



T.C.
KIRŞEHİR AHİ EVRAN ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ
İLERİ TEKNOLOJİLER ANABİLİM DALI

**VANADYUM KATKILI Ti_2FeGa TERS HEUSLER
TİPİ ALAŞIMLARIN FİZİKSEL ÖZELLİKLERİNİN
YOĞUNLUK FONKSİYONEL TEORİSİ İLE
İNCELENMESİ**

AHMET SEFA MERİÇ

YÜKSEK LİSANS TEZİ

KIRŞEHİR / 2020



T.C.
KIRŞEHİR AHİ EVRAN ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ
İLERİ TEKNOLOJİLER ANABİLİM DALI

**VANADYUM KATKILI Ti_2FeGa TERS HEUSLER
TİPİ ALAŞIMLARIN FİZİKSEL ÖZELLİKLERİNİN
YOĞUNLUK FONKSİYONEL TEORİSİ İLE
İNCELENMESİ**

AHMET SEFA MERİÇ

YÜKSEK LİSANS TEZİ

DANIŞMAN

Doç. Dr. Osman ÖRNEK

II. DANIŞMAN

Dr. Öğr. Üyesi Ahmet İYİGÖR

KIRŞEHİR / 2020

Bu çalışma 24.01.2020 tarihinde ařağıdaki jüri tarafından İleri Teknolojiler Anabilim Dalı, İleri Teknolojiler Programında Yüksek Lisans olarak kabul edilmiştir.

Tez Jürisi



Doç. Dr. Nihat ARIKAN
Kırşehir Ahi Evran Üniversitesi
Eğitim Fakültesi



Doç. Dr. Osman ÖRNEK
Kırşehir Ahi Evran Üniversitesi
Mimarlık-Mühendislik Fakültesi



Doç. Dr. Mustafa ÖZDURAN
Kırşehir Ahi Evran Üniversitesi
Fen-Edebiyat Fakültesi



Dr. Öğr. Üyesi Ahmet İYİĞÖR
Kırşehir Ahi Evran Üniversitesi
Teknik Bilimler MYO



Dr. Öğr. Üyesi Arif KÖSEMEN
Muş Alparslan Üniversitesi
Varto MYO

TEZ BİLDİRİMİ

Tez içindeki bütün bilgilerin etik davranış ve akademik kurallar çerçevesinde elde edilerek sunulduğunu, ayrıca tez yazım kurallarına uygun olarak hazırlanan bu çalışmada bana ait olmayan her türlü ifade bilginin kaynağına eksiksiz atıf yapıldığını bildiririm.

Bu çalışma Kırşehir Ahi Evran Üniversitesi Bilimsel Araştırma Projeleri biriminin PYO-FEN.4001.14.018, FEF.A3.16.002 ve FEF.A3.16.022 numaralı projesi ile desteklenmiştir.

Ahmet Sefa MERİÇ



20.04.2016 tarihli Resmi Gazete' de yayımlanan Lisansüstü Eğitim ve Öğretim Yönetmeliğinin 9/2 ve 22/2 maddeleri gereğince; Bu Lisansüstü teze, Kırşehir Ahi Evran Üniversitesi'nin aboneli olduğu intihal yazılım programı kullanılarak Fen Bilimleri Enstitüsü'nün belirlemiş olduğu ölçütlere uygun rapor alınmıştır.



ÖNSÖZ

Tez çalışmalarım sırasında karşılaştığım tüm zorlukların çözümünde her türlü yardım ve desteğini esirgemeyen değerli danışmanım Sayın Doç. Dr. Osman ÖRNEK'e büyük bir içtenlikle teşekkür ederim. Ayrıca tez çalışmamda kullandığım programları öğrenmemde yardımcı olan, tezin yazımında zamanı, bilgisi ve her türlü desteği ile yardımını esirgemeyen değerli danışmanım Dr. Öğr. Üyesi Ahmet İYİGÖR'e teşekkür ederim.

Gerekli bilgisayar sistemi ve yazılımını sağlayan Doç. Dr. Mustafa ÖZDURAN ve Dr. Öğr. Üyesi Abdullah CANDAN'a teşekkür ederim.

Her zaman yanımda olan ve bana destek olan annem, babam, sevgili eşim Behiye MERİÇ'e ve arkadaşım Öğr. Gör. Hüseyin BAHADIR'a aynı zamanda bu çalışmayı yapabilmem için her türlü desteği veren çalışmam sürecinde Kaman ilçesinde Kaymakam olan Dr. Murat GİRGIN'e teşekkür ederim.

Ocak, 2020

Ahmet Sefa MERİÇ

İÇİNDEKİLER

	Sayfa No
ÖNSÖZ	iv
İÇİNDEKİLER.....	v
ŞEKİL LİSTESİ	vii
TABLO LİSTESİ.....	viii
SİMGE VE KISALTMA LİSTESİ	ix
ÖZET	x
SUMMARY	xi
1. GİRİŞ	1
2. KURAMSAL TEMELLER	4
2.1. Giriş	4
2.2. Çok Cisim Problemi.....	4
2.3. Hartree-Fock Yaklaşımı.....	5
2.4. Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi	7
2.4.1. Hohenberg-Kohn Teoremi	7
2.4.2. Kohn-Sham Denklemleri	9
2.5. Değiş Tokuş Kolerasyon Enerjisi	10
2.5.1. Yerel Yoğunluk Yaklaşımı	10
2.5.2. Genelleştirilmiş Gradyent Yaklaşımı	11
2.6. Pseudopotansiyel Yaklaşım.....	12
3. TEORİ VE METODLAR	13
3.1. Heusler Alaşımları.....	13
3.2. Yüzey Merkezli Kübik (fcc) ve Basit Tetragonal Örgülerin Yüksek Simetri Noktaları.....	14
3.3. Materials Design Paket Programı	16
3.4. VASP Program Paketi	17
3.5. Elastik Özellikler	19
3.5.1. Elastik Sabitler	19
3.5.2. Voigt-Reuss-Hill Yöntemi.....	21
4. BULGULAR VE TARTIŞMA.....	23

Sayfa No

4.1. $(Ti_{1-x}V_x)_2FeGa$ ($x = 0; 0,25; 0,5; 0,75; 1$) Alařımlarının Yapısal Özellikleri	24
4.2. $(Ti_{1-x}V_x)_2FeGa$ ($x = 0; 0,25; 0,5; 0,75; 1$) Alařımlarının Manyetik ve Elektronik Özellikleri.....	26
4.3. $(Ti_{1-x}V_x)_2FeGa$ ($x = 0; 0,25; 0,5; 0,75; 1$) Alařımlarının Mekanik Özellikleri.....	34
5. SONUÇ VE ÖNERİLER	42
KAYNAKLAR.....	45
ÖZGEÇMİŐ	51



ŞEKİL LİSTESİ

	Sayfa No
Şekil 3.1. Yarı, tam, dördlü ve ters Heusler alaşımlarının kristal yapısı.....	13
Şekil 3.2. Yüzey merkezli kübik örgünün yüksek simetri noktaları	15
Şekil 3.3. Basit tetragonal örgünün yüksek simetri noktaları.....	16
Şekil 4.1. $(Ti_{1-x}V_x)_2FeGa$ ($x = 0; 0,25; 0,5; 0,75; 1$) alaşımlarının kristal yapıları	23
Şekil 4.2. Ti_2FeGa ters Heusler alaşımının yüksek simetri eksenleri boyunca çizilmiş elektronik bant eğrileri, toplam ve kısmi durum yoğunlukları.....	29
Şekil 4.3. $(Ti_{0,75}V_{0,25})_2FeGa$ tetragonal alaşımın yüksek simetri eksenleri boyunca çizilmiş elektronik bant eğrileri, toplam ve kısmi durum yoğunlukları	30
Şekil 4.4. $TiVFeGa$ dördlü Heusler alaşımının yüksek simetri eksenleri boyunca çizilmiş elektronik bant eğrileri, toplam ve kısmi durum yoğunlukları	31
Şekil 4.5. $(Ti_{0,25}V_{0,75})_2FeGa$ tetragonal alaşımın yüksek simetri eksenleri boyunca çizilmiş elektronik bant eğrileri, toplam ve kısmi durum yoğunlukları	32
Şekil 4.6. V_2FeGa ters Heusler alaşımının yüksek simetri eksenleri boyunca çizilmiş elektronik bant eğrileri, toplam ve kısmi durum yoğunlukları.....	33
Şekil 4.7. Mekanik özellikleri hesaplanan Ti_2FeGa ters Heusler alaşımının yön bağımlılığı; Young modülü, doğrusal sıkıştırılabilirlik, kayma modülü ve Poisson oranı	37
Şekil 4.8. Mekanik özellikleri hesaplanan $(Ti_{0,75}V_{0,25})_2FeGa$ tetragonal alaşımının yön bağımlılığı; Young modülü, doğrusal sıkıştırılabilirlik, kayma modülü ve Poisson oranı	38
Şekil 4.9. Mekanik özellikleri hesaplanan $TiVFeGa$ dördlü Heusler alaşımının yön bağımlılığı; Young modülü, doğrusal sıkıştırılabilirlik, kayma modülü ve Poisson oranı	39
Şekil 4.10. Mekanik özellikleri hesaplanan $(Ti_{0,25}V_{0,75})_2FeGa$ tetragonal alaşımının yön bağımlılığı; Young modülü, doğrusal sıkıştırılabilirlik, kayma modülü ve Poisson oranı.....	40
Şekil 4.11. Mekanik özellikleri hesaplanan V_2FeGa ters Heusler alaşımının yön bağımlılığı; Young modülü, doğrusal sıkıştırılabilirlik, kayma modülü ve Poisson oranı.....	41

TABLO LİSTESİ

	Sayfa No
Tablo 4.1. $(\text{Ti}_{1-x}\text{V}_x)_2\text{FeGa}$ ($x = 0; 0,25; 0,5; 0,75; 1$) alaşımlarının Wyckoff pozisyonları.....	24
Tablo 4.2. $(\text{Ti}_{1-x}\text{V}_x)_2\text{FeGa}$ ($x = 0; 0,25; 0,5; 0,75; 1$) alaşımlarının örgü sabitleri ($a, c; \text{Å}$) ve hacimleri ($V; \text{Å}^3$).....	25
Tablo 4.3. $(\text{Ti}_{1-x}\text{V}_x)_2\text{FeGa}$ ($x = 0; 0,25; 0,5; 0,75; 1$) alaşımlarının toplam ve kısmi manyetik momentleri ($M_i; \mu_B$) ve spin-aşağı yöneliminde yasak enerji aralıkları ($E_g; \text{eV}$).....	27
Tablo 4.4. $(\text{Ti}_{1-x}\text{V}_x)_2\text{FeGa}$ ($x = 0; 0,25; 0,5; 0,75; 1$) alaşımlarının ikinci dereceden elastik sabitleri ($C_{11}, C_{12}, C_{13}, C_{33}, C_{44}, C_{66}; \text{GPa}$).....	35
Tablo 4.5. $(\text{Ti}_{1-x}\text{V}_x)_2\text{FeGa}$ ($x = 0; 0,25; 0,5; 0,75; 1$) alaşımlarının Bulk modülü ($B; \text{GPa}$), Kayma (Shear) modülü ($G; \text{GPa}$), Bulk modülünün Kayma modülüne oranı (B/G), Young modülü ($E; \text{GPa}$), Poisson oranı (σ) ve Anizotropi faktörü (A).....	36
Tablo 4.6. $(\text{Ti}_{1-x}\text{V}_x)_2\text{FeGa}$ ($x = 0; 0,25; 0,5; 0,75; 1$) alaşımlarının Young modülü ($E; \text{GPa}$), Sıkışabilirlik ($\beta; \text{TPa}^{-1}$), Kayma modülü ($G; \text{GPa}$) ve Poisson oranı (σ) alt ve üst sınır değerleri.....	36

SİMGE VE KISALTMA LİSTESİ

Simgeler	Açıklama
N_e	: Elektronlar
N_n	: Çekirdekler
Ψ	: Dalga fonksiyonu
E	: Toplam enerji
H	: Hemilton operatörü
M_α	: Çekirdeğin kütlesi
Z_α	: Çekirdeğin yükü
R_α	: Çekirdeğin konumu
$n(r)$: Elektron yoğunluğu
\hat{V}_x	: Değiş tokuş terim operatörü
V_{ext}	: Harici dış potansiyel
E_0	: Durum enerjisi
σ_{ij}	: Gerilme tensörü
ϵ_{kl}	: Deformasyon tensörü
C_{ijkl}	: Sertlik tensörü
C_{ij}	: Elastik sabiti
$E_{xc}[n]$: Değiş Tokuş Kolerasyon Enerjisi

Kısaltmalar	Açıklama
YFT	: Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi
QMC	: Kuantum Monte Carlo
HF	: Hartree-Fock Yaklaşımı
YYY	: Yerel Yoğunluk Yaklaşımı
GGY	: Genelleştirilmiş Gradyent Yaklaşımı
PAW	: İz Düşümsel Birleştirilmiş Dalga
fcc	: Yüzey Merkezli Kübik Örgü
MTJ	: Manyetik Tünel Bağlantıları
GMR	: Yüksek Manyeto Direnç
PBE	: Perdew-Burke-Ernzerhof
FPLO	: Tam Potansiyel Yerel Orbital
FP-LAPW	: Tam Potansiyel Doğrusallaştırılmış Genişletilmiş Düzlem Dalga
FPLO	: Tam Potansiyel Yerel Orbital
MedeA	: Materials Design Paket Programı
VASP	: The Vienna Ab-initio Simulation Package
XRD	: X-Işınları Difraktometresi
GAP	: Yasak Enerji Aralığı
CASTEP	: Cambridge Sequential Total Energy Package
PW91	: Perdew-Wang 91
WC	: Wu-Cohen
SQL	: Yapılandırılmış Sorgu Dili
US-PP	: Ultra-soft vanderbit Pseudopotansiyel
GAP	: Yasak Enerji Aralığı

ÖZET

YÜKSEK LİSANS TEZİ

VANADYUM KATKILI Ti_2FeGa TERS HEUSLER TİPİ ALAŞIMLARIN FİZİKSEL ÖZELLİKLERİNİN YOĞUNLUK FONKSİYONEL TEORİSİ İLE İNCELENMESİ

Ahmet Sefa MERİÇ

Kırşehir Ahi Evran Üniversitesi

Fen Bilimleri Enstitüsü

İleri Teknolojiler Anabilim Dalı

Danışman: Doç. Dr. Osman ÖRNEK

II. Danışman: Dr. Öğr. Üyesi Ahmet İYİGÖR

Bu çalışmada, $(Ti_{1-x}V_x)_2FeGa$ ($x = 0; 0,25; 0,5; 0,75; 1$) alaşımlarının yapısal, elektronik, manyetik ve mekanik özellikleri Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi ile genelleştirilmiş gradyent yaklaşımı kullanılarak hesaplandı. Bu alaşımların yapısal özellikler kapsamında örgü sabitleri hesaplanarak incelendi. Bu malzemeler için elektronik bant eğrileri ve durum yoğunlukları hesaplandı ve değerlendirildi. Manyetik özellikleri incelenen bu alaşımların tamamının manyetik özellik gösterdiği görüldü. Mekanik özellikler kapsamında elastik sabitler stress-strain yöntemi kullanılarak incelendi. Bu alaşımların tamamı hesaplanan elastik sabitlerinden anlaşıldığı üzere Born kararlılık kriterlerini karşıladığından bu alaşımlar mekanik olarak kararlıdır. Ayrıca, Bulk modülü, Kayma modülü, B/G oranı, Young modülü, poisson oranı ve anizotropi faktörü hesaplanarak elde edildi. Bu alaşımlar için elde edilen B/G oranından sünek bir doğaya sahip oldukları ve anizotropi faktöründen anizotropik oldukları sonucuna varıldı.

Ocak 2020, 51 Sayfa

Anahtar Kelimeler: Mekanik özellikler, Elektronik özellikler, Heusler Alaşımları

ABSTRACT

MASTER OF SCIENCE THESIS

INVESTIGATIONS OF PHYSICAL PROPERTIES OF VANADIUM- DOPED Ti_2FeGa INVERSE-HEUSLER TYPE ALLOYS WITHIN THE DENSITY FUNCTIONAL THEORY

Ahmet Sefa MERİÇ

Kirsehir Ahi Evran University

Graduate School of Sciences and Engineering

Advanced Technologies Department

Supervisor: Assoc. Prof. Dr. Osman ÖRNEK

II. Supervisor: Assist. Prof. Dr. Ahmet İYİĞÖR

In this study, the structural, electronic, magnetic and mechanical characteristics of $(Ti_{1-x}V_x)_2FeGa$ ($x = 0; 0.25; 0.5; 0.75; 1$) alloys were calculated using the generalized gradient approach with Density Functional Theory. The structural properties of these alloys were examined by calculating the lattice constants. Electronic band curves and state densities for these materials were calculated and evaluated. All of these alloys whose magnetic characteristics were examined showed magnetic characteristics. Elastic constants within the scope of mechanic characteristics were examined by using stress-strain method. As all of these alloys meet Born stability criteria as understood from the calculated elastic constants, these alloys are mechanically stable. In addition, Bulk modulus, Shear modulus, B / G ratio, Young modulus, poisson ratio and anisotropy factor were procured by calculation. It was concluded that these alloys had a ductile nature within the B / G ratio and anisotropic within anisotropy factor.

January 2020, 51 Pages

Keywords: Mechanical properties, Electronic properties, Heusler alloys

1. GİRİŞ

Heusler tipi alaşımların keşfi 1903 yılına dayanır. O zamandan beri ferromanyetik olmayan malzemeler kullanılarak elde edilebilecek olan alaşımların, termal ve elektriksel özellikleri nedeniyle araştırmacıların ilgi duyduğu malzemeler olmuştur [1]. Bu alaşımlar genelde X_2YZ formülüne sahip olan üçlü alaşımlardır. Buradaki X ve Y genellikle d elektronlu geçiş metallerini, Z ise sp elektronlu ana grup metalini temsil eden malzemelerdir [2]. İlk Heusler alaşımları dört tane fcc alt örgüden oluşan Fm-3m (#225) uzay grubundaki $L2_1$ fazında bulundu. Ardından, dört tane fcc alt örgünün bir tanesi dışarıda bırakıldığında $C1_b$ fazında F-43m (#216) uzay grubunda yer alan yarı Heusler malzemelerin elde edildiği görüldü. Bu nedenle, $L2_1$ fazında bulunan gruba tam Heusler denmektedir. Yıllar içerisinde Heusler tipi alaşımlar incelendikçe bu aileye ters ve dörtlü Heusler malzemelerde eklendi. Ters Heusler malzemeler, $L2_1$ yapısındaki tam Heusler malzemelerden X atomlarından birinin, Y veya Z atomu ile yer değiştirilmesi sonucunda XA yapısında (X_2YZ) elde edilebilir ve F-43m uzay grubunda bulunur. Bir başka Heusler tipindeki dörtlü Heusler malzemeler ise $XX'YZ$ kimyasal formülüne sahip, F-43m uzay grubundadır. Ayrıca X, X' ve Y elementleri geçiş metali grubundan olup Z elementleri ise periyodik tablonun ana grup elementidir [3]. Dörtlü Heusler tipi malzemeler için LiMgPdSn yapısı bir prototiptir [3,4]. Bu malzemeler, yarı metaliklik [5-7], termodinamik [8, 9], şekil hafızası etkisi [10, 11], ağır fermiyon davranışı [12-14], manyetik [15, 16] ve süper iletkenlik [17] gibi geniş özelliklere sahiptir. Heusler tipi malzemeler, kapsamlı özelliklerinden dolayı araştırmacılar tarafından oldukça büyük bir ilgi görmektedir. Bunların yanı sıra, bu malzemelerin tamamını üretmek ve tüm özelliklerini deneysel olarak ortaya koymak oldukça zordur. Bu nedenle, güvenilir ve hızlı bir metot ile mümkün olan bu malzemeleri iyi bir şekilde incelemek gerekir. Araştırmacılar tarafından oldukça fazla tercih edilen ab-initio hesaplamaları doğruluğu kanıtlanmış hesaplamalı bir yöntemdir. Bu yöntem, herhangi bir deneysel parametreye ihtiyaç duymadan, zorluk ve maliyet içermeden bir malzemenin yapısal, elektronik, manyetik, mekanik, titreşim ve termodinamik özellikleri hakkında kapsamlı bilgi sağlar.

Heusler tipi malzemeler genellikle spin polarize durumundadır. Spin yönelimlerinden bir tanesi metalik özellik gösterirken diğeri yarıiletken veya yalıtkan özellik gösterir. Bu nedenle de manyetik özellik sergileyen yarı metalik malzemeler sınıfında yer alırlar. Groot ve arkadaşlarının [18] 1983 yılında NiMnSb yarı Heusler bileşiği ile yaptıkları çalışmada ilk defa yarı metal kavramı kullanıldı. Yarı metalik davranış gözlemlenen malzemelerden bazıları; ferromanyetik metal oksitler [19, 20], manyetik yarıiletkenler [21-23], Heusler tipi malzemeler [24-28], zinc-blend yapıdaki (ZnS) kalkojenler ve ikili geçiş metalleri [29]. Heusler tipi malzemeler, yüksek Curie sıcaklıklarından ve Zinc-blend yapısıyla olan yapısal benzerliklerinden dolayı uygulamalarda yarı metalik Heusler tipi malzeme özellikleri etkindir. Bu tür Heusler tipi malzemeler yarı metalik ferromanyetler sınıfında yer almaktadır. Manyetik tünel bağlantıları (MTJ'ler) [30-33], yüksek manyeto dirençli valfler (GMR'ler) [34-37], yarı iletkenlere spin enjeksiyonu [38] için cihazlar gibi alanlarda yarı-metalik Heusler tipi malzemelerin kullanımı tercih edilmektedir [39]. Özellikle yarı metalik Heusler tipi malzemelerin spintronik cihaz uygulamaları ilginç özellikleri öne çıkmaktadır.

Ti ve V tabanlı yarı metalik Heusler tipi malzemelerin literatürde az sayıda çalışması bulunmaktadır. Berri [40] tarafından 2019 yılında WIEN2k kodları kullanılarak tam potansiyel doğrusallığı artırılmış düzlem dalga (FP-LAPW) yöntemi ile Genelleştirilmiş Gradyent Yaklaşımı içerisinde Perdew-Burke-Ernzerhof (GGY-PBE) pseudopotansiyelleri ile $Ti_2RhSn_{1-x}Si_x$, $Ti_2RhSn_{1-x}Ge_x$ ve $Ti_2RhGe_{1-x}Si_x$ dörtlü Heusler alaşımlarının yapısal, elektronik ve yarı metalik özellikleri incelendi ve $x=0,5$ durumu için tetragonal (P-4m2) fazında olduğu belirlendi. Ma ve ark. [41] tarafından ters Heusler bileşiklerinin spintronik uygulamaları VASP kodları kullanılarak GGY-PBE yöntemiyle araştırıldı. Tam potansiyel yerel orbital (FPLO) minimum temel bant yapı metodu ile GGY-PBE pseudopotansiyelleri yardımıyla Wei ve ark. [42] tarafından Ti_2YZ (Y = Fe, Co, Ni; Z = Al, Ga, In) Heusler alaşımlarının yarı metalik özellikleri incelendi ve bu alaşımların yarı metalik oldukları tesbit edildi. Ahmadian [43, 44] tarafından iki ayrı çalışmada Ti_2FeSn ve Ti_2CoSn Heusler alaşımlarının yapısal, elektronik ve manyetik özellikleri incelendi ve spin-aşağı durumunda yasak enerji aralıkları (GAP) Ti_2FeSn için 0,79 eV ve Ti_2CoSn için 0,87 eV bulundu. Ti_2FeZ (Z = Al, Ga, Ge) Heusler alaşımlarının yapısal, elektronik ve manyetik özellikleri Liping ve ark. [45] tarafından VASP kodları ile GGY-PBE pseudopotansiyelleri

kullanılarak çalışıldı. Buna göre, Ti_2FeZ ($Z = Al, Ga, Ge$) Heusler alaşımlarının yarı metalik olduklarını tespit ettiler. Drief ve ark. [46] Ti bazlı Heusler alaşımlarından Ti_2FeZ ($Z = Al, Ga, In$) alaşımlarını WIEN2k kodlarıyla FP-LAPW yöntemine göre Genelleştirilmiş Gradyent Yaklaşımı içerisinde Wu-Cohen (GGY-WC) pseudopotansiyelleriyle inceledi ve onlar bu alaşımların yapısal, elektronik ve manyetik özelliklerini raporladılar. Goraus ve Czerniewski [47] tarafından Ti_2MnAl , Ti_2FeAl ve Ti_2FeGa alaşımlarının manyetik özellikleri XRD ile yapılan deneysel ve FPLO ile yapılan teorik çalışmada incelendi. Bunlardan başka, Zhang ve ark. [48] tarafından yapılan deneysel ve teorik çalışmada Ti_2YAl ve $Ti_2Y'Ga$ ($Y = Co, Fe; Y' = Cr, Fe$) alaşımları, Zhang ve ark. [49] tarafından yapılan teorik çalışmada ise Vanadyum bazlı ters Heusler alaşımlarının yapısal, elektronik ve manyetik özellikleri incelenerek rapor edildi.

Bu çalışmada, literatürde sınırlı sayıda çalışma bulunan Ti_2FeGa ters Heusler alaşımına çeşitli oranlarda V atomu katkılanıp $(Ti_{1-x}V_x)_2FeGa$ ($x = 0; 0,25; 0,5; 0,75; 1$) alaşımları elde edildi. Elde edilen bu alaşımların yapısal, elektronik, manyetik ve mekanik özellikleri MedeA paket programında VASP kodları yardımıyla GGY-PBE pseudopotansiyelleri kullanılarak Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi (YFT) ile yapıldı. $x = 0,25; 0,5; 0,75$ oranları seçilerek oluşturulan alaşımlar ile ilgili literatür taraması sonucunda her hangi bir veriye rastlanılmamıştır. Dolayısıyla bu alaşımların elektronik, manyetik ve mekanik özellikleri bu çalışma ile literatüre kazandırılmış olunacaktır.

2. KURAMSAL TEMELLER

2.1. Giriş

Yoğun madde ve moleküllerin özellikleri, elektronlar ve çekirdekler tarafından belirlenmektedir. Elektronların incelenmesi, maddenin elektronik, manyetik, optik ve kütle özellikleri hakkında önemli bilgiler sağlamaktadır. Modern fizik, birçok elektron ve çekirdeğin etkileşimli sistemini doğru bir şekilde göstermek ve hesaplama yöntemlerini geliştirmek için bir zorlukla karşı karşıyadır. Ayrıca, elektronik yapıların hesaplanması, temel duruma ve uyarılmış durum özelliklerine bölünebilir [50]. Elastik özellikler gibi temel durum özellikleri için, yük yoğunluğu, denge hacimleri ve titreşim frekansları, maddenin diğer ilginç özellikleri arasında elde edilebilir. Öte yandan, elektronik uyarılmış durumlar, optik özellikler vb. hakkında faydalı bilgiler sağlamaktadır. Geçmişte çeşitli elektronik yapı yöntemleri geliştirilmiştir. Katı sistemler için en çok kullanılanlar, Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi (YFT) ve Kuantum Monte Carlo'dur (QMC) [51-53]. YFT, yeni materyalleri tahmin etmek, deneysel keşifleri onaylamak veya deneysel çalışmada gözlemlenen yeni olayların açıklamasını sağlamak için çok güvenilir bir teoridir.

2.2. Çok Cisim Problemi

Atomların kuantum mekaniksel davranışının tam bir açıklaması, elektronlar ve çekirdekler arasındaki etkileşimlerin detaylı olarak ele alınmasını gerektirmektedir. N_e elektronları ve N_n çekirdekleri ifade eden bir sistem için, göreceli olmayan zamandan bağımsız basit Schrödinger denklemi;

$$H\Psi = E\Psi \quad (2.1)$$

Burada Ψ , çok parçacıklı dalga fonksiyonudur ve E , sistemin toplam enerjisini ifade etmektedir. Çok parçacıklı dalga fonksiyonu simetrik veya anti-simetrik olabilir. Simetrik durum şöyle tanımlanır;

$$\Psi = \Psi(r_1, \dots, r_{N_e}) \quad (2.2)$$

Anti-simetrik durum ise;

$$\Psi = \Psi(r_1, \dots, r_j r_i, \dots, r_{N_e}) = -\Psi(r_1, \dots, r_i r_j, \dots, r_{N_e}) \quad (2.3)$$

Elektron gibi yarı tam sayılı dönüşlü parçacıklar, anti simetrik dalga fonksiyonları ile tanımlanır ve Pauli dışlama ilkesine uyarlar. Bu parçacıklar fermantasyon olarak adlandırılır. Pauli dışlama ilkesi, hiçbir iki elektronun aynı kuantum sayı grubuna sahip olamayacağını ve aynı dönüşe sahip elektronların aynı anda meydana gelemeyeceğini belirlemektedir. Dalga fonksiyonları parçacık değişimi altında, simetrik olan ve integral ya da sıfır iç dönüşe sahip olan parçacıklara bozon denir.

2.1 eşitliğindeki Hamilton operatörü H olarak yazılabilir.

$$H = - \sum_{i=1}^{N_e} \frac{1}{2} \nabla_i^2 - \sum_{\alpha=1}^{N_n} \frac{1}{2M_\alpha} \nabla_\alpha^2 - \sum_{i=1}^{N_e} \sum_{\alpha=1}^{N_n} \frac{Z_\alpha}{|r_i - R_\alpha|} + \sum_{i=1}^{N_e} \sum_{j>1}^{N_e} \frac{1}{|r_i - r_j|} + \sum_{\alpha=1}^{N_n} \sum_{\beta>\alpha}^{N_n} \frac{Z_\alpha Z_\beta}{|R_\alpha - R_\beta|} \quad (2.4)$$

Burada M_α çekirdeğin kütlesi, Z_α çekirdeğin yükü ve R_α çekirdeğin konumudur. Elektronun konumu r_i olarak belirtilmiştir. Birinci ve ikinci terimler, sırasıyla elektronların ve çekirdeklerin kinetik enerjileridir. Üçüncü terim çekirdek ve elektronlar arasındaki Coulomb çekmesini, dördüncü ve beşinci terimler sırasıyla elektron-elektron ve çekirdek-çekirdek Coulomb itmesini tanımlamaktadır.

2.3. Hartree-Fock Yaklaşımı (HF)

Hartree-Fock yaklaşımı, elektronlar arasındaki korelasyonu kapsayan daha doğru bir yaklaşım için temeldir [54]. Hartree-Fock yaklaşımı içerisinde, sistemin çok parçacıklı dalga fonksiyonu, anti simetri kuralını sağlayan bağımsız elektronların tek bir determinanı belirleyici olarak ele alınabilir [55].

$$\varphi = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \varphi_1(x_1, \sigma_1) & \varphi_1(x_2, \sigma_2) & \dots & \varphi_1(x_N, \sigma_N) \\ \varphi_2(x_1, \sigma_1) & \varphi_2(x_2, \sigma_2) & \dots & \varphi_2(x_N, \sigma_N) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \varphi_N(x_1, \sigma_1) & \varphi_N(x_2, \sigma_2) & \dots & \varphi_N(x_N, \sigma_N) \end{vmatrix} \quad (2.5)$$

Buradaki $\varphi_1(x_1; \sigma_1)$, tek parçacıklı dönüş orbitalleridir.

Hartree-Fock teorisi, moleküllerin ve daha büyük N cisim sistemlerinin hesaplanmasında yararlı olan değiş tokuş korelasyonunun doğru bir iyileştirmesini sağlar [50, 55-57].

Hamiltonyenin dalga fonksiyonu ile olan beklenti değeri;

$$\begin{aligned}
\langle \varphi | \hat{H} | \varphi \rangle &= \sum_{i,\sigma} \int dr \psi_i^{\sigma*}(r) \left[-\frac{1}{2} \nabla^2 + V_{ext}(r) \right] \psi_i^\sigma(r) + E_{11} \\
&+ \frac{1}{2} \sum_{i,j,\sigma_i\sigma_j} \int dr dr' \psi_i^{\sigma_i*}(r) \psi_j^{\sigma_j}(r') \frac{1}{|r-r'|} \psi_i^{\sigma_i}(r) \psi_j^{\sigma_j}(r') \\
&- \frac{1}{2} \sum_{i,j,\sigma} \int dr dr' \psi_i^{\sigma*}(r) \psi_j^{\sigma}(r') \frac{1}{|r-r'|} \psi_i^\sigma(r) \psi_j^\sigma(r')
\end{aligned} \tag{2.6}$$

İlk terim birlikte gruplandığında, tekli beklenti değerleri yörüngeler üzerinde toplanır. Üçüncü terim, elektronlar arasındaki doğrudan etkileşimi tarif ederken, değişim etkileşimi dördüncü terimle açıklanmaktadır. Üçüncü ve dördüncü terimlerde çift toplama olduğuna dikkat edilmelidir. Döndürme işlevlerinin bir eksen boyunca nitelendirildiği bir durum göz önüne alındığında, her döndürme σ için $\Psi_i^{\sigma*}(r)$ değişimleri şu şekilde ifade edilebilir:

$$\begin{aligned}
\left[-\frac{1}{2} \nabla^2 + \sum_{i,j,\sigma} \int dr' \psi_i^{\sigma_j*}(r') \psi_j^{\sigma_j}(r') \frac{1}{|r-r'|} \right] \psi_i^\sigma(r) \\
- \sum_j \int dr' \psi_j^{\sigma_j*}(r') \psi_i^\sigma(r') \frac{1}{|r-r'|} \psi_j^\sigma(r) = E_i^\sigma \psi_i^\sigma(r)
\end{aligned} \tag{2.7}$$

Hartree-Fock eşitliğini tanımlar. Eşitlik 2.7'nin değiştirilmesi, duruma bağlı olarak etkili bir Hamilton operatörü ile Schrödinger benzeri bir denklem vermektedir.

$$\hat{H}_{eff}^i \psi_i^\sigma(r) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla^2 + \hat{V}_{eff}^{i,\sigma}(r) \right] \psi_i^\sigma(r) = E_i^\sigma \psi_i^\sigma(r) \tag{2.8}$$

r noktasındaki σ dönüşünün her elektronuna etki eden etkin $V_{eff}^{i,\sigma}(r)$ potansiyeli;

$$\hat{V}_{eff}^{i,\sigma} \psi_i^\sigma(r) = V_{ext}(r) + V_{Hartree}(r) + \hat{V}_x^{i,\sigma}(r) \tag{2.9}$$

Değiş tokuş terim operatörü \hat{V}_x , aynı σ dönüşünün yörüngeleri üzerinden bir miktar verilir.

$$\hat{V}_x^{i,\sigma}(r) = - \sum_j \int dr' \psi_j^{\sigma_j*}(r') \psi_i^\sigma(r') \frac{1}{|r-r'|} \frac{\psi_j^\sigma(r')}{\psi_i^\sigma(r)} \tag{2.10}$$

$\sum_j \Psi_j^{\sigma*}(r') \Psi_j^\sigma(r')$ 'nin, her durum i ve σ için deęişim yükü yoğunluęundan dolayı coulomb potansiyeli olduęuna dikkat edilmelidir.

2.4. Yoęunluk Fonksiyonel Teorisi (YFT)

Yaklaşık otuz yıldır yoęunluk fonksiyonel teorisi (YFT), katı sistemlerin elektronik yapı özelliklerinin hesaplanmasında birincil araç olarak yaygın bir şekilde kullanılmaktadır. Yoęunluk fonksiyonel teorisi, Kohn, Sham ve Hohenberg, Kohn tarafından geliştirilmiştir [51, 52]. Katı maddeler ve moleküllerin temel durum özelliklerinin çok doęru bir tanımını vermektedir. YFT, birçok elektron dalga fonksiyonu Ψ yerine $n(r)$ elektronik yoęunluk dağılımına dayanmaktadır[58]. YFT'de denge hacminin, kütle modülünün, örgü sabitlerinin vs. tespitinde çok önemlidir. YFT yalnızca basit elektronik özelliklerin simülasyonuna izin vermekle kalmaz, aynı zamanda oldukça karmaşık malzemelerin özelliklerinin işlenmesini sağlamaktadır. Bu durumda, manyetik ve elektriksel duyarlılıkların, eğri polarize yer durumlarının, süper iletkenlik vb. temel durum özelliklerinin YFT kullanılarak belirlenebilir. Ayrıca, uyarılmış durum özelliklerini de bir dereceye kadar tanımlanmasında etkilidir. Bu durum, bir elektronik sistemin temel durum yoęunluęunun sadece elektron sayısını deęil, aynı zamanda belirli bir Hamilton operatörü ile ilişkili olan harici potansiyeli belirlemesi gerçeęine dayanmaktadır. Hamilton operatörü, temel durumu ve uyarılmış durumu tam olarak tanımlamaktadır[59].

2.4.1. Hohenberg-Kohn Teoremi

Hohenberg-Kohn Teoremi, eęer N ile etkileşimli elektronlar harici bir potansiyel V_{ext} içerisinde hareket ederse, enerjinin işlevsellięini en aza indiren benzersiz bir taban durum elektron yoęunluęu $n_0(r)$ olduęunu belirtmektedir [51].

$$E[n] = F[n] + \int n(r)V_{ext}(r)dr \quad (2.11)$$

Burada F , n 'nin evrensel bir işlevsellięidir. Fonksiyonel E 'nin sonuçta ortaya çıkan minimum deęeri, temel elektronik enerji olan E_0 'dır. Hohenberg-Kohn teoreminin özel bir basit kanıtı aşıęıdaki şekilde verilebilir [60]. N -elektron fonksiyonel F 'nin tanımlanması

$$F[n(r)] = \min_{|\Psi \rightarrow n_0|} \langle \Psi | \hat{F} | \Psi \rangle \quad (2.12)$$

Beklenti değerinin tüm N elektron dalga fonksiyonlarının araştırılması ile belirlendiği durumda, $n(r)$ 'nin yoğunluğunu azaltan Ψ , daha sonra, F 'nin beklenen değerini etkin bir şekilde en aza indiren Ψ dalga fonksiyonunu seçer. Daha sonra F olarak belirtirsek;

$$\hat{F} = \sum_i -\frac{1}{2} \nabla_i^2 + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{1}{|r_i - r_j|} \quad (2.13)$$

Yoğunluğu n_0 veren bir N elektron temel durum dalga fonksiyonu Ψ_0 düşünürsek. O zaman temel hal enerjisi;

$$E_0 = \langle \Psi_0 | \hat{F} + \hat{V}_{ext} | \Psi_0 \rangle \quad (2.14)$$

Tanımdan eşitlik 2.12,

$$F[n_0] = \min_{|\Psi \rightarrow n_0|} \langle \Psi | \hat{F} | \Psi \rangle = \langle \Psi_{min}^0 | \hat{F} | \Psi_{min}^0 \rangle \quad (2.15)$$

Minimal prensibe göre;

$$F[n_0] + \int n_0(r) d^3r = \langle \Psi_{min}^0 | \hat{F} + \hat{V}_{ext} | \Psi_{min}^0 \rangle \geq E_0 \quad (2.16)$$

Fakat,

$$F[n_0] = \langle \Psi_{min}^0 | \hat{F} | \Psi_{min}^0 \rangle \leq \langle \Psi_0 | \hat{F} | \Psi_0 \rangle \quad (2.17)$$

Olduğundan şu sonuca ulaşıyoruz;

$$F[n_0] + \int n_0(r) d^3r = \langle \Psi_{min}^0 | \hat{F} + \hat{V}_{ext} | \Psi_{min}^0 \rangle \leq E_0 \quad (2.18)$$

Ψ_{min}^0 ve Ψ_0 'dan beri aynı yoğunluğu n_0 verir. Eşitlik 2.16 ve 2.18 den;

$$E[n_0] = F[n_0] + \int n_0(r) d^3r = E_0 \quad (2.19)$$

Böylece ispatı tamamlarız.

2.4.2. Kohn-Sham Denklemleri

Katılma işleminin hesaplanmasından elde edilen katı maddelerin özelliklerinin açıklaması, bir genel parçacık denklemi kümesi olan Kohn-Sham denklemlerinin çözümünü içermektedir. Bu denklemlerin çözümü için doğru ve zamana bağlı yöntemler büyük bir

sorun olmaya devam etmektedir. Şimdiye kadar, çeşitli basitleştirici yöntemler önerilmiştir ancak bu yöntemlerin her birinde sınırlamaları vardır. Örneğin, muffin-tin yaklaşımı, potansiyelin örgü bölgelerinin etrafında atomik benzeri ve katı maddenin atomları arasında neredeyse düz olduğu gözlemine dayanmaktadır [61, 62]. Bu yöntem Korringa, Kohn ve Rostocker tarafından geliştirilen varyasyonel yöntemde en belirgin uygulamaya sahiptir [63-65]. Diğer yaklaşım yöntemleri, hareketsiz atom çekirdeğini bir model potansiyeli ile ikame eden ve bir dizi sahte değerlik durumunun bu model çekirdeklerine ortogonal olan pseudopotensiyel yöntemleri içermektedir [66, 67]. Kohn ve Sham [52], etkileşimli olmayan bir referans sisteminin temel durum yoğunluğunu $n_0(r)$ belirlemek için genel bağlanmış diferensiyel denklem gruplarını türetmiştir. Bu amaçla, Kohn ve Sham $F[n(r)]$ 'yi dört ayrı parçaya böldü ve fonksiyonel E oldu.

$$E[n(r)] = T_s[n(r)] + \frac{1}{2} \int \int \frac{n(r)n(r')}{|r-r'|} dr dr' + E_{xc}[n(r)] + \int n(r) V_{ext}(r) dr \quad (2.20)$$

Buradaki $T_s[n(r)]$, $n(r)$ yoğunluğuyla etkileşimli olmayan bir elektron gazının kinetik enerjisi olarak tanımlanır, yani;

$$T_s[n(r)] = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \int \Psi_i^*(r) \nabla^2 \Psi_i(r) dr \quad (2.21)$$

Eşitlik 2.20 ayrıca $E_{xc}[n]$ değiş tokuş kolerasyon enerjisini tanımlamaktadır. Elektron yoğunluğu üzerine bir normalizasyon kısıtı uygulayarak, $\int n(r) dr = N$ aşağıdaki varyasyon prensibini elde ederiz.

$$\frac{\delta}{\delta n(r)} \left[E[n(r)] - \mu \int n(r) dr \right] = 0 \quad \Rightarrow \quad \frac{\delta E[n(r)]}{\delta n(r)} = \mu \quad (2.22)$$

Eşitlik 2.22, $V_{eff}(r)$ cinsinden yeniden yazılabilir.

Buna göre,

$$\frac{\delta T_s[n(r)]}{\delta n(r)} + V_{eff}(r) = \mu \quad (2.23)$$

olduğundan,

$$V_{eff}(r) = V_{ext}(r) + \int \frac{n(r')}{|r - r'|} dr' + V_{XC}(r) \quad (2.24)$$

böylece

$$V_{XC}(r) = \frac{\delta E_{XC}[n(r)]}{\delta n(r)} \quad (2.25)$$

Harici bir potansiyel $V_{eff}(r)$ içinde hareket eden etkileşmeyen elektronların bir yer durum yoğunluğu ile tanımlandığına dikkat etmek önemlidir.

$$n_0(r) = \sum_{i=1}^N |\Psi_i(r)|^2 \quad (2.26)$$

Temel durum enerjisini E_0 belirlemek için aşağıdaki elektron Schrödinger denklemini çözmeliyiz.

$$\left(\frac{1}{2} \nabla_i^2 + V_{eff}(r) - E_i \right) \Psi_i(r) = 0 \quad (2.27)$$

ve bu eşitlik grubunun kendiliğinden tutarlı bir şekilde çözülmesi gerekmektedir.

$$V_{eff}(r) = V_{eff}(n_0(r)) \quad (2.28)$$

Yukarıdaki Eşitlik 2.23 ve 2.24'den etkileşime girmeyen bir referans sisteminin varsayılması, E_{XC} formunun bilinmesi koşuluyla etkileşimli bir sistemin temel durum enerjisini bulmak için teorik olarak kesin bir yöntem sağlamaktadır.

YFT uygulaması, yerel yoğunluk yaklaşımı [68] ve genelleştirilmiş gradyent yaklaşımı [69] gibi E_{XC} için çeşitli yaklaşık formların kullanılmasını gerektirmektedir.

2.5. Değiş Tokuş Kolerasyon Enerjisi

2.5.1. Yerel Yoğunluk Yaklaşımı (YYY)

Yerel yoğunluk yaklaşımı (YYY) [68, 70, 71] çerçevesinde, $E_{XC}[n(r)]$ değerine, elektronun $n(r)$ yoğunluğundaki homojen bir elektron gazındaki değiş tokuş kolerasyon enerjisi ile yaklaşmaktadır. Yani;

$$E_{XC}^{LDA}[n(r)] = \int E_{XC}(n(r))n(r)dr \quad (2.29)$$

YYY işlevi, birçok sistemin temel hal özelliklerini çok doğru şekilde üretmektedir. Örneğin, 4d ve 5d grubu metallerin toplu özellikleri YYY tarafından iyi tarif edilmiştir. Fakat, YYY'nin başarısız olduğu durum vardır. Örneğin YYY, demirin manyetik yapısını yanlış tahmin etmektedir [72, 73]. YYY ayrıca yarı iletken malzemelerin bant boşluğunu da yanlış tahmin etmektedir[74-76].

2.5.2. Genelleştirilmiş Gradyent Yaklaşımı (GGY)

Uzun bir süredir yerel yoğunluk yaklaşımı, elektronik yapı hesaplamalarında tercih edilen yöntem olarak kabul edilmiştir. YYY üzerine geliştirilecek bir strateji, yük korelasyon fonksiyonunun değiş tokuş korelasyon işlevindeki değişimini, elektron gazının homojenliğini hesaba katması gereken bir şey dahil etmektir. XC potansiyelinin hem yük yoğunluğunun (belirli bir noktada) hem de yük yoğunluğunun birinci dereceden gradyentinin (aynı noktada) bir işlevi olduğu ortaya çıkartan yöntem, genelleştirilmiş gradyent yaklaşımı (GGY) olarak bilinmektedir. [69, 77, 78].

$$E_{XC}^{GGA}[n] = \int d^3r f(n, \nabla n) \quad (2.30)$$

E_{XC}^{GGA} , bir elektron gazının parçacık başına değiş tokuş korelasyon enerjisidir. GGY yöntemi, özellikle küçük moleküller için daha iyi toplam enerji verir, ancak hesaplama açısından YYY'den daha fazla zaman alıcıdır [79]. Genel olarak, GGY YYY'ye göre aşağıdaki avantajlara sahiptir: [80, 81]:

1. GGY hafif atomlar, moleküller ve kümeler için temel durum özelliklerini geliştirir.
2. GGY, gövde merkezli demir gibi 3d geçiş metallerinin doğru manyetik özelliklerini öngörmektedir.

GGY, YYY'ye göre daha üstün görünse de, bazı dezavantajları vardır. GGY yöntemleri, hidrojen bağı doğru şekilde yorumlayamamaktadır. Bu kusur, genişleme ve dolayısıyla bağların yumuşatılmasıyla açıkça ortaya çıkmaktadır [82].

2.6. Pseudopotansiyel Yaklaşımı

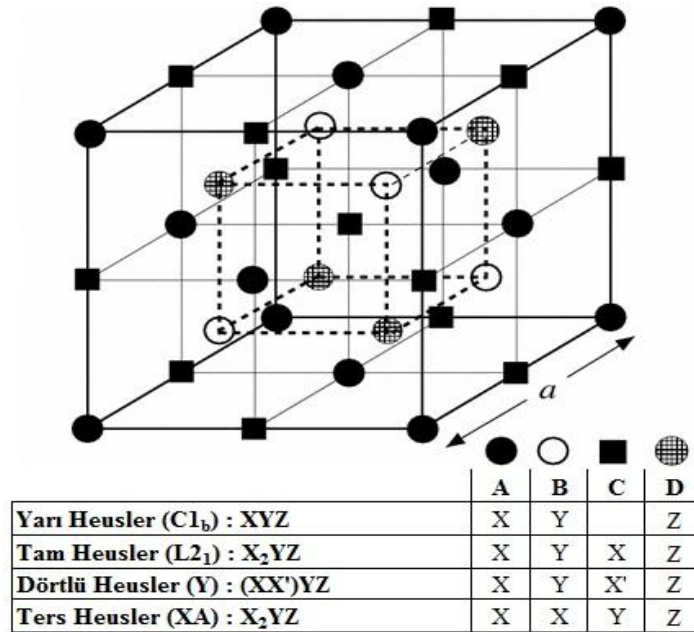
Önceki bölümlerde belirtildiği gibi, kendi kendine tutarlı Kohn-Sham denklemlerine pratik çözümler çeşitli yaklaşımlara tabidir. Hesaplamaların sonucundan ödün vermeden hesaplama maliyetini (hızlı yakınsama) azaltmak için yöntemler geliştirilmiştir. Pseudo metotların birinci prensibi [83-85], derin iç çekirdek durumları ve onları çekirdeğe bağlayan güçlü potansiyeli hariç, sadece değerlik elektronlarını dikkate alır. Bu, hesaplamaların tam potansiyel yöntemlere kıyasla daha az hesaplama açısından pahalı olmasını sağlar. Normalde, çekirdek elektronları katıların özellikleri üzerinde en az etkiye sahiptir, ancak bunların pseudopotansiyellere uygun şekilde dahil edilmesi, elektronik yapı hesaplamalarında düzlem dalga baz kümelerinin yeterli kullanımı için yer açmaktadır [86-88]. Birkaç çeşit pseudopotansiyel vardır: norm-koruyucu pseudopotansiyeller [89, 90], ultra yumuşak pseudopotansiyeller [91] ve iz düşümsel birleştirilmiş dalga tipi (PAW) pseudopotansiyeller [92]. PAW yöntemi, değerlik elektron dalga fonksiyonunun düğüm davranışını iyi tanımladığından ve aynı zamanda üst çekirdek durumlarının kendi kendine uygun yineleme prosedürüne dahil edilmesine izin verdiğinden, malzemelerin elektronik yapısını belirlemek için eşsiz bir yöntemdir [93, 94].

3. TEORİ VE METODLAR

3.1. Heusler Alaşımları

Heusler alaşımları kristal yapı olarak yarı, tam, ters ve dörtlü Heusler olmak üzere 4'e ayrılırlar. Stokiyometrik kompozisyonları yarı Heusler alaşımları için XYZ, tam ve ters Heusler alaşımları için X_2YZ , dörtlü Heusler alaşımları için $XX'YZ$ yapısındadır. Bununla birlikte genellikle X, X' ve Y elementleri geçiş metali grubundan olup Z elementleri ise periyodik tablonun ana grup elementidir. Yarı, tam ve ters Heusler alaşımları sırasıyla $C1_b$ (#216), $L2_1$ (#225) ve XA (#216) kristal yapılarında ve dörtlü Heusler alaşımı ise Y (#216) kristal yapısında karakterize olurlar.

X alt örgüsü $(3/4, 3/4, 3/4)$ ve $(1/4, 1/4, 1/4)$, Y alt örgüsü $(1/2, 1/2, 1/2)$ ve Z alt örgüsü ise $(0, 0, 0)$ pozisyonlarında olacak şekilde tam Heusler alaşımı 4 tane yüzey merkezli kübik alt örgünün iç içe geçmesiyle oluşur. Yarı Heusler alaşımı için $(3/4, 3/4, 3/4)$ pozisyonları boştur. 3 tane yüzey merkezli kübik alt örgünün iç içe geçmesiyle oluşur. Ters ve dörtlü Heusler alaşımları için ise yarı Heusler alaşımlarındaki boş olan pozisyonlara X' atomu yerleşir. Şekil 3.1'de yarı, tam, ters ve dörtlü Heusler tipi yapılar görülmektedir [95].



Şekil 3.1. Yarı, tam, dörtlü ve ters Heusler alaşımlarının kristal yapısı [96]

Spin hareketiyle elektronun eksi yüklü parçacığı belirli bir manyetik momente sahiptir. Spin hareketinden dolayı oluşmuş olan bu manyetik moment dış manyetik alandan etkilenir. Elektronların orbitallere dağılımı malzemelerin manyetik özelliğini belirlemede etkilidir. Çiftlenmiş elektronların spin manyetik momentleri zıt yönde olur ve birbirinin etkisini yok eder. Çünkü Pauli dışlama ilkesine gereğince bir orbitalde aynı kuantum durumunda iki elektron bulunamaz bundan dolayı iki elektron karşıt yönelimli olarak bulunur. Al, Si gibi orbitallerinde çiftlenmemiş elektron bulunan malzemeler paramanyetik özellik gösterir ve bu gibi paramanyetik malzemelerde dışarıdan uygulanan bir alanla aynı yöne doğru hafif bir yönelme oluşur. Cu, Ag, Au gibi elementlerin orbitallerinde tüm elektronları çiftlenmiş olan malzemeler diyamanyetik özellik gösterir ve bu gibi diyamanyetik malzemelerde dışarıdan uygulanan bir alanla hafif ters yönde bir yönelme oluşur. Fe, Co, Ni gibi paramanyetik atomların çiftlenmemiş elektronları bir kristal yapıda paralel spinli olarak yönelirlerse, güçlü bir manyetik alan meydana getirir. Böyle malzemelere ferromanyetik malzeme denir. NiO, Fe₂O₃ gibi malzemelerde bir kristal yapıdaki paramanyetik atomlar, spin manyetik momentleri birbirinin etkisini bitirecek şekilde dizilmişlerse, bu tarz malzemeler antiferromanyetik özellik göstermektedir ve net bir manyetizasyon oluşturmamaktadır. Geçiş metallerinin *d* orbitallerindeki kısmen dolu elektronlar antiferromanyetik malzemelerin oluşmasına neden olmaktadır. Malzemenin yapısı hakkında bilgi alabilmek için bir geçiş metalinin oluşturduğu yapının manyetik özelliğinin bilinmesi yeterli olacaktır.[97].

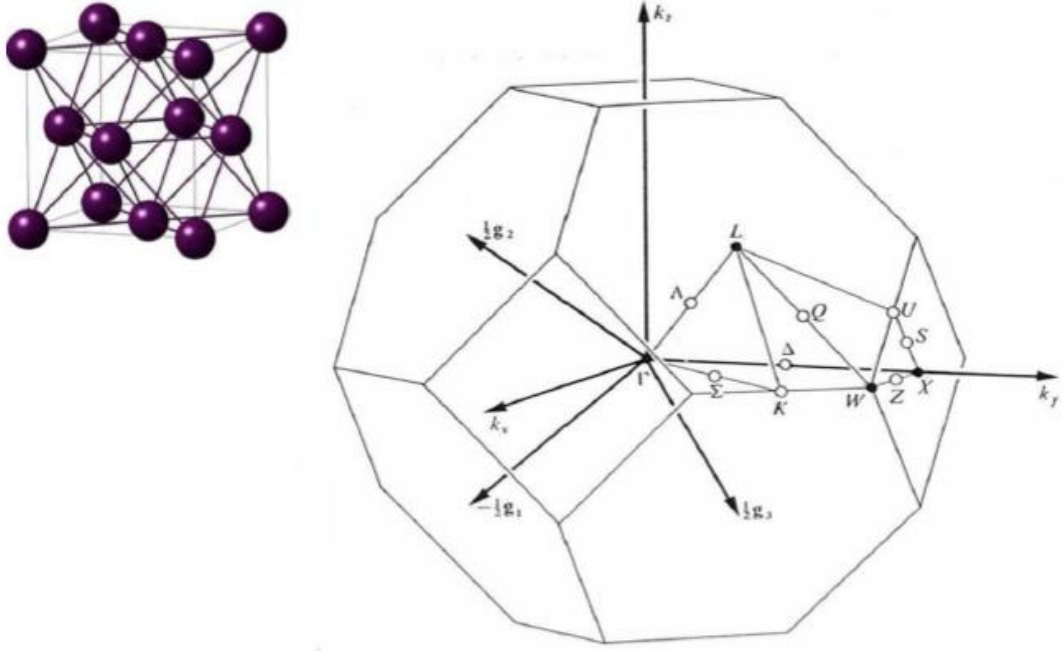
3.2. Yüzey Merkezli Kübik (fcc) ve Basit Tetragonal Örgülerin Yüksek Simetri

Noktaları

Ters örgünün birim hücresi, Wigner-Seitz Hücresi ya da Brillouin Bölgesi olarak bilinmektedir. Verilen bir örgü noktasını en yakın komşularıyla birleştiren doğru parçaları seçilir Bu doğruların orta dikmeleri olan doğruları çizilir. Böylece oluşan en küçük alanlı bölge Wigner-Seitz ilkel hücresi olur. Birinci Brillouin Bölgesi, ters örgünün Wigner-Seitz ilkel hücresidir. Merkezdeki örgü noktasından en yakın örgü noktalarına çizilen ters örgü vektörlerinin orta noktasından geçen düzlemlerin sınırladığı bölgedir.

Şekil 3.2’de fcc örgü için Şekil 3.3’de basit tetragonal örgü için birinci Brillouin bölgesi ve yüksek simetri noktaları görülmektedir. Bu noktaların koordinatları ters örgüde fcc yapı için Γ -X noktaları arasındaki hat Δ , Γ -L noktaları arasındaki hat Λ , Γ -K noktaları arasındaki hat Σ , L-W noktaları arasındaki Q, X-U noktaları arasındaki S ve X-W noktaları

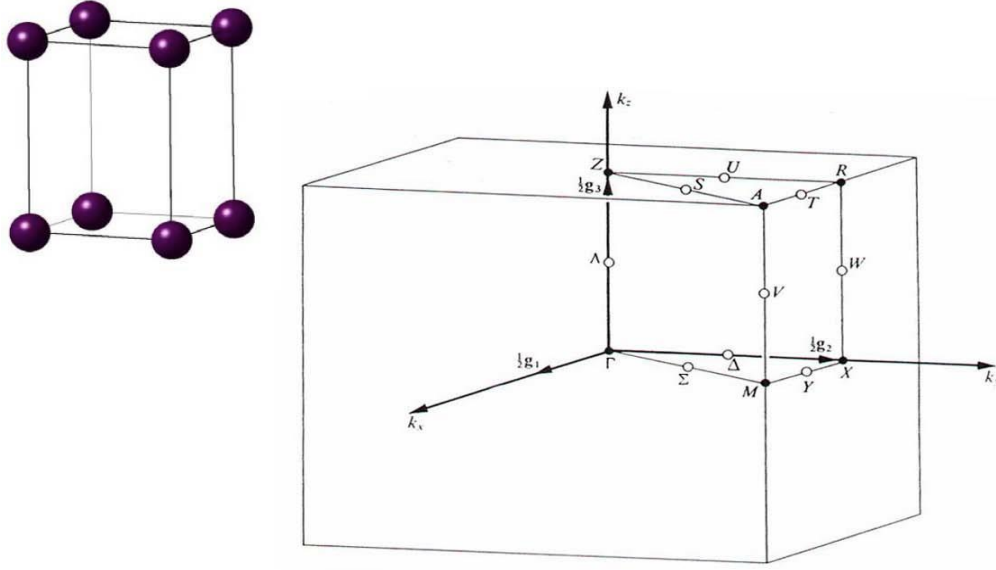
arasındaki Z hattıdır. Tetragonal yapı için ise Γ -M noktaları arasındaki hat Σ , M-X noktaları arasındaki hat Y, X- Γ noktaları arasındaki hat Δ , Γ -Z noktaları arasındaki Λ , Z-A noktaları arasındaki S, A-R noktaları arasındaki T, Z-R noktaları arasındaki U ve X-R noktaları arasındaki W hattıdır. Aynı zamanda, fcc örgüleri iç içe geçmiş Heusler alaşımları için de buradaki durumlar geçerlidir [98].



Şekil 3.2. Yüzey merkezli kübik örgünün yüksek simetri noktaları [99]

Noktalar (g_1, g_2, g_3)

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



Şekil 3.3. Basit tetragonal örgünün yüksek simetri noktaları [99]

Noktalar (g_1, g_2, g_3) ,

$$\Gamma(0,0,0); M\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0\right); Z\left(0,0, \frac{1}{2}\right); A\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right); R\left(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right); X\left(0, \frac{1}{2}, 0\right)$$

3.3. Materials Design (MedeA) Paket Programı

MedeA ortamı, hem deneysel verilere madencilik yaparak hem de deneysel verilerin sınırlı olduğu veya yalnızca kısmen kullanılabilir olduğu yerlerde hesaplama özelliklerini kullanarak, malzeme özellik verilerine hızlı erişim sağlamak üzere tasarlanmıştır [99]. MedeA'nın gücü, deneysel ve hesaplanmış verileri modern bilişim yöntemleriyle, grafiksel iş akışı oluşturma ve karmaşık bilgi işlem iş yönetimiyle birleştirmede yatmaktadır. MedeA, deneysel verilerin aranmasını ve alınmasını sağlamak için grafiksel kullanıcı ara yüzleri içerir ve bu ara yüzde yapı oluşturma, hesaplamaların kurulması, veri görselleştirme ve analizi yapılabilir. Bununla birlikte MedeA ile hesaplanan özellik verileri, deneysel sonuçların yorumlanması için rehberlik etmektedir. Özellikle deneyler ve simülasyonlar pahalı, zaman alıcı veya yapılması zor olduğu zaman MedeA çok değerlidir. Çünkü MedeA'da simülasyon motorları, ayrıntılı özellik tahmin modülleri, deneysel veri tabanları, yapı kurucuları ve analiz araçlarıyla entegre edilmiştir.

MedeA yöntemleri ve özellik modülleri metalleri, alaşımları, yarı iletkenleri ve yalıtkanları, organik katıları, polimerleri, moleküler sistemleri ve nano yapıları hedef almaktadır. MedeA simülasyonları, kristal katı ve şekilsiz katı, sıvı faz ve sıvı

karışımlarının yanı sıra katı / katı ara yüzleri ve sıvı / katı ara yüzlerini de kapsamaktadır. Hesaplamalar, uzunluk ve zaman skalasında çok çeşitli fiziksel büyüklükleri ve kimyasal olayları kapsamaktadır.

MedeA'nın katmanlı yapısı, MedeA grafik kullanıcı ara yüzü (ana aşama), JobServer (orta aşama) ve TaskServer (son aşama) içerir. JobServer, hesaplamalı iş kontrolü, iş ön işleme ve iş sonrası işleme için bir merkezdir. JobServer, işle ilgili verilerin SQL veritabanını tutar ve varsayılan olarak hesaplama sonuçlarının depolandığı JobServer makinesinde bulunur. MedeA ve TaskServers arasında iletişim yoktur, bunun yerine tüm veriler JobServer üzerinden akmaktadır. MedeA ve JobServer Windows uygulamalarıdır, VASP ve GIBBS gibi hesaplama yoğun kodları içeren TaskServer hem Windows hem de Linux işletim sistemlerine kurulabilir [100].

MedeA, deneysel veri tabanlarını yönetmek, belirli verileri ve kullanıcı tarafından oluşturulan verileri kodlamak için bir Microsoft SQL veri tabanı kullanmaktadır. Teknik olarak, SQL server ağa bağlı herhangi bir Windows makinesinde bulunabilir, genellikle, MedeA veya JobServer çalıştıran makineye kurulurlar.

MedeA, akademik araştırmadan endüstriyel malzeme tasarımına ve optimizasyonuna kadar birçok endüstride kullanılır; burada atomistik modelleme, hesaplamalı malzeme mühendisliği değer yaratma zincirinin ayrılmaz bir parçası haline gelmiştir [101].

3.4. VASP Program Paketi

VASP kodu Kresse ve Hafner tarafından geliştirilmiştir [102-104]. Elektron çekirdek etkileşimlerini tanımlamak için iz düşümsel birleştirilmiş dalga (PAW) [105] ve ultra soft Vanderbilt pseudo-potansiyelleri (US-PP) [91] kullanan bir düzlem dalga YFT kodudur. PAW yöntemi, malzemelerin elektronik yapısını doğru ve yeterince belirlemede güvenilirliği nedeniyle büyük ilgi görmüştür. PAW metodu, tüm elektron hesaplama fiziğini ve değerlik elektron dalga fonksiyonlarının düğüm davranışını korumaktadır. PAW yönteminin benzersizliği, dalga işlevini kısımlar veya parçalar halinde bölme biçiminden kaynaklanmaktadır [93].

VASP, bant yapısı enerjisinin Brillouin bölgesi üzerindeki entegrasyonu, tetrahedron yöntemleri kullanarak gerçekleştirebilir. Bu yaklaşımlar, özel noktaların sayısına göre yakınsamaya yöneliktir. VASP'ın diğer bazı uygulamaları yapısal optimizasyon, temel

durum Born-Oppenheimer yüzeyindeki moleküler dinamik, Nudged Elastic Band (NEB) ve Fourier String Method Dynamics'i içerir.

VASP kodunun bazı özelliklerinin kısa bir özetini aşağıdaki gibi yapabiliriz;

- VASP, PAW yöntemini veya ultra yumuşak pseudo potansiyelleri kullanmaktadır. Bu nedenle, geçiş metalleri ve C, O gibi ilk sıra elemanları için bile çok küçük tutulabilir. Genellikle, çoğu durumda bile, toplu malzemeleri tanımlamak için atom başına 100'den fazla düzlem dalgası (PW) gerekmez. Güvenilir bir tanım için atom başına PW yeterli olacaktır.
- Herhangi bir düzlem dalga programında, yürütme süresi kodun bazı bölümleri için N^3 gibi ölçeklenir; burada N, sistemdeki değerlik elektronlarının sayısıdır. VASP'da, kübik parçaların ön faktörleri, sistem boyutuna göre verimli bir ölçeklemeye yol açan neredeyse yok denecek kadar azdır. Bu, potansiyellerin yerel olmayan katkılarını gerçek uzayda değerlendirerek ve ortogonalizasyonların sayısını küçük tutarak mümkündür. Kabaca 2000 elektronik bant bulunan sistemler için, N^3 kısmı diğer parçalarla karşılaştırılabilir hale gelir. Dolayısıyla VASP'ın 4000 değerlik elektronlu sistemler için faydalı olması beklenilmektedir.
- VASP, elektron yer durumunu hesaplamak için oldukça geleneksel ve eski moda bir kendi kendine tutarlılık döngüsü kullanmaktadır. Bu tasarımın verimli sayısal yöntemlerle birleştirilmesi, Kohn-Sham fonksiyonunun kendi kendine tutarlı çözümünün değerlendirilmesi için verimli, sağlam ve hızlı bir tertip sağlamaktadır. Uygulanan yinelemeli matris köşegenleştirme programları (RMM-DISS ve bloke Davidson) muhtemelen şu anda mevcut olan en hızlı projeler arasındadır.
- VASP, isteğe bağlı yapılandırmaların simetrisini otomatik olarak belirleyen tam özellikli bir simetri kodu içermektedir.
- Simetri kodu ayrıca, Monkhorst Paketinin özel noktalarını ayarlamak için kullanılır; bu da dökme malzemelerin, simetrik kümelerin verimli bir şekilde hesaplanmasını sağlamaktadır.
- VASP süper skaler işlemcilerde, vektör bilgisayarlarda ve paralel bilgisayarlarda eşit derecede iyi çalışmaktadır [106].

3.5. Elastik Özellikler

3.5.1. Elastik Sabitler

Malzemelerin elastik sabitlerini belirlemek için literatürde önerilen birkaç yöntem vardır [107,108]. Bu çalışmada, anizotropik malzemelerin elastik sabitlerinin açıklamaları vurgulanmıştır. İzotropik bir malzeme, ana eksen yapısı yönünden bağımsız olan malzemenin özellikleri ile tanımlanır. Örneğin, bir izotropik malzeme, uygulanan bir dış kuvvetin yönüne bakılmaksızın aynı sertliğe sahip olacaktır. Çelik ve alüminyum doğada oluşan izotropik malzemelerin güzel örnekleridir. Öte yandan, anizotropik bir malzeme özellikleri, uygulanan kuvvetin yönüne bağlı olacak bir malzemedir. Örnek olarak grafit ve karbon nitrürü verebiliriz. Belirli bir malzemenin anizotropisi, özellikle karşılık gelen elastik sabitleri (teorik olarak deneysel olarak) belirlerken büyük bir zorluk haline gelebilir. Elastik sabitleri tarif ederken, malzeme, bir gerilme tensörü tarafından açıklanan deformasyonlara yol açan uygulanan dış kuvvetlere (gerilme tensörleri) tabidir. İncelenmekte olan malzemenin homojen olduğu varsayılmaktadır. Benzer şekilde, uygulanan baskıyla ortaya çıkan gerilme de aynı şekilde kabul edilir. Gerilme defarmasyon bağlantısı bir tür genel olarak Hooke kanunları olarak görülebilir. Dolayısıyla, elastik sabitler böyle bir genelleştirilmiş Hooke kanunu bakımından;

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl}\epsilon_{kl} \quad (3.1)$$

Burada σ_{ij} , gerilme tensörüdür, ϵ_{kl} , defarmasyon tensörüdür ve C_{ijkl} , sertlik tensörüdür.

i, j, k, l etiketleri, uzayda sabitlenmiş bir eksen sistemine karşılık gelen 1,2,3'tür.

Ters çevirme eşitliği 3.1, gerginliğin aşağıdaki gibi gerilme cinsinden ifade edildiği bir ilişki oluşturur.

$$\epsilon_{ij} = S_{ijkl}\sigma_{kl} \quad (3.2)$$

Burada S_{ijkl} uyum tensörüdür. C_{ijkl} , simetri nedeniyle, 21 bağımsız elastik katsayıya indirgeyen 81 elastik katsayı içerir [109].

Bireysel örgü yapılarının özel simetrisi ayrıca bağımsız elastik katsayıların sayısını azaltır. Daha sonra, $i, j = 1 \dots 6$ ile simetri sonucu C_{ijkl} 'nin altıya altı matris C_{ij} 'ye düşürüldüğü Voigt notasyonunu [110, 111] kullanılır ve C_{ij} dört gruba ayrılır; ilk grup, ana köşegenler boyunca elastik sabitleri içerir. Karşılık gelen elastik sabitler C_{11} , C_{22} ve C_{33} , uzunlamasına elastik sabitler olarak adlandırılır. $i \geq 4$ ile diyagonal sabitleri içeren ikinci

kategori, kayma elastik sabitleri olarak adlandırılır. Üçüncü kategori, $i \neq j$ ve $i, j < 3$ olan C_i j 'yi içerir. Bu grup, diyagonal olmayan sabitler olarak bilinir. Dördüncü ve son kategori, karışık elastik sabitler olarak adlandırılır. Bu kategori $i \leq 3$ ve $j > 3$ olan C_{ij} 'yi içerir. Örnek olarak C_{34} verilebilir. Seçilen kristal yapıların elastik katsayılı matrislerinin kısa bir açıklaması aşağıda verilmiştir. i ve j durumları için sırayla 1'den 6'ya kadar kombinasyon yapıldığında $\{xx, yy, zz, yz, xz, xy\}$ biçiminde ifade edilen toplam 36 tane elastik sabit vardır ancak kristal simetrisinden dolayı elastik sabitlerinin sayısı en fazla 21 tanedir. Bunlar ise; kübik için 3, hekzagonal için 5 tetragonal ve rombohedral için 6 veya 7, ortorombik için 9, monoklinik için 13 ve triklinik için 21 tanedir [99].

Üç eksenli kafes yapıları 21 bağımsız elastik katsayıya sahiptir.

$$C_{ij} = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & C_{14} & C_{15} & C_{16} \\ & C_{22} & C_{23} & C_{24} & C_{25} & C_{26} \\ & & C_{33} & C_{34} & C_{35} & C_{36} \\ & & & C_{44} & C_{45} & C_{46} \\ & & & & C_{55} & C_{56} \\ & & & & & C_{66} \end{bmatrix} \quad (3.3)$$

Simetri nedeniyle dik eksenli kafes yapıları dokuz bağımsız elastik sabite sahiptir.

$$C_{ij} = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & 0 & 0 & 0 \\ & C_{22} & C_{23} & 0 & 0 & 0 \\ & & C_{33} & 0 & 0 & 0 \\ & & & C_{44} & 0 & 0 \\ & & & & C_{55} & 0 \\ & & & & & C_{66} \end{bmatrix} \quad (3.4)$$

Bu yapılarda bazı katsayı elemanları sıfırdır, ana diyagonal boyunca tüm elemanlar sıfır değildir. Trigonal, altıgen ve kübik kafes yapıları, Eşitlik 3.5, 3.6 ve 3.7'de gösterildiği gibi sırasıyla altı, beş ve üç bağımsız elastik sabite sahiptir. Hem trigonal hem de altıgen örgü yapılarında C_{66} , C_{11} ve C_{12} katsayılarının bir kombinasyonu olarak görünür.

$$C_{ij} = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & C_{14} & -C_{15} & 0 \\ & C_{11} & C_{13} & -C_{14} & C_{25} & 0 \\ & & C_{33} & 0 & 0 & 0 \\ & & & C_{44} & 0 & C_{25} \\ & & & & C_{44} & -C_{14} \\ & & & & & \frac{1}{2}(C_{11} - C_{12}) \end{bmatrix} \quad (3.5)$$

$$C_{ij} = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & C_{14} & -C_{15} & 0 \\ & C_{11} & C_{13} & -C_{14} & C_{25} & 0 \\ & & C_{33} & 0 & 0 & 0 \\ & & & C_{44} & 0 & C_{25} \\ & & & & C_{44} & -C_{14} \\ & & & & & \frac{1}{2}(C_{11} - C_{12}) \end{bmatrix} \quad (3.6)$$

$$C_{ij} = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ & C_{11} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ & & C_{11} & 0 & 0 & 0 \\ & & & C_{44} & 0 & 0 \\ & & & & C_{44} & 0 \\ & & & & & C_{44} \end{bmatrix} \quad (3.7)$$

Kübik sistemler için uzunlamasına elastik sabitlerinin hepsi eşittir, $C_{11} = C_{22} = C_{33}$. Benzer şekilde, üç kayma elastik sabiti $C_{44} = C_{55} = C_{66}$ eşittir. Birçok moleküler kristal, triklinik, monoklinik ve ortombik gibi düşük simetri kristal yapılarında kristalleşir. Monoklinik kafes yapısının Voigt notasyon matrisi;

$$C_{ij} = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & 0 & C_{15} & 0 \\ & C_{22} & C_{23} & 0 & C_{25} & 0 \\ & & C_{33} & 0 & C_{35} & 0 \\ & & & C_{44} & 0 & C_{46} \\ & & & & C_{55} & 0 \\ & & & & & C_{66} \end{bmatrix} \quad (3.8)$$

Özetle, triklinik yapılar en yüksek bağımsız elastik sabitlere sahipken, kübik sistemler en düşük seviyededir. Uygulamada, kübik sistemlerin elastik sabitlerinin hesaplanması, yüksek simetrisi nedeniyle en kolay olanıdır.

3.5.2. Voigt-Reuss-Hill Yöntemi

Temel metot olan Voigt-Reuss-Hill metodu, Kayma modülü (G) ve Bulk modülü (B)'nin ifadesinden ayrılır.

$$G_{Hill} = \frac{1}{2} [G_{Voigt} + G_{Reuss}], \quad B_{Hill} = \frac{1}{2} [B_{Voigt} + B_{Reuss}] \quad (3.9)$$

Kübik yapı için, B_{Voigt} , G_{Voigt} , B_{Reuss} ve G_{Reuss} yaklaşımları [99]:

$$G_{Voigt} = \frac{1}{5} (C_{11} - C_{12} + 3C_{44}), \quad G_{Reuss} = \frac{5}{4(S_{11} - S_{12}) + 3S_{44}} \quad (3.10)$$

$$B_{Voigt} = B_{Reuss} = \frac{(C_{11} + 2C_{12})}{3} \quad (3.11)$$

Tetragonal yapı için elastik sabitler C_{ij} ve uyum matrisi S_{ij} arasındaki ilişkiler aşağıdaki gibidir [112].

$$S_{11} = \frac{C_{11}C_{33} - C_{13}^2}{C(C_{11} - C_{12})}, \quad S_{12} = \frac{-C_{12}C_{33} + C_{13}^2}{C(C_{11} - C_{12})}, \quad S_{13} = \frac{-C_{13}}{C}$$

$$S_{33} = \frac{C_{11} + C_{12}}{C}, \quad S_{44} = \frac{1}{C_{44}}, \quad S_{66} = \frac{1}{C_{66}} \quad (3.12)$$

$$C = C_{33}(C_{11} + C_{12}) - 2C_{13}^2$$

Tetragonal yapı için B_{Voigt} , G_{Voigt} , B_{Reuss} ve G_{Reuss} yakaşimleri [112];

$$B_{Voigt} = \frac{1}{9}(2C_{11} + 2C_{12} + 4C_{13} + C_{33}), \quad G_{Voigt} = \frac{1}{15}(2C_{11} - C_{12} - 4C_{13} + C_{33} + 6C_{44} + 3C_{66})$$

$$B_{Reuss} = \frac{1}{2S_{11} + 2S_{12} + 4S_{13} + S_{33}}, \quad G_{Reuss} = \frac{15}{8S_{11} - 4S_{12} - 8S_{13} + 4S_{33} + 6S_{44} + 3S_{66}} \quad (3.13)$$

Hem Kübik hem de tetragonal yapılar için S , uyum matrisidir yani C 'ye ters matristir ve bu nedenle aritmetik ortalama, G 'den daha iyi bir tahmin vermelidir.

B ve G belirlendiğinde, Poisson oranı σ ve Young modülü E , standart formülü aşağıdaki gibidir.

$$\sigma = \frac{1}{2} \frac{B - \frac{2}{3}G}{B + \frac{1}{3}G}, \quad E = \frac{9B}{1 + \frac{3B}{G}} \quad (3.14)$$

Kübik yapı için Anizotropi faktörü (A);

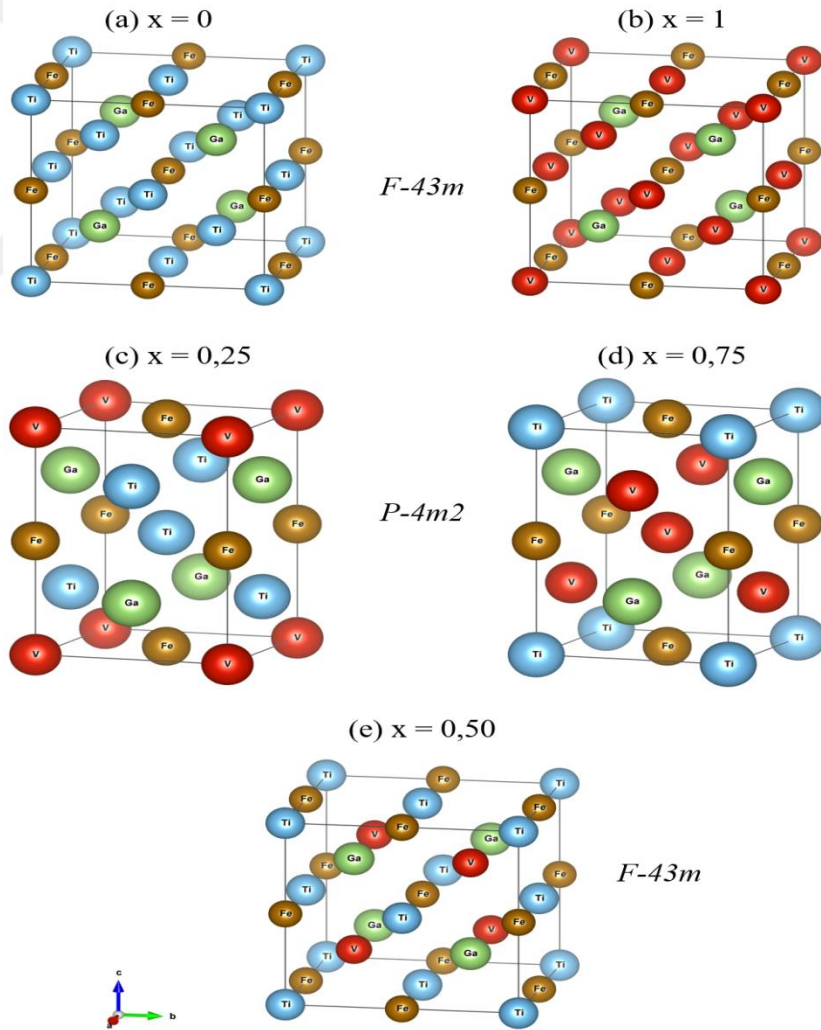
$$A = \frac{2C_{44}}{(C_{11} - C_{12})} \quad (3.15)$$

Tetragonal yapı için Anizotropi faktörü (A);

$$A = \frac{2C_{66}}{(C_{11} - C_{12})} \quad (3.16)$$

4. BUGULAR VE TARTIŞMA

Bu çalışmada, $(\text{Ti}_{1-x}\text{V}_x)_2\text{FeGa}$ ($x = 0; 0,25; 0,5; 0,75; 1$) alaşımlarının $x = 0$ ve 1 durumlarında $F-43m$ uzay grubunda bulunan Ti_2FeGa ve V_2FeGa ters Heusler alaşımları Şekil 4.1.a ve Şekil 4.1.b'deki gibi, $x = 0,5$ durumu için $F-43m$ uzay grubunda bulunan TiVFeGa dörtlü Heusler alaşımı Şekil 4.1.e'deki gibi, $x = 0,25$ ve $0,75$ durumlarında ise $P-4m2$ uzay grubunda bulunan $(\text{Ti}_{0,75}\text{V}_{0,25})_2\text{FeGa}$ ve $(\text{Ti}_{0,25}\text{V}_{0,75})_2\text{FeGa}$ tetragonal alaşımları Şekil 4.1.c ve Şekil 4.1.d'deki gibi kristal yapı oluşturacak biçimde atomlar Tablo 4.1'deki Wyckoff pozisyonlarına yerleştirildi.



Şekil 4.1. $(\text{Ti}_{1-x}\text{V}_x)_2\text{FeGa}$ ($x = 0; 0,25; 0,5; 0,75; 1$) alaşımlarının kristal yapıları

Kristal yapıları Şekil 4.1'deki gibi oluşturulan alaşımların MedeA paket programı içerisindeki VASP kütüphanesinde bulunan GGY-PBE [106] pseudo-potansiyelleri kullanılarak tüm hesaplamaları MedeA-VASP paket programıyla yapıldı. Öncelikli olarak yakınsama hesapları yapılarak uygun k-noktaları, kesme enerjisi ve smearing parametresi belirlendi. Daha sonrasında ise hesaplamalarda kullanılmak üzere kesme enerjisi 500 eV, Methfessel-Paxton'a [113] göre smearing parametresi 0,2 eV olarak alındı. Gamma-points ile oluşturulan k-noktaları F-43m kübik yapıları için toplam enerji hesabında 8x8x8 ve durum yoğunluğu hesabında ise 12x12x12 olarak, P-4m2 tetragonal yapısı için toplam enerji hesabında 8x8x6 ve durum yoğunluğu hesabında ise 10x10x7 alındı.

Tablo 4.1. $(\text{Ti}_{1-x}\text{V}_x)_2\text{FeGa}$ ($x = 0; 0,25; 0,5; 0,75; 1$) alaşımlarının Wyckoff pozisyonları

Malzemeler	Uzay Grubu	Ti			V			Fe			Ga		
		x	y	z	x	y	z	x	y	z	x	y	z
Ti₂FeGa	<i>F-43m</i>	0	0	0				1/2	1/2	1/2	3/4	3/4	3/4
		1/4	1/4	1/4									
(Ti_{0,75}V_{0,25})₂FeGa	<i>P-4m2</i>	1/2	1/2	1/2	1/2	1/2	0	0	0	1/2	0	1/2	z
		0	1/2	z				1/2	1/2	0			
TiVFeGa	<i>F-43m</i>	0	0	0	3/4	3/4	3/4	1/2	1/2	1/2	1/4	1/4	1/4
(Ti_{0,25}V_{0,75})₂FeGa	<i>P-4m2</i>	0	0	0	1/2	1/2	1/2	0	0	1/2	0	1/2	z
					0	1/2	z	1/2	1/2	0			
V₂FeGa	<i>F-43m</i>				0	0	0	1/2	1/2	1/2	3/4	3/4	3/4
					1/4	1/4	1/4						

4.1. $(\text{Ti}_{1-x}\text{V}_x)_2\text{FeGa}$ ($x = 0; 0,25; 0,5; 0,75; 1$) Alaşımlarının Yapısal Özellikleri

F-43m uzay grubundaki kübik ve P-4m2 uzay grubundaki tetragonal kristal yapılarına atomlar Tablo 4.1'deki şekilde yerleştirilerek kristal yapı değiştirilmeden atomlar arası kuvvet 1×10^{-9} eV olana kadar geometrik optimizasyon yapıldı ve P-4m2 uzay grubunda yer alan $(\text{Ti}_{0,75}\text{V}_{0,25})_2\text{FeGa}$ tetragonal yapıdaki alaşımın Ti ve Ga atomlarının z koordinatları sırasıyla 0,7606 ve 0,2471 olarak, $(\text{Ti}_{0,25}\text{V}_{0,75})_2\text{FeGa}$ tetragonal yapıdaki alaşımın ise V ve Ga atomlarının z koordinatları sırasıyla 0,7410 ve 0,2547 olarak hesaplandı. Daha sonrasında, $(\text{Ti}_{1-x}\text{V}_x)_2\text{FeGa}$ ($x = 0; 0,25; 0,5; 0,75; 1$) alaşımlarının minimum enerjideki denge durumundaki örgü parametreleri elde edildi. Bu alaşımların elde edilen örgü parametreleri Tablo 4.2'de karşılaştırmalı olarak verildi.

Tablo 4.2. $(\text{Ti}_{1-x}\text{V}_x)_2\text{FeGa}$ ($x = 0; 0,25; 0,5; 0,75; 1$) alaşımlarının örgü sabitleri ($a, c; \text{Å}$) ve hacimleri ($V; \text{Å}^3$)

Malzemeler	Ref.	a	c	c/a	V
Ti₂FeGa	Bu çalışma	6,101	-	-	227,119
	GGY-PBE [41]	6,122	-	-	-
	GGY-PBE [42]	6,120	-	-	-
	GGY-PBE [45]	6,100	-	-	-
	GGY-WC [46]	6,0226	-	-	-
	PW [45]	6,177	-	-	-
	GGY-PW91[48]	6,100	-	-	-
(Ti_{0.75}V_{0.25})₂FeGa	Bu çalışma	4,246	6,150	1,448	110,857
TiVFeGa	Bu çalışma	5,995	-	-	215,464
(Ti_{0.25}V_{0.75})₂FeGa	Bu çalışma	4,210	5,951	1,413	105,478
V₂FeGa	Bu çalışma	5,921	-	-	207,656
	GGY-PBE [41]	5,910	-	-	-
	CASTEP-GGY [49]	5,911	-	-	-

Ti₂FeGa ve V₂FeGa ters Heusler alaşımlarının hesaplanan örgü sabitleri literatürde yer alan diğer teorik çalışmalarla karşılaştırmalar yapıldı. Buna göre, Ti₂FeGa alaşımı için elde edilen örgü sabiti değeri CASTEP paket programı ile GGY-PW91 kullanılarak yapılan çalışmadan [48] ve VASP paket programı ile GGY-PBE kullanılarak yapılan çalışmadan %0,02'lik bir farkla ve Drief ve ark. tarafından [46] WIEN2k paket programı ile GGY-WC kullanılarak yapılan çalışmadan %1.3'lük bir farkla hesaplandı. V₂FeGe alaşımının örgü sabiti değeri ise Ma ve ark. tarafından [41] VASP kodları kullanılarak GGY-PBE yöntemine göre elde edilen değerden %0,18'lik farkla, Zhang ve ark. tarafından [49] CASTEP paket programı ile GGY yöntemine göre elde edilen değerden %0,17'lik bir farkla yüksek olarak elde edildi. TiVFeGa, (Ti_{0.75}V_{0.25})₂FeGa ve (Ti_{0.25}V_{0.75})₂FeGa alaşımları için literatürde çalışmaya rastlanılmadığından herhangi bir karşılaştırma yapılamamıştır. Tablo 4.2'deki alaşımların örgü sabitleri kendi aralarında karşılaştırıldığında kübik yapıdaki $x = 0; 0,5; 1$ durumları için Vanadyum katkısı arttıkça örgü sabiti değerlerinin düştüğü görülmektedir. Ayrıca, tetragonal simetriye sahip $x = 0,25$ ve $0,75$ durumlarındaki yapılar için hem a ve c örgü sabiti hem de c/a oranının Vanadyum katkısıyla azaldığı açık bir şekilde görülmektedir. Bu duruma Vanadyum'un atom çapının titanyumdan daha düşük olmasının neden olduğu söylenebilir.

4.2. $(\text{Ti}_{1-x}\text{V}_x)_2\text{FeGa}$ ($x = 0; 0,25; 0,5; 0,75; 1$) Alaşımlarının Manyetik ve Elektronik Özellikleri

Spin katkısı göz önüne bulundurularak $(\text{Ti}_{1-x}\text{V}_x)_2\text{FeGa}$ ($x = 0; 0,25; 0,5; 0,75; 1$) alaşımları için spin polarizasyonlarına göre hesaplamalar yapıldı. Bu alaşımların yapısal özellikler kapsamında elde edilen denge durumu örgü sabitleri ve yine yapısal özellikler kapsamında yakınsama sonucu bulunan k-noktaları, kesme enerjisi ve smearing parametresi gibi değerler manyetik ve elektronik özelliklerini hesaplarken kullanıldı. Hesaplama sonucunda bulunan spin polarizasyonuna göre elektronik bant enerji eğrilerinden, kısmi ve toplam durum yoğunluklarından Fermi enerjileri çıkartılarak Fermi enerji seviyesi 0 eV olacak şekilde alınıp şekiller çizildi. Çizilen elektronik bant yapı ve durum yoğunlukları Ti_2FeGa için Şekil 4.2’de, $(\text{Ti}_{0,75}\text{V}_{0,25})_2\text{FeGa}$ için Şekil 4.3’de, TiVFeGa için Şekil 4.4’de, $(\text{Ti}_{0,25}\text{V}_{0,75})_2\text{FeGa}$ için Şekil 4.5’de ve V_2FeGa için Şekil 4.6’da verildi. Şekillerde Fermi enerji seviyesi kesikli çizgilerle gösterildi.

Toplam manyetik momentler ile ilgili bilgi içeren Slater-Pauling davranışı (SPD) Heusler alaşımları için uygulanabilmektedir. Bu çalışmada incelenen Heusler yapıdaki ($x = 0; 0,5; 1$) alaşımların 9 valans bandının tamamı dolu olduğundan SPD’ye göre toplam manyetik momenti $M_t = (Z_t - 18)\mu_B$ kuralı ile bulunabilir [114, 115]. Burada yer alan Z_t , alaşımı oluşturan her bir atomdaki değerlik elektronların toplamı veya spin yörüngelerinde bulunan elektron sayılarının toplamı ($Z_t = N \uparrow + N \downarrow$) biçiminde verilir. SPD’ye göre toplam manyetik momentler hesaplandığında Ti_2FeGa ters Heusler alaşımı için $1 \mu_B$, TiVFeGa dörtlü Heusler alaşımı için $2 \mu_B$ ve V_2FeGa ters Heusler alaşımı için $3 \mu_B$ olarak elde edilir. Hesaplamalar sonucunda elde edilen bu Heusler alaşımlarına ($x = 0; 0,5; 1$) ait olan toplam manyetik momentler ile literatürde yer alan değerler ve SPD’den elde edilen değerlerle uyum içerisinde olduğu Tablo 4.3’te açıkça görülmektedir. Fakat tetragonal yapıda yer alan $(\text{Ti}_{0,75}\text{V}_{0,25})_2\text{FeGa}$ ve $(\text{Ti}_{0,25}\text{V}_{0,75})_2\text{FeGa}$ alaşımların SPD uyum sağladığını söyleyebilmek her zaman için doğru bir ifade olmayabilir. Bu yüzden, tetragonal yapıda yer alan bu alaşımlar için SPD kuralını uygulayarak bir karşılaştırma yapılmadı. Buna rağmen, Ti_2FeGa alaşımına V atomunun katılanmasıyla birlikte V katkısı artıkça toplam manyetik moment değerlerinde bir artışın olduğu görülmektedir. $(\text{Ti}_{1-x}\text{V}_x)_2\text{FeGa}$ ($x = 0; 0,25; 0,5; 0,75; 1$) alaşımlarının toplam manyetik momentleri sıfırdan farklı değerde olduklarından dolayı spin yönelimleri elektronik bant eğrileri ve durum yoğunlukları anti simetrik olmaktadır. Bu durum elektronik bant eğrilerine ve durum yoğunluklarına ait şekillerde açık bir biçimde görülmektedir. Manyetik özellik sergileyen bu alaşımların

toplam manyetik momentlerine en büyük katkı ise kısmi durum yoğunluğu eğrileri incelendiğinde alaşımları oluşturan Ti, V ve Fe atomlarının d orbitallerinden kaynaklandığı söylenebilir.

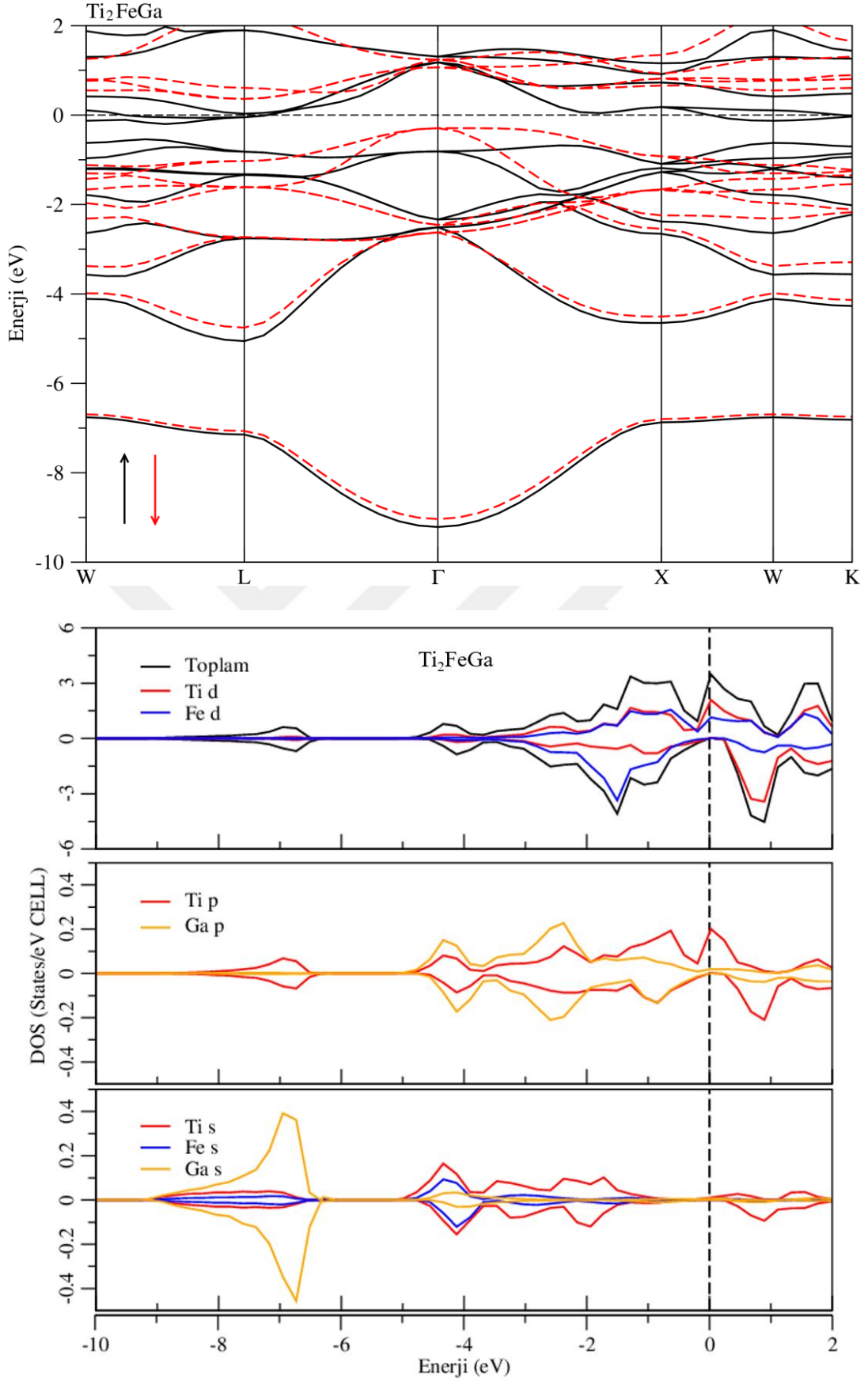
Tablo 4.3. $(\text{Ti}_{1-x}\text{V}_x)_2\text{FeGa}$ ($x = 0; 0,25; 0,5; 0,75; 1$) alaşımlarının toplam ve kısmi manyetik momentleri (M_i ; μ_B) ve spin-aşağı yöneliminde yasak enerji aralıkları (E_g ; eV)

Malzemeler	Referanslar	M_T	$M_{a-Ti(V)}$	$M_{b-V(Ti)}$	M_{Fe}	M_{Ga}	E_g
Ti₂FeGa	Bu çalışma	1,0074	0,998	0,754	-0,941	0,000	0,65
	GGY-PBE [41]	1	1,005	0,757	-0,966	0,009	0,57
	GGY-PBE [42]	1	1,22	0,93	-1,09	-0,06	0,56
	GGY-PBE [43]	-	-	-	-	-	0,56
	GGY-PBE [45]	1,002	1,123	0,904	-1,196	0,008	0,59
	GGY-WC [46]	1,0016	0,7886	0,5026	-0,5475	0,00537	0,64
	GGY-PW91[48]	0,98	1,00	0,76	-0,86	0,08	0,56
(Ti_{0,75}V_{0,25})₂FeGa	Bu çalışma	1,5024	0,560	0,983	-0,440	-0,002	0,38
TiVFeGa	Bu çalışma	1,8025	0,829	0,558	0,244	-0,008	0,83
(Ti_{0,25}V_{0,75})₂FeGa	Bu çalışma	1,9901	0,337	0,764	0,725	-0,005	0
V₂FeGa	Bu çalışma	2,8365	1,698	-0,226	1,182	-0,010	0,64
	GGY-PBE [41]	2,8487	1,803	-0,231	1,200	-0,001	-
	CASTEP-GGY [49]	2,86	2,34	-0,50	1,18	-0,16	-

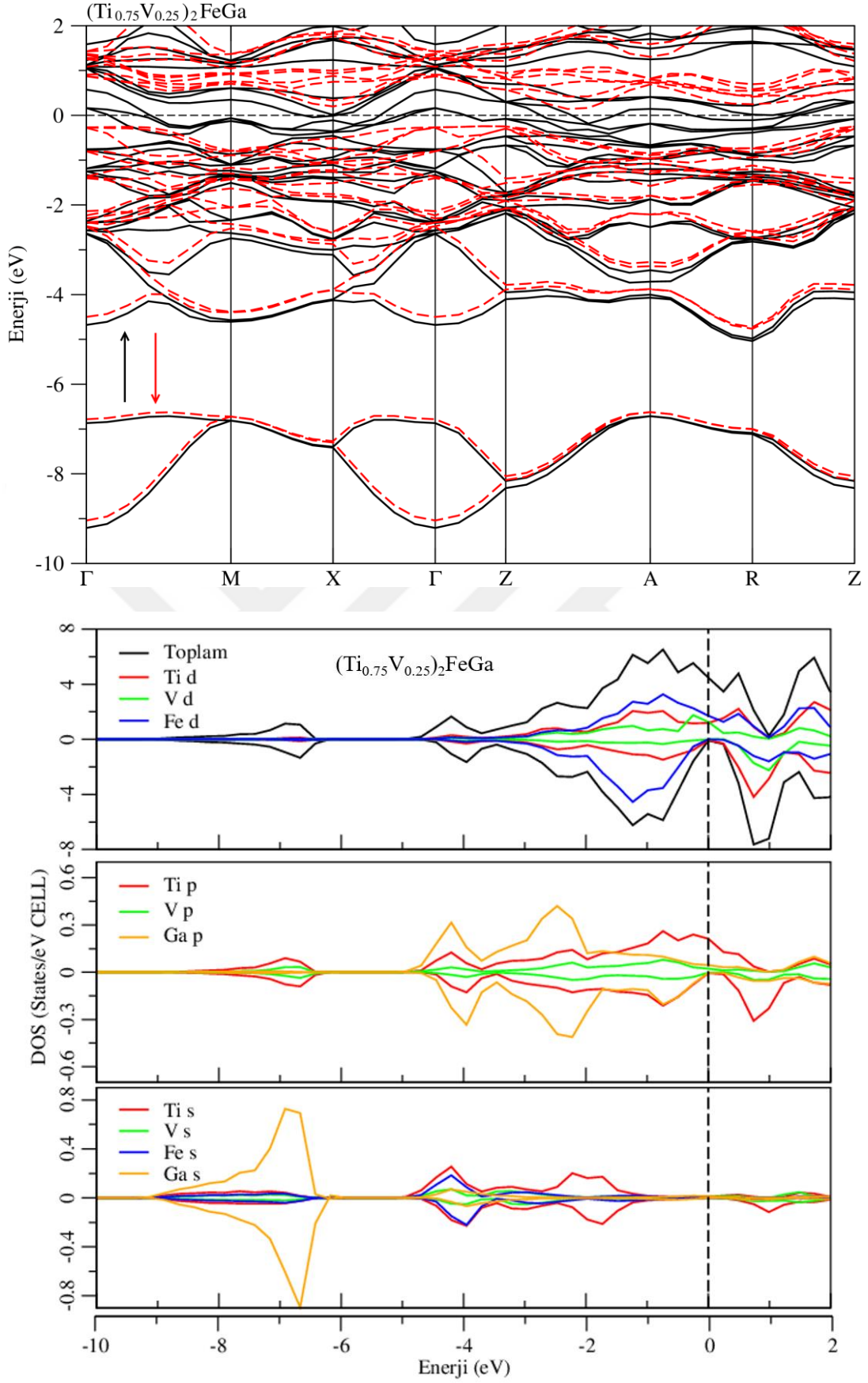
$(\text{Ti}_{1-x}\text{V}_x)_2\text{FeGa}$ ($x = 0; 0,25; 0,5; 0,75; 1$) alaşımlarının elektronik özellikler kapsamında Şekil 4.2 - 4.3 - 4.4 - 4.5 - 4.6'da çizilen elektronik bant eğrileri incelendiğinde, $x = 0; 0,5; 1$ katkılama durumlarında oluşan ters ve dörtlü Heusler alaşımlarında spin yukarı yöneliminde Fermi seviyesinin altında kalan valans bantları arasında küçük bir yasak enerji aralığı (GAP) olduğu elektronik bant eğrilerine ait şekillerden anlaşılmaktadır. Fakat bu alaşımların tamamında spin yukarı yöneliminde Fermi enerji seviyesi üzerinde herhangi bir yasak enerji aralığı bulunmadığı ve Fermi enerji seviyesini bantların kestiği görülmektedir. Bundan dolayı spin yukarı yöneliminde bu alaşımların metalik özellik gösterdiği söylenebilir. Spin aşağı yöneliminde ise Ti_2FeGa , $(\text{Ti}_{0,75}\text{V}_{0,25})_2\text{FeGa}$, TiVFeGa ve V_2FeGa alaşımlarında Fermi seviyesi civarında GAP olduğu ve spin aşağı durumunda bu alaşımların yarıiletken bir özellik gösterdiği alaşımlara ait şekillerden anlaşılmaktadır. Bundan dolayı bu dört alaşımların yarı metalik davranış sergilediği söylenebilir. Ayrıca, bu yarı metalik GAP'e sahip olan bu alaşımların valans ve iletkenlik bantları arasında dolaylı bir geçiş söz konusudur. Bu alaşımlara ait GAP değerleri Tablo 4.3'de verildi ve literatür taraması sonucunda Ti_2FeGa ters Heusler alaşımı için bulunan GAP değerleri ile karşılaştırma yapılarak uyumlu olduğu görüldü. Bunların yanı sıra, $(\text{Ti}_{0,25}\text{V}_{0,75})_2\text{FeGa}$ tetragonal alaşımı ise spin aşağı yöneliminde Fermi enerji seviyesinin hemen altında küçük

bir GAP'e sahiptir. Bu tetragonal alaşımın bu durumdan dolayı yarı metalik benzeri bir davranış sergilediği söylenebilir.

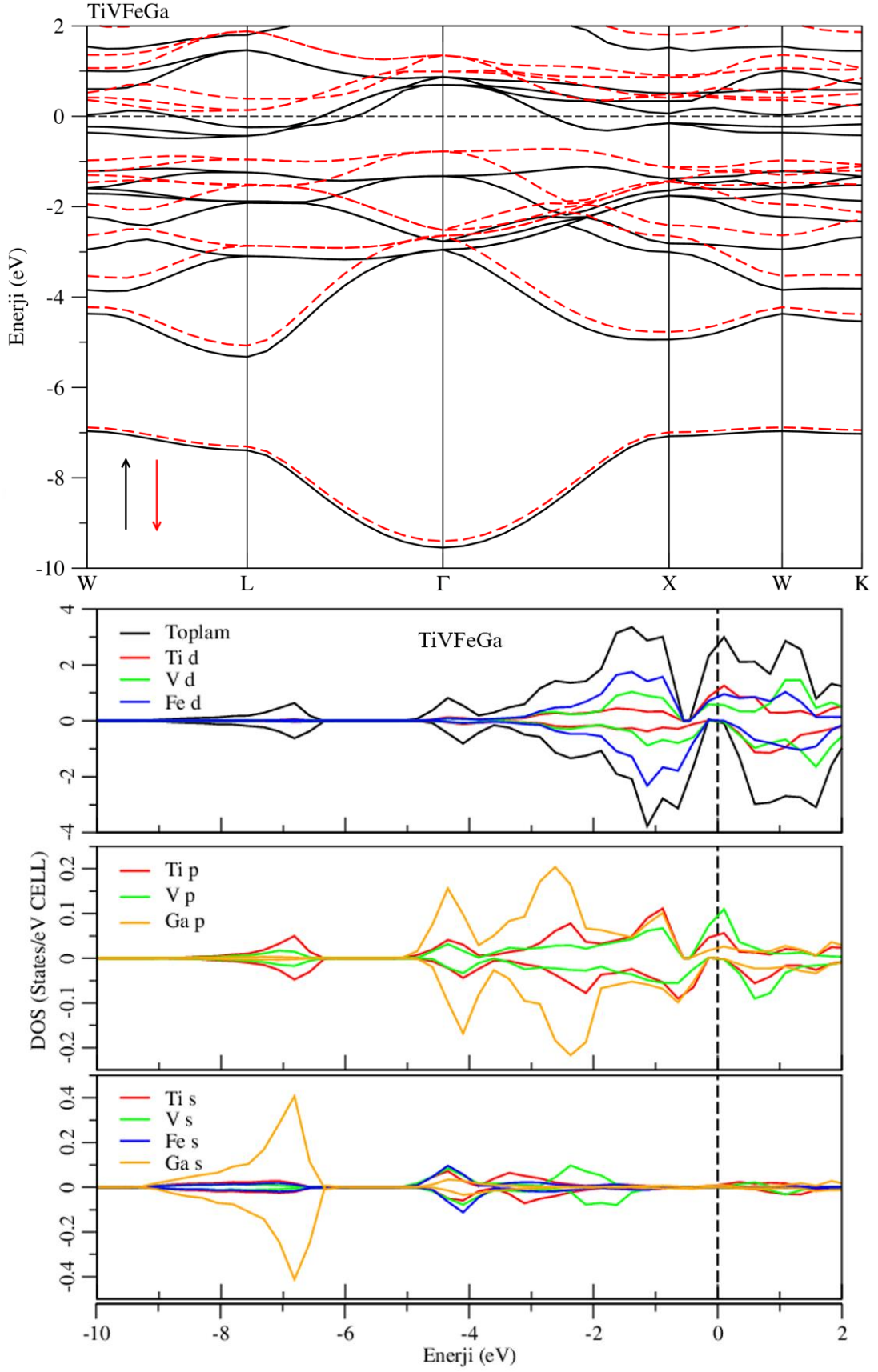
Toplam ve kısmi durum yoğunlukları incelenen bu alaşımların her bir elementten gelen iletkenliğe katkının daha iyi belirlenebilmesi için spin yukarı yönelimine bakıldığında, alaşımları oluşturan atomlara ait elektronların Fermi seviyesinin üzerinde en fazla katkının d orbitallerine ait elektronlar olduğu görülmektedir. Bununla birlikte, $(\text{Ti}_{1-x}\text{V}_x)_2\text{FeGa}$ ($x = 0; 0,25; 0,5; 0,75; 1$) alaşımlarında $x = 0; 0,5; 1$ katkılama durumlarındaki elde edilen ters ve dörtlü Heusler alaşımlarında en baskın Ti-d orbitalinin elektronlarıken V atomunun katkılama oranı arttıkça Fe-d orbitalinin katkısının da arttığı şekillerden anlaşılmaktadır. Katkılamanın $x = 0,25; 0,75$ olduğu durumlarda ise oluşan tetragonal yapıdaki alaşımlarda V atomunun oranının artmasıyla kübik durumun tam tersine Fe-d orbitalinden gelen katkının azaldığı görülmektedir. Ayrıca, literatürdeki yer alan çalışmalar ile bu alaşımların elektronik özellikleri karşılaştırıldığında uyumlu oldukları görüldü. Ma ve ark. [41] VASP kodları kullanılarak GGY-PBE metodu ile birçok ters Heusler yapıdaki malzemeyi inceledi ve Ti_2FeGa ters Heusler alaşımın yarı metalik bir gap'a sahip olduğunu raporladı. FPLO minimum temel bant yapı metodu ile GGY-PBE pseudopotansiyelleri yardımıyla Wei ve ark. [42] tarafından Ti_2YZ ($Y = \text{Fe, Co, Ni}; Z = \text{Al, Ga, In}$) Heusler alaşımlarının yarı metalik özellikleri incelendi ve bu alaşımların yarı metalik oldukları tespit edildi. Ti_2FeZ ($Z = \text{Al, Ga, Ge}$) Heusler alaşımları Liping ve ark. [45] tarafından VASP kodları ile GGY-PBE metodu ile incelendi ve bu Heusler alaşımlarının yarı metalik olduklarını raporlandı. Drief ve ark. [46] Ti_2FeZ ($Z = \text{Al, Ga, In}$) alaşımlarını WIEN2k kodlarıyla FP-LAPW yöntemine göre Genelleştirilmiş Gradyent Yaklaşımı içerisinde Wu-Cohen (GGY-WC) metodu ile inceledi ve bu alaşımların yarı metalik davranış sergilediklerini bildirdi. Bunlardan başka, Zhang ve ark. [48] tarafından 2016 yılında yapılan deneysel ve teorik çalışmada Ti_2YAl ve $\text{Ti}_2\text{Y}'\text{Ga}$ ($Y = \text{Co, Fe}; Y' = \text{Cr, Fe}$) alaşımlarının, Zhang ve ark. [49] tarafından yapılan teorik çalışmada ise Vanadyum bazlı ters Heusler alaşımlarının yapısal, elektronik ve manyetik özellikleri incelendi. Bu çalışmanın, Zhang ve ark. [48, 49] tarafından yapılan çalışma ile uyumlu olduğu görüldü.



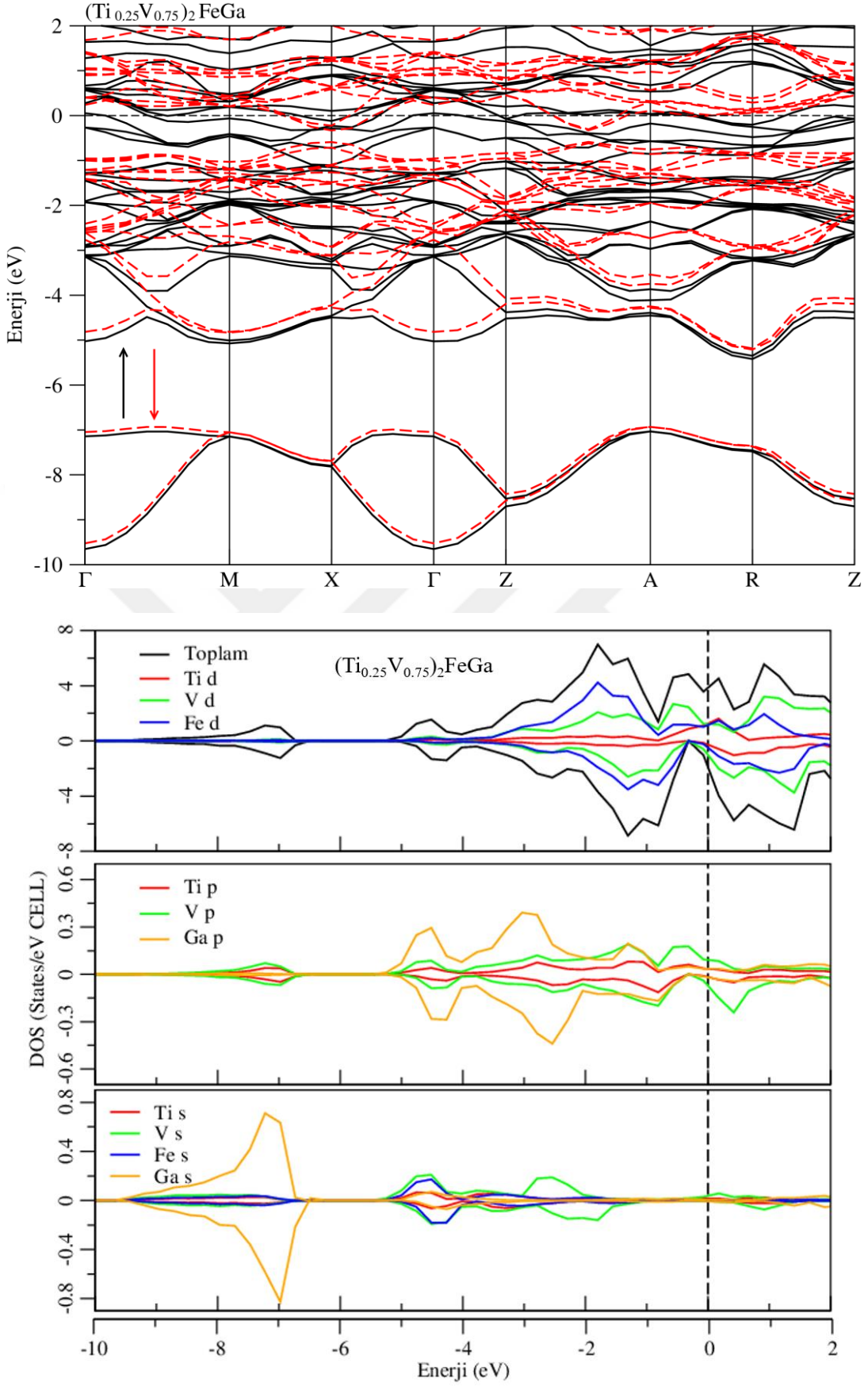
Şekil 4.2. Ti_2FeGa ters Heusler alaşımının yüksek simetri eksenleri boyunca çizilmiş elektronik bant eğrileri, toplam ve kısmi durum yoğunlukları



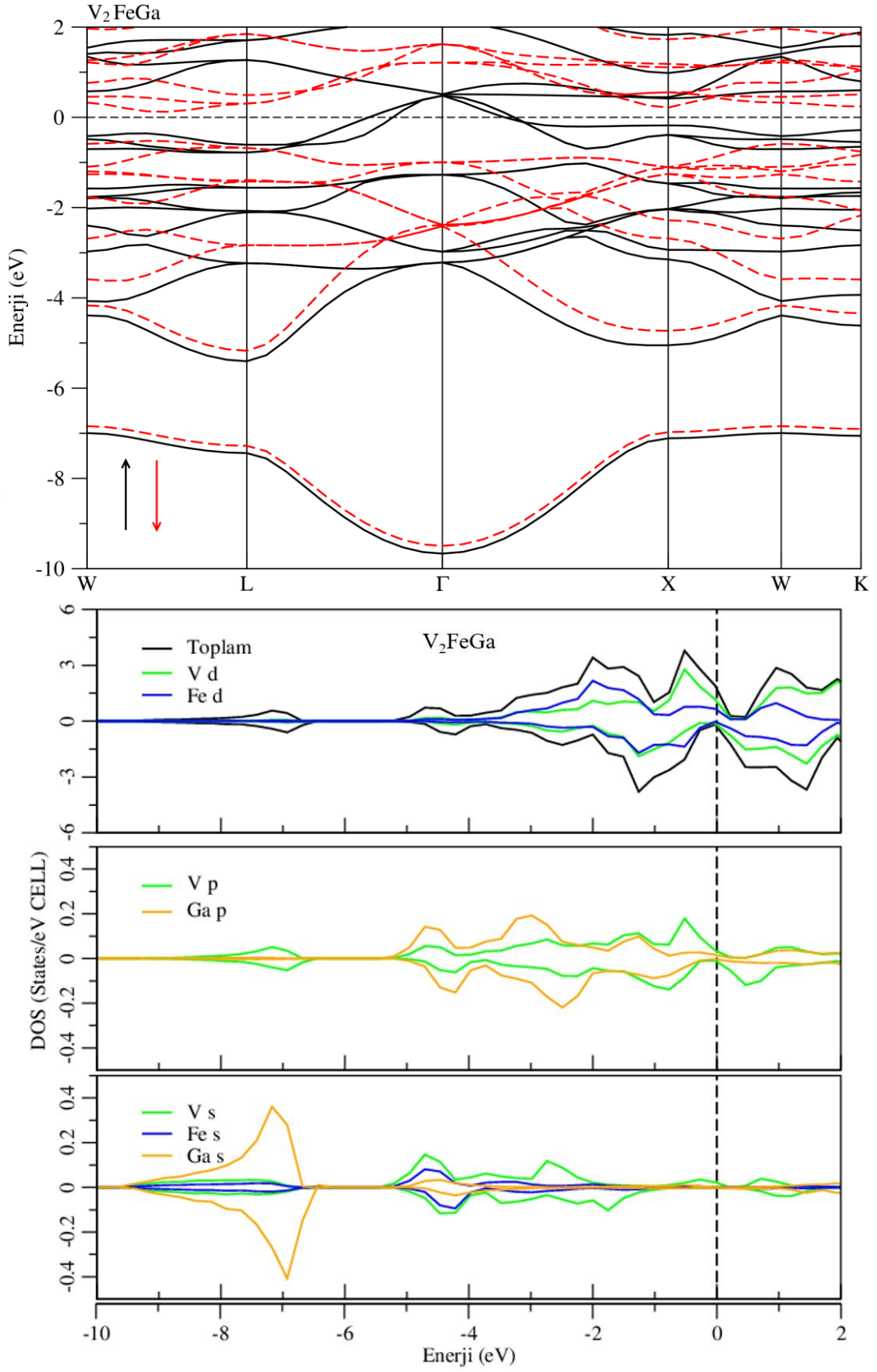
Şekil 4.3. $(\text{Ti}_{0.75}\text{V}_{0.25})_2\text{FeGa}$ tetragonal alaşımın yüksek simetri eksenleri boyunca çizilmiş elektronik bant eğrileri, toplam ve kısmi durum yoğunlukları



Şekil 4.4. TiVFeGa dörtlü Heusler alaşımının yüksek simetri eksenleri boyunca çizilmiş elektronik bant eğrileri, toplam ve kısmi durum yoğunlukları



Şekil 4.5. $(\text{Ti}_{0.25}\text{V}_{0.75})_2\text{FeGa}$ tetragonal alaşımın yüksek simetri eksenleri boyunca çizilmiş elektronik bant eğrileri, toplam ve kısmi durum yoğunlukları



Şekil 4.6. V_2FeGa ters Heusler alaşımının yüksek simetri eksenleri boyunca çizilmiş elektronik bant eğrileri, toplam ve kısmi durum yoğunlukları

4.3. $(\text{Ti}_{1-x}\text{V}_x)_2\text{FeGa}$ ($x = 0; 0,25; 0,5; 0,75; 1$) Alaşımlarının Mekanik Özellikleri

Bir katı malzeme için elastik sabitler (C_{ij}) hem yapısal hem de mekanik kararlılıkla ilgili önemli bilgiler içermektedir. Katıların elastik özellikleri erime noktası, ısı sığası, ısıl genleşme katsayısı, Debye sıcaklığı gibi birçok fiziksel özelliklerle yakından ilişkilidir. F-43m uzay grubunda bulunan XA kristal simetrisine sahip ters Heusler alaşımları ve Y kristal simetrisindeki dörtlü Heusler alaşımları kübik yapıdadır. Kübik yapıda bulunan katı malzemelerin birbirinden bağımsız ikinci mertebeden C_{11} , C_{12} ve C_{44} gibi üç tane elastik sabiti vardır. P-42m uzay grubunda bulunan malzemeler ise tetragonal yapıda kristalleşirler ve bu uzay grubunda bulunan tetragonal yapıdaki malzemelerin ise birbirinden bağımsız ikinci mertebeden C_{11} , C_{12} , C_{13} , C_{33} , C_{44} ve C_{66} gibi altı tane elastik sabiti bulunur. Elastik özellik hesaplamaları, MedeA-VASP paket programı içerisinde optimize haldeki yapının INCAR dosyasına IBRION = 6, ISIF = 5 kodları girilerek denge halindeki kristale Stress-Strain tekniği [116-118] ile $(\text{Ti}_{1-x}\text{V}_x)_2\text{FeGa}$ ($x = 0; 0,25; 0,5; 0,75; 1$) alaşımları için hesaplandı. Hesaplamalar sonucunda elde edilen C_{ij} elastik sabitleri Tablo 4.4'te verildi.

Elastik sabitler için Born kararlılık ilkeleri olarak bilinen ve kübik yapıdaki kristaller için Eşitlik 4.1'deki, tetragonal yapıdaki kristaller için ise Eşitlik 4.2'deki mekanik kararlılık şartlarını oluşturan kriterler;

$$C_{11} - C_{12} > 0, \quad (C_{11} + 2C_{12}) > 0, \quad C_{44} > 0 \quad (4.1)$$

$$C_{11} > |C_{12}|, \quad 2C_{13}^2 < C_{33}(C_{11} + C_{12}), \quad C_{44} > 0, \quad C_{66} > 0 \quad (4.2)$$

gibi ifade edilir [119]. Tablo 4.4'de yer alan C_{11} , C_{12} , C_{13} , C_{33} , C_{44} ve C_{66} değerlerinden Born kararlılık şartları dikkate alındığında bu alaşımlarının tamamının mekanik kararlılık şartlarını sağladığı görülmektedir. Bundan dolayı hem kübik yapıdaki ters ve dörtlü Heusler alaşımların hem de tetragonal yapıdaki alaşımların buldukları kristal simetritlerinde mekanik olarak kararlı oldukları söylenebilir. Aynı zamanda elastik sabitleri incelenen bu alaşımların C_{11} değerlerine bakıldığında V atomunun katkısı arttıkça C_{11} değerinin arttığı alaşımların tamamında görülmektedir. C_{12} değerinde ise kübik alaşımların kendi aralarında ve tetragonal alaşımların kendi aralarında V katkısı ile doğru orantılı olarak arttığı söylenebilir. Ayrıca, genel olarak bu alaşımların elastik sabitlerine bakıldığında V_2FeGa alaşımının C_{11} , C_{12} , ve C_{44} değerlerinde en yüksek olduğu

görülmektedir. Literatür taramasında bu alaşımların elastik sabitleri ile ilgili herhangi bir çalışmaya rastlanılmadığından karşılaştırma yapılamadı.

Tablo 4.4. $(\text{Ti}_{1-x}\text{V}_x)_2\text{FeGa}$ ($x = 0; 0,25; 0,5; 0,75; 1$) alaşımlarının ikinci dereceden elastik sabitleri ($C_{11}, C_{12}, C_{13}, C_{33}, C_{44}, C_{66}$; GPa)

Malzemeler	C_{11}	C_{12}	C_{13}	C_{33}	C_{44}	C_{66}
Ti₂FeGa	137,34	121,06	-	-	75,98	-
(Ti_{0.75}V_{0.25})₂FeGa	236,53	80,77	122,68	181,79	92,77	37,41
TiVFeGa	202,57	138,74	-	-	55,89	-
(Ti_{0.25}V_{0.75})₂FeGa	245,21	94,25	139,11	211,46	73,54	38,81
V₂FeGa	253,68	130,24	-	-	91,23	-

$(\text{Ti}_{1-x}\text{V}_x)_2\text{FeGa}$ ($x = 0; 0,25; 0,5; 0,75; 1$) alaşımlarının hesaplanan elastik sabitlerinden Bulk modülü (B), Kayma modülü (G), Young modülü (E), poisson oranı (σ) ve anizotropi faktörü (A) hesaplanarak Tablo 4.5'te verildi. Bu alaşımlara ait Bulk modülü değerleri beklenildiği üzere C_{11} ve C_{12} elastik sabiti değerleri arasındaki bir değerde elde edildi. Ayrıca, literatürde yer alan diğer teorik çalışmalarda sadece Ti_2FeGa ters Heusler alaşımının Bulk modülü değeri bulundu ve karşılaştırma yapıldı. Buna göre, Wei ve ark. [42] tarafından yapılan çalışma ile % 0,7 'lik bir farkla oldukça uyumu diğer çalışmalarla ise biraz daha yüksek bir farkla uyumlu olduğu tespit edildi. Bunların yanı sıra, Ti_2FeGa alaşımına yapılan V katkısı arttıkça doğru orantılı olarak Bulk modülü değerinin arttığı görüldü. Bulk modülünün yanı sıra sıkışabilirliğin bir başka ifadesi olan Kayma modülünde ise bu alaşımların 100 GPa değerinin altında bir değere sahip olduğundan makaslama kuvvetler (köşelerden karşılıklı) daha fazla sıkışabilir oldukları anlaşıldı. Ayrıca, Kayma modülü değeri en düşük olan Ti_2FeGa ters alaşımının diğer alaşımlardan daha fazla sıkışabilirlikte olduğuda söylenebilir. Malzemelerin kırılman veya sünek doğasıyla ilgili bilgi edinmek için kullanılan Pugh'un kriteri [98] yaygın olarak kullanılır. Bu kriter gere, B/G oranı 1,75'den küçükse malzeme kırılman doğada, büyük ise sünek doğaya sahiptir. Buna göre bu alaşımların B/G oranı 1,75'ten büyük olduğundan dolayı tamamı sünek bir malzemedir. $(\text{Ti}_{1-x}\text{V}_x)_2\text{FeGa}$ ($x = 0; 0,25; 0,5; 0,75; 1$) alaşımlarının $x = 0; 0,5; 1$ katkı durumlarında kübik kristal yapıda olan Heusler alaşımları için V katkısı arttıkça süneklikte azalma olduğu, $x = 0,25; 0,75$ katkı durumlarında tetragonal kristal yapıda olan alaşımlar için V katkısı arttıkça sünekliğinde arttığı Tablo 4.5'den görülmektedir. Sertliğin bir ifadesi olan Young modülü incelendiğinde B/G oranının tersine kübik yapılarda V katkısı arttıkça sertliğin arttığı, tetragonal yapılarda ise V katkısı arttıkça sertliğin azaldığı Young modülü değerlerinden söylenebilir. Hesaplanan poisson

oranı genel olarak, atomik bağlanmalar ile ilgili bilgiler içermektedir ve kovalentliğin bir ölçüsü olarak değerlendirilir. Poisson oranının değeri, kovalent malzemelerde 0,1'e yakın, iyonik malzemelerde ise 0,25'e yakın değerlerde çıkmaktadır [120,121]. Bu alaşımların hesaplanan poisson oranları (0,30 – 0,38) 0,25 değerine daha yakın bir değerde olduğundan iyonik karakterde oldukları söylenebilir.

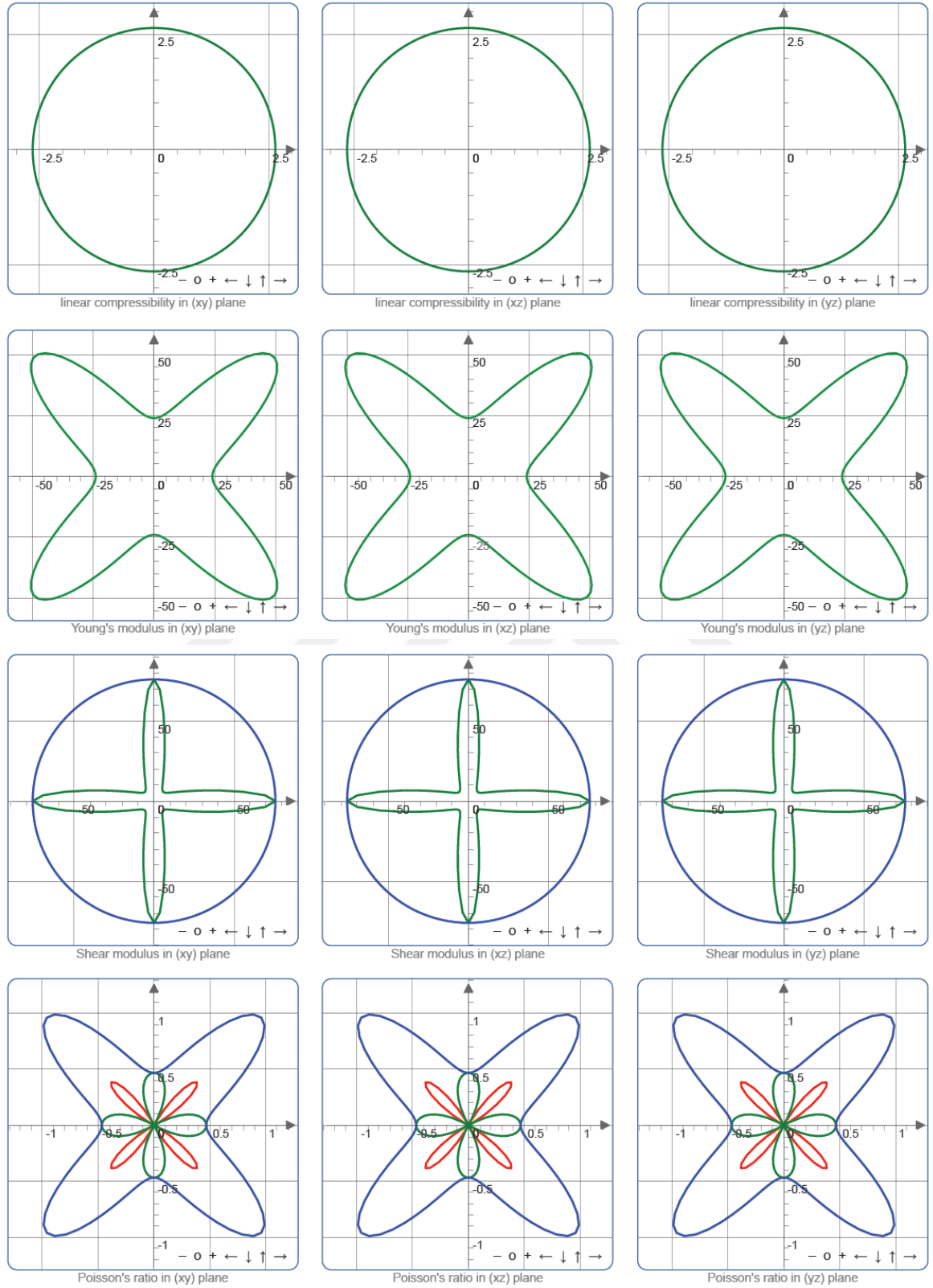
Tablo 4.5. $(\text{Ti}_{1-x}\text{V}_x)_2\text{FeGa}$ ($x = 0; 0,25; 0,5; 0,75; 1$) alaşımlarının Bulk modülü (B ; GPa), Kayma (Shear) modülü (G ; GPa), Bulk modülünün Kayma modülüne oranı (B/G), Young modülü (E ; GPa), Poisson oranı (σ) ve Anizotropi faktörü (A)

Malzemeler	Ref.	B	G	B/G	E	σ	A
Ti₂FeGa	Bu çalışma	126,49	33,19	3,81	91,57	0,38	9,32
	GGY-PBE [42]	125,60					
	GGY-PBE [45]	172,637					
	GGY-WC [46]	152,74					
(Ti_{0.75}V_{0.25})₂FeGa	Bu çalışma	145,14	60,22	2,41	158,70	0,32	2,82
TiVFeGa	Bu çalışma	160,01	44,64	3,58	122,53	0,37	1,75
(Ti_{0.25}V_{0.75})₂FeGa	Bu çalışma	160,69	55,78	2,88	149,99	0,34	2,14
V₂FeGa	Bu çalışma	171,39	78,00	2,19	203,18	0,30	1,48

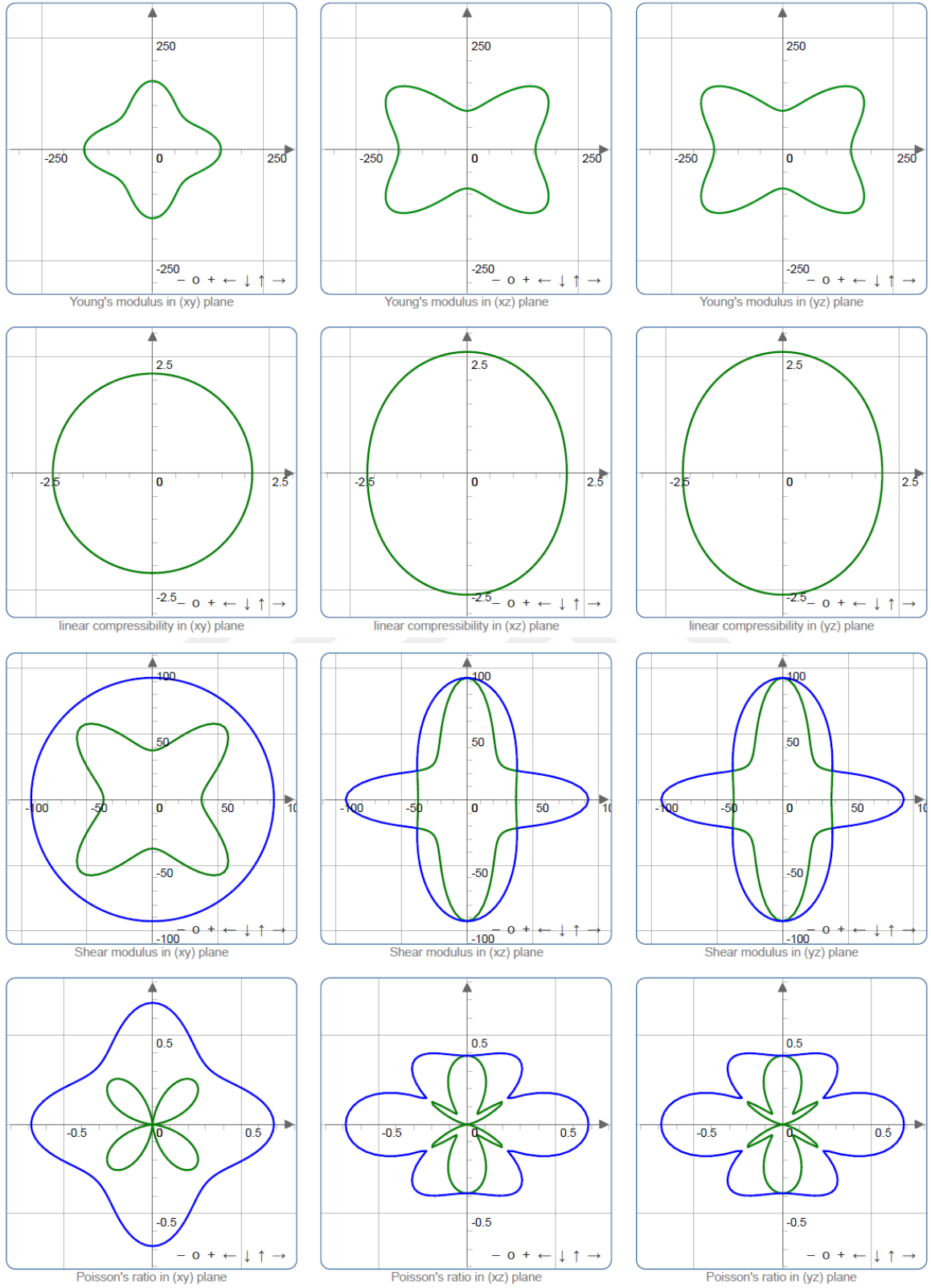
Mekanik özellikler kapsamında elde edilen bir başka parametre ise anizotropi faktörüdür. Anizotropi faktörü, izotropik malzemeler için 1'e eşitken anizotropik malzemeler için 1'den farklı değerdedir. Buna göre mekanik özellikleri incelenen bu alaşımların tamamının anizotropik olduğu söylenebilir. Anizotropik olan bu alaşımlar için ELATE kodları [122] kullanılarak Young modülü, Kayma modülü, sıkışabilirlik ve poisson oranlarının minimum ve maksimum değerleri hesaplanarak Tablo 4.6'da verildi. Ayrıca, hesaplanan bu parametreler xy , xz ve yz düzlemlerinde çizilerek Şekil 4.7 - 4.8 - 4.9 - 4.10 - 4.11'de verildi.

Tablo 4.6. $(\text{Ti}_{1-x}\text{V}_x)_2\text{FeGa}$ ($x = 0; 0,25; 0,5; 0,75; 1$) alaşımlarının Young modülü (E ; GPa), Sıkışabilirlik (β ; TPa^{-1}), Kayma modülü (G ; GPa) ve Poisson oranı (σ) maksimum ve minimum değerleri

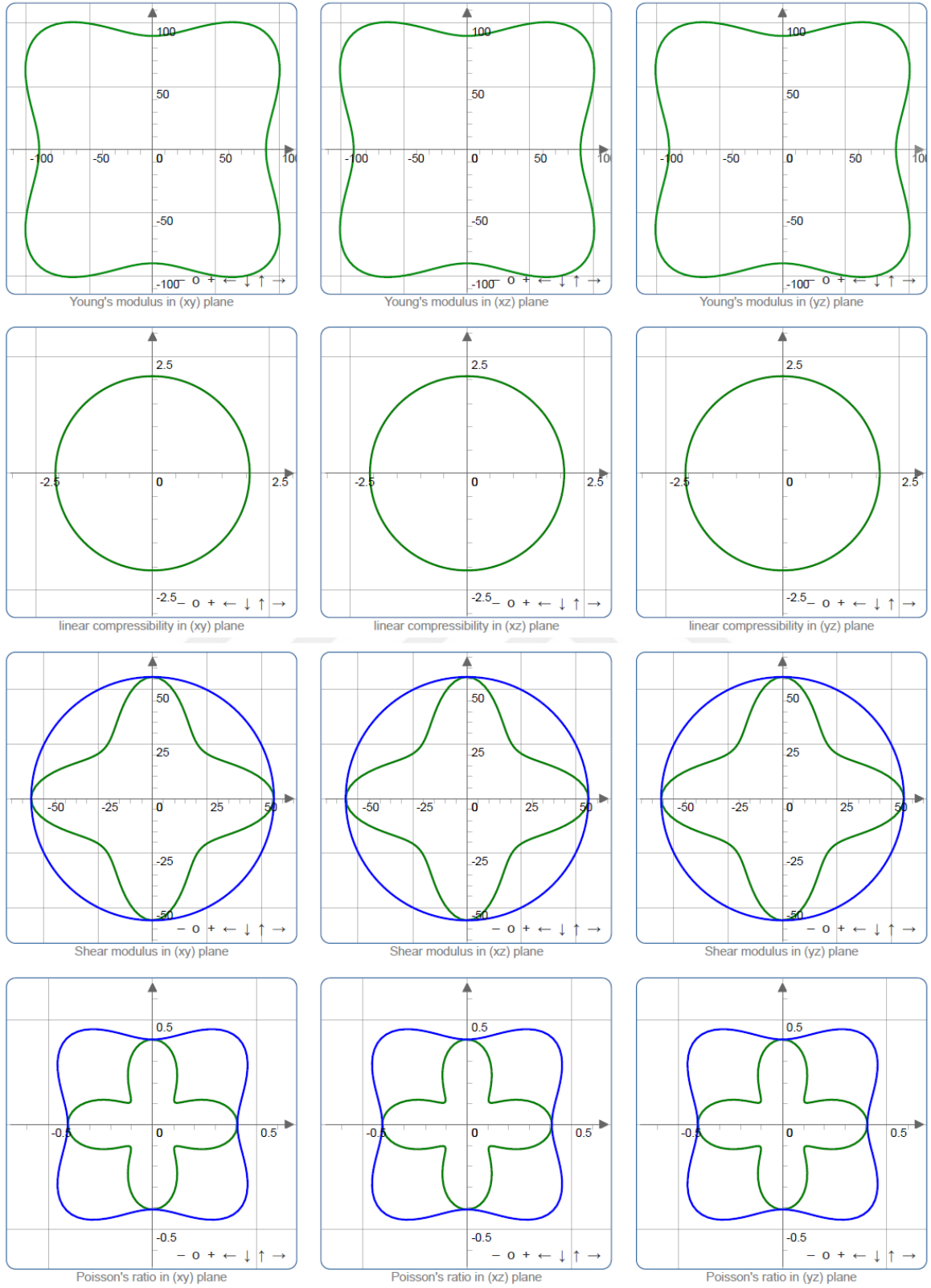
Malzemeler	E_{min}	E_{max}	β_{min}	β_{max}	G_{min}	G_{max}	σ_{min}	σ_{max}
Ti₂FeGa	23.92	189.92	2.64	2.64	8.145	75.98	-0.54	1.36
(Ti_{0.75}V_{0.25})₂FeGa	86.93	218.06	2.14	2.61	32.92	92.77	-0.08	0.68
TiVFeGa	89.78	150.19	2.08	2.08	31.92	55.89	0.15	0.58
(Ti_{0.25}V_{0.75})₂FeGa	97.44	192.86	1.85	2.19	35.32	75.48	0.02	0.65
V₂FeGa	165.31	232.45	1.94	1.94	61.72	91.23	0.16	0.43



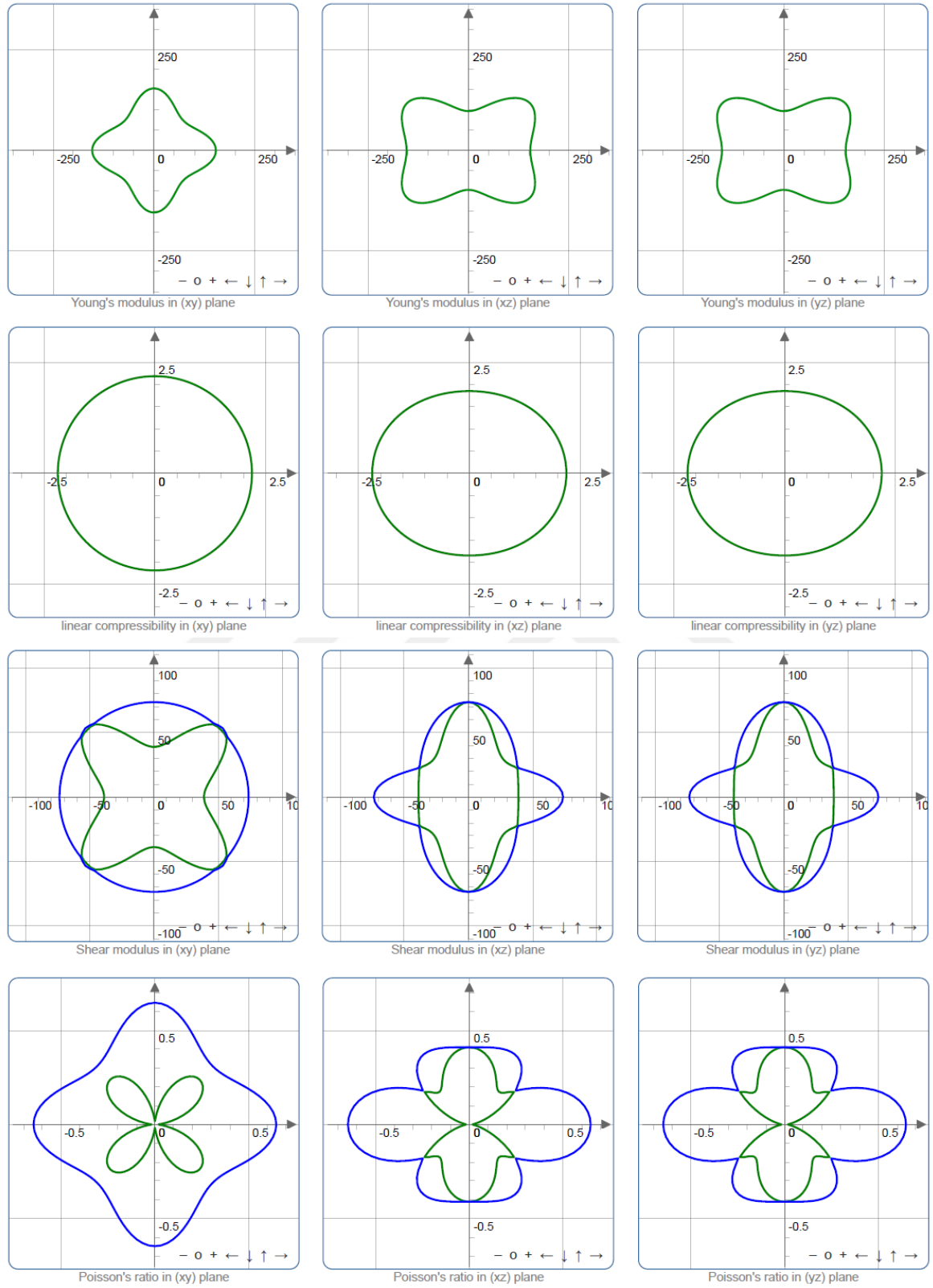
Şekil 4.7. Mekanik özellikleri hesaplanan Ti_2FeGa ters Heusler alaşımının yön bağımlılığı; Young modülü, doğrusal sıkıştırılabilirlik, kayma modülü ve Poisson oranı



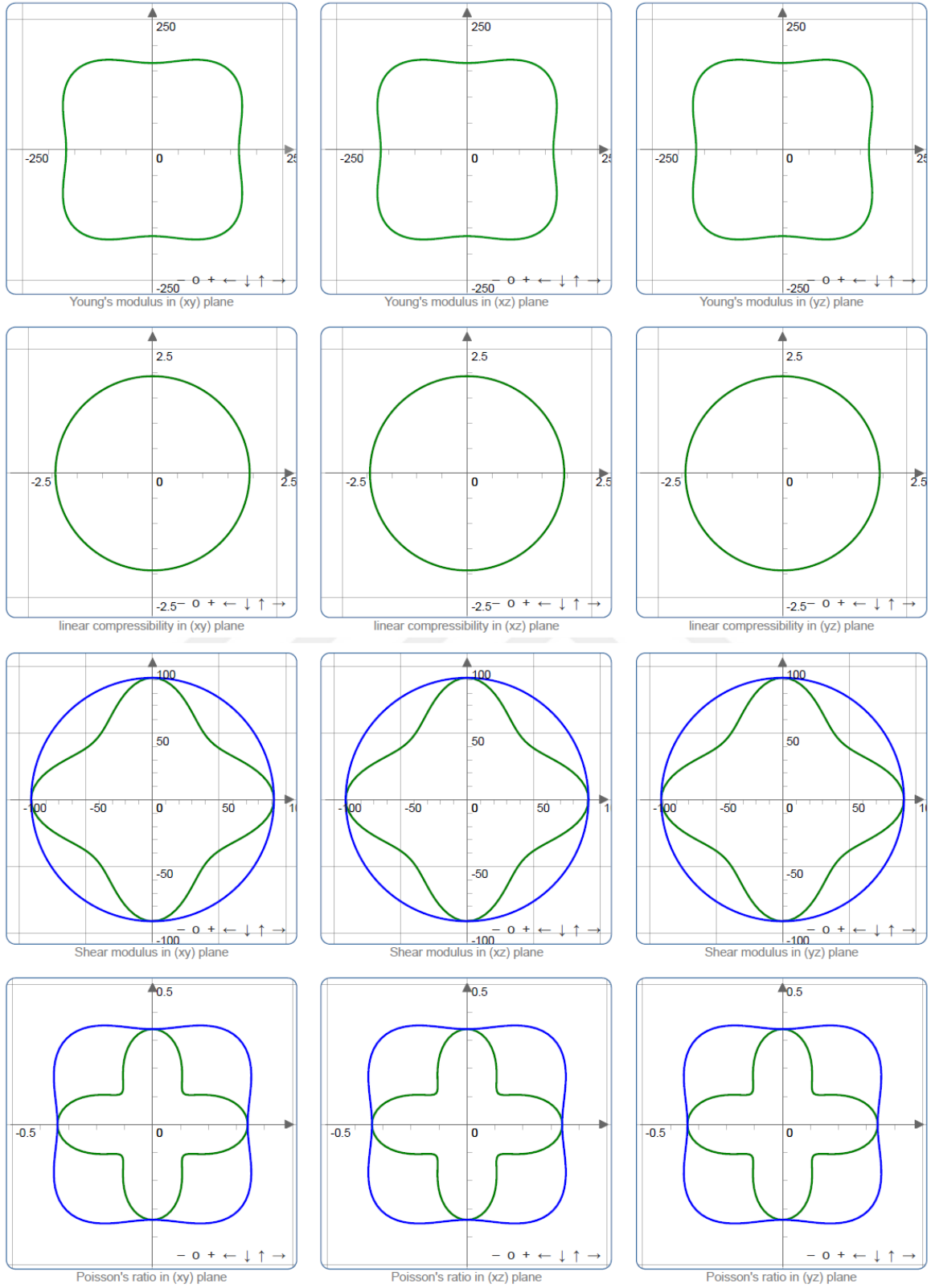
Şekil 4.8. Mekanik özellikleri hesaplanan $(\text{Ti}_{0.75}\text{V}_{0.25})_2\text{FeGa}$ tetragonal alaşımının yön bağımlılığı; Young modülü, doğrusal sıkıştırılabilirlik, kayma modülü ve Poisson oranı



Şekil 4.9. Mekanik özellikleri hesaplanan TiVFeGa dörtlü Heusler alaşımının yön bağımlılığı; Young modülü, doğrusal sıkıştırılabilirlik, kayma modülü ve Poisson oranı



Şekil 4.10. Mekanik özellikleri hesaplanan $(\text{Ti}_{0.25}\text{V}_{0.75})_2\text{FeGa}$ tetragonal alaşımının yön bağımlılığı; Young modülü, doğrusal sıkıştırılabilirlik, kayma modülü ve Poisson oranı



Şekil 4.11. Mekanik özellikleri hesaplanan V_2FeGa ters Heusler alaşımının yön bağımlılığı; Young modülü, doğrusal sıkıştırılabilirlik, kayma modülü ve Poisson oranı

5. SONUÇ VE ÖNERİLER

Bu tez çalışmasında, Ti_2FeGa ters Heusler alaşımına V atomu katkılanarak $(Ti_{1-x}V_x)_2FeGa$ ($x = 0; 0,25; 0,5; 0,75; 1$) formülünde oluşturulan alaşımların yapısal, elektronik, manyetik ve mekanik özellikleri Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi ile genelleştirilmiş gradyent yaklaşımı kullanılarak hesaplandı. Bu alaşımlar için yapılan tüm hesaplamalarda $x = 0; 1$ katkılama durumunda F-43m uzay grubunda bulunan XA kristal simetrisinde, $x = 0,5$ katkılama durumunda F-43m uzay grubunda bulunan Y kristal simetrisinde ve $x = 0,25; 0,75$ katkılama durumunda P-4m2 uzay grubunda bulunan tetragonal simetride atomların pozisyonları sabit tutularak yapıldı. Yapılan hesaplamalar sonucunda yapısal özellikler, $(Ti_{1-x}V_x)_2FeGa$ ($x = 0; 0,25; 0,5; 0,75; 1$) alaşımlarının denge durumundaki örgü sabiti değerleri elde edildi. Ti_2FeGa ve V_2FeGa ters Heusler alaşımlarının hesaplanan örgü sabitleri literatürde yer alan diğer teorik çalışmalarla karşılaştırmalar yapıldı. Buna göre, Ti_2FeGa %0,02 ile %1,3'lük arasında değişen bir farkla hesaplandı. V_2FeGe alaşımının örgü sabiti değeri ise %0,18'lik ve %0,17'lik bir farkla elde edildi. $TiVFeGa$, $(Ti_{0,75}V_{0,25})_2FeGa$ ve $(Ti_{0,25}V_{0,75})_2FeGa$ alaşımları için literatürde çalışmaya rastlanılmadığından herhangi bir karşılaştırma yapılamamıştır. Ayrıca, kübik yapıdaki $x = 0; 0,5; 1$ katkılama durumları için alaşımların örgü sabitleri kendi aralarında karşılaştırıldığında Vanadyum katkısı arttıkça örgü sabiti değerlerinin düştüğü tetragonal yapıda ise $x = 0,25; 0,75$ katkılama durumlarında örgü parametrelerinin Vanadyum katkısıyla azaldığı açık bir şekilde görülmektedir. Bu duruma ise Vanadyum'un atom çapının titanyumdan daha düşük olmasının neden olduğu söylenebilir.

Manyetik özellikleri incelenen bu alaşımların yapılan hesaplamalar sonucunda, alaşımların tamamının manyetik özellik sergilediği görüldü. Kübik yapıdaki ters ve dörtlü Heusler alaşımlarının Slater-Pauling davranışı (SPD) sergilediği ve toplam manyetik momentlerinin SPD'ye göre hesaplanarak elde edilen diğer sonuçlarla karşılaştırdığında uyumlu olduğu görüldü. Ayrıca, ters Heusler yapıdaki Ti_2FeGa ve V_2FeGa alaşımlarının toplam manyetik momentleri literatürde yer alan teorik çalışmalar ile uyumlu olarak elde edildiği saptandı. $TiVFeGa$ dörtlü Heusler alaşımı ile $(Ti_{0,75}V_{0,25})_2FeGa$ ve

$(\text{Ti}_{0,25}\text{V}_{0,75})_2\text{FeGa}$ tetragonal alařımlarının literatürde herhangi bir çalıřması bulunmadığından karşılařtırma yapılamadı.

Bu alařımların elektronik bant yapı eđrileri, toplam ve kısmi durum yoğunlukları elektronik özellikleri kapsamında elde edildi. Spin yukarı yöneliminde bu alařımların tamamının metalik özellik gösterdiği, spin ařađı yöneliminde ise Ti_2FeGa , $(\text{Ti}_{0,75}\text{V}_{0,25})_2\text{FeGa}$, TiVFeGa ve V_2FeGa alařımlarının bir gap'e sahip olduđu ve yarı iletken özellik gösterdiği görüldü. Dolayısıyla Ti_2FeGa , $(\text{Ti}_{0,75}\text{V}_{0,25})_2\text{FeGa}$, TiVFeGa ve V_2FeGa alařımlarının yarı metalik manyet, $(\text{Ti}_{0,25}\text{V}_{0,75})_2\text{FeGa}$ alařımının ise yarı metaliđe yakın bir karakterde olduđu sonucuna varıldı. Bunların yanı sıra, Ti_2FeGa ve V_2FeGa ters Heusler alařımlarının elektronik özellikleri literatürde yer alan çalıřmalar ile oldukça uyumlu olduđu tespit edildi. Ancak diđer alařımlarla ilgili literatürde bir çalıřmaya rastlanmadığı için karşılařtırma yapılamadı.

Mekanik özellikler kapsamında $(\text{Ti}_{1-x}\text{V}_x)_2\text{FeGa}$ ($x = 0; 0,25; 0,5; 0,75; 1$) alařımlarının hesaplanan elastik sabitlerinden bu alařımların tamamının mekanik kararlılık şartlarını sağladığından mekanik olarak kararlı oldukları anlařıldı. Bu alařımların tamamının B/G oranı 1,75 sınırından büyük olduğundan dolayı sünek oldukları saptandı. $(\text{Ti}_{1-x}\text{V}_x)_2\text{FeGa}$ ($x = 0; 0,25; 0,5; 0,75; 1$) alařımlarının $x = 0; 0,5; 1$ katkı durumlarında kübik kristal yapıda olan Heusler alařımları için V katkısı arttıkça süneklikte azalma olduđu, $x = 0,25; 0,75$ katkı durumlarında tetragonal kristal yapıda olan alařımlar için V katkısı arttıkça süneklikte artma olduđu, aynı zamanda, Young modüllerinde ise B/G oranının tersine kübik yapılarda V katkısı arttıkça sertliđin arttığı, tetragonal yapılarda ise V katkısı arttıkça sertliđin azaldığı Young modülü deđerlerinden belirlendi. Bu alařımlar için hesaplanan poisson oranından alařımların tamamının iyonik karakterinde oldukları anlařıldı. Bunların yanı sıra, mekanik özellikler kapsamında elde edilen bir başka parametre ise anizotropi faktörüdür. Anizotropi faktörü hesaplanan bu alařımların tamamının anizotropik olduđu belirlendi. Bundan dolayı, bu alařımların yönlere bađlı olarak Young modülü, Kayma modülü, sıkıřabilirlik ve poisson oranlarının minimum ve maksimum deđerleri hesaplandı ve Őekilleri çizildi.

Bu tez çalıřmasında hesaplanan $(\text{Ti}_{1-x}\text{V}_x)_2\text{FeGa}$ ($x = 0; 0,25; 0,5; 0,75; 1$) alařımlarıyla ilgili Ti_2FeGa ve V_2FeGa alařımı haricindeki diđer alařımlar ile ilgili literatürde çalıřma bulunmamaktadır ve bu çalıřma ile bu alařımların yapısal, elektronik, manyetik ve

mekanik özellikleri literatüre kazandırılmıştır. Ancak, bu alışımlar ile ilgili daha birçok çalışmaya ihtiyaç vardır.



6. KAYNAKLAR

- [1]. Heusler, F., 1903, Über magnetische manganlegierungen Verh. Dtsch. Phys. Ges. 5, 219.
- [2]. Candan, A., 2019, Mater. Res. Express, 6, 096571.
- [3]. Xu, G.Z., Liu, E.K., Du, Y., Li, G.J., Liu, G.D., Wang, W.H. and Wu, G.H., 2013, EPL: A Letters Journal Exploring the Frontiers of Physics, 102, 17707, 1-6.
- [4]. Eberz, U., Seelentag, W. and Schuster, H. U., 1980, Zeitschrift für Naturforschung, 35b, 1341-1343.
- [5]. Hem, C. K., Gerhard, H. F. and Claudia, F., 2007, J. Phys. D: Appl. Phys. 40, 1507.
- [6]. Galehgirian, S. and Ahmadian, F., 2015, Solid State Commun, 202, 52-7.
- [7]. Feng, L., Tang, C., Wang, S. and He, W., 2011, J. Alloys Compd. 509 5187–9
- [8]. Tobała, J. and Pierre, J., 2000, J. Alloys Compd, 296, 243-52.
- [9]. Bhattacharya, S., Pope, A. L., Littleton, R. T., and Tritt, T. M., 2000, Applied Phys. Lett., 77, 2476.
- [10]. Wuttig, M., Li, J., and Craciunescu, C., 2001, Scr. Mater, 44, 2393-7.
- [11]. Sutou, Y., Imano, Y., Koeda, N., Omori, T., Kainuma, R., Ishida, K., and Oikawa, K., 2004, Appl. Phys. Lett., 85, 4358-60.
- [12]. Gofryk, K., Kaczorowski, D., and Czopnik, A., 2005, Solid State Commun., 133, 625-8.
- [13]. Nakamura, H., Kitaoka, Y., Asayama, K., Onuki, Y. and Komatsubara, T., 1988, J. Magn. Magn. Mater., 76-77, 467-8.
- [14]. Takayanagi, S., Woods, S. B., Wada, N., Watanabe, T., Onuki, Y., Kobori, A., Komatsubara, T., Imai, M. and Asano, H., 1988, J. Magn. Magn. Mater., 76-77, 281-2.
- [15]. Gofryk, K., Kaczorowski, D. and Plackowski, T., 2005, Physical Review B, 72, 094409.
- [16]. Kaczorowski, D., Gofryk, K., Plackowski, T., Leithe-Jasper, A. and Grin, Y., 2005, J. Magn. Magn. Mater., 290-291, 573-9.
- [17]. Akgenc, B., Kinaci, A., Tasseven, C. and Cagin, T., 2018, Mater. Chem. Phys., 205, 315-24.
- [18]. De Groot, R.A., Mueller, F. M., Van Engen, P. G. and Buschow, K. H. J., 1983, Phys. Rev. Lett. 50, 2024.

- [19]. Jedema, E.J., Filip, A.T. and Von Wees, B., 2001, *Nature* 410, 345.
- [20]. Song, W., Zhao, E., Meng, J. and Wu, Z., 2009, *J. Chem. Phys.* 130, 114707.
- [21]. Akai, H.: 1988, *Phys. Rev. Lett.*, 81, 3002.
- [22]. Yao, K.L., Gao, G.Y., Liu, Z.L., Zhu, L. and Li, Y.L., 2005, *Physica B*, 366, 62.
- [23]. Ogawa, T., Shirai, M., Suzuki, N. and Kitagawa, I., 1999, *J. Magn. Magn. Mater.*, 428, 196-197.
- [24]. Li, J., Li, Y., Dai, X. and Xu, X., 2009, *J. Magn. Magn. Mater.*, 321, 365-372.
- [25]. Koa, V., Hana, G. And Fengb, Y.P., 2010, *J. Magn. Magn. Mater.*, 322, 2989.
- [26]. Liu, G.D., Dai, X. F., Liu, H. Y., Chen, J. L., Li, Y. X., Xiao, G. and Wu, G. H., 2008, *Phys. Rev. B*, 77, 014424.
- [27]. Xing, N., Gong, Y., Zhang, W., Dong, J. and Li, H., 2009, *Comput. Mater. Sci.*, 45, 489-493.
- [28]. Chatterjee, S., Singh, V. R., Deb, A.K., Giri, S., De, S. K., Dagubta, I. and Majumdar, S., 2010, *J. Magn. Magn. Mater.*, 322, 102-107.
- [29]. Tan, J.-J., Guang-Fu, J., Xiang-Rong, C. And Qing-Quan G., 2010, *Commun. Theor. Phys.*, 53, 1160.
- [30]. Tsunegi, S., Sakuraba, Y., Ogane, M., Naganuma, H., Takanashi, K. and Ando, Y., 2009, *Applied Physics Letters*, 94, 252503.
- [31]. Tezuka, N., Ikeda, N., Mitsuhashi, F. and Sugimoto, S., 2009, *Applied Physics Letters*, 94, 162504.
- [32]. Liu, H. X., Honda, Y., Taira, T., Matsuda, K. I., Arita, M., Uemura, T. and Yamamoto, M., 2012, *Applied Physics Letters*, 101, 132418.
- [33]. Liu, H. X., Kawami, T., Moges, K., Uemura, T., Yamamoto, M., Shi, F. and Voyles, P. M., 2015, *Journal of Physics D: Applied Physics*, 48, 164001.
- [34]. Iwase, T., Sakuraba, Y., Bosu, S., Saito, K., Mitani, S. and Takanashi, K., 2009, *Applied Physics Express*, 2, 063003.
- [35]. Nakatani, T. M., Furubayashi, T., Kasai, S., Sukegawa, H., Takahashi, Y. K., Mitani, S. and Hono, K., 2010, *Applied Physics Letters*, 96, 212501.
- [36]. Takahashi, Y. K., Srinivasan, A., Varaprasad, B., Rajanikanth, A., Hase, N., Nakatani, T. M., Kasai, S., Furubayashi, T. and Hono, K., 2011, *Applied Physics Letters* 98, 152501.
- [37]. Sato, J., Oogane, M., Naganuma, H. and Ando, Y., 2011, *Applied Physics Express*, 4, 113005.
- [38]. Chadov, S., Graf, T., Chadova, K., Dai, X., Casper, F., Fecher, G. H. and Felser, C., 2011, *Phys. Rev. Lett.*, 107, 047202.

- [39]. Felser, C., Wollmann, L., Chadov, S., Fecher, G. H. and Parkin, S. S. P., 2015, *APL Materials*, 3, 041518.
- [40]. Berri, S., 2019, *Journal of Superconductivity and Novel Magnetism*, 32, 2219-2228.
- [41]. Ma, J., He, J., Mazumdar, D., Munira, K., Keshavarz, S., Lovorn, T., Wolverton, C., Ghosh, A. W. and Butler, W. H., 2018, *Physical Review B* 98, 094410.
- [42]. Wei, X. P., Deng, J. B., Mao, G. Y., Chu, S. B. and Hu, X. R., 2012, *Intermetallics*, 29, 86-91.
- [43]. Ahmadian, F., 2014, *Journal of the Korean Physical Society*, 64, 277-282.
- [44]. Ahmadian, F., 2013, *Journal of Alloys and Compounds*, 576, 279-284.
- [45]. Liping, M., 2014, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 369, 205-210.
- [46]. Drief, M., 2018, *J Supercond Nov Magn*, 31, 1059-1065.
- [47]. Goraus, J. and Czerniewski, J., 2019, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 166106.
- [48]. Zhang, X. J., Liu, Z. H., Zhang, Y. J., Liu, H. Y., Liu, G.D., Cui, Y.T. and Ma, X. Q., 2016, *Intermetallics*, 73, 26-30.
- [49]. Zhang, X. M., Xu, G. Z., Du, Y., Liu, E. K., Liu, Z. Y., Liu, G. D., Wang, W. H. and Wu, G. H., 2013, *A Letters Journal Exploring the Frontiers of Physics*, 104, 27012.
- [50]. Martin, R., 2004, Cambridge Univ Pr.
- [51]. Hohenberg, P. and Kohn, W., 1964, *Phys. Rev.*, 136, 3B, 864-871.
- [52]. Kohn, W. and Sham, L. J., 1965, *Phys. Rev.*, 140, 4A, 1133-1138.
- [53]. Ohno, K., Esfarjani, K. and Kawazoe, Y., 1999, Springer Verlag, 129.
- [54]. Szabo, A. and Ostlund, N., 1996, Dover Pubns.
- [55]. Slater, J. C., 1951, *Phys. Rev.*, 81, 385-390.
- [56]. Becke, A., 1993, *The Journal of Chemical Physics*, 98, 1372.
- [57]. Görling, A. and Ernzerhof, M., 1995, *Phys. Rev. A*, 51, 4501-4513.
- [58]. Kohn, W., Becke, A. and Parr, R., 1996, *The Journal of Physical Chemistry*, 100, 31, 12974-12980.
- [59]. *Phys. Rev. A*, 1996, 54, 3912-3915.
- [60]. Levy, M., 1979, *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 76, 12, 6062.
- [61]. Feng, D. and Jin, G., 2005, World Scientific Pub Co Inc, Vol 1.
- [62]. Vitos, L., 2007, Springer Verlag.

- [63]. JGalsin, J., 2002, Springer Us.
- [64]. Inoue, K. and Ohtaka, K., 2004, Springer Verlag, Vol. 94.
- [65]. Mizutani, U., 2001, Cambridge Univ Pr.
- [66]. Wimmer, E., Krakauer, H., Weinert, M. and Freeman, A., 1981, Physical Review B, 24, 864.
- [67]. Kerker, G., 1980, Journal of Physics C: Solid State Physics, 13, 189.
- [68]. Perdew, J. P. and Zunger, A., 1981, Phys. Rev. B 23, 10, 5048-5079.
- [69]. Perdew, J., Burke, K. and Ernzerhof, M., 1996, Physical Review Letters, 77, 18, 3865-3868.
- [70]. Ceperley, D. and Alder, B., 1980, Physical Review Letters, 45, 7, 566-569.
- [71]. Perdew, J. and Wang, Y., 1992, Physical Review B, 45, 23, 13244.
- [72]. Leung, T., Chan, C. and Harmon, B., 1991, Physical Review B, 44,7, 2923.
- [73]. Wang, C., Klein, B. and Krakauer, H., 1985, Physical Review Letters 54, 16, 1852-1855.
- [74]. Grüning, M., Marini, A. and Rubio, A., 2006, The Journal of chemical physics 124,154108.
- [75]. Lebegue, S., Klintonberg, M., Eriksson, O. and Katsnelson, M., 2009, Physical Review B, 79, 24, 245117.
- [76]. Rinke, P., Qteish, A., Neugebauer, J., Freysoldt, C. and Scheffler, M., 2005, New Journal of Physics, 7, 126.
- [77]. Perdew, J., Chevary, J., Vosko, S., Jackson, K., Pederson, M., Singh, D. and Fiolhais, C., 1992, Physical Review B, 46, 11, 6671.
- [78]. Perdew, J., Burke, K. and Ernzerhof, M., 1998, Physical Review Letters, 80, 4, 891-891.
- [79]. El-Barbary, A., 2005, Ph.D. thesis, University of Sussex.
- [80]. Singh, D. and Nordström, L., 2006, Springer Verlag.
- [81]. Ozolin, V. and Körling, M., 1993, Phys. Rev. B, 48, 18304-18307.
- [82]. Proynov, E., Ruiz, E., Vela, A. and Salahub, D., 1995, International Journal of Quantum Chemistry, 56, 61-78.
- [83]. Cohen, M. and Heine, V., 1970, Solid State Physics, 24, 37-248.
- [84]. Phillips, J. and Kleinman, L., 1959, Physical Review, 116, 2, 287.
- [85]. Bachelet, G., Hamann, D. and Schluter, M., 1982, Physical Review B, 26, 8, 4199.
- [86]. Rappe, A., Rabe, K., Kaxiras, E. and Joannopoulos, J., 1990, Physical Review B, 41, 1227.

- [87]. Kleinman, L. and Bylander, D., 1982, Physical Review Letters 48, 1425-1428.
- [88]. Hutter, J., Luthi, H. and Parrinello, M., 1994, Computational Materials Science, 2, 244-248.
- [89]. Hamann, D., Schluter, M. and Chiang, C., 1979, Physical Review Letters, 43, 20, 1494-1497.
- [90]. Troullier, N. and Martins, J., 1991, Physical Review B, 43, 3, 1993.
- [91]. Vanderbilt, D., 1990, Physical Review B, 41, 11, 7892.
- [92]. Kresse, G. and Joubert, D., 1999, Phys. Rev. B, 59, 1758-1775.
- [93]. Holzwarth, N., Matthews, G., Dunning, R., Tackett, A. and Zeng, Y., 1997, Physical Review B, 55, 4, 2005.
- [94]. Blöchl, P., 1994, Physical Review B, 50, 24, 17953.
- [95]. İyigör, A., 2016, Dörtlü Heusler Alaşımlarının Yapısal, Elektronik, Elastik, Dinamik ve Termodinamik Özelliklerinin Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi ile İncelenmesi, Doktora Tezi, Gazi Üniversitesi.
- [96]. Galanakis L., 2015, Ssmaterials, 222.
- [97]. Tunalı, N. K. ve Özkar, S., 1993, Anorganik Kimya. Ankara: Gazi Üniversitesi Yayınları, 266.
- [98]. Sarıkurt, S., 2007, Üçlü Alaşım Wurtzite $In_xGa_{1-x}N$ Malzemenin Band Yapısı Hesabı, Yüksek Lisans Tezi, Dokuz Eylül Üniversitesi.
- [99]. Materials Design Kullanım Kılavuzu, 2012, Medea Manual v2.10, 3-298.
- [100]. Materials Design Kullanım Kılavuzu, 2008, Medea Manual v2.4, 5-409.
- [101]. <https://www.materialsdesign.com/medea-software>
- [102]. Kresse, G. and Hafner, J., 1993, Physical Review B, 47, 1, 558.
- [103]. Kresse, G. and Hafner, J., 1994, Phys. Rev. B, 49, 20, 14251-14269.
- [104]. Kresse, G. and Furthmuller, J., 1996, Computational Materials Science, 6, 1, 15-50.
- [105]. Hobbs, D., Kresse, G. and Hafner, J., 2000, Physical Review B, 62, 17, 11556.
- [106]. VASP Kullanım Kılavuzu, 2018, 2-234.
- [107]. Bachelet, G., Hamann, D. and Schluter, M., 1982, Physical Review B, 26, 8, 4199.
- [108]. Rappe, A., Rabe K., Kaxiras, E. And Joannopoulos, J., 1990, Physical Review B, 41, 2, 1227.
- [109]. Kleinman, L. and Bylander, D., 1982, Physical Review Letters, 48, 20, 1425-1428.
- [110]. Hutter, J., Luthi, H. and Parrinello, M., 1994, Computational Materials Science, 2, 244-248.

- [111]. Hamann, D., Schluter, M. and Chiang, C., 1979, *Physical Review Letters*, 43, 20, 1494-1497.
- [112]. Wu, S. Naghavi, S. S., Fecher, G. H. and Felser, C., 2018, *Journal of Modern Physics*, 9, 775-805.
- [113]. Grüneisen, E., 1926, Zustand des festen Körpers, Thermische Eigenschaften der Stoffe. In H. Greiger and K. Scheel (Eds.) *Handbuch der Physik*, Berlin: Springer, 1-59.
- [114]. Picozzi, S., Continenza, A. and Freeman, A. J., 2002, *Physical Review B*, 66, 094421, 1-9.
- [115]. Galanakis, I., Papanikolaou, N. and Dederichs, P. H., 2002, *Physical Review B*, 66, 134428, 1-10.
- [116]. Page, Y. L. and Saxe, P., 2001, *Phys. Rev. B*, 63, 174103.
- [117]. Page, Y. L. and Saxe, P., 2002, *Phys. Rev. B*, 65, 104104.
- [118]. Nielsen, O. H. and Martin, R. C., 1983, *Phys. Rev. Lett.*, 50, 697-700.
- [119]. Mouhat, F. and Coudert, F. X., 2014, *Phys. Rev. B* 90, 224104.
- [120]. Pugh, S. F., 1954, *Philosophical Magazine: Series 7*, 45, 823-843.
- [121]. Haines, J., Leger, J. M. and Bocquillon, G., 2001, *Annual Review of Materials Research*, 31, 1-23.
- [122]. Gaillac, R., Pullumbi, P. And Coudert, F. X., 2016, *Journal of Physics: Condensed Matter*, 28, 275201.

ÖZGEÇMİŞ

Kişisel Bilgiler

Adı Soyadı Ahmet Sefa MERİÇ
Doğum Yeri Kırşehir
Doğum Tarihi 20.02.1988
Uyruğu T.C. Diğer:
Telefon 05073038254
E-Posta Adresi meric8840@gmail.com
Web Adresi -



Eğitim Bilgileri Lisans

Üniversite Sakarya Üniversitesi
Fakülte Mühendislik Fakültesi
Bölümü Elektrik Elektronik Mühendisliği
Mezuniyet Yılı 2012

Yüksek Lisans

Üniversite Ahi Evran Üniversitesi
Enstitü Adı Fen Bilimleri Enstitüsü
Anabilim Dalı İleri Teknolojiler
Programı İleri Teknolojiler
Mezuniyet Tarihi 2020