

Cr₂ZrSb Heusler Bileşiğinin Yapısal, Elektronik, Manyetik ve Optik Özelliklerinin İlk-Prinsip Hesaplamaları ile İncelenmesi

*Makale Bilgisi / Article Info

Alındı/Received: 15.08.2024

Kabul/Accepted: 28.10.2025

Yayımlandı/Published: 08.04.2026

Investigation of the Structural, Electronic, Magnetic and Optical Properties of the Cr₂ZrSb Heusler Compound with First-Principle Calculations

Nazmiye KERVAN* 



Ankara Hacı Bayram Veli Üniversitesi, Polatlı Fen Edebiyat Fakültesi, Fizik Bölümü, Ankara, Türkiye

© 2026 The Authors | Creative Commons Attribution-Noncommercial 4.0 (CC BY-NC) International License

Öz

Bu çalışmada, Cr₂ZrSb Heusler bileşiğinin yapısal, elektronik, manyetik ve optik özellikleri ilk-prinsip hesaplamaları ile incelenmiştir. Cr₂ZrSb Heusler bileşiğinin elektronik yapı hesaplamaları, yoğunluk fonksiyonel teorisini (DFT) temel alan, tam-potansiyel çizgisel genişletilmiş düzlem dalga (FPLAPW) yöntemini uygulayan WIEN2K bilgisayar programı kullanılarak gerçekleştirilmiştir. Değiş-tokuş korelasyon potansiyeli için, Perdew-Burke-Ernzerhof'un genelleştirilmiş gradyent yaklaşımı (GGA) kullanılmıştır. Cr₂ZrSb bileşiği için AlCu₂Mn-tipi yapının CuHg₂Ti-tipi yapıya göre daha kararlı olduğu bulunmuştur. Kararlı durumda bileşiğin örgü sabiti 6,39 Å'dur ve toplam manyetik momenti Slater-Pauling kuralı ile uyumlu olacak şekilde 3 μ_B'dir. Cr₂ZrSb bileşiğinin spin-aşağı durumlarının metalik özelliğe sahip olduğu ve spin-yukarı durumlarında ise Fermi seviyesinde 0,662 eV'lik bant boşluğunun olduğu bulunmuştur. Yarı metalik Cr₂ZrSb bileşiği, örgü sabitinin 6,3-6,6 Å aralığında %100 spin kutuplanmasını korumaktadır. Ayrıca Cr₂ZrSb Heusler bileşiğinin optik özelliklerini incelemek için, dielektrik fonksiyonunun gerçek ve sanal kısımları, elektron enerji kaybı fonksiyonu, soğurma katsayısı, yansıtma, optik iletkenlik, kırılma indisi ve sönme katsayısı rastgele faz yaklaşımında (RPA) hesaplanmıştır.

Anahtar Kelimeler: Yarı metalik malzemeler; İlk-prinsip hesaplamaları; Elektronik yapı; Manyetik özellikler; Optik özellikler

Abstract

In this study, the structural, electronic, magnetic, and optical properties of the Cr₂ZrSb Heusler compound are examined by first-principles calculations. Electronic structure calculations of the Cr₂ZrSb Heusler compound have been carried out using the WIEN2K software package, which implements the full potential linear extended plane wave (FPLAPW) method, based on density functional theory (DFT). For the exchange-correlation potential, Perdew-Burke-Ernzerhof's generalized gradient approximation (GGA) is used. For the Cr₂ZrSb compound, the AlCu₂Mn-type structure is found to be more stable than the CuHg₂Ti-type structure. In stable state, the lattice constant of the compound is 6.39 Å and the total magnetic moment value is 3 μ_B, which is compatible with the Slater-Pauling rule. It is found that the spin-down states of the Cr₂ZrSb compound have metallic properties and that the spin-up states have a band gap of 0.662 eV at the Fermi level. The half-metallic Cr₂ZrSb compound maintains 100% spin polarization in the lattice constant range of 6.3 to 6.6 Å. Additionally, to examine the optical properties of the Cr₂ZrSb Heusler compound, the real and imaginary parts of the dielectric function, electron energy loss function, absorption coefficient, reflectivity, optical conductivity, refractive index, and extinction coefficient are calculated in the random phase approach (RPA).

Keywords: Half-metallic materials; First-principle calculations; Electronic structure; Magnetic properties; Optical properties

1. Giriş

Heusler bileşiklerinin yapısal, elektronik ve manyetik özellikleri birçok araştırmacının ilgisini çekmektedir. Bu bileşikler manyeto-elektronik, spintronik, şekil hafızası, termoelektrik ve optoelektronik cihazlardaki potansiyel uygulamaları nedeniyle önemli bilimsel ve teknolojik faydalar sağlamaktadır (Felser vd. 2007, Kieven ve Klenk 2010, Ouardi vd. 2010, Zayak vd. 2005). Heusler bileşikleri adını 1903 yılında Cu₂MnAl Heusler alaşımının, hiç manyetik element içermemesine rağmen bir ferromanyet gibi davrandığını keşfeden Alman mühendis Friedrich Heusler'den almıştır (Heusler 1903). Bu bileşikler ferromanyetizma, antiferromanyetizma, ferrimanyetizma

gibi çok çeşitli manyetik özellikler gösterir (Ishida vd. 1995, Hakimi vd. 2013, Balke vd. 2013). Farklı elektronik yapıya sahip yarı metalik malzemeler, spin aşağı (↓) bandı ve spin yukarı (↑) bandı olmak üzere iki farklı banda sahiptir. Spin aşağı bandında Fermi seviyesinde (E_F) bir enerji bant boşluğu vardır ve yarı iletken veya yalıtkan davranışa sahip olur. Spin aşağı bandında Fermi seviyesinde bant aralığının varlığı %100 spin kutuplanması gösterirken, spin yukarı bandı metalik davranışa sahiptir. İlk yarı metalik ferromanyet, 1983 yılında de Groot ve arkadaşları tarafından yarı-Heusler bileşiği NiMnSb'nin elektronik yapı hesaplamaları kullanılarak keşfedilmiştir (de Groot vd. 1983). Bant spektrumunun bir spin

kanalında bir boşluğa sahip olan yarı metalik ferromanyet Heusler bileşikleri ve özellikleri ilk-prensip hesaplamaları ile yaygın bir şekilde incelenmektedir (Galanakis vd. 2006). Bu bileşikler yüksek Curie sıcaklıkları, Fermi seviyesindeki %100 spin kutuplanması ve büyük bant aralığı nedeniyle spintronik cihazların üretiminde kilit rol oynamaktadır (Kuo vd. 2005, Özdoğan vd. 2006, Qi vd. 2015).

Elektronik yapının hesaplanması, Heusler bileşiklerinin manyetik özelliklerinin belirlenmesinde ve özellikle yarı metalik ferromanyetizmanın tahmin edilmesinde önemli rol oynar. Birçok yeni yarı metalik ferromanyetik malzeme ve bunların özellikleri, ilk-prensip hesaplamalarıyla tahmin edilmiş ve daha sonra deneylerle doğrulanmıştır. Heusler bileşiklerinin yarı metalik özellikleri üzerine yapılan çalışmalar, ağırlıklı olarak Co₂ bazlı bileşiklere aittir (Chen vd. 2006, Özdoğan vd. 2007). Son yıllarda, Mn₂CoZ (Z=Al, Ga, Si, Ge, Sn ve Sb), Fe₂YSi (Y= Cr, Mn, Fe, Co, Ni), Cr₂MnZ (Z=P, As, Sb ve Bi), Cr₂MnAl, Cr₂TiX (X=Al, Ga, Si, Ge, Sn ve Sb), Cr₂YSb (Y=Fe, Co ve Ni), Sc₂MnZ (Z=C, Si, Ge ve Sn), Ti₂YZ (Y=Fe, Co, Ni; Z=Al, Ga, In), Ti₂YAl (Y=V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu ve Zn) Heusler bileşiklerinin elektronik yapıları ve manyetik özellikleri ilk-prensip hesaplamaları kullanılarak incelenmiş ve yarı metalik oldukları bulunmuştur (Liu vd. 2008, Hongzhi vd. 2007, Galanakis vd. 2007, Li vd. 2009, Li vd. 2010, Ahmadian 2013, Ahmadian ve Salary 2014, Wei vd. 2012, Zheng vd. 2012). Daha önce yaptığımız çalışmalarda ise Fe₂MnP, Co₂ScP, Mn₂NbAl, Ti₂RuSn tam Heusler bileşiklerinin kristal yapıları, elektronik yapıları ve manyetik özellikleri yoğunluk fonksiyonel teorisi (DFT) ile incelenmiştir ve Curie sıcaklıkları hesaplanmıştır (Kervan ve Kervan 2012, Kervan 2012, Kervan vd. 2016, Taşkın vd. 2017).

Bir optik malzemenin geniş bir optik analizi, fotonlarla etkileşimi hakkında bilgi sağlar ve optik malzemenin dielektrik veya optoelektronik uygulamalar için uygunluğunu ortaya çıkartır. Genel olarak, yarı iletken malzemelerin optik özelliklerinin çok düşük frekanslarda metal benzeri, çok yüksek frekanslarda ise yalıtkan gibi bir davranış sergiledikleri gözlenir (Dresselhaus 1966). Boşluksuz tam Heusler bileşiği olan Cu₂MnAl'nin elektronik, manyetik, optik özellikleri yoğunluk fonksiyonel teorisi hesaplamalarına dayanan FPLAPW yöntemiyle incelenmiştir. Kompleks dielektrik sabiti, kırılma indisi, yansıtma, optik iletkenlik gibi optik sabitler elde edilmiş ve mevcut deneysel ve teorik sonuçlarla karşılaştırılmıştır (Rai ve Thapa 2014). Mn₂ZrGa tam Heusler bileşiğinin optik özellikleri yoğunluk fonksiyonel teorisi hesaplamaları kullanılarak incelenmiştir (Emami vd. 2018). İlk prensip hesaplamaları kullanılarak Fe₂YAl (Y = Ti, V ve Cr) için dielektrik fonksiyonunun gerçek ve sanal

kısımları, optik iletkenlik, yansıtma, soğurma katsayısı, kırılma indisi, elektron enerji kaybı fonksiyonu ve sönme katsayısı foton enerjisine bağlı olarak hesaplanmıştır (Sharma ve Pilania 2013).

Bu çalışmada, Cr₂ZrSb Heusler bileşiğinin yapısal, elektronik, manyetik ve optik özellikleri, ilk-prensip metodlarından olan yoğunluk fonksiyonel teorisi (DFT) hesaplamalarıyla incelenmiştir.

2. Materyal ve Metot

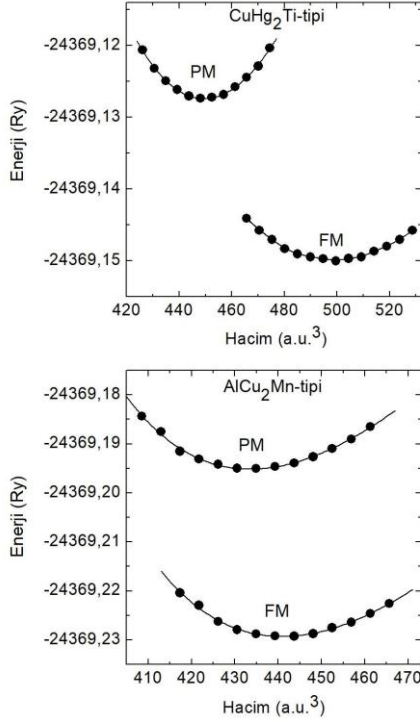
Cr₂ZrSb Heusler bileşiğinin elektronik yapı hesaplamaları, yoğunluk fonksiyonel teorisini (DFT) (Kohn ve Sham 1965) temel alan, tam potansiyel lineer genişletilmiş düzlem dalga (FPLAPW) (Singh 1994) yöntemini uygulayan WIEN2K hesaplama programı (Blaha vd. 2020) kullanılarak gerçekleştirilmiştir. Değiş-tokuş korelasyon potansiyeli için, Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE)'un genelleştirilmiş gradyent yaklaşımı (GGA) (Perdew vd. 1996) kullanılmıştır. Bu yöntemde uzay, atomları temsil eden küreler ve ara bölgedeki boşluklar olarak ikiye ayrılmıştır. Baz fonksiyonları, kürenin içinde küresel harmoniklere bağlı olarak boşluklarda ise Fourier açılımı olarak alınmıştır. Cr₂ZrSb bileşiğinde, küre şeklinde düşünülen atomların yarıçapları Cr=2,35 a.u., Zr=2,40 a.u. ve Sb=2,45 a.u. olarak alınmıştır. Baz setlerinin yakınsaması, R_{mt} en küçük atomik yarıçap ve K_{mak} ise düzlem dalga açılımında en büyük ters örgü vektörü olmak üzere, kesme parametresi $R_{mt} \times K_{mak} = 7$ ile kontrol edilmiştir. Yük yoğunluğu Fourier açılımındaki en büyük vektör $G_{mak} = 12$ a.u. olarak alınmıştır. Çekirdek ve bant durumlarını ayıran kesme enerjisi $-6 R_y$ olarak alınmıştır. Toplam enerjinin yakınsaması, birim hücre başına 0,0001 elektron yükü olarak seçilmiştir. Hesaplamalarda spin yörünge etkileşimleri ihmal edilmiştir. Brillouin bölgesinin tamamındaki k noktası sayısı ise 4000'dir. Hesaplamalarda Cr ($4s 3d^5$), Zr ($5s^2 4d^2$) ve Sb ($5s^2 5p^3$) durumları değerlik elektronları olarak kabul edilir.

3. Bulgular

3.1. Yapısal özellikler

Heusler bileşikleri, tam Heusler bileşiği (X_2YZ genel formülü) ve yarı Heusler bileşiği (XYZ genel formülü) olmak üzere iki kategoriye ayrılabilir. Bu kimyasal formüllerde X ve Y; 3d, 4d ve 5d geçiş metallerinden herhangi biri olabilir ve Z ise manyetik olmayan III, IV ve V ana gruplarından bir elementtir. Tam Heusler bileşikleri genellikle, AlCu₂Mn tipi ve CuHg₂Ti tipi olmak üzere iki yapıda kristalleşir. Kristal yapı, A (0,0,0), B (1/4,1/4,1/4), C (1/2,1/2,1/2) ve D (3/4,3/4,3/4) Wyckoff koordinatlarıyla tanımlanan konumlara sahip iç içe geçmiş dört tane yüzey merkezli kübik (fcc) örgüden oluşabilir. AlCu₂Mn tipi

yapıda (225, Fm $\bar{3}$ m), X atomları A ve C konumlarını, Y atomu B konumunu ve Z atomu da D konumunu işgal eder. Uzak grubu (216, F $\bar{4}$ 3m) olan CuHg₂Ti tipi yapıda ise A ve B konumları X atomları tarafından işgal edilirken, C ve D konumları sırasıyla Y ve Z atomları tarafından işgal edilir. Bu konfigürasyonları X ve Y atomlarının değerlik elektronları belirler. X atomu Y'den daha elektronegatif ise, tam Heusler bileşiğinde AlCu₂Mn tipi atomik düzenleme tercih edilir ve bunun tersi durumda CuHg₂Ti tipi (ters Heusler bileşik) elde edilir (Kandpal vd. 2007).



Şekil 1. CuHg₂Ti ve AlCu₂Mn tipi yapılarıdaki Cr₂ZrSb bileşiği için hacim optimizasyonu. Sürekli çizgiler Murnaghan durum denklemini temsil ederken, PM ve FM sırasıyla paramanyetik ve ferromanyetik hesaplamalara karşılık gelir.

İlk olarak, Cr₂ZrSb Heusler bileşiği için hem AlCu₂Mn-tipi yapı hem de CuHg₂Ti-tipi yapı ile kristal yapı optimizasyonları gerçekleştirilerek, minimum toplam enerjiyi veren örgü sabitleri elde edilmiştir (Çizelge 1). Paramanyetik (PM) ve ferromanyetik (FM) durumlarında toplam enerjinin birim hücre hacmine göre değişimleri Şekil 1'de görülmektedir. Her iki durumda AlCu₂Mn-tipi yapının enerjisi daha düşüktür, bu da onun CuHg₂Ti-tipi yapıdan daha kararlı olduğunu gösterir. Cr₂ZrSb bileşiği ferromanyetik durumunda, AlCu₂Mn-tipi yapı için -24369,23 Ry ve CuHg₂Ti-tipi yapı için -24369,15 Ry temel durum enerjilerine sahiptir. Bu daha düşük enerji değeri FM durumundaki AlCu₂Mn-tipi yapının denge hacminde enerji bakımından daha kararlı yapı olduğunu doğrulamaktadır. Cr atomu, Zr atomundan daha fazla değerlik elektronuna sahip olduğundan, Cr atomları A ve

C konumlarını işgal etmeyi tercih eder ve AlCu₂Mn-tipi yapı oluşur.

Cr₂ZrSb bileşiğinin temel durum özellikleri, hacme karşı hesaplanan toplam enerjiler Murnaghan durum denkleminde (Murnaghan 1944) fit edilerek bulunmuştur:

$$E(V) = E_0(V) + \frac{BV}{B'} \left(\frac{1}{(B'-1)} \left(\frac{V_0}{V} \right)^{B'} + 1 \right) - \frac{BV_0}{(B'-1)} \quad (1)$$

Burada $E(V)$, birim hücre hacmi V 'nin fonksiyonu olarak tanımlanan elektronik temel durum enerjisidir. E_0 , $T = 0$ K'deki minimum enerjidir, V_0 teorik denge birim hücre hacmidir, B izotermal hacim modülüdür ve B' hacim modülünün basınca ($P = -dE/dV$) göre türevidir. Her iki yapı için hesaplanan hacim modülleri ve hacim modülünün türevleri Çizelge 1'de listelenmiştir.

Cr₂ZrSb bileşiğinin oluşum enerjisi (E_f) ve kohezyon enerjisi (E_c)

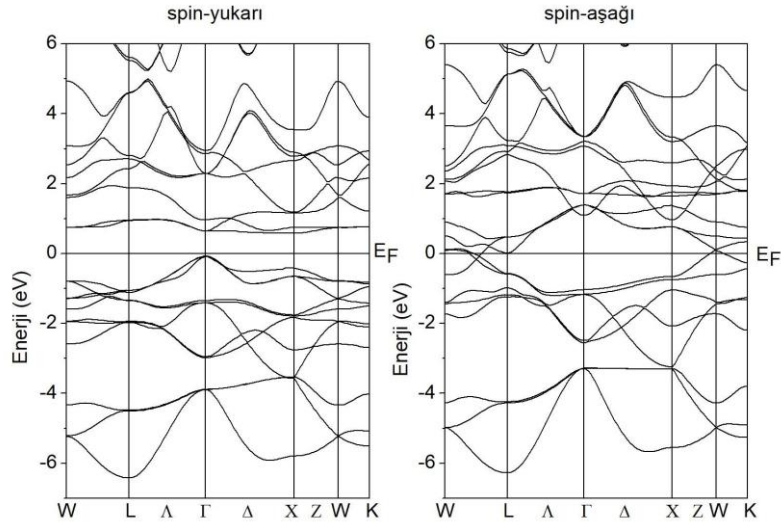
$$E_f = E_{Cr_2ZrSb}^{toplaml} - [2E_{Cr}^{hacimli} + E_{Zr}^{hacimli} + E_{Sb}^{hacimli}] \quad (2)$$

$$E_c = E_{Cr_2ZrSb}^{toplaml} - [2E_{Cr}^{izole} + E_{Zr}^{izole} + E_{Sb}^{izole}] \quad (3)$$

denklemleri kullanılarak hesaplanmıştır. Burada, $E_{Cr_2ZrSb}^{toplaml}$ Cr₂ZrSb Heusler bileşiğinin denge örgü sabitindeki toplam enerjisini ifade eder. $E_{Cr}^{hacimli}$, $E_{Zr}^{hacimli}$ ve $E_{Sb}^{hacimli}$ sırasıyla Cr, Zr ve Sb atomlarının atom başına toplam enerjileridir. E_{Cr}^{izole} , E_{Zr}^{izole} ve E_{Sb}^{izole} ise sırasıyla yalıtılmış Cr, Zr ve Sb atomlarının enerjileridir. İki farklı yapı için Cr₂ZrSb bileşiğinin formül birimi başına hesaplanan oluşum ve kohezyon enerjileri Çizelge 1'de verilmiştir. Bileşiğin oluşum ve kohezyon enerjileri; toplam enerjiler AlCu₂Mn-tipi yapı için -24369,23 Ry, CuHg₂Ti-tipi yapı için -24369,15 Ry ve her iki tip yapı için Cr, Zr ve Sb atomlarının atom başına toplam enerjileri sırasıyla -2101,74 Ry, -7198,42 Ry ve -12967,24 Ry ve yalıtılmış Cr, Zr ve Sb atomlarının enerjileri ise sırasıyla -2101,09 Ry, -7197,89 Ry ve -12966,96 Ry değerleri kullanılarak elde edilmiştir. Oluşum ve kohezyon enerjilerinin negatif değerleri, Cr₂ZrSb bileşiğinin enerji bakımından kararlı olduğunu gösterir. AlCu₂Mn-tipi yapının hesaplanan oluşum ve kohezyon enerjileri, CuHg₂Ti-tipi yapı için hesaplanarlardan daha negatif olup, Cr₂ZrSb için AlCu₂Mn-tipi yapının daha kararlı bir yapı olduğunu göstermektedir.

Çizelge 1. Cr₂ZrSb bileşiğinin hesaplanan denge örgü sabitleri, hacim modülleri, hacim modülünün türevleri, oluşum ve kohezyon enerjileri.

Yapı Tipi	a_0 (Å)	B (GPa)	B'	E_f (eV)	E_c (eV)
AlCu ₂ Mn-tipi	6,39	72,5	9,92	-1,21	-29,84
CuHg ₂ Ti-tipi	6,66	71,9	3,43	-0,13	-28,76



Şekil 2. AlCu₂Mn-tipi yapıdaki Cr₂ZrSb bileşiğinin denge örgü sabitinde hesaplanan spin yukarı ve spin aşağı enerji bantları.

3.2. Elektronik özellikler

AlCu₂Mn-tipi yapıya sahip Cr₂ZrSb Heusler bileşiğinin elektronik özelliklerini incelemek için, spin-yukarı (çoğunluk) ve spin-aşağı (azınlık) durumları için bant yapıları elde edilmiştir ve enerji bant aralığı hesaplanmıştır. Cr₂ZrSb bileşiğinin denge durumundaki örgü sabiti kullanılarak hesaplanan spin-yukarı ve spin-aşağı elektronları için bant yapıları Şekil 2'de görülmektedir. Cr₂ZrSb için spin-aşağı durumları Fermi seviyesini kestiği için metal karakteristiğine sahipken, çoğunluk spin durumları Fermi seviyesindeki enerji aralığından dolayı yarı iletken niteliktedir. Çoğunluk spin bandında, değerlik bandı maksimum enerjisi -0,082 eV'de ve iletim bandı minimum enerjisi 0,580 eV'de bulunur. Çoğunluk bandındaki bant aralığı 0,662 eV'dir ve bu, Γ noktadaki en yüksek dolu bandın ve X noktadaki en düşük boş bandın enerjileri kullanılarak hesaplanabilir. Bu bant boşluğu, Cr₂ZrSb bileşiğinin yarı metalik özellikte olduğunu gösterir ve E_F 'de %100 spin kutuplanmasına sebep olur. Cr₂ZrSb bileşiğinin çoğunluk bandında Fermi seviyesi civarındaki bant boşluğu, Cr₂TiSb bileşiğinin 0,7 eV olan bant boşluğundan daha küçüktür (Li vd. 2010). Cr₂CoSb ve Cr₂FeSb alaşımlarında, çoğunluk spin durumları Fermi seviyesinde metalik özellik gösterirken azınlık spin durumları Fermi seviyesine yakın bant aralığına sahiptir. Bu boşlukların genişlikleri Cr₂CoSb ve Cr₂FeSb alaşımları için sırasıyla 0,51 ve 0,7 eV'dir (Ahmadian 2013).

Cr₂ZrSb'deki çoğunluk bant aralığının nedenini bulmak için hesaplanan spin-kutuplu toplam ve atomlara ait durum yoğunlukları (DOS) Şekil 3'de görülmektedir. -3 eV ile +4 eV arasındaki enerji bölgelerinin esas olarak Cr ve Zr atomlarının d-durumlarından oluştuğu ve hem çoğunluk hem de azınlık spin durumlarında birbirleriyle

hibritleştiği görülebilir. Sb atomunun p-durumları -3 eV'nin altında bulunur. Yarı metalik bir malzemenin spin kutuplanma yüzdesi şu şekilde tanımlanır:

$$P = \frac{\rho_{\uparrow}(E_F) - \rho_{\downarrow}(E_F)}{\rho_{\uparrow}(E_F) + \rho_{\downarrow}(E_F)} \times 100\% \quad (4)$$

Burada $\rho_{\uparrow}(E_F)$ ve $\rho_{\downarrow}(E_F)$ sırasıyla Fermi seviyesinde spin-yukarı ve spin-aşağı elektronlar için toplam durum yoğunluklarıdır. $\rho_{\uparrow}(E_F)$ veya $\rho_{\downarrow}(E_F)$ sıfıra eşit olduğunda, E_F 'de %100 spin kutuplanmasıyla sonuçlanır.

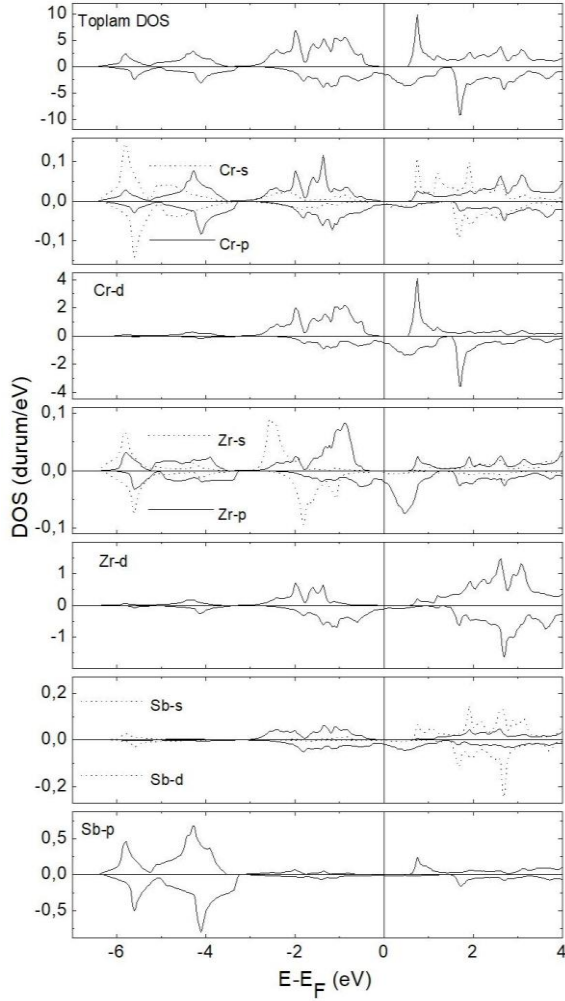
Fermi seviyesinde, spin-aşağı elektronları için sonlu ve önemli yoğunlukta durumların olduğu görülürken, $\rho_{\uparrow}(E_F)$ sıfırdır. Bu, Cr₂ZrSb bileşiğinin Fermi seviyesinde %100 spin kutuplanmasına sahip yarı metalik bir yapıya sahip olduğunu gösterir.

3.3. Manyetik özellikler

Manyetik özellikler Slater-Pauling kuralı ile doğrudan elektronik yapıya bağlanabilir (Galanakis vd. 2002). $m_{top} = z_{top} - 24$ denklemi, birim hücre başına bileşiğin toplam spin manyetik momentini verir, burada z_{top} bileşiğin toplam değerlik elektronu sayısıdır. Cr₂ZrSb bileşiğinin toplam manyetik momenti formül birimi başına $3 \mu_B$ olarak elde edilmiştir ve Slater-Pauling kuralı ile uyumludur. Tam sayı değerdeki toplam manyetik moment, yarı metalik malzemelerin önemli bir karakteristik özelliğidir. GGA yaklaşımı yardımıyla hesaplanan Cr₂ZrSb bileşiğinin toplam ve her bir atoma ait manyetik momentleri ve ara bölgedeki manyetik momenti Çizelge 2'de verilmiştir. Toplam manyetik momente en büyük katkının Cr atomundan geldiği açıktır. Sb atomunun manyetik momenti çok küçüktür. Cr'un atomik manyetik momenti, Zr atomunun manyetik momentine anti paraleldir ve bu da Cr₂ZrSb bileşiğinin ferrimanyet olduğunu gösterir.

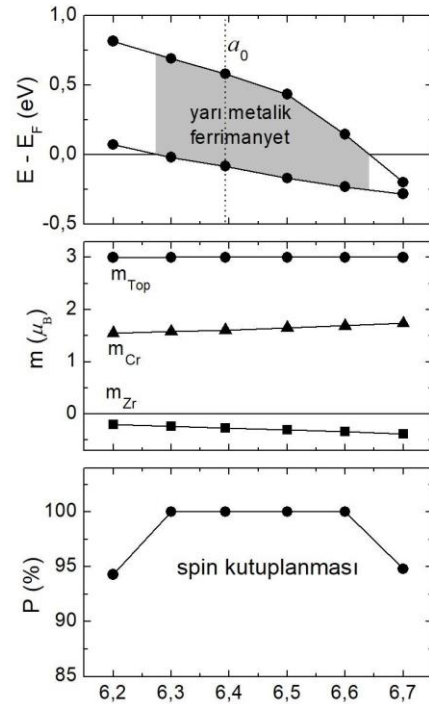
Çizelge 2. Cr₂ZrSb bileşiğinin temel durumu, hesaplanan toplam ve yerel manyetik momentleri, ara bölgedeki manyetik momentini ve bant boşluğu.

Bileşik	Temel durumu	m_{top} (μ_B)	m_{Cr} (μ_B)	m_{Zr} (μ_B)	m_{Sb} (μ_B)	m_{ara} (μ_B)	Bant boşluğu (eV)
Cr ₂ ZrSb	Ferrimanyet	3,00	1,608	-0,264	-0,046	0,045	0,662

**Şekil 3.** Cr₂ZrSb bileşiğine ait spin-kutuplu toplam ve atomlara ait durum yoğunlukları (DOS).

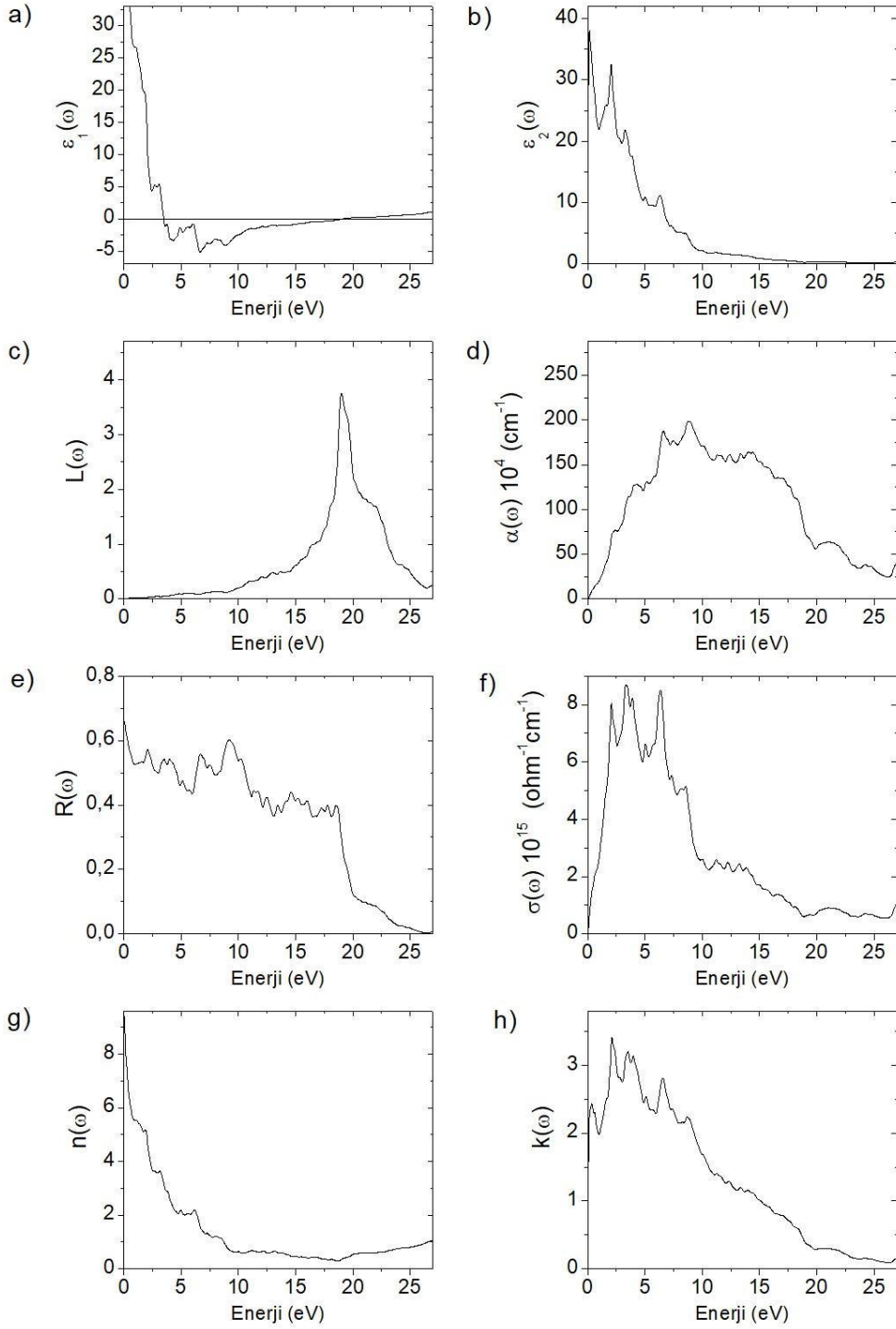
AlCu₂Mn-tipi yapıya sahip Cr₂ZrSb bileşiğinin yarı metalik karakteristiğinin örgü sabitine bağımlılığını araştırmak için örgü sabitinin 6,2-6,7 Å aralığında değişimi için elektronik yapılar hesaplanmıştır. Örgü sabitine bağlı olarak hesaplanan toplam manyetik momentler, Cr ve Zr atomlarının manyetik momentleri ve spin kutuplanması Şekil 4'te verilmiştir. Cr₂ZrSb Heusler bileşiğinin örgü sabitinin 6,3-6,6 Å aralığında değişimi için yarı metalik yapıya sahip olduğu görülmektedir. Cr₂ZrSb için hesaplanan toplam manyetik momentler, örgü sabitinin geniş bir aralığında $3 \mu_B$ 'dir. Örgü sabitinin geniş bir aralıkta değişimi Cr₂ZrSb bileşiğinin yarı metalik davranışını ve toplam manyetik momentini etkilemez. Örgü sabiti değiştiğinde her atomun spin manyetik momentleri farklı değişim gösterir. Cr atomunun hesaplanan manyetik momentleri örgü sabitinin artmasıyla hafifçe artarken, Zr

atomunun manyetik momentleri ters yönde artmaktadır. Cr atomunun toplam manyetik momente katkısı daha fazladır. Örgü sabitinin 6,2-6,7 Å aralığında değişimi için elde edilen Cr atomunun manyetik momentleri pozitif iken, Zr atomunun manyetik momentleri negatiftir, bu da Cr₂ZrSb'deki ferrimanyetik çiftlenimi gösterir. Denklem 4 kullanılarak hesaplanan %100 spin kutuplanma değerleri, örgü sabitinin 6,3-6,6 Å aralığında bileşiğin yarı metalik karakterini koruduğunu göstermektedir.

**Şekil 4.** Cr₂ZrSb bileşiğinin örgü sabitinin değişimine bağlı olarak yarı metalik durumu, toplam ve atomlara ait manyetik momentleri ve spin kutuplanması.

3.4. Optik özellikler

Optik özellikler, bir malzemenin optoelektronik doğasını anlamada önemli bir role sahiptir. Uygulanan bir elektromanyetik dalgaya karşı tepkiyi belirlemek için genellikle malzemenin dielektrik fonksiyonu hesaplanır. Kompleks dielektrik fonksiyonu $\epsilon(\omega) = \epsilon_1(\omega) + i\epsilon_2(\omega)$ şeklinde tanımlanır; $\epsilon_1(\omega)$ ve $\epsilon_2(\omega)$ dielektrik fonksiyonunun sırasıyla gerçekte ve sanal kısımlarıdır ve malzeme yüzeyine gelen elektromanyetik radyasyonun dağılımını ve emilimini gösterir. Cr₂ZrSb bileşiğinin optik özelliklerini incelemek için, dielektrik fonksiyonunun gerçekte $\epsilon_1(\omega)$ ve sanal $\epsilon_2(\omega)$ kısımları, elektron enerji kaybı fonksiyonu $L(\omega)$, soğurma katsayısı $\alpha(\omega)$, yansıtma $R(\omega)$, optik iletkenlik $\sigma(\omega)$, kırılma indisi $n(\omega)$ ve sönme



Şekil 5. Cr₂ZrSb Heusler bileşiği için foton enerjisine bağlı olarak (a) $\epsilon_1(\omega)$ dielektrik fonksiyonunun gerçek kısmı (b) $\epsilon_2(\omega)$ dielektrik fonksiyonunun sanal kısmı (c) $L(\omega)$ elektron enerji kaybı fonksiyonu (d) $\alpha(\omega)$ soğurma katsayısı (e) $R(\omega)$ yansıtma (f) $\sigma(\omega)$ optik iletkenlik (g) $n(\omega)$ kırılma indisi ve (h) $k(\omega)$ sönme katsayısı.

katsayısı $k(\omega)$ rastgele faz yaklaşımında (RPA) (Ren vd. 2012), FPLAPW yöntemi kullanılarak hesaplanmıştır (Delin vd. 1996, Rai ve Thapa 2014). Cr₂ZrSb Heusler bileşiği için elde edilen tüm sonuçlar, gelen foton enerjisine bağlı olarak Şekil 5'de verilmiştir.

Şekil 5a ve 5b'de, düşük enerjilerde dielektrik fonksiyonunun gerçek $\epsilon_1(\omega)$ ve sanal $\epsilon_2(\omega)$ kısımlarının büyük pozitif değerler aldığı görülmektedir (Sukhender vd. 2020). Pozitif $\epsilon_1(\omega)$ değerlerinin genellikle bağ

elektronlarının bantlar arası geçişleriyle ilişkili olduğu bilinmektedir. 3,5 eV ile 19,1 eV enerji aralığında dielektrik fonksiyonunun gerçek kısmı negatif değerler alır, yani bu enerji aralığında dalgalar malzemelerden geçemez ve bu da malzemelerin dalgaları soğuran manyetik filtreler olarak kullanılmasını mümkün kılar. Dielektrik fonksiyonunun gerçek kısmının negatif değerleri metalik davranışa işaret ederken, pozitif değerler dielektrik davranışa işaret eder (Yadav ve Jain

2025). Şekil 5b'de Cr₂ZrSb bileşiğinin dielektrik fonksiyonunun sanal kısmındaki pikler, bantlar arası ve bant içi geçişlerle ilişkilidir. $\epsilon_2(\omega)$ 'nin büyük değeri, düşük enerjilerde meydana gelen bant içi geçişlerle bağlantılıdır. Bant yapısı ve DOS analiz edildiğinde, bu pikler esas olarak spin-yukarı kanalındaki geçişlerden kaynaklanmaktadır. Şekil 5c'de $L(\omega)$, enerji kaybını temsil eder. Elektron enerji kaybı fonksiyonu, bir elektronun malzeme içinde hareket etmesiyle enerjinin kaybolduğu etkileşimi tanımlar. $L(\omega)$ 'da, plazma rezonansı ile ilişkili olan 19 eV'lik enerjide önemli bir tepe noktası vardır ve buna karşılık gelen frekans, plazma frekansı olarak adlandırılır. Şekil 5d'de verilen $\alpha(\omega)$ soğurma katsayısı spektrumundan, çok yakın bantlardaki geçişlerden kaynaklanan birçok tepe noktasının olduğu görülür. Foton enerjisinin bir fonksiyonu olarak optik yansıtma $R(\omega)$, Şekil 5e'de görülmektedir. Düşük enerjilerde Cr₂ZrSb'nin yansıtıcılığı yüksektir ve bileşik neredeyse %100 yansıtıcıdır. Ayrıca 19 eV plazmon enerjisinden sonra yansımının azaldığı ve sifıra yaklaştığı görülmektedir. Şekil 5f'de görülen optik iletkenlik $\sigma(\omega)$, dielektrik fonksiyonunun sanal kısmından hesaplanabilir. Optik iletkenlik, belirli bir frekansta gelen foton nedeniyle üretilen akım yoğunluğu olarak tanımlanır. Optik iletkenlik spektrumunda bantlar arası ve bant içi geçişlere karşılık gelen birkaç pik görülmektedir. Herhangi bir malzemenin optik özelliklerini tanımlayan bir diğer önemli fiziksel nicelik, Şekil 5g'de foton enerjisinin bir fonksiyonu olarak verilen $n(\omega)$ kırılma indisidir. Bir malzemenin kırılma indisi, ışığın malzeme boyunca yayılmasını tanımlar. Kırılma indisi, metalik bileşiklerdeki serbest elektronlardan dolayı düşük enerji sınırında büyük bir değere sahiptir. Gelen fotonun enerjisi arttıkça kırılma indisinin değeri azalmaktadır. Sönme katsayısı $k(\omega)$, Şekil 5h'de görüldüğü gibi, dielektrik fonksiyonunun sanal kısmı $\epsilon_2(\omega)$ ile benzer şekle sahip olup, bir malzeme tarafından radyasyonun emilim oranını ölçmek için kullanılır. Sönme katsayısındaki pikler maksimum soğurma anlamına gelir ve enerjinin artmasıyla sönme katsayısında önemli bir azalma görülmektedir. Küçük sönüm katsayısı, elektromanyetik dalgaların malzemelerden kolayca geçebileceğini gösterir.

4. Sonuçlar ve Tartışma

Cr₂ZrSb Heusler bileşiğinin elektronik yapısı, manyetik ve optik özellikleri tam potansiyel çizgisel genişletilmiş düzlem dalga (FP-LAPW) yöntemi ile teorik olarak incelenmiştir. Sonuçlar, bu bileşiğin örgü sabitinin geniş bir aralığında $3 \mu_B$ 'lik manyetik momente sahip yarı-metalik ferrimanyet olduğunu göstermiştir. Bileşik, yarı metalik davranış bölgesinde ideal bir spin-kutuplanma değerine sahiptir. Elektronik yapı hesaplamaları, Cr₂ZrSb

Heusler bileşiğinin spintronik cihazlarda uygulama potansiyeli olan ilginç elektronik ve manyetik özelliklere sahip olduğunu göstermektedir.

Ayrıca, Cr₂ZrSb Heusler bileşiğinin optik özellikleri, optoelektronik uygulamalar için uygun koşulları araştırmak amacıyla incelenmiştir. Rastgele faz yaklaşımında (RPA), Cr₂ZrSb Heusler bileşiği için dielektrik fonksiyonunun gerçek ve sanal kısımları, elektron enerji kaybı fonksiyonu, soğurma katsayısı, yansıtma, optik iletkenlik, kırılma indisi ve sönme katsayısı hesaplanmış ve spektrumları analiz edilmiştir.

Etik Standartlar Bildirgesi

Bu çalışma tüm etik standartlara uygun olarak tasarlanmıştır.

Yazarlık Katkı Beyanı

Yazar: Fikir Sahibi, Kaynaklar, Araştırma, Metodoloji, Yazma, Proje Yürütücüsü

Çıkar Çatışması Beyanı

Bu makalenin içeriğiyle ilgili olarak beyan edilecek hiçbir çıkar çatışması yoktur.

Verilerin Kullanılabilirliği

Bu çalışma sırasında oluşturulan veya analiz edilen tüm veriler, yayınlanan bu makaleye dahil edilmiştir.

Teşekkür

Bu araştırma Eskişehir Teknik Üniversitesi Bilimsel Araştırma Projeleri Koordinatörlüğü tarafından desteklenmiştir (Proje No: ESTÜ BAP 23ADP086)

5. Kaynaklar

- Ahmadian, F., 2013. New Heusler compounds Cr₂YSb (Y = Fe, Co and Ni): Magnetic and electronic properties. *Journal of Superconductivity and Novel Magnetism*, **26**, 1737-1743. <https://doi.org/10.1007/s10948-012-1893-6>
- Ahmadian, F. and Salary A., 2014. Half-metallicity in the Inverse Heusler compounds Sc₂MnZ (Z= C, Si, Ge, and Sn). *Intermetallics*, **46**, 243-249. <https://doi.org/10.1016/j.intermet.2013.11.021>
- Balke, B., Fecher, G.H. and Felser, C., 2013. Spintronics. Springer, Dordrecht, 15-43.
- Błaha, P., Schwarz, K., Tran, F., Laskowski, R., Madsen, G.K.H. and Marks, L.D., 2020. WIEN2k: An APW+lo program for calculating the properties of solids. *The Journal of Chemical Physics*, **152**, 074101. <https://doi.org/10.1063/1.5143061>
- Chen, X-Q., Podloucky, R. and Rogl, P., 2006. Ab initio prediction of half-metallic properties for the ferromagnetic Heusler alloys Co₂MSi (M = Ti, V, Cr). *Journal of Applied Physics*, **100**, 113901. <http://dx.doi.org/10.1063/1.2374672>
- de Groot, R.A., Mueller, F.M., van Engen, P.G. and Buschow, K.H.J., 1983. New class of materials: Half-

- metallic ferromagnets. *Physical Review Letters*, **50** (25), 2024-2027.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.50.2024>
- Delin, A., Eriksonn, A.O., Ahuja, R., Johansson, B., Brooks, M.S.S., Gasche, T., Auluck, S. Nad Wills, J.M., 1996. Optical properties of the group-IVB refractory metal compounds. *Physical Review B*, **54**, 1673-1681.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.54.1673>
- Dresselhaus, M.S., 1966. Optical properties of solids. Academic Press, New York.
- Emami, S.A.A., Amirabadizadeh, A., Nourbakhsh, Z., Baizae, S.M. and Sadr, S.M.A., 2018. Study of the structural, electronic, magnetic, and optical properties of Mn₂ZrGa full-Heusler alloy: First-principles calculations. *Journal of Superconductivity and Novel Magnetism*, **31**, 127-134.
<https://doi.org/10.1007/s10948-017-4174-6>
- Felser, C., Fecher, G.H. and Balke, B., 2007. Spintronics: A challenge for materials science and solid-state chemistry. *Angewandte Chemie International Edition*, **46**, 668-699.
<https://doi.org/10.1002/anie.200601815>
- Galanakis, I., Dederichs, P.H. and Papanikolaou, N., 2002. Slater-Pauling behavior and origin of the half-metallicity of the full-Heusler alloys. *Physical Review B*, **66**, 174429.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.66.174429>
- Galanakis, I., Mavropoulos, P. and 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**, 765-775.
<http://dx.doi.org/10.1088/0022-3727/39/5/S01>
- Galanakis, I., Özdoğan, K. Şasioğlu, E. and Aktaş, B., 2007. Ab initio design of half-metallic fully compensated ferrimagnets: The case of Cr₂MnZ (Z=P, As, Sb, and Bi). *Physical Review B*, **75**, 172405.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.75.172405>
- Hakimi, M., Venkatesan, M., Rode, K., Ackland, K. and Coey, J.M.D., 2013. The zero-magnetization Heusler ferrimagnet. *Journal of Applied Physics*, **113**, 17B101.
<https://doi.org/10.1063/1.4794744>
- Heusler, F., 1903. Über magnetische manganlegierungen. *Verhandlungen der Deutschen physikalischen Gesellschaft*, **5**, 219-223.
<https://archive.org/details/verhandlungende33unkngoog>
- Hongzhi, L., Zhiyong, Z., Li, M., Shifeng, X., Heyan, L., Jingping, Q., Yangxian, L. and Guangheng, W., 2007. Electronic structure and magnetic properties of Fe₂YSi (Y= Cr, Mn, Fe, Co, Ni) Heusler alloys: a theoretical and experimental study. *Journal of Physics D: Applied Physics*, **40**, 7121-7127.
<http://dx.doi.org/10.1088/0022-3727/40/22/039>
- Ishida, S., Fujii, S., Kashiwagi, S. and Asano, S., 1995. Search for half-metallic compounds in Co₂MnZ (Z=IIIb, IVb, Vb Element). *Journal of Physical Society of Japan*, **64**, 2152-2157.
<https://doi.org/10.1143/JPSJ.64.2152>
- Kandpal, H.C., Fecher, G.H. and Felser, C., 2007. Calculated electronic and magnetic properties of the half-metallic, transition metal based Heusler compounds. *Journal of Physics D: Applied Physics*, **40**, 1507-1523.
<https://doi.org/10.1088/0022-3727/40/6/S01>
- Kervan, S. and Kervan, N., 2012. Half-metallicity in the full-Heusler Fe₂MnP compound. *Intermetallics*, **24**, 56-59.
<https://doi.org/10.1016/j.intermet.2012.01.030>
- Kervan, N., 2012. Half-metallicity in the full-Heusler Co₂ScP compound: A density functional study. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, **324**, 4114-4117.
<https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2012.07.034>
- Kervan, N., Kervan, S., Canko, O., Atis, M. and Taşkın, F., 2016. Half-metallic ferrimagnetism in the Mn₂NbAl full-Heusler compound: a First-principles study. *Journal of Superconductivity and Novel Magnetism*, **29**, 187-192.
<https://doi.org/10.1007/s10948-015-3228-x>
- Kieven, D. and Klenk, R., 2010. I-II-V half-Heusler compounds for optoelectronics: Ab initio calculations. *Physical Review B*, **81**, 075208.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.81.075208>
- Kohn, W. and Sham, L.G., 1965. Self-consistent equations including exchange and correlation effects. *Physical Review*, **140**, A1133-A1138.
<https://doi.org/10.1103/PhysRev.140.A1133>
- Kuo, Y.K., Sivakumar, K.M., Chen, H.C., Su J.H. and Lue, C.S., 2005. Anomalous thermal properties of the Heusler alloy Ni₂+xMn_{1-x}Ga near the martensitic transition. *Physical Review B*, **72**, 054116.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.72.054116>
- Li, J., Li, Y., Zhou, G., Sun, Y. and Sun, C.Q., 2009. A first principles study on the full-Heusler compound Cr₂MnAl. *Applied Physics Letters*, **94**, 242502.
<https://doi.org/10.1063/1.3156811>
- Li, J., Chen, G., Liu, H., Li, Y., Li, J. and Xu, X., 2010. A first-principles study on the lower-valence coexisting Cr₂TiX (X=Al, Ga, Si, Ge, Sn, Sb) Heusler alloys. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, **322**, 1-6.
<https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2009.07.048>
- Liu, G.D., Dai, X.F., Liu, H.Y., Chen, J.L., Li Y.X., Xiao, G. and Wu, G.H., 2008. Mn₂CoZ (Z=Al, Ga, In, Si, Ge, Sn, Sb) compounds: Structural, electronic, and magnetic properties. *Physical Review B*, **77**, 014424.

- <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.77.014424>
- Murnaghan, F.D., 1944. The compressibility of media under extreme pressures. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, **30**, 244-247.
<https://doi.org/10.1073/pnas.30.9.244>
- Özdoğan, K., Şaşıoğlu, E., Aktaş, B. and Galanakis, I., 2006. Doping and disorder in the Co₂MnAl and Co₂MnGa half-metallic Heusler alloys. *Physical Review B*, **74**, 172412.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.74.172412>
- Özdoğan, K., Galanakis, I., Şaşıoğlu, E. and Aktaş, B., 2007. Defects-driven appearance of half-metallic ferrimagnetism in Co–Mn-based Heusler alloys. *Solid State Communications*, **142**, 492-497.
<https://doi.org/10.48550/arXiv.cond-mat/0702437>
- Perdew, J.P., Burke, S. and Ernzerhof, M., 1996. Generalized gradient approximation made simple. *Physical Review Letters*, **77**, 3865-3868.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.77.3865>
- Qi, S., Zhang, C.H., Chen, B. and Shen, J., 2015. First-principles study on the band structure, magnetic and elastic properties of half-metallic Cr₂MnAl. *Modern Physical Letters B*, **29**, 1550139.
<https://doi.org/10.1142/S0217984915501390>
- Ouardi, S., Fecher, G. H., Balke, B., Kozina, X. and Stryganyuk, G. 2010. Electronic transport properties of electron-and hole-doped semiconducting C1b Heusler compounds: NiTi_{1-x}MxSn (M=Sc, V). *Physical Review B*, **82**, 085108.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.82.085108>
- Rai, D.P. and Thapa, R.K., 2014. Study of electronic, magnetic, optical and elastic properties of Cu₂MnAl a gapless full Heusler compound. *Journal of Alloys and Compounds*, **612**, 355-360.
<https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2014.05.056>
- Ren, X., Rinke, P., Joas, C. and Scheffler, M., 2012. Random-phase approximation and its applications in computational chemistry and materials science. *Journal of Materials Science*, **47**, 7447-7471.
<https://doi.org/10.1007/s10853-012-6570-4>
- Sharma, V. and Pilania, G., 2013. Electronic, magnetic, optical and elastic properties of Fe₂YAl (Y=Ti, V and Cr) using first-principles methods. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, **339**, 142-150.
<https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2013.03.008>
- Singh, D., 1994. Planes Waves, Pseudo-Potentials and the LAPW Method, Kluwer Academic Publishers, Boston, Dordrecht, London.
- Sukhender, S., Mohan, L., Kumar, S., Bhardwaj, S.R. and Verma, A.S., 2020. Electronic, optical, elastic and magnetic properties of Co₂VZ (Z=As, B, In, Sb) full Heusler compounds. *East European Journal of Physics*, **4**, 51-62.
<https://doi.org/10.26565/2312-4334-2020-4-07>
- Taşkın, F., Atis, M., Canko, O., Kervan, S. and Kervan, N., 2017. Half-metallicity in the inverse Heusler Ti₂RuSn alloy: A first-principles prediction. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, **426**, 473-478.
<https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2016.06.071>
- Wei, X.P., Deng, J.B., Mao, G.Y., Chu, S.B. and 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*, **29**, 86-91.
<https://doi.org/10.48550/arXiv.1110.5411>
- Yadav, A. and Jain, V.K., 2025. Study of structural, magnetic, electronic, and optical properties of Fe₂MnSn Heusler alloy. *Journal of Electronic Materials*, **54**, 7492–7502.
<https://doi.org/10.1007/s11664-025-12132-x>
- Zayak, A.T., Entel, P., Rabe, K.M., Adeagbo, W. A. and Acet, M., 2005. Anomalous vibrational effects in nonmagnetic and magnetic Heusler alloys. *Physical Review B*, **72**, 054113.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.72.054113>
- Zheng, N. and Jin, Y., 2012. Band-gap and Slater-Pauling rule in half-metallic Ti₂-based Heusler alloys: A first-principles study. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, **324**, 3099-3104.
<https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2012.05.009>