



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



**MgVPt₂, MgV₂Pt VE Mg₂VPt ALAŞIMLARININ
FİZİKSEL ÖZELLİKLERİNİN Ab-İNİTİO İLE
İNCELENMESİ**

ABDULLAH BERTAN

YÜKSEK LİSANS TEZİ

KIRŞEHİR

2025



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



**MgVPt₂, MgV₂Pt VE Mg₂VPt ALAŞIMLARININ
FİZİKSEL ÖZELLİKLERİNİN Ab-İNİTİO İLE
İNCELENMESİ**

ABDULLAH BERTAN

YÜKSEK LİSANS TEZİ

DANIŞMAN

Prof. Dr. Osman ÖRNEK

KIRŞEHİR

2025

KIRŐEHİR AHİ EVRAN ÜNİVERSİTESİ FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ
YÜKSEK LİSANS TEZ ÇALIŐMASI
ETİK BEYANI

Kırőehir Ahi Evran Üniversitesi Bilimsel Araőtırma ve Yayın Etięi Yönergesini okuduęumu ve anladığımı ve Kırőehir Ahi Evran Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Tez Yazım Kurallarına uygun olarak hazırladığım bu tez çalışmasında;

- Tez içinde sunduęum verileri, bilgileri ve dokümanları akademik ve etik kurallar çerçevesinde elde ettięimi,
- Tüm bilgi, belge, deęerlendirme ve sonuçları bilimsel etik kurallarına uygun olarak sunduęumu,
- Tez çalışmasında yararlandığım eserlerin tümüne uygun atıfta bulunarak kaynak gösterdiğimi,
- Kullanılan verilerde ve ortaya çıkan sonuçlarda herhangi bir deęişiklik yapmadığımı,
- Tez olarak sunduęum bu çalışmanın özgün olduęunu,
- bildirir, aksi bir durumda bu konuda hakkımda yapılacak tüm yasal işlemleri ve aleyhime doğabilecek tüm hak kayıplarını kabullendięimi beyan ederim.

31/07/2025

Abdullah BERTAN

İÇİNDEKİLER DİZİNİ

Sayfa No

İÇİNDEKİLER DİZİNİ	I
TEŞEKKÜR.....	III
ÖZET	IV
ABSTRACT	V
TABLolar DİZİNİ	VI
ŞEKİLLER DİZİNİ	VII
KISALTMALAR DİZİNİ.....	IX
1. GİRİŞ.....	1
2. ÖNCEKİ ÇALIŞMALAR	5
3. MATERYAL VE METOT	7
3.1. Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi (DFT).....	7
3.2. Çok Cisim Problemi ve Born-Oppenheimer Yaklaşımı	8
3.2.1. Çok cisim problemi.....	8
3.2.2. Born-Oppenheimer yaklaşımı.....	9
3.3. Hartree ve Hartree Fock Yaklaşımı	9
3.4. Hohenberg -Kohn Teoremi.....	10
3.4.1. Birinci Hohenberg-Kohn teoremi: Varlık kanıtı.....	10
3.4.2. İkinci Hohenberg-Kohn teoremi: Varyasyonel prensip.....	14
3.5. Kohn-Sham Denklemleri.....	16
3.6. Yerel Yoğunluk Yaklaşımı (LDA).....	19
3.7. Genelleştirilmiş Gradyent Yaklaşımı (GGA).....	21
3.8. Quantum Espresso Programı	22
3.9. Heusler Alaşımları: Yapısal Karakteristikleri, Fonksiyonel Özellikleri ve Biyomedikal Uygulamalara Yönelik Geleceği.....	24
4. BULGULAR VE TARTIŞMA	27
4.1. Mg ₂ VPt, MgV ₂ Pt ve MgVPt ₂ Alaşımlarının Yapısal Özellikleri.....	27
4.2. Mg ₂ VPt, MgV ₂ Pt ve MgVPt ₂ Alaşımlarının Elektronik Özellikleri	29
4.3. Mg ₂ VPt, MgV ₂ Pt ve MgVPt ₂ alaşımlarının Mekanik Özellikleri.....	37
4.5. Mg ₂ VPt, MgV ₂ Pt ve MgVPt ₂ Alaşımlarının Titreşim Özellikleri	45
5. SONUÇ VE ÖNERİLER.....	53
KAYNAKLAR.....	55
EKLER.....	61
EK-1 Kongre Katılım Belgesi.....	61

TEŐEKKÜR

Tez alıőmam sűresince bilgi ve tecrűbeleriyle bana yol gűsteren, akademik geliőimime bűyűk katkı saęlayan deęerli danıőmanım Prof. Dr. Osman ŐRNEK'e en iten teőekkűrlerimi sunarım.

Ayrıca, tezimin eőitli aőamalarında destek ve katkılarını esirgemeyen Do. Dr. Ahmet İYİGŐR hocama ve her zaman yanımda olduęunu hissettiren, manevi desteęiyle bana gű veren Prof. Dr. Levent URTEKİN hocama da gűnűlden teőekkűr ederim.

Bu sűrete, sadece akademik yaőamımda deęil, hayatımın her anında yanımda olan, varlıklarıyla bana gű veren kıymetli aileme; baőta sevgili annem Műnevver BERTAN'a, babam Musa BERTAN'a, kardeőim Fatma BERTAN'a, her daim desteęiyle yanımda olan eőim Kűbra BERTAN'a, neőesiyle hayatıma anlam katan kızım Ela BERTAN'a ve dűnyaya gűzlerini amak iin sabırsızlıkla bekledięimiz oęlum Ege BERTAN'a űkranlarımı sunuyorum.

Onların varlıęı, sabrı ve sevgisi, bu alıőmanın en bűyűk motivasyon kaynaęı olmuőtur.

Temmuz, 2025

Abdullah BERTAN

ÖZET

YÜKSEK LİSANS TEZİ

MgVPt₂, MgV₂Pt VE Mg₂VPt ALAŞIMLARININ FİZİKSEL ÖZELLİKLERİNİN Ab-İNİTİO İLE İNCELENMESİ

Abdullah BERTAN

KIRŞEHİR AHI EVRAN ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ
İLERİ TEKNOLOJİLER ANABİLİM DALI

Danışman: Prof. Dr. Osman ÖRNEK
Yıl: 2025, Sayfa: 63
Jüri: Prof. Dr. Osman ÖRNEK
Doç.Dr.Arif KÖSEMEN
Doç. Dr. Ahmet İYİGÖR

Bu çalışmada, Mg₂VPt ters Heusler alaşımının yapısal, elektronik, mekanik ve termodinamik özellikleri yoğunluk fonksiyonel teorisi (DFT) kullanılarak sistematik bir şekilde araştırılmıştır. Alaşımın F-43m uzay grubundaki kararlı örgü sabiti 6.352 Å olarak elde edilmiştir. Elastik sabitler ($C_{11} = 137.78$ GPa, $C_{12} = 105.42$ GPa, $C_{44} = 34.44$ GPa) ve türetilen mekanik modüller ($B = 116.20$ GPa, $G = 25.43$ GPa, $E = 71.10$ GPa) alaşımın mekanik olarak kararlı ve sünek karakterli olduğunu göstermektedir. Ayrıca Poisson oranı 0.40 olarak hesaplanmış ve Debye sıcaklığı 242.33 K bulunmuştur. Ortalama ses hızı 2051.65 m/s olarak belirlenmiştir. Termodinamik özellikler ise 0–800 K aralığında incelenmiş; ısı sığası, titreşim enerjisi, serbest enerji ve entropi ile ilgili sıcaklık bağımlı davranışlar ortaya konmuştur. Elektronik yapı analizleri spin ayrımlı olarak gerçekleştirilmiş ve bant yapısı ile yoğunluk durumları (DOS) grafiksel olarak sunulmuştur. Bant yapısında spin yukarı ve spin aşağı yönelimlerinde enerji seviyelerinde farklılıklar gözlenmiş, bu da alaşımın yarı-metalik karakter gösterdiğini düşündürmektedir. Toplam manyetik moment 1.00 μ B olarak hesaplanmıştır. Bu sonuçlar, Mg₂VPt alaşımının manyetik ve elektronik uygulamalar için potansiyel bir aday olabileceğini göstermektedir.

Anahtar Kelimeler: Elektronik ve termodinamik özellikler, Ters Heusler alaşımı, Yoğunluk fonksiyonel teorisi (DFT).

ABSTRACT

MASTER'S THESIS

INVESTIGATION OF PHYSICAL PROPERTIES OF MgVPt₂, MgV₂Pt and Mg₂VPt ALLOYS BY Ab-INITIO

Abdullah BERTAN

KIRŞEHİR AHI EVRAN UNIVERSITY
INSTITUTE OF NATURAL AND APPLIED SCIENCES
DEPARTMENT OF ADVANCED TECHNOLOGİES

Supervisor: Prof. Dr. Osman ÖRNEK
Year: 2025, **Pages:** 63
Juries: Prof. Dr. Osman ÖRNEK
Assoc. Prof. Dr. Arif KÖSEMEN
Assoc. Prof. Dr. Ahmet İYİGÖR

In this study, the structural, electronic, mechanical, and thermodynamic properties of the Mg₂VPt inverse Heusler alloy were systematically investigated using density functional theory (DFT). The stable lattice constant in the F-43m space group was found to be 6.352 Å. The calculated elastic constants ($C_{11} = 137.78$ GPa, $C_{12} = 105.42$ GPa, $C_{44} = 34.44$ GPa) and derived mechanical moduli ($B = 116.20$ GPa, $G = 25.43$ GPa, $E = 71.10$ GPa) confirm that the alloy is mechanically stable and exhibits ductile behavior. The Poisson's ratio was calculated to be 0.40, and the Debye temperature was estimated as 242.33 K. The average sound velocity was determined to be 2051.65 m/s. Thermodynamic properties, including heat capacity, vibrational energy, free energy, and entropy, were examined over the temperature range of 0–800 K. Spin-polarized electronic structure calculations were performed, and the band structure and density of states (DOS) were plotted. The differences observed between spin-up and spin-down states in the band structure indicate a possible half-metallic character of the alloy. The total magnetic moment was found to be 1.00 μ_B per formula unit. These findings suggest that Mg₂VPt is a promising candidate for future magnetic and electronic device applications.

Keywords: Density functional theory (DFT), Electronic and thermodynamic properties, Inverse Heusler alloy.

TABLolar DİZİNİ

Sayfa No

Tablo 4.1. Mg ₂ VPt, MgV ₂ Pt ve MgVPt ₂ alařımlarının örgü sabitleri (a ₀) ve toplam manyetik momentleri (M _T)	27
Tablo 4.2. Mg ₂ VPt, MgV ₂ Pt ve MgVPt ₂ alařımlarının elastik sabitleri (C _{ij} ; GPa).....	38
Tablo 4.3. Mg ₂ VPt, MgV ₂ Pt ve MgVPt ₂ alařımlarının bulk modülü (B; GPa), kayma modülü (G; GPa), young modülü (E; GPa), B/G oranı, poisson oranı (σ), anizotropi faktörü (A) ve ortalama ses hızı (V _m : m/s).....	39

ŞEKİLLER DİZİNİ

Sayfa No

Şekil 4.1. Mg ₂ VPt, MgV ₂ Pt ve MgVPt ₂ alaşımlarının Fm-3m ve F-43m uzay gruplarındaki kristal yapısı.....	28
Şekil 4.2. Mg ₂ VPt tam Heusler alaşımının yüksek simetri yönelimleri boyunca elektronik bant eğrileri.....	30
Şekil 4.3. Mg ₂ VPt ters Heusler alaşımının yüksek simetri yönelimleri boyunca elektronik bant eğrileri.....	31
Şekil 4.4. Mg ₂ VPt tam Heusler alaşımının toplam ve kısmi durum yoğunluğu eğrileri.	31
Şekil 4.5. Mg ₂ VPt ters Heusler alaşımının toplam ve kısmi durum yoğunluğu eğrileri.	32
Şekil 4.6. MgV ₂ Pt tam Heusler alaşımının yüksek simetri yönrlimleri boyunca elektronik bant eğrileri.....	33
Şekil 4.7. MgV ₂ Pt ters Heusler alaşımının yüksek simetri yönelimleri boyunca elektronik bant eğrileri.	33
Şekil 4.8. MgV ₂ Pt tam Heusler alaşımının toplam ve kısmi durum yoğunluğu eğrileri.	34
Şekil 4.9. MgV ₂ Pt ters Heusler alaşımının toplam ve kısmi durum yoğunluğu eğrileri.	34
Şekil 4.10. MgVPt ₂ tam Heusler alaşımının yüksek simetri yönelimleri boyunca elektronik bant eğrileri.....	35
Şekil 4.11. MgVPt ₂ ters Heusler alaşımının yüksek simetri yönelimleri boyunca elektronik bant eğrileri.....	36
Şekil 4.12. MgVPt ₂ tam Heusler alaşımının toplam ve kısmi durum yoğunluğu eğrileri	36
Şekil 4.13. MgVPt ₂ ters Heusler alaşımının toplam ve kısmi durum yoğunluğu eğrileri	37
Şekil 4.14. Mg ₂ VPt, MgV ₂ Pt ve MgVPt ₂ tam Heusler alaşımlarının titreşim enerjilerinin sıcaklık ile değişimi.....	40
Şekil 4.15. Mg ₂ VPt, MgV ₂ Pt ve MgVPt ₂ ters Heusler alaşımlarının titreşim enerjilerinin sıcaklık ile değişimi.....	41
Şekil 4.16. Mg ₂ VPt, MgV ₂ Pt ve MgVPt ₂ tam Heusler alaşımlarının serbest titreşim enerjilerinin sıcaklık ile değişimi	41
Şekil 4.17. Mg ₂ VPt, MgV ₂ Pt ve MgVPt ₂ ters Heusler alaşımlarının serbest titreşim enerjilerinin sıcaklık ile değişimi	42
Şekil 4.18. Mg ₂ VPt, MgV ₂ Pt ve MgVPt ₂ tam Heusler alaşımlarının entropilerinin sıcaklık ile değişimi	43

Şekil 4.19. Mg_2VPt , MgV_2Pt ve $MgVPt_2$ ters Heusler alaşımlarının entropilerinin sıcaklık ile değişimi	43
Şekil 4.20. Mg_2VPt , MgV_2Pt ve $MgVPt_2$ tam Heusler alaşımlarının ısı sığalarının sıcaklık ile değişimi..	44
Şekil 4.21. Mg_2VPt , MgV_2Pt ve $MgVPt_2$ ters Heusler alaşımlarının ısı sığalarının sıcaklık ile değişimi	44
Şekil 4.22. Mg_2VPt tam Heusler alaşımının fonon dispersiyon eğrileri	45
Şekil 4.23. Mg_2VPt tam Heusler alaşımının fonon toplam durum yoğunluğu	46
Şekil 4.24. Mg_2VPt ters Heusler alaşımının fonon dispersiyon eğrileri	46
Şekil 4.25. Mg_2VPt ters Heusler alaşımının fonon toplam durum yoğunluğu	47
Şekil 4.26. MgV_2Pt tam Heusler alaşımının fonon dispersiyon eğrileri	48
Şekil 4.27. MgV_2Pt tam Heusler alaşımının fonon toplam durum yoğunluğu	49
Şekil 4.28. MgV_2Pt ters Heusler alaşımının fonon dispersiyon eğrileri	49
Şekil 4.29. MgV_2Pt ters Heusler alaşımının fonon toplam durum yoğunluğu	50
Şekil 4.30. $MgVPt_2$ tam alaşımının fonon dispersiyon eğrileri	50
Şekil 4.31. $MgVPt_2$ tam alaşımının fonon toplam durum yoğunluğu.....	51
Şekil 4.32. $MgVPt_2$ ters alaşımının fonon dispersiyon eğrileri.....	51
Şekil 4.33. $MgVPt_2$ ters alaşımının fonon toplam durum yoğunluğu.....	52

KISALTMALAR DİZİNİ

Kısaltmalar	Açıklama
B	: Bulk Modülü
DFT	: Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi
E	: Young Modülü
GGA	: Genelleştirilmiş Gradyan Yaklaşımı
G	: Kesme Modülü
LDA	: Yerel Yoğunluk Yaklaşımı
Mg	: Magnezyum
PBE	: Perdew-Burke-Enzerhof
Pt	: Platin
V	: Vanadyum
V _m	: Ortalama ses hızı

1. GİRİŞ

Malzeme bilimi ve mühendisliği, çağımızın gelişen teknolojilerinde önemli bir rol oynayan, disiplinler arası bir alandır. Enerji depolama, elektronik cihazlar, havacılık ve biyomedikal mühendislik gibi farklı alanlarda kullanılabilecek yeni nesil fonksiyonel malzemelerin geliştirilmesi, mühendislik uygulamalarının performansını artırmakta ve sürdürülebilirliği sağlamaktadır (Callister ve Rethwisch, 2020). Bu kapsamda, kristal yapıdaki düzenlilik, elektronik bant yapısı, mekanik dayanım, termal kararlılık ve biyoyumluluk özellikleri, geliştirilecek malzemelerin seçiminde kritik belirleyiciler arasındadır (Murr, 2015; Yin ve ark., 2022). Son yıllarda, spintronik ve enerji uygulamalarına yönelik Heusler ve ters Heusler alaşımları dikkat çekmektedir. Bu alaşımlar, yüksek spin polarizasyonları, yarı-metalik elektronik yapı özellikleri ve ayarlanabilir manyetik momentleri sayesinde ileri teknoloji uygulamalarında geniş kullanım potansiyeline sahiptir (Graf ve ark., 2011; Felser ve ark., 2015). Ters Heusler alaşımları, X_2YZ formülasyonuna sahip olup XA tipi kristal yapı sergilemektedir. Atomların örgü noktalarındaki dizilişinin optimize edilmesi ile elektronik ve manyetik özellikler üzerinde kontrol sağlanabilmektedir (Liu ve ark., 2008). Bu özellik, ters Heusler alaşımlarını spin bazlı elektronik cihazlarda (spintronik), manyetik bellek sistemlerinde ve sensör teknolojilerinde avantajlı bir konuma taşımaktadır (Zutic ve ark., 2004). Biyomedikal mühendislik alanında ise yeni nesil biyomalzemelerin geliştirilmesi büyük önem taşımaktadır. Biyomalzemelerin, kullanıldıkları doku veya organ ile uyumlu mekanik özelliklere sahip olması, biyolojik ortamda korozif etkilere dayanıklı olması ve toksik etki oluşturmadan hücre proliferasyonunu desteklemesi gerekmektedir (Staiger ve ark., 2006). Biyomedikal implantlarda kullanılan malzemelerin biyoyumluluğu, mekanik uyumu ve korozif ortamlara dayanıklılığı kritik parametrelerdir.

Magnezyum (Mg) bazlı alaşımlar, kemik dokusuna yakın elastik modülleri ve biyoyumlulukları nedeniyle implant uygulamalarında öne çıkmaktadır (Li ve ark., 2022). Mg alaşımları biyolojik ortamda çözünürlük göstererek vücutta ikinci bir cerrahi işlem olmadan rezorbe edilebilir ve bu yönüyle kemik yenilenmesine katkı sağlayabilir (Staiger ve ark., 2006). Bununla birlikte Mg alaşımlarının hızlı korozif çözünme eğilimleri, kontrolsüz hidrojen gazı açığa çıkışı ve mekanik dayanım eksiklikleri klinik uygulamalar öncesinde iyileştirilmesi gereken parametrelerdir (Yang ve ark., 2020). V bazlı ters Heusler alaşımlarının yüksek sıcaklıklarda dahi yarı-metalik özelliklerini koruyarak spin bazlı cihazlarda kullanılabileceği gösterilmiştir (Belasri ve ark., 2021; Sharma ve ark., 2025). Platin (Pt) ise yüksek kimyasal kararlılığı ve doku uyumluluğu

sayesinde korozif ortamlara dayanıklılığı artırır ve elektriksel iletkenliği iyileştirir (Lu ve ark., 2020). Bu elementlerin bir araya geldiği Mg_2VPt ters Heusler alaşımı, biyoyumlu ve fonksiyonel implant tasarımlarında kullanılabilir potansiyele sahip yeni nesil bir aday malzeme sunmaktadır.

Mg_2VPt ters Heusler alaşımı, Mg, V ve Pt elementlerinin avantajlı özelliklerini bir arada bulundurarak ileri teknoloji ve biyomedikal uygulamalarda kullanılabilir potansiyel bir malzeme adayı olarak öne çıkmaktadır (Örnek ve ark., 2021). Bu alaşımın spintronik uygulamalarda kullanımı, yüksek spin polarizasyonuna sahip yarı-metalik elektronik yapısı sayesinde bilgi depolama ve işleme kapasitelerini artırabilirken; biyomedikal uygulamalarda, elektriksel iletkenliği ve biyoyumlu özellikleri sayesinde doku mühendisliği ve implant teknolojilerinde kullanılabilirliğini mümkün kılmaktadır (Chatterjee ve ark., 2019). Literatür verileri, Mg_2VPt ters Heusler alaşımının biyomedikal implantlarda kullanılabilirliğinin yüksek potansiyel taşıdığını, Mg bazlı biyoyumluluğu, Pt bazlı kimyasal kararlılığı ve V bazlı manyetik fonksiyonellik gibi avantajları bir arada sunarak ileri nesil akıllı implant uygulamalarına katkı sağlayabileceğini göstermektedir. Ancak Mg_2VPt alaşımının implant biyoyumluluğu üzerine doğrudan deneysel çalışmalar henüz sınırlıdır, bu nedenle *in vitro* ve *in vivo* biyoyumluluk testlerinin gerçekleştirilmesi gerekmektedir. Ancak Mg_2VPt alaşımı üzerine yapılan çalışmalar oldukça sınırlıdır ve bu durum, söz konusu alaşımın potansiyelinin ortaya çıkarılması için araştırma yapılmasını gerekli kılmaktadır.

Malzemelerin elektronik, mekanik ve termodinamik özelliklerinin belirlenmesinde Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi (Density Functional Theory, DFT), deneysel çalışmaların öncesinde güvenilir bir hesaplama yöntemi sunmaktadır (Kohn ve Sham, 1965; Perdew ve ark., 1996). DFT hesaplamaları, örgü parametrelerinin optimizasyonu, bant yapısı ve durum yoğunluğu analizleri, elastik sabitlerin belirlenmesi ve manyetik özelliklerin tahmin edilmesi gibi alanlarda geniş bir kullanım alanına sahiptir (Giannozzi ve ark., 2009). Quantum ESPRESSO, DFT hesaplamalarının gerçekleştirildiği açık kaynak kodlu bir paket programdır ve dalga fonksiyonlarının düzlem dalga temsiline dayalı olarak hesaplamalar yapar (Giannozzi ve ark., 2009). Quantum ESPRESSO, elektronik bant yapısı, yoğunluk fonksiyonu, kısmi ve toplam yoğunluk durumu (DOS), mekanik özellikler için elastisite tensörü ve fonon hesaplamaları gibi özelliklerin hesaplanmasında kullanılmaktadır. DFT’de değiş-tokuş-korelasyon (exchange-correlation) enerji fonksiyonelinin doğru tanımlanması hesaplamaların hassasiyetini artırır. Genelleştirilmiş Gradyent Yaklaşımı (GGA), değiş-

tokuř-korelasyon enerjisini sadece elektron yoęunluęuna deęil, yoęunluęun gradyentine de baęlı olarak hesaplar. Bu yaklařım, LDA'ya (Yerel Yoęunluk Yaklařımı) kıyasla malzemelerin hacmi, örgü parametreleri ve baę uzunluklarının daha geręekçi tahmin edilmesine imkân tanır (Perdew ve ark., 1996). GGA, özellikle mekanik ve termodinamik özelliklerin ilk-prensiplerden belirlenmesinde yaygın olarak tercih edilmektedir.

Bu tez çalıřmasında, Mg-V-Pt sisteminin oluřturduęu Heusler alařımlarının yapısal, elektronik, mekanik, termodinamik ve fonon özellikleri DFT tabanlı ilk-prensip hesaplamalar kullanılarak sistematik bir řekilde incelenecektir. Elde edilen bulgular, alařımların yarı-metalik ferromanyetik yapısı, yüksek spin polarizasyonu, mekanik dayanımı, elastik modülleri ve biyouyum potansiyeli ile hem ileri teknolojik hem de biyomedikal alanlarda kullanılabilirlięini ortaya koyacaktır. Böylece çalıřma, literatürdeki bořluęu dolduracak ve Mg-V-Pt alařımları gelecekteki deneysel ve teorik çalıřmalara temel oluřturmasına katkı saęlayacaktır.

2. ÖNCEKİ ÇALIŞMALAR

Son yıllarda ileri teknoloji uygulamalarında kullanılmak üzere geliştirilen yeni nesil intermetalik bileşikler arasında, magnezyum (Mg), vanadyum (V) ve platin (Pt) elementlerinden oluşan alaşım sistemlerine olan ilgi artmaktadır. Özellikle bu üç elementin farklı oranlarda bir araya getirilmesiyle oluşturulan Mg_2VPt , MgV_2Pt ve $MgVPt_2$ gibi üçlü Heusler ve ters Heusler yapılı bileşikler üzerine yapılan teorik çalışmalar oldukça sınırlı sayıda olup, literatürde bu spesifik alaşımları doğrudan inceleyen kapsamlı bir yayın bulunmamaktadır. Bununla birlikte, bu üçlü sistemlerin yapıtaşlarını oluşturan ikili alaşımlar (Mg-Pt, V-Pt ve Mg-V) üzerine yapılmış çeşitli araştırmalar mevcuttur ve bu çalışmalar söz konusu üçlü sistemlerin temel fiziksel ve kimyasal özellikleri hakkında fikir vermektedir.

Mg-Pt ikili sistemine yönelik yapılan çalışmalarda, Gierlotka ve arkadaşları tarafından gerçekleştirilen ab initio hesaplamalar sonucunda, $MgPt$ ve Mg_2Pt fazlarının negatif oluşum enerjileri gösterdiği ve bu yapıların hem termodinamik hem de mekanik olarak kararlı oldukları rapor edilmiştir. Aynı çalışmada, elastisite modüllerinin yüksekliği ve kararlı kristal yapıları sayesinde bu fazların ileri teknoloji malzeme uygulamaları için uygun adaylar olduğu ifade edilmiştir (Gierlotka ve ark., 2022). Bu sistemin başka bir yönüyle ele alındığı bir çalışmada ise Yoshida ve arkadaşları, $MgPt$ alaşımının metan molekülünün aktivasyonu üzerindeki katalitik etkisini değerlendirmiş ve bu alaşımın düşük enerji bariyerleri sayesinde CH_4 dönüşümünde etkin bir katalizör olabileceğini belirtmişlerdir (Yoshida ve ark., 2022).

VPt alaşımı üzerine yapılan araştırmalarda ise özellikle VPt_3 bileşiği dikkat çekmektedir. Kuentzler, bu yapının manyetik özelliklerini detaylı şekilde incelemiş ve alaşımın 210 K civarında bir antiferromanyetik geçiş sıcaklığına (Néel sıcaklığı) sahip olduğunu ortaya koymuştur (Kuentzler, 1982). Jesser ve arkadaşları tarafından yapılan başka bir çalışmada, V-Ir-Pt üçlü sistemleri üzerinde yapılan manyetik ve elektriksel karakterizasyonlar sonucunda Pt oranı arttıkça sistemin ferromanyetik özellikler kazandığı ve bu bağlamda VPt bileşiğinin potansiyel manyetik uygulamalarda değerlendirilebileceği sonucuna varılmıştır (Jesser ve ark., 1992).

Mg-V ikili sistemine yönelik doğrudan yapılmış çalışmaların sayısı ise oldukça az olmakla birlikte, Fujiwara ve arkadaşları, Mg-V-Cr üçlü alaşım sistemini yüksek basınçlı burulma (High-Pressure Torsion - HPT) yöntemiyle sentezlemiş ve bu yapının hidrojen depolama kapasitesi, mikroyapısal özellikleri ve termal kararlılığı gibi önemli parametrelerini değerlendirmiştir. Söz konusu çalışmada elde edilen bulgular, Mg ve V

elementlerinin birlikte kullanıldığında yapıya yüksek sertlik ve stabilite kazandırabileceğini göstermektedir (Fujiwara ve ark., 2018). Başka bir araştırmada Jin ve Min Cheng, Sikloheksanın oksidatif dehidrojenasyonu farklı Mg/V atom oranlarına sahip Mg-V-O katalizörleri üzerinde çalışıldı. Katalizörler sitrik asit kompleksasyonu yoluyla hazırlandı ve N₂-adsorpsiyon, XRD, FT-IR, Raman spektroskopisi, NH₃-TPD ve H₂-TPR teknikleriyle karakterize edildi. Saf magnezyum vanadatlar arasında, Mg₃(VO₄)₂ izole edilmiş aktif bölgelere, zayıf bazik yüzeye ve metal katyonlarının daha düşük indirgenbilirliğine sahiptir ve katalitik aktif faz olarak tanımlanmasına ilişkin araştırmalarda bulundular(Jin ve Cheng, 2009). Ayrıca, MgV₂O₄ gibi oksit türevi bileşikler üzerine yapılan teorik araştırmalarda, bu yapıların spintroniğe uygun yarımetal özellikler gösterebildiği rapor edilmiştir (Azadani ve ark., 2020).

Bu bağlamda değerlendirildiğinde, Mg₂VPt, MgV₂Pt ve MgVPt₂ gibi üçlü Heusler tipi alaşımlar üzerine literatürde doğrudan yapılmış sistematik çalışmaların oldukça sınırlı olduğu görülmektedir. Ancak bu alaşımların yapıtaşlarını oluşturan Mg-Pt, V-Pt ve Mg-V sistemleri üzerine yapılan deneysel ve teorik çalışmalar, söz konusu üçlü sistemlerin potansiyel elektronik, manyetik ve termodinamik davranışları hakkında temel bilgiler sunmaktadır. Bu nedenle, bu tez kapsamında Mg₂VPt, MgV₂Pt ve MgVPt₂ alaşımları üzerine gerçekleştirilecek ilk-prensip hesaplamalar, literatürdeki boşluğu dolduracak ve bu alaşımların ileri teknoloji ve biyomedikal uygulamalardaki potansiyellerinin daha iyi anlaşılmasına katkı sağlayacaktır.

3. MATERYAL VE METOT

3.1. Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi (DFT)

1927'de Thomas ve Fermi tarafından geliştirilen bir teoridir. Bu araştırmacıların çalışmalarına dayanan Hohenberg ve Kohn teoremleri ve bunların devamı olan Kohn-Sham teoremleri yoğunluk fonksiyonel teorisinin temelini oluşturmaktadır. Moleküllerin elektronik yapılarını incelemek ve anlamak için birden fazla teori ortaya konulmuştur. Bu teorilerden en önemli ve sık kullanılanı yoğunluk fonksiyonel teorisi (Zhang ve ark., 2008). Yoğunluk fonksiyonel teorisi (DFT) kuantum mekaniğini modellemek için kullanılan hesaplama yöntemidir (Cramer, 2004).

Yoğunluk fonksiyonel teorisi (DFT), atomik seviyedeki sistemlerde çok cisim problemini çözmek için bir standart haline geldi ve son yıllarda nanotüplerin fiziksel özelliklerinin yanı sıra katıların hacim ve yüzey özelliklerini incelemek için de kullanıldı (Hohenberg ve Kohn, 1964). Born-Oppenheimer yaklaşımında çekirdek-elektron hareketini birbirinden ayıran ve Hohenberg-Kohn (HK) teoreminden geliştirilen DFT (Born ve Heisenberg, 1985), N elektronların birbiriyle olan etkileşimini durum parçacık yoğunluğu $\rho(\vec{r})$ olarak belirtir. Dolayısıyla bir Kohn-Sham (KS) denklem sistemi, Lineer olmayan ve öz-uyumlu tek bir parçacık Schrödinger denkleminin çözümleri, $\{\Psi_i\}$ molekül yörüngeler kümesi ve N elektron sayısı olmak üzere taban durum parçacık yoğunluğu,

$$\rho(\vec{r}) = \sum_{i=1}^N |\Psi_i(\vec{r})|^2 \quad (3.1)$$

Olarak tanımlanır (Kohn ve Sham, 1965). Enerji fonksiyonunun toplamının en aza indirilmesi atomik düzeyde incelenen sistemlerin iyi tanımlanmasını sağlar. Maalesef bütün enerjisi, E_{xc} gibi belli olmayan değiş-tokuş korelasyon fonksiyonuna bağlıdır. Bu işlevsellik hakkında çok az şey bilinmesine rağmen, E_{xc} 'ye yönelik iyi yapılandırılmış yaklaşımların şaşırtıcı derecede etkili olduğu kanıtlandı ve atomik yapıda incelenen sistemin çoğuna uygulandı.

Atomik sisteminin özelliklerinin çoğunluğu onu oluşturan atomların valans yörüngesinde bulunan elektronlar tarafından belirlenir. Sözde-potansiyel yaklaşımı (pseudo-potential approximation) olarak tanımlanan valans ile çekirdeğe en yakın yörüngedeki elektronların yani kor elektronlarının etkili etkileşimlerini belirler ayrıca kor elektronlarının çekirdeğin yerine geçmesini tanımlar. Kohn-Sham denklemlerinin

çözümü, elektron dalga fonksiyonunu temsil edecek uygun bir tabanın seçilmesini gerektirir.

3.2. Çok Cisim Problemi ve Born-Oppenheimer Yaklaşımı

3.2.1. Çok cisim problemi

Elektronların birbiriyle etkileşimleri sayısı arttıkça daha da karmaşık hal alır. Çok elektronlu atom ve molekülleri tam olarak tanıyabilmek için elektronik yapılarını bilmekten geçer bu yüzden maddenin içindeki elektron yapılarını öğrenmek için kuantum yasalarını kullanmamız gerekir. Schrödingerin zamana bağlı denklemi

$$\hat{H}_e \psi_e = E_e \psi_e \quad (3.2)$$

şeklinindedir. \hat{H} Hamiltonyen operatörü, ψ dalga fonksiyonu ve E ise sistemin toplam enerjisini ifade etmektedir. N_i çekirdekli bir sistemde N_e tane elektronun hareketi olarak tanımlanır. Burada elektronik hamiltoniyeni de içine alan Schrödinger denkleminin çözümü;

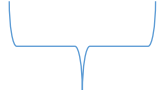
$$H_e \psi_e(\{\vec{r}_i\}; \{\vec{R}_I\}) = E_e(\{\vec{R}_I\}) \psi_e(\{\vec{r}_i\}; \{\vec{R}_I\}) \quad (3.3)$$

Şeklinde olur. denklem (3.3)'deki $\psi_e(\{\vec{r}_i\}; \{\vec{R}_I\})$ elektronik dalga fonksiyonudur. Buradan ortalama bir elektron alanında hareket eden bir çekirdeğin hamiltoniyeni,

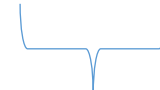
$$(T_n + E_e(\vec{R})) \Phi(\vec{R}) = E \Phi(\vec{R}) \quad (3.4)$$

biçiminde olan Schrödinger denklemi çözümlenerek,


$$H = - \sum_{I=1}^{N_i} \frac{1}{2M_I} \nabla_I^2 + \left\langle - \sum_{i=1}^{N_e} \nabla_i^2 - \sum_{i=1}^{N_e} \sum_{I=1}^{N_i} \frac{Z_I}{|\vec{r}_i - \vec{R}_I|} + \sum_{i=1}^{N_e} \sum_{j>1}^{N_i} \frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \right\rangle$$



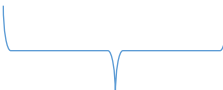
Çekirdeğin
Kinetik Enerjisi



Elektronun
Kinetik Enerjisi

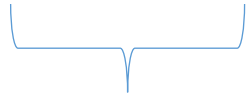


Çekirdek ve
elektronlar
arasındaki Coulomb
çekim alanıdır



Elektronlar
arasındaki Coulomb
itme etkileşimi

$$+ \sum_{I=1}^{N_i} \sum_{J>1}^{N_i} \frac{Z_I Z_J}{|\vec{R}_I - \vec{R}_J|} \quad (3.5)$$



Çekirdekler
arasındaki Coulomb
itme etkileşimi

Z_I çekirdeklerin atom M_I ise kütle numarası, \vec{r}_i ve \vec{R}_I ise elektron ve çekirdeğin koordinatlarıdır.

$$= - \sum_{I=1}^{N_i} \frac{1}{2M_I} \nabla_i^2 + E_e(\{\vec{R}_I\}) \sum_{I=1}^{N_i} \sum_{J>1}^{N_i} \frac{Z_I Z_J}{|\vec{R}_I - \vec{R}_J|} \quad (3.6)$$

3.2.2. Born-Oppenheimer yaklaşımı

1920'li yılların son çeyreğinde Born ve Oppenheimer tarafından önerilmiş olan bu yaklaşım halen günümüzde kullanılmaya devam etmektedir (Born ve Oppenheimer, 1927). Bu yaklaşım, elektronun kütlesinin çekirdeğin kütlesine göre kıyaslanamayacak kadar çok hafif olduğu için elektronun hareketi, çekirdeğe göre çok hızlı olduğunu ifade eder. Bu yüzden çok elektronlu atom ve moleküllerin Schrödinger denkleminin çözümünde çekirdeğin hareketsiz olduğu varsayılır yani çekirdeğin kinetik enerjisi sıfır kabul edilir. Sadece elektronların hareketi hesaplanır. Çekirdekler arasında sabit bir mesafe varsayıldığında, aralarındaki itici potansiyeli tanımlayan terim bir sabite eşit olacaktır. Bu noktada, elektronik Hamiltonyen, Hamiltoniyene eşit olacaktır. Bu senaryoda, elektronik enerjinin ve sabit çekirdek-çekirdek itme teriminin toplamı toplam enerji olacaktır (Hacettepe Üniversitesi, 2024).

Born-Oppenheimer yaklaşımı çok fazla tercih edilmesine rağmen geçerli olmadığı zamanlarda olabilir. Çünkü uyarılmış moleküllerde çekirdeğin hızı o kadar hızlıdır ki elektronun hareketi aynı anda fark edilemez böylelikle çekirdek ile elektronun hareketleri birbirinden ayırt edilemez, bu durumda yaklaşım geçersiz olur (Szabo ve Ostlund, 1989).

3.3. Hartree ve Hartree Fock Yaklaşımı

Bu yaklaşım ilk olarak Hartree tarafından bulunmuş olup daha sonra Fock ve Slater tarafından geliştirildi. Hartree, atom ve iyonların dalga fonksiyonlarını ve enerjilerini tahmin etmek için bir yöntem sundu. Buna öz tutarlı alan yaklaşımı (self-consistent field method) adını verdi (Hartree, 1928). Bu yaklaşımla çok cisimli zamandan

bağımsız Schrödinger denklemini deneysel parametrelere ihtiyaç duymadan temel fizik ilkelerinden yani ab initio temelli bir yaklaşımla çözmeyi amaçladı. Slater ve Fock 1930'da Hartree yaklaşımının dalga fonksiyonunun antisimetri ilkesini uymadığını belirtmişlerdir (Slater, 1930; Fock, 1930). 1930 yılı ve sonrasında Hartree yaklaşımı geliştirilmiştir. Hartree yaklaşımı Slater ve Fock tarafından Pauli dışarlama İlkesi ile getirilen antisimetri durumunu dikkate alarak geliştirdi (Fock, 1930a; Fock, 1930b; Slater, 1929; Slater, 1930). Hartree-Fock yaklaşımı, etkileşmeyen elektron orbitallerine karşı gelen dalga fonksiyonlarını temsil eder (Akıncı, 2007; Fock, 1930). Sistemin dalga fonksiyonu, antisimetrik özellikli olarak seçilir ve seçilen sistemin dalga fonksiyonu, Pauli dışarlama ilkesine göre sistemdeki iki elektronun yer değiştirmesi altında,

$$\psi(\dots, \vec{r}_i, \dots, \vec{r}_j, \dots) = -\psi(\dots, \vec{r}_j, \dots, \vec{r}_i, \dots) \quad (3.7)$$

antisimetrik olmalıdır. Eş. (3.7)'yi sağlayan en basit dalga fonksiyonu Slater determinantı ile verilir ve

$$D(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) = \begin{vmatrix} \psi_1(\vec{r}_1) & \psi_1(\vec{r}_2) & \dots & \psi_1(\vec{r}_N) \\ \psi_2(\vec{r}_1) & \psi_2(\vec{r}_2) & \dots & \psi_2(\vec{r}_N) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \psi_N(\vec{r}_1) & \psi_N(\vec{r}_2) & \dots & \psi_N(\vec{r}_N) \end{vmatrix} \quad (3.8)$$

Eş. 3.8'deki gibi ifade edilir (Slater, 1930). Hartree Fock yaklaşımının avantajı varyasyonel olması, Slater determinantını kullanması ve toplam enerjini minimize eden bir deneme dalga fonksiyonu kullanmasıdır. Buna rağmen bu yaklaşımın çözümü çok zordur ve yoğunluk fonksiyoneli teorisine göre hesaplanması çok uzun sürer.

3.4. Hohenberg -Kohn Teoremi

3.4.1. Birinci Hohenberg-Kohn teoremi: Varlık kanıtı

Akla yatkınlık argümanlarımızın aslında fiziksel olarak garanti edildiğine dair kanıtlar ilk Hohenberg-Kohn teoreminden gelmektedir. Başka bir deyişle, elektron yoğunluğunun Hamilton operatörünü ve diğer tüm sistem özelliklerini benzersiz bir şekilde nasıl etkilediğini göstermektedir. Thomas ve Fermi tarafından tanımlanan elektron yoğunluğunun, Hohenberg ve Kohn tarafından 1964 tarihli çalışmalarında temel değişken olarak kullanılmaya başlanması, yoğunluk fonksiyoneli teorisinin gelişiminde

önemli bir dönüm noktası olmuştur. Doğrudan Hohenberg-Kohn çalışmasından alınan bu ilk teorem, “dış potansiyelin $\vec{V}_{ext}(\vec{r})$ (bir sabit dahilinde) $\rho(\vec{r})$ 'nin benzersiz bir fonksiyonu olduğunu; $\vec{V}_{ext}(\vec{r})$ 'yi sabitlediğinden, tam çok parçacıklı temel durumun $\rho(\vec{r})$ 'nin eşsiz bir fonksiyonu olduğunu görürüz.” Aşağıda, reductio ad absurdum'u temel olarak kullanan veriler yer almaktadır. Bir sabitten daha fazla farklılık gösteren (dalga fonksiyonu ve dolayısıyla yük yoğunluğu potansiyele bir sabit eklendiğinde değişmediğinden, başlangıçtan itibaren iki dış potansiyelin sadece bir sabitle farklılık göstermesini değil) ancak her ikisi de N parçacıklarının dejenere olmayan temel durumlarıyla ilişkili aynı elektron yoğunluğuna $\rho(r)$ yol açan iki dış potansiyel V_{ext} ve V'_{ext} 'yi düşünerek başlıyoruz (orijinal Hohenberg-Kohn argümanının dejenere olmayan temel durumlarıyla ilgili sınırlaması daha sonra kaldırılacaktır, aşağıya bakınız). Bu iki dış potansiyel, sadece dış potansiyel açısından farklılık gösteren $\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}_{ee} + \hat{V}_{ext}$ ve $\hat{H}' = \hat{T} + \hat{V}_{ee} + \hat{V}'_{ext}$ olmak üzere iki Hamiltonyenin bir bileşenidir. E_0 ve E'_0 . $E_0 \neq E'_0$ ile eşdeğer temel durum enerjileridir ve iki Hamiltonyen \hat{H} ve \hat{H}' açıkça iki farklı temel durum dalga fonksiyonuna aittir ve dalga fonksiyonları Ψ ve Ψ' dir. Bununla birlikte, her iki dalga fonksiyonunun da aynı elektron yoğunluğuyla sonuçlandığını varsayıyoruz, ki bu da bir dalga fonksiyonundan yoğunluk oluşturmak için kareleri alındığında, yani $\rho(\vec{r}) = N \int \dots \int |\Psi(\vec{X}_1, \vec{X}_2, \dots, \vec{X}_N)|^2 ds_1 d\vec{x}_2 \dots d\vec{x}_N$ açıkça benzersiz olmadığı göz önüne alındığında oldukça uygulanabilir.

$$V_{ext} \Rightarrow \hat{H} \Rightarrow \Psi \Rightarrow \rho(\vec{r}) \Leftarrow \Psi' \Leftarrow \hat{H}' \Leftarrow \hat{V}'_{ext} \quad (3.9)$$

Sonuç olarak, Ψ ve Ψ' farklıdır ve Ψ' 'yi H' için deneme dalga fonksiyonu olarak kullanabiliriz. Varyasyonel kavram bu nedenle aşağıdakilere sahip olmamızı gerektirir.

$$E_0 < \langle \Psi' | \hat{H} | \Psi' \rangle = \langle \Psi' | \hat{H}' | \Psi' \rangle + \langle \Psi' | \hat{H} - \hat{H}' | \Psi' \rangle \quad (3.10)$$

ya da dış potansiyel iki Hamilton operatörü arasındaki tek fark olduğu için

$$E_0 < E'_0 + \langle \Psi' | \hat{T} + \hat{V}_{ee} + \hat{V}_{ext} - \hat{T} - \hat{V}_{ee} - \hat{V}'_{ext} | \Psi' \rangle \quad (3.11)$$

Bu şu sonuçları doğurur

$$E_0 < E'_0 + \int \rho(\vec{r}) \{V_{ext} - V'_{ext}\} d\vec{r} \quad (3.12)$$

İlgili denklem, (3.10)'dan (3.12)'e kadar olan denklemlerin önceki adımlarının tekrarlanması ve astarsız enerji seviyesi miktarların astarlı enerji seviyesi miktarlarla değiştirilmesiyle elde edilir.

$$E'_0 < E_0 - \int \rho(\vec{r}) \{V_{ext} - V'_{ext}\} d\vec{r} \quad (3.13)$$

Denklem (3.12) ve (3.13) toplandıktan sonra geriye bariz çelişki kalır.

$$E_0 + E'_0 < E'_0 + E_0 \text{ veya } 0 < 0 \quad (3.14)$$

Başka bir deyişle, temel durum yoğunluğu dış potansiyel V_{ext} 'i benzersiz bir şekilde belirler. Bu, iki farklı V_{ext} 'in aynı temel durum elektron yoğunluğunu üretmeyeceğine dair kanıtı tamamlar. $\{N, Z_A, R_A\}$ hakkındaki verileri tutan özellik olarak ρ_0 'ı ekleyebilir ve bunu şu şekilde özetleyebiliriz

$$\rho_0 \Rightarrow \{N, Z_A, R_A\} \Rightarrow \hat{H} \Rightarrow \Psi_0 \Rightarrow E_0 \text{ (ve diğer özellikleri)} \quad (3.15)$$

Şöyle yazabiliriz (bizim durumumuzda mevcut olan dış potansiyel türünü belirtmek için “ N_e ” alt simgesine geri dönüyoruz, ki bu tamamen çekirdeklerden kaynaklanan çekim tarafından tanımlanır), çünkü tam temel durum enerjisi, temel durum elektron yoğunluğunun bir fonksiyoneldir, dolayısıyla bireysel bileşenleri de öyle olmalıdır.

$$E_0[\rho_0] = T[\rho_0] + E_{ee}[\rho_0] + E_{Ne}[\rho_0] \quad (3.16)$$

Bu aşamada, bu enerji ifadesini, çekirdekler ve elektronlar arasındaki çekimden kaynaklanan potansiyel enerji gibi gerçek sisteme bağlı bileşenlere ayırmak faydalı olacaktır, $E_{Ne}[\rho_0] = \int \rho_0(\vec{r}) V_{Ne} d\vec{r}$ ve formlarının N, Z_A ve R_A 'dan bağımsız olması bakımından evrensel olanlara ek olarak,

$$E_0[\rho_0] = \underbrace{\int \rho_0(\vec{r}) V_{Ne} d\vec{r}}_{\text{sisteme bağlı}} + \underbrace{T[\rho_0] + E_{ee}[\rho_0]}_{\text{evrensel olarak geçerli}} \quad (3.17)$$

sisteme bağlı evrensel olarak geçerli

Yeni bir nicelik olan Hohenberg-Kohn fonksiyoneli $F_{HK}[\rho_0]$ 'ı oluşturmak için sistemin münferit bileşenlerini birleştirerek şunları elde ederiz

$$E_0[\rho_0] = \int \rho_0(\vec{r})V_{Ne}d\vec{r} + F_{HK}[\rho_0] \quad (3.18)$$

$F_{HK}[\rho_0]$ bu şekilde tanımlanır. Başka bir şekilde ifade edilirse, Hohenberg-Kohn fonksiyonu keyfi bir yoğunluk $\rho(\vec{r})$ ile beslendiğinde $\langle \Psi | \hat{T} + \hat{V}_{ee} | \Psi \rangle$ beklenti değerini üretir. Bu, elektron-elektron itme operatörü ve kinetik enerjinin toplamıdır ve temel durum dalga fonksiyonu Ψ bu yoğunlukla ilişkilidir (yani Ψ , ρ 'yi veren birçok dalga fonksiyonu arasından en az miktarda enerji sağlayan dalga fonksiyonudur).

$$F_{HK}[\rho_0] = T[\rho] + E_{ee}[\rho] = \langle \Psi | \hat{T} + \hat{V}_{ee} | \Psi \rangle \quad (3.19)$$

Yoğunluk fonksiyonel teorisinin en önemli özelliği, ilk bakışta zararsız görünen bu $F_{HK}[\rho]$ fonksiyoneldir. Bu fonksiyoneller tam olarak bilinseydi; Schrödinger denklemini kabaca değil tam olarak çözüldü. Dahası, söz konusu sistemden tamamen bağımsız evrensel bir fonksiyonel olduğu için, hidrojen atomu için olduğu kadar DNA gibi büyük moleküller için de geçerlidir! Elektron-elektron etkileşimi için fonksiyonel olan $E_{ee}[\rho]$ ve kinetik enerji olan $T[\rho]$, $F_{HK}[\rho]$ içinde yer alır. Ne yazık ki, bu fonksiyonellerin her birinin kesin biçimi tamamen bilinmemektedir. Bununla birlikte, klasik Coulomb kısmı $J[\rho]$ zaten iyi bilindiğinden, en azından ikincisinden çıkarabiliriz.

$$E_{ee}[\rho] = \frac{1}{2} \int \int \frac{\rho(\vec{r}_1)\rho(\vec{r}_2)}{r_{12}} d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 + E_{ncl}[\rho] = J[\rho] + E_{ncl}[\rho] \quad (3.20)$$

Elektron-elektron etkileşimine klasik olmayan katkı, $E_{ncl}[\rho]$, daha önce bahsedilen değişim, Coulomb korelasyonu ve kendi kendine etkileşim düzeltmesinin tüm etkilerini içerir. Yoğunluk fonksiyonel teorisindeki temel zorluk, $T[\rho]$ ve $E_{ncl}[\rho]$ gibi henüz bilinmeyen fonksiyoneller için açık formülasyonlar geliştirmektir. Bu konu çalışmanın önemli bir bölümünü kaplayacaktır.

Sistemin hem taban hem de uyarılmış durumlarını tanımlayan Hamilton operatörünün taban durum yoğunluğu tarafından benzersiz bir şekilde belirlendiğine dikkat edilmelidir. Elektriksel olarak uyarılmış durumların özelliklerini değil, E_0 'ı vermek için tasarlanmış fonksiyonel olan $\int \rho_0(\vec{r})V_{Ne}d\vec{r} + F_{HK}[\rho_0]$ dışında başka fonksiyonellere

ihtiyaç duysak da, tüm durumların özellikleri bu nedenle resmi olarak temel durum yoğunluğu tarafından belirlenir. İkinci Hohenberg-Kohn teoremi, bir sonraki bölümde göreceğimiz gibi, yoğunluk fonksiyonel teorisinin tipik olarak sadece temel hal teorisi olarak anılmasının nedenidir. Bununla birlikte, çekirdeklerin konumları ve yükleri hakkında bilgi sağladığından, yoğunluktan dış potansiyele eşleme yapmak için yalnızca temel hal yoğunluğu kullanılabilir ve uyarılmış bir halin yoğunluğu kullanılamaz.

3.4.2. İkinci Hohenberg-Kohn teoremi: Varyasyonel prensip

Şimdiye kadar temel hal yoğunluğunun prensipte arzu edilen tüm özelliklerini yerine getirmek için yeterli olduğunu gösterdik. Ancak belirli bir yoğunluğun temel durumda aradığımız yoğunluk olduğundan nasıl emin olabiliriz? Hohenberg ve Kohn'un 1964 tarihli katkılarına göre, ikinci teorem bu soruna nasıl yaklaşılması gerektiğine dair önemli bilgiler sunmaktadır. Bu teoreme göre, sadece ve sadece girdi yoğunluğu gerçek temel durum yoğunluğu ρ_0 ise, sistemin temel durum enerjisini sağlayan fonksiyonel $F_{HK}[\rho]$, en düşük enerjiyi sağlar. Doğal olarak bu, varyasyon prensibidir ve mevcut durumda aşağıdaki gibi ifade edilebilir:

$$E_0 \leq E[\tilde{\rho}] = T[\tilde{\rho}] + E_{Ne}[\tilde{\rho}] + E_{ee}[\tilde{\rho}] \quad (3.21)$$

Başka bir deyişle, bu, denklem (3.16)'da verilen fonksiyonelden türetilen enerjinin, $\tilde{\rho}_0(\vec{r}) \geq 0$, $\int \rho(\vec{r}) d\vec{r} = N$ gibi gerekli sınır koşullarını karşılayan ve bazı dış potansiyel V_{ext} ile ilişkili olan herhangi bir deneme yoğunluğu, $\tilde{\rho}(\vec{r})$ için gerçek temel durum enerjisi E_0 'ın bir üst sınırını temsil ettiğini gösterir. Denklem (3.18), ancak ve ancak kesin taban durum yoğunluğu girilirse E_0 'ı verir. Dalga fonksiyonları için geliştirilen varyasyonel kavram, eşitsizliğin (3.21) doğrudan kanıtlanmasında kullanılır. Tüm deneme yoğunlukları $\tilde{\rho}(\vec{r})$ kendi dalga fonksiyonlarını $\tilde{\Psi}$ ve dolayısıyla kendi Hamiltonyenlerini \tilde{H} tanımlar. Artık bu dalga fonksiyonunu, gerçek dış potansiyel V_{ext} 'ten üretilen Hamiltonyen için dalga fonksiyonu olarak düşünmek mümkündür. Sonuç olarak, amaçlanan

$$\langle \tilde{\Psi} | \hat{H} | \tilde{\Psi} \rangle = T[\tilde{\rho}] + V_{ee}[\tilde{\rho}] + \int \tilde{\rho}(\vec{r}) V_{ext} d\vec{r} = E[\tilde{\rho}] \geq E_0[\rho_0] = \langle \Psi_0 | \hat{H} | \Psi_0 \rangle \quad (3.22)$$

sonucunu elde ederiz.

Şimdiye kadar gösterdiklerimizi gözden geçirelim. Bir dış potansiyel V_{ext} ile karakterize edilen bir sistem için, temel durum yoğunluğu tüm özelliklerini belirler. $\int \rho(\vec{r})V_{Ne}d\vec{r} + F_{HK}[\rho]$ fonksiyonu, ρ yoğunluğu ile ilişkili temel durum enerjisine erişim sağlar. $\tilde{\rho}(\vec{r}) \equiv \rho_0(\vec{r})$ için, bu fonksiyonun izin verilen tüm yoğunluklara göre minimum değerine ulaşması için giriş yoğunluğu gerçek temel durum yoğunluğu olmalıdır. Bu varyasyonel tarif, E_0 'ın sistemin akla gelebilecek en düşük enerjisi olduğu gerçeğini açıkça kullandığından, açıkça sadece temel durum enerjisine uygulanabilir (daha spesifik olarak, belirli bir simetri içinde en düşük yatan durumla sınırlıdır). Dolayısıyla, bu yöntem yalnızca temel duruma ilişkin enerji hesaplamalarında kullanılabilir olup, uyarılmış durumların enerji seviyeleri ve özelliklerinin belirlenmesinde sınırlı kalmaktadır.

Bu noktada, daha resmi, teorik bir konuyu ele alalım. Anlayışlı okuyucunun fark etmiş olabileceği gibi, “ve bazı dış potansiyel V'_{ext} ile ilişkili olan” şartını, yoğunlukların varyasyonel yaklaşıma uygunluğuna bir kısıtlama olarak ekledik. Elektron yoğunluklarının sözde V_{ext} – temsil edilebilme sorunu bu kısıtlama ile tanımlanır. Sorun, akla gelen birkaç yoğunluğun hepsinin Hohenberg-Kohn teoremi için uygun olmamasıdır. Yalnızca antisimetrik bir dalga fonksiyonuna ve bir Hamilton operatörüne bir tür dış potansiyelle (ancak daha önce karşılaştığımız potansiyellerle sınırlı olmak zorunda değildir) bağlı olanlar dikkate alınmalıdır. Bu tür yoğunlukların nasıl tanımlanabileceği yakından ilişkili bir konudur. Bu, yoğunluk fonksiyonel teorisinin daha teorik kısımlarının bazılarında önemli bir konudur (örneğin, yoğunlukların V_{ext} - temsil edilebilir olması için hangi kısıtlamaları karşılaması gerektiği şu anda bilinmemektedir), ancak bir uygulama perspektifinden bakıldığında, pek önemli değildir. Bu gereklilik, yoğunluğun harici bir potansiyele açıkça atıfta bulunmadan antisimetrik bir dalga fonksiyonundan kaynaklandığına dair biraz daha az katı bir kriterle ikame edilebilir. N -temsil edilebilir yoğunluklar bu şekilde bilinir. Bu kriter, pratikte tüm gerçek uygulamalarda ortaya çıkan ve hepsi bir şekilde dalga fonksiyonu yaklaşımlarıyla bağlantılı olan tüm yoğunluklar tarafından önemsiz bir şekilde karşılanır. Ne olursa olsun, V_{ext} - veya N - temsil edilebilirlik sorunları, ilgi çekici bir entelektüel zorluk oluştursalar bile, hesaplamalı kimyadan ziyade teorik fiziğe daha uygun oldukları için bizi rahatsız etmeye devam etmeyecektir. (Koch ve Holthausen, 2001).

3.5. Kohn-Sham Denklemleri

Kohn ve Sham, kinetik enerjiyi tam olarak ifade eden bir fonksiyonelin bilinmediği durumlarda, kinetik enerjinin mümkün olan en büyük kısmını doğrudan hesaplamayı ve geri kalan kısmı yaklaşık olarak değerlendirmeyi önermiştir. Bu amaçla, etkileşmeyen fakat aynı elektron yoğunluğuna sahip bir referans sistem tanımlayarak, bu sistemin kesin kinetik enerjisini hesaplamak için $T_{HF} = -\frac{1}{2}\sum_i^N \langle \chi_i | \nabla^2 | \chi_i \rangle$ denklemini kullanmışlardır.

$$T_S = -\frac{1}{2}\sum_i^N \langle \varphi_i | \nabla^2 | \varphi_i \rangle \quad (3.23)$$

Sistemler aynı yoğunluğa sahip olsa bile, $T_S \neq T^{13}$, etkileşmeyen kinetik enerji açıkça etkileşen sistemin gerçek kinetik enerjisine eşit değildir. Bunu açıklamak için Kohn ve Sham, $F[\rho]$ fonksiyonelinin ayrılmasını aşağıdaki gibi tanıtmıştır:

$$F[\rho(\vec{r})] = T_s[\rho(\vec{r})] + J[\rho(\vec{r})] + E_{XC}[\rho(\vec{r})] \quad (3.24)$$

Burada değişim-korelasyon enerjisi veya E_{XC} , denklem (3.24) ile aşağıdaki gibi tanımlanır.

$$E_{XC}[\rho] \equiv (T[\rho] - T_s[\rho]) + (E_{ee}[\rho] - J[\rho]) = T_c[\rho] + E_{ncl}[\rho] \quad (3.25)$$

Klasik olmayan elektrostatik katkılar, T_s ile ifade edilen enerjinin karşılayamadığı kısmı temsil eden T_c aracılığıyla dikkate alınır. Bu katkılar, sistemin toplam kinetik enerjisini daha gerçekçi şekilde modellemeye yardımcı olur. Değişim-korelasyon enerjisi, diğer bir deyişle E_{XC} , sistemin tam olarak tanımlanamayan kuantum mekaniksel etkilerini kapsar. Literatürde bu fonksiyonel hem değişim hem de korelasyon etkilerinin yanı sıra, öz-etkileşim düzeltmeleri ile klasik olmayan kinetik enerji bileşenlerini de içermesi açısından dikkat çeker. Özellikle (3.24) numaralı ifade kapsamında, EXC'nin yalnızca potansiyel enerjiye değil, aynı zamanda sistemin toplam enerji bileşenlerine yönelik daha karmaşık katkılar sunduğu vurgulanmalıdır.

$$\rho_s(\vec{r}) = \sum_i^N \sum_s |\varphi_i(\vec{r}, s)|^2 = \rho_0(\vec{r}) \quad (3.26)$$

T_s , (3.26) denklemdaki orbitaller ve yoğunluk arasındaki yakın ilişkinin gösterdiği gibi ρ 'nun bir fonksiyonu olmalıdır. Buna bakmanın bir başka yolu da kinetik enerji ve dış potansiyel ile etkileşimden kaynaklanan enerjinin, etkileşime girmeyen sistemin enerji ifadesinin yalnızca iki bileşeni olduğunu kabul etmektir. Hohenberg-Kohn teoremine göre toplam enerji için bir yoğunluk fonksiyonu gereklidir. Benzer şekilde, dış potansiyel etkileşimi ρ 'nin açık bir fonksiyonudur. Dolayısıyla, T_s kinetik enerjisinin de yoğunluğun bir fonksiyonu olması beklenir. Ancak, T_s 'nin doğrudan yoğunluk üzerinden ifade edilen açık bir fonksiyonel formu mevcut değildir; denklem (3.23), ρ yoğunluğundan ziyade Kohn-Sham orbitallerini gösterir.

Uygulamada Kohn-Sham yaklaşımının uygulanabilmesi için, etkileşmeyen referans sistemdeki orbitallerin tanımlanması gerekmektedir. Bu amaçla, referans potansiyel V_s , etkileşimli sistem ile aynı elektron yoğunluğunu sağlayacak şekilde belirlenir. Bu tanımlama, orbitallerin yoğunlukla olan bağımlılığını dikkate alarak etkileşmeyen referans sistemin potansiyeli V_s , sistemin gerçek elektron yoğunluğunu sağlayacak bir Slater determinantı oluşturacak şekilde tanımlanmalıdır. Bu sorunu, (3.26) ve (3.23) denklemlerinde gösterildiği gibi orbitallerin bağımlılığını vurgulayarak, etkileşimli, gerçek sistemin enerjisinin formülünü denklem (3.24) ile gösterilen bileşenlerine ayrılması yoluyla gerçekleştirilir.

$$\begin{aligned}
E[\rho(\vec{r})] &= T_s[\rho] + J[\rho] + E_{XC}[\rho] + E_{Ne}[\rho] \\
&= T_s[\rho] + \frac{1}{2} \int \int \frac{\rho(\vec{r}_1)\rho(\vec{r}_2)}{r_{12}} d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 + E_{XC}[\rho] + \int V_{Ne}\rho(\vec{r})d\vec{r} \\
&= -\frac{1}{2} \sum_i^N \langle \varphi_i | \nabla^2 | \varphi_i \rangle + \frac{1}{2} \sum_i^N \sum_j^N \int \int |\varphi_i \rho(\vec{r}_1)|^2 \frac{1}{r_{12}} |\varphi_j \rho(\vec{r}_2)|^2 d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \\
&= E_{XC}[\rho(\vec{r})] - \sum_i^N \int \sum_A^M \frac{Z_A}{r_{1A}} |\varphi_i(\vec{r}_1)|^2 d\vec{r}_1
\end{aligned} \tag{3.27}$$

E_{XC} , bilinmeyen tek terim değişim-korelasyon enerjisidir. Hartree-Fock yaklaşımında olduğu gibi, varyasyonel prensibi kullanarak: $\langle \varphi_i | \varphi_j \rangle = \delta_{ij}$ standart kısıtlayıcı değişkenler göz önüne alındığında, toplam enerjiyi minimize eden orbitaller bulunur. Normalleştirme koşulu altında yapılan bu minimizasyon sonucunda Kohn-Sham tek parçacık denklemleri elde edilir (Parr ve Yang, 1989):

$$\left(-\frac{1}{2} \nabla^2 + \left[\int \frac{\rho(\vec{r}_2)}{r_{12}} d\vec{r}_2 + V_{XC}(\vec{r}_1) - \sum_A^M \frac{Z_A}{r_{1A}} \right] \right) \varphi_i$$

$$= \left(-\frac{1}{2} \nabla^2 + V_{eff}(\vec{r}_1) \right) \varphi_i = \varepsilon_i \varphi_i \quad (3.28)$$

Etkin potansiyel V_{eff} ifadesi, bu denklemi etkileşimsiz referans sistemindeki tek parçacık denklemleriyle karşılaştırdığımızda hemen görülebileceği gibi,

$$\hat{f}^{KS} = -\frac{1}{2} \nabla^2 + V_S(\vec{r}) \quad (3.29)$$

Yukarıdaki (3.29) denklemindeki V_S ile aynıdır.

$$V_S(\vec{r}) \equiv V_{eff}(\vec{r}) = \int \frac{\rho(\vec{r}_2)}{r_{12}} d\vec{r}_2 + V_{XC}(\vec{r}_1) - \sum_A^M \frac{Z_A}{r_{1A}} \quad (3.30)$$

Sonuç olarak, denklem (3.30)'teki gösterilen etkin potansiyelin bileşenleri incelendiğinde, daha sonra tek parçacık denklemlerine dahil etmemiz gereken potansiyel V_S 'yi manipüle edebiliriz. Bu denklemler daha sonra orbitalleri ve dolayısıyla temel hal yoğunluğunu ve enerjisini hesaplamak için enerji ifadesini (3.27) kullanır. Denklem (3.27)'te gösterilen Coulomb terimi, V_{eff} 'in zaten yoğunluğa ve dolayısıyla orbitallere dayandığını gösterir. Kohn-Sham tek elektron denklemleri (3.28) bu nedenle Hartree-Fock denklemleri gibi öz-uyumlu bir çözüm yöntemiyle çözülür.

V_{XC} , değişim-korelasyon enerjisi E_{XC} 'den kaynaklanan potansiyel. E_{XC} 'nin ρ 'ya göre fonksiyonel türevi V_{XC} olduğu için, basitçe şu şekilde ifade edilebilir.

$$V_{XC} \equiv \frac{\delta E_{XC}}{\delta \rho} \quad (3.31)$$

E_{XC} ve V_{XC} 'nin kesin formları biliniyor olsaydı, Kohn-Sham yaklaşımının Schrödinger denkleminin Hamilton operatörü \hat{H} 'nin kesin enerjisini veya doğru özdeğerini sağlayacağını anlamak çok önemlidir fakat ne yazık ki durum böyle değildir. Bu nedenle, yaklaşımı ortaya koyan Hartree-Fock modelinin aksine (dalga fonksiyonunun asla doğru çözümü sağlayamayacak tek bir Slater determinantı olduğu varsayıldığından), Kohn-Sham yöntemi teoride doğrudur, fakat yaklaşım yalnızca ilgili potansiyel V_{XC} ve değişim-korelasyon enerjisi E_{XC} için bilinmeyen fonksiyonel için açık bir form seçmemiz gerektiğinde devreye girer. Bu nedenle, çağdaş yoğunluk fonksiyonel teorisinin temel amacı, bu iki değer için giderek daha doğru yaklaşımlar keşfetmektir.

Kohn-Sham yönteminin temel özellikleri:

Tanım gereği, gerçek, etkileşimli sistemimiz ρ_0 'ın yoğunluğuyla tam olarak eşleşen ve tam temel durumu tek bir Slater determinantı θ_S olan ρ_S yoğunluğuna sahip N parçacıktan oluşan etkileşimsiz bir referans sistemi kuruyoruz.

N tek parçacık denklemleri $\hat{f}^{KS}\varphi_i = \varepsilon_i\varphi_i$ bu Slater determinantını oluşturan orbitallere sahiptir. (3.23)'e göre, bu etkileşimsiz kinetik enerjiyi veya T_S 'yi hesaplamayı mümkün kılar. Tek elektronlu Hamilton operatörünün etkin potansiyeli V_S , $\rho_S = \rho_0$ gereksinimi karşılanacak şekilde seçilmelidir. Sonraki aşamalar bu V_S 'nin nasıl oluşturulacağını bulmaktır.

Denklem (3.25) etkileşen sistemin enerjisini etkileşmeyen sistemin kinetik enerjisine T_S , çekirdeklere atfedilen enerjiye E_{Ne} , klasik elektrostatik elektron-elektron itme enerjisine J ve potansiyel enerjiye kuantum-mekanik katkılardan (kendi kendine etkileşim düzeltmesi, değişim ve korelasyon) ve gerçek kinetik enerjinin T_S tarafından kapsanmayan kısmından oluşan kalana E_{XC} ayırır. (Koch ve Holthausen, 2001).

Bu enerji ifadesinde bağımsız yörünge dalgalanmaları ile ilgili olarak varyasyonel kavram kullanılmaktadır. Elde edilen ifadelerle göre (3.27), etkileşmeyen referans sisteminin doğru orbitallerini elde etmek için gereken etkin potansiyel V_S , tam olarak E_{XC} veya V_{XC} (denklem 3.30), klasik Coulomb potansiyeli, V_C ve çekirdeklerden kaynaklanan potansiyel, V_{Ne} tarafından üretilen potansiyellerin toplamına eşittir.

Bu potansiyellerin her birinin açık biçimlerini bildiğimizi varsayarsak, V_S 'yi ve tek elektron denklemlerinin çözümüyle KS orbitallerini belirleyebiliriz. Bunlar, yoğunluk bakımından gerçek sistemimizle aynı olan etkileşimsiz sistemi karakterize eder. Tüm gerçek dünya durumlarında kesin V_{XC} bilinmediğinden, değişim-korelasyon potansiyeli için bir yaklaşım getirilmelidir.

Denklem (3.26) bize orbitallerin yoğunluğunu verir. Bir kez daha, eğer kesin fonksiyonelleri biliyorsak, bu yoğunluğu enerji denkleminde eklediğimizde sonuçta tam temel durum yoğunluğu ve dolayısıyla tam temel durum enerjisi elde edilir. Ancak, bilinmeyen fonksiyonel E_{XC} göz önüne alındığında, tüm gerçek durumlarda yaklaşımları kullanmak zorunda kalırız.

3.6. Yerel Yoğunluk Yaklaşımı (LDA)

Kohn ve Sham ilk olarak 1965 yılında DFT'nin yerel yoğunluk yaklaşımını (LDA) önermiştir (Bagayoko, 2014). Kohn-Sham denklemlerinin bir sonucu olarak değişim korelasyon enerjisini yalnızca elektron yoğunluğu etkiler (Kohn ve Sham, 1965).

Yerel yoğunluk yaklaşımları (LDA) olarak bilinen yoğunluk fonksiyonel teorisindeki (DFT) değişim-korelasyon (XC) enerji fonksiyoneline yönelik yaklaşımların bir sınıfı, uzaydaki her bir noktadaki elektronik yoğunluk değerine dayanır (yoğunluk türevleri veya Kohn-Sham orbitalleri yerine). XC enerjisinin yerel tahminleri çeşitli yöntemler kullanılarak elde edilebilir.

Öte yandan, Etkileşen elektronlardan oluşan sabit yoğunluklu bir sisteme homojen elektron gazı denir. Spesifik olarak, homojen bir elektron gazının elektron başına değişim korelasyon enerjisi $\epsilon_{xc}^0[n(\vec{r})]$, Hedin ve Lundqvist (Hedin ve Lundqvist, 1971) (Hedin ve Lundqvist, 1972) tarafından çok parçacıklı pertürbasyon teorisi ve Ceperley ve Alder tarafından kuantum Monte-Carlo metodolojisi gibi çeşitli teknikler kullanılarak hesaplanmıştır. ϵ_{xc} 'yi tahmin etmek için en kesin yaklaşım Ceperley ve Alder'in yöntemidir (Ceperley ve Alder, 1980). Homojen elektron gazı (HEG) modeli son derece başarılı yerel yaklaşımlar üretmiştir. Bu söz konusu olduğunda, LDA tipik olarak HEG yaklaşımından türetilen ve daha sonra pratik sistemlere (katılar ve moleküller) uygulanan fonksiyonellerle birbirinin yerine kullanılır.

Spin polarizasyonu olmayan bir sistem için değişim-korelasyon enerjisi yerel yoğunluk yaklaşımı genellikle şu şekilde ifade edilir.

$$E_{xc}^{LDA}[\rho] = \int \rho(r) \epsilon_{xc}(\rho(r)) dr \quad (3.32)$$

Burada ρ yük yoğunluğuna sahip homojen bir elektron gazının parçacık başına değişim-korelasyon enerjisi ϵ_{xc} ile ve elektronik yoğunluk ρ ile gösterilir. Değişim-korelasyon enerjisi doğrusal olarak korelasyon ve değişim kısımlarına ayrılır.

$$E_{xc} = E_X + E_C \quad (3.33)$$

Farklı bölümlere ayrılır. Bunlar Hartree biriminden;

$$\epsilon_{xc} = -\frac{0,4582}{\tau_s} \quad (3.34)$$

$$E_C = \begin{cases} -0,0480 + 0,031 \ln \tau_s & , \tau_s \geq 1 \\ -0,0116\tau_s + 0,0020\tau_s \ln \tau_s & , \tau_s < 1 \end{cases} \quad (3.35)$$

Bu şekilde gösterilir. Formüllerde yer alan τ_s yoğunlukla bağlantılı olup, bağlantı

$$\rho^{-1} = \frac{4\pi}{3} \tau_s^3 \quad (3.36)$$

Bu şekildedir.

Öyle ki E_C ve E_X için farklı ifadeler aranır. HEG, değişim terimi için basit bir analitik form varsayar. ε_c için birçok farklı tahmin, korelasyon yoğunluğu için yalnızca sınırlayıcı ifadelerin tam olarak bilinmesinden kaynaklanmaktadır.

Herhangi bir yaklaşık değişim-korelasyon fonksiyonelinin değişken olmayan yoğunluklar için HEG'nin kesin sonuçlarını yeniden üretmesi arzu edildiğinden, değişim-korelasyon enerjisine hibrit fonksiyoneller veya genelleştirilmiş gradyan yaklaşımları (GGA) gibi daha karmaşık yaklaşımlar oluştururken yerel yoğunluk yaklaşımları çok önemlidir. Bu nedenle, LDA'lar sıklıkla bu fonksiyonellerin açık bir parçasıdır (Wikipedia, 2024).

3.7. Genelleştirilmiş Gradyent Yaklaşımı (GGA)

Atomların, moleküllerin ve katıların yerel spin yoğunluğu (LSD) tanımıyla karşılaştırıldığında, değişim-korelasyon enerjisi genelleştirilmiş gradyan yaklaşımları (GGA'lar) ile daha iyi tanımlanır. Temel bir GGA'nın doğrudan türetilmesindeki tüm parametreler (LSD'dekiler hariç) temel sabitlerdir. Perdew-Wang (1991) GGA'sının temelini oluşturan karmaşık yapının yalnızca geniş yönlerinden bahsedilmektedir. Tekdüze elektron gazının doğrusal tepkisinin tam bir tanımı, tekdüze ölçekleme altında uygun davranış ve daha yumuşak bir potansiyel, PW91'e göre yapılan iyileştirmeler arasındadır.

Atomların, moleküllerin ve katıların temel hal özelliklerinin öz-tutarlı-alan elektronik yapı simülasyonları için Kohn-Sham yoğunluk fonksiyonel teorisi sıklıkla kullanılır. Bu teori yalnızca, $n_\uparrow(r)$ ve $n_\downarrow(r)$ elektron spin yoğunluklarının bir fonksiyonu olarak değişim-korelasyon enerjisi $E_{xc} = E_X + E_C$ 'nin bir yaklaşımını gerektirir. En sık kullanılan fonksiyoneller, kademeli olarak değişen yoğunluklarla iyi çalışan bir forma sahiptir: yerel spin yoğunluğunun (LSD) tahmin edilmesi

$$E_{xc}^{LDA}[n_\uparrow, n_\downarrow] = \int d^3r n \varepsilon_{xc}^{unif}(n_\uparrow, n_\downarrow) \quad (3.37)$$

Buradan $n = n_{\uparrow} + n_{\downarrow}$, ve genelleştirilmiş gradyan yaklaşımı,

$$E_{xc}^{GGA}[n_{\uparrow}, n_{\downarrow}] = \int d^3r f(n_{\uparrow}, n_{\downarrow}, \nabla n_{\uparrow}, \nabla n_{\downarrow}) \quad (3.38)$$

Toplam enerjiler, atomizasyon enerjileri, enerji bariyerleri ve yapısal enerji farklılıkları LSD'ye kıyasla GGA'lar tarafından genellikle iyileştirilir. GGA'lar bağları yumuşatma ve uzatma yeteneğine sahiptir, bu da LSD tahminini bazen aşırı düzeltebilir ve bazen de düzeltebilir. Genel olarak, yoğunluk homojensizliği GGA'lar tarafından LSD'ye tercih edilir (Perdew ve ark., 1996).

Araştırmacılar, LDA'da ϵ_{xc} sonucu farklı olmamasına rağmen, GGA'da f fonksiyonu bir tane değildir ve çok fazla GGA fonksiyoneli önermiştir. Herhangi bir atomik yapılandırma için çeşitli fonksiyoneller farklı sonuçlar vereceğinden, hesaplamada hangi fonksiyonelin kullanıldığını belirtmek gerekir.

3.8. Quantum Espresso Programı

Quantum ESPRESSO, nano ölçekli elektriksel yapı hesaplamaları ve malzeme modellemesi için açık kaynaklı bir bilgisayar kodu paketidir. Yoğunluk-fonksiyonel teorisi, düzlem dalgaları ve psödopotansiyelleri kullanır.

Quantum ESPRESSO, bağımsız ve birlikte çalışabilir programları dağıtan açık kaynaklı bir proje haline gelmiştir. Quantum ESPRESSO dağıtımı, “tarihsel” bir çekirdek bileşen seti, daha karmaşık işlevleri yerine getiren bir eklenti koleksiyonu ve çekirdek bileşenlerle birlikte çalışması amaçlanan bir dizi üçüncü taraf paketinden oluşur. Elektronik yapı hesaplamaları konusunda çalışan araştırmacılar, kendi kodlarını yazarak veya fikirlerini mevcut kodlara dahil ederek projeye katkıda bulunmaya teşvik edilmektedir.

Quantum ESPRESSO Vakfı, bu açık kaynaklı kodlamayı dünya çapında çeşitli kuruluşlarla ortaklaşa koordine etmektedir. Scuola Internazionale Superiore di Studi Avanzati (SISSA), Abdus Salam Uluslararası Teorik Fizik Merkezi (ICTP), CINECA Ulusal Süper Bilgisayar Merkezi, Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne ve Oden Institute for Computational Engineering and Sciences, The University of Texas at Austin, İtalyan Ulusal Araştırma Konseyi (CNR) ile iş birliği içinde bu kuruluşun mevcut üyeleridir. ICTP ile, Quantum ESPRESSO kodları üzerinde uygulamalı eğitimlerin yanı sıra aylık olarak güncel elektronik yapı teorisi üzerine dersler verilmektedir.

Quantum ESPRESSO, en güçlü paralel makinelerin yanı sıra iş istasyonları ve kişisel bilgisayarlar da dahil olmak üzere çok çeşitli mimariler üzerinde çalışır.

Temel durum hesaplaması:

- Öz-tutarlı toplam enerjiler, basınçlar, gerilmeler ve Kohn-Sham orbitalleri;
- PAW (Projector Augmented Waves) ile ayrılabilir norm koruyucu ve ultrasoft (Vanderbilt) psödopotansiyeller;
- LDA, tam değişim (HF), meta-GGA, hibrit fonksiyoneller (PBE0, B3LYP, HSE) ve genelleştirilmiş gradyan düzeltmeleri (PW91, PBE, B88-P86, BLYP) çeşitli değişim-korelasyon fonksiyonelleri arasındadır;
- Grimme'nin D2 ve D3, Tkatchenko-Scheffler, XDM (değişim deliği dipol momenti) ve yerel olmayan VdW fonksiyonelleri (vdw-DF) VdW düzeltmelerine örnektir;
- Hubbard U (DFT+U, DFT+U+V);
- Berry'nin faz polarizasyonu;
- Spin-yörünge eşleşmesi ve doğrusal olmayan manyetizma;

Potansiyel enerji yüzeyleri, moleküler dinamikler ve yapısal optimizasyon:

- Yarı-Newton BFGS ön koşullandırılmalı GDIIS;
- Sönümlü dinamikler;
- Car-Parrinello Moleküler Dinamikleri (CP paketi);
- Born-Oppenheimer Moleküler Dinamiği (PWscf paketi);
- Nudged Elastic Band (NEB) yöntemi;

Elektrokimya ve özel sınır koşulları:

- Etkin Tarama Ortamı (EYM) yöntemi;
- ESM-RISM yöntemi;
- Environ eklentisi ile çevre efektleri ;

Tepki özellikleri (yoğunluk-fonksiyonel bozulma teorisi):

- Herhangi bir dalga vektöründe fonon frekansları ve özvektörler;
- Tam fonon dispersiyonları; gerçek uzayda atomlar arası kuvvet sabitleri;
- Translasyonel ve rotasyonel akustik toplam kuralları;
- Etkin yükler ve dielektrik tensörler;
- Elektron-fonon etkileşimleri ve EPW ile ilgili özellikler;
- D3Q paketi kullanılarak üçüncü dereceden anharmonik fonon ömürleri ;
- Kızılötesi ve (rezonanssız) Raman kesitleri;
- QE-GIPAW paketi kullanılarak EPR ve NMR kimyasal kaymaları ;

- 2 boyutlu heteroyapılar için fononlar (referans);
- Manyetik uyarımlar (TurboMagnon paketi);

Spektroskopik özellikler:

- K-kenar, L1 ve L2,3 -kenar X-ışını Soğurma Spektrumları (XSpectra paketi);
- Zaman Bağımlı Yoğunluk Fonksiyonel Bozulma Teorisi (TurboTDDFT paketi);
- Elektron enerji kaybı spektroskopisi (TurboEELS paketi);
- Çok-Cisim Pertürbasyon Teorisi ile elektronik uyarımlar (GWL paketi);
- YAMBO paketi kullanılarak Çok-Cisim Pertürbasyon Teorisi ile elektronik

uyarımlar ;

- Koopman'ın uyumlu fonksiyonelleri (KCW paketi);

Kuantum Taşımacılığı:

- Balistik Taşıma (PWCOND paketi);
- WanT kodunu kullanarak, Maksimum Yerelleştirilmiş Wannier Fonksiyonlarından Tutarlı Taşıma ;

• WANNIER90 kodunu kullanarak maksimum yerelleştirilmiş Wannier fonksiyonları ve taşıma özellikleri ;

- KGEC koduna göre Kubo-Greenwood elektriksel iletkenliği ;

Foto uyarılmış yalıtkanları simüle etmek için İki kimyasal potansiyele sahip kısıtlanmış DFPT

• Foto uyarılmış yalıtkanları simüle etmek için İki Kimyasal Potansiyele sahip Kısıtlanmış DFPT (Quantum ESPRESSO, 2025).

3.9. Heusler Alaşımları: Yapısal Karakteristikleri, Fonksiyonel Özellikleri ve Biyomedikal Uygulamalara Yönelik Geleceği

Heusler alaşımları, ilk olarak 20. yüzyılın başlarında Fritz Heusler tarafından tanımlanmış olup, yapısal çeşitlilikleri ve sıra dışı fiziksel özellikleri ile dikkat çeken intermetalik bileşiklerdir. Ferromanyetik davranış sergileyen ilk Heusler bileşiği, manyetik elementler içermemesine rağmen bu özelliği göstermesiyle bilimsel ilgiyi üzerine çekmiştir (Graf ve ark., 2011). Genel formülleri X_2YZ (tam Heusler) veya XYZ (yarım Heusler) olan bu alaşımlar, X ve Y geçiş metalleri ile Z grubunun çoğunlukla p-blok elementlerden oluştuğu bileşimlerden meydana gelir.

Kristal yapı itibariyle, tam Heusler alaşımları genellikle $L2_1$ tipi yüzey merkezli kübik yapıya sahiptir. Bu düzen, yüksek simetriye sahip olması sayesinde hem mekanik dayanıklılığı hem de elektronik düzenliliği artırır (Galanakis ve ark., 2002). Yarım

Heusler alařımlarında ise C_{1b} tipi yapı gözlemlenir. Bu düzen farklı atoma sahip alt örgüler içerdiğinden, alařım içerisindeki atomların konumlandırılması elektronik ve manyetik özellikler üzerinde belirleyici olmaktadır. Özellikle spin polarizasyonu yüksek olan Heusler bileřikleri, spintronik uygulamalarında potansiyel aday malzemelerdir (Felser ve ark., 2007).

Elektronik yapı bakımından, Heusler alařımları çok çeřitli davranıřlar gösterebilir. Bazı bileřikler tam yarı-metalik özellik sergileyerek bir spin kanalında iletken, diđerinde yalıtkan özellik gösterebilir. Bu durum, spin akımı taşıma yeteneđini artırarak spin bazlı elektronik cihazlarda tercih edilme sebeplerinden biri olmuřtur (Ouardi ve ark., 2013). Diđer taraftan, bazı Heusler bileřikleri yarı iletken veya spin gapless yarı iletken özellikler sunarak spintronikte enerji verimliliđi bakımından avantaj yaratır.

Enerji sistemlerinde ise, özellikle yarı Heusler tipi alařımlar termoelektrik uygulamalar için arařtırılmaktadır. Yüksek Seebeck katsayısı, düşük ısıl iletkenlik ve optimum taşıyıcı konsantrasyonu gibi özellikleri sayesinde, TiNiSn ve benzeri bileřikler enerji geri kazanım sistemlerinde kullanılmaktadır (Snyder ve Toberer, 2008). Dopant ekleme, atom düzenleme ve nanoyapı mühendisliđi ile performans iyileřtirmeleri sađlanmakta, bu da onları atık ısıdan elektrik üretimi için ideal adaylar haline getirmektedir (Shi ve ark., 2011).

Heusler alařımlarının bir diđer dikkat çekici yönü, bazı bileřiklerinin manyetik řekil hafıza alařımı olarak görev alabilmesidir. Özellikle Ni-Mn-Ga bileřenleri, manyetik alan etkisiyle biçim deđiřtirme yeteneđine sahiptir. Bu özellik, hassas kontrol gerektiren sistemlerde ve mikroaktüatör tasarımlarında kullanılmasına olanak tanır (Winterlik ve ark., 2008).

Son yıllarda artan ilgiyle birlikte, Heusler alařımlarının biyomedikal uygulamalarda da deđerlendirilmesi gündeme gelmiřtir. Manyetik hipertermi tedavisi, hedefli ilaç taşıma sistemleri ve biyosensör teknolojilerinde kullanılacak özellikler, bu malzemelerin tıpta işlevsel hale getirilmesini mümkün kılmaktadır (Périgo ve ark., 2015). Özellikle biyouyumlu Heusler bileřiklerinin geliřtirilmesiyle, vücut içi ortamlarda kararlılık ve fonksiyonelliđin bir arada sađlanması hedeflenmektedir. Bu bağlamda, alařım bileřimlerinin yeniden tasarlanması, toksisite analizleri ve yüzey modifikasyonu gibi arařtırmalar ön plana çıkmaktadır.

Günümüzde yapay zekâ destekli malzeme tarama yöntemleri ve kuantum hesaplama teknikleri, Heusler alařımlarının potansiyel uygulama alanlarını daha da

geniřletmektedir. Özellikle DFT (Yoęunluk Fonksiyonel Teorisi) hesaplamaları sayesinde yüzlerce yeni bileřięin teorik özellikleri incelenebilmekte, böylece deneysel arařtırmalar yönlendirilebilmektedir (Wollmann ve ark., 2014; Kübler ve Felser, 2016). Gelecek yıllarda, biyomedikal alanlarda kullanıma uygun yeni nesil Heusler bileřiklerinin geliřtirilmesi, kiřiselleřtirilmiř tıbbi teknolojilerin yaygınlařmasına katkı saęlayabilir.

Sonuç olarak, Heusler alařımları sahip oldukları çok yönlü özellikler sayesinde yalnızca fizik ve malzeme mühendislięi için deęil, aynı zamanda saęlık, enerji ve nanoteknoloji gibi disiplinler için de önemli bir arařtırma konusudur. Yapısal esneklikleri ve uyarlanabilir elektronik-mekanik özellikleri, onları ileri teknoloji uygulamalarında vazgeçilmez malzemeler arasına yerleřtirmiřtir. Gelecekte biyomedikal alanlardaki geliřmelerle birlikte bu alařımların insan yařamına doğrudan katkı saęlayan çözümler sunması beklenmektedir.

4. BULGULAR VE TARTIŞMA

Bu çalışmada yapılan tüm hesaplamalar, yoğunluk fonksiyoneli teorisi (DFT) temelinde çalışan *Quantum ESPRESSO* yazılım paketi kullanılarak gerçekleştirilmiştir (Giannozzi ve ark., 2009; Giannozzi ve ark., 2017). Elektronlar arası değişim ve korelasyon etkilerinin tanımlanmasında, Genelleştirilmiş Gradyan Yaklaşımı (GGA) çerçevesinde Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE) değiş-tokuş-korelasyon fonksiyoneli tercih edilmiştir (Perdew ve ark., 1996). Düzlem dalga temelli hesaplamalarda, dalga fonksiyonları için düzlem dalga kesme enerjisi 65 Ry, yük yoğunluğu için ise 700 Ry olarak belirlenmiştir. Elektronik yapı analizlerinde Methfessel-Paxton yaklaşımı kullanılmış ve smearing değeri 0.01 Ry olarak atanmıştır (Methfessel ve Paxton, 1989). Brillouin bölgesi, Monkhorst-Pack yöntemi ile $12 \times 12 \times 12$ k-noktası ağı kullanılarak örneklenmiştir (Monkhorst ve Pack, 1976). Tüm hesaplamalarda spin polarizasyonu dikkate alınmış olup, atomlara başlangıç manyetizasyonları tanımlanmıştır (Mg: 0.0, V: 0.2, Pt: 0.2). Toplam enerji hesaplamalarında yüksek doğruluk elde edebilmek amacıyla yakınsama kriteri 10^{-12} eV seviyesinde tutulmuştur. Yapı optimizasyonunun ardından, fonon özelliklerini ve termodinamik davranışları analiz etmek amacıyla *thermo_pw* modülü kullanılmıştır (Dal Corso, 2014; Dal Corso, 2016). Fonon hesaplamaları sırasında q-noktası ağı $2 \times 2 \times 2$ olarak belirlenmiş ve sistemin titreşim modları bu kılavuzda tanımlanan kontrol dosyaları aracılığıyla elde edilmiştir.

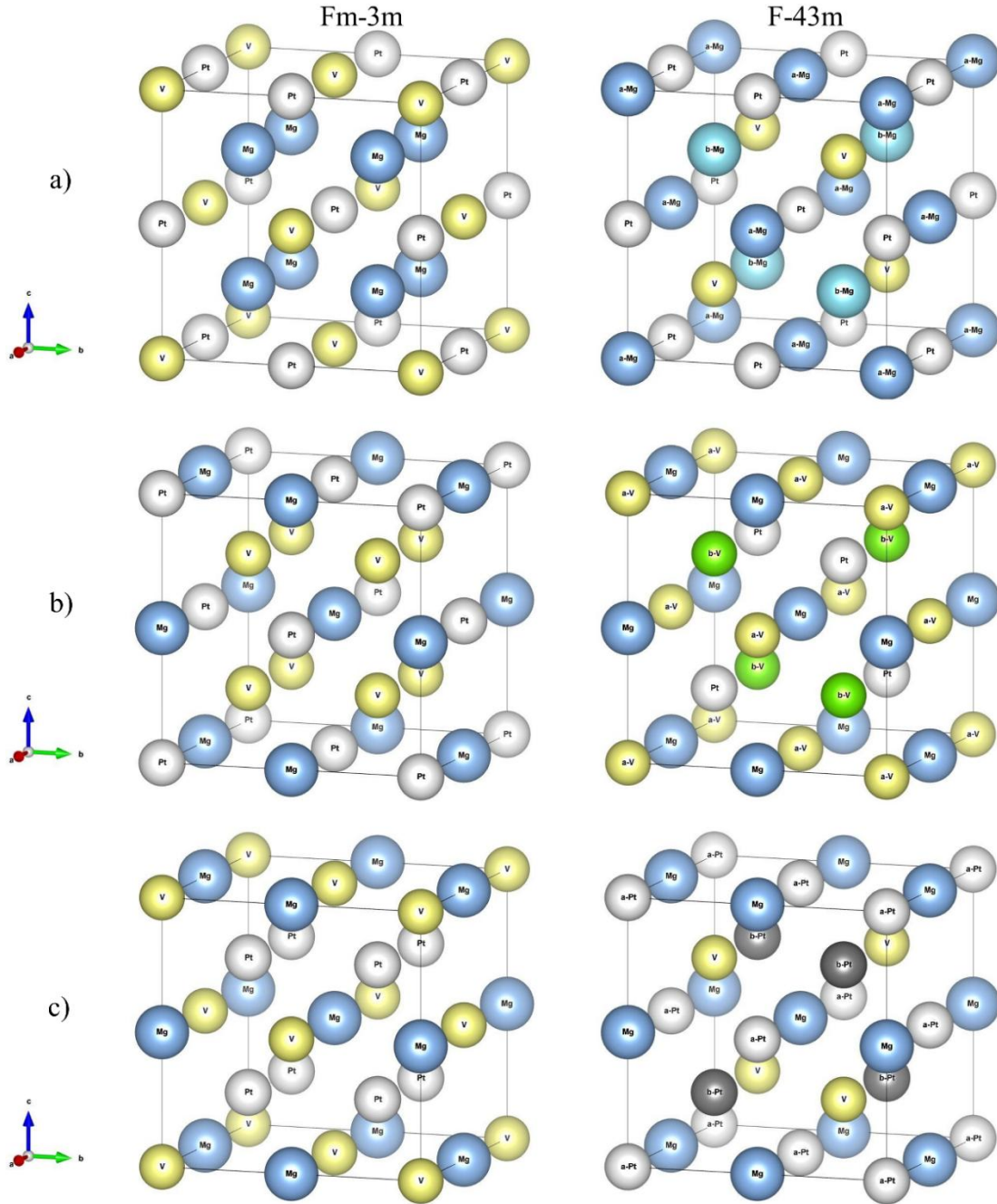
Tüm hesaplamalar sırasında spin durumları gözetilmiş, manyetik etkiler sistemin elektronik ve titreşimsel özellikleriyle birlikte değerlendirilmiştir.

4.1. Mg_2VPt , MgV_2Pt ve $MgVPt_2$ Alaşımlarının Yapısal Özellikleri

Tablo 4.1. Mg_2VPt , MgV_2Pt ve $MgVPt_2$ alaşımlarının örgü sabitleri (a_0) ve toplam manyetik momentleri (M_T).

Alaşımlar	Referanslar	Uzay grubu	a_0 (Å)	M_T (μ_B)
Mg_2VPt	Bu Çalışma	Fm-3m	6.441	3.38
	OQMD ¹	Fm-3m	6.413	3.37
	Bu Çalışma	F-43m	6.352	1.00
	OQMD ¹	F-43m	6.335	1.01
MgV_2Pt	Bu Çalışma	Fm-3m	6.303	4.12
	OQMD ¹	Fm-3m	6.259	4.07
	Bu Çalışma	F-43m	6.212	1.97
$MgVPt_2$	Bu Çalışma	Fm-3m	6.288	1.77
	ODMD ¹	Fm-3m	6.222	1.77
	Bu Çalışma	F-43m	6.272	0.99
	OQMD ¹	F-43m	6.259	1.00

¹(Saal ve ark., 2013; Kirilin ve ark., 2015)



Şekil 4.1. Mg_2VPt , MgV_2Pt ve $MgVPt_2$ alaşımlarının Fm-3m ve F-43m uzay gruplarındaki kristal yapısı

Bu çalışmada Mg_2VPt , MgV_2Pt ve $MgVPt_2$ alaşımları tam Heusler (Fm-3m) ve ters Heusler (F-43m) yapılarında incelenmiştir. Yapısal optimizasyonlar sonucunda elde edilen örgü sabitleri (a_0) ve toplam manyetik momentler (M_T), kristal simetrisinin ve atomik yerleşimin fiziksel özellikler üzerindeki belirleyici etkisini ortaya koymaktadır. Şekil 4.1.'de incelenen alaşımların Fm-3m ve F-43m yapılarındaki kristal örgüleri sunulmaktadır. Fm-3m yapısı, yüksek simetriye sahip tam Heusler tipi düzenli bir

yerleşim gösterirken, F-43m yapısı antisite bozukluklar içeren ters Heusler yapıyı temsil etmektedir.

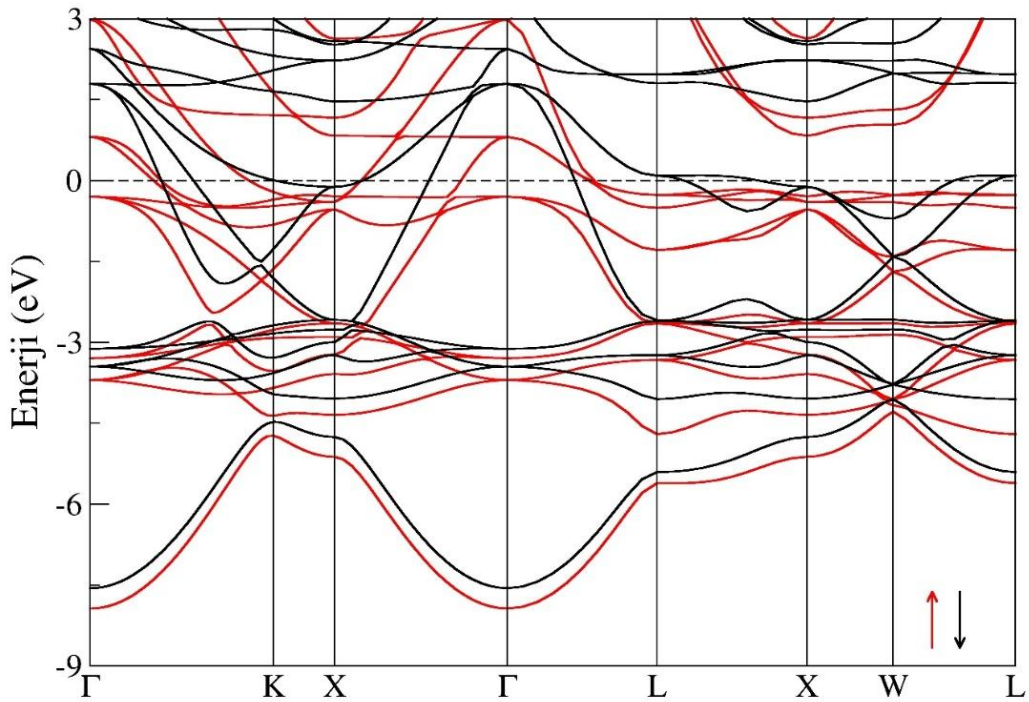
Tablo 4.1’de hem bu çalışmada hesaplanan hem de OQMD veritabanından elde edilen teorik değerler karşılaştırmalı olarak verilmiştir. OQMD (Open Quantum Materials Database) verileri tamamen teorik olarak hesaplanmış olup, farklı metodolojik yaklaşımlar (örneğin kılavuz dalga seti seçimi, kesme enerjisi, k nokta ağı vb.) nedeniyle küçük sapmalar göstermesi beklenmektedir. Fm-3m yapılarında bu çalışmada elde edilen örgü sabitleri, OQMD verileriyle oldukça uyumludur; farklar genellikle %1’in altındadır. Bu durum hesaplamaların güvenilirliğini göstermektedir. Ters Heusler (F-43m) yapılarında da benzer şekilde uyumlu sonuçlar elde edilmiştir. Manyetik moment değerlerinde de OQMD ile bu çalışma arasında oldukça küçük farklar gözlenmiş, genel eğilimlerin korunduğu tespit edilmiştir. Örneğin, MgV₂Pt alaşımı Fm-3m yapısında her iki çalışmada da yüksek manyetik moment sergilerken, F-43m yapısında belirgin bir azalma gözlenmektedir. Bu tutarlılık, hesaplamaların sistematikliğini ve doğruluğunu teyit etmektedir.

Mg₂VPt, MgV₂Pt ve MgVPt₂ alaşımları; içerdiği Mg ve Pt gibi biyoyumlu elementler nedeniyle biyomedikal uygulamalar açısından dikkat çekicidir. Özellikle Mg, vücutta çözünür ve kemik doku ile yüksek uyum gösteren bir metaldir. Pt ise kimyasal kararlılığı ve doku ile etkileşimsizliği nedeniyle uzun vadeli implant uygulamalarında sıkça tercih edilmektedir. V elementi ise potansiyel toksisiteye sahip olsa da alaşım içerisindeki oranı ve bağlanma durumu biyolojik etkiyi belirleyici olacaktır. Bu nedenle Mg-V-Pt alaşımlarının biyoyumluluğu, yapısal ve manyetik istikrar kadar element dağılımı ve çözünürlük özelliklerine bağlıdır. Özellikle F-43m yapılarında gözlenen düşük manyetik moment, bu alaşımların manyetik rezonans gibi ortamlarda kullanılabilirliğini artırabilir. Sonuç olarak, bu alaşımlar potansiyel biyoyumlu malzeme adayları arasında yer almakta olup, deneysel biyoyumluluk testleriyle desteklenmeleri önerilmektedir.

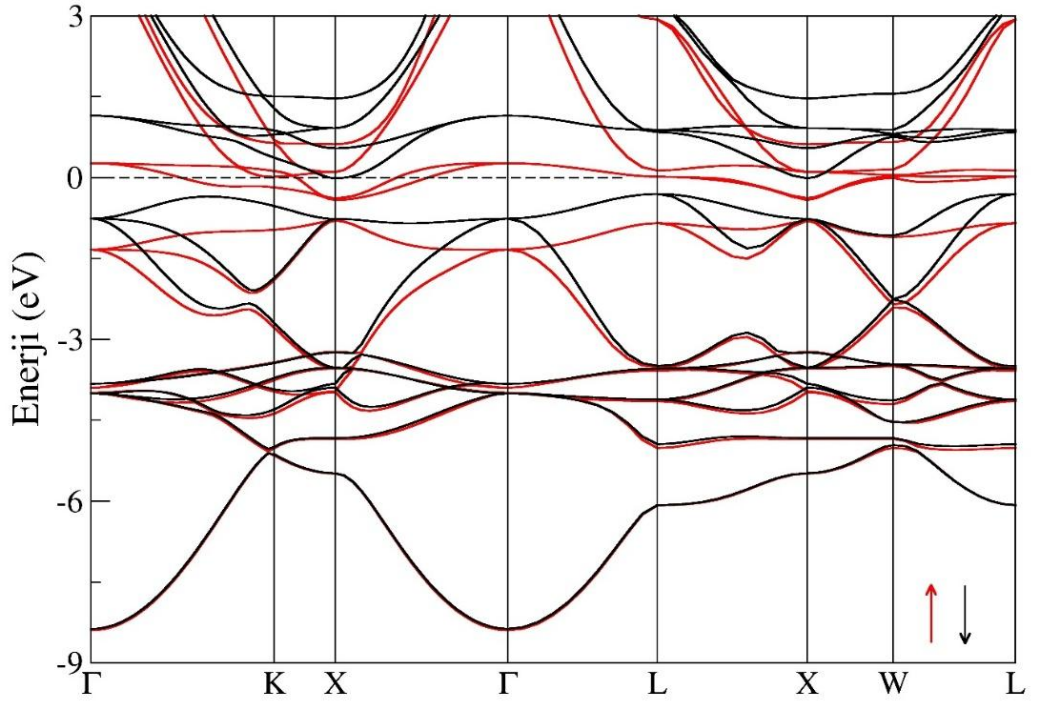
4.2. Mg₂VPt, MgV₂Pt ve MgVPt₂ Alaşımlarının Elektronik Özellikleri

Bu bölümde Mg₂VPt, MgV₂Pt ve MgVPt₂ alaşımlarının tam Heusler (Fm-3m) ve ters Heusler (F-43m) kristal yapılarındaki elektronik bant yapıları ile toplam ve kısmi durum yoğunluğu (TDOS/PDOS) analizleri sunulmaktadır. Şekil 4.2., 4.3., 4.6., 4.7., 4.10. ve 4.11. bant yapıları, Şekil 4.4., 4.5., 4.8., 4.9., 4.12. ve 4.13. ise ilgili durum yoğunluğu eğrileri yer almaktadır.

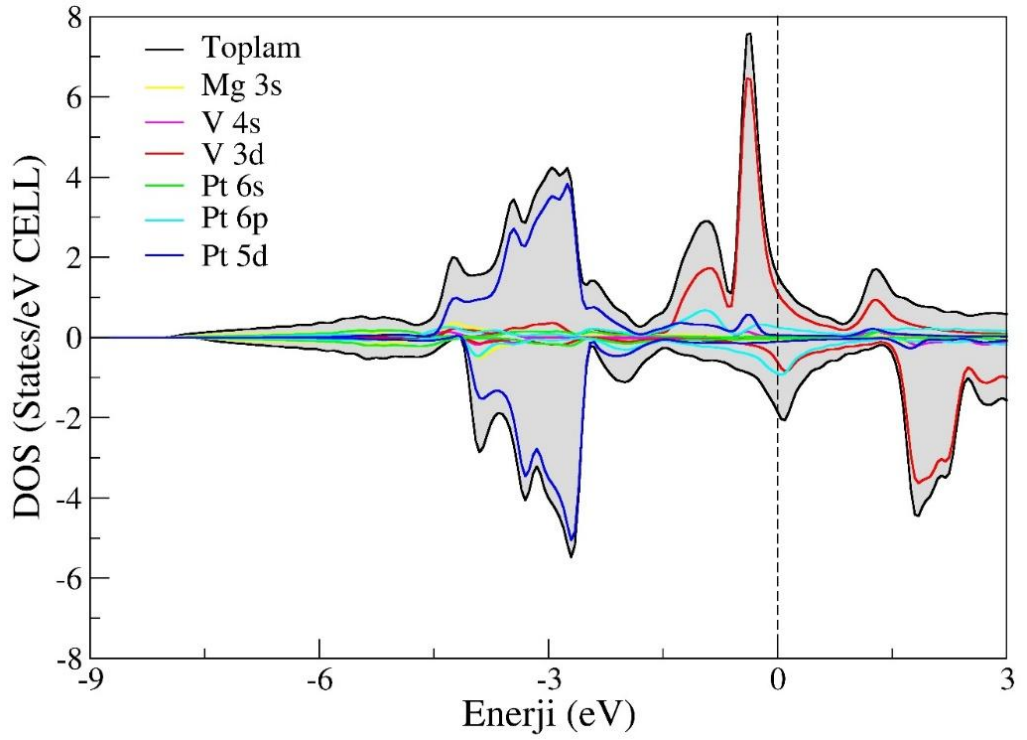
Mg₂VPt Alařımı; tam Heusler (Fm-3m) yapıda elde edilen bant yapısı (řekil 4.2.), Mg₂VPt alařımının metalik karaktere sahip olduđunu göstermektedir. Hem yukarı hem de ařađı spin durumlarında Fermi seviyesini kesen enerji bantları mevcuttur. Bu da sistemin her iki spin yönelimi için de iletkenlik özelliđi gösterdiđini ortaya koyar. Durum yoğunluđu grafiđide (řekil 4.4) bu sonucu desteklemektedir; her iki spin durumu için de Fermi seviyesinde durum yoğunluđu sıfırdan büyüktür. Özellikle V-3d ve Pt-6p orbitallerinin Fermi seviyesine yakın bölgelerde yoğun katkı sađladıđı gözlemlenmiřtir. Mg atomlarının katkısı ise oldukça düřüktür. Bu alařımın, ters Heusler (F-43m) yapısında elde edilen bant yapısı (řekil 4.3), Mg₂VPt alařımının yarı-metalik özellik gösterdiđini ortaya koymaktadır. Spin ařađı durumunda Fermi seviyesi bir yasak enerji aralıđı yer almakta, spin yukarı durumunda ise valans ve iletkenlik bantları Fermi seviyesini kesmektedir. Bu yapı, yalnızca bir spin durumunda iletkenlik gösteren sistemlerde gözlenen tipik yarı-metal davranıřıdır. Durum yoğunluđu (řekil 4.5) bu durumu açıkça yansıtmaktadır; spin ařađı durumunda Fermi seviyesinde durum yoğunluđu yokken, spin yukarı durumunda belirgin bir durum yoğunluđu mevcuttur. Bundan dolayı Fermi seviyesi civarında bu malzeme % 100 spin polarizasyonu göstermektedir. Bu özellik, Mg₂VPt alařımını potansiyel bir spintronik malzeme adayı haline getirmektedir.



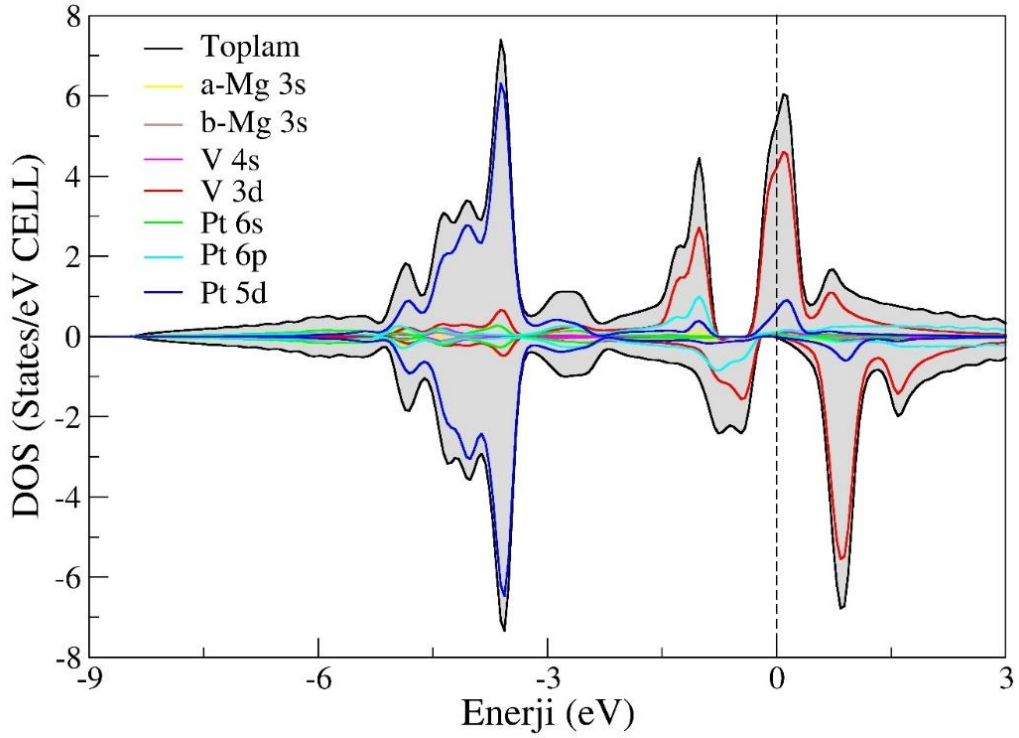
řekil 4.2. Mg₂VPt tam Heusler alařımının yüksek simetri yönelimleri boyunca elektronik bant eđrileri.



Şekil 4.3. Mg_2VPt ters Heusler alaşımının yüksek simetri yönelimleri boyunca elektronik bant eğrileri.

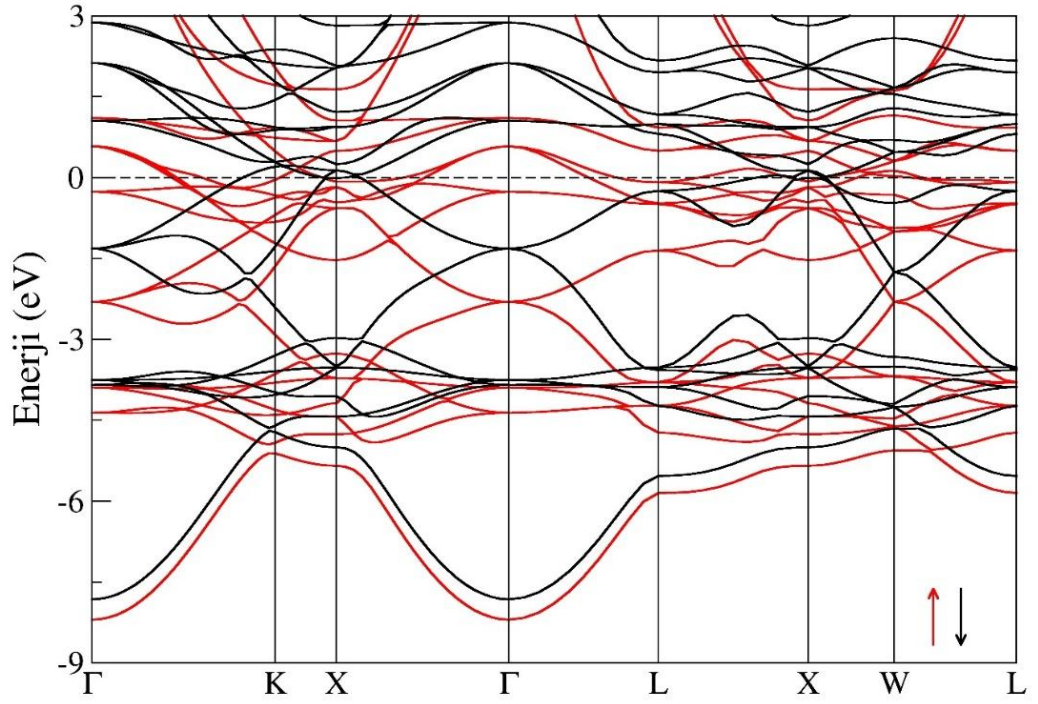


Şekil 4.4. Mg_2VPt tam Heusler alaşımının toplam ve kısmi durum yoğunluğu eğrileri.

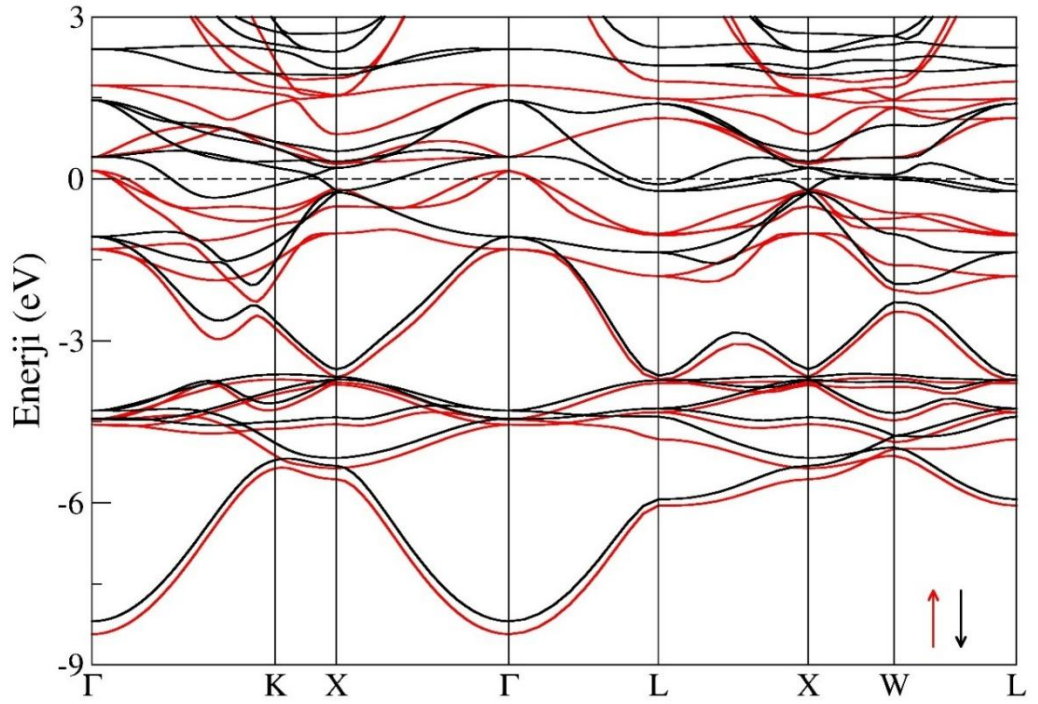


Şekil 4.5. Mg₂VPt ters Heusler alaşımının toplam ve kısmi durum yoğunluğu eğrileri.

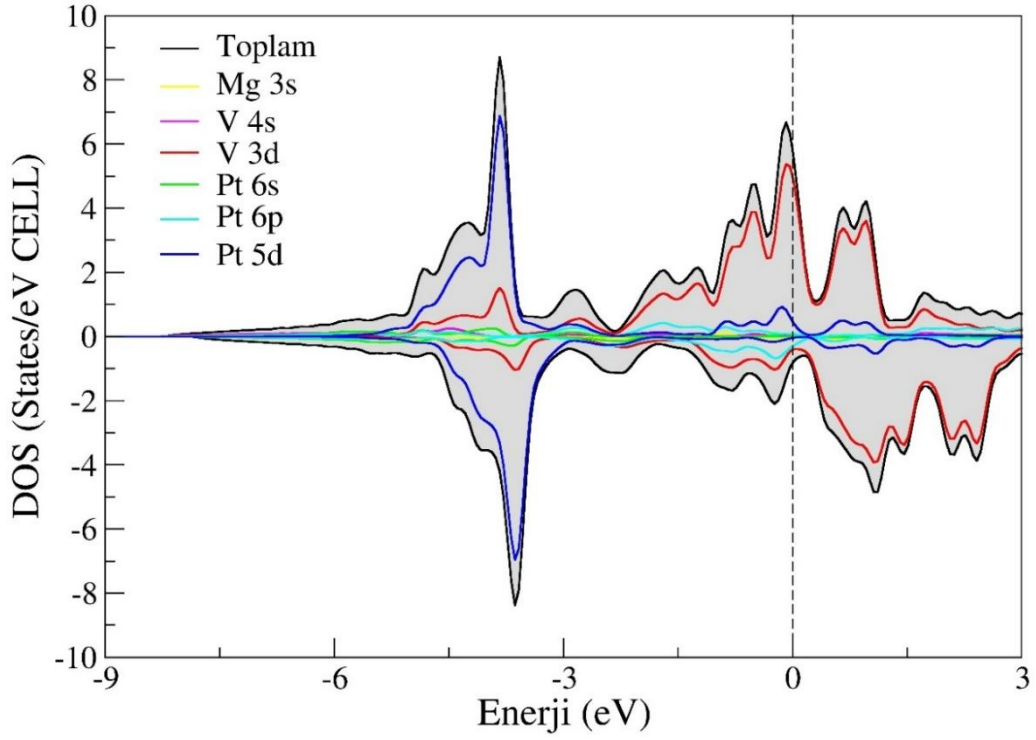
MgV₂Pt Alaşımı; tam Heusler yapıda hesaplanan bant yapısı (Şekil 4.6), MgV₂Pt alaşımının metalik karakterini ortaya koymaktadır. Fermi seviyesinde her iki spin durumunda da enerji bantlarının kesiştiği görülmekte, bu da çift spin iletkenliği anlamına gelmektedir. Durum yoğunluğu eğrisi (Şekil 4.8) bu gözlemleri desteklemektedir. Özellikle V atomlarının 3d orbitalleri Fermi seviyesine yakın enerjilerde baskın rol oynamakta, Pt katkısı ise biraz daha düşük enerji seviyelerinde yoğunlaşmaktadır. Mg atomları, önceki alaşımda olduğu gibi, elektronik yoğunluk açısından sınırlı katkı sunmaktadır. Ters Heusler yapısında elde edilen bant yapısı (Şekil 4.7) da benzer şekilde tam metalik bir yapıyı işaret etmektedir. Hem yukarı hem de aşağı spin durumlarında Fermi seviyesini kesen bantlar mevcuttur. Durum yoğunluğu (Şekil 4.9), Fermi seviyesinde her iki spin durumunda da sıfırdan büyük TDOS değerleri göstermektedir. Dolayısıyla, MgV₂Pt alaşımı her iki kristal yapıda da metalik karakterini korumaktadır. Bu durum, söz konusu alaşımın spin ayrımı gerektiren uygulamalarda sınırlı kullanılabilirliğe sahip olabileceğini göstermektedir.



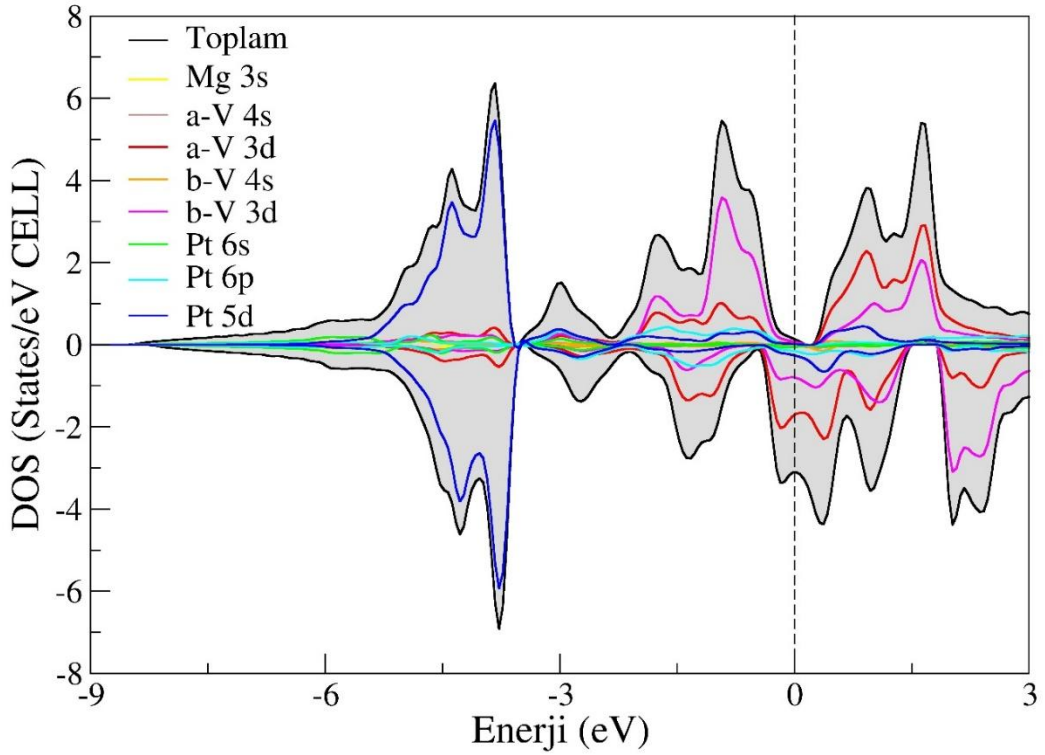
Şekil 4.6. MgV₂Pt tam Heusler alaşımının yüksek simetri yönelimleri boyunca elektronik bant eğrileri.



Şekil 4.7. MgV₂Pt ters Heusler alaşımının yüksek simetri yönelimleri boyunca elektronik bant eğrileri.



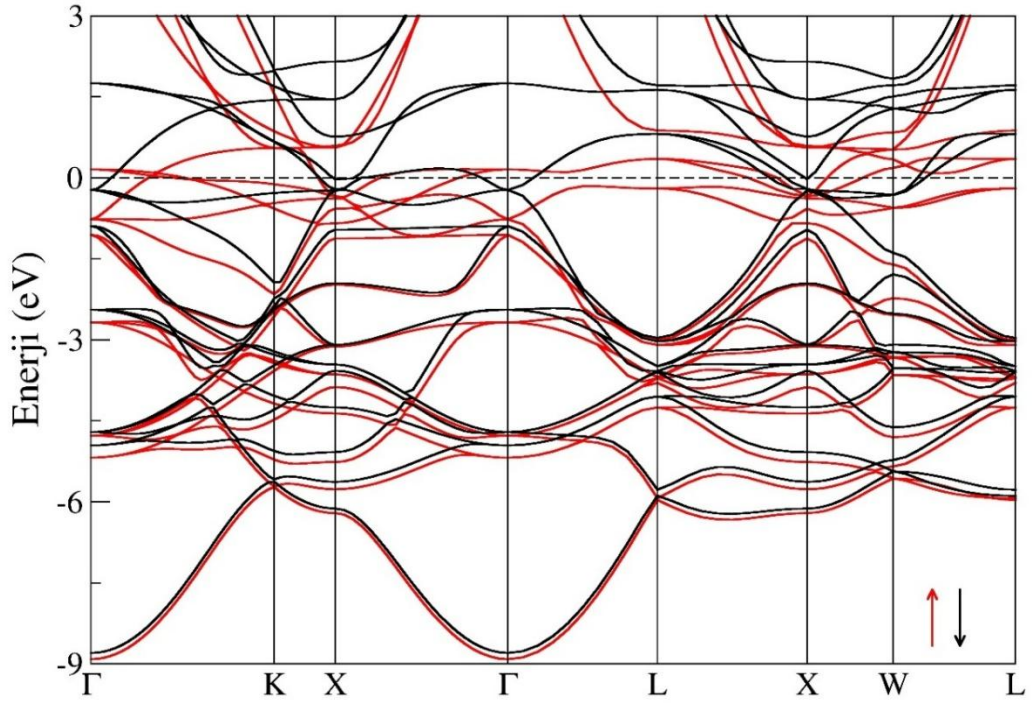
Şekil 4.8. MgV_2Pt tam Heusler alaşımının toplam ve kısmi durum yoğunluğu eğrileri.



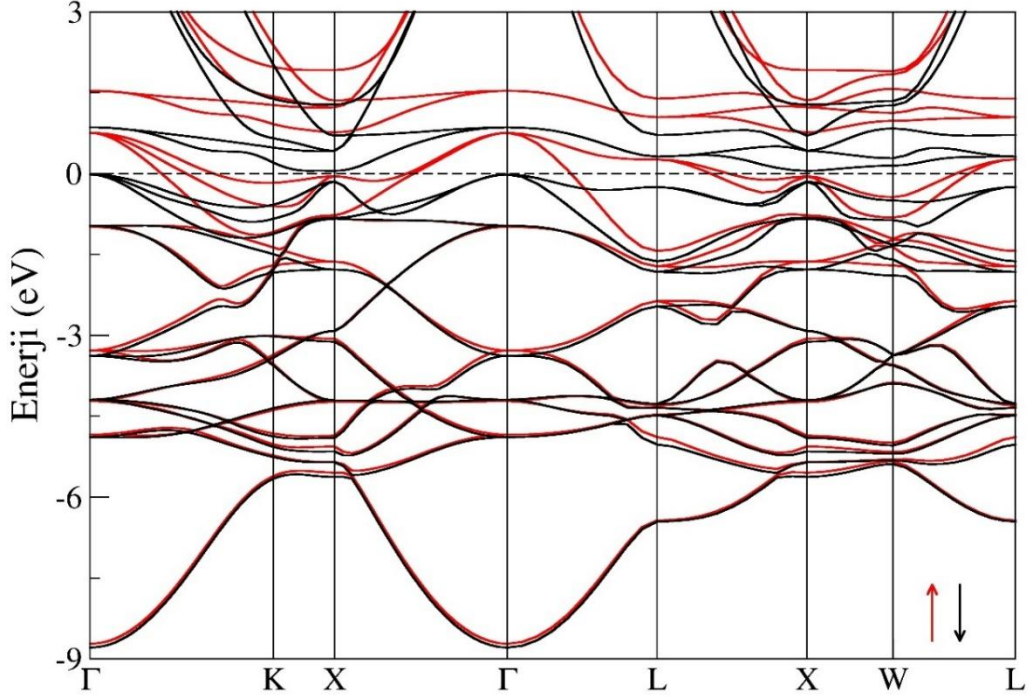
Şekil 4.9. MgV_2Pt ters Heusler alaşımının toplam ve kısmi durum yoğunluğu eğrileri.

$MgVPt_2$ alaşımı da tam Heusler yapıda (Şekil 4.10) metalik karakter göstermektedir. Bant yapısı, Fermi seviyesini geçen çok sayıda bant içerdiğinden dolayı

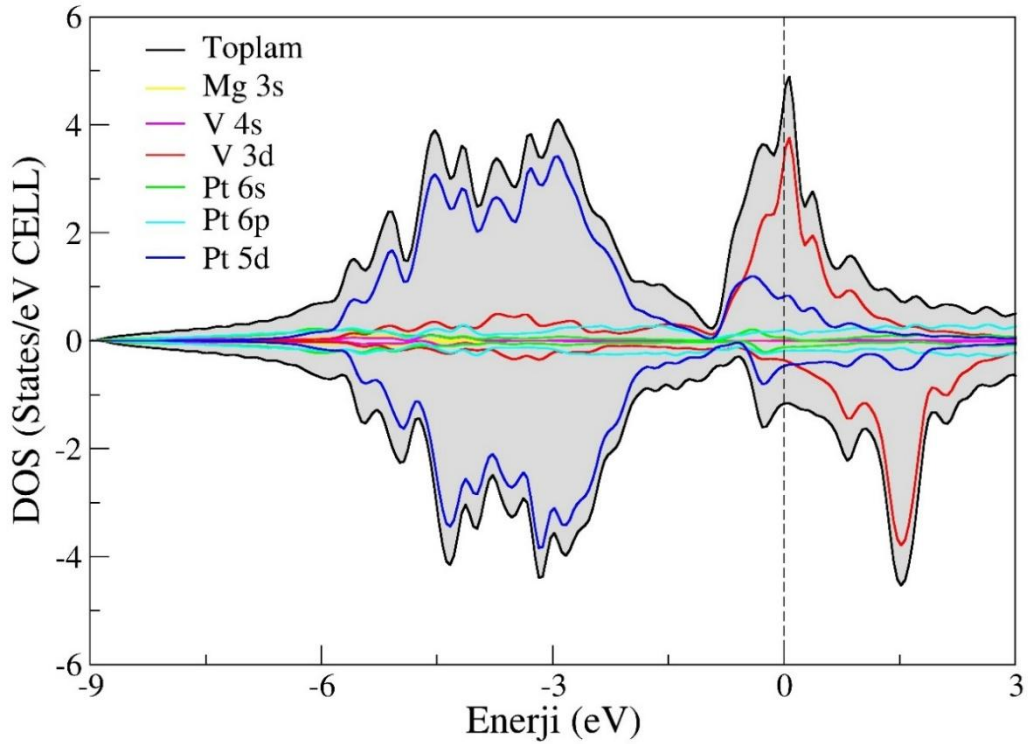
elektronların her iki spin yönelimiyle de iletkenliğe katkıda bulunduğu anlaşılmaktadır. Şekil 4.12’de verilen TDOS/PDOS grafikleri bu durumu doğrulamaktadır. Fermi seviyesine en büyük katkının V-3d ve Pt-5d orbitallerinden geldiği, Mg atomlarının ise bu seviyelerde ihmal edilebilir katkı sağladığı görülmektedir. Ancak ters Heusler yapıda (Şekil 4.11) MgVPt₂ alaşımı yarı-metal davranışı göstermektedir. Spin aşağı durumunda bir enerji aralığı bulunurken, spin yukarı durumunda Fermi seviyesini kesen bantlar iletkenliği sağlar. Bu durum, özellikle spin polarizasyonu gerektiren uygulamalar açısından dikkat çekicidir. Şekil 4.13’deki durum yoğunluğu grafiği, yalnızca spin yukarı durumunda Fermi seviyesinde TDOS’un sıfırdan büyük olduğunu ortaya koyarak yarı-metal karakteri doğrulamaktadır.



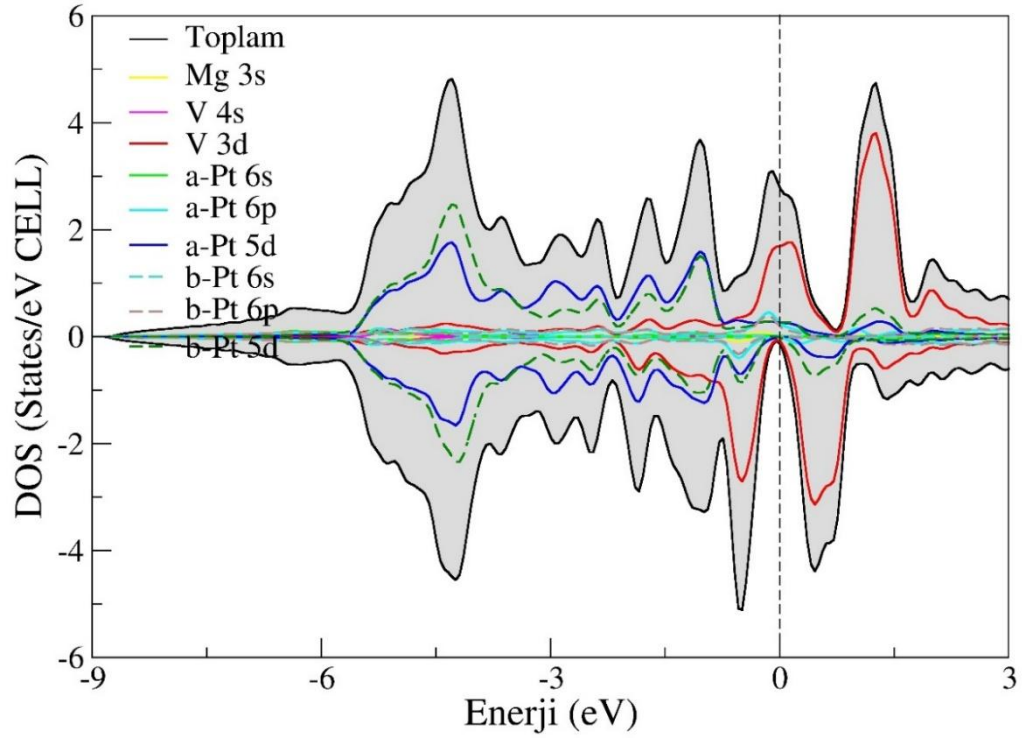
Şekil 4.10. MgVPt₂ tam Heusler alaşımının yüksek simetri yönelimleri boyunca elektronik bant eğrileri.



Şekil 4.11. MgVPt₂ ters Heusler alaşımının yüksek simetri yönelimleri boyunca elektronik bant eğrileri.



Şekil 4.12. MgVPt₂ tam Heusler alaşımının toplam ve kısmi durum yoğunluğu eğrileri.



Şekil 4.13. MgVPt₂ ters Heusler alaşımlarının toplam ve kısmi durum yoğunluğu eğrileri.

Yapılan hesaplamalar sonucunda, Mg₂VPt ve MgVPt₂ alaşımlarının ters Heusler (F-43m) yapılarında yarı-metalik, tam Heusler (Fm-3m) yapılarında ise metalik özellik sergilediği belirlenmiştir. MgV₂Pt alaşımı ise her iki kristal yapıda da metalik davranış göstermektedir. Yarı-metal özellik gösteren yapıların yalnızca bir spin durumunda iletkenlik göstermesi, bu alaşımları spintronığe dayalı elektronik aygıtlarda kullanılabilir hale getirmektedir. Özellikle tam spin polarizasyonu, veri depolama, spin valfler ve manyetik sensörler gibi alanlarda avantaj sağlamaktadır. Bu bağlamda, Mg₂VPt ve MgVPt₂ alaşımları hem biyoyumluluk potansiyeli hem de spintronığe elverişli yarı-metal karakterleri nedeniyle gelecek vadede malzeme adayları arasında öne çıkmaktadır.

4.3. Mg₂VPt, MgV₂Pt ve MgVPt₂ alaşımlarının Mekanik Özellikleri

Bu çalışmada Mg₂VPt, MgV₂Pt ve MgVPt₂ alaşımlarının mekanik özellikleri, hesaplanan elastik sabitler ve bu sabitlerden türetilen mekanik modüller üzerinden değerlendirilmiştir. İlgili verilere Tablo 4.2 ve Tablo 4.3'te yer verilmiştir.

Alaşımların elastik kararlılıkları, Born kararlılık kriterlerine göre incelenmiştir. Bu kriterlere göre bir kübik yapının kararlı olabilmesi için elastik sabitlerin $C_{11} > 0$, $C_{44} > 0$ ve $C_{11} - C_{12} > 0$ koşullarını sağlaması gerekmektedir (Born ve ark., 1955). Bu kriterlere göre yapılan değerlendirme sonucunda, Mg₂VPt alaşımının her iki

kristal yapıda (Fm-3m ve F-43m) elastik olarak kararlı olduğu görülmüştür. MgV₂Pt alaşımı ise yalnızca ters Heusler (F-43m) yapıda bu koşulları sağlamaktadır. Diğer yandan, MgVPt₂ alaşımı her iki yapıda da Born kriterlerini sağlayamamakta, dolayısıyla mekanik olarak kararsız bir yapı sergilemektedir. Kayma modülü (G) değerleri de bu durumu desteklemektedir. Özellikle MgV₂Pt ve MgVPt₂ alaşımları için tam Heusler yapıda, MgVPt₂ için ise ters Heusler yapıda hesaplanan kayma modülü negatif çıkmıştır. Bu durum, söz konusu fazların elastik kararlılığının zayıf olduğunu ve mekanik gerilmelere karşı dirençlerinin düşük olabileceğini göstermektedir.

Tablo 4.2. Mg₂VPt, MgV₂Pt ve MgVPt₂ alaşımlarının elastik sabitleri (C_{ij}; GPa).

Alaşımlar	Referanslar	Üzay Grubu	C ₁₁	C ₁₂	C ₄₄
Mg₂VPt	Bu Çalışma	Fm-3m	106.97	85.96	61.65
		F-43m	137.78	105.42	34.44
MgV₂Pt	Bu Çalışma	Fm-3m	106.80	146.58	79.94
		F-43m	221.28	104.42	92.75
MgVPt₂	Bu Çalışma	Fm-3m	136.14	166.26	81.93
		F-43m	83.67	135.63	77.64

Alaşımların dayanıklılık ve sertlik özellikleri, Tablo 4.3'te verilen bulk modülü (B), Young modülü (E) ve kayma modülü (G) değerleriyle incelenmiştir. Ters Heusler yapısındaki MgV₂Pt alaşımı, yüksek B ve E değerleri ile rijit ve sert bir yapı göstermektedir. Mg₂VPt alaşımı ise bu fazda daha düşük ama pozitif modül değerleri ile daha esnek ve sünek bir yapıdadır. MgVPt₂ alaşımı ise mekanik kararsızlık gösterdiği için bu değerlere dayalı güvenilir bir yorum yapılamamaktadır.

Pugh kriterine göre, B/G oranı 1.75'in üzerinde olan malzemeler sünek, bu değer altındaki kalanlar ise kırılabilir olarak değerlendirilir (Pugh, 1954). Bu kriter göre, Mg₂VPt alaşımı, hem Fm-3m (2.99) hem de F-43m (4.57) yapılarında yüksek B/G oranına sahip olup sünek davranış göstermektedir. Buna karşılık, MgV₂Pt alaşımı, F-43m yapısında B/G = 1.86 değeriyle bu sınır değere yakın olmakla birlikte, görece daha az sünek bir yapı sergilemektedir.

Poisson oranı (σ) da malzemelerin deformasyon kabiliyeti ve bağ karakteri hakkında bilgi verir. Kovalent bağlı sistemlerde bu oran genellikle 0.1 civarında, iyonik bağ karakteri gösteren sistemlerde ise yaklaşık 0.25 civarındadır (Haines ve ark., 2001). Hesaplamalara göre, Mg₂VPt alaşımı ters Heusler yapıda 0.397 Poisson oranına sahiptir,

bu da oldukça sünek ve iyonik bağ karakteri taşıyan bir sistem olduğunu göstermektedir. MgV₂Pt alaşımını ise 0.272 oranıyla daha rijit ve bağ yapısı açısından ise iyonik bir karakter sergilemektedir.

Anizotropi faktörü (*A*) ve ortalama ses hızı (*v_m*) gibi büyüklükler de mekanik özelliklerin yön bağımlılığını ve elastik davranışını değerlendirmek için kullanılmıştır. *A* > 1 olması, mekanik özelliklerin kristal doğrultularına göre değiştiğini ve izotropik olmadığını gösterir. Tablo 4.3'te tüm alaşımlar için *A* değerleri oldukça yüksek çıkmıştır. Ortalama ses hızı açısından en yüksek değer ters Heusler fazındaki MgV₂Pt alaşımında görülmüş olup, bu sonuç rijit yapısal karakteri desteklemektedir.

Tablo 4.3. Mg₂VPt, MgV₂Pt ve MgVPt₂ alaşımlarının bulk modülü (*B*; GPa), kayma modülü (*G*; GPa), young modülü (*E*; GPa), *B/G* oranı, poisson oranı (*σ*), anizotropi faktörü (*A*) ve ortalama ses hızı (*v_m*: m/s).

Alaşımlar	Referanslar	Uzay Grubu	<i>B</i>	<i>G</i>	<i>E</i>	<i>B/G</i>	<i>σ</i>	<i>A</i>	<i>v_m</i>
Mg₂VPt	Bu Çalışma	Fm-3m	92.96	31.06	83.03	2.99	0.337	6.441	2201
	Bu Çalışma	F-43m	116.20	25.43	71.10	4.57	0.397	6.352	2051
MgV₂Pt	Bu Çalışma	Fm-3m	133.32	-19.66	-93.88	-6.78	1.388	6.303	1218
	Bu Çalışma	F-43m	143.37	77.06	196.05	1.86	0.272	6.212	3261
MgVPt₂	Bu Çalışma	Fm-3m	156.22	-4.42	-28.44	-35.34	2.216	6.288	1106
	Bu Çalışma	F-43m	118.31	-47.09	-59.86	-2.51	1.759	6.272	997

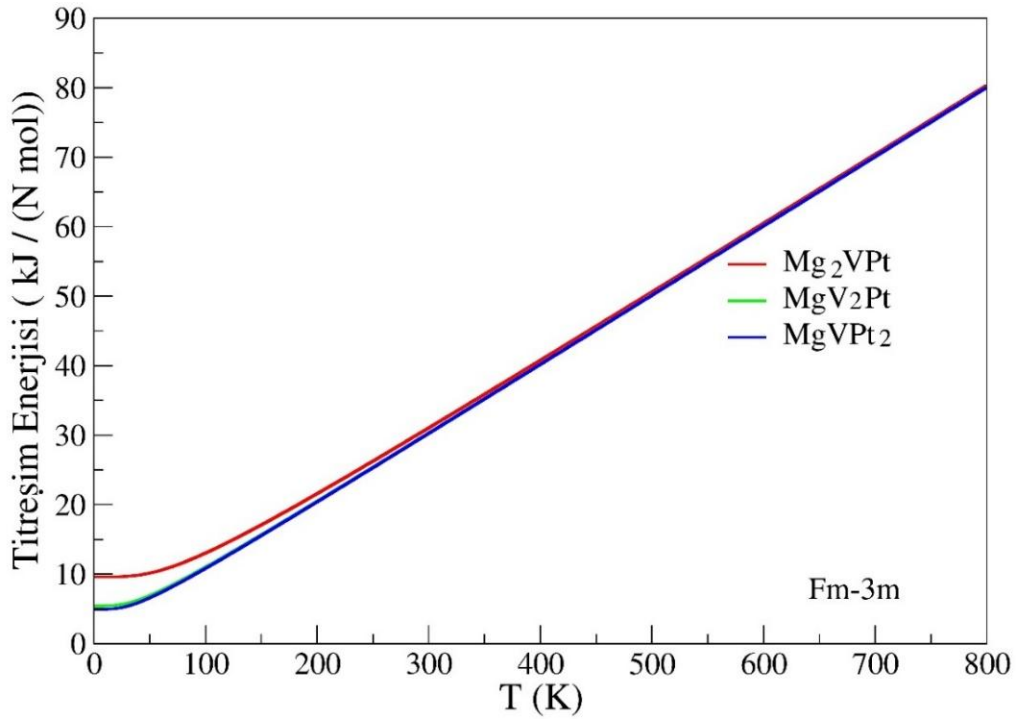
Genel olarak değerlendirildiğinde, Mg₂VPt alaşımını her iki fazda da mekanik olarak kararlı ve sünek yapıdadır. MgV₂Pt alaşımını ise yalnızca ters Heusler yapıda kararlıdır ve daha rijit ve sünek bir yapı sunmaktadır. MgVPt₂ alaşımını ise her iki yapıda da mekanik kararsızlık göstermektedir. Bu bağlamda, özellikle Mg₂VPt ve MgVPt₂ alaşımlarının ters Heusler yapıları, süneklik ve elastik kararlılık açısından biyomedikal uygulamalarda tercih edilebilir potansiyel malzemeler olarak öne çıkmaktadır.

4.4. Mg₂VPt, MgV₂Pt ve MgVPt₂ alaşımlarının Termodinamik Özellikleri

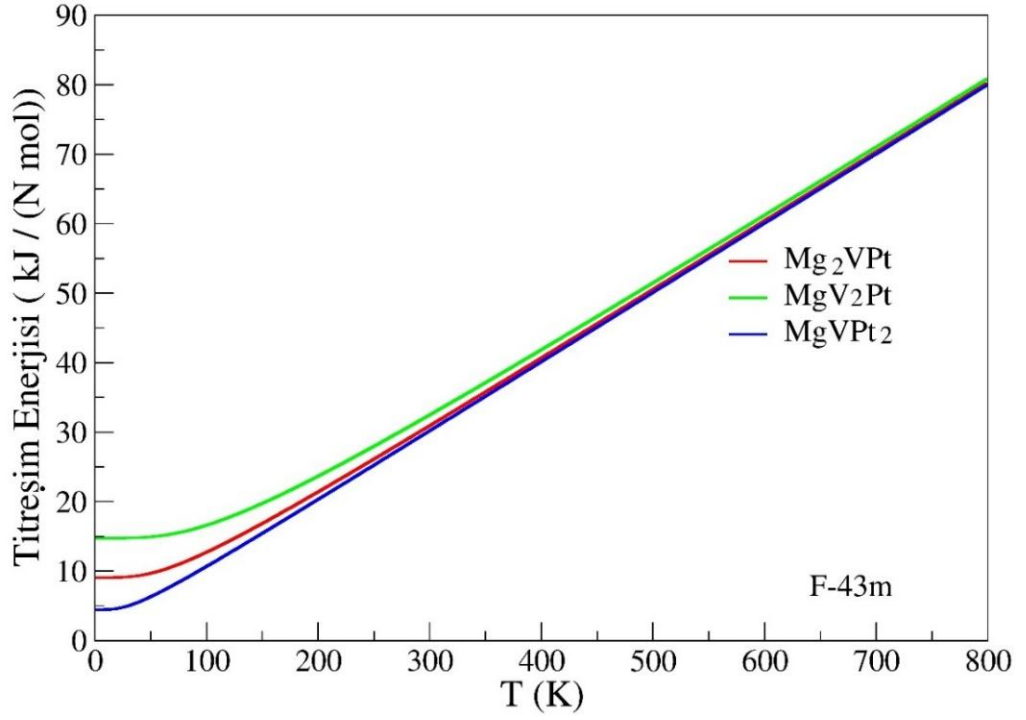
Bu bölümde, Mg₂VPt, MgV₂Pt ve MgVPt₂ alaşımlarının tam Heusler (Fm-3m) ve ters Heusler (F-43m) kristal yapılarında elde edilen termodinamik özellikleri karşılaştırmalı olarak sunulmaktadır. Hesaplamalar, Quantum ESPRESSO yazılım paketi içinde yer alan thermo_pw modülü aracılığıyla, daha önce hesaplanan elastik sabitler temel alınarak gerçekleştirilmiştir. Sıcaklık bağımlı titreşim enerjisi, serbest enerji, entropi ve ısı sığası gibi büyüklükler, elastik parametrelerden türetilen termodinamik

modeller aracılığıyla elde edilmiştir. Bu sayede, incelenen alaşımların farklı sıcaklıklarda gösterdiği termodinamik davranışlar doğrudan mekanik özelliklerle ilişkilendirilmiştir.

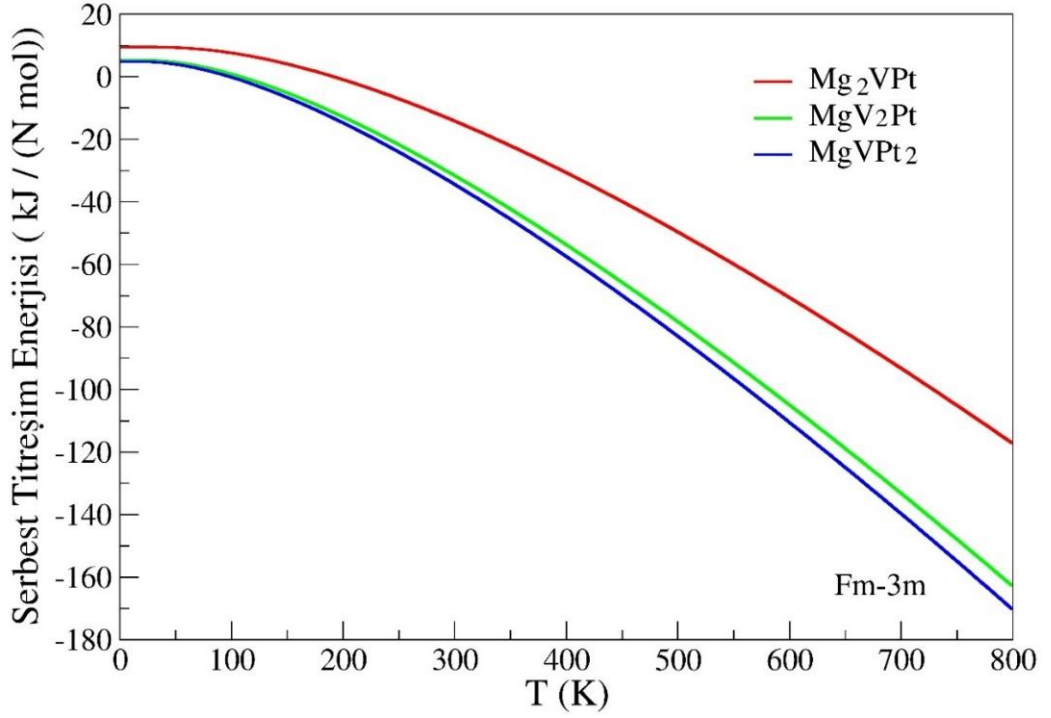
Titreşim enerjisi, Şekil 4.14 ve 4.15'te, Mg_2VPt , MgV_2Pt ve $MgVPt_2$ alaşımlarının farklı kristal yapılarında hesaplanan titreşim enerjisinin sıcaklığa bağlı değişimi verilmiştir. Tüm alaşımlarda sıcaklık arttıkça titreşim enerjisi monoton bir artış göstermektedir. Bu durum, atomik sistemlerin termal enerji etkisiyle artan titreşimsel hareketliliğine işaret etmektedir. Fm-3m yapılar için Mg_2VPt alaşımı daha yüksek titreşim enerjisi değerleri sergilerken, F-43m yapıda $MgVPt_2$ alaşımı daha düşük değerlere sahiptir. Bu farklılıklar, alaşımların kristal simetrisinin ve bağ sertliğinin termal tepkime üzerindeki etkisini yansıtmaktadır.



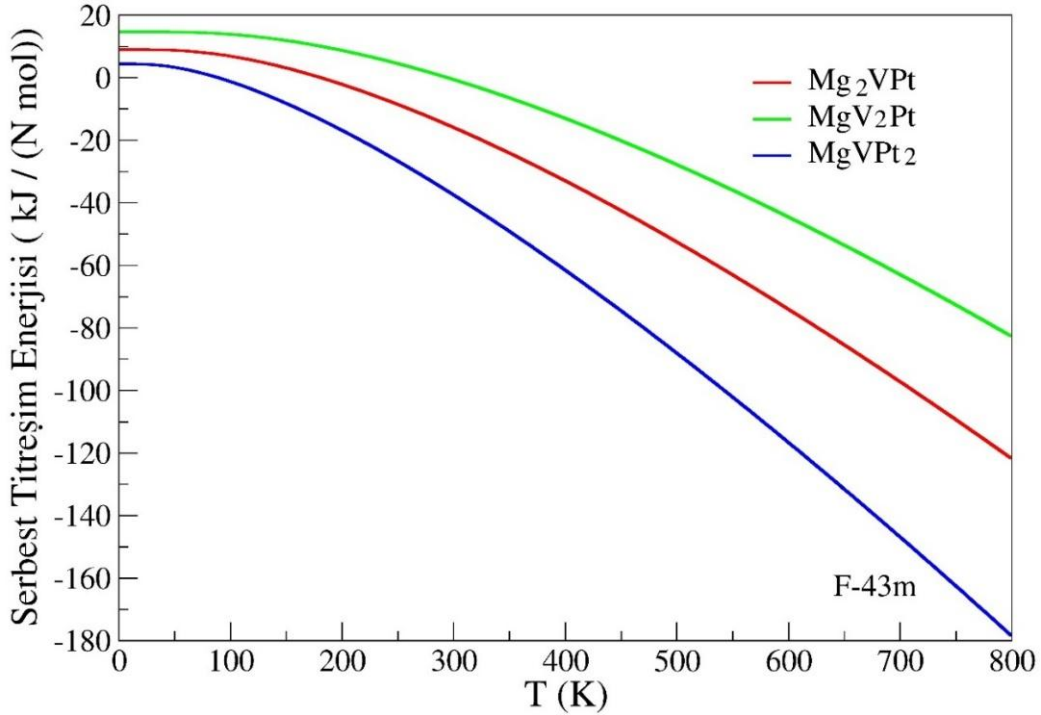
Şekil 4.14. Mg_2VPt , MgV_2Pt ve $MgVPt_2$ tam Heusler alaşımlarının titreşim enerjilerinin sıcaklık ile değişimi.



Şekil 4.15. Mg_2VPt , MgV_2Pt ve $MgVPt_2$ ters Heusler alaşımlarının titreşim enerjilerinin sıcaklık ile değişimi.



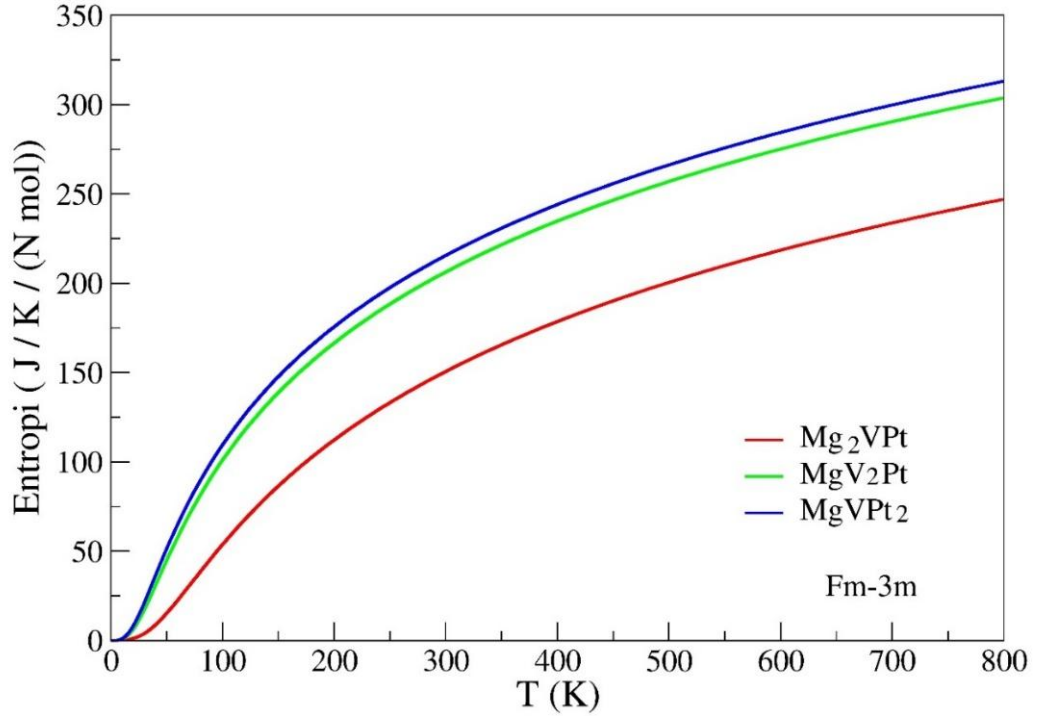
Şekil 4.16. Mg_2VPt , MgV_2Pt ve $MgVPt_2$ tam Heusler alaşımlarının serbest titreşim enerjilerinin sıcaklık ile değişimi.



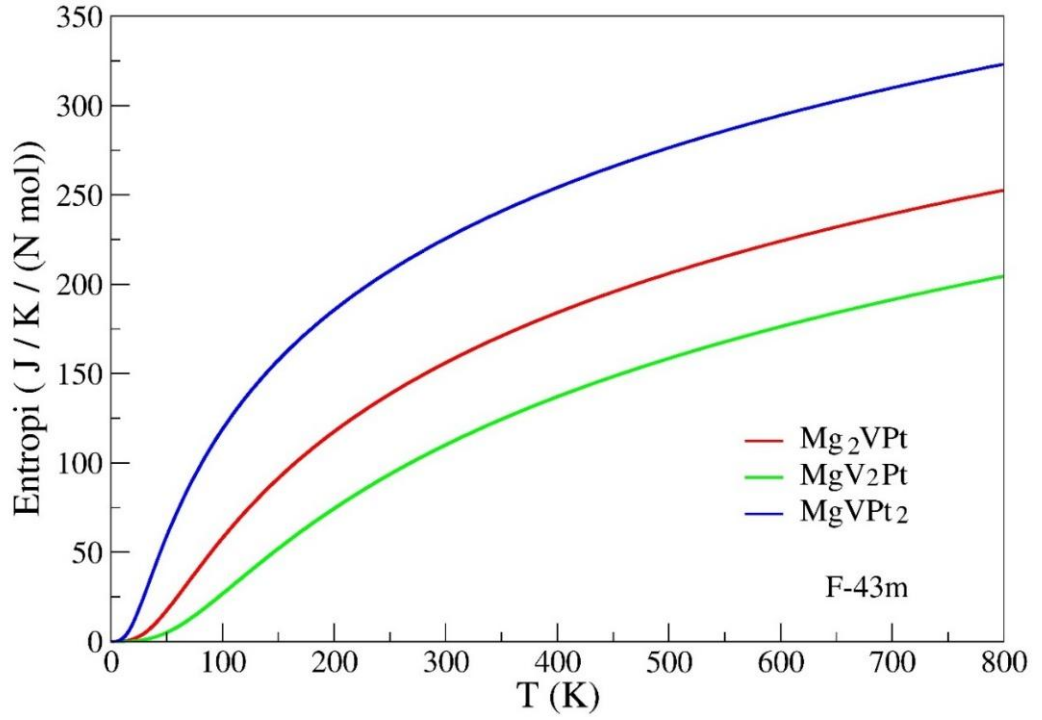
Şekil 4.17. Mg₂VPt, MgV₂Pt ve MgVPt₂ ters Heusler alaşımlarının serbest titreşim enerjilerinin sıcaklık ile değişimi.

Serbest titreşim enerji, Şekil 4.16 ve 4.17’de sunulan serbest titreşim enerji eğrileri, sıcaklık arttıkça negatif yönde düzenli bir azalma göstermektedir. Bu beklenen termodinamik davranış, sistemlerin artan sıcaklıkla birlikte serbest enerji açısından daha az kararlı hale gelmesini ifade eder. 0-800 K sıcaklık aralığında en düşük serbest enerjiye sahip faz, F-43m yapıdaki MgVPt₂ alaşımıdır. Bu durum, bu fazın diğerlerine göre termodinamik açıdan daha kararlı olduğunu düşündürmekte olsada bu alaşımın mekanik olarak kararsız olmasından dolayı bunu söylemek mümkün değildir. Mg₂VPt ve MgV₂Pt alaşımları için serbest titreşim enerji farkları daha küçük olup, özellikle Fm-3m yapılarda benzer eğilimler gözlenmiştir.

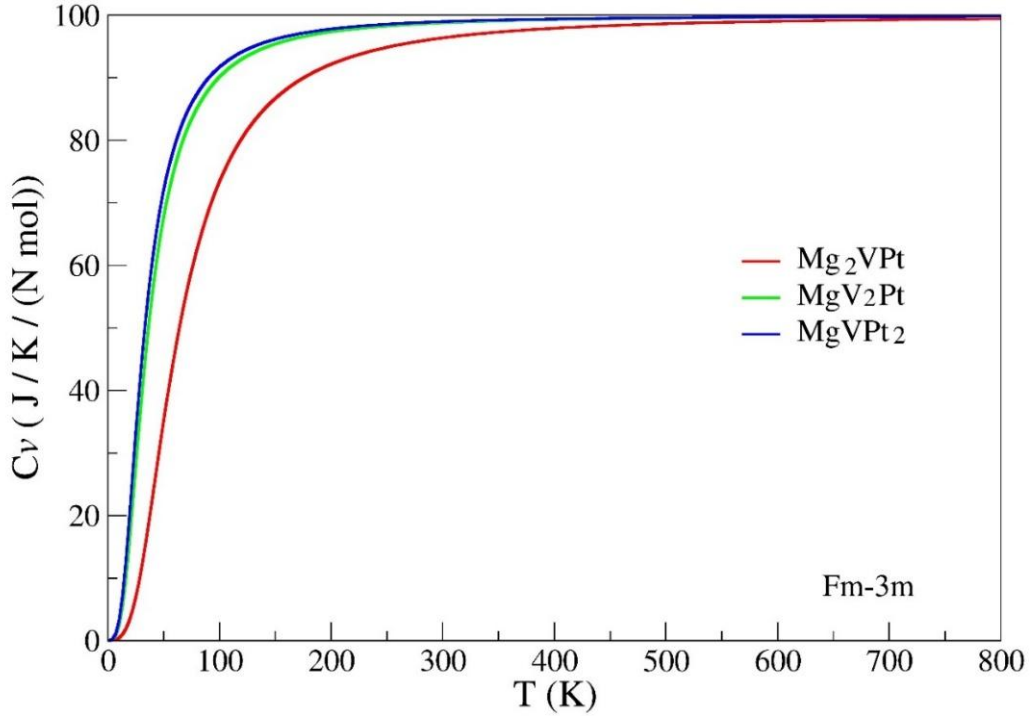
Entropi, Şekil 4.18 ve 4.19’da görüldüğü üzere, tüm alaşımlarda entropi sıcaklıkla birlikte düzenli olarak artmaktadır. Bu durum, atomların düzensizliğinin ve mikro durumlarının sıcaklıkla arttığını göstermektedir. Entropi değerleri karşılaştırıldığında, tam Heusler yapısında MgV₂Pt alaşımı (MgVPt₂ alaşımı mekanik kararsız) daha yüksek entropi değerleri sergilemektedir. Bu da bu fazın daha fazla atomik serbestlik derecesine sahip olduğunu ve daha yüksek termal düzensizlik barındırdığını göstermektedir. Buna karşılık, F-43m yapıdaki MgV₂Pt alaşımı daha düşük entropi değerleri ile daha düzenli ve sıkı bağlanmış bir kristal yapıya işaret etmektedir.



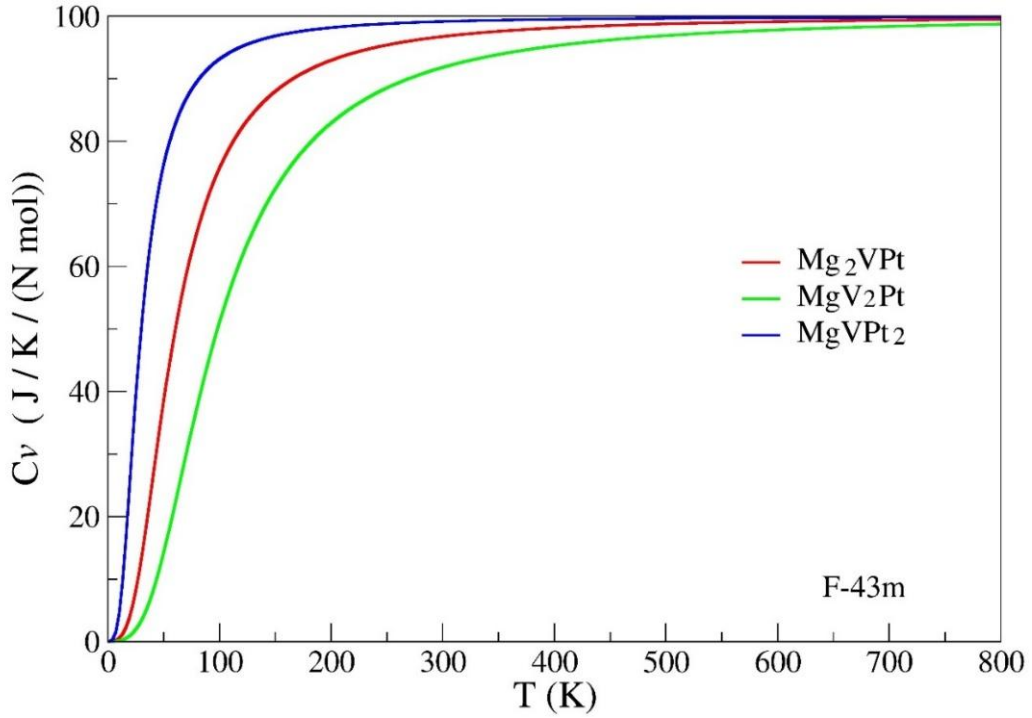
Şekil 4.18. Mg₂VPt, MgV₂Pt ve MgVPt₂ tam Heusler alaşımlarının entropilerinin sıcaklık ile değişimi.



Şekil 4.19. Mg₂VPt, MgV₂Pt ve MgVPt₂ ters Heusler alaşımlarının entropilerinin sıcaklık ile değişimi.



Şekil 4.20. Mg_2VPt , MgV_2Pt ve $MgVPt_2$ tam Heusler alaşımlarının ısı sığalarının sıcaklık ile değişimi.



Şekil 4.21. Mg_2VPt , MgV_2Pt ve $MgVPt_2$ ters Heusler alaşımlarının ısı sığalarının sıcaklık ile değişimi.

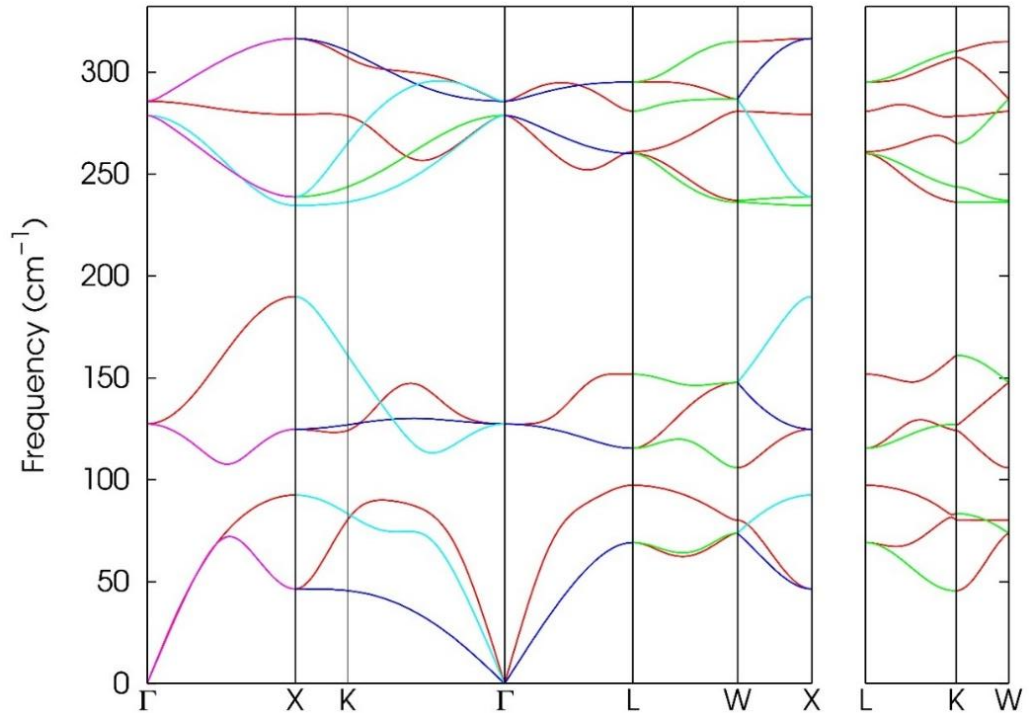
Isı sığası, Şekil 4.20 ve 4.21’de Mg_2VPt , MgV_2Pt ve $MgVPt_2$ alaşımlarının sabit hacimde ısı sığası değerlerinin sıcaklığa bağlı değişimi sunulmaktadır. Tüm alaşımlar için düşük sıcaklıklarda hızlı bir artış görülmekte, yüksek sıcaklıklarda ise değerler doyuma

ulaşarak klasik Dulong-Petit limitine yaklaşmaktadır. Bu davranış, elastik temelli modellerle elde edilen ısı sığalarının sıcaklık bağımlılığı açısından beklenen eğilimi gösterdiğini ortaya koymaktadır. Mekanik kararlılıklar göz önüne alındığında Mg_2VPt alaşımı her iki fazda da diğerlerine kıyasla daha yüksek C_V değerleri sergileyerek, ısıyı absorplama ve yayma açısından daha etkili bir yapı olduğunu göstermektedir.

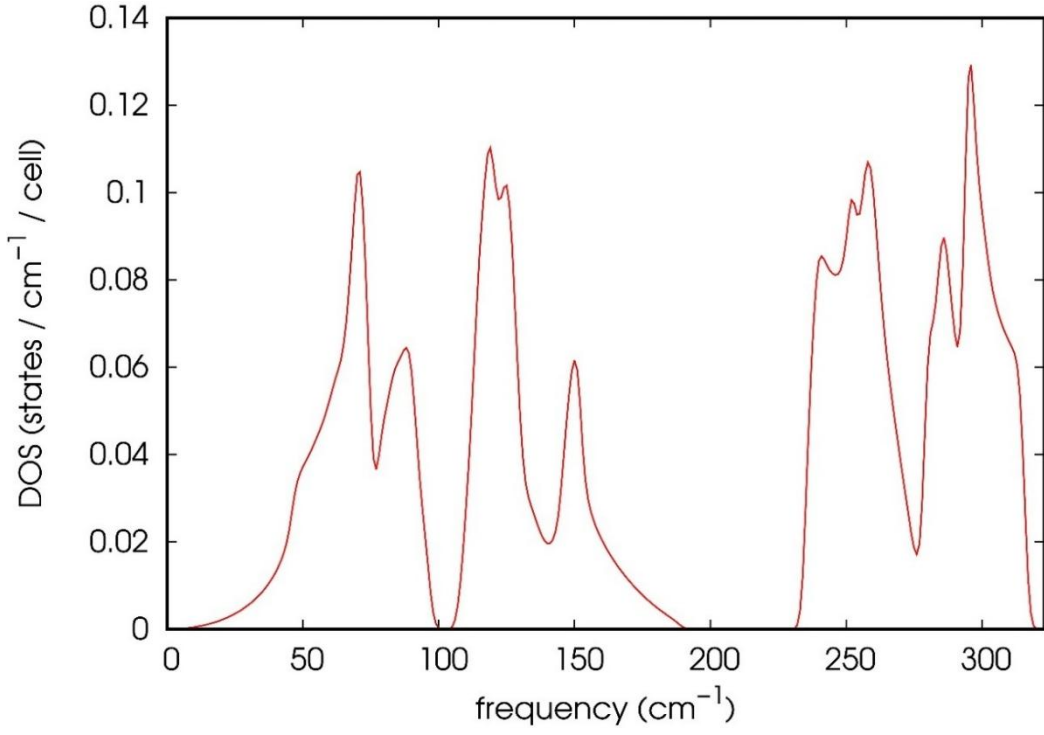
Termodinamik büyüklüklerin sıcaklıkla değişimi göz önünde bulundurulduğunda, Mg_2VPt alaşımı tam Heusler yapıda yüksek ısı sığası ve düşük entropi ile dikkat çekmektedir. Bu bağlamda, Mg_2VPt alaşımı, sıcaklık değişimlerine karşı daha dengeli tepki vermeleri nedeniyle biyomedikal uygulamalarda termal kararlılık bakımından daha uygun adaylar olarak değerlendirilebilir.

4.5. Mg_2VPt , MgV_2Pt ve $MgVPt_2$ Alaşımlarının Titreşim Özellikleri

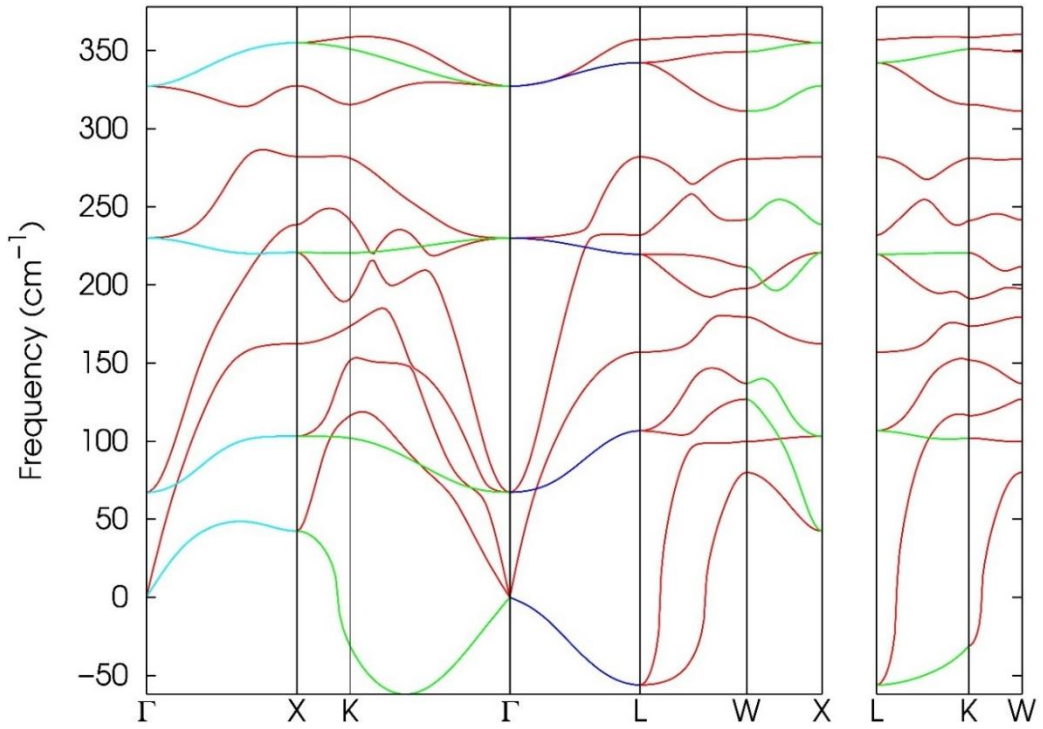
Bu bölümde, Mg_2VPt , MgV_2Pt ve $MgVPt_2$ alaşımlarının tam Heusler (Fm-3m) ve ters Heusler (F-43m) kristal yapılarındaki titreşimsel özellikleri, fonon dispersiyon eğrileri ve toplam fonon durum yoğunluğu (DOS) grafikleri üzerinden değerlendirilmiştir. Fonon spektrumları, yapısal fazların dinamik kararlılığı hakkında bilgi sağlarken, aynı zamanda atomik titreşimlerin bant genişliği ve mod yoğunluğu gibi niteliklerini de ortaya koyar.



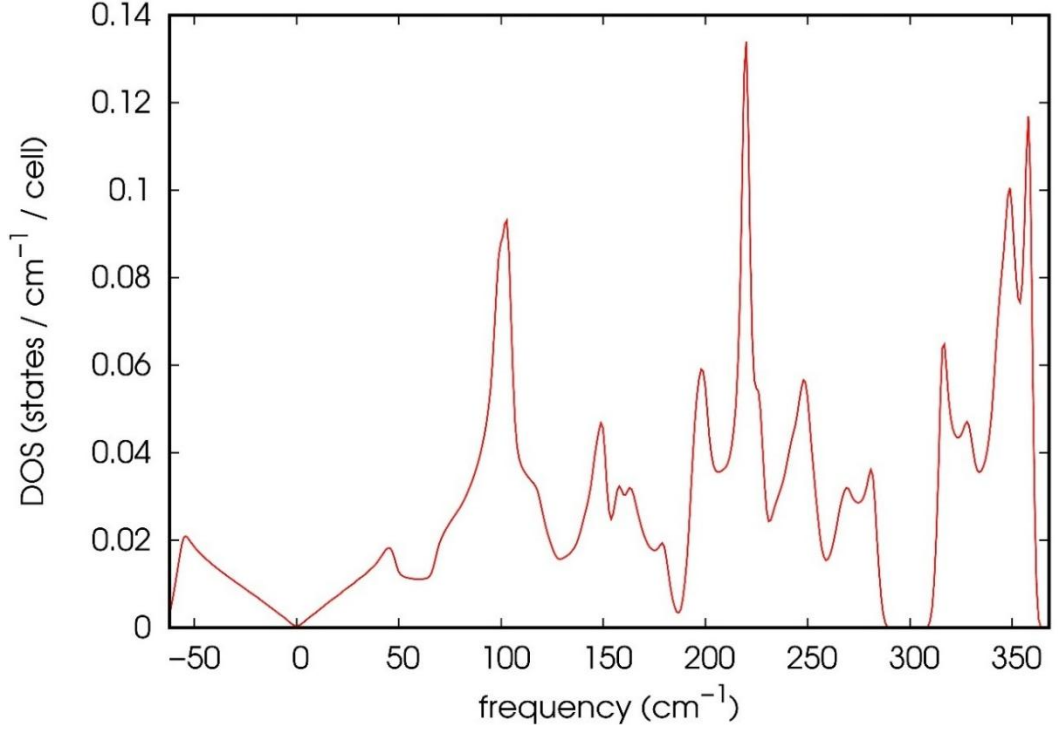
Şekil 4.22. Mg_2VPt tam Heusler alaşımının fonon dispersiyon eğrileri.



Şekil 4.23. Mg_2VPt tam Heusler alaşımının fonon toplam durum yoğunluğu.



Şekil 4.24. Mg_2VPt ters Heusler alaşımının fonon dispersiyon eğrileri.

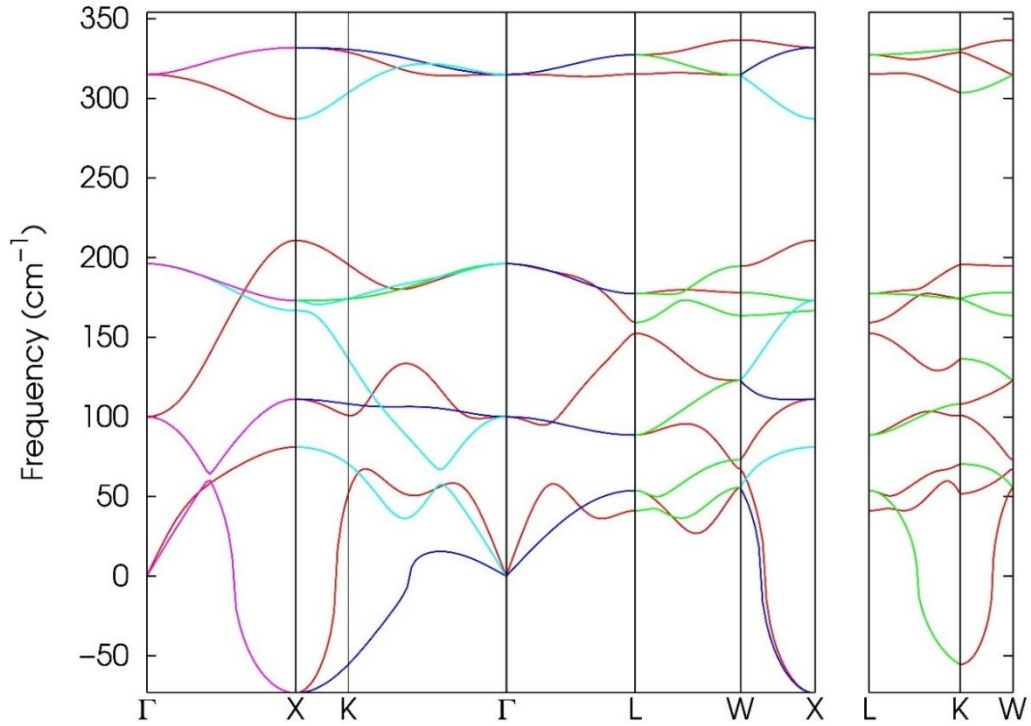


Şekil 4.25. Mg₂VPt ters Heusler alaşımasının fonon toplam durum yoğunluğu.

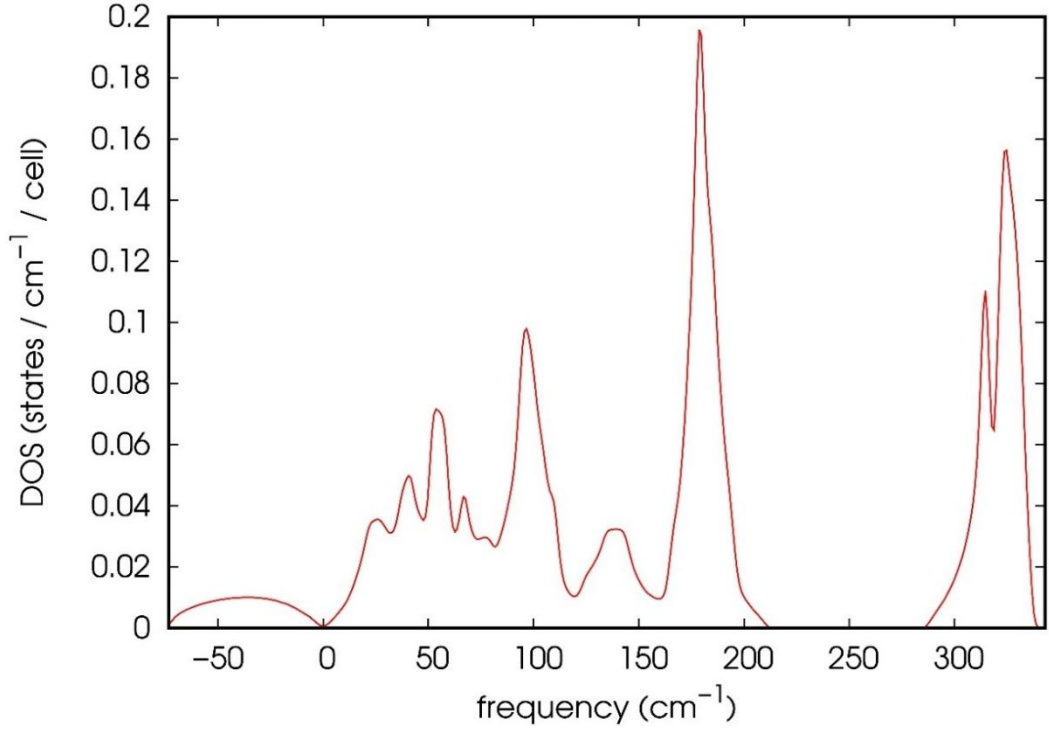
Mg₂VPt alaşımasının Fm-3m fazında elde edilen fonon dispersiyon eğrileri (Şekil 4.22), tüm simetri yönelimlerinde pozitif frekanslar içermekte olup, dinamik olarak da kararlı olduğunu göstermektedir. Bu durum, bu fazın dinamik olarak kararlı olduğunu doğrulamaktadır. Özellikle Fm-3m fazında akustik modlar ile optik modlar arasında net bir ayırım gözlenmekte, düşük frekanslı modların yayılımı V ve Pt atomlarının kütle etkisiyle şekillenmektedir. Ancak F-43m fazında (Şekil 4.24), özellikle akustik modlarda negatif frekanslar gözlenmiş olup, bu yapı için dinamik kararsızlık söz konusudur. Dolayısıyla Mg₂VPt alaşımı yalnızca Fm-3m yapıda fonon temelli analizlerde fiziksel olarak anlamlı sonuçlar vermektedir. Fonon durum yoğunluğu eğrilerinde (Şekil 4.23 ve 4.25), kararlı fazda orta ve yüksek frekanslarda belirgin tepe yapıları göstermektedir; bu durum özellikle Mg atomlarının katkısıyla ilişkilidir.

MgV₂Pt alaşımı, yalnızca F-43m fazda mekanik olarak kararlıdır. Fm-3m faz fonon dispersiyon eğrileri (Şekil 4.26) incelendiğinde, Γ -X-K- Γ , W-X ve L-K-W simetri yönelimlerinin olduğu bölgelerde negatif frekansların gözlemlendiği dikkat çekmektedir. Bu durum, mekanik kararsızlık ile uyumlu olarak dinamik kararsızlık göstergesidir. Buna karşılık F-43m fazda elde edilen fonon dispersiyon eğrileri (Şekil 4.28) tamamen pozitif frekanslardan oluşmakta olup, bu fazın hem mekanik hem de dinamik olarak kararlı olduğunu göstermektedir. Fonon dispersiyon eğrilerindeki boşluklar alaşımı oluşturan atomların kütleleri arasındaki farklardan kaynaklanmaktadır. En üst optik modlardaki

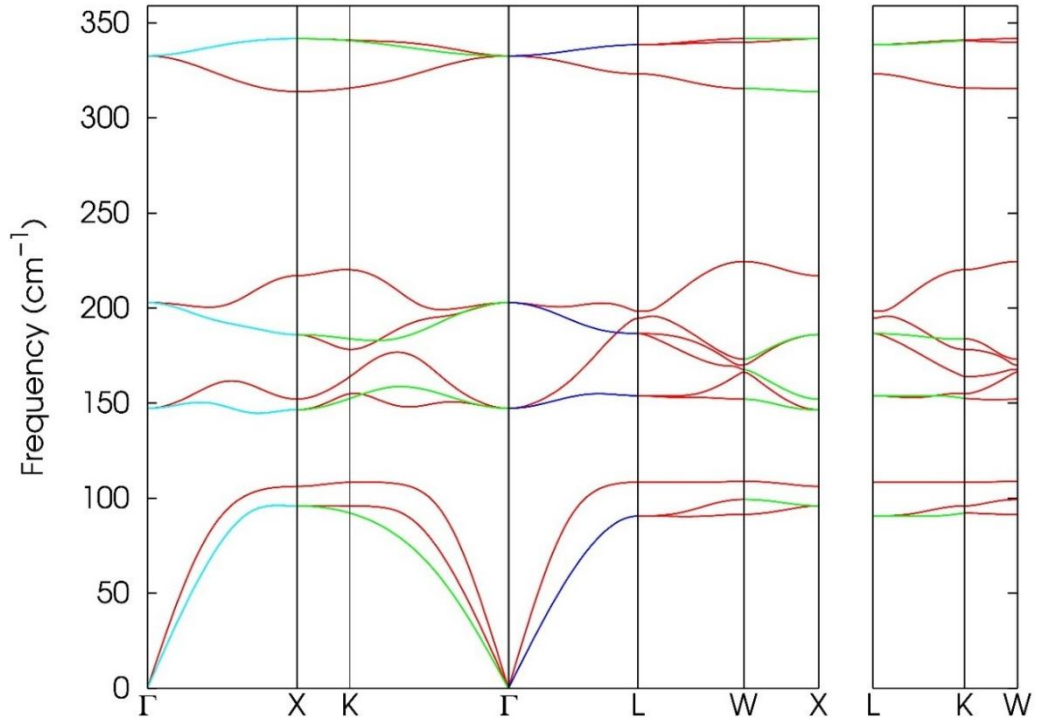
frekanslar kütlece daha hafif olan Mg atomlarından gelmekteyken akustik modlardaki frekanslar ise kütlece en ağır olan Pt atomundan ve orta bölgedeki altı adet optik modlara ait frekanslar ise V atomundan gelmektedir. Fonon durum yoğunluğu eğrileri (Şekil 4.29) incelendiğinde üç frekans bölgesi olduğu görülmekte ve alaşımı oluşturan atomların kütleleri arasındaki bu farklardan dolayı ara bölgelerdeki boşlukları desteklemektedir. Dolayısıyla bu yapı, alaşımı oluşturan atomların (Mg, V ve Pt) farklı kütleleri nedeniyle geniş titreşim spektrumuna yol açmaktadır.



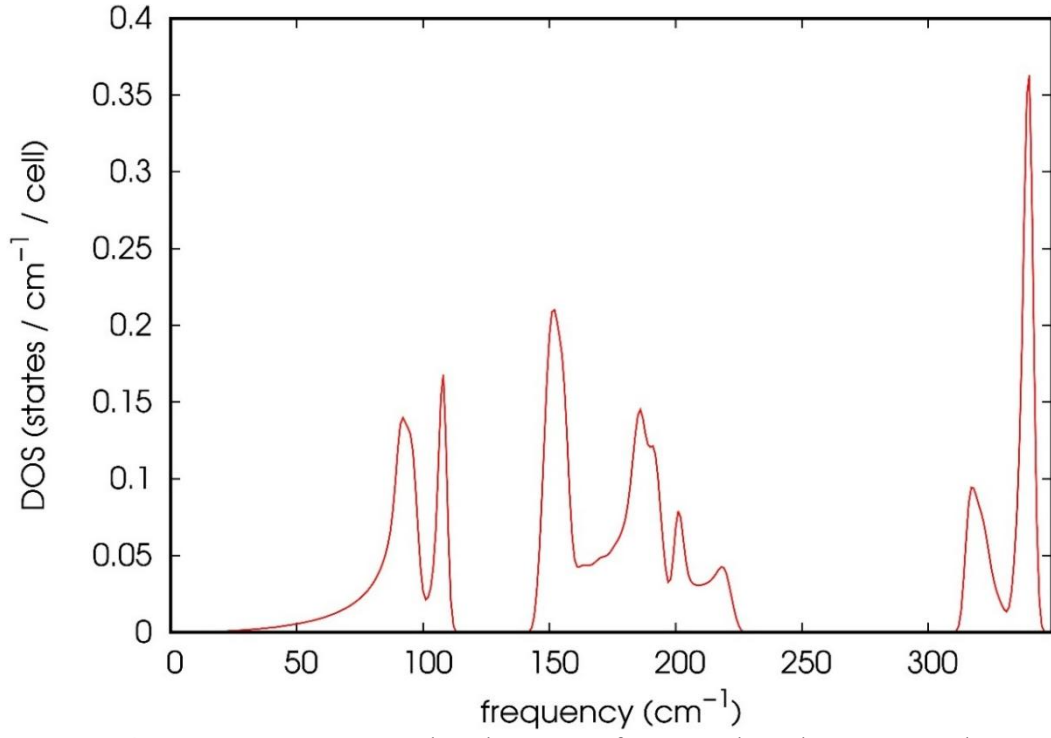
Şekil 4.26. MgV₂Pt tam Heusler alaşımının fonon dispersiyon eğrileri.



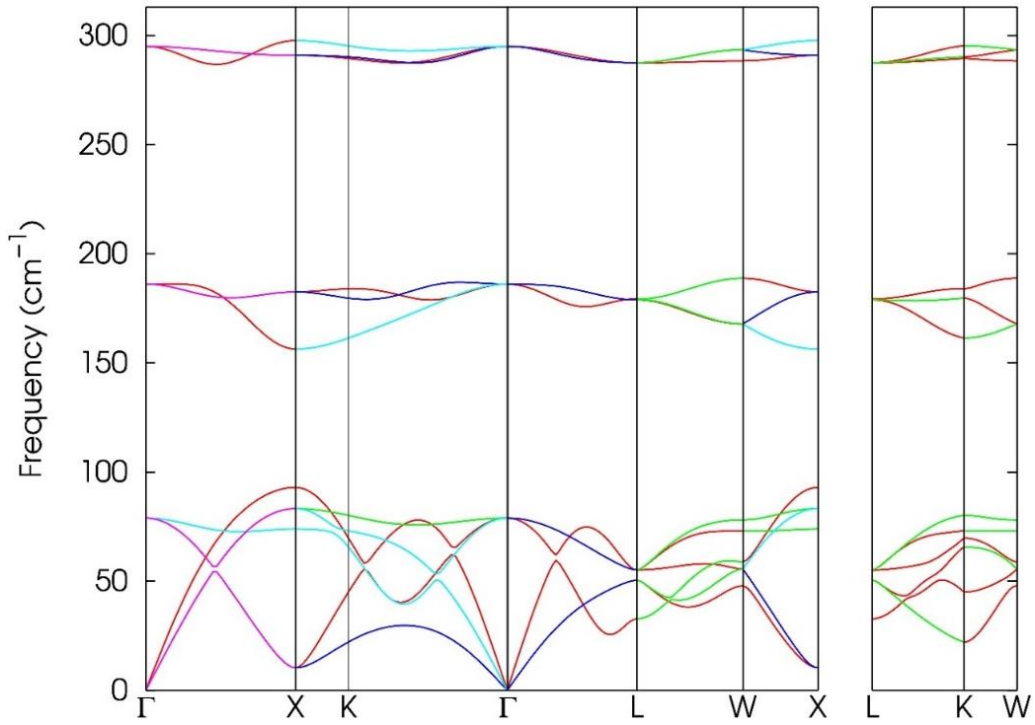
Şekil 4.27. MgV₂Pt tam Heusler alaşımının fonon toplam durum yoğunluğu.



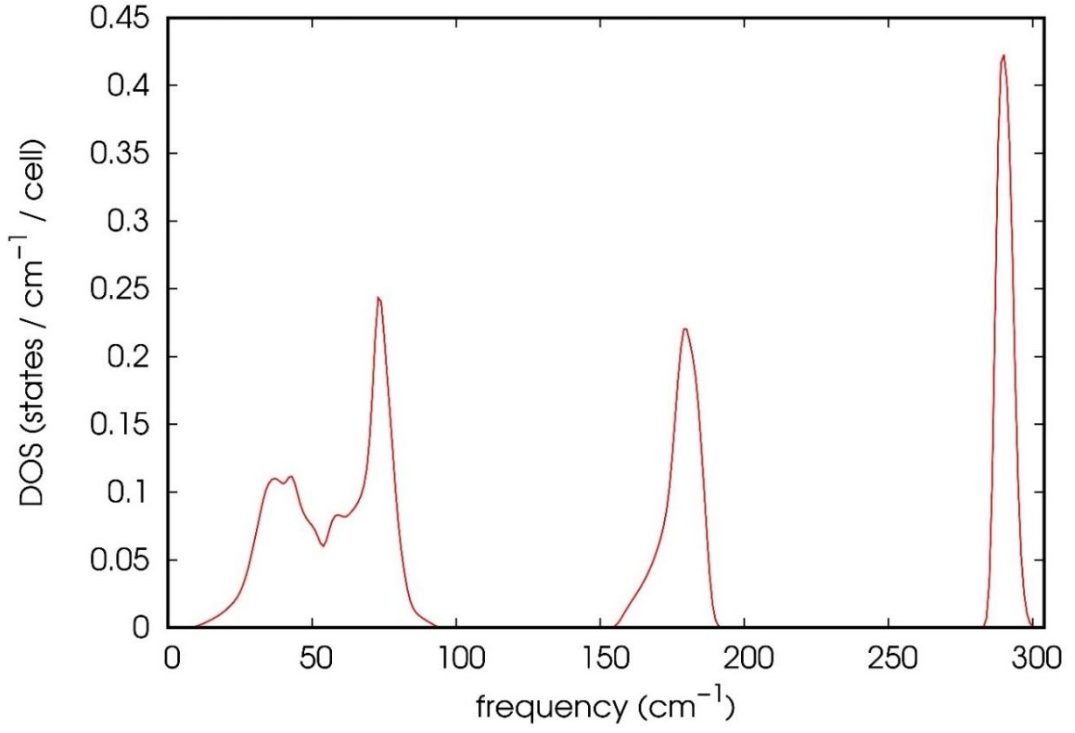
Şekil 4.28. MgV₂Pt ters Heusler alaşımının fonon dispersiyon eğrileri.



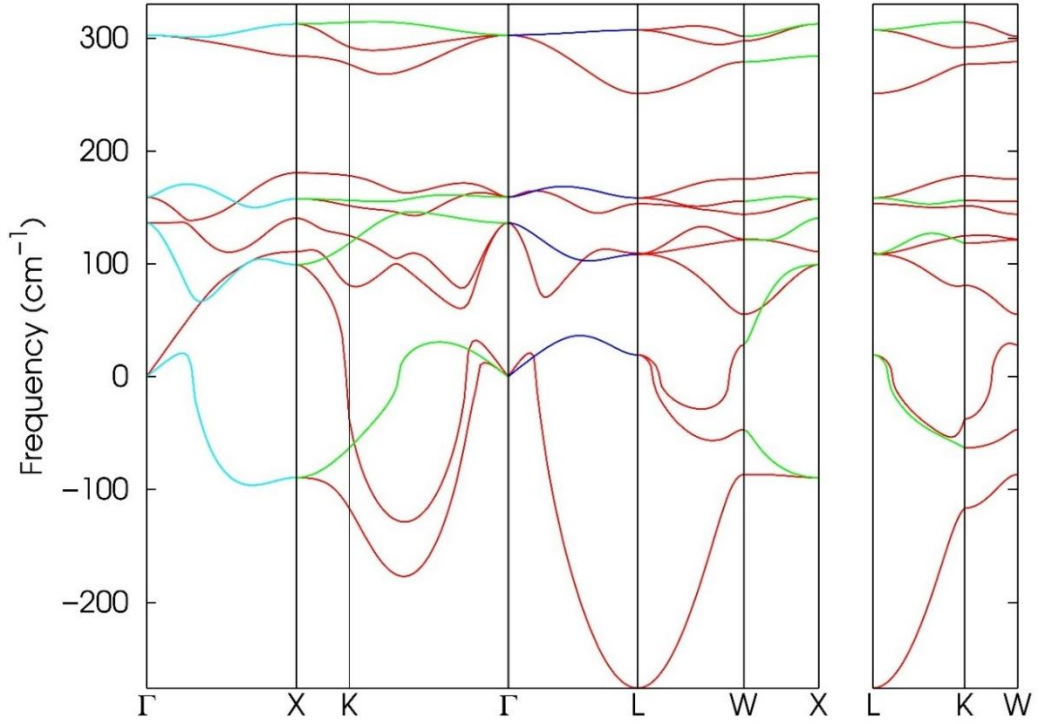
Şekil 4.29. MgV₂Pt ters Heusler alaşımının fonon toplam durum yoğunluğu.



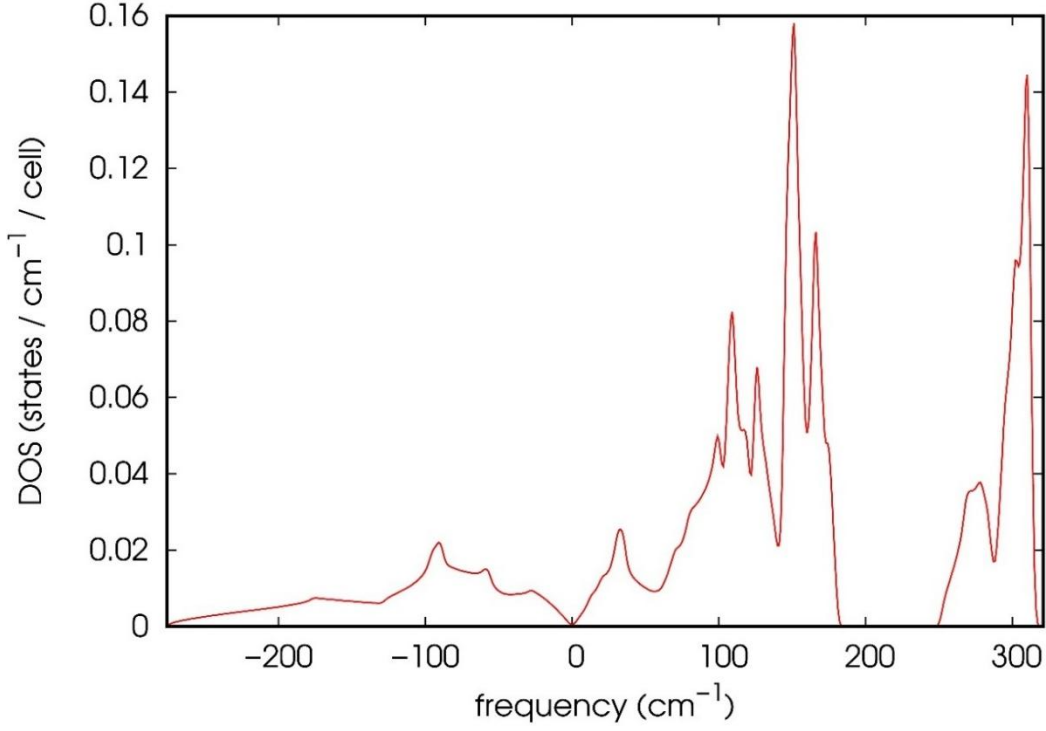
Şekil 4.30. MgVPt₂ tam Heusler alaşımının fonon dispersiyon eğrileri.



Şekil 4.31. MgVPt₂ tam Heusler alaşımının fonon toplam durum yoğunluğu.



Şekil 4.32. MgVPt₂ ters Heusler alaşımının fonon dispersiyon eğrileri.



Şekil 4.33. MgVPt₂ ters alaşımının fonon toplam durum yoğunluğu.

MgVPt₂ alaşımı, hem Fm-3m hem de F-43m fazlarında mekanik olarak kararsızdır. Bu kararsızlık, özellikle C_{11} elastik sabitinin C_{12} 'den küçük olması nedeniyle ortaya çıkmaktadır; bu durum, kübik yapılar için Born kararlılık kriterlerini açıkça ihlal etmektedir. Fonon analizleri, Fm-3m fazda (Şekil 4.30) tüm modların pozitif frekansta yer aldığını göstermekte olup, bu fazın dinamik olarak kararlı olduğunu ortaya koymaktadır. Bu, elastik kararsızlığa rağmen sistemin kısa zaman ölçeklerinde veya düşük sıcaklıkta stabil kalabileceğini göstermektedir. Ayrıca, X simetrisinde akustik modlarda (TA modları) bir yumuşama görülmektedir. Bu durum ise yine C_{11} değerinin C_{12} değerinden küçük olmasından kaynaklanmaktadır. Ters Heusler (F-43m) fazında ise (Şekil 4.32), fonon spektrumunda negatif frekanslar yer almakta, bu yapı dinamik olarak da kararsız görünmektedir. Fonon durum yoğunlukları (Şekil 4.31 ve 4.33), bu durumlarla uyumlu şekilde yoğunluklar göstermektedir.

Fonon analizleri, mekanik kararlılık verileriyle birlikte değerlendirildiğinde, yalnızca Mg₂VPt (Fm-3m), MgV₂Pt (F-43m) ve MgVPt₂ (Fm-3m) fazlarının dinamik açıdan kararlı olduğu görülmektedir. Bu durum, yalnızca bu fazların fonon-temelli termodinamik veya ısıl analizlerde kullanılabilir olduğunu göstermektedir. Özellikle Mg₂VPt'in Fm-3m fazı gerek mekanik gerek dinamik yönden tam kararlılığı sayesinde yapısal uygulamalar için güçlü bir aday olarak öne çıkmaktadır.

5. SONUÇ VE ÖNERİLER

Bu çalışmada, Mg_2VPt , MgV_2Pt ve $MgVPt_2$ alaşımlarının tam Heusler (Fm-3m) ve ters Heusler (F-43m) kristal yapılarındaki yapısal, elektronik, mekanik, termodinamik ve titreşimsel özellikleri, yoğunluk fonksiyoneli teorisi (DFT) çerçevesinde detaylı bir şekilde araştırılmıştır. Hesaplamalar Quantum ESPRESSO yazılımı kullanılarak gerçekleştirilmiş, elektronik yapı analizleri için GGA-PBE yaklaşımı, mekanik ve termodinamik özellikler için ise elastik sabitlere dayalı modeller uygulanmıştır. Fonon hesaplamaları ve dinamik kararlılık analizleri, fonon dispersiyon eğrileri ve toplam fonon yoğunluk durumları üzerinden değerlendirilmiştir.

Yapısal optimizasyonlar sonucunda elde edilen örgü sabitleri ve toplam manyetik moment değerleri, OQMD verileriyle yüksek uyum göstermekte olup, kullanılan hesaplama yönteminin doğruluğunu ve güvenilirliğini teyit etmektedir. Mg_2VPt , MgV_2Pt ve $MgVPt_2$ alaşımları her iki fazda da incelenmiş, kristal simetrisinin fiziksel özellikler üzerindeki etkileri açıkça ortaya konmuştur. Özellikle ters Heusler (F-43m) yapılarında gözlenen düşük manyetik momentler, bu alaşımların manyetik rezonans gibi hassas ortamlarda kullanılabilirliğini artıracak önemli bir avantaj olarak değerlendirilmektedir.

Elektronik bant yapısı ve durum yoğunluğu analizleri, Mg_2VPt ve $MgVPt_2$ alaşımlarının F-43m yapılarında yarı-metal karakter sergilediğini ortaya koymuştur. Bu durum, bu alaşımların %100 spin polarizasyonuna sahip olduğu anlamına gelmekte ve spintronik uygulamalar için güçlü bir potansiyel sunmaktadır. MgV_2Pt alaşımı ise her iki fazda da metalik karakter göstermekte olup, spin ayrımı gerektiren uygulamalarda göreceli olarak daha sınırlı bir performans sergileyebilir.

Mekanik özellikler incelendiğinde, Mg_2VPt alaşımı hem Fm-3m hem de F-43m fazlarda Born kriterlerini sağlamakta ve elastik olarak kararlı bir yapı sergilemektedir. Buna karşılık MgV_2Pt yalnızca F-43m fazda mekanik kararlılık göstermektedir. $MgVPt_2$ alaşımı ise her iki fazda da mekanik olarak kararsızdır ve bu durum özellikle C_{11} elastik sabitinin C_{12} 'den küçük olmasıyla ilişkilidir. Bu mekanik kararsızlık, ilgili fazların yapı içerisindeki gerilme ve deformasyona karşı dirençlerinin zayıf olduğunu göstermektedir.

Fonon hesaplamaları sonucunda Mg_2VPt alaşımının yalnızca Fm-3m fazda, MgV_2Pt alaşımının ise yalnızca F-43m fazda dinamik olarak kararlı olduğu tespit edilmiştir. $MgVPt_2$ alaşımı ise mekanik olarak kararsız olmasına rağmen, Fm-3m fazda tüm fonon modlarının pozitif olması nedeniyle dinamik olarak kararlıdır. Bu önemli bulgu, elastik kararsızlık olmasına rağmen bu fazın belirli sıcaklık ve zaman ölçeklerinde

yapısal bütünlüğünü koruyabileceğini göstermektedir. Buna karşın, F-43m fazda hem mekanik hem de dinamik kararsızlık gözlenmiştir. Özellikle Γ -X doğrultusunda akustik modlarda yumuşama, elastik sabitlerin dengesizliği ile doğrudan ilişkilidir ve yapının fonon seviyesinde istikrarsız olduğunu göstermektedir.

Termodinamik analizler, yalnızca mekanik ve dinamik olarak kararlı fazlar üzerinden yapılmış ve elde edilen ısı sığası, serbest enerji ve entropi eğrileri incelenmiştir. Mg_2VPt alaşımı Fm-3m fazda yüksek ısı sığası ve düşük entropi profili ile termal açıdan en dengeli yapı olarak öne çıkmıştır. MgV_2Pt alaşımı ise F-43m fazda yüksek entropi ve rijit yapısıyla dikkat çekmiştir. $MgVPt_2$ alaşımının Fm-3m fazda dinamik kararlı olması nedeniyle sınırlı sıcaklık aralıklarında değerlendirilmesi mümkün olmakla birlikte, yapının elastik olarak dengesiz olması geniş uygulamalar açısından sınırlayıcıdır.

Genel olarak değerlendirildiğinde, Mg_2VPt alaşımı hem yapısal hem elektronik hem de mekanik ve dinamik kararlılık açısından en tutarlı sonuçları veren sistem olarak öne çıkmaktadır. Yarı-metal karakteri, sünekliği ve yüksek termal kararlılığı ile hem spintronic hem de biyomedikal alanlarda kullanılabilir güçlü bir adaydır. MgV_2Pt alaşımı, yalnızca ters Heusler yapıda kararlı olmakla birlikte, yüksek rijitliği ve düşük ısı sığası ile sertlik ve direnç gerektiren uygulamalar için uygun olabilir. $MgVPt_2$ alaşımı ise Fm-3m fazda dinamik kararlılığı sayesinde sınırlı koşullarda değerlendirilebilecek potansiyele sahiptir; ancak mekanik dengesizliği nedeniyle bu alaşımın yapay kararlılıkla desteklenmesi (örneğin yüzey mühendisliği, doping) gerekebilir.

Öneriler;

- Mg_2VPt alaşımı için deneysel sentez ve biyolojik uyumluluk testlerinin gerçekleştirilmesi önerilir.
- MgV_2Pt ve $MgVPt_2$ alaşımalarında mekanik kararlılığı artırmak için doping, alaşımlama veya basınç etkisi altında yeniden değerlendirme çalışmaları yapılabilir.
- Yarımetal karakterli yapılar, spintronic aygıtların performansını artırma amacıyla ileri elektronik transport hesaplamalarına tabi tutulabilir.
- Dinamik kararlılığı olan ancak mekanik olarak dengesiz olan fazlar için kısa zaman ölçekli uygulamaların (örneğin geçici tıbbi implantlar veya mikro elektronik bileşenler) araştırılması faydalı olabilir.

KAYNAKLAR

- Akıncı, Ü. (2007). Yoğunluk fonksiyoneli teorisi. Dokuz Eylül Üniversitesi. <http://kisi.deu.edu.tr/umit.akinci/kmc/node1.html>
- Aliev, F. G., Kozyrev, A. V., & Aliev, A. I. (2018). Heusler Alloys: Promising Multifunctional Materials. *Physics of the Solid State*, 60(9), 1707–1724. <https://doi.org/10.1134/S1063783418090031>
- Azadani, E., Salari, M., & Raza, H. (2020). Electronic and magnetic properties of spinel MgV_2O_4 : A DFT study. *arXiv preprint arXiv:2009.10323*. <https://doi.org/10.48550/arXiv.2009.10323>
- Bagayoko, D. (2014). Understanding Density Functional Theory (DFT) and Completing it in Practice. *AIP Conference Proceedings*, 1635(1), 2-3. <https://doi.org/10.1063/1.4903408>
- Belasri, A., Ziane, C., Boufadi, R., Bacha, A., Baaziz, H., & Djabou, A. E. (2021). The half metallic behavior at high temperature of highly spin-polarized V-based Heusler alloy: DFT calculations. *The European Physical Journal B*, 94(5), 110. <https://doi.org/10.1140/epjb/e2021-10515-5>
- Born, M., & Heisenberg, W. (1985). Zur quantentheorie der molekeln. In *Original Scientific Papers Wissenschaftliche Originalarbeiten* (pp. 216-246). Springer Berlin Heidelberg.
- Born, M., & Oppenheimer, R. (1927). Zur Quantentheorie der Molekeln. *Annalen der Physik*, 84(20), 457-484. <https://doi.org/10.1002/andp.19273892002>
- Born, M., Huang, K., & Lax, M. (1955). *Dynamical theory of crystal lattices*. American Journal of Physics, 23(7), 474-474.
- Callister, W. D., & Rethwisch, D. G. (2020). *Materials Science and Engineering: An Introduction* (10th ed.). Wiley.
- Ceperley, D. M., & Alder, B. J. (1980). Ground state of the electron gas by a stochastic method. *Physical Review Letters*, 45(7), 566-569.
- Chatterjee, S., Kumar, A., Chatterjee, A., & Nanda, D. (2019). Biomedical applications of Heusler alloys: Prospects and challenges. *Materials Science and Engineering: C*, 104, 109928. <https://doi.org/10.1016/j.msec.2019.109928>
- Cramer, C. J. (2004). *Essentials of computational chemistry (2nd ed.)*. John Wiley & Sons.

- Dal Corso, A. (2014). *thermo_pw: A package to compute thermal properties within the quasi-harmonic approximation*. Retrieved from https://dalcorso.github.io/thermo_pw/
- Dal Corso, A. (2016). Elastic constants of beryllium: a first-principles investigation. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 28(7), 075401.
- Felser, C., Fecher, G. H., & Balke, B. (2007). Spintronics: A challenge for materials science and solid-state chemistry. *Angewandte Chemie International Edition*, 46(5), 668–699. <https://doi.org/10.1002/anie.200602530>
- Felser, C., Fecher, G. H., & Balke, B. (2015). Basics and prospective of magnetic Heusler compounds. *APL Materials*, 3(4), 041518. <https://doi.org/10.1063/1.4917377>
- Fock, V. A. (1930). Bemerkung zum Virialsatz. *Zeitschrift für Physik*, 63, 855–858.
- Fock, V. A. (1930). Näherungsmethode zur Lösung des quantenmechanischen Mehrkörperproblems. *Zeitschrift für Physik*, 61, 126–148.
- Fujiwara, K., Uehiro, R., Edalati, K., Li, H. W., Floriano, R., Akiba, E., & Horita, Z. (2018). New Mg–V–Cr BCC alloys synthesized by high-pressure torsion and ball milling. *Materials Transactions*, 59(5), 741–746. <https://doi.org/10.2320/matertrans.M2018001>
- Galanakis, I., Dederichs, P. H., & Papanikolaou, N. (2002). Slater-Pauling behavior and origin of the half-metallicity of the full-Heusler alloys. *Physical Review B*, 66(17), 174429. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.66.174429>
- Giannozzi, P., Andreussi, O., Brumme, T., Bunau, O., Nardelli, M. B., Calandra, M., ... & Baroni, S. (2017). Advanced capabilities for materials modelling with Quantum ESPRESSO. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 29(46), 465901.
- Giannozzi, P., Baroni, S., Bonini, N., Calandra, M., Car, R., Cavazzoni, C., Ceresoli, D., Chiarotti, G. L., Cococcioni, M., Dabo, I., Dal Corso, A., de Gironcoli, S., Fabris, S., Fratesi, G., Gebauer, S., Gerstmann, U., Gougoussis, C., Kokalj, A., Lazzeri, M., ... Scoles, S. (2009). QUANTUM ESPRESSO: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 21(39), 395502. <https://doi.org/10.1088/0953-8984/21/39/395502>
- Gierlotka, W., Dębski, A., & Terlicka, S. (2022). Thermodynamic and mechanical properties of Mg–Pt intermetallics: A DFT investigation. *Journal of Materials Research*, 37(6), 1904–1915. <https://doi.org/10.1557/s43578-022-00603-4>

- Graf, T., Felser, C., & Parkin, S. S. P. (2011). Simple rules for the understanding of Heusler compounds. *Progress in Solid State Chemistry*, 39(1), 1–50. <https://doi.org/10.1016/j.progsolidstchem.2011.02.001>
- Hacettepe Üniversitesi, (2024). <http://www.magum.hacettepe.edu.tr/MMKurs/Kuantum%20KimyaII.pdf>.
- Haines, J., Leger, J., & Bocquillon, G. (2001). Synthesis and design of superhard materials. *Annual Review of Materials Research*, 31(1), 1-23.
- Hartree, D. R. (1928). The Wave Mechanics of an Atom with a Non-Coulomb Central Field. *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*, 24(1), 89-132.
- Hedin, L., & Lundqvist, B. I. (1971). Explicit local exchange-correlation potentials. *Journal of Physics C: Solid state physics*, 4(14), 2064-2083.
- Hedin, L., & Lundqvist, S. (1972). On local density schemes. *Le Journal de Physique Colloques*, 33(C3), C3-73.
- Hohenberg, P., & Kohn, W. (1964). Inhomogeneous Electron Gas. *Physical Review*, 136(3B), B864-B871.
- Jesser, R., Bieber, A., & Kuentzler, R. (1992). Magnetic and electrical properties of ferromagnetic V(Ir_{1-x}Pt_x)₃ alloys. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 103(1–3), 113–116. [https://doi.org/10.1016/0304-8853\(92\)91663-E](https://doi.org/10.1016/0304-8853(92)91663-E)
- Jin, M., & Cheng, Z. M. (2009). Oxidative dehydrogenation of cyclohexane to cyclohexene over Mg-VO catalysts. *Catalysis Letters*, 131(1-2), 266-278.
- Kirklin, S., Saal, J. E., Meredig, B., Thompson, A., Doak, J. W., Aykol, M., ... & Wolverton, C. (2015). The Open Quantum Materials Database (OQMD): Assessing the accuracy of DFT formation energies. *npj Computational Materials*, 1(1), 1-15.
- Koch, W., & Holthausen, M. C. (2001). *A Chemist's Guide to Density Functional Theory* (2nd ed.). Wiley-VCH.
- Kohn, W., & Sham, L. J. (1965). Self-consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects. *Physical Review*, 140(4A), A1133-A1138. <https://doi.org/10.1103/PhysRev.140.A1133>
- Kübler, J., & Felser, C. (2016). Non-collinear antiferromagnets and the anomalous Hall effect. *Europhysics Letters*, 114(4), 47005. <https://doi.org/10.1209/0295-5075/114/47005>
- Kuentzler, R. (1982). Magnetic properties of the ordered VPt₃ alloy. *Journal of Applied Physics*, 53(3), 2726–2734. <https://doi.org/10.1063/1.330887>

- Li, H., Yang, H., Chen, J., Zhao, S., Hu, T., Tan, L., Zhang, J., & Li, B. (2022). Magnesium-based materials in orthopedics: Current status and perspectives. *Advanced Science*, 9(12), 2106124. <https://doi.org/10.1002/advs.202106124>
- Lu, Y., Li, S., Zhang, S., Han, Y., & Li, R. (2020). Corrosion resistance and biocompatibility of Pt-based materials for biomedical applications. *Journal of Alloys and Compounds*, 834, 155142. <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2020.155142>
- Methfessel, M., & Paxton, A. T. (1989). High-precision sampling for Brillouin-zone integration in metals. *Physical Review B*, 40(6), 3616.
- Monkhorst, H. J., & Pack, J. D. (1976). Special points for Brillouin-zone integrations. *Physical Review B*, 13(12), 5188.
- Murr, L. E. (2015). Metallurgy and History of Metallic Biomaterials. In *Advances in Metallic Biomaterials* (pp. 1-45). Springer.
- Ouardi, S., Fecher, G. H., Felser, C., & Kübler, J. (2013). Realization of spin gapless semiconductors: The Heusler compound Mn_2CoAl . *Physical Review Letters*, 110(10), 100401. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.110.100401>
- Örnek, O., Önal, Z. K., Bağcı, Ş., & Sevinç, T. E. (2021). First-Principle investigations of $(Ti_{1-x}V_x)_2FeGa$ alloys: A study on structural, magnetic, electronic, and elastic properties. *Russian Journal of Physical Chemistry A*, 95(13), 2592-2599. <https://doi.org/10.1134/S003602442113020X>
- Parr, R. G., & Yang, W. (1994). *Density-functional theory of atoms and molecules*. Oxford University Press.
- Perdew, J. P., Burke, K., & Ernzerhof, M. (1996). Generalized Gradient Approximation Made Simple. *Physical Review Letters*, 77(18), 3865-3868. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.77.3865>
- Perdew, J. P., & Wang, Y. (1992). Accurate and simple analytic representation of the electron-gas correlation energy. *Physical Review B*, 45(23), 13244–13249.
- Perdew, J. P., & Wang, Y. (1991). Accurate and simple density functional for the electronic exchange energy. *Physical Review B*, 43(12), 11847. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.43.11847>
- Pérido, E. A., Hemery, G., Sandre, O., Ortega, D., Garaio, E., Plazaola, F. J., & Teran, F. J. (2015). Fundamentals and advances in magnetic hyperthermia. *arXiv preprint arXiv:1510.06383*.

- Pugh, S. (1954). XCII. Relations between the elastic moduli and the plastic properties of polycrystalline pure metals. *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science*, 45(367), 823-843.
- Quantum ESPRESSO. (2025). *Quantum ESPRESSO official website*. Retrieved from <https://www.quantum-espresso.org/>
- Saal, J. E., Kirklin, S., Aykol, M., Meredig, B., & Wolverton, C. (2013). Materials design and discovery with high-throughput density functional theory: the open quantum materials database (OQMD). *Jom*, 65, 1501-1509.
- Sharma, S., Kumar, N., Sharma, S., & Bhardwaj, S. K. (2025). Exploration of magneto-electronic, structural and mechanical properties of V₂MnGe Heusler alloy: A DFT insight. *AIP Conference Proceedings*, 3198(1), 020002. <https://doi.org/10.1063/5.0232470>
- Shi, X., Yang, J., Salvador, J. R., Chi, M., Cho, J. Y., Wang, H., Bai, S., Yang, J., Zhang, W., & Chen, L. (2011). Multiple-Filled Skutterudites: High Thermoelectric Figure of Merit through Separately Optimizing Electrical and Thermal Transports. *Journal of the American Chemical Society*, 133(20), 7837–7846. <https://doi.org/10.1021/ja110935f>
- Slater, J. C. (1929). The Theory of Complex Spectra. *Physical Review*, 34, 1293-1322.
- Snyder, G. J., & Toberer, E. S. (2008). Complex thermoelectric materials. *Nature Materials*, 7(2), 105–114. <https://doi.org/10.1038/nmat2090>
- Staiger, M. P., Pietak, A. M., Huadmai, J., & Dias, G. (2006). Magnesium and its alloys as orthopedic biomaterials: A review. *Biomaterials*, 27(9), 1728-1734. <https://doi.org/10.1016/j.biomaterials.2005.10.003>
- Szabo, A., & Ostlund, N. S. (1989). *Modern Quantum Chemistry*. McGraw Hill.
- Wikipedia. (2024, May 16). *Local-density approximation*. https://en.wikipedia.org/wiki/Local-density_approximation
- Winterlik, J., Balke, B., Fecher, G. H., Felser, C., Kandpal, H. C., Friák, M., Neugebauer, J., & Spitaler, R. (2008). Structural, electronic, and magnetic properties of Co₂-based Heusler compounds. *Physical Review B*, 77(5), 054406. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.77.054406>
- Wollmann, L., Chadov, S., Kübler, J., & Felser, C. (2014). Magnetism in cubic manganese-rich Heusler compounds. *Physical Review B*, 90(21), 214420. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.90.214420>

- Yang, C., Zeng, X., Tian, W., Cui, Z., Liang, B., & Zeng, D. (2020). Challenges and opportunities in the development of magnesium alloys for biomedical applications: A review. *Acta Biomaterialia*, *94*, 540-556. <https://doi.org/10.1016/j.actbio.2019.05.015>
- Yin, Z., Li, J., Chen, X., & Deng, Z. (2022). Electrically active biomaterials for tissue engineering applications. *Biomaterials Science*, *10*(5), 1119-1142. <https://doi.org/10.1039/D1BM01899A>
- Yoshida, M., Tsuji, Y., Iguchi, S., Nishiguchi, H., Yamanaka, I., Abe, H., & Yoshizawa, K. (2022). Toward computational screening of bimetallic alloys for methane activation: A case study of MgPt alloy. *ACS Catalysis*, *12*(15), 9458–9472. <https://doi.org/10.1021/acscatal.2c02645>
- Zhang, J., Kuznetsov, A. M., Medvedev, I. G., Chi, Q., Albrecht, T., Jensen, P. S., & Ulstrup, J. (2008). Single-molecule electron transfer in electrochemical environments. *Journal of Electroanalytical Chemistry*, *616*(1-2), 101–110. <https://doi.org/10.1016/j.jelechem.2007.11.008>
- Zutic, I., Fabian, J., & Sarma, S. D. (2004). Spintronics: Fundamentals and applications. *Reviews of Modern Physics*, *76*(2), 323-410. <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.76.323>

EKLER

EK-1

Kongre Katılım Belgesi



ÖZGEÇMİŞ

Kişisel Bilgiler	
Adı Soyadı	Abdullah BERTAN
Uyruğu	T.C.
Orcid Numarası	0009-0000-7283-9612

Eğitim Bilgileri	
Lisans	
Üniversite	Kırıkkale Üniversitesi
Fakülte	Mühendislik
Bölümü	Elektrik-Elektronik Mühendisliği
Mezuniyet Yılı	2012
Yüksek Lisans	
Üniversite	Kırşehir Ahi Evran Üniversitesi
Enstitü Adı	Fen Bilimleri Enstitüsü
Anabilim Dalı	İleri Teknolojiler
Mezuniyet Tarihi	2025

Tezden Üretilen Makaleler ve Bildiriler
Uluslararası Konferans ve Sempozyumlarda Sunulan Bildiri Bertan, A. ve Örnek, O. (16.05.2025-18.05.2025) Mg ₂ VPt Ters Heusler Alaşımının İlk-Premsiplerden Elektronik, Mekanik ve Termodinamik Özelliklerinin İncelenmesi, Ahi Evran 5th International Conference On Scientific Research, Dubai, UAE