



Fm-3m Uzay Grubundaki LiMn₂Ga Full Heusler Alaşımının Teorik Olarak İncelenmesi

Erol Albayrak*

* Kırşehir Ahi Evran Üniversitesi, Mühendislik Mimarlık Fakültesi, Metalürji ve Malzeme Mühendisliği Bölümü, Kırşehir, Türkiye, (ORCID: 0000-0001-9161-9068), erol_albayrak@hotmail.com

(İlk Geliş Tarihi 2 Temmuz 2023 ve Kabul Tarihi 11 Eylül 2023)

(DOI: 10.5281/zenodo.10256818)

ATIF/REFERENCE: Albayrak, E. (2023). Fm-3m Uzay Grubundaki LiMn₂Ga Full Heusler Alaşımının Teorik Olarak İncelenmesi. *Avrupa Bilim ve Teknoloji Dergisi*, (52), 87-94.

Öz

Full Heusler Yapıdaki LiMn₂Ga Alaşımının yapısal, manyetik, elektronik ve elastik özellikleri yoğunluk fonksiyonel teorisi ile geliştirilmiş grandyent yaklaşımı kullanılarak incelendi. Hesap edilen optimize edilmiş örgü sabiti 5.940 Å olarak elde edilmiş olup hesaplanan bu örgü sabiti gibi alaşıma ait elektronik bant yapısı ve toplam manyetik moment incelendiğinde de incelenen bu değerlerin daha önce yapılmış çalışmalarla uyumlu olduğu görüldü. Elektronik bant grafiklerinin hesaplamalarına göre yapılan incelemelerde ise tüm spin yönelimlerinde herhangi bir yasak enerji aralığının varlığı tespit edilmemiştir. Bu duruma göre Fm-3m uzay grubuna göre kristalleşen full Heusler yapıdaki LiMn₂Ga üçlü alaşımının metalik iletken ve manyetik özelliklere sahip olduğu tahmin edildi. Alaşıma ait elastik sabitlerine bakılarak (C₁₁, C₁₂, C₄₄) bu alaşım için Born mekanik kararlılık kriterlerinin sağlandığı ve alaşımın Born kararlılık kriterlerine göre mekanik olarak kararlı olduğu anlaşıldı. B/G oranına gbkılarak yapılan incelemelerde ise alaşımın kırılğan bir yapıya sahip olduğu, sıkışabilir olduğu ve anizotropik davranış gösterdiği anlaşıldı.

Anahtar Kelimeler: LiMn₂Ga, Fm-3m uzay grubu, Yapısal özellikler.

Theoretical Investigation of LiMn₂Ga Full Heusler Alloy in the Fm-3m Space Group

Abstract

The structural, magnetic, electronic and elastic properties of LiMn₂Ga alloy with full Heusler structure were investigated using density functional theory and generalized grandyent approximation. The calculated optimized lattice constant was obtained as 5.940 Å. The electronic band structure and total magnetic moment of the alloy, as well as the calculated lattice constant, were found to be in agreement with previous studies. According to the calculations of the electronic band graphs, no forbidden energy gap was detected in all spin orientations. Accordingly, the LiMn₂Ga ternary alloy with full Heusler structure crystallized according to the Fm-3m space group was predicted to have metallic conductive and magnetic properties. The elastic constants of the alloy (C₁₁, C₁₂, C₄₄) indicate that the Born mechanical stability criteria for this alloy are met, and the alloy is mechanically stable according to the Born stability criteria. Investigations based on the B/G ratio revealed that the alloy has a brittle structure, is compressible and shows anisotropic behavior.

Keywords: LiMn₂Ga, Fm-3m space group, Structural properties.

* Sorumlu Yazar: erol_albayrak@hotmail.com

1. Giriş

Friedrich Heusler 1903 yılında yaptığı çalışmada, ferromanyetik özelliği olmayan atomlara sahip yarı heusler (YH) ve Full Heusler (FH) alaşımların ferromanyetik özelliğe sahip olabileceklerini ortaya koymuştur. XY_2Z formülüne sahip intermetalik alaşımlar olan full Heusler alaşımlar spintronik cihazların ve manyetik sensörlerin geliştirilmesinde önemli rol oynamaktadırlar. İlk çalışılan Heusler alaşımları iç içe geçmiş dört yüzey merkezli kübik (FCC) örgü yapısına sahip ve $L2_1$ fazında kristalleşen alaşımlardır. Bu örgü yapısı içindeki iç içe geçmiş dört FCC hücreden bir tanesinin örgüden ayrılması ile yarı Heusler diye adlandırılan alaşımlar elde edilmişlerdir. Bu alaşımlar manyetik, termodinamik, süper iletkenlik gibi bazı özellikleri ile bilim camiasının önemli ölçüde ilgisini çekmişlerdir (İyigör ve ark., 2022). Tüm bu ilgi çekici özelliklere rağmen bu alaşımların sentezlenmesi her zaman mümkün değildir. Bu açıdan da teorik olarak çalışılıp sonrasında çıkan sonuçlara göre ümit vaat eden alaşımların sentezlenmesi en mantıklı seçenek olmaktadır.

$LiMn_2Ga$ FH alaşımı $Fm-3m$ uzay grubuna ait atomik dizilimine sahip olarak kristalleşmektedir. Alaşım içerisindeki Lityum, şarj edilebilir pil ve bataryalarda dolayısıyla da taşınabilir şarjlı matkaplar, cep telefonları, kameralar gibi elektronik cihazlarda kullanılmaktadır (Blumenthal, 2022). $LiMn_2Ga$ FH alaşımındaki galyum, yarı iletkenlerin elde edilmesinde, entegre devre üretiminde, LED ve lazer diyotlarda ve havacılık ve uzay sağlık ekipmanlarında kullanılır (Secrets, 2023). Alaşım içerisindeki mangan ise demir ve çelik üretiminde, bu metallerin kırılgenliğini azaltmak ve paslanmaz çelik yapımında kullanılır. Ayrıca mangan alüminyum ile alaşımlandırılarak birçok başka sektörde de kullanılır. Manganez bileşikler ise katalizör, gübrei dezenfektan ve pigment olarak da kullanılmaktadır (Mc Cormick ve Eugene, 2021). $LiMn_2Ga$ FH alaşımındaki Li, Mn ve Ga bileşenlerin kullanım alanları göz önüne alındığında alaşımın elastik, termodinamik, elektronik ve yapısal özelliklerinin teorik olarak araştırılmasının bilime katkı sağlayacağı düşünülmüş ve bu çalışmada $LiMn_2Ga$ FH alaşımı, Yoğunluk Fonksiyon Teorisi (DFT) kullanılarak yapısal, elektronik, elastik ve termodinamik açıdan incelenmiştir.

2. Materyal ve Metot

Çok elektronlu atomik sistemlerde yozlaşmamış (dejenere olmamış) taban durumlar için Hamilton denklemi eşitlik 1 de verilmiştir.

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

Hamilton denklemi kinetik (K) ve potansiyel (V) enerjilerin toplamını içerir. 1964'te yapılan bir çalışmanın sonucunda çok elektronlu atomik yapıların taban durum enerjilerinin elektron yoğunluğuna bağlılıkları eşitlik 2 de verilmiştir (Hohenberg ve Kohn, 1964).

$$E_g[n] = \int v(r) n(r) d(r) + F[n(r)] \quad (2)$$

Eşitlik 2 de ki yaklaşımla denge durumundaki en düşük enerji hesaplanılmaktadır. Denge durumundaki en düşük enerji ifadesi ise 1965 yılında Kohn ve arkadaşları tarafından;

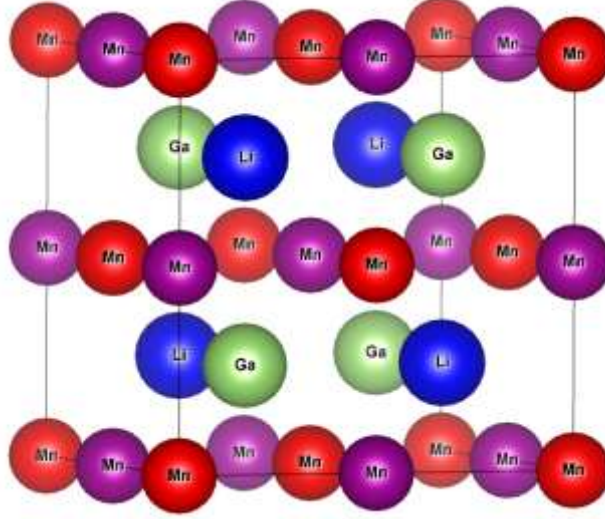
$$\rho(r) = \sum_{j=1}^N |\phi_j(r)|^2 \quad (3)$$

olarak ifade edilmiştir (Kohn ve Sahn, 1965). Minimum enerji hesaplanırken atomlar içerisindeki elektronların tamamının etkileştiği kabul edilir ama bu tam olarak doğru olmayabilir. Denge durumu minimum enerjisi yani en kararlı hale karşılık gelen minimum enerji değerinin hesaplanması için yeni bir yaklaşım gerekmektedir. Bahsi geçen bu sorunu çözmek için yerel yoğunluk yaklaşımı (LDA) kullanılır. Ayrıca LDA yaklaşımına eklemeler yapılarak daha başarılı sonuçlara ulaşılması hedeflenmiştir. Bu yaklaşıma Perdew-Burke-Ernzehof, genelleştirilmiş gradyent yaklaşımı (PBE-GGY) denilmektedir (Perdew ve ark., 1996). Çok elektronlu bir sistemde enerji hesaplanırken kor ve değerlik elektronların katkıları toplanır. Ancak bu yaklaşım kor elektronların değerlik elektronlarla etkileşimini içermemektedir. Bu durumda kor ve değerlik elektronlarının etkileşiminden gelen katkılarında toplam enerji ifadesine eklenmesi gerekir. Bu etkileşim Schrödinger dalga denkleminde yapay bir potansiyel olarak eklenir. Bu yapay potansiyeller pseudo potansiyeller olarak adlandırılır ve gerçek potansiyellere göre daha kısa sürede sıfır değerine ulaştığından tercih edilirler (Garrity ve ark., 2014).

Bu çalışmadaki tüm hesaplamalar Quantum-ESPRESSO paket programı (Giannozzi ve ark., 2009) kullanılarak yapıldı. Hesaplamalarda kullanılan değiş-tokuş korelasyon potansiyeli için PBE-GGY (Perdew ve ark., 1996) kullanıldı. Li, Mn ve Si atomlarına ait kullanılan pseudopotansiyeller Rappe grubdan alındı (Srivastava., 1990). Hesaplamalar için kullanılan elektronik dalga fonksiyonlarında kesme enerjisi olarak 40 Ry, yük yoğunluğunu temsilen kinetik enerji değeri 400 Ry olarak alındı. Brillouin-zone entegrasyonları $8 \times 8 \times 8$ k-noktaları mesh değerleri kullanılarak gerçekleştirildi. Hesaplamalarda Methfessel-Paxton smearing tekniği (Methfessel., Paxton, 1989) tercih edildi. Yapılan hesaplamalarda smearing parametresi 0.02 Ry alındı.

3. Araştırma Sonuçları ve Tartışma

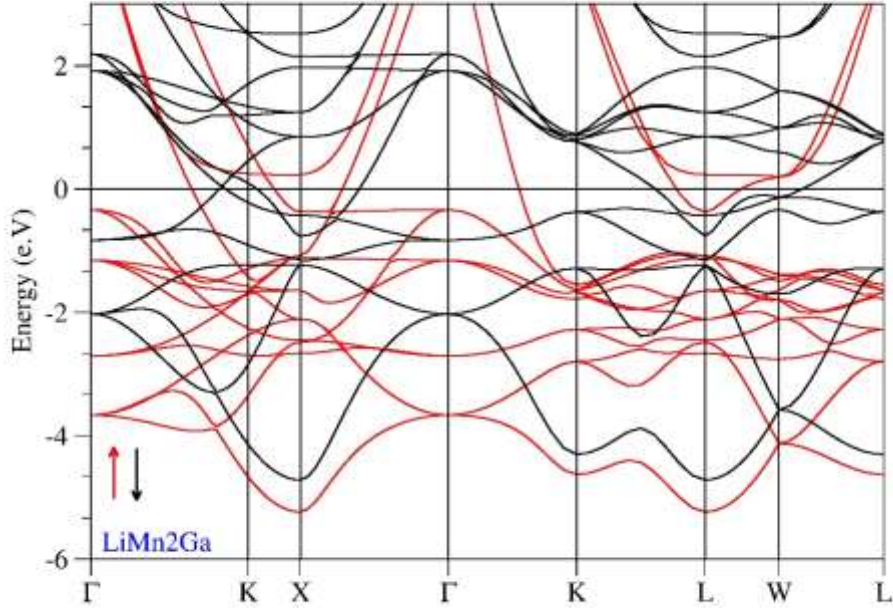
LiMn₂Ga alaşımı iç içe geçmiş dört ilkel hücreden oluşan bir full Heusler yapısına sahiptir ve Fm-3m uzay grubuna uygun bir atomik dizilimi vardır. Bu çalışma yapılırken alaşımın bileşenleri olan atomlar xyz koordinat sistemine göre şu şekilde yerleştirilmişlerdir; merkeze konumlandırılan Mn atomu (a-Mn) (0, 0, 0), Ga (1/4, 1/4, 1/4), ikinci Mn atomu (b-Mn) (1/2, 1/2, 1/2), Li (3/4, 3/4, 3/4). Bu atomik koordinatlandırma olayından önce çeşitli kombinasyonlar deneyerek atomik yapının en kararlı durumu tespit edilmeye çalışıldı. Örneğin Ga un merkezde olduğu ya da Li'un merkezde olduğu durumlar gibi toplamda dokuz kombinasyon deneyerek en kararlı durumun yukarıda verilen koordinatlara sahip LiMn₂Ga FH alaşımı olduğu anlaşıldı. Bu veriler ışığında hesaplanan örgü parametresi de göz önüne alınarak LiMn₂Ga FH alaşımının kristal örgü yapısı şekil 1 gösterilmiştir. Burada bizmut atomları koordinat sisteminin merkezine yerleştirilmiş olduğundan alaşımın adı genel formüle göre değil de referans olarak merkeze yerleştirilen bizmuta göre LiMn₂Ga olarak seçilmiştir.



Şekil 1. LiMn₂Ga FH alaşımının kristal örgü yapısı (Figure 1).

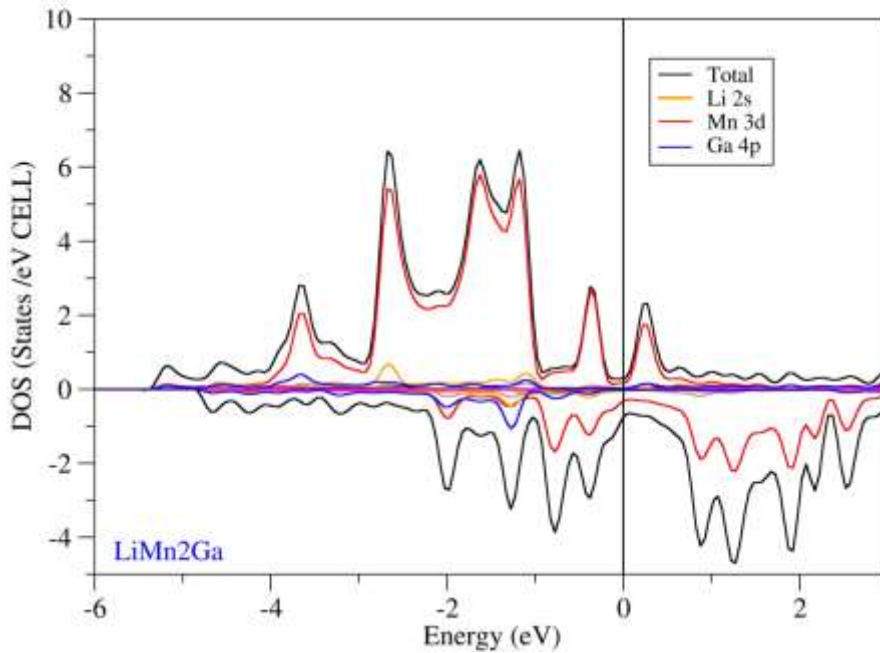
Oluşturulan kristal yapının denge durumu incelenmesi için toplam enerjinin minimum değerinin hesaplanması gerekir. Bu hesaplama sonucu elde edilen toplam enerji değerine karşılık gelen optimize örgü sabiti değeri $a = 5.940 \text{ \AA}$ olarak belirlendi. Literatür ile bulunan örgü parametresi kıyaslaması yapılmak istendi fakat LiMn₂Ga FH alaşımına ait herhangi bir çalışma olmadığından bu kıyas yapılamadı. Bununla birlikte teorik çalışmalar için bir kütüphane olarak kabul gören The Open Quantum Materials Database (URL-1) web sitesinde yapılan modelleme sonucu elde edilen kararlı durum optimize örgü sabiti ile bu çalışmada bulunan $a = 5.940 \text{ \AA}$ değerinin %99.336 oranında uyumlu olduğu görüldü.

LiMn₂Ga alaşımının spin yönelimlerine göre elektronik bant grafiği çizdirilerek alaşımın elektronik özellikleri anlaşılmasına çalışıldı. Buna göre alaşımın spin yönelimlerine göre elektronik bant grafiği şekil 2 de verilmiştir.



Şekil 2. LiMn₂Ga FH alaşımının yüksek simetri (spin) yönelimlerine göre elektronik bant grafiği (Figure).

Şekilde kırmızı renkli eğriler spin yukarı, siyah renkli eğriler ise spin aşağı yüksek simetri eksenlerini temsil etmektedir. Grafikteki sıfır noktasında x eksenini boyunca uzanan doğru Fermi enerji seviyesini gösterir. Fermi enerji seviyesinin yakınına bakıldığında hem spin yukarı hem de spin aşağı eğrileri Fermi seviyesini kesmektedir. Spin yönelimlerini temsil eden eğriler ile Fermi seviyesi arasında herhangi bir boşluk yani yasak enerji aralığı gözlenmemiştir. Ayrıca spin yukarı ve spin aşağı yönelimlerini temsil eden eğriler birbirlerini de kesmektedir. Tüm bu bilgiler ışığında alaşımın iletkenlik ve valans bantlarındaki elektronların birbirlerine geçiş yapabildikleri, Fermi seviyesinin civarında yasak enerji aralığı olmaması nedeniyle de alaşımın metalik iletken karakterde olduğu söylenebilir. Ayrıca spin yukarı ve spin aşağı eğrilerinin üst üste çakışık yekpare bir görüntü de olmaması bu alaşımın manyetik bir momentinin olduğu ve bu yüzden de alaşımın manyetik olduğunu göstermektedir. Elektronik özelliklerin daha iyi anlaşılması açısından alaşımın durum yoğunluğu eğrilerinin grafiği çizildi (Şekil 3). Bu grafik aşağıda verilmiştir.



Şekil 3. LiMn₂Ga FH alaşımının spin yukarı ve spin aşağı durumları için durum yoğunluğu eğrileri (Figure 3).

Şekil 3 de ki grafik incelendiğinde Fermi enerji düzeyi yakınlarında iletkenliğe en fazla katkının spin yukarı yöneliminde Mn atamunun 3d ve Ga atomunun 4p orbitalindeki elektronlardan geldiği görülmüştür. Spin aşağı yöneliminde de aynı durum gözlenmektedir. Manyetik moment Slater Pauling ilkesine göre $M_T=Z_T-18$ formülü ile verilir (Wei ve ark., 2012). LiMn₂Ga FH alaşımının manyetik momenti hesaplandığında Slater Pauling ilkesi ile uyumlu olduğu görüldü.

Bir malzemenin esnekliği o malzemeye uygulanan zorlamaya karşı koyması olarak bilinir. Bir alaşımın mekanik kararlılığı incelenirken esneklik oldukça önemli bir yer tutar. Bu bağlamda LiMn₂Ga FH alaşımının esneklik sabitleri hesaplanarak bu değerlerin Born kararlılık kriterlerini sağladığı teyit edilmelidir. Born kararlılık kriterleri eşitlik 4 te verilmiştir (Örnek, 2017).

$$C_{44} > 0; C_{11} - C_{12} > 0; C_{11} + 2C_{12} > 0 \quad (4)$$

Burada C_{11} , C_{12} ve C_{44} alaşıma ait elastik sabitleridir. Çizelge 1 de LiMn₂Ga FH alaşımına ait hesaplanan elastik sabitleri verilmiştir.

Çizelge 1 LiMn₂Ga FH alaşımının elastik sabitleri (C_{11} , C_{12} ve C_{44} ; GPa) (Table 1)

Malzeme	C_{11}	C_{12}	C_{44}
LiMn ₂ Ga	89.792	61.130	96.205

Bu çalışmada alaşımın sertliği, sünekliği, sıkışabilirliği gibi yapısal bazı özellikler hakkında bilgi veren poisson oranı σ , B/G oranı, Kayma modülü G , Young modülü E , Anizotropi faktörü A , Bulk modülü B aşağıdaki eşitliklerle hesaplandı.

$$E = \frac{9 \cdot B \cdot G}{3B + G} \quad (5)$$

$$B = \frac{C_{11} + 2 \cdot C_{12}}{3} \quad (6)$$

$$G = \frac{(5C_{11} - 2C_{12}) \cdot C_{44}}{(3C_{11} - 2C_{12}) + C_{44}} \quad (7)$$

$$\sigma = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{E}{3B}\right) \quad (8)$$

$$A = \frac{2C_{44}}{C_{11} - C_{12}} \quad (9)$$

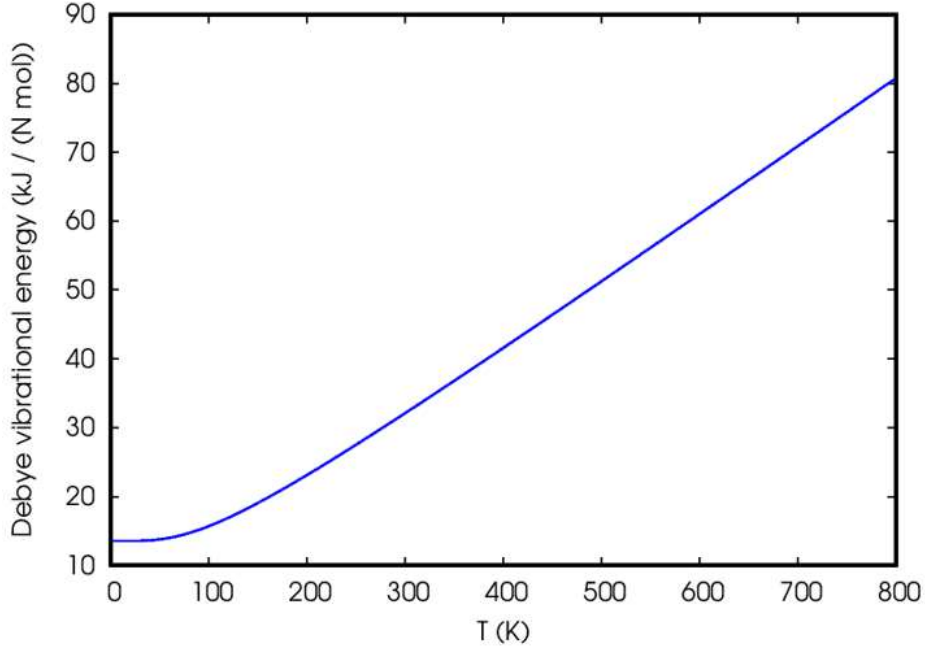
Çizelge 2 de LiMn₂Ga FH alaşımı için hesaplanan E , B , G , A ve σ değerleri verilmiştir.

Çizelge 2. LiMn₂Ga FH alaşımı için hesaplanan Kayma modülü, (G ; GPa), Bulk Modülü (B ; GPa), Young modülü (E ; GPa), poisson oranı (σ), B/G oranı ve Anizotropi faktörü (A) (Table 2)

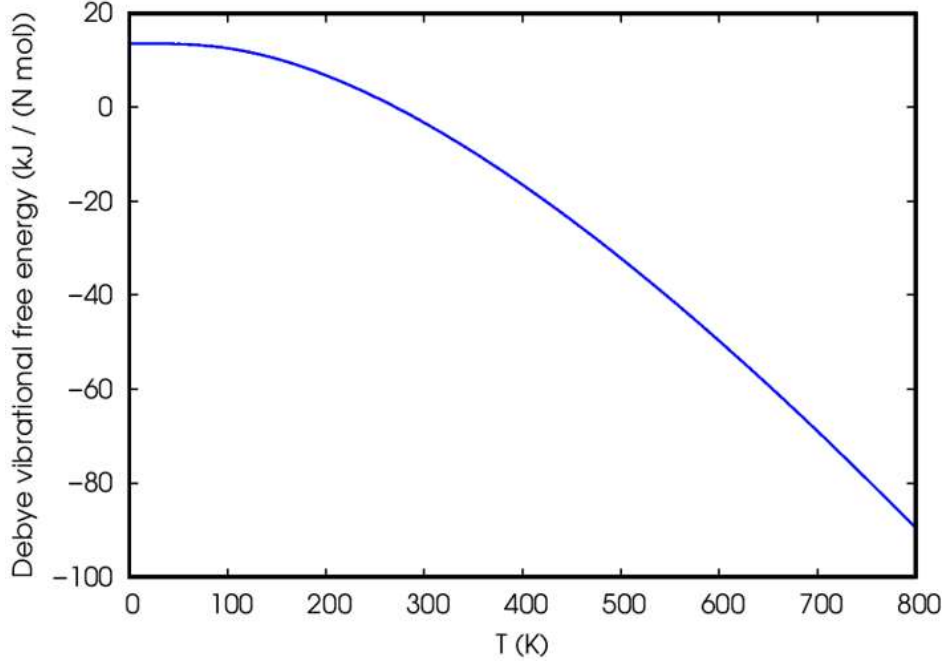
Malzeme	B_V	B_R	B	G_V	G_R	G	E_V	E_R	E	B/G	σ	A
LiMn ₂ Ga	70.684	70.684	70.684	63.455	29.284	46.369	146.521	77.192	111.856	1.524	0.206	6.713

Hesaplanan B değeri $C_{12} < B < C_{11}$ olarak beklenen bir değerde hesaplandı. Hesaplanan B ve E değerlerine bakıldığında B değerinin 100 GPa'dan küçük olması alaşımın sıkışabilir olduğunu E değerinin 111.856 GPa olması da alaşımın sert bir yapıya sahip olduğunu göstermektedir. Pugh kriterlerine göre bir malzemenin B/G oranı 1.75 değerinden büyükse malzemenin sünek, küçükse de kırılğan olduğu söylenebilir. B/G oranı dikkate alındığında 1.524 GPa değeri 1.75 ten küçük olduğundan alaşımın kırılğan (gevrek) doğaya sahip olduğu anlaşılmaktadır (Pugh, 1954). Malzemenin sünek olduğuna ışık tutan başka bir bilgi de Poisson oranıdır (σ). Ayrıca σ değerinin 0.1 civarında olması atomik bağlanmaların kovalent, 0.25 civarında olması da atomik bağlanmaların iyonik olduğunu göstermektedir. Burada Poisson oranı 0.25 civarında hesaplandığından alaşımın iyonik karakterinin baskın olduğu anlaşılmaktadır. Buna ek olarak elastik sabitleri olan C_{11} ve C_{12} arasındaki fark ($C_{11} - C_{12}$) Cauchy basıncı olarak bilinir ve bu değer pozitif olması alaşımın atomlar arası bağlanmalarının iyonik karakterde olduğunun anlaşılmasına destek sağlar. Bir malzemenin fiziksel ya da mekanik bazı

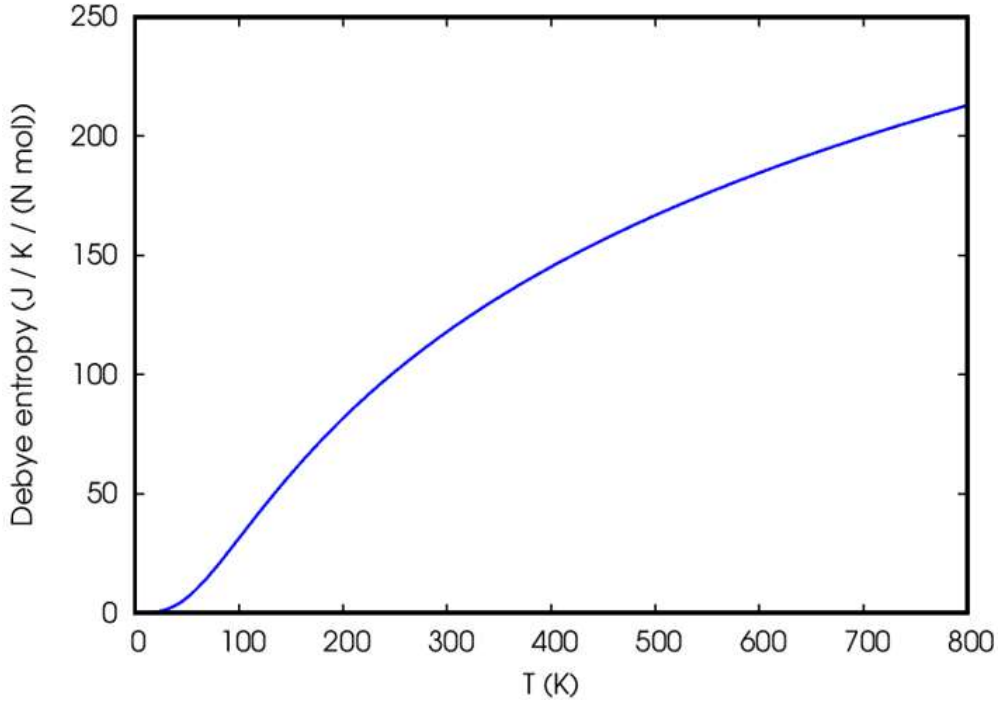
özelliklerinin yöne bağımlılığı anizotropi olarak bilinir. A değeri 1 olan malzemeler izotropik iken be değer 1 den farklı olan malzemeler ise anizotropiktirler. Buna göre hesaplamalar sonucu elde edilen 6.713 değeri 1 den farklı olduğu için LiMn_2Ga FH alaşımının anizotropik olduğu anlaşıldı. LiMn_2Ga FH alaşımına ait termodinamik özellikler incelenmek istendiğinde elde edilen grafikler şekil 4, 5, 6 ve 7 de verilmiştir.



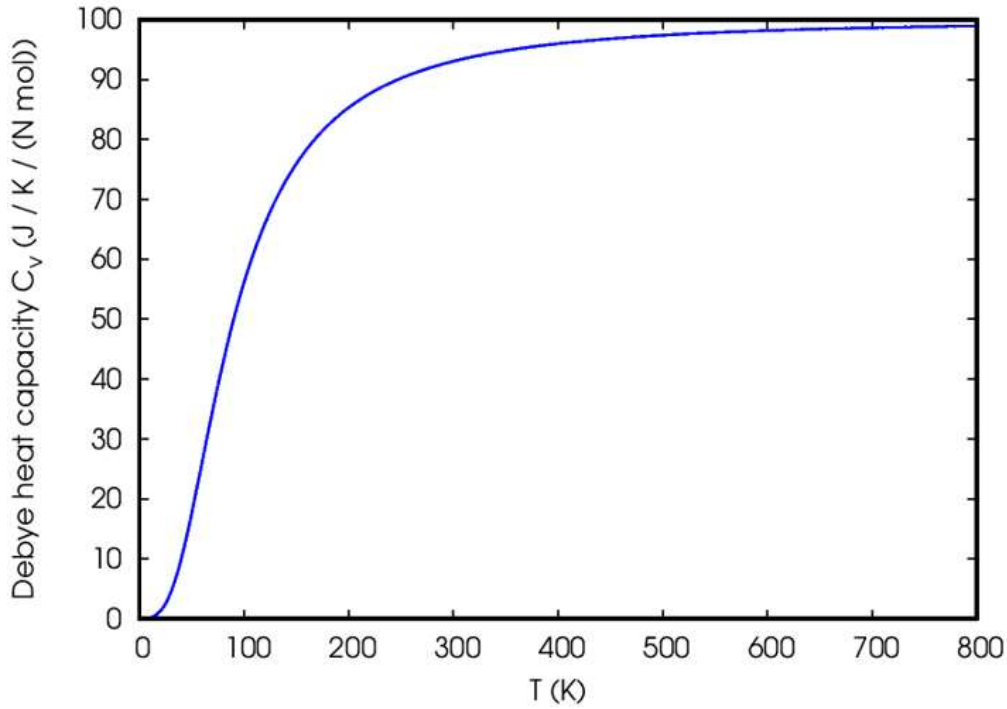
Şekil 4. LiMn_2Ga FH alaşımının titreşim enerjisinin sıcaklığa bağlı grafiği (Figure 4).



Şekil 5. LiMn_2Ga FH alaşımının serbest titreşim enerjisinin sıcaklığa bağlı grafiği (Figure 5).



Şekil 6. LiMn₂Ga FH alaşımasının entropisinin sıcaklığa bağlı grafiği (Figure 6).



Şekil 7. LiMn₂Ga FH alaşımasının ısı sığasının sıcaklığa bağlı grafiği (Figure 7).

Şekil 4. İncelendiğinde titreşim enerjisinin sıcaklık arttıkça arttığı görülür. Sıcaklığın artışı atomların kinetik enerjisini artıracığından titreşim enerjisindeki artış beklenen bir durumdur. Titreşim enerjisinin sıcaklıkla artmasına karşın serbest titreşim enerjisinin ise sıcaklık arttıkça azalması beklenir. Şekil 5de ki grafik bu durumun bir teyidi olarak görülebilir. Şekil 6 da düzensizliğin bir derecesi olan entropinin sıcaklığa bağlı grafiği görülmektedir. Entropi dolayısıyla alaşımdaki düzensizlik sıcaklıkla orantılı olarak artmaktadır. Şekil 7 incelendiğinde, dört atomu barındıran LiMn₂Ga FH alaşımasının ısı sığası yüksek sıcaklık değerlerine çıkıldıkça Dulong-Petit limitine yakınsamaktadır. Bu durum mekanik kararlı bir alaşım için beklenen bir durumdur (Petit, 1819). Şekil 7 deki grafikte sıcaklık artmaya devam ederken ısı sığasının sabitlenmeye başladığı nokta bütün dalga boylarının uyarıldığı sıcaklık değeri olan Debye sıcaklığı olarak bilinir. Burada Debye sıcaklığı 168.441 K olarak hesaplanmıştır.

4. Sonuç

LiMn₂Ga FH alaşımı için DFT yaklaşımı kullanan Quantum-ESPRESSO paket programı kullanılarak alaşımın yapısal, elastik, elektronik ve termal özellikleri incelenmiştir. İncelenen LiMn₂Ga FH alaşımı ile ilgili yapılan literatür taramasında alaşımın yapısal, elastik, elektronik ve termal özellikleri ile ilgili herhangi bir çalışma gözlemlenmemiştir. Yukarıda belirtilen özellikler ilk kez bu çalışma ile ortaya konulmuştur. Bu çalışmada hesaplanan örgü sabiti (5.40 Å) teorik değerinden % 0.664 lük bir farkla hesaplanmıştır. Hesaplanan toplam manyetik moment ile elektronik bantlar teorik verilerle oldukça uyumlu bir sonuç vermiştir. Alaşımın hem spin yukarı hem de spin aşağı durumları için Fermi enerji seviyesi ile arasında herhangi bir yasak enerji aralığı gözlemlenmemiştir. Ayrıca spin aşağı ve spin yukarı yönelimlerine ait eğriler hem birbirlerini hem de Fermi enerji seviyesini kesmektedir. Bu durum malzemenin elektronik olarak iletken metalik olduğunu gösterir. Spin yukarı ve spin aşağı yönelimlerine ait eğrilerin simetrik olmamaları alaşımın bir manyetik momente sahip olduğunu, bu da alaşımın manyetik bir karaktere sahip olduğunu anlamamızı sağlar. LiMn₂Ga FH alaşımı Born kararlılık kriterlerini sağladığından mekanik kararlı bir alaşımdır. *B/G* oranının 1.75 değerinden küçük olması alaşımın gevrek bir yapıda olduğunu, Bulk modülünün 100 GPa'dan küçük olması da alaşımın sıkışabilir olduğunu göstermektedir. Young modülü değeri alaşımın sert, Poisson oranı değeri de alaşım içindeki atomik bağlanmaların iyonik karakterde olduğunu göstermektedir. Anizotropi faktörünün değerinin 1 den farklı bulunması ise alaşımın bazı yapısal ve mekanik özelliklerinin yöne bağlı olduğunu gösterir. Yapılan bu çalışmada rapor edilen hesaplama sonuçları ilk olup daha önce çalışılmamış ya da rapor edilmemiştir. Bu bağlamda LiMn₂Ga FH alaşımı spintronik cihaz çalışmaları için ümit vaat edebilecek bir adaydır.

Kaynakça

- Blumenthal R. L., 2022. *Lithium (li)*, Salem Press Encyclopedia of Science, 202, Research Starters
- Garrity K.F., *et al.* 2014. Pseudopotentials for high-throughput DFT calculations, *Comput. Mater. Sci.*, 81, pp. 446-452
- 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
- Hem C.K., Gerhard H.F., Claudia F., 2007. Calculated electronic and magnetic properties of the half-metallic, transition metal based Heusler compounds, *J. Phys. D: Appl. Phys.* 40, 6
- Hohenberg P., Kohn W., 1964. Inhomogeneous Electron Gas, *Phys. Rev.*, 136 (3B) (1964), pp. B864-B871
- İyigör A., Al S., Arıkan N., 2022. Density functional theory investigation on structural, mechanical, electronic and vibrational properties of Heusler alloys AlXIr₂ (X = Co, Cr, Cu, Fe and Zn), *Chemical Physics Letters*, 806, 140052. Doi: 10.1016/j.cplett.2022.140052
- Kohn W., Sham L.J., 1965. Self-consistent equations including exchange and correlation effects, *Phys. Rev.*, 140 (4A) (1965), pp. A1133-A1138
- McCormick, Eugene R., 2021. *Manganese (Mn)*, Salem Press Encyclopedia of Science, 202, Research Starters
- Methfessel M., Paxton A., 1989, High-precision sampling for Brillouin-zone integration in metals, *Phys. Rev. B*, 40 (6), p. 3616
- 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
- Perdew J.P., Burke K., Ernzerhof M., 1996, Generalized Gradient Approximation Made Simple, *Phys. Rev. Lett.*, 77 (18) , pp. 3865-3868
- Petit P., 1819. Recherches sur quelques points importants de la Théorie de la Chaleur, *Annales de Chimie et de Physique* 10395–413.
- 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
- Secrets R., 2023. *Gallium (Ga)*, Salem Press Encyclopedia of Science, 2023, Research Starters
- Srivastava G.P., 1990. *The physics of phonons*. Adam Hilger: Bristol,
- URL-1. The Open Quantum Materials Database, <https://oqmd.org/analysis/calculation/824849>
- Wei X.P., Deng J.B., Mao G.Y., Chu S.B., Hu X.R. (2012). Half-metallic properties for the Ti₂YZ (Y = Fe, Co, Ni, Z = Al, Ga, In) Heusler alloys: A first-principles study, *Intermetallics Volume 29*, Pages 86-91