



Tam Heusler Yapıdaki Bi₂FeNi Alaşımının Esneklik, Manyetoelektronik, Yapısal ve Termodinamik Özelliklerinin Teorik Olarak İncelenmesi

Theoretical Investigation of Flexibility, Magneto Electronic, Structural and Thermodynamic Properties of Bi₂FeNi Alloy with Full Heusler Structure

Erol Albayrak^{1*}, Fikri Erdem Şeşen²

¹ Kırşehir Ahi Evran Üniversitesi, Mühendislik Mimarlık Fakültesi, Metalürji ve Malzeme Mühendisliği Bölümü, Kırşehir, Türkiye

² Kırıkkale Üniversitesi, Mühendislik ve Doğa Bilimleri Fakültesi, Metalürji ve Malzeme Mühendisliği Bölümü, Kırıkkale, Türkiye

Başvuru/Received: 30/11/2023 Kabul/Accepted: 30/01/2024 Çevrimiçi Basım/Published Online: 30/06/2024

Son Versiyon/Final Version: 30/06/2024

Öz

Spintronik ve manyetoelektronik özellikleri oldukça ilgi gören Heusler alaşımlar sentezlerinin zaman alması ve maliyetli olması yüzünden öncelikle torik olarak çalışılmaktadırlar. XY₂Z formuna sahip alaşımlar Full Heusler alaşımlar olarak adlandırılmaktadır. Bi₂FeNi alaşımı da Full Heusler yapıda bir alaşım olup bu çalışmada alaşıma ait yapısal, manyetik, elektronik ve elastik özellikler yoğunluk fonksiyonel teorisi yaklaşımı (DFT) kullanılarak teorik olarak incelenmiştir. FeBi₂Ni alaşımı ile alakalı bugüne kadar literatürde herhangi bir deneysel ya da teorik çalışma rapor edilmemiştir. Bu çalışmada FeBi₂Ni alaşımının mekanik ve elektronik özellikleri spintronik ve manyetoelektronik cihaz uygulamalarında kullanılabilirliklerinin anlaşılması amaçlanarak incelenmiştir. Alaşıma ait hesaplanan optimize edilmiş örgü sabiti Quantum Espresso paket programı kullanılarak 6,78925 Å olarak elde edildi, alaşımın elektronik bant grafikleri çizdirildi. Bu grafikler sayesinde alaşıma ait iletkenlik, manyetizasyon ve atomlar arası bağların türü incelenmiştir. Bu incelemeler sonucunda Full Heusler yapıdaki Bi₂FeNi üçlü alaşımının metalik iletken ve manyetik özelliklere sahip olduğu düşünülmektedir. Alaşıma ait elastik sabitleri (C₁₁, C₁₂, C₄₄) hesaplanarak alaşımın Born kararlılık kriterlerine göre mekanik olarak kararlı olduğu anlaşıldı. Young modülü, Bulk modülü gibi alaşıma ait tahminler yapmamızı sağlayan nicelikler hesap edilerek alaşımın sünek bir yapıya sahip olduğu, sıkışabilir olduğu ve anizotropik davranış gösterdiği anlaşıldı. Bu bilgiler ışığında alaşımın spintronik ve manyetoelektronik uygulamalarda kullanılabileceği düşünülmektedir.

Anahtar Kelimeler

“Spintronik, Full Heusler alaşımlar, Yapısal özellikler”

Abstract

Heusler alloys, whose spintronic and magnetoelectronic properties are of great interest, are primarily studied as toric alloys due to the time-consuming and costly synthesis. Alloys with the XY₂Z form are called Full Heusler alloys. Bi₂FeNi alloy is also a full Heusler alloy and in this study the structural, magnetic, electronic and elastic properties of the alloy have been investigated theoretically using the density functional theory approach (DFT). No experimental or theoretical studies on FeBi₂Ni alloy have been reported in the literature so far. In this study, the mechanical and electronic properties of FeBi₂Ni alloy are investigated with the aim of understanding their usability in spintronic and magnetoelectronic device applications. The calculated optimized lattice constant of the alloy was obtained as 6.78925 Å using the Quantum Espresso package program and the electronic band graphs of the alloy were plotted. Thanks to these graphs, the conductivity, magnetization and the type of interatomic bonds of the alloy were investigated. As a result of these investigations, Bi₂FeNi ternary alloy with full Heusler structure is considered to have metallic conductive and magnetic properties. The elastic constants (C₁₁, C₁₂, C₄₄) of the alloy were calculated and it was found that the alloy is mechanically stable according to Born stability criteria. Quantities such as Young modulus and Bulk modulus, which allow us to make predictions about the alloy, were calculated and it was understood that the alloy has a ductile structure, is compressible and shows anisotropic behavior. In the light of this information, it is thought that the alloy can be used in spintronic and magnetoelectronic applications.

Key Words

“Spintronic, Full Heusler alloys, Structural properties”

1. Giriş

1903 yılında yapılan bir çalışmada Friedrich Heusler, bazı alaşımların içerisinde ferromanyetik özelliği olmayan atomlara sahip olmalarına rağmen alaşımların ferromanyetik özelliğe sahip olabileceklerini ortaya koymuştur. Bu durum Heusler alaşımların kendilerini oluşturan bileşenlerden farklı manyetik, elektronik vb. özelliklere sahip olabileceğini göstermiş ve oldukça ilgi çekmiştir (İyigör ve ark., 2022). Bu şekilde bileşenlerinden farklı özellikler gösterebilen XY_2Z formülüne sahip intermetalik alaşım türü Friedrich Heusler'in keşfine atfen tam Heusler alaşımlar olarak adlandırılmışlardır. Bu alaşımlar spintronik cihazların ve manyetik sensörlerin geliştirilmesinde önemli rol oynamaktadırlar. Başlangıçta yapılan incelemelerde Heusler alaşımların iç içe geçmiş 4 yüzey merkezli kübik (FCC) örgü yapısında olduğu anlaşılmış ve alaşımların L_{21} fazı verilen bir fazda kristalleştikleri tespit edilmiştir (Albayrak, 2022). Zaman içinde yapılan çalışmalarda, iç içe geçmiş 4 FCC hücreden bir tanesinin örgüden ayrılabilirdiği anlaşılmış ve bu tür alaşımlara da Yarı Heusler alaşımlar denilmiştir. Genel adıyla Heusler alaşımları, alaşımları oluşturan bileşenlerin farklı özellikleri olabilmesine rağmen termodinamik, manyetik, süper iletkenlik gibi özellikleri sayesinde bilim insanları için ümit vaat eden yeni bir çalışma alanı olmuştur (İyigör ve ark., 2022; Lagrone, 2023). Teorik olarak ümit veren Heusler alaşımların sentezlenmesi ise her zaman mümkün olmayabilmektedir. Bu alaşımların yapılması için kullanılacak malzemeler ve cihazlar pahalıdır. Ön bir çalışma yapılmadan hangi alaşımın işe yarar olduğunu anlamadan gelişmiş güzel belirlenen malzemelerden Heusler alaşımlar elde etmek eldeki kaynakların büyük ihtimalle boş yere harcanmasına neden olacaktır. Bu yüzden Heusler alaşımlarının öncelikle teorik olarak çalışılıp bu çalışmalar sonucunda ümit vaat eden alaşımların seçilerek sentezlenmesi en mantıklı yaklaşımdır. Bu yüzden bu çalışmada öncelikli olarak seçilen malzemeler ile teorik bir çalışma yapılarak sentezlenecek alaşımın ümit vaat edip etmediğinin belirlenmesi amaçlandı.

$Fm\bar{3}m$ uzay grubuna ait atomik dizilimine sahip olan Bi_2FeNi FH alaşımı içerisindeki bizmut, metal döküm parçalarının üretiminde, lehim işlemlerinde kurşun elementi yerine ve frengi hastalığına karşı antisifilitik (antisyphilitic) olarak kullanılmaktadır (Lagrone, 2023). Bi_2FeNi FH alaşımındaki Nikel, paslanmaz çelik alaşımları, kaplama sektörü, denizcilik, katalitik işlemler ve pillerde yaygın olarak kullanılmaktadır (Philips, 2023). Alaşım içerisindeki Demir ise çelik alaşımlarında, makinelerde, alet-edevatlarda, inşaatlarda sıkça kullanılmaktadır (Nichelson, 2023). Bi_2FeNi FH alaşımındaki Fe, Bi ve Ni bileşenlerin kullanım alanları göz önüne alındığında alaşımın esneklik, termodinamik, elektronik ve yapısal özelliklerinin teorik olarak araştırılmasının bilime katkı sağlayacağı düşünülmüş ve bu çalışmada Bi_2FeNi FH alaşımı, Yoğunluk Fonksiyon Teorisi (DFT) yaklaşımını kullanan Quantum Espresso paket programı ile incelendi. DFT yaklaşımı atomik/moleküler yapıyı çekirdek-elektron etkileşimlerinden dolayı var olan enerji ve dış alanlardan gelen enerjilerin toplamını, elektronların yoğunluk fonksiyonlarını kullanarak hesaplar. Bu şekilde en kararlı durumlar atomik/moleküler sistemin minimum enerji değeri hesaplanarak tayin edilir (Chermete, 1998). Bu çalışmada, Bi_2FeNi FH alaşımı DFT yaklaşımı ile belirtilen şekilde hesaplamalar yapılarak incelendi. Alaşım hakkında henüz deneysel veya teorik herhangi bir çalışma bulunmamaktadır. Bu yüzden çalışmada yapılan hesaplamaların alaşımın bazı özelliklerine ışık tutacağı düşünülmektedir. Bununla birlikte çalışmada asıl amaçlanan alaşımın olası spintronik ve manyetoelektronik uygulamalarda kullanılabilirliğinin anlaşılmasıdır.

2. Materyal ve Yöntem

Çok elektronlu bir atomik sistem için taban durumlara ait toplam enerji Hamilton denklemleri ile eşitlik 1'deki gibi ifade edilebilir.

$$E_{TOP} = E_{KIN} + E_{POT} \quad (1)$$

Bu denklem toplam enerji için kinetik (E_{KIN}) ve potansiyel (E_{POT}) enerjilerin toplamını içerir. Çok elektronlu atomlar için taban durum enerjilerinin elektron yoğunluğuna bağlılıkları modern DFT'nin temelini atan Hohenberg ve Kohn tarafından eşitlik 2'deki denklemlerle verilmiştir (Hohenberg ve Kohn, 1964).

$$E_{\theta} [n] = \int v(r) n(r) d(r) + F[n(r)] \quad (2)$$

Bu eşitliğin geliştirilmesi ile atomların denge durumundaki en düşük enerjileri hesaplanabilecektir. Eşitlik 2 üzerinde yapılan çalışmalar ile denge durumundaki en düşük enerji ifadesi Kohn ve Sahm tarafından denklem 3'teki şekliyle gösterilmiştir (Kohn ve Sahm, 1965). Burada $n(r)$ elektron yoğunluğu olup N tane elektron arasındaki etkileşim enerjisi $\rho(r)$ şekil^te görüldüğü gibi ifade edilmiştir.

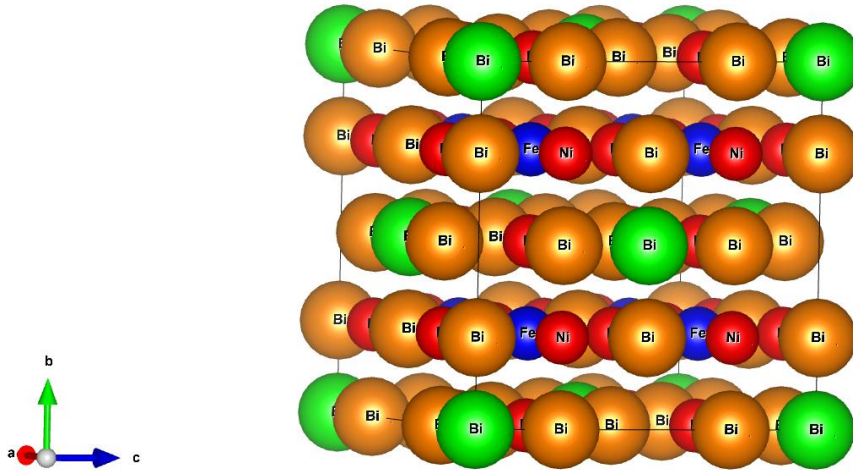
$$\rho(r) = \sum_{j=1}^N |\phi_j(r)|^2 \quad (3)$$

Minimum enerji değeri hesaplanırken elektronlar arasındaki etkileşimlerin tam olarak bilinmesi gerekir. Fakat atomlardaki elektronların hangilerinin etkileşip hangilerinin etkileşmediğini bilmek çok zordur. Bu yüzden de denge durumuna karşılık gelen minimum enerji değeri yani en kararlı hale karşılık gelen minimum enerji değerinin hesaplanması için yeni bir yaklaşım gerekmektedir. LDA adı verilen yerel yoğunluk yaklaşımı bu sorunu çözmekte önemli bir rol oynar. İlerleyen zamanlarda LDA yaklaşımına eklemeler yapılarak daha başarılı sonuçlara ulaşılması için iyileştirmeler de yapıldı. Yapılan iyileştirmeler sonucunda elde edilen yeni yaklaşıma Perdew-Burke-Ernzelhof, Genelleştirilmiş Gradyent Yaklaşımı (PBE-GGY) denilmektedir (Perdev ve ark., 1996). Alaşımların kararlı olduğu en düşük enerji değerlerini hesaplamak için atomlara ait kor ve değerlik elektronlarının etkileşimleri de toplam enerji değerine katkı sunar. Ancak PBE-GGY yaklaşımı kor elektronların değerlik elektronlarla etkileşimini içermemektedir. Daha doğru hesaplamalar

yapabilmek için PBE-GGY yaklaşımına kor ve değerlik elektronlarının etkileşiminden gelen enerji katkısını da eklemek gerekir. Kor ve değerlik elektronlarının etkileşiminden gelen katkı Schrödinger dalga denkleminde sanal bir potansiyel olarak eklenir. Schrödinger dalga denkleminde eklenen potansiyeller Pseudo Potansiyeller olarak adlandırılırlar (Garrity ve ark., 2014). FeBi_2Ni için yapılan tüm hesaplamalar Quantum-ESPRESSO (Giannozzi ve ark., 2009) paket programı kullanılarak yapıldı. Hesaplamalarda kor ve değerlik elektro etkileşimleri için PBE-GGY (Perdew ve ark., 1996) yaklaşımı kullanıldı. Fe, Bi ve Ni atomlarına ait hesaplamalar için kullanılan Pseudopotansiyeller, Rappe gruptan (Srivastava., 1990) alındı. Hesaplamalarda kullanılan elektronik dalga fonksiyonlarının 13,6 elektron volta karşılık gelen enerji birimi Rydberg (Ry) cinsinden kesme enerjisi 40 Ry, yük yoğunluğunu temsilen kinetik enerji değeri 400 Ry olarak belirlendi. Brillouin-zone entegrasyonları $8 \times 8 \times 8$ k-noktaları mesh değerleri kullanılarak gerçekleştirildi. Yapılan hesaplamalarda Smearing parametresi (Kohn-Sham orbitallerinin popülasyonunu yumuşatarak değişimini sağlayan bir fonksiyonla genişletilmesini sağlayan parametre) 0,02 Ry alındı.

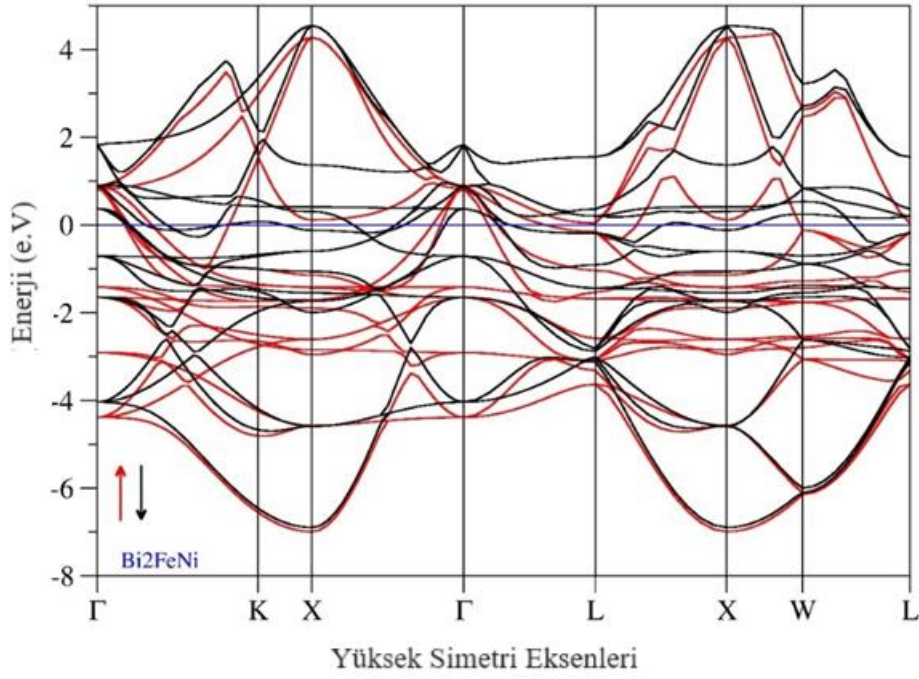
3. Bulgular

FeBi_2Ni alaşımının $Fm\bar{3}m$ uzay grubuna uygun ilkel hücre yapısı ve bu yapı içerisinde atomların yerleşimi şekil 1’de gösterilmiştir. Hesaplamalara başlamadan önce alaşımın bileşenleri olan atomların konumları, en kararlı durum için x-y-z koordinat sistemine göre; merkeze konumlandırılan Bi atomu (a-Bi) (0, 0, 0), Fe (1/4, 1/4, 1/4), ikinci Bi atomu (b-Bi) (1/2, 1/2, 1/2) ve Ni (3/4, 3/4, 3/4) olarak belirlenmiştir. Atomik koordinatlar belirlenirken birçok kombinasyon denenmiş ve atomik yapının en kararlı olduğu yukarıda belirtilen konumlara yerleştirilen atomların oluşturduğu alaşım için hesaplamalar yapıldı. Belirlenen atomik pozisyonlara yerleştirilen atomlara ait kararlı durum örgü parametresi hesaplanmış, akabinde de Bi_2FeNi FH alaşımının kristal örgü yapısı şekil 1’de gösterildiği şekliyle çizdirildi. Şekil 1’de Bizmut atomları koordinat sisteminin merkezine yerleştirilmiş olduğundan alaşımın adı genel formüle göre değil de referans olarak merkeze yerleştirilen Bizmuta göre Bi_2FeNi olarak seçilmiştir.



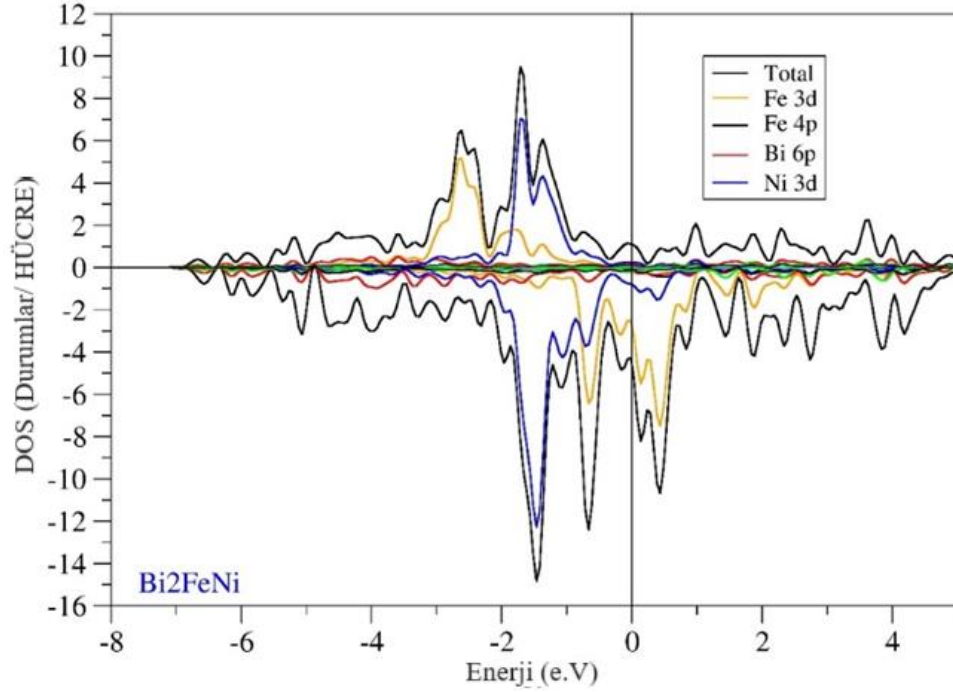
Şekil 1. Bi_2FeNi FH alaşımının örgü sabiti göz önüne alınarak çizilmiş birim hücre yapısı.

Şekil 1’deki gibi oluşturulan kristal yapı için kararlı olduğu denge durumunu bulmak amaçlı olarak toplam enerjinin minimum değeri hesaplandı. Hesaplama sonucu elde edilen kararlı durum örgü sabiti değeri $a = 6,78925 \text{ \AA}$ olarak belirlendi. Literatürde Bi_2FeNi FH alaşımı ile ilgili 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 örgü sabiti ile bu çalışmada bulunan $a = 6,78925 \text{ \AA}$ değerinin %99,766 oranında uyumlu olduğu görüldü. Alaşımın elektronik özelliklerinin tahmin edilmesi için yapılan hesaplamalar sonucunda elde edilen verilerle Bi_2FeNi FH alaşıma ait elektronik bant grafiği yüksek simetri eksenli spin yönelimlerine bağlı olarak çizdirildi. Çizdirilen elektronik bant grafiği şekil 2’de görülmektedir.



Şekil 2. Bi_2FeNi FH alaşımının elektronik bant grafiği (yüksek simetri eksenli spin yönelimlerine göre).

Şekilde 2'deki elektronik bant grafiğinde kırmızı renk spin yukarı (spin up) yüksek simetri yönelimi için, siyah renk spin aşağı (spin down) yüksek simetri eksenini, mavi renk ise Fermi enerji seviyesini göstermek için kullanıldı. spin yukarı ve spin aşağı durumlarını temsil eden eğriler Fermi enerji seviyesi civarında hem birbirlerini hem de Fermi enerji seviyesini kesmektedirler. spin yukarı ve spin aşağı eğrilerinin Fermi enerji seviyesini ve birbirlerini kesmiş olması aralarında herhangi bir boşluk yani yasak enerji aralığı olmadığını gösterir. Fermi enerji seviyesinin üzerinde kalan valans bandı ile alt tarafında kalan iletkenlik bandı arasında yasak enerji aralığı olmaması bu bantlardaki elektronların bantlar arasında geçiş yapabildiklerini gösterir. İletkenlik ve valans bandı arasında elektron alışverişinin olması alaşımın metalik iletken karakterde olduğunu gösterir. Ayrıca spin yukarı ve spin aşağı eğrilerinin yekpare bir görüntüde olmaması bu alaşımın manyetik bir momentinin olduğu ve bu yüzden de alaşımın manyetik özellikte olduğunu göstermektedir. Elektronik bant grafiğine ek olarak elektronik durum yoğunluğu eğrileri de çizdirilerek bu grafik Şekil 3'te verilmiştir.



Şekil 3. Bi_2FeNi FH alaşımının durum yoğunluğu eğrileri.

Durum yoğunluğu eğrileri incelendiğinde Fermi enerji düzeyi yakınlarında iletkenliğe en fazla katkının spin yukarı yöneliminde Ni atomunun 3d orbitalindeki elektronlardan geldiği görüldü. Spin aşağı yöneliminde ise iletkenliğe en çok katkı sırasıyla Fe 3d, Ni 3d ve Bi 6p orbitallerindeki elektronlardan gelmektedir.

Malzemelerin esnekliği malzemeye uygulanan zorlamaya karşı koyması olarak bilinir. Bir alaşımın esneklik özelliği alaşımın mekanik kararlılığı açısından oldukça önemlidir. Bi₂FeNi FH alaşımının mekanik kararlılığını anlamak için esneklik sabitleri hesaplandı. Alaşımın/malzemenin mekanik kararlılığının bir ölçütü de esneklik sabitlere göre yorum yapmamıza izin veren Born kararlılık kriterleridir. Eşitlik 4'te Born kararlılık kriterleri görülmektedir (Örnek, 2017).

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

Alaşıma ait C_{11} , C_{12} ve C_{44} esneklik sabitleri hesaplanarak tablo 1'de verilmiştir.

Tablo 1. Bi₂FeNi FH alaşımının esneklik sabitleri (C_{11} , C_{12} ve C_{44} ; GPa)

Malzeme	C_{11}	C_{12}	C_{44}
Bi ₂ FeNi	113,589	53,408	16,385

Alaşımın esneklik özellikleri ile ilgili tahminde bulunmak için Poisson oranı σ , B/G oranı, Kayma modülü G , Young modülü E , Anizotropi faktörü A , Bulk modülü B aşağıdaki eşitliklerle hesaplandı.

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

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

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

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

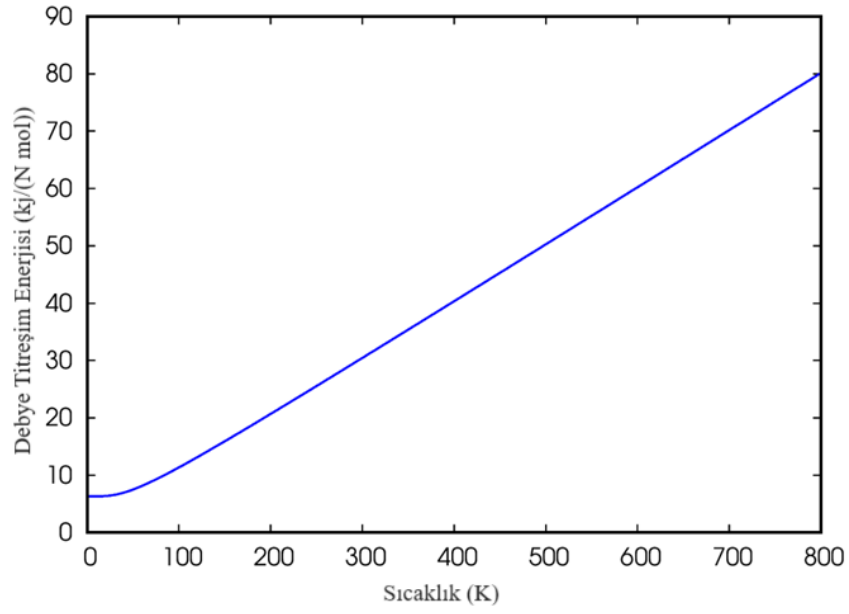
$$A = \frac{2C_{44}}{C_{11}-C_{12}} \quad (9)$$

Tablo 2'de Bi₂FeNi FH alaşımı için yukarıdaki formüller esas alınarak hesaplanan E , B , G , A ve σ değerleri verilmiştir.

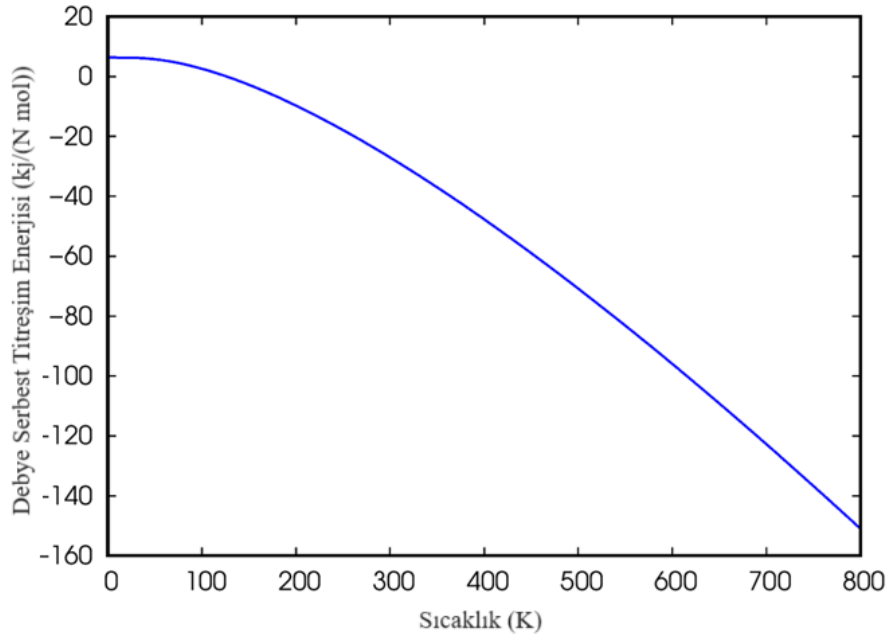
Tablo 2. Bi₂FeNi FH alaşımı için hesaplanan Kayma modülü, (G ; GPa), Bulk Modülü (B ; GPa), Young modülü (E ; GPa), Poisson oranı (σ), B/G oranı ve Anizotropi faktörü (A)

Malzeme	B_V	B_R	B	G_V	G_R	G	E_V	E_R	E	B/G	σ	A
Bi ₂ FeNi	73,468	73,468	73,468	21,87	20,03	20,95	59,68	55,09	57,39	3,506	0,369	0,544

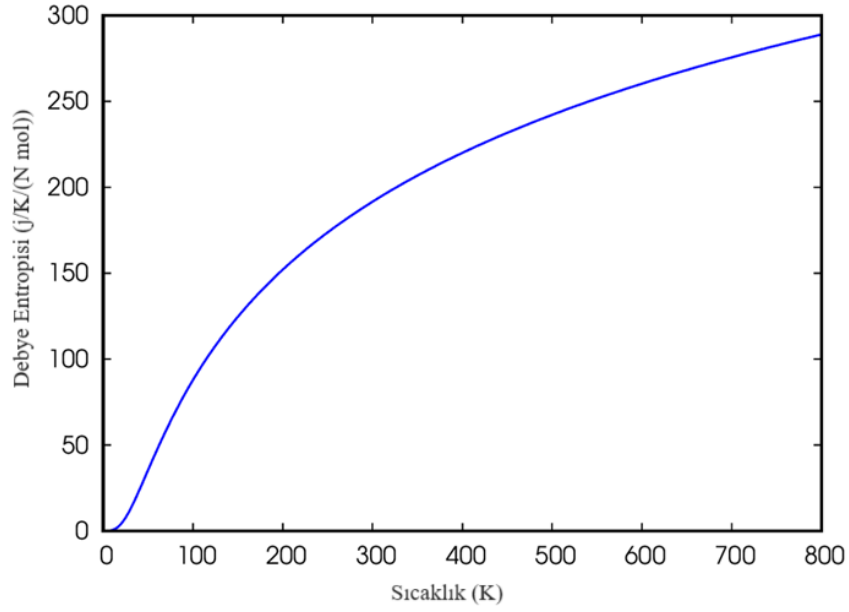
Tabloda verilen E , B , G değerlerinin ayrıca iki farklı modele göre hesaplanan B_V , B_R , E_V , E_R , G_V , G_R değerleri de hesaplanan değerlerinin istikrarlılığını anlamak açısından önemlidir. Alaşımın Bulk modülü değeri B , C_{12} ve C_{11} arasında ($C_{12} < B < C_{11}$) hesaplandı. Bu durum aslında beklenen bir durumdur. Hesaplanan B değeri 100 GPa'dan küçüktür. B değerinin 100 GPa'dan küçük olması alaşımın sıkışabilir olduğunu gösterir. Young modülü değerinin 57,39 GPa olması sertlik açısından düşünüldüğünde alaşımın yumuşak bir doğaya sahip olduğunu göstermektedir. Bir malzemenin sünek ya da kırılğan olması Pugh kriterlerine göre belirlenir. Pugh kriterlerine göre, B/G oranı 1,75 değerinden küçükse malzeme kırılğan büyükse de malzemenin sünek olduğu söylenebilir (Pugh, 1954). Bu çalışmada B/G oranı 3,506 GPa olarak hesaplandı ve bu değer 1,75 ten büyük olduğundan alaşımın sünek doğaya sahip olduğu anlaşılmaktadır. Heusler alaşımlarında Poisson oranının 0,1 civarında olması atomik bağlanmaların kovalent, 0,25 civarında olması da iyonik olduğunu göstermektedir. Bu çalışmada hesaplanan Poisson oranı 0,25 civarında hesaplandı ve bu değer alaşımın iyonik karakterinin baskın olduğuna işaret etmektedir. Alaşımın atomları arasındaki bağ türünü anlamakta kullanılan başka bir bilgi ise Cauchy basıncı olarak bilinen C_{11} ve C_{12} arasındaki farktır ($C_{11} - C_{12}$). C_{11} ve C_{12} arasındaki farkın pozitif olması atomlar arası bağların iyonik karakterde olduğunu destekler. Anizotropi (A), bir malzemenin kristalleşirken fiziksel ya da mekanik bazı özelliklerinin kristalleşme yönüne bağımlılığı olarak bilinir. İzotropik malzemelerde A değeri 1'e eşit iken anizotropik malzemelerde bu değer 1'den farklıdır. Bi₂FeNi FH alaşımı için hesaplanan A değeri 0,544 olup bu değer 1'den farklı olduğu için alaşımın anizotropik olduğu yargısına varıldı. Bi₂FeNi FH alaşımının termodinamik özelliklerini anlamak için gerekli grafikler şekil 4, 5, 6 ve 7'de verildi.



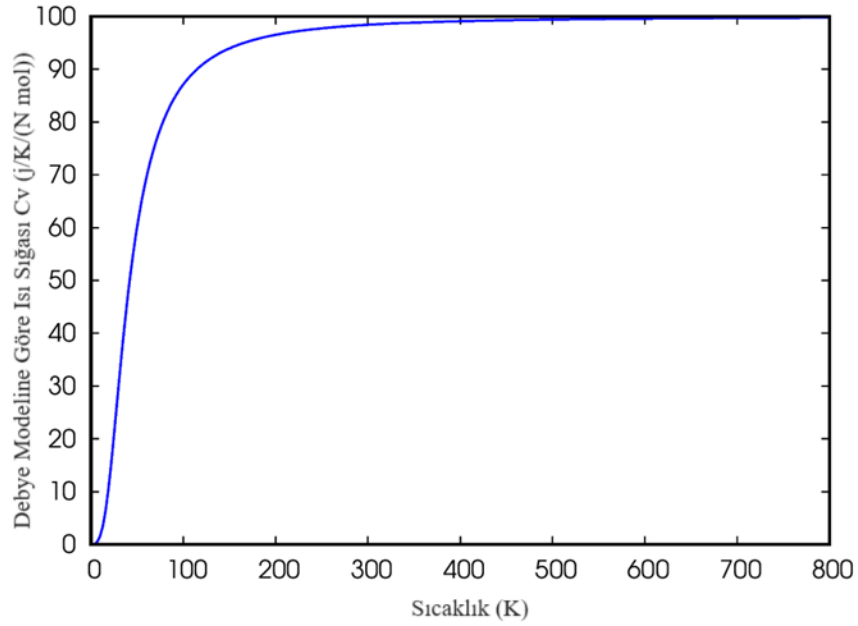
Şekil 4. Bi₂FeNi FH alaşımının titreşim enerjisinin sıcaklığa bağlı grafiği.



Şekil 5. Bi₂FeNi FH alaşımının serbest titreşim enerjisinin sıcaklığa bağlı grafiği.



Şekil 6. Bi₂FeNi FH alaşımının entropisinin sıcaklığa bağlı grafiği.



Şekil 7. Bi₂FeNi FH alaşımının ısı sığasının sıcaklığa bağlı grafiği.

Yukarıda verilen sıcaklığa bağlı grafiklerden titreşim enerjisi grafiğinde beklendiği üzere titreşim enerjisinin sıcaklık arttıkça arttığı görülür. Sıcaklığın artışı atomların kinetik enerjisini artıracığından atomların titreşim enerjisinde artış beklenir ve bu durum grafikte de gözlemlenmektedir. Serbest titreşim enerjisi titreşim enerjisi ile ters orantılıdır. Şekil 5'te ki grafikte serbest titreşim enerjisinin sıcaklıkla azaldığı görülür. Entropi düzensizliğin bir derecesi olarak bilinir ve şekil 6'da entropinin sıcaklığa bağlı grafiği görülmektedir. Şekil 6 incelendiğinde entropinin/düzensizliğin beklendiği gibi sıcaklıkla orantılı olarak arttığı görülür. Dört atomlu Bi₂FeNi FH alaşımının ısı sığası-sıcaklık grafiğine göre yüksek sıcaklık değerlerine gidildikçe ısı sığası değeri sabit bir değere ulaşır. Bu sabit değere Dulong-Petit limiti denir ve ısı sığasının (C_v) yüksek sıcaklıklara çıkıldıkça sabit bir değere yakınsaması mekanik kararlı bir alaşım için beklenen bir durumdur (Petit, 1819). Isı sığası grafiğindeki ısı sığasının sabitlenmeye başladığı nokta bütün dalga boylarının uyarıldığı sıcaklık değeri olan Debye sıcaklığı olarak bilinir. Burada Debye sıcaklığı 168,441 K olarak hesaplandı.

4. Tartışma ve Sonuç

Bu çalışma öncesinde Bi₂FeNi FH alaşımı ile ilgili yapılan literatür taramasında alaşımın teorik ya da deneysel herhangi bir çalışmaya rastlanmamıştır. Alaşımın yapısal, termal, manyetoelektronik ve esneklik özellikleri ilk kez bu çalışma ile ortaya konulmuştur. Alaşım için hesaplanan örgü sabiti (6,78925 Å) The Open Quantum Materials Database web sitesinde verilen değerden yalnızca % 0,0234 lük bir farkla hesaplandı. Alaşımın elektronik bant ve durum yoğunluğu (DOS) grafiğine bakılarak eğrilerin simetrisinden alaşımın manyetik doğaya sahip olduğu anlaşıldı. Yine alaşıma ait elektronik bant grafiğine bakılarak hem spin yukarı hem de spin aşağı durumları için Fermi enerji seviyesi ile arasında herhangi bir yasak enerji aralığı olmadığı gözlemlendi. Buna ek olarak spin yukarı ve spin aşağı yönelimlerine ait eğrilerin birbirlerini ve Fermi enerji seviyesini kestikleri dolayısıyla da alaşımın metalik iyonik karakterde olduğu tahmin edildi. Hesaplanan esneklik sabitlerine bakılarak yapılan ek hesaplamalara göre alaşımın Born kararlılık kriterlerini sağladığı ve bu yüzden de mekanik kararlı olduğu anlaşıldı. Hesaplanan değerlere göre B/G oranının 1,75 değerinden büyük olduğu görüldü. Hesaplanan bu oran alaşımın sünek bir yapıda olduğunu, Bulk modülünün 100 GPa'dan küçük olması da alaşımın sıkışabilir olduğunu göstermektedir. Hesaplanan niceliklerden birisi olan Young modülü değeri (E) alaşımın yumuşak bir karakterde olduğunu gösterdi. 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 hesaplamaların sonuçları ilk olup daha önce çalışılmamış ya da rapor edilmemiştir. Bu bağlamda Bi₂FeNi FH alaşımını manyetoelektronik cihaz çalışmaları için ümit vaat edebilecek bir adaydır.

Kaynakça

- Albayrak, E. (2022). XA yapıdaki Ti₂RuSn ters-Heusler alaşımının yapısal elektronik, elastic ve termodinamik özelliklerinin teorik olarak incelenmesi, *Journal of the Institute of Science and Technology*, 12(3): 1496 - 1505
- Chermette, H. (1998). Density functional theory A powerful tool for theoretical studies in coordination chemistry, *Coordination Chemistry Reviews*, 178–180 (1998) 699–721, [https://doi.org/10.1016/S0010-8545\(98\)00179-9](https://doi.org/10.1016/S0010-8545(98)00179-9)
- Garrity, K. F., Bennett, J. W., Rabe, K. M. & Vanderbilt, D. (2014). Pseudopotentials for high-throughput DFT calculations, *Comput. Mater. Sci.*, 81, pp. 446-452, <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2013.08.053>
- Giannozzi, P., Baroni, S., Bonini, N., Calandra, M., Car, C., Cavazzoni, C., Ceresoli, D., Chiarotti, G. L., Cococcioni, M., Dabo, I., Corso, A. D., de Gironcoli, S., Fabris, S., Fratesi, G., Gebauer, R., Gerstmann, U., Gougoussis, C., Kokalj, A., Lazzeri, M., Martin-Samos, L., Marzari, N., Mauri, F., Mazzarello, R., Paolini, S., Pasquarello, A., Paulatto, L., Sbraccia, C., Scandolo, S., Sclauzero, G., Seitsonen, A. P., Smogunov, A., Umari, P. & Wentzcovitch, R. M. (2009). Quantum Espresso: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials *J. Phys. Condens. Matter*, 21 (39), p. 395502, <https://doi.org/10.1088/0953-8984/21/39/395502>
- 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, <https://doi.org/10.1088/0022-3727/40/6/S01>
- Hohenberg, P. & Kohn, W. (1964). Inhomogeneous Electron Gas, *Phys. Rev.*, 136(3B), pp.B864-B871, <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRev.136.B864>
- 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, <https://doi.org/10.1016/j.cplett.2022.140052>
- Kohn, W. & Sham, L. J. (1965). Self-consistent equations including exchange and correlation effects, *Phys. Rev.*, 140 (4A) pp. A1133-A1138, <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRev.140.A1133>
- Lagrone, C. B. (2023). *Bismuth (Bi)*, Salem Press Encyclopedia of Science, Research Starters
- Nicholson, B. (2023). *Iron (Fe)*, Salem Press Encyclopedia of Science, Research Starters
- Örnek, O. (2017). B2 fazda intermetalik RuTi alaşımının elektronik, elastik esneklik 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, <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.77.3865>
- Petit, P. (1819). Recherches sur quelques points importants de la Théorie de la Chaleur, *Annales de Chimie et de Physique* 10395–413,

Philips, J. R. (2023). *Nickel (Ni)*, Salem Press Encyclopedia of Science, Research Starters

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, <https://doi.org/10.1080/14786440808520496>

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 Ti_2YZ (Y = Fe, Co, Ni, Z = Al, Ga, In) Heusler alloys: A first-principles study, Intermetallics Volume 29, Pages 86-91, <https://doi.org/10.48550/arXiv.1110.5411>