



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

**Mn₂Cr_{1-x}V_xSi SİSTEMİNİN YAPISAL, ELEKTRONİK,
MANYETİK, ELASTİK VE TERMODİNAMİK
ÖZELLİKLERİNİN AB-İNİTO YÖNTEMİYLE
İNCELENMESİ**

AHMET SAYDAM

YÜKSEK LİSANS TEZİ

KIRŞEHİR / 2021



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

**Mn₂Cr_{1-x}V_xSi SİSTEMİNİN YAPISAL, ELEKTRONİK,
MANYETİK, ELASTİK VE TERMODİNAMİK
ÖZELLİKLERİNİN AB-İNİTO YÖNTEMİYLE
İNCELENMESİ**

AHMET SAYDAM

YÜKSEK LİSANS TEZİ

DANIŞMAN
Doç. Dr. Osman ÖRNEK

KIRŞEHİR / 2021

TEZ BİLDİRİMİ

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

Ahmet SAYDAM



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



ÖNSÖZ

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

Her zaman yanımda olan ve bana destek olan annem, babam ve kızım Sümeyye SAYDAM'a teşekkür ederim.

Kasım, 2021

Ahmet SAYDAM

İÇİNDEKİLER

TEZ BİLDİRİMİ	i
ÖNSÖZ	iv
İÇİNDEKİLER	v
ŞEKİL LİSTESİ	vi
TABLO LİSTESİ	vii
SİMGE VE KISALTMA LİSTEİ	viii
ÖZET	ix
ABSTRACT	x
1. GİRİŞ	1
2. KURAMSAL TEMELLER	4
2.1. Giriş	4
2.2. Çok Cisim Problemi	4
2.3. Hartree-Fock Yaklaşımı (HF)	5
2.4. Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi (YFT)	6
2.4.1. Hohenberg-Kohn Teoremi	8
2.4.2. Kohn-Sham Denklemleri	9
2.5. Göreceli Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi (ab-initio yöntemi)	11
2.6. Pseudo Potansiyel Yaklaşımı	13
3. TEORİ VE METODLAR	15
3.1. Heusler Alaşımları	15
3.2. Quantum Espresso Programı	17
4. BULGULAR VE TARTIŞMA	19
4.1. $Mn_2Cr_{1-x}V_xSi$ ($x = 0; 0,25; 0,5; 0,75; 1$) Alaşımlarının Yapısal Özellikleri	20
4.2. $Mn_2Cr_{1-x}V_xSi$ ($x = 0; 0,25; 0,5; 0,75; 1$) Alaşımlarının Manyetik ve Elektronik Özellikleri	21
4.3. $Mn_2Cr_{1-x}V_xSi$ ($x = 0; 0,25; 0,5; 0,75; 1$) Alaşımlarının Mekanik Özellikleri	27
5. SONUÇ VE ÖNERİLER	39
6. KAYNAKLAR	41
ÖZGEÇMİŞ	46

ŞEKİL LİSTESİ

	Sayfa No
Şekil 3.1. Yarı, tam, dörtlü ve ters Heusler alaşımlarının kristal yapısı.....	16
Şekil 4.1. $Mn_2Cr_{1-x}V_xSi$ ($x = 0; 0,25; 0,5; 0,75; 1$) alaşımlarının kristal yapıları	19
Şekil 4.2. Mn_2CrSi alaşımının yüksek simetri eksenleri boyunca çizilmiş elektronik bant eğrileri, toplam ve kısmi durum yoğunlukları	23
Şekil 4.3. $Mn_2Cr_{0,75}V_{0,25}Si$ alaşımının yüksek simetri eksenleri boyunca çizilmiş elektronik bant eğrileri, toplam ve kısmi durum yoğunlukları	24
Şekil 4.4. $Mn_2Cr_{0,50}V_{0,50}Si$ alaşımının yüksek simetri eksenleri boyunca çizilmiş elektronik bant eğrileri, toplam ve kısmi durum yoğunlukları	25
Şekil 4.5. $Mn_2Cr_{0,25}V_{0,75}Si$ alaşımının yüksek simetri eksenleri boyunca çizilmiş elektronik bant eğrileri, toplam ve kısmi durum yoğunlukları	26
Şekil 4.6. Mn_2VSi alaşımının yüksek simetri eksenleri boyunca çizilmiş elektronik bant eğrileri, toplam ve kısmi durum yoğunlukları	27
Şekil 4.7. Mekanik özellikleri hesaplanan Mn_2CrSi alaşımının yön bağımlılığı; Young modülü, doğrusal sıkıştırılabilirlik, kayma modülü ve Poisson oranı	31
Şekil 4.8. Mekanik özellikleri hesaplanan $Mn_2Cr_{0,75}V_{0,25}Si$ alaşımının yön bağımlılığı; Young modülü, doğrusal sıkıştırılabilirlik, kayma modülü ve Poisson oranı	32
Şekil 4.9. Mekanik özellikleri hesaplanan $Mn_2Cr_{0,50}V_{0,50}Si$ alaşımının yön bağımlılığı; Young modülü, doğrusal sıkıştırılabilirlik, kayma modülü ve Poisson oranı ..	33
Şekil 4.10. Mekanik özellikleri hesaplanan $Mn_2Cr_{0,25}V_{0,75}Si$ alaşımının yön bağımlılığı; Young modülü, doğrusal sıkıştırılabilirlik, kayma modülü ve Poisson oranı.....	34
Şekil 4.11. Mekanik özellikleri hesaplanan Mn_2VSi alaşımının yön bağımlılığı; Young modülü, doğrusal sıkıştırılabilirlik, kayma modülü ve Poisson oranı	35
Şekil 4.12. $Mn_2Cr_{1-x}V_xSi$ ($x = 0; 0,25; 0,5; 0,75; 1$) alaşımların Debye entropisinin sıcaklığa bağlı değişimi	36
Şekil 4.13. $Mn_2Cr_{1-x}V_xSi$ ($x = 0; 0,25; 0,5; 0,75; 1$) alaşımların ısı sığasının sıcaklığa bağlı değişimi.....	37
Şekil 4.14. $Mn_2Cr_{1-x}V_xSi$ ($x = 0; 0,25; 0,5; 0,75; 1$) alaşımların titreşim enerjisinin sıcaklığa bağlı değişimi.....	38
Şekil 4.15. $Mn_2Cr_{1-x}V_xSi$ ($x = 0; 0,25; 0,5; 0,75; 1$) alaşımların titreşim serbest enerjisinin sıcaklığa bağlı değişimi	38

TABLO LİSTESİ

	Sayfa No
Tablo 4.1. $\text{Mn}_2\text{Cr}_{1-x}\text{V}_x\text{Si}$ ($x = 0; 0,25; 0,5; 0,75; 1$) İncelenen alaşımların atomik koordinatları.....	21
Tablo 4.2. $\text{Mn}_2\text{Cr}_{1-x}\text{V}_x\text{Si}$ ($x = 0; 0,25; 0,5; 0,75; 1$) alaşımlarının örgü sabitleri (a, c ; Å)..	21
Tablo 4.3. $\text{Mn}_2\text{Cr}_{1-x}\text{V}_x\text{Si}$ ($x = 0; 0,25; 0,5; 0,75; 1$) İncelenen alaşımların ikinci mertebeden elastik sabitleri C_{ij} (GPa).....	28
Tablo 4.4. $\text{Mn}_2\text{Cr}_{1-x}\text{V}_x\text{Si}$ ($x = 0; 0,25; 0,5; 0,75; 1$) İncelenen alaşımların Bulk modülü B (GPa), Kayma modülü G (GPa), B/G oranı, Young modülü E (GPa), Poisson oranı σ , Anizotropi faktörü A.....	29
Tablo 4.5. $\text{Mn}_2\text{Cr}_{1-x}\text{V}_x\text{Si}$ ($x = 0; 0,25; 0,5; 0,75; 1$) İncelenen alaşımların Young modülü E (GPa), Kayma modülü G (GPa) ve sıkışabilirlik β (TPa^{-1}) minimum ve maksimum değerleri.....	30

SİMGE VE KISALTMA LİSTESİ

Simgeler	Açıklama
N_e	: Elektronlar
N_n	: Çekirdekler
Ψ	: Dalga fonksiyonu
E	: Toplam enerji
H	: Hemilton operatörü
M_α	: Çekirdeğin kütlesi
Z_α	: Çekirdeğin yükü
R_α	: Çekirdeğin konumu
$n(r)$	: Elektron yoğunluğu
$\hat{V}_x$	: Değiş tokuş terim operatörü
V_{ext}	: Harici dış potansiyel
E_0	: Durum enerjisi
σ_{ij}	: Gerilme tensörü
ϵ_{kl}	: Deformasyon tensörü
C_{ijkl}	: Sertlik tensörü
C_{ij}	: Elastik sabiti
$Exc[n]$	: Değiş Tokuş Kolerasyon Enerjisi
Kısaltmalar	Açıklama
YFT	: Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi
QMC	: Kuantum Monte Carlo
HF	: Hartree-Fock Yaklaşımı
YYY	: Yerel Yoğunluk Yaklaşımı
GGY	: Genelleştirilmiş Gradyent Yaklaşımı
PAW	: İz Düşümsel Birleştirilmiş Dalga
fcc	: Yüzey Merkezli Kübik Örgü
MTJ	: Manyetik Tünel Bağlantıları
GMR	: Yüksek Manyeto Direnç
PBE	: Perdew-Burke-Ernzerhof
FPLO	: Tam Potansiyel Yerel Orbital
FP-LAPW	: Tam Potansiyel Doğrusallaştırılmış Genişletilmiş Düzlem Dalga
FPLO	: Tam Potansiyel Yerel Orbital
MedeA	: Materials Design Paket Programı
VASP	: The Vienna Ab-initio Simulation Package
XRD	: X-Işınları Difratometresi
GAP	: Yasak Enerji Aralığı
CASTEP	: Cambridge Sequential Total Energy Package
PW91	: Perdew-Wang 91
WC	: Wu-Cohen
SQL	: Yapılandırılmış Sorgu Dili
US-PP	: Ultra-soft vanderbit Pseudopotansiyel
GAP	: Yasak Enerji Aralığı

ÖZET

YÜKSEK LİSANS TEZİ

Mn₂Cr_{1-x}V_xSi SİSTEMİNİN YAPISAL, ELEKTRONİK, MANYETİK, ELASTİK VE TERMODİNAMİK ÖZELLİKLERİNİN AB-İNİTO YÖNTEMİYLE İNCELENMESİ

Ahmet SAYDAM

Kırşehir Ahi Evran Üniversitesi

Fen Bilimleri Enstitüsü

İleri Teknolojiler Anabilim Dalı

Danışman: Doç. Dr. Osman ÖRNEK

Bu çalışmada, Mn₂Cr_{1-x}V_xSi (x = 0; 0,25; 0,5; 0,75; 1) alaşımlarının yapısal, elektronik, manyetik elastik ve termodinamik özellikleri Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi ile geliştirilmiş eğim yaklaşımı kullanılarak hesaplandı. Bu alaşımların yapısal özellikleri kapsamında örgü sabitleri hesaplanarak incelendi. Bu malzemeler için elektronik bant eğrileri ve durum yoğunlukları hesaplandı ve değerlendirildi. Manyetik özellikleri incelenen bu alaşımların toplam manyetik momentlerinin sıfır civarında olduğu ve manyetik özellik göstermediği görüldü. Mekanik özellikler kapsamında elastik sabitler stress-strain yöntemi kullanılarak incelendi. Bu alaşımların hesaplanan elastik sabitlerinden anlaşıldığı üzere mekanik olarak kararlı oldukları görüldü. Ayrıca, Bulk modülü, Kayma modülü, B/G oranı, Young modülü, poisson oranı ve anizotropi faktörü hesaplanarak elde edildi. Bu alaşımlar için elde edilen B/G oranından Mn₂VSi alaşımının kırılğan, diğer alaşımların ise sünek bir doğaya sahip oldukları ve anizotropi faktöründen anizotropik oldukları sonucuna varıldı.

Ekim 2021, 46 Sayfa

Anahtar Kelimeler: Mekanik özellikler, Elektronik özellikler, Heusler Alaşımları

ABSTRACT

MASTER OF SCIENCE THESIS

INVESTIGATION OF THE STRUCTURAL, ELECTRONIC, MAGNETIC, ELASTIC AND THERMODYNAMIC PROPERTIES OF MN₂CR_{1-x}V_xSI SYSTEM BY AB-INITIO METHOD

Ahmet SAYDAM

Kirsehir Ahi Evran University

Graduate School of Sciences and Engineering

Advanced Technologies Department

Supervisor: Assoc. Prof. Dr. Osman ÖRNEK

In this study, the structural, electronic, magnetic, elastic and thermodynamic properties of Mn₂Cr_{1-x}V_xSi (x = 0; 0.25; 0.5; 0.75; 1) alloys were calculated using Density Functional Theory and generalized slope approach. The structural properties of these alloys were investigated by calculating the lattice constants. Electronic band curves and state densities for these materials were calculated and evaluated. It was observed that the total magnetic moments of these alloys, whose magnetic properties were examined, were around zero and did not show magnetic properties. Elastic constants within the scope of mechanical properties were investigated using the stress-strain method. These alloys were found to be mechanically stable, as understood from the calculated elastic constants. Also, the Bulk modulus, Shear modulus, B/G ratio, Young's modulus, poisson's ratio and anisotropy factor were calculated. From the B/G ratio obtained for these alloys, it was concluded that the Mn₂VSi alloy is brittle, while the other alloys have a ductile nature and are anisotropic due to the anisotropy factor.

October 2021, 46 Pages

Keywords: Mechanical properties, Electronic properties, Heusler Alloys

1. GİRİŞ

Keşfi 1903 yılına dayanan Heusler tipi alaşımlarla birlikte ferromanyetik olmayan malzemeler kullanılarak elde edilen yeni alaşımların termal ve elektriksel özellikleri araştırmacıların ilgi duyduğu bir alan olmuştur [1]. Bu alaşımların sitokiyometrik pozisyonları 2:1:1 formunda genellikle X_2YZ formülüne sahiptir. Buradaki X ve Y genellikle d elektronlu geçiş metallerini, Z ise sp elektronlu ana grup metalini temsil eden atomlardır [2]. İlk Heusler alaşımı dört tane fcc alt örgüden oluşan $L2_1$ fazındaki Fm-3m (#225) uzay grubunda elde edildi. Ardından, dört tane fcc alt örgünün bir tanesi dışarıda bırakılarak $C1_b$ fazında F-43m (#216) uzay grubunda yer alan yarı Heusler malzemelerin elde edilebileceği anlaşıldı. Bundan dolayı, $L2_1$ fazında bulunan Heusler alaşımlara tam Heusler denmektedir. Zamanla Heusler tipi alaşımlar ile ilgili çalışmalar arttıkça bu aileye ters ve dörtlü Heusler malzemelerde katıldı. “Ters Heusler malzemeler, $L2_1$ yapısındaki tam Heusler malzemelerden X atomlarından birinin, Y veya Z atomu ile yer değiştirilmesi sonucunda XA yapısında (X_2YZ) elde edilebilir ve F-43m uzay grubunda bulunur. Bir başka Heusler tipindeki dörtlü Heusler malzemeler ise $XX'YZ$ kimyasal formülüne sahip, F-43m uzay grubundadır. Ayrıca X, X' ve Y elementleri geçiş metali grubundan olup Z elementleri ise periyodik tablonun ana grup elementidir” [3]. $LiMgPdSn$ yapısı dörtlü Heusler tipi malzemeler için bir prototiptir [3,4]. Bu malzemeler, yarı metaliklik [5-7], termodinamik [8, 9], şekil hafızası etkisi [10, 11], ağır fermiyon davranışı [12-14], manyetik [15, 16] ve süper iletkenlik [17] gibi geniş özelliklere sahiptir. Heusler tipi alaşımlar veya bileşikler, çeşitli ve kapsamlı özelliklerinden dolayı araştırmacılar tarafından oldukça fazla ilgi görmektedir. Fakat, bu tür malzemeleri üretmek ve tüm özelliklerini deneysel olarak incelemek bir hayli zor ve masraflıdır. Bundan dolayı, hızlı ve güvenilir bir yöntem ve yaklaşımla bu tür malzemeleri iyi bir şekilde incelemek gerekmektedir. Bu gibi durumlarda Ab-initio hesaplamaları araştırmacılar tarafından oldukça fazla tercih edilen doğruluğu kanıtlanmış hesaplamalı bir yöntemi olarak karşımıza çıkmaktadır. Bu yöntem, herhangi bir deneysel parametreye ihtiyaç duymadan, zorluk ve maliyet içermeyen bir malzemenin taban durum özellikleri olan yapısal, elektronik, manyetik, mekanik, titreşim ve termodinamik özellikleri gibi konular hakkında detaylı bilgiler sağlar.

Heusler tipi malzemeler genellikle yüksek spin polarizasyona sahip durumundadır. Spinlerin yönelimlerinden bir tanesi metalik özellik gösterirken diğeri yarıiletken veya yalıtkan özellik göstermektedir. Bundan dolayı manyetik özellik sergileyen yarı metalik malzemeler sınıfı

içerinde yer almaktadırlar. 1983 yılında NiMnSb yarı Heusler bileşiği ile yaptıkları çalışmada Groot ve arkadaşları [18] ilk defa yarı metal kavramını kullandı. Yarı metalik davranış gözlemlenen malzemelerden bazıları; “ferromanyetik metal oksitler” [19, 20], “manyetik yarıiletkenler” [21-23], “Heusler tipi malzemeler” [24-28], “zinc-blend yapıdaki (ZnS) kalkojenler ve ikili geçiş metalleri” [29]. Yüksek Curie sıcaklıklarından ve Zinc-blend yapısıyla olan yapısal benzerliklerinden dolayı yarı metalik Heusler tipi malzeme özellikleri uygulamalarda etkindir. Bu tür Heusler tipi malzemeler yarı metalik manyetler sınıfında yer almaktadır. “Manyetik tünel bağlantıları (MTJ’ler)” [30-33], “yüksek manyeto dirençli valfler (GMR’ler)” [34-37], “yarı iletkenlere spin enjeksiyonu” [38] gibi alanlarda yarı-metalik Heusler tipi malzemelerin kullanımı yoğun bir şekilde tercih edilmektedir [39]. Özellikle yarı metalik Heusler tipi malzemelerin spintronik cihaz uygulamaları ilginç özellikleri öne çıkmaktadır.

Luo ve ark. [40] 2008 yılında Mn_2CrSi alaşımının yapısal, elektronik ve manyetik özelliklerini FLAPW yöntemi ile incelemişlerdir. Benzer bir çalışmada Mn_2CrSi alaşımının 2008 yılında Fujii ve ark. [41] tarafından yapısal, elektronik ve manyetik özellikleri FLAPW yöntemi ile incelenmiştir. Mn_2VSi antiferromanyetik ince filminin Wu ve ark. [42] tarafından 2017 yılında X-ışınları difraksiyonu (XRD) kullanılarak deneysel olarak yapısal özellikleri incelenmiştir. Tam potansiyel elektronik yapı metodu (FPLO) ile 2006 yılında Mn_2VSi alaşımının Özdoğan ve ark. [43] tarafından yarı metalik ferrimanyet ve yapısal özellikleri incelenmiştir. Benzer bir çalışmada Galanakis ve ark. [44] tarafından 2007 yılında Mn_2CrSi ve Mn_2VSi alaşımlarının FPLO metodu ile antiferromanyetik yarı metalik özellikler çalışılmıştır. 2021 yılında Li ve ark. [45] tarafından CASTEP paket programı ile yapılan çalışmada Mn_2CrSi ve Mn_2VSi alaşımlarının B/G oranı sırasıyla 5,78 ve 1,69 olarak, poisson oranları ise sırasıyla 0,30 ve 0,25 olarak rapor edilmiştir. 2016 yılında ise Kirklin ve ark. [46] Mn_2VSi alaşımının formasyon enerjisini VASP paket programı ile GGY kodları ile hesaplayarak -0,516 eV olarak elde etmişlerdir.

Bu çalışmada, literatürde sınırlı sayıda çalışma bulunan Mn_2CrSi tam Heusler alaşımına çeşitli oranlarda V atomu katkılanıp $Mn_2Cr_{1-x}V_xSi$ ($x = 0; 0,25; 0,5; 0,75; 1$) alaşımları elde edildi. Elde edilen bu alaşımların yapısal, elektronik, manyetik, mekanik, anizotropi ve termodinamik özellikleri quantum-espresso paket programında GGY-PBE pseudopotansiyelleri kullanılarak Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi (YFT) ile yapıldı. $x = 0,25; 0,5; 0,75$ oranları seçilerek oluşturulan alaşımlar ile ilgili literatür taraması sonucunda her hangi bir veriye rastlanılmamıştır. Dolayısıyla bu alaşımların yapısal, elektronik, manyetik,

mekanik, anizotropi ve termodinamik özellikleri bu çalışma ile literatüre kazandırılmış olunacaktır.



2. KURAMSAL TEMELLER

2.1. Giriş

Yoğun madde ve moleküllerin özellikleri, elektronlar ve çekirdekler tarafından belirlenmektedir. Elektronların incelenmesi, maddenin elektronik, manyetik, optik ve kütle özellikleri hakkında önemli bilgiler sağlamaktadır. Modern fizik, birçok elektron ve çekirdeğin etkileşimli sistemini doğru bir şekilde göstermek ve hesaplama yöntemlerini geliştirmek için bir zorlukla karşı karşıyadır. Ayrıca, elektronik yapıların hesaplanması, temel duruma ve uyarılmış durum özelliklerine bölünebilir [47]. Elastik özellikler gibi temel durum özellikleri için, yük yoğunluğu, denge hacimleri ve titreşim frekansları, maddenin diğer ilginç özellikleri arasında elde edilebilir. Öte yandan, elektronik uyarılmış durumlar, optik özellikler vb. hakkında faydalı bilgiler sağlamaktadır. Geçmişte çeşitli elektronik yapı yöntemleri geliştirilmiştir. Katı sistemler için en çok kullanılanlar, Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi (YFT) ve Kuantum Monte Carlo'dur (QMC) [48-50]. YFT, yeni materyalleri tahmin etmek, deneysel keşifleri onaylamak veya deneysel çalışmada gözlemlenen yeni olayların açıklamasını sağlamak için çok güvenilir bir teoridir.

2.2. Çok Cisim Problemi

Schrödinger Denklemi atom, molekül ve katıların temel fiziksel özelliklerini çalışmak için kullanılır. Çekirdek ve elektronlardan oluşan bir sistem için zamandan bağımsız Schrödinger Denklemi

$$H\Psi = E\Psi \quad (2.0)$$

şeklinde verilir. Bu denklemde Ψ dalga fonksiyonu, E sistemin toplam enerjisi, H ise Hamiltonyen operatörüdür. Bir katıdaki elektronların ve iyonların davranışları göz önünde bulundurularak N_e tane elektron ve N_n tane çekirdekten oluşan bir sistemin Hamiltoniyeni

$$H = -\sum_{i=1}^{N_e} \frac{1}{2} \nabla_i^2 - \sum_{\alpha=1}^{N_n} \frac{1}{2M_\alpha} \nabla_\alpha^2 - \sum_{i=1}^{N_e} \sum_{\alpha=1}^{N_n} \frac{Z_\alpha}{|r_i - R_\alpha|} + \sum_{i=1}^{N_e} \sum_{j>1}^{N_e} \frac{1}{|r_i - r_j|} + \sum_{\alpha=1}^{N_n} \sum_{\beta>\alpha}^{N_n} \frac{Z_\alpha Z_\beta}{|R_\alpha - R_\beta|} \quad (2.1)$$

Şeklinde ifade edilir. Burada M_α kütle ve Z_α çekirdeklerin atom numarasını ifade ederken r_i ve R_α (R_β) ise elektron ve çekirdeğin koordinatlarını simgeler. Denklemi 5 terim olarak ele alırsak sırasıyla birinci ve ikinci terimler; elektron ve çekirdeğin kinetik enerjileri, üçüncü

terim; çekirdek ve elektronlar arasındaki Coulomb çekim alanı, dördüncü ve beşinci terimler yine sırasıyla; elektronlar arasındaki ve çekirdekler arasındaki Coulomb itme etkileşimidir. Denklemin karmaşık ve zor olmasından dolayı çözüm kolaylığı sağlamak amacıyla bazı yaklaşımlar geliştirilmiştir. Bu yaklaşımlardan en çok tercih edileni katı hal fiziği ve atom ve molekül fiziğinde çok kullanılan Born-Oppenheimer yaklaşımıdır. Bu yaklaşımda elektron ve çekirdeklerin hareketleri ayrı ayrı incelenir. Çekirdek durgun kabul edilir ve çekirdeğin kinetik enerjisi sıfır kabul edilerek hesaplanır.

2.3. Hartree-Fock Yaklaşımı (HF)

Hesaplamalı fizik ve kimyada, Hartree-Fock (HF) yöntemi, durağan bir durumda kuantum çok cisim sisteminin dalga fonksiyonunun ve enerjisinin belirlenmesi için bir yaklaşım yöntemidir. Hartree-Fock yöntemi genellikle, sistemin tam N-cismi dalga fonksiyonunun tek bir Slater determinantı (parçacıkların fermiyon olması durumunda) veya tek bir kalıcı (bozonlar durumunda) tarafından yaklaşık olarak tahmin edilebileceğini varsayar. Varyasyon yöntemini çağırarak, N spin orbitalleri için bir dizi N-bağlı denklem türetilir. Bu denklemlerin bir çözümü sistemin Hartree-Fock dalga fonksiyonunu ve enerjisini verir.

Sabit nokta yineleme algoritması her zaman yakınsamasa da, denklemler yinelemeli bir yöntemle neredeyse evrensel olarak çözülür.[16] Bazı elektronların eşleşmediği açık kabuk sistemleri, kısıtlı açık kabuk veya sınırsız Hartree-Fock yöntemleri ile ele alınabilir.

Moleküler Hamiltonian'ın elektron-elektron itme terimi iki farklı elektronun koordinatlarını içerdiğinden, onu yaklaşık olarak yeniden formüle etmek gerekir. Bu yaklaşım altında nükleer-nükleer itme terimi dışında tam Hamiltonyen'in tüm terimleri, kapalı kabuklu atomlar veya moleküller için aşağıda ana hatları verilen tek elektronlu operatörlerin toplamı olarak yeniden ifade edilir. Her operatör sembolünden sonraki "(1)", operatörün doğası gereği 1 elektronlu olduğunu gösterir

$$\begin{aligned}
 \langle \varphi | \hat{H} | \varphi \rangle = & \sum_{i,\sigma} \int dr \psi_i^{\sigma*}(r) \left[-\frac{1}{2} \nabla^2 + V_{ext}(r) \right] \psi_i^{\sigma}(r) + E_{11} \\
 & + \frac{1}{2} \sum_{i,j,\sigma_i\sigma_j} \int dr dr' \psi_i^{\sigma*}(r) \psi_j^{\sigma*}(r') \frac{1}{|r-r'|} \psi_i^{\sigma_i}(r) \psi_j^{\sigma_j}(r') \\
 & - \frac{1}{2} \sum_{i,j,\sigma} \int dr dr' \psi_i^{\sigma*}(r) \psi_j^{\sigma*}(r') \frac{1}{|r-r'|} \psi_i^{\sigma}(r) \psi_j^{\sigma}(r')
 \end{aligned} \tag{2.2}$$

Φ_3 orbitalleri tarafından üretilen

$$\left[-\frac{1}{2}\nabla^2 + \sum_{i,j,\sigma} \int dr' \psi_i^{\sigma_{j*}}(r') \psi_j^{\sigma_{j*}}(r') \frac{1}{|r-r'|} \right] \psi_i^{\sigma}(r) - \sum_j \int dr' \psi_j^{\sigma*}(r') \psi_i^{\sigma}(r') \frac{1}{|r-r'|} \psi_j^{\sigma}(r) = E_i^{\sigma} \psi_i^{\sigma}(r) \quad (2.3)$$

tek elektronlu Fock operatörü ve tek elektron çekirdekli Hamiltoniyen'dir.

$$\hat{H}_{eff}^i \psi_i^{\sigma}(r) = \left[-\frac{h^2}{2m_e} \nabla^2 + \hat{V}_{eff}^{i,\sigma}(r) \right] \psi_i^{\sigma}(r) = E_i^{\sigma} \psi_i^{\sigma}(r) \quad (2.4)$$

aynı zamanda, j-th orbitalindeki iki elektronun her birine bağlı elektron-elektron itme enerjisini tanımlayan Coulomb operatörüdür.

$$\hat{V}_{eff}^{i,\sigma} \psi_i^{\sigma}(r) = V_{ext}(r) + V_{Hartree}(r) + \hat{V}_x^{i,\sigma}(r) \quad (2.5)$$

son olarak, toplam N-elektron dalga fonksiyonunun antisimetrisinden dolayı elektron değişim enerjisini tanımlayan değişim operatörüdür. Bu "enerji değişimi" operatörü K, Slater determinantının basit bir eseridir. Hartree–Fock tek elektronlu dalga fonksiyonlarını bulmak artık özfonksiyon denklemini çözmeye eşdeğerdir.

$$\hat{V}_x^{i,\sigma}(r) = - \sum_j \int dr' \psi_j^{\sigma*}(r') \psi_i^{\sigma}(r') \frac{1}{|r-r'|} \frac{\psi_j^{\sigma}(r)}{\psi_i^{\sigma}(r)} \quad (2.6)$$

Hartree-Fock yöntemi tipik uygulamasını atomlar, moleküller, nanoyapılar[18] ve katılar için Schrödinger denkleminin çözümünde bulur, ancak nükleer fizikte de yaygın bir kullanım bulmuştur.

2.4. Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi (YFT)

Yoğunluk-fonksiyonel teori (YFT), fizik, kimya ve malzeme biliminde çok yapıli sistemlerin, özellikle atomların, moleküllerin elektronik yapısını araştırmak için kullanılan bir hesaplamalı kuantum mekanik modelleme yöntemidir. Bu teoriyi kullanarak, çok elektronlu bir sistemin özellikleri, fonksiyoneller, yani başka bir fonksiyonun fonksiyonları

kullanılarak belirlenebilir. Yoğunluk fonksiyonel teorisi durumunda, bunlar uzaysal olarak bağımlı elektron yoğunluğunun fonksiyonelleridir. Yoğunluk fonksiyonel teorisi yoğun madde fiziği, hesaplamalı fizik ve hesaplamalı kimyada mevcut olan en popüler ve çok yönlü yöntemler arasındadır.

Yoğunluk fonksiyonel teorisi, 1970'lerden beri katı hal fiziğindeki hesaplamalar için çok popüler olmuştur. Bununla birlikte, Yoğunluk fonksiyonel teorisi, teoride değişim ve korelasyon etkileşimlerini daha iyi modellemek için kullanılan yaklaşımların 1990'lara kadar kuantum kimyasındaki hesaplamalar için yeterince doğru kabul edilmedi. Hesaplama maliyetleri, yalnızca Hartree-Fock teorisini ve elektron korelasyonunu içeren benzerlerini değiş tokuş etmek gibi geleneksel yöntemlerle karşılaştırıldığında nispeten düşüktür. Yoğunluk fonksiyonel teorisi, kristallerdeki belirli elektrik alan gradyanlarının kökenini anlamak için Mössbauer spektroskopisi veya pertürbed açısal korelasyon gibi nükleer spektroskopi yöntemleri kullanıldığından beri önemli bir hale geldi.

Son gelişmelere rağmen, yoğunluk fonksiyonel teorisini uygun şekilde tanımlamak için hala zorluklar var: moleküller arası etkileşimler (kimyasal reaksiyonları anlamak için kritik öneme sahip), özellikle van der Waals kuvvetleri (dağılım); yük transfer uyarıları; geçiş durumları, küresel potansiyel enerji yüzeyleri, dopant etkileşimleri ve bazı güçlü ilişkili sistemler; ve yarı iletkenlerde bant aralığı ve ferromanyetizma hesaplamalarında [51]. Dispersiyonun eksik işlenmesi, dispersiyonun baskın olduğu sistemlerin (örneğin etkileşimli soy gaz atomları) işleyişinde yoğunluk fonksiyonel teorisinin doğruluğunu (en azından tek başına ve düzeltilmemiş olduğunda) olumsuz etkileyebilir.[52] Veya dağılımın diğer etkilerle (örneğin biyomoleküllerde) önemli ölçüde rekabet ettiği durumlarda doğruluğunu olumsuz etkileyebilir[53]. Bu sorunun üstesinden gelmek için tasarlanan yeni YFT yöntemlerinin, işlevsel değişikliklerle veya ek terimlerin dahil edilmesiyle geliştirilmesi güncel bir araştırma konusudur[54, 55]. Klasik yoğunluk fonksiyonel teorisi, düzgün olmayan klasik akışkanların özelliklerini hesaplamak için benzer bir yöntem kullanır.

Bu değişikliklerin veya ek terimlerin dahil edilmesinin mevcut popülaritesine rağmen, tam işlevsellik arayışından uzaklaştıkları bildirilmektedir [56]. Ayrıca, ayarlanabilir parametrelerle elde edilen yoğunluk fonksiyonel teorisi potansiyelleri, yük yoğunluğuna göre değişim korelasyon enerjisinin fonksiyonel türevleri olmadıkları göz önüne alındığında, artık gerçek yoğunluk fonksiyonel teorisi potansiyelleri değildir [57]. Sonuç olarak,

yoğunluk fonksiyonel teorisinin ikinci teoreminin bu koşullarda geçerli olup olmadığı açık değildir [58].

2.4.1. Hohenberg-Kohn Teoremi

Hohenberg-Kohn teoremleri, harici bir potansiyelin etkisi altında hareket eden elektronlardan oluşan herhangi bir sistemle ilgilidir.

Teorem 1. Dış potansiyel elektron yoğunluğunun benzersiz bir işlevidir.

iki elektron sistemi varsa, biri bir potansiyele hapsedilmişse $v_1(r)$ ve diğeri de $v_2(r)$, aynı temel durum yoğunluğuna sahip $n(r)$ sonra $v_1(r)-v_2(r)$ mutlaka bir sabittir.

Sonuç.1 Taban durum yoğunluğu, potansiyeli ve dolayısıyla çok cisimli dalga fonksiyonu da dahil olmak üzere sistemin tüm özelliklerini benzersiz bir şekilde belirler. Özellikle, $F[n]=T[n]+U[n]$ olarak tanımlanan HK fonksiyoneli yoğunluğun evrensel bir işlevidir (açıkça dış potansiyele bağlı değildir).

Sonuç.2 İşgal edilen enerjilerin toplamının, temel durum yük yoğunluğunun benzersiz bir işlevi olan Hamiltonian'ın enerji içeriğini sağladığı gerçeği ışığında, Hamiltonian'ın spektrumu aynı zamanda temel durum yük yoğunluğunun benzersiz bir işlevidir [59].

Teorem.2 Sistemin temel durum enerjisini ileten fonksiyonel, ancak ve ancak giriş yoğunluğunun gerçek temel durum yoğunluğu olması durumunda en düşük enerjiyi verir. Başka bir deyişle, yük yoğunluğu temel durumunki olduğunda, Hamiltonian'ın enerji içeriği mutlak minimumuna, yani temel duruma ulaşır.

Herhangi bir pozitif tamsayı N ve potansiyel $v(r)$ için bir yoğunluk fonksiyoneli $F[n]$ mevcuttur, öyle ki;

$$E[n] = F[n] + \int n(r)V_{ext}(r)dr \quad (2.7)$$

Minimum değerine $v(r)$ potansiyelindeki N elektronun temel durum yoğunluğunda ulaşır. $E(u,N)[n]$ 'nin minimum değeri bu sistemin taban durum enerjisidir. N -elektron fonksiyonel F 'nin tanımlanması

$$F[n(r)] = \min_{|\Psi \rightarrow n_0|} \langle \Psi | \hat{F} | \Psi \rangle \quad (2.8)$$

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

$$\hat{F} = \sum_i -\frac{1}{2} \nabla_i^2 + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{1}{|r_i - r_j|} \quad (2.9)$$

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

$$E_0 = \langle \Psi_0 | \hat{F} + \hat{V}_{ext} | \Psi_0 \rangle \quad (2.10)$$

Tanımdan eşitlik 2.12,

$$F[n_0] = \min_{|\Psi \rightarrow n_0|} \langle \Psi | \hat{F} | \Psi \rangle = \langle \Psi_{min}^0 | \hat{F} | \Psi_{min}^0 \rangle \quad (2.11)$$

Minimal prensibe göre;

$$F[n_0] + \int n_0(r) d^3r = \langle \Psi_{min}^0 | \hat{F} + \hat{V}_{ext} | \Psi_{min}^0 \rangle \geq E_0 \quad (2.12)$$

Fakat,

$$F[n_0] = \langle \Psi_{min}^0 | \hat{F} | \Psi_{min}^0 \rangle \leq \langle \Psi_0 | \hat{F} | \Psi_0 \rangle \quad (2.13)$$

Olduğundan şu sonuca ulaşıyoruz;

$$F[n_0] + \int n_0(r) d^3r = \langle \Psi_{min}^0 | \hat{F} + \hat{V}_{ext} | \Psi_{min}^0 \rangle \leq E_0 \quad (2.14)$$

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

$$E[n_0] = F[n_0] + \int n_0(r) d^3r = E_0 \quad (2.15)$$

Böylece ispatı tamamlarız.

2.4.2. Kohn-Sham Denklemleri

Fizik ve kuantum kimyasında, özellikle yoğunluk fonksiyonel teorisinde, Kohn-Sham denklemi, etkileşimsiz parçacıkların hayali bir sisteminin tek elektronlu Schrödinger. Herhangi bir etkileşimli parçacık sistemi ile aynı yoğunluğu üretir[60]. Kohn-Sham

denklemini, etkileşmeyen parçacıkların hareket ettiği, tipik olarak $v_s(r)$ veya $v_{eff}(r)$ olarak gösterilen ve Kohn-Sham potansiyeli olarak adlandırılan hayali bir dış potansiyel ile tanımlanır. Kohn-Sham sistemindeki parçacıklar etkileşmeyen fermiyonlar olduğundan, Kohn-Sham dalga fonksiyonu, en düşük enerjili çözümler olan bir dizi orbitalden oluşturulan tek bir kaplama determinantıdır.

$$E[n(r)] = T_s[n(r)] + \frac{1}{2} \int \int \frac{n(r)n(r')}{|r-r'|} dr dr' + E_{xc}[n(r)] + \int n(r) V_{ext}(r) dr \quad (2.16)$$

Bu denklem temsili Kohn-Sham denklemlerindendir. Burada ϵ_i , karşılık gelen Kohn-Sham orbital ϕ_i 'nin yörünge enerjisidir ve bir N-parçacık sistemi için yoğunluk

$$T_s[n(r)] = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \int \Psi_i^*(r) \nabla^2 \Psi_i(r) dr \quad (2.17)$$

Eşitlik 2.16 ayrıca $E_{xc}[n]$ değiş tokuş kolerasyon enerjisini tanımlamaktadır. Elektron yoğunluğu üzerine bir normalizasyon kısıtı uygulayarak, $\int n(r) dr = N$ aşağıdaki varyasyon prensibini elde ederiz.

$$\frac{\delta}{\delta n(r)} \left[E[n(r)] - \mu \int n(r) dr \right] = 0 \quad \Rightarrow \quad \frac{\delta E[n(r)]}{\delta n(r)} = \mu \quad (2.18)$$

Eşitlik 2.19, $V_{eff}(r)$ cinsinden yeniden yazılabilir.

Buna göre,

$$\frac{\delta T_s[n(r)]}{\delta n(r)} + V_{eff}(r) = \mu \quad (2.19)$$

olduğundan,

$$V_{eff}(r) = V_{ext}(r) + \int \frac{n(r')}{|r-r'|} dr' + V_{xc}(r) \quad (2.20)$$

böylece

$$V_{xc}(r) = \frac{\delta E_{xc}[n(r)]}{\delta n(r)} \quad (2.21)$$

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

$$n_0(r) = \sum_{i=1}^N |\Psi_i(r)|^2 \quad (2.22)$$

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

$$\left(\frac{1}{2} \nabla_i^2 + V_{eff}(r) - E_i \right) \Psi_i(r) = 0 \quad (2.23)$$

ve bu eşitlik grubunun kendiliğinden tutarlı bir şekilde çözülmesi gerekmektedir.

$$V_{eff}(r) = V_{eff}(n_0(r)) \quad (2.24)$$

Kohn-Sham denklemleri, kavramı 1965'te San Diego'daki California Üniversitesi'nde tanıtan Walter Kohn ve Lu Jeu Sham'ın adını almıştır[61].

Kohn-Sham yoğunluk fonksiyonel teorisinde, bir sistemin toplam enerjisi, yük yoğunluğunun bir fonksiyonu olarak şu şekilde ifade edilir: değişim-korelasyon potansiyelidir. Bu terim ve buna karşılık gelen enerji ifadesi, yoğunluk fonksiyonel teorisine Kohn-Sham yaklaşımındaki tek bilinmeyenlerdir. Yörüngeleri değiştirmeyen bir yaklaşım Harris fonksiyonel teorisidir.

2.5. Göreceli Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi (ab-initio yöntemi)

Aynı teoremler göreceli elektronlar durumunda da kanıtlanabilir, böylece göreceli durum için yoğunluk fonksiyonel teorisinin genelleştirilmesi sağlanır. Relativistik olmayan teorisinin aksine, relativistik durumda relativistik yoğunluk fonksiyoneli için birkaç kesin ve açık formül türetmek mümkündür.

Göreceli Dirac denklemine uyan hidrojen benzeri bir iyondaki bir elektronu ele alalım. Coulomb potansiyelinde hareket eden göreceli bir elektron için Hamiltonian H aşağıdaki biçimde seçilebilir (atomik birimler kullanılır):

$$H = c (\alpha \cdot p) + eV + mc^2 \beta, \quad (2.25)$$

burada $V = -eZ/r$ nokta benzeri bir çekirdeğin Coulomb potansiyelidir, p elektronun momentum operatörüdür ve e , m ve c sırasıyla temel yük, elektron kütlesi ve ışık hızıdır ve son olarak α ve β Dirac 2×2 matris kümesidir:

$$\alpha = \begin{pmatrix} 0 & \rho \\ \rho & 0 \end{pmatrix},$$

$$\alpha = \begin{pmatrix} 0 & \rho \\ \rho & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.26)$$

Özfonksiyonları ve karşılık gelen enerjileri bulmak için özfonksiyon denklemi çözülür.

$$H\Psi = E\Psi \quad (2.27)$$

burada $\Psi = (\Psi(1), \Psi(2), \Psi(3), \Psi(4))^T$ dört bileşenli bir dalga fonksiyonudur ve E ilişkili özenerjidir. Brack'te[9] (1983) virial teoremin özfonksiyon denkleminde uygulanmasının herhangi bir bağlı durumun özenerjisi için aşağıdaki formülü ürettiği gösterilmiştir:

$$E = mc^2 \langle \Psi | \beta | \Psi \rangle = mc^2 \int |\Psi(1)|^2 + |\Psi(2)|^2 - |\Psi(3)|^2 - |\Psi(4)|^2 d\tau, \quad (2.28)$$

ve benzer şekilde, Hamiltonian verimlerinin karesi ile özfonksiyon denkleminde uygulanan virial teorem[62]

$$E^2 = m^2 c^4 + emc^2 (\Psi | IV \beta I \Psi). \quad (2.29)$$

Yukarıdaki formüllerin her ikisinin de yoğunluk fonksiyonellerini temsil ettiğini görmek kolaydır. Önceki formül, çok elektronlu durum için kolayca genelleştirilebilir.

Makul ölçüde geniş bir fonksiyon setine varyasyon için izin verilirse, yukarıda yazılan her iki fonksiyonun da uç noktalara sahip olmadığı gözlemlenebilir. Bununla birlikte, bunlardan istenilen maksimum özelliklere sahip bir yoğunluk fonksiyoneli tasarlamak mümkündür. Bunu şu şekilde yapalım:

$$F[n] = \frac{1}{mc^2} \{ mC^2 \int n dr - \sqrt{m^2 C^4 + emC^2 \int V_n dT} \}^2 + \delta_{n_1} \cdot \int_{\epsilon} mc^2 \int n dT \quad (2.30)$$

burada ikinci terimin Kronecker delta sembolündeki n , fonksiyonel F 'nin ilk terimi ile temsil edilen fonksiyonel için herhangi bir maksimum değeri belirtir. İkinci terim, fonksiyonel F 'nin ilk terimi için ekstrem olmayan herhangi bir fonksiyon için sıfırdır. Daha fazla ilerlemek için bu fonksiyonel için Lagrange denklemini bulmak istiyoruz. Bunu

yapmak için, bağımsız değişken işlevi değiştirildiğinde, işlevsel artışın doğrusal bir bölümünü oluşturmamız:

$$F[n_e + \delta n] = \frac{1}{mc^2} \left(mc^2 \int (n_e + \delta n) d\tau - \sqrt{m^2 c^4 + emc^2 \int V(n_e + \delta n) d\tau} \right)^2. \quad (2.31)$$

Yukarıda yazılan denklemi kullanarak, fonksiyonel türev için aşağıdaki formülü bulmak kolaydır:

$$\frac{\delta F[n_e]}{\delta n} = 2A - \frac{2B^2 + AeV(\tau_0)}{B} + eV(\tau_0), \quad (2.32)$$

burada $A = mc^2 \int n_e d\tau$ ve $B = \sqrt{m^2 c^4 + emc^2 \int V n_e d\tau}$ ve $V(\tau_0)$, sonsuz küçük olduğu varsayılan varyasyon fonksiyonu δn 'nin desteğiyle belirtilen bir noktadaki potansiyelin bir değeridir. Lagrange denklemine doğru ilerlemek için, fonksiyonel türevi sıfıra eşitleriz ve basit cebirsel işlemlerden sonra aşağıdaki denkleme ulaşırız:

$$2B(A - B) = eV(\tau_0)(A - B) \quad (2.33)$$

Görünüşe göre, bu denklem sadece $A = B$ ise çözüme sahip olabilir. Bu son koşul bize fonksiyonel F için Lagrange denklemini sağlar ve bu denklem sonunda aşağıdaki biçimde yazılabilir:

$$(mc^2 \int n d\tau)^2 = m^2 c^4 + emc^2 \int V n d\tau \quad (2.34)$$

Bu denklemin çözümleri, fonksiyonel F için uç değerleri temsil eder. Tüm gerçek yoğunlukların, yani söz konusu sistemin bağlı durumlarına karşılık gelen yoğunlukların, bu özel durumda Kohn-Sham denklemi olarak adlandırılabilir, yukarıda yazılan denklemin çözümleri olduğunu görmek kolaydır. Fonksiyonel F 'nin tanımına baktığımızda, fonksiyonelin sistemin uygun yoğunluk için enerji ürettiğini açıkça görürüz, çünkü birinci terim bu yoğunluk için sıfırdır ve ikincisi enerji değerini verir.

2.6. Pseudo Potansiyel Yaklaşımı

Elektronlar iki gruba ayrılırsa, değerlik elektronları ve iç çekirdek elektronları adı altında çok elektronlu Schrödinger denklemi çok basitleştirilebilir. İç kabuklardaki elektronlar güçlü bir şekilde bağlıdır ve atomların kimyasal bağlanmasında önemli bir rol oynamazlar; ayrıca çekirdeği kısmen süzerler, böylece çekirdekle birlikte neredeyse hareketsiz bir çekirdek

oluştururlar. Bağlanma özellikleri, özellikle metallerde ve yarı iletkenlerde, neredeyse tamamen değerlik elektronlarından kaynaklanmaktadır. Bu ayırma, çok sayıda durumda iç elektronların göz ardı edilebileceğini ve böylece atomun değerlik elektronları ile etkileşime giren iyonik bir çekirdeğe indirgenebileceğini düşündürmektedir. Değerlik elektronları tarafından hissedilen potansiyele yaklaşan bir pseudo potansiyel olan etkili bir etkileşimin kullanımı ilk olarak 1934'te Fermi ve 1935'te Hellmann tarafından önerildi. Pseudo potansiyellerin hesaplamalara getirdiği basitleştirmelere rağmen, 1950'lerin sonlarına kadar unutulmuş olarak kaldılar.

Daha gerçekçi Pseudo potansiyellere doğru çok önemli bir adım, Pseudo potansiyelin değerlik yük yoğunluğunu doğru bir şekilde tanımlayacak şekilde ayarlanması gerektiğini öne süren Topp ve Hopfield ve daha yakın zamanda Cronin tarafından verildi [63]. Bu fikre dayanarak, belirli bir referans elektronik konfigürasyonu için serbest atomlu Schrödinger denklemini tersine çevirerek ve belirli bir rl mesafesinin ötesinde pseudo dalga fonksiyonlarının gerçek değerlik dalga fonksiyonları ile çakışmaya zorlayarak modern sahte potansiyeller elde edilir. Sahte dalga fonksiyonları da gerçek değerlik dalga fonksiyonları ile aynı norma sahip olmaya zorlanır ve şu şekilde yazılabilir:

$$R_l^{PP}(r) = R_{nl}^{AE}(r),$$

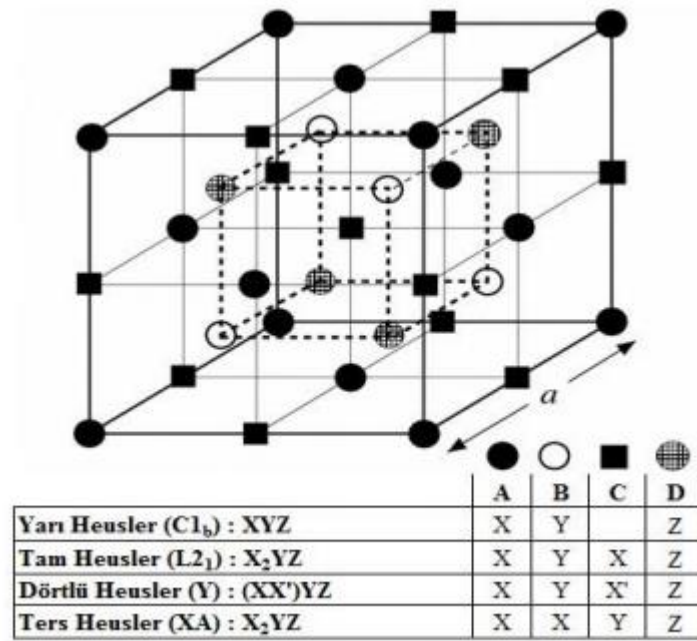
$$\int_0^{r_l} |R_l^{PP}(r)|^2 r^2 dr = \int_0^{r_l} |R_{nl}^{AE}(r)|^2 r^2 dr, \quad (2.35)$$

burada $R_l(r)$, l açısall momentumlu dalga fonksiyonunun radyal kısmıdır ve PP ve AE sırasıyla yalancı dalga fonksiyonunu ve gerçek dalga fonksiyonunu gösterir. Gerçek dalga fonksiyonlarındaki indeks n , değerlik seviyesini gösterir. Gerçek ve yalancı dalga fonksiyonlarının eşit olduğu rl mesafesi de l 'ye bağlıdır.

3. TEORİ VE METODLAR

3.1. Heusler Alaşımları

Yalın halde manyetik özellik göstermeyen metallerden oluşmakla birlikte, bir bütün halinde manyetik özellik taşıyan alaşımların ortak adıdır. Heusler tipi alaşımlar ferromanyetik ve ilginç manyetik özellikler göstermelerinden dolayı spinelektronik ve magneto-elektronik uygulamalar için ideal malzeme grubudur. Heusler alaşımları kristal yapı olarak yarı, tam, ters ve dörtlü Heusler olmak üzere 4'e ayrılırlar. Stokiyometrik kompozisyonları yarı Heusler alaşımları için XYZ, tam ve ters Heusler alaşımları için X_2YZ , dörtlü Heusler alaşımları için $XX'YZ$ yapısındadır. Bununla birlikte genellikle X, X' ve Y elementleri geçiş metali grubundan olup Z elementleri ise periyodik tablonun ana grup elementidir. Yarı, tam ve ters Heusler alaşımları sırasıyla $C1_b$ (#216), $L2_1$ (#225) ve XA (#216) kristal yapılarında ve dörtlü Heusler alaşımı ise Y (#216) kristal yapısında karakterize olurlar. X alt örgüsü ($3/4$, $3/4$, $3/4$) ve ($1/4$, $1/4$, $1/4$), Y alt örgüsü ($1/2$, $1/2$, $1/2$) ve Z alt örgüsü ise (0, 0, 0) pozisyonlarında olacak şekilde tam Heusler alaşımı 4 tane yüzey merkezli kübik alt örgünün iç içe geçmesiyle oluşur. Yarı Heusler alaşımı için ($3/4$, $3/4$, $3/4$) pozisyonları boştur. 3 tane yüzey merkezli kübik alt örgünün iç içe geçmesiyle oluşur. Ters ve dörtlü Heusler alaşımları için ise yarı Heusler alaşımlarındaki boş olan pozisyonlara X' atomu yerleşir. Şekil 3.1'de yarı, tam, ters ve dörtlü Heusler tipi yapılar görülmektedir [64].



Şekil 3.1. Yarı, tam, dörtlü ve ters Heusler alaşımlarının kristal yapısı [65].

Dönme hareketiyle elektronun negatif yüklü parçacığı belirli bir manyetik momente sahiptir. Dönme hareketinden dolayı oluşmuş olan bu manyetik moment dış manyetik alandan etkilenir. Elektronların orbitallere dağılımı malzemelerin manyetik özelliğini belirlemede etkilidir. Çiftlenmiş elektronların spin manyetik momentleri zıt yönde olur ve birbirinin etkisini yok eder. Çünkü Pauli dışlama ilkesi gereğince bir orbitalde aynı kuantum durumunda iki elektron bulunamaz bundan dolayı iki elektron karşıt yönelimli olarak bulunur. Al, Si gibi orbitallerinde çiftlenmemiş elektron bulunan malzemeler paramanyetik özellik gösterir ve bu gibi paramanyetik malzemelerde dışarıdan uygulanan bir alanla aynı yöne doğru hafif bir yönlenme oluşur. Cu, Ag, Au gibi elementlerin orbitallerinde tüm elektronları çiftlenmiş olan malzemeler diyamanyetik özellik gösterir ve bu gibi diyamanyetik malzemelerde dışarıdan uygulanan bir alanla hafif ters yönde bir yönlenme oluşur. Fe, Co, Ni gibi paramanyetik atomların çiftlenmemiş elektronları bir kristal yapıda paralel spinli olarak yönelirlerse, güçlü bir manyetik alan meydana getirir. Böyle malzemelere ferromanyetik malzeme denir. NiO, Fe₂O₃ gibi malzemelerde bir kristal yapıdaki paramanyetik atomlar, spin manyetik momentleri birbirinin etkisini bitirecek şekilde dizilmişlerse, bu tarz malzemeler antiferromanyetik özellik göstermektedir ve net bir manyetizasyon oluşturmamaktadır. Geçiş metallerinin d orbitallerindeki kısmen dolu elektronlar antiferromanyetik malzemelerin oluşmasına neden olmaktadır. Malzemenin yapısı hakkında bilgi alabilmek için bir geçiş metalinin oluşturduğu yapının manyetik özelliğinin bilinmesi yeterli olacaktır [66].

3.2. Quantum Espresso Programı

Quantum-Espresso, birçok kristal yapıdaki metaller, yarımetal ve yalıtkanların YFT içerisinde düzlem dalga temel setlerini ve sanki potansiyelleri kullanarak hesaplayan programdır. Program, Baroni ve arkadaşları tarafından geliştirilmiştir. Quantum-Espresso taban durum enerjisi ve tek elektron (K-S) orbitallerinin hesaplarında, atomik kuvvetleri, zorlanmaları, yapısal kararlı durumları belirlemedeki hesaplarda ve taban durumu için Born-Oppenheimer yüzeyindeki moleküler dinamik çalışmaları hesaplarında kullanılır. Bu program kararsız hücre moleküler dinamik çalışmalarında, fonon frekansları ve herhangi bir genel dalga vektöründeki özvektörleri hesaplamada, metallerde elektron-fonon katsayısı hesaplamalarında, gerçek uzayda atomlar arası kuvvet sabitleri hesaplamalarında ve üçüncü derecede harmonik olmayan fonon ömrü hesaplamalarında çok başarılı sonuçlar vermektedir. Ayrıca bu program hem klasik (Hamann-SchlüterChiang) pseudo potansiyeller hem de Ultrasoft (Vanderbilt) sanki potansiyeller kullanarak, verilen Bravais örgüsü ve grup simetrisiyle periyodik bir kristalin elektronik bant yapısını, yük yoğunluğunu ve taban durumu toplam enerjisini hesaplar. Bu program periyodik örgü kolları ve diğer valans elektronlarının oluşturduğu potansiyel içindeki bir valans elektronu için, öz-uyum'dan K-S denklemlerini çözer. K-S denklemleri, orbitalleri sınırlı bir düzlem dalga temel setiyle genişletilir ve bu işlem iterasyon tekniğiyle çözülen özdeğer problemini kolaylaştırır [67, 68].

Quantum-Espresso, katının nokta grup simetrisi, yük yoğunluğu ve toplam enerjiyi hesaplamak için gerekli olan işlem sayısına indirger. Bu niceliklerin hesabı, yapısal (örgü sabitleri, yığın modülü ve elastik sabitleri) ve dinamiksel (fonon frekansları) özelliklerini, yapısal faz geçişlerini ve katı üzerindeki basınç etkilerini açıklamaya izin verir.

Hesaplamalarda kullanılan YYY yaklaşımı, deneysel bir parametreye ihtiyaç duymadan değiş tokuş enerjisini açıklar. Bu yaklaşım kovalent ve metalik sistemler için oldukça iyi sonuçlar verir. Dış potansiyel $V_{dış}(r)$ olmak üzere, K-S denklemleri ile YFT formülasyonu içinde etkileşen bir elektronik sistemin toplam enerjisi,

$$E_{tot} = -\frac{1}{2} \sum_i^x \int \psi_i(\vec{r}) \nabla^2 \psi_i(\vec{r}) d\vec{r} + \int \psi_i(\vec{r}) V_{dış}(\vec{r}) d\vec{r} \quad (3.00)$$

verilir. Burada n r elektronik yük yoğunluğudur. $\epsilon_{dış}$ ise YYY yaklaşımının içinde bulunan değiş tokuş korelasyon enerjisidir ve yoğunluğun bir fonksiyonudur. Bu formül K-S denklemlerinin ψ_i r ile çarpımıdır.

$$E_{tot} = \sum_i \varepsilon_i - \frac{1}{2} \int \frac{n(\vec{r}')n(\vec{r})}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d\vec{r} d\vec{r}' + \int n(\vec{r})(\varepsilon_{dt-e}(n(\vec{r})) - \mu(n(\vec{r}))) d\vec{r} \quad (3.01)$$

ψ_i r için K-S denklemleri, tek elektron için Schrödinger denklemine özdeştir. Burada dış potansiyel, diğer bütün denklemlerin çözümleri üzerinde öz-uyum (SC) ifadesine bağlıdır. Bu denklemlerin çözümleri iterasyon ile belirlenir. Keyfi bir V_{gir} 0 r iç potansiyel ile iterasyon başlatılarak aşağıdaki yol izlenir[69,70].

$$\left[-\frac{1}{2} \nabla^2 + V_{gir}^{(n)}(\vec{r}) \right] \psi_{gir}^{(n)}(\vec{r}) = \varepsilon_i^{(n)} \psi_{gir}^{(n)}(\vec{r})$$

$$n^n(\vec{r}) = \sum_i |\psi_i^{(n)}(\vec{r})|^2$$

$$V_{çik}^n(\vec{r}) = V_{dış}(\vec{r}) + \int \frac{n^{(n)}(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d\vec{r}' + \mu_{dış}(n^{(n)}(\vec{r})) \quad (3.02)$$

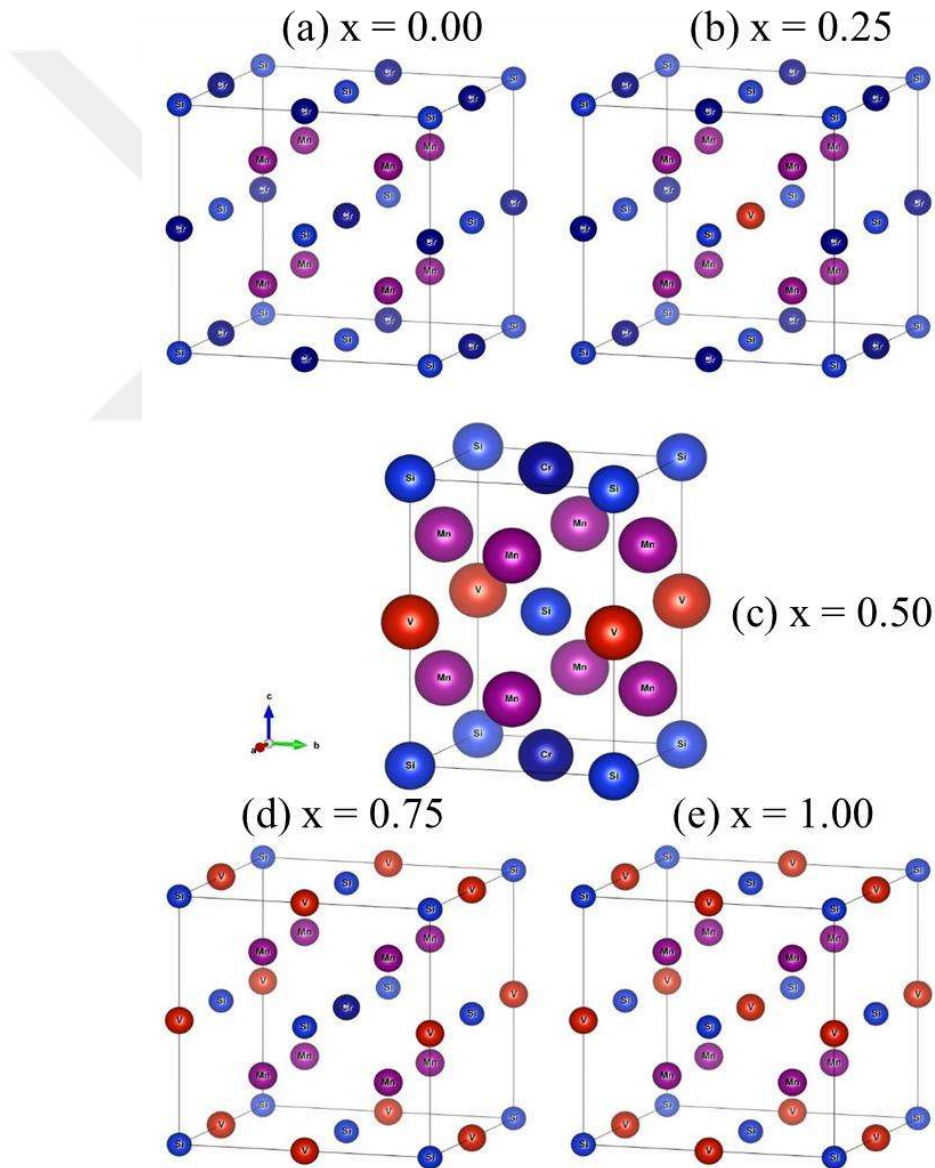
Bu çözümlerden yeni bir V_{gir} $n+1$ başlangıç potansiyeli oluşturulur. öz-uyum potansiyel $VSCF$ ifadesine yaklaştırılır ki bu ifade $V_{gir}=V_{çik}$ potansiyeline denktir. En basit iterasyon V_{gir} $n+1$ "in $V_{çik}$ n "a eşit olduğu durumdur. Bu problemi kararsız yapar ve öz-uyum olmayan çözüme ulaşılır. En iyi çözüm ise giriş ve çıkış potansiyellerinin

$$V_{gir} n+1 = 1 - \beta V_{gir} n + \beta V_{çik} n \quad (3.03)$$

karışımıdır. Burada β , 0 ile 1 arasında bir sayıdır. Bu parametre küçük sistemler için büyük tutulmalıdır ($\cong 0,7$) . Fakat yakınsamanın zor olduğu durumlarda daha küçük bir değer alınabilir [71].

4. BUGULAR VE TARTIŞMA

Bu çalışmada, $\text{Mn}_2\text{Cr}_{1-x}\text{V}_x\text{Si}$ ($x = 0; 0,25; 0,5; 0,75; 1$) alaşımlarının $x = 0$ ve 1 durumlarında Fm-3m uzay grubunda bulunan Mn_2CrSi ve Mn_2VSi tam Heusler alaşımları Şekil 4.1.a ve Şekil 4.1.e'deki gibi, $x = 0,25$ ve $0,75$ durumlarında ise Pm-3m uzay grubunda bulunan $\text{Mn}_2\text{Cr}_{0,75}\text{V}_{0,25}\text{Si}$ ve $\text{Mn}_2\text{Cr}_{0,25}\text{V}_{0,75}\text{Si}$ kübik alaşımları Şekil 4.1.b ve Şekil 4.1.d'deki gibi, $x = 0,5$ durumu için P4/mmm uzay grubunda bulunan $\text{Mn}_2\text{Cr}_{0,5}\text{V}_{0,5}\text{Si}$ dörtlü Heusler alaşımı Şekil 4.1.c'deki gibi kristal yapı oluşturacak biçimde atomlar Tablo 4.1'deki Wyckoff pozisyonlarına yerleştirildi.



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

Kristal yapıları Şekil 4.1'deki gibi oluşturulan alaşımların GGY-PBE [72] pseudo-potansiyelleri kullanılarak tüm hesaplamaları quantum-espresso paket programıyla yapıldı. Öncelikli olarak yakınsama hesapları yapılarak uygun k-noktaları, kesme enerjisi ve smearing parametresi belirlendi. Daha sonrasında ise hesaplamalarda kullanılmak üzere kesme enerjisi 40 Ry, Methfessel-Paxton'a [73] göre smearing parametresi 0,01 Ry olarak alındı. Fm-3m ve Pm-3m kübik yapıları için k-noktaları toplam enerji hesabında 8x8x8 ve durum yoğunluğu hesabında ise 12x12x12 olarak, P4/mmm tetragonal yapısı için toplam enerji hesabında 6x6x5 ve durum yoğunluğu hesabında ise 12x12x10 alındı.

4.1. $Mn_2Cr_{1-x}V_xSi$ ($x = 0; 0,25; 0,5; 0,75; 1$) Alaşımlarının Yapısal Özellikleri

Atomlar, Fm-3m ve Pm-3m uzay grubundaki kübik ve P4/mmm uzay grubundaki tetragonal kristal yapılarına Tablo 4.1'deki şekilde yerleştirilerek kristal yapı değiştirilmeden farklı örgü sabiti değerlerine göre toplam enerjiler hesaplandı. Toplam enerjinin minimum olduğu değer tespit edilerek geometrik optimizasyon yapıldı. Daha sonrasında, $Mn_2Cr_{1-x}V_xSi$ ($x = 0; 0,25; 0,5; 0,75; 1$) alaşımlarının minimum enerjideki denge durumundaki örgü sabitleri elde edildi. Bu alaşımların elde edilen örgü parametreleri Tablo 4.2'de karşılaştırmalı olarak verildi. Mn_2CrSi ve Mn_2VSi alaşımlarının elde edilen örgü sabiti değerleri literatürdeki sonuçlarla uyum içerisinde olduğu görüldü. $x = 0,25, 0,50$ ve $0,75$ katkılarlarıyla ilgili literatür taramasında her hangi bir veriye rastlanmadığından bir karşılaştırma yapılamadı. Fakat V atomunun katkısı arttıkça örgü sabiti değerinde bir artma olduğu Tablo 4.2'deki verilerden görüldü.

Tablo 4.1. İncelenen alaşımların atomik koordinatları

Malzemeler	Mn	Cr	V	Si
Mn₂CrSi	0,25 0,25 0,25	0,50 0,50 0,50	-	0 0 0
Mn₂Cr_{0,75} V_{0,25}Si	0,25 0,25 0,25 0,25 0,25 0,75 0,75 0,75 0,25	0,50 0 0	0,50 0,50 0,50	0 0 0 0 0,5 0,5
Mn₂Cr_{0,5} V_{0,5}Si	0 0,50 0,25	0,5 0,5 0	0 0 0,50	0 0 0 0,5 0,5 0,5
Mn₂Cr_{0,25} V_{0,75}Si	0,25 0,25 0,25 0,25 0,25 0,75 0,75 0,75 0,25	0,50 0,50 0,50	0,50 0 0	0 0 0 0 0,5 0,5
Mn₂VSi	0,25 0,25 0,25	-	0,50 0,50 0,50	0 0 0

Tablo 4.2. İncelenen alaşımların örgü sabitleri (Å).

Malzemeler	Ref.	<i>a</i>
Mn₂CrSi	Bu Çalışma FLAPW [40] FLAPW [41]	5,593 5,590 5,623
Mn₂Cr_{0,75} V_{0,25}Si	Bu Çalışma	5,606
Mn₂Cr_{0,5} V_{0,5}Si	Bu Çalışma	<i>a</i> = 3,973536 <i>c</i> = 5,615404
Mn₂Cr_{0,25} V_{0,75}Si	Bu Çalışma	5,636
Mn₂VSi	Bu Çalışma FPLO [43]	5,652 5,687

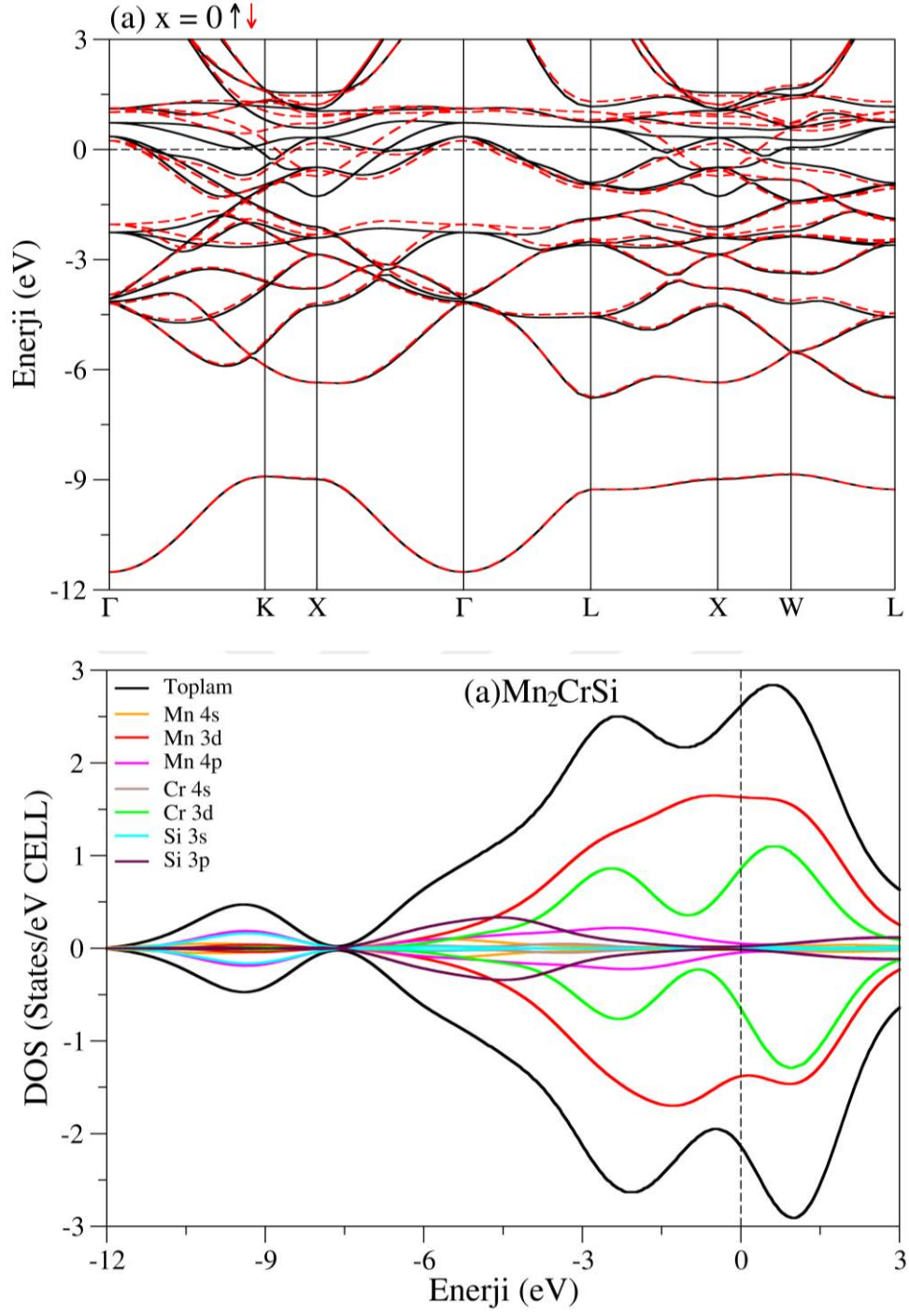
4.2. Mn₂Cr_{1-x}V_xSi (x = 0; 0,25; 0,5; 0,75; 1) Alaşımlarının Manyetik ve Elektronik Özellikleri

Bu alaşımların yapısal özellikler kapsamında elde edilen denge durumu örgü sabitleri manyetik ve elektronik özellikler hesaplarken kullanıldı. Spin katkısı göz önüne bulundurularak Mn₂Cr_{1-x}V_xSi (x = 0; 0,25; 0,5; 0,75; 1) alaşımları için ferrimanyetik malzeme oluşturacak şekilde spin polarizasyonlarına göre hesaplamalar yapıldı. Toplam manyetik momentleri x = 0,25, 0,50 ve 0,75 katkılama durumlarında sıfır olarak, x = 0'da

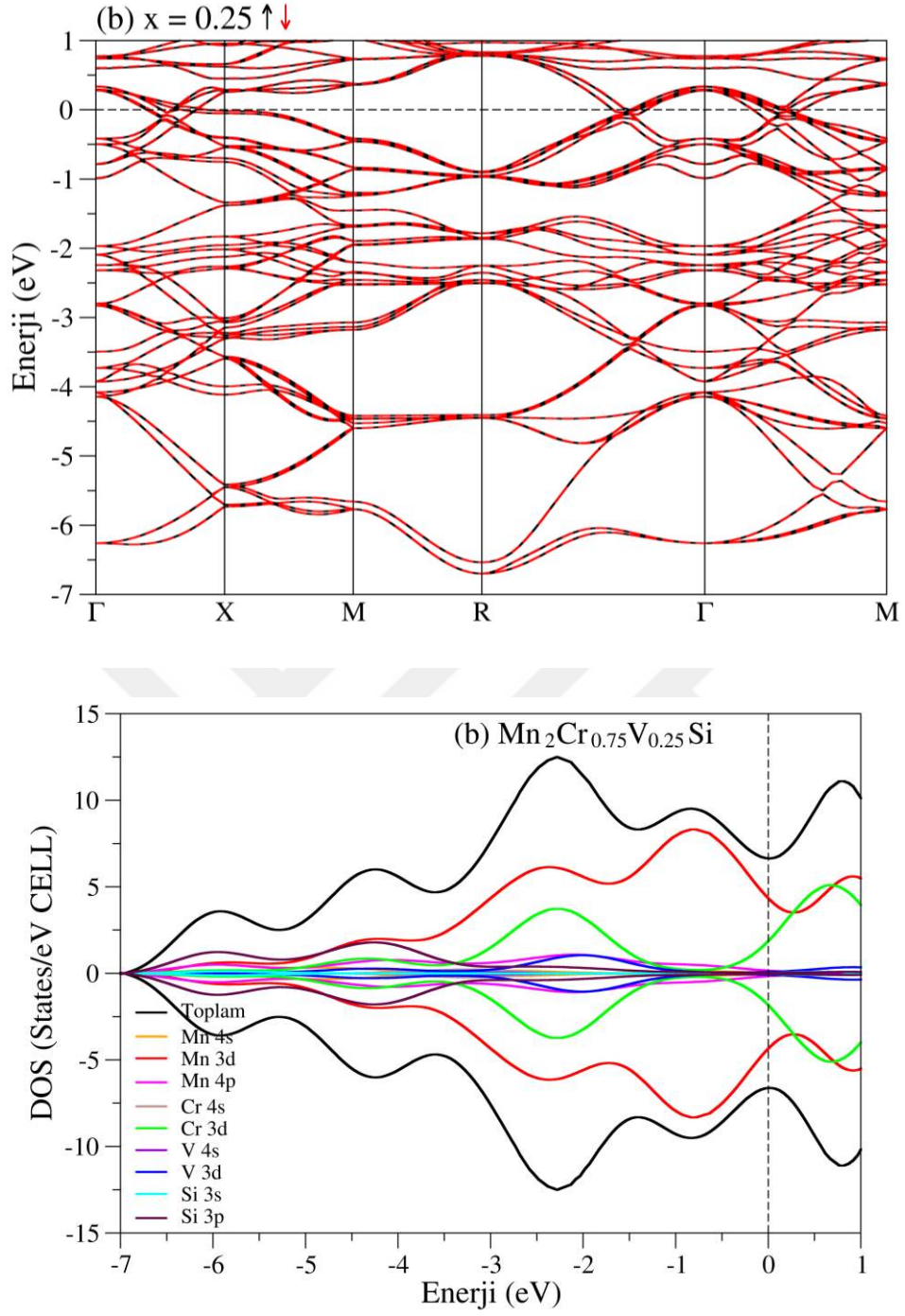
$0,23 \mu_B$, $x = 1$ 'de ise $0,41 \mu_B$ olarak elde edildi. Yapılan manyetik özellik hesaplamalarından bu alaşımların $x = 0,25, 0,50$ ve $0,75$ katkılama durumlarında manyetik olmadıkları $x = 0$ ve 1 katkılama durumları için ise çok küçük bir manyetizasyona sahip oldukları sonucuna varıldı. Hesaplama sonucunda bulunan spin polarizasyonuna göre elektronik bant enerji eğrilerinden, kısmi ve toplam durum yoğunluklarından Fermi enerjileri çıkartılarak Fermi enerji seviyesi 0 eV olacak şekilde alınıp şekiller çizildi.

$Mn_2Cr_{1-x}V_xSi$ ($x = 0; 0,25; 0,5; 0,75; 1$) alaşımlarının elektronik özellikler kapsamında Şekil 4.2 - 4.3 - 4.4 - 4.5 - 4.6'da çizilen elektronik bant eğrileri incelendiğinde, $x = 0; 0,5; 1$ katkılama durumlarında oluşan ters ve dörtlü Heusler alaşımlarında spin yukarı yöneliminde Fermi seviyesinin altında kalan valans bantları arasında küçük bir yasak enerji aralığı (GAP) olduğu elektronik bant eğrilerine ait şekillerden anlaşılmaktadır. Fakat bu alaşımların tamamında spin yukarı yöneliminde Fermi enerji seviyesi üzerinde herhangi bir yasak enerji aralığı bulunmadığı ve Fermi enerji seviyesini bantların kestiği görülmektedir. Bundan dolayı spin yukarı yöneliminde bu alaşımların metalik özellik gösterdiği söylenebilir. Spin aşağı yöneliminde ise $Mn_2Cr_{1-x}V_xSi$ alaşımlarında Fermi seviyesi civarında GAP olduğu ve spin aşağı durumunda bu alaşımların yarıiletken bir özellik gösterdiği alaşımlara ait şekillerden anlaşılmaktadır. Bundan dolayı bu dört alaşımın yarı metalik davranış sergilediği söylenebilir. Ayrıca, bu yarı metalik GAP'e sahip olan bu alaşımların valans ve iletkenlik bantları arasında dolaylı bir geçiş söz konusudur.

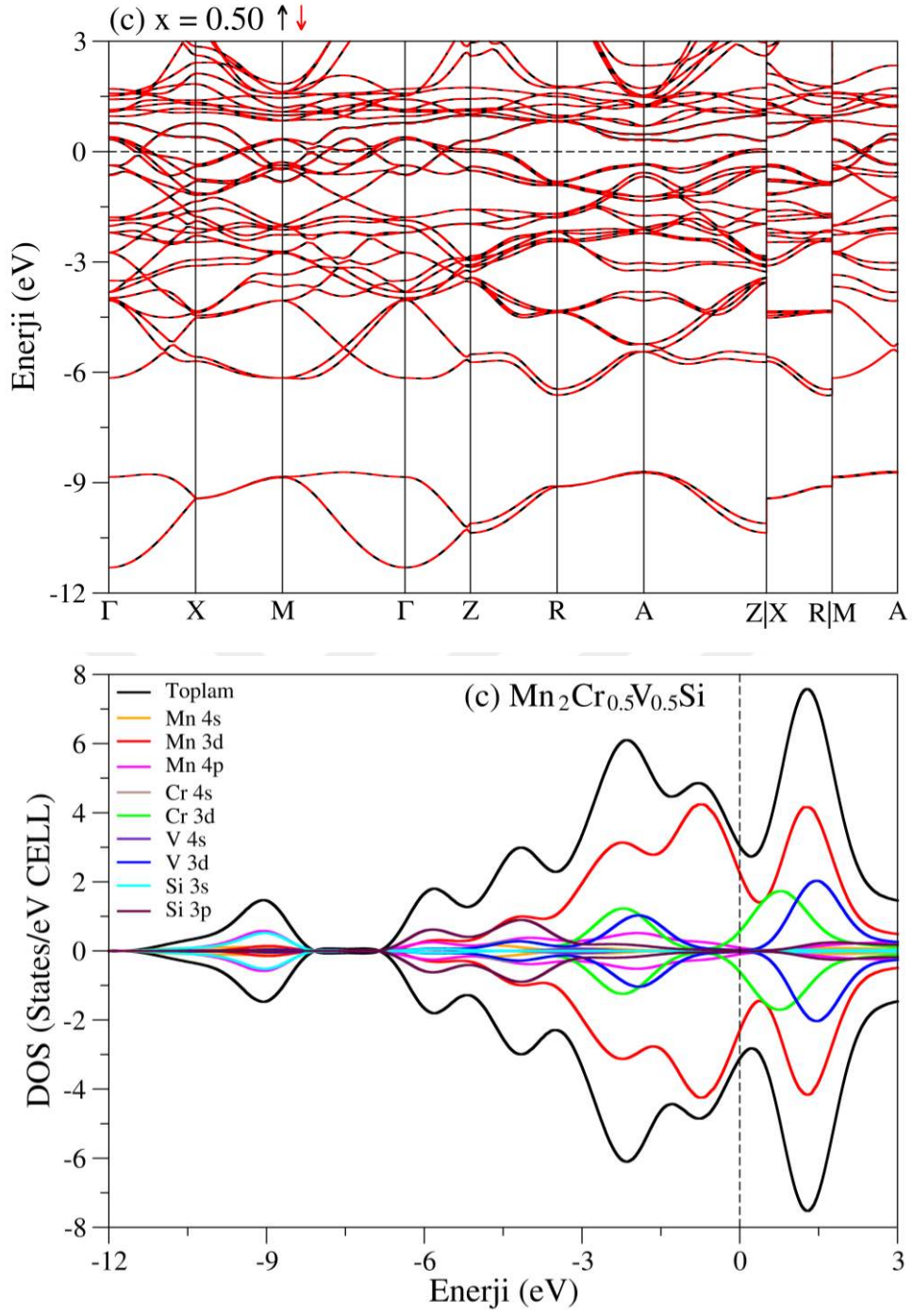
Toplam ve kısmi durum yoğunlukları incelenen bu alaşımların her bir elementten gelen iletkenliğe katkının daha iyi belirlenebilmesi için spin yukarı yönelimine bakıldığında, alaşımları oluşturan atomlara ait elektronların Fermi seviyesinin üzerinde en fazla katkının d orbitallerine ait elektronlar olduğu görülmektedir. Bununla birlikte, $Mn_2Cr_{1-x}V_xSi$ ($x = 0; 0,25; 0,5; 0,75; 1$) alaşımlarında $x = 0; 0,5; 1$ katkılama durumlarındaki elde edilen ters ve dörtlü Heusler alaşımlarında en baskın Ti-d orbitalinin elektronlarıyken V atomunun katkılama oranı arttıkça Fe-d orbitalinin katkısının da arttığı şekillerden anlaşılmaktadır. Katkılamanın $x = 0,25; 0,75$ olduğu durumlarda ise oluşan tetragonal yapıdaki alaşımlarda V atomunun oranının artmasıyla kübik durumun tam tersine Fe-d orbitalinden gelen katkının azaldığı görülmektedir. Ayrıca, literatürdeki yer alan çalışmalar ile bu alaşımların elektronik özellikleri karşılaştırıldığında uyumlu oldukları görüldü.



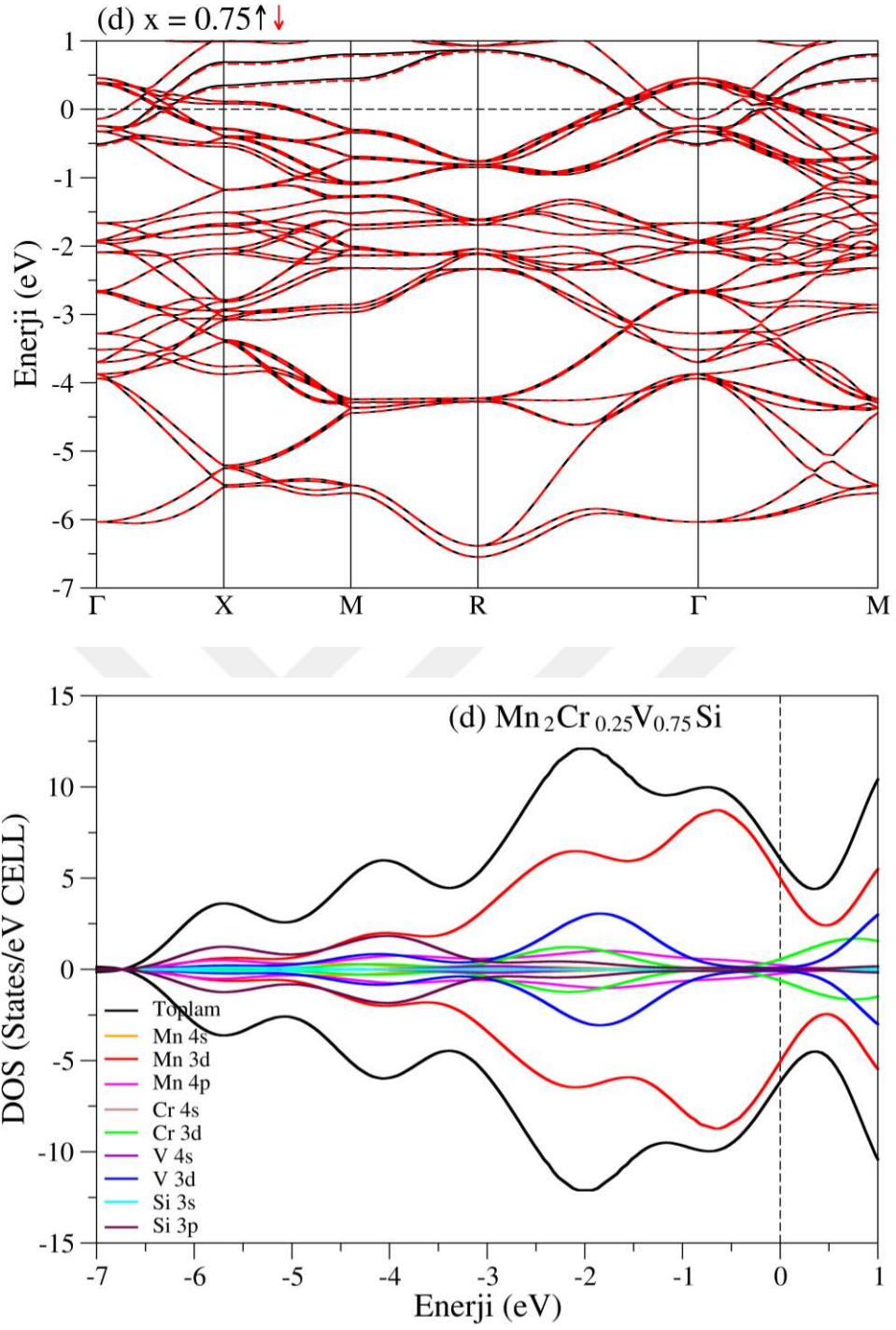
Şekil 4.2. Mn_2CrSi alaşımının yüksek simetri eksenleri boyunca çizilmiş elektronik bant eğrileri, toplam ve kısmi durum yoğunlukları



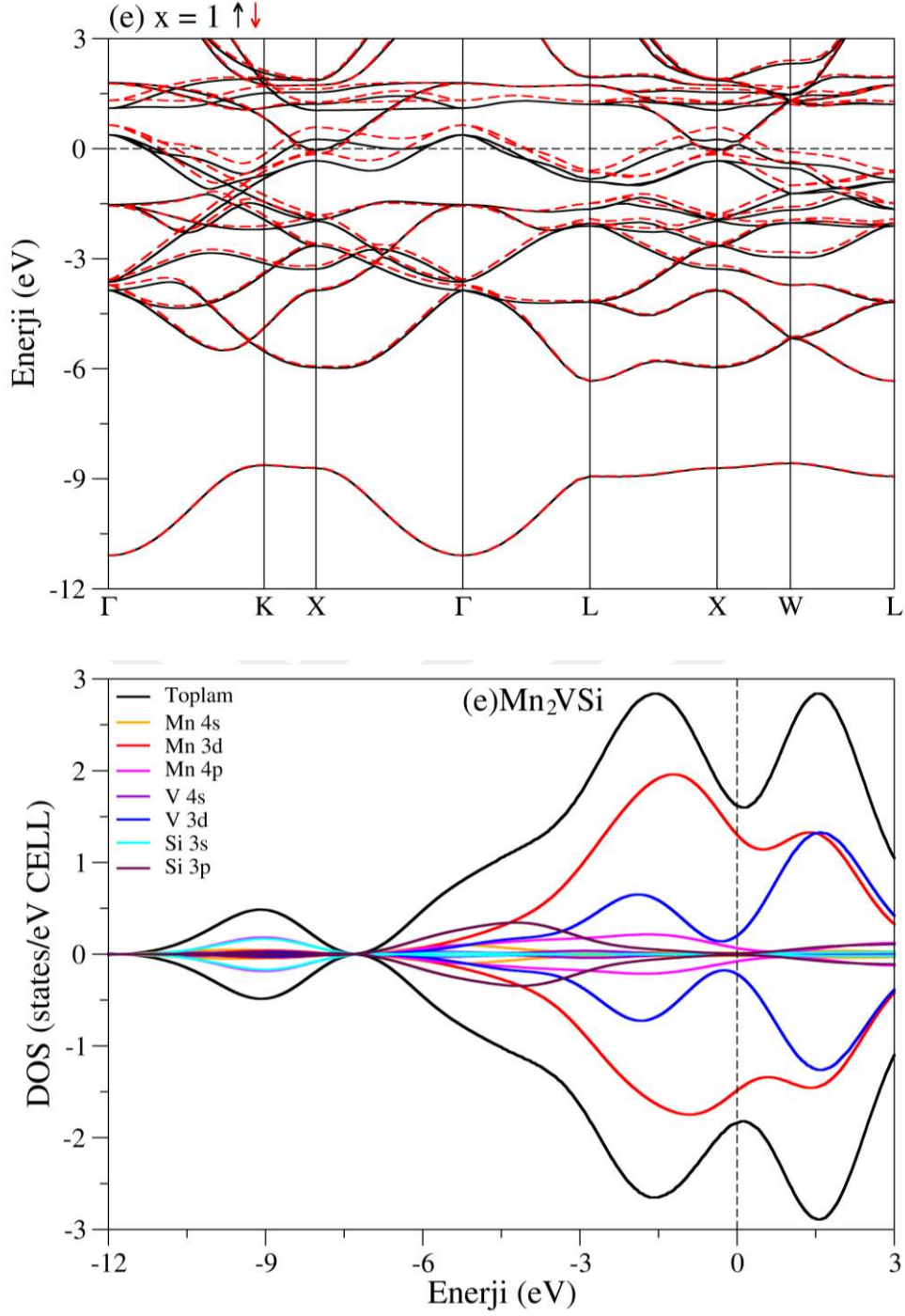
Şekil 4.3. $\text{Mn}_2\text{Cr}_{0.75}\text{V}_{0.25}\text{Si}$ alaşımının yüksek simetri eksenleri boyunca çizilmiş elektronik bant eğrileri, toplam ve kısmi durum yoğunlukları



Şekil 4.4. $\text{Mn}_2\text{Cr}_{0.5}\text{V}_{0.5}\text{Si}$ alaşımının yüksek simetri eksenleri boyunca çizilmiş elektronik bant eğrileri, toplam ve kısmi durum yoğunlukları



Şekil 4.5. $\text{Mn}_2\text{Cr}_{0.25}\text{V}_{0.75}\text{Si}$ alaşımanın yüksek simetri eksenleri boyunca çizilmiş elektronik bant eğrileri, toplam ve kısmi durum yoğunlukları



Şekil 4.6. Mn_2VSi alaşımının yüksek simetri eksenleri boyunca çizilmiş elektronik bant eğrileri, toplam ve kısmi durum yoğunlukları

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

Katılar için ikinci mertebeden elastik sabitler (C_{ij}) yapısal ve mekanik kararlılıkla ilgili oldukça önemli bilgiler içermektedir. Katı malzemelerin elastik özellikleri Debye sıcaklığı, erime noktası, ısıl genleşme katsayısı ve ısı sığası gibi fiziksel özelliklerle yakından alakalıdır.

Fm-3m ve Pm-3m uzay grubunda bulunan $x = 0; 0,25; 0,75; 1$ katkılama durumlarındaki alaşımlar kübik kristal simetriye sahiptir. Kübik yapıdaki katı malzemeler birbirinden farklı ve bağımsız ikinci mertebeden C_{11} , C_{12} ve C_{44} gibi üç tane elastik sabite sahiptir. P4/mmm uzay grubunda bulunan katı malzemeler ise tetragonal yapıda kristalleşirler. Tetragonal yapıdaki malzemeler ise birbirinden bağımsız ve farklı ikinci mertebeden C_{11} , C_{12} , C_{13} , C_{33} , C_{44} ve C_{66} gibi altı tane elastik sabite sahiptir. Elastik özellik hesaplamaları, quantum-espresso paket programı içerisinde entegre olarak bulunan thermo_pw [74] programı ile optimize edilmiş kristal yapıya stress uygulayarak ile $Mn_2Cr_{1-x}V_xSi$ ($x = 0; 0,25; 0,5; 0,75; 1$) alaşımları için hesaplandı. Hesaplamalar sonucunda elde edilen C_{ij} elastik sabitleri Tablo 4.3'te verildi.

Tablo 4.3. İncelenen alaşımların ikinci mertebeden elastik sabitleri C_{ij} (GPa).

Malzemeler	C_{11}	C_{12}	C_{44}	C_{13}	C_{33}	C_{66}
Mn₂CrSi	385,10	171,40	132,09	-	-	-
Mn₂Cr_{0,75}V_{0,25}Si	414,55	185,74	137,66	-	-	-
Mn₂Cr_{0,5}V_{0,5}Si	441,00	154,67	145,03	183,13	428,34	117,33
Mn₂Cr_{0,25}V_{0,75}Si	416,58	184,32	147,27	-	-	-
Mn₂VSi	373,49	144,69	150,69	-	-	-

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

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

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

gibi ifade edilir [48]. Tablo 4.3'deki C_{11} , C_{12} , C_{13} , C_{33} , C_{44} ve C_{66} değerleri incelendiğinde Born kararlılık kriterlerine göre bu alaşımlarının mekanik kararlılık şartlarını sağladığı açıkça görülmektedir. Bundan dolayı hem kübik yapılardaki alaşımların hem de tetragonal yapıdaki alaşımların bulundukları kristal simetrilerinde mekanik olarak kararlı oldukları ifade edilebilir. Aynı zamanda elastik sabitleri incelenen bu alaşımların C_{11} değerlerine

bakıldığında V atomunun katkısı arttıkça C_{11} değerinin arttığı fakat Cr atomunun yokluğunda ise Mn_2VSi alaşımındaki gibi düştüğü anlaşılmaktadır. C_{12} değerinde ise kübik alaşımların kendi aralarında V katkısı ile C_{11} 'deki sonuca benzer olduğu görülmektedir. C_{44} değerinin ise biraz daha farklı olarak bütün alaşımlarda V atomunun katkısıyla doğru orantı bir şekildedir. Ayrıca, genel olarak bu alaşımların elastik sabitlerine incelendiğinde Mn_2VSi alaşımının C_{11} ve C_{12} değerlerinde en düşük, C_{44} değerinde ise en yüksek olduğu görülmektedir.

Tablo 4.4. İncelenen alaşımların Bulk modülü B (GPa), Kayma modülü G (GPa), B/G oranı, Young modülü E (GPa), Poisson oranı σ , Anizotropi faktörü A.

Malzemeler	Ref.	B	G	B/G	E	σ	A
Mn_2CrSi	Bu Çalışma	242,63	121,34	2,00	312,01	0,286	1,236
	CASTEP [75]	-	-	5,78	-	0,30	-
$Mn_2Cr_{0,75}V_{0,25}Si$	Bu Çalışma	262,01	127,83	2,05	329,86	0,290	1,203
$Mn_2Cr_{0,5}V_{0,5}Si$	Bu Çalışma	261,31	133,48	1,96	342,17	0,282	1,236
$Mn_2Cr_{0,25}V_{0,75}Si$	Bu Çalışma	261,74	133,91	1,95	343,20	0,281	1,268
Mn_2VSi	Bu Çalışma	220,96	134,95	1,64	336,37	0,246	1,317
	CASTEP [75]	-	-	1,69	-	0,25	-

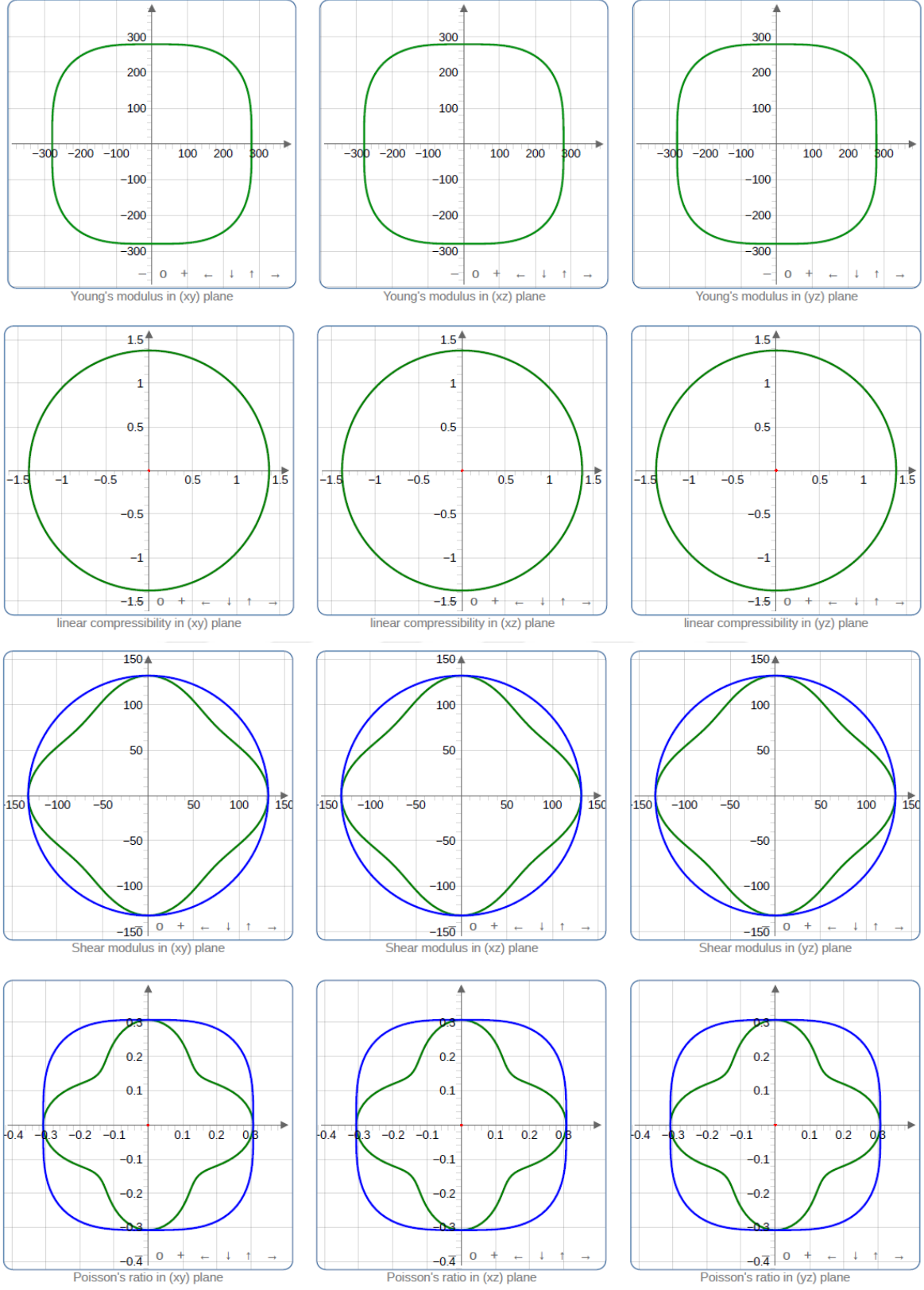
$Mn_2Cr_{1-x}V_xSi$ ($x = 0; 0,25; 0,5; 0,75; 1$) alaşımlarının hesaplanan elastik sabitlerinden Bulk modülü (B), Kayma modülü (G), Young modülü (E), Poisson oranı (σ) ve anizotropi faktörü (A) hesaplanarak Tablo 4.4'te verildi. Bu alaşımlara ait Bulk modülü değerleri beklenildiği üzere C_{11} ve C_{12} elastik sabiti değerleri arasındaki bir değerde elde edildi. Bulk modülünün yanı sıra sıkışabilirliğin bir başka ifadesi olan Kayma modülünde ise bu alaşımların 100 GPa değerinin üzerinde bir değere sahip olduğundan makaslama kuvvetler (köşelerden karşılıklı) az sıkışabilir oldukları anlaşıldı. Ayrıca, V atomunun katkısı arttıkça kayma modülü değerinin de arttığı görüldü. Malzemelerin kırılman veya sünek doğasıyla ilgili bilgi edinmek için kullanılan Pugh'un kriteri [76] yaygın olarak kullanılan kriterlerin başında gelir. Bu kriter gere, B/G oranı 1,75'den küçükse malzeme kırılman doğada, büyük ise sünek doğaya sahiptir. Buna göre, B/G oranı 1,75'ten küçük olan Mn_2VSi alaşımı kırılman bir doğaya sahipken diğer alaşımlar ise 1,75'ten büyük olduğundan dolayı sünek bir doğaya sahiptir. Bu durum V atomunun katkısı arttıkça Bulk modülü değerinde Mn_2VSi haricindeki

alaşımlarda orantılı bir şekilde artmaktayken Mn_2VSi alaşımında ise bir azalmanın olmasıyla açıklanabilir. $Mn_2Cr_{1-x}V_xSi$ ($x = 0; 0,25; 0,5; 0,75; 1$) alaşımlarının $x = 0; 0,25; 0,5; 0,75$ katkı durumlarındaki alaşımlarda sünekliğin birbirine çok yakın olduğu Tablo 4.4'den görülmektedir. Sertliğin bir ifadesi olan Young modülü incelendiğinde sünek doğada bulunan alaşımlarda V katkısı arttıkça young modülünün arttığı Tablo 4.4'deki değerlerden anlaşılmaktadır. Kısaca, sert malzemelerin daha kırılğan bir yapıya sahip olduğu düşünürse buradan V katkısıyla birlikte malzemelerin daha sertleştiği söylenebilir. Hesaplanan poisson oranı genel olarak, atomik bağlanmalar ile ilgili bilgiler içermektedir ve kovalentliğin bir ölçüsü olarak değerlendirilir. Poisson oranının değeri, kovalent malzemelerde 0,1'e yakın, iyonik malzemelerde ise 0,25'e yakın değerlerde çıkmaktadır [77,78]. Bu alaşımların hesaplanan poisson oranları (0,246 – 0,290) 0,25 değerine daha yakın bir değerde olduğundan iyonik karakterde oldukları söylenebilir.

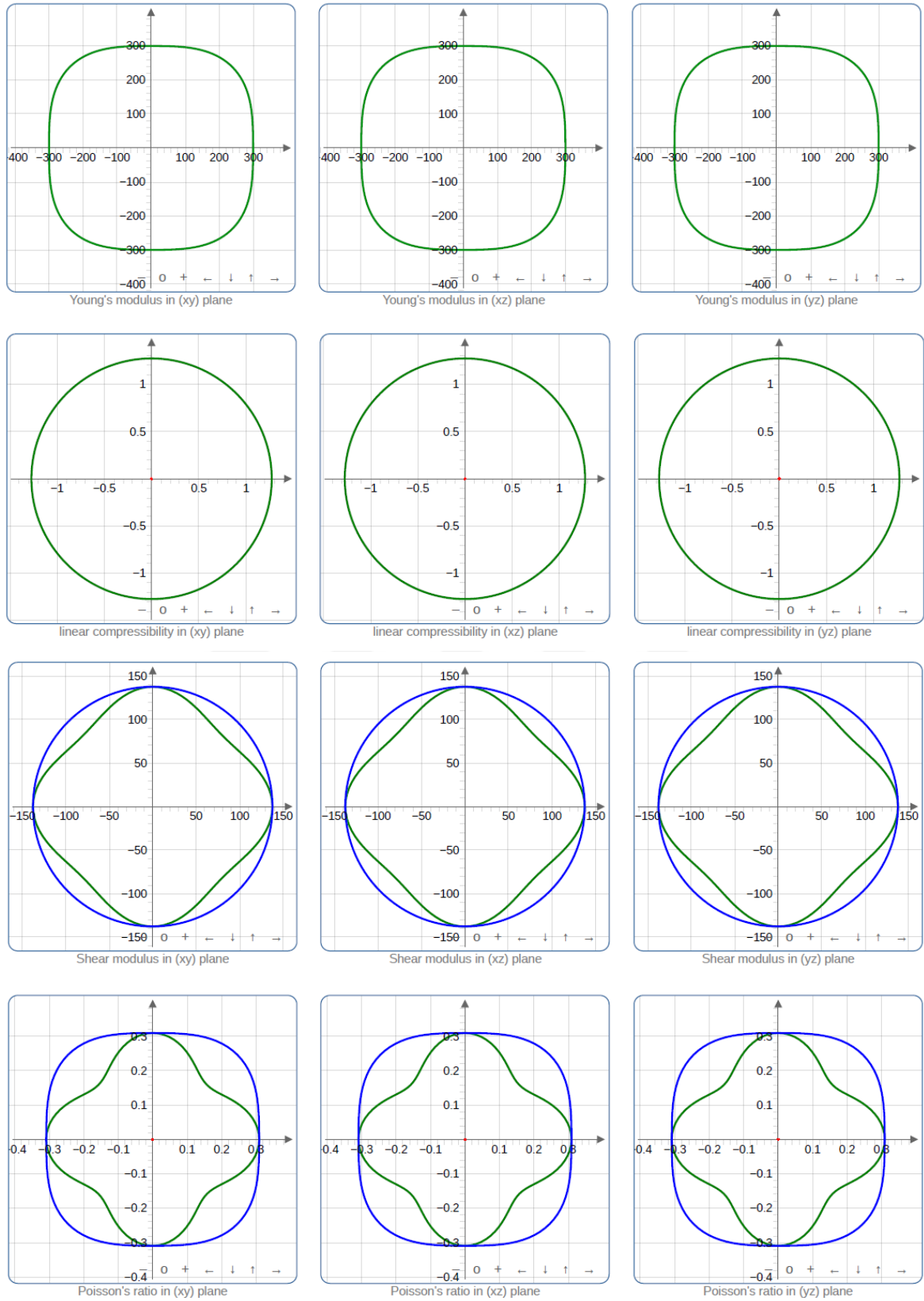
Mekanik özellikler kapsamında elde edilen bir başka parametre ise anizotropi faktörüdür. Anizotropi faktörü, izotropik malzemeler için 1'e eşitken anizotropik malzemeler için 1'den farklı değerdedir. Buna göre mekanik özellikleri incelenen bu alaşımların tamamının anizotropi faktörü 1'den farklı değere sahiptir. Bundan dolayı, bu alaşımların anizotropik olduğu söylenebilir. Anizotropik olan bu alaşımlar için ELATE kodları [79] kullanılarak Young modülü, Kayma modülü ve sıkışabilirlik minimum ve maksimum değerleri hesaplanarak Tablo 4.5'de verildi. Ayrıca, hesaplanan bu parametreler xy, xz ve yz düzlemlerinde çizilerek Şekil 4.7 - 4.8 - 4.9 - 4.10 - 4.11'de verildi.

Tablo 4.5. İncelenen alaşımların Young modülü E (GPa), Kayma modülü G (GPa) ve sıkışabilirlik β (TPa⁻¹) minimum ve maksimum değerleri.

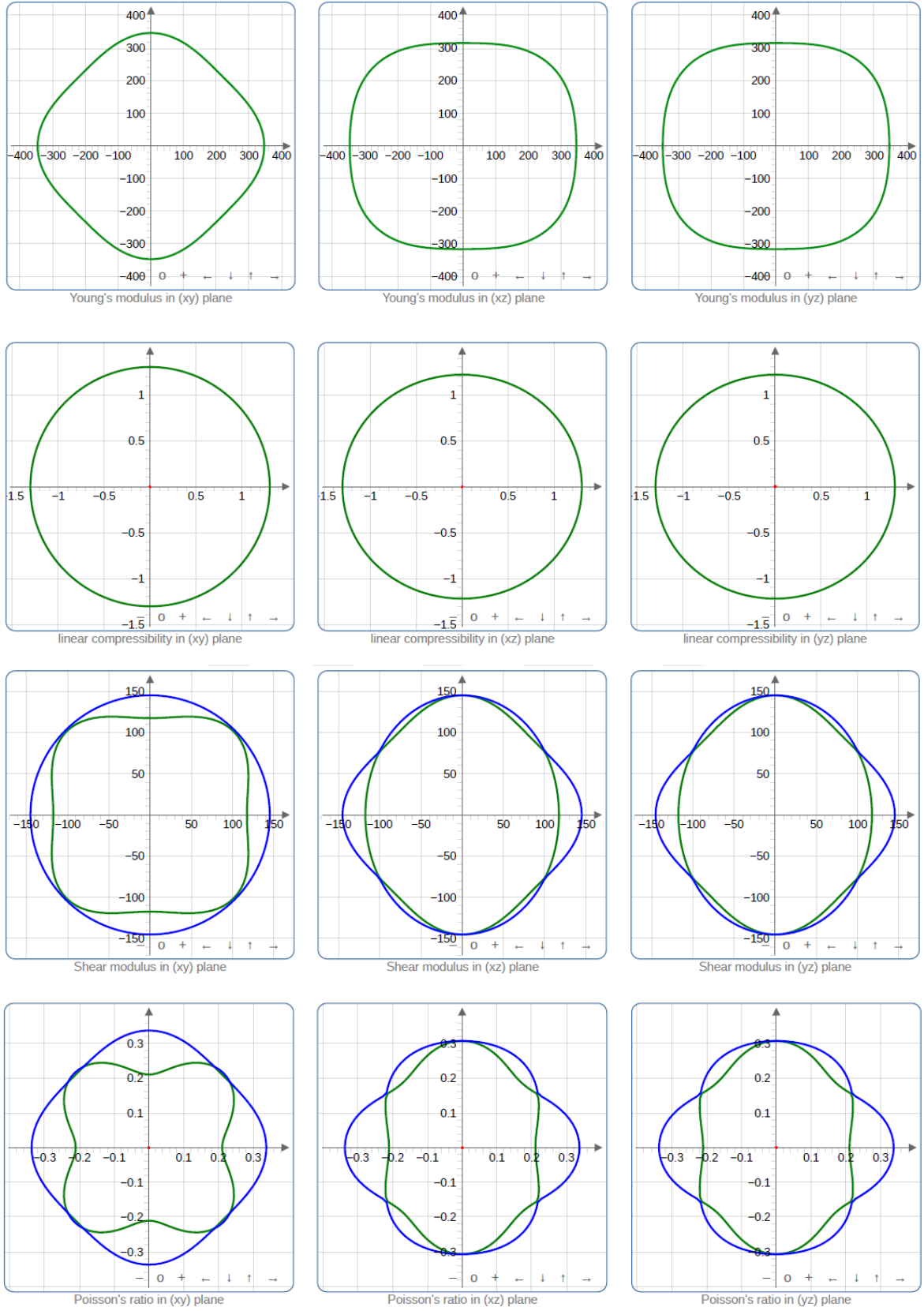
Malzemeler	E _{min}	E _{max}	β_{min}	β_{max}	G _{min}	G _{max}
Mn₂CrSi	279,52	335,40	1,3738	1,3738	106,85	132,09
Mn₂Cr_{0,75}V_{0,25}Si	299,61	351,44	1,2722	1,2722	114,41	137,66
Mn₂Cr_{0,5}V_{0,5}Si	305,85	366,04	1,2198	1,3038	117,33	145,03
Mn₂Cr_{0,25}V_{0,75}Si	303,50	372,04	1,2735	1,2735	116,13	147,27
Mn₂VSi	292,69	368,34	1,5086	1,5086	114,40	150,69



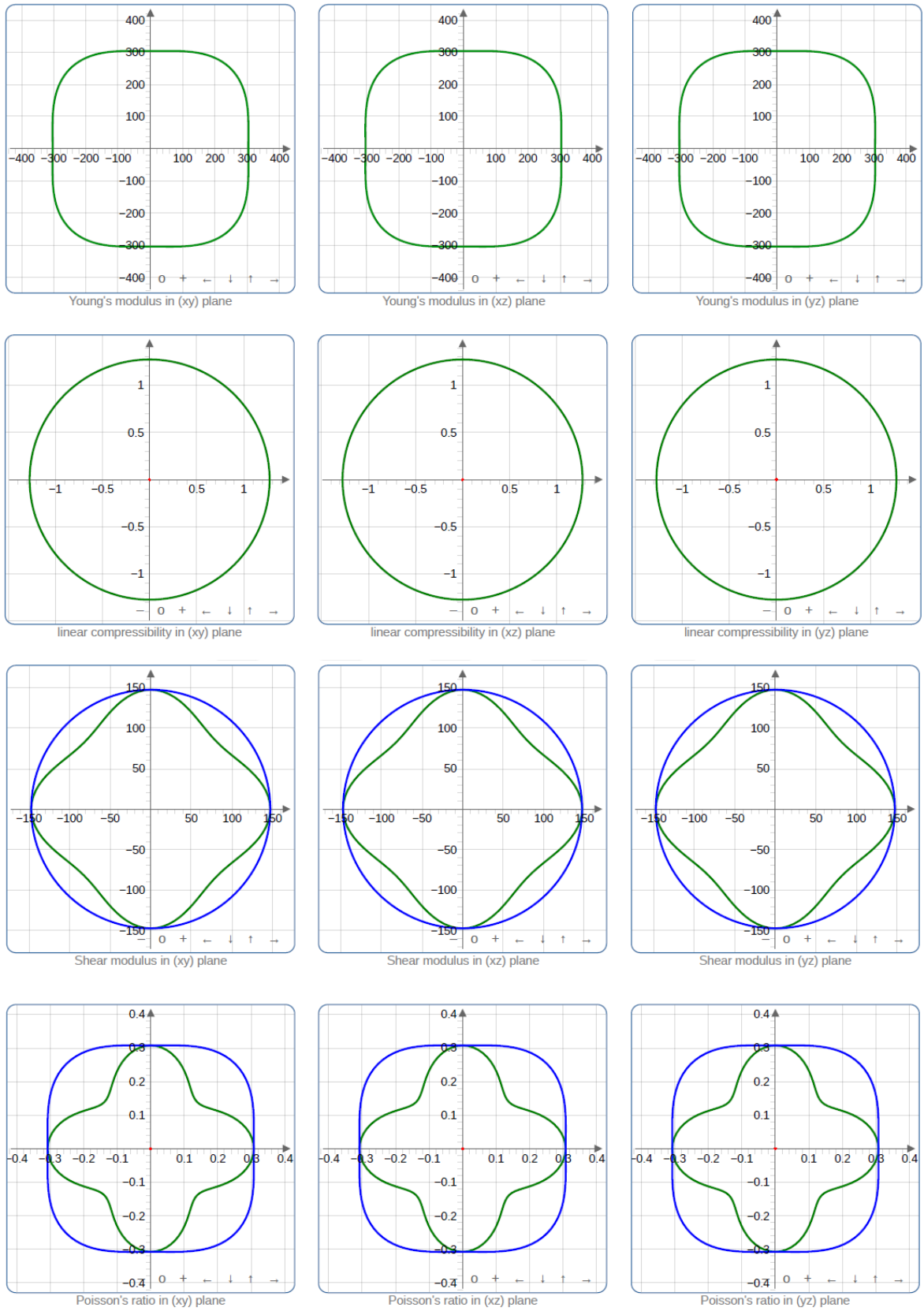
Şekil 4.7. Mekanik özellikleri hesaplanan Mn_2CrSi alaşımının yön bağımlılığı; Young modülü, doğrusal sıkıştırılabilirlik, kayma modülü ve Poisson oranı



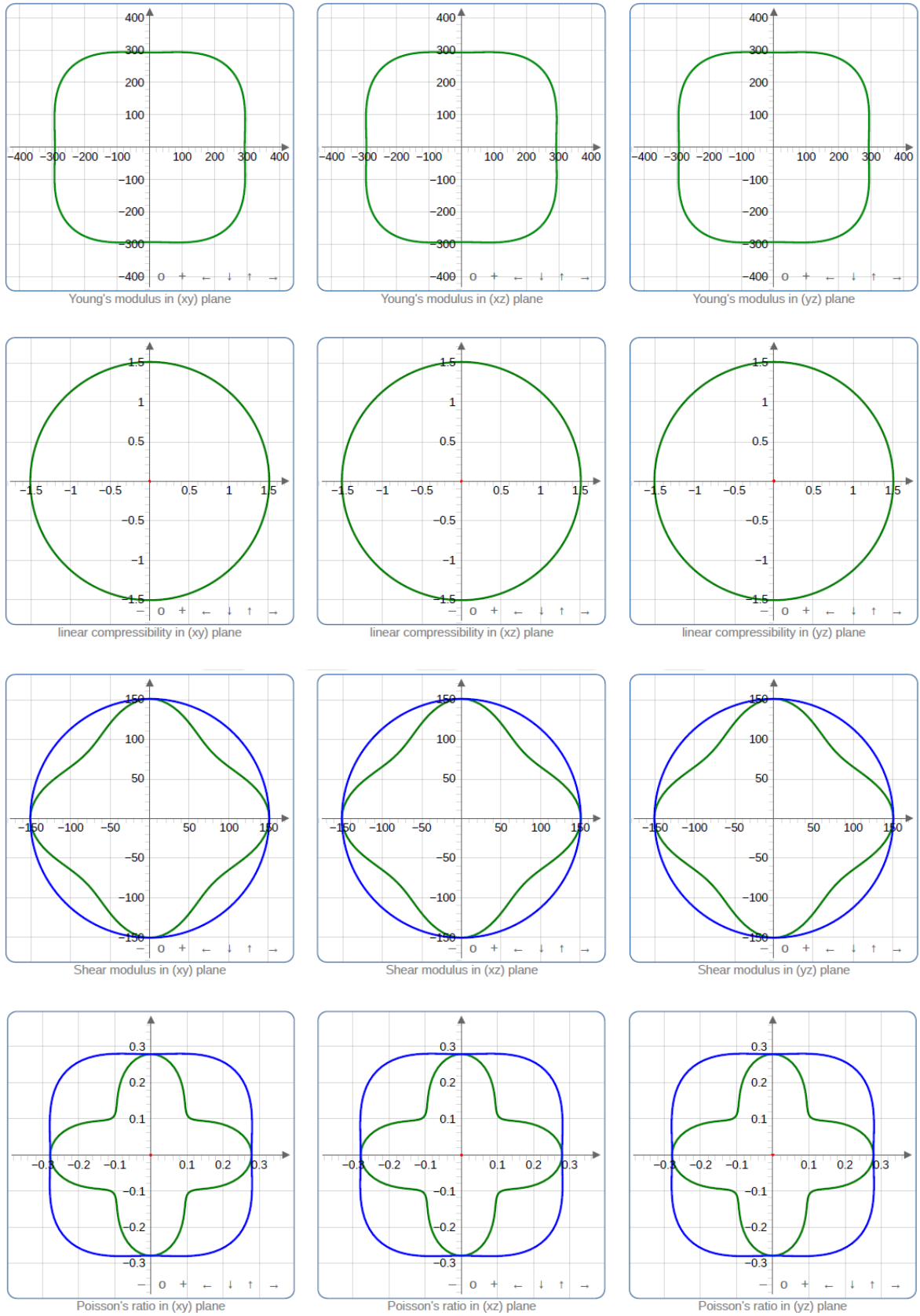
Şekil 4.8. Mekanik özellikleri hesaplanan $\text{Mn}_2\text{Cr}_{0.75}\text{V}_{0.25}\text{Si}$ alaşımının yön bağımlılığı; Young modülü, doğrusal sıkıştırılabilirlik, kayma modülü ve Poisson oranı



Şekil 4.9. Mekanik özellikleri hesaplanan $\text{Mn}_2\text{Cr}_{0.50}\text{V}_{0.50}\text{Si}$ alaşımının yön bağımlılığı; Young modülü, doğrusal sıkıştırılabilirlik, kayma modülü ve Poisson oranı



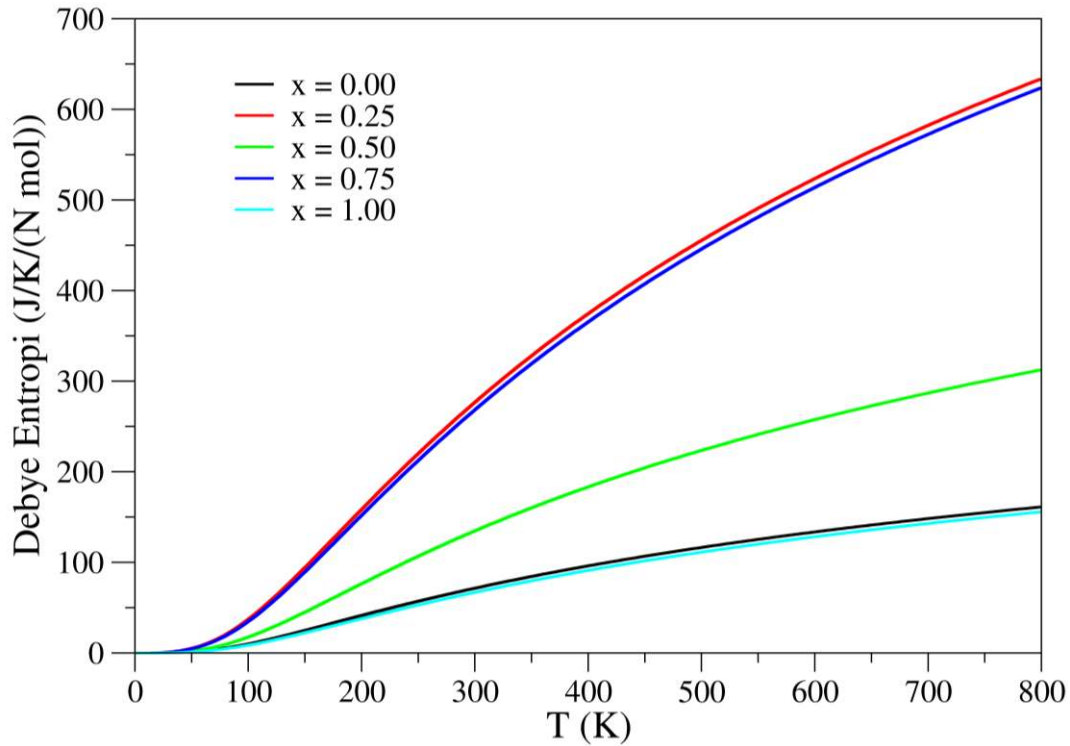
Şekil 4.10. Mekanik özellikleri hesaplanan $\text{Mn}_2\text{Cr}_{0.25}\text{V}_{0.75}\text{Si}$ alaşıımının yön bağımlılığı; Young modülü, doğrusal sıkıştırılabilirlik, kayma modülü ve Poisson oranı



Şekil 4.11. Mekanik özellikleri hesaplanan Mn_2VSi alaşımının yön bağımlılığı; Young modülü, doğrusal sıkıştırılabilirlik, kayma modülü ve Poisson oranı

4.3. $\text{Mn}_2\text{Cr}_{1-x}\text{V}_x\text{Si}$ ($x = 0; 0,25; 0,5; 0,75; 1$) Alaşımlarının Termodinamik Özellikleri

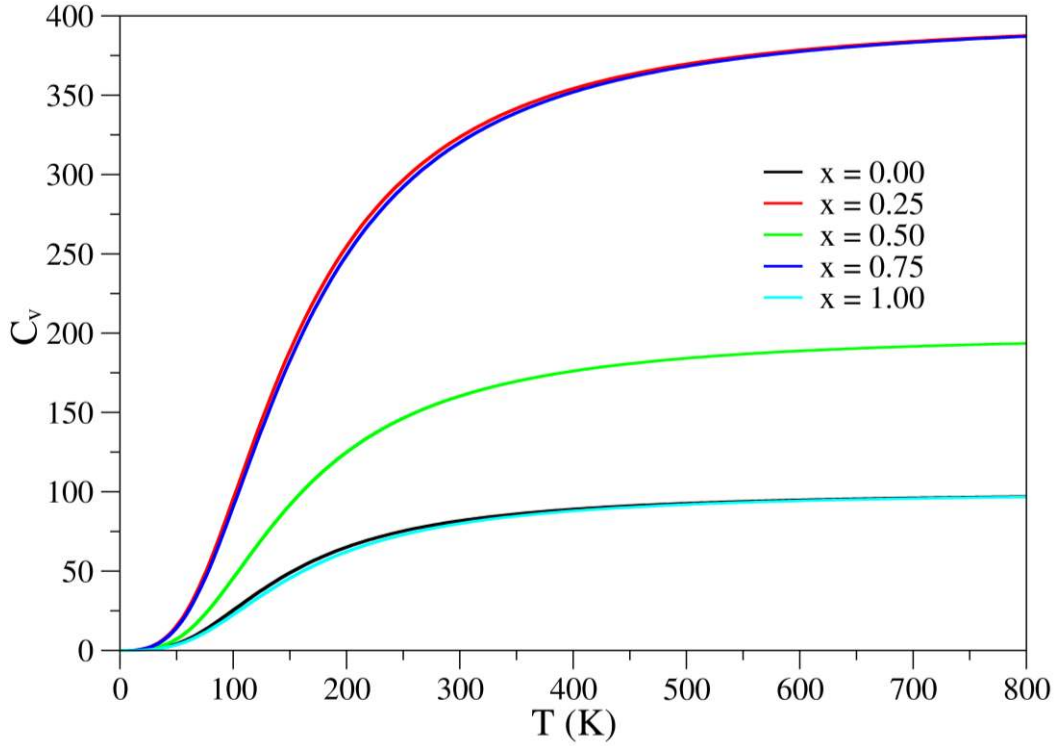
Termodinamik özellik hesaplamaları, quantum-espresso paket programı içerisinde entegre olarak bulunan thermo_pw [74] programı ile optimize edilmiş kristal yapıya stress uygulayarak yarı harmonik debye modeli ile $\text{Mn}_2\text{Cr}_{1-x}\text{V}_x\text{Si}$ ($x = 0; 0,25; 0,5; 0,75; 1$) alaşımları için hesaplandı. Hesaplamalar sonucunda elde edilen entropinin sıcaklığa bağlı değişimi Şekil 4.12’de, ısı sığasının sıcaklığa bağlı değişimi Şekil 4.13’te, titreşim enerjisinin sıcaklığa bağlı değişimi Şekil 4.14’de titreşim serbest enerjisinin sıcaklığa bağlı değişimi Şekil 4.15’de $\text{Mn}_2\text{Cr}_{1-x}\text{V}_x\text{Si}$ ($x = 0; 0,25; 0,5; 0,75; 1$) alaşımları için çizilerek verildi. Şekil 4.12’de verilen entropinin sıcaklığa bağlı değişimi incelendiğinde beklenildiği gibi sıcaklık arttıkça entropisinde arttığı görülmektedir. Pm-3m uzay grubunda bulunan $x = 0,25$ ve $0,75$ V atomu katkılı durumlarda sıcaklığa bağlı entropi artışının en fazla olduğu, Fm-3m uzay grubunda bulunan $x = 0$ ve 1 V atomu katkılı durumlarda ise en az olduğu görülmektedir.



Şekil 4.12. $\text{Mn}_2\text{Cr}_{1-x}\text{V}_x\text{Si}$ ($x = 0; 0,25; 0,5; 0,75; 1$) alaşımların Debye entropisinin sıcaklığa bağlı değişimi

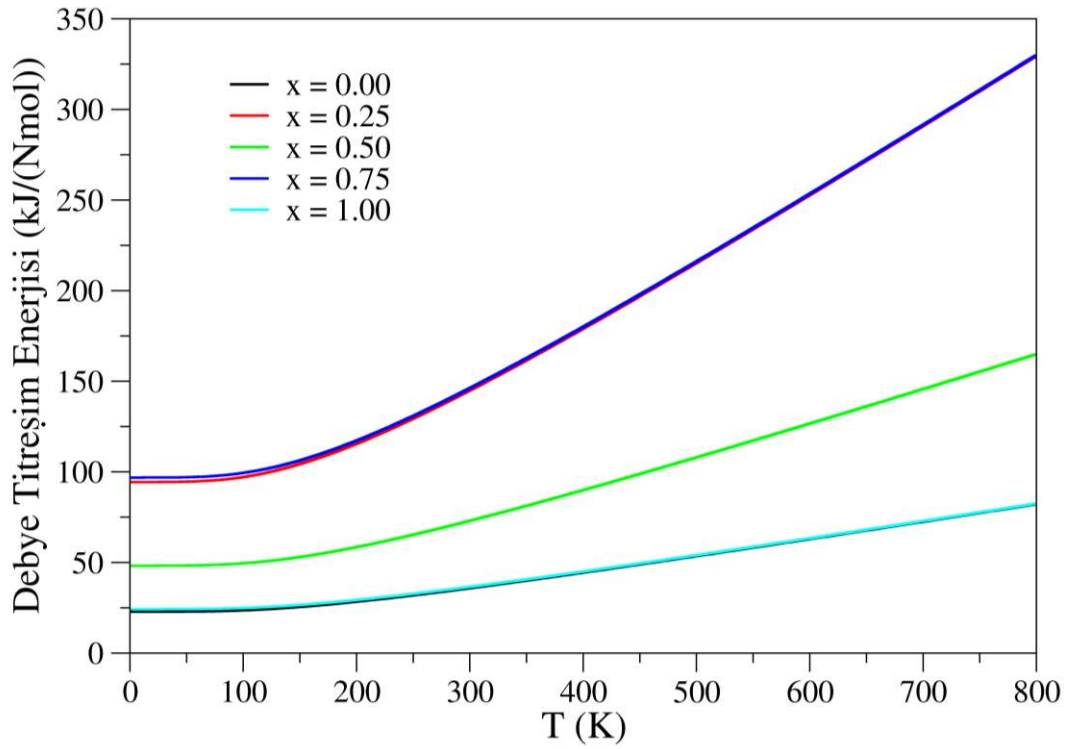
Isı sığasının sıcaklığa bağlı değişimi incelendiğinde Şekil 4.13’de görüldüğü üzere sıcaklık arttıkça ısı sığasının yükseldiği ve yüksek sıcaklıklara doğru gidildiğinde Dulong-Petit limiti [80] olarak bilinen $3NR$ (N birim hücredeki atom sayısı, R gaz sabiti) değerine yaklaştığı görülmektedir. Birim hücresinde 16 atom bulunan Pm-3m uzay grubunda bulunan $x = 0,25$

ve 0,75 durumlarındaki alaşımların ısı sığasının Dulong-Petit yayasına göre en yüksekte olduğu görülmektedir. Ayrıca, ısı sığasının düzleşmeye başladığı yer olarak da bilinen ve malzemelerin en yüksek titreşim frekansına ulaştığı sıcaklık değeri olan Debye sıcaklığı da bu alaşımlar için ısı sığasının sıcaklığa bağlı grafiği ile uyumlu olarak sırasıyla $\text{Mn}_2\text{Cr}_{1-x}\text{V}_x\text{Si}$ ($x = 0; 0,25; 0,5; 0,75; 1$) alaşımları için 612,949 K, 630,792 K, 644,921 K, 647,263 K ve 648,076 K olarak hesaplandı.

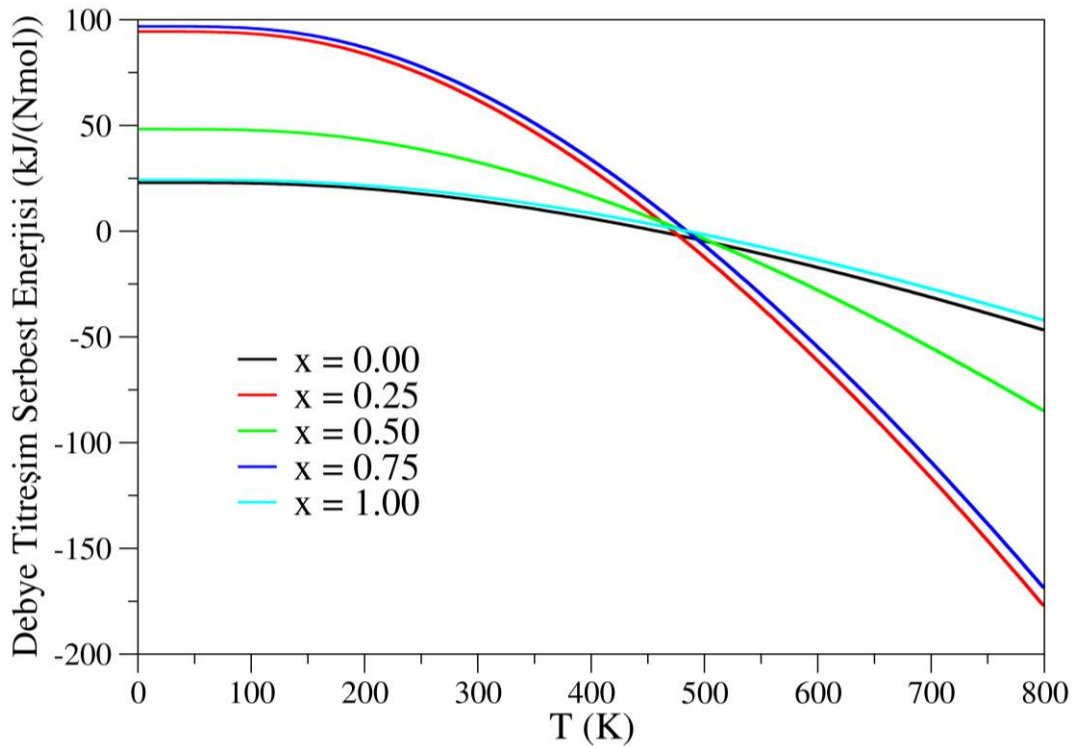


Şekil 4.13. $\text{Mn}_2\text{Cr}_{1-x}\text{V}_x\text{Si}$ ($x = 0; 0,25; 0,5; 0,75; 1$) alaşımların ısı sığasının sıcaklığa bağlı değişimi

Bir başka termodinamik özellik olan titreşim enerjisinin sıcaklığa bağlı değişimi incelendiğinde; Şekil 4.14'den de görüldüğü üzere sıcaklığın artmasıyla birlikte alaşımlardaki titreşim enerjisinin arttığı açık bir şekilde görülmektedir. Bununla birlikte Şekil 4.15'de yer alan titreşim serbest enerjisinin sıcaklığa bağlı değişimi incelendiğinde; sıcaklık artışıyla ters orantılı bir şekilde azalma olduğu görülmektedir. Sıcaklık artışıyla birlikte malzemelerdeki titreşim enerjisinin artması beklenildiği gibi titreşim serbest enerjisinin azalmasına sebep olmaktadır. Dolayısıyla sıcaklığa bağlı olarak titreşim enerjisi en çok artan $x = 0,25$ ve $0,75$ V atomu katkılı durumlarda sıcaklık artışıyla birlikte titreşim serbest enerjisi en çok azalan alaşımlar olduğu görülmektedir.



Şekil 4.14. $Mn_2Cr_{1-x}V_xSi$ ($x = 0; 0,25; 0,5; 0,75; 1$) alaşımların titreşim enerjisinin sıcaklığa bağlı değişimi



Şekil 4.15. $Mn_2Cr_{1-x}V_xSi$ ($x = 0; 0,25; 0,5; 0,75; 1$) alaşımların titreşim serbest enerjisinin sıcaklığa bağlı değişimi

5. SONUÇ VE ÖNERİLER

Bu tez çalışmasında, Mn_2CrSi tam Heusler alaşımına V atomu katkılanarak $Mn_2Cr_{1-x}V_xSi$ ($x = 0; 0,25; 0,5; 0,75; 1$) formunda oluşan alaşımların yapısal, elektronik, manyetik ve mekanik özellikleri Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi ile genelleştirilmiş gradyent yaklaşımı kullanılarak hesaplandı. Bu alaşımlar için yapılan tüm hesaplamalarda $x = 0; 1$ katkılama durumunda $Fm-3m$ uzay grubunda bulunan tam Heusler yapısında, $x = 0,25; 0,75$ katkılama durumunda $Pm-3m$ uzay grubunda bulunan basit kübik yapıda ve $x = 0,50$ katkılama durumunda $P4mmm$ uzay grubunda bulunan tetragonal yapıda atomların pozisyonları sabit tutularak yapıldı. Yapılan hesaplamaların sonuçları şu şekildedir:

Yapısal özellikler kapsamında;

- Mn_2CrSi ve Mn_2VSi tam Heusler alaşımlarının $Fm-3m$ uzay grubundaki örgü sabitleri sırasıyla $5,593 \text{ Å}$ ve $5,652 \text{ Å}$ olarak hesaplandı.
- $Mn_2Cr_{0.25}V_{0.75}Si$ ve $Mn_2Cr_{0.25}V_{0.75}Si$ alaşımlarının $Pm-3m$ uzay grubundaki kübik yapısında örgü sabitleri sırasıyla $5,606 \text{ Å}$ ve $5,636 \text{ Å}$ olarak hesaplandı.
- $Mn_2Cr_{0.5}V_{0.5}Si$ tetragonal alaşımının $P4/mmm$ uzay grubunda örgü sabitleri $a = 3,974 \text{ Å}$ ve $c = 5,615 \text{ Å}$ olarak hesaplandı.
- Literatürde yer alan çalışmalar ile Mn_2CrSi ve Mn_2VSi tam Heusler alaşımlarının örgü sabiti değerleri karşılaştırıldı ve oldukça uyumlu olduğu görüldü. Diğer alaşımlar için ise literatürde herhangi bir çalışmaya rastlanılmadığından karşılaştırma yapılamadı.

Manyetik özellikler kapsamında;

- Bu çalışmada bu alaşımların Ferrimanyetik yapıya göre spin yönelimleri tercih edilerek, spin-aşağı ve spin-yukarı durumlarına göre hesaplamalar yapıldı. Toplam manyetik momentleri $x = 0,25, 0,50$ ve $0,75$ katkılama durumlarında sıfır olarak, $x = 0$ 'da $0,23 \mu B$, $x = 1$ 'de ise $0,41 \mu B$ olarak elde edildi. Yapılan manyetik özellik hesaplamalarından bu alaşımların $x = 0,25, 0,50$ ve $0,75$ katkılama durumlarında manyetik olmadıkları $x = 0$ ve 1 katkılama durumları için ise çok küçük bir manyetizasyona sahip oldukları sonucuna varıldı.

Elektronik özellikler kapsamında;

- Spin polarizasyonuna göre elektronik bant eğrileri ve durum yoğunlukları hesaplanan bu alaşımların her birisinin metalik karakterde oldukları anlaşıldı.
- Toplam ve kısmi durum yoğunlukları hesaplanan bu alaşımların iletkenliğe en fazla katkının Mn-3d'den geldiği görüldü. Ayrıca V atomunun katkılama oranı arttıkça Cr-3d'nin iletkenliğe katkısının azaldığı anlaşıldı.

Mekanik özellikler kapsamında;

- $Mn_2Cr_{1-x}V_xSi$ ($x = 0; 0,25; 0,5; 0,75; 1$) alaşımlarının ikinci mertebeden elastik sabitleri ve polikristal özellikleri elde edildi.
- Elde edilen elastik sabitlerinden bu alaşımların mekanik olarak kararlı oldukları görüldü.
- Hesaplanan Bulk, Kayma ve Young modüllerinden ise sıkışabilirliklerinin az oldukları anlaşıldı.
- B/G oranlarından Mn_2VSi tam Heusler alaşımının kırılğan, diğer alaşımların ise sünek bir doğaya sahip oldukları görüldü.
- Poisson oranı elde edilen bu alaşımların sınır şartları göz önüne alındığında iyonik-metalik bir karakterizasyona sahip oldukları sonucuna varıldı.

Termodinamik özellikler kapsamında;

- Yarı harmonik debye modeli kullanılarak, $Mn_2Cr_{1-x}V_xSi$ ($x = 0; 0,25; 0,5; 0,75; 1$) alaşımları için entropinin, ısı sığasının, titreşim enerjisinin ve titreşim serbest enerjisinin sıcaklığa bağlı değişimleri hesaplandı.
- Debye sıcaklıkları $Mn_2Cr_{1-x}V_xSi$ ($x = 0; 0,25; 0,5; 0,75; 1$) alaşımları için sırasıyla 612,949 K, 630,792 K, 644,921 K, 647,263 K ve 648,076 K olarak elde edildi.

Bu tez çalışmasında hesaplanan $Mn_2Cr_{1-x}V_xSi$ ($x = 0; 0,25; 0,5; 0,75; 1$) alaşımlarıyla ilgili Mn_2CrSi ve Mn_2VSi alaşımı haricindeki diğer alaşımlar ile ilgili literatürde çalışma bulunmamaktadır ve bu çalışma ile bu alaşımların yapısal, elektronik, manyetik, mekanik ve termodinamik özellikleri literatüre kazandırılmıştır. Ancak, bu alaşımların tamamıyla ilgili daha birçok hem deneysel hem de teorik çalışmaya ihtiyaç vardır.

6. KAYNAKLAR

- [1]. Assadi, M. H. N.; et al. (2013). "Theoretical study on copper's energetics and magnetism in TiO₂ polymorphs". *Journal of Applied Physics*. **113** (23): 233913–233913–5.
- [2]. Van Mourik, Tanja; Gdanitz, Robert J. (2002). "A critical note on density functional theory studies on rare-gas dimers". *Journal of Chemical Physics*. **116** (22): 9620–9623.
- [3]. Vondrášek, Jiří; Bendová, Lada; Klusák, Vojtěch; Hobza, Pavel (2005). "Unexpectedly strong energy stabilization inside the hydrophobic core of small protein rubredoxin mediated by aromatic residues: correlated ab initio quantum chemical calculations". *Journal of the American Chemical Society*. **127** (8): 2615–2619.
- [4]. Grimme, Stefan (2004). "Accurate description of van der Waals complexes by density functional theory including empirical corrections". *Journal of Computational Chemistry*. **25** (12): 1463–1473.
- [5]. Zimmerli, Urs; Parrinello, Michele; Koumoutsakos, Petros (2004). "Dispersion corrections to density functionals for water aromatic interactions". *Journal of Chemical Physics*. **120** (6): 2693–2699.
- [6]. Medvedev, Michael G.; Bushmarinov, Ivan S.; Sun, Jianwei; Perdew, John P.; Lyssenko, Konstantin A. (2017-01-05). "Density functional theory is straying from the path toward the exact functional". *Science*. **355** (6320): 49–52.
- [7]. Jiang, Hong (2013-04-07). "Band gaps from the Tran-Blaha modified Becke-Johnson approach: A systematic investigation". *The Journal of Chemical Physics*. **138** (13): 134115.
- [8]. Bagayoko, Diola (December 2014). "Understanding density functional theory (DFT) and completing it in practice". *AIP Advances*. **4** (12): 127104.
- [9]. Brack, M. (1983). "Virial theorems for relativistic spin-1/2 and spin-0 particles" (PDF). *Physical Review D*. **27** (8): 1950.
- [10]. Koshelev, K. (2015). "About density functional theory interpretation".
- [11]. Bagayoko, Diola (December 2014). "Understanding density functional theory (DFT) and completing it in practice". *AIP Advances*. **4** (12): 127104.
- [12]. Kohn, Walter; Sham, Lu Jeu (1965). "Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects". *Physical Review*. **140** (4A): A1133–A1138.
- [13]. Parr, Robert G.; Yang, Weitao (1994). *Density-Functional Theory of Atoms and Molecules*. Oxford University Press.
- [14]. Tomas Arias (2004). "Kohn–Sham Equations". *P480 notes*. Cornell University.
- [15]. Topp, William C.; Hopfield, John J. (1973-02-15). "Chemically Motivated Pseudopotential for Sodium". *Physical Review B*. **7** (4): 1295–1303.
- [16]. Froese Fischer, Charlotte (1987). "General Hartree-Fock program". *Computer Physics Communications*. **43** (3): 355–365.
- [17]. Levine, Ira N. (1991). *Quantum Chemistry* (4th ed.). Englewood Cliffs, New Jersey: Prentice Hall. p. 403.
- [18]. Abdulsattar, Mudar A. (2012). "SiGe superlattice nanocrystal infrared and Raman spectra: A density functional theory study". *J. Appl. Phys.* **111** (4): 044306–044306–4.
- [19]. İyigör, A., 2016, Dörtlü Heusler Alaşımlarının Yapısal, Elektronik, Elastik, Dinamik ve Termodinamik Özelliklerinin Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi ile İncelenmesi, Doktora Tezi, Gazi Üniversitesi.
- [20]. Galanakis L., 2015, Ssmaterials, 222.

- [21]. Tunalı, N. K. ve Özkar, S., 1993, Anorganik Kimya. Ankara: Gazi Üniversitesi Yayınları, 266.
- [22]. Soyalt, F., “Yoğunluk Fonksiyon Teorisi ile bazı bileşiklerin Elektronik yapılarının ve titreşim özelliklerinin teorik olarak incelenmesi” Doktora Tezi, Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Ankara, (2006).
- [23]. Uğur, ğ., “AIN (110) Yüzeyinin Atomik Yapısının ve Titreşim Özelliklerinin Yoğunluk Fonksiyon Teorisi ile İncelenmesi”, Doktora Tezi, Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Ankara, 2-33 (2004).
- [24]. Baroni, S., Giannozzi, P., Testa, A., “Green's-function approach to linear response in solids”, Phys. Rev. Lett., 58: 1861-1864 (1987).
- [25]. Grüning, M., Marini, A. and Rubio, A., 2006, The Journal of chemical physics 124,154108.
- [26]. Methfessel, M. and Paxton, A. T. (1989). High-precision sampling for brillouin-zone integration in metals. Physical Review B, 40 (6), 3616-3621.
- [27]. Xing, N., Gong, Y., Zhang, W., Dong, J. and Li, H., 2009, Comput. Mater. Sci., 45, 489-493.
- [28]. Chatterjee, S., Singh, V. R., Deb, A.K., Giri, S., De, S. K., Dagubta, I. and Majumdar, S., 2010, J. Magn. Magn. Mater., 322, 102-107.
- [29]. Tan, J.-J., Guang-Fu, J., Xiang-Rong, C. And Qing-Quan G., 2010, Commun. Theor. Phys., 53, 1160.
- [30]. Tsunegi, S., Sakuraba, Y., Ogane, M., Naganuma, H., Takanashi, K. and Ando, Y., 2009, Applied Physics Letters, 94, 252503.
- [31]. Tezuka, N., Ikeda, N., Mitsuhashi, F. and Sugimoto, S., 2009, Applied Physics Letters, 94, 162504.
- [32]. Liu, H. X., Honda, Y., Taira, T., Matsuda, K. I., Arita, M., Uemura, T. and Yamamoto, M., 2012, Applied Physics Letters, 101, 132418.
- [33]. Liu, H. X., Kawami, T., Moges, K., Uemura, T., Yamamoto, M., Shi, F. and Voyles, P. M., 2015, Journal of Physics D: Applied Physics, 48, 164001.
- [34]. Iwase, T., Sakuraba, Y., Bosu, S., Saito, K., Mitani, S. and Takanashi, K., 2009, Applied Physics Express, 2, 063003.
- [35]. Nakatani, T. M., Furubayashi, T., Kasai, S., Sukegawa, H., Takahashi, Y. K., Mitani, S. and Hono, K., 2010, Applied Physics Letters, 96, 212501.
- [36]. Takahashi, Y. K., Srinivasan, A., Varaprasad, B., Rajanikanth, A., Hase, N., Nakatani, T. M., Kasai, S., Furubayashi, T. and Hono, K., 2011, Applied Physics Letters 98, 152501.
- [37]. Sato, J., Oogane, M., Naganuma, H. and Ando, Y., 2011, Applied Physics Express, 4, 113005.
- [38]. Chadov, S., Graf, T., Chadova, K., Dai, X., Casper, F., Fecher, G. H. and Felser, C., 2011, Phys. Rev. Lett., 107, 047202.

- [39]. Felser, C., Wollmann, L., Chadov, S., Fecher, G. H. and Parkin, S. S. P., 2015, *APL Materials*, 3, 041518.
- [40]. Hongzhi Luo ., 2007 , *Journal of the chinese Physical Society* , Tianjin 300130, PR China
- [41]. Shinpei FUJII_, Mitsuo OKADA, Shoji ISHIDA, and Setsuro ASANO Department of Physics, Faculty of Science, Kagoshima University, Kagoshima 890-0065 1Institute of Physics, College of Arts and Sciences, University of Tokyo, Meguro, Tokyo 153-0041
- [42]. Haokaifeng Wu *et al* 2017 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **50** 375001
- [43]. K O' zdog~an1, I Galanakis2, E S,as,ioğ~lu3 and B Aktas,1 Department of Physics, Gebze Institute of Technology, Gebze, 41400, Kocaeli, Turkey
- [44]. I. Galanakis,1,* K. Özdoğan,2,† E. Şaşıoğlu,3,4,‡ and B. Aktaş2 1*Department of Materials Science, School of Natural Sciences, University of Patras, GR-26504 Patra, Greece*
- [45]. Yutong Li a, Jingchuan Zhu a,*, Ramesh Paudel b, Jingtao Huang a, Fei Zhou a *School of Materials Science and Engineering, Harbin Institute of Technology, Harbin 150001, China*
- [46]. S. Kirklin, James E. Saal 1, Vinay I. Hegde, C. Wolverton* Department of Materials Science and Engineering, Northwestern University, Evanston, IL 60208, USA
- [47]. P. Giannozzi et al., Advanced capabilities for materials modelling with Quantum-ESPRESSO. *J. Phys.: Condens. Matter* 29(46), 465901 (2017).
- [48]. Page, Y. L. and Saxe, P., 2001, *Phys. Rev. B*, 63, 174103.
- [49]. Nielsen, O. H. and Martin, R. C., 1983, *Phys. Rev. Lett.*, 50, 697-700.
- [50]. Liping, M., 2014, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 369, 205-210.
- [51]. Bagayoko, Diola (December 2014). "Understanding density functional theory (DFT) and completing it in practice". *AIP Advances*. **4** (12): 127104.
- [52]. Brack, M. (1983). "Virial theorems for relativistic spin-1/2 and spin-0 particles" (PDF). *Physical Review D*. **27** (8): 1950.
- [53]. Koshelev, K. (2015). "About density functional theory interpretation".
- [54]. Bagayoko, Diola (December 2014). "Understanding density functional theory (DFT) and completing it in practice". *AIP Advances*. **4** (12): 127104.
- [55]. Kohn, Walter; Sham, Lu Jeu (1965). "Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects". *Physical Review*. **140** (4A): A1133–A1138.
- [56]. Parr, Robert G.; Yang, Weitao (1994). *Density-Functional Theory of Atoms and Molecules*. Oxford University Press.
- [57]. Tomas Arias (2004). "Kohn–Sham Equations". *P480 notes*. Cornell University.

- [58]. Topp, William C.; Hopfield, John J. (1973-02-15). "Chemically Motivated Pseudopotential for Sodium". *Physical Review B*. **7** (4): 1295–1303.
- [59]. Froese Fischer, Charlotte (1987). "General Hartree-Fock program". *Computer Physics Communications*. **43** (3): 355–365.
- [60]. Levine, Ira N. (1991). *Quantum Chemistry* (4th ed.). Englewood Cliffs, New Jersey: Prentice Hall. p. 403.
- [61]. Abdulsattar, Mudar A. (2012). "SiGe superlattice nanocrystal infrared and Raman spectra: A density functional theory study". *J. Appl. Phys.* **111** (4): 044306–044306–4.
- [62]. İyigör, A., 2016, Dörtlü Heusler Alaşımlarının Yapısal, Elektronik, Elastik, Dinamik ve Termodinamik Özelliklerinin Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi ile İncelenmesi, Doktora Tezi, Gazi Üniversitesi.
- [63]. Galanakis L., 2015, *Ssmaterials*, 222.
- [64]. Tunalı, N. K. ve Özkar, S., 1993, *Anorganik Kimya*. Ankara: Gazi Üniversitesi Yayınları, 266.
- [65]. Soyalp, F., “Yoğunluk Fonksiyon Teorisi ile bazı bileşiklerin Elektronik yapılarının ve titreşim özelliklerinin teorik olarak incelenmesi” Doktora Tezi, Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Ankara, (2006).
- [66]. Uğur, ğ., “AIN (110) Yüzeyinin Atomik Yapısının ve Titreşim Özelliklerinin Yoğunluk Fonksiyon Teorisi ile İncelenmesi”, Doktora Tezi, Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Ankara, 2-33 (2004).
- [67]. Baroni, S., Giannozzi, P., Testa, A., “Green's-function approach to linear response in solids”, *Phys. Rev. Lett.*, 58: 1861-1864 (1987).
- [68]. Koa, V., Hana, G. And Fengb, Y.P., 2010, *J. Magn. Magn. Mater.*, 322, 2989.
- [69]. Liu, G.D., Dai, X. F., Liu, H. Y., Chen, J. L., Li, Y. X., Xiao, G. and Wu, G. H., 2008, *Phys. Rev. B*, 77, 014424.
- [70]. Drief, M., 2018, *J Supercond Nov Magn*, 31, 1059-1065.
- [71]. Goraus, J. and Czerniewski, J., 2019, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 166106.
- [72]. Zhang, X. J., Liu, Z. H., Zhang, Y. J., Liu, H. Y., Liu, G.D., Cui, Y.T. and Ma, X. Q., 2016, *Intermetallics*, 73, 26-30.
- [73]. Zhang, X. M., Xu, G. Z., Du, Y., Liu, E. K., Liu, Z. Y., Liu, G. D., Wang, W. H. and Wu, G. H., 2013, *A Letters Journal Exploring the Frontiers of Physics*, 104, 27012.
- [74]. Martin, R., 2004, Cambridge Univ Pr.
- [75]. Hohenberg, P. and Kohn, W., 1964, *Phys. Rev.*, 136, 3B, 864-871.
- [76]. Kohn, W. and Sham, L. J., 1965, *Phys. Rev.*, 140, 4A, 1133-1138.

- [77]. Nielsen, O. H. and Martin, R. C., 1983, Phys. Rev. Lett., 50, 697-700.
- [78]. Mouhat, F. and Coudert, F. X., 2014, Phys. Rev. B 90, 224104.
- [79]. Gaillac, R., Pullumbi, P. And Coudert, F. X., 2016, Journal of Physics: Condensed Matter, 28, 275201.
- [80]. Petit, A. T. and Dulong, P. L. (1819). Recherches sur quelques points importants de la Théorie de la Chaleur. Annales de Chimie et de Physique, 10, 395-413.



ÖZGEÇMİŞ

Kişisel Bilgiler

Adı Soyadı Ahmet Saydam

Doğum Yeri

Doğum Tarihi

Uyruğu

Telefon

E-Posta Adresi

Web Adresi

Eğitim Bilgileri Lisans

Üniversite Kocaeli Üniversitesi
Fakülte Mühendislik Fakültesi
Bölümü Elektronik Ve Haberleşme Mühendisliği
Mezuniyet Yılı 2015

Yüksek Lisans

Üniversite Ahi Evran Üniversitesi
Enstitü Adı Fen Bilimleri Enstitüsü
Anabilim Dalı İleri Teknolojiler
Programı İleri Teknolojiler
Mezuniyet Tarihi 2021