



Araştırma Makalesi

Spintronik Uygulamalar için BeFeSi Yarı Heusler Alaşımının DFT ile Teorik inceleme

DFT Theoretical Investigation of BeFeSi Semi-Heusler Alloy for Spintronic Applications

Erol ALBAYRAK^{1*}  0000-0001-9161-9068

Makale Bilgileri	Özet
Anahtar Kelimeler: Spintronik uygulamalar, Heusler alaşımlar, DFT yaklaşımı, Yarı metalik malzemeler.	Bu çalışmada, BeFeSi yarı Heusler alaşımının elektronik, yapısal, elastik ve termal özellikleri, Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi (DFT) yöntemiyle ilk kez teorik olarak detaylı bir şekilde incelenmiştir. Literatürde daha önce kapsamlı bir çalışması bulunmayan BeFeSi alaşımına yönelik hesaplamalar, bu malzemenin ileri teknoloji alanlarındaki potansiyelini ortaya koymaktadır. Yapısal analizler sonucunda, alaşımın en kararlı örgü parametresi 5.032 Å olarak hesaplanmıştır. Bu değer, alaşımın mekanik olarak dengeli ve kararlı bir kristal yapıya sahip olduğunu göstermektedir. Bant yapısı ve durum yoğunluğu (DOS) analizleri, BeFeSi'nin yarı metalik karakter taşıdığını ve Fermi seviyesinde spin bağımlı bir bant yapısına sahip olduğunu ortaya koymuştur. Spin-aşağı yöneliminde yaklaşık 0.2 eV civarında küçük bir bant boşluğu bulunması, malzemenin spintronik uygulamalarda kullanım potansiyeline işaret etmektedir. Fe 3d ve Si 3p orbitalleri arasındaki hibritleşme, bant yapısının oluşumunda kritik bir rol oynamaktadır. Mekanik analizler sonucunda, Bulk modülü 147.88 GPa, kayma modülü 23.62 GPa ve Young modülü 67.28 GPa olarak hesaplanmıştır. B/G oranının 6.26 olması, alaşımın yüksek süneklik sergilediğini göstermektedir. Poisson oranının 0.424 olması, bağlanma yapısının metalik karakter içerdiğini ve Fe-Si bağlarının metalik-kovalent hibrit bağlanma gösterdiğini işaret etmektedir. Termal analizlerde, titreşim enerjisi, serbest enerjisi, entropisi ve ısı kapasitesinin (C_v) sıcaklığa bağlı değişimi değerlendirilmiştir. Serbest enerjinin sıcaklık arttıkça azalması, alaşımın yüksek sıcaklıklarda kararlılığının azaldığını göstermektedir. Entropi artışı ise atomik hareketliliğin yükseldiğine işaret etmektedir. Yapılan hesaplamalar ve analizler, BeFeSi alaşımının termoelektrik, spintronik ve enerji dönüşüm sistemleri gibi ileri teknoloji alanlarında kullanılabilecek potansiyele sahip olduğunu göstermektedir. Elektronik bant yapısının manyetik özelliklerle birleşmesi, malzemenin düşük güçlü manyetik hafıza ve manyetik sensörler gibi uygulamalarda değerlendirilebileceğini ortaya koymaktadır.

^{1*} Kırşehir Ahi Evran University, erol.albayrak@ahievran.edu.tr
Sorumlu yazar: erol.albayrak@ahievran.edu.tr

Article Info	Abstract
Keywords: Spintronic applications, Heusler alloys, DFT approximation, Semi-metallic materials.	In this study, the electronic, structural, elastic, and thermal properties of the BeFeSi semi-Heusler alloy have been theoretically investigated in detail for the first time using Density Functional Theory (DFT). The calculations for the BeFeSi alloy, which has not been extensively studied in the literature before, reveal the potential of this material in advanced technology fields. The structural analysis yielded a lattice parameter of 5.032 Å, indicating a mechanically stable and stable crystal structure. The band structure and density of state (DOS) analyses revealed the semi-metallic character of BeFeSi and its spin-dependent band structure at the Fermi level. The presence of a modest band gap of approximately 0.2 eV in the spin-down orientation suggests the material's suitability for spintronic applications. The hybridization between Fe 3d and Si 3p orbitals plays a pivotal role in shaping the band structure. Bulk modulus, shear modulus, and Young's modulus were calculated to be 147.88 GPa, 23.62 GPa, and 67.28 GPa, respectively, through mechanical analysis. The B/G ratio of 6.26 indicates that the alloy exhibits high ductility. The Poisson's ratio of 0.424 suggests the presence of metallic bonding and Fe-Si bonds exhibiting a metallic-covalent hybrid bonding character. In the thermal analysis, the temperature-dependent variation of vibration energy, free energy, entropy, and heat capacity (C_v) were evaluated. The decrease in free energy with increasing temperature indicates that the alloy's stability decreases at high temperatures, while the increase in entropy indicates an increase in atomic mobility. The calculations and analysis demonstrate that the BeFeSi alloy has the potential to be utilized in advanced technology areas such as thermoelectricity, spintronics, and energy conversion systems. The combination of electronic band structure with magnetic properties suggests that the material can be used.

1. GİRİŞ

1903 yılında keşfedilen Heusler alaşımları, geniş kullanım alanları ve sahip oldukları üstün manyetik, elektronik, yapısal ve termal özellikler nedeniyle malzeme bilimi ve ileri mühendislik uygulamalarında önemli bir araştırma konusu olmuştur. Bu alaşımlar, tam Heusler (X_2YZ) ve yarı Heusler (XYZ) bileşikleri olarak sınıflandırılmaktadır (Kawasaki, 2019; Elphick ve ark., 2021; Yadav ve ark., 2020; Fortunato ve ark., 2023; Marathe ve ark., 2023; Chernov ve Lukoyanov, 2023). Özellikle BeFeSi yarı Heusler alaşımı, bileşimindeki elementlerin kendine özgü özellikleri sayesinde dikkat çekmektedir. Bu alaşım, yapısal stabilitesi ve elektronik iletkenliği açısından termoelektrik, spintronik ve enerji dönüşüm sistemlerinde potansiyel bir malzeme olarak değerlendirilebilir. Manyetik anizotropi ve yoğunluk, süneklik, dayanıklılık gibi özellikleri, onu hafif ve dayanıklı malzemeler arasında önemli bir konuma getirmektedir (Otrokov ve ark., 2019). Ayrıca, belirli Heusler bileşiklerinin gösterdiği topolojik faz özellikleri, BeFeSi alaşımının kuantum malzemeleri ve ileri elektronik sistemlerde değerlendirilmesine de olanak tanıyabilir (Qi ve Zhang, 2011). Modern hesaplamalı modelleme yöntemleri ve gelişmiş spektroskopik teknikler, Heusler alaşımlarının atomik yapıları, manyetik faz geçişleri ve elastik özellikleri hakkında daha ayrıntılı veriler sunmaktadır (Bansil ve ark., 2016; Berry ve ark., 2017; Singh ve ark., 2020; Aravindan ve ark., 2022; Tavares ve ark., 2023; Zhao ve ark., 2025). Alaşım içerisindeki Be elementi, yüksek termal iletkenliği ve sertliği ile bilinirken, Fe manyetik özellikleri ile öne çıkmaktadır. Si ise yarı iletken yapısı sayesinde elektronik ve termoelektrik malzemelerde kritik bir rol üstlenmektedir. Bu üç elementin birleşimi, BeFeSi alaşımına hem manyetik hem de elektronik açıdan üstün özellikler kazandırarak, yeni nesil enerji ve bilgi teknolojileri uygulamaları için alaşımı umut verici bir malzeme haline getirebilir. Literatürde BeFeSi alaşımı üzerine detaylı deneysel ve teorik çalışmalar henüz sınırlıdır. Ancak, diğer yarı Heusler bileşikleriyle karşılaştırıldığında, BeFeSi'nin düşük yoğunluk, iyi mekanik dayanım ve uygun elektriksel iletkenlik gibi özelliklere sahip olması beklenmektedir. Özellikle BeFeSi alaşımının bileşenlerine bakılarak, üstün mekanik performans ve yüksek termal iletkenlikleri sayesinde malzemenin genel özellikleri açısından geniş bir uygulama

Albayrak¹

alanı bulabileceği tahmin edilmektedir. Bu çalışmada, literatürde hakkında araştırma bulunmayan BeFeSi yarı Heusler alaşımının yapısal, elektronik, manyetik ve termodinamik özellikleri Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi (DFT) yaklaşımı kullanılarak detaylı bir şekilde incelenmiş, potansiyel kullanım alanları değerlendirilmiştir. Özellikle enerji dönüşüm sistemleri ve elektronik bileşenler açısından taşıdığı potansiyel üzerinde durularak, malzemenin performansını artırabilecek parametreler tartışılmıştır. Bu tür alaşımların sentezlenmesi ve özelliklerinin deneysel olarak çalışılması zaman ve maliyet gerektirdiğinden alaşımlar hakkında önceden yapılacak teorik hesaplamalar önemli avantajlar sağlar. Çalışmanın amacı da teknolojiye uygulama alanları bulması muhtemel BeFeSi alaşımının teorik olarak özelliklerinin belirlenmesi ve bu teorik çalışmanın yapılacak deneysel çalışmalara yol göstermesidir.

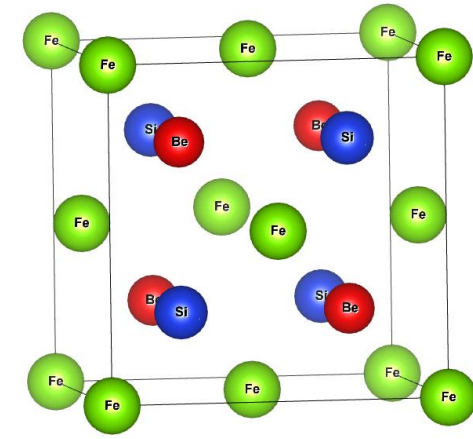
2. MATERYAL VE YÖNTEM

Bu çalışmada, BeFeSi yarı Heusler alaşımının yapısal, elektronik, elastik ve termal özellikleri analiz edilerek teknolojik uygulamalar açısından potansiyel kullanımı araştırılmıştır. Bu amaç doğrultusunda, Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi (DFT) tabanlı hesaplamalar için Quantum Espresso (QE) paket programı kullanılmıştır. QE, düzlem dalga yöntemine dayalı hesaplamalar yapabilen açık kaynaklı bir yazılımdır ve malzeme bilimi alanında geniş bir kullanım alanına sahiptir (Giannozzi ve ark., 2020). Sistemin kararlı durumuna ulaşabilmesi için en düşük enerji yapılandırmasının belirlenmesi gerekmektedir. Bunun için, malzemenin elektronik taban durum yük yoğunluğu ve değiş-tokuş korelasyon potansiyeli incelenmiştir. Bu çalışmada değiş-tokuş korelasyon potansiyeli için Perdew-Burke-Ernzerhof genelleştirilmiş gradyent yaklaşımı (PBE-GGA) kullanılmıştır (Perdew ve ark., 1996). Atomik kor ve değerlik elektronları arasındaki etkileşimleri modellemek için Rappe grubuna ait pseudo potansiyeller tercih edilmiştir. Hesaplamalar sırasında dalga fonksiyonları için kinetik enerji kesme değeri 40 Ry, elektronik yük yoğunluğu kesme değeri ise 400 Ry olarak belirlenmiştir. Fermi yüzeyine yakın bölgelerdeki hesaplamaların doğruluğunu artırmak için Smearing parametresi 0.05 Ry olarak seçilmiştir. BeFeSi yarı Heusler alaşımı, kübik kristal yapıya sahip olup F-43m uzay grubunda yer almaktadır. Bu yapı, tipik yarı Heusler bileşiklerine özgü yüzey merkezli örgü düzenine sahiptir. BeFeSi kristal yapısındaki atomik yerleşimler; Fe atomu: (0,0,0), Si atomu: (0.75, 0.75, 0.75), Be atomu: (0.25, 0.25, 0.25) şeklinde seçilmiştir. Aslında alaşımın birim hücresine ait atomik pozisyonlarının farklı kombinasyonları da denenmiş fakat burada bu kombinasyonlardan mekanik kararlı duruma karşılık gelen durum seçilmiş ve ona ait atomik pozisyonlar verilmiştir. Alaşımın elastik özelliklerinin belirlenmesi için Thermo PW (TP) programı kullanılmıştır. Elastik sabitlerin hesaplanabilmesi için sistemin belirli bir basınç altında tepkisi incelenmiş, kristal yapıdaki değişimler göz önüne alınarak elastik modüller hesaplanmıştır (Corso, 2016; Örnek ve ark., 2021). Bu veriler doğrultusunda malzemenin sünekliği, mekanik dayanıklılığı ve rijitliği analiz edilmiştir. Termodinamik özelliklerin belirlenmesi için Debye modeli kullanılarak ısı kapasitesi, termal genleşme ve ısıl iletkenlik gibi parametreler hesaplanmıştır.

3. BULGULAR

3.1 Yapısal Özellikler/Structural Features

BeFeSi alaşımı F-43m uzay grubunda bir atomik dizilime sahip olup C1_b yapıda kristalleşir. Bu çalışmada modellenen alaşım içerisindeki atomik konumlar alaşımın mekanik kararlılığını sağlamak amacıyla; Fe (0,0,0), Be (1/4, 1/4, 1/4), Si (3/4, 3/4, 3/4) olarak tercih edilmiştir. Şekil 1'de Vesta programına çizdirilen BeFeSi'nin birim hücre yapısı gösterilmektedir.

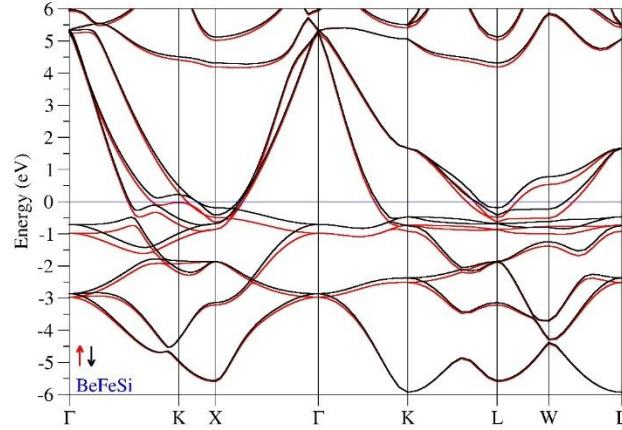


Şekil 1. F-43m uzay grubunda atomik dizilime sahip BeFeSi alaşımının temsili birim hücre yapısı.

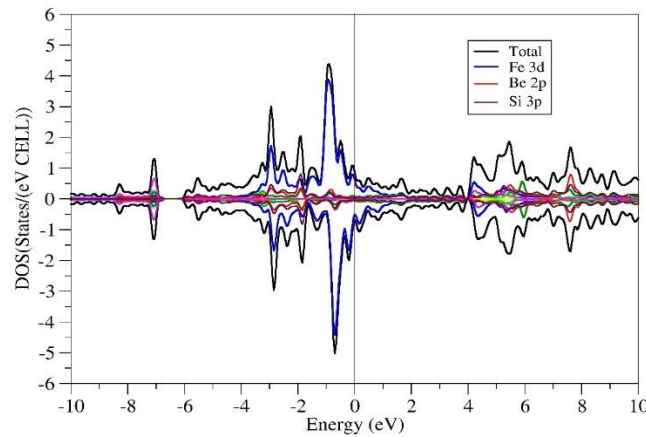
Alaşımin en düşük enerji seviyesi hesaplanarak bu duruma karşılık gelen optimize örgü parametresi $a_0 = 5.032 \text{ Å}$ olarak belirlendi.

3.2 Elektronik Özellikler

Alaşımin elektronik bant ve durumların yoğunluğu (DOS) grafikleri Şekil 2 ve Şekil 3'te verilmiştir.



Şekil 2. BeFeSi alaşıma ait elektronik bant grafiği.



Şekil 3. BeFeSi alaşıma ait durumların yoğunluğu (DOS) grafiği.

Alaşımin elektronik bant yapısındaki spin yukarı ve spin aşağı yüksek simetri eksenlerinde iletim bandı ve valans bandına ait eğrilerin birbirlerini ve Fermi enerji seviyesini kestiği görülür. Bununla birlikte her iki yüksek simetri ekseninde, özellikle de spin aşağı yöneliminde Fermi enerji seviyesiyle küçük bir enerji boşluğu olduğu ve hibritleşmiş bantlar mevcut olduğu anlaşıldı. Bu durum malzemenin yarı metalik bir karakter taşıdığını göstermektedir. Bu bulgu, BeFeSi'nin spintronik uygulamalar için ilginç bir malzeme olabileceğini gösterir. Spin seçici iletim sağlayabilir, bu da manyetik sensörler ve spintronik cihazlar için önemli bir özellik olabilir. Ayrıca DOS grafiğinde Fermi enerji seviyesinde düşük bir yoğunluk gözlemleniyor, bu da tam metal yerine yarı metalik bir davranış sergileyebileceğine başka bir işaret. Elektronik bant grafiğinde Fe 3d ve Si 3p orbitallerine ait eğrilerin örtüştüğü gözlemlendi. Bu durum bu iki orbitale ait güçlü bir hibritleşmenin olduğunu anlamamızı sağladı. Fe 3d orbitalleri ve Si 3p orbitalleri arasındaki güçlü etkileşim, bant yapısında spin bağımlı geçişlerin oluşmasına neden olmakta ve malzemenin spintronik uygulamalarda değerlendirilmesini mümkün kılmaktadır.

3.3 Elastik Özellikler

Bir malzemenin mekanik kararlılığını belirlemek ve sertlik, süneklik gibi özelliklerini anlamak için elastik sabitlerinin hesaplanması gereklidir. Bu bağlamda, BeFeSi alaşıminin C_{11} , C_{12} ve C_{44} elastik sabitleri belirlenmiş ve mekanik kararlılığı değerlendirmek için Born kararlılık kriterleri kullanılmıştır (Born ve Huang 1965). Bu kriterlere göre alaşımin mekanik olarak kararlı olup olmadığı test edilmiştir:

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

Elde edilen sonuçlara göre BeFeSi alaşımasının mekanik olarak kararlı olduğu görülmüştür. Hesaplanan elastik sabitler Tablo 1’de sunulmaktadır.

Tablo 1. BeFeSi alaşımı için hesaplanan elastik sabitleri (C_{11} , C_{12} ve C_{44} ; GPa)

Malzeme	C_{11}	C_{12}	C_{44}
BeFeSi	175.89	133.86	25.54

Tablo 1’de verilen elastik sabitleri ve denklem 2,3,4,5,6 da verilen formüller kullanılarak alaşıma ait Bulk modülü, Young modülü, Kayma modülü, Anizotropi faktörü ve Poisson oranı hesaplanarak Tablo 2’de hesaplanan değerler verilmiştir.

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

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

$$G = \frac{5(C_{11} - 2C_{12})C_{44}}{3(C_{11} - 2C_{12}) + C_{44}} \quad (4)$$

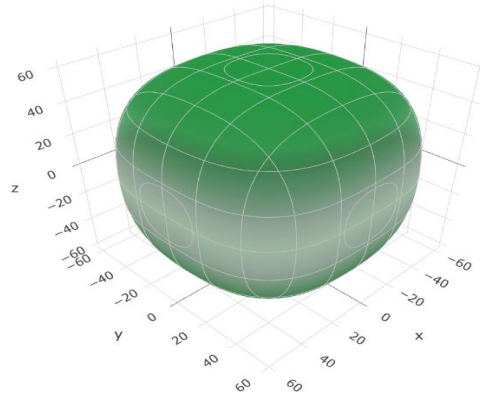
$$\sigma = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{E}{3B} \right) \quad (5)$$

$$A = \frac{2C_{44}}{C_{11} - C_{12}} \quad (6)$$

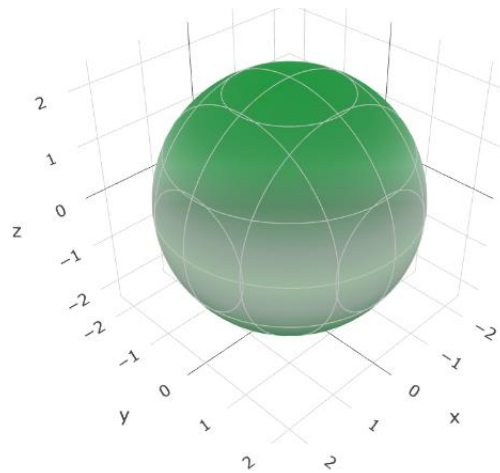
Tablo 2. BeFeSi alaşımı için hesaplanmış Bulk Modülü (B ; GPa), Kayma modülü (G ; GPa), Young modülü (E ; GPa), B/G oranı, poisson oranı (σ), Anizotropi faktörü (A).

Malzeme	B	G	E	B/G	σ	A
BeFeSi	147.88	23.62	67.28	6.26	0.424	1.22

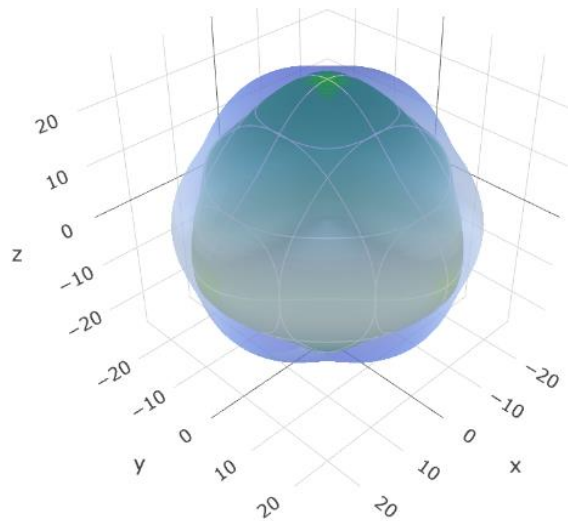
Alaşımın B/G oranı oldukça büyüktür bu da alaşımanın oldukça sünek bir karaktere sahip olduğunu gösterir. Alaşımanın sünekliğinin bir teyidi de sertliğin ölçütlerinden biri olan Young modülüdür. Bu modülün düşük olması alaşımanın sert olmayan ama deformasyona karşı dayanıklı bir doğaya sahip olduğunu anlamamızı sağladı. Bu özelliği sayesinde alaşım özellikle mekanik stabilite gerektiren ancak aşırı sertlik gerektirmeyen uygulamalar için uygun olabilir. Kayma modülünün düşük olması, bu malzemenin yüksek kesme gerilmeleri altında şekil değiştirmeye yatkın olabileceğini gösterir. Bu yüzden alaşımanın yüksek kesme yükleri altında çalıştırılacak uygulamalar için dikkatli değerlendirilmesi gerekir. Bulk modülünün 100 GPa’dan yüksek olması alaşımanın sıkışmaya karşı dirençli yani sıkışabilirliğinin az olduğuna işaret eder. Bununla birlikte kayma modülünün düşük değerde oluşu da Bulk modülü ile birlikte değerlendirildiğinde alaşımanın sıkışabilirliğinin az olması yanında şekil değişimine uyum sağlayan bir yapıda olduğu da anlaşıldı. Poisson oranının metalik bağlanmalara işaret eden aralıkta olması da alaşım içerisindeki atomik bağlanmaların önemli ölçüde Be ve Fe atomları arasında olduğunu ve bu bağlanmalarında metalik bağlanma karakterinde olduğunu işaret eder. Ayrıca Fe ve Si atomları arasındaki bağlar da bu elementlerin karakteristiği gereği metalik-kovalent bağlanma hibritliğine sahiptir. Bu hibrit bağlanma sayesinde alaşımanın rijitliği bir miktar artabilir. Alaşımanın Anizotropi faktörü küçük bir farla da olsa 1 değerinden farklıdır. Bu bilgi alaşımanın bize anizotropik olduğunu gösterir. ELATE kodları kullanılarak alaşıma ait bazı modül ve oranların ve doğrusal sıkışabilirliğin x, y ve Z eksenlerine bağlı olarak değişimlerinin üç boyutlu gösterimleri Şekil 4, 5, 6 ve 7’de gösterilmiştir (Gaillac vd. 2016).



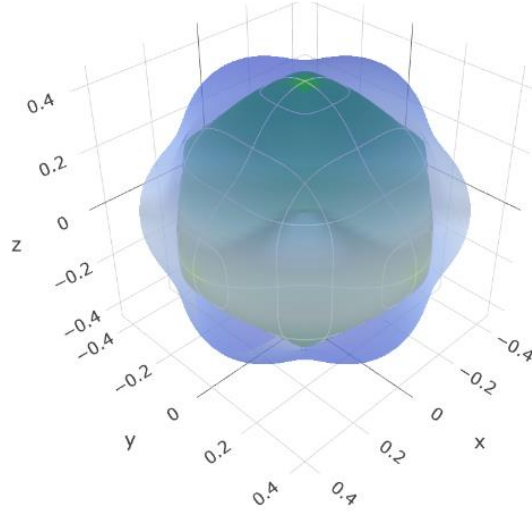
Şekil 4. BeFeSi alaşımasının Young modülünün yöne bağımlı değişimi.



Şekil 5. BeFeSi alaşımasının doğrusal sıkışabilirliğinin yöne bağımlı değişimi.



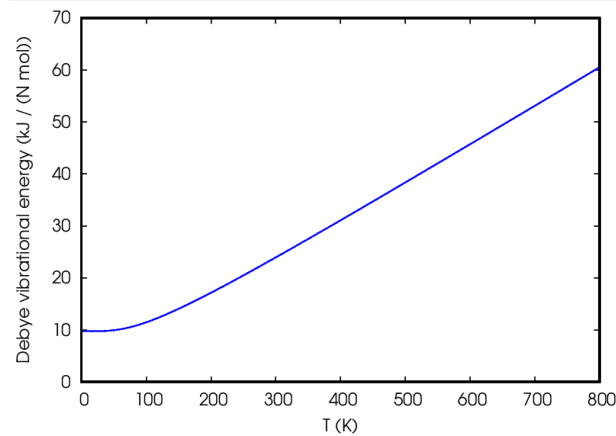
Şekil 6. BeFeSi alaşımasının Kayma modülünün yöne bağımlı değişimi.



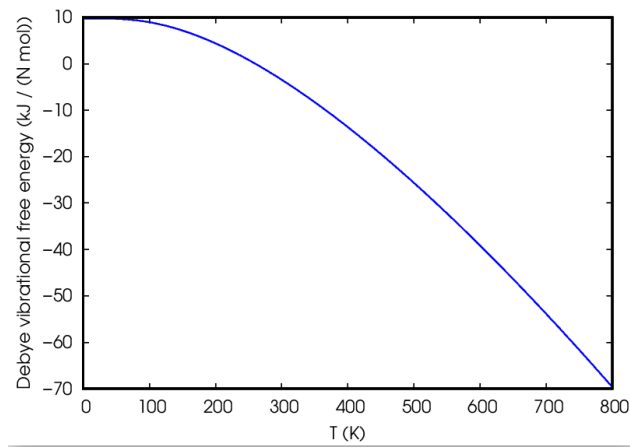
Şekil 7. BeFeSi alaşımlarının Poisson oranının yöne bağımlı değişimi.

3.4 Termal Özellikler

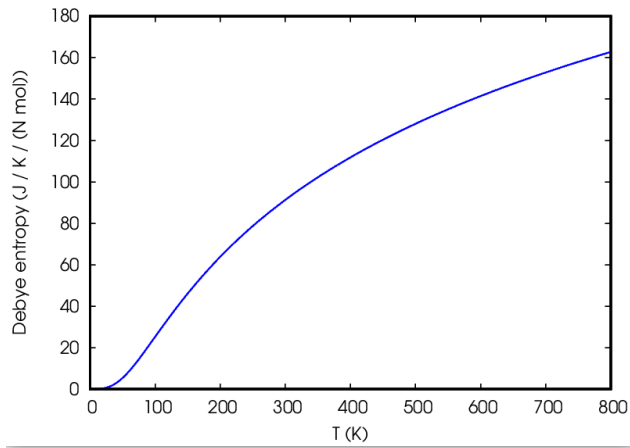
BeFeSi yarı Heusler alaşımlarının ısı ve termodinamik özellikleri, Debye modeli temel alınarak incelenmiştir. Thermo Pw yazılımı kullanılarak gerçekleştirilen hesaplamalar sonucunda Şekil 8, 9, 10 ve 11'de gösterilen grafikler oluşturulmuştur. Bu grafikler, toplam titreşim enerjisi, serbest titreşim enerjisi, ısı kapasitesi (C_V) ve entropi gibi termal parametrelerin sıcaklığa bağlı değişimini sunmaktadır. Elde edilen bu veriler, malzemenin sıcaklık karşısındaki tepkisini ve termodinamik stabilitesini değerlendirmek açısından kritik öneme sahiptir.



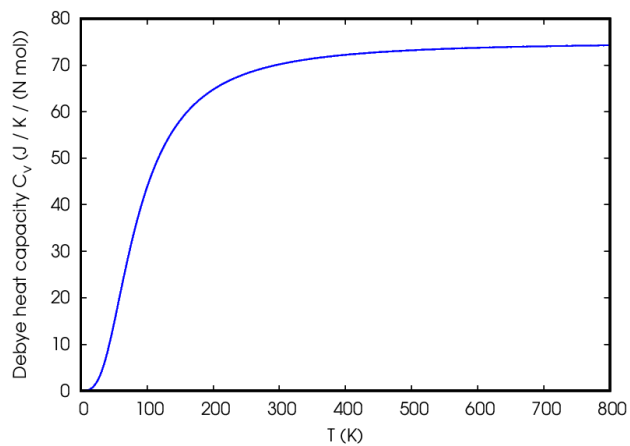
Şekil 8. BeFeSi alaşımlarının titreşim enerjisinin sıcaklıkla değişimi.



Şekil 9. BeFeSi alaşımasının serbest titreşim enerjisinin sıcaklıkla değişimi.



Şekil 10. BeFeSi alaşımasının entropisinin sıcaklıkla değişimi,



Şekil 11. BeFeSi alaşımasının ısı kapasitesinin (C_v) sıcaklıkla değişimi.

Katıların iç enerjisi, sıcaklık arttıkça yükselir ve bu durum, BeFeSi için de gözlemlenmektedir. Malzeme atomlarının daha fazla titreşmesi, enerji seviyesinin artmasına neden olur. Bu eğilim, malzemenin yüksek sıcaklıklarda daha fazla termal genişleme gösterebileceğini işaret eder. Serbest enerji, malzemenin kararlılığı açısından önemli bir parametredir. Sıcaklık yükseldikçe serbest enerjinin azalması, malzemenin yüksek

Albayrak¹

sıcaklıklarda daha az stabil hale gelebileceğini gösterir. Düşük sıcaklıklarda ise serbest enerjinin yüksek olması, BeFeSi'nin bu sıcaklık aralıklarında daha kararlı bir yapı sergilediğini göstermektedir. Sistemdeki düzensizliğin ölçüsü olan entropi, sıcaklık arttıkça yükselmektedir. Bu artış, atomik hareketliliğin arttığını ve malzemenin termal enerjiye karşı hassasiyetinin yükseldiğini gösterir. Entropinin belirli bir seviyeye ulaşması, malzemenin yüksek sıcaklıklarda yapısal değişiklikler geçirme potansiyelini de gösterebilir. Malzemenin sıcaklık karşısında ne kadar enerji absorbe edebildiğini gösteren ısı kapasitesi, belirli bir sıcaklık değerine kadar artarak daha sonra sabit bir noktaya ulaşmaktadır. Bu davranış, katı malzemelerde görülen tipik bir özellik olup, Debye modeline uygun bir termal eğilim sergilemektedir. Yüksek sıcaklıklarda C_v 'nin plato yapması, malzemenin belirli bir enerji seviyesinden sonra ek enerji alımına karşı daha az duyarlı hale geldiğini gösterir. BeFeSi alaşımı, düşük sıcaklıklarda oldukça kararlı bir yapı gösterirken, sıcaklık arttıkça kararlılığında azalma eğilimi göstermektedir. Titreşim enerjisi ve entropideki artış, yüksek sıcaklıklarda daha fazla atomik hareketlilik oluştuğunu işaret etmektedir. Serbest enerjinin azalması, malzemenin belirli bir sıcaklık seviyesinin üzerinde termodinamik olarak daha az dengeli hale gelebileceğini gösterir. Isı kapasitesinin belli bir noktada sabitlenmesi, malzemenin yüksek sıcaklıklarda belirli bir enerji seviyesinden sonra daha stabil hale gelebileceğini düşündürmektedir.

4. SONUÇLAR VE TARTIŞMA

Bu çalışmada, BeFeSi yarı Heusler alaşımının elektronik, mekanik ve termal özellikleri literatürde ilk kez detaylı olarak incelenmiştir. Yapılan hesaplamalar, malzemenin örgü parametresinin 5.032 Å olduğunu ve mekanik olarak kararlı bir yapıya sahip olduğunu ortaya koymuştur. Bant yapısı analizleri, malzemenin Fermi seviyesinde bant kesişimleri gösterdiğini, ancak spin-aşağı yöneliminde 0.2 eV civarında küçük bir bant boşluğu bulunduğunu göstermektedir. Bu durum, BeFeSi'nin tam bir metal değil, yarı metalik karakter sergilediğini ve spin bağımlı elektronik özellikler taşıdığını kanıtlamaktadır. Mekanik özellikler açısından, malzeme yüksek süneklik ve sıkışmaya karşı direnç sunarken, kesme kuvvetlerine karşı daha hassas olabilir. Bulk modülü 147.88 GPa, kayma modülü 23.62 GPa ve Poisson oranı 0.424 olarak hesaplanmıştır. Bu değerler, alaşımın mekanik olarak dengeli ve sünek karakterde olduğunu kanıtlamaktadır. Termal analizlerde, ısı kapasitesinin (C_v) sıcaklık arttıkça plato yaptığı ve entropinin sıcaklıkla yükseldiği gözlemlenmiştir. Bu eğilim, malzemenin düşük sıcaklıklarda stabil, ancak yüksek sıcaklıklarda atomik hareketliliğe bağlı olarak daha kararsız hale gelebileceğini göstermektedir. Sanayi ve teknoloji açısından değerlendirildiğinde, BeFeSi yarı Heusler alaşımı, spintronik cihazlar, manyetik sensörler, termoelektrik malzemeler ve enerji dönüşüm sistemleri gibi ileri mühendislik uygulamaları için umut vadeden bir adaydır. Spin-bağımlı bant yapısının varlığı, malzemenin manyetik hafıza ve düşük güç tüketimli elektroniklerde değerlendirilebileceğini göstermektedir. Genel olarak, BeFeSi yarı Heusler alaşımı, yarı metalik elektronik özellikleri, yüksek sünekliği ve termal kararlılığı sayesinde ileri teknoloji alanlarında değerlendirilmesi gereken bir malzeme olarak öne çıkmaktadır. Bununla birlikte, Be elementinin zehirli doğası da göz ardı edilmeden yapılacak deneysel çalışmalarla elektronik ve manyetik özelliklerin doğrulanması ve optimizasyonu alaşımın gerçek uygulama potansiyelini ortaya koyabilecektir.

Yazar Katkısı

Yazar 1: Kaynaklar, Araştırma, Yazma – orijinal taslak Görselleştirme, Yazma – orijinal taslak gibi makale ile ilgili tüm çalışmalar yazar tarafından yapılmıştır.

Çıkar Çatışması

Yazarların bu makalenin içeriğiyle ilgili olarak beyan edecekleri hiçbir çıkar çatışması yoktur.

Veri Kullanılabilirliği

Bu çalışma sırasında oluşturulan veya analiz edilen tüm veriler, yayınlanan bu makaleye dahil edilmiştir. Veri kümeleri istek üzerine mevcuttur. Bu makalenin sonuçlarını destekleyen ham veriler, yazarlar tarafından herhangi bir çekince olmaksızın sunulacaktır.

KAYNAKÇA

Bansil, A., Lin, H., & Das, T. 2016. Colloquium: Topological band theory. *Reviews of Modern Physics* 88:021004. DOI: 10.1103/RevModPhys.88021004.

Berry, T., Fu, C., Auffermann, G., Fecher, G.H., Schnelle, W., Serrano-Sanchez, F., et al. 2017. Enhancing thermoelectric performance of TiNiSn half-Heusler compounds via modulation doping. *Chemistry of Materials* 29:7042–7048. DOI: 10.1021/acs.chemmater.7b02685.

Albayrak¹

Born, M., & Huang, K. 1965. *Dynamical Theory of Crystal Lattices*. Oxford: Clarendon Press. DOI: 10.1093/oso/9780192670083.001.0001.

Chernov, E.D., & Lukoyanov, A.V. 2023. Effect of electron correlations on the electronic structure and magnetic properties of the full Heusler alloy Mn₂NiAl. *Magnetochemistry* 9:185. DOI: 10.3390/magnetochemistry9070185.

Corso, A.D. 2016. Elastic constants of beryllium: A first-principles investigation. *Journal of Physics: Condensed Matter* 28:075401. DOI: 10.1088/0953-8984/28/7/075401.

Elphick, K., Frost, W., Samiepour, M., Kubota, T., Takanashi, K., Sukegawa, H., et al. 2021. Heusler alloys for spintronic devices: Review on recent development and future perspectives. *Science and Technology of Advanced Materials* 22(1):235–271. DOI: 10.1080/14686996.2020.1812364.

Fortunato, N.M., Li, X., Schönecker, S., Xie, R., Taubel, A., Scheibel, F., Opahle, I., Gutfleisch, O., & Zhang, H. 2023. High-throughput design of all-d-metal Heusler alloys for magnetocaloric applications. *Chemistry of Materials* 36:6765. DOI: 10.1021/acs.chemmater.4c00345.

Giannozzi, P., Andreussi, O., Brumme, T., Bunau, O., Buongiorno Nardelli, M., Calandra, M., et al. 2020. Advanced capabilities for materials modelling with Quantum ESPRESSO. *Journal of Physics: Condensed Matter* 29:465901. DOI: 10.1088/1361-648X/aa8f79.

Kawasaki, J.K. 2019. Heusler interfaces—Opportunities beyond spintronics? *APL Materials* 7:080907. DOI: 10.1063/1.5099576.

Marathe, M., & Herper, H.C. 2023. Exploration of all-3d Heusler alloys for permanent magnets: An ab initio based high-throughput study. *Physical Review B* 107:174402. DOI: 10.1103/PhysRevB.107.174402.

Otrokov, M.M., Klimovskikh, I.I., Bentmann, H., et al. 2019. Prediction and observation of an antiferromagnetic topological insulator. *Nature* 576:416–422. DOI: 10.1038/s41586-019-1840-9.

Perdew, J.P., Burke, K., & Ernzerhof, M. 1996. Generalized gradient approximation made simple. *Physical Review Letters* 77:3865. DOI: 10.1103/PhysRevLett.77.3865.

Singh, A.K., Ramarao, S.D., & Peter, S.C. 2020. Rare-earth based half-Heusler topological quantum materials: A perspective. *APL Materials* 8:060903. DOI: 10.1063/5.0006118.

Tavares, S., Yang, K., & Meyers, M.A. 2023. Heusler alloys: Past, properties, new alloys, and prospects. *Progress in Materials Science* 132:101017. DOI: 10.1016/j.pmatsci.2022.101017.

Yadav, D.K., Bhandari, S.R., & Kaphle, G.C. 2020. Structural, elastic, electronic, and magnetic properties of MnNbZ (Z = As, Sb) and FeNbZ (Z = Sn, Pb) semi-Heusler alloys. *Materials Research Express* 7:116527. DOI: 10.1088/2053-1591/abcc86.

Zhao, W., Zhang, Y., Yin, Y., Xing, K., Zhou, S., Bake, A., et al. 2025. Giant Berry curvature in amorphous ferromagnet Co₂MnGa. *Matter*. DOI: 10.1016/j.matt.2025.101988.

Qi, X.L., & Zhang, S.C. 2011. Topological insulators and superconductors. *Reviews of Modern Physics* 83:1057–1110. DOI: 10.1103/RevModPhys.83.1057.