



Gazi University



Journal of Science

PART A: ENGINEERING AND INNOVATION

<http://dergipark.org.tr/gujisa>

Rh₂CoX (X=Al, Ga ve In) Bileşiklerinin Yapısal, Elastik, Elektronik ve Manyetik Özellikleri

Rh₂CoX (X=Al, Ga and In) Compounds Structural, Elastic, Electronic and Magnetic Properties

Ziya MERDAN^{1*} , Fadime I. BALMUMCU¹ ¹Gazi University, Sciences Faculty, Department of Physics, 06500, Ankara, Turkey

Anahtar Kelimeler	Özet
Elektronik Yapı	Bu çalışmada full Heusler tipi Rh ₂ CoX (X=Al, Ga ve In) bileşiklerinin yapısal özellikleri yoğunluk fonksiyonel teorisi kullanılarak incelenmiştir. Rh ₂ CoX (X=Al, Ga ve In) bileşikleri için hesaplanan örgü sabiti ve magnetizasyon değerleri literatür sonuçları ile uyumludur. Literatürde mevcut olan bulgulara ilaveten ab-initio toplam enerji hesaplamaları yapan VASP programı ile yeni veriler eklenmiş ve bileşiklerin bant, DOS yapıları ve elektronik özellikleri üzerine yoğunlaşmıştır. Ayrıca bileşikler için elastik sabitler hesaplanmıştır ve elde edilen elastik sabitler bu bileşiklerin mekanik kararlı yapıda olduklarını göstermektedir.
Full Heusler Bileşikleri	
DFT	
Elastik Özellik	
GGA-PBE	

Keywords	Abstract
Electronic Structure	Density functional theory was used to investigate the structural properties of full Heusler type Rh ₂ CoX (X=Al, Ga ve In) compounds in the present study. When the calculated lattice constant and magnetization values for Rh ₂ CoX (X=Al, Ga ve In) compounds are consistent with the literature results. In addition to the previously published findings, new data were added using the VASP program, which performs ab-initio total energy calculations and focuses on the band, DOS structures and electronic properties of the compounds. Furthermore, elastic constants for the compounds were calculated, and it was showed that these compounds were mechanically stable using the elastic constants obtained.
Full Heusler Compounds	
DFT	
Elastic Property	
GGA-PBE	

Alıntı / Cite

Merdan, Z., Balmumcu, F.I. (2021). Rh₂CoX (X=Al, Ga ve In) bileşiklerinin yapısal, elastik, elektronik ve manyetik özellikleri, *GU J Sci, Part A*, 8(4), 505-514.

Yazar Kimliği / Author ID (ORCID Number)	Makale Süreci / Article Process
Z. Merdan, 0000-0001-8708-8583	Başvuru Tarihi / Submission Date 22.10.2021
F. I. Balmumcu, 0000-0001-7011-110X	Revizyon Tarihi / Revision Date 20.12.2021
	Kabul Tarihi / Accepted Date 29.12.2021
	Yayın Tarihi / Published Date 30.12.2021

1. GİRİŞ

Heusler tipi bileşikler 1903 yılında Friedrich Heusler tarafından CuMn bileşiklerine 3. grup eklenmesi ile bulunmuştur ve bu bileşiklerin ferromanyetik bir malzemeye dönüştüğü keşfedilmiştir (Heusler, 1903). Heusler bileşikleri yarı Heusler, tam Heusler ve dördü Heusler olmak üzere üçe ayrılmaktadır. C1_b (No:216) kristal yapısında olan yarı Heusler bileşikler XYZ kimyasal formülüne sahiptir (Otto vd., 1987; 1989; Offernes vd., 2008). L2₁ (No:225) kristal yapısında olan tam Heusler bileşikler X₂YZ kimyasal formülüne sahiptir (Villars & Calvert, 1991). LiMgPdSn-tipi kristal yapısında olan dördü Heusler bileşikler ise XX'YZ kimyasal formülüne sahiptir.

XYZ kimyasal formülüne sahip yarı-Heusler bileşikleri F-43m uzay grubundadır, stokiometrik kompozisyonu 1:1:1 şeklinde olup üç tane iç içe girmiş fcc alt örgüsünden oluşmaktadır. X₂YZ kimyasal

*Sorumlu Yazar / Corresponding Author, e-mail: ziyamerdan@gazi.edu.tr

formülüne sahip tam Heusler bileşikleri Fm-3m uzay grubundadır ve stokiyometrik kompozisyonu 2:1:1 şeklinde verilmektedir (Xing vd., 2009). XX'YZ kimyasal formülüne sahip olan dörtdü Heusler bileşikler ise F-43m uzay grubunda yer almaktadır ve stokiyometrik kompozisyonu 1:1:1:1 şeklindedir (Xu vd., 2013). Tam Heusler bileşiklerinde, X ve Y genellikle iki farklı geçiş metali iken Z manyetik olmayan III-VI A grubu yani sp grubu elementidir. Dörtdü Heusler bileşiklerinde X, X' ve Y elementleri periyodik tablonun geçiş metali grubunda olup Z elementleri ise periyodik tablonun ana grup elementidir ve dörtdü Heusler bileşikler için LiMgPdSn yapısı örnek olarak gösterilebilir (Eberz vd., 1980; Xu vd., 2013).

Heusler tipi bileşiklerin en önemli özelliği, bileşikler oluşturan elementlerin bir araya geldiklerinde ferromanyetik özelliklerinin değişebilmesidir. Ferromanyetik özellik gösteren bu bileşikler, metal ya da yarı metalik özellik göstermektedirler. Spintronik (Žutić vd., 2004) ve termodinamik uygulamalarda önemli bir yere sahip olan tam Heusler bileşikler ferromanyetik yarı metal davranışlarının yanı sıra şekil hatırlatma özelliği ve manyetik özellikleri nedeniyle önemli ölçüde dikkat çekmektedir. Heusler bileşiklerinin başlıca uygulama alanları; manyetik sensörler, manyetik hafızalar, spintronik sistemleridir. Ayrıca tünelleme manyetik direnç, spin enjeksiyon cihazlarının ve polarize ışık yayan LED üretiminde de kullanılmaktadır.

Heusler bileşikler sahip oldukları bu özelliklerinden dolayı son yıllarda bir çok araştırmaya konu olmuştur. Ancak Rh₂CoX (X=Al, Ga ve In) bileşiklerinin elektronik ve manyetik özellikleri ile ilgili bugüne kadar kapsamlı bir çalışma yapılmamıştır. Sadece M. Gillben'in (Gilleßen, 2009) yapmış olduğu doktora tez çalışmasında Rh₂CoX (X=Al, Ga ve In) bileşikler için örgü sabiti ve toplam manyetik değerleri incelenmiştir. Bu çalışmada ise, Vienna Ab initio Simulation Package (VASP) programı kullanılarak Rh₂CoX (X=Al, Ga ve In) bileşikler için örgü sabitleri, manyetik moment değerleri ve elastik özellikler incelenmiştir. Elde edilen sonuçlar literatürde mevcut veriler ile karşılaştırılmıştır.

2. MATERYAL VE METOT

Değiş-tokuş ve korelasyon etkileri standart Yoğunluk Fonksiyon Teorisi'nde (DFT) Yerel Yoğunluk Yaklaşımı (LDA) veya Genelleştirilmiş Gradyant Yaklaşımı (GGA) ile ele alınmaktadır. Bu çalışmada değiş-tokuş korelasyon enerjisi için Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE), GGA Yaklaşımı kullanılmıştır (Kresse & Hafner, 1993; 1994; Kresse & Furthmüller, 1996a, b; Perdew vd., 1996). Rh tabanlı Rh₂CoX (X=Al, Ga ve In) bileşiklerin yapısal ve manyetik özellikleri VASP programı kullanılarak incelenmiştir. Dalga fonksiyonlarının açılımında kullanılan düzlem dalga taban kümesi için kesme kinetik enerji değeri 500 eV olarak belirlenmiştir. Tüm grafikler Orijin Pro 8.0 programı ile çizilmiştir ve tüm parametrelerin sabit tutulması ile VASP Mede-A paket programı yardımıyla Rh₂CoX (X=Al, Ga ve In) bileşikler için elastik sabitler elde edilmiştir.

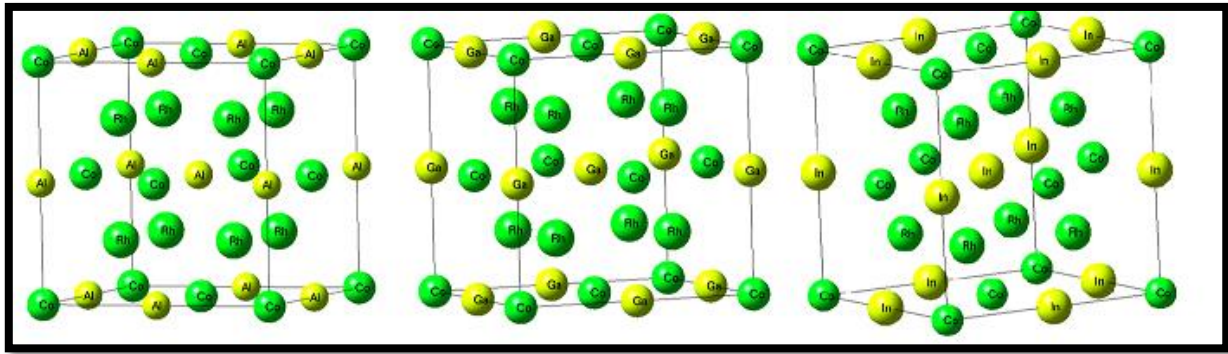
Vienna Ab initio Simulation Package (VASP) (Kresse & Joubert, 1999) programının temeli Mike Payne (Chadi & Cohen, 1973) tarafından oluşturulmuş olan bir programa dayanmaktadır ve yoğunluk fonksiyonel teorisi içinde düzlem dalga setleri, pseudo potansiyeller, PAW metodu ve iz düşümsel birleştirilmiş dalga yapılarını kullanarak ab initio moleküler dinamik ve kuantum mekaniksel simülasyonları yapabilmektedir. Ayrıca VASP programı aracılığı ile termodinamik ve manyetik özellikler, dinamik özellikler, mekanik özellikler, yapısal özellikler, optik özellikler, atomik kuvvetler, durgun dielektrik tensörü gibi temel fiziksel özellikler başarılı bir şekilde hesaplanabilmektedir.

3. BULGULAR VE TARTIŞMA

3.1. Yapısal ve Elastik Özellikler

Atomların kristal sistemlerindeki diziliş biçimi örgü yapıyı oluşturmaktadır. Atomik pozisyonlar kristal yapıyı ve malzemenin özelliklerini anlamak için büyük önem taşımaktadır. Rh₂CoX (X=Al, Ga ve In) bileşiklerinin kristal yapıları Şekil 1'de gösterilmiştir.

Tam Heusler bileşikler L2₁ formunda Fm-3m uzay gruplu ve yüzey merkezli kübik yapıda kristalleşmektedir. Rh₂CoX (X=Al, Ga ve In) bileşikler için örgü sabitleri ve manyetik moment değerleri elde edilerek bu değerler Tablo 1'de sunulmaktadır. Rh₂CoX (X=Al, Ga ve In) bileşikler için hesaplanan değerlerin literatür ile uyumlu olduğu görülmektedir.



Şekil 1. Rh_2CoX ($X=Al, Ga$ ve In) Full Heusler Bileşiklerinin Kristal Yapıları

Tablo 1. Örgü Sabitleri (A^0) ve Manyetik Moment Değerleri ($\mu_B/f.u$)

Bileşik	a_0 (Å) (Bu çalışma)	a_0 (Å) Teori (Gilleßen, 2009)	M ($\mu_B/f.u.$) (Bu çalışma)	M ($\mu_B/f.u.$) Teori (Gilleßen, 2009)
Rh₂CoAl	5.9359	5.979	3.2730	3.02
Rh₂CoGa	5.9605	5.998	3.2763	3.00
Rh₂CoIn	6.1859	6.222	3.2636	3.00

Bir katının elastik sabitleri o kristal için dinamiksel ve mekaniksel özellikleri arasında bağlantı kurmaktadır. Elastik sabitleri, kristalin sertlik ve kararlılığı hakkında önemli bilgiler vermektedir ve elastik sabitlerinin doğru bir şekilde hesaplanmasından elde edilen bilgiler sayesinde, sert malzeme tasarımında ve katının makroskopik mekaniksel özelliklerinin araştırılmasında önemli bir yere sahiptir. Ayrıca bir dış zorlanmaya karşı kristalin gösterdiği tepkiler ve en yakın komşu atomlar arasındaki bağ şiddetleri elastik sabitlerden yararlanılarak elde edilebilmektedir.

Elastik sabitleri hesaplamak amacıyla temelde iki yöntem mevcuttur. Bunlardan birincisi, kristalin birim hücrenin hacmini koruyacak şekilde belirli ve küçük bir deformasyon uygulamaktır. Diğeri ise, zor-zorlanma ilişkisinin orantı katsayısı olarak alınmasıdır. Bir kübik kristal C_{11} , C_{12} ve C_{44} olmak üzere üç tane bağımsız ikinci mertebeden elastik sabitine sahiptir (Rassoulinejad-Mousavi vd., 2016; Luan vd., 2018). Elastik sabitleri C_{ij} şeklinde gösterilmektedir ve Rh_2CoX ($X=Al, Ga$ ve In) bileşikleri için elde edilen değerler Tablo 2’de verilmiştir. Kübik kristallerin mekanik kararlı olabilmeleri için Born kararlılık kriterlerini sağlaması gerekmektedir ve bu koşullar aşağıda verilmiştir (Wu vd., 2007; Mogulkoc, vd., 2013; Mouhat & Coudert, 2014);

$$C_{11} > 0, C_{44} > 0, C_{11} > |C_{12}|, (C_{11} + 2C_{12}) > 0 \quad (1)$$

Buna göre Rh_2CoX ($X=Al, Ga$ ve In) bileşiklerinin Born Kararlılık kriterlerini sağladığı ve mekaniksel kararlı oldukları sonuçlarına varılmıştır.

Tablo 2. Rh_2CoX ($X=Al, Ga$ ve In) Bileşikleri için Hesaplanan Elastik Sabitleri C_{ij} (C_{11} , C_{12} ve C_{44})

Bileşik	C_{11} (Gpa)	C_{12} (Gpa)	C_{44} (Gpa)
Rh₂CoAl	279.881	182.560	116.428
Rh₂CoGa	270.706	182.929	111.689
Rh₂CoIn	216.149	169.165	84.528

Elastik sabitleri aracılığıyla, Bulk modülü (B), İzotropik kayma (Shear) modülü, Poisson oranı, Young modülü (E), Debye sıcaklığı ve Ortalama ses hızları hesaplanabilmektedir. Hesaplamalar için kullanılan formüller aşağıda verilmiştir;

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

$$G = \frac{1}{5}(C_{11} - C_{12} + 3C_{44}) \quad (3)$$

$$C' = \frac{1}{2}(C_{11} - C_{12}) \quad (4)$$

$$C'' = (C_{11} - C_{44}) \quad (5)$$

$$E = \frac{9BG}{3B + G} \quad (6)$$

Kristalin birim hücresi denge durumunda iken küçük zorlamalar uygulanmış ve enerjideki değişimden yararlanılarak Bulk modülü (B) hesaplamaların gerçekleştirilmiş olduğu VASP (Mede-A) programı aracılığı ile elde edilmiştir. Ayrıca, Rh_2CoX ($X=Al, Ga$ ve In) bileşikleri için Shear modülü (G), B/G oranı, Young Modülü (E) ve Poisson oranları (ν) hesaplanmıştır ve Rh_2CoX ($X=Al, Ga$ ve In) bileşikleri için yapılan hesaplama sonuçları Tablo 3'te yer almaktadır.

Tablo 3. Rh_2CoX ($X=Al, Ga$ ve In) Bileşikleri için Hesaplanan Bulk Modülü (B), Shear Modülü (G), B/G Oranı, Young Modülü (E) ve Poisson Oranı (ν)

Bileşik	B	G	B/G	E	ν
Rh₂CoAl	215.000	82.048	2.620	218.365	0.331
Rh₂CoGa	212.188	76.800	2.763	205.596	0.339
Rh₂CoIn	184.826	50.782	3.640	139.564	0.374

Shear modülü ve Bulk modülü katıların sertliğinin bir ölçüsüdür. Farklı bileşikler kıyaslandığında bulk modülü en büyük olan bileşik en az sıkışabilirlik değerine sahip olduğu yorumunu yapılabilmektedir. Young modülü, gerilme zoruna karşılık gelen gerilme zorlanmasının oranı olarak ifade edilmektedir ve malzeme sert ise Young modülü yüksektir. Dışarıdan gelen bir kuvvetten dolayı katı cismin çapının ne kadar büyüyecek küçüleceğini Poisson oranı vermektedir. Kovalent materyaller için Poisson oranı 0,1'dir ve iyonik materyaller için 0,25'tir. Eğer Poisson oranı 0,5'e yaklaşırsa bulk modülü kayma modülünden daha büyük hale gelir ve malzeme sıkıştırılamaz. Poisson oranı 1'e yaklaştığında malzeme son derece sıkıştırılabilir olurken, kesme gerilmeleri altında şekil değişikliğine karşı direnci artmaktadır. Pugh'a (Pugh, 1954) göre B/G oranı 1.75'ten büyükse malzeme sünek davranış gösterirken, B/G oranı 1.75'ten küçük ise malzeme kırılğan davranış göstermektedir (Perdew vd., 1993; Mouhat & Coudert, 2014). Tablo 3'te verilen değerlere göre Rh_2CoX (Al, Ga ve In) bileşikleri için hesaplanan B/G oranı kritik değer olan 1.75 ten büyük olduğu için Rh_2CoX (X=Al, Ga ve In) bileşiklerinin sünek yapıda oldukları gözlemlenmiştir.

Elde edilen örgü sabit değerleri literatür ile karşılaştırıldığında Michael Gilleßen (Gilleßen, 2009) tarafından 2009 yılında yapılan tez çalışmasına göre Rh_2CoAl için örgü sabit değeri yaklaşık % -0.72, Rh_2CoGa için örgü sabit değeri yaklaşık % -0.63 farkla ve Rh_2CoIn için örgü sabit değeri yaklaşık % -0.58 farkla elde edilmiştir. Dolayısı ile örgü sabiti için elde edilen hesaplama sonuçlarının, literatürde mevcut çalışma ile uyumlu olduğu görülmektedir.

Bir kristalin bant yapısının bilinmesi o malzemenin; mekanik özellikleri, manyetik özellikleri, optik özellikleri, elektronik özelliklerinden kaynaklanan yapısal bozulmalar ve elektronik iletkenliği gibi birçok özelliğinin belirlenmesinde önemli rol oynamaktadır (Galanakis vd., 2006; Gilleßen & Dronskowski, 2009; 2010). Denge durumundaki örgü sabitleri kullanılarak $L2_1$ kristal yapısındaki Rh_2CoX (X=Al, Ga ve In) bileşiklerinin yüksek simetri yönleri boyunca elektronik bant yapısı Şekil 2'de gösterilmiştir.

Rh_2CoX (X=Al, Ga ve In) bileşiklerinin elektronik bant yapısı eğrileri temel simetri yönleri boyunca hem spin aşağı hem de spin yukarı durumları için çizdirilmiştir. Fermi seviyeleri sıfır olarak alınmıştır ve Fermi seviyesindeki yoğunluk azaldıkça yapı daha kararlı (stable) olmaktadır. Şekil 2'de görüldüğü üzere Rh_2CoX (X=Al, Ga ve In) bileşikleri için Fermi seviyesinde herhangi bir yasak enerji aralığı yoktur. Diğer ifade ile, valans ve iletkenlik bantları Fermi seviyesinde büyük oranda çakışmaktadır. Bu yüzden Rh_2CoX (X=Al, Ga ve In) bileşiklerinin metalik karakter gösterdiği sonucuna varılabilir. Bu özellik spin kutuplu taşıma için çok aranan bir özelliktir. Spin kutuplu sistemler manyetik alana çok duyarlıdır. Çünkü bu sistemlerde öz direnç manyetik alanla değişmektedir. Öz direncin manyetik alanla değişmesi esasına dayanan manyetik sensörler ve manyetik hafızalar yapılmaktadır. Ayrıca tünelleme manyetik direnç (TMR), polarize ışık yayan LED'ler spin-spin enjeksiyon cihazlarının üretilmesinde de Heusler bileşikleri kullanılmaktadır. Sonuç olarak Rh_2CoX (X=Al, Ga ve In) bileşiklerinin spintronik aygıtlar için kullanılmaya aday malzemeler olduğu söylenebilir.

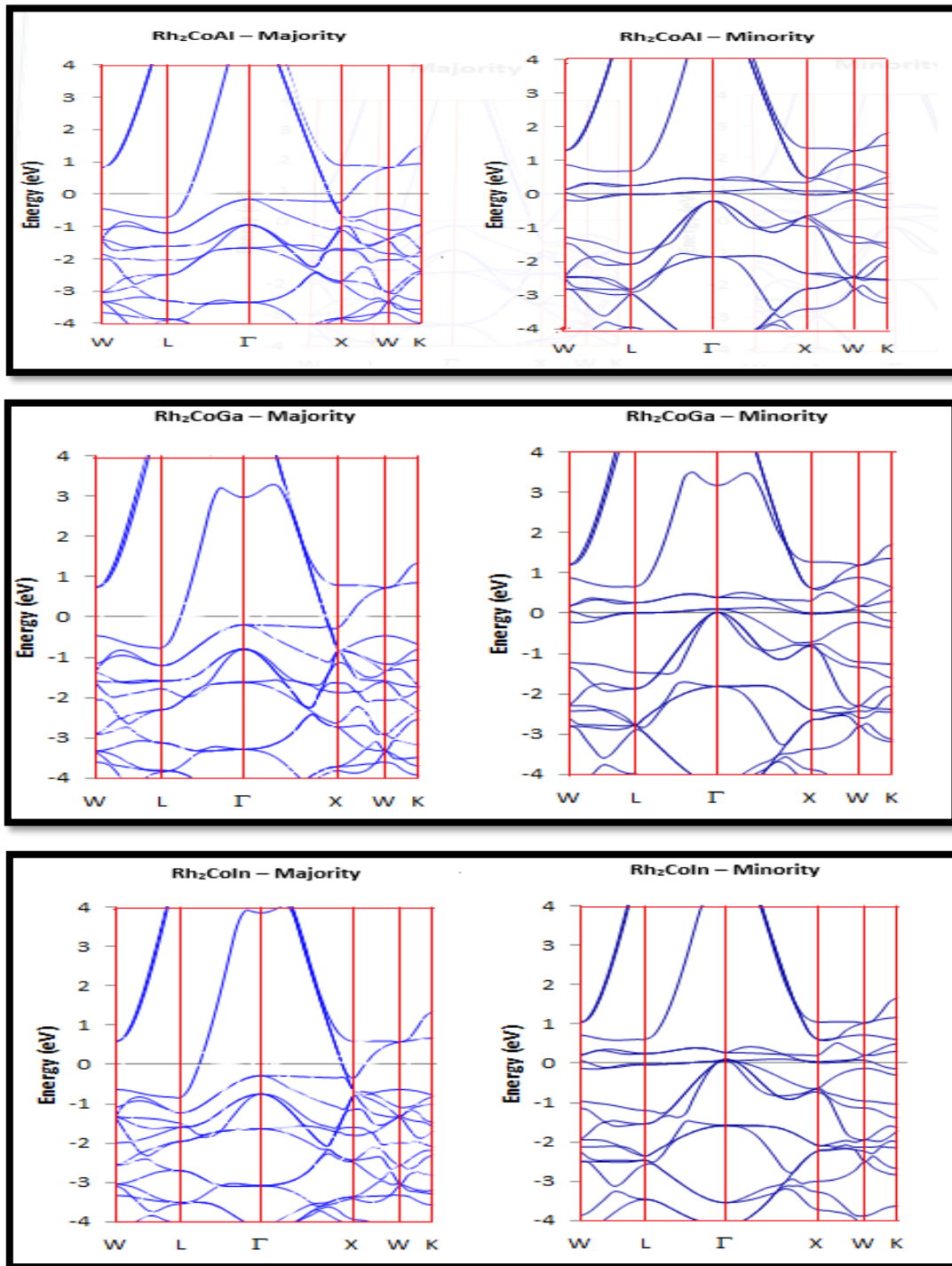
Rh_2CoX (Al, Ga ve In) bileşiklerinin elektronik band yapılarının grafiklerinin daha iyi analiz edilebilmesi için toplam ve kısmi durum yoğunlukları hesaplanarak çizdirilmiştir.

Fermi enerji seviyesi sıfır noktasında sabitlenmiştir ve Fermi enerji seviyesinde elektron yoğunluğunun bulunmasından dolayı Rh_2CoX (Al, Ga ve In) bileşikleri metalik özellik göstermektedir. Şekil 3'te Rh_2CoX (Al, Ga ve In) bileşikleri için spin yönelimlerine göre hesaplanan durum yoğunluk (DOS) eğrileri verilmiştir. Durum yoğunluk eğrileri, bandların yoğun olduğu noktalarda maksimum pik değerlerine ulaşmıştır. -5 ve 0 eV aralığında toplam durum yoğunluk eğrilerine (DOS) ana katkılar geçiş metali olan Co'dan gelmektedir. Yani Rh_2CoX (Al, Ga ve In) bileşikleri için Fermi seviyesinin etrafındaki maksimum pikler geçiş metallerine aittir.

Elektron dizilimine göre, d yörüngesi elektron dağılımının en dış yörüngesidir. Atomik durum yoğunluğu eğrileri incelendiğinde durum yoğunluk eğrilerine en çok katkının d orbitallerinden gelmesi beklenmektedir. Rh_2CoX (Al, Ga ve In) tam Heusler bileşikleri için s, p ve d orbitallerinin katkıları Şekil 4'te verilmektedir. -5 ve 0 eV aralığında maksimum piklerin Co atomunun d orbitallerinden geldiği görülmektedir.

Şekil 5 incelendiğinde Rh_2CoX (Al, Ga ve In) bileşikleri için toplam manyetik moment değerleri $-0.5 \mu_B/f.u.$ ve $3.5 \mu_B/f.u.$ değerleri arasında yer almaktadır. Rh_2CoAl bileşiği için toplam manyetik moment değeri 3.2730

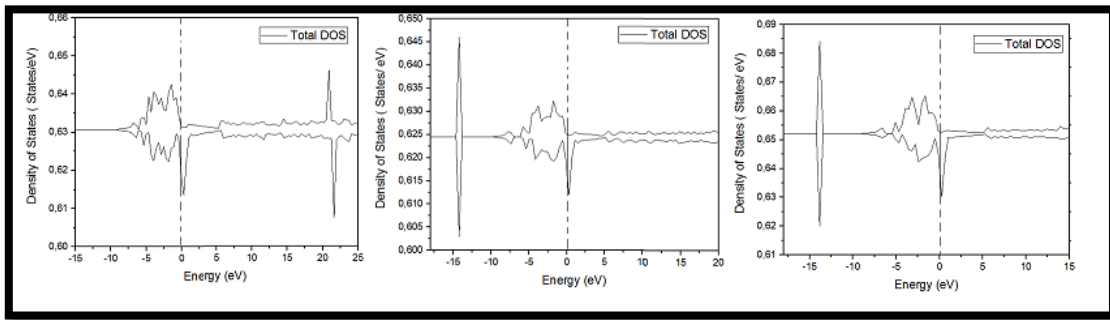
$\mu_B/f.u.$, Rh_2CoGa bileşiği için toplam manyetik moment değeri $3.2763 \mu_B/f.u.$ ve Rh_2CoIn bileşiği için ise toplam manyetik moment değeri $3.2636 \mu_B/f.u.$ şeklindedir.



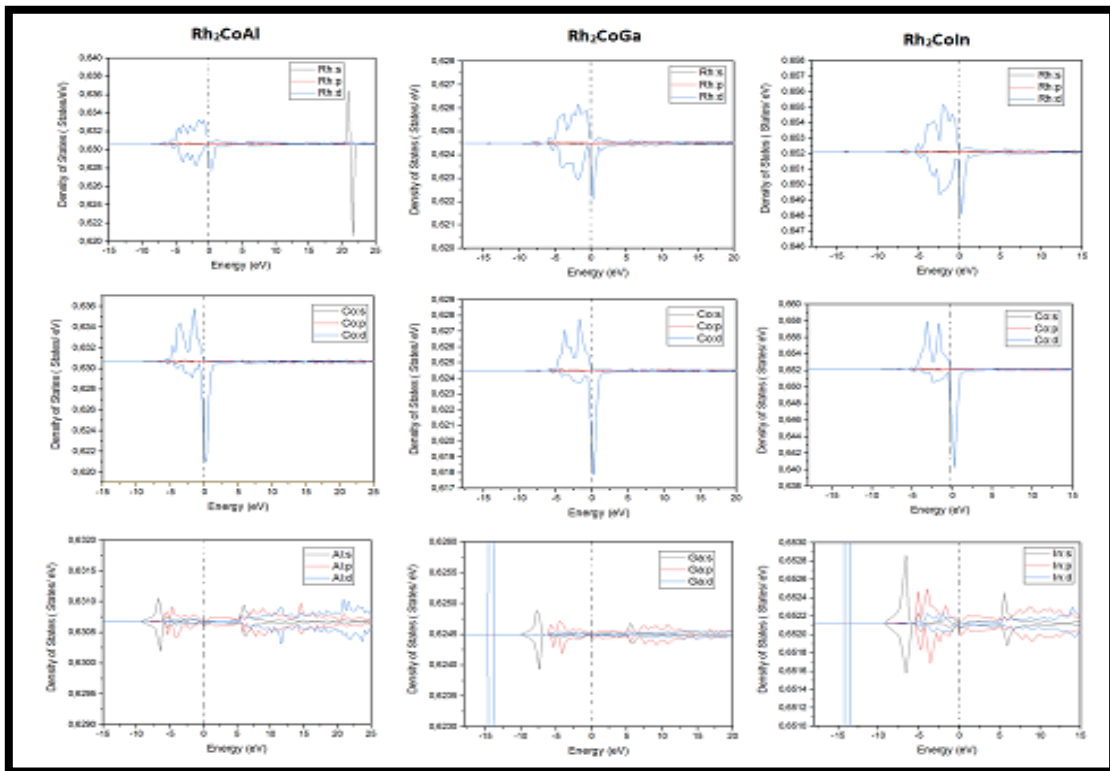
Şekil 2. Rh_2CoX ($X=Al, Ga$ ve In) Heusler Bileşikleri için Simetri Yönleri Boyunca Hesaplanan Elektronik Bant Yapıları

Tablo 4'te görüldüğü üzere Rh_2CoAl bileşiği için toplam manyetik moment değeri $3.2730 \mu_B/f.u.$ dir. Manyetik moment değerleri Rh için $0.555 \mu_B/f.u.$, Co için $1.933 \mu_B/f.u.$ ve Al için $-0.012 \mu_B/f.u.$ 'dur ve en büyük katkı Co atomundan gelmektedir. Rh_2CoGa bileşiği için toplam manyetik moment değeri $3.2763 \mu_B/f.u.$ olmak üzere manyetik moment değerleri Rh için $0.553 \mu_B/f.u.$, Co için $1.917 \mu_B/f.u.$ ve Ga için $-0.015 \mu_B/f.u.$ 'dur ve en büyük katkı Co atomundan gelmektedir. Rh_2CoIn bileşiği için toplam manyetik moment değeri $3.2636 \mu_B/f.u.$ dir ve manyetik moment değerleri Rh için $0.537 \mu_B/f.u.$, Co için $1.972 \mu_B/f.u.$, In için $-0.020 \mu_B/f.u.$ 'dur ve en büyük katkı Co atomundan gelmektedir.

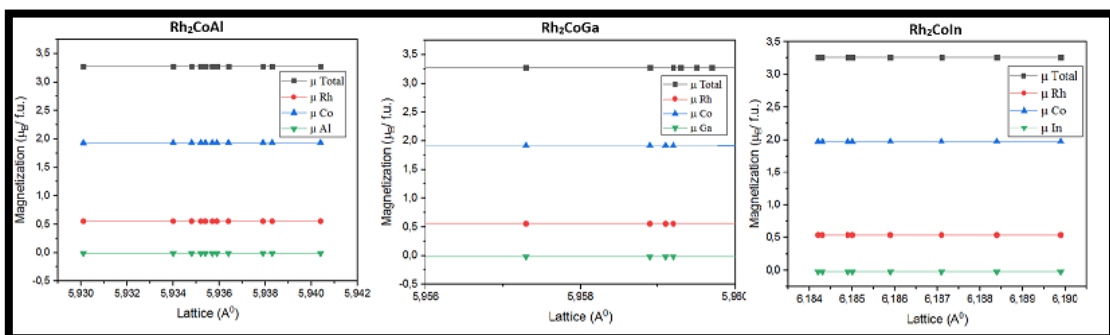
katkı Co atomundan gelmektedir. Ayrıca Rh_2CoX (Al, Ga ve In) bileşikleri için elde edilen kısmi manyetik moment değerleri Tablo 5'te yer almaktadır.



Şekil 3. Rh_2CoX ($X=Al, Ga$ ve In) Heusler Bileşikleri için Spin Yönelimlerine Göre Hesaplanan Toplam Durum Yoğunluk Eğrileri (DOS)



Şekil 4. Rh_2CoX ($X=Al, Ga$ ve In) Heusler Bileşiklerinin Parçalı Durum Yoğunluğu Eğrileri



Şekil 5. Rh_2CoX ($X=Al, Ga$ ve In) Heusler Bileşiklerinin Magnetizasyon Eğrileri

Tablo 4. Rh_2CoX ($X=Al, Ga$ ve In) Heusler Bileşikleri için Hesaplanan Toplam ve Atomik Manyetik Moment Değerleri

Bileşik	Rh_2CoAl	Rh_2CoGa	Rh_2CoIn
μ_{Tot} ($\mu_B/f.u.$)	3.2730	3.2763	3.2636
μ_{Rh} ($\mu_B/f.u.$)	0.555	0.553	0.537
μ_{Co} ($\mu_B/f.u.$)	1.933	1.917	1.972
μ_{Al} ($\mu_B/f.u.$)	-0.012	-	-
μ_{Ga} ($\mu_B/f.u.$)	-	-0.015	-
μ_{In} ($\mu_B/f.u.$)	-	-	-0.020

Tablo 5. Rh_2CoX ($X=Al, Ga$ ve In) Heusler Bileşikleri için Kısmi Manyetik Moment Değerleri

Bileşik	Atom	s	p	d
Rh_2CoAl	Rh	-0.004	-0.007	0.565
	Co	0.008	-0.002	1.927
	Al	-0.001	-0.009	-0.002
Rh_2CoGa	Rh	-0.004	-0.007	0.563
	Co	0.007	-0.002	1.911
	Ga	-0.003	-0.011	-0.001
Rh_2CoIn	Rh	-0.004	-0.006	0.548
	Co	0.008	-0.002	1.965
	In	0.003	-0.016	-0.002

4. SONUÇLAR

Bu çalışmada uzay grubu $Fm-3m$ olan Rh_2CoX ($X=Al, Ga$ ve In) bileşiklerinin yapısal ve manyetik özellikleri Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi ile incelenmiştir. Elde edilen örgü sabit değerleri literatür ile karşılaştırıldığında Michael Gilleßen (Gilleßen, 2009) tarafından 2009 yılında yapılan tez çalışmasına göre Rh_2CoAl için örgü sabit değeri yaklaşık % -0.72, Rh_2CoGa için örgü sabit değeri yaklaşık % -0.63 farkla ve Rh_2CoIn için örgü sabit değeri yaklaşık % -0.58 farkla elde edilmiştir.

Manyetik moment değerleri ise, Michael Gilleßen (Gilleßen, 2009) tarafından 2009 yılında yapılan tez çalışması ile karşılaştırıldığında Rh_2CoAl için manyetik moment değeri yaklaşık % +8.37, Rh_2CoGa için manyetik moment değeri yaklaşık % +9.21 farkla ve Rh_2CoIn için manyetik moment değeri yaklaşık % +8.78

farkla elde edilmiştir. Bu bileşikler için örgü parametreleri manyetik moment değerleri hesaplanmıştır ve çıkan sonuçların literatür ile oldukça uyumlu olduğu gözlemlenmiştir. Tablolarda verilen diğer değerler ile ilgili olarak daha önce bu veriler ile ilgili deneysel veya teorik bir çalışma yapılmadığı için herhangi bir kıyaslama yapılamamıştır.

Rh_2CoX ($X=Al, Ga$ ve In) bileşikleri için elastik sabitler hesaplanmıştır ve Born Kararlılık kriterlerini sağlamaktadırlar. Bu durumda Rh_2CoX ($X=Al, Ga$ ve In) bileşiklerinin mekanik kararlı oldukları söylenebilir. Rh_2CoX ($X=Al, Ga$ ve In) için Poisson oranları 1,75 kritik değerinden yüksek olduğu için bileşiklerin sünek yapıda olduğu gözlemlenmiştir. Rh_2CoX ($X=Al, Ga$ ve In) bileşikleri için bant yapıları ve durum yoğunluk grafikleri elde edilmiştir ve elde edilen grafiklere göre bu bileşikler metalik özellik sergilemektedir. Sonuç olarak Rh_2CoX ($X=Al, Ga$ ve In) bileşikleri göstermiş olduğu özelliklerden dolayı spintronik ve magneto-elektronik cihazlarda kullanılmak üzere yeni aday malzemeler olabileceği söylenebilir.

ÇIKAR ÇATIŞMASI

Yazar çıkar çatışması beyan etmemektedir.

KAYNAKLAR

- Chadi, D. J., & Cohen, M. L. (1973). Special Points in the Brillouin Zone. *Phys. Rev. B*, 8(12), 5747-5753. doi:[10.1103/PhysRevB.8.5747](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.8.5747)
- Eberz, U., Seelentag, W., & Schuster, H. U. (1980). Coloured Ternary and Quaternary Zintl-Phase. *Zeitschrift für Naturforschung B*, 35(11), 1341-1343. doi:[10.1515/znB-1980-1103](https://doi.org/10.1515/znB-1980-1103)
- 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), 765-775. doi:[10.1088/0022-3727/39/5/S01](https://doi.org/10.1088/0022-3727/39/5/S01)
- Gilleßen, M., & Dronskowski, R. (2010). A combinatorial study of inverse Heusler alloys by first-principles computational methods. *Journal of Computational Chemistry*, 31(3), 612-619. doi:[10.1002/jcc.21358](https://doi.org/10.1002/jcc.21358)
- Gilleßen, M., & Dronskowski, R. (2009). A combinatorial study of full Heusler alloys by first-principles computational methods. *Journal of Computational Chemistry*, 30(8), 1290-1299 doi:[10.1002/jcc.21152](https://doi.org/10.1002/jcc.21152)
- Gilleßen, M. (2009). Über die quantenchemischen Untersuchungen einiger ternärer intermetallischer Verbindungen, PhD Thesis, Aachen University. zur Erlangung des akademischen Grades eines.
- Heusler, F. (1903). Übermagnetischemanganlegierungen Verhandlugen der Deutschen Physikalischen Gesellschaft, sec. 5, pp. 219.
- Kresse, G., & Hafner, J. (1993). Ab initio molecular dynamics for liquid metals. *Phys. Rev. B*, 47(1), 558-561. doi:[10.1103/PhysRevB.47.558](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.47.558)
- Kresse, G., & Hafner, J. (1994). Ab initio molecular-dynamics simulation of the liquid-metalamorphous-semiconductor transition in germanium. *Phys. Rev. B*, 49(20), 14251-14269. doi:[10.1103/PhysRevB.49.14251](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.49.14251)
- Kresse, G., & Furthmüller, J. (1996a). Efficiency of ab-initio total energy calculations for metals and semiconductors using a plane-wave basis set. *Computational Materials Science*, 6(1), 15-50. doi:[10.1016/0927-0256\(96\)00008-0](https://doi.org/10.1016/0927-0256(96)00008-0)
- Kresse, G., & Furthmüller, J. (1996b). Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set. *Phys. Rev. B*, 54(16), 11169-11186. doi:[10.1103/PhysRevB.54.11169](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.54.11169)
- Kresse, G. & Joubert, D. (1999). From ultrasoft pseudopotentials to the projector augmented-wave method. *Phys. Rev. B*, 59(3), 1758-1775. doi:[10.1103/PhysRevB.59.1758](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.59.1758)
- Luan, X., Qin, H., Liu, F., Dai, Z., Yi, Y., & Li, Q. (2018). The mechanical properties and elastic anisotropies of cubic Ni_3Al from first principles calculations. *Crystals*, 8(8), 307. doi:[10.3390/cryst8080307](https://doi.org/10.3390/cryst8080307)
- Mogulkoc, Y., Ciftci, Y.O., Kabak, M., & Colakoglu, K. (2013) First-principles study of structural, elastic and electronic properties of $NdTe_2$ and $TlNdTe_2$. *Cumhuriyet Science Journal*, 34(3), 12-28.

- Mouhat, F., & Coudert, F-X. (2014). Necessary and sufficient elastic stability conditions in various crystal systems. *Phys. Rev. B*, 90, 224104. doi:[10.1103/PhysRevB.90.224104](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.90.224104)
- Offernes, L., Ravindran, P., Seim, C. W., & Kjekshus, A. (2008). Prediction of composition for stable half-Heusler phases from electronic band-structure analyses. *Journal of Alloys and Compounds*, 458(1-2), 47-60. doi:[10.1016/j.jallcom.2007.04.038](https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2007.04.038)
- Otto, M. J., Feil, H., van Woerden, R. A. M., Wijngaard, J., van der Valk, P. J., van Bruggen, C. F., & Haas, C. (1987). Electronic structure and magnetic, electrical and optical properties of ferromagnetic Heusler alloys. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 70(1-3), 33-38. doi:[10.1016/0304-8853\(87\)90354-4](https://doi.org/10.1016/0304-8853(87)90354-4)
- Otto, M. J., van Woerden, R. A. M., van der Valk, P. J., Wijngaard, J., van Bruggen, C. F., Haas, C., & Buschow, K. H. J. (1989). Half-metallic ferromagnets. 1. structure and magnetic properties of NiMnSb and related intermetallic compounds. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 1(13), 2341. doi:[10.1088/0953-8984/1/13/007](https://doi.org/10.1088/0953-8984/1/13/007)
- Perdew, J. P., Chevary, J. A., Vosko, S. H., Jackson, K. A., Pederson, M. R., Singh, D. J., & Fiolhais, C. (1993). Atoms, molecules, solids, and surfaces: Applications of the generalized gradient approximation for exchange and correlation. *Phys. Rev. B*, 46(11), 6671-6687. doi:[10.1103/PhysRevB.46.6671](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.46.6671)
- Perdew, J. P., Burke, K., & Ernzerhof, M. (1996). Generalized gradient approximation made simple. *Phys. Rev. Lett.*, 77(18), 3865-3868. doi:[10.1103/PhysRevLett.77.3865](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.77.3865)
- 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. doi:[10.1080/14786440808520496](https://doi.org/10.1080/14786440808520496)
- Rassoulinejad-Mousavi, S. M., Mao, Y., & Zhang, Y. (2016). Evaluation of copper, aluminum, and nickel interatomic potentials on predicting the elastic properties. *Journal of Applied Physics*, 119, 244304. doi:www.doi.org/10.1063/1.4953676
- Villars, P., & Calvert, L. D. (1991). *Pearson's handbook of crystallographic data for intermetallic phases* (2nd ed.), ASM International, Materials Park, OH.
- Wu, Z-J., Zhao, E-J., Xiang, H-P., Hao, X-F., Liu, X-J., & Meng, J. (2007). Crystal structures and elastic properties of superhard Ir N₂ and Ir N₃ from first principles. *Phys. Rev. B*, 76, 054115. doi:[10.1103/PhysRevB.76.054115](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.76.054115)
- Xing, N., Gong, Y., Zhang, W., Dong, J., & Li, H. (2009). First-principle prediction of half-metallic properties for the Heusler alloys V₂YSb (Y=Cr, Mn, Fe, Co). *Computational Materials Science*, 45(2), 489-493. doi:[10.1016/j.commat.2008.11.008](https://doi.org/10.1016/j.commat.2008.11.008)
- Xu, G. Z., Liu, E. K., Du, Y., Li, G. J., Liu, G. D., Wang, W. H., & Wu, G. H. (2013). A New Spin Gapless Semiconductors Family: Quaternary Heusler Compounds. *EPL: A Letters Journal Exploring the Frontiers of Physics*, 102, 17707.
- Žutić, I., Fabian, J. & Das Sarma, S. (2004). Spintronics: Fundamentals and applications. *Reviews of Modern Physics*, 76, 323-410. doi:[10.1103/RevModPhys.76.323](https://doi.org/10.1103/RevModPhys.76.323)