

Co-M-Ni (M= Fe, Ag) Geçiş Metali Nanoalaşımlarının Yapısal, Enerjik ve Manyetik Özellikleri

Hüseyin YILDIRIM¹¹ Karabük Üniversitesi, Yenice Meslek Yüksekokulu, Karabükhuseyinyildirim@karabuk.edu.tr. ORCID ID: <http://orcid.org/0000-0002-8554-3885>

Geliş Tarihi: 01.05.2021

Kabul Tarihi: 04.10.2021

Öz

Bu çalışmada, $\text{Co}_1\text{Fe}_n\text{Ni}_{12-n}$ ($n=0-12$) ve $\text{Co}_1\text{Ag}_n\text{Ni}_{12-n}$ ($n=0-12$) üçlü nanoalaşım sistemlerinin yapısal, enerjik ve manyetik özellikleri hakkında teorik bir araştırma yapılmıştır. Hesaplamalarımız, seçilen sistemlerde Gupta ve DFT yaklaşımları birleştirilerek yapılmıştır. Gupta düzeyindeki optimizasyon sonuçları, Fe, Ag ve Ni atomlarının yüzeye yerleşmeyi tercih ettiğini ve Co atomlarının ise merkeze yerleşme eğiliminde olduğunu göstermektedir. Gupta düzeyindeki karışma enerjisi analizinden, $\text{Co}_1\text{Fe}_6\text{Ni}_6$ ve $\text{Co}_1\text{Ag}_6\text{Ni}_6$ nanoalaşımlarının sırasıyla $\text{Co}_1\text{Fe}_n\text{Ni}_{12-n}$ ($n=0-12$) ve $\text{Co}_1\text{Ag}_n\text{Ni}_{12-n}$ ($n=0-12$) nanoalaşımları için en kararlı bileşim olduğu bulunmuştur. Ayrıca, Gupta düzeyi enerjik olarak DFT düzeyi ile uyumlu değildir. Nanoalaşımların toplam manyetik momentleri ve atomların lokal manyetik momentleri ve lokal yükleri de incelenmiştir. 13 atomlu Co-M-Ni (M= Fe, Ag) nanoalaşımlarının toplam manyetik momentinin ferromanyetik Fe atomlarının eklenmesiyle arttığı ve manyetik olmayan Ag atomlarının eklenmesiyle genellikle azaldığı görülmüştür. Simülasyon sonuçları, $\text{Co}_1\text{Fe}_n\text{Ni}_{12-n}$ ($n=0-12$) ve $\text{Co}_1\text{Ag}_n\text{Ni}_{12-n}$ ($n=0-12$) nanoalaşımlarının yapısal, enerjik ve manyetik özelliklerinin kompozisyona bağlı olarak değiştiğini göstermektedir.

Anahtar kelimeler

Manyetik nanoalaşımlar;
Optimizasyon;
Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi; Kobalt; Demir; Nikel

Structural, Energetic and Magnetic Properties of Co-M-Ni (M= Fe, Ag) Transition Metal Nanoalloys

Abstract

In this study, a theoretical investigation about structural, energetic, and magnetic properties of $\text{Co}_1\text{Fe}_n\text{Ni}_{12-n}$ ($n=0-12$) ve $\text{Co}_1\text{Ag}_n\text{Ni}_{12-n}$ ($n=0-12$) ternary nanoalloy systems has been performed. Our calculations have been performed combining Gupta and DFT approaches on chosen systems. The optimization results at Gupta level show that, Fe, Ag and Ni atoms prefer to locate on the surface and Co atoms tend to locate at the centre. From the excess energy analysis at Gupta level, $\text{Co}_1\text{Fe}_6\text{Ni}_6$ and $\text{Co}_1\text{Ag}_6\text{Ni}_6$ nanoalloys was found to be the most stable composition for $\text{Co}_1\text{Fe}_n\text{Ni}_{12-n}$ ($n=0-12$) ve $\text{Co}_1\text{Ag}_n\text{Ni}_{12-n}$ ($n=0-12$) nanoalloys, respectively. Also, the Gupta level energetically does not compatible with the DFT level. The total magnetic moments of the nanoalloys and local magnetic moments and local charges of the atoms have been examined. It has been observed that the total magnetic moment of the 13 atom Co-M-Ni (M=Fe, Ag) nanoalloys increase by the addition of ferromagnetic Fe atoms and generally decrease by the addition of non-magnetic Ag atoms. The simulation results show that the structural, energetic, and magnetic properties of $\text{Co}_1\text{Fe}_n\text{Ni}_{12-n}$ ($n=0-12$) ve $\text{Co}_1\text{Ag}_n\text{Ni}_{12-n}$ ($n=0-12$) nanoalloys vary depending on the composition.

Keywords

Magnetic nanoalloys;
Optimization; Density functional theory;
Cobalt; Iron; Nickel

© Afyon Kocatepe Üniversitesi

1. Giriş

Son yıllarda nanomanyetizma, bulk sistemlerdeki manyetizmadan önemli ölçüde farklı olduğu için hem temel hem de uygulamalı araştırmalarda ilgi görmektedir. (Ferrando 2016, Ebrahimi *et al.* 2019, Binns 2014). Manyetik nanoalaşımlar, benzersiz manyetik özellikleri nedeniyle ultra yüksek

yoğunluklu manyetik kayıt ortamı, manyetik veri depolama, radar emici malzeme, nükleer manyetik rezonans (NMR) görüntüleme, ilaç ve gen dağıtımı, kanser tedavisi ve teşhisi, tümörlerin ısı tedavisi, hücre ayırımı, piller, floresan biyolojik etiketleme, gaz sensörleri ve katalizörler gibi endüstriyel ve biyomedikal uygulamalarda yaygın olarak kullanılmaktadır. (Ebrahimi *et al.* 2019, Binns 2014,

Salati *et al.* 2020, Sun *et al.* 2008, El-Gendy 2018, Toparli *et al.* 2017). Özellikle geçiş metali nanoalaşımları mükemmel katalitik ve manyetik özelliklere sahiptir (Abhandlung 2013).

Geçiş metalleri arasında Co, Fe, Ag ve Ni gibi metaller ve bunların alaşımları, yüksek bulunabilirlikleri, düşük maliyetleri ve elektron açısından zengin kapasiteleri nedeniyle çeşitli elektrokimyasal uygulamalar, oksijen evrimi reaksiyonu (oxygen evolution reaction-OER) ve oksijen indirgeme reaksiyonu (oxygen reduction reaction-ORR) için etkili bir elektrokatalizör olarak bilinmektedir ve benzersiz manyetik özelliklere sahiptir (Toparli *et al.* 2017, Annalakshmi, Nam *et al.* 2018, Yang *et al.* 2017, Theofanidis *et al.* 2018, Boroujeni *et al.* 2019, Bochicchio and Ferrando 2013). Örneğin, Ni-Co nanoalaşımlarının OER ve ORR reaksiyonlarında mükemmel elektrokatalitik aktivite sergiledikleri görülmüştür ve manyetik özelliklerini araştıran birçok çalışma yapılmıştır (Fu *et al.* 2016, Zeng *et al.* 2017, Panday *et al.* 2013, Bouzit *et al.* 2017). Ni-Fe nanoalaşımları OER reaksiyonunda elektrokatalizör olarak kullanılmıştır ve mıknatıs alaşım oldukları bilinmektedir (Toparli *et al.* 2017, Bates *et al.* 2016). Fe-Co nanoalaşımları, en yüksek seviyede doyunluk manyetizasyonu, yüksek Curie sıcaklığı, yüksek geçirgenlik gibi manyetik özellikler sergilemektedir (Çelik and Fırat 2018, Klencsar *et al.* 2016). Ag-Co ve Ag-Ni nanoalaşımları ise bir ferromanyetik ve bir ferromanyetik olmayan metalden oluşmalarından kaynaklanan ilginç manyeto-optik özellikleri nedeniyle incelenmiştir (Bochicchio and Ferrando 2013).

Nanoalaşımların yapısal, manyetik ve katalitik özelliklerinin belirlenmesinde, nanoalaşımların kimyasal düzeni, yapısal morfolojisi ve kompozisyon çeşitliliği önemli rol oynamaktadır (Taran *et al.* 2020b, Taran 2019, Calvo 2013, Taran and Arslan 2020, Taran *et al.* 2016). Bu nedenle, manyetik özelliklerin kompozisyona bağımlılığı ve nanoalaşımların manyetik özellikleri ile kimyasal düzeni arasındaki ilişki hakkında detaylı araştırmalara ihtiyaç duyulmaktadır. Bu çalışmada, 13 atomlu Co-Fe-Ni ve Co-Ag-Ni nanoalaşımların yapısal ve manyetik özellikleri hakkında yeterli

literatür bilgisi olmadığı için, Co₁Fe_nNi_{12-n} (n=0-12) ve Co₁Ag_nNi_{12-n} (n=0-12) üçlü nanoalaşımların yapısal ve manyetik özelliklerinin kompozisyon ve kimyasal düzen ile ilişkisi incelenmiştir. 13 atomlu ikosahedron geometriye yoğunlaşmamızın sebebi, ikosahedron geometrinin farklı geometriler arasında en yüksek simetriye sahip olması ve 13'ün ikosahedron geometri için sihirli bir sayı olmasıdır (Taran 2019, Yıldırım and Arslan 2020). Ayrıca, az sayıda atomdan oluşan ikosahedron nanoalaşımlar, sıkı istiflenmiş bir yüzeye sahip oldukları için daha kullanışlıdır (Taran 2019).

Bu çalışmada, Co₁Fe_nNi_{12-n} (n=0-12) ve Co₁Ag_nNi_{12-n} (n=0-12) üçlü nanoalaşımların yapısal kararlılığı ve manyetik davranışlarını karşılaştırmak için farklı kompozisyon sistemleri düşünülmüştür ve simülasyonlar, atomik potansiyellerin Yoğunluk Fonksiyonel Teorisine (Density Functional Theory-DFT) karşı geçerliliğini kontrol etmek için Gupta ve DFT simülasyonlarını birleştirerek gerçekleştirilmiştir. Gupta düzeyindeki lokal optimizasyonlar, Co₁Fe_nNi_{12-n} (n=0-12) ve Co₁Ag_nNi_{12-n} (n=0-12) üçlü nanoalaşımların bir tane atomu sabit alınarak ve diğer iki atomun toplam sayısı 12 olacak şekilde gerçekleştirilmiştir. Gupta düzeyindeki lokal optimizasyonlar sonucunda varsayılan en düşük enerjiye sahip yapılar daha sonra DFT yaklaşımı ile yeniden optimize edilmiştir. Göreceli kararlılığı analiz etmek için Gupta ve DFT düzeylerinin karışma enerjileri hesaplanmıştır. Ayrıca, nanoalaşımların toplam manyetik momentleri ve atomların lokal manyetik momentleri ve lokal yükleri de hesaplanmıştır.

2. Materyal ve Metot

Co₁Fe_nNi_{12-n} (n=0-12) ve Co₁Ag_nNi_{12-n} (n=0-12) üçlü nanoalaşımların varsayılan en düşük enerjiye sahip yapıları Basin-Hopping algoritması kullanılarak GMIN programı ile elde edilmiştir (Wales and Doye 1997). Her nanoalaşım için Basin-Hopping algoritması 2×10^5 adımda gerçekleştirilmiştir. Atomlar arası etkileşimler Gupta çok cisim potansiyeli ile modellenmiştir ve Co-Fe-Ni ve Co-Ag-Ni üçlü nanoalaşımların Gupta potansiyel parametreleri Çizelge 1'de verilmiştir [Varas *et al.*

2015, Kuntová *et al.* 2008). Co-Fe, Co-Ni ve Fe-Ni etkileşmeleri için parametreler homonükleer parametrelerin aritmetik ortalaması olarak alınmıştır.

Çizelge 1. Co-Fe-Ni ve Co-Ag-Ni nanoalaşımlarının Gupta potansiyel parametreleri.

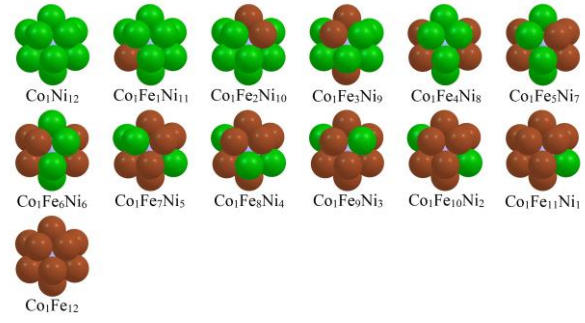
	A (eV)	p	q	ξ (eV)	r ₀ (Å)
Co-Co	0.0950	11.604	2.2860	1.4880	2.4970
Co-Fe	0.1141	11.052	2.4430	1.5530	2.5250
Co-Ag	0.1444	10.001	3.0850	1.4776	2.6900
Co-Ni	0.0663	14.302	1.7375	1.2790	2.4935
Fe-Fe	0.1332	10.500	2.6000	1.6179	2.5530
Ag-Ag	0.1031	10.850	3.1800	1.1895	2.8900
Fe-Ni	0.0854	13.750	1.8945	1.3440	2.5215
Ag-Ni	0.0960	11.095	2.7250	1.3400	2.6900
Ni-Ni	0.0376	16.999	1.1890	1.0700	2.4900

Gupta düzeyindeki lokal optimizasyonlar sonucunda elde edilen en düşük enerjiye sahip yapılar DFT hesaplamaları için başlangıç konfigürasyonları olarak kullanılmıştır. DFT hesaplamaları, Quantum Espresso'da (QE) PWscf kodu (Giannozzi vd. 2009, Giannozzi vd. 2017), pseudopotansiyeller (Vanderbilt 1990) ve Perdew Burke Ernzerhof (PBE) tarafından önerilen genelleştirilmiş gradyent yaklaşımı (GGA) kullanarak yapılmıştır (Perdew *et al.* 1996). Dalga fonksiyonu enerji kesim değeri 41.0 Ry ve yük yoğunluğu enerji kesim değeri ise Co-Fe-Ni nanoalaşımları için 782.0 Ry, Co-Ag-Ni nanoalaşımları için 445.0 Ry olarak seçilmiştir. Marzari-Vanderbilt smearing tekniği 0.02 Ry genişletilerek uygulanmıştır. Tüm DFT hesaplamalarında küme bir kenarı 17 Å olan kübik bir hücrenin merkezine yerleştirilmiştir.

3. Bulgular ve Tartışma

13 atomlu $Co_1Fe_nNi_{12-n}$ ($n=0-12$) ve $Co_1Ag_nNi_{12-n}$ ($n=0-12$) üçlü nanoalaşımların lokal optimizasyonları, her iki kompozisyon sistemi için Co_1Ni_{12} ikili nanoalaşımlarından başlayarak sırasıyla Fe ve Ag atom sayıları artırılarak yapılmıştır. 13 atomlu ikosahedron geometrinin bir atomu merkezde diğer 12 atomu ise yüzeyde bulunmaktadır. $Co_1Fe_nNi_{12-n}$ ($n=0-12$) ve $Co_1Ag_nNi_{12-n}$ ($n=0-12$) üçlü nanoalaşımların lokal optimizasyonları sonucunda bulunan en düşük enerjiye sahip yapıları sırasıyla Şekil 1 ve Şekil 2'de gösterilmiştir. Şekil 1 ve Şekil 2'de Co, Fe, Ag ve Ni atomları sırasıyla mavi,

kahverengi, gri ve yeşil renkli küreler ile gösterilmiştir.



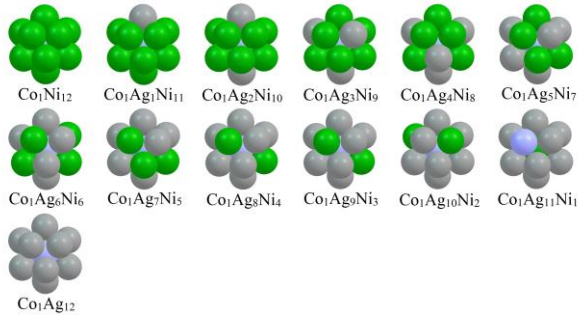
Şekil 1 $Co_1Fe_nNi_{12-n}$ ($n=0-12$) nanoalaşımlarının Gupta düzeyindeki lokal optimizasyonları sonucunda elde edilen en düşük enerjiye sahip yapıları.

Şekil 1'e göre, Co_1Ni_{12} ikili nanoalaşımında Co atomu nanoalaşımın merkezine, Ni atomları nanoalaşımın yüzeyine yerleşmektedir. Bir Fe atomunun, bir Ni atomunun yerine ikame edilmesiyle Fe atomları nanoalaşımların yüzeyine yerleşmektedir. Co_1Fe_{12} ikili nanoalaşımında Co atomu nanoalaşımın merkezine, Fe atomları nanoalaşımın yüzeyine yerleşmektedir. $Co_1Fe_nNi_{12-n}$ ($n=0-12$) nanoalaşımları için Co atomu daima nanoalaşımın merkezine, Fe ve Ni atomlarının ise yüzeye yerleşme eğiliminde olduğu görülmüştür.

Şekil 2'e göre, Co_1Ni_{12} ikili nanoalaşımında Co atomu nanoalaşımın merkezine, Ni atomları nanoalaşımın yüzeyine yerleşmektedir. Bir Ag atomunun, bir Ni atomunun yerine ikame edilmesiyle Ag atomları nanoalaşımların yüzeyine yerleşmektedir. $Co_1Ag_{11}Ni_1$ nanoalaşımında 1 Ni atomu nanoalaşımın merkezine yerleşirken, Ag ve Co atomları yüzeye yerleşmektedir. Co_1Ag_{12} ikili nanoalaşımında ise Co atomu nanoalaşımın merkezine, Ag atomları yüzeye yerleşmektedir. $Co_1Ag_nNi_{12-n}$ ($n=0-12$) nanoalaşımları için Co atomu genellikle nanoalaşımın merkezine, Ag ve Ni atomlarının ise yüzeye yerleşme eğiliminde olduğu görülmüştür.

Sonuç olarak, Gupta düzeyinde $Co_1Fe_nNi_{12-n}$ ($n=0-12$) ve $Co_1Ag_nNi_{12-n}$ ($n=0-12$) nanoalaşımlarında, Co atomunun nanoalaşımlara yerleşme eğiliminin birbirine benzediği görülmüştür. Co atomu her iki kompozisyon sisteminde de merkeze yerleşmiştir. Lokal optimizasyon sonuçları bu çalışmada öne

sürülen $Co_{merkez}(FeNi)_{yüzey}$ ve $Co_{merkez}(AgNi)_{yüzey}$ yerleşimlerini desteklemektedir. Varas ve arkadaşları 13 atomlu Fe-Co-Ni nanoalaşımları için benzer sonuçları elde etmişlerdir (Varas *et al.* 2015).



Şekil 2 $Co_1Ag_nNi_{12-n}$ ($n=0-12$) nanoalaşımlarının Gupta düzeyindeki lokal optimizasyonları sonucunda elde edilen en düşük enerjiye sahip yapıları.

Kimyasal düzeni ile en düşük enerjiye sahip olan yapıların enerjileri kullanılarak yapılan karışma enerjisi (E_{exc}) analizi, nanoalaşımların kararlılığını kompozisyona göre incelenmek için kullanılan bir yöntemdir. Nanoalaşımda sayısı sabitlenen atom türü varsa, lokal optimizasyonlar sonucunda elde edilen $Co_1Fe_nNi_{12-n}$ ($n=0-12$) ve $Co_1Ag_nNi_{12-n}$ ($n=0-12$) üçlü nanoalaşımları için karışma enerjisi sırasıyla Eşitlik (1) ve Eşitlik (2) ile tanımlanmaktadır (Yıldırım and Arslan 2020).

$$\Delta E_{exc}^{Gupta,DFT} = E(Co_1Fe_nNi_{12-n}) - n \frac{E(Co_1Fe_{12})}{12} - 12 - n \frac{E(Co_1Ni_{12})}{12} \quad (1)$$

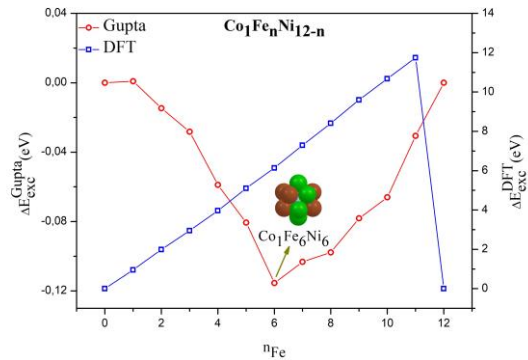
$$\Delta E_{exc}^{Gupta,DFT} = E(Co_1Ag_nNi_{12-n}) - n \frac{E(Co_1Ag_{12})}{12} - 12 - n \frac{E(Co_1Ni_{12})}{12} \quad (2)$$

$E(Co_1Fe_nNi_{12-n})$ ve $E(Co_1Ag_nNi_{12-n})$ üçlü nanoalaşımların toplam Gupta ve DFT enerjilerini, $E(Co_1Fe_{12})$, $E(Co_1Ni_{12})$ ve $E(Co_1Ag_{12})$ ise ikili nanoalaşımların toplam Gupta ve DFT enerjilerini ifade etmektedir (Taran *et al.* 2020a).

Karışma enerjisi analizi, nanoalaşımı oluşturan metallerin karışma derecesini vermektedir. Karışma enerjisinin en düşük değeri, bir kompozisyon sisteminde karışma en uygun kompozisyonu yani en

kararlı nanoalaşımı vermektedir (Yıldırım ve Arslan 2019). $Co_1Fe_nNi_{12-n}$ ($n=0-12$) ve $Co_1Ag_nNi_{12-n}$ ($n=0-12$) kompozisyon sistemlerinin Gupta ve DFT düzeyindeki karışma enerjisi eğrileri sırasıyla Şekil 3 ve Şekil 4'te verilmiştir.

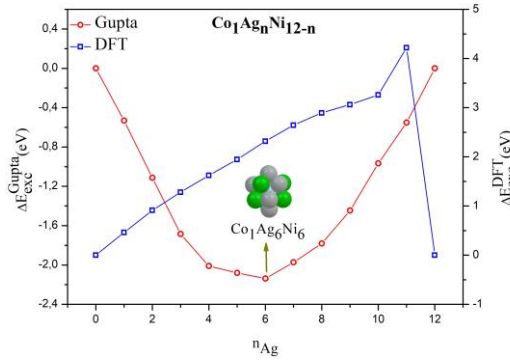
Fe atomlarının sayısının (n_{Fe}) bir fonksiyonu olarak $Co_1Fe_nNi_{12-n}$ ($n=0-12$) nanoalaşımlarının karışma enerjisi grafiği Şekil 3'te verilmiştir. Şekil 3'e göre, $Co_1Fe_nNi_{12-n}$ ($n=0-12$) nanoalaşımları Gupta düzeyinde enerjik olarak karışma uygunken, DFT düzeyinde pozitif karışma enerjileri nedeniyle enerjik olarak karışma uygun değildir. Bu sonuç, $Co_1Fe_nNi_{12-n}$ ($n=0-12$) kompozisyon sistemi için Gupta ve DFT düzeylerinin enerjik olarak birbiri ile uyumlu olmadığını göstermektedir. Ayrıca, Gupta düzeyinde en kararlı nanoalaşım $Co_1Fe_6Ni_6$ olarak elde edilmiştir. $Co_1Fe_6Ni_6$ nanoalaşımının sahip olduğu karışma enerjisi değeri $E_{exc}=-0.12$ eV'dur. $Co_1Fe_6Ni_6$ nanoalaşımında Fe ve Ni atomları birbiriyle karışarak simetrik olarak nanoalaşımın yüzeyine yerleşirken, Co atomu nanoalaşımın merkezine yerleşmektedir.



Şekil 3 $Co_1Fe_nNi_{12-n}$ ($n=0-12$) nanoalaşımlarının Gupta ve DFT düzeyinde karışma enerjilerinin Fe sayısına göre değişimi.

Ag atomlarının sayısının (n_{Ag}) bir fonksiyonu olarak $Co_1Ag_nNi_{12-n}$ ($n=0-12$) nanoalaşımlarının karışma enerjisi grafiği Şekil 4'te verilmiştir. Şekil 4'e göre, $Co_1Ag_nNi_{12-n}$ ($n=0-12$) nanoalaşımları Gupta düzeyinde enerjik olarak karışma uygunken, DFT düzeyinde pozitif karışma enerjileri nedeniyle enerjik olarak karışma uygun değildir. Bu sonuç, $Co_1Ag_nNi_{12-n}$ ($n=0-12$) kompozisyon sistemi için Gupta ve DFT düzeylerinin enerjik olarak birbiri ile

uyumlu olmadığını göstermektedir. Ayrıca, Gupta düzeyinde en kararlı nanoalaşım $\text{Co}_1\text{Ag}_6\text{Ni}_6$ olarak elde edilmiştir. $\text{Co}_1\text{Ag}_6\text{Ni}_6$ nanoalaşımının sahip olduğu karışma enerji değeri $E_{\text{exc}}=-2.13$ eV'dur. $\text{Co}_1\text{Ag}_6\text{Ni}_6$ nanoalaşımında Ag ve Ni atomları birbiriyle karışarak nanoalaşımın yüzeyine yerleşirken, Co atomu nanoalaşımın merkezine yerleşmektedir.



Şekil 4 $\text{Co}_1\text{Ag}_n\text{Ni}_{12-n}$ ($n=0-12$) nanoalaşımlarının Gupta ve DFT düzeyinde karışma enerjilerinin Ag sayısına göre değişimi.

Gupta düzeyinde, $\text{Co}_1\text{Fe}_n\text{Ni}_{12-n}$ ($n=0-12$) ve $\text{Co}_1\text{Ag}_n\text{Ni}_{12-n}$ ($n=0-12$) kompozisyon sistemleri için ikili nanoalaşımların karışma enerjisi değerlerinin $E_{\text{exc}}=0.00$ eV olduğu görülmektedir. Bu sonuç üçlü nanoalaşımların Gupta düzeyinde ikili nanoalaşımlara göre daha kararlı olduğu anlamına gelmektedir. Yani üçlü nanoalaşımlar enerji analizine göre karışma daha elverişlidir. Ayrıca, $\text{Co}_1\text{Fe}_n\text{Ni}_{12-n}$ ($n=0-12$) ve $\text{Co}_1\text{Ag}_n\text{Ni}_{12-n}$ ($n=0-12$) kompozisyon sistemlerinde Gupta ve DFT düzeyleri birbiriyle uyumsuz sonuçlar vermektedir. Fernandez ve arkadaşlarının çalışmasından en düşük enerjilere karşılık gelen Gupta düzeyi konfigürasyonlarının DFT hesaplamalarıyla uyumlu olmadığı bilinmektedir (Fernandez and Balbas 2005).

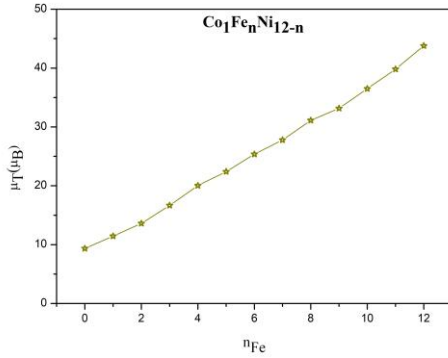
Geçiş metali nanoalaşımlarının manyetik özellikleri umut verici teknolojik uygulamalarda kullanıldığından dolayı, manyetik özellikler üzerindeki alaşım etkisi 13 atomlu $\text{Co}_1\text{Fe}_n\text{Ni}_{12-n}$ ($n=0-12$) ve $\text{Co}_1\text{Ag}_n\text{Ni}_{12-n}$ ($n=0-12$) üçlü nanoalaşımları için hesaplanmıştır. Quantum Espresso'da boyutları açıkça belirtilmeyen tüm büyüklükler Rydberg atomik birimleri ile tanımlanmıştır. Yük sayı olarak

verilmiştir. Toplam ve lokal manyetik momentler, Bohr magnetonu (μ_B) birimi ile verilmiştir. Bu çalışmada, $\text{Co}_1\text{Fe}_n\text{Ni}_{12-n}$ ($n=0-12$) ve $\text{Co}_1\text{Ag}_n\text{Ni}_{12-n}$ ($n=0-12$) üçlü nanoalaşımlarının lokal yük ve manyetik moment birimleri Quantum Espresso ile uyumlu olarak verilmiştir. Her iki kompozisyon sisteminin toplam manyetik momentleri $\text{Co}_1\text{Ni}_{12}$ ikili nanoalaşımından başlayıp $\text{Co}_1\text{Fe}_{12}$ ve $\text{Co}_1\text{Ag}_{12}$ ikili nanoalaşımlarına kadar hesaplanmış ve sırasıyla Şekil 5 ve Şekil 6'da verilmiştir.

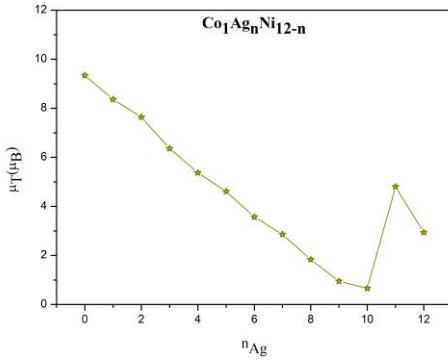
Fe atomlarının sayısının bir fonksiyonu olarak $\text{Co}_1\text{Fe}_n\text{Ni}_{12-n}$ ($n=0-12$) nanoalaşımlarının manyetik momentlerinin değişimi Şekil 5'te gösterilmiştir. Şekil 5'e göre, $\text{Co}_1\text{Ni}_{12}$ nanoalaşımın manyetik momentleri $9.34 \mu_B$ 'dir. Bu sonuç, $\text{Co}_1\text{Fe}_n\text{Ni}_{12-n}$ ($n=0-12$) nanoalaşımları içinde en zayıf manyetik momente sahip nanoalaşımın $\text{Co}_1\text{Ni}_{12}$ olduğunu göstermektedir. $\text{Co}_1\text{Fe}_n\text{Ni}_{12-n}$ ($n=0-12$) nanoalaşımlarında en zayıf ferromanyetik özelliklere sahip Ni atomu ile en kuvvetli ferromanyetik özelliklere sahip olan Fe atomunun yer değiştirmesiyle manyetik momentin Fe atomu sayısı ile lineer olarak arttığı görülmektedir (Billas *et al.* 1994). Bu lineer manyetik davranış Fe bakımından zayıf olan nanoalaşımlarda daha yavaşken, Fe bakımından zengin olan nanoalaşımlarda çok daha hızlıdır. $\text{Co}_1\text{Fe}_{12}$ nanoalaşımının manyetik momentleri $43.79 \mu_B$ 'dir. Genel olarak, $\text{Co}_1\text{Fe}_n\text{Ni}_{12-n}$ ($n=0-12$) nanoalaşımları için Fe sayısının nanoalaşımın manyetik davranışını etkilediği görülmüştür.

Ag atomlarının sayısının bir fonksiyonu olarak $\text{Co}_1\text{Ag}_n\text{Ni}_{12-n}$ ($n=0-12$) nanoalaşımlarının manyetik momentlerinin değişimi Şekil 6'da gösterilmiştir. Şekil 6'a göre, $\text{Co}_1\text{Ni}_{12}$ nanoalaşımın manyetik momentleri $9.34 \mu_B$ 'dir. Bu sonuç, $\text{Co}_1\text{Ag}_n\text{Ni}_{12-n}$ ($n=0-12$) nanoalaşımları içinde en kuvvetli manyetik momente sahip nanoalaşımın $\text{Co}_1\text{Ni}_{12}$ olduğunu göstermektedir. $\text{Co}_1\text{Ag}_n\text{Ni}_{12-n}$ ($n=0-12$) nanoalaşımlarında en zayıf ferromanyetik özelliklere sahip Ni atomu ile ferromanyetik olmayan Ag atomunun yer değiştirmesiyle manyetik momentin Ag atomu sayısı ile genel olarak bir azalma eğilimine sahip olduğu görülmektedir. $\text{Co}_1\text{Ag}_n\text{Ni}_{12-n}$ ($n=0-12$) nanoalaşımları için Ag sayısı ile manyetik momentleri artışı gösteren tek nanoalaşım $\text{Co}_1\text{Ag}_{11}\text{Ni}_1$ 'dir. Şekil 2

incelendiğinde Co atomunun, $\text{Co}_1\text{Ag}_n\text{Ni}_{12-n}$ ($n=0-12$) nanoalaşımlarındaki Co atomunun genel davranışının aksine yüzeye yerleştiği görülmektedir. Bu sonuç, Co atomu yüzeye yerleştiğinde daha fazla manyetik momente sahip olduğu şeklinde yorumlanabilir. $\text{Co}_1\text{Ag}_{12}$ nanoalaşımının manyetik momentleri $2.94 \mu_B$ 'dir. Genel olarak, $\text{Co}_1\text{Ag}_n\text{Ni}_{12-n}$ ($n=0-12$) nanoalaşımları için Ag sayısının nanoalaşımın manyetik davranışını etkilediği görülmüştür.



Şekil 5 $\text{Co}_1\text{Fe}_n\text{Ni}_{12-n}$ ($n=0-12$) nanoalaşımlarının μ_B cinsinden toplam manyetik momentlerinin Fe sayısına göre değişimi.



Şekil 6 $\text{Co}_1\text{Ag}_n\text{Ni}_{12-n}$ ($n=0-12$) nanoalaşımlarının μ_B cinsinden toplam manyetik momentlerinin Ag sayısına göre değişimi.

$\text{Co}_1\text{Fe}_n\text{Ni}_{12-n}$ ($n=0-12$) ve $\text{Co}_1\text{Ag}_n\text{Ni}_{12-n}$ ($n=0-12$) nanoalaşımlarının manyetik davranışlarını daha detaylı açıklamak için tekli, ikili ve üçlü nanokümelere Co, Fe, Ag ve Ni atomlarının lokal manyetik momentleri ve lokal yük dağılımları da incelenmiştir. Tekli, ikili ve üçlü nanokümelere lokal manyetik momentleri ve lokal yük dağılımları sırasıyla Şekil 7 ve Şekil 8' de, toplam manyetik momentleri Çizelge 2'de verilmiştir.

Çizelge 2'de $\text{Co}_1\text{Fe}_n\text{Ni}_{12-n}$ ($n=0-12$) nanoalaşımını oluşturan Co, Fe ve Ni atomlarından oluşmuş tekli, ikili ve üçlü nanokümelere sahip olduğu toplam manyetik momentler verilmiştir. Çizelge 2 incelendiğinde, Fe atomu en kuvvetli ferromanyetik olmasına rağmen, en yüksek manyetik momente ($43.79 \mu_B$) sahip nanokümenin, Fe_{13} nanoparçacığı değil, $\text{Co}_1\text{Fe}_{12}$ ikili nanoalaşımı olduğu görülmüştür. En düşük manyetik momente ($8.45 \mu_B$) sahip nanoküme ise, en zayıf ferromanyetik Ni atomlarından oluşan Ni_{13} nanoparçacığıdır.

Çizelge 2. Co, Fe, Ag ve Ni atomlarının tekli, ikili ve üçlü nanokümelere sahip toplam manyetik momentleri.

Nanoalaşım/Nanoparçacık	Manyetik Moment (μ_B)
Co_{13}	28.80
Fe_{13}	42.30
Ag_{13}	3.57
Ni_{13}	8.45
$\text{Co}_1\text{Ni}_{12}$	9.34
$\text{Co}_1\text{Fe}_{12}$	43.79
$\text{Co}_1\text{Ag}_{12}$	2.94
$\text{Fe}_1\text{Ni}_{12}$	10.32
$\text{Ni}_1\text{Ag}_{12}$	3.38
$\text{Co}_1\text{Fe}_6\text{Ni}_6$	25.36
$\text{Co}_1\text{Ag}_6\text{Ni}_6$	3.57

$\text{Co}_1\text{Fe}_n\text{Ni}_{12-n}$ ($n=0-12$) nanoalaşımını oluşturan atomların tekli, ikili ve üçlü nanokümelere sahip olduğu lokal manyetik momentleri ve lokal yük dağılımları Şekil 7'de gösterilmiştir. Şekil 7a incelendiğinde Co atomunun yüzeydeki atom başına manyetik momentinin ($1.96 \mu_B$) merkezdeki atom başına manyetik momentinden ($1.89 \mu_B$) fazla olduğu görülmektedir. Bu sonuç yukarıda vurguladığımız Co atomu yüzeye yerleştiğinde daha fazla manyetik momente sahip olur yorumunu doğrulamaktadır. Şekil 7a, 7b ve 7c incelendiğinde yüzeydeki atomların merkezdeki atomlardan daha fazla manyetik momente sahip olduğu görülmektedir. Yüzeye yerleşen Ni atomları ($0.76 \mu_B$) ve Co atomlarının ($1.96 \mu_B$) atom başına sahip olduğu manyetik moment aynı iken, Fe atomlarının atom başına sahip olduğu manyetik moment $2.87 \mu_B$ ve $2.99 \mu_B$ arasında değişmektedir. Fe_{13} nanoparçacığında merkeze simetrik olarak yerleşen atomlar aynı manyetik momente sahiptir. Şekil 7d, 7e ve 7g incelendiğinde Ni atomlarının yüzeydeki lokal manyetik momentlerinin, Ni atomlarının Fe atomları ile yer değiştirmesinden etkilendiği görülmektedir. Ayrıca, $\text{Co}_1\text{Fe}_{12}$ ikili nanoalaşımında yüzeydeki farklı konumlardaki Fe atomları aynı

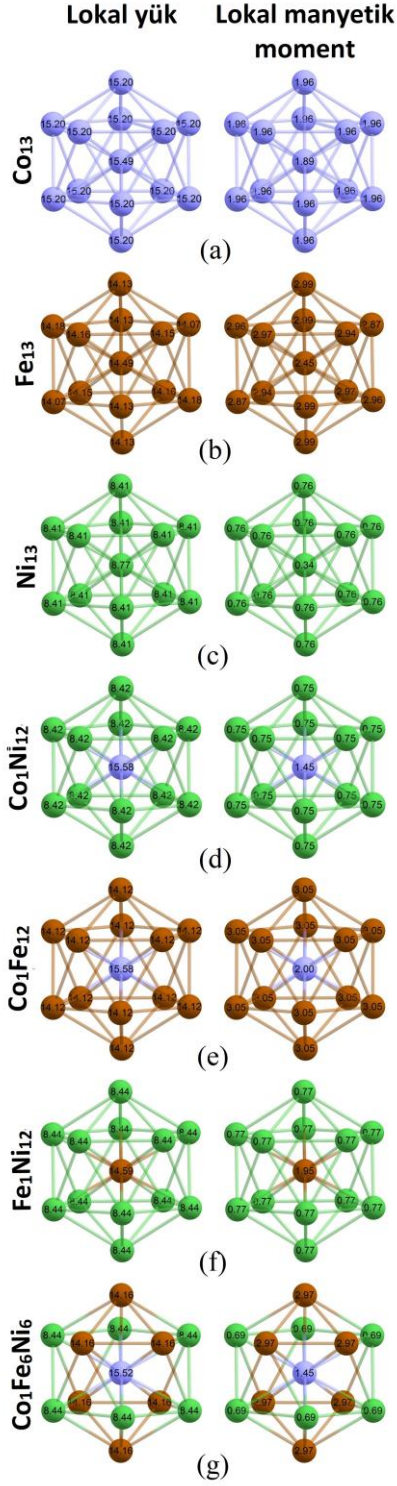
manyetik momente ($3.05 \mu_B$) sahiptir. Şekil 7d ve 7g incelendiğinde, Co_1Ni_{12} nanoalaşımında merkezdeki Co atomunun lokal yükü $15.58'$ dir. $Co_1Fe_6Ni_6$ nanoalaşımında ise merkezdeki Co atomunun lokal yükü $15.52'$ dir. $Co_1Fe_nNi_{12-n}$ ($n=0-12$) nanoalaşımalarında Fe atomu katkısının merkezdeki Co atomunun lokal yükünü çok az da olsa azalttığı görülmüştür.

Çizelge 2'de $Co_1Ag_nNi_{12-n}$ ($n=0-12$) nanoalaşımını oluşturan Co, Ag ve Ni atomlarından oluşmuş tekli, ikili ve üçlü nanokümlerin sahip olduğu toplam manyetik momentleri de verilmiştir. Çizelge 2 incelendiğinde, en yüksek manyetik momente ($28.80 \mu_B$) sahip nanoalaşım bu kompozisyon sistemindeki en iyi ferromanyetik olan Co atomlarından oluşan Co_{13} nanoparçacığdır. En düşük manyetik momente ($2.94 \mu_B$) sahip nanoalaşım ise ferromanyetik olmayan Ag atomlarından oluşan Ag_{13} nanoparçacığı değil, ferromanyetik Co atomu katkılı Co_1Ag_{12} nanoalaşımı olduğu görülmüştür. $Co_1Ag_nNi_{12-n}$ ($n=0-12$) nanoalaşımını oluşturan atomların tekli, ikili ve üçlü nanokümlerinin lokal manyetik momentleri ve lokal yük dağılımları Şekil 8'de gösterilmiştir. Şekil 8a, 8b ve 8c incelendiğinde ferromanyetik Co ve Ni atomlarından oluşan Co_{13} ve Ni_{13} nanoparçacıklarında yüzeydeki atomların merkezdeki atomlardan daha fazla manyetik momente sahip olduğu görülmektedir. Ferromanyetik olmayan Ag atomlarından oluşan Ag_{13} nanoparçacığında ise yüzeydeki ve merkezdeki Ag atomlarının manyetik momenti ($0.06 \mu_B$) eşittir. Şekil 8e ve 8f'deki Co_1Ag_{12} ve Ni_1Ag_{12} nanoalaşımaları incelendiğinde, Ni atomu Co atomundan daha zayıf ferromanyetik olmasına rağmen, Ni_1Ag_{12} nanoalaşımında yüzeydeki Ag atomlarının lokal manyetik momentlerinin daha yüksek olduğu görülmüştür. Şekil 8d ve 8g incelendiğinde Ni atomlarının yüzeydeki lokal manyetik momentlerinin, Ni atomlarının Ag atomları ile yer değiştirmesinden etkilendiği görülmektedir. Ek olarak ferromanyetik olmayan Ag atomlarının toplam manyetik momente katkısının negatif olduğu tek nanoalaşım $Co_1Ag_6Ni_6$ nanoalaşımıdır. Co_1Ni_{12} nanoalaşımında merkezdeki Co atomunun lokal yükü $15.58'$ dir. $Co_1Ag_6Ni_6$ nanoalaşımında ise

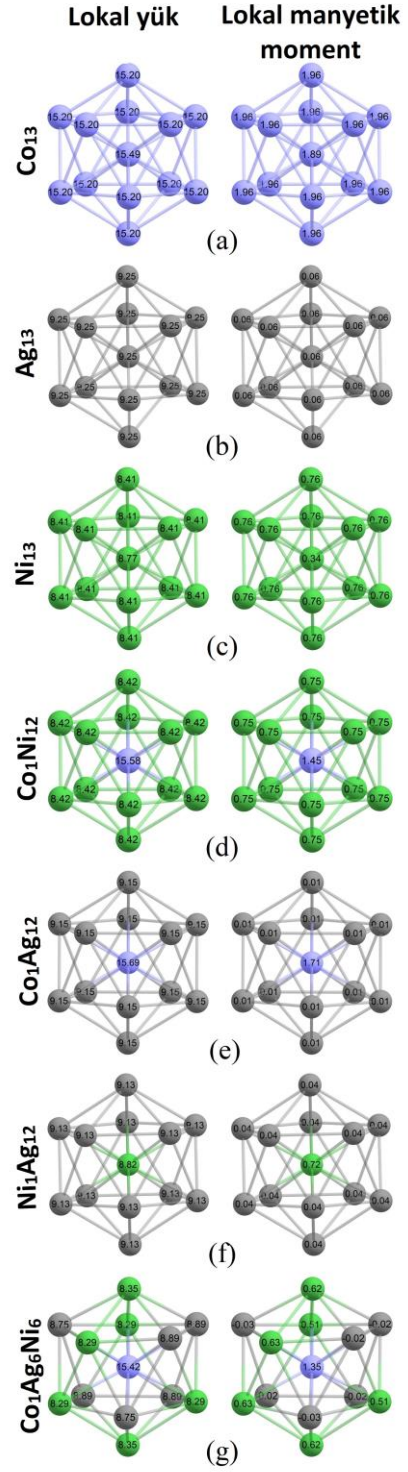
merkezdeki Co atomunun lokal yükü ise $15.42'$ dir. $Co_1Ag_nNi_{12-n}$ ($n=0-12$) nanoalaşımalarında Ag atomu katkısının merkezdeki Co atomunun lokal yükünü azalttığı görülmüştür.

4. Sonuç

Bu çalışmada, 13 atomdan oluşan $Co_1Fe_nNi_{12-n}$ ($n=0-12$) ve $Co_1Ag_nNi_{12-n}$ ($n=0-12$) üçlü nanoalaşımalarının yapısal, enerjik ve manyetik özellikleri Gupta ve DFT düzeylerindeki hesaplamalar ile teorik olarak incelenmiştir. Gupta düzeyinde, Co atomlarının her iki kompozisyon sisteminde de nanoalaşımaların merkezine yerleşmeyi tercih ettiği görülmüştür. Fe, Ag ve Ni atomları ise nanoalaşımaların yüzeyine yerleşmeyi tercih etmektedirler. Gupta düzeyindeki karışma enerjisi analizine göre $Co_1Fe_nNi_{12-n}$ ($n=0-12$) ve $Co_1Ag_nNi_{12-n}$ ($n=0-12$) nanoalaşımalarının en kararlı kompozisyonu sırasıyla $Co_1Fe_6Ni_6$ ve $Co_1Ag_6Ni_6$ olarak elde edilmiştir. Her iki kompozisyon sisteminde de Gupta ve DFT düzeylerinin enerjik olarak birbiri ile uyumsuz olduğu görülmüştür. Nanoalaşımalar, Gupta düzeyinde enerjik olarak karışıma uygunken, DFT düzeyinde karışıma uygun değildirler. $Co_1Fe_nNi_{12-n}$ ($n=0-12$) nanoalaşımalarında manyetik moment, ferromanyetik Fe atomu katkısı ile lineer olarak artarken, $Co_1Ag_nNi_{12-n}$ ($n=0-12$) nanoalaşımalarında ferromanyetik olmayan Ag atomu katkısıyla genellikle lineer olarak azalmaktadır. Tekli, ikili ve üçlü nanokümlerin toplam manyetik momentlerinin ilginç davranışlar sergilediği görülmektedir. Örneğin, tamamen ferromanyetik olmayan atomdan oluşan Ag_{13} nanoparçacığının, ferromanyetik Co ve Ni atomu katkılı Co_1Ag_{12} ve Ni_1Ag_{12} ikili nanoalaşımalarından daha yüksek manyetik momente sahip olduğu elde edilmiştir. Ayrıca, nanoalaşımın yüzeyine yerleşmiş Co atomlarının lokal manyetik momenti, nanoalaşımın merkezine yerleşmiş Co atomunun lokal manyetik momentinden daha fazladır. Co_{13} , Fe_{13} ve Ni_{13} nanoparçacıklarında yüzeye yerleşen atomların merkeze yerleşen atomlardan daha fazla manyetik momente sahip olduğu görülmüştür. $Co_1Fe_nNi_{12-n}$ ($n=0-12$) ve $Co_1Ag_nNi_{12-n}$ ($n=0-12$) nanoalaşımalarında Fe ve Ag atomu katkısının nanoalaşımın merkezine yerleşen Co atomunun lokal yükünü azalttığı elde edilmiştir.



Şekil 7 (a) Co₁₃, (b) Fe₁₃, (c) Ni₁₃ (d) Co₁Ni₁₂, (e) Co₁Fe₁₂, (f) Fe₁Ni₁₂ ve (g) Co₁Fe₆Ni₆ nanokümlerinin lokal manyetik momentleri ve lokal yükleri.



Şekil 8 (a) Co₁₃, (b) Ag₁₃, (c) Ni₁₃, (d) Co₁Ni₁₂, (e) Co₁Ag₁₂, (f) Ni₁Ag₁₂ ve (g) Co₁Ag₆Ni₆ nanokümlerinin lokal manyetik momentleri ve lokal yükleri.

Teşekkür

Bu çalışmada gerçekleştirilen lokal optimizasyonlar Zonguldak Bülent Ecevit Üniversitesi Bilimsel Araştırma Projeleri tarafından desteklenen bilgisayar olanakları kullanarak yapılmıştır (Proje no: 2016-22794455-01, 2016-22794455-02). DFT hesaplamaları ise, TÜBİTAK-ULAKBİM TRUBA kaynaklarında gerçekleştirilmiştir.

5. Kaynaklar

Abhandlung, G., 2013. Structural and electronic properties of transition metal nanoalloys and magnetic compounds, Doktora Tezi, Universitat Bayreuth, 119.

Annalakshmi, M., Balasubramanian, P., Chen, S. and Chen, T., 2019. One pot synthesis of nanospheres-like trimetallic NiFeCo nanoalloy: A superior electrocatalyst for electrochemical sensing of hydrazine in water bodies. *Sensors & Actuators: B. Chemical*, **296**, 126620.

Bates, M.K., Jia, Q., Doan, H., Liang, W. and Mukerjee, S., 2016. Charge-Transfer Effects in Ni-Fe-Co Mixed-Metal-Oxides for the Alkaline Oxygen Evolution Reaction. *ACS Catalysis*, **6(1)**, 155–161.

Billas, I.M.L., Chatelain, A. and De Heer, W.A., 1994. Magnetism from the Atom to the Bulk in Iron, Cobalt, and Nickel Clusters. *Science*, **265(5179)**, 1682-1684.

Binns, C., 2014. Nanomagnetism: Fundamentals and Applications. Richard E. Palmer (Series Editör), *Elsevier*, 1-32.

Bochicchio, D. and Ferrando, R., 2013. Morphological instability of core-shell metallic nanoparticles. *Physical Review B*, **87**, 165435.

Boroujeni, K.P., Shahrokh, M., Karvani, J., Moradi, N., Farokhnia, A. and Mobini, M., 2019. Synthesis and Study of Catalytic, Anti-Bacterial, Anti-Oxidant, and DNA Cleavage Properties of Ag-Co and Ag-Ni Magnetic Nanoparticles. *Acta Chimica Slovenica*, **66(3)**, 542-551.

Bouzit, F.Z., Nemamcha, A., Moumeni, H. and Rehspringer J.L., 2017. Morphology and Rietveld analysis of nanostructured Co-Ni electrodeposited thin films obtained at different current densities. *Surface and Coatings Technology*, **315**, 172-180.

Calvo, F., 2013. Nanoalloys From Fundamentals to Emergent Applications. *Elsevier*, 1-405.

Çelik, Ö. and Fırat, T., 2018. Synthesis of FeCo Magnetic Nanoalloys and Investigation of Heating Properties for Magnetic Fluid Hyperthermia. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, **456**, 11-16.

Ebrahimi, F., Sajjadi, S.A. and Babakhani, A., 2019. On the role of structural variables in magnetic properties of $\text{Co}_{(1-x)}\text{Ni}_x\text{Fe}_2\text{O}_4$ nanoferrites. *Ceramics International*, **45**, 20921–20928.

El-Gendy, A.A., 2018. Core/Shell Magnetic Nanoparticles for Biomedical Applications. *Elsevier*, 41–58.

Fernandez, E.M. and Balbas, L.C., 2005. Structural Properties Of Bimetallic Clusters From Density Functional Calculations. *International Journal Of Modern Physics B*, **19**, 2339-2344.

Ferrando, R., 2016. Structure and properties of nanoalloys. Richard E. Palmer (Series Editör), *Elsevier*, 1-327.

Fu, G., Chen, Y., Cui, Z., Li, Y., Zhou, W., Xin, S., Tang, Y. and Goodenough, J. B., 2016. A Novel Hydrogel-derived Bifunctional Oxygen Electrocatalyst for Rechargeable Air Cathodes. *Nano Letters*, **16(10)**, 6516–6522.

Giannozzi, P., Baroni, S., Bonini, N., Calandra, M., Car, R., Cavazzoni, C., Ceresoli, D., Chiarotti, G.L., Cococcioni, M., Dabo, I., Dal Corso, A., 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. and Wentzcovitch, R.M., 2009. QUANTUM ESPRESSO: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials. *Journal of Physics:Condensed Matter*, **21(39)**, 395502.

Giannozzi, P., Andreussi, O., Brumme, T., Bunau, O., Nardelli, M.B., Calandra, M., Car, R., Cavazzoni, C., Ceresoli, D., Cococcioni, M., Colonna, N., Carnimeo, I., Dal Corso, A., De Gironcoli, S., Delugas, P., DiStasio Jr, R.A., Ferretti, A., Floris, A., Fratesi, G., Fugallo, G., Gebauer, R., Gerstmann, U., Giustino, F., Gorni, T., Jia, J., Kawamura, M., Ko, H., Kokalj, A., Küçükbenli, E., Lazzeri M., Marsili, M., Marzari, N., Mauri, F., Nguyen,

- N.L., Nguyen, H., De La Roza, A., Paulatto, L., Ponce, S., Rocca, D., Sabatini, R., Santra, B., Schlipf, M., Seitsonen, A.P., Smogunov, A., Timrov, I., Thonhauser, T., Umari, P., Vast, N., Wu, X. and Baroni, S., 2017. Advanced capabilities for materials modelling with Quantum ESPRESSO. *Journal of Physics:Condensed Matter*, **29(46)**, 465901.
- Klencsar, Z., Nemeth, P., Sandor, Z., Horvath, T., Sajo, I.E., Meszaros, S., Mantilla, J., Coaquira, J.A.H., Garg, V.K., Kuzmann, E. and Tolnai, G., 2016. Structure and magnetism of Fe-Co alloy nanoparticles. *Journal of Alloys and Compounds*, **674**, 153-161.
- Kuntová, Z., Rossi, G. and Ferrando, R., 2008. Melting of core-shell Ag-Ni and Ag-Co nanoclusters studied via molecular dynamics simulations. *Physical Review B*, **77**, 205431.
- Nam, G., Son, Y., Park, S.O., Jeon, W.C., Jang, H., Park, J., Chae, S., Yoo, Y., Ryu, J., Kim, M.G., Kwak, S.K. and Cho, J., 2018. A Ternary Ni₄₆Co₄₀Fe₁₄ Nanoalloy-Based Oxygen Electrocatalyst for Highly Efficient Rechargeable Zinc–Air Batteries. *Advanced Materials*, **30(46)**, 1803372.
- Panday, S., Jeevanandam P. and Daniel, B.S.S., 2013. Synthesis and magnetic properties of nanocrystalline Co-Ni alloys:A review. *Materials Science Forum*, **736**, 229-240.
- Perdew, J.P., Burke, K. and Ernzerhof, M., 1996. Generalized gradient approximation made simple. *Physical Review Letters*, **77(18)**, 3865-3868.
- Salati, A., Ramazani, A. and Kashi, M.A., 2020. Tuning hyperthermia properties of FeNiCo ternary alloy nanoparticles by morphological and magnetic characteristics. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, **498**, 166172.
- Sun, C., Lee, J.S.H. and Zhang, M., 2008. Magnetic nanoparticles in MR imaging and drug delivery. *Advanced Drug Delivery Reviews*, **60**, 1252–1265.
- Taran, S., Garip, A.K. and Arslan, H., 2016. Theoretical study of the structures and chemical ordering of CoPd nanoalloys supported on MgO(001). *International Journal of Modern Physics C*, **27(11)**, 1650146.
- Taran, S., 2019. 13 atomlu Cu-Au-Pt üçlü metal nanoalaşımların yapısal özellikleri. *Düzce Üniversitesi Bilim ve Teknoloji Dergisi*, **7**, 1204-1216.
- Taran, S., Garip, A.K. and Arslan, H., 2020a. A theoretical study on chemical ordering of 38-atom trimetallic Pd-Ag-Pt nanoalloys. *Chinese Physics B*, **29(7)**, 077801.
- Taran, S. and Arslan, H., 2020. Stability and magnetic behaviour of 19-,23-and 26-atom trimetallic Pt-Ni-Ag nanoalloys. *Molecular Physics*, **118(23)**, e1818859.
- Taran, S., Garip, A.K. and Arslan, H., 2020b. Investigation of the chemical ordering and structural properties of the trimetallic (PtNi)@Ag nanoalloys. *Journal of Cluster Science*, **32**, 199-208.
- Theofanidis, S.A., Galvita, V.V., Konstantopoulos, C., Poelman H. and Marin, G.B., 2018. Fe-Based Nano-Materials in Catalysis. *Materials*, **11(5)**, 831.
- Toparli, Ç., Ebin, B. and Gürmen, S., 2017. Synthesis, structural and magnetic characterization of soft magnetic nanocrystalline ternary FeNiCo particles. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, **423**, 133–139.
- Vanderbilt, D., 1990. Soft self-consistent pseudopotentials in a generalized eigenvalue formalism. *Physical Review B*, **41(11)**, 7892-7895.
- Varas, A., Aguilera-Granja, F., Rogan, J. and Kiwi, M., 2015. Structural, electronic, and magnetic properties of Fe_xCo_yNi_z (x+y+z=13) clusters: A density-functional-theory study. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, **394**, 325–334.
- Wales, D.J. and Doye, J.P.K., 1997. Global optimization by basin-hopping and the lowest energy structures of lennard-jones clusters containing up to 110 Atoms. *The Journal of Physical Chemistry A*, **101(28)**, 5111-5116.
- Yang, Y., Lin, Z., Gao, S., Su, J., Lun, Z., Xia, G., Chen, J., Zhang, R. and Chen, Q., 2017. Tuning electronic structures of non-precious ternary alloys encapsulated in graphene layers for optimizing overall water splitting activity. *ACS Catalysis*, **7(1)**, 469–479.
- Yıldırım, H. ve Arslan, H., 2019. CuAgAu üçlü nanoalaşımların optimizasyonu ve erime dinamiği.

Balkesir Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Dergisi,
21(1), 336-351.

Yıldırım, H. and Arslan, H., 2020. Size and composition effect on structural properties and melting behaviors of Cu-Ag-Au ternary nanoalloys. *International Journal of Modern Physics C*, **31(6)**, 2050078.

Zeng, L., Cui, X., Chen, L., Ye, T., Huang, W., Ma, R., Zhang, X. and Shi, J., 2017. Non-noble bimetallic alloy encased in nitrogen-doped nanotubes as a highly active and durable electrocatalyst for oxygen reduction reaction. *Carbon*, **114**, 347-355.