
	SAKARYA ÜNİVERSİTESİ FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ DERGİSİ <i>SAKARYA UNIVERSITY JOURNAL OF SCIENCE</i>		
	e-ISSN: 2147-835X Dergi sayfası: http://dergipark.gov.tr/saufenbilder		
	<u>Geliş/Received</u> 29-06-2017 <u>Kabul/Accepted</u> 12-10-2017	<u>Doi</u> 10.16984/saufenbilder.324124 <u>Online Access</u>	

Ru₂FeGa Heusler alaşımının yapısal, elektronik, elastik ve fonon özelliklerinin ilk prensip çalışması

Abdullah Candan*¹

ÖZ

Heusler tipi alaşımlar ferromanyetik ve ilginç manyetik özellikler göstermelerinden dolayı spin-elektronik ve magneto-elektronik uygulamalar için ideal malzeme grubudur. L₂₁ kristal yapısındaki Ru₂FeGa Heusler alaşımının yapısal, elektronik, elastik ve fonon özellikleri, yoğunluk fonksiyonel teorisi (DFT) içerisinde genelleştirilmiş eğim yaklaşımı (GGA) metodu kullanılarak analiz edildi. Ru₂FeGa alaşımının hesaplanan örgü sabiti ve manyetik momenti, teorik sonuç ile iyi bir şekilde uyumludur. Bant yapısının analizi, Ru₂FeGa'nın metalik olduğunu ortaya koymaktadır. Ayrıca, bu alaşım için Bulk modülü (*B*), Shear modülü (*G*), *B/G* oranı, Young modülü (*E*) ve tek kristal elastik sabitler (*C_{ij}*) hesaplandı. Fonon dağılım eğrileri, yoğunluk fonksiyonel pertürbasyon teorisinin ilk prensip doğrusal tepki yaklaşımı kullanılarak elde edildi.

Anahtar Kelimeler: Tam Heusler alaşımlar, DFT, elastik sabitler, fonon eğrileri

First-Principle study of structural, electronic, elastic and phonon properties of Ru₂FeGa Heusler alloy

ABSTRACT

Heusler type alloys are ferromagnetic and are the ideal material for spin-electronic and magneto-electronic applications due to their interesting magnetic properties. The structural, electronic, elastic and phonon properties of the Ru₂FeGa Heusler alloy in L₂₁ crystal structure have been analyzed handling density functional theory (DFT) in the Generalized Gradient Approximation (GGA) method. The calculated lattice constant and magnetic moment of Ru₂FeGa alloy is in good agreement with theoretical result. The analysis of the band structure reveal that Ru₂FeGa is metallic. Furthermore we also calculated the Bulk modulu (*B*), Shear modulu (*G*), *B/G* ratio, Young modulu (*E*) and unique-crystal elastic constants (*C_{ij}*) for this alloy. Phonon-dispersion curve has been obtained using the first principle linear-response touch of the density-functional perturbation theory.

Keywords: Full Heusler alloys, Density functional theory, elastic constants, phonon curves

*Sorumlu Yazar / Corresponding Author

Ahi Evran Üniversitesi Teknik Bilimler Meslek Yüksekokulu Kırşehir, acandan@ahievran.edu.tr

1. GİRİŞ (INTRODUCTION)

Heusler tipi alaşımlar 1903 yılında Friedrich Heusler tarafından CuMn alaşımına 3. grup elementinin eklenmesi ile bulunmuştur [1]. Kristal yapısı L₂₁ tipi kübik yapıda ve uzay grubu Fm-3m (No:225) olan Heusler tipi alaşımların formülü A₂BC (A: Ru, Cu, Ni, Pd...; B: Cr, Mn, Fe, Ti...; C: Al, Ge, Si, Ga, Sn...) biçimindedir [2-4]. Heusler tipi alaşımların birim hücresi, (0, 0, 0) ve (0.5, 0.5, 0.5) koordinatlarında A atomu, (0.25, 0.25, 0.25) koordinatlarında B atomu ve (0.75, 0.75, 0.75) koordinatlarında C atomu ile iç içe geçmiş yüzey merkezli kristal yapının 4 tane alt örgüsünü içerir [5, 6]. 200 K ile 1100 K arasında değişen Curie sıcaklıklarda Heusler alaşımların çoğu ferromanyetik ve uygulanan zayıf manyetik alanda bile doyuma ulaşırlar [7-10]. Bu alaşımların elektronik bant yapıları üzerine yapılan hesaplamalar yarımetalik ferromanyetik olduklarını göstermiştir [11-13]. Bu özelliklerinden dolayı bu türdeki alaşımlar, çok sayıda elektronik aygıt yapımında kullanılabilir ideal malzeme grubudur. Alaşımı oluşturan atomların bir araya gelerek alaşımı oluşturduklarında ferromanyetik özelliklerinin değiştirilebilmesi bu alaşımları farklı kılmaktadır. Heusler tipi alaşımlar, manyetik şekil hafıza etkisine sahip olmasından dolayı yeterli ısı işlem ile eski boyutunu ve şeklini geri kazanabilme kabiliyetine sahip olabilir [14, 15]. Bu önemli özellik sayesinde Heusler tipi alaşımlar teknolojide birçok farklı alanda kullanılmaktadır. Bu tür alaşımlar spin-elektronik ve magneto-elektronik cihazlarda kullanılmasından dolayı son yıllarda yoğun çalışılan malzeme grubu arasındadır [16, 17]. Bugüne kadar Heusler tipi alaşımlar çok sayıda araştırmanın konusu olmuştur [4-19]. Fakat Ru₂FeGa alaşımının fiziksel özellikleri üzerine kapsamlı bir çalışma bu zamana kadar yapılmamıştır. Bu malzemenin elastik ve dinamik özellikleri diğerlerine oranla neredeyse hiç çalışılmamıştır. Faleev ve arkadaşları yaptıkları çalışmada yarı metaliklik için en umut verici adaylardan olan Ru₂FeGa alaşımının da içinde bulunduğu çok sayıda kübik tam Heusler alaşımının, kimyasal düzen ve manyetik özelliklerini incelemişlerdir [20]. Onlar yaptıkları bu çalışmada tam Heusler alaşımları için bir orbital çiftlenme modeli geliştirdiler. Yakın zamanda yapılan bir çalışmada ise tetragonal fazdaki Ru₂FeGa alaşımının örgü sabiti ve manyetik momenti, Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi (DFT)

kullanılarak hesaplanmıştır [21]. Bir diğer teorik çalışma olarak M. Gilleßen doktora tezinde, DFT kullanarak Ru₂FeGa Heusler alaşımının hem örgü sabitini hem de manyetik momentini inceledi [22]. Bu çalışmada Ru₂FeGa alaşımının temel özellikleri, Quantum-Espresso kodları kullanılarak gerçekleştirildi [23].

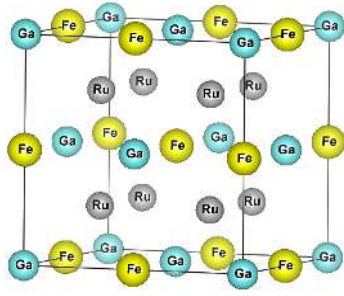
2. YÖNTEM (METHOD)

Ru₂FeGa alaşımı için yapılan hesaplamalarda, pseudo-potansiyeller Perdew-Burke-Ernzerhof [24] vasıtasıyla bilinen form içerisinde Genelleştirilmiş Eğim Yaklaşımı (GGA) hesaba katılarak kullanılmıştır [25, 26]. Bütün yapılan hesaplamalar, Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi (DFT) üzerine kurulu Quantum-Espresso kodları ile yapıldı [23]. İlk başta yapısal parametreler çerçevesinde örgü sabitleri ile beraber Bulk modülü ve daha sonrada Bulk modülünün basınca göre birinci türevi hesaplandı. Bu değerler kullanılarak elektronik, elastik ve titreşim özellikleri araştırıldı. Fonon frekanslarını belirlemek için lineer tepki metodu kullanıldı [27]. Bununla beraber fonon hesaplamalarında 8 dinamik matris ve *k*-noktaları 4x4x4 alınarak kullanıldı. Ru₂FeGa alaşımının denge durumundaki örgü sabitini elde etmek için, değişik örgü sabiti değerlerine karşılık gelen toplam enerjiler 40 Ryd' lik kesme enerjisi ve $\sigma=0.02$ Ry smearing parametre değeri alınarak hesaplandı [28].

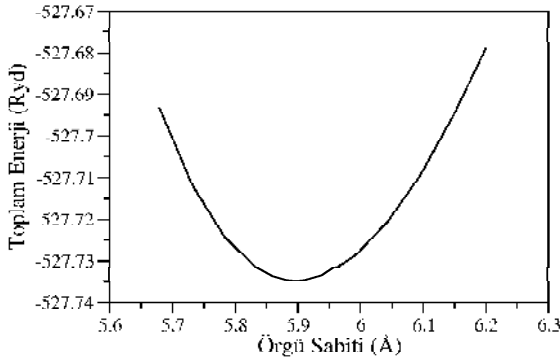
3. SONUÇLAR (CONCLUSIONS)

L₂₁ tipi kübik yapıda ve uzay grubu Fm-3m (No:225) olan A₂BC formundaki tam Heusler tipi alaşımların birim hücresi, A atomu için (0, 0, 0) ve (0.5, 0.5, 0.5), B atomu için (0.25, 0.25, 0.25) ve C atomu için (0.75, 0.75, 0.75) koordinatlarında bulunan 4 tane fcc alt örgüsünü kapsar. Ru₂FeGa Heusler alaşımının kristal yapısı Şekil 1'de verilmiştir. Kararlı durumdaki örgü sabitini bulmak için, farklı örgü sabiti değerlerine karşılık gelen toplam enerji değerleri hesaplandı. Ru₂FeGa alaşımının örgü sabiti Murnaghan denkleminde [29] yararlanılarak elde edildi.

L₂₁ yapısındaki Ru₂FeGa alaşımı için 40 Ryd kesme enerjisindeki örgü sabitlerine karşılık gelen toplam enerji değerleri Şekil 2'de gösterildi. Bu grafikten minimum enerjiye karşılık gelen örgü sabitinin sayısal değerini vermektedir.



Şekil 1. Ru₂FeGa Heusler alaşımının kristal yapısı (Crystal structure of Ru₂FeGa Heusler alloy)



Şekil 2. L₂₁ kristal yapısındaki Ru₂FeGa alaşımı için hesaplanan değişik örgü parametrelerine karşılık kristalin toplam enerjisi (The total energy of the crystal versus the different lattice parameters calculated for the Ru₂FeGa alloy in the L₂₁ crystal structure)

Ru₂FeGa alaşımı için hesaplanan örgü sabiti (a_0), toplam manyetik moment (μ_B), Murnaghan denkleminde elde edilen Bulk modülü (B) ve Bulk modülünün basınca göre türevi (B') Tablo 1'de verildi.

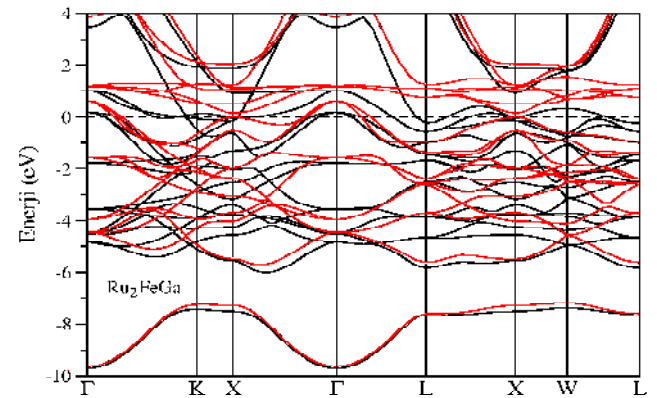
Tablo 1. Mevcut teorik veri ile karşılaştırılan, Ru₂FeGa alaşımı için hesaplanan örgü sabiti (a_0), toplam manyetik moment (μ_B), Bulk modülü (B) ve Bulk modülünün basınca göre türevi (B') (Calculated lattice constant (a_0), the total magnetic moment (μ_B), Bulk modulu (B) and its pressure derivative (B'), compared with the available theoretical data for the Ru₂FeGa alloy)

Malzeme	Referans	a_0 (Å)	M (μ_B)	B ₀ (GPa)	B' (GPa)
Ru ₂ FeGa	Bu çalışma	5.990	3.18	232.5	5.03
	Teorik [8]	5.996	3.14	-	-

Tablo 1'den görüldüğü üzere Ru₂FeGa alaşımının örgü sabiti değeri 5.990 Å olarak hesaplandı. Bununla birlikte toplam manyetik momentin değeri de 3.18 μ_B olarak bulundu. M. Gilleßen tarafından Yoğunluk Fonksiyonel Teorisini (DFT) kullanılarak yapılan çalışmada Ru₂FeGa alaşımının örgü sabiti 5.996 Å ve toplam manyetik moment değeri ise 3.14 μ_B olarak hesaplanmıştır [22]. Örgü sabiti ve toplam manyetik moment için hesaplanan değerler literatürde var olan teorik değerlerden sırasıyla % 0.1 ve % 1.2 hata ile sapma göstermektedir [22]. Bu sapma değerlerine göre

hem örgü sabiti (a_0) hem de toplam manyetik moment (μ_B) literatürde var olan teorik çalışma ile uyum içerisinde.

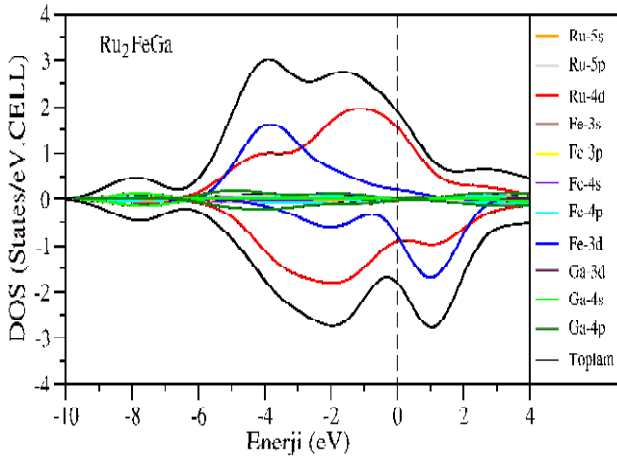
Bir kristalin bant yapısının bilinmesi, o malzemenin; mekanik ve manyetik özellikleri, optik özellikleri, elektronik özelliklerden kaynaklanan yapısal bozulmalar ve elektronik iletkenlik gibi birçok özelliğinin belirlenmesinde önemli rol oynar [3, 4]. Denge konumundaki örgü sabitleri kullanılarak L₂₁ kristal yapısındaki Ru₂FeGa alaşımının yüksek simetri yönleri boyunca elektronik bant yapısı Şekil 3'de gösterildi. Görüldüğü üzere Fermi seviyesinde herhangi bir yasak enerji aralığı yoktur. Bir diğer deyişle, valans ve iletim bantları Fermi seviyesinde büyük oranda çakışmaktadır. Bu yüzden Ru₂FeGa alaşımının metalik bir karakter gösterdiği sonucuna varılabilir. Bu özellik spin-kutuplu taşıma için çok aranan bir özelliktir. Spin-kutuplu sistemler, uygulanan 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 ve spin-spin enjeksiyon cihazlarının üretilmesinde de Heusler tipi alaşımlar kullanılmaktadır. Sonuç olarak Ru₂FeGa alaşımı spin-elektronik ve magneto-elektronik aygıtlar için kullanılmaya aday bir malzemedir [16-18].



Şekil 3. L₂₁ kristal yapısındaki Ru₂FeGa alaşımı için simetri yönleri boyunca hesaplanan elektronik bant yapısı (spin-yukarı siyah çizgiler, spin-aşağı; kırmızı çizgiler). Calculated electronic band structure for Ru₂FeGa alloy along several lines of symmetry in the L₂₁ crystal structure)

Ayrıca elektronik katkının daha iyi analiz edilebilmesi için, spin yönelimlerine göre toplam ve kısmi durum yoğunluğu eğrileri de Şekil 4 ile verildi. Ru₂FeGa alaşımı için Fermi enerji değeri, 15.5935 eV olarak hesaplandı ve Fermi enerjileri tüm simetri yönleri boyunca hesaplanan bant

enerjilerinden çıkarılarak sıfır olarak alındı. Kısmi durum yoğunluğu eğrilerinden spin aşağı durumunda yaklaşık -2 eV civarında, spin yukarı durumunda ise yaklaşık -2 eV ve -4 eV civarındaki keskin tepelerin Ru ve Fe atomlarının sırasıyla 4d ve 3d orbitallerindeki elektronların sağladığı açıkça görülmektedir. Spin aşağı durumunda Fermi enerjisinin üzerinde yaklaşık 1 eV civarındaki keskin tepeler de benzer şekilde Ru ve Fe atomlarının sırasıyla 4d ve 3d orbitallerindeki elektronlardan kaynaklanmaktadır.



Şekil 4. L₂₁ kristal yapısındaki Ru₂FeGa alaşımı için spin yönelimlerine göre hesaplanan toplam ve parçalı durum yoğunluğu eğrisi (Calculated total and partial density of states (DOS) according to spin orientations for Ru₂FeGa alloy in the L₂₁ crystal structure)

Katıların elastik özelliklerinin bilinmesi ile atomlar arasındaki potansiyel değerleri, fonon spektrumları gibi temel özellikler arasında bağlantı kurulabilir. Ayrıca spesifik ısı, Debye sıcaklığı, termal genleşme ve Grüneisen sabiti de elastik özellikler ile ilişkilidir. Bir kübik sistem için birbirinden bağımsız üç tane elastik sabiti (C_{11} , C_{12} , C_{44}) vardır. Kristalin birim hücresi denge durumunda iken küçük zorlamalar uygulanmış ve enerjideki değişimden yararlanılarak [30-32] Bulk modülü (B), C_{44} ve $C'=(C_{11}-C_{12})/2$ değerleri elde edildi. Elde edilen bu değerler kullanılarak ikinci mertebeden olan C_{11} ve C_{12} elastik sabitleri hesaplandı.

İncelenen alaşımın Bulk modülü (B), Shear modülü (G), B/G oranı ve Young modülü (E) değerleri Tablo 2’de verildi. Pugh’a [33] göre B/G oranı 1.75’ten büyükse malzeme sünek davranış gösterir iken, B/G oranı 1.75’ten küçükse malzeme kırılğan davranış gösterir. Tablo 2’de Ru₂FeGa alaşımı için hesaplanan B/G oranı (2.00) kritik değer olan 1.75’ten büyük olduğu için incelenen malzemenin sünek olduğu söylenebilir. Öte yandan Young modülü (E), sertliğin bir ölçüsüdür ve E değeri ne kadar büyükse, malzeme o kadar

serttir. Ru₂FeGa alaşımı için hesaplanan Young modülü değeri 301.14 GPa olarak bulundu. Ru₂FeGa Heusler alaşımı için hesaplanan ikinci dereceden elastik sabitler (C_{11} , C_{12} , C_{44}) ve Debye sıcaklığı (θ_D) ise Tablo 3 ile verildi. Kübik kristal yapıdaki malzemelerin elastik sabitleri için mekanik kararlılık şartlarını oluşturan Born kararlılık kriteri [34];

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

şeklinde dir. Tablo 3’de verilen elastik sabitler bu kararlılık koşullarını sağlamaktadır. Bundan dolayı Ru₂FeGa alaşımının mekanik olarak kararlı bir yapıda olduğu sonucuna varılır. Ru₂FeGa alaşımı için literatürde elastik özellikler ile ilgili herhangi bir çalışma olmadığından dolayı karşılaştırma yapılamamıştır. Fakat benzer bir çalışmada, L₂₁ kristal yapısındaki Ru₂MnGa Heusler alaşımının VASP kodları kullanılarak elde edilen Bulk modülü (B), Shear modülü (G), B/G oranı, Young modülü (E) ve elastik sabitler (C_{11} , C_{12} ve C_{44}) değerleri ile Ru₂FeGa alaşımı için hesaplanan değerler birbirine yakındır.

Tablo 2. Ru₂FeGa alaşımı için hesaplanan Bulk modülü (B), Shear modülü (G), B/G oranı ve Young modülü (E) (Calculated Bulk modulu (B), Shear modulu (G), B/G ratio and Young modulu (E) for Ru₂FeGa alloy)

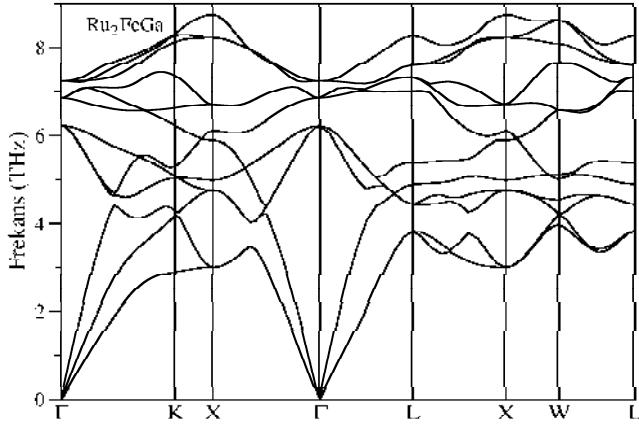
Malzeme	Referans	B (GPa)	G (GPa)	B/G	E (GPa)
Ru ₂ FeGa	Bu çalışma	234.37	117.10	2.00	301.14
Ru ₂ MnGa	[35]	227.10	124.83	1.82	316.51

Tablo 3. Ru₂FeGa alaşımı için hesaplanan elastik sabitler (C_{11} , C_{12} ve C_{44}) ve Debye sıcaklığı (θ_D) (Calculated elastic constants and Debye temperatures for Ru₂FeGa alloy)

Malzeme	Referans	C_{11} (GPa)	C_{12} (GPa)	C_{44} (GPa)	θ_D (K)
Ru ₂ FeGa	Bu çalışma	343.03	180.04	149.30	355.83
Ru ₂ MnGa	[35]	343.51	168.89	158.63	-

Ru₂FeGa Heusler alaşımının birim hücresinde dört tane atom mevcuttur. Her atomun üç tane serbestlik derecesi olduğundan herhangi bir dalga vektörü için on iki tane fonon dalı bulunur. Bu fonon dallarından üç tanesi akustik, dokuz tanesi ise optik moddur. Ru₂FeGa alaşımının hesaplanan fonon dispersiyon eğrileri yüksek simetri yönleri boyunca Şekil 5’de verildi. Ru₂FeGa alaşımı için, Γ noktasında hesaplanan titreşim frekansları; T_{1u} modu için 0, 6.841, 7.229 THz ve T_{2g} modu için ise 6.215 THz olarak bulundu. Γ noktasındaki T_{1u} modları infrared aktif, T_{2g} modu ise raman aktif moddur. Diğer taraftan bu alaşımın en yüksek

titreştiği frekans ise 8.76 THz'dir. Çalışılan malzemenin fonon frekanslarını ile ilgili literatürde mevcut teorik veya deneysel veri yoktur. Bundan dolayı, Ru₂FeGa alaşımının fonon özelliklerini aynı yapıdaki Ru₂MnGa [35], Ru₂TiGa [36] ve Ru₂ScGa [36] bileşiklerinin fonon özellikleri ile karşılaştırdığımızda büyük oranda benzerlik göstermektedir.



Şekil 5. Ru₂FeGa Heusler alaşımı için simetri yönleri boyunca hesaplanan fonon dispersiyon eğrisi (Calculated phonon dispersion curve for Ru₂FeGa Heusler alloy along several lines of symmetry)

4. TARTIŞMA VE DEĞERLENDİRME (DISCUSSION AND ASSESSMENT)

Bu çalışmada, L₂₁ tipi kübik yapıda ve uzay grubu Fm-3m (No: 225) olan Ru₂FeGa Heusler alaşımının yapısal, elektronik, elastik ve titreşimsel özellikleri hakkında teorik bir inceleme sunuldu. Örgü sabiti ve toplam manyetik moment için hesaplanan değerler literatürde var olan teorik değerden sırasıyla % 0.1 ve % 1.2 hata ile sapma göstermektedir. Bulk modülü için daha önce deneysel veya teorik bir çalışma yapılmadığından kıyaslama yapılamamıştır. Ru₂FeGa alaşımının toplam durum yoğunluğu eğrilerinde, Fermi düzeyinin sonlu bir enerjiye sahip olmasından dolayı metalik özellik gösterdiği açıkça görülmektedir. Ru₂FeGa Heusler alaşımı için hesaplanan B/G oranı (2.00) kritik değer olan 1.75'ten büyük olduğu için incelenen malzemenin sünek olduğu sonucuna varılabilir. Diğer taraftan Ru₂FeGa alaşımı için hesaplanan Young modülü (E) ve Debye sıcaklığı (θ_D) değerleri sırasıyla 301.14 GPa ve 355.83 K olarak bulundu. Elastik sabitlerinin analizi yapıldığında ise, bu alaşımın mekanik açıdan kararlı olduğu görüldü. Ayrıca fonon dispersiyon eğrilerinden L₂₁ kristal yapısında ve uzay grubu Fm-3m (No: 225) olan bu alaşımın dinamiksel olarak kararlı yapıda olduğu bulundu. Ru₂FeGa alaşımının elastik ve fonon

özellikleri ilk defa bu çalışmada sunulmuştur. Sonuç olarak yapılan hesaplamalardan Ru₂FeGa Heusler alaşımının ferromanyetik olduğu ve ilginç manyetik özellik gösterdiğinden dolayı spin-elektronik ve magneto-elektronik cihazlarda kullanılmaya aday bir malzeme olduğu söylenebilir.

KAYNAKÇA (REFERENCES)

- [1] F. Heusler, *Verhandlugen der Deutschen Physikalischen Gesellschaft*, sec. 5, pp. 219, 1903.
- [2] I. Galanakis, P. H. Dederichs, and N. Papanikolaou, "Slater-Pauling behavior and origin of the half-metallicity of the full-Heusler alloys," *Phys. Rev. B*, vol. 66, no. 17, pp. 174429, 2002.
- [3] I. Galanakis, P. Mavropoulos, and P. H. Dederichs, "Electronic structure and Slater-Pauling behaviour in half-metallic Heusler alloys calculated from first principles", *Journal of Physics D: Applied Physics*, vol. 39, no. 5, pp. 765, 2006.
- [4] I. Galanakis, P. Mavropoulos, and P. H. Dederichs, "Introduction to half-metallic Heusler alloys: electronic structure and magnetic properties", *arXiv preprint cond-mat/0510276*, 2005.
- [5] M. Gilleßen, R. Dronskowski, "A combinatorial study of inverse Heusler alloys by first-principles computational methods", *Journal of computational chemistry*, vol. 31, no. 3, pp. 612-619, 2010.
- [6] M. Gilleßen, R. Dronskowski, "A combinatorial study of full Heusler alloys by first-principles computational methods", *Journal of computational chemistry*, vol. 30, no.8, pp. 1290-1299, 2009.
- [7] E. Şaşıoğlu, L. M. Sandratskii, and P. Bruno, "First-principles calculation of the intersublattice exchange interactions and Curie temperatures of the full Heusler alloys Ni₂MnX (X= Ga, In, Sn, Sb)", *Physical Review B*, vol. 70, no. 2, pp. 024427, 2004.
- [8] J. Kübler, G. H. Fecher, and C. Felser, "Understanding the trend in the Curie

- temperatures of Co₂-based Heusler compounds: Ab initio calculations”, *Physical Review B*, vol. 76, no. 2, pp. 024414, 2007.
- [9] T. Kanomata, K. Shirakawa, and T. Kaneko, “Effect of hydrostatic pressure on the Curie temperature of the Heusler alloys Ni₂MnZ (Z= Al, Ga, In, Sn and Sb)”, *Journal of magnetism and magnetic materials*, vol. 65, no.1, pp. 76-82, 1987.
- [10] S. Wurmehl, G. H. Fecher, H. C. Kandpal, V. Ksenofontov, C. Felser, H. J. Lin, and J. Morais, “Geometric, electronic, and magnetic structure of Co₂FeSi: Curie temperature and magnetic moment measurements and calculations”, *Physical Review B*, vol. 72, no. 18, pp. 184434, 2005.
- [11] E. Şaşıođlu, L. M. Sandratskii, P. Bruno, and I. Galanakis, “Exchange interactions and temperature dependence of magnetization in half-metallic Heusler alloys”, *Physical review B*, vol. 72, no. 18, pp. 184415, 2005.
- [12] I. Galanakis, “Orbital magnetism in the half-metallic Heusler alloys”, *Physical Review B*, vol. 71, no. 1, pp. 012413, 2005.
- [13] V. Alijani, J. Winterlik, G. H. Fecher, S. S. Naghavi, and C. Felser, “Quaternary half-metallic Heusler ferromagnets for spintronics applications”, *Physical Review B*, vol. 83, no. 18, pp. 184428, 2011.
- [14] N. Arıkan, A. İyigör, A. Candan, Ş. Uđur, Z. Charifi, H. Baaziz, and G. Uđur, “Electronic and phonon properties of the full-Heusler alloys X₂YAl (X= Co, Fe and Y= Cr, Sc): a density functional theory study”, *Journal of Materials Science*, vol. 49, no. 12, pp. 4180-4190, 2014.
- [15] F. Dahmane, Y. Mogulkoc, B. Doumi, A. Tadjer, R. Khenata, S. B. Omran, D. P. Rai, G. Murtaza and D. Varshney, “Structural, electronic and magnetic properties of Fe₂-based full Heusler alloys: A first principle study”, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, vol. 407, pp. 167-174, 2016.
- [16] I. Źutić, J. Fabian, and S. D. Sarma, “Spintronics: Fundamentals and applications”, *Reviews of modern physics*, vol. 76, no. 2, pp. 323, 2004.
- [17] S. A. Wolf, and D. Treger, “Spintronics: A new paradigm for electronics for the new millennium”, *IEEE Transactions on Magnetism*, vol. 36, no. 5, pp. 2748-2751, 2000.
- [18] A. Candan, G. Uđur, Z. Charifi, H. Baaziz, and M. R. Ellialtıođlu, “Electronic structure and vibrational properties in cobalt-based full-Heusler compounds: A first principle study of Co₂MnX (X= Si, Ge, Al, Ga)”, *Journal of Alloys and Compounds*, vol. 560, pp. 215-222, 2013.
- [19] A. İyigör, and Ş. Uđur, “Elastic and phonon properties of quaternary Heusler alloys CoFeCrZ (Z= Al, Si, Ga and Ge) from density functional theory”, *Philosophical Magazine Letters*, vol. 94, no.11, pp. 708-715, 2014.
- [20] S. V. Faleev, Y. Ferrante, J. Jeong, M. G. Samant, B. Jones, and S. S. Parkin, “Unified explanation of chemical ordering, the Slater-Pauling rule, and half-metallicity in full Heusler compounds”, *Physical Review B*, vol. 95, no. 4, pp. 045140, 2017.
- [21] S. V. Faleev, Y. Ferrante, J. Jeong, M. G. Samant, B. Jones, and S. S. Parkin, “Origin of the Tetragonal Ground State of Heusler Compounds”, *Physical Review Applied*, vol. 7, no. 3, pp. 034022, 2017.
- [22] M. Gilleßen, and R. Dronskowski (Thesis advisor), Maßgeschneidertes und Analytik-Ersatz: über die quantenchemischen Untersuchungen einiger ternärer intermetallischer Verbindungen (No. RWTH-CONV-113777), *Fachgruppe Chemie*, 2010.
- [23] S. Baroni, S. De Gironcoli, A. Dal Corso, and P. Giannozzi, “Phonons and related crystal properties from density-functional perturbation theory”, *Reviews of Modern Physics*, vol. 73, no. 2, pp. 515, 2001.
- [24] J. P. Perdew, K. Burke and M. Ernzerhof, “Generalized Gradient Approximation Made Simple”, *Phys. Rev. Lett.*, vol. 77, no. 18, pp. 3865-3868, 1996.

- [25] J. P. Perdew, J. A. Chevary, S. H. Vosko, K. A. Jackson, M. R. Pederson, D. J. Singh, and C. Fiolhais, "Atoms, molecules, solids, and surfaces: Applications of the generalized gradient approximation for exchange and correlation", *Physical Review B*, vol. 46, no.11, pp. 6671, 1992.
- [26] Y. Zhang, and W. Yang, "Comment on: Generalized Gradient Approximation Made Simple", *Phys. Rev. Lett.*, vol. 80, no. 4, pp. 890, 1998.
- [27] S. Baroni, P. Giannozzi, and A. Testa, "Green's-function approach to linear response in solids", *Physical Review Letters*, vol. 58, no. 18, pp. 1861, 1987.
- [28] M. Methfessel and A. T. Paxton, "High-precision sampling for Brillouin-zone integration in metals", *Phys. Rev. B*, vol. 40, no. 6, pp. 3616- 3621, 1989.
- [29] F. D. Murnaghan, "The compressibility of media under extreme pressures", *Proceedings of the National Academy of Sciences*, vol. 30, no. 9, pp. 244-247, 1944.
- [30] S. Q. Wang, and H. Q. Ye, "First-principles study on elastic properties and phase stability of III-V compounds", *Physica status solidi (b)*, vol. 240, no. 1, pp. 45-54, 2003.
- [31] O. Örnek, N. Arıkan, A. İyigör, "L₁₂ yapıdaki Co₃Al ve Co₃Ta alaşımlarının mekanik ve dinamik özellikleri", *Journal of the Faculty of Engineering and Architecture of Gazi University*, vol. 32, pp. 377-384, 2017.
- [32] N. Arıkan, O. Örnek, Z. Charifi, H. Baaziz, Ş. Uğur, G. Uğur, "A first principle study of Os based compounds: Electronic structure and vibrational properties", *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, vol. 96, pp. 121-127, 2016.
- [33] S. F. Pugh, "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*, vol. 45, no. 367, pp. 823-843, 1954.
- [34] M. Born, K. Huang, *Dynamical Theory of Crystal Lattices*, Oxford: At the Clarendon press, 1954.
- [35] A. Candan, M. Özduran, S. Akbudak, O. Örnek, "First-principles electronic, magnetic, elastic and vibrational properties of Ru₂MnGa alloy", (Oral Presentation), *3rd International Conference on Engineering and Natural Sciences (ICENS 2017)*, 2017.
- [36] G. Uğur, A. Candan, Ş. Uğur, A. İyigör, M. Özduran, O. Örnek, "Structural, electronic, elastic, thermodynamic and phonon properties of Ru₂YGa (Y= Ti and Sc) alloys in the L₂₁ phase", (Poster Presentation), *2nd International Congress on the World of Technology and Advanced Materials (WITAM-2016)*, 2016.