



**T.C.
AKSARAY ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

FİZİK ANABİLİM DALI

**LnAuSb (Ln=La, Ce, Pr) BİLEŞİKLERİNİN FİZİKSEL
ÖZELLİKLERİNİN TEORİK İNCELENMESİ**

YÜKSEK LİSANS TEZİ

Ayşegül KARADAĞ

DANIŞMAN

Doç. Dr. Havva ÖZİŞİK

AKSARAY, 2019

Aksaray Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü'nün 162310002 numaralı Yüksek Lisans öğrencisi, **Ayşegül KARADAĞ** tarafından hazırlanan "**LnAuSb (Ln=La, Ce, Pr) BİLEŞİKLERİNİN FİZİKSEL ÖZELLİKLERİNİN TEORİK İNCELENMESİ**" adlı tez çalışması aşağıdaki jüri tarafından OY BİRLİĞİ ile Fizik Anabilim Dalında YÜKSEK LİSANS TEZİ olarak kabul edilmiştir.

Danışman: Doç. Dr. Havva ÖZİŞİK

Aksaray Üniversitesi

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



Üye: Doç. Dr. Engin ATEŞER

Aksaray Üniversitesi

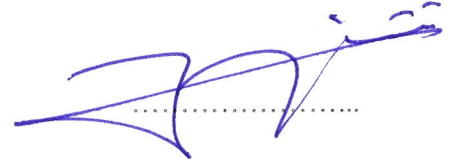
Bu tezin, kapsam ve kalite olarak Yüksek Lisans Tezi olduğunu onaylıyorum.



Üye: Doç. Dr. Gökhan SÜRÜCÜ

Kırşehir Ahi Evran Üniversitesi

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



Tez Savunma Tarihi: 20/06/2019

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

.....
Doç. Dr. Mehmet Ali HINIS
Fen Bilimleri Enstitüsü Müdürü

DOĞRULUK BEYANI

Yüksek lisans tezi olarak sunduğum bu çalışmayı, bilimsel etik, ahlak ve geleneklere aykırı düşecek bir yol ve yardıma başvurmaksızın yazdığımı, yararlandığım eserleri kaynakçada gösterilenlerden oluştuğunu ve bu eserleri her kullanışında alıntı yaparak yararlandığımı belirtir; bunu şerefimle doğrularım.

Enstitü tarafından belli bir zamana bağlı olmaksızın, tezimle yaptığım bu beyanda aykırı bir durumun saptanması durumunda ortaya çıkacak tüm ahlaki ve hukuki sonuçlara uyacağımı doğrularım.



Ayşegül KARADAĞ

TEŞEKKÜR

Bu çalışmanın hazırlanmasında ve yüksek lisans öğrenimim boyunca maddi ve manevi desteğini esirgemeyen; bilgi ve deneyimini sabırla benimle paylaşan ve çalışmalarımın daha verimli bir şekilde tamamlanmasında yardımcı olan çok değerli danışmanım Sayın Doç. Dr. Havva ÖZİŞİK hocama teşekkürü bir borç bilirim.

Çalışmalarımın her aşamasında benden bilgi ve yardımını esirgemeyen Sayın Doç. Dr. Hacı ÖZİŞİK hocama teşekkür ederim. Eğitim hayatım boyunca benden desteklerini esirgemeyen aileme, ablam Songül KARADAĞ'a ve arkadaşım Umur ÇÜRÜK'e sonsuz sevgi ve saygılarımı sunarım.

Bu araştırmada yer alan kısmi nümerik hesaplamalar TÜBİTAK ULAKBİM, Yüksek Başarım ve Grid Hesaplama Merkezi'nde (TRUBA kaynaklarında) gerçekleştirilmiştir.

Ayşegül KARADAĞ
AKSARAY, 2019

İÇİNDEKİLER

TEŞEKKÜR	i
İÇİNDEKİLER	ii
ÖZET.....	iii
ABSTRACT	iv
ŞEKİLLER DİZİNİ	v
ÇİZELGELER DİZİNİ	vi
SİMGELER VE KISALTMALAR	vii
1. GİRİŞ	1
2. YOĞUNLUK FONKSİYONEL TEORİSİ	3
2.1 Çok Cisim Problemi	3
2.2 Born-Oppenheimer Yaklaşımı	4
2.3 Dalga Fonksiyonu Yaklaşımları	4
2.3.1 Hartree yaklaşımı	4
2.3.2 Hartree-Fock yaklaşımı	5
2.4 Hohenberg-Khon Teoremi.....	6
2.5 Kohn-Sham Teoremi	6
2.6 Yerel Yoğunluk Yaklaşımı.....	7
2.7 Genelleştirilmiş Gradyent Yaklaşımı	7
3. TEMEL TEORİK BİLGİLER	9
3.1 Kristal Yapılar	9
3.1.1 Kristal örgü ve örgü öteleme vektörleri.....	10
3.2 Elastik Sabitleri	12
3.3 Bulk Modülü.....	14
3.4 Shear Modülü	15
3.5 Young Modülü	16
3.6 Poisson Oranı	16
3.7 Debye Sıcaklığı	18
3.8 Sertlik	18
3.9 B/G Oranı	19
3.10 Anizotropi Faktörü	19
4. MATERYAL-ARAÇLAR VE METOT.....	21
5. BULGULAR VE DEĞERLENDİRME	23
5.1 Yapısal Özellikler.....	23
5.2 Elektronik Özellikler	25
5.3 Mekanik Özellikler.....	30
5.3.1 Elastik sabitleri	30
5.3.2 Polikristal özellikler.....	31
5.3.3 Elastik anizotropi	33
5.3.4 Yönelime bağlı mekanik özellikler.....	33
5.4 Titreşimsel Özellikler	36
5.4.1 Fonon dağınımı ve fonon durum yoğunluğu	37
6. SONUÇLAR	41
KAYNAKLAR	42
ÖZGEÇMİŞ	47

YÜKSEK LİSANS TEZİ

LnAuSb (Ln=La, Ce, Pr) BİLEŞİKLERİNİN FİZİKSEL ÖZELLİKLERİNİN TEORİK İNCELENMESİ

Ayşegül KARADAĞ

Aksaray Üniversitesi
Fen Bilimleri Enstitüsü
Fizik Anabilim Dalı

Danışman: Doç. Dr. Havva ÖZİŞİK

ÖZET

Bu tez çalışmasında LaAuSb, CeAuSb ve PrAuSb bileşikleri kuramsal olarak incelenmiştir. Bu bileşiklerin hekzagonal yapıda (uzay grubu 194, $P6_3/mmc$) kristal oluşturduğu bilinmektedir. Bileşiklerin yapısal, elektronik ve titreşimsel özellikleri hesaplanarak, elde edilen sonuçlar mevcut deneysel verilerle karşılaştırıldı. Deneysel olarak elde edilmesi güç ve masraflı olan fiziksel özellikler de ortaya çıkartıldı. Hesaplanan elektronik band yapılarından bu bileşiklerin metalik karakter sergiledikleri belirlendi. Ayrıca yük yoğunlukları yorumlanarak bağ yapıları hakkında ayrıntılı bilgi verildi.

Bileşiklerin ikinci dereceden elastik sabitleri hesaplandı ve mekanik kararlılık şartlarını sağladıkları görüldü. Bu sabitler kullanılarak malzemelerin polikristal özellikleri (hacim, kesme, gerilme modülleri, Poisson oranı, Debye sıcaklığı, ortam ses hızları) ve yönelime bağlılıkları hakkında ayrıntılı inceleme yapıldı. Bu bileşiklerin genel olarak yumuşak ve esnek karakter sergiledikleri görüldü. Ayrıca, incelenen bileşiklerin fonon dağılımları ve fonon durum yoğunlukları, süper hücre ve yoğunluk fonksiyoneli pertürbasyon teorisi kullanılarak elde edildi. Malzemelerin titreşimsel olarak kararlı oldukları görüldü.

Anahtar Kelimeler: LaAuSb, CeAuSb, PrAuSb, Yapısal özellikler, Mekanik kararlılık, Titreşimsel özellikler.

Haziran, 2019; 47 sayfa

M.Sc. THESIS

**THE THEORETICAL RESEARCH OF THE PHYSICAL PROPERTIES OF
LnAuSb (Ln = La, Ce, Pr) COMPOUNDS**

Ayşegül KARADAĞ

**Aksaray University
Graduate School of Natural and Applied Sciences
Department of Physics**

Supervisor: Assoc. Prof. Dr. Havva ÖZİŞİK

ABSTRACT

In this thesis, LaAuSb, CeAuSb and PrAuSb compounds were examined theoretically. These compounds are known to form crystalline in hexagonal (space group no: 194, $P6_3/mmc$). The obtained results by calculating the structural, electronic and vibrational properties of the compounds were compared with the available experimental data. Some physical properties, experimentally difficult to obtain and costly, were also released. From the electronic band structure calculations, it was determined that these compounds had metallic character. In addition, charge densities were interpreted and detailed information was given about bond structures.

The second order elastic constants of the compounds were calculated and found to be lay down mechanical stability conditions. These constants were used to evaluate the polycrystalline properties (volume, shear, Young modules, Poisson's ratio, Debye temperature, ambient sound velocities) and their anisotropy of the materials. It was determined that these compounds show soft and ductile nature. Also, the phonon distributions and phonon density of states of the compounds were visualized by supercell approximation and density functional perturbation theory. All considered materials were found vibrationally stable.

Keywords: LaAuSb, CeAuSb, PrAuSb, Structural properties, Mechanical stability, Vibrational properties.

June, 2019; 47 pages

ŞEKİLLER DİZİNİ

Şekil 3.1. Örgü ve baz bileşenleri ile kristalin gösterimi	10
Şekil 3.2. Yedi kristal sistemine ait 14 farklı kristal geometrisi.....	11
Şekil 3.3. Ters örgü vektörünün şekilsel gösterimi.....	12
Şekil 3.4. Bir küpün bütün yüzeylerine eşit kuvvet uygulanarak oluşan hacim değişimi ile Bulk modülünün gösterilmesi.....	15
Şekil 3.5. Shear Modülü.	16
Şekil 3.6. Bir F kuvvetinin bir pistona uygulanmasıyla Young modülünün şekilsel gösterimi.	16
Şekil 3.7. Poisson oranı.....	17
Şekil 4.1. Kesilim enerjisi yakınsama testi	21
Şekil 5.1. LaAuSb kristalinin YPtAs yapı genel hücre görünümü	23
Şekil 5.2. LaAuSb kristalinin YPtAs yapı z-ekseninden görünümü.....	24
Şekil 5.3. Bileşikler için hesaplanan hacim-enerji eğrileri	25
Şekil 5.4. LaAuSb kristalinin hesaplanan elektronik band yapısı	26
Şekil 5.5. CeAuSb kristalinin hesaplanan elektronik band yapısı	27
Şekil 5.6. PrAuSb kristalinin hesaplanan elektronik band yapısı	27
Şekil 5.7. LaAuSb, CeAuSb ve PrAuSb kristallerinin toplam durum yoğunluğu eğrileri.....	28
Şekil 5.8. LaAuSb, CeAuSb ve PrAuSb kristallerinin kısmi durum yoğunluğu	28
Şekil 5.9. LaAuSb kristalinin (-1 -1 0) ve (0 0 1) yüzeylerinde yük yoğunluğu grafikleri	29
Şekil 5.10. LaAuSb kristalinin xy- ve xz-düzlemlerinde Young modülünün değişimi	29
Şekil 5.11. LaAuSb kristalinin xy- ve xz-düzlemlerinde liner sıkışabilirliğin değişimi	34
Şekil 5.12. LaAuSb kristalinin xy- ve xz-düzlemlerinde kesme modulunun değişimi	35
Şekil 5.13. LaAuSb kristalinin xy- ve xz-düzlemlerinde Poisson oranı değişimi	35
Şekil 5.14. LaAuSb kristalinin fonon dağılımı ve fonon durum yoğunluğu eğrileri	36
Şekil 5.15. CeAuSb kristalinin fonon dağılımı ve fonon durum yoğunluğu eğrileri	37
Şekil 5.16. CeAuSb kristalinin fonon dağılımı ve fonon durum yoğunluğu eğrileri	37
Şekil 5.17. PrAuSb kristalinin fonon dağılımı ve fonon durum yoğunluğu eğrileri	38
Şekil 5.18. LaAuSb kristalinin sıcaklığa bağlı serbest enerji, entropi ve ısı kapasitesi değişimi	40

ÇİZELGELER DİZİNİ

Çizelge 5.1. LnAuSb ($\text{Ln}=\text{La}, \text{Ce}, \text{Pr}$) kristallerinin hesaplanan temel durum örgü sabitleri (a, c), enerji (E_0), hacim (V_0), oluşum entalpisi (ΔH_f), Bulk modülü ve birinci türevi (B_0, B_0') ve deneysel değerler	24
Çizelge 5.2. LnAuSb ($\text{Ln}=\text{La}, \text{Ce}, \text{Pr}$) kristallerinin hesaplanan temel durum atomik örgü koordinatları ($x/a, y/b, z/c$) ve deneysel değerleri.	25
Çizelge 5.3. Hekzagonal yapı için yüksek simetri noktaları ve koordinatları.	26
Çizelge 5.4. LnAuSb ($\text{Ln}=\text{La}, \text{Ce}, \text{Pr}$) kristallerinin hesaplanan ikinci dereceden elastik sabitleri (C_{ij} , GPa).....	30
Çizelge 5.5. LnAuSb ($\text{Ln}=\text{La}, \text{Ce}, \text{Pr}$) kristallerinin polikristal mekanik modülleri; bulk modülü (B), kesme modülü (G), Young modülü (E), Poisson oranı (ν), Debye sıcaklığı (Θ_D), boyuna, enine ve ortalama ses hızları (V_l, V_t, V_m) ve Vicker sertliği (H_v)	31
Çizelge 5.6. LnAuSb ($\text{Ln}=\text{La}, \text{Ce}, \text{Pr}$) kristallerinin elastik anizotropi faktörleri (A_1, A_3), bulk ve kayma modüllerinin anizotropik % değerleri (A_B, A_G) ve evrensel anizotropi katsayısı (A^U).....	33
Çizelge 5.7. Young modulunun (E , GPa) hesaplanan maksimum-minimum değerleri ve yönelimleri.	34
Çizelge 5.8. Liner sıkıştırılabilirliğin (β , TPa^{-1}) hesaplanan maksimum-minimum değerleri ve yönelimleri.	35
Çizelge 5.9. Kesme modulunun (G , GPa) hesaplanan maksimum-minimum değerleri ve yönelimleri	36
Çizelge 5.10. Poisson oranının (ν) hesaplanan maksimum-minimum değerleri ve yönelimleri.....	36
Çizelge 5.11. Bileşikler için hesaplanan Γ noktası temel titreşim modları ve frekansları	39
Çizelge 5.12. Bileşikler için oda sıcaklığında (300 K) hesaplanan termodinamik değerler (Serbest Enerji [F], Entropi [S] ve Isı Kapasitesi [C_v]).....	40

SİMGELER VE KISALTMALAR

A	Anizotropi
A_B	Bulk modülünün elastik anizotropi yüzdesi
A_G	Kayma modülünün elastik anizotropi yüzdesi
B	Bulk modülü
B'	Bulk modülünün basınca göre birinci türevi
B_R	Bulk modülünün alt sınırı
B_V	Bulk modülünün üst sınırı
C_{ij}	Elastik sabitler
E	Young modülü
F	Kuvvet
F_S	Sürtünme kuvveti
G	Shear modülü
G_R	Shear modülünün alt sınırı
G_V	Shear modülünün üst sınırı
H	Sertlik
k_B	Boltzman sabiti
θ_l	Boyuna ses hızı
θ_m	Ortalama ses hızı
θ_t	Enine ses hızı
V	Hacim
ε_{ij}	Zorlanma tensörü
h	Planck sabiti
ρ	Yoğunluk
σ_{ij}	Zor tensörü
ν	Poisson oranı
θ_D	Debye sıcaklığı

1. GİRİŞ

İleri teknolojiadaki gelişmeler, malzeme bilimindeki gelişmelerle benzerlik göstermektedir. Sentezlenen ve yeni keşfedilen birçok malzeme teknoloji uygulamalarında da karşımıza çıkmaktadır. Kristal araştırmalarında yapılan temel bilimsel çalışmalar içinde deneysel sonuçlar kadar kuramsal veriler de oldukça önemlidir. Hatta bazı durumlarda, kuramsal değerlendirme sonrasında deney aşamasına da geçilmektedir. Bu şekilde üretilecek kristalin özellikleri daha kısa zamanda ve daha az bir masrafla tahmin edilebilmektedir. Sentezlenmiş kristalleri yapı bilgileri bu kuramsal çalışmalara başlangıç teşkil edilebileceği gibi hiç bir veri olamadan da (kristal yapı tahminleri gibi) yapılabilmektedir. Bu yöntemler genel olarak ab initio veya ilk prensipler (first principles) metotlar anılmaktadırlar ve oldukça başarılı ve kendini ispat etmiş bir kuram olan Yoğunluk Fonksiyonel Teorisini (DFT) temel alırlar. Bu tez çalışmasında da kristal yapı verileri bilinen malzemelerin fiziksel özellikleri DFT kullanılarak ortaya konulmuştur.

Son yıllarda, deneysel olarak çalışılan ve lantanit grubu elementler (Sc, Y, La-Lu) içeren bileşiklere ayrı bir önem verilmiştir. Bunun nedeni olarak da yüksek sıcaklıklarda reaktif özellik göstermeleri öne sürülmektedir.

Bu tez çalışmasında, 1:1:1 sitokiyometride bulunan LnAuZ kapalı formülüyle temsil edilen bazı üçlü bileşikler incelenmiştir. Altın temelli bu yapıda birçok üçlü geçiş metal bileşikler vardır. Burada Ln lantanit grubu elementi, Z ise Ge, As, Sn, Sb, Pb, Bi ana grup elementlerinden biri olabilir [1]. Bu bileşiklerin hekzagonal ve kübik yapılarda kristalize oldukları bilinmektedir.

Lantanit gurubu yani bir diğer adıyla Nadir toprak elementleri, birçok elektronik, optik ve manyetik uygulamaların vazgeçilmezi olmuştur. Nadir toprak mıknatısları son derece güçlüdür; Bazıları yüksek sıcaklıklarda manyetik gücünü muhafaza ederler ve bu onları ticari ve havacılık uygulamaları için ideal hale getirir. Nadir toprak elementleri lazerler ve çözünürlük teknolojileri için de kullanılırlar. Bu teknolojiler, modern havacılık sistemleri için kritik öneme sahiptir [2].

Ayrıca Lantanitler renkli televizyon tüplerinde, kanser hastalıklarının tedavisinde ve kırılma indisi yüksek merceklerin yapımında, alaşımları ise metalürjik işlemlerde

kullanılmaktadır. Bileşikleri ise optik camlarda, seramiklerde ve elektronik cihazların imalinde kullanılmaktadır. La, mutlak sıfır noktasına yakın sıcaklıklarda üstün iletkenlik göstermektedir. Lantanitler, seyreltik asitlerden etkilenmektedir [2].

Bu tez çalışmasında incelenen YPtAs-tipi hekzagonal yapıdaki LaAuSb, CeAuSb ve PrAuSb bileşiklerinin kristal yapıları bilinmekle beraber diğer fiziksel özellikleri, özellikle mekanik ve titreşimsel özellikleri hakkında yeterli bilgi bulunmamaktadır. Bu tez çalışmasında yapısal, elektronik, elastik ve dinamik özellikleri ab initio yöntemi ile hesaplanıp detaylı olarak analiz edilmiştir. Sonuçlardan elde edilen verilerle mevcut deneysel bulgular karşılaştırılmış ve yorumlanmıştır. Bu tez çalışmasında incelediğimiz bileşiklerin tahmin edilen özellikleri, gelecekte yapılacak olan araştırmalar için bir referans teşkil edeceğini beklemekteyiz.

2. YOĞUNLUK FONKSİYONEL TEORİSİ

Yoğunluk fonksiyonel teorisi (DFT), maddenin özelliklerini atom ve molekül seviyesinde anlayabilmek ve kontrol edebilmek için ortaya çıkmış bir yaklaşımdır. Bu yaklaşım kuantum mekaniği teorisini fizik, fizik mühendisliği, kimya ve malzeme bilimi gibi diğer bilim dallarından birçok araştırmacının kullanması için bir araca dönüştürmüştür [3]. Khon ve Hohenberg tarafından ispatlanmış olan bu teori 60'lı yılların ortalarında türetilen bir dizi denklem üzerine inşa edilmiştir. İspatlanan bu teorem Schrödinger denkleminde elde edilen taban durum enerjisinin elektron yoğunluğunun tek bir fonksiyonel olduğunu göstermektedir. Bu teorem taban durum dalga fonksiyonu ve taban durum elektron yoğunluğu arasında bire bir haritalama olduğunu ifade eder. Kısacası Schrödinger denkleminin çözülmesi bize taban-durum enerjisini bulmamızı sağlar [3].

2.1 Çok Cisim Problemi

Günümüzde fiziğin önemli problemlerinden biri olan maddenin elektronik yapısındaki farklılıklar zamandan bağımsız Schrödinger denklemi ile çözülebilmektedir.

Elektrondan ve çekirdekten oluşan bu sistemin zamandan bağımsız Schrödinger denklemi

$$H\Psi(R, r) = E\Psi(R, r) \quad (2.1)$$

şeklinde ifade edilir. Eşitlikte $\Psi(R, r)$ çok elektron dalga fonksiyonu E ise sistemin toplam enerjisini ifade eder. R iyonların sahip oldukları konumları, r elektronların konumlarını, H ise kuantum sisteminin hamiltoniyeni olup aşağıdaki gibi yazılır:

$$H = -\sum_{i=1}^{Ne} \frac{1}{2} \nabla_i^2 - \sum_{i=1}^{Ni} \frac{1}{2M_i} \nabla_i^2 - \sum_{i=1}^{Ne} \sum_{j=1}^{Ni} \frac{Z_i}{|\vec{r}_i - \vec{R}_j|} + \sum_{i=1}^e \sum_{j>1}^{Ni} \frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} + \sum_{j>1}^{Ni} \frac{Z_i Z_j}{|\vec{R}_i - \vec{R}_j|} \quad (2.2)$$

Burada M_i kütle, Z_i atom sayısı, r_i ve R_i ise elektron ve çekirdeğin koordinatlarıdır. Şekil 2.2'de verilen birinci terim elektronun, ikinci terim ise çekirdeğin kinetik enerjisidir. Üçüncü terim çekirdek ve elektronlar arasındaki Coulomb çekim alanıdır. Dördüncü terim elektronlar arasında meydana gelen, beşinci terim çekirdekler

arasında meydana gelen Coulomb itme etkileşimidir. Oluşan sistemin taban durumu özellikleri zamandan bağımsız Schrödinger denkleminin çözümüyle belirlenir.

2.2 Born-Oppenheimer Yaklaşımı

Bohr-Oppenheimer tarafından ortaya atılmış olan bu yaklaşım hala çok elektronlu sistemlerin Schrödinger denklemini çözmede kullanılmaktadır. Yaklaşımın en önemli özelliği çekirdek ve elektronların hareketlerini birbirinden bağımsız kılmasıdır. Çekirdekler, elektronlardan daha büyük olması sebebiyle daha yavaş hareket ederler. Bu yüzden çekirdekleri hareketsiz olarak düşünebiliriz ve elektronları ise duran çekirdekler etrafında hareket ettiğini düşünürsek çekirdeklerin kinetik enerjisini ihmal edebiliriz. Ayrıca çekirdekler arasındaki Coulomb etkileşimlerini de bir sabit olarak düşünebiliriz [4].

Born-Oppenheimer yaklaşımına göre dalga fonksiyonu;

$$H = -\sum_{i=1}^{Ne} \frac{1}{2} \nabla_i^2 - \sum_{i=1}^{Ni} \frac{1}{2M_I} \nabla_I^2 - \sum_{i=1}^{Ne} \sum_{I=1}^{Ni} \frac{Z_I}{|\vec{r}_i - \vec{R}_I|} \quad (2.3)$$

şeklinde yazılır. Bu yaklaşım ile sistemin hamiltonyeni basitleşse dahi, hamiltoniyendeki elektron-elektron etkileşimlerini tanımlayan terimden dolayı denklemin çözümüne ulaşmak oldukça zordur. Çok parçacıklı sistemin Schrödinger denkleminin çözümlerini dalga fonksiyonu ile hesaplamaya odaklanan metotlar bulunur. Bu metotlar dalga fonksiyonu yaklaşımları adı altında hesaplanabilmektedir. Bu yaklaşımlardan ikisi Hartree ve Hartree-Fock teoremleridir [5].

2.3 Dalga Fonksiyonu Yaklaşımları

2.3.1 Hartree yaklaşımı

Hartree çözülmesi mümkün olmayan elektronik Schrödinger denklemini çözebilmek için kendi adını verdiği bu yaklaşımı ileri sürmüştür. Bu yaklaşımın temelinde çok elektronlu sistemin dalga fonksiyonları tek elektronlu dalga fonksiyonlarının çarpımı şeklinde yazılabilir prensibi vardır [5]. Çok elektronlu sistemin Schrödinger denkleminin hamiltonyeni,

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

şeklindedir. Çok elektronlu sistemin dalga fonksiyonu, tek elektron dalga fonksiyonlarının çarpımı olarak yazıldığında dalga fonksiyonu;

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) = \prod_{i=1}^N \psi_i(\vec{r}_i) \quad (2.5)$$

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

$$V_H(\vec{r}) = - \int d\vec{r}' \frac{\rho(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \quad (2.6)$$

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

$$\rho(\vec{r}') = \sum_{i \neq j} |\psi_i(\vec{r}')|^2 \quad (2.7)$$

şeklinde olur ve hamiltoniyen sonuç olarak;

$$\left[-\frac{1}{2} \nabla^2 + V(\vec{r}) \right] \Psi(\vec{r}) + \sum_i \int d\vec{r}' \frac{|\psi_i(\vec{r}')|^2}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \Psi(\vec{r}) = \varepsilon_i \Psi(\vec{r}) \quad (2.8)$$

şeklini alır. Hartree yaklaşımında dalga fonksiyonu, tek tek elektronların dalga fonksiyonlarının çarpımı olarak yazıldığı için herhangi iki elektronun yer değiştirmesi fark etmeyeceğinden, simetrik kalır [1].

2.3.2 Hartree-Fock yaklaşımı

Bu yaklaşım birbiri ile etkileşim içerisinde olmayan elektron orbitallerine karşılık gelen dalga fonksiyonlarını bulmaya yarayan bir yaklaşımdır. N tane elektronu tanımlayan bir dalga fonksiyonu düşünecek olursak bu elektronların birbirleriyle etkileşmediklerini varsayalım.

Bu durumda sistemin toplam hamiltoniyeni;

$$H = \sum_{i=1}^N h_i \quad (2.9)$$

şeklinde yazılabilir. Burada h_i , i elektronun hamiltoniyenini yani kinetik enerjisini ve potansiyel enerjisini tanımlar.

2.4 Hohenberg-Khon Teoremi

Bu teorem gerçek fonksiyoneli sistemli bir şekilde ifade eden yeni bir fonksiyonel geliştirip bu fonksiyoneli gerekli problemleri çözmek için matematiksel bir forma getirir. Hohenberg ve Khon bu teoremde temel değişken olarak bir sistemin temel durum elektron yoğunluğunu dikkate almıştır. Hesaplama açısından daha kolay ve üç boyutlu elektronik yoğunluk dağılımı $n(\vec{r})$ 'nin 3N boyutlu dalga fonksiyonuna göre daha anlaşılabilir olmasıdır. Bunun dışında sonsuz boyutlu periyodik sistemlerin yanı sıra çok sayıda atom içeren ve periyodik olamayan sistemlerin kullanılabilir olmasını sağlamıştır [6].

Birinci Hohenberg-Kohn teoremi, Schrödinger denklemini çözmek için kullanılabilecek bir elektron yoğunluğu fonksiyonelinin mevcut olduğunu belirler fakat fonksiyonelin gerçekte ne olduğu hakkında bilgi vermez. İkinci Hohenberg-Kohn teoremi ise, toplam fonksiyonelin enerjisini minimize eden elektron yoğunluğu, Schrödinger denkleminin tam çözümüne karşılık gelen doğru elektron yoğunluğudur. Bu halde Hohenberg-Kohn teoremi için $\psi_i(\mathbf{r})$ tek elektron dalga fonksiyonları kullanmak gerekir [6]. Enerji fonksiyoneli;

$$[\{\Psi_i\}] = E_{bilinen} [\{\Psi_i\}] + E_{xc}[\{\Psi_i\}] \quad (2.10)$$

şeklinde ifade edilir. Burada bilinen terimler 4 temel unsurdan oluşur.

$$E_{bilinen} [\{\Psi_i\}] = \frac{\hbar^2}{2m} \int \Psi_i^* \nabla^2 \Psi_i d^3r + \int V(r) n(r) d^3r + \frac{e^2}{2} \iint \frac{n(r)n(r')}{|r-r'|} d^3r d^3r' + E_{iyon} \quad (2.11)$$

2.5 Kohn-Sham Teoremi

Kohn-Sham denklemlerini çözmek için Hartree potansiyelini tanımlamamız ve Hartree potansiyelini tanımlamak için de elektron yoğunluğunu bilmemiz gerekir. Elektron yoğunluğunu bulabilmemiz için tek elektron dalga fonksiyonlarını bilmeliyiz ve onları bilmek için de Kohn-Sham denklemlerini çözmeliyiz. Bu döngüyü kırmak için problem genelde aşağıdaki algoritmada özetlendiği gibi iteratif bir yolla ele alınır [7].

- i. Bir başlangıç, deneme elektron yoğunluğu tanımlanır, $n(r)$
- ii. Tek parçacık dalga fonksiyonlarını $\Psi(r)$ bulmak için bu deneme elektron yoğunluğu kullanılarak tanımlanan Kohn-Sham denklemleri çözülür.
- iii. Adım 2'den elde edilen Kohn-Sham tek parçacık dalga fonksiyonları ile tanımlanan elektron yoğunluğu hesaplanır, $(n_{KS}(r) = 2\Sigma\Psi^*(r))$
- iv. Hesaplanan elektron yoğunluğunu $n_{KS}(r)$ Kohn-Sham denklemlerini çözmek için kullanılan elektron yoğunluğu $n(r)$ ile karşılaştırılır. Eğer her iki yoğunluk aynı ise o zaman bu taban durum elektron yoğunluğudur ve toplam enerjiyi hesaplamak için kullanılabilir. Eğer her iki yoğunluk birbirinden farklı ise, o zaman deneme elektron yoğunluğu bir şekilde güncellenmelidir. Bu yapıldığında ikinci adımdan tekrar başlar ve her iki yoğunluk aynı olana kadar iteratif olarak devam eder [7].

2.6 Yerel Yoğunluk Yaklaşımı

Yerel yoğunluk yaklaşımı değiş tokuş korelasyon fonksiyoneli tanımlamak amacıyla, sadece yerel yoğunluğu kullanılır ve bu nedenle yerel yoğunluk yaklaşımı (LDA) olarak adlandırılır [5, 10]. Yaklaşım hesaplama kolaylığı ve güvenilir sonuçlar verdiği için oldukça sık kullanılan bir yöntemdir. LDA bize Kohn-Sham denklemlerini de tam olarak tanımlama imkanı verir. Yerel yoğunluk yaklaşımında değiş tokuş korelasyon enerjisi;

$$E_{XC}^{LDA}[n] = \int d^3 r n(\vec{r}) e_{XC}^{\text{elektrongazı}}(n(\vec{r})) \quad (2.12)$$

şeklinde gösterilir. Buradaki $e_{XC}^{\text{elektrongazı}}(n(\vec{r}))$, $n(\vec{r})$ yoğunluğundaki bir homojen elektron gazının parçacık başına düşen değiş tokuş korelasyon enerjisini ifade eder.

2.7 Genelleştirilmiş Gradyent Yaklaşımı

Genelleştirilmiş gradyent yaklaşımı, yerel yaklaşımların yetersiz kaldığı durumlarda hesaplamada yoğunluk gradyentinin büyük değerlere sahip olduğu durumlarda kullanılan bir yaklaşımdır. Bu yaklaşımda değiş-tokuş korelasyon fonksiyonu, yerel elektron yoğunluğu ve elektron yoğunluğu gradyenti kullanılarak ifade edilir.

$$V^{GGA}_{XC}(r) = V_{xc}[n(r), \nabla n(r)] \quad (2.13)$$

Elektron yoğunluğunun gradyentinden elde edilen bilgiler GGA fonksiyoneli içine çok çeşitli yollarla dahil edildiğinden, çok sayıda farklı GGA fonksiyoneli vardır. Katılar içeren hesaplamalarda yaygın bir şekilde kullanılan fonksiyonellerden ikisi Perdew-Wang fonksiyoneli ve Perdew-Burke-Ernzerhof fonksiyonelidir. Özellikle izole moleküllerle ilgili hesaplamalar için çok sayıda GGA geliştirilmiş ve kullanılmıştır [8].



3. TEMEL TEORİK BİLGİLER

3.1 Kristal Yapılar

Katıların atomları arasında görülen ve birbirini tekrarlayan düzenli yapılar vardır. Bu düzen içindeki atom veya atom gruplarının bulunduğu katı cisme kristal denir. Bir başka deyişle; kristal, bu cisimlerin uzaydaki üç boyutlu periyodik dizilişleridir.

Bir kristaldeki bu dizilişler 18. yüzyılda, kristalin yüzey normallerinde gösterilen vektörlerin bileşenlerinin küçük tam sayılarla ifade edildiğinin jeologlar tarafından keşfedilmesinden beri bilinmektedir. Atomların yerleşiminin geometrisine bağlı olarak değişen birçok kristal tipi vardır. Katının fiziksel özellikleri kristalin yapı tipine de bağlı olduğundan, bu yapıların bilinmesi bilim adamları kadar mühendisleri de ilgilendirmektedir [9].

Bazı katılardaki atomlar rastgele yerleşmiş olabilirler, yani bu katılar kristal yapıya sahip değildirler [9]. Bunlara amorf cisimler denir. Cam plastik, odun vb. gibi maddeler buna örnek olarak gösterilebilir.

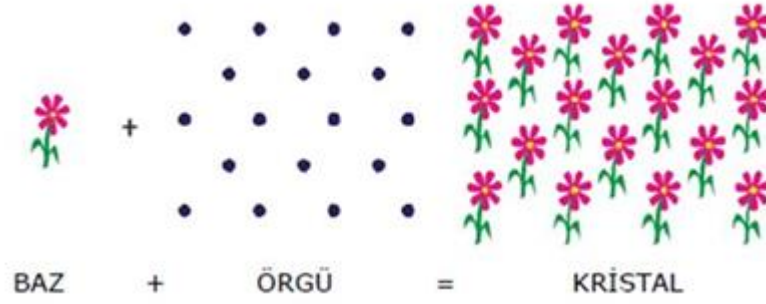
İdeal bir kristal, özdeş yapı birimlerinin uzayda sonsuz tekrarı ile elde edilir. Bakır, demir, gümüş, alüminyum ve alkali metaller gibi en basit kristallerde yapı birimi bir tek atomdur. Yapı birimi, inorganik kristallerde 100 ve protein kristallerinde 10000 atomun üstüne çıkar.

Kristalin atomlarının tutulduğunu ve gerçek kristalin üzerine kurulduğunu varsaydığımız hayali noktaların oluşturduğu kümeye “örgü “ denir. Her kristal kendine özgü bir örgü ile tanımlanır. Bu örgü noktalarına yerleşen atom veya atom grubuna da “baz” denir. Bazın uzayda kendini tekrarlamasıyla da kristal oluşur. Bir örgü $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ olmak üzere üç temel öteleme vektörü ile ifade edilir [9, 10].

Bu durumda atomların dizilişi bir $\vec{r}$ konumunda nasıl ise $\vec{r}'$ konumunda da aynıdır ve

$$\vec{r}' = \vec{r} + m_1 \vec{a}'_1 + m_2 \vec{a}'_2 + m_3 \vec{a}'_3 \quad (3.1)$$

ile gösterilir. Burada m_1, m_2 ve m_3 tam sayılardır. Kristali basit olarak Şekil 3.1 gibi gösterebiliriz.



Şekil 3.1. Örgü ve Baz bileşenleri ile kristalin gösterimi.

3.1.1 Kristal örgü ve örgü öteleme vektörleri

Maddelerin kristal yapıları kendilerini oluşturan atomlardan meydana gelmektedir. Bu yüzden her atom, o atomun merkezine yerleştirilen geometrik birer nokta ile temsil edilir. Böylece kristalinkiyle aynı geometrik özelliklere sahip olan noktaların bir deseni elde edilir. Bu geometrik desene kristal örgü veya sadece örgü denir.

İdeal bir kristal, kristal örgü noktalarına yerleştirilen özdeş atomlar veya atom grupları tarafından oluşturulur.

Kübik kristal sistem için üç farklı tipte yapı söz konusudur; basit kübik, yüzey merkezli kübik ve hacim merkezli kübik. Tetragonal kristal sistemde ise basit tetragonal ve hacim merkezli tetragonal olmak üzere iki farklı tipte yapı bulunmaktadır [10].

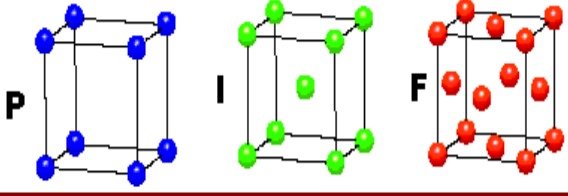
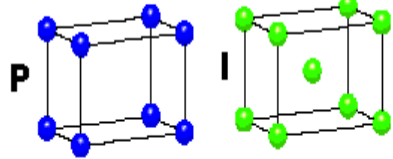
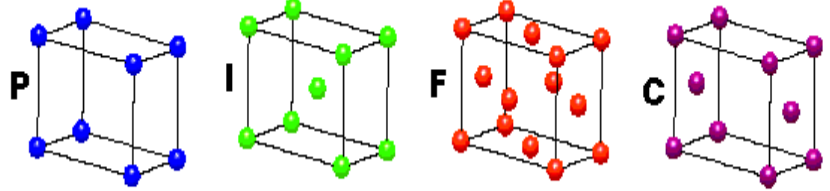
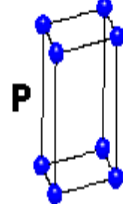
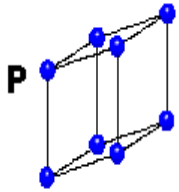
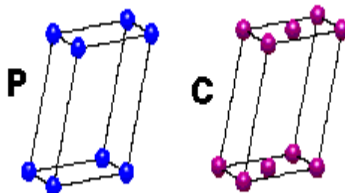
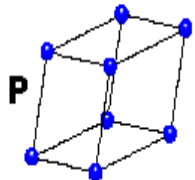
Ortorombik kristal sistem ise basit ortorombik, hacim merkezli ortorombik, taban merkezli ortorombik ve yüzey merkezli ortorombik olmak üzere dört tip yapıya ayrılır. Mono klinik kristal sistemin basit monoklinik ve taban merkezli monoklinik olmak üzere iki farklı tipi söz konusudur [11].

3.1.2 Ters örgü vektörleri

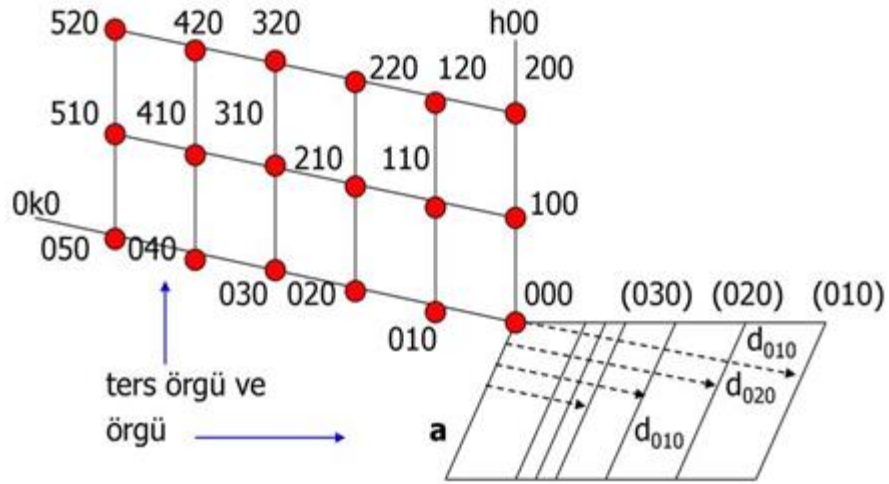
$f(r)$ elektron yoğunluğu, her birim hücresinde aynı olan kristali tanımlayan herhangi bir fonksiyon olsun. $f(r)$ fonksiyonu,

$$f(r + T(n_1, n_2, \dots)) = f(r) \quad (3.2)$$

şeklinde yazılır ve bu fonksiyon ilgi çekici özelliklere sahiptir. Burada T bir öteleme vektörü $\vec{q}$ dalga vektörlü Fourier bileşenleri yardımı ile böyle periyodik fonksiyonlar Fourier dönüşümüne açılabilirler.

KÜBİK $a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	
TETRAGONAL $a = b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	
ORTOROMBİK $a \neq b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	
HEKZAGONAL $a = b \neq c$ $\alpha = \beta = 90^\circ$ $\gamma = 120^\circ$	
TRIGONAL $a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$	
MONOKLİNİK $a \neq b \neq c$ $\alpha = \gamma = 90^\circ$ $\beta \neq 120^\circ$	
TRIKLİNİK $a \neq b \neq c$ $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$	

Şekil 3.2.Yedi kristal sistemine ait 14 farklı kristal geometrisi [52].



Şekil 3.3. Ters örgü vektörünün şekilsel gösterimi [53].

3.2 Elastik Sabitleri

Elastik sabitler bir malzeme için önemli parametrelerdir ve yapısal kararlılık hakkında bilgi sağlarlar. Elastik sabitler, sistemin hacminde değişikliğe sebep olmayan küçük deformasyonların fonksiyonu olarak toplam enerjinin hesaplanmasıyla elde edilebilir [12]. Dengedeki örgü konfigürasyonuna uygulanan küçük deformasyonlar ile oluşan enerji değişimi,

$$\Delta E = \frac{V}{2} \sum_{i=1}^6 \sum_{j=1}^6 C_{ij} e_i e_j \quad (3.3)$$

şeklinde verilebilir. Burada V , dış etki ile bozulmamış örgü hücre hacmi, C elastik sabitlerin matrisi ve e ise zorlanma vektörüdür. Kristallerin ilkel vektörleri $\vec{a}_i (i = 1 \dots 3)$, deformasyon altında yeni vektörlere dönüşür.

$$\begin{pmatrix} \vec{a}'_1 \\ \vec{a}'_2 \\ \vec{a}'_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \vec{a}_1 \\ \vec{a}_2 \\ \vec{a}_3 \end{pmatrix} \cdot (I + \varepsilon) \quad (3.4)$$

Burada I , birim matris ve ε , zorlanma (strain) matrisidir. Bu matris zorlanma vektörleri cinsinden yazılabilir.

$$\varepsilon = \begin{bmatrix} e_1 & e_5/2 & e_6/2 \\ e_6/2 & e_2 & e_4/2 \\ e_5/2 & e_4/2 & e_3 \end{bmatrix} \quad (3.5)$$

Sistemin simetrisine göre C_{ij} elastik matris sabitinin bağımsız eleman sayısı azalır. Kübik bir sistemde üç bağımsız elastik sabit vardır ; (C_{11}, C_{12}, C_{44}).

$$B_V = B_R = \frac{C_{11} + 2C_{12}}{3} \quad (3.6)$$

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

$$G_R = \frac{5C_{11} - C_{12} + C_{44}}{5} \quad (3.8)$$

Burada V ve R alt indisleri Voigt üst sınır ve Reuss alt sınır değerlerini ifade etmektedir. Eğer sistem Hekzagonal yapıya sahip ise elastik sabitleri ($C_{11}, C_{33}, C_{44}, C_{12}$ ve C_{13}) şeklinde ve denklemler aşağıdaki formdadır.

$$B_V = \frac{2(C_{11} + C_{12}) + 4C_{13} + C_{33}}{9} \quad (3.9)$$

$$B_R = \frac{(C_{11} + C_{12})C_{33} - 2C_{13}^2}{C_{11} + C_{12} + 2C_{33} - 4C_{13}} \quad (3.10)$$

$$G_V = \frac{C_{11} + C_{12} + 2C_{33} - 4C_{13} + 12C_{44} + 12C_{66}}{30} \quad (3.11)$$

$$G_R = \frac{5[(C_{11} + C_{12})C_{33} - 2C_{13}^2]C_{44}C_{66}}{6B_VC_{44}C_{66} + 2[(C_{11} + C_{12})C_{33} - 2C_{13}^2](C_{44} + C_{66})} \quad (3.12)$$

Bir malzemenin sertliğini tanımlayan Bulk modülü de C_{11} ve C_{12} elastik sabitleri cinsinden ifade edilebilir [12].

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

Hidrostatik basınç altında $e = (\delta, \delta, \delta, 0, 0, 0)$ zorlanma vektörüne maruz kalan katının enerji değişiminden yararlanılarak bulk modülü elde edilebilir.

$$\frac{\Delta E}{V} = \frac{9}{2} B \delta^2 \quad (3.14)$$

Katı, $[1 \ 1 \ 1]$ yönünde $e = (\delta, \delta, \delta, 0, 0, 0)$ shear deformasyonuna maruz kaldığında enerji değişimi,

$$\frac{\Delta E}{V} = \frac{3}{2} C_{44} \delta^2 \quad (3.15)$$

ile uyumludur. Buradan C_{44} elastik sabiti hesaplanır. Hacmi koruyan ortorombik strain için ise strain vektörü,

$$\mathbf{e} = (\delta, \delta, (1 + \delta)^{-2}, -1, 0, 0) \quad (3.16)$$

şeklindedir. Bu strain kullanılarak shear modülü (C'),

$$\frac{\Delta E}{V} = 6C' \delta^2 + 0(\delta^3) \quad (3.17)$$

den hesaplanır. Shear modülü, C_{11} ve C_{12} sabitleri ile ifade edilebilir.

$$C' = \frac{(C_{11} - C_{12})}{2} \quad (3.18)$$

Bulk ve shear modülünün elastik sabitlere bağlantılı denklemler 3.14 ve 3.17 ile 3.18 kullanılarak C_{11} ve C_{12} elastik sabitleri hesaplanır.

$$C_{11} = \frac{(3B + 4C')}{3} \quad C_{12} = \frac{(3B - 2C')}{3} \quad (3.19)$$

3.3 Bulk Modülü

Bulk modülü bir kütleyi çepeçevre saran, basınç altındaki sıkışmasının bir ölçüsüdür [12]. Bulk modülü kübik bir yapı için şu şekilde ifade edilir:

$$B_V = B_R = \frac{1}{3} (C_{11} + 2C_{12}) \quad (3.20)$$

Hekzagonal yapılar için ise;

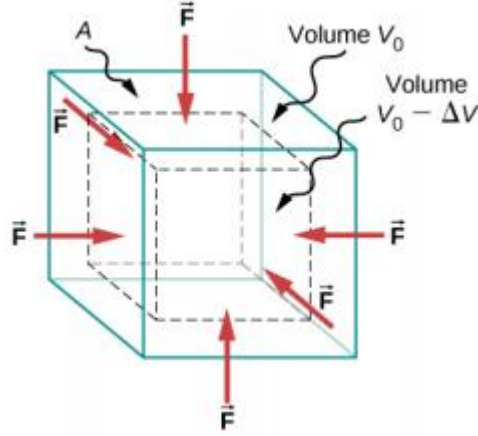
$$B_V = \frac{2(C_{11} + C_{12}) + 4C_{13} + C_{33}}{9} \quad (3.21)$$

$$B_R = \frac{C^2}{M} \quad (3.22)$$

$$M = C_{11} + C_{12} + 2C_{33} - 4C_{13} \quad (3.23)$$

$$C^2 = (C_{11} + C_{12})C_{33} - 2C_{13}^2 \quad (3.24)$$

şeklinde tanımlanır.



Şekil 3.4. Bir küpün bütün yüzeylerine eşit kuvvet uygulanarak oluşan hacim değişimi ile Bulk modülünün gösterilmesi.

Ortalaması ise;

$$B = \frac{B_R + B_V}{2} \quad (3.25)$$

şeklinde ifade edilir.

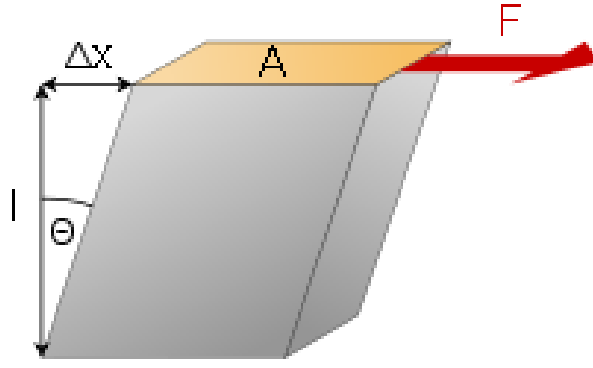
3.4 Shear Modülü

Bir cisme etki eden F_s sürtünme kuvveti ile sabit bir konumda tutulan diğer yüzüne yüzeye teğet bir f kuvveti uygulandığında farklı bir bozulma gerçekleşir. Bu bozulma cisimlerin F kuvvetinin etkisiyle birbirlerine doğru hareket etmelerini sağlar. Bu durumun neden olmasını sağlayan zora kesme zoru denir.

Kesme zorunun uygulandığı yüzeyin alanı A ise kesme zoru teğet kuvvetinin yüzeyin alanına oranı olarak F/A şeklinde tanımlanır. Kesme zorlanması ise $\Delta x/l$ oranı olarak bilinir. Burada Δx kesilen yüzün uygulanan kuvvet doğrultusundaki yer değiştirmesidir [13].

$$G = \frac{F/A}{\Delta x/l} \quad (3.26)$$

şeklinde ifade edilir.

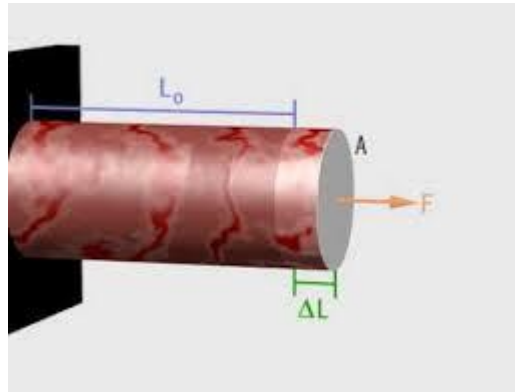


Şekil 3.5. Shear Modülü.

3.5 Young Modülü

Bir malzemeye uygulanan gerilmenin ve gerilmeden dolayı meydana gelen birim şekil değişimine oranıyla elde edilir [12, 13]. Bir malzemenin Young modülü ne kadar yüksek ise plastik yani kalıcı şekil değişimine uğramadan dayanabileceği kuvvet o kadar yüksek veya elastik uzama oranı o kadar düşüktür. Young modülü; bulk modülü ve shaer modülünden yararlanılarak aşağıdaki gibi hesaplanabilir [13].

$$E = \frac{9GB}{G+3B} \quad (3.27)$$



Şekil 3.6. Bir F kuvvetinin bir pistona uygulanmasıyla Young modülünün şekilsel gösterimi.

3.6 Poisson Oranı

Poisson oranı; bir malzemenin elastik bölgede yanal ve eksensel elastik birim şekil değişimlerinin oranı ile elde edilen bir sabittir. Poisson oranı 0.5 değerine yaklaşan bir malzemenin sıkıştırılabilirliği ne kadar düşük ise, şekil değiştirmesi o kadar yüksek

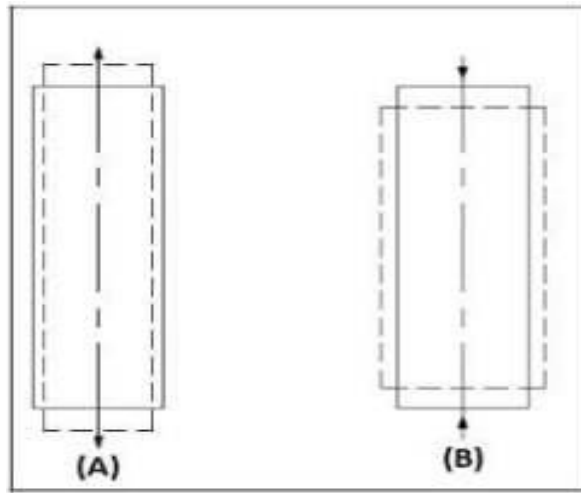
yani kolaydır. Bu durumda Poisson oranı -1'e yaklaşan bir malzemenin ise sıkıştırılabilirliği o kadar fazla ve şekil değiştirmesi ise o kadar zordur yani şekil değişimine karşı dirençlidir. Bu durumda Poisson oranı elastik malzemelerin kuvvet altında uğrayacağı deformasyonlar hakkında bilgi veren önemli bir sabittir [13, 55].

Malzemelerin temel özelliklerinden olan Poisson oranının negatif saptandığı durumlarda gözlenmektedir. Bu negatif durumlardaki malzemeler “auxetic malzemeler” olarak adlandırılmaktadır [14, 56].

Auxetic malzemeler, konvansiyonel malzemelere kıyasla olağanüstü özelliklere sahiptirler. Buna örnek olarak üstün enerji emiciliği, termal şok dayanımı, daha iyi kırılma dayanımı vb. verilebilir. Pek çok mühendislik malzemelerinin özellikleri auxetic (negatif Poisson oranı) davranışı kazandırılarak geliştirilebilir. Negatif Poisson oranına sahip malzemeler teknik tekstillere ve kompozitlere daha iyi karakteristik özellikler sağlayabilir. Auxetic malzemeler malzemenin direk yapısında olacağı gibi malzemeye sonradan da kazandırılabilir [14, 57].

$$V = \frac{1}{2} \left[\frac{\left(B - \frac{1}{2}G\right)}{\left(B + \frac{1}{3}G\right)} \right] \quad (3.28)$$

şeklinde hesaplanır.



Şekil 3.7. Poisson oranı.

3.7 Debye Sıcaklığı

Debye sıcaklığı; öz ısı, elastik sabitler ve erime sıcaklığı ile ilgili temel bir fiziksel özelliktir. Bu sıcaklık katılar için, yüksek ve düşük sıcaklık bölgelerini ayırmak için kullanılır. Debye sıcaklığın üstünde fononların dalga boyları küçük; altında ise büyüktür. Debye sıcaklığının hesaplaması için;

$$\theta_D = \frac{h}{k} \left[\frac{3n}{4\pi} \left(\frac{N_A \rho}{M} \right) \right]^{\frac{1}{3}} V_M \quad (3.29)$$

Eşitliği kullanılır. Burada h Planck sabiti; k Boltzman sabiti, N_A Avagadro sayısı, M moleküler ağırlık ρ yoğunluk, n moleküldeki atom sayısı, V_m ise ortalama ses hızı olmaktadır. Ortalama ses hızı ise;

$$V = \left[\frac{1}{3} \left(\frac{2}{V_t^3} + \frac{1}{V_l^3} \right) \right]^{-1/4} \quad (3.30)$$

eşitliği ile gösterilir. Burada V_t ve V_l boyuna ve enine dalga hızlarıdır;

$$V_l = \sqrt{\frac{4B+3G}{3\rho}} \quad (3.31)$$

$$V_t = \sqrt{\frac{G}{\rho}} \quad (3.32)$$

şekilde ifade edilir.

3.8 Sertlik

Sertlik bağıl bir kavram olup, malzemelerin sürtünmeye, çizmeye, kesmeye ve plastik deformasyona karşı gösterdiği direnç olarak tanımlanabilir. Sertlik ölçümü, mühendislik malzemelerine uygulanan çok genel bir testtir. Bir malzemenin sertliği ile diğer mekanik özellikleri arasında bir ilişki kurulabilir. Örneğin; çeliklerde, çekme mukavemeti sertlik ile doğru orantılıdır.

Genellikle malzemelerin sertliği ile işlenebilme özelliği arasında ters bağıntı vardır. Diğer bir deyişle, sert malzemeleri işlemek zordur. Bir malzemenin sertliği 10

GPa'dan küçükse yumuşak, 10-40 GPa arasında ise sert, 40 GPa'dan büyükse çok sert malzeme olarak nitelendirilir.

$$H_{Chen} = 2(k^2 G)^{0.585} - 3, \quad k = G/B \quad (3.33)$$

formülü ile hesaplanabilir. Burada; B bulk modulu G kesme modülüdür.

3.9 B/G Oranı

B/G oranı sertlik için önemli bir parametre olup malzemenin sertliği için önemli bir unsurdur. Pugh kriterlerine göre B/G oranı 1.75 referans alınarak ölçüldüğünde bu değerin altında olması malzemenin kırılğan, üstünde olması ise esnek olmasını ifade etmektedir [15].

3.10 Anizotropi Faktörü

Dışarıdan bir etki ile fiziksel özellikleri doğrultuya göre değişebilen malzemelere anizotrop malzeme denir. Bu faktör, farklı yüzeylerde atomlar arasındaki bağlanma anizotropisinin bir ölçüsüdür [16]. Elastik bir kristal için, kristalde meydana gelen hatalar elastik anizotropi tarafından etkilenen olaylardır. Kübik bir yapı için elastik anizotropi elastik sabitler cinsinden;

$$A_1 = A_2 = A_3 = \frac{2C_{44}}{C_{11} - C_{12}} \quad (3.34)$$

şeklinde ifade edilebilir.

Hekzagonal yapıda ise;

$\langle 0 \ 1 \ 1 \rangle$ ve $\langle 0 \ 1 \ 0 \rangle$ yönelimleri arasındaki $\{1 \ 0 \ 0\}$ düzlemleri ve $\langle 1 \ 0 \ 1 \rangle$ ve $\langle 0 \ 0 \ 1 \rangle$ yönelimleri arasındaki $\{0 \ 1 \ 0\}$ düzlemleri için;

$$A_1 = A_2 = \frac{4C_{44}}{C_{11} + C_{33} - 2C_{13}} \quad (3.35)$$

$\langle 1 \ 1 \ 0 \rangle$ ve $\langle 0 \ 1 \ 0 \rangle$ yönleri arasındaki $\{0 \ 0 \ 1\}$ düzlemi için;

$$A_3 = \frac{4C_{66}}{C_{11} + C_{22} - 2C_{12}} \quad (3.36)$$

şeklindedir.

Yüzde elastik anizotropiler, bulk modülü (B) ve shear modülü (G) cinsinden

$$A_B = \frac{B_V - B_R}{B_V + B_R} \times 100 \quad (3.37)$$

$$A_G = \frac{G_V - G_R}{G_V + G_R} \times 100\% \quad (3.38)$$

ile hesaplanır. Sonuçlarda %0 değeri elastik izotropiyi %100 değeri ise en büyük elastik anizotropiyi gösterir. Elastik anizotropi indeksi anizotropi için önemli bir parametre olup bu değer sıfır ise malzeme izotrop, sıfırdan farklı ise anizotrop olarak nitelendirilir. Evrensel elastik anizotropi indeksi ise tüm yapılar için,

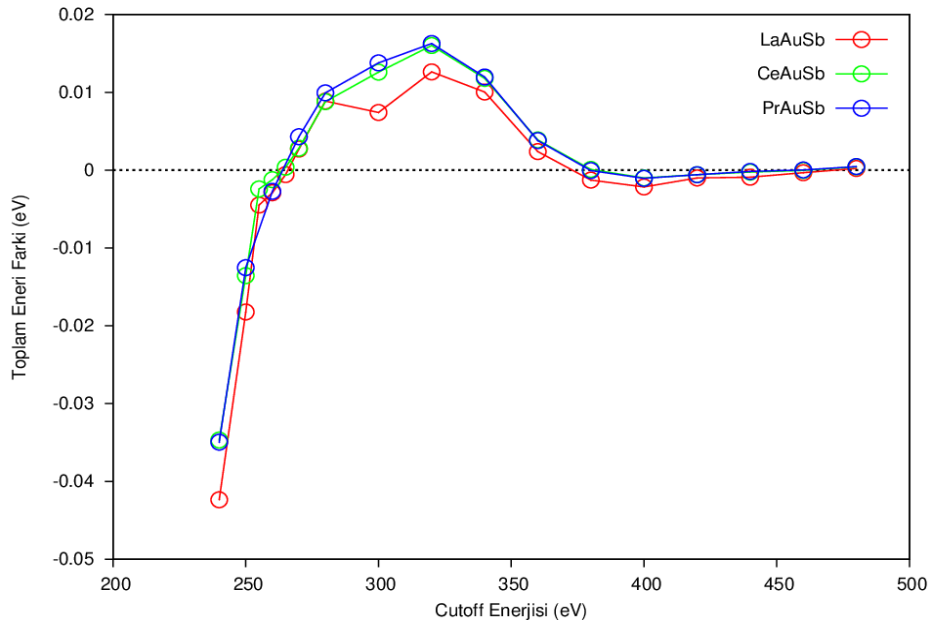
$$A^U = 5 \frac{G_V}{G_R} + \frac{B_V}{B_R} - 6 \geq 0 \quad (3.39)$$

şeklinde tanımlanır.

4. MATERYAL-ARAÇLAR VE METOT

Bu tez çalışmasında LaAuSb, CeAuSb ve PrAuSb bileşiklerinin temel durum fiziksel özellikleri (tek kristal yapı parametreleri, mekanik ve titreşimsel özellikler, elektronik-band yapısı, fiziksel özelliklerin yönelime bağlılığı) ilk ilkeler (*ab initio*) kuramsal metotları kullanılarak incelendi. Hesaplamalarda kullandığımız metot, Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi (DFT), literatürde katı sistemlerin incelenmesinde çokça başvurulmuş, kendini ispatlamış temel araştırma kuramsal yöntemidir ve mühendislik uygulamaları için birçok veri üretilmektedir [25-28]. DFT yönteminin içerdiği iki temel yaklaşımdan Genelleştirilmiş Gradyent yaklaşımı (GGA) tercih edilmiştir. Değiş-tokuş korelasyon etkileşimleri ise Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE) tarafından parametrize edilen formüller kullanılarak hesaplamalara katılmıştır [29, 30]. PAW pseud-potansiyel yaklaşımı ile de elektron-iyon etkileşimleri dahil edilmiştir [31, 32]. Bu kuramsal formülasyonların tamamı kullandığımız Vienna Ab-initio Simulation Package (VASP) yazılımı ile mümkün olmuştur [33, 36].

Yük yoğunluğu temelli hesaplamalarda k-noktaları önem arz etmektedir. Bu çalışmada Monkhorst-Pack metodu kullanılarak üretilen k-noktaları kullanıldı [37]. Atom başına en az 5000 noktanın üretildiği, $0.12 \text{ \AA}^{-1}$ k-noktası aralığına denk gelen $13 \times 13 \times 4$ k-grid kullanıldı. Kesilim enerji yakınsama testi sonucu bu değer 380 eV olarak seçildi.



Şekil 4.1. Kesilim enerjisi yakınsama testi.

İncelenen malzemelerin elektriksel davranışlarının (iletken, yalıtkan ve yarı iletkenlerin) tespiti elektronik band yapısının incelenmesi ile mümkün olabilmektedir. Bu amaçla temel durum parametreleri belirlenen malzemelerin yük yoğunlukları hesaplanır. Hesaplanan yük yoğunluğunda, birinci Brillion bölgesi dediğimiz ve tüm malzemenin karakteristiğini ortaya koyan bölgede, sistemdeki her bir elektronun yüksek simetri noktaları boyunca seçilen her bir k-noktasında enerji seviyeleri hesaplanır. Bu şekilde malzemedeki elektronların enerji seviyeleri görselleştirilmektedir.

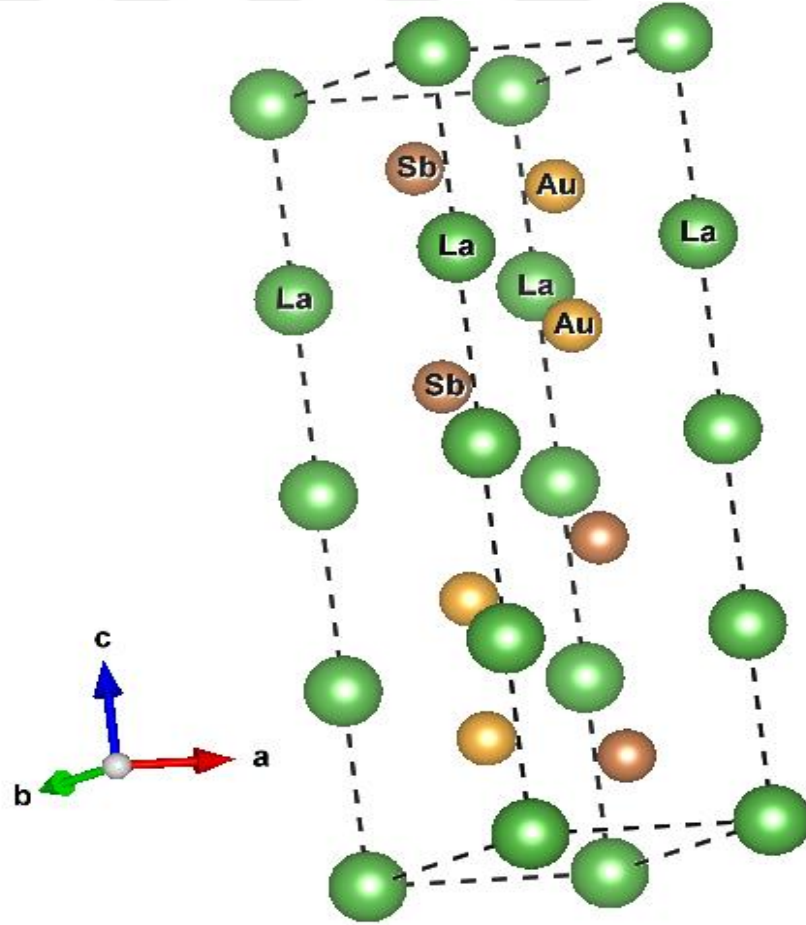
Fermi enerji seviyesi elektronik-band kuramında önem arz eder. Eğer, Fermi seviyesi band aralığının içinde kalır ise malzeme ya yalıtkan ya da yarıiletkendir. Fermi seviyesinde bandların bulunması sistemin iletken doğasına delalet eder. Bu tez çalışmasında, katı kristallerin ikinci dereceden elastik sabitlerini hesaplamak için kullandığımız paket programda (VASP) bulunan “zor-zorlanma” (stress-strain) yönteminden faydalanıldı [38]. Bu sabitler yardımıyla malzemelerin polikristal doğalarının dış etkiye karşı tepkilerini tahmin etmek mümkün olmaktadır. Tek kristal elastik sabitlerinden malzemenin kararlılığı hakkında da bilgi edinilebilir. Simetriye bağlı sayıları değişebilen (mesela kübik için 3 $\{C_{11}, C_{12} \text{ ve } C_{44}\}$, altıgen yapı için 6 $\{C_{11}, C_{12}, C_{13}, C_{33}, C_{44}, C_{66}\}$ ikinci dereceden elastik sabitlerinin tamamı pozitif ve Born mekanik kararlılık şartlarını [39] sağlıyorsa, sistem mekanik karardır. Altıgen yapı için kararlılık şartları [41]; $C_{11}>0$, $C_{44}>0$, $C_{11}-C_{12}>0$, $(C_{11}+C_{12})C_{33}-2C_{12}^2>0$ şeklindedir.

2. dereceden tek kristal elastik sabitleri (C_{ij}) ile polikristal elastik modülleri tahmin etmek mümkündür. Sistem mekanik olarak kararlı ise malzemelerin polikristal etkin hacim ve kayma modüllerinin üst sınırı Voigt (V), alt sınırı ise Reuss (R) hesaplanır [42, 44].

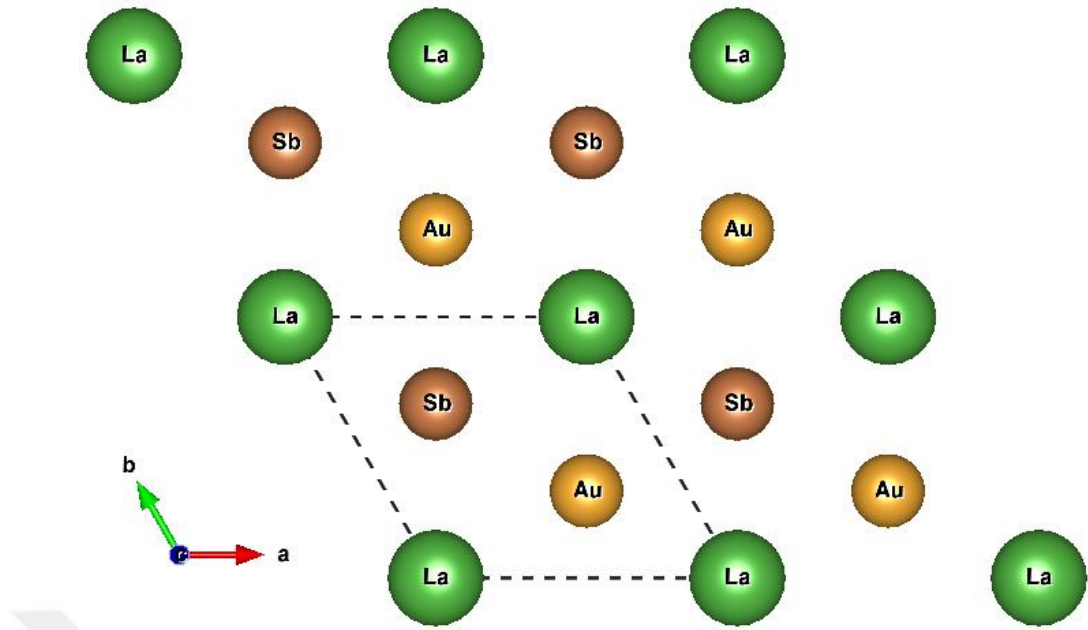
5. BULGULAR VE DEĞERLENDİRME

5.1 Yapısal Özellikler

Bu tez çalışmasında incelenen bileşiklerin kristal formu YPtAs-tipi ($P6_3/mmc$, uzay grubu no: 194) yapıdadır [1]. LaAuSb kristalinin birim hücre görünümü örnek olarak Şekil 5.1 ve Şekil 5.2 ile verilmiştir. İncelenen birim hücre 12 atom içerir. Z değeri kristalografi de hücredeki bulunan formül sayısını göstermektedir ve bir tam sayıdır. Bu malzemeler için formülde 3 atom olduğundan $Z = 4$ 'tür. Bileşiklerdeki lantanit elementleri $2a (0, 0, 0)$ ve $2b (0, 0, \frac{1}{2})$ bazlarını, altın (Au) ve antimon (Sb) atomları ise $4f (\frac{1}{3}, \frac{2}{3}, z)$ bazını işgal etmektedirler. Hesaplama için gerekli temel örgü parametreleri [1] tarafından yayınlanan deney verilerinden alınmıştır. Enerji minimizasyonu sonucu elde edilen yapı parametreleri, mevcut deneysel verilerle birlikte Çizelge 5.1 ve 5.2'de verildi.



Şekil 5.1. LaAuSb kristalinin YPtAs yapı genel hücre görünümü.



Şekil 5.2. LaAuSb kristalinin YPtAs yapı z-ekseninden görünümü.

Çizelge 5.1. LnAuSb (Ln=La, Ce, Pr) kristallerinin hesaplanan temel durum örgü sabitleri (a , c), enerji (E_0) hacim (V_0), oluşum entalpisi (ΔH_f), Bulk modülü ve birinci türevi (B_0 , B_0') ve deneysel değerler.

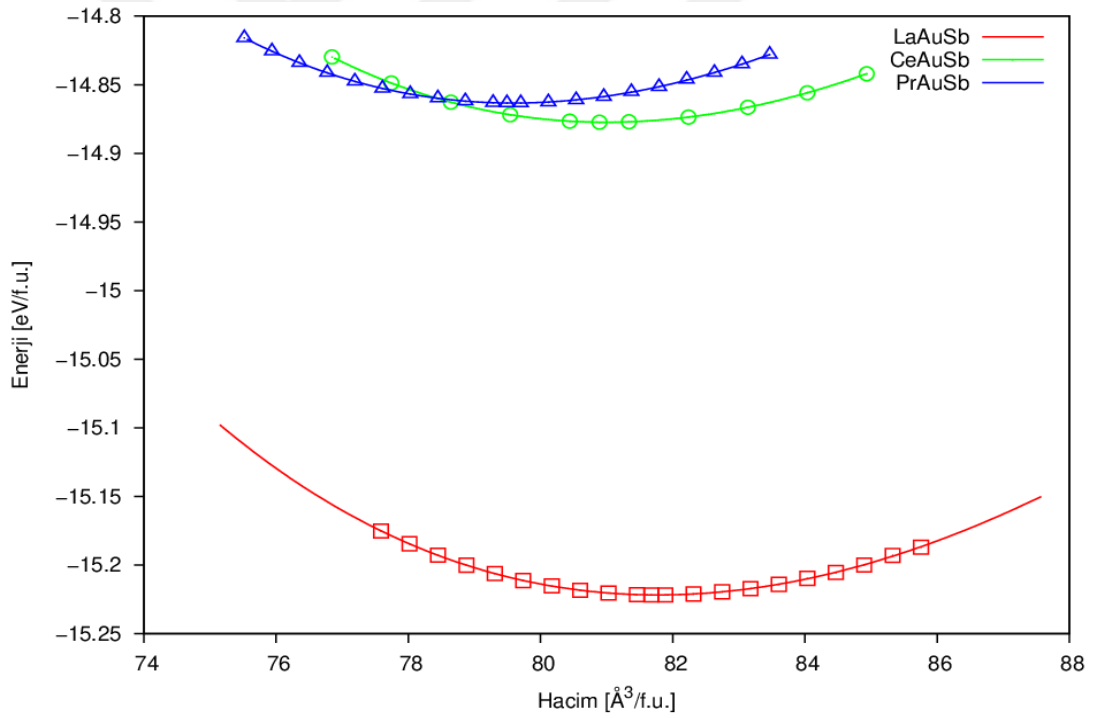
Malzeme	a (Å)	c (Å)	V_0 (Å ³ /uc)	E_0 (eV/fu)	ΔH_f (eV/fu)	B_0	B_0'	Kaynaklar
LaAuSb	4.705	17.041	326.70	-15.222	-0.995	64.15	4.20	Bu tezde
	4.638	16.832	313.60					Deney [1]
CeAuSb	4.698	16.931	323.57	-14.877	-0.928	65.73	4.09	Bu tezde
	4.614	16.635	306.66					Deney [1]
PrAuSb	4.675	16.796	317.97	-14.863	-0.925	66.90	4.04	Bu tezde
	4.593	16.532	302.13					Deney [1]

Hesaplamalarda kullandığımız GGA yaklaşımı, yapı sabitlerini deneysel değerlere göre daha fazla tahmin ettiği bilinmektedir. Elde edilen veriler bu beklentileri karşılamaktadır ve deneysel değerler ile uyum içerisindedir. Sonuçlarımızın deney ile uyumlu olması, hesapladığımız fiziksel özelliklerin sağlıklı olduğunun bir göstergesidir.

Ayrıca Çizelge 5.1’de hesaplanan temel durum hacim değerlerinin $(0.95-1.05)V_0$ aralığında enerji değerleri hesaplandı ve EOS denkleminde fit edilerek Bulk modülü ve birinci türevi belirlendi. Fit eğrileri Şekil 5.3’te sunuldu.

Çizelge 5.2. LnAuSb (Ln=La, Ce, Pr) kristallerinin hesaplanan temel durum atomik örgü koordinatları (x/a , y/b , z/c) ve deneysel değerler.

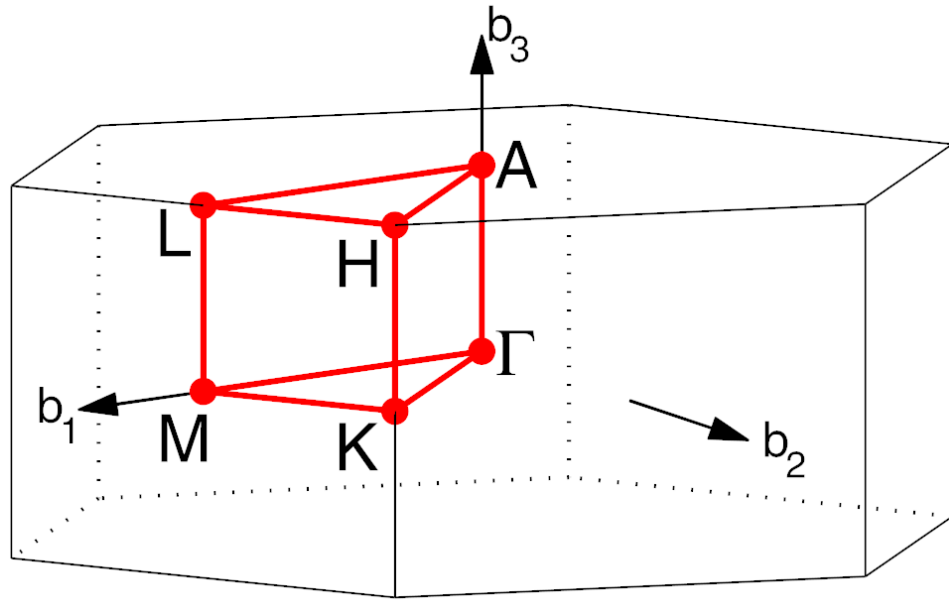
Bileşik	Atom	Baz koordinat	Bu tezde	Deney [1]
	Ln atomları 2a ve 2b koordinatlarında bulunmaktadır.			
LaAuSb	Au	Au 4f (2/3 1/3 z)	0.1610	0.1572
	Sb	Sb 4f (1/3 2/3 z)	0.1107	0.1127
CeAuSb	Au	Au 4f (2/3 1/3 z)	0.1593	0.1583
	Sb	Sb 4f (1/3 2/3 z)	0.1115	0.1122
PrAuSb	Au	Au 4f (2/3 1/3 z)	0.1600	-
	Sb	Sb 4f (1/3 2/3 z)	0.1108	-



Şekil 5.3. Bileşikleri için hesaplanan hacim-enerji eğrileri.

5.2 Elektronik Özellikler

LnAuSb (Ln=La, Ce, Pr) katı kristalleri $P6_3/mmc$ uzay grubunda olup hekzagonal (altıgen) yapıya sahiptir. Şekil 5.4'de bu hekzagonal yapı için birinci Brillion Bölgesi gösterilmektedir.



Şekil 5.4. Hekzagonal $P6_3/mmc$ yapının birinci Brillion bölgesi.

Temel durum örgü parametreleri kullanılarak hesaplanan yük yoğunluğunda, Γ -M-K- Γ -A-L-H-A yüksek simetri noktaları (koordinatlar için Çizelge 5.3’de bakınız) boyunca elektronik band eğrileri görselleştirildi ve Şekil 5.4-6’da sunuldu. Grafiklerde Fermi enerji düzeyi $E_f=0$ eV şeklinde belirlenerek gösterimde kolaylığı sağlandı. Tam band aralığının yanında Fermi seviyesi civarı da detaylı verildi.

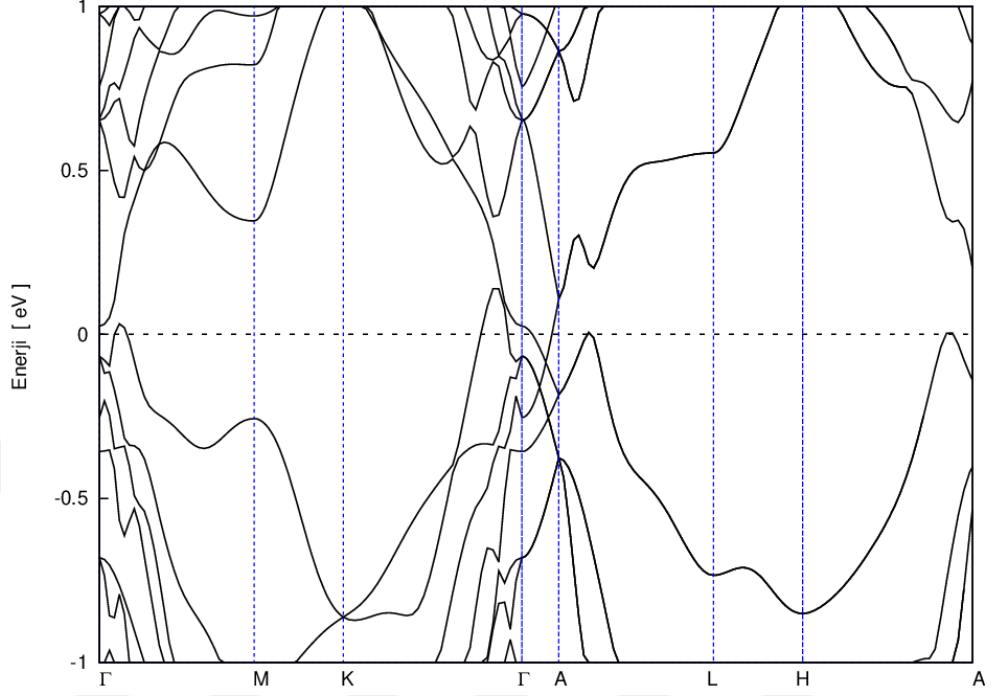
Çizelge 5.3. Hekzagonal yapı için yüksek simetri noktaları ve koordinatları.

Yüksek Simetri Noktası	x/a	y/b	z/c
Γ	0	0	0
M	$\frac{1}{2}$	0	0
K	$\frac{1}{3}$	$\frac{1}{3}$	0
Γ	0	0	0
A	0	0	$\frac{1}{2}$
L	$\frac{1}{2}$	0	$\frac{1}{2}$
H	$\frac{1}{3}$	$\frac{1}{3}$	$\frac{1}{2}$
A	0	0	$\frac{1}{2}$

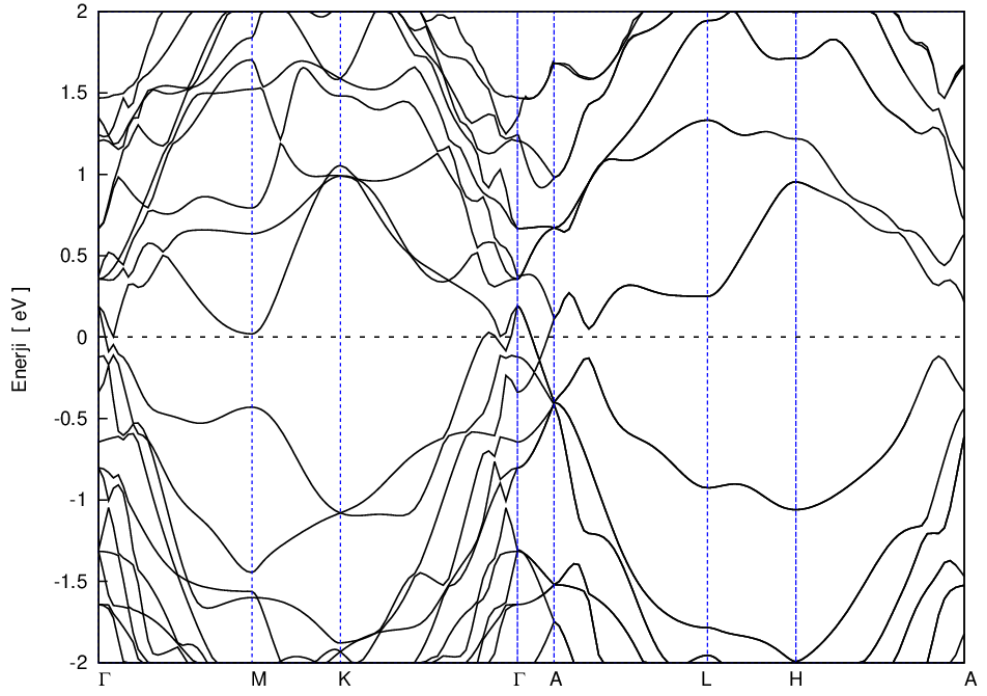
Şekil 5.5-7 verilen band eğrilerinden incelenen malzemelerin metalik karakter sergiledikleri belirlendi. Her üç bileşiğin band eğrilerinin benzerlikler gösterdiği görüldü. Ayrıca Şekil 5.5-7’de verilen durum yoğunluğu eğrilerinden de incelenen üç malzemenin metalik doğası görülebilmektedir.

Bu malzemelerin LMTTO metodu ile yapılan hesaplamalarından semi-metal oldukları bilinmektedir [1]. Bu tez çalışmasında varılan sonuçlar Siebel ve arkadaşları tarafından

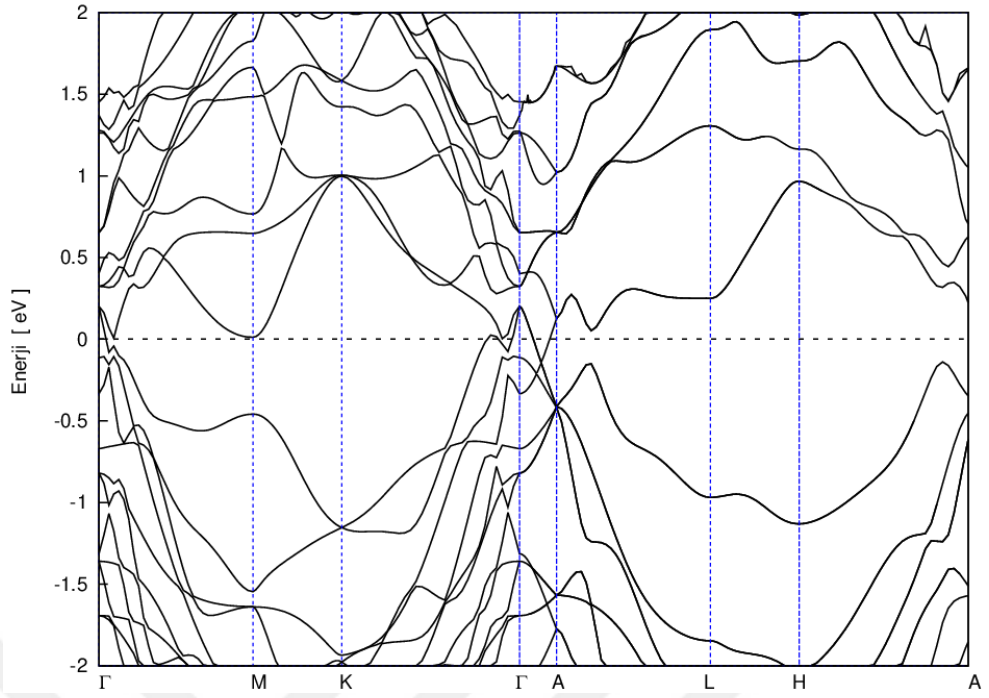
yapılan alıřmaları desteklemektedir. Aynı alıřmada grlen pseudogap (band aralıęımsı) burada da gzlenmektedir. Aęırlıklı olarak mekanik zellikler incelendięinden spin katkısı gz nnde bulundurulmamıřtır.



řekil 5.5. LaAuSb kristalinin hesaplanan elektronik band yapısı.

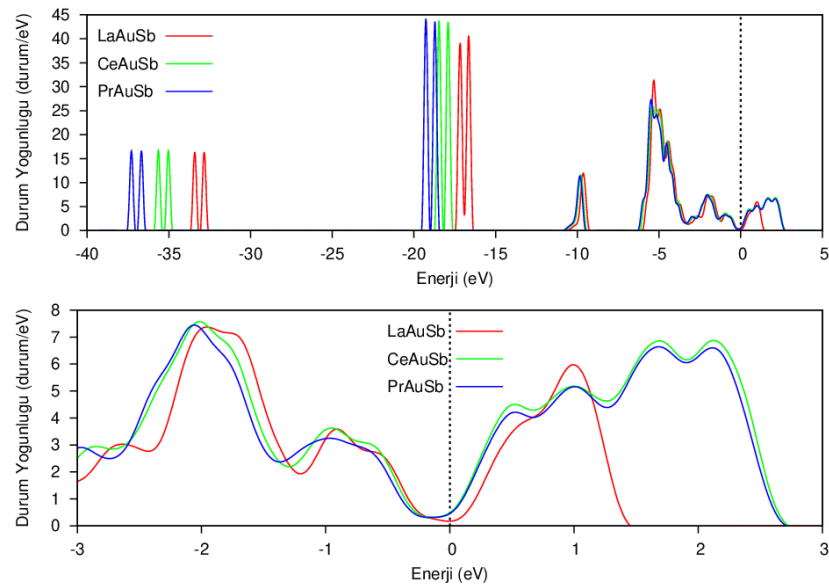


řekil 5.6. CeAuSb kristalinin hesaplanan elektronik band yapısı.

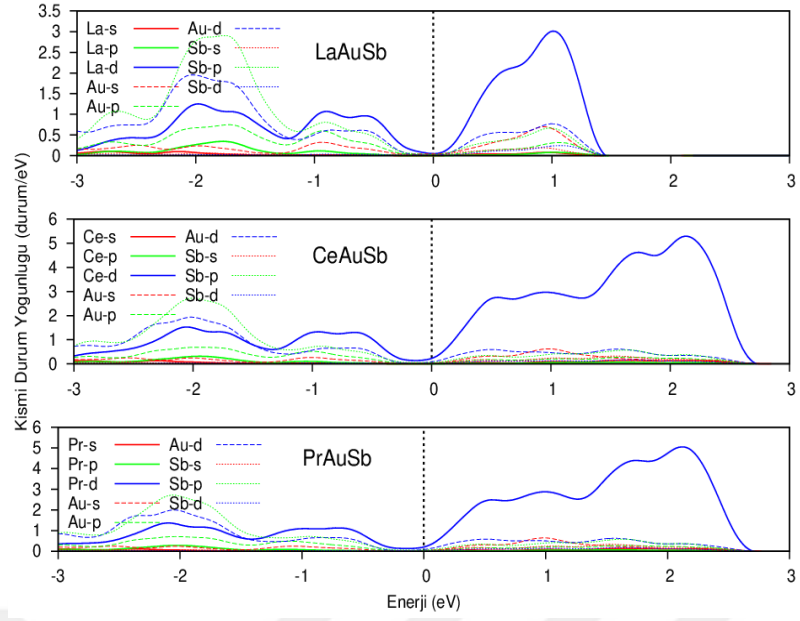


Şekil 5.7. PrAuSb kristalinin hesaplanan elektronik band yapısı.

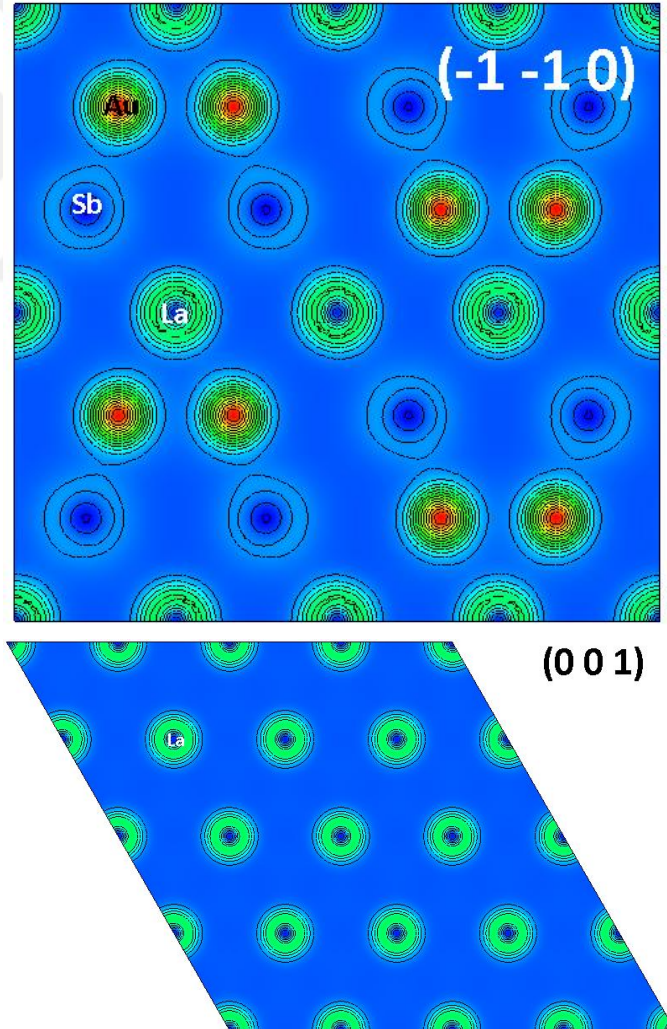
Toplam durum yoğunluğu da malzemelerin elektronik doğası ile ilgili bilgiler içermektedir. Şekil 5.8’de her üç malzemenin toplam durum yoğunlukları çizdirildi. Buradan da malzemelerin iletken karakteri görülebilmektedir. Fermi seviyesinde LaAuSb, CeAuSb ve PrAuSb için hesaplanan durum sayıları 0.17, 0.50 ve 0.47 durum/eV şeklindedir. LaAuSb bileşiğine göre diğer iki bileşikte ilettime katılan durum sayısının daha fazla olduğu görüldü.



Şekil 5.8. LaAuSb, CeAuSb ve PrAuSb kristallerinin toplam durum yoğunluğu eğrileri.



Şekil 5.9. LaAuSb, CeAuSb ve PrAuSb kristallerinin kısmi durum yoğunluğu eğrileri.



Şekil 5.10. LaAuSb kristalinin $(-1 -1 0)$ ve $(0 0 1)$ yüzeylerinde yük yoğunluğu grafikleri.

Ayrıca Şekil 5.9’da ise kısmi durum yoğunlukları çizdirilerek, orbital katkıları incelendi. İncelenen bileşiklerde iletimin *d*-elektronları tarafından gerçekleştirildiği saptandı.

Malzemelerde atomlar arası bağ yapısını incelemek için yük yoğunluğu grafikleri kullanıldı. Bu amaçla malzemelerin yük yoğunlukları incelendi ve birbirine benzerlikleri dolayısıyla Şekil 5.10’da sadece LaAuSb için verildi. (-1 -1 0) yüzeyi tüm bileşik atomlarını içermektedir. (0 0 1) yüzeyinde ise sadece nadir toprak elementleri bulunmaktadır. (0 0 1) yüzeyinde atomlar arası metalik bağ baskındır.

(-1 -1 0) yüzeyinde ise genel olarak metalik bağ baskın iken, Au ve Sb atomları arasında azda olsa elektron paylaşımı mevcuttur. Bu sebeple Au-Sb arasında kovalent bağ yapısı vardır diyebiliriz.

5.3 Mekanik Özellikler

5.3.1 Elastik sabitleri

LnAuSb (Ln=La, Ce, Pr) kristallerinin 2.mertebeden elastik sabitleri (C_{ij}) VASP paket programı temelinde zor-zorlanma metodu [45] ve sonlu deformasyon yöntemi [16] kullanılarak hesaplandı. Elde edilen değerler Çizelge 5.4’de listelendi. Her üç kristalin de verilen mekaniksel kararlılık ölçütlerini sağladıkları görüldü. Her iki yöntemle elde edilen veriler birbirleri ile uyumlu olduğu görüldü. Elastik sabitlerinden türetilen ve sonraki bölümlerde sunulan verilerde yalnızca zor-zorlanma metodu çıktıları göz önüne alınmıştır.

Çizelge 5.4. LnAuSb (Ln=La, Ce, Pr) kristallerinin hesaplanan ikinci dereceden elastik sabitleri (C_{ij} , GPa).

<i>Malzeme</i>	<i>Metot*</i>	C_{11}	C_{12}	C_{13}	C_{33}	C_{44}	C_{66}^{**}
LaAuSb	ZZ	118.4	64.7	41.3	83.1	42.1	26.8
	SD	109.08	72.26	44.15	87.54	41.75	18.41
CeAuSb	ZZ	124.4	63.8	43.3	83.9	44.2	30.3
	SD	113.20	73.15	44.78	85.57	43.77	20.0
PrAuSb	ZZ	127.3	67.9	43.7	84.5	44.8	29.7
	SD	116.30	76.95	43.98	84.70	44.36	19.68

*ZZ: Zor-Zorlanma, SD: Sonlu deformasyon Yöntemi; $C_{66}^{**}=(C_{11}-C_{12})/2$

Hekzagonal yapıda x-, z- eksensel dayanıklılığın göstergesi C_{11} ve C_{33} elastik sabitleri değerleridir [24]. Her üç kristalde de $C_{11} > C_{33}$ olduğundan, bu malzemelerde x- ve y- ekseni boyunca sıkışabilirlik z-eksenine göre daha azdır. Ayrıca, PrAuSb diğerlerine göre sıkışmaya karşı daha dayanıklıdır. Genel olarak La-Ce-Pr sıralamasına göre elastik sabitleri artmaktadır.

5.3.2 Polikristal özellikler

Malzemenin makroskobik mekanik davranışlarını polikristal sabitler hesaplanarak tahmin edilebilir. Bu amaçla Bölüm 4’de verilen altıgen yapı için eşitlikler yardımıyla hesaplanan polikristal etkin elastik modülleri (bulk modülü, kesme modülü, Young modülü, Poisson oranı, B/G oranı, Debye sıcaklığı, boyuna, enine ve ortalama ses hızları) Çizelge 5.5’te verildi. Hesaplamalarda sadece zor-zorlanma yöntemi ile elde edilen elastik sabitleri değerlendirildi.

Çizelge 5.5. LnAuSb (Ln=La, Ce, Pr) kristallerinin polikristal mekanik modülleri; bulk modülü (B), kesme modülü (G), Young modülü (E), Poisson oranı (ν), Debye sıcaklığı (Θ_D), boyuna, enine ve ortalama ses hızları (V_l , V_t , V_m), ve Vicker sertliği (H_v).

Bileşik	B (GPa)	G (GPa)	E (GPa)	ν	B/G	θ_D (K)	V_l (m/s)	V_t (m/s)	V_m (m/s)	H_v (GPa)
LaAuSb	66.1	32.7	84.2	0.29	2.02	206.9	3434	1875	2091	3.8
CeAuSb	68.0	35	89.6	0.28	1.94	213.2	3489	1928	2148	4.4
PrAuSb	69.5	35.1	90.1	0.28	1.98	212.8	3481	1912	2132	4.2

Bulk modülü, sistem yüzeyindeki tüm noktalara aynı basınç (hidrostatik basınç) uygulandığında malzemenin hacim değişimine karşı gösterdiği zorlanmanın oranıdır [46]. Her üç malzemenin de hacim değişimine gösterdikleri tepkiler birbirine yakın bulundu (~70 GPa). Bu da incelenen malzemeleri sıkışabilirliklerinin birbirine yakın olması demektir. Ayrıca EOS fit eğrilerinden elde edilen verilerle bulunan değerler uyum içersindedir.

Kesme (shear) modülü, tersinir deformasyonlara ve makaslama zoruna karşı gösterilen direncin bir ölçüsüdür [46] ve sistemin bağ yapısı ile yakından ilgilidir. Düşük kesme modülü atomlar arası zayıf bağlara delalet eder. İncelenen bileşiklerin kesme

modülleri birbirlerine yakın olmakla birlikte içlerinde diğerlerine göre en zayıf bağ yapısı LaAuSb kristaline sahiptir.

Young modülü ise malzemelerin sertliği hakkında bilgi içerir [24]. Yine PrAuSb kristali en yüksek (90.1 GPa) Young modülüne sahip olduğundan diğerlerine göre daha sert ve dış etkilere karşı daha dayanıklı olması beklenir.

Poisson oranı ise atomlar arası bağlanma kuvvetlerinin davranışları ile ilgili bize bilgi verir. Eğer ki değeri 0.5'e yaklaşırsa malzemenin plastiklik özelliği artar [47]. “Kovalent bağ yapısına sahip malzemelerde 0.1 iken iyonik bağın baskın olduğu malzemelerde ise 0.25 ve metalik bağın baskın olduğu malzemelerde ise 0.33 civarındadır” [48]. Hesaplanan değerler (~ 0.28) incelediğimiz malzemelerde iyonik bağların baskın olduğunu gösterir. Bu sonuca durum yoğunluğu grafiklerinden de ulaşılmıştı.

Pugh oranı diye bilinen B/G değeri malzemenin mekanik doğası hakkında önemli bilgi içerir. Bu oranın 1.75'den az olması malzeme kırılgan (gevrek), yüksek olması ise esnek (sünek) karakteristiği temsil eder. İncelediğimiz bileşiklerin tümü esnek davranış sergileyeceği önerilmiştir ($B/G \sim 2.0$).

“Vicker sertik skalasında; değer 10 GPa'dan küçükse malzeme yumuşak, 10-40 GPa arası ise sert ve 40 GPa'dan yüksekse çok sert malzeme olarak sınıflandırılır” [14]. İncelenen malzemeler için hesap sonuçlarına ($H_v \sim 4$ GPa) bakarak bu malzemeler yumuşak olarak nitelendirilebilir.

Hesaplanan Debye sıcaklıklarından (Çizelge 5.6), bu malzemelerin oda sıcaklığının çok altında düşük termal iletkenliğe sahip malzemeler olduğunu söylemek mümkündür.

Ayrıca bu bileşiklerin ortam ses hızları birbirine yakın ve düşük hızlara sahip oldukları söylene bilinir.

5.3.3 Elastik anizotropi

Bölüm 4’de anlatılan metot ile hesapladığımız anizotropi faktörleri (A_1 , A_2 , A_3), bulk (A_B), kesme (A_G) modüllerinin elastik anizotropi yüzdeleri ve evrensel elastik anizotropi katsayısı (A^U) Çizelge 5.6’da verildi.

Tüm incelediğimiz bileşiklerin anizotropi sergilediği, A_3 değerinin 1 olması ise $\langle 101 \rangle$ ve $\langle 001 \rangle$ yönelimleri arasındaki $\{010\}$ düzlemlerinde izotropik davrandığı söylene bilinir.

Çizelge 5.6.LnAuSb (Ln=La, Ce, Pr) kristallerinin elastik anizotropi faktörleri (A_1 , A_3), bulk ve kayma modüllerinin anizotropik % değerleri (A_B , A_G) ve evrensel anizotropi katsayısı (A^U).

Malzeme	A_1	A_3	A_B	A_G	A^U
LaAuSb	1.42	1	3.1	2.8	0.343
CeAuSb	1.45	1	3.3	2.4	0.317
PrAuSb	1.44	1	3.7	2.7	0.352

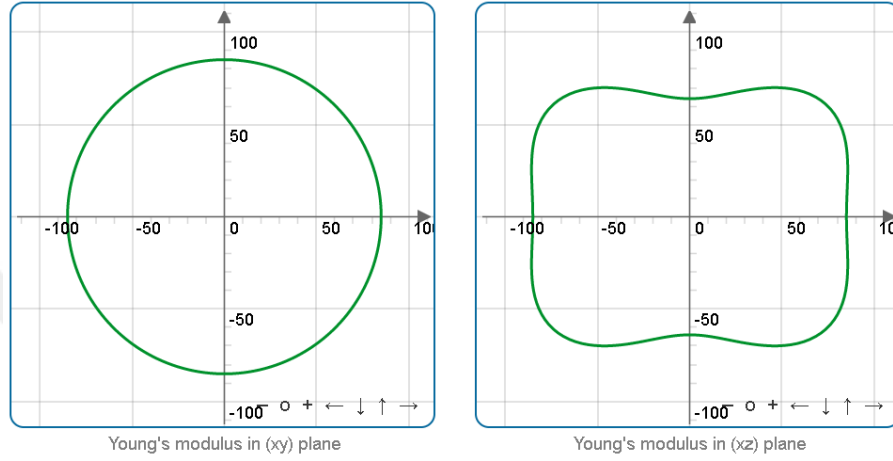
LaAuSb, CeAuSb ve PrAuSb kristallerinin hacim modülü için yüzde (%) elastik izotropileri ($A_B \sim \%4$) civarındadır. Kesme modülü için ise bu değer nispeten daha küçüktür ($A_G \sim \%2$).

5.3.4 Yönelime bağlı mekanik özellikler

Bir önceki bölümde hesaplanan anizotropi (yönelime bağımlılık) değerleri içermekte idi. Elastik sabitleri kullanarak fiziksel özelliklerin yönelime bağımlılıklarını 2 boyutta veya 3 boyutta elde etmek mümkündür. Bu şekilde her bir mekanik sabitinin maksimum ve minimum değerlerinin hangi spesifik doğrultularda olduğu tespit edile bilinir. Bunu gerçekleştirmek için son yıllarda birçok araç geliştirilmiştir. Örneğin; Chimie Paris Tech araştırmacılarından Gaillac ve Coudert tarafından hazırlanan ve kullanıcı dostu web ara yüzüne sahip “ELATE: Elastic tensor analysis” programıdır [49, 58]. Bileşikler için hesaplanan 6x6 elastik sabiti matrisi kullanılarak yönelime bağlı elastik mekanik sabitler (Young modülü, sıkışabilirlik, kesme modülü ve Poisson oranı) elde edildi. İncelenen tüm bileşiklerin genel eğilimleri benzerlikler gösterdiğinden burada sadece CeAuSb kristalinin ve xy ve xz düzlemleri için Şekil

5.11-14’de verildi. yz-düzlemi ile xz-düzlemi aynı davranışı sergilediğinden sadece birinin verilmesi yeterli görüldü.

Şekil 5.11’de verilen Young modülü değişiminden malzemelerin xy düzleminde izotropik karakter sergilediği (yönelime bağlı değişmediği), buna rağmen xz düzleminde ise anizotropik doğaya sahiptir. Malzemelerin en az ve en fazla hangi yönelimlerde sahip oldukları Çizelge 5.7’de listelendi.

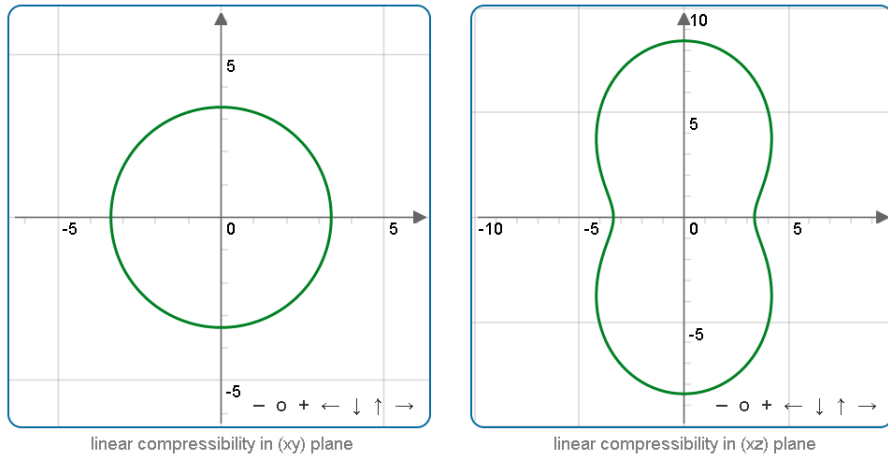


Şekil 5.11. LaAuSb kristalinin xy- ve xz-düzlemlerinde Young modülünün değişimi.

Çizelge 5.7. Young modülünün (E, GPa) hesaplanan maksimum-minimum değerleri ve yönelimleri.

Malzeme	E_{min}	E_{max}
LaAuSb	64.4 (0 0 1)	89.9 (-0.5548 0.5548 -0.6200)
CeAuSb	64.0 (0 0 1)	96.3 (0.5755 0.5755 0.5810)
PrAuSb	65.0 (0 0 1)	96.6 (0.8097 0.0 0.5868)

Sıkışabilirlikler için elde edilen değişim grafiği Şekil 5.12’de sunuldu. xy-düzlemi izotropik, xz-düzleminin ise anizotropik doğası burada da görüldü ve maksimum minimum değerleri doğrultularıyla birlikte Çizelge 5.8’de sunuldu.

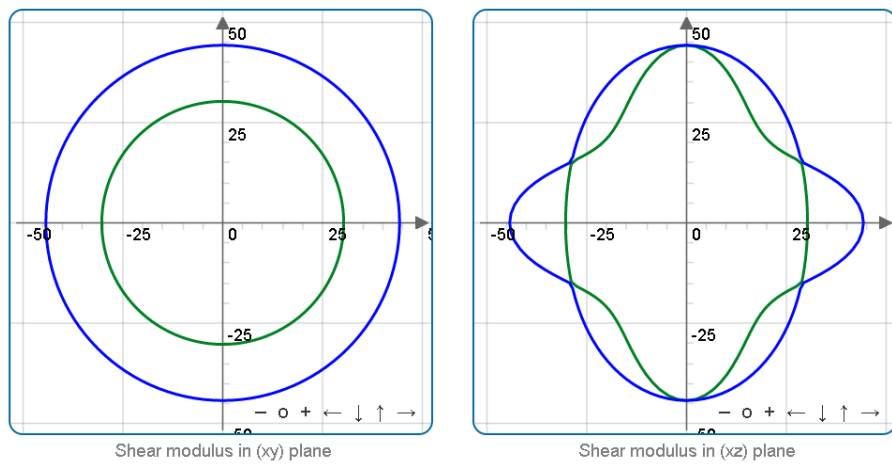


Şekil 5.12. LaAuSb kristalinin xy- ve xz-düzlemlerinde liner sıkışabilirliğin değişimi.

Çizelge 5.8. Liner sıkıştırılabilirliğin (β , TPa⁻¹) hesaplanan maksimum-minimum değerleri ve yönelimleri.

Malzeme	$\beta_{\min}$ (Doğrultu)	$\beta_{\max}$ (Doğrultu)
LaAuSb	3.5385 (0.2588 0.9659 0)	8.5112 (0 0 1)
CeAuSb	3.3728 (1 0 0)	8.4432 (0 0 1)
PrAuSb	3.2211 (1 0 0)	8.5018 (0 0 1)

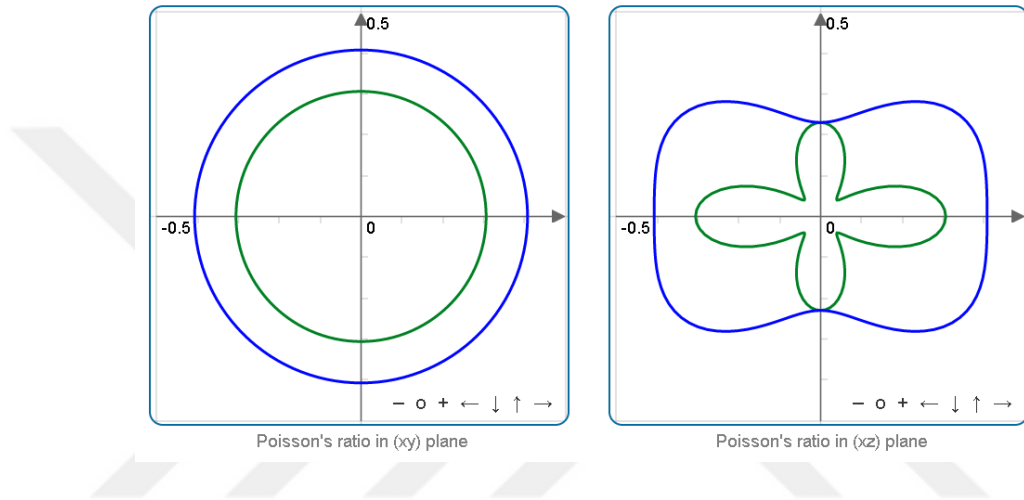
İncelenen kristallerin kesme modülü ve Poisson oranları için sonuçlar benzer eğilim göstermektedir (Bkz. Şekil 5.13-5.14). Bu modüllerin maksimum-minimum oranları ve yönelimlerine de Çizelge 5.10-5.11'den ulaşıla bilinir.



Şekil 5.13. LaAuSb kristalinin xy- ve xz-düzlemlerinde kesme modülünün değişimi.

Çizelge 5.9. Kesme modülünün (G , GPa) hesaplanan maksimum-minimum değerleri ve yönelimleri.

Malzeme	$G_{\min}$ (Doğrultu)	$G_{\max}$ (Doğrultu)
LaAuSb	26.8 (-0.71 0.71 0)	42.1 (0 0 1)
CeAuSb	28.9 (0.71 0.00 0.71)	44.2 (0 0 1)
PrAuSb	29.4 (0.50 0.50 0.71)	44.8 (0 0 1)



Şekil 5.14. LaAuSb kristalinin xy - ve xz - düzlemlerinde Poisson oranının değişimi.

Çizelge 5.10. Poisson oranının (ν) hesaplanan maksimum-minimum değerleri ve yönelimleri.

Malzeme	$G_{\min}$	$G_{\max}$
LaAuSb	0.053331 (0.70 0.00 -0.71)	0.46373 (0.91 0.00 -0.41)
CeAuSb	0.056346 (0.70 0.00 -0.71)	0.42839 (-0.88 0.00 0.47)
PrAuSb	0.048393 (0.52 0.47 -0.71)	0.44835 (-0.64 0.64 0.43)

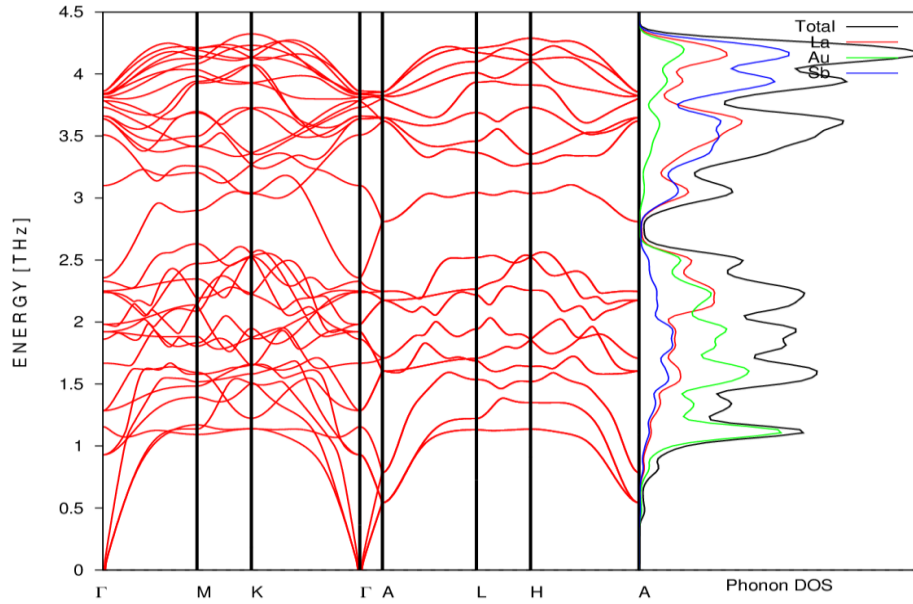
5.4 Titreşimsel Özellikler

Kuramsal yaklaşımlardan kararlılık tespitinde en sağlıklı yöntemlerden biri de fonon dağılımı incelemesidir. Titreşim modlarının tamamının sıfırdan büyük olması bir kararlılık göstergesidir. Bu tez çalışmasında fonon dağılımları ve fonon durum yoğunlukları VASP programı ve Phonopy [50, 51, 59] program paketi kullanılarak

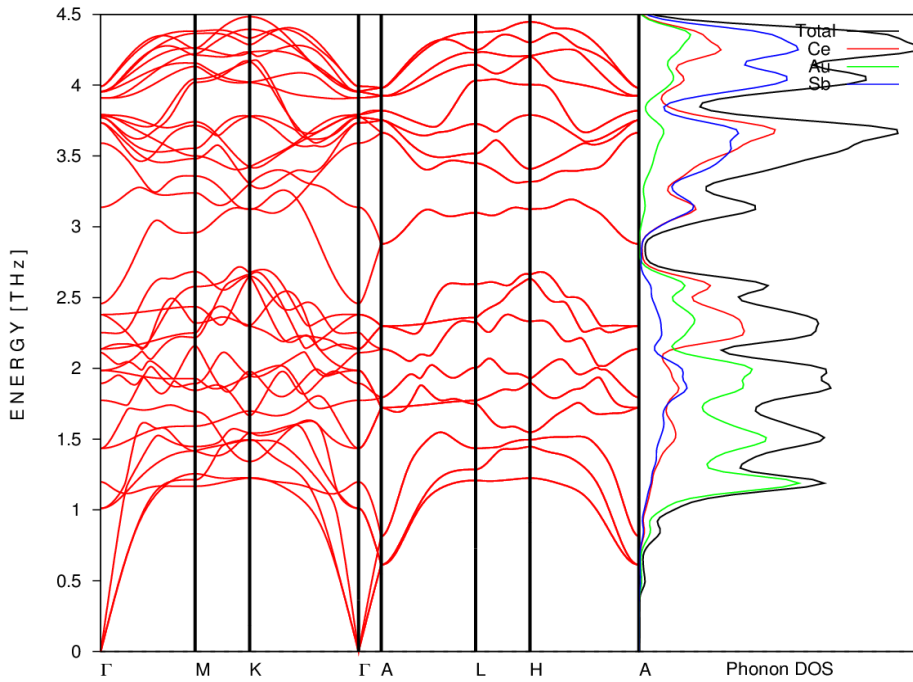
elde edildi. Devamında yine Phonopy kodu kullanılarak fonon dağılımları, fonon durum yoğunluğu ve sıcaklığa bağlı termodinamik özellikleri belirlendi.

5.4.1 Fonon dağılımı ve fonon durum yoğunluğu

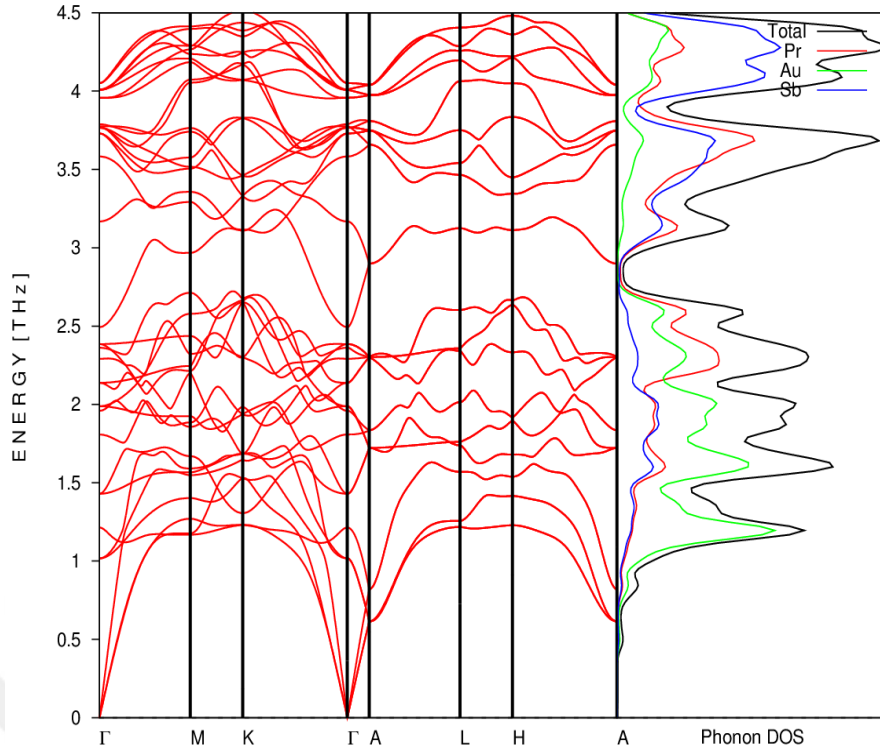
İncelenen kristallerin fonon dağılımları ve fonon durum yoğunlukları Şekil 5.3’de tanımlanan yüksek simetri noktaları boyunca hesaplanarak Şekil 5.14-16’da verildi.



Şekil 5.15. LaAuSb kristalinin fonon dağılımı ve fonon durum yoğunluğu eğrileri.



Şekil 5.16. CeAuSb kristalinin fonon dağılımı ve fonon durum yoğunluğu eğrileri.



Şekil 5.17. PrAuSb kristalinin fonon dağılımı ve fonon durum yoğunluğu eğrileri.

İncelenen YPtAs-tipi hekzagonal yapı ilkel birim hücresinde $N=12$ adet atom vardır (4 Ln, 4 Au ve 4 Sb). Bu bileşiklerin fonon dağılımlarında $3N=36$ (3 akustik, 33 optik) fonon dalı vardır.

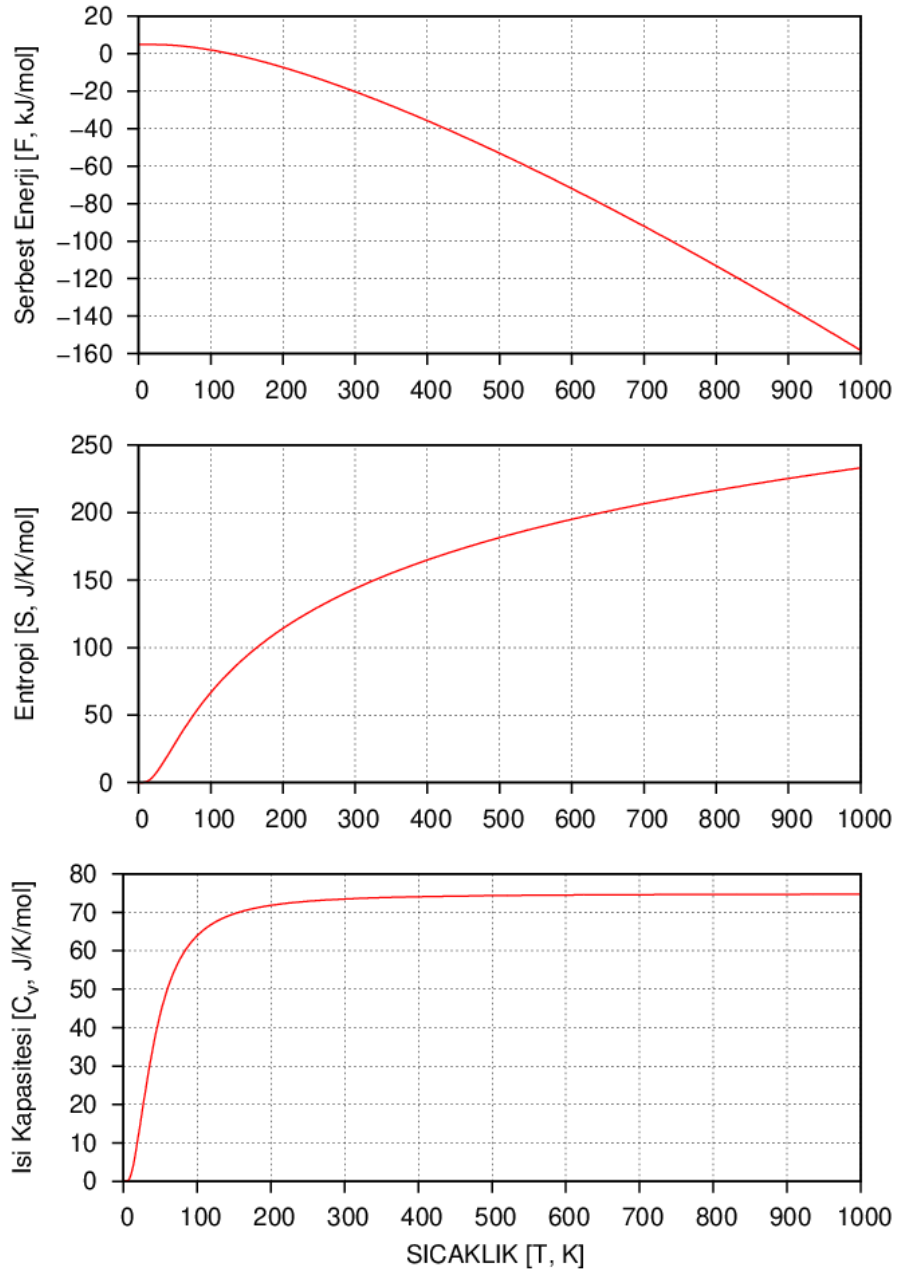
Şekil 5.15-17’den da anlaşılacağı gibi tüm incelenen malzemeler fonon dağılımlarında negatif frekans gözlenmediğinden titreşimsel kararlılık sergilemektedir. Γ yüksek simetri noktasında hesaplanan temel titreşim frekansları ve simetrileri Çizelge 5.11’de sunulmuştur. La-Ce-Pr için bu frekanslar kütle arttıkça bir miktar artış gözlenmiştir. Bu çizelgede sıfır olan akustik modlar listelenmemiştir. Her üç kristalde sürekli fonon dağılıma sahipken 2.5-3.0 THz arasında sanal bir boşluk vardır. “Bu aralıklar THz algılayıcılar için de önem arz etmektedir” [24].

Fonon durum yoğunlukları incelendiğinde Şekil 5.15-5.17 düşük ve orta frekanslarda titreşimlerin Altın ve lantanit atomlarından, yüksek frekanslarda ise antimon atomlarından kaynaklandığı görülmektedir. Bu elementlerin kütleleri ile ilişkili olduğundan beklenen bir durumdur.

Çizelge 5.11. Bileşikler için hesaplanan Γ noktası temel titreşim modları ve frekansları.

Simetri	LaAuSb	CeAuSb	PrAuSb
E _{2g}	0.93	1.012	1.018
B _{2g}	1.155	1.198	1.214
E _{2u}	1.286	1.435	1.43
A _{2u}	1.668	1.774	1.808
B _{1u}	1.862	1.894	1.96
E _{1g}	1.921	1.985	1.988
E _{1u}	1.982	2.111	2.138
A _{1g}	2.238	2.137	2.291
E _{2u}	2.25	2.252	2.362
B _{1u}	2.329	2.379	2.385
B _{2g}	2.356	2.458	2.494
A _{1g}	3.1	3.138	3.168
A _{2u}	3.508	3.59	3.583
E _{2g}	3.638	3.734	3.729
E _{1u}	3.66	3.771	3.764
A _{2u}	3.73	3.782	3.768
B _{2g}	3.783	3.789	3.776
B _{1u}	3.783	3.793	3.788
E _{1g}	3.813	3.91	3.957
E _{2g}	3.836	3.954	4.009
E _{2u}	3.843	3.956	4.01
E _{1u}	3.861	3.992	4.051

Ayrıca, bileşiklerin sıcaklığa bağlı serbest enerji, entropi ve ısı kapasiteleri elde edilerek sadece LaAuSb için Şekil 5.18’de görselleştirilmiştir (CeAuSb ve PrAuSb bileşikleri LaAuSb ile benzer eğilimler sergilediğinden sunulmadı). Artan sıcaklıkla serbest enerjinin düştüğü, entropinin ise arttığı gözlemlendi. Düşük sıcaklıklarda (0-25 K) ısı kapasitesinin T^3 ile arttığı, 350 K seviyesinde ise Dulong-Petit limitine (atom başına $\sim 3R$ J/K/mol) ulaştığı görülmektedir. Ayrıca oda sıcaklığında hesaplanan termodinamik özelliklerin değerleri bilgi amaçlı Çizelge 5.13’te listelenmiştir.



Şekil 5.18. LaAuSb kristalinin sıcaklığa bağlı serbest enerji, entropi ve ısı kapasitesi değişimi.

Çizelge 5.12. Bileşikler için oda sıcaklığında (300 K) hesaplanan termodinamik değerler (Serbest Enerji [F], Entropi [S] ve Isı Kapasitesi [C_v]).

Bileşik	F [kJ/mol]	S [J/K/mol]	C _v [J/K/mol]
LaAuSb	-20.2473	143.6984	73.4584
CeAuSb	-19.616875	141.672975	73.3872
PrAuSb	-19.42715	141.06305	73.36515

6. SONUÇLAR

Bu tez çalışmasında LnAuSb ($\text{Ln}=\text{La, Ce, Sb}$) kristallerinin fiziksel özellikleri yoğunluk fonksiyoneli teorisi (DFT) ve genelleştirilmiş gradyent yaklaşımı kullanılarak tahmin edildi.

Hesaplanan yapı parametrelerinin deneysel verilerle uyumlu olduğu bulundu. İncelenen 3kristalindeYPtAs-tipi yapıda hesaplanan elastik sabitlerinden mekanik kararlı oldukları görüldü. Titreşimsel olarak da kararlı bulunan bileşiklerin incelenen elektronik yapılarından iletken karakter sergiledikleri belirlendi.

Mekanik özelliklerinin incelenmesi sonucu LnAuSb ($\text{Ln}=\text{La, Ce, Pr}$) katılarının yumuşak ve sünek olduğu belirlendi. Ayrıca polikristal etkin bulk, kesme, Young modülleri ve Poisson oranı hesaplanarak yorumlandı. Malzemelerin hidrostatik basınca ve kesme zoruna karşı $\sim\%4$ ve $\%3$ civarında anizotropik karakter sergilediği belirlendi. Anizotropik özellikleri detaylı incelemek için xy ve xz düzlemlerinde yönelime bağlı Young modülü, sıkışabilirlik, kesme modülü ve Poisson oranı incelendi. Bu özelliklerin hangi yönelimler boyunca minimum ve maksimum değerler aldığı belirlendi.

Kristallerin fonon dağınımı ve fonon durum yoğunlukları çizdirilerek yorumlandı. Titreşimsel kararlı olduğu görülen sistemlerin 2.5-3.0 THz civarında bir spektrum aralığı sergilediği belirlendi. Tüm fonon frekansları pozitif ve hiçbirisi sıfırın altında olmadığından bu bileşiğimizin titreşimsel olarak kararlı olduğunu gösterir. 0-600 K aralığında sıcaklığa bağlı serbest enerji, entropi ve ısı kapasiteleri incelenerek yorumlandı.

Bu bileşiklerin elastik, elektronik ve titreşimsel özellikleri ilk kez bu tez çalışmasında incelendiğinden bundan sonra yapılacak çalışmalara kaynak olacağı düşünülmektedir.

KAYNAKLAR

1. Seibel, E. M., Schoop, L. M., Xie, W., Gibson, Q. D., Webb, J. B., Fucillo, M. K., Krizan, J.W. ve Cava, R. J., 2015. Gold–gold bonding: The key to stabilizing the 19-electron ternary phases LnAuSb ($\text{Ln} = \text{La}–\text{Nd}$ and Sm), *Journal of the American Chemical Society*, 137, 1282-1289.
2. Berke, S. B., 2014. Eskişehir-Beylikahır kompleks cevheri lantanit grubu elementlerin toryum ve uranyumdan metalurjik proseslerle ekstraksiyonu, Yüksek Lisans Tezi, İstanbul Teknik Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, İstanbul.
3. Nazlı, S., 2016. Kübik yapıdaki Os_2YPb ($\text{Y} = \text{Sc}, \text{Ti}, \text{V}, \text{Cr}, \text{Mn}, \text{Fe}, \text{Co}, \text{Ni}, \text{Cu}, \text{Zn}$) heusler bileşiklerinin yapısal, elektronik, elastik ve titreşimsel özelliklerinin yoğunluk fonksiyonel teorisi ile incelenmesi, Yüksek Lisans Tezi, Gazi Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Ankara.
4. Born, M. ve Oppenheimer, R., 1927. Zur quantentheorie der molekeln, *Ann. Phys.*, 389, 457-484.
5. Sholl, D. S. ve Steckel J. A., 2012. Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi, Aydın S., Körözlü N., 1. baskı, Nobel Yayınları, Ankara
6. Hohenberg, P. ve Kohn, W., 1964. In homogeneous electron gas. *Physical Review*, 136(3B), B864-B871.
7. Kohn, W. ve Shom, L. J., 1965. Self-consistent equations including Exchange and Correlation Effects, *Phys. Rev.*, 140, A1133-A1138.
8. Karadağ, S., 2017. LaRu_2P_2 Malzemesinin fiziksel özelliklerinin yoğunluk fonksiyonel teorisi kullanılarak incelenmesi, Yüksek Lisans Tezi, Sakarya Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Sakarya.
9. Dikici M., 2012. Katıhal Fiziği, 2. baskı, Seçkin Yayınları, Ankara.
10. Mehmet, K., 2004. X-Işınları Kristalografisi, baskı 1, Seçkin yayınları, Ankara.
11. Akbalı B., 2018. Monitoring The Diffusion and Degradation Characteristics of Crystals via Raman Spectroscopy, İzmir.
12. Sürücü, G., 2009. Baz A_3B (L1_2) tipi alaşımların yapısal, elektronik, elastik, termodinamik ve titreşimsel özelliklerinin ab initio yöntemle incelenmesi, Yüksek Lisans Tezi, Gazi Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Ankara.
13. Hill, R., 1952. The Elastic behaviour of a crystalline aggregate, *Proc, Phys. Soc., Section A*, 65, 349-354.
14. Özyar, Ü., 2014. TiSiSb , TiGeSb , ZrSiSb , ZrGeSb , HfSiSb ve HfGeSb bileşiklerin elastik, elektronik ve titreşimsel özellikleri, Yüksek Lisans Tezi, Aksaray Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Aksaray.

15. Pugh, S.F., 1954. XCII. Relations between the elastic moduli and the plastic properties of polycrystalline pure metals, Philos. Mag. Ser. 7, 45, 823-843.
16. Özışık, H., 2012. NaIn, NaTI, Na-As, K-As ve Rb-As bileşiklerinin yapısal, mekanik ve elektronik özelliklerinin abinitio yöntemlerle hesaplanması, Doktora Tezi, Gazi Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Ankara.
17. Majda, J. A. ve Wang, X., 2006. The emergence of large-scale coherent structure under small-scale random bombardments, Communications on Pure and Applied Mathematics, 59, 467-500.
18. Lochun, B., Krajewski, T. ve Martinetti, P., 2001. Distances in finites paces from noncommutative geometry, Journal of Geometry and Phys., 37, 100-125.
19. Yıldırım, U., 2017. XZn_2SB_2 ve $XCdSb_2$ ($X=Sr$ ve Li) bileşiklerinin fiziksel özelliklerinin yoğunluk fonksiyonel teorisi kapsamında incelenmesi, Yüksek Lisans Tezi, Mehmet Akif Ersoy Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Burdur.
20. Baysal, M. B., 2016. $LaMgNi_4H_x$ ($x=1, 4, 7$) bileşiğinin mekanik ve titreşimsel özellikleri üzerine hidrojenin etkisi, Yüksek Lisans Tezi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Aksaray.
21. Serway, R. A. ve Beichner, R. J., 2007. Fen ve Mühendislik için Fizik 1, Prof. Dr. Kemal Çolakoğlu, Palme Yayınları, Ankara.
22. Kohn, W., 1999. Nobel Lecture: Electronic structure of matter-wave Functions and density functionals, Rev. Mod. Phys., 71, 1253-1266.
23. Kocagöz, Ö. D., 2016. CeX_2In_4 ($X=Pt, Pd$) bileşiklerinin yapısal, elektronik, mekanik ve titreşimsel özelliklerinin kurumsal incelenmesi, Yüksek Lisans Tezi, Aksaray Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Aksaray.
24. Deligöz, E., Ozisik, H. ve Colakoğlu, K., 2014. Theoretical predictions of the structural, mechanical and lattice dynamical properties of XW_2 ($X=Zr, Hf$) Laves phases, Philosophical Magazine, 94, 1379-1392.
25. Geldi C. M., 2009. Yoğunluk Fonksiyonel teorisi ile Be ve Ti Bazlı sistemlerin elektronik yapılarının incelenmesi, Yüksek Lisans Tezi, Ankara Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Ankara.
26. Schreiber, E., Anderson O.L. ve Soga N., 1973. Elastic Constants and Their Measurements, McGraw-Hill, New York, 1-34.
27. Yavuz, M., 2018. Yoğunluk fonksiyonel teorisi ile baz kristallerin elektronik ve titreşim özelliklerinin incelenmesi, Doktora Tezi, Yıldız Teknik Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, İstanbul.
28. Hill, M. C., 1995. Fizik, baskı 1, Litaratür Yayıncılık, İstanbul.
29. Çolakoğlu, K., 1985. Temel Fizik, baskı 2, Hatipoğlu yayınları, Ankara.

30. Grimvall, G., 1986. Thermophysical Properties of Materials, North-Holland, Amsterdam, 28-29.
31. Slater J. C., 1930. Note on Hartree's Method, Phys. Rev., 35, 210-211.
32. Callister, W. C. ve Rethwisch, D. G., 2013. Malzeme Bilimi ve Mühendisliği, Nobel Yayınları.
33. Düz, I., 2018. Hg kalkojenit malzemelerin yoğunluk fonksiyonel teorisine dayalı ab-initio yöntemi ile fiziksel özelliklerinin belirlenmesi, Doktora Tezi, Pamukkale Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Denizli.
34. Okvuran, O., 2017. Üçlü Talyum kalkojenlerinin Tl_2MQ_3 (M= Zr, Hf; Q=S, Se, Te) mekanik kararlılıklarının ve elektronik yapılarının ab-initio metoduyla incelenmesi, Yüksek Lisans Tezi, Aksaray Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Aksaray.
35. Erdem, E., 2017. Pt-Cu atom topaklarının genetik algoritma ve yoğunluk fonksiyonel teorisi ile global optimizasyonu, Koç Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, İstanbul.
36. Karaca, E., 2017. Hacim merkezli tetragonal yapılarda süper iletkenliğin yoğunluk fonksiyonel teorisi kullanılarak incelenmesi, Doktora Tezi, Sakarya Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Sakarya.
37. Kutlu, E., 2016. Al, Ga, In ve As safsızlıklarının beta- Si_3N_4 bileşiğinin elektronik ve optik özelliklerine etkisinin yoğunluk fonksiyonel teorisi ile incelenmesi, Yüksek Lisans Tezi, Gazi Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Ankara.
38. Umucu, R., 2016. Fe-Ti-Si üçlü Heusler alaşımların yapısal, elektronik ve manyetik ve mekanik özelliklerinin yoğunluk fonksiyonel teorisi ile incelenmesi, Yüksek Lisans Tezi, Ahi Evran Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Kırşehir.
39. Türkdal, N., 2015. $ZrMo_2$ ve $HfMo_2$ bileşiklerinin kararlılıklarının ab-initio yöntemiyle incelenmesi, Yüksek Lisans Tezi, Aksaray Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Aksaray.
40. Karaca, M., 2015. CsSe bileşiğinin yarımetalik özelliklerinin yoğunluk fonksiyonel teorisi ile incelenmesi, Yüksek Lisans Tezi, Nevşehir Hacı Bektaş Veli Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Nevşehir.
41. Soykan, C., 2014. Yeni manyetik şekil hafızalı alaşımların yoğunluk fonksiyonel teorisine dayalı ab-initio metodu ile tasarlanması: Ni-Fe-Ga, Doktora Tezi, Pamukkale Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Denizli.
42. Köker, Ö., 2014. TIBr ve TICI bileşiklerinin taban durum özelliklerinin yoğunluk fonksiyonel teorisi ile incelenmesi, Yüksek Lisans Tezi, Gazi Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Ankara.

43. Gezci, S., 1991. Kristal Yapı, Katıhal Fiziği, İstanbul Teknik Üniversitesi, İstanbul., 1-25.
44. Martin, R. M., 2004. Electronic Structure, Cambridge University Press, Cambridge, 73-85.
45. Page, Y.L. ve Saxe, P., 2002. Symmetry general least-squares extraction of elastic data for strained materials from ab initio calculations of stress, Phys. Rev. B, 65, 104104.
46. Özışık, H., 2011. GeI₂, Re₂C, La-Bi ve Ln₂O₃ (Ln=Sc, Y, La-Lu) bileşiklerinin yapısal, elektronik, mekanik ve titreşimsel özelliklerinin ab initio yöntemlerle incelenmesi, Doktora Tezi, Gazi Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Fizik Anabilim Dalı, Ankara.
47. Liu, Y., Hu, W.C., Li, D.J., Li, K., Jin, H. L., Xu, Y. X., Xu, C.S. ve Zeng, X. Q., 2015. Mechanical, electronic and thermodynamic properties of C14-type AMg₂ (A=Ca, Sr and Ba) compounds from first principles calculations, Comp. Mater. Sci., 97, 75-85.
48. Bannikov, V., Shein, V. ve Ivanovskii, I.R., 2007. Electronic structure, chemical bonding and elastic properties of the first thorium-containing nitride perovskite TaThN₃, Phys. Stat. Sol., 3, 89-91.
49. Gaillac, R., Pullumbi, P. ve Coudert, F.-X., 2016. ELATE: an open-source online application for analysis and visualization of elastic tensors, Journal of Physics: Condensed. Matter, 28, 275201.
50. Togo, A., Oba, F. ve Tanaka, I., 2008. First-principles calculations of the ferro elastic transition between rutile-type and CaCl₂-type SiO₂ at high pressures, Phys. Rev. B, 78, 134106.
51. Togo, A. ve Tanaka, I., 2015. First principles phonon calculations in materials science, Scr. Mater., 108, 1-5.
52. URL-1 <http://www.katihall.sakarya.edu.tr/kutuphane/z_yapilar.htm>, Erişim Tarihi: 08.05.2019.
53. URL-2 <<https://slideplayer.biz.tr/slide/13259641>>, Erişim Tarihi: 08.05.2019.
54. URL-3 <<https://studylibtr.com>>, Erişim Tarihi: 08.05.2019.
55. URL-4 <<http://www.serdarkorkut.com/2017/05/26/poisson-orani-nedir>>, Erişim Tarihi: 08.05.2019.
56. URL-5 <<https://www.humbarahane.com/poisson-orani>>, Erişim Tarih 08.05.2019.

57. URL-6

<<http://www.tekstilteknik.com.tr/negatifyondekipozitifgucauxeticmalzemeler>>
, Eriřim Tarihi: 08.05.2019.

58. URL-7 < <http://progs.coudert.name/elate> >, Eriřim Tarihi: 08.05.2019.

59. URL-8 < <http://atztogo.github.io/phonopy/vasp.html> >, Eriřim Tarihi: 08.05.2019



ÖZGEÇMİŞ

Adı Soyadı : Ayşegül KARADAĞ
Doğum Tarihi ve yeri : 1991, Merkez/ADİYAMAN
E-posta adresi : aysegulkaradag01@gmail.com

EĞİTİM BİLGİLERİ

Lisans : Aksaray Üniversitesi, Fizik Bölümü, 2009-2015
Yüksek Lisans : Aksaray Üniversitesi, Fizik ABD, 2016-2019