

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

**Mn – V (N,P,AS,Sb,Bi) BİLEŞİKLERİNİN
YAPISAL,ELEKTRONİK VE MANYETİK
ÖZELLİKLERİNİN TEORİK OLARAK İNCELENMESİ**



YÜKSEK LİSANS TEZİ

Narin NURCAN

Enstitü Anabilim Dalı : FİZİK

Tez Danışmanı : Dr. Öğr. Üyesi Metin ASLAN

Eylül 2019

T.C.
SAKARYA ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

**Mn – V (N,P,AS,Sb,Bi) BİLEŞİKLERİNİN
YAPISAL,ELEKTRONİK VE MANYETİK
ÖZELLİKLERİNİN TEORİK OLARAK İNCELENMESİ**

YÜKSEK LİSANS TEZİ

Narin NURCAN

Enstitü Anabilim Dalı : FİZİK

Bu tez 27.09.2019 tarihinde aşağıdaki jüri tarafından oybirliği / oyçokluğu ile kabul edilmiştir.

Dr.Öğr.Üyesi
Metin ASLAN
Jüri Başkanı

Prof.Dr.
Elif AKALIN
Üye

Dr.Öğr.Üyesi
Nagihan DELİBAŞ
Üye



BEYAN

Tez içindeki tüm verilerin akademik kurallar çerçevesinde tarafımdan elde edildiğini, görsel ve yazılı tüm bilgi ve sonuçların akademik ve etik kurallara uygun şekilde sunulduğunu, kullanılan verilerde herhangi bir tahrifat yapılmadığını, başkalarının eserlerinden yararlanılması durumunda bilimsel normlara uygun olarak atıfta bulunulduğunu, tezde yer alan verilerin bu üniversite veya başka bir üniversitede herhangi bir tez çalışmasında kullanılmadığını beyan ederim.

TEŞEKKÜR

Yüksek lisans eğitimim süresince değerli bilgi ve deneyimlerinden yararlandığım, tezimin araştırılması ve planlanmasında bana yol gösterip laboratuvar olanakları konusunda anlayış ve yardımlarını esirgemeyen, tezimin yazılmasına kadar tüm aşamalarında bana destek olan , sürekli teşvik eden , değerli danışman hocam Dr.Öğr.Üyesi Metin ASLAN'a teşekkürlerimi sunarım.

Tez yazımı sırasında yaşamım boyunca benden yardımlarını ve manevi desteklerini esirgemeyen anne ve babama teşekkür ederim.

İÇİNDEKİLER

TEŞEKKÜR	i
İÇİNDEKİLER	ii
SİMGELER VE KISALTMALAR LİSTESİ	v
ŞEKİLLER LİSTESİ.....	vi
TABLOLAR LİSTESİ	xiii
ÖZET	xiv
SUMMARY	xv
BÖLÜM 1.	
GİRİŞ	1
BÖLÜM 2.	
KAYNAK ARAŞTIRMASI	2
2.1. Mn Elementi ve Özellikleri	2
2.2. N Elementi ve Özellikleri	3
2.3. P Elementi ve Özellikleri	4
2.4. As Elementi ve Özellikleri	5
2.5. Sb Elementi ve Özellikler	6
2.6. Bi Elementi ve Özellikler	7
BÖLÜM 3.	
MATERYAL VE YÖNTEM	8
3.1. Kristal Yapı	8
3.2. Metallerin Kristal Yapıları	9
3.2.1. Hacim merkezli kübik yapı	9
3.2.2. Yüzey merkezli kübik yapı	9

3.2.3. Sıkı Düzen Hexagon Yapı	10
3.3. Yoğunluk Fonksiyon Teorisi	10
3.3.1. Çok cisim problemi	11
3.3.2. Born-Oppenheimer yaklaşımı	12
3.3.3. Hartree- Fock metodu	12
3.4. WIEN2k Yazılımı	13
3.4.1. Case.struct ve case.inst dosyalarının oluşturulması	15
3.4.2. SCF Hesapları.....	17
3.5. Hesaplama Özellikleri	17
3.5.1. Elektron yoğunluğu	18
3.5.2. Durum yoğunluğu.....	18
3.5.3. Band hesabı	19
 BÖLÜM 4.	
ARAŞTIRMA BULGULARI Mn-V (N,P,As,Sb,Bi) Bileşikleri.....	20
4.1. Mn-N Bileşikleri	20
4.1.1. Mn-N bileşiklerinin yapısı ve optimizasyonu	20
4.1.2. Mn-N bileşiklerinin elektron yoğunluğu	25
4.1.3. Mn-N bileşiklerinin durum yoğunlukları grafikleri	32
4.1.4. Mn-N bileşiklerinin bant grafikleri	47
4.1.5. Mn-N bileşiklerinin manyetik alan hesap sonuçları	52
4.2. Mn-P Bileşikleri	55
4.2.1. Mn-P bileşiklerinin yapısı ve optimizasyonu	56
4.2.2. Mn-P bileşiklerinin elektron yoğunluğu	58
4.2.3. Mn-P bileşiklerinin durum yoğunlukları grafikleri	62
4.2.4. Mn-P bileşiklerinin band grafikleri	69
4.2.5. Mn-P bileşiklerinin manyetik alan hesap sonuçları.....	72
4.3. Mn-As Bileşikleri	74
4.3.1. Mn-As bileşiklerinin yapısı ve optimizasyonu	74
4.3.2. Mn-As bileşiklerinin elektron yoğunluğu.....	76
4.3.3. Mn-As bileşiklerinin durum yoğunlukları grafikleri	78
4.3.4. Mn-As bileşiklerinin band grafikleri	80

4.3.5.Mn-As bileşiklerinin manyetik alan hesap sonuçları	82
4.4. Mn-Sb Bileşikleri	83
4.4.1. Mn-Sb bileşiklerinin yapısı ve optimizasyonu	83
4.4.2. Mn-Sb bileşiklerinin elektron yoğunluğu	85
4.4.3. Mn-Sb bileşiklerinin durum yoğunlukları grafikleri	88
4.4.4. Mn-Sb bileşiklerinin band grafikleri	91
4.4.5. Mn-Sb bileşiklerinin manyetik alan hesap sonuçları	92
4.5. Mn-Bi Bileşikleri	93
4.5.1. Mn-N bileşiklerinin yapısı ve optimizasyonu	93
4.5.2. Mn-N bileşiklerinin elektron yoğunluğu	94
4.5.3.Mn-n bileşiklerinin durum yoğunlukları grafikleri	97
4.5.4.Mn-N bileşiklerinin band grafikleri	100
4.5.5.Mn-N bileşiklerinin manyetik alan hesap sonuçları	102
BÖLÜM 5.	
TARTIŞMA VE SONUÇ	103
KAYNAKLAR.....	106
ÖZGEÇMİŞ	107

SİMGELER VE KISALTMALAR LİSTESİ

APW	: Arttırılmış düzlem dalgaları
DFT	: Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi
DOS	: Density of States
$\hat{e}$	: Elektron EF Fermi Enerji
EF	: Fermi Enerji
eV	: Elektronvolt
E_{xc}	: Değiş-tokuş ve karşılıklı etkileşme enerji
F_{hk}	: Hohenberg – Kohn fonksiyonu
GGA	: Genelleştirilmiş gradyant yaklaşımı
H_F	: Hartree Fock
KS	: Kohm Sham
LAPW	: Lineer arttırılmış düzlem dalgaları
LDA	: Yerel yoğunluk yaklaşımı
RMT	: Muffin-Tin yarıçapı
s , p , d	: Band isimleri

ŞEKİLLER LİSTESİ

Şekil 3.1. Metallerde kristal yapılar	8
Şekil 3.2. Hacim Merkezli Kübik Yapı.....	9
Şekil 3.3. Yüzey Merkezli Kübik Yapı.....	10
Şekil 3.4. Sıkı Paket Hexagonal Yapı	10
Şekil 3.5. Wien2k akış şeması.....	14
Şekil 3.6. Wien2k giriş ekranı.....	15
Şekil 3.7. Wien2k data giriş ekranı	15
Şekil 3.8. Başlangıç hesabı ekran.....	16
Şekil 3.9. Yapı dosyası.....	16
Şekil 3.10. in1_st dosyası.....	16
Şekil 3.11. Scf döngü ekranı	17
Şekil 3.12. Elektron yoğunluğu hesabı ekranı	18
Şekil 3.13. DOS başlangıç ekranı	19
Şekil 4.1. MnN0.89 bileşiğinin kristalyapısı.....	20
Şekil 4.2. MnN0.43 bileşiğinin kristal yapısı.....	20
Şekil 4.3. MnN0.43 bileşiğinin kristal yapısı.....	21
Şekil 4.4. Mn4N bileşiğinin kristal yapısı.....	21
Şekil 4.5. Mn3N2 bileşiğinin kristal yapısı.....	21
Şekil 4.6. MnN0.89 bileşiğinin enerji-hacim grafiği	22
Şekil 4.7. MnN0.43 bileşiğinin enerji-hacim grafiği	22
Şekil 4.8. MnN0.43 bileşiğinin enerji-hacim grafiği	23
Şekil 4.9. Mn4N bileşiğinin enerji-hacim grafiği	23
Şekil 4.10. Mn4N bileşiğinin enerji-hacim grafiği	24
Şekil 4.11. Mn3N2 bileşiğinin enerji-hacim grafiği	24
Şekil 4.12. MnN0.89 bileşiğinin yapı dosyası	26
Şekil 4.13. MnN0.43 (MnN20) yapı dosyası	26

Şekil 4.14. MnN0.43 (MnN182) yapı dosyası	26
Şekil 4.15. MnN221 yapı dosyası	26
Şekil 4.16. Mn3N2 yapı dosyası	26
Şekil 4.17. MnN0.89 elektron yoğunluğu spin up	27
Şekil 4.18. MnN0.89 elektron yoğunluğu spin down	27
Şekil 4.19. MnN0.43 elektron yoğunluğu spin up	28
Şekil 4.20. MnN0.43 elektron yoğunluğu spin down	28
Şekil 4.21. MnN0.43 (MnN20) elektron yoğunluğu spin up	29
Şekil 4.22. MnN0.43 (MnN20) elektron yoğunluğu spin down	29
Şekil 4.23. Mn4N (MnN221) elektron yoğunluğu spin up	30
Şekil 4.24. Mn4N (MnN221) elektron yoğunluğu spin down	30
Şekil 4.25. Mn3N2 (MnN39) elektron yoğunluğu spin up	31
Şekil 4.26. Mn3N2 (MnN39) elektron yoğunluğu spin down	31
Şekil 4.27. MnN0.89 (MnN225) DOS spin up	32
Şekil 4.28. MnN0.89 (MnN225) DOS spin down	32
Şekil 4.29. MnN0.89 (MnN225) DOS spin up	33
Şekil 4.30. MnN0.89 (MnN225) DOS spin down	33
Şekil 4.31. MnN0.89 (MnN225) DOS p	34
Şekil 4.32. MnN0.89 (MnN225) DOS spd	34
Şekil 4.33. MnN0.43 (MnN182) spin up	35
Şekil 4.34. MnN0.43 (MnN182) spin down	35
Şekil 4.35. MnN0.43 (MnN182) spin up	36
Şekil 4.36. MnN0.43 (MnN182) spin down	36
Şekil 4.37. MnN0.43 (MnN182) DOS p	37
Şekil 4.38. MnN0.43 (MnN182) DOS spd	37
Şekil 4.39. MnN0.43 (MnN20) spin up	38
Şekil 4.40. MnN0.43 (MnN20) spin down	38
Şekil 4.41. MnN0.43 (MnN20) spin up	39
Şekil 4.42. MnN0.43 (MnN20) spin up	39
Şekil 4.43. MnN0.43 (MnN20) DOS sp	40
Şekil 4.44. MnN0.43 (MnN20) DOS spd	40
Şekil 4.45. Mn4N spin up	41

Şekil 4.46. Mn4N spin down.....	41
Şekil 4.47. Mn4N spin up	42
Şekil 4.48. Mn4N spin down.....	42
Şekil 4.49. Mn4N DOS sp	43
Şekil 4.50. Mn4N DOS spd	43
Şekil 4.51. Mn3N2 spin up	44
Şekil 4.52. Mn3N2 spin down.....	44
Şekil 4.53. Mn3N2 DOS	45
Şekil 4.54. Mn3N2 DOS	45
Şekil 4.55. Mn3N2 DOS sp	46
Şekil 4.56. Mn3N2 DOS spd	46
Şekil 4.57. MnN0.89 spin up	47
Şekil 4.58. MnN0.89 spin down.....	48
Şekil 4.59. MnN0.43 spin up	48
Şekil 4.60. MnN0.43 spin down.....	49
Şekil 4.61. MnN0.43 (MnN20) spin up	49
Şekil 4.62. MnN0.43 (MnN20) spin down	50
Şekil 4.63. MnN0.43 (Mn4N) spin up	50
Şekil 4.64. MnN0.43 (Mn4N) spin down	51
Şekil 4.65. MnN0.43 (Mn3N2) spin up	51
Şekil 4.66. MnN0.43 (Mn3N2) spin down	52
Şekil 4.67. Mn3P Bileşiğinin kristal yapısı.....	56
Şekil 4.68. Mn2P bileşiğinin kristal yapısı	56
Şekil 4.69. MnP Bileşiğinin kristal yapısı.....	56
Şekil 4.70. Mn3P bileşiğinin enerji-volum grafiği	57
Şekil 4.71. Mn2P bileşigini enerji-volum grafiği	57
Şekil 4.72. MnP Bileşiğinin enerji volum grafiği	58
Şekil 4.73. Mn2P elektron yoğunluğu spin up	59
Şekil 4.74. Mn2P elektron yoğunluğu spin down	60
Şekil 4.75. Mn3P elektron yoğunluğu spin up	60
Şekil 4.76. Mn3P elektron yoğunluğu spin down	61
Şekil 4.77. MnP elektron yoğunluğu spin up	61

Şekil 4.78. MnP elektron yoğunluğu spin down	62
Şekil 4.79. Mn2P DOS spin up	63
Şekil 4.80. Mn2P DOS spin down	63
Şekil 4.81. Mn2P DOS spin up	64
Şekil 4.82. Mn2P DOS spin down	64
Şekil 4.83. Mn2P DOS sp	65
Şekil 4.84. Mn2P DOS spd	65
Şekil 4.85. Mn3P DOS spin up	66
Şekil 4.86. Mn3P DOS spin down	66
Şekil 4.87. Mn3P DOS.....	67
Şekil 4.88. MnP DOS spin up	67
Şekil 4.89. MnP DOS spin down	68
Şekil 4.90. MnP DOS.....	68
Şekil 4.91. Mn2P band spin up	69
Şekil 4.92. Mn2P band spin down	70
Şekil 4.93. Mn3P band spin up	70
Şekil 4.94. Mn3P band spin down	71
Şekil 4.95. MnP band spin up	71
Şekil 4.96. MnP band spin down	72
Şekil 4.97. MnAs189 Bileşiğinin kristal yapısı	74
Şekil 4.98. MnAs63 Bileşiğinin kristal yapısı	74
Şekil 4.99. MnAs129 Bileşiğinin kristal yapısı	74
Şekil 4.100. MnAs189 enerji-volum grafiği	75
Şekil 4.101. MnAs63 enerji-volume grafiği	75
Şekil 4.102. MnAs62 enerji-volum grafiği	76
Şekil 4.103. MnAstetra elektron yoğunluğu spin up	77
Şekil 4.104. MnAstetra elektron yoğunluğu spin down.....	77
Şekil 4.105. MnAs194 elektron yoğunluğu spin up.....	78
Şekil 4.106. MnAs194 elektron yoğunluğu spin down.....	78
Şekil 4.107. MnAs194 DOS spin up.....	79
Şekil 4.108. MnAs194 DOS spin down.....	79
Şekil 4.109. MnAs63 DOS up	79

Şekil 4.110. MnAs194 up2	79
Şekil 4.111. MnAs63 up	79
Şekil 4.112. MnAs194 band up.....	80
Şekil 4.113. MnAs194 band down.....	81
Şekil 4.114. MnAshex up.....	81
Şekil 4.115. MnAshex down	82
Şekil 4.116. Mn1.1Sb kristal yapısı	84
Şekil 4.117. Mn2Sb kristal yapısı	84
Şekil 4.118. Mn1.1Sb ve Mn2Sb kristal yapısı.....	85
Şekil 4.119. MnSb194 elektron yoğunluğu spin up.....	86
Şekil 4.120. MnSb194 elektron yoğunluğu spin down.....	86
Şekil 4.121. MnSb129 elektron yoğunluğu spin up.....	87
Şekil 4.122. MnSb129 elektron yoğunluğu spin down.....	87
Şekil 4.123. MnSb194 band spin up	88
Şekil 4.124. MnSb194 band spin down	89
Şekil 4.125. MnSb194 DOS.....	89
Şekil 4.126. MnSb129 band spin up	90
Şekil 4.127. MnSb129 band spin down	90
Şekil 4.128. MnSb129 DOS.....	91
Şekil 4.129. MnSb194 spin up	93
Şekil 4.130. Mn2.23Bi1.88 ve MnBi bileşiklerinin kristal yapısı	93
Şekil 4.131. MnBi hex enerji-volum grafiği	94
Şekil 4.132. MnBi ortho enerji-volum grafiği	94
Şekil 4.133. MnBi hex elektron yoğunluğu spin up	95
Şekil 4.134. MnBi hex elektron yoğunluğu spin down.....	96
Şekil 4.135. MnBi ortho51 elektron yoğunluğu spin up.....	96
Şekil 4.136. MnBi ortho51 elektron yoğunluğu spin down.....	97
Şekil 4.137. MnBi hex DOS spin up.....	97
Şekil 4.138. MnBi hex DOS spin down.....	98
Şekil 4.139. MnBi hex DOS	98
Şekil 4.140. MnBi ortho51 DOS spin up	99
Şekil 4.141. MbBi ortho51 DOS spin down	99

Şekil 4.142. MnBiortho51 DOS.....	100
Şekil 4.143. MNBihex up	100
Şekil 4.144. MnBihex down.....	101
Şekil 4.145. MnBiortho up.....	101
Şekil 4.146. MnBiortho down.....	102



TABLolar LİSTESİ

Tablo 2.1. Mn elementinin özellikleri.....	3
Tablo 2.2. N elementinin özellikleri	4
Tablo 2.3. P elementinin özellikleri	5
Tablo 2.4. As elementinin özellikleri	6
Tablo 2.5. Sb elementinin özellikleri	6
Tablo 2.6. Bi elementinin özellikleri.....	7
Tablo 4.1. Mn-N bileşikleri simetri gubu	21
Tablo 4.2. Mn-N bileşikleri hacim hesap sonuçları	24
Tablo 4.3. Mn-P bileşikleri	56
Tablo 4.4. Mn-P bileşikleri hacim hesap sonuçları.....	58
Tablo 4.5. Mn-As bileşikleri	75
Tablo 4.6. Mn-As bileşikleri hacim hesap sonuçları	76
Tablo 4.7. Mn-Sb bileşikleri	84
Tablo 4.8. Mn-Sb bileşikleri hacim hesap sonuçları.....	85
Tablo 4.9. Mn-Bi bileşikleri.....	93
Tablo 4.10. Mn-Bi bileşikleri hacim hesap sonuçları	104
Tablo 4.11. Mn-V(N,P,As,Sb,Bi) bileşikleri hacim hesap sonuçları.....	105

ÖZET

Anahtar kelimeler: MnN, MnP, MnAs, MnSb, MnBi, özellikler

Yoğunluk fonksiyonel teorisi kullanarak Mn-V (N, P, As, Sb, Bi) bileşiklerinin yapısal, elektronik ve manyetik özelliklerini belirlemek için ilk prensipleri uyguladık. Hacim ve yapı optimizasyon hesaplamalarını kullanarak en kararlı yapı geometrisini ve minimum enerji kafes sabitlerini bulduk. Değişim ve korelasyon etkileri, Perdew ve arkadaşlarına göre genelleştirilmiş gradyan yaklaşımı kullanılarak elde edilir. Doğru bant aralığı sonuçları elde etmek için modifiye Becke-Johnson potansiyelini kullandık. Yapısal hesaplama göre, tüm bileşiklerin çeşitli kristal yapılarda oluştuğunu bulduk. Bant yapısı, bağlanma karakterleri ve manyetik davranış gibi malzemelerin bazı özelliklerini anlamak için durumların yoğunluğunu hesapladık. Elektronik bant hesaplamasından farklı dönüş yönlerinde farklı elektronik bant yapısı bulduk. Son olarak, Mn-V bileşiklerinin dört katkı aşırı ince manyetik alan özelliğini de hesapladık. Baskın etkinin fermi temas aşırı ince manyetik alanlarından geldiğini bulduk.

THEORETICAL INVESTIGATION of STRUCTURAL, ELECTRONIC AND MAGNETIC PROPERTIES of Mn-V (N, P, As, Sb, Bi) COMPOUNDS

SUMMARY

Keywords: Mn-N, MnP, MnAs, MnSb, MnBi, electronic structural properties

We have performed first principles method to determine structural, electronic and magnetic properties of Mn-V (N, P, As, Sb, Bi) compounds using density functional theory. We have found most stable structure geometry and minimum energy lattice constants with using volume and structure optimization calculation. The exchange and correlation effects are treated using generalized gradient approach based on Perdew et al. We have used modified Becke-Johnson potential to obtain accurate band gap results. From the structural calculation we have found that all compounds formed in various crystal structures. We have calculated the density of states in order to understand some properties of the materials such as the band structure, bonding characters and magnetic behavior. From the electronic band calculation we have found different electronic band structure at different spin directions. Finally, we have also calculated four contribution hyperfine magnetic field properties of Mn-V compounds. We have found that the dominant effect is comes from the fermi contact hyperfine magnetic fields. Some results of MnAs are given below as an example with different (tetra, hex) crystal structure.

BÖLÜM 1. GİRİŞ

Son yıllarda teorik çalışmalarda kazanılan gelişmeler bir atomik yapının kolayca oluşturulması ve incelenmesine olanak sağlamaktadır. Teorik tabanlı bu yazılımlardan biri DFT tabanlı WIEN2k yazılımıdır. Bu Yazılım sayesinde istenilen kristal yapı gerçeğe çok yakın olacak şekilde simüle edilip birçok fiziksel özelliği deneysel sonuçlarla uyumlu olacak şekilde elde edebilmektedir. Bu durumu göz önünde bulundurarak geçiş elementlerinden biri olan yüksek manyetik özelliğe sahip Mn atomunun VA grubu elementleriyle yapmış olduğu Mn-V(N,P,As,Sb,Bi) bileşiklerine yapısal, elektronik ve manyetik özelliklerini neden sonuç ilişkilerini belirleme konusunda önemli olduğu görülmektedir.

BÖLÜM 2. KAYNAK ARAŞTIRMASI

2.1. Mn (Mangan) Elementi ve Özellikleri

1774 yılında İsviçreli kimyacı Wilham Scheele tarafından bulunmuştur. Aynı yıl asistanı Johan Gottlieb Gahn ise ilk maddesel manganizi üretmiştir. Bir geçiş metali olan MANGAN elementinin elektronik konfigürasyonu d orbitali ile biter. Oda şartlarında katı halde bulunan element farklı bileşiklerinde farklı değerlikler alabilir.

Mangan elementinin grimsi metal rengi vardır. Toz haline getirilebilir. Sert, gevrek ve kırılgandır. Elektrik ve ısıyı iletir. Doğal olarak karbonat, oksit, sülfür ve silikat halindedir. Demir başta olmak üzere birçok elementle bağlı olarak bulunmaktadır. Demir gibi nemli ortamlarda paslanır. Yüksek sıcaklıkta O₂ ile yanar [1].

Mangan, metal ve mineral olarak hem endüstride hem de insan sağlığında önemli bir yere sahiptir. Demir çelik alaşımlarında çekme direncini artırır. Mangan içeriğinde bulunan karbon (C) miktarına bağlı olarak çeliğin dayanıklılığını artırır. Ayrıca çeliğin paslanmasını ve aşınmasını önlemek amacıyla da kullanılır.

Canlı organizmalar için mangan son derece önemlidir. Çoğu enzim mangan içerir. Mangan toprak ve suda parçacıklar halinde, havada ise toz parçacıklarının içerisinde bulunur. Kemik oluşumu, bağışıklık sistemleri vb. vücudumuzdaki önemli fonksiyonların gerçekleşmesinde rol oynar. Fotosentez olayında önemli bir yere sahiptir.

Alkali ve çinko- karbon piller, gemi pervaneleri, suni gübre, cam, seramik, petro kimya ürünleri, ilaçlar, elektronik cihazlar vb. ürünler mangan ve alaşımlarının kullanıldığı ürünlerden bazılarıdır [1,2].

Tablo 2.1. Mn elementinin özellikleri [1,3,4]

Simgesi	Mn
Atom Numarası	25
Grup / Periyot / Orbital	7B / 4 / d
Elektronik Konfigürasyonu	[Ar] 3d ⁵ 4s ²
Element Serisi	Geçiş Metalleri
Atom Ağırlığı	54.938044(3) g/mol
Yoğunluk	7.21 g/mol
Ergime Noktası	1246 ° C
Kaynama Noktası	2061 ° C
Ergime Isısı	12.91 kJ/mol
Buharlaşma Isısı	221 kJ/mol
Isı Kapasitesi	26.32 J/(mol*K)
Elektronegatiflik	-1.55 Pauling ölçeği
1.İyonlaşma Enerji Seviyesi	717.3 kJ/mol
2.İyonlaşma Enerji Seviyesi	1509.0 kJ/mol
3.İyonlaşma Enerji Seviyesi	3248 kJ/mol
Atom Yarıçapı	127 pm
Kovalent Yarıçapı	139-161 pm arası
Van der Waals Yarıçapı	-pm
Termal İletkenlik	7.81 W/(m*K)
Ses Hızı	5150 m/s
Mohs Sertliği	6
Vickers Sertliği	-MPa
Brinell Sertliği	196 MPa
Kristal Yapısı	Hacim Merkezli Kübik Kafes
Yükseltgenme Seviyeleri	7,6,5,4,3,2,1,-1,-2,-3

2.2. N (Azot) Elementi ve Özellikleri

Atmosferde en bol bulunan elementlerden biridir. İskoç kimyager Daniel Rutherford 1772 yılında azotu izole eden ilk kimyacıdır. 1774 yılında Priestly, havanın yanmayan kısmının olduğunu tespit ederek, cıva oksitin ısıtılmasıyla azot elde etmiştir.

Azot, evrendeki bolluğu açısından, elementler arasında altıncı sırayı alır. Yer atmosferinin (havanın) hacimce yüzde 78'ini, ağırlıkça yaklaşık yüzde 75'ini [3] oluşturur. Renksiz, tatsız, kokusuz bir gazdır. Amino asit, amonyak, nitrik asit ve siyanür gibi bileşikler de oluşturur [1,2]. Gübre ve patlayıcı üretiminde kullanılır.

Yanma ihtimaline karşın uçak lastikleri nitrojen ile şişirilir. Sıvı patlayıcılarda örtü olarak kullanılır. Moleküler azot paketlenmiş gıdaların korunmasında ve paslanmaz çelik üretiminde kullanılır. Kısaca hassas algılayıcılar, patlayıcılar, ilaçlar, elektronik cihazlar, yüksek sıcaklık termometreleri vb. alanlarda kullanılır.

Tablo 2.2. Azot elementinin özellikleri [1,5]

Simgesi	N
Atom Numarası	7
Grup / Periyot / Orbital	5A / 2 / p
Elektronik Konfigürasyonu	1s ² 2s ² 2p ³
Element Serisi	Ametaller
Atom Ağırlığı	14,0067 (2) g/mol
Yoğunluk	0,001251 g/mol
Ergime Noktası	-210,00 °C
Kaynama Noktası	-195,79 °C
Ergime Isısı	0,720 kJ/mol
Buharlaşma Isısı	5,57 kJ/mol
Isı Kapasitesi	29,124 J/(mol*K)
Elektronegatiflik	3,04 Pauling ölçeği
İyonlaşma Enerjisi	1402,3 kJ/mol
Atom Yarıçapı	65 pm
Kovalent Yarıçapı	75 pm
Van der Waals Yarıçapı	155 pm
Termal İletkenlik	0,02583 W/(m*K)
Ses Hızı	353 m/s (27 °C)
Mohs Sertliği	---
Vickers Sertliği	---MPa
Brinell Sertliği	--- MPa
Kristal Yapısı	Hegzagonal
Yükseltgenme Seviyeleri	5,4,3,2,-3

2.3. P (Fosfor) Elementi ve Özellikleri

1669’ da Alman simyager Hennig Brand keşfetmiştir. 1775’te İsveçli kimyager Scheele, kemikten fosfor elde etmiştir. 1840 yılında kırmızı fosfor elde edilmiştir. 19. yy sonlarında James Readman elektrikli fırında fosfor üretimi yöntemini geliştirdi.

İnsan vücudunda kalsiyumdan sonra en fazla bulunan kimyasal elementtir [1,2]. Doğada beyaz, kırmızı ve siyah fosfor olmak üzere 3 allotropu bulunmaktadır. Fosfor elementi, gün ışığına maruz kaldığında enerji seviyesini yükseltir [1,2].

Fosfor ışık veren ürünlerin önemli bir hammaddesidir. Tarım ve hayvancılıkta fosforik asit kullanılır. Fosfor ve bileşiklerinin kullanıldığı yerler ve ürünler; gıda sektörü, gübre yapımı, deterjan yapımı, havai fişekler, çelik yapımı, fahre zehiri imalatı, kibrit yapımı vb.dir.

Tablo 2.3. Fosfor elementi özellikleri [1,6,7,8]

Simgesi /Maddenin hali	P/katı
Atom Numarası	15
Grup / Periyot / Orbital	5A / 3 / p
Elektronik Konfigürasyonu	[Ne] 3s ² 3p ³
Element Serisi	Ametaller
Atom Ağırlığı	30.973761 g/mol
Yoğunluk	1.823 g/mol
Ergime Noktası	44.2 ° C
Kaynama Noktası	277 ° C
Ergime Isısı	0.66 kJ/mol
Buharlaşma Isısı	12.4 kJ/mol
Isı Kapasitesi	23.824 J/(mol*K)
Elektronegatiflik	2.19 Pauling ölçeği
İyonlaşma Enerjisi	1011.8 kJ/mol
Atom Yarıçapı	100 pm
Termal İletkenlik	0.00236 W/(m*K)
Kristal Yapısı	Monoklinik
Yükseltgenme Seviyeleri	5,3,1,-3

2.4. As (Arsenik) Elementi ve Özellikleri

1250’li yıllarda keşfedilen arsenik elementi Alman filozof ve simyacı Albetrus Magnus’ a atfediliyor.1649 yılında Alman eczacı Johann Schroeder, saf arseniği izole eden ilk kişi olmuştur.

Endüstriyel açıdan faydalı bir element olmasına karşın insanlar için tehlikeli bir maddedir. Metalik gri etmektedir. 3 allotropu bulunur. Bunlar gri arsenik, sarı arsenik ve siyah arseniktir.

Kimyasal uygulamalarda etkin bir maddedir. Yarı iletkenlerin yapısında kullanılır. Matbaa mürekkebi, böcek öldürücüler, tekstil boya ları, deri koruyucular, pigmentler, seramik, lazer, LED’ler vb. ürünlerde kullanılır.

Tablo 2.4.Arsenik Elementinin Özellikleri [1,5]

Simgesi /Maddenin hali	As/Gaz
Atom Numarası	33
Grup / Periyot / Orbital	5A / 4 / p
Elektronik Konfigürasyonu	[Ar] 3d ¹⁰ 4s ² 4p ³
Element Serisi	Metaloidler
Atom Ağırlığı	74.92160 g/mol
Yoğunluk	0.00008988 g/mol
Ergime Noktası	-259.14 ° C
Kaynama Noktası	-252.87 ° C
Ergime Isısı	0.117 kJ/mol
Buharlaşma Isısı	0.904 kJ/mol
Isı Kapasitesi	28.836 J/(mol*K)
Elektronegatiflik	2.20 Pauling ölçeği
İyonlaşma Enerjisi	1312.0 kJ/mol
Atom Yarıçapı	25 pm
Ses Hızı	1310 m/s (27°C,gaz)
Kristal Yapısı	Kübik
Yükseltgenme Seviyeleri	1,-2

2.5. Sb (Antimon) Elementi ve Özellikleri

Antimonun keşfedilmesi 16.yy'da gerçekleşmiştir. Çok kullanışlıdır ancak zehirlidir. Doğal antimon sülfürden elde edilir [1]. Metale benzeyen , kırılabilen ve kolayca toz durumuna getirilebilen gümüş beyazı renğinde bir katıdır. Cephane yapımında, cam ve seramik sanayinde ve renklendirmede kullanılır [1,2]. Akü yapımında [1,2] hammaddedir. N-tipi yarıiletken yapımında silikonu katkılamak için kullanılır. Tıpta balgam söktürücü ilaçlarda antimon içeriği vardır.

Tablo 2.5.Antimon elementinin özellikleri [1]

Simgesi /Maddenin hali	Sb/katı
Atom Numarası	51
Grup / Periyot / Orbital	5A / 5 / p
Elektronik Konfigürasyonu	[Kr] 4d ¹⁰ 5s ² 5p ³
Element Serisi	Metaller
Atom Ağırlığı	121.760 g/mol
Yoğunluk	6.697 g/mol
Ergime Noktası	630.63 ° C
Kaynama Noktası	1587 ° C
Ergime Isısı	19.79 kJ/mol
Buharlaşma Isısı	193.43 kJ/mol
Isı Kapasitesi	25.23 J/(mol*K)
Elektronegatiflik	2.05 Pauling ölçeği
İyonlaşma Enerjisi	834 kJ/mol
Atom Yarıçapı	140 pm
Termal İletkenlik	24.4 W/(m*K)
Kristal Yapısı	Basit üçgensel

2.6. Bi (Bizmut) Elementi ve Özellikleri

İlk olarak 1450 yılında Alman keşiş Basil Valentine tarafından tanımlandı. Kurşun ve kalay ile karıştırılmıştır. 1753 yılında Claude François Geoffroy antimonun kalaydan daha ağır bir metal olduğunu ve kurşun formunda olmadığını tespit etti.

Periyodik cetvelde 5A grubundaki azot ailesinin en metalsi ve en az bulunan elementidir. Bütün metaller içinde en diyamagnetik elementtir. Parlak, kaba kristalli ve gevrek bir metaldir.

Katı halde genleşme özelliği sebebiyle ince ayrıntılı metal döküm parçalarının üretiminde kullanılır. İyi bir katalizördür. Nükleer reaktörlerde soğutma sıvısı olarak kullanılabilir. Elektrik sigortaları, basınçlı gaz silindirlerinde, yangın dedektörleri, termoelektrik sistemler, boyalar plazma ekranlar, seramik, cam, diskler, vb. bizmutun kullanıldığı ürünlerden bazılarıdır.

Tablo 2.6.Bizmut elementinin özellikleri [1,6]

Simgesi /Maddenin hali	Bi/katı
Atom Numarası	83
Grup / Periyot / Orbital	5A / 6 / p
Elektronik Konfigürasyonu	[Xe] 4f ¹⁴ 5d ¹⁰ 6s ² 6p ³
Element Serisi	Zayıf metaller
Atom Ağırlığı	208.98040 g/mol
Yoğunluk	9.78 g/mol
Ergime Noktası	271.5 ° C
Kaynama Noktası	1564 ° C
Ergime Isısı	11.30 kJ/mol
Buharlaşma Isısı	151 kJ/mol
Isı Kapasitesi	25.62 J/(mol*K)
Elektronegatiflik	2.02 Pauling ölçeği
İyonlaşma Enerjisi	703 kJ/mol
Atom Yarıçapı	156 pm
Termal İletkenlik	7.97 W/(m*K)
Kristal Yapısı	Rombohedral
Yükseltgenme Seviyeleri	5,4,3,2,1
Ses Hızı	1790 m/s
Mohs sertliği	2.25
Brinell sertliği	94.2 MPa

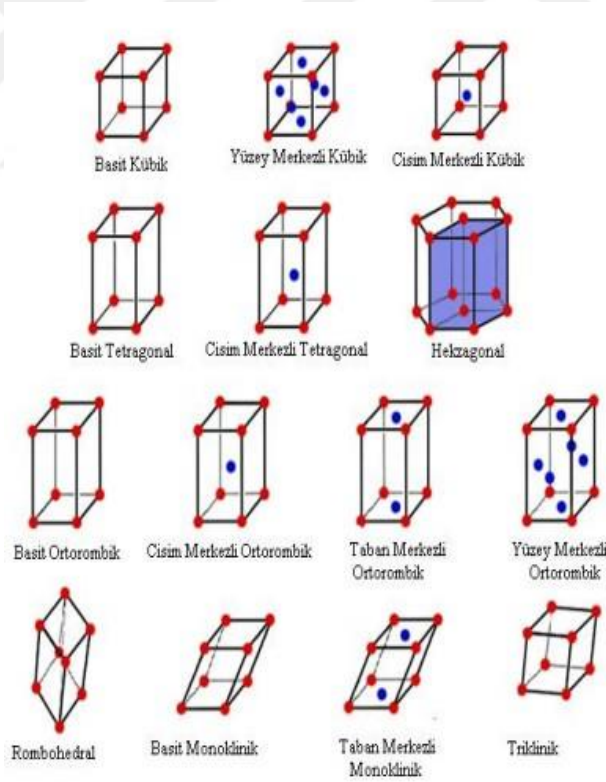
BÖLÜM 3. MATERİYAL ve METODLAR

3.1. Kristal Yapı

Kristal yapı; Atomlar, iyonlar ya da moleküllerin uzaysal olarak düzenlenme şeklidir.

Birim hücre; Atomik yapıda düzenli ve sürekli tekrar eden en basit yapıdır.

Latis ; Atom konumlarıyla çakışan 3 – boyutlu noktalar dizisi.



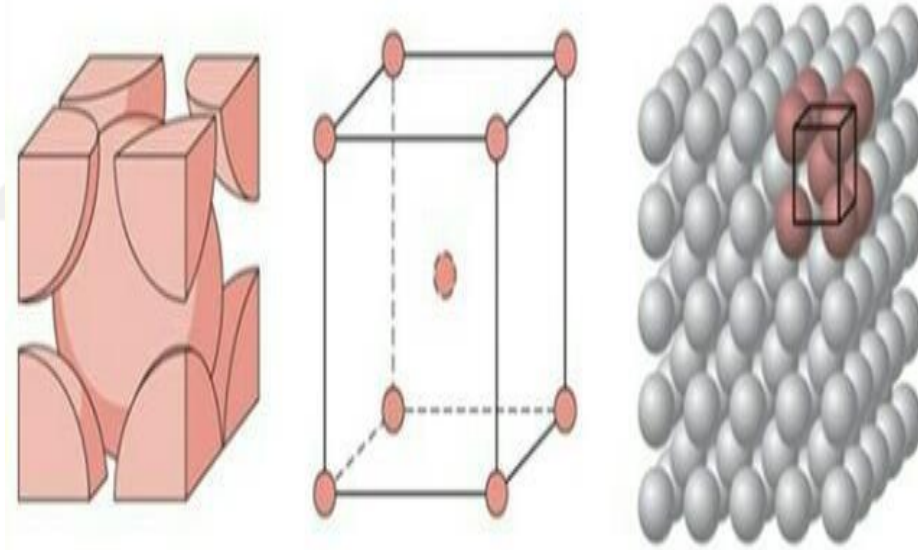
Şekil 3.1. Metallerde kristal yapılar

3.2. Metallerin Kristal Yapıları

Metallerde 3 tür kristal kafes vardır. Bunlar; hacim merkezli kübik yapı, yüzey merkezli kübik yapı ve sıkı düzen hexagonal yapıdır.

3.2.1. Hacim merkezli kübik yapı

Küpün her köşesinde birer atom ve merkezinde de bir atom bulunur. Köşesindeki her atom 8 komşu birim hücre ile paylaşılmaktadır. Merkezdeki atom sayısı 1 dir. Köşe atomlarının sayısı: $8 \times 1/8 = 1$ olur. Toplam atom sayısı 2 olur. Koordinasyon sayısı 8'dir.



Şekil 3.2. Hacim merkezli kübik yapı [2]

3.2.2. Yüzey merkezli kübik yapı

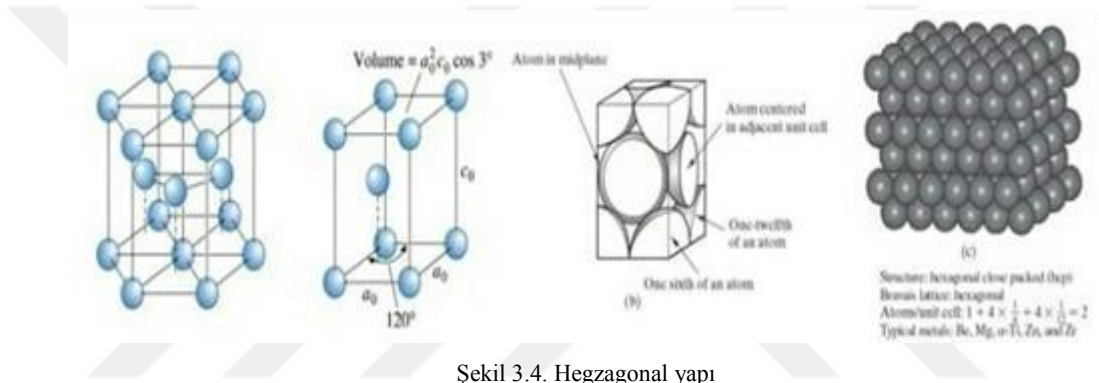
Birim hücrenin köşelerinde ve yüzey merkezlerinde birer atom bulunur. Yüzeylerdeki atom sayısı $6 \times 1/2 = 3$, köşelerindeki atom sayısı $8 \times 1/8 = 1$ olmak üzere toplam atom sayısı 4'tür.



Şekil 3.3. Yüzey merkezli kübik yapı [3]

3.2.3. Sıkı düzen hexagonal yapı

3 kristal yapının yan yana gelmesiyle hexagon oluşur.



Şekil 3.4. Hexagonal yapı

3.3. Yoğunluk Fonksiyon Teorisi

Bu teorinin temelini, 1927 yıllarında Thomas ve Fermi tarafından yapılan çalışmalar oluşturmuştur. 1964 yılında Hohenberg ve Kohn teoremleri, 1965 yılında da Kohn-Sham teoremleri geliştirildi. Hohenberg-Kohn teoremi, korelasyon ve değiş-tokuş etkisindeki elektron gazının toplam enerjisinin elektron yoğunluğunun bir fonksiyoneli olarak ifade edilebileceğini söyler.

Hohenberg-Kohn teoremi bize bir sistemin taban durum enerjisinin, toplam enerji fonksiyonelinin minimum olduğu değer olduğunu söyler. Kohn-Sham teoremi, çok elektronlu bir sistemin yerine tek elektronlu denklem setlerinin nasıl kullanabileceğimizi gösteren önemli bir teoremdir.

Yoğunluk fonksiyoneli teorisi (DFT); Atom, molekül ve katıların elektronik yapılarını hesaplayabilen bir teordir.

3.3.1. Çok cisim problemi

Kristal yapı oluşturulurken gerek elektron - çekirdek etkileşimleri gerekse elektron-elektron etkileşmelerinden dolayı çekirdek hareketi ile elektron hareketleri birbirleriyle uyumsuzdur. Bir sistemin toplam enerjisini hesaplamak için Schrödinger denklemi kullanılır. Zamana bağlı Schrödinger denklemi

$$H\Psi = E\Psi \quad (3.1)$$

eşitliği ile ifade edilir. Ψ elektronik dalga fonksiyonu, E sistemin toplam enerjisidir.

H ise Hamiltonyen operatördür [2] ve ;

$$H = -\sum_{i=1}^{N_e} \frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_i^2 - \sum_{I=1}^{N_I} \frac{\hbar^2}{2M_I} \nabla_I^2 - \sum_{i=1}^{N_e} \sum_{I=1}^{N_I} \frac{e^2 Z_I}{|\vec{r}_i - \vec{R}_I|} + \sum_{i=1}^{N_e} \sum_{j>1}^{N_e} \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} + \sum_{I=1}^{N_I} \sum_{j>1}^{N_I} \frac{e^2 Z_I Z_j}{|\vec{R}_I - \vec{R}_j|} \quad (3.2)$$

denklemi ile ifade edilir. Sistemin taban durum özelliklerini zamandan bağımsız Schrödinger denkleminin çözümünden elde edilen sonuçlar belirler. Bu denklem,

$$H\psi(\{\vec{r}_i\}, \{\vec{R}_I\}) = E\psi(\{\vec{r}_i\}, \{\vec{R}_I\}) \quad (3.3)$$

şeklinde ifade edilir. Bu denklem oldukça karmaşıktır ve çözümü zordur. Çözümü kolaylaştırmak için bazı yaklaşımlar geliştirilmiştir. Bu yaklaşımlardan biri Born-Oppenheimer yaklaşımıdır.

3.3.2. Born-Oppenheimer yaklaşımı

Elektronun kütlesi çekirdeğin kütlesinden 1836 kat küçüktür. Bu durumda çekirdeğin hareketi elektron hareketinden daha yavaş olur. Elektronun ve çekirdeğin hareketi birbirinden bağımsız olduğu düşünülerek çekirdek hareketsiz kabul edilir. Moleküler bir sistem için hamiltonyen denklemi şöyledir.

$$H = T^{\text{elektron}}(r) + T^{\text{çekirdek}}(R) + V^{\text{çekirdek-elektron}}(R,r) + V^{\text{elektron}}(r) + V^{\text{çekirdek}}(R) \quad (3.4)$$

İlk terim elektronun kinetik enerjisi, ikinci terim çekirdeğin kinetik enerjisi, üçüncü terim çekirdek-elektron etkileşme potansiyeli, dördüncü terim elektron- elektron etkileşme potansiyeli, son terim i çekirdek-çekirdek etkileşme potansiyelini ifade eder.

Çekirdekler sabit parçacık gibi düşünüldüğünde çekirdeğin kinetik enerjisi ihmal edilir. Schrödinger denkleminde Hamiltonyen aşağıdaki şekilde verilebilir.

$$H^{\text{elek}} \psi^{\text{elek}}(r,R) = E^{\text{eff}}(R) \psi^{\text{elek}}(r,R) \quad (3.5)$$

3.3.3. Hartree-Fock (HF) metodu

Bu yaklaşım, elektronların birbirinden bağımsız olarak hareket ettiğini fakat her elektronun diğer elektronların ortalama alanı ile etkileştiğini söylemektedir [2]. Hartree yaklaşımı, Pauli dışarlama ilkesini ihmal ettiğinden dolayı sadece tek elektrona sahip atomlarda daha kullanışlıdır. Sonraki yıllarda Hartree ve Fock çalışmaları daha da geliştirerek küçük moleküler sistemlere uyguladılar. 1951 yılında Slater, H-F teorisini basitleştirmek için elektron gazından yola çıkma fikrini kullandı ve böylece katıların elektronik yapı hesaplamaları mümkün hale geldi. Slater'in α olarak adlandırılan metodu elektronik yapı hesaplamalarının gelişmesine olağanüstü katkıda bulunmuştur. H-F yaklaşımı antisimetrik dalga fonksiyonlarını kullanarak tek-elektron dalga fonksiyonlarından, çok-elektron dalga fonksiyonunu Hartree teorisinden daha iyi

ifade etti. Bu yaklaşımda elektronik dalga fonksiyonu, elektronik orbitallerin antisimetrik çarpımı olarak yazılır.

Bu yaklaşımda dalga fonksiyonu, Hartree dalga fonksiyonundan daha karmaşıktır [5]. Fakat bu fonksiyon Slater determinantı ile tanımlanabilir.

$$\Psi(\vec{r}_1s_1, \vec{r}_2s_2, \dots, \vec{r}_Ns_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \Psi_1(\vec{r}_1s_1) & \Psi_1(\vec{r}_2s_2) & \dots & \Psi_1(\vec{r}_Ns_N) \\ \Psi_2(\vec{r}_1s_1) & \Psi_2(\vec{r}_2s_2) & \dots & \Psi_2(\vec{r}_Ns_N) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \Psi_N(\vec{r}_1s_1) & \Psi_N(\vec{r}_2s_2) & \dots & \Psi_N(\vec{r}_Ns_N) \end{vmatrix} \quad (3.6)$$

Hamiltonyen kullanılarak enerjinin beklenen değeri aşağıdaki şekilde elde edilir.

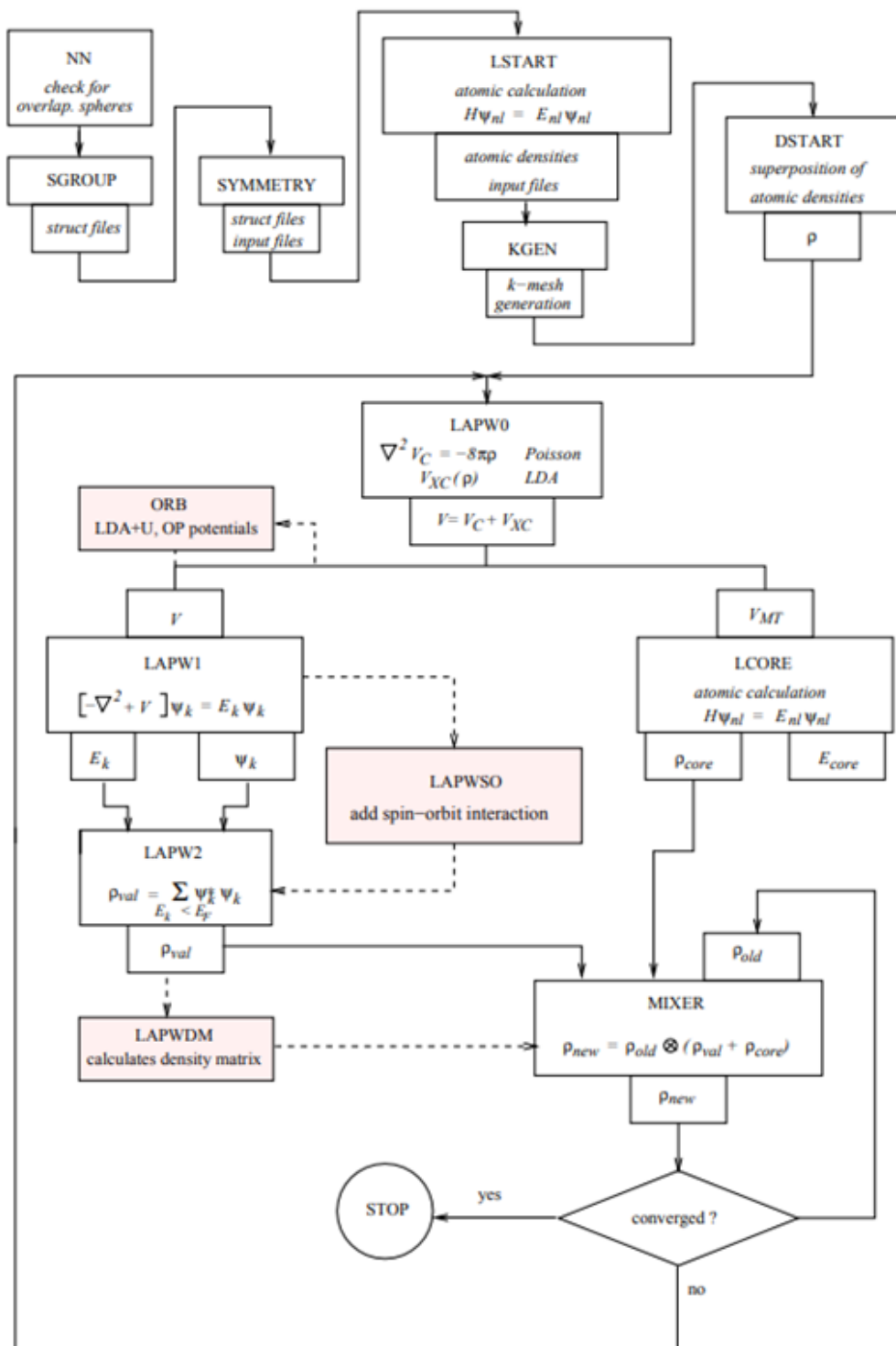
$$\left[-\frac{1}{2}\nabla^2 + V_i(\vec{r}) \right] \Psi_i(\vec{r}) + \sum_j \int d\vec{r}' \frac{|\Psi_j(\vec{r}')|^2}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \Psi_i(\vec{r}) - \sum_j \delta_{s_i s_j} \int d\vec{r}' \frac{\Psi_j(\vec{r}') \Psi_i(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \Psi_j(\vec{r}) \quad (3.7)$$

3.4. WIEN2k Programı

Çok atomlu karmaşık sistemlerin elektronik yapılarını incelemek için simülasyon programlarına ihtiyaç duyulur. Wien2k programı; çok atomlu karmaşık sistemlerin elektronik yapılarını incelemek amacıyla kullanılan, temeli yoğunluk fonksiyon teorisine dayanan bir simülasyon metodudur.

Öncelikle kristal yapımızın birim hücresi tanımlanır. Kristal yapının örgü parametreleri, açıl değerleri, koordinat eksenleri, en yakın komşulukları gibi periyodik sınır şartları da kullanılarak sonsuz bir kristal tanımlanır. Kristalin öteleme ve nokta grubu simetri işlemi de dahil edilerek, ideal kristal yapının bozulmaması ve işlemlerin basitleşmesi sağlanır.

Wien2k programı ile bir kristal yapının; hacim optimizasyonu, elektron yoğunluğu, durum yoğunluğu, spin yoğunluğu, band yapısı, toplam enerjisi, x-ray spektralleri, manyetik özellikleri, mekanik özellikleri, optik özellikleri ve fermi yüzeyleri incelenebilir.



Şekil 3.5. Wien2k akış şeması

3.4.1. Case.struct ve case.inst dosyalarının oluşturulması

Wien2k programında yapı dosyasını oluşturulur. Programa giriş yapılır ve yeni bir klasör adı tanımlanır (Şekil 3.6.).

Daha sonra (Execution – StructGen) yapı ile bilgiler girilir. Data bilgilerinin hazır olduğu bir .cif dosyası var ise bu dosyayı da programa tanımlayabiliriz (Şekil 3.7.).



Şekil 3.6. Wien2k giriş ekranı



Şekil 3.7. Data giriş sayfası

Gerekli bilgiler girildikten sonra (Execution – initialize cal) ilk hesap işlemi yapılır (Şekli 3.8.). Sonra SCF hesabına giriş yapmadan önce yapı optimize edilir.



Session: [narin]
/home/maslan/WIEN2k/narin

Initialize calculation

Fast mode:

This is in general the recommended way of initialization (except for antiferromagnets, supercells and slabs).
Specify RKMAX and K-mesh, adapted to your problem.
Check STDOUT for errors. When errors occur, run in individual mode (at least the symmetry programs)

☒ select spin-polarized calculation

RMT reduction by X % (default: RMT not changed)

VXC option (13-PBE, 5-LDA, 11-WC, 19-PBESol) [default=13]

energy separation between core/valence (default: -6.0 Ry)

RKMAX (default: 7.0) [[Click here for more info](#)]

use TEMP with smearing by X Ry (default: TETRA)

use X k-points in full BZ (default: 1000; [[Click here for more info](#)])

Individual mode (phase 1)

For antiferromagnets, self-generated structures, supercells and surfaces we recommend to run at least the first steps (until instgen) manually and accept the recommendations

[[Click here for more info](#)]

Şekil 3.8. Başlangıç hesabı

Yapı dosyası (Şekil 3.9.) ve in1_st dosyası (Şekil 3.10.) aşağıda verilmiştir.

```

MnN_221
P LATTICE,NONEQUIV.ATOMS: 3 221_Pm-3m
MODE OF CALC=RELA unit=bohr
7.315130 7.315130 7.315130 90.000000 90.000000 90.000000
ATOM -1: X=0.50000000 Y=0.00000000 Z=0.00000000
MULT= 3 ISPLIT=-2
-1: X=0.00000000 Y=0.50000000 Z=0.00000000
-1: X=0.00000000 Y=0.00000000 Z=0.50000000
Mn NPT= 781 R0=0.00005000 RMT= 1.8600 Z: 25.000
LOCAL ROT MATRIX: 0.00000000 0.00000000 1.00000000
0.00000000 1.00000000 0.00000000
-1.00000000 0.00000000 0.00000000
ATOM 2: X=0.50000000 Y=0.50000000 Z=0.50000000
MULT= 1 ISPLIT= 2
Mn NPT= 781 R0=0.00005000 RMT= 1.8600 Z: 25.000
LOCAL ROT MATRIX: 1.00000000 0.00000000 0.00000000
0.00000000 1.00000000 0.00000000
0.00000000 0.00000000 1.00000000
ATOM 3: X=0.00000000 Y=0.00000000 Z=0.00000000
MULT= 1 ISPLIT= 2
N NPT= 781 R0=0.00010000 RMT= 1.5200 Z: 7.000
LOCAL ROT MATRIX: 1.00000000 0.00000000 0.00000000
0.00000000 1.00000000 0.00000000
0.00000000 0.00000000 1.00000000
48 NUMBER OF SYMMETRY OPERATIONS
-1 0 0 0.00000000
0 -1 0 0.00000000
0 0 -1 0.00000000

```

Şekil 3.9. Yapı dosyası

```

-----
:ITE186:186. ITERATION
-----
:NATO : 4 INDEPENDENT AND 9 TOTAL ATOMS IN UNITCELL
SUBSTANCE: MnP
LATTICE = H
:POT : POTENTIAL OPTION EX_LDA EC_LDA VX_MBJ VC_LDA (with gamma = 0.80000000)
:LAT : LATTICE CONSTANTS= 10.80171 10.80171 7.40730
:VOL : UNIT CELL VOLUME = 748.47174
MODE OF CALCULATION IS = RELA
SPINPOLARIZED CALCULATION
Calculation includes Kinetic Energy Density
:IFFT : FFT-parameters: 90 90 60 Factor: 2.00
ATOMNUMBER= 1 Mn VCOUL-ZERO = 0.57964E+00
:EFG001: EFG = 3.14434 *10**21 V / m**2
V20 TOT/SRF= -0.16800 0.10154
V22 TOT/SRF= 3.04735 -0.13527
V2M TOT/SRF= 0.00000 0.00000
V21 TOT/SRF= 0.00000 0.00000
V21M TOT/SRF= 0.00000 0.00000
3.14434 0.00000 0.00000 3.14434 0.00000 0.00000
0.00000 -2.95035 0.00000 0.00000 -2.95035 0.00000
0.00000 0.00000 -0.19399 0.00000 0.00000 -0.19399
MAIN DIRECTIONS OF THE EFG 1.0000 0.0000 0.0000
0.0000 1.0000 0.0000
0.0000 0.0000 1.0000
:ANG001: ANGLE WITH OLD X-AXIS = 0.0
:ETA001: ASYMM. ETA = 0.87661

```

Şekil 3.10. in1_st dosyası

3.4.2. SCF hesaplamaları

SCF (self – consistency cycle) için Execation kısmında “run SCF” komutu seçilir (Şekil 3.11.). Bu komut aşağıdaki verilen hesaplamaları yapar.

LAPWO : (POTENTIAL) Genel olarak yoğunluktan potansiyeli oluşturur.

LAPW1 (BANDS): Valans bandlarını hesaplanır (özvektörler ve özdeğerler). LAPW2

(RHO) : Özvektörlerden değerlik yoğunluklarını hesaplar.

LCORE : Çekirdek durumları ve yoğunluklarını hesaplar.

MIXER : Giriş ve çıkış yoğunluklarını karıştırır. SCF döngüsü giriş yoğunluğuna yakın bir değere ulaşana kadar devam eder.

Şekil 3.11. Scf döngü ekranı

3.5. Hesaplama Özellikleri

SCF döngüsü tamamlandıktan sonra aşağıda verilen diğer hesaplamalara geçilir (elektron yoğunluğu, durumlar yoğunlukları (DOS), band yapıları vb.).

3.5.1. Elektron yoğunluğu

“Task” menüsü altında “elektron density” komutu seçilir (Şekil 3.12.). Açılan ekranda tüm işlem basamakları sırasıyla spin yukarı ve spin aşağı için yapılır.

Şekil 3.12. Elektron yoğunluğu hesabı girişi

X lapw2 : Değerlik (valans) yoğunlukları hesaplar.

X lapw5 : Elektron yoğunluğu hesaplanır. “rhoplot” komutu ile elektron yoğunluğu grafiği [5] çizilir.

3.5.2.Durum yoğunluğu

Task menüsü altından “DOS” komutu seçilir (Şekil 3.13.) x lapw2 –qtl komutu ile kısmi yükler hesaplanır . X tetra komutu ile tetrahedron metodu kullanılarak kısmi ve toplam DOS’ lar hesaplanır. Sonra dosplot komutu kullanılarak DOS grafikleri çizilir.

Optional steps:

Edit narin.in1c and specify a larger E-max (bottom of file)

Prepare a denser k-mesh

Create eigenvalues at denser k-mesh or higher E-max ☐ orb ☒ interactively

for both spins ☐ orb ☒ interactively

Optional alternative to "x lapw2 -qtl" (t-states, SO-DOS, rotations) !

Edit input-file for QTL

Calculate partial charges with QTL program ☐ so ☒ interactively

Necessary steps:

Calculate partial charges ☐ so ☒ interactively

The required input file narin.int can be generated by:

configure input-file for TETRA Edit input-file for TETRA

Calculate partial DOS ☒ interactively

Check output of TETRA

Plot DOS or download DOS ASCII-data files for plotting with your own plotting program

Şekil 3.13. DOS başlangıç ekranı

3.5.3. Band hesabı

Task menüsü altından “Bandstructure” komutu seçilir (Şekil 3.15.). X lapw1_band komutu ile özdeğerler hesaplanır. X spaghetti komutu ile enerji band yapısının grafiği çizilir.

Spin UP selected.

The required k-mesh for bandstructure plotting can be generated by:

[\[Brillouinzones from Bilbao Cryst Server \]](#)

or (save klist as narin.klist_band)

Calculate Eigenvalues ☐ orb ☒ interactively

Calculate Eigenvalues ☐ orb ☒ interactively

needed only for continuous lines in the plot (not for non-symmorphic spacegroups)!

Calculate irreducible representations ☐ so ☒ interactively

for band character plots only!

Calculate partial charges ("qtl"-file) ☐ so ☒ interactively

Insert correct EF

Calculate bandstructure ☐ so ☒ interactively

Plot bandstructure or download Xmgrace files for plotting with xmgrace

with name:

Şekil 3.14. Bant hesap ekranı

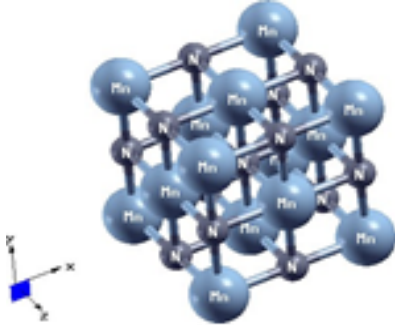
BÖLÜM 4. MANGAN -VA (N,P,As,Sb,Bi) BİLEŞİKLERİ

4.1. Mn-N Bileşikleri

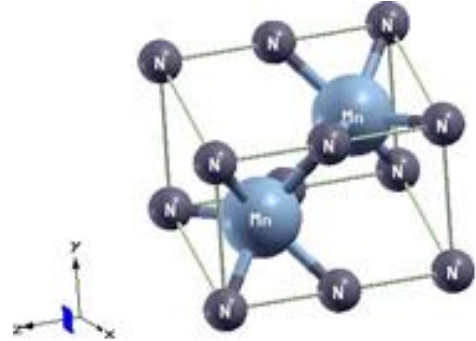
NaCl kristal yapısında bulunur. Metalik ve kovalent bağların kombinasyonu ile bağlanırlar. MnN bileşikleri; MnN, Mn₄N, Mn₃N₂, MnN_{0.89}, MnN_{0.43} şeklindedir.

4.1.1. Mn-N bileşiklerinin yapısı ve optimizasyonu

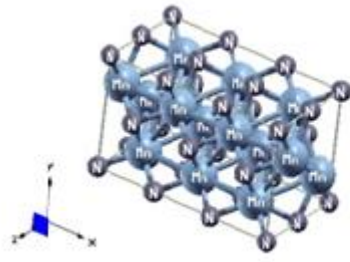
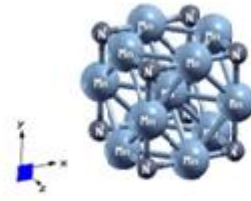
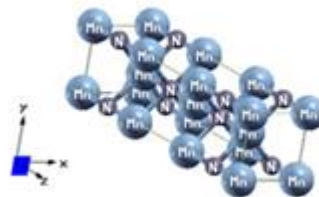
Inorganic Material Database sitesinde bulunan .cif dosyaları alınarak WIEN2k paket programına tanıtılıp, yapı için minimum enerji değerleri hacim hesabı yapılarak elde edildi. Enerji-hacim grafikleri çizildi.



Şekil 4.1. MnN_{0.89} (1) bileşiğinin kristal yapısı

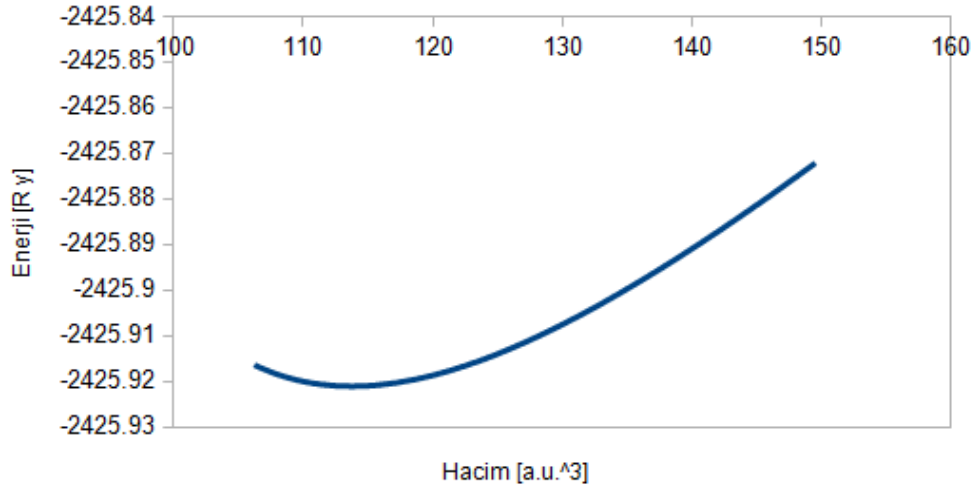


Şekil 4.2. MnN_{0.43} (1) bileşiğinin kristal yapısı

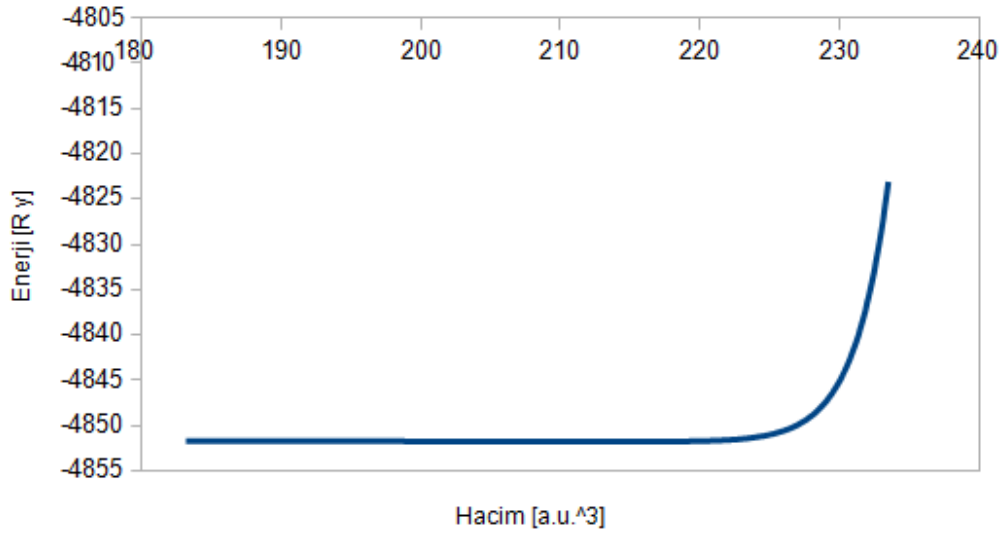
Şekil 4.3. MnN_{0.43} (2) bileşiğinin kristal yapısıŞekil 4.4. Mn₄N (1) bileşiğinin kristal yapısıŞekil 4.5. Mn₃N bileşiğinin kristal yapısı

Tablo 4.1. Mn - N Bileşiklerinin simetri grupları

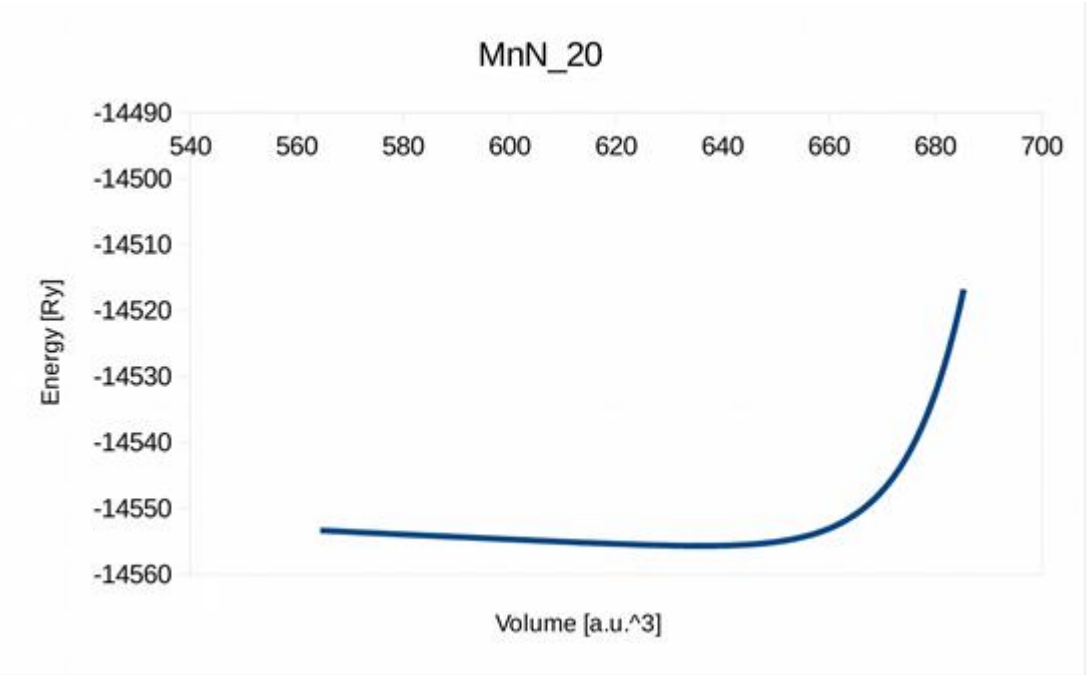
Bileşik	Kristal yapısı	Uzay Grup
Mn ₃ N ₂	tetragonal	I4/mmm-139
Mn ₄ N	kübik	Pm-3m -221
MnN _{0.43} (2)	orthorombik	C221 ₁ -20
MnN _{0.43} (1)	hexagonal	P6 ₃ 22 -182
MnN _{0.89}	tetragonal	I4/mmm-139
MnN _{0.89} (1)	kübik	Fm-3m-225



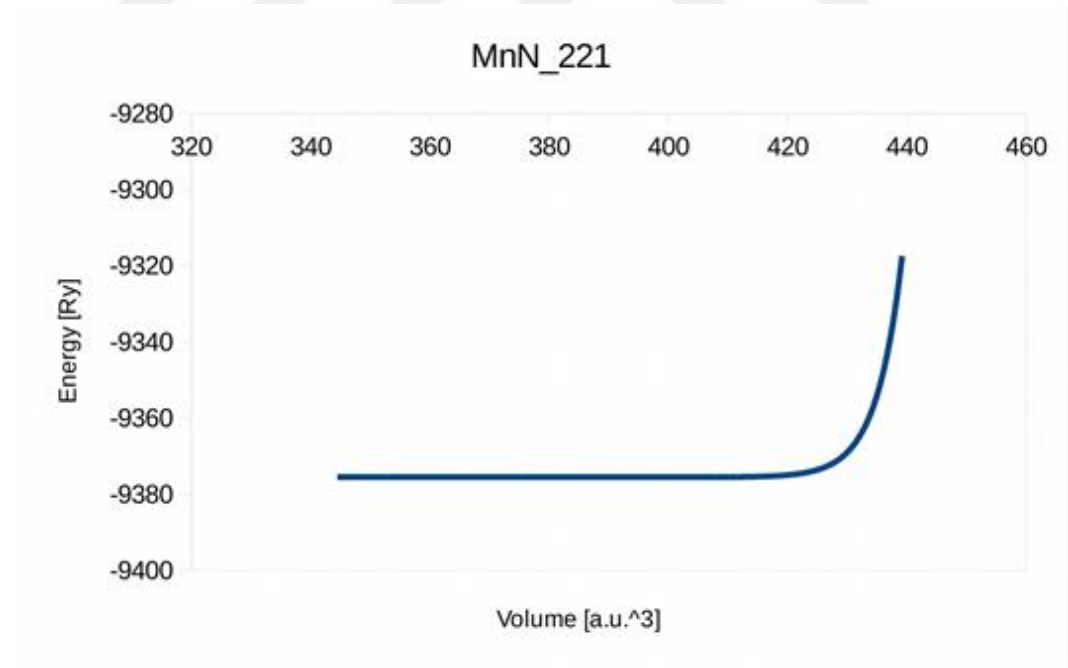
Şekil 4.6. Mn N0.89 (1) bileşiğinin enerji-hacim grafiği



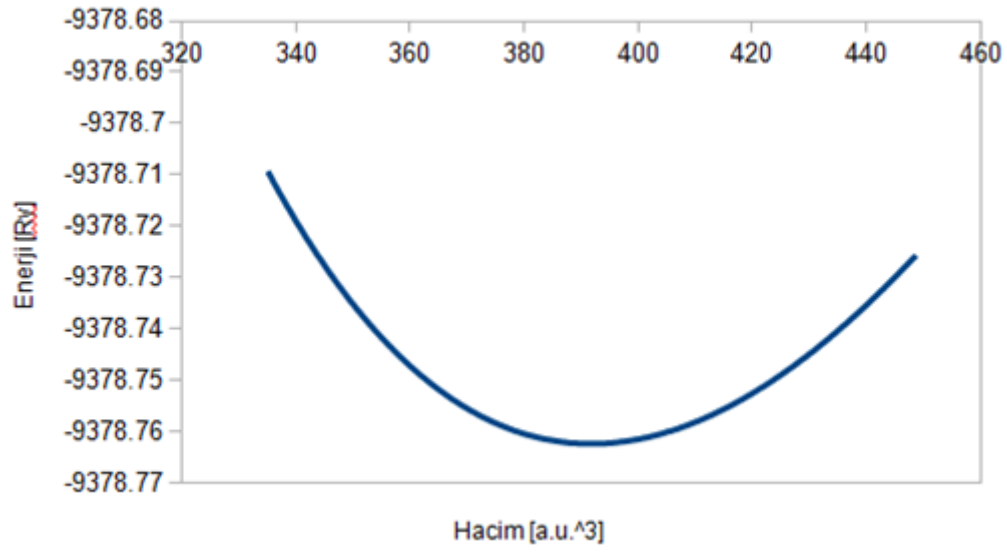
Şekil 4.7. Mn N0.43 (1) bileşiğinin enerji-hacim grafiği



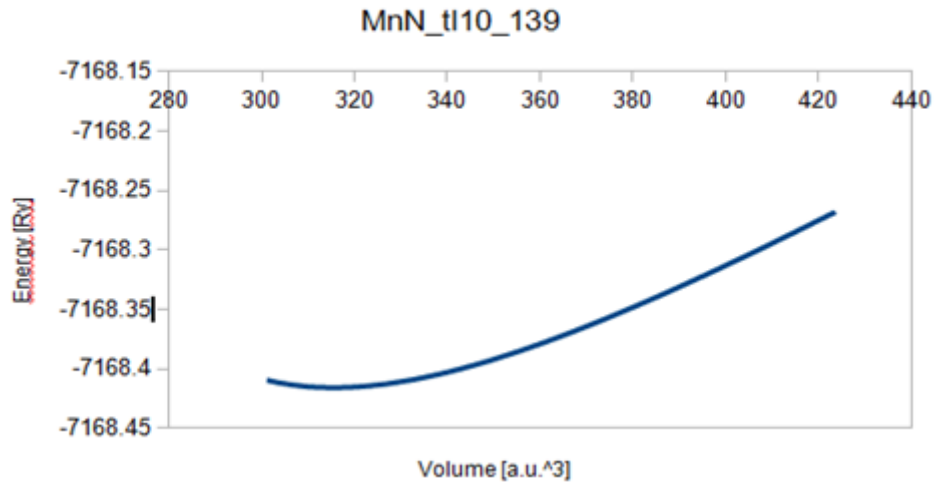
Şekil 4.8. MnN_{0.43} (2) bileşiminin enerji-hacim grafiği



Şekil 4.9. Mn₄N bileşiğinin enerji-hacim grafiği (WC ile hesaplanan)



Şekil 4.10. Mn₄N bileşiğinin enerji-hacim grafiği (pbe2 ile hesaplanan)



Şekil 4.11. Mn₂N₂ bileşiğinin enerji-hacim grafiği

Tablo 4.2. MnN bileşikleri hacim hesabı sonuçları

		Hacim	B (GPa)	BP	Enerji
MnN	Mn ₃ N ₂	315.5084	245.2880	7.5967	-7168.415695
MnN225_2	MnN _{0.89}	21492.3415	-8.6771	-0.4401	-2417.259980
MnN_182	MnN _{0.43(1)}	217.1090	274.4897	6.8467	4851.754218
MnN_221	Mn ₄ N	370.5090	159.8467	1.5566	-9375.562262
MnN_20	MnN _{0.43}	631.2884	137.5915	80.7097	-14555.25103

4.1.2. Mn-N bileşiklerinin elektron yoğunluğu

Mn-N bileşikleri için kullandığımız yapı değerleri aşağıdaki gibidir.

Yapının adı : $\text{MnN}_{0.89}$ Uzay Grubu: Fm-3m $a = b = c : 8.350405$ bohr $\gamma = \beta = \alpha : 900$

Atom 1: N (0.5,0.5,0.5) pozisyonunda ve RMT= 1.7

Atom 2: Mn (0,0,0) pozisyonunda ve RMT= 2.08

Yapının adı : $\text{MnN}_{0.43}$ (1) Uzay Grubu: hP12

$a = b = 5.468068$ bohr , $c : 8.350405$ bohr $\gamma = \beta = 900$ $\alpha = 1200$

Atom 1: Mn (0.33,0.66,0.25) pozisyonunda ve RMT= 1.9

Atom 2: N (0,0,0.5) pozisyonunda ve RMT= 1.550

Yapının adı : $\text{MnN}_{0.43}$ Uzay Grubu: oS24

$a = 16.303248$; $b = 9.413416$; $c = 8.788143$ bohr

$\gamma = \beta = 900$ α

Atom 1: Mn (0.33,0.66,0.25) pozisyonunda ve RMT= 1.9

Atom 2: N (0,0,0.5) pozisyonunda ve RMT= 1.550

Yapının adı : Mn_4N Uzay Grubu: cP5

$a = b = c = 7.551263$ bohr $\gamma = \beta = \alpha = 900$

Atom 1: Mn (0.5,0,0) pozisyonunda ve RMT= 1.86

Atom 2: N (0,0,0) pozisyonunda ve RMT= 1.52

Yapının adı : Mn_3N_2 Uzay Grubu: tI10

$a = 5.813057$; $b = 5.813057$; $c = 23.753838$ bohr

$\gamma = \beta = \alpha = 900$

Atom 1: N (0,0,0.15940) pozisyonunda ve RMT= 1.550

Atom 2: Mn (0,0,0.33) pozisyonunda ve RMT= 1.89

Kesme enerji değeri -6.0 ve Kgen 1000 k noktası alınıp hesaplama yapıldı.

Mn_N hesaplamaları için yapı dosyaları oluşturuldu. MnN için yapı bilgileri dolduruldu. Wu-Cohen 06 potansiyeli kullanılarak hesaplandı.

$$a = 0.423 \text{ nm}, b = 0.423 \text{ nm}, c = 0.423 \text{ nm},$$

$$\alpha = 90^\circ, \beta = 90^\circ, \gamma = 90^\circ$$

$$0.07569 \text{ nm}^3$$

Şekil 4.12. MnN0.89

$$a = 0.45327 \text{ nm}, b = 0.48549 \text{ nm}, c = 0.48549 \text{ nm},$$

$$\alpha = 119.996^\circ, \beta = 90^\circ, \gamma = 90^\circ$$

$$0.09253 \text{ nm}^3$$

Şekil 4.13. MnN0.43 (MnN20)

$$a = 0.48551 \text{ nm}, b = 0.48551 \text{ nm}, c = 0.45326 \text{ nm},$$

$$\alpha = 90^\circ, \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$$

Şekil 4.14. MnN0.43 (MnN182)

$$a = 0.3871 \text{ nm}, b = 0.3871 \text{ nm}, c = 0.3871 \text{ nm},$$

$$\alpha = 90^\circ, \beta = 90^\circ, \gamma = 90^\circ$$

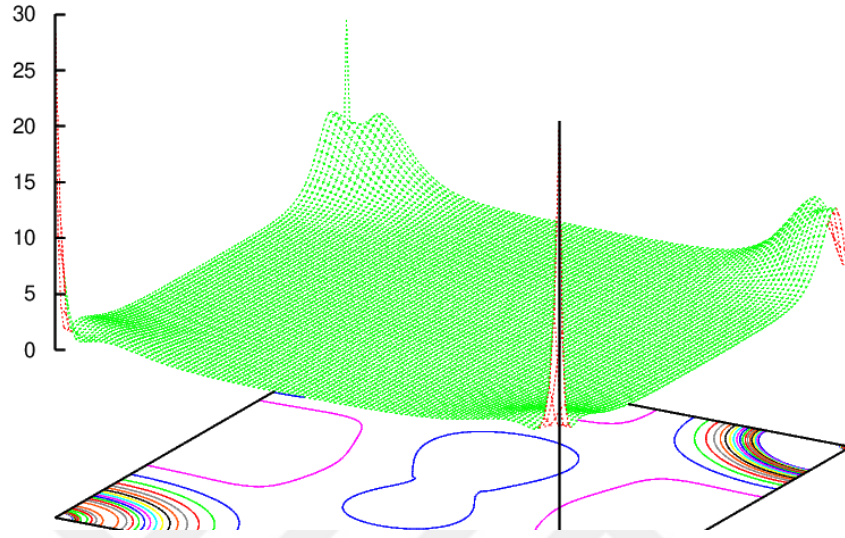
Şekil 4.15. (MnN221)

$$a = 0.4214 \text{ nm}, b = 0.4214 \text{ nm}, c = 0.4144 \text{ nm},$$

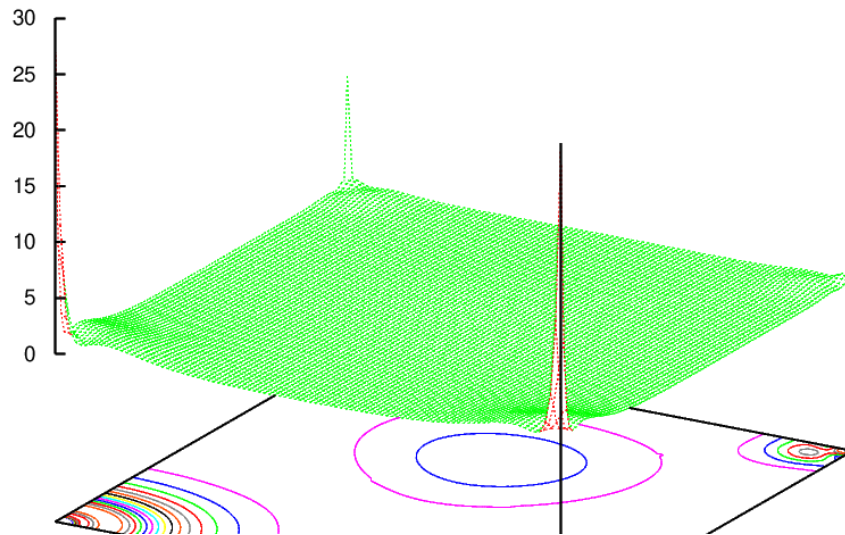
$$\alpha = 90^\circ, \beta = 90^\circ, \gamma = 90^\circ$$

Şekil 4.16. Mn3N2 (MnN139)

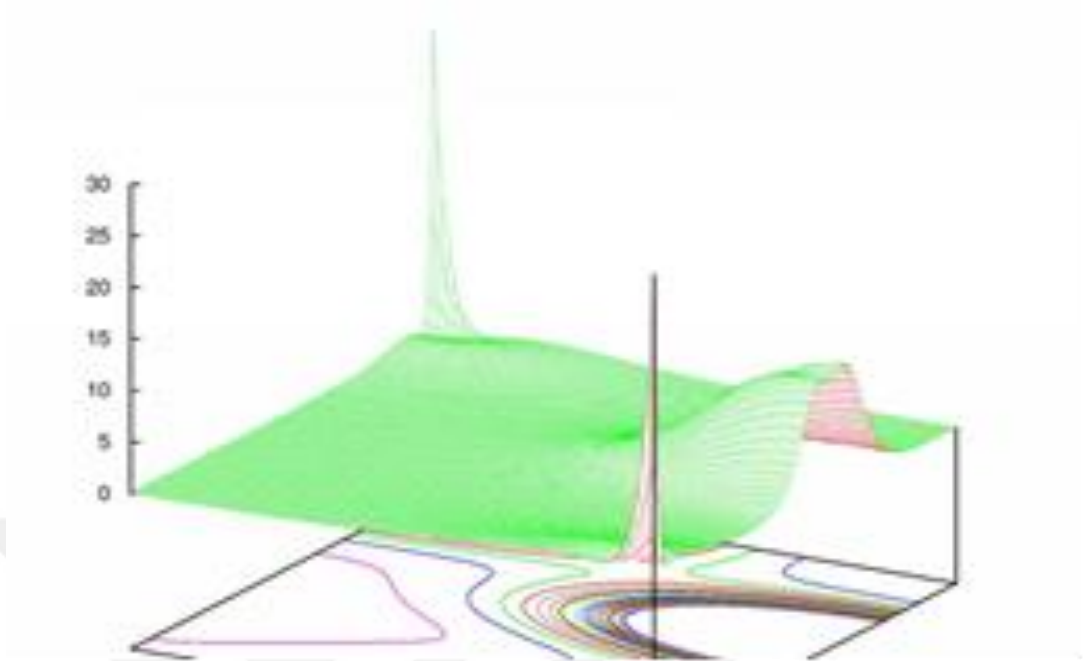
Gerekli hesaplamalar yapıldıktan sonra her bir bileşik için elde edilen 3-boyutlu elektron yoğunluğu grafikleri aşağıda verilmiştir.



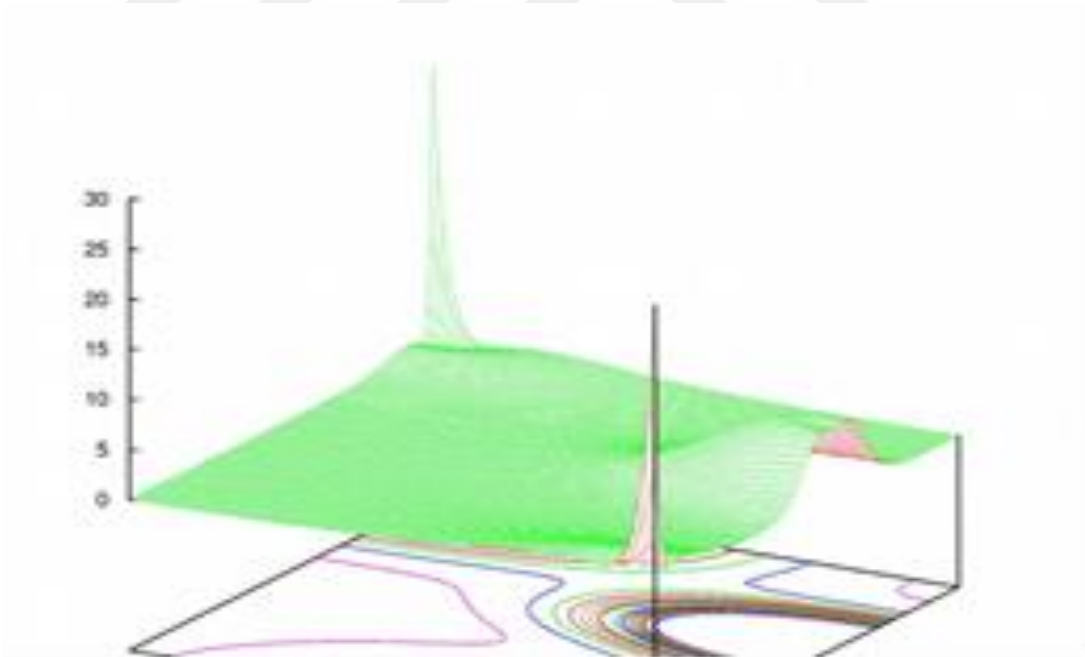
Şekil 4.17. MnN_{0.89} (MnN₂₂₅) spin up



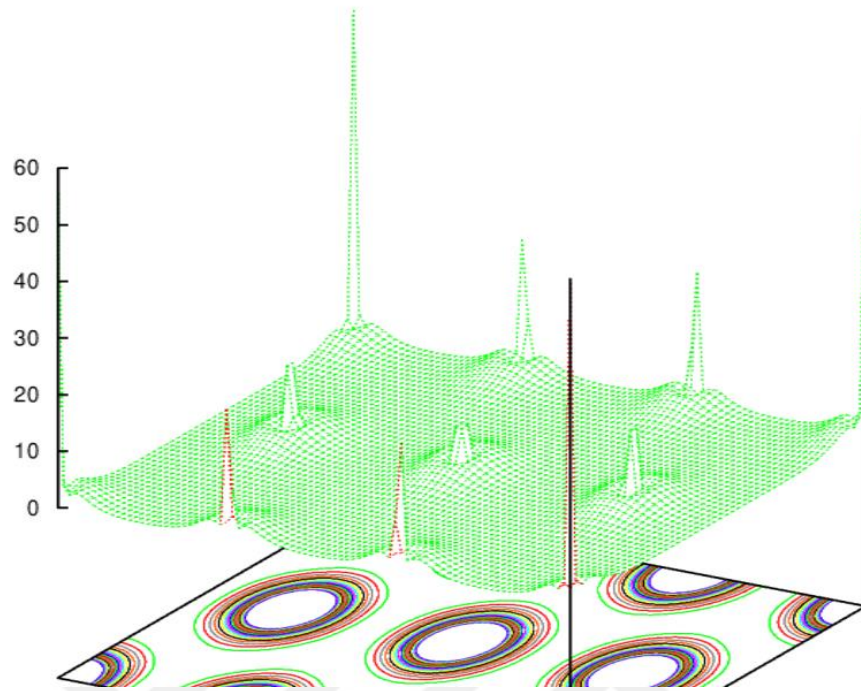
Şekil 4.18. MnN_{0.89} (MnN₂₂₅) spin down



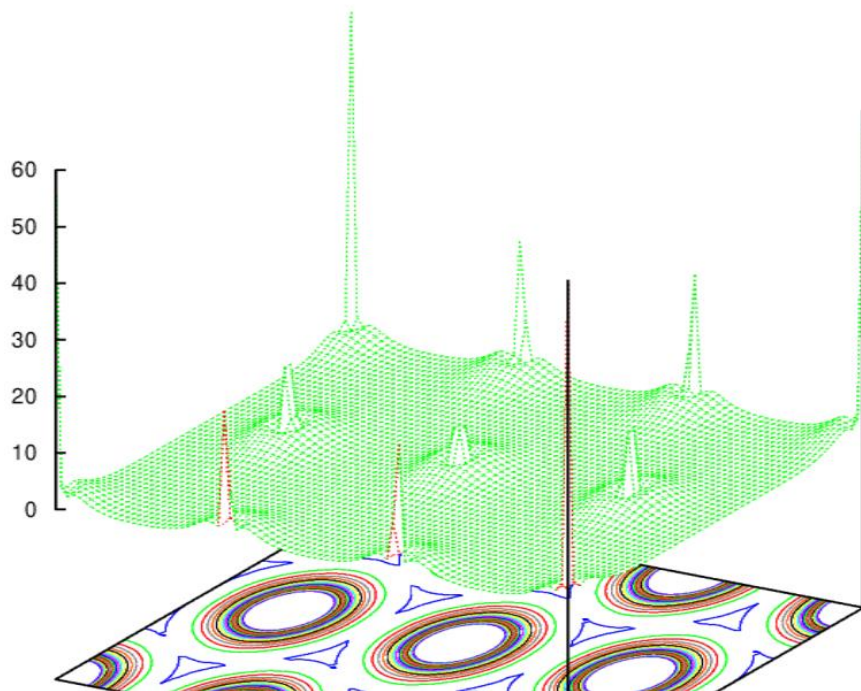
Şekil 4.19. MnN_{0.43} (MnN182) spin up



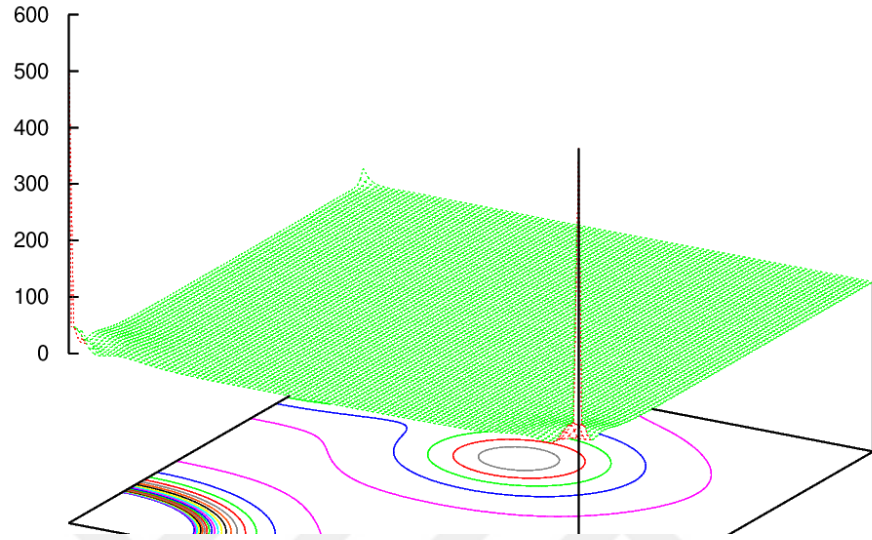
Şekil 4.20. MnN_{0.43} (MnN182) spin down



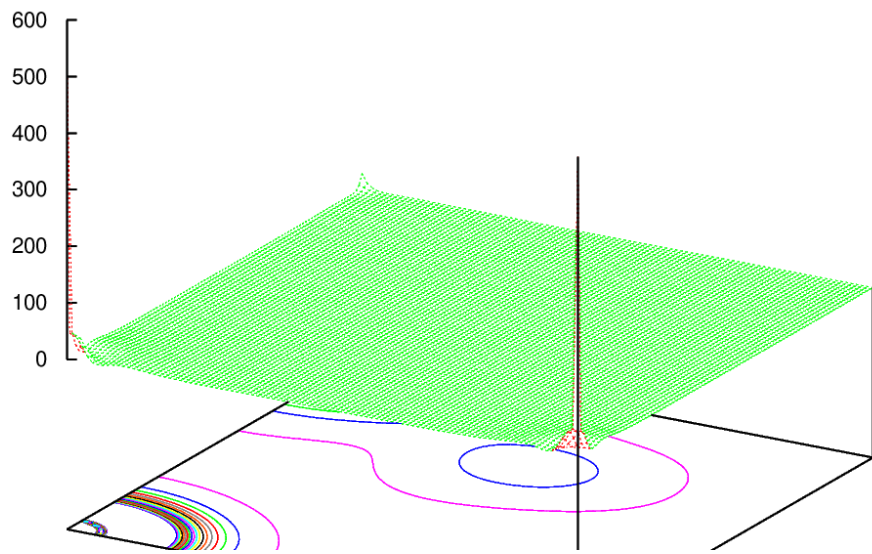
Şekil 4.21. MnN_{0.43} (MnN₂₀) spin up



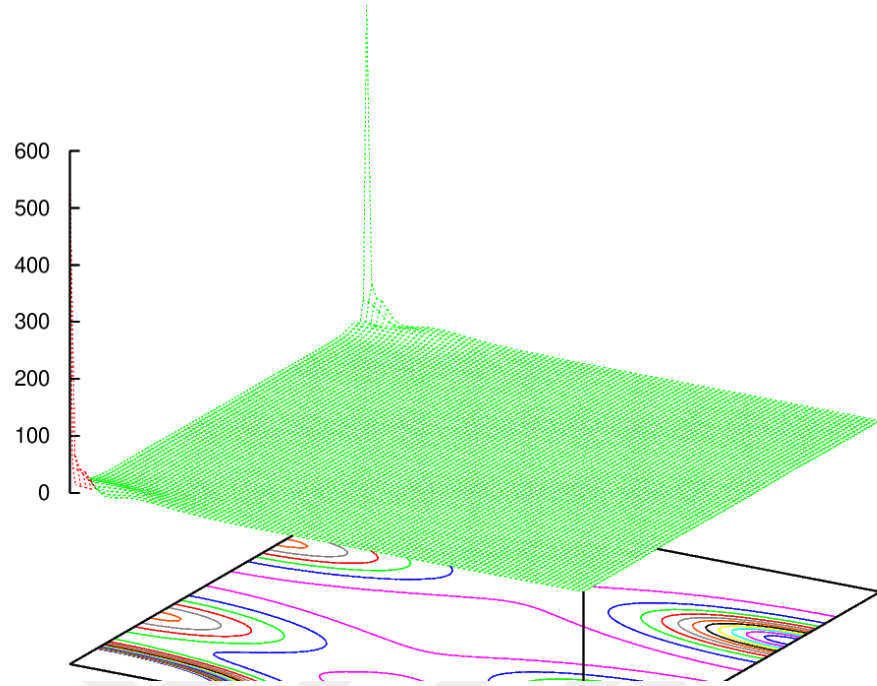
Şekil 4.22. MnN_{0.43} (MnN₂₀) spin down



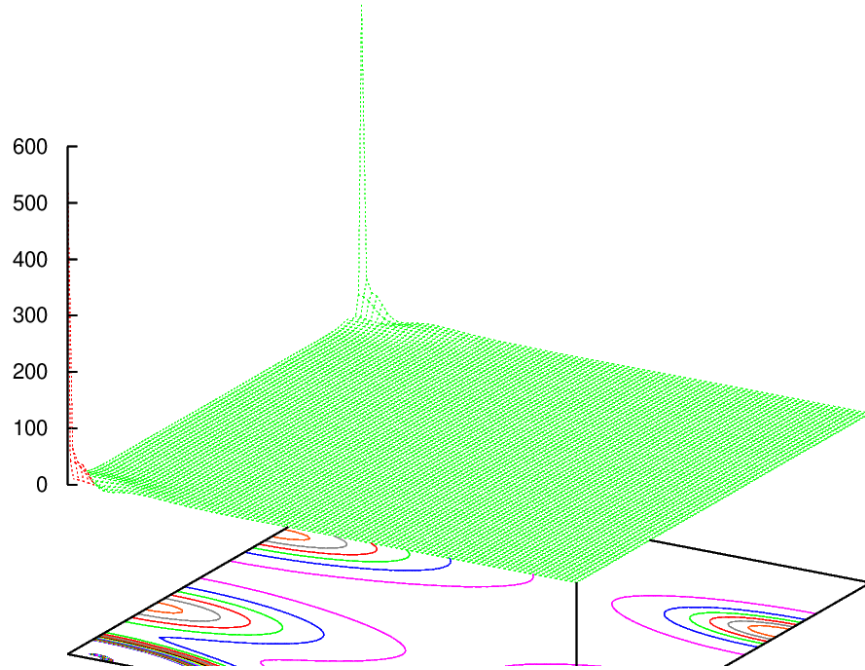
Şekil 4.23. Mn₄N (MnN221) spin up



Şekil 4.24. Mn₄N (MnN221) spin down



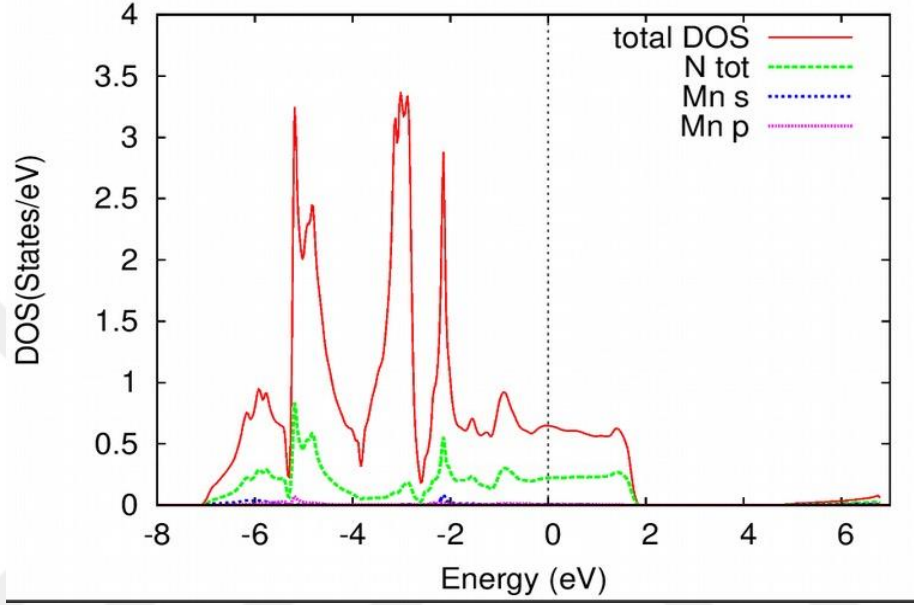
Şekil 4.25. Mn₃N₂ (MnN139) spin up



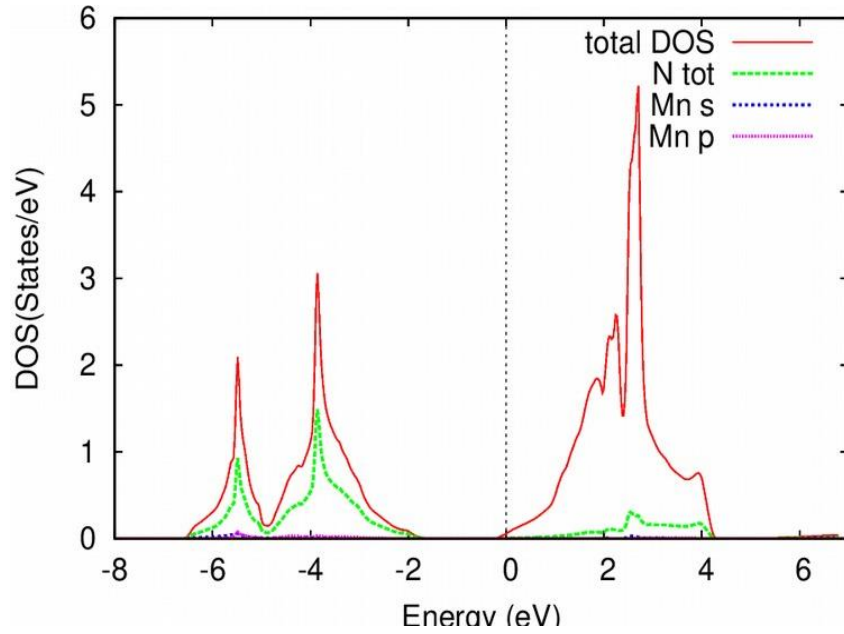
Şekil 4.26. Mn₃N₂ (MnN139) spin down

4.1.3. Mn-N Bileşiklerinin Durum Yoğunluğu

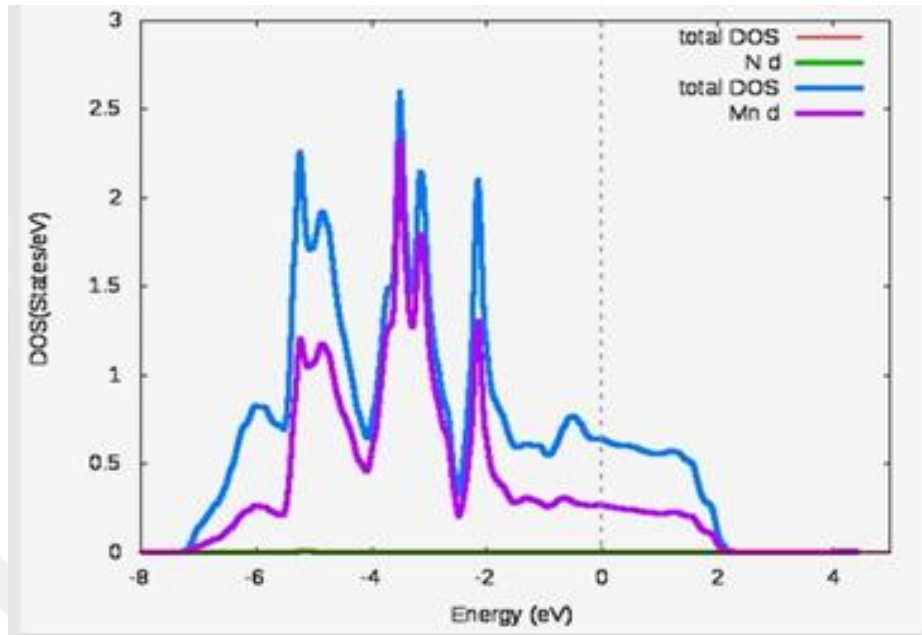
Elektron yoğunlukları hesaplanan bileşikler için durum yoğunluğu hesabı yapıldı ve aşağıdaki grafikler elde edildi. Xkgen değeri 1000 alındı. Giriş dosyası yardımıyla durum yoğunluğu (DOS) grafikleri çizildi.



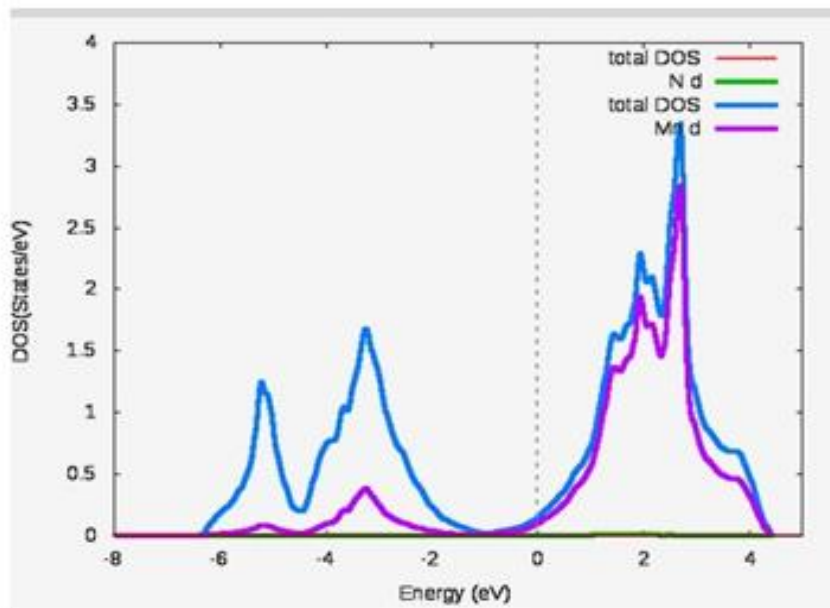
Şekil 4.27. MnN_{0.89} spin up



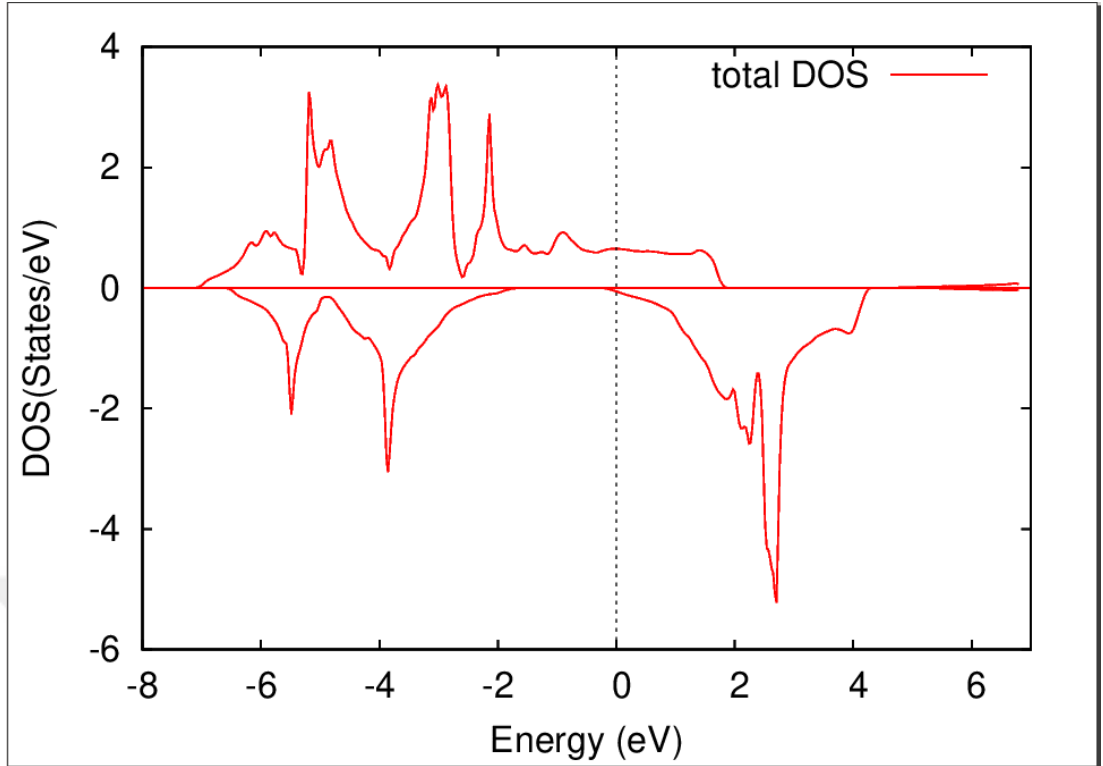
Şekil 4.28. MnN_{0.89} spin down



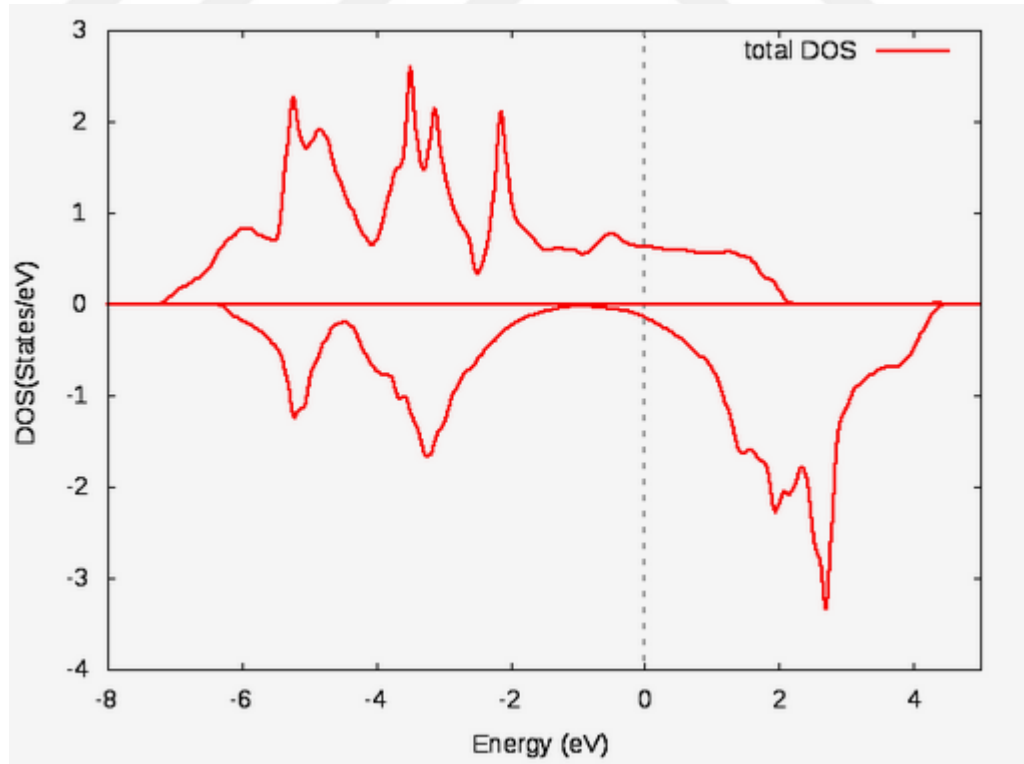
Şekil 4.29. MnN_{0.89} (MnN₂₂₅) spin up



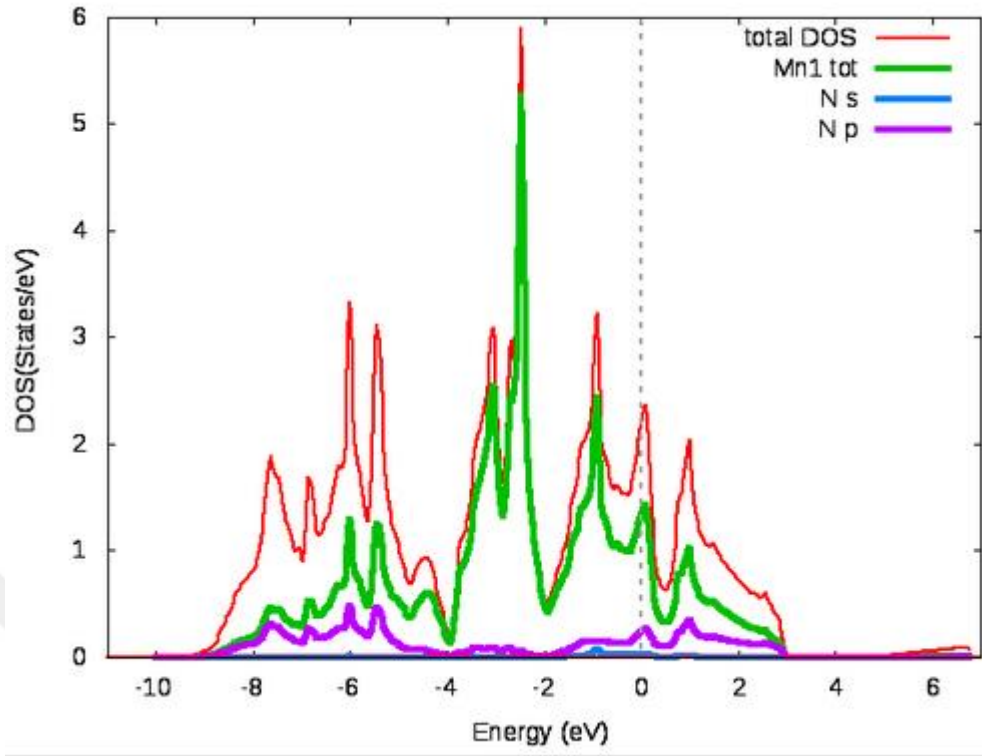
Şekil 4.30. MnN_{0.89} (MnN₂₂₅) spin down



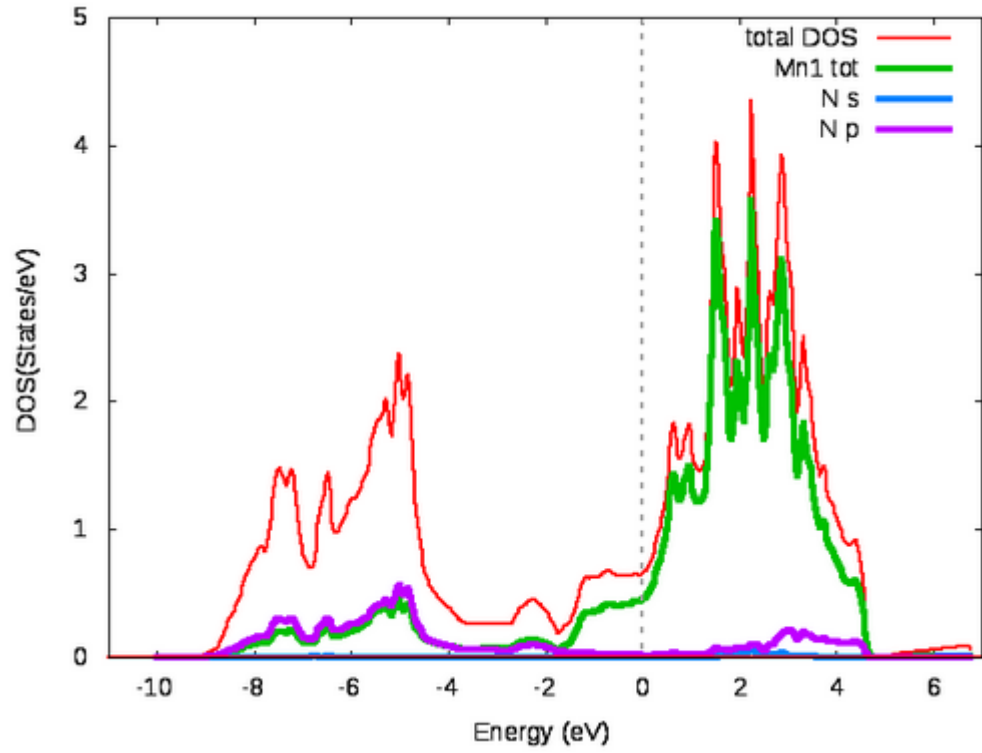
Şekil 4.31. MnN_{0.89} (MnN₂₂₅) DOS sp



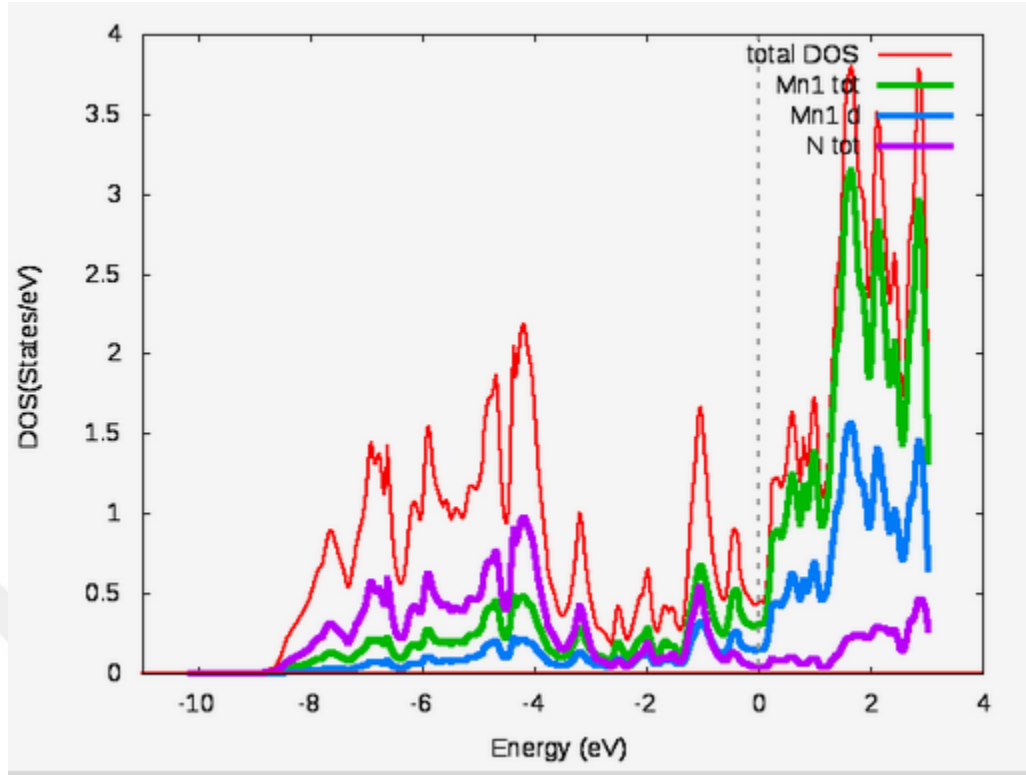
Şekil 4.32. MnN_{0.89} (MnN₂₂₅) DOS spd



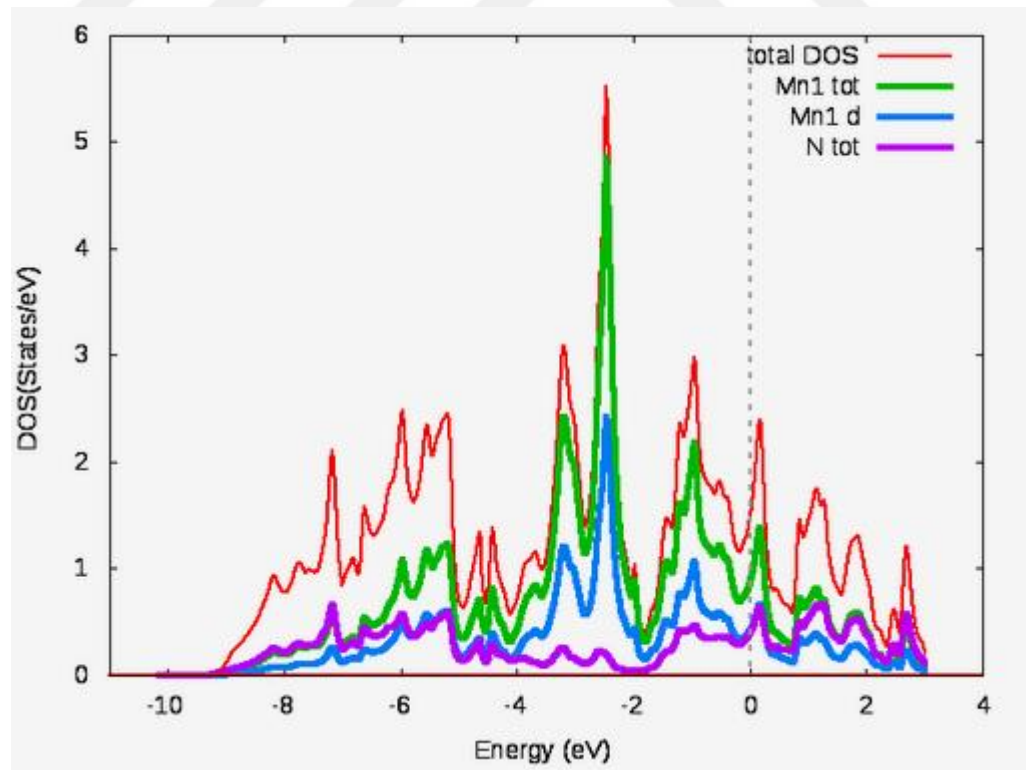
Şekil 4.33. $\text{MnN}_{0.43}$ (MnN182) spin up



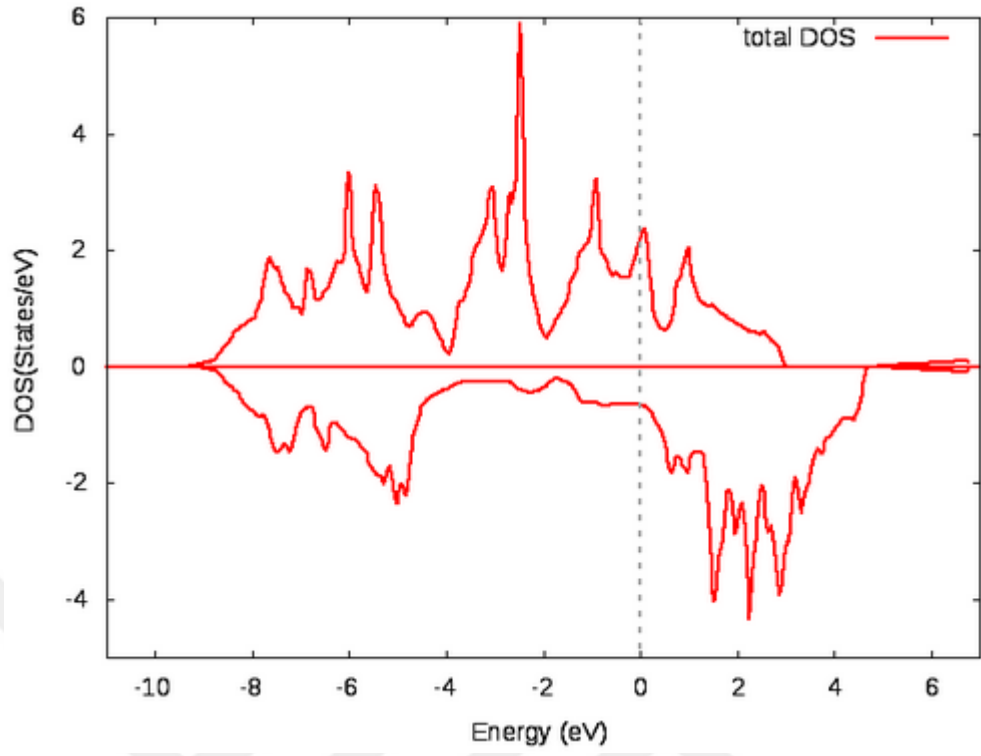
Şekil 4.34. $\text{MnN}_{0.43}$ (MnN182) spin down



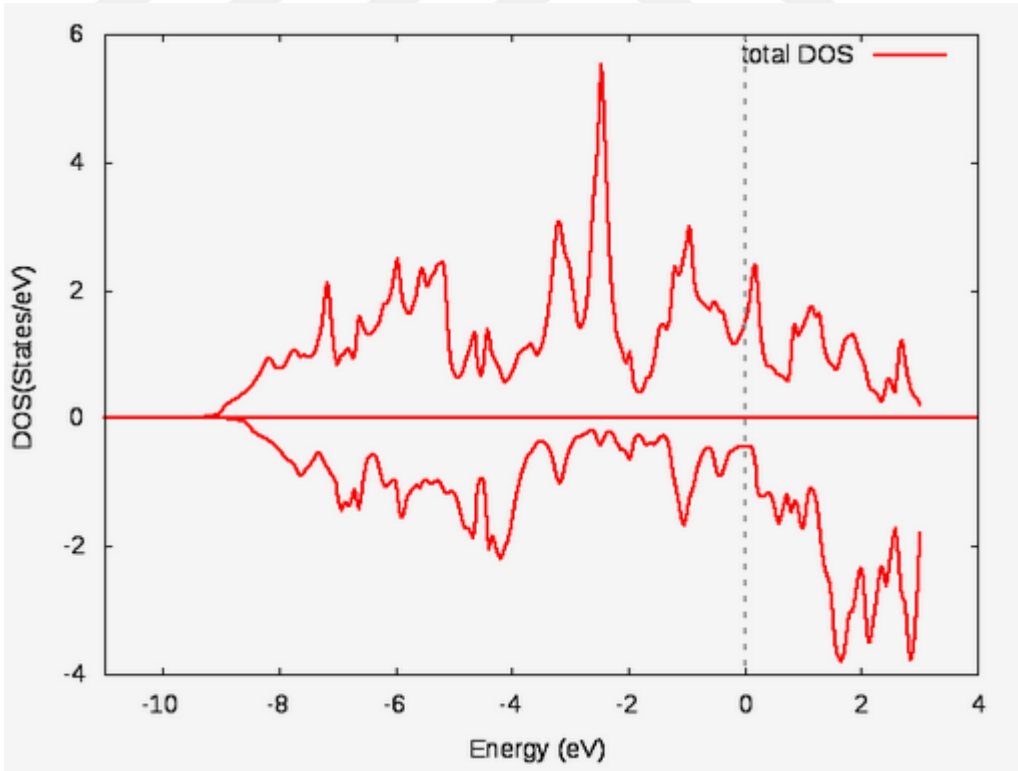
Şekil 4.35. $\text{MnN}_{0.43}$ (MnN_{182}) spin up



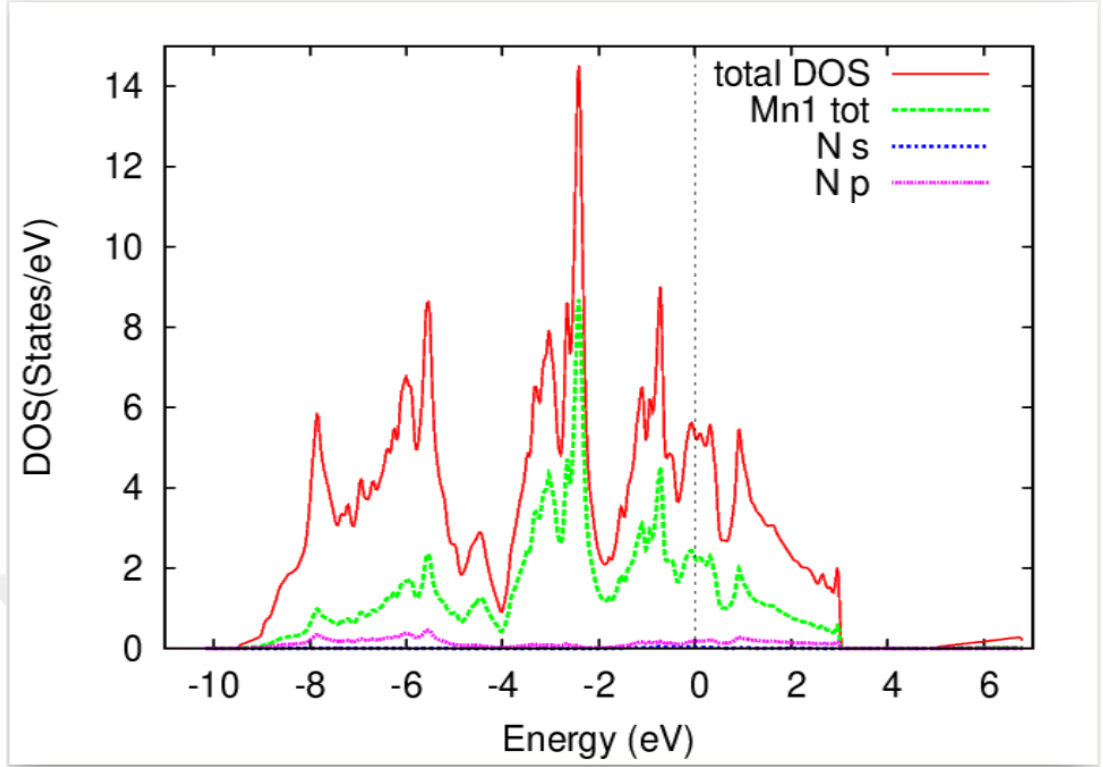
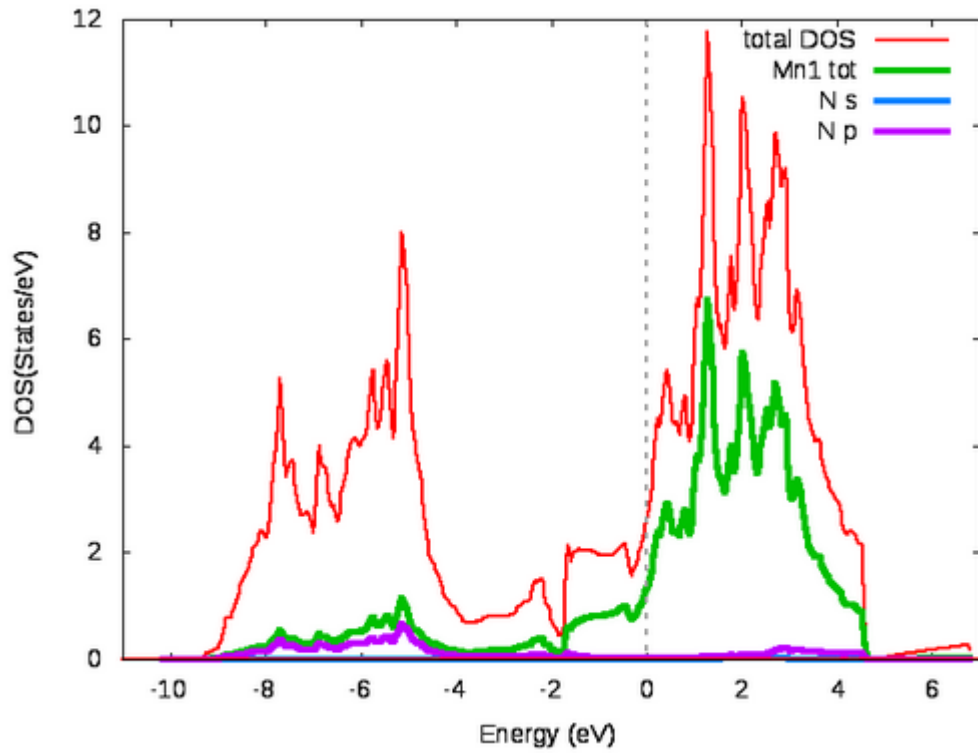
Şekil 4.36. $\text{MnN}_{0.43}$ (MnN_{182}) spin down

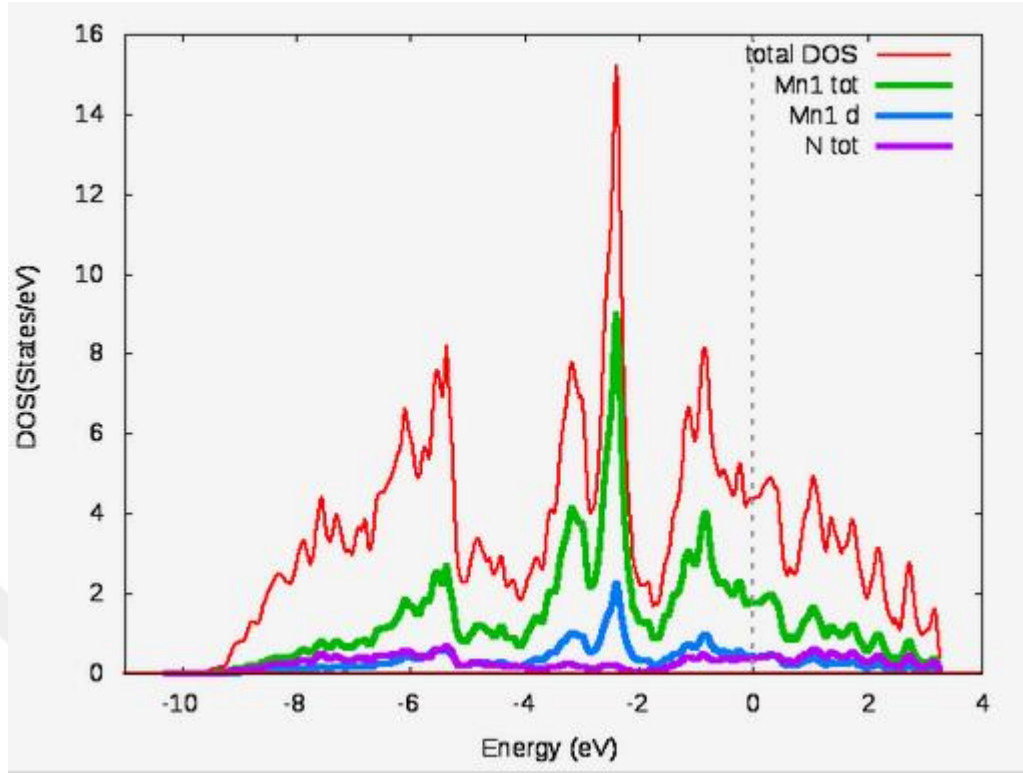
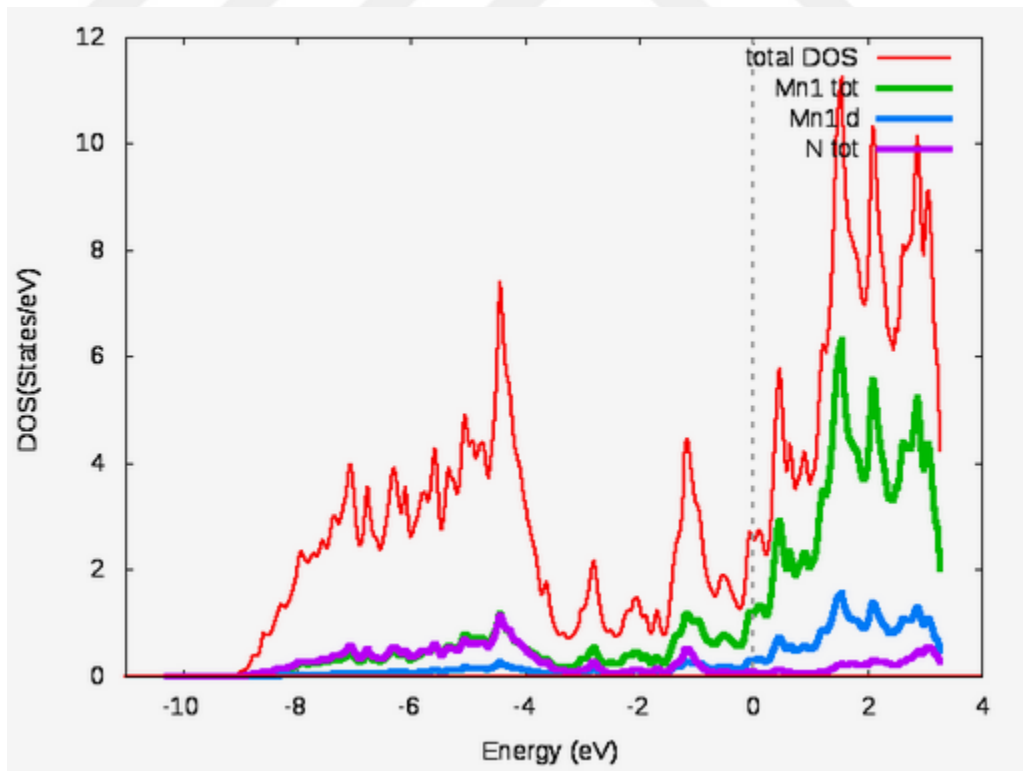


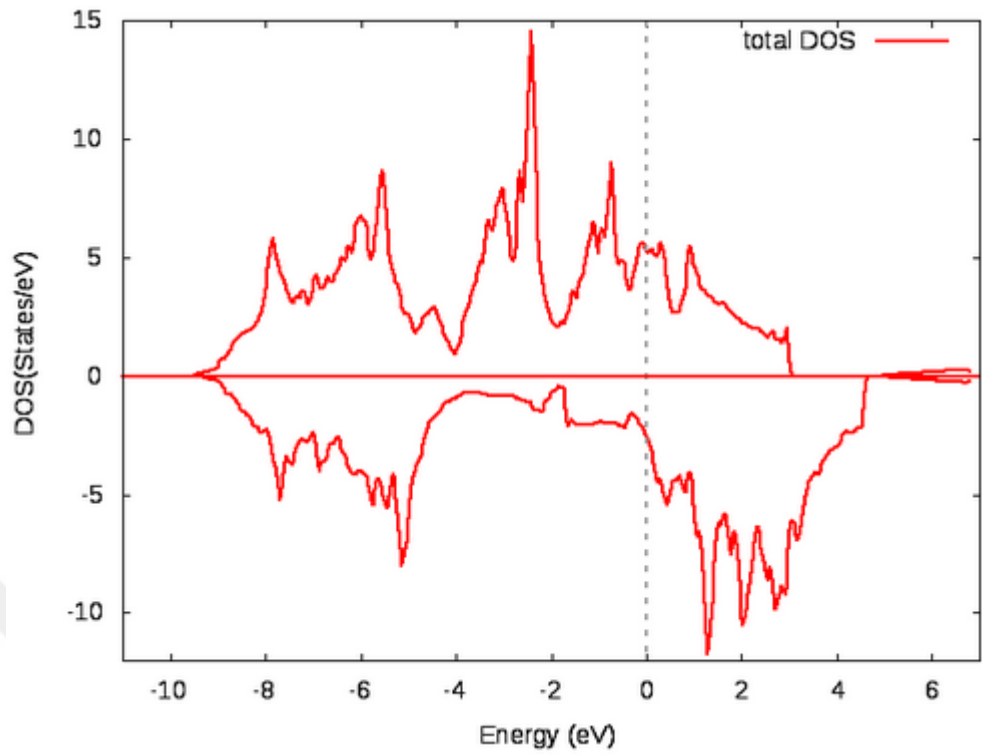
Şekil 4.37. MnN_{0.43}(MnN₁₈₂) DOS sp



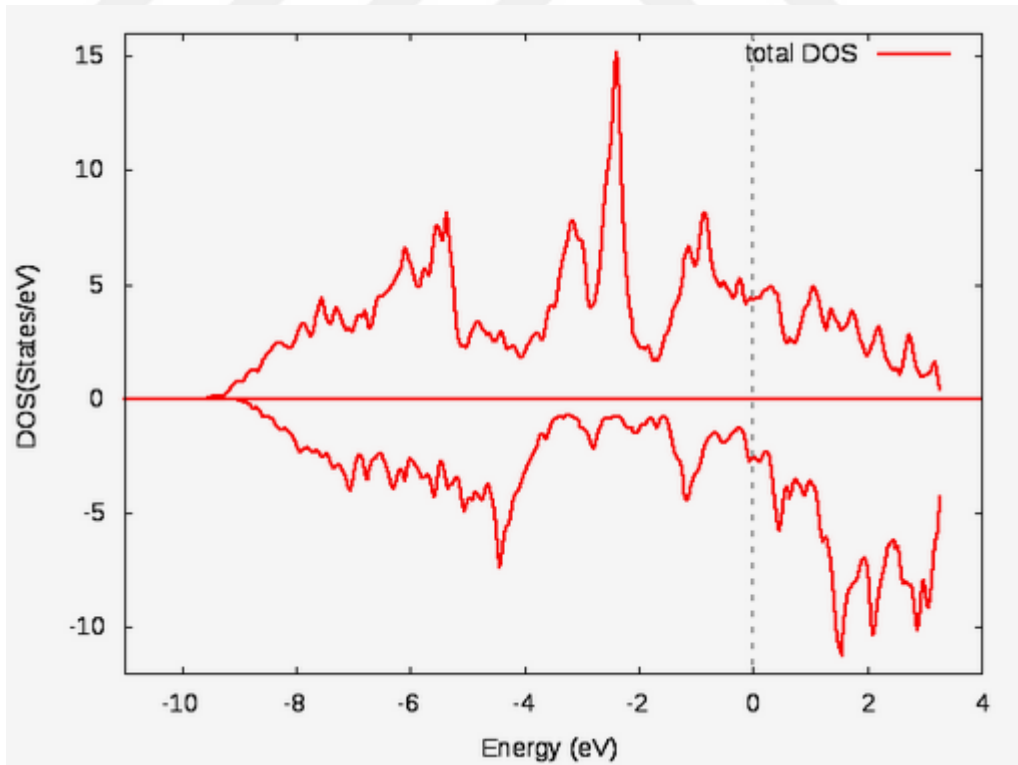
Şekil 4.38. MnN_{0.43}(MnN₁₈₂) DOS spd

Şekil 4.39. MnN_{0.43} (MnN₂₀) spin upŞekil 4.40. MnN_{0.43} (MnN₂₀) spin down

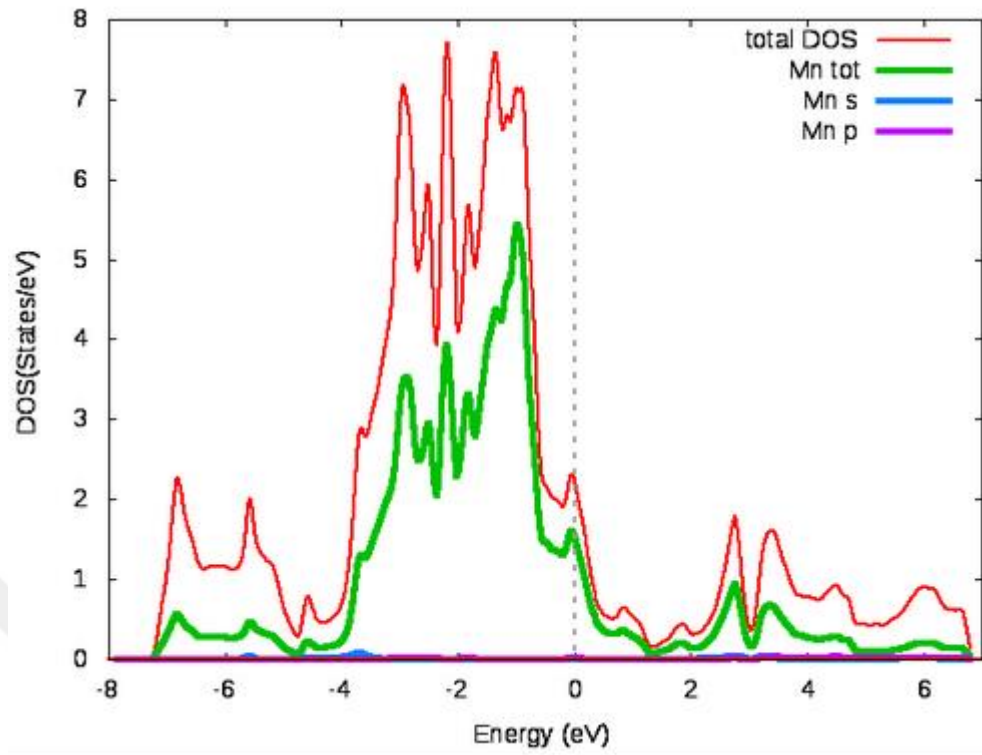
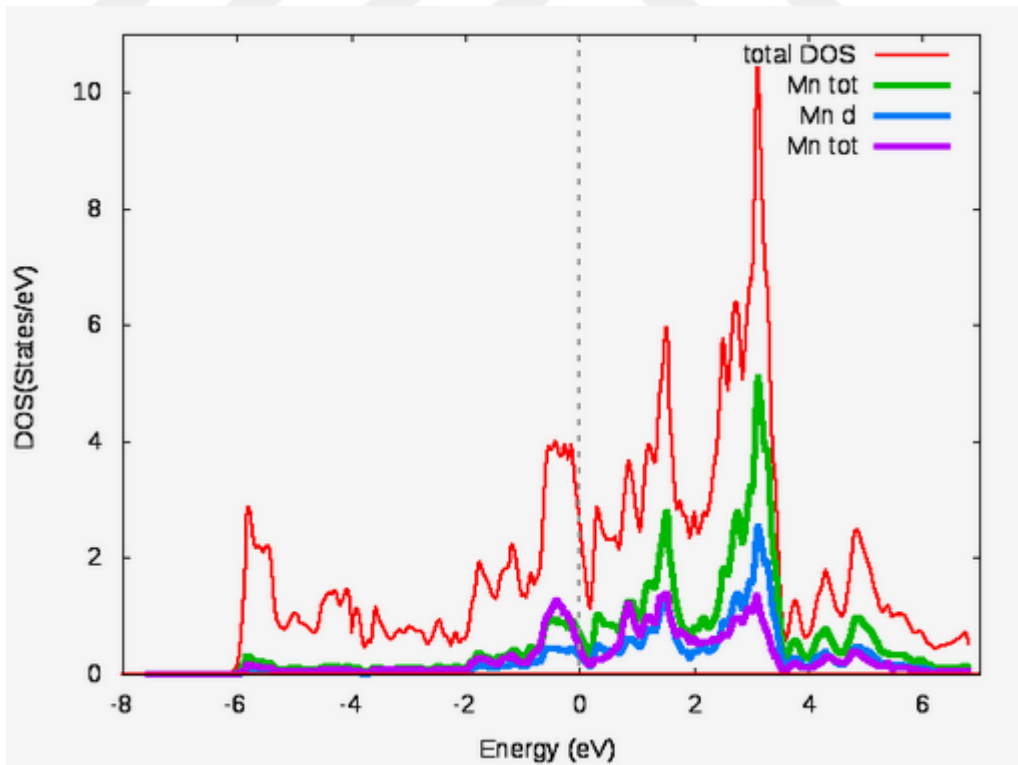
Şekil 4.41. MnN_{0.43} (MnN₂₀) spin upŞekil 4.42. MnN_{0.43} (MnN₂₀) spin down

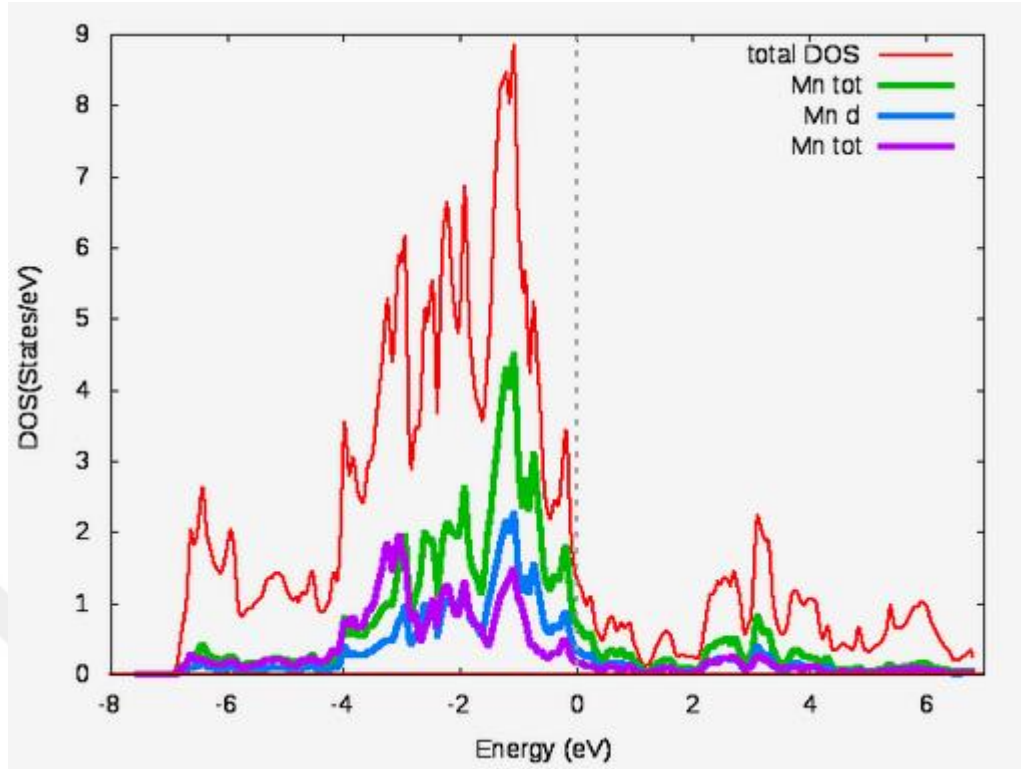
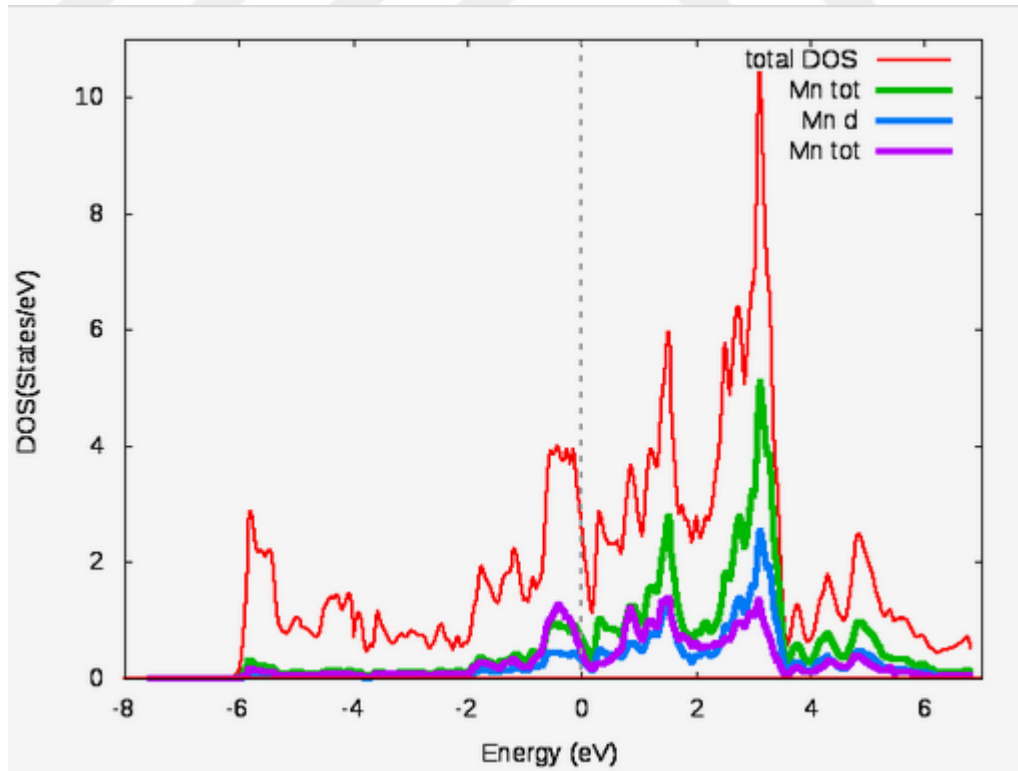


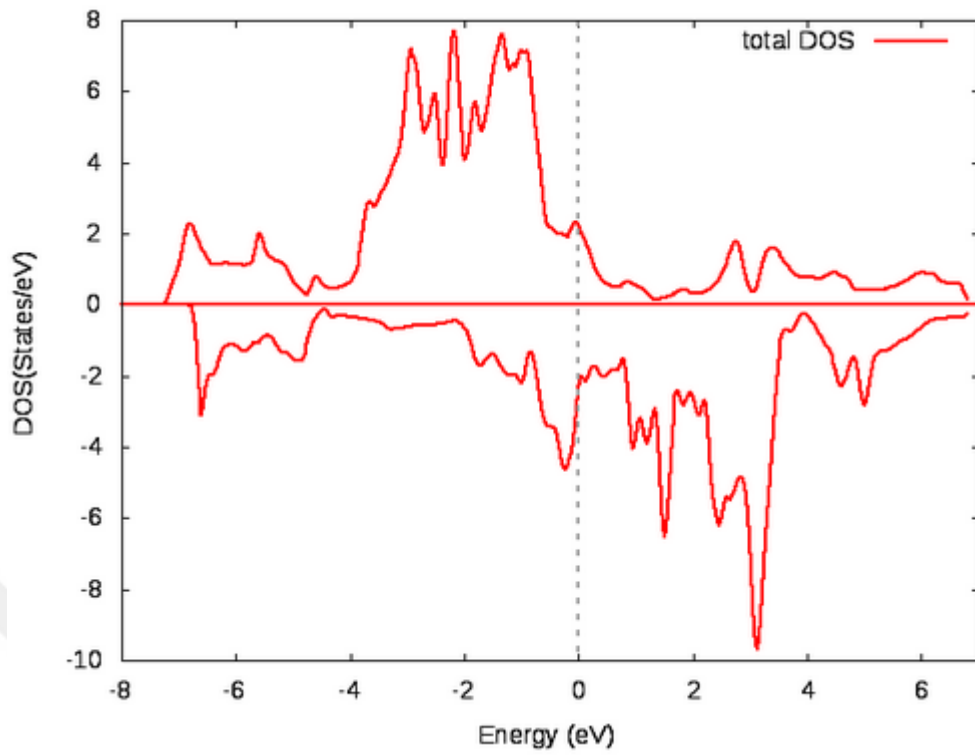
Şekil 4.43. MnN_{0.43} (MnN 20) DOS sp



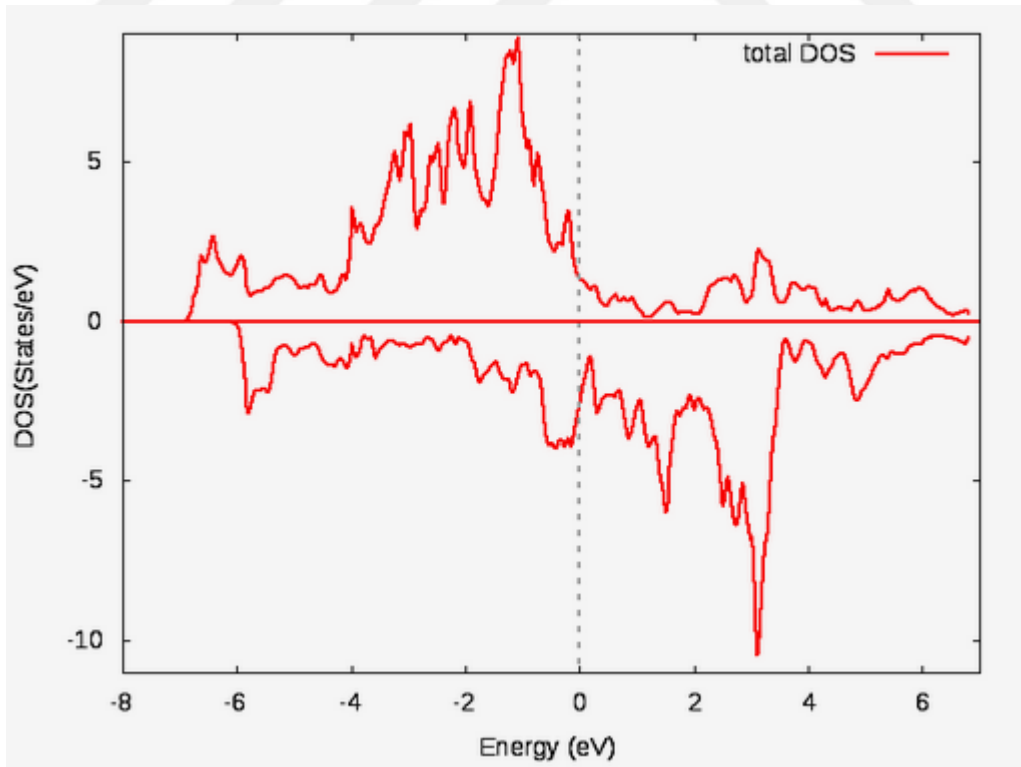
Şekil 4.44. MnN_{0.43} (MnN 20) DOS spd

Şekil 4.45. Mn₄N (MnN221) spin upŞekil 4.46. Mn₄N (MnN221) spin down

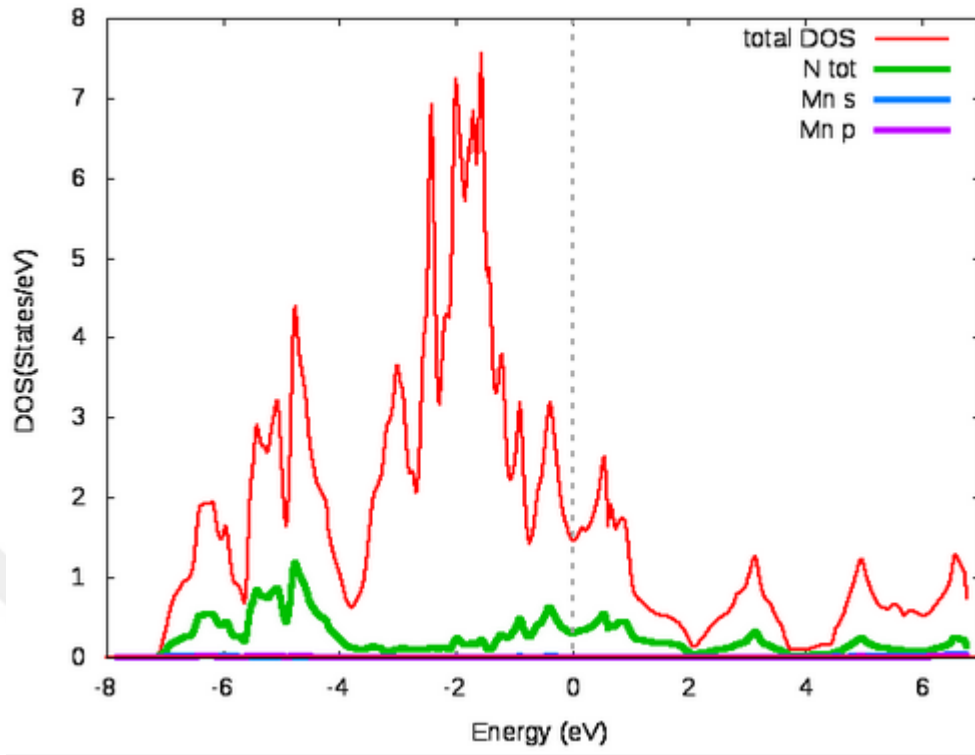
Şekil 4.47. Mn₄N (MnN₂₂₁) spin upŞekil 4.48. Mn₄N (MnN₂₂₁) spin down



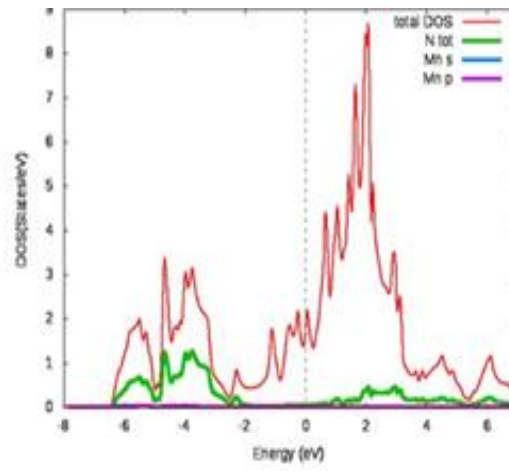
Şekil 4.49. Mn₄N (MnN221) DOS sp



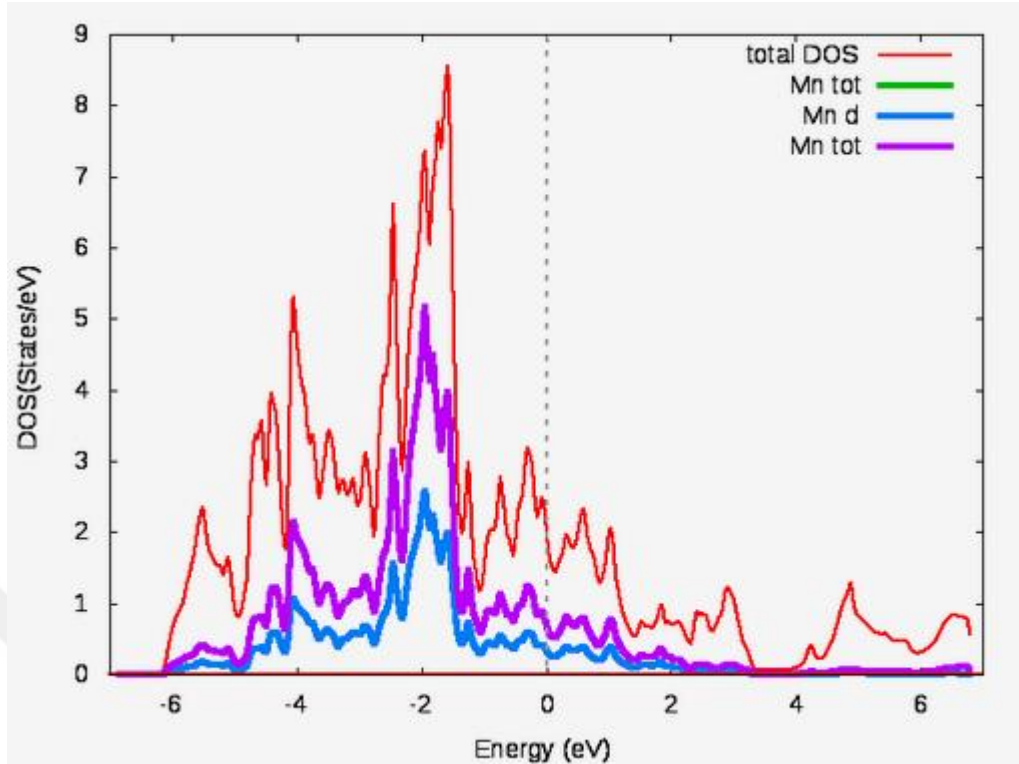
Şekil 4.50. Mn₄N (MnN221) DOS spd



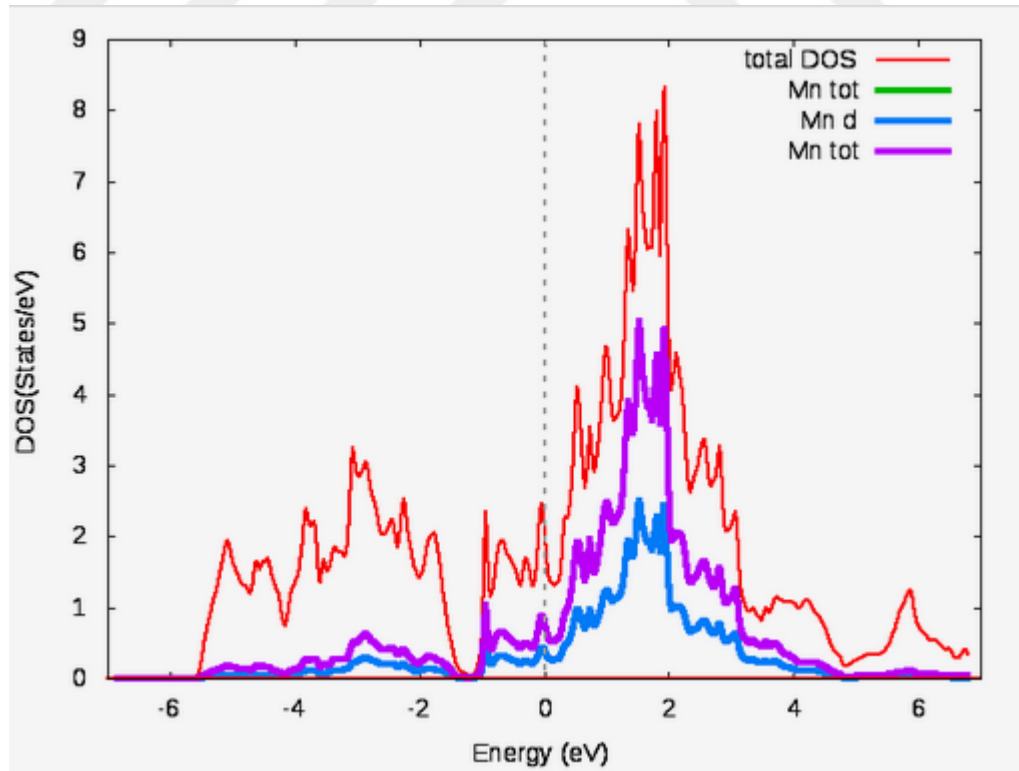
Şekil 4.51. Mn₃N₂ (MnN139) spin up



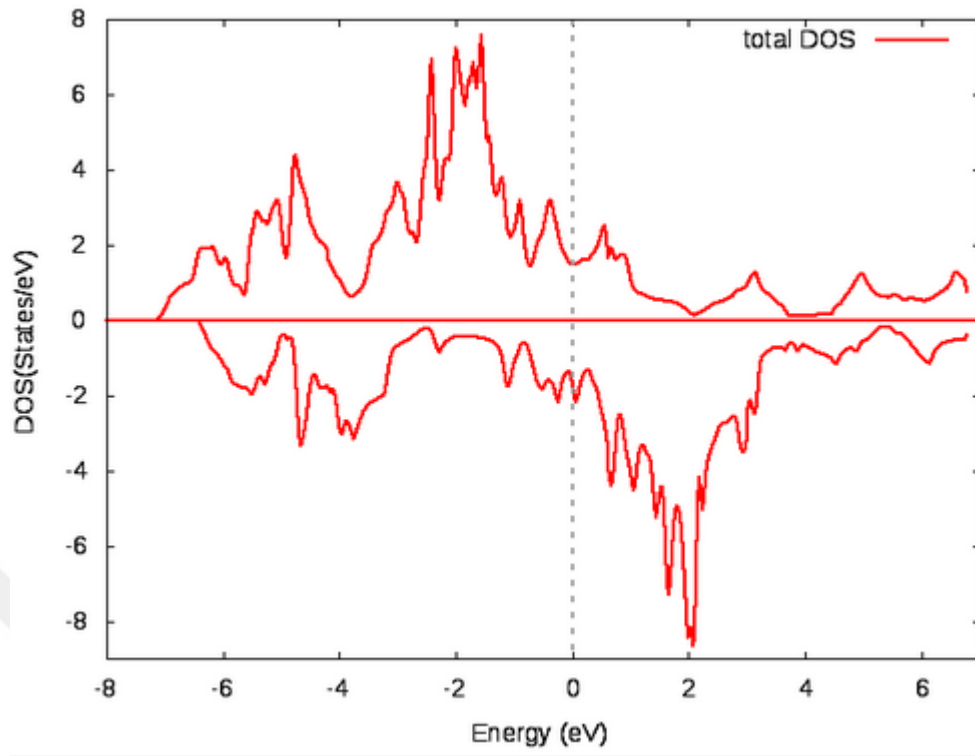
Şekil 4.52. Mn₃N₂ (MnN139) spin down



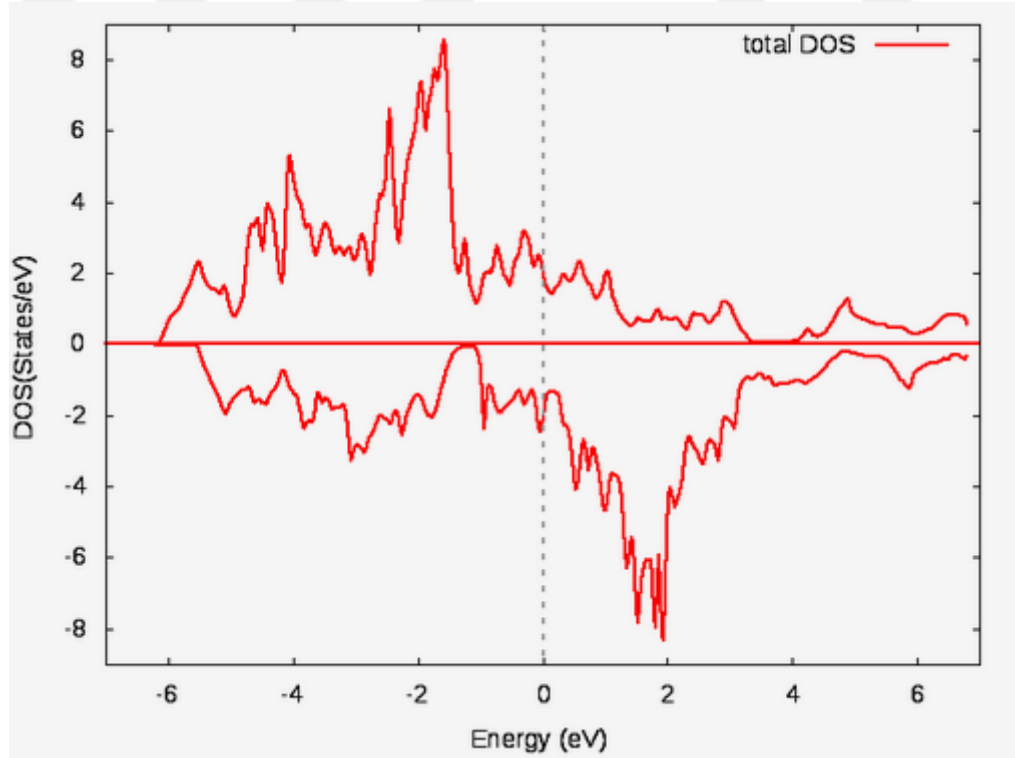
Şekil 4.53. Mn_3N_2 (MnN139) spin up



Şekil 4.54. Mn_3N_2 (MnN139) spin down



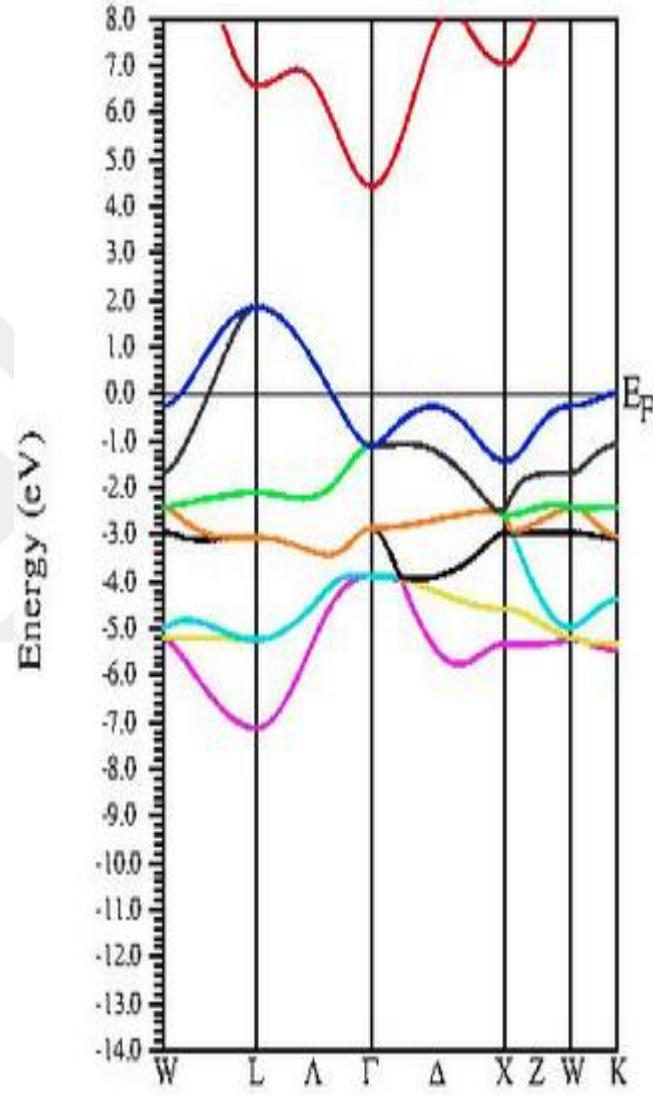
Şekil 4.55. Mn₃N₂ (MnN139) DOS sp



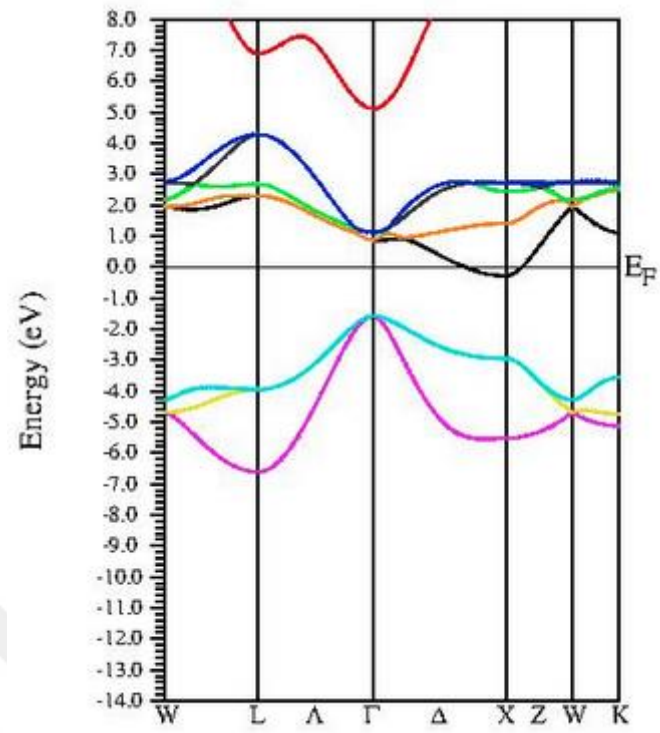
Şekil 4.56. Mn₃N₂ (MnN139) DOS spd

4.1.4. Mn-N bileşiklerinin band yapısı

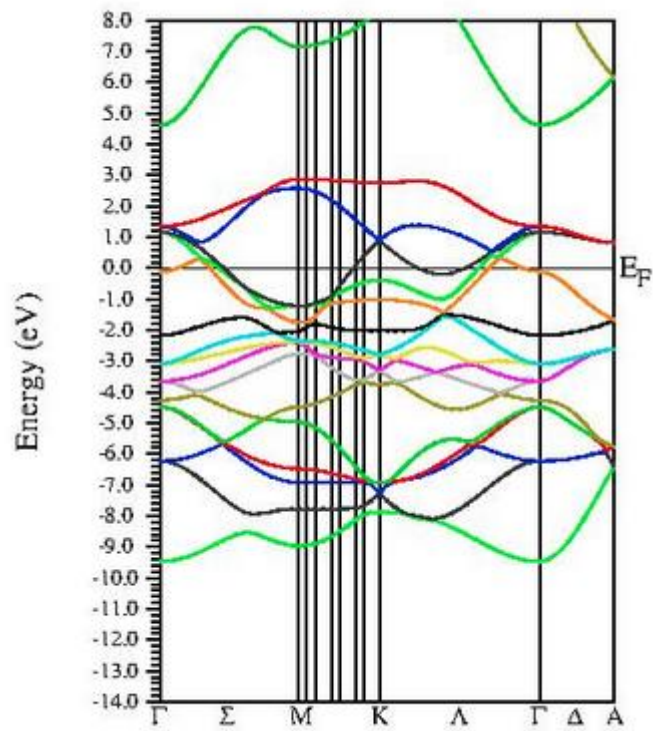
DOS hesabından sonra bileşiklerimiz için (spin up ve spin down) band hesabı yapıldı. Fermi seviyesinin ilk hesaplanan değeri band yapısı hesabı için kullanıldı.



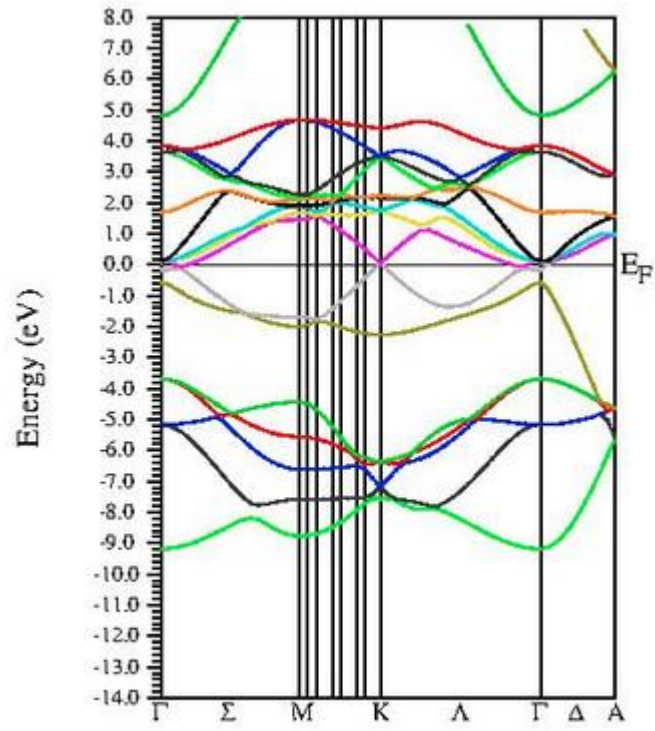
Şekil 4.57. MnN_{0.89} (MnN₂₂₅) spin up



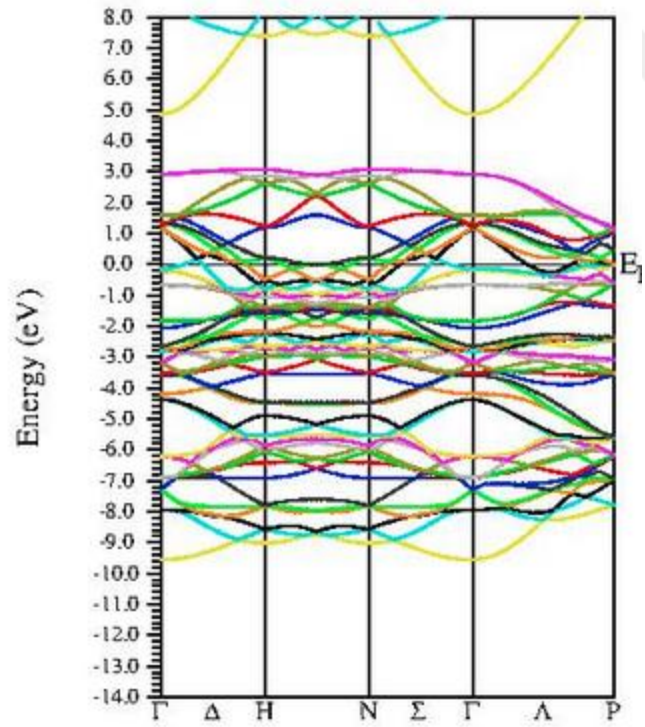
Şekil 4.58. MnN_{0.89} (MnN₂₂₅) spin down



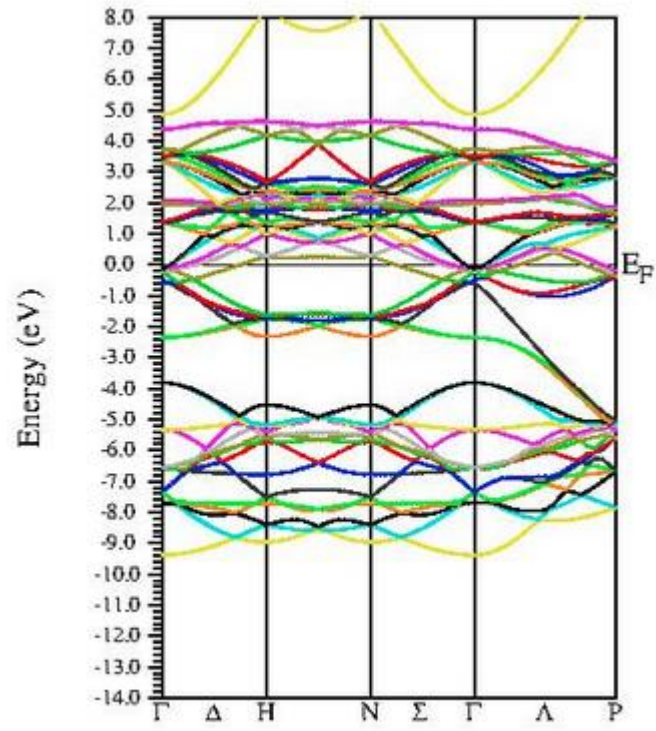
Şekil 4.59. MnN_{0.43} (MnN₁₈₂) spin up



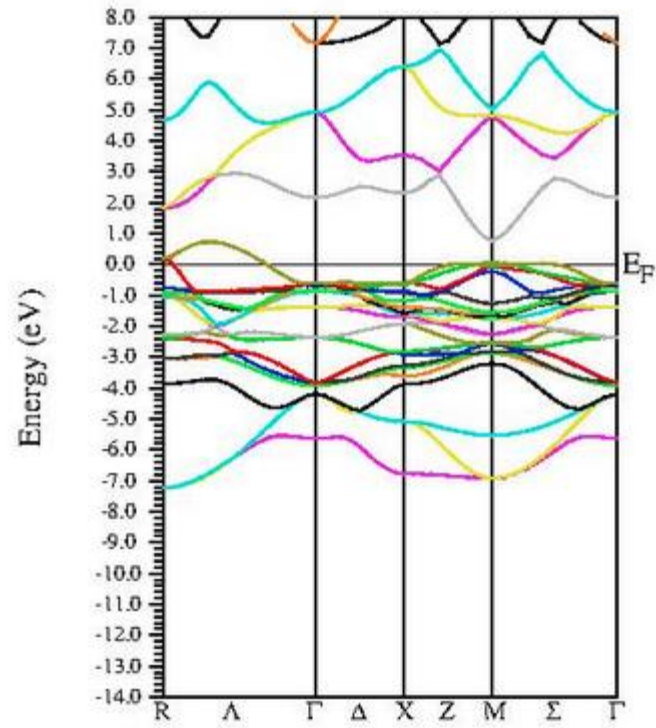
Şekil 4.60. MnN_{0.43} (MnN182) spin down



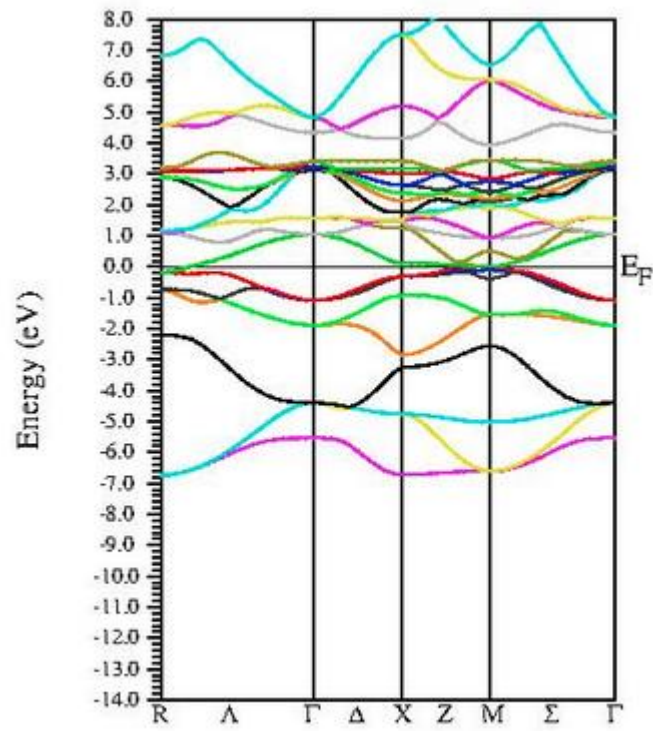
Şekil 4.61. MnN_{0.43} (MnN20) spin up



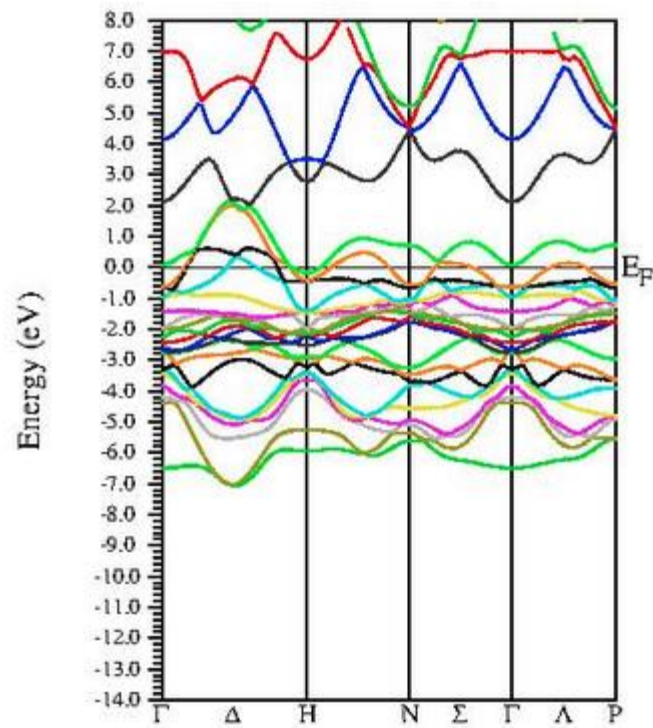
Şekil 4.62. MnN_{0.43} (MnN₂₀) spin down



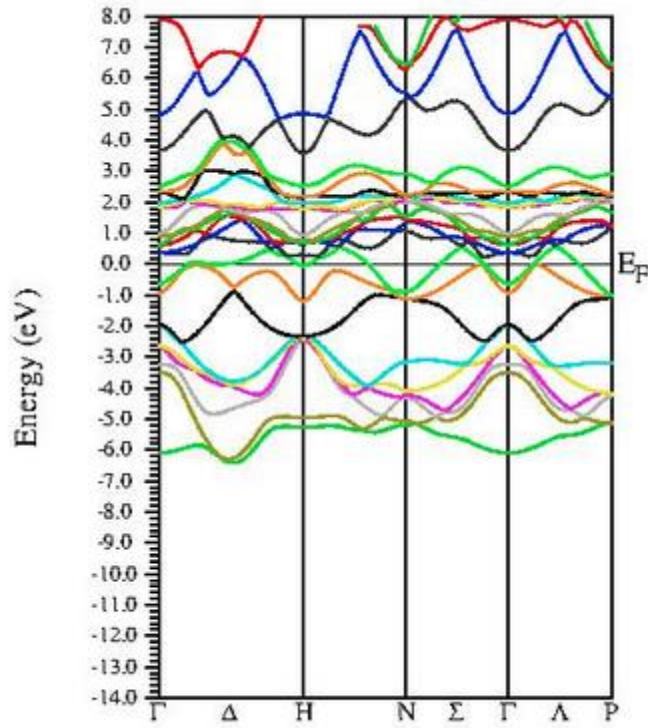
Şekil 4.63. MnN_{0.43} (Mn₄N) spin up



Şekil 4.64. MnN_{0.43} (Mn₄N) spin down



Şekil 4.65. MnN_{0.43} (Mn₃N₂) spin up



Şekil 4.66. $\text{MnN}_{0.43}$ (Mn_3N_2) spin down

4.1.5. Mn-N bileşiklerinin manyetik hesap sonuçları

Fermi (contact hyperfine field);

(MnN_{225}) bileşiğini için 1. Atom N ve 2. Atom Mn dir.

HFF001: 118.525 0.000 29.316 147.841 (KGAUSS)

HFF001: 118.564 0.000 29.311 147.875 (KGAUSS)

HFF002: 828.963 0.000 -955.319 -126.356 (KGAUSS)

HFF002: 828.960 0.000 -955.326 -126.366 (KGAUSS)

Toplam =42.994 KGAUSS

(MnN_{182}) bileşiği için 1. Atom Mn ve 2. Atom N dir.

HFF001: 729.874 0.000 -775.330 -45.456 (KGAUSS)

HFF002: 134.202 0.000 44.277 178.478 (KGAUSS)

Toplam=133.022 KGAUSS

(MnN20) bileşiği için 1. Atom Mn ve 2. Atom N dir.

HFF001:	702.075	0.000	-743.172	-41.097 (KGAUSS)
HFF002:	136.384	0.000	39.784 176.169	(KGAUSS)
HFF003:	136.557	0.000	39.700 176.257	(KGAUSS)
HFF004:	702.522	0.000	-744.700	-42.178 (KGAUSS)

Toplam=269.151 KGAUSS

(MnN221) bileşiği için 1. Atom Mn ve 2. Atom Mn 3. Atom N dir.

HFF001:	402.514	0.000	-632.775	-230.261 (KGAUSS)
HFF002:	382.919	0.000	-751.845	-368.926 (KGAUSS)
HFF003:	-37.589	0.000	10.747 -26.842	(KGAUSS)

Toplam= - 626.029 KGAUSS

(MnN139) bileşiği için 1. Atom N ve 2. Atom Mn 3. Atom Mn dir.

HFF001:	57.467	0.000	5.960	63.427 (KGAUSS)
HFF002:	543.443	0.000	-714.642	-171.200 (KGAUSS)
HFF003:	348.784	0.000	-679.722	-330.938 (KGAUSS)

Toplam= -438.711 KGAUSS

Dipolar hyperfine field ;

(MnN225) bileşiğini için 1. Atom N ve 2. Atom Mn dir.

ATOM: 1 N	0.50000	0.50000	0.50000
ATOM: 2 Mn	0.00000	0.00000	0.00000

atom 1 mag. moment -0.0820 Bohr magneton atom 2 mag. moment 145.5669

Bohr magneton

(MnN182) bileşiği için 1. Atom Mn ve 2. Atom N dir.

ATOM:	1	Mn1	0.33333	0.66667	0.25000
ATOM:	2	Mn1	0.66667	0.33333	0.75000
ATOM:	1	N 1	0.00000	0.00000	0.50000
ATOM:	2	N 1	0.00000	0.00000	0.00000

atom 1 mag. moment 3.0607 Bohr magneton atom 2 mag. moment 228.9509 Bohr magneton

(MnN20) bileşiği için 1. Atom Mn ve 2. Atom N dir.

ATOM: 1 EQUIV. 1 Mn1 AT 0.66670 0.33330
0.25000

ATOM: 1 EQUIV. 2 Mn1 AT 0.33330 0.66670
0.75000

ATOM: 1 EQUIV. 3 Mn1 AT 0.33330 0.33330
0.25000

ATOM: 1 EQUIV. 4 Mn1 AT 0.66670 0.66670
0.75000

ATOM: 2 EQUIV. 1 N 1 AT 0.00000 0.00000
0.50000

ATOM: 2 EQUIV. 2 N 1 AT 0.00000 0.00000
0.00000

ATOM: 3 EQUIV. 1 N 2 AT 0.16670 0.50000
0.50000

ATOM: 3 EQUIV. 2 N 2 AT 0.83330 0.50000
0.00000

ATOM: 3 EQUIV. 3 N 2 AT 0.83330 0.50000
0.50000

ATOM: 3 EQUIV. 4 N 2 AT 0.16670 0.50000
0.00000

ATOM: 4 EQUIV. 1 Mn2 AT 0.00000 0.33330 0.25000

ATOM: 4 EQUIV. 2 Mn2 AT 0.00000 0.66670 0.75000

atom 1 mag. moment 2.9595 Bohr magneton atom 2 mag. moment 674.3549

Bohr magneton atom 3 mag. moment 0.0000 Bohr magneton

(MnN139) bileşiği için 1. Atom N ve 2. Atom Mn 3. Atom Mn dir. ATOM: 1 EQUIV.

1 N AT 0.00000 0.00000 0.15930

ATOM: 1 EQUIV. 2 N AT 0.00000 0.00000 0.84070

ATOM: 2 EQUIV. 1 Mn AT 0.00000 0.00000
0.33341

ATOM: 2 EQUIV. 2 Mn AT 0.00000 0.00000
0.66659
ATOM: 3 EQUIV. 1 Mn AT 0.00000 0.00000
0.00000

atom 1 has moment -0.0242 Bohr magneton atom 2 has moment 412.5447 Bohr magneton atom 3 has moment 1.0000 Bohr magneton

(MnN₂21) bileşiği için 1. Atom Mn ve 2. Atom Mn 3. Atom N dir.

ATOM: 1 EQUIV. 1 Mn AT 0.50000 0.00000
0.00000
ATOM: 1 EQUIV. 2 Mn AT 0.00000 0.50000
0.00000
ATOM: 2 EQUIV. 1 Mn AT 0.00000 0.00000
0.50000
ATOM: 3 EQUIV. 1 Mn AT 0.50000 0.50000
0.50000
ATOM: 4 EQUIV. 1 N AT 0.00000 0.00000 0.00000

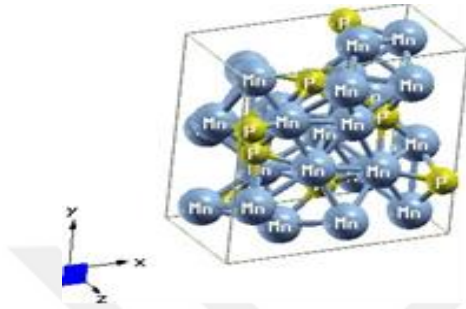
atom 1 mag. moment 2.9668 Bohr magneton
atom 2 mag. moment 430.5849 Bohr magneton
atom 3 mag. moment 1.0000 Bohr magneton
atom 4 mag. moment 0.0000 Bohr magneton

4.2. Mn-P Bileşikleri

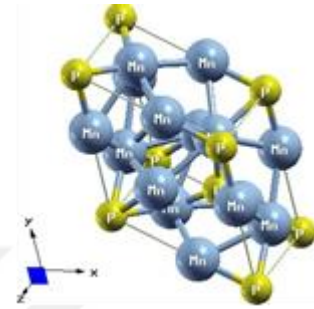
MnP bileşikleri; Mn₂P, Mn₃P, MnP, şeklindedir. Öncelikle yapılar optimize edildi ve daha sonra elektron yoğunluğu, durum yoğunluğu, bant hesabı ve manyetik alan hesabı işlemleri sırasıyla yapıldı.

4.2.1. Mn-P bileşiklerinin yapısı ve optimizasyonu

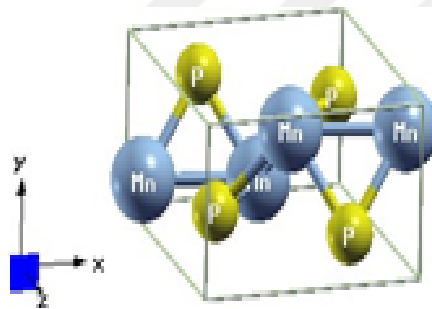
Inorganic Material Database sitesinde bulunan .cif dosyaları alınarak WIEN2k paket programına tanıtılıp, yapı için minimum enerji değerleri hacim hesabı yapılarak elde edildi. Enerji-hacim grafikleri çizildi.



Şekil 4.67. Mn_3P bileşiğinin kristal yapısı



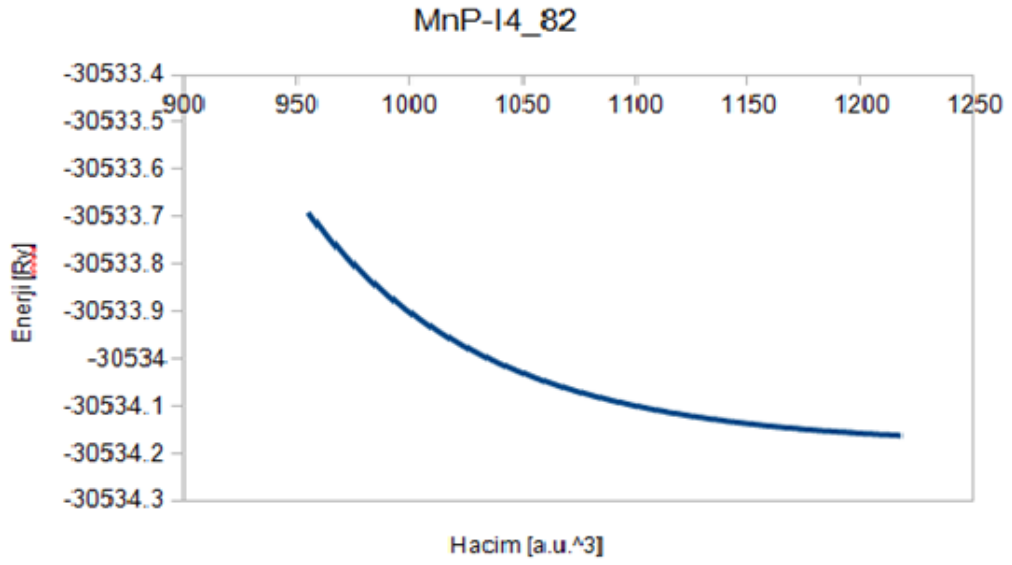
Şekil 4.68. Mn_2P bileşiğinin kristal yapısı



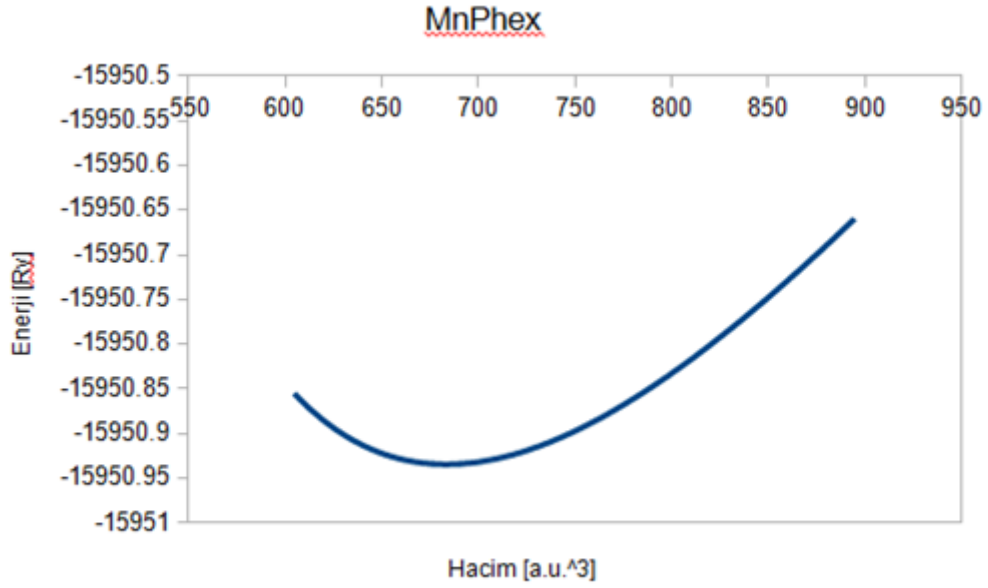
Şekil 4.69. MnP bileşiğinin kristal yapısı

Tablo 4.3. Mn – P Bileşikleri

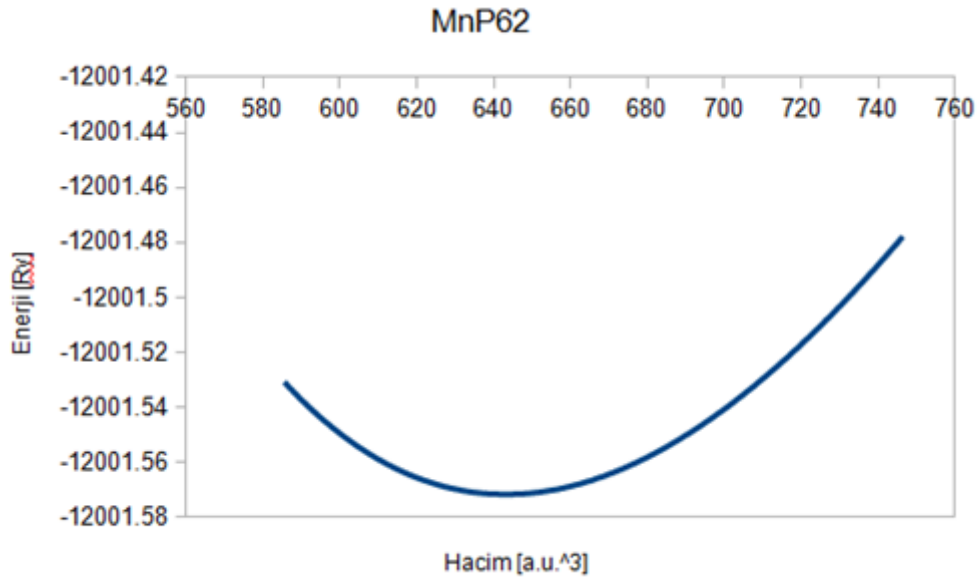
Bileşik	Kristal yapı	Uzay grup
Mn_2P	hexagonal	P-62m 189
Mn_3P	tetragonal	I-4 82
MnP	ortorombik	Pnma 62



Şekil 4.70. Mn3P bileşiğin hacim grafiği



Şekil 4.71. Mn₂P bileşiğin hacim grafiği



Şekil 4.72. MnP bileşiğinin hacim grafiği

Tablo 4.4. MnP Bileşiklerinin volume hesabı sonuçları

	Hacim [a.u.^3]	B (GPa)	BP	Enerji[Ry]
Mn ₂ P	686.6329	884.1676	64.2295	-15950.93269
MnP	643.1549	203.7453	3.1866	-12001.57161
Mn ₃ P	1357.1942	14.7683	12.3682	-30534.17528

4.2.2. Mn-P bileşiklerinin elektron yoğunluğu

Her bileşik için öncelikle yapı dosyası oluşturuldu. Daha sonra task menüsü altından bulunan elektron density komutu ile elektron yoğunlukları Wu-Cohen potansiyeli ile hesaplandı.

Yapının adı : Mn₃P Uzay Grubu: I-4

a= 16.108306 ,b= 16.108306 ,c =8.365655 bohr

$\gamma = \beta = \alpha : 900$

Atom 1: Mn RMT= 2.12

Atom 2: Mn RMT= 2.12

Atom 3: P RMT= 1.68

Atom 4: Mn RMT= 2.12

Yapının adı : Mn₂P Uzay Grubu: P-62m

$a=10.256921$, $b= 6.179902$, $c = 11.546351$ bohr $\gamma = \beta = 90^\circ$ $\alpha= 120^\circ$

Atom 1: Mn RMT= 2.3

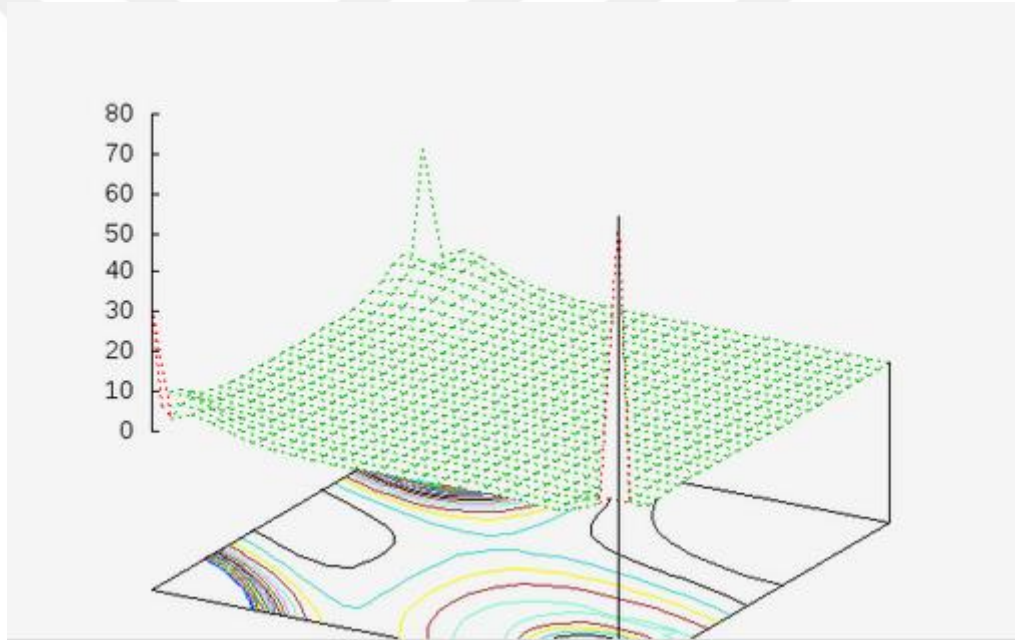
Atom 2: P RMT= 1.78

Yapının adı : MnP Uzay Grubu: Pnma

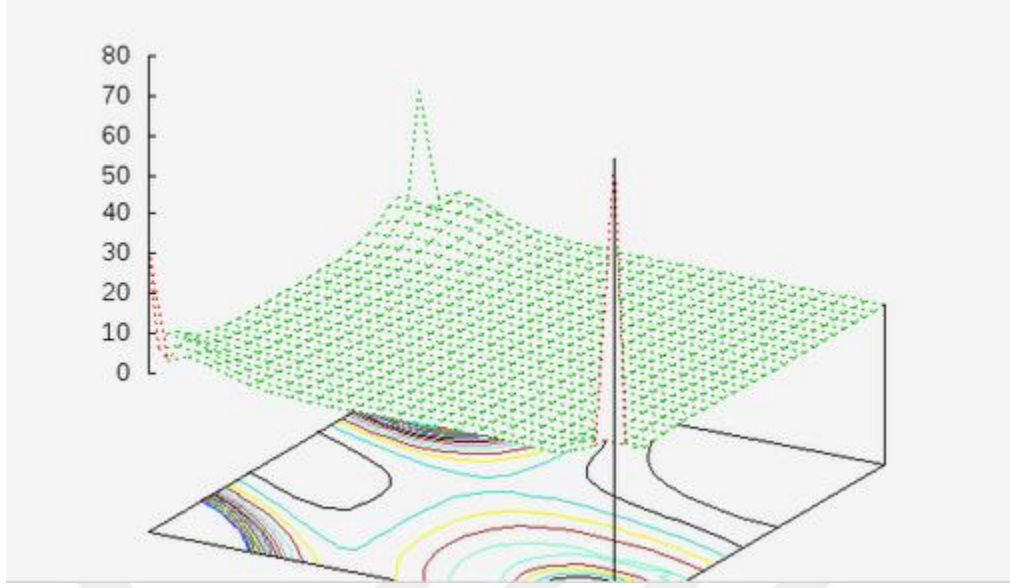
$a=b= 12.094098$; $c =6.854183$ bohr $\gamma = \beta = 90^\circ$ $\alpha=120^\circ$

Atom 1: Mn RMT= 2.26

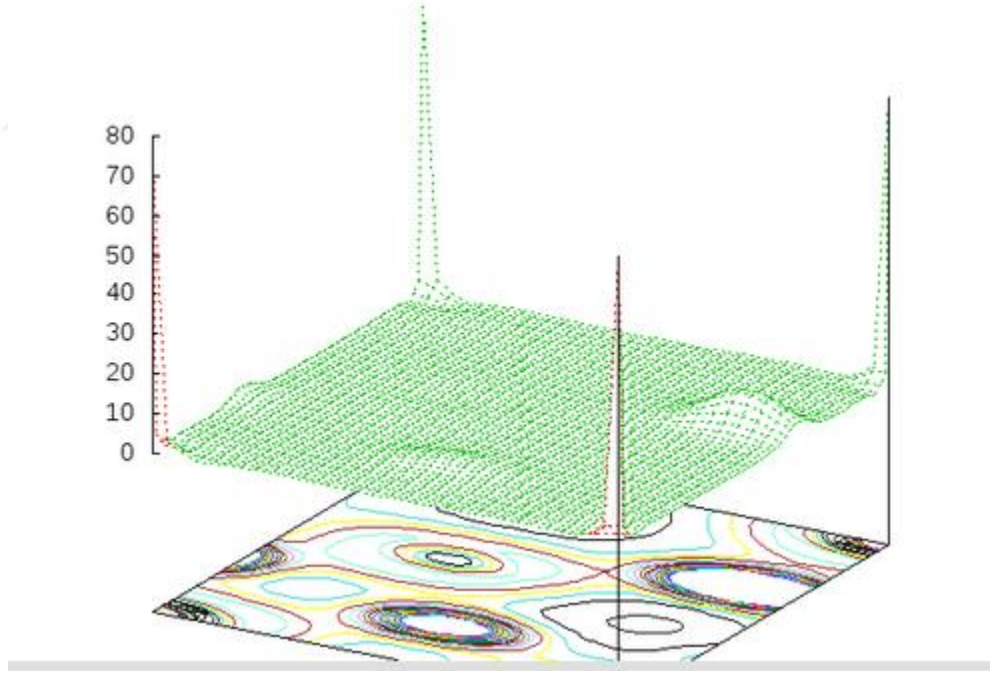
Atom 2: P RMT= 1.76



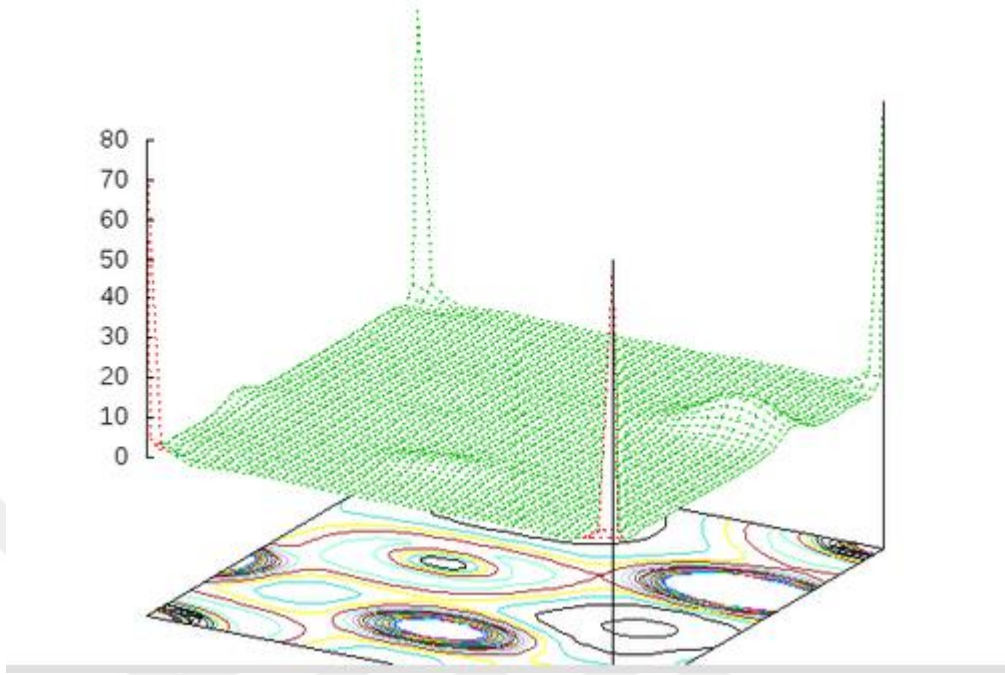
Şekil 4.73. Mn₂P elektron yoğunluğu spin up



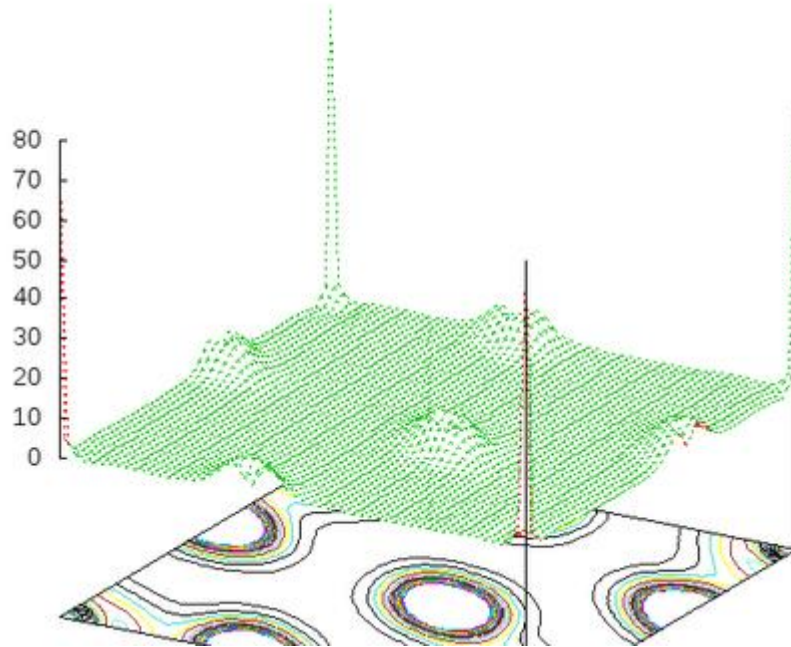
Şekil 4.74. Mn2P elektron yoğunluğu spin down



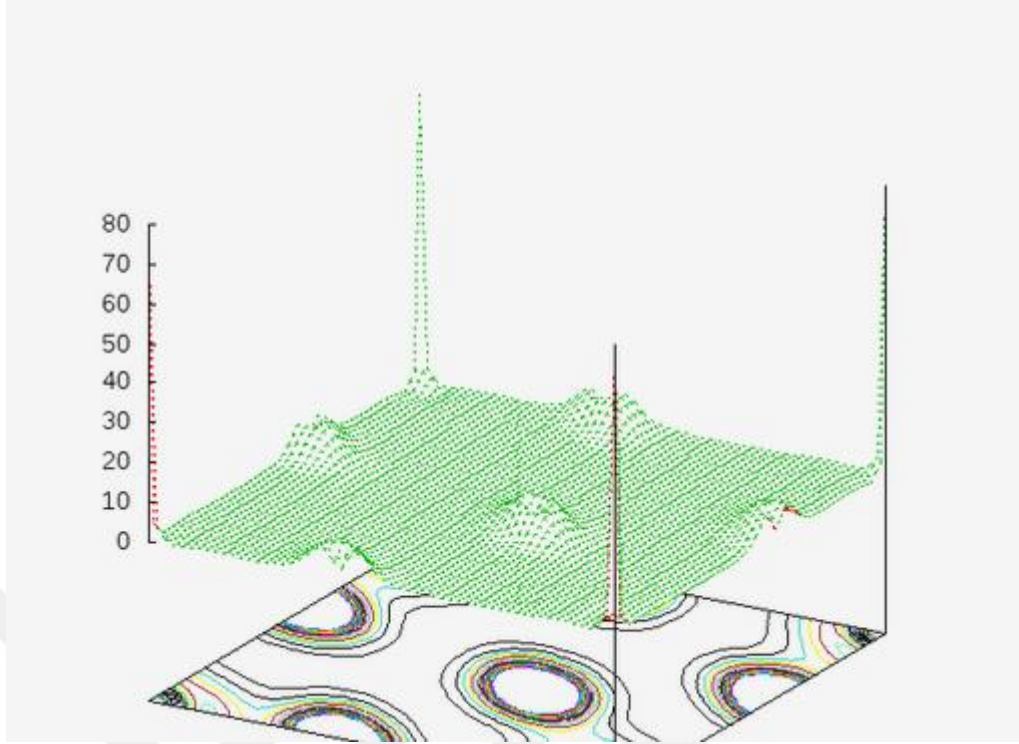
Şekil 4.75. Mn3P elektron yoğunluğu spin up



Şekil 4.76. Mn₃P elektron yoğunluğu spin down



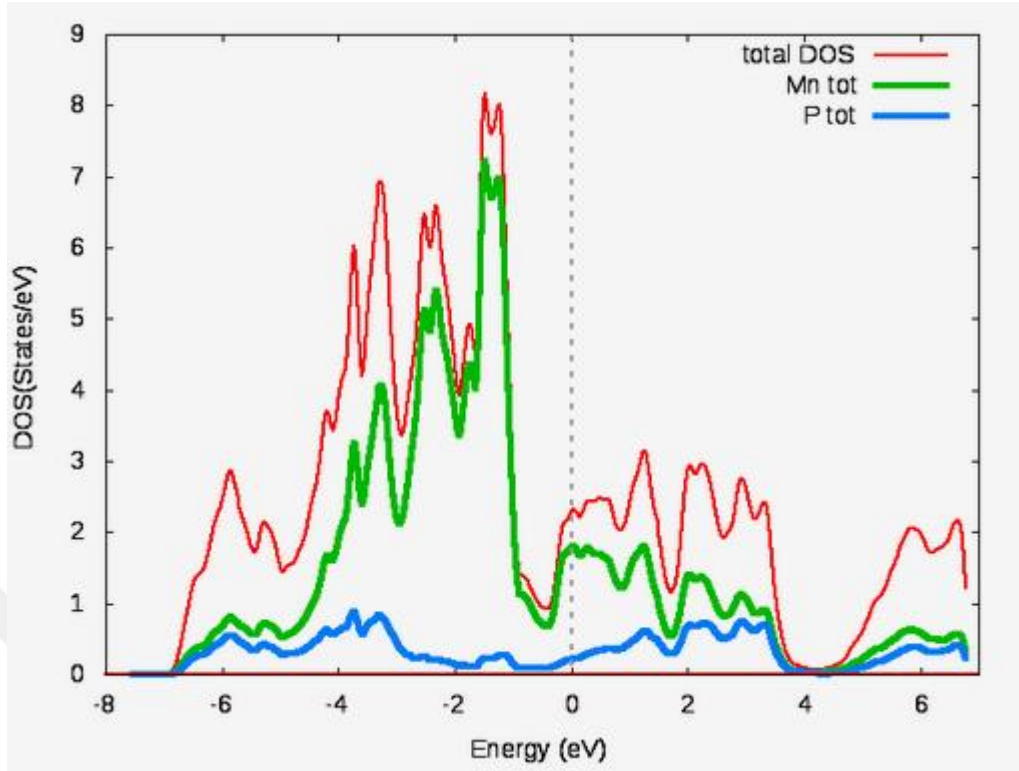
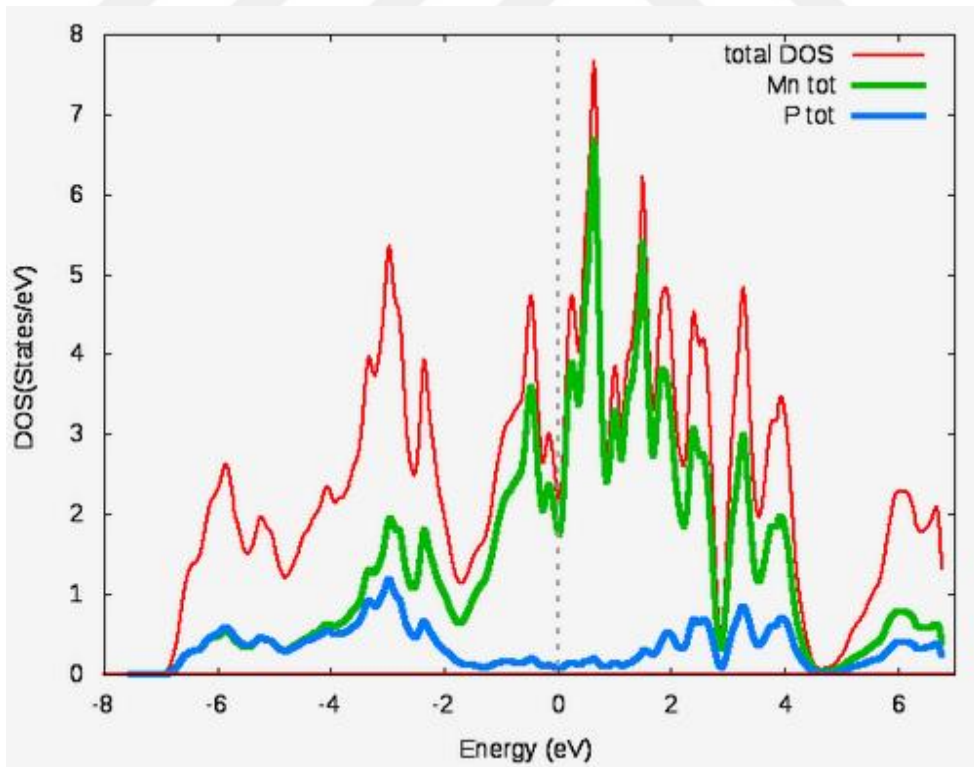
Şekil 4.77. MnP elektron yoğunluğu spin up

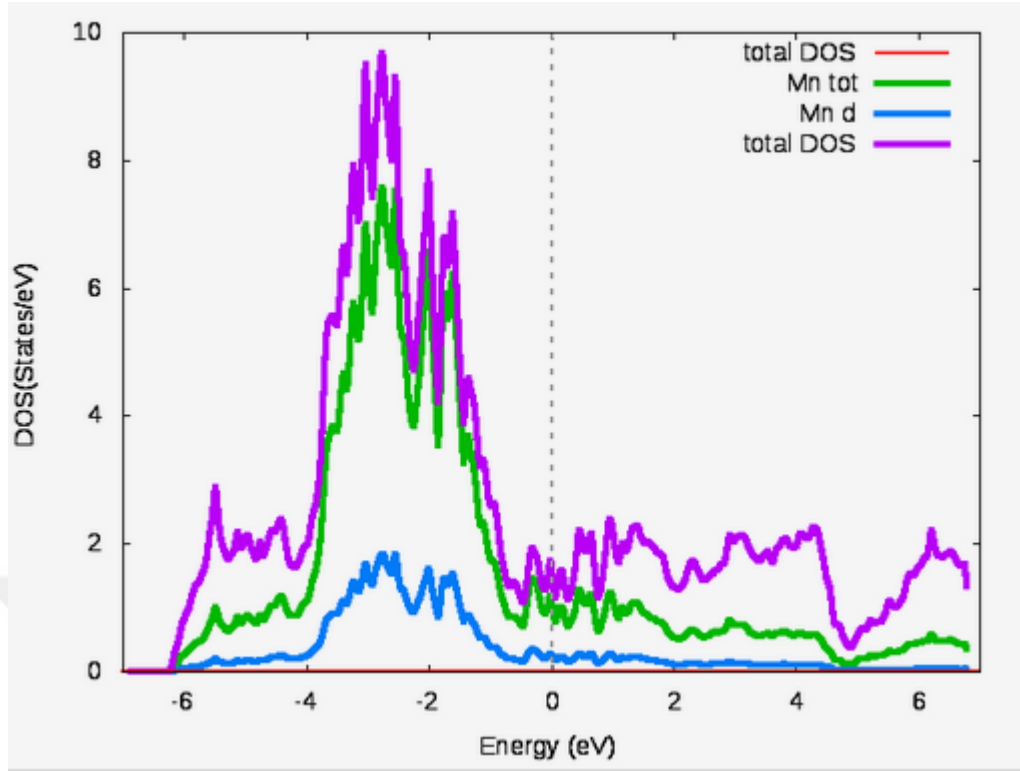
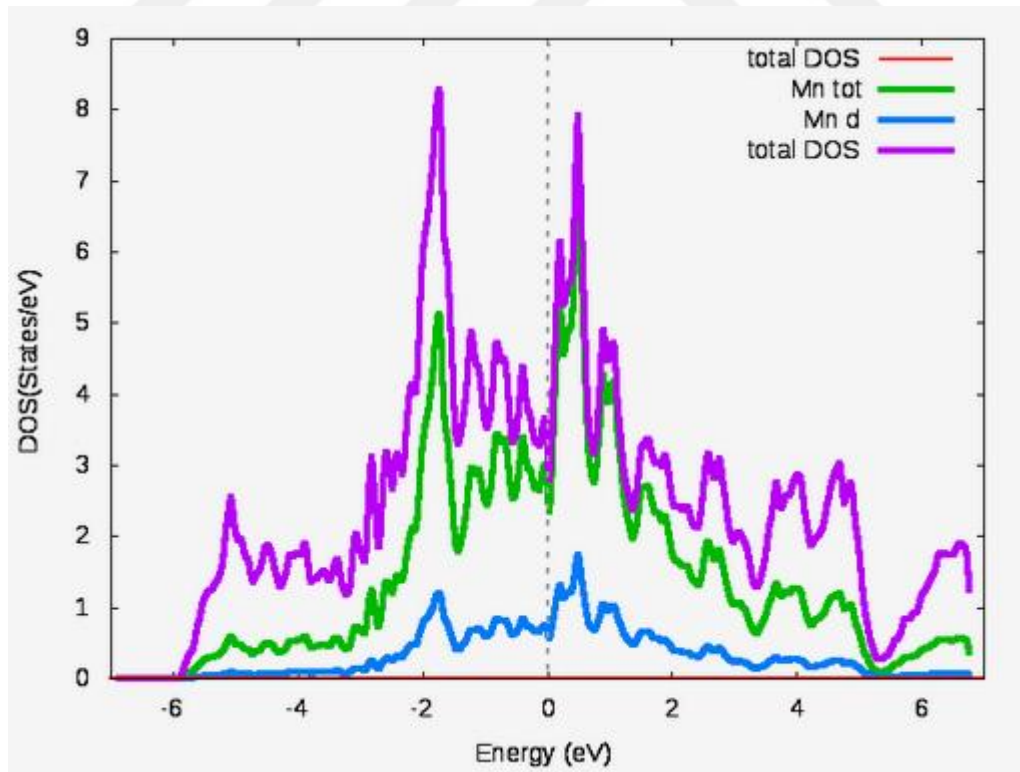


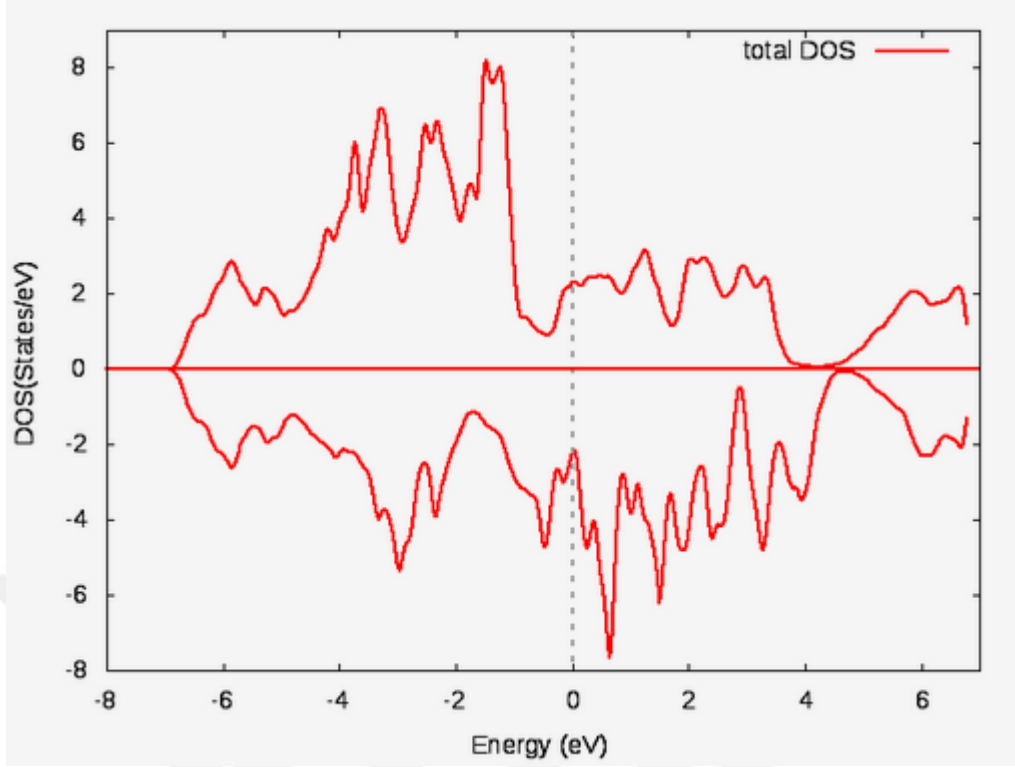
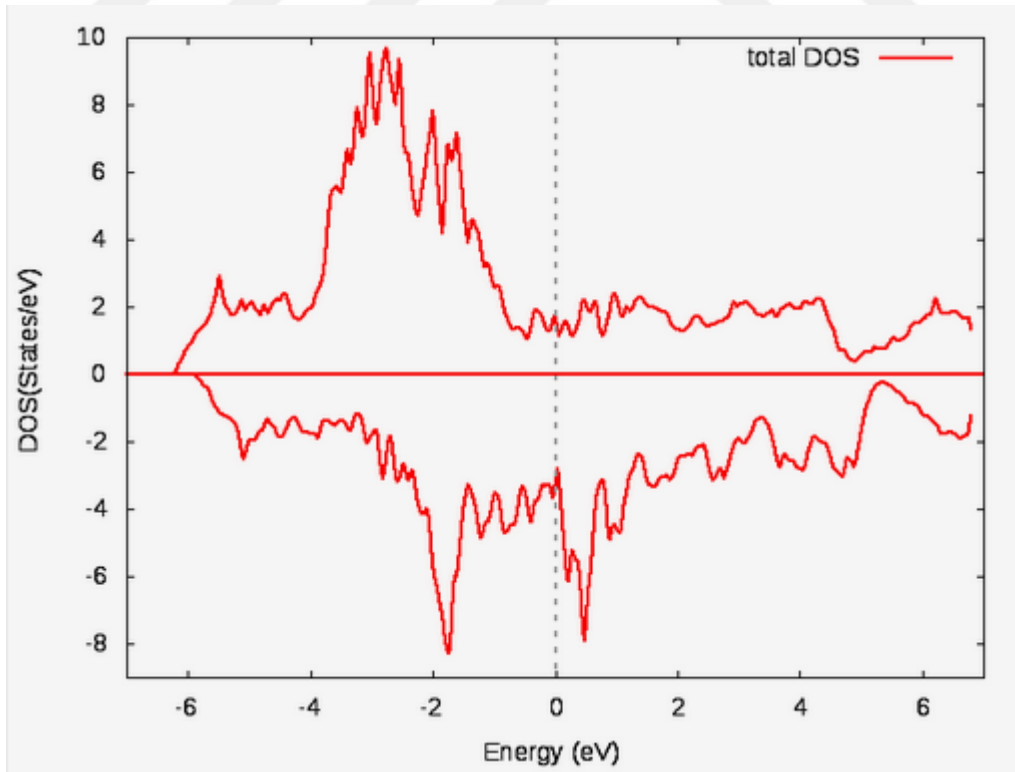
Şekil 4.78. MnP elektron yoğunluğu spin down

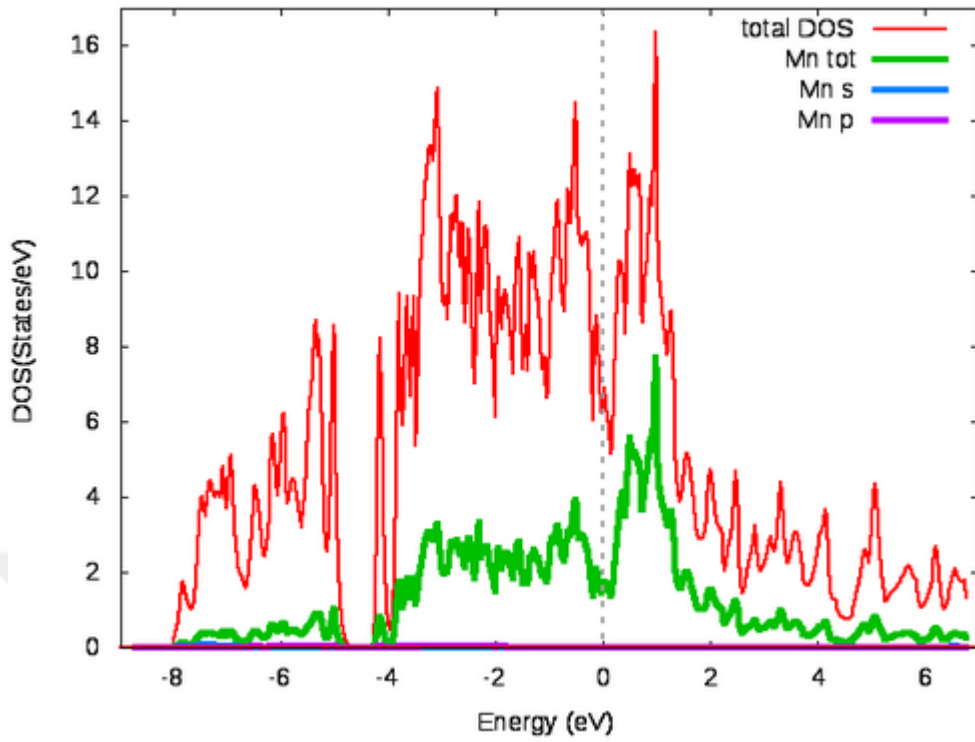
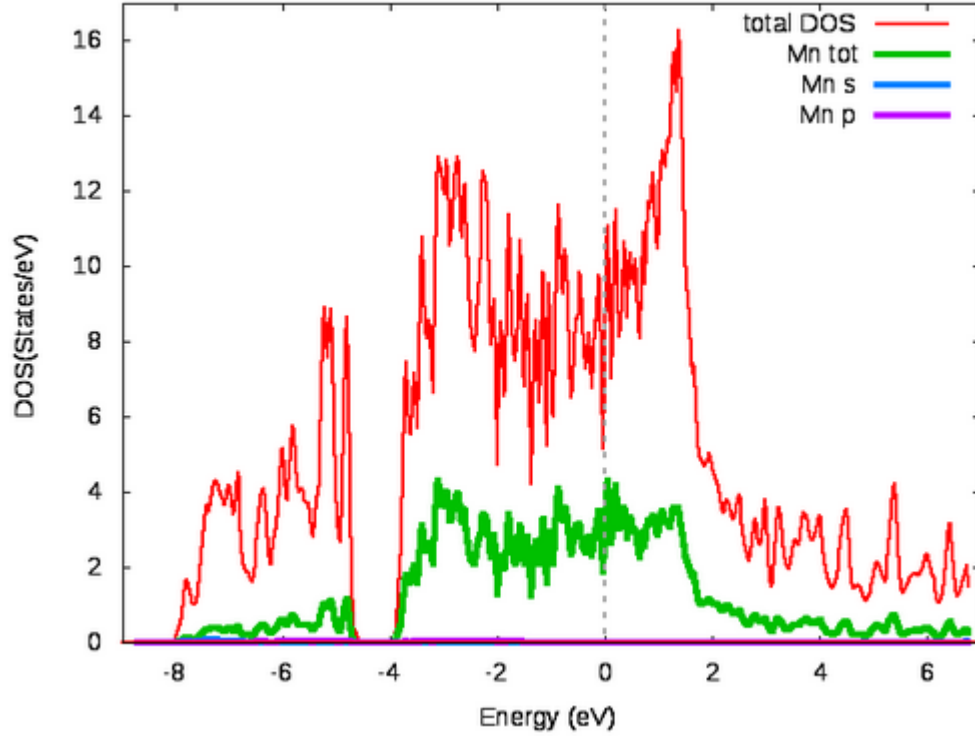
4.2.3. Mn-P bileşiklerinin durum yoğunluğu

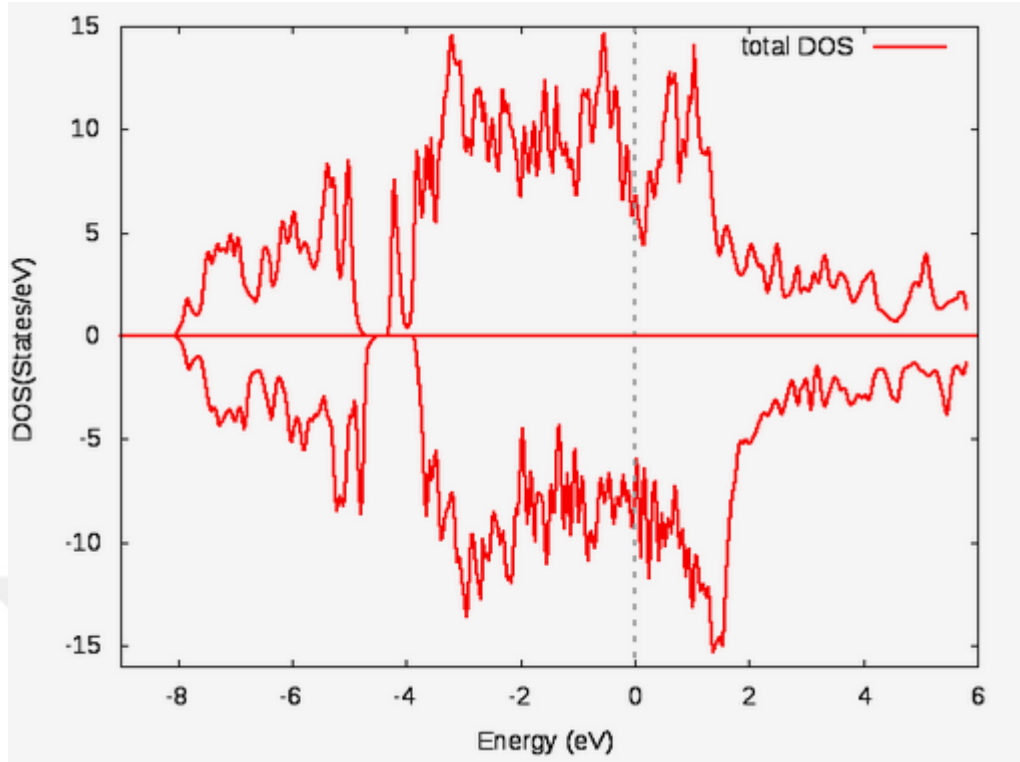
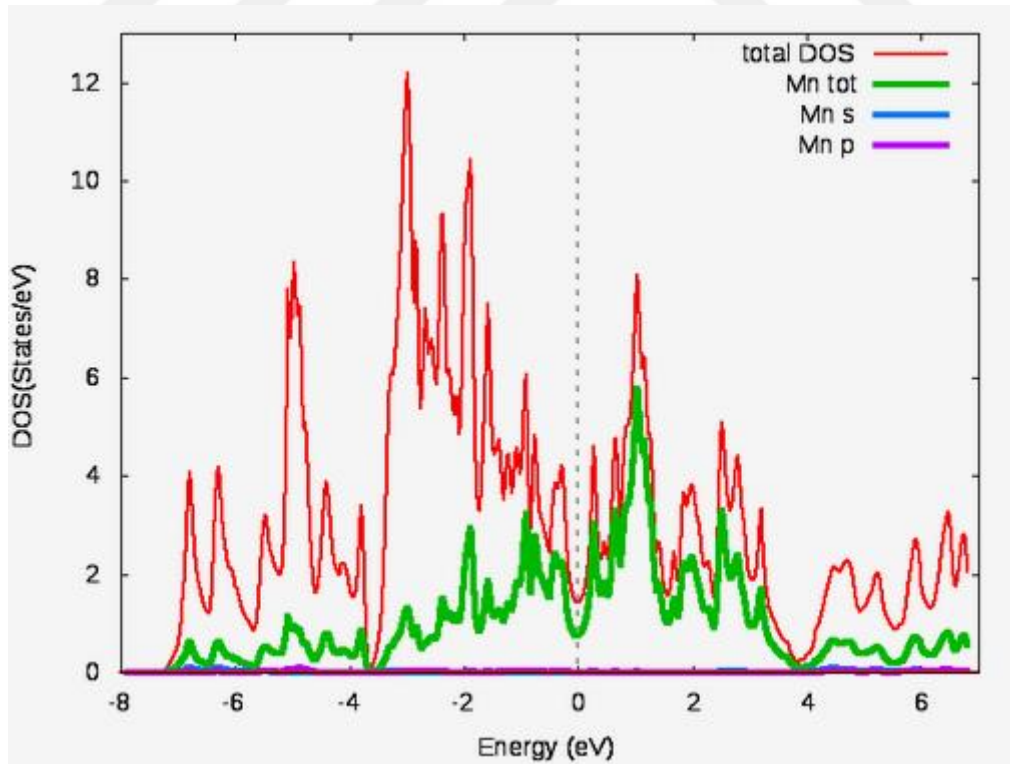
Elektron yoğunlukları hesaplanan bileşikler için task menüsü altında bulunan DOS komutu ile durum yoğunluğu hesabı yapıldı ve aşağıdaki grafikler elde edildi. ‘xkgen’ 1000 alındı.

Şekil 4.79. Mn₂P dos spin upŞekil 4.80. Mn₂P dos spin down

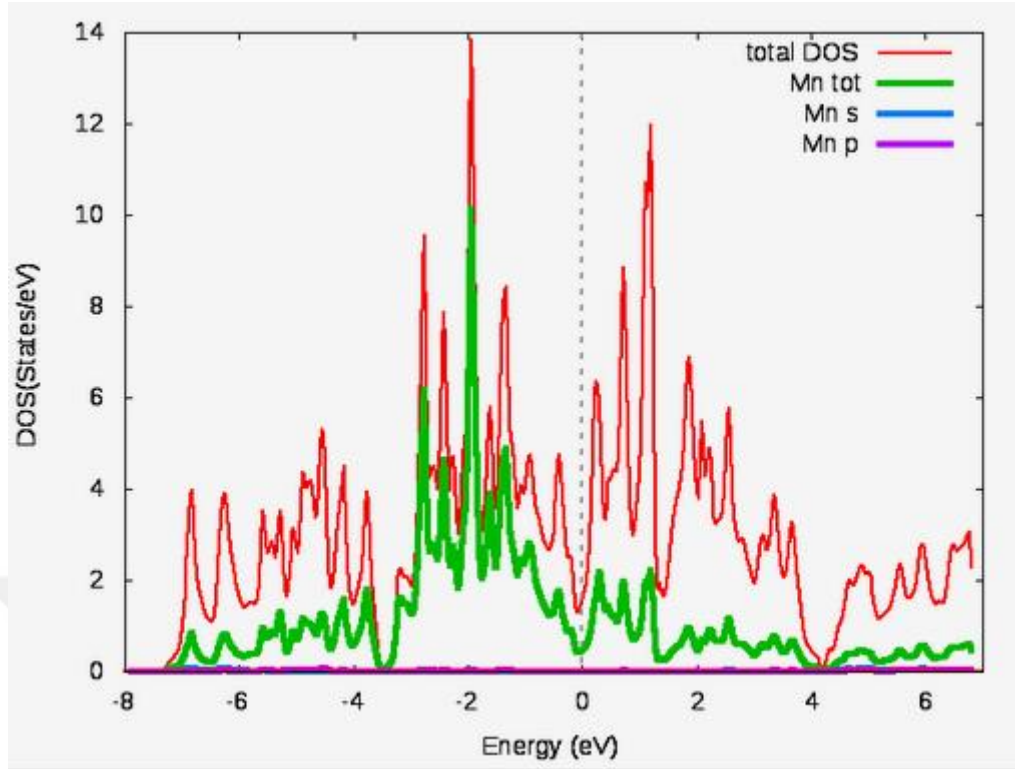
Şekil 4.81. Mn₂P dos spin upŞekil 4.82. Mn₂P dos spin down

Şekil 4.83. Mn₂P DOS spŞekil 4.84. Mn₂P DOS spd

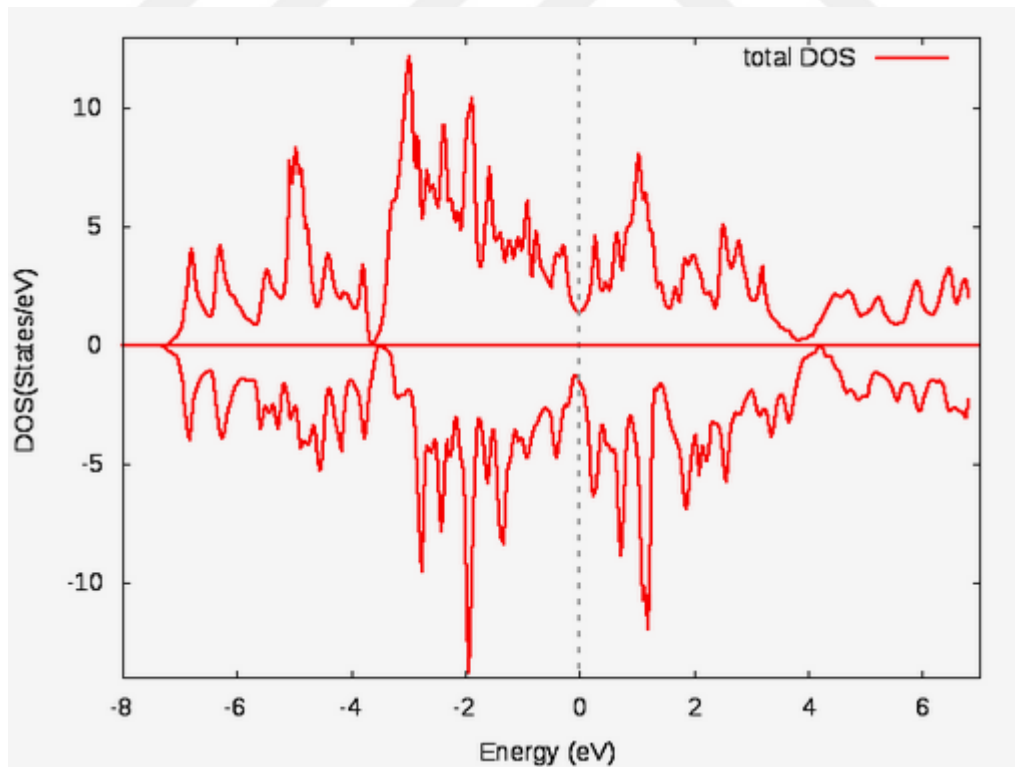
Şekil 4.85. Mn₃P dos spin upŞekil 4.86. Mn₃P dos spin dn

Şekil 4.87. Mn₃P DOS

Şekil 4.88. MnP dos spin up



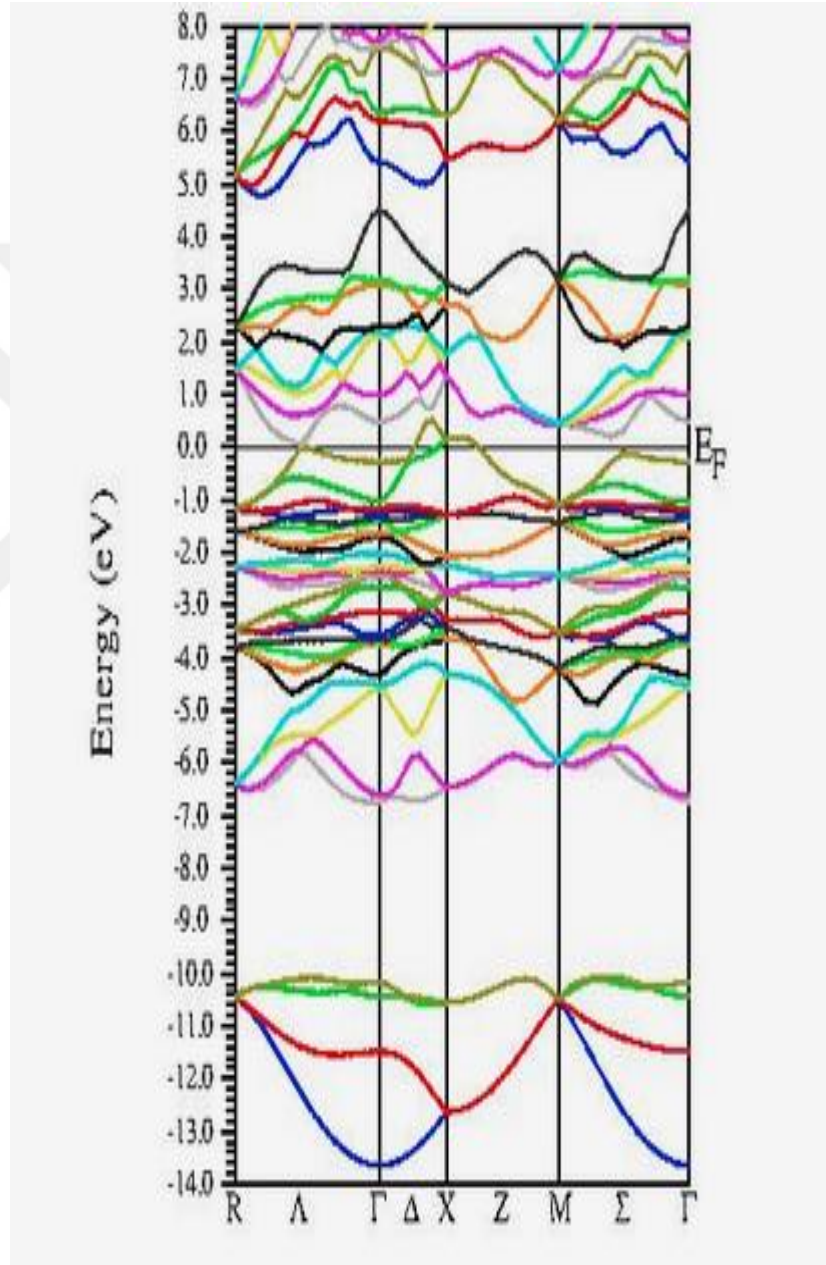
Şekil 4.89. MnP dos spin down



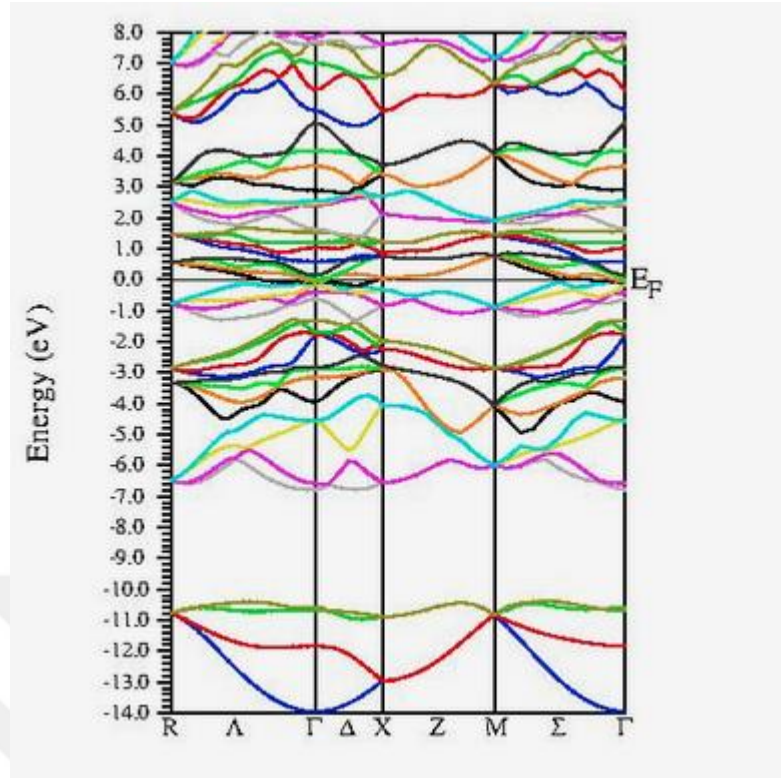
Şekil 4.90. MnP dos

4.2.4. Mn-P bileşiklerinin bant hesabı

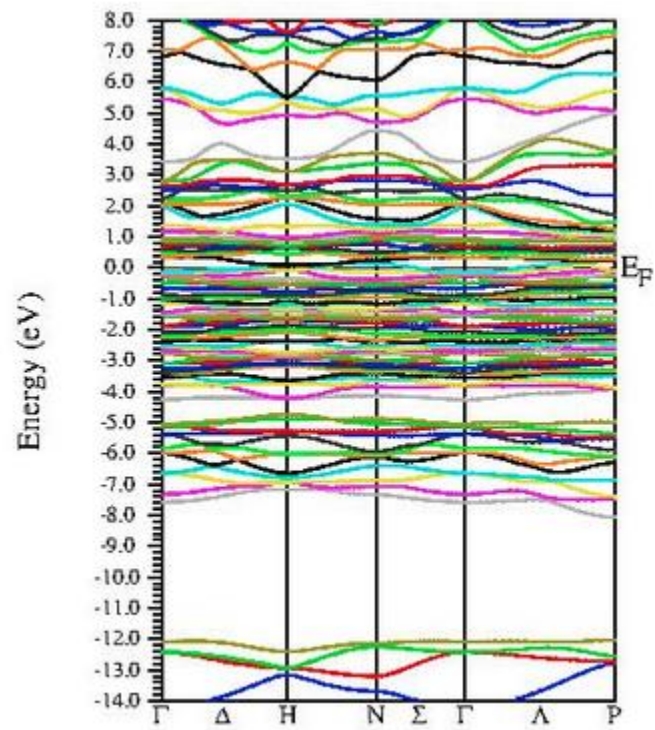
Durum yoğunluğu hesaplanan bileşiklerimiz için bant hesabı yapıldı ve grafikleri çizdirildi.



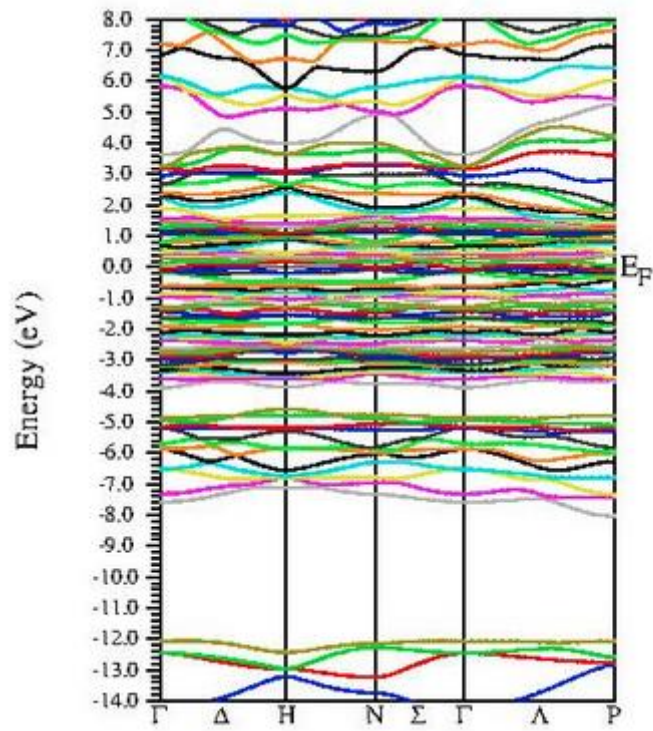
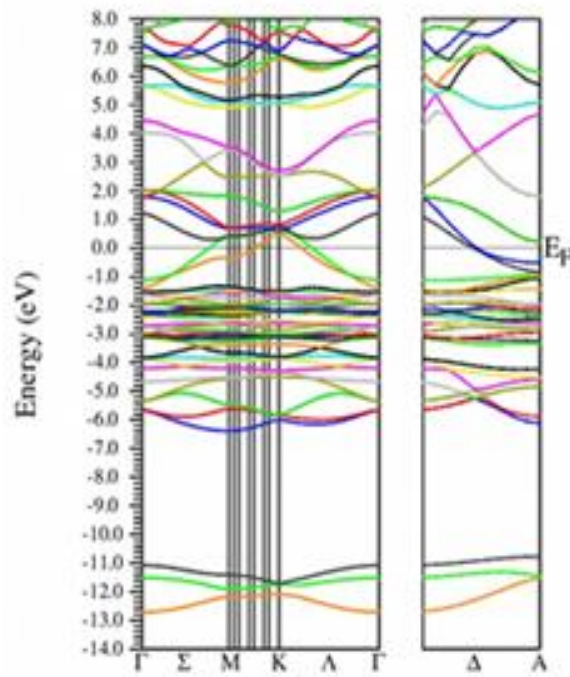
Şekil 4.91. Mn₂P band spin up



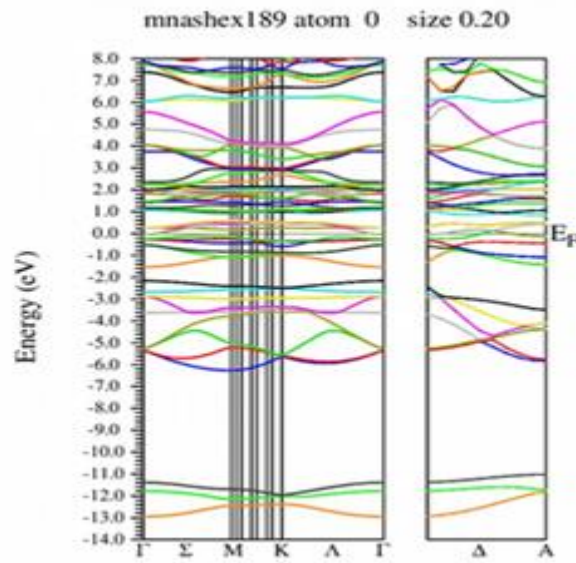
Şekil 4.92. Mn₂P band spin down



Şekil 4.93. Mn₃P band spin up

Şekil 4.94. Mn₃P band spin down

Şekil 4.95. MnP band spin up



Şekil 4.96. MnP band spin down

4.2.5. Mn-P bileşiklerinin manyetik alan hesabı

Fermi contact hyperfine field hesabı;

(MnP62) bileşiğinin (1.Atom Mn, 2.Atom P) fermi contact hyperfine field sonucu:

HFF001: 83.454 0.000 -199.491 -52.726 (KGAUSS)

HFF001: 83.480 0.000 -199.526 -71.877 (KGAUSS)

Toplam=-124.603 (KGAUSS)

(MnP82) bileşiğinin(1.Atom Mn, 2.Atom P) fermi contact hyperfine field sonucu:

HFF001: -85.616 0.000 66.589 -19.027 (KGAUSS)

HFF002: 166.877 0.000 -217.856 -50.979 (KGAUSS)

HFF003: -28.331 0.000 -0.936 -29.267 (KGAUSS)

HFF004: 136.979 0.000 -174.345 -37.366 (KGAUSS)

Toplam= -136.639

(MnPhex) bileşiğinin(1.Atom Mn, 2.Atom P) fermi contact hyperfine field sonucu:

HFF001: -386.688 307.159 0.000 -79.528 (KGAUSS)

HFF002: 614.686 -612.892 0.000 1.794 (KGAUSS)

HFF003: 109.256 4.886 0.000 114.142 (KGAUSS)

HFF004: -50.161 -2.333 0.000 -52.494 (KGAUSS)

Toplam= -16.086 (KGAUSS)

Orbital hyperfine field hesap sonuçları;

(MnP62) bileşiğinin (1.Atom Mn, 2.Atom P) orbital hyperfine field sonucu:

	Up	Down	Total
0	0.000000	0.000000	0.000000
1	0.438430	1.358952	-0.079478
2	-1.438195	2.410135	0.971940

Toplam= 0.892462

(MnP82) bileşiğinin(1.Atom Mn, 2.Atom P) orbital hyperfine field sonucu:

	Up	Down	Total
0	0.000000	0.000000	0.000000
1	-1.485760	1.454181	-0.031579
2	-2.062700	1.782236	-0.280464

Toplam= -0.312044

(MnPhex) bileşiğinin (1.Atom Mn, 2.Atom P) orbital hyperfine field sonucu:

	Up	Down	Total
0	0.000000	0.000000	0.000000
1	-1.445821	1.499570	0.053750
2	-2.062700	1.782236	0.880564

Toplam= 0.934314

dipolar hyperfine field elektron spin sonucu;

(MnP62) bileşiğinin (1.Atom Mn, 2.Atom P) orbital hyperfine field sonucu:

	Up	Down	Total
0	0.000000	0.000000	0.000000
1	0.153557	0.120504	0.274061
2	-0.866661	-0.702881	-1.569542

Toplam= -1.295481

(MnP82) bileşiğinin (1.Atom Mn, 2.Atom P) orbital hyperfine field sonucu:

	Up	Down	Total
1 2	-2.062700	1.782236	-0.280464

1 4 -0.312044 0.000000 -0.312044

(MnPhex) bileşiğinin (1.Atom Mn, 2.Atom P) orbital hyperfine field sonucu: XOP 1

2 0.602323 -1.358841 -0.756517

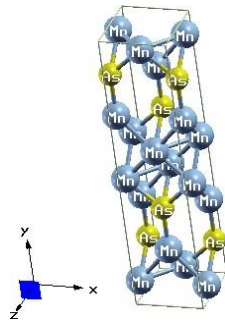
XOP 1 4 -0.288017 0.000000 -0.288017

4.3. Mn-As Bileşikleri

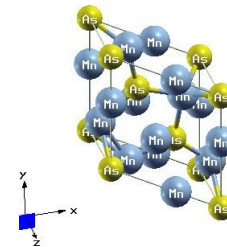
Düşük sıcaklıkta hexagonal yapıdadır. Bileşikleri; MnAs, Mn₂As, Mn₃As, Mn₃As₂, Mn₅As₄ şeklindedir.

4.3.1. Mn-As bileşiklerinin yapısı ve optimizasyonu

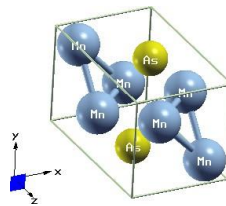
Inorganic Material Database sitesinde bulunan .cif dosyaları alınarak WIEN2k paket programına tanıtıldı. WIEN2k programı ile yapılar için minimum enerji değerleri hacim hesabı yapılarak elde edildi.



Şekil 4.97. MnAs189



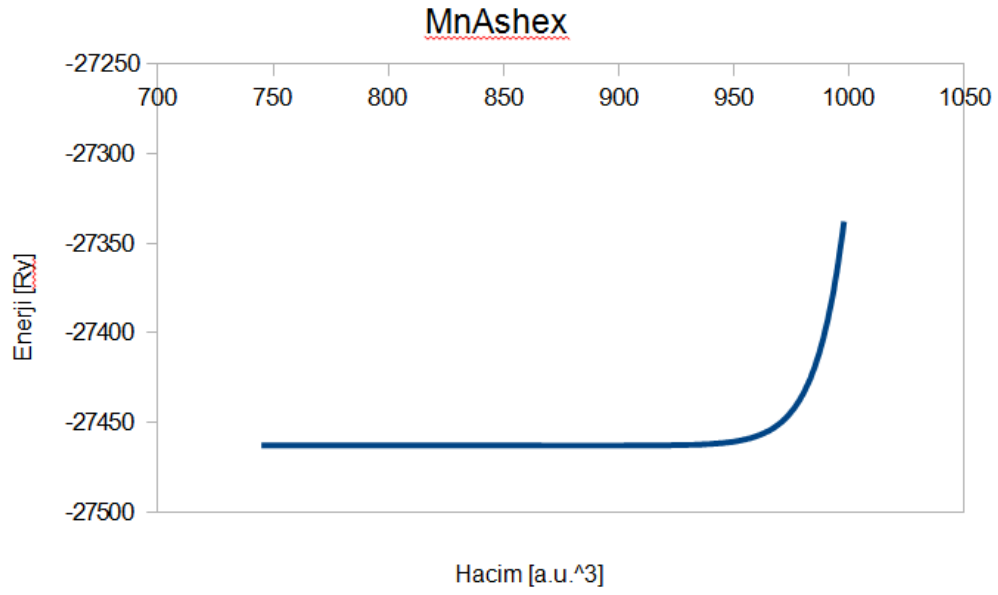
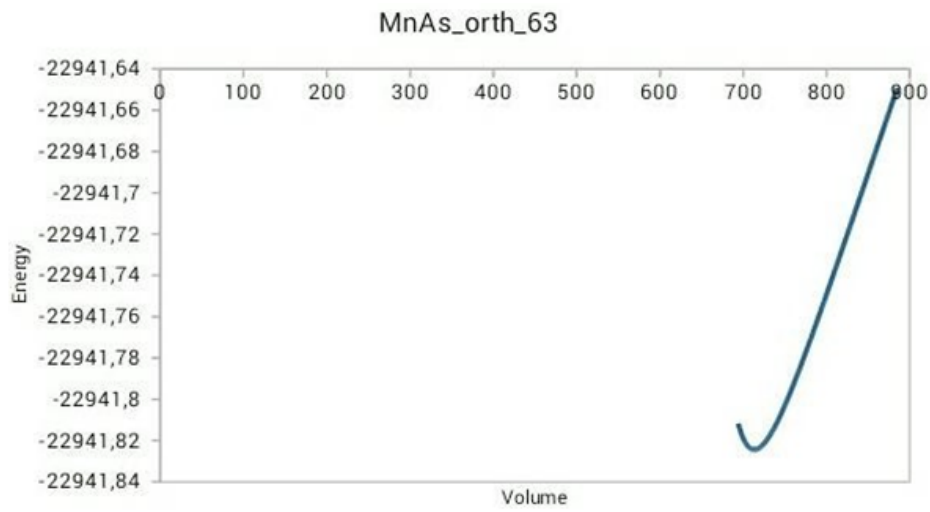
Şekil 4.98. MnAs63



Şekil 4.99. MnAs 129

Tablo 4.5. MnAs Bileşikleri

Bileşik	Yapısı	Uzay grubu/No
Mn _{2.9} As ₂	Mn _{2.9} As ₂	C2/m 12
Mn ₂ As	Cu ₂ Sb	P4/nmm 129
Mn ₂ As	Fe ₂ P	P-62m 189
Mn ₃ As	Mn ₃ As	Cmcm 63
Mn ₃ As ₂	Mn ₃ As ₂	C2/m 12
Mn ₃ As ₂	Mn ₃ As ₂	Cmc21 36
Mn ₅ As ₄	Mn ₅ As ₄	Cmc21 36
MnAs	FeAs	Pnma 62
MnAs	NiAs	P63/mmc 194

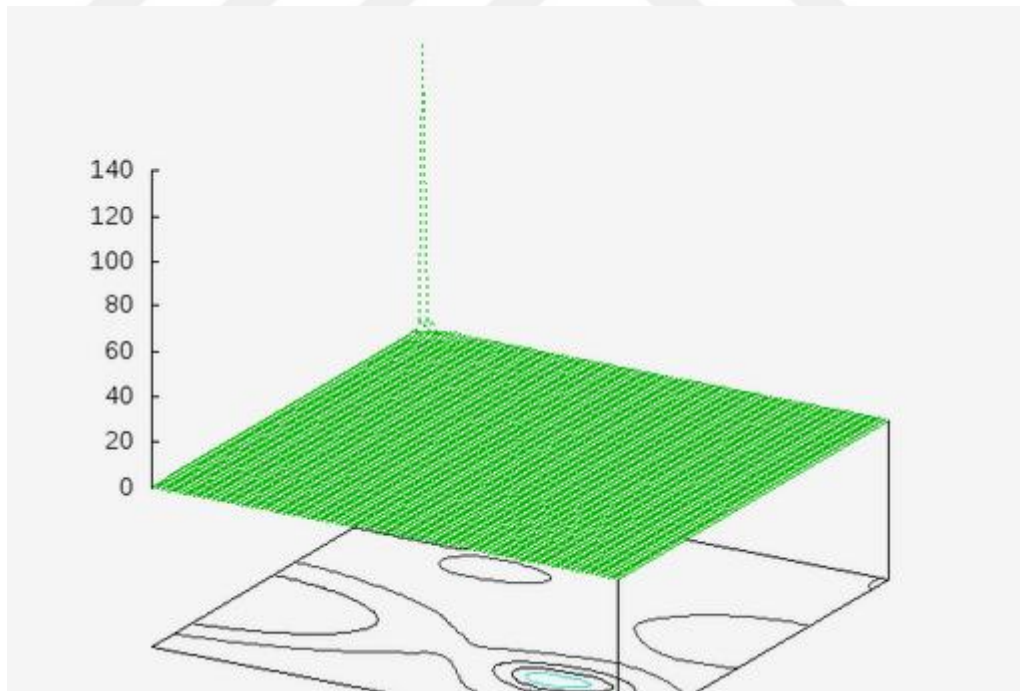
Şekil 4.100. MnAs₁₈₉ enerji-hacim grafiğiŞekil 4.101. MnAs₆₃ bileşiğinin enerji- hacim grafiği

Tablo 4.6. MnAs bileşikleri volume hesabı sonuçları

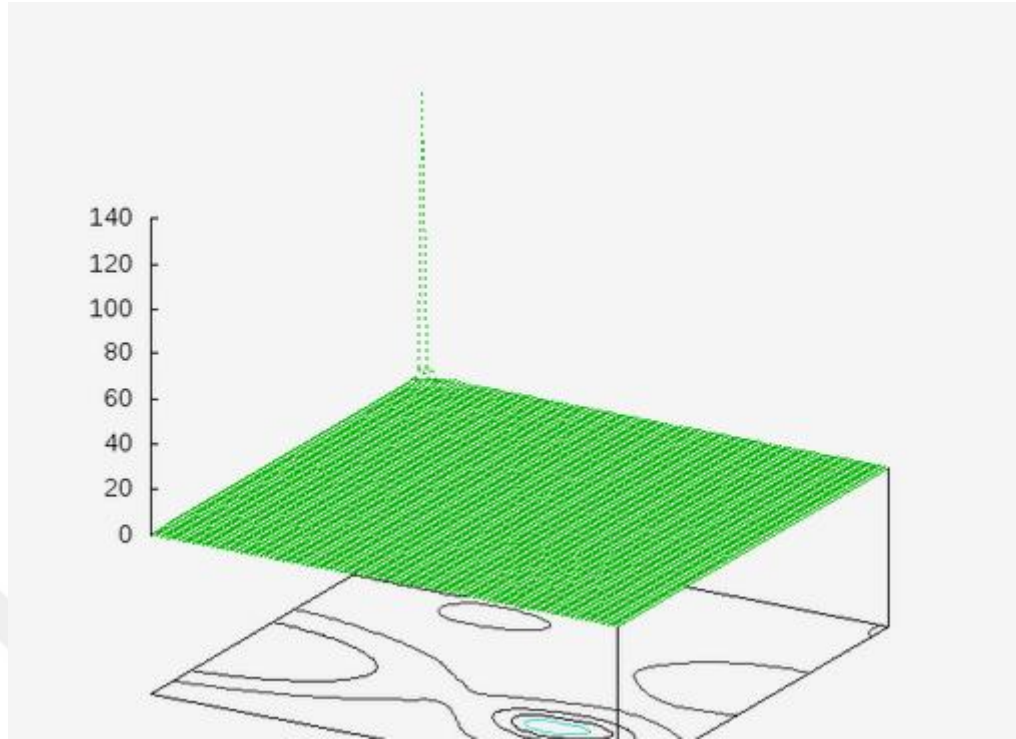
	Hacim [a.u. ³]	B (GPa)	BP	Enerji [Ry]
Mn ₂ As ₂	1884.4996	164.5868	11.0329	-63968.512473
Mn ₂ As (129)	550.9879	212.8762	13.3491	-18308.685096
Mn ₂ As(189)	795.8874	239.3585	11.0055	-27463.046999
Mn ₃ As	713.1739	531.9615	30.4679	-22941.824461
Mn ₃ As ₂ (12)	932.3035	163.3355	11.6197	-31984.290276
Mn ₃ As ₂ (36)	1932.6319	263.4215	18.9539	-63968.493973
Mn ₅ As ₄	1742.6645	134.6528	9.3625	-59335.473471
MnAs(62)	194.9375	4.0107	-0.7581	-27351.450567
MnAs(194)	391.9718	55.0502	1.4592	-13675.607624

4.3.2. Mn-As bileşiklerinin elektron yoğunluğu

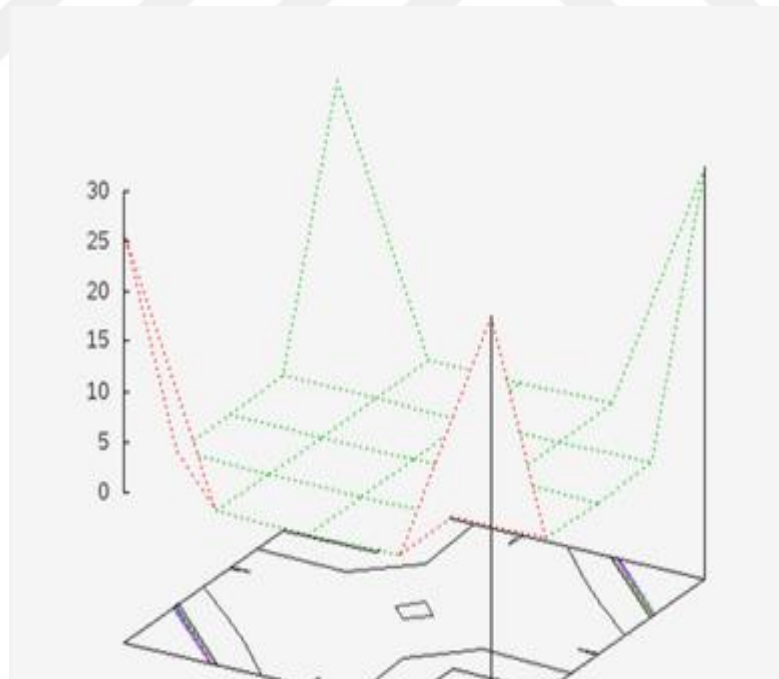
Optimize edilen bileşikler için WIEN2k programında ‘task’ menüsü altında yer alan elektron density komutu ile elektron yoğunlukları Wu-Cohen 06 potansiyeli ile hesaplandı.



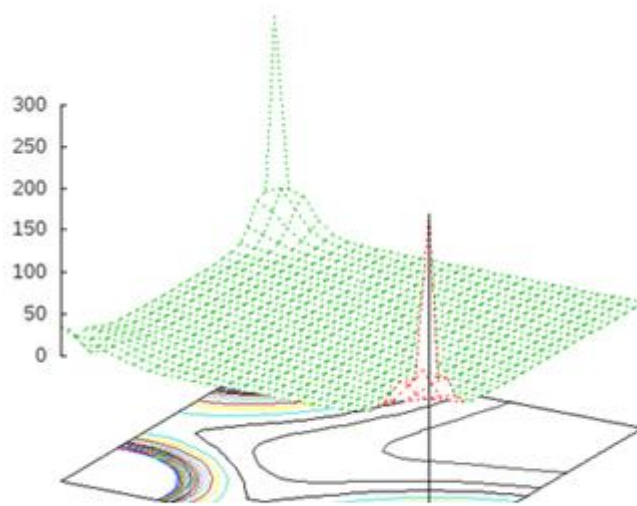
Şekil 4.102. MnAshex up



Şekil 4.103. MnAshex down



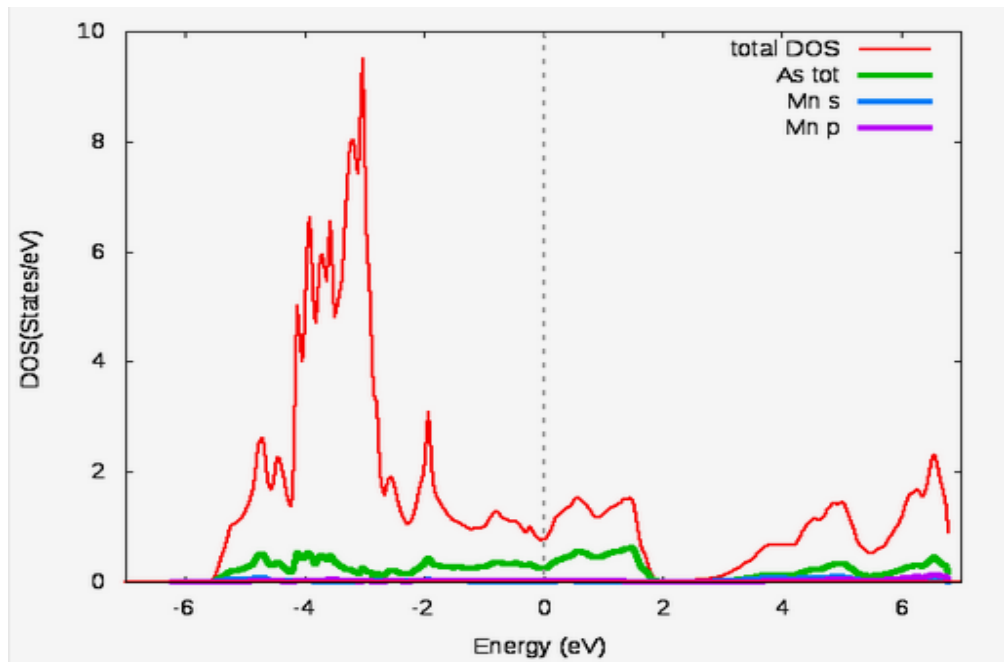
Şekil 4.104. MnAs63 up



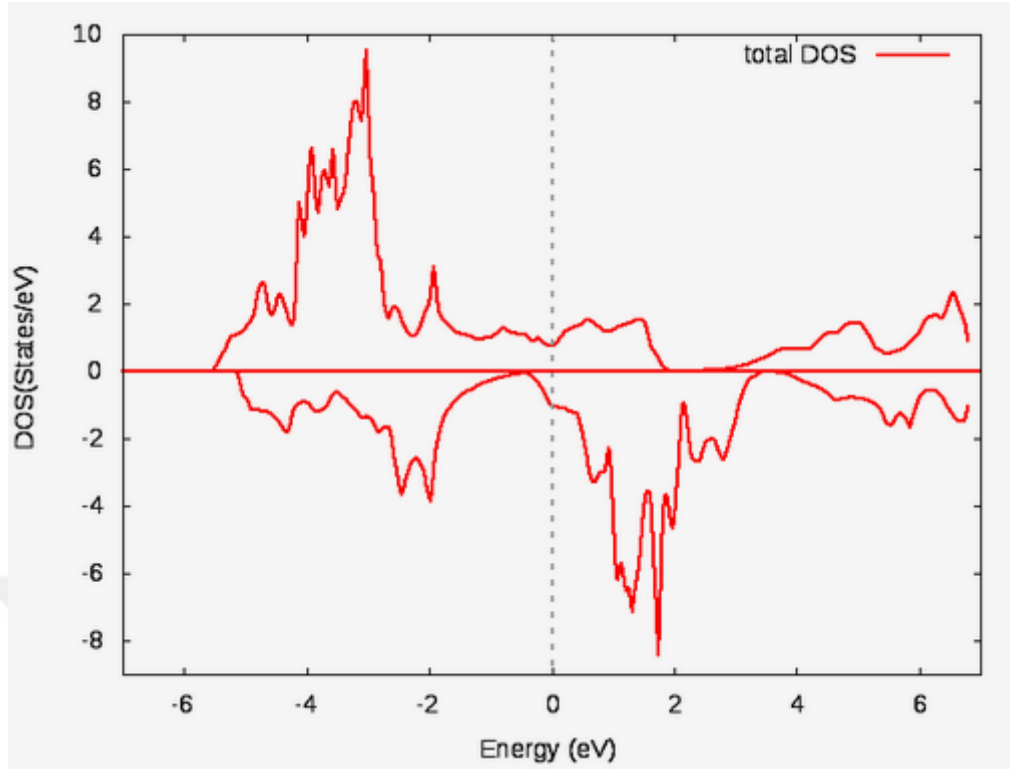
Şekil 4.105. MnAs63 spin down

4.3.3. MnAs durum yoğunlukları

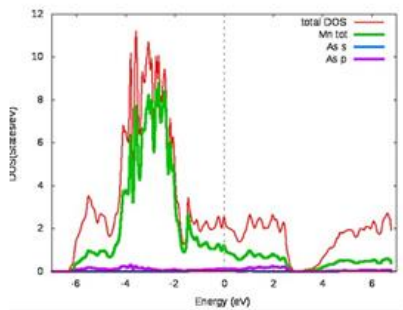
Elektron yoğunluğunu hesapladığımız bileşiklerimiz için durum yoğunluğu hesabını task menüsü altındaki Dos komutu ile yaptık. Xkgen 1000 alındı. Sonuç grafikleri aşağıdaki gibidir.



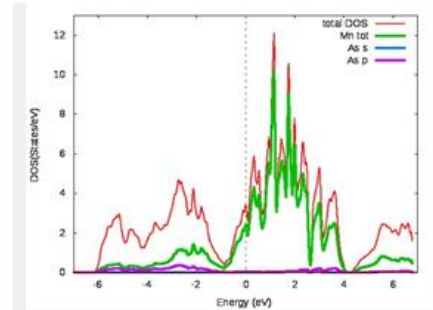
Şekil 4.106. MnAshex up



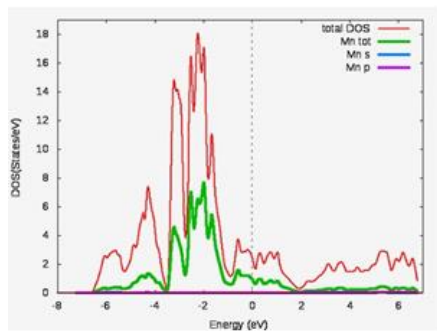
Şekil 4.107. MnAshex dos



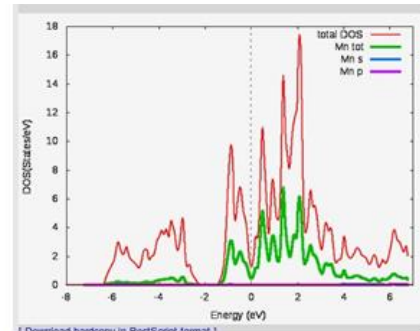
Şekil 4.108. MnAs194 up



Şekil 4.109. MnAsort63



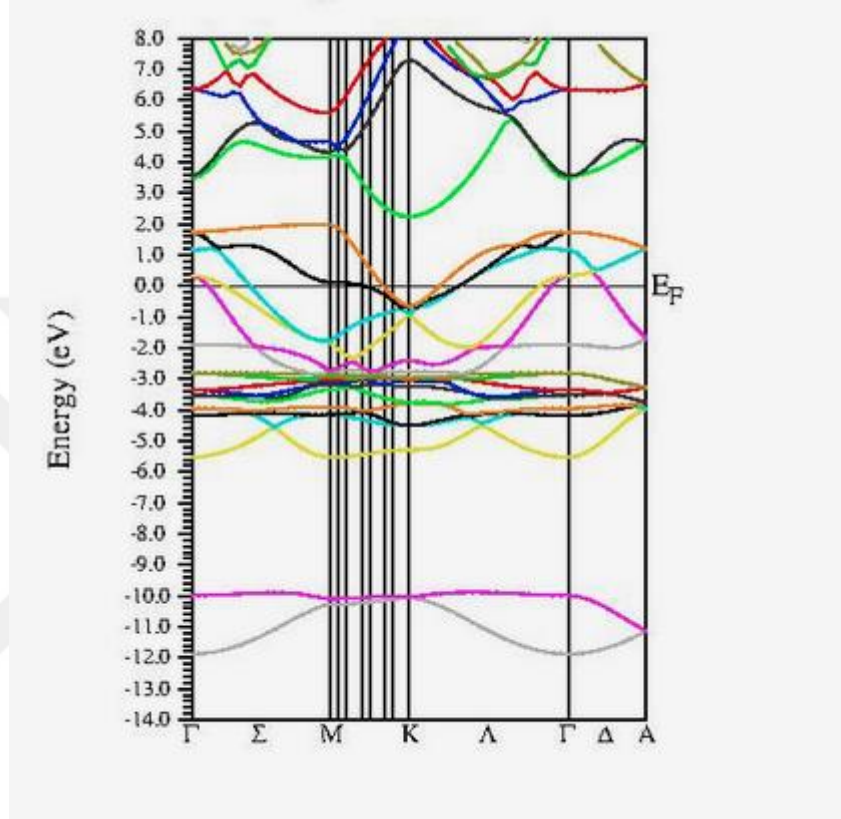
Şekil 4.110. MnAs194 up2



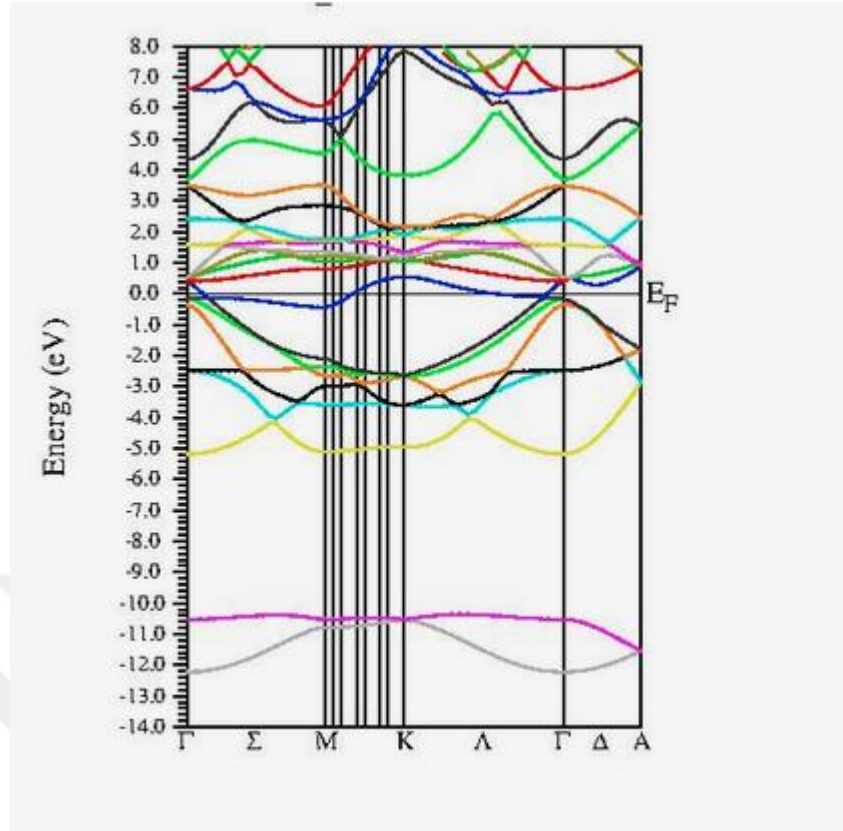
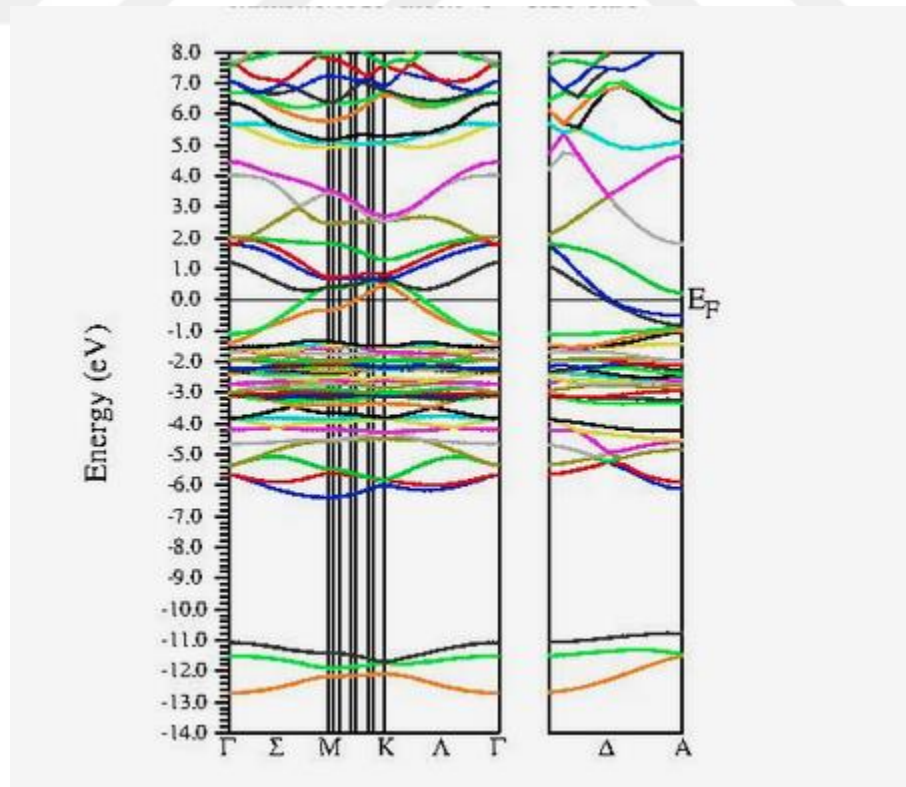
Şekil 4.111. MnAsort63

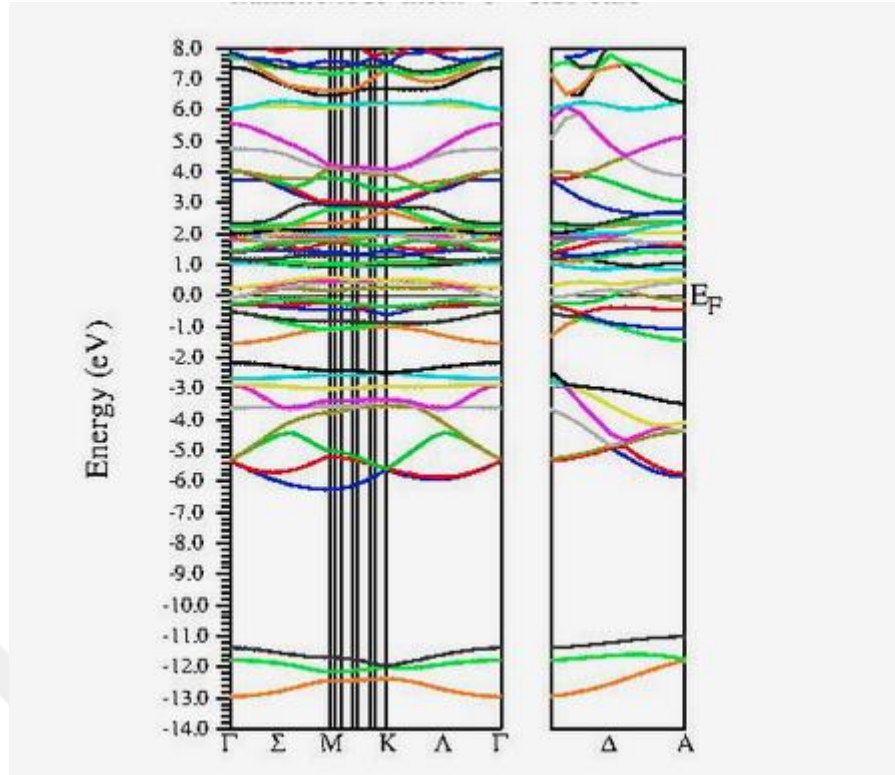
4.3.4. MnAs bileşikleri band hesabı

Band hesabı task menüsü altındaki band structure komutu ile spin up ve spin down için ayrı olarak hesaplandı. Sonuçlar aşağıdaki şekildedir.



Şekil 4.112. Mnas194 band up

Şekil 4.113. MnAs₁₉₄ band dnŞekil 4.114. MnAs₁₉₄ up



Şekil 4.115. Mnashex down

4.3.5. MnAs manyetik hesap

Hff hesabı sonuçları; MnAshex189 için:

HFF001:	146.868	0.000	-248.797	-101.929 (KGAUSS)
HFF002:	172.904	0.000	-287.924	-115.020 (KGAUSS)
HFF003:	391.132	0.000	1.357	392.489 (KGAUSS)
HFF004:	276.935	0.000	-1.849	275.086 (KGAUSS)

Toplam=451.626

MnAstetra için:

HFF001:	582.524	0.000	-291.016	291.509 (KGAUSS)
HFF002:	267.874	0.000	5.906	273.780 (KGAUSS)
HFF003:	-168.695	0.000	244.584	75.889 (KGAUSS)

Toplam=641.178

MnAs spin orbital orbital hesap sonuçları;

MnAstetra için:

XOP 1 2	-0.637234	0.638672	0.001438
XOP 1 4	0.486068	0.000000	0.486068

MnAshex189 için:

XOP 1 2	0.616790	0.356995	0.973785
XOP 1 4	0.853637	0.000000	0.853637

Dipolar alan;

MnAstetra için:

atom 1 Mn mag. moment = 3.8240

Bohr magnetonu atom 2 As mag. moment =652.9373

Bohr magnetonu atom type 3 has mag. moment 1.0000 Bohr magneton

MnAshex189 için:

atom 1 Mn mag. moment = 3.0505

Bohr magnetonu atom 2 As mag. moment =974.7363

Bohr magnetonu atom 3 mag. moment = 1.0000

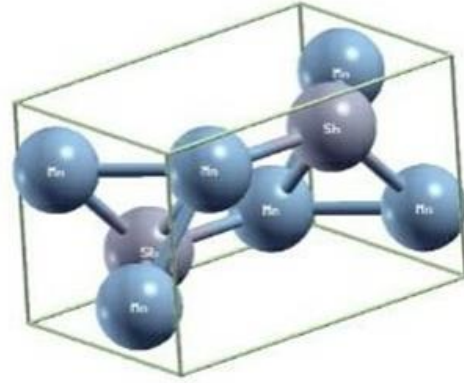
Bohr magneton atom 4 mag. moment = 0.0000 Bohr magneton

4.4. Mn-Sb Bileşikleri

Kristal yapısı hexagonaldır. Ferromagnetik bir alaşımdır. Mn_3Sb kübik yapıdadır.

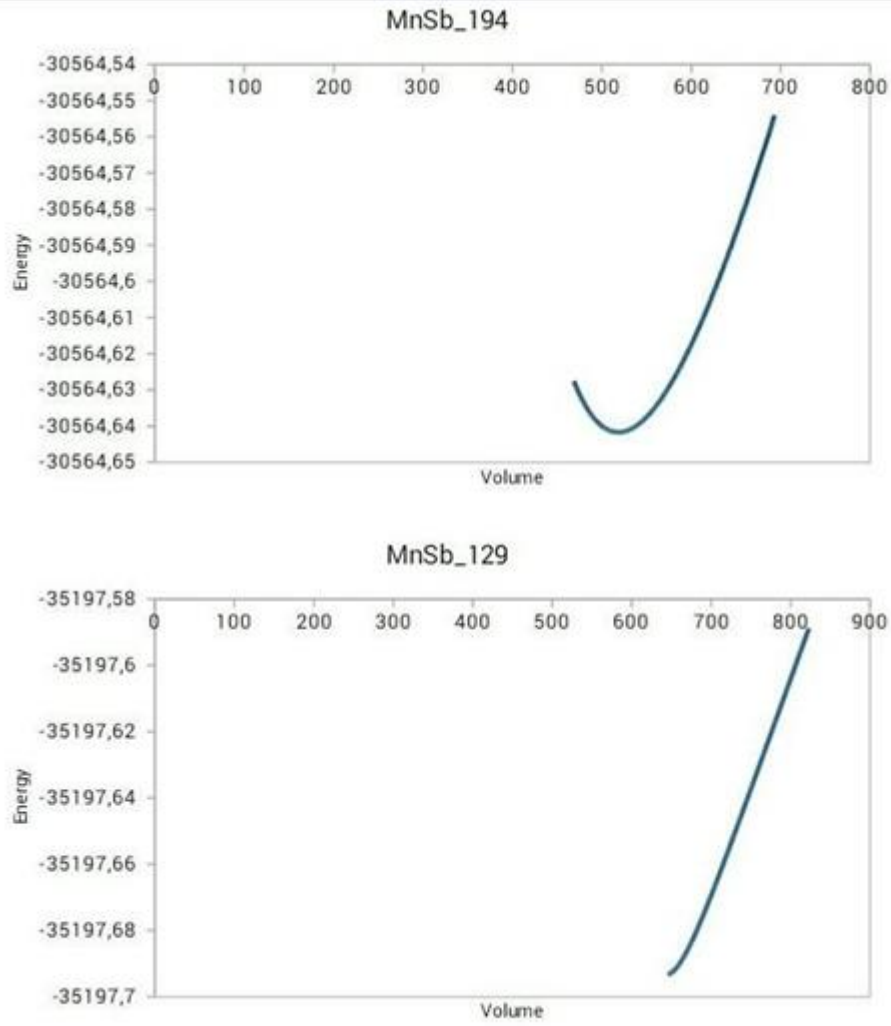
4.4.1. MnSb bileşiklerinin yapısı ve optimizasyonu

Inorganic Material Database sitesinde bulunan .cif dosyaları alınarak WIEN2k paket programına tanıtılıp, yapı için minimum enerji değerleri hacim hesabını yapılarak elde edildi. Enerji-hacim grafikleri çizildi.

Şekil 4.116. Mn_{1.1}SbŞekil 4.117. Mn₂Sb

Tablo 4.8. Mn-Sb Bileşikleri

Bileşik	Yapı şekli	Kristal yapı	Uzay grubu/no
Mn _{1.1} Sb	Co _{1.75} Ge	hP6	P6 ₃ /mmc 194
Mn ₂ Sb	Cu ₂ Sb	tp6	P4/nmm 129



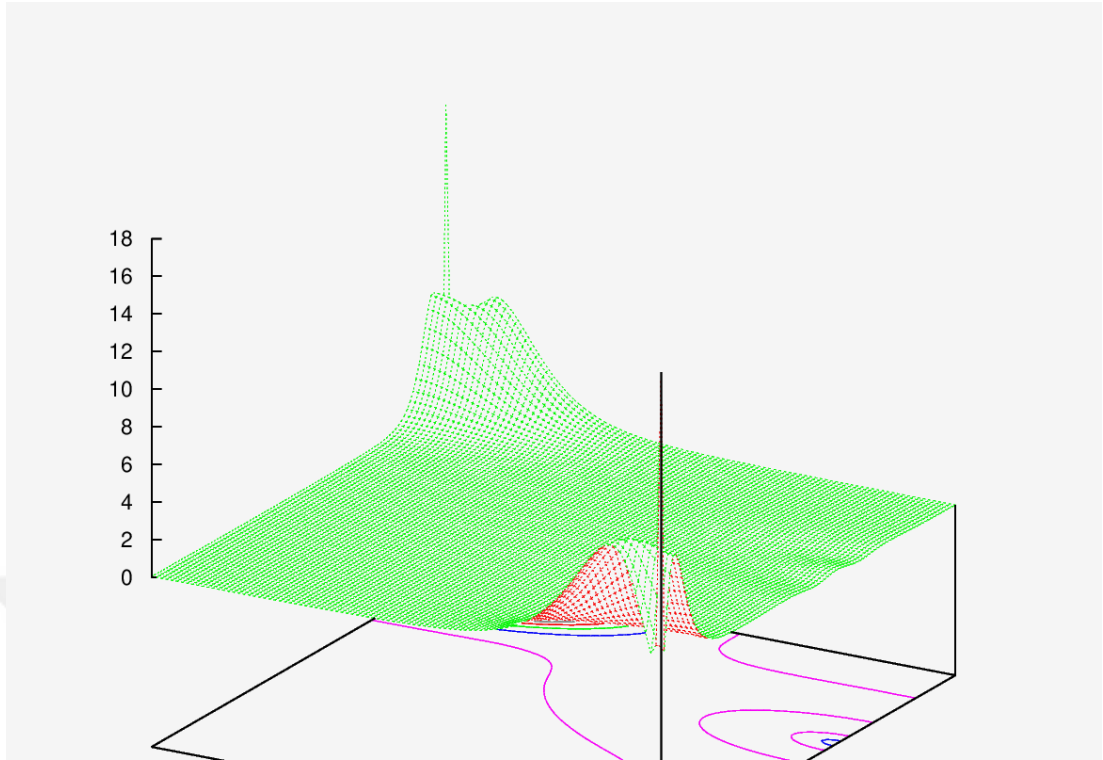
Şekil 4.118. Mn_{1.1}Sb ve Mn₂Sb hacim grafikleri

Tablo 4.9. MnSb bileşikleri volume hesabı sonuçları

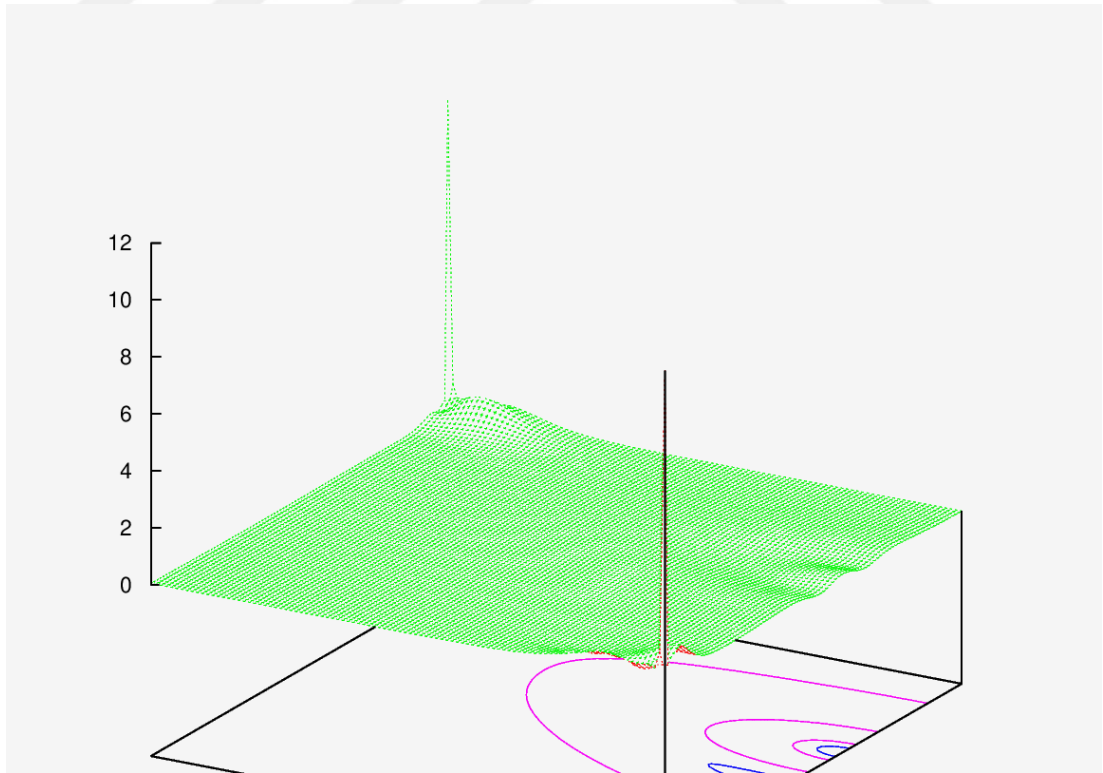
	Hacim [a.u. ³]	B (GPa)	BP	Enerji [Ry]
Mn ₂ Sb	643.6225	288.0604	29.3831	-35197.693295
Mn _{1.1} Sb	495.2347	42.3108	0.8860	-30564.637675

4.4.2. MnSb bileşiklerinin elektron yoğunluğu

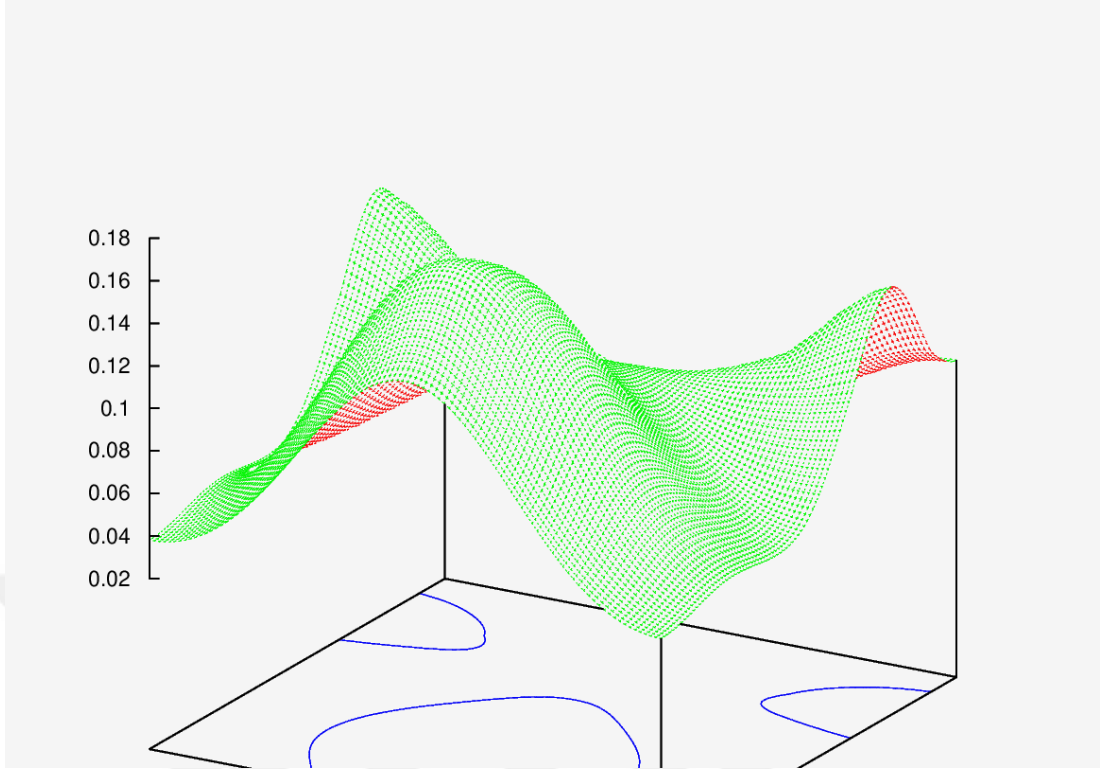
Optimize edilen yapılar için 'task' menüsünde 'elektron density' komutu içindeki aşamalar yapıldı. Hesaplama Wu-Cohen potansiyeli kullanılarak yapıldı. Elde edilen grafikler aşağıda verilmiştir.



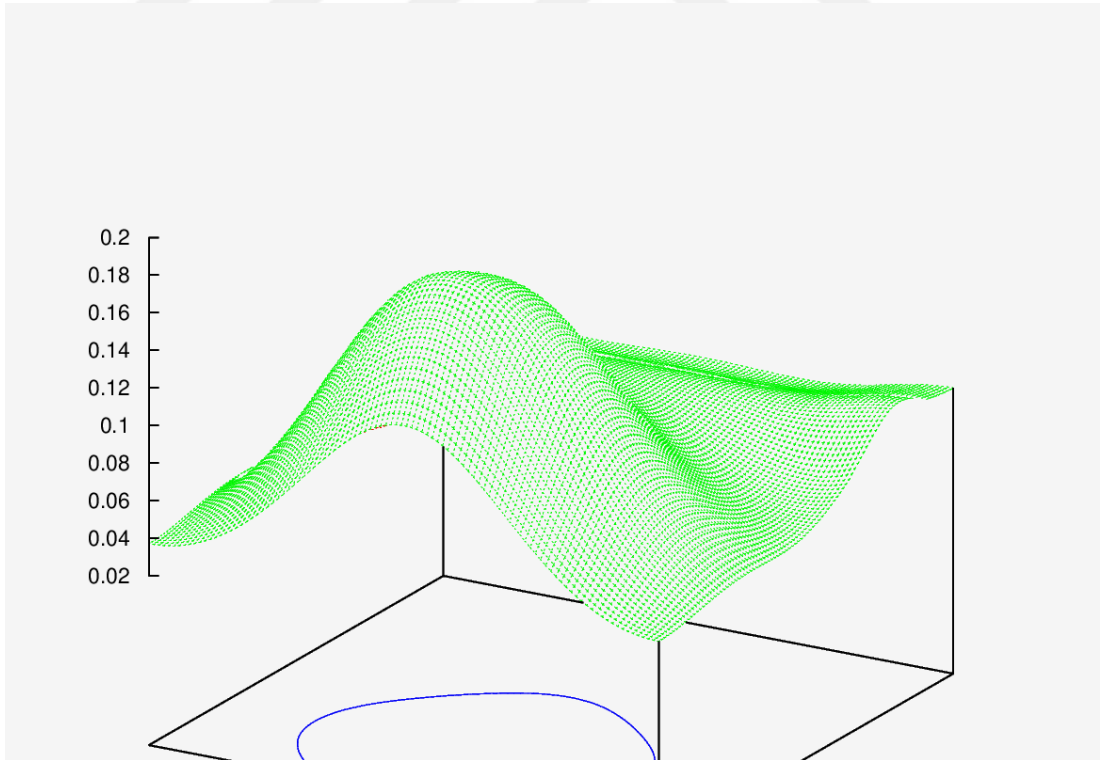
Şekil 4.119. MnSb194 up



Şekil 4.120. MnSb194 down



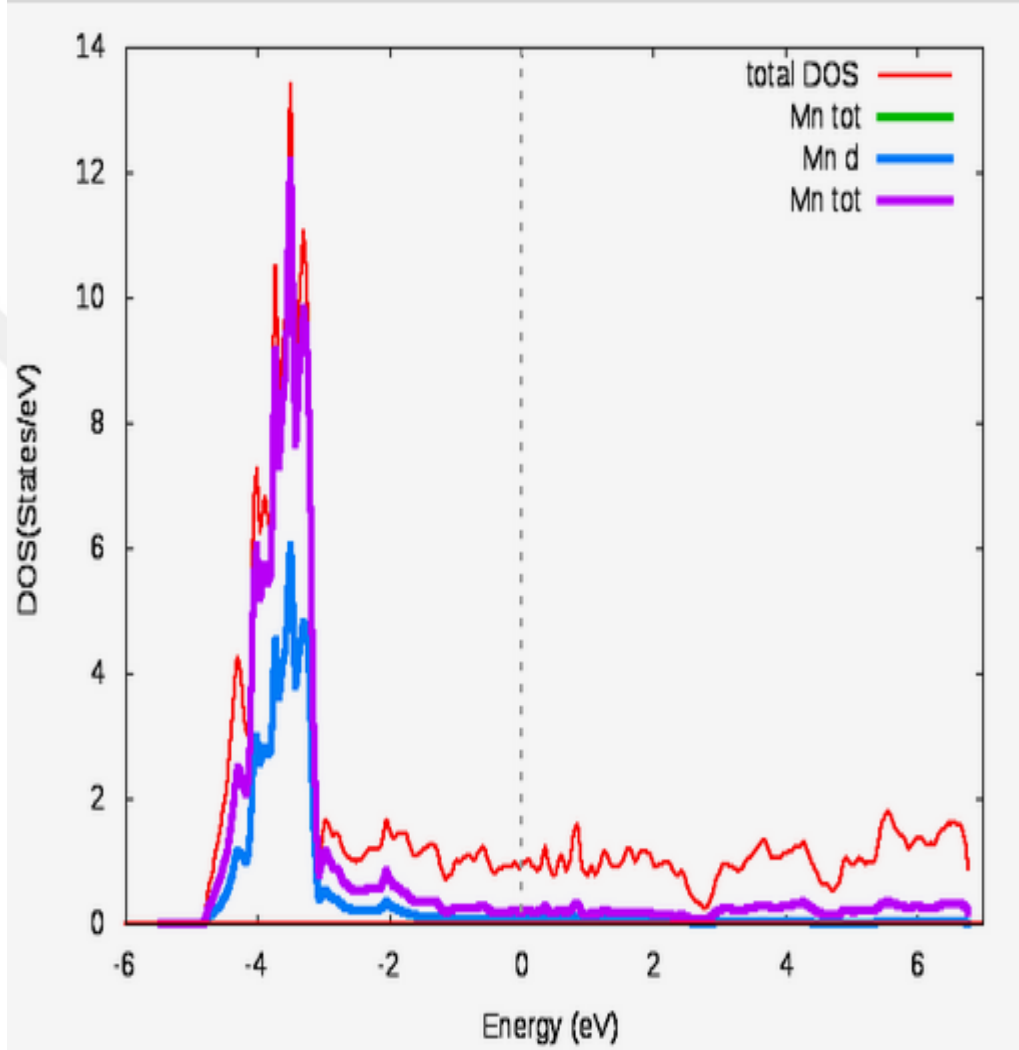
Şekil 4.121. MnSb129 up



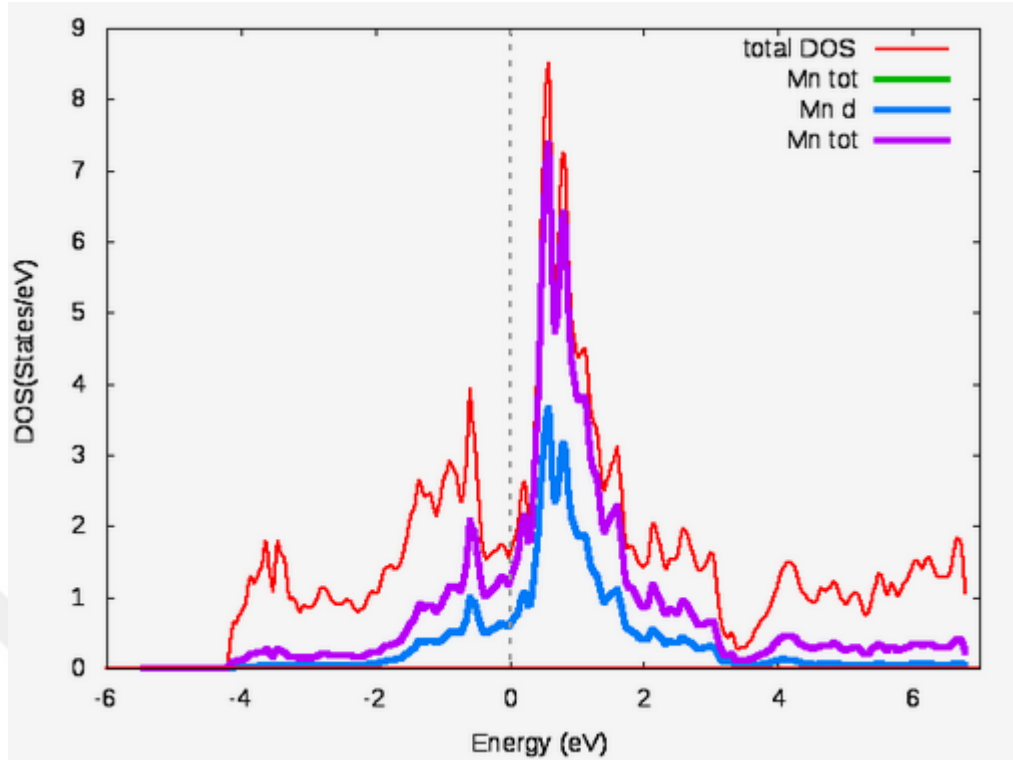
Şekil 4.122. MnSb129 down

4.4.3. MnSb bileşikleri durum yoğunluğu

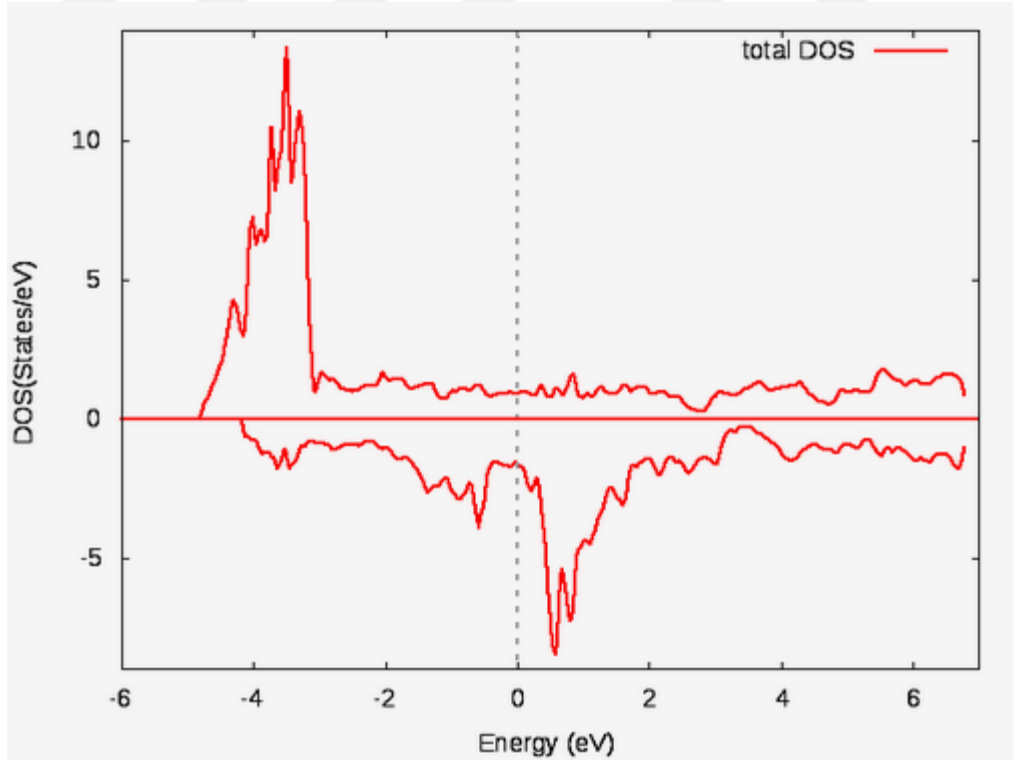
Elektron yoğunluğu hesabı yapılan bileşikler için durum yoğunluğu hesabı spin up ve spin down için hesaplandı. Grafikleri çizildi.



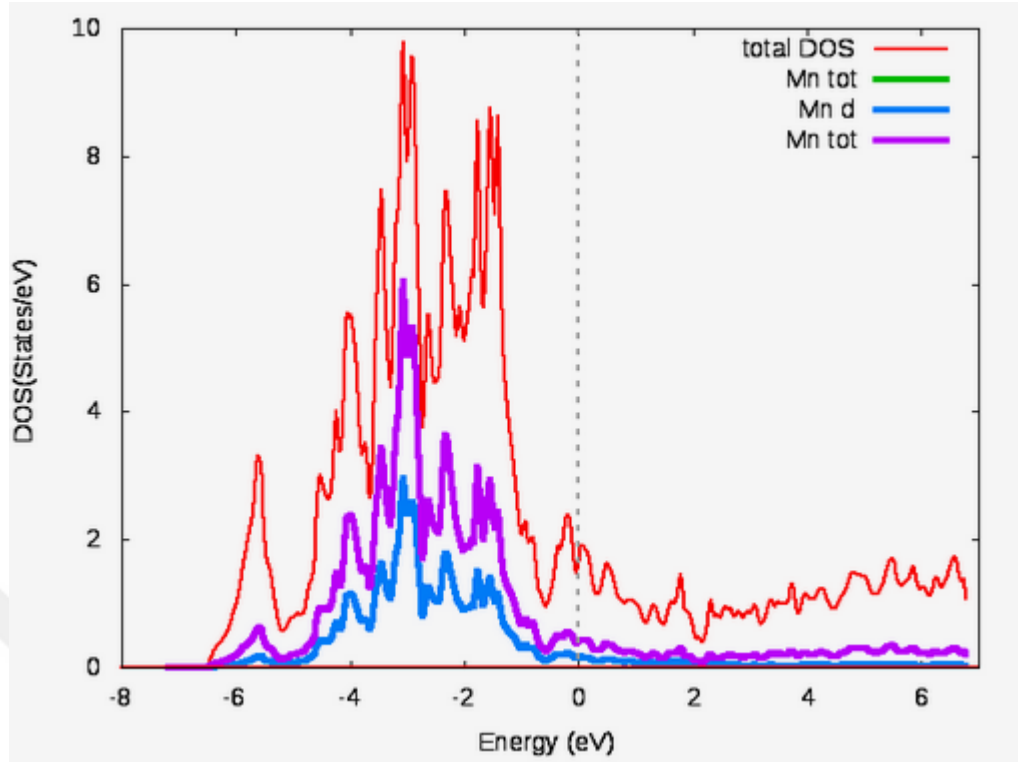
Şekil 4.123. MnSb194 spin up



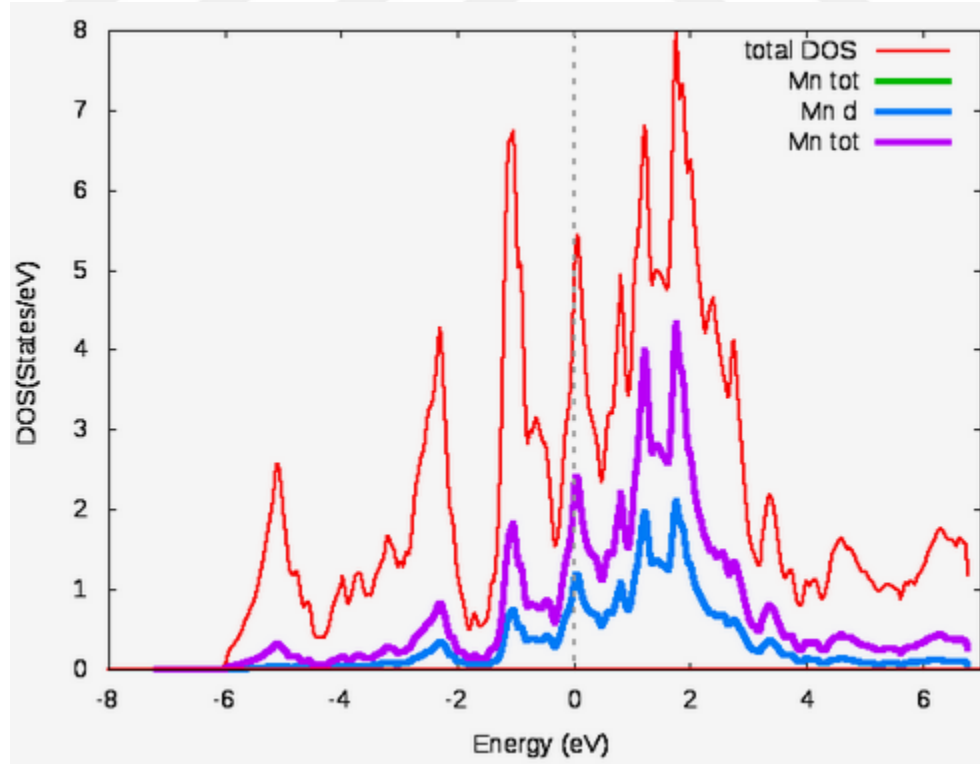
Şekil 4.124. MnSb194 spin down



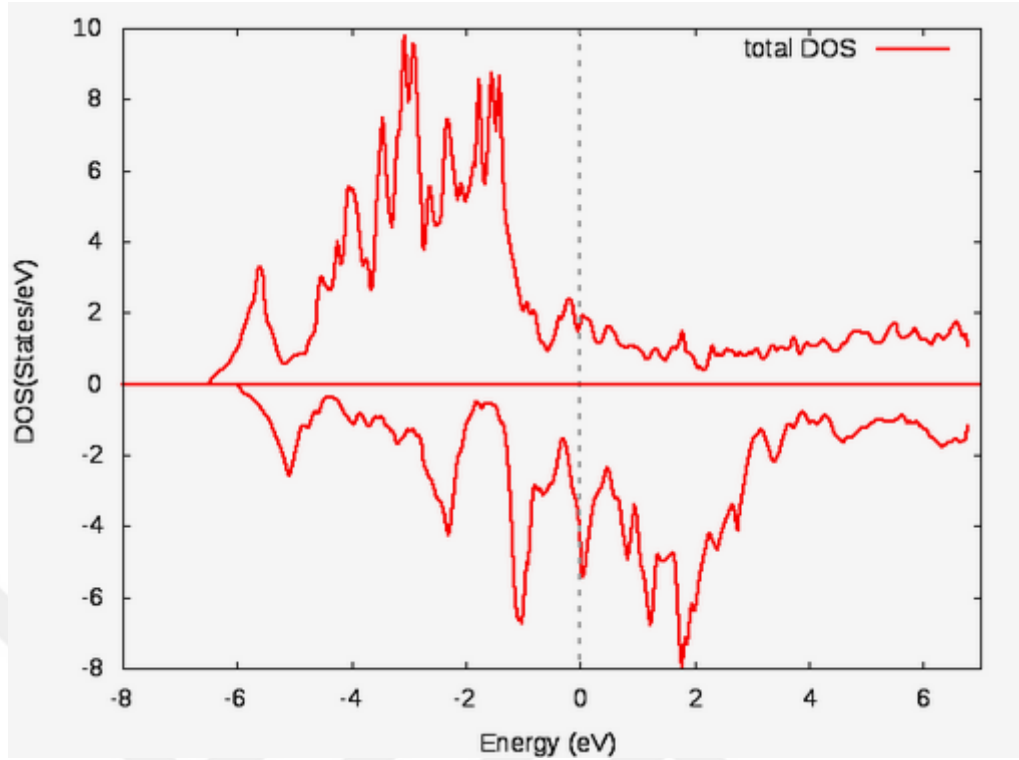
Şekil 4.125. MnSb194 DOS



Şekil 4.126. MnSb129 spin up



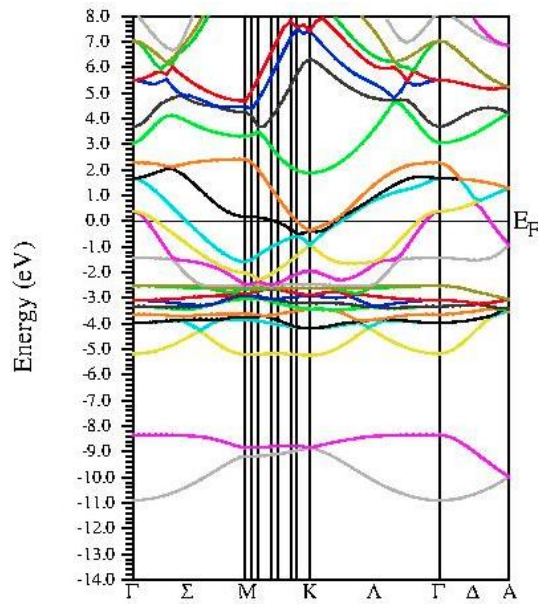
Şekil 4.127. MnSb129 spin down



Şekil 4.128. MnSb129 DOS

4.4.4. MnSb bileşiklerinin band grafikleri

DOS hesabından sonra bant hesabı yapıldı.



Şekil 4.129. MnSb194 bant spin up

4.4.5. MnSb bileşikleri için manyetik hesap sonuçları

MnSb194 için:

HFF001: 644.584 0.000 -25.588 618.996 (KGAUSS)

HFF002: 359.598 0.000 -291.401 68.197 (KGAUSS)

Toplam=687.193 KGAUSS

MnSb129 için:

HFF001: 113.161 0.000 -21.813 91.348 (KGAUSS)

HFF002: 182.488 0.000 -273.822 -91.335 (KGAUSS)

HFF003: 48.012 0.000 -220.643 -172.630 (KGAUSS)

Toplam=-172.623

orbital;

MnSb194 için:

XOP 1 2-0.014348 0.050694 0.036346

XOP 1 4-2.067198 0 -2.067198

MnSb129 için;

XOP 1 2 -0.041213 -0.052853 -0.094065

XOP 1 4 0.829819

dipolar;

MnSb194 için:

atom 1 mag. moment -0.1848 Bohr magneton

atom 2 mag. moment 672.7666 Bohr magneton

MnSb129 için;

atom 1 mag. moment -0.1226 Bohr magneton

atom 2 mag. moment 647.5582 Bohr magneton

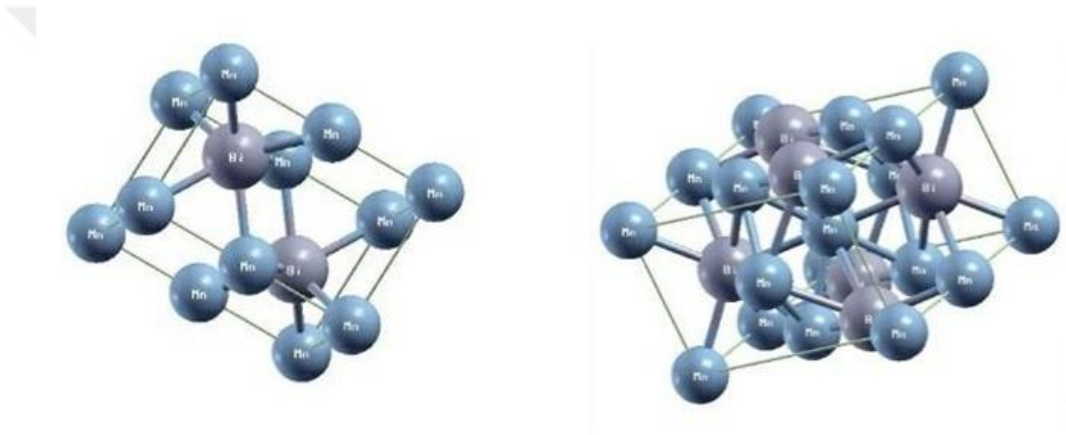
atom 3 mag. moment 1.0000 Bohr magneton

4.5. Mn-Bi Bileşikleri

Mangan – Bizmut bileşikleri ; $Mn_{2.23}Bi$, $MnBi$, Mn_3Bi şeklindedir.

4.5.1. MnBi bileşiklerin yapısı ve optimizasyonu

Inorganic Material Database sitesinde bulunan .cif dosyaları alınarak WIEN2k paket programına tanıtılıp, yapı için minimum enerji değerleri hacim hesabı yapılarak elde edildi.



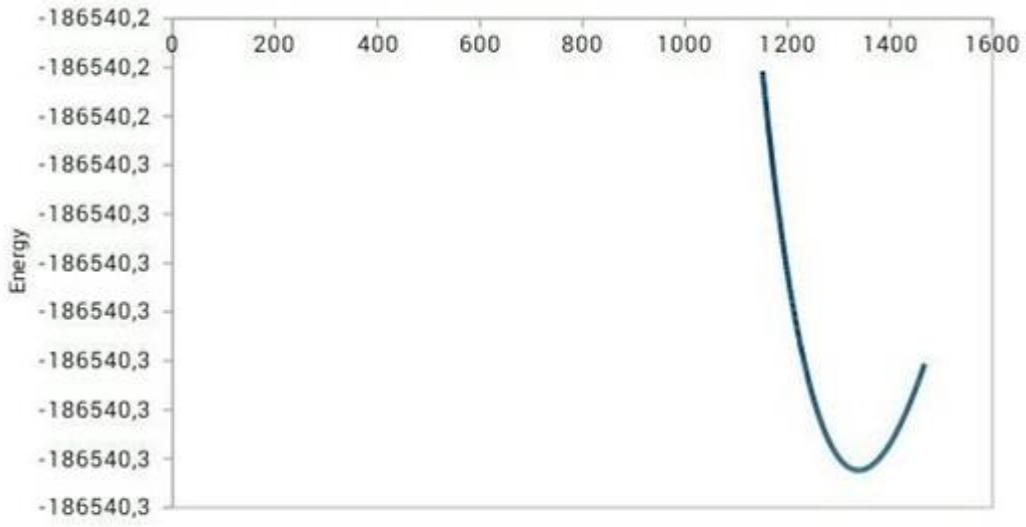
Şekil 4.130. $MnBi$ ve $Mn_{2.23}Bi_{1.88}$ bileşikleri kristal yapısı

Tablo 4.9. Mn – Bi bileşikleri yapı ve uzay grup

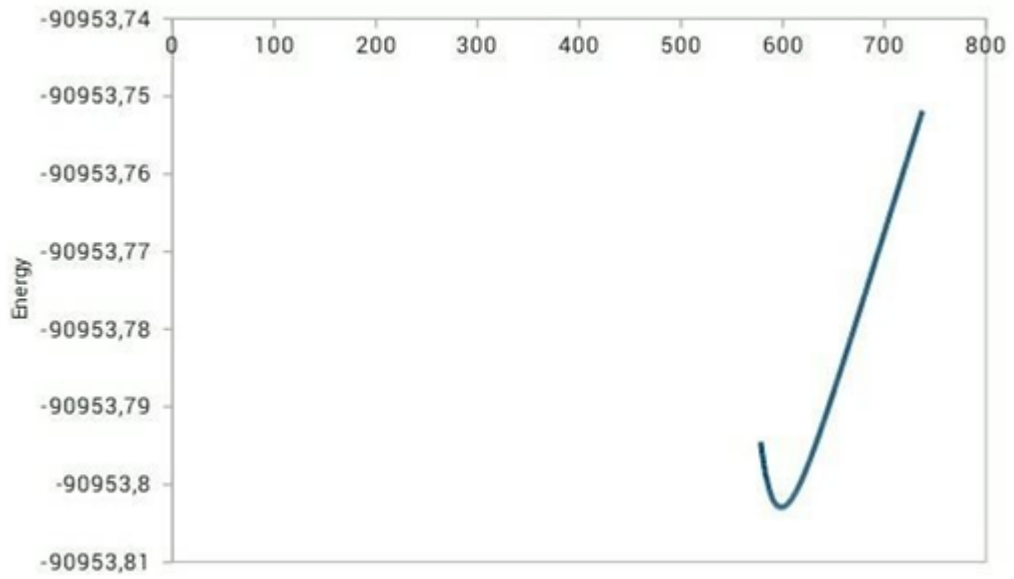
Bileşik	Kristal yapı	Uzay grup
$Mn_{2.21}Bi_{1.88}$	ortorombik	Pmma 51
$MnBi$	hexagonal	$P6_3/mmc$ 194

Tablo 4.10. $MnBi$ bileşikleri hacim hesabı sonuçları

	Hacim [a.u. ³]	B (GPa)	BP	Enerji [Ry]
$Mn_{2.21}Bi_{1.88}$	1338.6208	63.3787	5.9070	-186540.31241
$MnBi$	598.4912	226.3055	36.7692	-90953.803002



Şekil 4.131. MnBi hex enerji-hacim grafiği



Şekil 4.132. MnBi ortho enerji-hacim grafiği

4.5.2. MnBi bileşikleri elektron yoğunluğu grafikleri

Mn-Sb bileşikleri için kullandığımız yapı değerleri aşağıdaki gibidir.

Yapının adı : MnBihex Uzay Grubu: h194

$a = b = 7.944948$ $c = 12.021768$ bohr $\gamma = \beta = 900$ $\alpha = 1200$

Atom 1: Bi RMT= 2.5

Atom 2: Mn RMT= 2.5

Yapının adı : MnBiortho Uzay Grubu: pmma 51

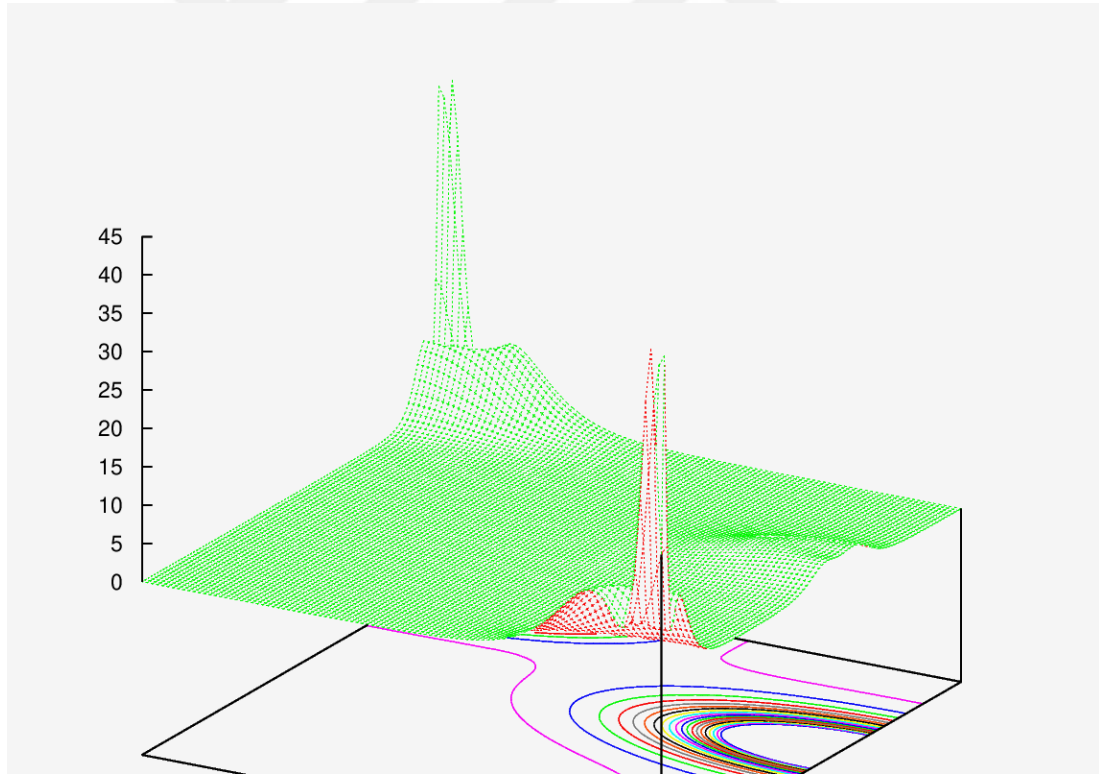
$a = 11.624380$ $b = 8.454450$ bohr , $c = 14.640204$ bohr

$\gamma = \beta = \alpha = 900$

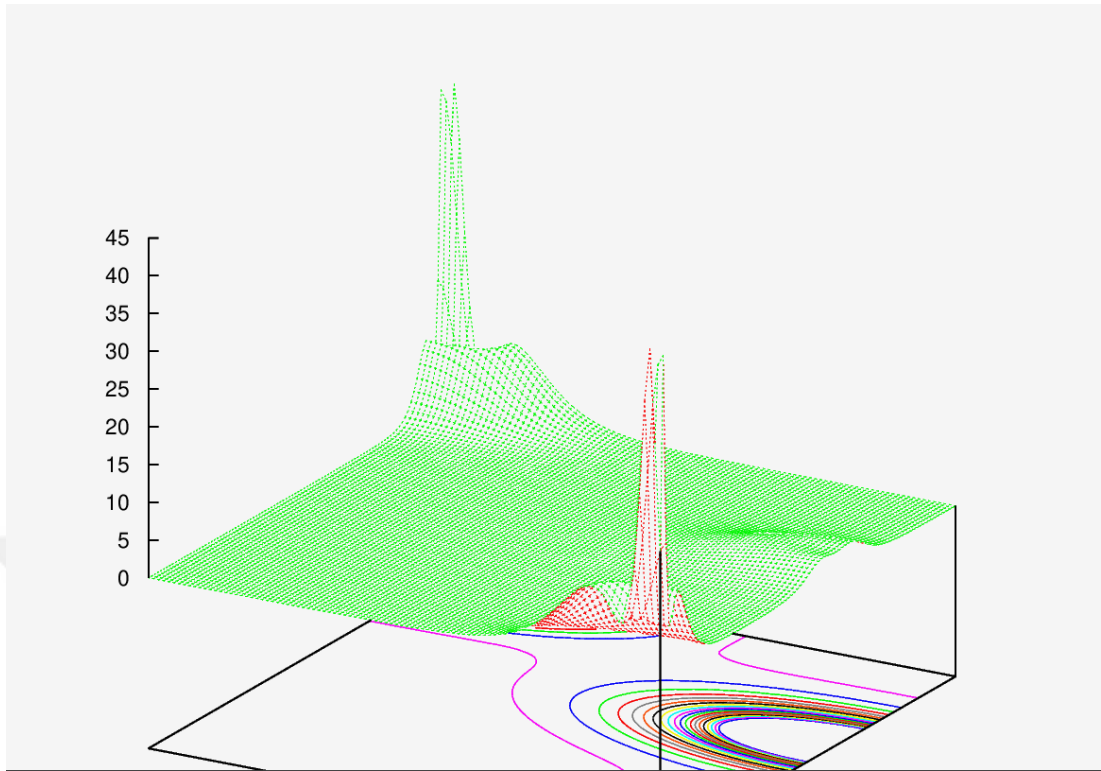
Atom 1: Bi RMT= 2.07

Atom 2: Mn RMT= 1.97

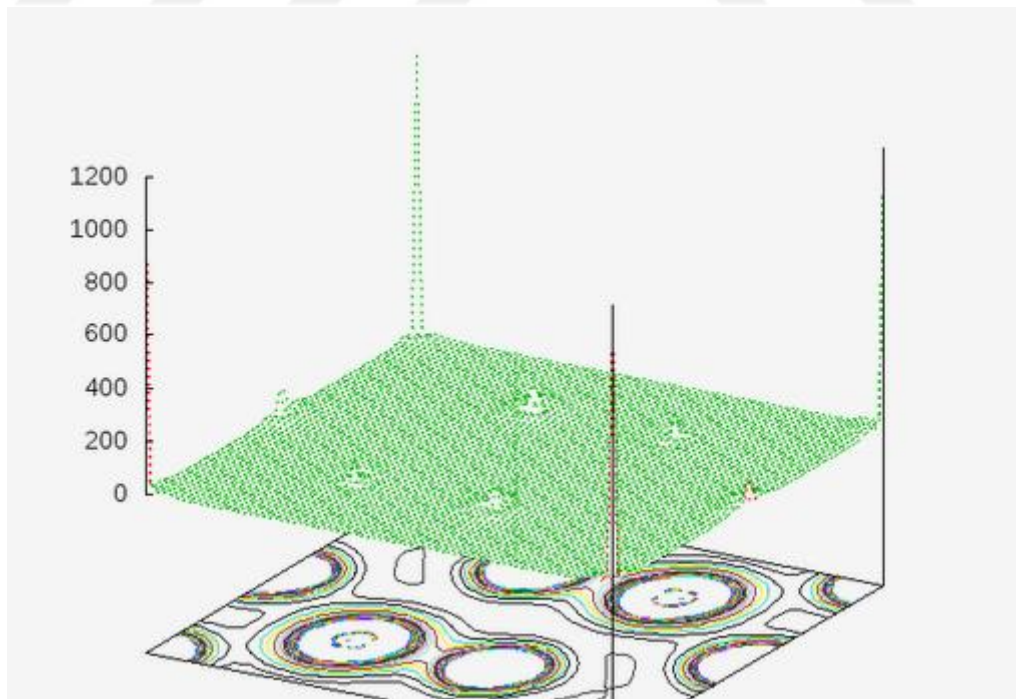
Gerekli hesaplamalar yapıldıktan sonra her bir bileşik için elde edilen 3-boyutlu elektron yoğunluğu grafikleri aşağıda verilmiştir.



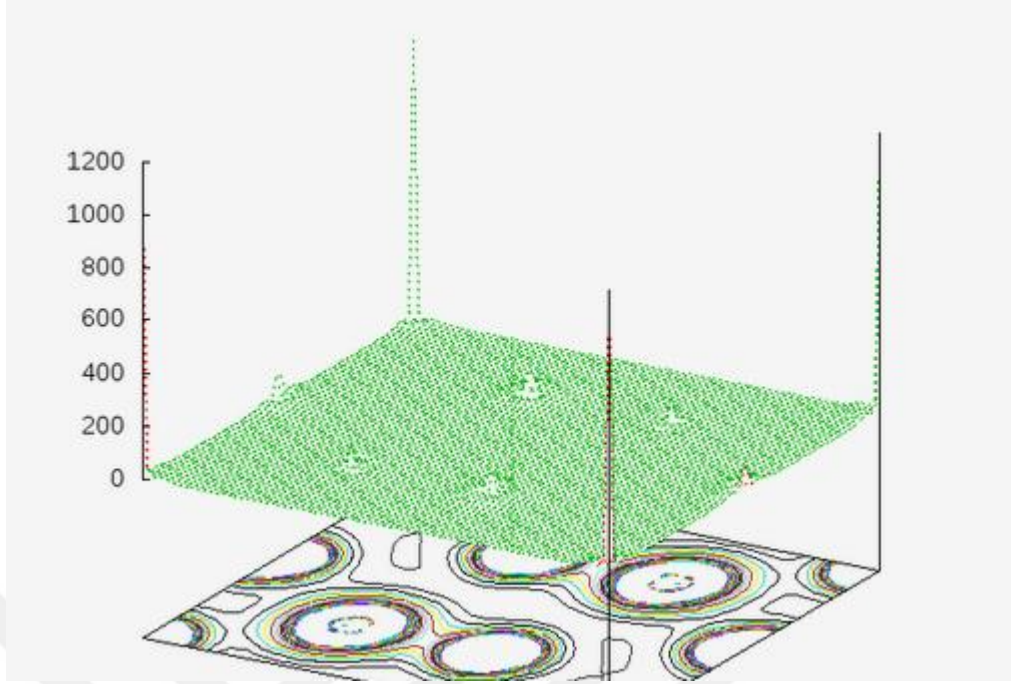
Şekil 4.133. MnBihex spin up



Şekil 4.134. MnBi hex spin down



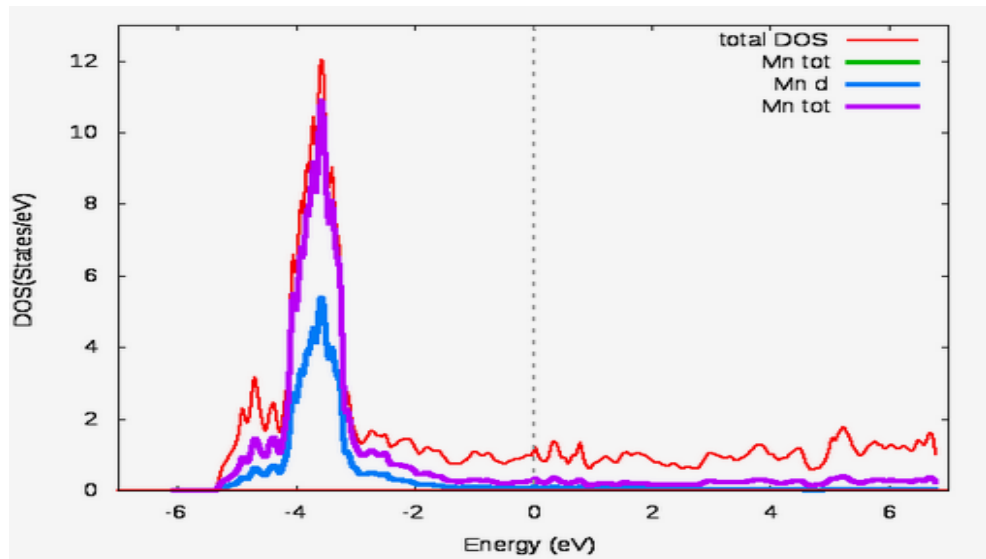
Şekil 4.135. MnBi ortho51 spin up



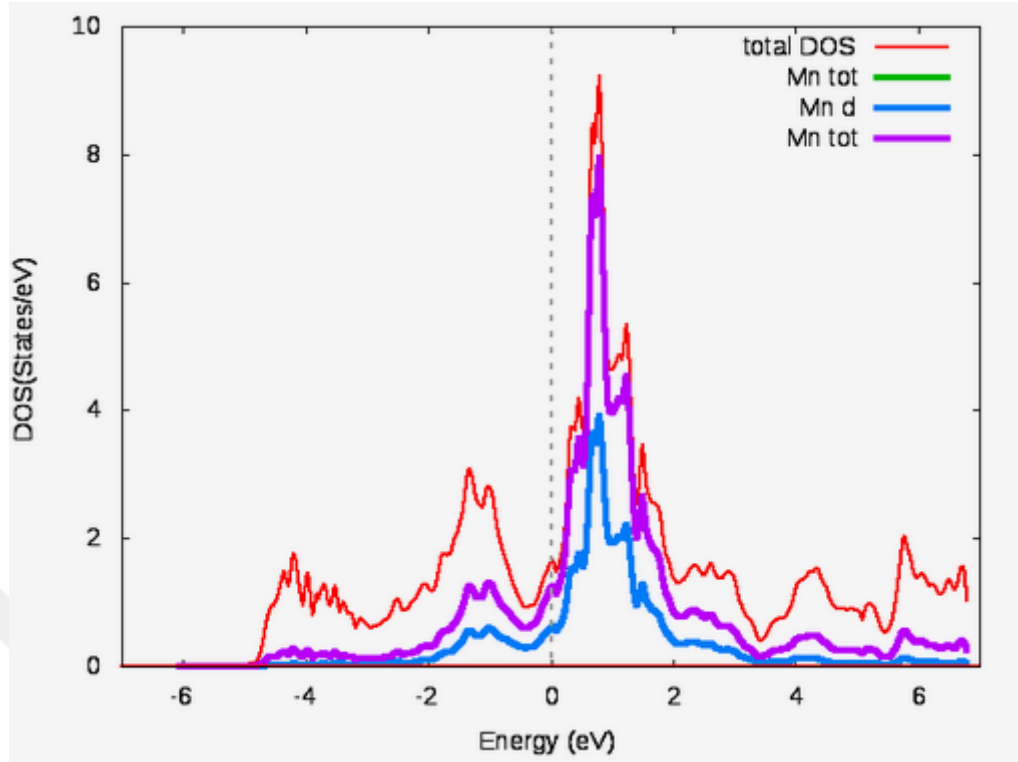
Şekil 4.136. MnBiortho51 spin down

4.5.3. MnBi bileşikleri durum yoğunluğu

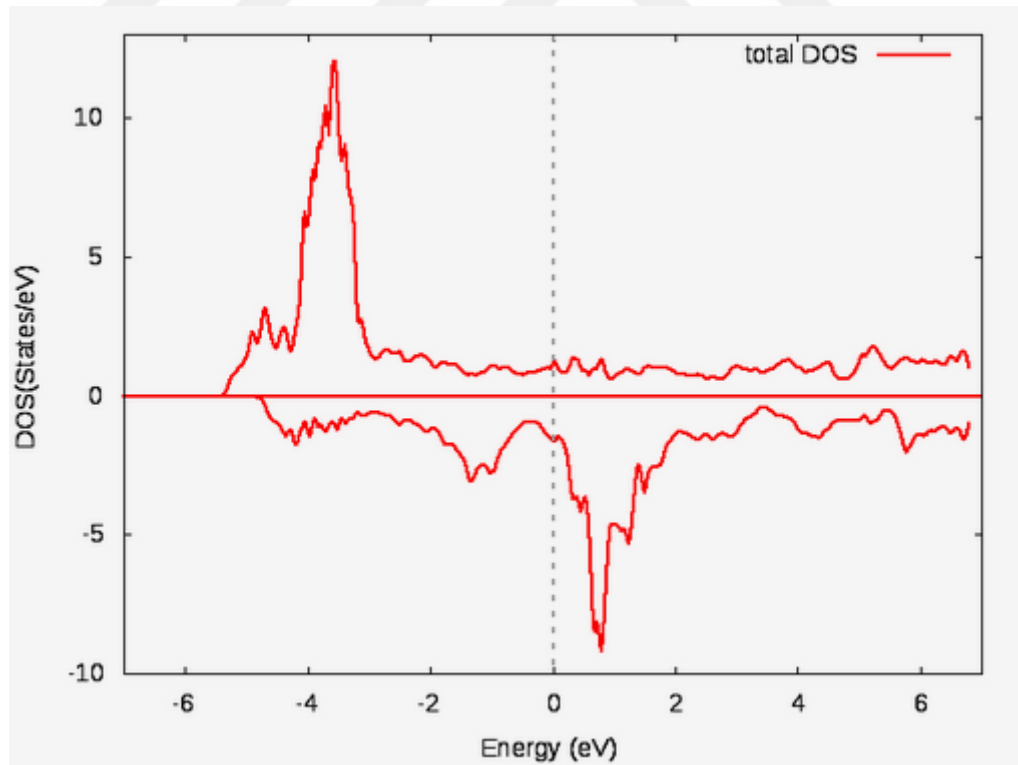
Elektron yoğunlukları hesaplanan bileşikler için durum yoğunluğu hesabı xkgen 1000 alınarak yapıldı ve aşağıdaki grafikler elde edildi.



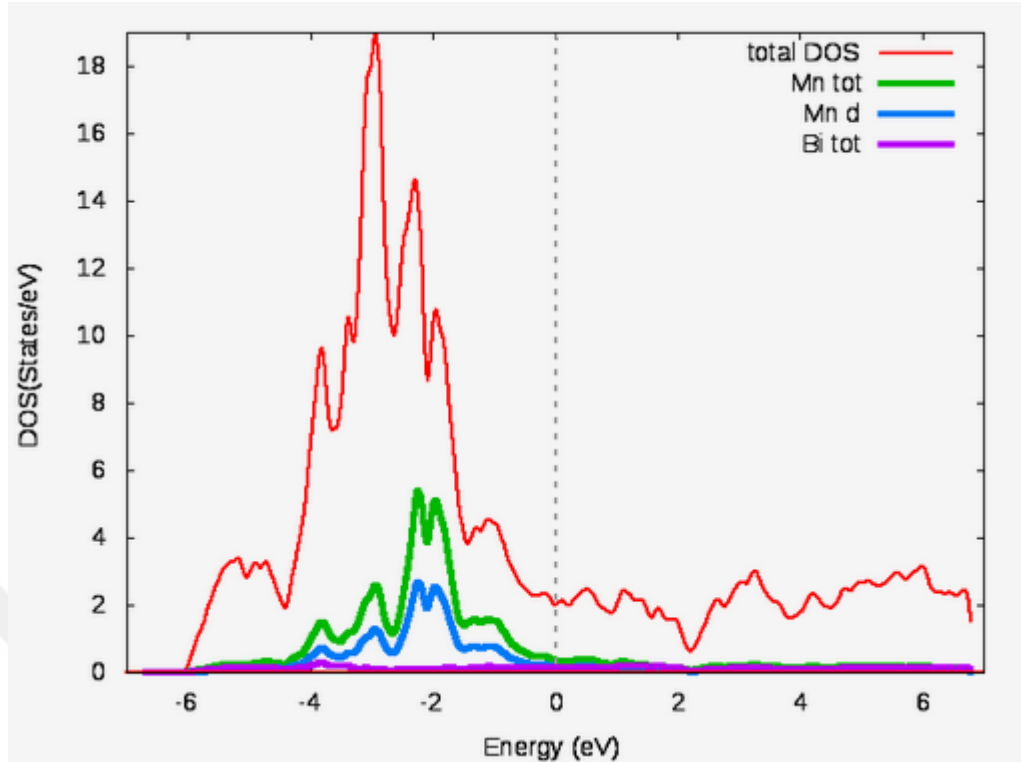
Şekil 4.137. MnBi hex spin up



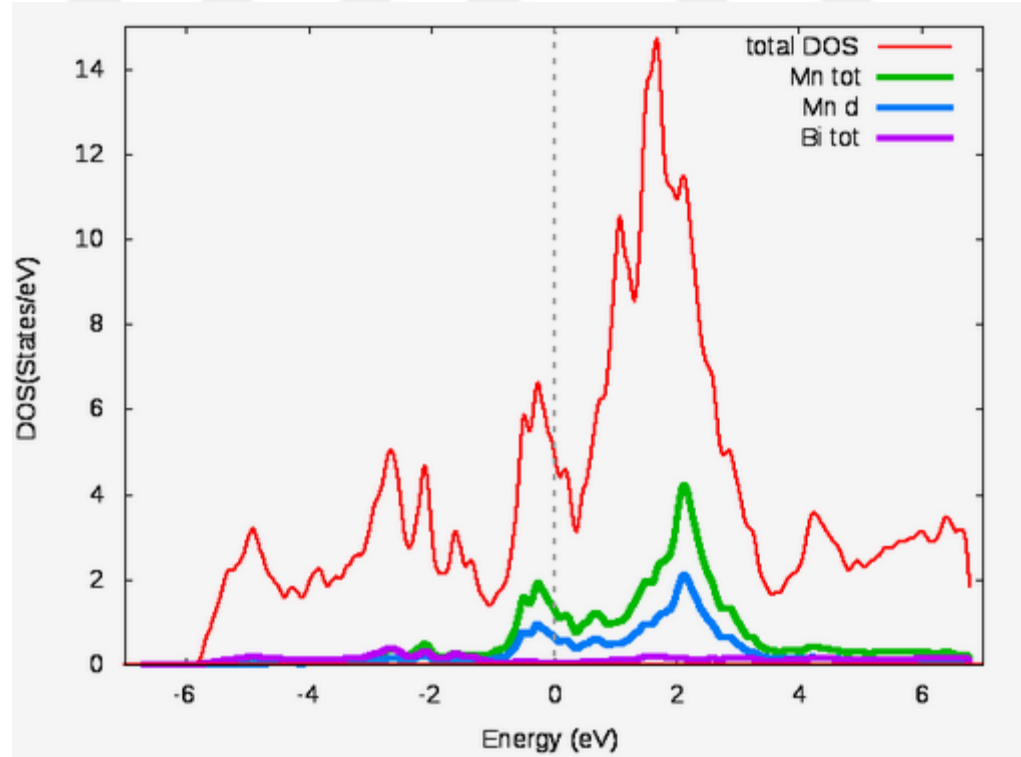
Şekil 4.138. MnBiHex spin down



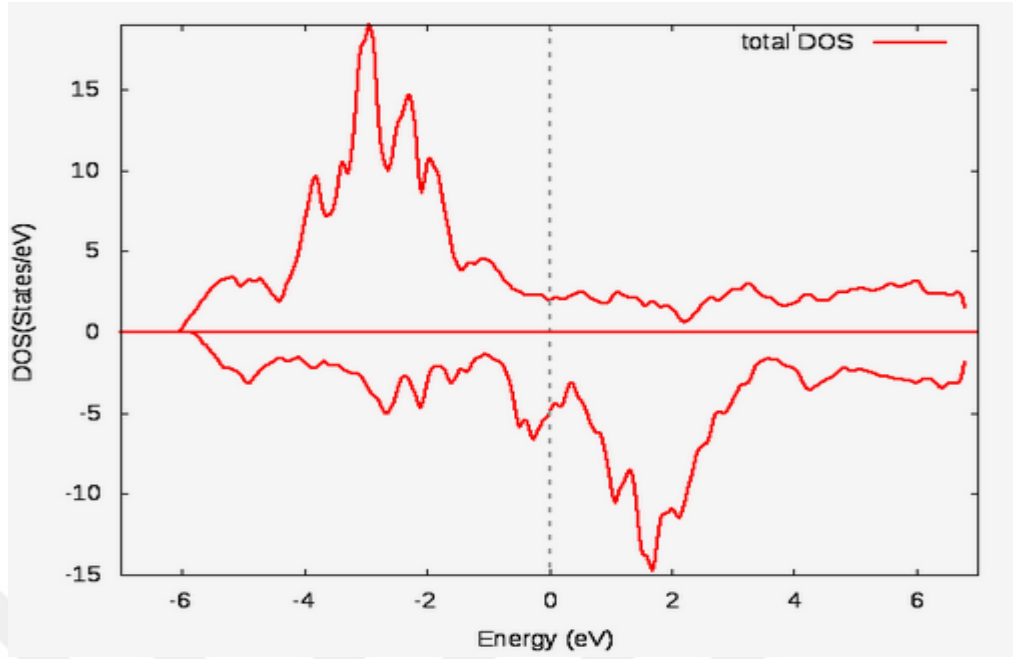
Şekil 4.139. MnBiHex DOS



Şekil 4.140. MnBiortho51 spin up



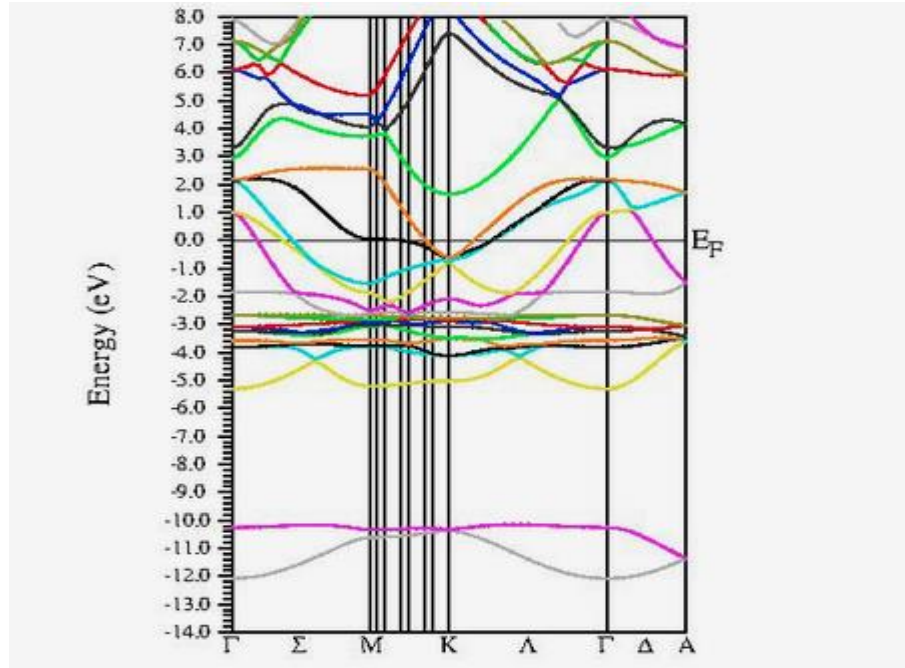
Şekil 4.141. MnBiortho51 spin dn



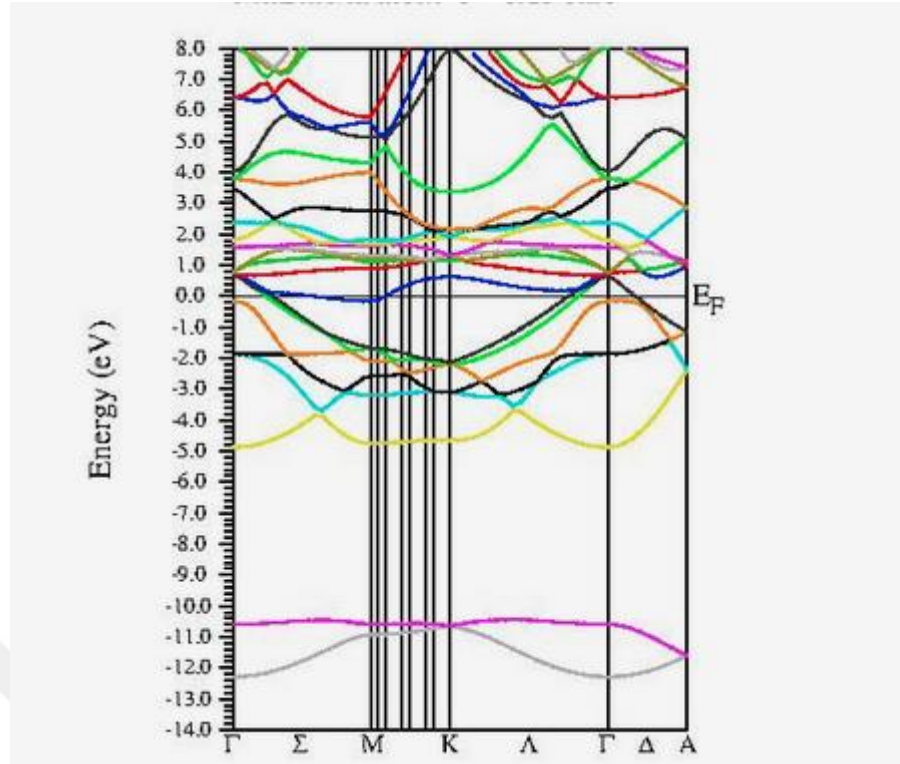
Şekil 4.142. MnBiortho51 DOS

4.5.4. MnBi bileşikleri band hesap sonuçları

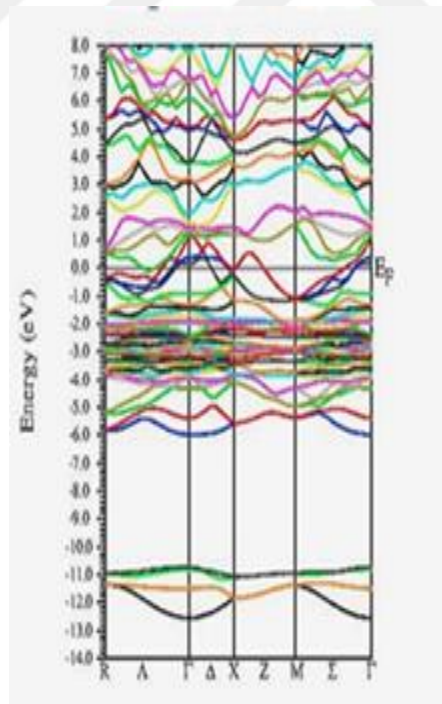
DOS hesabından sonra bileşiklerimiz için (spin up ve spin down) band hesabı yapıldı.



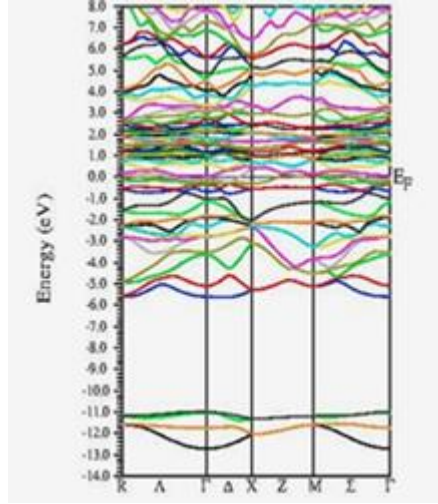
Şekil 4.143. MnBi hex up



Şekil 4.144. MnBi hex down



Şekil 4.145. MnBi ortho up



Şekil 4.146. MnBiortho down

4.5.5. MnBi bileşikleri manyetik alan hesap sonuçları

(MnBihex) bileşiğini için Toplam=0 (MnBiortho51) bileşiğini için:

HFF001:	1657.693	0.000	-42.964	1614.730 (KGAUSS)
HFF002:	572.746	0.000	-620.453	-47.707 (KGAUSS)
HFF003:	1154.932	0.000	-53.723	1101.209 (KGAUSS)
HFF004:	587.805	0.000	-715.686	-127.881 (KGAUSS)
HFF005:	787.733	0.000	-725.699	62.034 (KGAUSS)

Toplam=2602.385 KGAUSS

(MnBihex) bileşiğini için dipolar manyetik hesap

atom 1 mag. moment = -0.1372 Bohr magneton

atom 2 mag. moment =657.1751 Bohr magneton

(MnBiortho51) bileşiğini için dipolar manyetik hesap:

atom 1 mag. moment = -0.0402 Bohr magneton

atom 2 mag. moment =1438.8061 Bohr magneton

atom 3 mag. moment =1.0000 Bohr magneton

atom 4 mag. moment = 0.0000 Bohr magneton

BÖLÜM 5. TARTISMA VE SONUÇ

Bu çalışma ile Yoğunluk Fonsiyonel Teorisi kullanılarak yapılan hesaplamalar sayesinde manyetik özelliğe sahip geçiş elementlerinden biri olan Mangan' ın 5A grubu elementleriyle yapmış olduğu bileşiklerin yapısal, elektronik ve manyetik özelliklerini incelendi.

Bu incelemeler birçok araştırmacının kullandığı Wien2k yazılımı kullanılarak yapıldı. Deneysel veriler ile uyumlu sonuçlar veren Wien2k yazılımı kullanılarak yazılmış binlerce akademik makale bulunmaktadır.

Yapmış olduğumuz kapsamlı inceleme sonucunda Mn atomu 5A grubu atomlar ile farklı oranlarda ve kristal yapıda oluştuğu görülmüştür. Yapılan minimum enerji en kararlı hal hesaplamalarıyla da Mn bileşiklerinin hangi kristal yapıda oluşabileceklerini tespit edildi. Elektron yoğunluğu hesapları ile her bir atomun orbitallerinin elektron yoğunluklarını elde edildi. Ayrıca durum yoğunluğu hesaplamaları ile her bir atomda elektronların yerleşebilecekleri durumlar ile ilgili bilgi verildi. Bu hesaplamalarda Mn atomunda spin yukarı ve spin aşağı durumlarda, durum yoğunluğu dağılımının değiştiği, 5A grubu atomlarının ise kayda değer bir değişime uğramadığı görüldü. Mn atomu ile yapılan detaylı durum yoğunluğu hesaplamalarında manyetik özelliği gösteren bu farkın d orbitalinden meydana geldiği görülmüştür.

Elektronik bant hesaplamalarında incelen bütün bileşiklerin elektronik bant yapılarının spin yukarı ve spin aşağı durumlarında farklılıklar görülmüştür. Bazı durumlarda iletkenlikten yarı iletkenliğe geçiş görülmüştür. Bu durumun, bazı uygulamalara yönelik bir özelliğin olabileceği düşünülmektedir.

Son olarak dört aşamada yapılan manyetik özelliklerin belirlenmesinde fermi dağılım manyetik momentin baskın olduğu diğer dağılımlarının belirleyici olmadığı görülmüştür.

Tablo 4.11. Mn – V(N,P,As,Sb,Bi) bileşikleri hacim hesapları

Yöntem	Bileşik	V0	B(GPa)	BP	E0
LSDA	Mn _{2.23} Bi _{1.88}	1229.7951	118.5004	22.2245	-186438.095491
PBE-GGA	Mn _{2.23} Bi _{1.88}	2889.8789	0.0854	7.8951	-186555.661200
PBE (08)	Mn _{2.23} Bi _{1.88}	1307.1887	34.8016	19.5725	-186496.545146
WC	Mn _{2.23} Bi _{1.88}	1339.2473	3821.2451	-101.4768	-186540.534500
LSDA	MnBi	558.8955	86.0314	6.2574	-90906.179488
PBE-GGA	MnBi	623.4099	57.4758	6.5938	-90960.710856
PBE (08)	MnBi	586.1624	74.6741	6.7070	-90933.384939
WC	MnBi	587.5001	73.6988	6.7167	-90953.801600
LSDA	Mn _{1.1} Sb	486.3445	101.6646	6.6638	-30538.808138
PBE-GGA	Mn _{1.1} Sb	552.8693	53.5527	-0.2414	-30569.135156
PBE (08)	Mn _{1.1} Sb	514.0926	79.1135	5.7296	-30553.469215
WC	Mn _{1.1} Sb	598.6815	807.4111	-62.1665	-30564.688989
LSDA	Mn ₂ Sb	606.3837	325.5044	21.3572	-35164.916156
PBE-GGA	Mn ₂ Sb	645.9945	36.5370	1.1642	-35203.694681
PBE (08)	Mn ₂ Sb	351.7861	1.8369	-2.4019	-35183.681131
WC	Mn ₂ Sb	608.8503	69.7330	3.6495	-35197.699296
LSDA	MnN _{0.89}	111.0499	475.1748	10.1490	-2421.91071
PBE-GGA	MnN _{0.89}	117.8428	289.4385	8.9369	-2426.861518
PBE (08)	MnN _{0.89}	115.4926	419.9069	14.9011	-2424.262848
WC	MnN _{0.89}	129.4072	801.1959	-96.1670	-2425.920865
LSDA	MnN _{0.43}	204.8951	391.7503	4.4608	-4843.771890
PBE-GGA	MnN _{0.43}	653.6882	311.7719	6.4913	-14560.856322
PBE (08)	MnN _{0.43}	626.9609	406.6561	11.6300	-14545.347560
WC	MnN _{0.43} (20)	315.5084	245.2880	7.5967	-7168.415695
LSDA	MnN _{0.43} (20)	615.8452	392.0430	4.5673	-14531.309101
PBE-GGA	MnN _{0.43} (20)	654.1436	328.1186	4.3594	-14560.856806
PBE (08)	MnN _{0.43} (20)	656.6405	301.1957	5.0002	-14560.858401
WC	MnN _{0.43} (20)	636.0249	34269.1338	-61.5473	-14555.729039
LSDA	Mn ₄ N	43843.0279	-15.8916	-0.4537	-9329.404545
PBE-GGA	Mn ₄ N	391.8132	155.2950	2.8461	-9378.762504
PBE (08)	Mn ₄ N	99772.0992	-9.9283	-0.3636	-9320.806951
WC	Mn ₄ N	399.5281	1288.5433	-102.2152	-9375.581505
LSDA	Mn ₃ N ₂	266.9605	80.4447	-1.4760	-7156.940510
PBE-GGA	Mn ₃ N ₂	328.8509	363.3300	22.2029	-7171.048958
PBE (08)	Mn ₃ N ₂	315.1365	341.7287	7.1541	-7163.638665
WC	Mn ₃ N ₂	315.5084	245.2880	7.5967	-7168.415695
LSDA	Mn ₃ P	620.9725	227.0522	4.1998	-11980.861258
PBE-GGA	Mn ₃ P	661.4833	193.1361	3.1024	-12006.408596
PBE (08)	Mn ₃ P	637.8591	199.1703	2.8896	-11993.02393
WC	Mn ₃ P	1357.1942	14.7683	12.3682	-30534.17528
LSDA	Mn ₂ P	129445.4629	-10.9723	-0.4486	-15859.339351
PBE-GGA	Mn ₂ P	712.1766	206.9331	7.0889	-15956.807221
PBE (08)	Mn ₂ P	155083.8595	-7.0453	-0.4569	-15889.814737
WC	Mn ₂ P	686.6329	884.1676	64.2295	-15950.934209

Tablo 4.11. (Devamı)

LSDA	MnP	620.9725	227.0522	4.1998	-11980.861258
PBE-GGA	MnP	661.4833	193.1361	3.1024	-12006.408596
PBE (08)	MnP	637.8591	199.1703	2.8896	-11993.023931
WC	MnP	643.1549	203.7453	3.1866	-12001.571610
LSDA	MnAs	405.9476	156.9191	8.1221	-13658.468604
PBE-GGA	MnAs	448.4266	96.3479	6.5699	-13679.051687
PBE (08)	MnAs	432.9723	140.8146	8.4928	-13668.282277

KAYNAKLAR

- [1] www.makaleler.com, Eriřim Tarihi: 22.11.2018.
- [2] www.kuark.org, Eriřim Tarihi: 22.11.2018.
- [3] www.civil.emu.edu.tr/kristalyapilar.pdf, Eriřim Tarihi : 26.11.2018.
- [4] Fermi,E(1927).Statistical method to determine some properties of atoms.
- [5] Hohenberg. P. and Kohn,W.(1964).In homogenous elektrongas.Physical Review,136(3B).
- [6] [Kohn,W. And Sham,LJ81965).Self-consistent equations including exchange and correlation effects.Physical review,140(4A).A 1133-1138.
- [7] Soyalp,F.(2006).yoęunluk Fonksiyonel Teorisi ile bazı bileřiklerin elektronik yapılarının ve titreřim özelliklerinin teorik olarak incelenmesi,Doktora Tezi,Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü,Ankara,3-4
- [8] www.google.com., Eriřim Tarihi: 11.12.2016.

ÖZGEÇMİŞ

Narin Nurcan, 04.04.1987’de İstanbul’da doğdu. İlk, orta ve lise eğitimini İstanbul’da tamamladı.2008 yılında Sakarya Üniversitesi İşletme bölümüne başladı. Buradan mezun olduktan sonra uzun bir çalışma döneminin ardından İstanbul Üniversite Fizik Bölümü’ ne 2010 yılında başladı. İstanbul Üniversitesi Fizik Bölümü’nü 2014 yılında bitirdi. 2014 yılında başladığı, 1 yıl süren Pedagojik Formasyon eğitimini İstanbul Üniversitesi Hasan Ali Yücel Eğitim Fakültesi’nde 2015 yılında tamamladı. 2016 yılında Sakarya Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Bölümü’nde yüksek lisans eğitimine başladı.