

Atf İçin: Erol A, 2022. XA yapıdaki Ti_2RuSn ters-Heusler alaşımının yapısal, elektronik, elastik ve termodinamik özelliklerinin teorik olarak incelenmesi. *İğdır Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Dergisi*, 12(3): 1496 - 1505.

To Cite: Erol A, 2022. Theoretical investigation of the structural, electronic, elastic and thermodynamic properties of Ti_2RuSn reverse-Heusler alloy in XA structure. *Journal of the Institute of Science and Technology*, 12(3): 1496 - 1505.

XA yapıdaki Ti_2RuSn ters-Heusler alaşımının yapısal, elektronik, elastik ve termodinamik özelliklerinin teorik olarak incelenmesi

Erol ALBAYRAK ^{1*}

ÖZET: Ters-Heusler (XA) yapıdaki üçlü Ti_2RuSn alaşımının bazı yapısal özellikleri, manyetikliği, elektronik yapısı ve ayrıca elastisitesi DFT olarak bilinen yoğunluk fonksiyonel teorisi içerisinde yer alan genelleştirilmiş grandyent kabulleri kullanılarak incelenmiştir. Hesaplanan optimize edilmiş örgü sabitinin, toplam manyetik momentin ve elektronik bant yapısının literatürde yer alan mevcut verilerle uyumlu olduğu görüldü. Spin polarize bant hesaplamasından, Ti_2RuSn alaşımı spin-aşağı yöneliminde 0.405 eV'luk bir yasak enerji aralığına sahipken, spin-yukarı yöneliminde metalik özellik göstermekte olduğu ve bundan dolayı yarı metalik ferromanyetik bir doğaya sahip olduğu tahmin edildi. İkinci dereceden elastik sabitlerinin sonuçlarının, bu alaşım için Born mekanik kararlılık kriterlerini karşıladığı ve mekanik olarak kararlı olduğu anlaşıldı. Ayrıca, Pugh kriterlerine göre B/G oranı 3.23 olan bu alaşımın 1.75 sınırından büyük olması nedeniyle sünek bir doğaya sahip olduğu ve anizotropi faktörü (A) 2.88 olması nedeniyle anizotropik davranış gösterdiği tespit edildi. İncelenen bu alaşımın spin elektronu uygulamaları için umut verici bir aday olduğu söylenebilir

Anahtar Kelimeler: Yoğunluk fonksiyonel teori, elastik özellikler, ters-Heusler, yarı metalik malzemeler.

Theoretical investigation of the structural, electronic, elastic and thermodynamic properties of Ti_2RuSn reverse-Heusler alloy in XA structure

ABSTRACT: Structural, magnetic, electronic and elastic properties of the ternary Ti_2RuSn alloy in reverse-Heusler (XA) structure were investigated using density functional theory and generalized grandyent approach. It was seen that the calculated optimized lattice constant, total magnetic moment and electronic band structure were compatible with the available data in the literature. From the spin polarized band calculation, it was predicted that the Ti_2RuSn alloy has a band gap of 0.405 eV in the spin-down orientation, while it shows metallic properties in the spin-up orientation and therefore has a semi-metallic ferromagnetic nature. The results of the second order elastic constants were found to meet the Born mechanical stability criteria for this alloy and to be mechanically stable. In addition, it was determined that this alloy, which has a B/G ratio of 3.23 according to Pugh criteria, has a ductile nature due to its greater than 1.75 limit and exhibits anisotropic behavior due to its anisotropy factor (A) of 2.88. It can be said that the investigated alloy is a promising candidate for spin electronics applications.

Keywords: Density functional theory, elastic properties, inverse-Heusler, semi-metallic materials.

¹ Erol ALBAYRAK ([Orcid ID: 0000-0001-9161-9068](https://orcid.org/0000-0001-9161-9068)) Kırıkkale Mühendislik Mimarlık Fakültesi, Metalürji ve Malzeme Mühendisliği Bölümü, Kırıkkale, Türkiye

*Sorumlu Yazar/Corresponding Author: Erol ALBAYRAK, e-mail: erol_albayrak@hotmail.com

GİRİŞ

Yüksek sıcaklıklardaki kararlı davranışları, hafif olmaları, mukavemetlerinin yüksek olması, alaşımlarının ve bileşiklerinin uzay araçları ve otomotiv endüstrisinde çok kullanılıyor olması gibi nedenler sayesinde titanyumlu (Ti) bileşiklerin ya da alaşımların fiziksel ve kimyasal özellikleri oldukça önem arz etmektedir (Urtekin, 2015). Bununla birlikte Hartley 1991’de yaptığı çalışmada platin grubu metallerin iyi birer reaktif element olduklarını ortaya koymuştur. Bu metallerden olan rutenyum (Ru) ise çok iyi bir katalitik aktiviteye sahip olması, yüksek korozyon direnci gibi özellikleri nedeniyle endüstride titanyum (Ti) ve kalay (Sn) ile birlikte anot materyalleri için TiRuSnO₂ şeklinde kullanılırlar (Panizza ve ark., 2013).

Ru-Ti sistemi, Gao ve ark. (2009), Jahnatek ve ark. (2011) gibi bilim insanlarınca detaylı bir biçimde çalışılıp ortaya önemli sonuçlar koymuşlardır. Jahnatek 2011’de ve Jain 2014’te yaptığı çalışmalarla B2 durumundaki RuTi sistemlerinin elektronik, elastik ve yapısal özelliklerini incelemişlerdir. Yine bir RuTi çalışması Örnek (2017) tarafından yapılarak B2 fazındaki RuTi sisteminin yapısal, elastiki, titreşim ve elektronik özellikleri Yoğunluk Fonksiyon Teorisi (DFT) kullanarak incelemiştir. RuTi bazlı çalışmaların tamamı Ti₂RuSn alaşımının doğasını anlamakta TiRu açısından bilgi verdikleri için önem arz etmektedirler. Ayrıca, Örnek ve ark. (2021) (Ti_{1-x}V_x)₂FeGa alaşımının yapısal, manyetik, elektronik ve titreşim özelliklerini incelemişlerdir ve çeşitli katkılama oranlarına göre sonuçları elde etmişlerdir.

Bazı malzemeler bir spin yöneliminde metalik özellik gösterirlerken diğer spin yöneliminde yarı iletken özellik gösterirler. Bu tür malzemeler Yarı Metalik (YM) malzemeler olarak adlandırılırlar (Taşkın ve ark., 2017).

YM ferromanyetik malzemelerin yüksek spin polarizasyon kapasitesine sahip oldukları düşünülür ve bu malzemeler sanayide manyetik sensörler, veri depo aparatı ve kalıcı mıknatıslar gibi bazı cihazlarda kullanılmaktadırlar (Taşkın ve ark., 2017).

YM malzemeler bir spin yöneliminde metalik özellik gösterirlerken diğer spin yöneliminde yarı iletken özellik gösterirler. Taşkın ve ark. 2017 de yaptıkları çalışmada Ti₂RuSn alaşımının bazı kararlı durumlarını ve elastik sabitlerini incelemiş ve bu malzeme için en kararlı durumun XA yüzey merkezli kübik (FCC) kristal yapıda olduğunu ortaya koymuştur. Ayrıca, bu alaşımın elektronik yapı ve manyetik özelliklerini inceleyerek yarı metalik özelliklerini ortaya koymuşlardır.

Tüm bu bilgiler ışığında literatürde sınırlı sayıda çalışma bulunan Ti₂RuSn alaşımının fiziksel özellikleri yeterince tanımlanamamıştır. Bundan dolayı bu alaşımın taban durum özelliklerini tam olarak belirlemek için yoğunluk fonksiyonel teorisi içerisinde yer alan genelleştirilmiş grandyent yaklaşımı kullanılması amaçlanmaktadır. Bu amaç doğrultusunda bu çalışmada; Ters-Heusler (XA) yapıdaki üçlü Ti₂RuSn alaşımının yapısal, manyetik, elektronik bant ve elastik özellikleri incelenmiştir.

MATERYAL ve METOT

Çok elektronlu bir atomik sistem ele alındığında elektronların bulunma ihtimallerine göre bir fonksiyon türetilmek istendiğinde öncelikle Hamilton ifadesi yoğunluk fonksiyonu teorisine göre (DFT) temel durumun dejenere olmadığı durumlar için eşitlik 1 de verildiği gibi yazılabilir.

$$H = T + V \quad (1)$$

Bu ifadedeki kinetik enerji eşitlik 2’de, potansiyel enerji de eşitlik 3 te verilmiştir.

$$T = \frac{1}{2} \int \nabla \varphi^* (r) \int \nabla \varphi (r) dr \quad (2)$$

$$V = \int \vartheta(r) \varphi^*(r) \varphi(r) dr \quad (3)$$

Hohenberg ve Kohn yaptıkları çalışmalarda çok elektronlu yapıların taban durum enerjilerinin elektronların yoğunluklarına bağlı olduklarını eşitlik 4 te ki gibi göstermişlerdir (Hohenberg ve ark., 1964 ; Kohn ve ark., 1965).

$$E_{\theta} [n] = \int v(r) n(r) d(r) + F[n(r)] \quad (4)$$

Bu çalışmada yapılan hesaplamalar da çoklu elektron yapısına sahip moleküler yapıdaki malzemeler için önemli sonuçlar veren DFT yaklaşımı kullanılarak gerçekleştirilmiştir. Denge durumundaki minimum enerjisi, yapısal ve diğer özellikleri hesaplamak için DFT yaklaşımını dikkate alan Quantum-ESPRESSO paket programı kullanılmıştır (Giannozzi ve ark., 2009).

Minimum enerji durumunu tespit etmek için gerekli olan taban durum elektronik yük yoğunluğu ifadesi Kohn ve Sham'ın 1965 yılında yaptığı çalışmada;

$$\rho(r) = \sum_{j=1}^N |\phi_j(r)|^2 \quad (5)$$

olarak belirtilmiştir (Kohn ve ark.,1965).

Elektronları bir biriyle etkileşmeyen moleküler yapılar için karşılıklı Değiş-tokuş etkileşimlerinin katkısı bilinemez, bu yüzden de değiş- tokuş korelasyon potansiyeli için bazı yaklaşımları göz önünde bulundurmak gerekir. değiş-tokuş korelasyon potansiyelinin tespiti için ilk sistemi homojen bir gaz ortamı olarak kabul eden yerel yoğunluk yaklaşımı (LDA) kullanılmıştır (Giannozzi ve ark., 1991). Homojen olmayan sistemler için LDA yaklaşımına elektronik yük yoğunluğunun gradyenti eklenerek daha başarılı sonuçların alınması amaçlanmıştır. Bu şekilde LDA yaklaşımına elektronik yük yoğunluğunun gradyenti eklenerek genelleştirilmiş gradyent yaklaşımı ortaya çıkmış olup Perdew-Burke-Ernzeshof, genelleştirilmiş gradyent yaklaşımı (PBE-GGY) da genelleştirilmiş bir gradyent yaklaşımıdır (Perdew ve ark., 1996). Bu çalışmada da daha başarılı sonuçlar için PBE-GGY yaklaşımı kullanılmıştır.

Çok elektronlu bir moleküler sistemde enerji hesaplamaları için elektronlardan gelen katkılar için de çeşitli yaklaşımlar yapmak gerekmektedir. Buna göre 1'den fazla elektronu olan bir atomun schrödinger denklemi eşitlik 6 da ki gibi yazılabilir.

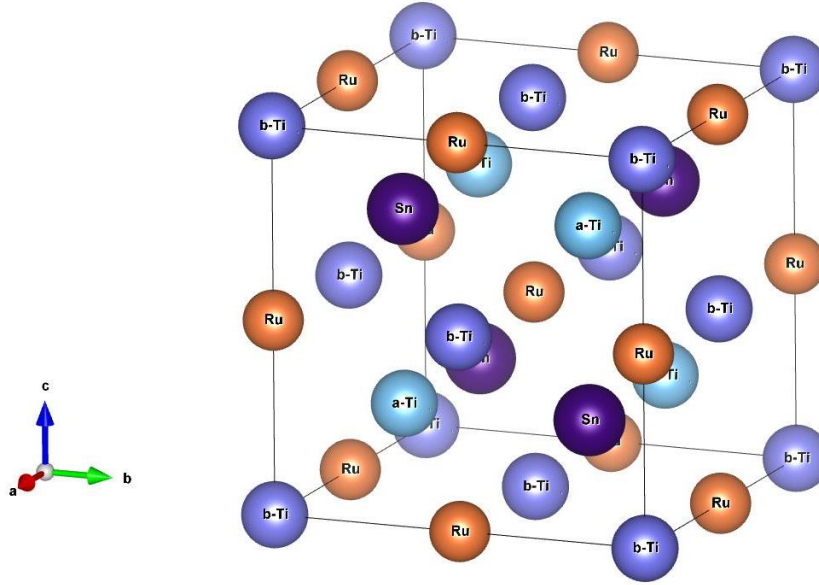
$$H\varphi = \varepsilon\varphi \quad (6)$$

Burada H, ε operatörler olup φ ise dalga fonksiyonudur. Genel olarak bu dalga fonksiyonu atomun kor elektronları yani çekirdeğe yakın ve dolu orbitallerdeki elektronlarla değerlik elektronlarından katkılarının toplamı şeklinde ifade edilebilir. Bununla birlikte schrödinger denkleminde kor ve değerlik elektronlarının etkileşimleri de yapay potansiyel olarak eklenmelidir. Gerçek bir potansiyele göre daha kısa sürede yakınsayan yani sıfır değerine ulaşan potansiyellerden biri de pseudopotansiyeller olarak adlandırılırlar (Srivastava G.P., 1990).

Bu yüzden de Ti, Ru ve Sn atomlarına ait bu çalışmada pseudopotansiyeller Rappe grubdan alınmıştır (Garrity, 2014). Kullanılan elektronik dalga fonksiyonlarının açılımı için kesme enerjisi 40 Ry ve elektronik yük yoğunluğu için kinetik enerji 400 Ry olarak alınarak kesme sınırına kadar incelendi. Brillouin-bölgesi tamamlamaları $8 \times 8 \times 8$ k-noktaları örgü değerleri kullanılarak hesaplamalar gerçekleştirildi. Fermi yüzeyine kadar yapılan incelemede tamamlamaların gerçekleştirilmesi için smearing tekniği kullanılıp smearing parametresi 0.02 Ry alınarak gerçekleştirildi (Methfessel, Paxton, 1989). Alaşımın elastik özellikleri ve termodinamik özellikleri thermo_pw programı ile incelendi (Corso, 2016). Elastik sabitleri, alaşıma stress uygulanarak bozulmamış ve bozulmuş kristal yapı arasındaki enerji farkından elde edilmektedir. Termodinamik özellikler ise Debye modeli esas alınarak yapılmıştır.

BULGULAR VE TARTIŞMA

XA kristal simetrisinde bulunan Ters-Heusler yapısının ilkel birim hücresi 4 atom içermektedir. Ti_2RuSn alaşımı F-43m uzay grubu olarak adlandırılan atomik dizilime ve XA kristal simetrisine sahiptir. Bu alaşımın yapısı iç içe geçmiş 4 FCC hücre içerdiğinden aynı zamanda Ters-Heusler yapıya sahip bir alaşım olarak da incelenebilmektedir. Bu çalışmada, Ti_2RuSn Ters-Heusler alaşımındaki atomların koordinatları xyz koordinat sistemine göre; a-Ti (3/4, 3/4, 3/4), b-Ti (0, 0, 0), Sn (1/4, 1/4, 1/4) ve Ru (1/2, 1/2, 1/2) olacak şekilde kristal yapı oluşturuldu (Bkz. Şekil 1).



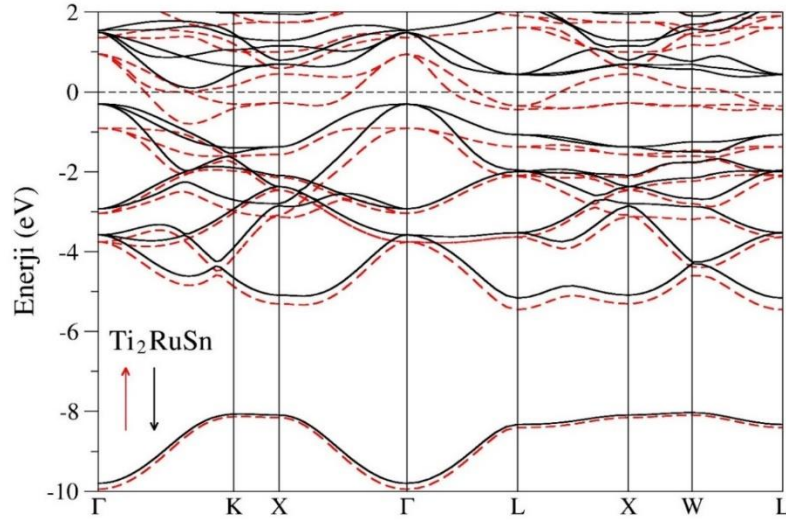
Şekil 1. XA kristal simetrisinde bulunan Ti_2RuSn Ters-Heusler alaşımının kristal yapısı

Oluşturulan kristal yapının toplam enerjisini minimum olduğu denge durumu örgü sabiti değeri $a_0 = 6.435 \text{ \AA}$ olarak belirlendi (Taşkın ve ark. 2017). FLAPW metot ile yaptıkları çalışmada Ti_2RuSn alaşımının örgü sabitini 6.44 \AA olarak hesapladı. Bu çalışmada elde edilen örgü sabiti değeri Taşkın ve ark. (2017) tarafından elde edilen değerinden %0.08'lik bir farkla elde edilerek oldukça uyumlu olarak bulundu.

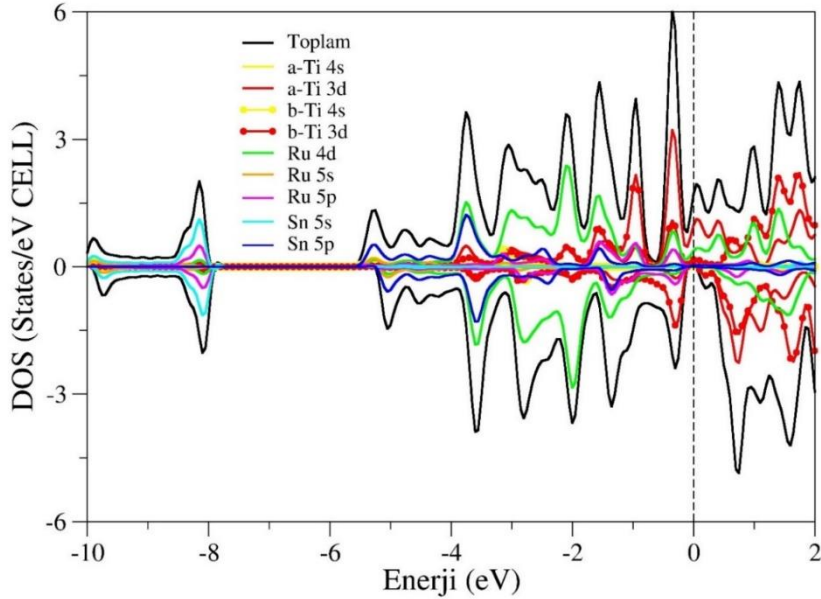
XA kristal simetrisinde bulunan F-43m uzay grubundaki Ti_2RuSn Ters-Heusler alaşımının spin polarizasyonu hesaba katılarak spin yönelimlerine göre elektronik özellikleri hesaplandı. Ti_2RuSn Ters-Heusler alaşımının Şekil 2'deki yüksek simetri yönelimlerine göre elde edilen elektronik bant eğrilerine bakılarak spin yukarı ve spin aşağı değerleri incelendiğinde malzemenin spin yukarı yöneliminde valans ve iletkenlik bantlarının iç içe geçtiği görülmektedir. Ayrıca spin yukarı yönelimde Fermi enerji seviyesi civarında herhangi bir yasaklanmış enerji aralığı bulunmadığından malzemenin metalik karakterde olduğu anlaşılmaktadır. Spin aşağı yöneliminde ise Fermi enerji seviyesi yakınlarında dolaylı geçişe sahip bir yasaklı enerji aralığı olduğu Şekil 2'den anlaşılmaktadır. Bu yasaklı enerji aralığı 0.405 eV olarak hesaplanmıştır. Bu yüzden spin aşağı yöneliminde yarıiletken karakterde olduğu da söylenebilir. Dolayısıyla spin yukarı yönelimi iletken iken spin aşağı yönelimi yarıiletken karakterde olan Ti_2RuSn Ters-Heusler alaşımının yarı metalik (YM) karakterde olduğu söylenebilir.

Elektronik yapının daha iyi anlaşılması amacı ile Ti_2RuSn Ters-Heusler alaşımı için kısmi durum yoğunluğu ve toplam durumların yoğunluğu eğrileri elde edildi. Şekil 3'de verilen durum yoğunluğu eğrileri incelendiğinde Fermi enerji düzeyi yakınlarında spin yukarı yöneliminde iletkenliğe en fazla katkı sırasıyla a-Ti atomunun 3d orbitali (a-Ti 3d) ve Ru atomunun 4d orbitalinden (Ru 4d) sağlanmaktadır.

Fermi enerji seviyesinin aşağısındaki 0 ile -1 eV aralığındaki kısımda ise a-Ti 3d orbitalindeki elektronlarının katkısı daha baskınken -1 ile -3 eV aralığında ise Ru 4d orbital elektronlarının katkısı daha baskın halde keskin tepeler oluşturur. -3 ile -4 eV aralığındaki keskin tepelerde ise Ru 4d orbitalindeki elektronlar ile Sn 5p orbitalindeki elektronların hibritleşmesinden kaynaklandığı düşünülmektedir.



Şekil 2. Ti_2RuSn Ters-Heusler yapısına sahip alaşımının yüksek simetri yönleri doğrultusunda ki elektronik bant eğrileri



Şekil 3. Ti_2RuSn Ters-Heusler alaşımının spin yönelimlerine bakılarak hazırlanan kısmi durum yoğunluğu ve toplam durum yoğunluğu eğrileri

Spin yönelimlerine bakılarak incelenen elektronik özellikler kapsamında elektronik bant eğrileri ve durum yoğunlukları hesaplanan Ti_2RuSn Ters Heusler alaşımının spin yönelimlerinin simetrik olmadığı görülmektedir (Bkz. Şekil 2; Şekil 3). Spin yönelimlerinin simetrik olmaması bu alaşımın bir manyetik momente sahip olduğu anlamına gelmektedir. Spin aşağı ve spin yukarı durumlarının farkından bu alaşımın toplam manyetik moment $2\mu_B$ olarak elde edildi. Ayrıca, Slater Pauling ilkesine göre ise Ti_2RuSn Ters-Heusler alaşımı için toplam manyetik moment $M_T = Z_T - 18$ formülü göz önüne alınarak $2\mu_B$ olarak hesaplanmıştır (Galanakis I ve ark. 2006; Wei X.P. ve ark. 2012). Elektronik özelliklerden ve Slater Pauling ilkesinden elde edilen sonuçların birbirleriyle oldukça uyumlu olduğu görülmektedir.

Bir malzemenin sertliği, mekanik kararlılığı gibi özellikleri o malzemenin esnekliğine bağlıdır. Esneklik ise malzeme üzerine uygulanan zorlamaya karşı uyguladığı tepkinin bir ölçüsü olan elastik sabitleriyle ilgilidir. Kübik bir kristalin mekanik kararlılığını incelerken elastik sabitlerinin Born kararlılık kriterlerini sağlaması gerektiğini unutmamak gerekir. Kübik yapılar için Born kararlılık kriterleri;

$$C_{44} > 0; C_{11} - C_{12} > 0; C_{11} + 2C_{12} > 0 \quad (7)$$

olarak belirtilmiştir (Born M., Huang K., 1954; Arıkan N. ve ark., 2014). Burada C_{11} , C_{12} ve C_{44} malzemeye ait elastik sabitleridir. Bu kriterler kübik kristal yapının elastik sabitleri için geçmişte oldukça iyi sonuçlar vermiştir. Ti₂RuSn ters Heusler elastik özellikleri ise birbirinden bağımsız olan C_{11} , C_{12} ve C_{44} elastik sabitleri ile tam olarak anlaşılabilir. Çizelge 1’de Ti₂RuSn alaışımı için hesaplanan elastik sabitlerinin değerleri verilmiştir. Ti₂RuSn ters Heusler alaışımının hesaplanan elastik sabitleri Eş. 1’de verilen Born kararlılık kriterlerini karşıladığından F-43m uzay grubunda bulunan bu alaışımın mekanik olarak kararlı olduğu söylenebilir.

Çizelge 1. Ti₂RuSn ters Heusler alaışımının elastik sabitleri (C_{11} , C_{12} ve C_{44} ; GPa)

Malzeme	C_{11}	C_{12}	C_{44}
Ti ₂ RuSn	215.52	157.52	83.62

Ayrıca Çizelge 2’de Ti₂RuSn ters Heusler alaışımı için hesaplanan elastik sabitlerinden alaşıma ait; Young modülü, Bulk modülü, Kayma modülü, poisson oranı, B/G ve anizotropi faktörü gibi nicelikler Voight-Reuss yaklaşımına göre hesaplanarak verilmiştir. Ayrıca bu yaklaşıma göre Bulk Modülü B , Kayma modülü G , Young modülü E , poisson oranı σ ve Anizotropi faktörü A aşağıda verilen eşitliklere göre hesaplanmıştır (Al S. ve ark.,2018).

$$B = \frac{C_{11} + 2C_{12}}{3} \quad (8)$$

$$G = \frac{5(C_{11} - 2C_{12}) \cdot C_{44}}{3(C_{11} - 2C_{12}) + C_{44}} \quad (9)$$

$$E = \frac{9 \cdot B \cdot G}{3B + G} \quad (10)$$

$$\sigma = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{E}{3B} \right) \quad (11)$$

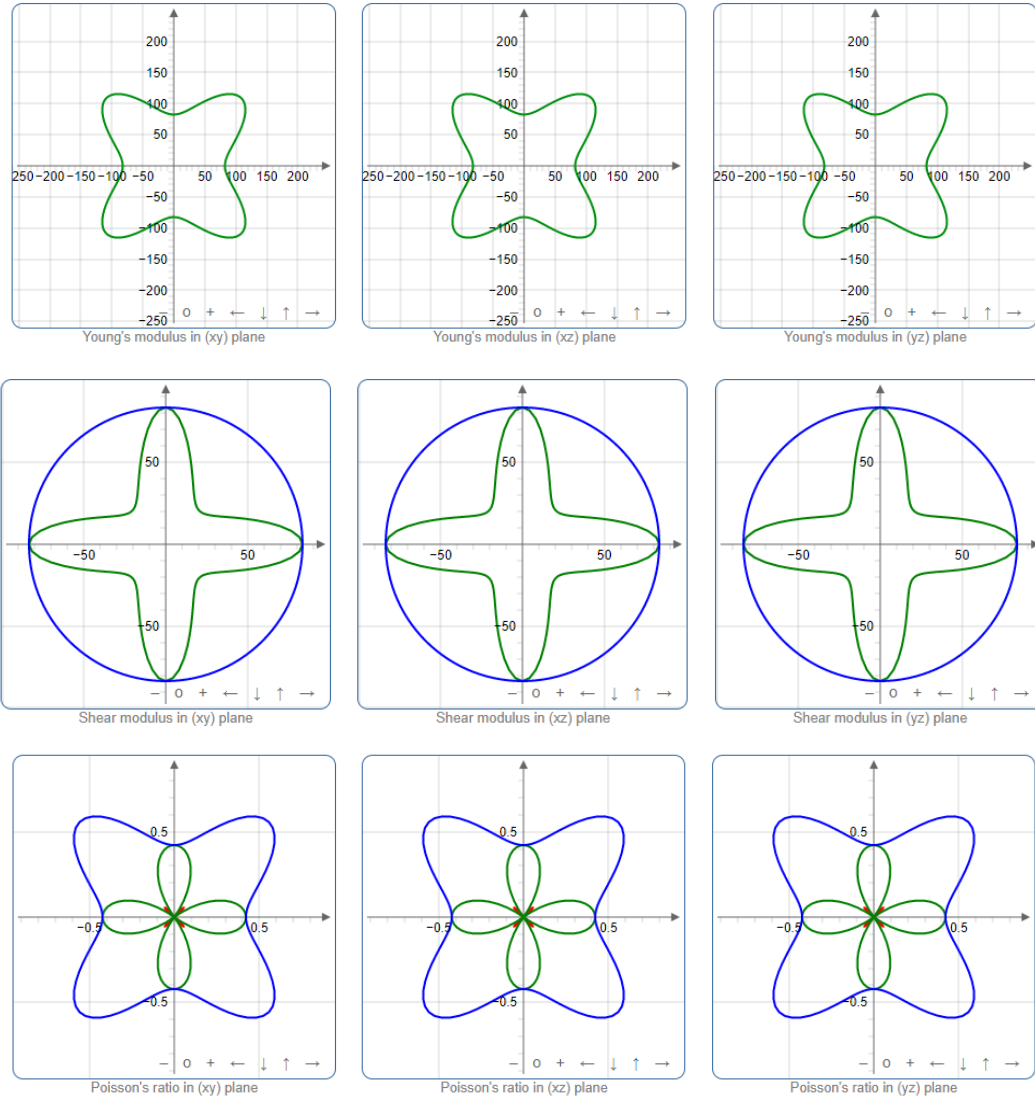
$$A = \frac{2 \cdot C_{44}}{(C_{11} - C_{12})} \quad (12)$$

Çizelge 2. Ti₂RuSn ters Heusler alaışımının Bulk Modülü (B ; GPa), Kayma modülü (G ; GPa), Young modülü (E ; GPa), B/G oranı, poisson oranı (σ) ve Anizotropi faktörü

Malzeme	B_V	B_R	B	G_V	G_R	G	E_V	E_R	E	B/G	σ	A
Ti ₂ RuSn	176.85	176.85	176.85	61.8	47.69	5473	165.99	131.27	148.63	3.23	0.36	2.88

Elde edilen bu değerler incelendiğinde, Ti₂RuSn ters Heusler alaışımının Bulk modülü değeri tahmin edildiği üzere C_{11} ve C_{12} sabitleri arasındaki bir değerde hesaplandı. Buna ek olarak, bu alaışımın Bulk modülü ve Young modülü değerlerinden az sıkışabilir olduğu anlaşılmaktadır. Ancak makaslama kuvvetler arası sıkışabilirliğin bir ölçüsü olan Kayma modülü değerinden ise bu alaışımın karşılıklı köşelerden sıkışabilirliğinin biraz daha yüksek olduğu söylenebilir. Pugh’un kriterine göre B/G oranı göz önüne alındığında 1.75 sınırından büyük değerler için malzemelerin sünek bir doğaya, 1.75 sınırından küçük değerler için ise kırılğan bir doğaya sahip olduğu söylenir (Pugh 1954). Bu alaışımının B/G oranı 3.23 olarak elde edildi ve 1.75 sınırından büyük bir değerdedir. Bundan dolayı, Ti₂RuSn ters Heusler alaışımının sünek bir doğaya sahip olduğu söylenebilir. Yine poisson oranından bu alaışımın

sünek bir doğaya sahip olduğu sonucu çıkmaktadır. Ayrıca, poisson oranı atomik bağlanmalar ile ilgili bilgiler içermektedir. Bu değer kovalent karakterdeki malzemeler için 0.1 civarındayken iyonik karakterli malzemeler ele alındığında ise 0.25 civarında hesaplanılmıştır. (Bannikov ve ark., 2007; Örnek ve ark., 2017). Bu alaşım için elde edilen poisson oranı (0.36) 0.25 değerine yakın olduğundan Ti_2RuSn ters Heusler alaşımında iyonik karakterin baskın olduğu anlaşılmaktadır. Cauchy basıncı olarak adlandırılan $C_{11} - C_{12}$ değerinin pozitif olması bu alaşımın atomları arasındaki bağlanmalarda iyonik karakterin baskın olduğunu doğrulamaktadır.

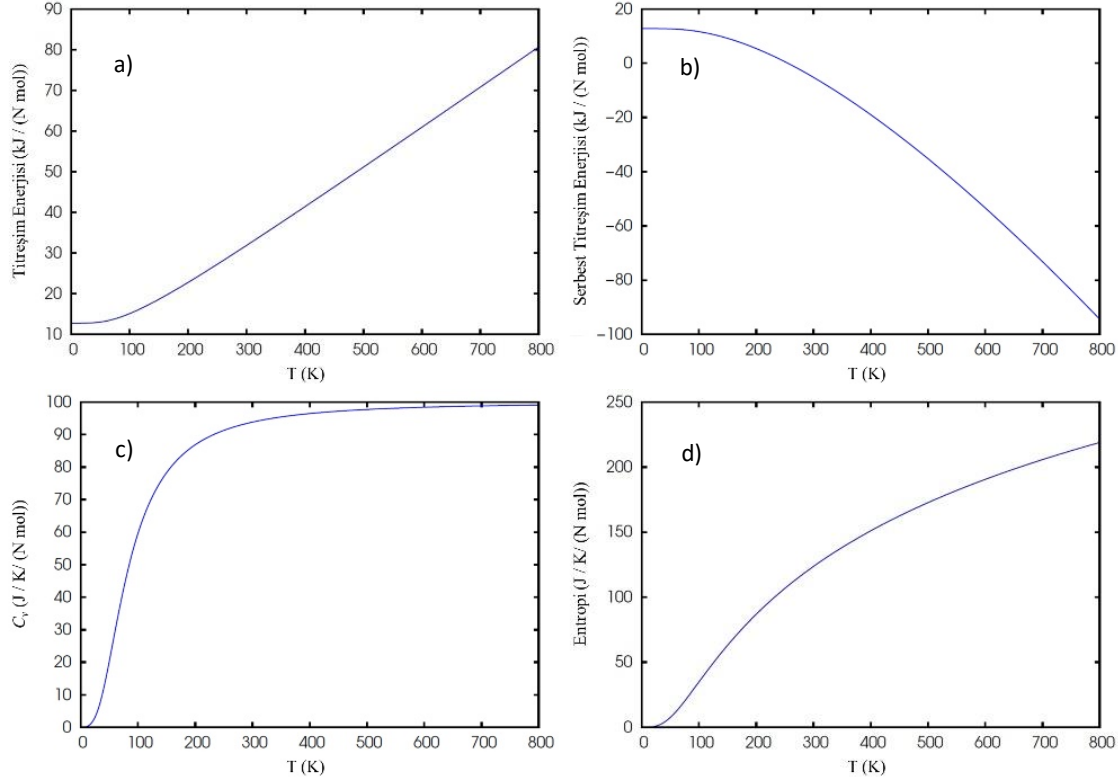


Şekil 4. Ti_2RuSn alaşımının sırasıyla Young modülü, Kayma modülü ve son olarak poisson oranının iki boyutlu yönlere göre çizilmiş hali

Malzemelerin elastik anizotropi derecesini tahmin etmek için kullanılmakta olan anizotropi faktörü bu alaşım için 2.88 olarak elde edildi. Tamamen izotropik olan malzemeler için anizotropi faktörünün değeri 1'dir. Buna göre Ti_2RuSn alaşımının elastik anizotropik olduğu anlaşılmaktadır. Bu alaşımın anizotropik olması nedeniyle, yön bağımlılığına göre değişimi Young modülünün, Kayma modülü ve Poisson oranı iki boyutlu olarak bu alaşım için hesaplandı. Bu parametrelerin maksimum ve minimum değerleri Çizelge 3'te verildi. Hesaplamaları gerçekleştirmek için ELATE kodu (Gaillac, 2016) benimsendi.

XA yapıdaki Ti_2RuSn ters-Heusler alaşımının yapısal, elektronik, elastik ve termodinamik özelliklerinin teorik olarak incelenmesi**Çizelge 3.** Ti_2RuSn ters Heusler alaşımının Young modülü (E ; GPa), Kayma modülü (G ; GPa) ve poisson oranı (σ) maksimum ve minimum değerleri

E		G		σ	
E_{min}	E_{max}	G_{min}	G_{max}	σ_{min}	σ_{max}
82,49	216,71	29,00	83,62	-0,08	0,79

**Şekil 5.** Ti_2RuSn ters Heusler alaşımı için; a) Titreşim enerjisini, b) Serbest titreşim enerjisinin, c) Isı sığasının ve d) Entropinin sıcaklığa bağlı değişimleri

Debye modeli esas alınarak Ti_2RuSn ters Heusler alaşımına ait elde edilmiş olan termodinamik özellikler Şekil 5'te görülmektedir. Bu alaşıma ait termodinamik özellikler incelendiğinde beklenildiği üzere titreşim enerjisinin sıcaklık arttıkça arttığı görülmektedir (Bkz. Şekil 5-a). Enerjinin korunumu gereği Ti_2RuSn ters Heusler alaşımını oluşturan atomlar arasındaki titreşim enerjisi artarken serbest titreşim enerjisi ise azaldığı Şekil 5-b'de açıkça görülmektedir. Şekil 5-c'de görüldüğü üzere ısı sığasının sıcaklıkla değişimi incelendiğinde birim hücresinde 4 atom bulunduran bu alaşımının ısı sığası yüksek sıcaklıklara gidildikçe Dulong-Petit limiti (Petit 1819) olarak bilinen 3NR değerine doğru gittiği anlaşılmaktadır. Ayrıca düşük sıcaklık değerlerinde ısı sığası hızla artarken yüksek sıcaklık değerlerine doğru artış hızı azalmakta ve giderek düzleşmektedir. Bütün dalga boylarının uyarıldığı sıcaklık olarak bilinen ve ısı sığasının düzleşmeye başladığı noktadaki sıcaklığı olan Debye sıcaklığı bu alaşım için 304,805 K olarak hesaplanmıştır. Son olarak, düzensizliğin bir derecesi olan entropinin sıcaklığa bağlı değişimi ele alınacak olursa bu alaşım için sıcaklık arttıkça entropinin yani düzensizliğin arttığı Şekil 5-d'de görülmektedir.

SONUÇ

Ti_2RuSn alaşımının yapısal, elastik, elektronik ve termodinamik özellikleri, DFT yaklaşımı göz önüne alınarak incelenmiştir. İncelenen alaşımın elastik ve termodinamik özelliklerine yapılan literatür taraması sırasında rastlanmamış ve ilk kez bu çalışma ile rapor edilmiştir. Hesaplanan örgü sabiti (6.44 Å) %0,08 lik bir farkla, toplam manyetik momenti ($2\mu_B$) ve elektronik bantları teorik veriyle oldukça

iyi bir uyum içindedir. Elektronik özellikleri hesaplanan bu alaşımın spin-aşağı yöneliminde 0.405 eV'luk bir yasaklı enerji bölgesine sahip olan yarı metalik bir manyetik olduğu bulunmuştur. Elastik sabitleri için hesaplanılan $C_{11} = 215.52$, $C_{12} = 157.52$ ve $C_{44} = 83.62$ değerleri göz önünde tutulduğunda bu alaşımın F-43m uzay grubundaki XA yapısında mekanik olarak kararlı olduğu rapor edildi. Ayrıca, bu alaşımın B/G oranının 3.23 olarak hesaplanmış olması yüzünden sünek bir doğaya sahip olduğu ve iyonik karakterli olduğu söylenebilir. Bununla birlikte, Ti_2RuSn alaşımının anizotropi sabitinin 2.88 olarak hesaplanması bu malzemenin elastik anizotropik olduğunu gösterir.. Young modülü, Kayma modülü ve poisson oranının yön bağımlılığı dikkate alınarak sırasıyla $E = 148.63$, $G = 5473$, $\sigma = 0.36$ olarak hesaplandı ve sonuçları rapor edildi. Bu çalışmada elde edilen sonuçlar uygulama ve bilimsel bakış açısından oldukça ilginçtir ve sonuçların bu alanda gelecekteki çalışmalar için referans veriler sağlayabileceğini umuyorum. Ayrıca bu çalışmada incelenen Ti_2RuSn alaşımını spin elektroniği uygulamaları için umut vaadeden bir adaydır.

KAYNAKLAR

- Urtekin L., 2015. Experimental investigation of process parameters for WEDM of Ti-6Al-4V/TiN composites. *Science and Engineering of Composite Materials*, 22 (6), 685-692.
- Hartlet F.R., 1991. *Chemistry of the Platinum Group Metals. Recent Developments 1st Edition - August 30.*
- Panizza M., Martinez-Huitle C.A., 2013. Role of electrode materials for the anodic oxidation of a real landfill leachate – Comparison between Ti–Ru–Sn ternary oxide, PbO_2 and boron-doped diamond anode. *Chemosphere Volume 90, Issue 4, Pages 1455-1460*
- Gao Y., Guo C., Li C., Cui S., Du Z., 2009. Thermodynamic modeling of the Ru–Ti system, *Journal of Alloys and Compounds* 479, 148-151.
- Jahnatek M., Levy O., Hart G.L.W., Nelson L.J., Chepulskaa R.V., Xue J., Curtarolo S., 2011. Ordered phases in ruthenium binary alloys from high-throughput first-principles calculations, *Physical Review B*, 84, 214110-214118.
- Jain E., Pagare G., Chouhan S.S., Sanyal S.P., 2014. Electronic structure, phase stability and elastic properties of ruthenium based four intermetallic compounds: Ab-initio study, volume 54.
- Örnek O., 2017. B2 fazda intermetalik RuTi alaşımının elektronik, elastik ve fonon özelliklerinin incelenmesi. *Dicle Üniversitesi Mühendislik Fakültesi Mühendislik Dergisi* cilt:8, sayı:4, 845-851
- Örnek O., İyigör A., Meriç A.S., *et al.* 2021. First-Principle Investigations of $(Ti_{1-x}V_x)_2FeGa$ Alloys. A Study on Structural, Magnetic, Electronic, and Elastic Properties. *Russ. J. Phys. Chem.* 95, 2592–2599
- Taşkın F., Atiş M., Canko O., Kervan S., Kervan N., 2017. Half-metallicity in the inverse Heusler Ti_2RuSn alloy: A first-principles prediction, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* 426, 473–478
- Hohenberg P., Kohn W., 1964. Inhomogeneous Electron Gas, *Phys. Rev.*, 136 (3B), pp. B864-B871
- Kohn W., Sham L.J., 1965. Self-consistent equations including exchange and correlation effects, *Phys. Rev.*, 140 (4A), pp. A1133-A1138
- Giannozzi P. et al., 2009. Quantum Espresso: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials *J. Phys.: Condens. Matter*, 21 (39), p. 395502
- Giannozzi P., De Gironcoli S., Pavone P., Baroni S., 1991. Ab initio calculation of phonon dispersions in semiconductors. *Phys. Rev. B* 43 7231, 1991.

- Perdew J.P., Burke K., Ernzerhof M., 1996. Generalized Gradient Approximation Made Simple, Phys. Rev. Lett., 77 (18), pp. 3865-3868
- Srivastava G.P., 1990. The physics of phonons. Adam Hilger: Bristol,
- Garrity K.F., *et al.* 2014. Pseudopotentials for high-throughput DFT calculations, Comput. Mater. Sci., 81, pp. 446-452
- Methfessel M., Paxton A., 1989, High-precision sampling for Brillouin-zone integration in metals, Phys. Rev. B, 40 (6), p. 3616
- Corso A.D., 2016. Elastic constants of beryllium: a first-principles investigation, J. Phys: Condens. Matter 28, 075401
- Wei X.P., Deng J.B., Mao G.Y., Chu S.B., Hu X.R., 2012. Half-metallic properties for the Ti_2YZ ($Y = Fe, Co, Ni, Z = Al, Ga, In$) Heusler alloys: A first-principles study, Intermetallics Volume 29, Pages 86-91
- Born M., Huang K., 1954. Dynamical Theory of Crystal Lattices, Clarendon, Oxford.
- Arikan N., İyigör A., Candan A., Uğur Ş., Charifi Z., Baaziz H., Uğur G., 2014. Electronic and phonon properties of the full-Heusler alloys X_2YAl ($X = Co, Fe$ and $Y = Cr, Sc$): a density functional theory study J. Mater. Sci. 49 4180–90
- Al S., Arikan N., Demir S. and İyigör A., 2018. "LatticeDynamic Properties of Rh_2XAl ($X= Fe$ and Y) Alloys", Physica B: Condensed Matter, 531, pp. 16-20,
- 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
- Bannikov V.V., Shein I.R., Ivanovskii A.L., 2007. Electronic structure, chemical bonding and elastic properties of the first thorium-containing nitride perovskite $TaThN_3$. Physica status solidi (RRL) – Rapid Res. Lett., 1 (3), pp. 89-91
- Örnek O, İyigör A, Arikan N., 2017. L12 yapıdaki Co_3Al ve Co_3Ta alaşımlarının mekanik ve dinamik özellikleri. Gazi Üniversitesi Mühendislik Mimarlık Fakültesi Dergisi, 32 (2), DOI: 10.17341/gazimmfd.322160
- Gaillac R., Pullumbi P., Coudert FX., 2016. ELATE: an open-source online application for analysis and visualization of elastic tensors. J. Phys.:Condens. Matter 28, 275201, <http://progs.coudert.name/elate>.
- Petit PLDAT, 1819. Recherches sur quelques points importants de la Théorie de la Chaleur, Annales de Chimie et de Physique 10395–413.