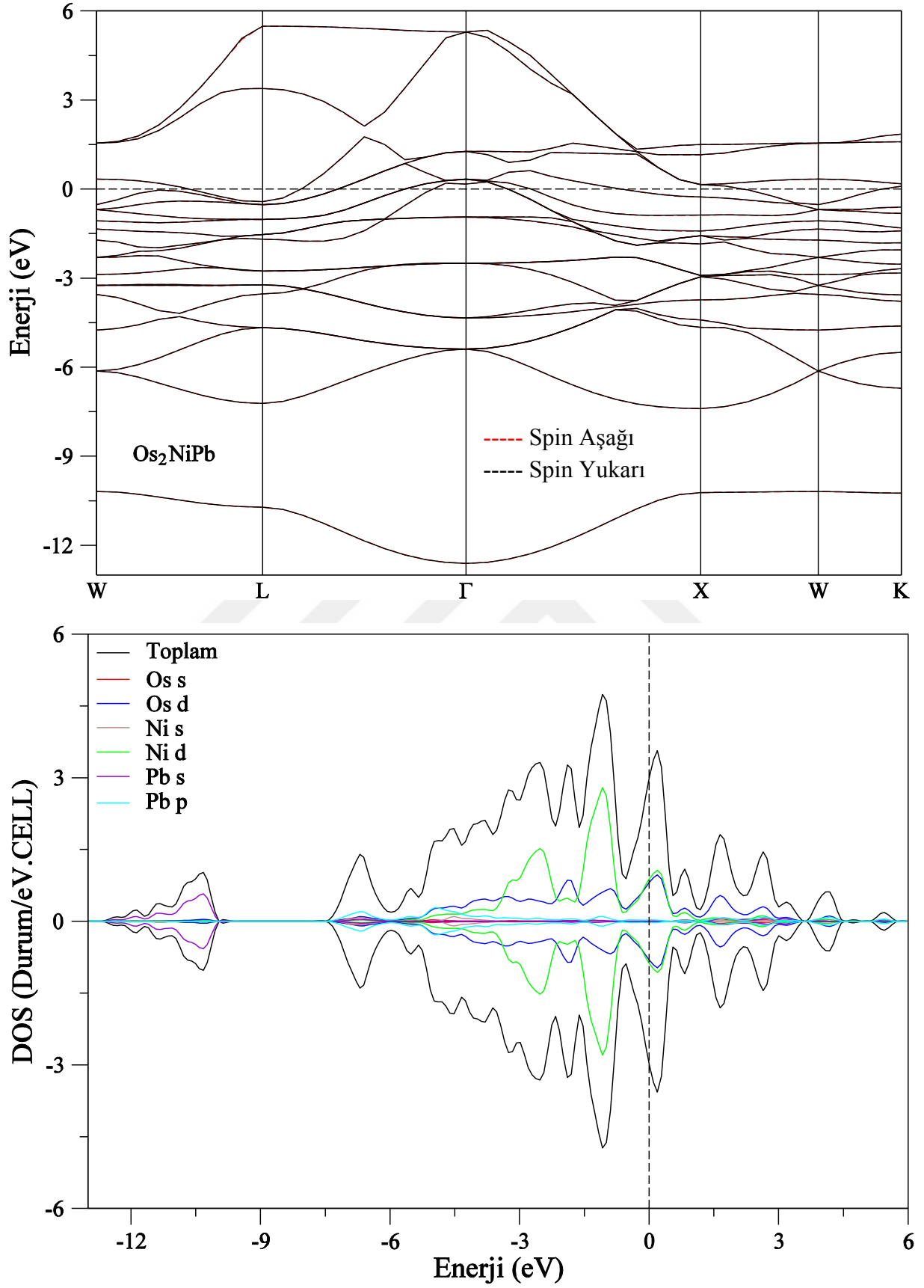
Şekil 5.15. Os_2MnPb Heusler alaşımının elektronik bant, kısmi ve toplam durum yoğunluğu eğrileri



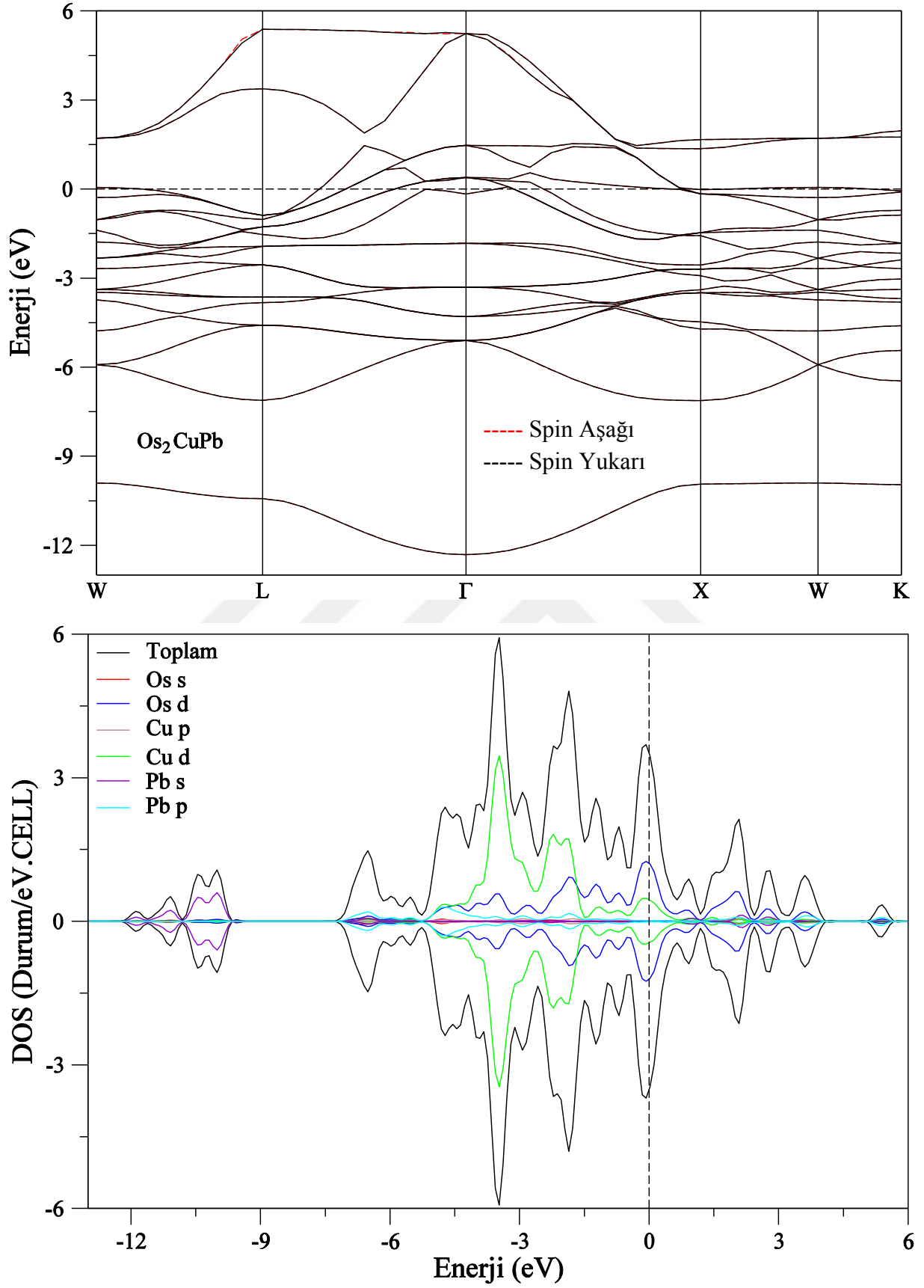
Şekil 5.16. Os_2FePb Heusler alaşımlarının elektronik bant, kısmi ve toplam durum yoğunluğu eğrileri



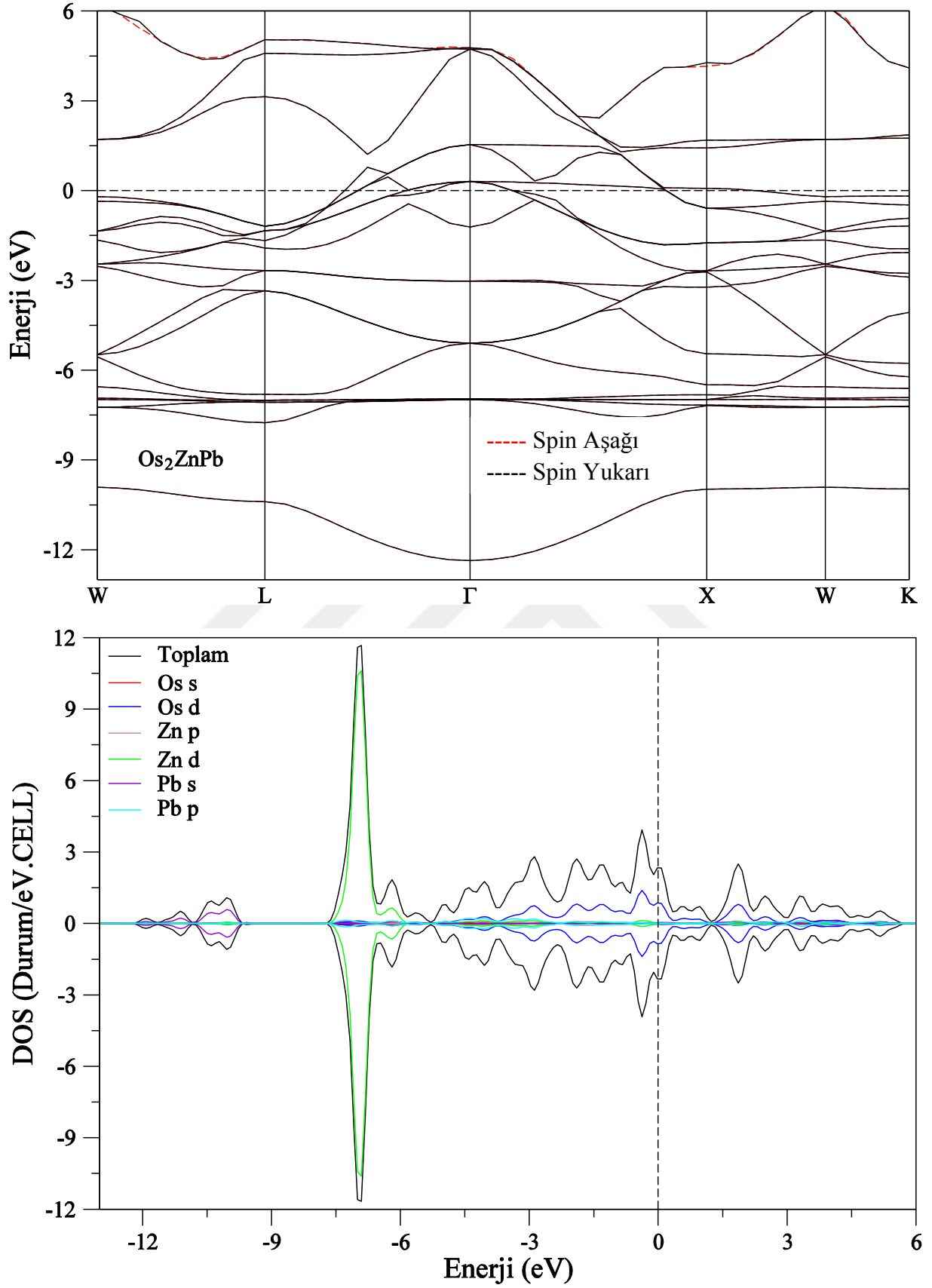
Şekil 5.17. Os_2CoPb Heusler alaşımının elektronik bant, kısmi ve toplam durum yoğunluğu eğrileri



Şekil 5.18. Os_2NiPb Heusler alaşımının elektronik bant, kısmi ve toplam durum yoğunluğu eğrileri



Şekil 5.19. Os_2CuPb Heusler alaşımının elektronik bant, kısmi ve toplam durum yoğunluğu eğrileri



Şekil 5.20. Os_2ZnPb Heusler alaşımının elektronik bant, kısmi ve toplam durum yoğunluğu eğrileri

5.3. Os₂YPb (Y=Sc, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn) Heusler Alaşımlarının Elastik Özellikleri

Bu kesimde bahsedilen elastik sabitleri, bir kristalde mekaniksel ve dinamiksel davranışlar arasında ilişki kurar. Hesaplanan elastik sabitleri değerleri, malzemenin sertlik ve kararlılığı için hakkında da bilgi içerir.

Ayrıca bunların yanı sıra katıların elastik özellikleri Debye sıcaklığı, erime noktası, özgül ısı, ısı genleşme katsayısı gibi fiziksel özellikler ile yakından bağlantılıdır.

Bir kübik sistemin üç bağımsız elastik sabiti vardır (C_{11} , C_{12} ve C_{44}). Os₂YPb (Y=Sc, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn) Heusler alaşımları için Eşitlik 3.3 ve 3.4'den hesaplanan elastik sabitleri (C_{11} , C_{12} ve C_{44}) Çizelge 5.5'te, Bulk (yığın) modülleri (B), Shear (kayma) modülleri (G), Young modülleri (E) ve B/G oranları Çizelge 5.6'da verildi.

Mekanik kararlılık şartları kübik kristaller için Born kararlılık ilkesi olarak bilinir. Bu ilkeye göre;

$$C_{11} > 0, \quad (C_{11}/C_{12} > 1), \quad (C_{11}^2 - C_{12}^2) > 0, \quad (C_{11} + 2C_{12}) > 0 \quad (4.1)$$

Eşitlikleri sağlanmalıdır [58]. Bu kararlılık şartları göz önüne alındığında elastik özellikleri hesaplanan alaşımların tamamı mekaniksel olarak kararlıdır.

Young modülü (E), sertliğin bir ölçüsüdür ve E değeri ne kadar büyükse, malzeme o kadar serttir. Bu malzemeler için hesaplanan Young modülü değerlerine göre en sert alaşım Os₂CrPb'dir.

Pugh [59] tarafından önerilen ve yaygın olarak kullanılan Bulk modüllerinin (B) Shear modüllerine (G) oranı (B/G) eğer 1.75'ten büyükse malzeme sünek davranış gösterir.

Eğer bu oran 1,75'ten küçükse malzeme kırılgan davranış gösterir. Çizelge 5.6 göz önüne alındığında B/G oranlarının kritik değer olan 1.75'ten büyük olduğu ve tüm alaşımların sünek olduğu sonucuna varıldı.

Çizelge 5.5. Os₂YPb (Y=Sc, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn) Heusler alaşımlarının Elastik sabitleri

Os ₂ YPb		Elastik sabitler (GPa)		
		C ₁₁	C ₁₂	C ₄₄
GGY	Os ₂ ScPb	232.73	145.35	110.86
	Os ₂ TiPb	328.18	161.32	87.35
	Os ₂ VPb	325.10	184.25	84.32
	Os ₂ CrPb	301.31	186.54	122.88
	Os ₂ MnPb	307.18	208.27	100.88
	Os ₂ FePb	327.58	217.92	112.39
	Os ₂ CoPb	247.31	208.65	44.30
	Os ₂ NiPb	175.45	134.42	64.56
	Os ₂ CuPb	237.80	192.54	78.71
	Os ₂ ZnPb	239.91	170.52	-41.70
YYY	Os ₂ ScPb	285.75	187.54	125.99
	Os ₂ TiPb	388.93	194.24	102.59
	Os ₂ VPb	326.77	241.49	45.13
	Os ₂ CrPb	364.74	245.40	136.68
	Os ₂ MnPb	324.91	224.21	100.78
	Os ₂ FePb	305.53	214.89	72.32
	Os ₂ CoPb	313.36	279.64	71.05
	Os ₂ NiPb	294.38	253.50	51.10
	Os ₂ CuPb	268.72	235.67	-38.59
	Os ₂ ZnPb	289.32	206.73	13.30

Çizelge 5.6. Os_2YPb (Y=Sc, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn) Heusler alaşımlarının Bulk, Shear ve Young's Modülleri

Os_2YPb		Modül (GPa)			
		Bulk(<i>B</i>)	Shear (<i>G</i>)	Young (<i>E</i>)	<i>B/G</i>
GGY	Os_2ScPb	174.48	88.99	217.14	1.96
	Os_2TiPb	216.94	85.78	227.38	2.52
	Os_2VPb	231.20	78.76	212.18	2.93
	Os_2CrPb	224.80	96.68	253.68	2.31
	Os_2MnPb	241.24	80.31	216.86	3.00
	Os_2FePb	253.14	88.56	237.94	2.85
	Os_2CoPb	221.54	34.31	97.88	6.45
	Os_2NiPb	148.10	46.94	127.37	3.15
	Os_2CuPb	207.63	56.27	154.84	3.68
	Os_2ZnPb	193.65	-11.14	-34.08	-17.38
YYY	Os_2ScPb	220.28	95.23	249.71	2.31
	Os_2TiPb	259.14	100.49	266.97	2.57
	Os_2VPb	269.92	44.13	125.56	6.11
	Os_2CrPb	285.18	105.49	282.64	2.70
	Os_2MnPb	257.78	80.61	219.00	3.19
	Os_2FePb	245.10	61.52	170.31	3.98
	Os_2CoPb	290.88	49.38	140.19	5.89
	Os_2NiPb	267.13	38.84	111.12	6.87
	Os_2CuPb	246.69	-16.54	-50.77	-14.91
	Os_2ZnPb	234.56	24.50	71.02	9.57

5.4. Os₂YPb (Y=Sc, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn) Heusler Alaşımlarının Titreşim Özellikleri

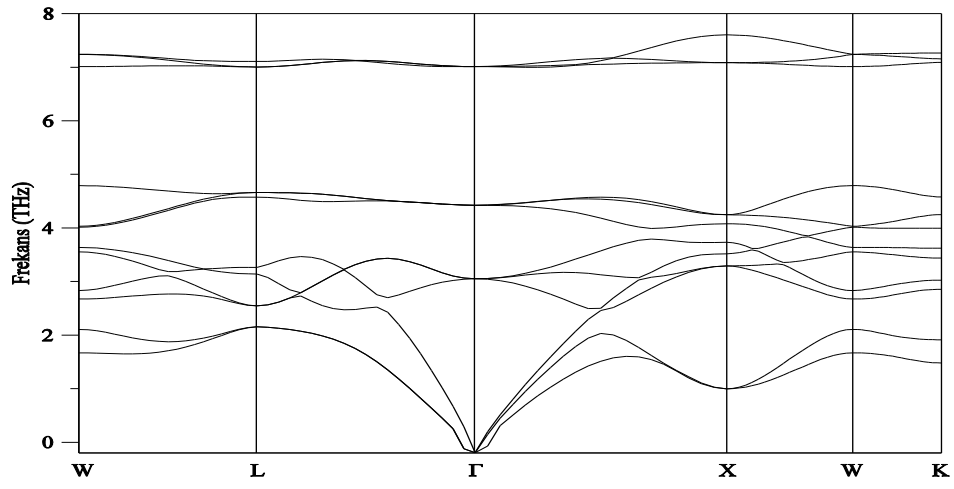
Tezde çalışılan Os₂YPb (Y=Sc, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn) Heusler alaşımları için fonon frekansları, MedeA paket programının içerisinde bulunan PHONON programı yardımıyla “doğrudan-metot” (direk-metot) kullanarak iki farklı yaklaşımla (GGY ve YYY) hesaplandı ve dispersiyon (dağınım) eğrileri GGY için Şekil 5.21 – 6.30, YYY için ise Şekil 5.31 – 5.40’ de çizdirildi.

3N serbestlik derecesinden dolayı birim hücresinde 4 atom bulunan Fm-3m uzay grubunda bu Heusler alaşımlarının 3’ü akustik 9’u optik olmak üzere toplam 12 fonon dalı bulunmaktadır. Ancak L- Γ yönünde dejenerelikten dolayı toplam mod sayısı 8’dir.

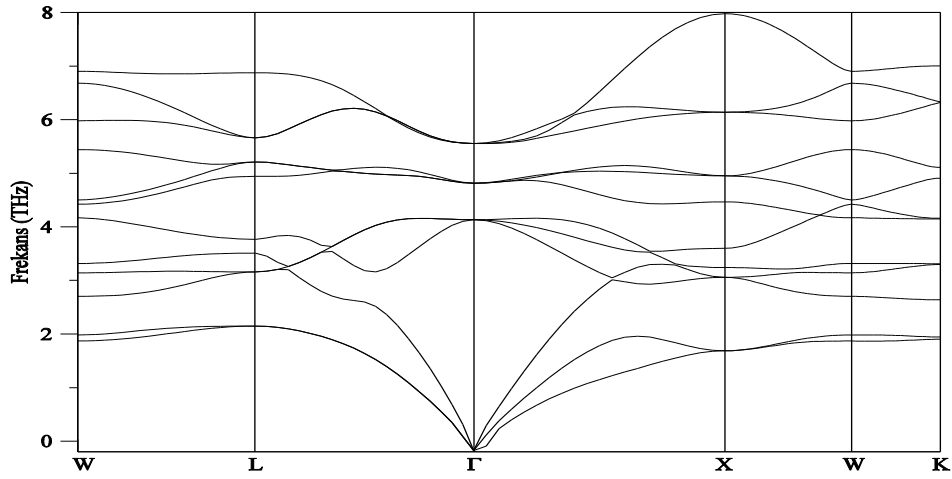
Fonon dispersiyon eğrilerinden; Os₂CrPb ve Os₂TiPb’nin YYY ile hesaplananları hariç diğerleri değişik simetri bölgelerinde negatif frekans değerlerine sahip olmasından dolayı dinamik olarak kararsız olduğu sonucuna varıldı.

GGY için Os₂YPb (Y=Sc, Ti, V, Cr) ve YYY için Os₂YPb (Y=Sc, Mn) sadece Γ simetri noktasına yakın küçük **k** değerlerinde negatif frekans değerleri vardır. GGY yaklaşımı altında Os₂MnPb için W simetri ve Os₂FePb için ise X simetri noktasına yakın yine küçük **k** değerlerinde negatif frekans değerleri bulundu.

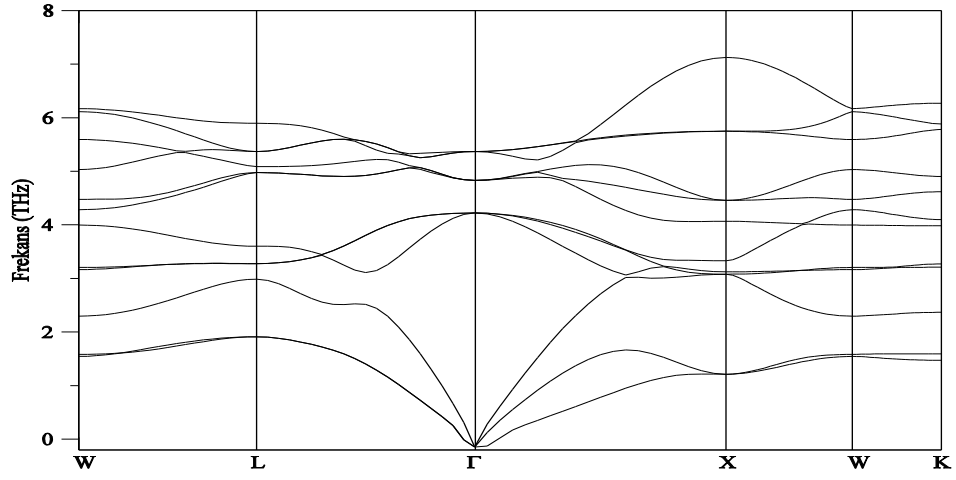
Geriye kalan GGY için Os₂YPb (Y=Co, Ni, Cu, Zn) ve YYY için Os₂YPb (Y=V, Fe, Co, Ni, Cu, Zn) alaşımları için hemen hemen tüm simetri yönleri boyunca negatif frekans değerleri elde edildi.



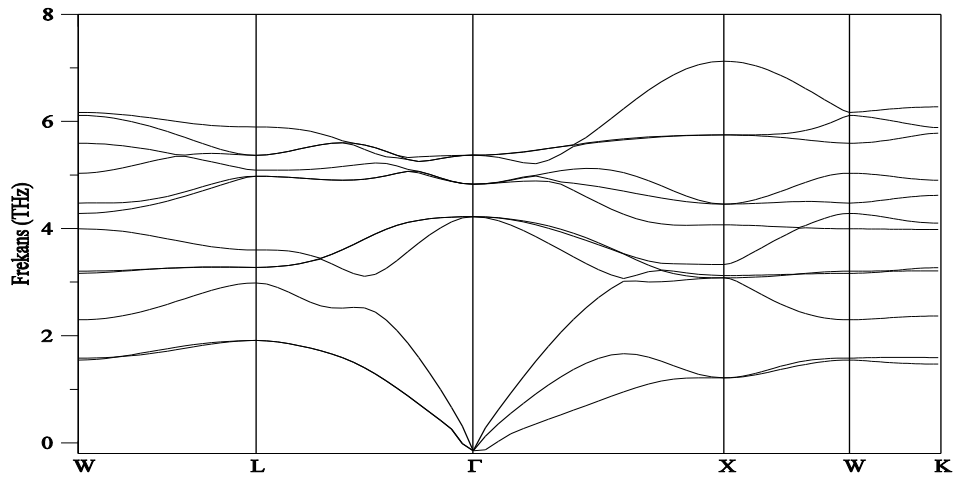
Şekil 5.21. GGY-Os₂ScPb Heusler alaşıımının temel simetri eksenleri boyunca fonon dispersiyon eğrileri



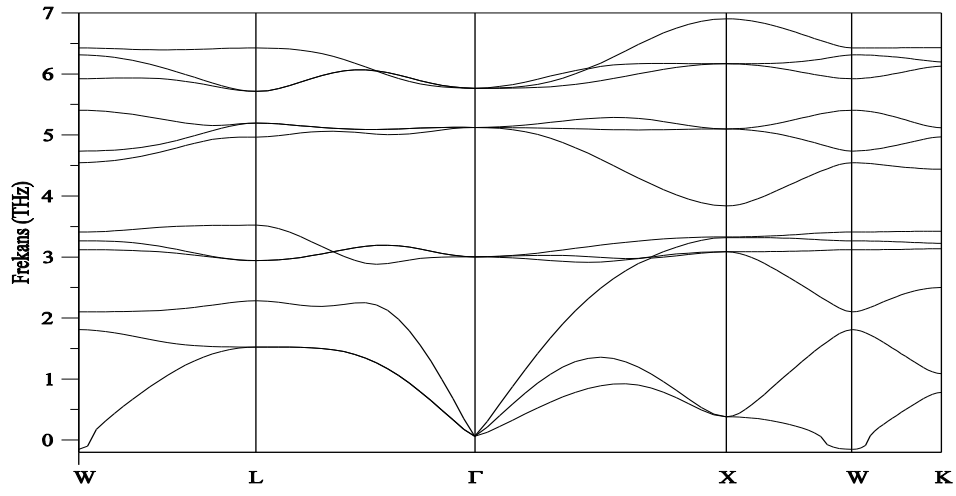
Şekil 5.22. GGY-Os₂TiPb Heusler alaşıımının temel simetri eksenleri boyunca fonon dispersiyon eğrileri



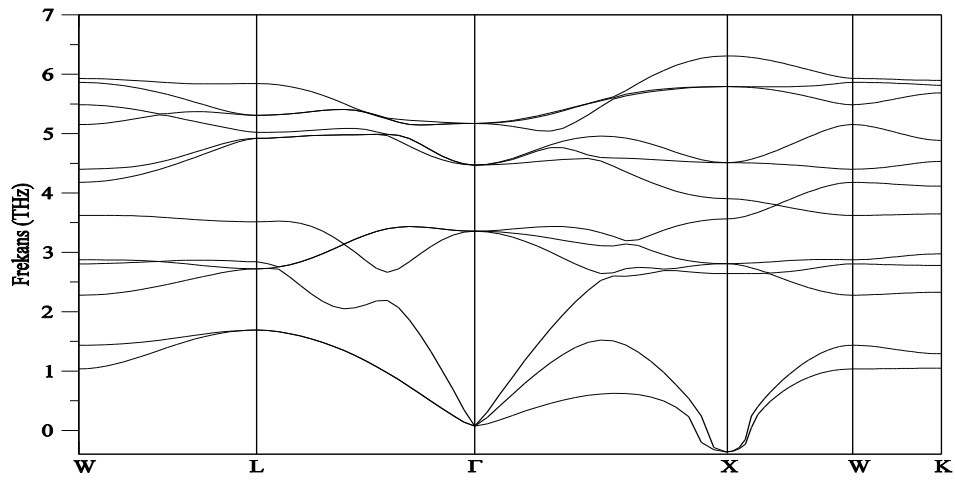
Şekil 5.23. GGY-Os₂VPb Heusler alaşımasının temel simetri eksenleri boyunca fonon dispersiyon eğrileri



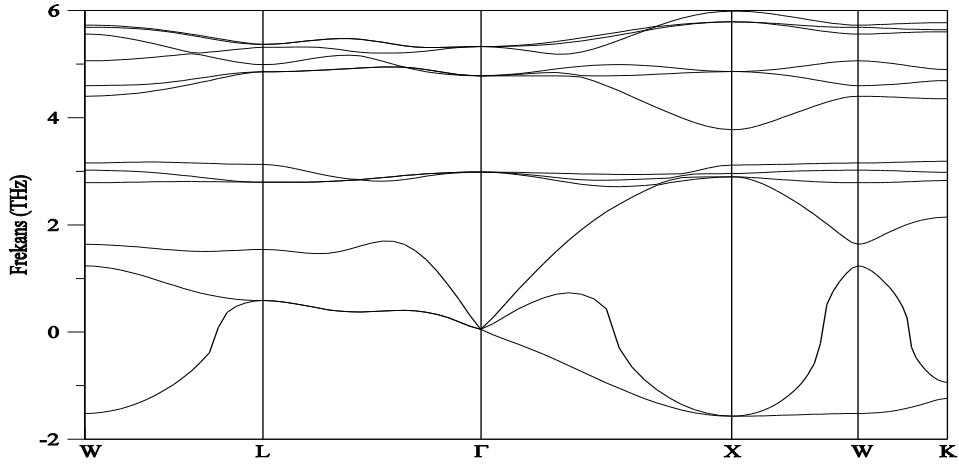
Şekil 5.24. GGY-Os₂CrPb Heusler alaşımasının temel simetri eksenleri boyunca fonon dispersiyon eğrileri



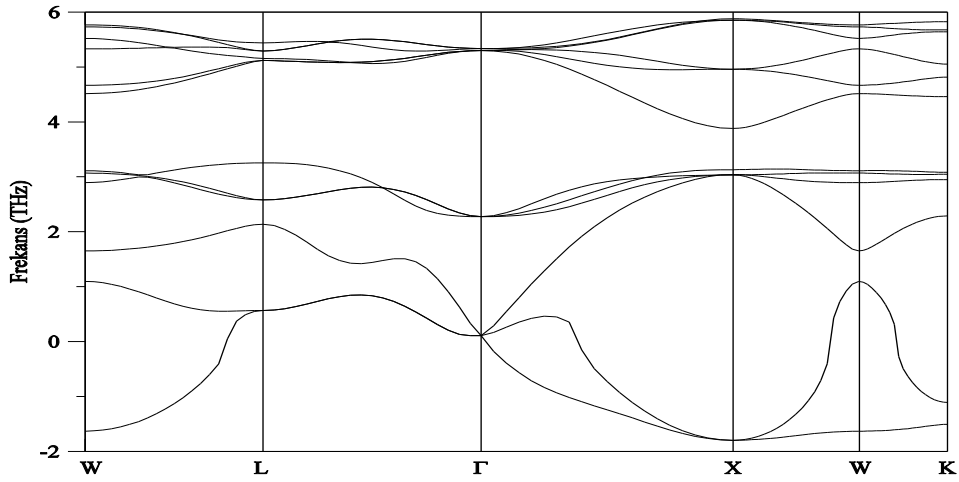
Şekil 5.25. GGY-Os₂MnPb Heusler alaşıımının temel simetri eksenleri boyunca fonon dispersiyon eğrileri



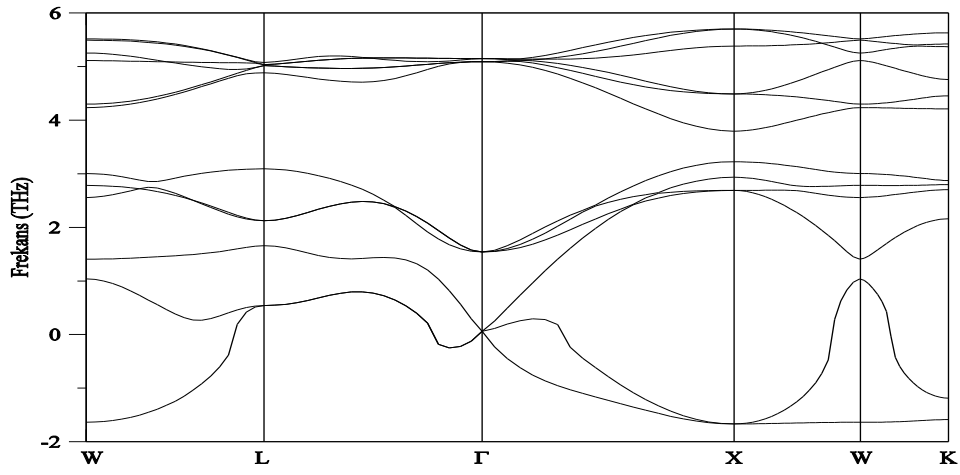
Şekil 5.26. GGY-Os₂FePb Heusler alaşıımının temel simetri eksenleri boyunca fonon dispersiyon eğrileri



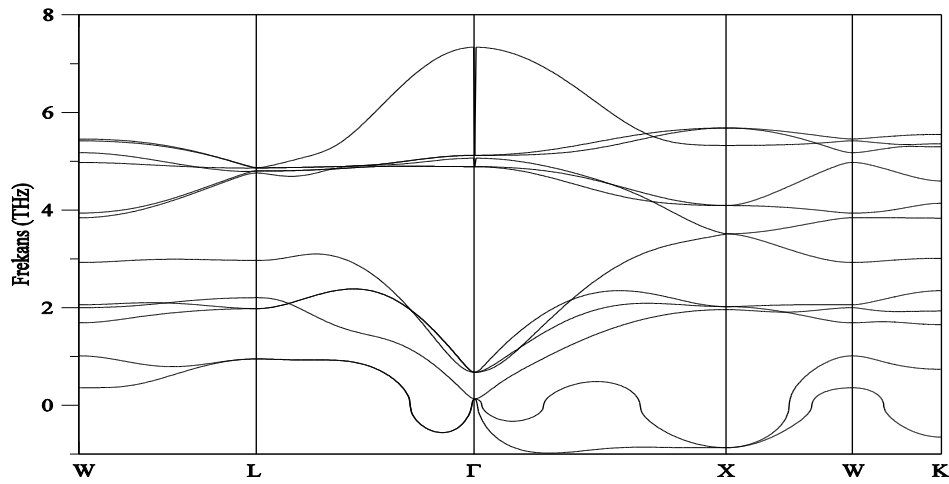
Şekil 5.27. GGY-Os₂CoPb Heusler alaşıminın temel simetri eksenleri boyunca fonon dispersiyon eğrileri



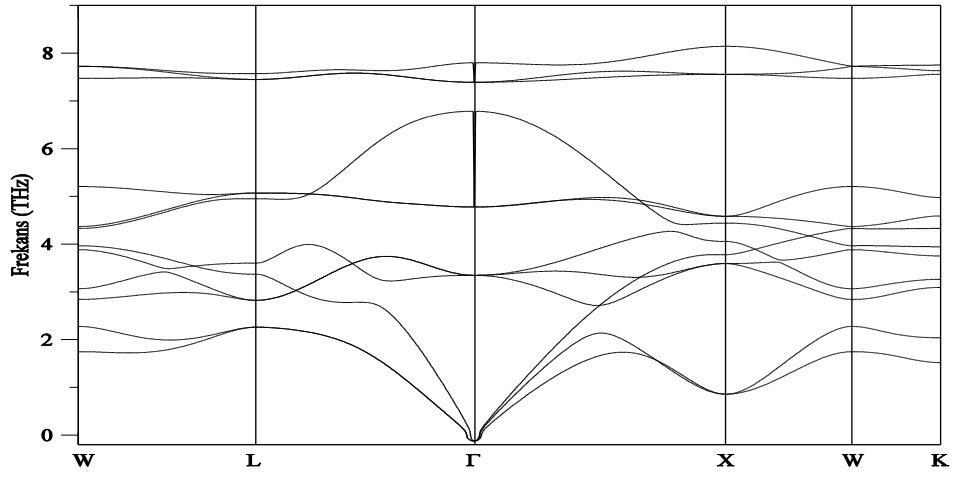
Şekil 5.28. GGY-Os₂NiPb Heusler alaşıminın temel simetri eksenleri boyunca fonon dispersiyon eğrileri



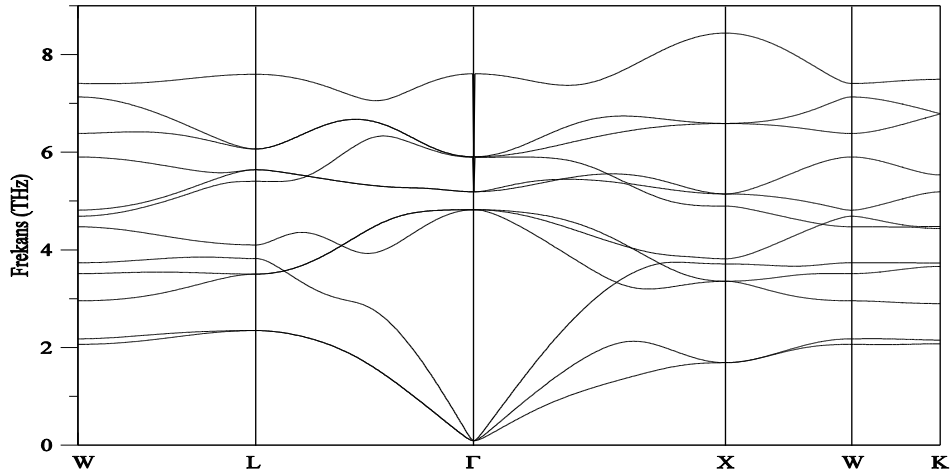
Şekil 5.29. GGY-Os₂CuPb Heusler alaşıminın temel simetri eksenleri boyunca fonon dispersiyon eğrileri



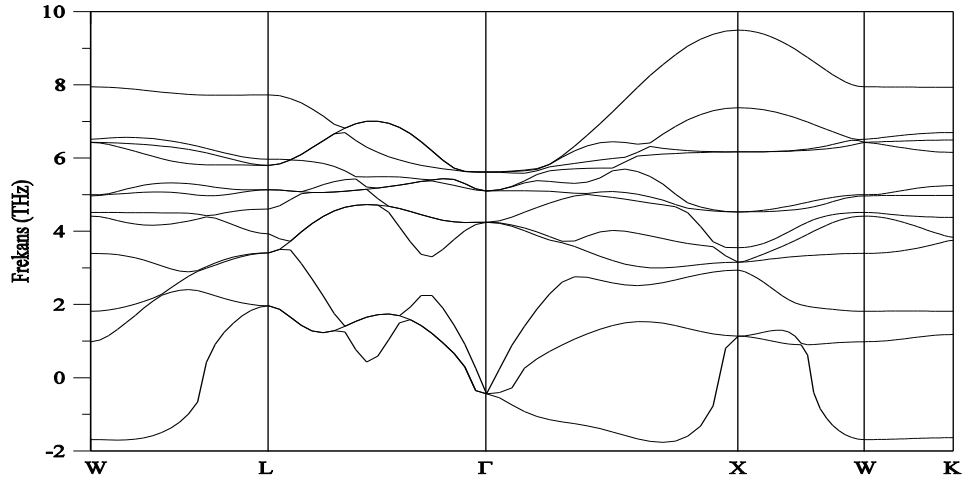
Şekil 5.30. GGY-Os₂ZnPb Heusler alaşıminın temel simetri eksenleri boyunca fonon dispersiyon eğrileri



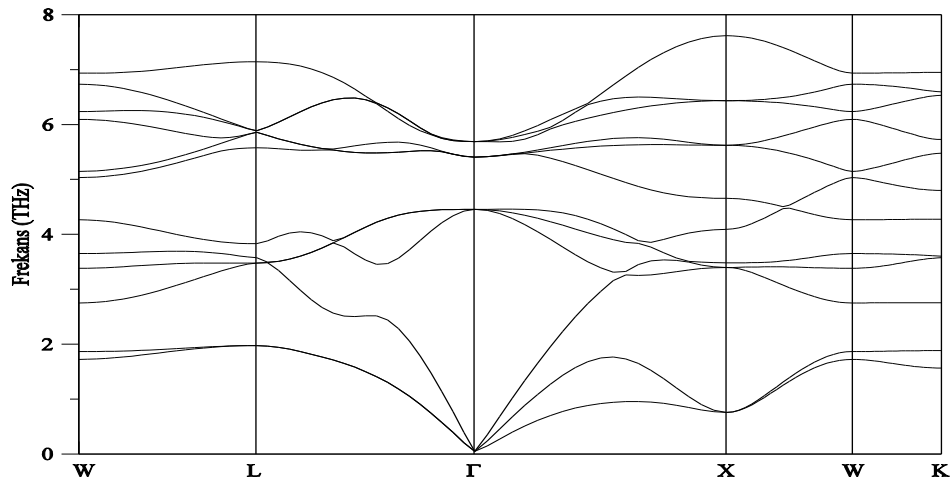
Şekil 5.31. YYY-Os₂ScPb Heusler alaşımasının temel simetri eksenleri boyunca fonon dispersiyon eğrileri



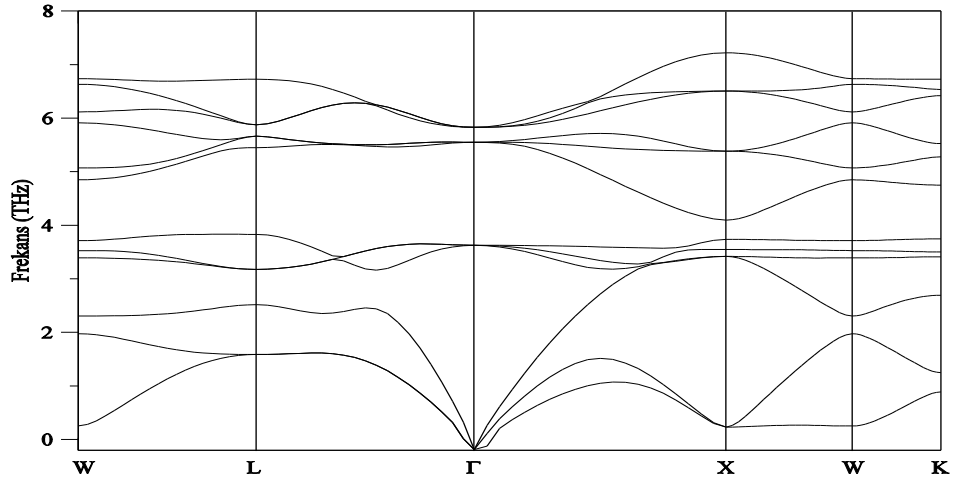
Şekil 5.32. YYY-Os₂TiPb Heusler alaşımasının temel simetri eksenleri boyunca fonon dispersiyon eğrileri



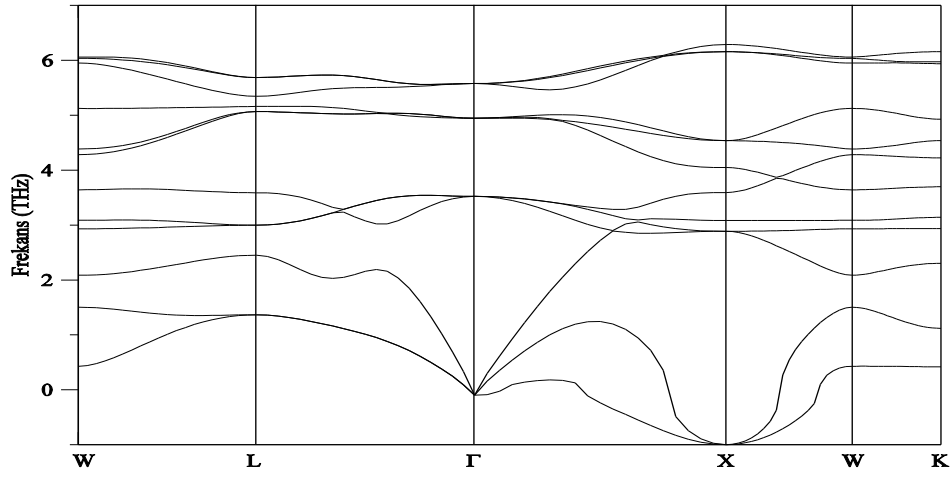
Şekil 5.33. YYY-Os₂VPb Heusler alaşımasının temel simetri eksenleri boyunca fonon dispersiyon eğrileri



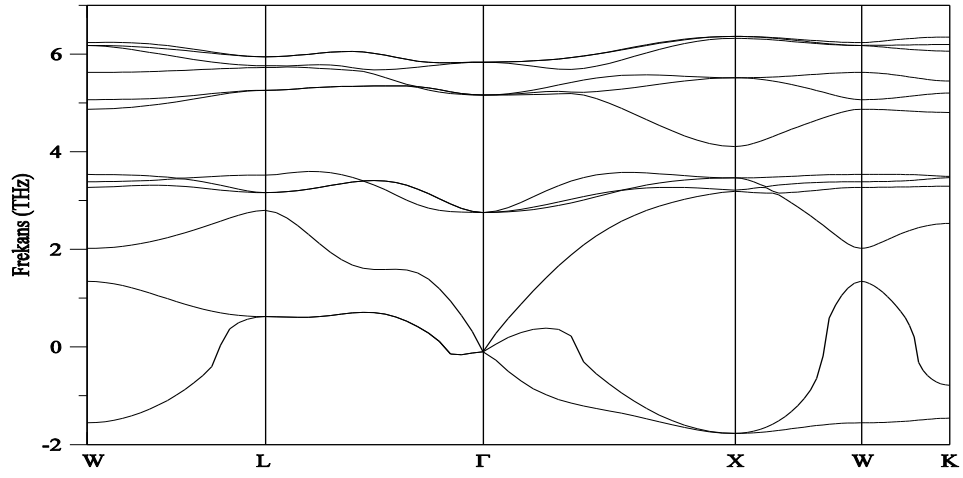
Şekil 5.34. YYY-Os₂CrPb Heusler alaşımasının temel simetri eksenleri boyunca fonon dispersiyon eğrileri



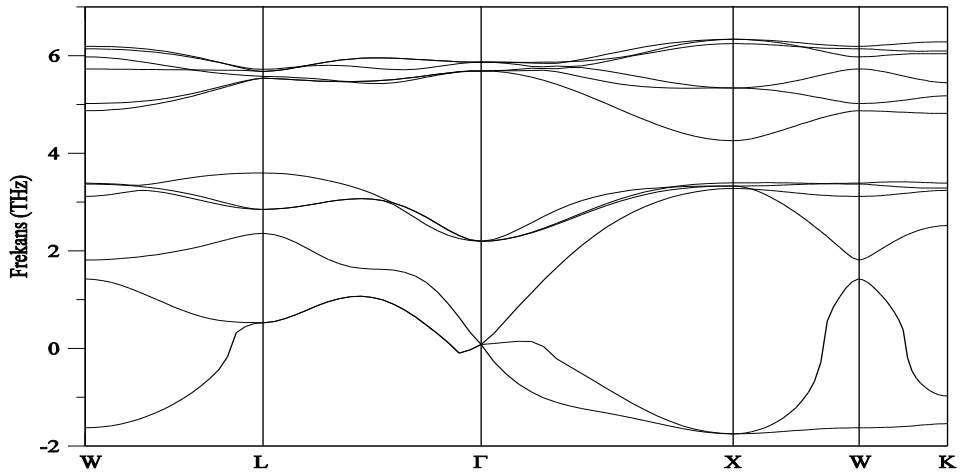
Şekil 5.35. YYY-Os₂MnPb Heusler alaşımlarının temel simetri eksenleri boyunca fonon dispersiyon eğrileri



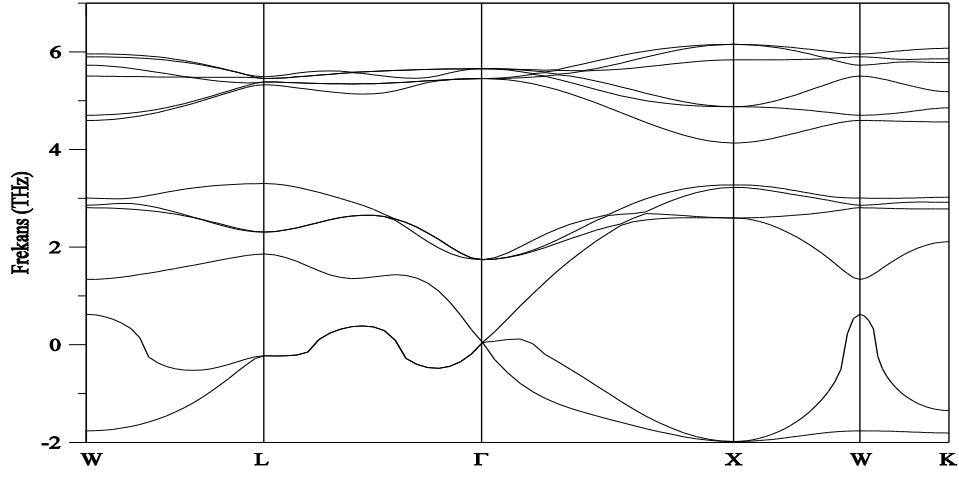
Şekil 5.36. YYY-Os₂FePb Heusler alaşımlarının temel simetri eksenleri boyunca fonon dispersiyon eğrileri



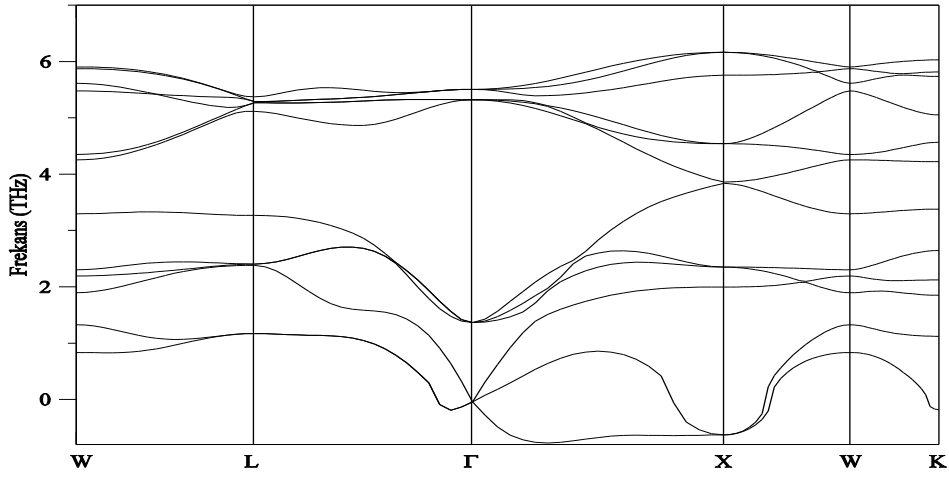
Şekil 5.37. YYY-Os₂CoPb Heusler alaşıminın temel simetri eksenleri boyunca fonon dispersiyon eğrileri



Şekil 5.38. YYY-Os₂NiPb Heusler alaşıminın temel simetri eksenleri boyunca fonon dispersiyon eğrileri



Şekil 5.39. YYY-Os₂CuPb Heusler alaşıminın temel simetri eksenleri boyunca fonon dispersiyon eğrileri



Şekil 5.40. YYY-Os₂ZnPb Heusler alaşıminın temel simetri eksenleri boyunca fonon dispersiyon eğrileri



6. SONUÇ VE ÖNERİLER

Bu tez çalışmasında, Fm-3m uzay grubunda yer alan Os_2YPb Y=(Sc, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn) Heusler alaşımlarının yapısal, elektronik, manyetik, elastik ve titreşim özellikleri iki farklı yaklaşımla (GGY ve YYY) Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi (YFT) kullanılarak teorik olarak hesaplandı.

Yapısal özellikleri kapsamında örgü sabiti değerleri literatürde yer alan diğer bir teorik çalışma [1] ile karşılaştırıldı ve oldukça uyumlu olarak bulundu.

Çalışılan alaşımlar arasında en büyük örgü sabiti değeri Os_2ScPb alaşımına ait olduğu görüldü.

Manyetik özellikler kapsamında yapılan hesaplamalardan, GGY kullanıldığında Os_2ScPb ve Os_2TiPb ve YYY kullanıldığında Os_2NiPb hariç diğer alaşımlarının net bir manyetik momente sahip olduğu bulundu.

Daha sonra elektronik bant yapı eğrileri yüksek simetri yönleri boyunca hesaplanarak ilgili şekillerde çizdirildi.

Elektronik katkının daha iyi analiz edilebilmesi için ise toplam ve kısmi durum yoğunluğu eğrileri de ayrıca gösterildi. Bu eğrilere göre tüm alaşımların iletkenlik özelliği gösterdiği sonucuna varıldı.

Fermi seviyesinde iletkenliğe en çok Os-*d*, ve Y=Sc, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn elementlerinin *d* orbitallerinin elektronlarının katkı verdiği analiz edildi.

Elastik özellikleri incelemelerinden, çalışılan tüm alaşımların mekanik kararlılık şartlarını sağladığı ve bu alaşımların $B/G > 1,75$ kriterine uyduğu görüldüğü sünük oldukları sonucuna ulaşıldı.

Ayrıca en fazla sertliğe Os_2CrPb alaşımının sahip olduğu belirlendi. Os_2CrPb ve Os_2TiPb 'nin YYY kullanılarak yapılan fonon hesaplamalarından bu iki alaşımın dinamik

olarak kararlı olduđu bulundu. Geriye kalan diğ er b t n alařımların fonon hesaplamalarından ise dinamik olarak kararsız olduđu sonucuna varıldı.

Bu  alıřmada yer alan yapısal ve manyetik  zellikleri hari  diğ er  zellikleri ile ilgili  alıřmalar yapılan literat r taramalarında bulunamamıř ve ilk defa bu tez  alıřması ile literat re kazandırılmıřtır.

Bu tezde elde edilen sonu ların, gelecekte yapılacak olan bařka teorik ve deneysel  alıřmalarla destekleneceđi umulmaktadır.

Bu tez  alıřma kapsamında yapılan, Os_2YPb $Y=(Sc, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn)$ Heusler alařımlarının yapısal, elektronik, manyetik, elastik ve titreřim  zellikleri, 2015 yılında, *XII INTERNATIONAL CONGRESS MACHINES, TECHNOLOGIES, MATERIALS 16-19 September Varna, BULGARIA* kongresinde poster bildirisi olarak sunuldu. Ayrıca *Materials Science Non-Equilibrium Phase Transformations* dergisinde tam metni basıldı [60].

KAYNAKLAR

1. Gillaben, M. (2009). *Über die quantenchemischen Untersuchungen einiger ternärer intermetallischer Verbindungen*, Von der Fakultät für Mathematik, Informatik und Naturwissenschaften der RWTH Aachen University, Erlangung des akademischen Grades eines Doktors der Naturwissenschaften genehmigte Dissertation, 108.
2. Kuralı, D. (2008). *Üçlü Alaşım Wurtzite $Al_xGa_{1-x}N$ Malzemenin Band Yapısı Hesabı*, Yüksek Lisans Tezi, Dokuz Eylül Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, İzmir, 29.
3. Kaffashnia, A. (2014). *Li_2XY ($X=Cu, Ag, Au; Y=Ge, Sn, Sb, Al, Ga, In$) Bileşiklerinin Yapısal, Elektronik, Elastik, Dinamik ve Termodinamik Özelliklerinin Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi ile İncelenmesi*, Yüksek Lisans Tezi, Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Ankara, 7.
4. Srivastava, G.P. (1999). Theoretical modelling of semiconductor surfaces: microscopic studies of electrons and phonons, *World Scientific*, 17,21-22.
5. Haug, A. (1972). *Theoretical Solid State Physics*, Oxford:Pergamon Press, 2,24-65.
6. Atkins, P. W. and Friedman R. S. (1997). *Molecular Quantum Mechanics*, 3rd ed., New York: Oxford University Press.
7. İnternet: Wikipedia Ansiklopedisi (2007). Yoğunluk fonksiyoneli teorisi, URL: http://www.webcitation.org/query?url=http%3A%2F%2Fen.wikipedia.org%2Fwiki%2FDensity_functional_theory&date=2016-01-24, Son Erişim Tarihi: 24.01.2016
8. İnternet: Dokuz Eylül Üniversitesi (2007). Yoğunluk fonksiyoneli teorisi, URL: <http://www.webcitation.org/query?url=http%3A%2F%2Fkisi.deu.edu.tr%2Fumit.akinci%2Fkmc%2Fnode1.html&date=2016-01-25>, Son Erişim Tarihi: 25.01.2016
9. Slater, J.C. (1930). Note on Hartree's Method, *Physical Review* 35, 210-211.
10. Şimşek, Ş. (2008). *$AgNbO_3$ VE $AgTaO_3$ Kristallerinin Elektronik Band Yapısı Ve Optik Özelliklerinin incelenmesi*, Yüksek Lisans Tezi, Çukurova Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Adana, 9.
11. Fock, V. (1930). Näherungsmethode zur Lösung des quantenmechanischen Mehrkörper problems, *Zeitschrift für Physik*, 61,126-148.
12. Born, M. and Oppenheimer, J. R. (1927). Zur Quantentheorie der Molekeln, *Annalen der Physik*, 84, 457-484.
13. Erkişi, A. (2007). *Bazı Bileşiklerin Elektronik Ve Titreşim Özelliklerinin Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi ile incelenmesi*, Yüksek Lisans Tezi, Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Ankara, 3-5.

14. Fermi, E. (1927). A statistical method for determining some properties of the atom, *Rendiconti Accademia*, 6, 602-607.
15. Hohenberg, P. and Kohn, W. (1964). Inhomogeneous Electron Gas, *Physical Review*, 136, B864-B871.
16. Kohn, W. And Sham, L. J. (1965). Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects, *Physical Review*, 140, A1133-A1138.
17. Ceperley, D. M. and Alder M. J. (1980). Ground State of the Electron Gas by a Stochastic Method, *Physical Review Letters*, 45, 566-569.
18. Jones, R. O. and Gunnarsson, O. (1989). The density functional formalism, its applications and prospects, *Reviews Of Modern Physics*, 6, 689-746.
19. Herman, F., Van Dyke, J. P. and Ortenburger, I. P. (1969). Improved statistical Exchange approximation for inhomogeneous many-electron system, *Physical Review Letters*, 22, 807-811.
20. Svendsen, P. S. and von Barth, U. (1996). Gradient expansion of the exchange energy from second-order density response theory, *Physical Review, B*, 54, 17402-17413.
21. Perdew, J. P. and Burke, K. (1996). Comparison shopping for a gradient-corrected density functional, *Quantum Chemistry*, 57, 309-319.
22. Körözlü, N. (2009). *Cd_xZn_{1-x}X (X=Te, Se, S) Alaşımlarının ve Wp, GdX (X=Bi, Sb) Bileşiklerinin Temel Fiziksel Özelliklerinin Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi (DFT) Ne Dayalı Yöntemlerle Hesaplanması*, Doktora Tezi, Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Ankara, 50-53.
23. Harrison, W. A. (1966). *Pseudo potentials in the theory of metals*, New York: Benjamin Press, 336.
24. Cohen, M. L. , Heine V. (1970). *Solid state physics*, New York: Academic Press, (24. ed.).
25. Sütlü, A. (2008). *BeO'nun Çinko Sülfür Ve Wurtzite Fazlarının Yapısal, Elektronik Ve Titreşim Özelliklerinin incelenmesi*, Yüksek Lisans Tezi, Sakarya Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Sakarya, 25-27.
26. Brown, P.J., Kanomata, T., Matsumoto, M., Neumann, K.U. and Ziebeck, K.R.A. (2005). The structure and Transformation Mechanism in the Ferromagnetic Shape Memory Alloy Ni₂MnGa .Magnetism and Structure in Functional Materials, *Springer-Verlag, Berlin Heidelberg*, 79, 653-655
27. Vasil'ev, A. N., Bozhko, A. D., Khovailo, V. V., Dikshtein, I. E., Shavrov, V. G., Buchelnikov, V. D., Matsumoto, M., Suzuki, S., Tagagi, T. and Tani, J. (1999).

- Structural and magnetic phase transitions in shape-memory alloys $\text{Ni}_{2+x}\text{Mn}_{1-x}\text{Ga}$, *Physical Review B*, 59, 1113-1120.
28. Dubowik, J., Goscianska, I., Szlaferek, A. and Kudryavtsev, Y.V. (2007). Structure and magnetism of Co_2CrAl Heusler alloy films. *Material Science*, 25, 417-418.
 29. Tunalı, N.K. ve Özkar, S. (1993). *Anorganik Kimya*. Ankara: Gazi Üniversitesi Yayınları, 266.
 30. Boeck, J., Roy, W., Das, J., Motsnyi, V., Liu, Z., Lagae, L., Boeve, H., Dessein, K. and Borghs, G. (2002). Technology and materials issues in semiconductor-based magnetoelectronics. *Semiconductor Science and Technology*, 17, 342-354.
 31. Durlu, T. N. (1992). *Katıhal Fiziğine Giriş* (3. Baskı). Ankara: Ankara Üniversitesi Fen Fakültesi Yayınları, 1-65.
 32. Materials Design, Inc., (2012), Materials Design, *MedeA Manual 2*(10), 3-298.
 33. Kresse, G. and Hafner, J. (1994). Ab-initio molecular dynamics for liquid metals. *Physical Review B*, 47, 558-561.
 34. Zhang, G. M. and Hewson, A. C. (1996). Non-Fermi-liquid theory of a compactified Anderson single-impurity model. *Physical Review B*, 54, 1169-1186.
 35. Page, Y. L. and Saxe, P. (2002). Symmetry-general least-squares extraction of elastic data for strained materials from ab initio calculations of stress. *Physical Review B*, 65 (104104), 1-14.
 36. Parlinski, K., Lii Z. Q. and Kawazoe Y. (1997). First-Principles Determination of the Soft Mode in Cubic ZrO_2 . *Physical Review Letters*, 78, 4063-4066.
 37. Kresse, G. and Furthmüller, J. (1996). Efficiency of ab-initio total energy calculations for metals and semiconductors using a plane-wave basis set. *Computational Materials Science*, 6, 15-50.
 38. Kresse, G. and Joubert, D. (1999). From ultrasoft pseudopotentials to the projector augmented-wave method. *Physical Review B*, 59, 1758-1775.
 39. Kresse, G. and Furthmüller, J. (1996). Efficient iterative schemes for ab initio total energy calculations using a plane-wave basis set. *Physical Review B*, 54, 11169-11186.
 40. Sürücü, G. (2014). $\text{W}_{1-x}\text{Tc}_x\text{B}_2$ ($x=0.1\sim 0.9$), Pd_3X ($\text{X}=\text{Ti}, \text{Zr}, \text{Hf}$) alaşımlarının ve $\text{Ti}_{n+1}\text{GaN}_n$ ($n=1,2,3$) bileşiklerinin ab initio yöntemlerle incelenmesi, Doktora Tezi, Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Ankara, 20-21.

41. İnternet: Kresse, G., Marsman, M. and Furthmüller, J. (2015). Vasp Manual, URL: <http://www.webcitation.org/query?url=http%3A%2F%2Fcms.mpi.univie.ac.at%2Fvasp%2Fvasp%2Fvasp.html&date=2016-01-29>, Son Erişim Tarihi: 29.01.2016
42. Page, Y.L. and Saxe, P. (2001). Symmetry-general least-squares extraction of elastic coefficients from ab initio total energy calculations, *Physical Review B*, 63 (174103), 1-8.
43. Murnaghan, F.D. (1944). The compressibility of media under extreme pressures. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 30(9), 244-247.
44. Soyalp, F. (2006). *Yoğunluk Fonksiyon Teorisi ile bazı bileşiklerin Elektronik yapılarının ve titreşim özelliklerinin teorik olarak incelenmesi*, Doktora Tezi, Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Ankara.
45. Kittel, C. (1986). *Introduction to Solid State Physics*, New York: John Wiley Sons, Inc. 8.Ed., 63- 65.
46. Laricchia, S. (2011). Generalized gradient approximations of the noninteracting kinetic energy from the semiclassical atom theory: rationalization of the accuracy of the frozen density embedding theory for nonbonded interactions, *Journal of chemical theory and computation*, 7(8), 2439-2451.
47. Dikici, M. (1993). *Katı Hal Fiziğine Giriş*, On Dokuz Mayıs Üniversitesi Yayınları, Yayın No:71, Samsun.
48. Burns, G. (1925). *Solid State Physics*, New York: Academic Press, 140-165.
49. Uğur, Ş. (2004). *AIN (110). Yüzeyinin Atomik Yapısının ve Titreşim Özelliklerinin Yoğunluk Fonksiyon Teorisi ile İncelenmesi*, Doktora Tezi, Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Ankara, 2-33.
50. Duman, S. (2002). *III-N Tipi Yarı iletkenlerin Örgü Dinamiğinin Adyabatik Bağ Yükü Modeli ile İncelenmesi*, Yüksek Lisans Tezi, Sakarya Üniversitesi. Fen Edebiyat Fakültesi, 58-59.
51. Parlinski, K. and Parlinska-Wojtan, M. (2002). First-principles calculations of vibrational and thermodynamical properties of solids, *Physical Review B*, 66, 0604307.
52. Parlinski, K., Li, Z.Q. and Kawazoe, Y. (1997). First Principles Determination of The Soft Mode in Cubic ZrO₂, *Physical Review Letter*, 78, 4063.
53. Gonze, X. and Vigneron J.P. (1989). Density-functional approach to nonlinearresponse coefficients of solids, *Physical Review B*, 39, 13120.
54. Jezierski, A., Morkowski, J.A., Szajek, A. and Pugacheva, M. (1995). Electronic structure in ternary intermetallic Pd₂TiX (X=Al,Ga,In) Heusler-type alloys: are they magnetic, *Physical Review*, 17, 60-179.

55. Asker, E. (2010). *XRh (X=Mg, Sc, Y) Bileşiklerinin Yapısal, Elektronik ve Titreşimsel Özelliklerinin Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi ile İncelenmesi*, Yüksek Lisans Tezi, Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Ankara.
56. Methfessel, M. and Paxton, A.T. (1989). High-precision sampling for brillouin-zone integration in metals, *Physical Review B*, 40 (6), 3616-3621.
57. Monkhorst, H. and Pack, J. (1976). Special points for brillouin-zone integrations, *Physical Review B*, 13, 5188-5192.
58. Born, M. and Huang, K. (1940). *Dynamical Theory of Crystal Lattice*, Oxford: Clarendon Press, 140-153.
59. Pugh, S. F. (1954). XCII. Relations between the elastic moduli and the plastic properties of polycrystalline pure metals, *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science*, 45(367), 823-843.
60. Uğur, Ş. and Nazlı, S. (2015). Pseudo-Potential Calculations of Structural, Electronic, Elastic and Phonon Properties Of Os₂YPb (Y=Sc, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn), *Materials Science Non-Equilibrium Phase Transformations*, 3, 15



ÖZGEÇMİŞ

Kişisel Bilgiler

Soyadı, adı : NAZLI, Sadullah
 Uyuğu : T.C.
 Doğum tarihi ve yeri : 27.11.1960, Ankara
 Medeni hali : Evli
 Telefon : 0 (549) 330 2115
 E-mail : sadullah1960@yahoo.com



Eğitim

Derece	Eğitim Birimi	Mezuniyet tarihi
Yüksek lisans	Gazi Üniversitesi /FİZİK	2016
Lisans	Ankara Üniversitesi/FİZİK MÜH.	1990
Lise	Çankaya Lisesi	1983

İş Deneyimi

Yıl	Yer	Görev
1991-1996	Milli Eğitim Bakanlığı	Öğretmen
1996-Halen	A.B.B. EGO Genel Müdürlüğü	Mühendis

Yabancı Dil

İngilizce

Yayınlar

-

Hobiler

Okuma, Yüzme, Gezi





GAZİ GELECEKTİR..