



T.C.

KIRŞEHİR AHI EVRAN ÜNİVERSİTESİ

FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

İLERİ TEKNOLOJİLER ANABİLİM DALI



**İr TABANLI BAZI TAM HEUSLER  
ALAŞIMLARININ FİZİKSEL  
ÖZELLİKLERİNİN YOĞUNLUK  
FONKSİYONEL TEORİSİ İLE İNCELENMESİ**

**MEHMET KARA**

**YÜKSEK LİSANS TEZİ**

**KIRŞEHİR**

**2025**



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



**İr TABANLI BAZI TAM HEUSLER  
ALAŞIMLARININ FİZİKSEL  
ÖZELLİKLERİNİN YOĞUNLUK  
FONKSİYONEL TEORİSİ İLE İNCELENMESİ**

**MEHMET KARA**

**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 Etiđi Yönergesini okuduđumu ve anladıđımı ve Kırőehir Ahi Evran Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Tez Yazım Kurallarına uygun olarak hazırladıđım bu tez çalışmasında;

- Tez içinde sunduđum verileri, bilgileri ve dokümanları akademik ve etik kurallar çerçevesinde elde ettiđimi,
- Tüm bilgi, belge, deđerlendirme ve sonuçları bilimsel etik kurallarına uygun olarak sunduđumu,
- Tez çalışmasında yararlandıđım eserlerin tümüne uygun atıfta bulunarak kaynak gösterdiđimi,
- Kullanılan verilerde ve ortaya çıkan sonuçlarda herhangi bir deđerşiklik yapmadıđımı,
- Tez olarak sunduđum bu çalışmanın özgün olduđunu,
- bildirir, aksi bir durumda bu konuda hakkımda yapılacak tüm yasal işlemleri ve aleyhime doğabilecek tüm hak kayıplarını kabullendiđimi beyan ederim.

30/10/2025

MEHMET KARA

<b>İÇİNDEKİLER DİZİNİ</b> .....	<b>I</b>
<b>TEŞEKKÜR</b> .....	<b>III</b>
<b>ÖZET</b> .....	<b>IV</b>
<b>ABSTRACT</b> .....	<b>V</b>
<b>TABLolar DİZİNİ</b> .....	<b>VI</b>
<b>ŞEKİLLER DİZİNİ</b> .....	<b>VII</b>
<b>KISALTMALAR DİZİNİ</b> .....	<b>VIII</b>
<b>1.GİRİŞ</b> .....	<b>1</b>
<b>2.ÖNCEKİ ÇALIŞMALAR</b> .....	<b>3</b>
<b>3.MATERYAL VE METOT</b> .....	<b>5</b>
3.1. Heusler alaşımları .....	5
3.1.1.Heusler alaşımların yapısal özellikleri. ....	6
3.1.2. Heusler alaşımların manyetik özellikleri.....	7
3.2.Çok Cisim Proble.....	7
3.3. Born-Oppenheimer yaklaşımı.....	8
3.4. Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi (DFT) .....	8
3.4.1.Elektron Yoğunluğu .....	9
3.5. Hohenberg-Kohn Teoremi (HK) .....	9
3.6. Değiş Tokuş-Korelasyon Enerjisi Yaklaşımları .....	13
3.7. Yerel Yoğunluk Yaklaşımı.....	14
3.8. Genelleştirilmiş Gradyent Yaklaşımı (GGA).....	14
3.9. Pseudopotansiyel Yaklaşımı.....	15
3.10. Hartree-Fock Yaklaşımı .....	16
3.11. Temel Setler .....	17
3.12. Quantum Espresso Programı .....	18
3.13.Quantum Espresso Programı (Q-E).....	19
<b>4.BULGULAR VE TARTIŞMA</b> .....	<b>21</b>
4.1 Ir <sub>2</sub> XIn (X = Sc, Ti ve V) Alaşımlarının hesaplanan yapısal özellikleri.....	22
4.2 Ir <sub>2</sub> XIn (X = Sc, Ti ve V) Alaşımlarının hesaplanan elektronik özellikleri .....	23
4.3 Ir <sub>2</sub> XIn (X = Sc, Ti ve V) Alaşımlarının hesaplanan mekanik özellikleri .....	27
4.4 Ir <sub>2</sub> XIn (X = Sc, Ti ve V) Alaşımlarının hesaplanan termodinamik özellikleri .....	29

4.5 Ir <sub>2</sub> XIn (X = Sc, Ti ve V) Alařımlarının hesaplanan titreřim özellikleri.....	34
<b>5.SONUÇ VE ÖNERİLER.....</b>	<b>39</b>
<b>KAYNAKLAR .....</b>	<b>41</b>
<b>ÖZGEÇMİŐ.....</b>	<b>45</b>

## TEŐEKKÜR

Tez alıőmam sűresince bilgi ve tecrűbeleriyle bana yol gűsteren ve akademik geliőimime 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 İyigűr hocama ve her zaman manevi desteęiyle yanımda olan Prof. Dr. Levent Urtekin 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 merhum babam Duran Kara'ya, annem Menduha Kara'ya, her daim desteęiyle neőesiyle yanımda olan eőim Dilek Őnal Kara'ya, őűkranlarımı sunuyorum.

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

Temmuz, 2025

Mehmet KARA

## ÖZET

### YÜKSEK LİSANS TEZİ

## Ir TABANLI BAZI TAM HEUSLER ALAŞIMLARININ FİZİKSEL ÖZELLİKLERİNİN YOĞUNLUK FONKSİYONEL TEORİSİ İLE İNCELENMESİ

Mehmet KARA

KIRŞEHİR AHİ EVRAN ÜNİVERSİTESİ  
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ  
İLERİ TEKNOLOJİLER ANABİLİM DALI

Danışman: Prof. Dr. Osman ÖRNEK  
Yıl: 2025, Sayfa: 45  
Jüri: Prof. Dr. Osman ÖRNEK  
Doç. Dr. Arif KÖSEMEN  
Doç. Dr. Ahmet İYİGÖR

Bu tez çalışmasında,  $Ir_2XIn$  ( $X = Sc, Ti$  ve  $V$ ) tam Heusler alaşımlarının yapısal, elektronik, mekanik ve termodinamik özellikleri ilk ilke (first-principles) hesaplamalarına dayalı olarak dayalı olarak Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi (DFT) kapsamında incelenmiştir. Hesaplamalar, Quantum ESPRESSO yazılım paketi kullanılarak, Genelleştirilmiş Gradyan Yaklaşımı (GGA) çerçevesinde Perdew–Burke–Ernzerhof (PBE) değişim-korelasyon fonksiyoneli ile gerçekleştirilmiştir. Alaşımlar  $Fm-3m$  uzay grubuna ait  $L2_1$  tipi yüzey merkezli kübik yapı için optimize edilmiştir. Elde edilen örgü sabitleri sırasıyla  $Ir_2ScIn$  için  $6.468 \text{ \AA}$ ,  $Ir_2TiIn$  için  $6.376 \text{ \AA}$  ve  $Ir_2VIn$  için  $6.328 \text{ \AA}$  olarak bulunmuştur. Elastik sabitlerin ( $C_{11}, C_{12}, C_{44}$ ) mekanik kararlılık koşullarını sağladığı ve alaşımların sünek (ductile) karakterde olduğu belirlenmiştir. Elektronik bant yapısı ve durum yoğunluğu (DOS) analizleri, alaşımların yarı-metallic (half-metallic) davranış sergilediğini göstermektedir. Spin-yukarı ve spin-aşağı kanallarındaki enerji farkı, yüksek spin polarizasyonu ile  $1.00 \mu B$  civarındaki toplam manyetik momentin uyumlu olduğu belirlenmiştir. Termodinamik hesaplamalar sonucunda Debye sıcaklığının yaklaşık  $240 \text{ K}$  olduğu belirlenmiştir. Isı sığası, serbest enerji ve entropi değerlerinin sıcaklığa bağlı değişimleri, alaşımların termodinamik açıdan kararlı olduğunu ortaya koymuştur. Sonuç olarak,  $Ir_2ScIn$ ,  $Ir_2TiIn$  ve  $Ir_2VIn$  alaşımlarının tümü mekanik olarak kararlı, yarı-metallic yapıda ve yüksek spin polarizasyonuna sahip bileşikler olarak belirlenmiştir. Bu bulgular, özellikle  $Ir_2ScIn$  alaşımının spintronik ve elektronik cihaz uygulamaları açısından umut verici bir aday olduğunu göstermektedir.

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

## ABSTRACT

### MASTER'S THESIS

## INVESTIGATION OF PHYSICAL PROPERTIES OF SOME IR-BASED FULL HEUSLER ALLOYS USING DENSITY FUNCTIONAL THEORY

Mehmet KARA

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

Supervisor: Prof. Dr. Osman ÖRNEK  
Year: 2025, Pages: 45  
Juries: Prof. Dr. Osman ÖRNEK  
Assoc. Prof. Dr. Arif KÖSEMEN  
Assoc. Prof. Dr. Ahmet İYİGÖR

In this thesis, the structural, electronic, mechanical and thermodynamic properties of Ir<sub>2</sub>XIn (X = Sc, Ti and V) full Heusler alloys were investigated within the scope of Density Functional Theory (DFT) based on first-principles calculations. The calculations were carried out with the Perdew–Burke–Ernzerhof (PBE) exchange-correlation functional within the Generalized Gradient Approximation (GGA) framework using the Quantum ESPRESSO software package. The alloys were optimized for the L<sub>21</sub> type face-centered cubic structure belonging to the Fm-3m space group. The lattice constants obtained were found to be 6.468 Å for Ir<sub>2</sub>ScIn, 6.376 Å for Ir<sub>2</sub>TiIn and 6.328 Å for Ir<sub>2</sub>VIn, respectively. It was determined that the elastic constants (C<sub>11</sub>, C<sub>12</sub>, C<sub>44</sub>) met the mechanical stability conditions and that the alloys were ductile. Electronic band structure and density of states (DOS) analyses indicate that the alloys exhibit semi-metallic behavior. The energy difference in the spin-up and spin-down channels is consistent with the high spin polarization and the total magnetic moment of around 1.00 μB. Thermodynamic calculations indicate that the Debye temperatures are approximately 240 K. Temperature-dependent changes in heat capacity, free energy, and entropy values reveal that the alloys are thermodynamically stable. Consequently, Ir<sub>2</sub>ScIn, Ir<sub>2</sub>TiIn, and Ir<sub>2</sub>VIn alloys are all mechanically stable, semi-metallic, and highly spin polarized compounds. These findings suggest that Ir<sub>2</sub>ScIn, in particular, is a promising candidate for spintronic and electronic device applications.

**Keywords:** Density Functional Theory (DFT), Electronic and Thermodynamic Properties, Inverse Heusler Alloy.

## TABLolar DİZİNİ

## Sayfa No

<b>Tablo 4.1.</b> Ir <sub>2</sub> XIn (X=Sc, Ti ve V) alaşımlarının Fm-3m uzay grubundaki örgü sabitleri (a <sub>0</sub> ). .....	<b>23</b>
<b>Tablo 4.2.</b> Ir <sub>2</sub> XIn (X=Sc, Ti ve V) alaşımlarının elastik sabitleri (C <sub>ij</sub> ; GPa).....	<b>28</b>
<b>Tablo 4.3.</b> Ir <sub>2</sub> XIn (X=Sc, Ti ve V) alaşımlarının bulk modülü (B; GPa), kayma .....modülü(G; GPa), young modülü (E; GPa), B/G oranı, poisson oranı (σ) ve ortalama ses hızı (v <sub>m</sub> : m/s).....	<b>29</b>

## ŞEKİLLER DİZİNİ

Sayfa No

Şekil 4.1. $\text{Ir}_2\text{XIn}$ ( $\text{X}=\text{Sc}$ , $\text{Ti}$ ve $\text{V}$ ) alaşımlarının $\text{Fm-3m}$ uzay grubundaki kristal yapısı.....	22
Şekil 4.2. $\text{Ir}_2\text{ScIn}$ Heusler alaşımının yüksek simetri yönelimleri boyunca elektronik bant eğrileri.....	24
Şekil 4.3. $\text{Ir}_2\text{TiIn}$ Heusler alaşımının yüksek simetri yönelimleri boyunca elektronik bant eğrileri.....	24
Şekil 4.4. $\text{Ir}_2\text{VIn}$ Heusler alaşımının yüksek simetri yönelimleri boyunca elektronik bant eğrileri.....	25
Şekil 4.5. $\text{Ir}_2\text{ScIn}$ Heusler alaşımının toplam ve kısmi durum yoğunluğu eğrileri.....	26
Şekil 4.6. $\text{Ir}_2\text{TiIn}$ Heusler alaşımının toplam ve kısmi durum yoğunluğu eğrileri .....	26
Şekil 4.7. $\text{Ir}_2\text{VIn}$ Heusler alaşımının toplam ve kısmi durum yoğunluğu eğrileri.....	27
Şekil 4.8. $\text{Ir}_2\text{ScIn}$ alaşımının titreşim enerjilerinin sıcaklık ile değişimi .....	31
Şekil 4.9. $\text{Ir}_2\text{ScIn}$ alaşımının serbest titreşim enerjilerinin sıcaklık ile değişimi .....	31
Şekil 4.10. $\text{Ir}_2\text{ScIn}$ alaşımının entropilerinin sıcaklık ile değişimi .....	32
Şekil 4.11. $\text{Ir}_2\text{ScIn}$ alaşımının ısı sığalarının sıcaklık ile değişimi .....	33
Şekil 4.12. $\text{Ir}_2\text{ScIn}$ alaşımının fonon dispersiyon eğrileri.....	34
Şekil 4.13. $\text{Ir}_2\text{TiIn}$ alaşımının fonon dispersiyon eğrileri .....	36
Şekil 4.14. $\text{Ir}_2\text{VIn}$ alaşımının fonon dispersiyon eğrileri.....	37

## KISALTMALAR DİZİNİ

<b>Kısaltmalar</b>	<b>Açıklama</b>
B	: Bulk Modülü
DFT	: Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi
E	: Young Modülü
G	: Kayma Modülü
GGA	: Genelleştirilmiş Gradyan Yaklaşımı
Ir	: Iridyum
LDA	: Yerel Yoğunluk Yaklaşımı
PBE	: Perdew-Burke-Enzerhof
Pt	: Platin
V	: Vanadyum

## 1. GİRİŞ

Malzeme biliminde atomik düzeyde malzeme özelliklerinin belirlenmesinde yoğunluk fonksiyonel teorisi (DFT) etkin bir şekilde kullanılmakta olup, temel durum özelliklerinin elektron yoğunluğu aracılığıyla hesaplanmasına imkân tanımaktadır. (Hohenberg ve Kohn, 1964; Kohn ve Sham, 1965). DFT, kristal yapı optimizasyonu, elektronik bant yapısı, durum yoğunluğu (DOS), manyetik moment dağılımları ve mekanik parametrelerin hesaplanmasında yüksek doğruluk sağlamaktadır. Genellikle Genelleştirilmiş Gradyan Yaklaşımı (GGA) tercih edilerek değişim-korelasyon fonksiyonelleri ile hesaplamalar yapılmakta ve malzemenin elektronik ve mekanik özelliklerinin belirlenmesinde başarı ile kullanılmaktadır (Perdew ve ark., 1996).

Günümüzde teknolojinin hızlı ilerlemesi, enerji, elektronik ve manyetik cihazlarda kullanılmak üzere yüksek performanslı malzemelerin geliştirilmesine olan ihtiyacı artırmaktadır. Bu bağlamda, Heusler alaşımları, olağanüstü fiziksel özellikleri ve geniş uygulama potansiyelleri nedeniyle son yıllarda hem deneysel hem de teorik çalışmalarda önemli bir yer edinmiştir (Graf ve ark., 2011). Özellikle tam Heusler alaşımları ( $X_2YZ$ ; X, Y: geçiş metalleri, Z: p-blok elementi), geniş bant aralıkları, manyetik özellikleri ve spin-kutup davranışları sayesinde spintronik, termoelektrik, manyetokalorik soğutma ve enerji dönüşüm teknolojilerinde kullanılmaya aday malzemeler arasında yer almaktadır (Galanakis ve ark., 2006). Heusler alaşımları ilk olarak 1903 yılında Friedrich Heusler tarafından keşfedilmiş olup, manyetik özellik göstermelerine rağmen bileşimlerinde manyetik element içermeyen ilk malzeme grubu olarak literatüre geçmiştir (Heusler, 1903). Tam Heusler alaşımları,  $L2_1$  tipi yüzey merkezli kübik kristal yapıda kristal özellik gösterir (Webster, 1984). Heusler alaşımlarının dikkat çekici özelliklerinden biri, kimyasal bileşimin ve atomik düzenlemenin hassas bir şekilde ayarlanarak manyetik ve elektronik özelliklerin kontrol edilebilmesidir. Geçiş metalleri ve indiyum içeren tam Heusler alaşımları yüksek elektrik iletkenliği, düşük termal iletkenlik ve yüksek Seebeck katsayısı gibi özellikleri sayesinde termoelektrik uygulamalarda kullanılabilir (Liu ve ark., 2012). Ayrıca, yüksek Curie sıcaklığına ve yüksek spin polarizasyon oranına sahip olmaları, bu alaşımları spintronik uygulamalar için uygun hale getirmektedir (Kandpal ve ark., 2007).

Spintronik uygulamalar açısından bakıldığında, spin polarizasyonunun %100'e yakın olduğu yarı-metalik ferromanyetik Heusler alaşımları, yüksek manyetik tünelleme direnci (MTJ), spin valf ve spin enjeksiyon cihazları gibi alanlarda kullanılmaktadır (De Groot ve ark., 1983; Felser ve Hirohata, 2018). Bu alaşımlar, bir spin kanalında metalik

iletkenlik sağlarken diğler spin kanalında yarı-iletken davranış göstererek yüksek spin polarizasyonuna sahip olmaktadır (Galanakis ve ark., 2006).

Iridyum elementi yüksek ergime sıcaklığı, kimyasal stabilitesi ve yüksek yoğunluğu nedeniyle uzay, havacılık ve elektronik uygulamalarda kritik rol oynayan bir geçiş metali olup, Heusler alaşımlarında kullanılması durumunda spin yörünge etkileşimlerinin etkisini artırarak manyetik özelliklerin kontrolüne olanak sağlamaktadır (Guo ve Liu, 2013). DFT hesaplamaları, Ir tabanlı tam Heusler alaşımlarının  $L2_1$  tipi yüzey merkezli kübik kristal yapı gösterdiğini ve negatif formasyon enerjileri ile termodinamik olarak kararlı olduklarını ortaya koymaktadır (Graf ve ark., 2011; Wang ve ark., 2021).

Iridyum tabanlı tam Heusler alaşımlarının DFT hesaplamaları aracılığı ile elektronik bant yapısı, manyetik özellikler, elastik sabitler ve mekanik kararlılık gibi özelliklerinin belirlenmesi, bu alaşımların potansiyel uygulama alanlarının belirlenmesine katkıda bulunmakta ve deneysel çalışmalar için öngörü sağlamaktadır (Wang ve ark, 2021). In katkısı, bant yapısında iletkenlik özelliklerini artırmakta, Sc ve V elementleri ise manyetik moment oluşumunu kontrol ederek spintroniğe katkı sağlamaktadır. Literatürden alınan veriler ışığında  $Ir_2ScIn$ ,  $Ir_2TiIn$  ve  $Ir_2VIn$  alaşımlarının DFT ile detaylı incelenmesi, yeni nesil fonksiyonel malzeme geliştirilmesi açısından önem arz etmektedir. Iridyum tabanlı Heusler alaşımları, yüksek korozyon direnci, kararlı kristal yapıları ve spin-yörünge etkileşimleri açısından önemli avantajlar sunmaktadır (Guo ve Liu, 2013). Bu durum, elektronik bant yapısı, manyetik moment dağılımları ve mekanik kararlılık hakkında bilgi sağlayarak deneysel çalışmalara yol gösterici veriler sunmaktadır.

Bu tez çalışmasında, In, Sc ve V elementlerinin Ir tabanlı tam Heusler alaşımlarındaki rolünü, elektron yapılarına katkılarını, kristal yapı stabilitesine etkilerini ve termoelektrik ve spintronik uygulamalardaki potansiyellerini içerecek şekilde hedeflenmektedir. Yoğunluk fonksiyonel teorisi (DFT) kullanılarak yapılan çalışmalar, Ir tabanlı alaşımların  $L2_1$  tipi kristal yapı stabilitesi, mekanik dayanım, elektronik bant yapısı, manyetik özellikler ve termoelektrik potansiyelleri üzerine detaylı analizler yapılacaktır. Literatürde Ir tabanlı tam Heusler alaşımları üzerine yapılan çalışmalar sınırlıdır ve  $Ir_2ScIn$ ,  $Ir_2TiIn$ ,  $Ir_2VIn$  alaşımlarının DFT ile kapsamlı bir şekilde incelenmesi yeni literatür katkısı sağlayarak deneysel çalışmalara temel oluşturacaktır.

## 2. ÖNCEKİ ÇALIŞMALAR

Yoğunluk fonksiyonel teorisi (DFT), malzemelerin atomik ve elektronik özelliklerinin hesaplanmasında güçlü bir yöntem olarak kullanılmaktadır (Hohenberg ve Kohn, 1964; Kohn ve Sham, 1965). Bu yöntem, kristal yapı optimizasyonu, elektronik bant yapısı, yoğunluk durumları (DOS), manyetik moment dağılımları ve elastik parametrelerin yüksek doğrulukla hesaplanmasını sağlar. Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi (DFT) kapsamında gerçekleştirilen hesaplamalarda, değişim ve korelasyon etkilerinin tanımlanmasında çoğunlukla Genelleştirilmiş Gradyan Yaklaşımı (GGA) tercih edilmektedir. Bu yaklaşım, malzemelerin elektronik yapısı ile mekanik davranışlarının öngörülmesinde etkin bir hesaplama aracı olarak öne çıkmaktadır (Perdew, ve ark., 1996). Elektronik yapı açısından, DFT hesaplamalarında Ir tabanlı tam Heusler alaşımlarının metalik veya yarı-metalik özellik gösterdiği, spin yukarı kanalında iletkenlik sağlanırken spin aşağı kanalında bant aralığı olduğu ve bu durumun spintronik uygulamalar açısından yüksek spin polarizasyonu sağladığı belirlenmiştir (de Groot ve ark., 1983; Galanakis ve ark., 2006 ; Guo ve Liu, 2013). DFT çalışmaları, Ir tabanlı tam Heusler alaşımlarının  $L2_1$  tipi yüzey merkezli kübik yapı gösterdiğini ve geometrik optimizasyon sonrası negatif formasyon enerjileri ile termodinamik kararlılığa sahip olduklarını ortaya koymaktadır (Wang ve ark., 2021). Literatürde Pt, Co, Ni ve Ir tabanlı Heusler alaşımlarının büyük çoğunluğu  $L2_1$  yapı ile kristallenir ve bu yapı stabilitesinin X (Ir), Y (Sc, Ti, V) ve Z (In) atomlarının atomik yarıçap ve elektron yapılarına bağlı olduğu rapor edilmiştir (Graf, ve ark., 2011). DFT ile hesaplanan kararlı  $L2_1$  yapı ile literatür arasındaki tutarlılığı göstermektedir. DFT hesaplamalarında Ir tabanlı tam Heusler alaşımlarında metalik veya yarı-metalik bant yapısı elde edilmiştir (Guo ve Liu, 2013). Özellikle  $Ir_2ScIn$  bileşiği, yüksek spin polarizasyonu nedeniyle spintronik uygulamalarda öne çıkan bir malzeme olarak değerlendirilmektedir (de Groot ve ark., 1983).

Son yıllarda spintronik uygulamalar için spin polarizasyonu %100'e yakın olan yarı-metalik ferromanyetik Heusler alaşımları önemli bir araştırma konusu haline gelmiştir (de Groot ve ark., 1983). Bu alaşımlar, bir spin kanalında metalik iletkenlik gösterirken, diğer spin kanalında yarı iletken davranış sergileyerek spin-kutup özelliklerini mümkün kılmaktadır. Bu durum, manyetik tünelleme direnci (MTJ), spin valf ve spin enjeksiyon cihazlarının performansını artırmak için önem arz etmektedir (Felser ve Hirohata, 2018).

Ir tabanlı tam Heusler alařımlarına ynelik DFT alıřmalarında, alařımların L2<sub>1</sub> tipi yzey merkezli kbik kristal yapı sergilediđi, geometrik optimizasyon sonrası negatif formasyon enerjileri ile termodinamik kararlılık sađladıkları belirlenmiřtir (Wang ve ark., 2021). Bu bulgular, Pt, Co, Ni ve Ir tabanlı tam Heusler alařımlarının ođunluđunun L2<sub>1</sub> tipi yapıda kristallendiđini gsteren literatr ile uyumludur (Graf ve ark., 2011).Manyetik zelliklerde, Ir gibi ađır geiř metalleri ieren tam Heusler alařımlarında spin-yrnge etkileřimlerinin gl olması, d-elektron katkılarıyla manyetik momentlerin hassas řekilde kontrol edilmesine olanak tanımaktadır (Wang ve ark., 2021). Bu alařımlar, Slater-Pauling davranıřı gstererek toplam manyetik momentin valans elektron sayısına bađlı olarak ayarlanabildiđini ortaya koymaktadır (Skaftouros ve ark., 2013).Mekanik zellikler aısından, DFT alıřmalarında Ir tabanlı tam Heusler alařımlarının yksek Bulk ve Shear modl deđerlerine sahip olduđu, bu durumun alařımların mekanik kararlılıđı ve sertliđini artırdıđı belirtilmektedir (Liu ve ark., 2012; Gao ve ark., 2011). Iridyumun yksek atomik ktle ve gl metalik bađ karakteri, elastik modllerin yksek ıkmasına katkı sađlamaktadır.Termoelektrik ve spintronik uygulamalarda, yarı-metalik davranıř, dřk termal iletkenlik ve yksek spin polarizasyon gibi zellikler Ir tabanlı tam Heusler alařımlarını potansiyel aday haline getirmektedir (Galanakis ve ark., 2006; Felser ve Hirohata, 2018). Bu zellikler sayesinde enerji verimli cihazların tasarımı iin Ir tabanlı tam Heusler alařımları nemli bir malzeme grubu olarak ne ıkmaktadır.

Literatrde Ir tabanlı tam Heusler alařımları zerinde yapılan alıřmalar sınırlı sayıdadır ve Ir<sub>2</sub>ScIn, Ir<sub>2</sub>TiIn ve Ir<sub>2</sub>VIn alařımları iin ilk-prensip hesaplamalar yoluyla detaylı bir analiz bulunmamaktadır. Bu durum, sz konusu alařımların fiziksel zelliklerinin teorik olarak incelenmesini ve yeni fonksiyonel malzemelerin tasarımına katkı sađlanmasını nemli kılmaktadır. Bu alıřmanın, hem teorik malzeme bilimi literatrne katkı sađlayacađı hem de deneysel sentez sreleri iin yol gsterici olacađı ngrlmektedir.

### 3. MATERYAL VE METOT

Schrödinger denklemi yalnızca bir hidrojen atomu gibi temel sistemlerde tam olarak çözülebilir. Schrödinger denkleminin çok elektronlu sistemler için çözülmesi oldukça zordur. Çok elektronlu sistemlerde dalga fonksiyonlarını ve ilgili enerji seviyelerini bulmak için farklı yöntemlerin kullanılması gerekir. Yoğunluk fonksiyonel teorisi (DFT), çok cisimli sistemler için Schrödinger denkleminin yaklaşım amacıyla kullanılabilir (Hohenberg ve Kohn, 1964). Elektriksel, manyetik, taşıma ve optik özellikler de dahil olmak üzere birçok malzeme özelliği DFT kullanılarak kesin olarak tahmin edilebilir. Bu tezdeki denklemlerin tümü atomik birimler (a.u.) cinsinden değeri ( $e = m_e = \hbar = 1$ ) elektron yükü  $e$ , elektron kütlesi  $m_e$ , indirgenmiş Planck sabiti  $\hbar$  birim olarak 1'e eşit alınır.

#### 3.1. Heusler Alaşımları

Heusler alaşımları üzerine çalışmalar 1903 yılında başlamıştır. Alman maden mühendisi Friedrich Heusler, ferromanyetik elementler içermeyen bazı alaşımlara sp elementleri (örneğin Al, In vb.) eklemiştir. Sn, As, Sb veya Bi gibi elementler eklendiğinde alaşımların ferromanyetik özellik kazandığını keşfetmiştir (Potter ve ark., 1928). Heusler alaşımlarının oluşumunu ve kristal yapısını kavramak uzun zaman almıştır ve kimliği belirsiz kaldı. Cu ve Mn'nin X-ışını tespiti bu belirsizliğin nedenidir. Bunun nedeni siteler arasında ayırım yapmanın zorluğudur. Cu-Mn-Al alaşımı X-ışını ölçümleri ve Potter Cu<sub>2</sub>MnAl'ın taban kristalleri Her sistem bileşeninin bir f.c.c.'si vardır. Super Braid 1929'da aydınlandı ve (Heusler, 1934) 'da kamuoyuna duyuruldu. 1934'te Bradley ve Rodgers (Heusler,O., Annın Physik., 19:155, (1934). 1)i kullanarak Cu-Mn-Al sisteminin kapsamlı bir analizini gerçekleştirdiler ve X-ışınlarını ve normal olmayan saçılmayı keşfettiler. Benzer şekilde Heusler, her yıl Cu<sub>2</sub>MnAl yapısındaki Mn atomlarının konfigürasyonunu hesaplamak için X ışınlarını kullanır (Johnston,G. B., Hall,E. O. J.,Phys. Chem. Solids,). Daha sonra, kimyasal deneyler yapan bilim adamları tarafından bileşim ile manyetik özellikler arasında bir korelasyon keşfedildi (Johnston,G. B., Hall,E. O. J.,Phys. Chem. Solids,).Heusler, kristal yapıları iyi anlaşıldığında çok sayıda alaşım deneyi yaptı. Bir soruşturma yürütüldü. XZ'nin düzenli kombinasyonlarının, iki bileşenli B2 bileşikler XY'ye dayanan Heusler alaşımlarının yapısını oluşturduğu bulunmuştur. Örneğin CoMn, CoAlCo<sub>2</sub>MnAl'ı verir. Bu iki maddenin her ikisi de CsCl tipi kristal yapıya sahip olabilir. Bu nedenle yeni bir Heusler özelliği, bileşiklerin B2 yapısını oluşturabilme yeteneğidir. Alaşım üretme eğilimini

gösterir. Ayrıca alaşımların dört dolgulu alt örgüsünden birini boş bırakarak  $C1_b$ 'nin Heusler yapısının tamamı elde edilebilir.  $C1_b$  yapısına sahip bileşiklere yarım veya yarı Heusler alaşımları adı verilir. Daha önce bahsedildiği gibi  $L2_1$  bileşiklerine tam Heusler alaşımları adı verilir. Heusler Alaşımların stokiyometrik bileşenlerinin çoğunda ferromanyetik kapsamlı deneysel çalışmalar şu şekilde yapılandırıldığını göstermiştir (Bradley ve Rodgers, 1934). Heusler alaşımları bilim insanları tarafından yoğun deneysel araştırmalara ve teorik araştırmalara konu olmuştur. Operasyonunun birincil nedeni  $NiMnSb$ 'deki yarı metalik metaldir.  $Ni_2MnGa$  kombinasyonunda ferromanyetizma ve manyetik form hafızası keşfedildi ve şekil hafızası olgusu başarıyla gözlemlendi. Heusler alaşımları aşağıda listelenmiştir. Araştırmaları yapısal ve manyetik özelliklere ilişkin birkaç teorik ve deneysel araştırmayı içerecektir (Johnston ve ark., 1968).

### 3.1.1. Heusler alaşımların yapısal özellikleri

Şekil 3.1 tam Heusler alaşımlarının ( $X_2YZ$ ) ve yarı-Heusler alaşımlarının stokiyometrik sırayla ( $XYZ$ ) sırasıyla  $L2_1$  ve  $C1_b$  yapılarında kristalleştiğini göstermektedir. Heusler alaşımlarının birim hücresinde birbirine kenetlenen dört f.c.c. bulunur. Z atomu için  $(1/4 \ 1/4 \ 1/4)$  ve  $(3/4 \ 3/4 \ 3/4)$  ve X atomu için  $(0 \ 0 \ 0)$  ve  $(1/2 \ 1/2 \ 1)$  konumlarına sahip konumlar/2) Y atomu için. Alt örgü onun içinde bulunur (Johnston, G. B., Hall, E. O. J., Phys. Chem. Solids,). Yarı Heusler alaşımları dört geçmeli alt örgüden oluşur, ancak bunlardan üçü X, Y ve Z atomlarıyla doludur ve dördüncü alt örgü  $(1/2 \ 1/2 \ 1/2)$  kafes noktasıdır.  $C1_b$  yapısında çekirdek simetrisi yoktur. Heusler alaşımlarında oktahedral simetri pozisyonundaki herhangi bir Y veya Z atomu ilk komşu olarak işlev görür. İçinde sekiz X atomu var. Öte yandan her X atomunda dört Y ve dört Z atomu bulunur. Sonuç olarak, kristalin simetrisi azalır ve tetrahedral simetriye dönüşür (Johnston ve ark., 1968).

İki farklı alt örgü, kimyasal olarak benzer X atomları içerir. Bunun nedeni ilk alt örgünün 900 metrelik yarıçapıdır. Döndürüldüğünde ikinci alt örgü çevresine eşdeğerdir. (Johnston, G. B., Hall, E. O. J., Phys. Chem. Solids,). Yarı Heusler alaşımlarından farklı olarak  $L2_1$  yapısı X atomları içerir. X atomlarının etkileşimleri, ikinci komşu konumda olsalar bile alaşımların manyetik özelliklerinin belirlenmesinde çok önemlidir (Johnston, G. B., Hall, E. O. J., Phys. Chem. Solids,). Farklı alt örgülerdeki kısmi atomlar stokiyometrik bileşiklerde kaosa neden olur. İkame şeklini alabilir. Johnston ve Hall XYZ tipi alaşımların yapısal özellikleri, belirli türdeki tercihli düzensizliğin büyüklüklerini nasıl etkilediğini tespit etmek için kullanılır. Tek bir bozukluk parametresi olan  $\alpha$  onlar

tarafından önerilmiştir (Webster,P. J.,Ziebeck K. R. A., “in Alloys and Compounds of d-Elements with Main Group Elements, Part 2, edited by H. P. J. Wijn, Landolt Börnstein, New Series, Group III”, Vol. 19/c Springer, Berlin, 75 184,(1988). Z atomunun kısmi yerleşimi ve Y'nin birbiri üzerindeki alt örgüsü L2<sub>1</sub> - B2 tipi düzensizliğe neden olur. Z atomlarının yarısının yerleri değiştirilerek B<sub>2</sub> tipi Y yapısı üretilebilir.

### 3.1.2. Heusler alaşımların manyetik özellikleri

Heusler alaşımları çeşitli manyetik özellikler sergileyen önemli bileşiklerdir. Bu alaşımlar helimagnetizma, antiferromanyetizma, Pauli paramanyetizması ve ağır fermiyonik davranış veya lokalize manyetizma gibi diğer ilgi çekici manyetik olayları sergiler. Hepsisi aynı ailenin üyeleridir. Bu özellikler not edilmiştir (Tobola,J., Kaprzyk,S., Pechur,P., Phys. Stat. Sol., 236 531, (2002). Morris,A., “The Physical Properties of Magnetism IEEE”Press: Newyork, 46-75, 259-321, 432-482,(2001).

### 3.2. Çok Cisim Problemi

1926'da Schrödinger kuantum mekaniksel sistemlerin davranışını karakterize etmek için bir denklem buldu. Nihai hedefimiz zamandan bağımsız, göreceli olmayan Schrödinger denklemini çözmektir.

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

Bu durumda E,  $\psi$  durumu Hamilton operatörü H'nin enerji özdeğerini temsil eder. Çok cisimli etkileşimli kuantum mekaniksel parçacıklardan oluşan bir sistem için Hamiltoniyen şu şekilde sağlanır

$$H = -\frac{1}{2}\sum_i \nabla_{r_i}^2 - \frac{1}{2}\sum_i \frac{1}{M_j} \nabla_{r_j}^2 + \sum_{i<j} \frac{1}{r_i-r_j} - \sum_{i,j} \frac{Z_j}{r_i-R_j} + \sum_{i<j} \frac{Z_i Z_j}{R_i-R_j} \quad (3.2)$$

Bu durumda elektron ve çekirdeğin kinetik enerjileri birinci ve ikinci terimlerle temsil edilirken, elektron-elektron, elektron-çekirdek ve çekirdek-çekirdek etkileşimlerinin enerjileri bu sırayla son üç terimle temsil edilir. i'inci atomun atom numarası  $Z_i$ 'dir. i' inci elektron ve j' inci çekirdek sırasıyla  $r_i$  ve  $R_j$ 'de bulunur. Aşağıdaki Schrödinger' in çok cisim durumları için zamandan bağımsız denklemdir.

$$H\Psi(r_1, r_2 \dots, r_N, R_1, R_2, \dots, R_M) = E\Psi(r_1, r_2 \dots, r_N, R_1, R_2, \dots, R_M) \quad (3.3)$$

Çekirdekler, kütlelerinin çok daha büyük olması nedeniyle elektronlardan daha yavaş hareket eder. Hızlı hareket eden elektronların aksine çekirdeklerin belirli bir  $R_j$  konumunda sabit olduğu kabul edilir. Bu yöntem Born–Oppenheimer yaklaşımı adı verilir.

### 3.3. Born-Oppenheimer Yaklaşımı

Denklem 3.4 tarafından sağlanan Hamiltonyen, Born-Oppenheimer yaklaşımı sayesinde çekirdekleri harici bir elektrostatik potansiyel üreten sabit yükler olarak ele alabilir. Sonuç olarak, elektronik ve çekirdek Hamiltoniyenler tüm Hamiltoniyenin iki yarısını oluşturur.

Bu yöntem kullanılarak elektronik Hamiltoniyen aşağıdaki şekilde ifade edilebilir:

$$H_{el} = -\frac{1}{2}\sum_i \nabla_{r_i}^2 + \sum_{i<j} \frac{1}{r_i-r_j} - \sum_{i,j} \frac{Z_j}{r_i-R_j} = T + V_{ee} + V_{Ne} \quad (3.4)$$

T, elektronların kinetik enerjisidir, elektronların elektriksel Coulomb itmesinden kaynaklanan elektron-elektron terimidir ve  $V_{Ne}$ , elektronların çekirdekle etkileşiminden kaynaklanan potansiyeldir.

Elektronik Schrödinger denkleminde göre bu Hamiltoniyen ilişkilidir.

$$H = -\sum_{I=1}^{N_e} \frac{1}{2M_I} \nabla_I^2 + \left\langle -\sum_{i=1}^{N_e} \nabla_i^2 - \sum_{i=1}^{N_e} \sum_{I=1}^{N_i} \frac{Z_I}{|\vec{r}_i - \vec{R}_I|} + \sum_{i=1}^{N_e} \sum_{j>1}^{N_i} \frac{1}{\vec{r}_i - \vec{r}_j} \right\rangle \quad (3.5)$$

$$H_{el}\Psi_{el}(r_1, r_2 \dots, r_N) = E_{el}\Psi_{el}(r_1, r_2 \dots, r_N) \quad (3.6)$$

### 3.4. Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi (DFT)

Hamiltonian'ın elektron-elektron etkileşimi terimi veya, çok cisim problemini çözmeyi aşırı derecede zorlaştırır ve çoğu zaman imkânsız hale getirir. Elektronik yapıların hesaplanmasına yönelik neredeyse tüm yöntemler, elektron-elektron etkileşimlerini çözmeyi kolaylaştıran stratejilere dayanır. Hohenberg, Kohn ve Sham tarafından 1964 ve 1965'te geliştirilen yoğunluk fonksiyonel teorisi (DFT), yine de bu tür sorunların üstesinden gelmek için kullanılabilir (Hohenberg ve Kohn, 1964). DFT,

katılar, moleküller, atomlar ve çekirdekler gibi geniş bir sistem yelpazesinin birçok temel durum karakteristiğini incelemek için kullanılabilir. Çok sayıda cismin dalga fonksiyonlarını kullanmak yerine, bu fikir bir sistemin temel durum özelliklerini elektron yoğunluğu değişkeni  $n(r)$  aracılığıyla tanımlar. Titreşim frekansları, elektronik ve fonon bant yapıları, yapısal geometriler ve manyetik özellikler dahil olmak üzere çok sayıda sistem özelliği bu yöntem kullanılarak tahmin edilebilir. Ampirik parametrelere ihtiyaç duymadan DFT, çok cisimli sistemlerin özelliklerini değerlendirmek için iyi bilinen ve popüler bir çerçeve haline geldi. DFT yönteminin temel amacı, çok cisim dalga fonksiyonu yerine elektron yoğunluğunu  $n(r)$  kullanarak çok cisim etkileşimli bir sistemin özelliklerini açıklamaktır.  $N$  elemanlı bir sistem için, üç uzaysal boyuttaki elektron yoğunluğu  $n(r)$ , aynı sistemi  $3N$  serbestlik derecesiyle temsil etmek için yeterlidir (Martin, 2020).

### 3.4.1 Elektron yoğunluğu

Yoğunluk fonksiyoneli teorisinin temel yapı taşları elektron yoğunluk dağılım fonksiyonu (EDF) ve  $n(r)$ 'dir; burada  $r$ , üç uzaysal boyutu ( $x$ ,  $y$  ve  $z$ ) temsil eder. Belirli bir hacim elemanı  $dr$ 'de herhangi bir elektronu tespit etme olasılığı, elektron yoğunluğunun veya  $n(r)$ 'nin fiziksel tanımıdır.

### 3.5. Hohenberg-Kohn Teoremi (HK)

Dağıtım fonksiyoneli teorisi Hohenberg-Kohn (H-K) teoremine dayanmaktadır. Teoremin iki bileşeni vardır. Teoremin ilk bölümüne göre, tek başına yayılan ışınlardan (elektronlar/fermionlar) oluşan bir sistem, temel durum elektronları tarafından patlatılan bir  $V_{dış}(r)$  dış potansiyeline sahiptir. Dış potansiyel  $V_{external}(r)$ , elektronik yük yoğunluğu  $n(r)$  tarafından belirlendiğinden, temel durum Hamiltoniyeninin tamamı bilinmektedir. Bu,  $n(r)$ , öz fonksiyonlar ve enerji özdeğerleri  $E$  dahil olmak üzere kuantum mekaniksel sistemlerin kapasitansının tamamen kontrol edilebilir olduğu anlamına gelir. Buna göre,  $N$  tane parçacığın yayıldığı bir sistemde enerji,  $V_{dış(r)}$  dış potansiyeline etki eden elektronların tek bir fonksiyoneli. Aşağıdaki toplam enerji fonksiyoneli  $E[n(r)]$ 'yi verir:

$$E[n(r)] = F[n(r)] + \int n(r)V_{dış}(r)d^3r \quad (3.7)$$

Bu denklemdeki ikinci terim çekirdekten gelen dış enerjidir ve  $F[n(r)]$  elektronik yük yoğunluğu  $n(r)$  cinsinden evrensel bir enerji fonksiyoneli. Hohenberg-Kohn (H-K) teoreminin ikinci kısmı toplam enerjii elektron yoğunluğuna göre azaltmak ve elektronik sistemlerin temel durum enerjisini belirlemek için varyasyon ilkesini kullanır. Elektron yoğunluğunun fonksiyonel  $F[n(r)]$ 'si global olarak benzersizdir, yani herhangi bir  $V_{\text{external}}(r)$  dış potansiyeli için bu fonksiyonelin global minimumu, sistemin tam temel durum enerjisini verir. Bu fonksiyonelin global minimum değeri kesin temel durumdur.

$$E[n_0(r)] = F_0[n(r)] + \int n(r)V_{\text{dış}}(r)d^3r \quad (3.7-1)$$

Hohenberg-Kohn teoremi DFT'ye teorik bir temel sağlar ancak çok cisimli elektronik zorluklar için kolay bir çözüm sunamaz. Kohn ve Sham (1965) tarafından yapılan araştırma konuya bir çözüm sunmaktadır. Formül 3.8 Kohn-Sham, Kansas H-K teoremi,  $F[n(r)]$  elektronik yoğunluğunun evrensel fonksiyoneli temsil eder, ancak kesin formu bilinmemektedir ve yaklaşık olarak hesaplanması gerekmektedir. 1965 yılında Kohn ve Sham tarafından geliştirilen (Kohn ve Sham, 1965), Kohn-Sham tek parçacık potansiyeli, gerçek bir etkileşim potansiyeline sahip, tamamen etkileşen çok elektronlu bir sistemi, elektronların etkileşime girmediği hayali, etkileşime girmeyen bir gaz parçacığı sistemine dönüştüren bir yöntemdir. Bir aksiyon potansiyeli dahilinde hareket eder Vektörel  $[n(r)]$ . Bu yöntem, çoklu elektron problemini daha küçük parçalara bölerek çözümünü kolaylaştırır.

$$F[n(r)] = T[n(r)] + E_H[n(r)] + E_{xc}[n(r)] \quad (3.8)$$

Bu durumda, klasik elektron-elektron elektrostatik etkileşimi (Hartree enerjisi),  $E_H[n(r)]$  denklemiyle temsil edilirken,  $T[n(r)]$  terimi, etkileşime girmeyen bir elektron sisteminin kinetik enerji fonksiyoneli. . Denklem 3.8'in son elemanı olan değişim-korelasyon enerjisi ( $E_{xc}[n(r)]$ ), enerjiye olan tüm artık katkıların toplamıdır. Bu üçü arasında yalnızca Hartree'nin katkısı bilinen bir şekilde sahip bir enerji terimine sahiptir. Hartree enerji fonksiyoneli aşağıdaki gibidir:

$$E_H[n(r)] = \frac{1}{2} \iint \frac{n(r)n(r')}{|r-r'|} d^3r d^3r' \quad (3.9)$$

Bu durumda Eş. 3.10'un verdiği toplam enerji fonksiyoneli aşağıdaki gibi olur.

$$E[n(r)] = T[n(r)] + E_H[n(r)] + E_{xc}[n(r)] + \int n(r)V_{dış}(r)d^3r \quad (3.10)$$

Kohn-Sham yaklaşımı, etkileşime girmeyen sistemin eşdeğer kinetik enerjisine eklenen değişim-korelasyon enerjisi  $E_{xc}$  ile etkileşime giren elektronların kinetik enerjisini değiştirerek, etkileşime girmeyen sistemin temel durum elektronik yoğunluğunu şuna eşit üretmeyi amaçlamaktadır: Etkileşimli sistemin durumu. Çerçeve, farklı elektronik yük yoğunluklarının bu şekilde toplanmasıyla sistemin genel elektron yük yoğunluğu  $n(r)$  bulunur.

$$n(r) = \sum_{occ \alpha} n_{\alpha} r = \sum_{occ \alpha} \langle \psi_{\alpha}(r) | \psi_{\alpha}(r) \rangle = \sum_{occ \alpha} |\psi_{\alpha}(r)|^2 \quad (3.11)$$

Elektronun spin dahil kuantum sayıları, etkileşime girmeyen elektron gazının  $\psi_{\alpha}(r)$  ile gösterilen tek parçacık dalga fonksiyonları ile temsil edilir; bunların toplamı, o noktada işgal edilen tüm tek parçacık durumları üzerinden hesaplanır. Ayrıca, yörünge seti aşağıda açıklanan şekilde  $\psi_{\alpha}(r)$  kinetik enerjisini verir:

$$T[n(r)] = -\frac{1}{2} \sum_{\alpha} \langle \psi_{\alpha}(r) | \nabla^2 | \psi_{\alpha}(r) \rangle \quad (3.12)$$

Yoğunluğa göre toplam sıcaklığa ilişkin Denklem 3.13'ün minimuma indirgeme ilkesini kullanarak, ortonormallik kriterlerini karşılayan tek parça Kohn-Sham Denklemleri türetiyoruz.

$$\left( -\frac{1}{2} \nabla^2 + V_{etkin}[n(r)] \right) \psi_{\alpha}(r) = \varepsilon_{\alpha} \psi_{\alpha}(r) \quad (3.13)$$

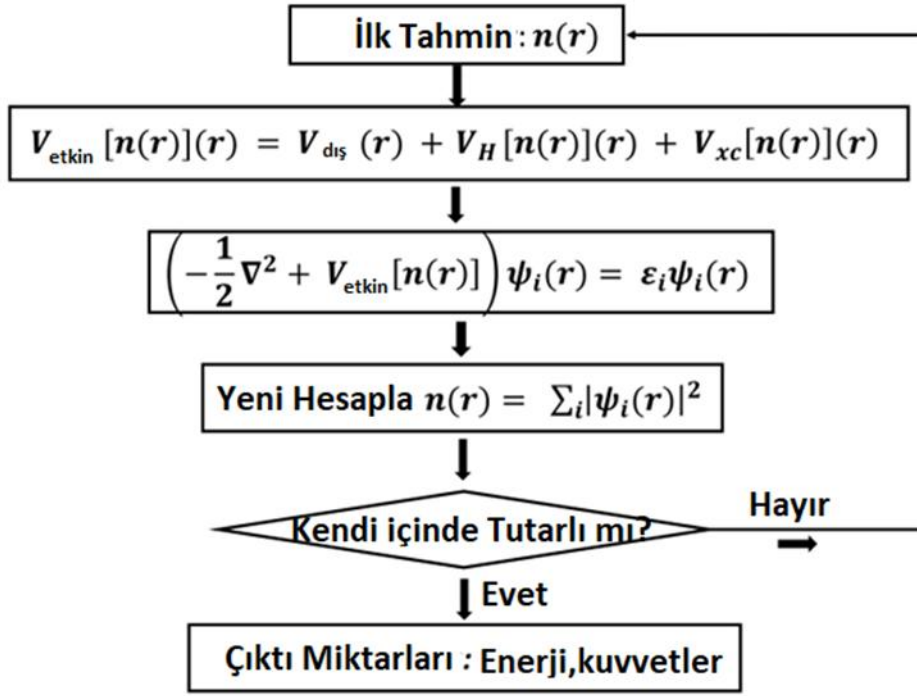
Bu durumda  $\alpha$ , elektronun spin dahil kuantum sayılarını temsil ederken, Kohn-Sham yörüngeleri ve özdeğerleri sırasıyla  $\psi_{\alpha}$  ve  $\varepsilon_{\alpha}$  sembolleriyle temsil edilir. Elektronların çekirdekler ve diğer elektronlarla etkileşimi Kohn-Sham etkin potansiyeli  $V_{etkin}[n(r)]$  ile tanımlanır ve şu şekilde verilir:

$$V_{etkin}[n(r)](r) = V_{dış}(r) + V_H[n(r)](r) + V_{xc}[n(r)](r) \quad (3.14)$$

Burada, deęişim-korelasyon potansiyeli veya  $V_{xc}[n(r)](r)$ , bilinmeyen bir elektron yoğunluęunun bir fonksiyoneldir ve  $V_{ext}(r)$ , Denklemin ilk terimindeki pozitif yüklü iyonların (çekirdek) potansiyelidir 3.14. Eş. 3.15'in Hartree potansiyeli olarak adlandırılan ikinci terimi aőaęıdaki gibidir:

$$V_H[n(r)](r) = \int \frac{n(r')}{|r-r'|} d^3r' \quad (3.15)$$

Coulomb etkileşimi burada Hartree potansiyel terimi  $V_H[n(r)]$  ile tanımlanmaktadır, burada  $n(r) = \sum_{occ \alpha} |\psi_\alpha(r)|^2$ , Kohn-Sham potansiyeli  $V_{etkili}[n(r)]$  elektron yoğunluęundan etkilenir, bu nedenle Eş. 3.13 ve 3.14'te verilen Kohn-Sham denklemlerinin elektron yoğunluęu birbirine yaklaőana kadar tekrar tekrar çözümlenmesi gerekir.  $E_{xc}[n(r)]$ 'nin tam biçimi bilinseydi spesifik temel durum enerjisini ve yoğunluęunu belirlemek mümkün olurdu. Durum böyle deęil, dolayısıyla  $E_{xc}[n]$ 'yi tahmin etmemiz gerekiyor. Şekil 3.1: Kohn–Sham denklemleri kendi kendine tutarlılık (self-consistent) döngüsü kullanılarak çözümlenir. Kendi kendine tutarlılık döngüsü aőaęıdaki adımlardan oluşur: Elektron yoğunluęu başlangıç tahmini  $[n(r)]$  tanımlanır. Etkin Kohn-Sham potansiyelinin  $V_{etkili}[n(r)]$  hesaplanması beklenen elektron yoğunluęuna göre yapılır. Kohn Kohn-Sham dalga fonksiyonlarını  $\psi_\alpha(r)$  elde etmek için Denklem 3.13 ve 3.14'te bulunan Sham denklemlerinin çözümlenmesi gerekir. Yeni elektron yoğunluęunu  $[n(r)]$  belirlemek için Kohn-Sham dalga fonksiyonları kullanılır. Aőaęıdaki adımlarda hesaplanan elektronik yoğunluk, yeni elektron yoğunluęu görevi görür. Yukarıda belirtilen işlem, elektron yoğunluęu birlięe yaklaőana kadar yinelenir. Yakınsak elektronik yük yoğunluęu kuvvetleri, voltajları, enerjiyi ve dięer özellikleri belirlemek için kullanılır.



Şekil 3.1. Kohn-Sham denklemlerini çözmek için kendi kendine tutarlılık döngüsü

### 3.6. Değiş Tokuş-Korelasyon Enerjisi Yaklaşımları

Çok cisimli sistem problemi, Hohenberg-Kohn-Sham yöntemiyle çözülebilecek tek elektronlu probleme indirgenir. Sorunu tam olarak cevaplamak için değişim-korelasyon enerjisini ( $E_{xc} [n(r)]$ ) sağlamak gerekir. Ne yazık ki, ( $E_{xc} [n(r)]$ )'nin kesin ifadesi hala bilinmiyor. Yoğunluk fonksiyoneli teorisi, Eş. 3.14'te verilen değişim-korelasyon potansiyeline yönelik yaklaşımlara dayanmaktadır. Değişim-korelasyon enerjisi  $E_{xc} [n]$ 'nin fonksiyonel türevi, değişim-korelasyon potansiyelinin tanımıdır.

$$V_{xc}[n(r)](r) = \frac{\delta E_{xc}[n(r)]}{\delta n(r)} = \varepsilon_{xc}[n(r)] + n(r) \frac{dE_{xc}[n(r)]}{dn(r)} \quad (3.16)$$

Değişim-korelasyon enerjisini yaklaşık olarak hesaplamak için çok sayıda yöntem vardır ve bu yöntemler, bir malzemenin özelliklerine ilişkin hesaplamaların kesinliği açısından önemlidir. Farklı işlevselliklerden elde edilen teorik sonuçların erişilebilir deneysel verilerle karşılaştırılması, belirli bir nitelik ve malzeme kümesi için hangi işlevin en uygun olduğunun belirlenmesine olanak tanır. Değişim-korelasyon enerjisi

fonksiyoneli tahmin etmek için yaygın olarak kullanılan iki yöntem, yerel yoğunluk yaklaşımı (LDA) ve genelleştirilmiş gradyan yaklaşımıdır (GGA).

### 3.7. Yerel Yoğunluk Yaklaşımı

Kohn ve Sham tarafından oluşturulan yerel yoğunluk yaklaşımı (LDA), Kohn-Sham denklemlerinde bilinmeyen değişim-korelasyon enerjisinden gelen katkıları hesaplamak için en basit ve yaygın olarak kullanılan tekniklerden biridir. Bu yöntem, homojen olmayan bir sistemin değişim-korelasyon (x-c) enerji yoğunluğunu, yoğunluğu söz konusu sistemin yerel yoğunluğuna eşit olan homojen bir elektron gazıyla değiştirir. LDA yönteminde değişim-korelasyon enerjisi şu şekilde sağlanır:

$$E_{xc}^{LDA}[n(r)] = \int n(r)\varepsilon_{xc}[n(r)]d^3(r) \quad (3.17)$$

Düzgün yoğunlukta ( $[n(r)]$ ) elektron gazı başına değişim-korelasyon enerjisi, bu durumda değişim-korelasyon fonksiyonu  $\varepsilon_{xc}[n(r)]$  tarafından verilir. Bu yöntem, elektronik yoğunluk  $[n(r)]$  yavaşça değiştiğinde doğru çözümü sağlar, ancak yoğunluklar hızla değiştiğinde hatalar beklenmelidir (Sholl ve Steckel, 2022). Olağanüstü doğruluğu ve kullanım kolaylığı nedeniyle LDA tekniği yoğunluk fonksiyonel teorisinde yaygın olarak kullanılır. Değişim-korelasyon fonksiyoneli  $\varepsilon_{xc}[n(r)]$  analitik olarak hesaplanamaz. Bu tekdüze elektron gazı, tam olarak bilinen bir  $\varepsilon_{xc}[n(r)]$  değişim bileşenine ve çok doğru sayısal kuantum Monte-Carlo simülasyonlarına uydurulabilen  $\varepsilon_c[n(r)]$  korelasyon kısmına sahiptir. LDA değişim-korelasyon fonksiyoneli  $\varepsilon_{xc}[n(r)]$  için birden fazla ayar vardır. Perdew ve Wang (PW), bu parametrelerden en sık kullanılan ikisidir.

### 3.8. Genelleştirilmiş Gradyent Yaklaşımı (GGA)

LDA yaklaşımının faydası, elektron bozunumunun gradyanı bütünleştirilerek genişletilir. Bu yaklaşım genelleştirilmiş dereceli yaklaşım veya GGA olarak bilinir ve şu şekilde çalışır:

$$E_{xc}^{GGA}[n(r)] = \int f[n(r)\nabla n(r)]d^3(r) \quad (3.18)$$

$f[n(r), \nabla n(r)]$ ' yi bunu tanımlamak için çeşitli parametrelendirmeler mevcuttur. En yaygın kullanılan teknikler Perdew, Burke ve Ernzerhof (PBE, PBEsol) (Perdew ve ark., 1996; Perdew ve ark., 2008) ve Perdew ve Wang (PW) (Perdew ve Wang, 1992) tarafından oluşturulan tekniklerdir. GGA işlevleri, LDA tekniğinin bazı dezavantajlarının

üstesinden gelmesini sağlamıştır. Örneğin, GGA yöntemiyle tahmin edilen bağlanma enerjileri ve atomlar arası bağ uzunlukları, LDA tekniği kullanılarak elde edilenlere kıyasla deneysel değerlerle daha uyumludur. Katı hal fiziğinde ve kuantum kimyasında hesaplamalarda LDA ve GGA gibi yaklaşım teknikleri sıklıkla kullanılır.

### 3.9. Pseudopotansiyel Yaklaşımı

Herhangi bir atomun elektronları nükleer veya değerlik olarak sınıflandırılabilir. Coulomb kuvveti, bir atomun çekirdeğindeki ve atomun iç kabuklarındaki veya "çekirdek elektronları" ndaki elektronların birbirlerine kuvvetli bir şekilde çekilmesine neden olur, dolayısıyla bunların malzemenin özellikleri üzerindeki etkileri ihmal edilebilir düzeydedir. Malzemenin çok sayıda özelliği, kimyasal bağa katılan tek elektron oldukları için yalnızca değerlik elektronlarına atfedilir. Bu nedenle potansiyel formalizmi olarak adlandırılan yöntemin temel konsepti, çekirdek elektronlarının eylemlerinin yerine etkin bir potansiyel koymaktır.

En sık kullanılan psödopotansiyeller Hamann, Schlüter ve Chiang tarafından önerilen normu koruyanlardır; Vanderbilt tarafından geliştirilen ultra yumuşak olanlar (Vanderbilt, 1990); ve Kleinman ve Bylander tarafından önerilen tamamen ayrılabilir olanlar (Kleinman ve Bylander, 1982).

$$\left(-\frac{1}{2} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{2r^2} + V_{etkin}[n(r)]\right) R_{nl}(r) = \varepsilon_{nl} R_{nl}(r) \quad (3.19)$$

Bu durumda  $n(r)$ , dolu durumlar için elektronik yük konsantrasyonlarının eklenmesiyle belirlenen radyal yük yoğunluğudur,  $R_{nl}(r)$  radyal dalga özellikleridir ve  $V_{active}[n(r)]$ , kendi kendine yeten bir elektron potansiyelidir. Bir elektron potansiyeli  $V_{etkili}[n(r)]$ 'nin öz potansiyeli şu şekilde belirlenir:

$$V_{etkin}[n(r)] = -\frac{Z}{r} + V_H[n(r)] + V_{xc}[n(r)] \quad (3.20)$$

Psödopotansiyeller belirli temel spesifikasyonları yerine getirmek için yapılmıştır. Bunların listesi aşağıda özetlenmiştir:

Seçilen kesme yarıçapının ( $r_c$ ) dışında, radyal sözde dalga fonksiyonları, karşılık gelen tüm elektron dalga fonksiyonlarına eşit olmalıdır (belirli bir açısız momentum için). İlk ön koşul şudur.

$$R_l^{pseudo}(r) = R_{nl}^{all-e}(r) \quad r > rc \quad (3.21)$$

Her sözde dalga fonksiyonunun öz değerleri, karşılık gelen her elektron dalga fonksiyonunun öz değeriyle eşleşmelidir;

$$\varepsilon_l^{pseudo} = \varepsilon_{nl}^{all-e} \quad (3.22)$$

Her bir sözde dalga fonksiyonunun birinci ve ikinci türevleri, rc kesim yarıçapında karşılık gelen her elektron dalga fonksiyonu ile çakışmalıdır.

Tüm elektron dalga fonksiyonları ve kukla, rc'de aynı toplam yüke sahip olmalıdır.

$$\int_0^{rc} |R_l^{(pseudo)}(r)|^2 r^2 dr = \int_0^{rc} |R_{nl}^{(all-e)}|^2 r^2 dr \quad (3.23)$$

Son olarak, değerlik radyal sözde dalga fonksiyonlarının kesme yarıçapı (rc) içerisinde hiçbir düğüm yoktur.

### 3.10. Hartree-Fock Yaklaşımı

Elektronların ve çekirdeğin potansiyellerinin ortalaması, Hartree'nin (1928) elektronu etkileyen potansiyel olarak önerdiği şeydir. Hartree, Schrödinger denklemini çözmek için bu potansiyeli kullanmak amacıyla bir sistemin dalga fonksiyonunun bireysel  $\phi(i)$  parçacıklarının dalga fonksiyonlarının çarpımı olduğunu varsaydı.

$$\Psi(1, \dots, N) = \phi_1(1)\phi_2(2) \dots \phi_N(N) \quad (3.24)$$

Bu durumda elektron sayısının (i) konumu ve spini  $v_i(i)$ 'yi belirler. Fermiyonlar elektronlara benzer şekilde yarı-integral bir dönüşe sahiptir. Pauli dışlama ilkesine uymak için bu parçacıkların dalga fonksiyonu, hiçbir iki elektronun aynı kuantum sayısına sahip olmadığını garanti etmelidir. Bununla birlikte, elektron-elektron etkileşimleri tanımlanmadığından Hartree dalga fonksiyonu antisimetriktir. İki elektronun yeri değiştirildiğinde, Hartree-Fock tek bir Slater determinantı kullanarak çoklu

parçacıklardan oluşan bir sistemin tüm dalga fonksiyonunu yazdığı için dalga fonksiyonu işaret değiştirebilir:

$$\Psi(1, \dots, N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \phi_1(1) & \phi_1(2) & \dots & \phi_1(N) \\ \phi_2(1) & \phi_2(2) & \dots & \phi_2(N) \\ \dots & \dots & \ddots & \dots \\ \phi_N(1) & \phi_N(2) & \dots & \phi_N(N) \end{vmatrix} \quad (3.25)$$

Bu durumda özdurum alt simgeyle gösterilirken, elektronun atom numarası parantez içindeki sayıyla gösterilir. Eş. 3.26, dalga fonksiyonunun işaretinin herhangi iki elektronun değiştirilmesiyle değiştirilebileceğini, dolayısıyla Pauli dışlama ilkesinin karşılandığını göstermektedir. İki elektron aynı kuantum durumundaysa dalga fonksiyonu sıfıra düşer. Hartree-Fock dalga fonksiyonu, Hartree çözümü bu terimi hesaba katmadığı için bir değişim terimi içerir; bu, temel durum enerjisini azaltabilir ve gerçek enerjiye en iyi yaklaşımı sunabilir. Bir elektronun  $\phi_i(r)$  Hartree-Fock dalga fonksiyonu şu şekilde verilir:

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{etkin} \right) (r) \phi_i(r) = \varepsilon_i \phi_i(r) \quad (3.26)$$

Bu durumda etkin potansiyel, sırasıyla değişim ( $V_x$ ), elektron-elektron ( $V_{ee}$ ) ve elektron-iyon ( $V_{eN}$ ) potansiyellerinden oluşan  $V_{etkin}$  dir

$$V_{ee}(r) = -\frac{Z_e^2}{|r|} \quad (3.27)$$

$$V_{eN}(r) = e^2 \sum_{i \neq j} \int \frac{|\phi_j(r_2)|}{|r_1 - r_2|} d\mathbf{r}_2 \quad (3.28)$$

$$V_{eN}(r) = -e^2 \sum_{j, i \neq j} \int \frac{\phi_j(r_2) \phi_i(r_2)}{|r_1 - r_2|} d\mathbf{r}_2 \quad (3.29)$$

Hartree-Fock yönteminin hem atomlar hem de moleküller için avantajları vardır. Ancak hesaplama açısından oldukça yoğundur ve aşırı elektron sayısına sahip bileşiklerde kullanıldığında kesin olmayan bulgular verir.

### 3.11. Temel Setler

Hem hesaplama maliyeti hem de hesaplama çıktısının doğruluğu, seçilen temel setten güçlü bir şekilde etkilenir. Kohn-Sham denklemlerini çözmek için elektronik dalga

fonksiyonlarının hesaplama açısından mümkün bir şekilde temsil edilmesi gerekir. Temel işlevler, Kohn-Sham yörüngelerini ifade etmenin sonlu ızgaralardan daha etkili bir yoludur. Böylece Kohn-Sham elektronik dalga fonksiyonlarını iyi bilinen fonksiyonların temel kümeleri (veya yörünge kümeleri) cinsinden genişleterek bunları açıklayabiliyoruz. Tek elektron dalga fonksiyonu için olası bir gösterim şöyledir:

$$\psi(r) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \phi_n \quad (3.30)$$

Bu durumda  $\phi_n$  tam bir fonksiyon kümesine aittir. Eğer sistem tam bir fonksiyon setine sahipse, bu genişleme onun elektronik dalga fonksiyonunu tam olarak karakterize edecektir. Gerçek hesaplamalarda Eş. 3.24'teki toplam, sonlu sayıda temel fonksiyon üzerinden alınır. Bu nedenle temel set yetersiz kalıyor ve genişlemedeki fonksiyon sayısının dikkatli yönetilmesi gerekiyor. Hesaplamalar için temel kümenin boyutu çok önemlidir. Daha büyük temel kümeler daha doğru sonuçlara yol açsa da bunların hesaplanması da daha pahalıdır.

### 3.12. Quantum Espresso Programı

Elektronik yapı hesaplamaları için quantum espresso, Genel Kamu Lisansı koşulları altında açık kaynaklı bir program olarak mevcuttur. Bu program kuantum mekaniksel sistemleri hesaplamak için gerekli tüm teknikleri ve yoğunluk fonksiyonel teorisini uygular. Bu nedenle kuantum kimyası deneylerinde kullanılan temel araçlar olan yüzey ve kristal yapı hesaplamaları için oldukça faydalıdır. Quantum Espresso paketinin kodlarının çoğu C++, Fortran 77 ve Fortran 95 ile yazılmıştır. Ayrıca MPI (mesaj aktarma arayüzü) paketleri paralelleştirmeye izin verir ve bu da hesaplama maliyetlerini büyük ölçüde azaltır.

Kodda, Gianozzi ve ark. (Gianozzi ve ark., 2009) çok çeşitli kavramları uyguladı. Bu pratik uygulamalar arasında Kohn Sham yörüngelerinin temel durum enerjisinin hesaplanması, süper hücre yaklaşımı, değişim korelasyon potansiyelleri için psödopotansiyel yaklaşımlar, yapısal optimizasyon şemaları, ab initio moleküler dinamik şemaları, manyetik sistem hesaplamaları ve yoğunluk fonksiyonel pertürbasyon teorisini içeren hesaplamalar ve diğerleri yer alır. Çeşitli hesaplama türleri için birden fazla ayrı koda sahiptir. PWscf, CP, PHonon, Atomic, PWcond, GIPAW, XSPECTRA, Wannier90, PostProc ve PWggu kodların ilgili adlarıdır.

Giriş dosyasında üç ad listesi (kontrol, sistem ve elektron) bulunmalıdır. Sistem isim plakası, sistemin elektriksel ve yapısal özelliklerinin bir açıklamasını sağlamalı, kontrol ise hesaplama akışını göstermelidir. Elektron isim listesi kendi kendine tutarlılık için uygun stratejileri gösterir.

### **3.13. Quantum-ESPRESSO Programı (Q-E)**

Çok sayıda kristal metal, yarı metal ve yalıtkanın YFT'si Q-E'dir. Sahte potansiyelleri ve düzlem dalga temel setlerini kullanan bir programdır. Yazılım S. Baroni ve arkadaşları tarafından oluşturulmuştur (Baroni ve ark., 1987). Hesaplamalarında atomik gerilimler, gerinimler, yapısal kararlı durumlar, temel durum Born-Oppenheimer yüzeyindeki moleküler değerler ve Q-E temel durum enerjisi ve tek elektron (K-S) yörüngeleri kullanılır. Dinamik araştırma için yapılan hesaplamalar bundan yararlanır (Soyalp, 2006). Bu uygulama fonon frekansları ve kararsız hücre moleküler dinamiği araştırmalarında kullanılır. Üçüncü dereceden harmonik olmayan fonon ömrü, gerçek uzayda atomlar arası kuvvet sabitleri, metallerde elektron fonon katsayısı hesaplamaları ve herhangi bir genel dalga vektöründe özvektör hesaplamaları oldukça başarılı sonuçlar verir (Soyalp, 2006; Uğur, 2004). Ayrıca bu uygulama Ultrasoft (Vanderbilt) ve geleneksel (Hamann-Schlüter-Chiang) sözde potansiyelleri kullanır. Sağlanan Bravais örgü ve simetri, elektronik bant yapısı, yük yoğunluğu ile periyodik bir kristali gruplandırır ve sözde potansiyelleri kullanarak toplam enerjiyi hesaplar. Düzenli ağ çekirdekleri ve ek değerlik Kendi kendine uyumdan dolayı elektronlarının değerlik elektronu için oluşturduğu potansiyelde K-S denklemleri çözüldü. Sınırlı yörüngelere (51) sahip bir düzlem dalga temeli, K-S denklemleri kullanılarak genişletilir;

Katının yük yoğunluğunu, nokta grubu simetrisini ve toplam enerjiyi belirlemek için gereken işlem miktarı Q-E kullanılarak azaltılır. Bu sayıların hesaplanması, dinamik (fonon frekansları) ve yapısal (kafes sabitleri, hacim modülü ve elastik sabitler) özelliklerle birlikte, yapısal faz geçişlerinin ve katı üzerindeki basınç etkilerinin açıklanmasına olanak sağlar. Hesaplamaların YYY yöntemi deneysel bir parametreye bağlıdır. Değişim enerjisinin açıklamasını gerektirmeden sağlar. Bir elektronik sistem YFT formülasyonundaki K-S denklemleriyle etkileşime girdiğinde bu kovalent yöntem metalik sistemler için mükemmel sonuçlar üretir.



#### 4. BULGULAR VE TARTIŞMA

Bu çalışmada,  $\text{Ir}_2\text{XIn}$  ( $\text{X} = \text{Sc}, \text{Ti}$  ve  $\text{V}$ ) alaşımlarının yapısal, elektronik, elastik ve dinamik özellikleri ilk ilke hesaplamalarıyla araştırılmıştır. Tüm hesaplamalar, yoğunluk fonksiyonel teorisine (DFT) dayalı Quantum ESPRESSO yazılım paketi (Giannozzi ve ark., 2009; 2017) kullanılarak gerçekleştirilmiştir. Elektronlar arası değiş-tokuş ve korelasyon etkileri, genelleştirilmiş gradyan yaklaşımı (GGA) kapsamında Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE) fonksiyoneli ile modellenmiştir (Perdew, ve ark, 1996). Atom-çekirdek ve elektron etkileşimleri için norm-koruyucu pseudopotansiyeller tercih edilmiştir.

Her bir alaşım için yapısal optimizasyon işlemleri, değişken-hücre geometri rahatlatması (vc-relax) yöntemi ile yürütülmüştür. Düzlem dalga temel seti için enerji kesme değeri 40 Ry, yük yoğunluğu için ise 400 Ry olarak belirlenmiştir. Brillouin bölgesi,  $8 \times 8 \times 8$  Monkhorst-Pack k-noktası ağıyla örneklenmiştir (Monkhorst ve Pack, 1976). Fermi yüzeyi düzleştirilmesi amacıyla Methfessel-Paxton smearing yöntemi uygulanmış ve genişlik parametresi 0.01 Ry olarak seçilmiştir (Methfessel ve Paxton, 1989). Elektron yoğunluğunun kendi içinde tutarlı hale gelmesi için enerji yakınsama eşiği  $1.0 \times 10^{-10}$  Ry olarak kullanılmıştır.

Elektronik yapı analizleri, optimizasyon sonrası elde edilen denge geometrisi üzerinden gerçekleştirilmiştir. Bu aşamada daha yoğun bir  $12 \times 12 \times 12$  k-noktası ağı kullanılarak öz-tutarlı alan (SCF) hesaplamaları tekrarlanmıştır. Bant yapıları, Brillouin bölgesinin temel simetri yönelimleri boyunca hesaplanmış; durum yoğunluğu (DOS) ve kısmi durum yoğunluğu (PDOS) ise geniş bir enerji aralığında yüksek çözünürlükle elde edilmiştir.

Elastik özellikler, gerilme-deformasyon yöntemi aracılığıyla belirlenmiştir. Tüm bağımsız elastik sabitler, Quantum ESPRESSO'nun thermo\_pw.x modülü içerisinde yer alan gelişmiş algoritma kullanılarak hesaplanmıştır (Dal Corso, 2016). Bu aşamada elektronik hesaplamalarda kullanılan parametrelerle tutarlılık korunmuştur.

Dinamik kararlılığın değerlendirilmesinde yoğunluk fonksiyonel pertürbasyon teorisi (DFPT) temelinde fonon hesaplamaları yapılmıştır. Fonon frekansları,  $4 \times 4 \times 4$  q-noktası ağı üzerinden hesaplanmış ve akustik modların  $\Gamma$  noktasında sıfır frekansa sahip olması için akustik toplam kuralı uygulanmıştır. Fonon bant yapıları, Brillouin bölgesinin temel simetri yolları boyunca elde edilmiştir. Dinamik matrislerin hesaplanmasında karıştırma parametresi olarak  $\alpha_{\text{mix}} = 0.1$  olarak kullanılmıştır.

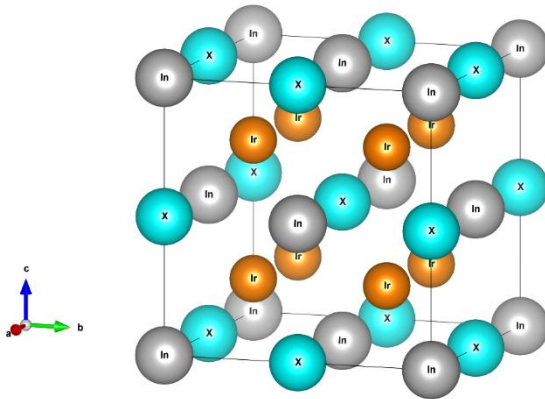
#### 4.1. Ir<sub>2</sub>XIn (X = Sc, Ti ve V) Alařımlarının hesaplanan yapısal özellikleri

Bu çalışmada yapısal özellikleri incelenen Ir<sub>2</sub>XIn (X = Sc, Ti ve V) alařımları, tipik bir tam Heusler fazı olan Fm-3m uzay grubuna ait yüzey merkezli kübik yapıda kristallenmektedir (Şekil 4.1). Bu kristal yapı, Heusler alařımlarına özgü yüksek simetriye sahip bir örgü düzeni gösterir ve malzemelerin elektronik ve mekanik özellikleri üzerinde önemli etkiler yaratabilir.

Her üç alařım için yapılan yapısal optimizasyonlar sonucunda elde edilen örgü sabitleri Tablo 4.1’de sunulmuştur. Hesaplanan örgü sabiti deęerleri sırasıyla Ir<sub>2</sub>ScIn için 6.468 Å, Ir<sub>2</sub>TiIn için 6.376 Å ve Ir<sub>2</sub>VIn için 6.328 Å olarak bulunmuştur. Özellikle X elementi olarak kullanılan Sc, Ti ve V atomlarının atomik yarıçaplarının sırasıyla küçülmesi, elde edilen örgü sabitlerinde de kademeli bir azalmaya yol açmıştır. Bu sonuçlar, doğrudan örgü parametrelerinde deęişimlere yol açtığını göstermektedir

Bununla birlikte, hesaplanan bu deęerler; OQMD (Open Quantum Materials Database) ve MP (Materials Project) veritabanlarında yer alan teorik VASP sonuçlarıyla oldukça uyumludur. Örneęin, Ir<sub>2</sub>ScIn alařımını için OQMD verisi 6.457 Å ve MP verisi 6.430 Å olarak verilmişken, bu çalışmada elde edilen deęer yalnızca birkaç yüzde bir sapmayla 6.468 Å olarak hesaplanmıştır. Bu tutarlılık, yapılan DFT hesaplamalarının güvenilirliğini ve kullanılan yöntemlerin geçerliliğini göstermesi açısından önemlidir.

Genel olarak, elde edilen bulgular; Ir<sub>2</sub>XIn alařımlarının Fm-3m simetrik kararlı bir yapıya sahip olduğunu ve X elementi deęiřtikçe örgü parametrelerinin sistematik olarak deęiřtiğini ortaya koymaktadır. Bu durum, daha sonraki bölümlerde tartışılacak olan elektronik ve mekanik özelliklerdeki farklılıkların da yapısal düzeydeki bu deęişimlerden kaynaklanabileceğine işaretlemektedir.



Şekil 4.1. Ir<sub>2</sub>XIn (X=Sc, Ti ve V) alařımlarının Fm-3m uzay grubundaki kristal yapısı

**Tablo 4.1.** Ir<sub>2</sub>XIn (X=Sc, Ti ve V) alaşımlarının Fm-3m uzay grubundaki örgü sabitleri (*a*<sub>0</sub>).

Alaşımlar	Referanslar	<i>a</i> <sub>0</sub> (Å)
<b>Ir<sub>2</sub>ScIn</b>	Bu Çalışma	6.468
	OQMD-VASP <sup>1</sup>	6.457
	MP-VASP <sup>2</sup>	6.430
<b>Ir<sub>2</sub>TiIn</b>	Bu Çalışma	6.376
	OQMD-VASP <sup>1</sup>	6.362
<b>Ir<sub>2</sub>VIn</b>	Bu Çalışma	6.328
	OQMD-VASP <sup>1</sup>	6.302

<sup>1</sup> Saal ve ark., 2013; Kirilin ve ark., 2015

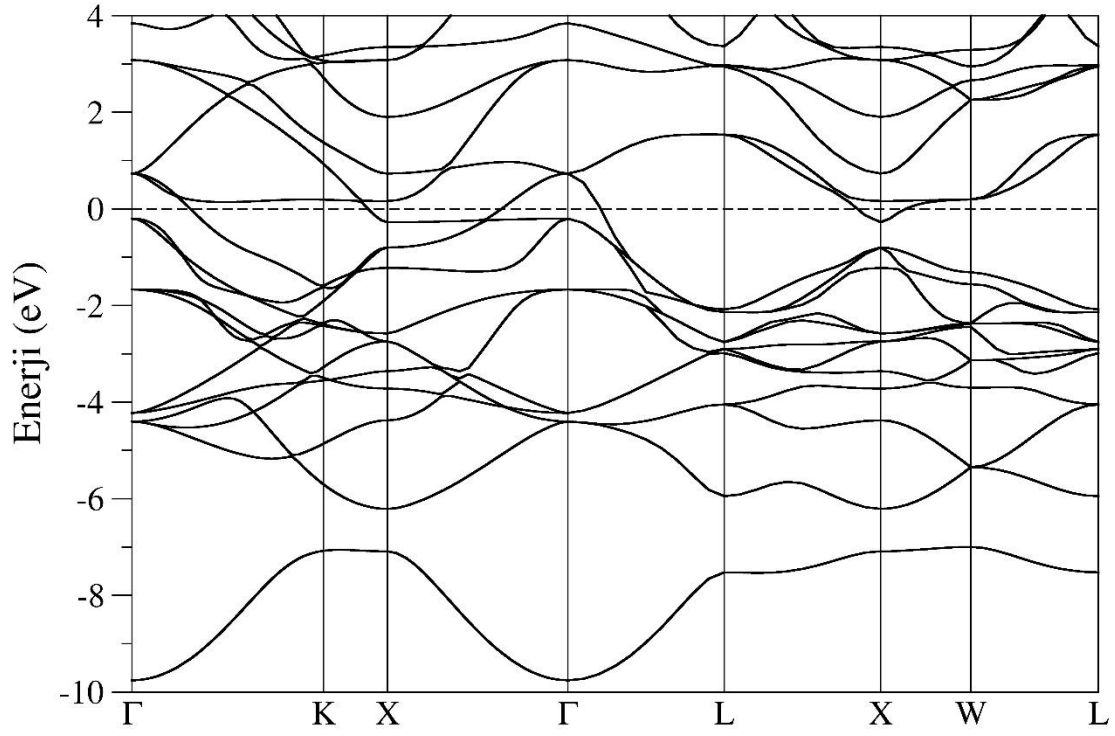
<sup>2</sup> Jain ve ark., 2013; Materials Project. (2025).

#### 4.2. Ir<sub>2</sub>XIn (X = Sc, Ti ve V) Alaşımlarının Hesaplanan Elektronik Özellikleri

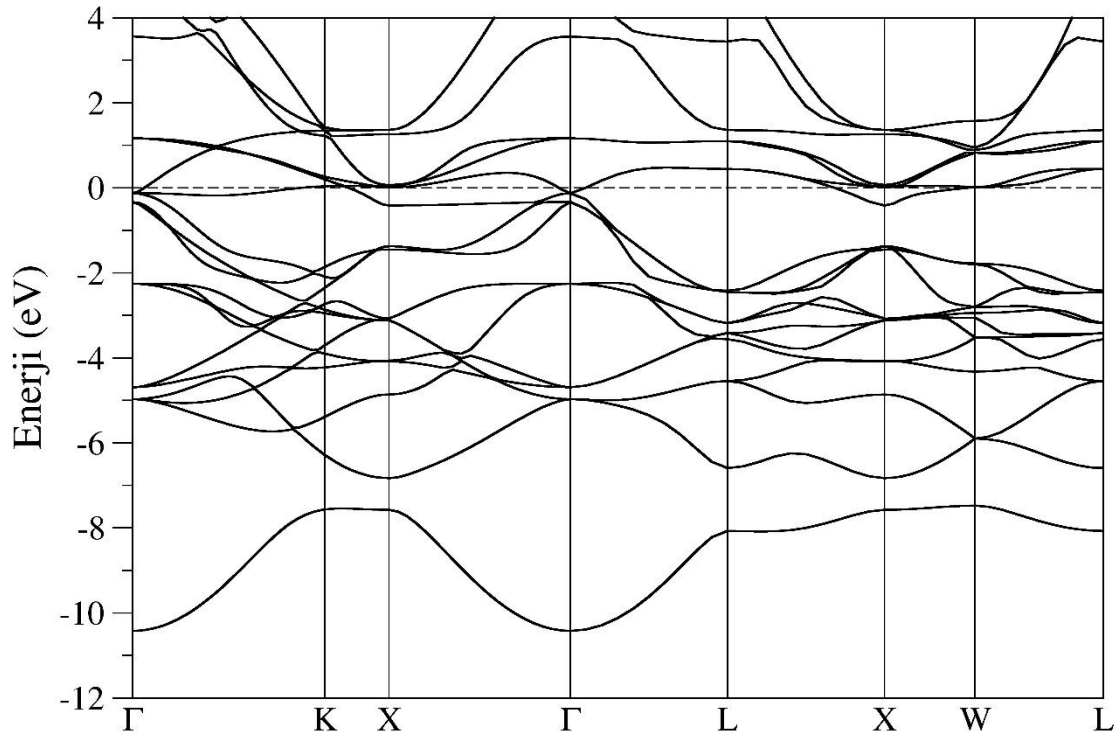
Ir<sub>2</sub>XIn (X = Sc, Ti ve V) alaşımlarının elektronik yapı özellikleri, yoğunluk fonksiyonel teorisi (DFT) çerçevesinde hesaplanan bant yapıları ve durum yoğunluğu (DOS) verileriyle ayrıntılı şekilde analiz edilmiştir. Şekil 4.2-4.4'te verilen bant yapıları, yüksek simetri yönelimleri boyunca incelenmiş olup; Şekil 4.5-4.7'de sunulan toplam ve kısmi durum yoğunluğu eğrileri değerlendirilmiştir.

Bant yapısı analizi, her üç alaşım için elde edilen bant yapılarında, Fermi seviyesini kesen enerji bantlarının bulunması, bu yapıların metalik karakter taşıdığını açıkça göstermektedir. Yani Ir<sub>2</sub>ScIn, Ir<sub>2</sub>TiIn ve Ir<sub>2</sub>VIn alaşımları, bant aralığına (band gap) sahip olmayan, serbest taşıyıcı içeren iletken malzemeler olarak değerlendirilebilir.

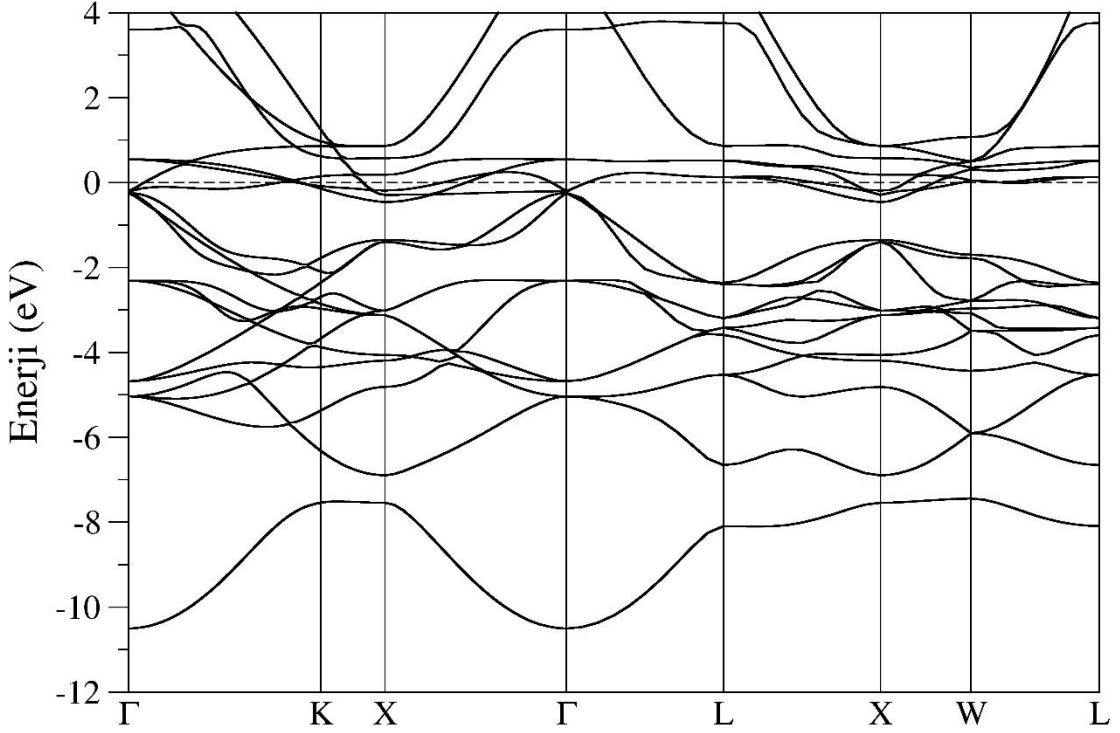
Bant yapılarında, özellikle Fermi seviyesi çevresinde yer alan yoğun bant kümeleri, d-orbitallerin katkısının baskın olduğunu göstermektedir. Bu durum, geçiş metalleri olan Ir ve X (Sc, Ti, V) elementlerinin d-elektronlarının, iletkenlik özelliklerinde belirleyici rol oynadığını ortaya koyar. Ir atomlarına ait d-bandlarının genişliği ve konumu, bu elementin kimyasal bağ yapısı ve elektronegatifliği ile doğrudan ilişkilidir. Ayrıca X elementinin değişimiyle bant yapılarında da sistematik bir değişim gözlemlenmektedir. Özellikle Ir<sub>2</sub>VIn alaşımında, Fermi seviyesine yakın bölgelerde daha sıkı paketlenmiş ve daha karmaşık bir bant yapısı mevcuttur. Bu durum, V atomunun daha fazla valans elektronuna sahip olması nedeniyle oluşan daha fazla bant doluluğu ve yüksek taşıyıcı konsantrasyonu ile açıklanabilir.



Şekil 4.2. Ir<sub>2</sub>ScIn Heusler alaşımının yüksek simetri yönelimleri boyunca elektronik bant eğrileri.



Şekil 4.3. Ir<sub>2</sub>TiIn Heusler alaşımının yüksek simetri yönelimleri boyunca elektronik bant eğrileri.

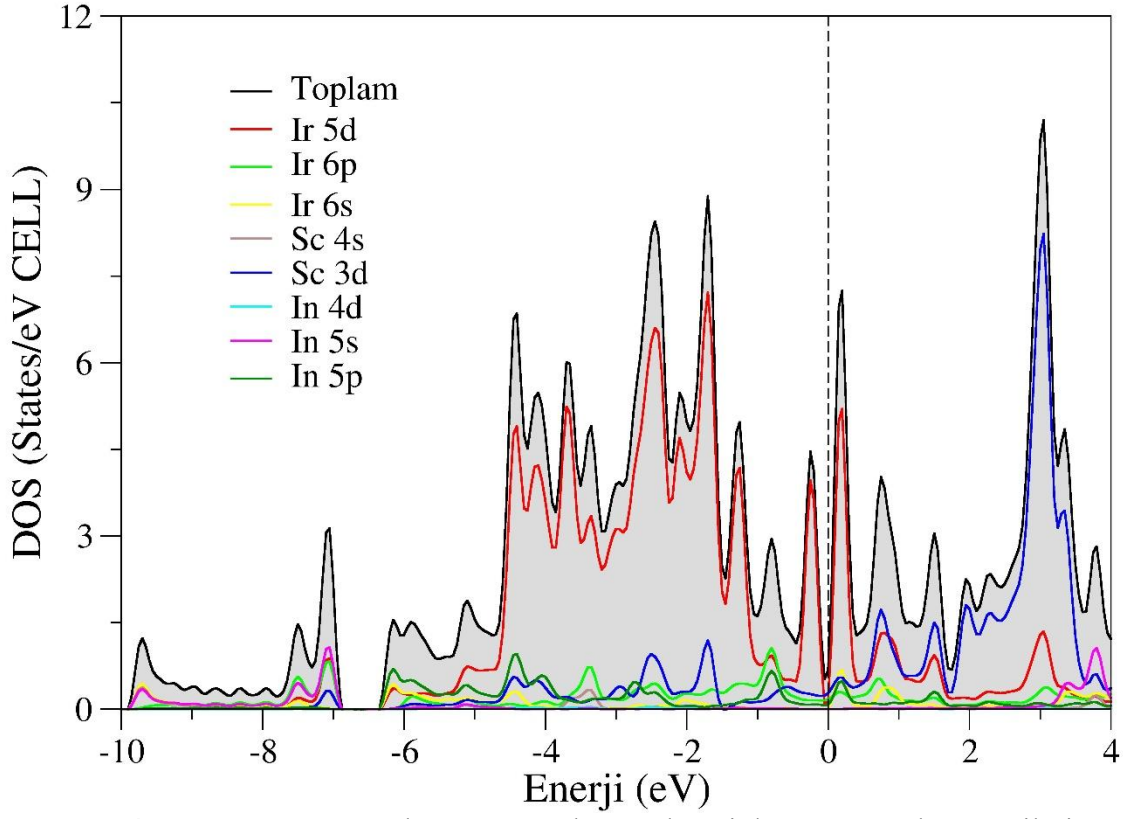


**Şekil 4.4.** Ir<sub>2</sub>VIn Heusler alaşımasının yüksek simetri yönelimleri boyunca elektronik bant eğrileri.

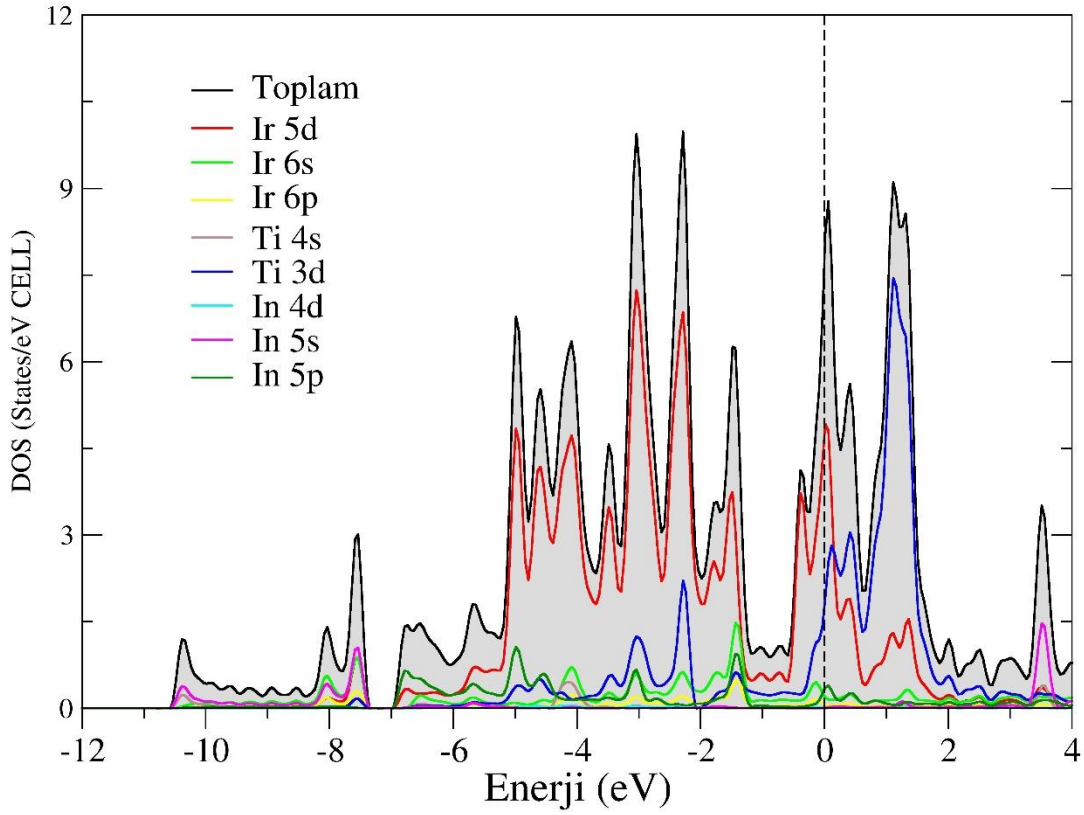
Durum yoğunluğu (DOS) ve kısmi durum yoğunluğu (PDOS) analizi, toplam ve kısmi durum yoğunluğu (PDOS) eğrileri, Fermi seviyesinde belirgin bir elektron yoğunluğunun varlığını göstermektedir. Bu yoğunluklar özellikle Ir d-orbitalleri ile X (Sc, Ti, V) d-orbitalleri arasında önemli bir hibritleşme olduğunu ortaya koymaktadır.

Ir<sub>2</sub>ScIn alaşımında Fermi seviyesinde Ir-d ve Sc-d orbitalleri arasında güçlü bir örtüşme görülmektedir. Bu hibritleşme, alaşımanın metalik doğasını desteklediği gibi, elektronik iletkenliğin büyük oranda bu orbitallerin etkileşiminden kaynaklandığını göstermektedir.

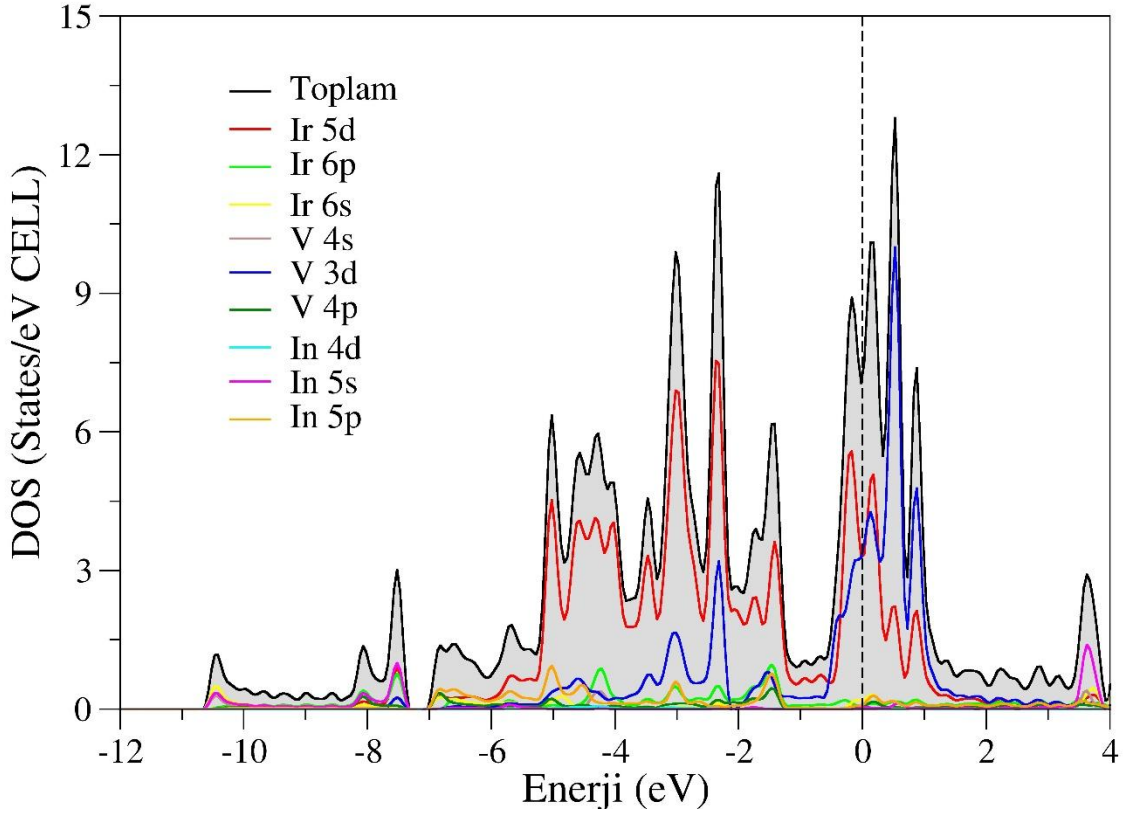
Ir<sub>2</sub>TiIn ve Ir<sub>2</sub>VIn alaşımlarında, Ir d-orbitalleri yine baskın rol oynamaktadır; ancak X atomunun valans elektron sayısı arttıkça, X-d orbitallerinin Fermi seviyesi yakınındaki katkısının da arttığı gözlemlenmiştir. Özellikle Ir<sub>2</sub>VIn için, V-d orbitallerinin PDOS üzerinde belirgin bir yükseliş gösterdiği ve bunun Fermi seviyesinde taşıyıcı yoğunluğunu artırdığı belirlenmiştir. Bu özellik, Ir<sub>2</sub>VIn alaşımasının daha yüksek elektronik iletkenliğe sahip olabileceğini düşündürmektedir.



Şekil 4.5. Ir<sub>2</sub>ScIn Heusler alaşımının toplam ve kısmi durum yoğunluğu eğrileri.



Şekil 4.6. Ir<sub>2</sub>TiIn Heusler alaşımının toplam ve kısmi durum yoğunluğu eğrileri.



Şekil 4.7. Ir<sub>2</sub>VIn Heusler alaşımının toplam ve kısmi durum yoğunluğu eğrileri.

Bu sonuçlar, Ir<sub>2</sub>XIn alaşımlarının klasik metaller gibi davranarak yüksek elektriksel iletkenlik sergilediğini ve bu nedenle elektronik aygıtlar, iletken katmanlar ya da termoelektrik uygulamalarda potansiyel taşıyabileceğini göstermektedir. Ayrıca, d-orbitallerin hibritleşmesiyle oluşan yoğunluk dağılımı, bu malzemelerin spintronik uygulamalarda da değerlendirilmesine olanak sağlayabilir, özellikle manyetik özellikler ile birleştirilirse yarı-metal davranışı da gözlemlenebilir.

### 4.3. Ir<sub>2</sub>XIn (X = Sc, Ti ve V) Alaşımlarının hesaplanan mekanik özellikleri

Ir<sub>2</sub>XIn (X = Sc, Ti ve V) alaşımlarının mekanik özellikleri, yoğunluk fonksiyonel teorisi (DFT) çerçevesinde elde edilerek Tablo 4.2’de verilen elastik sabitler ( $C_{11}$ ,  $C_{12}$ ,  $C_{44}$ ) ve bu sabitlerden türetilerek Tablo 4.3’te verilen makroskopik elastik parametreler (bulk modülü B, kayma modülü G, Young modülü E), Poisson oranı ( $\sigma$ ), B/G oranı ve ortalama ses hızı ( $v_m$ ) ile kapsamlı bir şekilde değerlendirilmiştir. Elde edilen elastik sabitler, kübik kristal sistemlerin mekanik kararlılık kriterlerine (Born ve Huang 1954) göre analiz edilmiştir. Bu kriterler,  $C_{11} - C_{12} > 0$ ,  $C_{11} + 2C_{12} > 0$  ve  $C_{44} > 0$  şeklinde ifade edilmekte olup, yapının elastik gerilimler altında kararlı kalabilmesi için bu koşulların sağlanması gerekmektedir.

$\text{Ir}_2\text{ScIn}$  alařımı iin hesaplanan  $C_{11} = 242.10$  GPa,  $C_{12} = 146.41$  GPa ve  $C_{44} = 109.31$  GPa deęerleri, sz konusu kararlılık kořullarını saęlamakta ve bu alařımın elastik anlamda kararlı bir yapı sergiledięini aıka ortaya koymaktadır. Bu deęerler aynı zamanda, alařımın hem ynl sıkıřtırmalara hem de kayma gerilmelerine karřı direnli olduęunu gstermektedir. Dięer yandan,  $\text{Ir}_2\text{TiIn}$  alařımı iin  $C_{11}$  deęeri  $-17.06$  GPa olarak bulunmuř ve bu negatif deęer, yapının tek eksenli basına karřı kararsız olduęunu gstermektedir. Benzer řekilde,  $\text{Ir}_2\text{VIn}$  alařımı iin  $C_{44}$  deęeri  $-83.64$  GPa olarak hesaplanmıř olup, bu durum yapının kayma deformasyonlarına karřı ciddi derecede zayıf ve mekanik olarak kararsız olduęunu gstermektedir. Bu iki alařım, hesaplamalar sonucu ortaya ıkan negatif elastik sabitler nedeniyle, kristal yapıları kararlı grnse bile pratikte dıř gerilimler altında yapısal btnlklerini koruyamayacak, dolayısıyla deneysel kořullarda stabil fazlar olarak bulunma olasılıkları olduka dřktr.

**Tablo 4.2.**  $\text{Ir}_2\text{XIn}$  (X=Sc, Ti ve V) alařımlarının elastik sabitleri ( $C_{ij}$ ; GPa).

Alařımlar	Referanslar	$C_{11}$	$C_{12}$	$C_{44}$
<b><math>\text{Ir}_2\text{ScIn}</math></b>	Bu alıřma	242.10	146.41	109.31
<b><math>\text{Ir}_2\text{TiIn}</math></b>	Bu alıřma	-17.06	307.25	33.86
<b><math>\text{Ir}_2\text{VIn}</math></b>	Bu alıřma	20.65	313.40	-83.64

Bu sabitlerden elde edilen makroskopik elastik modller de kararlılık durumu hakkında nemli bilgiler sunmaktadır.  $\text{Ir}_2\text{ScIn}$  alařımı iin bulk modl  $178.31$  GPa, kayma modl  $78.47$  GPa ve Young modl  $205.14$  GPa olarak hesaplanmıřtır. Bulk modl, malzemenin hacimsel sıkıřtırmalara karřı direncini ifade ederken, kayma modl malzemenin řekil deęiřimine, Young modl ise genel elastik rijitlięine karřı gsterdięi direnci tanımlar. Bu deęerler,  $\text{Ir}_2\text{ScIn}$  alařımının hem sert hem de dayanıklı bir yapıya sahip olduęunu, uygulamalarda mekanik btnlęn koruyabileceęini ortaya koymaktadır. Aksine,  $\text{Ir}_2\text{TiIn}$  ve  $\text{Ir}_2\text{VIn}$  alařımları iin G ve E modlleri sırasıyla negatif ıkmıř ve fiziksel olarak anlamını yitirmiřtir. Bu da bu alařımların yalnızca teorik dzeyde modellenebileceęini, gerek bir malzeme olarak kararlı ve kullanılabilir olmayabileceklerini gstermektedir.

**Tablo 4.3.** Ir<sub>2</sub>XIn (X=Sc, Ti ve V) alařımlarının bulk modülü (*B*; GPa), kayma modülü (*G*; GPa), young modülü (*E*; GPa), *B/G* oranı, poisson oranı ( $\sigma$ ) ve ortalama ses hızı ( $v_m$ : m/s).

<b>Alařımlar</b>	<b>Referanslar</b>	<b><i>B</i></b>	<b><i>G</i></b>	<b><i>E</i></b>	<b><i>B/G</i></b>	<b><math>\sigma</math></b>	<b><math>v_m</math></b>
<b>Ir<sub>2</sub>ScIn</b>	Bu alıřma	178.31	78.47	205.14	2.27	0.31	2678.9
<b>Ir<sub>2</sub>TiIn</b>	Bu alıřma	199.15	10.51	16.42	18.95	-0.21	-
<b>Ir<sub>2</sub>VIn</b>	Bu alıřma	215.82	-104.84	-375.4	-2.06	0.79	-

Poisson oranı ( $\sigma$ ), atomlar arası baę tipini deęerlendirmek aısından önemlidir. Ir<sub>2</sub>ScIn iin  $\sigma = 0.31$  olarak elde edilmiřtir. Bu deęer, genellikle metalik baę karakterine iřaret eden 0.25-0.35 aralıęında yer almaktadır (Kojima, 2024). Bu da yapının metalik zellik gsterdięini, aynı zamanda elastik deformasyonlar sırasında hacim koruma eęiliminde olduęunu gstermektedir. Aynı alařım iin hesaplanan *B/G* oranı 2.27 olup, bu oran 1.75 sınır deęerinin zerinde olduęu iin malzemenin snek davranıř sergiledięi sonucuna varılmaktadır (Pugh, 1954). Bu sonu, malzemenin dıř gerilimler altında kırılmadan nce řekil deęiřtirme kapasitesine sahip olduęunu ve bylece yapısal uygulamalarda tercih edilebilir bir aday olduęunu gstermektedir.

Ortalama ses hızı ( $v_m$ ) ise elastik dalgaların yapı ierisinde yayılma hızını yansıtır ve dolaylı olarak malzemenin rijitlięini ifade eder. Ir<sub>2</sub>ScIn iin bu hız 2678.9 m/s olarak hesaplanmıřtır ve bu deęer, alařımın saęlam mekanik baęlara sahip olduęunu desteklemektedir. Dięer iki alařım iin negatif elastik sabitlerden tr ses hızı hesaplanamamıř veya fiziksel olarak geersiz sonular vermiřtir.

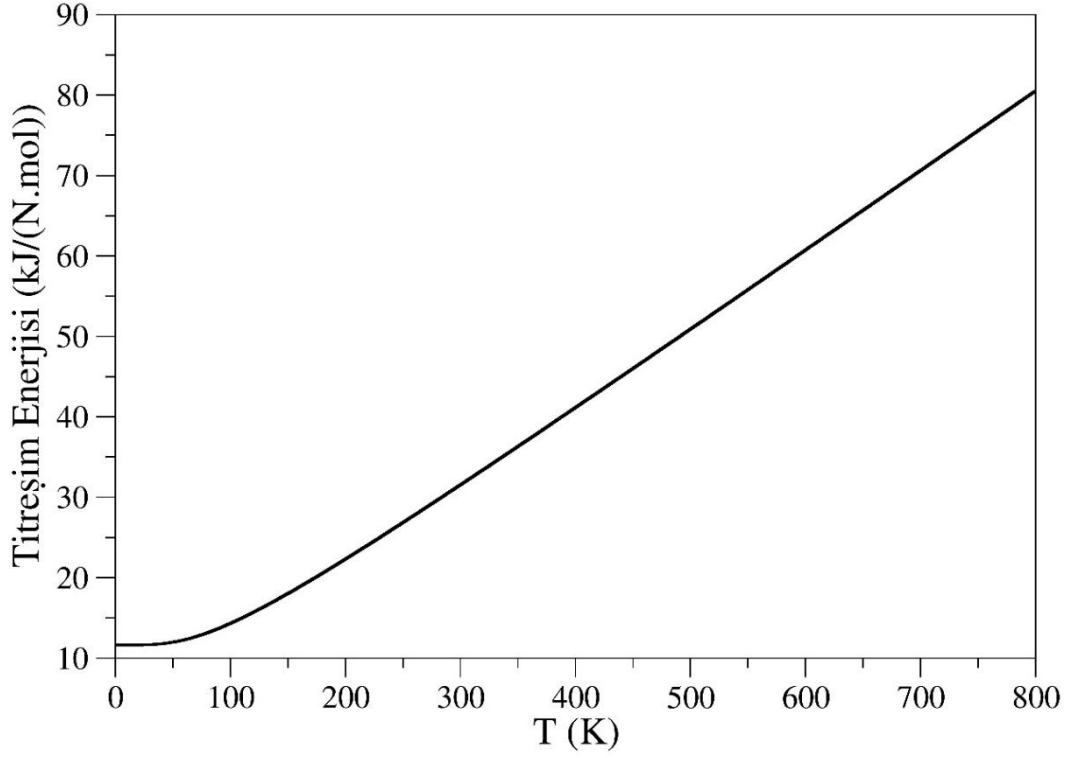
Sonu olarak, Ir<sub>2</sub>ScIn alařımı hem elastik kararlılık kriterlerini saęlaması hem de rijitlik, sneklik ve mekanik dayanıklılık aısından uygun deęerler sunması nedeniyle mekanik olarak kararlı ve uygulamaya uygun bir yapıya sahiptir. Ir<sub>2</sub>TiIn ve Ir<sub>2</sub>VIn alařımları ise negatif elastik sabitleri nedeniyle kararsız yapılar sergilemekte, bu da bu malzemelerin dıř gerilimler altında kristal yapılarını srdremeyeceęini gstermektedir. Dolayısıyla yalnızca Ir<sub>2</sub>ScIn alařımı, mekanik performans aısından ileri dzey teknolojik uygulamalar iin dikkate alınmaya deęer niteliktedir.

#### **4.4. Ir<sub>2</sub>XIn (X = Sc, Ti ve V) Alařımlarının hesaplanan termodinamik zellikleri**

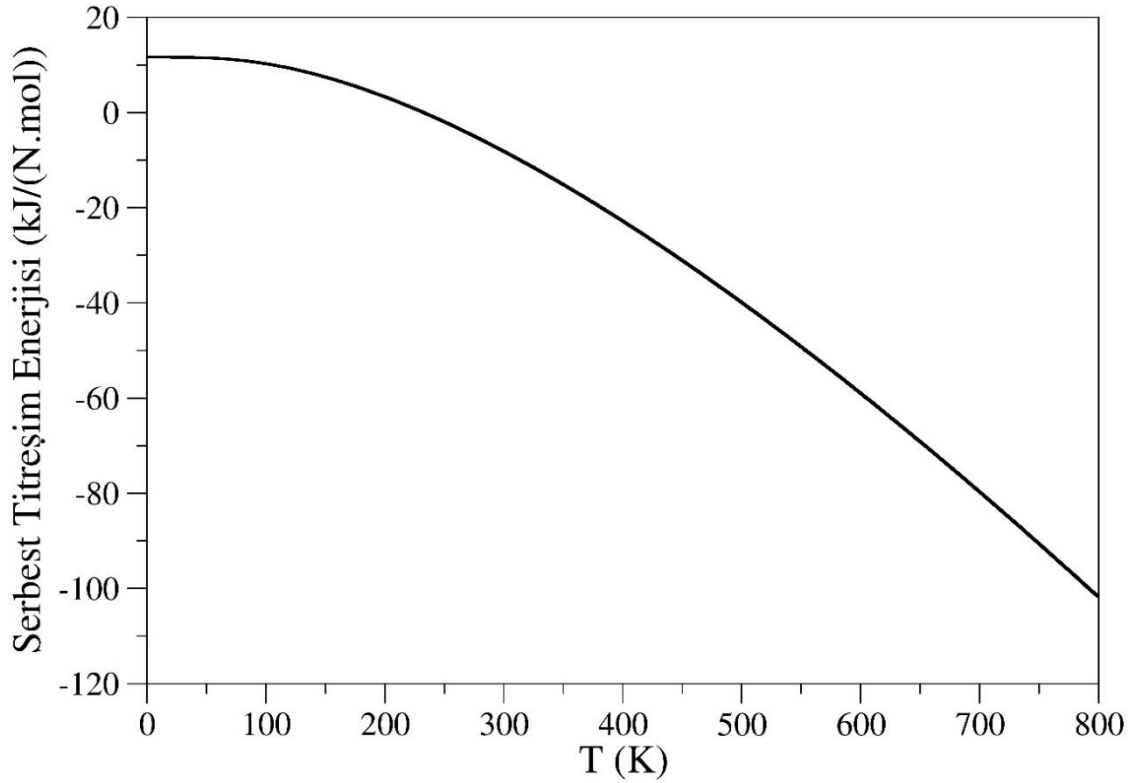
Bu alıřmada Ir<sub>2</sub>XIn (X = Sc, Ti ve V) alařımlarının termodinamik kararlılıęı serbest titreřim enerjisi, titreřim enerjisi, entropi ve ısı sığası gibi temel sıcaklık baęımlı termodinamik byklklerin hesaplanması yoluyla incelenmiřtir. Ancak bu kapsamda yalnızca Ir<sub>2</sub>ScIn alařımı iin hesaplamalar gerekleřtirilmiř ve yorumlanabilir sonular

elde edilmiştir. Bu durum, diğer iki alaşımın ( $\text{Ir}_2\text{TiIn}$  ve  $\text{Ir}_2\text{VIn}$ ) dinamik kararsızlık göstermesi nedeniyle elastik tabanlı termodinamik analizlerin fiziksel anlam taşımamasıyla ilişkilidir.

$\text{Ir}_2\text{ScIn}$  alaşımına ait titreşim enerjisinin sıcaklığa bağlı değişimi Şekil 4.8’de verilmiştir. Grafikte gözlemlenen belirgin artış, sıcaklık yükseldikçe fonon modlarının daha yüksek enerji seviyelerinde uyarıldığını ve sistemin toplam iç enerjisinin arttığını ortaya koymaktadır. Bu durum, kristal örgünün atomlarının sıcaklıkla birlikte daha yoğun titreşim hareketlerine maruz kaldığını ve bu hareketlerin termal enerjiyi taşıyan fononlar aracılığıyla sistem geneline yayıldığını göstermektedir. Titreşim enerjisinin sıcaklıkla düzenli ve sürekli artış göstermesi, kristal yapının bu termal uyarımlara karşı kararlı bir şekilde tepki verdiğini göstermesi açısından oldukça kritiktir. Özellikle düşük sıcaklıklarda Debye modeline uygun olarak  $T^3$  bağımlılığına yaklaşan bu eğri, yüksek sıcaklıklarda ise fonon modlarının tamamının aktif hale gelmesiyle birlikte daha doğrusal bir artış eğilimi sergilemektedir. Bu geçiş, sistemin ısı kapasitesini etkileyen fonon yoğunluk durumunun sıcaklıkla nasıl evrildiğini göstermektedir. Ayrıca, titreşim enerjisindeki bu artış, yapının termal enerji absorpsiyon kapasitesinin yüksek olduğunu ve bu enerjiyi yapısal bütünlüğünü bozmadan fononlar aracılığıyla dağıtabildiğini göstermektedir. Diğer bir ifadeyle, kristal örgü termal olarak uyarıldığında düzensizleşme eğilimi göstermemekte; aksine, enerjiyi kontrollü bir şekilde dağıtarak yapısal kararlılığını sürdürmektedir. Bu özellik, malzemenin yüksek sıcaklık koşullarında termal şoklara veya sıcaklık gradyanlarına karşı dirençli olduğunu ve ısıl gerilimlerden kaynaklanan faz bozulmalarına karşı dayanıklı kalabileceğini ima etmektedir. Yine titreşim enerjisi eğrisinde herhangi bir anomalinin (örneğin ani sıçrama, düzensizlik, doygunluk ya da plato oluşumu) gözlemlenmemesi, sistemin faz geçişi gibi yapısal bir dönüşüm geçirmediğini ve fonon spektrumunun tamamının fiziksel olarak anlamlı olduğunu desteklemektedir. Bu da  $\text{Ir}_2\text{ScIn}$  alaşımının, geniş bir sıcaklık aralığında stabil kalabilen, fonon temelli enerji taşıma mekanizmaları açısından dengeli ve güvenilir bir malzeme olduğunu göstermektedir.



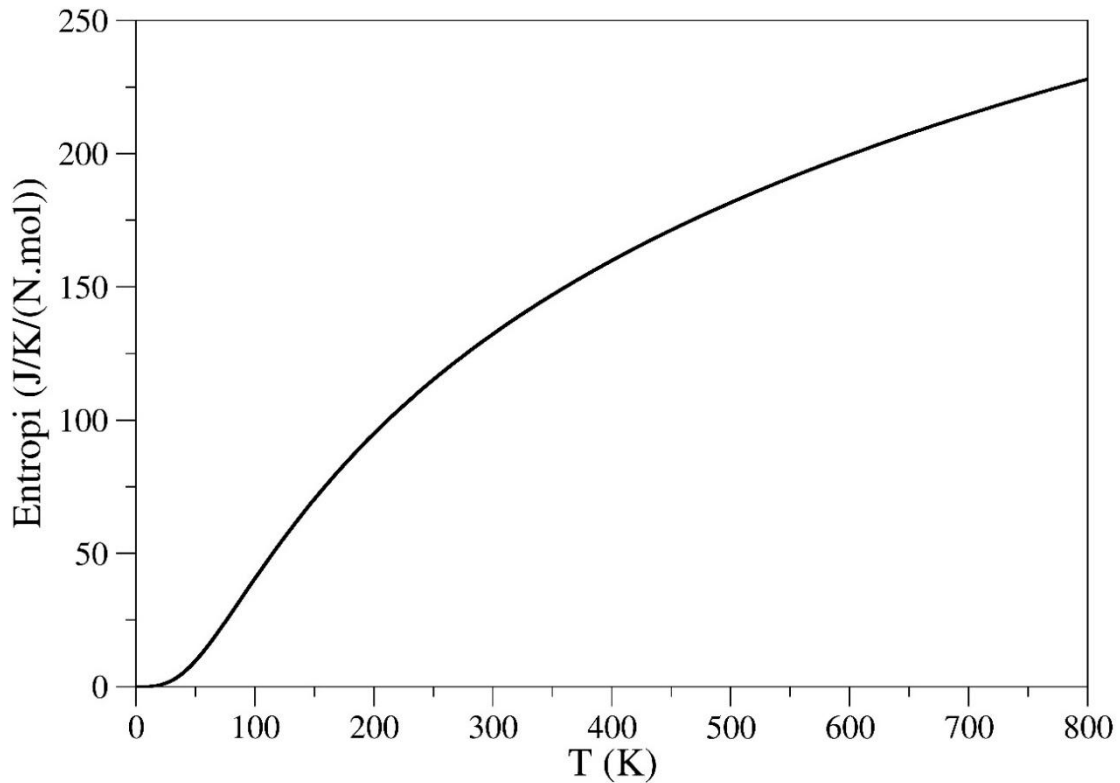
Şekil 4.8. Ir<sub>2</sub>ScIn alaşımasının titreşim enerjilerinin sıcaklık ile değişimi.



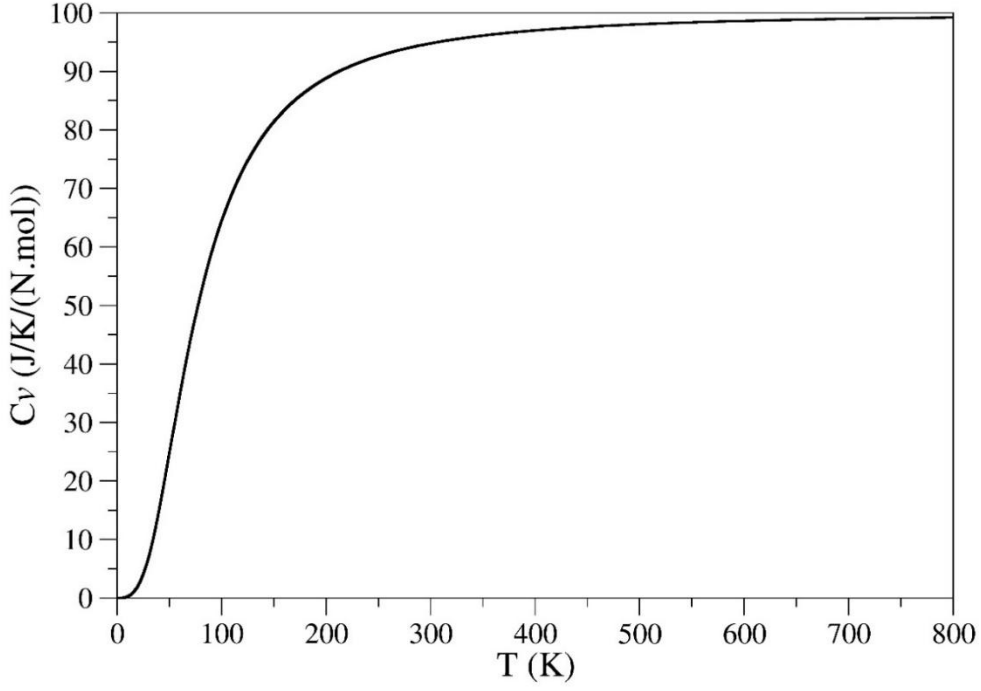
Şekil 4.9. Ir<sub>2</sub>ScIn alaşımasının serbest titreşim enerjilerinin sıcaklık ile değişimi.

Şekil 4.9’da gösterilen serbest titreşim enerjisinin sıcaklıkla değişimi, Ir<sub>2</sub>ScIn alaşımasının termodinamik kararlılığına dair daha kapsamlı bir bakış sunmaktadır. Serbest enerjinin sıcaklık arttıkça monoton bir şekilde azalma eğilimi göstermesi, sistemin

termodinamik dengeye ulaşma eğilimini açıkça ortaya koymaktadır. Bu azalma, artan sıcaklıkla birlikte sistemin entropisindeki yükselişten kaynaklanan serbest enerji düşüşüyle açıklanabilir. Termodinamik olarak, düşük serbest enerji düzeyleri daha kararlı fazların göstergesi olduğundan, bu sonuç  $\text{Ir}_2\text{ScIn}$  alaşımının yüksek sıcaklıklarda da kararlı fazını koruyabildiğini göstermektedir. Aynı zamanda bu davranış, yapının olası bir faz geçişine uğramadığını ve entropik katkıların sistemin serbest enerjisini dengeleyerek kararlılığı sürdürdüğünü göstermektedir. Bu özellik, özellikle yüksek sıcaklık ortamlarında çalışan yapısal malzemeler için aranan bir özelliktir. Ayrıca serbest enerjide gözlemlenen düzenli ve sürekli azalış, fonon modlarının sıcaklıkla birlikte istikrarlı bir şekilde katkı verdiğini, yani sistemin fonon düzeyinde herhangi bir bozulma ya da düzensizlik sergilemediğini göstermektedir. Bu durum,  $\text{Ir}_2\text{ScIn}$  alaşımının hem düşük hem de yüksek sıcaklık aralıklarında termodinamik stabilitesini sürdürebildiğini ve enerji değişimlerine karşı öngörülebilir bir yanıt verdiğini kanıtlar niteliktedir. Bu tür bir davranış, özellikle termal genişleme, ısıl yorulma ve faz stabilitesi gibi sıcaklığa duyarlı mühendislik problemlerinde büyük önem taşımaktadır.



Şekil 4.10.  $\text{Ir}_2\text{ScIn}$  alaşımının entropilerinin sıcaklık ile değişimi.



**Şekil 4.11.** Ir<sub>2</sub>ScIn alaşımasının ısı sığalarının sıcaklık ile değişimi.

Şekil 4.10’da sunulan entropinin sıcaklığa bağlı değişimi, sistemin düzensizlik düzeyini ve atomik titreşim özgürlüğünü yansıtmaktadır. Entropi eğrisinin sıcaklıkla birlikte düzgün bir şekilde artması, fonon modlarının kararlı ve fiziksel olarak anlamlı olduğunu teyit eder. Entropideki bu sürekli artış, kristal örgüdeki atomların sıcaklık yükseldikçe daha fazla serbestlik derecesine sahip olduğunu ve böylece yapının termodinamik olarak tutarlı bir şekilde ısı uyarılara cevap verdiğini gösterir. Bu sonuç, fonon hesaplamalarının güvenilirliğini desteklemekte ve alaşımın ısıl kararlılığının temel termodinamik göstergesi olarak değerlendirilmektedir. Ayrıca, bu davranış kristal yapının fonon spektrumunda herhangi bir anomalinin (örneğin yumuşama, negatif modlar) bulunmadığını ve dolayısıyla kararlılığın yalnızca 0 K civarında değil, geniş bir sıcaklık aralığında sürdürülebilir olduğunu ortaya koyar.

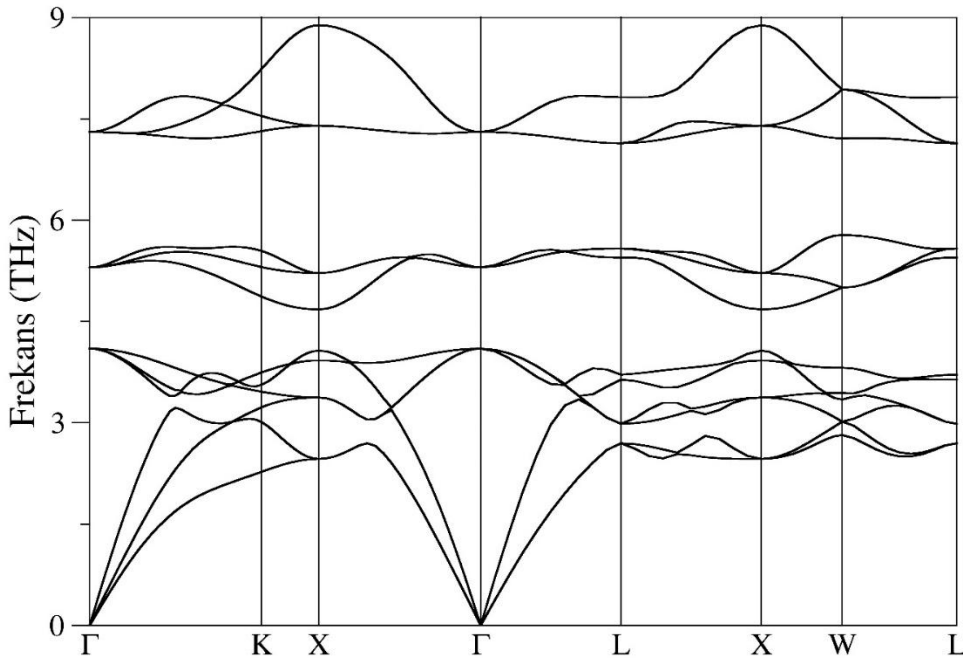
Şekil 4.11’de gösterilen ısı sığası ( $C_v$ ) eğrisi ise, alaşımın fonon katkılı ısıl davranışını açıklamaktadır.  $C_v$ ’nin sıcaklıkla birlikte artış göstermesi ve yüksek sıcaklıklarda doygunluğa ulaşması, kristal yapı içindeki tüm fonon modlarının uyarıldığını ve enerjiyi taşıyacak maksimum kapasiteye ulaşıldığını göstermektedir. Bu davranış, Debye modelinin öngörülerine uyumlu olup, kristal yapıdaki titreşim modlarının klasik sınırdaki (yüksek T limiti) eşit enerji paylaşımı yaptığını ortaya koyar. Düşük sıcaklıklarda  $C_v$ ’nin  $T^3$  yasasına uyumlu bir şekilde artması ve yüksek sıcaklıklarda Dulong-Petit limiti (Dulong ve Petit, 1819) civarına ulaşması, Ir<sub>2</sub>ScIn

alaşımının hem düşük hem de yüksek sıcaklıklarda klasik fonon davranışı sergilediğini doğrular. Bu özellikler, alaşımın hem kriyojenik hem de yüksek sıcaklık uygulamaları için uygun bir termal kararlılık profiline sahip olduğunu göstermektedir. Ayrıca  $C_v$ 'nin düzgün artışı, yapının fonon modları arasında enerji taşıma kapasitesinin sürekli olduğunu ve ani faz değişimlerinin söz konusu olmadığını da desteklemektedir.

Sonuç olarak, yalnızca  $\text{Ir}_2\text{ScIn}$  alaşımı için elde edilen termodinamik büyüklükler, bu alaşımın geniş sıcaklık aralığında termodinamik olarak kararlı olduğunu açıkça göstermektedir. Diğer alaşımlara kıyasla  $\text{Ir}_2\text{ScIn}$ , yapısal, elektronik ve mekanik kararlılığının yanı sıra termodinamik açıdan da stabil olmasıyla öne çıkmakta; bu özellikleriyle yüksek sıcaklık uygulamaları başta olmak üzere pek çok mühendislik alanında değerlendirilebilecek potansiyel bir malzeme olduğunu ortaya koymaktadır.  $\text{Ir}_2\text{TiIn}$  ve  $\text{Ir}_2\text{VIn}$  alaşımları için bu tür bir analiz gerçekleştirilememiştir.

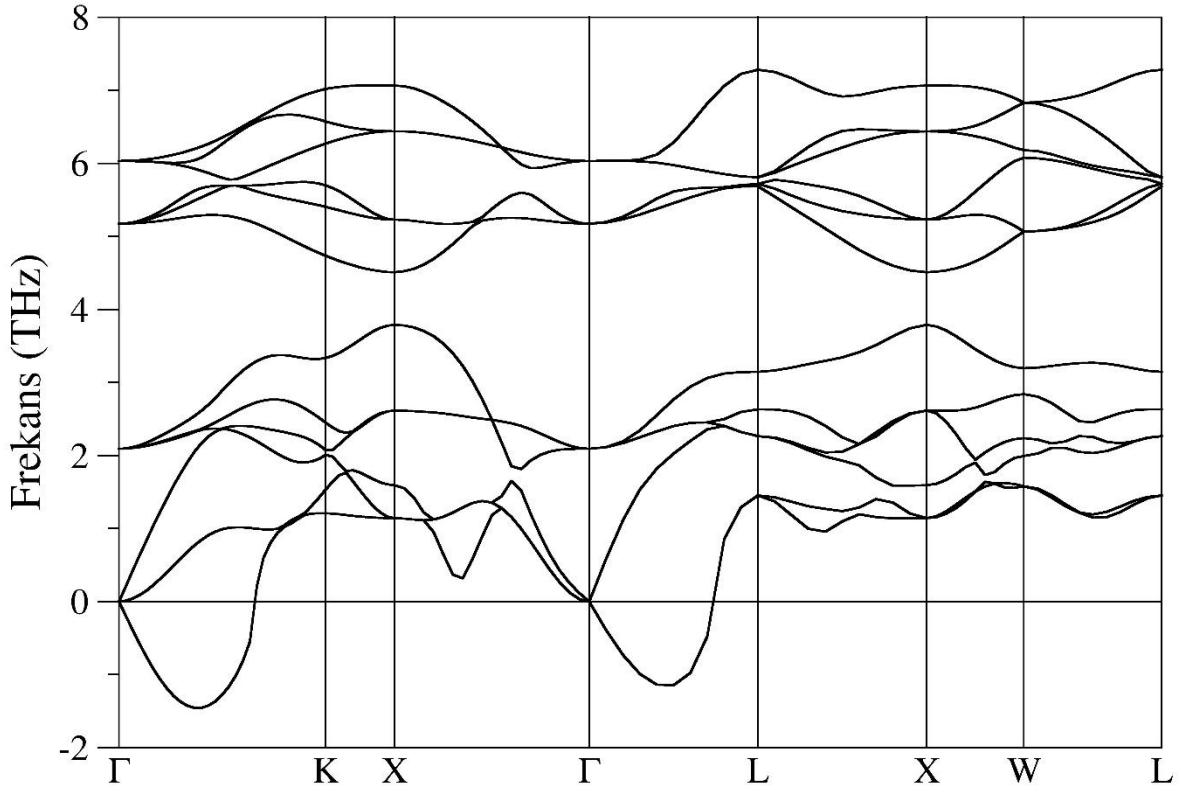
#### 4.5. $\text{Ir}_2\text{XIn}$ ( $X = \text{Sc}, \text{Ti}$ ve $\text{V}$ ) Alaşımlarının hesaplanan titreşim özellikleri

$\text{Ir}_2\text{XIn}$  ( $X = \text{Sc}, \text{Ti}$  ve  $\text{V}$ ) alaşımlarının titreşim özellikleri, yoğunluk fonksiyonel pertürbasyon teorisi (DFPT) çerçevesinde elde edilen fonon dispersiyon eğrileri aracılığıyla değerlendirilmiştir. Bu analizler, yapının dinamik kararlılığı hakkında doğrudan bilgi sağlayan temel yöntemlerden biridir. Fonon bant yapıları Brillouin bölgesinin yüksek simetri yönelimleri boyunca hesaplanmış ve Şekil 4.12-4.14'te sunulmuştur.



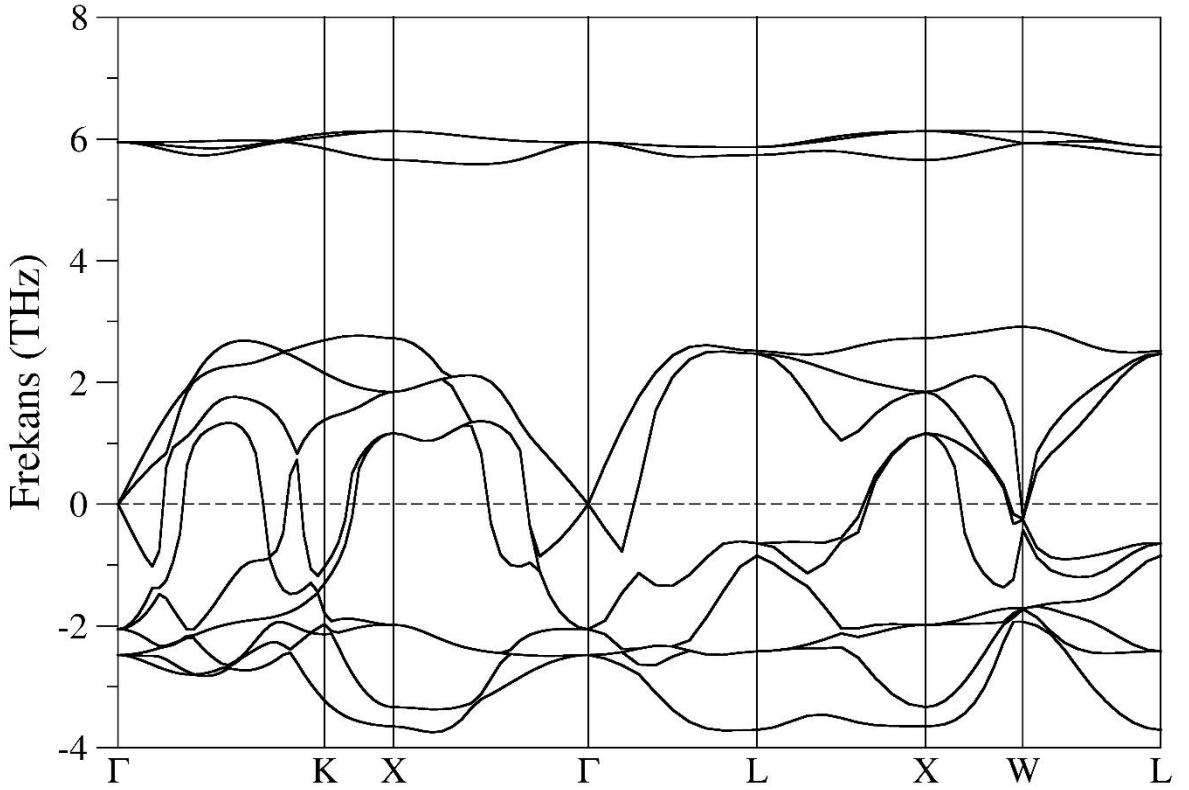
Şekil 4.12.  $\text{Ir}_2\text{ScIn}$  alaşımının fonon dispersiyon eğrileri.

Şekil 4.12’de verilen  $\text{Ir}_2\text{ScIn}$  alaşımına ait fonon dispersiyon eğrileri, Brillouin bölgesinin yüksek simetri yönelimleri boyunca elde edilmiş olup, tüm q-yönleri boyunca pozitif frekans değerleri içermektedir. Bu durum, sistemde herhangi bir hayali (imaginer) frekansın bulunmadığını ve dolayısıyla dinamik kararlılığın tamamen sağlandığını açıkça ortaya koymaktadır. Bu, yapı üzerinde uygulanabilecek küçük bozunmalar karşısında sistemin denge konumuna geri dönebileceğini, yani yapının fonon düzeyinde kararlı olduğunu göstermektedir. Özellikle  $\Gamma$  (Gamma) noktasında sıfır frekansla başlayan akustik modlar, örgünün çevirisel simetriye sahip olduğunu ve bu modların uzun dalga boylu kolektif titreşimlerle ilişkili olduğunu göstermektedir. Bu akustik modlar, düşük frekanslı ve pozitif eğimle yükselerek, sistemin esneklik ve mekanik dayanımını destekleyen fonon modlarının varlığına işaret etmektedir. Bu eğim, ses hızları ile ilişkilidir ve yapının elastik modülleriyle doğrudan bağlantılıdır. Optik modlar, akustik modlardan net bir şekilde ayrılmış durumdadır ve belirli bir frekans bandı içinde kümelenmiştir. Bu modlar, kristal yapıdaki farklı atom türlerinin göreceli titreşimlerinden kaynaklanır.  $\text{Ir}_2\text{ScIn}$  alaşımında Ir, Sc ve In gibi farklı atomik kütlelere ve bağ sertliklerine sahip atomların bulunması, optik modlarda mod çoğalmasına ve belirli enerji aralıklarında modların sıkışmasına neden olmuştur. Bu durum, malzemenin titreşimsel özgüllüğünü artırır ve fonon-fonon etkileşimlerinin belirli enerji bölgelerinde yoğunlaşabileceğini düşündürür. Fonon bant yapısının herhangi bir anormal kesinti, çakışma ya da mod yumuşaması göstermemesi, fonon modlarının fiziksel olarak tutarlı ve sistematik olduğunu ortaya koyar. Ayrıca yüksek simetriye sahip  $Fm-3m$  yapısal düzenin, fonon bantlarının dağılımında düzgünlük ve denge sağladığı görülmektedir. Bu durum, ısı iletimi, termal genleşme ve fonon ömrü gibi birçok ısı ve fononik özelliğin istikrarlı olacağını işaret eder. Bu titreşimsel kararlılık, ayrıca termodinamik hesaplamalarda kullanılan fonon yoğunluk durumlarının da fiziksel anlam taşıdığını ve serbest enerji, entropi ve ısı sığası gibi büyüklüklerin güvenilir bir şekilde elde edilebileceğini göstermektedir. Özellikle yüksek sıcaklık uygulamaları için kritik olan bu özellik,  $\text{Ir}_2\text{ScIn}$  alaşımının ısı kararlılığının sadece teorik değil, pratik açıdan da güçlü olduğunu vurgular. Sonuç olarak, Şekil 4.12’deki fonon dispersiyon eğrileri,  $\text{Ir}_2\text{ScIn}$  alaşımının dinamik olarak tamamen kararlı, fonon modları açısından zengin, ayrık ve yüksek simetrik bir kristal yapı içerisinde uyumlu bir şekilde titreşen bir malzeme olduğunu açıkça göstermektedir. Bu özellikler, alaşımın ileri düzey uygulamalarda özellikle ısı yönetim, termoelektrik ve fononik cihazlar gibi alanlarda kullanılabilirliğini destekleyen güçlü bir temel oluşturmaktadır.



**Şekil 4.13.** Ir<sub>2</sub>TiIn alaşımasının fonon dispersiyon eğrileri.

Buna karşılık, Şekil 4.13'te sunulan Ir<sub>2</sub>TiIn alaşımına ait fonon dispersiyon eğrisinde, bazı q noktaları boyunca negatif frekans bileşenlerinin (hayali frekansların) yer aldığı açıkça gözlemlenmektedir. Bu negatif modlar, özellikle düşük frekanslı akustik modlar arasında belirginleşmekte ve bu durum, yapının küçük titreşimsel uyarılar karşısında kararsızlık sergilediğini ortaya koymaktadır. Akustik modlarda ortaya çıkan bu bozulmalar, kristal örgünün uzun dalga boylu fononlara karşı duyarlı olduğunu ve denge konumunu sürdüremediğini göstermektedir. Böyle bir durum, örgünün simetrik düzeninin bozulmasıyla faz geçişleri, yapısal simetri kırılmaları veya düşük sıcaklıkta yeni bir yapı fazına yönelim gibi süreçlerin başlamasına yol açabilir. Fonon spektrumundaki bu kararsızlık, daha önce elde edilen negatif elastik sabitler ile de tutarlıdır ve Ir<sub>2</sub>TiIn alaşımının mekanik olarak da kararsız olduğunu desteklemektedir. Mekanik ve dinamik kararsızlığın birlikte gözlenmesi, bu yapının yalnızca hesaplamalı düzeyde teorik olarak kararlı görüldüğünü, ancak pratikte gerçek bir faz olarak stabilize edilmesinin oldukça güç olacağını ortaya koyar. Bu durum, özellikle deneysel sentez ya da uygulama koşullarında yapı üzerinde oluşabilecek en küçük bozulmaların bile malzemenin kararsız bir faza geçmesine veya kristal yapının tamamen çökmesine neden olabileceğini düşündürmektedir.



Şekil 4.14. Ir<sub>2</sub>VIn alaşımının fonon dispersiyon eğrileri.

Benzer şekilde, Şekil 4.14'te sunulan Ir<sub>2</sub>VIn alaşımının fonon dispersiyon eğrisinde de bazı modlar için hayali frekanslar tespit edilmiştir. Bu negatif frekanslar özellikle Brillouin bölgesinin kenar noktalarına (örneğin X, K, L yönlerine) yakın q-vetörlerinde yoğunlaşmakta ve bu da yapının kısa dalga boylu örgü titreşimlerine karşı da kararsız olduğunu göstermektedir. Bu tür kararsızlık, yalnızca uzun dalga boylu (akustik) modlar değil, aynı zamanda bazı optik modların da fiziksel olmayan davranışlar sergilediğini göstermekte, bu da yapının çok yönlü bir dinamik instabilite içerisinde olduğunu işaret etmektedir. Ir<sub>2</sub>VIn alaşımının fonon spektrumundaki bu anomaliler, bu yapının tüm sıcaklık aralığı boyunca termodinamik olarak dengede kalamayacağını ve yüksek sıcaklık uygulamalarında faz kararlılığını sürdürmeyeceğini göstermektedir. Özellikle titreşimsel kararsızlık, Helmholtz serbest enerjisi, entropi ve ısı sığası ( $C_v$ ) gibi fonon spektrumuna dayalı termodinamik büyüklüklerin fiziksel anlamını yitirmesine neden olur. Bu nedenle Ir<sub>2</sub>VIn alaşımı için yapılan termodinamik hesaplamalar yalnızca sınırlı koşullarda geçerli olabilir veya tamamen yapılandırılmaz hale gelir.

Sonuç olarak, yalnızca Ir<sub>2</sub>ScIn alaşımı, fonon modları açısından herhangi bir negatif frekans içermeyen, dolayısıyla dinamik olarak tamamen kararlı bir yapı profili sergilemektedir. Diğer iki alaşım olan Ir<sub>2</sub>TiIn ve Ir<sub>2</sub>VIn, fonon spektrumlarında tespit

edilen hayali frekanslar nedeniyle dinamik açıdan kararsız yapılar olup, bu durum onların deneysel olarak kristalleşmesinin zor olduğunu ve yüksek sıcaklık uygulamaları veya termoelektrik tasarım gibi alanlar için uygun olmadıklarını göstermektedir. Fonon düzeyindeki bu değerlendirmeler, malzemelerin titreşimsel kararlılık sınırlarını, termal dayanıklılığını ve enerji taşıma kapasitelerini doğrudan etkilediğinden, teorik olarak öngörülen fazların gerçek uygulamalarda kullanılıp kullanılmayacağını belirlemede kritik öneme sahiptir.  $\text{Ir}_2\text{TiIn}$  ve  $\text{Ir}_2\text{VIn}$  için gözlemlenen bu kararsızlıklar, bu yapılar üzerinde ileride yapılacak deneysel çalışmaların da oldukça dikkatli bir şekilde planlanması gerektiğini ortaya koymaktadır.

## 5. SONUÇ VE ÖNERİLER

Bu çalışmada,  $\text{Ir}_2\text{XIn}$  ( $\text{X} = \text{Sc}, \text{Ti}, \text{V}$ ) alaşımlarının yapısal, elektronik, mekanik, termodinamik ve dinamik özellikleri ab-initio hesaplamaları yoluyla sistematik olarak incelenmiştir. Tüm hesaplamalar, yoğunluk fonksiyonel teorisi (DFT) çerçevesinde gerçekleştirilmiş olup elde edilen veriler, malzemelerin fiziksel ve potansiyel uygulama özellikleri hakkında kapsamlı bilgiler sunmuştur.

Yapısal açıdan yapılan hesaplamalarda, X atomunun ( $\text{Sc}, \text{Ti}, \text{V}$ ) atomik yarıçapına bağlı olarak örgü sabitlerinde sistematik bir küçülme belirlenmiş, bu sonuçlar literatürdeki VASP tabanlı verilerle yüksek oranda örtüşmüştür.

Elektronik yapı hesaplamalarında,  $\text{Ir}_2\text{XIn}$  alaşımlarının tümünün metalik karakter taşıdığını, Fermi seviyesini kesen bantlara sahip olduklarını ve özellikle Ir ve X atomlarının d-orbitallerinin bu iletkenlikte belirleyici rol oynadığını ortaya koymuştur.  $\text{Ir}_2\text{VIn}$  alaşımı, daha karmaşık ve yoğun bir bant yapısı sergilemiş olup yüksek taşıyıcı yoğunluğuna sahip olabileceği öngörülmüştür.

Elastik özellikler açısından yapılan değerlendirmede yalnızca  $\text{Ir}_2\text{ScIn}$  alaşımı, mekanik kararlılık kriterlerini sağlayarak elastik anlamda kararlı bir yapı sergilemiştir.  $\text{Ir}_2\text{TiIn}$  ve  $\text{Ir}_2\text{VIn}$  alaşımları için negatif elastik sabitler hesaplanmış, bu da yapıların mekanik olarak kararsız olduğunu ve dış gerilimler altında yapısal bütünlüklerini koruyamayacaklarını göstermiştir.

Termodinamik özellikler sadece  $\text{Ir}_2\text{ScIn}$  alaşımı için incelenebilmiştir. Bu alaşımın titreşim enerjisi, serbest titreşim enerjisi, entropi ve ısı sığası gibi parametreleri, geniş bir sıcaklık aralığında düzenli ve fiziksel olarak tutarlı davranışlar sergilemiş, klasik Debye teorisi ve Dulong-Petit limitine uygunluk göstermiştir. Bu da malzemenin hem düşük hem de yüksek sıcaklık uygulamalarında kullanılabilirliğini desteklemektedir.

Dinamik kararlılık değerlendirmelerinde de yalnızca  $\text{Ir}_2\text{ScIn}$  alaşımı tüm q-yönlerinde pozitif frekanslara sahip fonon modları sergilemiş ve dinamik olarak kararlı olduğu teyit edilmiştir.  $\text{Ir}_2\text{TiIn}$  ve  $\text{Ir}_2\text{VIn}$  alaşımlarında ise negatif (hayali) frekans bileşenleri tespit edilerek, bu yapıların dinamik olarak da kararsız oldukları belirlenmiştir. Bu kararsızlıklar, ilgili alaşımların deneysel olarak sentezlenebilirliğini ve uygulama potansiyellerini ciddi biçimde sınırlamaktadır.

Öneriler:

- $\text{Ir}_2\text{ScIn}$  alaşımı, sahip olduğu yapısal bütünlük, yüksek mekanik dayanım, elektronik iletkenlik ve ısıl kararlılık özellikleriyle ileri düzey teknolojik uygulamalarda,

zellikle yksek sıcaklık ortamlarında, termoelektrik cihazlarda veya fononik sistemlerde deęerlendirilebilir.

- $\text{Ir}_2\text{TiIn}$  ve  $\text{Ir}_2\text{VIn}$  alařımları iin hesaplamalar sadece teorik dzeyde sınırlı anlam tařımakta olup, bu yapıların deneysel olarak elde edilmeden nce farklı kristal fazlarda (rneęin dřk simetrik yapılar) yeniden deęerlendirilmesi nerilir.
- Son olarak, tm bu hesaplamaların daha ileri doęrulukla teyit edilebilmesi iin hibrit fonksiyonel, GW veya manyetik spin-korelasyon ieren DFT+U tr yntemlerle desteklenmesi faydalı olacaktır.

## KAYNAKLAR

- Baranov, M. A. (2006). Spherical symmetry of electron shells of atoms and crystal stability. *Elektron. Fiz.-Tekh. Zh.*, 1(1), 34–48. (EPhTJ, 1, 49–62).
- Baroni, S., Giannozzi, P., & Testa, A. (1987). Green's-function approach to linear response in solids. *Physical Review Letters*, 58(18), 1861.
- Born, M., & Huang, K. (1954). *Dynamical theory of crystal lattices*. Oxford University Press.
- Bradley, A. J., & Rodgers, J. W. (1934). The crystal structure of the Heusler alloys. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character*, 144(852), 340-359.
- Dal Corso, A. (2016). Elastic constants of beryllium: a first-principles investigation. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 28(7), 075401.
- De Groot, R. A., Mueller, F. M., van Engen, P. G., & Buschow, K. H. J. (1983). New class of materials: Half-metallic ferromagnets. *Physical Review Letters*, 50(25), 2024-2027.
- Dulong, P. L., & Petit, A. T. (1819). Recherches sur quelques points importants de la theorie de la chaleur. *Annales de Chimie et de Physique*, 10, 395–413.
- Felser, C., & Hirohata, A. (Eds.). (2018). *Heusler alloys: Properties, growth, applications*. Springer.
- Galanakis, I., Mavropoulos, P., & Dederichs, P. H. (2006). Electronic structure and Slater–Pauling behaviour in half-metallic Heusler alloys calculated from first principles. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 39(5), 765.
- Gao, G. Y., Yao, K. L., & Liu, Z. L. (2011). Half-metallic ferromagnetism and elastic properties of Co-based full-Heusler alloys. *Journal of Applied Physics*, 109(7), 07E114.
- Giannozzi, P., Andreussi, O., Brumme, T., Bunau, O., Nardelli, M. B., Calandra, M., Car, R., Cavazzoni, C., Ceresoli, D., Cococcioni, M., Colonna, N., Carnimeo, I., Dal Corso, A., de Gironcoli, S., Delugas, P., DiStasio, R. A., Jr., Ferretti, A., Floris, A., Fratesi, G., ... 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, R., Gerstmann, U., Gougoussis, C., Kokalj, A., Lazzeri, M., ... Wentzcovitch, R. M. (2009). QUANTUM ESPRESSO: A modular and open-source software project for quantum simulations of materials. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 21(39), 395502.
- 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.
- Guo, G. Y., & Liu, L. M. (2013). Spin-orbit coupling and spin polarization in Heusler compounds. *Journal of Applied Physics*, 113(17), 17B109.
- Heusler, O. (1934). Kristallstruktur und Ferromagnetismus der Mangan-Aluminium-Kupferlegierungen. *Annalen der Physik*, 411(2), 155–201. <https://doi.org/10.1002/andp.19344110202>
- Hohenberg, P., & Kohn, W. (1964). Inhomogeneous electron gas. *Physical Review*, 136(3B), B864–B871. <https://doi.org/10.1103/PhysRev.136.B864>
- Jain, A., Ong, S. P., Hautier, G., Chen, W., Richards, W. D., Dacek, S., ... & Ceder, G. (2013). The Materials Project: A materials genome approach to accelerating

- materials innovation. *APL Materials*, *1*(1), 011002. <https://doi.org/10.1063/1.4812323>
- Johnston, G. B., & Hall, E. O. (1968). Studies on the Heusler alloys—II: The effect of composition on the magnetic properties and structure of  $\text{Co}_2\text{MnAl}$ ,  $\text{Co}_2\text{MnSi}$  and  $\text{Co}_2\text{MnGa}$ . *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, *29*(2), 193–200. [https://doi.org/10.1016/0022-3697\(68\)90132-2](https://doi.org/10.1016/0022-3697(68)90132-2)
- Kandpal, H. C., Fecher, G. H., & Felser, C. (2007). Calculated electronic and magnetic properties of the half-metallic, transition metal based Heusler compounds. *Journal of Physics D: Applied Physics*, *40*(6), 1507–1523. <https://doi.org/10.1088/0022-3727/40/6/S03>
- Kirklin, S., Saal, J. E., Meredig, B., Thompson, A., Doak, J. W., Aykol, M., Rühl, S., & Wolverton, C. (2015). The Open Quantum Materials Database (OQMD): Assessing the accuracy of DFT formation energies. *npj Computational Materials*, *1*(1), 15010. <https://doi.org/10.1038/npjcompumats.2015.10>
- 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>
- Kojima, S. (2024). Poisson's ratio of glasses, ceramics, and crystals. *Materials*, *17*(2), 300. <https://doi.org/10.3390/ma17020300>
- Liu, G. D., Liu, Z. H., Dai, X. F., Li, Y. X., & Wu, G. H. (2012). Mechanical and thermodynamic properties of Heusler alloys. *Journal of Physics D: Applied Physics*, *45*(13), 135001. <https://doi.org/10.1088/0022-3727/45/13/135001>
- Materials Project. (2025). *Material ID: mp-1185028*. <https://next-gen.materialsproject.org/materials/mp-1185028>, Erişim Tarihi: 03.03.2025.
- Methfessel, M., & Paxton, A. T. (1989). High-precision sampling for Brillouin-zone integration in metals. *Physical Review B*, *40*(6), 3616–3621. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.40.3616>
- Monkhorst, H. J., & Pack, J. D. (1976). Special points for Brillouin-zone integrations. *Physical Review B*, *13*(12), 5188–5192. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.13.5188>
- Morrish, A. H. (2001). *The physical principles of magnetism* (p. 696).
- 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>
- Potter, H. H. (1929). Some magnetic alloys and their properties. *Proceedings of the Physical Society*, *41*(1), 135–142. <https://doi.org/10.1088/0959-5309/41/1/325>
- Pugh, S. F. (1954). XCII. Relations between the elastic moduli and the plastic properties of polycrystalline pure metals. *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science*, *45*(367), 823–843. <https://doi.org/10.1080/14786440808520496>
- 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. <https://doi.org/10.1007/s11837-013-0755-4>
- Skaftouros, S., Özdoğan, K., Şaşıoğlu, E., & Galanakis, I. (2013). Generalized Slater–Pauling rule for the inverse Heusler compounds. *Physical Review B*, *87*(2), 024420. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.87.024420>

- Soyalp, F. (2006). *Yoğunluk fonksiyon teorisi ile bazı bileşiklerin elektronik yapılarının ve titreşim özelliklerinin teorik olarak incelenmesi* [Doktora tezi, Gazi Üniversitesi]. Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü.
- Tobola, J., Kaprzyk, S., & Pecheur, P. (2003). Electronic structure and transport properties of some full Heusler alloys. *physica status solidi (b)*, 236(2), 531–535. <https://doi.org/10.1002/pssb.200301899>
- Uğur, Ş. (2004). *AIN (110) yüzeyinin atomik yapısının ve titreşim özelliklerinin yoğunluk fonksiyon teorisi ile incelenmesi* (Doctoral dissertation, Doktora Tezi, Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Ankara, 54-65).
- Wang, C., Liu, H., Zhang, Y., Wang, X., & Liu, E. (2021). First-principles calculations on the structural, electronic, and magnetic properties of Ir-based Heusler compounds. *Journal of Alloys and Compounds*, 870, 159466. <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2021.159466>
- Webster, P. J. (1984). Heusler alloys. *Contemporary Physics*, 25(6), 535–571. <https://doi.org/10.1080/00107518408227473>
- Webster, P. J., & Ziebeck, K. R. A. (1988). Alloys and compounds of d-elements with main group elements. Part 2. In H. P. J. Wijn (Ed.), *Landolt-Börnstein: Numerical data and functional relationships in science and technology (New Series, Group III)* (Vol. 19c, pp. 75–184). Springer. <https://doi.org/10.1007/978-3-540-76617-53>



## ÖZGEÇMİŞ

<b>Kişisel Bilgiler</b>	
<b>Adı Soyadı:</b>	Mehmet KARA
<b>Uyruğu:</b>	T.C.
<b>Orcid Numarası:</b>	0000-0002-9630-1005

<b>Eğitim Bilgileri</b>	
<b>Lisans</b>	
<b>Üniversite</b>	Gaziantep Üniversitesi /Kırşehir Ahi Evran Üniversitesi
<b>Fakülte</b>	Mühendislik /Fen Fakültesi
<b>Bölümü</b>	Elektrik-Elektronik Mühendisliği /Matematik
<b>Mezuniyet Yılı</b>	2022
<b>Lisans</b>	
<b>Yüksek Lisans</b>	
<b>Üniversite</b>	Kırşehir Ahi Evran
<b>Enstitü Adı</b>	Fen Bilimleri
<b>Anabilim Dalı</b>	İleri Teknolojiler
<b>Mezuniyet Tarihi</b>	2025

<b>Bilimsel Yayınlar</b>
Kara, M., & Örnek, O. (2022) "Ir2ScIn Tam Heusler Alaşımının Fiziksel Özelliklerinin Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi ile İncelenmesi", International Korkut Ata Scientific Researches Conference , (pp. 754-758), Osmaniye, Türkiye, (Temmuz 2022).