



**DÖRTLÜ HEUSLER ALAŞIMLARININ YAPISAL, ELEKTRONİK,
ELASTİK, DİNAMİK VE TERMODİNAMİK ÖZELLİKLERİNİN
YOĞUNLUK FONKSİYONEL TEORİSİ İLE İNCELENMESİ**

Ahmet İYİGÖR

**DOKTORA TEZİ
FİZİK ANABİLİM DALI**

**GAZİ ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

OCAK 2016

Ahmet İYİĞÖR tarafından hazırlanan “Dörtlü Heusler Alaşımlarının Yapısal, Elektronik, Elastik, Dinamik ve Termodinamik Özelliklerinin Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi ile İncelenmesi” adlı tez çalışması aşağıdaki jüri tarafından OY BİRLİĞİ ile Gazi Üniversitesi Fizik Anabilim Dalında DOKTORA TEZİ olarak kabul edilmiştir.

Danışman: Doç. Dr. Şule UĞUR

Fizik, Gazi Üniversitesi

Bu tezin, kapsam ve kalite olarak Doktora Tezi olduğunu onaylıyorum

.....

Başkan : Prof. Dr. Hüseyin ÜNVER

Fizik, Ankara Üniversitesi

Bu tezin, kapsam ve kalite olarak Doktora Tezi olduğunu onaylıyorum

.....

Üye : Prof. Dr. Bahtiyar SALAMOV

Fizik, Gazi Üniversitesi

Bu tezin, kapsam ve kalite olarak Doktora Tezi olduğunu onaylıyorum

.....

Üye : Prof. Dr. Nezihe ÇALIŞKAN

Fizik, Gazi Üniversitesi

Bu tezin, kapsam ve kalite olarak Doktora Tezi olduğunu onaylıyorum

.....

Üye : Prof. Dr. Bahadır BOYACIOĞLU

Fizik, Ankara Üniversitesi

Bu tezin, kapsam ve kalite olarak Doktora Tezi olduğunu onaylıyorum

.....

Tez Savunma Tarihi: 15/01/2016

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

.....

Prof. Dr. Metin GÜRÜ

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.

.....
Ahmet İYİGÖR
(15.01.2016)

DÖRTLÜ HEUSLER ALAŞIMLARININ YAPISAL, ELEKTRONİK, ELASTİK,
DİNAMİK VE TERMODİNAMİK ÖZELLİKLERİNİN YOĞUNLUK FONKSİYONEL
TEORİSİ İLE İNCELENMESİ

(Doktora Tezi)

Ahmet İYİGÖR

GAZİ ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

Ocak 2016

ÖZET

Dörtlü CoFeCrX (X = Al, Si, Ga, Ge), CoFeTiY (Y = Al, Ga, Si, Ge, As ve Sb), CoFeVY (Y = Al, Ga, Si, Ge, As ve Sb), CoRhMnZ (Z = Ga, Sn ve Sb), CuCoMnGa ve FeNiMnAl Heusler alaşımlarının yapısal, elektronik, elastik, termodinamik ve titreşim özellikleri genelleştirilmiş gradyent yaklaşımı kullanılarak yoğunluk fonksiyonel teorisiyle incelendi. Taban durum özellikleri mevcut deneysel ve teorik çalışmalarla uyum içerisinde bulundu. Elastik sabitleri (C_{ij}) stress-strain tekniği kullanılarak hesaplandı. Hesaplanan sonuçlar CoFeCrX (X = Al, Si, Ga, Ge), CoFeTiY (Y = Al, Ga, Si, Ge, As ve Sb), CoFeVY (Y = Al, Ga, Si, Ge, As ve Sb), CoRhMnZ (Z = Ga, Sn ve Sb) ve CuCoMnGa alaşımlarını sünek malzeme olduğunu göstermektedir. Fakat sonuçlara göre FeNiMnAl alaşımı kırılğan malzemedir. Debye sıcaklığı hesaplanan ses hızlarından belirlendi. Sabit hacimdeki ısı sığasının ve entropinin sıcaklığa göre değişimi hesaplandı. Ayrıca tüm dörtlü Heusler alaşımları için fonon dispersiyon ilişkileri ilk defa yoğunluk fonksiyonel teorisi ve doğrudan-metot (direkt-metot) kullanılarak hesaplandı.

Bilim Kodu : 202.1.147
Anahtar Kelimeler : Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi, Fonon dağılımı, Elastik özellikler,
Dörtlü Heusler Alaşımları
Sayfa Adedi : 110
Danışman : Doç. Dr. Şule UĞUR

THE INVESTIGATION OF STRUCTURAL, ELECTRONIC, ELASTIC, DYNAMIC
AND THERMODYNAMIC PROPERTIES OF QUATERNARY HEUSLER ALLOYS
WITHIN THE DENSITY FUNCTIONAL THEORY

(Ph. D. Thesis)

Ahmet İYİĞÖR

GAZİ UNIVERSITY

GRADUATE SCHOOL OF NATURAL AND APPLIED SCIENCES

January 2016

ABSTRACT

The structural, electronic, elastic, thermodynamic and vibration properties of the quaternary CoFeCrX (X=Al, Si, Ga and Ge), CoFeTiY (Y=Al, Ga, Si, Ge, As and Sb), CoFeVY (Y=Al, Ga, Si, Ge, As and Sb), CoRhMnZ (Z=Ga, Sn and Sb), CuCoMnGa and FeNiMnAl Heusler alloys have been investigated using the generalized gradient approximation method within density functional theory. The ground-state properties are in good agreement with the available theoretical and experimental data. The elastic constants (C_{ij}) are computed using the stress-strain technique. The calculated results indicate that CoFeCrX (X=Al, Si, Ga and Ge), CoFeTiY (Y=Al, Ga, Si, Ge, As and Sb), CoFeVY (Y=Al, Ga, Si, Ge, As and Sb), CoRhMnZ (Z=Ga, Sn and Sb) and CuCoMnGa alloys are ductile materials. But FeNiMnAl alloy is brittle material. Debye temperatures is determined from calculated sound velocity. Heat capacity at constant volume and Entropy versus temperature are calculated. The phonon dispersion relations of all quaternary Heusler alloys are calculated for the first time using the density functional theory and the direct method.

Science Code : 202.1.147

Key Words : Density Functional Theory, Phonon dispersion, Elastic properties,
Quaternary Heusler Alloys

Page Number : 110

Supervisor : Assoc. Prof. Dr. Şule UĞUR

TEŞEKKÜR

Çalışmalarım boyunca değerli yardım ve katkılarıyla beni yönlendiren, karşılaştığım tüm zorlukların çözümlenmesinde yakın ilgisini esirgemeyen danışmanım Doç. Dr. Şule UĞUR'a teşekkürlerimi bir borç bilirim. Ayrıca Çalışmalarım sırasında yardımlarını esirgemeyen, sorunlarıma çözüm bulan, çalışmalarımı daha verimli bir şekilde tamamlamamı sağlayan, değerli hocam Prof. Dr. Gökay UĞUR'a çok teşekkür ederim.

Tez çalışmalarım sırasında benden desteklerini ve yardımlarını esirgemeyen Uzman Abdullah CANDAN'a, Yrd. Doç. Dr. Mustafa ÖZDURAN'a, Doç. Dr. Nihat ARIKAN'a, Barış ATALAYIN'a, Yudum BALCI'ya, Savaş BALCI'ya ve en ufak bir yardımı dahi geçen herkese teşekkür ederim.

Bu uzun ve meşakkatli süreçte her zaman yanımda bulunan gerek maddi gerekse manevi açıdan desteğini hep üzerimde hissettiğim kıymetli eşim Didem'e bu tez çalışmamı ithaf ederek gönülden teşekkür ediyorum.

Bu çalışma Gazi Üniversitesi Araştırma Projesi Birimi tarafından 05/2012-62 nolu proje ile desteklenmiştir.

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. Ab-initio Hesaplamasına Giriş	5
2.2. Çok Cisim Sistemi.....	5
2.3. Born-Oppenheimer Yaklaşımı	6
2.4. Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi (YFT)	7
2.4.1. Hohenberg-Kohn teoremleri	7
2.4.2. Kohn-Sham eşitlikleri	9
2.4.3. Değiş-tokuş korelasyon fonksiyoneli.....	11
2.4.4. Pseudopotansiyel metodu (PP).....	12
2.4.5. Brillouin bölgesindeki k-noktaları	14
3. TEORİ VE METOTLAR	17
3.1. Heusler Alaşımları	17
3.1.1. Manyetik özellikler	18
3.1.2. Yarı metalik ferromanyetler	18
3.1.3. Yüzey merkezli kübik (fcc) örgünün temel simetri noktaları	20

	Sayfa
3.2. Materials Design (MedeA) Programı.....	21
3.3. VASP Program Paketi.....	22
3.4. MT Modülü – Elastik Özellikler	23
3.4.1 Elastik sabitlerin tanımı.....	23
3.4.2 Elastik sabitlerinin hesaplanması	24
3.4.3. Voigt-Ress-Hill metot	25
3.4.4. Termal genleşme, Debye sıcaklığı ve ısı sığası	26
3.5. PHONON Programı ve Doğrudan Metot.....	27
3.5.1. Termodinamik fonksiyonlar	30
4. BULGULAR VE TARTIŞMA	33
4.1. İncelenen Dörtlü Heusler Alaşımlarının Yapısal Özellikleri	35
4.2. İncelenen Dörtlü Heusler Alaşımlarının Elektronik ve Manyetik Özellikleri	38
4.3. İncelenen Dörtlü Heusler Alaşımlarının Elastik Özellikleri	67
4.4. İncelenen Dörtlü Heusler Alaşımlarının Titreşim Özellikleri.....	71
4.5. İncelenen Dörtlü Heusler Alaşımlarının Termodinamik Özellikleri.....	83
5. SONUÇ VE ÖNERİLER.....	91
KAYNAKLAR	97
ÖZGEÇMİŞ	107

ÇİZELGELERİN LİSTESİ

Çizelge	Sayfa
Çizelge 4.1. F-43m uzay grubundaki İncelenen dörtlü Heusler alaşımlarının atomik pozisyonları.....	34
Çizelge 4.2. Hesaplamalarda kullanılan bazı kesme enerjisi (eV), smearing parametresinin değerleri ve k-noktaları.	34
Çizelge 4.3. İncelenen dörtlü Heusler alaşımlarının örgü sabitleri (Å) ve Bulk modülü (GPa).....	37
Çizelge 4.4. İncelenen dörtlü Heusler alaşımlarının toplam manyetik momentleri (Mt , μ_B), toplam değerlik elektron sayıları ve SPD'ye göre elde edilen toplam manyetik momentler (Mt , μ_B).....	44
Çizelge 4.5. İncelenen dörtlü Heusler alaşımlarının Fermi Seviyesi üzerindeki durum yoğunlu değerleri (DOS/States CELL).....	45
Çizelge 4.6. İncelenen dörtlü Heusler alaşımlarının için hesaplanan elastik sabitleri....	68
Çizelge 4.7. İncelenen dörtlü Heusler alaşımlarının Bulk modülü (B), Kayma modülü (G), Bulk modülünün Kayma modülüne oranı (B/G) ve Young modülü (E), Poisson's oranı (σ).....	70
Çizelge 4.8. İncelenen dörtlü Heusler alaşımlarının hesaplanan ses hızları (m/s).....	71
Çizelge 4.9. İncelenen dörtlü Heusler alaşımlarının Γ temel simetri ekseninde yer alan Brillouin bölgesinin merkezindeki optik fonon frekansları.....	72
Çizelge 4.10. İncelenen dörtlü Heusler alaşımlarının Debye sıcaklıkları (K)	84

ŞEKİLLERİN LİSTESİ

Şekil	Sayfa
Şekil 2.1. Bir kristalin toplam enerjisini kendini doğrulama metodunu kullanarak hesaplayan bir bilgisayar programının akış çizelgesi	11
Şekil 2.2. Pseudo potansiyel ve Pseudo dalga fonksiyonu	14
Şekil 3.1. Heusler alaşımlarının kristal yapısı a) yarı, b) tam ve c) dörtlü Heusler alaşımları.....	17
Şekil 2.2. 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. Heusler tipi alaşımların kristal yapıları a) Heusler, b) Dörtlü Heusler.....	33
Şekil 4.2. CoFeCrAl dörtlü Heusler alaşımının elektronik bant, kısmi ve toplam durum yoğunluğu eğrileri.....	46
Şekil 4.3. CoFeCrSi dörtlü Heusler alaşımının elektronik bant, kısmi ve toplam durum yoğunluğu eğrileri.....	47
Şekil 4.4. CoFeCrGa dörtlü Heusler alaşımının elektronik bant, kısmi ve toplam durum yoğunluğu eğrileri.....	48
Şekil 4.5. CoFeCrGe dörtlü Heusler alaşımının elektronik bant, kısmi ve toplam durum yoğunluğu eğrileri.....	49
Şekil 4.6. CoFeTiAl dörtlü Heusler alaşımının elektronik bant, kısmi ve toplam durum yoğunluğu eğrileri.....	50
Şekil 4.7. CoFeTiGa dörtlü Heusler alaşımının elektronik bant, kısmi ve toplam durum yoğunluğu eğrileri.....	51
Şekil 4.8. CoFeTiSi dörtlü Heusler alaşımının elektronik bant, kısmi ve toplam durum yoğunluğu eğrileri.....	52
Şekil 4.9. CoFeTiGe dörtlü Heusler alaşımının elektronik bant, kısmi ve toplam durum yoğunluğu eğrileri.....	53
Şekil 4.10. CoFeTiAs dörtlü Heusler alaşımının elektronik bant, kısmi ve toplam durum yoğunluğu eğrileri	54
Şekil 4.11. CoFeTiSb dörtlü Heusler alaşımının elektronik bant, kısmi ve toplam durum yoğunluğu eğrileri.....	55

Şekil	Sayfa
Şekil 4.12. CoFeVAl dörtlü Heusler alaşımasının elektronik bant, kısmi ve toplam durum yoğunluğu eğrileri.....	56
Şekil 4.13. CoFeVGa dörtlü Heusler alaşımasının elektronik bant, kısmi ve toplam durum yoğunluğu eğrileri.....	57
Şekil 4.14. CoFeVSi dörtlü Heusler alaşımasının elektronik bant, kısmi ve toplam durum yoğunluğu eğrileri.....	58
Şekil 4.15. CoFeVGe dörtlü Heusler alaşımasının elektronik bant, kısmi ve toplam durum yoğunluğu eğrileri.....	59
Şekil 4.16. CoFeVAs dörtlü Heusler alaşımasının elektronik bant, kısmi ve toplam durum yoğunluğu eğrileri.....	60
Şekil 4.17. CoFeVSb dörtlü Heusler alaşımasının elektronik bant, kısmi ve toplam durum yoğunluğu eğrileri.....	61
Şekil 4.18. CoRhMnGa dörtlü Heusler alaşımasının elektronik bant, kısmi ve toplam durum yoğunluğu eğrileri.....	62
Şekil 4.19. CoRhMnSn dörtlü Heusler alaşımasının elektronik bant, kısmi ve toplam durum yoğunluğu eğrileri.....	63
Şekil 4.20. CoRhMnSb dörtlü Heusler alaşımasının elektronik bant, kısmi ve toplam durum yoğunluğu eğrileri.....	64
Şekil 4.21. CuCoMnGa dörtlü Heusler alaşımasının elektronik bant, kısmi ve toplam durum yoğunluğu eğrileri.....	65
Şekil 4.22. FeNiMnAl dörtlü Heusler alaşımasının elektronik bant, kısmi ve toplam durum yoğunluğu eğrileri	66
Şekil 4.23. CoFeCrAl dörtlü Heusler alaşımasının temel simetri yönelimlerine göre fonon dispersiyon eğrileri	73
Şekil 4.24. CoFeCrSi dörtlü Heusler alaşımasının temel simetri yönelimlerine göre fonon dispersiyon eğrileri	73
Şekil 4.25. CoFeCrGa dörtlü Heusler alaşımasının temel simetri yönelimlerine göre fonon dispersiyon eğrileri	74
Şekil 4.26. CoFeCrGe dörtlü Heusler alaşımasının temel simetri yönelimlerine göre fonon dispersiyon eğrileri	74
Şekil 4.27. CoFeTiAl dörtlü Heusler alaşımasının temel simetri yönelimlerine göre fonon dispersiyon eğrileri.....	75

Şekil	Sayfa
Şekil 4.28. CoFeTiGa dörtlü Heusler alaşımının temel simetri yönelimlerine göre fonon dispersiyon eğrileri	75
Şekil 4.29. CoFeTiSi dörtlü Heusler alaşımının temel simetri yönelimlerine göre fonon dispersiyon eğrileri	76
Şekil 4.30. CoFeTiGe dörtlü Heusler alaşımının temel simetri yönelimlerine göre fonon dispersiyon eğrileri	76
Şekil 4.31. CoFeTiAs dörtlü Heusler alaşımının temel simetri yönelimlerine göre fonon dispersiyon eğrileri	77
Şekil 4.32. CoFeTiSb dörtlü Heusler alaşımının temel simetri yönelimlerine göre fonon dispersiyon eğrileri	77
Şekil 4.33. CoFeVAl dörtlü Heusler alaşımının temel simetri yönelimlerine göre fonon dispersiyon eğrileri	78
Şekil 4.34. CoFeVGa dörtlü Heusler alaşımının temel simetri yönelimlerine göre fonon dispersiyon eğrileri	78
Şekil 4.35. CoFeVGe dörtlü Heusler alaşımının temel simetri yönelimlerine göre fonon dispersiyon eğrileri	79
Şekil 4.36. CoFeVAs dörtlü Heusler alaşımının temel simetri yönelimlerine göre fonon dispersiyon eğrileri	79
Şekil 4.37. CoFeVSb dörtlü Heusler alaşımının temel simetri yönelimlerine göre fonon dispersiyon eğrileri	80
Şekil 4.38. CoRhMnGa dörtlü Heusler alaşımının temel simetri yönelimlerine göre fonon dispersiyon eğrileri.....	80
Şekil 4.39. CoRhMnSn dörtlü Heusler alaşımının temel simetri yönelimlerine göre fonon dispersiyon eğrileri	81
Şekil 4.40. CoRhMnSb dörtlü Heusler alaşımının temel simetri yönelimlerine göre fonon dispersiyon eğrileri	81
Şekil 4.41. CuCoMnGa dörtlü Heusler alaşımının temel simetri yönelimlerine göre fonon dispersiyon eğrileri a) CuCoMnGa 0 GPa, b) CuCoMnGa 0,2 GPa .	82
Şekil 4.42. FeNiMnAl dörtlü Heusler alaşımının temel simetri eksenleri boyunca fonon dispersiyon eğrileri	83
Şekil 4.43. CoFeCrX (X=Al, Si, Ga ve Ge) dörtlü Heusler alaşımlarının ısı iletkenliklerinin sıcaklıkla değişimi	85

Şekil	Sayfa
Şekil 4.44. CoFeTiY (Y=Al, Ga, Si, Ge, As ve Sb) dörtlü Heusler alaşımlarının ısı sığalarının sıcaklıkla değişimi	85
Şekil 4.45. CoFeVY (Y=Al, Ga, Si, Ge, As ve Sb) dörtlü Heusler alaşımlarının ısı sığalarının sıcaklıkla değişimi	86
Şekil 4.46. CoRhMnZ (Z=Ga, Sn ve Sb) dörtlü Heusler alaşımlarının ısı sığalarının sıcaklıkla değişimi	86
Şekil 4.47. CuCoMnGa ve FeNiMnAl dörtlü Heusler alaşımlarının ısı sığalarının sıcaklıkla değişimi	87
Şekil 4.48. CoFeCrX (X=Al, Si, Ga ve Ge) dörtlü Heusler alaşımlarının entropilerinin sıcaklıkla değişimi.....	87
Şekil 4.49. CoFeTiY (Y=Al, Ga, Si, Ge, As ve Sb) dörtlü Heusler alaşımlarının entropilerinin sıcaklıkla değişimi.....	88
Şekil 4.50. CoFeVY (Y=Al, Ga, Si, Ge, As ve Sb) dörtlü Heusler alaşımlarının entropilerinin sıcaklıkla değişimi	88
Şekil 4.51. CoRhMnZ (Z=Ga, Sn ve Sb) dörtlü Heusler alaşımlarının entropilerinin sıcaklıkla değişimi	89
Şekil 4.52. CuCoMnGa ve FeNiMnAl dörtlü Heusler alaşımlarının entropilerinin sıcaklıkla değişimi	89

SİMGELER VE KISALTMALAR

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

Simgeler	Açıklama
a_0	Örgü sabiti
B	Bulk modülü
G	Kayma modülü
E	Young modülü
σ	Poisson oranı
v_l, v_t, v_m	Ses hızları
γ_G	Grüneisen sabiti
θ_D	Debye sıcaklığı
C_V	Isı sığası
$F(n, \mu)$	Hellmann-Feynman kuvvetleri
S	Entropi
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
R_C	Kor yarıçapı
T	Kinetik enerji fonksiyoneli
$V_{dış}$	Dış potansiyel
V_{dtk}	Deği-tokuş korelasyon fonksiyoneli
ψ	Dalga fonksiyonu
$N(E_F), N(E_F) \uparrow, N(E_F) \downarrow$	Fermi seviyesindeki elektron yoğunluğu
F_{HK}	Hohenberg-Kohn fonsiyoneli
$V_H[\rho]$	Hartree katkısı
V_{ps}	Pseudopotansiyel

Kısaltmalar	Açıklama
CASTEP	Cambridge Sequential Total Energy Package
fcc	Yüzey merkezli kübik örgü
FP-LAPW	Tam Potansiyel Doğrusallaştırılmış Genişletilmiş Düzlem Dalga
FPLO	Tam Potansiyel Yerel Orbital
GGA	Genelleştirilmiş Gradyent Yaklaşımı
GMR	Yüksek Manyeto Direnç
HF	Hartree-Fock metodu
KKR	Korring-Kohn-Rostocker
KS	Kohn-Sham
LAMMPS	Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator
LDA	Yerel Yoğunluk Yaklaşımı
MedeA	Materials Design Paket Programı
MT	Mechanical/Thermal
PAW	İz düşümsel birleştirilmiş dalga
PBE	Perdew-Burke-Ernzerhof
PP	Pseudopotansiyel
SCF	Öz uyumlu alan
SPD	Slater-Pauling Davranışı
TA	Enine akustik mod
TIG	Tungsten Inert Gaz
TO	Enine optik mod
US-PP	Ultra-soft vanderbit pseudopotansiyel
VASP	The Vienna Ab initio Simulation Package
YFT	Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi
XRD	X-Işınları Difraktometresi

1. GİRİŞ

1903 yılında Friedrich Heusler tarafından CuMn alaşımına, 3. grup elementlerden olan alüminyum (Al) ilave edilerek ilk Heusler tipi alaşımı (Cu_2MnAl) elde edilmiş ve bu alaşımın ferromanyetik bir malzemeye dönüştüğü keşfedilmiştir [1]. Cu_2MnAl Heusler alaşımları tam Heusler alaşımları olarak isimlendirilir. X_2YZ kimyasal formülüne sahip tam Heusler alaşımlarının stokiyometrik kompozisyonu 2:1:1 şeklinde ve Fm-3m uzay grubundadır [1]. Cu_2MnAl Heusler alaşımı 1928 yılında Potter tarafından incelendi ve bu inceleme sonucunda X-ışınları ölçümleri Cu-Mn-Al sistemi üzerindeki bütün bileşenlerinin bir fcc süper örgünün üzerinde düzenlendiğini buldu [2]. 1934 yılında ise Bradley ve Rodgers normal olmayan saçılma ve X-ışınlarını kullanarak Cu-Mn-Al sistemini detaylı bir şekilde inceledi [3]. Yine Heusler tarafından aynı yılda X-ışınları kullanılarak Cu_2MnAl yapısındaki Mn atomlarının düzenlenmesi saptandı [4]. Böylece Heusler alaşımlarının yapısının esasında CsCl tipi kristal yapıya sahip B2 bileşiklerinin XY ve XZ'nin düzenli olarak bileşimlerinden oluştuğu belirlendi. Tam Heusler alaşımlarının yanı sıra dörtlü Heusler alaşımları ise XX'YZ kimyasal formülüne sahip, 1:1:1:1 stokiyometrik kompozisyonunda ve F-43m uzay grubundadır. Ayrıca X, X' ve Y elementleri periyodik tablonun geçiş metali grubundan olup Z elementleri ise periyodik tablonun III-V grubunun elementidir [5]. Dörtlü Heusler alaşımları için LiMgPdSn yapısı bir örnek olarak gösterilebilir [5,6].

Spintronik, başka bir deyişle magneto-elektronik adıyla bilinen alan, manyetizmanın yeni gelişen bir dalıdır [7] ve yoğun madde fiziği ile ilgilenen bilim adamları için çok disiplinli yeni bir araştırma sahasıdır. Heusler alaşımları gibi yüksek spin polarizasyonlu manyetik malzemeler, spin filtresi ve spin vana gibi spintronik cihazların performansının iyileştirilmesi için çok önemlidir [8]. Spintronikğin ana fikri 1988 yılında Fert ve Grünberg tarafından yüksek manyeto-dirençlerin (GMR) keşfiyle başlamıştır. Geleneksel elektronik aygıtlar, bir yarıiletken olan silisyumda olduğu gibi elektron ya da boşlukların taşınması ilkesine göre çalışır. Elektronun spinini de kullanan aygıtlar yukarıda bahsedilen özelliğe ilave olarak çok daha iyi elektronik aygıtlar üretilmesini amaçlar. Spinin serbestlik derecesinin, bilinen elektronik cihazlara eklenmesi ile elektriksel güç kullanımında azaltma, veri işleme hızını artırma ve kalıcı bellek gibi çok önemli avantajlar sağladığı bilinmektedir [9]. Bu nedenlerden dolayı yarı-metalik ferromanyetler birçok araştırmacının ilgisini

çekmektedir. Yarı-metalik ferromanyetler yüksek spin polarizasyonlu malzemelerin en ümit verici adayları olarak görülür, çünkü spin polarizasyonları Fermi seviyesi civarında biri (spin aşağı yöneliminde) yarı iletken veya yalıtkan iken diğeri (spin yukarı yöneliminde) ise iletkendir [8]. Heusler alaşımlarının önemli özelliklerinden biri de manyetik şekil hafıza etkisine sahip olabilmeleridir. Günümüzde Heusler alaşımları teknolojiye manyetik şekil hafıza etkisi sayesinde pek çok alanda kullanılmaktadır. Ayrıca Ni_2MnGa alaışımının keşfedilmesiyle Ni-Mn tabanlı alaşımlar önemli hale gelmiştir [10]. Heusler alaşımlarının manyetik özellikleri ile ilgili Groot ve arkadaşları tarafından MnNiSb alaışımının [11] ve Kübler ve arkadaşları tarafından Co_2MnSn alaışımının ise yarı-metalik ferromanyet olduğu bulunmuştur [12]. Benzer şekilde, Co-bazlı Heusler alaşımları için yarı metalik ferromanyet benzeri bir davranışı Plogmann ve arkadaşları buldu [13]. Oldukça yüksek Curie sıcaklığı ve farklı manyetik momentleri Co-bazlı Heusler alaşımları için özel bir önem taşımaktadır [14].

Deneysel olarak, Heusler tipi alaşımlar çoğunlukla ark eritme metoduyla sentezlenir. Tungsten Inert Gaz (TIG) teknolojisi, ark eritme metodunda kullanılmaktadır. Bu teknolojiyle oksitlenme olmadan üretim inert gaz atmosferinde yapılabilmektedir. Yüksek gerilime sahip olan tungsten çubuk ile numunenin arasında argon gazı bulunur, böylelikle ark boşalması mümkün hale gelir [15]. Ayrıca son yıllarda Westerholt ve ark. ince film olarak bu alaşımları sentezleyerek spintronik cihazlara entegre etmeyi denediler ve onlar kapsamlı olarak Co_2MnGe filmlerinin özelliklerini inceleyerek spin valf ve çok tabakalı yapılar durumuna uygulamayı başardılar [16]. Reiss ve ark. Co_2MnSi alaışımını temel alan manyetik tünel eklemleri oluşturdular [17,18]. Benzer bir çalışmada Sakuraba ve ark. Co_2MnSi filmlerini bir manyetik elektrot ve Al-O'ı bariyer olarak kullanıp manyetik tünel eklemler yapmayı başardılar. Yapılan bu çalışmada yarı metalikliğin varlığı ile sonuçlarının Co_2MnSi için uyumlu olduğu görüldü [19].

Bu tezde çalışılan dörtlü Heusler alaşımları da genelde yarı metalik bir davranış sergiler. Bu alaşımlarla ilgili literatürde pek çok sayıda deneysel ve teorik çalışma bulunmaktadır. Yarı metalik dörtlü Heusler $\text{Co}_2\text{Cr}_{1-x}\text{Fe}_x\text{Al}$ alaşımlarının elektronik ve manyetik özellikleri Genelleştirilmiş Gradient Yaklaşımı (GGA) içinde yoğunluk fonksiyonel teorisi (YFT) kullanılarak incelenmiştir [20]. Dörtlü $\text{Co}_2\text{Cr}_{1-x}\text{Fe}_x\text{Al}$ Heusler alaşımlar için, Wurmehl ve arkadaşları [21] elektronik yapıyı ve spektroskopik özelliklerini tam relativistik Korring-Kohn-Rostocker (KKR) yöntemini kullanarak hesaplandılar ve X-ışını absorpsiyonu ile

manyetik özelliklerini ölçtüler. Onlar, $\text{Co}_2\text{Cr}_{1-x}\text{FeAl}$ alaşımının yarı-metalik ferromanyetik özelliğini Co atomunun davranışının belirlediğini ortaya konulmuştur. Öte yandan Karhik ve arkadaşları [22] dörtlü $\text{Co}_2\text{Cr}_{1-x}\text{FeAl}$ Heusler alaşımının yapı, manyetik ve spin polarizasyon özelliklerini araştırmışlardır. Ayrıca, CoFeCrAl için, yapısal ve manyetik özellikleri sırasıyla ab-initio metodu ve SQUID manyetometresi kullanarak Luo ve arkadaşları tarafından çalışıldı [23]. Nehra ve ark. 2013 yılında CoFeCrAl dörtlü yarı metalik Heusler alaşımının yüksek spin polarizasyonlu olduğunu bildirmişlerdir [24]. Onlar Fermi seviyesi civarında azınlık spin elektronlarının bant aralığını 0,41 eV değerinde buldular. Xu ve arkadaşları [5] CoFeCrGa Heusler alaşımının elektronik özelliklerini incelemek için pseudopotansiyel metodunu uyguladılar. Gao ve arkadaşları [25] tam potansiyel doğrusallaştırılmış genişletilmiş düzlem dalga (FP-LAPW) metodunu Wien2k paket programında uygulayarak [26], CoFeCrAl ve CoFeCrSi alaşımlarının mükemmel yarı metalik, CoFeCrGa ve CoFeCrGe alaşımlarının ise yarı metaliğe yakın davranış sergilediğini buldular. Alhaj ve Hamad [27] FP-LAPW metodu ile $\text{Co}_{2-x}\text{Fe}_x\text{CrAl}$ alaşımının elektronik ve manyetik özelliklerini inceledi. $\text{Cr}_{2-x}\text{Fe}_x\text{CoZ}$ ($Z=\text{Al}$ ve Si) Heusler alaşımlarının manyetik ve elektronik özellikleri Sing ve arkadaşları [28] tarafından FP-LAPW metodu kullanılarak incelendi. Bunların yanı sıra, yakın zamanda yapılan deneysel ve teorik çalışmalar Mn_2CoAl [29] ve Ti_2CoSi [30] tam Heusler alaşımları gibi CoFeCrAl ve MnCrVAI dörtlü Heusler alaşımlarının sözde spin boşluksuz yarıiletken olduğunu söylemektedir [5, 31, 32]. Ayrıca Bainsla ve ark. CoFeCrAl [33] ve CoFeCrGa [34] alaşımlarının elektronik özelliklerini, Enamullah ve ark CoFeCrGe ve CoMnCrAl [35] alaşımlarının elektronik yapı ve manyetik özelliklerini XRD ve VASP paket programını kullanarak deneysel ve teorik olarak incelediler.

Yarı metalik ferromanyet CoFeTiSb dörtlü Heusler Alaşımı Wien2k paket programı, FP-LAPW metodu ile GGA-PBE kodları kullanılarak Berri ve ark. tarafından elektronik, manyetik ve yapısal özellikleri incelendi [36]. Fermi seviyesi civarında azınlık elektronlarında 0,53 eV'luk bant aralığı, toplam manyetizasyonu $2 \mu_B$ ve örgü sabitini ferromanyetik durumda 6,08 Å, paramanyetik durumda 6,11 Å olarak hesapladılar [36]. Ayrıca, Xiong ve ark. [37] CoFeTiZ ve CoFeVZ ($Z= \text{Al}, \text{Ga}, \text{Si}, \text{Ge}, \text{As}$ ve Sb) dörtlü Heusler alaşımlarının yapısal ve elektronik özelliklerini ve manyetik momentlerini inceledi. Buna göre, CoFeTiAl ve CoFeTiGa alaşımlarının yarıiletken, CoFeTiSi , CoFeTiGe , CoFeTiAs , CoFeTiSb , CoFeVGe , CoFeVAs ve CoFeVSb alaşımlarının yarı metalik ve CoFeVAI , CoFeVGa ve CoFeVSi alaşımlarının ise yarı metaliğe yakın özellik gösterdiği sonucuna

vardılar [37]. Bunların yanı sıra, Zhang ve ark. [38] CoFeTiZ (Z=Si, Ge ve Sn) alaşımlarının, Lui ve ark. [39] CoFeTiZ (Z=As ve Sb) alaşımlarının CASTEP paket programında GGA yaklaşımı ile, Basit ve ark. [40] deneysel ve teorik olarak CoFe_{1+x}Ti_{1-x}Al ve CoMn_{1+x}V_{1-x}Al alaşımlarının elektronik, yapısal ve manyetik özelliklerini inceledi.

Co_{2-x}RhMnZ (Z=Ga, Sn ve Sb) dörtlü Heusler alaşımlarının kristal yapı, elektronik yapı ve manyetik özellikleri Alijani ve ark. [41] tarafından XRD ve SQUID ile deneysel, Wien2k paket programında FP-LAPW metodu ile GGA-PBE pseudo potansiyel yaklaşımıyla incelediler ve Co_{2-x}RhMnZ (Z=Ga, Sn, Sb) dörtlü Heusler alaşımlarının yarı metalik ferromanyet olduğunu söylediler. Ayrıca, CuCoMnGa, NiFeMnGa ve NiCoMnGa yarı metalik ferromanyet dörtlü Heusler alaşımlarının yapısal, elektronik, manyetik ve elastik özellikleri Alijani ve ark. [42] tarafından incelendi ve onlar Ni-bazlı NiFeMnGa ve NiCoMnGa dörtlü Heusler alaşımların yüksek spin polarizasyonlu olduğunu belirtmişlerdir.

Bu tez çalışmasında, CoFeCrX (X=Al, Si, Ga ve Ge), CoFeTiY (Y=Al, Ga, Si, Ge, As ve Sb), CoFeVY (Y=Al, Ga, Si, Ge, As ve Sb), CoRhMnZ (Z=Ga, Sn ve Sb), CuCoMnGa ve FeNiMnAl dörtlü Heusler alaşımlarının yapısal, elektronik, mekanik, titreşim ve termodinamik özellikleri Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi (YFT) ile incelenmiştir.

2. KURAMSAL TEMELLER

2.1. Ab-initio Hesaplamasına Giriş

Herhangi bir fiziksel niceliğin hesaplanması deneysel bir veri olmadan hareketin temel denklemlerinden (Schrödinger veya Dirac) başlıyorsa bu hesaplama ab-initio denir. Periyodik bir kristalin elektronik, manyetik ve diğer özellikleri (taban durum özellikleri) ile ilgili kuantum seviyeleri hakkındaki çalışma katıhal fiziğinin ilgilendiği geleneksel konularından biridir. Bu yüzden günümüzde, deneysel ölçümleri yorumlamak, yeni etkilerini tahmin etmek ve ab-initio yöntemiyle yeni malzemeleri tasarlamak için birçok teorik model geliştirildi [43]. Bu bölümde ab-initio hesaplamalarının temelini oluşturan Yoğunluk Fonksiyonel Teorisinden (YFT'den) kısaca bahsedilecektir.

2.2. Çok Cisim Sistemi

Bir maddenin mikroskobik açıdan ağır pozitif yüklü çekirdek ve hafif negatif yüklü elektronların birleşimi olduğu bilinmektedir. Bu çekirdek ve elektronlar elektromanyetik açıdan nokta yükler olarak düşünülürse ve bu sistem için tam rölativistik olmayan çok cisim hamiltonyen şöyle olur.

$$\begin{aligned}
 H = & -\frac{\hbar^2}{2} \sum_j^m \frac{\nabla_j^2}{M_j} - \frac{\hbar^2}{2} \sum_i^n \frac{\nabla_i^2}{m_e} - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_i^n \sum_j^n \frac{e^2 Z_j}{|\vec{r}_i - \vec{R}_j|} \\
 & + \frac{1}{8\pi\epsilon_0} \sum_i^n \sum_{j \neq i}^n \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} + \frac{1}{8\pi\epsilon_0} \sum_i^m \sum_{j \neq i}^m \frac{e^2 Z_i Z_j}{|\vec{R}_i - \vec{R}_j|}
 \end{aligned} \quad (2.1)$$

Burada M_j , R_j 'deki çekirdeğin kütlesidir. Elektronlar m_e kütlesine sahiptir ve r_i konumunda bulunurlar. Birinci ve ikinci terimler sırasıyla çekirdeğin ve elektronların kinetik enerji operatörlerini temsil eder. Geriye kalan terimler ise sırasıyla elektron-çekirdek arasındaki, elektronlar arasındaki ve çekirdekler arasındaki Coulomb etkileşmelerini göstermektedir. Sistemin bu halini anlamak için bu sisteme ait aşağıdaki Schrödinger denklemini çözmek gerekir.

$$H\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N, \vec{R}_1, \vec{R}_2, \dots, \vec{R}_N, s) = E\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N, \vec{R}_1, \vec{R}_2, \dots, \vec{R}_N, s) \quad (2.2)$$

$\psi(\vec{r}_i, \vec{R}_i, s)$ çok cisim sistemin dalga fonksiyonu ve E sistemin enerjisidir. Bu problemin çözümü oldukça zordur. Bundan dolayı çok cisim probleminin çözümü bazı yaklaşımlar gerektirmektedir [43, 44].

2.3. Born-Oppenheimer Yaklaşımı

Elektronun kütlesi çekirdeğin kütlesinden çok daha küçük olmasına rağmen elektronların üzerindeki elektromanyetik kuvvetler fark edilebilir büyüklüktedir. Sonuç olarak, elektronların ortalama hızı ($\approx 10^6$ m/s) çekirdeğin hızından ($\approx 10^3$ m/s) çok daha büyüktür. Şöyle ki, ani bir çekirdek yapılandırılmasında ile karşılaşıldığında herhangi bir anda elektronlar temel hallerinde bulunur. Bu yüzden çekirdek hareketi elektronun hareketiyle karşılaştırıldığında çekirdek neredeyse duruyormuş gibi görülür. Böylece Eş. 2.1 şu hale gelir.

$$H = \underbrace{-\frac{\hbar^2}{2} \sum_i^n \frac{\nabla_i^2}{m_e}}_{T_e} + \underbrace{\frac{1}{8\pi\epsilon_0} \sum_i^n \sum_{j \neq i}^n \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|}}_{V_{ee}} - \underbrace{\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_i^n \sum_j^n \frac{e^2 Z_j}{|\vec{r}_i - \vec{R}_j|}}_{V_{dış}} + \underbrace{\frac{1}{8\pi\epsilon_0} \sum_i^m \sum_{j \neq i}^m \frac{e^2 Z_i Z_j}{|\vec{R}_i - \vec{R}_j|}}_{V_{çç}} \quad (2.3)$$

Bu hamiltonyen ifadesi çekirdek tarafından üretilen dış potansiyel içindeki elektronik hareketle uyumludur. Ayrıca çekirdek-çekirdek etkileşim enerjisi de sabit olacağından uygun bir referans enerjisi seçimi ile sıfır olur. Kristal sisteminin içerisinde bulunduğu dış alan da sıfır alınır Eş. 2.3'deki hamiltoniyen de şöyle yazılabilir.

$$H_e = -\frac{\hbar^2}{2} \sum_i^n \frac{\nabla_i^2}{m_e} + \frac{1}{8\pi\epsilon_0} \sum_i^n \sum_{j \neq i}^n \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_i^n \sum_j^n \frac{e^2 Z_j}{|\vec{r}_i - \vec{R}_j|} \quad (2.4)$$

$$H = H_e + V_{çç} \quad (2.5)$$

Eş. 2.4 elektron hamiltonyeni olarak adlandırılır. İlk terim çekirdek potansiyelinin etkisinde hareket eden elektronların oluşturduğu elektron bulutunun kinetik enerjisi, ikinci terim

elektron-elektron etkileşiminin oluşturduğu potansiyel enerji ve son terim ise çekirdeklerin elektronlar üzerinde oluşturduğu dış potansiyeldir. Bundan sonra, elektronlar ve çekirdek ayrı ayrı ele alınabilir. Bu çekirdek ve elektron hareketinin ayrımı Born-Oppenheimer yaklaşımı olarak bilinir [43, 44].

2.4. Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi (YFT)

Çok cisim sisteminin çözümü büyük sistemler için hala çok zordur. Bu yüzden çok cisim problemini çözmek için daha farklı yaklaşımlar yapılmalıdır. Bu yaklaşımların tarihi açıdan çok önemlilerinden biri Hartree-Fock metodudur (HF) [45, 46]. Hartree-Fock alan yöntemi ilk olarak Hartree tarafından ortaya atılmış ve daha sonradan Fock ve Slater tarafından geliştirilmiştir [47]. Bu metod Slater determinantı olarak yazılabilen sınırlı determinanta tatmin edici iyi bir çözüm sunar ve sistematik olarak çözüme ulaştırılabilir. Buna rağmen Hartree-Fock metodu sayısal olarak katı cisimler için oldukça karmaşık bir çözüme sahiptir.

Hesaplamalı fizik için diğer bir can alıcı noktaya 1964’de Hohenberg-Kohn [48] ve 1965’de Kohn-Sham [49] tarafından geliştirilen Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi (YFT) ile ulaşılır. YFT’de Hartree-Fock metodundan farklı bir yaklaşım kullanmıştır. YFT, temel değişken olarak dalga fonksiyonu yerine elektronik yük yoğunluğunu kullanmıştır.

2.4.1. Hohenberg-Kohn teoremleri

1964 yılında Hohenberg ve Kohn tarafından Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi (YFT) üzerine iki teorem ortaya atıldı [48].

I. Teorem: Çok elektronlu sistemin taban durum yoğunluğu $\rho(\vec{r})$ ile dış potansiyel $V_{dış}$ arasında bir uyum vardır. Doğrudan sonuç şudur ki, herhangi bir gözlemlenebilir bir $\hat{O}$ operatörünün beklenen değeri, taban durumundaki elektron yoğunluğunun benzersiz bir fonksiyonudur.

$$\langle \psi | \hat{O} | \psi \rangle \quad (2.6)$$

II. Teorem: $\hat{O}$ için H hamiltonyen olarak taban durumundaki toplam enerji fonksiyonu, $H[\rho] \equiv E_{V_{dış}}[\rho]$ şeklinde iken,

$$E_{V_{dış}}[\rho] = \langle \psi | \hat{T} + \hat{V} | \psi \rangle + \langle \psi | \hat{V}_{dış} | \psi \rangle \quad (2.7)$$

$$E_{V_{dış}}[\rho] = F_{HK}[\rho] + \int \rho(\vec{r}) V_{dış}(\vec{r}) d\vec{r} \quad (2.8)$$

ifade edilir. Burada Hohenberg-Kohn yoğunluk fonksiyoneli $F_{HK}[\rho]$, herhangi birçok elektronlu sistem için evrenseldir. $V_{dış}$ 'e uyan taban durum yoğunluğu için $E_{V_{dış}}[\rho]$ minimum değerine ulaşır.

Buradaki amaç teoremleri kanıtlamak değil onların anlamlarını açıklığa kavuşturmadır. Taban durum yoğunluğu ve dış potansiyel arasındaki birebir uyum bazı önemli bulgulara sahiptir. Açıkça, sistemin dış potansiyeli verildiğinde sistemin benzersiz bir taban durum yoğunluğunu elde etmek mümkündür. Schrödinger denklemini çözmek, kendiliğinden taban durum yoğunluğunun hesaplanabileceği bir dalga fonksiyonu ortaya çıkarır. Bakıldığında taban durum yoğunluğu dalga fonksiyonundan daha az bilgi içeriyor gibi görünür. Fakat bu şekilde olmuş olsaydı taban durum yoğunluğundan dış potansiyel elde edilmezdi. Buna rağmen Hohenberg-Kohn'nun birinci teoremi bu uyumunda geçerli olduğunu ileri sürer. Diğer bir değişle bu yoğunluk, dalga fonksiyonu kadar bilgi içerir.

İkinci teoremin sonucu olarak, taban durum yoğunluğu $E_{V_{dış}}[\rho]$ 'yi minimuma indirdiği gerçeğinin daha kısacası Rayleigh-Ritz varyasyonel metodu [50] taban durum yoğunluğunu bulmak için kullanılır. Dikkate değer bir noktada $V_{dış}$ ile uyumlu taban durum yoğunluğu için $E_{V_{dış}}[\rho]$ değeri taban durum enerjisine eşittir. Yalnız $E_{V_{dış}}[\rho]$ değeri fiziksel bir anlam içerir. Sonuç olarak, ikinci teoremde Hohenberg-Kohn fonksiyoneli çekirdek ve çekirdeğin pozisyonları ile ilgili hiçbir bilgi içermez. Dolayısıyla, fonksiyonel tüm çok elektronlu sistemler için aynıdır. Maalesef, Hohenberg-Kohn fonksiyoneli F_{HK} bilinmiyor ve bu aşamada YFT şeklen tam ama kullanışsız bir teori olarak kalır. Bu yüzden Eş. 2.8'deki ikinci terim gereksiz olur.

2.4.2. Kohn-Sham eşitlikleri

Yoğunluk Fonksiyonel Teorinin uygulanabilirliğine yönelik önemli bir adım 1965 yılında Kohn ve Sham tarafından atıldı [49]. Onlar F_{HK} 'nin aşağıdaki gibi yeniden yazılmasını önerdiler.

$$F_{HK}[\rho] = T_0[\rho] + V_H[\rho] + \underbrace{(V_{dt}[\rho] + V_k[\rho])}_{V_{atk}[\rho]} \quad (2.9)$$

Burada $T_0[\rho]$ etkileşim içinde olmayan elektronların kinetik enerji fonksiyoneli ve $V_H[\rho]$ geride kalan elektronların konumlarının ortalamasını alarak elde edilen sistemdeki etkileşimi açıklayan Hartree katkısıdır. Sistemde bulunan hiçbir elektron-elektron etkileşimi hesaba katılmamasına rağmen $V_H[\rho]$ elektron etkileşimi için iyi bir yaklaşımdır. Ayrıca, değiş-tokuş korelasyon fonksiyoneli $V_{atk}[\rho]$ 'nin bilindiği farz edilerek şu şekilde yazılabilir.

$$E_{V_{dış}}[\rho] = T_0[\rho] + V_H[\rho] + V_{atk}[\rho] + V_{dış}[\rho] \quad (2.10)$$

Eş. 2.10, Kohn-Sham hamiltonyeni ile uyum içerisinde olan birbirleriyle etkileşim içinde olmayan ve iki dış potansiyel ($V_{atk}[\rho]$ ve $V_{dış}[\rho]$) olarak sunulan enerji fonksiyoneli ile yorumlanabilir.

$$\hat{H}_{KS} = \hat{T}_0 + \hat{V}_H + \hat{V}_{dt} + \hat{V}_{dış} \quad (2.11)$$

$$\hat{H}_{KS} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_i^2 + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int \frac{\rho(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d\vec{r}' + \hat{V}_{atk} + \hat{V}_{dış} \quad (2.12)$$

Değiş-tokuş korelasyon operatörü fonksiyonel türevi ile birlikte verildiğinde aşağıdaki gibi ifade edilir.

$$\hat{V}_{atk} = \frac{\partial V_{atk}[\rho]}{\partial \rho} \quad (2.13)$$

Bundan sonra, Kohn-Sham teoremi aşağıdaki gibi belirtilebilir; N elektronlu bir sistemin taban durum yoğunluğu $\rho(\vec{r})$,

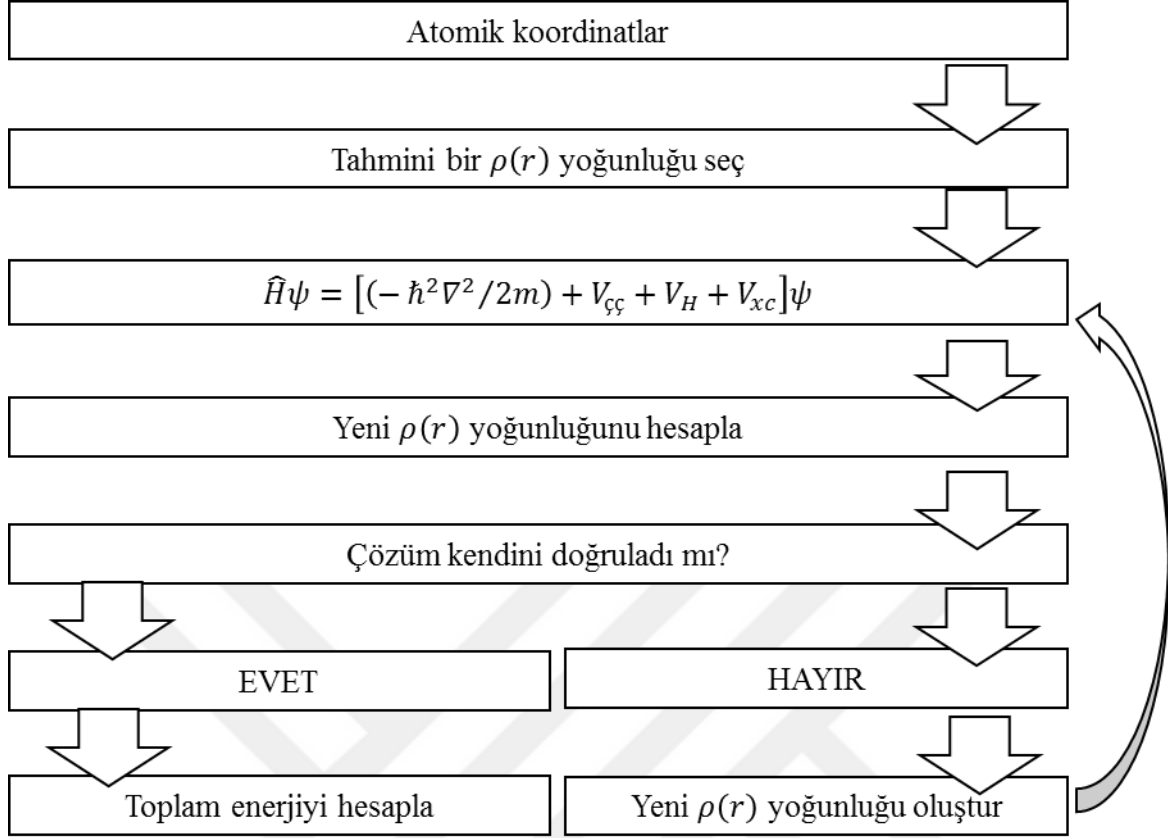
$$\rho(\vec{r}) = \sum_{i=1}^N \psi_i^*(\vec{r})\psi_i(\vec{r}) \quad (2.14)$$

şeklinde ifade edilir. Burada tek parça dalga fonksiyonu $\psi_i(\vec{r})$, i. Kohn-Sham eşitliğinin en düşük enerji çözümleri aşağıdaki gibidir.

$$\hat{H}_{KS}\psi_i = \epsilon_i\psi_i \quad (2.15)$$

Schrödinger benzeri tek parçacıklı denklemlerin çözümü ile çok cisim sisteminin taban durum yoğunluğu elde edilir. Bu problemdeki tek bilinmeyen katkı değiş-tokuş korelasyon fonksiyonelidir. Bu fonksiyonel için uygun yaklaşımlar gerekmektedir.

Kohn-Sham eşitliklerinde dikkat edilmesi gereken iki önemli husus vardır. Bunlardan ilki, tek parçacıklı dalga fonksiyonları ψ_i , ayrıca tek parçacığın enerjisi ϵ_i , elektron dalga fonksiyonu ya da elektron enerjisi değildir. Onlar sadece fiziksel anlam içermeyen matematiksel fonksiyonlardır. Sadece yarı parçacıklardan (quasi-parçacıklar) hesaplanan toplam taban durum yoğunluğu gerçek taban durum yoğunluğuna eşittir. İkincisi ise Kohn-Sham hamiltonyeni Hartree ve değiş-tokuş korelasyon terimiyle ortaya çıkan elektron yoğunluğuna bağlıdır. Öte yandan elektron yoğunluğu hesaplanması gereken ψ_i 'ye bağlıdır. Şöyle ki, bu eşitlikler kendini kendilerini doğrulayarak çözülebilirler. Bundan dolayı bu denklemler kendini doğrulayabilen (Self-Consistency) Kohn-Sham eşitlikleri olarak isimlendirilirler [49]. Bu eşitliklerin kendini doğrulayarak çözümü Şekil 2.1'de verilen algoritma diyagramıyla gösterilmektedir [51-53].



Şekil 2.1. Bir kristalin toplam enerjisini kendini doğrulama metodunu kullanarak hesaplayan bir bilgisayar programının akış çizelgesi

2.4.3. Değiş-tokuş korelasyon fonksiyoneli

Daha öncede açıklandığı gibi eğer değiş-tokuş korelasyon fonksiyoneli bilinirse Kohn-Sham eşitlikleri çözülebilir. Şu da bir gerçektir ki, tam bir açıklama mümkün değildir ve bunun için bir yaklaşıma ihtiyaç vardır. Bu şekilde en sık kullanılan iki yaklaşım Yerel Yoğunluk Yaklaşımı (LDA) ve Genelleştirilmiş Gradient Yaklaşımı (GGA) olarak bilinir.

Değiş-tokuş korelasyon fonksiyoneli aşağıdaki gibi tanımlayan en eski yaklaşım Yerel Yoğunluk Yaklaşımı (LDA) dır [54-56].

$$V_{\text{dtk}}^{\text{LDA}}[\rho] \int \rho(\vec{r}) \epsilon_{\text{dtk}}(\rho(\vec{r})) d\vec{r} \quad (2.16)$$

Burada $\epsilon_{\text{dtk}}(\rho(\vec{r}))$, $\rho(\vec{r})$ yoğunluğundaki homojen elektron gazının parçacık başına değiş-tokuş korelasyon enerjisini gösterir ve sayısal olarak Monte Carlo [57] hesaplamaları olarak bilinir. Uzaydaki her bir nokta için değiş-tokuş korelasyon enerjisi homojen elektron gazının

aynı noktadaki elektron yoğunluğuyla birlikte yerel olarak hesaplanır. LDA, değiş-tokuş korelasyonunun yerel doğasına dayanır ve yoğunluk dağılımı hızlı bir şekilde değişmez. LDA basit olmasına rağmen daha gerçekçi sistemlerde bile çok iyi sonuçlar verir. Daha karmaşık bir yaklaşım Genelleştirilmiş Gradient Yaklaşımı (GGA) ile yapılır [58-60]. LDA sadece yerel yoğunluğa bağlı iken GGA ise ayrıyeten yoğunluk gradientini içerir ve aşağıdaki gibi tanımlanır.

$$V_{atk}^{GGA}[\rho] \int \rho(\vec{r}) \epsilon_{atk}(\rho(\vec{r}), |\nabla \rho(\vec{r})|) d\vec{r} \quad (2.17)$$

LDA'ya göre düşük bağlanma enerjisine ve büyük örgü sabitine sahip sistemlerde GGA daha iyi sonuçlar vermektedir. Ayrıca, spin polarizasyonu hesaba katılan hesaplamalarda LDA iyi değilken, GGA ise manyetizasyonu deneye yakın bir şekilde elde eder. Fakat LDA açısından bakıldığında eşsiz (benzersiz) bir $\epsilon_{atk}(\rho(\vec{r}))$ vardır. Ancak GGA'da yoğunluk gradienti birçok farklı şekilde elde edilir. Bunlardan bazılarını Becke [61], Perdew [62], Lee-Yang-Parr [63], Perdew ve Wang [59], Perdew ve Vosko [64], Perdew-Burke ve Ernzerhof [65] örnek olarak verilebilir. Fakat bunlardan hangisinin daha iyi olduğu konusundan tam bir fikir birliği yoktur.

2.4.4. Pseudopotansiyel metodu (PP)

1966 yılında Harrison tarafından yazılan kitapta pseudopotansiyel metodunun (PP) temel öğeleri [66] ve 1970 yılında Cohen-Heine tarafından ortak çalışma ile yapılan bir makalede [67] ilk olarak ele alınmıştır. Bu bölümde PP ile ilgili kısaca söz edilerek birkaç önemli noktadan bahsedilecektir.

Sistem içerisindeki bir atomdaki elektronlar, kor ve değerlik elektronları olmak üzere iki kısımdan oluşmaktadır. Örneğin, $1s^2 2s^2 2p^4$ elektronik konfigürasyonuna ait oksijen atomunu ele alalım, tamamen dolu $1s^2$ orbitalindeki elektronlar kor elektronları iken diğer elektronlar ise değerlik elektronlarıdır. Kor elektronları genellikle çekirdek çevresinde yerleşirler ve kor elektronları ile çekirdeğin oluşturduğu sistem ise iyon kuru adlandırılır. Dalga fonksiyonları ortogonal olan kor ve değerlik elektronlarından oluşan bir kristal sistemin pseudopotansiyel metodu ile elektronik özellikleri elde edilirken tamamen değerlik elektronlarından yararlanırken, iyon kurları ihmal edilerek hesaba katılmazlar. Bunun gibi

bir kristal sisteminin elektronik özellikleri Eş. 2.18'deki Schrödinger denkleminde elde edilebilir.

$$H\psi = \epsilon\psi \quad (2.18)$$

Eşitlikte yer alan H hamiltoniyeni, V etkin potansiyeli ve T kinetik enerjisinin toplamı şeklindedir. Ayrıca ψ dalga fonksiyonu ise, değerlik elektronlarından kaynaklanan bir ϕ fonksiyonu ve iyon korlarından gelen ϕ_c fonksiyonlarının toplamı şeklinde,

$$\psi = \phi + \sum_c b_c \phi_c \quad (2.19)$$

yazılabilir [65]. Eşitlikteki toplam içerisinde bulunan b_c katsayıları ψ ile ϕ_c 'nin,

$$\langle \psi | \phi_c \rangle = 0 \quad (2.20)$$

şeklinde ortogonalite koşullarından kaynaklanan normalizasyon sabitleridir. Bu durumda Eş. 2.18, Eş. 2.19 ve 2.20'den yararlanılarak yeniden yazılırsa,

$$H\phi + \sum_c (\epsilon - E_c |\phi_c\rangle \langle \phi_c|) \phi = \epsilon \phi \quad (2.21)$$

şeklinde olur. Kor bölgesindeki öz değerlerden biri Eş. 2.21'deki E_c terimidir. Ayrıca Eş. 2.21'den aşağıdaki gibi iki eşitlik yazılabilir [68]:

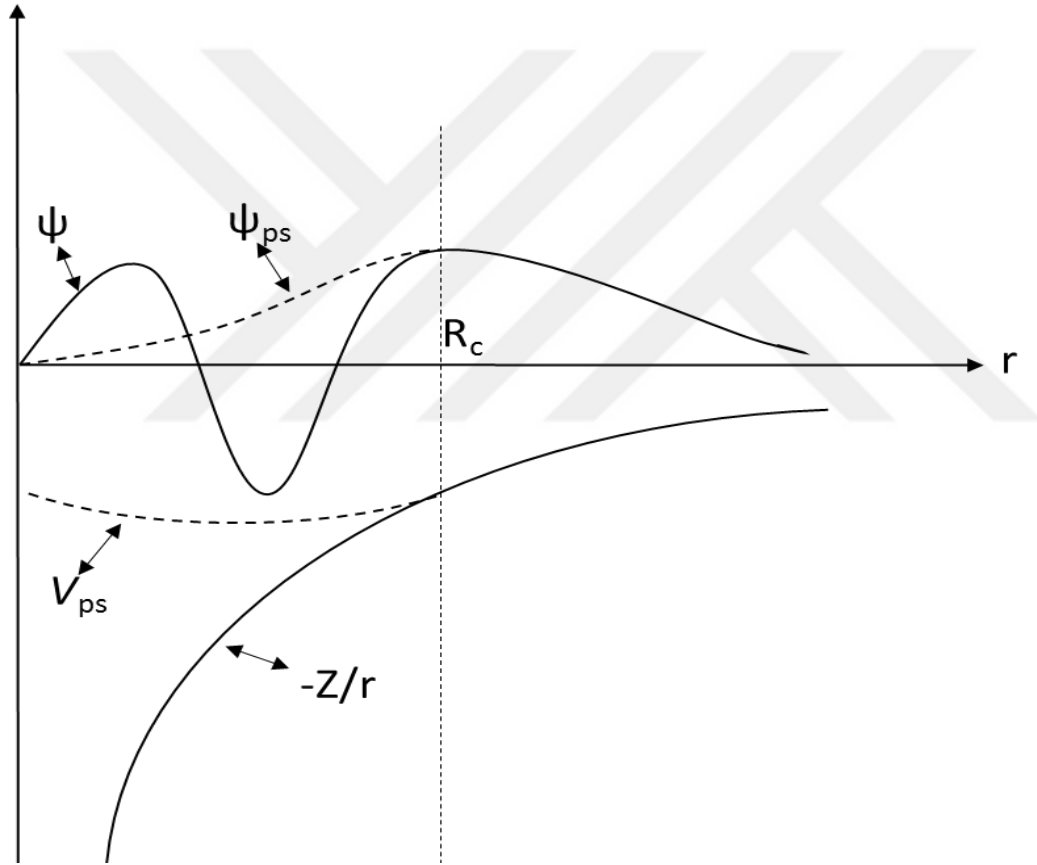
$$(H + V_R)\phi = \epsilon\phi \quad (2.22)$$

$$(T + V_{ps})\phi = \epsilon\phi \quad (2.23)$$

Yukarıdaki eşitliklerde verilen V_R , itici potansiyel operatörüdür. Diğer eşitlikteki yer alan V_{ps} potansiyeli ise, Phillips ve Kleinman'ın 1959 yılında yaptıkları ortak çalışmalar [69] ile Antoncik tarafından onlardan bağımsız olarak yapılan çalışmalar [70] neticesinde aşağıdaki gibi verilen bir operatördür [68].

$$V_{ps} = V_A + V_R \quad (2.67)$$

Eşitlikte yer alan V_{ps} potansiyeli, V_R itici potansiyeli ile V_A etkin potansiyelinin birbirleriyle yaptıkları etkileşmeler sonucunda oluşan zayıf etkili bir potansiyeldir. Böyle verilen V_{ps} potansiyeline pseudo potansiyel ve ϕ 'ye ise pseudo dalga fonksiyonu denir. Bu pseudo potansiyel ve pseudo dalga fonksiyonu Şekil 2.2'de verildi. Gerçek potansiyel sonsuzda yakınsarken pseudo potansiyelin daha çabuk yakınsadığı şekilden görülmektedir. Bundan dolayı hesaplama yapılırken dalga fonksiyonu hesaplamalarında özellikle tercih edilir [53].



Şekil 2.2. Pseudo potansiyel ve Pseudo dalga fonksiyonu

2.4.5. Brillouin bölgesindeki k-noktaları

Kristal sistemlerindeki çoğu hesaplama yöntemi Brillouin bölgesi üzerinden dalga vektörünün periyodik bir fonksiyonunun integralini alarak gerçekleştirir. Dalga fonksiyonun Brillouin bölgesinin her bir noktasındaki değerini bilmesinin gerekliliği ve gerçek kristallerde neredeyse sonsuz sayıda elektron olması, sonsuz sayıda k-noktasının var

olması demektir. Bu yüzden bu işlem bir hayli zordur. Bu işlemi biraz basit hale getirmek için birbirlerine yakın k-noktalarında elektronik dalga fonksiyonunun değeri hemen hemen aynı olduğundan çok sayıdaki k-noktasının yerine yalnızca tek bir k-noktası için integralleri almak doğru olacaktır. Bundan dolayı sınırlı sayıda k-noktaları üzerinden integral alınması tüm Brillouin bölgesi üzerinden integral almaktan daha kolay hale gelecektir. Bu nedenle integralleri almak için Brillouin bölgesinde bazı özel k-noktaları seti oluşturmak gerekmektedir. Bu özel k-noktaların elde etmek için farklı yöntemler geliştirilmiştir [71-73].



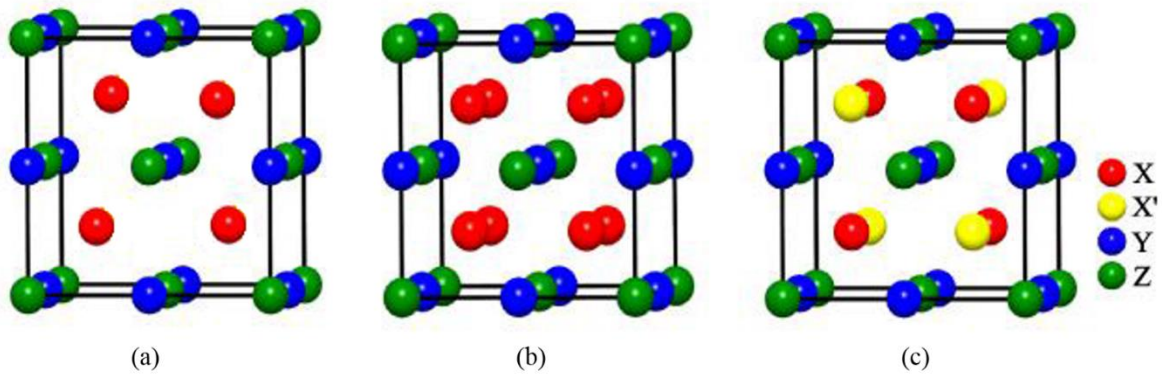


3. TEORİ VE METOTLAR

3.1. Heusler Alaşımları

Heusler alaşımları yarı, tam ve dörtlü Heusler olmak üzere üçe ayrılırlar. Stokiyometrik kompozisyonları yarı Heusler alaşımları için XYZ, tam Heusler alaşımları için X_2YZ ve dörtlü Heusler alaşımları için $XX'YZ$ şeklinde ve yarı ve tam Heusler alaşımları sırasıyla $C1_b$ (#216) ve $L2_1$ (#225) kristal yapıları ile dörtlü Heusler alaşımı ise $C1_b$ benzeri $LiMgPdSn$ -tipi kristal yapısında karakterize edilir. X, X' ve Y elementleri periyodik çizelgede geçiş metalleri grubunda iken Z ise ana grup elementlerindendir. Mn elementi birçok Heusler yapı için Y pozisyonunda yer alırken nadiren de olsa X pozisyonunda bulunur. Bunlara örnek deneysel olarak çalışılmış sadece Mn_2VAl [74] ve Mn_2VGa [75] alaşımlarıdır.

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

Heusler yapılar incelendiğinde gerçekte iki bileşenli B2 alaşımlarının XY ve XZ 'nin düzenli bileşimlerinden meydana geldiği söylenebilir. Örneğin; Co_2ZrAl gibi bir tam Heusler alaşımını ele alacak olursak, bu Heusler alaşımı $CoAl$ ve $CoZr$ gibi B2 yapıdaki alaşımlardan

oluşmaktadır. Bu iki alaşımda CsCl-tipi kristal yapıya sahiptir. Dolayısıyla B2 yapısındaki bu gibi ikili alaşımlar yeni Heusler alaşımların elde edilmesinin bir ölçüsüdür [76].

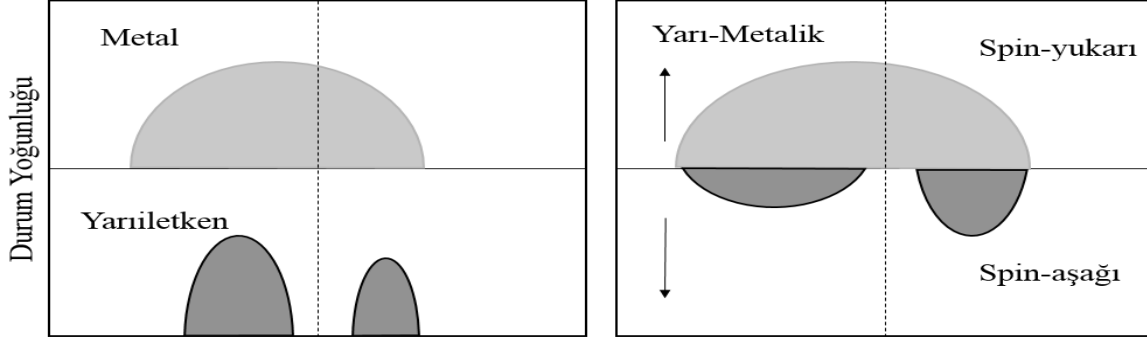
3.1.1. Manyetik özellikler

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 (Örneğin: Al, Si). Orbitallerindeki tüm elektronları çiftlenmiş olan maddeler ise diyamanyetik özellik gösterir ve dışarıdan uygulanan alana elektronların manyetik momentlerinden dolayı hafif ters yönde yönlenme oluşur (Örneğin: Cu, Au, Ag, Mg). 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 (Örneğin: Fe, Ni, Co). 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 (Örneğin: NiO, Fe₂O₃). Bir geçiş metalinin oluşturduğu yapının (bileşik veya alaşım) manyetik özelliğinin bilinmesi, maddenin yapısı hakkında bilgi verir [77].

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 olarakta bilinen spintronik cihazlarındaki uygulamalar için uygun malzemelerdir [78].



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 özelliğı olduğu için sadece spin yukarı elektronlarının iletkenliğe sahip olması ve manyetik alan ile bir bant kayması spin yukarı ve spin aşağı durumlarının dolumunu değıştirmeyeceğı için boyuna spin doygunluğun sıfır olması gibi örnekler verilebilir.

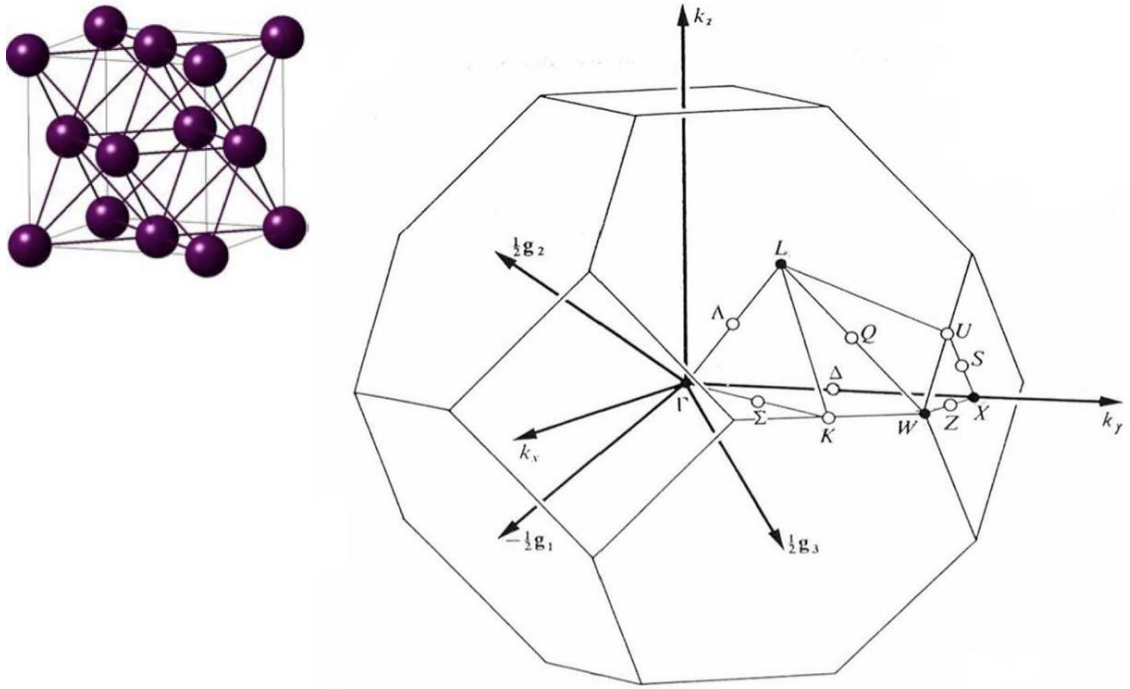
Slater-Pauling davranışı

Yarı metalik özelliğı sahip olan yarı, tam ve dörtlü Heusler alaşımların toplam momentleri basit bir kurala uyarlar. Yarı Heusler alaşımların toplam moment $M_t = (Z_t - 18)\mu_B$ ile, tam ve dörtlü Heusler alaşımların toplam moment ise $M_t = (Z_t - 24)\mu_B$ ile ifade edilir. Buradaki, Z_t hücredeki değerklik elektronlarının toplam sayısını ifade eder [79, 80]. Aynı zamanda M_t toplam moment, spin yukarı ve spin aşağı elektronlarının sayısının farkından hesaplanırken ($M_t = (N \uparrow - N \downarrow)\mu_B$), Z_t toplam elektron sayısı ise spin yukarı ve spin aşağı elektron sayıların toplamı ($Z_t = N \uparrow + N \downarrow$) şeklinde hesaplanır. Yarı Heusler alaşımların 9 spin aşağı bandı, tam ve dörtlü Heusler alaşımlarında 12 spin aşağı bandı tamamıyla dolu olduğu için yarı Heusler alaşımları için $M_t = (Z_t - 18)\mu_B$, tam ve dörtlü Heusler alaşımları için ise $M_t = (Z_t - 24)\mu_B$ basit kuralı ile hesaplanabilir. Bu kural, ikili geçiş metali alaşımlarında uygulanan Slater-Pauling davranışı olarak bilinen kurala benzemektedir [81].

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 [82].

Şekil 3.3’de fcc örgü için birinci Brillouin bölgesi ve temel simetri noktaları görülmektedir. Bu noktaların koordinatları ters örgüde aşağıdaki gibidir [83]. 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 [83]

Noktalar (g_1, g_2, g_3) :

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

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 [83].

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 [83].

MedeA GUI ve görev sunucuları arasında doğrudan bir iletişim yoktur bunun yerine tüm veri akışları iş sunucusu üzerinden olur [83].

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 [83].

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 [83].

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 rutinlere 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 [84, 85] kodları kullanıldı. Ayrıca elastik özelliklerini hesaplamada MT modülü [86] ve titreşim özelliklerini hesaplamada ise PHONON modülü [87] kullanıldı.

3. 3. VASP Program Paketi

Yoğunluk fonksiyonel teorisine dayanan VASP program paketi [84, 88-90] ismini; Vienna Ab initio Simulation Package'in baş harflerinden almaktadır. VASP'ın temeli Mike Payne tarafından oluşturulan bir programa dayanır [71]. 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 [92].

VASP program paketi diğer ab initio paket programlar (quantum-ESPRESSO, CASTEP, vb.) gibi yerel yoğunluk yaklaşımı (LDA) ve genelleştirilmiş gradyent yaklaşımına (GGA) 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 [91].

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 [86]. 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 [83]. Bu tez çalışmasında, zorlanma (stress) miktarı 0,005 olarak alınmıştır.

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 [83].

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

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 [83].

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 [83].

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 alınır, 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 alınır $U = C_{44} \frac{e^2}{2}$ 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 simetrisinin genel formülasyonu, toplam enerji hesaplamaları, elastik sabitlerinin hesaplanması Le Page ve Saxe dayanmaktadır [86, 93].

3.4.3. Voigt-Reuss-Hill metot

Gerçek etkin elastik modüllerin üst ve alt limitleri olan Voigt ve Reuss sınır değerleri, bir polikristal boyunca uniform zorlama altında ortalama polikristal modülleridir [94]. Bulk ve kayma modülleri mekanik açıdan kararlı olan malzemeler için aşağıdaki eşitliklerle hesaplandı. Bu eşitliklerde yer alan V ve R alt indisleri sırasıyla Voigt ve Reuss sınır değerlerini temsil etmektedir [95, 96].

$$B_V = B_R = \frac{C_{11} + C_{12}}{3} \quad (3.5)$$

$$G_V = \frac{C_{11} - C_{12} + 3C_{44}}{5} \quad (3.6)$$

$$G_R = \frac{5(C_{11} - C_{12})C_{44}}{3(C_{11} - C_{12}) + 4C_{44}} \quad (3.7)$$

Polikristal elastik modüllerinin hesaplanmasında yaygın olarak Voigt ve Reuss sınır değerlerinin aritmetik ortalaması kullanılmaktadır. Voigt-Reuss-Hill (VRH) [97] yaklaşımı ile hesaplanan polikristal bulk modülü ve izotropik kayma modülleri kullanılarak polikristallerin diğer elastik özellikleri (Young modülü, Poisson oranı, ortamdaki ses hızları, Debye sıcaklığı) hesaplanabilir. Bu tez çalışması kapsamında, polikristal elastik modülleri VRH yaklaşımındaki aşağıdaki eşitlikler kullanılarak hesaplandı.

Bulk modülü (B), basınç uygulanan malzemenin hacim değişimine karşı gösterilen direncin bir ölçüsüdür. Katı malzemelerin sertliğini ifade eden önemli bir parametredir [98].

$$B = \frac{B_V + B_R}{2} \quad (3.8)$$

Kayma modülü (Shear Modülü, G), malzemenin makaslama kuvvetler altındaki esnemesini veya yatay kuvvetlere karşı gösterdiği direncin bir ölçüsüdür. Bundan dolayı kayma modülü, sertliği izotropik bulk modülüne göre daha iyi belirler.

$$G = \frac{G_V + G_R}{2} \quad (3.9)$$

Young modülü (E), malzemenin uygulanan kuvvet altında elastik şekil değiştirmesinin bir ölçüsür. Young modülünün değeri ne kadar yüksek ise malzeme o kadar daha serttir.

$$E = \frac{9GB}{G + 3B} \quad (3.10)$$

Poisson oranı (σ), kısaca malzemedeki enine deformasyonun boyuna deformasyona oranıdır. Ayrıca, kovalent bağlanmanın derecesinin bir göstergesidir [99]. Poisson oranı'nın değeri kovalent malzemeler için 0,1'e civarında, iyonik malzemeler için ise 0,25'e civarındadır. Merkezi kuvvetler için alt ve üst limit değerleri sırasıyla 0,25 ve 0,5'dir.

$$\sigma = \frac{1}{2} \left[\frac{B - \frac{2}{3}G}{B + \frac{1}{3}G} \right] \quad (3.11)$$

Katı malzeme içindeki enine (v_l), boyuna (v_t) ve ortalama (v_m) ses hızları ise aşağıdaki eşitliklerden elde edilir [83, 100].

$$v_l = \sqrt{\frac{3B + 4G}{3\rho}}, \quad v_t = \sqrt{\frac{G}{\rho}}, \quad v_m = \left[\frac{1}{3} \left(\frac{2}{v_t^3} + \frac{1}{v_l^3} \right) \right]^{-1/3} \quad (3.12)$$

3.4.4. Termal genleşme, Debye sıcaklığı ve ısı sığası

Ab initio ile yapılan elastik sabiti hesaplamalarında sıcaklık sıfır ile sınırlıdır. İyi bilindiği gibi, bir harmonik kafes için, ortalama örgü parametreleri ve elastik sabitler sıcaklıktan bağımsızdır. Anharmonik davranışlarda ise bunun aksine sıfır sıcaklıkta elastik sabitlerini hesaplamaya göre termal genleşme katsayısını hesaplamak bir derece daha zordur. Bundan dolayı, 1928 yılında Grüneisen tarafından örgü parametrelerinin termal düzeltmelerini hesaplamak için el ile hesaplamanın ötesinde bir yaklaşım öne sürüldü [101]. Ancak bugün ise Grüneisen'in çalışmalarını YFT'yi kullanarak uygulamak mümkündür.

Grüneisen teorisinin tam olarak uygulanması malzemenin fonon spektrumu ve hücre parametreleri açısından başlı başına fonon frekansları türevlerini değerlendirmeyi gerektirir. Ancak, teorisinin daha düşük düzeyde olduğu Grüneisen-Debye yaklaşımı termal genleşme katsayısının elastik sabitler yoluyla hesaplanmasına izin verir. Kübik metaller için sadece γ_G Grüneisen sabiti eklemek gerekir. Bir parametre olarak γ_G için uygun bir yaklaşımla [102],

$$E(V) = \frac{BV_0}{\frac{5}{6} - \gamma_G} \left(\frac{V}{V_0} \right)^{\frac{5}{6} - \gamma_G} \left(\ln \frac{V}{V_0} - \frac{5}{6} - \gamma_G \right) + E_\infty \quad (3.13)$$

Eş. 3.13'deki gibi elde edilir. Ancak bu eşitliğin hesaplaması büyük bir dikkat ve yüksek doğrulukta yapılmalıdır. γ_G elde edildikten sonra, Debye sıcaklığını hesaplamak için elastik sabitleri yardımı ile Eş. 3.12'den elde edilen v_m ses hızına ihtiyaç vardır. Debye sıcaklığı θ_D ,

$$\theta_D = \frac{\hbar}{k_B} \left(\frac{6\pi^2 q}{V_0} \right)^{\frac{1}{3}} v_m \quad (3.14)$$

ile ifade edilir. Burada q birim hücredeki atom sayısı, V_0 hacim $\hbar$ ve k_B sırasıyla Plank ve Boltzmann sabitleridir. Ayrıca özgül ısı sığası sıcaklığın bir fonksiyonu olarak aşağıdaki eşitlikten hesaplanabilir [102].

$$C_{V(T)} = 9qk_B \left(\frac{T}{\theta_D} \right)^3 \int_0^{\theta_D/T} X^4 \frac{\exp x}{(\exp x - 1)^2} dx \quad (3.15)$$

Ayrıca lineer genleşme katsayısı α_L , aşağıda yer alan eşitlikle hesaplanabilir [44, 83].

$$\alpha_L(T) = \frac{1}{3} \gamma_G \frac{C_V(T)}{BV_0} \quad (3.16)$$

3. 5. PHONON Programı ve Doğrudan Metot

PHONON programı; fonon dispersiyon eğrilerini, kristallerin fonon yoğunluk spektrumlarını, kusurları ile kristalleri, yüzeyleri ve yüzey üzerindeki absorbe edilmiş

atomları; kuvvet sabitleri yolu ya da ab initio programları ile hesaplanan kuvvetleri kullanarak hesaplayan bir tür yazılımdır [87, 103]. Program, önce kristallerin 230 uzay grubundan birini kullanarak bir kristalin yapısını oluşturur, sonra Hellmann-Feynman kuvvetleri için kuvvet sabitlerini bulur ve dinamik matrisleri oluşturup köşengenleştirir, daha sonra da fonon dispersiyon ilişkilerini ve bunların yoğunluklarını hesaplar [103]. Polarizasyon vektörleri ve Γ noktasındaki fonon modlarının indirgenemez temsillerini bulur ve toplam ve kısmi durum yoğunluğunu hesaplar. Aynı zamanda, “harmonik yaklaşım”ı kullanarak iç enerji, serbest enerji, entropi, ısı sığası ve yer değiştirmelerin karelerinin ortalamasını temsil eden Debye-Waller çarpanlarını hesaplar. PHONON, tutarlı esnek olmayan nötron saçılımı için dinamik yapı faktörünü, tek kristal ve polikristal için tutarsız çift diferansiyel saçılma tesir kesiti bulur. Ayrıca, kutuplu kristaller için LO/TO modlarındaki yarıllama da dahil edilebilir [103].

Doğrudan metot’ta, süper hücredeki atomlar arasında oluşan süper hücrenin kuvvet sabitlerini hesaplamak amacı ile Hellmann-Feynman kuvvetleri kullanılır. Süper hücre kuvvet sabitleri ve klasik kuvvet sabitleri süper hücrenin periyodik sınır şartlarını hesaba kattığından dolayı bir birlerinden farklıdır. MedeA, VASP, CASTEP, SIESTA, Wien2k ve ABINIT gibi periyodik sınır şartlarını kullanan ab initio programları Hellman-Feynman kuvvetlerini hesaplar. Kısaca, Doğrudan metottan aşağıda bahsedilmiştir [103].

0 K’de taban durum enerjisi E , atomik yer değiştirmelerin $R(n, \mu)$ bir fonksiyonudur. Burada μ ise indislenen atomu, n indislenen birim hücreyi göstermektedir. Bütün küçük yer değiştirmelerin $R(n, \mu)$ cinsinden,

$$E(R(n, \mu), \dots R(m, v), \dots) = E_0 + \frac{1}{2} \sum_{n, \mu, m, v} \Phi(n, \mu, m, v) U(n, \mu) U(m, v) \quad (3.17)$$

şeklinde yazılır. Burada kuvvet matrisini $\Phi(n, \mu, m, v)$ olup,

$$\Phi_{i,j}(n, \mu, m, v) = \left. \frac{\partial^2 E}{\partial R_i(n, \mu) \partial R_j(m, v)} \right|_0 \quad (3.18)$$

şeklindedir. Dinamik matris ise,

$$D(k; \mu, v) = \frac{1}{\sqrt{M_\mu M_v}} \sum_m \Phi(0, \mu; m, v) \exp\{-2\pi i k [R(0, \mu) - R(m, v)]\} \quad (3.19)$$

şeklinde ifade edilir. Eşitlikteki m , kristali oluşturan atomlar üzerinden toplam olup, M_μ, M_v atomların kütleleri, k ise dalga vektörüdür. Dinamik matrisin öz değeri,

$$\omega^2(k, j) e(k, j) = D(k) e(k, j) \quad (3.20)$$

polarizasyon vektörünü $e(k, j)$ ve fonon frekanslarını $\omega^2(k, j)$ verir. Bütün atomlar için Hellmann-Feynman kuvvetlerini atomik yer değiştirmeler ($U(m, v)$) oluşturur.

$$F(n, \mu) = - \frac{\partial E}{\partial R(n, \mu)} \quad (3.21)$$

Eş. 3.17’de yer alan ifade Eş. 3.21’de kullanılırsa,

$$F_i(n, \mu) = - \sum_{m, v, j} \Phi_{i, j}(n, \mu, m, v) U_j(m, v) \quad (3.22)$$

eşitliği elde edilir. Bu eşitlik kuvvet sabitleri matrisi ile oluşturan kuvvetler ve atomik yer değiştirmeler ile ilgilidir. Titreşim özelliklerinin hesaplanmasında ilk olarak atomik koordinatlar ve örgü sabiti kullanılıp kristalin toplam enerjisi minimize edilir. Hellmann-Feynman kuvvetleri minimize edilmiş bir durumda tamamı yok olmalı ve denge konumundaki tek bir atomun yer değiştirmesi ile oluşan konfigürasyon ile hesaplanmalıdır. Periyodik sınır şartlarındaki süper hücreden Hellmann-Feynman kuvvetleri hesaplanır. Yer değiştirmiş bir atom ve bir süper hücre düşünülür ise periyodik sınır şartlarındaki bu yer değiştirme süper hücredeki tüm atomlar $(m + L, v)$ aynı yer değiştirmeye uğrar. Buradaki $L = (L_a, L_b, L_c)$ süper hücrenin örgü sabitlerini gösterir. Böylece, süper hücredeki tek bir atomun yer değiştirmesi Eş. 3.22 ile uyumlu olarak net bir kuvvet üretir ve

$$F_i(n, \mu) = - \sum_L \Phi_{i, j}(n, \mu, (m + L), v) U_j(m, v) \quad (3.23)$$

şeklinde ifade edilir. Eğer kuvvet sabitleri yeniden tanımlanırsa ise,

$$\Phi_{i,j}^{(\Sigma)}(n, \mu, m, v) = - \sum_L \Phi_{i,j}(n, \mu, m + L, v) \quad (3.24)$$

eşitliği elde edilir. Bu eşitlikteki, L süper hücrede yer alan bütün atomlar üzerinden toplamı gösterir. Doğrudan metot'un temelini Eş. 3.23'nin çözümü oluşturur [104, 105] ve kuvvet sabitlerine göre PHONON programı Eş. 3.23'yi çözer. Kristaldeki bütün atomlar üzerinden toplamı dalga vektörleri için süper hücre ile orantılı olan Eş. 3.19 bir dinamik matris oluşturur. Böylelikle bu doğru dinamik matrisi, fonon frekanslarını ve polarizasyon vektörlerini oluşturur. Fonon frekanslarının dalga vektörleri ile orantılı olmaması bazı belirsizliklere sebep olur. Eğer süper hücre oldukça büyük seçilirse bu durumda bütün dalga vektörlerinin fononları düzgündür. Dolayısıyla PHONON programı, kuvvet sabitlerinin kristalin uzay grubunun gerektirdiği doğru simetriye sahip olmasını sağlar [106].

3.5.1. Termodinamik fonksiyonlar

Ab initio fonon hesaplamaları $T = 0 K$ ile sınırlıdır ve fonon yardımıyla kristallerinin termodinamik özellikleri ayrıntılı olarak incelenebilir [107]. Fakat bu tez çalışmasındaki hesaplamalarda bu yaklaşım kullanılmadı.

Fononların durum yoğunlukları kullanılarak termodinamik fonksiyonlar yardımı ile iç enerji, serbest enerji, entropi, ısı sıgası ve termal yer değiştirmeler elde edilebilir. Her termodinamik fonksiyon için belirli atomlar ve polarizasyon yönlerinin katkıları kısmi fonon durum yoğunluklarından yararlanarak hesaplanabilir. Termodinamik fonksiyonlar fononların akustik modları için duyarlıdır. Düşük ve yüksek sıcaklık limitlerini kontrol etmek için tavsiye edilir. Bu bölümde kısaca bu denklemlerden bahsedilecektir. [83].

Harmonik yaklaşımda, her bir ilkel birim hücre için fononlar yardımı ile sıcaklığa bağlı iç enerji (Eş. 3.25), serbest enerji (Eş. 3.26), entropi (Eş. 3.27) ve ısı kapasitesi (Eş. 3.28) ifadeleri aşağıdaki eşitlikler yoluyla hesaplanabilir [83, 103].

$$E = \frac{1}{2} r \int_0^\infty g(w) (\hbar w) \coth \left(\frac{\hbar w}{2k_B T} \right) dw \quad (3.25)$$

$$F = r k_B T \int_0^\infty g(w) \ln \left[2 \sinh \frac{\hbar w}{2k_B T} \right] dw \quad (3.26)$$

$$S = rk_B \int_0^\infty g(w) \left\{ \left(\frac{\hbar w}{2k_B T} \right) \left[\coth \left(\frac{\hbar w}{2k_B T} \right) - 1 \right] - \ln \left[1 - \exp \left(\frac{-\hbar w}{k_B T} \right) \right] \right\} dw \quad (3.28)$$

$$C_v = rk_B \int_0^\infty g(w) \left(\frac{\hbar w}{2k_B T} \right)^2 \frac{\exp \left(\frac{\hbar w}{k_B T} \right)}{\left[\exp \left(\frac{\hbar w}{k_B T} \right) - 1 \right]^2} dw \quad (3.30)$$

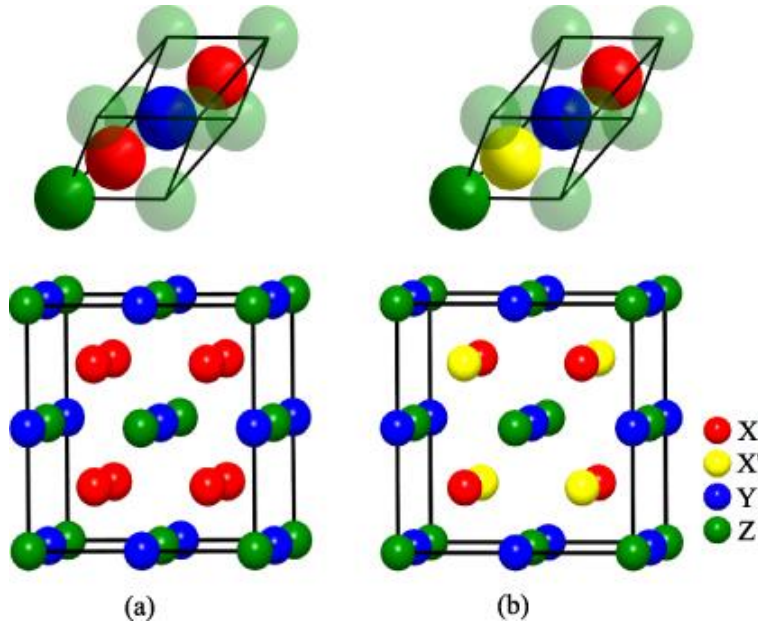
Burada eşitliklerde kullanılan; r birim hücrenin serbestlik derecesi, $\hbar$ Planck sabiti, k_B Boltzmann sabiti ve T sıcaklıktır.



4. BULGULAR VE TARTIŞMA

Heusler tipi alaşımlar, $Fm-3m$ uzay grubunda, stokiyometrik kompozisyonu X_2YZ türünde olan üçlü intermetalik alaşımlardır ve $L2_1$ tipi kübik yapıdadırlar. Aynı zamanda Heusler tipi alaşımların birim hücresinde yer alan, Z atomu için 4a (0, 0, 0), Y atomu için 4b ($1/2$, $1/2$, $1/2$), X atomu için 4c ($1/4$, $1/4$, $1/4$) ve 4d ($3/4$, $3/4$, $3/4$) atomik pozisyonları ile iç içe geçmiş 4 tane fcc alt örgüsü içermektedir. Fakat bundan farklı olarak dörtlü Heusler alaşımları LiMgPdSn-tipi kristal yapısındaki $F-43m$ uzay grubunda, X atomu 4d ($3/4$, $3/4$, $3/4$) ve X' atomu 4c ($1/4$, $1/4$, $1/4$) atomik pozisyonlarında kristalize olurlar [41,108].

Heusler tipi alaşımlarında herhangi bir Y veya Z atomu bir oktahedral simetri pozisyonunda yerleşen birinci komşu olarak sekiz X atomuna sahiptir. Ancak her bir X atomu birinci komşu olarak dört Y ve dört Z atomuna sahip olduğundan dolayı kristalin simetrisi tetrahedral simetriye indirgenir. İki farklı alt örgüye yerleşen X atomları kimyasal olarak eşdeğerdir. Çünkü birinci alt örgünün çevresi 90 döndürülürse ikinci alt örgünün çevresiyle aynı çevreye sahip olur. Şekil 4.1'de Heusler ve dörtlü Heusler tipi alaşımların kristal yapıları gösterilmiştir [41, 108].



Şekil 4.1. Heusler tipi alaşımların kristal yapıları a) Heusler, b) Dörtlü Heusler

Dörtlü Heusler tipi alaşımlar Hermann Mauguin Notasyonuna [109] göre kristal simetrisi $F-43m$ şeklindedir. Bu simetriye göre;

- F: Yüzey merkezli kafes. Kafesin köşeleri ve yüzey merkezleri dolu.
- -43m: Kristal eksenleri ile 54.44° açı yapan 4 katlı dönme eksenine sahip olduğunu, 3 yapının kübik olduğunu, m ise ayna simetrisine sahip olduğunu gösterir.

Çizelge 4.1. F-43m uzay grubundaki İncelenen dörtlü Heusler alaşımlarının atomik pozisyonları

Malzemeler	4d (3/4, 3/4, 3/4)	4c (1/4, 1/4, 1/4)	4b (1/2, 1/2, 1/2)	4a (0, 0, 0)
CoFeCrX (X=Al, Si, Ga ve Ge)	Co	Fe	Cr	X
CoRhMnZ (Z=Ga, Sn ve Sb)	Co	Rh	Mn	Z
CoFeTiY (Y=Al, Al, Ga, Si, Ge, As ve Sb)	Co	Fe	Ti	Y
CoFeVY (Y=Al, Al, Ga, Si, Ge, As ve Sb)	Co	Fe	V	Y
CuCoMnGa	Cu	Co	Mn	Ga
FeNiMnAl	Fe	Ni	Mn	Al

Çizelge 4.2. Hesaplamalarda kullanılan kesme enerjisi (eV), smearing parametresinin değerleri ve k-noktaları

Malzemeler	Kesme Enerjisi	smearing	k-noktaları
CoFeCrX (X=Al, Si, Ga ve Ge)	500	0,2	4x4x4
CoRhMnZ (Z=Ga, Sn ve Sb)	500	0,2	4x4x4
CoFeTiAl ve CoFeTiSb	313	0,225	5x5x5
CoFeTiGa	330	0,225	6x6x6
CoFeTiSi ve CoFeTiAs	328	0,169	6x6x6
CoFeTiGe	320	0,225	5x5x5
CoFeVAl ve CoFeVSb	328	0,225	6x6x6
CoFeVGa	330	0,225	5x5x5
CoFeVSi ve CoFeVAs	342	0,169	7x7x7
CoFeVGe	336	0,225	6x6x6
CuCoMnGa	296	0,2	4x4x4
FeNiMnAl	270	0,2	4x4x4

Bu tez çalışmasında LiMgPdSn-tipi kristal yapısındaki F-43m kristal simetrisindeki CoFeCrX (X=Al, Si, Ga ve Ge), CoFeTiY, CoFeVY (Y=Al, Ga, Si, Ge, As ve Sb), CoRhMnZ (Z=Ga, Sn ve Sb), CuCoMnGa ve FeNiMnAl dörtlü Heusler alaşımlarının atomları Şekil 4.1'deki gibi kristal yapı oluşturacak şekilde Çizelge 4.1'deki atomik pozisyonlara yerleştirildi. Yapılan tüm hesaplamalarda MedeA paket programı ve VASP kütüphanesinde bulunan GGA-PBE [92] pseudo-potansiyelleri kullanıldı. Yakınsama sonucu elde edilen ve malzemelerin diğer tüm özelliklerini hesaplamak için kullanılan kesme enerjisi, Methfessel-Paxton'a [110] göre smearing parametresi ve Monkhorst-Pack metodu [72] ile oluşturulan k-point değerleri Çizelge 4.2' de verildi.

4.1. İncelenen Dörtlü Heusler Alaşımlarının Yapısal Özellikleri

LiMgPdSn-tipi kristal yapısında F-43m kristal simetrisinde oluşturulan dörtlü Heusler alaşımlarının kristal simetrisi sabit tutularak atomlar arası kuvvet 1×10^{-5} eV olana kadar geometrik optimizasyon yapıldı ve minimum enerjideki örgü sabiti değerleri bu simetriye göre elde edildi. Bu tez çalışması kapsamında İncelenen tüm alaşımlar için elde edilen örgü sabitleri ve yapısal özellikler kapsamındaki Bulk modülü değerleri Çizelge 4.3’de literatürde yer alan diğer çalışmalardaki değerler ile karşılaştırılarak verildi.

CoFeCrX (X=Al, Si, Ga ve Ge) dörtlü Heusler alaşımları için elde edilen örgü sabitleri literatürde yer alan deneysel ve teorik çalışmalar ile karşılaştırıldı. Bainsla ve ark. tarafından 2015 yılında yapılan iki ayrı deneysel çalışmada X=Al için %0,9’luk [33], X=Ga için %1,11’lik [34], Nehra ve ark. [24] tarafından 2013 yılında yapılan deneysel çalışmadan ise X=Al için %0,66’lık bir fark ile düşük olarak örgü sabitleri elde edildi. Literatürdeki teorik çalışmalarda ise X=Al için %0,04 - %1,08 arasında [5, 23-25, 27, 28, 31], X=Si için %0,05’lik ve %0,3’lük [25, 28, 31], X=Ga için %0,07’lik [25] ve X=Ge için %0,03’lük fark ile örgü sabitleri elde edildi. Ayrıca CoFeCrX (X=Al, Si, Ga ve Ge) alaşımlarına ait örgü sabiti değerleri X (X=Al, Si, Ga ve Ge) elementinin atomik yarıçapı arttıkça artmaktadır. Bunun yanı sıra, CoFeCrX (X=Al, Si, Ga ve Ge) alaşımlarının hesaplanan örgü sabiti değerleri arttıkça Bulk modülü değerlerinin azalmakta olduğu Çizelge 4.3’den açıkça görülmektedir. Bu sonuçlara göre bu alaşımların örgü sabitleri literatürdeki çalışmalar ile uyumlu olduğu görülmektedir. CoFeTiY (Y=Al, Ga, Si, Ge, As ve Sb) alaşımlarına ait elde edilen örgü sabiti değerleri literatür ile birlikte incelendiğinde, Basit ve ark. [40] tarafından 2011 yılında yapılan deneysel çalışmaya göre Y=Al için %0,8’lik bir fark ile düşük olarak elde edildi. Xiong ve ark. [37] tarafından FPLAPW metodu ile hesaplanan sonuçlara göre CoFeTiY (Y=Al, Ga, Si, Ge, As ve Sb) alaşımlarının sırasıyla %0,07; %0,03; %0,16; %0,43; %0,12 ve %0,24’lük fark ile uyumlu olarak hesaplandı. Literatürdeki diğer çalışmalar ile gerekli karşılaştırmalar yapıldığında, Y=Al için %0,1’lik [31], Y=Si için %0,19’luk [31,38], Y=Ge için %0,1’lik [38], Y=As için %0,22 ve %0,29’lük [31, 39] ve Y=Sb için %0,08’lik [36, 39] fark ile uyumlu olarak örgü sabitleri edildi. Ayrıca, Berri ve ark. [36] tarafından 2014 yılında FPLAPW metodu ile yapılan çalışmada CoFeTiSb alaşımının Bulk modülü hesaplanmış ve %2,63’lük bir fark ile uyumlu olarak elde edilmiştir. Bu çalışmadan elde edilen örgü sabitleri (Y=Al, Ga, Si, Ge, As ve Sb) elementlerine göre kıyaslandığında ise $a_{Sb} > a_{As} > a_{Ge} > a_{Ga} > a_{Al} > a_{Si}$, Bulk modüllerinin ise $B_{Al} > B_{Si} > B_{Ge} > B_{Ga} > B_{As} > B_{Sb}$ şeklinde

olduğu Çizelge 4.3'den açıkça görülmektedir. CoFeVY (Y=Al, Ga, Si, Ge, As ve Sb) dörtlü Heusler alaşımlarının örgü sabiti değerleri Xiong ve ark. [37] tarafından FPLAPW metodu ile hesaplanan sonuçlara göre sırasıyla %0,12; %0,19; %0,20; %0,38; %0,35 ve %0,27'lik fark ile yüksek olarak hesaplandı. Özdoğan ve ark. [31] tarafından 2013 yılında FPLO metodu ile yapılan çalışmaya göre ise Y=Al, Si ve As alaşımları için sırasıyla %0,05; %0,16 ve %0,17'lik fark ile düşük olarak örgü sabitleri elde edildi. Bu sonuçlara göre hesaplanan örgü sabitlerinin literatürdeki çalışmalar ile uyumlu olduğu görülmektedir. Ayrıca bu çalışmadan elde edilen sonuçlara göre bu alaşımların örgü sabitleri arasında $a_{Sb} > a_{As} > a_{Ge} > a_{Ga} > a_{Al} > a_{Si}$, Bulk modülleri arasında ise $B_{Al} > B_{Si} > B_{Ge} > B_{Ga} > B_{Sb} > B_{As}$ şeklinde bir ilişki olduğu Çizelge 4.3'den anlaşılmaktadır. Alijani ve ark. [41] tarafından 2012 yılında CoRhMnZ (Z=Ga, Sn ve Sb) dörtlü Heusler alaşımları ile yapmış olduğu deneysel çalışmaya göre sırasıyla %1,12; %0,29 ve %2,63'lük, FPLAPW metodu ile yapmış olduğu teorik çalışmaya göre ise sırasıyla %0,02; %0,05 ve %0,06'lık fark ile örgü sabitleri elde edildi. Bir başka çalışma ise Bankabou ve ark. tarafından [111] 2015 yılında FPLAPW metodu kullanılarak yapılmış ve bu çalışmaya göre ise CoRhMnGa alaşımı için %0,12'lik fark ile örgü sabiti oldukça uyumlu çıkmıştır. Ayrıca Alijani ve ark. [41] tarafından CoRhMnZ (Z=Ga, Sn ve Sb) alaşımlarının, Bankabou ve ark. tarafından [111] ise CoRhMnGa alaşımının Bulk modülleri teorik olarak elde edilmiştir. Buna göre Alijani ve ark. [41] tarafından yapılan çalışma ile CoRhMnZ (Z=Ga, Sn ve Sb) alaşımlarının Bulk modülleri sırasıyla %0,98; %2,64 ve %2,69'luk fark ile uyumlu olarak bulunmuştur. Bankabou ve ark. tarafından [111] yapılan çalışmaya göre ise CoRhMnGa alaşımının Bulk modülü %5,33'lük fark ile elde edilmiştir. Bu alaşımların elde edilen örgü sabitleri ve Bulk modülleri Z (Z=Ga, Sn ve Sb) elementine göre karşılaştırıldığında ise örgü sabitleri arasında $a_{Sb} > a_{Sn} > a_{Ga}$ ve Bulk modülleri arasında ise $B_{Sb} < B_{Sn} < B_{Ga}$ bir ilişki olduğu Çizelge 4.3'den açıkça görülmektedir. Dolayısıyla örgü sabiti arttıkça Bulk modülü değeri azalmaktadır. CuCoMnGa alaşımı için ise örgü sabiti ve Bulk modülü Alijani ve ark. [42] tarafından 2011 yılında hem deneysel hem de teorik olarak FPLAPW metodu ile elde edilmiştir. Buna göre deneysel olarak %0,68'lik, teorik olarak ise %0,65'lik fark ile örgü sabiti değeri uyumlu olarak bulundu. Bulk modülü ise %9,78'lik fark ile hesaplandı. FeNiMnAl alaşımı için yapılan hesaplamalar ise yapılan literatür taraması sonucunda bulunamadığı için herhangi bir karşılaştırma yapılamadı.

Çizelge 4.3. İncelenen dörtlü Heusler alaşımlarının örgü sabitleri (Å) ve Bulk modülü (GPa)

Malzemeler	Referanslar	a_0	B
CoFeCrAl	Bu Çalışma	5,698	194,64
	FPLAPW [25]	5,71	-
	LDA [23]	5,76	-
	GGA [5]	5,70	-
	Deneysel [24]	5,736	-
	FPLAPW [27]	5,696	-
	FPLAPW [28]	5,70	-
	FPLO [31]	5,70	-
	VASP [33]	5,69	-
	Deneysel [33]	5,75	-
CoFeCrSi	Bu Çalışma	5,613	243,79
	FPLAPW [25]	5,63	-
	FPLAPW [28]	5,61	-
	FPLO [31]	5,61	-
CoFeCrGa	Bu Çalışma	5,726	177,66
	FPLAPW [25]	5,73	-
	Deneysel [34]	5,79	-
CoFeCrGe	Bu Çalışma	5,718	192,75
	FPLAPW [25]	5,72	-
CoFeTiAl	Bu Çalışma	5,804	233,63
	FPLAPW [37]	5,80	-
	FPLO [31]	5,81	-
	Deneysel [40]	5,851	-
CoFeTiGa	Bu Çalışma	5,808	194,99
	FPLAPW [37]	5,81	-
CoFeTiSi	Bu Çalışma	5,719	215,99
	FPLAPW [37]	5,71	-
	FPLO[31]	5,73	-
	CASTEP [38]	5,73	-
CoFeTiGe	Bu Çalışma	5,815	199,22
	FPLAPW [37]	5,79	-
	CASTEP [38]	5,81	-
CoFeTiAs	Bu Çalışma	5,837	188,30
	FPLAPW [37]	5,83	-
	FPLO[31]	5,85	-
	CASTEP [39]	5,82	-
CoFeTiSb	Bu Çalışma	6,075	170,57
	FPLAPW [37]	6,06	-
	FPLAPW [36]	6,08	175,18
	CASTEP [39]	6,07	-
CoFeVAl	Bu Çalışma	5,727	233,76
	FPLAPW [37]	5,72	-
	FPLO [31]	5,73	-
CoFeVGa	Bu Çalışma	5,741	207,78
	FPLAPW [37]	5,73	-

Çizelge 4.3. İncelenen dörtlü Heusler alaşımlarının örgü sabitleri (Å) ve Bulk modülü (GPa) (Devamı)

Malzemeler	Referanslar	a_0	B
CoFeVSi	Bu Çalışma	5,651	231,63
	FPLAPW [37]	5,64	-
	FPLO [31]	5,66	-
CoFeVGe	Bu Çalışma	5,752	210,37
	FPLAPW [37]	5,73	-
CoFeVAs	Bu Çalışma	5,770	172,23
	FPLAPW [37]	5,75	-
	FPLO [31]	5,78	-
CoFeVSb	Bu Çalışma	6,006	187,97
	FPLAPW [37]	5,99	-
CoRhMnGa	Bu Çalışma	5,909	197,93
	Deneysel [41]	5,976	-
	Teorik [41]	5,910	196
	FPLAPW [111]	5,916	187,92
CoRhMnSn	Bu Çalışma	6,167	181,68
	Deneysel [41]	6,149	-
	Teorik [41]	6,164	177
CoRhMnSb	Bu Çalışma	6,207	155,06
	Deneysel [41]	6,048	-
	Teorik [41]	6,203	151
CuCoMnGa	Bu Çalışma	5,808	158,09
	FPLAPW [42]	5,846	-
	Deneysel [42]	5,847	144
FeNiMnAl	Bu Çalışma	5,733	176,89

4.2. İncelenen Dörtlü Heusler Alaşımlarının Elektronik ve Manyetik Özellikleri

LiMgPdSn-tipi kristal yapısında F-43m kristal simetrisinde dörtlü Heusler alaşımları için spin polarizasyonu hesaba katılarak 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 elektronik bant enerjileri, kısmi ve toplam durum yoğunlukları hesaplanarak bunlara ait eğriler çizildi. Sonuçlar CoFeCrX (X=Al, Si, Ga ve Ge) için Şekil 4.2 - 4.3 - 4.4 - 4.5’de, CoFeTiY (Y=Al, Ga, Si, Ge, As ve Sb) için Şekil 4.6 - 4.7 - 4.8 - 4.9 - 4.10 - 4.11’de, CoFeVY (Y=Al, Ga, Si, Ge, As ve Sb) için Şekil 4.12 - 4.13 - 4.14 - 4.15 - 4.16 - 4.17’de, CoRhMnZ (Z=Ga, Sn ve Sb) için Şekil 4.18 - 4.19 - 4.20’de, CuCoMnGa için Şekil 4.21’de ve FeNiMnAl için Şekil 4.22’de sırasıyla verildi. Şekillerde Fermi enerjisi değerleri tüm enerjilerden çıkartılarak Fermi enerji seviyesi sıfır olarak alınmıştır ve kesikli çizgilerle gösterilmiştir. Ayrıca, yarı metalik özelliğe sahip Heusler alaşımlarının toplam manyetik momentleri Slater-Pauling davranışı (SPD) sergilemektedir.

SPD'ye göre dörtlü Heusler alaşımlarının 12 azınlık bandı tamamıyla dolu olduğu için toplam manyetik moment $M_t = (Z_t - 24)\mu_B$ kuralı ile ifade edilmişti [79, 80]. Buradaki Z_t alaşımdaki değerlik elektronların toplamı veya spin yukarı ve spin aşağı elektronların sayısının toplamıdır ($Z_t = N \uparrow + N \downarrow$). Örneğin, SPD'ye göre CoFeCrAl alaşımının toplam manyetik momentini hesaplanırsa; Co için $[Ar] 3d^7 4s^2$, Fe için $[Ar] 3d^6 4s^2$, Cr için $[Ar] 3d^5 4s^1$ ve Al için $[Ne] 3s^2 3p^1$ elektronik dizilimleri göz önüne alındığında, bu alaşımın Z_t 'si 26 elektrona sahiptir ve $M_t = (Z_t - 24)\mu_B$ kuralı gereği toplam manyetik moment $2\mu_B$ olarak elde edilir. Bu çalışmadaki incelenen alaşımların SPD'ye göre ve Medea ile hesaplanarak elde edilen toplam manyetik momentleri Çizelge 4.4'de literatürde yer alan diğer çalışmalar ile birlikte verildi. Bu sonuçlara göre toplam manyetik moment değerleri, Medea paket programı yardımıyla hesaplanan sonuçların SPD'ye göre hesaplanan sonuçlar ile oldukça uyumlu olduğu açıkça görülmektedir. Fakat Xiong ve ark. [37] tarafından FPLAPW metodu ile yapılan çalışmadan %34'lük bir fark ile CoFeVGe alaşımının toplam manyetik momentini farklı olmasına rağmen literatürdeki diğer çalışmalardaki toplam manyetik moment değerleri ile hem Medea paket programından hem de SPD'den elde edilen sonuçlar oldukça uyumlu olarak elde edilmiştir. Bunların yanı sıra, CoFeTiAl ve CoFeTiGa alaşımlarının toplam manyetik momentleri sıfır olarak hesaplandığı için spin yönelimlerine göre spin aşağı ve spin yukarı yönelimleri birbirleriyle simetrik çıkmıştır. Bu iki alaşım dışında kalan diğer alaşımların ise toplam manyetik momentleri sıfırdan farklı olduğu için spin yönelimlerinin simetrik olmadıkları şekillerden açıkça görülmektedir. Manyetik özellik gösteren bu alaşımlardaki toplam manyetik momente en büyük katkı alaşımları oluşturan geçiş metallerine ait d orbitallerinden gelmekte olduğu kısmi durum yoğunluğu eğrilerinde açıkça görülmektedir. Örneğin, CoCrFeAl alaşımı için Cr- d , Co- d ve Fe- d orbitallerinden gelen katkının toplamı neredeyse toplam manyetik momentteki değere yakın bir değere sahiptir.

CoFeCrX (X=Al, Si, Ga ve Ge) dörtlü Heusler alaşımlarının elektronik bant eğrileri (bkz. Şekil 4.2 - 4.3 - 4.4 - 4.5) incelendiğinde, iletkenlik bakımından spin yukarı yönelimi metalik özellik göstermektedir. CoFeCrAl ve CoFeCrSi alaşımlarında spin aşağı yöneliminde Fermi seviyesi yakınlarında sırasıyla 0,44 eV ve 0,53 eV'luk yasak enerji aralığı (GAP) olduğu ve bu yöneliminde ise yarıiletken bir özellik gösterdiği Şekil 4.2 ve Şekil 4.3'den anlaşılmaktadır. Bundan dolayı bu alaşımlar yarı metalik özellik göstermektedir. Bant yapısı grafiklerinden (bkz. Şekil 4.4 ve Şekil 4.5) CoFeCrGa ve CoFeCrGe alaşımlarının spin aşağı yöneliminde Γ simetri eksenini civarında Fermi seviyesini kesen iki bandın olduğu görülmektedir. Ancak bu çok küçük bir değere sahip (bkz. Çizelge 4.5) olduğu için toplam

durum yoğunluğu eğrisinde gözlenememiştir. Bu nedenden dolayı ise CoFeCrGe ve CoFeCrGa alaşımlarının yarı metaliğe yakın bir özellik gösterdiği söylenebilir. Her bir elementten gelen katkının daha iyi anlaşılması için çizilen toplam ve kısmi durum yoğunluğu eğrilerine bakıldığında (bkz. Şekil 4.2 - 4.3 - 4.4 - 4.5), CoFeCrX (X=Al, Si, Ga ve Ge) alaşımları için Cr-3d, Co-3d ve Fe-3d orbitallerinin elektronları -4 eV ile 2 eV arasına verdiği katkının çok olduğu görülmektedir. Ayrıca, bu alaşımların elektronik özellikleri literatürdeki yer alan çalışmalar ile karşılaştırılarak uyumlu oldukları görüldü. Luo ve ark. [23] 2009 yılında yerel yoğunluk yaklaşımı (LDA) kullanılarak CoFeCrAl alaşımlarının yarı metalik ferromanyet olduğunu söylemişlerdir. Nehra ve ark. [24] 2013 yılında, Alhaj ve ark. [27] 2014 yılında FPLAPW metodu ile yapmış oldukları çalışmalarda, Bainsla ve ark. [33] ise 2015 yılında VASP ile yapmış oldukları çalışmada CoFeCrAl alaşımlarının spin aşağı yönelimdeki yasak enerji aralığını sırasıyla 0,41 eV; 0,5 eV ve 0,31 eV olarak elde etmişler ve yarı metalik ferromanyet olduğunu bildirmişlerdir. Gao ve ark. [25] 2013 yılında CoFeCrX (X=Al, Si, Ga ve Ge) alaşımlarını FPLAPW metodu ile incelemişlerdir. Onlar tarafından X=Al ve Si alaşımlarının yarı metalik oldukları bildirilmiş ve yasak enerji aralıkları sırasıyla 0,16 eV ve 0,28 eV olarak elde edilmiştir. X=Ga ve Ge alaşımlarının ise yarı metaliğe yakın bir özellik gösterdiğini söylemişlerdir. Bunlardan başka, Singh ve ark. [28] 2014 yılında FPLAPW metodu ile CoFeCrAl ve CoFeCrSi alaşımlarının yasak enerji aralıklarını sırasıyla 0,672 eV ve 0,32 eV olarak hesaplayarak yarı metalik olduklarını belirlemişlerdir. Enamullah ve ark. [35] ise 2015 yılında VASP ile CoFeCrGe alaşımlarının elektronik özelliklerini incelemiş ve yarı metalik olduğunu söylemişlerdir.

CoFeTiY (Y=Al, Ga, Si, Ge, As ve Sb) dörütlü Heusler alaşımlarının elektronik bant eğrileri (bkz. Şekil 4.6 - 4.7 - 4.8 - 4.9 - 4.10 - 4.11) incelendiğinde toplam manyetik momenti sıfır olan CoFeTiAl alaşımlarında (bkz. Şekil 4.6) ve CoFeTiY (Y= Si, Ge, As ve Sb) ferromanyetik alaşımlarının (bkz. Şekil 4.7 - 4.8 - 4.9 - 4.10 - 4.11) ise spin aşağı yönelimlerinde yasak enerji aralıklarına sahip oldukları açık bir şekilde görülmektedir. Bundan dolayı CoFeTiAl alaşımları yarıiletken özellik göstermektedir. Ayrıca, CoFeTiAl alaşımları için yasak enerji aralığı 0,18 eV olarak elde edildi. CoFeTiY (Y=Si, Ge, As ve Sb) alaşımları için ise spin yukarı yöneliminde metalik, spin aşağı yöneliminde ise yarıiletken özellik gösterdiğinden dolayı yarı metalik özellik gösterdikleri söylenebilir. Ayrıca CoFeTiY (Y=Si, Ge, As ve Sb) alaşımları için spin aşağı yönelimindeki yasak enerji aralıkları sırasıyla 0,59 eV; 0,40 eV; 0,35 eV ve 0,48 eV olarak elde edildi. Fakat CoFeTiGa alaşımlarının ise valans bantlarının Fermi seviyesini kestiği ve Γ simetri eksenini civarında en üst düzeyde olduğu görülmektedir.

Dolayısıyla CoFeTiGa alařım için metalik bir karakterde olduđu söylenebilir. Toplam ve kısmi durum yoğunluđu eđrileri incelendiđinde ise CoFeTiGa alařımının Fermi Seviyesi civarında iletkenliđi düřüktür. Ayrıca, $N(E_F)$ deđerinin Fermi enerji seviyesi üzerinde çok düřük bir deđere sahip olduđu Çizelge 4.5’de görölmektedir. Bu özelliđinden dolayı ise CoFeTiGa alařımının boşluksuz yarıiletken olduđu söylenebilir. Bunların yanı sıra, toplam ve kısmi durum yoğunluđu eđrilerine bakıldıđında yapılan hesaplama sonuçlarına göre spin yukarı yönelimindeki -4 eV ile 2 eV arasındaki iletkenliđe en büyük katkı bu alařımlar için sırasıyla Co-3d, Fe-3d ve Ti-3d orbitallerinin elektronlarından geldiđi görölmektedir. Ayrıca durum yoğunluđu eđrilerinden negatif bölgedeki Fermi seviyesine en uzakta kalan tepe grupları Al, Ga, Si, Ge, As ve Sb atomlarına ait s orbitalindeki elektronlardan geldiđi de açıkça görölmektedir. Literatürde yer alan çalışmalar incelendiđinde, Xiong ve ark. [37] 2014 yılında FPLAPW metodu ile yaptıkları çalışmada CoFeTiY (Y=Al, Ga, Si, Ge, As ve Sb) alařımlarının yasak enerji aralıkları sırasıyla 0,14 eV; 0 eV; 0,31 eV; 0,07 eV; 0,18 eV ve 0,02 eV olarak elde etmişlerdir. Ayrıca, Y=Al için yarıiletken, Y=Ga için boşluksuz yarıiletken ve Y=Si, Ge, As ve Sb için ise yarı metalik olduklarını söylemişlerdir. Bu çalışmadan başka, Zhang ve ark. [38] 2014 yılında CASTEP ile yapmış oldukları çalışmada CoFeTiSi ve CoFeTiGe alařımlarının yasak enerji aralıklarını sırasıyla 0,577 eV ve 0,424 eV olarak elde etmişler ve yarı metalik olduklarını bildirmişlerdir. Bu alařımlara ait literatürde yer alan bu çalışmalar ile bu çalışmada hesaplanan elektronik özellikler uyumlu çıkmıştır.

İletkenlik bakımından CoFeVY (Y=Al, Ga, Si, Ge, As ve Sb) alařımlarının elektronik bant eđrileri (bkz. Şekil 4.12 - 4.13 - 4.14 - 4.15 - 4.16 - 4.17) incelendiđinde spin yukarı yönelimlerinde alařımların hepsinin iletken özellik gösterdiđi fakat spin ařađı yönelimlerinde ise CoFeVSb alařımı için açıkça bir yasak enerji aralıđı görölmektedir. CoFeVSb alařımının spin ařađı yönelimindeki yasak enerji aralıđı 0,45 eV olarak elde edildi. Diđer alařımlar için ise X simetri eksenı civarında iletkenlik bantlarının Fermi seviyesini kestiđi, fakat CoFeVAs alařımı için ise buna rađmen bir yasak enerji aralıđına sahip olduđu görölmektedir. Bu alařımlar için hesaplanan $N(E_F)$ deđerleri Çizelge 4.5’de verildi. Çizelge 4.5’den CoFeVAl, CoFeVGa, CoFeVSi ve CoFeVGe alařımları için spin ařađı yönelimindeki $N(E_F)↓$ deđerlerinin küçük oldukları görölmektedir. Ayrıca, toplam ve kısmi durum yoğunluđu eđrileri de göz önüne alınarak CoFeVAl, CoFeVGa, CoFeVSi ve CoFeVGe alařımlarının yarı metaliđe yakın, CoFeVAs ve CoFeVSb alařımlarının ise yarı metalik özellik gösterdiđi söylenebilir. Elektronik katkıyı daha ayrıntılı inceleyebilmek için

toplam ve kısmi durum yoğunluğu eğrilerine bakıldığında (bkz. Şekil 4.12 - 4.13 - 4.14 - 4.15 - 4.16 - 4.17) hesaplama sonuçlarına göre -4 eV ile 2 eV arasında iletkenliğe en büyük katkı Co-3d, Fe-3d ve V-3d orbitallerinin elektronlarından geldiği görülmektedir. Bunların yanı sıra, durum yoğunluğu grafiklerindeki negatif bölgedeki Fermi seviyesine en uzaktaki kalan tepe gruplarının ise Al, Ga, Si, Ge, As ve Sb büyük oranda atomlarının s orbitaline ait elektronlardan geldiği görülmektedir. Literatürde yer alan, Xiong ve ark. [37] 2014 yılında FPLAPW metodu ile yapmış oldukları çalışmada Y=Ge, As ve Sb alaşımlarının yasak enerji aralıklarını sırasıyla 0 eV; 0 eV ve 0,17 eV olarak elde etmişler ve yarı metalik olduklarını bildirmişlerdir. Ayrıca, Y=Al, Ga ve Si alaşımlarının ise yarı metaliğe yakın olduklarını söylemişlerdir. Bundan başka, Özdoğan ve ark. [31] 2013 yılında FPLO metodu ile yaptıkları çalışmada CoFeVAs alaşımının yarı metalik olduğunu bildirmişlerdir. Literatürdeki çalışmalar ile bu çalışmada elektronik özellikleri incelenen bu alaşımlar uyum içerisinde çıkmıştır.

CoRhMnZ (Z=Ga, Sn ve Sb) dörtlü Heusler alaşımlarının elektronik bant eğrileri (bkz. Şekil 4.18 - 4.19 - 4.20) incelendiğinde spin aşağı yöneliminde Γ temel simetri ekseninin hemen üzerinde Fermi Seviyesinin üst kısmında CoRhMnGa alaşımının (bkz. Şekil 4.18), Fermi seviyesinin hemen üzerinde ise CoRhMnSn alaşımının (bkz. Şekil 4.19) valans bantlarından gelen eğriler ile iletkenlik bant eğrilerinin birbirini kestiği görülmektedir. Fakat CoRhMnSb alaşımı için ise Γ -X-W temel simetri yönleri boyunca spin aşağı yönelimindeki iletkenlik bandından gelen eğrilerin Fermi seviyesinin üzerinden geçerek gittiği görülmektedir (bkz. Şekil 4.20). Ayrıca, bu alaşımlar için Fermi enerji seviyesinin üzerindeki $N(E_F)$ değerleri hesaplandı ve Çizelge 4.5’de verildi. $N(E_F)$ değeri incelendiğinde CoRhMnGa ve CoRhMnSn alaşımlarının spin aşağı yönelimindeki $N(E_F)_{\downarrow}$ değerlerinin oldukça düşük olduğu fakat CoRhMnSb alaşımında ise 2,249 DOS/States CELL olduğu görülmektedir. CoRhMnSb alaşımına ait spin aşağı yönelimindeki $N(E_F)_{\downarrow}$ değerinin yüksek olmasının nedeni Γ -X-W temel simetri yönleri boyunca iletkenlik bandının Fermi seviyesinin üzerinden geçmesidir. Buna rağmen ilgili durum yoğunluğu eğrisinde Fermi seviyesinin hemen altında 0,25 eV – 1,12 eV aralığında bu alaşım 0,25 eV’luk bir yasak enerji aralığına sahiptir. Aynı zamanda elektronik bant, toplam ve kısmi durum yoğunluğu eğrileri incelendiğinde ise iletkenlik bakımından bu alaşımların spin yukarı yönelimde metalik özellik gösterdiği Şekil 4.18 - 4.19 - 4.20’den açıkça görülmektedir. Bu nedenden dolayı ise CoRhMnGa, CoRhMnSn ve CoRhMnSb alaşımlarının yarı metaliğe yakın bir özellik

gösterdiği söylenebilir. Ayrıca, toplam ve kısmi durum yoğunluğu eğrilerine incelendiğinde bu alaşımlar için -5 eV ile 2 eV arasındaki iletkenliğe en büyük katkı Co-3d, Mn-3d ve Rh-3d orbitallerine ait elektronlardan geldiği görülmektedir. Bunun yanı sıra bu alaşımlar için spin aşağı yönelimindeki Fermi seviyesinin hemen altında bulunan (0 eV ile -2 eV arasında kalan) keskin tepeler ise Co-3d orbitali tarafından kaynaklanmaktadır. Ayrıca, Fermi seviyesinin altında kalan en uzaktaki tepeler ise Ga, Sn ve Sb atomlarının s orbitallerine ait elektronlardan en büyük katkının geldiği görülmektedir. Literatürdeki, Alijani ve ark. [41] 2012 yılında FPLAPW metodu kullanarak yaptıkları çalışmada CoRhMnZ (Z=Ga, Sn ve Sb) alaşımlarının yarı metalik ferromanyete yakın olduklarını bildirmişlerdir. Alijani ve ark. tarafından yapılan çalışma ile bu çalışmada elektronik özellikleri incelenen bu alaşımlar uyum içerisinde çıkmıştır.

CuCoMnGa ve FeNiMnAl dörtlü Heusler alaşımları iletkenlik açısından elektronik bant eğrilerinden (bkz. Şekil 4.21 - 4.22) görüldüğü üzere CuCoMnGa alaşımının (bkz. Şekil 4.21) spin aşağı ve spin yukarı yönelimlerinde hem valans hem de iletkenlik bantlarının Fermi seviyesini kestiği ve bundan dolayı metalik karakterde olduğu söylenebilir. Fakat FeNiMnAl alaşımı (bkz. 4.22) için ise spin yukarı yönelimde metalik özellik gösterdiği, spin aşağı yöneliminde ise Fermi seviyesinde bir yasak enerji aralığına sahip olduğu görülmektedir. FeNiMnAl alaşımının spin aşağı yönelimindeki yasak enerji aralığı 0,2 eV olarak elde edildi. Bundan dolayı bu alaşımlar için CuCoMnGa alaşımı için düşük bir iletkenliğe sahip düzgün metalik karakterde olduğu ve FeNiMnAl alaşımı için ise yarı metalik olduğu söylenebilir. Toplam ve kısmi durum yoğunluğu eğrilerinden (bkz. Şekil 4.21 - 4.22) anlaşılabacağı üzere CuCoMnGa alaşımı için hem spin aşağı hem de spin yukarı yönelimlerinde, -1 eV ile 4 eV arasında Co-3d ve Mn-3d, -5 eV ile -3 eV arasında ise Cu-3d orbitallerine ait elektronlardan iletkenliğe en çok katkının geldiği görülmektedir. Ayrıca, FeNiMnAl alaşımı için ise Fermi seviyesindeki spin yukarı yöneliminde sırasıyla Fe-3d ve Mn-3d, -4 eV ile -2 eV arasında ise Ni-3d orbitallerinin elektronlarının iletkenliğe en çok katkıyı verdiği görülmektedir. Alijani ve ark. [42] 2011 yılında FPLAPW metodu ile yaptıkları çalışmada CuCoMnGa alaşımının elektronik özelliğini incelemişler ve düzenli metalik ferromanyet olduğunu bildirmişlerdir. Literatürdeki bu çalışma ile CuCoMnGa alaşımına ait hesaplanan elektronik özellikler uyum içerisinde çıkmıştır. Fakat FeNiMnAl alaşımının elektronik özellikleri ile ilgili literatür taramasında herhangi bir çalışmaya rastlanmadığı için karşılaştırma yapılamadı.

Çizelge 4.4. İncelenen dörtlü Heusler alaşımlarının toplam manyetik momentleri (M_t , μ_B), toplam değerlik elektron sayıları (Z_t) ve SPD'ye göre elde edilen toplam manyetik momentler ($(M_t = Z_t - 24)$, μ_B)

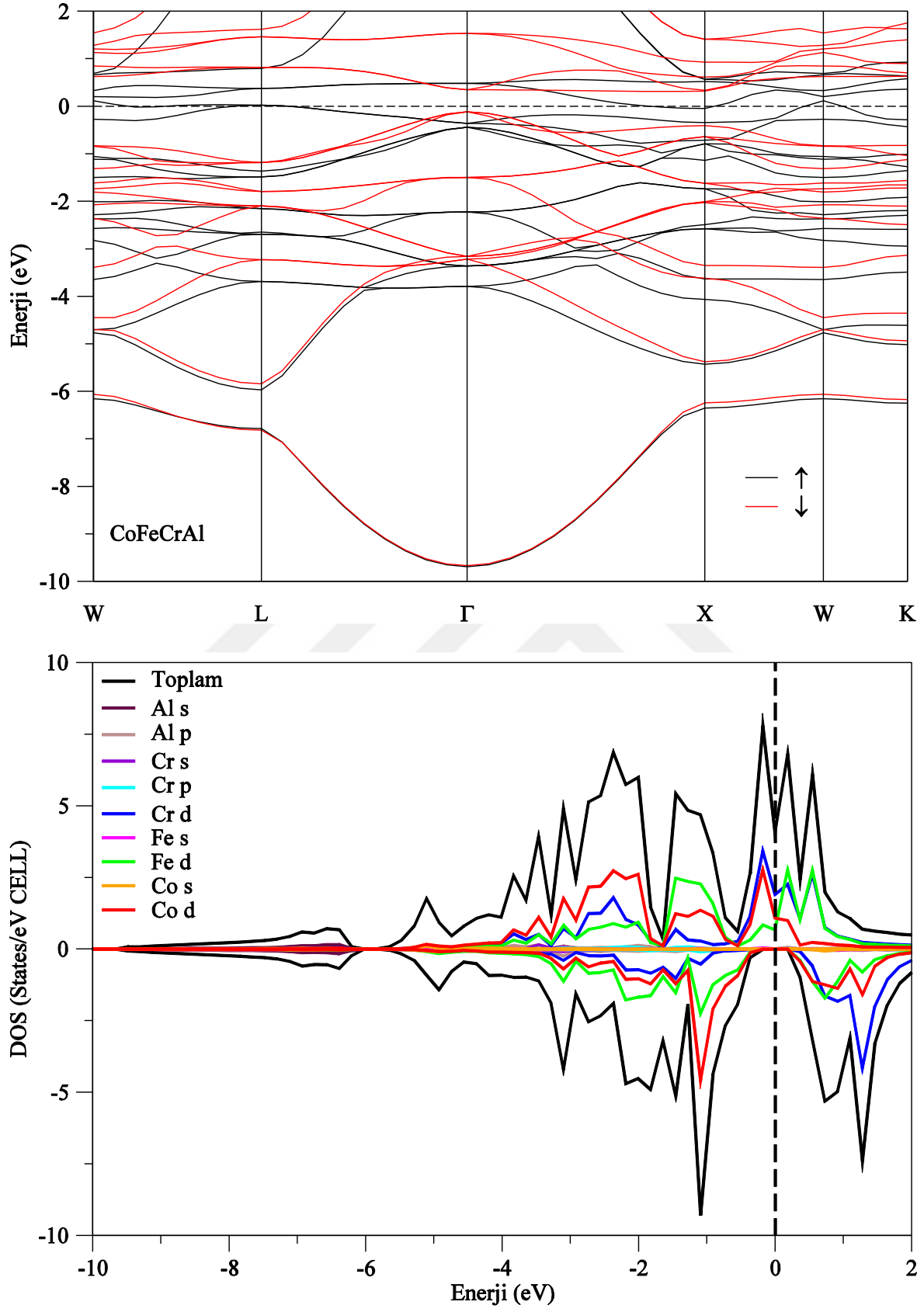
Malzemeler	Referanslar	M_t	Z_t	$M_t = Z_t - 24$
CoFeCrAl	Bu Çalışma FPLAPW [25] LDA [23] FPLO [31] FPLAPW [28] Deneysel [33]	2,01 2,00 2,07 2,00 2,00 2,00	26	2
CoFeCrGa	Bu Çalışma FPLAPW [25] VASP [34] Deneysel [34]	2,09 2,00 1,98 2,07	26	2
CoFeCrGe	Bu Çalışma FPLAPW [25] VASP [35] Deneysel [35]	3,05 3,00 2,99 3,00	27	3
CoFeCrSi	Bu Çalışma FPLAPW [25] FPLO [31] FPLAPW [28]	2,99 3,00 3,00 3,00	27	3
CoFeTiAl	Bu Çalışma FPLAPW [37]	0 0	24	0
CoFeTiGa	Bu Çalışma FPLAPW [37]	0 0	24	0
CoFeTiSi	Bu Çalışma FPLAPW [37] FPLO [31] CASTEP [38]	1,00 1,00 1,00 1,00	25	1
CoFeTiGe	Bu Çalışma FPLAPW [37] CASTEP [38]	1,02 1,00 1,00	25	1
CoFeTiAs	Bu Çalışma FPLAPW [37] FPLO [31] CASTEP [39]	2,00 2,00 2,00 2,00	26	2
CoFeTiSb	Bu Çalışma FPLAPW [37] FPLAPW [36] CASTEP [39]	2,01 2,00 2,00 2,00	26	2
CoFeVAl	Bu Çalışma FPLAPW [37] FPLO [31]	0,99 0,96 0,97	25	1
CoFeVGa	Bu Çalışma FPLAPW [37]	1,01 0,98	25	1
CoFeVSi	Bu Çalışma FPLAPW [37] FPLO [31]	1,93 1,96 1,97	26	2

Çizelge 4.4. İncelenen dörtlü Heusler alaşımlarının toplam manyetik momentleri (M_t , μ_B), toplam değerlik elektron sayıları (Z_t) ve SPD'ye göre elde edilen toplam manyetik momentler ($(M_t = Z_t - 24)$, μ_B), (Devamı)

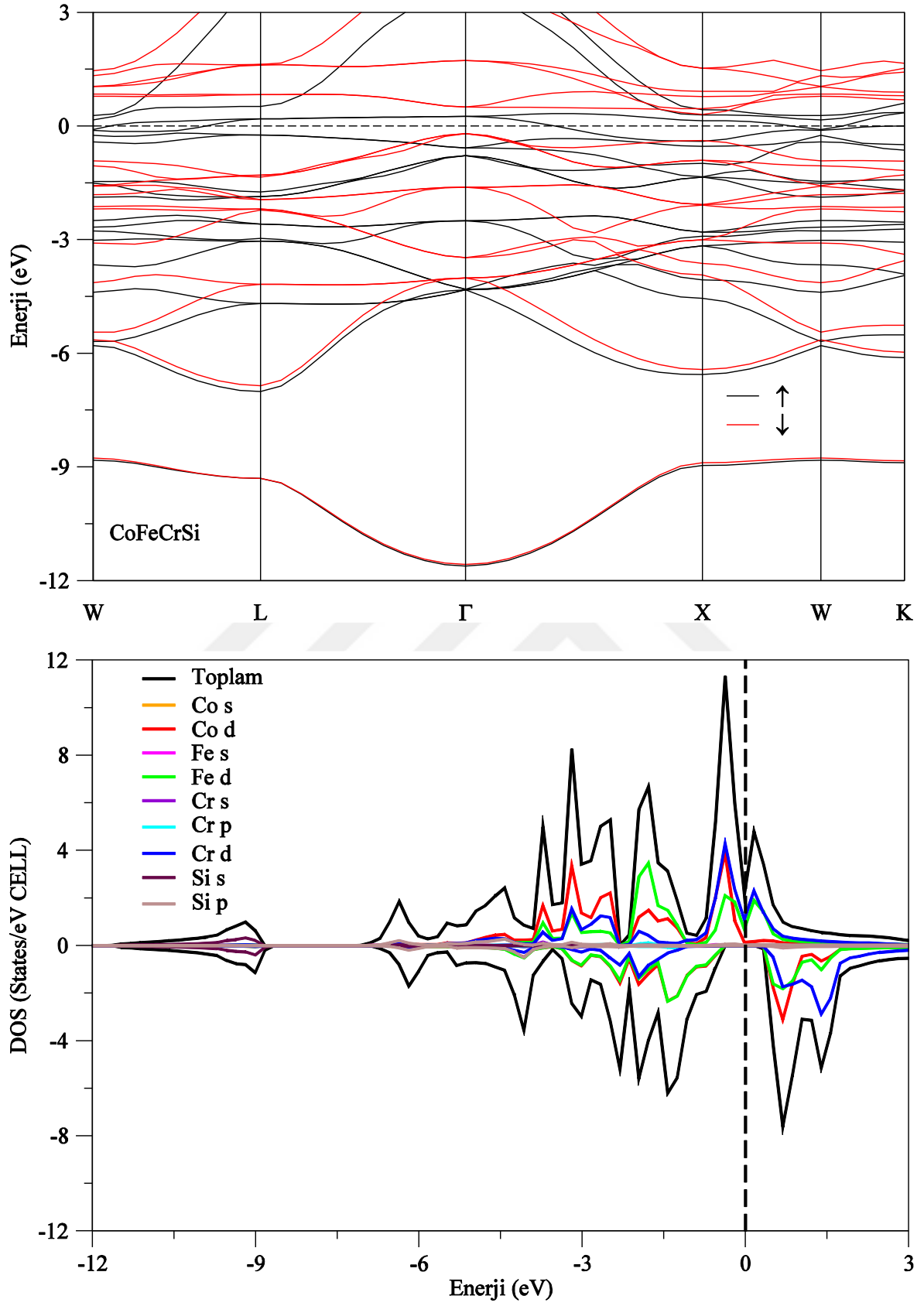
Malzemeler	Referanslar	M_t	Z_t	$M_t = Z_t - 24$
CoFeVGe	Bu Çalışma FLAPW [37]	1,98 3,00	26	2
CoFeVAs	Bu Çalışma FPLAPW [37] FPLO [31]	3,01 3,00 3,00	27	3
CoFeVSb	Bu Çalışma FPLAPW [37]	3,03 3,00	27	3
CoRhMnGa	Bu Çalışma Deneyisel (5 K) [41] Deneyisel (300 K) [41] FPLAPW [41]	4,07 3,39 2,27 4,11	28	4
CoRhMnSn	Bu Çalışma Deneyisel (5 K) [41] Deneyisel (300 K) [41] FPLAPW [41]	4,91 4,83 4,61 5,02	29	5
CoRhMnSb	Bu Çalışma Deneyisel (5 K) [41] Deneyisel (300 K) [41] FPLAPW [41]	5,98 5,50 4,87 5,98	30	6
CuCoMnGa	Bu Çalışma FPLAPW [42]	3,70 3,98	20	-4
FeNiMnAl	Bu Çalışma	4,04	28	4

Çizelge 4.5. İncelenen dörtlü Heusler alaşımlarının Fermi Seviyesi üzerindeki durum yoğunluğu değerleri (DOS/States CELL)

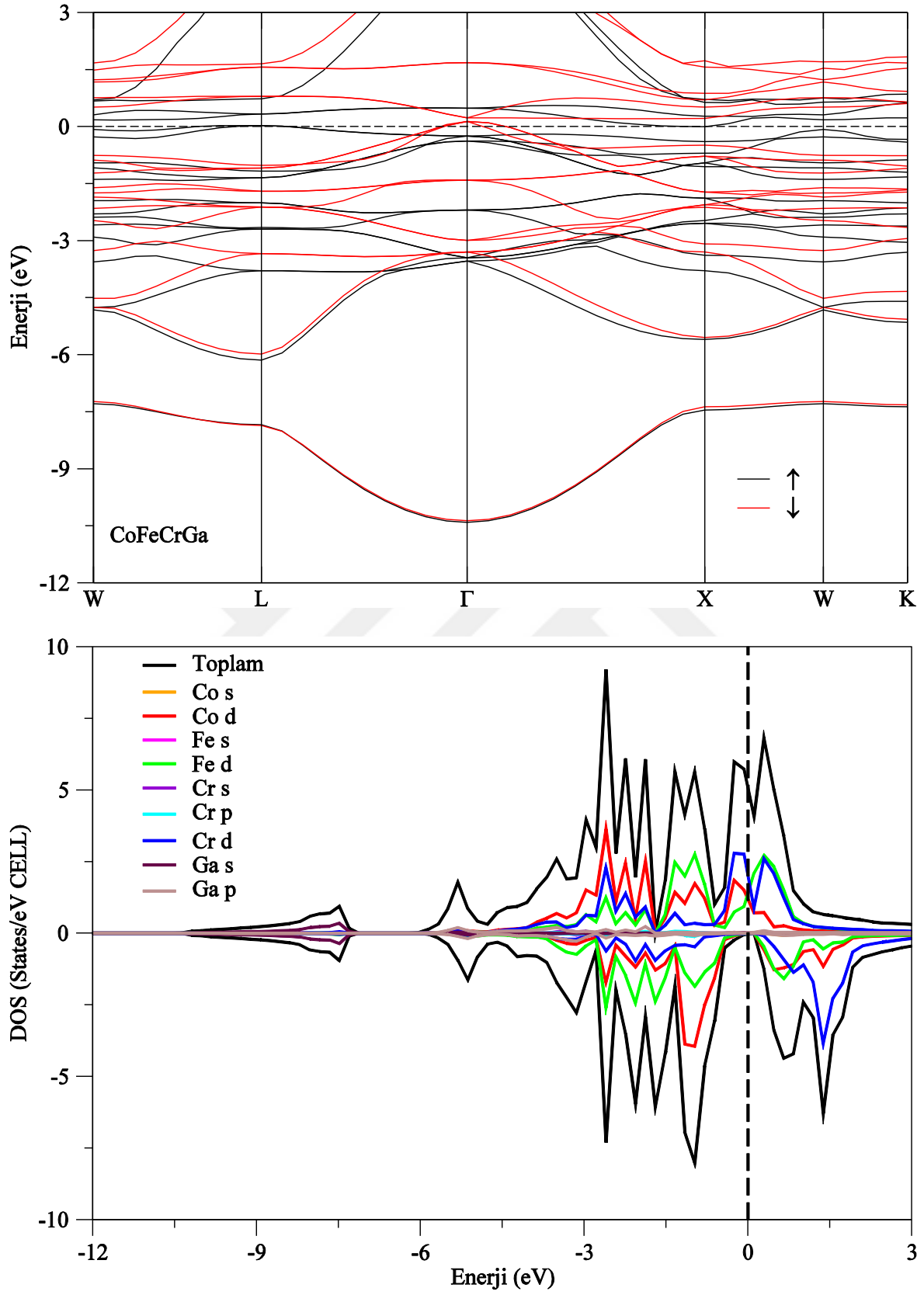
Malzemeler	$N(E_F)\uparrow$	$N(E_F)\downarrow$
CoFeCrAl	4,074	-
CoFeCrSi	2,443	-
CoFeCrGa	5,097	0,028
CoFeCrGe	4,640	0,002
CoFeTiAl	-	-
CoFeTiGa	0,157	0,157
CoFeTiSi	2,272	-
CoFeTiGe	2,377	-
CoFeTiAs	0,872	-
CoFeTiSb	1,266	-
CoFeVAl	2,626	0,086
CoFeVGa	2,724	0,127
CoFeVSi	2,726	0,142
CoFeVGe	2,690	0,129
CoFeVAs	2,559	0,001
CoFeVSb	2,935	-
CoRhMnGa	2,873	0,299
CoRhMnSn	1,139	0,046
CoRhMnSb	1,076	2,249
CuCoMnGa	1,168	1,896
FeNiMnAl	7,092	-



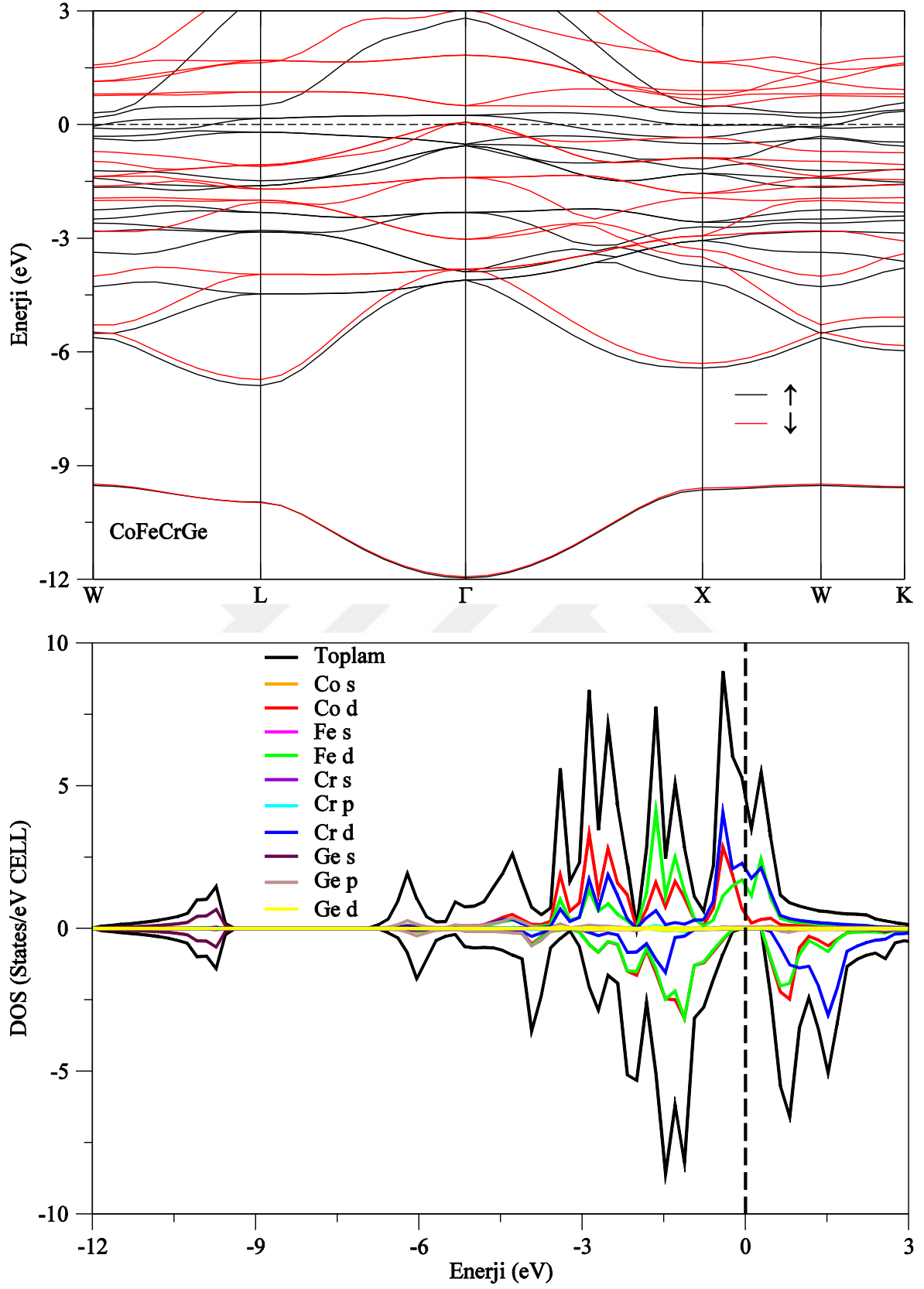
Şekil 4.2. CoFeCrAl dörü Heusler alaşımlının elektronik bant, kısmi ve toplam durum yoğunluğu eğrileri



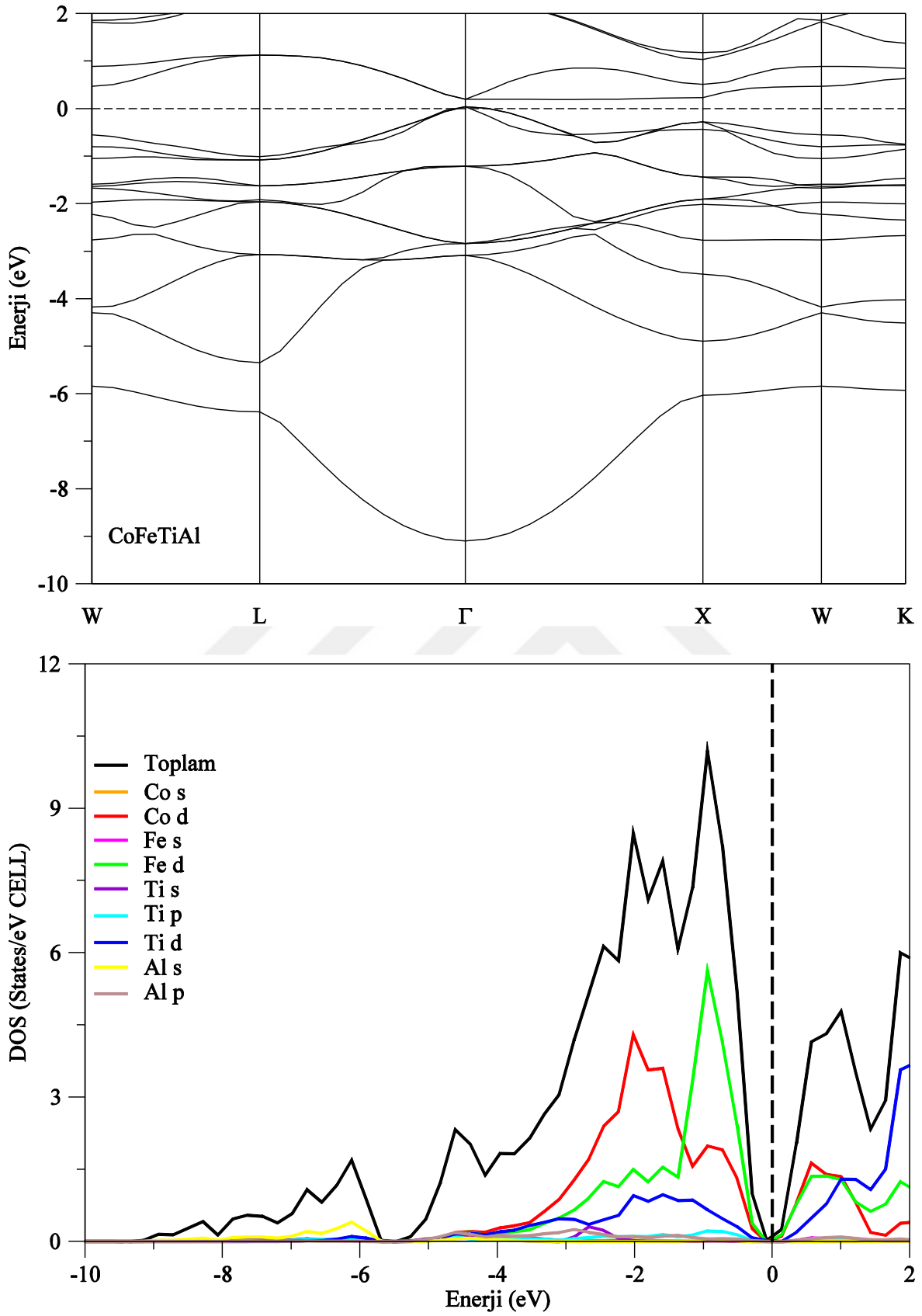
Şekil 4.3. CoFeCrSi dörütlü Heusler alaşımlının elektronik bant, kısmi ve toplam durum yoğunluğu eğrileri



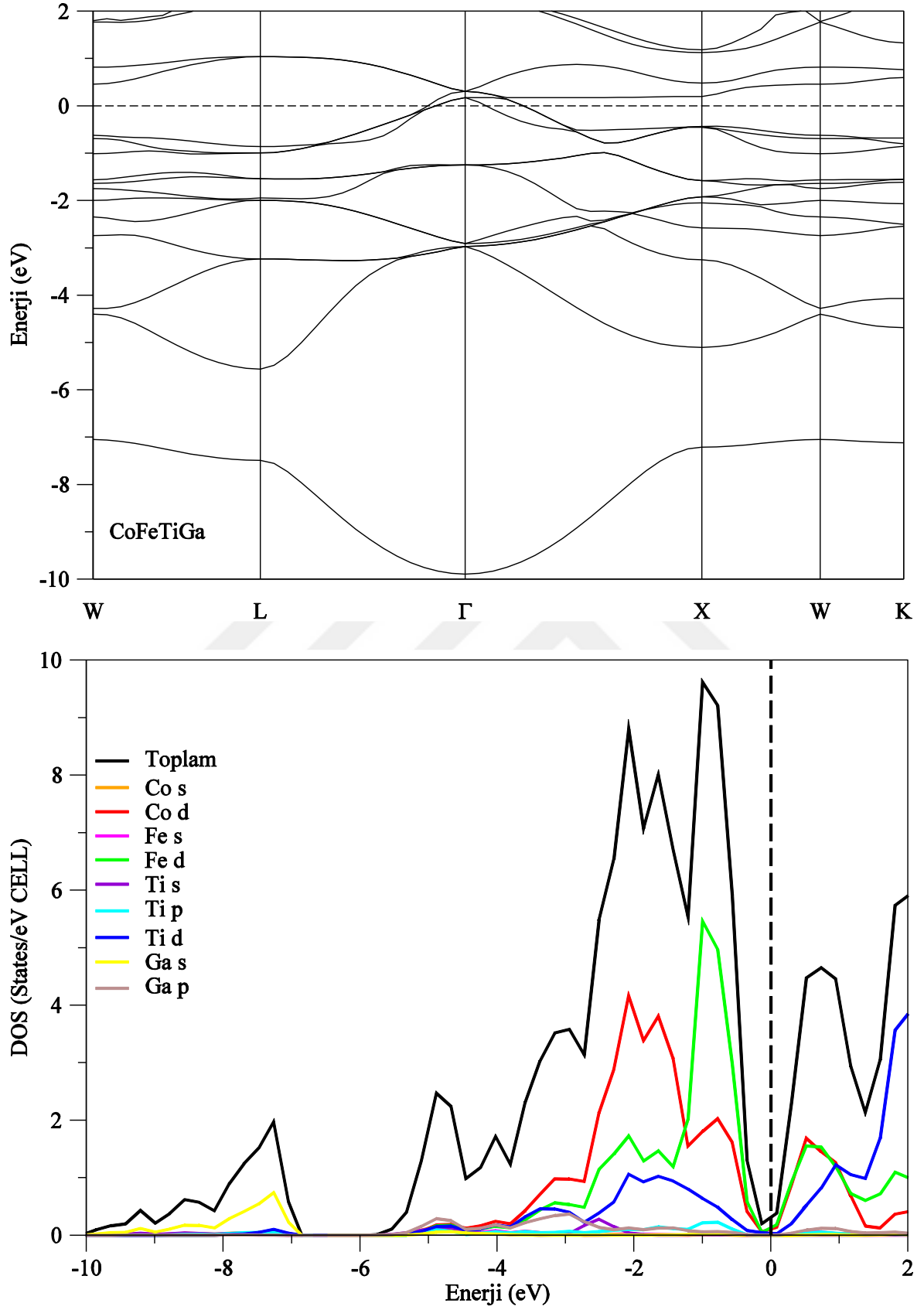
Şekil 4.4. CoFeCrGa dörtlü Heusler alaşımının elektronik bant, kısmi ve toplam durum yoğunluğu eğrileri



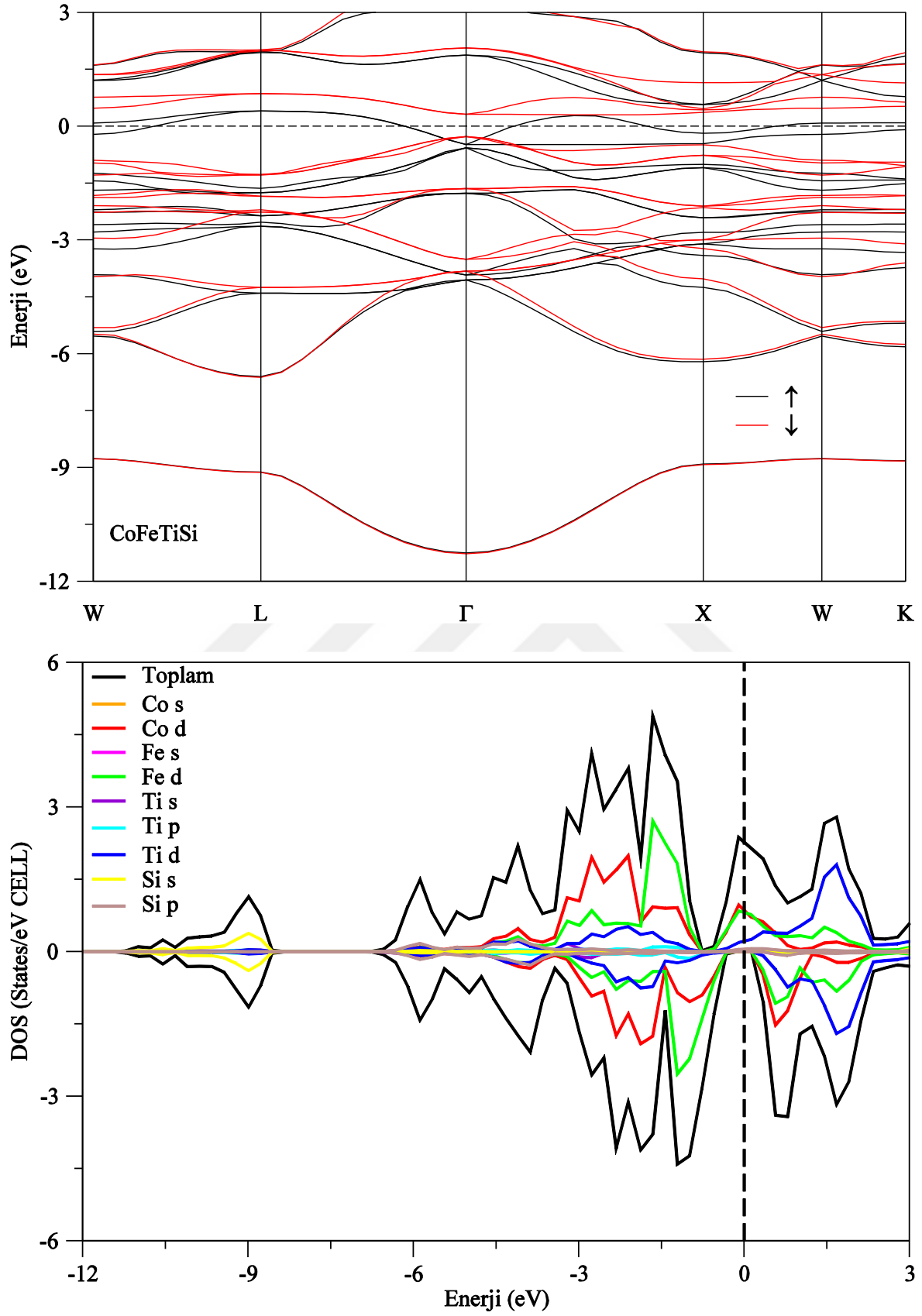
Şekil 4.5. CoFeCrGe dörtlü Heusler alaşımlarının elektronik bant, kısmi ve toplam durum yoğunluğu eğrileri



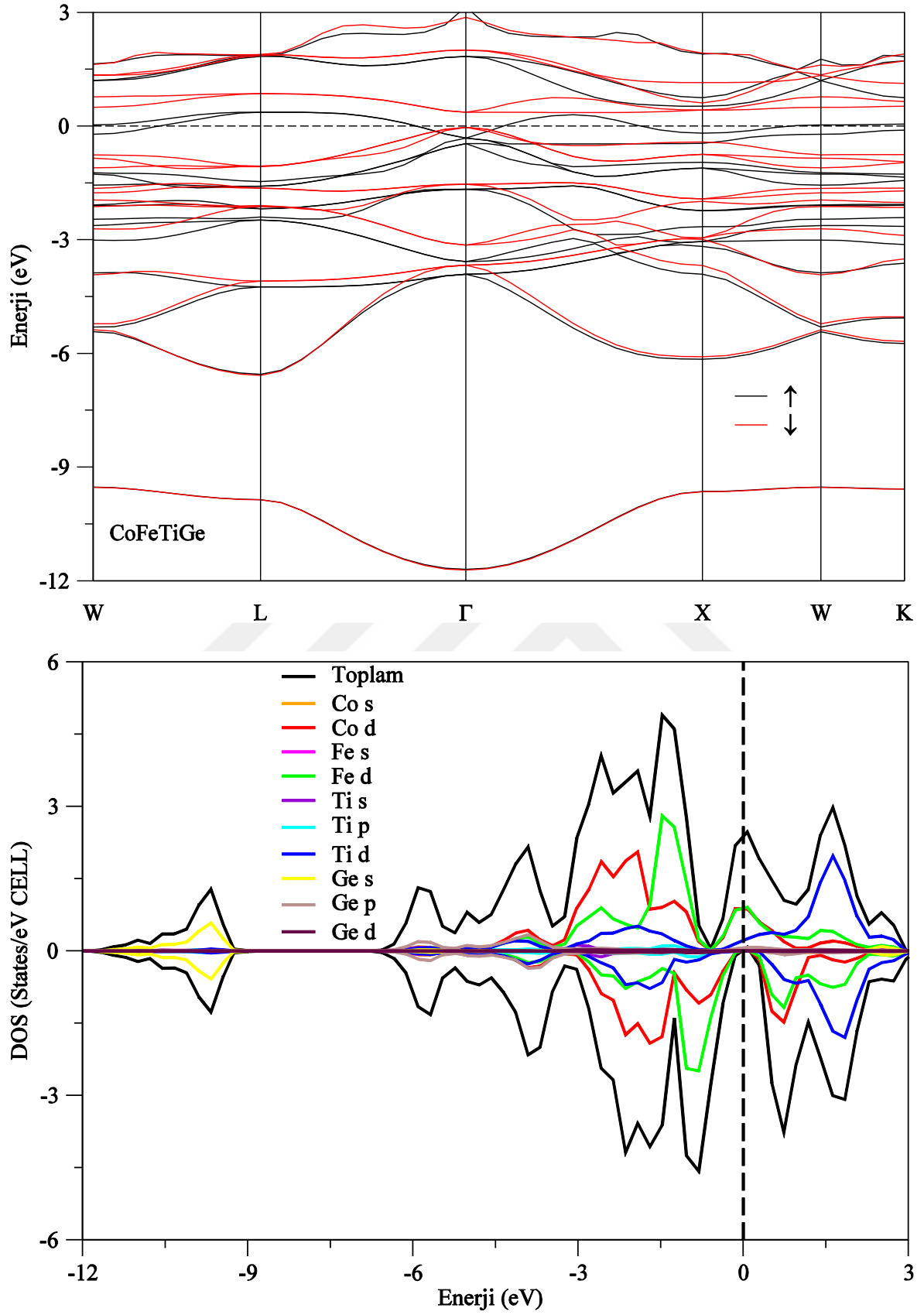
Şekil 4.6. CoFeTiAl dörütlü Heusler alaşımlının elektronik bant, kısmi ve toplam durum yoğunluğu eğrileri



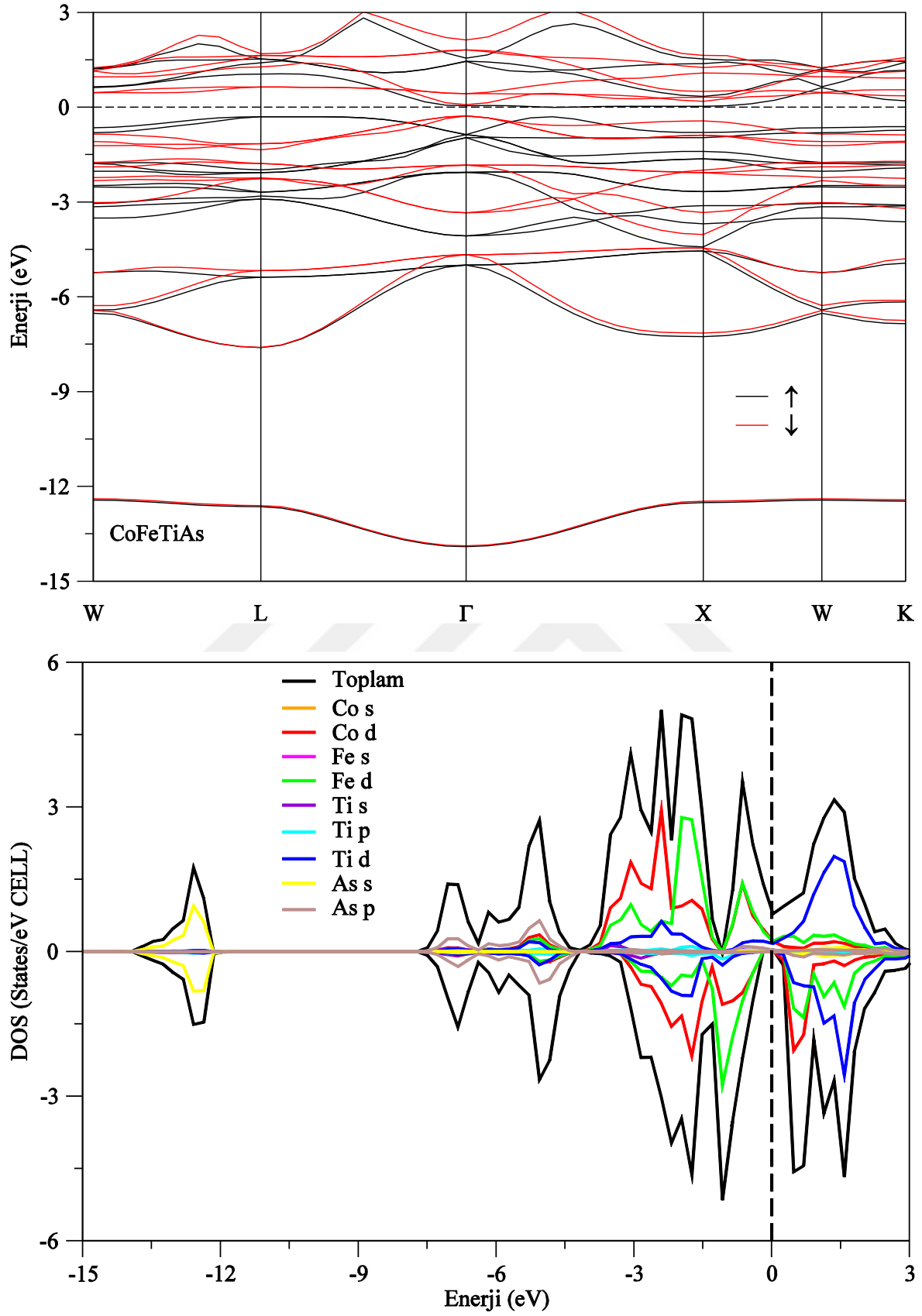
Şekil 4.7. CoFeTiGa dörtlü Heusler alaşımasının elektronik bant, kısmi ve toplam durum yoğunluğu eğrileri



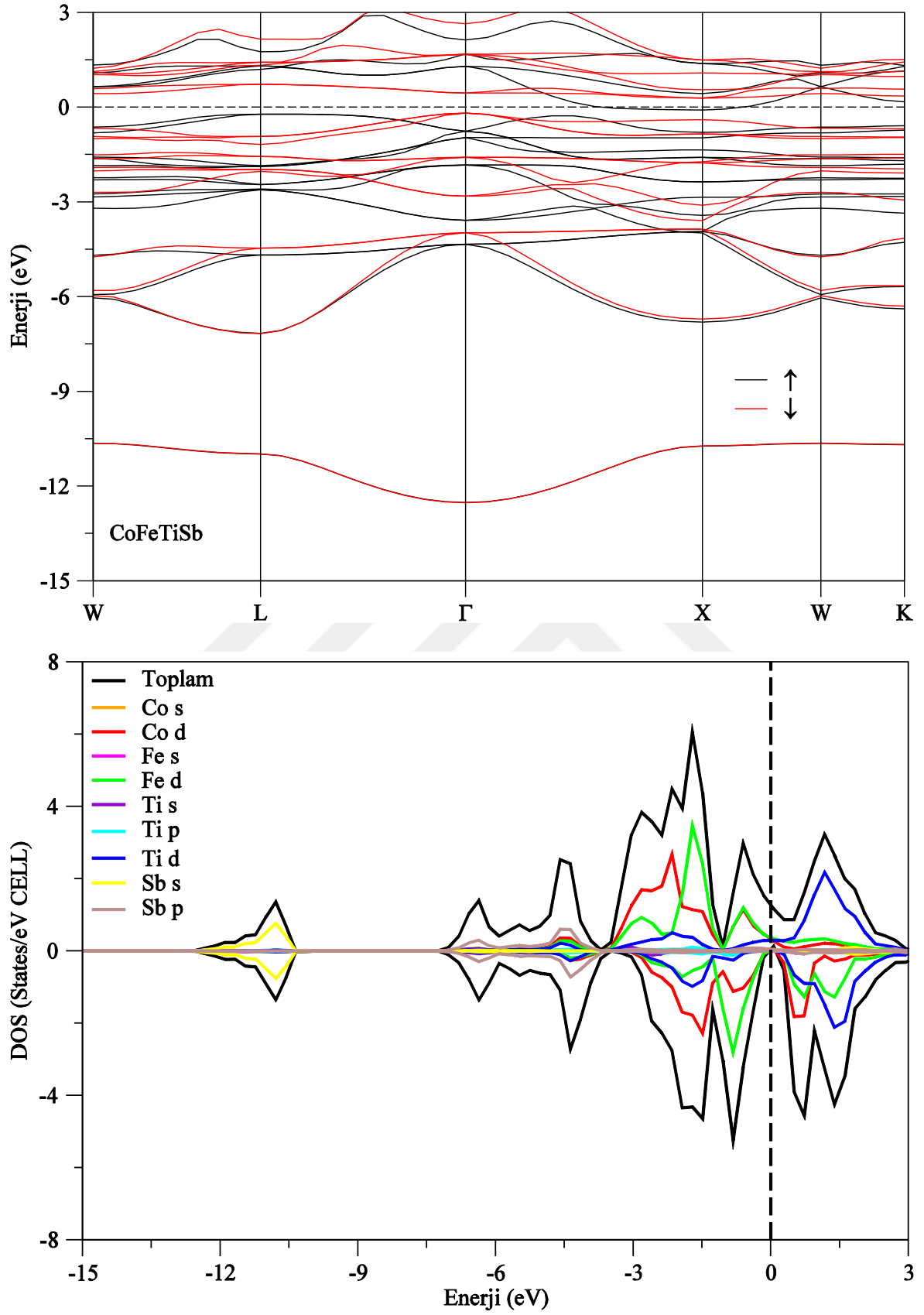
Şekil 4.8. CoFeTiSi dörtlü Heusler alaşımının elektronik bant, kısmi ve toplam durum yoğunluğu eğrileri



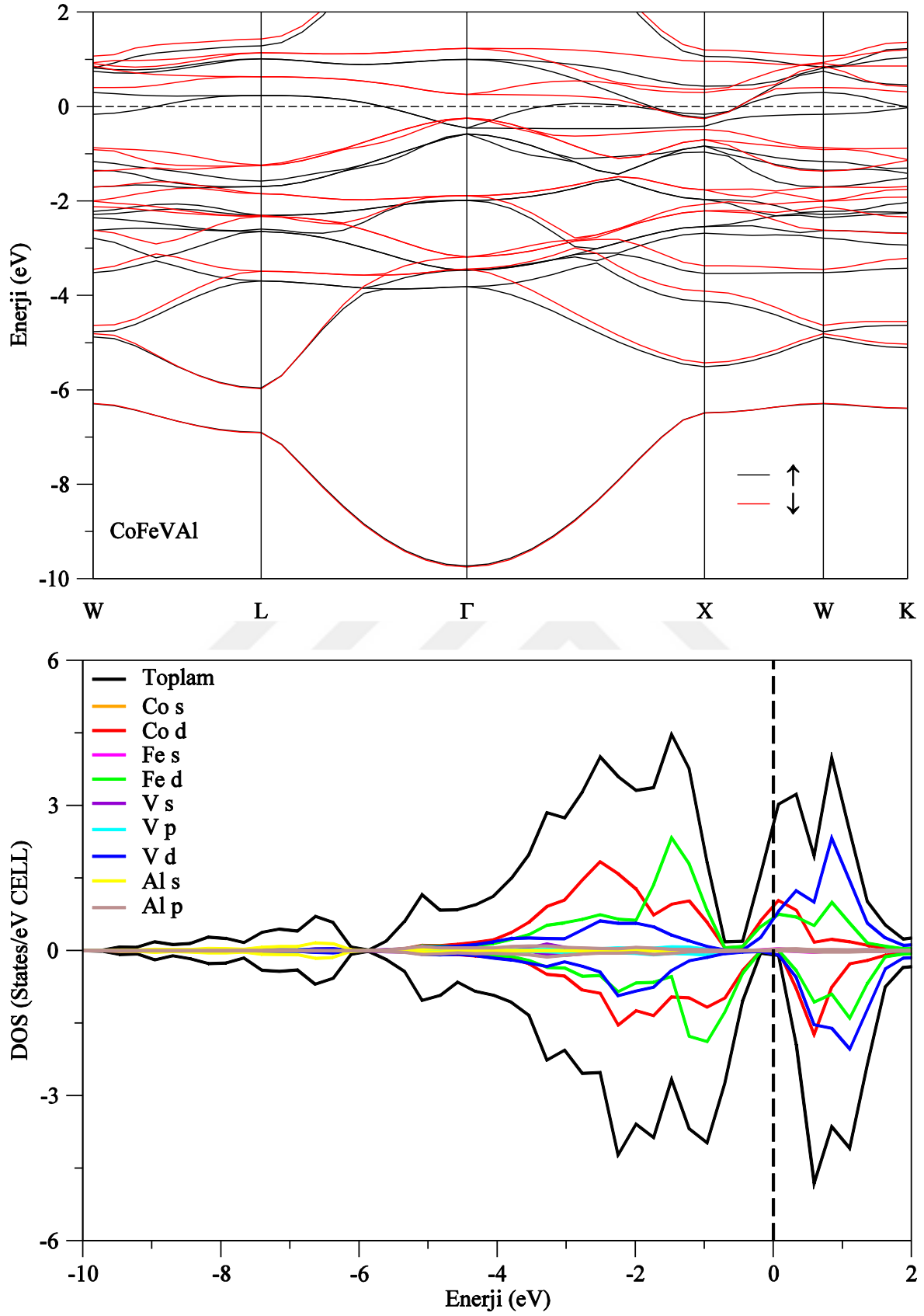
Şekil 4.9. CoFeTiGe dörtlü Heusler alaşımasının elektronik bant, kısmi ve toplam durum yoğunluğu eğrileri



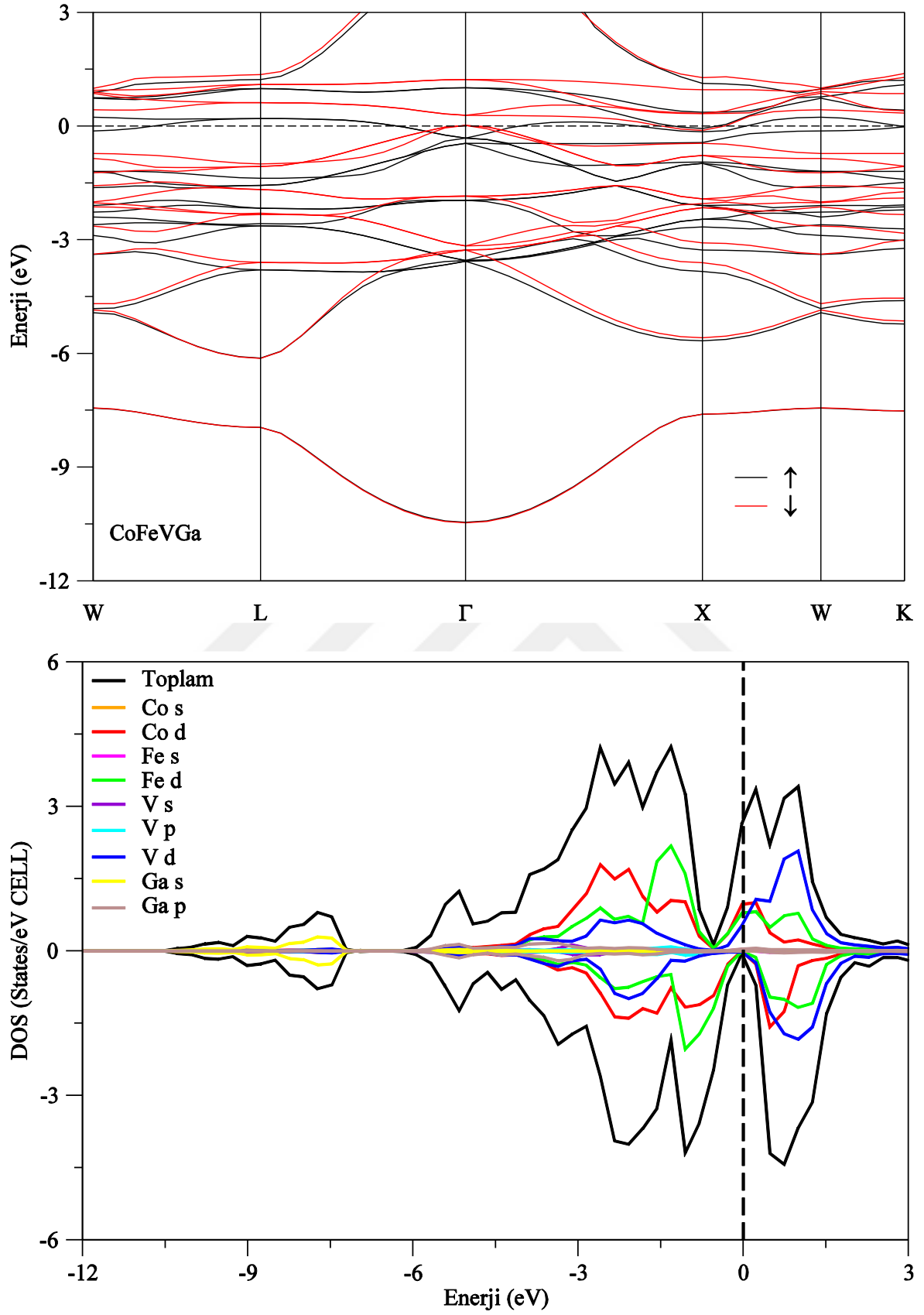
Şekil 4.10. CoFeTiAs dörtlü Heusler alaşımının elektronik bant, kısmi ve toplam durum yoğunluğu eğrileri



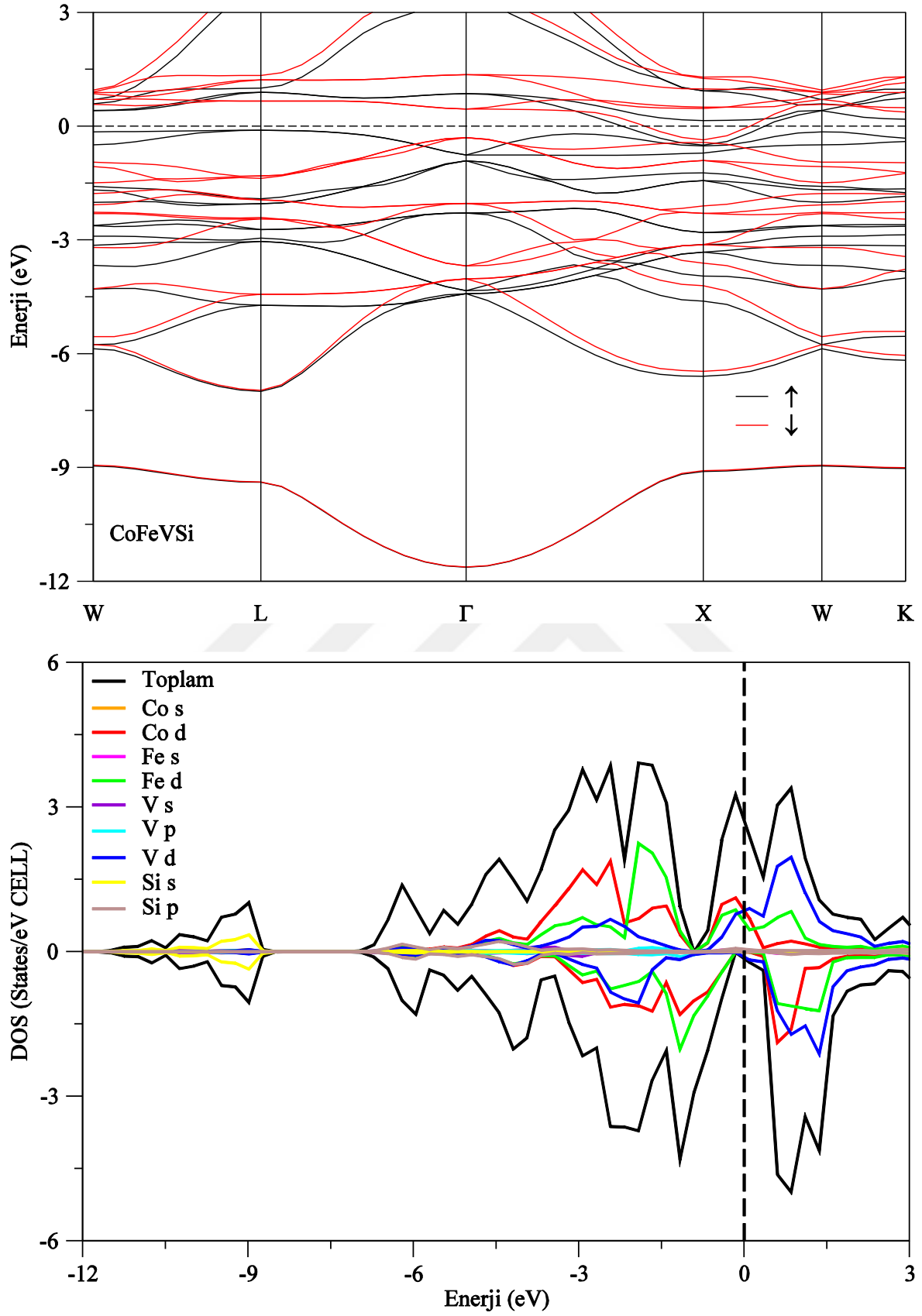
Şekil 4.11. CoFeTiSb dörü Heusler alaşımlının elektronik bant, kısmi ve toplam durum yoğunluğu eğrileri



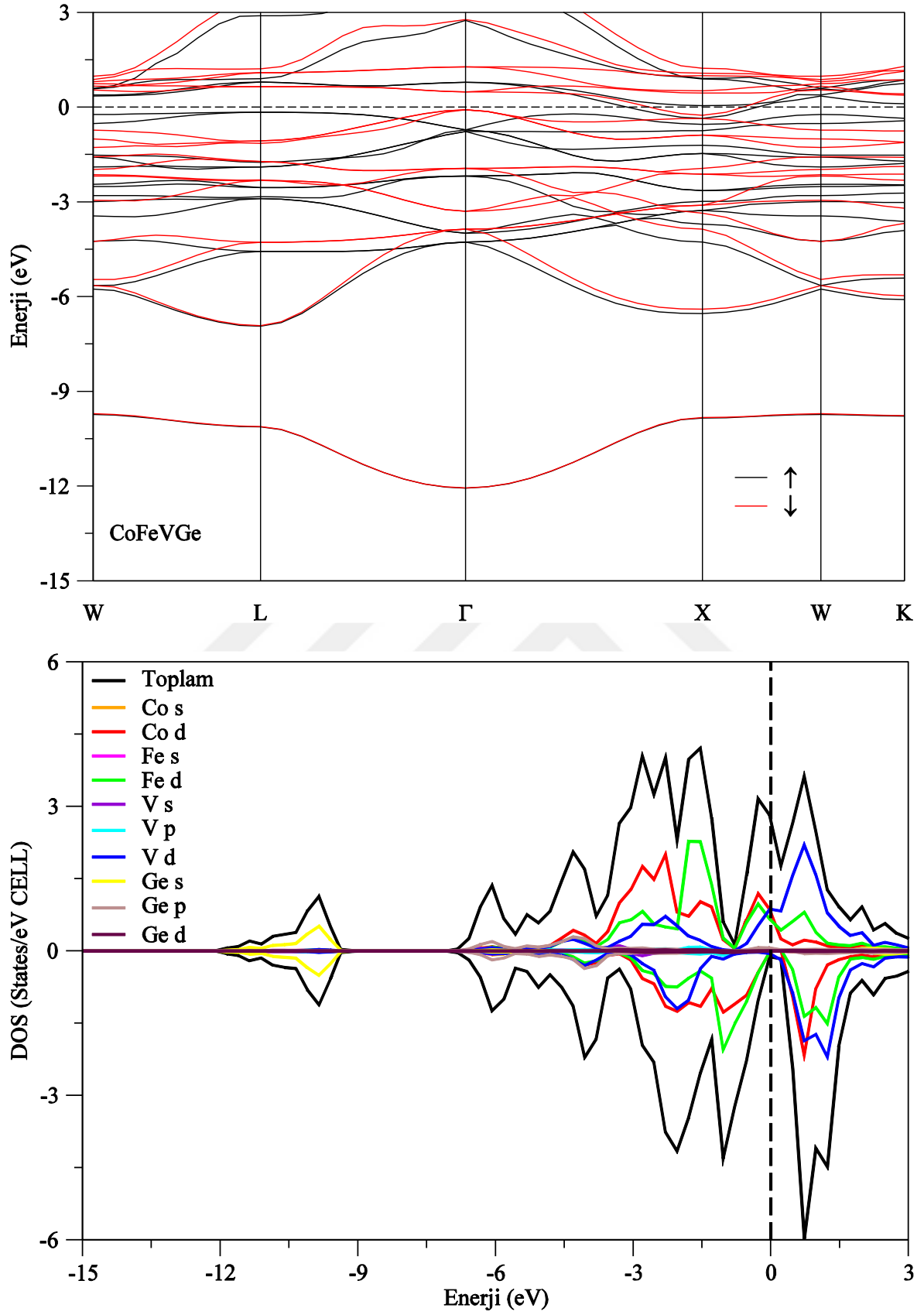
Şekil 4.12. CoFeVAI dörtlü Heusler alaşımının elektronik bant, kısmi ve toplam durum yoğunluğu eğrileri



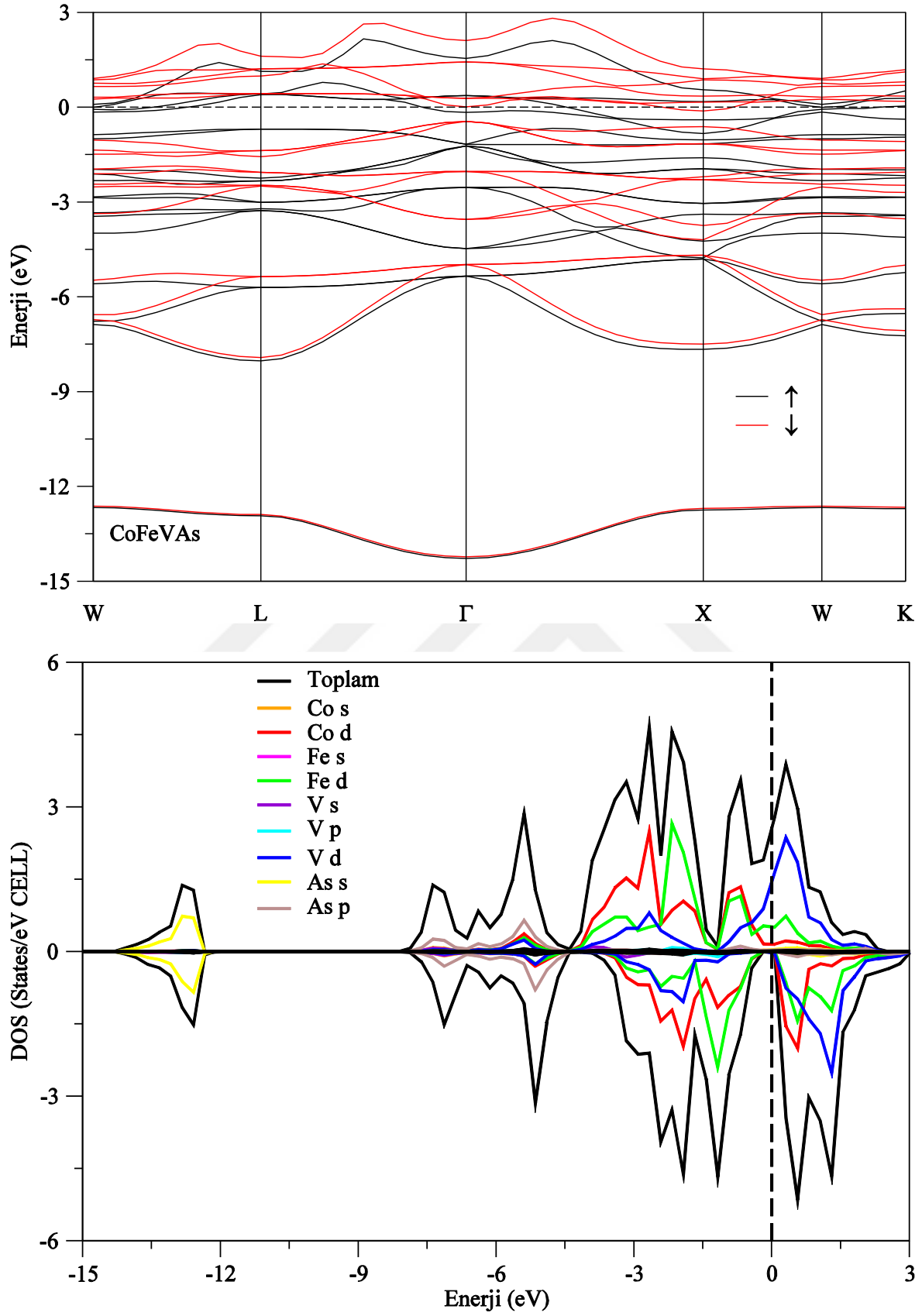
Şekil 4.13. CoFeVGa dörü Heusler alaşımlının elektronik bant, kısmi ve toplam durum yoğunluğu eğrileri



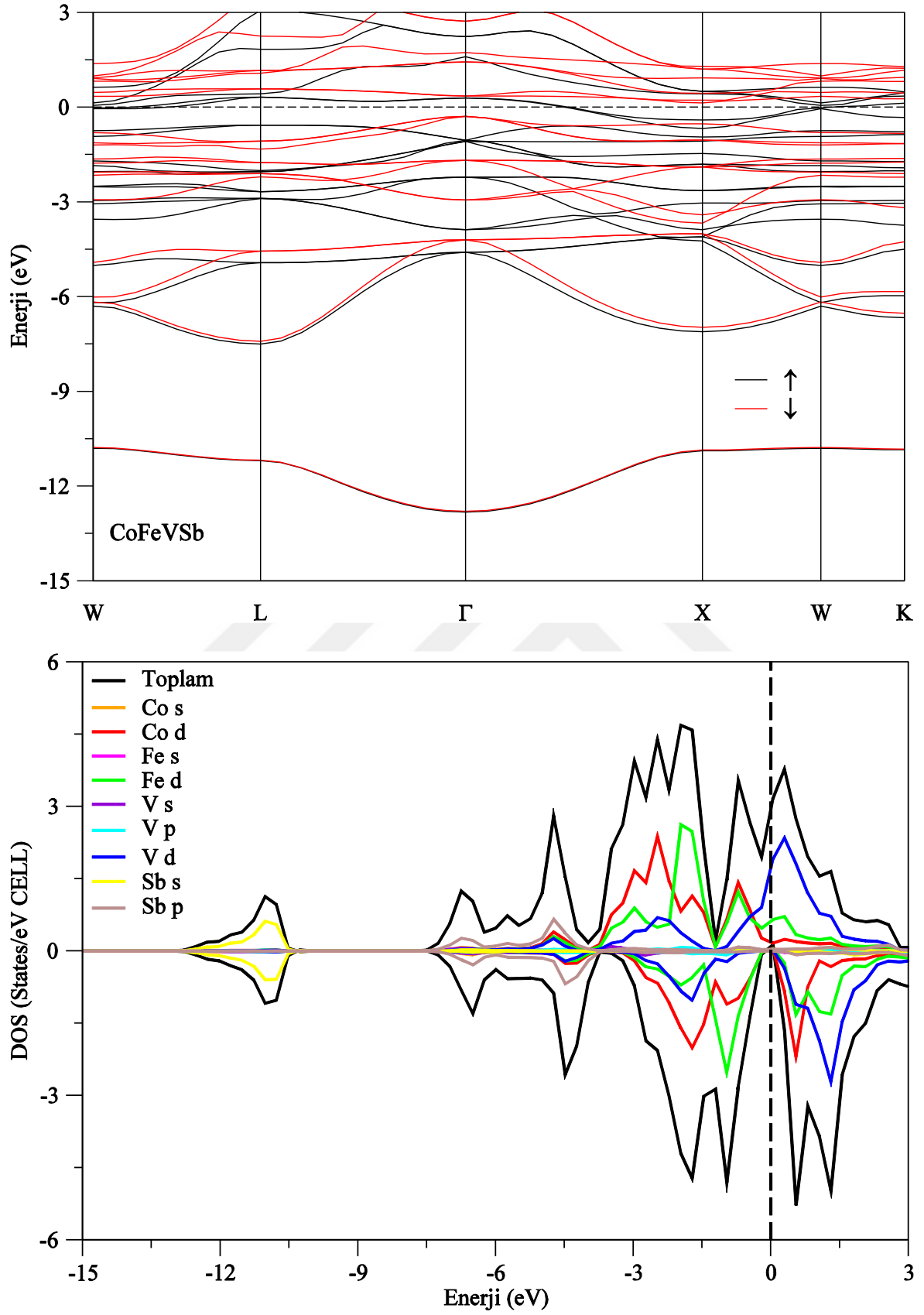
Şekil 4.14. CoFeVSi dörtlü Heusler alaışımının elektronik bant, kısmi ve toplam durum yoğunluğu eğrileri



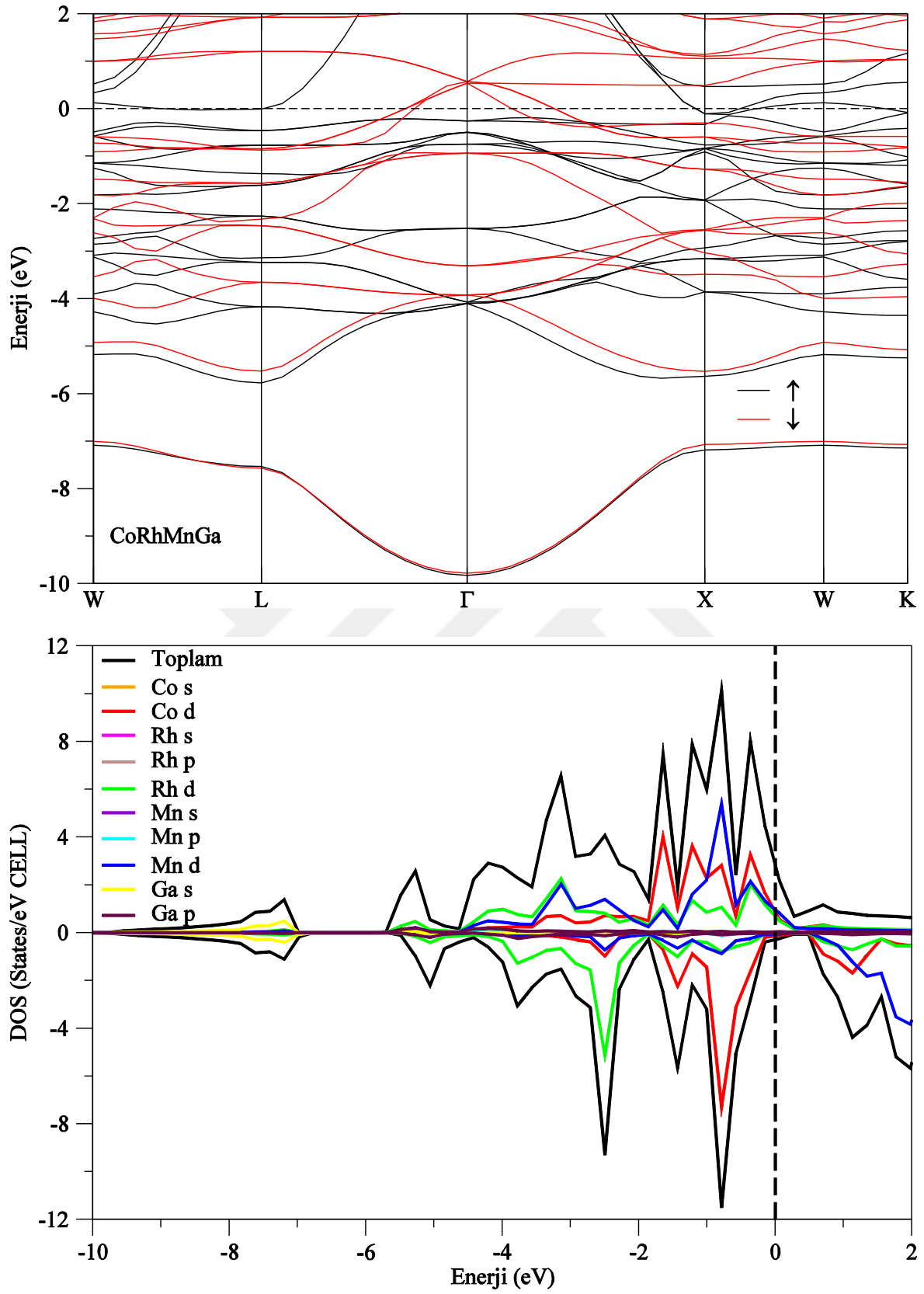
Şekil 4.15. CoFeVGe dörü Heusler alaşımlının elektronik bant, kısmi ve toplam durum yoğunluğu eğrileri



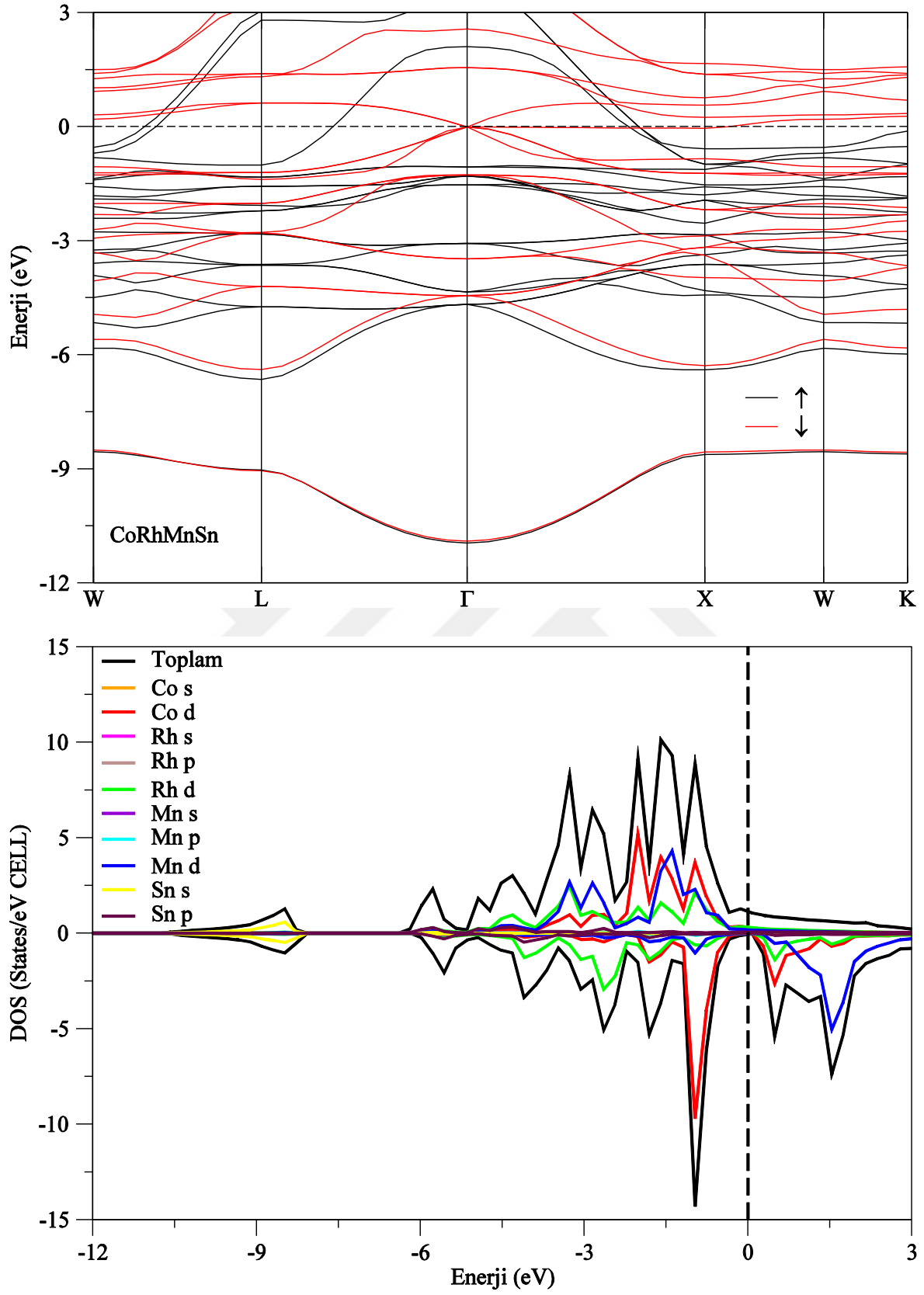
Şekil 4.16. CoFeVAs dörü Heusler alařımının elektronik bant, kısmi ve toplam durum yoğunluęu eğrileri



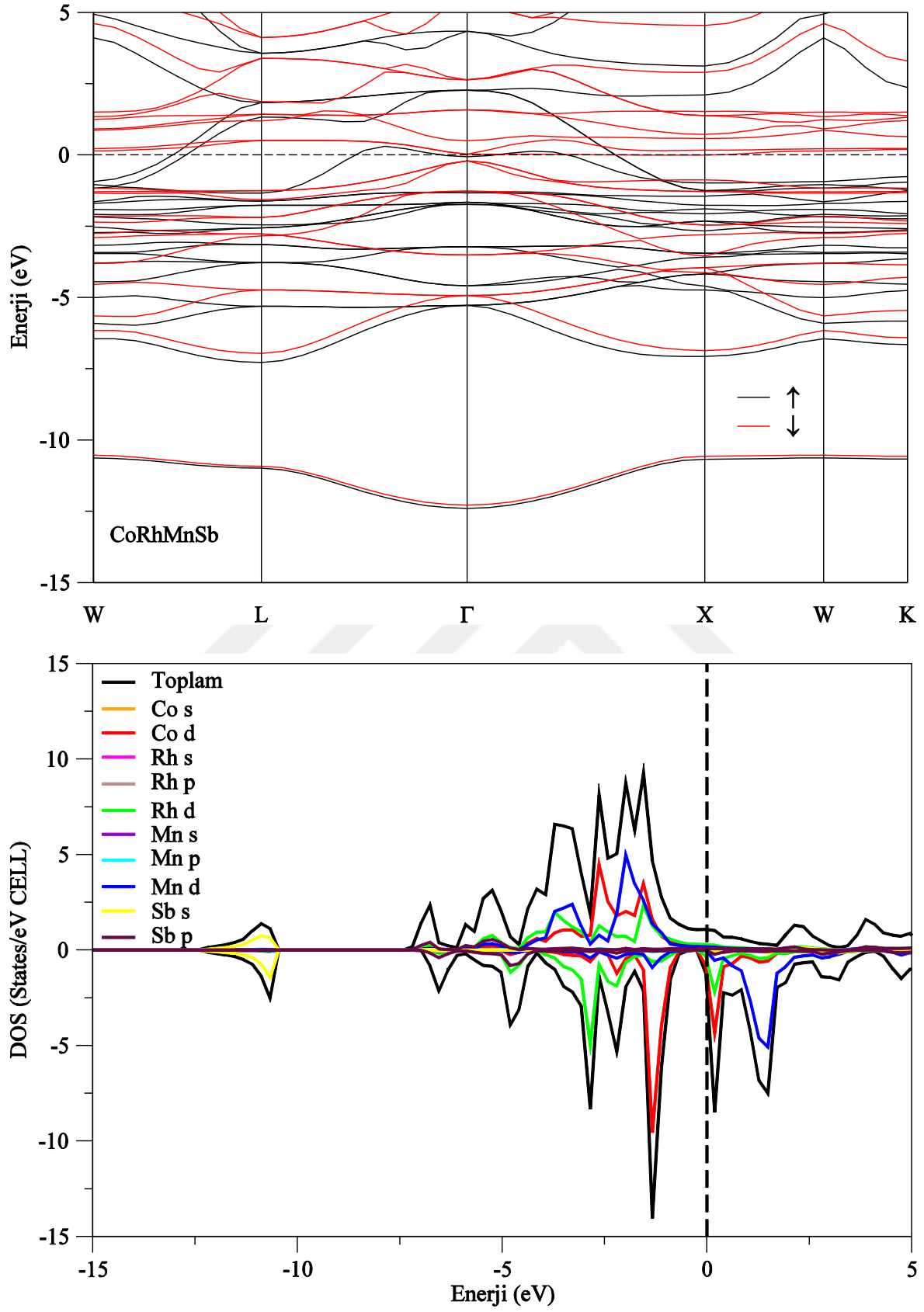
Şekil 4.17. CoFeVSb dörtlü Heusler alaşımlarının elektronik bant, kısmi ve toplam durum yoğunluğu eğrileri



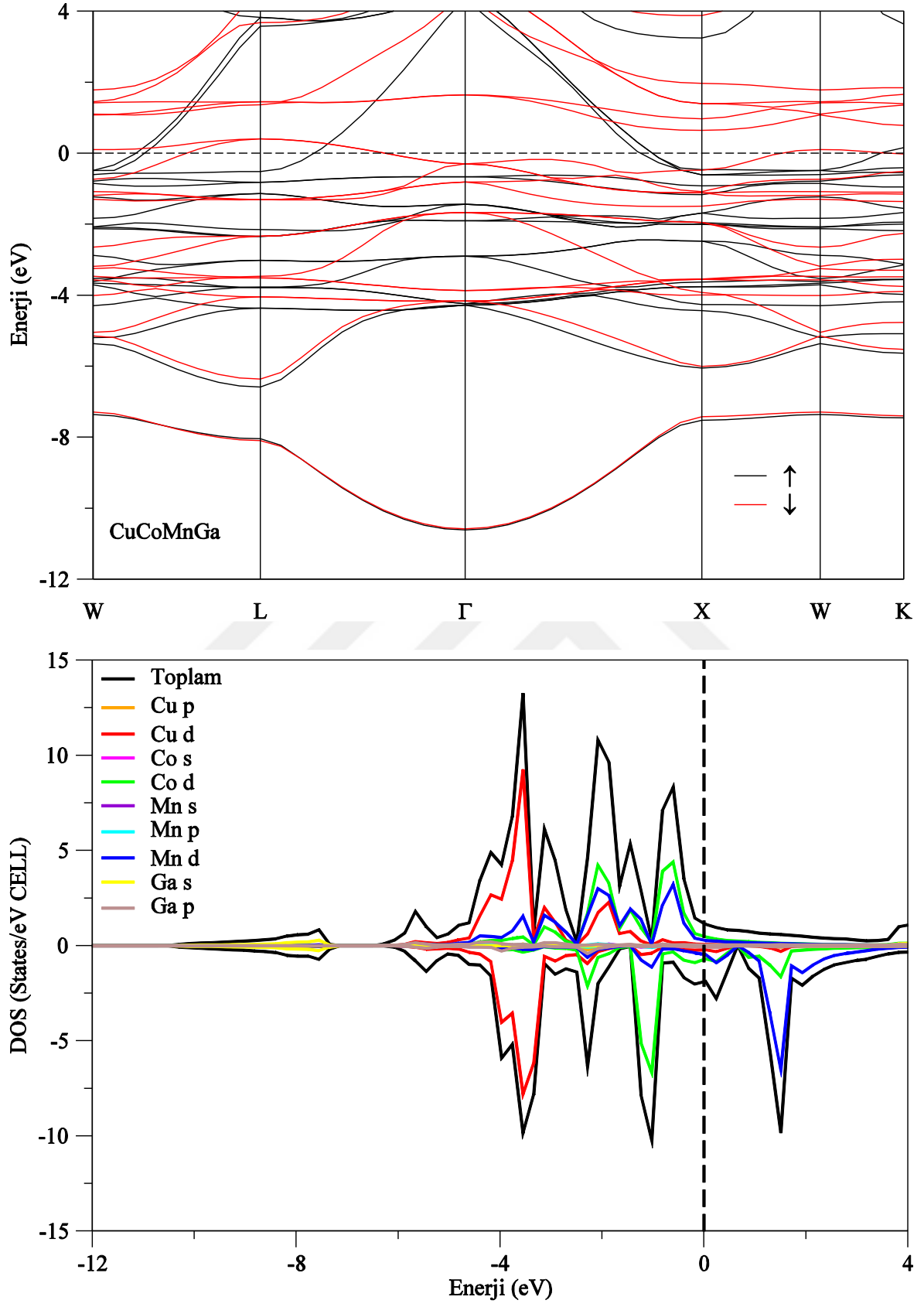
Şekil 4.18. CoRhMnGa dörü Heusler alaşımlının elektronik bant, kısmi ve toplam durum yoğunluğu eğrileri



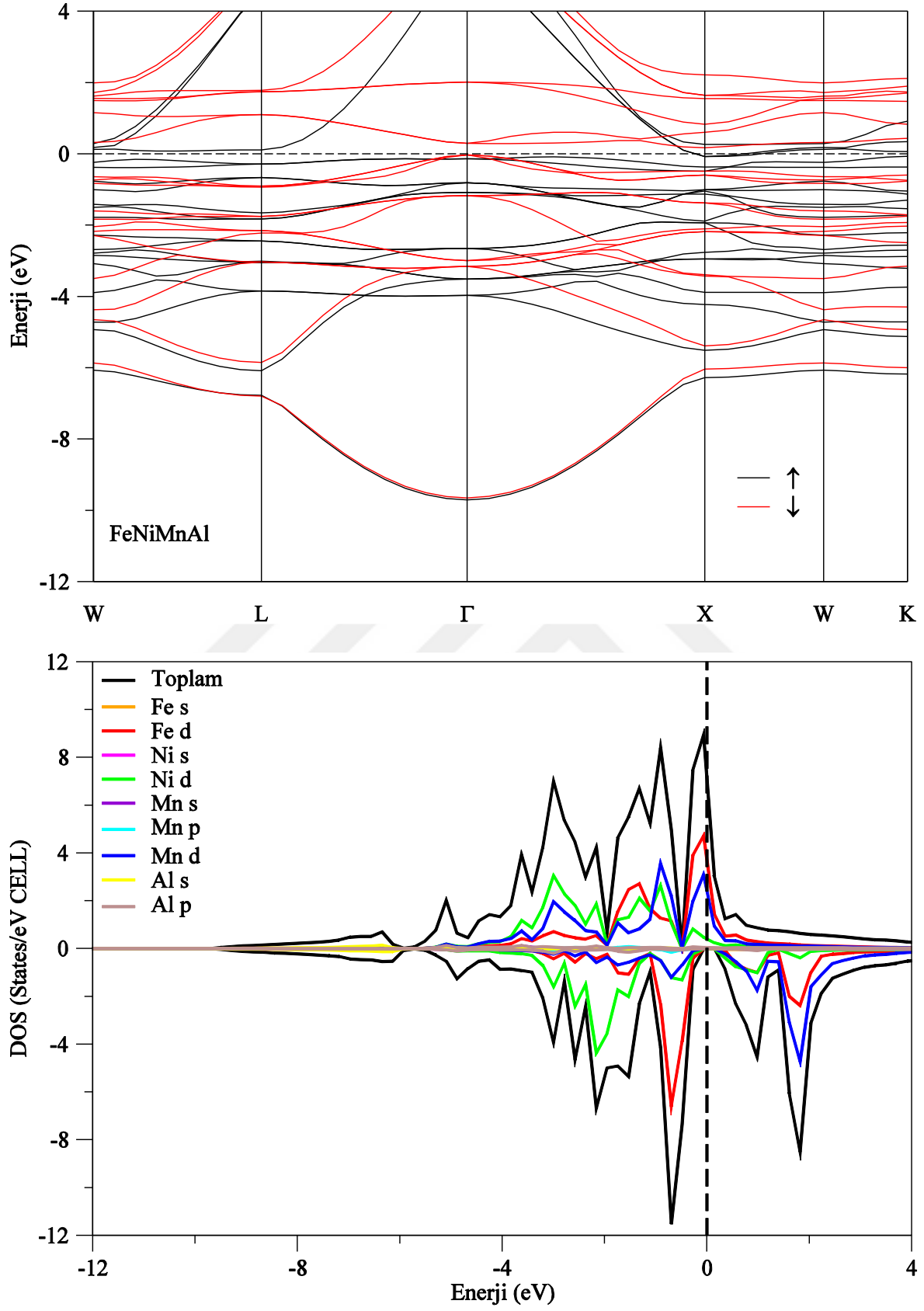
Şekil 4.19. CoRhMnSn dörtlü Heusler alaşımının elektronik bant, kısmi ve toplam durum yoğunluğu eğrileri



Şekil 4.20. CoRhMnSb dörü Heusler alaşımlının elektronik bant, kısmi ve toplam durum yoğunluğu eğrileri



Şekil 4.21. CuCoMnGa dörtlü Heusler alaşımının elektronik bant, kısmi ve toplam durum yoğunluğu eğrileri



Şekil 4.22. FeNiMnAl dörtlü Heusler alaşımının elektronik bant, kısmi ve toplam durum yoğunluğu eğrileri

4.3. İncelenen Dörtlü Heusler Alaşımlarının Elastik Özellikleri

Elastik sabitler katı bir malzeme için önemli parametreleridir. Genellikle yapısal ve mekanik kararlılıkla ilgili önemli bilgiler içermektedir. Ayrıca bunların yanı sıra katıların elastik özellikleri Debye sıcaklığı, erime noktası, özgül ısı, ısı genleşme katsayısı gibi fiziksel özellikler ile yakından bağlantılıdır. LiMgPdSn-tipi kristal yapısındaki F-43m kristal simetrisine sahip dörtlü Heusler alaşımları kübik yapıda olduklarından C_{11} , C_{12} ve C_{44} gibi üç tane bağımsız ikinci mertebeden elastik sabiti vardır. MedeA paket programının içerisinde yer alan MT modülü tarafından VASP kodları ile CoFeCrX (X=Al, Si, Ga ve Ge), CoFeTiY (Y=Al, Ga, Si, Ge, As ve Sb), CoFeVY (Y=Al, Ga, Si, Ge, As ve Sb), CoRhMnZ (Z=Ga, Sn ve Sb), CuCoMnGa ve FeNiMnAl dörtlü Heusler alaşımlarının elastik özellikleri hesaplandı. C_{11} , C_{12} ve C_{44} elastik sabitleri hesaplanırken Bölüm 3’de yer alan Eş. 3.2’deki matris gösterimi, Eş. 3.3 ve Eş. 3.4’deki denklemler kullanıldı. Bunların yanı sıra, Bulk modülü (B), Kayma modülü (G), Young modülü (E) ve ses hızları için yine Bölüm 3’de yer alan eşitlikler (Eş. 3.2-3.3-3.4-3.5-3.6-3.7-3.8-3.9-3.10-3.12) kullanıldı. Hesaplanan elastik sabitleri (C_{11} , C_{12} ve C_{44}) Çizelge 4.6’da, Bulk modülü (B), Kayma modülü (G), Young modülü (E) ve Bulk modülünün Kayma modülüne oranı (B/G) Çizelge 4.7’de, ses hızları ise Çizelge 4.8’de verildi.

Kübik kristaller için mekanik kararlılık şartlarını oluşturan Born kararlılık ilkeleri elastik sabitler için;

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

şeklindedir [112]. Bu kararlılık şartları göz önüne alındığında elastik özellikleri hesaplanan bu dörtlü Heusler alaşımlarının mekanik olarak kararlı bir yapıda olduğu Çizelge 4.6’dan anlaşılmaktadır. Ayrıca bu alaşımların elastik sabitleri incelendiğinde C_{11} değerlerinin CoFeTiY (Y=Al, Ga, Si, Ge, As ve Sb) grubunda, C_{12} ve C_{44} değerlerinin ise CoFeVY (Y=Al, Ga, Si, Ge, As ve Sb) grubunda en yüksek değerde olduğu görülmektedir. Literatürde yer alan çalışmalar ile karşılaştırıldığında ise, Alijani ve ark. [41] FPLAPW metodu kullanarak yapmış oldukları çalışmada CoRhMnZ (Z=Ga, Sn ve Sb) alaşımlarının elastik sabitlerini elde etmişler ve Born kararlılık şartlarını sağladığını ve mekanik olarak kararlı yapıda olduklarını göstermişlerdir. Fakat Alijani ve ark. [42] aynı metot ile elastik sabitlerini hesapladıkları CuCoMnGa alaşımlarının mekanik olarak kararsız olduğunu bildirmişler.

Yapılan bu çalışmada ise CuCoMnGa alaşımlarının mekanik olarak kararlı olduğunu görülmektedir. Bundan dolayı bu çalışmadaki CuCoMnGa alaşımlarının elastik sabitlerinin daha iyi bir sonuçta olduğunu söylenebilir.

Çizelge 4.6. İncelenen dörtlü Heusler alaşımlarının ikinci dereceden elastik sabitleri (C_{11} , C_{12} ve C_{44} ; GPa)

Malzemeler	Referanslar	C_{11}	C_{12}	C_{44}
CoFeCrAl	Bu Çalışma	252,76	165,58	141,11
CoFeCrSi	Bu Çalışma	273,74	228,81	145,46
CoFeCrGa	Bu Çalışma	215,63	158,68	134,8
CoFeCrGe	Bu Çalışma	193,55	192,36	120,36
CoFeTiAl	Bu Çalışma	403,95	148,47	124,57
CoFeTiGa	Bu Çalışma	333,20	125,88	113,61
CoFeTiSi	Bu Çalışma	305,54	171,21	127,13
CoFeTiGe	Bu Çalışma	245,26	176,21	105,54
CoFeTiAs	Bu Çalışma	232,96	165,97	77,72
CoFeTiSb	Bu Çalışma	241,75	134,98	92,07
CoFeVAl	Bu Çalışma	297,80	201,74	126,84
CoFeVGa	Bu Çalışma	233,86	194,74	118,09
CoFeVSi	Bu Çalışma	296,93	198,98	131,69
CoFeVGe	Bu Çalışma	258,72	186,20	109,06
CoFeVAs	Bu Çalışma	211,85	152,41	80,29
CoFeVSb	Bu Çalışma	244,66	159,63	100,96
CoRhMnGa	Bu Çalışma FPLAPW [41]	282,49 300	155,66 135	131,37 146
CoRhMnSn	Bu Çalışma FPLAPW [41]	203,04 369	171,00 88	97,80 173
CoRhMnSb	Bu Çalışma FPLAPW [41]	206,91 296	129,13 89	82,20 217
CuCoMnGa	Bu Çalışma FPLAPW [42]	160,38 65	159,95 184	115,87 153
FeNiMnAl	Bu Çalışma	247,06	141,80	153,20

Pugh'un B/G oranı kriteri [99] malzemelerin kırılğan (sünek) doğası hakkında bilgi sağlamak için yaygın olarak kullanılan kriterlerden biridir. Bu kritere göre, B/G oranı sertlik için önemli bir kriterdir ve bu değer 1,75'den küçükse malzeme kırılğan, büyük ise sünek olduğu söylenir. Bu alaşımlar için hesaplanan B/G oranlarının (bkz. Çizelge 4.7) 1,75 sınırından FeNiMnAl alaşımı küçük olduğu için kırılğan diğer alaşımlar ise büyük olduğu için sünek oldukları söylenebilir. Süneklik açısından bu alaşımların içerisinde CoFeCrGe alaşımının en sünek olduğu da görülmektedir. Aynı zamanda CoFeCrGe alaşımından sonra sırasıyla CoRhMnSn, CoFeVGa, CoFeCrSi, CoFeTiAs ve CoFeVAs alaşımlarında sünekliklerinin diğerlerine göre fazla oldukları da söylenebilir. Ayrıca sertliğin bir göstergesi olan Young modülü değerine bakıldığında en yüksek CoFeTiAl (320,03 GPa), en düşüğün ise CoFeCrGe (98,80 GPa) olduğu görülmektedir. Malzeme ne kadar sert ise Young modülü o kadar yüksektir. CoFeTiY (Y=Al, Ga, Si, Ge, As ve Sb) alaşımlarının Çizelge 4.7'den Young modüllerinin en yüksek olan grup olduğu görülmektedir. Bunların yanı sıra, bu alaşımların Bulk modüllerinin 100 GPa değerinden yüksek olmaları ve kayma modülü değerlerinden de bu alaşımların az sıkışabilir oldukları söylenebilir. Ayrıca Bölüm 3'te yer alan Eş. 3.11'den yararlanılarak bu malzemelerin Poisson's oranları (bkz. Çizelge 4.7) hesaplandı. Genel olarak, kovalentliğin bir ölçüsü olan Poisson's oranı incelendiğinde; kovalent malzemeler için 0,1'e yakın, iyonik malzemeler için ise 0,25'e yakın değerlerdedir ve merkezi kuvvetler için alt ve üst limit değerleri sırasıyla 0,25 ve 0,5'dir. [99,113]. Bundan dolayı bu alaşımların iyonik karakterinde oldukları Poisson's oranlarından (0,24 – 0,41) anlaşılmaktadır. Bu alaşımlar arasında iyonik karakterin en baskın olduğu alaşım CoFeCrGe'dur.

Katı bir malzeme içerisindeki ses hızları malzemenin elastik, dinamik ve termodinamik özellikleriyle yakından ilgilidir. Ayrıca ses hızları, katı malzemeyi tanımlayan bir özelliktir. Örneğin, birim hücreinde bir atom bulunan bir kristalin 3N serbestlik derecesin dolayı sadece 3 tane akustik fonon modları elde edilir. Buradaki akustik modlar ise kristal içinde yayılan ses dalgalarının frekansını verir [106]. Elastik özellikleri incelenen bu dörtlü Heusler alaşımlarının Bulk ve Kayma modüllerinden yararlanılarak MT modülü tarafından Bölüm 3'de yer alan Eş. 3.12 kullanılarak hesaplandı ve Çizelge 4.8'de verildi. Elde edilen ses hızları incelendiğinde ortalama ses hızlarının Young ve kayma modülleri en yüksek olan CoFeTiAl alaşımında en yüksek ses hızına sahip olduğu, yine Young ve kayma modülleri en düşük olan CoFeCrGe alaşımında en düşük ortalama ses hızına sahip olduğu görülmektedir.

Çizelge 4.7. İncelenen dörtlü Heusler alaşımlarının Bulk modülü (B , GPa), Kayma (Shear) modülü (G , GPa), Bulk modülünün Kayma modülüne oranı (B/G) ve Young modülü (E , GPa), Poisson's oranı (σ)

Malzemeler	Referanslar	B	G	B/G	E	σ
CoFeCrAl	Bu Çalışma	194,64	88,28	2,20	229,42	0,30
CoFeCrSi	Bu Çalışma	243,79	70,93	3,44	191,99	0,37
CoFeCrGa	Bu Çalışma	177,66	73,17	2,43	191,6	0,32
CoFeCrGe	Bu Çalışma	192,75	36,97	5,21	98,80	0,41
CoFeTiAl	Bu Çalışma	233,63	125,83	1,86	320,03	0,27
CoFeTiGa	Bu Çalışma	194,99	109,52	1,78	276,74	0,26
CoFeTiSi	Bu Çalışma	215,99	98,41	2,19	256,24	0,30
CoFeTiGe	Bu Çalışma	199,22	67,52	2,95	181,66	0,35
CoFeTiAs	Bu Çalışma	188,30	55,44	3,40	151,38	0,37
CoFeTiSb	Bu Çalışma	170,57	73,99	2,31	193,90	0,31
CoFeVAl	Bu Çalışma	233,76	85,95	2,72	229,43	0,34
CoFeVGa	Bu Çalışma	207,78	58,92	3,53	160,07	0,37
CoFeVSi	Bu Çalışma	231,63	88,60	2,61	235,44	0,33
CoFeVGe	Bu Çalışma	210,37	70,21	3,00	189,22	0,35
CoFeVAs	Bu Çalışma	172,23	53,92	3,19	146,30	0,36
CoFeVSb	Bu Çalışma	187,97	71,36	2,63	189,89	0,33
CoRhMnGa	Bu Çalışma	197,93	98,07	2,02	252,39	0,29
CoRhMnSn	Bu Çalışma	181,68	48,62	3,74	132,75	0,38
CoRhMnSb	Bu Çalışma	155,06	60,87	2,55	161,42	0,33
CuCoMnGa	Bu Çalışma	158,09	70,21	2,25	183,46	0,31
FeNiMnAl	Bu Çalışma	176,89	112,97	1,57	279,43	0,24

Çizelge 4.8. İncelenen dörtlü Heusler alaşımlarının ses hızları (m/s)

Malzemeler	v_t	v_l	v_m
CoFeCrAl	3561	6699	3980
CoFeCrSi	3112	6797	3507
CoFeCrGa	2957	5736	3311
CoFeCrGe	2085	5335	2363
CoFeTiAl	4418	7892	4918
CoFeTiGa	3728	6578	4145
CoFeTiSi	3812	7160	4259
CoFeTiGe	2914	6032	3276
CoFeTiAs	2644	5749	2979
CoFeTiSb	2963	5653	3315
CoFeVAl	3554	7154	3988
CoFeVGa	2670	5887	3011
CoFeVSi	3525	7004	3953
CoFeVGe	2906	6046	3267
CoFeVAs	2547	5419	2867
CoFeVSb	2844	5665	3190
CoRhMnGa	3258	5965	3634
CoRhMnSn	2261	5092	2552
CoRhMnSb	2543	5009	2850
CuCoMnGa	2109	4984	2385
FeNiMnAl	3779	6657	4201

4.4. İncelenen Dörtlü Heusler Alaşımlarının Titreşim Özellikleri

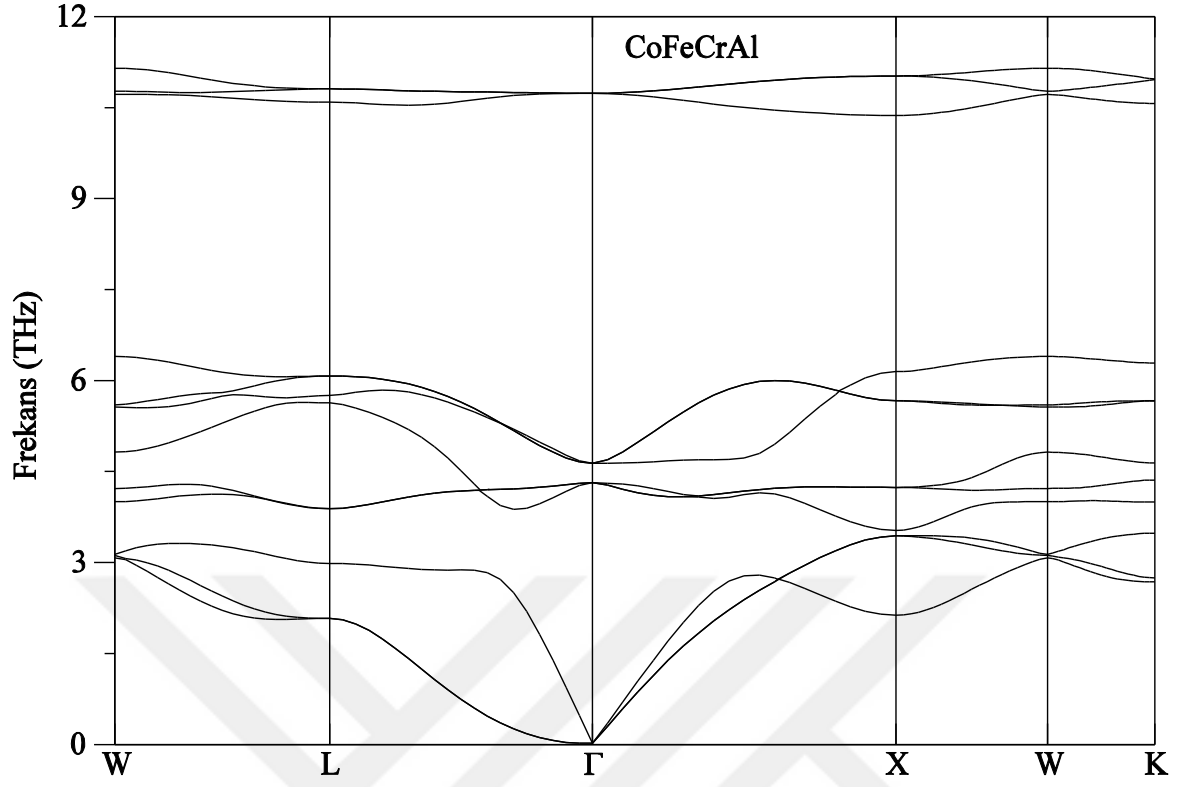
LiMgPdSn-tipi kristal yapısındaki F-43m kristal simetrisinde bulunan, bu tez çalışmasındaki dörtlü Heusler alaşımları için fonon dispersiyon eğrileri, MedeA paket programının içerisinde bulunan VASP program paketinden elde edilen kuvvetler ile “doğrudan-metot” (direk-metot) kullanarak PHONON programı yardımıyla hesaplandı. Hesaplamalar, PHONON programında LiMgPdSn-tipi kristal yapısındaki F-43m kristal simetrisinde 4096 atom içeren 2x2x2’lik süper hücre kurularak yapıldı. Hesaplamalardan elde edilen sonuçlar neticesinde bu alaşımlara ait Çizelge 4.9’da Γ temel simetri ekseninde yer alan Brillouin bölgesinin merkezindeki optik fonon frekansları verildi. Aynı zamanda Çizelge 4.9’da verilen Brillouin bölgesinin merkezindeki frekanslarda bu alaşımların tamamının hem Raman hem de IR aktif moda sahip oldukları yapılan hesaplamalarda görüldü. Ayrıca temel simetri yönleri boyunca fonon dispersiyon eğrileri çizilerek CoFeCrX (X=Al, Si, Ga ve Ge) alaşımları için Şekil 4.23 - 4.24 - 4.25 - 4.26’da, CoFeTiY (Y=Al, Ga, Si, Ge, As ve Sb) alaşımları için Şekil 4.27 - 4.28 - 4.29 - 4.30 - 4.31 - 4.32’de, CoFeVY (Y=Al, Ga, Ge, As ve Sb) alaşımları için Şekil 4.33 - 4.34 - 4.35 - 4.36 - 4.37’de, CoRhMnZ (Z=Ga, Sn ve Sb) alaşımları için Şekil 4.38 - 4.39 - 4.40’da, CuCoMnGa alaşımı için Şekil 4.41’de ve FeNiMnAl alaşımları için Şekil 4.42’de sırasıyla verildi.

3N serbestlik derecesinden dolayı birim hücresinde 4 atom bulunan F-43m kristal simetrisine sahip kübik yapıdaki dörtlü Heusler alaşımlarının 3’ü akustik 9’u optik olmak üzere toplam 12 fonon dalı bulunmaktadır. CoFeCrX (X=Al, Si, Ga ve Ge), CoRhMnZ (Z=Ga, Sn ve Sb) CuCoMnGa ve FeNiMnAl alaşımları L- Γ -X temel simetri eksenleri boyunca sırasıyla Şekil 4.23 - 4.24 - 4.25 - 4.26 - 4.38 - 4.39 - 4.40 - 4.41 - 4.41’de, CoFeTiY (Y=Al, Ga, Si, Ge, As ve Sb) ve CoFeVY (Y=Al, Ga, Ge, As ve Sb) alaşımları ise L- Γ temel simetri eksenleri boyunca sırasıyla Şekil 4.27 - 4.28 - 4.29 - 4.30 - 4.31 - 4.32 - 4.33 - 4.34 - 4.35 - 4.36 - 4.37 fonon modlarının ikili dejenerelik durumundan dolayı 8’e düştüğü açıkça görülmektedir. F-43m kristal simetrisi için İncelenen CoFeCrGa alaşımında (bkz. Şekil 4.25) L- Γ temel simetri eksenleri arasında enine akustik (TA) modlarının ve CoFeCrSi alaşımında (bkz. Şekil 4.24) ise tüm temel simetri eksenleri boyunca fonon dispersiyon eğrilerinin beklendiği gibi çıkmayıp negatif değer vermiştir. Ayrıca, CuCoMnGa alaşımı hem 0 GPa (bkz. Şekil 4.41. a) (basınç uygulamadan) hem de 0,2 GPa basınç altında (bkz. Şekil 4.41.b) fonon dispersiyon eğrileri incelendi. Fakat CuCoMnGa alaşımına basınç

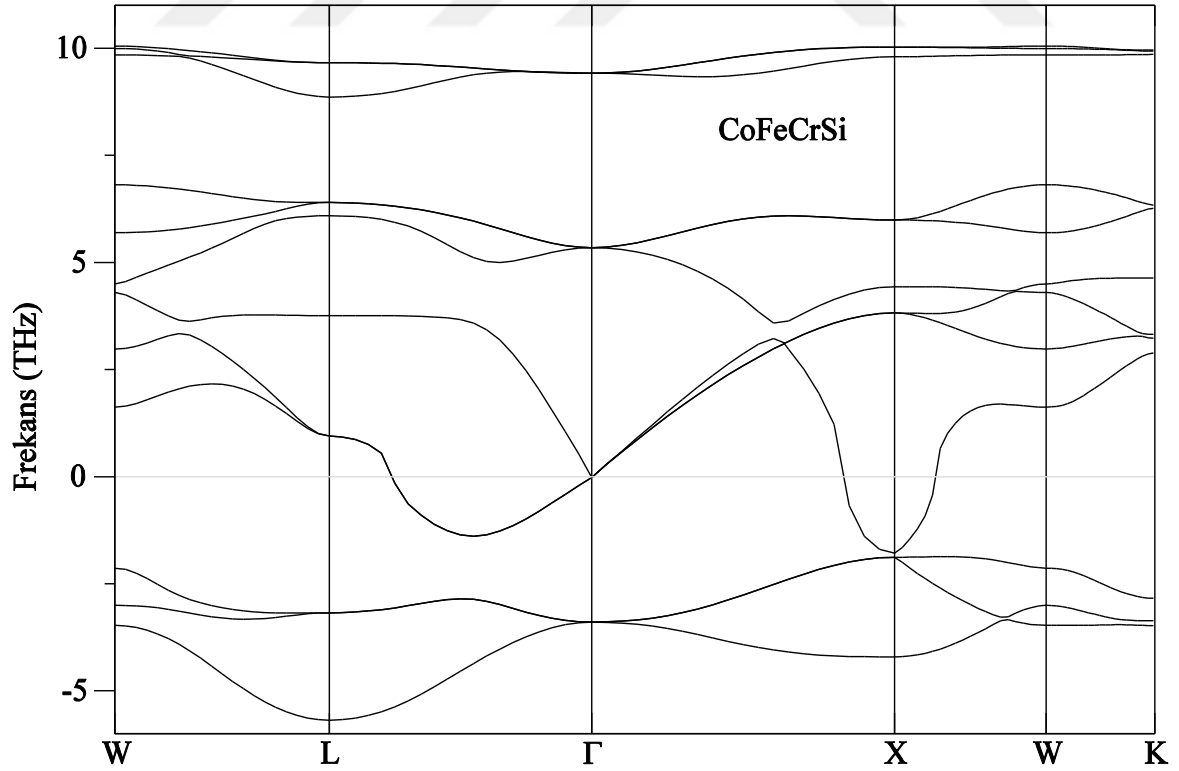
uygulamadan fonon dispersiyon eğrileri L- Γ temel simetri eksenleri arası dışında kalan tüm temel simetri eksenleri boyunca akustik fonon modları negatif değerde çıktığı Şekil 4.41.a'da görülmektedir. Bundan dolayı F-43m kristal simetrisindeki CoFeCrGa ve CoFeCrSi alaşımları ve basınç uygulanmayan CuCoMnGa alaşımının dinamiksel olarak kararsız oldukları söylenebilir. Bunun yanı sıra, birim hücreesine 0,2 GPa basınç uygulanarak İncelenen CuCoMnGa alaşımının fonon dispersiyon eğrileri F-43m kristal simetrisi için pozitif değerde çıkmıştır (bkz. Şekil 4.41.b). Aynı zamanda, CoFeCrAl alaşımı için enine akustik modda (TA) L- Γ temel simetri eksenleri arasında hafif bir yumuşama olduğu da Şekil 4.23'de görülmektedir. Buna rağmen CoFeCrAl alaşımının tüm fonon modlarının pozitif değerde beklendiği gibi çıkmıştır. Bunların yanı sıra, fonon dispersiyon eğrileri çizilen diğer alaşımlar LiMgPdSn-tipi kristal yapısındaki F-43m kristal simetrisinde fonon dispersiyon eğrileri tüm temel simetri eksenleri boyunca pozitif değerde çıktığı şekillerden görülmektedir. Dolayısıyla, CoFeCrGa, CoFeCrSi ve CuCoMnGa (basınç uygulanmadan) alaşımları haricindeki tüm İncelenen alaşımlar dinamiksel olarak kararlı oldukları söylenebilir. CoFeCrAl, CoFeTiAl, CoFeTiSi, CoFeVAl, CoFeVSb, CoRhMnGa, CoRhMnSb ve FeNiMnAl alaşımları için optik fonon modları arasında bir bant aralığı olduğu şekillerden açıkça görülmektedir. Bu bant aralığının alaşımları oluşturan atomlar arasındaki kütle farkından kaynaklandığı söylenebilir. Dolayısıyla düşük kütleli atomlar daha yüksek frekanslarda titreşmekte iken kütlesi daha yüksek olan atomlar ise daha düşük frekanslarda titreşmektedir. Ayrıca CoFeCrAl ve CoFeCrGe alaşımları W temel simetri eksenini üzerinde en yüksek frekansta titreşmekte iken diğer alaşımlar ise X temel simetri eksenini üzerinde en yüksek frekansta titreşmektedir. Fakat bu alaşımların deneysel ve teorik sonuçlarına literatürde rastlanmadığından daha fazla araştırılması gerekebilir.

Çizelge 4.9. İncelenen dörtlü Heusler alaşımlarının Γ temel simetri eksenini üzerinde yer alan Brillouin bölgesinin merkezindeki optik fonon frekansları (THz)

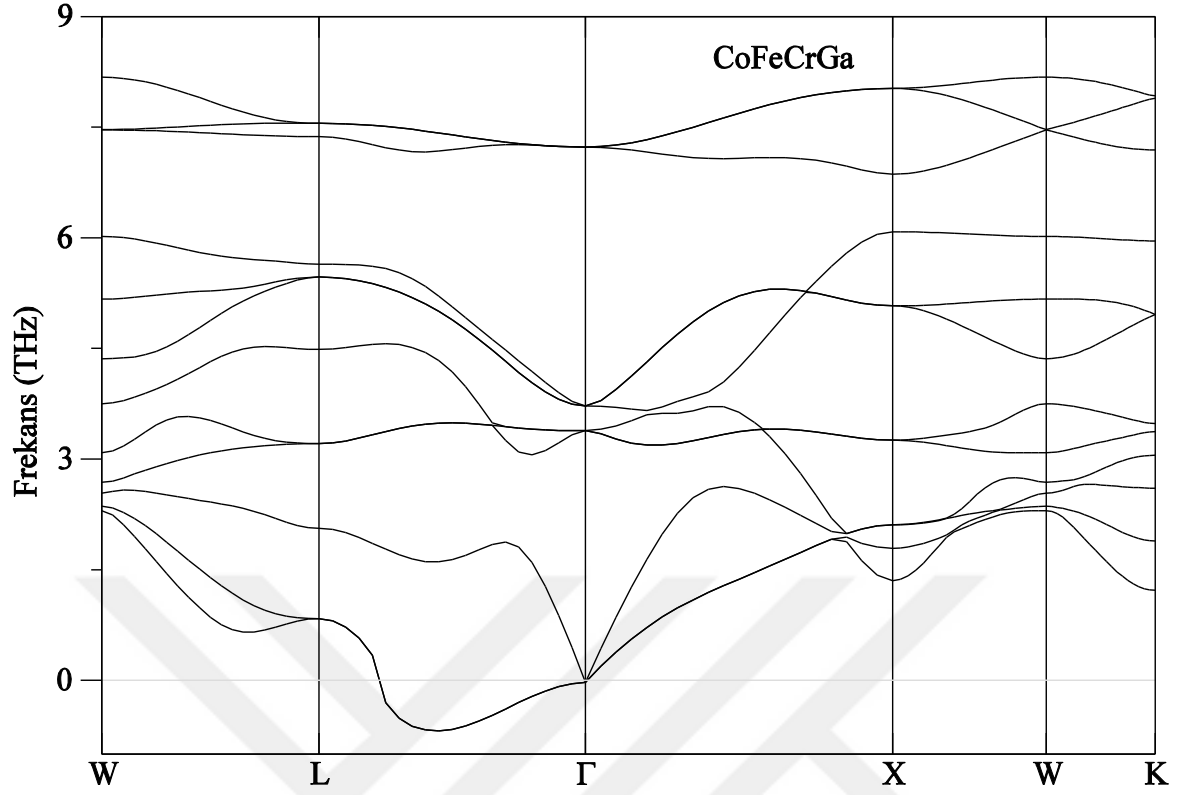
Malzemeler	Optik Fonon Frekansları	Malzemeler	Optik Fonon Frekansları
CoFeCrAl	4,314; 4,634; 10,733	CoFeVGa	6,334; 6,760; 7,440
CoFeCrSi	Negatif	CoFeVGe	5,521; 6,502; 7,023
CoFeCrGa	3,386; 3,723; 7,232	CoFeVAs	5,903; 6,467; 6,592
CoFeCrGe	6,548; 6,787; 7,434	CoFeVSb	5,652; 6,057; 6,458
CoFeTiAl	8,069; 8,242; 10,441	CoRhMnGa	5,837; 6,328; 7,035
CoFeTiGa	7,100; 7,817; 8,053	CoRhMnSn	5,195; 5,738; 6,422
CoFeTiSi	7,245; 8,213; 9,651	CoRhMnSb	4,376; 5,165; 5,971
CoFeTiGe	6,583; 6,721; 7,696	CuCoMnGa (0 GPa)	4,26; 5,73; 6,61
CoFeTiAs	5,554; 6,358; 6,910	CuCoMnGa (0,2 GPa)	5,05; 5,99; 7,41
CoFeTiSb	5,626; 6,200; 6,322	FeNiMnAl	6,52; 7,29; 10,12
CoFeVAl	6,963; 7,136; 10,821		



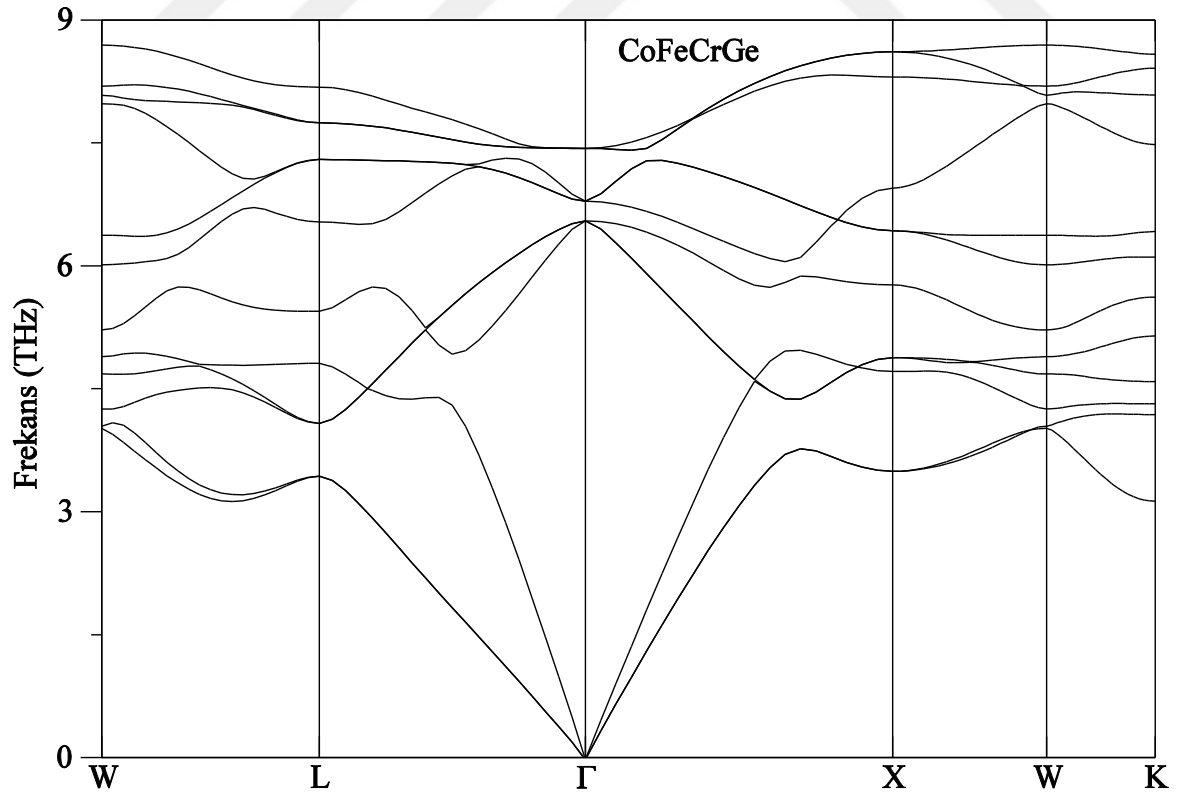
Şekil 4.23. CoFeCrAl dörtlü Heusler alaşıımının temel simetri yönelimlerine göre fonon dispersiyon eğrileri



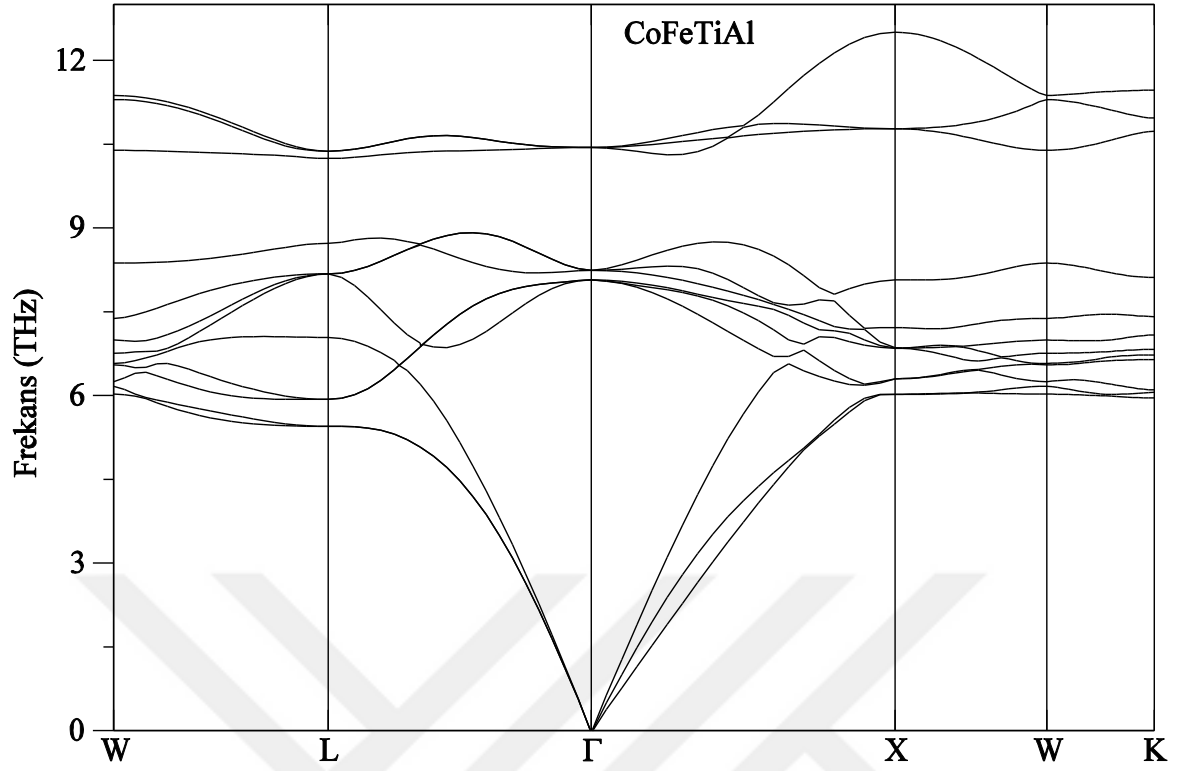
Şekil 4.24. CoFeCrSi dörtlü Heusler alaşıımının temel simetri yönelimlerine göre fonon dispersiyon eğrileri



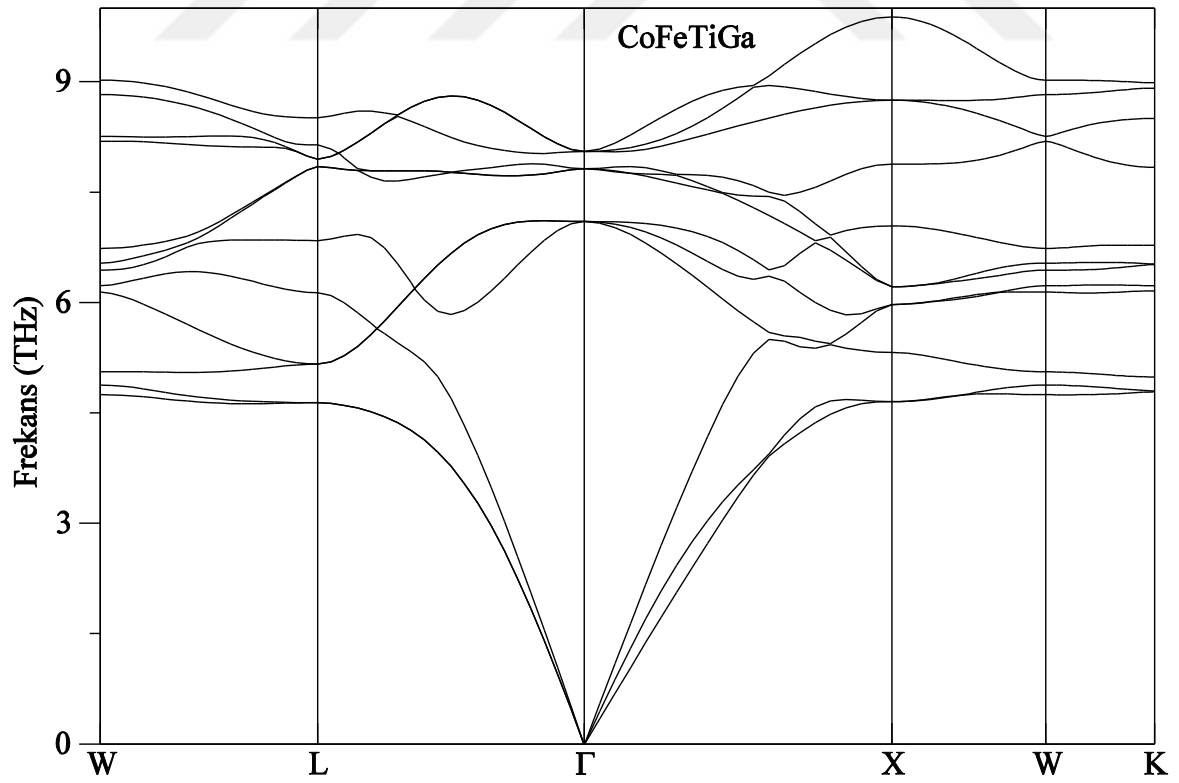
Şekil 4.25. CoFeCrGa dörtlü Heusler alaşımlarının temel simetri yönelimlerine göre fonon dispersiyon eğrileri



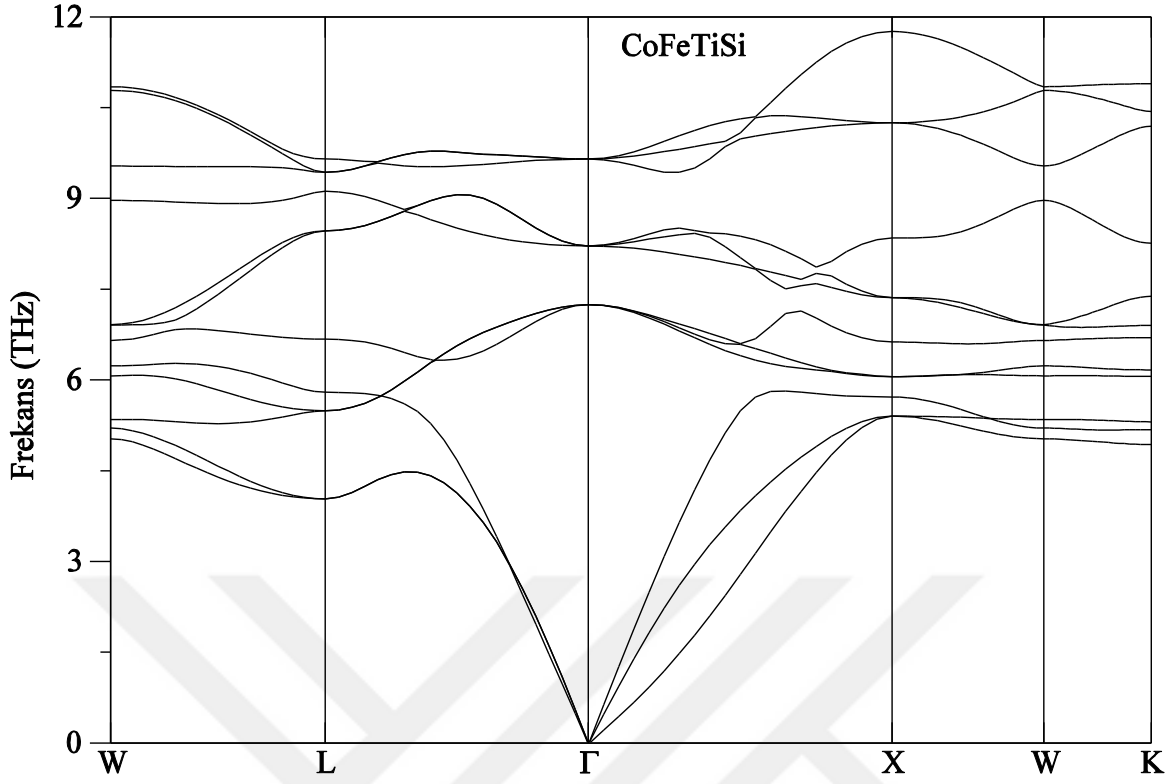
Şekil 4.26. CoFeCrGe dörtlü Heusler alaşımlarının temel simetri yönelimlerine göre fonon dispersiyon eğrileri



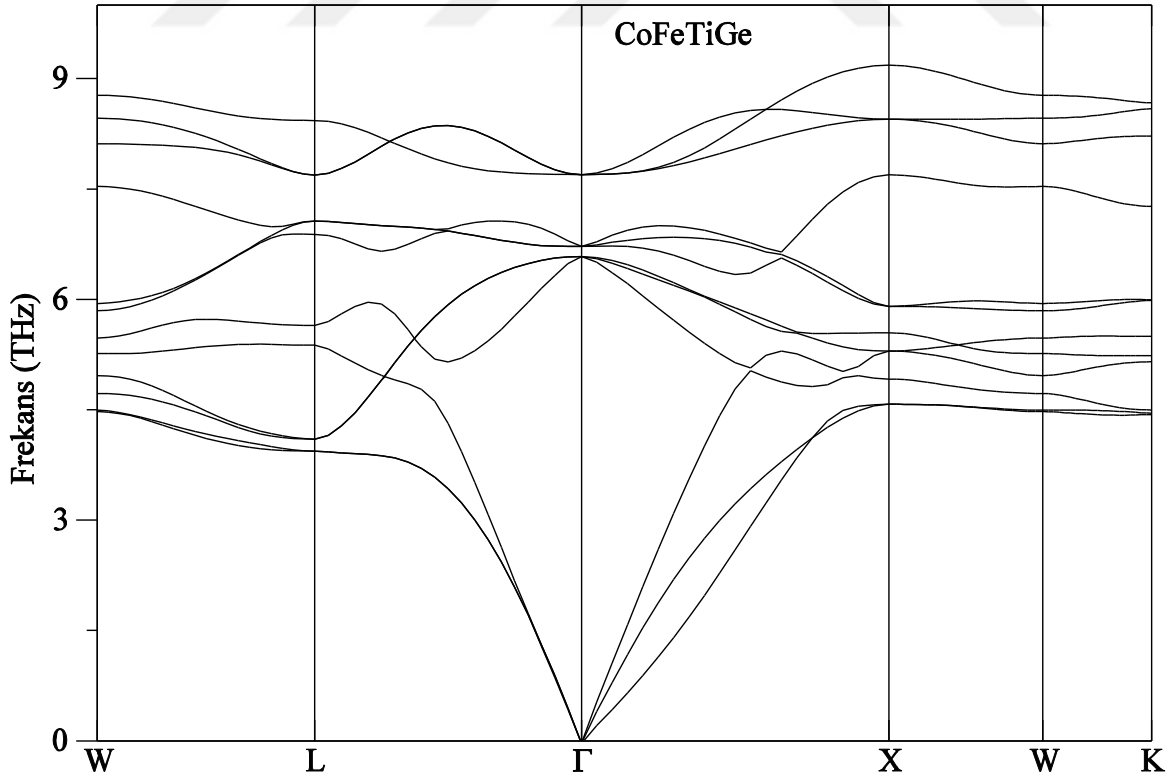
Şekil 4.27. CoFeTiAl dörtlü Heusler alaşımlarının temel simetri yönelimlerine göre fonon dispersiyon eğrileri



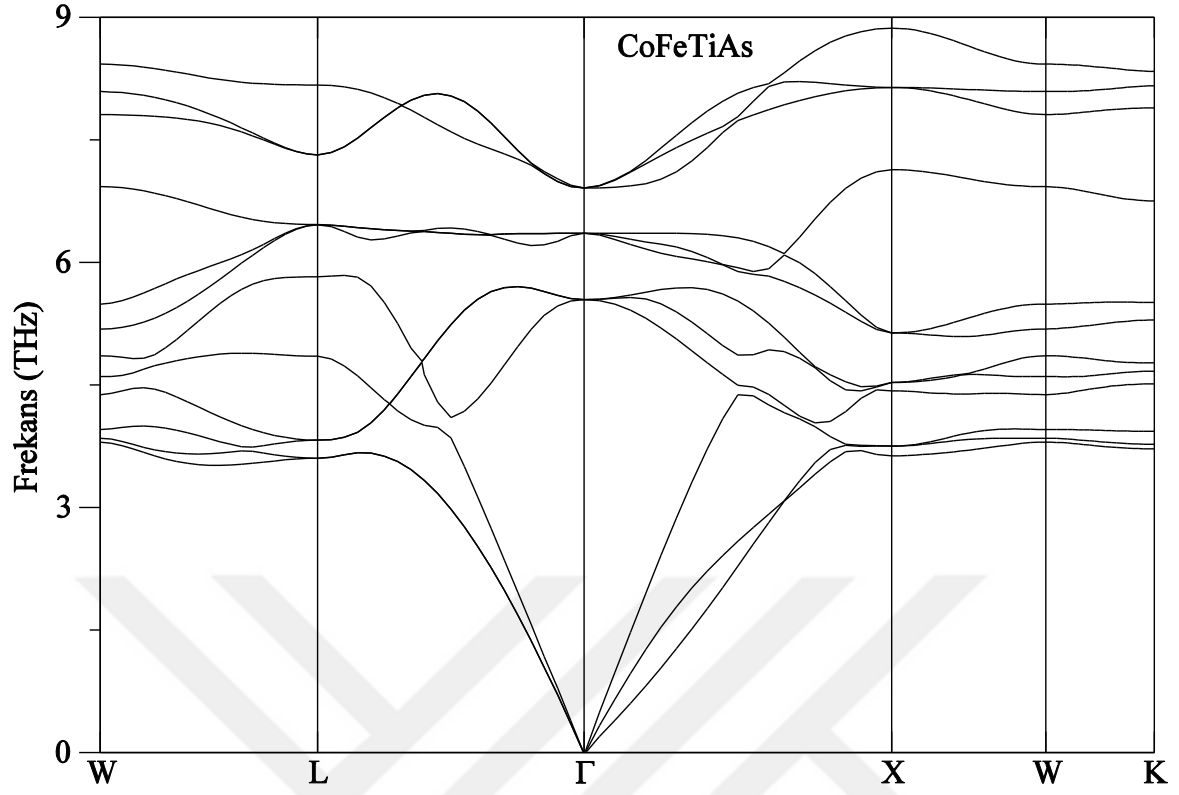
Şekil 4.28. CoFeTiGa dörtlü Heusler alaşımlarının temel simetri yönelimlerine göre fonon dispersiyon eğrileri



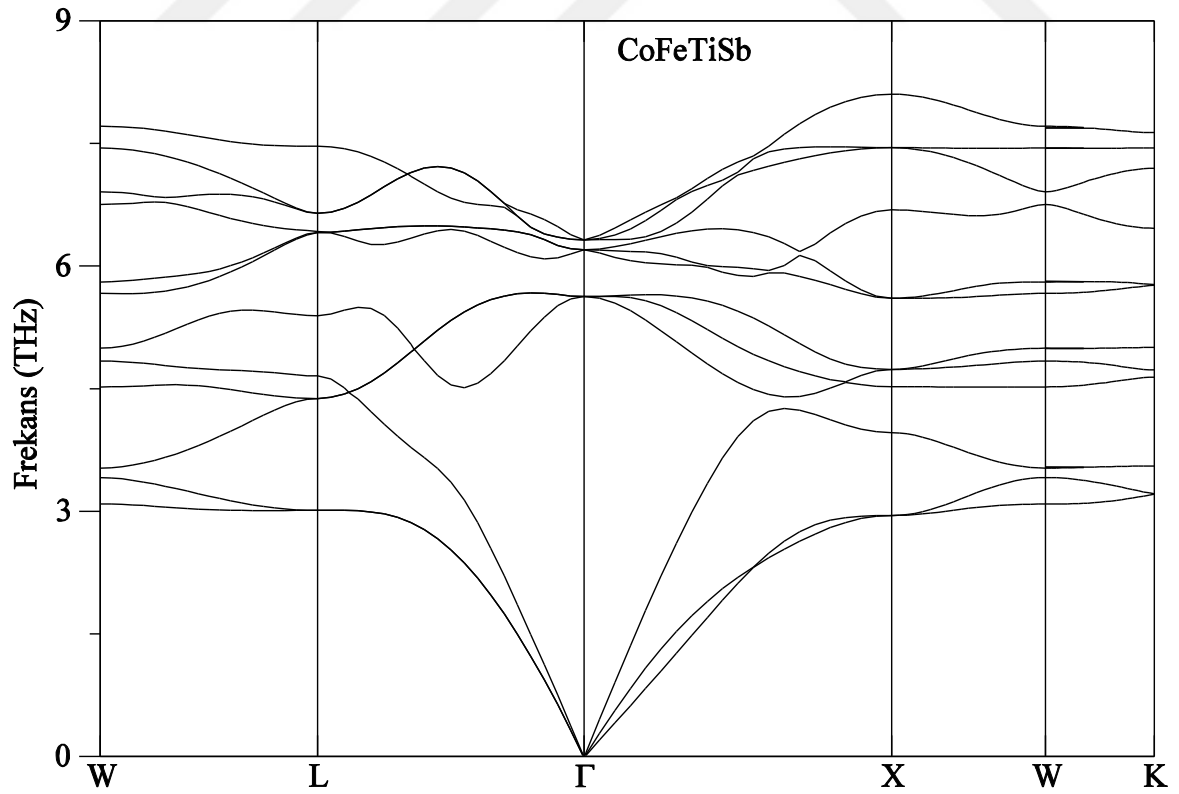
Şekil 4.29. CoFeTiSi dörü Heusler alaşımlının temel simetri yönelimlerine göre fonon dispersiyon eğrileri



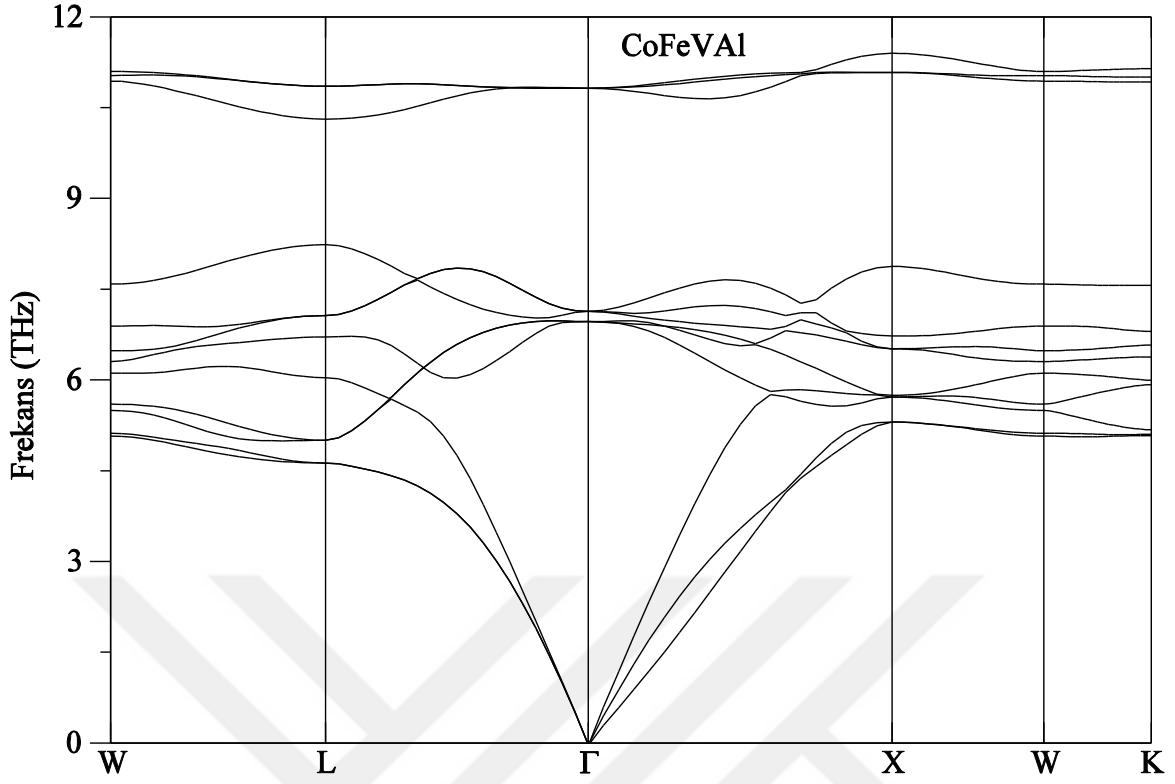
Şekil 4.30. CoFeTiGe dörü Heusler alaşımlının temel simetri yönelimlerine göre fonon dispersiyon eğrileri



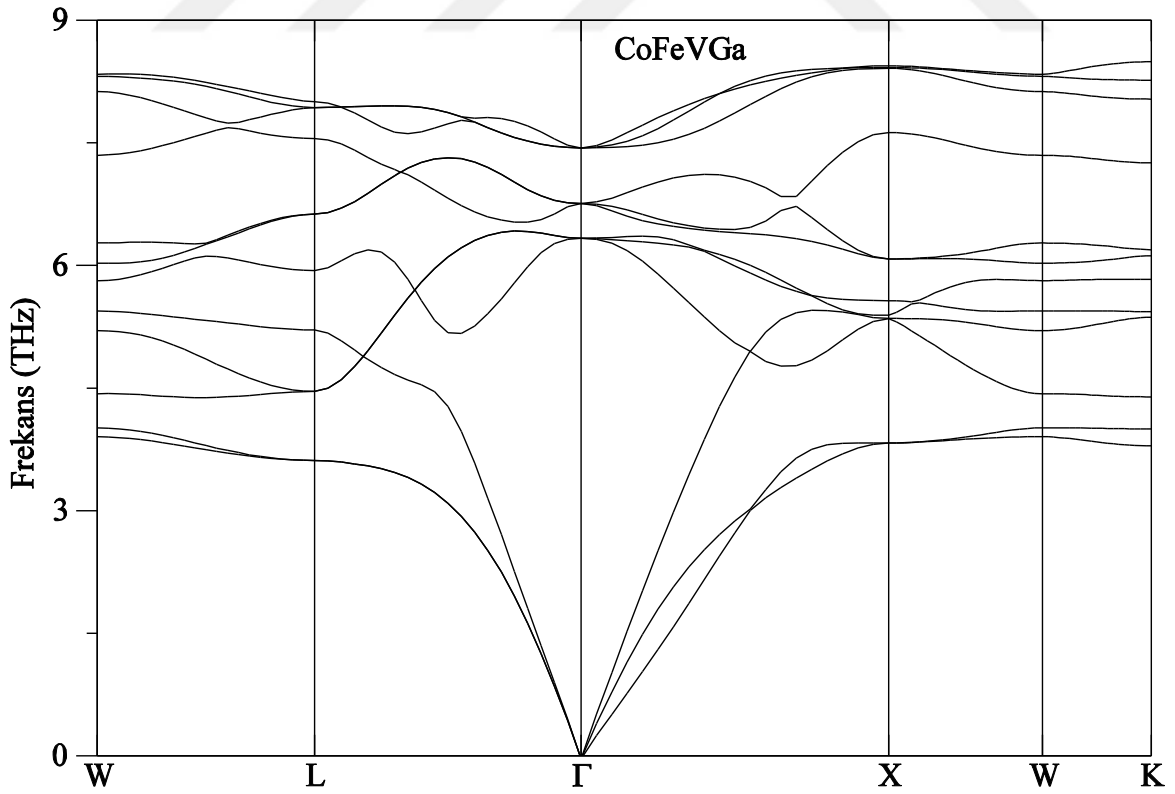
Şekil 4.31. CoFeTiAs dörtlü Heusler alaşımının temel simetri yönelimlerine göre fonon dispersiyon eğrileri



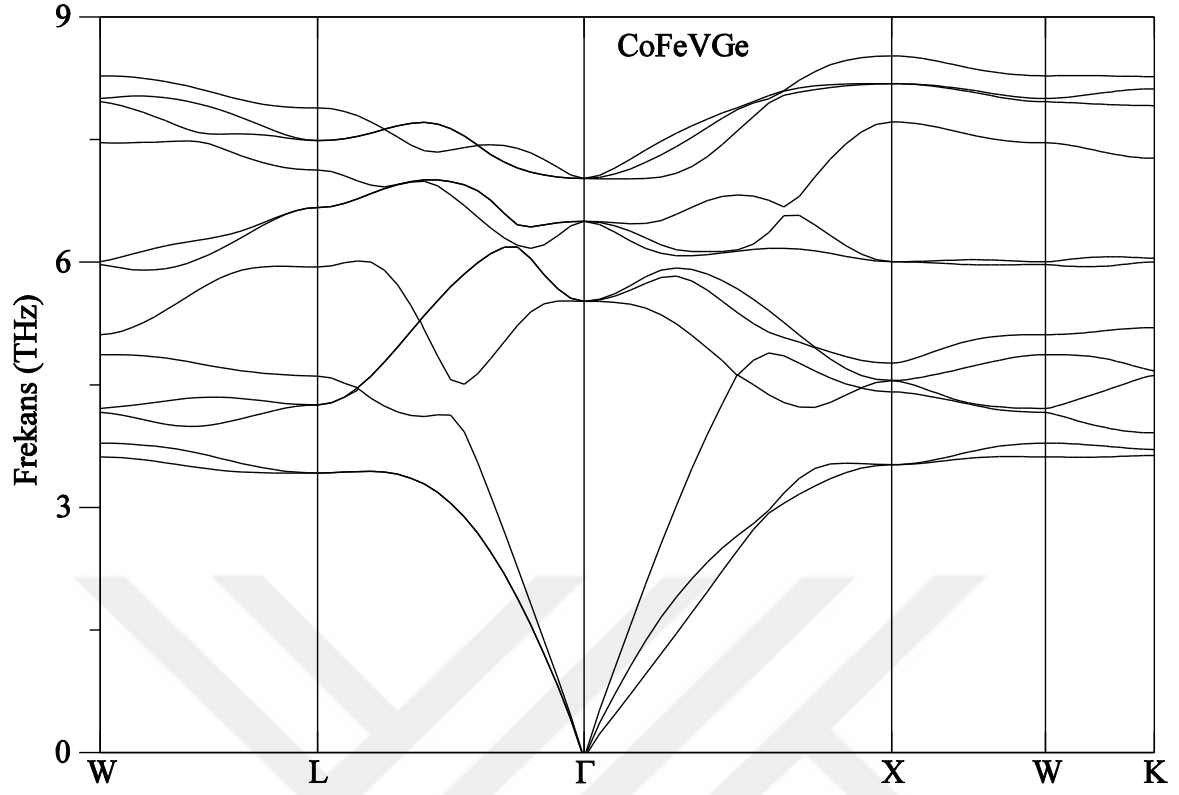
Şekil 4.32. CoFeTiSb dörtlü Heusler alaşımının temel simetri yönelimlerine göre fonon dispersiyon eğrileri



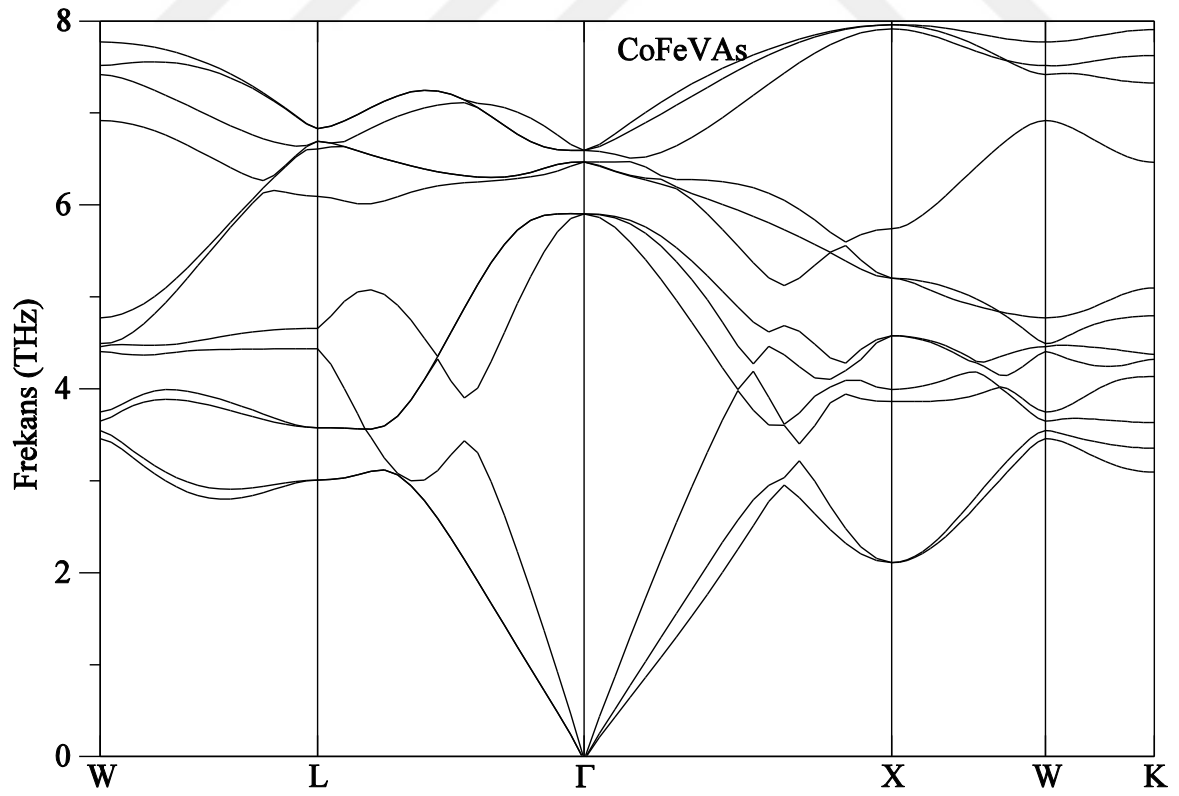
Şekil 4.33. CoFeVAl dörtlü Heusler alaşımlarının temel simetri yönelimlerine göre fonon dispersiyon eğrileri



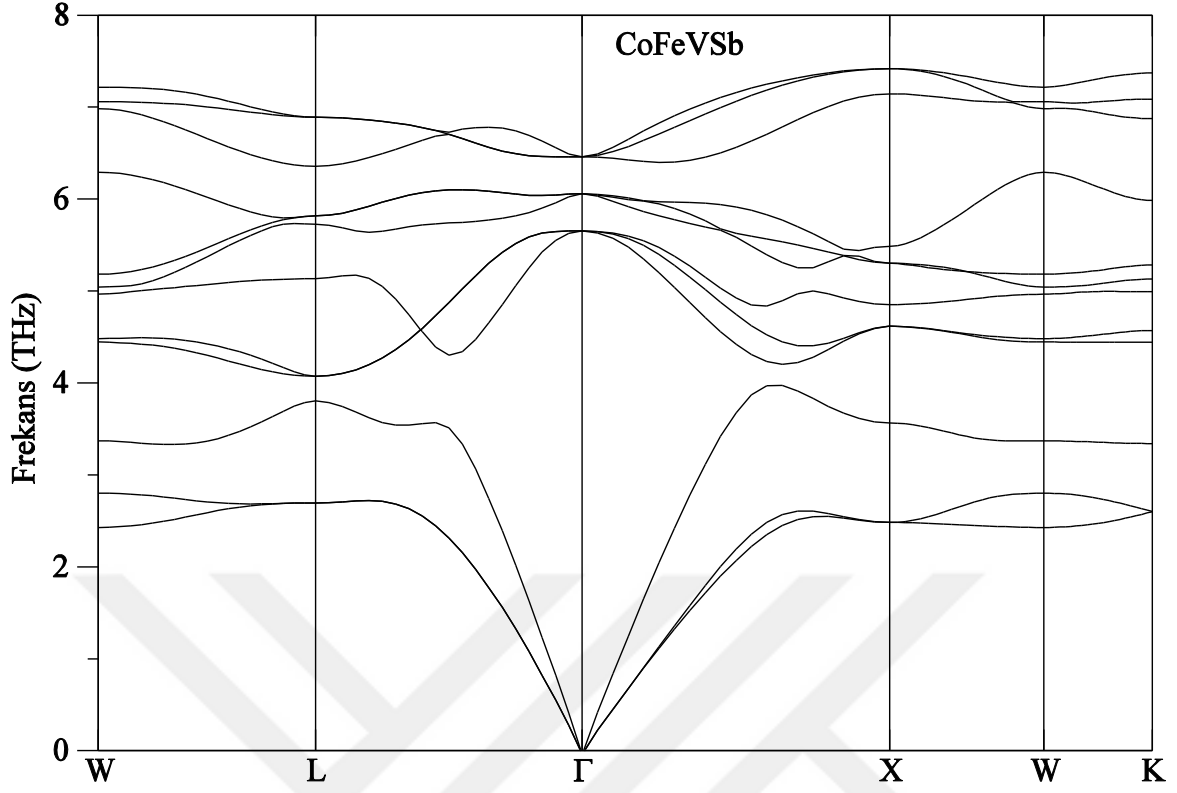
Şekil 4.34. CoFeVGa dörtlü Heusler alaşımlarının temel simetri yönelimlerine göre fonon dispersiyon eğrileri



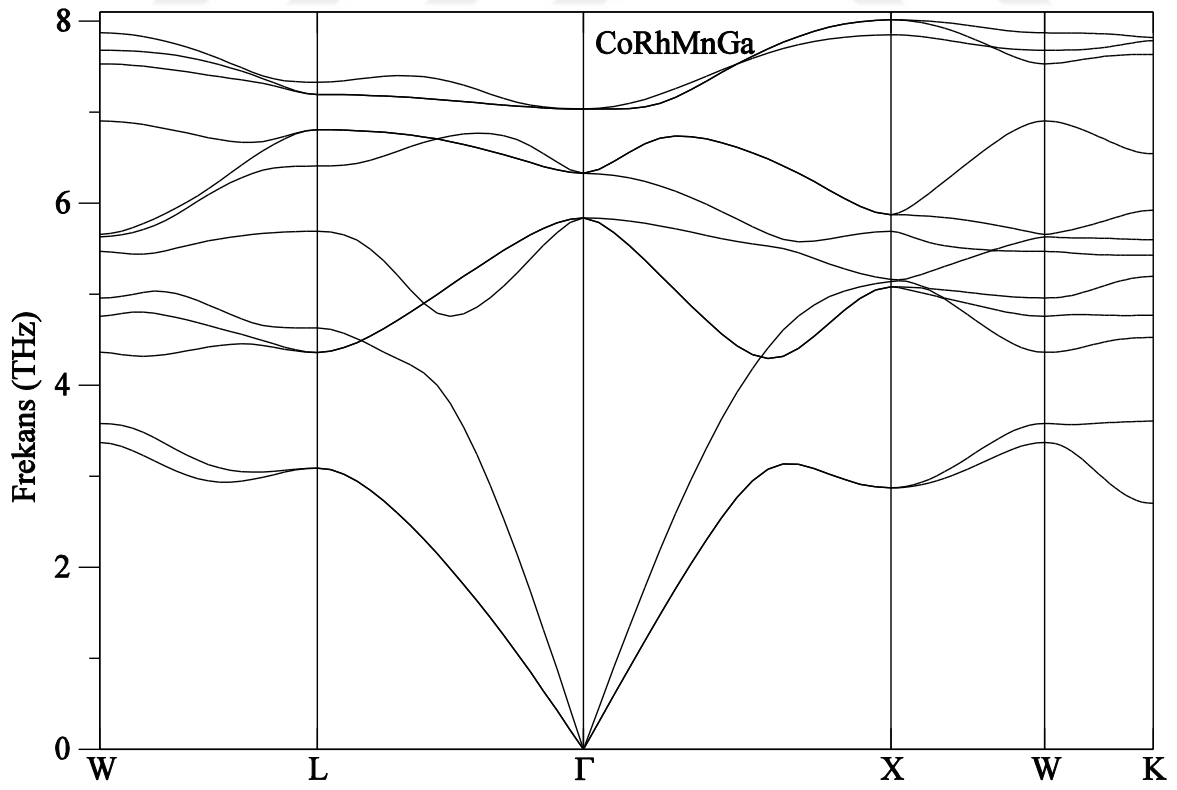
Şekil 4.35. CoFeVGe dörtlü Heusler alaşımının temel simetri yönelimlerine göre fonon dispersiyon eğrileri



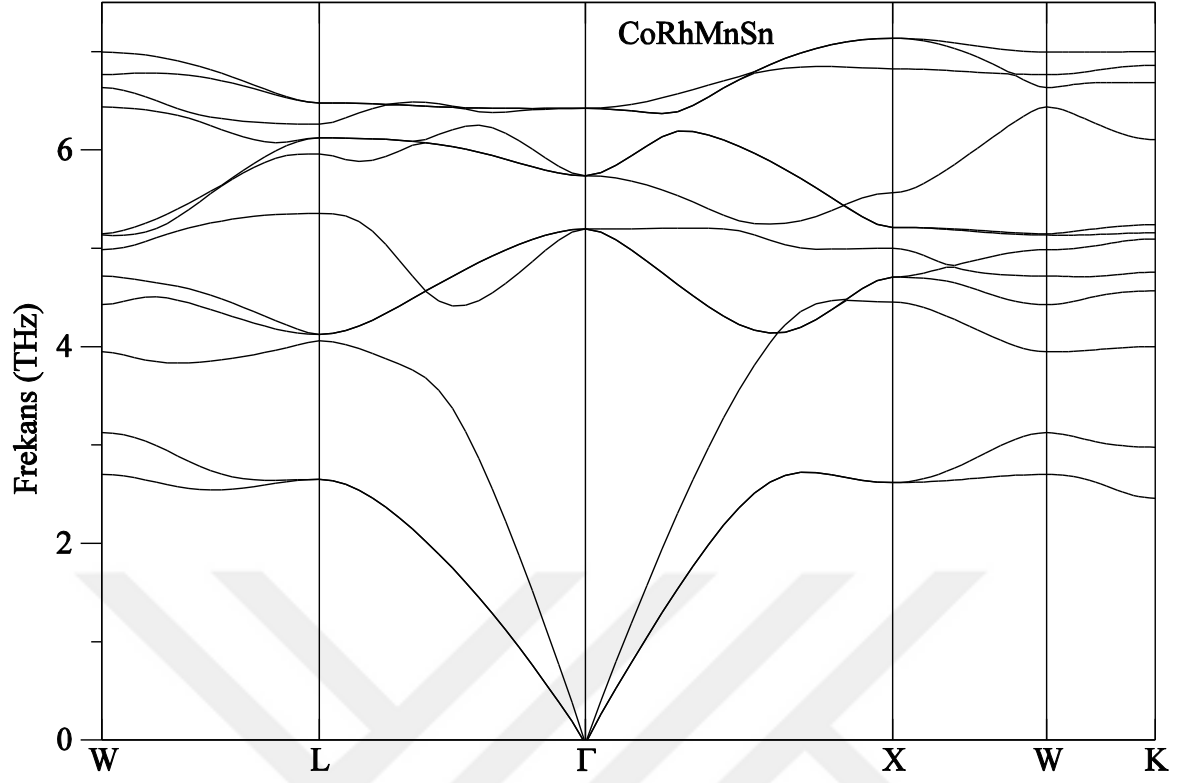
Şekil 4.36. CoFeVAs dörtlü Heusler alaşımının temel simetri yönelimlerine göre fonon dispersiyon eğrileri



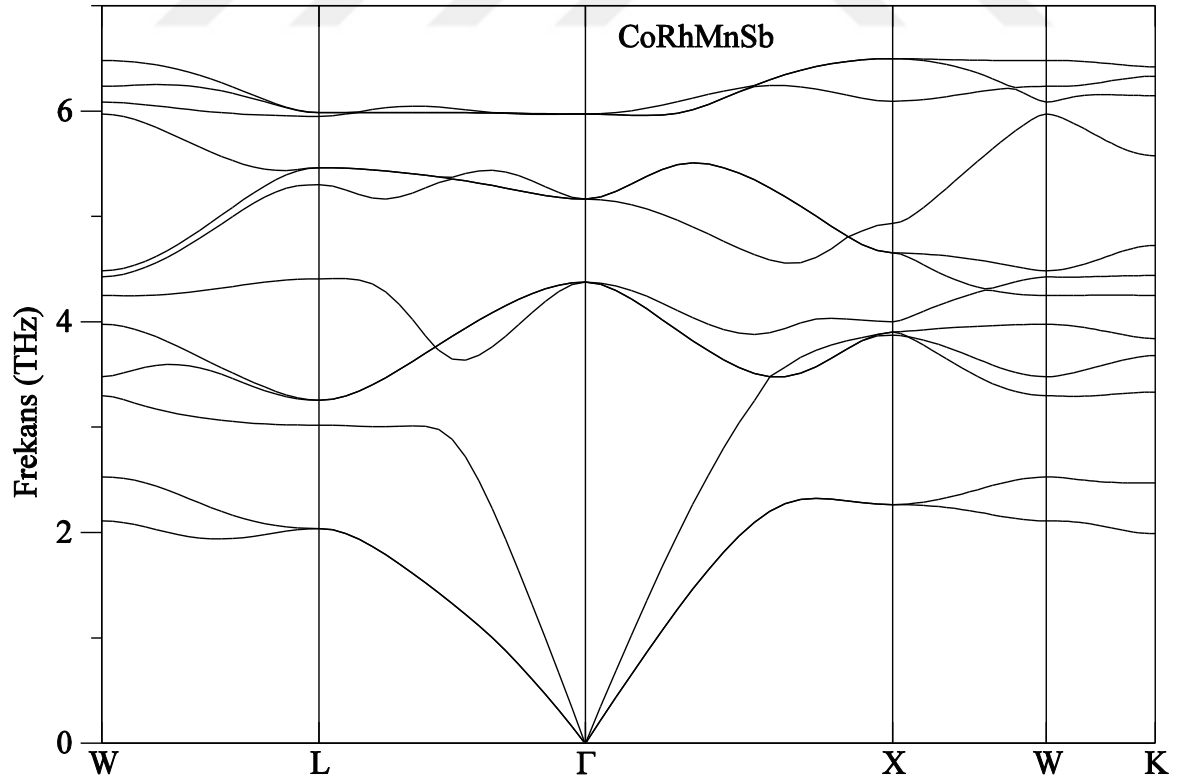
Şekil 4.37. CoFeVSb dörü Heusler alaşımlının temel simetri yönelimlerine göre fonon dispersiyon eğrileri



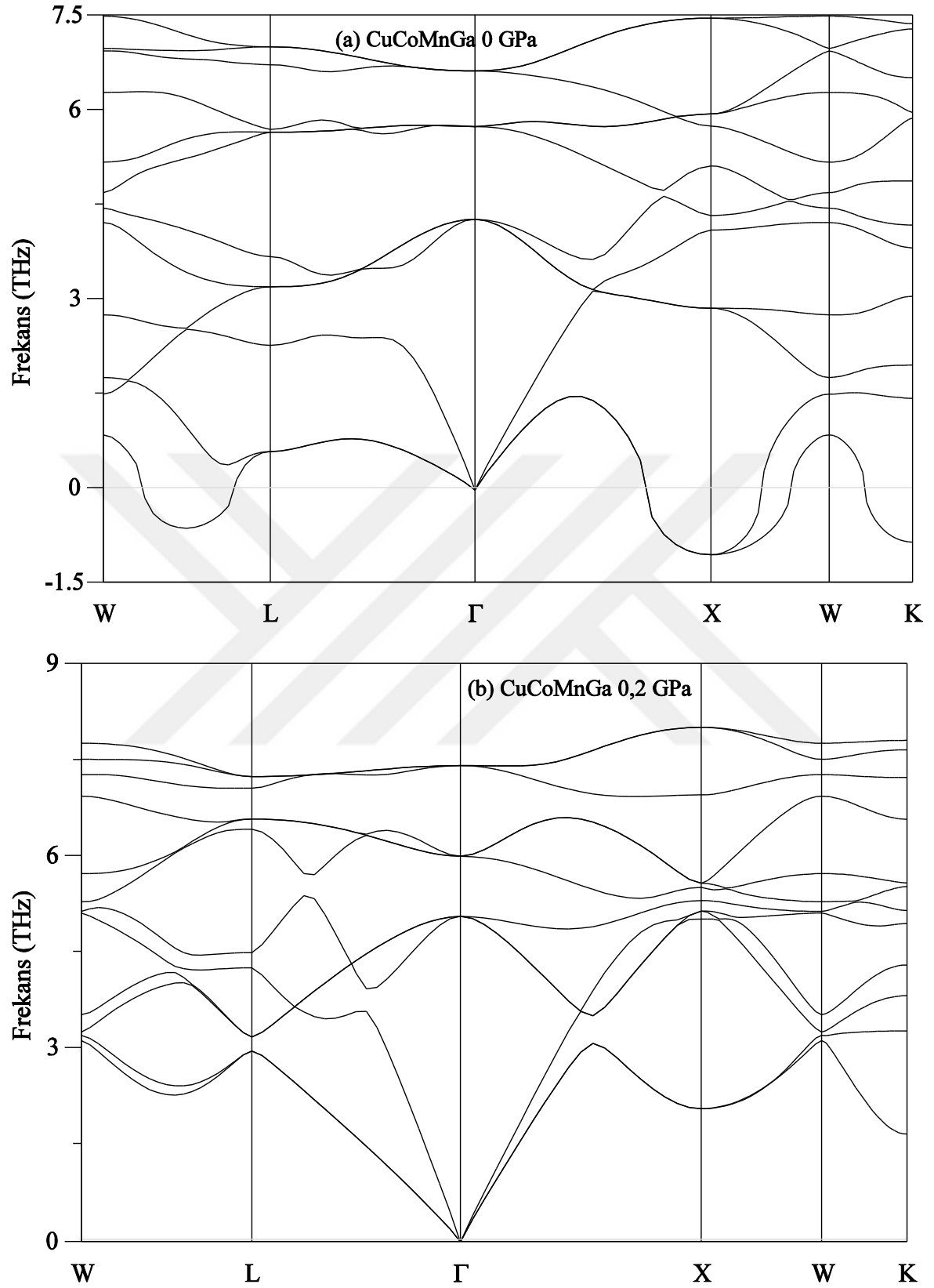
Şekil 4.38. CoRhMnGa dörü Heusler alaşımlının temel simetri yönelimlerine göre fonon dispersiyon eğrileri



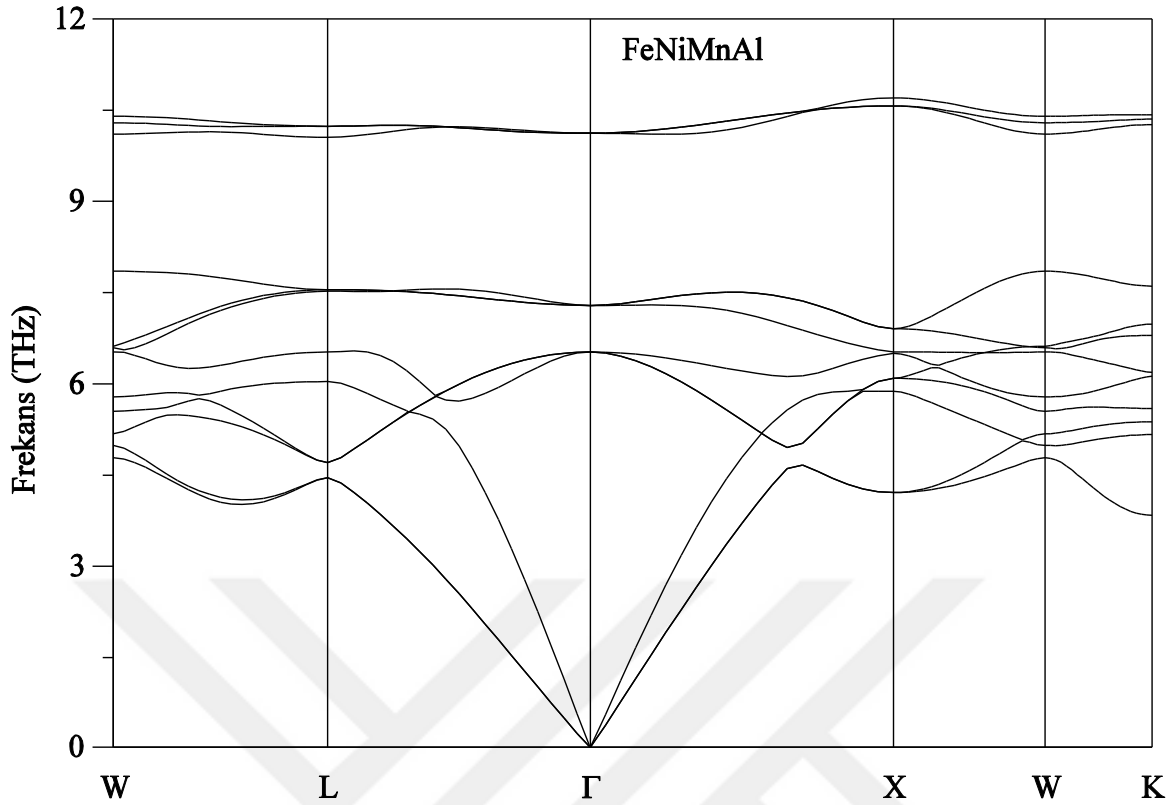
Şekil 4.39. CoRhMnSn dörtlü Heusler alaşımlarının temel simetri yönelerlerine göre fonon dispersiyon eğrileri



Şekil 4.40. CoRhMnSb dörtlü Heusler alaşımlarının temel simetri yönelerlerine göre fonon dispersiyon eğrileri



Şekil 4.41. CuCoMnGa dörtlü Heusler alaşımasının temel simetri yönelimlerine göre fonon dispersiyon eğrileri. a) CuCoMnGa 0 GPa, b) CuCoMnGa 0,2 GPa



Şekil 4.42. FeNiMnAl dörtlü Heusler alaşımlarının temel simetri eksenleri boyunca fonon dispersiyon eğrileri

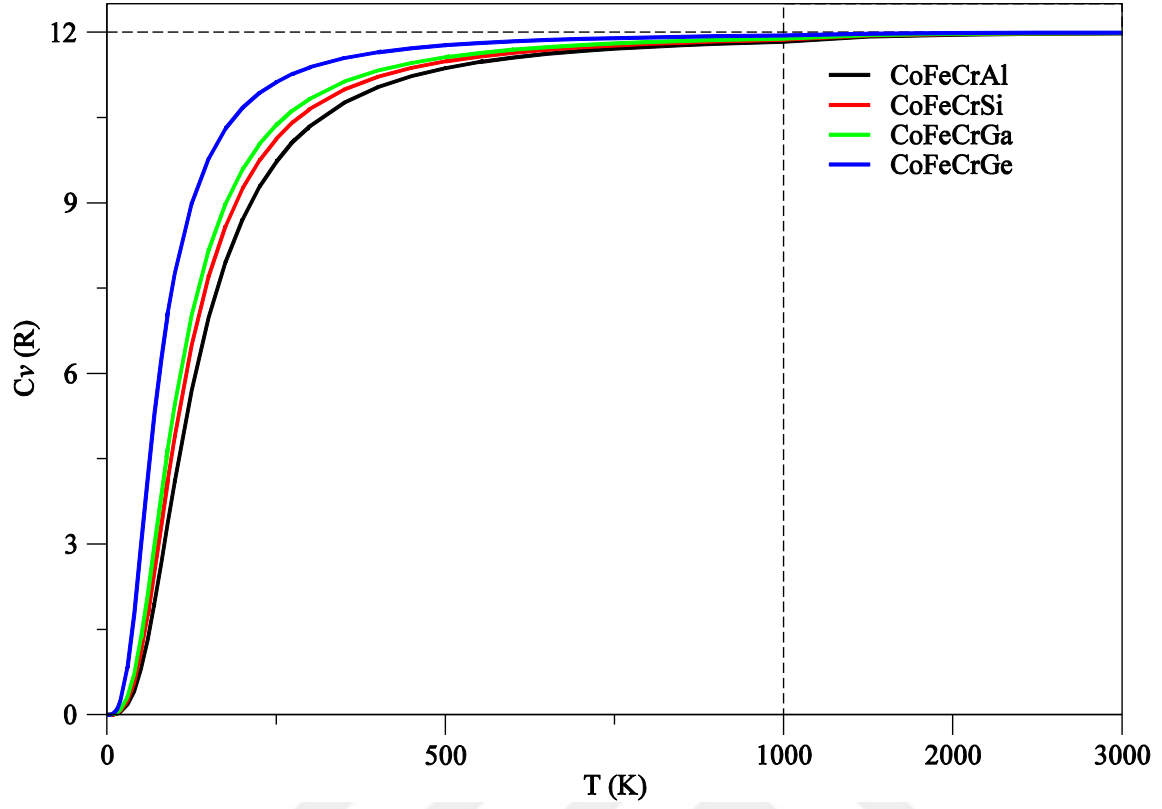
4.4. İncelenen Dörtlü Heusler Alaşımlarının Termodinamik Özellikleri

Bir katının örgü titreşimlerinin belirlenmesinde önemli bir parametre olan Debye sıcaklığı (θ_D), aynı zamanda metallerde elektriksel direncin sıcaklığa bağımlılığıyla ilgili önemli rol oynar. CoFeCrX (X=Al, Si, Ga ve Ge), CoFeTiY, CoFeVY (Y=Al, Ga, Si, Ge, As ve Sb), CoRhMnZ (Z=Ga, Sn ve Sb), CuCoMnGa ve FeNiMnAl dörtlü Heusler alaşımlarının Debye sıcaklıkları, ısı sığasının ve entropinin sıcaklığa bağlı değişimi, MedeA paket programı içerisinde bulunan MT modülü yardımıyla VASP kodları kullanılarak, Bölüm 4’de elastik özellikler kapsamında hesaplanan ortalama ses hızları ile Bölüm 3’de verilen termal özellikler ile ilgili eşitliklerden hesaplandı. Bu alaşımlar için hesaplanan Debye sıcaklıkları Çizelge 4.10’da verildi. Bu değerlere göre çalışılan malzemeler arasında Debye sıcaklığı en yüksek CoFeTiAl alaşımı iken en düşük ise CuCoMnGa alaşımı olarak belirlendi. Bunların yanı sıra, ısı sığasının sıcaklığa göre değişimi bu alaşımlar için Şekil 4.43 - 4.44 - 4.45 - 4.46 - 4.47’de ve entropinin sıcaklığa göre değişimi Şekil 4.48 - 4.49 - 4.50 - 4.51 - 4.52’de verildi. Şekillerden de görüldüğü gibi bu alaşımlar için, ısı sığası hemen hemen $T \leq 250$ K’de hızla artmaktayken $T > 250$ K’de ise yavaşça artmaktadır. Ayrıca ısı sığası, birim

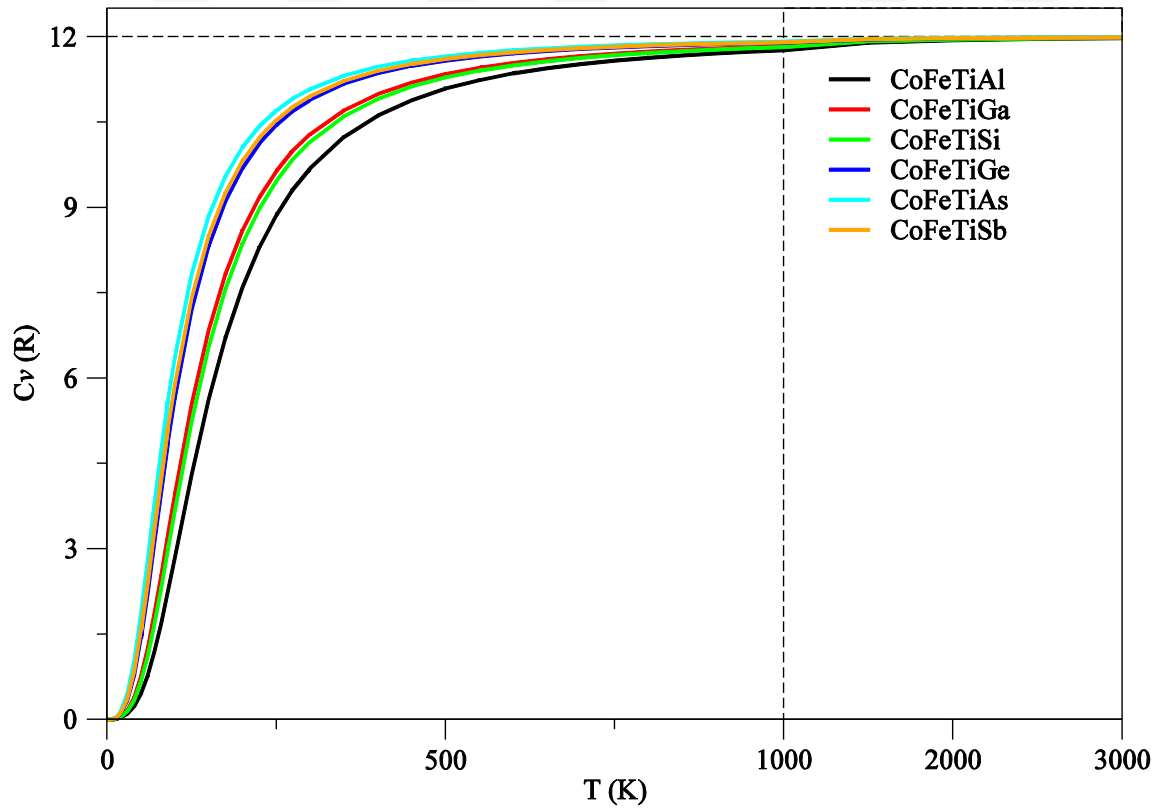
hücresinde dört atom bulunan bu alaşımlarda düşük sıcaklıklarda ısı sığası $\approx T^3$ davranışı sergilemekte iken, yüksek sıcaklıklara doğru gidildikçe Dulong-Petit limiti [114] ($\approx 3NR$) olarak bilinen sabite yaklaşmakta olduğu enine kesikli çizgilere bakıldığında açıkça görülmektedir. Entropinin sıcaklığa göre değişimi incelendiğinde; düşük sıcaklık değerlerinde entropi hızla artmakta iken yüksek sıcaklık değerlerinde ise yavaşça artmakta olduğu şekillerden açıkça görülmektedir.

Çizelge 4.10. İncelenen dörtlü Heusler alaşımlarının Debye sıcaklıkları (K)

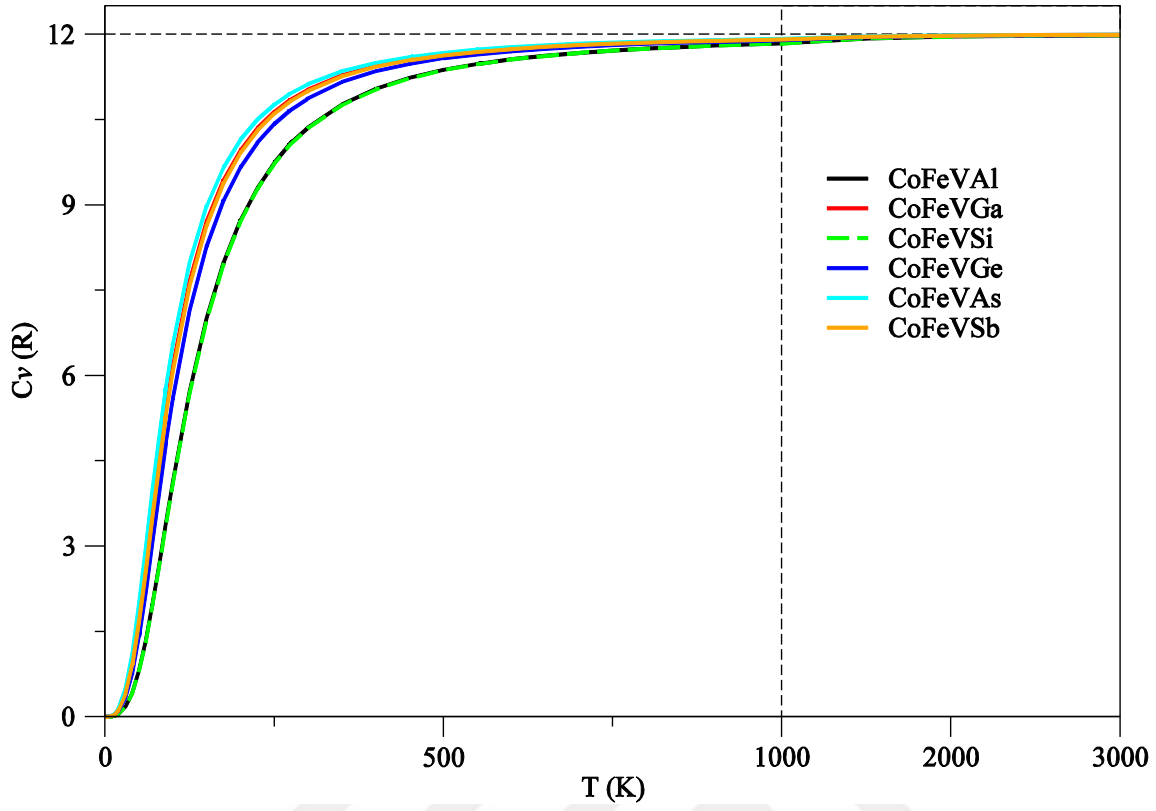
Malzemeler	θ_D
CoFeCrAl	524,0
CoFeCrSi	468,9
CoFeCrGa	433,8
CoFeCrGe	310,1
CoFeTiAl	635,8
CoFeTiGa	535,5
CoFeTiSi	558,7
CoFeTiGe	422,6
CoFeTiAs	382,8
CoFeTiSb	409,3
CoFeVAl	522,2
CoFeVGa	393,4
CoFeVSi	524,7
CoFeVGe	426,0
CoFeVAs	372,6
CoFeVSb	398,6
CoRhMnGa	461,6
CoRhMnSn	310,5
CoRhMnSb	344,6
CuCoMnGa	307,8
FeNiMnAl	551,7



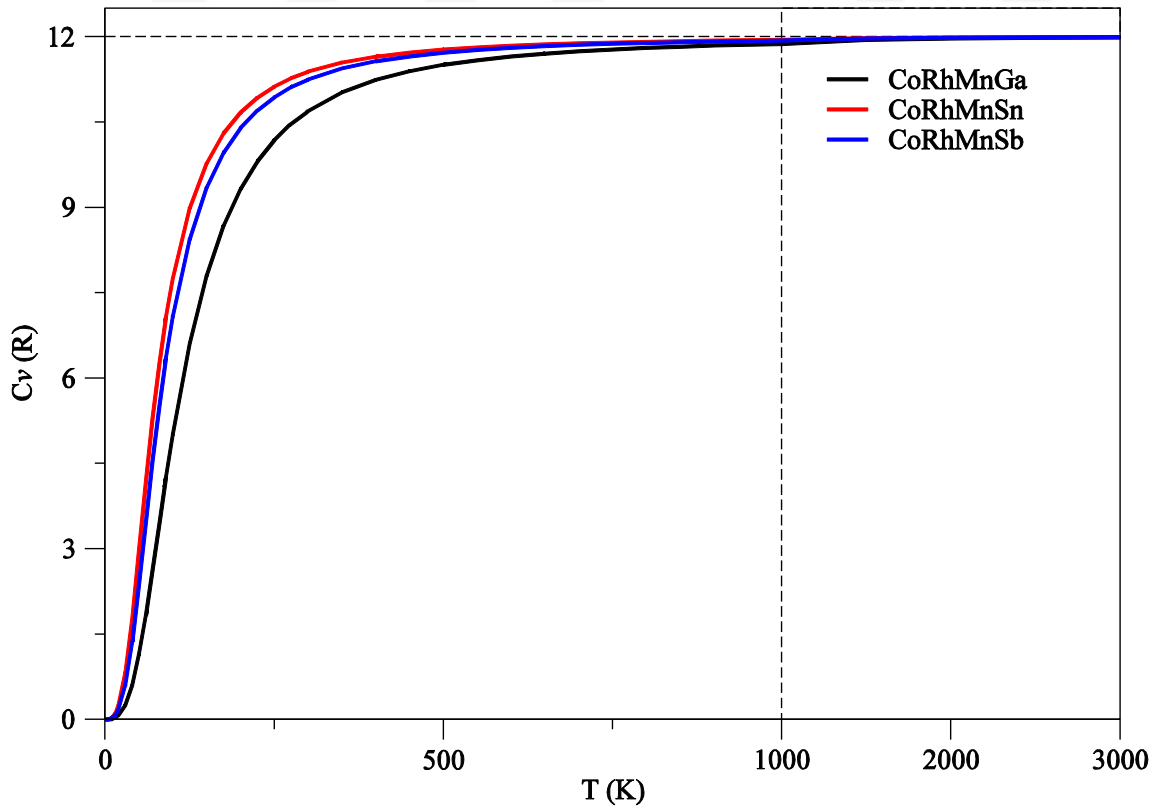
Şekil 4.43. CoFeCrX (X=Al, Si, Ga ve Ge) dörütlü Heusler alaşımlarının ısı sığalarının sıcaklıkla değışimi



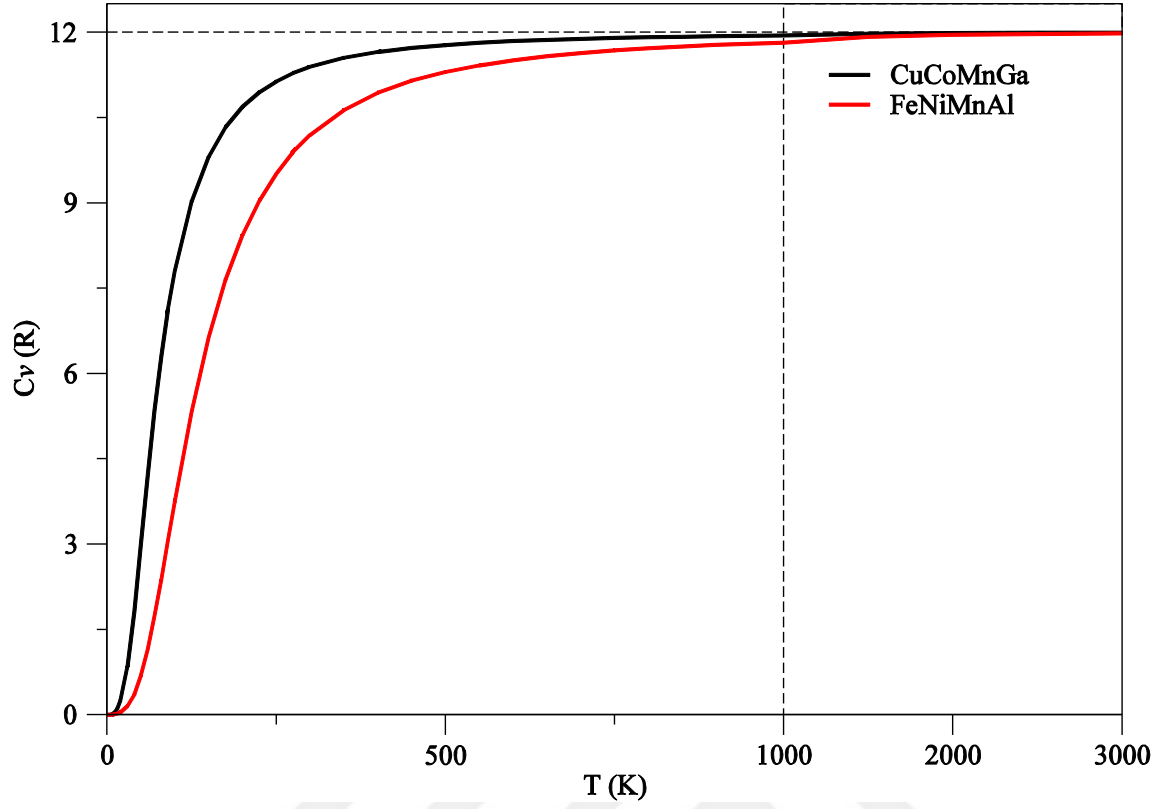
Şekil 4.44. CoFeTiY (Y=Al, Ga, Si, Ge, As ve Sb) dörütlü Heusler alaşımlarının ısı sığalarının sıcaklıkla değışimi



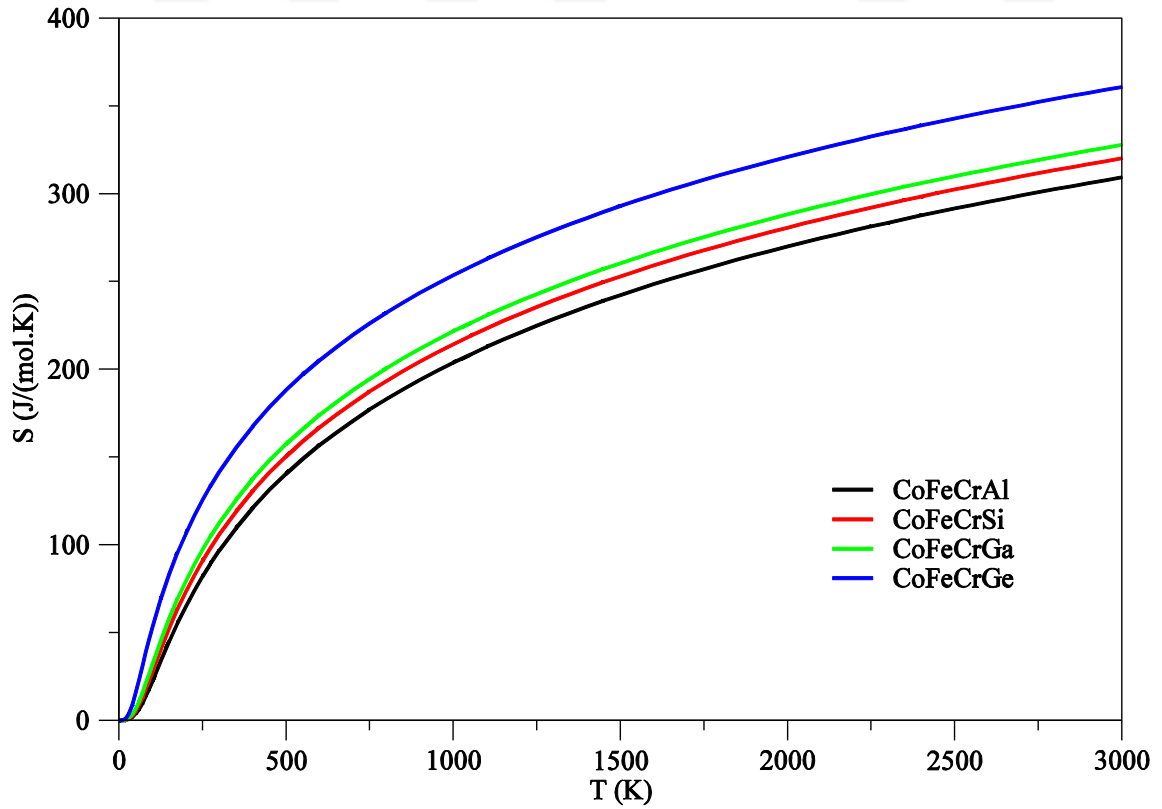
Şekil 4.45. CoFeVY (Y=Al, Ga, Si, Ge, As ve Sb) dörütlü Heusler alaşımlarının ısı sığalarının sıcaklıkla değışimi



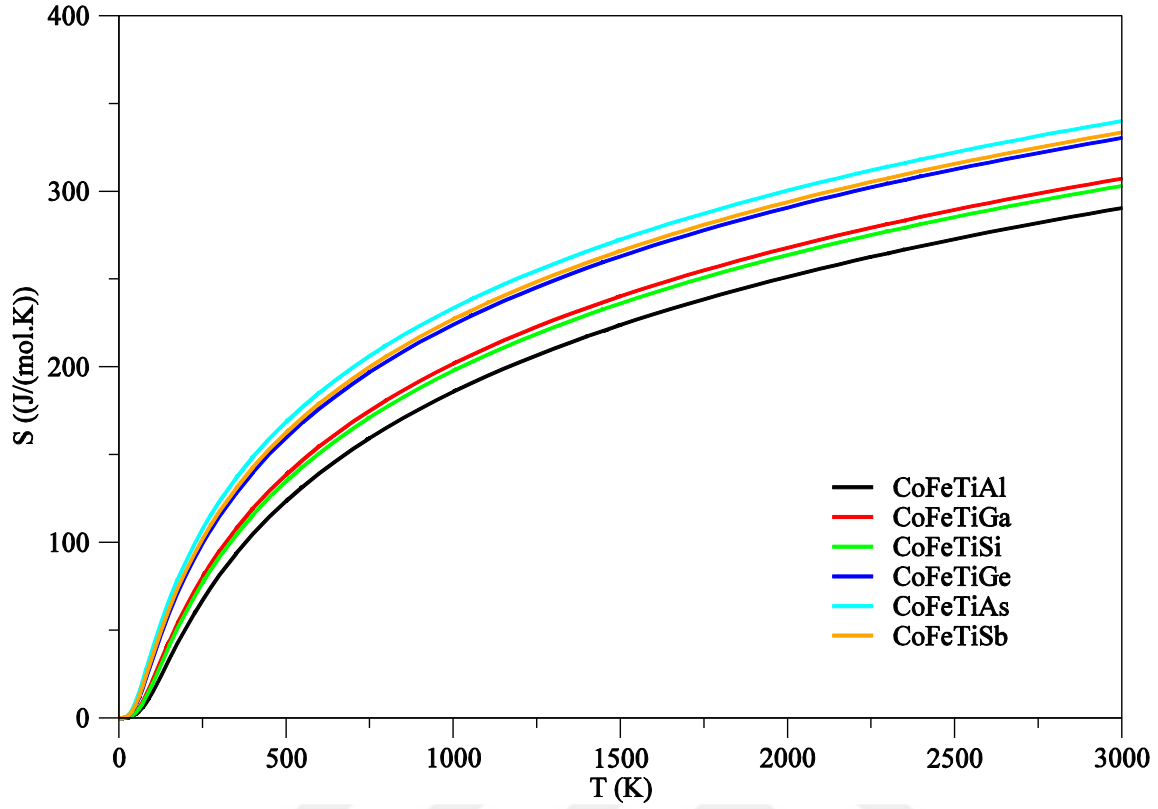
Şekil 4.46. CoRhMnZ (Z=Ga, Sn ve Sb) dörütlü Heusler alaşımlarının ısı sığalarının sıcaklıkla değışimi



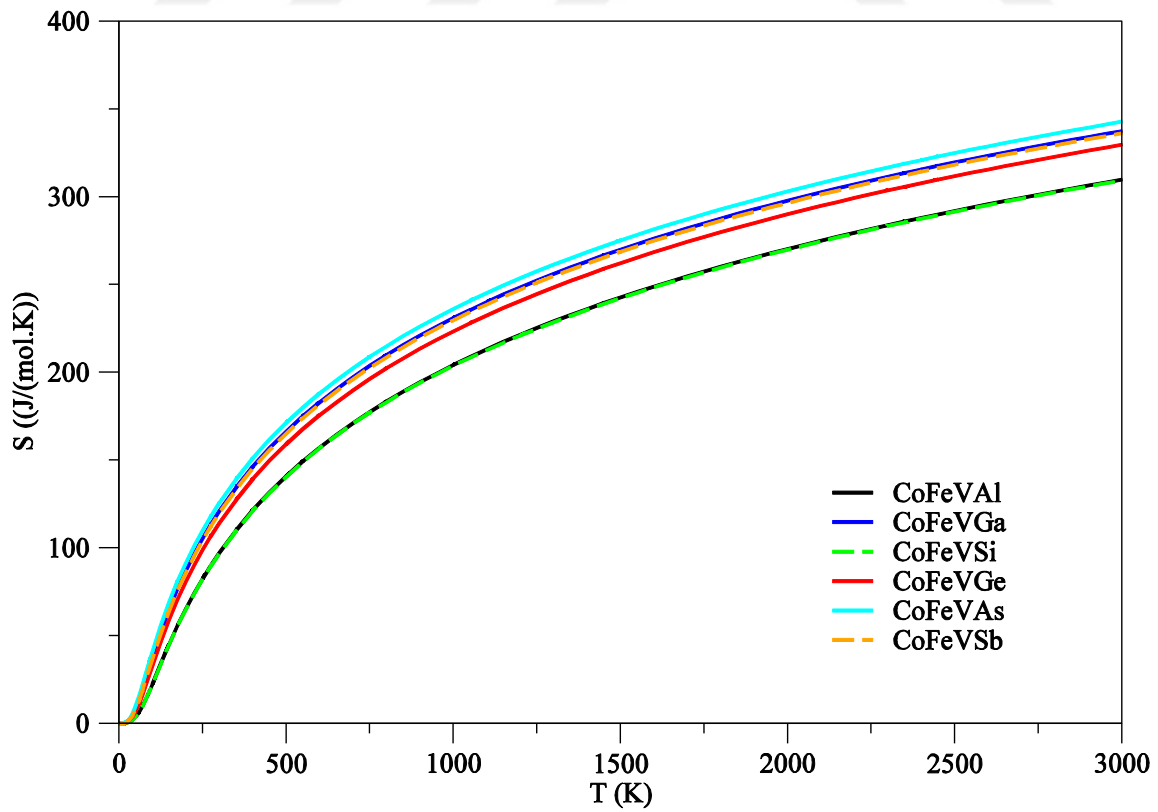
Şekil 4.47. CuCoMnGa ve FeNiMnAl dörü Heusler alaşımlarının ısı sığalarının sıcaklıkla değişimi



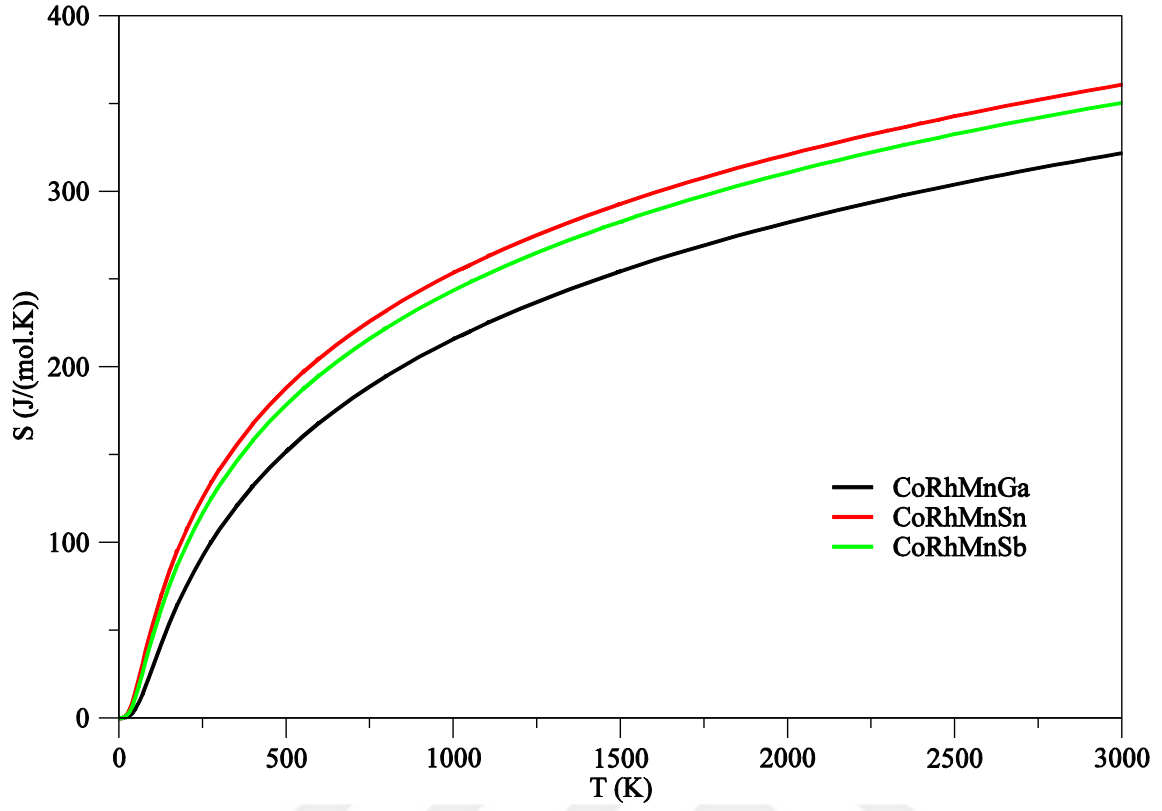
Şekil 4.48. CoFeCrX (X=Al, Si, Ga ve Ge) dörü Heusler alaşımlarının entropilerinin sıcaklıkla değişimi



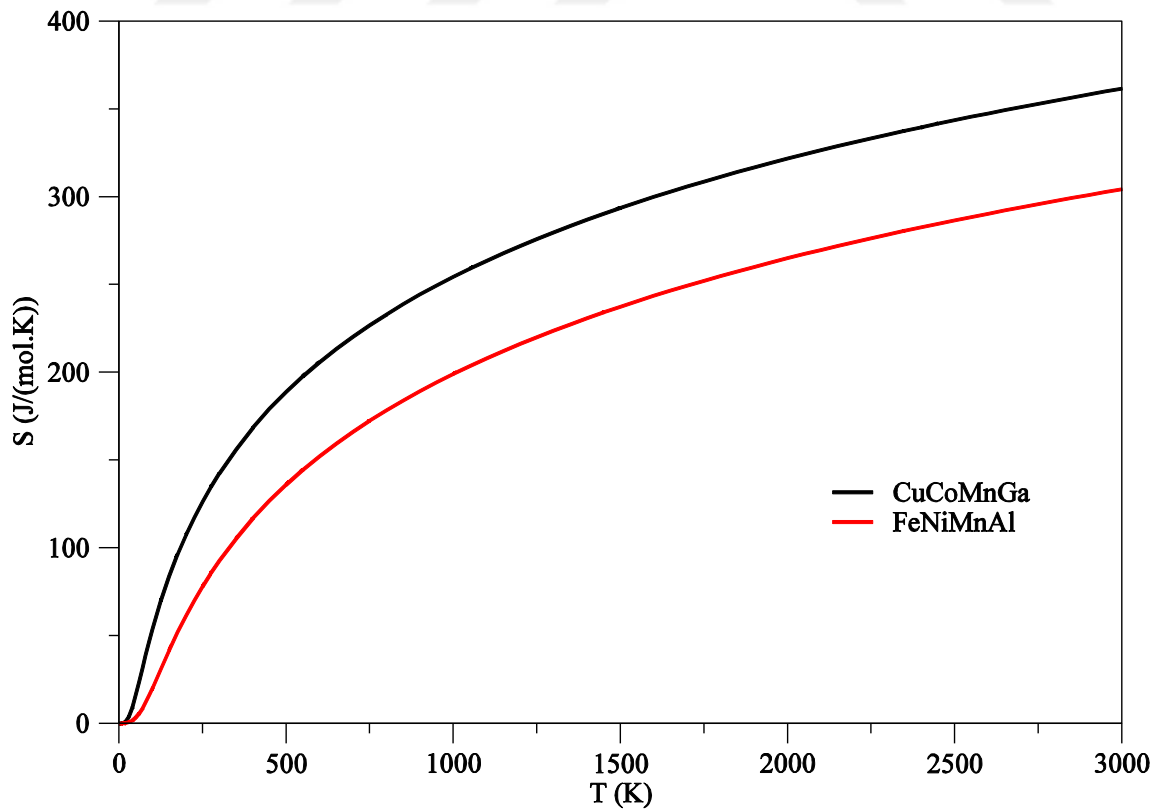
Şekil 4.49. CoFeTiY (Y=Al, Ga, Si, Ge, As ve Sb) dörü Heusler alaşımlarının entropilerinin sıcaklıkla değışimi



Şekil 4.50. CoFeVY (Y=Al, Ga, Si, Ge, As ve Sb) dörü Heusler alaşımlarının entropilerinin sıcaklıkla değışimi



Şekil 4.51. CoRhMnZ (Z=Ga, Sn ve Sb) dörütlü Heusler alaşımlarının entropilerinin sıcaklıkla değışimi



Şekil 4.52. CuCoMnGa ve FeNiMnAl dörütlü Heusler alaşımlarının entropilerinin sıcaklıkla değışimi



5. SONUÇ VE ÖNERİLER

Bu tez çalışmasında, CoFeCrX (X=Al, Si, Ga ve Ge), CoFeTiY(Y=Al, Ga, Si, Ge, As ve Sb), CoFeVY (Y=Al, Ga, Si, Ge, As ve Sb), CoRhMnZ (Z=Ga, Sn ve Sb), CuCoMnGa ve FeNiMnAl dörtlü Heusler alaşımlarının yapısal, elektronik, mekanik, titreşim ve termodinamik özellikleri Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi (YFT) ile hesaplandı. Ayrıca bu alaşımlar için yapılan tüm hesaplamalar LiMgPdSn-tipi kristal yapısında F-43m kristal simetrisinde atomların yerleri sabit tutularak yapıldı. Hesaplamalar sonucu bulunan sonuçlar her bir alaşım için aşağıdaki gibi sıralandı.

- i. CoFeCrX (X=Al, Si, Ga ve Ge) dörtlü Heusler alaşımları için;
 - Örgü sabiti değerleri literatürde yer alan FLAPW metodu [25] ile hesaplanan sonuçlara göre sırasıyla %0,21; %0,30; %0,07 ve %0,03'lük fark ile uyumlu olarak hesaplandı. Ayrıca literatürdeki diğer yer alan çalışmalar ile de oldukça uyumludur. Bunların yanı sıra, örgü sabitleri arasında $a_{Ga} > a_{Ge} > a_{Al} > a_{Si}$, Bulk modülleri arasında $B_{Si} > B_{Al} > B_{Ge} > B_{Ga}$ şeklinde ilişki vardır. Dolayısıyla örgü sabiti değerleri artmakta iken Bulk modülü değerleri azalmaktadır.
 - Manyetik özellikler kapsamında yapılan hesaplamalardan, bu alaşımların manyetik özellik gösterdiği bulundu. Bunun yanı sıra, bu alaşımların Slater-Pauling davranışına (SPD) göre toplam manyetik momentleri hesaplanarak elde edilen değerlerle karşılaştırılıp doğrulama yapıldı ve oldukça uyumlu sonuçlar elde edildi.
 - Elektronik özellikleri incelendiğinde ise, CoFeCrAl ve CoFeCrSi alaşımlarının yarı-metalik, CoFeCrGa ve CoFeCrGe alaşımlarının ise yarı-metalığe yakın karakterde olduğu görüldü. Ayrıca, spin aşağı yönelimde CoFeCrAl için 0,44 eV, CoFeCrSi için ise 0,53 eV'luk yasak enerji aralığı hesaplandı. Bu sonuçlar ise literatürde yer alan çalışmalar ile oldukça uyumludur.
 - Hesaplanan elastik özelliklerden, hepsinin mekanik kararlılık şartlarını sağladığı ve mekaniksel olarak kararlı oldukları görüldü. Aynı zamanda, bu alaşımların $B/G > 1,75$ sınırından büyük olduğu görülerek sünek oldukları anlaşıldı. Ayrıca az sıkışabilirlikte oldukları ve en fazla sıkışabilirliğe CoFeCrGe alaşımının sahip olduğu belirlendi. Sertlik bakımından ise aralarında CoFeCrAl alaşımının en sert olduğu sonucuna varıldı. Bunların yanı sıra, bu tez çalışmasında incelenen tüm alaşımlar arasında Young modülü ve kayma modülü en düşük olan CoFeCrGe alaşımının en düşük ortalama ses hızına sahip olduğu

görüldü.

- Titreşim özellikleri kapsamında yapılan hesaplama sonuçlarına göre, CoFeCrAl ve CoFeCrGe alaşımlarının dinamiksel olarak kararlı oldukları sonucuna varıldı. Fakat CoFeCrGa ve CoFeCrSi alaşımlarının fonon modlarında negatif değerler görüldüğünden dinamiksel olarak kararsız oldukları belirlendi.
- Termodinamik özelliklerinden Debye sıcaklıkları arasında CoFeCrAl alaşımının en yüksek CoFeCrGe alaşımının ise en düşük değere sahip olduğu görüldü.

ii. CoFeTiY(Y=Al, Ga, Si, Ge, As ve Sb) dörtlü Heusler alaşımları için;

- Örgü sabiti değerleri literatürde yer alan Wien2k programı [37] ile hesaplanan sonuçlara göre sırasıyla %0,07; %0,03; %0,16; %0,43; %0,12; %0,24'lük fark ile uyumlu olarak hesaplandı. Ayrıca literatürdeki diğer yer alan çalışmalar ile de oldukça uyumludur. Bunların yanı sıra, örgü sabitleri (Y=Al, Ga, Si, Ge, As ve Sb) elementlerine göre kıyaslandığında ise $a_{Sb} > a_{As} > a_{Ge} > a_{Ga} > a_{Al} > a_{Si}$, Bulk modülleri ise $B_{Al} > B_{Si} > B_{Ge} > B_{Ga} > B_{As} > B_{Sb}$ şeklinde bir ilişkiye sahiptir.
- Manyetik özellikler kapsamında yapılan hesaplamalardan, CoFeTiAl ve CoFeTiGa dörtlü Heusler alaşımlarının manyetik olmadıkları ve diğer alaşımların manyetik özellik gösterdiği anlaşıldı. Bunun yanı sıra, bu alaşımlar için SPD'ye göre toplam manyetik momentleri hesaplanarak elde edilen değerlerle karşılaştırılıp doğrulama yapıldı ve oldukça uyumlu sonuçlar elde edildi.
- Bu alaşımların, elektronik özellikleri incelendiğinde, CoFeTiAl alaşımı yarıiletken olduğu görüldü. CoFeTiAl alaşımı için 0,18 eV'luk yasak enerji aralığı hesaplandı. CoFeTiGa alaşımının ise boşluksuz yarıiletken olduğu görüldü. Ayrıca, CoFeTiY (Y=Si, Ge, As ve Sb) alaşımları ise yarı-metalik karakterde oldukları görüldü ve spin aşağı yöneliminde yasak enerji alalıkları sırasıyla 0,59 eV; 0,40 eV; 0,35 eV ve 0,48 eV olarak elde edildi.
- Hesaplanan elastik özelliklerden, hepsinin mekanik kararlılık şartlarını sağladığı ve mekaniksel olarak kararlı oldukları görüldü. Aynı zamanda, bu alaşımların $B/G > 1,75$ sınırından yüksek olduğu görülerek sünek oldukları anlaşıldı. Ayrıca az sıkışabilirlikte oldukları ve en fazla sıkışabilirliğe CoFeTiAs alaşımının sahip olduğu belirlendi. Sertlik bakımından ise aralarında CoFeTiAl alaşımının en sert olduğu sonucuna varıldı. Bunların yanı sıra, bu tez çalışmasında incelenen tüm alaşımlar arasında Young modülü ve kayma modülü en yüksek olan CoFeTiAl alaşımının en yüksek ortalama ses hızına sahip olduğu görüldü.

- Titreşim özellikleri kapsamında yapılan hesaplama sonuçlarına göre, bu alaşımlarının hepsinin dinamiksel olarak kararlı oldukları sonucuna varıldı.
- Termodinamik özelliklerinden Debye sıcaklıkları arasında CoFeTiAl alaşımının en yüksek CoFeTiAs alaşımının ise en düşük değere sahip olduğu görüldü.

iii. CoFeVY (Y=Al, Ga, Si, Ge, As ve Sb) dörtlü Heusler alaşımları için;

- Örgü sabiti değerleri literatürde yer alan Wien2k programı [37] ile hesaplanan sonuçlara göre sırasıyla %0,12, %0,19; %0,20; %0,38; %0,35; %0,27'lik fark ile uyumlu olarak hesaplandı. Ayrıca literatürdeki diğer yer alan çalışmalar ile de oldukça uyumludur. Bunların yanı sıra, örgü sabitleri (Y=Al, Ga, Si, Ge, As ve Sb) elementlerine göre kıyaslandığında ise $a_{Sb} > a_{As} > a_{Ge} > a_{Ga} > a_{Al} > a_{Si}$, Bulk modülleri ise $B_{Al} > B_{Si} > B_{Ge} > B_{Ga} > B_{Sb} > B_{As}$ şeklinde bir ilişki vardır.
- Manyetik özellikler kapsamında yapılan hesaplamalardan, bu alaşımlarının manyetik özellik gösterdiği anlaşıldı. CoFeVGe alaşımının literatürde yer alan Wien2k programı [37] ile yapılan hesaplama sonucundan toplam manyetik momenti % 34'lük bir fark ile farklı bulunmuştur. Fakat bunun yanı sıra, bu alaşımlar için SPD'ye göre toplam manyetik momentleri hesaplanarak elde edilen değerlerle karşılaştırılıp doğrulama yapıldı ve oldukça uyumlu sonuçlar elde edildi.
- Bu alaşımlar için yapılan elektronik özellikler incelendiğinde, CoFeVAs ve CoFeVSb alaşımlarının yarı-metalik karakterde oldukları görüldü. Spin aşağı yöneliminde CoFeVSb alaşımı için yasak enerji aralığı 0,45 eV olarak hesaplandı. Ayrıca, CoFeVY (Y=Al, Ga, Si ve Ge) alaşımlarının ise yarı-metalığe yakın karakterde olduğu sonucuna varıldı.
- Hesaplanan elastik özelliklerden, hepsinin mekanik kararlılık şartlarını sağladığı ve mekaniksel olarak kararlı oldukları görüldü. Aynı zamanda, bu alaşımların $B/G > 1,75$ sınırından yüksek olduğu görülerek sünek oldukları anlaşıldı. Ayrıca az sıkışabilirlikte oldukları ve en fazla sıkışabilirliğe CoFeVAs alaşımının sahip olduğu belirlendi. Bunların yanı sıra, sertlik bakımından aralarında CoFeVSi alaşımının en sert olduğu sonucuna varıldı.
- Titreşim özellikleri kapsamında yapılan hesaplama sonuçlarına göre, CoFeVY (Y=Al, Ga, Ge, As ve Sb) alaşımlarının dinamiksel olarak kararlı oldukları sonucuna varıldı. Fakat programsal bir hatadan dolayı CoFeVSi alaşımının titreşim özellikleri hesaplanamadı.
- Termodinamik özelliklerinden Debye sıcaklıkları arasında CoFeVAl alaşımının en

yüksek CoFeVAs alaşımasının ise en düşük değere sahip olduğu görüldü.

iv. CoRhMnZ (Z=Ga, Sn ve Sb) dörütlü Heusler alaşımları için;

- Örgü sabiti değeri literatürde yer alan deneysel ve teorik [41] çalışmadaki sonuçlara göre sırasıyla %1,12 - %0,02; %0,29 - %0,05 ve %2,63 - %0,07'lik fark ile teorik sonuçlarla daha uyumlu olarak hesaplandı. Bu alaşımların elde edilen örgü sabitleri ve Bulk modülleri Z (Z=Ga, Sn ve Sb) elementine göre karşılaştırıldığında ise örgü sabitleri arasında $a_{Sb} > a_{Sn} > a_{Ga}$ ve Bulk modülleri arasında ise $B_{Sb} < B_{Sn} < B_{Ga}$ bir ilişki olduğu görülmektedir. Dolayısıyla bu alaşımların örgü sabiti değeri artarken Bulk modülü değeri azalmaktadır.
- Manyetik özellikler kapsamında yapılan hesaplamalardan, bu alaşımların manyetik özellik gösterdiği bulundu. Ayrıca, bu alaşımların SPD'ye göre toplam manyetik momentleri hesaplanarak elde edilen değeri ile karşılaştırılıp doğrulama yapıldı ve oldukça uyumlu sonuçlar elde edildi. Bu sonuçlara göre toplam manyetik momentleri diğer bu çalışmada yer alan diğer alaşımlar arasında en yüksek değerde olduğu görüldü.
- Elektronik özellikleri incelendiğinde, bu alaşımlarının yarı-metalğe yakın davranış sergiledikleri sonucuna varıldı. Ayrıca, CoRhMnSb alaşımı için Fermi seviyesinin hemen altında valans ile iletkenlik bantları arasında 0,25 eV'luk bir yasak enerji aralığı hesaplandı.
- Hesaplanan elastik özelliklerden, hepsinin mekanik kararlılık şartlarını sağladığı ve mekaniksel olarak kararlı oldukları görüldü. Aynı zamanda, bu alaşımların $B/G > 1,75$ sınırından yüksek olduğu görüldüğü sünük oldukları anlaşıldı. Ayrıca az sıkışabilirlikte oldukları ve en fazla sıkışabilirliğe CoRhMnSn alaşımasının sahip olduğu belirlendi. Bunların yanı sıra, sertlik bakımından aralarında CoRhMnGa alaşımasının en sert olduğu sonucuna varıldı.
- Titreşim özellikleri kapsamında yapılan hesaplama sonuçlarına göre, bu alaşımlarının hepsinin dinamiksel olarak kararlı oldukları sonucuna varıldı.
- Termodinamik özelliklerinden Debye sıcaklıkları arasında CoRhMnGa alaşımasının en yüksek CoRhMnSb alaşımasının ise en düşük değere sahip olduğu görüldü.

v. CuCoMnGa ve FeNiMnAl dörütlü Heusler alaşımları için;

- Örgü sabiti değeri hesaplandı. CuCoMnGa alaşımı için literatürde yer alan FLAPW metoduna [41] göre hesaplanan değeri ile %0,65'lik, XRD [2] ölçümündeki değeri ile %0,67'lik fark ile uyumlu olarak hesaplandı. Ayrıca F-43m kristal simetrisindeki

FeNiMnAl dörütlü Heusler alaşımlının literatür taraması sonucunda her hangi bir çalışması bulunmadığı için karşılaştırma yapılamadı.

- Manyetik özellikler kapsamında yapılan hesaplamalardan, bu alaşımların her ikisinde manyetik özellik gösterdiği bulundu. Ayrıca, SPD'ye göre toplam manyetik momentleri hesaplanarak elde edilen değerlerle karşılaştırılıp doğrulama yapıldı ve oldukça uyumlu sonuçlar elde edildi.
- Elektronik özellikler kapsamında ise, CuCoMnGa alaşımlının metalik karakterde dolayısıyla düzenli ferromanyet olduğu ve FeNiMnAl alaşımlının ise yarı-metalik karakterde olduğu görüldü. Ayrıca, FeNiMnAl alaşımlının spin aşağı yöneliminde 0,2 eV'luk yasak enerji aralığı hesaplandı.
- Hesaplanan elastik özelliklerden, her iki alaşımlında mekanik kararlılık şartlarını sağladığı ve mekaniksel olarak kararlı oldukları görüldü. Aynı zamanda, CuCoMnGa alaşımlının $B/G > 1,75$ sınırından yüksek olduğu görülerek sünek, FeNiMnAl alaşımlının ise bu sınır değerinin altında olduğu görülerek kırılğan olduğu anlaşıldı. Ayrıca az sıkışabilirlikte oldukları ve CuCoMnGa alaşımlının daha fazla sıkışabilirliğe sahip olduğu belirlendi. Bunların yanı sıra, FeNiMnAl alaşımlının CuCoMnGa alaşımlından daha sert olduğu sonucuna varıldı.
- Titreşim özellikleri kapsamında yapılan hesaplama sonuçlarına göre, FeNiMnAl alaşımlı dinamiksel olarak kararlı iken CuCoMnGa alaşımlının ise 0,2 GPa basınç altında dinamiksel olarak kararlı olduğu sonucuna varıldı. Bu sonuca göre, CuCoMnGa alaşımlının uygulanan basınç ile kararsız fazdan kararlı faza geçtiği söylenebilir.
- Termodinamik özelliklerinden Debye sıcaklıkları arasında FeNiMnAl alaşımlının CuCoMnGa alaşımlından daha yüksek değere sahip olduğu görüldü.

Bütün alaşımlar için yapılan termodinamik hesaplama sonuçlarına göre, ısı sığasının düşük sıcaklıklarda $\approx T^3$ davranışı sergilemekteyken, yüksek sıcaklıklara doğru gidildikçe Dulong-Petit limiti ($\approx 3NR$) olarak bilinen sabite yaklaşmakta olduğu görüldü. Aynı zamanda ısı sığasının $T \leq 250$ K'de hızla artmaktayken $T > 250$ K'de ise yavaşça artmakta olduğu belirlendi. Ayrıca, Entropinin sıcaklığa göre değişimi incelendiğinde ise; düşük sıcaklık değerlerinde entropi hızla artmakta iken yüksek sıcaklık değerlerinde yavaşça artmakta olduğu görüldü. Bunların yanı sıra, titreşim özelliklerinden bu alaşımların tamamının Brillouin bölgesinin merkezindeki optik fonon frekanslarında hem Raman hem de IR aktif moda sahip oldukları yapılan hesaplamalarda anlaşıldı.

Bu çalışmada yer alan yapısal, elektronik, elastik ve termodinamik özellikler kapsamında yapılan hesaplamaların bir kısmı literatür taramasında bulunamamış ve bu çalışma ile literatüre kazandırılmıştır. Ayrıca bu çalışmadaki bütün alaşımlar için yapılan titreşim özellikleri kapsamındaki fonon dispersiyon eğrileri ise tüm simetri yönelimleri boyunca ilk defa bu çalışmada yapılarak literatüre kazandırılmış ve yapılan bu çalışmaların bir kısmı yayına dönüştürülmüştür. Bulgu ve sonuçlarımızın, gelecekte yapılacak olan başka teorik ve deneysel çalışmalarla destekleneceği umulmaktadır.

Bu tez çalışma kapsamında yapılan, CoFeCrX (X=Al, Si, Ga ve Ge) dörtlü Heusler alaşımlarının elastik ve fonon özellikleri, 2014 yılında *Philosophical Magazine Letters* dergisinde yayınlandı [115]. Ayrıca, CoRhMnZ (Z=Ga, Sn ve Sb) alaşımlarının elastik ve titreşim özellikleri, 2013 yılında *TFD-30 Uluslararası Fizik Kongresinde* poster bildirisi olarak sunuldu ve özet kitapçığında basıldı [116]. Yine, bu çalışmadaki CoFeVAs ve CoFeVSb alaşımlarının yapısal, elektronik, elastik ve titreşim özellikleri, 2014 yılında *20. Yoğun Madde Fiziği Ankara Toplantısında* poster bildirisi olarak sunuldu ve özet kitapçığında basıldı [117]. Bunların yanı sıra, CuCoMnGa ve FeNiMnAl alaşımlarının yapısal, elastik, elektronik, manyetik ve titreşim özellikleri, 2014 yılında *International Conference of Computational Methods in Sciences and Engineering (ICCMSE 2014)*'de sözlü bildiri olarak sunuldu ve *AIP Publishing* tarafından tam metni basıldı [118,119].

KAYNAKLAR

1. Heusler, F. (1903). Über magnetische Manganlegierungen. *Verhandlungen der Deutschen Physikalischen Gesellschaft*, 5, 217-219.
2. Potter, H. H. (1928). The X-ray structure and magnetic properties of single crystals of Heusler alloy. *Proceedings of the Physical Society*, 41, 135-142.
3. Bradley, A.J. and Rodgers, J. W. (1934). The Crystal Structure of the Heusler Alloys. *Proceedings of the Royal Society London Series A*, 144 (852), 340-359.
4. Heusler, O. (1934). Crystal Structure and Ferromagnetism of the Mn-Al-Cu Alloys. *Annalen der Physik*, 19, 155-201.
5. Xu, G.Z., Liu, E.K., Du, Y., Li, G.J., Liu, G.D., Wang, W.H. and Wu, G.H. (2013). A New Spin Gapless Semiconductors Family: Quaternary Heusler Compounds. *EPL: A Letters Journal Exploring the Frontiers of Physics*, 102 (17707), 1-6.
6. Eberz, U., Seelentag, W. and Schuster, H. U. (1980). Coloured Ternary and Quaternary Zintl-Phase, *Zeitschrift für Naturforschung*, 35b, 1341-1343.
7. Zutic, I., Fabian, J. and Das Sarma, S. (2004). Spintronics: Fundamentals and applications. *Reviews of Modern Physics*, 76, 323-410.
8. Inomata, K., Ikeda, N., Tezuka, N., Goto, R., Sugimoto, S., Wojcik, M. and Jedryka, E. (2008). Highly spin-polarized materials and devices for spintronics. *Science and Technology of Advanced Materials*, 9 (014101), 1-19.
9. Wolf, S. A., Awschalom, D. D., Buhrman, R. A., Daughton, J. M., Von Molnar S., Roukes, M. L., Chtchelkanova, A. Y. and Treger, D. M. (2001). Spintronics: A Spin-Based Electronics Vision for the Future. *Science*, 294 (5546), 1488-1495.
10. Ullakko, K., Huang, J.K., Kantner, C. and O'Handley, R.C. (1996). Large Magnetic-Field-Induced Strains in Ni₂MnGa Single Crystals. *Applied Physics Letters*, 69 (13), 1966-1968.
11. Groot, R. A., Mueller, F. M., Engen, P. G. and Buschow, K. H. J. (1983). New Class of Materials: Half-Metallic Ferromagnets. *Physical Review Letters*, 50 (25), 2024-2027.
12. Kübler, J., William, A. R. and Sommers, C. B. (1983). Formation and coupling of magnetic moments in Heusler alloys. *Physical Review B*, 28 (4), 1745-1755.
13. Plogmann, S., Schlathölter, T., Braun, J., Neumann, M., Yarmoshenko, Y. M., Yablonskikh, M. V., Shreder, E. I., Kurmaev, E. Z., Wrona A. and Ślebarski, A. (1999). Local moments in Mn-based Heusler alloys and their electronic structures. *Physical Review B*, 60 (9), 6428-6438.

14. Block, T., Felser, C., Jakob, G., Ensling, J., Mühling, B., Gütlich P. and Cava, R. J. (2003). Large negative magnetoresistance effects in $\text{Co}_2\text{Cr}_{0.6}\text{Fe}_{0.4}\text{Al}$. *Journal of Solid State Chemistry*, 176 (2), 646-651.
15. Şerefoğlu, H. (2006). *Heusler Tipi Alaşımların Manyetik Özelliklerinin İncelenmesi*, Yüksek Lisans Tezi, Erciyes Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Kayseri, 6-7.
16. Bergmann, A., Grabis, J., Toperverg, B. P., Leiner, V., Wolff, M., Zabel, H. and Westerholt, K. (2005). Antiferromagnetic dipolar ordering in $[\text{Co}_2\text{MnGe/V}]_N$ multilayers. *Physical Review B*, 72 (214403), 1-12.
17. Kammerer, S., Thomas, A., Hütten, A. and Reiss, G. (2004). Co_2MnSi Heusler alloy as magnetic electrodes in magnetic tunnel junctions. *Applied Physics Letters*, 85 (1), 79-81.
18. Schmalhorst, J., Kammerer, S., Sacher, M., Reiss, G., Hütten, A. and Scholl, A. (2004). Interface structure and magnetism of magnetic tunnel junctions with a Co_2MnSi electrode. *Physical Review B* 70 (024426), 1-7.
19. Sakuraba, Y., Nakata, J., Oogane, M., Kubota, H., Ando, Y., Sakuma, A. and Miyazaki, T. (2005). Huge Spin-Polarization of L_{21} -Ordered Co_2MnSi Epitaxial Heusler Alloy Film. *Japanese Journal of Applied Physics*, 44 (35), 1100-1102.
20. Fecher, G.H., Kandpal, H.C., Wurmehl, S., Morais, J., Lin, H.J., Elmers, H.J., Schönhense G. and Felser, C. (2005). Design of magnetic materials: the electronic structure of the ordered, doped Heusler compound $\text{Co}_2\text{Cr}_{1-x}\text{Fe}_x\text{Al}$. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 17, 7237-7252.
21. Wurmehl, S., Fecher, G.H., Kroth, K., Kronast, F., Dürr, H.A., Takeda, Y., Saitoh, Y., Kobayashi, K., Lin, H.-J., Schönhense, G. and Felser, C. (2006). Electronic structure and spectroscopy of the quaternary Heusler alloy $\text{Co}_2\text{Cr}_{1-x}\text{Fe}_x\text{Al}$. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 39, 803-815.
22. Karthik, S.V., Rajanikanth, A., Takahashi, Y.K., Okhubo, T. and Hono, K. (2006). Spin polarization of quaternary $\text{Co}_2\text{Cr}_{1-x}\text{Fe}_x\text{Al}$ Heusler alloys. *Applied Physics Letters*, 89 (052505), 1-3.
23. Luo, H., Liu, H., Yu, X., Li, Y., Zhu, W., Wu, G., Zhu, X., Jiang, C. and Xu, H. (2009). Effect of Fe substitution on the magnetic properties of half-Heusler alloy CoCrAl . *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 321, 1321-1324.
24. Nehra, J., Sudheesh, V.D., Lakshmi, N. and Venugopalan, K. (2013). Structural, electronic and magnetic properties of quaternary half-metallic Heusler alloy CoFeCrAl . *Physica Status Solidi (RRL)*, 7 (4), 289-292.
25. Gao, G.Y., Hu, L., Yao, K.L., Luo, B. and Liu, N. (2013). Large half-metallic gaps in the quaternary Heusler alloys CoFeCrZ ($Z = \text{Al, Si, Ga, Ge}$): A first-principles study. *Journal of Alloys and Compounds*, 551, 539-543.

26. İnternet: Blaha, P., Schwarz, K., Madsen, G., Kvasnicka D. and Luitz, J. Institute of Material Chemistry, TU Vienna. Available at. URL: <http://www.webcitation.org/query?url=http%3A%2F%2Fwww.wien2k.at%2F&date=2016-01-29>, Son Erişim Tarihi: 29.01.2016.
27. Alhaj, B. A. and Hamad, B. (2014). Electronic and magnetic properties of $\text{Co}_{2-x}\text{Fe}_x\text{CrAl}$ alloys: Ab-initio calculations. *Physica Status Solidi B*, 251, 184-189.
28. Singh, M., Saini, H.S., Thakur, J., Reshak, A.H. and Kashyap, M.K. (2014). Tuning Fermi level of Cr_2CoZ (Z=Al and Si) inverse Heusler alloys via Fe-doping for maximum spin polarization. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 370, 81-86.
29. Ouardi, S., Fecher, G. H., Felser, C. and Kubler, J. (2013). Realization of Spin Gapless Semiconductors: The Heusler Compound Mn_2CoAl . *Physical Review Letters*, 110 (100401), 1-5.
30. Skaftouros, S., Özdoğan, K., Şaşıoğlu, E. and Galanakis, I. (2013). Search for spin gapless semiconductors: The case of inverse Heusler compounds. *Applied Physics Letters*, 102 (022402), 1-4.
31. Özdoğan, K., Şaşıoğlu, E. and Galanakis, I. (2013). Slater-Pauling behavior in LiMgPdSn -type multifunctional quaternary Heusler materials: Half-metallicity, spin-gapless and magnetic semiconductors. *J. Appl. Phys.*, 113 (193903), 1-5.
32. Gao, G. Y. and Yao, K. L. (2013). Antiferromagnetic half-metals, gapless half-metals, and spin gapless semiconductors: The D03-type Heusler alloys. *Applied Physics Letters*, 103 (232409) 1-5.
33. Bainsla, L., Mallick, A. I., Coelho, A. A., Nigam, A. K., Varaprasad, B. S. D. Ch. S., Takahashi, Y. K., Alam, A., Suresh, K. G. And Hono, K. (2015). High spin polarization and spin splitting in equiatomic quaternary CoFeCrAl Heusler Alloy. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 394, 82-86.
34. Bainsla, L., Mallick, A. I., Raja, M. M., Coelho, A. A., Nigam, A. K., Johnson, D. D., Alam, A. and Suresh, K. G. (2015). Origin of Spin gapless semiconductor behavior in CoFeCrGa : Theory and Experiment. *Physical Review B*, 92, 045201,1-5.
35. Enamullah, Venkateswara, Y., Gupta, S., Varma, M. R., Singh, P., Suresh, K. G. and Alam, A. (2015). Electronic Structure, Magnetism and Antisite disorder in CoFeCrGe and CoMnCrAl quaternary Heusler Alloys. *Condensed Matter: Materials Science* 1, 1-7.
36. Berri, S., Maouche, D., Ibrir, M. and Zerarga, F. (2014). A first-principle study of half-metallic ferrimagnetism in the CoFeTiSb quaternary Heusler compound. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 354, 65-69.
37. Xiong, L. Yi, L. and Gao, G. Y. (2014). Search for half-metallic magnets with large half-metallic gaps in the quaternary Heusler alloys CoFeTiZ and CoFeVZ (Z=Al, Ga,Si,Ge,As,Sb). *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 360, 98-103.

38. Zhang, Y. J., Liu, Z. H., Li, G. T., Ma, X. Q. and Liu, G. D. (2014). Magnetism, band gap and stability of half-metallic property for the quaternary Heusler alloys CoFeTiZ ($Z = \text{Si, Ge, Sn}$). *Journal of Alloys and Compounds*, 616, 449-453.
39. Lui, Z. H., Zhang, Y. J., Lui, E. K., Lui, G. D., Ma, X. Q. and Wu, G. H. (2015). Role of d-d and p-d Hybridization in CoTi-based Magnetic Semiconductors with 21 and 26 Valence Electrons. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 48 (325001), 1-8.
40. Basit, L., Fecher, G. H., Chadov, S., Balke, B. and Felser, C. (2011). Quaternary Heusler Compounds without Inversion Symmetry: $\text{CoFe}_{1+x}\text{Ti}_{1-x}\text{Al}$ and $\text{CoMn}_{1+x}\text{V}_{1-x}\text{Al}$. *European Journal of Inorganic Chemistry*, 3950-3954.
41. Alijani, V., Winterlik, J., Fecher, G. H., Naghavi, S. S., Chadov, S., Gruhn T. and Felser, C. (2012). Quaternary Heusler compounds $\text{Co}_{2-x}\text{Rh}_x\text{MnZ}$ ($Z=\text{Ga, Sn, Sb}$): crystal structure, electronic structure, and magnetic properties. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 24 (046001), 1-7.
42. Alijani, V., Winterlik, J., Fecher, G.H., Naghavi, S.S. and Felser, C. (2011). Quaternary half-metallic Heusler ferromagnets for spintronics applications. *Physical Review B*, 83 (184428), 1-7.
43. Vanhoof, V. (2006). *Density Functional Theory Studies for Transition Metals: Small (Fe, Co)-clusters in fcc Ag, and the Spin Density Wave in bcc Chromium*. PHD. Thesis, Katholieke Universiteit Instituut voor Kern- en Stralingsfysica, 9-16.
44. Ashcroft, N. W. and Mermin, N. D. (1976). *Solid State Physics*. Newyork: Saunders College Publishing, 421-509.
45. Hartree, D. R. (1928). The Wave Mechanics of an Atom with a Non-Coulomb Central Field. Part I. Theory and Methods. *Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*, 24, 89-110.
46. Fock, V. (1930). Naheerungsmethode zur Lösung des quatenmechanischen Mehrkörperproblems. *Zeitschrift für Physik*, 61, 126-148.
47. Atkins, P. and Friedman, R. (1997). *Molecular Quantum Mechanics*. (Third edition). New York: Oxford Univertsity Pres Inc, 234-236.
48. Hohenberg, P. and Kohn, W. (1964). Inhomogeneous electron gas. *Physical Review*, 136, 864-871.
49. Kohn, W. and Sham, L. J. (1965). Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects. *Physical Review*, 140, 1133-1138.
50. Runge, E. and Gross, E. K. U. (1984). Density-Functional Theory for Time-Dependent Systems. *Physical Review Letters*, 52 (12), 997-1000.
51. Zhang, N. i Cheni, F. Y. and Wui, X. Q. (2015). Global optimization and oxygen dissociation on polyicosahedral $\text{Ag}_{32}\text{Cu}_6$ core-shell cluster for alkaline fuel cells. *Scientific Reports*, 5 (11984), 1-12.

52. Payne, M. C., Teter, M. P., Allan, D. C., Arias, T. A. and Joannopoulos, J. D. (1992). Iterative minimization techniques for ab-initio total energy calculations: molecular dynamics and conjugate gradients. *Reviews of Modern Physics*, 64, 1045-1097.
53. Sütü, A. (2008). *BeO'nun Çinko Sülfür Ve Wurtzite Fazlarının Yapısal, Elektronik Ve Titreşim Özelliklerinin İncelenmesi*. Yüksek Lisans Tezi, Sakarya Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Sakarya, 17-27.
54. Barth, U. and Hedin, L. (1972). A local exchange-correlation potential for the spin polarized case. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, 5, 1629-1642.
55. Ceperley, D. M. and Alder, B. J. (1980). Ground State of the Electron Gas by a Stochastic Method. *Physical Review Letters*, 45, 566-569.
56. Vosko, S. H., Wilk, L. and Nusair, M. (1980). Accurate spin-dependent electron liquid correlation energies for local spin density calculations: a critical analysis. *Canadian Journal of Physics*, 58 (8), 1200-1211.
57. Metropolis, N. and Ulam, S. (1949). The Monte Carlo method. *Journal of the American Statistical Association*, 44, 335-341.
58. Perdew, J. P. and Wang, Y. (1986). Accurate and simple density functional for the electronic exchange energy: Generalized gradient approximation. *Physical Review B*, 33, 8800-8802.
59. Perdew, J. P. and Wang, Y. (1992). Accurate and simple analytic representation of the electron-gas correlation energy. *Physical Review B*, 45, 13244-13249.
60. Perdew, J. P., Burke, K., Ernzerhof, M. (1996). Generalized Gradient Approximation Made Simple. *Physical Review Letters*, 77 (18), 3865-3868.
61. Becke, A. D. (1988). Density-functional exchange-energy approximation with correct asymptotic behavior. *Physical Review*, A38:3098-3100.
62. Perdew, J. P. (1986). Density-functional approximation for the correlation energy of the inhomogeneous electron gas. *Physical Review B*, 33, 8822-8824.
63. Lee, C., Yang, W., Parr, R. G. (1988). Development of the Colle-Salvetti correlation-energy formula into a functional of the electron density. *Physical Review B*, 37, 785-789.
64. Perdew, J.P., Shevay, J.A., Vosko, S.H., Jackson, K.A., Pederson, M.R., Singh, D.J., Fiolhais, C. (1992). Atoms, molecules, solids, and surfaces: Applications of the generalized gradient approximation for exchange and correlation. *Physical Review B*, 46, 6671-6687.
65. Perdew, J. P., Burke, K., Ernzerhof, M. (1996). Generalized Gradient Approximation Made Simple. *Physical Review Letters*, 77, 3865-3868.

66. Harrison, W. A. (1966). *Pseudopotentials in the theory of metals*. New York: Benjamin Press, 336.
67. Cohen, M. L., and Heine, V. (1970). The Fitting of pseudopotentials to Experimental Data and Their Subsequent Application. In F. Seitz and D. Turnbull (Eds.), *Solid State Physics*. New York: Academic Press, pp. 37-248.
68. Srivastava, G. P. (1990). The physics of phonons. *Adam Hilger: Bristol*, 375-387.
69. Phillips, J. C., Kleinman, L. (1959). New method for calculating wave functions in crystals and molecules. *Physical Review*, 116, 287-294.
70. Antoncik, E. (1959). Approximate formulation of the orthogonalized planewave method. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, 10, 314-320.
71. Chadi, D.J., Cohen, M.L. (1973). Special Points in the Brillouin Zone. *Physical Review B*, 8, 5747-5753.
72. Monkhorst, H. and Pack, J. (1976). Special points for brillouin-zone integrations. *Physical Review B*, 13, 5188-5192.
73. Candan, A. (2011). *Kübik Yapıdaki Co_2MnX ($X=\text{Al, Ga, Ge, Si}$) Heusler Alaşımlarının Yapısal, Elektronik, Elastik ve Titreşim Özelliklerinin Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi ile İncelenmesi*, Yüksek Lisans Tezi, Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Ankara, 41.
74. Itoh, H., Nakamichi, T., Yamaguchi, Y. and Kazama, N. (1983). Neutron Diffraction Study of Heusler Type Alloy $\text{Mn}_{0.47}\text{V}_{0.28}\text{Al}_{0.25}$. *Transactions of the Japan Institute of Metals*, 24 (5), 265-271.
75. Buschow, K. H. J. and Van Engen, P. G. (1981). Magnetic and magneto-optical properties of heusler alloys based on aluminium and gallium. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 25, 90-96.
76. Özmen, T. (2012). *$\text{Co}_2\text{MnAl}_{1-x}\text{Sn}_x$ Heusler Alaşımlarının Manyetik Özelliklerinin Belirlenmesi*, Yüksek Lisans Tezi, Gebze İleri Teknoloji Enstitüsü, Mühendislik ve Fen Bilimleri Enstitüsü, Kocaeli, 4-8.
77. Tunalı, N.K. ve Özkar, S. (1993). *Anorganik Kimya*. Ankara: Gazi Üniversitesi Yayınları, 266.
78. Boeck, J., Roy, W., Das, J., Motsnyi, V., Liu, Z., Lagae, L., Boeve, H., Dessen, K. and Borghs, G. (2002). Technology and materials issues in semiconductor-based magnetoelectronics. *Semiconductor Science and Technology*, 17, 342-354.
79. Picozzi, S., Continenza, A. and Freeman, A. J. (2002). Co_2MnX ($X=\text{Si, Ge, Sn}$) Heusler compounds: An ab initio study of their structural, electronic, and magnetic properties at zero and elevated pressure. *Physical Review B*, 66 (094421), 1-9.

80. Galanakis, I. Papanikolaou, N. and Dederichs, P. H. (2002). Origin and properties of the gap in the half-ferromagnetic Heusler alloys. *Physical Review B*, 66, (134428), 1-10.
81. Kübler, J. (1984). First principle theory of metallic magnetism. *Physica B*, 127, 257-263.
82. Durlu, T. N. (1992). *Katıhal Fiziğine Giriş* (3. Baskı). Ankara: Ankara Üniversitesi Fen Fakültesi Yayınları, 1-65.
83. Materials Design Kullanım Kılavuzu. (2012). *MedeA Manual v2.10*, 3-298.
84. Kresse, G. and Hafner, J. (1994). Ab-initio molecular dynamics for liquid metals. *Physical Review B*, 47, 558-561.
85. 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.
86. 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.
87. Parlinski, K., Li Z. Q. and Kawazoe Y. (1997). First-Principles Determination of the Soft Mode in Cubic ZrO_2 . *Physical Review Letters*, 78, 4063-4066.
88. 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.
89. Kresse, G. and Joubert, D. (1999). From ultrasoft pseudopotentials to the projector augmented-wave method. *Physical Review B*, 59, 1758-1775.
90. 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.
91. Sürücü, G. (2014). $W_{1-x}Tc_xB_2$ ($x=0.1\sim0.9$), Pd_3X ($X=Ti, Zr, Hf$) alaşımlarının ve $Ti_{n+1}GaN_n$ ($n=1,2,3$) bileşiklerinin ab initio yöntemlerle incelenmesi, Doktora Tezi, Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Ankara, 20-21.
92. İnternet: Kresse, G., Marsman, M., Furthmüller, J. (October, 2015). Vasp Kullanım Klavuzu "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.
93. 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.

94. Wu, Z., Zhao, E., Xiang, H., Hao, X., Liu, X., Meng, J. (2007). Crystal structures and elastic properties of superhard IrN_2 and IrN_3 from first principles. *Physical Review B*, 76 (054115) 1-15.
95. Voigt, W. (1928). *Lehrbuch der Kristallphysik* (Second edition). Berlin-Leipzig: Teubner Verlag 954-964.
96. Reuss, A. (1929). Berechnung der Fließgrenze von Mischkristallen auf Grund der Plastizitätsbedingung für Einkristalle. *Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik*, 9, 49-58.
97. Hill, R. (1952). The Elastic Behaviour of a Crystalline Aggregate. *Proceedings of the Physical Society. Section A*, 65, 349-354.
98. Nye, J. F. (1985). Physical Properties of Crystals: Their Representation by Tensors and Matrices. *Clarendon, Oxford*, 145-147.
99. Pugh, S. F. (1954). XCII. Relations between the elastic moduli and the plastic properties of polycrystalline pure metals. *Philosophical Magazine: Series 7*, 45, 823-843.
100. Özışık, H. (2011). *GeI_2 , Re_2C , La-Bi ve Ln_2O_3 ($\text{Ln}=\text{Sc}$, Y , La-Lu) bileşiklerinin yapısal, mekanik ve elektronik özelliklerinin ab initio yöntemlerle hesaplanması*, Doktora Tezi, Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Ankara, 21-23.
101. Grüneisen, E. (1926). Zustand des festen Körpers, Thermische Eigenschaften der Stoffe. In H. Greiger and K. Scheel (Eds.) *Handbuch der Physik*, Berlin: Springer, pp. 1-59.
102. Mayer, B., Anton, H., Bott, E., Methfessel, M., Sticht, J., Harris, J. and Schmidt, P. (2003). Ab-initio calculation of the elastic constants and thermal expansion coefficients of Laves phases. *Intermetallics*, 11, 23-32.
103. İnternet: Parlinski, K. (January, 2008). PHONON Software. URL: <http://www.webcitation.org/query?url=http%3A%2F%2Fwolf.ifj.edu.pl%2Fphonon%2F&date=2016-01-29>, Son Erişim Tarihi: 29.01.2016.
104. Parlinski, K. (1999). Calculations of phonon dispersion curves by the direct method. In M. R. Johnson, G. J. Kearley and H. G. Büttner (Eds.), *Neutrons and Numerical Methods N2M*, American Institute of Physics, pp. 121-126.
105. Landolt, H., Borstein, R., Madelung, O., Schulz, M. and Weiss, H. (Eds.). (1982). *Landolt-Borstein: Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology*, Berlin: Springer-Verlag, 17.
106. Deligöz, E. (2007). *Bazı ikili (CdS , CdSe , CdTe , CdF_2 , AlBi , BBi) bileşiklerin yapısal, elektronik, elastik, termodinamik ve titreşimsel özelliklerinin ab initio yöntemle incelenmesi*, Doktora Tezi, Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Ankara, 77-82.

107. Özışık, H. (2012). *NaIn, NaTl, Na-As, K-As ve Rb-As bileşiklerinin yapısal, mekanik ve elektronik özelliklerinin ab initio yöntemlerle hesaplanması*. Doktora Tezi, Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Ankara, 31-32.
108. Bacon, G. E. and Plant, J. S. (1971). Chemical ordering in Heusler alloys with the general formula A_2BC or ABC . *Journal of Physics F: Metal Physics*, 1, 524-532.
109. İnternet: The Artemis Users' Guide. URL: <http://www.webcitation.org/query?url=https%3A%2F%2Fbruceravel.github.io%2Fdemeter%2Fartug%2Fatoms%2Fspace.html%23decodingthehermand-maguinnotation&date=2016-01-29>, Son Erişim Tarihi: 29.01.2016.
110. Methfessel, M. and Paxton, A. T. (1989). High-precision sampling for brillouin-zone integration in metals. *Physical Review B*, 40 (6), 3616-3621.
111. Benkabou, M., Rached, H., Abdellaoui, A., Rached, D., Khenata, R. and Elahmar, M. H. (2015). Electronic Structure and Magnetic Properties of Quaternary Heusler Alloys $CoRhMnZ$ ($Z=Al, Ga, Ge$ and Si) via First-Principle Calculations. *Journal of Alloys and Compounds*, 647, 276-286.
112. Born, M. and Huang, K. (1940). *Dynamical Theory of Crystal Lattice*. İngiltere: Clarendon Press, Oxford, 140-153.
113. Haines, J., Leger, J. M. and Bocquillon, G. (2001). Synthesis and Design of Superhard materials. *Annual Review of Materials Research*, 31, 1-23.
114. Petit, A. T. and Dulong, P. L. (1819). Recherches sur quelques points importants de la Théorie de la Chaleur. *Annales de Chimie et de Physique*, 10, 395-413.
115. İyigör, A. and Uğur, Ş. (2014). Elastic and phonon properties of quaternary Heusler alloys $CoFeCrZ$ ($Z = Al, Si, Ga$ and Ge) from density functional theory. *Philosophical Magazine Letters*, 94 (11), 708-715.
116. İyigör, A. ve Uğur, Ş. (2013, 2-5 Eylül). *Dörtlü Heusler Bileşiklerinin Elastik ve Foton Özellikleri*. TFD 30 - Türk Fizik Derneği 30. Uluslararası Fizik Kongresinde sunuldu, İstanbul.
117. İyigör, A. and Uğur, Ş. (2014, 26 Aralık). *CoFeVAs ve CoFeVSb Dörtlü Heusler Alaşımlarının Yapısal, Elektronik, Elastik ve Titreşim Özelliklerinin İncelenmesi*. 20. Yoğun Madde Fiziği Ankara Toplantısında sunuldu, Ankara.
118. İyigör, A. and Uğur, Ş. (2014). Structural, elastic, electronic, magnetic and vibrational properties of $CuCoMnGa$ under pressure. *AIP Conference Proceedings*, 1618, 193-196.
119. Uğur, Ş. and İyigör, A. (2014). Calculations of structural, elastic, electronic, magnetic and phonon properties of $FeNiMnAl$ by the first principles. *AIP Conference Proceedings*, 1618, 186-189.



ÖZGEÇMİŞ

Kişisel Bilgiler

Soyadı, adı : İYİGÖR, Ahmet
 Uyruğu : T.C.
 Doğum tarihi ve yeri : 15.01.1987, Bakırköy
 Medeni hali : Evli
 Telefon : 0 (543) 813 24 99
 E-mail : ahmetiyigor@gazi.edu.tr
 ahmetiyigor@ahievran.edu.tr



Eğitim

Derece	Eğitim Birimi	Mezuniyet tarihi
Doktora	Gazi Üniversitesi/FİZİK	2016
Yüksek lisans	Gazi Üniversitesi /FİZİK	2011
Lisans	Gazi Üniversitesi/FİZİK	2008
Lise	Orhan Gazi Lisesi	2004

İş Deneyimi

Yıl	Yer	Görev
2012-Halen	Ahi Evran Üniversitesi	Uzman

Yabancı Dil

İngilizce

Yayınlar

A. SCI, SCI-EXP., SSCI, AHCI Tarafından Taranan Makaleler

1. İyigör, A. and Uğur Ş. (2014). Elastic and phonon properties of quaternary Heusler alloys CoFeCrZ ($Z = \text{Al, Si, Ga and Ge}$) from density functional theory. *Philosophical Magazine Letters*, 94 (11), 708-715. *
2. Charifi, Z., Baaziz, H., Noui, S., Uğur, Ş., Uğur, G., İyigör, A., Candan, A. and Al-Douri, Y. (2014). Phase transition of Nowotny-Juza NaZnX ($X = \text{P, As and Sb}$) compounds at high pressure: Theoretical investigation of structural, electronic and vibrational properties. *Computational Materials Science*, 87, 187-197.
3. Arıkan, N., İyigör, A., Candan, A., Uğur, Ş., Charifi, Z., Baaziz, H. and Uğur, G. (2014). Electronic and phonon properties of the full-Heusler alloys X_2YAl ($X = \text{Co, Fe and Y = Cr, Sc}$): a density functional theory study. *Journal of Materials Science*, 49, 4180-4190.
4. Arıkan, N., İyigör, A., Candan, A., Özduran, M., Karakoç, A., Uğur, Ş., Uğur, G., Bouhemadou, A., Bin-Omran, S. and Guechi, N. (2014). Ab-initio study of the structural, electronic, elastic and vibrational properties of the intermetallic Pd_3V and Pt_3V alloys in the L_{12} phase. *Metals and Materials International*, 20, 765-773.
5. Arıkan, N., İyigör, A., Candan, A., Uğur, Ş., Charifi, Z., Baaziz, H. and Uğur, G. (2013). Structural, elastic, electronic and phonon properties of scandium-based compounds ScX_3 ($X = \text{Ir, Pd, Pt and Rh}$): an ab initio study. *Computational Materials Science*, 79, 703-709.
6. Arıkan, N., Ersen, M., Ocak, H.Y., İyigör, A., Candan, A., Uğur, Ş., Uğur, G., Khenata, R. and Varshney, D. (2013). Ab initio study of phonon dispersion and elastic properties of L_{12} intermetallics Ti_3Al and Y_3Al . *Modern Physics Letters B*, 27, 1350224.
7. Uğur, Ş., İyigör, A., Charifi, Z., Baaziz, H. and Ellialtıoğlu, M.R. (2013). Structural, electronic and vibrational properties of ordered intermetallic alloys CoZ ($Z = \text{Al, Be, Sc and Zr}$) from first-principles total-energy calculations. *Philosophical Magazine*, 93, 3260-3277.

B. ULUSLARARASI TOPLANTILAR, KONFERANSLAR VE SEMİNERLER

1. İyigör, A. ve Uğur, Ş. (2015, 17-18 November). *Investigation of electronic, phonon and thermodynamic properties of quaternary Heusler alloys CoFeTiY ($Y = \text{As and Sb}$): An ab-initio study*. Paper presented at the 1st International Workshop on Thermodynamic of Metallic Alloys (WITAM 2015), Algeria. *

2. İyigör, A. and Uğur, Ş. (2014). Structural, elastic, electronic, magnetic and vibrational properties of CuCoMnGa under pressure. *AIP Conference Proceedings*, 1618, 193-196. *
3. Uğur, Ş. and İyigör, A. (2014). Calculations of structural, elastic, electronic, magnetic and phonon properties of FeNiMnAl by the first principles. *AIP Conference Proceedings*, 1618, 186-189. *
4. Özduran, M., Turgut, K., Arıkan, N., İyigör, A. and Candan, A. (2014). The first principle study of Ni₂ScGa and Ni₂TiGa. *AIP Conference Proceedings*, 1618, 178-181.
5. İyigör, A. ve Uğur, Ş. (2013, 2-5 Eylül). CoRhMnX (X=Ga, Sn ve Sb) Dörtlü Heusler Bileşiklerinin Elastik Ve Fonon Özellikleri. TFD 30 - Türk Fizik Derneği 30. Uluslararası Fizik Kongresinde sunuldu, İstanbul. *
6. İyigör, A., Candan, A., Uğur, Ş., Uğur, G., Arıkan, N. ve Özduran, M. (2013, 2-5 Eylül). Dy-Ga (Disprosiyum-Galyum) Bileşiklerinin Yapısal ve Elastik Özellikleri. TFD 30 - Türk Fizik Derneği 30. Uluslararası Fizik Kongresinde sunuldu, İstanbul..
7. İyigör, A., Uğur, Ş. and Ellialtıoğlu, R. (2010, September). *First-Principles Calculations of Elastic and Vibrational Properties for CoBe, CoSc and CoZr*. Paper presented at the 27. International Physics Congress, İstanbul.
8. Nay, B., İyigör, A., Uğur, Ş. and Ellialtıoğlu, R. (2010, September). *Ab-initio Study of Structural, Elastic and Electronic Properties of ScSe and ScTe Compounds*. Paper presented at the 27. International Physics Congress, İstanbul.
9. Uğur, Ş., İyigör, A., Ekinci, F. and Ellialtıoğlu, R. (2010, September). *Magnetic and Electronic Properties of L2₁-Phase Heusler Alloy Fe₂CrSi*. Paper presented at the 27. International Physics Congress, İstanbul.
10. Uğur, G., Ekinci, F., İyigör, A. and Ellialtıoğlu, R. (2010, September). *First-Principles GGA and LDA+U Study of Cubic Fe₂CoSi*. Paper presented at the 27. International Physics Congress, İstanbul.

C. ULUSAL TOPLANTILAR, KONFERANSLAR VE SEMİNERLER

1. İyigör, A. ve Uğur, Ş. (2014, 26 Aralık). CoFeVAs ve CoFeVSb Dörtlü Heusler Alaşımlarının Yapısal, Elektronik, Elastik ve Titreşim Özelliklerinin İncelenmesi. 20.Yoğun Madde Fiziği Ankara Toplantısında sunuldu, Ankara. *
2. Uğur, Ş., İyigör, A. ve Ellialtıoğlu, R. (2014, 26 Aralık). MNNi₃ (M = Al, Ga ve In) Ters Perovskite Üçlü Bileşiklerinin Yapısal, Elektronik ve Elastik Özelliklerinin Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi ile İncelenmesi. 20.Yoğun Madde Fiziği Ankara Toplantısında sunuldu, Ankara.

3. İyigör, A., Uğur, Ş. ve Ellialtıoğlu, R. (2013, 20 Aralık). *SmX (X = S, Se ve Te) Bileşiklerinin Yapısal, Elastik ve Titreşim Özelliklerinin Hesaplanması*. 19.Yoğun Madde Fiziği Ankara Toplantısında sunuldu, Ankara.
4. Uğur, G., Candan, A., İyigör, A., Uğur, Ş. ve Ellialtıoğlu, R. (2011, 25 Kasım). *Yarı-metalik Co₂CrAl Heusler Alaşımının Yapısal, Manyetik, Elastik, Elektronik ve Fonon Özelliklerinin İncelenmesi*. 18.Yoğun Madde Fiziği Ankara Toplantısında sunuldu, Ankara.
5. Candan, A., İyigör, A., Uğur, G., Uğur, Ş. ve Ellialtıoğlu, R. (2011, 25 Kasım). *L2₁ Yapıdaki Fe₂CrAl ve C1_b Yapıdaki FeCrAl Alaşımlarının Yapısal, Elektronik, Elastik ve Fonon Özelliklerinin İncelenmesi*. 18.Yoğun Madde Fiziği Ankara Toplantısında sunuldu, Ankara.
6. Candan, A., İyigör, A., Uğur, G., Uğur, Ş. ve Ellialtıoğlu, R. (2011, 25 Kasım). *Tam-Heusler Co₂TiSn ve Yarı-Heusler CoTiSn Alaşımlarının Manyetik, Elektronik, Elastik ve Fonon Özelliklerinin İncelenmesi*. 18.Yoğun Madde Fiziği Ankara Toplantısında sunuldu, Ankara.
7. İyigör, A., Candan, A., Uğur, Ş., Uğur, G. ve Ellialtıoğlu, R. (2011, 25 Kasım). *C15_b Yapıdaki YMgNi₄ ve LaMgNi₄ Üçlü Bileşiklerinin Yapısal, Elastik ve Elektronik Özellikleri*. 18.Yoğun Madde Fiziği Ankara Toplantısında sunuldu, Ankara.
8. İyigör, A., Candan, A., Uğur, Ş., Uğur, G. ve Ellialtıoğlu, R. (2011, 25 Kasım). *Fe₂ScAl ve Co₂ScAl Heusler Alaşımlarının Kübik L2₁ Yapıdaki Elastik ve Fonon Özelliklerinin Teorik Olarak İncelenmesi*. 18.Yoğun Madde Fiziği Ankara Toplantısında sunuldu, Ankara.
9. Uğur, G., İyigör, A., Uğur, Ş. ve Ellialtıoğlu, R. (2010, 5 Kasım). *Fe₃Si Heusler Alaşımının Yapısal, Manyetik ve Elektronik Özellikleri*. 17.Yoğun Madde Fiziği Ankara Toplantısında sunuldu, Ankara.
10. İyigör, A., Uğur, Ş., Uğur, G. ve Ellialtıoğlu, R. (2010, 5 Kasım). *CoAl Alaşımının Elastik ve Termodinamik Özelliklerinin Hesaplanması*. 17.Yoğun Madde Fiziği Ankara Toplantısında sunuldu, Ankara.
11. İyigör, A., Uğur, Ş., Uğur, G. ve Ellialtıoğlu, R. (2010, 5 Kasım). *Co₂ScAl Heusler Alaşımının L2₁ Yapıda Elektronik Özelliklerinin Hesaplanması*. 17.Yoğun Madde Fiziği Ankara Toplantısında sunuldu, Ankara.
12. İyigör, A., Uğur, Ş. ve Ellialtıoğlu, R. (2009, 6 Kasım). *B2 Yapıdaki CoAl Alaşımının Yapısal, Elektronik ve Titreşim Özelliklerinin Teorik Olarak İncelenmesi*. 16. Yoğun Madde Fiziği Toplantısında sunuldu, Ankara.

* Bu tez çalışmasından çıkan yayınlar.



GAZİ GELECEKTİR..