



MAKÜ FEBED  
ISSN Online: 1309-2243  
<http://dergipark.ulakbim.gov.tr/makufebed>

Mehmet Akif Ersoy Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Dergisi Özel Sayı 1: 66-69 (2016)  
*The Journal of Graduate School of Natural and Applied Sciences of Mehmet Akif Ersoy University Special Issue 1: 66-69 (2016)*

## Ni<sub>2</sub>FeAl Alaşımının Mekanik Özelliklerinin DFT Hesaplama Yöntemiyle Belirlenmesi<sup>β</sup>

İnanç YILMAZ<sup>1</sup>, Ülkü BAYHAN<sup>2\*</sup>

<sup>1</sup>Mehmet Akif Ersoy Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Fizik Anabilim Dalı, Burdur

<sup>2</sup>Mehmet Akif Ersoy Üniversitesi, Fen Edebiyat Fakültesi, Burdur

✉ Sorumlu Yazar (Corresponding author)\*: [ubayhan@mehmetakif.edu.tr](mailto:ubayhan@mehmetakif.edu.tr)

### ÖZ

Bu çalışmada (GGA) genelleştirilmiş gradyent yaklaşımına dayanarak Ni<sub>2</sub>FeAl alaşımının bazı yapısal ve elastik özelliklerini düzlem dalga – pseudopotansiyel ve Yoğunluk Fonksiyonel Teorisine (DFT) dayanan VASP 5.2 kaynak kodu kullanılarak hesaplanmıştır. Tam Heusler alaşımları X<sub>2</sub>YZ kimyasal yapısında L21 formunda kristalleşen uzay grubuna (grup no:225) dâhildir. Ni<sub>2</sub>FeAl alaşımının bu çalışmada yapısal ve mekanik özellikleri incelendi. Alaşımın örgü parametresi(a), elastik sabitleri (C<sub>ij</sub>), Young Modülü (Y), Bulk Modülü (B), Shear Modülü (G), Poisson Oranı (ν) ve Zener Anizotropi Faktörü hesaplanmıştır. Hesaplanan verilerden bu alaşımın mekanik özelliklerini temsil eden bazı sabitler belirlenmiş ve diğer mevcut teorik-deneysel verilerle karşılaştırılmıştır.

**Anahtar Kelimeler:** Ni<sub>2</sub>FeAl, DFT, VASP 5.2, Tam Heusler Alaşımları, Elastik Sabitleri(C<sub>ij</sub>)

## Determining the Mechanical Properties of Alloy Ni<sub>2</sub>FeAl with DFT Calculation Method

### ABSTRACT

In this study, Ni<sub>2</sub>FeAl calculated elastic properties by using plane –wave pseudopotentials and density functional theory with in the generalized gradient approximation for VASP (Vienna Ab initio Simulation Package) 5.2 source code. Full Heusler alloys X<sub>2</sub>YZ in the form of the chemical structure of space group (group number: 225) is included. Mechanical properties were examined in this study of Ni<sub>2</sub>FeAl alloy. Alloy lattice parameters (a), the elastic constants (C<sub>ij</sub>), Young's Modulus (Y), Bulk Modulus (B), Shear Modulus (G), and Poisson's ratio (ν) and Zener Anisotropy Factor was calculated. The obtained results are in good agreement with the available experimental and theoretical data.

**Keywords:** Ni<sub>2</sub>FeAl, DFT, VASP 5.2, Full Heusler Alloys, Elastic Constants(C<sub>ij</sub>)

### GİRİŞ

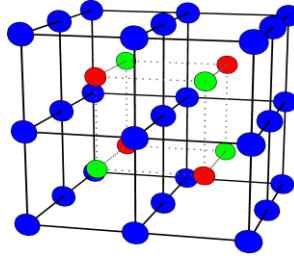
Tam Heusler alaşımları X<sub>2</sub>YZ şeklinde gösterilen L2<sub>1</sub> yapıdaki kristal  $Fm\bar{3}m$  (sayı 225) uzay grubunda yer alan bileşiklerdir. Tam Heusler alaşımları yarı – metal olabilir. Co<sub>2</sub>YZ (Y=Ti, V, Cr, Mn; Z= Al, Ga, Si) (Kandpal ve ark., 2007) veya metalik alaşımları Ni<sub>2</sub>TAl (T=Ti, Zr, Hf, V, Nb, Ta)(Qawasmesh ve Hamad, 2012) örnekleri verilebilir.

<sup>β</sup> 10 -12 Mayıs 2016 tarihleri arasında Mehmet Akif Ersoy Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü tarafından düzenlenen "2016 Akademik Gelişim Günleri" kapsamında sunulmuştur.

Nikel içeren Heusler alaşımları şekil hafıza özelliği nedeniyle günümüzde pratik ve ileri düzey olmak üzere birçok uygulamada tercih edilmektedir. Bu alaşımlar makine – teçhizat ve yapı ürünleri, medikal aygıtlar ve araçlar gibi endüstriyel ve tıbbi uygulamaların yanı sıra; elektronik aygıtlar, uzay araçları gibi ileri düzey uygulamalarda ve süper elastik gözlük çerçeveleri, telefon antenleri gibi günlük hayatı kolaylaştıran birçok ürünle hayatımıza dokunmaktadır. Bilgi teknolojilerindeki gelişmelerin sonucunda son yıllarda robotik alanda yapılan araştırmalarda gün geçtikçe hız kazanmaktadır. Şekil hafızalı alaşımların yüksek ve düşük sıcaklıklarda iki yönlü faz değişimi gösterirler.

Austenit ↔martensit dönüşümü malzemenin soğutulması sırasında gözlenen bir özelliktir. Örneğin Ni<sub>2</sub>FeGa alaşımının termoelastik olarak kübik L<sub>21</sub> yapıdan ortorombik yapıya 142 K' de (Lin ve Freeman, 1992) dönüştüğü deneysel olarak gözlenmiştir. Ni<sub>2</sub>MnGa alaşımı ise oda sıcaklığında L<sub>21</sub> yapıdan martensit dönüşüm yaparak modüle edilmiş yaklaşık tetragonal yapıda görülmüştür (Liu ve ark., 2003). Şekil hafızalı alaşımların bu özelliği üstün özellikli sensör ve aktivatör malzemesi olarak kullanılmasının önünü açmıştır.

Bu çalışmanın amacı Ni<sub>2</sub>FeAl alaşımının yapısal ve mekanik özellikleri araştırılmıştır (Şekil 1).



Şekil 1. L<sub>21</sub> Birim Hücresi Mavi Atomlar: Nikel(Ni);  
Yeşil Atomlar: Demir(Fe); Kırmızı Atomlar: Alüminyum(Al)

## HESAPLAMA YÖNTEMİ

Bu çalışmada Ni<sub>2</sub>FeAl bileşiğinin mekanik özellikleri yoğunluk fonksiyonel teorisine dayanan Vienna Ab – Initio simülasyon paketi (VASP 5.2)(Hohenberg ve Kohn, 1964; Kohn ve Sham, 1965; Perdew ve ark., 1996) kullanılarak hesaplanmıştır. Hesaplama elektron iyon etkileşimi için Perdew – Burke – Ernzerhof (PBE)(Perdew ve ark.,1996) metodu, elektron – elektron etkileşimi için genelleştirilmiş gradiyent yaklaşımı(GGA) kullanılmıştır. Brillouin bölgesinde özel k – noktaları için Gamma yöntemi ve 8x8x8 Gamma örgü ağı kullanılmıştır. Pseudopotansiyel elektron dağılımı Ni:1s<sup>2</sup> 2s<sup>2</sup> 2p<sup>6</sup> 3s<sup>2</sup> 3p<sup>6</sup> 4s<sup>2</sup> 3d<sup>8</sup>, Fe: 1s<sup>2</sup> 2s<sup>2</sup> 2p<sup>6</sup> 3s<sup>2</sup> 3p<sup>6</sup> 3d<sup>6</sup> 4s<sup>2</sup>, Al: 1s<sup>2</sup> 2s<sup>2</sup> 2p<sup>6</sup> 3s<sup>2</sup> 3p<sup>1</sup> şeklindedir ve enerji kesilim değeri (mesh cutoff) 450 eV olarak alındı. Bütün bu hesaplamaların sonuçları literatür ile karşılaştırılmıştır, pek çok özelliğin deney ve başka teorik çalışmalarla uyum içinde olduğu görülmüştür.

Yapısal özellikleri belirlemek için L<sub>21</sub> yapıdaki *Fm $\bar{3}$ m* (sayı 225) uzay grubunda kristal yapısında örgü sabiti değeri toplam enerjisi hesaplanmıştır. Ni<sub>2</sub>FeAl için örgü sabiti 5,546 alınarak hesaplama yapılmıştır (Qawasmesh ve Hamad, 2012). Sistemin L<sub>21</sub> fazındaki durumu için elastik sabitleri Tablo 1'de sunulmuştur. Bulk Modülü(B), Shear Modülü(G), Young Modülü(Y), Zener Anizotropi Faktörü(A), denge örgü sabiti(a) ve Poisson Oranı( $\nu$ ) Tablo 2' de sunulmuştur.

Kristal simetrilerine göre Born mekanik kararlılık kriterleri kübik yapılar için

$$C_{11} > 0, C_{12} > 0, C_{44} > 0, C_{12} > C_{44}, C_{11} + C_{12} > 0, C_{11} - C_{12} > 0, \text{ dir.}$$

**Tablo 1.** Hesaplanan Elastik Sabitler (GPa biriminde ve L2<sub>1</sub> Faz için belirlenmiştir)

Ni <sub>2</sub> FeAl	C <sub>11</sub> (GPa)	C <sub>12</sub> (GPa)	C <sub>44</sub> (GPa)
Bu Çalışma	148	210,9	131,1
(Qawasmesh ve Hamad, 2012)	176.919	162.875	123.436

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

$$G = \frac{1}{2}(C_{11} - C_{12}) \quad (2)$$

$$A = \frac{2C_{11}}{C_{11} - C_{12}} \quad (3)$$

Denklem (1) ve (2) kullanılarak bulunan Bulk modülü ve Shear Modülünde sayesinde Young Modülü ve Poisson oranı aşağıdaki denklemler kullanılarak hesaplanır.

$$Y = \frac{9GB}{G+3B} \quad (4)$$

$$\nu = \frac{1}{2} \left[ \frac{(B - \frac{2}{3}G)}{(B + \frac{2}{3}G)} \right] \quad (5)$$

Hesaplanan değerler aşağıdaki Tablo 2'deki gibidir. Bu çalışmada ilk kez hesaplanan Shear Modülü(G), Zener Anizotropi Faktörü(A), Young Modülü(Y) ve Poisson Oranı( $\nu$ ) ilk kez hesaplandığından karşılaştırmak mümkün olmuştur.

**Tablo 2.** Hesaplanan Denge Örgü sabiti(a), Bulk Modülü(B), Shear Modülü(G), Zener Anizotropi Faktörü(A), Young Modülü(Y) ve Poisson Oranı( $\nu$ )

Ni <sub>2</sub> FeAl		
a(Å)	5,546 Teorik 5,75 Teorik 4,47 Deneysel	Bu çalışma (Qawasmesh ve Hamad, 2012) (Da Silva ve ark., 1988)
B(GPa)	189,3 164,23	Bu çalışma (Qawasmesh ve Hamad, 2012)
G(GPa)	-31,45	Bu çalışma
A(GPa)	-4,705	Bu çalışma
Y(GPa)	428,94	Bu çalışma
$\nu$	0,0165	Bu çalışma

## SONUÇLAR

Bu çalışmada (DFT) Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi ile enerji hesaplamaları Ni<sub>2</sub>FeAl için yapıldı. Elde edilen sonuçlar aşağıda sıralanmıştır;

- Kristal malzemenin elastik sabitleri ab initio toplam enerji değerleri kullanılarak birim hücrenin hacmini koruyacak şekilde belirli bir küçük deformasyon stres strain (zor – zorlanma) uygulanması yoluyla hesaplanmıştır.
- L2<sub>1</sub> austenit yapıdaki kararlı durum örgü sabiti a = 5,546 Å minimum enerji denge değeri alınarak elastik sabitleri C<sub>11</sub> = 148 GPa, C<sub>12</sub> = 210,9 GPa, C<sub>44</sub> = 131,1 GPa hesaplandı. Sonuçların mevcut diğer teorik çalışmalarla uyumlu olduğu görüldü. Deney sonucu mevcut olmayan büyüklükler için bu sonuçlar yol gösterici nitelik taşımaktadır.
- Cij elastik sabitleri pozitif bulunmuştur. C<sub>11</sub> – C<sub>12</sub> > 0 koşulunun dışında diğer Born mekanik kararlılık kriterlerine uygun olduğu görülmüştür. Tetragonal yapıda L2<sub>1</sub> yapıdan daha kararlı olduğu literatür tarafından da

dođrulanmıřtır (Qawasmesh ve Hamad, 2012). Bu sonuçla ıřıđında incelenen řartlarda malzemenin kararlılıđının düşük olduđu tespit edilmiřtir.

- Bu tür malzemelerin gelecekte üstün özellikli akıllı sistemlerde kullanılabilirliđi gündemde olup Ni<sub>2</sub>FeAl gibi demir içeren çok bileřenli sistemler için kararlılık ve ileri bir çalıřma olarak da manyetik özelliklerinin incelemesi teknolojik arařtırmalarının geleceđi açařından önem tařımaktadır.

## TEŐEKKÜR

Bu arařtırmanın konusu ve diđer teorik çalıřmalara destek olduđundan dolayı TÜBİTAK ULAKBİM TR – Grid hesaplamaya ađına teőekkür ederiz.

## KAYNAKLAR

- Da Silva, E. Z., Jepsen, O., Andersen, O. K., (1988). Electronic properties of Ni-based Heusler alloys Solid State Commun. 67, 13.
- Hohenberg, P., Kohn, W., (1964). Inhomogeneous Electron Gas Physical Review 136, B864.
- Kandpal, H. C., Fecher, G. H., Gerhard, 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.
- Kohn, W., Sham, L. J., (1965). Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects Physical Review. 140,A1133
- Kresse, G., Hafner, J., (1993). Ab initio molecular dynamics for liquid metals. Phys. Rev. B, 47:558.
- Lin, W., Freeman, A., (1992). Cohesive properties and electronic structure of Heusler L<sub>21</sub> compounds Ni<sub>2</sub>XAl (X=Ti, V, Zr, Nb, Hf, and Ta) Physical Review B 45, 61.
- Liu, Z. H., Zhang, M. Y. Cui, T., Zhou, Y. Q., Wang, W. H., Wu, G. H., Zhang, X. X., Xiao, G.,(2003). Martensitic transformation and shape memory effect in ferromagnetic Heusler alloy Ni<sub>2</sub>FeGa Applied physics letters 82, 424 - 426.
- Perdew, J. P., Burke, S., Ernzerhof, M., (1996). Generalized Gradient Approximation Made Simple physical review letters 77, 3865 .
- Qawasmesh, Y., Hamad, B., (2012). Investigation of the structural, electronic, and magnetic properties of Ni-based Heusler alloys from first principles *Journal of Applied Physics* 111, 3, 033905.
-