



**KÜBİK YAPIDAKİ BAKIR BAZLI ÜÇLÜ HEUSLER BİLEŞİKLERİNİN
YAPISAL, ELEKTRONİK, ELASTİK VE TİTREŞİM ÖZELLİKLERİNİN
YOĞUNLUK FONKSİYONEL TEORİSİ İLE İNCELENMESİ**

Emrah ULUSU

**YÜKSEK LİSANS TEZİ
FİZİK ANABİLİM DALI**

**GAZİ ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

OCAK 2016

Emrah ULUSU tarafından hazırlanan “KÜBİK YAPIDAKİ BAKIR BAZLI ÜÇLÜ HEUSLER BİLEŞİKLERİNİN YAPISAL, ELEKTRONİK, ELASTİK ve TİTREŞİM ÖZELLİKLERİNİN YOĞUNLUK FONKSİYONELİ TEORİSİ İLE İNCELENMESİ” adlı tez çalışması aşağıdaki jüri tarafından OY BİRLİĞİ ile Gazi Üniversitesi Fizik Anabilim Dalında YÜKSEK LİSANS TEZİ olarak kabul edilmiştir.

Danışman: Doç. Dr. Şule UĞUR

Fizik, Gazi Üniversitesi

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

.....

Başkan : Prof. Dr. Nezihe ÇALIŞKAN

Fizik, Gazi Üniversitesi

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

.....

Üye : Prof. Dr. Hüseyin ÜNVER

Fizik, Ankara Üniversitesi

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

.....

Tez Savunma Tarihi: 15/01/2016

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

.....
Prof. Dr. Metin GÜRÜ
Fen Bilimleri Enstitüsü Müdürü

ETİK BEYAN

Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Tez Yazım Kurallarına uygun olarak hazırladığım bu tez çalışmada;

- Tez içinde sunduğum verileri, bilgileri ve dokümanları akademik ve etik kurallar çerçevesinde elde ettiğimi,
- Tüm bilgi, belge, değerlendirme ve sonuçları bilimsel etik ve ahlak kurallarına uygun olarak sunduğumu,
- Tez çalışmada yararlandığım eserlerin tümüne uygun atıfta bulunarak kaynak gösterdiğimi,
- Kullanılan verilerde herhangi bir değişiklik yapmadığımı,
- Bu tezde sunduğum çalışmanın özgün olduğunu,

bildirir, aksi bir durumda aleyhime doğabilecek tüm hak kayıplarını kabullendiğimi beyan ederim.

.....
Emrah ULUSU

15/01/2016

KÜBİK YAPIDAKİ BAKIR BAZLI ÜÇLÜ HEUSLER BİLEŞİKLERİNİN YAPISAL,
ELEKTRONİK, ELASTİK ve TİTREŞİM ÖZELLİKLERİNİN YOĞUNLUK
FONKSİYONEL TEORİSİ İLE İNCELENMESİ
(Yüksek Lisans Tezi)

Emrah ULUSU

GAZİ ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

Ocak 2016

ÖZET

Bu tezin amacı, Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi hesaplamalarını kullanarak Cu_2MnZ ($Z= \text{Al, Si, Ge, Ga, In, Sn, Sb}$) alaşımlarının yapısal, elektronik, manyetik, elastik ve fonon özelliklerini araştırmaktır. Yerel yoğunluk yaklaşımı (YYY) ve genelleştirilmiş gradyent yaklaşımı (GGY) kullanıldı. GGY pek çok Heusler alaşımı sistemlerinin deneysel verileri ile karşılaştırdığımızda YYY sonuçlarına göre daha iyidir. Hesaplanan örgü sabitleri, yığın modülleri, toplam manyetik momentleri ve elastik sabitleri bulunabilen deneysel sonuçlarla ve daha önceki teorik sonuçlarla oldukça uyumludur. Bu alaşımların elektronik özellikleri detaylı bir şekilde karşılaştırıldı ve değerlendirildi. Cu_2MnZ ($Z= \text{Al, Si, Ge, Ga, In, Sn, Sb}$) ferromanyetik metalik bileşiklerdir. Cu_2MnZ ($Z= \text{Al, Si, Ge, Ga, In, Sn, Sb}$) nin fonon özellikleri doğrudan metot ile çalışıldı. Cu_2MnAl ve Cu_2MnIn için hesaplanan fonon dispersiyon eğrilerinden bu iki alaşımın $L2_1$ tipi yapıda dinamik olarak kararlı olduğu anlaşılmaktadır.

Bilim Kodu : 202.1.167
Anahtar Kelimeler : Heusler Alaşımları, Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi, Elektronik Bant Yapısı, Elastik Özellikler, Fonon
Sayfa Adedi : 69
Danışman : Doç. Dr. Şule UĞUR

THE INVESTIGATION OF STRUCTURAL, ELECTRONIC, ELASTIC AND
DYNAMICAL PROPERTIES OF COOPER TO IMPLY TRIPLE HEUSLER
COMPOUNDS IN CUBIC STRUCTURES WITHIN
THE DENSITY FUNCTIONAL THEORY

(M. Sc. Thesis)

Emrah ULUSU

GAZİ UNIVERSITY

GRADUATE SCHOOL OF NATURAL AND APPLIED SCIENCES

January 2016

ABSTRACT

The aim of this thesis is to investigate structural, electronic, magnetic, elastic and phonon properties of Heusler alloys Cu_2MnZ ($Z = \text{Al, Si, Ge, Ga, In, Sn, Sb}$) using the density functional theory calculations. We use the local density approximation (LDA) and generalized gradient approximation (GGA). GGA yields a better agreement with experimental data for most of the Heusler alloy systems compared to the results of LDA. The calculated lattice constants, bulk modulus, total magnetic moments and elastic constants are in agreement with the previous theoretical calculations and available experimental results. We analyze and compare in detail the electronic properties for these alloys. We have found the Cu_2MnZ ($Z = \text{Al, Si, Ge, Ga, In, Sn, Sb}$) are a ferromagnet metallic compounds. Phonon properties of Cu_2MnZ ($Z = \text{Al, Si, Ge, Ga, In, Sn, Sb}$) were studied in the direct method. The calculated phonon dispersion curves of Cu_2MnAl and Cu_2MnIn confirm that these two alloy are dynamically stable in the $L2_1$ type structure.

Science Code : 202.1.167

Key Words : Heusler Alloys, Density Functional Theory, Electronic Band
Structure, Elastic Properties, Phonon

Page Number : 69

Supervisor : Assoc. Prof. Dr. Şule UĞUR

TEŐEKKÜR

Bu tez alıőmam boyunca bana her konuda yardım ve katkılarını esirgemeyen ve beni yönlendiren deęerli hocam Do. Dr. Őule UęUR' a, her konuda yardım ve desteęini esirgemeyen ve beni yönlendiren deęerli hocam Prof. Dr. Gökay UęUR' a teőekkür ediyorum ve Őükranlarımı sunuyorum.

Tüm eęitim hayatım boyunca benden hiçbir zaman desteklerini esirgemeyen ve ilelebet minnettar kalacaęım annem Gürcan ULUSU ve babam Ömer ULUSU' ya teőekkür ediyorum.

İÇİNDEKİLER

	Sayfa
ÖZET	iv
ABSTRACT	v
TEŞEKKÜR	vi
İÇİNDEKİLER	vii
ÇİZELGELERİN LİSTESİ	ix
ŞEKİLLERİN LİSTESİ	x
SİMGELER VE KISALTMALAR.....	xii
1. GİRİŞ.....	1
2. ÇOK PARÇACIK PROBLEMİNİN TEORİSİ	5
2.1. Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi	5
2.2. Born – Oppenheimer Yaklaşımı	6
2.3. Dalga Fonksiyonu Yaklaşımları	6
2.3.1. Hartree yaklaşımı	7
2.3.2. Hartree – Fock yaklaşımı.....	8
2.4. Hohenberg ve Kohn Yaklaşımı	9
2.5. Kohn - Sham Denklemleri	10
2.6. Yerel Yoğunluk Yaklaşımı	12
2.7. Genelleştirilmiş Gradyent Yaklaşımı	12
2.8. Pseudo Potansiyeli.....	13
2.9. Örgü Titreşimleri	13
2.9.1. İki atomlu örgü titreşimleri.....	14
2.9.2. Üç boyutta örgü titreşimleri.....	18
2.10. Direkt (Doğrudan) Metot.....	20

2.11. Fonon Frekanslarının Durum Yoğunluğunu Hesaplama Metodu	21
2.12. Enerji Bantları.....	22
2.13. Birinci Brillouin Bölgesi ve Yüksek Simetri Noktaları	23
2.14. Yığın Modülü.....	24
2.15. Elastik Özellikler	25
3. MALZEMELERİN YAPISI ve KULLANILAN YÖNTEM	29
3.1. Heusler Alaşımları	29
3.2. MedeA ve PHONON Programları.....	30
4. BULGULAR ve TARTIŞMA	33
4.1. Cu_2MnZ (Z=Al, Si, Ge, Ga, Sn ve Sb) Heusler Alaşımlarının Yapısal ve Manyetik Özellikleri	33
4.2. Cu_2MnZ (Z=Al, Si, Ge, Ga, Sn ve Sb) Heusler Alaşımlarının Elektronik Özellikleri.....	36
4.3. Elastik Sabitler	53
4.4. Fononların Dağılım Eğrileri	54
5. SONUÇ VE ÖNERİLER	61
KAYNAKLAR	63
ÖZGEÇMİŞ	69

ÇİZELGELERİN LİSTESİ

Çizelge	Sayfa
Çizelge 4.1. Kesilim enerjisi, Smearing parametresi, k-noktaları, örgü sabitleri, Yığın modülleri, Toplam manyetik momentler	34
Çizelge 4.2. Cu_2MnZ ($Z=\text{Al, Si, Ge, Ga, In, Sn ve Sb}$) Heusler alaşımlarının GGY ile kısmi manyetik momentleri	35
Çizelge 4.3. Cu_2MnZ ($Z=\text{Al, Si, Ge, Ga, In, Sn ve Sb}$) Heusler alaşımlarının YYY ile kısmi manyetik momentleri	36
Çizelge 4.4. Cu_2MnZ ($Z=\text{Al, Si, Ge, Ga, In, Sn ve Sb}$) Heusler alaşımlarının Fermi enerjileri.....	37
Çizelge 4.5. Elastik sabitler.....	54

ŞEKİLLERİN LİSTESİ

Şekil	Sayfa
Şekil 2.1. Pseudo potansiyeli	13
Şekil 2.2. İki atomlu kristal yapıdaki atomik düzlemlerin yer değiştirmeleri	14
Şekil 2.3. İki atomlu çizgisel örgünün dağınım eğrileri	16
Şekil 2.4. İki atomlu çizgisel örgüde enine optik (TO) ve enine akustik mod (TA).....	17
Şekil 2.5. Enerji bant yapısının yasak enerji aralıklarına göre sınıflandırılması	23
Şekil 2.6. Kartezyen koordinatlarda yüzey merkezli kübik yapı (fcc) için birinci Brillouin bölgesi ve yüksek simetri noktaları.....	24
Şekil 3.1. L ₂₁ yapısındaki Heusler alaşımlarının gösterimi	29
Şekil 3.2. L ₁₀ yapısındaki Heusler alaşımlarının gösterimi	30
Şekil 4.1. Cu ₂ MnAl Heusler alaşımının YYY ile elektronik bant yapısı ve durum yoğunluğu.....	39
Şekil 4.2. Cu ₂ MnSi Heusler alaşımının YYY ile elektronik bant yapısı ve durum yoğunluğu.....	40
Şekil 4.3. Cu ₂ MnGe Heusler alaşımının YYY ile elektronik bant yapısı ve durum yoğunluğu.....	41
Şekil 4.4. Cu ₂ MnGa Heusler alaşımının YYY ile elektronik bant yapısı ve durum yoğunluğu.....	42
Şekil 4.5. Cu ₂ MnIn Heusler alaşımının YYY ile elektronik bant yapısı ve durum yoğunluğu.....	43
Şekil 4.6. Cu ₂ MnSn Heusler alaşımının YYY ile elektronik bant yapısı ve durum yoğunluğu.....	44
Şekil 4.7. Cu ₂ MnSb Heusler alaşımının YYY ile elektronik bant yapısı ve durum yoğunluğu.....	45
Şekil 4.8. Cu ₂ MnAl Heusler alaşımının GGY ile elektronik bant yapısı ve durum yoğunluğu.....	46
Şekil 4.9. Cu ₂ MnSi Heusler alaşımının GGY ile elektronik bant yapısı ve durum yoğunluğu.....	47

Şekil	Sayfa
Şekil 4.10. Cu_2MnGe Heusler alaşımının GGY ile elektronik bant yapısı ve durum yoğunluğu.....	48
Şekil 4.11. Cu_2MnGa Heusler alaşımının GGY ile elektronik bant yapısı ve durum yoğunluğu.....	49
Şekil 4.12. Cu_2MnIn Heusler alaşımının GGY ile elektronik bant yapısı ve durum yoğunluğu.....	50
Şekil 4.13. Cu_2MnSn Heusler alaşımının GGY ile elektronik bant yapısı ve durum yoğunluğu.....	51
Şekil 4.14. Cu_2MnSb Heusler alaşımının GGY ile elektronik bant yapısı ve durum yoğunluğu.....	52
Şekil 4.15. Cu_2MnAl Heusler alaşımının YYY ile fonon dağınım eğrisi.....	56
Şekil 4.16. Cu_2MnSi Heusler alaşımının YYY ile fonon dağınım eğrisi.....	56
Şekil 4.17. Cu_2MnGe Heusler alaşımının YYY ile fonon dağınım eğrisi.....	56
Şekil 4.18. Cu_2MnGa Heusler alaşımının YYY ile fonon dağınım eğrisi.....	57
Şekil 4.19. Cu_2MnIn Heusler alaşımının YYY ile fonon dağınım eğrisi.....	57
Şekil 4.20. Cu_2MnSn Heusler alaşımının YYY ile fonon dağınım eğrisi.....	57
Şekil 4.21. Cu_2MnSb Heusler alaşımının YYY ile fonon dağınım eğrisi.....	58
Şekil 4.22. Cu_2MnAl Heusler alaşımının GGY ile fonon dağınım eğrisi.....	58
Şekil 4.23. Cu_2MnSi Heusler alaşımının GGY ile fonon dağınım eğrisi.....	58
Şekil 4.24. Cu_2MnGe Heusler alaşımının GGY ile fonon dağınım eğrisi.....	59
Şekil 4.25. Cu_2MnGa Heusler alaşımının GGY ile fonon dağınım eğrisi.....	59
Şekil 4.26. Cu_2MnIn Heusler alaşımının GGY ile fonon dağınım eğrisi.....	59
Şekil 4.27. Cu_2MnSn Heusler alaşımının GGY ile fonon dağınım eğrisi.....	60
Şekil 4.28. Cu_2MnSb Heusler alaşımının GGY ile fonon dağınım eğrisi.....	60

SİMGELER VE KISALTMALAR

Bu çalışmada kullanılmış simgeler ve kısaltmalar, açıklamaları ile birlikte aşağıda sunulmuştur.

Simgeler	Açıklamalar
a	Örgü sabiti
B	Yığın modülü
F_{cc}	Yüzey merkezli kübik örgü
sc	Kübik örgü
B_{cc}	Cisim merkezli kübik örgü
\vec{R}	Örgü vektörü
C	Elastik sabit
C'	Shear modülü
$\tilde{D}_{ij}(\vec{R})$	Dinamik matris
E	Young modülü
E_{cut}	Kesilim enerjisi
$E_{d-t}[\rho]$	Değiş-tokuş korelasyon enerjisi
E_f	Fermi enerjisi
$F[\rho]$	Hohenberg-Kohn fonksiyonu
\hat{H}	Hamilton operatörü
M_T	Toplam manyetik moment
$\rho(\vec{r})$	Elektron yoğunluğu
T	Kinetik enerji fonksiyonu
V_{d-t}^{YYY}	YYY altında değiş-tokuş potansiyeli
$V_{dış}(\mathbf{r})$	Dış potansiyel
$V_{Hartree}$	Hartree potansiyeli
Ψ	Dalga fonksiyonu
δ	Zor miktarı

Kısaltmalar**Açıklamalar****GGY**

Genelleştirilmiş Gradyent Yaklaşımı

HF

Hartree Fonksiyonu

KS

Kohn - Sham

LA

Boyuna akustik mod

LO

Boyuna optik mod

PP

Pseudo Potansiyeli

TA

Enine akustik mod

TO

Enine optik mod

YFT

Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi

YYY

Yerel Yoğunluk yaklaşımı

1. GİRİŞ

Heusler alaşımları üçlü bileşiklerdir. Stokiyometrik kompozisyonu X_2YZ şeklinde gösterilen bu alaşımlarda X ve Y genellikle iki farklı geçiş metali iken Z manyetik olmayan bir elementtir. Ferromanyetik yarı metal davranışlarının yanında, şekil hatırlatma ve manyetik özellikleri nedeniyle son yıllarda Heusler alaşımları hem deneysel hem de teorik olarak pek çok araştırmacının ilgi odağı haline gelmiştir.

Bu alaşımların dikkat çeken özelliklerinden biri de (örneğin; bu tezde çalışılan Cu_2MnAl gibi) elementlerinin tek başına ferromanyetik özellik göstermemesine rağmen, yüksek bir kritik sıcaklıkta alaşımların kendisinin ferromanyetik olmasıdır [1]. Kübik Cu_2MnAl yapısı $L2_1$ olarak bilinir ve uzay grubu $Fm-3m$ dir [2]. Bu malzemelerin incelenmesinde elektronik, elastik ve titreşim özelliklerinin belirlenmesi ve aralarındaki ilişkilerin bulunması oldukça önemlidir. Bu tez çalışmasına konu olan Cu_2MnZ ($Z= Al, Si, Ge, Ga, In, Sn, Sb$)' nin örgü parametrelerinin deneysel değerleri literatürde bulunmaktadır [3]. Diğer bir deneysel çalışmada Cu_2MnZ ($Z= Al, In, Sn$) için örgü parametreleri ve manyetik momentleri Kiyoshi tarafından verilmiştir [4]. Ayrıca sadece kübik $L2_1$ yapıdaki Cu_2MnAl alaşımlarının yapısal ve manyetik özellikleri için yapılan deneysel çalışmalar literatürde bulunmaktadır [5-8].

Rai ve arkadaşları tarafından [9] Cu_2MnAl alaşımlarının elektronik, elastik, manyetik ve optik özellikleri Wien2k simülasyon programı ile teorik olarak hesaplanmıştır. Onlar, çalışmalarında bu alaşımların ferromanyetik ve metalik olduğunu göstermişlerdir ancak Jaafar Jalilian 2015 yılında yazdığı makalede [10] Rai ve arkadaşlarının [9] hesaplamalarının hatalı olduğunu belirtmiş, aynı bilgisayar programını kullanarak farklı sonuçlar bulmuştur. Cu_2MnGa alaşımlarının yapısal, elektronik ve manyetik özellikleri VASP (Vienna Ab-initio Simulation Package) bilgisayar kodu ve Genelleştirilmiş Gradyent Yaklaşımı (GGY) ile teorik olarak Aparna ve arkadaşları tarafından çalışılmıştır [11]. Onlar, bu çalışmalarında Ni_2MnGa alaşımlarının böyle bir faz geçişi göstermediğini hesapladılar.

Roy ve arkadaşları Cu_2MnAl alaşımlarının elastik kararlılığını, elektronik yapısını, manyetik özelliklerini incelediler [12]. Elde ettikleri toplam ve parçalı durum yoğunluğu eğrilerinde

Fermi seviyesinde iki tepe yapısına sahip ve bu tür özellik gösteren malzemelerin elektronik olarak daha kararlı olduğunu gösterdiler.

Deb ve arkadaşları [13] Cu_2MnAl alaşımının elektronik yapısını ve kimyasal bağlanma mekanizmasını hem Spin Yoğunluk Yaklaşımı (SYY) hem de Genelleştirilmiş Gradyent Yaklaşımı (GGY) kullanarak hesaplamışlardır. Manyetik özellikler, toplam ve parçalı durum yoğunluğu eğrileri Cu_2MnAl için teorik olarak Kulkova ve arkadaşları tarafından çalışılmıştır [14].

Cu_2MnSn alaşımının elektronik ve mekanik özellikleri Wien2k bilgisayar programı kullanılarak hem Genelleştirilmiş Gradyent Yaklaşımı (GGY) hem de sabit potansiyel altında Genelleştirilmiş Gradyent Yaklaşımı (GGY+U) metodu ile Hamri ve arkadaşları tarafından araştırıldı [15]. Toplam ve parçalı durum yoğunluğu eğrileri hem sıfır basınç hem de 20 GPa basınç altında karşılaştırıldı. Ayrıca bu çalışmada basınç arttıkça toplam manyetik momentin lineer olarak azaldığı bulunmuştur. Cu_2MnZ (Z= Al, Si, Ge, Ga, In, Sn, Sb) alaşımları için [16] ve Cu_2MnSn alaşımı için [17] Mösbauer spektrum çalışmaları literatürde bulunmuştur. Kurtuluş ve arkadaşları Cu_2MnZ (Z= Al, In, Sn) alaşımlarının manyetik özelliklerini ve toplam durum yoğunluğu eğrilerini hem yerel yoğunluk yaklaşımı (YYY) hem de Genelleştirilmiş Gradyent Yaklaşımı (GGY) kullanarak hesaplamıştır [18].

Cu_2MnZ (Z= Al, Si, Ge, Ga, In, Sn, Sb) alaşımlarının yapısal, elastik, manyetik, elektronik özellikleri için çeşitli çalışmalar olmasına rağmen, bu malzemelerin titreşimsel özellikleri ile ilgili literatürde sınırlı sayıda çalışma vardır. Bu tezin amacı; kübik $L2_1$ yapıdaki Cu_2MnZ (Z= Al, Si, Ge, Ga, In, Sn, Sb) alaşımlarının yapısal, elektronik, manyetik ve elastik özelliklerini teorik olarak elde etmek ve daha önceki çalışmalarla karşılaştırmaktır. Ayrıca termal genleşme, ısı iletimi, öz ısı ve elektron-fonon etkileşimi gibi malzemeye ait fiziksel özelliklerin belirlenmesinde çok önemli olan fonon frekanslarını Cu_2MnZ (Z= Al, Si, Ge, Ga, In, Sn, Sb) alaşımları için bulmak ve bunlara ait eğrileri çizdirmek ve kendi aralarında değerlendirmektir.

Bu tez çalışmasında kübik yapıdaki bakır bazlı Heusler bileşiklerinin yapısal parametreleri belirlenecek, elektronik bant yapıları elde edilecek, elastik ve titreşim özellikleri incelenerek elastik sabitler ve fonon dağılım eğrileri hesaplanacaktır. Bu işlemler,

Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisini (YFT) temel alan Material Design (MedeA) paket programı kullanılarak, Genelleştirilmiş Gradyent Yaklaşımı (GGY) ve Yerel Yoğunluk Yaklaşımı (YYY) ile yapılacaktır.

2. ÇOK PARÇACIK PROBLEMİNİN TEORİSİ

N tane parçacık (çekirdek ve elektronlar) içeren sistemler, çok parçacık sistemi olarak bilinir. Çok parçacıklı sistemlerin durumu zamandan bağımsız Schrödinger dalga denkleminin çözümü ile belirlenir.

$$H\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N, \vec{R}_1, \vec{R}_2, \dots, \vec{R}_N, s) = E\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N, \vec{R}_1, \vec{R}_2, \dots, \vec{R}_N, s) \quad (2.1)$$

$$H = -\frac{\hbar^2}{2} \sum_i^n \frac{\nabla_i^2}{m_e} - \frac{\hbar^2}{2} \sum_j^m \frac{\nabla_j^2}{M_j} + \frac{1}{8\pi\epsilon_0} \sum_i^n \sum_{j \neq 1}^n \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_i^n \sum_j^n \frac{e^2 Z_j}{|\vec{r}_i - \vec{R}_j|} + \frac{1}{8\pi\epsilon_0} \sum_i^m \sum_{j \neq 1}^m \frac{e^2 Z_i Z_j}{|\vec{R}_i - \vec{R}_j|} \quad (2.2)$$

Burada $\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N, \vec{R}_1, \vec{R}_2, \dots, \vec{R}_N, s)$, çok parçacıklı sistemin dalga fonksiyonu ve E sistemin enerjisidir. Bu problemin çözümü oldukça zordur. Problemin çözümü için, Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi'ne ihtiyaç duyulmaktadır [23].

2.1. Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi

Çok elektronlu sistemlerin temel durum özelliklerini belirleyebilmek için yararlı bir yaklaşım olan Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi (YFT)'nin temeli, 1927 yıllarda Thomas ve Fermi tarafından yapılan çalışmaları [24] temel alan Hohenberg ve Kohn teoremleri [25] ile onun devamı olan Kohn–Sham teoremlerine dayanmaktadır [26]. Teorem çok elektronlu sistemlerin taban durum özelliklerini belirlemek için elektron yük yoğunluğunu temel değişken kabul eder. Özellikle Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi metallerin, yarıiletkenlerin ve yalıtkanların taban durum özelliklerini tanımlamak için oldukça başarılı bir yaklaşımdır.

Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi, temel durumdaki herhangi birçok parçacık sisteminin dalga fonksiyonu yerine elektron yoğunluğunu kullanır. Bir dış potansiyelden elektron yoğunluğunu değerlendiren metot tanımlamak istendiğinde, sistemin Schrödinger denkleminin çözülmesi gerekmektedir. Böylece çok elektronlu sistemlerin serbestlik derecesi büyük olacağından, bu denklemin çözümü oldukça karmaşık olacaktır. Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi Schrödinger denkleminin çözümü dışında, taban durum özelliklerini

açıklamak için de oldukça iyi bir teorik çerçevedir. Eş. 2.2' nin çözülmesinde aşağıdaki yaklaşımlar kullanılmaktadır [23].

2.2. Born – Oppenheimer Yaklaşımı

Bu yaklaşım, 1927 yılında Born ve Oppenheimer tarafından önerilmiştir [28,29]. Çok parçacık sisteminin Schrödinger denklemini çözmeye çalışan yaklaşımlardan biridir.

Born-Oppenheimer yaklaşımı temelde elektronun kütesinin çekirdeğin kütesinden çok daha hafif olduğunu ve bu yüzden çekirdeğin hareketinin, elektronun hareketinden çok daha yavaş olduğunu ifade eder. Dolayısıyla çekirdek, belli bir konumda hareketsiz olarak kabul edilebilir. Yani çok parçacıklı sistemde sadece elektronların hareketi incelenir. Born-Oppenheimer yaklaşımında; çekirdeğin kinetik enerjisi sıfır kabul edilir. Böylece Hamiltonyen ;

$$H = -\frac{\hbar^2}{2} \sum_i^n \frac{\nabla_i^2}{m_e} + \frac{1}{8\pi\epsilon_0} \sum_i^n \sum_{j \neq i}^n \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_i^n \sum_j^n \frac{e^2 Z_j}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \quad (2.3)$$

halini alır. Burada ilk terim elektronun kinetik enerjisi, ikinci terim Coulomb potansiyeli iken üçüncü terim ise, çekirdek potansiyelidir. Sonuç olarak Hamiltonyen,

$$H = T_{elektron} + V_{coulomb} + V_{çekirdek} \quad (2.4)$$

şeklindedir.

Born-Oppenheimer yaklaşımı yaygın bir şekilde kullanılmasına rağmen, her zaman geçerli olmayabilir. Uyarılmış moleküllerde çekirdek o kadar hızlı hareket eder ki, elektron bu hareketi aynı anda fark edemez ve böylece çekirdek ile elektronun hareketleri birbirinden ayırt edilemez, bu durumda yaklaşım geçersiz olur.

2.3. Dalga Fonksiyonu Yaklaşımları

Bu yaklaşım, molekül geometrisinin ve molekül frekanslarının hesaplanması için uygundur [30]. Dalga fonksiyonu yaklaşımında temel değişken olarak dalga fonksiyonu kullanılmaktadır. Hartree Teorisi ve Hartree-Fock Teorisi bu yaklaşımın temelini oluşturur [31].

2.3.1. Hartree yaklaşımı

Çok elektronlu sisteme ait Hamiltonyen denkleminin çözümünü öngören yöntemlerden biridir. Yöntem ilk olarak Hartree tarafından 1928 yılında ortaya atılmış [32], daha sonradan V. Fock ve J.C.Slater tarafından geliştirilmiştir [33].

Hartree, kristal içindeki elektronları yaklaşık olarak tek-parçacık halinde düşünür. Elektron dalga fonksiyonlarının her biri, çarpım şeklinde çok-elektron dalga fonksiyonunu oluşturur. Bu denklemler zamandan bağımsız Schrödinger denkleminin oldukça benzer. Diğer elektronların hareketi sistemin elektron dağılımının zaman ortalamasına yakından bağlıdır. Bu önemli faktör, her bir elektronu tek parçacık olarak düşünülmesini sağlar. Çok elektronlu sistemin Schrödinger denkleminin Hamiltonyeni,

$$H_e \Psi_e = E_e \Psi_e \quad (2.5)$$

$$H = -\frac{\hbar^2}{2} \sum_i^n \frac{\nabla_i^2}{m_e} + \frac{1}{8\pi\epsilon_0} \sum_i^n \sum_{j \neq i}^n \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_i^n \sum_j^n \frac{e^2 Z_j}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \quad (2.6)$$

şeklinindedir. Hartree yaklaşımında [34,35], çok elektronlu sistemin dalga fonksiyonu, tek elektron dalga fonksiyonlarının çarpımı olarak yazılabilir. Bu durumda dalga fonksiyonu,

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) = \prod_{i=1}^N \psi_i(\vec{r}_i) \quad (2.7)$$

şeklini alır. Burada potansiyele, Hartree potansiyeli şeklinde bir katkı eklenir. Hartree potansiyeli,

$$V_H(\vec{r}) = - \int d\vec{r}' \frac{r(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \quad (2.8)$$

olarak hesaplanır. Hartree potansiyelindeki herhangi bir i elektronuna etkiyen yoğunluk terimi,

$$\rho(\vec{r}') = \sum_{i \neq j} |\psi_j(\vec{r}')|^2 \quad (2.9)$$

ile verilir. Sonuç olarak Hamiltonyen,

$$\left[-\frac{1}{2}\nabla_i^2 + V(\vec{r}) \right] \psi(\vec{r}) + \sum_i \int d\vec{r}' \frac{|\psi_j(\vec{r}')|^2}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \psi(\vec{r}) = \varepsilon_i \psi(\vec{r}) \quad (2.10)$$

şeklini alır.

Hartree yaklaşımında dalga fonksiyonu, tek tek elektronların dalga fonksiyonlarının çarpımı olarak yazıldığı için herhangi iki elektronun yer değiştirmesi fark etmeyeceğinden, simetrik kalır. Fakat Pauli dışarılama ilkesine göre elektronik dalga fonksiyonu anti-simetrik olmalıdır. Yani Hartree yaklaşımı, Pauli dışarılama ilkesini ihmal eder. Bu Hartree yaklaşımının geçersiz olduğunun göstergesidir.

2.3.2. Hartree – Fock yaklaşımı

Hartree yaklaşımının [34] eksikliğinden yola çıkarak anti-simetrik dalga fonksiyonları kullanılmıştır. Bu önerinin başlamasıyla değişim ilkesi boyunca sistem için, Hamiltonyen denklemini açıklamak tekrar mümkün hale geldi.

Sistemin dalga fonksiyonu, anti-simetri özelliğini sağlayacak şekilde seçilir. Elektronlardan oluşan sistemin dalga fonksiyonu, Pauli dışarılama ilkesi gereği, sistemdeki iki elektronun yer değiştirmesi altında, dalga fonksiyonları anti-simetriktir.

$$\psi(\dots, \vec{r}_i, \dots, \vec{r}_j, \dots) = -\psi(\dots, \vec{r}_j, \dots, \vec{r}_i, \dots) \quad (2.11)$$

Bu yaklaşımda dalga fonksiyonu, Hartree dalga fonksiyonundan daha karmaşıktır. Fakat bu fonksiyon Slater determinantı [36] ile tanımlanabilir.

$$D(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_1(\vec{r}_1) & \psi_2(\vec{r}_1) & \dots & \psi_N(\vec{r}_1) \\ \psi_1(\vec{r}_2) & \psi_2(\vec{r}_2) & \dots & \psi_N(\vec{r}_2) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \psi_1(\vec{r}_N) & \psi_2(\vec{r}_N) & \dots & \psi_N(\vec{r}_N) \end{vmatrix} \quad (2.12)$$

Slater determinantı [36] ile denklem varyasyonel olacak ve toplam enerjiyi minimize eden bir deneme dalga fonksiyonu kullanılacaktır. Böylece denklem,

$$\left[-\frac{1}{2}\nabla_i^2 + V_i(\vec{r}) \right] \psi(\vec{r}) + \sum_i \int d\vec{r}' \frac{|\psi_j(\vec{r}')|^2}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \psi(\vec{r}) - \sum_j \delta_{\alpha_i \alpha_j} \int d\vec{r}' \frac{\psi_i(\vec{r}') \psi_j(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} = \varepsilon_i \psi(\vec{r}) \quad (2.13)$$

olur. Burada son terim deęiş-tokuş terimidir, α_i ve α_j spinleri aynı olduęunda sıfırdan farklıdır.

Hartree-Fock yaklaşımının avantajı; tek elektron dalga fonksiyonunu içeren bir Slater determinantı kullanması, varyasyonel olması ve toplam enerjiyi minimize eden bir deneme dalga fonksiyonu kullanmasıdır. Hartree-Fock metodu [37,38] elektronlar arasındaki ilişkiyi göz önüne almamıştır ve deęiş-tokuş terimi yerel olmadığından Hartree-Fock yaklaşımı, Fermi yüzeyi civarındaki elektronlar için doęru sonuçlar vermez.

Hartree-Fock denkleminin çözümü oldukça zordur ve hesaplanması da Yoęunluk Fonksiyoneli Teorisine göre oldukça uzundur. Bu yüzden molekül özelliklerinin belirlenmesinde YFT daha kolaydır.

2.4. Hohenberg ve Kohn Yaklaşımı

Hohenberg ve Kohn, 1964 yılında çok-cisim sistemini tam olarak çözen Yoęunluk Fonksiyoneli Teorisi'ni formüle etmişlerdir [25]. Bir dış potansiyel altında temel deęişken olarak dikkate alınan elektron yoęunluęunun, tek parçacık probleminin temeli olan yük yoęunluęunun bir fonksiyonu olarak ifade edilebileceęini kanıtladılar.

YFT de, ana deęişken $\rho(\vec{r})$ yoęunluęunun seçilmesi fikri, herhangi bir atom veya molekül sisteminin Hamiltonyenini, çekirdek yükleri (Z_k), uzaydaki çekirdeęin konumu (R_k) ve elektron sayısı (N) tarafından tanımlanmasıdır. M çekirdek ve N elektrondan oluşan bir sistem için, atomik birimler ($m = \hbar = e = 1$) cinsinden temel Hamilton

$$H = H_{elektron} + H_{çekirdek} \quad (2.14)$$

$$H_{elektron} = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \nabla_i^2 - \sum_{i=1}^N \sum_{k=1}^M \frac{Z_k}{r_{ik}} + \sum_{i=1}^N \sum_{j>i}^N \frac{1}{r_{ij}} \quad (2.15)$$

$$H_{çekirdek} = -\frac{1}{2} \sum_{k=1}^M \frac{1}{M_k} \nabla_k^2 + \sum_{k=1}^M \sum_{l>k}^M \frac{Z_k Z_l}{R_{kl}} \quad (2.16)$$

olarak yazılır.

Çekirdek kütlesi, elektron kütlesinden daha fazla olması nedeniyle çekirdek daha az hareketlidir. Bu nedenle elektronlar sabit çekirdek alanında hareket ediyormuş gibi düşünülebilir. Bu Born-Oppenheimer yaklaşımı olarak bilinir. Çekirdek uzayda hareketsiz ise kinetik enerjileri sıfırdır ve çekirdek-çekirdek itmelerinden dolayı potansiyel enerjileri sabittir. Sonuç olarak Hamiltonyen, H_{elektron} elektronik Hamiltonyene indirgenir. Böylece sistemin çözümü sadece elektronik dalga fonksiyonudur. Bu durum öz değer problemine dönüşür.

$$H_{\text{elektron}}\Psi_{\text{elektron}} = E_{\text{elektron}}\Psi_{\text{elektron}} \quad (2.17)$$

Tüm parçacıkların temel durum enerjisi elektron yük yoğunluğunun $\rho(\vec{r})$ 'nin bir fonksiyonu olduğu ortaya çıkıyor. Buradan temel durum enerjisi, $\rho(\vec{r})$ yük yoğunluğu terimine bağlı olarak iki kısma ayrılır.

$$E[\rho] = \int V(\vec{r})\rho(\vec{r})d\vec{r} + F[\rho] \quad (2.18)$$

Burada, $F[\rho] \equiv \langle \psi | T + U | \psi \rangle$ eşitliğindedir. $F[\rho]$, Hohenberg-Kohn fonksiyonu olarak adlandırılır. Herhangi bir dış potansiyel ve herhangi bir parçacıkların sayısı için geçerli olan genel bir fonksiyondur [39]. Sistemin temel durum enerjisini ortaya çıkarır.

2.5. Kohn – Sham Denklemleri

1965 yılında, Kohn ve Sham (KS), Hamilton denklemlerinde düzenlemeye giderek yeniden yazmışlardır [26]. Bu denklemler, etkin bir potansiyel içinde hareket eden bağımsız parçacıkları ifade eder.

Normalde birbirleri ile etkileşmeyen elektronları sanki etkileşiyormuş gibi varsayan ve Shrödinger denklemlerinden elde edilen denklemlerdir. Kohn-Sham denklemlerinin çözümü, neredeyse tümü doğru kinetik enerjiyi içeren, birbiri ile etkileşmeyen parçacıklar için tam kinetik enerjiyi verir. Sistemin temel durum özelliklerini içeren Schrödinger denklemi,

$$H\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) = E\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) \quad (2.19)$$

$$\left[-\sum_i \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2(\vec{r}_i) + V_{dış}(\vec{r}_i) + \frac{e^2}{2} \sum_{i \neq j} \frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \right] \psi = E\psi \quad (2.20)$$

ile verilir. Burada \vec{r}_j parçacıkların koordinatlarını ve spinlerini belirtir. Temel durumda sistemin herhangi bir fiziksel özelliği, elektron yoğunluğunun fonksiyonu olarak,

$$E[\rho] = \min \left(F[\rho] + \int V_{dış}(\vec{r}) \rho(\vec{r}) d\vec{r} \right) \quad (2.21)$$

haline gelir. Burada $\int \rho(\vec{r}) d\vec{r} = N$ toplam elektron sayısını verir, sabit değerdir. $F[\rho]$, $V_{dış}(\vec{r})$ potansiyelinden bağımsız genel bir fonksiyondur. $\rho(\vec{r})$ yoğunluklu etkileşmeyen elektron sisteminin kinetik enerjisi olarak tanımlanan $T_0[\rho]$ terimi cinsinden $F[\rho]$ fonksiyonu,

$$F[\rho] = T_0[\rho] + \frac{e^2}{2} \int \frac{\rho(\vec{r}) \rho(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d\vec{r} d\vec{r}' + E_{d-t}[\rho] \quad (2.22)$$

Burada $E_{d-t}[\rho]$, değiş tokuş bağlanma enerjisidir. Denklemler yerine konulduğunda Scrödinger denkleminin son hali,

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{K-S}(\vec{r}) \right] \psi_i(\vec{r}) = \varepsilon_i \psi_i(\vec{r}) \quad (2.23)$$

V_{K-S} , Kohn-Sham potansiyelidir, matematiksel olarak

$$V_{K-S}(\vec{r}) = V_{elektron}(\vec{r}) + e^2 \int \frac{\rho(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d\vec{r}' + v_{d-t}(\vec{r}) \quad (2.24)$$

şekildedir.

$$\rho(\vec{r}) = \sum_i |\psi_i(\vec{r})|^2 \quad (2.25)$$

$$v_{d-t}(\vec{r}) = \frac{\delta E_{d-t}(\rho)}{\delta \rho(\vec{r})} \quad (2.26)$$

Bu iki denklem, Kohn – Sham denklemleri [26] olarak bilinir. Etkileşmeyen parçacıkların sistemini tanımlar. Kohn - Sham denklemleri, çok-elektron sistemlerinin özelliklerini tam olarak açıklar.

2.6. Yerel Yoğunluk Yaklaşımı

Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi' nde değiş-tokuş bağlanma enerjisini belirlemek için kullanılan yöntemdir. Bu yöntemde hem kolay hesaplama hem de doğru sonuç söz konusudur.

Yerel Yoğunluk Yaklaşımında sistemdeki her bir noktanın, eşit elektron yoğunluğuna sahip olduğu ve birbirleri ile etkileştiği kabul edilir. Burada değiş-tokuş enerjisi,

$$E_{d-t}^{YYY} = \int \rho(r) E'_{d-t}(\rho) d^3r \quad (2.27)$$

şeklinindedir. $\rho(\vec{r})$ yoğunluklu sistemin parçacık başına düşen enerji E'_{d-t} olarak tanımlanır [40].

Yerel Yoğunluk Yaklaşımı, homojen yoğunluklu sistemlerde kullanılmış fakat homojen olmayan sistemlerde de doğruya yakın sonuç verdiği belirlenmiştir [41]. YYY' nin eksik olduğu yönleri şu şekildedir:

- Uyarılmış enerji durumları, yarıiletkenlerde ve yalıtkanlarda yasak bant aralıkları gerçek değerinin altındadır. Bu sürpriz değildir. Çünkü YFT temel durum seviyesini baz alır.
- Kohesiv enerjiler gerçek değerinin üzerinde çıkarken örgü sabitleri gerçek değerinin altında çıkar. Bu yaklaşık olarak %3 kadardır.
- Bazı manyetik sistemler için gerçek olmayan uyarılmış durumlar belirlenir.
- Van der-Waals etkileşmeleri YYY ile uygun bir şekilde tanımlanamaz.

2.7. Genelleştirilmiş Gradyent Yaklaşımı

Moleküller içinde yoğunluk oldukça hızlı değişmektedir. Bu yüzden Yerel Yoğunluk Yaklaşımı ötesinde bir yaklaşım, Genelleştirilmiş Gradyent Yaklaşımı gerekir. Yoğunluğun boşluktaki değişimini de göz önüne alan yaklaşım şeklidir. Yerel Yoğunluk Yaklaşımına göre bağ uzunluğu ve toplam enerji hesabında daha iyi sonuçlar verir. Genelleştirilmiş Gradyent Yaklaşımı, elektron yoğunluğunun artış yönüne göre değiş-tokuş enerjisinin durumunu belirler [42-44]. Spin-polarize etkileri göz önüne alınmayan bir sistem için GGY' de değiş-tokuş korelasyon enerjisi:

$$E_{d-t}^{GGY}[\rho] = \int f(r, \vec{\nabla}[\rho(r)])\rho(r)d^3r \quad (2.28)$$

ile verilir [45].

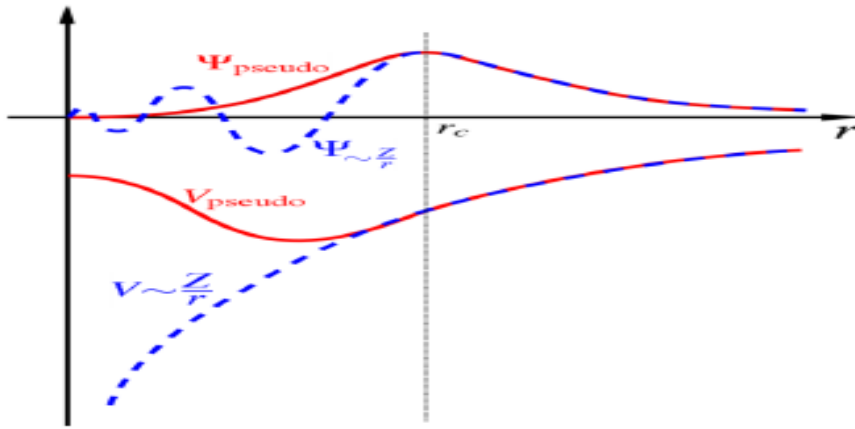
2.8. Pseudo Potansiyeli

İlk olarak 1966'da Harrison açıklamış [46] ve daha sonra 1970'de Cohen ve Heine tarafından araştırılmıştır [47]. Radyal Kohn-Sham denklemi çözümlenerek yapılır:

$$\left\{ -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{2r^2} + V[\rho; r] \right\} rR_{nl}(r) = \varepsilon_{nl}(r)R_{nl}(r) \quad (2.29)$$

$$V[\rho; r] = -\frac{Z}{r} + V_{Hartree}[\rho; r] + V_{d-t}^{YYY}[\rho(r)] \quad (2.30)$$

Burada $\rho(r)$, radyal dalga fonksiyonları için toplam elektron yoğunluğu, $V_{Hartree}$ Hartree potansiyeli, V_{d-t}^{YYY} yerel yoğunluk yaklaşımı (YYY) altında değiş-tokuş potansiyelidir.



Şekil 2.1. Pseudo potansiyel

Pseudo (Sanki) potansiyel metodu, dalga fonksiyonu hesabında oldukça kullanışlıdır [48].

2.9. Örgü Titreşimleri

Örgü titreşimlerinin kuantumlanmasına fonon denir. Kristali basit bir fonon modeli olarak, birbirine yaylarla bağlı parçacıklardan oluşan doğrusal bir örgü gibi düşünebiliriz.

N tane m kütleli parçacık, kuvvet sabitleri K ve eşit uzunluklu yaylarla birbirine bağlanmış olsun. Sınır koşullarını tespit etmek için, parçacıkların bir halka oluşturduğunu düşünelim.

Parçacıklar halka düzlemine dik doğrultuda enine yer değiştirirler. Yer değiştirmesi x_i ve momentumu da p_i olan parçacığın oluşturduğu sistemin hamiltonyeni;

$$H = \sum_i^N \frac{p_i^2}{2m} + \frac{1}{2} K x_i^2 \quad (2.31)$$

Bu denklemin enerji öz değerleri şu şekildedir:

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega \quad (n = 0, 1, 2, 3, \dots) \quad (2.32)$$

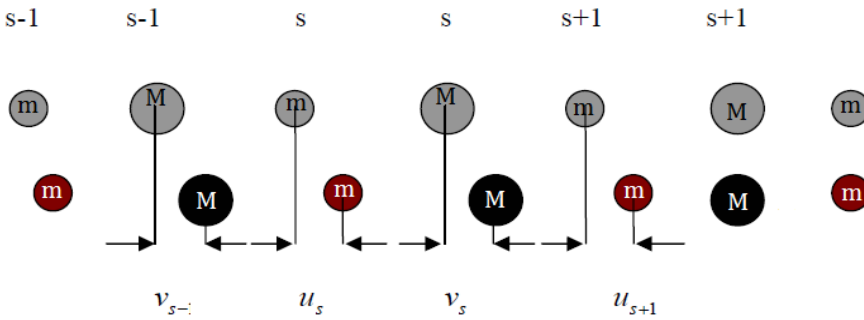
Bir örgü dalgasının enerjisi $\hbar \omega$ ile ifade edilir. Fononların enerjileri de $\hbar \omega$ katları şeklinde değişir [49]. Böylece kuantum mekaniği kapsamında değerlendirme yapabiliriz. Fononlar, Bose – Einstein istatistiklerine uyarlar, bozon gibi düşünülebilir.

$$\bar{n} = \frac{1}{\left(e^{\frac{\hbar \omega}{k_B T}} - 1 \right)} \quad (2.33)$$

Bu denklem k modundaki ortalama fonon sayısını verir [50].

2.9.1. İki atomlu örgü titreşimleri

İlkel hücresinde M ve m kütleli iki atom bulunduran bir kübik kristal düşünelim



Şekil 2.2. İki atomlu kristal yapıdaki atomik düzlemlerin yer değiştirmeleri

Komşu atomlar arası kuvvet sabiti C (m ve M için kuvvet sabitini aynı alıyoruz), u ile v atomların denge konumlarından yer değiştirmeleri olmak üzere;

➤ M kütleli s durumundaki atom için hareket denklemi :

$$M \frac{d^2 v_s}{dt^2} = C(u_{s+1} - v_s) + C(u_s - v_s) = C(u_{s+1} + u_s - 2v_s) \quad (2.34)$$

➤ m kütleli s durumundaki atom için hareket denklemi :

$$m \frac{d^2 u_s}{dt^2} = C(v_s - u_s) + C(v_{s-1} - u_s) = C(v_s + v_{s-1} - 2u_s) \quad (2.35)$$

şeklinde birbirlerine bağlı iki denklem yazılabilir. Ardışık düzlemlerde farklı u ve v genliklerine sahip ilerleyen dalgaları ;

$$u_s = u e^{-i\omega t} e^{iska} \quad \text{ve} \quad v_s = v e^{-i\omega t} e^{-iska} \quad (2.36)$$

şeklinde ifade edelim. Türevleri,

$$\frac{d^2 u_s}{dt^2} = -\omega^2 u_s \quad \text{ve} \quad \frac{d^2 v_s}{dt^2} = -\omega^2 v_s \quad (2.37)$$

$$u_{s+1} = u e^{-i\omega t} e^{i(s+1)ka} \quad \text{ve} \quad v_{s+1} = v e^{-i\omega t} e^{-i(s+1)ka} \quad (2.38)$$

eşitlikleri yerlerine yazıldıktan ve gerekli düzenlemeler yapıldıktan sonra,

$$(2C - M\omega^2)u - C(1 + e^{-ika})v = 0 \quad (2.39)$$

$$-C(1 + e^{ika})u + (2C - m\omega^2)v = 0 \quad (2.40)$$

u ve v ye göre çizgisel olan bu denklemin çözümü katsayılar determinantını sıfır yaparak bulunur.

$$\begin{vmatrix} 2C - M\omega^2 & -C(1 + e^{-ka}) \\ -C(1 + e^{ka}) & 2C - M\omega^2 \end{vmatrix} = 0 \quad (2.41)$$

$$mM\omega^4 - 2C(m + M)\omega^2 + 2C^2[1 - \cos(ka)] = 0 \quad (2.42)$$

Burada $2 \cos(ka) = [e^{ika} + e^{-ika}]$ ifadesi kullanılmıştır.

$$\omega^2 = \frac{C(m + M)}{mM} \pm \frac{C\sqrt{(m + M)^2 + 2mM[1 - \cos(ka)]}}{mM} \quad (2.43)$$

İki atomlu çizgisel örgü için dağınım bağıntısı elde edilir [23,24]. Bunlardan eksi işaretli olanı akustik, artı işaretli olanı optik moda karşılık gelir. Dağınım eğrilerinin sınırları :

$$\cos(ka) \approx 1 - \left(\frac{1}{2}\right)k^2a^2 + \dots \quad (2.44)$$

küçük ka değerleri için yazılır. Binom açılımını kullanarak,

$$\sqrt{\left[\frac{m+M}{mM}\right]^2 - \frac{k^2a^2}{mM}} \approx \frac{m+M}{mM} + \frac{k^2a^2}{2(m+M)} \quad (2.45)$$

$$\omega^2 \approx \frac{C(m+M)}{mM} \pm C \left[\frac{m+M}{mM} - \frac{k^2a^2}{2(m+M)} \right] \quad (2.46)$$

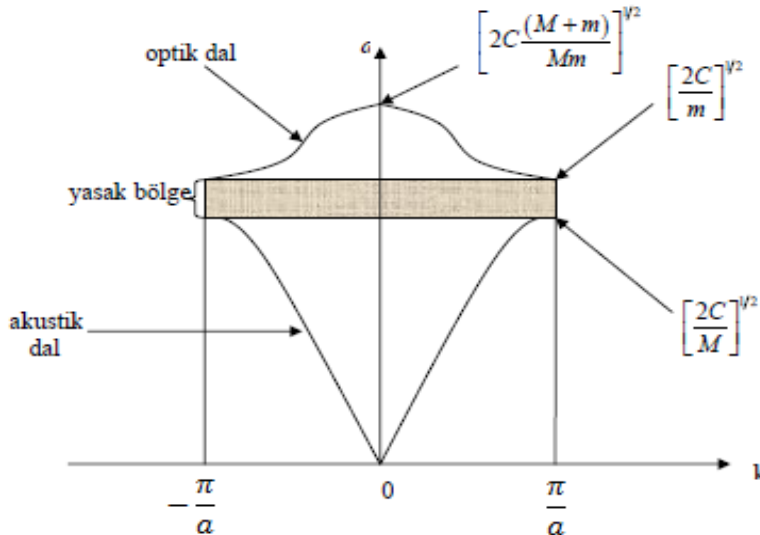
olur. Bu eşitlikteki (+) işaretli durum için, ka 'nın çok küçük olduğu bilindiğine göre;

$$\omega^2 \approx \frac{2C(m+M)}{mM}, \quad (\text{optik kol}) \quad (2.47)$$

(-) işaretli durum için,

$$\omega^2 \approx \frac{Ck^2a^2}{2(m+M)}, \quad (\text{akustik kol}) \quad (2.48)$$

bulunur [50,51].



Şekil 2.3. İki atomlu çizgisel örgünün dağılım eğrileri

- ilk Brillouin bölgesi sınırlarında $k = \pm \pi/a$ ve $\cos(ka) \approx -1$ olduğundan (a, aynı cins düzlemler arası uzaklık),

$$\omega^2 \approx \frac{C(m+M)}{mM} \pm \frac{C\sqrt{(m+M)^2 - 4mM}}{mM} \quad (2.49)$$

$m < M$ için,

$$\omega^2 \approx \frac{C(m+M)}{mM} \pm \frac{C(M-m)}{mM} \quad (2.50)$$

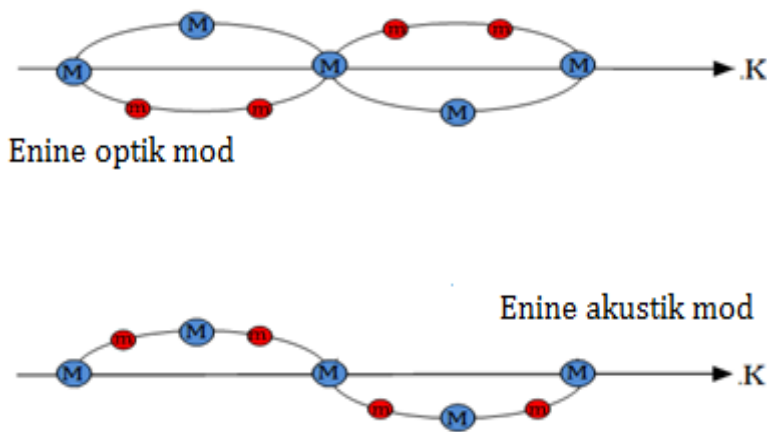
yazılabilir. Sonuç olarak ilk Brillouin bölgesinin sınırlarında;

$$\omega^2 \approx \frac{2C}{m}, \quad (\text{optik kol}) \quad (2.51)$$

$$\omega^2 \approx \frac{2C}{M}, \quad (\text{akustik kol}) \quad (2.52)$$

elde edilir [51,52].

Böylece ilk Brillouin bölgesi sınırlarında; optik kolun minimum ve akustik kolun maksimum olduğu görülür. Akustik kolların maksimumları ve optik kolların minimumları arasında kalan frekans aralığı tanımlı değildir ve bu aralığa yasaklanmış frekans bölgesi denir. Örgü bu frekans aralığındaki dalgaları geçirmez. Bu yüzden iki atomlu çizgisel örgü mekanik süzgeç (filtre) olarak kullanılabilir [52].



Şekil 2.4. İki atomlu çizgisel örgüde enine optik mod (TO) ve enine akustik mod (TA)

Akustik ve optik modlar arasındaki dinamik farklılık yukarıdaki şekilde açıkça görülmektedir. Burada her iki modun dalga boyu eşittir.

2.9.2. Üç boyutta örgü titreşimleri

Fonon dispersiyon bağıntıları, denge konumundaki atomların klasik hareket denkleminin çözülmesiyle bulunur. Birim hücresinde n atom bulunan, N tane hücrenin üç boyutlu bir kristali oluşturduğu göz önüne alınırsa, kristal içindeki i . atomun konumu

$$\vec{R}_{L,i} = \vec{R}_L + \vec{\tau}_i \quad i = 1,2,3, \dots, n \quad (2.53)$$

olarak verilir. Her bir birim hücre; \vec{a}_1, \vec{a}_2 , ve \vec{a}_3 , olmak üzere baz vektörleri cinsinden lineer bağımsız vektörler olarak tanımlanır. $l=(0,0,0)$ orijin olmak üzere, örgü vektörü \vec{R}_L ,

$$\vec{R}_L = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + n_3\vec{a}_3 \quad L = \{n_1, n_2, n_3\} \quad (2.54)$$

şeklinde ifade edilebilir. Burada n katsayıları tamsayı ve birim hücre içindeki i . atomun konumu şu şekildedir:

$$\vec{\tau}_i = x_{i1}\vec{a}_1 + x_{i2}\vec{a}_2 + x_{i3}\vec{a}_3 \quad 0 \leq x < 1 \quad (2.55)$$

Harmonik yaklaşımda, denge konumundan itibaren küçük yer değiştirmeler hesaba katılır. Bu yüzden kristalin toplam etkin potansiyel enerjisi, yer değiştirmelerin bir fonksiyonu olarak yazılabilir. Yer değiştirme;

$$\vec{R}_{L,i} = \vec{R}_L + \vec{u}_i(\vec{R}_L) \quad (2.56)$$

şeklindedir. Kristalin toplam etkin potansiyel enerjisi Taylor serisine açılıp 2. dereceye kadar olan terimler dikkate alınır,

$$\varepsilon = \varepsilon_0 + \frac{1}{2} \sum_{L,L} \sum_{i,j} \vec{u}_i(\vec{R}_L) \cdot C_{i,j}(\vec{R}_L, \vec{R}_L) \cdot \vec{u}_j(\vec{R}_L) + \sigma(u^3) \quad (2.57)$$

elde edilir. Burada $C_{i,j}(\vec{R}_L, \vec{R}_L)$ kat sayıları atomlar arası kuvvet sabitleridir. R_i konumundaki bir atomun üzerine etkiyen kuvvet ifadesi aşağıdaki şekildedir.

$$F_i(\vec{R}'_L) = -\frac{d\varepsilon}{du_i(R_L)} = -\sum_{R',j} C_{i,j}(\vec{R}_L, \vec{R}'_L) \cdot u_j(\vec{R}'_L) + \sigma(u^2) \quad (2.58)$$

Elastik sabitler, bağımsız nicelikler olmadığı gibi kristalin simetri özelliklerinden dolayı birbirleriyle ilişki içindedir. Özellikle kristalin öteleme simetrisine sahip olması nedeniyle kuvvet sabitleri sadece $(\vec{R} - \vec{R}')$ farkına bağlıdır. Bu ilişki,

$$\sum_{R'j} C_j (\vec{R} - \vec{R}') = 0 \quad (2.59)$$

şeklindedir. Böylece kristalin öteleme simetrisi altında potansiyel enerjisinin değişmeyeceği görülür. Klasik hareket denklemi,

$$M_i u''(\vec{R}) = - \sum_{R'j} C_j (\vec{R} - \vec{R}') \cdot u_j(\vec{R}') \quad (2.60)$$

şeklindedir ve bunun çözümü ise,

$$u_i(\vec{R}) = \frac{1}{\sqrt{M_i}} u_i e^{i\vec{q} \cdot \vec{R} - i\omega t} \quad (2.61)$$

şeklinde yazılabilir ve \vec{q} ' nun izinli değerleri Born-Von Karman periyodik sınır şartlarına göre seçilir.

$$\omega^2 u_i = \sum_{R'j} \widetilde{D}_{ij}(\vec{q}) \cdot u_j \quad (2.62)$$

sonucu elde edilir. Burada farklı bir Fourier dönüşümü tanımlanabilir:

$$\widetilde{D}_{ij}(\vec{R}) = \frac{1}{\sqrt{M_i M_j}} \sum_R C_{i,j}(\vec{R}) e^{i\vec{q} \cdot \vec{R}} \quad (2.63)$$

$3n \times 3n$ boyutunda olan $\widetilde{D}_{ij}(\vec{R})$ matrisine, kristalin dinamik matrisi denir. Bu matris hermitiktir [53]. Öz değer problemi Brillouin bölgesinde her bir \vec{q} noktasındaki ω^2 için, $3n$ çözüme sahiptir ve $\omega_m^2(\vec{q})$ ile gösterilir. $\widetilde{D}_{ij}(\vec{R})$ matrisinin hermitik olması nedeniyle $u_{i,q}^m$ öz vektörleri, ortogonallik ve kapalılık bağıntılarını sağlayacak olanlar seçilir [53,54].

$$\sum_i u_{i,\vec{q}}^{m*} \cdot u_{i,\vec{q}}^m = \delta_{mm'} \quad (2.64)$$

$$\sum_i (u_{ai,\vec{q}}^m)^* \cdot u_{\alpha'l_j,\vec{q}}^m = \delta_{ij} \delta_{\alpha\alpha'} \quad (2.65)$$

2.10. Direkt (Doğrudan) Metot

Örgü dinamiğinde bir kristalin potansiyel enerjisi, atomik konumların fonksiyonu olarak kabul edilir. Kristalin potansiyel enerjisi, denge konumunun yer değiştirmelerine göre seriye açılabilir:

$$\begin{aligned} \phi = \phi_0 + \sum_{l\kappa\alpha} \phi_\alpha(l\kappa)u_\alpha(l\kappa) + \frac{1}{2} \sum_{l\kappa\alpha} \sum_{l'\kappa'\beta} \phi_{\alpha\beta}(l\kappa; l'\kappa')u_\alpha(l\kappa)u_\beta(l'\kappa') \\ + \frac{1}{6} \sum_{l\kappa\alpha} \sum_{l'\kappa'} \sum_{l''\kappa''\gamma} \phi_{\alpha\beta\gamma}(l\kappa; l'\kappa'; l''\kappa'')u_\alpha(l\kappa)u_\beta(l'\kappa')u_\gamma(l''\kappa'') \\ + \dots \end{aligned} \quad (2.66)$$

Bu herhangi bir enerji modelinde kullanılan genel bir açılımdır. İkinci dereceye kadar açılım yapılırsa harmonik yaklaşım adını alır [55]. Bu yaklaşım ile fonon modları hakkında bilgi edinilir. ϕ_0 , denge konumundaki tüm atomların potansiyel enerjisidir. $u_\alpha(l\kappa)$, α kartezyen doğrultusunda l . İlkel birim hücrede κ . atomun denge konumundan olan yer değiştirmesidir. Toplamlar, birim hücredeki tüm atomlar üzerinden sonsuz birim hücre boyunca yapılmaktadır.

$\phi_\alpha(l\kappa)$, $\phi_{\alpha\beta}(l\kappa; l'\kappa')$ ve $\phi_{\alpha\beta\gamma}(l\kappa; l'\kappa'; l''\kappa'')$ katsayıları denge konumunun atomik yer değiştirmelere göre potansiyel enerjinin türevleridir.

$$\phi_\alpha(l\kappa) = \frac{\partial \phi}{\partial u_\alpha(l\kappa)} \quad (2.67)$$

sıfırdır, çünkü sistem dengededir. $\phi_{\alpha\beta}(l\kappa; l'\kappa')$ ve $\phi_{\alpha\beta\gamma}(l\kappa; l'\kappa'; l''\kappa'')$ ikinci ve üçüncü dereceden kuvvet sabiti matrislerdir. Denge konumundaki atomlar için hesaplanmıştır.

$$\phi_{\alpha\beta}(l\kappa; l'\kappa') = \left. \frac{\partial^2 \phi}{\partial u_\alpha(l\kappa) \partial u_\beta(l'\kappa')} \right|_0 \quad (2.68)$$

$$\phi_{\alpha\beta\gamma}(l\kappa; l'\kappa'; l''\kappa'') = \left. \frac{\partial^3 \phi}{\partial u_\alpha(l\kappa) \partial u_\beta(l'\kappa') \partial u_\gamma(l''\kappa'')} \right|_0 \quad (2.69)$$

Literatürde, kuvvet sabitleri terimi genellikle ikinci dereceden kuvvet sabitleri matrisi ile ifade edilir. Örgü için hareket denklemi, her bir atom üzerindeki kuvvetler Newton'un temel dinamik ilkesinden hesaplanır :

$$F_{\alpha}(l\kappa) = m_{l\kappa} a_{l\kappa} = m_{l\kappa} \ddot{u}_{\alpha}(l\kappa) = - \sum_{l'\kappa'} \phi_{\alpha\beta}(l\kappa; l'\kappa') u_{\beta}(l'\kappa') \quad (2.70)$$

Direkt metot, Eş. 2.68 ve Eş. 2.70 denklemlerinin doğrudan kullanımını gerektirir. Bu metot, atomların yer değiştirmesi ile κ . atoma etki eden kuvvetleri kullanır.

$$F_{\alpha}(l\kappa) = - \sum_{l'\kappa'} \phi_{\alpha\beta}(l\kappa; l'\kappa') u_{\beta}(l'\kappa') \quad (2.71)$$

Direkt metotta, ilk olarak 230 adet kristalografik uzay grubundan biri kullanılarak kristal yapı kurulur ve kuvvet sabitlerinin matrisi bulunur daha sonra dinamik matris oluşturulur. Fonon frekansları ve fonon simetrisi (Γ -noktasında) ile fonon durum yoğunlukları üretilir. Bu tür hesaplamalar ile periyodik sınır şartları uygulanmış herhangi bir paralelkenar şekilli süper hücreler oluşturulur ve uygun pertürbasyon terimleri seçilir. Süper hücrelerdeki pertürbasyonlar hesaplanarak, bilinmeyen kuvvet sabitleri ve atomlar üzerine etkiyen kuvvetler için lineer denklem seti oluşturulur. Kuvvet sabiti matrisinin değerleri Hellmann-Feynman kuvvetlerinden oluşturulur. Yani $\phi_{\alpha\beta}(l\kappa; l'\kappa'), u_{\beta}(l'\kappa')$ pertürbasyonlarından ve $F_{\alpha}(l\kappa)$ kuvvetlerinden elde edilir.

Direkt metot, fonon dispersiyon eğrilerinin hesabında daha iyi sonuç verir. Hesaplama esnasında kuvvet sabitlerinde yuvarlama yapılır [56]. Buna rağmen Lineer Tepki Yöntemi'ne yakın sonuçlar bulunur.

2.11. Fonon Frekanslarının Durum Yoğunluğunu Hesaplama Metodu

Birinci Brillouin bölgesinde seçilen \vec{q} dalga vektörleri içinde frekans değerlerinden ne kadar bulunduğu durum yoğunluğu ile belirlenir. Bu durum, her frekansın durum yoğunluklarını gösteren eğrilerin bulunduğu bir grafikte ifade edilir. Hesaplamalarda öncelikle mümkün olduğu kadar çok sayıda fonon frekansının belirlenmesi gerekir [57,58]. Daha sonra;

$$\rho(\omega) = \frac{N_0 \Omega_c}{8\pi^3} \sum_q \delta(\omega - \omega(\vec{q})) \quad (2.72)$$

Eş. 2.72 kullanılarak durum yoğunluğu hesaplanır. Burada $\rho(\omega)$ durum yoğunluğu, N_0 kristaldeki birim hücre sayısı ve Ω_c ise birim hücre hacmidir. Yukarıda verilen denklem ile

fonon dağılımından durum yoğunluğunu hesaplayabilmek için aşağıdaki şekilde bir deneme fonksiyonunu kullanmak uygundur.

$$\rho(\omega) = \frac{N_0 \Omega_c}{8\pi^3} \sum_q \theta(\omega - \omega(\vec{q})) \quad (2.73)$$

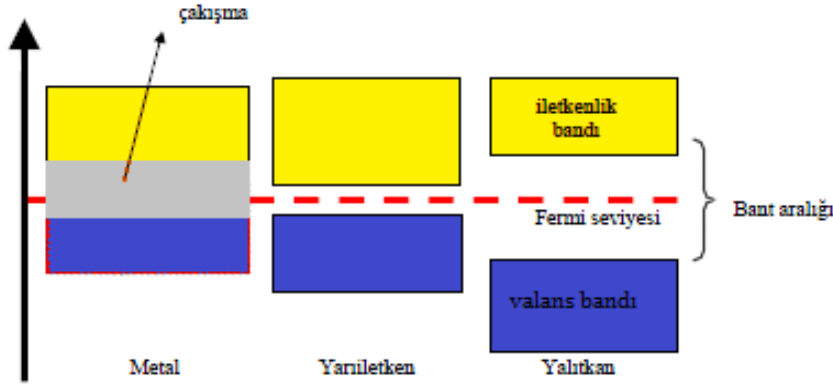
Bu ifadede hesaplanan frekans farkı; $|\omega - \omega(\vec{q})| \leq \Delta\omega/2$ ise, $\theta = 1$ olur, diğer durumlarda sıfırdır. Burada $\Delta\omega = 0,005 THz$ olarak alınır. Bu hesaplama her bir frekans değeri için yapıldığı için uzun zaman alır. Hesaplamalar sonunda frekans farkının sabit kaldığı noktalarda bir pik oluşur. Bu pikler hesaplanan bütün frekans değerlerinin birinci Brillouin bölgesindeki durum yoğunluklarını gösterir [58].

2.12. Enerji Bantları

Kristali oluşturan atomlar birbirlerinden çok uzakta olduklarında birer uyarılmış atom gibi davranırlar. Birbirlerine yaklaştıklarında ise en dış yörüngedeki elektronları birbirleriyle etkileşmeye başlar. Bu etkileşim, elektronların gruplaşmasına ve enerji bandı oluşturmaya neden olur. Enerji bantları birbirlerinden ayrıdır. Enerji bantlarını ayıran enerji bölgelerine yasak bölge veya yasak enerji aralığı adı verilir. Yasak bölgeler elektronlar tarafından işgal edilemez.

Enerji seviyelerinin işgalinde de Pauli Prensipleri geçerlidir. Bu durum elektronların enerjilerini etkiler. Bir kristalde atomların sayısı yaklaşık 10^{23} mertebesinde ve enerji seviyelerinin kapladığı aralık bir kaç eV civarındadır. Bunun sonucu olarak komşu seviyeler arasındaki mesafe o kadar küçüktür ki, sürekli enerji bandı oluşur. İç yörüngedeki elektronlar, kendi çekirdeklerine daha yakındır ve etkileşme çok zayıftır. Buna karşılık gelen bant daha küçük enerji aralığındadır [59].

Atomların dış kabuk elektronlarının bulunduğu banda valans bandı denir. Valans bandı kısmen dolu veya tamamen doludur. Bir kristalin iletkenlik veya yalıtkanlık durumları valans bandı ile belirlenir. Valans bandın doldurulması ve valans bandı ile iletkenlik bandı arasındaki enerji aralığının büyüklüğü, bir kristalin iletkenlik, yarıiletkenlik veya yalıtkanlık karakterini tanımlayacaktır.



Şekil 2.5. Enerji bant yapısının yasak enerji aralıklarına göre sınıflandırılması

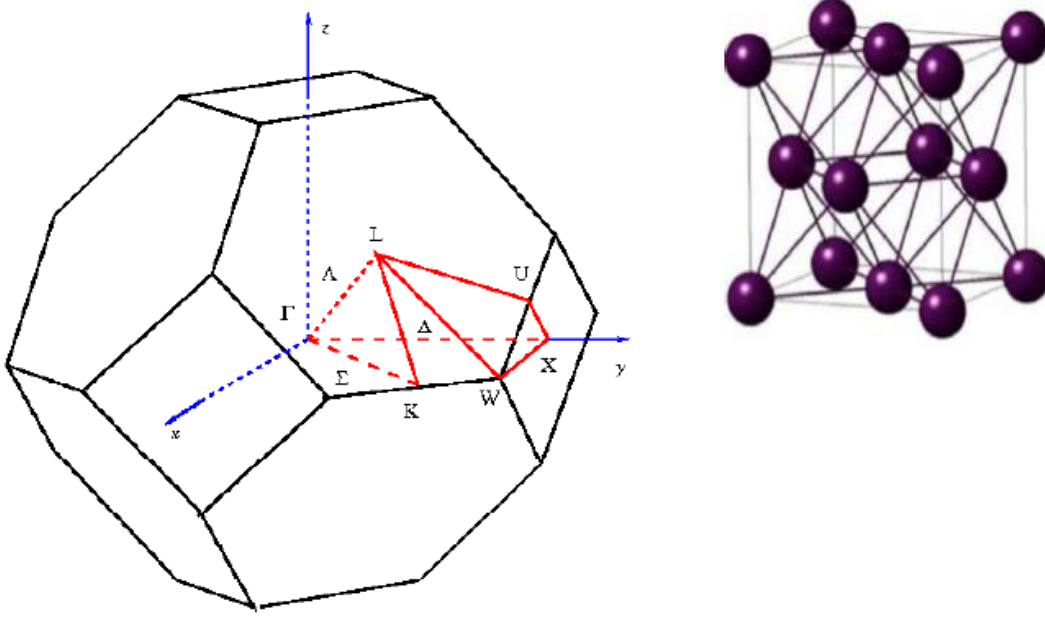
Şekil 2.5’de görüldüğü gibi metallerde Fermi enerjisi (E_F) izinli bir bant içinde bulunur ve iletkenlik bandı ile valans bandı arasındaki boşluk yani yasak aralık hemen hemen yok denecek kadar azdır.

Bu yasak aralığın çok az olması, elektriksel iletkenliklerini oldukça yüksek olduğunun göstergesidir. Yalıtkanlarda ise valans bandı elektronlar tarafından tamamıyla doldurulmuş olup bunun üzerindeki iletkenlik bandı tamamen boştur ve bu iki bant birbirinden mertebesi 8-9 eV veya daha fazla olan bir E_g yasak enerji aralığı ile ayrılmıştır. (E_F) bu yasak enerji aralığında yer alır. Bir yarıiletkenin bant yapısı yalıtkanın bant yapısıyla aynı olmasına rağmen yasak enerji aralığı (0,15 – 4,7 eV) daha az olduğundan valans bandından iletkenlik bandına elektron geçebilir. Böylece elektron iletkenlik bandında bir çok izinli enerji seviyesi bulunduğu yarıiletken elektrikçe iletken olur [59].

2.13. Birinci Brillouin Bölgesi ve Yüksek Simetri Noktaları

Birinci Brillouin bölgesi ters örgüde Wigner-Seitz ilkel hücresi olarak tanımlanır. Birinci Brillouin bölgesi, başlangıç noktasından çıkan ters örgü vektörlerinin orta noktasına dik olacak şekilde geçirilen düzlemler tarafından tamamen kapatılan ve yalnızca merkezinde bir örgü noktası içeren en küçük hacimdir [60]. Lineer örgünün bölge sınırları $k = \pm \pi/a$ da oluşur.

Yüzey merkezli kübik (fcc) örgü için birinci Brillouin bölgesi ve yüksek simetri noktaları Şekil 2.6’da gösterilmiştir. Yüksek simetri noktaları aynı zamanda gerçek uzayda cisim merkezli kübik (bcc) örgünün Wigner-Seitz hücresidir.



Şekil 2.6. Kartezyen koordinatlarda yüzey merkezli kübik yapı (fcc) için birinci Brillouin bölgesi ve yüksek simetri noktaları

Burada temel simetri noktaları; K: İki altıgen yüzeyin birleşme noktasının ortası, L: Altıgen yüzeyin merkezi, U: Bir altıgen, bir kare yüzeyin birleştiği kenarın orta noktası, W: Köşe nokta, X: Kare yüzeyin merkezidir. Bu noktaların koordinatları ters örgüde şu şekildedir:

$\Gamma (0, 0, 0)$	$L (1/2, 1/2, 1/2)$
$X (0, 1/2, 1/2)$	$W (1/4, 1/2, 3/4)$
$K (3/8, 3/8, 3/4)$	$U (1/4, 5/8, 5/8)$

2.14. Yığın Modülü

Yığın modülü, bir malzemenin hidrostatik basınç altında sıkıştırılması halinde onun hacminde oluşacak değişime karşı gösterdiği direnci tanımlayan bir özelliktir. Başka bir ifade ile bir deformasyon oluşturmak için gerekli enerjinin ölçüsüdür [61]. Bu nedenle hem teorik hem de deneysel açıdan, bir malzemenin sertliğini temsil eden önemli bir özelliktir. Bir katı maddenin yığın modülü,

$$B = -V \left(\frac{\partial P}{\partial V} \right)_T = \frac{1}{X} \quad (2.74)$$

şeklindedir. Burada X sıkıştırılabilirlik, P basınç ve V hacimdir. Mutlak sıfırda Entropi sabit olduğundan,

$$\partial\varphi = -P\partial V \quad (2.75)$$

termodinamik eşitliğinden yararlanarak,

$$\frac{\partial P}{\partial V} = \frac{\partial^2 \varphi}{\partial V^2} \quad (2.76)$$

yazılır. Böylece yığın modülü,

$$B = V \frac{\partial^2 \varphi}{\partial V^2} \quad (2.77)$$

elde edilir. Yığın modülü, katıların örgü sabitinin bulunmasında da önemli bir parametredir.

2.15. Elastik Özellikler

Bir kristalin herhangi bir zorlanmaya karşı tepkisini elastik özelliklerinden bulabiliriz [62]. Kristalin deformasyonu, e zorlanma matrisi kullanılarak ve deforme olmamış birim hücre $R=(a,b,c)$ Bravais örgü vektörünün, $R'=(a',b',c')$ vektörüne dönüştürülmesiyle oluşturulur. Bunun için kristalin Bravais $R=(a,b,c)$ örgü vektörü ve zorlanma matrisini kullanarak deforme olmuş kristalin örgü vektörü $R'=(a',b',c')$ cinsinden denklem yazabiliriz.

$$R' = R \begin{pmatrix} 1 + e_{xx} & \frac{1}{2}e_{xy} & \frac{1}{2}e_{xz} \\ \frac{1}{2}e_{yx} & 1 + e_{yy} & \frac{1}{2}e_{yz} \\ \frac{1}{2}e_{zx} & \frac{1}{2}e_{zy} & 1 + e_{zz} \end{pmatrix} \quad (2.78)$$

Zorlanmaya maruz kalan kristalin toplam enerjisini şu şekilde yazabiliriz:

$$U = \frac{E_{TOPLAM} - E_0}{V_0} = \frac{\Delta E}{V_0} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^6 \sum_{j=1}^6 C_{ij} e_i e_j \quad (2.79)$$

Kristalin zorlanmadan önceki enerjisi E_0 , hacmi ise V_0 'dır. Burada C_{ij} , elastik sabitlerin genel ifadesidir [62]. Eşitliğin sağ tarafının açılımında ve zorlanma tensörü simetrik olduğundan 36 tane elastik sabit vardır.

Kristal simetrisinin sınırlamaları kullanıldığında kübik yapı için 3 tane elastik sabit kalmaktadır. Bunlar C_{11} , C_{12} ve C_{44} elastik sabitleridir. Yukarıdaki zorlanma matrisini kullanarak $e_{xx} = e$ ve $e_{ij} = 0$ ($i \neq j$) kabul edilir. Böylece enerji ifadesi,

$$U = C_{11} \frac{e^2}{2} \quad (2.80)$$

bulunur. Eğer $e_{yx}=e_{zy}=e/2$ olarak alır diğer zorlanma elemanlarını sıfır kabul edersek,

$$U = C_{44} \frac{e^2}{2} \quad (2.81)$$

yazabiliriz. Buradan yola çıkarak yığın modülünü yazmak için $e_{xx}=e_{yy}=e_{zz}=e$ kabul edelim. Enerjinin yığın modülü cinsinden ifadesi,

$$U = \frac{Be^2}{2} \quad (2.82)$$

yazılır. Yine zorlanma matrisinden yola çıkarak, $e_{zz}=e$ ve $e_{xx}=e_{yy}= -e/2$ olacak şekilde Shear modülünü

$$U = 3C' \frac{e^2}{2} \quad (2.83)$$

İfade edebiliriz. Son olarak, bu matrisi köşegenleştirerek C_{12} elastik sabitini Yığın ve Shear modülleri cinsinden yazabiliriz [62]:

$$B = \frac{1}{3}(C_{11} + 2C_{12}) \quad (2.84)$$

$$C' = \frac{1}{2}(C_{11} - C_{12}) \quad (2.85)$$

Trigonal Shear modülü (G);

$$G = \frac{1}{2}(G_V + G_r) \quad (2.86)$$

Bir kristalin ikinci mertebeden elastik sabitlerinin pozitif olması durumunda yapı mekaniksel olarak kararlıdır. Kbik yapılar iin, Born kararlılık kriterleri;

$$\blacktriangleright C_{11} - C_{12} > 0 \quad \blacktriangleright C_{11} + 2C_{12} > 0 \quad \blacktriangleright C_{44} > 0$$

dir [60]. Buradaki G_V ve G_r sırasıyla;

$$G_V = \frac{1}{2}(C_{11} - C_{12} + 3C_{44}) \quad (2.87)$$

$$G_r = \frac{5C_{44}(C_{11} - C_{12})}{4C_{44} + 3(C_{11} - C_{12})} \quad (2.88)$$

Young modl (E);

$$E = \frac{9BG}{(3B + G)} \quad (2.89)$$

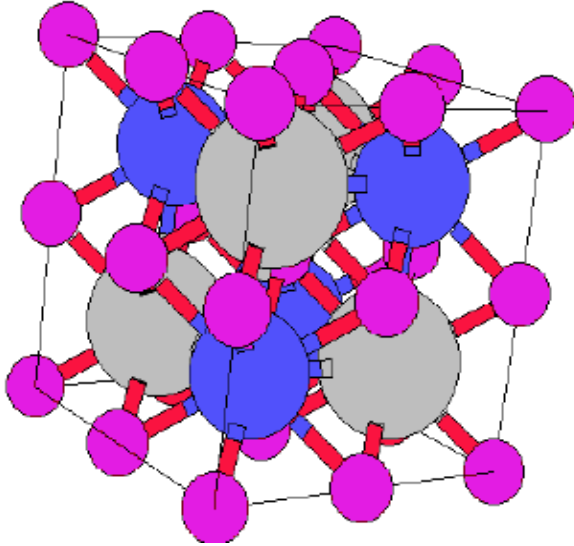
eklinde verilir [62].

3. MALZEMELERİN YAPISI ve KULLANILAN YÖNTEM

3.1. Heusler Alaşımları

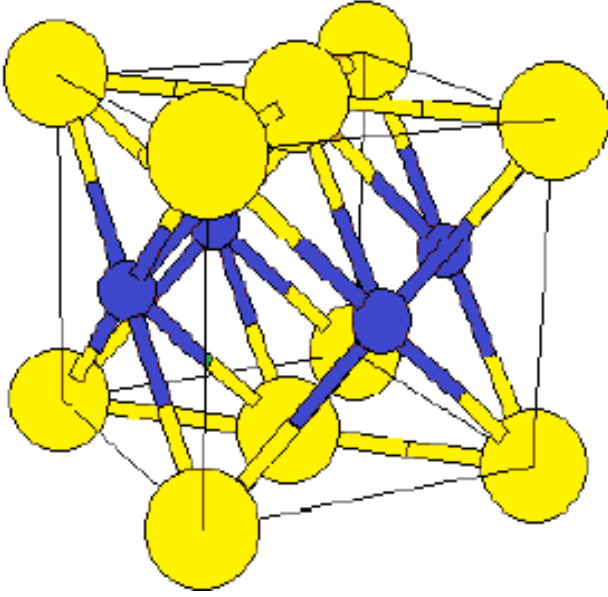
Heusler alaşımları, geniş bir yelpazede ilginç fiziksel özellikler sergileyen malzemelerden oluşmaktadır. Ferromanyetik özellik gösteren bu alaşımlar, metal ya da yarı metalik özellik göstermektedirler. Bazı Heusler alaşımları kristalografik tersinir, ısısal esnek, Martensit geçiş gösterdiklerinden şekil hafıza alaşımları olarak da adlandırılmaktadırlar [64,65].

Heusler tipi alaşımlar, stokiyometrik kompozisyonu X_2YZ ve kristal yapısı $L2_1$ tipinde kübik yapı olan üçlü bileşiklerdir. Heusler alaşımlarını iki farklı gruba ayrılabilir. Bunlar X_2YZ formunda, $L2_1$ yapısındaki tam Heusler alaşımları ve XYZ formunda, $C1_b$ yapısındaki yarı-Heusler alaşımlarıdır. X ve Y elementleri periyodik tablonun geçiş metali grubundan iken Z elementleri periyodik tablonun III-V grubunun elementidir [64]. Heusler alaşımlarının birim hücresi, orijinleri $(0,0,0)$, $(1/4,1/4,1/4)$, $(1/2,1/2,1/2)$ ve $(3/4,3/4,3/4)$ noktalarında bulunan dört tane iç-içe girmiş fcc alt örgüsü şeklindedir.



Şekil 3.1. $L2_1$ yapısındaki Heusler alaşımlarının gösterimi

Heusler sistemlerindeki alaşımların kristal yapıları L notasyonu ile gösterilmektedirler. $L2_1$ yapısındaki atomlar yüzey merkezli kübik örgüdeki atomların yerlerindedirler. $L1_0$ yapısındaki gösterim ise yüzey merkezli tetragonal yapının bozunmuş halidir.



Şekil 3.2. L1₀ yapısındaki Heusler alaşımlarının gösterimi

Heusler alaşımları içinde X_2MnZ şeklinde oluşan alaşımlar, mangan atomlarından kaynaklanan manyetik özelliklerinden dolayı, ayrıca bir ilgi görmektedirler. Bu bileşikler metalik özellik göstermekle beraber manyetik momentleri de belli bir yönelimde olan manyetik alaşımlardır. Mangan içeren Heusler alaşımlarında manyetik iyonlar arasında değiş-tokuş etkileşimleri olmaktadır. Bu da dış manyetik alan tarafından alaşımların kristal yapısının ve boyutun değiştirilmesine olanak sağlamaktadır [65].

Yapısal geçiş sıcaklığı yakınlarında manyetik alanın etkisiyle alaşımların kristal yapısı değişmektedir. Manyetik ve yapısal geçiş sıcaklıkları birbirine yaklaştırıldığı zaman, manyetik ve yapısal faz geçişlerinin manyetik entropi değişimine katkısı olmaktadır. Manyetik ve yapısal faz geçişinin birleştiği bu olgu katı hal fiziğinde çok nadir görülen bir durumdur. Bu da malzemelerde ilginç özelliklerin ortaya çıkmasına önayak olmaktadır [66].

3.2. MedeA ve PHONON Programları

Bu tezde yöntem olarak YFT' ne göre geliştirilmiş MedeA [62] ve PHONON [55] bilgisayar yazılım programları kullanılmıştır. Malzemelerin yapısal, elektronik, manyetik ve elastik özellikleri MedeA-WASP ile dinamik özellikler ise Phonon programı ile belirlenmiştir.

MedeA programı verilerin girilmesi, sonuçların yorumlanması ve grafikleştirilmesi için görsel ekranı kullanan ve içinde VASP, LAMMPS, GIBBS, MT gibi modülleri içeren lisanslı bir yazılımdır.

VASP programı hesaplama yapmak üzere INCAR, POSCAR, POTCAR ve K-POINTS olmak üzere dört farklı giriş dosyasına ihtiyaç duyar. INCAR; değişik özellikler için farklı giriş parametrelerini, POTCAR; atomik pozisyonları ve sınır şartlarını, K-POINTS; k-nokta değerlerini, POSCAR ise kullanılan pseudo potansiyellerini içerir.

Dinamik ve termodinamik özellikleri hesaplamada kullanılan ve lisanslı bir yazılım olan PHONON programı, Bölüm 2.10' da anlatılan Direkt (Doğrudan) metot kullanır ve fonon dağılım eğrilerini çizer.

4. BULGULAR ve TARTIŞMA

Bu çalışmada kübik $L2_1$ yapıdaki Cu_2MnZ ($Z = Al, In, Si, Ge, Ga, Sn, Sb$) Heusler alaşımları kullanılmıştır. Heusler alaşımlarının yapısal, elektronik, manyetik, elastik ve dinamik özelliklerinin hesaplamaları yoğunluk fonksiyonel teorisi üzerine kurulu Medea programı ile yapıldı.

4.1. Cu_2MnZ ($Z = Al, In, Si, Ge, Ga, Sn, Sb$) Heusler Alaşımlarının Yapısal ve Manyetik Özellikleri

$L2_1$ yapıdaki kristallerin örgü sabiti değerleri hacim sabit tutulmayarak yapısal optimizasyon ile elde edildi. Elde edilen bu örgü sabiti değerleri elektronik, elastik ve titreşim özellikleri hesaplanırken kullanıldı.

Cu_2MnZ ($Z = Al, In, Si, Ge, Ga, Sn, Sb$) Heusler alaşımları için Medea kütüphanesinde bulunan Pseudo-potansiyeller; Yerel Yoğunluk Yaklaşımı (YYY) ve Genelleştirilmiş Gradyent Yaklaşımı (GGY) uygulanarak kullanıldı. Kohn-Sham tek parçacık fonksiyonları bir düzlem dalga seti içinde genişletildi. Kohn-Sham denklemlerinin çözümü kesme enerjisi değerleri alınarak yapıldı. Bu hesaplama Fermi yüzeyine kadar Smearing tekniği ile yapıldı. Smearing parametresi hesaplanırken Methfessel-Paxton metodu kullanıldı. Kesilim enerjisi (E_{cut}), smearing parametresi (σ) ve k-noktaları için en iyi değerler yakınsama sonucu elde edildi. Hesaplanan kesilim enerjisi (E_{cut}), smearing parametresi, k noktaları, örgü parametreleri (a), toplam manyetik moment (μ_T) ve Yığın modülü (B) Çizelge 4.1. 'de verildi.

Çizelge 4.1.' de verilen ve GGY ile hesaplanan (a , M_T ve B) değerlerinin literatürde bulunan mevcut hem deneysel hem de teorik sonuçlarla oldukça uyumlu olduğu görüldü. Hesaplanan örgü sabitleri hem GGY hem de YYY için büyükten küçüğe sıralanması; $a_{Z=Sn} > a_{Z=In} > a_{Z=Ge} > a_{Z=Ga} > a_{Z=Al} > a_{Z=Si}$ şeklindedir. Örgü sabitleri için YYY ile elde edilen değerler, GGY ile elde edilen değerlerden yaklaşık 3 % daha küçük olduğu bulundu. Bu beklenen bir sonuçtur. Çünkü yöntem olarak YYY, örgü parametrelerini deneysel değerlerden küçük hesaplar.

Çizelge 4.1. Kesilim enerjisi (E_{cut}), Smearing parametresi (σ), Örgü sabitleri (a), k-noktaları, Yığın modülleri (B), Toplam manyetik momentler (M_T)

	(Cu ₂ MnZ)	E_{cut} (eV)	Smearing parametresi (σ) (eV)	k nokta	a (Å)	M_T (μ_B)	B (GPa)	
YYY	Cu ₂ MnAl	376,791	0,169	6x6x6	5,755241	3,2020	15,49	
	Cu ₂ MnSi	340,446	0,225	7x7x7	5,677539	3,3961	170,76	
	Cu ₂ MnGe	361,492	0,225	6x6x6	5,815464	3,6596	14,32	
	Cu ₂ MnGa	360,537	0,169	6x6x6	5,761216	3,3771	164,45	
	Cu ₂ MnSn	344,196	0,225	7x7x7	6,038436	3,6249	139,36	
	Cu ₂ MnSb	360,557	0,225	6x6x6	6,102149	3,6367	125,51	
	Cu ₂ MnIn	360,537	0,225	5x5x5	6,002546	3,5131	139,22	
GGY	Cu ₂ MnAl	Bu çalışma	376,696	0,127	7x7x7	5,928606	3,5764	124,24
		XANES [20]				5,957		
		DENEYSEL [3]				5,949	4,12	
		DENEYSEL [5]				5,947		
		FPLAPW-GGA [9]				5,957	3,568	115,64
		DENEYSEL [10]						112
		DENEYSEL [14]				5,621	3,47	
		DENEYSEL [18]				5,95	3,80	
	Cu ₂ MnSi	Bu çalışma	344,196	0,225	8x8x8	5,864956	3,7303	133,60
	Cu ₂ MnGe	Bu çalışma	395,823	0,217	9x9x9	6,005586	3,9944	114,80
	Cu ₂ MnGa	DENEYSEL [3]				Tetragonal c/a = 0,96	2,84	
		Bu çalışma	344,196	0,225	5x5x5	5,953944	3,6176	121,19
		VASP [11]				5,961		118
	Cu ₂ MnSn	VASP [12]				5,96		117,56
		Bu çalışma	360,446	0,169	7x7x7	6,233775	3,8685	101,31
		DENEYSEL [3]				6,173	4,11	
		WIEN2K [15]				6,26	4,11	
		DENEYSEL [17]				6,16		
		DENEYSEL [18]				6,17	4,10	
	Cu ₂ MnSb	XANES [21]				6,166		
		Bu çalışma	360,537	0,225	6x6x6	6,313866	3,9057	96,50
	Cu ₂ MnIn	DENEYSEL [3]				6,096		
		Bu çalışma	344,196	0,225	6x6x6	6,202166	3,7879	106,96
DENEYSEL [3]					6,206	3,95		
DENEYSEL [18]					6,19	4,00		
	XANES[22]				6,217			

Çalışılan malzemelerin toplam manyetizasyon değerlerinin büyükten küçüğe sıralanması; $M_{T(Z=Ge)} > M_{T(Z=Sb)} > M_{T(Z=Sn)} > M_{T(Z=In)} > M_{T(Z=Si)} > M_{T(Z=Ga)} > M_{T(Z=Al)}$ şeklindedir. Ayrıca bu malzemelerdeki her elementin toplam manyetizasyona verdiği katkıyı ayrıntılı bir şekilde görmek üzere Çizelge 4.2’ de GGY ve Çizelge 4.3’ de YYY ile kısmi manyetik momentleri verildi.

Çizelge 4.2. Cu_2MnZ (Z = Al, In, Si, Ge, Ga, Sn, Sb) Heusler alaşımlarının GGY ile kısmi manyetik momentleri

Cu_2MnZ	Element	s	P	d	Toplam
Cu_2MnZ	Cu	-0,020	-0,009	0,083	0,054
	Cu	-0,020	-0,009	0,083	0,054
Cu_2MnAl	Mn	-0,031	-0,024	3,287	3,342
	Al	-0,010	-0,037	0,000	-0,046
Cu_2MnSi	Cu	-0,018	-0,005	0,085	0,062
	Cu	-0,018	-0,005	0,085	0,062
	Mn	0,028	0,026	3,334	3,389
	Si	0,019	-0,028	0,000	-0,010
Cu_2MnGe	Cu	-0,013	-0,004	0,090	0,074
	Cu	-0,013	-0,004	0,090	0,074
	Mn	0,032	0,027	3,492	3,551
	Ge	0,041	-0,028	0,001	0,014
Cu_2MnGa	Cu	-0,020	-0,011	0,080	0,048
	Cu	-0,020	-0,011	0,080	0,048
	Mn	0,032	0,019	3,366	3,417
	Ga	-0,003	-0,056	0,002	-0,058
Cu_2MnSn	Cu	-0,019	-0,007	0,065	0,039
	Cu	-0,019	-0,007	0,065	0,039
	Mn	0,031	0,026	3,495	3,551
	Sn	0,019	-0,043	0,000	-0,025
Cu_2MnSb	Cu	-0,027	-0,006	0,068	0,037
	Cu	-0,027	-0,006	0,068	0,037
	Mn	0,033	0,024	3,494	3,549
	Sb	0,028	-0,019	-0,005	-0,057
Cu_2MnIn	Cu	-0,020	-0,009	0,067	0,054
	Cu	-0,020	-0,009	0,067	0,054
	Mn	-0,034	-0,023	3,493	3,342
	In	-0,005	-0,055	0,003	-0,046

Alaşımlar içinde manyetik özellik belirleyici element genellikle Mn olarak görülmektedir. Bu da dış manyetik alan tarafından alaşımın kristal yapısının ve boyutun değiştirilmesine olanak sağlamaktadır.

Çizelge 4.3. Cu_2MnZ ($Z = Al, In, Si, Ge, Ga, Sn, Sb$) Heusler alaşımlarının YYY ile kısmi manyetik momentleri

Cu_2MnZ	Element	s	P	d	Toplam
Cu_2MnAl	Cu	-0,018	-0,009	0,082	0,055
	Mn	0,024	0,018	2,932	2,975
Cu_2MnSi	Cu	-0,015	-0,002	0,080	0,063
	Cu	-0,015	-0,002	0,080	0,063
	Mn	0,023	0,024	3,014	3,061
	Si	0,013	-0,027	0,002	-0,012
Cu_2MnGe	Cu	-0,018	-0,006	0,087	0,064
	Cu	-0,018	-0,006	0,087	0,064
	Mn	0,025	0,018	3,061	3,105
	Ge	-0,004	-0,042	0,003	-0,042
Cu_2MnGa	Cu	-0,020	-0,011	0,080	0,048
	Cu	-0,020	-0,011	0,080	0,048
	Mn	0,032	0,019	3,366	3,417
	Ga	-0,003	-0,056	0,002	-0,058
Cu_2MnSn	Cu	-0,016	-0,003	0,068	0,048
	Cu	-0,016	-0,003	0,068	0,048
	Mn	0,026	0,024	3,227	3,276
	Sn	0,016	-0,038	0,002	0,002
Cu_2MnSb	Cu	-0,022	-0,003	0,062	0,037
	Cu	-0,022	-0,003	0,062	0,037
	Mn	0,020	0,024	3,222	3,266
	Sb	0,025	-0,010	-0,004	0,011
Cu_2MnIn	Cu	-0,018	-0,007	0,074	0,049
	Cu	-0,018	-0,007	0,074	0,049
	Mn	0,029	0,018	3,198	3,245
	In	-0,004	-0,053	0,006	-0,051

4.2. Cu_2MnZ ($Z = Al, In, Si, Ge, Ga, Sn, Sb$) Heusler Alaşımlarının Elektronik Özellikleri

Cu_2MnZ ($Z = Al, In, Si, Ge, Ga, Sn, Sb$) Heusler alaşımlarının $L2_1$ fazında hesaplanan elektronik bant yapısı ve toplam durum yoğunluğu eğrileri yüksek simetri yönlerine göre spin yukarı ve spin aşağı yöneliminde çizdirildi. Kısmi durum yoğunluğu eğrileri elektronik bant yapısının daha iyi analiz edilmesi için çizdirildi. Cu_2MnZ ($Z = Al, In, Si, Ge, Ga, Sn, Sb$) için YYY ile elde edilen sonuçlar sırasıyla Şekil 4.1, 4.2, 4.3, 4.4, 4.5, 4.6, 4.7 ve GGY ile elde edilen sonuçlarda Şekil 4.8, 4.9, 4.10, 4.11, 4.12, 4.13, 4.14' de

verildi. Elektronik bant yapısı şekillerindeki kırmızı renkli eğriler spin aşağı, mavi renkli eğriler spin yukarı durumları göstermektedir. Ayrıca toplam ve kısmi durum yoğunluğu eğrilerindeki sol taraf spin aşağı, sağ taraf ise spin yukarı yönelimleri göstermektedir. Şekillerde Fermi Enerjisi değerleri tüm enerji değerlerinden çıkartılarak Fermi enerji seviyesi sıfır olarak alındı. L2₁ fazında çalışılan alaşımlara ait bu Fermi enerjileri Çizelge 4.4' de verildi.

Çizelge 4.4. Cu₂MnZ (Z = Al, In, Si, Ge, Ga, Sn, Sb) Heusler alaşımlarının Fermi enerjileri

	<i>Alaşım</i>	<i>E_F (Fermi Enerjisi) (eV)</i>
<i>GGY</i>	<i>Cu₂MnAl</i>	<i>8,3155</i>
	<i>Cu₂MnSi</i>	<i>9,3763</i>
	<i>Cu₂MnGe</i>	<i>8,4556</i>
	<i>Cu₂MnGa</i>	<i>8,0314</i>
	<i>Cu₂MnSn</i>	<i>9,2396</i>
	<i>Cu₂MnSb</i>	<i>9,2354</i>
	<i>Cu₂MnIn</i>	<i>8,5984</i>
	<i>YYY</i>	<i>Cu₂MnAl</i>
<i>Cu₂Mn Si</i>		<i>10,3626</i>
<i>Cu₂MnGe</i>		<i>9,4269</i>
<i>Cu₂MnGa</i>		<i>8,9462</i>
<i>Cu₂MnSn</i>		<i>10,1967</i>
<i>Cu₂MnSb</i>		<i>10,3952</i>
<i>Cu₂MnIn</i>		<i>9,5962</i>

İncelenen bu alaşımların spin yönelimlerine bakıldığında elektronik bant, toplam ve kısmi durum yoğunluğu eğrilerinden bu malzemelerin spin-aşağı ve spin-yukarı yönelimlerinin simetrik olmadığı ve bundan dolayı net bir manyetik momente sahip oldukları açıkça görülmektedir.

Elektronik bant yapısı şekillerinden spin aşağı ve spin yukarı durumlarda iletkenlik bandındaki eğrilerin Fermi seviyesini kestikleri ve toplam durum yoğunluğu şekillerinden de spin aşağı ve spin yukarı durumlarda sonlu bir Fermi enerjisi ($n(E_F)$) sahip olduğu görüldüğünden, çalışılan tüm malzemelerin metalik karakter gösterdiği sonucuna varıldı.

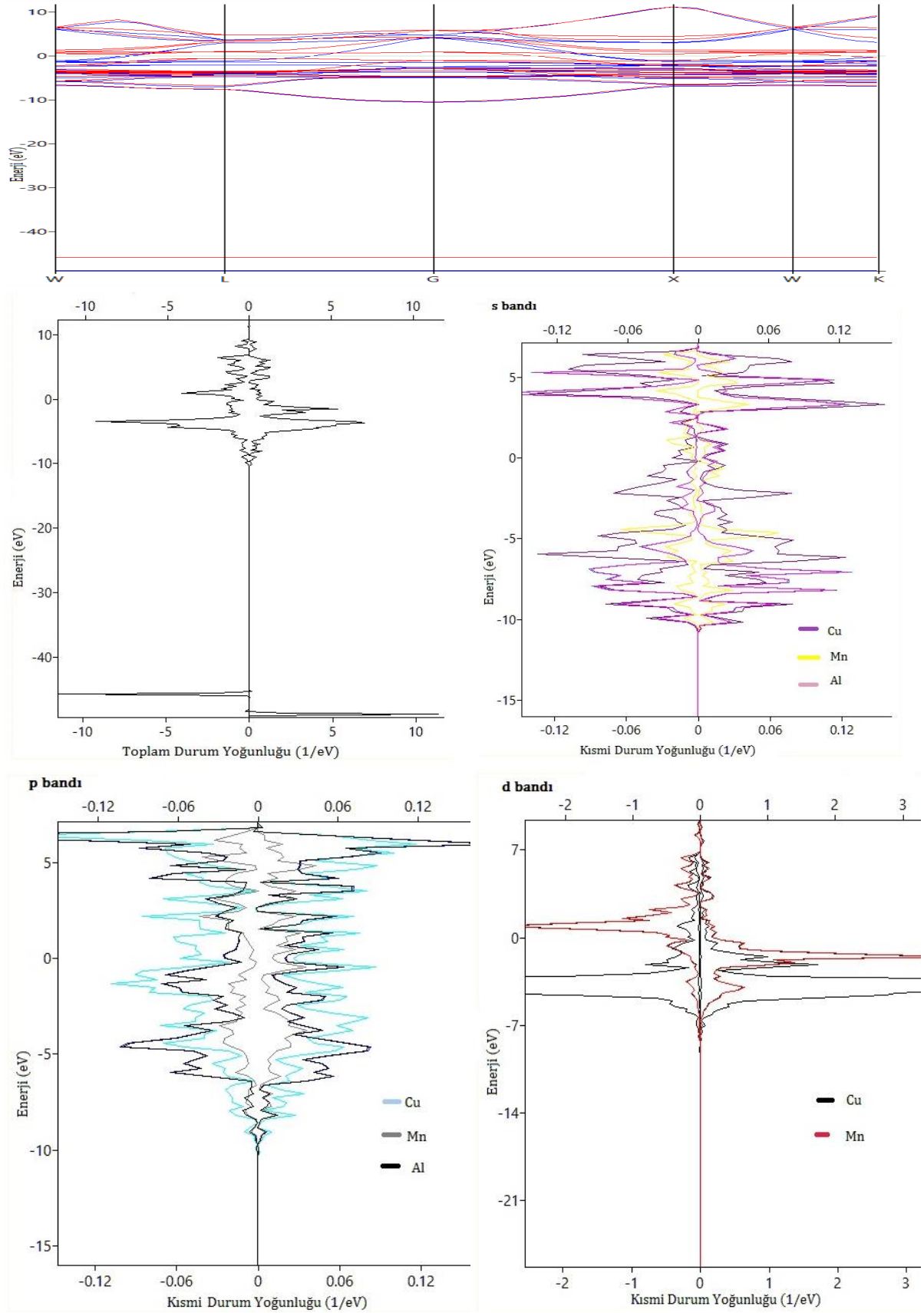
Spin aşağı ve spin yukarı durumlarda hem GGY hem de YYY elektronik bant yapı grafiklerinde Fermi seviyesinin altında -40eV ile -50eV aralığında hemen hemen bandın uzandığını ve bunun toplam durum yoğunluğu eğrilerinde keskin ve büyük bir tepe verdiği

görülmektedir. Kısmi durum yoğunluğu eğrilerine bakıldığında tüm malzemeler için Mn elementinin “p” bandındaki elektronlardan kaynaklandığı görülmektedir.

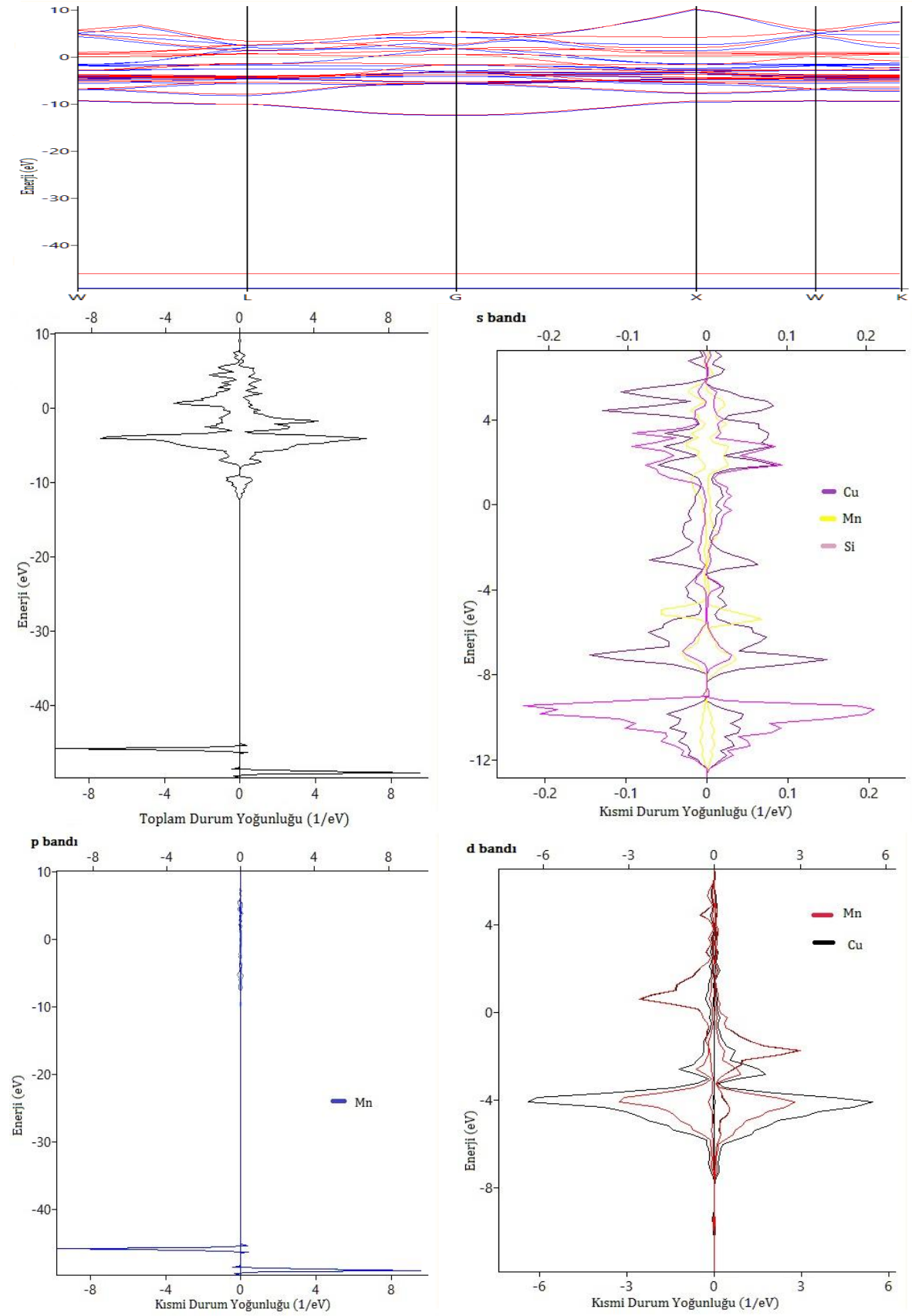
Cu elementinin “d” bandı elektronları hem spin aşağı hem de spin yukarı durumları için -2eV ile -6eV bölgesinde toplam durum yoğunluğuna büyük katkılar verirken, Mn “d” elektronları spin yukarı durumlar için valans bandında -2eV civarında önemli rol oynamaktadır.

Ayrıca Fermi seviyesinin üstünde 3eV’a kadar olan bölgede yine Mn “d” elektronları spin aşağı durumlar için çok etkili olmaktadır. Valans bandındaki -12eV ile -7eV arasında kalan bölgede daha çok Z=Al, Si, Ge, Ga, In, Sn ve Sb elementlerinin “s” bandı elektronları ile aynı zamanda daha az Cu ve Mn elementinin “s” bandı elektronları toplam durum yoğunluğuna katkıda bulunmaktadır.

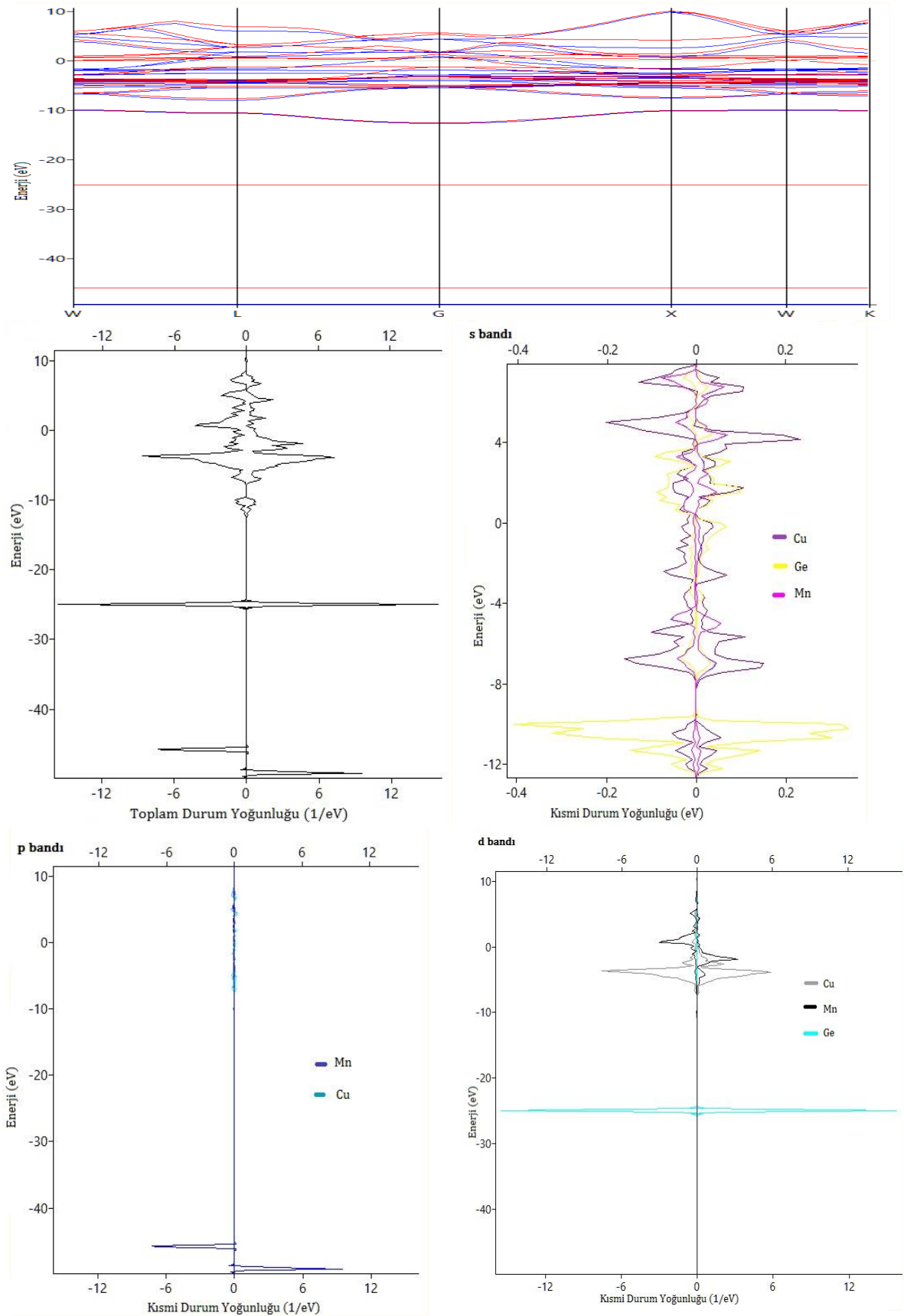
Spin aşağı durumlar için Fermi seviyesinde toplam durum yoğunluğu değerleri ($n(E_F)$), spin yukarı durumlara göre daha yüksektir ve Cu ile Mn “d” elektronlarından gelmektedir. Spin aşağı ve spin yukarı durumlarda her iki yaklaşımda (YYY ve GGY) Cu_2MnGe için -25eV, Cu_2MnGa için -15eV, Cu_2MnIn için -14eV ve Cu_2MnSn için -22eV civarında Z=Ge, Ga, In ve Sn elementlerinin “d” orbitallerinin elektronları toplam durum yoğunluğu eğrilerinde büyük tepeler vermektedir. Elde edilen sonuçların literatürde yer alan teorik sonuçlarla uyumlu olduğu görüldü [9-15,18].



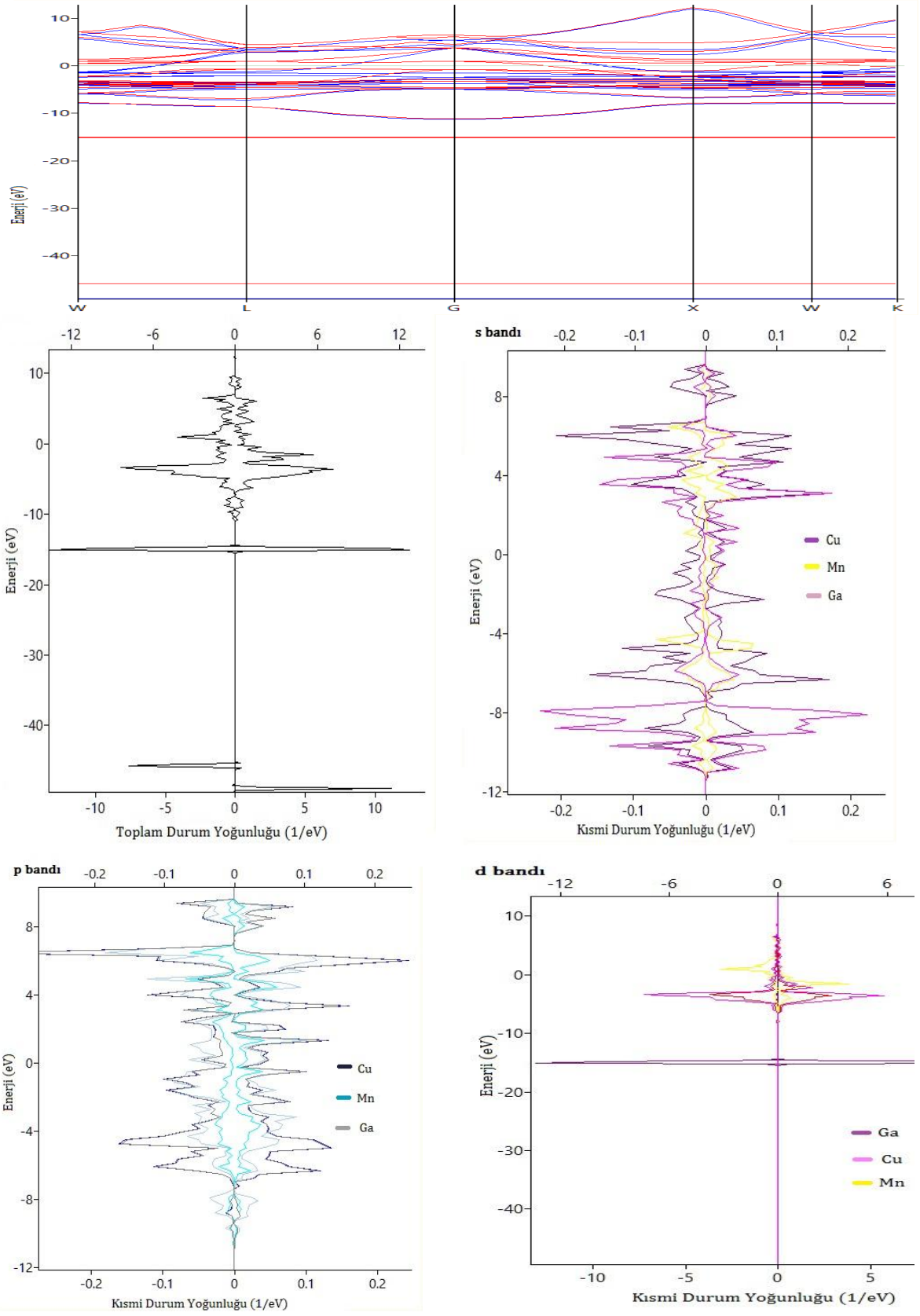
Şekil 4.1. Cu_2MnAl Heusler alaşımının YYY ile elektronik bant yapısı ve durum yoğunluğu



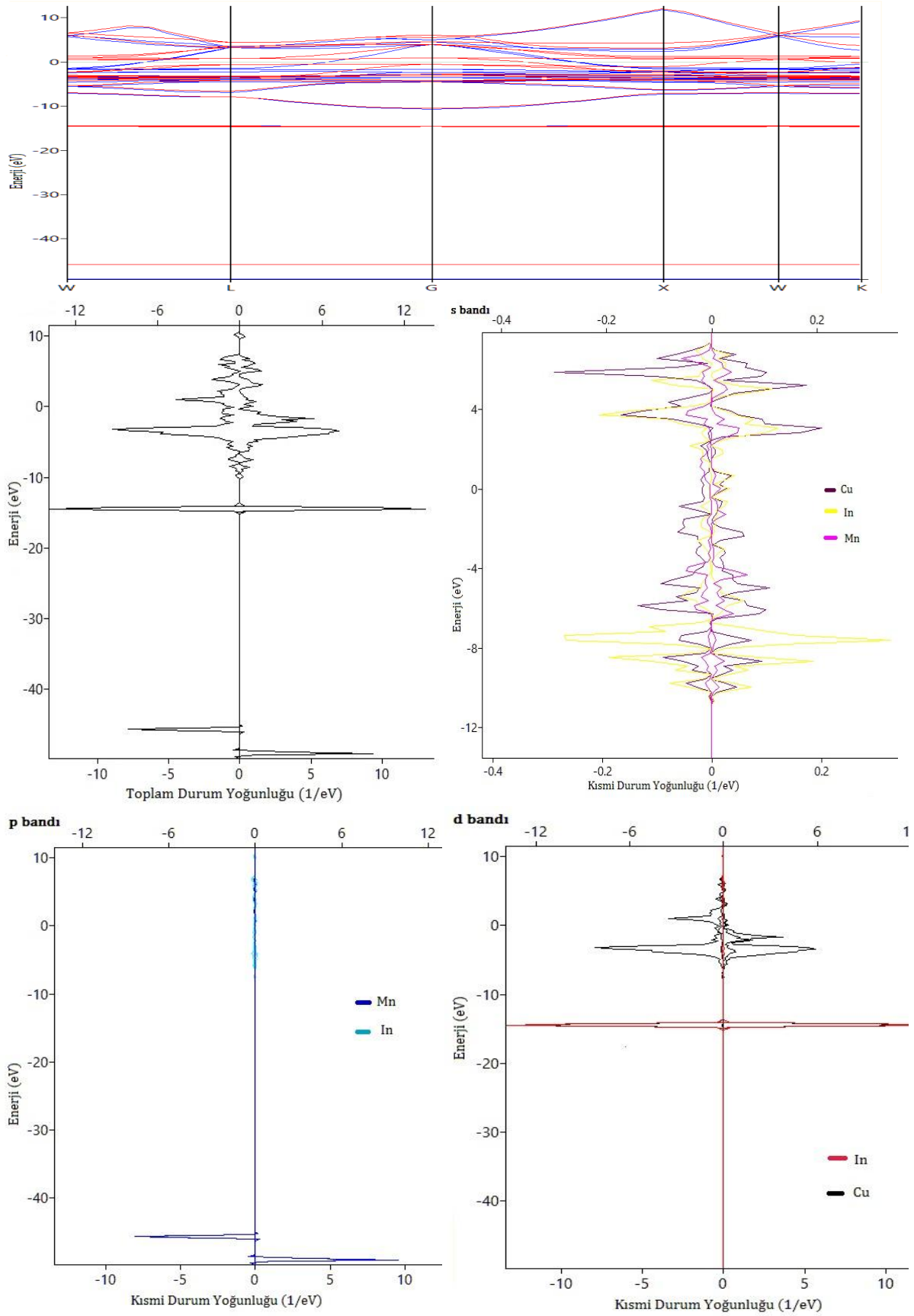
Şekil 4.2. Cu_2MnSi Heusler alaşımının YYY ile elektronik bant yapısı ve durum yoğunluğu



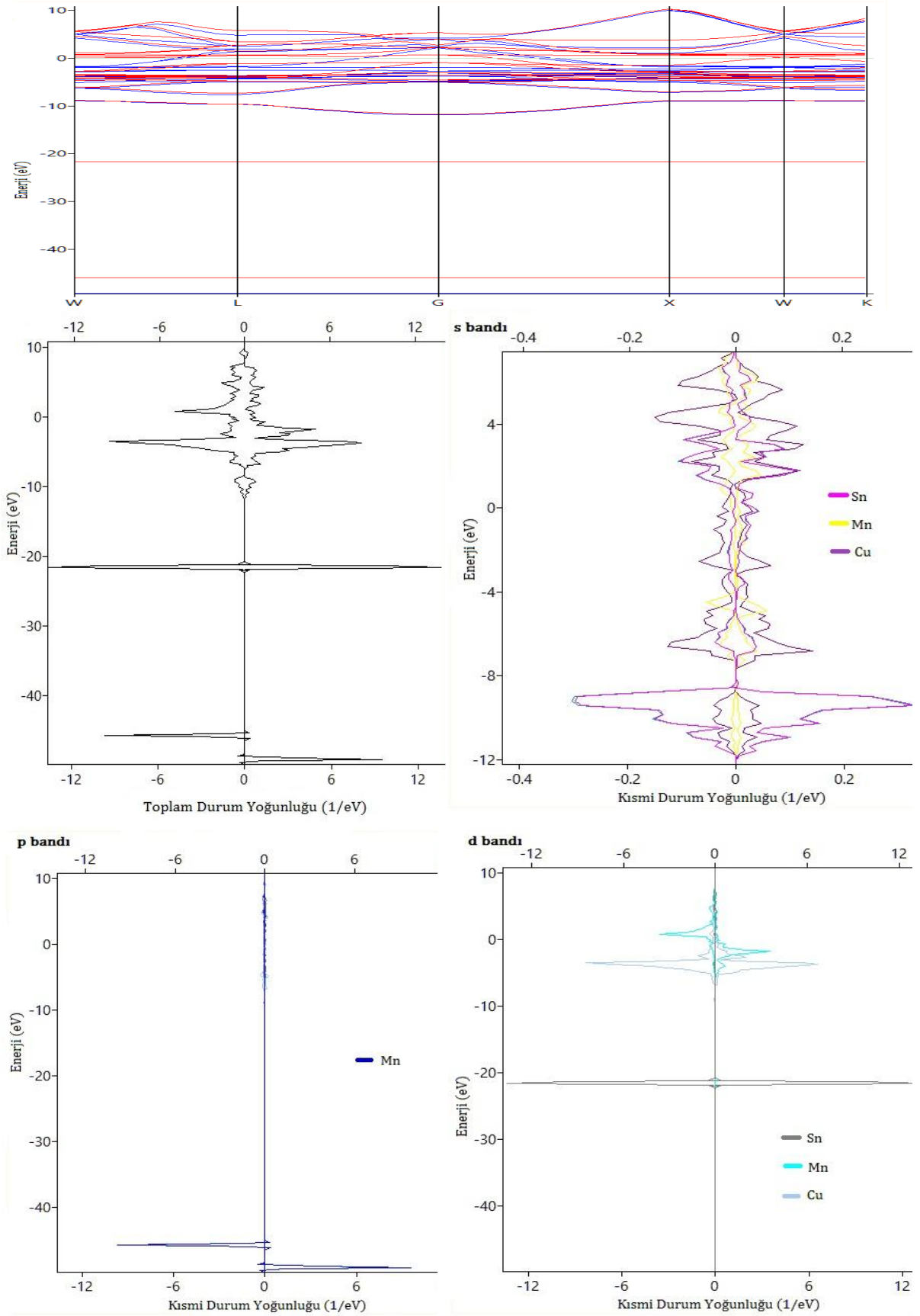
Şekil 4.3. Cu_2MnGe Heusler alaşımının YYY ile elektronik bant yapısı ve durum yoğunluğu



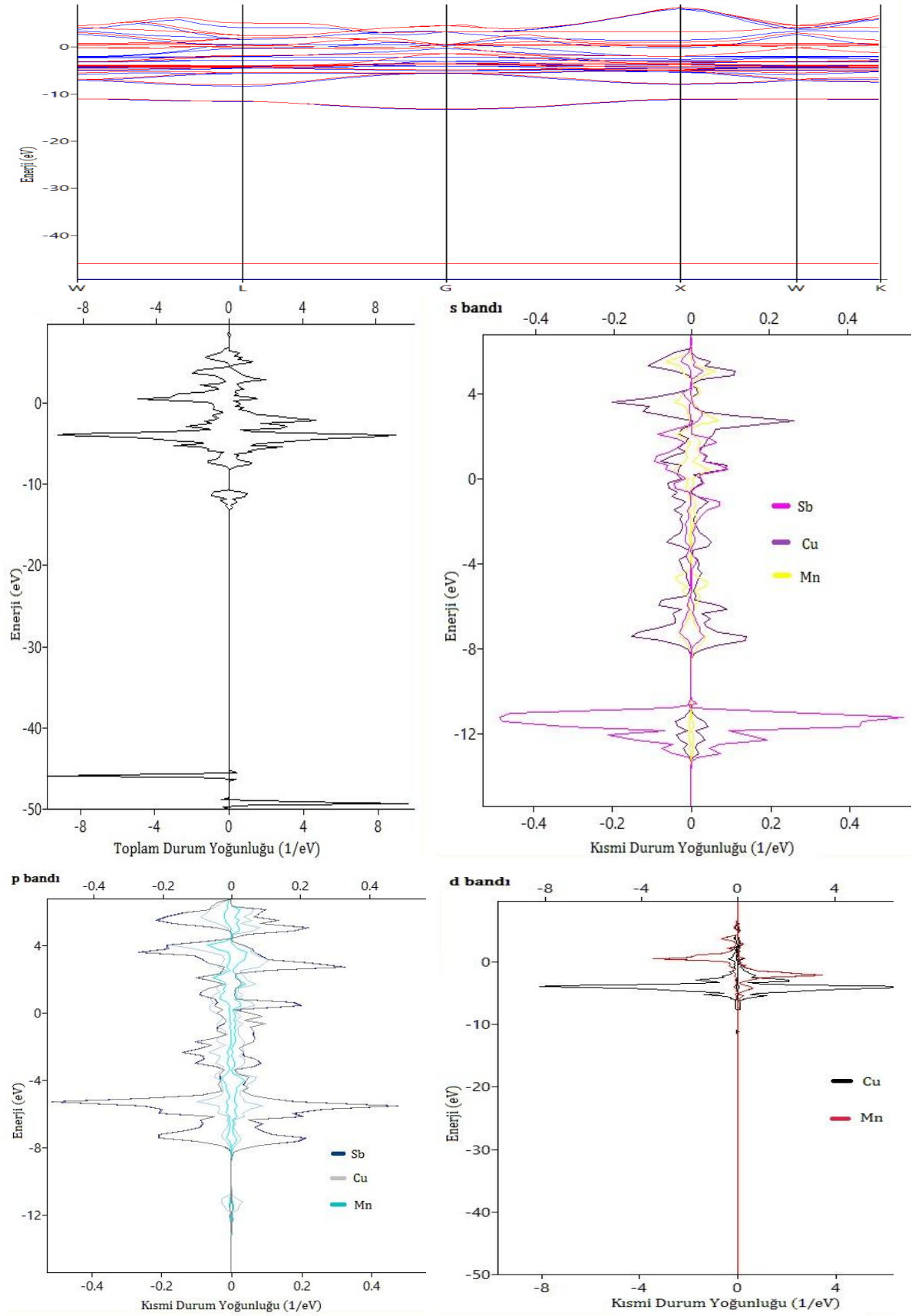
Şekil 4.4. Cu_2MnGa Heusler alaşımının YYY ile elektronik bant yapısı ve durum yoğunluğu



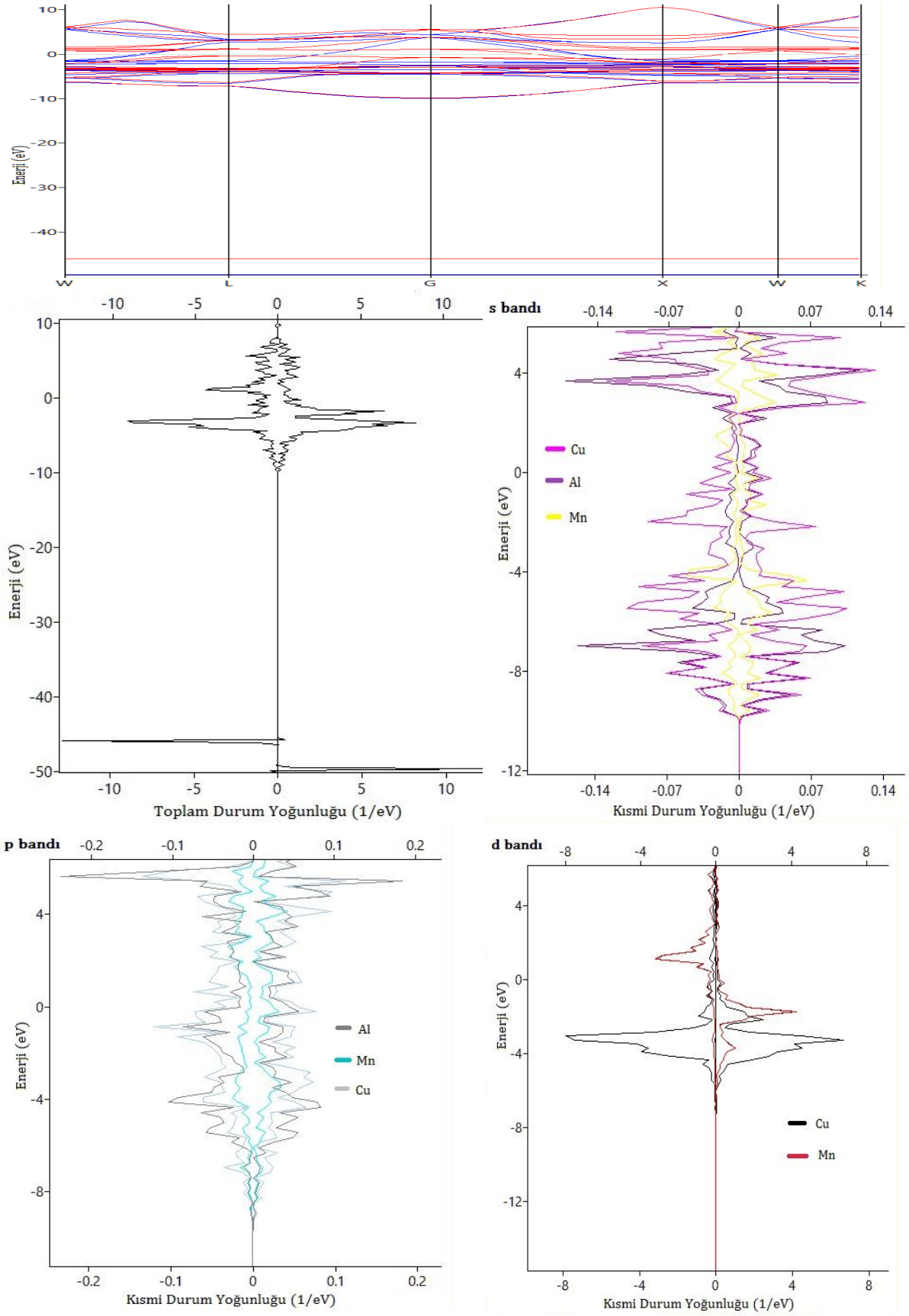
Şekil 4.5. Cu_2MnIn Heusler alaşımının YYY ile elektronik bant yapısı ve durum yoğunluğu



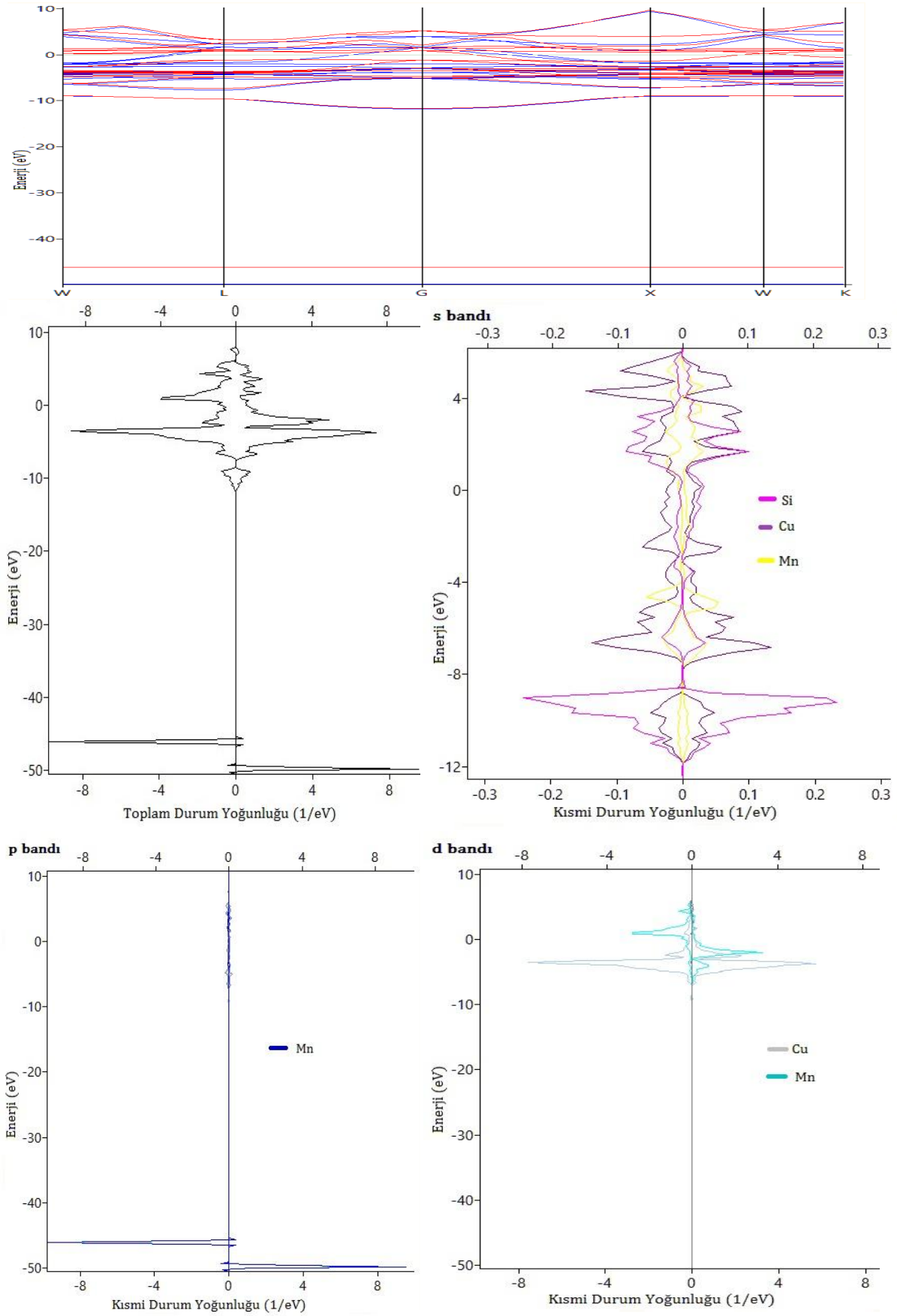
Şekil 4.6. Cu_2MnSn Heusler alaşımlının YYY ile elektronik bant yapısı ve durum yoğunluğu



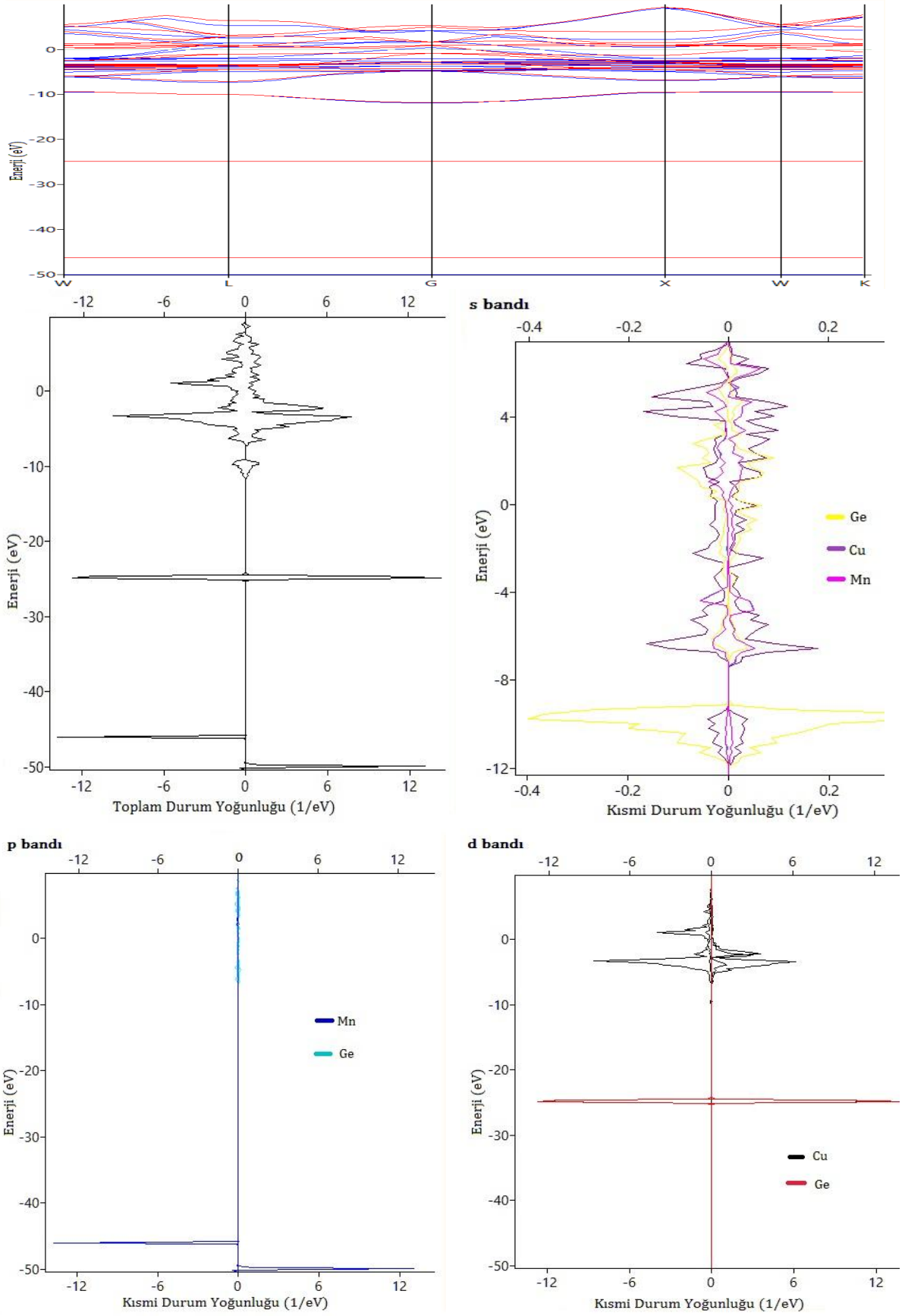
Şekil 4.7. Cu_2MnSb Heusler alaşımının YYY ile elektronik bant yapısı ve durum yoğunluğu



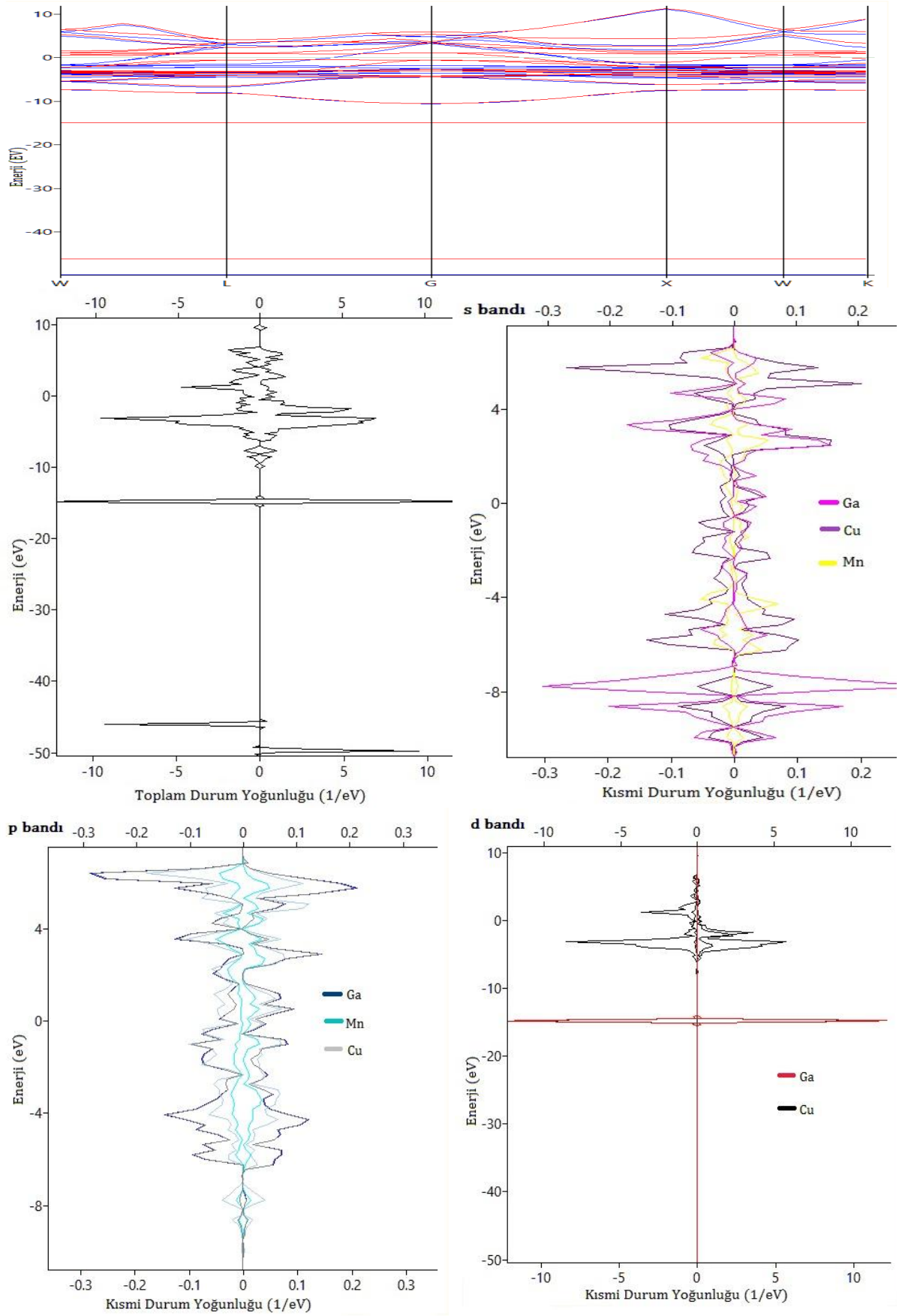
Şekil 4.8. Cu_2MnAl Heusler alaşımının GGY ile elektronik bant yapısı ve durum yoğunluğu



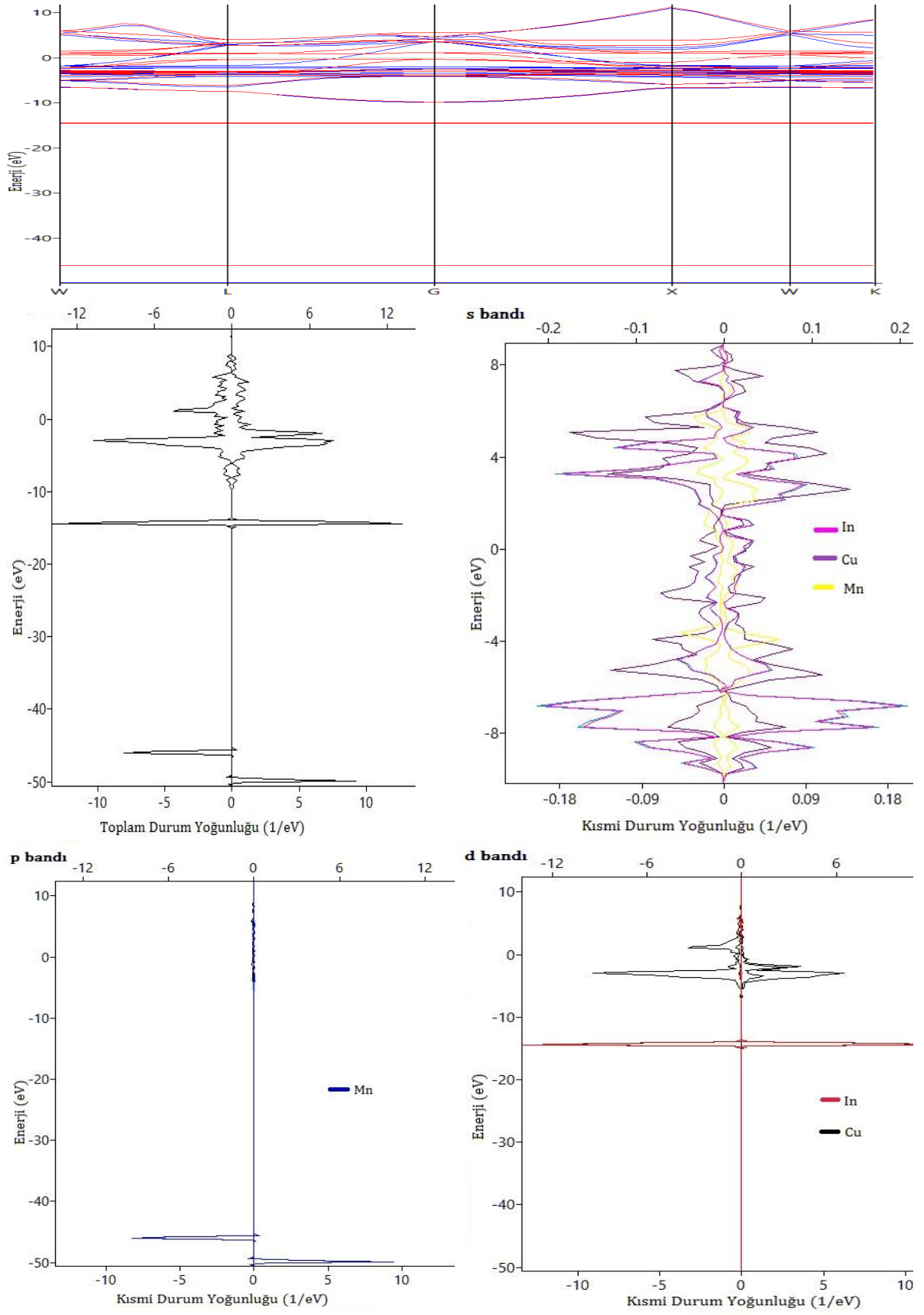
Şekil 4.9. Cu_2MnSi Heusler alaşımasının GGY ile elektronik bant yapısı ve durum yoğunluğu



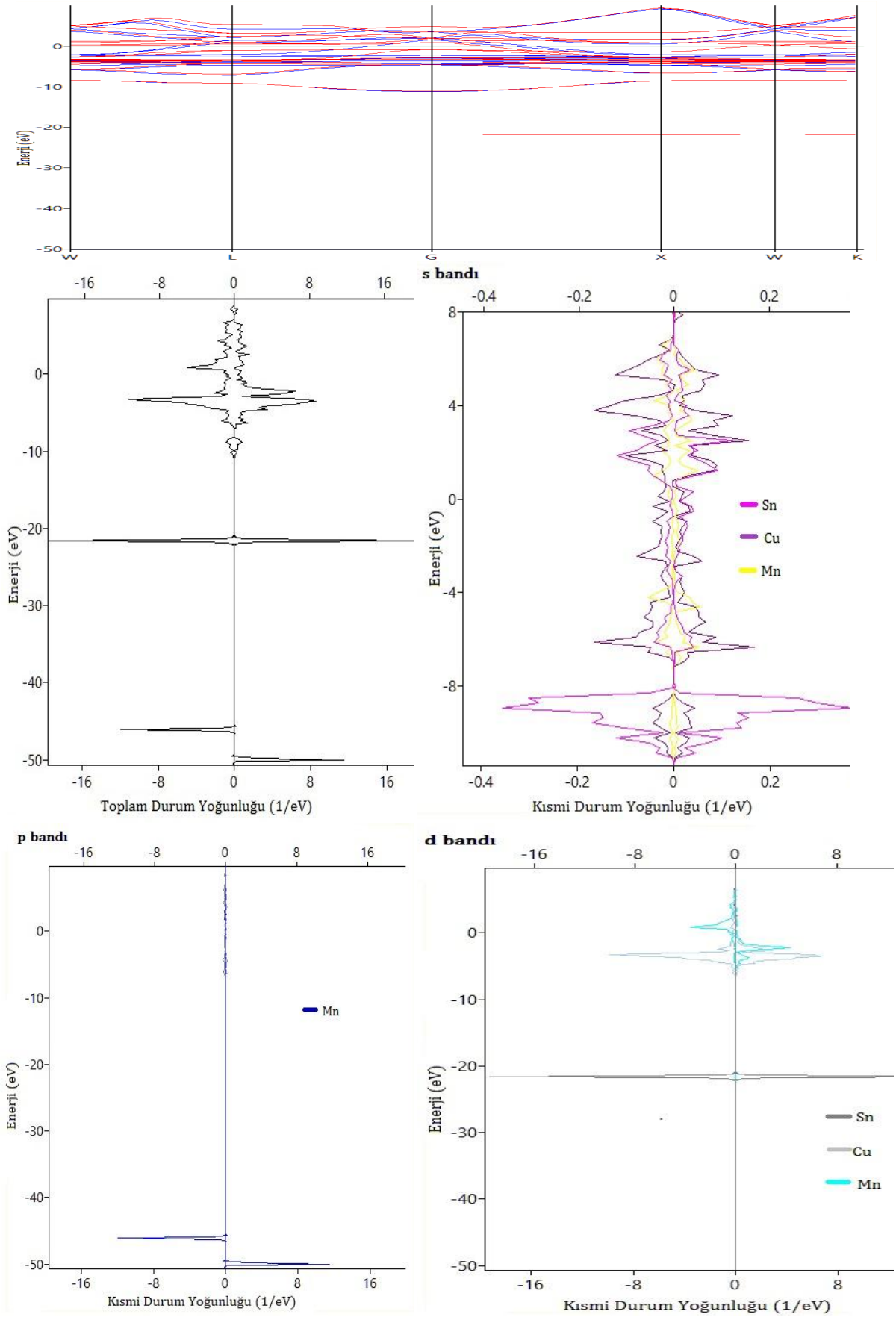
Şekil 4.10. Cu_2MnGe Heusler alaşımının GGY ile elektronik bant yapısı ve durum yoğunluğu



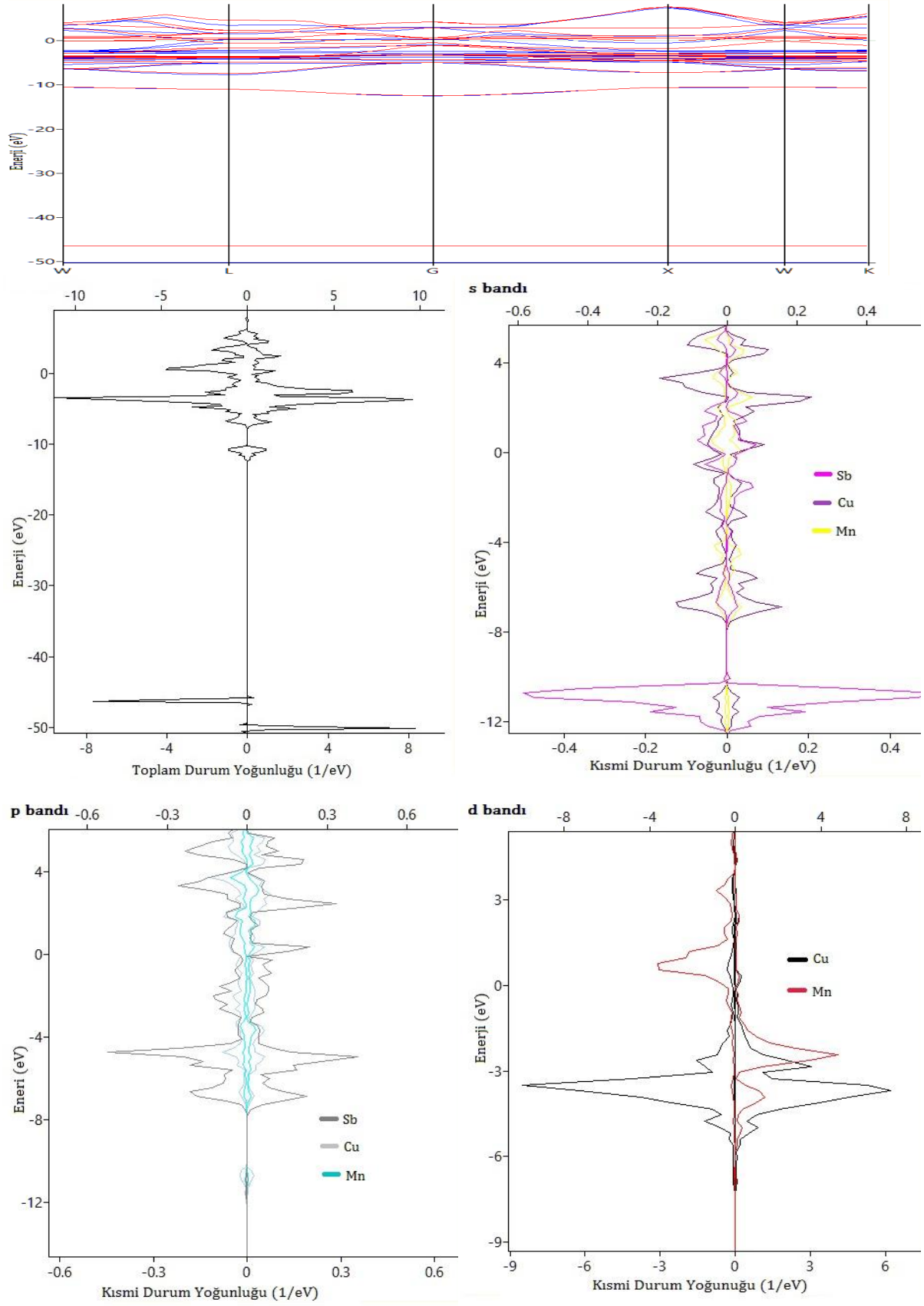
Şekil 4.11. Cu_2MnGa Heusler alaşımının GGY ile elektronik bant yapısı ve durum yoğunluğu



Şekil 4.12. Cu_2MnIn Heusler alaşımının GGY ile elektronik bant yapısı ve durum yoğunluğu



Şekil 4.13. Cu_2MnSn Heusler alaşımının GGY ile elektronik bant yapısı ve durum yoğunluğu



Şekil 4.14. Cu_2MnSb Heusler alaşımının GGY ile elektronik bant yapısı ve durum yoğunluğu

4.3. Elastik Sabitler

Bir katı maddenin elastik sabitleri, o kristal için mekaniksel ve dinamiksel özellikleri arasında bağlantı kurar. Ayrıca o kristalin sertlik ve kararlılığı hakkında önemli bilgiler içerir.

Kübik kristaller için 3 tane bağımsız ikinci dereceden elastik sabiti vardır. Bunlar C_{11} , C_{12} ve C_{44} ' dır. Cu_2MnZ ($Z = \text{Al, In, Si, Ge, Ga, Sn, Sb}$) Heusler alaşımlarının Shear modülü (C'); Eş. 2.85, Young modülü (E); Eş. 2.89 ve ikinci derece elastik sabitleri C_{11} , C_{12} ve C_{44} ise Eş. 2.81, 2.82, 2.83, 2.84 ve 2.85 yardımıyla hesaplandı. Hesaplanan bu değerler hem YYY hem de GGY için Çizelge 4.5' de verildi. YYY ile literatürde benzer çalışmaya rastlanmadığından karşılaştırılmadı. GGY ile elde edilen sonuçlar diğer bir teorik çalışma olan [9] Cu_2MnAl alaşımının C_{44} değeri hariç diğer teorik sonuçlarla oldukça uyumlu bulundu. Gerçekte Rai ve arkadaşlarının [9] hesapladığı bu sonucun hatalı olduğunu Jalilian [10] yazdığı makalede belirtmiştir. Çizelge 4.5' de verilen ve YYY ile elde edilen tüm değerlerin, GGY ile elde edilen değerlerden daha büyük olduğu görülmektedir. YYY ile elde edilen örgü sabiti değerleri, GGY 'ye oranla küçük olduğu için böyle bir sonucun elde edilmesi doğaldır.

Young modülü (E), sertliğin bir ölçüsüdür. Büyük E değerleri malzemenin sert olduğunu gösterir. Young modülüne göre sertlik sıralaması,

$$E(\text{Cu}_2\text{MnAl}) > E(\text{Cu}_2\text{MnGa}) > E(\text{Cu}_2\text{MnIn}) > E(\text{Cu}_2\text{MnSi}) > E(\text{Cu}_2\text{MnSn}) > E(\text{Cu}_2\text{MnGe}) > E(\text{Cu}_2\text{MnSb})$$

şeklindedir.

Çalışılan malzemeler arasında elastik sabitlerden elde edilen hem YYY hem de GGY sonuçlarına göre Cu_2MnZ ($Z=\text{Al, Ga, In ve Sn}$) alaşımlarının Born kararlılık kriterlerini [60] sağladığı ve mekaniksel olarak kararlı olduğu, Cu_2MnZ ($Z=\text{Si, Ge ve Sb}$) alaşımlarının ise bu şartları sağlamadığından kararsız olduğu sonucuna varıldı.

Çizelge 4.5. Elastik sabitler

Cu ₂ MnZ			C' (GPa)	E (GPa)	Elastik sabitler (GPa)		
					C ₁₁	C ₁₂	C ₄₄
YYY	Cu ₂ MnAl	Bu çalışma	82,85	210,65	170,13	145,17	129,76
	Cu ₂ MnSi		60,76	162,95	162,48	174,90	105,41
	Cu ₂ MnGe		48,29	130,59	137,52	152,22	85,38
	Cu ₂ MnGa		72,13	188,79	169,35	162,01	117,77
	Cu ₂ MnSn		51,20	136,85	142,35	137,86	83,84
	Cu ₂ MnSb		21,56	61,18	103,65	136,43	46,87
	Cu ₂ MnIn		63,51	165,38	149,53	134,06	100,69
GGY	Cu ₂ MnAl	Bu çalışma	67,06	170,50	137,2	117,75	105,28
		FPLAPW [9]	16,54	237,76	137,68	104,614	460,41
		FPLAPW [10]	11	237	137	115	112
	Cu ₂ MnSi	Bu çalışma	52,08	138,27	128,33	136,24	89,43
	Cu ₂ MnGe	Bu çalışma	38,18	103,12	110,64	116,88	65,72
	Cu ₂ MnGa	Bu çalışma	54,99	143,30	124,49	119,55	90
		VASP [12]	53,65		117,49	117,60	89,45
	Cu ₂ MnSn	Bu çalışma	40,24	106,60	105,93	99,00	64,75
		WIEN2K [15]			102,03	91,71	66,81
	Cu ₂ MnSb	Bu çalışma	12,73	36,58	80,38	104,56	29,27
Cu ₂ MnIn	Bu çalışma	49,20	127,98	114,45	103,22	78,26	

4.4. Fononların Dağılım Eğrileri

Yüzey merkezli L21 yapıdaki Cu₂MnZ (Z=Al, Si, Ge, Ga, In, Sn ve Sb) Heusler alaşımlarının birim hücresinde dört tane atom bulunur ve serbestlik derecesi 3N olduğundan toplam on iki tane fonon modu vardır. Bunlardan üçü akustik dokuzu ise optik moda sahiptir. Ancak L-G yönünde dejenerelikten dolayı toplam mod sayısı 8'dir. Bu çalışmadaki Heusler alaşımlarının Birinci Brillouin bölgesinde yüksek simetri yönleri boyunca fonon frekansları iki farklı yaklaşımla hesaplandı. Cu₂MnZ (Z=Al, Si, Ge, Ga, In, Sn ve Sb) alaşımlarının YYY ile hesaplanan fonon dağılım eğrileri Şekil 4.15 – 4.21, GGY ile hesaplanan fonon dağılım eğrileri ise Şekil 4.22 – 4.28' de çizdirildi.

Bu şekillerden her iki yaklaşımda da Cu₂MnAl ve Cu₂MnIn alaşımlarının tüm simetri yönleri boyunca pozitif fonon frekanslarına sahip ve dinamik olarak kararlı olduğu anlaşılmaktadır. Cu₂MnSi ve Cu₂MnGe alaşımlarının sadece L-G simetri yönleri boyunca pozitif frekans, diğer yönlerde ise negatif frekans değerleri göstermesi yüzünden dinamik olarak kararsız bir yapıya sahip olduğu söylenebilir. Cu₂MnGa alaşımı ise sadece W-K

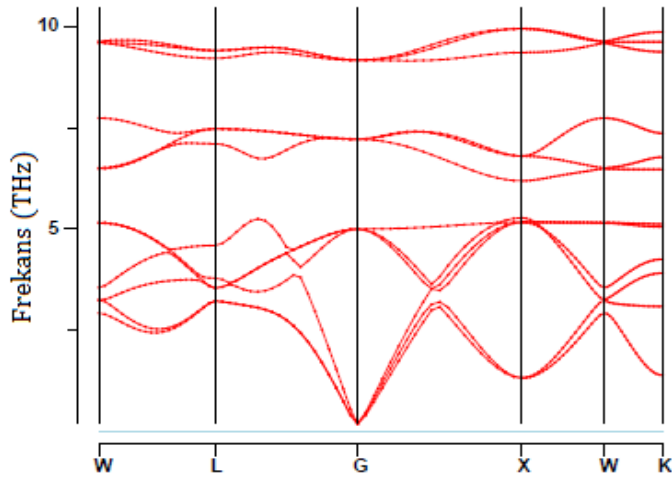
yönünde ve K' ya yakın yerlerde negatif fonon değerlerine sahiptir. Bu yüzden Cu_2MnGa alaşımı da dinamik olarak kararsızdır.

Cu_2MnSn ve Cu_2MnSb alaşımları ise hemen hemen tüm simetri yönleri boyunca negatif frekans değerleri gösterdiğinden, dinamik olarak kararsızdır. Cu_2MnAl ve Cu_2MnIn alaşımları için Born kararlılık kriterlerine göre mekanik olarak kararlı oldukları önceki kısımda bulunmuştur. O halde bu iki alaşım için hem mekanik hem de dinamik olarak kararlı oldukları açıktır. Cu_2MnGa ve Cu_2MnSn alaşımları mekanik olarak kararlı olmalarına rağmen bu çalışmada her ikisi de dinamik olarak kararsız bulundu.

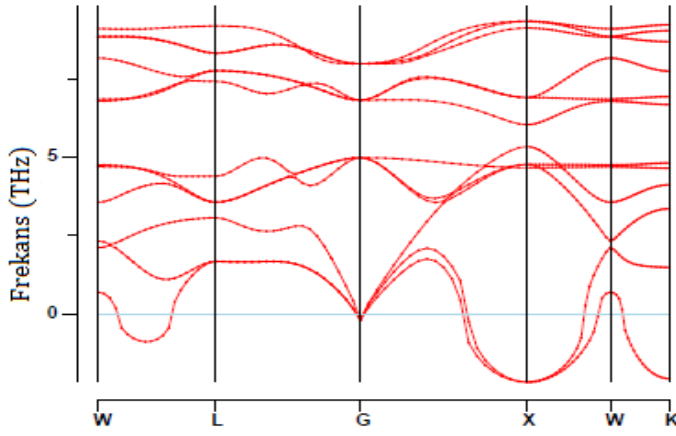
Cu_2MnSi , Cu_2MnGe ve Cu_2MnSb alaşımları ise hem mekanik hem de dinamik olarak kararsızdır. Ayrıca Al ve Si atomlarının kütleleri Cu ve Mn atomlarının kütleleri ile kıyaslandığında oldukça küçük olduğundan, optik fonon frekanslarının en üst bölgesinde titreşen bu atomların (Al ve Si) diğer optik frekanslarından ayrı ve oldukça düz eğriler verdiği Şekil 4.15, 4.16, 4.22 ve 4.23' te açıkça görülmektedir.

L_{21} yapıdaki bu Heusler alaşımlarının Brillouin bölge merkezindeki (G) optik fonon frekansları YYY (GGY) için;

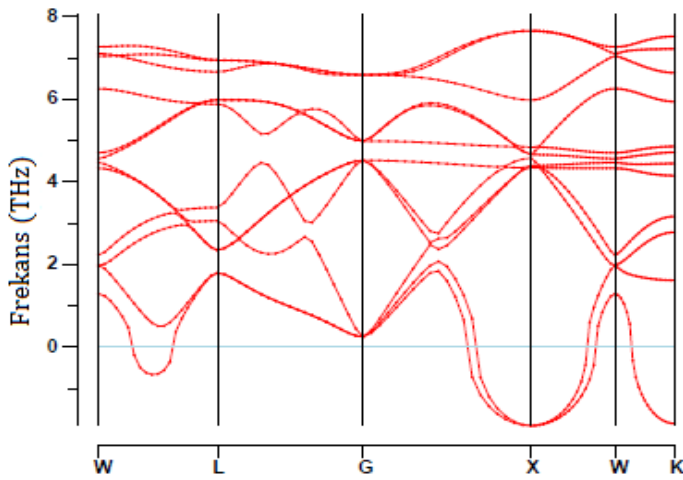
Cu_2MnAl ' da 5,01 (4,47) THz, 7,22 (6,58) THz ve 9,18 (8,23) THz
 Cu_2MnSi ' de 4,99 (4,51) THz, 6,82 (6,30) THz ve 7,99 (7,08) THz
 Cu_2MnGe ' de 4,52 (4,00) THz, 4,99 (4,52) THz ve 6,59 (5,93) THz
 Cu_2MnGa ' da 4,98 (4,37) THz, 5,72 (5,01) THz ve 7,27 (6,44) THz
 Cu_2MnIn ' da 4,51 (4,97) THz, 5,37 (4,76) THz ve 6,30 (5,65) THz
 Cu_2MnSn ' da 4,31 (3,85) THz, 4,99 (4,54) THz ve 5,92 (5,29) THz
 Cu_2MnSb ' da 3,62 (2,97) THz, 3,82 (3,26) THz ve 5,17 (4,44) THz
 dir.



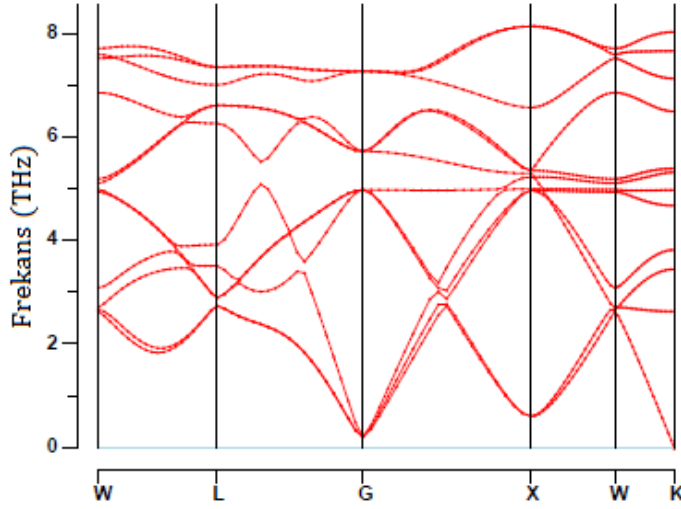
Şekil 4.15. Cu_2MnAl Heusler alaşıminın YYY ile fonon dağılım eğrisi



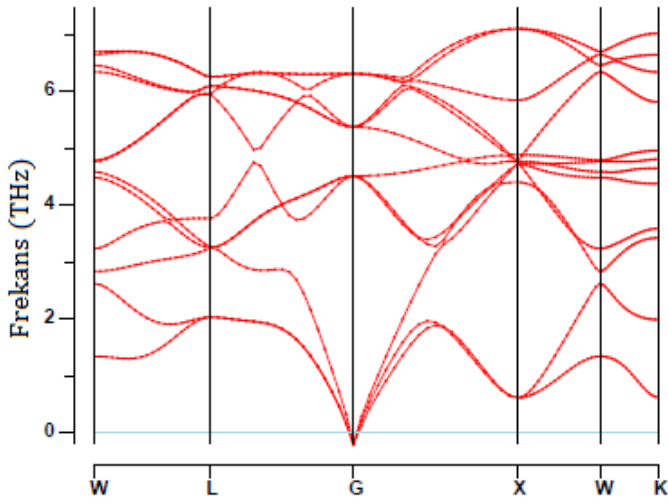
Şekil 4.16. Cu_2MnSi Heusler alaşıminın YYY ile fonon dağılım eğrisi



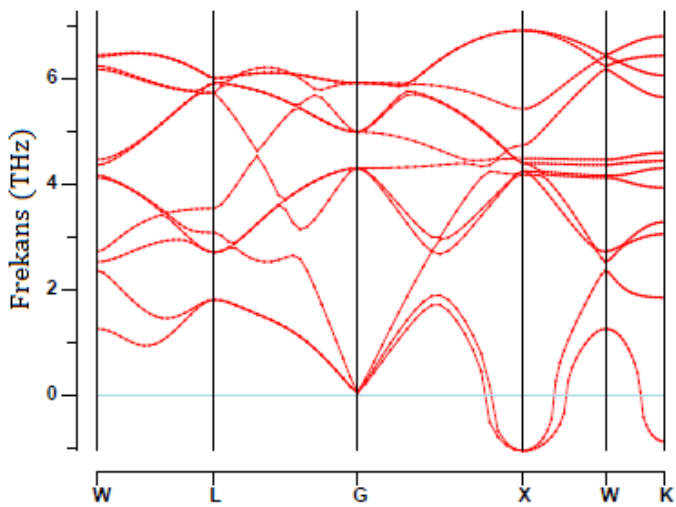
Şekil 4.17. Cu_2MnGe Heusler alaşıminın YYY ile fonon dağılım eğrisi



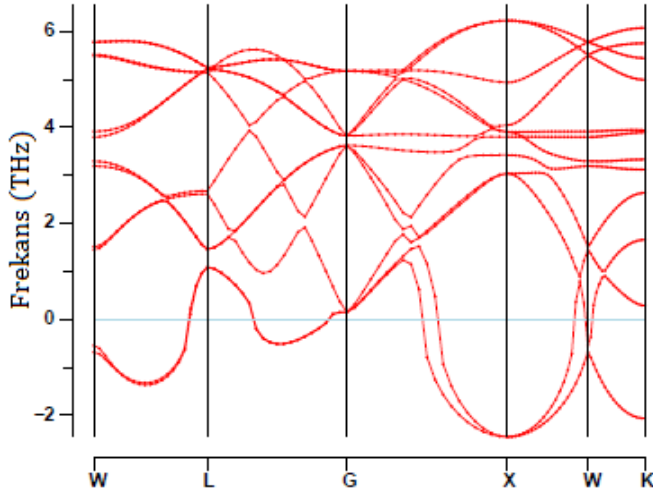
Şekil 4.18. Cu_2MnGa Heusler alaşımının YYY ile fonon dağılımı eğrisi



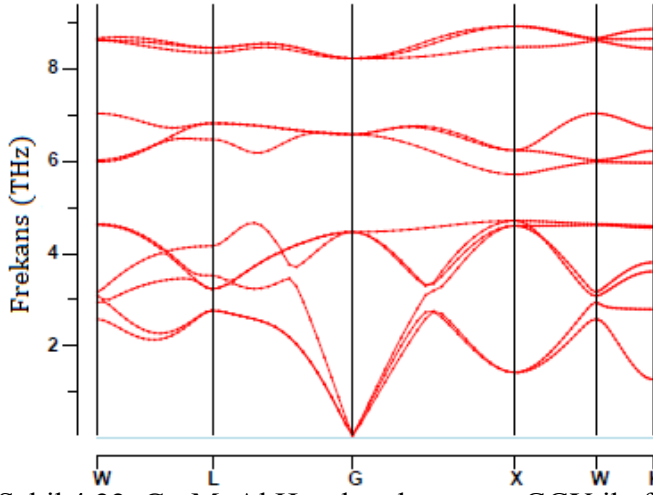
Şekil 4.19. Cu_2MnIn Heusler alaşımının YYY ile fonon dağılımı eğrisi



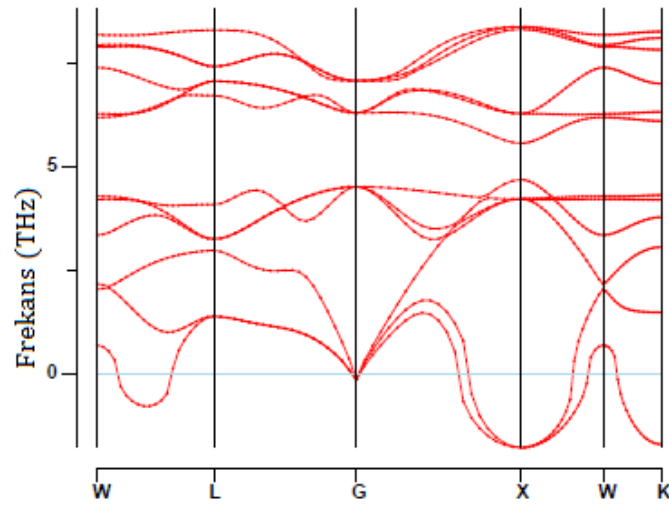
Şekil 4.20. Cu_2MnSn Heusler alaşımının YYY ile fonon dağılımı eğrisi



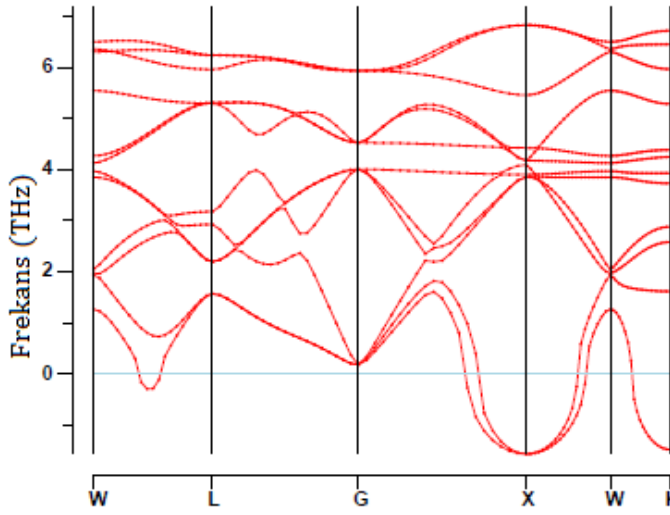
Şekil 4.21. Cu_2MnSb Heusler alaşımının YYY ile fonon dağılım eğrisi



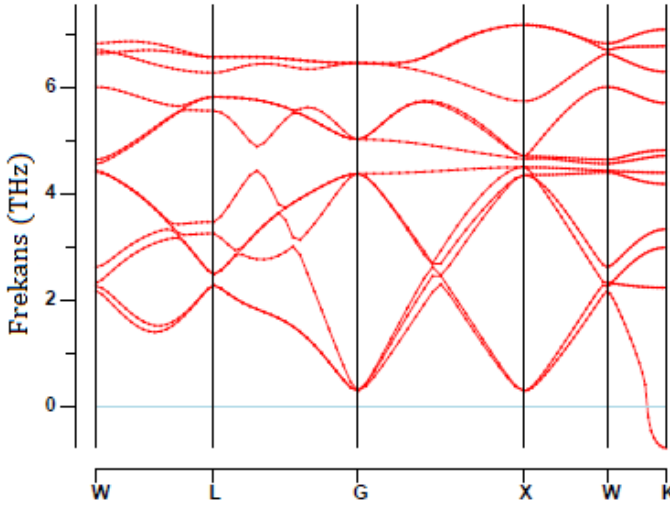
Şekil 4.22. Cu_2MnAl Heusler alaşımının GGY ile fonon dağılım eğrisi



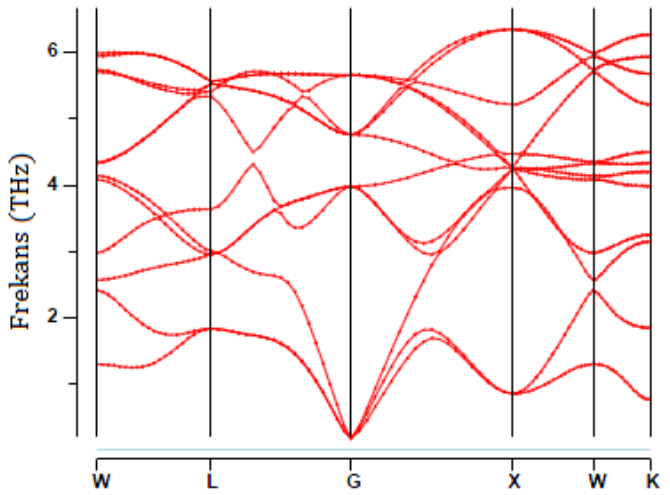
Şekil 4.23. Cu_2MnSi Heusler alaşımının GGY ile fonon dağılım eğrisi



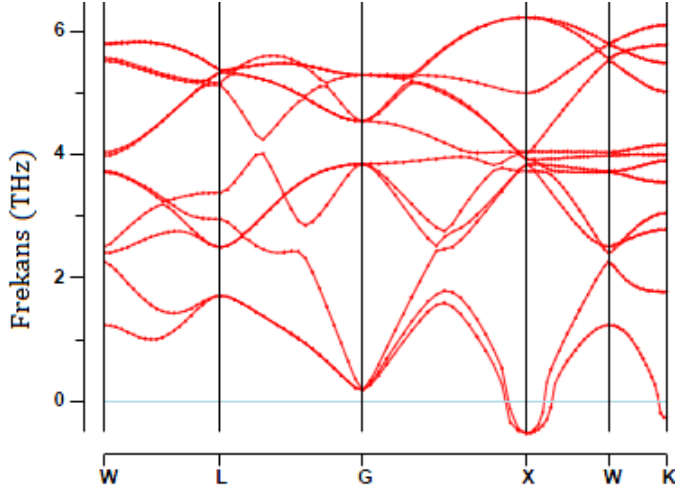
Şekil 4.24. Cu_2MnGe Heusler alaşımının GGY ile fonon dağılım eğrisi



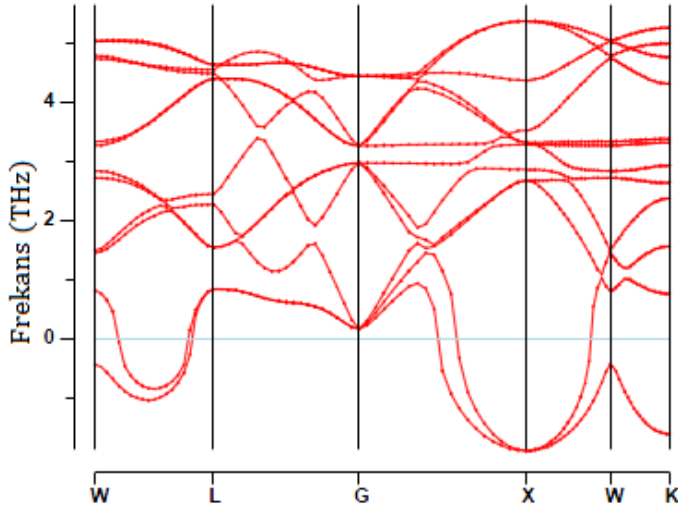
Şekil 4.25. Cu_2MnGa Heusler alaşımının GGY ile fonon dağılım eğrisi



Şekil 4.26. Cu_2MnIn Heusler alaşımının GGY ile fonon dağılım eğrisi



Şekil 4.27. Cu₂MnSn Heusler alaşımının GGY ile fonon dağılımı eğrisi



Şekil 4.28. Cu₂MnSb Heusler alaşımının GGY ile fonon dağılımı eğrisi

5. SONUÇ VE ÖNERİLER

Bu tez çalışmasında, Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi'ni temel alan MedeA programında Yerel Yoğunluk Yaklaşımı (YYY) ve Genelleştirilmiş Gradyent Yaklaşımını (GGY) kullanılarak $L2_1$ kübik yapıdaki Cu_2MnZ ($Z= Al, Si, Ge, Ga, In, Sb, Sn$) Heusler alaşımlarının yapısal, manyetik, elektronik, elastik ve titreşim özellikleri incelendi.

Ele alınan alaşımların ilkönce örgü sabitleri iki farklı yaklaşım ile hesaplandı ve literatürde yer alan çalışmalarla karşılaştırılarak oldukça uyumlu olduğu görüldü. Hesaplanan örgü sabiti kullanılarak Yığın modülü ve toplam manyetik moment değerleri hesaplanarak aynı çizelgede verildi. GGY ile elde edilen örgü sabitleri ve toplam manyetik moment değerlerinin YYY' den daha büyük olduğu bulundu. Alaşımda yer alan her bir element için kısmi manyetik moment değerleri ilgili çizelgelerde verildi. Elde edilen sonuçlardan toplam manyetik momente en büyük katkının Mn elementinden olduğu açıkça görüldü.

Cu_2MnZ ($Z= Al, Si, Ge, Ga, In, Sb, Sn$) alaşımlarının elektronik bant yapısı eğrileri temel simetri yönleri boyunca hem spin aşağı hem de spin yukarı durumları için çizdirildi. Elde edilen şekillerden, Fermi seviyesinin altındaki ve üstündeki bantların Fermi seviyesini kestiği ve üst üste bindiği açıkça görüldü ve tüm alaşımların metalik bir yapıya sahip olduğu sonucuna varıldı. Elektronik bant yapı grafiklerinin daha iyi analiz edilebilmesi için toplam ve kısmi durum yoğunlukları hesaplanarak çizdirildi. Elde edilen eğriler analiz edildi ve diğer teorik çalışmalarla karşılaştırıldı. Analiz sonucunda Fermi seviyesinde toplam durum yoğunluğu değerlerinin Cu ve Mn elementlerinin "d" elektronlarından kaynaklandığı ve spin aşağı durumlarından gelen katkının spin yukarı durumlarına göre daha büyük olduğu bulundu.

Bu tezde elektronik özelliklerin yanı sıra elastik özelliklerde detaylı bir şekilde incelenmiştir. İkinci derece elastik sabitleri (C_{11}, C_{12}, C_{44}) Shear ve Young modülleri hesaplanarak literatürde yer alan çalışmalarla karşılaştırıldı. Elde edilen ikinci dereceden elastik sabitlerinden Cu_2MnZ ($Z= Al, Ga, In, Sn$) mekanik olarak kararlı, diğer üç alaşımların (Cu_2MnZ ($Z= Si, Ge, Sb$)) mekanik olarak kararsız olduğu sonucuna varıldı.

Ayrıca hesaplanan Young modülüne göre çalışılan malzemeler kendi aralarında sertlik sıralamasına dizildi. Buna göre Cu_2MnAl , çalışılan malzemeler arasında en sert olduğu bulundu.

Son olarak Cu_2MnZ ($Z= \text{Al, Si, Ge, Ga, In, Sb, Sn}$) alaşımlarının Birinci Brillouin bölgesinde yüksek simetri yönleri boyunca fonon frekansları hesaplanarak, dağılım eğrileri çizdirildi. Cu_2MnAl ve Cu_2MnIn alaşımlarının dinamik olarak kararlı, diğer alaşımların (Cu_2MnZ ($Z= \text{Si, Ge, Ga, Sb, Sn}$)) ise dinamik olarak kararsız olduğu bulundu. Ayrıca Brillouin bölge merkezindeki optik fonon frekansları verildi.

Bu çalışmada elde edilen sonuçlar uluslar arası “XII. International Congress, Machines, Technologies, Materials” kongresinde sunuldu [67] ve *Mechanics Technologies Materials* dergisinde basıldı [68].

KAYNAKLAR

1. Heusler, F., (1904): Über Manganbronze und über die Synthese magnetisierbarer Legierungen aus unmagnetischen Metallen. *Angewandte Chemie* 17. (9), 260-264.
2. Sahariah, Munima B., (2012) et al. First-principles computation of structural, elastic and magnetic properties of Ni₂FeGa across the martensitic transformation. *Journal of Physics: Condensed Matter* 25.(2), 025502.
3. Livingston, J. D. (1963). Superconductivity in Lead-Base Solid Solution Alloys. *Journal of Applied Physics*, 34(4), 1362-1362.
4. Masumoto, H., and Watanabe, K. (1976). Magnetic Properties of Cl b-Type Pseudo-Ternary Intermetallic Compounds Pt 1– x Au x MnSb. *Transactions of the Japan Institute of Metals*, 17(9), 588-591.
5. Singh, D., Tiwari, R. S., Srivastava, O. N., (2012). Structural and magnetic properties of Cu₅₀Mn₂₅Al_{25-x}Ga_x Heusler Alloys” *Department of Physics, Nano-Science and Technology Unit, Banaras Hindu University, Varanasi 221005, India.*
6. Geiersbach, U., Bergman, A., Westerholt, K., (2002). Preparation and structural properties of thin films and multilayers of the Heusler compounds Cu₂MnAl, Co₂MnSn, Co₂MnSi and Co₂MnGe *Institut für Experimentalphysik IV, Ruhr-Universität D44780 Bochum, Germany*
7. Geiersbach, U., Bergman, A., Westerholt, K., (2002). Structural, magnetic and magnetotransport properties of thin films of the Heusler alloys Cu₂MnAl, Co₂MnSi, Co₂MnGe and Co₂MnSn *Institut für Experimentalphysik IV, Ruhr-Universität D44780 Bochum, Germany*
8. Do, B. , Nguyen, H. D. , Nguyen, A. T. , Nguyen, X. P., (2006). Magnetic and transport properties of Cu₂MnAl Heusler alloy prepared by rapidly quenched method *Institute of Materials Science, VAST, 18 Hoang Quoc Viet, Hanoi, Vietnam*
9. Rai, D. P. , Thapa, R. K., (2014). Study of electronic, magnetic, optical and elastic properties of Cu₂MnAl a gapless full Heusler compound *Beijing Computational Science Research Center, 3 Heiqing Road, Beijing 100084, People’s Republic of China. Dept. of Physics, Mizoram University, Aizawl 796004, India.*
10. Jalilian, J., (2014). Comment on Study of electronic, magnetic, optical and elastic properties of Cu₂MnAl a gapless full heusler compound *Young Researchers and Elite Club, Kermanshah Branch, Islamic Azad University, Kermanshah, Iran*
11. Chakrabarti, A., Siewert, M., Roy, T., Mondal, K., Banerjee, A., Gruner, M. E. and Entel, P., (2013). Ab initio studies of effect of copper substitution on the electronic and magnetic properties of Ni₂MnGa and Mn₂NiGa *India.Germany.*
12. Roy, T., Chakrabati, A., Gruner, M. E., Entel, P., (2015). Effect of substitution on elastic stability, electronic structure and magnetic property of Ni-Mn based Heusler alloys: An ab initio comparison *India .Germany.*

13. Deb, A., Sakurai, Y.,(1999). Electronic structure of the Cu_2MnAl Heusler alloy *Japan Synchrotron Radiation Research Institute (JASRI), SPring-8, Mikazuki, Sayo, Hyogo 679-5198, Japan.*
14. Kulkova, S.E., Kulkov, S.S.,Subashiev, A.V., (2004). Ab-initio investigation of electronic and magnetic properties of Heusler alloys *St. Petersburg and Tomsk, Russia.*
15. Hamri, B., Abbar, B., Hamri, A., Baraka, O., Hallouche, A., Zaoui, A., (2015). Electronic structure and mechanical properties of X_2MnSn ($\text{X}=\text{Cu},\text{Ni},\text{Pd}$) under hydrostatic pressure: GGA+U calculations *Djillali Liabès University of Sidi Bel-Abbès, Sidi Bel-Abbès 22000, Algeria.*
16. Jha, S., Seyoum, H.M., Demarco, M., Julian, G.M., Stubbs, D.A., Blue, J.W., Silva, M. T. X. and Vasquez, A., (1983). Site and probe of hyperfine magnetic field in L_{21} Heusler alloys X_2MnZ ($\text{X}=\text{Ni}, \text{Cu}, \text{Rh}, \text{Pd}$ and $\text{Z}=\text{Ga}, \text{Ge}, \text{In}, \text{Sn}, \text{Pb}$).
17. Kuz'min, R. N., Ibraimov, N. S. and Zhdanov, G. S., (1966). Mössbauer effect in Heusler alloys *Moscow State University*
18. Kurtuluş, Y., Gilleßen, M. and Dronskowski, R., (2005). Electronic Structure, Chemical Bonding and Finite-Temperature Magnetic Properties of Full Heusler Alloys *Institut für Anorganische Chemie, RWTH Aachen University, D-52056 Aachen, Germany.*
19. Hatada, K. and Chaboy, J., (2007). Role of exchange and correlation potential in calculating x-ray absorption spectra of half-metallic alloys: Mn and Cu K-edge XANES in Cu_2MnM Heusler alloys ($\text{M}=\text{Al}, \text{Sn}, \text{In}$) *Instituto de Ciencia de Materiales de Aragón, CSIC-Universidad de Zaragoza, 50009 Zaragoza, Spain*
20. Sutou, Y., et al. (1998). Ordering and martensitic transformations of Ni_2AlMn Heusler alloys. *Metallurgical and Materials Transactions A* 29.(8), 2225-2227.
21. Uhl, E., (1981). Magnetic properties of new Heusler alloys $(\text{Cu}_{1-x}\text{Co}_x)_2\text{MnSn}$. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* 25 (2), 221-227.
22. Ziebeck, K. and Neumann K., (2001). *Alloys and Compounds of d-Elements with Main Group Elements. Part 2.* Springer Berlin Heidelberg, 409-414.
23. Kuralı, D., (2008). Üçlü Alaşım Wurtzite $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ Malzemenin Band Yapısı Hesabı, Yüksek Lisans Tezi, *Dokuz Eylül Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü*, İzmir, 29
24. Laricchia, S., (2011). Generalized gradient approximations of the noninteracting kinetic energy from the semiclassical atom theory: rationalization of the accuracy of the frozen density embedding theory for nonbonded interactions. *Journal of chemical theory and computation* 7.8 2439-2451.
25. Hohenberg, P. and Kohn, W., (1964). Inhomogeneous electron gas. *Physical review* 136.3B (1964): B864.

26. Schimka, L., (2010). Accurate surface and adsorption energies from many-body perturbation theory. *Nature Materials* 9.9 741-744.
27. Fermi, E., (1928). A statistical method for the determination of some properties of atoms. II. Application to the periodic system of the elements, *Zeitschrift für Physik* 48: 73-79
28. Born, M., (1927). Oppenheimer, J. R. Zur Quantentheorie der Molekeln, *Annalen der Physik* 84: 457-484
29. Erkişi, A., (2007). Bazı Bileşiklerin Elektronik Ve Titreşim Özelliklerinin Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi ile incelenmesi, Yüksek Lisans Tezi, **Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü**, Ankara, 3-5
30. Kaffashnia, A., (2014). Li_2XY (X=Cu,Ag,Au;Y=Ge,Sn,Sb,Al,Ga,In) Bileşiklerinin Yapısal, Elektronik, Elastik, Dinamik ve Termodinamik Özelliklerinin Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi ile İncelenmesi **Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü**, Ankara
31. Srivastava, G.P., (1999). Theoretical modelling of semiconductor surfaces: microscopic studies of electrons and phonons. **World Scientific**.
32. Haug, A. (2013). *Theoretical Solid State Physics: International Series in Natural Philosophy* (Vol. 1). Elsevier.
33. Atkins, P. W., Friedman R. S. (2011). Molecular Quantum Mechanics, **Oxford University press** New York
34. Candan, A., (2011). Kübik Yapıdaki Co_2MnX (X=Al, Ga, Ge, Si) Heusler Alaşımlarının Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi ile İncelenmesi, Yüksek Lisans Tezi, **Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Ankara**
35. İyigör, A., (2011). Bazı Kübik Yapıdaki CoZ (Z=Al, Be, Sc, Zr) İkili Bileşiklerin Yapısal, Elektronik, Elastik ve Titreşim Özelliklerinin Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi ile İncelenmesi, Yüksek Lisans Tezi, **Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Ankara**
36. Slater, J. C. (1974). *The self-consistent field for molecules and solids* (Vol. 4, p. 23). New York: McGraw-Hill.
37. Şimşek, Ş., (2008). $AgNbO_3$ VE $AgTaO_3$ Kristallerinin Elektronik Band Yapısı Ve Optik Özelliklerinin incelenmesi, Yüksek Lisans Tezi, **Çukurova Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü**, Adana, 9
38. Fock, V., (1930). Näherungsmethode zur Lösung des quantenmechanischen Mehrkörperproblems, *Zeitschrift für Physik* 61:126-148
39. Mete, E., (2003). Electronic properties of transition metal oxides, Doktora Tezi, **Orta Doğu Teknik Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü**, Ankara, 80

40. Ceperley, D. M. and Alder, M. J., (1980). Ground State of the Electron Gas by a Stochastic Method, *Phys. Rev. Lett.*, 45: 566-569
41. Jones, R. O. and Gunnarsson, O., (1989). The density functional formalism, its applications and prospects”, *Reviews of Modern Physics* .61: 689-746
42. Herman, F., Van Dyke, J. P. and Ortenburger, I. P., (1969). Improved statistical exchange approximation for inhomogeneous many-electron system, *Physical Review Letters* 22: 807-811
43. Svendsen, P. S. and von Barth, U., (1996). Gradient expansion of the exchange energy from second-order density response theory, *Phys. Rev. B*, 54: 17402-17413
44. Perdew, J. P. and Burke, K., (1996). Comparison shopping for a gradient-corrected density functional”, *International journal of quantum chemistry* 57: 309-319
45. Körözlü, N., (2009). Cd_xZn_{1-x}X (X=Te, Se, S) Alaşımlarının ve Wp, GdX (X=Bi, Sb) Bileşiklerinin Temel Fiziksel Özelliklerinin Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi (DFT)“Ne Dayalı Yöntemlerle Hesaplanması, Doktora Tezi, *Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü*, Ankara, 50-53.
46. Harrison, W. A., (1966). Pseudo potentials in the theory of metals, *Benjamin Press*. New York, 336
47. Massalski, T. B. and Mizutani, U., (1978). Electronic structure of Hume-Rothery phases. *Progress in Materials Science*, 22(3), 151-262.
48. Sütü, A., (2008). BeO“nun Çinko Sülfür Ve Wurtzite Fazlarının Yapısal, Elektronik Ve Titreşim Özelliklerinin incelenmesi, Yüksek Lisans Tezi, *Sakarya Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü*, Sakarya, 25-27
49. Soyalp, F., (2006). Yoğunluk Fonksiyon Teorisi ile bazı bileşiklerin Elektronik yapılarının ve titreşim özelliklerinin teorik olarak incelenmesi” Doktora Tezi, *Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü*, Ankara,
50. Hu, C. K. and Harper, J. M. E., (1998). Copper interconnections and reliability. *Materials Chemistry and Physics*, 52(1), 5-16.
51. Dikici, M., (1993). Katı Hal Fiziğine Giriş *On Dokuz Mayıs Üniversitesi*.
52. Burns, G., (1925). Solid State Physics, *Academic Press*, New York, 140-165.
53. Uğur, Ş., (2004). AlN (110) Yüzeyinin Atomik Yapısının ve Titreşim Özelliklerinin Yoğunluk Fonksiyon Teorisi ile İncelenmesi, Doktora Tezi, *Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü*, Ankara, 2-33.
54. Duman, S., (2002). III-N Tipi Yarı iletkenlerin Örgü Dinamiğinin Adyabatik Bağ Yükü Modeli ile İncelenmesi, Yüksek Lisans Tezi, *Sakarya Üniv. Fen Edebiyat Fakültesi*, 58-59.

55. Parlinski, K. and Parlinska-Wojtan, M., (2002). Lattice dynamics of NiTi austenite, martensite, and R phase. *Physical Review B*, 66(6), 064307.
56. Parlinski, K., Li, Z. Q. and Kawazoe, Y., (1997). First-principles determination of the soft mode in cubic ZrO₂. *Physical Review Letters*, 78(21), 4063.
57. Gonze, X., Vigneron J.P. (1989). Density-functional approach to nonlinear response coefficients of solids, *Phys. Review. B.*, 39: 13120
58. Jezierski, A., Morkowski, J. A., Szajek, A., Pugacheva, M. (1995). Electronic structure in ternary intermetallic Pd₂TiX (X=Al,Ga,In) Heusler-type alloys: are they magnetic?. *Journal of Physics* 17: 60-179
59. Asker, E. (2010). XRh (X=Mg, Sc, Y) Bileşiklerinin Yapısal, Elektronik ve Titreşimsel Özelliklerinin Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi ile İncelenmesi *Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü*, Ankara.
60. Wang, J., Yip, S., Phillpot, S. R., and Wolf, D. (1993). Crystal instabilities at finite strain. *Physical Review Letters*, 71(25), 4182.
61. Murnaghan, F. D. (1944). The compressibility of media under extreme pressures. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 30(9), 244-247.
62. Materials Design kullanım kılavuzu (2012) “MedeA Manual v2.10”, 3-298.
63. Durak G. (2010). *CoMnGe_{1-x}Ga_x* Sistemlerinin $0 \leq x \leq 0.1$ Bileşikleri için Yapısal, Isısal, Manyetik ve Manyetokalorik Özelliklerinin İncelenmesi *Ankara Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü*
64. Brown, P.J., Kanomata, T., Matsumoto, M., Neumann, K.U. and Ziebeck, K.R.A. (2005). The structure and Transformation Mechanism in the Ferromagnetic Shape Memory Alloy Ni₂MnGa. *Magnetism and Structure in Functional Materials*, Springer-Verlag, Berlin Heidelberg.
65. Vasil'ev, A. N., Bozhko, A. D., Khovailo, V. V., Dikshtein, I. E., Shavrov, V. G., Buchelnikov, V. D., Matsumoto, M., Suzuki, S., Tagagi, T. and Tani, J. 1999. “Structural and magnetic phase transitions in shape-memory alloys Ni_{2+x}Mn_{1-x}Ga”. *Physical Review B*, 59, 1113-1120.
66. Dubowik, J., Goscianska, I., Szlaferek, A. And Kudryavtsev, Y.V. (2007). *Material Science- Poland*, 25,n.2.
67. XII International Congress Machines, Technologies, Materials (2015). Varna-Bulgaria
68. Uğur Ş. and Ulusu E., (2016). Structural, Elastic and Electronic properties of Cu₂MnZ (Z= Al, Si Ge, Ga, In, Sb, Sn) : A first-Principles Study, *Machines Technologies Materials*,

ÖZGEÇMİŞ

Kişisel Bilgiler

Soyadı, adı : ULUSU, Emrah
 Uyuğu : T.C.
 Doğum tarihi ve yeri : 24.07.1988, Ankara
 Telefon : 0 (539) 634 88 66
 e-mail : emrahulusu@gmail.edu.tr



Eğitim

Derece	Eğitim Birimi	Mezuniyet tarihi
Lisans	On Dokuz Mayıs Üniversitesi/ Fizik Bölümü	2013
Lise	Sincan Lisesi	2005

Yabancı Dil

İngilizce

Hobiler

Tarihi kaynakları incelemek, Tartışma programlarını izlemek, Doğa ile iç içe olmak

Kongre

1. Uğur Ş., Ulusu E., 2015. Structural and Electronic Properties of Cu₂MnZ (Z=Al, Si, Ge, Ga, In, Sn, Sb): a first-principles, XII Congress, Machines, Technologies, Materials (Scientific Proceedings of the Scientific-Technical Union of Mechanical Engineering, Vol.22/185,p.112) Varna, Bulgaria.



GAZİ GELECEKTİR..