



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

FİZİK ANABİLİM DALI

**XGe_3 (X=Be, Mg, Ca, Sr, Ba) BİLEŞİKLERİNİN ELEKTRONİK VE
DİNAMİK ÖZELLİKLERİ**

YÜKSEK LİSANS TEZİ

Seda ÖZDEMİR

DANIŞMAN

Prof. Dr. Havva ÖZİŞİK

AKSARAY, 2024

Aksaray Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü'nün 222310702 numaralı Yüksek Lisans öğrencisi Seda ÖZDEMİR tarafından hazırlanan “**XGe₃ (X=Be, Mg, Ca, Sr, Ba) BİLEŞİKLERİNİN ELEKTRONİK VE DİNAMİK ÖZELLİKLERİ**” adlı tez çalışması aşağıdaki jüri tarafından OY BİRLİĞİ ile Fizik Anabilim Dalında YÜKSEK LİSANS TEZİ olarak kabul edilmiştir.

Danışman: Prof. Dr. Havva ÖZİŞİK

Aksaray Üniversitesi

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

.....

Üye: Prof. Dr. Nefise ÖZÇELİK

Aksaray Üniversitesi

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

.....

Üye: Prof. Dr. Nurettin KÖRÖZLÜ

Burdur Mehmet Akif Ersoy Üniversitesi

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

.....

Tez Savunma Tarihi: 08/02/2024

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

.....

Prof. Dr. Mehmet Ali HINIS

Fen Bilimleri Enstitüsü Müdürü

DOĞRULUK BEYANI

Yüksek lisans tezi olarak sunduğum bu çalışmayı, akademik kurallara ve bilimsel etik, ahlak ve geleneklere aykırı düşecek bir yol ve yardıma başvurmaksızın yazdığımı, yararlandığım eserlerin kaynakçada gösterilenlerden oluştuğunu, çalışmamda kullandığım verilerin orijinalliğini ve her türlü intihalden uzak olduğunu beyan ederim.

Enstitü tarafından belli bir zamana bağlı olmaksızın, tezimle ilgili yaptığım bu beyana aykırı bir durumun saptanması durumunda, ortaya çıkacak tüm ahlaki ve hukuki sonuçlara katlanacağımı bildiririm.

Seda ÖZDEMİR

TEŞEKKÜR

Bu çalışmanın hazırlanıp ortaya çıkması da; yüksek lisans öğrenimim boyunca desteğini esirgmeden, bilgi ve deneyimini sabırla paylaşan çok değerli ve özel biri olan danışman hocam Sayın Prof. Dr. Havva ÖZİŞİK'a sonsuz teşekkürlerimi borç bilirim.

Yüksek lisans tezi hazırlık aşamasında gereken alt yapıyı hazırlayan, programları sabırla öğreten, karşılaştığım her zorluğu çözmem için zamanını, bilgilerini ve tecrübelerini esirgmeden aktaran, tez çalışmalarımın verimli olmasını sağlayan hocalarım Sayın Prof. Dr. Hacı ÖZİŞİK'a, Sayın Prof. Dr. Engin DELİGÖZ'e, Sayın Prof. Dr. Engin ATEŞER'e ve Sayın Öğretim Görevlisi Mehtap AKGÜN'e teşekkürlerimi sunarım.

Çalışmalarım esnasında yanımda dualarıyla birlikte, maddi ve manevi her zaman yanımda olduklarını bildiğim desteklerini ve sevgilerini esirgmeden, sabırla ve umutlu bakışları ile bizlere emeklerini veren, onurum ve gururum olan, sevgili babam Sayın İsa TAYLAN ve sevgili annem Sayın Dönüş TAYLAN ile birlikte kardeşlerime sonsuz teşekkür ederim.

Şimdiye kadar maddi ve manevi her konuda desteğini esirgemeyen sevgili eşim Sayın Bilal ÖZDEMİR 'e teşekkür ederim. Özellikle sevgili oğlum senin varlığın ile güç bulduğum Sayın Muhammet Baki ÖZDEMİR 'e sonsuz teşekkür ederim.

Sevgili eşimin ailesinin her zaman maddi, manevi desteğini gördüğüm Sayın Burhan ÖZDEMİR ve ailesine teşekkür ederim.

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

Seda ÖZDEMİR
AKSARAY, 2024

İÇİNDEKİLER

TEŞEKKÜR	i
İÇİNDEKİLER	ii
ÖZET.....	iii
ABSTRACT	iv
ŞEKİLLER DİZİNİ	v
ÇİZELGELER DİZİNİ	vii
SİMGELER VE KISALTMALAR	viii
1. GİRİŞ	1
2. TEMEL BİLGİLER	3
2.1 Kristal Yapı	5
2.2 Mekanik Özellikler.....	5
3. HESAPLAMA METOTLARI	3
3.1 Schrödinger Denklemi.....	8
3.2 Born-Oppenheimer Yaklaşımı	8
3.3 Hartree-Fock Metodu	9
3.4 Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi.....	10
3.4.1 Hohenberg-Kohn teoremi	10
3.4.2 Kohn-Sham denklemleri	11
3.4.3 Yerel yoğunluk yaklaşımı (LDA)	12
3.4.4 Genelleştirilmiş gradyent yaklaşımı (GGA)	12
4. ARAŞTIRMA BULGULARI	13
4.1 Yapısal Özellikler.....	13
4.2 Elektronik Özellikler	17
4.3 Mekanik Özellikler.....	26
4.3.1 Elastik sabitleri	26
4.3.2 Polikristal özellikler	28
4.3.3 Yönelime bağlı mekanik özellikler	32
4.4 Termal İletkenlik	44
4.5 Titreşimsel Özellikler	45
4.5.1 Fonon dağınımı ve fonon durum yoğunluğu.....	46
4.5.2 Termodinamik özellikler	56
5. SONUÇ VE ÖNERİLER.....	58
KAYNAKLAR	59
ÖZGEÇMİŞ.....	65

YÜKSEK LİSANS TEZİ

XGe₃ (X=Be, Mg, Ca, Sr, Ba) BİLEŞİKLERİNİN ELEKTRONİK VE DİNAMİK ÖZELLİKLERİ

Seda ÖZDEMİR

**Aksaray Üniversitesi
Fen Bilimleri Enstitüsü
Fizik Anabilim Dalı**

Danışman: Prof. Dr. Havva ÖZİŞİK

ÖZET

Bu tez çalışmasında tetragonal ve hekzagonal fazda XGe₃ (X=Be, Mg, Ca, Sr, Ba) bileşiklerinin yapısal, mekanik, titreşimsel ve termodinamik özellikleri yoğunluk fonksiyonel teorisi yardımıyla hesaplandı. Hesaplamalar yapılırken elektron iyon etkileşimi PAW metodu, elektron-elektron etkileşimi ise PBE parametrizasyonu ile ele alındı. Geometrik optimizasyon sonucunda elde edilen örgü parametreleri mevcut verilerle karşılaştırılarak uyumlu olduğu görüldü. Bu bileşikler için elektronik band grafikleri ve durum yoğunluğu eğrileri çizdirilerek yorumlandı. Elastik sabitler “zor-zorlama” yöntemi kullanılarak hesaplandı ve mekaniksel olarak kararlı olan bileşikler için polikristal özellikleri de hesaplanarak detaylı bir şekilde incelendi. Ayrıca minimum termal iletkenlik değerleri de hesaplandı. Ek olarak fonon dağılımı ve fonon durum yoğunluğu eğrileri çizdirildi ve dinamik olarak kararlılıkları incelendi. Dinamik olarak kararlı bulunan bileşiklerin termodinamik özelliklerine bakıldı.

Anahtar Kelimeler: Yapısal Özellikler, Elektronik Özellikler, Mekanik Özellikler, Titreşimsel Özellikler, BeGe₃, MgGe₃, CaGe₃, SrGe₃, BaGe₃.

Şubat, 2024; 65 sayfa

M.Sc. THESIS

ELECTRONIC AND DYNAMIC PROPERTIES OF $X\text{Ge}_3$ ($X=\text{Be, Mg, Ca, Sr, Ba}$) COMPOUNDS

Seda ÖZDEMİR

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

Supervisor: Prof. Dr. Havva ÖZİŞİK

ABSTRACT

In this thesis study, the structural, mechanical, vibrational and thermodynamic properties of $X\text{Ge}_3$ ($X=\text{Be, Mg, Ca, Sr, Ba}$) compounds in tetragonal and hexagonal phases were calculated with the density functional theory. While making the calculations, the electron-ion interaction was handled with the PAW method, and the electron-electron interaction was handled with the PBE parameterization. The obtained lattice parameters from geometric optimization were found to be consistent with existing results. Electronic band structure and density of states curves for these compounds were plotted and interpreted. Elastic constants were calculated using the stress-strain method, and polycrystalline properties for mechanically stable compounds were also calculated and examined in detail. Minimum thermal conductivity values were also calculated. Additionally, phonon dispersion and phonon density of states were drawn and their dynamic stability was investigated. The thermodynamic properties of dynamically stable compounds were also analyzed.

Keywords: Structural Properties, Electronic Properties, Mechanic Properties, Vibrational Properties, BeGe_3 , MgGe_3 , CaGe_3 , SrGe_3 , BaGe_3 .

February, 2024; 65 pages

ŞEKİLLER DİZİNİ

Şekil 2.1. Birim hücre.	3
Şekil 2.2. Winger Seitz ilkel hücresi çizimi.....	4
Şekil 4.1. CaGe_3 (Tetragonal) ilkel birim hücre ve BaGe_3 (Hekzagonal) birim hücre görünümü.....	14
Şekil 4.2. Hesaplanan oluşum enerjileri (hekzagonal fazı mavi çember, tetragonal fazı kırmızı üçgen temsil etmektedir).	17
Şekil 4.3. Hekzagonal $P6_3/mmc$ faz için Brillouin bölgesi.....	18
Şekil 4.4. Tetragonal $I4/mmm$ faz için Brillouin bölgesi	18
Şekil 4.5. MgGe_3 bileşiğinin tetragonal fazda hesaplanan elektronik band yapısı ve toplam durum yoğunluğu	20
Şekil 4.6. MgGe_3 bileşiğinin hekzagonal fazda hesaplanan elektronik band yapısı ve toplam durum yoğunluğu.....	20
Şekil 4.7. CaGe_3 bileşiğinin tetragonal fazda hesaplanan elektronik band yapısı ve toplam durum yoğunluğu.....	20
Şekil 4.8. CaGe_3 bileşiğinin hekzagonal fazda hesaplanan elektronik band yapısı ve toplam durum yoğunluğu.....	21
Şekil 4.9. SrGe_3 bileşiğinin tetragonal fazda hesaplanan elektronik band yapısı ve toplam durum yoğunluğu.....	21
Şekil 4.10. SrGe_3 bileşiğinin hekzagonal fazda hesaplanan elektronik band yapısı ve toplam durum yoğunluğu	21
Şekil 4.11. BaGe_3 bileşiğinin tetragonal fazda hesaplanan elektronik band yapısı ve toplam durum yoğunluğu.....	22
Şekil 4.12. BaGe_3 bileşiğinin hekzagonal fazda hesaplanan elektronik band yapısı ve toplam durum yoğunluğu.....	22
Şekil 4.13. MgGe_3 bileşiğinin tetragonal fazda hesaplanan kısmi durum yoğunluğu.....	23
Şekil 4.14. MgGe_3 bileşiğinin hekzagonal fazda hesaplanan kısmi durum yoğunluğu.....	23
Şekil 4.15. CaGe_3 bileşiğinin tetragonal fazda hesaplanan kısmi durum yoğunluğu.....	24
Şekil 4.16. CaGe_3 bileşiğinin hekzagonal fazda hesaplanan kısmi durum yoğunluğu.....	24
Şekil 4.17. SrGe_3 bileşiğinin tetragonal fazda hesaplanan kısmi durum yoğunluğu.....	24
Şekil 4.18. SrGe_3 bileşiğinin hekzagonal fazda hesaplanan kısmi durum yoğunluğu.....	25
Şekil 4.19. BaGe_3 bileşiğinin tetragonal fazda hesaplanan kısmi durum yoğunluğu	25
Şekil 4.20. BaGe_3 bileşiğinin hekzagonal fazda hesaplanan kısmi durum yoğunluğu.....	25
Şekil 4.21. Tetragonal MgGe_3 bileşiğinin xy ve xz düzlemleri ile 3-boyutta hesaplanan Young modülü, sıkışabilirlik, Kesme modülü ve Poisson oranının yönelime bağlı değişimleri.....	34
Şekil 4.22. Tetragonal CaGe_3 bileşiğinin xy ve xz düzlemleri ile 3-boyutta hesaplanan Young modülü, sıkışabilirlik, Kesme modülü ve Poisson oranının yönelime bağlı değişimleri.....	35

Şekil 4.23.	Tetragonal SrGe_3 bileşiğinin xy ve xz düzlemleri ile 3-boyutta hesaplanan Young modülü, sıkışabilirlik, Kesme modülü ve Possion oranının yönelime bağlı değişimleri.....	36
Şekil 4.24.	Tetragonal BaGe_3 bileşiğinin xy ve xz düzlemleri ile 3-boyutta hesaplanan Young modülü, sıkışabilirlik, Kesme modülü ve Possion oranının yönelime bağlı değişimleri.....	37
Şekil 4.25.	Hekzagonal MgGe_3 bileşiğinin xy ve xz düzlemleri ile 3-boyutta hesaplanan Young modülü, sıkışabilirlik, Kesme modülü ve Possion oranının yönelime bağlı değişimleri.....	38
Şekil 4.26.	Hekzagonal CaGe_3 bileşiğinin xy ve xz düzlemleri ile 3-boyutta hesaplanan Young modülü, sıkışabilirlik, Kesme modülü ve Possion oranının yönelime bağlı değişimleri.....	39
Şekil 4.27.	Hekzagonal SrGe_3 bileşiğinin xy ve xz düzlemleri ile 3-boyutta hesaplanan Young modülü, sıkışabilirlik, Kesme modülü ve Possion oranının yönelime bağlı değişimleri.....	40
Şekil 4.28.	Hekzagonal BaGe_3 bileşiğinin xy ve xz düzlemleri ile 3-boyutta hesaplanan Young modülü, sıkışabilirlik, Kesme modülü ve Possion oranının yönelime bağlı değişimleri.....	41
Şekil 4.29.	Tetragonal BeGe_3 bileşiğinin fonon dağınımı ve fonon durum yoğunluğu eğrileri.....	46
Şekil 4.30.	Hekzagonal BeGe_3 bileşiğinin fonon dağınımı ve fonon durum yoğunluğu eğrileri.....	47
Şekil 4.31.	Tetragonal MgGe_3 bileşiğinin fonon dağınımı ve fonon durum yoğunluğu eğrileri.....	47
Şekil 4.32.	Hekzagonal MgGe_3 bileşiğinin fonon dağınımı ve fonon durum yoğunluğu eğrileri.....	48
Şekil 4.33.	Tetragonal CaGe_3 bileşiğinin fonon dağınımı ve fonon durum yoğunluğu eğrileri.....	48
Şekil 4.34.	Hekzagonal CaGe_3 bileşiğinin fonon dağınımı ve fonon durum yoğunluğu eğrileri.....	49
Şekil 4.35.	Tetragonal SrGe_3 bileşiğinin fonon dağınımı ve fonon durum yoğunluğu eğrileri.....	49
Şekil 4.36.	Hekzagonal SrGe_3 bileşiğinin fonon dağınımı ve fonon durum yoğunluğu eğrileri.....	50
Şekil 4.37.	Tetragonal BaGe_3 bileşiğinin fonon dağınımı ve fonon durum yoğunluğu eğrileri.....	50
Şekil 4.38.	Hekzagonal BaGe_3 bileşiğinin fonon dağınımı ve fonon durum yoğunluğu eğrileri.....	51
Şekil 4.39.	Hekzagonal fazda XGe_3 ($X = \text{Ca}, \text{Sr}, \text{Ba}$) bileşiklerinin sıcaklığa bağlı ısı sıçması.....	57
Şekil 4.40.	Tetragonal fazda XGe_3 ($X = \text{Mg}, \text{Ca}, \text{Sr}, \text{Ba}$) bileşiklerinin sıcaklığa bağlı ısı sıçması.....	57

ÇİZELGELER DİZİNİ

Çizelge 2.1. 7 kristal sistemi ve 14 Bravais örgüsü.	4
Çizelge 2.2. Bulk modülü (B), Shear modülü (G), Young modülü (E), Poisson oranı (ν), Debye sıcaklığı (Θ_D), boyuna, enine ve ortalama ses hızları (v_l, v_t, v_m) hesabı için kullanılan denklemler	7
Çizelge 4.1. Yapı Tablosu.....	14
Çizelge 4.2. Tetragonal fazda XGe_3 (X=Be, Mg, Ca, Sr, Ba) bileşiklerinin hesaplanan temel durum atomik örgü koordinatları ve mevcut çalışmalar.	15
Çizelge 4.3. Hekzagonal fazda XGe_3 (X=Be, Mg, Ca, Sr, Ba) bileşiklerinin hesaplanan temel durum atomik örgü koordinatları ve mevcut çalışmalar.	15
Çizelge 4.4. Hesaplanan temel durum örgü sabitleri (a, c; Å), hacim (V_0 , Å ³ /u.c.), oluşum entalpisi (ΔH_f , ev/p.a.) ve mevcut çalışmalar	16
Çizelge 4.5. Band hesabında kullanılan hekzagonal $P6_3/mmc$ uzay grubu için yüksek simetri noktalarının koordinatları	19
Çizelge 4.6. Band hesabında kullanılan tetragonal $I4/mmm$ uzay grubu için yüksek simetri noktalarının koordinatları	19
Çizelge 4.7. XGe_3 (X=Mg, Ca, Sr, Ba) bileşiklerinin hesaplanan $N(E_f)$ (states/eV-f.u) ve μ^* değerleri	26
Çizelge 4.8. XGe_3 (X=Be, Mg, Ca, Sr, Ba) bileşiklerinin hesaplanan ikinci dereceden elastik sabitleri (C_{ij} , GPa)	27
Çizelge 4.9. XGe_3 (X=Mg,Ca,Sr,Ba) bileşiklerinin hesaplanan polikristal elastik modülleri; bulk (B,GPa), Young (E,GPa), kesme (G,GPa), Poisson (ν), Pugh (B/G), Cauchy basıncı (P), işlenebilirlik indeksi (μ).....	28
Çizelge 4.10. XGe_3 (X=Mg, Ca, Sr, Ba) Vicker sertliği (H_v , GPa), Evrensel anizotropi katsayısı (A^u), boyuna, enine ve ortalama ses hızları ($\vartheta_l, \vartheta_t, \vartheta_m$, m/s), ve Debye sıcaklığı (Θ_D , K) ve Grüneisen parametresi (γ).....	31
Çizelge 4.11. XGe_3 (X= Mg, Ca, Sr, Ba) Bileşiklerinin Young Modülü, Lineer Sıkışabilirlik, Kesme modülü ve Poisson oranı için maksimum, minimum ve anizotropi değerleri	42
Çizelge 4.12. Tetragonal Yapıdaki XGe_3 (X=Mg, Ca, Sr, Ba) bileşiklerinin yönelime bağlı ses hızları (m/s)	44
Çizelge 4.13. Hekzagonal Yapıdaki XGe_3 (X=Mg, Ca, Sr, Ba) bileşiklerinin yönelime bağlı ses hızları (m/s)	44
Çizelge 4.14. XGe_3 (X= Mg, Ca, Sr, Ba) Bileşiklerinin minimum termal iletkenlik değerleri (k_{Clarke} , k_{Cahill} ve k_{Long}) (W/m·K).....	45
Çizelge 4.15. Hekzagonal Fazda XGe_3 (X=Ca, Sr, Ba) bileşiklerinin Γ noktasındaki fonon frekansları (THz) ve simetrileri.....	54
Çizelge 4.16. Tetragonal Fazda XGe_3 (X=Mg, Ca, Sr, Ba) bileşiklerinin Γ noktasındaki fonon frekansları (THz) ve simetrileri.....	55
Çizelge 4.17. Hekzagonal Fazda 300 K'de XGe_3 (X= Ca, Sr, Ba) Bileşiklerinin serbest enerji F[kJ/mol], entropi S [J/K/mol], ısı sığası C_v [J/K/mol] ve iç enerji E[kJ/mol]	56
Çizelge 4.18. Tetragonal fazda 300 K'de XGe_3 (X= Mg, Ca, Sr, Ba) bileşiklerinin serbest enerji F[kJ/mol], entropi S [J/K/mol], ısı sığası C_v [J/K/mol] ve iç enerji E[kJ/mol]	56

SİMGELER VE KISALTMALAR

DFT	Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi
GGA	Genelleştirilmiş Gradyent Yaklaşımı
K-S	Kohn-Sham
LDA	Yerel Yoğunluk Yaklaşımı
PBE	Perdew Burke Enzerhof
VRH	Voigt -Reuss-Hill Yaklaşımı
H-F	Hartree-Fock
VASP	Vienna Ab initio Simulation Package
A	Anizotropi
A_B	Hacim modülünün elastik anizotropi yüzdesi
A_G	Kayma modülünün elastik anizotropi yüzdesi
A^U	Elastik anizotropi indeksi
B	Bulk modülü
E	Young modülü
G	Kesme modülü
C_{ij}	Elastik sabitler
k	Boltzman sabiti
m, M	Kütle
Ba	Baryum
Ca	Kalsiyum
Sr	Stronsiyum
Mg	Magnezyum
Be	Berilyum
H	Hamilton
H_v	Vicker sertlik değeri
V	Hacim
V_l	Boyuna ses hızı
V_m	Ortalama ses hızı
V_t	Enine ses hızı
v	Poisson oranı
ρ	Yoğunluk
ψ	Dalga fonksiyonu
θ	Debye sıcaklığı

1. GİRİŞ

Metalurji, kimya mühendisliği, havacılık ve uzay bilimlerindeki potansiyel teknolojik uygulamaları ve eşsiz özellikleri nedeniyle, intermetalik bileşiklerin araştırılmasına son zamanlarda önemli çabalar sarf edilmiştir [1-4]. Bu intermetalik bileşikler, çok kullanışlı fonksiyonel malzemelerdir [5]. Güneş pilleri, termoelektrik, süperiletkenlik ve optoelektronik gibi birçok teknolojik alanda kapsamlı çalışmalar yapılmıştır [5-12]. Alkali-, toprak alkali- ve nadir toprak metallerinin elektropozitif ortakları ile grup IV elementleri tarafından oluşturulan bileşikler, yarı iletkenler veya metallerle zengin bir ikili sistem çeşitliliği sergiler. Bu bileşiklerde, tetrel atomları nedeniyle farklı yapılar oluşturabilir. Böylesine zengin bir yapısal çeşitlilik doğal olarak güneş pillerinde, termoelektrikte ve optoelektronikte kullanılabilen ilginç fiziksel olguları ve özellikleri beraberinde getirir [13-15]. Si ve Ge içeren intermetalik bileşikler, yapı çeşitliliğinin yanı sıra özellikle süperiletkenlik ve termoelektrik alanlarında gelecek vadeden bileşikler sınıfında yer almaktadır [16, 17].

Ba-Ge tipi bileşikler, özellikle enerji üretimi ve soğutma için kullanılan termoelektrik cihazlarda, atık ısı kaynaklarından enerji elde etmek için ve süperiletkenlik özellikleriyle kuantum bilgi işlemeyi gerçekleştiren sistemlerin uygulanması için kullanılmaktadır [18, 19]. Ca-Ge intermetalik bileşikleri, termoelektrik ve optoelektrik malzemelerdeki ve yeni elektronik cihazların tasarımındaki pratik uygulamaları nedeniyle büyük ilgi çekmiştir [1, 20, 21].

Bildiğimiz kadarıyla XGe_3 ($X = Be, Mg, Ca, Sr, Ba$) intermetalik bileşikleri ile ilgili yapılan çalışmalar sınırlı sayıdadır. Fukuoka ve arkadaşları [17] hekzagonal yapıda $BaGe_3$ bileşiğini sentezlediler ve Wien2k kodunu kullanarak elektronik özelliklerini incelediler. Castillo ve arkadaşları [22], yeni bir faz olan tetragonal yapıdaki $BaGe_3$ kristalini yüksek basınç ve sıcaklıkta sentezleyerek 6,5K'de süperiletkenliğe geçtiğini gözlemlediler. Zurek ve arkadaşları [23] tarafından $BaGe_3$ bileşiğinin üç fazının ($P6_3/mmc$, $I4/mmm$ ve $Amm2$) kararlı olduğunu tahmin ettiler. Ayrıca bu üç faz için elektronik ve süperiletkenlik özelliklerini tartıştılar [19]. Schnelle ve arkadaşları [24] ise tetragonal $CaGe_3$ bileşiğini yüksek basınç ve sıcaklık altında sentezlediler ve yaklaşık 6,8 K' de süperiletkenlik gözlemlediler. Tetragonal yapıdaki $SrGe_3$, yüksek basınç ve yüksek sıcaklıkta sentezlenerek 6K'de süperiletkenliğe geçtiği gözlemlendi ve ayrıca elektronik yapısı Wien2k programı ile çalışıldı [25]. Sr-Ge sistemindeki faz

diyagramını, kristal yapısını ve fiziksel özelliklerini 0 GPa ile 200 GPa arasında değişen basınçlarda ele aldılar [13]. Castillo ve arkadaşları [26] $AE\text{Ge}_3$ ($tI32$) ($AE=\text{Ca}, \text{Sr}, \text{Ba}$) bileşiklerinin kimyasal bağlanmalarını ve süperiletkenliklerini inceledi. Ayrıca Castillo'nun doktora tezinde BaGe_3 ve SrGe_3 bileşiklerinin sentezi yapılarak fiziksel özellikleri (manyetik alınganlık, elektriksel direnç ve özısı) ele alındı [27].

Bu tezin amacı, XGe_3 ($X= \text{Be}, \text{Mg}, \text{Ca}, \text{Sr}, \text{Ba}$) intermetalik bileşiklerinin yapısal, elektronik, elastik ve titreşimsel özelliklerini incelemektir. Bildiğimiz kadarıyla XGe_3 ($X= \text{Be}, \text{Mg}, \text{Ca}, \text{Sr}, \text{Ba}$) ile ilgili yapılan çalışmalar çok azdır ve hatta elastik ve titreşimsel özellikleri hakkında bilgi bulunmamaktadır. Bu bileşiklerin potansiyel kullanım alanlarının belirlenebilmesi için, sistematik olarak bu bileşiklerin yapısal, elektronik, elastik, titreşimsel ve termodinamik özellikleri yoğunluk fonksiyonel teorisini kullanarak hesaplandı ve detaylı olarak analiz edildi.

2. TEMEL BİLGİLER

Bu bölümde tez içerisinde kullanılan temel kavramlar hakkında kısa bilgiler verilecektir.

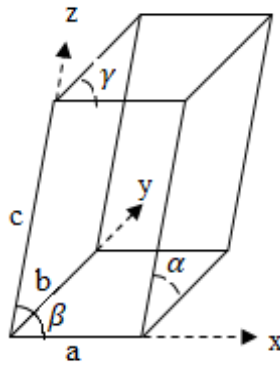
2.1 Kristal Yapı

Uzayda her bir noktası aynı çevreye sahip olan tekrarlanabilen nokta kümelerine örgü denir. Bu örgü noktalarında bulunan atom veya atom grupları baz olarak ifade edilir. Uzay örgüsündeki her bir noktaya bir baz konulursa kristal yapı oluşmaktadır. Yapıyı oluşturabilecek atomlar, iyonlar veya moleküllerin üç boyutta periyodik bir düzen içerisinde devam etmesiyle oluşan yapıya kristal denir.

Üç boyutlu kristalde örgü yer vektörü,

$$\vec{r}_{uvw} = u\vec{a} + v\vec{b} + w\vec{c} \quad (2.1)$$

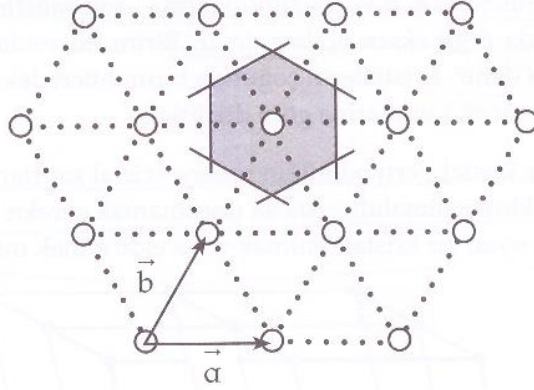
olarak gösterilmektedir. Burada u, v ve w birer tam sayı ve birim hücreyi tanımlayan $\vec{a}$, $\vec{b}$, $\vec{c}$ örgü öteleme vektörüdür. Birim hücrenin kenar uzunlukları olan a, b, c ise örgü sabitleridir. Tüm uzayı dolduran en küçük düzenli yapı birimine birim hücre denir. Şekil 2. 1.'de birim hücrenin örgü sabitleri ve örgü eksen açıları (α, β, γ) gösterilmektedir.



Şekil 2.1. Birim hücre.

İlkel hücre, bir örgü noktası içeren minimum hacimli yapıdır. Wigner-Seitz hücresi; bir ilkel hücre çeşididir. Bir örgü noktası seçilir ve en yakınındaki örgü noktalarına doğrular çizilir. Daha sonra da çizilen doğruların orta dikmelerine doğrular çizilir ve

bu doğrulardan meydana gelen kapalı bölgeye Wigner-Seitz hücresi denir. Şekil 2.2.'de iki boyutlu bir örgü için Wigner-Seitz hücresinin oluşumu gösterilmektedir.



Şekil 2.2. Winger Seitz ilkel hücresi çizimi [28].

Üç boyutlu uzayda örgü öteleme simetrisi ve dönme simetrisi birlikte değerlendirilerek yedi kristal sistemi elde edilir. Bu 7 kristal sistemi basit örgülerdir. Bu kristal sistemlerinin simetri özelliklerini değiştirmeyecek şekilde cisim merkezinde, yüzey merkezinde veya taban merkezinde örgü noktaları bulunabilir. Bu şekilde 14 Bravais örgüsü elde edilir. Bu 7 adet kristal sistemi ve 14 Bravais örgüsü Çizelge 2.1' de verilmiştir.

Çizelge 2.1. 7 kristal sistemi ve 14 Bravais örgüsü.

Sistem	Örgü sayısı	Birim hücre eksen ve açıların özellikleri
Hekzagonal	1	$\vec{a}_1 = \vec{a}_2 \neq \vec{a}_3; \quad \alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$
Kübik	3	$\vec{a}_1 = \vec{a}_2 = \vec{a}_3; \quad \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
Trigonal	1	$\vec{a}_1 = \vec{a}_2 = \vec{a}_3; \quad \alpha = \beta = \gamma < 120^\circ, \neq 90^\circ$
Tetragonal	2	$\vec{a}_1 = \vec{a}_2 \neq \vec{a}_3; \quad \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
Ortorombik	4	$\vec{a}_1 \neq \vec{a}_2 \neq \vec{a}_3; \quad \alpha = \beta = \gamma$
Triklinik	1	$\vec{a}_1 \neq \vec{a}_2 \neq \vec{a}_3; \quad \alpha \neq \beta \neq \gamma$
Monoklinik	2	$\vec{a}_1 \neq \vec{a}_2 \neq \vec{a}_3; \quad \alpha = \beta = 90^\circ \neq \gamma$

Kristaller, gerçek uzayda kristal örgü ve fourier uzayında ters örgü ile ifade edilirler. Kristal örgünün eksen vektörleri $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ ile ifade edilirse buradaki tüm geometrik özelliklerini gösteren birer ters örgü bulunmaktadır. Ters örgü vektörü,

$$\vec{G} = v_1 \vec{b}_1 + v_2 \vec{b}_2 + v_3 \vec{b}_3 \quad (2.2)$$

şeklindedir. Burada v_1, v_2, v_3 tamsayı olmak üzere, $\vec{b}_1, \vec{b}_2, \vec{b}_3$ ters örgüdeki eksen vektörleridir. Birim hücre ve ters örgü hacimleri sırasıyla,

$$V_c = \vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3) \quad V'_c = \vec{b}_1 \cdot (\vec{b}_2 \times \vec{b}_3) \quad (2.3)$$

ile ifade edilmektedir ve

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{V_c} (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3), \quad \vec{b}_2 = \frac{2\pi}{V_c} (\vec{a}_3 \times \vec{a}_1), \quad \vec{b}_3 = \frac{2\pi}{V_c} (\vec{a}_1 \times \vec{a}_2) \quad (2.4)$$

olarak elde edilir.

Ters örgünün Winger-Seitz hücresi, Birinci Brillouin Bölgesini verir. Brillouin bölgesi kırınım şartının geometrik yorumunu vermesinden dolayı önemlidir. $\vec{k}$ dalga vektörü olmak üzere kırınım koşulu

$$2\vec{k} \cdot \vec{G} = G^2 \quad (2.5)$$

ile ifade edilir. Sadece Brillouin bölgesi sınırlarında kırınım gerçekleşir.

2.2 Mekanik Özellikler

Bir malzemenin tasarımı ve mühendislik uygulamaları için gerekli olan mekaniksel davranışları, elastik modülleri ile ifade edilmektedir. Bu tezde elastik sabitleri hesaplanırken en yaygın yöntemlerden biri olan zor-zorlanma [29] yöntemi kullanıldı. Zor, birim yüzeye uygulanan kuvveti ve zorlanma ise oluşan deformasyonu belirtir. Zor ve zorlanmanın yeterince küçük olduğunda zor tensörü (σ_i) ve zorlanma tensörü (ϵ_j) arasındaki ilişki,

$$\sigma_i = \sum_j C_{ij} \epsilon_j \quad (i, j = 1, 2, \dots, 6) \quad (2.6)$$

ile ifade edilir. Burada C_{ij} elastik sabitleri göstermektedir ve 6x6 matris formundadırlar. 21 tane bağımsız elastik sabiti elde edilir ve kristal yapısına göre bu sayı azalabilir. Bu tek kristal elastik özelliklerinden polikristal elastik özellikleri (Bulk modülü, Kesme Modülü, Young modülü gibi) elde edilebilir.

Bir malzemenin mekanik olarak kararlılığından söz edilebilmesi için Born kararlılık kriterlerini sağlaması gerekir. Bu tez kapsamında incelediğimiz yapılar için Born kararlılık kriterleri [30],

Hekzagonal yapılar için (C_{11} , C_{33} , C_{44} , C_{12} ve C_{13})

- $C_{44} > 0$, $C_{11} > |C_{12}|$, $(C_{11} + 2C_{12})C_{33} > 2C_{13}^2$

Tetragonal yapılar için (C_{11} , C_{33} , C_{44} , C_{66} , C_{12} ve C_{13})

- $C_{11} > 0$, $C_{33} > 0$, $C_{44} > 0$, $C_{66} > 0$, $(C_{11} - C_{12}) > 0$, $(C_{11} + C_{33} - 2C_{13}) > 0$,

$$[2(C_{11} + C_{12}) + C_{33} + 4C_{13}] > 0$$

ile verilmektedir. Bu yapılar için Bulk modülü (B) ve shear modülü (G);

Hekzagonal yapılar için

- $B_V = (1/9)[2(C_{11} + C_{12}) + 4C_{13} + C_{33}]$,
- $G_V = (1/30)(M + 12C_{44} + 12C_{66})$,
- $B_R = C^2/M$,
- $G_R = (5/2)(C^2 C_{44} C_{66}) / [3B_V C_{44} C_{66} + C^2(C_{44} + C_{66})]$,
- $M = C_{11} + C_{12} + 2C_{33} - 4C_{13}$,
- $C^2 = (C_{11} + C_{12})C_{33} - 2C_{13}^2$

Tetragonal yapılar için

- $B_V = [2(C_{11} + C_{12}) + C_{33} + 4C_{13}] / 9$
- $B_R = [(C_{11} + C_{12})C_{33} - 2C_{13}^2] / [C_{11} + C_{12} + 2C_{33} - 4C_{13}]$
- $G_V = (4C_{11} - 2C_{12} + 2C_{33} - 4C_{13} + 12C_{44} + 6C_{66}) / 30$
- $G_R = 15 / \{ (18B_V / C^2) + [6 / (C_{11} - C_{12})] + (6 / C_{44}) + (3 / C_{66}) \}$

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

ile hesaplanır [31]. Burada alt indis olarak verilen V ve R, Voight [32] ve Reuss [33] yaklaşımlarının ilk harfleri olup, sırasıyla üst ve alt sınır değerlerini göstermektedir. Bulk modülü ve shear modülünü hesaplanırken bu iki yaklaşımın ortalamasını alan Voigt-Reuss-Hill (VRH) [34] yaklaşımından diğer polikristal özellikleri Çizelge 2.2’de gösterildiği gibi hesaplanabilir.

Çizelge 2.2. Bulk modülü (B), Kesme modülü (G), Young modülü (E), Poisson oranı (ν), Debye sıcaklığı (Θ_D), boyuna, enine ve ortalama ses hızları (v_l , v_m , v_t) hesabı için kullanılan denklemler.

$B = \frac{B_V + B_R}{2}$	$G = \frac{G_V + G_R}{2}$	$E = \frac{9GB}{G + 3B}$	$\nu = \frac{3B - 2G}{2(3B + G)}$
$\Theta_D = \frac{\hbar}{k} \left[\frac{3n}{4\pi} \left(\frac{N_A \rho}{M} \right) \right]^{-1/3} \vartheta_m$	$\vartheta_l = \sqrt{\frac{3B + 4G}{3\rho}}$	$\vartheta_t = \sqrt{\frac{G}{\rho}}$	$\vartheta_m = \left[\frac{1}{3} \left(\frac{2}{\vartheta_t^3} + \frac{1}{\vartheta_l^3} \right) \right]^{-1/3}$

Burada $\hbar=h/2\pi$ olmak üzere h Planck sabiti, k Boltzman sabiti, N_A Avogadro sayısı, ρ yoğunluk, n formül başına atom sayısını ve M formül başına molekül kütlesini ifade etmektedir.

3. HESAPLAMA METODLARI

Bilim dünyasında geçerliliği yüksek olan Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi (DFT), bir kuantum mekanik modelleme metodudur. Bu bölümde Yoğunluk Fonksiyonel Teorisinin ana hatlarından bahsedilecektir.

3.1 Schrödinger Denklemi

Schrödinger Denklemi, bir kuantum-mekanik sistemin dalga fonksiyonunu tanımlayan bir denklemdir. Bir sistemin taban durum enerjisi zamandan bağımsız Schrödinger Denkleminin çözülmesi ile bulunabilir.

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

Burada H , Hamilton operatörü; Ψ , sistemin dalga fonksiyonu ve E ise sistemin enerjisini temsil eder. Hamilton operatörü, potansiyel enerji ve kinetik enerji olmak üzere iki terimle ifade edilebilir:

$$H = \frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V \quad (3.2)$$

Burada, m kütle olmak üzere eşitliğin sağ tarafındaki ilk terim kinetik enerji ve ikinci terim V ise potansiyel enerji ifadesidir.

Schrödinger Denklemini çözmek zordur ve yalnızca hidrojen atomu gibi birkaç seçilmiş sistemde analitik olarak çözmek mümkündür. Daha karmaşık bir sistemi ele almak için yaklaşık hesaplama yöntemleri gerekir.

3.2 Born-Oppenheimer Yaklaşımı

Born-Oppenheimer yaklaşımı [35] kütle farkından dolayı herhangi bir anda elektronların çekirdekten çok daha hızlı hareket ettiğini ele alarak çekirdekleri donmuş olarak varsayar. Bir sistemin hareketini, çekirdeklerin ve elektronların hareketi olarak ayırır ve Schrödinger Denklemini basitleştirmek için kullanılır. Toplam Hamilton operatörü, çekirdek ve elektron terimlerine ayrılabilir:

$$H = T_{\text{ç}} + T_e + V_{\text{çç}} + V_{\text{çe}} + V_{ee} \quad (3.3)$$

T_ζ ve T_e sırasıyla çekirdek ve elektronların kinetik enerji operatörleridir; $V_{\zeta\zeta}$, $V_{\zeta e}$ ve V_{ee} ise sırasıyla çekirdek-çekirdek, çekirdek-elektron ve elektron-elektron arasındaki Coulomb etkileşiminin potansiyel enerji operatörlerini temsil eder.

Born-Oppenheimer yaklaşımıyla, dalga fonksiyonu,

$$\Psi(r, R) = \Psi_\zeta(R) \Psi_e(r, R) \quad (3.4)$$

şeklinde ifade edilebilir. Burada $\Psi_\zeta(R)$, çekirdeği tanımlayan dalga fonksiyonudur ve yalnızca çekirdek konumu (R) ile ilgilidir; $\Psi_e(r, R)$ elektronları tanımlayan dalga fonksiyonudur ve hem elektronların konumu (r) hem de çekirdek konumu (R) ile de ilgilidir. Schrödinger denklemi

$$H_e(r, R) \Psi_e(r, R) = E_e \Psi_e(r, R) \quad (3.5)$$

$$H_\zeta(R) \Psi_\zeta(R) = E_\zeta \Psi_\zeta(R) \quad (3.6)$$

şeklinde yazılabilir. E_e elektronik enerjiyi ve E_ζ çekirdek enerjisini temsil eder. Bu nedenle sistemin toplam enerjisi, toplam elektronik enerji ve çekirdek-çekirdek enerji etkileşimleri toplamı olarak özetlenebilir:

$$E_{toplam} = E_e + E_\zeta \quad (3.7)$$

3.3 Hartree-Fock Metodu

Born-Oppenheimer yaklaşımı kullanılarak çekirdek ve elektronların dalga fonksiyonu ayrılrsa da, bir sistemdeki çok fazla elektron nedeniyle Schrödinger denklemini çözmek hala zordur. Hartree metodu [36], atom ve iyonların dalga fonksiyonu tanımlamasını ve enerji hesaplamasını basitleştirir. Hartree metodunda, elektronlar birbirinden bağımsız olarak düşünülür ve her elektron durumu, karşılık gelen tek elektronlu dalga fonksiyonu ile tanımlanabilir. Böylece bir n -elektron sisteminin dalga fonksiyonu, tüm tek elektron dalga fonksiyonunun çarpılmasıyla elde edilir.

$$\Psi_{(r)} = \Psi_1(r_1) \cdot \Psi_2(r_2) \dots \Psi_n(r_n) \quad (3.8)$$

Ancak Hartree metodu, dalga fonksiyonunun anti-simetri durumunu dikkate almadığından dolayı, bir sistemin elektronik dalga fonksiyonunu daha iyi tanımlamak

için Slater determinantından yararlanılır [37]. Anti-simetri ilkesini sağlayacak şekilde, N -elektron sisteminin dalga fonksiyonunu temsil etmek için Slater determinanı:

$$\Psi(r_1\sigma_1, r_2\sigma_2, \dots, r_N\sigma_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_1(r_1\sigma_1) & \psi_1(r_2\sigma_2) & \dots & \psi_1(r_N\sigma_N) \\ \psi_2(r_1\sigma_1) & \psi_2(r_2\sigma_2) & \dots & \psi_2(r_N\sigma_N) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_N(r_1\sigma_1) & \psi_N(r_2\sigma_2) & \dots & \psi_N(r_N\sigma_N) \end{vmatrix} \quad (3.9)$$

eşitliği ile verilir. Sütunlar tek dalga fonksiyonlarına ve satırlar elektron koordinatlarına karşılık gelmektedir. Burada herhangi iki satır veya sütunu değiştirdiğimizde, işareti değiştiğinden anti-simetri ilkesini sağlamaktadır. Ayrıca, iki eşdeğer satır veya sütun nedeniyle determinant sıfır olur ve bu iki farklı elektronun aynı elektron durumunu işgal edemeyeceğini belirtir. Ancak, Hartree-Fock metodunda da elektron korelasyon etkileri ihmal edilir. Kuantum kimyasına göre, elektron korelasyonundan kaynaklanan enerji,

$$E_{korelasyon} = E_{gerçek} - E_{HF} \quad (3.10)$$

şeklinde tanımlanır. Yani, elektron korelasyon enerjisi, gerçek elektron dalga fonksiyonu ile Hartree-Fock metodu ile bulunan taban durum enerjileri arasındaki farka eşittir.

3.4 Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi

1960'larda, dalga fonksiyonunu temel alan Hartree-Fock yöntemine daha düşük hesaplama maliyetleri ile bir alternatif olarak DFT geliştirildi [38]. DFT, bir sistemin toplam enerjisini hesaplarken değiş-tokuş ve korelasyonu da dikkate alır.

3.4.1 Hohenberg–Kohn teoremi

Hohenberg-Kohn [39] kuantum mekaniğinde temel durumdaki bir sistemin özelliklerinin tamamen sistemin elektron yoğunluğu tarafından belirlenebildiğini gösterdiler. Hohenberg-Kohn teoremi, yoğunluk fonksiyonel teorisinin temelidir ve iki teoremden oluşmaktadır.

Teorem 1: Dış potansiyel $V_{dış}(r)$ ve elde edilen toplam enerji $E[\rho(r)]$, elektron yoğunluğunun $\rho(r)$ fonksiyoneliidir.

Teorem 2: Yalnızca sistem enerjisi en düşük enerjiye ulaştığında yoğunluk taban (temel) durumu yoğunluğudur. Bu da sistemin rastgele yoğunluğuna sahip diğer enerjilerinin, taban durumu yoğunluğuna sahip enerjiden daha büyük olduğu anlamına gelir.

Toplam fonksiyonelin enerjisini minimum yapan elektron yoğunluğu, Schrödinger denkleminin tam çözümüne karşılık gelen doğru elektron yoğunluğudur [40].

Toplam enerji,

$$E[\rho(r)] = T[\rho(r)] + V_{ee}[\rho(r)] + \int \rho(r) V_{dış}(r) dr \quad (3.11)$$

ile ifade edilir.

3.4.2 Kohn-Sham denklemleri

Hohenberg-Kohn teoremlerine göre, toplam enerjiyi elde etmek için öncelikle sistemin taban durum yoğunluğunun bulunması gerekir. Kohn-Sham [41] denklemleri, çok elektronlu dalga fonksiyonunun karmaşıklığını tek elektron dalga fonksiyonunun bir Slater determinantına indirger.

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{K-S}(r) \right) \varphi_i(r) = \varepsilon_i \varphi_i(r) \quad (3.12)$$

Burada $V_{K-S}(r)$, etkileşmeyen parçacıkların hareket ettiği etkin dış potansiyeli temsil eden Kohn-Sham potansiyeli olarak adlandırılır. $\varphi_i(r)$, Kohn-Sham yörünge fonksiyonudur; ve ε_i değeri, o yörüngeye enerjisine karşılık gelen Kohn-Sham yörüngesinin öz değeridir. Elektron yoğunluğu,

$$\rho(r) = \sum_i^N |\varphi_i(r)|^2 \quad (3.13)$$

ile verilir. $V_{K-S}(r)$ ifadesi

$$V_{K-S}(r) = E_{K-S}(r) + e^2 \int \frac{\rho(r')}{|r-r'|} dr' + V_{xc}(r) \quad (3.14)$$

ile verilir. Toplam enerji:

$$E(\rho) = T(\rho) + E_{ee}(\rho) + \int V_{K_S}(r)\rho(r)dr + V_{xc}(\rho) \quad (3.15)$$

bu ifadede, $T(\rho)$ etkileşimli olmayan elektronların kinetik enerjisidir; $E_{ee}(\rho)$, elektronlar ve elektronlar arasındaki etkileşim enerjisidir; $V_{K_S}(r)$ dış potansiyeldir; $V_{xc}(\rho)$, değiş-tokuş korelasyon potansiyelidir ve:

$$V_{xc} = \frac{\delta E_{xc}(\rho)}{\delta \rho(r)} \quad (3.16)$$

ile verilir. $E_{xc}(\rho)$ teriminin iyi bir tahmini, Yerel Yoğunluk Yaklaşımı (LDA) ve Genelleştirilmiş Gradyent Yaklaşımı (GGA) gibi yaklaşımlarla yapılır.

3.4.3 Yerel yoğunluk yaklaşımı (LDA)

Yerel yoğunluk yaklaşımı (LDA) [42] değiş- tokuş korelasyon fonksiyoneli oldukça doğru veren en basit yaklaşımlardan biridir. Bu yaklaşım, yoğunluğun her yerde homojen kabul edildiğini varsayar. Değiş-tokuş korelasyon enerjisi,

$$E_{xc}^{LDA}(\rho(r)) = \int \rho(r) \varepsilon_{xc}(\rho(r))dr \quad (3.17)$$

ile verilir.

3.4.4 Genelleştirilmiş gradyent yaklaşımı (GGA)

Genelleştirilmiş Gradyent Yaklaşımı (GGA) [43], gerçek elektronik yoğunluğun homojen olmamasından kaynaklanan hatayı telafi etmek için ortaya çıkmaktadır. GGA yaklaşımı, değiş-tokuş ve korelasyon enerjilerini yoğunluğun ve gradyanın bir fonksiyonu olarak ifade eder. Değiş-tokuş korelasyon enerjisi:

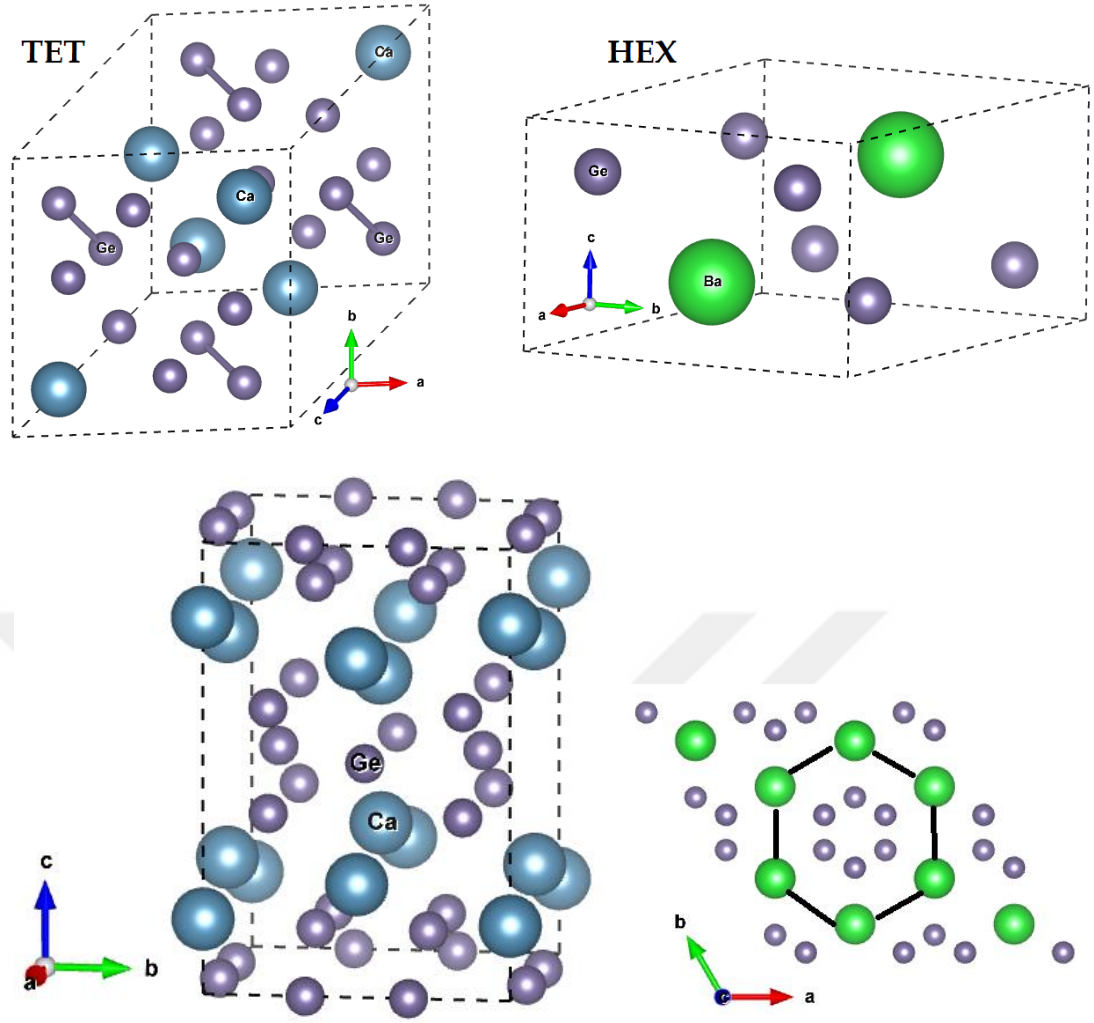
$$E_{xc}^{GGA}(\rho(r)) = \int \rho(r) \varepsilon_{xc}(\rho(r), \nabla r)dr \quad (3.18)$$

4. ARAŞTIRMA BULGULARI

Bu bölüm içeriğinde XGe_3 ($X=Be, Mg, Ca, Sr, Ba$) bileşiklerinin tetragonal ve hekzagonal fazları için yapısal, elektronik, mekanik, titreşimsel ve termodinamik özellikleri yoğunluk fonksiyonel teorisi kullanılarak hesaplandı ve elde edilen sonuçlar detaylı olarak analiz edildi. Hesaplamalarda VASP yazılım paketi [44-46] kullanıldı. Hesaplamalarda elektron-iyon etkileşimi için PAW metodu ve elektron-elektron etkileşimi için ise PBE değiş-tokuş ve korelasyon fonksiyoneli temel alındı [43,47,48]. Hesaplamalarda hekzagonal yapılar için $11 \times 11 \times 13$, tetragonal yapılar için $9 \times 9 \times 9$ k-grid kullanıldı [49]. Kesilim enerjisi hekzagonal ve tetragonal fazların ikisi içinde 520 eV kullanıldı. Tek kristal elastik özellikleri zor-zorlanma yöntemi kullanılarak hesaplandı [29]. Polikristal elastik özellikleri ise ikinci dereceden elastik sabitleri kullanılarak hesaplandı ve yönelime bağlı özellikleri ise ELATE kod kullanılarak görselleştirildi [50]. Titreşimsel özellikleri (Fonon ve Fonon Durum Yoğunluğu) ise Phonopy programı kullanılarak sonlu küçük yerdeğiştirme metodu (finite displacement metod) ile hesaplandı [51]. Termodinamik özellikleri yine Phonopy programı yardımıyla hesaplanmıştır.

4.1 Yapısal Özellikler

$BaGe_3$ bileşiğinin deneysel olarak bilinen iki kararlı yapısı bulunmaktadır. Bunlar tetragonal $I4mmm$ (No: 139) ve hekzagonal $P6_3/mmc$ (No: 194) kristal fazlarıdır [22]. Ayrıca $BeGe_3$, $MgGe_3$, $CaGe_3$ ve $SrGe_3$ bileşikleri içinde bu fazlar incelenmiştir. Bu bileşikler için birim hücre görünümleri Şekil 4.1 ile verilmiştir. Birim hücrelerinde tetragonal fazda 32 atom ($Z=8$), hekzagonal fazda ise 8 atom ($Z=2$) bulunmaktadır. Bu iki fazda bileşiklerin geometrik optimizasyonu için gerekli olan giriş parametreleri Çizelge 4.1-4.4 de verilen deneysel değerler kullanılarak yapıldı ve elde edilen yapı parametreleri mevcut verilerle birlikte Çizelge 4.2-4.4’de verildi.



Şekil 4.1. CaGe₃ (Tetragonal) ilkel birim hücre ve BaGe₃ (Hekzagonal) birim hücre görünümü.

Çizelge 4.1. Yapı tablosu.

<i>Yapı</i>	<i>Malzeme</i>	<i>Atom</i>	<i>Site</i>	<i>Atomik Koordinatlar</i>	<i>Kaynak</i>
TET	Tetragonal <i>I4/mmm</i> No. 139	X1 X2 Ge1 Ge2	4e 4d 8i 16m	0 0 z_{Ca1} $\frac{1}{2}$ 0 $\frac{1}{4}$ x_{Ge1} 0 0 x_{Ge2} x_{Ge2} z_{Ge2}	[24]
HEX	Hekzagonal <i>P6₃/mmc</i> No: 194	X Ge	2d 6h	$\frac{2}{3}$ $\frac{1}{3}$ $\frac{1}{4}$ x y $\frac{1}{4}$	[23]

Çizelge 4.2. Tetragonal fazda XGe_3 ($X=Be, Mg, Ca, Sr, Ba$) bileşiklerinin hesaplanan temel durum atomik örgü koordinatları ve mevcut çalışmalar.

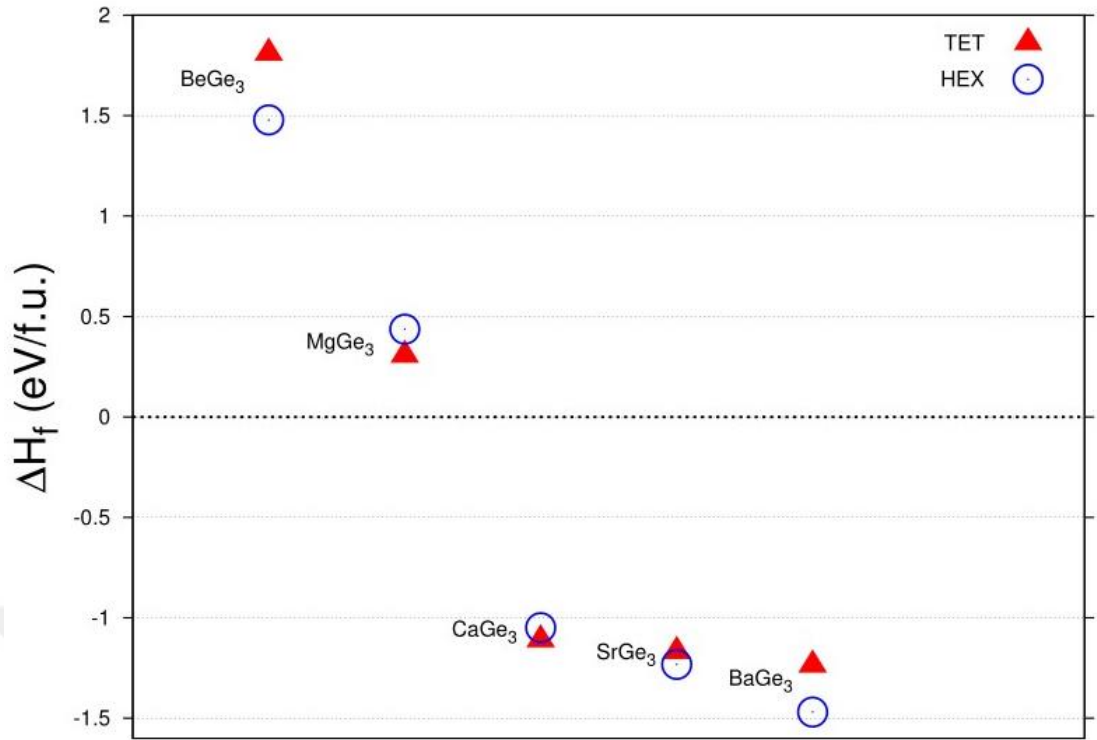
	Wyckoff Konum				Kaynak
	X1 (4e)	Ge1 (8i)	Ge2 (16m)		
Malzeme	<i>z</i>	<i>x</i>	<i>x</i>	<i>z</i>	
BeGe ₃	0.1247	0.3114	0.3344	0.1551	Bu tezde
MgGe ₃	0.1480	0.3269	0.3146	0.1374	Bu tezde
CaGe ₃	0.1659	0.3318	0.3168	0.1167	Bu tezde
	0.1655	0.3343	0.31649	0.11470	Deneyisel [24]
SrGe ₃	0.3299	0.3365	0.8184	0.3937	Bu tezde
	0.1709	0.3370	0.3177	0.1050	Deneyisel [26]
	0.32894	0.83724	0.81728	0.39453	Deneyisel [25]
BaGe ₃	0.3276	0.3399	0.8207	0.4009	Bu tezde
	0.1740	0.3396	0.3185	0.0982	Deneyisel [22]
	0.1761	0.3307	0.1807	0.3951	Teorik [23]

Çizelge 4.3. Hekzagonal fazda XGe_3 ($X=Be, Mg, Ca, Sr, Ba$) bileşiklerinin hesaplanan temel durum atomik örgü koordinatları ve mevcut çalışmalar.

	Wyckoff Konum		Kaynak
	Ge (6h)		
Malzeme	x	y	
BeGe ₃	0.1811	0.3622	Bu tezde
MgGe ₃	0.1623	0.3247	Bu tezde
CaGe ₃	0.1432	0.2864	Bu tezde
SrGe ₃	0.135	0.27	Bu tezde
BaGe ₃	0.12781	0.25562	Bu tezde
	0.1278	0.2557	Deneyisel [23]
	0.1278	0.25	Deneyisel [22]
	0.12783	0.25567	Deneyisel [17]
	0.1293	0.2586	Teorik [23]

Çizelge 4.4. Hesaplanan temel durum örgü sabitleri (a , c ; Å), hacim (V_0 , Å³/u.c.), oluşum entalpisi (ΔH_f , eV/p.a.) ve mevcut çalışmalar.

<i>Malzeme</i>	<i>Yapı</i>	<i>a</i>	<i>c</i>	<i>V₀</i>	<i>ΔH_f</i>	<i>Kaynak</i>
BeGe₃	TET	7.9434	8.6401	68.15	1.809	Bu çalışmada
	HEX	7.612	2.885	72.38	1.478	Bu çalışmada
MgGe₃	TET	7.668	10.618	78.04	0.306	Bu çalışmada
	HEX	5.945	5.080	77.76	0.437	Bu çalışmada
CaGe₃	TET	7.736	11.343	84.87	-1.112	Bu çalışmada
		7.6920	11.3141	83.805		Deneysel [24]
	HEX	6.316	5.003	86.43	-1.049	Bu çalışmada
SrGe₃	TET	7.831	12.132	93.00	-1.169	Bu çalışmada
		7.7873	12.0623	91.43		Deneysel [26]
		7.7800	12.0561	91.22		Deneysel [25]
	HEX	6.640	4.978	95.05	-1.232	Bu çalışmada
BaGe₃	TET	7.903	12.927	100.93	-1.237	Bu çalışmada
		7.8261	12.7956	97.96		Deneysel [22]
		7.23	12.06			Teorik [23]
	HEX	6.958	4.995	104.73	-1.469	Bu çalışmada
		6.8288	5.0303	101.58		Deneysel [22]
		6.814	5.027	101.1		Deneysel [17]
		6.89	4.92			Teorik [23]
		6.81	5.02			Deneysel [23]

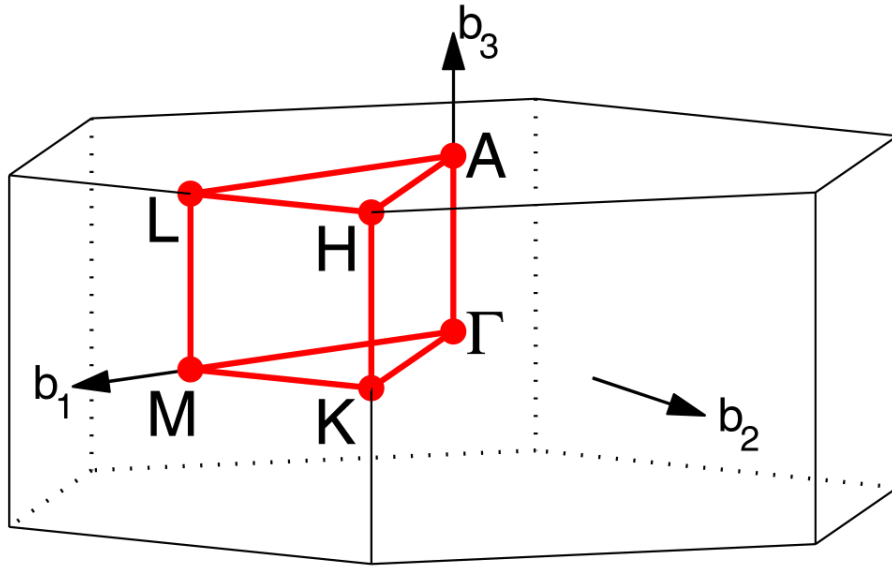


Şekil 4.2. Hesaplanan oluşum enerjileri (hekzagonal fazı mavi çember, tetragonal fazı kırmızı üçgen temsil etmektedir).

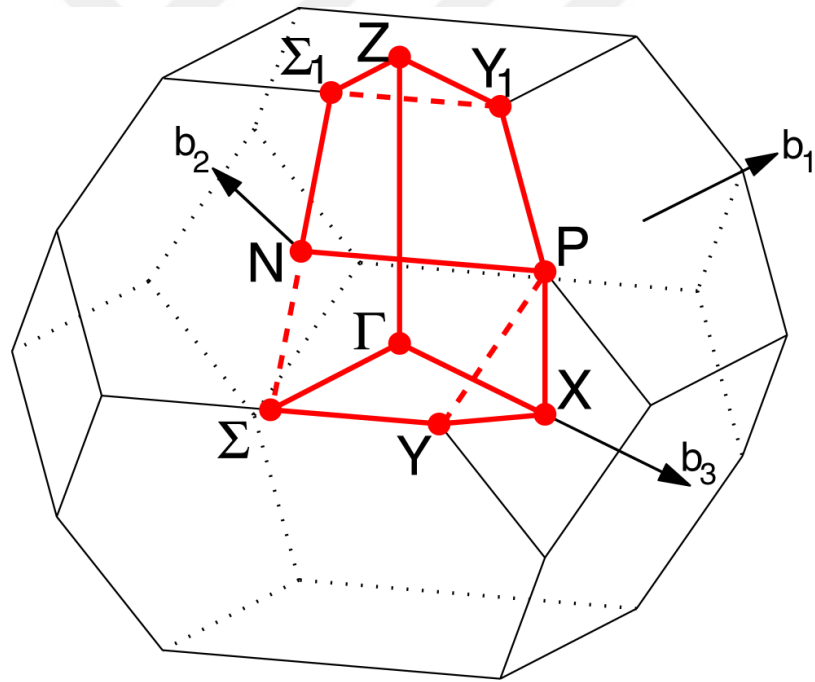
Elde edilen örgü parametreleri ve atomik örgü koordinatları mevcut deneysel verilerle [17, 22-26] uyumlu bulundu. Deneysel verilerle uyumlu olarak hesaplanan temel durum örgü parametreleri, hesaplanacak diğer fiziksel özelliklerin güvenilirliği açısından önemlidir. Hesapladığımız örgü parametreleri, kullandığımız PBE yaklaşımından dolayı deneysel değerlerden çok az yüksek hesaplandı. Ayrıca her iki faz için bu bileşiklerin oluşum entalpileri hesaplandı ve Çizelge 4.4 ve Şekil 4.2’de verildi. Her iki faz için BeGe₃ ve MgGe₃ bileşiklerinin termodinamik olarak kararsız, diğer bileşiklerin (CaGe₃, SrGe₃, BaGe₃) ise her iki fazda kararlı olduğu görüldü.

4.2 Elektronik Özellikler

XGe₃ (Be, Mg, Ca, Sr, Ge) bileşiklerinin *P6₃/mmc* uzay grubuna ait hekzagonal fazı ve *I4/mmm* uzay grubuna ait tetragonal fazı için birinci Brillouin bölgeleri Şekil 4.3 ve 4.4’ de gösterilmiştir.



Şekil 4.3. Hekzagonal $P6_3/mmc$ faz için Brillouin bölgesi.



Şekil 4.4. Tetragonal $I4/mmm$ faz için Brillouin bölgesi.

Malzemelerin elektronik band yapıları, hekzagonal fazları için Γ -M-K- Γ -A-L-H-A ve tetragonal fazları için Γ -X-Y- Σ - Γ -Z- Σ_1 -N-P-Y₁-Z yüksek simetri noktaları boyunca çizdirilmiştir. İlgili koordinatların değerleri bu fazlar için Çizelge 4.5 ve 4.6'da verilmiştir. Her iki faz için XGe_3 (Mg, Ca, Sr, Ge) bileşiklerinin elektronik band yapıları ve toplam durum yoğunluğu Şekil 4.5-4.12'de verildi. Fermi enerji düzeyi

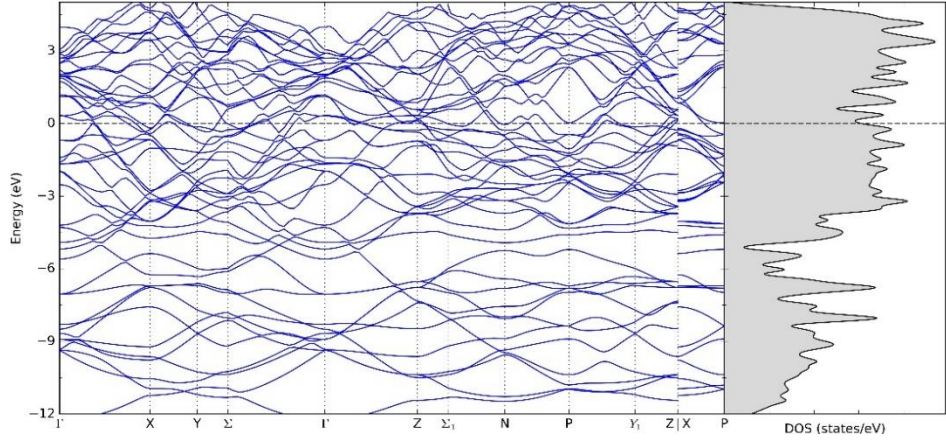
$E_F=0$ eV olarak alındı. BeGe₃ bileşiği her iki fazda da mekanik ve titreşimsel olarak kararsız olduğundan dolayı elektronik band hesabı yapılmadı.

Çizelge 4.5. Band hesabında kullanılan hekzagonal $P6_3/mmc$ uzay grubu için yüksek simetri noktalarının koordinatları.

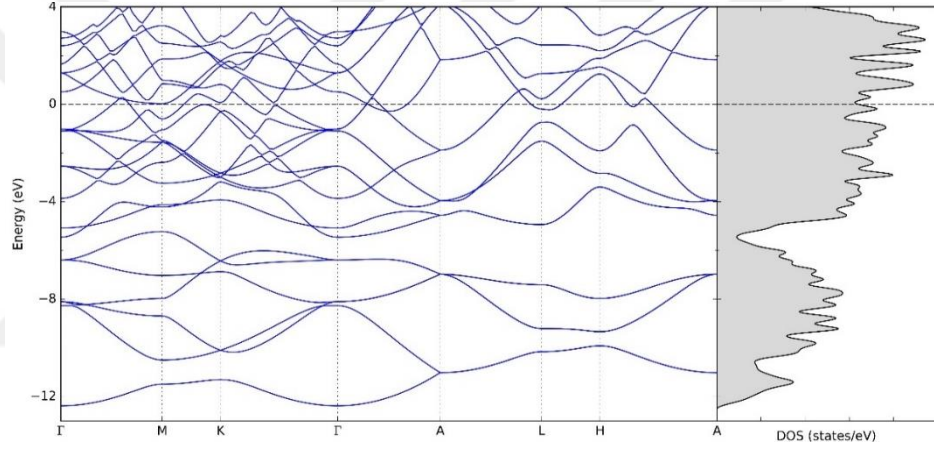
Yüksek Simetri Noktası	x	y	z
Γ	0	0	0
M	$\frac{1}{2}$	0	0
K	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	0
Γ	0	0	0
A	0	0	$\frac{1}{2}$
L	$\frac{1}{2}$	0	$\frac{1}{2}$
H	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$
A	0	0	$\frac{1}{2}$

Çizelge 4.6. Band hesabında kullanılan tetragonal $I4/mmm$ uzay grubu için yüksek simetri noktalarının koordinatları.

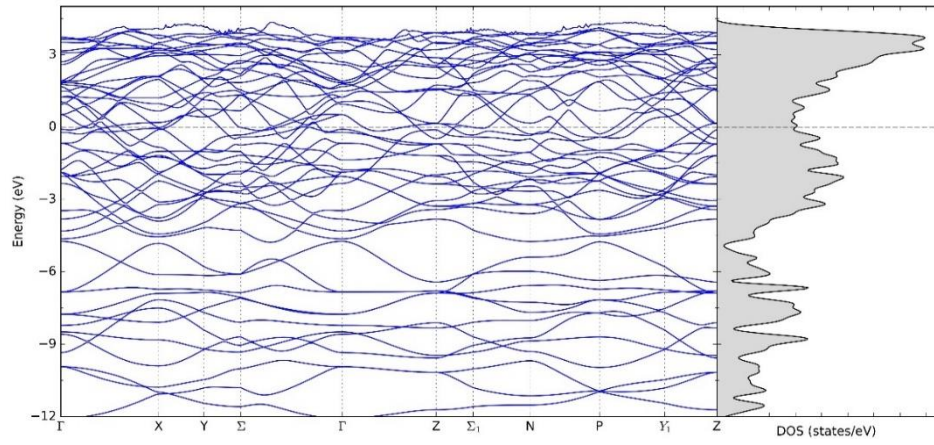
Yüksek Simetri Noktası	x	y	z
Γ	0	0	0
X	0	0	$\frac{1}{2}$
Y	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$
Σ	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$
Γ	0	0	0
Z	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$
Σ_1	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$
N	0	$\frac{1}{2}$	0
P	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$
Y_1	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$
Z	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$



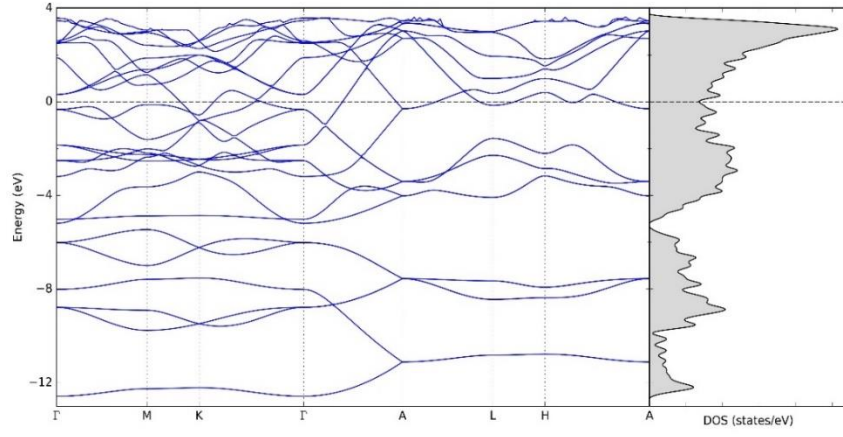
Şekil 4.5. MgGe_3 bileşiğinin tetragonal fazda hesaplanan elektronik band yapısı ve toplam durum yoğunluğu.



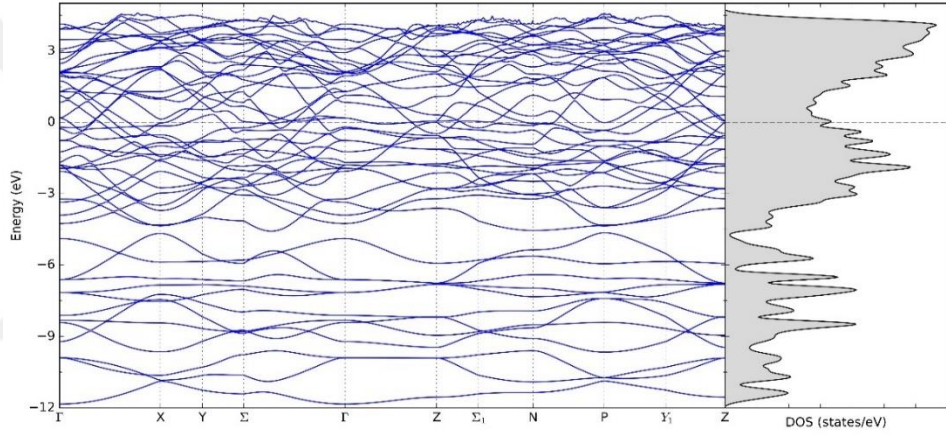
Şekil 4.6. MgGe_3 bileşiğinin hekzagonal fazda hesaplanan elektronik band yapısı ve toplam durum yoğunluğu.



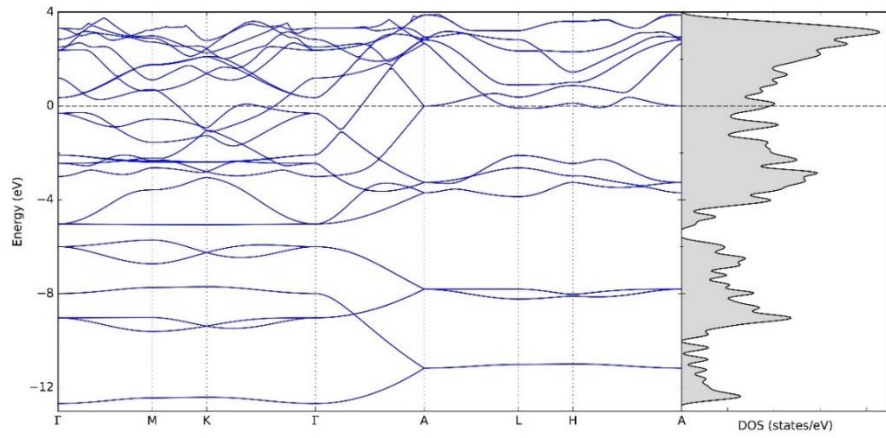
Şekil 4.7. CaGe_3 bileşiğinin tetragonal fazda hesaplanan elektronik band yapısı ve toplam durum yoğunluğu.



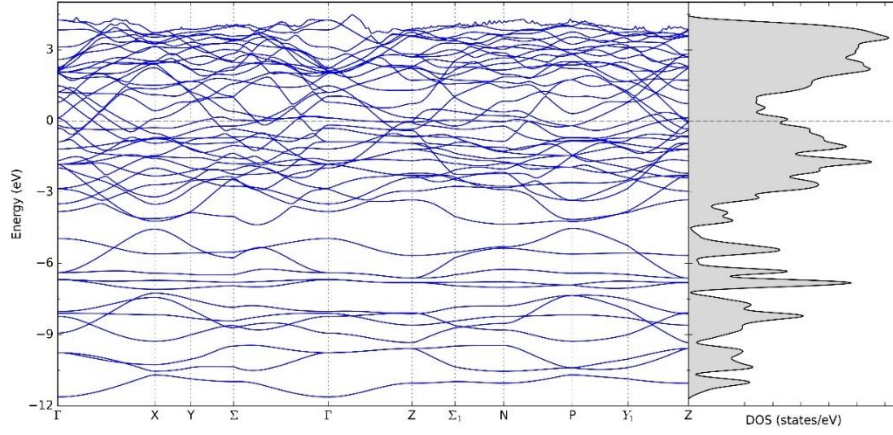
Şekil 4.8. CaGe_3 bileşiğinin hekzagonal fazda hesaplanan elektronik band yapısı ve toplam durum yoğunluğu.



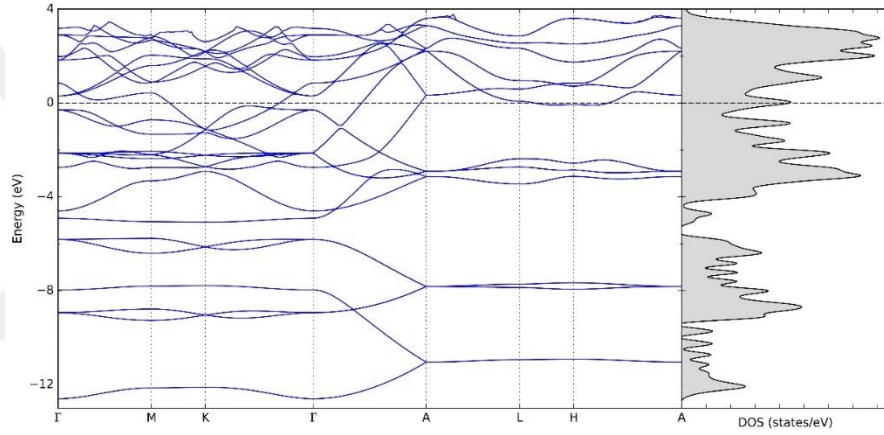
Şekil 4.9. SrGe_3 bileşiğinin tetragonal fazda hesaplanan elektronik band yapısı ve toplam durum yoğunluğu.



Şekil 4.10. SrGe_3 bileşiğinin hekzagonal fazda hesaplanan elektronik band yapısı ve toplam durum yoğunluğu.



Şekil 4.11. BaGe₃ bileşiğinin tetragonal fazda hesaplanan elektronik band yapısı ve toplam durum yoğunluğu.

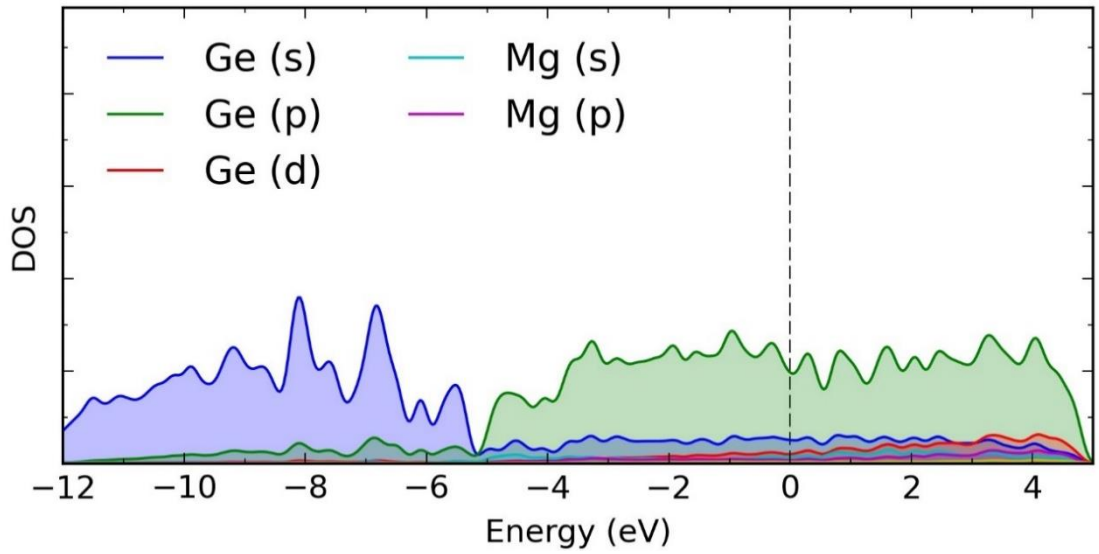


Şekil 4.12. BaGe₃ bileşiğinin hekzagonal fazda hesaplanan elektronik band yapısı ve toplam durum yoğunluğu.

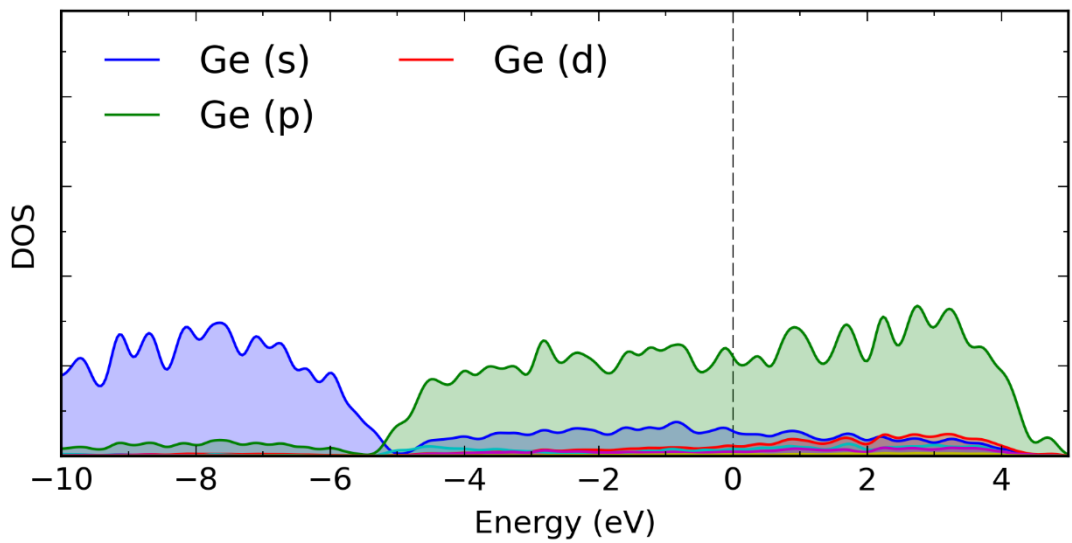
XGe₃ (Mg, Ca, Sr, Ge) bileşiklerinin her iki fazı için de elektronik band yapılarından görüldüğü üzere iletkenlik ve valans bandları arasında bir boşluk bulunmadığından bu bileşiklerin iletken özelliğe sahip olduğunu söyleyebiliriz. Genel olarak, elde edilen elektronik band yapıları diğer mevcut çalışmalarla [17, 22-24] da uyum içindedir. Elektronik band yapılarının yanında band yapılarıyla uyumlu olarak toplam durum yoğunluğu (TDOS) eğrileri de çizilmiştir.

Ayrıntılı olarak inceleyebilmek için bu bileşiklerin elementlere ve yörüngelere bağlı olarak kısmi durum yoğunluğu eğrileri (PDOS) Şekil 4.13-4.20’de verilmiştir. Tetragonal fazda XGe₃ (X=Mg, Ca, Sr, Ba) bileşiklerinin valans bandının alt kısımlarında (yaklaşık -12 ile -6 eV aralığında) asıl katkı Ge atomunun s orbitalinin ve

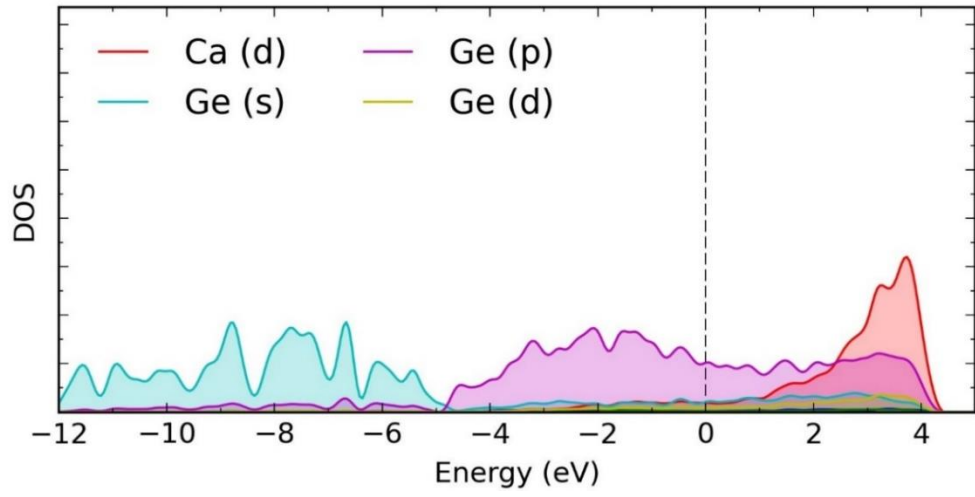
valans bandının üst kısımlarında Ge atomunun p orbitalinin katkısı daha fazladır. Tetragonal MgGe_3 bileşiğinin iletkenlik bandındada Ge(p) baskındır. Tetragonal CaGe_3 , SrGe_3 ve BaGe_3 bileşiklerinde ise iletkenlik bandının fermi seviyesine yakın kısımlarında Ge(p) orbitali, iletkenlik bandının üst kısımlarında ise X(d) (X=Ca, Sr, Ba) orbitallerinden katkı gelmektedir. Hekzagonal faz da tetragonal faza kısmen benzemektedir. Hekzagonal fazda CaGe_3 , SrGe_3 ve BaGe_3 bileşiklerinin tetragonal fazdan farkı, valans bandın alt ve üst kısımları arasında bir aralık (boşluk) bulunmasıdır.



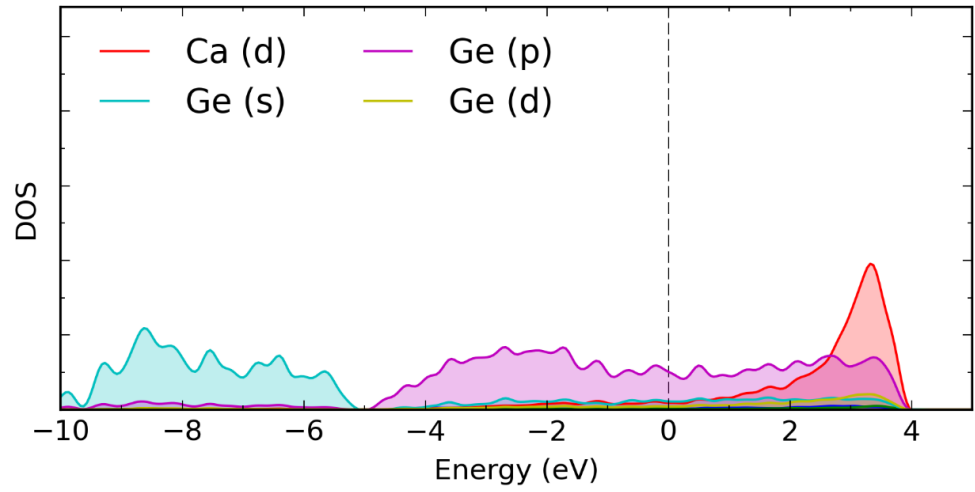
Şekil 4.13. MgGe_3 bileşiğinin tetragonal fazda hesaplanan kısmi durum yoğunluğu.



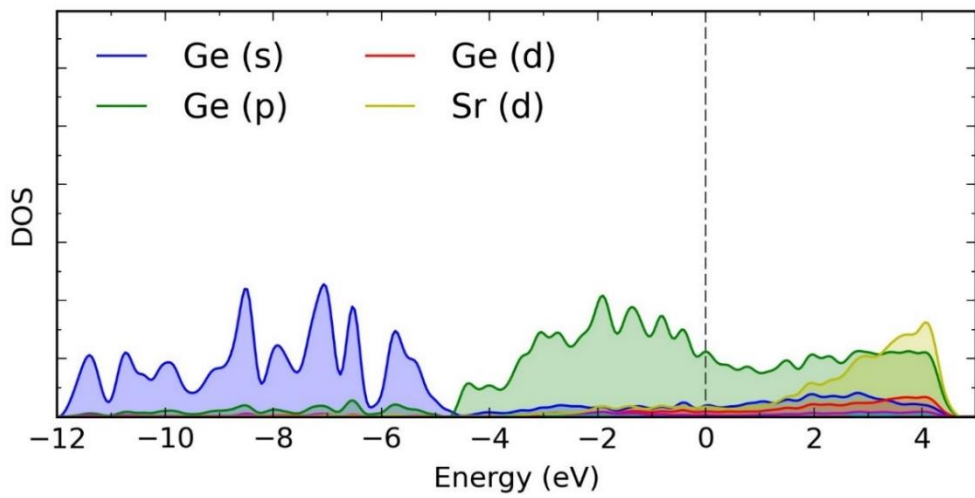
Şekil 4.14. MgGe_3 bileşiğinin hekzagonal fazda hesaplanan kısmi durum yoğunluğu.



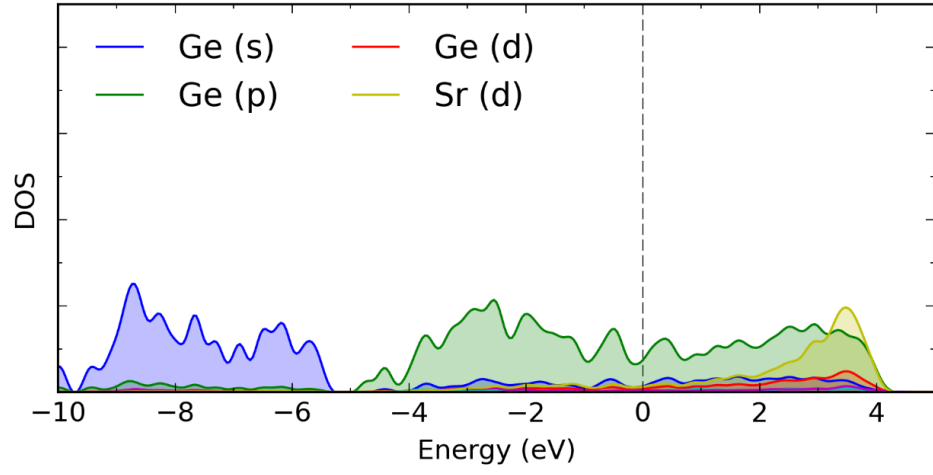
Şekil 4.15. CaGe_3 bileşiğinin tetragonal fazda hesaplanan kısmi durum yoğunluğu.



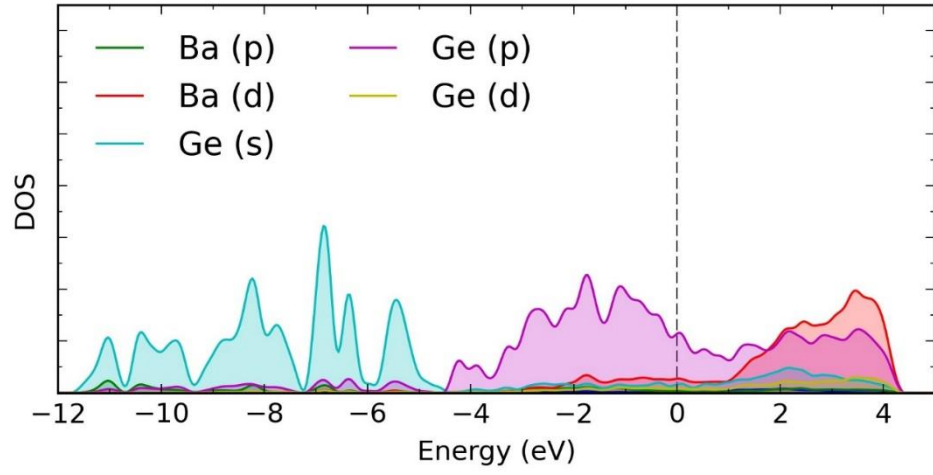
Şekil 4.16. CaGe_3 bileşiğinin hekzagonal fazda hesaplanan kısmi durum yoğunluğu.



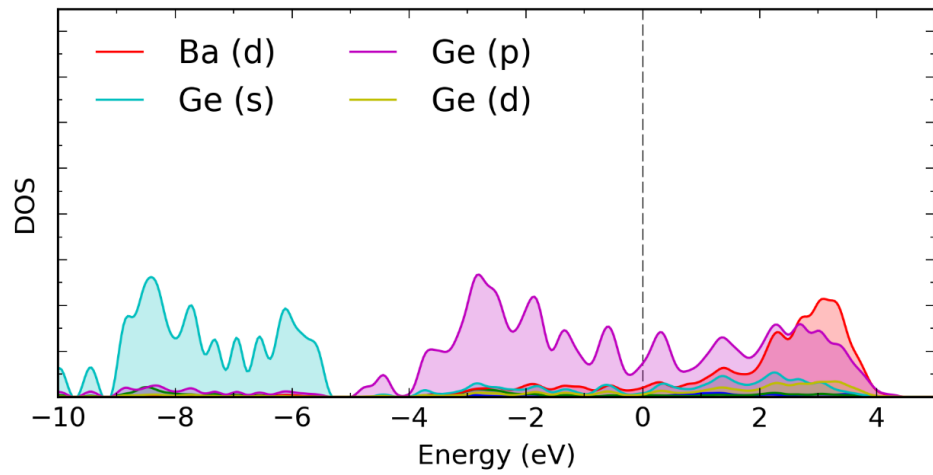
Şekil 4.17. SrGe_3 bileşiğinin tetragonal fazda hesaplanan kısmi durum yoğunluğu.



Şekil 4.18. SrGe_3 bileşiğinin hekzagonal fazda hesaplanan kısmi durum yoğunluğu.



Şekil 4.19. BaGe_3 bileşiğinin tetragonal fazda hesaplanan kısmi durum yoğunluğu.



Şekil 4.20. BaGe_3 bileşiğinin hekzagonal fazda hesaplanan kısmi durum yoğunluğu.

Çizelge 4.7. XGe₃ (X=Mg, Ca, Sr, Ba) bileşiklerinin hesaplanan N(E_f) (states/eV-f.u) ve μ^* değerleri.

<i>Malzeme</i>	<i>Yapı</i>	<i>N(E_f)</i>	<i>μ^*</i>	<i>Kaynak</i>
MgGe₃	TET	1.48	0.16	Bu çalışmada
	HEX	1.71	0.16	Bu çalışmada
CaGe₃	TET	1.51	0.16	Bu çalışmada
		1.49		[26]
	HEX	1.55	0.16	Bu çalışmada
SrGe₃	TET	1.67	0.16	Bu çalışmada
		1.90		[26]
	HEX	1.21	0.14	Bu çalışmada
BaGe₃	TET	1.76	0.17	Bu çalışmada
		1.85		[22, 26]
	HEX	1.25	0.14	
		1.32		[22]

Ayrıca bir materyalin itici Coulomb pseudopotansiyel olarak bilinen elektron- elektron etkileşim parametresi,

$$\mu^* = \frac{0.26N(E_f)}{1 + N(E_f)} \quad (4.1)$$

eşitliği kullanılarak hesaplanabilir [52]. Burada N(E_f) fermi seviyesindeki toplam durum yoğunluğu değeridir. Hesaplanan bu değerler Çizelge 4.7’ de verilmiştir. Elektron-elektron etkileşim parametresi bir süperiletken malzemenin süperiletkenliğe geçiş sıcaklığını etkiler. Süperiletkenlik için gerekli olan Cooper çiftlerinin oluşumunu, itici Coulomb pseudopotansiyel engellediğinden dolayı süperiletken geçiş sıcaklığının azaltılmasında rol oynar [52].

4.3. Mekanik Özellikler

4.3.1 Elastik sabitleri

XGe₃ (X=Be, Mg, Ca, Sr, Ba) bileşiklerinin ikinci dereceden elastik sabitleri (*C_{ij}*) zor-zorlanma [29] yöntemi ile hesaplandı ve elde edilen veriler Çizelge 4.8’te listelendi.

Her iki faz içinde BeGe₃ bileşiği dışında diğer XGe₃ (X= Mg, Ca, Sr, Ba) bileşiklerin Bölüm 2’de verilen Born Kararlılık kriterlerini sağladığı görüldü. Dolayısıyla tetragonal ve hekzagonal fazlarında BeGe₃ bileşiği hariç diğer bileşiklerin mekaniksel olarak kararlı olduğu bulundu. BeGe₃ bileşiği mekaniksel olarak kararsız olduğundan dolayı polikristal mekanik özelliklerine bakılmadı.

Çizelge 4.8. XGe₃ (X=Be, Mg, Ca, Sr, Ba) bileşiklerinin hesaplanan ikinci dereceden elastik sabitleri (C_{ij} , GPa).

<i>Malzeme</i>	<i>Yapı</i>	C_{11}	C_{12}	C_{13}	C_{33}	C_{44}	C_{66}	<i>Kararlılık</i>
BeGe₃	TET	59.9	75.4	62.5	103.8	-1.1	6.4	X
	HEX	96.3	40.3	38.7	158.8	-1.3	28	X
MgGe₃	TET	95.2	34.2	49.4	76.7	10.7	24.1	✓
	HEX	78.9	61.7	39.9	80	0.8	8.6	✓
CaGe₃	TET	108.6	17.5	29.2	88.3	28.1	25.7	✓
	HEX	70.6	37.4	29.7	86.4	10.3	16.6	✓
SrGe₃	TET	101.9	10	25	89.6	27.2	31.6	✓
	HEX	70.7	31.2	22.5	93.6	16.7	19.7	✓
BaGe₃	TET	94.6	8.3	23.4	94.1	29.4	30.2	✓
	HEX	67.6	30.8	16.2	104.4	20.8	18.4	✓

C_{11} ve C_{33} elastik sabitleri değerleri, sırasıyla x- ve z-eksenleri boyunca sıkıştırmaya direnci temsil eder [53]. Bu bileşikler için tetragonal fazda $C_{11} > C_{33}$ olduğundan, x-ekseni boyunca sıkışmaya olan direnç z-ekseni boyunca olan sıkışmaya olan dirençten daha fazladır. Hekzagonal fazda ise $C_{33} > C_{11}$ olduğundan, sıkışmaya karşı en büyük direnç z-ekseni boyunca olmaktadır. Benzer şekilde, C_{44} ve C_{66} elastik sabitleri, sırasıyla (100) ve (001) düzlemleri için kayma deformasyonuna karşı direnci gösterir

[53]. Tetragonal fazdaki CaGe_3 ve hekzagonal fazdaki BaGe_3 bileşikleri dışında her iki faz için de $C_{66} > C_{44}$ şeklindedir. Ayrıca C_{11} ve C_{33} değerlerinin C_{44} ve C_{66} değerlerinden oldukça yüksek olması da dikkat çekmektedir. Bu nedenle tek eksen boyunca sıkıştırmaya olan direnç, kayma deformasyonuna olan dirençten daha güçlüdür diyebiliriz.

4.3.2 Polikristal özellikler

Bölüm 2’de verilen eşitlikler kullanılarak hesaplanan polikristal etkin elastik modülleri Çizelge 4.9’da verildi.

Bulk modülü, bir materyalin düzgün sıkıştırılması durumunda hacim değişimine gösterdiği direncin bir ölçüsüdür [54]. Bulk modülü değerleri hekzagonal ve tetragonal fazları için $\text{MgGe}_3 > \text{CaGe}_3 > \text{SrGe}_3 > \text{BaGe}_3$ şeklinde sıralanmaktadır. Her iki faz için de MgGe_3 bileşiği en yüksek bulk modülüne sahip olduğundan en az sıkıştırılabilir bileşiktir.

Çizelge 4.9. XGe_3 ($\text{X}=\text{Mg}, \text{Ca}, \text{Sr}, \text{Ba}$) bileşiklerinin hesaplanan polikristal elastik modülleri; bulk (B, GPa), Young (E, GPa), kesme (G, GPa), Poisson (ν), Pugh oranı (B/G), Cauchy basıncı (P), işlenebilirlik indeksi (μ).

Bileşik		B	E	G	ν	B/G	P_{100}	P_{001}	μ
MgGe₃	TET	59.2	45.5	16.6	0.37	3.575	38.7	10.1	5.53
	HEX	57.5	14.8	5.1	0.46	11.322	39.1	53.1	71.88
CaGe₃	TET	50.8	77.4	31	0.25	1.636	1.1	-8.2	1.81
	HEX	46.8	41.1	15.2	0.35	3.082	19.4	20.8	4.54
SrGe₃	TET	45.9	78.3	32.2	0.22	1.428	-2.2	-21.6	1.69
	HEX	42.9	53.2	20.5	0.29	2.088	5.8	11.5	2.57
BaGe₃	TET	43.6	78.4	32.6	0.20	1.336	-6	-21.9	1.48
	HEX	40.4	57.5	22.8	0.26	1.776	-4.6	12.4	1.94

Young modülü, bir malzemenin çekme kuvvetine maruz kaldığında davranışını tahmin etmek için yararlı bir özelliktir. Bir malzemenin sertliği, genellikle Young modülü ile

ilişkilidir [55]. Her iki faz içinde en küçük Young modülü MgGe_3 bileşiğine aittir. Her bir faz için diğer bileşiklerin Young modülü nispeten benzerdir. Bu bileşiklerin her iki fazı da düşük Young modülüne sahip olduğundan bu bileşiklerin sert olmadığı söylenebilir. Aralarında en küçük Young modülüne sahip hekzagonal fazdaki MgGe_3 olduğundan, bu bileşik için en yumuşak olanıdır denilebilir. Ayrıca Young modülü, termal şok direnci ile ters orantılıdır. Young modülü ne kadar düşük olursa termal şok direnci o kadar iyi olur. Yüksek termal şok direncine sahip bir malzeme, bir termal bariyer kaplama (TBC) malzemesi olarak kullanılma potansiyeline sahiptir. Aynı zamanda yüksek ısı genleşme katsayısına ve erime noktasına, düşük ısı iletkenliğine ve iyi oksidasyon direncine sahip olmaları durumunda bu bileşiklerin TBC malzemeleri olma olasılıkları vardır [55].

Kesme modülü, plastik deformasyonlara karşı gösterilen direnç ile ilişkilidir [54]. Ayrıca kesme modülünün büyük olması atomlar arasında yönlü bağın kuvvetli olmasına işaret eder [56]. Bizim çalıştığımız bu bileşiklerin her iki fazı da düşük kesme modülü değerlerine sahiptir.

Poisson oranı, bir malzemeye belirli bir yönde kuvvet uygulandığında o yöndeki uzama ve kesit yönünde azalma ile ilişkilidir [57]. Poisson oranı bağlanma kuvvetlerinin karakteristikleri hakkında bilgi verir. Değeri 0.5'e yaklaştıkça malzemenin plastiklik özelliği artar [58]. Bir malzeme için Poisson oranı, kovalent bağ yapısına sahipse 0.1, iyonik bağ baskınsa 0.25 ve metalik bağ baskında 0.33 civarındadır [59]. Tetragonal fazda MgGe_3 bileşiği dışında diğer bileşikler için iyonik bağ baskın iken MgGe_3 bileşiğinde metalik bağ baskındır. Hekzagonal fazda ise BaGe_3 bileşiğinde iyonik bağ, diğer bileşiklerde ise metalik bağ baskındır. Hekzagonal MgGe_3 bileşinde Poisson oranı 0.46 olarak bulunmuştur ve bu bize bileşiğin az sıkıştırılabileceğini gösterir. Örneğin, lastik, kauçuk gibi bazı malzemelerin poisson oranları 0.5 değerine yakındır. Aynı zamanda Poisson oranı bir katıdaki atomlar arasındaki atomlar arası kuvvetleri de tanımlayabilir. Bir katının Poisson oranı 0.25 ile 0.50 arasında olduğunda, atomlar arası kuvvetler merkezi kuvvetlerdir; bu aralığın dışındaysa atomlar arası kuvvetler merkezi olmayan kuvvetler olacaktır [60]. Atomlar arasındaki kuvvetler tetragonal yapıda MgGe_3 ve CaGe_3 bileşiklerinde merkezi, SrGe_3 ve BaGe_3 bileşiklerinde ise merkezi olmayan kuvvetlerdir. Hekzagonal yapıdaki tüm

bileşiklerde de bu aralıkta olduğundan dolayı atomlar arası kuvvetler merkezi kuvvetlerdir.

Pugh oranı, B/G değeri ile gösterilir ve mekanik özellikler için önemli parametrelerden biridir [61]. Pugh oranı 1,75'den büyük olduğunda malzeme esnek, küçük olduğunda ise kırılğan bir yapıya sahiptir. Tetragonal fazda $MgGe_3$ bileşiği hariç hepsi kırılğan, hekzagonal fazda ise hepsi esnek karakterdedir.

Cauchy basınçları, bir materyalin bağ yönelimleri hakkında bilgi verebilir. Bir materyal pozitif bir Cauchy basıncına sahipse, metalik (yönelimli olmayan) bağa sahiptir ve böylece malzeme esnektir. Diğer durumda ise kovalent (yönelimli) bağa sahip olacağından kırılğan doğaya sahiptir [62]. (100) ve (001) düzlemleri için Cauchy basıncı sırasıyla ($C_{13}-C_{44}$) ve ($C_{12}-C_{66}$) ifadeleriyle bulunabilir [63-65]. Her iki fazda ve her iki düzlem için $MgGe_3$ bileşiği yönelime bağlı olmayan yani metalik bağa sahiptir. $CaGe_3$ her iki fazda da (100) düzlemi için metalik iken; (001) düzlemi için tetragonal fazında yönelimli, hekzagonal fazında ise yine metalik bağ karakteri sergilemektedir. Tetragonal $SrGe_3$ ve $BaGe_3$ bileşiklerinde yönelimli bağ karakteri gözlenmektedir. Hekzagonal $SrGe_3$ bileşiği ise metalik karaktere sahiptir. Hekzagonal $BaGe_3$ (100) düzleminde yönelimli karakter, (001) düzleminde ise metalik karakter göstermektedir.

Bir malzemenin işlenebilirliği de sanayide kullanımı açısından önemli bir özelliktir. İşlenebilirlik indeksi (μ), B/C_{44} ile verilir. Malzemenin yağlama özellikleri ve plastisitesi hakkında da fikir verir. Yüksek işlenebilirlik indeksi, malzemenin iyi yağlama özelliklerine ve yüksek plastik deformasyon değerlerine sahip olduğunu gösterir [52]. Çizelge 4.9' dan görüldüğü gibi hekzagonal fazların işlenebilirlik indeksleri tetragonal fazlardan daha yüksektir. En düşük işlenebilirlik değerine sahip olan tetragonal $BaGe_3$ bileşiğidir.

Sertlik, endüstride önemlidir ve bir malzemenin plastik deformasyonlara, aşınmalara, çizilmelere karşı dayanıklılığının göstergesidir [55]. Sertlik $H_v = 2(G^3/B^2)^{0.585} - 3$ eşitliği kullanılarak hesaplandı [66]. Her iki faz içinde hesaplanan sertlik değeri 10 GPa'dan küçük olduğundan bu bileşikler yumuşak olarak nitelenebilir. Bütün bileşikler için tetragonal fazı nispeten hekzagonal fazından biraz daha sert denilebilir (Çizelge 4.10).

Çizelge 4.10. XGe_3 ($X=Mg, Ca, Sr, Ba$) Vicker sertliği (H_v , GPa), Evrensel anizotropi katsayısı (A^u), boyuna, enine ve ortalama ses hızları ($\vartheta_l, \vartheta_t, \vartheta_m$, m/s), ve Debye sıcaklığı (Θ_D , K) ve Grüneisen parametresi (γ).

Bileşik		H_v	A^u	ϑ_l	ϑ_t	ϑ_m	Θ_D	γ	Kaynak
MgGe₃	TET	1.58	0.98	3972	1793	2022	223.6	2.31	
	HEX	0.18	19.88	3526	991	1130	125.2	3.53	
CaGe₃	TET	5.99	0.21	4273	2480	2752	296	1.5	
							330		[26]
	HEX	1.75	0.69	3677	1750	1969	210.4	213	
	SrGe₃	7.16	0.19	3743	2252	2491	259.8	1.37	
							287		[26]
	HEX	3.39	0.34	3629	1962	2190	226.8	1.71	
BaGe₃	TET	7.81	0.12	3861	2363	2609	264.9	1.29	
							266		[22]
	HEX	4.38	0.47	3545	2011	2236	224.1	1.55	
							205		[22]

Anizotropi, bir malzemenin özelliklerinin farklı kristalografik yönelimlere bağlı olarak değişmesidir. Elastik anizotropi, malzemelerin tasarımı ve teknolojik kullanımının belirlenmesinde önemli bir rol oynayabilir. Burada Evrensel anizotropi faktörü

$$A^u = 5 \frac{G_V}{G_R} + \frac{B_V}{B_R} - 6 \geq 0$$

Eşitliği kullanılarak hesaplandı. A^u , değeri sıfırsa malzeme izotropik bu değerden sapması anizotropinin derecesini gösterir. Her iki fazda da tüm bileşikler anizotropik özellik sergiler.

Debye sıcaklığı (Θ_D); katıların bağlanma kuvvetleri, erime sıcaklığı, termal iletkenlik, fonon dinamiği, süperiletkenlik, öz ısı gibi birçok termodinamik özellikleri kavramak için önemlidir [55]. Bu sıcaklık, bir katının yüksek ve düşük sıcaklık bölgelerini ayırır. Debye sıcaklığının üzerindeki sıcaklıklarda, tüm titreşim modları $k_B T$ olan aynı enerjiye sahiptir. Ancak altındaki sıcaklıklar da ise yüksek frekans modlarının

bulunmadığı kabul edilir. Düşük sıcaklıklarda titreşim uyarımları yalnızca akustik modlardan kaynaklanmaktadır. Debye sıcaklığı Bölüm 2’ de Çizelge 2.2 verilen formüller kullanılarak hesaplandı.

Bu bileşikler için Debye sıcaklığının hesaplanan değerleri mevcut verilerle birlikte Çizelge 4.10'da gösterilmektedir ve mevcut verilerle uyumludur. Bu bileşikler için bulunan Debye sıcaklıklarının düşük olması, atomlar arasındaki bağ kuvvetlerinin çok güçlü olmadığını ve incelenen bileşiklerin yumuşak olduğunu gösterir. Nispeten düşük termal iletkenliğe sahip olduklarını da belirtir.

Ayrıca bu bileşiklerin ses hızları nispeten birbirine yakın ve düşük hızlara sahip oldukları söylenebilir.

Bu bileşikler için Grüneisen parametresi Poisson oranı kullanılarak hesaplandı.

$$\gamma = \frac{3(1+\nu)}{2(2-3\nu)} \quad (4.3)$$

Bu nicelik çeşitli fiziksel süreçleri (termal iletkenlik, termal genleşme, elastik özelliklerin sıcaklığa bağlılığı, ...) yönetir. Ayrıca bir kristalin anharmonik etkisinin ölçüsünü de belirler. Ne kadar büyük olursa, anharmoniklikte o kadar büyük olur ve fonon termal iletkenliği o kadar düşük olur [52]. Hekzagonal fazdaki bileşiklerin Grüneisen parametresi tetragonal fazdan daha yüksek çıkmıştır.

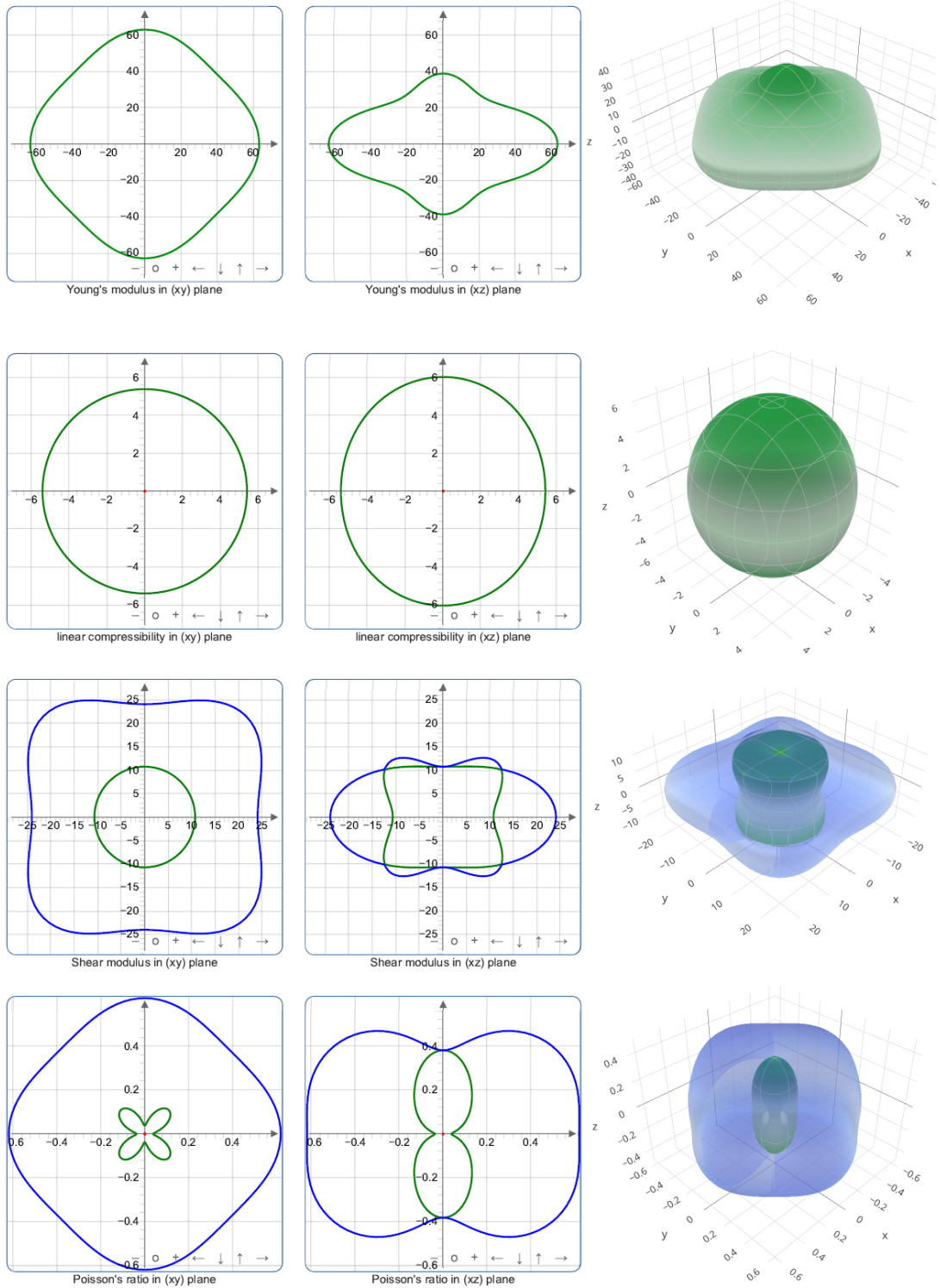
4.3.3 Yönelime bağlı mekanik özellikler

Hesapladığımız elastik sabitler (C_{ij}) yardımıyla ELATE programını [50] kullanarak yönelime bağlı olarak Young modülü, Sıkışabilirlik, Kesme modülü ve Poisson oranı elde edildi ve Şekil 4.21-4.28’ de verildi. İki boyutlu görselleştirmelerde dairesel olarak elde edilen eğriler izotropiyi, daireselden sapmalar anizotropinin derecesini belirtir. Aynı şekilde üç boyutlu görselleştirmeler de ise küreselden sapmalar anizotropinin derecesini belirtir.

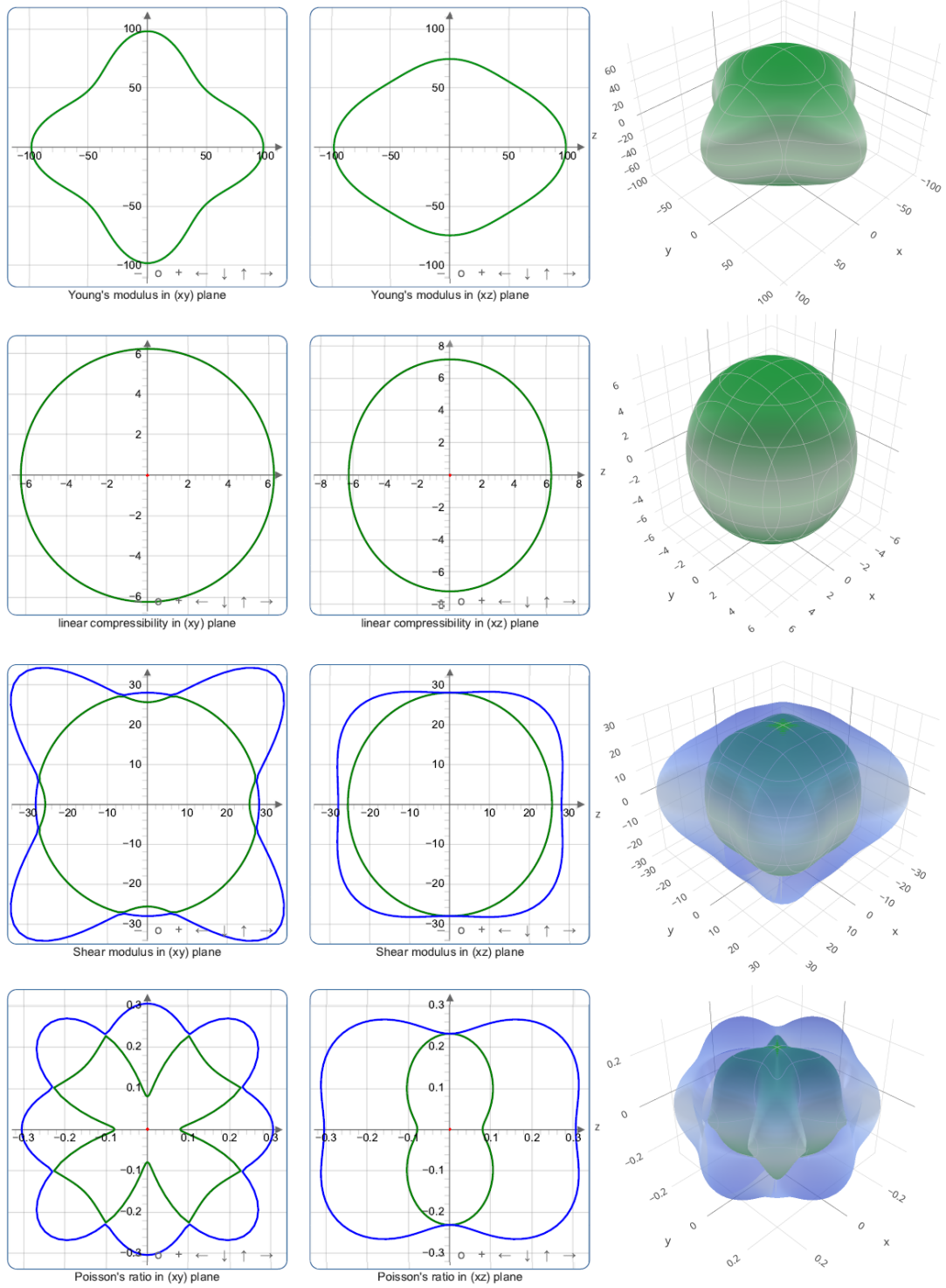
Şekil 4.39-4.42’den de görüldüğü gibi hekzagonal fazda bileşiklerin Young modülleri benzer karakter sergilemektedir. Bu bileşikler xy düzlemlerinde izotropik özellik sergilerken, yz düzlemlerinde anizotropik özellik sergilemektedir. Tetragonal fazda ise xy düzlemi de xz düzlemi de anizotropiktir.

Sıkışabilirlik deęerleri her iki fazda da xy düzleminde izotropik, xz düzlemlerinde anizotropik özellik sergilemektedir. $SrGe_3$ bileşigi xz düzleminde dięerlerine göre daha izotropiktir.

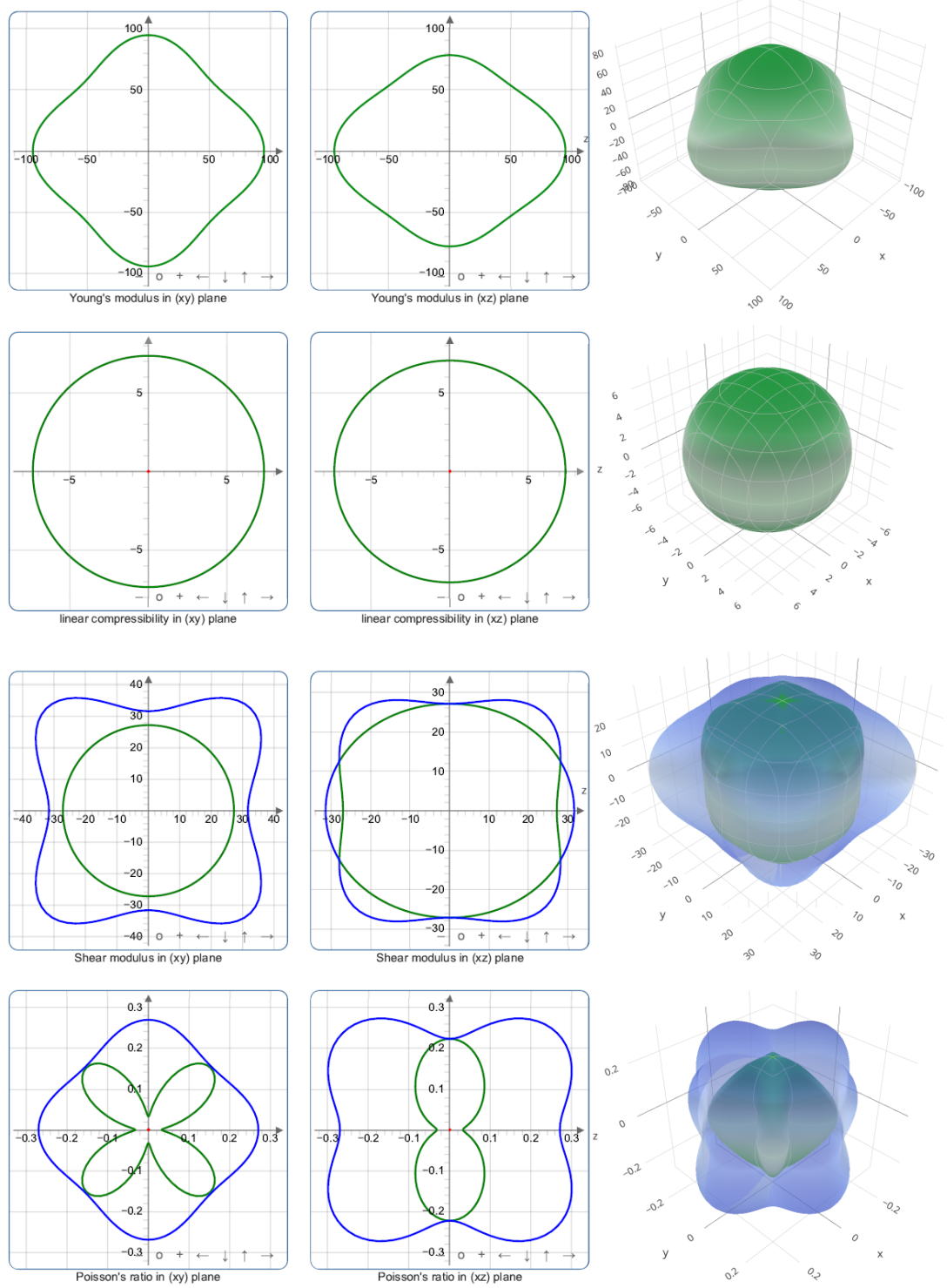
Kesme modülünün ve Poisson oranının xy , ve xz düzlemlerindeki eğilimlerini incelenirken, mavi eğriler maksimum deęerleri, yeşil eğriler minimum deęerleri göstermektedir. Kesme modülü hekzagonal fazlarda, xy düzleminde izotropik özellik gösterirken xz düzlemi anizotropik özellik sergilemektedir. Tetragonal fazlarda ise her iki düzlemde de anizotropik özellik göstermektedir. Hekzagonal fazda $MgGe_3$ bileşigi yz düzleminde en fazla anizotropi gösteren bileşiktir. Poisson oranı ise hekzagonal fazlarda xy düzleminde izotropik, xz düzleminde anizotropik özellikte iken tetragonal fazlarda her iki düzlemde de anizotropik özellik sergilemektedir.



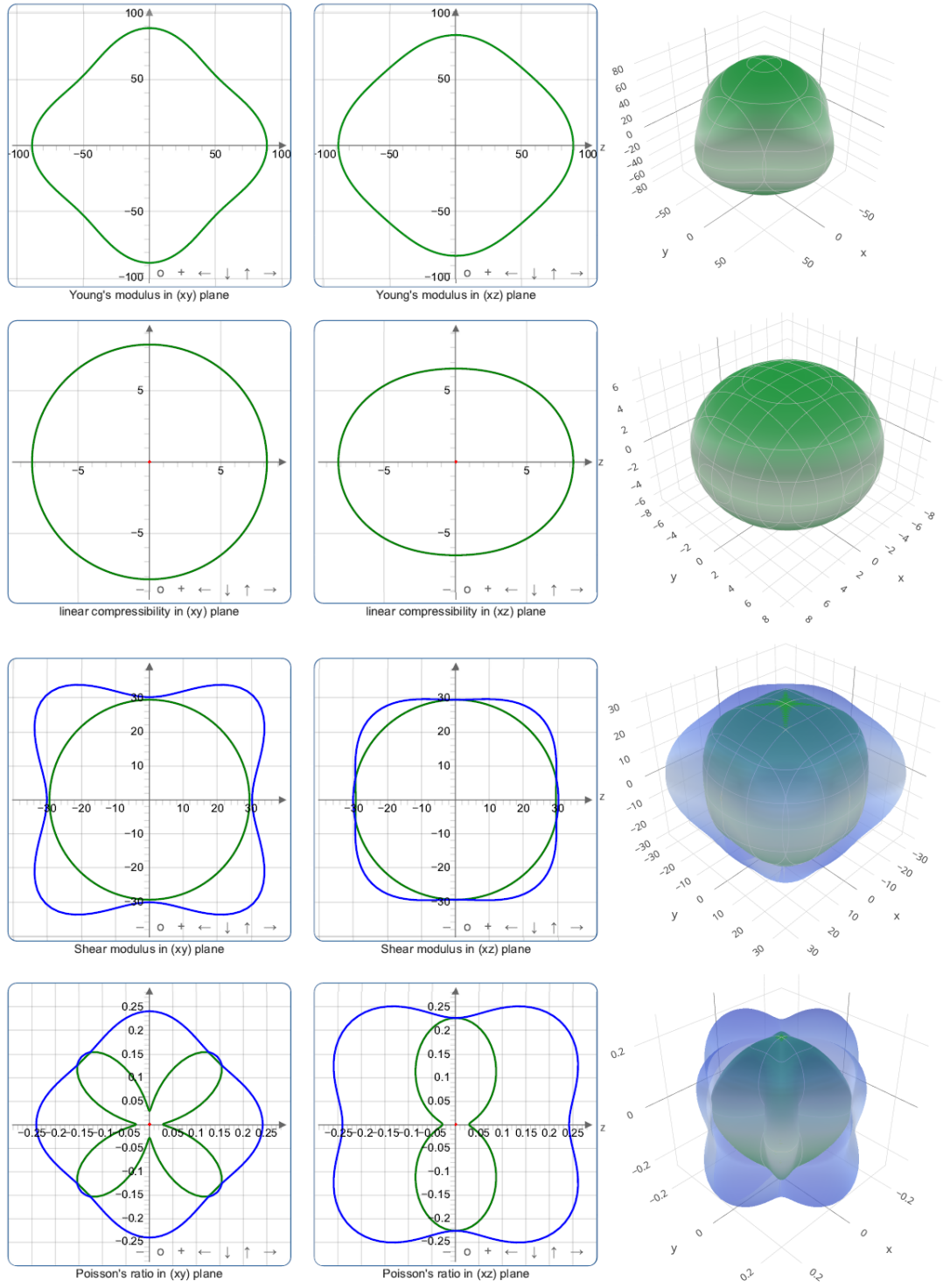
Şekil 4.21. Tetragonal MgGe_3 bileşiğinin xy ve xz düzlemleri ile 3-boyutta hesaplanan Young modülü, sıkışabilirlik, Kesme modülü ve Possion oranının yönelime bağlı değişimleri.



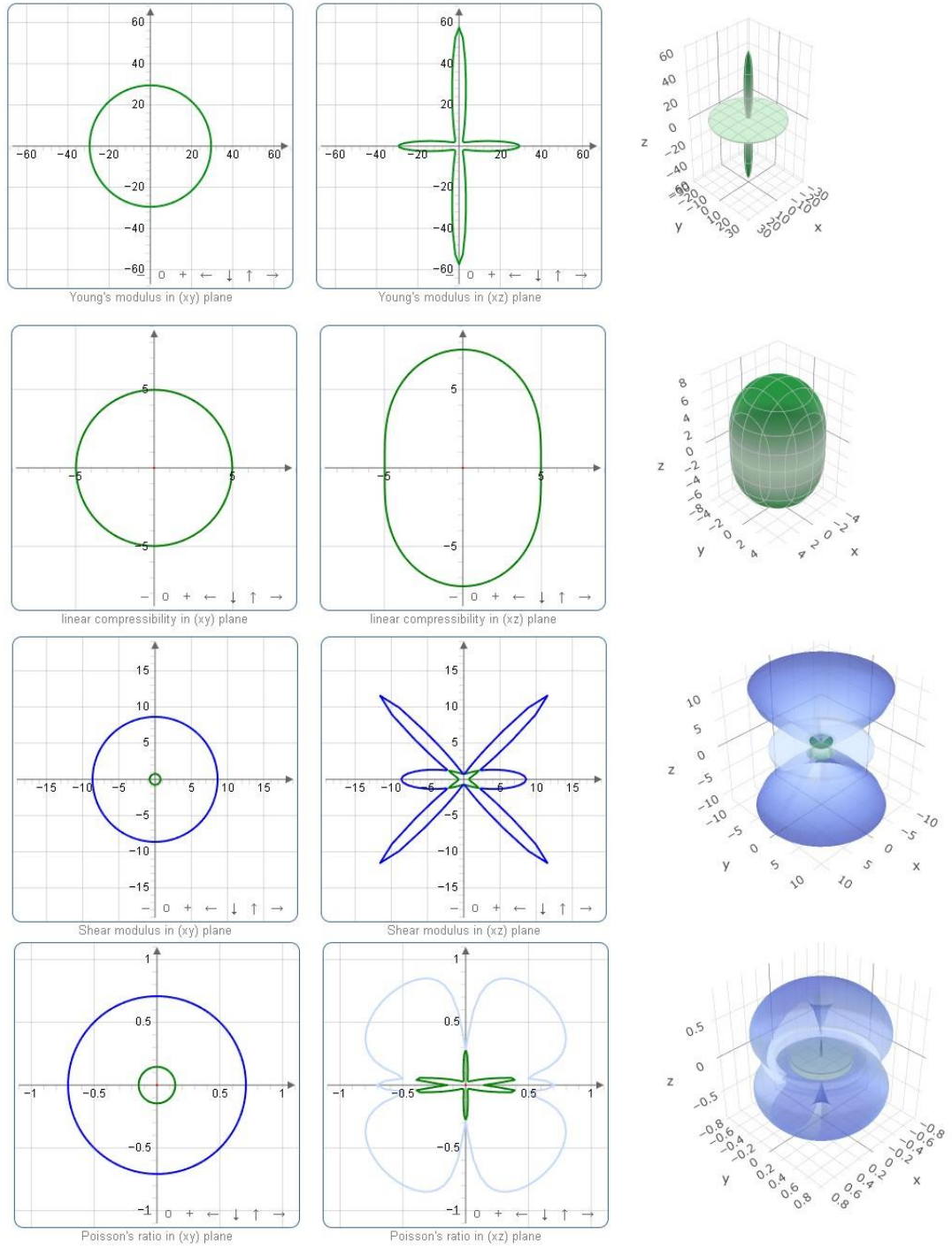
Şekil 4.22. Tetragonal CaGe_3 bileşiminin xy ve xz düzlemleri ile 3-boyutta hesaplanan Young modülü, sıkışabilirlik, Kesme modülü ve Poisson oranının yöneline bağlı değişimleri.



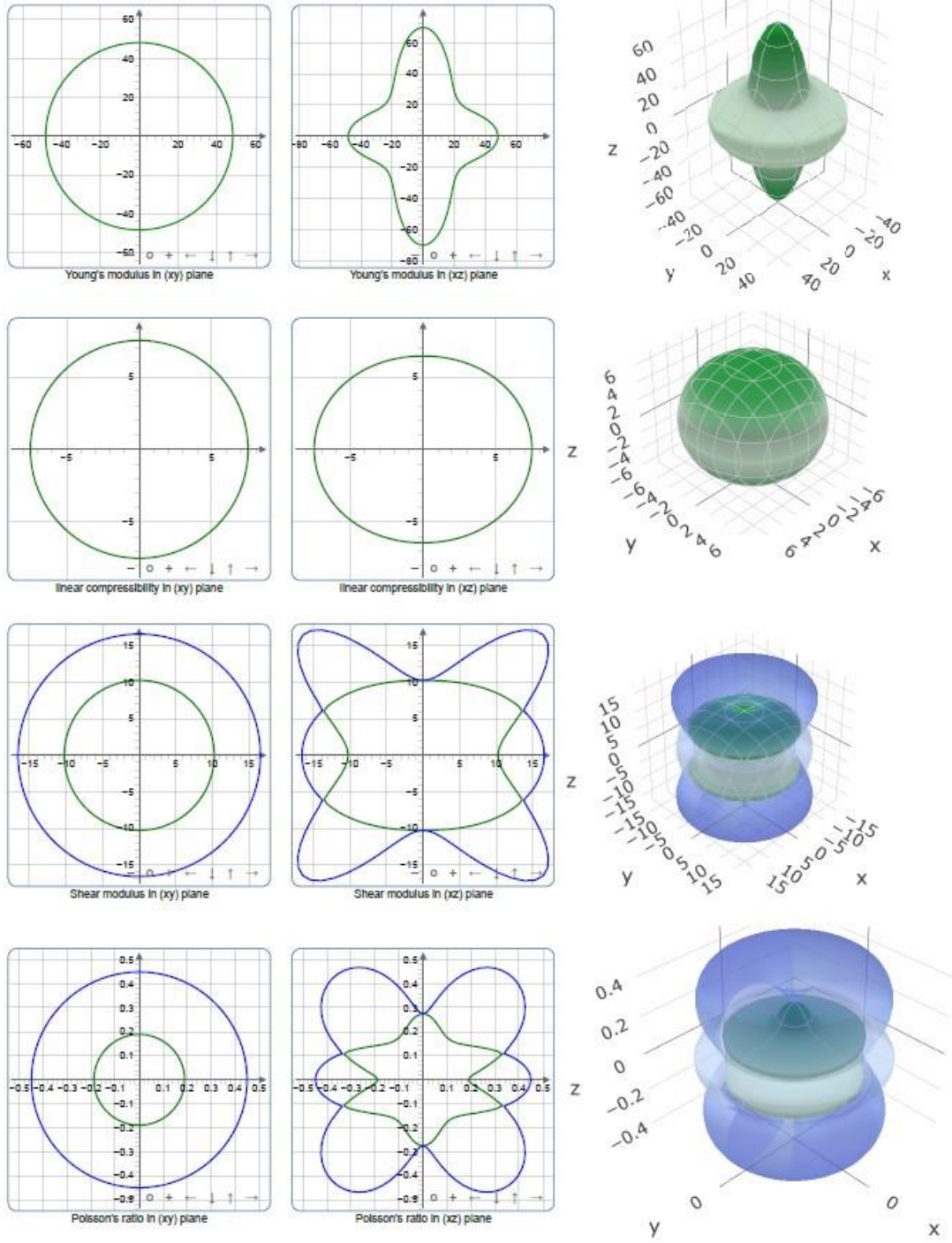
Şekil 4.23. Tetragonal SrGe_3 bileşiğinin xy ve xz düzlemleri ile 3-boyutta hesaplanan Young modülü, sıkışabilirlik, Kesme modülü ve Poisson oranının yöneline bağlı değişimleri.



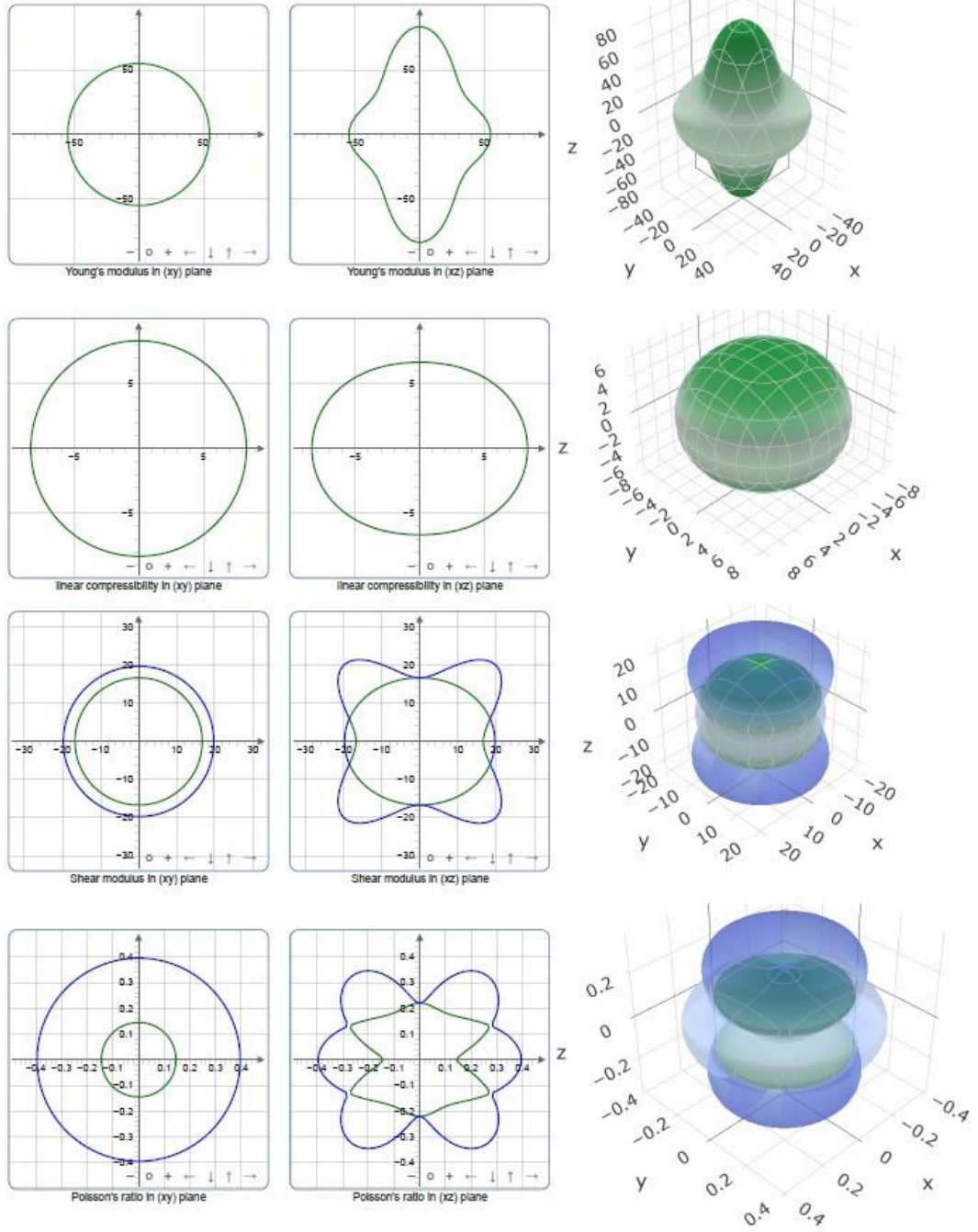
Şekil 4.24. Tetragonal BaGe_3 bileşiğinin xy ve xz düzlemleri ile 3-boyutta hesaplanan Young modülü, sıkışabilirlik, Kesme modülü ve Poisson oranının yöneline bağlı değişimleri.



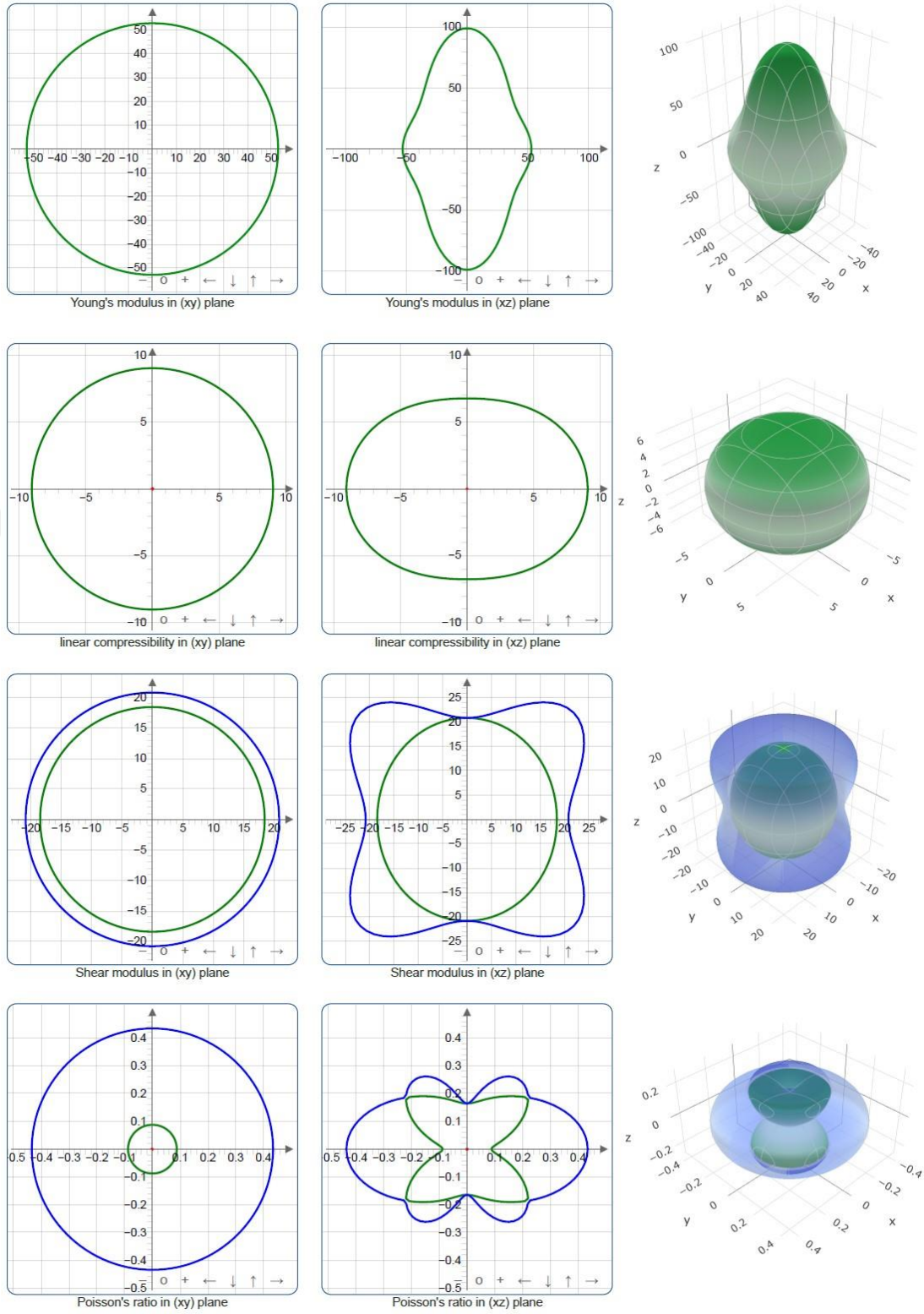
Şekil 4.25. Hekzagonal MgGe_3 bileşiğinin xy ve xz düzlemleri ile 3-boyutta hesaplanan Young modülü, sıkışabilirlik, Kesme modülü ve Possion oranının yönelime bağlı değişimleri.



Şekil 4.26. Hekzagonal CaGe_3 bileşiğinin xy ve xz düzlemleri ile 3-boyutta hesaplanan Young modülü, sıkışabilirlik, Kesme modülü ve Poisson oranının yöneline bağlı değişimleri.



Şekil 4.27. Hekzagonal SrGe_3 bileşiğinin xy ve xz düzlemleri ile 3-boyutta hesaplanan Young modülü, sıkışabilirlik, Kesme modülü ve Poisson oranının yöneline bağlı değişimleri.



Şekil 4.28. Hekzagonal BaGe_3 bileşiğinin xy ve xz düzlemleri ile 3-boyutta hesaplanan Young modülü, sıkışabilirlik, Kesme modülü ve Poisson oranının yöneline bağlı değişimleri.

Ayrıca Young Modülü, Lineer Sıkışabilirlik, Kesme modülü ve Poisson oranı için maksimum, minimum değerleri ve anizotropisi Çizelge 4.11’ de verildi. Anizotropi değerlerinde 1 değeri izotropiyi gösterirken, 1 den sapmalar anizotropiyi göstermektedir. Çizelge 4.11’den görüldüğü gibi bileşiklerin hekzagonal fazda Young modülünün maksimum ve minimum değerleri arasındaki fark daha yüksek iken tetragonal fazda ise daha düşüktür. Young modülünde hekzagonal fazda $MgGe_3$ bileşiği en fazla anizotropiye sahiptir. Her iki fazda da lineer sıkışabilirlik değerlerinin maksimum ve minimum değerleri nispeten birbirine yakındır. En fazla anizotropi sergileyen hekzagonal fazdaki $MgGe_3$ bileşiğidir. Aynı şekilde Kesme modülü değerlerinde de hekzagonal fazda maksimum ve minimum değerler arasındaki fark tetragonal faza göre daha fazladır. Bu bileşikler arasında $MgGe_3$ hekzagonal fazda en fazla anizotropiye sahiptir. Poisson oranı değerlerinde en fazla anizotropiyi hekzagonal fazdaki $MgGe_3$ bileşiği göstermektedir.

Çizelge 4.11. XGe_3 (X= Mg, Ca, Sr, Ba) Bileşiklerinin Young Modülü, Lineer Sıkışabilirlik, Kesme modülü ve Poisson oranı için maksimum, minimum ve anizotropi değerleri.

Malzeme	$MgGe_3$		$CaGe_3$		$SrGe_3$		$BaGe_3$	
Yapı	TET	HEX	TET	HEX	TET	HEX	TET	HEX
E_{min}	33.55	2.92	69.11	31.95	70.37	46.35	72.16	50.8
E_{max}	63.26	57.44	98.37	70.03	94.86	83.68	88.75	99.04
$E_{anizotropi}$	1.89	19.72	1.42	2.19	1.35	1.81	1.23	1.95
β_{min}	5.42	4.98	6.27	6.43	7.05	6.68	6.54	6.78
β_{max}	6.06	7.54	7.18	7.49	7.36	8.35	8.23	9.04
$\beta_{anizotropi}$	1.12	1.52	1.15	1.17	1.04	1.25	1.26	1.33
G_{min}	10.72	0.75	25.68	10.29	27.2	16.69	29.4	18.42
G_{max}	30.49	16.34	45.58	23.32	45.95	28.27	43.14	30.93
$G_{anizotropi}$	2.84	21.76	1.78	2.27	1.69	1.69	1.47	1.68
ν_{min}	0.03	0.03	0.07	0.2	0.03	0.14	0.02	0.08
ν_{max}	0.65	0.94	0.35	0.56	0.35	0.41	0.31	0.43
$\nu_{anizotropi}$	17.37	25.56	4.45	2.82	10.99	2.89	10.99	4.96

Bir malzeme içinde elastik dalgaların hızı malzemenin anizotropisinden dolayı yönelimlere göre farklılık gösterebilir. Ses dalgalarının hızı, yayılma yönelimine bağlıdır. Aşağıdaki denklemler de V_l boyuna, V_t enine ses hızlarına ve ρ yoğunluğa karşılık gelmektedir.

[100] ve [001] yönelimleri boyunca hekzagonal yapı için boyuna ve enine akustik ses hızları [52];

[100]:

$$[100]V_l = \sqrt{\frac{C_{11} - C_{12}}{2\rho}} \quad ; \quad [010]V_{t1} = \sqrt{\frac{C_{11}}{\rho}} \quad ; \quad [001]V_{t2} = \sqrt{\frac{C_{44}}{\rho}}$$

[001]:

$$[001]V_l = \sqrt{\frac{C_{33}}{\rho}} \quad ; \quad [100]V_{t1} = [010]V_{t2} = \sqrt{\frac{C_{44}}{\rho}}$$

[100], [001], [110] yönelimleri boyunca tetragonal yapı için boyuna (V_l) ve enine (V_t) akustik ses hızları [67];

[100]=[010]:

$$[100]V_l = [010]V_l = \sqrt{\frac{C_{11}}{\rho}} \quad ; \quad [001]V_{t1} = \sqrt{\frac{C_{44}}{\rho}} \quad ; \quad [010]V_{t2} = \sqrt{\frac{C_{66}}{\rho}}$$

[001]:

$$[001]V_l = \sqrt{\frac{C_{33}}{\rho}} \quad ; \quad [010]V_{t2} = [100]V_{t1} = \sqrt{\frac{C_{66}}{\rho}}$$

[110]:

$$[110]V_l = \sqrt{\frac{C_{11} + C_{12} + 2C_{66}}{2\rho}} \quad ; \quad [001]V_{t1} = \sqrt{\frac{C_{44}}{\rho}} \quad ; \quad [1\bar{1}0]V_{t2} = \sqrt{\frac{C_{11} - C_{12}}{2\rho}}$$

şeklinde verilir.

Çizelge 4.12. Tetragonal fazdaki XGe_3 ($X=Mg, Ca, Sr, Ba$) bileşiklerinin yönelime bağlı ses hızları (m/s).

Yönelimler		$MgGe_3$	$CaGe_3$	$SrGe_3$	$BaGe_3$
[100]=[010]	[100] V_1	4299.1	4639.6	4323.2	4024.1
	[001] V_{t1}	1441.3	2360.1	2233.6	2243.3
	[010] V_{t2}	2163.0	2257.0	2407.5	2273.6
[001]	[001] V_1	3858.8	4183.6	4053.9	4013.4
	[100] V_{t1}	2163.0	2257.0	2407.5	2273.6
	[010] V_{t2}	2163.0	2257.0	2407.5	2273.6
[110]	[110] V_1	4152.0	4194.2	4007.3	3738.5
	[001] V_{t1}	1441.3	2360.1	2233.6	2243.3
	[1 $\bar{1}$ 0] V_{t2}	2433.3	3004.8	2903.1	2717.8

Çizelge 4.13. Hekzagonal fazdaki XGe_3 ($X=Mg, Ca, Sr, Ba$) bileşiklerinin yönelime bağlı ses hızları (m/s).

Yönelimler		$MgGe_3$	$CaGe_3$	$SrGe_3$	$BaGe_3$
[100]	[100] V_1	1289.7	1830.5	1924.1	1807.8
	[010] V_{t1}	3906.5	3775.1	3640.3	3465.1
	[001] V_{t2}	393.4	1441.9	1769.3	1922.1
[001]	[001] V_1	3933.7	4176.8	4188.6	4306.2
	[100] V_{t1}	393.4	1441.9	1769.3	1922.1
	[010] V_{t2}	393.4	1441.9	1769.3	1922.1

Çizelge 4.12 ve 4.13'lerden görüldüğü üzere aynı fazdaki bileşiklerin aynı yönelimdeki ses hızları birbirine yakın çıkmaktadır. Nispeten hekzagonal fazdaki $MgGe_3$ bileşiğinin yönelime bağlı ses hızları daha düşük çıkmıştır.

4.4 Termal İletkenlik

Termal iletkenlik, bir malzemenin ısıyı iletme kabiliyetinin bir ölçüsüdür. Yüksek termal iletkenliğe sahip malzemeler ısıyı iyi iletirler. Minimum termal iletkenlik, fononun ısı iletkenliğe katkısının minimum değere ulaştığı ve sıcaklıktan bağımsız

hale geldiği yüksek sıcaklıkta sabit bir ısı iletkenliktir [68]. Minimum termal iletkenlik, Clark ve Cahill modelleri ile

$$k_{Clark} = 0.87k_b \left[\frac{M}{mN_A} \right]^{-\frac{2}{3}} E^{\frac{2}{3}} \rho^{\frac{1}{6}} \quad (4.4)$$

$$k_{Cahill} = \frac{k_b}{2.48} n^{\frac{2}{3}} (V_l + 2V_t) \quad (4.5)$$

eşitlikleri kullanılarak hesaplanmıştır ve elde edilen veriler Çizelge 4.14’ de verilmiştir [69-71].

Genel olarak XGe_3 ($X=Mg, Ca, Sr, Br$) bileşiklerinin düşük termal iletkenlik değerlerine sahip olduğu söylenebilir. Termal bariyer kaplama uygulamaları için minimum termal iletkenlik değeri $1.25 \text{ W/m}\cdot\text{K}$ 'den büyük olan malzemelerin potansiyel aday olma olasılığı daha düşüktür [65]. Dolayısıyla bu bileşiklerin tümü her iki fazda da termal bariyer kaplama için uygun adaylar olabilir. Sonuçlarımız, bu bileşiklerin minimum termal iletkenliklerinin ilk niteliksel tahminidir ve daha ileri araştırmalara ilham verebilir.

Çizelge 4.14. XGe_3 ($X= Mg, Ca, Sr, Ba$) Bileşiklerinin minimum termal iletkenlik değerleri (k_{Clarke} , k_{Cahill}) ($\text{W/m}\cdot\text{K}$).

<i>Malzeme</i>	<i>Yapı</i>	<i>k_{Clarke}</i>	<i>k_{Cahill}</i>
MgGe₃	TET	0.492	0.581
	HEX	0.640	0.424
CaGe₃	TET	0.614	0.671
	HEX	0.962	0.514
SrGe₃	TET	0.558	0.608
	HEX	0.967	0.508
BaGe₃	TET	0.551	0.556
	HEX	0.890	0.477

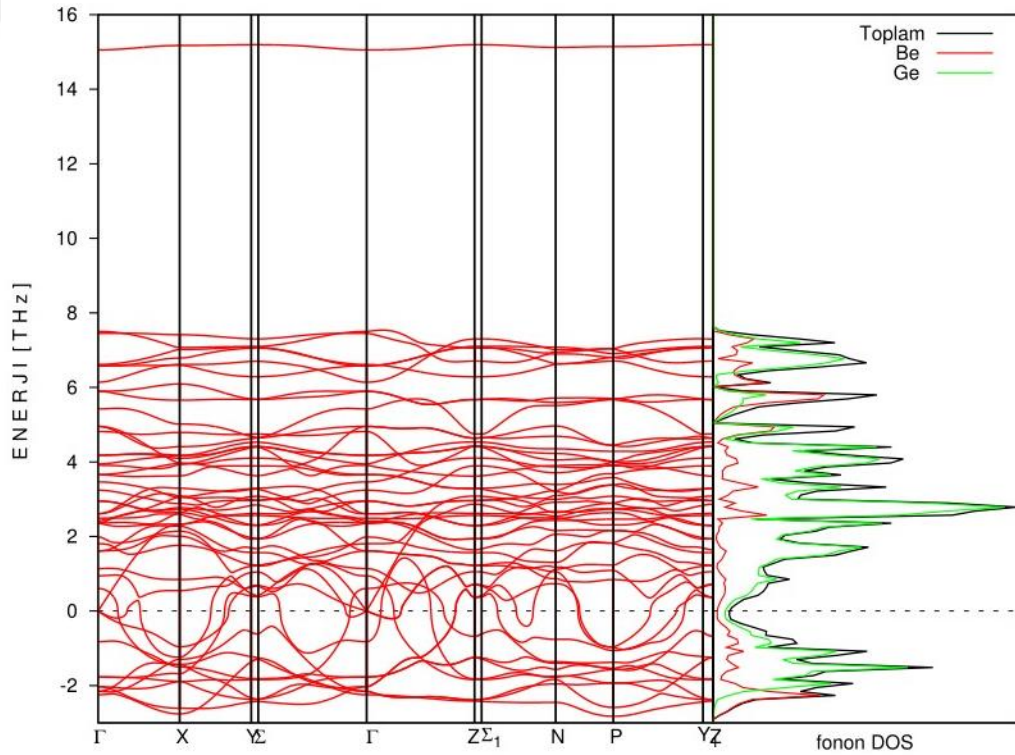
4.5 Titreşimsel Özellikler

Malzemelerin dinamik olarak kararlılıkları fonon modları ile incelenebilir. Bir kristalin tüm titreşim modları pozitifse, malzeme dinamik olarak karardır. Bu bileşiklerin fonon dağıtım ve fonon durum yoğunluğu eğrilerini elde etmek için VASP

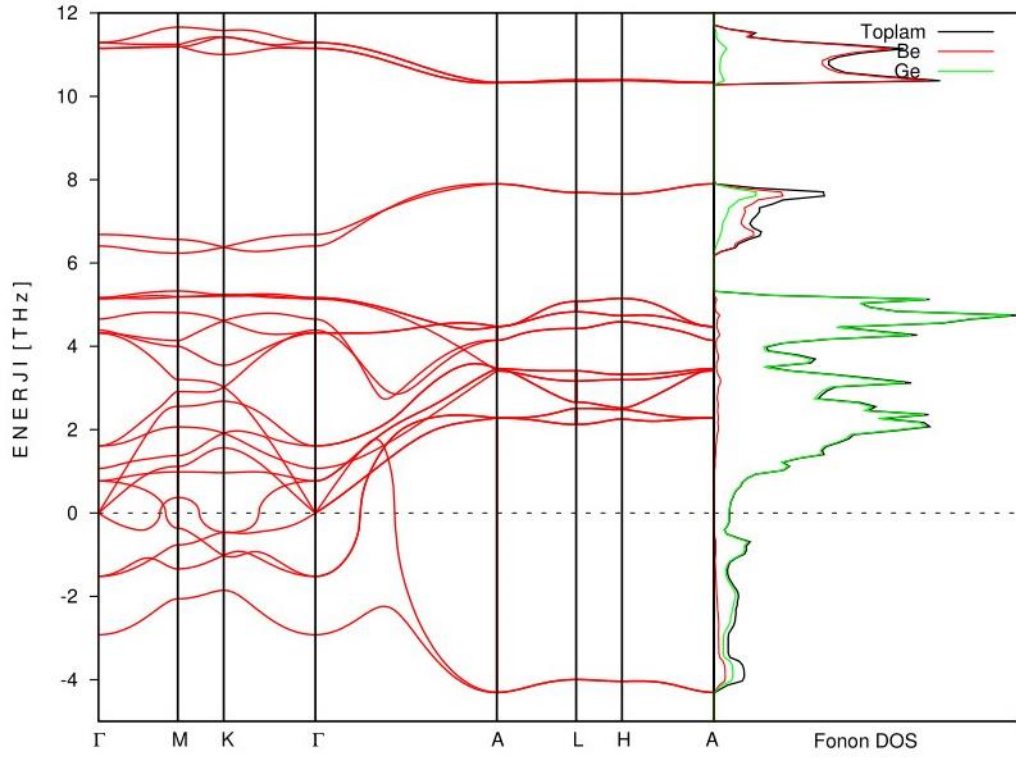
paket programı ve Phonopy [55-56] programını kullanıldı. Fonon dağılımları hesabı yapılırken tetragonal faz için 2x2x2 büyüklüğünde süpercell ve hekzagonal fazı için 3x3x2 büyüklüğünde süpercell kullanıldı. Ek olarak Phonopy kodu kullanılarak sıcaklığa bağlı termodinamik özellikleri hesaplandı.

4.5.1 Fonon dağılımı ve fonon durum yoğunluğu

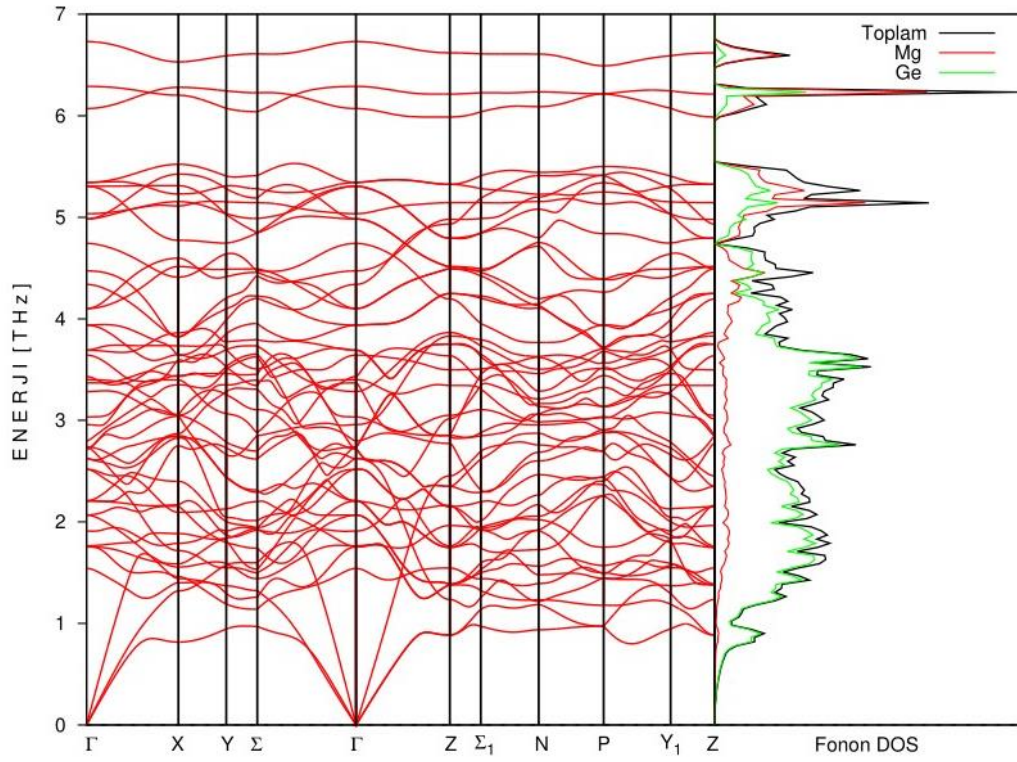
XGe_3 ($X=Be, Mg, Ca, Sr, Ba$) bileşiklerinin hekzagonal ve tetragonal fazdaki yüksek simetri noktaları boyunca fonon dağılımları ve fonon dağılımları ile uyuşan fonon durum yoğunluğu eğrileri hesaplanarak Şekil 4.29-4.38’de verildi.



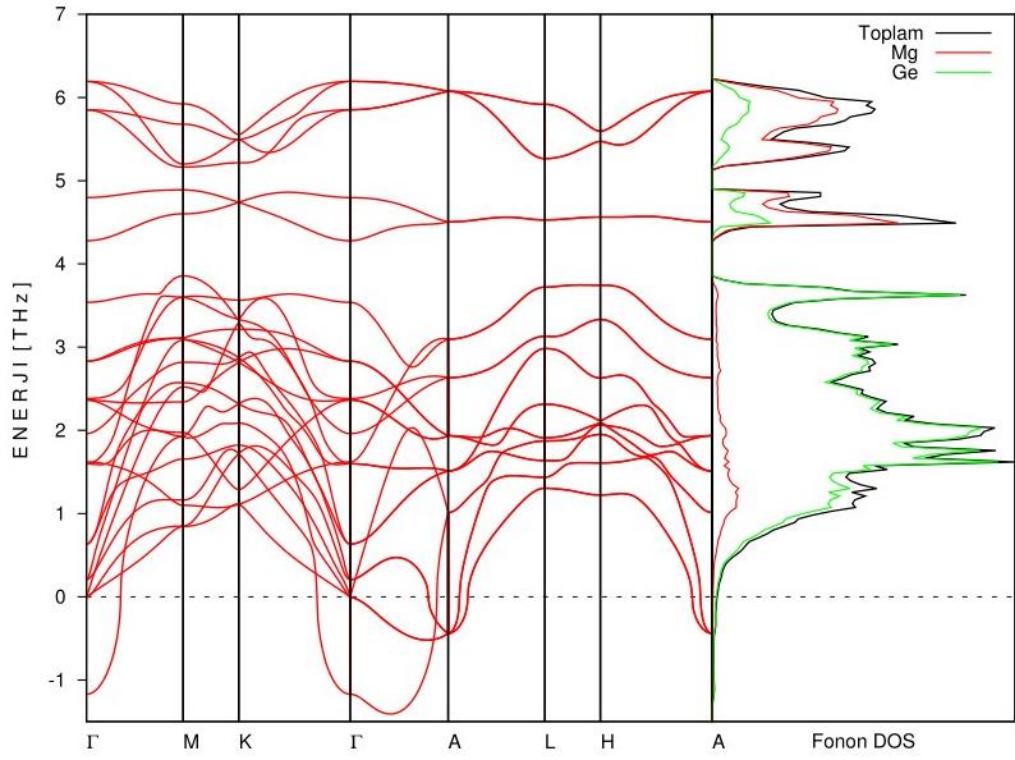
Şekil 4.29. Tetragonal BeGe₃ bileşiğinin fonon dağılımı ve fonon durum yoğunluğu eğrileri.



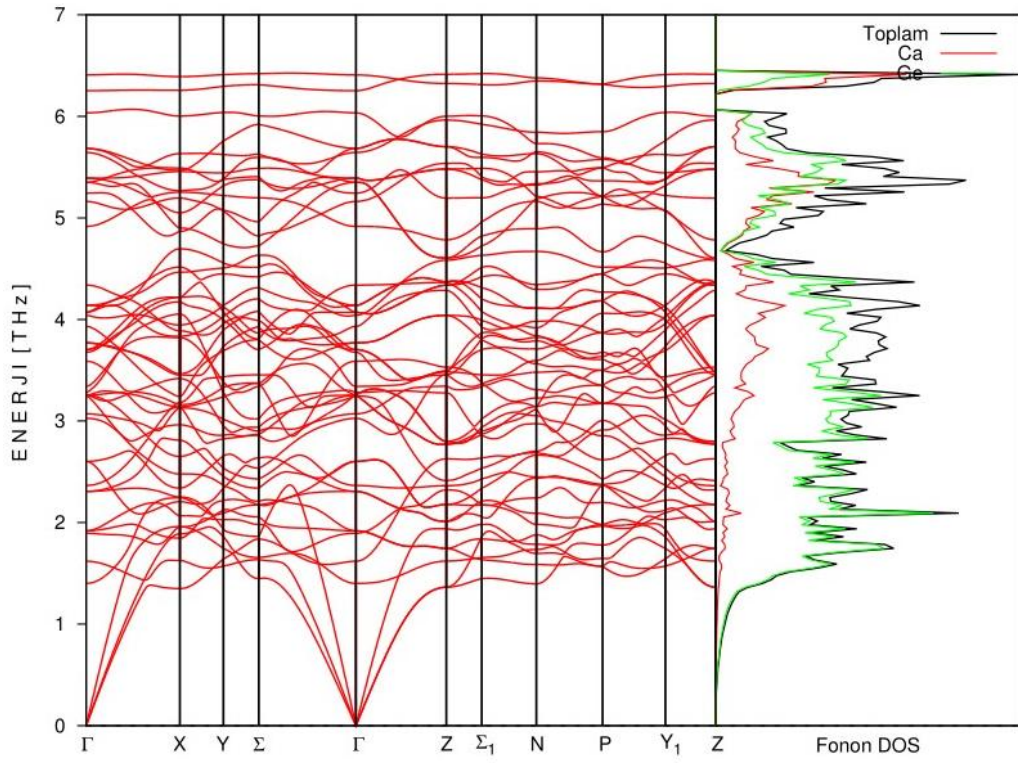
Şekil 4.30. Hekzagonal BeGe₃ bileşiğinin fonon dağılımı ve fonon durum yoğunluğu eğrileri.



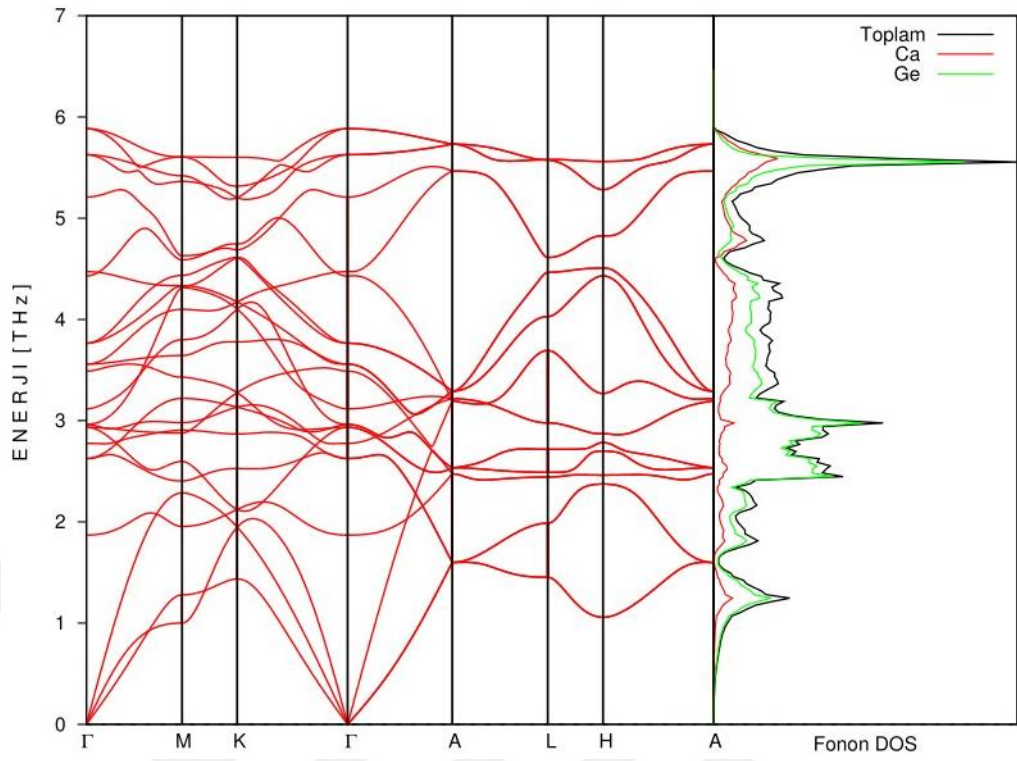
Şekil 4.31. Tetragonal MgGe₃ bileşiğinin fonon dağılımı ve fonon durum yoğunluğu eğrileri.



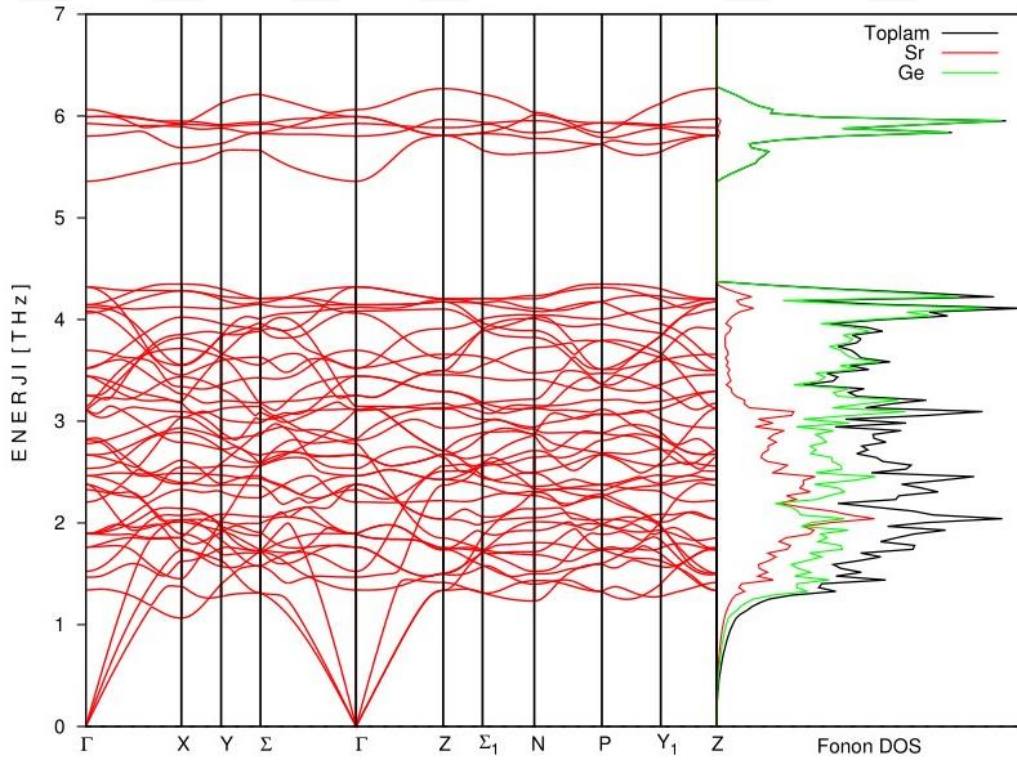
Şekil 4.32. Hekzagonal MgGe_3 bileşiğinin fonon dağılımı ve fonon durum yoğunluğu eğrileri.



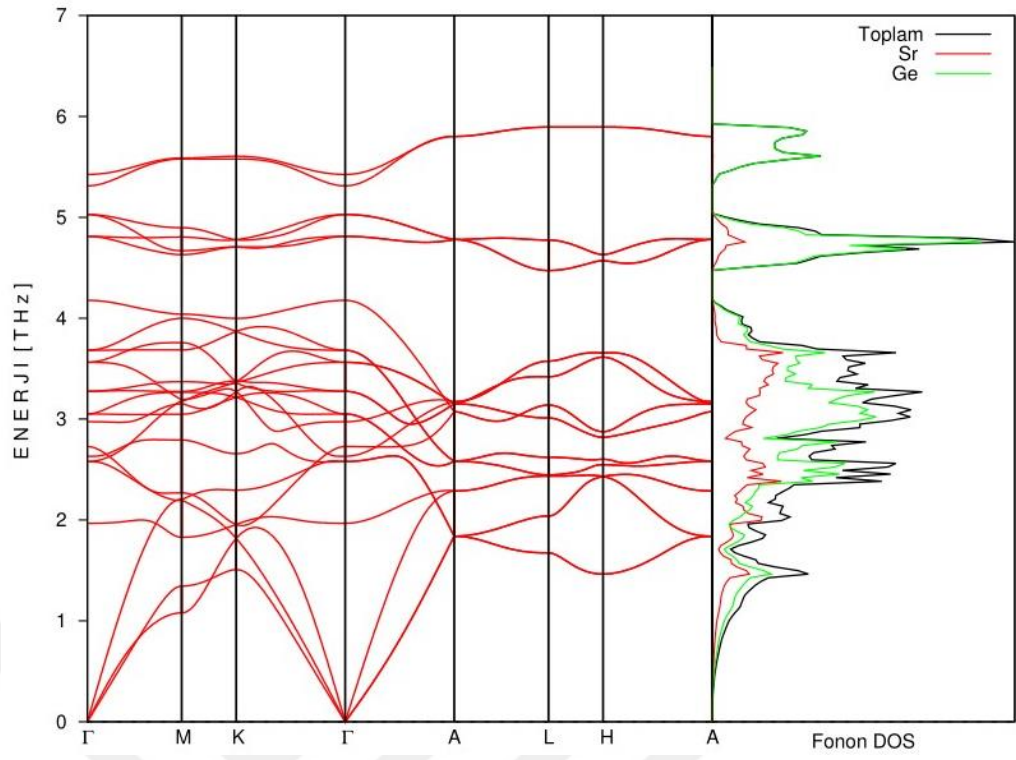
Şekil 4.33. Tetragonal CaGe_3 bileşiğinin fonon dağılımı ve fonon durum yoğunluğu eğrileri.



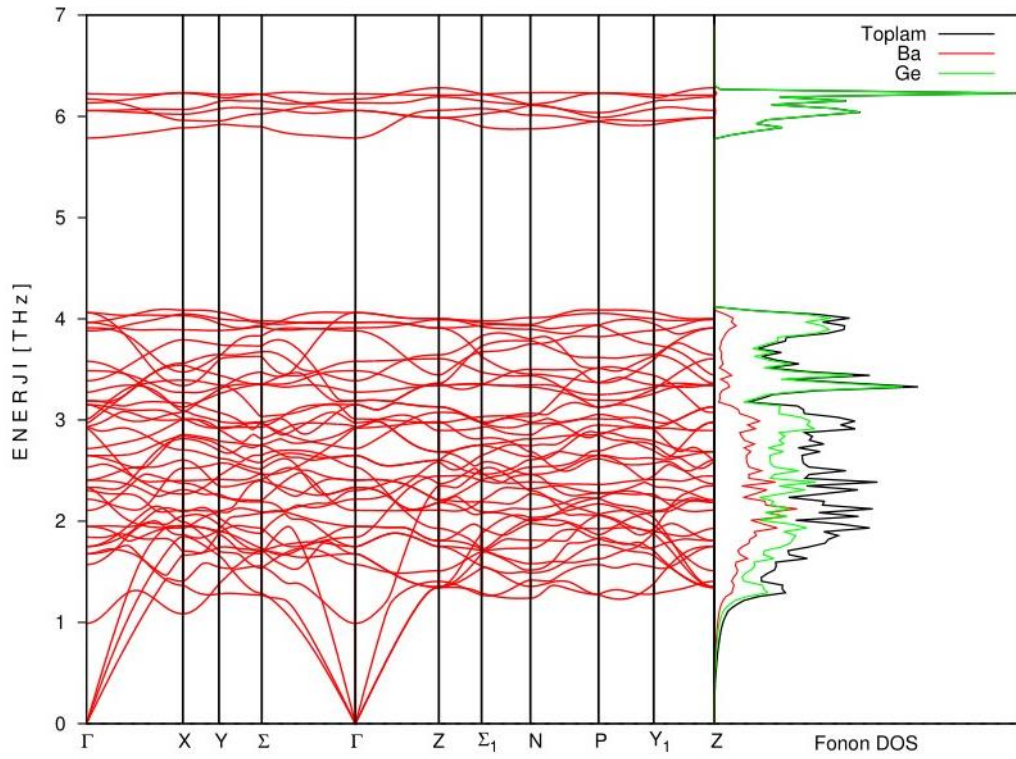
Şekil 4.34. Hekzagonal CaGe_3 bileşiğinin fonon dağılımı ve fonon durum yoğunluğu eğrileri.



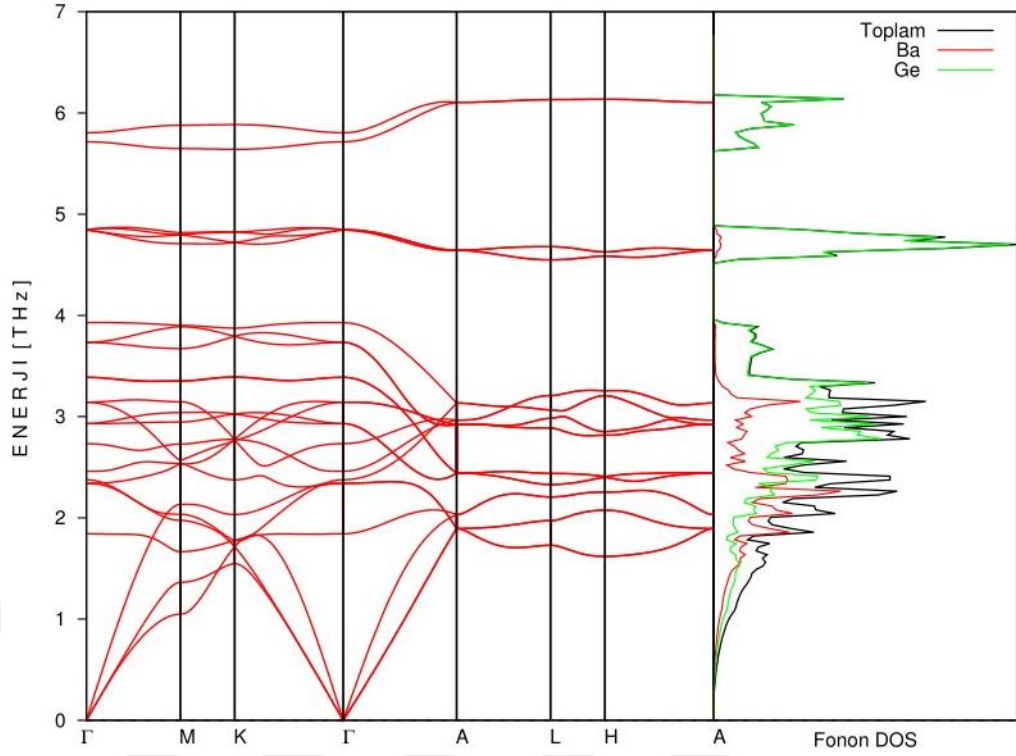
Şekil 4.35. Tetragonal SrGe_3 bileşiğinin fonon dağılımı ve fonon durum yoğunluğu eğrileri.



Şekil 4.36. Hekzagonal SrGe_3 bileşiğinin fonon dağılımı ve fonon durum yoğunluğu eğrileri.



Şekil 4.37. Tetragonal BaGe_3 bileşiğinin fonon dağılımı ve fonon durum yoğunluğu eğrileri.



Şekil 4.38. Hekzagonal BaGe_3 bileşiğinin fonon dağılımı ve fonon durum yoğunluğu eğrileri.

XGe_3 ($\text{X} = \text{Be}, \text{Mg}, \text{Ca}, \text{Sr}, \text{Ba}$) bileşiklerinin tetragonal fazında 16 atom bulunduğundan fonon dağılımında 48 titreşim modu içerir. Bunlardan 3 tanesi akustik, 45 tanesi optik daldır. Hekzagonal fazda ise birim hücresinde 8 atom vardır, dolayısıyla 24 fonon dalı (3 akustik dal ve 21 optik dal) vardır.

Şekil 4.29-4.38’de görüldüğü gibi bu bileşiklerin hekzagonal fazdaki MgGe_3 bileşiği ve her iki fazdaki BeGe_3 bileşikleri dışında her iki fazdaki tüm bileşiklerin fonon dağılım eğrilerinde negatif frekans bulunmamaktadır. Dolayısıyla hekzagonal MgGe_3 ve BeGe_3 bileşikleri dışında tüm bileşikler dinamik olarak kararlıdır.

Hekzagonal CaGe_3 bileşiğinde akustik ve alt optik dallarda Ca ve Ge atomlarından, üst optik dallarda ise Ge atomunun etkisi vardır. Yaklaşık 5.2 THz’in üstündeki optik dallar diğer optik dallarla çakışmamaktadır ama bir aralıkta bulunmamaktadır. Üst optik dallar düz, burada durum yoğunluğunda Ge atomundan kaynaklanan pik meydana gelmektedir. Ayrıca akustik ve optik dallar birbiriyle çakışmaktadır.

Hekzagonal SrGe_3 bileşiğinde akustik dallara ve alt optik dallara katkı Sr ve Ge atomlarından, yaklaşık 4 THz'in üstündeki optik dallara (orta ve üst optik dallara) katkı Ge atomundan gelmektedir. Akustik ve optik dallar çakışmaktadır. Optik dallarda yaklaşık 4.3 ve 5 THz civarında yaklaşık 0.2 THz'lik iki aralık bulunmaktadır.

Hekzagonal BaGe_3 bileşiğinde de akustik ve alt optik dallara katkı Ba ve Ge atomlarından, orta ve üst optik dallara katkı ise Ge atomundan gelmektedir. Optik modlar arasında yaklaşık olarak 4-4.7 THz ve 4.9 -5.6 THz civarında iki aralık bulunmaktadır.

Dinamiksel olarak kararlı olan hekzagonal fazlarda Ca'dan Ba'a gittikçe en yüksek titreşim frekansı azalmaktadır. Ayrıca aralıkların büyüklüğü de artmaktadır. Atom ağırlıklarının da etkisiyle akustik modlarda X (Ca, Sr, Ba) atomundan gelen katkı, üst optik modlarda da Ge atomundan gelen katkı belirginleşmektedir.

Tetragonal fazda MgGe_3 bileşiğinde akustik ve alt optik modlarda Mg atomunun etkisi, yaklaşık 5 THz' in üstünde ise Ge atomunun etkisi baskındır. Yaklaşık 5.5- 6 THz ve 6.3-6.5 THz aralığında iki boşluk bulunmaktadır. Üst optik modlar düz dolayısıyla fonon DOS eğrilerinde bir pik gözlenmektedir.

Tetragonal fazdaki CaGe_3 bileşiğinde akustik ve alt optik dallarda Ge atomunun, yaklaşık 5 THz'in üstündeki dallarda ise Ca ve Ge atomunun katkısı vardır. Yaklaşık 6-6.2 THz aralığında bir boşluk bulunmaktadır. Bu aralıktan sonraki optik modlar düz ve DOS eğrisinde keskin bir pik görülmektedir.

Tetragonal fazda SrGe_3 bileşiğinde akustik ve alt optik dallara katkı Sr ve Ge atomundan, yaklaşık 3 THz'in üstündeki optik dallara katkı ise Ge atomundan gelmektedir. Yaklaşık 4.4-5.4 THz aralığında bir boşluk bulunmaktadır. Yine aynı şekilde üst optik dallar düz ve fonon DOS eğrisinde bir pik gözlenmektedir.

Tetragonal fazdaki BaGe_3 bileşiği de şekil itibariyle SrGe_3 bileşiğine benzemektedir. Yaklaşık 4.1-5.8 THz aralığında bir boşluk bulunmaktadır.

Tetragonal fazda Mg'dan Ba' a gittikçe en yüksek titreşim frekans değeri azalmaktadır ve aralıkların genişliği de artmaktadır.

Her iki fazda da görüldüğü gibi akustik ve alt optik dallar çakışmaktadır. Dolayısıyla bu bileşiklerin düşük termal iletkenlik sergilemeleri beklenir. Bu bileşiklerin hepsinde optik dallar arasında aralık bulunmaktadır. Bu aralıklar THz algılayıcı sensörler için önemlidir [72].

Gama noktasındaki normal mod, kristal boyunca tüm atomların kolektif titreşimine karşılık gelir [73]. Dinamik olarak kararlı olan malzemelerin Γ noktasındaki fonon frekansları Çizelge 4.15 ve 4.16 'da özetlenmiştir.

Hekzagonal fazdaki bileşikler $P6_3/mmc$ (No 194) uzay grubunda ve D_{6h} ($6/mmm$) nokta grubunda bulunmaktadır. Dolayısıyla bu bileşiklerin fonon modları

$$\Gamma_{akustik} = A_{2u} + E_{1u}$$

$$\Gamma_{optik} = A_{1g} + A_{2g} + A_{2u} + 2B_{1g} + B_{1u} + B_{2u} + E_{2u} + 3E_{2g} + 2E_{1u} + E_{1g}$$

bu optik modlardan $A_{2u} + 2E_{1u}$ infrared aktif mod, $A_{1g} + 3E_{2g} + E_{1g}$ ise raman aktif moddur.

Tetragonal fazdaki bileşikler ise $I4/mmm$ (No 139) uzay grubunda ve D_{4h} ($4/mmm$) nokta grubunda bulunmaktadır. Bu fazdaki bileşiklerin fonon modları

$$\Gamma_{akustik} = A_{2u} + E_u$$

$$\Gamma_{optik} = 4A_{1g} + A_{1u} + 2A_{2g} + 4A_{2u} + 3B_{1g} + 2B_{1u} + 3B_{2g} + 2B_{2u} + 6E_u + 6E_g$$

bu optik modlardan $4A_{2u} + 6E_u$ infrared aktif mod, $4A_{1g} + 3B_{1g} + 3B_{2g} + 6E_g$ ise raman aktif moddur.

Çizelge 4.15. Hekzagonal Fazda XGe_3 ($X=Ca, Sr, Ba$) bileşiklerinin Γ noktasındaki fonon frekansları (THz) ve simetrileri.

CaGe₃		SrGe₃		BaGe₃	
0	E _{1u}	0	E _{1u}	0	E _{1u}
0	A _{2u}	0	A _{2u}	0	A _{2u}
1.869	B _{1g}	1.967	B _{1g}	1.843	B _{1g}
2.626	E _{2g}	2.579	E _{2g}	2.341	E _{2g}
2.776	A _{2g}	2.631	A _{2g}	2.377	A _{2u}
2.935	E _{1g}	2.728	A _{2u}	2.461	A _{2g}
2.963	E _{2g}	2.974	B _{1u}	2.733	B _{1u}
3.116	B _{1u}	3.051	E _{1g}	2.932	E _{1g}
3.489	A _{2u}	3.276	E _{2g}	3.142	E _{1u}
3.559	E _{2u}	3.563	E _{1u}	3.389	E _{2g}
3.766	E _{1u}	3.682	E _{2u}	3.734	E _{2u}
4.429	B _{2u}	4.177	B _{1g}	3.928	B _{1g}
4.473	B _{1g}	4.811	E _{1u}	4.843	E _{1u}
5.209	A _{1g}	5.028	E _{2g}	4.848	E _{2g}
5.627	E _{1u}	5.312	B _{2u}	5.715	A _{1g}
5.885	E _{2g}	5.425	A _{1g}	5.804	B _{2u}

Çizelge 4.16. Tetragonal Fazda XGe_3 ($X=Mg, Ca, Sr, Ba$) bileşiklerinin Γ noktasındaki fonon frekansları (THz) ve simetrileri.

MgGe₃		CaGe₃		SrGe₃		BaGe₃	
0	A _{2u}	0	A _{2u}	0	E _u	0	A _{2u}
0	E _u	0	E _u	0	A _{2u}	0	E _u
1.542	B _{1u}	1.401	B _{2g}	1.341	B _{1u}	0.991	A _{2u}
1.754	E _g	1.620	B _{1u}	1.468	A _{2u}	1.572	B _{2g}
1.765	B _{2g}	1.895	A _{2u}	1.525	B _{2g}	1.677	E _g
1.910	A _{2u}	1.919	E _g	1.763	E _g	1.750	E _u
2.068	E _u	2.307	E _u	1.893	E _g	1.842	B _{1u}
2.204	A _{2g}	2.365	A _{2g}	1.895	E _u	1.949	E _g
2.209	E _u	2.602	E _g	2.206	A _{2g}	2.107	A _{2g}
2.517	E _g	3.027	A _{2u}	2.326	A _{1g}	2.218	A _{1g}
2.623	A _{2u}	3.071	B _{2g}	2.379	E _g	2.304	A _{2u}
2.625	B _{2u}	3.246	B _{2u}	2.463	E _u	2.333	E _g
2.718	E _g	3.253	E _u	2.536	A _{2u}	2.406	E _u
2.740	E _u	3.257	E _g	2.668	E _u	2.534	B _{2u}
2.799	B _{2g}	3.282	A _{1u}	2.780	B _{1g}	2.649	E _u
2.958	B _{1u}	3.341	B _{1u}	2.812	A _{2u}	2.718	B _{1g}
3.034	A _{1u}	3.589	A _{1g}	2.827	B _{2u}	2.921	B _{1u}
3.284	A _{2g}	3.678	B _{2u}	3.104	B _{1u}	2.929	E _g
3.368	B _{1g}	3.703	E _g	3.114	E _g	2.973	A _{2u}
3.401	A _{1g}	3.770	E _u	3.146	A _{1u}	3.011	A _{1u}
3.432	B _{2u}	3.932	B _{1g}	3.252	E _g	3.152	E _u
3.643	A _{1g}	4.042	A _{1g}	3.443	E _u	3.190	E _g
3.691	E _g	4.071	E _u	3.518	B _{2u}	3.275	B _{2g}
3.938	E _u	4.140	E _g	3.525	B _{2g}	3.388	B _{2u}
4.101	E _g	4.339	A _{2g}	3.697	A _{1g}	3.487	A _{1g}
4.339	B _{1g}	4.916	A _{2u}	4.063	A _{2u}	3.580	A _{2g}
4.473	B _{2g}	5.162	B _{1g}	4.083	A _{2g}	3.882	A _{2u}
4.743	A _{1g}	5.244	A _{1g}	4.120	B _{1g}	3.911	B _{1g}
4.984	E _u	5.350	E _u	4.145	E _g	3.965	E _g
5.036	A _{2u}	5.392	E _g	4.320	E _u	4.061	E _u
5.306	E _u	5.645	B _{2g}	5.359	A _{1g}	5.786	A _{1g}
5.343	E _g	5.684	E _u	5.803	A _{1g}	6.057	E _u
6.071	A _{2u}	6.034	A _{1g}	5.926	B _{1g}	6.133	A _{1g}
6.289	B _{1g}	6.252	A _{2u}	5.993	E _u	6.172	B _{2g}
6.731	A _{1g}	6.407	B _{1g}	6.062	B _{2g}	6.223	B _{1g}

4.5.2 Termodinamik özellikler

Mühendislik uygulamaları için bir malzemenin serbest enerji, entropi ve ısı kapasitesinin bilinmesi önemlidir. Özellikle birçok teknolojik uygulama için bu niceliklerin oda sıcaklığındaki değerleri gereklidir. Her iki faz için de ısı kapasiteleri 0-600 K sıcaklık aralığında hesaplandı ve Şekil 4.39-40'da verildi. Ayrıca 300 K değerindeki serbest enerji, entropi, ısı kapasitesi ve iç enerji değerleri Çizelge 4.17-18'de verildi.

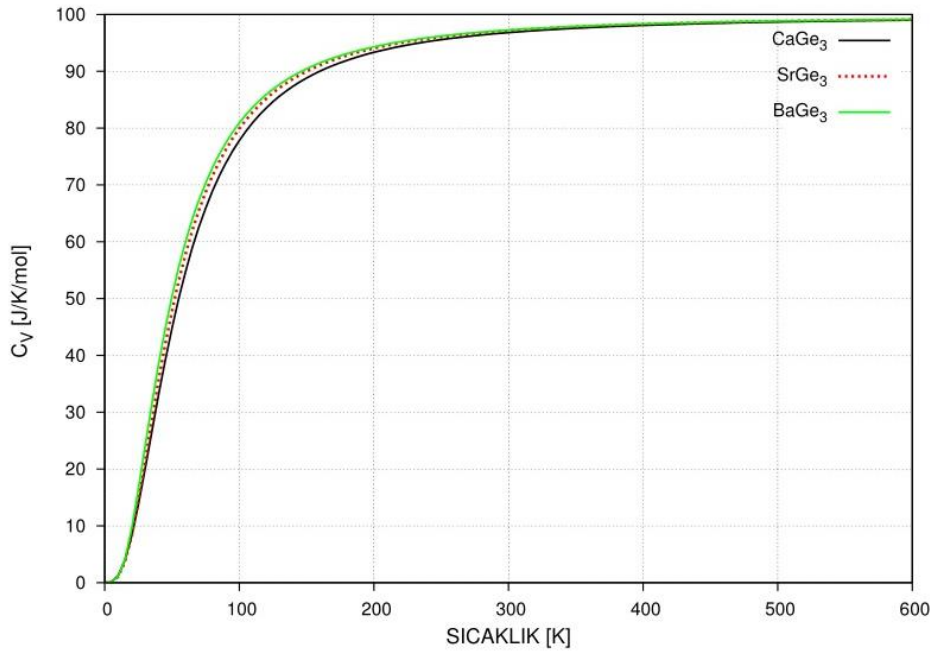
Şekil 4.39 ve 4.40' dan görüldüğü gibi ısı kapasitesi beklenildiği gibi düşük sıcaklıklarda yaklaşık olarak T^3 davranışı sergilemekte ve sonra sıcaklık yavaş bir şekilde artarak Dulong-Petit limitine ulaşmaktadır. Her iki fazda da ısı kapasitesinin sıcaklığa bağlı değişimleri birbirine yakındır. Isı kapasitesi grafiklerinden de anlaşılacağı gibi bu bileşiklerin Debye sıcaklıkları her iki faz için de oda sıcaklığının biraz altında kalmaktadır. Çizelge 4.17 ve 4.18' de verilen 300 K' deki entropi ve ısı sığası değerlerine baktığımızda her iki fazda da Ca' dan Ba' a gidildikçe artmaktadır. İç enerji ve serbest enerji değerleri ise Ca'dan Ba'a gidildikçe azalmaktadır.

Çizelge 4.17. Hekzagonal Fazda 300 K'de XGe_3 (X= Ca, Sr, Ba) bileşiklerinin serbest enerji F[kJ/mol], entropi S [J/K/mol], ısı sığası C_v [J/K/mol] ve iç enerji E[kJ/mol] değerleri.

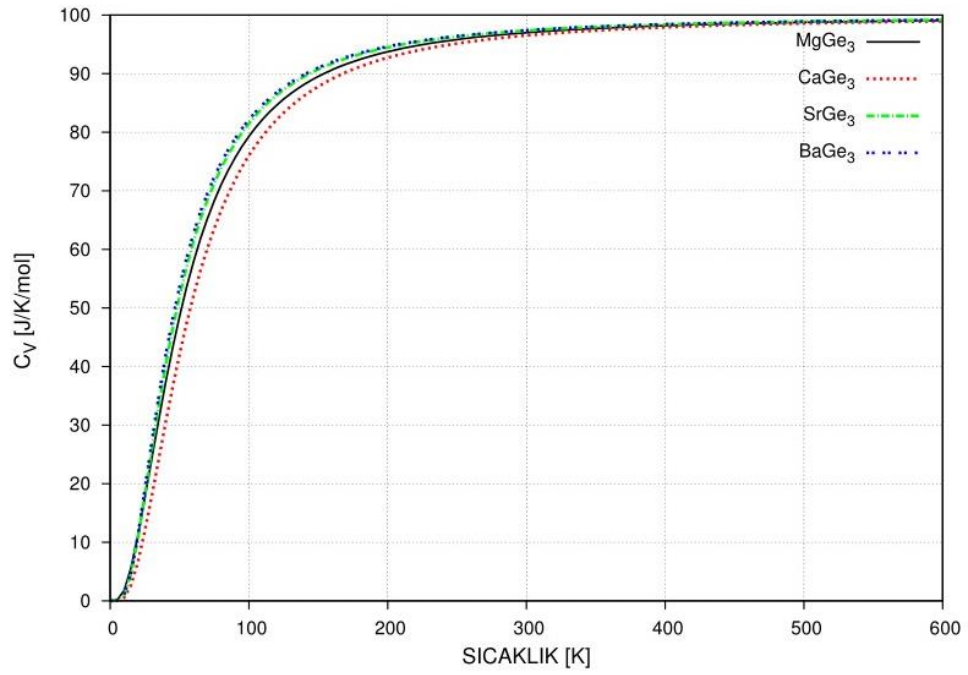
Bileşik	T[K]	F[kJ/mol]	S[J/K/mol]	C_v [J/K/mol]	E[kJ/mol]
CaGe ₃	300	-38,53	333,97	193,64	61,66
SrGe ₃	300	-41,31	342,55	194,31	61,45
BaGe ₃	300	-43,91	350,97	194,54	61,38

Çizelge 4.18. Tetragonal fazda 300 K'de XGe_3 (X= Mg, Ca, Sr, Ba) bileşiklerinin serbest enerji F[kJ/mol], entropi S [J/K/mol], ısı sığası C_v [J/K/mol] ve iç enerji E[kJ/mol] değerleri.

Bileşik	T[K]	F[kJ/mol]	S[J/K/mol]	C_v [J/K/mol]	E[kJ/mol]
MgGe ₃	300	-86,19	697,65	388,01	123,11
CaGe ₃	300	-69,91	645,35	386,11	123,69
SrGe ₃	300	-91,33	713,40	389,38	122,69
BaGe ₃	300	-94,30	723,00	389,67	122,60



Şekil 4.39. Hekzagonal fazda XGe_3 (X= Ca, Sr, Ba) bileşiklerinin sıcaklığa bağlı ısı sığası.



Şekil 4.40. Tetragonal fazda XGe_3 (X= Mg, Ca, Sr, Ba) bileşiklerinin sıcaklığa bağlı ısı sığası.

5. SONUÇ VE ÖNERİLER

Bu tez çalışmasında hekzagonal ve tetragonal fazlarda XGe_3 ($X = Be, Mg, Ca, Sr, Ba$) bileşiklerinin yapısal, elektronik, mekanik, titreşimsel ve termodinamik özellikleri incelendi.

Geometrik optimizasyon sonucunda elde edilen yapısal parametreler mevcut verilerle uyumlu bulundu. Hekzagonal ve tetragonal fazlardaki XGe_3 ($X = Mg, Ca, Sr, Ba$) bileşiklerinin elektronik bant yapısı özelliklerinden iletken özellik sergiledikleri bulundu. $BeGe_3$ bileşiği dışında her iki fazdaki tüm bileşiklerin mekaniksel olarak kararlı oldukları bulundu. Mekaniksel olarak kararlı olan bileşiklerin yumuşak, sünek ve anizotropik özellik sergiledikleri görüldü. Ayrıca XGe_3 ($X = Be, Mg, Ca, Sr, Ba$) bileşiklerinin her iki faz için fonon dağılımı ve fonon durum yoğunluğu eğrileri çizdirildi. Hekzagonal fazda $CaGe_3$, $SrGe_3$ ve $BaGe_3$, tetragonal fazda ise $MgGe_3$, $CaGe_3$, $SrGe_3$ ve $BaGe_3$ bileşiklerinin dinamiksel olarak kararlı oldukları bulundu. Dinamiksel olarak kararlı olan bu bileşikler için ısı sığasının sıcaklıkla değişimi incelendi. Ayrıca 300 K' deki entropi ve ısı sığası değerlerinin her iki fazda da Ca' dan Ba' a gidildikçe arttığı; iç enerji ve serbest enerji değerlerinin ise Ca'dan Ba'a gidildikçe azaldığı görüldü. Son olarak bu bileşiklerin minimum termal iletkenlik değerlerine bakıldı ve bu malzemelerin minimum termal iletkenliklerinin düşük olduğu bulundu.

Bu bileşiklerin mekanik, titreşimsel ve termodinamik özellikleri ilk kez bu tez çalışmasında ele alındığından ve detaylı olarak analiz edildiğinden bundan sonra yapılacak teorik ve deneysel çalışmalara kaynak olacağı düşünülmektedir.

KAYNAKLAR

1. Yang, Z., Shi, D., Wen, B., Melnik, R., Yao, S. ve Li, T., 2010. First-principle studies of Ca–X (X=Si,Ge,Sn,Pb) intermetallic compounds, *Journal of Solid State Chemistry*, 183, 136–143.
2. Ganeshan, S., Shang, S.L., Zhang, H., Wang, Y., Mantina, M. ve Liu, Z.K., 2009. Elastic constants of binary Mg compounds from first-principles calculations, *Intermetallics*, 17, 313-318.
3. Wen, B., Zhao, J.J., Bai, F.D ve Li, T.J., 2008. First-principle studies of Al-Ru intermetallic compounds, *Intermetallics*, 16, 333-339.
4. Shi, D.M., Wen, B., Melnik, R., Yao, S. ve Li, T.J., 2009. First-principles studies of Al–Ni intermetallic compounds, *Journal of Solid State Chemistry*, 182, 2664-2669.
5. Kumar, M., Umezawa, N. ve Imai, M., 2015. Structural, electronic and optical characteristics of SrGe₂ and BaGe₂: A combined experimental and computational study, *Journal of Alloys and Compounds*, 630, 126–132.
6. Kumar, M., Umezawa, N. ve Imai, M., 2014. BaSi₂ as a promising low-cost, earthabundant material with large optical activity for thin-film solar cells: a hybrid density functional study, *Applied Physics Express*, 7, 071203.
7. Flores-Livas, J.A., Debord, R., Botti, S., San Miguel, A., Pailhès, S. ve Marques, M.A.L., 2011. Superconductivity in layered binary silicides: a density functional theory study, *Physical Review B*, 84, 184503.
8. Rousseau, B. ve Bergara, A., 2010. Ab initio superconducting temperature of BaSi₂ at ambient pressure, *Journal of Physics: Conference Series*, 215, 012109.
9. Hashimoto, K., Kurosaki, K., Imamura, Y., Muta, H. ve Yamanaka, S., 2007. Thermoelectric properties of BaSi₂, SrSi₂, and LaSi, *Journal of Applied Physics*, 102, 063703.
10. Nakamura, T., Suemasu, T., Takakura, K.I., Hasegawa, F., Wakahara, A. ve Imai, M., 2002. Investigation of the energy band structure of orthorhombic BaSi₂ by optical and electrical measurements and theoretical calculations, *Applied Physics Letters*, 81, 1032–1034.
11. Imai, M., Abe, E., Ye, J., Nishida, K., Kimura, T., Honma, K., Abe, H. ve Kitazawa, H., 2001. Superconductivity of ternary silicide with the AIB₂-type structure Sr(Ga_{0.37},Si_{0.63})₂, *Physical Review Letters*, 87, 077003.
12. Imai, M., Hirata, K. ve Hirano, T., 1995. Superconductivity of trigonal BaSi₂, *Physica C*, 245, 12–14.

13. Han, S., Duan, S., Liu, Y-X., Wang, C., Chen, X., Sun, H-R. ve Liu, X-B., 2023. Pressure-induced stable structures and physical properties of Sr-Ge system, *Chinese Physics B*, 32, 016101.
14. Hao, C.M., Li, Y., Huang, H.M. ve Li, Y.L., 2018. Structural diversity and electronic properties in potassium silicides, *The Journal of Chemical Physics*, 148, 204706.
15. Shi, J., Cui, W., Flores-Livas, J.A., San-Miguel, A., Botti, S. ve Marques, M.A.L., 2016. Investigation of new phases in the Ba-Si phase diagram under high pressure using ab initio structural search, *Physical Chemistry Chemical Physics*, 18, 8108-8114.
16. Akselrud, L., Wosylus, A., Castillo, R., Aydemir, U., Prots, Y., Schnelle, W., Grin, Y. ve Schwarz, U., 2014. BaGe₆ and BaGe_{6-x}: Incommensurately Ordered Vacancies as Electron Traps, *Inorganic Chemistry*, 53, 24, 12699–12705.
17. Fukuoka, H., Tomomitsu, Y. ve Inumaru, K., 2011. High-Pressure Synthesis and Superconductivity of a New Binary Barium Germanide BaGe₃, *Inorganic Chemistry*, 50, 6372–6377.
18. Kim, S.J., Hu, S., Uher, C., Hogan, T, Huang, B., Corbett, J.D. ve Kanatzidis, M.G., 2000. Structure and Thermoelectric Properties of Ba₆Ge_{25-x}, Ba₆Ge₂₃Sn₂, and Ba₆Ge₂₂In₃: Zintl Phases with a Chiral Clathrate Structure, *Journal of Solid State Chemistry*, 153, 321–329.
19. Szewczyk, K.A., Drzazga-Szcześniak, E.A., Jarosik, M.W., Szcześniak, K.M. ve Binek, S.M., 2019. Characteristics of the s-wave symmetry superconducting state in the BaGe₃ compound, *Symmetry*, 11, 8, 977.
20. Migas, D.B., Shaposhnikov, V.L., Filonov, A.B., Dorozhkin, N.N. ve Borisenko, V.E., 2007. New semiconducting silicide Ca₃Si₄, *Journal of Physics: Condensed Matter*, 19, 34, 346207.
21. Migas, D.B., Miglio, L., Shaposhnikov, V.L. ve Borisenko, V.E., 2003. Comparative study of structural, electronic and optical properties of Ca₂Si, Ca₂Ge, Ca₂Sn, and Ca₂Pb, *Physical Review B*, 67, 205203.
22. Castillo, R., Baranov, A.I., Burkhardt, U., Cardoso-Gil, R., Schnelle, W., Bobnar, M. ve Schwarz, U., 2016. Germanium Dumbbells in a New Superconducting Modification of BaGe₃, *Inorganic Chemistry*, 55, 9, 4498-4503.
23. Zurek, E. ve Yao, Y., 2015. Theoretical predictions of novel superconducting phases of BaGe₃ stable at atmospheric and high pressures, *Inorganic Chemistry*, 54, 6, 2875-2884.
24. Schnelle, W., Ormeci, A., Wosylus, A., Meier, K., Grin, Y. ve Schwarz, U., 2012. Dumbbells of Five-Connected Ge Atoms and Superconductivity in CaGe₃, *Inorganic Chemistry*, 51, 5509–5511.

25. Nishikawa, T., Fukuoka, H. ve Inumaru, K., 2015. High-Pressure Synthesis and Electronic Structure of a New Superconducting Strontium Germanide (SrGe_3) Containing Ge_2 Dumbbells, *Inorganic Chemistry*, 54, 7433–7437.
26. Castillo, R., Schnelle, W., Baranov, A.I., Burkhardt, U., Bobnar, M., Cardoso-Gil, R., Schwarz, U. ve Grin, Y., 2016. Trigermanides AEGe_3 ($\text{AE} = \text{Ca}, \text{Sr}, \text{Ba}$): chemical bonding and superconductivity, *Zeitschrift für Naturforschung B*, 71, 5, 585–592.
27. Castillo, R., 2016. Synthesis of silicon- and germanium-rich phases at high-pressure conditions, Doktora Tezi, der Technischen Universität Dresden, der Fakultät Mathematik und Naturwissenschaften, Dresden, Almanya.
28. Aydoğan, Ş., 2014. Katıhal Fiziği, 2. Basım, Nobel Akademik Yayıncılık, Ankara, 26.
29. Page, Y.L. ve Saxe, P., 2001. Symmetry-general least-squares extraction of elastic coefficients from ab initio total energy calculations, *Physical Review B*, 63, 17, 174103.
30. Born, M., 1940. On the stability of crystal lattices. I, *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*, 36, 02, 160.
31. Wu, Z., Zhao, E., Xiang, H., Hao, X., Liu, X. ve J. Meng, 2007. Crystal structures and elastic properties of superhard IrN_2 and IrN_3 from first principles, *Physical Review B*, 76, 5, 054115.
32. Voigt, W., 1966. *Lehrbuch der Kristallphysik*, Wiesbaden: Vieweg+Teubner Verlag, Germany.
33. Reuss, A., 1929. Berechnung der Fließgrenze von Mischkristallen auf Grund der Plastizitätsbedingung für Einkristalle, *ZAMM - Journal of Applied Mathematics and Mechanics / Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik*, 9, 1, 49–58.
34. Hill, R., 1952. The Elastic Behaviour of a Crystalline Aggregate, *Proceedings of the Physical Society. Section A*, 65, 5, 349–354.
35. Born, M. ve Oppenheimer, R., 1927. Zur quantentheorie der molekeln, *Annalen Der Physik*, 389, 457-484.
36. Hartree, D.R., 1928. The Wave Mechanics of an Atom with a Non-Coulomb Central Field. Part I. Theory and Methods, *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*, 24,1, 89–110.
37. Slater, J.C., 1929. The theory of Complex Spectra, *Physical Review*, 34, 10, 1293-1322.

38. Huang, H., 2020. A density functional theory study into the mechanism and reactivity in heterogeneous system, Doktora Tezi, Queen's University Belfast, School of Chemistry and Chemical Engineering.
39. Hohenberg, P. ve Kohn, W., 1964. Inhomogeneous Electron Gas, *Physical Review*, 136, B864-B871.
40. Sholl, D.S. ve Steckel, J.A., 2012. Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi: Pratik Bir Giriş, pp.10-23, Aydın, S. ve Körözlü, N. (Editör), Nobel.
41. Kohn, W. ve Sham, L.J., 1965. Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects, *Physical Review*, 140, 4A, A1133-A1138.
42. Ceperley, D.M. ve Alder, B.J., 1980. Ground state of electron gas by a stochastic method, *Physical Review Letters*, 5, 566-569.
43. Perdew, J.P., Burke, K. ve Ernzerhof, M., 1996. Generalized Gradient Approximation Made Simple, *Physical Review Letter*, 77, 18, 3865-3868.
44. Kresse, G. ve Hafner, J., 1993. Ab initio molecular dynamics for open-shell transition metals, *Physical Review B*, 48, 13115.
45. Kresse, G. ve Hafner, J., 1994. Ab initio molecular-dynamics simulation of the liquid-metal–amorphous-semiconductor transition in germanium, *Physical Review B*, 49, 14251.
46. Kresse, G. ve Furthmüller, J., 1996. Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set, *Physical Review B*, 54, 11169.
47. Kresse, G. ve Furthmüller, J., 1996. Efficiency of Ab-Initio Total Energy Calculations for Metals and Semiconductors Using a Plane-Wave Basis Set, *Computational Materials Science*, 6, 15-50.
48. Blochl, P.E., 1994. Projector augmented-wave method, *Physical Review B*, 50, 17953.
49. Monkhorst, H.J. ve Pack, J.D. 1976. Special points for Brillouin-zone integrations, *Physical Review B*, 13, 5188.
50. Gaillac, R., Pullumbi, P. ve Coudert, F.X., 2016. ELATE: an open-source online application for analysis and visualization of elastic tensors, *Journal of Physics: Condensed Matter*, 28, 275201.
51. Togo, A. ve Tanaka, I., 2015. First principles phonon calculations in materials science, *Scripta Materialia*, 108, 1-5.
52. Naher, M.I. ve Naqib, S.H., 2022. First-principles insights into the mechanical, optoelectronic, thermophysical, and lattice dynamical properties of binary topological semimetal BaGa₂, *Results in Physics* 37, 105507.

53. Ozisik, H.B., Colakoglu, K., Deligoz, E. ve Ozisik, H., 2011. First principles study on the structural, electronic, and elastic properties of Na–As systems, *Solid State Communications*, 151, 1349–1354.
54. Florez, M., Recio, J.M., Francisco, E., Blanco, M.A. ve Penda's, A.M., 2002. First-principles study of the rocksalt–cesium chloride relative phase stability in alkali halides, *Physical Review B*, 66, 144112.
55. Hadi, M.A., Christopoulos, S.-R.G., Chroneos, A., Naqib, S.H. ve Islam, A.K.M.A., 2022. DFT insights into the electronic structure, mechanical behaviour, lattice dynamics and defect processes in the first Sc-based MAX phase Sc₂SnC, *Scientific Reports*, 12, 14037.
56. Ravindran, P., Fast, L., Korzhavyi, P. ve Johansson, B., 1998. Density functional theory for calculation of elastic properties of orthorhombic crystals: application to TiSi₂, *Journal of Applied Physics*, 84, 4891.
57. Chrisman, J.R., 1988. *Fundamentals of Solid State Physics*, John Wiley & Sons, New York, USA.
58. Liu, Y., Hu, W.C., Li, D.J., Li, K., Jin, H.L., Xu, Y.X., Xu, C.S. ve Zeng, X.Q., 2015. Mechanical, electronic and thermodynamic porperties of C14-type AMg₂ (A=Ca, Sr and Ba) compounds from first principles calculations, *Computational Materials Science*, 97, 75-85.
59. Bannikov, V., Shein, V. ve Ivanovskii, I.R., 2007. Electronic structure, chemical bonding and elastic properties of the first thorium-containing nitride perovskite TaThN₃, *Physica Status Solidi - Rapid Research Letters*, 1, 3, 89-91.
60. Fu, H., Li, D., Peng, F., Gao, T. ve Cheng, X., 2008. Ab initio calculations of elastic constants and thermodynamic properties of NiAl under high pressures, *Computational Materials Science*, 44, 774–778.
61. Pugh, S.F., 1954. XCII. Relations between the elastic moduli and the plastic properties of polycrystalline pure metals, *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science*, 45, 833.
62. Pettifor, D.G., 1992. Theoretical predictions of structure and related properties of intermetallics, *Materials Science and Technology (United Kingdom)*, 8, 4, 345–349.
63. Zeng, X., Peng, R., Yu, Y., Hu, Z., Wen, Y. ve Song, L., 2018. Pressure Effect on Elastic Constants and Related Properties of Ti₃Al Intermetallic Compound:A First-Principles Study, *Materials*, 11, 10, 2015.
64. Wu., D.-H., Wang, H.-C., Wei, L.-T., Pan, R.-K. ve Tang, B.-Y., 2014. First-principles study of structural stability and elastic properties of MgPd₃ and its hydride, *Journal of Magnesium and Alloys*, 2, 165-174.

65. Rougab, M. ve Gueddouh, A., 2023. First-principles insights into structural stability, elastic anisotropies, mechanical and thermodynamic properties of the Hf_2GeX ($X = \text{C}, \text{N}, \text{and B}$) 211 MAX phases, *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, 176, 111251.
66. Chen, X.Q., Niu, H., Li, D. ve Li, Y., 2011. Modeling hardness of polycrystalline materials and bulk metallic glasses, *Intermetallics*, 19, 9, 1275-1281.
67. Naher, M.I. ve Naqib, S.H., 2021. An ab-initio study on structural, elastic, electronic, bonding, thermal, and optical properties of topological Weyl semimetal TaX ($X = \text{P}, \text{As}$), *Scientific Reports*, 11, 5592.
68. Ali, M.A., Hossain, M.M., Islam, A.K.M.A. ve Naqib, S.H., 2021. Ternary boride Hf_3PB_4 : insights into the physical properties of the hardest possible boride MAX phase, *Journal of Alloys and Compounds*, 857, 158264.
69. Clarke, D.R., 2003. Materials selection guidelines for low thermal conductivity thermal barrier coatings, *Surface and Coatings Technology*, 163-164, 67–74.
70. Clarke, D.R. ve Levi, C.G., 2003. Materials design for the next generation thermal barrier coatings, *Annual Review of Materials Research*, 33, 383–417.
71. Cahill, D.G., Watson, S.K. ve Pohl, R.O., 1992. Lower limit to the thermal conductivity of disordered crystals, *Physical Review B*, 46, 6131–6140.
72. Kocaöz, Ö.D., 2016. CeX_2In_4 ($X= \text{Pd}, \text{Pt}$) Bileşiklerinin Yapısal, Elektronik, Mekaniksel ve Titreşimsel Özelliklerinin Kuramsal İncelenmesi, Yüksek Lisans Tezi, Aksaray.
73. Brázdová, V. ve Bowler, D.R., 2013. *Atomistic Computer Simulations*, John Wiley & Sons, Weinheim, Germany.

ÖZGEÇMİŞ

Adı ve Soyadı : Seda ÖZDEMİR

EĞİTİM BİLGİLERİ (Kurum ve Yıl)

Lisans : Selçuk Üniversitesi, Fizik Bölümü, 2009-2015

Yüksek Lisans : Aksaray Üniversitesi, Fizik Anabilim Dalı, 2022-2024

TEZDEN ÜRETİLEN YAYINLAR, SUNUMLAR VE PATENTLER

Kongrelerde Sunulan Makaleler

1. S. Özdemir, H. Özışık, H. Özışık, M. Altay, E. Deligöz, E. Ateşer, BaGe₃ Bileşiğinin Mekanik ve Titreşimsel Özellikleri: Ab-initio Çalışması, ADIM Fizik Günleri VII, 23-25 Mayıs 2018, Adnan Menderes Üniversitesi, AYDIN (Poster Sunumu).
2. S. Özdemir, H. Özışık, H. Özışık, M. Altay, E. Deligöz, CaGe₃ Bileşiğinin Mekanik ve Elektronik Özelliklerinin Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi ile İncelenmesi, VII. Yoğun Madde Fiziği İzmir Toplantısı (YMF18), İzmir Yüksek Teknoloji Enstitüsü, 13 Nisan 2018 (Poster Sunumu).