

**T.C.
BALIKESİR ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ
FİZİK ANABİLİM DALI**



**BAZI X_2YZ TİPİ TAM-HEUSLER BİLEŞİKLERİNİN TEMEL
FİZİKSEL ÖZELLİKLERİNİN İLK İLKELER YÖNTEMİYLE
İNCELENMESİ**

HALİL ŞAHİN

YÜKSEK LİSANS TEZİ

**Jüri Üyeleri : Prof. Dr. Cansu ÇOBAN (Tez Danışmanı)
Prof. Dr. Yasemin ÖZTEKİN ÇİFTÇİ
Doç. Dr. Elif GÜNGÖR**

BALIKESİR, MART - 2021

ETİK BEYAN

Balıkesir Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Tez Yazım Kurallarına uygun olarak tarafımda hazırlanan “**Bazı X₂YZ tipi tam-heusler bileşiklerinin temel fiziksel özelliklerinin ilk ilkelere yöntemiyle incelenmesi**” başlıklı tezde:

- Tüm bilgi ve belgeleri akademik kurallar çerçevesinde elde ettiğimi,
- Kullanılan veriler ve sonuçlarda herhangi bir değişiklik yapmadığımı,
- Tüm bilgi ve sonuçları bilimsel araştırma ve etik ilkelere uygun şekilde sunduğumu,
- Yararlandığım eserlere atıfta bulunarak kaynak gösterdiğimi,

beyan eder, aksinin ortaya çıkması durumunda her türlü yasal sonucu kabul ederim.

Halil SAHİN

ÖZET

**BAZI X₂YZ TİPİ TAM-HEUSLER BİLEŞİKLERİNİN TEMEL FİZİKSEL
ÖZELLİKLERİNİN İLK İLKELER YÖNTEMİYLE İNCELENMESİ
YÜKSEK LİSANS TEZİ
HALİL ŞAHİN
BALIKESİR ÜNİVERSİTESİ FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ
FİZİK ANABİLİM DALI
(TEZ DANIŞMANI: PROF. DR. CANSU ÇOBAN)
BALIKESİR, MART-2021**

X₂YZ (L2₁) yapıdaki Co₂YGe(Y=Fe, Sc, Ti) tam-Heusler bileşiklerinin yapısal, elektronik, elastik, titreşimsel ve termodinamik özellikleri ilk ilkeler yöntemiyle incelenmiştir. *E-V* eğrileri kullanılarak öncelikle $P=0$ GPa'da örgü sabiti (a_0), bulk modülü (B_0) ve bulk modülünün türevi (B_0') hesaplanmıştır. Sonuçlar literatürdeki mevcut bulgularla uyumludur. Bileşiklerin elektronik bant ve durum yoğunluğu (DOS) grafikleri, Zener anizotropi faktörü, Young modülü, vs. gibi elastik özellikleri bulunmuş ve sunulmuştur. Elastik özellikler basınç altında da incelenmiştir. Sonuçlar, Co₂FeGe'un daha düşük, diğer malzemelerin ise daha yüksek basınçlarda da kararlı olduğunu göstermektedir. Elde edilen fonon dağılım eğrilerinde tüm frekanslar pozitif olduğundan Co₂YGe(Y=Fe, Sc, Ti) bileşikleri dinamik olarak da kararlıdır. Fonon sonuçlarından faydalanılarak hesaplanan termodinamik sonuçlar da çalışmanın son kısmında ele alınarak açıklanmıştır.

ANAHTAR KELİMELER: Co₂YGe(Y=Fe, Sc, Ti) tam Heusler bileşikleri, ilk ilkeler yöntemi, elektronik özellikler, elastik özellikler, fonon özellikleri, termodinamik özellikler, Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi.

ABSTRACT

**THE INVESTIGATION OF THE BASIC PHYSICAL PROPERTIES OF
SOME X₂YZ TYPE FULL-HEUSLER COMPOUNDS USING FIRST
PRINCIPLES METHODS
MSC THESIS
HALİL ŞAHİN
BALIKESİR UNIVERSITY INSTITUTE OF SCIENCE
PHYSICS
(SUPERVISOR: PROF. DR. CANSU ÇOBAN)
BALIKESİR, MARCH-2021**

The structural, electronic, elastic, vibrational, and thermodynamic properties of Co₂YGe(Y=Fe, Sc, Ti) full-Heusler compounds in X₂YZ (L2₁) structure were investigated by the method of first principles. Using the *E-V* curves, firstly, the lattice constant (*a*₀), bulk modulus (*B*₀), and derivative of bulk modulus (*B*₀') were calculated at *P* = 0 GPa. The results are consistent with the available findings in the literature. The electronic band and density of state (DOS) graphs of the compounds, the elastic properties of the compounds such as Zener anisotropy factor, Young's modulus, etc. were found and presented. Elastic properties have also been studied under pressure. The results show that Co₂FeGe is stable at lower pressures, while other materials are also stable at higher pressures. Since all frequencies are positive in the obtained phonon dispersion curves, Co₂YGe(Y=Fe, Sc, Ti) compounds are also dynamically stable. The thermodynamic results calculated using the phonon results were also discussed and explained in the last part of the study.

KEYWORDS: Co₂YGe(Y=Fe, Sc, Ti) full-Heusler compounds, method of first principles, electronic properties, elastic properties, phonon properties, thermodynamic properties, Density Functional Theory.

İÇİNDEKİLER

Sayfa

ÖZET	i
ABSTRACT	ii
İÇİNDEKİLER	iii
ŞEKİL LİSTESİ	iv
TABLO LİSTESİ	v
ÖNSÖZ	vi
1. GİRİŞ	1
2. TEORİK BİLGİLER	4
2.1 Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi	4
2.2 Thomas-Fermi Modeli.....	4
2.3 Hohenberg-Kohn Teoremleri.....	6
2.4 Kohn-Sham Eşitlikleri.....	8
2.5 Değiş-tokuş-korelasyon Yaklaşımları	10
2.5.1 Yerel yoğunluk Yaklaşımı (LDA)	10
2.5.2 Genelleştirilmiş Gradyan Yaklaşımı (GGA)	11
2.6 DFT'nin Düzlem Dalga Uygulamaları	11
2.6.1 Bloch Teoremi	11
2.6.2 Kohn-Sham Eşitliklerinin Düzlem Dalgalar ile Gösterimi.....	12
2.6.3 Psödopotansiyeller	12
2.6.4 İzdüşümsel Artırılmış Dalga (PAW) Yöntemi	13
3. HESAPLAMA YÖNTEMLERİ	15
3.1 Vienna Ab initio Simulation Package (VASP).....	15
3.2 Yapısal Verilerin Hesaplanması	15
3.3 Elektronik Verilerin Hesaplanması	15
3.4 Elastik Verilerin Hesaplanması	16
3.5 Titreşimsel Özellikler ve Hesaplama Yöntemi.....	20
3.6 Termodinamik Verilerin Hesaplanması	22
4. BULGULAR VE TARTIŞMA	23
4.1 Yapısal Veriler	23
4.2 Elektronik Veriler	24
4.3 Elastik Veriler	31
4.3.1 Ses Hızlarının Anizotropisi.....	34
4.4 Co ₂ YGe(Y=Fe, Sc, Ti) Bileşiklerinin Titreşimsel Özellikleri.....	35
4.5 Termodinamik Veriler	36
5. SONUÇLAR	39
6. KAYNAKLAR	40
ÖZGEÇMİŞ	48

ŞEKİL LİSTESİ

	<u>Sayfa</u>
Şekil 1.1 : Co_2YGe (Y=Fe, Sc, Ti) için kristal yapı ($L2_1$).....	1
Şekil 4.1 : a) Co_2FeGe , b) Co_2ScGe , c) Co_2TiGe bileşikleri için $E-V$ eğrileri.....	23
Şekil 4.2 : a) Co_2FeGe , b) Co_2ScGe , c) Co_2TiGe bileşiklerinin elektronik bant yapısı.....	25
Şekil 4.3 : a) Co_2FeGe , b) Co_2ScGe , c) Co_2TiGe bileşikleri için TDOS.....	27
Şekil 4.4 : a) Co_2FeGe , b) Co_2ScGe , c) Co_2TiGe bileşikleri için TDOS ve PDOS spin_up.....	28
Şekil 4.5 : a) Co_2FeGe , b) Co_2ScGe , c) Co_2TiGe bileşikleri için TDOS ve PDOS spin_down.....	30
Şekil 4.6 : a) Co_2FeGe , b) Co_2ScGe , c) Co_2TiGe bileşikleri için fonon dağılım eğrileri ve fonon DOS.....	35
Şekil 4.7 : a) Co_2FeGe , b) Co_2ScGe , c) Co_2TiGe bileşikleri için termodinamik parametreler	37

TABLO LİSTESİ

	<u>Sayfa</u>
Tablo 4.1 : Co ₂ YGe(Y=Fe,Sc,Ti) bileşiklerinin 0 GPa basınçta yapısal verileri	24
Tablo 4.2 : Co ₂ YGe(Y=Fe,Sc,Ti) bileşiklerinin kısmi ve toplam manyetik momentleri.....	25
Tablo 4.3 : Co ₂ YGe(Y=Fe,Sc,Ti) bileşiklerinin 0 GPa basınçta elastik sabitleri (C_{ij} (GPa)) ve Cauchy basıncı (C_{12} - C_{44} (GPa)) değerleri.....	32
Tablo 4.4 : Co ₂ YGe(Y=Fe,Sc,Ti) için basınç altında G ve B/G oranı değerleri.....	32
Tablo 4.5 : Co ₂ YGe(Y=Fe,Sc,Ti) için basınç altında E , ν , A^Z değerleri....	33
Tablo 4.6 : Co ₂ YGe(Y=Fe,Sc,Ti) için enine (v_t), boyuna (v_l) ve ortalama (v_m) izotropik ses hızları ve Debye sıcaklığı (θ_D).....	34
Tablo 4.7 : Anizotropik ses hızlarının v (m/s) P (GPa) altındaki davranışı.....	34

ÖNSÖZ

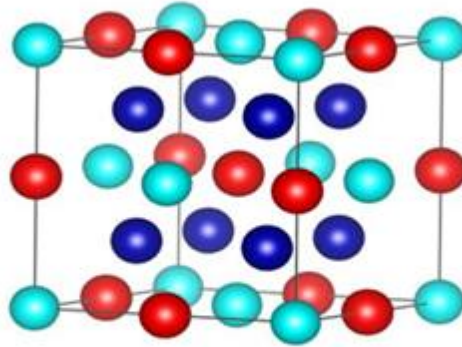
Yüksek lisans tez çalışmam süresince, akademik anlamda bana katmış olduğu tecrübe, paylaşmış olduğu bilgi birikimi, göstermiş olduğu büyük sabır ve özveri için, sayın hocam Prof.Dr. Cansu ÇOBAN'a, manevi desteklerinden dolayı eşim Zahide ŞAHİN, ailem ve iş arkadaşlarıma teşekkürü borç bilirim.

Balıkesir, 2021

Halil ŞAHİN

1. GİRİŞ

Heusler bileşikleri, Alman mühendis Heusler [1] tarafından 1903'lerde keşfedilmiştir. Heusler tipi alaşımlar, alışılmadık elektrik, manyetik, termodinamik ve taşıma özellikleri ve birçok uygulamaları nedeniyle intermetalik bileşiklerin ilginç üyeleridir [2-7]. Bu bileşiklerin genel formülü X_2YZ şeklindedir. Kristal yapıları Cu_2MnAl ($L2_1$) dir ve bu yapı $Fm\bar{3}m$ (no. 225) uzay grubunda bulunur (Şekil 1.1) [1,8-9]. Bu yapıda, X ve Y, genellikle geçiş elementleri, Z de genellikle periyodik tabloda III-V grubundadır. X atomları $8c$ ($1/4, 1/4, 1/4$), Y ve Z atomları ise sırasıyla $4a$ ($0, 0, 0$) ve $4b$ ($1/2, 1/2, 1/2$) koordinatlarına yerleştirilir. Bu yapı, iç içe geçen dört fcc alt örgüden oluşmaktadır. Bunlardan ikisi X tarafından eşit olarak işgal edilmiştir. Y ve Z elementleri tarafından NaCl tipi bir örgü oluşur. Etkileşimleri iyonik olduğundan bu elementler sekiz yüzlü olarak koordine edilir. Tüm dört yüzlü boşlukları da X elementi doldurur. $L2_1$ yapı X ve Z tarafından oluşturulan çinko blende tipi bir alt örgü gibidir. İkinci X elementi diğer dört yüzlü, Y ise oktahedral boşluklara yerleşir.



Lacivert: X=Co Kırmızı:Y=Fe,Sc,Ti Mavi: Z=Ge

Şekil 1.1: Co_2YGe (Y=Fe, Sc, Ti) için kristal yapı ($L2_1$).

Şaşırtıcı bir şekilde, değerlik elektron sayısı (VEC) Heusler bileşiklerinin elektriksel, manyetik, süper iletken, yarı iletken vb. temel özelliklerini tahmin etmek için kullanılabilir [10]. Örneğin, $VEC=27$ değerine sahip manyetik olmayan Heusler alaşımları süper iletken davranış sergiler [11]. $C1_b$ kristal yapısına sahip yarı-Heusler bileşiklerinde geçerli "18 değerlik elektronu kuralı" na benzer şekilde, birden fazla geçiş metali içeren tam-Heusler bileşikleri için bir "24 değerlik elektronu kuralı" bulunmuştur. $VEC=24$ ise bu tam-Heusler bileşikleri yarı iletkendir ve buna örnek olarak Fe_2VAl [12-14] verilebilir.

Heusler bileşikleri, manyetik şekil hafıza etkisi ve yarı metalik özellik gibi birçok büyüleyici özelliğe sahiptir. Bu sayede teknolojiye birçok alanda kullanılır. Bu özellik ilk defa Ni₂MnGa Heusler alaşımlarında keşfedilmiştir [15]. Bu bileşiklerin çoğu manyetik davranış sergiler ve manyeto-optik [16], manyetokalorik [17] ve manyeto-yapısal özellikler [18] gibi manyetik özelliklere sahiptirler.

Literatürde Co tabanlı pek çok tam-Heusler bileşiğiyle ilgili çalışma mevcuttur. Co₂MnX (X = Si, Ge, Al, Ga) bileşiklerinin fonon ve yapısal özellikleri teorik olarak araştırılmıştır [19]. Co₂TiZ (Z=Si, Ge, Sn) için elektronik, manyetik ve transport özellikleri Sharma ve grubu tarafından hesaplanmıştır [20]. Michael Gilleben ve Richard Dronskowski içinde Co içerikliler de olan 810 tane tam-Heusler bileşiği üzerinde ilk prensipler yöntemiyle çalışmışlardır [21]. Co₂MnZ tam-Heusler alaşımları için deneysel ve teorik çalışmalar yapılmıştır. Kurtuluş ve grubunun yaptıkları çalışmada Co₂MnZ (Z=Ga, Si, Ge, Sn), Rh₂MnZ (Z=Ge, Sn, Pn) Ni₂MnSn, Cu₂MnSn ve Pd₂MnZ tam-Heusler bileşiklerinin elektronik ve manyetik özellikleri Yoğunluk Fonksiyonel Teorisine (DFT) dayalı olarak çalışılmıştır [22]. Bu alaşımlarla ilgili bundan dar kapsamlı olarak, S. Picozzi, A. Continenza ve A.J. freeman çalışmalarda bulunmuşlardır [23]. 2007 yılında ise içinde Co tabanlıların da olduğu tam-Heusler bileşiklerinin elektronik bant özellikleri ve manyetik davranışları üzerinde çalışılmıştır [24]. Rai ve Thapa Co₂MnZ (Z=Ge, Sn) ile ilgili teorik olarak yaptıkları çalışmalarda, bu alaşımların elektronik yapılarını ve manyetik özelliklerini incelemişlerdir [25].

Co tabanlı tam-Heusler bileşikleri için geçmişteki çalışmalar incelendiğinde, teorik ve deneysel çok sayıda araştırma mevcuttur. Co₂YGe (Y=Sc, Ti, V, Cr, Mn, Fe) tam-Heusler bileşiklerinin yapısal özelliklerinin GGA yaklaşımı kullanılarak DFT'e dayalı ilk prensipler yöntemiyle hesaplandığı görülmektedir [26]. Co₂FeGe'nin elektronik bant yapısı, optik özellikleri ve örgü parametresi Uvarov ve grubu tarafından hesaplanarak yayınlanmıştır [27]. Aynı bileşik için oluşturulan ince filmlerin çeşitli özellikleri teorik olarak araştırılmıştır [28]. Deneysel olarak Co₂TiGe ince filmlerinin büyüme, yapısal ve manyetik özellikleri araştırılmıştır [29]. Co₂TiGe ve Co₂TiSn Heusler alaşımlarının optik ve elektronik yapısı, Shereder ve çalışma arkadaşları tarafından araştırılmıştır [30]. Co₂TGe (T=Sc, Ti, V, Cr, Mn, Fe) bileşiklerinin yarı-metalik özellikleri ile ilgili ab initio hesaplamaları LSDA+U ile gerçekleştirilmiştir [31]. Co₂YGe (Y = Sc, Ti, V, Cr, Mn, Fe)

bileşiklerinin yarı-metalik özellikleri DFT'e dayalı olarak hesaplanmıştır [32]. Co_2FeGe nin yapısal, elektronik ve manyetik özellikleriyle deneysel ve teorik sonuçları içeren bir çalışma da Mitra ve grubu tarafından rapor edilmiştir [33]. Yine aynı türde bir çalışma Co_2FeGe için literatürde yerini almıştır [34]. Co_2TiSi , Co_2TiGe ve Co_2TiSn nin transport özellikleri Barth ve grubunca deney ve teorik yöntemlerle araştırılmıştır [35]. Amari ve grubu, $\text{Co}_2\text{FeGe}_{1-x}\text{Si}_x$ ($x = 0, 0.5, 1$) bileşiklerinin yapısal, manyetik ve bant özelliklerini teorik olarak araştırmıştır [36]. Co ve Ti içeren Heusler alaşımlarının manyetik ve kimyasal düzeni Webster ve Ziebeck tarafından incelenmiştir [37].

Bu tez çalışmasında, Co_2YGe ($\text{Y}=\text{Fe,Sc,Ti}$) tam Heusler bileşiklerinin yapısal, elektronik, elastik, fonon ve termodinamik özellikleri incelenmiştir. Bu bileşiklerler ilgili yapılan deneysel ve teorik çalışmalarla örgü sabiti, bulk modülü, elektronik bant yapısı vs. gibi özellikleri içerse de özellikle elastik, fonon ve termodinamik parametrelerle ilgili bir çalışmaya rastlanmamıştır. Çalışma, ilk prensipler yöntemiyle Vienna Ab Initio Simülasyon paket programı (VASP) [38] kullanılarak yapılmıştır. Fonon hesaplamalarında da PHONOPY [39] kodu kullanılmıştır.

2. TEORİK BİLGİLER

2.1 Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi

Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi (DFT), Hohenberg-Kohn (HK) teoremleri ve Kohn-Sham (KS) eşitliklerini temel alır. Moleküller, katılar, sıvılar, nanoyapılar gibi çok parçacıklı sistemlerin analizinde oldukça etkin yöntemlerdendir. N parçacıklı bir sistemde Schrödinger denkleminin analitik çözümünü DFT aracılığıyla bulabiliriz. Bu teoride, çok parçacık dalga fonksiyonları yerine, elektron yoğunluğu ($\rho(\vec{r})$) kullanılarak sisteme ait pek çok temel fiziksel özellikleri belirleyen hesaplamalar yapılabilir.

2.2 Thomas-Fermi Modeli

Adını Llewellyn Thomas ve Enrico Fermi'den alan Thomas-Fermi (TF) modeli [40, 41], Schrödinger denkleminin ileri sürülmesinden sonra geliştirilen, çok parçacıklı sistemlerin elektronik yapısı için bir kuantum mekaniksel teoridir. Tek başına elektronik yoğunluk (ρ) ile formüle edildiğinden dalga fonksiyonu teorisinden ayrılır ve dolayısıyla DFT'nin temeli olarak görülmektedir. Bu model sadece sonsuz nükleer yük sınırında doğrudur. Gerçekçi sistemler için çok doğru sonuçlar vermez. Model, çok zor bir problem olan çekirdek etrafındaki elektronların dalga fonksiyonlarını elde etmek için Schrödinger denklemini çözmek yerine atomun elektronik yoğunluğunu bulur. Bu şekilde, elektronik yoğunluğun bir fonksiyonu olarak sistemin toplam enerjisi elde edilebilir. En büyük zorluk, elektronik yoğunluk cinsinden kinetik enerji fonksiyonunu ifade etmektir. Bu nedenle, bir yaklaşım yapılarak, sadece homojen elektron gazının kinetik enerjisi kullanılmaktadır. Homojen elektron gazının kinetik enerjisi:

$$T = \frac{3}{10} (3\pi^2)^{2/3} \rho^{5/3} \quad (2.1)$$

şeklindedir. Burada ρ sabittir. Sabit değilse kinetik enerji:

$$T[\rho(\vec{r})] = \frac{3}{10} (3\pi^2)^{2/3} \int d\vec{r} \rho^{5/3}(\vec{r}) \quad (2.2)$$

olur [42]. Burada integralin dışındaki katsayı C ile gösterilir ve değeri yaklaşık 2.87 a.u. dur. $\rho(\vec{r})$ yoğunluğuna sahip homojen elektron gazının kinetik enerji yoğunluğu $C\rho^{\frac{5}{3}}(\vec{r})$ dir. Potansiyel enerji fonksiyoneli [43]:

$$V[\rho(\vec{r})] = \int V_{dış}(\vec{r})\rho(\vec{r})d\vec{r} + \frac{1}{2} \iint \frac{\rho(\vec{r})\rho(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d\vec{r}d\vec{r}' \quad (2.3)$$

şeklindedir. İlk terim, atomik durum için harici potansiyeldir. Eelektronlarla ilişkilidir ve elektronlar ile çekirdekler arasındaki etkileşimdir. İkinci terim de, çekirdeğe karşılık gelen bir yük yoğunluğu ile ilişkilidir ve etkileşim potansiyel enerjisi olarak düşünülebilir. Böylece, çekirdek-elektron ve elektron-elektron etkileşmelerini de içeren sistemin toplam enerjisi elektron yoğunluğu türünden:

$$E_{TF}[\rho(\vec{r})] = T_{TF}[\rho(\vec{r})] + \int V_{dış}(\vec{r})\rho(\vec{r})d\vec{r} + \frac{1}{2} \iint \frac{\rho(\vec{r})\rho(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d\vec{r}d\vec{r}' \quad (2.4)$$

şeklinde ifade edilir [43]. N parçacıklı bir sistem için, $\rho(\vec{r})$ yoğunluğu, yoğunluk operatörünün beklenen değeri hesaplanarak aşağıdaki gibi bulunur.

$$\begin{aligned} \rho(\vec{r}) &= \langle \Psi | \hat{n}(\vec{r}) | \Psi \rangle = \sum_{i=1, N} \int \delta(\vec{r} - \vec{r}_i) |\Psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)|^2 d\vec{r}_1, \dots, d\vec{r}_N \quad (2.5) \\ &= \int |\Psi(\vec{r}, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N)|^2 d\vec{r}_2 d\vec{r}_3 \dots d\vec{r}_N \\ &+ \int |\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}, \dots, \vec{r}_N)|^2 d\vec{r}_1 d\vec{r}_3 \dots d\vec{r}_N + \dots \\ &= N \int |\Psi(\vec{r}, \dots, \vec{r}_N)|^2 d\vec{r}_2 \dots d\vec{r}_N \end{aligned}$$

Bunun tüm uzay üzerinden integrali toplam elektron sayısını verir.

$$\int \rho(\vec{r})d\vec{r} = N \quad (2.6)$$

Burada, $\rho(\vec{r})$ için konuma bağılı olmayan bir homojen elektron gazı modeli kullanılır. Ancak model, değiş-tokuş enerjisini dikkate almamaktadır. Bu nedenle TF modeli yeterince doğru sonuçlar vermez. Değiş-tokuş enerjisi 1928'de Paul Dirac tarafından ilave edilmiştir. Buna rağmen, TF teorisi ile tam doğru sonuç elde edilememiştir.

2.3 Hohenberg-Kohn Teoremleri

DFT, 1964 yılında Hohenberg ve Kohn [44] tarafından öne sürülen ve kanıtlanan iki teoreme dayanır.

Teorem I: Harici bir potansiyel ($V_{dış}(\vec{r})$) içerisindeki parçacıklardan oluşan bir sistemde, $V_{dış}(\vec{r})$ ve dolayısıyla toplam enerji $\rho(\vec{r})$ 'nin benzersiz bir fonksiyonudur. Böylece enerji fonksiyoneli:

$$E[\rho(\vec{r})] = F_{HK}[\rho(\vec{r})] + \int V_{dış}(\vec{r})\rho(\vec{r})d\vec{r} \quad (2.7)$$

şeklinde ifade edilir. Burada $F_{HK}[\rho(\vec{r})]$ yalnızca $\rho(\vec{r})$ 'nin evrensel fonksiyoneli. Sistemin Hamiltoniyeni, beklenen değeri minimum yapan elektron dalga fonksiyonu Ψ , taban durum enerjisini verecek şekilde yazılabilir. Taban durum enerjisi:

$$E[\rho(\vec{r})] = \langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle \quad (2.8)$$

şeklindedir. Hamiltoniyen:

$$\hat{H} = \hat{F} + \hat{V}_{dış} \quad (2.9)$$

şeklinde ifade edilir. Burada \hat{F} elektronik Hamiltoniyendir ve elektron-elektron etkileşme potansiyeli ile kinetik enerji operatöründen oluşur.

$$\hat{F} = \hat{T} + \hat{V}_{ee} \quad (2.10)$$

İspat: Teoremi ispatlamak için elektron yoğunluğu $\rho(\vec{r})$ olan ve dejenere olmayan N elektronlu bir sistemin taban durumunu ele alalım. Aralarındaki fark bir sabitten daha fazla olan iki farklı dış potansiyelin $V_{dış}(\vec{r})$ ve $V'_{dış}(\vec{r})$ olduğunu varsayalım. Bunların taban durum yoğunluğu eşittir. Böylece bu potansiyeller, \hat{H} ve \hat{H}' şeklinde taban durum yoğunluğu aynı olan iki Hamiltonyen ve ψ ve ψ' şeklinde iki farklı taban durum dalga fonksiyonuna sahip olurlar. \hat{H} problemi için ψ' dalga fonksiyonu olarak alındığında:

$$\begin{aligned} E_0 < \langle \psi' | \hat{H} | \psi' \rangle &= \langle \psi' | \hat{H}' | \psi' \rangle + \langle \psi' | \hat{H} - \hat{H}' | \psi' \rangle \\ &= E'_0 + \int \rho(\vec{r}) [V_{dış}(\vec{r}) - V'_{dış}(\vec{r})] d\vec{r} \end{aligned} \quad (2.11)$$

bulunur [41]. Burada, E_0 ve E'_0 sırasıyla \hat{H} ve \hat{H}' için taban durum enerjileridir. Aynı yol izlenerek \hat{H}' problemi için dalga fonksiyonu olarak ψ alınırsa:

$$\begin{aligned} E'_0 < \langle \psi | \hat{H}' | \psi \rangle &= \langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle + \langle \psi | \hat{H}' - \hat{H} | \psi \rangle \\ &= E_0 - \int \rho(\vec{r}) [V_{dış}(\vec{r}) - V'_{dış}(\vec{r})] d\vec{r} \end{aligned} \quad (2.12)$$

bulunur. Denklem 2.11 ve 2.12 toplandığında:

$$E_0 + E'_0 < E'_0 + E_0 \quad (2.13)$$

elde edilir. Bu ifade üst indisler değiştirildiğinde de geçerlidir.

Teorem II: İkinci teoreme göre, taban durum enerjisi $\rho(\vec{r})$ a göre değişken olarak elde edilebilir. Toplam enerjisi en aza indiren yoğunluk, doğru taban durum yoğunluğudur. Böylece evrensel enerji fonksiyoneli $\rho(\vec{r})$ cinsinden tanımlanabilir. Bu nedenle sistemin taban durumunun enerjisi, $E[\rho(\vec{r})]$ taban durum yoğunluğuna göre minimize edilerek hesaplanır. $V_{dış}(\vec{r})$, $\rho(\vec{r})$ ile belirlendiğinden, ayrıca $V_{dış}(\vec{r})$ taban durum dalga fonksiyonunu da belirlediğinden kinetik enerji gibi sistemin tüm diğer özellikleri de belirlenebilir. Denklem (2.4) ile verilen TF enerji fonksiyoneli yerine yazılan enerji fonksiyoneli [43]:

$$E_{HK}[\rho(\vec{r})] = F_{HK}[\rho(\vec{r})] + \int V_{dış}(\vec{r}) \rho(\vec{r}) d\vec{r} + E_{II} \quad (2.14)$$

şeklinde ifade edilir. Burada E_{II} çekirdek-çekirdek etkileşmesini ifade eden enerji terimidir. Varyasyonel ilkesine göre yoğunluk değişince taban durum enerjisinden daha yüksek bir enerji elde edilir ve bir deneme yoğunluğu $\tilde{\rho}(\vec{r})$ ve dalga fonksiyonu $\tilde{\psi}$ ise enerji:

$$\langle \tilde{\psi} | \hat{H} | \tilde{\psi} \rangle = E_{HK}[\tilde{\rho}(\vec{r})] \geq E_{HK}[\rho(\vec{r})] \quad (2.15)$$

şeklinde yazılır [43]. Teoreme göre taban durum enerjisi:

$$E_0 \leq E_{HK}[\tilde{\rho}(\vec{r})] \quad (2.16)$$

şeklindedir.

2.4 Kohn-Sham Eşitlikleri

Kohn-Sham formülasyonu [45], elektronların etkin bir "Kohn-Sham" tek parçacık potansiyeli ($V_{KS}(\vec{r})$) içinde hareket ettiği, gerçek potansiyel ile tam etkileşimli sistem üzerinde durur. Kohn-Sham yöntemi, gerçek sistemle aynı temel durum yoğunluğunu verir ve hesaplamayı büyük ölçüde kolaylaştırır.

Kohn ve Sham, TF teorisindeki zorlukları ortadan kaldırmak için kinetik enerjinin kesin olarak bulunabileceği bir sistem kurdular. Sistemin taban durum dalga fonksiyonu Ψ_{KS} tek parçacık orbitallerinin $\phi_i(\vec{r}_i)$ determinantı ile bulunur.

$$\Psi_{KS} = \frac{1}{\sqrt{N!}} \det[\phi_1(\vec{r}_1) \phi_2(\vec{r}_2) \dots \dots \phi_N(\vec{r}_N)] \quad (2.17)$$

Kohn ve Sham [45] yaklaşımında, Hohenberg-Kohn teoreminde tanımlanan evrensel $F_{HK}[\rho(\vec{r})]$ fonksiyoneli modifiye edilerek üç terim şeklinde ifade edilir.

$$F_{HK}[\rho(\vec{r})] = T_S[\rho(\vec{r})] + E_H[\rho(\vec{r})] + E_{xc}[\rho(\vec{r})] \quad (2.18)$$

Buradaki $T_S[\rho(\vec{r})]$ yoğunluğu $\rho(\vec{r})$ olan etkileşimsiz elektron gazının kinetik enerjisi, $E_H[\rho(\vec{r})]$ elektronların Hartree enerjisi, $E_{xc}[\rho(\vec{r})]$ de değiş-tokuş-korelasyon enerjisidir. Hartree enerjisi:

$$E_H[\rho(\vec{r})] = \frac{1}{2} \iint \frac{\rho(\vec{r})\rho(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d\vec{r}d\vec{r}' \quad (2.19)$$

şeklinde ifade edilir. $E_{xc}[\rho(\vec{r})]$ etkileşmeyen elektronların kinetik enerjileri arasındaki farkı ve ayrıca değiş-tokuş enerjisinin bir parçası olan elektron-elektron etkileşimlerine klasik olmayan katkıyı içerir.

$$E_{xc}[\rho(\vec{r})] \equiv T[\rho(\vec{r})] - T_S[\rho(\vec{r})] + V_{ee}[\rho(\vec{r})] - E_H[\rho(\vec{r})] \quad (2.20)$$

Taban durum elektron yoğunluğu enerji fonksiyoneli minimize eder ve Euler denklemini sağlar. Burada Euler denklemine göre:

$$\mu = V_{KS}(\vec{r}) + \frac{\delta T_S[\rho(\vec{r})]}{\delta \rho(\vec{r})} \quad (2.21)$$

bulunur. Burada μ Lagrange çarpanıdır. $V_{KS}(\vec{r})$, $V_{dış}(\vec{r})$ 'ı, Hartree potansiyeli ($V_H(\vec{r})$) ve değiş-tokuş potansiyeli ($V_{xc}(\vec{r})$) ni içerir. Böylece $V_{KS}(\vec{r})$:

$$V_{KS}(\vec{r}) = V_{dış}(\vec{r}) + V_H(\vec{r}) + V_{xc}(\vec{r}) = V_{dış}(\vec{r}) + \int d\vec{r}' \frac{\rho(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} + V_{xc}(\vec{r}) \quad (2.22)$$

şeklinde yazılır. Kohn-Sham teorisinde anlaşılması gereken en önemli kavram, etkileşimli olmayan alternatif Kohn-Sham sistemi için bulunan yoğunluğun, taban durum yoğunluğuna eşdeğer olduğudur. Tek parçacık için Schrödinger denklemi ise:

$$\left[-\frac{1}{2} \nabla_i^2 + V_{KS}(\vec{r}_i) \right] \phi_i = \varepsilon_i \phi_i \quad (2.23)$$

şeklindedir. Böylece $\rho(\vec{r})$:

$$\rho(\vec{r}) = \sum_i^N \sum_s |\phi_i(\vec{r})|^2 \quad (2.24)$$

şeklinde ifade edilir. Böylece etkileşmeyen elektronların kinetik enerjisi:

$$T_S[\rho(\vec{r})] = \langle \Phi_i \left| \sum_i^N \left(-\frac{1}{2} \nabla_i^2 \right) \right| \Phi_i \rangle \quad (2.25)$$

şeklinde verilir. $V_{KS}(\vec{r})$ değiş-tokuş-korelasyon potansiyeli aracılığıyla $\rho(\vec{r})$ 'a bağlıdır. $V_{KS}(\vec{r})$, tek parçacık için Schrödinger denklemi ve $\rho(\vec{r})$ denklemleri Kohn-Sham eşitlikleridir.

2.5 Değiş-Tokuş-Korelasyon Yaklaşımları

2.5.1 Yerel Yoğunluk Yaklaşımı (LDA)

En eski, en basit ve en önemli fonksiyonel yerel yoğunluk yaklaşımı (LDA) dır. LDA, eş yoğunluktaki homojen bir elektron gazı ile ilişkili değiş-tokuş-korelasyon enerjisi ile bir sistemin gerçek değiş-tokuş-korelasyon enerjisine yerel yaklaşımı çerir. LDA, yalnızca yerel yoğunluğa bağlıdır ve toplam enerji genellikle şu şekilde yazılır:

$$E_{xc}^{LDA}[\rho(\vec{r})] = \int \varepsilon_{xc}[\rho(\vec{r})] \rho(\vec{r}) d\vec{r} \quad (2.26)$$

Burada $E_{xc}[\rho(\vec{r})]$ değiş-tokuş-korelasyon enerjisi, E_x değiş-tokuş ve E_c korelasyon şeklinde ikiye ayrılır. E :

$$E_x[\rho(\vec{r})] = -\frac{3}{4} \left(\frac{3}{\pi} \right)^{1/3} \int \rho(\vec{r})^{4/3} d\vec{r} \quad (2.27)$$

şeklinde Dirac [46] tarafından ifade edilmiştir. E_c de başka bir formülle bulunur [47, 48]. Korelasyon kısmı Ceperley ve Alder [49] tarafından bulunmuştur.

Basit olduğu halde, LDA fonksiyoneli, katı sistemlerde iyi çalışır ve bu nedenle katı hal hesaplamalarında kullanılmaktadır. LDA özellikle moleküllerde çok iyi sonuç vermez.

2.5.2 Genelleştirilmiş Gradyan Yaklaşımı (GGA)

Gradyan açılımı yaklaşımı [45], GGA [50] nın temelini oluşturur. Gradyan açılımı yaklaşımında, yoğunluk gradyan terimlerinin bir seri açılımı gerçekleşir. Ancak, atom ve moleküllerde başarılı olamamıştır. Gradyan açılımı yaklaşımını bir adım öne götüren katkıyı Perdew-Wang [51,52] yapmıştır. Perdew-Wang, değiş-tokuş enerjisi için iyileştirme yapmıştır. Ayrıca korelasyondaki iyileştirme de kesilim yöntemi [53,54] ile gerçekleşmiştir. Böylece, değiş-tokuş-korelasyon enerjisi:

$$E_{xc}^{GGA}[\rho(\vec{r})] = \int \rho(\vec{r}) \varepsilon_{xc}[\rho(\vec{r})] F_{xc}[\rho(\vec{r}), \nabla\rho(\vec{r}), \nabla^2\rho(\vec{r}), \dots] d\vec{r} \quad (2.28)$$

şeklinde yazılır. GGA'nın çeşitli fonksiyonelleri mevcuttur. Bunlar PW91, Perdew, Burke ve Enzerhof (PBE) [55] şeklindedir. PBE, PW91'in basit halidir.

2.6 DFT'nin Düzlem Dalga Uygulamaları

2.6.1 Bloch Teoremi

Bloch teoremine [56] göre, periyodik bir potansiyel içindeki bir elektronun dalga fonksiyonu Ψ :

$$\Psi_{j,\vec{k}}(\vec{r}) = u_j(\vec{r}) e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \quad (2.29)$$

şeklinde verilir. Örgünün periyodik kısmı $u_j(\vec{r})$, dalga kısmı ise $e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$ ile ifade edilir. j bant indeksini, \vec{k} dalga vektörünü temsil eder. $u_j(\vec{r})$ örgü ile aynı periyodikliğe sahip olduğundan, bir düzlem dalga seti ile ifade edilebilir:

$$u_j(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} c_{j,\vec{G}} e^{i\vec{G}\cdot\vec{r}} \quad (2.30)$$

Burada $c_{j,G}$ düzlem dalga katsayılarıdır. Böylece, elektron dalga fonksiyonları düzlem dalga seti şeklinde açılabilir.

$$\Psi_{j,\vec{k}}(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} c_{j,\vec{k}+\vec{G}} e^{i\vec{G}\cdot\vec{r}} \quad (2.31)$$

2.6.2 Kohn-Sham Eşitliklerinin Düzlem Dalgalar ile Gösterimi

Elektronun dalga fonksiyonlarını açmak için düzlem dalga baz seti kullanılırsa, Kohn-Sham eşitlikleri daha kolay bir formda ifade edilebilir. Böylece potansiyel:

$$V(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} \bar{V}(\vec{G}) e^{i\vec{G}\cdot\vec{r}} \quad (2.32)$$

şeklinde yazılır. Buna göre elektron için dalga fonksiyonu $V_{KS}(\vec{r})$ 'de kullanılırsa, ters-uzayda Kohn-Sham eşitlikleri:

$$\sum_{\vec{G}} \frac{1}{2} |\vec{k} + \vec{G}|^2 \delta_{\vec{G},\vec{G}'} c_{j,\vec{k}+\vec{G}} + V_{KS}(\vec{G} - \vec{G}') c_{j,\vec{k}+\vec{G}} = \epsilon_i(\vec{k}) c_{j,\vec{k}+\vec{G}} \quad (2.33)$$

şeklinde ifade edilir. Tam doğru bir çözüm için düzlem dalga baz setinin sonsuz olması gerekir. Ancak düzlem dalgaların hepsinin çok önemi yoktur. Sonsuz sayıda düzlem dalga baz seti oluşmasının engellenmesi için bir kinetik kesilim enerji sınırı koyulur. Kinetik kesilim enerjisi E_{cut} ile gösterilir ve bu sınırlama:

$$\frac{1}{2} |\vec{k} + \vec{G}| < E_{cut} \quad (2.34)$$

şeklinde ifade edilir.

2.6.3 Psödopotansiyeller

Tüm elektron düzlem dalgası hesaplamaları çok geniş kapsamlı bir hesaplama gerektirir. Kor elektronları, çekirdeğe çok yakın, aktif olmayan elektronlardır. Bu nedenle katıların temel fiziksel özelliklerini belirleyen daha çok değerlik elektronlarıdır. Dolayısıyla psödopotansiyel yaklaşım [57,58] ile bu problem çözülür. Bu yaklaşımda, çekirdek

donmuş kabul edilir ve kor elektronları dikkate alınmaz. Buna göre, gerçek iyonik Coulomb potansiyeli (V_i) yerine, bunun çok benzeri ve değerlik elektronlarına etkileyen, daha zayıf bir psödopotansiyel (V_i^{PS}) kullanılır.

2.6.4 İzdüşümsel Artırılmış Dalga (PAW) Yöntemi

İzdüşümsel artırılmış dalga (PAW) yöntemi [59], ab initio hesaplamalarında kullanılan bir tekniktir. PAW formalizmi, Vanderbilt tipi [60] ultrasoft psödopotansiyeller [61] (USPP) ile doğrusallaştırılmış artırılmış düzlem dalga [62] (LAPW) yönteminin bir genel halidir. DFT hesaplamalarının daha yüksek hesaplama verimliliği ile yapılmasına izin verir [60].

Değerlik dalga fonksiyonları, iyon korları çevresinde hızlı titreşim yapma eğilimindedirler. Bu bir problemdir ve bu bölgedeki dalga fonksiyonlarını doğru tanımlamak için çok sayıda Fourier bileşeni gerekir. PAW yöntemi, bu hızlı titreşim yapan dalga fonksiyonlarını hesaplamada daha uygun olan düzgün dalga fonksiyonlarına dönüştürerek bu problemi ortadan kaldırır. Yöntem böylece, düzgün dalga fonksiyonlarından tüm elektron özelliklerini hesaplamak için bir yol sağlar.

Doğrusal dönüşüm ile psödodalga fonksiyonu $\tilde{\Psi}$ tüm elektron dalga fonksiyonuna Ψ dönüştürülür.

$$|\Psi\rangle = \hat{T}|\tilde{\Psi}\rangle \quad (2.35)$$

Ψ , bir Kohn-Sham tek parçacık dalga fonksiyonudur. Bu iki dalga fonksiyonunun sadece kor bölgesinde farklı olması için:

$$\hat{T} = 1 + \sum_R S_R \quad (2.36)$$

yazılır. Burada, S_R sadece R atomunu çevreleyen artırılmış küresel bölge içinde sıfırdan farklıdır. Her atomun etrafında, psödo dalga fonksiyonunu, psödo kısmi dalgalara açmak iyi olur. Böylece:

$$|\tilde{\Psi}\rangle = \sum_i |\tilde{\phi}_i\rangle c_i \quad (2.37)$$

olacaktır. \hat{T} doğrusal olduğundan c_i katsayıları bir dizi sözde projektör işleviyle ($|p_i\rangle$) bir iç çarpım olarak yazılabilir:

$$c_i = \langle p_i | \tilde{\Psi} \rangle \quad (2.39)$$

şeklinde yazılır. Burada:

$$c_i = \langle p_i | \tilde{\phi}_j \rangle = \delta_{ij} \quad (2.40)$$

dir. Tüm elektron kısmi dalga fonksiyonları:

$$|\phi_i\rangle = \hat{T} |\tilde{\phi}_i\rangle \quad (2.41)$$

şeklinindedir. Bunlar, izole bir atom için Kohn-Sham Schrödinger denkleminin çözümleridir. Dönüşüm \hat{T} , tüm elektron kısmi dalga fonksiyon seti $|\phi_i\rangle$, psödo kısmi dalga fonksiyonu seti $|\tilde{\phi}_i\rangle$ ve $|p_i\rangle$ projektör fonksiyon seti ile:

$$\hat{T} = 1 + \sum_i (|\phi_i\rangle - |\tilde{\phi}_i\rangle) \langle p_i | \quad (2.42)$$

şeklinde ifade edilir.

Artırma bölgelerinin dışında, pseudo kısmi dalgaları, tüm elektron kısmi dalgalara eşittir. PAW yöntemi donmuş çekirdek yaklaşımı ile birleştirilir. Çünkü kordaki elektronlar çekirdeğin hemen yakınındadır ve diğer elektronlarla etkileşmezler. Bundan dolayı donmuş varsayırlar. Sonuç olarak, değerlik elektronları dikkate alınır. Doğrusal dönüşüm ile elde edilen düzlem dalga seti ile tüm elektron dalga fonksiyonları yeni formunu alır ve bir sistemin temel fiziksel özellikleri buradan elde edilir.

3. HESAPLAMA YÖNTEMLERİ

3.1 Vienna Ab initio Simulation Package (VASP)

Co₂YGe (Y=Fe, Sc, Ti) bileşiklerinin yapısal, elektronik, elastik, fonon ve termodinamik özellikleri ilk ilkeler yöntemiyle incelenmiştir. Hesaplamalar Vienna Ab-initio Simulation Package (VASP) programı [38, 63-65] ile yapılmıştır. Elektron iyon etkileşimleri PAW yöntemi [59] ile hesaplanmaktadır. Değiş-tokuş-korelasyon, GGA [50] altında PW91 [51,52] fonksiyoneli ile tanımlanmıştır. Hesaplama sırasında kullanılan optimize kesilim enerjisi Co₂FeGe için 700 eV, Co₂TiGe için 800 eV ve Co₂ScGe için 750 eV dir. Bütün bileşikler için optimize Monkhorst-Pack [66] k-nokta değeri ise 11x11x11 olarak alınmıştır.

3.2 Yapısal Verilerin Hesaplanması

Co₂YGe(Y=Fe,Sc,Ti) bileşiklerinin farklı örgü sabitleri için toplam enerji ve hacim değerleri hesaplanmış ve elde edilen grafiklerdeki eğriler Murnaghan hal [67] denklemine fit edilerek sıfır basınçta örgü sabiti (a_0), bulk modülü (B_0) ve bulk modülünün birinci türevi (B_0') hesaplanmıştır (bk.Tablo 4.1). Murnaghan hal denklemi:

$$E(V) = E_0 + \frac{B_0}{B_0'} \left(\frac{(V_0/V)^{B_0'}}{B_0'-1} + 1 \right) - \frac{B_0 V_0}{B_0'-1} \quad (3.1)$$

şeklinindedir. Bir malzemenin hacmi değiştirilmek istendiğinde malzeme buna direnç gösterir. Bu direncin ölçüsü B dir. B ve B' aşağıdaki eşitliklerden bulunur [68].

$$B = -V \frac{\partial P}{\partial V} \quad (3.2)$$

$$B' = \frac{\partial B}{\partial P} \quad (3.3)$$

3.3 Elektronik Verilerin Hesaplanması

Bir atomda elektronlar enerji seviyelerine Pauli dışarlama ilkesine göre dizilirler. Atomların en dış orbitallerinde elektronlar birbirine yaklaştıklarında etkileşirler. Bu etkileşme iki atom için iki farklı enerji seviyesine sebep olur. Oluşan bu enerji seviyeleri

izole atomun üstünde ve altında konumlanır. Bu, N atomlu sistemler için N tane enerji seviyesi oluşması demektir. Bu oluşan enerji seviyeleri birkaç eV'lik enerjiye sahip olduğu için enerji seviyeleri arasındaki boşluklar çok azalır bu da sürekli enerji bandı oluşturur.

Malzemelerin bant yapıları bize iletkenliği ile ilgili bilgiler verir ve onları sınıflandırmamızı sağlar. Bant grafiğinde iletkenlik ve değerlik bandı arasında yasak aralık varsa malzeme yalıtkan, aralık yoksa malzeme iletken özelliğe sahip olur. Yalıtkanlar elektriksel iletken değildir. Metaller iletkenidir. Yarıiletkenlerin bant yapısı yalıtkanlara benzer. Ancak, yasak enerji aralığı oldukça küçüktür.

T sıcaklığında, elektronlar enerji seviyelerine Fermi-Dirac dağılımına göre yerleşirler. Her bir enerji seviyedeki kuantum durumlarının sayısı Durum Yoğunluğu (DOS) ile belirlenir [69].

Co_2YGe (Y=Fe, Sc, Ti) için elektronik bant enerjileri VASP [38, 61-63] ile hesaplanarak, grafik şeklinde yüksek simetri noktaları boyunca şekil 4.2'de gösterilmiştir. Buna ek olarak yapılan DOS hesabından elde edilen toplam ve kısmi sonuçlar da grafik ile görselleştirilmiştir (bk. Şekil 4.3-4.5).

3.4 Elastik Verilerin Hesaplanması

Bir malzemenin uygulanan gerilime tepkisi, mekanik kararlılık, sertlik, atomlar arası bağlanmanın türü ve katıların anizotropisi hakkında bilgi veren elastik sabitler C_{ij} ile temsil edilir.

Bu çalışmada, Co_2YGe (Y=Fe, Sc, Ti) için C_{ij} değerleri malzemenin dış etkenlere karşı verdiği reaksiyonu belirlemek için hesaplanmıştır. Hesaplama, VASP kodu [38, 61-63] ile zor-zorlanma yöntemi yoluyla yapılmıştır. Bunun için Zor (σ_{ij}) ve zorlanma tensörleri (ϵ_{ij}) kullanılır. Bu tensörler simetriktir ve bundan dolayı uygulanan zor ile bundan kaynaklanan zorlanma orantılıdır. Bir katıdaki bozulma da zor ile orantılı olarak değişir.

Zorlanmadaki artış $d\epsilon_{ij}$ birim hacimdeki zorlanma enerjisindeki artışa karşılıktır ve bu:

$$dW = \sigma_{ij}d\epsilon_{ij} = dE \equiv \frac{\partial E}{\partial \epsilon_{ij}} d\epsilon_{ij} \quad (3.4)$$

şeklinde ifade edilir. Burada W zorlanma enerji yoğunluğudur ve:

$$W = \int_0^{\varepsilon_{ij}} \sigma_{ij} d\varepsilon_{ij} \quad (3.5)$$

şeklindedir. Buna göre zor:

$$\sigma_{ij} = \frac{\partial W}{\partial \varepsilon_{ij}} = \frac{\partial E}{\partial \varepsilon_{ij}} \quad (3.6)$$

olarak bulunur. Hooke yasası gereğince zor ve zorlanma tensörleri aşağıdaki şekilde birbirine bağlıdır [70, 71].

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl} \varepsilon_{kl} \quad (3.7)$$

Zor tensörü ve zorlama tensörleri birbiriyle orantılıdır. Bu orantı katsayısına (C_{ijkl}) elastik sabit denir. C_{ijkl} dördüncü dereceden, 81 elastik sabitten oluşan bir tensördür. Simetriden dolayı bu sayı 21'e düşer. Böylece C_{ijkl} 6x6'lık C_{ij} matrisine dönüşür. Yukarıdaki denklem:

$$\sigma_{ij} = C_{ij} \varepsilon_{ij} \quad (3.8)$$

şeklini alır [70]. C_{ij} de:

$$C_{ij} = \frac{1}{V_0} \left(\frac{\partial^2 E}{\partial \varepsilon_i \partial \varepsilon_j} \right) \quad (3.9)$$

şeklinde ifade edilir [72].

Kübik örgüler için elastik sabit matrisi birbirinden bağımsız C_{11} , C_{12} , C_{44} sabitlerinden oluşur [70]

$$C_{k\u00fcbik} = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{12} & C_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} \end{bmatrix} \quad (3.10)$$

Elastik sabit matrisi Hooke yasasından bulunur ve elastik sabitler:

$$C_{44} = \frac{1}{2} \frac{\partial \sigma_{12}}{\partial \varepsilon_{12}} \quad (3.11)$$

$$C' = \frac{1}{2} (C_{11} - C_{12}) = -\frac{1}{2} \frac{\partial \sigma_{33}}{\partial \varepsilon_{33}} \quad (3.12)$$

$$B = \frac{1}{3} (C_{11} + 2C_{12}) = \frac{\partial \sigma_{11}}{\partial \varepsilon_{11}} \quad (3.13)$$

şeklindedir [70]. Burada C' tetragonal makaslama modülü, B elastik sabitlerden elde edilen bulk modülüdür.

Makaslama modülü elastik parametrelerden biridir ve makaslama zorlanmasına karşı malzemenin karşı koymasını ifade eder. İzotropik makaslama modülü G , Voigt ve Reuss makaslama modüllerinin (G_V ve G_R) aritmetik ortalamasıdır [72]. Bunlar:

$$G_V = \frac{((C_{11} - C_{12}) + 3C_{44})}{5} \quad (3.14)$$

$$\frac{5}{G_R} = \frac{4}{(C_{11} - C_{12})} + \frac{3}{C_{44}} \quad (3.15)$$

$$G = \frac{1}{2} (G_V + G_R) \quad (3.16)$$

şeklinde ifade edilir.

Young modülü (E) gerilme zoru ile bundan kaynaklanan gerilme zorlanmasının oranıdır. Sertlik de E ile belirlenir. Hesaplama da kullanılan denklem aşağıda verilmiştir [73].

$$E = \frac{9GB}{G + 3B} \quad (3.17)$$

Poisson oranı (ν), katıdaki bağ kuvvetleri hakkında bilgi veren [74], bir katının gevrek ya da sünek karakterinin tespitinde ölçüt olarak alınan, metalik, iyonik ve kovalent [75-77] malzemeleri ayırt etmede kullanılan bir parametredir. ν aşağıdaki gibi hesaplanabilir [73].

$$\nu = \frac{1}{2} \left[\frac{(B - \frac{2}{3}G)}{(B + \frac{1}{3}G)} \right] \quad (3.18)$$

Zener Anizotropi faktörü (A) ise malzemenin izotropik veya anizotropik olduğuna karar verebildiğimiz farklı bir elastik parametredir. İzotropik malzemeler tüm doğrultularda eş özelliklere sahip malzemelerdir. A , aşağıdaki gibi elastik sabitlerden hesaplanmaktadır [78].

$$A = \frac{2C_{44}}{C_{11} - C_{12}} \quad (3.19)$$

Debye sıcaklığı (θ_D) öz ısı ve erime sıcaklığı ile bağlantılı bir elastik parametredir. Bir katıdaki yüksek ve düşük sıcaklık bölgeleri θ_D ile ayırt edilir [79] ve aşağıdaki bağıntıdan bulunur [80].

$$\theta_D = \frac{h}{k_B} \left[\frac{3n}{4\pi} \left(\frac{N_A \rho}{M} \right) \right]^{1/3} v_m \quad (3.20)$$

Burada, h Planck sabiti, k_B Boltzmann sabiti, N_A Avogadro sayısı, M moleküler ağırlık, ρ yoğunluk, n moleküldeki atom sayısı, v_m de ortalama ses hızıdır. v_m :

$$v_m = \left[\frac{1}{3} \left(\frac{2}{v_t^3} + \frac{1}{v_l^3} \right) \right]^{-1/3} \quad (3.21)$$

şeklinde ifade edilir [81]. Diğer taraftan, boyuna v_l ve enine v_t ses hızları [82]:

$$v_l = \sqrt{\frac{3B + 4G}{3\rho}} \quad (3.22)$$

$$v_t = \sqrt{\frac{G}{\rho}} \quad (3.23)$$

şeklindedir. Farklı yönlerdeki, anizotropik ses hızları da aşağıdaki denklemlerden yararlanılarak hesaplanmıştır [83].

$$v_l^{[100]} = \sqrt{\frac{C_{11}}{\rho}}, \quad v_{t1}^{[100]} = v_{t2}^{[100]} = \sqrt{\frac{C_{44}}{\rho}} \quad (3.24)$$

$$v_l^{[110]} = \sqrt{\frac{C_{11} + C_{12} + 2C_{44}}{2\rho}}, \quad v_{t1}^{[110]} = \sqrt{\frac{C_{44}}{\rho}}, \quad v_{t2}^{[110]} = \sqrt{\frac{C_{11} - C_{12}}{2\rho}} \quad (3.25)$$

$$v_l^{[111]} = \sqrt{\frac{C_{11} + 2C_{12} + 4C_{44}}{3\rho}}, \quad v_{t1}^{[111]} = v_{t2}^{[111]} = \sqrt{\frac{C_{11} - C_{12} + C_{44}}{3\rho}} \quad (3.26)$$

3.5 Titreşimsel Özellikler ve Hesaplama Yöntemi

Örgü dinamiği bir kristaldeki atomların titreşimiyle ilgilendir. Bir katıdaki atomlar, herhangi bir sıcaklıkta denge konumu civarında salınım yaparlar. Bu hareket, ısı iletkenlik, örgü genişlemesi, ısı kapasitesi gibi önemli özelliklerden sorumludur. Bu titreşimlerin teorisi örgü dinamiği olarak adlandırılır. Örgü dinamiği, katıların termodinamik özellikleriyle ve elastik teoriyle yakından ilişkilidir. Titreşimin kuantumu fonon olarak adlandırılır. Kristalin örgü dinamiği, fonon kavramına dayanmaktadır.

Kristallerde atomlar denge konumu civarında salınım yaptığına göre denge konumu $\vec{r}_{l\kappa}$, bu noktadan yapılan yer değiştirmeyi de $\vec{u}_{l\kappa}$ ile gösterirsek kristalin potansiyel enerjisi Φ :

$$\begin{aligned}
\Phi = \Phi_0 + \sum_{l\kappa} \sum_{\alpha} \Phi_{\alpha}(l\kappa) u_{\alpha}(l\kappa) \\
+ \frac{1}{2} \sum_{l'l''\kappa\kappa'} \sum_{\alpha\beta} \Phi_{\alpha\beta}(l\kappa, l'\kappa') u_{\alpha}(l\kappa) u_{\beta}(l'\kappa') \\
+ \frac{1}{3!} \sum_{l'l''\kappa\kappa'\kappa''} \sum_{\alpha\beta\gamma} \Phi_{\alpha\beta\gamma}(l\kappa, l'\kappa', l''\kappa'') \\
\times u_{\alpha}(l\kappa) u_{\beta}(l'\kappa') u_{\gamma}(l''\kappa'') + ..
\end{aligned} \tag{3.27}$$

şeklinde ifade edilir [39,84]. Burada l , κ sırasıyla birim hücre ve her bir birim hücredeki atomları, $\alpha, \beta, \gamma, \dots$ kartezyen indisleri, Φ_0 , $\Phi_{\alpha}(l\kappa)$, $\Phi_{\alpha\beta}(l\kappa, l'\kappa')$, $\Phi_{\alpha\beta\gamma}(l\kappa, l'\kappa', l''\kappa'')$ sırasıyla sıfırıncı, birinci, ikinci ve üçüncü dereceden atomik kuvvet sabitlerini temsil eder. Sabit hacimdeki küçük yer değiştirmeler yöntemiyle problemin ikinci dereceden terimi çözülür. Buna göre kuvvet ve kuvvet sabitleri:

$$F_{\alpha}(l\kappa) = - \frac{\partial \Phi}{\partial u_{\alpha}(l\kappa)} \tag{3.28}$$

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial u_{\alpha}(l\kappa) u_{\beta}(l'\kappa')} = - \frac{\partial F_{\beta}(l'\kappa')}{\partial u_{\alpha}(l\kappa)} \tag{3.29}$$

şeklinindedir. Harmonik yaklaşımda dinamik özellikler, dinamik matrisin özdeğer probleminin çözülmesiyle [39,84,85] elde edilir.

Fononlar için durum yoğunluğu aşağıdaki eşitlikten hesaplanmaktadır.

$$g(\omega) = \frac{1}{N} \sum_{\lambda} \delta(\omega - \omega_{\lambda}) \tag{3.30}$$

Burada, N birim hücre sayısı, $\lambda = (v, q)$ (v bant indeksi ve q noktası), ω fonon frekanslarıdır. Fonon hesaplamalarında PHONOPY [39] kodu kullanılmıştır. Öncelikle, bu kod yardımıyla süper hücre, kristal simetriyi tamamen muhafaza eden bir birim hücreden oluşturulur. Ardından VASP [38, 61-63] ile kuvvet sabitleri elde edilir. Hesaplama bittikten sonra vasprun.xml dosyasından kuvvetleri çıkarmak için PHONOPY [39] kullanılır ve kuvvet sabiti matrisi oluşturulur. Buradan da fonon dağılım ve fonon DOS grafikleri elde edilir.

3.6 Termodinamik Verilerin Hesaplanması

PHONOPY [39], harmonik yaklaşımda ısı kapasitesi, entropi, vs. gibi termal özellikleri hesaplamada kullanılır. Brillouin bölgesindeki fonon frekansları bilirse, harmonik yaklaşımda fononların istatistiksel mekaniğe göre kanonik dağılımından fonon sisteminin enerjisi [39]:

$$E = \sum_{\vec{q}j} \hbar\omega_{\vec{q}j} \left[\frac{1}{2} + \frac{1}{\exp(\hbar\omega_{\vec{q}j}/k_B T) - 1} \right] \quad (3.31)$$

şeklinde ifade edilir. Burada T sıcaklık, k_B Boltzmann sabiti ve \hbar indirgenmiş Planck sabitidir. Aşağıdaki termodinamik bağıntılar kullanılarak Helmholtz serbest enerjisi (F), sabit hacimdeki ısı kapasitesi (C_v) ve entropi (S) gibi termodinamik özellikler sıcaklığın fonksiyonu olarak hesaplanmıştır [86].

$$C_v = \sum_{\vec{q}j} C_{\vec{q}j} = \sum_{\vec{q}j} k_B \left(\frac{\hbar\omega_{\vec{q}j}}{k_B T} \right)^2 \frac{e^{\hbar\omega_{\vec{q}j}/k_B T}}{[e^{\hbar\omega_{\vec{q}j}/k_B T} - 1]^2} \quad (3.32)$$

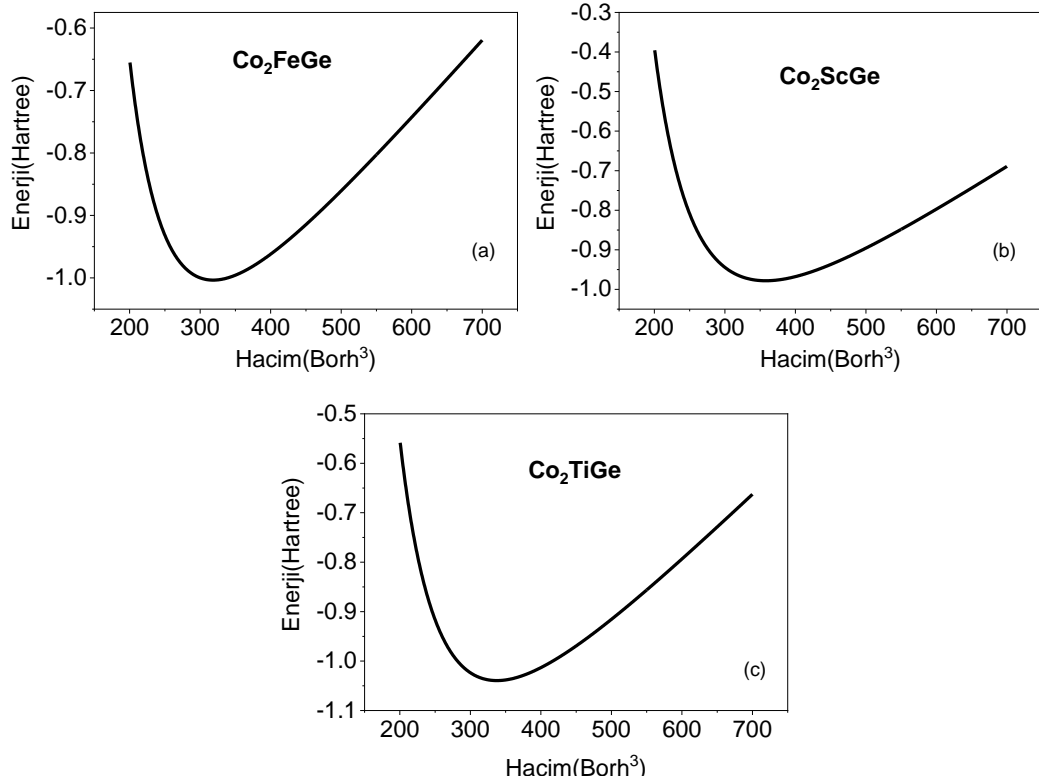
$$F = \frac{1}{2} \sum_{\vec{q}j} \hbar\omega_{\vec{q}j} + k_B T \sum_{\vec{q}j} \ln[1 - e^{-\hbar\omega_{\vec{q}j}/k_B T}] \quad (3.33)$$

$$S = \frac{1}{2T} \sum_{\vec{q}j} \hbar\omega_{\vec{q}j} \coth(\hbar\omega_{\vec{q}j}/2k_B T) - k_B \sum_{\vec{q}j} \ln[2 \sinh(\hbar\omega_{\vec{q}j}/2k_B T)] \quad (3.34)$$

4. BULGULAR VE TARTIŞMA

4.1 Yapısal Veriler

Çalışmada öncelikle kristal yapısı Cu_2MnAl ($L2_1$), uzay grubu $Fm\bar{3}m$ (225) olan Co_2YGe ($Y=Fe,Sc,Ti$) bileşikleri için yapısal özellikler araştırılmıştır. Hesaplama sonucunda toplam enerji ve hacim (E ve V) arasındaki ilişkiyi gösteren eğriler Şekil 4.1’de çizilmiştir. 0 GPa’da elde edilen örgü sabiti (a_0), bulk modülü (B_0) ve onun basınca göre birinci türevi (B_0') daha önce hesaplanmış verilerle birlikte Tablo 4.1’de sunulmuştur. Hesaplanan örgü sabitleri literatür verileriyle çok uyumludur. Bulk modülü değerlerinin ise Co_2FeGe için kaynak [26] da verilen veriden %8,69 daha yüksek, kaynak [36] de verilen diğer sonuçtan ise %7,99 daha düşük olduğu belirlenmiştir. Co_2ScGe için bu değer kaynak [26] deki veriden %38.05 daha yüksektir. Co_2TiGe için hesaplanan B değeri kaynak [26] deki değerden %10,43 daha düşüktür.



Şekil 4.1 : a) Co_2FeGe , b) Co_2ScGe , c) Co_2TiGe bileşikleri için $E-V$ eğrileri.

Tablo 4.1 : Co₂YGe(Y=Fe,Sc,Ti) bileşiklerinin 0 GPa basınçta yapısal verileri.

Bileşik	Yaklaşım	Kaynak	a_0 (Å)	B_0 (GPa)	B_0'	
Co ₂ FeGe	GGA	Bu çalışma	5,736	176,810	4,694	
	GGA	Teorik [26]	5,758	162,677		
	GGA	Teorik [36]	5,731	192,171	4,819	
	GGA_PBE	Teorik [34]	5,75			
	GGA_PBE	Teorik [27]	5,75			
			Deneysel [34]	5,736		
			Deneysel [27]	5,702		
			Deneysel [24]	5,738		
			Deneysel [33]	5,72		
		GGA_PBE	Teorik [33]	5,742		
Co ₂ ScGe	GGA	Bu çalışma	5,965	151,808	4,424	
	GGA	Teorik [26]	5,978	109,969		
	GGA	Teorik [21]	5,953			
Co ₂ TiGe	GGA	Bu çalışma	5,849	179,486	4,393	
	GGA	Teorik [26]	5,867	200,378		
	GGA	Teorik [21]	5,842			
			Deneysel [35]	5,819		
	FLAPW	Teorik [35]	5,850			
			Deneysel [37]	5,831		
	GGA	Teorik [20]	5,787			

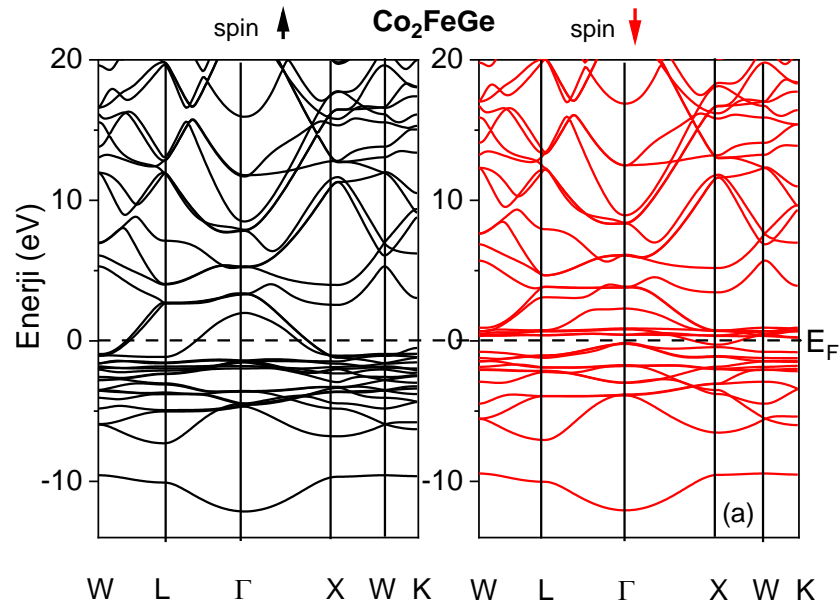
4.2 Elektronik Veriler

Co₂YGe(Y=Fe,Sc,Ti) bileşikleri için hesaplanan elektronik bant enerjileri, toplam ve kısmi durum yoğunlukları (TDOS ve PDOS) sırayla Şekil 4.2, Şekil 4.3, Şekil 4.4 ve Şekil 4.5'de verilmiştir. Hesaplamalar, spin polarizasyon dikkate alınarak gerçekleştirilmiştir. Çünkü bileşikler manyetik özellik göstermektedir. Bileşiklerin manyetik verileri Tablo 4.2'de sunulmuştur. Görüldüğü gibi Co₂ScGe ile Co₂TiGe'nin manyetik momenti Co₂FeGe bileşiğine ait değerden oldukça düşüktür. Co₂FeGe ve Co₂ScGe bileşiklerinin spin_down grafiğinde değerlik bandı incelendiğinde, Fermi enerji seviyesinin maksimumdan geçtiği görülmektedir. Co₂ScGe'dan daha yüksek manyetik momente sahip Co₂TiGe'nin spin_down bant grafiğinde çok küçük bir bant aralığı bulunmaktadır. Bu, Γ simetri noktasında oluşan bir direk enerji aralığıdır. Co₂TiGe bileşiğinde, Co atomu, Ti ve Ge dışında diğer Co ile etkileşir ve enerji aralığı oluşur. Aynı sonuç WIEN2k kod ile yapılan

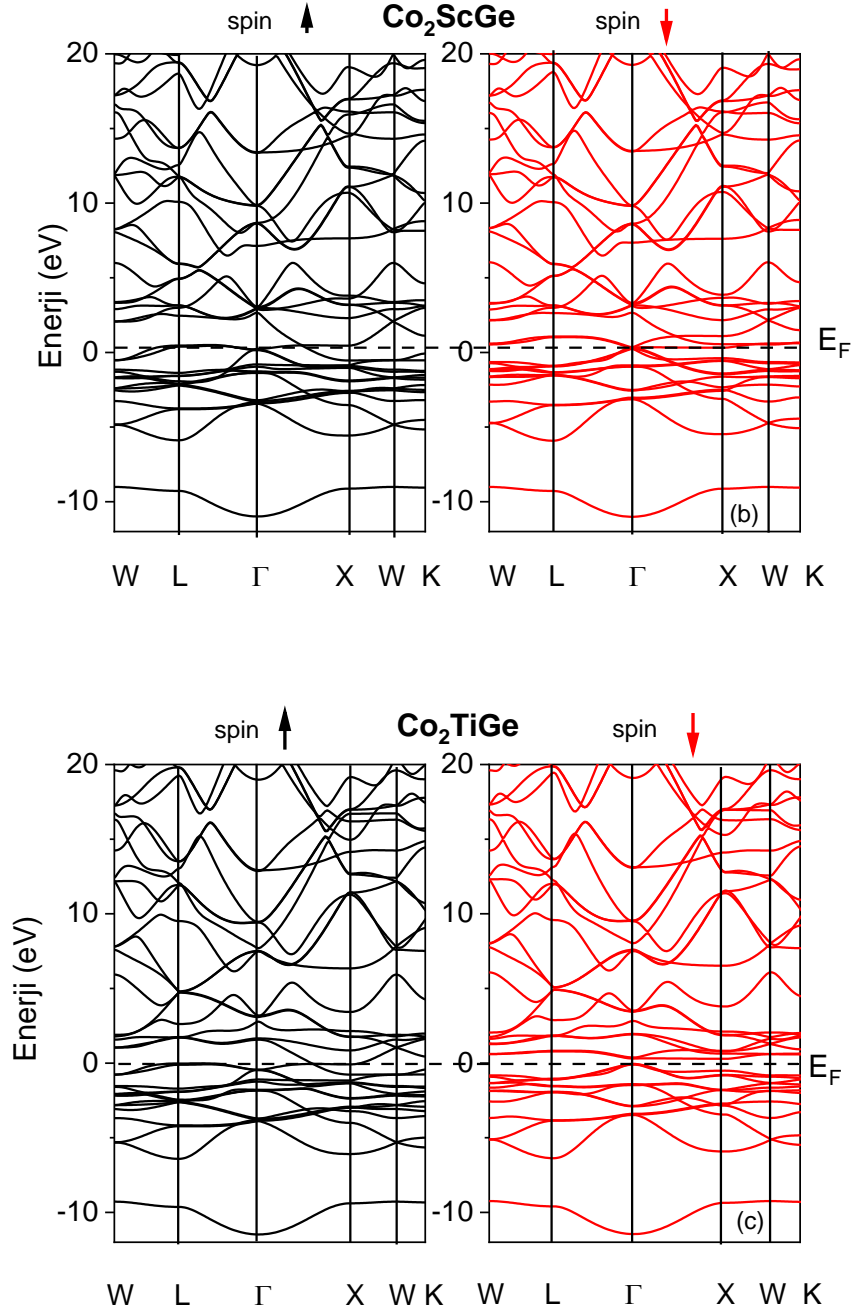
diğer bir teorik çalışmada da gözlenmiştir [20]. Bu nedenle Co_2TiGe yarı-metalik ferromanyetiktir. Ancak diğerlerinde spin_down grafiğinde bant aralığı oluşmamıştır. Bu nedenle mükemmel yarı-metal değillerdir. Metalik özelliktedirler. Sonuçlar literatürle uyumludur [32, 35].

Tablo 4.2: Co_2YGe (Y=Fe,Sc,Ti) bileşiklerinin kısmi ve toplam manyetik momentleri.

Bileşik	Kaynak	Yaklaşım	Manyetik moment (μ_B)			
			Co	Y=Fe,Sc,Ti	Ge	Toplam
Co_2FeGe	Bu çalışma	GGA	1,287	2,696	-0,001	5,270
	Teorik [27]	GGA				5,693
	Deneysel[27]					5,54
	Teorik [31]	LSDA	1,320	2,777	0,004	5,391
	Teorik [21]	GGA				5,48
Co_2ScGe	Bu çalışma	GGA	0,595	-0,106	0,001	1,084
	Teorik [31]	LSDA	0,572	-0,077	0,0009	1,012
	Teorik [21]	GGA				1,02
Co_2TiGe	Bu çalışma	GGA	0,978	-0,02	0,029	1,965
	Teorik [34]	GGA				5,61
	Deneysel[34]					5,74
	Teorik [31]	LSDA	0,951	-0,016	0,026	1,889



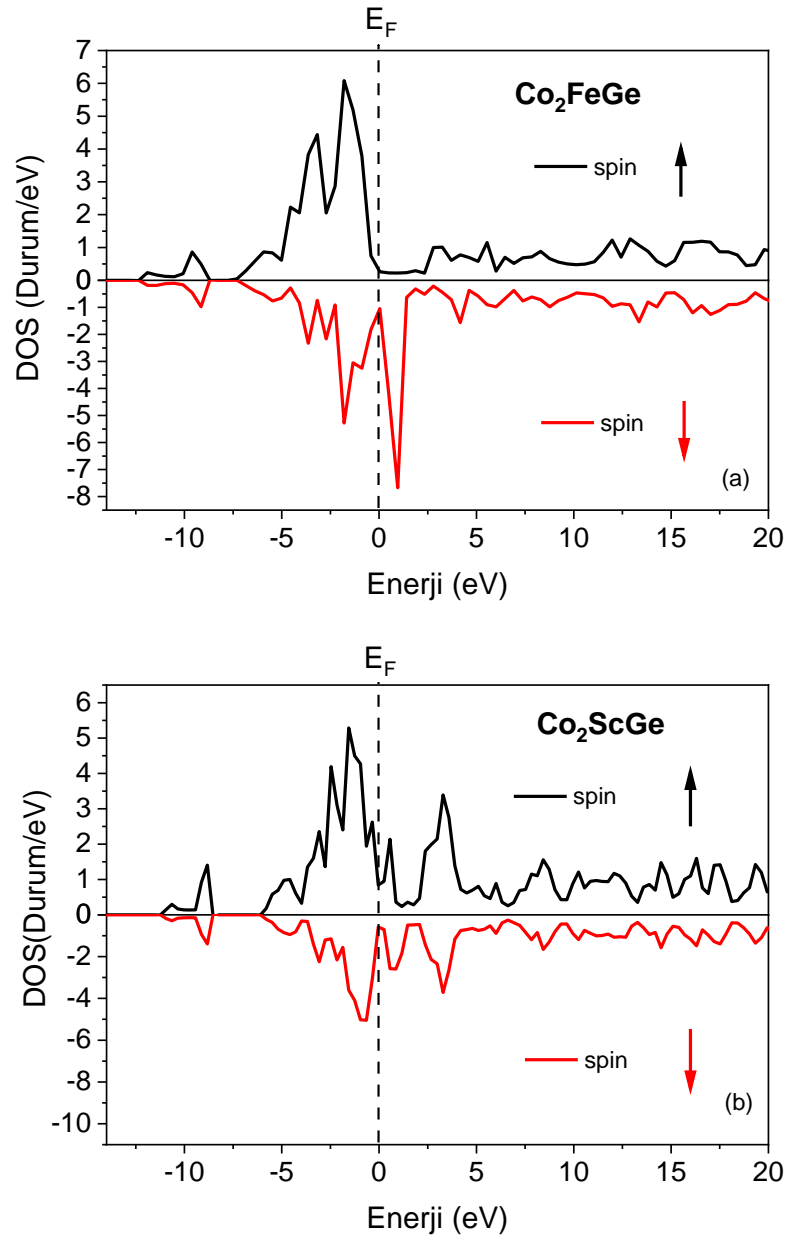
Şekil 4.2 : a) Co_2FeGe , b) Co_2ScGe , c) Co_2TiGe bileşiğinin elektronik bant yapısı.



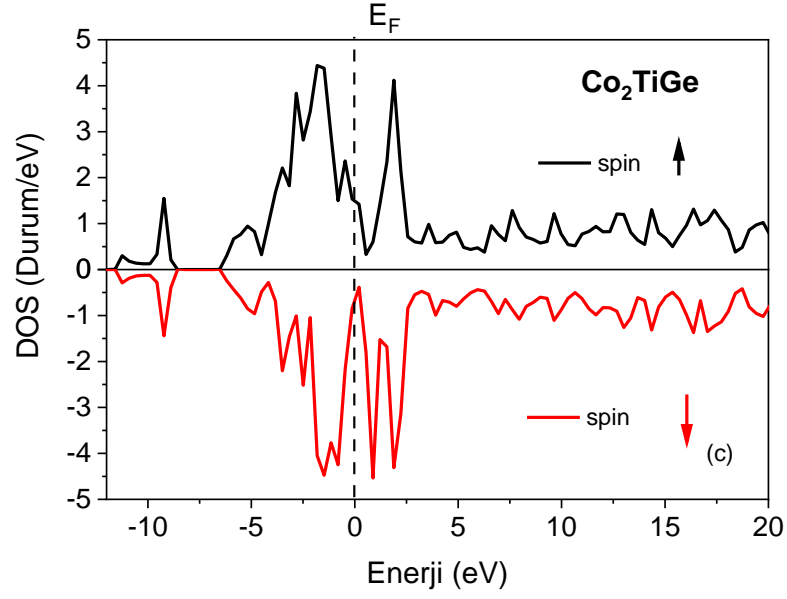
Şekil 4.2 (Devam): a) Co_2FeGe , b) Co_2ScGe , c) Co_2TiGe bileşiğinin elektronik bant yapısı.

Spin_up PDOS grafiklerine bakıldığında, değerlik bölgesinde tüm bileşiklerde ana katkının Co atomunun d yörüngesindeki elektronlardan kaynaklandığı görülür. Bu bölgede Co_p ve s durumlarının katkısı çok düşüktür. Fe atomunun ana DOS katkısı değerlik bölgesinde d yörüngesinden gelir ve burada Fermi seviyesine yaklaştıkça keskin çıkışlarla kendini gösterir. İletkenlik bölgesinde Co_2FeGe 'da Co_d ve Fe_d katkısı birbirine yakındır.

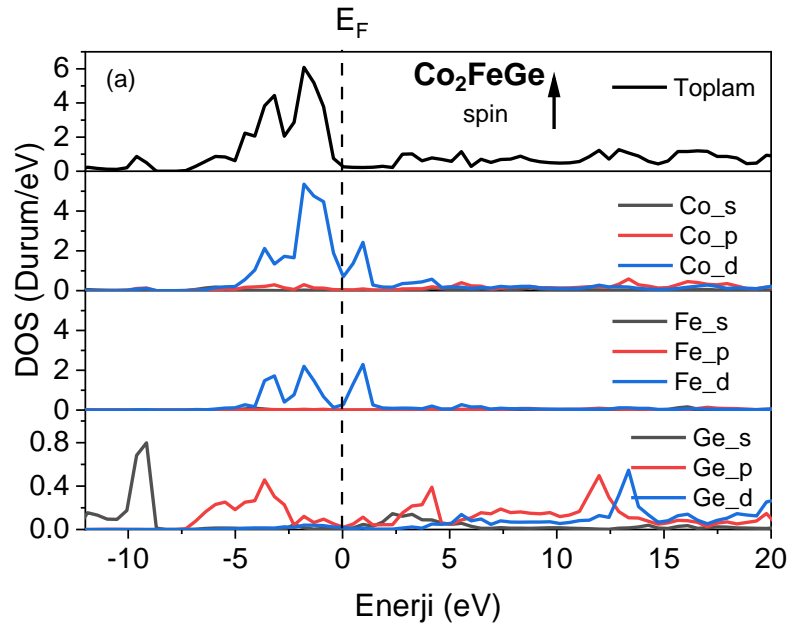
Co₂ScGe ve Co₂TiGe için bu bölgede maksimum katkı Sc_d ve Ti_d yörüngesinden kaynaklanır ve 0-5 eV enerji aralığında yüksek değerlerle kendini gösterir. Co_d ve Y_d elektronları arasında hibritleşme vardır (bk. Şekil 4.4). Spin_down PDOS grafiklerine göre, değerlik bölgesinde Co₂FeGe'da Fe_d, diğerlerinde de Co_d baskındır. $E > E_F$ bölgesinde, E_F civarında, genel olarak Co_d daha etkindir. Ancak Co₂TiGe bileşiğinde Ti_d ninde etkisinin Co_d ye yakın olduğu görülmektedir. Tüm PDOS grafiklerinde, Ge katkısının çok düşük olduğu belirlenmiştir. Bu, Ge'un diğer atomlarla iyonik bağ yapmasından kaynaklanıyor olabilir.



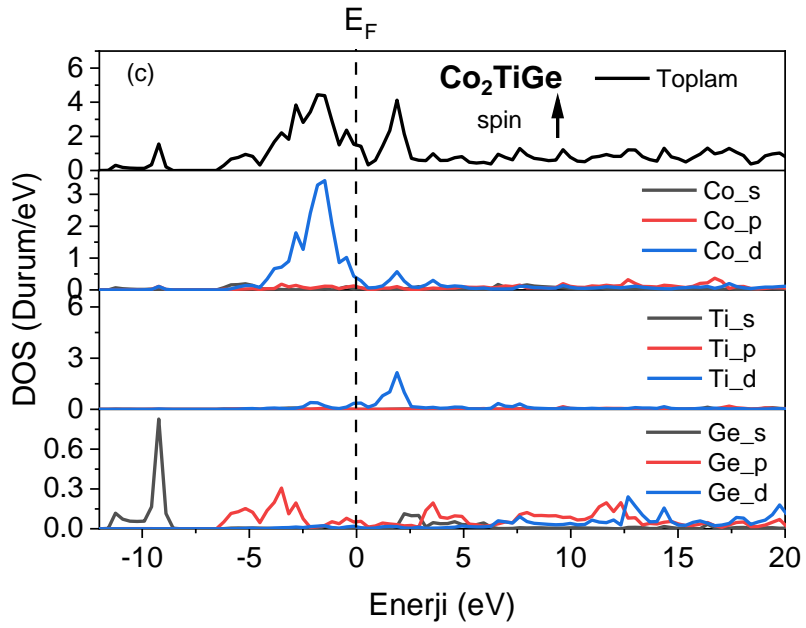
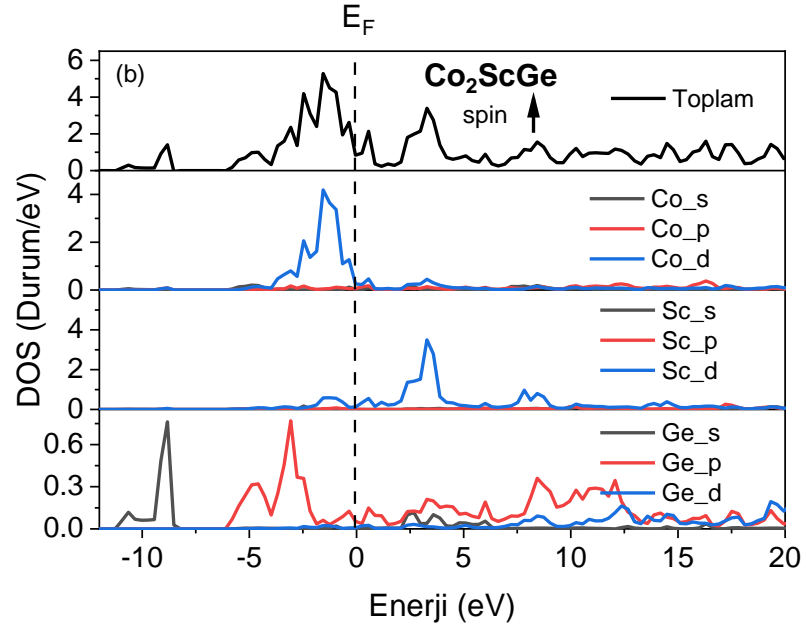
Şekil 4.3: a) Co₂FeGe, b) Co₂ScGe, c) Co₂TiGe bileşikleri için TDOS.



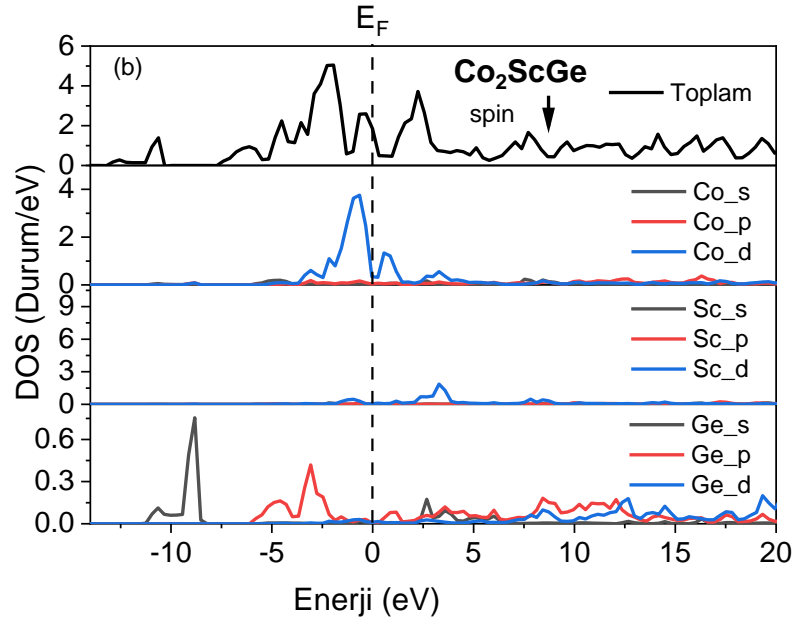
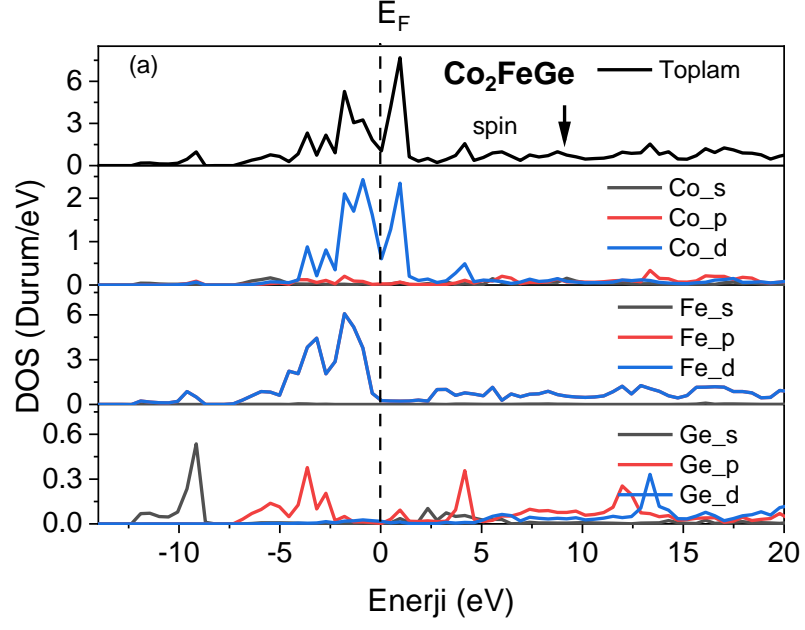
Şekil 4.3 (Devam): a) Co_2FeGe , b) Co_2ScGe , c) Co_2TiGe bileşikleri için TDOS.



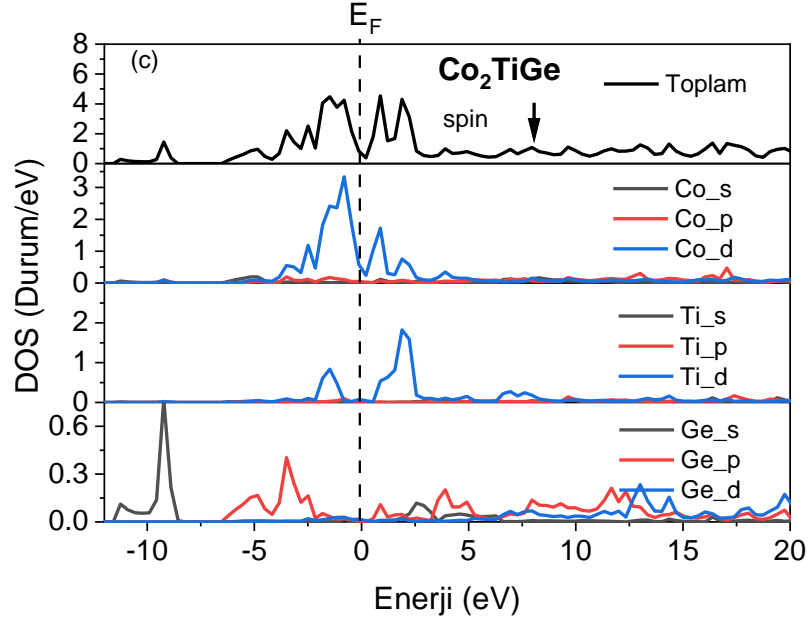
Şekil 4.4: a) Co_2FeGe , b) Co_2ScGe , c) Co_2TiGe bileşikleri için TDOS ve PDOS spin_up.



Şekil 4.4 (Devam): a) Co_2FeGe , b) Co_2ScGe , c) Co_2TiGe bileşikleri için TDOS ve PDOS spin_up.



Şekil 4.5: a) Co₂FeGe, b) Co₂ScGe, c) Co₂TiGe bileşikleri için TDOS ve PDOS spin_down.



Şekil 4.5 (Devam): a) Co_2FeGe , b) Co_2ScGe , c) Co_2TiGe bileşikleri için TDOS ve PDOS spin_down.

4.3 Elastik Veriler

Bileşiklerin Tablo 4.3'de sunulan, hesaplanan elastik sabitlerine göre sıfır basınçta : $C_{11}>0$, $C_{12}>0$, $C_{44}>0$, $C_{11}+2C_{12}>0$ $C_{11}-C_{12}>0$ kararlılık kriterlerine [87] uyduğu görülmektedir. Ancak basınç arttıkça Co_2FeGe 5 GPa'dan sonra kararsız hale gelmektedir. Diğer iki bileşik ise artan basınç ile 20 GPa'a kadar kararlılığını korumuştur.

Malzemelerin sünek veya gevrek karakterde olup olmadığına karar verilirken kullanılan kriterlerden birisi de $C_{12}-C_{44}$ Cauchy basıncıdır. Pettifor [88] ve Johnson [89], sünek/gevrek özelliğini tespit etmek için malzemelerdeki atomik bağların açısallık karakterinin dikkate alınması gerektiğini öne sürmüşlerdir. Bunun için $C_{12}-C_{44}$ sonuçları değerlendirilebilir. Metalik bağlanma için $C_{12}-C_{44}>0$, açısallık karaktere sahip bir bağlanma için $C_{12}-C_{44}<0$ dir. Öte yandan, sünek malzemelerde $C_{12}-C_{44}>0$, gevreklerde ise $C_{12}-C_{44}<0$ dir. Burada, $C_{12}-C_{44}$ değerlerinin hepsi pozitifdir. Dolayısıyla, Co_2YGe ($\text{Y}=\text{Fe}, \text{Sc}, \text{Ti}$) sünektir.

Tablo 4.3 : Co₂YGe(Y=Fe,Sc,Ti) bileşiklerinin 0 GPa basınçta elastik sabitleri (C_{ij} (GPa)) ve Cauchy basıncı ($C_{12}-C_{44}$ (GPa)) değerleri.

Bileşik	Kaynak	P (GPa)	C_{11}	C_{12}	C_{44}	$C_{12}-C_{44}$
Co ₂ FeGe	Bu çalışma	0	198,153	187,148	102,445	84,703
		4	205,624	200,284	110,215	90,069
		5	206,152	202,503	112,245	90,258
Co ₂ ScGe	Bu çalışma	0	234,259	121,312	90,0419	31,270
		5	254,647	135,331	99,9213	35,409
		15	289,050	166,119	118,228	47,891
		20	301,987	181,255	126,657	54,598
Co ₂ TiGe	Bu çalışma	0	217,275	170,111	82,717	87,394
		5	241,855	196,567	103,896	92,671
		15	282,755	213,951	130,601	83,350
		20	294,589	231,708	137,352	94,356

Voigt-Reuss-Hill (VRH) yaklaşımı [90-92] ile hesaplanan makaslama modülü G ve bulk modülü B Tablo 4.4 de verilmiştir. Tabloya bakıldığında B/G oranının 1,75 den yüksek olduğu görülür. Dolayısıyla, Co₂YGe(Y=Fe,Sc,Ti) tüm basınç değerlerinde sünek davranış sergiler. Sıfır basınçta en sünek olan malzeme Co₂FeGe dir.

Tablo 4.4: Co₂YGe(Y=Fe,Sc,Ti) için basınç altında G ve B/G oranı değerleri.

Bileşik	Kaynak	P (GPa)	B (GPa)	G (GPa)	B/G
Co ₂ FeGe	Bu çalışma	0	190,816	38,199	4,995
		4	202,064	36,819	5,488
		5	203,719	36,265	5,618
Co ₂ ScGe	Bu çalışma	0	158,961	74,680	2,129
		5	175,103	81,248	2,155
		15	207,096	90,929	2,278
		20	221,499	94,071	2,355
Co ₂ TiGe	Bu çalışma	0	185,832	50,179	3,703
		5	211,663	57,029	3,712
		15	236,886	76,884	3,081
		20	252,668	76,749	3,292

Co_2YGe (Y=Fe,Sc,Ti) için hesaplanan diğer bir elastik parametre Young modülü E dir (bk. Tablo 4.5). E katılarda sertliğin ölçüsüdür. En sert malzeme 20 GPa basınç altındaki Co_2ScGe dur.

Poisson oranı ν bir bileşiğin bağ yapısının kovalent ya da metalik olduğunu belirlemek için kullanılan iyi bir göstergedir. Kovalent malzemelerde daha çok yaklaşık 0,2, metaliklerde yaklaşık 0,4 değerindedir [93]. Diğer bir kritere göre metallerde $\nu=0,33$ olur [94]. Bu nedenle burada tüm bileşiklerin metalik karakter taşıdığını söyleyebiliriz. ν , 0,26 kritik değerine sahiptir. Bu değer malzemenin gevrek ya da sünek olduğu hakkında bilgi verir [75,95]. Eğer $\nu>0,26$ ise sünek, $\nu<0,26$ ise gevrek malzemenin bahsederiz. Bu bakış açısına göre incelenen tüm malzemeler sünektir. Ayrıca, tüm ν değerleri 0,25-0,5 aralığında olduğu için atomlar arasındaki kuvvetlerin merkezi olduğu sonucuna varılır [96].

Zener anizotropi faktörü A^Z de Tablo 4.5 de listelenmektedir. A^Z birden farklıysa anizotropinin derecesini göstermektedir. Burada da Co_2FeGe için bu değer çok yüksektir. Bu nedenle Co_2FeGe en anizotropik bileşiktir.

Tablo 4.5: Co_2YGe (Y=Fe,Sc,Ti) için basınç altında E , ν , A^Z değerleri.

Bileşik	Kaynak	$P(\text{GPa})$	$E(\text{GPa})$	ν	A^Z
Co_2FeGe	Bu çalışma	0	107,429	0,406	18,618
		4	104,132	0,414	41,279
		5	102,700	0,416	61,521
Co_2ScGe	Bu çalışma	0	193,706	0,297	1,594
		5	211,095	0,299	1,675
		15	237,961	0,308	1,923
		20	247,215	0,314	2,098
Co_2TiGe	Bu çalışma	0	138,107	0,376	3,508
		5	156,988	0,376	4,588
		15	208,135	0,354	3,796
		20	209,078	0,362	4,369

Co_2YGe (Y=Fe,Sc,Ti) için izotropik ses hızları ve Debye sıcaklığı Tablo 4.6'da sunulmuştur. Sıfır basınçta maksimum hız ve Debye sıcaklığı Co_2ScGe için bulunmuştur.

Tablo 4.6 : Co₂YGe(Y=Fe,Sc,Ti) için enine (v_t), boyuna (v_l) ve ortalama(v_m) izotropik ses hızları ve Debye sıcaklığı (θ_D).

Bileşik	Kaynak	$P(GPa)$	$v_t(m/s)$	$v_l(m/s)$	$v_m(m/s)$	$\theta_D(K)$
Co ₂ FeGe	Bu çalışma	0	2098,851	5280,039	2377,948	311,026
		4	2038,557	5324,252	2312,135	304,593
		5	2018,057	5320,497	2289,463	302,115
Co ₂ ScGe	Bu çalışma	0	3182,941	5922,234	3553,884	447,022
		5	3269,311	6106,265	3651,321	464,009
		15	3371,145	6405,965	3769,573	487,287
		20	3391,667	6513,350	3795,201	494,183
Co ₂ TiGe	Bu çalışma	0	2517,900	5650,829	2840,990	364,431
		5	2649,225	5950,344	2989,268	386,826
		15	3007,723	6319,379	3383,248	444,411
		20	2975,901	6400,241	3351,324	443,091

4.3.1 Ses Hızlarının Anizotropisi

[100], [110] ve [111] yönlerinde yayılan boyuna v_l ve enine v_t hız değerleri Tablo 4.7 de verilmiştir. Tablo 4.7 incelendiğinde boyuna hız değerlerinin v_l [100]→[110]→ [111] yönünde artmakta olduğu görülmektedir. v_l ve v_{t1} , v_{t2} değerleri bu yayılım yönlerinde birbirinden oldukça farklıdır. Bu, Co₂YGe(Y=Fe,Sc,Ti) bileşiklerindeki elastik anizotropinin diğer bir göstergesidir.

Tablo 4.7 Anizotropik ses hızlarının v (m/s) P (GPa) altındaki davranışı.

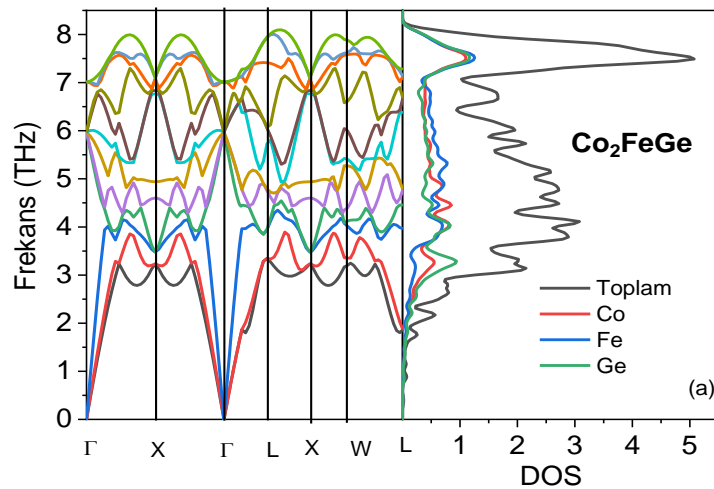
Bileşik	P	$v_l^{[100]}$	$v_{t1=t2}^{[100]}$ $= v_{t1}^{[110]}$	$v_l^{[110]}$	$v_{t2}^{[110]}$	$v_l^{[111]}$	$v_{t1=t2}^{[111]}$
Co ₂ FeGe	0	4780,309	3437,170	5833,604	796,592	6144,710	2088,321
	4	4817,523	3527,014	5945,334	548,962	6276,396	2085,070
	5	4811,532	3550,366	5962,469	452,649	6299,559	2082,857
Co ₂ ScGe	0	5637,345	3495,013	6027,733	2767,890	6152,359	3029,716
	5	5787,876	3625,593	6228,664	2801,459	6368,818	3100,606
	15	6010,529	3844,027	6574,255	2771,673	6751,712	3169,694
	20	6076,864	3935,501	6710,784	2716,950	6909,178	3175,521

Tablo 4.7 (devam)

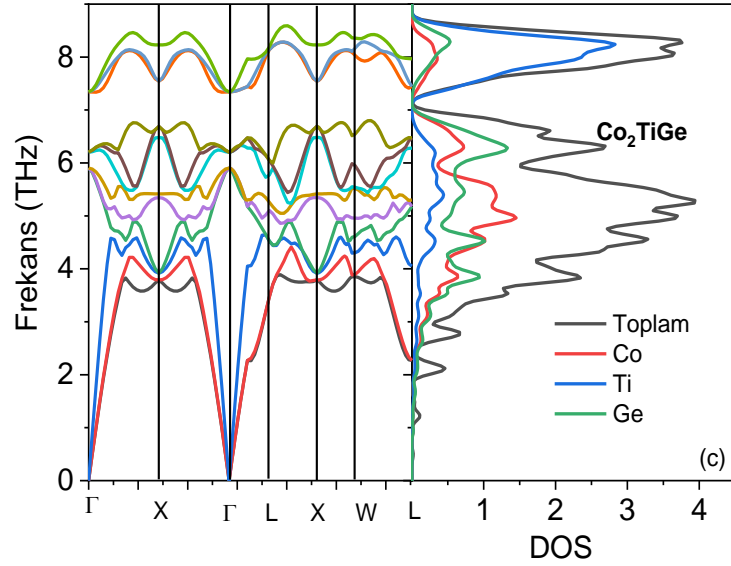
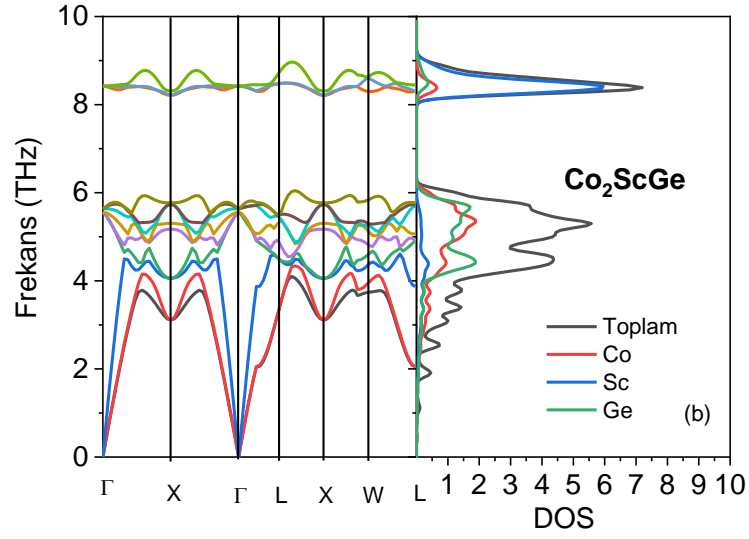
Bileşik	P	$\nu_l^{[100]}$	$\nu_{t1=t2}^{[100]} = \nu_{t1}^{[110]}$	$\nu_l^{[110]}$	$\nu_{t2}^{[110]}$	$\nu_l^{[111]}$	$\nu_{t1=t2}^{[111]}$
Co ₂ TiGe	0	5239,410	3232,771	5909,549	1726,107	6116,635	2338,782
	5	5455,674	3575,776	6305,857	1669,350	6564,829	2473,839
	15	5767,996	3920,063	6677,487	2011,924	6954,268	2796,580
	20	5830,294	3981,069	6798,040	1904,701	7091,334	2775,169

4.4 Co₂YGe (Y=Fe, Sc, Ti) Bileşiklerinin Titreşimsel Özellikleri

L₂₁ fazındaki Co₂YGe(Y=Fe, Sc, Ge) bileşikleri için hesaplanan fonon dağılım eğrileri Şekil 4.6 da gösterilmiştir. Bileşiklerin ilkel hücresi dört atom içerdiğinden bunların her birine karşılık gelen titreşim modu on iki tanedir. Bunlardan üçü akustik dal, diğer dokuz tanesi de optik daldır. Brillouin bölgesi boyunca negatif fonon moduna rastlanmamıştır. Elde edilen bu sonuç L₂₁ fazındaki Co₂YGe(Y=Fe, Sc, Ge) bileşiklerinin dinamik kararlılığını ispatlar. DOS grafikleri incelendiğinde, yüksek frekans değerlerinde daha hafif atomlar Fe, Sc ve Ti'nin, düşük frekanslarda ise Ge'un daha etkin olduğu açıktır. Optik dalların en üst frekanslarına en çok Fe, Sc ve Ti katkı yapmaktadır. Çünkü bu atomlar diğer iki atomdan daha hafiftir. Co₂ScGe ve Co₂TiGe için çizilen grafiklerde optik ve akustik dallar arasında boşluk bulunmaktadır. Ayrıca, optik dallar Γ noktasında üç katlı dejeneredir.



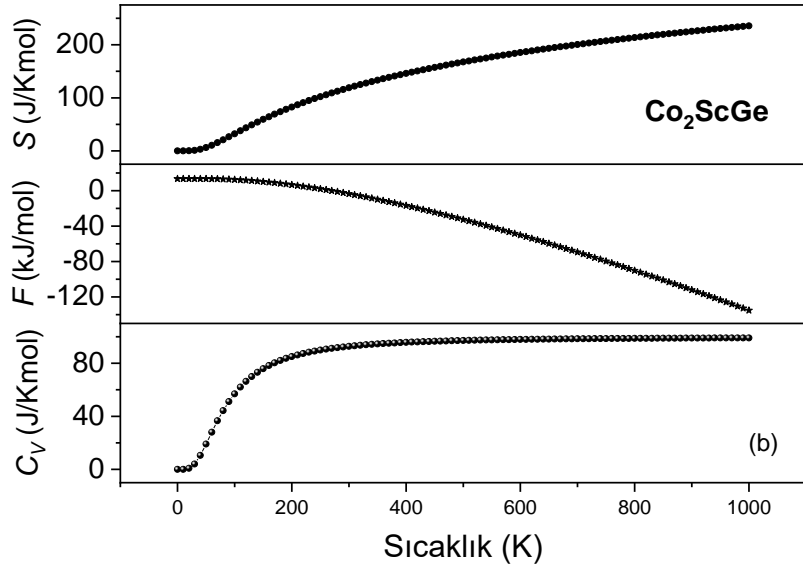
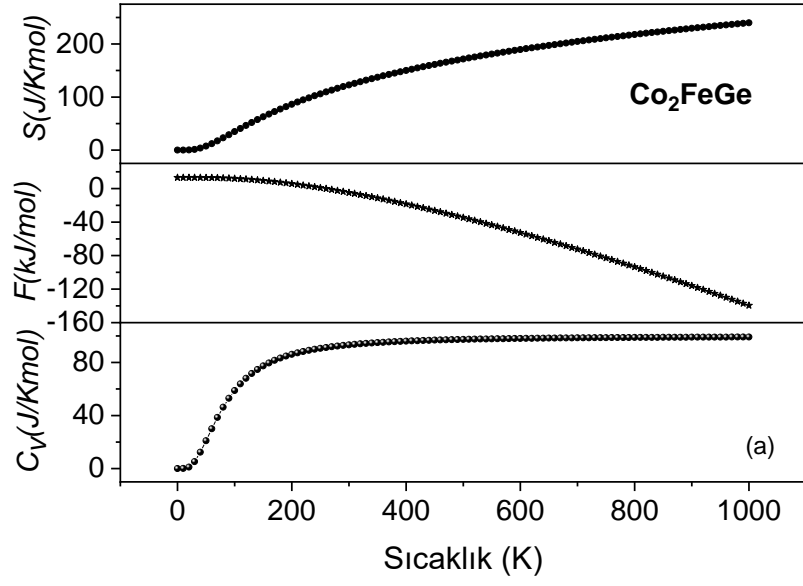
Şekil 4.6: a) Co₂FeGe, b) Co₂ScGe, c) Co₂TiGe bileşikleri için fonon dağılım eğrileri ve fonon DOS.



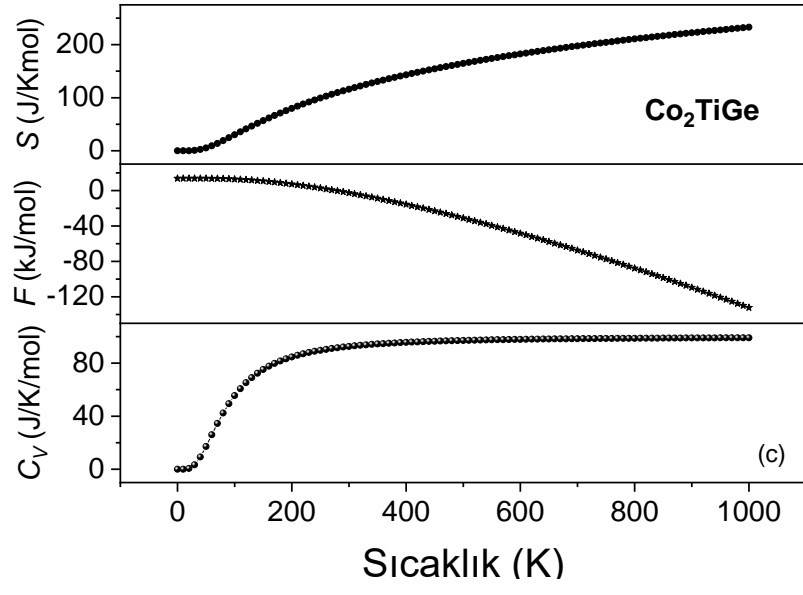
Şekil 4.6(Devam) : a) Co_2FeGe , b) Co_2ScGe , c) Co_2TiGe bileşikleri için fonon dağılım eğrileri ve fonon DOS.

4.5 Termodinamik Veriler

Co_2YGe ($\text{Y}=\text{Fe}, \text{Sc}, \text{Ge}$) bileşikleri için sabit hacimdeki ısı kapasitesi C_v , entropi S ve serbest enerji F 'nin sıcaklığa bağlı değişimi Şekil 4.7'de görülmektedir. Düşük sıcaklıklarda ısı kapasitesi artmış, artan sıcaklıkla Dulong-Petit sınırına ulaşmıştır. S sıcaklıkla yükselmektedir. Bunun nedeni sıcaklıkla birlikte fonon titreşimlerinin artmasıdır. S 'nin artması F 'nin düşmesine neden olmuştur.



Şekil 4.7 : a) Co_2FeGe , b) Co_2ScGe , c) Co_2TiGe bileşikleri için termodinamik parametreler.



Şekil 4.7 (Devam): a) Co_2FeGe , b) Co_2ScGe , c) Co_2TiGe bileşikleri için termodinamik parametreler.

5. SONUÇLAR

Bu çalışmada, Co_2YGe ($\text{Y}=\text{Fe}, \text{Sc}, \text{Ge}$) bileşiklerinin yapısal, elektronik, elastik, fonon ve termodinamik özellikleri ab initio hesaplama yöntemleri ile ele alınmıştır. Hesaplamalar için VASP [38, 61-63] kodu kullanılmıştır.

Örgü sabitleri deneysel ve diğer teorik verilerle uyumludur. Bulk modülü de diğer teorik sonuçlara oldukça yakındır. Bileşiklerin bant yapıları daha önceki başka çalışmalarda bulunan elektronik verilerle uyumludur. Spin_up grafiklerinde bant aralığı bulunmamaktadır. Sadece Co_2TiGe un spin_down grafiğinde bant aralığı vardır. Bu nedenle bu bileşik yarı-metalik ferromanyetik özelliktedir. Diğerleri ise metaliktir.

İncelenen bileşikler için anizotropi faktörü, makaslama modülü, Young modülü, Poisson oranı, v.s gibi elastik parametreler ulaşılabilen literatür bilgisine göre ilk defa bu çalışmada hesaplanmıştır. Bileşiklerin hepsi mekaniksel kararlı ve sünektir. Ancak Co_2FeGe basınç altında çok çabuk kararsız hale gelmektedir. Co_2ScGe ve Co_2TiGe basınç altında 20 GP basınca kadar kararlıdır.

Bileşiklerin fonon frekasları PHONOPY [39] ile hesaplanarak sunulmuştur. Fonon dağılım eğrilerinde negatif mod bulunmadığından tümünün dinamiksel kararlı olduğu kararlaştırılmıştır. Ayrıca termodinamik veri hesabında da PHONOPY [39] programı kullanılmıştır. Isı kapasitesi 100 J/Kmol civarında Dulong-Petit limite yaklaşmış, entropi de sıcaklığa bağlı olarak artmıştır. Serbest enerji ise sıcaklıkla azalmaktadır.

Sonuç olarak, Co_2YGe ($\text{Y}=\text{Fe}, \text{Sc}, \text{Ge}$) bileşiklerinin basınç altında incelenmesi ileride yapılacak yeni malzeme sentezleri ve cihaz tasarımı için bir temel bilgi sağlayacaktır. Çünkü yüksek basınç temel özellikleri oldukça etkilemektedir. Malzemelerin sünek olması ısı şoklara dayanıklı oldukları sonucunu ortaya koymaktadır. Basınç altında da malzemeler sünektir. Anizotropi malzeme üretiminde mikro çatlak oluşumunun kontrolü için oldukça önemli bir ölçüttür. Burada sunulan anizotropik veriler bu konuda yapılacak çalışmalara ışık tutacaktır.

6. KAYNAKLAR

- [1] F. Heusler, W. Starck, and E. Haupt, ‘‘Magnetic-chemical studies, Heusler allays’’, *Verh. Dtsch. Phys. Ges.*, 5, 219-23, (1903).
- [2] X. L. Yuan, M. Xue, A. W. Chen, and T. Q. An, ‘‘First-principles study of structural, elastic, electronic, magnetic and thermo properties of Ni₂ZrX (X=Sn,Sb) Heusler alloys under pressure’’, *Comput. Mater. Sc.*, 82, 76, (2014).
- [3] S. Amari, R. Mebsout, S. Mécabih, B. Abbar, and B. Bouhafs, ‘‘First-principles study of magnetic, elastic, and thermal properties of full Heusler Co₂MnSi’’, *Intermetallics*, 44, 26, (2014).
- [4] A. Ślebarski, E. Talik, G. Chekowska, and A. Jezierski, ‘‘Electrical resistivity xPdxTiSn Heusler-type alloys’’, *J. Alloys Compd.*, 287, 45, (1999).
- [5] T. Kanomata, T. Sasaki, H. Nishihara, H. Yoshida, T. Kaneko, et al., ‘‘Magnetic properties of ferromagnetic Heusler alloy Co₂ZrAl’’, *J. Alloys Compd.*, 393, 26, (2005).
- [6] S. K. Ren, Y. X. Wang, Y. J. Zhang, G. B. Ji, F. M. Zhang, et al., ‘‘Magnetic behavior of half Heusler alloy CuNiMnSb’’, *J. Alloys Compd.*, 387, 32, (2005).
- [7] X. Dai, G. Liu, L. Chen, J. Chen, and G. Wu, ‘‘Mn₂CoSb compound: structural, electronic, transport and magnetic properties’’, *Solid State Commun.*, 140, 533, (2006).
- [8] O. Heusler, ‘‘Kristallstruktur und Ferromagnetismus der Mangan - Alüminyum - Kupferlegierungen’’, *Ann. Phys.*, 19, 155-201, (1934).
- [9] A. J. Bradley and J. W. Rodgers, ‘‘The crystal structure of the Heusler alloys’’, *Proc. Roy. Soc. A.*, 144, 340-59, (1934).
- [10] C. Felser, G. H. Fecher, and B. Balke, ‘‘A Challenge for Materials Science and Solid-State Chemistry, Spintronics’’, *Angew. Chem. Int. Ed.*, 46,668, (2007).
- [11] J. Winterlik, G. H. Fecher, and C. Felser, ‘‘Pressure and temperature dependent study of heusler alloys Cu₂MGa(M=Cr and V)’’, *Solid State Commun.*, 145, 475, (2008).
- [12] Y. Nishino, M. Kato, S. Asano, K. Soda, M. Hayasaki, and U. Mizutani, ‘‘Semiconductor like behavoir of electrical resistivity in Heusler-type Fe₂ VAl compound’’, *Phys. Rev. Lett.*, 79, 1909-12, (1997).

- [13] K. Endo, H. Matsuda, K. M. Ooiwa, Iijima, K. Ito, T. Goto, et al. ‘‘Anomalous giant magnetoresistance in Heusler-type alloys $\text{Fe}_{2+x}\text{V}_{1-x}\text{Ga}$ ’’, *J. Phys. Soc. Jpn.*, 66, 1257, (1997).
- [14] N. Kawamiya, Y. Nishino, M. Matsuo, and S. Asano, ‘‘Electrical-resistance maximum near the Curie point in $(\text{Fe}_{1-x}\text{V}_x)_3\text{Ga}(\text{Fe}_{1-x}\text{Ti}_x)_3\text{Ga}$ ’’, *Phys. Rev. B.*, 44, 12406, (1991).
- [15] T. Krenke, E. Duman, M. Acet, E. F. Wassermann, X. Moya, L. Manosa, and A. Planes, ‘‘Magnetic superelasticity and inverse magnetocaloric effect in Ni-Mn-In’’, *Phys. Rev. B.*, 75, 104414, (2007).
- [16] F. Ricci, S. Picozzi, A. Continenza, F. D’Orazio, F. Lucari, K. Westerholt, M. Kim, and A. J. Freeman, ‘‘Optical and magneto-optical properties of ferromagnetic full-Heusler films: Experiments and first-principles calculations’’, *Phys. Rev. B.*, 76, 014425, (2007).
- [17] A. Planes, L. Mañosa, and M. Acet, ‘‘Magnetocaloric effect and its relation to shape-memory properties in ferromagnetic Heusler alloys’’, *J. Phys. Condens. Matter* 21, 23, (2009).
- [18] L. Galdun, T. Ryba, V. M. Prida, and V. Zhukova, ‘‘Monocrystalline Heusler Co_2FeSi alloy glass-coated microwires: Fabrication and magneto-structural characterization’’, *J. Magn. Magn. Mater.*, 453, 96-100, (2018).
- [19] A. Candan, G. Uğur, Z. Charifi, H. Baaziz, and M.R. Ellialtıođlu, ‘‘Electronic structure and vibrational properties in cobalt-based full-Heusler compounds: A first principle study of Co_2MnX ($X = \text{Si}, \text{Ge}, \text{Al}, \text{Ga}$)’’, *J. of Alloys Compd.*, 560 215–222, (2013).
- [20] V. Sharma, A.K. Solanki, and A. Kashyap ‘‘Electronic, magnetic and transport properties of Co_2TiZ ($Z = \text{Si}, \text{Ge}$ and Sn): A first-principle study’’, *J. Magn. Magn. Mater.*, 322, 2922–2928, (2010).
- [21] M. Gilleßen and R. Dronskowski, ‘‘Combinatorial study of inverse Heusler alloys by first-principles computational methods’’, *J. Comput. Chem.*, 30, 1290-1299, (2009).
- [22] Y. Kurtulus and R. Dronskowski, ‘‘Electronic structure and magnetic exchange coupling in ferromagnetic full Heusler alloys’’, *Phys. Rev. B.*, 71, 014425-12, (2005).
- [23] S. Picozzi, A. Continenza, and A.J. Freeman, ‘‘ Co_2MnX ($X = \text{Si}, \text{Ge}, \text{Sn}$) Heusler compounds: An ab initio study of their structural, electronic, and magnetic properties at zero and elevated pressure’’, *Phys. Rev. B.*, 66, 094421-1–094421-9, (2002).

- [24] H. C. Kandpal, G. H. Fecher, and C. Felser, "Calculated electronic and magnetic properties of the half-metallic, transition metal based Heusler compounds", *J. Phys. D., Appl. Phys.*, 40, 1507–1523, (2007).
- [25] D. P. Rai and R. K. Thapa, "Electronic structure and magnetic properties of X_2YZ ($X= Co, Y=Mn, Z=Ge, Sn$) type Heusler compounds: a first principle study", *Phase Transit.*, 1–11, (2012).
- [26] D. P. Rai, A. Shankar, Sandeep, Rosangliana, and R. K. Thapa, "Study of the structural properties of Co_2YGe ($Y=Sc, Ti, V, Cr, Mn, Fe$) Generalized Gradient Approximation method", *Sci. Vis.*, 12 (2), 74-78, (2012).
- [27] M. V. Uvarov, Y. V. Kudryavtsev, A. F. Kravets, Ya, A. Vovk, R. P. Borges, M. Godinho, and V. Korenivski, "Electronic structure, optical and magnetic properties of Co_2FeGe Heusler alloy films", *J. Appl. Phys.*, 112, 063909, (2012).
- [28] H. Jung-Min and K. Miyoung, "The half-metallicity of Co_2FeGe full heusler alloy in (001) thin film: first principles study", *J. Korean Phys. Soc.*, 72, 276-282, (2018).
- [29] J. A. Logan, T. L. Brown-Heft, S. D. Harrington, N. S. Wilson, A. P. Mcfadden, A. D. Rice, M. Pendharkar, and C. J. Palmstrom, "Growth, structural, and magnetic properties of single-crystal full-Heusler Co_2TiGe thin films", *J. Appl. Phys.*, 121, 213903, (2017).
- [30] E. I. Shereder, A.A. Makhnev, A.V. Lukoyanov, and K.G. Suresh, "Optical properties and the electronic structure of Co_2TiGe and Co_2TiSn Heusler alloys", *Phys. Met. Metallogr.*, 118, 965-969, (2017).
- [31] D. P. Rai and R. K. Thapa, "An Ab initio Study of the Half-metallic Properties of Co_2TGe ($T=Sc, Ti, V, Cr, Mn, Fe$): LSDA+U Method", *J. Korean Phys. Soc.*, 62, 11, 1652-1660, (2013).
- [32] D. P. Rai, A. Shankar, Sandeep, N. Devi, and L. R. Singh, "Study of Half-metallic Properties of Co_2YGe ($Y = Sc, Ti, V, Cr, Mn, Fe$): A Density Functional Theory", *J. Phys. Sci.*, 25(1), 45–57, (2014).
- [33] S. Mitra, A. Ahmad, S. Chakrabarti, S. Biswas, and A. Kumar Das, "Investigation on structural, electronic and magnetic properties of Co_2FeGe Heusler alloy: experiment and theory", <https://www.researchgate.net/publication/344757276>, (2020).
- [34] K. R. Kumar, K. K. Bharathi, J. A. Chelvane, S. Venkatesh, G. Markandeyulu, and N. Harishkumar, "First-Principles Calculation and Experimental Investigations on Full-Heusler Alloy Co_2FeGe ", *IEEE Trans. Mag.*, 45. 10, (2009).

- [35] J. Barth, G. H. Fecher, B. Balke, T. Graf, A. Shkabko, A. Weidenkaff, P. Klaer, M. Kallmayer, H. J. Elmers, H. Yoshikawa, S. Ueda, K. Kobayayashi, and C. Felser, “Anomalous transport properties of the half-metallic ferromagnets Co_2TiSi , Co_2TiGe and Co_2TiSn ”, *Phil. Trans. R. Soc. A.*, 369, 3588–3601, (2011).
- [36] S. Amari, F. Dahmane, S. Bin Omran, B. Doumi, et al., “Theoretical investigation of the structural, magnetic and band structure characteristics of $\text{Co}_2\text{FeGe}_{1-x}\text{Si}_x$ ($x = 0, 0.5, 1$) full-Heusler alloys”, *J. Korean Phys. Soc.*, 69 (9), 1462-1468, (2016).
- [37] P. J. Webster and K. Ziebeck, “Magnetic and chemical order in Heusler alloys containing cobalt and titanium”, *J. Phys. Chem. Solids*, 34, 1647–1654, (1983).
- [38] G. Kresse, M. Marsman, and J. Furthmüller, “VASP the GUIDE”, <http://cms.mpi.univie.ac.at/vasp/vasp.pdf>, (2018).
- [39] A. Togo and I. Tanaka, “First principles phonon calculations in materials science”, *Scr. Mater.*, 108, 1–5, (2015).
- [40] L. H. Thomas, “The calculation of atomic fields”, *Math. Proc. Cambridge Philos Soc.*, 23(5), 542–8, (1927).
- [41] E. Fermi, “Zur Quantelung des idealen einatomigen Gases”, *Zeitschrift für Phys.*, 36(11–12), 902–12, (1926).
- [42] N. Argaman and G. Makov, “Density of functional theory: an introduction”, *Am. J. Phys.*, 68, 69, (2000).
- [43] R.G. Parr and W. Yang, “Density Functional Theory of Atoms and Molecules”, *New York, Oxford Univ.*, 333, (1989).
- [44] P. Hohenberg and W. Kahn, “Inhomogeneous electron gas”, *Phys. Rev.B.*, 136, 864, (1964).
- [45] W. Kohn and L. J. Sham, “Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects”, *Phys. Rev. B.*, 140(4A), A1133–8, (1965).
- [46] P. A. M. Dirac, “Note on Exchange Phenomena in the Thomas Atom”, *Math. Proc. Cambridge Philos Soc.*, 26(3), 376, (1930).
- [47] J. Hubbard, Soc. Proc. R., “The description of collective motion interms of many-body perturbation theory”, *London Ser. A.*, 243, 336, (1957).
- [48] D. Pines and P. Nozieres, “The teory of quantum liquids”, *Benjamin, Reading, Mass*, (1966).
- [49] D. M. Ceperley and B. J. Alder, “Ground state of the electron gas by a stochastic model”, *Phys. Rev. Lett.*, 45(7), 566–9, (1980).

- [50] J. P. Perdew, J. A. Chevary, S. H. Vosko, K. A. Jackson, M. R. Pederson, D. J. Singh, et al. "Atoms, molecules, solids, and surfaces: Applications of the generalized gradient approximation for exchange and correlation", *Phys. Rev. B.*, 46, 6671–87, (1992).
- [51] Y. Wang and J. P. Perdew, "Correlation hole of the spin-polarized electron gas, with exact small-wave-vector and high-density scaling", *Phys. Rev. B.*, 44(24), 13298–307, (1991).
- [52] J. P. Perdew, "Density-functional approximation for the correlation energy of the inhomogeneous electron gas", *Phys. Rev. B.*, 33(12), 8822–4, (1986).
- [53] D. C. Langreth and M. J. Mehl, "Beyond the local-density approximation in calculations of ground-state electronic properties", *Phys. Rev. B.*, 28(4), 1809–3, (1983).
- [54] D. C. Langreth and M. J. Mehl, "Easily Implementable Nonlocal Exchange-Correlation Energy Functional", *Phys. Rev. Lett.*, 47(6), 446–50, (1981).
- [55] J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, "Generalized Gradient Approximation Made Simple", *Phys. Rev. Lett.*, 77(18), 3865–8, (1996).
- [56] P. Sabatier, "Annales de la faculté des sciences de Toulouse: Mathématiques", C. 17, 1-22, <https://eudml.org/doc/72891>.
- [57] B. Hammer, L. B. Hansen, and J. K. Nørskov, "Improved adsorption energetics within density-functional theory using revised Perdew-Burke-Ernzerhof functionals", *Phys. Rev. B.*, 59(11), 7413–21, (1999).
- [58] P. E. Blöchl, J. Kästner, and C. J. Först, "*Electronic Structure Methods: Augmented Waves, Pseudopotentials and The Projector Augmented Wave Method*", Handbook of Materials Modeling, 93-119 Springer, Dordrecht, (2005).
- [59] P. E. Blöchl, "Projector augmented-wave method", *Phys. Rev. B*, 50 (24), 17953–79, (1994).
- [60] D. Vanderbilt, "Soft self-consistent pseudopotentials in a generalized eigenvalue formalism", *Phys. Rev. B.*, *American Physical Society*, 41 (11), 7892–7895, (1990).
- [61] G. Kresse and J. Hafner, "Norm-conserving and ultrasoft pseudopotentials for first-row and transition elements", *J. Phys. Condens. Mat.*, 6 8245, (1994).
- [62] O. K. Andersen, "Linear methods in band theory", *Phys. Rev. B.*, 12 3060, (1975).
- [63] G. Kresse and J. Hafner, "Ab initio molecular dynamics for liquid metals", *Phys. Rev. B.*, 47(1), 558–61, (1993).

- [64] G. Kresse and J. Furthmüller, “Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set”, *Phys. Rev. B.*, 54(16), 11169–86, (1996).
- [65] G. Kresse and D. Joubert, “From ultrasoft pseudopotentials to the projector augmented-wave method”, *Phys. Rev. B.*, 59(3), 1758–75, (1999).
- [66] H. J. Monkhorst and J. D. Pack, “Special points for Brillouin-zone integrations”, *Phys. Rev. B*, 13(12), 5188–92, (1976).
- [67] F. D. Murnaghan, “The Compressibility of Media under Extreme Pressures”, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* 30 244 (1944).
- [68] J. R. Hook, R. John, H. E. Hall, and E. Henry, “*Solid state physics*”, John Wiley & Sons, 474 , (2010).
- [69] L. Fred and J. Terry, “Density of States Derivation”, http://web.eecs.umich.edu/~fredty/public_html/EECS320_SP12/Index.html, (2012).
- [70] P. Lazar, “Ab initio modelling of mechanical and elastic properties of solids” PhD thesis, University of Vienna, p. 157, (2006).
- [71] J. Pokluda, M. Černý, M. Šob, and Y. Umeno, "Ab initio calculations of mechanical properties: Methods and applications", *Prog. Mater. Sci.*, 73,127–58, (2015).
- [72] F. Mouhat and F. X. Coudert, “Necessary and sufficient elastic stability conditions in various crystal systems”. *Phys. Rev. B.*, 90, 224104, (2014).
- [73] B. Mayer, H. Anton, E. Bott, M. Methfessel, J. Sticht, J. Harris, et al., “Ab-initio calculation of the elastic constants and thermal expansion coefficients of Laves phases”, *Intermetallics*, 11(1), 23–32, (2003).
- [74] Y. Le Page and P. Saxe, “Symmetry-general least-squares extraction of elastic data for strained materials from ab initio calculations of stress”, *Phys. Rev. B*, 65(10), 104104, (2002).
- [75] I. N. Frantsevich, F. F. Voronov, and S. A. Bokuta, “Elastic constants and elastic moduli of metals and insulators handbook”, Kiev, 60–180, (1983).
- [76] J. B. Levine, S. H. Tolbert, and R. B. Kaner, “Advancements in the Search for Superhard Ultra-Incompressible Metal Borides”, *Adv. Funct. Mater.*, 19(22), 3519–33, (2009).
- [77] W. H. Wang, “The elastic properties, elastic models and elastic perspectives of metallic glasses”, *Prog. Mater. Sci.*, 57(3), 487–656, (2012).
- [78] S. Q. Wang, H. Q. Ye, “First-principles study on elastic properties and phase stability of III–V compounds”, *Phys. Status solidi*, 240(1), 45–54, (2003).

- [79] J. R. Christman, ‘‘*Fundamentals of solid state physics*’’, New York: Wiley, 518, (1988).
- [80] I. Johnston, G. Keeler, R. Rollins, and S. Spicklemire, ‘‘*Solid state physics simulations : Consortium for Upper Level Physics Software*’’, Wiley, 173, (1996).
- [81] O. L. Anderson, ‘‘A simplified method for calculating the debye temperature from elastic constants’’, *J. Phys. Chem. Solids*, 24(7), 909–17, (1963).
- [82] E. Schreiber, O. L. Anderson, and N. Soga, ‘‘*Elastic Constants and Their Measurements*’’, New York: McGraw-Hill, 196, (1974).
- [83] M. Levy, H. E. Bass, R. R. Stern, ‘‘*Handbook of elastic properties of solids, liquids, and gases*’’, vol. II. , Academic Press, San Diego, (2001).
- [84] A. Togo, F. Oba, and I. Tanaka, ‘‘First-principles calculations of the ferroelastic transition between rutile-type and CaCl_2 -type SiO_2 at high pressures’’, *Phys. Rev. B - Condens. Matter.- Mater. Phys.*, 78 (13), (2008).
- [85] L. Chaput, A. Togo, I. Tanaka, and G. Hug, "Phonon-phonon interactions in transition metals", *Phys. Rev. B.*, 84(9), 94302, (2011).
- [86] M. T. Dove, ‘‘*Introduction to lattice dynamics*’’, Cambridge University Press, 258, (1993).
- [87] M. Born and K. Huang, ‘‘*Dynamical Theory of Crystal Lattices*’’, Oxford University Press, (1954).
- [88] D. G. Pettifor, ‘‘Theoretical predictions of structure and related properties of intermetallics’’, *Mater. Sci. Technol.*, 8, 345, (1992).
- [89] R. A. Johnson, ‘‘Analytic nearest-neighbor model for fcc metals’’, *Phys. Rev. B.*, 37, 3924, (1988).
- [90] W. Voigt, ‘‘*Lehrbuch der Kristallphysik*’’, Teubner, Leipzig, (1928).
- [91] A. Reuss, ‘‘Account of the liquid limit of mixed crystals on the basis of the plasticity condition for single crystal’’, *Z. Angew. Math. Mech.*, 9 49-58, (1929).
- [92] R. Hill, ‘‘The elastic behaviour of a crystalline aggregate’’, *Proc. Phys. Soc.*, 65.
- [93] S. Yu, Q. Zeng, A. R. Oganov, G. Frappere, and L. Zhanga, ‘‘Phase stability, chemical bonding and mechanical properties of titanium nitrides: a first-principles study’’, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 17 11763 (2015).
- [94] A. Savin, D. Flad, J. Flad, H. Preuss, H. Schnering, and G. Angew, ‘‘On the Bonding in Carbosilanes’’, *Chem. Int. Ed. Engl.*, 31, 185, (1992).

- [95] G. Vaitheeswaran, V. Kanchana, A. Svane, and A. Delin, "Elastic properties of MgCNi_3 —a superconducting perovskite", *J. Phys. Condens. Matter*, 19, 326214, (2007).
- [96] O. L. Anderson and H. H. Demarest, "Elastic constants of the central force model for cubic structures: Polycrystalline aggregates and instabilities", *J. Geophys. Res.*, 76, 1349, (1971).

ÖZGEÇMİŞ

Kişisel Bilgiler

Adı Soyadı :Halil ŞAHİN

Doğum tarihi ve yeri : 13/11/1984, Gördes

e-posta :halilsahin1184@gmail.com

Öğrenim Bilgileri

Derece	Okul/Program	Yıl
Y. Lisans	Balıkesir Üniversitesi/Fizik Bölümü	2021
Lisans	Gazi Üniversitesi/ Fizik Bölümü	2012
Lise	Demirci (YDS) Lisesi	2005