

**ANKARA ÜNİVERSİTESİ  
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

**DOKTORA TEZİ**

**ÇOK TABAKALI İNCE FİLMLEİN YAPISAL, ELEKTRİKSEL, MANYETİK  
ÖZELLİKLERİNİN İNCELENMESİ VE SPİNTRONİĞE UYGULANMASI**

**ERCÜMENT YÜZÜAK**

**FİZİK MÜHENDİSLİĞİ ANABİLİM DALI**

**ANKARA  
2013**

**Her Hakkı Saklıdır**

## ÖZET

Doktora Tezi

### ÇOK TABAKALI İNCE FİLMLERİN YAPISAL, ELEKTRİKSEL, MANYETİK ÖZELLİKLERİNİN İNCELENMESİ VE SPİNTRONİĞE UYGULANMASI

Ercüment YÜZÜAK

Ankara Üniversitesi  
Fen Bilimleri Enstitüsü  
Fizik Mühendisliği Anabilim Dalı

Danışman: Prof. Dr. Yalçın ELERMAN

Bu tez çalışmasında, manyetik alanda sıçratma yöntemi ile farklı kalınlıklarda (10, 20, 35, 50, 100, 200 nm) ve kompozisyonlarda elde edilen Ni-Mn-Sn manyetik ince filmlerin yapısal, topografik, elektriksel ve manyetik özellikleri incelenmiştir. Ayrıca incelenilecek olan sistemin teorik bant hesaplarıyla, spin kutuplanmaları, manyetik moment değerleri ve sistemde tetragonal bir yapı kusuru yaratıldığında yapısal faz geçiş sıcaklıkları kestirilmiştir. Ni-Mn-Sn manyetik ince filmlerinin yapısal özellikleri Philips marka X-ışını kırınım metresiyle (XRD-XRF-XRR), NT-MDT marka Taramalı Uç Mikroskobu (AKM), manyetik kuvvet mikroskobu (MKM) ve FEI marka geçirimli elektron mikroskobu (TEM) ile incelenmiştir. XRD tekniğiyle, oda sıcaklığında tek fazlı ve homojen manyetik ince filmlerin elde edildiği bulunmuştur. XRF ile  $Ni_{50}Mn_{34}Sn_{16}$  ve  $Ni_{50}Mn_{35}Sn_{15}$  kompozisyonunda 2 tip örnek elde edilmiştir. XRR ile de örneklerin yüzey pürüzlülüğünün 1 nm civarlarında olduğu bulunmuştur. XRD, XRF ve XRR ile uygun olduğu belirlenen manyetik ince film için sıcaklığa bağlı TEM ölçümleri gerçekleştirilmiştir. Buna göre, 100nm kalınlığında ve  $Ni_{50}Mn_{35}Sn_{15}$  kompozisyonunda elde edilen manyetik ince filmin oda sıcaklığında  $L2_1$  kübik fazda, düşük sıcaklıklarda (100 K) ise  $L1_0$  fazında olduğu TEM elektron kırınım tekniğiyle tespit edilmiştir.

200 nm kalınlığında ve  $Ni_{50}Mn_{34}Sn_{16}$  kompozisyonunda elde edilen manyetik ince filmin sıcaklığa bağlı mıknatıslanma ölçümleriyle yapısal ve manyetik faz geçiş sıcaklıkları ve manyetik moment değerleri belirlenmiştir. Bu sıcaklıklar yakınlarda yapılan manyetik alan bağlı mıknatıslanma ölçümleriyle, manyetokalorik etkinin büyüklüğü (manyetik entropi değişimi) bulunmuştur. Manyetik entropi değişim değeri 1T'lık dış manyetik alan altında 1.6 J/Kg.K olarak Maxwell denklemleri yardımıyla hesaplanmıştır. Bulunan artı manyetik entropi değişim büyüklüğü bu tür manyetik ince filmlerde literatürde ilk defa gözlemlenmiştir. Sonuç olarak, bu tez çalışması sırasında yapılan tüm hesaplamalar ve deneysel bulgular Ni-Mn-Sn Heusler sisteminin spintronik ve minyatür soğutma uygulamalar için uygun ve yeterli özelliklere sahip olduğu ortaya koymuştur.

**Nisan 2013, 187 sayfa**

**Anahtar Kelimeler** : Heusler İnce Filmler, Manyetokalorik Etki, Manyetodirenç Etkisi, Spintronik

## ABSTRACT

Ph. D. Thesis

### THE INVESTIGATION OF MULTI LAYER FILM OF STRUCTURAL, ELECTRICAL AND MAGNETIC PROPERTIES AND APPLIED TO SPINTRONIC

Ercüment YÜZÜAK

Ankara University  
Graduate School of Natural and Applied Science  
Department of Engineering Physics

Supervisor: Prof. Dr. Yalçın ELERMAN

In this thesis, magnetic Ni-Mn-Sn thin films were deposited using magnetron sputtering with different thicknesses (10, 20, 35, 50, 100, 200 nm). The structural, topographical, electrical and magnetic properties were investigated with different techniques. In addition, the theoretical bandwidth of the system, spin polarization and magnetic moment values and the system structure of tetragonal structural phase transition temperatures were estimated defect is created in terms of SPR-KKR and Quantum Espresso program. Ni-Mn-Sn structural characteristics of magnetic thin films Philips X-ray diffraction meter (XRD-XRF-XRR), the brand of NT-MDT Scanning Probe Microscope (AFM), magnetic force microscopy (MFM) and FEI brand, transmission electron microscopy (TEM) were examined. XRD technique, single-phase, homogeneous magnetic thin films at room temperature was obtained. XRF composition of the two types of sample can be obtained with the  $\text{Ni}_{50}\text{Mn}_{34}\text{Sn}_{16}$  and  $\text{Ni}_{50}\text{Mn}_{35}\text{Sn}_{15}$  observed. surface roughness of the samples was found to be at around 1.5 nm from XRR. XRD, XRF and XRR to comply with the TEM measurements of the magnetic thin films was carried out for the temperature-dependent. Accordingly, the composition of the resulting magnetic thin film 100nm thickness and  $L2_1$  cubic phase at room temperature, at low temperatures (100 K) from TEM electron diffraction technique has been found that the  $L1_0$  phase.

The thickness of 200nm and composition of the obtained  $\text{Ni}_{50}\text{Mn}_{34}\text{Sn}_{16}$  temperature magnetization measurements of the magnetic thin film, structural and magnetic phase transition temperatures and magnetic moment were determined. These temperatures near the magnetization measurement in applied magnetic field, the magnitude of the magnetocaloric effect (magnetic entropy change) were found. Under the external magnetic field 1T, the magnetic entropy change value 1.6 J / kg.K calculated using the Maxwell's equations. Furthermore, the magnitude of the magnetic entropy change in this kind of magnetic thin films has been observed for the first time in the literature. As a result, all the calculations and experimental findings in this thesis, Ni-Mn-Sn Heusler system is to Spintronic and miniature cooling system with enough features and is suitable for applications has revealed.

April 2010, 187 pages

**Key words:** Heusler Thin Film, Magnetocaloric Effect, Magnetoresistivity Effect, Spintronic

## TEŞEKKÜR

Çalışmam süresince, bana olan güvenini kaybetmeden, araştırmalarımın her aşamasında öneri ve yardımlarını benimle paylaşan değerli danışmanım Sayın Prof. Dr. Yalçın ELERMAN'a (Ankara Üniversitesi, Mühendislik Fakültesi, Fizik Mühendisliği Bölümü);

Çalışmamda değerli yorum ve önerileri ile katkıda bulunan Sayın Doç. Dr. İlker DİNÇER'e (Ankara Üniversitesi, Mühendislik Fakültesi, Fizik Mühendisliği Bölümü);

Birlikte çalışmaktan son derece büyük zevk aldığım, görüş ve deneyimleriyle bana yeni ufuklar açan ve ayrıca Bielefeld Üniversitesi Nanofizik Bölümü imkanlarını bizimle paylaşan, Sayın Prof. Dr. Andreas HÜTTEN'e ve Bielefeld Üniversitesi'ndeki çalışma arkadaşlarım olan Dr. Alex AUGÉ ve Nichlas TEICHNERT'e;

Tez çalışmam süresinde doktora proje öğrencisi olarak çalıştığım ve bu kapsamda maddi imkan sağlayan TÜBİTAK' a (Proje No: 109T582);

Her zaman yanımda ve her ihtiyacım olduğu anda destek olan hayatımı paylaştığım ve paylaşacağım Sevgili Sözlüm Gizem DURAK'a (Ankara Üniversitesi, Fizik Mühendisliği Bölümü);

Yaşamımın her anında benim yanımda olan, Sevgili Rahmetli Babam Mukadder Memduh YÜZÜAK'a, Canım Annem Emine YÜZÜAK'a ve Canım Kardeşim Emre YÜZÜAK'a; en içten duygularıyla çok teşekkür ederim.

Ercüment YÜZÜAK

Ankara, Nisan 2013

## İÇİNDEKİLER

ÖZET.....	i
ABSTRACT .....	ii
TEŞEKKÜR .....	iii
SİMGELER DİZİNİ .....	vii
ŞEKİLLER DİZİNİ .....	viii
ÇİZELGELER DİZİNİ .....	xvi
1. GİRİŞ .....	1
2. KURAMSAL TEMELLER .....	7
2.1 Yoğunluk Fonksiyon Teorisi .....	7
2.2 Çok Cisim Problemi .....	9
2.3 Born Oppenheimer Yaklaşımı .....	10
2.4 Dalga Fonksiyonu Yaklaşımı .....	11
2.4.1 Hartee yaklaşımı.....	12
2.4.2 Hartee-Fock yaklaşımı.....	13
2.5 Hohenberg-Kohn Teoremi .....	13
2.6 Kohn-Sham Teoremi.....	14
2.7 Manyetik Malzemelerin Mıknatıslanma Özellikleri.....	16
2.7.1 Manyetik alınganlık .....	17
2.7.2 Diamanyetizma .....	17
2.7.3 Paramanyetizma.....	18
2.7.4 Ferromanyetizma .....	20
2.7.5 Artık mıknatıslanma .....	22
2.8 Faz Geçişleri .....	22
2.8.1 Birinci dereceden faz geçişi .....	24
2.8.2 İkinci dereceden faz geçişi .....	25
2.9 Martensit Faz Geçişi .....	25
2.9.1 Martensit faz geçişinin temel özellikleri.....	26
2.10 Ferromanyetik Şekil Hafıza Alaşımları .....	30
2.11 Manyetokalorik Etki.....	34
2.11.1 Ölçüm yöntemleri.....	39

2.11.1.1 Doğrudan ölçüm yöntemleri.....	39
2.11.1.2 Dolaylı ölçüm yöntemleri.....	40
2.12 Spintronik .....	41
2.12.1 Yarı-metallik davranış.....	43
2.12.2 Manyeto direnç etkisi.....	43
3. MATERYAL YÖNTEM .....	48
3.1 Teorik Hesaplamalar .....	48
3.1.1 Kuantum espresso programı ve tam potansiyel doğrusallığı artırılmış düzlem dalga kodları .....	50
3.1.2 SPR-KKR (Spin polarized relativistic Korringa-Kohn-Rostoker) .....	51
3.2 Deneysel Yöntem .....	54
3.2.1 İnce filmlerin altta taş üzerine kaplanması.....	55
3.2.2 Manyetik alanda sıçratma işlemi.....	55
3.2.3 Manyetik alanda sıçratma sistemi .....	58
3.3 Manyetik İnce Filmlerin Yapısal Karakterizasyonu .....	62
3.3.1 X-ışını kırınım metresi (XRD).....	62
3.3.2 X-ışını floresans spektrometresi (XRF).....	63
3.3.3 X-ışını reflektometre sistemi (XRR) .....	64
3.3.4 Atomik ve manyetik kuvvet mikroskobu (AKM ve MKM) çalışmaları .....	66
3.3.5 Taramalı elektron mikroskobu ölçümleri.....	68
3.4 Manyetik İnce Filmlerin Direnç Özelliklerinin Belirlenmesi.....	70
3.5 Manyetik İnce Filmlerin Direnç Özelliklerinin Belirlenmesi.....	72
4. BULGULAR .....	75
4.1 Teorik Bulgular .....	75
4.1.1 Stokiyometrik Ni <sub>50</sub> Mn <sub>25</sub> Sn <sub>25</sub> sistemi ile ilgili yapılan hesaplamalar.....	75
4.1.2 Ni <sub>50</sub> Mn <sub>35</sub> Sn <sub>15</sub> Heusler sistemi için enerjinin c/a bağımlılığı .....	76
4.1.3 Ni <sub>50</sub> Mn <sub>35</sub> Sn <sub>15</sub> Heusler sistemi için spin sarmalı çalışması .....	79
4.2 Deneysel Bulgular .....	83
4.2.1 Ni <sub>50</sub> Mn <sub>35</sub> Sn <sub>15</sub> kompozisyonunda manyetik ince filmlerin üretilmesi .....	84
4.2.2 Manyetik ince filmin TEM analizi.....	93
4.2.3 Manyetik ince filmin AKM ve MKM analizleri.....	94
4.2.4 Ni <sub>50</sub> Mn <sub>35</sub> Sn <sub>15</sub> kompozisyonunda ve farklı kalınlıklarda manyetik ince	

filmlerin elde edilmesi ve yapısal karakterizasyonu .....	96
4.2.5 Ni <sub>50</sub> Mn <sub>35</sub> Sn <sub>15</sub> kompozisyonunda ve farklı kalınlıklarda üretilen manyetik ince filmlerin manyetik ince filmin sıcaklığa bağlı AKM-MKM çalışması.....	107
4.2.6 Ni <sub>50</sub> Mn <sub>35</sub> Sn <sub>15</sub> kompozisyonunda ve farklı kalınlıklarda üretilen manyetik ince filmlerin direnç özelliklerinin belirlenmesi.....	111
4.2.7 Ni <sub>50</sub> Mn <sub>35</sub> Sn <sub>15</sub> kompozisyonunda ve farklı kalınlıklarda üretilen manyetik özelliklerinin karakterizasyonu .....	121
4.2.8 Ni <sub>50</sub> Mn <sub>35</sub> Sn <sub>15</sub> kompozisyonunda ve 100 nm kalınlığındaki üretilen manyetik ince filmin SEM analizi .....	126
4.2.9 Ni <sub>50</sub> Mn <sub>35</sub> Sn <sub>15</sub> kompozisyonunda ve 100 nm kalınlığındaki üretilen manyetik ince filmin TEM analizi .....	127
4.2.10 Ni <sub>50</sub> Mn <sub>34</sub> Sn <sub>16</sub> kompozisyonunda ve farklı kalınlıklarda manyetik ince filmlerin elde edilmesi ve yapısal karakterizasyonu .....	130
4.2. 11 Ni <sub>50</sub> Mn <sub>34</sub> Sn <sub>16</sub> kompozisyonunda ve farklı kalınlıklarda manyetik ince filmlerin direnç özelliklerinin karakterizasyonu .....	139
4.2. 12 Ni <sub>50</sub> Mn <sub>34</sub> Sn <sub>16</sub> kompozisyonunda ve farklı kalınlıklarda manyetik ince filmlerin manyetik özelliklerinin karakterizasyonu .....	144
4.2. 13 200 nm kalınlığında ve Ni <sub>50</sub> Mn <sub>34</sub> Sn <sub>16</sub> kompozisyonunda ince filmin manyetik ve manyetokalorik özellikleri .....	148
5. TARTIŞMA ve SONUÇ .....	158
KAYNAKLAR .....	175
ÖZGEÇMİŞ.....	181

## SİMGELER VE KISALTMALAR DİZİNİ

$G_k$	Katı Metalin Serbest Enerjisi
$G_s$	Sıvı Metalin Serbest Enerjisi
$G_M$	Martensit Durumun Serbest Enerjisi
$G_A$	Austenit Durumun Serbest Enerjisi
$\Delta V$	Hacim Değişimi
S	Entropi
GMR	Devasa manyetodirenç
H	Manyetik Alan
M	Mıknatıslanma
R	Gaz Sabiti
T	Geçiş Elementi
V	Hacim
P	Paramanyetik
AFM	Antiferromanyetik
AKM	Atomik Kuvvet Mikroskobu
MKM	Manyetik Kuvvet Mikroskobu
FC	Manyetik Alanda Soğutma
FH	Manyetik Alanda Isıtma
ZFC	Sıfır Manyetik Alanda Soğutma
AMR	Aktif Manyetik Rejeneratör
FM	Ferromanyetik
MKE	Manyetokalorik Etki
PM	Paramanyetik
RE	Nadir Toprak Elementi
Ni	Nikel
Mn	Mangan
Sn	Kalay
Ga	Galyum
$T_C$	Curie Sıcaklığı
q	Soğutma Gücü
$\Delta S_M$	Eşsıl Manyetik Entropi Değişimi
$\Delta T_{ad}$	Adyabatik Sıcaklık Değişimi
$T_M$	Erime Sıcaklığı



## ŞEKİLLER DİZİNİ

Şekil 1.1 Kristal yapısı $X_2YZ$ formundaki, $L2_1$ yapısındaki tam Heusler alaşımını şematik gösterimi.....	2
Şekil 1.2 $Ni_{50}Mn_{50-x}Sn_x$ Heusler alaşımlarının faz diyagramı .....	5
Şekil 2.1 Mıknatıslanmanın Curie sıcaklığına bağlı olan değişimi sırasında ferromanyetik fazdan paramanyetik faz geçişi.....	21
Şekil 2.2 1. dereceden faz geçişi için Gibbs serbest enerjisinin birinci türevinin sıcaklığa bağlı değişimi.....	24
Şekil 2.3 2. dereceden faz geçişi için Gibbs serbest enerjisinin birinci türevinin sıcaklığa bağlı değişimi.....	25
Şekil 2.4 Sıcaklık-zorlamalı Martensit geçiş ve tersine geçişler.....	27
Şekil 2.5 Austenit (A) ve Martensit (M) fazların serbest enerjilerinin sıcaklığa bağlı değişimi .....	28
Şekil 2.6 Atom hareketleri ile gerçekleşen Martensit geçiş şematik gösterimi .....	29
Şekil 2.7 Martensit fazdaki şekil hafıza olayının şematik gösterimi.....	30
Şekil 2.8 Uygulanan artan manyetik alan tarafından manyetik şekil hafıza alaşımlarının manyetik ve yapısal bölmelerinin değişiminin gösterimi.....	32
Şekil 2.9 Sıcaklığa bağlı sıfır alan soğutmalı modu (ZFC) ile mıknatıslan ölçümünden Ni-Mn-Sn alaşımının Landau serbest enerji durumları.....	33
Şekil 2.10 Sıcaklığa bağlı alan soğutmalı modu (FC) ile mıknatıslan ölçümünden Ni-Mn-Sn alaşımının Landau serbest enerji durumları.....	33
Şekil 2.11 Entropinin sıcaklıkla değişim eğrisi.....	36
Şekil 2.12 İki akım modelinin şematik gösterimi.....	42
Şekil 2.13 Metal, yarı iletken ve yarı metallerin durum yoğunlukları, $E_F$ Fermi enerji durumu eğrileri.....	43
Şekil 2.14 Farklı kalınlıklarda Cr tabakası içeren "Fe/Cr/Fe" katmanlarından oluşturulan spintronik cihazının uygulanan manyetik alana bağlı magnetodirenç değerleri.....	45

Şekil 3.1 DADD yönteminde kullanılan Muffin-Tin bölgeleri ( $\alpha$ ve $\beta$ ) ve ara bölgelerin (I) gösterimi.....	50
Şekil 3.2 Manyetik alanda sıçratma tekniğinin şematik olarak gösterimi.....	56
Şekil 3.3 Bielefeld Üniversitesi Nano Fizik bölümünde bulunan manyetik alanda sıçratma sistemi– (BESTEC) sisteminin görünümü.....	59
Şekil 3.4 Manyetik alanda sıçratma sisteminde Ni, Mn ve Sn hedeflerinin görünümü.....	60
Şekil 3.5 Manyetik alanda sıçratma sisteminin şematik gösterimi.....	60
Şekil 3.6 Bragg Yasasının şematik gösterimi.....	61
Şekil 3.7 Bielefeld Üniversitesi, Nano Fizik bölümünde bulunan X-ışını kırınım metresi.....	62
Şekil 3.8 Bielefeld Üniversitesi, Nano Fizik bölümünde bulunan X-ışını floresans spektrometresi.....	63
Şekil 3.9 Çeşitli kalınlıklardaki Ir metalinin reflektometri eğrisi.....	64
Şekil 3.10 Z doğrultusunda manyetik kuvvet değişimini veren faz değişiminin gösterimi.....	66
Şekil 3.11 Taramalı elektron mikroskopunun çalışma prensibi.....	69
Şekil 3.12 ZEISS EVO50 model taramalı elektron mikroskobu.....	70
Şekil 3.13 Bielefeld Üniversitesindeki direnç ölçüm sisteminin görünümü.....	72
Şekil 3.14 Direnç ölçümü için hazırlanmış olan manyetik ince filmin görünümü.....	72
Şekil 3.15 Fiziksel Özellikler Ölçüm Sistemi .....	74
Şekil 3.16 Fiziksel Özellikler Ölçüm Sistemi- VSM Özellikli .....	74
Şekil 4.1 Stokiyometrik $Ni_{50}Mn_{25}Sn_{25}$ alaşımının durum yoğunluğuna tüm yörüngelerden gelen katkıyı gösteren grafik.....	76
Şekil 4.2 a) Kübik $L2_1$ Heusler yapısı ve b) $L1_0$ tetragonal yapısı.....	77
Şekil 4.3 $Ni_{50}Mn_{35}Sn_{15}$ kompozisyonunda c/a'nın toplam enerji ile değişimi grafiği.....	78
Şekil 4.4 NiMnSn sisteminin farklı c/a değerleri deneysel ve teorik yapısal dönüşüm sıcaklıkları.....	79
Şekil 4.5 $Ni_{50}Mn_{35}Sn_{15}$ kompozisyonu için hesaplanan Mn-Mn, Mn-Ni ve	

Mn-Sn atomları arasındaki uzaklığa bağlı Heisenberg çiftlenim değiş tokuş integrali.....	81
Şekil 4.6 NiMnSn sisteminde değişen c/a değerine bağlı manyetik moment değerlerinin enerji uyumluluğu.....	82
Şekil 4.7 Üretilen manyetik ince film-İnce Film 1'in X-ışını kırınım deseni.....	85
Şekil 4.8 Üretilen manyetik ince film-İnce Film 2'nin X-ışını kırınım deseni.....	85
Şekil 4.9 Üretilen manyetik ince film-İnce Film 3'ün X-ışını kırınım deseni.....	86
Şekil 4.10 Üretilen manyetik ince film-İnce Film 4'ün X-ışını kırınım deseni.....	86
Şekil 4.11 Farklı alt taşlar sıcaklıklarında üretilen manyetik ince filmlerin, bu sıcaklıklara bağlı I(004)/I(002) yansımalarının oranı.....	87
Şekil 4.12 Üretilen manyetik ince film-İnce Film 1'in reflektometri deseni.....	88
Şekil 4.13 Üretilen manyetik ince film-İnce Film 2'in reflektometri deseni.....	88
Şekil 4.14 Üretilen manyetik ince film-İnce Film 3'ün reflektometri deseni.....	89
Şekil 4.15 Üretilen manyetik ince film-İnce Film 4'ün reflektometri deseni.....	89
Şekil 4.16 Üretilen manyetik ince film-İnce Film 5'in X-ışını kırınım deseni.....	90
Şekil 4.17 Üretilen manyetik ince film-İnce Film 6'in X-ışını kırınım deseni.....	90
Şekil 4.18 Üretilen manyetik ince film-İnce Film 7'in X-ışını kırınım deseni.....	91
Şekil 4.19 Üretilen manyetik ince film-İnce Film 8'in X-ışını kırınım deseni.....	91
Şekil 4.20 İnce Film 7'nin HRTEM resmi, MgO ve Ni <sub>50</sub> Mn <sub>35</sub> Sn <sub>15</sub> kompozisyonundaki tabakanın elektron kırınım desenleri.....	93
Şekil 4.21 İnce Film 9'ün AFM'den elde edilen a. 2 boyutta (2D) b. 3 boyutta (3D) topografi görüntüleri.....	94
Şekil 4.22 İnce Film 9'un değişik manyetik alanda alınmış MFM görüntüleri .....	95
Şekil 4.23 İnce Film 9'un değişik manyetik alanda alınmış MFM görüntüleri .....	96
Şekil 4.24 Üretilen manyetik ince film-İnce Film 9'un x-ışını kırınım deseni.....	100
Şekil 4.25 Üretilen manyetik ince film-İnce Film 10'un x-ışını kırınım deseni.....	100

Şekil 4.26 Üretilen manyetik ince film-İnce Film 11'in x-ışını kırınım deseni.....	101
Şekil 4.27 Üretilen manyetik ince film-İnce Film 12'un x-ışını kırınım deseni.....	101
Şekil 4.28 Üretilen manyetik ince film-İnce Film 12'un x-ışını kırınım deseni.....	102
Şekil 4.29 Ni <sub>50</sub> Mn <sub>35</sub> Sn <sub>15</sub> kompozisyonunda üretilen tüm manyetik ince filmlerin X- ışını kırınım desenleri.....	102
Şekil 4.30 Üretilen manyetik ince filmlerin Rietvelt analizi ve değişen ince film kalınlığına göre tanecik büyüklükleri.....	103
Şekil 4.31 İnce film 13 için sıcaklığa bağlı X-ışını kırınım desenleri.....	104
Şekil 4.32 Üretilen manyetik ince film-İnce Film 9'un reflektometri deseni.....	105
Şekil 4.33 Üretilen manyetik ince film-İnce Film 10'un reflektometri deseni.....	105
Şekil 4.34 Üretilen manyetik ince film-İnce Film 11'in reflektometri deseni.....	106
Şekil 4.35 Üretilen manyetik ince film-İnce Film 12'in reflektometri deseni.....	106
Şekil 4.36 Üretilen manyetik ince film-İnce Film 13'un reflektometri deseni.....	107
Şekil 4.37 Üretilen manyetik ince film-İnce Film 13'in oda sıcaklığında alınmış topografi ve manyetik kuvvet mikroskobu resimleri.....	108
Şekil 4.38 Üretilen manyetik ince film-İnce Film 13'in 280 K ve 1000 Oe dış manyetik alan altında alınmış manyetik kuvvet mikroskobu resmi.....	109
Şekil 4.39 Üretilen manyetik ince film-İnce Film 13'in 295 K ve 1000 Oe dış manyetik alan altında alınmış manyetik kuvvet mikroskobu resmi.....	109
Şekil 4.40 Üretilen manyetik ince film-İnce Film 13'in 310 K ve 1000 Oe dış manyetik alan altında alınmış manyetik kuvvet mikroskobu resmi.....	110
Şekil 4.41 Üretilen manyetik ince film-İnce Film 13'in 325 K ve 1000 Oe dış manyetik alan altında alınmış manyetik kuvvet mikroskobu resmi.....	110
Şekil 4.42 Üretilen manyetik ince film-İnce Film 13'in farklı sıcaklıklarda ve 500 Oe dış manyetik alan altında hesaplanmış manyetik kuvvet mikroskobu pürüzlülük değerleri.....	111
Şekil 4.43 İnce Film 9'un (10 nm) sıcaklığa bağlı direnç eğrisi.....	113

Şekil 4.44 İnce Film 10'un (20 nm) sıcaklığa bağlı direnç eğrisi.....	113
Şekil 4.45 İnce Film 11'un sıcaklığa bağlı direnç eğrisi.....	114
Şekil 4.46 İnce Film 12'in sıcaklığa bağlı direnç eğrisi.....	114
Şekil 4.47 İnce Film 13'un sıcaklığa bağlı direnç eğrisi.....	115
Şekil 4.48 Çeşitli kalınlıklardaki ince filmlerin sıcaklığa bağlı direnç eğrileri.....	115
Şekil 4.49 İnce Film 9'un sıfır ve 1T'lık dış manyetik alan altında alınmış direnç eğrileri.....	117
Şekil 4.50 İnce Film 9'un 1T'lık dış manyetik alan altında bulunmuş sıcaklığa bağlı manyetodirenç eğrileri.....	117
Şekil 4.51 İnce Film 9'un dış manyetik alana bağlı manyetodirenç eğrileri.....	118
Şekil 4.52 İnce Film 10'un sıcaklığa ve dış manyetik alana bağlı manyetodirenç eğrileri.....	119
Şekil 4.53 İnce Film 10'un dış manyetik alana bağlı manyetodirenç eğrileri.....	119
Şekil 4.54 İnce Film 10'un dış manyetik alana bağlı manyetodirenç eğrileri.....	120
Şekil 4.55 İnce Film 9'in sıcaklığa bağlı manyetik eğrisi.....	122
Şekil 4.56 İnce Film 10'in sıcaklığa bağlı manyetik eğrisi.....	122
Şekil 4.57 İnce Film 9 (10 nm) için elde edilen mıknatıslanma eğrileri.....	124
Şekil 4.58 İnce Film 10 (20 nm) için elde edilen mıknatıslanma eğrileri.....	124
Şekil 4.59 İnce Film 11 (35 nm) ve İnce Film 12 (50 nm) elde edilen sıcaklığa bağlı mıknatıslanma eğrileri.....	125
Şekil 4.60 İnce Film 13 (100 nm) için elde edilen mıknatıslanma eğrileri.....	126
Şekil 4.62 İnce Film 13'ün oda sıcaklığındaki SEM resmi.....	127
Şekil 4.63 İnce Film 10'un HRTEM resmi.....	127
Şekil 4.64 İnce film 13'un elektron kırınım deseni.....	128
Şekil 4.65 İnce film 2'nin oda sıcaklığında alınmış HRTEM resmi ve elektron kırınım deseni.....	129
Şekil 4.66 İnce film 2'nin -185 C alınmış HRTEM resmi ve elektron kırınım deseni.....	129
Şekil 4.67 Üretilen manyetik ince film-İnce Film 14'un x-ışını kırınım deseni.....	133
Şekil 4.68 Üretilen manyetik ince film-İnce Film 15'in x-ışını kırınım deseni.....	133
Şekil 4.69 Üretilen manyetik ince film-İnce Film 16'in x-ışını kırınım deseni.....	134
Şekil 4.70 Üretilen manyetik ince film-İnce Film 17'nin x-ışını kırınım deseni.....	134

Şekil 4.71 Üretilen manyetik ince film-İnce Film 18'in x-ışını kırınım deseni.....	135
Şekil 4.72 $Ni_{50}Mn_{34}Sn_{16}$ kompozisyonunda üretilen manyetik ince filmlerin x-ışını kırınım desenleri.....	135
Şekil 4.73 Üretilen Ince Film 14 (20 nm) manyetik ince filminin x-ışını kırınım deseni ve Rietvelt analizi sonucu.....	136
Şekil 4.74 Değişen manyetik ince film kalınlığına göre, kristal boyutu ve yarı genişlikler eğrileri.....	137
Şekil 4.75 Üretilen manyetik ince film-İnce Film 14'un reflektometri deseni.....	138
Şekil 4.76 Üretilen manyetik ince film-İnce Film 15'in reflektometri deseni.....	138
Şekil 4.77 Üretilen manyetik ince film-İnce Film 16'in reflektometri deseni.....	139
Şekil 4.78 20 nm kalınlığında $Ni_{50}Mn_{34}Sn_{16}$ ince filmin sıcaklığa bağlı özdirenç eğrisi-R(T).....	140
Şekil 4.79 35 nm kalınlığında $Ni_{50}Mn_{34}Sn_{16}$ ince filmin sıcaklığa bağlı özdirenç eğrisi-R(T).....	141
Şekil 4.80 50 nm kalınlığında $Ni_{50}Mn_{34}Sn_{16}$ ince filmin sıcaklığa bağlı özdirenç eğrisi-R(T).....	142
Şekil 4.81 100 nm kalınlığında $Ni_{50}Mn_{34}Sn_{16}$ ince filmin sıcaklığa bağlı özdirenç eğrisi-R(T).....	142
Şekil 4.82 200 nm kalınlığında $Ni_{50}Mn_{34}Sn_{16}$ ince filmin sıcaklığa bağlı özdirenç eğrisi-R(T).....	143
Şekil 4.83 200 nm kalınlığında elde edilen manyetik ince filmlerin manyetik alan bağlı ve farklı sıcaklıklarda elde edilen manyetodirenç değerleri.....	144
Şekil 4.84 20 nm kalınlığında ince filmin sıcaklığa bağlı mıknatıslanma eğrisi.....	145
Şekil 4.85. 35 nm kalınlığında ince filmin sıcaklığa bağlı mıknatıslanma eğrisi.....	146
Şekil 4.86 50 nm kalınlığında ince filmin sıcaklığa bağlı mıknatıslanma eğrisi.....	146
Şekil 4.87 100 nm kalınlığında ince filmin sıcaklığa bağlı mıknatıslanma eğrisi-.....	147
Şekil 4.88 200 nm kalınlığında ince filmin sıcaklığa bağlı mıknatıslanma	

eğrisi.....	147
Şekil 4.89 100 nm kalınlığındaki ince filmin 160 K ile 275 K'de alınan histerisis eğrileri.....	148
Şekil 4.90 İnce Film 18'in (200 nm) ZFC, FC, FH kiplerinde alınan sıcaklığa mıknatıslanma eğrileri.....	149
Şekil 4.91. İnce Film 18'in (200 nm) FH (a) ve FC (b) yönlerinde alınan sıcaklığa mıknatıslanma eğrileri.....	151
Şekil 4.92. İnce Film 18'in (200 nm) soğutma yönünde 0.01 T'lık ve 1 T'lık dış manyetik alan altında alınan mıknatıslanma değerlerinin türevinin sıcaklıkla değişimi eğrileri.....	153
Şekil 4.93. İnce Film 18'in (200 nm) ısıtma yönünde 0.01 T'lık ve 1 T'lık dış manyetik alan altında alınan mıknatıslanma değerlerinin türevinin sıcaklıkla değişimi eğrileri.....	154
Şekil 4.94. İnce Film 18'in (200 nm) alan ısıtma ve soğutma yönünde dış manyetik alana bağlı mıknatıslanma fark ( $\Delta M$ ) eğrileri.....	155
Şekil 4.95. İnce Film 18'in (200 nm), 1 , 0.5 ve 0.2 T'lık farklı dış manyetik alan altında soğutma yönünde hesaplanmış manyetik değişim eğrileri.....	157
Şekil 4.96. İnce Film 18'in (200 nm), 1 , 0.5 ve 0.2 T'lık dış manyetik alan altında ısıtma yönlerinde hesaplanmış manyetik entropi değişim eğrileri.....	157
Şekil 5.1 $Ni_{50}Mn_{35}Sn_{15}$ kompozisyonunda elde edilen manyetik ince filmin kalınlıklarına bağlı $L2_1$ kübik yapıda hesaplanan birim hücre parametreleri.....	160
Şekil 5.2 $Ni_{50}Mn_{34}Sn_{16}$ kompozisyonunda elde edilen manyetik ince filmin kalınlıklarına bağlı $L2_1$ kübik yapıda hesaplanan birim hücre parametreleri.....	161
Şekil 5.3 20 nm kalınlığında ve $Ni_{50}Mn_{35}Sn_{15}$ kompozisyonunda elde edilen manyetik ince filmin sıcaklığa bağlı 5 çevrimle alınan direnç eğrileri.....	163

Şekil 5.4 10 nm kalınlığında ve $Ni_{50}Mn_{35}Sn_{15}$ kompozisyonunda elde edilen manyetik ince filmin sıcaklığa bağlı mıknatıslanma ve direnç eğrileri.....	165
Şekil 5.5 20 nm kalınlığında ve $Ni_{50}Mn_{34}Sn_{16}$ kompozisyonunda elde edilen manyetik ince filmin sıcaklığa bağlı mıknatıslanma ve direnç eğrileri.....	166
Şekil 5.6 $Ni_{50}Mn_{35}Sn_{15}$ serisinin faz diyagramı.....	168
Şekil 5.7 $Ni_{50}Mn_{34}Sn_{16}$ serisinin faz diyagramı.....	168
Şekil 5.8 İnce Film 18'in (200 nm) 2 K'de elde edilmiş manyetik alana bağlı mıknatıslanma eğrisi.....	171



## ÇİZELGELER DİZİNİ

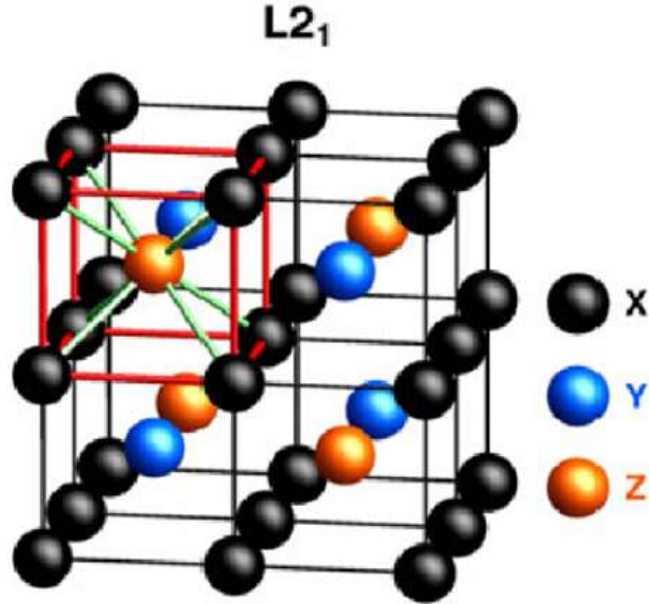
Çizelge 3.1	Ni-Mn-Sn sistemi için kübik ve tetragonal fazlar için kullanılan kristalografik değişkenler .....	49
Çizelge 3.2	Kullanılan manyetik alanda sıçratma sisteminin temel özellikleri .....	58
Çizelge 4.1	Stokiyometrik $Ni_{50}Mn_{25}Sn_{25}$ alaşımının atom koordinatları .....	74
Çizelge 4.2	Stokiyometrik $Ni_{50}Mn_{25}Sn_{25}$ alaşımının manyetik moment büyüklükleri.....	75
Çizelge 4.3	Literatürden seçilen bazı Heusler alaşımlarının deneysel ve teorik Curie sıcaklıkları .....	80
Çizelge 4.4	$Ni_{50}Mn_{35}Sn_{15}$ manyetik ince filmini elde etme için kullanılan parametreler .....	83
Çizelge 4.5	$Ni_{50}Mn_{35}Sn_{15}$ manyetik ince filmini elde etmek için kullanılan parametreler.....	89
Çizelge 4.6	$Ni_{50}Mn_{35}Sn_{15}$ manyetik ince filmini farklı kalınlıklarda elde etme için kullanılan parametreler.....	97
Çizelge 4.7	Denklem 4.4 ile hesaplanan parametreler ve literatürde bulunan değerler.....	120
Çizelge 4.8	$Ni_{50}Mn_{34}Sn_{16}$ manyetik ince filmini farklı kalınlıklarda elde etme için kullanılan parametreler.....	130
Çizelge 5.1	Bu tez çalışması sırasında elde edilen en ince kalınlık ve en yüksek manyetodirenç (MR) değerleri ve literatür ile kıyaslanması.....	170
Çizelge 5.2	Bu tez çalışması sırasında elde edilen en büyük manyetik entropi değişim değerleri ve literatürden bulunan Martensit faz geçişi gösteren ince filmlerin en büyük manyetik entropi değişim değerleri.....	172

## 1. GİRİŞ

Heusler alařımları, 1903 yılında Alman maden mühendisi ve aynı zamanda kimyager olan Friedrich Heusler tarafından bulunmuřtur. F. Heusler, ferromanyetik özellikler içermeyen atomlardan oluşmasına rağmen ferromanyetik özellik gösteren Cu-Mn-Al tipindeki alařımı üretmeyi başarmıřtır. Bu tip alařımlar günümüzde onun adı ile anılmaktadırlar (Heusler 1903). Bu alařımlarda bilimsel olarak ilk çalıřılan alařım ise, tam stokiometrik Heusler alařımı olan  $Cu_2MnAl$  alařımıdır. Gerçekleřtirilen bu çalıřmaya göre,  $Cu_2MnAl$  sisteminin manyetik özelliklerinin kompozisyona ve ısıl işleme çok baęlı olduęu bulunmuřtur (Knowlton vd. 1912). Bradley ve Roger yaptıkları çalıřmada,  $Cu_2MnAl$  alařımının  $L2_1$  kübik yapıda olduęunu ve örgü parametresinin  $5.95 \text{ \AA}$  olduęunu bulmuřlardır (Bradley vd. 1934). 1963 yılında,  $Cu_2MnAl$  Heusler alařımının manyetik özellikleri üzerine yapılan çalıřma ile, Curie sıcaklıęı  $630 \text{ K}$  olarak bulunmuřtur (Oxley vd. 1963).  $Cu_2MnAl$  alařımı, bu sıcaklıęın altında ferromanyetik özellikler gösterirken, üstünde de paramagnetik özellikler göstermektedir. Endo ve arkadaşlarının 1964 yılında yaptıkları nötron kırınımı deneyleri ile de  $Cu_2MnAl$  alařımında doęrusal bir manyetik moment dizilimi (doęrusal ferromanyetik) olduęunu ve toplam manyetik moment büyüklüęünün yaklaşık  $3.7 \mu B/f.u.$  büyüklüęünde olduęunu belirlemiřlerdir (Endo vd. 1964).

Heusler alařımları, üçlü intermetalik bileřiklerin  $X_2YZ$  stokiometrik oranlarında  $L2_1$  kübik yapı řeklinde bir araya gelmesiyle oluşan alařımlardır.  $L2_1$  simetrisine sahip bir birim hücre řekil 1.1'de gösterilmektedir (Bradley vd. 1934). Tam Heusler sistemlerindeki alařımların kristal yapıları  $L$  notasyonu ile gösterilmektedirler.  $L2_1$  yapısındaki gösterimde tüm atomlar hacim merkezli kübik örgüdeki atomların yerlerindedirler. Heusler alařımlarını 2 farklı gruba ayrılabilir. Bunlar  $X_2YZ$  formunda,  $L2_1$  yapısındaki tam Heusler alařımları ve  $XYZ$  formunda,  $C1_b$  yapısındaki yarı-Heusler alařımlarıdır.  $X_2YZ$  řeklindeki Heusler yapısı dört tane iç içe geçmiř yüzey merkezli kübik alt örgüden oluşmaktadır. Bunlara A, B, C, D adı verildięinde, merkezi  $(0,0,0)$ 'da olmak üzere  $\left(\frac{1}{4} \frac{1}{4} \frac{1}{4}\right)$ ,  $\left(\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}\right)$ ,  $\left(\frac{3}{4} \frac{3}{4} \frac{3}{4}\right)$  koordinatlarında bulunmaktadırlar. X ve Y elementleri genellikle geçiř metalleri olup, Z ise B grubu elementlerinden

seçilmektedir (Brown vd. 2005). Alaşım oluşturulurken ilginç yapısal ve manyetik özellik gösterebilecek ve aynı zamanda ısıl, manyetik, elektrik ve mekanik özellikleri ayarlanabilecek elementler seçilmektedir (Dubowik vd. 2007).



Şekil 1.1 Kristal yapısı  $X_2YZ$  formundaki,  $L2_1$  yapısındaki tam Heusler alaşımını şematik gösterimi

Heusler alaşımları içinde  $X_2MnZ$  şeklinde oluşan alaşımlar, mangan atomlarından kaynaklanan manyetik özelliklerinden dolayı, ayrıca bir ilgi görmektedirler (Helmholdt vd. 1987). Bu alaşımlar, metalik özellik göstermekle beraber, manyetik momentleri de belli bir yönelimde olan manyetik alaşımlardır. Mangan atomu içeren Heusler alaşımlarında manyetik momentleri arasında değiş-tokuş etkileşmeleri olmaktadır. Bu da dış manyetik alan tarafından alaşımın kristal yapısının ve boyutun değiştirilmesine olanak sağlamaktadır. Dışarıdan uygulanan zorun ve sıcaklığında eklenmesiyle uygulanan manyetik alanla birlikte, Martensit geçiş zorlanmakta ve yapısal faz geçiş sıcaklığı da değiştirilebilmektedir (Vasil'ev vd. 1999).

Alaşımında gözlemlenen yapısal faz geçişi manyetik bölgenin içinde olduğunda gözlemlenirse, manyetik entropi değişimine büyük katkısı olmaktadır. Yapısal geçiş sıcaklığı yakınlarında manyetik alanın etkisiyle alaşımın kristal yapısı değişmektedir.

Bu etkinin var olduđu alařımlarda "Devasa Manyetokalorik" ve "Devesa Manyetodirenç" etkileri gözlemlenmektedir. Yapısal faz geçişinin manyetik bölgede olması olgusu katı hal fiziğinde nadir ve özel görülen bir durumdur. Bu da malzemelerde ilginç özelliklerin ortaya çıkmasına ön ayak olmaktadır (L'vov vd. 2002, Brown vd. 2005, Entel vd. 2006).

Heusler alařımları, oldukça ilginç yapısal, elektriksel ve manyetik özellikler göstermektedirler (Marioni vd. 2007, Reinhold vd. 2010). Heusler alařımları yarı-metalik davranıř göstermelerinden dolayı, özellikle günümüzün ileri teknoloji ürünü olan spin elektroniđi (spintronik) uygulamaları aısından ideal malzemeler olmaktadır ve son zamanlarda birçok bilim insanı tarafından incelenilmektedirler. Teknolojide geniř uygulama alanı olan Heusler alařımları üzerinde uzun yıllardan beri alıřmalar yapılmaktadır. Deđişik manyetik özellikler gösteren bu alařımlar bilgi depolama, ses ve görüntü kaydı, transformatörler, elektromotorlar, hoparlörler gibi pek çok alanda kullanılmakta ve sosyal yaşamı oldukça kolaylařtırmaktadır (Casper vd. 2012).

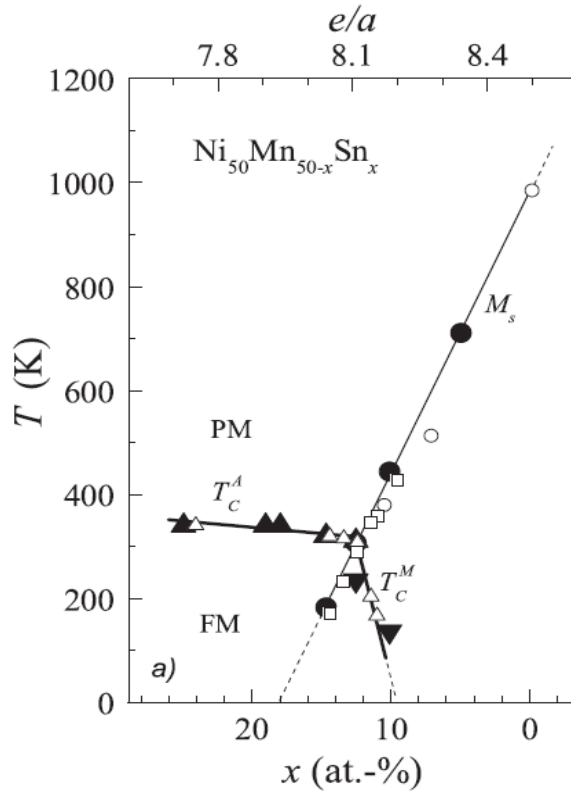
Spin elektroniđi, diđer bir adıyla ise, Spintronik olarak bilinen alan, manyetizma ve elektroniđin en yeni ve çok hızlı bir şekilde gelişen dalıdır (Ivanov vd. 2004). Spintronik, özellikle katıhal fiziđi ile ilgili alıřan bilim adamları için yeni bir arařtırma sahası olup, birçok disiplin tarafından ilgi çeken bir alıřma alanıdır. Spintroniđin son dönemde bu denli alıřılmasındaki en önemli nedenlerinden birisi ise, A. Fert ve Grünberg tarafından 1988 yılında dev manyeto-dirençlerin (GMR) keřfedilmesidir (Fert vd. 1988). Bu teknoloji, daha yüksek verimlerle alıřabilen nano-elektronik cihazların üretimi için elektron spininin serbestlik derecesinden yararlanmayı amaçlamaktadır (Žutić vd. 2004). Geleneksel elektronik cihazlar, spinin serbestlik derecesini yok saymaktadırlar. Bu nedenle, elektron spininin serbestlik derecesinin geleneksel elektronik cihazlara eklenmesi, bu cihazların veri işleme hızını artmasına, elektriksel güç kullanımını azaltmasına ve sürekli bellek kullanabilmesine olanak sağlayacaktır (Wolf vd. 2001).

Elektronun spinin serbestlik derecesinin geleneksel elektroniğe katılabilmesi için; incelenilecek olan sistemin, Fermi enerji seviyesine yakın çoğunluk elektron durumlarının (DOS-Spin Yukarı) iletken özellik gösterirken, azınlık elektron durumlarının (DOS-Spin Aşağı) ise yalıtkan yada yarı iletken davranışlar göstermesi gerekmektedir. Böylelikle sistem, % 100 spin kutuplanmasına sahip olmaktadır. Bu tanıma uyan ilk çalışma, De Groot ve arkadaşları 1983 yılında yaptıkları bir teorik bir çalışma ile NiMnSb alaşımında % 100 spin kutuplanması gözlemlemişlerdir (Groot vd. 1983). Daha sonradan bu alaşımın yarı metalik ferromanyetik özellikler gösterdiği birçok teorik ve deney grubu tarafında da kanıtlanmıştır. Bu yarı metalik ferromanyetik özellik gösteren alaşımlar kararlı yapıları, yüksek manyetik momentleri, yüksek Curie sıcaklıkları, yüksek spin kutuplanmaları ve kolaylıkla alt taş üzerinde büyütüldükleri için çok büyük ilgi çekmektedirler (Fert vd. 1988).

Heusler alaşımlarının içinde bilim insanlarının ilgisini en fazla çeken alaşım  $Ni_2MnGa$  alaşımıdır. Bu alaşım ile yapılan ilk deneyler sonucunda yüksek manyetik moment taşımaları ve ayrıca manyeto-yapısal faz geçişi göstermeleri bu alaşımların büyük bir ilgi görmesine neden olmuştur (Sozinov vd. 2002, Khovaylo vd. 2005, Krenke vd. 2007). Martensit geçiş manyetik, ısıl, elektriksel ve mekaniksel zorlanma ile toplam sistemin atomlarının yer değiştirebilmesi olarak tanımlanmaktadır (Ortin vd. 2006). Bunlar birinci dereceden katı-katı faz geçişleridir ve kristalografik düzen içerisindeki değişimler olarak adlandırılmaktadırlar. Bu geçişler yayınımsız olduğundan, atom pozisyonlarının değişimi, ara atomların uzaklığından daha azdır. Bu geçiş boyunca yer değiştiren atom veya atom grupları, birinci en yakın atom veya atom grupları komşululuğu ile ilişkisini sürdürmektedirler (Ortin vd. 2006). Ayrıca, Martensit geçişler sırasında yüksek ve alçak sıcaklık fazlarının iç enerjileri birbirinden oldukça farklı değerlere sahip olduğundan, değişimi sırasında bir histeresis oluşmaktadır.

Heusler alaşımları ailesinden diğer bir üye ise, Ni-Mn-Sn alaşımlarıdır. Bu alaşımlar tam Heusler yapısında kristallenmektedirler. Bu alaşımlar, taşıdıkları yüksek net manyetik moment değerleri ve ferromanyetik bölgelerinde yapısal faz dönüşümü gösterdiklerinden dolayı bilim adamları tarafından oldukça fazla çalışılmaktadırlar (Krenke vd. 2005, Krenke vd. 2007). Şekil 1.2’de Ni-Mn-Sn Heusler alaşımlarının

Krenke ve arkadaşları tarafından ortaya konan elektron konsantrasyonuna ( $e/a$ ) ve kompozisyona bağlı faz diyagramı görülmektedir. Burada  $e/a$  değeri, alaşımı oluşturan atomların son yörüngelerindeki değerlik elektron konsantrasyonunu göstermektedir. Faz diyagramından anlaşılacağı gibi, Martensitik başlangıç sıcaklığı  $e/a$  oranıyla beraber artmakta yada azalmaktadır. Bu tez çalışmasında, yüksek spin kutuplanması ve manyetoyapısal faz geçişleri etkin bir şekilde kullanılacağı için, Curie sıcaklığının Martensitik geçiş sıcaklığından daha yüksek sıcaklıklarda olması istenmektedir. Bu faz diyagramına göre, stokiometri dışı  $Ni_{50}Mn_{35}Sn_{15}$  ve  $Ni_{50}Mn_{34}Sn_{16}$  Heusler alaşımları, Curie sıcaklığı altında Martensitik yapısal faz geçişi göstermektedir (Krenke vd. 2007).



Şekil 1.2  $Ni_{50}Mn_{50-x}Sn_x$  Heusler alaşımlarının faz diyagramı (Krenke vd. 2007)

Stokiometri dışı  $Ni_{50}Mn_{35}Sn_{15}$  ve  $Ni_{50}Mn_{34}Sn_{16}$  Heusler alaşımlarının yapısal faz geçişinin ferromanyetik bölgede olması ve manyetik alana bağlı olarak çok büyük hacimsel değişim göstermesinden dolayı, fiziksel özelliklerin ayrıntılı olarak incelenmesinde bu Heusler alaşımına ait ince filmler kullanılmıştır.

Bu tezdeki amaç, farklı kalınlıklarda ve kompozisyonlarda manyeto-yapısal faz geişine sahip manyetik ince filmler üretebilmek ve bu üretilen manyetik ince filmlerin fiziksel özelliklerini farklı yöntemlerle karakterize edebilmektir. Bu kapsamda, manyetik ince filmler üretilmeden önce, Ni-Mn-Sn sisteminin Yoğunluk Fonksiyon Teorisi ile teorik bant çalışması yapılmıştır. Teorik çalışma ile Ni-Mn-Sn sisteminin elektronik bant yapısı ortaya konmuştur. Ayrıca Ni-Mn-Sn sistemin yaratılan yapısal faz bozukluğu ile, yapısal faz geçiş sıcaklıkları ve Curie sıcaklıkları tahmin edilmeye çalışılmıştır. Elde edilen teorik ve deneysel bulgular ışığında, Ni-Mn-Sn sistemine ait manyetik ince filmler üretilmiş ve fiziksel karakterizasyonu gerçekleştirilmiştir.

## 2. KURAMSAL TEMELLER

Bu tezde yapılan teorik bant hesaplarının amacı, ince film olarak elde edilecek Ni-Mn-Sn- Heusler sisteminin hacimsel (3 boyutta, 3D) örneğinin manyetik moment değerinin ve spin kutuplanma değerinin büyüklüğünü bulmaktır. Ayrıca sistemde tetragonal bir faz geçişi gözlemlendiğinde, bu faz geçişinin yaklaşık geçiş sıcaklığını tahmin edebilmektir.

Tez çalışması sırasında yapılan teorik hesapların sonuçları verilmeden, hangi yöntemlerin kullanıldığı anlatılacaktır. Tezin teorik kısmında, yoğunluk fonksiyon teorisini kullanan bilgisayar kodları kullanılmıştır. Bilindiği gibi, bu kullanılan kodların bir çok avantajı olduğu gibi bir o kadar da dezavantajlı yanları mevcuttur. Bu nedenle, hesaplamalar yapılırken, kullanılan bilgisayar kodlarının seçilimi ve giriş girdileri çok önemlidir. Bu tez çalışmasında, iki farklı kod sistemi kullanılmıştır. Bunlar, tam potansiyel artırılmış düzlem dalga metodunu kullanan "Quantum Espresso" ve spin kutuplu görelî Koringa-Kohn-Rosteker metodunu kullanan "SPR-KKR" kodlarıdır.

Bu iki farklı kod kullanılmasının temel amacı ise, farklı kodların sistemin farklı fiziksel özelliklerini daha ayrıntılı olarak incelenebilmesine olanak sağlamasıdır. Quantum Espresso kodları ile, sistemin manyetik moment büyüklerinin değişen birim hücre hacmine göre değişimi incelenmiştir. Ayrıca bu program ile sistemde tetragonal bir bozukluk yaratıldığında enerji durumlar belirlenmiştir. SPPR-KKR programıyla ise, Heisenberg teorisinin yardımıyla düşük sıcaklık ve yüksek sıcaklık fazlarına ait Curie sıcaklıkları kestirilmeye çalışılmış ve bu sistem için bulunan değerler literatürdeki benzer çalışmalar ile uyumluluğu kıyaslanmıştır.

### 2.1 Yoğunluk Fonksiyon Teorisi

Yoğunluk fonksiyon teorisi (YFT), katıhal fiziği ve malzeme biliminde yaygın olarak kullanılan "başlangıçtan beri" (ab-initio) yöntemleridir. Bu yöntemleri tamamı kuantum mekaniğine dayalı olduğu için, sonuç açısından katıhal fiziğinde ve malzeme biliminde çok başarılı bir şekilde kullanılmışlardır (Richard vd. 2001).



Yoğunluk fonksiyon yöntemlerinin başarılı olmasının nedeni, Kohn tarafından vurgulandığı gibi, tüm sistemi olası durumlarını ele alarak çözüme başlamasıdır. (Kohn vd. 1964). Tüm sistemin olası durumlarını ele alarak çözüme başlaması, sistem hakkında ortalama bir sonuç ortaya koymaktadır. Kohn yaklaşımına göre, herhangi bir kuantum sisteminde,  $N$  elektron sayısını göstermek üzere toplam sistemin dalga fonksiyonu  $3N$  ile orantılıdır.  $3$  ile orantılı olması, özellikle sistemin dalga fonksiyonlarından yola çıkılarak bulunan yük yoğunlukları  $3$  değişkenli bir fonksiyon olduğunu göstermektedir. Buradan yola çıkılarak, yoğunluk fonksiyon teorisi için toplam enerji  $3$  farklı enerjinin toplamı şeklinde yazılmaktadır:

- I.** Kinetik enerji
- II.** Yüklü parçacıklar arasındaki etkileşmeden kaynaklı Coulomb enerjisi
- III.** Çok parçacık etkileşmelerini kapsayan değiş-tokuş korelasyon enerjisi

dir. Yoğunluk fonksiyon yaklaşımına göre, bu enerjilerin toplamı sistemin toplam enerjisini vermektedir. Ancak bu verilen enerjiler içinde sadece kinetik enerji değeri bilinebilmektedir. Diğer iki enerji terimi farklı yaklaşımlar altında bulunabilirler. Bu terimleri bulmak için en yaygın olarak bilinen yaklaşım yerel yoğunluk yaklaşımıdır (LDA) (Ortiz vd. 1994). Bu yaklaşıma göre, daha önceden bilinen sabit etkileşmeye sahip olan bir elektron gazının diğer elektronlarla etkileşmesi alınarak değiş-tokuş korelasyon enerjisini bulunabilmektedir. Bu durumda, katının herhangi bir yerinde bir elektronun diğer elektronlarla hesaplanan değiş-tokuş korelasyon enerjisi, tüm sistem homojen varsayılarak ve tüm sistem üzerinden integral alınarak bulunabilmektedir.

Bu yerel yoğunluk yaklaşımının bazı eksiklerinden dolayı, başka yerel olmayan yaklaşımlar türetilmişlerdir. Bunun en önemli nedeni, yerelleşmeyen yoğunluk gradyentlerinin çok büyük olmasıdır. Buradan anlaşılacağı gibi, yoğunluk gradyentlerinin büyük olması, konuma göre elde edilen yoğunlukları farklı olmasından kaynaklanmaktadır. Bu nedenle yoğunluk değişimi hesaba katılarak bazı yöntemler geliştirilmiştir. Bu yöntemlerinin genel ismine ise genelleştirilmiş gradyent yaklaşımı denir. GGA'nın LDA'a göre en büyük artışı, genelde değil özelde ortaya çıkmaktadır. Bu yöntemde hesaplanacak olan bağ uzunluğu ve bu bağın enerjisi ise GGA yöntemi

çok daha iyi sonuçlar vermektedir. Bu genelleştirilmiş gradyent yaklaşımları içinde en çok 1991 yılında ve daha sonra 1996 yılında yayınladıkları yayın ile Perdew ve Wang olarak bilinen GGA yaklaşımları günümüzde oldukça yaygın olarak kullanılmaktadır (Perdew vd. 1991, Perdew vd. 1996a, b). Yaygın olarak kullanılmasının diğer bir nedeni ise, manyetik malzemelerdeki durum yoğunluğu kestirilmesinde gradyente bağlı daha iyi sonuçlar vermesidir (Wang vd. 2007).

## 2.2 Çok Cisim Problemi

Çok cisim problemi, fiziğin ve malzeme bilimin üzerinde en çok durulan ve en zor problemlerinden biri olan atomlar, moleküller ve bunların oluştukları katıların yani birçok parçacıktan bir araya gelmiş olan sistemlerin, kesin ve net bir şekilde tanımlanabilmesi problemidir. Bu tür sistemlerin kesin ve net bir şekilde tanımlanabilmesi için elektronlarının ve çekirdeklerinin tam olarak hareketleri belirlenmelidir. Bu işlem aslında çok karmaşık bir işlemdir. Bunun nedeni ise, herhangi bir sistemin içinde elektronların ve çekirdeklerin olduğunu düşünürsek ve bunların kendi içindeki etkileşmelerinin hesaba katarsak, çözümlenmesi gereken diferansiyellerin sayısı ve büyüklüğü oldukça fazla olacaktır. İnsanoğlunun şu anda sahip olduğu bilgisayar alt yapısı yapısı bunun için oldukça yetersiz kalmaktadır. Bu nedenden dolayı bu tür sistemlerin araştırması yapılırken bazı gözlem şartları ve bazı varsayım altında bütün hesaplamalar yapılmaktadır. Bu nedenle de, çok parçacık problemlerini çözmekte iki farklı yöntem geliştirilmiştir. Bunlar, Dalga Fonksiyonu İşlemi ve Elektron Yoğunluk İşlemi'dir. Bu her iki işlemde, bazı yaklaşımlar altında hesaplamalarda kullanıldığı için, her ikisinin de bazı eksiklikleri mevcuttur. Dalga fonksiyonu işlemi, başlangıç olarak çok parçacıklı sistemin elektronlarının dalga fonksiyonunu bulmaya çalışır, elektron yoğunluğu işleminde ise elektronların yoğunluklarının kullanılır.

Herhangi bir katı cismin iyonlarının ve elektronlarının davranışı, çok parçacıklı dalga fonksiyonu,  $\Psi$  ile tanımlanabilir. Bu durumda Schrödinger dalga denkleminde bakarsak,

$$H \Psi (R, r) = E \Psi (R, r) \quad (2.1)$$

bulunabilir.  $\Psi (R, r)$ , çok parçacıklı dalga fonksiyonu ve E ile sistemin toplam enerjisi gösterilmektedir. Burada, R iyonların konumlarını ve r ise elektronların konumlarını vermektedir. Buna göre, H, hamiltonyenini tanımlamamız gerekmektedir.

- Elektronların kinetik enerjisinden,
- Çekirdeğin kinetik enerjisinden,
- Çekirdek ile elektronlar arasındaki Coulomb etkileşmesinden,
- Elektronlar arasındaki Coulomb etkileşmesinden,
- Çekirdekler arasındaki Coulomb etkileşmesinden

gelmektedir. Buna göre, matematiksel olarak hamiltonyenimizi yazarsak,

$$H = \sum_{i=1}^{N_e} \left\{ -\frac{\nabla_i^2}{2} \right\} - \sum_{I=1}^{N_l} \frac{1}{M_I} \left\{ -\frac{\nabla_{Ii}^2}{2} \right\} - \sum_{i=1}^{N_e} \sum_{I=1}^{N_l} \left\{ \frac{Z_I}{|\vec{r}_i - \vec{R}_I|} \right\} - \sum_{i=1}^{N_e} \sum_{j>1}^{N_e} \left\{ \frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \right\} - \sum_{I=1}^{N_l} \sum_{j>1}^{N_l} \left\{ \frac{Z_I Z_j}{|\vec{R}_I - \vec{R}_j|} \right\} \quad (2.2)$$

bulunabilir. Buradaki birinci terim elektronların, ikinci terim çekirdeğin kinetik enerjisinden, üçüncü terim çekirdek ile elektron arasındaki Coulomb etkileşmesinden, dördüncü terim elektronların kendi arasındaki Coulomb etkileşmesinden ve beşinci ve son terim ise çekirdekler arasındaki Coulomb etkileşmesinden gelmektedir.

Bu diferansiyel denklem, çok parçacıklı bir sisteme vurulduğunda ise, bu problemin çözülebilmesi için, çok ama çok büyük bir işlem gücü ve hafıza gerektiren bir işlem olmaktadır. Bu nedenle fiziğin bu en temel sorununa, bazı yaklaşımlar altında bakılmakta ve çözümler bu yaklaşımlar altında bulunmaya çalışılmaktadır. Bu yaklaşımlardan olan , atom ve molekül fiziğinde oldukça sıklıkla kullanılan bir yaklaşım olan Born-Oppenheimer yaklaşımıdır.

### 2.3 Born Oppenheimer Yaklaşımı

1927 yılında, Born-Oppenheimer tarafından çok parçacıklı sistemlerin Schöndinger dalga denklemlerini çözmek için türetilmiş bir yaklaşımdır. Bu yaklaşım günümüzde

hala birçok bilim adamı tarafından, getirdiği hızlılık ve kolaylık açısından hala kullanılmaktadır.

Born-Oppenheimer teorik yaklaşımlarına, elektronların kütlelerinin çekirdeklerin kütlelerine göre çok daha küçük olduğu noktasından yola çıkarak başlamışlardır. Elektronun kütlelerinin, çekirdeğin kütlelerinden, 10000 kat daha küçük olduğu bilinmektedir. Bu nedenle elektron ve çekirdeğin hareketi sırasında, elektronlar çekirdeği sanki sabit ve hareket etmiyormuş gibi görmektedirler. Bunun tam tersinin de düşünebileceğimizi unutmamak gerekir. Yani çekirdek, kendi etrafında çok hızlı bir şekilde hareket eden elektronları hareketinden bağımsız olarak görür. Bu yaklaşım altında, denklem 2'deki bazı terimleri sabit olarak görebiliriz. Yukarıdaki yaklaşım altında denklem 2,

$$H = \sum_{i=1}^{N_e} \left\{ -\frac{\nabla_i^2}{2} \right\} - \sum_{I=1}^{N_l} - \sum_{i=1}^{N_l} \sum_I \left\{ \frac{Z}{\vec{r}_i - \vec{R}_I} \right\} - \sum_{i=1}^{N_l} \sum_{j>1}^{N_e} \left\{ \frac{1}{\vec{r}_i - \vec{r}_j} \right\} - \sum_{I=1}^{N_l} \sum_{j>1}^{N_e} \left\{ \frac{Z_I Z_j}{\vec{R}_I - \vec{R}_j} \right\} \quad (2.3)$$

bilgisayar kodlarıyla çözülebilecek bir duruma gelmektedir. Bu eşitlik, N tane elektronun, N tane çekirdek ile hareketini tanımlamakta kullanılmaktadır. Burada oluşturulan ifade de, ilk terim elektronların kinetik enerjisinden, ikinci terim elektron ile çekirdeğin çekişmesi sonucu doğan potansiyel enerjiyi ve son terim ise, elektron-elektron etkileşmesinden doğan potansiyel enerjiyi ifade etmekte kullanılmaktadır.

## 2.4 Dalga Fonksiyonu Yaklaşımı

Elektronların hareketi bir dalga fonksiyonu ile gerçekleştiği için bu yaklaşıma “Dalga Fonksiyonu Yaklaşımı” ismi verilmiştir. Buna göre, dalga fonksiyonu yaklaşımı, günümüzde sıklıkla kullanılan iki teori ile açıklanmaktadır:

- Hartee Yaklaşımı
- Hartee-Fock Yaklaşımı

### 2.4.1 Hartee Yaklaşımı

Elektronların dalga fonksiyonlarını çözmek için denklemlerini zamandan bağımsız Shödinger denklemi kullanılır. Hartee yaklaşımına göre, bu denklemin çözümünde elektronların simetrik uzayda herhangi başka bir konuma gittiklerinde dalga fonksiyonlarının da simetrik olarak hareket edeceklerini varsaymaktadır. Bu varsayıma göre, öz uyumlu bazı alanlar (Self Consistent Field, SCF) yaratarak ortalama alanlarla birlikte zamandan bağımsız dalga denkleminde kullanılan çok elektronlu yapıdan tek elektronlu yapıya çevrilmesini sağlamaktadır. Bu durumda denklem 2.3 çözülebilmesi için, zamandan bağımsız bir elektron-elektron etkileşmesinin olduğunu varsaymak gerekmektedir. Bu durumda denklemimiz çözülebilir duruma gelmektedir. Ancak denklemde zamana bağımlı elektron-elektron etkileşmeleri hesaba katılmamıştır. Bu durumda, Hartee öz uyumlu alanlar diye nitelendirdiği terimi hesaba katıldığı ve böylelikle zamana bağımlı elektron-elektron etkileşmeleri de hesaba katılmaktadır.

Başka bir çalışma da ise (Hartree vd. 1935), öz uyumlu alanlar kavramından yararlanarak, çok elektronlu dalga fonksiyonlarının, tek elektronlu dalga fonksiyonları çarpımı şeklinde yazılabileceğini göstermiştir. Buna göre,

$$\Psi(r_1, r_2, r_3, \dots, r_N) = \prod_{i=1}^N \Psi_i(r_i) \quad (2.4)$$

çok elektronlu bir dalga fonksiyonu tek elektron dalga fonksiyonlarını cinsinden olup, dalga fonksiyonları ortonormaldir.

Bu teori, elektronların serbest olarak hareket ettiğini, bu hareketi sırasında ise başka elektronlarla, sadece ortalama bir alan yardımıyla etkileştiğini varsaymaktadır. Bu durumda, Pauli dışarlama ilkesini sağlanmamaktadır. Pauli dışarlama ilkesine göre, uzayın aynı noktasında, aynı kuantum sayılarına sahip iki elektron bulunamaz. Denklem 4'e göre elektronların dalga fonksiyonları birbiriyle ilişkilendirildiğinde, her iki elektronun yer değiştirmesi sabit kalır. Fakat bilindiği gibi Pauli dışarlama ilkesine göre, elektronlar dalga fonksiyonları birbirine göre antisimetriktir. Bu durum, Hartee

yaklaşımının en büyük eksikliğidir ve Hartee-Fock yöntemi ile bu eksiklik giderilmiştir.

#### 2.4.2 Hartee-Fock Yaklaşımı

Hartee yaklaşımının Pauli dışarlama ilkesine ters düşen yeri olan dalga fonksiyonlarının durumu, Fock ve Slater tarafından bu yaklaşıma getirilen bir katkı ile aşılmıştır (Kohn vd. 1965). Hartee-Fock, tek elektronların dalga fonksiyonlarını anti simetrik olduğu durumları kendilerine başlangıç noktası olarak seçmişlerdir. Bu başlangıç noktasından yola çıkarak, anti simetrik tek elektron dalga fonksiyonlarının birbiriyle çarpımı ile çok elektronlu dalga fonksiyonları elde edilmektedir. Bu durumda Pauli dışarlama ilkesi de sağlanmaktadır.

Bu yaklaşımda, ise antisimetrik olarak dalga fonksiyonları elde edilmesi için antisimetrik dalga fonksiyonlarının birbiriyle çarpılması, en büyük sorunu teşkil etmektedir. Fock ve Slater, bu sorunu Slater determinanı ile aşmışlardır (Hartree 2006). Buna göre Slater determinanı,

$$\Psi(r_1, r_2, r_3, \dots, r_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{bmatrix} \Psi_1(r_1) & \dots & \Psi_N(r_1) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \Psi_1(r_N) & \dots & \Psi_N(r_N) \end{bmatrix} \quad (2.5)$$

şeklinde ifade edilir. Dalga fonksiyonları bu determinant ile çarpıldığında, bu determinatta satır ve sütun yer değiştirdiğinde, determinant işaret değiştirecek ve böylece anti simetrik durumu sağlanacaktır.

#### 2.5 Hohenberg-Kohn Teoremi

En genel anlamda Hohenberg-Kohn teoremi, bir sistemin taban durum yoğunluğu ve taban durum potansiyeli arasında birebir bir etkileşme olduğunu savunmaktadır. Bu etkileşmenin sonucu ortaya çıkan enerji, taban durum enerjisine ( $E(n)$ ) karşılık gelmektedir. Etkileşme enerjisi, bir varyasyon hesabı ile bulunabilir. Buna göre, çok elektronlu bir Hamiltonyenin, Hohenberg-Kohn benzetilmesi yapılırsa, toplam enerji:

$$E_{HK}(n) = T(n) + E_{int}(n) + \int d^3r V_{dış}(r) n(r) + E_{nn} \quad (2.6)$$

şeklinde yazılabilir. Buradaki ilk terim elektronların kinetik enerjisinden, ikinci terim ise elektronlar arasındaki etkileşmeden gelmektedir. Bu iki terim yoğunluk fonksiyonun içinde toplam şeklinde kolaylıkla yazılabilir. Örneğin, bütün elektron sistemi için bu yoğunluk fonksiyonu,

$$K(n) = T(n) + E_{etk} \quad (2.7)$$

şeklinde yazılabilir. Eğer bu  $K(n)$  fonksiyon başlangıçta alınan durum ile kestirilebilirse, sistemin taban durumu, taban durum yoğunluğuna ( $n(r)$ ) bağlı toplam enerjinin en küçük olduğu durum bulunabilir. Bu genelleme spin kutuplu sistemler için kolaylıkla bulunabilir. Bu işlem, farklı çoğunluk ve azınlık spin durumlarına sahip olan sistemler için manyetik alan altında farklı Zeeman terimi Hamiltonyene ekleyerek sağlanabilir. Her bir spin kanalı için, Hohenberg-Kohn teoremi bulunabilir. Kısaca, durumların yoğunluğu,

$$N(r) = N(r, \text{Yukarı}) + N(r, \text{Aşağı}) \quad (2.8)$$

ve spin yoğunluğu ise,

$$S(r) = N(r, \text{Yukarı}) - N(r, \text{Aşağı}) \quad (2.9)$$

şeklinde verilebilmektedir.

## 2.6 Kohn-Sham Teoremi

Sistemin temel özelliklerini anlayabilmek ve bulabilmek için verilen bir malzemenin yoğunluğunu ve yoğunluğunun gradyentini bilmek bu prensip için yeterli olmaktadır. Burada değiş-tokuş yoğunluk fonksiyonunu bulabilmek parçacıklar arasındaki etkileşme potansiyelini tanımlanamaktır. Kohm-Sham, bu yoğunluğu ve gradyentini bulabilmek amacıyla kendileri ( $F_{HK}(n)$ ) fonksiyonunu tanımlanmışlar.  $F_{HK}(n)$  fonksiyonu sistemin

başlangıç durumu için bilinmemektedir. Kohn-Sham teorilerin başlamadan önce çok cisim yaklaşımının çok karmaşık ve bir o kadar da çözülemeyecek kadar büyük olduğunu gördüler. Bu nedenle 1965 yılında yayınladıkları sonuca göre, çok cisim yaklaşımını temel alan parçacıkların birbiriyle olan ilişkisini değiştirmişlerdir. 1965 yılında yayınladıkları çalışmaya göre, sistemin taban durum enerjisi ve yoğunluğu, sistemin birbiriyle etkileşen parçacıklarının yerine, zaman ortalaması aynı olan ve uygun olarak seçilen birbiriyle etkileşmeyen parçacıklardan bulunabileceğidir. Bu nedenle, Hohenberg-Hohn teorisi ile elde edilen sonuç bu problemin çözümünde oldukça önemli bir rol oynamaktadır. Buradaki ana fikir, etkileşmeye elektronların orbitallerini sisteme tanıtmak ve bu orbitalleri çok cisim problemi açısından değiş-tokuş korelasyon fonksiyonun içine yerleştirmektir. Bu durumda fonksiyon etkileşmeyen elektronların kinetik enerjilerinin toplamı şeklinde yazılabilmektedir. Bu teoremi denklem 2.3' te yerine koyarsak,

$$H_{KS}^{\sigma}(r) = -\frac{1}{2}\nabla^2 + V_{KS}^{\sigma}(r), \quad (2.10)$$

haline gelir. Eğer toplam durumların sayısı  $N = N^{\uparrow} + N^{\downarrow}$  ve en düşük öz değerleri E olan parçacıklar belirlenen orbitallerde bulunuyorsa Kohn-Sham denklemi Schöndinger dalga denklemine benzer bir şekilde yazılabilir.

$$(H_{KS}^{\sigma} - \varepsilon_i^{\sigma})\Psi_i^{\sigma}(r) = 0 \quad (2.11)$$

Kohn-Sham sisteminde yoğunluk;

$$n(r) = \sum_{\sigma} \sum_{i=1}^N |\Psi_i^{\sigma}(r)|^2, \quad (2.12)$$

ile verilmektedir. Kinetik enerji ise,

$$T_S = \frac{1}{2} \sum_{\sigma} \sum_{i=1}^N |\Psi_i^{\sigma}(r)|^2, \quad (2.13)$$

gösterilmektedir.



Çok cisim problemi açısından bakar ve değiş-tokuş fonksiyonlarını yerine koyarsak Kohn-Sham teroremi,

$$V_{KS}^{\sigma}(r) = V_{dış}(r) + \frac{\delta E_{Hartree}}{\delta n(r,\sigma)} + \frac{\delta E_{Değiş-Tokuş}}{\delta n(r,\sigma)} = V_{dış}(r) + V_{Hartree}(r) + V_{Değiş-Tokuş}(r), \quad (2.14)$$

halini alır. Bu denklemin çözümü, denklem 2.10'den bulunan öz değer ve özvektörleri bağlıdır.

Tez çalışması sırasında, elektronik bant hesapların kullanılacak olan programın alt yapısının nasıl olduğu anlaşılmaya çalışılmıştır. Hesaplamalar için kullanılan Quantum Espresso (opEn Source Package for Research in Electronic Structure, Simulation, and Optimization) programı (Baroni vd. 2001), çeşitli bilimsel gruplar tarafından yazılmış, çeşitli yapıların kuantum mekaniğin temel özelliklerinden yola çıkarak, fiziksel özelliklerini hesaplamakta kullanılmaktadır. Temel olarak ise bu kodlar, yoğunluk fonksiyon teorisi, düzlem dalgalar ve zahiri potansiyeller kullanarak sonuca ulaşmaktadır (Baroni vd. 2001).

## 2.7 Manyetik Malzemelerin Mıknatıslanma Özellikleri

Manyetik malzemeler, malzemelerin sahip olduğu manyetik özellikler göz önüne alınarak sınıflandırılmaktadır. Manyetik özellikler genellikle atomların son yörüngesinde ve dolu olmayan iç kabuklarında bulunan elektron spinleri ve spinlerinin birbiriyle etkileşmesinden kaynaklanmaktadır. Bu etkileşmelerden kaynaklanan özellikler, manyetik malzemeleri, diamanyetik, paramanyetik, ferromanyetik, ferrimanyetik ve antiferromanyetik malzemeler olarak gruplandırılmasına yol açarlar. Bu özelliklere geçmeden önce, manyetizmanın temel özelliklerini incelemeye çalışalım.

### 2.7.1 Manyetik alınganlık

Mıknatıslanma (M), birim büyüklük veya birim hacim başına manyetik moment büyüklüğü olarak tanımlanmaktadır. Bu ifadenin matematiksel eşitliğini yazarsak,

$$\chi = \frac{\mu_0 M}{B} \quad (2.15)$$

$\chi$ , birim hacim başına manyetik alınganlık, B makroskopik manyetik alan şiddetini göstermektedir.

$\chi$ , manyetik alınganlığı, birim kütle başına veya mol başına tanımlanmaktadır. Manyetik alınganlık,  $\chi$  değişen dış manyetik alanla beraber malzemenin mıknatıslanmasında meydana gelen değişim olarak tanımlanmaktadır ve eşitlik 2.16 ile verilmektedir.

$$\chi = \lim_{H \rightarrow 0} \frac{\partial M}{\partial H} \quad (2.16)$$

Manyetik alınganlığı eksi olan maddeler diamanyetik, manyetik alınganlığı artı maddeler paramanyetik, ferromanyetik ya da ferrimanyetik maddeler olarak adlandırılmaktadırlar.

### 2.7.2 Diamanyetizma

Diamanyetik malzemelere, dışarıdan manyetik alan uygulandığında, malzemenin içinde uygulanan manyetik alana zıt yönde bir manyetik alan oluşmaktadır. Atom ve iyonların diamanyetik özellikleri, Larmor teoreminin uygulanmasıyla elde edilmektedir. Buna göre, bir manyetik alan içinde hareket eden yüklü parçacık "Larmor frekansı, ile dönme hareketi yapmaktadır.

$$\omega = \frac{eB}{2m_e} \text{ (SI)} \quad (2.17)$$

Çekirdek etrafındaki elektronların hareketleri incelendiğinde, başlangıçta çekirdek etrafında oluşan elektron akımı sıfır olarak gözlemlenmektedir. B dış manyetik alanın uygulanmasıyla çekirdek etrafında net bir elektron akımı oluşmaktadır. Bu akım manyetik momenti oluşturmaktadır. Bu manyetik moment ise uygulanan alanla zıt yönlü davranış göstermektedir.

Meydana gelen akım:

$$I = (-Ze) \left( \frac{1}{2\pi} \frac{eB}{2m_e} \right) \quad (2.18)$$

Z, atom numarası olarak tanımlanmaktadır.

İçinden I akımı geçen bir telin  $\mu$  manyetik momenti ise aşağıdaki şekilde verilmektedir.

$$\vec{\mu} = -\frac{Ze^2 \vec{B}}{6m_e} \langle r^2 \rangle \quad (2.19)$$

Buna göre birim hacim başına manyetik alınganlık ise aşağıdaki şekilde yazılmaktadır.

$$\chi = -\frac{NZe^2}{6m_e c^2} \langle r^2 \rangle \quad (2.20)$$

Burada r : atomik yarı çapı göstermektedir. Bu sonuçlar klasik olarak Langevin sonuçlarıdır.

### 2.7.3 Paramanyetizma

Paramanyetik malzemelerde, spin etkileşmelerinin var olduğu durumda, sıcaklık Curie sıcaklığının üzerinde ve manyetik alan sıfır iken, sistemin toplam mıknatıslanması sıfıra yakındır. Yani spinler doğal olarak bir düzenlenme içerisine girmemektedir. Ama sisteme dış manyetik alan uygulandığında spinler belli bir düzen içerisinde bulunmaktadır (Guimares vd. 1998).

Birim hacimde  $\mu$  manyetik momentine sahip N atomu bulunan bir sistemde, dışarıdan  $B = \mu_0 H$  manyetik alanı uygulandığında,  $\mu$  manyetik momenti ile B manyetik alanın etkileşmesi sonucunda aşağıdaki etkileşme enerjisi oluşmaktadır.

$$U = -\mu \cdot B = -g\mu_B m_J \quad (2.21)$$

Böyle bir sistem için mıknatıslanma, Langevin denklemiyle verilmektedir.

$$M = N\mu L(x) \quad (2.22)$$

Burada L(x), Langevin fonksiyonu olup,  $x = \mu B / k_B T$  dir.

$$L(x) = \coth(x) - \frac{1}{x} \quad (2.23)$$

$x \ll 1$  için, zayıf alan veya yüksek sıcaklıklar için,

$$\coth x = \frac{1}{x} + \frac{x}{3} - \frac{x^3}{45} + \dots \quad (2.24)$$

verilmektedir.

İlk iki terimi alıp işlem yaparsak;

$$\coth x = \frac{1}{x} + \frac{x}{3} - \frac{1}{x} \approx \frac{x}{3} \quad (2.25)$$

halini almaktadır.

Böylece mıknatıslanmanın değeri;

$$M \cong \frac{N\mu^2 B}{3k_B T} = \frac{C}{T} B \quad (2.26)$$

olarak bulunmaktadır. Bu 2.26 numaralı denklemde verilen C,

$$C = \frac{N\mu^2}{3k_B} \quad (2.27)$$

Curie sabiti olup, bu bağlantıya Curie yasası denilmektedir. Curie yasası, yüksek sıcaklık zayıf alan yaklaşımında ( $\mu B \ll kT$ ) geçerlidir.

#### 2.7.4 Ferromanyetizma

Ferromanyetizmanın en baskın özelliği spinler arasındaki değiş-tokuş etkileşmelerine bağlı olarak spinlerin doğal bir şekilde düzenlenmesidir. Bu doğal düzenlenme sadece sistemin Curie sıcaklığı altında gözlemlenmektedir üzerinde ise, ferromanyetik malzeme paramanyetik bir malzeme gibi davranış sergilemektedir (Guimares vd. 1998).

Paramanyetizma da kullanılan denklemler bu malzemeler için uygulandığında;

$$M = \frac{C}{T} (H_{dış} + \lambda M) \quad (2.28)$$

$$M = \frac{CH_{dış}}{T - C\lambda} \quad (2.29)$$

Eşitliklerden yararlanarak manyetik alınganlık aşağıdaki şekilde ifade edilmektedir.

$$\chi = \frac{C}{T - C\lambda} = \frac{C}{T - T_C} \quad (2.30)$$

$T_C$ , ise Curie sıcaklığıdır.

$$T_C = C\lambda \quad (2.31)$$

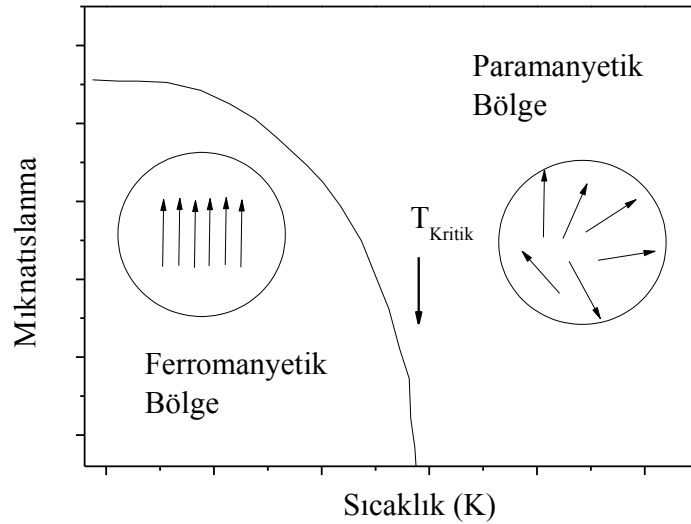
Düşük sıcaklıklarda deęiş-tokuş etkileşmesi gösteren ferromanyetik malzemelerde ise, tüm örnek üzerinden, iki moment arasındaki etkileşmeyi kullanarak etkin alan ifade edilebilmektedir.

$$H_{etkin} = -J \sum \vec{\mu}_i \vec{\mu}_j \quad (2.32)$$

Ferromanyetik malzemeler için mıknatıslanmaya baęlı dış alan ve manyetik alan eşitlięi aşıęıdaki gibi ifade edilmektedir.

$$H \longrightarrow H_{etkin} = H_{dış} + \lambda M \quad (2.33)$$

$\lambda$ , ortalama alan parametresidir. Ferromanyetik malzemeler için doęal spin düzenlenmesi, sıcaklık arttıkça azalmaktadır. Bu azalış kritik duruma, sıcaklık Curie sıcaklığına geldięinde ulaşmaktadır. Mıknatıslanma deęeri sifıra yakın bir deęere ulaştığı zaman ve sonrasında, malzeme paramanyetik bir malzeme gibi davranış göstermeye başlamaktadır. Şekil 2.1 bütün bu matematiksel ifadeleri çok güzel özetlemektedir.



Şekil 2.1 Mıknatıslanmanın Curie sıcaklığına baęlı deęişimi sırasında ferromanyetik fazdan paramanyetik faza geçişi

### 2.7.5 Artık mıknatıslanma

Bir manyetik özellik gösteren alaşımda, manyetik dipoller belli bir doğrultuda yönelmişlerdir. Bu manyetik özellik gösteren alaşıma dışarıdan bir manyetik alan uygulanırsa, mıknatıslanmanın tersi yönünde, manyetik alan azaltılırken manyetik malzeme üzerinde kalan bir artık alan oluşmaktadır. Bu oluşan artık alan, manyetik malzemenin mıknatıslanmasının sıfır yapabildiği dış manyetik alan değerine ise, zorlayıcı alan (demanyetizasyon alanı) değeri denilmektedir. Herhangi bir parçacığın, manyetik alan altındaki iç alanı,

$$H_i = H - NM \quad (2.34)$$

ile verilmektedir. Burada gözlemlenen manyetik alınganlık değeri ise,

$$\chi = \frac{M}{H} = \frac{\chi_i}{(1 + N\chi_i)} \quad (2.35)$$

verilmektedir.

### 2.8 Faz Geçişleri

Sistemin termodinamik kararlılığındaki bir değişimden dolayı tanımlanan bir durumdan diğer bir duruma geçişine faz geçişi adı verilmektedir. Ortamdaki basınç yada sıcaklık değerlerinde meydana gelen faz geçişi, serbest enerjideki azalışla veya artışla ilgilidir. Sistemin hangi kararlılıkla serbest enerjisini azaltıp artıracığına entalpi karar verir. Serbest enerji buradaki diğer önemli bir değişkendir.

Buna göre serbest enerjiyi bulmak istersek, benzer faz geçişi olan erime ve donma durumunda, verilen sıcaklık ve basınç değerleri için iki veya daha fazla faz aynı anda bulunabilmektedir. Bunun sonucunda ölçülen Gibbs serbest enerji değişimi,  $\Delta G$ , sistemin sabit sıcaklık ve basınç değeri ile alakalı olan serbest enerjisi, birçok durum için aşağıdaki şekilde uygulanabilmektedir.

$$\Delta G = \Delta H - T\Delta S \quad (2.36)$$

Buradaki  $\Delta H$  sistemin entalpi deęiřimi,  $\Delta S$  ise sistemin entropisinde ki deęiřimdir.

Faz geçiři sırasında, sistemin iinde veya dıřında meydana gelen ısı akıřı sıcaklık deęiřimine neden olmaktadır,  $\partial T$ , buradan da öz ısı ařaęıdaki řekilde yazılmaktadır.

$$C = \frac{dQ}{dT} \quad (2.37)$$

ve eř basın sıcaklık deęiřimi iin entropi deęiřimi, deęerlerin ayrıřtırılması ve belirli sıcaklık deęerleri arasında,  $T_1$  ve  $T_2$ , integral alınması ile bulunmaktadır.

$$\Delta S = \int_{T_1}^{T_2} \frac{C_p}{T} dT \quad (2.38)$$

Tersinir dengede bulunan faz deęiřimi (birinci dereceden) iin entropi deęiřimi ařaęıdaki řekilde hesaplanmaktadır.

$$\Delta S_t = \frac{\Delta H_t}{T_t} \quad (2.39)$$

Buradaki  $\Delta S_t$  geçiřin entropi deęiřimi,  $\Delta H_t$  faz deęiřimi iin entalpi deęiřimi ve  $T_t$  'de geçiř sıcaklıęıdır. Birinci dereceden faz deęiřimi gstermeyen bir sistem iin, entropi deęiřimi eřitlik (2.39) 'den, rgden gelen katkının yanına z ısının eklenmesiyle hesap edilmektedir. Buradan da toplam entropi

$$\Delta S = \sum_i \frac{\Delta H_i}{T_i} + \int \frac{C_p(T)}{T} dT \quad (2.40)$$

katkıları ařaęıdaki řekilde hesap edilmektedir.



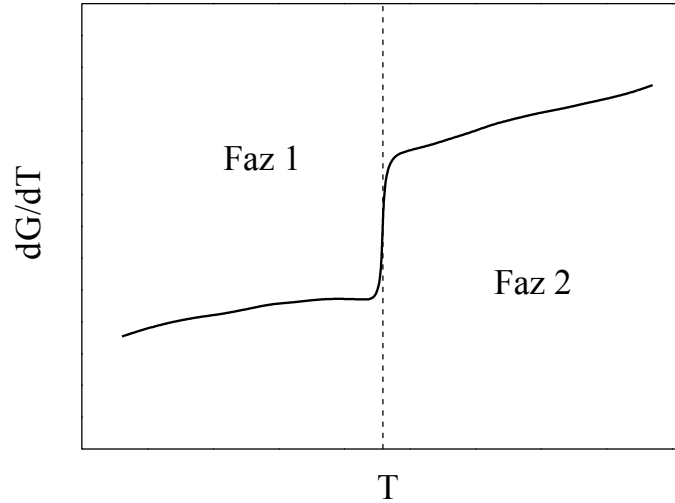
Faz geçişleri temel olarak 2 farklı başlık altında toplanmaktadır

1. Birinci dereceden faz geçişi (süresiz)
2. İkinci dereceden faz geçişi (sürekli)

Birinci dereceden faz geçişinde, geçiş sıcaklığında Gibbs fonksiyonun birinci türevinden elde edilen entropi ve hacim değerleri süresizlik göstermektedirler. İkinci dereceden faz geçişinde ise, geçiş sıcaklığında Gibbs fonksiyonunun birinci türevinden elde edilen entropi ve hacim değerlerinin sürekli olduğu durumda, Gibbs fonksiyonun ikinci türevinden elde edilen  $C_p$ ,  $\alpha$  ve  $\kappa$  değerleri sürekli dir.

### 2.8.1 Birinci dereceden faz geçişi

Birinci dereceden faz geçişi, Gibbs fonksiyonun birinci türevinde meydana gelen süresizlik olarak tanımlanmaktadır. Birinci dereceden faz geçişine örnek olarak Gibbs serbest enerjisinin sıcaklığa bağlı davranışı şekil 2.2’de gösterilmektedir.



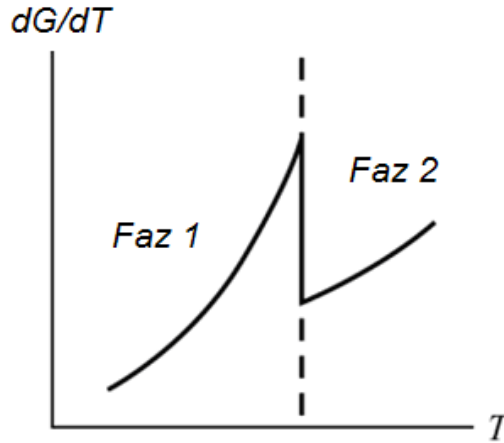
Şekil 2.2 Birinci dereceden faz geçişi için Gibbs serbest enerjisinin birinci türevinin sıcaklığa bağlı değişimi

Her iki fazın ayrı ayrı ve bir arada bulunduğu ( $dG/dT$ ) -  $T$  grafiğinde, iki fazın aynı anda gözlemlendiği sırada, geçiş sıcaklığı sonsuza gitme (süresizlik) eğilimindedir. Sistemin

denge durumunu sıcaklık belirlemektedir. Sıcaklığın, fazların bir arada olduğu durumda olduğunda sistem sonsuzda kararlı olacaktır.

### 2.8.2 İkinci dereceden faz geçişi (Sürekli)

İkinci dereceden faz geçişi, Gibbs fonksiyonunun birinci türevinde meydana gelen süreklilik olarak tanımlanmaktadır. Bu geçişlerde sistemin sahip olduğu kimyasal potansiyelde bir süreksizlik yoktur. İkinci dereceden faz geçişine örnek olarak Gibbs serbest enerjisinin sıcaklığa bağlı davranışı şekil 2.3’de gösterilmektedir. Her iki fazın ayrı ayrı ve bir arada bulunduğu  $(dG/dT) - T$  grafiğinde, iki fazın aynı anda gözlemlendiği sırada geçiş sıcaklığı süreklilik göstermektedir.



Şekil 2.3 İkinci dereceden faz geçişi için Gibbs serbest enerjisinin birinci türevinin sıcaklığa bağlı değişimi

### 2.9 Martensit Faz Geçişi

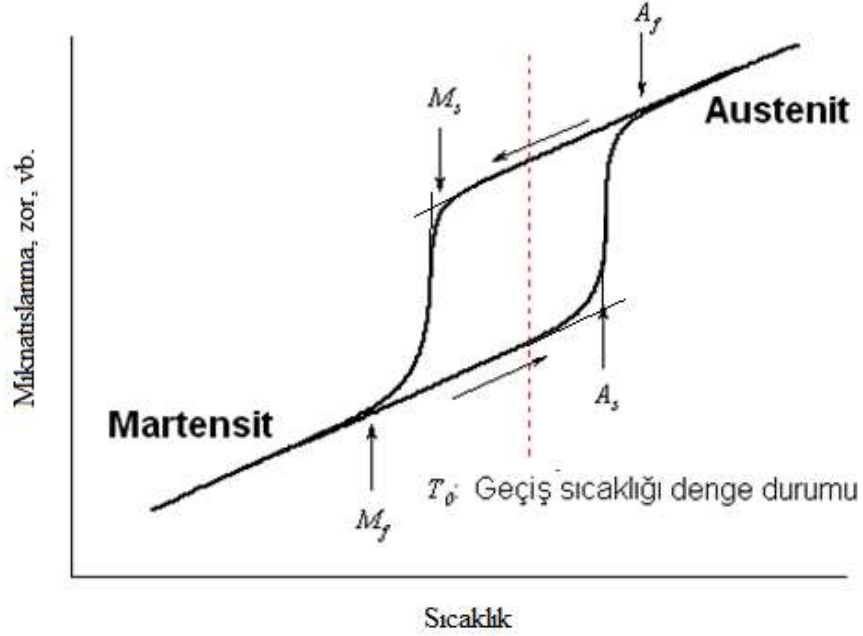
Bu etki, Alman bilim insanı Martensit tarafından gözlemlendiği için onun ismiyle anılmaktadır. Martensit geçiş, ısısal, elektriksel ve mekaniksel zorlanma ile toplam sistemin atomlarının yer değiştirebilmesi olarak tanımlanmaktadır (Ortin vd. 2006). Bunlar birinci dereceden katı-katı faz geçişleridir ve kristalografik düzen içerisindeki değişimler olarak adlandırılmaktadırlar. Bu geçişler yayınımsız olduğundan, atom pozisyonlarının değişimi, ara atomların uzaklığından daha azdır. Bu geçiş boyunca yer değiştiren atom, birinci en yakın atom komşuluğu ile ilişkisini sürdürmektedir (Ortin vd.

2006). Martensit geçişler sırasında iç ısının değişimi ile ısıl bir histeresis oluşmaktadır. Bu geçişin kendine özgü bazı özellikleri vardır.

### 2.9.1 Martensit faz geçişinin temel özellikleri

- Martensit faz dönüşümü sırasında, atomlar yakın komşuluklarını korurlar ve kısa veya uzun menzilli difüzyon etkisi gözlemlenmez. Bu geçiş sırasında, ana fazın kompozisyonunda herhangi bir değişim olmaz. Bu nedenle de difüzyonsuz geçiş olarak tanımlanmaktadır. Martensit bir faz geçişi için sadece kristal yapıda bir değişimi sürücü kuvvet rolü almaktadır.
- Martensit geçiş malzemenin sıcaklık değişimi tarafından zorlanmaktadır. Tipik bir Martensit geçişte kübik kristal örgünün simetrisi azaltılarak rombohedral tetragonal, veya ortorombik, monoklinik örgü içine dönüşümü sağlanmaktadır. Martensit geçiş, yüksek sıcaklık fazının kristal örgüsündeki kusurlarla beraber, kristal örgüsünde bulunan bölmelerin sayısına da bağlıdır. Bu yapılar Martensit geçiş sırasında, kristal örgünün toplam enerjisini azaltacak yönde eğilim göstermektedirler. Dış manyetik alan veya uygulanan zor ile bu değişkenlerin büyüme yönelimi uygun yönde artırılabilir.
- Martensit geçişte meydana gelen atomik yer değiştirme sonucunda, zorlanma ile birlikte örnek hacminde değişiklikler meydana gelmektedir. Martensit geçişlerde, geçiş döngüsünü karakterize edebilmek için dört tane geçiş sıcaklığı tanımlanmaktadır (Şekil 2.4). Bunlar:
  - $M_s$  : Soğuma sırasında yapının Austenit'ten Martensit'e geçişinin başladığı sıcaklığı göstermektedir.
  - $M_f$  : Bu değer de, Austenit yapıdan Martensit yapıya faz geçişinin bittiği sıcaklığı göstermektedir
  - $A_s$  : Yapının Martensit yapıdan Austenit yapıya geçişinin başladığı sıcaklığı göstermektedir.

- $A_f$  : Yapının Martensit yapıdan Austenit yapıya geçişinin bittiği sıcaklığı göstermektedir.
- $T_0$  : Varsayılan denge durumu sıcaklığıdır.



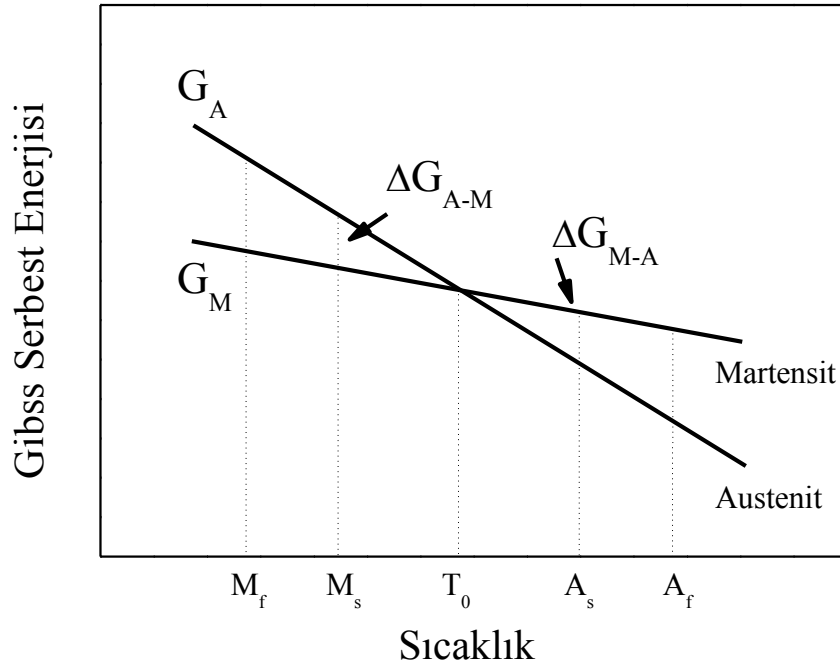
Şekil 2.4 Sıcaklık-zorlamalı Martensit geçiş ve tersine geçişler

Düşük sıcaklık fazı olan Martensit faz, yüksek sıcaklık fazı olan, Austenit fazına göre daha yüksek bir serbest enerjiye sahiptir (Şekil 2.5). Martensit faz belirli bir sıcaklık aralığı üzerinde bozulmaktadır ve genel olarak bu bozulma, ısıl histeresisle birlikte gözlemlenmektedir.

Her iki fazında dengede olduğu bir sıcaklık değeri vardır ve Martensit başlangıç sıcaklığı bu değerden oldukça düşüktür. Martensit fazı oluşturmak için gereken serbest enerji aşağıdaki eşitlik ile gösterilmektedir. Burada  $\Delta S_f$  Martensit geçiş sırasında ihtiyaç duyulan entropi değişimi ve  $T_E$  denge sıcaklığıdır (Verhoeven 1975).

$$\Delta G_{A \rightarrow M(start)} = \Delta S_f (T_E - M_s) \quad (2.41)$$

Isıtma yönünde yüksek sıcaklık fazına doğru Martensit geçişin başlangıç sıcaklığı ise  $A_s$  ile gösterilir.  $A_s$  her zaman  $M_s$  sıcaklığının üzerindedir ve geçiş eğrisi de belirtilen histeresis göstermektedir. Histeresis, Martensit ve Austenit arayüzler arasındaki etkileşmelerle ve kristal kusurları ile ilgilidir. Histeresis döngüsünün alanı, geçiş çevrimi sırasındaki enerji dağılım miktarına bağlıdır. Geçiş sırasında histeresis ne kadar büyük oluyor ise, bu geçiş sırasında ortaya çıkacak enerjide o kadar büyük olacak demektir.

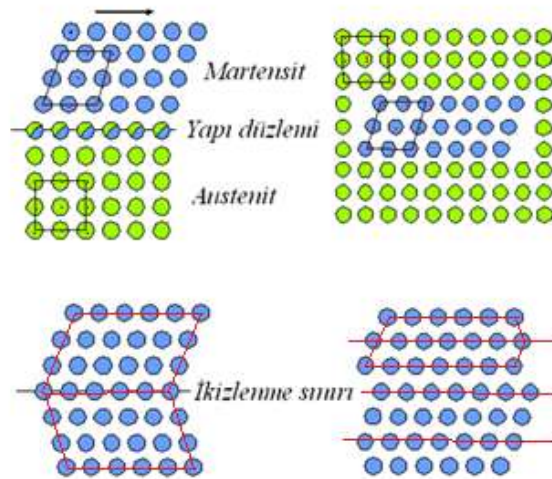


Şekil 2.5 Austenit (A) ve Martensit (M) fazların serbest enerjilerinin sıcaklığa bağlı değişimi (Verhoeven 1975)

Martensit fazın çekirdek kısmı yani büyümenin başlangıç noktası rastgele bir büyüme değildir. Yüksek sıcaklık fazının tercihli yönelimine bağlıdır. Bu etkinin ilk gözlemlendiği alaşım NiTi alaşımıdır. Bu alaşımında yüksek sıcaklık düşük sıcaklığa doğru geldikçe, 240 K civarlarında tanecik sınırları belirlemeye başlar. Bu tanecik sınırları dikkatlice incelendiğinde yüksek sıcaklık fazı ile düşük sıcaklık fazı arasında bir düzlemin olduğu bulunmuştur. Bu düzleme habit düzlemi denilmektedir. Habit düzlemi, yapı tamamen düşük sıcaklık fazına geçtiğinde de korunmaktadır. Bilindiği gibi evrendeki tüm sistemler en düşük enerjide olmak isterler ve herhangi bir olayın gerçekleşebilmesi için toplam entropisinin artması gerekmektedir. İşte bu nedenden

dolayı, martensit faz geçişi sırasında bu ara düzlemlerin oluşmasının nedeni, martensit fazın toplam enerjisinin daha düşük olmasıdır.

Martensit faz geçişi gerçekleşirken, malzemenin şeklinde ve hacminde bazı değişimler gözlemlenir. Bu değişimler, tersinir de (elastik deformasyon) olabilir tersinmez (plastik deformasyon) de olabilir. Bu değişimin hangi karakterde olduğu sistemi kristal anizotropisi ile ilgilidir. Eğer martensit olarak büyüyen plakaların kristal anizotropisi yüksek sıcaklık fazınınkinden çok daha büyükse geçiş geri dönüşümsüz bir özellik gösterir. Eğer kristal anizotropileri birbirine yakın ise, geri dönüşümlü bir bozulma gözlemlenecektir.



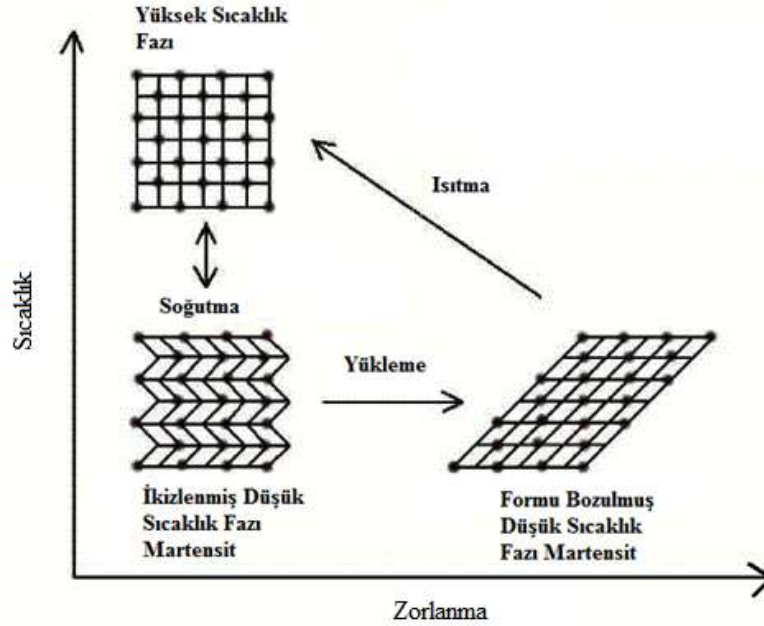
Şekil 2.6 Atom hareketleri ile gerçekleşen Martensit geçiş şematik gösterimi

Martensit geçişler genellikle makroskobik boyuttaki bain deformasyonu ile tanımlanmaktadır. Bu da makroskobik boyuttaki çiftlenme veya kayma olarak gözlemlenmektedir. Martensit geçişte meydana gelen atomik yer değiştirme sonucunda, zorlanmayla alakalı olarak örnek hacminde değişiklikler meydana gelmektedir.

## 2.10 Ferromanyetik Şekil Hafıza Alaşımları

Şekil hafıza olayları genel olarak Martensit geçişlerle ilişkili bir olgudur. Eğer bir cisim  $M_f$  sıcaklığı altında plastik deformasyona uğrarsa, ilk durumuna ancak  $A_s - A_f$

sıcaklıkları boyunca ısıtılarak, yani ters Martensit geçiş (yüksek sıcaklık fazına doğru) ile dönebilmektedir. Şekil hafıza olayı, uygulanan mekanik stres ve sıcaklık değişimlerinden dolayı mikro yapılarda meydana gelen farklılıklardan kaynaklanmaktadır (Balma vd. 2008).

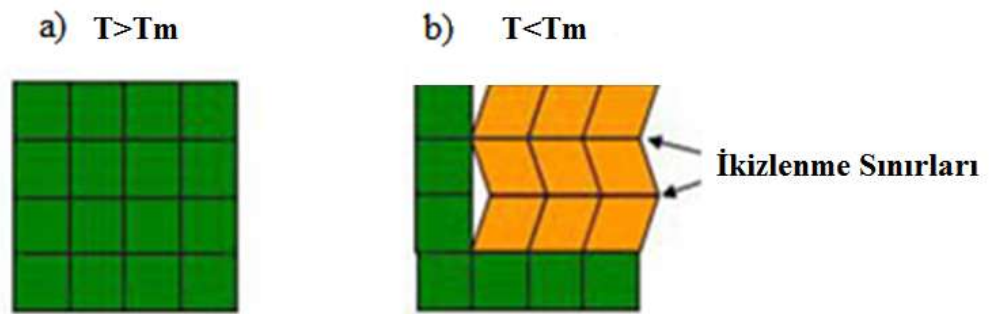


Şekil 2.7 Martensit fazdaki şekil hafıza olayının şematik gösterimi

Yüksek sıcaklık fazı birden fazla farklı yönelime sahip Martensit faza uyumlu hale dönüşmektedir. Ancak bu çoklu yönelime sahip Martensit yapıları mekanik zorlama ile plastik deformasyona uğratıldığında Martensit faz ikizlenmiş biçimde (Martensit ara yüzeylerin hareketinin sonucu) oluşmaktadır. Uygulanan zorlanma kaldırıldığı zaman, malzeme bozulma durumunda kalmaya devam etmektedir. Farklı yönelim içindeki yüksek sıcaklık fazına rağmen, tersine dönmesi durumu gözlenmemekte ve Martensit fazda kalmaya devam etmektedir. Ancak malzeme  $M_f$  sıcaklığı üzerinde ısıtılırsa (yüksek sıcaklık fazının üstündeki sıcaklıklara ısıtılırsa), yüksek sıcaklık fazına geçiş göstermektedir. İlgilenilen malzeme ferromanyetik özellikler göstermiyorsa, manyetik şekil hafıza olayı gözlemlenmektedir. Bu fiziksel olay, Martensit geçiş içeren veya uygulanan manyetik alanla beraber Martensit yada Austenit değişkenlerin yeniden düzenlenmesinden dolayı, manyetik malzemede

meydana gelen şekil değişikliği olarak tanımlanmaktadır (Ortin vd. 2006). Bu olgu geçiş sıcaklığı yakınlarında, alan zorlamalı faz geçişi olarak gerçekleşmektedir. En temelde, ikizlenme sınırlarının yüksek hareketliliğe sahip olduğu yerlerde gözlemlenmektedir. İkizlenme sınırlarının yüksek hareketliliğe sahip olması manyetokristal anizotropinin az olması anlamına gelmektedir. Genelde uygulanan manyetik alan örnekten kaldırıldığında, örnek ısıtılarak deformasyondan önceki ilk durumuna geçirilebilmektedir (Ortin vd. 2006).

Uygulanan sıcaklıkla yapının değişimi şekil 2.8'de gösterilmektedir. Şekil 2.8, aynı zamanda verilen alandaki sıcaklık zorlamalı geçişi de tanımlamaktadır. Uygulanan bir doğrultuda manyetik alan arttırılarak, her bir çizgi için değişim yapılabilmektedir. Bölme duvarlarını  $180^\circ$  kaydırılırken, uygun alanlar için manyetik bölmeler ile ikiz bantlar bir örtüşme eğilimindedir. Alanların bu bölgesinde, yüksek manyeto kristal anizotropi görülmektedir. İkizlenme sınırlarındaki yüksek hareketlilikten dolayı, uygulanan manyetik alan yönündeki, kolay mıknatıslanma eksenini oluşturan değişkenlerin sayısı artmaktadır. Bu artış ile beraber, ikizlenmeler arasındaki enerji farkı en aza indirilebilmektedir. Bu şekil hafıza olayında en verimli yöntem olan çiftlenme mekanizmasıdır. Diğer yaklaşımlar göz önüne alınarak manyetik uzama temel çiftlenme olarak, değişkenlerin gelişmesine ön ayak olmaktadır (L'Vov 2002).



Şekil 2.8 Uygulanan artan manyetik alan tarafından manyetik şekil hafıza alaşımlarının manyetik ve yapısal bölmelerinin değişiminin gösterimi

Günümüzde birçok ferromanyetik alaşımın manyetik şekil hafıza özelliği gösterdiği bilinmektedir (Balma vd. 2008).  $Ni_2MnGa$  Heusler kompozisyonuna yakın olan *Ni-Mn-Ga* alaşımları bu aile içinde en çok çalışılan alaşımlardandır. Martensit geçişle uyumlu



olarak iç enerjisinin artmasıyla meydana gelen büyük değişim sonucu, manyetokalorik etkide de büyük bir değişim olması beklenmektedir. Birinci dereceden yapısal geçiş ile ikinci dereceden manyetik geçiş birleştirildiği zaman bu etki oldukça arttırılabilmektedir. Bu duruma da “Devasa Manyetokalorik Etki” denilmektedir. Malzemelerin bu şekilde sınıflandırılmasında, uygulanan manyetik alanla beraber, değişen bölme yapılarının önemi de oldukça fazladır. Bu değişimler yapısal ve manyetik bölmeler arasındaki ilişkiler tarafından kontrol edilmektedir. Aynı zamanda şekil hafıza özellikleri ile de alakalıdır (Marcos vd. 2003). Bir malzemenin manyetik şekil hafıza özelliği göstermesi için sahip olması gereken özellikler kısaca şöyle sıralanabilir:

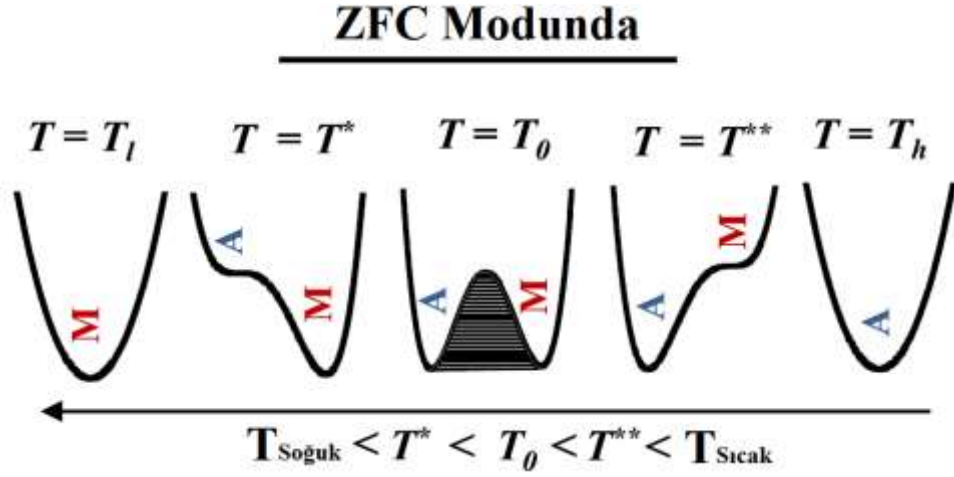
- Mutlaka ferromanyetik olmalı ve Martensite geçiş göstermeli,
- Manyetik anizotropi enerjisi ikiz sınırları hareket ettirmek için gerekli enerjiden büyük olmalı,
- Oda sıcaklığında martensitik fazda olmalı,
- Dışarıdan uygulanacak alan malzemenin manyetik momentiyle etkileşeceğinden, manyetik momenti yeteri kadar büyük olmalıdır.

Ni-Mn tabanlı sistemlerde gözlemlenen yapısal ve manyetik geçiş sıcaklıklarının daha iyi anlayabilmek için, Landau serbest enerji diyagramı sıcaklığa bağlı olarak farklı mıknatıslanma ölçüm kipleri temel alınarak şekil 2.9 ve şekil 2.10'da çizdirilmiştir. Buna göre, birinci dereceden faz geçişleri için F-serbest enerji, M-düzen parametresi olmak üzere;

$$F=a_0(H) + a_2(T,H)M^2 - a_3(T,H)M^3 \quad (2.42)$$

olarak tanımlanabilmektedir (Roy vd. 2004). Şekil 2.9'a göre, sıfır alan soğutması ve sıcaklık azalması yönünde ilk olarak Austenit durum daha kararlı olmaktadır. Sıcaklık azaltılmaya devam ettiğinde Austenit durumun Curie sıcaklığında yapısal olarak hala Austenit durum daha kararlıdır. Ancak sıcaklık olarak  $T_0$  olarak gösterilen duruma gelindiğinde Austenit ve Martensit durumda bulunma olasılıkları neredeyse aynıdır.

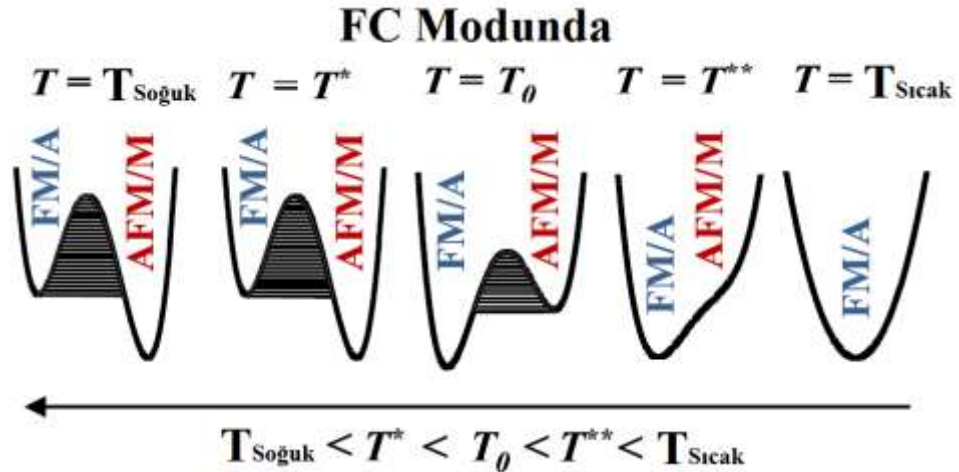
Sıcaklık daha da azaltıldığında Martensit durum tamamen baskın duruma geldiğinden sadece Martensit faz bulunmaktadır.



Şekil 2.9 Sıcaklığa bağlı sıfır alan soğutmalı modu (ZFC) ile mıknatıslanma ölçümünden Ni-Mn-Sn alaşımının Landau serbest enerji durumları,

T sistemin olduğu sıcaklık, M: Martensit, A: Austenit sıcaklık, T\*\*, T\*: FM: Ferromanyetik, AFM: Antiferromanyetik durumları ve sıcaklıkları göstermektedir.

Şekil 2.10'a göre, alan soğutması ve sıcaklık azalması yönünde ilk olarak ZFC modundaki gibi Austenit durum daha kararlı durum olmaktadır. Ancak ZFC modundan farklı olarak uygulanan manyetik alanla birlikte Austenit fazın manyetik yapısı ferromanyetikdir. Daha sonra sıcaklık azaltılarak Martensit ve Austenit fazının iç içe oldukları sıcaklık civarlarında ZFC moddakine benzer sonuçlar elde edilmiştir. Ancak Martensit faz antiferromanyetikdir.



Şekil 2.10 Sıcaklığa bağlı alan soğutmalı modu (FC) ile mıknatıslanma ölçümünden Ni-Mn-Sn alaşımının Landau serbest enerji durumları,

T sistemin olduğu sıcaklık, M: Martensit, A: Austenit sıcaklık, T\*\*:, T\*: FM: Ferromanyetik, AFM: Antiferromanyetik durumları ve sıcaklıkları göstermektedir.

## 2.11 Manyetokalorik Etki

Manyetokalorik etkinin mutlak büyüklüğü; adyabatik (eş entropi) sıcaklık değişimi ( $\Delta T_{ad}$ ) ya da eş ısı manyetik entropi değişimi ( $\Delta S_M$ ) ile tanımlanabilmektedir. Kısaca, manyetokalorik etki, manyetik alan altında malzemenin ısınması (normal manyetokalorik etki), yada soğuması (ters manyetokalorik etki) olarak tanımlanabilmektedir. bu süreç eş entropi durumunda geçerlidir. Adyabatik durumda toplam entropi sabit kalacağı için, malzemeye manyetik alan uygulandığında, manyetik entropideki azalma, örgü entropisinde artışa (normal manyetokalorik etki) veya manyetik entropide artmaya, örgü entropisinde azalmaya (ters manyetokalorik etki) neden olur. Örgü entropisindeki bu artışın veya azalış sonucunda atomlar, daha büyük yada daha küçük genlikle titreşimler yaparlar ve malzemenin sıcaklığında artış yada azalış olur. Manyetik alan kaldırıldığı zaman ise, manyetik momentler eski düzensiz yada düzenli durumlarına geri dönerler. Örgü entropisinin azalması yada artması, malzemenin soğumasına yada ısırmasına neden olur.

Bir malzemenin sabit basınç altındaki toplam entropi değeri (S), sıcaklığa (T) ve manyetik alana (H) bağlıdır. Toplam entropiye katkı; çekirdek ( $S_N$ ), kristal elektrik alan ( $S_{CEF}$ ), örgü ( $S_F$ ), elektronik ( $S_E$ ) ve manyetik ( $S_M$ ) entropilerden gelmektedir. Şimdi en genel anlamda toplam entropiyi bu katkıların toplamı şeklinde yazalım;

$$S(T,p,H) = S_N(T,p,H) + S_{CEF}(T,p,H) + S_M(T,p,H) + S_F(T,p,H) + S_E(T,p,H) \quad (2.43)$$

Manyetik malzemenin çekirdeğinden gelen katkı ( $S_N$ ), 4 K ve altındaki sıcaklıklarda geçerli olduğu için bu terimi oda sıcaklığında ya da geçiş sıcaklığı civarında yok sayılmaktadır. Manyetik entropi, manyetik alana bağlı iken, fonon ve elektronik entropi değerleri, belli durumlar dışında manyetik alandan bağımsızdır. Kristal alan etkileşimlerini fonon katkısı içinde düşünerek denklem 2.43 tekrar yazıldığında,

$$S(T,p,H) = S_M(T,p,H) + S_L(T,p,H) + S_E(T,p,H) \quad (2.44)$$

elde edilmektedir.

Bu kapalı fonksiyonun türevini alındığında,

$$dS(T, p, H) = \left( \frac{\partial S(T, p, H)}{\partial T} \right)_{p,H} dT + \left( \frac{\partial S(T, p, H)}{\partial p} \right)_{T,H} dp + \left( \frac{\partial S(T, p, H)}{\partial H} \right)_{T,p} dH \quad (2.45)$$

elde edilir. Sabit basınç ve sabit sıcaklıkta ( $dp=0$  ve  $dT=0$ ) toplam entropinin türevi, yalnızca manyetik alanın bir fonksiyonu olarak yazılırsa,

$$dS(T, p, H) = \left( \frac{\partial S_M(T, p, H)}{\partial H} \right)_{T,p} dH \quad (2.46)$$

Normal MKE şekil 2.2' deki eğri ile verilmektedir. Eş entropi durumunda, manyetik bir malzemeye manyetik alan uygulandığı zaman manyetik entropi azalır, ancak toplam entropi değişmez.

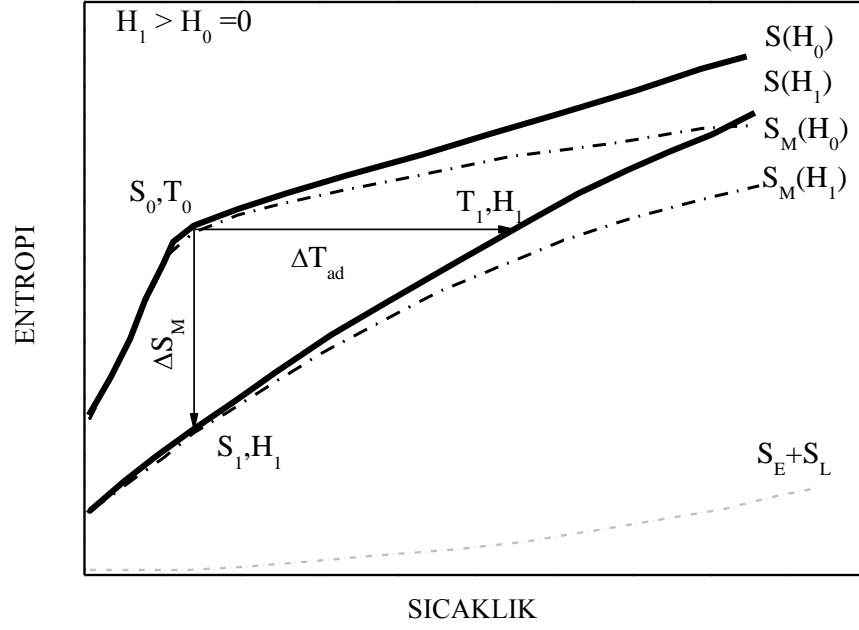
$$S(T_0, H_0) = S(T_1, H_1) \quad (2.47)$$

Eşsıl olarak uygulanan manyetik alanla, manyetik entropinin azalmasına bağlı olarak toplam entropi azalır.

$$\Delta S = S(T_0, H_0) - S(T_0, H_1) \quad (2.48)$$

Eğer örgü entropisi ile elektronik entropi alandan bağımsız ise, entropideki değişim, manyetik entropideki değişime eşit olur.

$$\Delta S_M = S(T_0, H_0) - S(T_0, H_1) \quad (2.49)$$



Şekil 2.11 Entropinin sıcaklıkla değişim eğrisi

Adyabatik sıcaklık değişimi,  $\Delta T_{ad}$  ve eşsıl manyetik entropi değişimi  $\Delta S_M$ , MKE'nin kendine özgü değerleridir. Her iki değer de, sıcaklığa (T) ve manyetik alan değişimine bağlıdır. Bu durumda; manyetik alanın uygulanması, manyetik düzenlenimi artırıyorsa yani, manyetik entropiyi azaltıyor ise,  $\Delta T_{ad}(T, \Delta H)$  artı ve  $\Delta S_M(T, \Delta H)$  eksi değer alır. Manyetik alan uygulanması ile manyetik düzenlenim azalıyor ise,  $\Delta T_{ad}(T, \Delta H)$  eksi ve  $\Delta S_M(T, \Delta H)$  artı değer alır.

Eş entropideki sıcaklık değişimi 2.46 denkleminin integrali,

$$\Delta T_{ad} = - \int_{H_2}^{H_1} \left[ \left( \frac{T}{C(T, H)} \right) \right]_H \left( \frac{\partial M(T, H)}{\partial T} \right)_H dH \mu \quad (2.50)$$

ile bulunabilir.

Denklem 2.46 ile tanımlanan manyetik entropi değişimi, MKE'nin genel prensiplerini anlatmakta olup, mikroskobik düzeyde geçelidirler. Şimdi de makroskobik ölçekte MKE'yi tanımlamaya çalışalım. Bunun için en iyi yöntem ortalama alan yaklaşımıdır.

Bu yöntemde, istatistiksel fizik ve kuantum fiziğinden yararlanarak problemi çözmeye çalışacağız. Ortalama alan yaklaşımında (OAY) mıknatıslanma,

$$M = NM_J B_J \left[ \frac{M_J H}{k_B T} \right] \quad (2.51)$$

ile verilmektedir.

N, sistemdeki toplam atom sayısını,  $M_J = g_J \mu_B J$  mıknatıslanmayı, J, toplam açısal momentumu,  $\mu_B$ , Bohr magnetonu,  $g_J$ , jromanyetik oranı, ve  $B_J(M_J H/k_B T)$  Brillouin fonksiyonunu göstermektedir.

Zayıf alan, yüksek sıcaklık yaklaşımında ( $k_B T \gg M_J H$ ) olduğunda, Curie yasasını tanımlamaktadır.

$$M = (C/T)/H \quad (2.52)$$

Burada  $C = N \mu_B^2 g_J^2 J(J+1)/3k_B$  olup, Curie sabitidir.

OAY teorisinde, 2.51'deki mıknatıslanma denklemi paramanyetik bölgede Curie-Weiss yasasını verir.

$$M = (C/(T-T_C))/H \quad (2.53)$$

$T_C$ , Curie sıcaklığı olmak üzere,

$$T_C = \frac{NM_{\text{etk}}^2 \alpha}{3k_B} \quad (2.54)$$

$M_{\text{etk}} = g_J (J(J+1))^{1/2} \mu_B$ , bir atomun etkin manyetik momenti olup,  $\alpha$  ortalama alan sabitidir.

Manyetik entropi,  $S_M$ , manyetik bir malzemeyi tanımlarken en önemli parametredir.  $S_M$ , manyetik alanın, sıcaklığın ve diğer termodinamik parametrelerin değişmesiyle

değişebilir.  $S_M$  ve  $\Delta S_M$  değerleri, manyetik etkileşimlerle ve MKE sonucuyla doğrudan ilgilidir. Maxwell denklemlerini kullanarak, istatistiksel serbest enerji fonksiyonunun yardımı ile (Smart 1966),

$$S_M(T, H) = Nk_B \left[ \ln \frac{\sinh \left[ \frac{2J+1}{2J} x \right]}{\sinh \left( \frac{x}{2J} \right)} - x B_J(x) \right] \quad (2.55)$$

yazılabilir.

$x = \left[ \frac{M_J H}{k_B T} \right]$  olsun.  $x \ll 1$  olduğu durumda, 2.51 denklemini paramanyetik bir malzeme için çözümü daha uygun bir duruma gelir.

$$S_M(T, H) \approx Nk_B \left[ \ln(2J+1) \frac{1}{2} \frac{CH^2}{T^2} \right] \quad (2.56)$$

2.56 denklemini basit bir ferromanyetik malzemenin Curie sıcaklığının altındaki sıcaklıklarda,

$$S_M(T, H) \approx Nk_B \left[ \ln(2J+1) \frac{1}{2} \frac{CH^2}{(T-T_C)^2} \right] \quad (2.57)$$

ile verilir.

Tamamen düzensiz durumda ( $H=0$ ,  $T \rightarrow \infty$ ), 2.55 denklemindeki ikinci terim sıfır olur ve bu durumda sistemin yerleşmiş manyetik momentlerinin ulaşacağı en büyük değer,

$$S_M(T, H) \approx Nk_B [\ln(2J+1)] = R[\ln(2J+1)] \quad (2.58)$$

olarak bulunur.

Burada R, evrensel gaz sabitidir. Bu deęer, kuramsal olarak manyetik entropi deęerinin tamamen düzensiz yapıdan, tamamen düzenli yapıya geçmesi sırasında ulaşacağı en büyük deęerdir. Bu aradaki kayıp olan entropi deęeri spin dalgalanmasından ve kristal elektrik alandan kaynaklanmaktadır (Gschneidner 1999).

Curie Weiss yasasını kullanarak, eş ısı manyetik entropi deęişimi paramanyetik ve ferromanyetik bir malzeme için;

$$\Delta S_M \approx -\frac{1}{2} \frac{C\Delta(H^2)}{T^2} \quad (2.59)$$

$$\Delta S_M \approx -\frac{1}{2} \frac{C\Delta(H^2)}{T^2} \quad (2.60)$$

$\Delta(H^2) = H_2^2 - H_1^2$  olmak üzere verilir. 2.59 ve 2.60 denklemlerindeki deęerler, eş ısı manyetik entropi deęerinin ulaşacağı en büyük deęerlerdir. Paramanyetik malzeme bu doruk deęere 0 K'de, ferromanyetik bir malzeme ise,  $T_C$  yakınlarında ulaşabilmektedir. Paramanyetik bir sistemde, ısı sıřasına fonon katkısı 0 K'de ihmal edilebilecek kadar küçüktür.

### 2.11.1 Ölçüm yöntemleri

Manyetokalorik etkinin büyüklüęü, doğrudan ve dolaylı yoldan 2 farklı yöntem ile ölçülebilmektedir.

#### 2.11.1.1 Doğrudan ölçüm yöntemleri

Doğrudan ölçüm yöntemlerinde, malzemeye dışardan manyetik alan uygulanır ( $H_0$  ve  $H_1$ ) ve malzemenin sıcaklığı, manyetik alanın uygulanmasından önce ( $T_0$ ) ve sonra ( $T_1$ ) ölçülür. Adyabatik sıcaklık deęişimi, bu şekilde kolaylıkla bulunabilmektedir.

$$\Delta T_{ad}(T_0, \Delta H) = T_1 - T_0 \quad (2.61)$$



Doğrudan ölçüm iki şekilde yapılmaktadır. Sıcaklık sensörü, ya malzemenin üzerine temas ettirilir, ya da dokundurulmaz. Bu ölçümlerde hızlı değişen bir manyetik alan oluşturularak, malzeme hareket ettirilmeden, alan değiştirilebilmektedir. Sabit manyetik alan bölgesi elde edildiği durumlarda, malzemenin alana girip çıkması sağlanmaktadır. Malzemenin hareket etmediği ölçüm yönteminde, genellikle atımlı manyetik alan, yaklaşık 10 kOe/s hızla değiştirilerek, MKE yüksek manyetik alan değerlerine kadar ölçülebilmektedir (1-40T).

### 2.11.1.2 Dolaylı ölçüm yöntemleri

Teknolojik uygulamalarda kullanılacak malzemelerin üretiminde ve özelliklerinin geliştirilmesinde, manyetik alan altında, entropi değişiminin hesaplanması büyük önem taşımaktadır. Doğrudan ölçüm yöntemi ile yalnızca  $\Delta T_{ad}$  ölçülebilirken, dolaylı ölçüm yöntemleri, hem  $\Delta T_{ad}$  hem de  $\Delta S_M$ 'in hesaplanmasını sağlamaktadır. Miknatıslanma ölçümlerinden sadece  $\Delta S_M$  hesaplanabilirken, manyetik alanın varlığında ya da  $H=0$  iken, ısı kapasitesi ölçümleri  $\Delta S_M$ 'nin ve  $\Delta T_{ad}$ 'nin birlikte hesaplanmasına olanak vermektedir. Miknatıslanmanın manyetik alana bağlı değişimi verilerinden aynı sıcaklık değerleri için manyetik entropi değişimi,

$$\Delta S_M(T_{ort})_{\Delta H} = \frac{1}{2\delta T} \left( \delta M_1 \delta H_1 + 2 \sum_{k=2}^{n-1} \delta M_k \delta H_k + \delta M_n \delta H_n \right) \quad (2.62)$$

şeklinde yazılmaktadır. Bu denklem yardımı ile, eş ısı manyetik entropi değişimi hesaplanmaktadır. Miknatıslanma verilerinden elde edilen manyetik entropi değişiminin doğruluğu, manyetik momentin, sıcaklığın ve manyetik alanın ölçümündeki doğruluğuna bağlıdır. Tüm bu etkiler,  $\Delta S_M$ 'nin bulunmasında genel olarak % 3-10 arasında hataya neden olmaktadır (Pecharsky vd. 2002).

Her iki yöntemin artıları ve eksileri bulunmaktadır.

- Miknatıslanma ölçümleri, ısısal ölçümlere göre daha hızlı ve daha ekonomiktir. Bu yöntemle, çok sayıda örnek kolaylıkla ölçülmektedir. Örnek yüzeyi ve geometrisinden bağımsız olarak ölçüm yapılabilir.

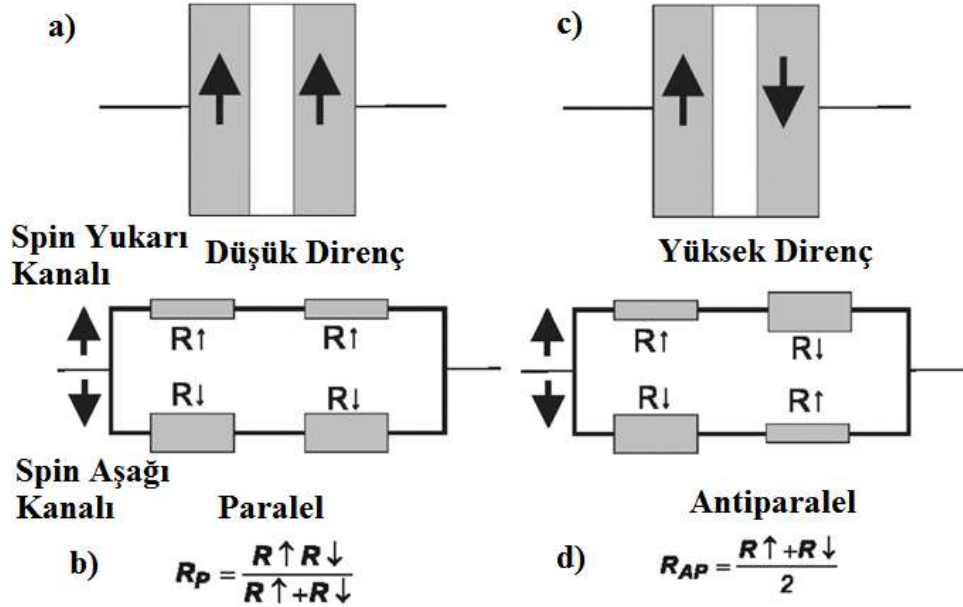
- Sıcaklığa ve alana bağılı ısı kapasitesi ölçümleri, teknolojik uygulamalar için adyabatik sıcaklık deęişiminin bulunmasına izin vermektedir. Isısal ölçümler daha uzun sürmekte ve pahalı olmaktadır. Bu ölçümlerde, örnek yüzeyinin, ısı iletkenlięin saęlanabilmesi için düz olması ve örnek geometrisinin belirli olması gerekmektedir.

## 2.12 Spintronik

Son yıllarda, Spintronik alanındaki çalışmalarda çok hızlı bir artış gözlemlenmektedir. Bu yeni çalışma alanı, fiziğin geleneksel dalları olan Manyetizma ve Elektriğin birleşimlerinden oluşmaktadır. Bu alanın temel amacı, elektronun spiniyle bilgi taşınımı olgusunun gerçekleştirilmesidir (Awschalom vd. 2002). Günümüzde bilgi taşınımı, elektronun yükünü ele göz önüne alınarak yapılmaktadır. Bu durumda elektronun spininin serbestlik derecesi ihmal edilmektedir. Kuantum teorisine göre, iki elektron sadece farklı spin yönelimine (spin yukarı elektronlar- $\uparrow$  ve spin aşağı elektronlar- $\downarrow$ ) sahip olduğunda aynı enerjilere sahip olabilmektedir. Sıradan bir elektrik devresinde, spinler rastgele düzenlenirler ve elektrik akımın akışını etkilemezler. Manyetik alan içinde ise, spin yukarı ve spin aşağı elektronlar birbirine göre farklı enerjidedirler. Spintronik cihazlar, elektronun spininin serbestlik derecesini kullanarak spin kutuplu akımları deęiştirebilirler.

Ferromanyetik özellik gösteren malzemeler özellikle spintronik tabanlı cihazların içinde kullanılabilir. Ferromanyetik bir malzemelerin elektronik bant yapısı Fermi enerji seviyesi yakınlarında dengesiz bir spin nüfuslanmasına sahiptir. Böylelikle bu malzemeler dışarıdan herhangi bir manyetik alan uygulanmadan kendiliğinden mıknatıslanırlar. Bu nedenle dengesiz bir spin nüfuslanmasına sahip ferromanyetik malzemeler spin yukarı ve spin aşağı durumdaki elektronları için iki farklı dirence sahip olmaktadır. Bu olgu, spintronik alanında iki akım modeli olarak bilinmektedir. İki akım modeli şekil 2.12 gösterilmeye çalışılmıştır. Buna göre ilk durumda, ferromanyetik tabakaların birbirine göre paralel olduğu durumda artı yönde (spin yukarı) gelen elektron tabakalar arasında spine baęlı saçılmalar az olacağı yüzünden az bir direnç gözlemlenecektir. Eksi yönde gelen (spin aşağı) elektron ise tabakaların arasında yüksek

bir spine bağılı saçılmaya uğrayacak ve direnç artacaktır. Şimdi bu toplam sistemin eş direncini çizersek şekil 2.12 b elde edilir. Bu durumu birde tabakaların birbirine göre antiparalel olduğu zaman tanımlarsak, şekil 2.12c ve şekil 2.12d elde edilir.



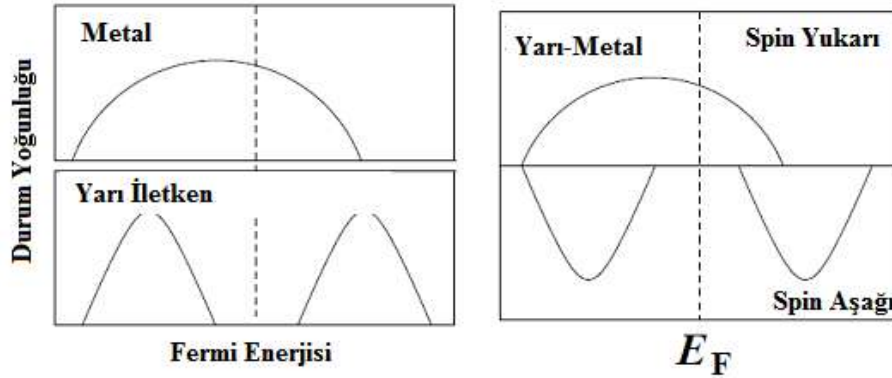
Şekil 2.12 İki akım modelinin şematik gösterimi

a.Tabakaların birbirine göre paralel olduğu durum, b. Elektriksel eş direnç gösterimi, c. Tabakaların birbirine göre antiparalel olduğu durum ve d. Elektriksel eş direnç gösterimi

Spin yukarı yada spin aşağı elektronları ile elde edilen spin kutuplu akımlar ile olası manyeto-elektronik uygulamalarda kullanılabilir (Dauhton vd. 1999). Elektronun spini, bilgi saklama ve tekrardan bilgiye ulaşabilmek için çok önemlidir. Manyetizmanın en büyük ekonomik uygulaması manyetik kayıt teknolojisinde kendini göstermektedir (White vd. 2001, Litvinov vd. 2005). Bu nedenle, bilgi saklama endüstrisinin spintronik teknolojisinde en önde olması şaşırtıcı değildir. Günümüzde kullanılan bilgisayarlarda yüksek kapasitelerde bilgi saklama becerisine sahip olan hardiskler mevcuttur. Bu hardiskler, yoğun paketlenmiş bilgileri okuma ve yazma becerisine sahip devasa manyetodirenç etkisinin gözlemlendiği kafalarla bu işlemi gerçekleştirmektedirler.

### 2.12.1 Yarı - metalik davranış

Yarı-metalik ferromanyetik özellik gösteren malzemeler spintronikte kullanımları nedeni ile son zamanlarda ilgiyle araştırılan yeni sınıf malzemelerdir. Bu tip malzemelerde, malzemenin sahip olduğu iki spin bandı birbirinden tamamen farklı davranış sergilerler. Bantlardan bir tanesi olan yukarı spinli bant Fermi seviyesinde  $E_F$ 'de sıfırdan farklı durum yoğunluğuna sahip olarak tipik metalik davranış gösterirken, aşağı spinli bant Fermi seviyesinde  $E_F$ 'de, bir boşlukla yarı-iletken davranış gösterir. Birbirinden farklı yukarı ve aşağı yönlü spinli bant karakterine sahip bu tip malzemeler yarı-metalik malzeme olarak adlandırılır. Bu sebeple, yarı-metaller metal ve yarı-iletkenler arasında hibrit olarak adlandırılırlar. Şekil 2.13'de metali iletken yarı-iletken ve yarı-metallerin durum yoğunlukları şematik olarak gösterilmektedir. Bant yapısındaki bu asimetrik davranıştan dolayı, yarı-metaller Fermi seviyesinde  $E_F$ , %100 spin kutuplanmasına ve tamamen spin kutuplanmış akıma sahiptirler.



Şekil 2.13 Metal, yarı iletken ve yarı metallerin durum yoğunlukları,  $E_F$ , Fermi enerji durumu eğrileri

Yarı-Heusler alaşımlarının temel özelliği olan bu bant yapısını etkileyen faktörler aşağıda tanımlanmıştır.

- **Örgü Parametresi:** Örgü parametresinde %2'lik uzama ve kısaltmaların,  $E_F$  civarında enerji aralığını kaydırır. Bu kaydırma miktarının deneylerde, yaklaşık olarak, %2'lik bir uzamayla 0.9eV olduğu, %2'lik bir kısaltmayla -0.8eV olduğu bulunmuştur.

- **Enerji Aralığının (Boşluğunun) Oluşması:** Enerji aralığı yüksek değerlikli geçiş metalinin düşük enerjili d-durumu ile düşük değerlikli geçiş metalinin daha yüksek enerjili d-durumlarının hibritleşmesinden ortaya çıkar.
- **sp Atomunun Etkisi:** İki geçiş metalinin hibritleşme eğilimi yoktur fakat düşük enerjili bir s ve 3p bandına sahip olan sp atomları alıcı gibi davranarak hibritleşmeyi mümkün kılmaktadır. Bu alıcı karakter  $Cl_b$  yapısının kararlı olmasını da sağlar. Tüm bunlarla birlikte manyetik özellikleri araştırmak için yapılan katkılamlarda sp atomu katkısı, sp atomları yarı-metalik karakteri bozduğundan yapılmaz.

### 2.12.2 Manyeto direnç etkisi

Akım verilen bir metalde, akımın iletimini sağlayan elektronlar metalin içindeki bazı kusurlardan dolayı metal içinde tam verimle hareket edemezler. Elektronların hareketi sırasında saçılma noktalarında elektronlar, hareket doğrultularını ve yönlerini değiştirirler. Hareket yönü ve doğrultusu değişen elektronlar, elektriksel bir direnç oluştururlar. Eğer metal manyetik özellikler gösterirse, manyetik alanla birlikte elektriksel dirençinde bir değişim gözlemlenir. Manyetik özellik gösteren malzemenin, manyetik alana girmesi sonucunda, elektriksel direncinin değişmesi olayına "Manyetodirenç" ve bu etkiye de "Manyetodirenç etkisi" denir. Manyetodirenç olayı, saf anizotropik ferromanyetik düzenlenim olan malzemelerde gözlemlenir. Bu manyetodirenç olayına, anizotropik manyetodirenç (AMR) denilmektedir. Anizotropik manyetodirenç etkisi, manyetik bir malzemenin ferromanyetik özellikleri eksensel olarak değişimi ile bu etkiyi gösterebilmektedir. Uygulanan manyetik alan akıma dik ise, enine manyetodirenç, paralel ise, boyuna manyetodirenç etkisi gözlemlenir.

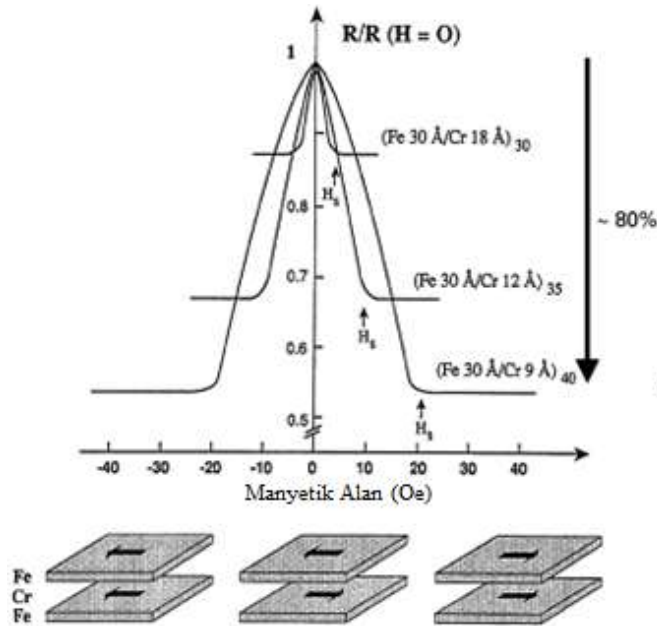
Lord Kelvin 1856 yılında yaptığı deneyde, hacimsel demirde ilk defa manyetodirenç etkisini gözlemlemiştir. Lord Kelvin, demir elementine boyuna doğru uyguladığı manyetik alanla birlikte elektriksel direncin arttığını ve enine doğru uyguladığı manyetik alanla birlikte ise elektriksel direncin azaldığını gözlemlemiştir. Yukarıda bahsedildiği

gibi, manyetodirenç etkisi dışarıdan uygulanan manyetik alanla birlikte malzemenin direncindeki değişim olarak verilmektedir. Bu etki matematiksel olarak,

$$MR(H) = \frac{R_H - R_0}{R_0} \quad (2.63)$$

verilmektedir. Buna göre,  $R_H$  değeri, malzemeye dışarıdan uygulanan manyetik alan ile gözlemlenen elektriksel direnci ve  $R_0$  değeri ise, malzemenin üzerinden manyetik alan kaldırıldığında elektriksel direncini göstermektedir.

Manyetik malzemelerin, manyetik alan altındaki bu değişim etkisi en net bir şekilde ortaya çıkması A. Fert ve arkadaşlarının 1986 yılında Fe/Cr/Fe çok katmanlı manyetik ince filmlerinde yaptıkları çalışmayla ortaya çıkmıştır. Bu etkinin şematik gösterimi şekil 2.14 'de manyetik alan uygulanması ve kaldırılması şekliyle verilmiştir.



Şekil 2.14 Farklı kalınlıklarda Cr tabakası içeren "Fe/Cr/Fe" katmanlarından oluşturulan spintronik cihazın uygulanan manyetik alana bağlı magnetodirenç değerleri (Fert vd. 1986)

Buna göre, bu çok katmanlı oluşturulan ince filmin tabakalarında kullanılan ferromanyetik tabakalar başlangıçta birbirine göre antiferromanyetik olarak düzenlenmektedir. Üzerinden belirli bir akım geçirildiğinde net bir direnç ile karşılaşılır.

Elektronlar katmanlar arasında geerken Fermi'nin altın kuralı geređi bir tabakadaki ođunluk elektronları, diđer tabakanın ođunluk elektronları yođuyla iletim sađlanmaktadır. Tabakaların birbirine gre bu antiferromanyetik dizilimi sonucunda, elektronlar karřı tabakanın ođunluk elektronlarıyla deđil aslında azınlık elektronlarıyla iletimi sađlamaya alıřmaktadır. Ancak manyetik alan uygulandıđında tabakalar birbirine gre ferromanyetik bir dizilime gemiřlerdir. Tabakalara uygulanan akım ile greli ferromanyetik tabakalar ilk duruma gre uygulanan akıma daha az bir tepkide bulunacaktır. nk ilk tabakanın ođunluk elektronları diđer katmandaki elektronların ođunluk elektronları ile etkileřimleri daha az olacaktır. Bunların sonucunda da gzlemlenecek olan diren, manyetik alan uygulanmadan nceki direne gre daha az olacaktır.

### 3. MATERYAL YÖNTEM

Tez çalışması iki temel bölümden oluşmaktadır. Bu temel bölümler, teorik çalışma ve deneysel çalışmadır. Bu nedenle, materyal ve yöntem kısmı da bu iki çalışma alt başığı altında verilmektedir.

#### 3.1 Teorik Hesaplamalar

Herhangi bir sistemin elektronik bant hesabı yapılırken, yoğunluk fonksiyon teorisine dayalı aşağıdaki yaklaşımlar kullanılmaktadır:

- Born-Oppenheimer yaklaşımı,
- Çok parçacıklı probleminin yoğunluk fonksiyonel teorisi yardımı ile tek parçacık problemine indirgenmesidir.

Burada yoğunluk fonksiyonu:

$$\left[-\vec{\nabla}^2 + V(\vec{r})\right]\psi(\vec{r}, E) = E\psi(\vec{r}, E) \quad (3.1)$$

ile hesaplanmaktadır. Seçilen  $V(r)$  periyodik potansiyeli:

$$V(\vec{r}) = V(\vec{r} + \vec{R}_n) \quad (3.2)$$

dır ve  $R_n$  kadar uzaktaki herhangi başka bir potansiyeli uygun olmalıdır. Bloch teoremini:

$$T_{\vec{R}_n} \psi_{\vec{k}}(\vec{r}, E) = e^{-i\vec{k}\vec{R}_n} \psi_{\vec{k}}(\vec{r}, E) \quad (3.3)$$

sağlamalıdır.



Bu yukarıda verilen denklem 3.3 çözülebilmesi için iki ayrı kuantum mekaniksel yaklaşımı kullanan program kullanılmıştır. Bunlar,

- Quantum Espresso Bilgisayar Kodları
- SPR-KKR Bilgisayar Kodlarıdır.

Quantum Espresso programı yardımıyla ile aşağıdaki özellikler incelenebilmektedir (Baroni vd. 2005):

- SCF-toplam enerji, kuvvetler ve stres
- Kohn – Sham integralleri
- Spin yörünge çiftlenimleri
- Fonon frekansları ve herhangi vektörün öz-vektörleri
- Durum yoğunlukları
- Elektron fonon etkileşimleri
- Manyetik momentler

İncelenen sistemin durum yoğunluğunu ve manyetik moment değerlerini hesaplayabilmek için, Quantum Espresso programı kullanılmıştır. Hesaplamalar yapılırken, bant hesabı yapılacak olan sistemin spin durumları özellikle Fermi düzeyinde farklılık gösterdiğinden dolayı, spin kutuplu yoğunluk fonksiyon hesabı göz önüne alınmıştır. Değiş-tokuş korelasyonu olarak Perdew ve arkadaşlarının geliştirdiği, genelleştirilmiş gradient yaklaşımı (GGY) kullanılmıştır (Perdew vd. 1997). Ayrıca, hesaplamalar da PWscf ([www.quantumespresso.com](http://www.quantumespresso.com), 2012) kodları kullanılmış ve değiş-tokuş korelasyon enerjileri için ise, ultra yumuşak düzlem dalga zahiri potansiyeller ([www.quantumespresso.com](http://www.quantumespresso.com), 2012) yöntemi uygulanmıştır. Spin-orbit etkileşimleri hesaba alınmamıştır. Brillouin bölgesi hesaplarında ise, Paxton-Methfessel yumuşaması (Paxton vd. 1998) kullanılmıştır. Bütün hesaplarda yakınsama enerjisi 0.01 mRy (450 eV) olarak seçilmiştir. Kendinden uyumlu alanların daha fazla minimum enerjiye yakınsaması ve doğruluk açısından bu değerın çevrim sayısı 200 olarak belirlenmiştir.

Bu anlatılanlar ışığında, stokiometrik ve stokiometrik olmayan Ni-Mn-Sn alaşımının teorik elektronik bant hesapları yapılmıştır. Yapılan hesaplamalar sonucunda, manyetik moment değerleri literatür ile kıyaslanmıştır

Bu hesaplamalar yapılırken, Ni-Mn-Sn sistem için kübik fazın yanında birde tetragonal bir bozukluk yaratılmıştır. Bu her iki fazın ayrı ayrı kristalografik başlangıç parametreleri çizelge 3.1'de verilmiştir. Çizelge 3.1 ile verilen yapısal başlangıç parametreleri literatürden elde edilmiştir.

**Çizelge 3.1** Ni-Mn-Sn sistemi için kübik ve tetragonal fazlar için kullanılan kristalografik konumlar

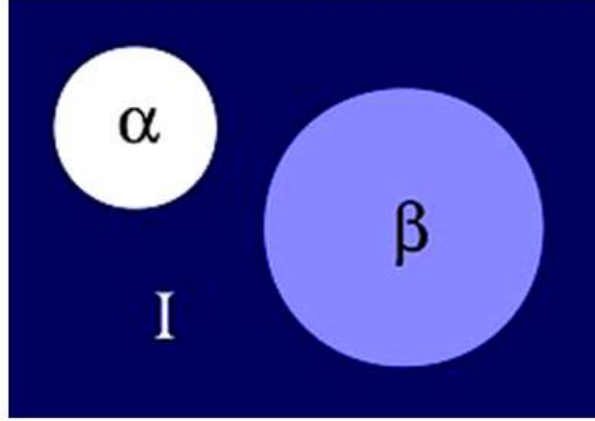
	Kübik ( $F_{m-3m}$ )	Tetragonal ( $F_{MMM}$ )
Ni	1/4,1/4,1/4	0.25,0.25,0.25
Mn	1/2,1/2,1/2	0,0,0.5
Sn	0,0,0	0,0,0

### **3.1.1 Kuantum Espresso Programı ve tam potansiyel doğrusallığı artırılmış düzlem dalga kodları**

Kauntum Espresso programı, yoğunluk fonksiyonlarını teorisini kullanan tam potansiyel doğrusal artırılmış düzlem dalga (TP-DADD) kodlarını kullanmaktadır. DADD kodları çekirdek ve değerlik elektronlarını enerjilerini ayrı ayrı hesaplayabilmektedir. Genel olarak ise bu kodlar, Kohn Sham denklemlerinin çözümünü yüksek duyarlılıkla ve hızlı bir biçimde yapabilmektedir.

DADD yöntemi Muffin-Tin'in (MT) farklı parçalara bölünmesiyle başlamaktadır. MT yaklaşımı, atomik çerçevede parçacıklar arasında oluşan değiş-tokuş potansiyellerin şekilleriyle ilgili olan bir yaklaşımdır. Bu yaklaşımda atomlar, atomik pozisyonlarında iç içe geçmemiş kürelerden oluşmaktadır. Elektronların, bu atomların bulunduğu bölgeler içinde ve verilen çekirdeğin yarıçapı değerinde neredeyse küresel simetriye sahip ve potansiyelleri korunmuş oldukları varsayılmaktadır. Çekirdek ile elektronlar arasında kalan ara bölgede ise değiş-tokuş etkileşim potansiyeli sabittir. Atom merkezli

kürelere arasındaki ve ara bölgedeki sürekli potansiyel kullanılarak hesaplama yapılmaktadır. Bu anlatılanlar şekil 3.1’de sadeleştirilmeye çalışılmıştır (www.quantumespresso.com, 2012).



Şekil 3.1 DADD yönteminde kullanılan Muffin-Tin bölgeleri ( $\alpha$  ve  $\beta$ ) ve ara bölgelerin (I) gösterimi

Kuantum Espresso paket programı olan açık kaynak kodları, verilen sistemin birim hücrelerini kürelere bölmektedir. Ortada çekirdek (muffin-tins), etrafında ise ara bölgenin potansiyeli kalmaktadır. Burada kullanılan temel set, muffin tin kürelerini ve ara bölgedeki düzlem dalgaları küresel harmonik yapmaktadır. Bu düzlem dalgaların küresel harmonik olma koşulu ise, açık kaynak kodlarında artırılmış düzlem dalgalar (ADD) yöntemi ile tanımlanmaktadır ve ilk kez Slater tarafından önerilen bir uygulamadır (Slater vd. 1965). Kuantum Espresso kodları, bu yaklaşımın çözümlerini doğrusallaştırarak sonuca ulaşmaktadır.

### 3.1.2 SPP-KKR (Spin polarized relativistic Korringa-Kohn-Rostoker kodları)

Bu tez çalışması sırasında, yoğunluk fonksiyon teorisine bağlı olarak kullanılan diğer bir kod sistemi ise, spin kutuplu göreceli Korringa-Kohn-Rostoker (SPR-KKR) kodlarıdır. H. Ebert, 1986 yılında bu paket programını geliştirmeye başlamıştır. Daha sonra ise, paket program M. M. Battocletti, D. Banea, M. Kosuth, J. Minar, A. Perlov, V. Popescu'nun yardımlarıyla literatürde şu anda kullanılan halini almıştır.

SPR-KKR paket programı, farklı boyutlarda (0D, 1D, 2D, 3D) periyodik sistemlerin elektronik bant hesaplarını hesaplamakta kullanılabilir. Özellikle de, bu paket programı, kimyasal olarak düzensiz yapıların elektronik bant hesapları için çok uygundur. Elektronik bant hesapları, görelilik olmayan yarı görelilik, tam görelilik olarak yapılabilir. Paket programın yarı görelilik kipleri ile, paramanyetik ve spin kutuplu sistemler (doğrusal olmayan manyetik yapılar ya da görelilik spin spiralleri) türetilmektedir. Ayrıca, paket programın tam görelilik kipleri yardımı ile, incelenen sistemin tepki fonksiyonları ve spektroskopik özellikleri belirlenebilir.

SPR-KKR paket programı temelde, KKR-Green fonksiyonlarını çoklu saçılma teorisine uygulanmış halidir. Bu bize, sistemin elektronik yapısını hesaplanırken kullanılan Bloch dalga fonksiyonlarının ve özdeğerlerinin karmaşık olduğu durumda, hesaplamalarda oldukça esnek davranmamıza yol açmaktadır.

Temelde spin kutuplu görelilik Korrington-Kohn-Rostoker yöntemi spin kutuplu bir sistem için, Fermi-Dirac Hamiltoniyeni ile tanımlanmaktadır.

$$\left[ \frac{\hbar}{i} c \vec{\alpha} \cdot \vec{\nabla} + \beta m c^2 + V_{etk.}(\vec{r}) + \beta \vec{\sigma} \cdot \vec{B}_{etk.} \right] \psi_i(\vec{r}) = \epsilon_i \psi_i(\vec{r}) \quad (3.4)$$

$$\vec{B}_{etk.}(\vec{r}) = \vec{B}_{dış}(\vec{r}) + \frac{dE_{deg.tok.}(n,m)}{d\vec{m}(\vec{r})} \quad (3.5)$$

Spine bağlı potansiyel, spin yoğunluk fonksiyonundan türetilmiştir. İlk adım olarak, potansiyel fonksiyonlarını ( $V_{etk.}$  ve  $B_{et}$ ) bulabilmek için, her bir atom tipine bağlı tek konum Dirac denklemi çözümlenmelidir. Prensip olarak, etkin manyetik alan ( $B_{eff}$ ) herhangi bir yönde tanımlanabilir. Ancak kolaylık açısından, etkin manyetik alan değeri,  $B_{eff}(\vec{r}) = B_{eff}(r) \vec{e}_z$  ile tanımlanmaktadır. Bu nedenle, tek konum Dirac denkleminin referansın yerel çerçevesinden yani tüm durumların tam dolu olduğu durum ile çözülebilir. Bu yaklaşıma göre,

$$\psi_v = \sum_{\Lambda} \psi_{\Lambda v} \quad (3.6)$$

parçalı dalga fonksiyonları kullanılabilir. Bu dalga fonksiyonları ile, küresel simetrik potansiyeller için doğrusal bağımsız çözümler türetilmektedir.

$$\psi_v(r, E) = \begin{pmatrix} g_K(r, E)\chi_{\Lambda}(r) \\ if_K(r, E)\chi_{-\Lambda}(r) \end{pmatrix} \quad (3.7)$$

Bu çiftlenmiş açısal diferansiyel denklemler kümesi, denklem 3.8 ve 3.9' a yol açar:

$$P'_{\Lambda v} = -\frac{\kappa}{r}P_{\Lambda v} + \left(\frac{E-V}{c^2} + 1\right)Q_{\Lambda v} + \frac{B}{c^2}\sum_{\Lambda}(\chi_{\Lambda} - \Lambda|\sigma_z|\chi_{-\Lambda'})Q_{\Lambda'v} \quad (3.8)$$

$$Q_{\Lambda'v} = -\frac{\kappa}{r}Q_{\Lambda v} - (E - V)P_{\Lambda v} + B\sum_{\Lambda}(\chi_{\Lambda}|\sigma_z|\chi_{\Lambda'})Q_{\Lambda v} \quad (3.9)$$

Düzensiz sistemler için, 3.8 ve 3.9 denklemi yardımıyla eş uyumlu potansiyel yaklaşımı türetilmiştir. Buna göre saçılma yol operatörü,

$$\begin{aligned} \chi_A\tau^{nn,A} + \chi_B\tau^{nn,B} &= \tau^{nn, eş pot. yak.} \\ \tau^{nn, \alpha} &= \tau^{nn, eş pot. yak.} (1 + (t_{\alpha}^{-1} - t_{eş pot. yak.}^{-1})\tau^{nn, eş pot. yak.})^{-1} \end{aligned} \quad (3.10)$$

denklemleri tekrarlanarak çözülebilmektedir.

Çoklu parçacık saçılma problemi çözüldükten sonra, elde edilen saçılma yol operatörü doğrusal olmayan spin sistemine dönüştürülebilir. Sonuçta Green fonksiyonu,

$$\begin{aligned} G(\vec{r}, \vec{r}', E) &= \sum_{\Lambda\Lambda'} Z_{\Lambda}^n(\vec{r}, E)\tau^{nn}(E)Z_{\Lambda'}^{n'x}(\vec{r}', E) \\ &- \sum_{\Lambda\Lambda'} Z_{\Lambda}^n(\vec{r}, E)J^{nx}(\vec{r}', E)\Theta(r' - r) \\ &+ J_{\Lambda}^n(\vec{r}, E)Z_{\Lambda}^{n'x}(\vec{r}', E)\Theta(r' - r)\delta_{nn'} \end{aligned} \quad (3.11)$$

olarak bulunur. Elde edilen bu Green fonksiyonu yardımıyla yük yoğunluğu ve manyetik moment büyüklükleri,

$$n(\vec{r}) = -\frac{1}{\pi} \Im \text{Trace} \int_0^{E_F} dE G(\vec{r}, \vec{r}', E) \quad (3.12)$$

$$n(\vec{r}) = -\frac{1}{\pi} \Im \text{Trace} \int_0^{E_F} dE \beta \sigma_z G(\vec{r}, \vec{r}', E) \quad (3.13)$$

ile bulunabilmektedir. Bu ifadeler aslında Green fonksiyonlarının temel çözümlerine dayanmaktadır.

$$\Im G(E) = -\pi \sum_{\alpha} |\alpha\rangle \langle \alpha| \delta(E - E_{\alpha}) \quad (3.14)$$

$|\alpha\rangle$ ,  $E_{\alpha}$  enerjisine sahip tek bir parçacığın elektronik durumlarıdır. Bir çok elektronik ve spektroskopik özellik bu yöntem ile hesaplanmaktadır.

### 3.2 Deneysel Yöntem

Ni (99.998), Mn (99.99), Sn (99.9999) saf elementlerden yapılmış hedefler kullanılarak 0.6 x 0.6 cm büyüklüğünde MgO (100) tek kristal alt taş üzerine Ni<sub>50</sub>Mn<sub>35</sub>Sn<sub>15</sub> Ni<sub>50</sub>Mn<sub>34</sub>Sn<sub>16</sub> kompozisyonlarının ince filmleri, Bielefeld Üniversitesi, Nano Fizik bölümünde bulunan Magnetron Sputtering sistemi kullanılarak elde edilmiştir. Magnetron Sputtering sisteminde, Radyo Dalgası ve Doğru Akım Manyetik Alanda Sıçratma (RF-DC Magnetron Sputtering) tekniği kullanılmıştır. Elde edilen ince filmlerin homojenliğinin sağlanması ve ince filmin içinde nano kristal formların oluşabilmesi için manyetik ince filmler elde edilmeden önce alttaş belirlenen sıcaklığa kadar ısıtılmıştır. Üretilen manyetik ince filmlerin alt taş sıcaklığının belirlenmesinde literatürde de oldukça yaygın olarak kullanılan bir yöntem olan yapı bölge modeli kullanılmıştır. Movchan ve Demschin, 1969 yılında yaptıkları çalışma ile ilk defa bu modeli tanımlamışlardır. Bu modele göre ince filmlerin yüzey pürüzlülüğü, çekirdeklenme ve büyüme oranları, alttaş sıcaklığı/erime sıcaklığıyla ( $T_{\text{alttaş}}/T_{\text{erime}}$ ) ile orantılıdır. Bu  $T_{\text{alttaş}}/T_{\text{erime}}$  oranı sayesinde ince filmleri 3 farklı bölgeye ayırmışlardır. 1. bölge,  $T_{\text{alttaş}}/T_{\text{erime}} < 0.3$  olduğu değerleri içermektedir. Bu bölgede yapılan ince filmler, ağırlıkça delikli silindirik yapılardan oluşmaktadır. Bu silindirler tek bir parçacıktan oluşmamakta ve genel olarak küçük olan silindirlerin bir araya gelmesiyle oluşan eş parçacıklar gözlemlenmektedir (Genel olarak ise amorf yapılar gözlemlenmektedir). 2.

bölge,  $0.3 < T_{\text{alttaş}}/T_{\text{erime}} < 0.5$  olduğu değerleri içermektedir. Bu bölgede yapılan ince filmler, ağırlıkça daha büyük silindirik parçacıklardan oluşmaktadır. Bu bölgedeki daha büyük silindirik parçacıkların oluşmasındaki en önemli faktörler ise, yüzey veya parçacık sınırlarının difüzyon hareketleridir. Bu yüzey veya parçacık sınırlarının difüzyonu, aktivasyon enerjisine göre artan  $T_{\text{alttaş}}/T_{\text{erime}}$  değeri ile doğru orantılıdır. Son olarak ise, 3. bölge,  $T_{\text{alttaş}}/T_{\text{erime}} > 0.5$  değerlerini içermektedir.. Bu bölge hacimsel difüzyon işlemi olan parçacık büyümesi ve tekrardan kristallenme olarak tanımlanmaktadır. Bu bölgedeki tanecikler, eş eksenli ya da silindirik ve tanecik sınırları yoğun olabilirler. Bu bölgede elde edilecek olan ince filmlerin tanecik sınırlarının yüksek hareketliliğinden dolayı homojenliğin büyümenin kontrolü oldukça zordur. Bu tez çalışması sırasında, Movchan ve Demschin tanımladıkları yapı bölge modeli kapsamında, ince filmin kontrollü olarak üretilmesi kolaylığı ve istenilen fiziksel özelliklerden dolayı 1. ve 2. bölge yakınlarında çalışmalar gerçekleştirilmiştir.

### **3.2.1 İnce filmlerin alt taş üzerine kaplanması**

Son yıllarda gelişen ileri teknoloji ile ince film üretiminde sıçratma tekniğine dayalı uygulamaların sayısı oldukça artmaktadır. Sıçratma tekniğine dayalı işlemlerin çok hızlı şekilde artmasının asıl nedenleri ise,

- Alttaş üzerinde ince filmin büyütülme hızının büyük olması,
- İnce filmlerin mükemmel bir şekilde istenilen yüzey boyunca büyüebilmesi,
- Yüksek derece duyarlı kontrol yapılabilmesi,
- İşlemlerin tekrarlanabiliyor olmasıdır.

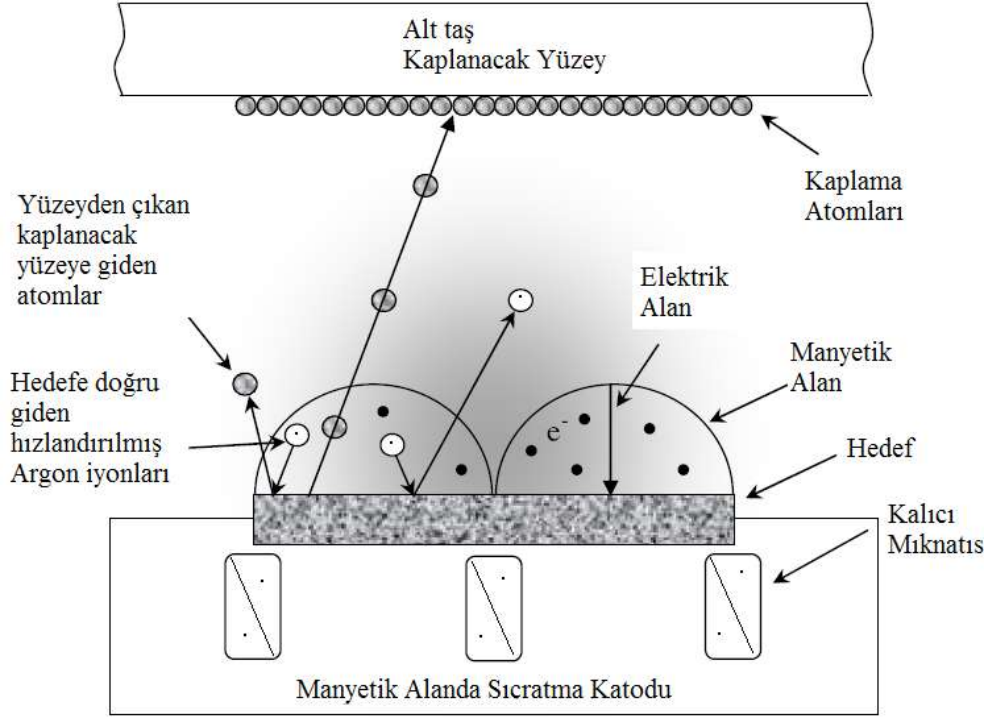
Tez sırasında incelenilen tüm örnekler manyetik alanda sıçratma tekniğine dayanmaktadır. Bu teknik hakkında bazı bilgiler vermek gerekmektedir.

### 3.2.2 Manyetik alanda sıçratma işlemi

İnce filmlerin üretimi esnasında, mevcut birçok tekniğin arasında sıçratma tekniği, özellikle hemen hemen her tür elementten ince film yapılabilirlik açısından en yetenekli ve en önde olan tekniktir. Sıçratma tekniğinin avantajlarının bazıları şunlardır: Yüksek derecede homojen bir yüzey oluşumu, yüzeye yüksek yapışma yeteneği, filmlerin tekrarlanabilirliği ve kalınlık kontrolünün kolay oluşudur.

Bu yöntem de çok hızlı hareket eden ağır ve soy gaz iyonları hedef yüzeye çarptırılmaktadır. Bu çarpışma sırasında Ar iyonları ile hedef yüzeyinde atomlar arasında momentum transferi gerçekleşir ve hedef atomları yüzeyden sökülürler. Bu DC sıçratma sistemi için temel şematik gösterim şekil 3.2'de verilmiştir. Bu şekilde hızlandırılan Ar iyonları hedef ile çarpıştıkların gerçekleşen olay şematize edilmektedir. Manyetik alanda sıçratma tekniğinde ise, hedef yüzeyine yakın ve altında olacak bir şekilde manyetik alanın yaratılacağı kalıcı mıknatıslar yerleştirilmektedir. Buradaki manyetik alan kaynağının nedeni ise şudur. Hedef yüzeyinden ortaya çıkan ikincil elektronlar, manyetik alan tarafından yakalanır ve plazma ortamına geri kazandırılır. Bu kazandırılan ikincil elektronlar sayesinde, sürekli bir plazma ortamı yaratılmakta ve bu yaratılan plazma ortamı sayesinde sıçratma için gerekli olan iyonlar sürekli olarak elde edilmiş olur (Ohring vd. 2002).





Şekil 3.2 Manyetik alanda sıçratma tekniğinin şematik olarak gösterimi

İnce film biriktirme ve büyüme sürecinin ince filmlerin yapısal, elektriksel ve manyetik özellikleri üzerine etkisi çok büyüktür. Sıçratma sürecinin kinetiği ve hareketli atomların varlığı filmlerin, yapısal ve manyetik özelliklerini belirlemede çok önemli bir rol oynamaktadır. Bu süreci anlamak için oluşturulan ortamdaki değişkenlere bakmak gerekmektedir. Süreci oluşturan temel değişkenler:

- Sıçratma Basıncı,
- Hedef – Alt taş arasındaki uzaklık,
- Sıçratma gücü,
- Alt taş sıcaklığı.

Düzgün ve homojen bir ince film yapabilmek için, bu parametreleri ayrı ayrı incelemek gerekmektedir.

- **Sıçratma Basıncı:** Sıçratma gaz basıncı sadece soy gaz iyonlarını hedef yüzeye çarptırmak için gerekli değildir. Aynı zamanda sıçratma gaz basıncı, hedef yüzeyinden ortaya çıkan atomları alt taşa yönlendirilmesini de sağlamaktadır.

Eğer gerektiğinden daha düşük basınçlarda sıçratma işlemi gerçekleştirilirse, hedef yüzeyi ile alt taş arasında oluşan plazmanın enerjisi saçılan atomların enerjisinden daha düşük bir enerjiye sahip olacaktır ve bu durumda saçılan atomlar alt taş yüzeyinde yüksek bir hareketlilik gösterecek ve istenilen homojenlik sağlanamayacaktır. Eğer gerektiğinden daha yüksek basınçlarda, sıçratma işlemi gerçekleştirilirse, bu seferde saçılan atomlar plazma ortamı sayesinde bir ısısal etkiyle karşılaşacaktır (Ohring 2002). Bu karşılaşılacak ısısal etki nedeniyle de alt taşın yüzeyine varan atomlar gerektiği kadar hareketli olmadıkları için homojen bir yüzey yaratılamayacaktır. Yüksek yada düşük argon atmosferinde yapılan sıçratma deneylerinde neredeyse he ikisinde de hmojen olmayan yüzeyler elde edilmiştir ve bu yüzeyler belirli bir strese ve bu stres ise gerilmelere yol açmaktadır. Bu nedenle basınç, filmlerin büyüme kinetiğinde önemli bir yere sahiptir.

- **Hedef – Alt taş arasındaki uzaklık:** Hedef alt taş uzaklığı, aynı sıçratma basıncında olduğu gibi ince filmlerin büyüme kinetiğinde çok önemli bir yere sahiptir. Hedef ile alt taş uzaklığı artırıldığında hedef atomlarının hareketliliğini azalmaktadır. Bunun tam tersi de doğrudur. Ayrıca bu hedef ile alt taş arasındaki mesafenin ile büyütülen ince filmin büyüme hızı ve tanecik boyutunu ile yakın bir ilişkisi vardır. Büyüme hızının yavaş olması tanecik boyutlarını küçültür, büyüme hızının olması gerekenden daha fazla olması ise, tanecik boyutlarını büyümesine neden olmaktadır (Ohring vd. 2002).
- **Sıçratma gücü:** Sıçratma işlemi sırasında, sıçratma gücü de sıçratma basıncına benzer bir rol oynamaktadır. Düşük güçler, yüzeyde bir çekme gerilimine neden olmaktadır (Vossen vd. 1991). Bu ise, yüzeyde parçacıkların ve yüzeyin hareketliliğinin artmasına neden olmaktadır. Büyüme hızı ile sıçratma gücü arasında doğrusal bir ilişki mevcuttur. Eğer sıçratma gücü çok artırırsa, büyüme işleminin sonucunda ince film yüzeyinde beklemeyen kusurlar oluşabilmektedir.
- **Alt taş sıcaklığı:** Filmlerin istenilen özelliklerde alt taş üzerinde büyüebilmesi için alt taş sıcaklığı çok önemlidir (Thompson vd. 2000). Alt taş üzerine gelen

atomlar onları birbirine bağlayacak enerjiye sahip olmazlarsa istenilen kompozisyon ve kristal yapı oluşmaz. Bu nedenle alt taş üzerine gelen atomlara gerekli enerji, alt taş ısıtılarak verilmektedir. Böylelikle istenilen kompozisyon ve kristal yapıda ince film üretmek mümkün olmaktadır.

### 3.2.3 Manyetik alanda sıçratma sistemi

Manyetik ince filmler, Bielefeld Üniversitesi, Nano Fizik bölümünde bulunan Manyetik alanda sıçratma sistemi yardımıyla üretilmiştir. Kullanılan manyetik alanda sıçratma sisteminin temel özellikleri, çizelge 3.2’de, sistemin görünümü ise, ayrıntılı bir şekilde şekil 3.3’te verilmiştir.

**Çizelge 3.2** Kullanılan manyetik alanda sıçratma sisteminin temel özellikleri

<b>Sistemin İsmi</b>	BesTec
<b>Temel Basınç</b>	$7 \times 10^{-10}$ mbar
<b>Çalışma Basınç</b>	$1.2 \times 10^{-3}$ mbar
<b>Magnetronlar</b>	5 x DC manyetik malzemeler için
	3 x Rf iletken olmayan malzemeler için
<b>Maskeleme</b>	1 adet
<b>Alttaşın Hedeflere Uzaklığı</b>	20 cm.
<b>Alt taşın ısıtılabilirdiği en büyük sıcaklık</b>	1000 °C
<b>Alttaşın en büyük dönme hızı</b>	30 rpm

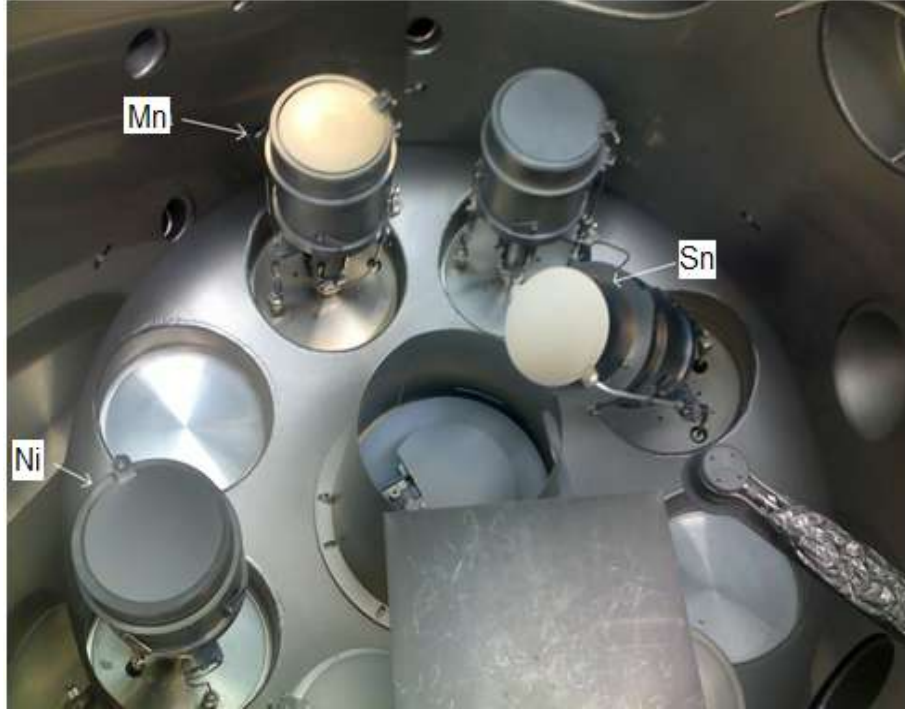
Manyetik alanda sıçratma sistemi 3 temel kısımdan meydana gelmektedir. Birincisi manyetik alanda sıçratma işleminin gerçekleştiği yer olan vakum odasının bulunduğu kısım, ikincisi kontrolcülerinin ve gücün sağladığı bölüm ve son olarak ise bu işlemlerinin tümünün kontrol edildiği bilgisayar bölümüdür. Bu bölümlerin içinde en büyük hacmi kaplayan bölüm ise vakum ve sıçratmanın meydana geldiği bölümdür.

Şekil 3.4’de Ni, Mn ve Sn hedeflerinin manyetik alanda sıçratma sistemindeki konumları görülmektedir. Şekil 3.5’de manyetik alanda sıçratma sisteminin içi

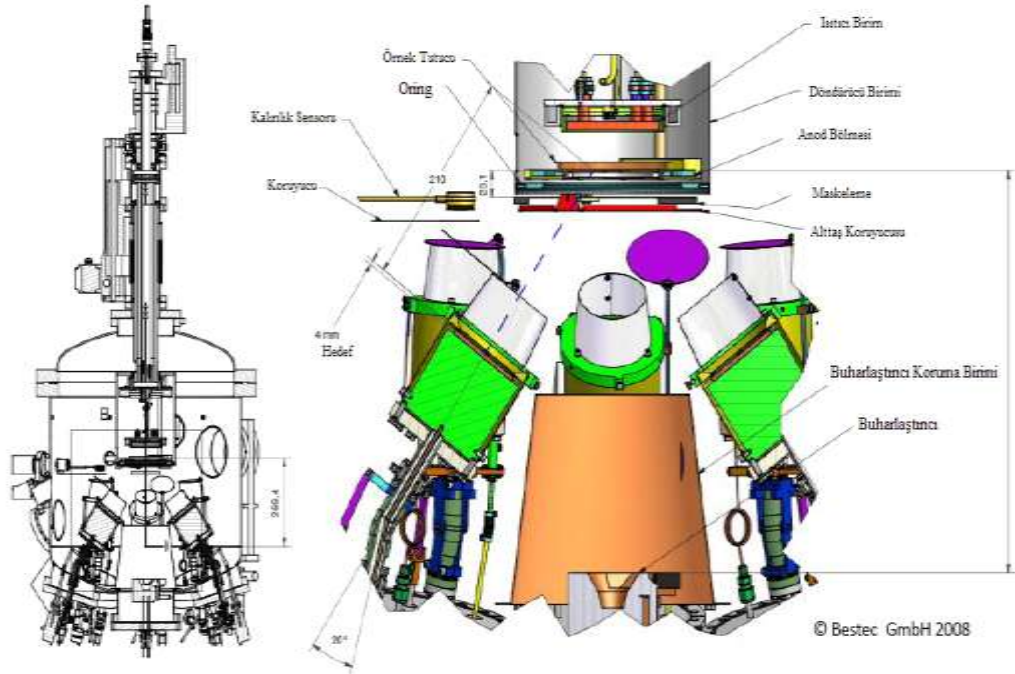
yapısının ayrıntılı çizimi verilmektedir. Burada kullanılan sisteminin en önemli özelliklerinden biri, hedefler ile alt taş arasındaki uzaklıktır. BESTEC sisteminde bu uzaklık 210 mm olarak belirlenmiştir. Bu uzaklığın büyük bir değer olması hedeflerin kolaylıkla istenilen konuma getirilmesi ve elde edilen örneğin istenilen fiziksel özelliklerde olmasını sağlamaktadır.



Şekil 3.3 Bielefeld Üniversitesi Nano Fizik bölümünde bulunan manyetik alanda sıçratma sistemi- (BESTEC) sisteminin görünümü



Şekil 3.4 Magnetron Sputtering sisteminde Ni, Mn ve Sn hedeflerinin görünümü



Şekil 3.5 Manyetik alanda sıçratma sisteminin şematik gösterimi

### 3.3 Manyetik İnce Filmlerin Yapısal Karakterizasyonu

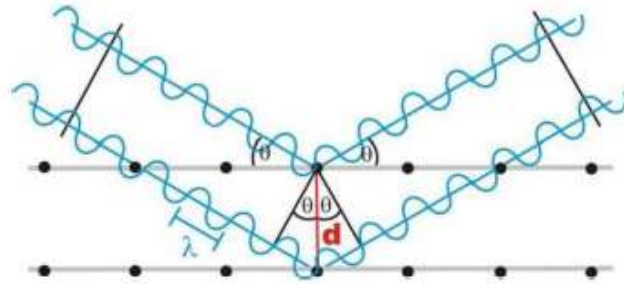
Manyetik alanda sıçratma sistemi yardımıyla elde edilen ince filmlerin, kristal yapıları, kimyasal kompozisyon ve yüzey pürüzlülükleri aşağıdaki yöntemlerle incelenmiştir.

#### 3.3.1 X-ışını kırınım metresi (XRD)

X-ışını kırınımı; kristal yapıların analizinde kullanılan bir yöntemdir. Bu yöntemle, bir malzemenin kristal yapısı incelenebilmektedir. İngiliz fizikçi W.H. Bragg tarafından 1913 yılında ortaya atılan teoreme göre, malzemeye gönderilen x-ışını, yapıdaki atomlara çarparak kırınıma uğramaktadır. Malzemeye gelen bir dalga, kristal düzlemlerinde bulunan atomlar tarafından saçılmaktadır (Şekil 3.6). Buna göre, paralel örgü düzlemlerinin arasındaki uzaklık  $d$ , gelen ve yansıyan ışının düzlemle yaptığı açı  $\theta$  ise, komşu iki düzlemden saçılan ışınlar arasındaki yol farkı  $2d \sin \theta$  olur. Yapıcı bir girişim olabilmesi için, bu ardışık iki düzlem arasından saçılan ışınların arasındaki yol farkının, dalga boyunun ( $\lambda$ ) tam katı olması gerekmektedir. Böylece Bragg Yasası:

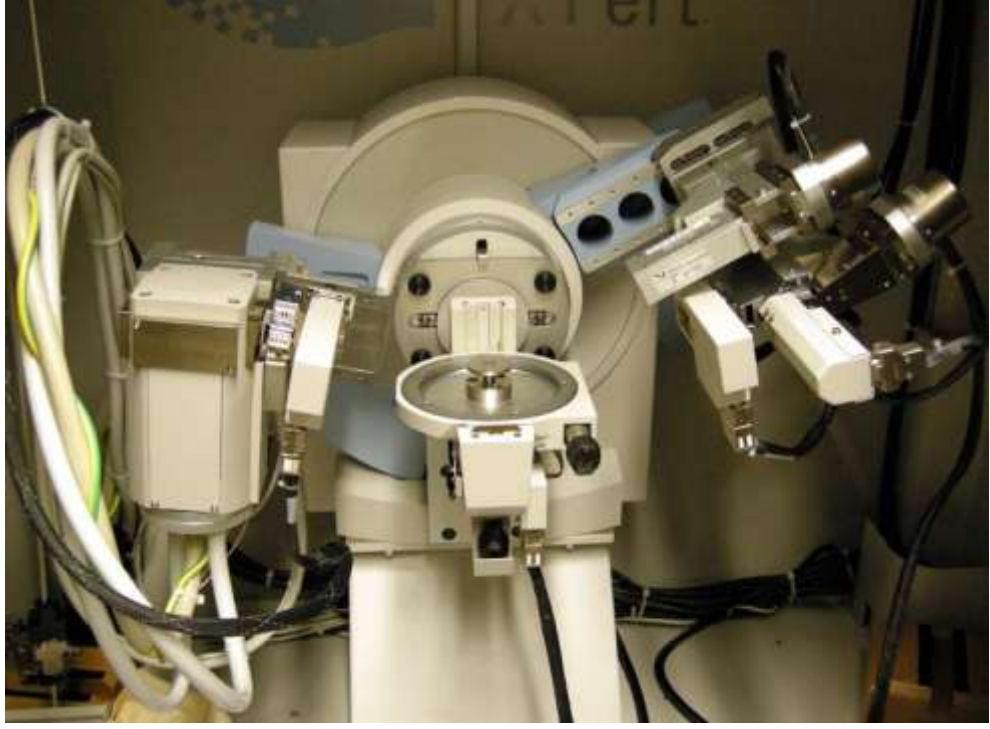
$$2d \sin \theta = n\lambda \quad (3.15)$$

şeklinde yazılmaktadır. Bragg yasasının geçerli olabilmesi için  $2d \geq \lambda$  koşulunun olması gerekir.



Şekil 3.6 Bragg Yasasının şematik gösterimi





Şekil 3.7 Bielefeld Üniversitesi, Nano Fizik bölümünde bulunan X-ışını kırınım metresi

Elde edilen manyetik ince filmlerin x-ışını kırınım çalışmalarında 60 kV'luk Cu  $K\alpha_{1,2}$  hedefli, Philips X-pert model x-ışını kırınım metresi kullanılmıştır, Hazırlanan manyetik ince filmlerin kırınım desenleri  $20^\circ < 2\theta < 70^\circ$  aralığında ve  $\Delta 2\theta=0.02^\circ$  derecelik adımlarla alınmıştır. Kullanılan x-ışını kırınım metresinin görünümü şekil 3.7'de verilmiştir.

### 3.3.2 X-ışını floresans spektrometresi (XRF)

XRF her cins malzemelerin kimyasal bileşimini belirleyen analitik bir yöntemdir. Bu spektrometre ile yapısal analiz mümkün değildir. XRF spektrometreleri ile yüzey haritalandırılması yapılabilmektedir. Bu teknik ile sodyum elementinden daha ağır elementlerinin kimyasal kompozisyonları belirlenebilmektedir. Gelen fotonun enerjisi etkileştiği elektronun bağlanma enerjisinden daha büyük ise, atomun elektronu serbest hale geçer ve bulunduğu konumu kaybeder. Yüksek bağlanma enerjisine sahip elektronlar, yüksek verimli ışınımaya sahiptirler. Bu alt tabakalara yerleşen elektronlar bir ışınım yayarlar. Bu ışınımaya da karakteristik radyasyon denilmektedir. Bu yayılan ışınım şiddeti, neredeyse kimyasal ortamından bağımsız olduğundan dolayı, katı malzemeler

kimyasal birleşimini bulmakta kullanılabilir. Bu tez çalışmasında örneklerin kompozisyon analizi, Bielefeld Üniversitesi, Nano Fizik bölümünde bulunan XRF sistemiyle yapılmıştır.



Şekil 3.8 Bielefeld Üniversitesi, Nano Fizik bölümünde bulunan x-ışını floresans spektrometresi.

### 3.3.3 X-ışını reflektometre sistemi (XRR)

X-ışını reflektometresi, fizik, kimya ve malzeme fiziği alanında sıkça kullanılan bir teknik olup, incelenen örneği yüzeyi hakkında bilgi vermektedir. Genellikle ince filmler ve çok katlı yapıların yüzeyleri bu teknikle incelenmektedir.

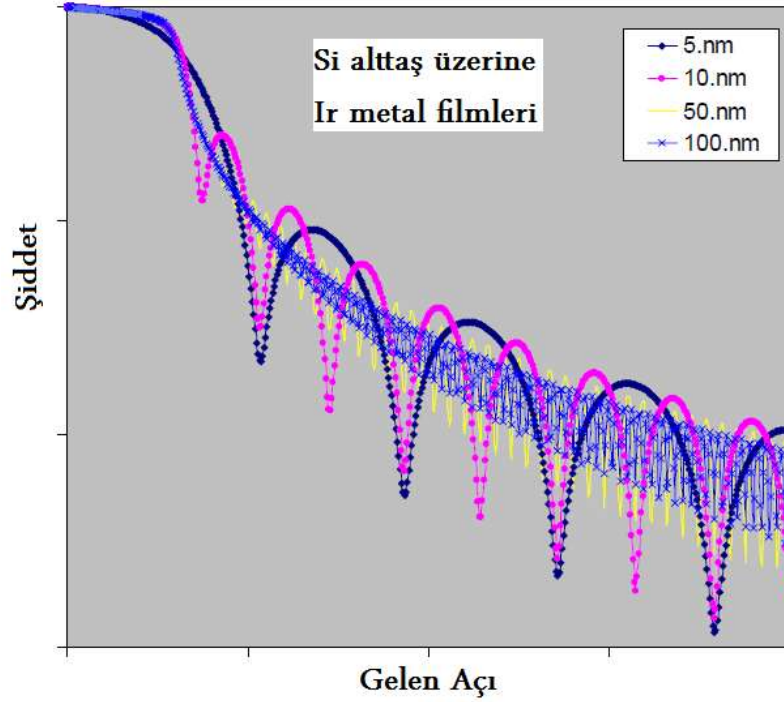
Bu yöntemin temeli, bir düz yüzeyden bir x-ışını demetinin yansıtılmasına dayanmaktadır. Daha sonra (yansıma açısının gelme açısına eşit olduğu yönde) bu yansıtılan x-ışınının şiddeti ölçülmektedir. Bu tip sistemlerde elde edilen tipik bir reflektometre eğrisi,  $\theta$ 'nın fonksiyonu olarak saçılan demetin şiddetini göstermektedir.

$$q_z = \frac{4\pi}{\lambda} \frac{1}{\Delta\theta} \quad (3.16)$$



Olduğunda, incelenen ince filmin kalınlığı bu eğriden kolaylıkla hesaplanabilmektedir. Burada  $q_z$ , katmanın kalınlığı,  $\lambda$ , gelen x-ışının dalga boyu,  $\theta$  ise gelen x ışını ile kırınıma uğrayan x-ışını arasındaki açıdır. İnce filmin kalınlığının belirlenmesinin yanı sıra bu teknik kullanılarak ince filmin yüzey pürüzlülüğü hakkında da bilgi edinilmektedir. Şekil 3.9'da örnek olarak, çeşitli kalınlıklardaki Si alttaş üzerinde elde edilmiş Ir metalinin reflektometri eğrisi görülmektedir. Şekil 3.9'dan görülebileceği gibi, Ir metalinin kalınlığı arttıkça, saçakların arasındaki açı değerlerin farkı azalmaktadır. Bu saçaklarının farkının azalması hacimsel alaşıma doğru gidildiğinin bir göstergesidir.

Bu tez çalışmasında elde edilen reflektometri desenleri, Bielefeld Üniversitesi NanoFizik bölümünde bulunan Philips marka E'xpert model (Şekil 3.7) X-ışını reflektometresi ile gerçekleştirilmiştir.



Şekil 3.9 Çeşitli kalınlıklardaki Ir metalinin reflektometri eğrisi(www.xrdrigaku.com)

### 3.3.4 Atomik ve manyetik kuvvet mikroskobu (AKM ve MKM) çalışmaları

Atomik Kuvvet Mikroskobu (AKM) 1980'lerde geliştirilmiştir. Atomik kuvvet mikroskobunun tarama kafasının içinde bulunan tarama ucu, örnek yüzeyindeki atomlarla etkileşerek, atomik kuvvetten yararlanarak yüzey tarama sonuçlarını vermektedir. Atomik kuvvet; kantileverin ucundaki atom ile yüzeydeki atom arasındaki kuvvet olarak tanımlanır. AKM'de görüntü alma işlemi kuvvete bağlı olduğu için hem iletkenlerde hem de yalıtkan yüzeylerde rahatlıkla kullanılabilir. AKM yüzey taraması; yüzey temas durumu, yarı yarı temas durum ve temassız durum olarak üç şekilde yapılabilir. Bu tezde ölçümler alınırken kontak mod kullanılmıştır.

Lazerin tarama ucundan geri yansıyan kısmı foto diyotta algılanır ve çeşitli yükselteçler yardımıyla sinyal dönüştürülerek taranan yüzeyin görüntüsü elde edilir. Tarama ucu eğilme miktarı bize atomik kuvvetin ne derece yüksek veya alçak olduğunu gösterir. AKM'de yüzey taraması yapılırken alınan ölçüm sonuçlarında koyu kısımlar yüzeydeki çukurları, açık renkli kısımlar ise tepe kısımlarını göstermektedir.

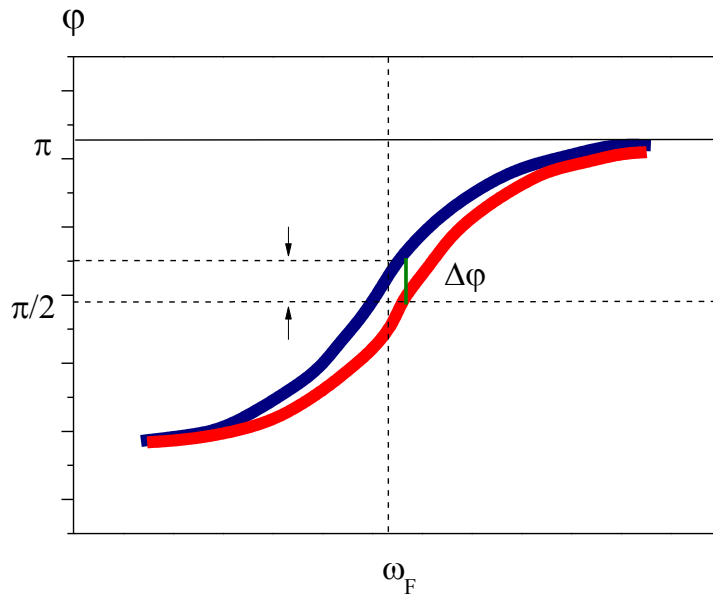
Manyetik Kuvvet Mikroskobu, Y. Martin ve arkadaşları tarafından manyetik malzemelerin fiziksel özelliklerini incelemek amacıyla 1987'de keşfedilmiştir (Martin vd. 1987). Genel çalışma prensibi ise, manyetik özellik gösteren uç ile örneğin manyetik alanı arasındaki kuvveti bulmak ve kaydetmektir. Manyetik Kuvvet Mikroskobunda ferromanyetik özellik gösteren malzemelerle kaplı uçlar kullanılmaktadır. Bu uçlarda kaplama olarak CoCr, FeNi, Co gibi malzemeler kullanılmaktadır. Manyetik uçlar yaklaşık olarak 150-250 kHz arasında rezonans frekanslı, 5,5 N/m yay sabitli ve kalite faktörü 300'dur.

Manyetik Kuvvet Mikroskobunda ikili geçiş tekniği kullanılmaktadır. İlk geçişte topografi ölçümü alınmakta, daha sonra uç topografi bilgisini izleyerek, yüzeyden yaklaşık 25 ile 100 nm yükseklikten geçmektedir. Böylece manyetik etkileşmelerin görüntüsünü almış olur. Ucun yüzeyden belirli yüksekliğe çıkarak ölçüm almasının sebebi; kısa mesafeli olan Van der Waals etkileşmelerini azaltmak ve bunun sonucunda

daha sağlıklı ölçüm almaktır. Böylece ikinci geçiş esnasında sadece manyetik etkileşmeler etkin olmaktadır.

Manyetik Kuvvet Mikroskobunda AC ve DC olmak üzere iki ölçüm kipi vardır. DC kipte ikinci geçiş esnasında tarama ucu salınım yapmadan ölçüm almaktadır. Bu durumda doğrudan tarama ucuna yansıtıcı yüzeyinden yansıyan lazerin sapması sonucunda ölçüm alınmaktadır. Böylece manyetik etkileşme kuvveti doğrudan hesaplanabilir.

AC kipte ikinci geçiş sırasında tarama ucu salınım yapmaktadır. Bu salınım frekansı manyetik etkileşmelerden dolayı değişmektedir. Bunun sonucunda doğal salınım frekansı ve etkileşme sonrası frekans arasında faz, genlik ve frekans farkı oluşmaktadır. Böylece manyetik görüntü elde edilmiş olur. Günümüz ikili geçiş sistemli kuvvet mikroskoplarında, en iyi görüntüler faz farkı ile alınan görüntülerdir. Genlik ve frekans farklılıklarından yola çıkılarak görüntü alınması pek elverişli olmamaktadır. Ölçüm sonucunda alınan görüntünün analizi yapıldığında faz farkı bulunur. Bu faz farkından da örneğin z doğrultusundaki manyetik kuvvet değişimi  $\Delta\varphi \approx (Q/k)(dF/dz)$  denkleminde hesaplanabilmektedir. Bu hesaplanan faz kayması Şekil 3.10'da verilmektedir.



Şekil 3.10 Z doğrultusunda manyetik kuvvet gradyentini veren faz değişiminin gösterimi

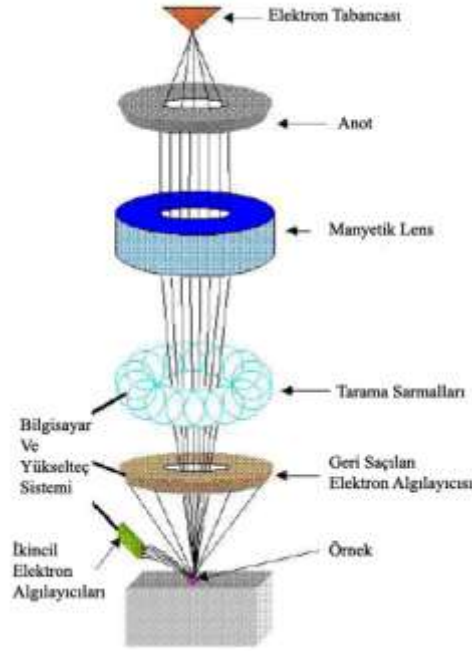
Manyetik Kuvvet Mikroskobu yardımı ile manyetik bölmeler hakkında bilgiler edinilmiştir. MKM ölçümlerinde NSG-Co kaplı silikon uç kullanılmış ve uç her ölçümden önce bir mıknatıs yardımı ile mıknatıslandırılmıştır. Elde edilen ölçümler tamamen mıknatıslanan NSG-Co uç ile malzemenin manyetik taneciklerini içermektedir. Yüzey ve uç ile olan etkileşmelerin ortadan kaldırılabilmesi için örnek ile uç arasındaki mesafe MKM ölçümlerinde 50 nm olarak alınmıştır. Bu değer bir dizi çalışma sonucunda en iyi görüntünün elde edildiği durum olarak belirlenmiştir.

Bu tezde yer alan örneklerin yüzeyi hakkında bilgi edinebilmek ve yüzeyin manyetik yapısını belirlemek için Ankara Üniversitesi Fizik Mühendisliği Bölümü Manyetik Malzemeler Araştırma Grubu Laboratuvarlarında bulunan NT-MDT Solver Pro Atomik ve Manyetik Kuvvet Mikroskobu kullanılmıştır. Ölçümler, 280 K ile 325 K sıcaklık aralığında 500 Oe'lık dış manyetik alan altında yapılmıştır.

### **3.3.5 Taramalı elektron mikroskobu ölçümleri**

Taramalı elektron mikroskobunda (SEM), görüntü oluşumu; elektron demetinin incelenen örneğin yüzeyi ile yaptığı fiziksel etkileşmelerin (esnek, esnek olmayan çarpışmalar ve diğerleri) sonucunda örnekten ortaya çıkan elektronların toplanması, işlenmesi ve incelenmesi prensibine dayanmaktadır. Taramalı elektron mikroskoplarında genel olarak gelen elektronların enerjisi 200-300 eV dan 50 keV a kadar değişebilmektedir.

Taramalı elektron mikroskobunun çalışma prensibi, atomdan elektronların saçılması üzerine kuruludur. Bu yöntem kısaca şu şekildedir (Şekil 3.11). Bir elektron tabancası tarafından üretilen elektronlar bir anod ile hızlandırılarak manyetik lensler tarafından birbirlerine paralel hale getirilmektedirler. Böylece ölçüm için kullanılacak olan elektron demeti hazırlanmış olmaktadır. Bu amaçla, yoğunlaştırıcı elektromanyetik mercekle toplanan, objektif mercekle de odaklanan elektron demeti, elektromanyetik saptırıcı bobinlerle örnek yüzeyinde tarama işlemini gerçekleştirmektedir.



**Şekil 3.11** Taramalı elektron mikroskobunun çalışma prensibi

Çarpışmalar sonucu ortaya çıkan elektronlar iki şekilde gruplanmaktadır. Bunlardan ilki, gelen elektron demetindeki elektronların, malzemedeki atomlarla yapmış olduğu esnek olmayan çarpışma sonucunda (yani, örnek yüzeyinde bulunan atomlardaki elektronlara enerjilerini transfer ederek) çıkan ikincil elektronlardır (SE).

Bu elektronlar örnek yüzeyinin yaklaşık 10 nm' lik bir derinliğinden ortaya çıkarlar ve bunların enerjileri en fazla 50 eV civarındadır. İkincil elektronlar fotoçoğaltıcı tüp yardımıyla toplanıp, örneğin tarama sinyali konumuyla ilişkilendirilerek yüzey görüntüsü elde edilmektedir.

Gelen elektron demetinin incelenen örnek yüzeyi ile yapmış olduğu diğer bir etkileşme ise (yaklaşık 1000 nm derinlik civarında), karakteristik x-ışınlarının çıktığı durumdur. Bu x-ışınlarının analizine de enerji dağılımlı x-ışını (EDX) denilmektedir. Buna göre örneğe çarpan elektron, örnekteki atomun iç yörüngesinden bir elektron kopmasına neden olunca, bir üst yörüngedeki elektron bu seviyeye geçer ve geçerken de ortama bir x-ışını yayar ve buna da karakteristik x-ışını adı verilir. Bu x-ışınları 10 mm çapındaki bir Si (Li) sayaçla algılanmaktadır. Ortaya çıkan sinyal yükselticiye, oradan çok kanallı

analizöre ve daha sonra da SEM sisteminin bilgisayarına gönderilir. Sonuçta ortaya çıkan karakteristik x-ışını incelenen malzemenin element bakımından içeriğinin nitel ve nicel olarak tespit edilmesine yardımcı olmaktadır.

Bu tez çalışmasında kullanılan SEM ölçümleri, Ankara Üniversitesi Fizik Mühendisliği bölümünde bulunan 30 keV'luk ZEISS EVO40 model şekil (3.12)'de gösterilen taramalı elektron mikroskobu ile gerçekleştirilmiştir.



Şekil 3.12 ZEISS EVO50 model taramalı elektron mikroskobu

### 3.4 Manyetik İnce Filmlerin Direnç Özelliklerinin Belirlenmesi:

Martensit faz geçişini görebilmek için 20-290 K sıcaklık aralığında, sıcaklığın azalması ve artması yönünde olmak üzere 4 nokta kontak yöntemiyle direnç ölçümleri yapılmıştır. Elektriksel kontaklar yapıldıktan sonra direnç ölçümü, Bielefeld Üniversitesindeki ev yapımı 20-360 K sıcaklık aralığında direnç ölçümü yapabilen bir sistemde yapılmıştır. Bu ölçüm sistemi Şekil 3.13'de görülmektedir.

Direnç ölçümü için, elde edilen manyetik ince filmin üzerine litografi yöntemi ile kontak yerleri açılmış ve kontaklar buraya yapılmıştır. Daha sonra örnek, direnç sisteminin örnek tutucusuna şekil 3.14’de görüldüğü gibi takılmıştır. Litografi ile manyetik ince film üzerine kontak yeri açmak için sırasıyla aşağıdaki işlemler yapılmıştır:

- Manyetik ince filmin yüzeyi Argon gazı ile temizlendi,
- Temiz odada, direnç özelliği kazandıran ARP 9583 sıvısı, manyetik ince filmin yüzeyine damlatıldı.
- Temiz odada, Ultra santrifüj cihazı ile yüzeyine sıvı damlatılmış manyetik ince film yaklaşık 3000 devirde 30 saniye döndürüldü.
- Temiz odada manyetik ince film 85 °C’de 20 dakika ısıtıldı.
- Temiz odada ışın kaynağı ile bir maskeyle pozlandı.
- Daha sonra bu film Ta ve Au ile kaplandı.
- Kaplama işleminden hemen sonra isopropanolün içinde manyetik ince film temizlendi ve manyetik ince filmin yüzeyi Şekil 3.14’de görüldüğü gibi olmuştur. Yani manyetik ince filmin yüzeyinde kontak yapmak için 4 bölge elde edilmiştir.
- Son aşamada ise manyetik ince film ile örnek tutucu arasındaki bağlantı çok ince altın teller kullanarak sağlanmıştır (Şekil 3.14).

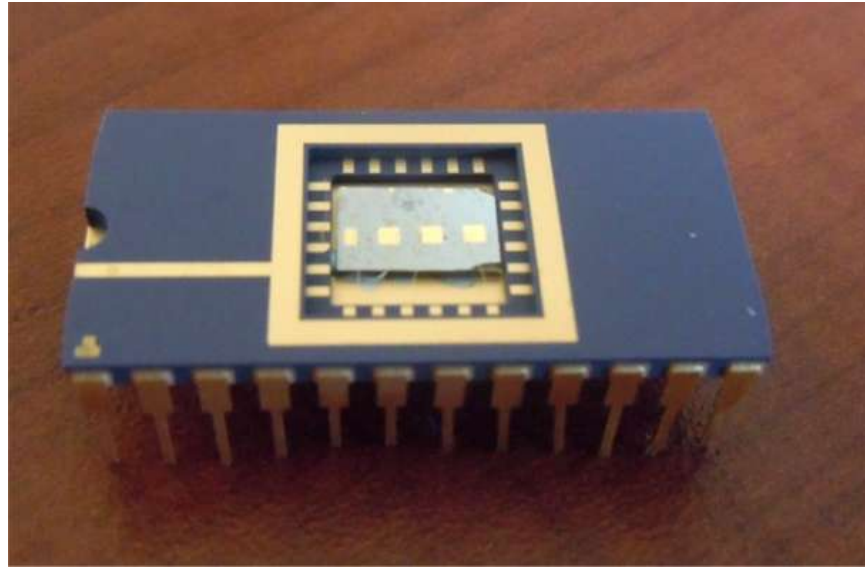
Bu yöntem ile hazırlanan manyetik ince filmlerle daha hassas ve daha az gürültülü ölçümler gerçekleştirilebilmiştir. İnce filmlerin manyetodirenç etkilerini ölçebilmek için 4 nokta Van der Pauw metodu kullanılmıştır. Üretilen manyetik ince filmlerin 1 T’lık dış manyetik alan altında öz direnç değerleri ölçülmüştür. Ölçülen bu öz dirençler yardımıyla, manyeto direnç değerleri sıcaklığa ve manyetik alana bağlı olarak hesaplanmıştır. Manyetodirenç değerleri hesaplanırken,

$$MR = \frac{\rho(H) - \rho(0)}{\rho(0)} \quad (3.17)$$

denkleminden yararlanılmıştır. Bu denklemde manyetodirenç değeri, manyetik alan altındaki ölçümlerden sıfır manyetik alan altındaki ölçümler çıkartılıp, sıfır manyetik alan altındaki ölçümlere bölünmesiyle elde edilmektedir.



Şekil 3.13 Bielefeld Üniversitesindeki direnç ölçüm sisteminin görünümü



Şekil 3.14 Direnç ölçümü için hazırlanmış olan manyetik ince filmin görünümü



### 3.5 Manyetik İnce Filmin Manyetik Özelliklerinin Belirlenmesi:

Sıcaklığa ve alana bağlı mıknatıslanma ölçümleri, Fiziksel Özellikler Ölçüm Sistemi (PPMS Physical Properties Measurement System-Quantum Design-ACMS-MPMS ve Cryogenic Design-VSM) kullanılarak yapılmıştır. Kullanılan ölçüm sistemi, 1T'lık alana kadar 5K–400K arasındaki sıcaklıklarda;  $\pm 0.5\%$  sıcaklık duyarlılığı ile ölçüm alabilmektedir. Manyetik faz geçişlerini duyarlı olarak belirleyebildiğimiz ACMS sistemin mıknatıslanma DC ölçüm duyarlılığı  $2.6 \times 10^{-8}$  emu ve VSM sistemin mıknatıslanma DC ölçüm duyarlılığı  $2.4 \times 10^{-7}$  emu'dur.

Sıcaklığa bağlı mıknatıslanma ölçümleri, 100 Oe zayıf alan altında sıfır alan soğutmalı (ZFC), alan soğutmalı (FC) ve alan ısıtılmalı (FH) olarak üç çevrimde gerçekleştirilmiştir. Sıcaklığa bağlı mıknatıslanma ölçümleri 0-1T manyetik alan aralığında farklı manyetik alanlar altında; yapısal-manyetik geçiş sıcaklığı yakınlarında yapılmıştır.

İyi bir mıknatıslanma ölçümü yapmak için; örnek fiziksel özellikler ölçüm sisteminde (PPMS) bulunan kangal içine yerleştirildikten sonra, manyetik alanın düzgün olduğu bölge içinde örneğin merkezlemesi yapılır. Sıvı helyum ile doldurulmuş PPMS tankında bulunan üstün iletken kangal içerisinde, örnek tutucuya yerleştirilen malzemeler sabit hızla kangal içine ve dışına doğru hareket etmektedir. Bu hareket sonucu örneğin manyetik momenti, algılama kangalında bir elektrik akımı oluşturur. Algılama kangalında oluşan bu elektrik akımı, örneğin manyetik momenti ile doğru orantılı olan PPMS çıkış geriliminde değişime neden olur. Tepe noktasındaki gerilim, herhangi bir manyetik alan ve sıcaklıkta mıknatıslanması iyi bilinen bir örnek için konum-gerilim eğrisi çıkarılarak bulunur. Eğrinin tepe noktasındaki gerilim, örneğin mıknatıslanmasına eşitlenerek, kalibrasyon katsayısı bulunmaktadır. Diğer örnekler için elde edilen tepe noktaları ile bu kalibrasyon katsayısı çarpılarak örneğin mıknatıslanması elde edilmektedir.

Martensit faz geiřini grebilmek iin 20-290 K sıcaklık aralıęında, sıcaklıęın azalması ve artması ynnde, farklı manyetik alanlar altında manyetik lmler gerekleřtirilmiřtir. Manyetik lmlerin bir kısmı, Hacettepe niversitesindeki Quantum Design markalı PPMS ve Helmholtz-Zentrum Dresden Rossendorf Arařtırma Merkezinde SQUID sisteminde (řekil 3.15) dięer bir kısmı ise, Bilkent niversitesindeki Cryogenic markalı PPMS sistemi (řekil 3.16) ile gerekleřtirilmiřtir.



řekil 3.15 Fiziksel zellikler lm Sistemi (PPMS-Physical Properties Measurement System)



Şekil 3.16 Fiziksel Özellikler Ölçüm Sistemi- VSM Özellikli (PPMS-Physical Properties Measurement System)

## 4. BULGULAR

Tezin, bulgular bölümü teorik ve deneysel sonuçlar olarak iki ayrı başlık altında toplanmıştır.

### 4.1 Teorik Bulgular

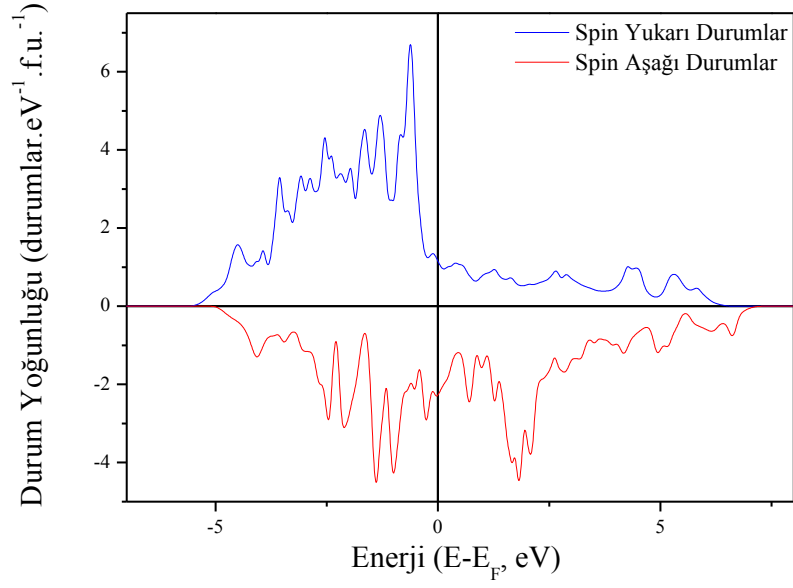
#### 4.1.1 Stokiyometrik $Ni_{50}Mn_{25}Sn_{25}$ sistemi ile ilgili yapılan hesaplamalar

Tez çalışmasında,  $Ni_{50}Mn_{25}Sn_{25}$  stoikiyometrik sistemi için elektronik bant hesapları yapılmış, elektron yoğunlukları ve manyetik moment değerleri hesaplanmıştır. Bu hesaplamalar sırasında stoikiyometrik  $Ni_{50}Mn_{25}Sn_{25}$  alaşımı için kristal yapısı olarak kübik, uzay grubu olarak  $Fm\bar{3}m$  (uzay grubu no=225) ve örgü parametresi olarak  $a=6.042 \text{ \AA}$  alınmıştır. Bu Heusler alaşımlarındaki Ni, Mn ve Sn atomlarının koordinatları için Çizelge 4.1’de verilen değerler alınmıştır [Krenke vd. 2006].

Çizelge 4.1 Stokiyometrik  $Ni_{50}Mn_{25}Sn_{25}$  alaşımının atom koordinatları

	Konum	X	Y	Z
Ni	8c	0.25	0.25	0.25
Mn	4b	0.5	0.5	0.5
Sn	4a	0	0	0

Şekil 4.1’deki grafikten görüldüğü gibi, alaşımın toplam durum yoğunluğu için yaklaşık spin kutuplanma değeri % 35 olarak hesaplanmıştır. Şekil 4.1’de ise spin yukarı ve spin aşağı durumlarının oluşturduğu herhangi bir boşluğa (gap) rastlanmamıştır. Program yardımıyla bu sistemin taşıdığı manyetik momentlerin büyüklüğü de hesaplanmıştır. Bulunan değerler Çizelge 4.2’de literatür ile kıyaslamalı olarak verilmiştir.  $Ni_{50}Mn_{25}Sn_{25}$  alaşımı için yapılan manyetik moment hesapları sonunda  $4.02 \mu_B/f.u.$  değerinde bir manyetik moment hesaplanmıştır. Elde edilen bu manyetik moment değerinin, literatürde bulunan  $4.05 \mu_B/f.u.$  değer ile oldukça uyumlu olduğu bulunmuştur.



Şekil 4.1 Stokiyometrik  $\text{Ni}_{50}\text{Mn}_{25}\text{Sn}_{25}$  alaşımının durum yoğunluğuna tüm yörüngelerden gelen katkıyı gösteren grafik

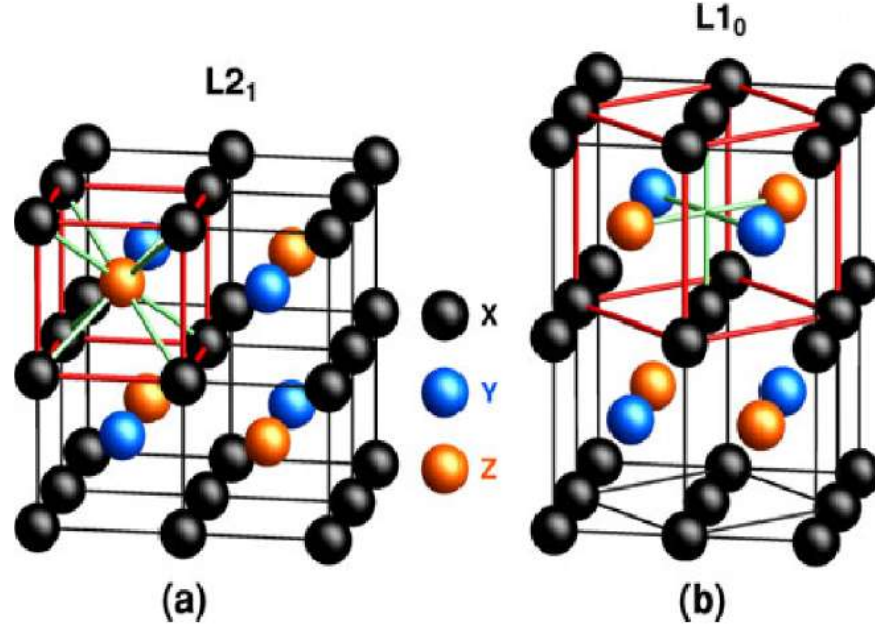
Çizelge 4.2. Stokiyometrik  $\text{Ni}_{50}\text{Mn}_{25}\text{Sn}_{25}$  alaşımının manyetik moment büyüklükleri

	Literatür ( $\mu_B/\text{f.u.}$ )	Buradaki Hesaplar, Quantum Espresso ( $\mu_B/\text{f.u.}$ )
$\text{Ni}_{50}\text{Mn}_{25}\text{Sn}_{25}$	4.05 (Thorsten Ph.D Thesis, 2007)	4.02

#### 4.1.2 $\text{Ni}_{50}\text{Mn}_{35}\text{Sn}_{15}$ Heusler sistemi için enerjinin c/a bağımlılığı

Çalışmanın bu bölümünde, toplam enerjinin birim hücre parametrelerine göre değişimine bakılarak  $\text{Ni}_{50}\text{Mn}_{35}\text{Sn}_{15}$  Heusler alaşımının olası temel enerji düzeyleri belirlenmeye çalışılmıştır. Kübik  $L2_1$  yapısında kristalleşen  $X_2YZ$  sisteminin temel düzeyleri belirleyebilmek için, tetragonal bozukluk (Tetragonal Distortion) uygulanmıştır. Bu işlem Şekil 4.2a ve b'de gösterilmiştir. Bu tetragonal bozukluğun uygulanabilmesi için  $L2_1$  yapısı en büyük  $c/a=1.6$  ve en küçük  $c/a=0.82$  değerlerine kadar a ve c eksenlerinde kaydırılmıştır. Bu seçilen aralıkta değişen c/a değerleri için

enerji deęerleri hesaplanmıřtır. Bu hesaplanan enerji deęerleri řekil 4.3'te ayrıntılı olarak verilmiřtir.

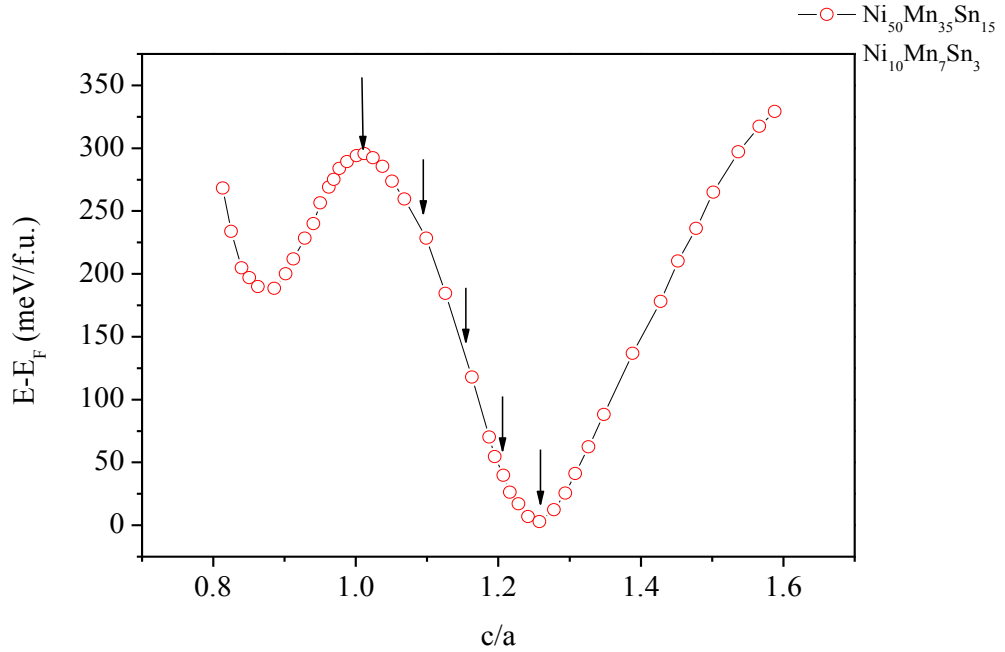


řekil 4.2 a) Kbik L<sub>21</sub> Heusler yapısı ve b) L<sub>10</sub> tetragonal yapısı.

NiMnSn tabanlı sistemlerde X: Ni, Y: Mn ve Z:Sn olarak verilmektedir

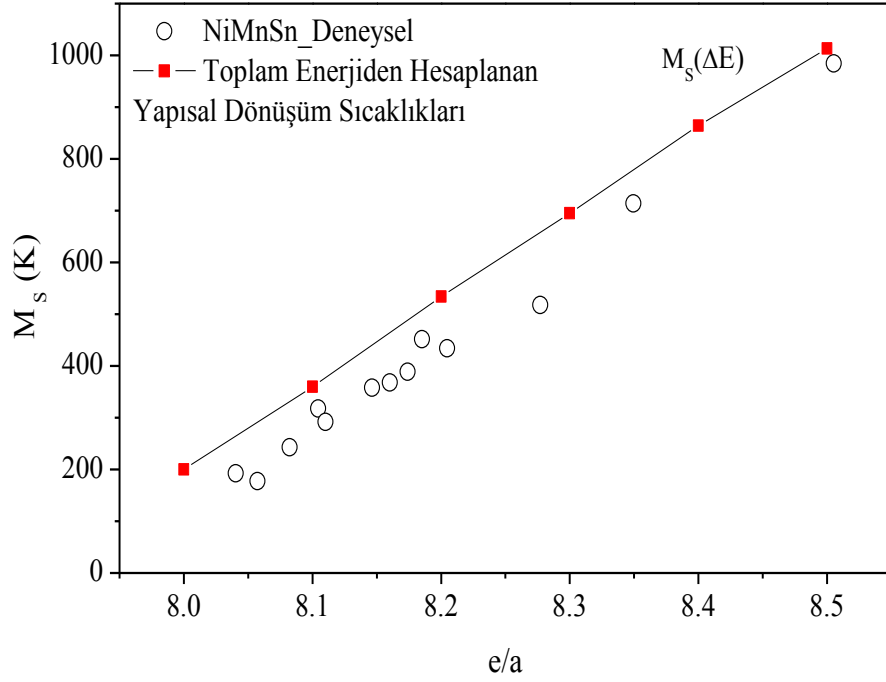
řekil 4.3 ayrıntılı olarak incelendięinde, NiMnSn sisteminin birbirinden farklı  $c/a$  deęerlerinde, iki tane en kk enerji deęerine sahip olduęu bulunmuřtur. Enerjinin en kk olduęu bu deęerler,  $c/a=1.24$  ve  $c/a=0.88$  iin gzlemlenmektedir. Hesaplanan (enerji- $c/a$ ) grafięi 0 K'deki bulguları vermektedir. Buradan, sistemin dřk sıcaklıklarda  $c/a$  deęeri 1,26 olduęunda tetragonal olarak kristalleřebildięini gstermektedir. S. R. Barman ve arkadařlarının yaptıkları alıřmayla Ni<sub>2</sub>MnGa sistemi iin elektronik band hesapları gerekleřtirmiřlerdir. Onların hesaplarına gre Ni<sub>2</sub>MnGa sisteminde, bu tez alıřmasında incelenen Ni<sub>50</sub>Mn<sub>35</sub>Sn<sub>15</sub> sistemdeki gibi iki adet en dřk enerji deęeri elde etmiřlerdir. Ayrıca aynı alıřmada  $c/a=1.26$  deęerine karřılık gelen enerji deęeri ile  $c/a=1$  olduęu deęerdeki enerji deęerlerinin, birbirinden ıkartarak bulunan enerjiler ile yapısal dnřm sıcaklıęı bulmaya alıřmıřlardır.  $c/a=1.40$  olduęu deęerde, hesaplanan yapısal dnřm sıcaklıęı=920 K'dir deneysel olarak bulunan deęer ise yaklařık 950 K'dir. Grldęu gibi bulunan deęerler birbirine olduka

yakındır.  $\text{Ni}_{50}\text{Mn}_{35}\text{Sn}_{15}$  sisteminde ise bu yapısal dönüşüm sıcaklığı farklı  $c/a$  değerleri için hesaplanmıştır. Bu hesaplanan farklı  $c/a$  değerleri oklarla Şekil 4.3'te verilmiştir.



Şekil 4.3  $\text{Ni}_{50}\text{Mn}_{35}\text{Sn}_{15}$  kompozisyonunda  $c/a$ 'nın toplam enerji ile değişimi grafiği

Barman ve arkadaşlarının önerdikleri yöntem ile  $\text{NiMnSn}$  sisteminde aynı hesaplamalar yapılmıştır (Barman vd. 2012). Bu yapılan hesaplamalar ve deneysel bulgular karşılaştırılmalı olarak Şekil 4.4 'te ayrıntılı olarak verilmiştir. Şekil 4.4 ayrıntılı olarak incelendiğinde, yapısal dönüşüm sıcaklığının azalan  $c/a$  farkıyla yani değerlik elektron sayısıyla azaldığı bulunmuştur. Bulunan yapısal dönüşüm sıcaklıkları literatürden elde edilen verilerle uyumludur.



Şekil 4.4 NiMnSn sisteminin farklı e/a değerleri deneysel ve teorik yapısal dönüşüm sıcaklıkları

#### 4.1.3 Ni<sub>50</sub>Mn<sub>35</sub>Sn<sub>15</sub> Heusler sistemi için spin sarmalı çalışması

Manyetik şekil hafıza etkisi, manyeto-kalorik etki ve manyeto-direnç etkisi içerisinde çok ilginç yeri olan Ni<sub>2</sub>MnSn Heusler alaşımı, doğrusal olmayan manyetik düzenlenmeye sahiptir. Bu bölümde, Ni<sub>2</sub>MnSn Heusler alaşımı için farklı spin sarmallarının toplam enerjileri hesaplanmış ve taban durum manyetik yapıları tanımlanmıştır. Spin sarmallarının dağılım eğrilerinden, Curie sıcaklığı tespit edilmiş ve literatürdeki değerlerle karşılaştırılmıştır. Ayrıca, değişen spin sarmalının fonksiyonu olarak Ni ve Mn atomlarının manyetik momentleri tespit edilmiştir.

Ni<sub>2</sub>MnSn Heusler alaşımı, yüksek sıcaklıkta L<sub>21</sub> kübik ve düşük sıcaklıkta ise L<sub>10</sub> tetragonal yapıdadır (Şekil 4.2a ve Şekil 4.2b). Manyetik düzenlenimi ise, ferromanyetiktir. Ferromanyetik özelliğinin en büyük nedeni ise, Mn atomlarının taşıdığı yüksek momentlerdir. Stokiyometrik Ni<sub>50</sub>Mn<sub>35</sub>Sn<sub>15</sub> alaşımında, Curie sıcaklığı 310 K olarak bulunmuştur (Thorsten vd. 2007).



Yerleşmiş spin yoğunluk yaklaşımı ile doğrusal olmayan manyetik düzenlenmeler bulunabileceği gibi, Sandradski'in çalışmasındaki gibi inceltmiş küre yaklaşımını (Muffin-Tin) temel alan tüm potansiyel artırılmış düzlem dalgalar ile de sonuçlara ulaşılabilmektedir. Sonlu sıcaklıklar için doğrusal olmayan manyetik özellikler üzerine uygulanabilmektedir. Düşük sıcaklıklarda dominant manyetik etki magnonların yarattığı doğrusal özellik taşımayan spin dalgalarıdır. Herhangi bir sistemin spin dalgalarını özelliklerini (enerji özdeğerlerini ve özvektörlerin) verilen momentum uzayında ya da gerçek uzayda belirlemek, Curie sıcaklığının tahmininde kullanılmaktadır. Klasik Heisenberg modelinde, yerleşmiş spinler için spin sisteminin Hamiltoniyeni,

$$H = - \sum_{i,j} e_i e_j J_{i,j} \quad (4.1)$$

ile verilmektedir. Buradaki  $J_{i,j}$  Heisenberg çiftlenim değiş tokuş integralidir.  $e_i$  ve  $e_j$  ise, sırasıyla  $i$  ve  $j$  konumlarında yerleşmiş manyetik momentleri temsil etmektedir. Değiş tokuş integrali ( $J_{ij}$ ) hesaplanarak Curie sıcaklıkları ortalama alan yaklaşımı yardımıyla bulunabilmektedir. Ortalama alan yaklaşımında, tek bir örgü için Curie sıcaklığı,

$$\frac{3}{2} k_B T_C^{Ort.Alan.Yak} = J_0 = \sum_{i,j} J_{0,j} \quad (4.2)$$

ile verilmektedir. Eğer sistem Heusler alaşımlarında olduğu gibi bir çok alt örgüden oluşuyorsa, bu zaman eşitlik

$$\frac{3}{2} k_B T_C^{Ort.Alan.Yak} = J_0 = e(v,r) \sum_{i,j} J_{0,j} \quad (4.3)$$

halini almaktadır. Buradaki  $e^v$ ,  $z$  yönünde ve  $(v,r)$  koordinatlarında bulunan manyetik momentlerin ortalama değerine karşılık gelmektedir.

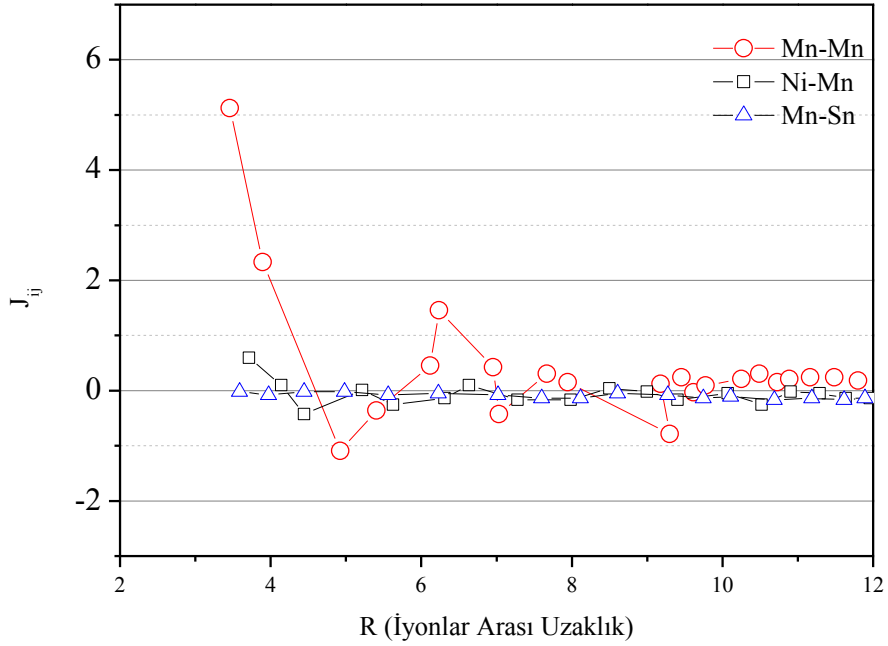
Bu yöntem ile bulunan bazı malzemelerin deneysel ve teorik sonuçları çizelge 4.3'de verilmektedir. Bu sonuçlara göre, deneysel bulguların teorik yoldan bulunan sonuçlardan daha küçük çıktığı açıkça gözlemlenmektedir. Hesaplanan Mn-Mn atomları

arasındaki deęiş-tokuş integralinin Mn-Mn atomları arasındaki uzaklığa baęlılığı Őekil 4.5'te ayrıntılı olarak verilmektedir.

Çizelge 4.3 Literatürden seçilen bazı Heusler alaşımlarının deneysel ve teorik Curie sıcaklıkları

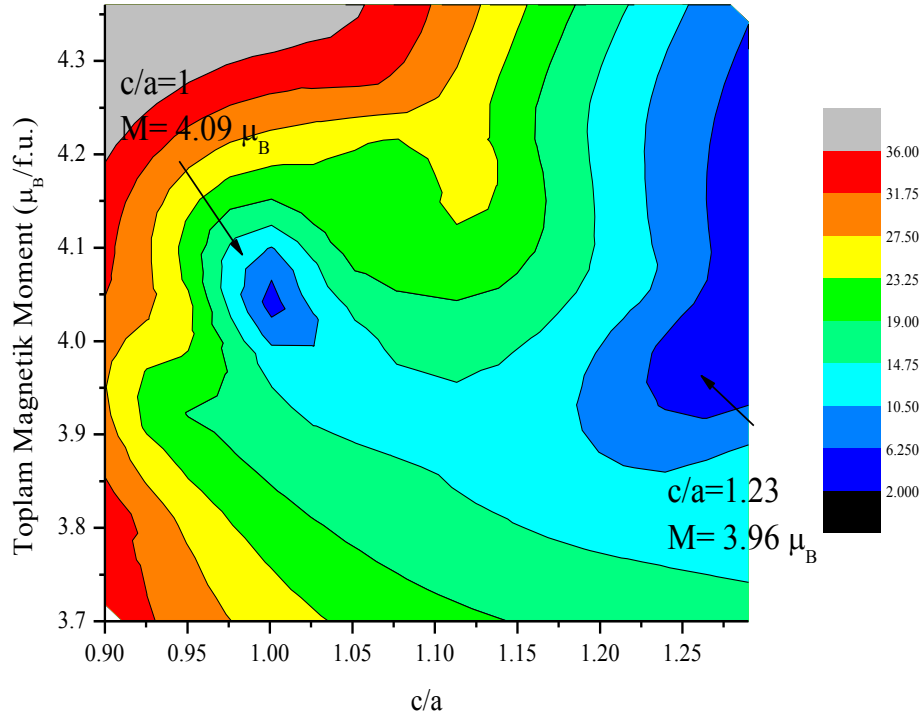
	Ortalama Alan Yaklaşımı (K)	Deneysel (K)
<b>Co<sub>2</sub>FeSi</b>	1123	850
<b>Co<sub>2</sub>TiSn</b>	383	355
<b>Co<sub>2</sub>MnSi</b>	1049	985
<b>Co<sub>2</sub>VGe</b>	550	420

Bu tez çalışmasında koherent potansiyel yaklaşımı yardımıyla, Ni<sub>50</sub>Mn<sub>35</sub>Sn<sub>15</sub> sisteminin Curie sıcaklığı tahmin edilmeye çalışılmış ve literatürdeki deęerle kıyaslanmıştır. Bu Ni<sub>50</sub>Mn<sub>35</sub>Sn<sub>15</sub> sisteminde ortalama alan yaklaşımı ile hesaplanan Curie sıcaklığı 365 K'dir. Literatürdeki çalışma da ise bulunan Curie sıcaklığı 310 K'dir (Krenke vd. 2007). Bu çalışma da hesaplanan Curie sıcaklığı deęeri ile deneysel olarak bulunan Curie sıcaklık mertebesi olarak aynı deęerdedir.



Şekil 4.5 Ni<sub>50</sub>Mn<sub>35</sub>Sn<sub>15</sub> kompozisyonu için hesaplanan Mn-Mn, Mn-Ni ve Mn-Sn atomları arasındaki uzaklığa baęlı Heisenberg çiftlenim deęiş tokuş integrali

Sabit manyetik moment yaklaşımında, belirli bir manyetik moment değeri seçilip bu manyetik moment değeri için enerji değeri bulunmaktadır. Daha sonra bu enerji değerleri  $c/a$  göre çizildiğinde bulunan kontur ile manyetik momentlerin değişen  $c/a$  değeri ile nasıl değiştiği bulunabilmektedir. Daha sonra sabit manyetik moment yaklaşımı ile olası uygun enerji değerleri  $c/a$  değişimine göre hesaplanmıştır. Bu hesaplanan manyetik moment değeri, şekil 4.6'da ayrıntılı olarak verilmiştir. Daha önceden bildiğimiz gibi, düşük sıcaklıklarda sistemimiz tetragonal ( $c/a \neq 1$ ) yüksek sıcaklıklarda ise kübik ( $c/a = 1$ ) kübik yapıda kristallenmektedir. Şekil 6'ya göre düşük ve yüksek sıcaklıklarda hesaplanan manyetik momentler birbirinden farklıdır. Literatürdeki deneysel çalışmalarda bulunan düşük sıcaklık fazı için bulunan manyetik moment değerinin yüksek sıcaklık fazı için bulunan manyetik moment değerinden küçük olduğunu teorik olarak göstermektedir.



Şekil 4.6 NiMnSn sisteminde değişen  $c/a$  değerine bağlı manyetik moment değerlerinin enerji uyumluluğu

## 4.2 Deneysel Bulgular

### 4.2.1 Ni<sub>50</sub>Mn<sub>35</sub>Sn<sub>15</sub> kompozisyonunda manyetik ince filmlerin üretilmesi

Gerçekleştirilen bu tez çalışmasında ayrı ayrı Ni, Mn, Sn elementlerinin hedefleri kullanılarak çeşitli ince filmler üretilmiştir. Farklı kompozisyonda manyetik ince filmleri üretmek için Ni, Mn, Sn hedeflerine farklı gerilim, akım ve güçler uygulanmıştır. Bu kompozisyon değerlerine ulaşabilmek için, BesTec (Manyetik alanda sıçratma sistemi) adlı sistem ile birlikte her bir element için daha önceden hesaplanan test verilerinden gidilerek gerilim, akım ve güç değerleri hesaplanmıştır.

İlk olarak istenilen kompozisyonda ve homojenlikte ince filmleri elde etmek için:

- Ni, Mn ve Sn hedeflerine uygulanan gerilim, akım ve güç değerleri,
- Alttaş sıcaklığı,
- Alttaşın dönme hızı,
- Sıçratma süresi,

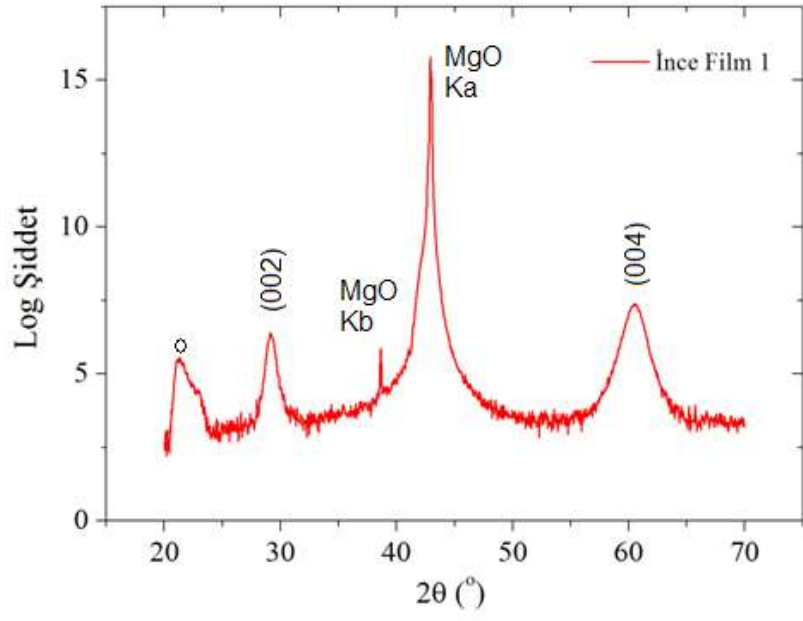
gibi parametrelerin en uygun değerleri belirlenmeye çalışılmıştır. Teorik olarak Ni, Mn ve Sn hedeflerine uygulanan gerilim, güç, sıçratma süreleri hesaplanmıştır. Bu hesaplanan değerler kullanılarak, alttaşın dönmediği durumda alttaş sıcaklığı değiştirilerek manyetik ince filmler üretilmiştir. Üretilen bu manyetik ince filmlerin üretim parametreleri Çizelge 4.4'te görülmektedir. Üretilen her bir manyetik ince filmin üzerine dış etkenler nedeni ile aşınmasını ve bozunmasını, ayrıca kristal yapının bozulmasını önlemek için koruyucu tabaka olarak 2 nm kalınlığında MgO kaplanmıştır.

Üretilen bu manyetik ince filmlerin yapısal karakterizasyonları x-ışını kırınımı deneyleri ile yapılmıştır. Şekil 4.7-4.10'da bu manyetik ince filmlerin x-ışını kırınım desenleri görülmektedir. Şekil 4.7-4.10'da görüldüğü gibi, kırınım desenindeki 2 $\theta$  değerleri 29.6° ve 61.3° civarındaki pikler kübik Heusler fazından gelmektedir. Ayrıca 43,0° derece civarındaki pik MgO alttaştan gelmektedir. Heusler fazından gelen pikler sıcaklık

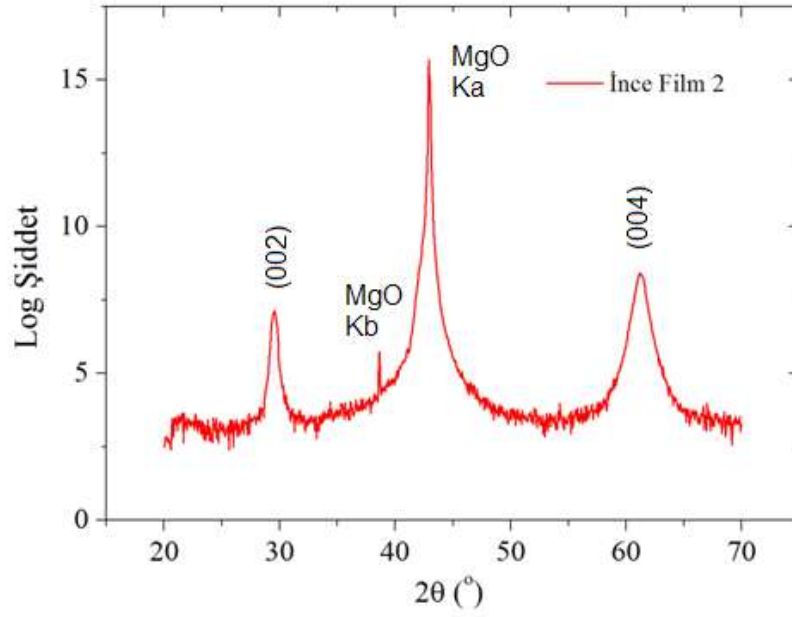
arttıkça daha keskin olmaktadır. 22° civarındaki pikler ise sistemden kaynaklanmaktadır.

Çizelge 4.4 Ni<sub>50</sub>Mn<sub>35</sub>Sn<sub>15</sub> manyetik ince filmini elde etme için kullanılan parametreler

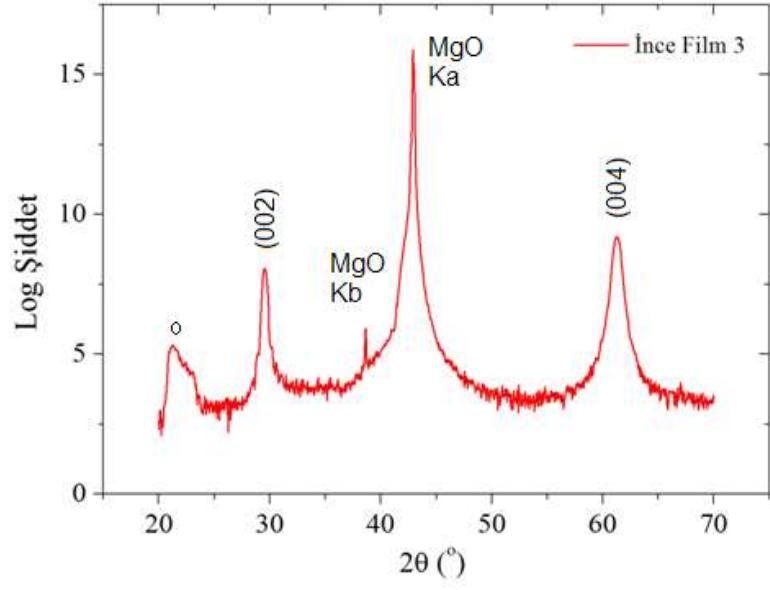
<b>Örnek İsmi</b>	<b>İnce Film 1</b>	<b>İnce Film 2</b>	<b>İnce Film 3</b>	<b>İnce Film 4</b>
<b>Hedef 1</b>	Ni	Ni	Ni	Ni
<b>Hedef 1 için Güç (Watt)</b>	233	233	233	233
<b>Hedef 1 için Gerilim (V)</b>	480	478	475	475
<b>Hedef 2</b>	Mn	Mn	Mn	Mn
<b>Hedef 2 için Güç (Watt)</b>	149	149	149	149
<b>Hedef 2 için Gerilim (V)</b>	377	377	377	377
<b>Hedef 3</b>	Sn	Sn	Sn	Sn
<b>Hedef 3 için Güç (Watt)</b>	42	42	42	42
<b>Hedef 3 için Gerilim (V)</b>	344	344	345	345
<b>Sıçratma Süresi (s)</b>	62	62	62	62
<b>Alttaş Sıcaklık (°C)</b>	400	500	600	700
<b>Alttaşın Dönme Hızı (m/s)</b>	0	0	0	0
<b>Alttaş</b>	MgO	MgO	MgO	MgO
<b>İnce Film Kalınlığı (nm)</b>	20	20	20	20
<b>2 nm MgO Koruyucu Tabaka</b>	Var	Var	Var	Var



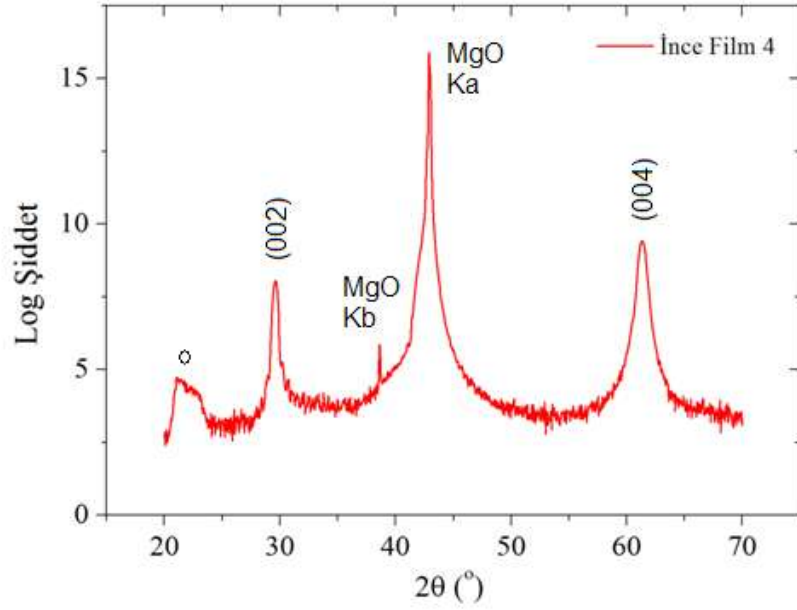
Şekil 4.7 Üretilen manyetik ince film-İnce Film 1'in x-ışını kırınım deseni



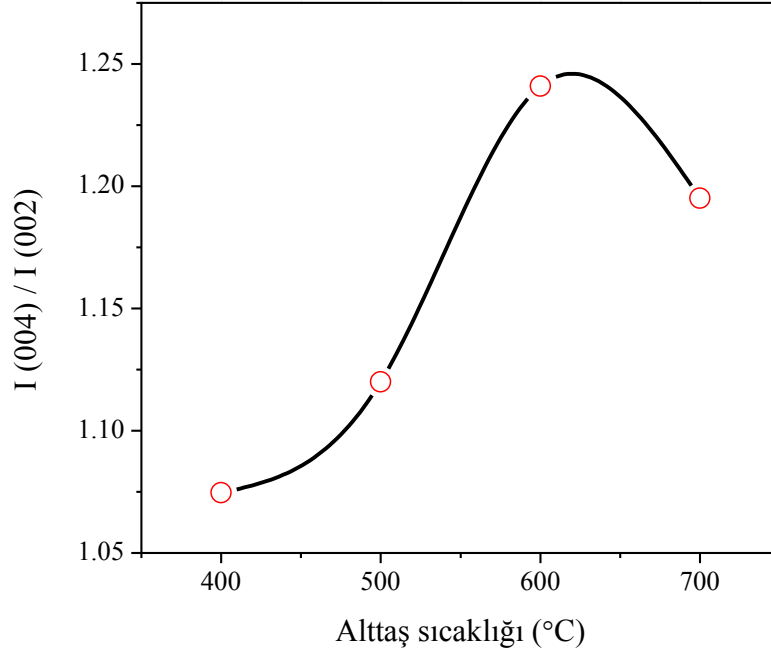
Şekil 4.8 Üretilen manyetik ince film-İnce Film 2'nin x-ışını kırınım deseni



Şekil 4.9 Üretilen manyetik ince film-İnce Film 3'ün x-ışını kırınım deseni



Şekil 4.10 Üretilen manyetik ince film-İnce Film 4'ün x-ışını kırınım deseni

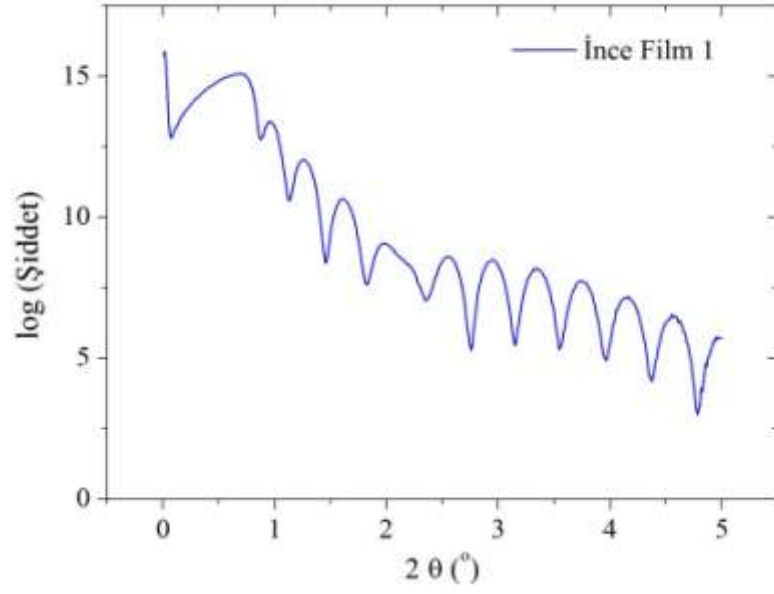


Şekil 4.11 Farklı alt taşlar sıcaklıklarında üretilen manyetik ince filmlerin, bu sıcaklıklara bağlı I(004)/I(002) yansımalarının oranı

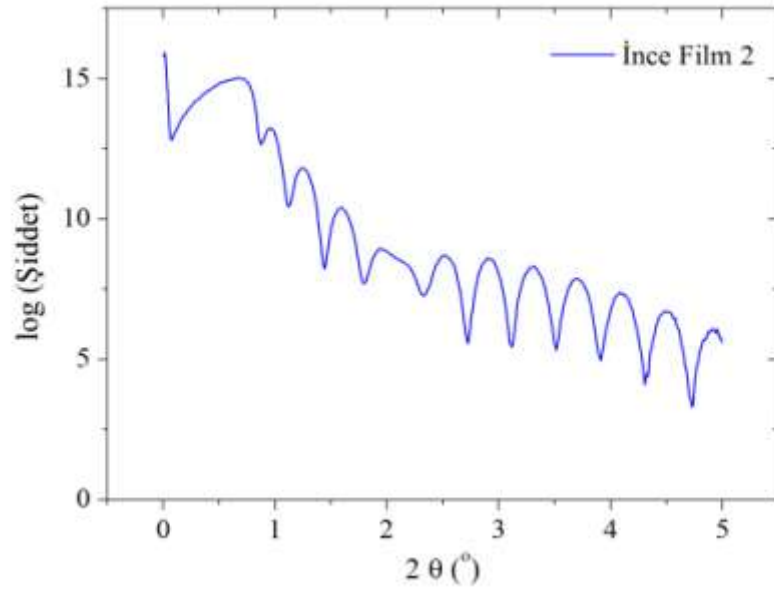
Manyetik ince filmlerin kristallenme oranlarını daha iyi görebilmek için kristalin (002) ve (004) düzlemlerinden gelen yansımaları kıyaslanmıştır (J. Musil vd. 1998) ve bu kıyaslanma, farklı alt taş sıcaklarında üretilmiş manyetik ince filmler için Şekil 4.11’de verilmiştir. Şekil 4.11’den de açıkça gözlemlendiği gibi alt taş sıcaklığı arttıkça manyetik ince filmler kristallenmeleri artmıştır. Ancak 600<sup>0</sup>C’den daha yüksek alttaş sıcaklıkları için için kristallenme oranı azalmaktadır. Buradan anlaşılmaktadır ki, bu sıcaklıktan sonra elde edilecek manyetik ince filmler daha düşük kristallenme boyutlarına sahip olacak ve bu 600<sup>0</sup>C sıcaklığından daha yüksek sıcaklıklarda elde edilen manyetik ince filmler, istenmeyen kristal özelliklere sahip olacaktır.

Farklı alttaş sıcaklıklarında üretilen manyetik ince filmlerin reflektometri desenleri şekil 4.12-4.15’te görülmektedir. Bu desenlerin yardımıyla manyetik ince filmlerin kalınlığının bulunmuştur. Elde edilen manyetik ince film kalınlığının ortalama 20 nm civarında olduğu belirlenmiştir. Bu hesaplanan kalınlık değeri, manyetik ince filmlerin kalınlıkları için daha önceden manyetik sıçratma cihazında için hesaplanan verilerin oldukça doğru olduğunu göstermektedir.

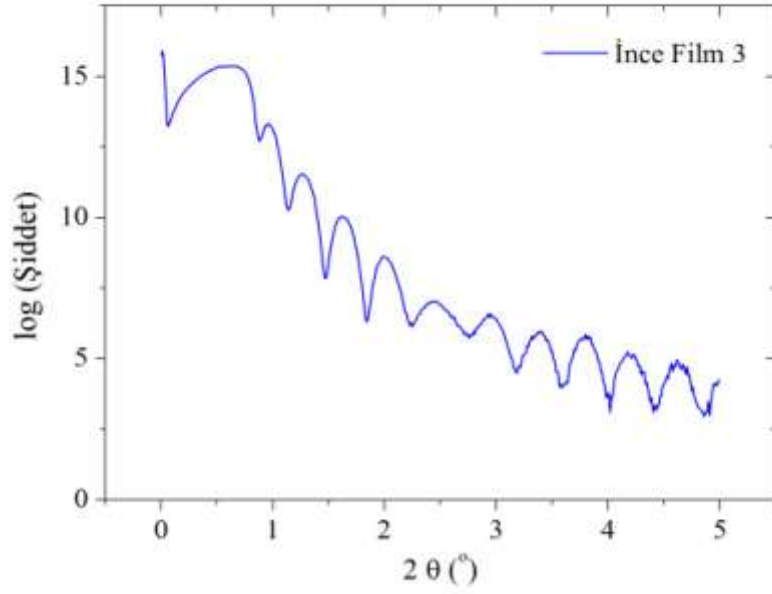




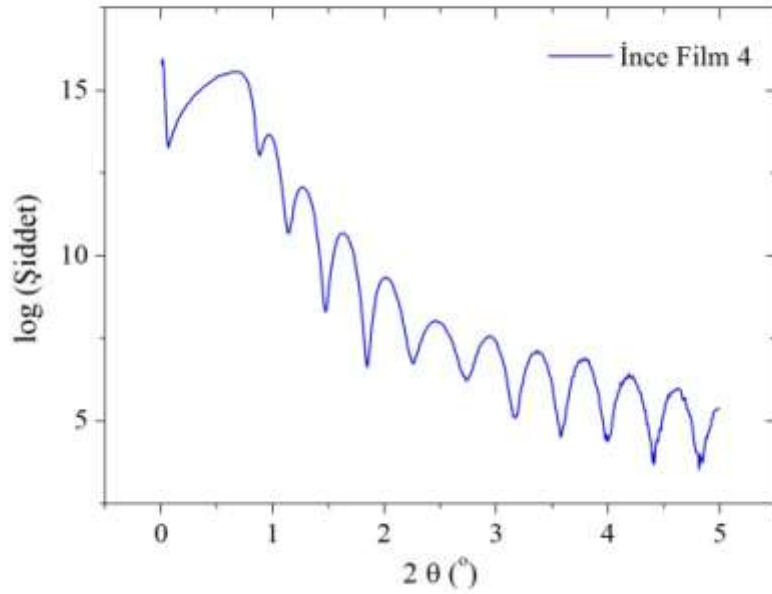
Şekil 4.12 Üretilen manyetik ince film-İnce Film 1'in reflektometri deseni



Şekil 4.13 Üretilen manyetik ince film-İnce Film 2'in reflektometri deseni



Şekil 4.14 Üretilen manyetik ince film-İnce Film 3'in reflektometri deseni.



Şekil 4.15 Üretilen manyetik ince film-İnce Film 4'in reflektometri deseni

Bu manyetik ince filmlerin kompozisyon analizleri XRF yöntemi ile incelendiğinde, alt taş sıcaklığı 400 ve 500 °C olduğunda kompozisyonun istenilen  $\text{Ni}_{50}\text{Mn}_{35}\text{Sn}_{15}$ 'den farklı olduğu tespit edilmiştir. Ayrıca alt taş sıcaklığı 700 °C olan manyetik ince filmde bazı bölgelerde, Mn birikmelerinin olduğu ışık mikroskobu ile tespit edilmiştir. XRF

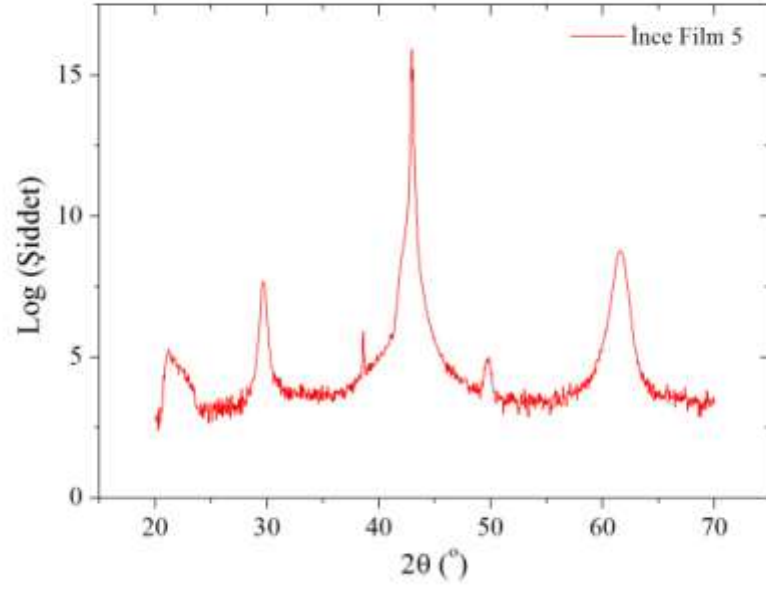
sonucuna göre, istenilen kompozisyona yakın olan manyetik ince film, alt taş sıcaklığı 600 °C iken elde edilmiştir.

$Ni_{50}Mn_{35}Sn_{15}$  alaşımının erime sıcaklığı yaklaşık 1273°C' dir. Bu alttaş sıcaklığının yapı bölge modeline uygunluğu incelendiğinde olduğu görülecektir. 600 °C'de üretilen manyetik ince filmin  $T/T_M$  değerinin 0.47'dir. Yapı bölge modeline göre, 2. bölgede  $Ni_{50}Mn_{35}Sn_{15}$  kompozisyonunda manyetik ince film üretebilmek uygun olmaktadır. İstenilen kompozisyona daha yakın ve daha homojen manyetik ince film elde etmek için hedeflere uygulanan akım, gerilim ve güç değerleri ve alt taş dönme hızı değiştirilerek yeni ince filmler elde edilmiştir. Yeni üretilen manyetik ince filmlerin üretiminde kullanılan üretim parametreleri çizelge 4.5' de verilmiştir.

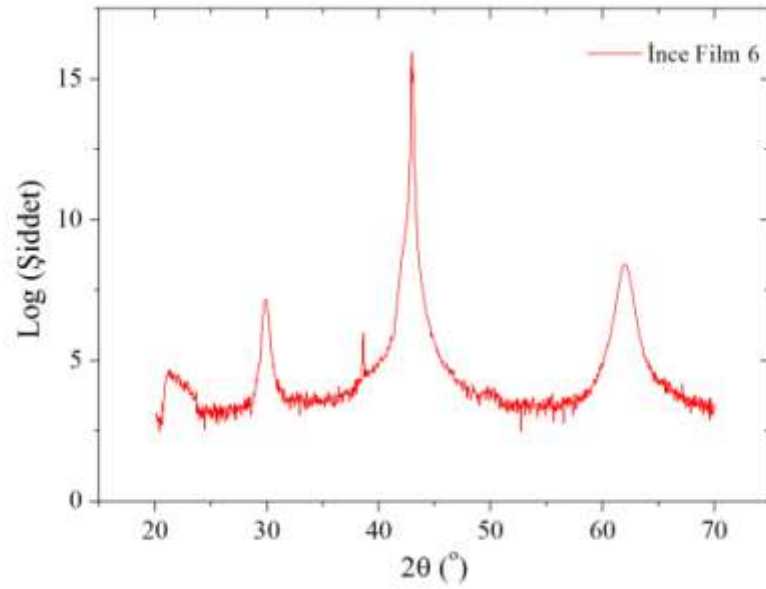
Çizelge 4.5  $Ni_{50}Mn_{35}Sn_{15}$  manyetik ince filmini elde etmek için kullanılan parametreler

Örnek İsmi	İnce Film 5	İnce Film 6	İnce Film 7	İnce Film 8
Hedef 1	Ni	Ni	Ni	Ni
Hedef 1 için Güç (Watt)	263	263	263	263
Hedef 1 için Gerilim (V)	479	476	476	476
Hedef 2	Mn	Mn	Mn	Mn
Hedef 2 için Güç (Watt)	149	149	153	153
Hedef 2 için Gerilim (V)	375	376	375	376
Hedef 3	Sn	Sn	Sn	Sn
Hedef 3 için Güç (Watt)	45	45	42	42
Hedef 3 için Gerilim (V)	344	346	343	343
Sıçratma Süresi (s)	62	62	62	62
Alttaş Sıcaklık (°C)	600	600	600	600
Alttaşın Dönme Hızı (m/s)	15	5	10	20
Alttaş	MgO	MgO	MgO	MgO
İnce Film Kalınlığı (nm)	20	20	20	20
2 nm MgO Koruyucu Tabaka	Var	Var	Var	Var

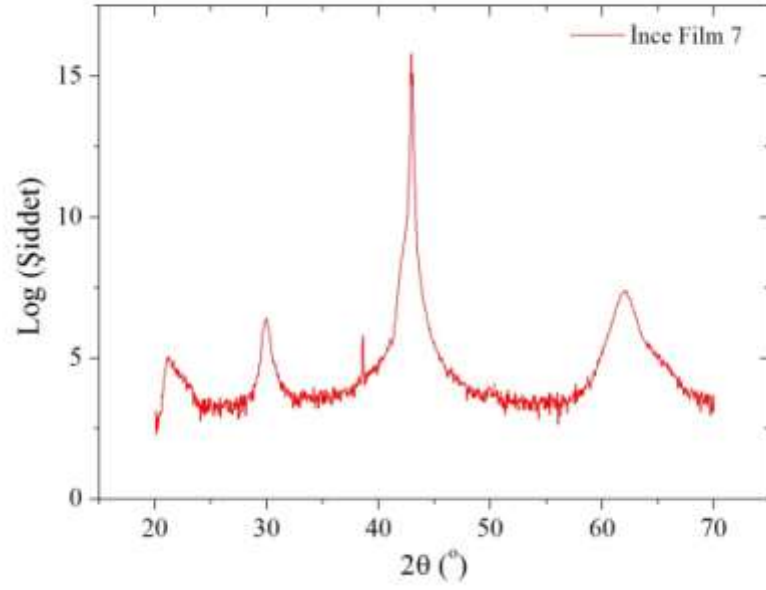
Şekil 4.16- 4.19’da farklı alttaş dönme hızlarında üretilen manyetik ince filmlerin (İnce Film 5, 6, 7 ve 8) X-ışını kırınım desenleri görülmektedir. Burada  $43.0^\circ$ ’deki pik alttaş MgO’den gelmektedir.  $29.6^\circ$  ve  $61.9^\circ$  civarındaki pikler ise Huesler fazından gelmektedir.  $22^\circ$  civarındaki pikler ise sistemden kaynaklanmaktadır.



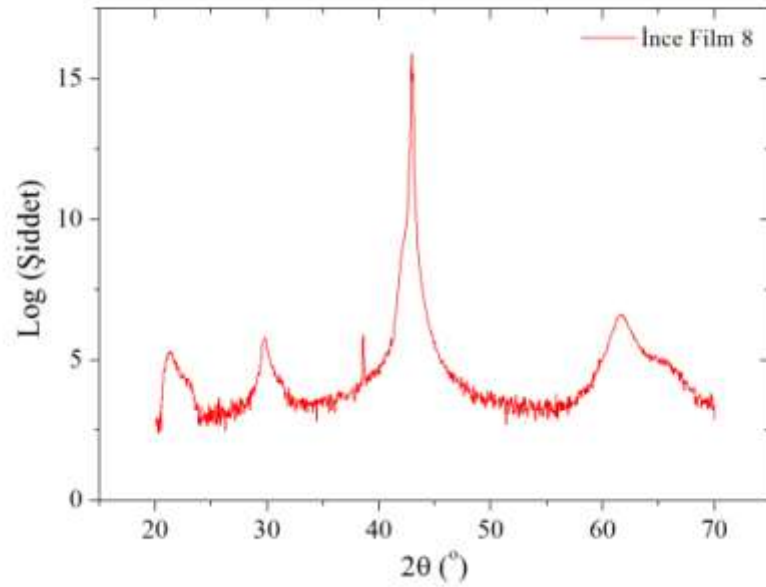
Şekil 4.16 Üretilen manyetik ince film-İnce Film 5’in X-ışını kırınım deseni



Şekil 4.17 Üretilen manyetik ince film-İnce Film 6’in X-ışını kırınım deseni



Şekil 4.18 Üretilen manyetik ince film-İnce Film 7'in X-ışını kırınım deseni



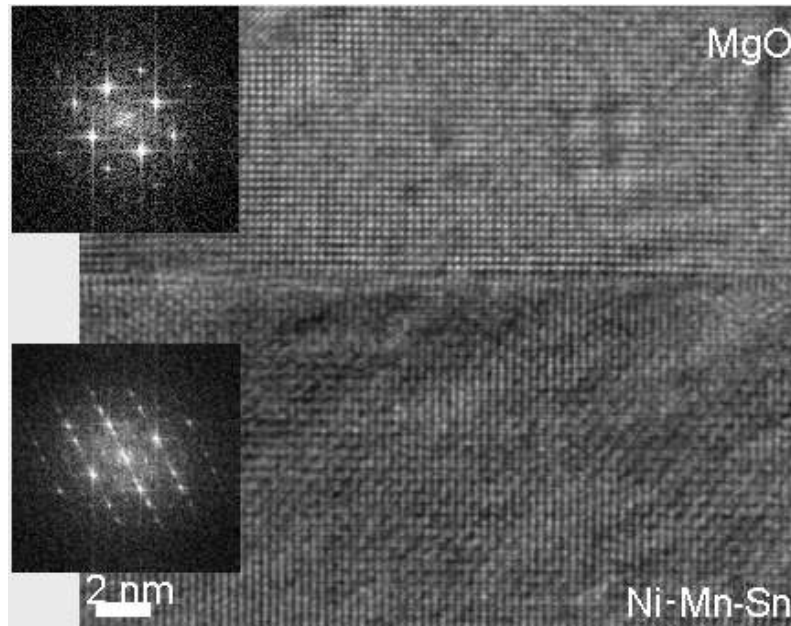
Şekil 4.19 Üretilen manyetik ince film-İnce Film 8'in X-ışını kırınım deseni

Üretilen bu manyetik ince filmlerin x-ışını kırınım ve x-ışını reflektometri desenlerine göre İnce Film 5, İnce Film 6 ve İnce Film 7'in düzgün bir şekilde elde edilemediği anlaşılmıştır. Reflektometri eğrileri, İnce Film 5, İnce Film 6 ve İnce Film 7'in manyetik ince filmin yüzeyinin pürüzlü olduğu göstermektedir. Bu ince filmlerin XRF

sonuçları, bu ince filmlerin kompozisyonlarının sadece İnce Film 8 için istenilen değerlerde olduğunu göstermiştir.

#### 4.2.2 Manyetik ince filmin TEM analizi:

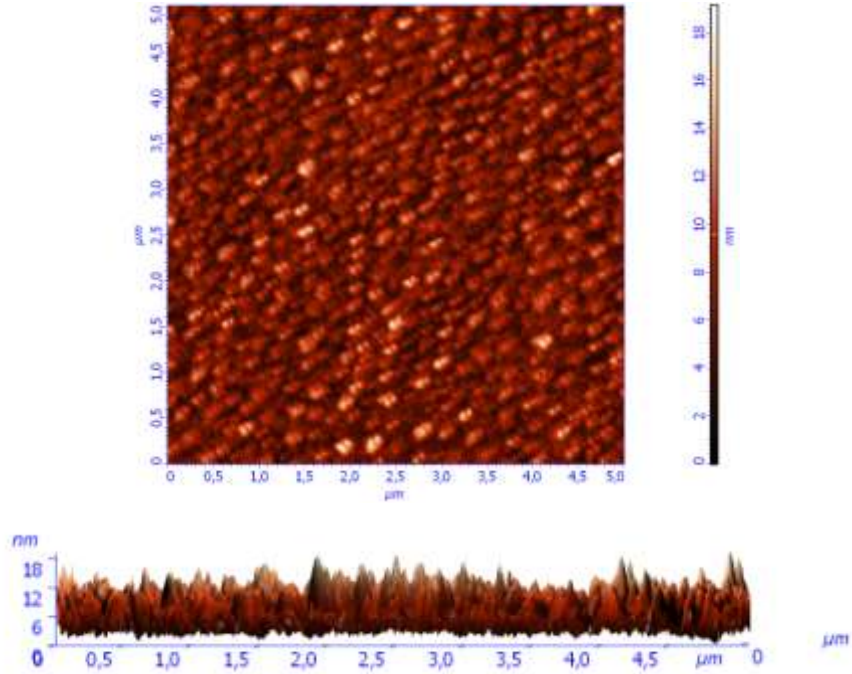
XRD, XRR ve XRF sonuçlarına göre düzgün kompozisyonda ve istenilen kristal yapıda olan manyetik İnce film 8'in Yüksek Çözünürlüklü Geçirimli Elektron Mikroskobu-HRTEM analizi Viyana Teknoloji Üniversitesinde yapılmıştır. Bu analiz sonucunda elde edilen HRTEM resmi ve elektron kırınım deseni şekil 4.20'de görülmektedir. Şekil 4.20'de MgO ve manyetik ince filmlerin kırınım desenlerine göre, MgO kübik yapıda ve manyetik ince filmde kübik yapıda kristallendiği bulunmuştur. Elektron kırınım verileri ayrıntılı olarak incelendiğinde, manyetik ince filmin MgO üzerinde (110) eksenini büyütüğü görülmektedir. Elde edilen bu sonuç daha önce literatürde verilen verilerle uyumludur (Vishnoi vd. 2012). Şekil 4.20'deki elektron kırınım deseni ve elektron mikroskobu resminden, MgO alttaş üzerine Ni-Mn-Sn ince filmini epitaksiyel olarak büyütüğünü göstermektedir.



Şekil 4.20 İnce Film 7'nin HRTEM resmi, MgO ve  $\text{Ni}_{50}\text{Mn}_{35}\text{Sn}_{15}$  kompozisyonundaki tabakanın elektron kırınım desenleri

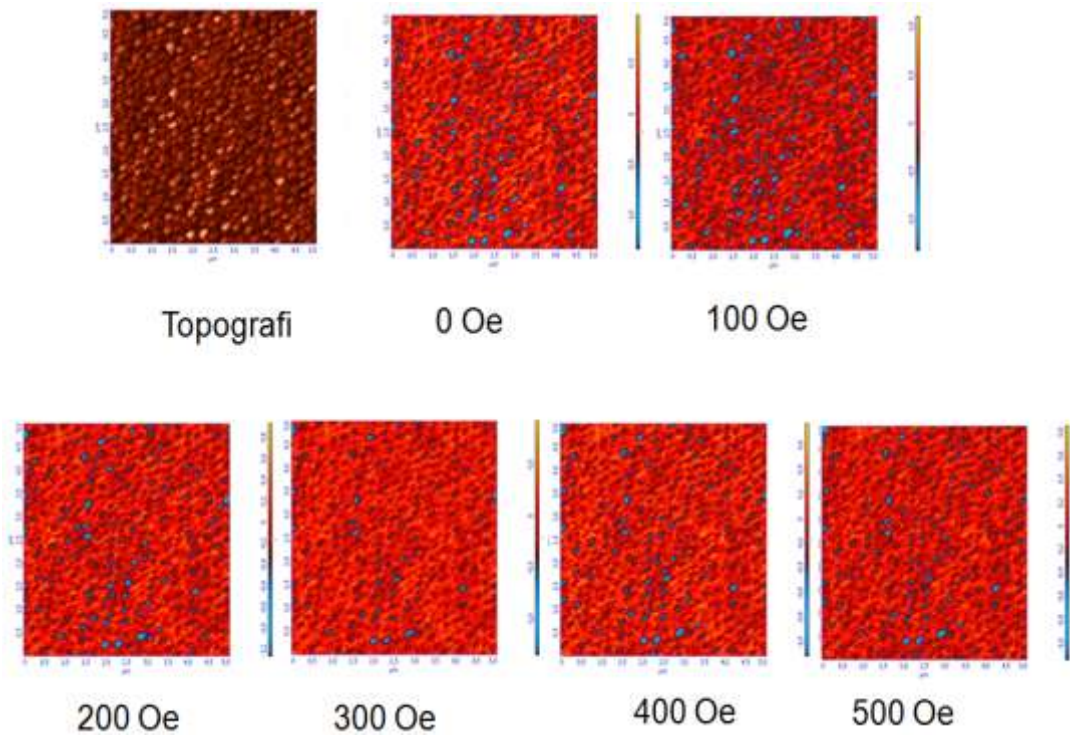
#### 4.2.3 Manyetik ince filmin AKM ve MKM analizleri:

Elde edilen manyetik ince filmlerin yüzeylerinin yapısal ve manyetik özelliklerini incelemek için AKM ve MKM analizleri, Ankara Üniversitesindeki Manyetik Malzemeler Araştırma laboratuvarımızda bulunan Atomik Kuvvet Mikroskobu-AFM ve Manyetik Kuvvet Mikroskobu-MFM kullanılarak yapılmıştır. Manyetik etkileşmeleri daha iyi belirlemek için yukarıda üretim parametreleri verilen İnce Film 8’de üzerinde 2 nm kalınlığındaki MgO tabakası olmadan yeniden üretilmiştir. Bu yeni üretilen manyetik ince filmin (İnce Film 8) XRD, XRR ve XRF analizleri yapılmış ve istenilen özelliklere sahip olduğu bulunmuştur. Daha sonra bu manyetik ince filmin topografik özellikleri AFM’de NSG01/Co uç kullanarak oda sıcaklığında belirlenmiştir. Bu filmin yüzey pürüzlülüğünün ortalama değerinin 1.85 nm olduğu belirlenmiştir (Şekil 4.21). İnce film 8 için bulunan ortalama pürüzlülük değerinin, Vishnoi ve arkadaşlarının yaptıkları çalışmada bulunan 1.65 nm değeriyle uyumlu olduğu gözlemlenmiştir (Vishnoi vd. 2010).



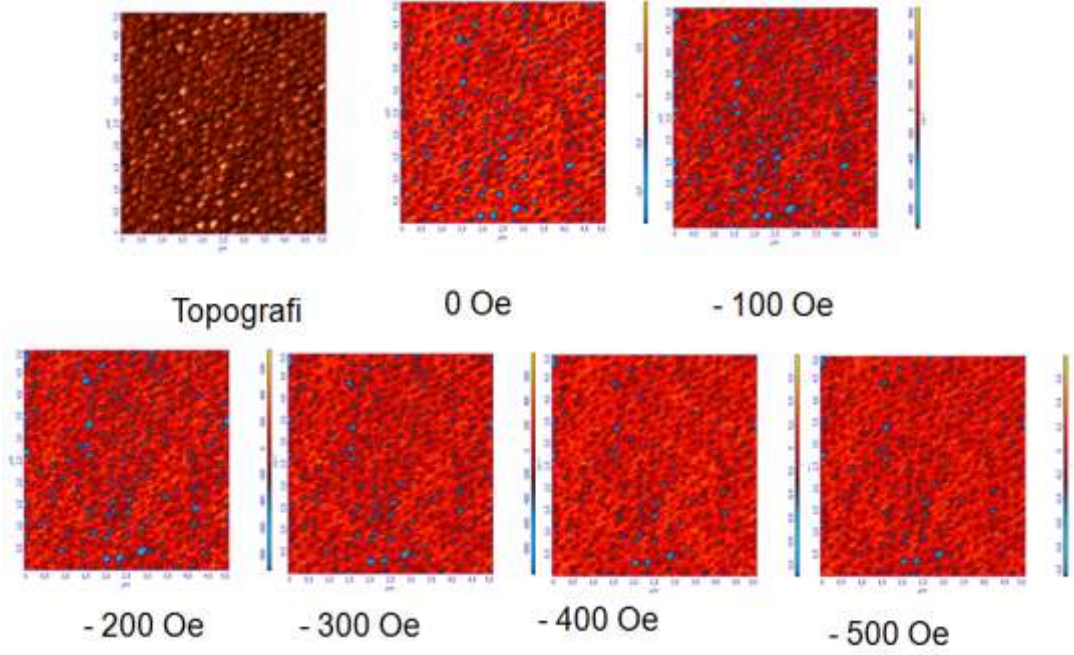
Şekil 4.21 İnce Film 8’in AFM’den elde edilen a) 2 boyutta (2D) b) 3 boyutta (3D) topografi görüntüleri

Daha sonra bu manyetik ince filmin yüzeyinin manyetik özelliklerini belirlemek için aynı uç kullanılarak yüzeye paralel olarak uygulanan 0, 100, 200, 300, 400, 500, -100, -200, -300, -400 ve -500 Oe'lik manyetik alan uygulanarak MFM'de incelenmiştir (Şekil 4.22 ve 4.23). NSG01/Co ucunun kullanılmasının sebebi, bu ucun manyetik olan Co ile kaplanmış olduğundan dolayı bu ucun manyetik etkileşmeleri duyarlı bir şekilde algılanmasıdır. Böylece incelenen örnek manyetik özelliğe sahip ise örnek ile uç arasındaki manyetik etkileşmeler, yani örneğin üzerindeki manyetik bölgelerin resminin mertebesinde belirlenebilmektedir. Bu amaçla ilk olarak bizim manyetik ince filmimizin sıfır manyetik alan altında incelenmesi yapılmıştır. Şekil 4.22'deki 0 Oe'de alınan MFM görüntüsüne göre yüzey üzerindeki manyetik bölgeler farklı renklerle gösterilmiştir. Uygulanan manyetik alan değeri artarken, manyetik ince filmin yüzeyindeki manyetik bölgelerdeki manyetik momentler alan yönüne doğru döndüğü görülmektedir.



Şekil 4.22 İnce Film 8'in değişik manyetik alanda alınmış MFM görüntüleri





Şekil 4.23 İnce Film 9'un değişik manyetik alanda alınmış MFM görüntüleri

#### 4.2.4 $\text{Ni}_{50}\text{Mn}_{35}\text{Sn}_{15}$ kompozisyonunda ve farklı kalınlıklarda manyetik ince filmlerin elde edilmesi ve yapısal karakterizasyonu:

Manyetik ince filmleri elde etmek için manyetik alanda sıçratma cihazında ayrı ayrı Ni, Mn ve Sn elementlerinin hedefleri kullanılmış ve bu manyetik ince filmler örgü uyumsuzluğunun en aza indirmek amacıyla MgO (100) tek kristal alt taş üzerine büyütülmüştür. Bulunan uygun parametrelerle farklı sıçratma zamanları seçilerek, manyetik ince film kalınlıkları 10 nm, 20 nm, 35 nm, 50 nm ve 100 nm olarak üretilmiştir. Farklı kalınlıklarda üretilen manyetik ince filmler kalınlıklarına göre yeni kısa isimler verilmiştir. Bu kısa isimler kullanılacaktır. Bu isimler, numaralama işlemi 8'den itibaren yapılmıştır. Yani:

- 10 nm kalınlığında üretilen örnek, İnce Film 9
- 20 nm kalınlığında üretilen örnek, İnce Film 10
- 34 nm kalınlığında üretilen örnek, İnce Film 11
- 50 nm kalınlığında üretilen örnek, İnce Film 12
- 100 nm kalınlığında üretilen örnek, İnce Film 13

şeklinde isimlendirme yapılmıştır.

İstenilen kompozisyondaki ince filmleri elde etmek için:

- Ni, Mn ve Sn hedeflerine uygulanan gerilim, akım ve güç değerleri,
- Alttaş sıcaklığı,
- Sıçratma süresi,

gibi parametrelerin en uygun değerleri belirlenmişti. Bu bilgiler kullanılarak, değişik kalınlıklardaki ince filmler elde edilmiştir. Elde edilen her bir manyetik ince filmin üzerine dış etkenler nedeni ile aşınmasını ve bozunmasını, ayrıca kristal yapının bozulmasını önlemek için koruyucu tabaka olarak 2 nm kalınlığında MgO tabakası kaplanmıştır.

Çizelge 4.6'da farklı kalınlıklarda üretilen manyetik ince filmlerin üretim parametreleri verilmektedir. Farklı kalınlıklarda manyetik ince filmler elde edebilmek amacıyla sıçratma süreleri birbirinden farklı olarak seçilmiştir. Bu sıçratma süreleri bulunurken ise Bielefeld Üniversitesindeki manyetik alanda sıçratma cihazı için bulunan daha önceden teorik olarak hesaplanan süreler ve yapılan ön deneylerin sonuçları kullanılmıştır. Manyetik ince filmler üretimi için yukarıda da söylendiği gibi MgO alttaş kullanılmıştır. Ayrıca ince filmin üretiminden önce MgO alttaşın yüzeyindeki olası kirliliklerden kurtulmak için MgO alttaş isoproponel ile yıkayıp, helyum gazı ile temizlenip Magnetron Sputtering cihazına konmuştur.

Üretilen bu farklı kalınlıklardaki manyetik ince filmlerin yapısal ve kompozisyon karakterizasyonlarını belirlemek için x-ışını kırınımı-XRD, X-ışını reflektometri-XRR ve X-ışını floresans-XRF spektrometre ölçümleri ile yapılmıştır.

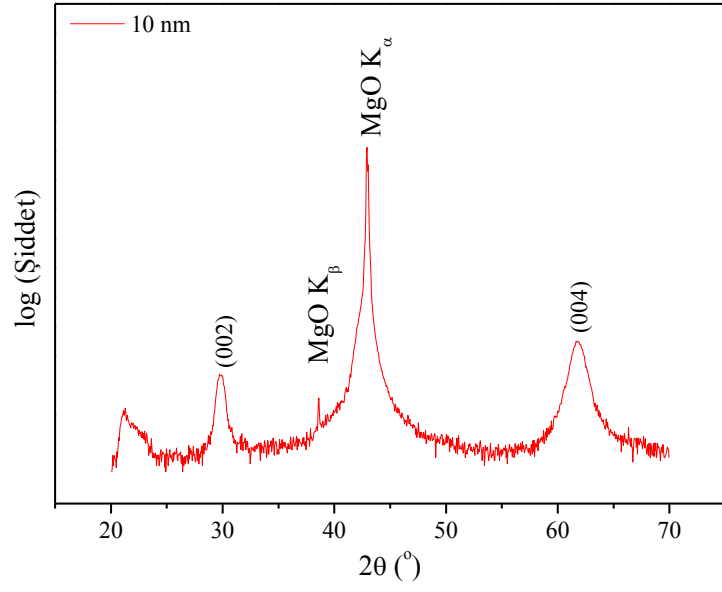
Çizelge 4.6 Ni<sub>50</sub>Mn<sub>35</sub>Sn<sub>15</sub> manyetik ince filmini farklı kalınlıklarda elde etme için kullanılan parametreler

Örnek İsmi	İnce Film 9	İnce Film 10	İnce Film 11	İnce Film 12	İnce Film 13
<b>Hedef 1</b>	Ni	Ni	Ni	Ni	Ni
<b>Hedef 1 için Güç (Watt)</b>	263	263	263	263	263
<b>Hedef 1 için Gerilim (V)</b>	467	467	46	467	475
<b>Hedef 2</b>	Mn	Mn	Mn	Mn	M
<b>Hedef 2 için Güç (Watt)</b>	149	149	149	149	149
<b>Hedef 2 için Gerilim (V)</b>	370	370	370	370	370
<b>Hedef 3</b>	Sn	Sn	Sn	Sn	Sn
<b>Hedef 3 için Güç (Watt)</b>	45	45	45	45	45
<b>Hedef 3 için Gerilim (V)</b>	340	340	340	340	340
<b>Sıçratma Süresi (s)</b>	30	62	102	155	301
<b>Alttaş Sıcaklık (°C)</b>	600	600	600	600	600
<b>Alttaşın Dönme Hızı (m/s)</b>	20	20	20	20	20
<b>Alttaş</b>	MgO	MgO	MgO	MgO	MgO
<b>İnce Film Kalınlığı (nm)</b>	10	20	35	50	100
<b>2 nm MgO Koruyucu Tabaka</b>	Var	Var	Var	Var	Var

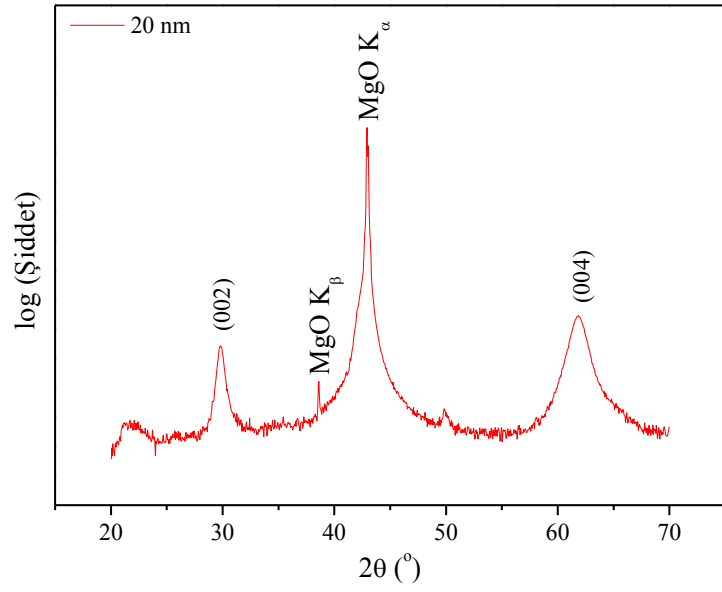
Oda sıcaklığında XRD ölçümleri Philips X-pert model x-ışını kırınım metresi Bakır ışın kaynağı kullanılarak yapılmıştır. Şekil 4.24-4.29'da bu manyetik ince filmlerin x-ışını

toz kırınım desenleri görülmektedir. Bu şekillerde de görüldüğü gibi, kırınım desenindeki  $2\theta$  değerleri  $29.8^\circ$  ve  $61.3^\circ$  civarındaki pikler kübik Heusler fazından gelmektedir. Ayrıca  $43,0^\circ$  derece civarındaki pik ise, MgO alttaştan gelmektedir. Heusler alaşımın karakteristik olan  $29.8^\circ$  (002) ve  $61.3^\circ$  (004) şiddetlerinin birbirine göre oranı, MgO alttaş üzerine büyütülen manyetik ince filmler için birbirine oldukça yakındır. Bu sonuç manyetik ince filmlerin MgO alttaş üzerinde epiktaksiyel olarak büyüdüğünü kanıtlamaktadır. XRD’de ince filmleri ölçmeden önce profil analizi için standart olarak Si toz ölçülmüştür. Böylece analizlerde kullanılacak ve cihazın gerçek u, v, w parametreleri Rietveld analizi ile belirlenmiştir.

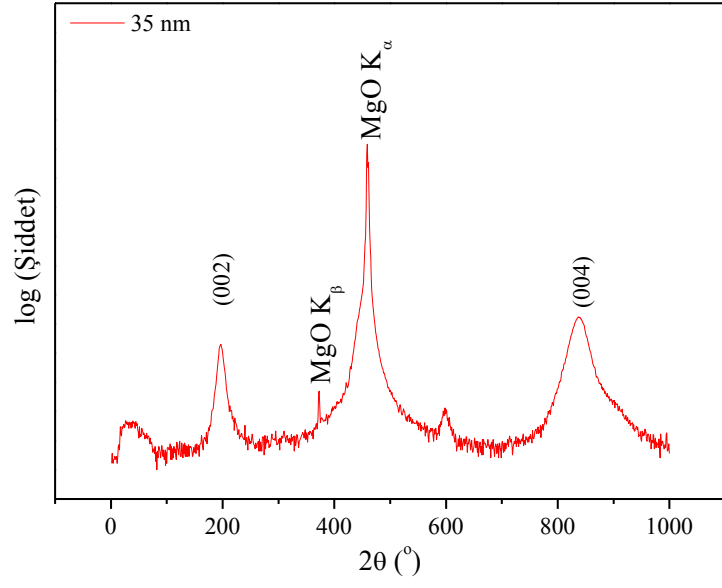
Elde edilen değişik kalınlıktaki manyetik ince filmlerin kristalografik parçacık boyutları XRD desenlerinden Scherrer formülü kullanılarak hesaplanmıştır. Bunun için  $2\theta=29.8^\circ$  değerine sahip (002) Bragg yansıma şiddeti analiz edilmiştir ve analiz sonuçları Şekil 4.30’da görülmektedir. Bu manyetik ince filmler için hesaplanan ortalama kristalit boyutları sırasıyla, İnce Film 9 (10 nm) 11.9 nm, İnce Film 10 (20 nm) 15.4 nm, İnce Film 11 (35 nm) 16.1 nm, İnce Film 12 (50 nm) 15.6 nm ve İnce Film 13 (100 nm) 17.5 nm şeklindedir. İnce filmlerin kalınlığa bağlı olarak parçacık büyüklüklerinin artmasının nedeni olarak Martensit fazdaki ikizlenmeler gösterilmektedir. (Ranzieri vd. 2013). R. Vishnoi ve arkadaşlarının yaptığı bir çalışmada Ni-Mn-Sn Heusler alaşımının 1  $\mu\text{m}$  kalınlığında ince filmi elde etmiş ve bu ince filmin değişik alttaş sıcaklığında kristalografik ve manyetik özelliğini incelemişlerdir. Bu çalışmaya göre alttaş sıcaklığının  $600^\circ\text{C}$  olduğunda kristalit büyüklüğünün 21 nm olduğu hesaplanmıştır (Vishnoi vd. 2010). Aynı yazarlar bir başka çalışmasında yine 1  $\mu\text{m}$  kalınlığında değişik kompozisyondaki Ni-Mn-Sn manyetik ince film elde etmişlerdir. Bu çalışmada 4 değişik kompozisyondaki bu ince filmler için kristalit büyüklüklerini ortalama 20 nm olarak bulmuşlardır. İnce filmlerin kalınlığının aynı kalmasına karşın farklı kristalit büyüklükleri elde edilmiştir (Vishnoi vd. 2010). Ayrıca aynı çalışmada manyetik ince filmlerin kristalit büyüklüğünün 6 nm’den daha küçük olduğu değerlerde Martensit faz dönüşümü göstermediği belirtilmiştir. Bu değerden daha küçük kristalit büyüklüğü için Martensit dönüşüm enerjisi gerekli büyüklükte olmadığından dolayı Martensit dönüşüm gözlemlenmediği savunulmaktadır (Malygin 2009, Vishnoi vd. 2010).



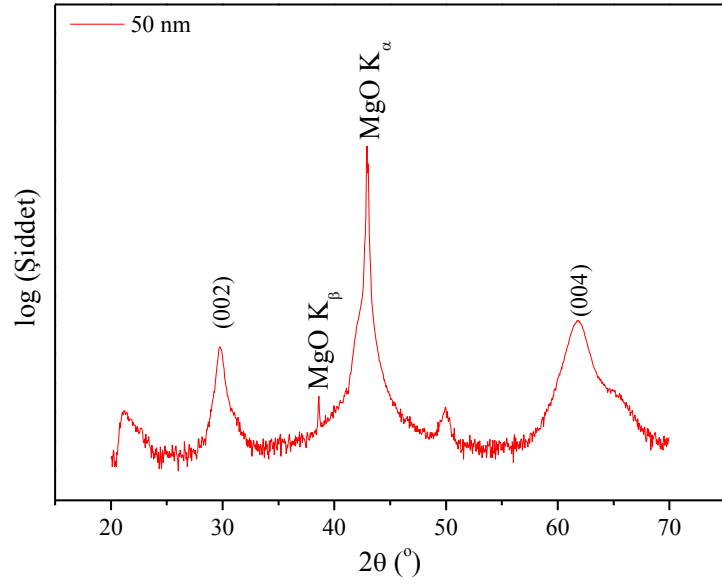
Şekil 4.24 Üretilen manyetik ince film-İnce Film 9'un x-ışını kırınım deseni



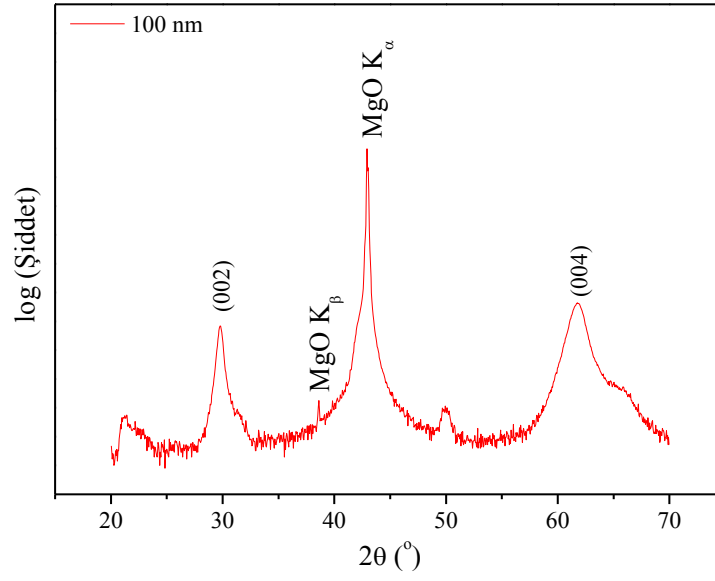
Şekil 4.25 Üretilen manyetik ince film-İnce Film 10'un x-ışını kırınım deseni



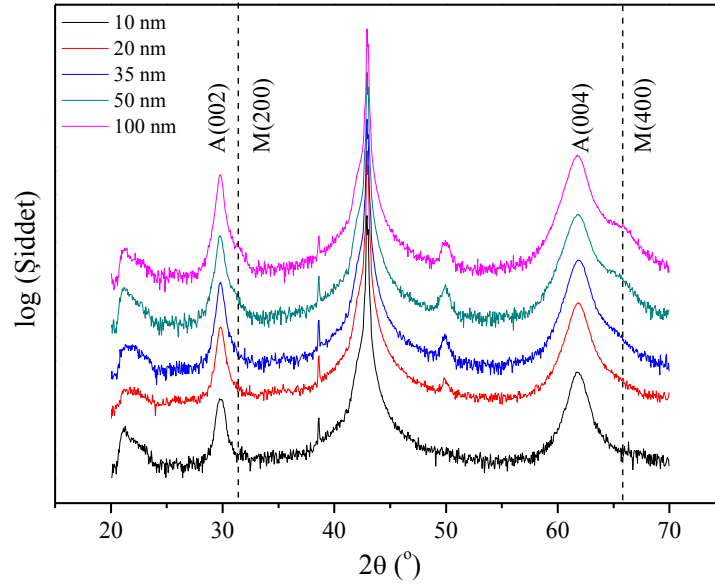
Şekil 4.26 Üretilen manyetik ince film-İnce Film 11'in x-ışını kırınım deseni



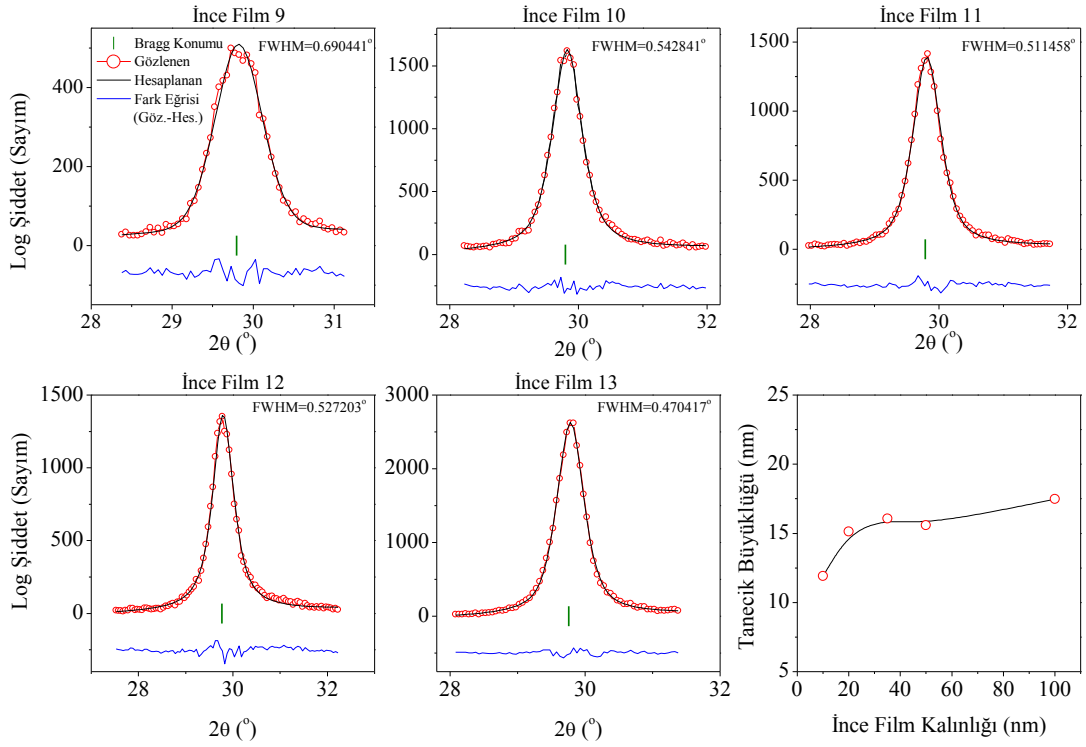
Şekil 4.27 Üretilen manyetik ince film-İnce Film 12'nin x-ışını kırınım deseni.



Şekil 4.28 Üretilen manyetik ince film-İnce Film 13'ün x-ışını kırınım deseni



Şekil 4.29  $Ni_{50}Mn_{35}Sn_{15}$  kompozisyonunda üretilen tüm manyetik ince filmlerin X-ışını kırınım desenleri

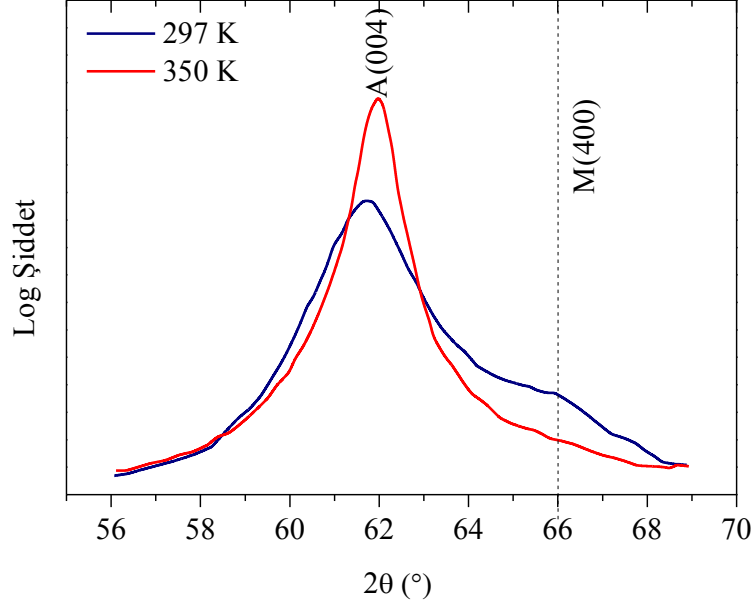


Şekil 4.30 Üretilen manyetik ince filmlerin Rietvelt analizi ve değişen ince film kalınlığına göre tanecik büyüklükleri

Bu manyetik ince filmlerin sıcaklığa bağlı X-ışını kırınım ölçümleri Bielefeld Üniversitesi bünyesinde bulunan Philips X-pert model X-ışını toz kırınım metresi ile gerçekleştirilmiştir. Bu gerçekleştirilen sıcaklığa bağlı X-ışını kırınım desenleri, Heusler alaşımlarında karakteristik olan kübik faza ait olan  $2\theta=61^\circ$  (004) ve ortorombik faza ait olan  $2\theta=66^\circ$  (400) şiddetinin yakınlarında şekil 4.31’de verilmiştir. Literatürdeki hacimsel örneğin sonuçlarına göre, yapısal olarak oda sıcaklığında düşük sıcaklık (Martensit) ve yüksek sıcaklık (Austenit) fazı beraber bulunmaktadır. Şekil 4.31’de oda sıcaklığından alınan X-ışını kırınım ölçümlerine göre, bu iki faza ait yansımalar aynen gözlemlenmektedir. Oda sıcaklığından daha yüksek sıcaklıklara çıkıldıkça, (004)-hkl düzlemine ait pikin şiddeti artmaktadır. Ayrıca Şekil 4.31’de kesik kesik çizgilerle verilen  $2\theta=66^\circ$  yakınlarında ve (004)-hkl şiddetinin uydusu olan pikte şiddette azalmaktadır. Bu şiddetin artması, kübik fazın yüzde olarak artması anlamına gelmektedir. Ayrıca (002) ve (004) düzlemlerinden gelen yansımalarının yanında uydu

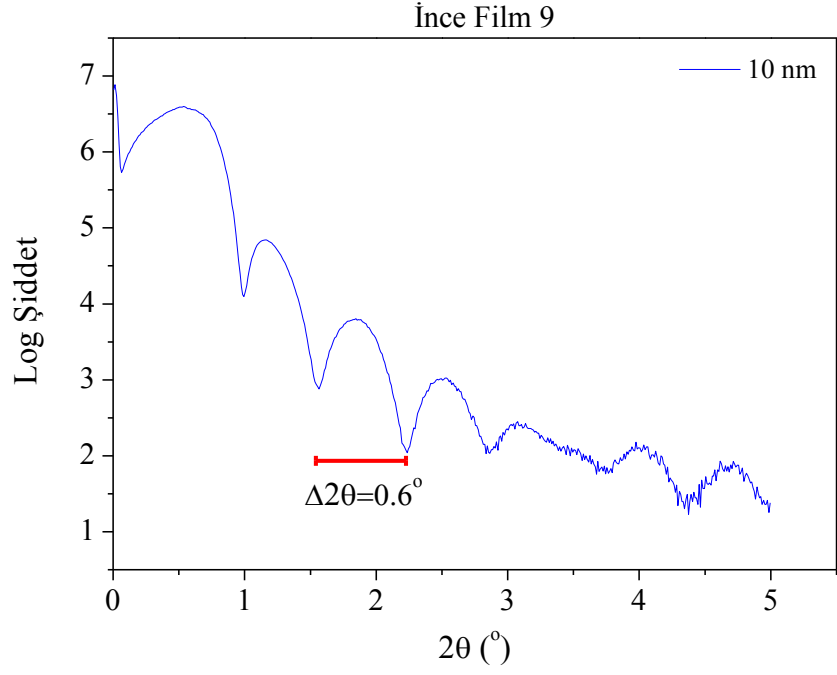


şeklinde gözlemlenen ve şekil 4.29’da verilen martensitik faz diye belirtilen pikler yüksek sıcaklığa doğru çıktıkça azalmaktadır.

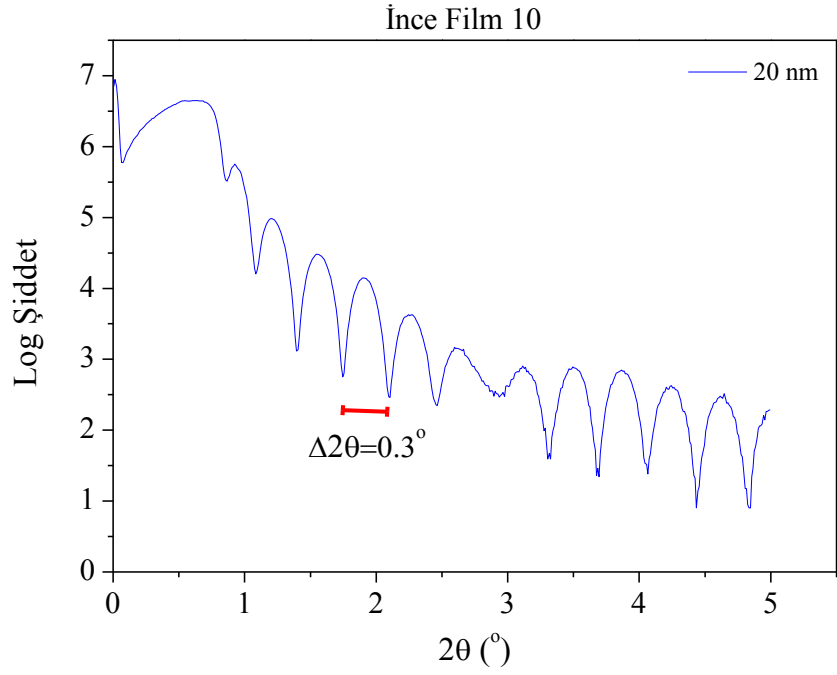


Şekil 4.31 İnce film 13 için sıcaklığa bağlı X-ışını kırınım desenleri

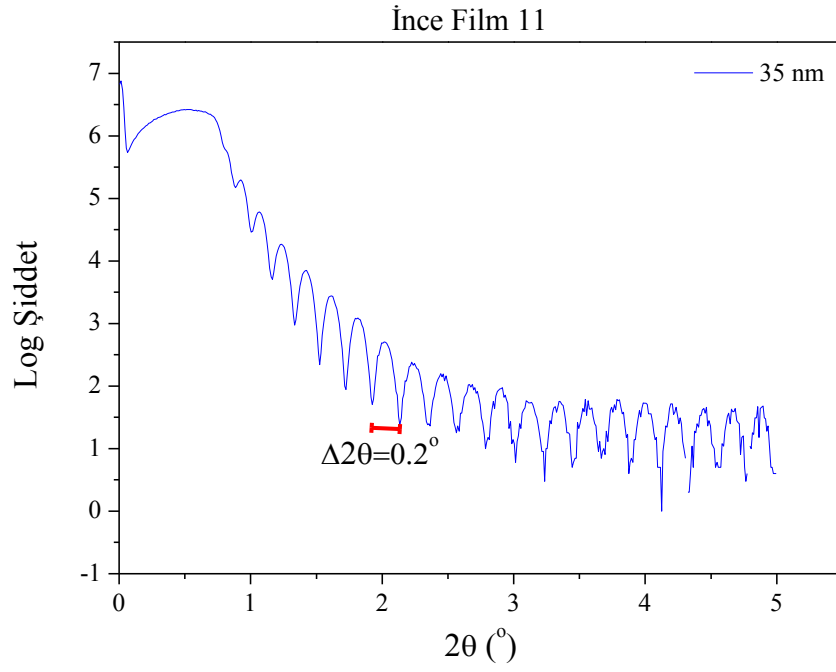
Üretilen bu manyetik ince filmlerin reflektometri desenleri şekil 4.32-4.36’da görülmektedir. XRR desenlerindeki ardışık piklerin birbirine yakınlığı ve sayısının artması film kalınlığını arttığını açıkça göstermektedir. Denklem 3.16 ile yapılan hesaplamalar ile, manyetik ince filmlerin kalınlığının ortalama İnce Film 9 için 10.1 nm, İnce Film 10 için 20.3 nm, İnce Film 11 için 34.3 nm, İnce Film 12 için 50.1 nm ve İnce Film 13 için ise 100.3 nm civarında olduğu bulunmuştur. Bu sonuçlara göre seçilen üretim parametreleri olan güç ve voltaj değerlerinin oldukça uygun olduğunu ve sıçratma cihazın kalibrasyonun tam olduğunu kanıtlamaktadır.



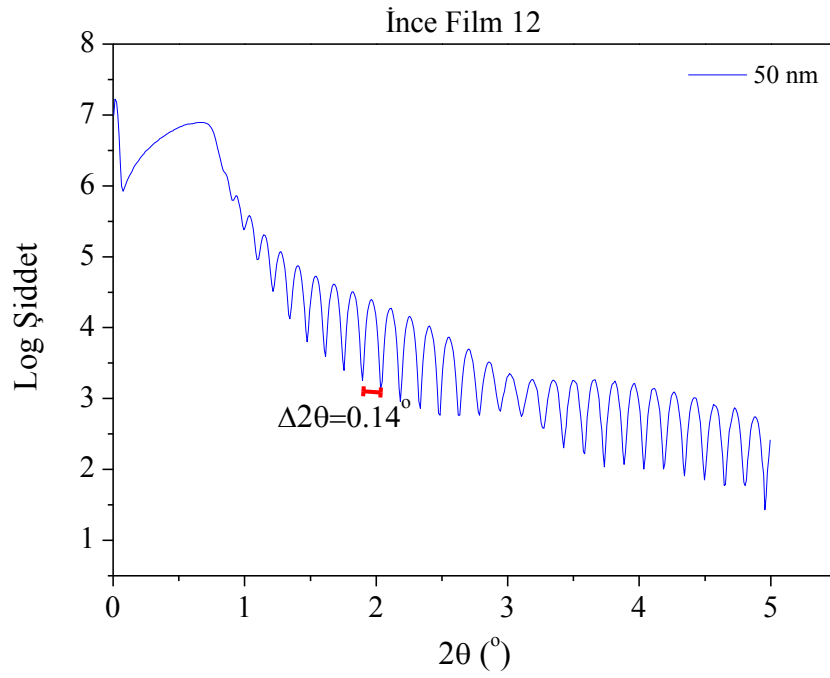
Şekil 4.32 Üretilen manyetik ince film-İnce Film 9'un reflektometri deseni



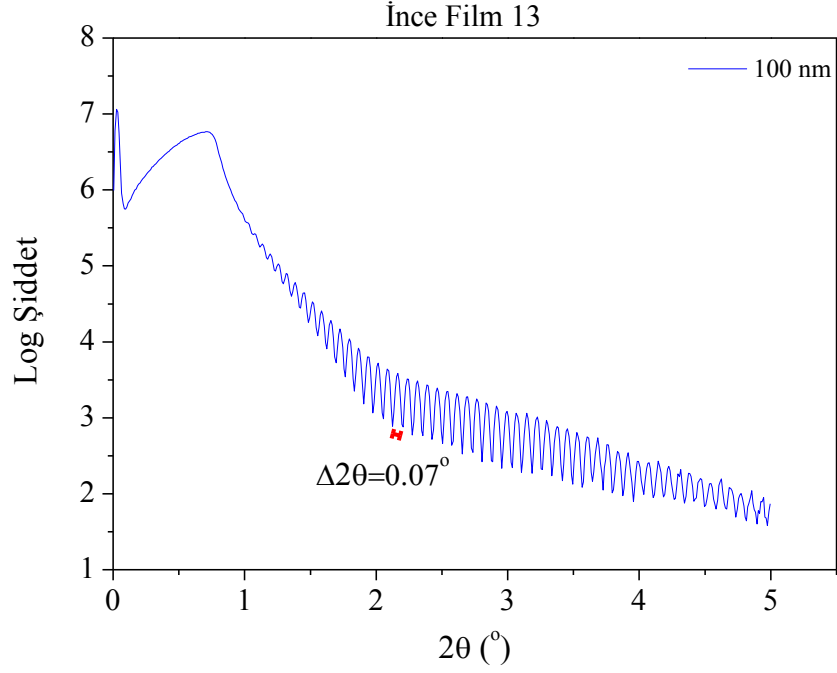
Şekil 4.33 Üretilen manyetik ince film-İnce Film 10'un reflektometri deseni



Şekil 4.34 Üretilen manyetik ince film-İnce Film 11'in reflektometri deseni



Şekil 4.35 Üretilen manyetik ince film-İnce Film 12'nin reflektometri deseni



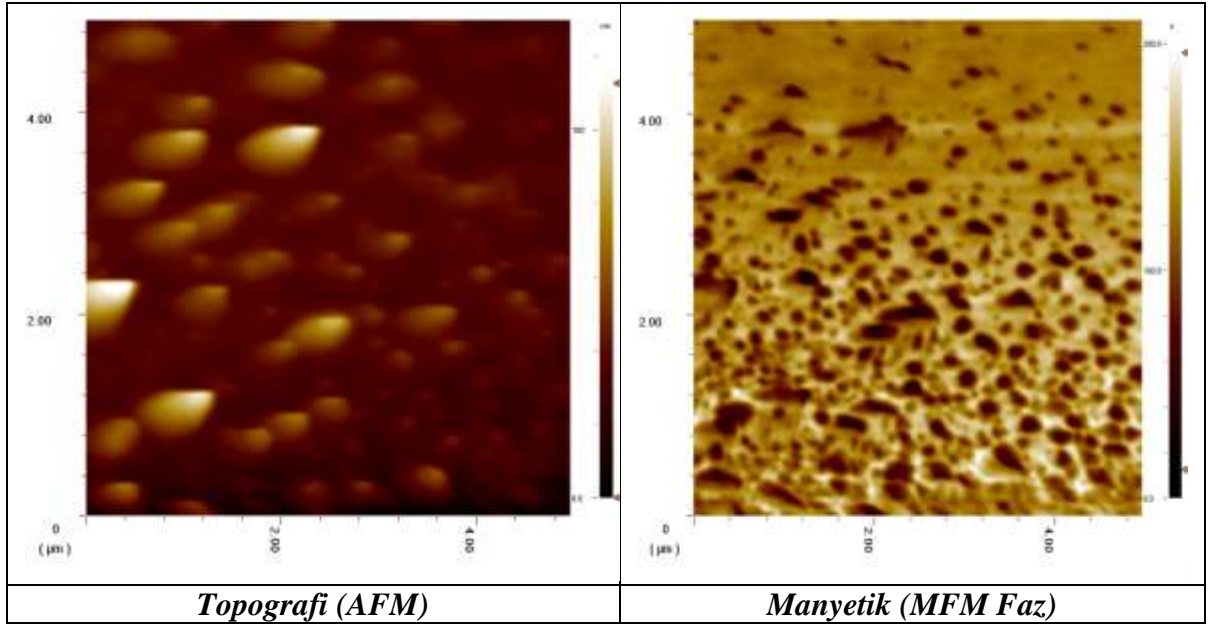
Şekil 4.36 Üretilen manyetik ince film-İnce Film 13'in reflektometri deseni

#### 4.2.5 $\text{Ni}_{50}\text{Mn}_{35}\text{Sn}_{15}$ kompozisyonunda ve farklı Kalınlıklarda üretilen manyetik ince filmlerin manyetik ince filmin sıcaklığa bağlı AFM-MFM çalışması:

Elde edilen manyetik ince filmlerin yüzeyin yapısal özelliklerini ve manyetik özelliklerini incelemek için AKM ve MKM analizleri, Atomik Kuvvet Mikroskobu ve Manyetik Kuvvet Mikroskobu kullanılarak incelenmiştir. Manyetik etkileşmeleri daha iyi belirlemek için yukarıda üretim parametreleri verilen İnce Film 13'den üzerinde 2 nm kalınlığındaki MgO tabakası olmadan yeniden üretilmiştir. Bu yeni üretilen manyetik ince filmin XRD, XRR ve XRF analizleri yapılmış ve istenilen özelliklere sahip olduğu bulunmuştur. Daha sonra bu manyetik ince filmin topografik özellikleri ve manyetik özellikleri 280 K'den başlayarak 325 K kadar 15 K sıcaklık aralığıyla belirlenmiştir. Bu filmin yüzey pürüzlülüğünün ortalama değerinin 1.45 nm olduğu belirlenmiştir.

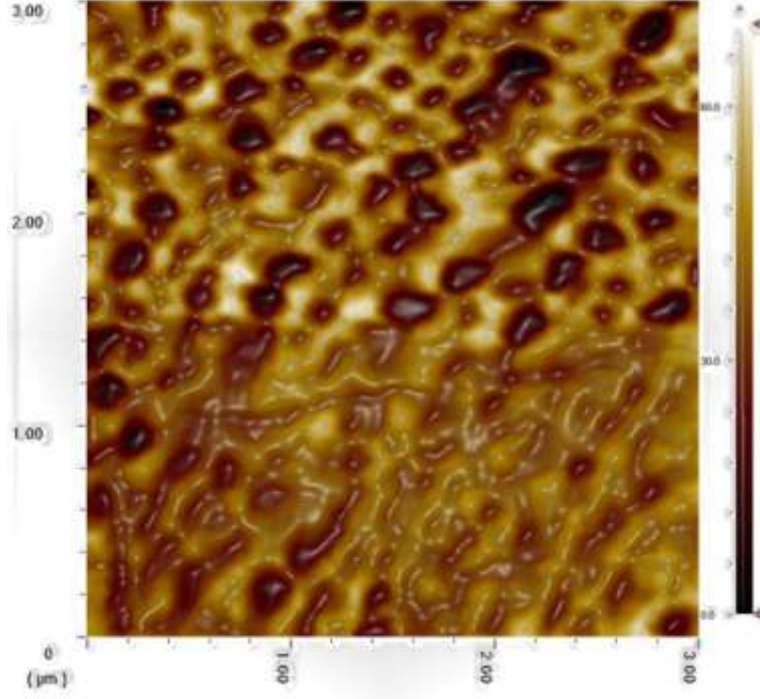
Oda sıcaklığında alınan topografi ve manyetik kuvvet mikroskobu görüntüleri Şekil 4.37'de verilmiştir. Görüldüğü gibi AKM ve MKM özellikleriyle elde edilen resimler birbirinden oldukça farklıdır. Bu da topografisinin manyetik özelliklerden yada başka bir ifadeyle, manyetik özelliklerin topografiden farklı özelliklerde göstermesinden

kaynaklanmaktadır. Daha sonra bu manyetik ince filmin yüzeyinin manyetik özelliklerini belirlemek için aynı uç kullanılarak 280 K, 295 K, 310 K ve 325 K sıcaklarında 1000 Oe manyetik alan altında MFM faz ölçümleri incelenmiştir (Şekil 4.38, 4.39, 4.40 ve 4.41). Co kaplı ucunun kullanılmasının sebebi, manyetik etkileşimleri duyarlı bir şekilde algılayabilmesidir. Böylece incelenen örnek manyetik özelliğe sahip ise örnek ile uç arasındaki manyetik etkileşimler, yani örneğin üzerindeki manyetik bölgelerin resmi nm mertebesinde belirlenebilmektedir.

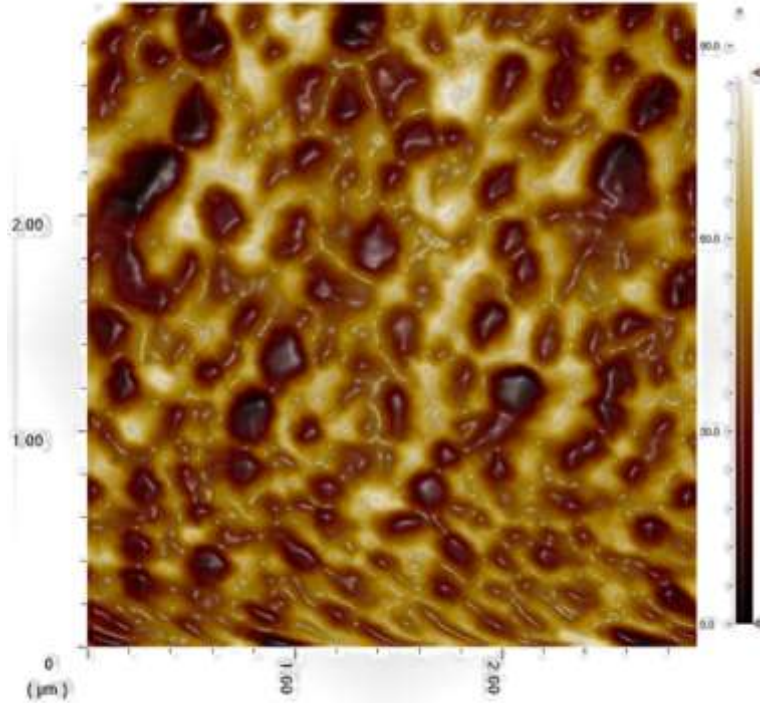


Şekil 4.37 Üretilen manyetik ince film-İnce Film 13'in oda sıcaklığında alınmış topografi ve manyetik kuvvet mikroskobu resimleri

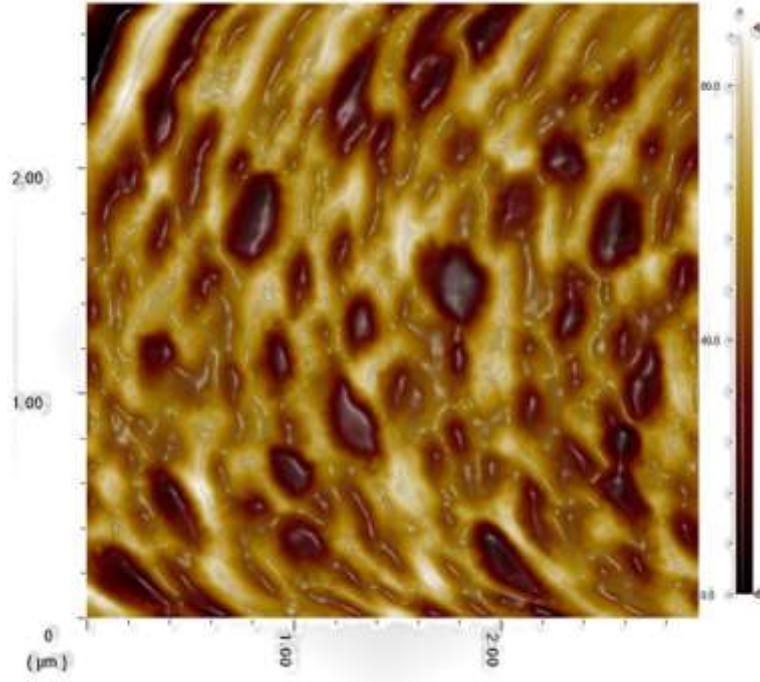
Manyetik kuvvet mikroskobu farklı ve sabit sıcaklıklarda alınan ile görüntülere göre, 325 K'de manyetik özellikler yok olmaktadır. Buradan anlaşılan 310 K ile 325 K sıcaklık aralığında manyetik özelliklerini yok olduğu anlaşılmaktadır. Manyetik ölçümleri de, bu sonuçları doğrulamaktadır.



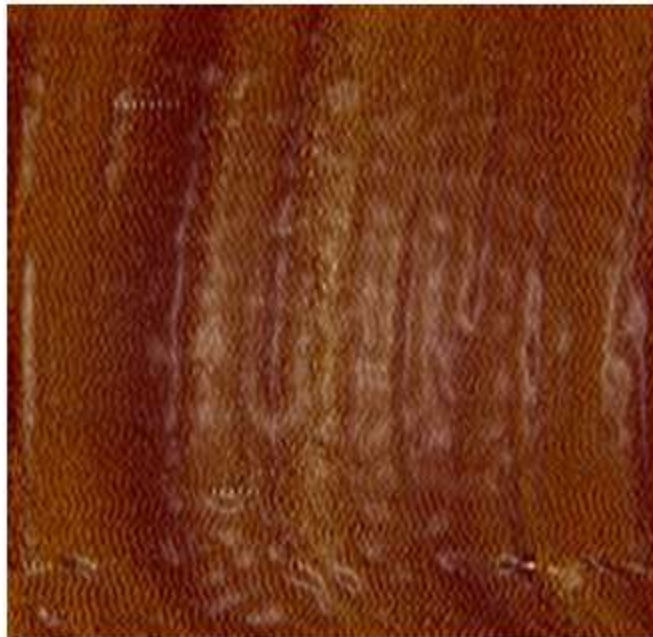
Şekil 4.38 Üretilen manyetik ince film-İnce Film 13'in 280 K ve 1000 Oe dış manyetik alan altında alınmış manyetik kuvvet mikroskobu resmi



Şekil 4.39 Üretilen manyetik ince film-İnce Film 13'in 295 K ve 1000 Oe dış manyetik alan altında alınmış manyetik kuvvet mikroskobu resmi

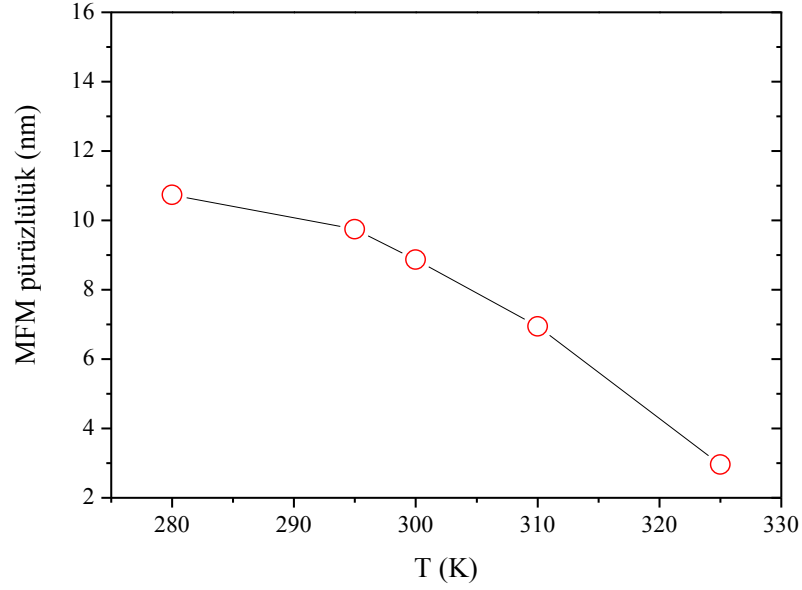


Şekil 4.40 Üretilen manyetik ince film-İnce Film 13'in 310 K ve 1000 Oe dış manyetik alan altında alınmış manyetik kuvvet mikroskobu resmi



Şekil 4.41 Üretilen manyetik ince film-İnce Film 13'in 325 K ve 1000 Oe dış manyetik alan altında alınmış manyetik kuvvet mikroskobu resmi





Şekil 4.42 Üretilen manyetik ince film-İnce Film 13'in farklı sıcaklıklarda ve 500 Oe dış manyetik alan altında hesaplanmış manyetik kuvvet mikroskobu pürüzlülük değerleri

Manyetik kuvvet mikroskobuyla pürüzlülük sonuçlarıyla manyetik malzeme manyetik çekici ve itici özellikleri hakkında bilgiler edinilebilmektedir. Manyetik ölçümlerinden yola çıkarak, 100 nm kalınlığında üretilen manyetik ince filmin 305 K yakınlarında Curie sıcaklığı mevcuttur (Sıcaklığa bağlı mıknatıslanma ölçümlerinden yararlanılmıştır). Farklı sıcaklıklarda alınan manyetik kuvvet mikroskobu verilerinden, manyetik pürüzlülük hesapları yapılmıştır. Bu hesaplanan pürüzlülük sonuçları Şekil 4.42'de verilmiştir. Buna göre, 300 K üstündeki sıcaklıklarda manyetik verileri üzerinden hesaplanan pürüzlülük birden azalmaktadır. Manyetik pürüzlülük hesabının bu tür örneklerde manyetik özellikleri belirlemede kullanılabileceği sonucunu ortaya koymaktadır. Nicel olarak hesaplanan bu sonuç özellikle ince filmin manyetik geçiş sıcaklığı hakkında bilgi edinilmek için kullanılabilir.

#### 4.2.6 $\text{Ni}_{50}\text{Mn}_{35}\text{Sn}_{15}$ kompozisyonunda ve farklı kalınlıklarda üretilen manyetik ince filmlerin direnç özelliklerinin belirlenmesi:

İstenilen kompozisyonda, homojen bir yapıya ve istenilen kalınlığa sahip alaşımların Martensit faz geçişini görebilmek için 20-290 K sıcaklık aralığında, sıcaklığın azalması ve artması yönünde olmak üzere 4 nokta kontak yöntemiyle sıcaklığa bağlı direnç



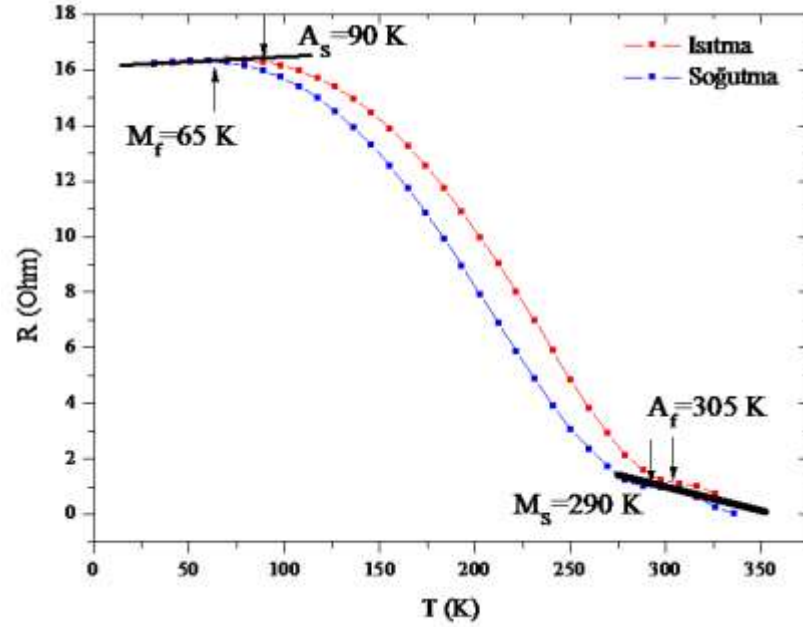
ölçümleri yapılmıştır. Elektriksel kontaklar yapıldıktan sonra direnç ölçümü, Bielefeld Üniversitesindeki ev yapımı 0-1 Tesla manyetik alan altında 20-360 K sıcaklık aralığında direnç ölçümü yapabilen bir sistemde yapılmıştır. Direnç ölçümü için, daha önce ayrıntılı olarak verilen yöntemle 10 nm, 20 nm, 35 nm, 50 nm ve 100 nm kalınlığında elde edilen manyetik ince filmlere sıcaklığa bağlı direnç ölçümü yapılmıştır.

İnce Film 9, İnce Film 10, İnce Film 11, İnce Film 12 ve İnce Film 13 için elde edilen sıcaklığa bağlı direnç eğrileri Şekil 4.43 - Şekil 4.47'de sırasıyla görülmektedir. Şekil 4.48'de tüm ince filmlerin direnç eğrileri aynı grafik içinde verilmektedir. Elde edilen sonuçlara göre, sıcaklık azalırken direncin artması Austenit durumdan Martensit duruma geçiş olduğu göstermektedir. İncelenen manyetik ince filmin kompozisyonunun yakın hacimsel bir alaşımın direnç eğrisinden de görüldüğü gibi bu tip alaşımlarda Austenit durumdaki direnç değeri Martensit durumdaki direnç değerinden daha küçüktür (Dinçer vd. 2010). Ayrıca ısıtma ve soğutma yönünde direnç eğrilerindeki ısıl histeresis bu sıcaklık bölgesinde yapısal faz geçişinin olduğunu göstermektedir.

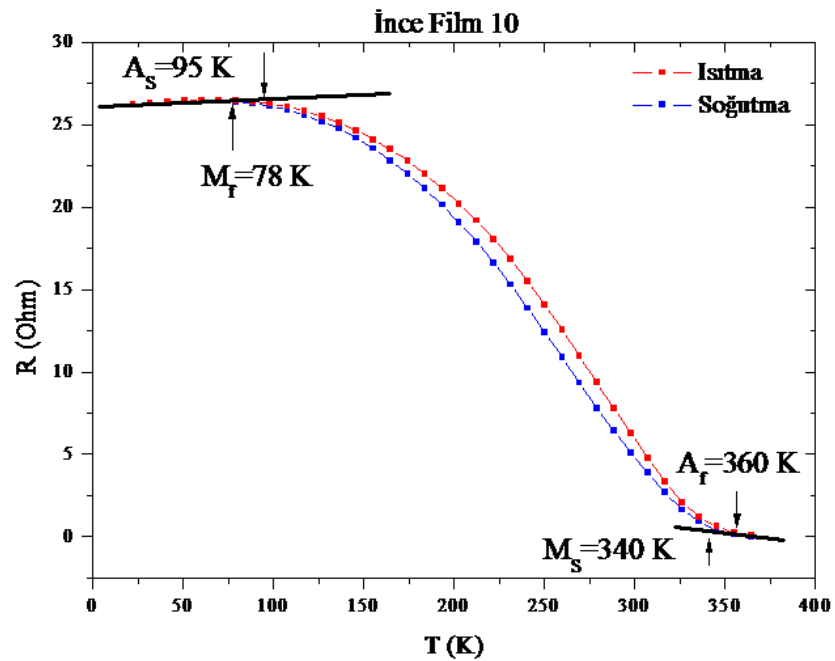
Şekil 4.43-Şekil 4.47'de farklı kalınlıklarda elde edilen manyetik ince filmlerin sıcaklığa bağlı direnç eğrilerine göre, sıcaklığın azalma yönünde yapısal faz geçiş başlama sıcaklığı 10 nm için yaklaşık oda sıcaklığında iken 100nm için 350'in üzerine kadar çıkmıştır. Sıcaklığın azalma yönünde ise yapısal geçişin bitiş sıcaklığı 10 nm için 65 K'den 100 nm'lik ince film için 140 K'e kadar çıkmıştır. Direnç ölçümlerine göre Martensitik dönüşüm sırasında gözlemlenen sıcaklık histeresisi, 10 nm için 225 K, 20 nm için 262 K, 35 nm için 252 K, 242 K ve 100 nm'lik ince film için 214 K gibi çok geniş bir sıcaklık aralığında olmaktadır.

R. Vishnoi ve arkadaşlarının yaptıkları çalışmada, 200 nm kalınlığındaki  $Ni_{51}Mn_{36}Sn_{13}$  ince filminde Martensitik faz geçişi, sıcaklığın azalma yönünde 135 K'de başlayıp 79 K'de bitmektedir yani 56 K'lik bir sıcaklık aralığında faz geçişi olmaktadır (Vishnoi vd. 2010). Bir başka benzer alaşımın 1  $\mu m$ 'lik ince filminde faz geçişi 150 K'de başlayıp 70 K'de bitmektedir. Bu ince film'de faz geçişi 80 K'lik sıcaklık aralığında olmaktadır (Vishnoi vd. 2010). 600 nm kalınlığındaki  $Ni_{49.5}Mn_{28.0}Ga_{22.5}$  manyetik ince filminde ise

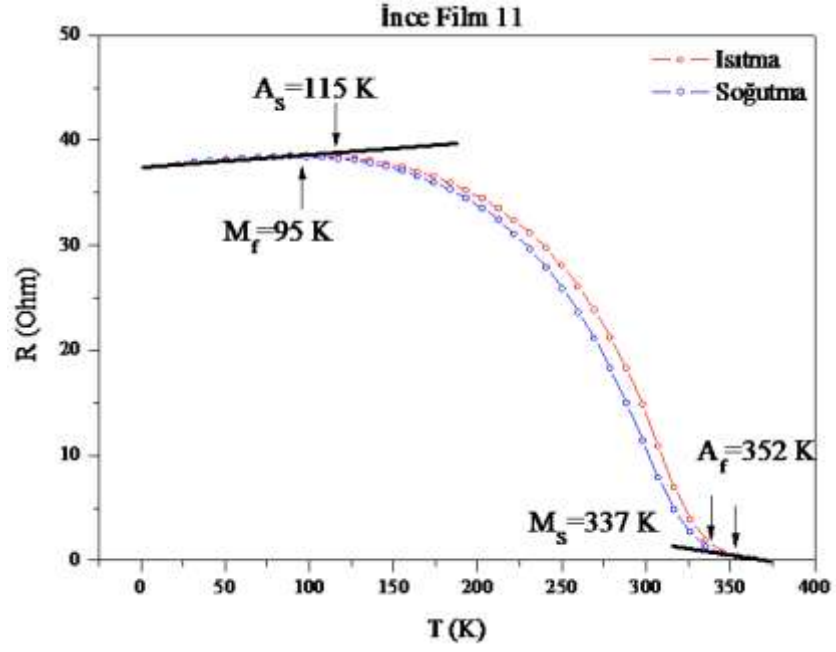
Martensitik faz geçişi olmakta ve direnç ölçümlerine göre, Martensitik faz geçişi 335 K ile 310 K arasında 25 K'lik bir sıcaklık aralığında olmaktadır (Golub vd. 2004).



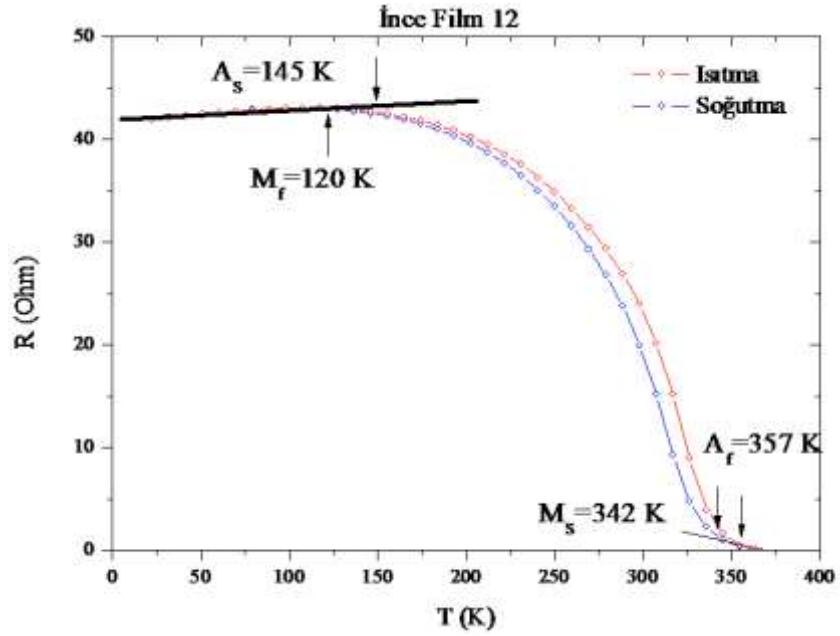
Şekil 4.43 İnce Film 9'un (10 nm) sıcaklığa bağlı direnç eğrisi



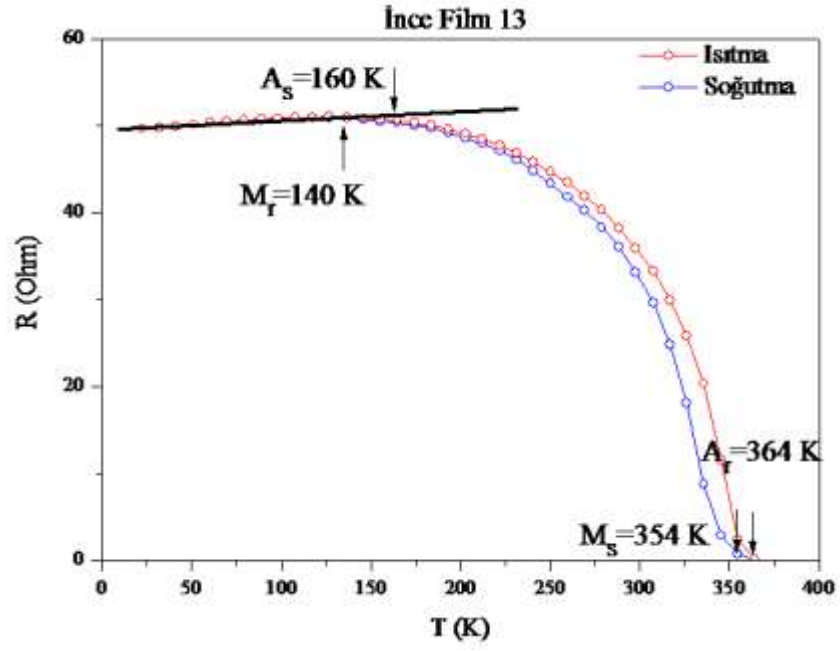
Şekil 4.44 İnce Film 10'un (20 nm) sıcaklığa bağlı direnç eğrisi



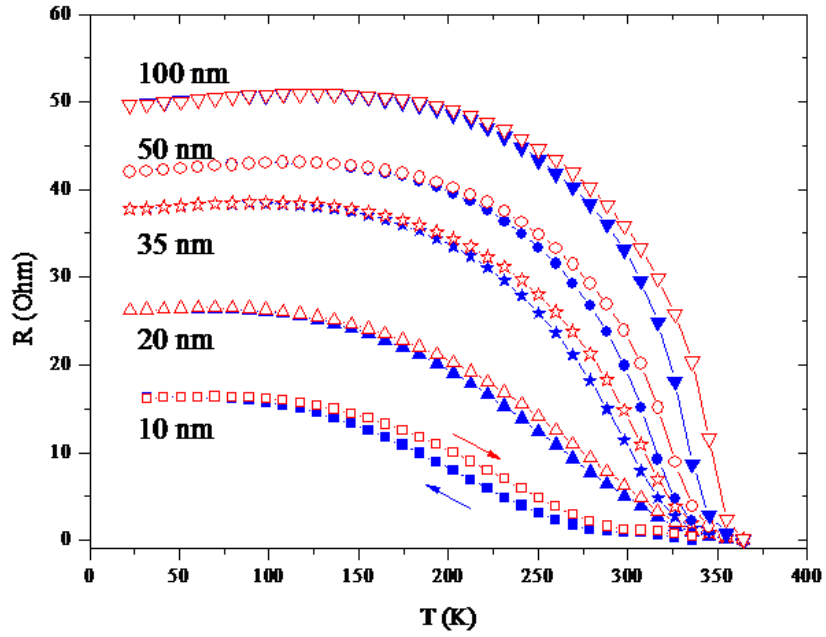
Şekil 4.45 İnce Film 11'in (35 nm) sıcaklığa bağlı direnç eğrisi



Şekil 4.46 İnce Film 12'nin (50 nm) sıcaklığa bağlı direnç eğrisi



Şekil 4.47 İnce Film 13'ün (100 nm) sıcaklığa bağlı direnç eğrisi

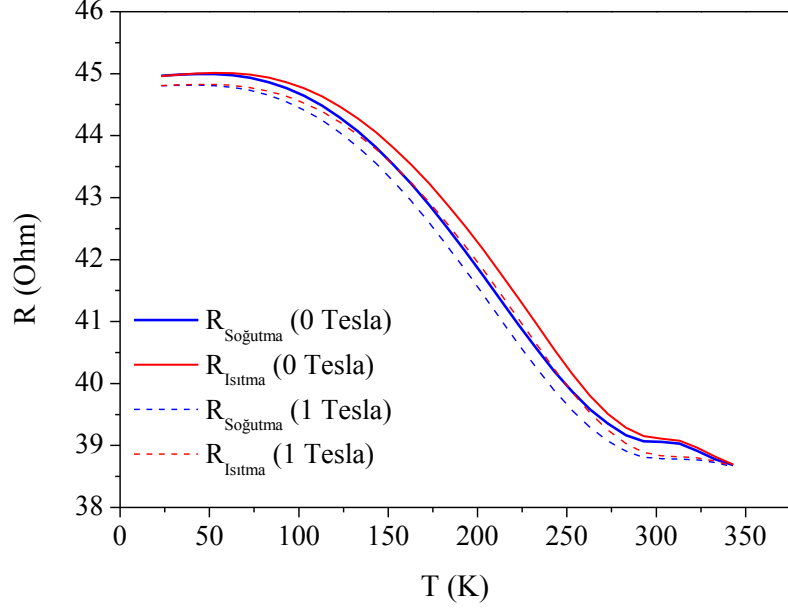


Şekil 4.48 Çeşitli kalınlıklardaki ince filmlerin sıcaklığa bağlı direnç eğrileri

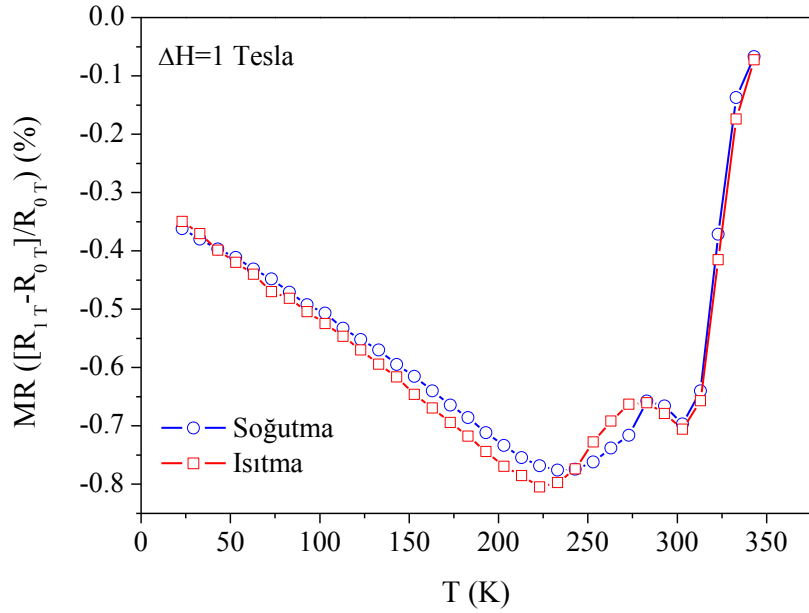
Sıfır manyetik altında sıcaklığa bağlı direnç ölçümü yapıldıktan sonra, Film 9 (10 nm) için 1T'lık manyetik alan altında sıcaklığa bağlı direnç ölçümü gerçekleştirilmiştir. Bu gerçekleştirilen ölçümün sonuçları şekil 4.49'de verilmektedir. Buna göre manyetik alan altında yapılan bu ölçümde direnç değerleri sıfır manyetik alan altındaki değere göre

daha düşük çıkmaktadır. Özellikle Curie sıcaklığı yakınlarında sıfır manyetik alan altında 300 K civarlarında ortaya çıkan dirençteki küçük değişim, manyetik alanla birlikte bastırılmaktadır. Şekil 4.50 ise, İnce film 9'un 1T'lık dış manyetik alan altında ısıtma ve soğutma kiplerinde alınmış sıcaklığa bağlı manyetodirenç değerleri verilmektedir. Buna göre, Curie sıcaklığı yakınlarında hem ısıtma yönünde hemde soğutma yönünde manyetodirenç hızlı bir şekilde azalmaktadır. Curie sıcaklığı yakınlarında herhangi bir sıcaklık histersisine rastlanmamıştır. Bu nedenle Curie sıcaklığı yakınlarındaki geçişin 2. dereceden faz geçişi olduğu söylenebilir. Martensit başlangıç (soğutma) ve Austenit bitiş (ısıtma) sıcaklıkları yakınlarında ise manyetodirenç en yüksek değerini almaktadır. Şekil 4.50 yakından incelendiğinde ise, Martensit başlangıç ve Austenit bitiş sıcaklıklarından itibaren manyetodirenç değerlerinde belirgin bir sıcaklık histersisis mevcuttur. Bu nedenle Martensit faz geçişinin 1. dereceden faz geçişi olduğu kanıtlanmıştır.

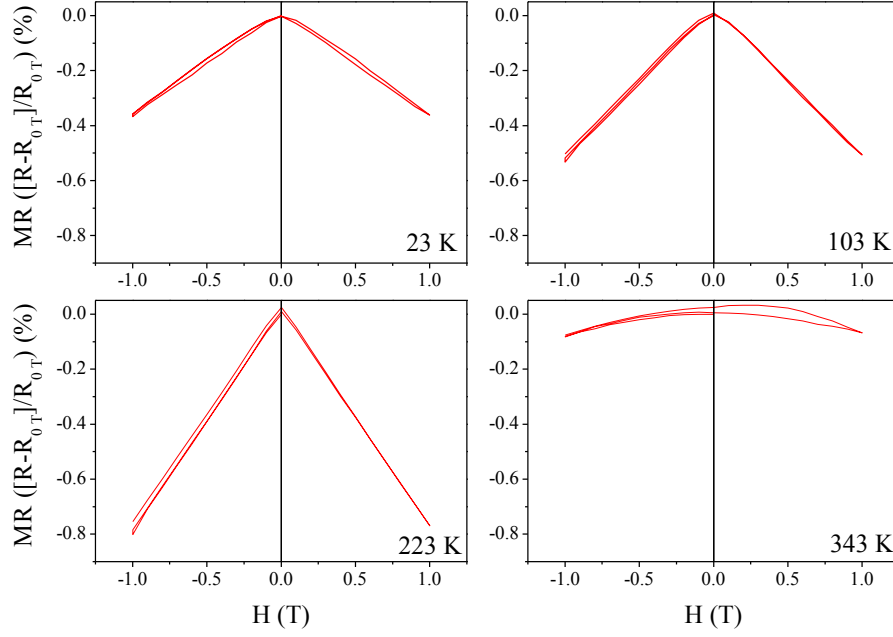
23 K, 103 K, 223 K ve 343 K'de dış manyetik alana bağlı manyeto-direnç ölçümleri yapılmıştır (Şekil 4.51). Tüm ölçümler dış manyetik alan değeri 0-1 T aralığında alınmıştır. Manyetodirenç değerleri hesaplanırken, denklem 3.17'den yararlanılmıştır. Bu denklemde manyetodirenç değeri, manyetik alan altındaki ölçümlerden sıfır manyetik alan altındaki ölçümler çıkartılıp, sıfır manyetik alan altındaki ölçümlere bölünmesiyle elde edilir. Şekil 4.51'e göre, Martensit bölgede (23K), Austenit bölgede (343 K) ve Austenit Martensit karışık bölgede (103 K ve 223 K) manyetodirenç değerleri manyetik alana bağlı olarak azalmaktadır. Ayrıca manyetik alana uygulandıktan sonra, manyetik alan kaldırılırken ince film 9'un manyetodirenç karakteristiği aynen devam etmektedir. Bu İnce film 9'un elastik özellikler göstermesi anlamına gelmektedir. Ayrıca, İnce film 9 manyetik ince filminin Austenit yapıda olduğu sıcaklıkta (343 K) en yüksek manyetodirenç değeri %-0.1 iken, Martensitik-Austenit karmaşık bölgenin tam içinde (223 K) en yüksek manyetodirenç değeri %-0.8 gözlemlenmiştir. Beklenildiği gibi Martensit-Austenit karışık bölgenin tam içinde manyetodirenç değeri, austenit bölgede elde edilen manyetodirenç değerine göre artmıştır. Martensit ve austenit karışık bölgedeki artışın nedeni, bu bölgedeki fonon ve elektronların karmaşık bir yapıda olması sonucu saçıcıların hem karakteristiğinin değişmesi hemde yoğunluğunun değişmesi olarak açıklanabilir.



Şekil 4.49 İnce Film 9'un sıfır ve 1T'lık dış manyetik alan altında alınmış direnç eğrileri



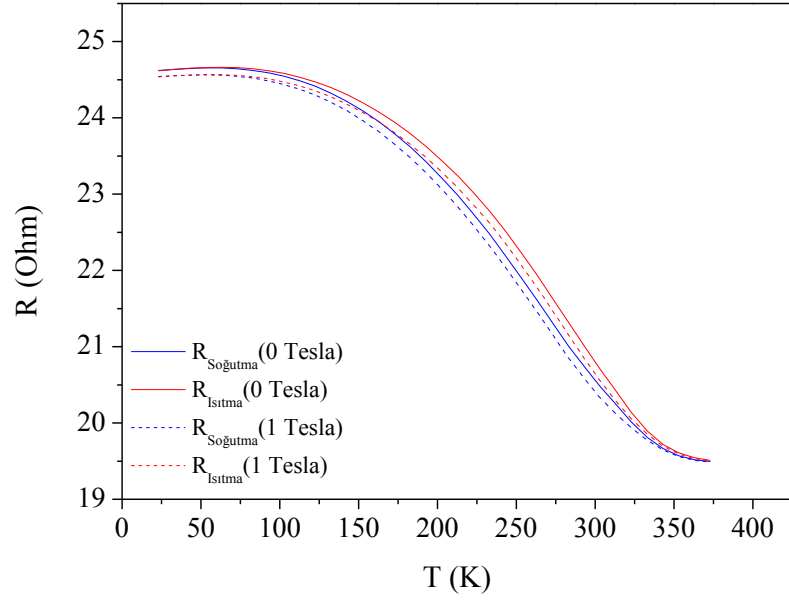
Şekil 4.50 İnce Film 9'un 1T'lık dış manyetik alan altında bulunmuş sıcaklığa bağlı manyetodirenç eğrileri



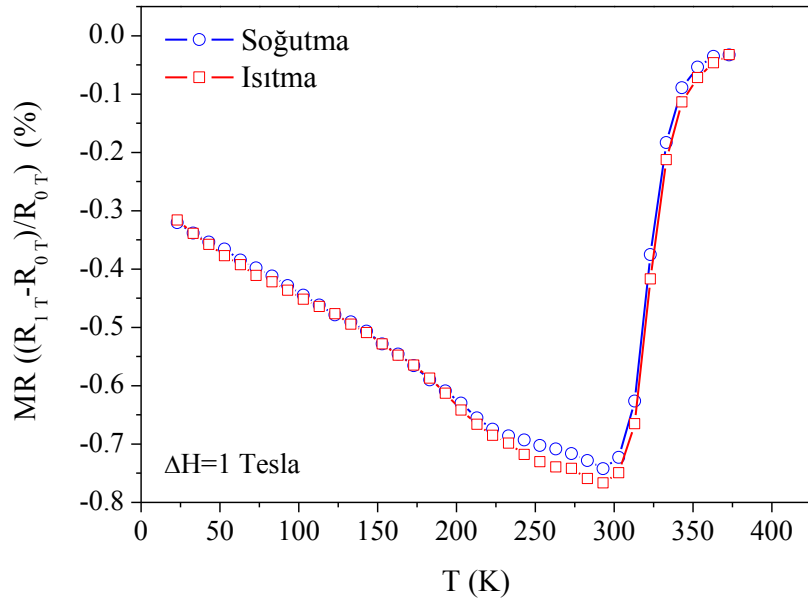
Şekil 4.51 İnce Film 9'un dış manyetik alana bağlı manyetodirenç eğrileri

Aynı şekilde sıfır manyetik alan altında sıcaklığa bağlı direnç ölçümü yapıldıktan sonra, Film 10 (20 nm) için 1T'lık manyetik alan altında sıcaklığa bağlı direnç ölçümü gerçekleştirilmiştir. Bu gerçekleştirilen ölçümün sonuçları şekil 4.52'de verilmektedir. Buna göre, 10 nm kalınlığında üretilen manyetik ince filmde elde edilen sonuçlar gibi, manyetik alan altında yapılan bu ölçümde direnç değerleri sıfır manyetik alan altındaki değere göre daha düşük çıkmaktadır. Şekil 4.53 ise, İnce film 10'un 1T'lık dış manyetik alan altında ısıtma ve soğutma yönlerinde alınmış sıcaklığa bağlı manyetodirenç değerleri verilmektedir. Buna göre, 10 nm kalınlığında üretilen manyetik ince filmdeki gibi, Curie sıcaklığı yakınlarında hem ısıtma kipinde hemde soğutma kipinde manyetodirenç hızlı bir şekilde azalmaktadır. Curie sıcaklığı yakınlarında herhangi bir sıcaklık histeresis gözlemlenmemiştir. Bu nedenle Curie sıcaklığı yakınlarındaki geçişin 2. dereceden faz geçişi olduğu söyleyebiliriz. Yine 10 nm kalınlığında elde edilen manyetik ince filmdeki gibi, Martensit başlangıç (soğutma) ve Austenit bitiş (ısıtma) sıcaklıkları yakınlarında ise manyetodirenç en yüksek değerini almaktadır. Şekil 4.45 yakından incelendiğinde ise, Martensit başlangıç ve Austenit bitiş sıcaklıklarından itibaren manyetodirenç değerlerinde belirgin bir sıcaklık histeresis

mevcuttur. Bu nedenle de Martensit faz geçişinin 1. dereceden faz geçişi olduğu söylenmektedir.

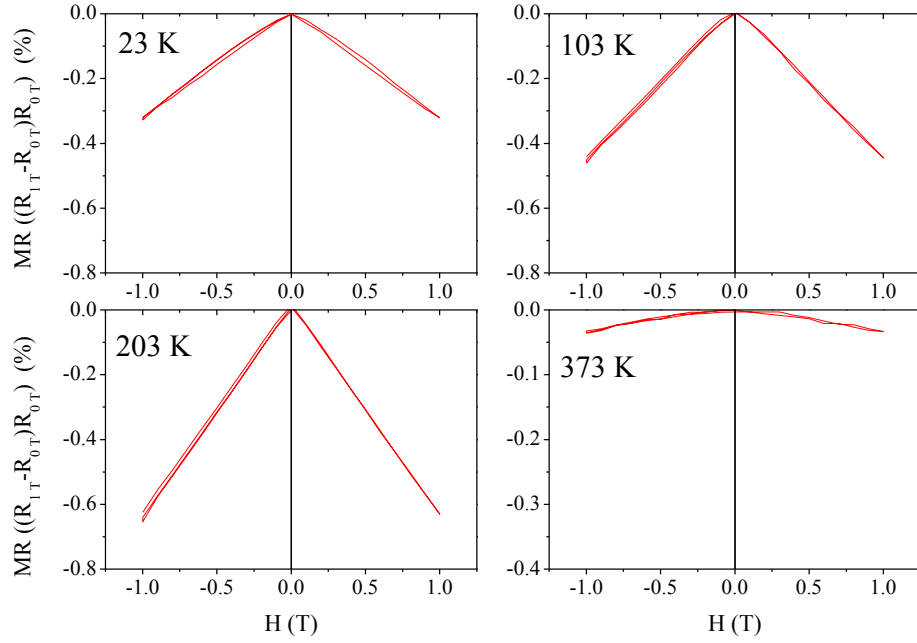


Şekil 4.52 İnce Film 10'un sıcaklığa ve dış manyetik alana bağlı manyetodirenç eğrileri



Şekil 4.53 İnce Film 10'un dış manyetik alana bağlı manyetodirenç eğrileri





Şekil 4.54 İnce Film 10'un dış manyetik alana bağlı manyetodirenç eğrileri

10 nm ve 20 nm kalınlığında üretilen manyetik ince filmlerin alana bağlı manyetodirenç etkisini daha iyi anlayabilmek için, Austenit, Martensit ve Martensit-Austenit karışık bölgelerde elde edilen manyetodirenç deneysel verileri manyetik alan bağımlılığı incelemek gerekmektedir. Bu amaçla, 10 nm ve 20 nm kalınlığındaki ince filmlerin bu bölgelerdeki manyetodirenç değerleri alana bağlı olarak ( $H^n$ ) uyarlanmıştır. S.Singh ve çalışma arkadaşlarının hacimsel alaşımlarda kullandıkları fit fonksiyonu seçilmiştir (J. Dubowik vd. 2012). Bu alana bağlı manyetodirenç fit fonksiyonu,

$$\frac{\Delta\rho}{\rho} = -\alpha(\mu_0 H)^n \quad (4.4)$$

'dur. Burada,  $\alpha$ , manyetodirenç değerinin şiddetini vermektedir. Bulunan değerler Çizelge 4.7'de verilmiştir. Bulunan değerler literatürdeki benzer çalışmadaki değerlerle aynı mertebede çıkmıştır.  $\alpha$  değeri özellikle Austenit bölgede çok daha küçük çıkmıştır. Bunun asıl nedeni, Austenit fazda elektronlar daha az sayıda saçılmakta bunun sonucunda da dirençteki değişim alana bağlı daha küçük gerçekleşmektedir.  $\alpha$  değeri

Austenit Martensit bölgede çok büyük çıkmıştır. Çünkü, bu bölgedeki elektron saçıcıların hem cinsi hem de sayısı oldukça fazladır ve bu durum elektronun ortalama serbest yolunu artırmaktadır. Ni-Mn-Sn ve Ni-Mn-Ga hacimsel alaşımlarında benzer sonuçlar elde edilmiştir (Dubowik vd. 2012, Porcar vd. 2012 Wang vd 2013, Krenke vd. 2010). Bu alaşımlarda benzer sonuç, s durumlarında bulunan iletim elektronlarının yerleşmiş d durumlarından saçılmasıyla açıklanmaktadır.

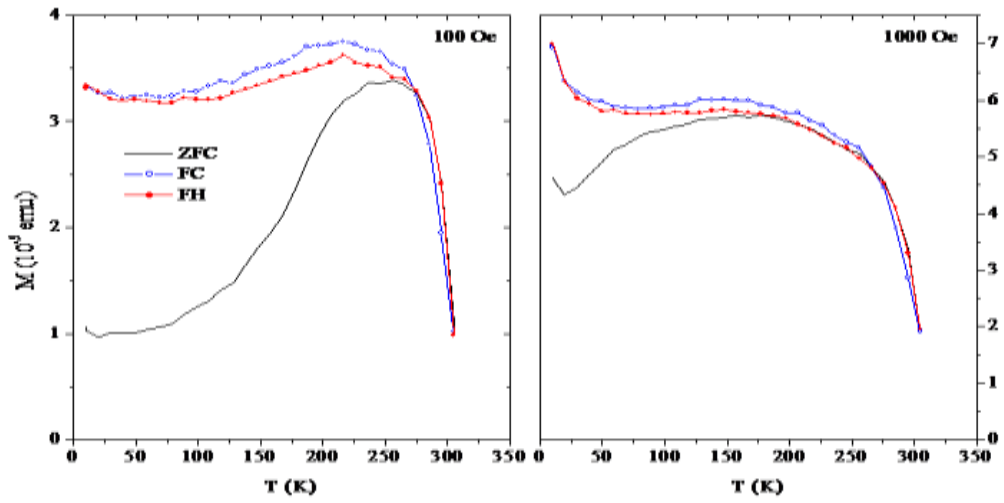
Çizelge 4.7 Denklem 4.4 ile hesaplanan parametreler ve literatürde bulunan değerler

Örnek	Austenit Bölge		Austenit Martensit Karışık Bölge		Martensit Bölge	
	$\alpha$	n	$\alpha$	n	$\alpha$	n
10 nm Man. İnce Film	0.0008	1.65	0.2	0.76	0.09	1.35
20 nm Man. İnce Film	0.0007	1.63	0.2	0.77	0.08	1.37
Ni <sub>50</sub> Mn <sub>36</sub> Sn <sub>14</sub> (Hacimsel)	0.0007	1.77	0.25	0.83	0.12	1.49
Ni <sub>50</sub> Mn <sub>32</sub> Sn <sub>18</sub> (Hacimsel)	0.0015	1.67	0.22	0.89	0.10	1.52

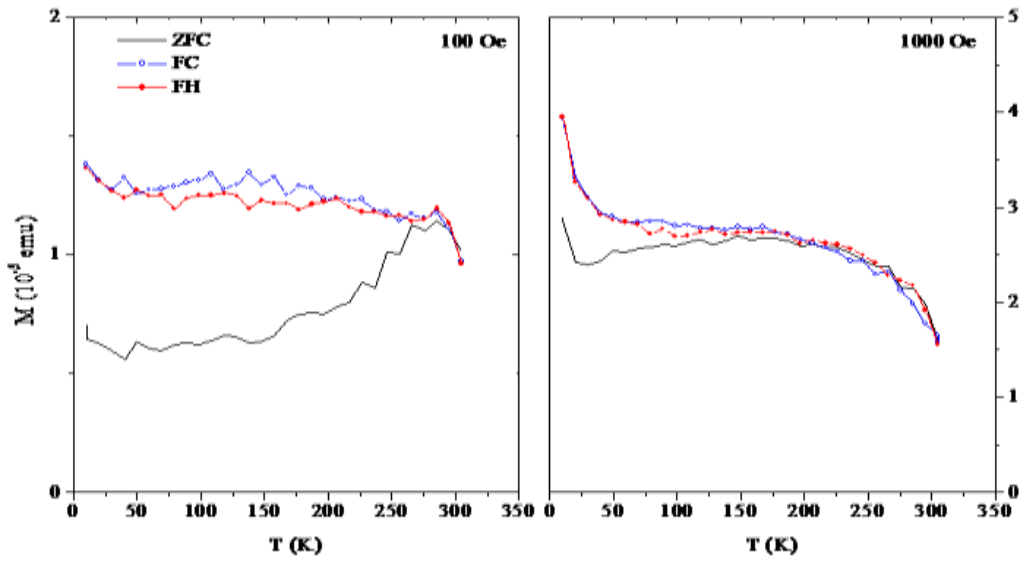
#### 4.2.7 Ni<sub>50</sub>Mn<sub>35</sub>Sn<sub>15</sub> kompozisyonunda ve farklı kalınlıklarda üretilen manyetik özelliklerinin karakterizasyonu:

Üretilen bu manyetik ince filmlerin (İnce Film 9, İnce Film 10, İnce Film 13) manyetik özelliklerini belirlemek için Hacettepe Üniversitesi bünyesinde bulunan Fiziksel Özellikler Ölçüm Sistemi kullanılarak manyetik ölçümler yapılmıştır. 10-310 K sıcaklık aralığında 100 Oe ve 1000 Oe manyetik alan altından sıfır alan soğutmalı (ZFC), alan ısıtmalı (FH) ve alan soğutmalı (FC) kiplerde, sıcaklığa bağlı mıknatıslanma (M(T)) ölçümleri yapılmıştır. (Şekil 4.55-Şekil 4.57). Şekil 4.55-şekil 4.57'deki M(T) eğrileri, direnç ölçümünde gözlenen Martensit-Austenit yapısal faz geçişini doğrulamaktadır. Özellikle İnce Film 11'in M(T) eğrisindeki FC ve FH arasındaki sıcaklık histerisisi bu alaşımdaki Martensit faz geçişini doğrulamaktadır. Yani bu alaşım yüksek sıcaklık fazı olan Austenit fazdan alçak sıcaklık fazı olan Martensit faza çok geniş bir sıcaklık aralığında geçmektedir. Manyetizasyon ölçümleri direnç ölçümlerinden elde edilen sonuçları doğrulamaktadır. Manyetik ölçümler cihazdaki problemden dolayı 300-10 K

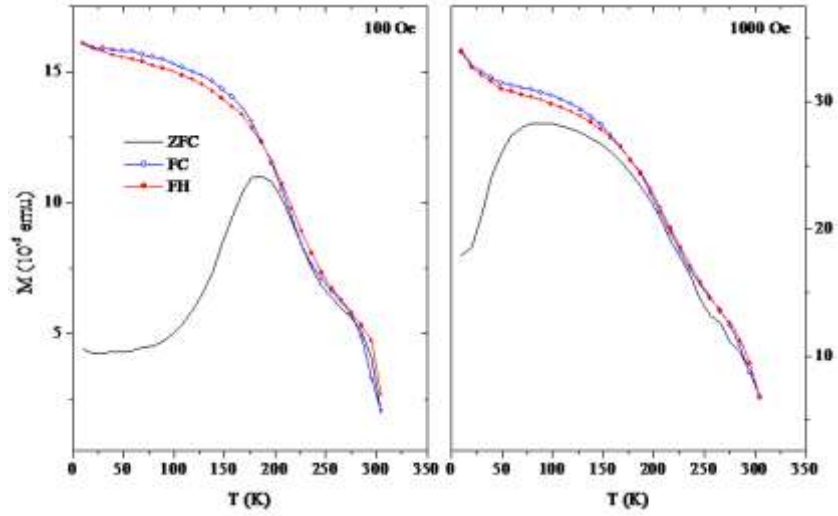
sıcaklık aralığında ölçülmüştür. Bu yüzden 300 K civarlarında FC ile FH birleşmiş gözükse de aslında bu iki eğri daha yüksek sıcaklıklar da birleşmektedir. Yani yapısal dönüşüm alçak sıcaklıklarda başlayıp oda sıcaklığının üzerinde son bulmaktadır. Vishnoi ve arkadaşlarının yaptığı çalışmaya göre 1  $\mu\text{m}$  Ni-Mn-Sn kalınlığındaki ince filmde FC ile FH manyetizasyon eğrisi 150-70 K sıcaklık aralığında birbirinden ayrılmaktadır ve Martensit dönüşüm bu sıcaklık aralığında olmaktadır (Vishnoi vd. 2010).



Şekil 4.55 İnce Film 9'in sıcaklığa bağlı mıknatıslanma eğrisi.



Şekil 4.56 İnce Film 10'nin sıcaklığa bağlı manyetik eğrisi.



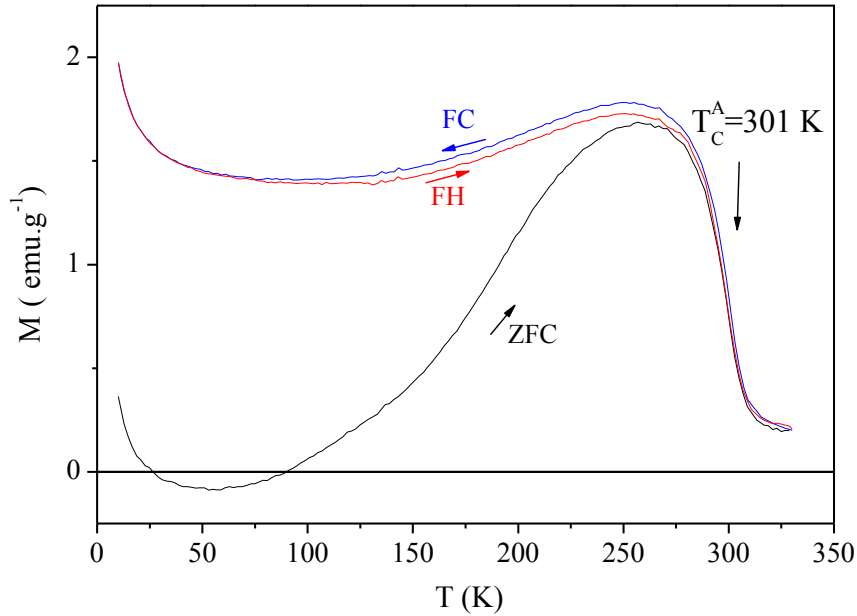
Şekil 4.57 İnce Film 13'ün sıcaklığa bağlı manyetik eğrisi

Titreşimli örnek manyetometresi ile İnce Film 9 (10 nm), İnce Film 10 (20 nm), ve İnce Film 13 (100 nm) için mıknatıslanma eğrileri elde edilmiştir. Ancak bilindiği gibi üretilen manyetik ince filmlerin kalınlıkları nm mertebesindedir. Bu nedenle örnekten algılanabilen mıknatıslanma sinyalleri çok küçüktür. Bu nedenle bu ölçümlerden elde edilen mıknatıslanma verilerinin duyarlılığı yeterli bulunmamıştır.

Bu mıknatıslanma ölçümleri manyetik duyarlılığı  $10^{-9}$  emu mertebesinde ve 330 K sıcaklığa kadar çıkabilen SQUID (Helmholtz-Zentrum Dresden Rossendorf Araştırma Merkezinde) ile tekrarlanmıştır. SQUID ile alınan mıknatıslanma ölçümleri İnce film 9, İnce film 10, İnce film 11, İnce film 12 ve İnce film 13 için şekil 4.58-4.61'te ayrıntılı olarak verilmiştir. Alınan ölçümler sıfır alan soğutmalı (ZFC), alan ısıtmalı (FH) ve alan soğutmalı (FC) kiplerde yapılmıştır. Uygulanan dış manyetik alan 150 Oe olarak seçilmiş ve 5-320 K sıcaklık aralığında manyetik ölçümler alınmıştır. Buna göre, İnce Film 9 (10 nm) yaklaşık 301 K civarlarında Austenit fazın Curie ( $T_C^A$ ) sıcaklığı bulunmuştur.  $T_C^A$  sıcaklığından daha düşük sıcaklıklarda ise FC ve FH kiplerde alınan ölçümler birbirinden ayrık çıkmıştır. Martensit faz dönüşümü gösteren sistem, FH ve FC yönlerinde farklı iki potansiyel kuyusu ile karşılaşmaktadır. Bu kuyuları aşabilmek için farklı iki enerjiye sahip olması gerekmektedir (Şekil 2.5). Burada gerçekleşen sıcaklık histeresisinin sebebi budur. Bu yapısal dönüşümün bir kanıtıdır. Ayrıca, literatürde oldukça fazla gözlenmem başka bir olgu ise, martensitik bölgenin

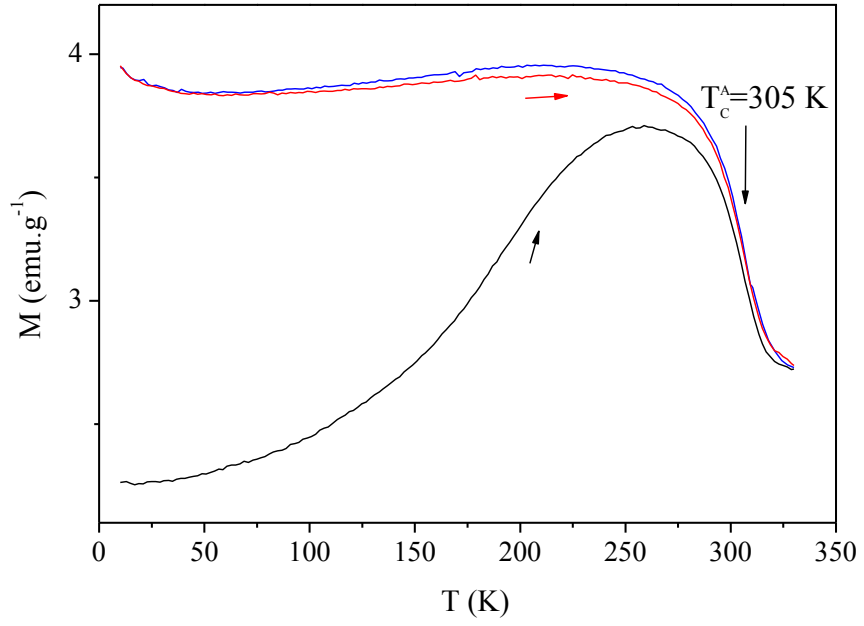
mıknatıslanma Austenit bölgenin mıknatıslanmasından daha küçük çıkmıştır. Örneğin 10 nm kalınlığında üretilen manyetik ince filmin, martensitik faz dönüşümün başladığı sıcaklık yakınlarında (280 K) mıknatıslanma azalmaktadır. Bu elde edilen sonuçlar diğer örneklerde de benzer şekilde gözlemlenmektedir.

Ayrıca ZFC ölçümü 10 ve 20 nm kalınlığındaki manyetik ince filmler için Austenit Curie sıcaklığından sonra ve 35, 50 ve 100 nm kalınlığındaki manyetik ince filmler için ise Martensit Curie sıcaklığından sonra FH eğrilerini izlememektedir. Bunun nedeni manyetik ince filmlerde bulunan antiferromanyetik birleşenden kaynaklanmaktadır. Bu antiferromanyetik birleşen ferromanyetik bölgeleri kendi birleşeni gibi davranmasına zorlamaktadır. Bu nedenle daha düşük bir mıknatıslanma elde edilmesine neden olmaktadır. Bu olay literatürde spinlerin çakılması yada kilitlenmesi şeklinde açıklanan bir olgudur (Krenke 2006, Krenke 2010).



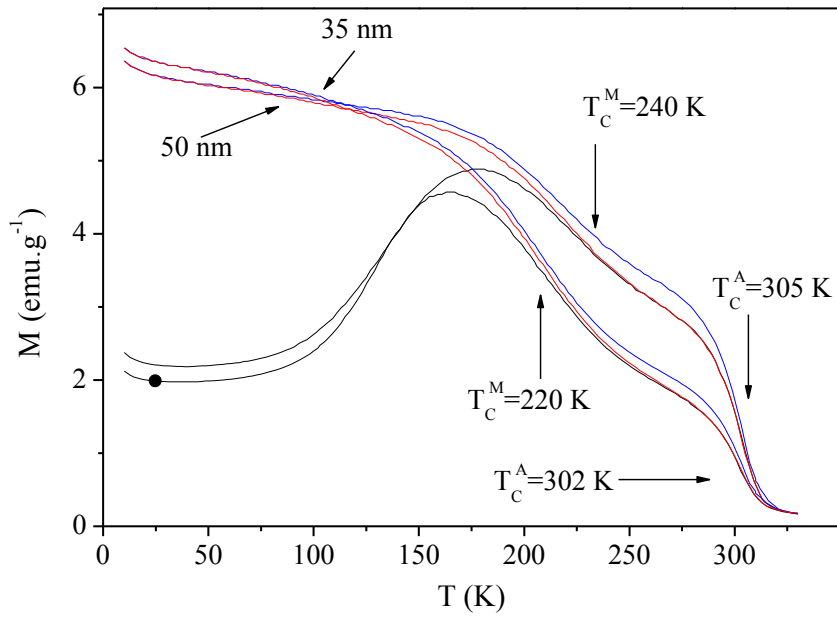
Şekil 4.58 İnce Film 9 (10 nm) için elde edilen mıknatıslanma eğrileri

$T_C^A$ =Austenit fazın Curie sıcaklığıdır



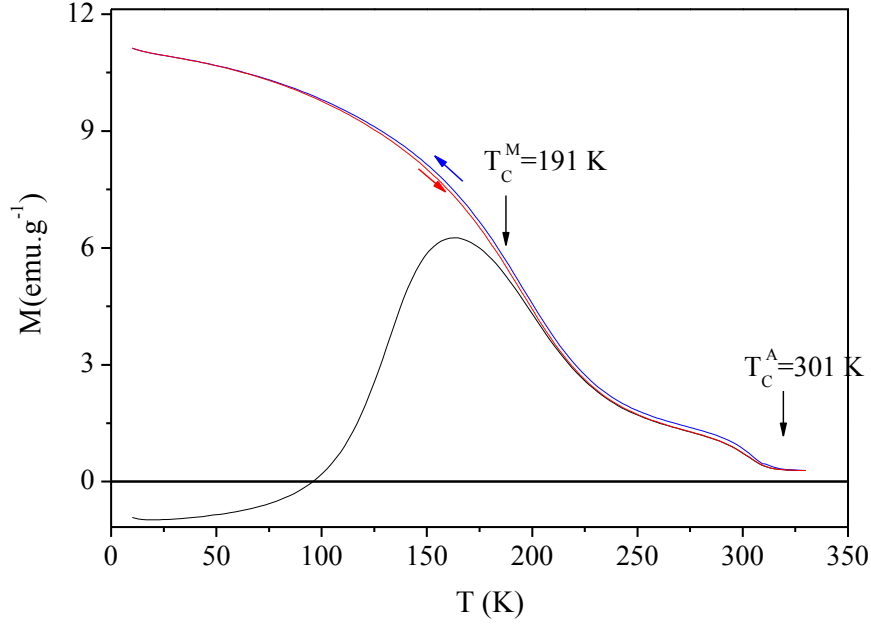
Şekil 4.59 İnce Film 10 (20 nm) için elde edilen sıcaklığa bağlı mıknatıslanma eğrileri.

$T_C^A$ =Austenit fazın Curie sıcaklığıdır



Şekil 4.60 İnce Film 11 (35 nm) ve İnce Film 12 (50 nm) elde edilen sıcaklığa bağlı mıknatıslanma eğrileri

$T_C^A$ =Austenit fazın Curie sıcaklığı,  $T_C^M$ = Martensitik fazın Curie sıcaklığıdır

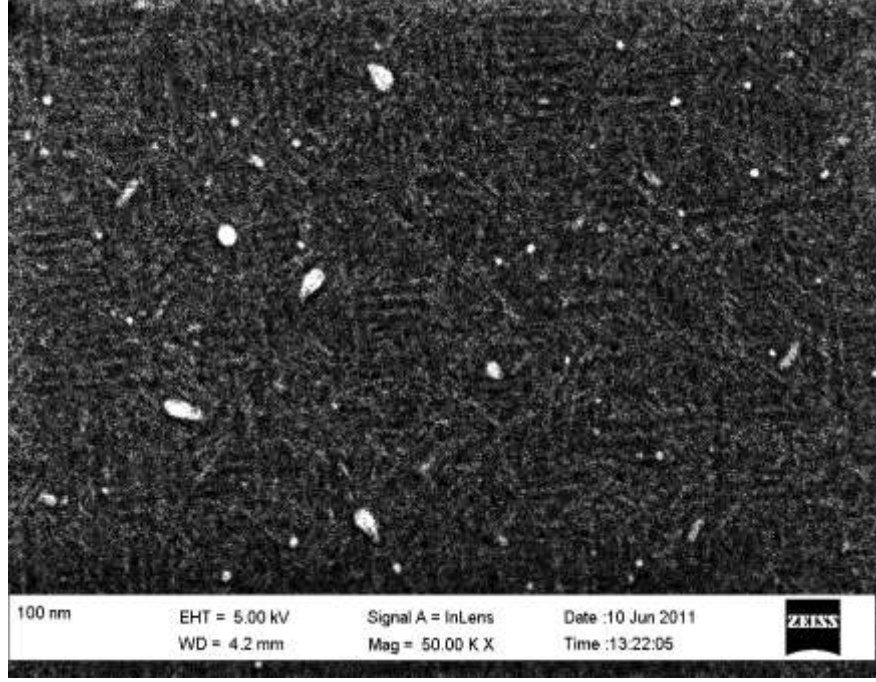


Şekil 4.61. İnce Film 13 (100 nm) için elde edilen mıknatıslanma eğrileri.

$T_C^A$ =Austenit fazın Curie sıcaklığı,  $T_C^M$ = Martensitik fazın Curie sıcaklığıdır.

#### 4.2.8 $Ni_{50}Mn_{35}Sn_{15}$ Kompozisyonunda ve 100 nm Kalınlığındaki Üretilen Manyetik İnce Filmin SEM Analizi:

Elde edilen ince filmlerden oda sıcaklığında Martensit bölgede olan 100 nm kalınlığında olan manyetik ince filmin yüzeyindeki MgO tabakası buharlaştırılmıştır. Bu tabaka ince filmi oksitlenmeye karşı korumak için uygulanmıştır. Böylece sadece ince filmin yüzeyi Taramalı Elektron Mikroskobu-SEM’de incelenmeye uygun hale getirilmiştir. Daha sonra ince filmin yüzeyi SEM’de oda sıcaklığında incelenmiştir. Elde edilen SEM resmi şekil 4.62’de görülmektedir. Bu SEM resminde görüldüğü gibi ince film yüzeyinde Martensit durumunda ortaya çıkan ikizlenmeler vardır (Krenke vd. 2006). Böylece alaşımın oda sıcaklığında faz geçişi gösterdiği ispatlanmıştır.



Şekil 4.62 İnce Film 13'ün oda sıcaklığındaki SEM resmi.

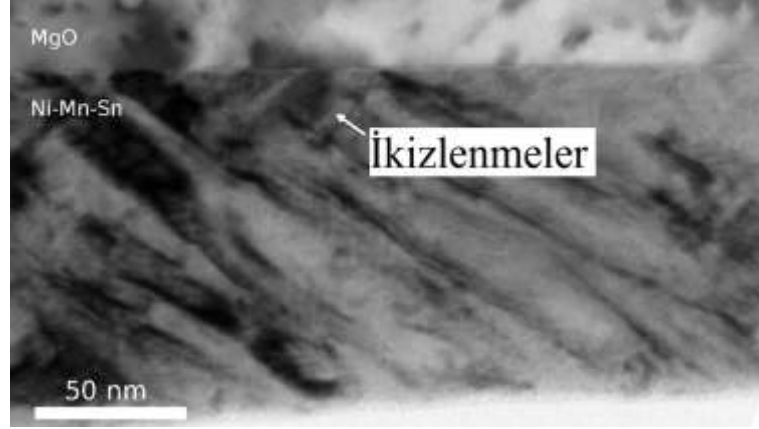
#### 4.2.9 $Ni_{50}Mn_{35}Sn_{15}$ kompozisyonunda ve 100 nm kalınlığındaki üretilen manyetik ince filmin TEM analizi:

İnce Film 13'un Yüksek Çözünürlüklü Geçirimli Elektron Mikroskobu-HRTEM analizi Viyana Teknoloji Üniversitesinde TECNAI F20/field emitter/EDX/GIF/HAADF ile yapılmıştır. Bu analiz sonucunda elde edilen HRTEM resmi ve elektron kırınım deseni Şekil 4.63 ve 4.64'te görülmektedir. Şekil 4.63'e göre, MgO alttaş üzerine Ni-Mn-Sn ince filmini epitaksiyel olarak büyüdüğünü göstermektedir (Chernenko vd 2011). İnce film 13'un sıcaklığa bağlı geçirimli elektron mikroskobu deneyleri yapılmış ve elektron kırınım deneyleri şekil 4.65 ve 4.66'de verilmiştir.

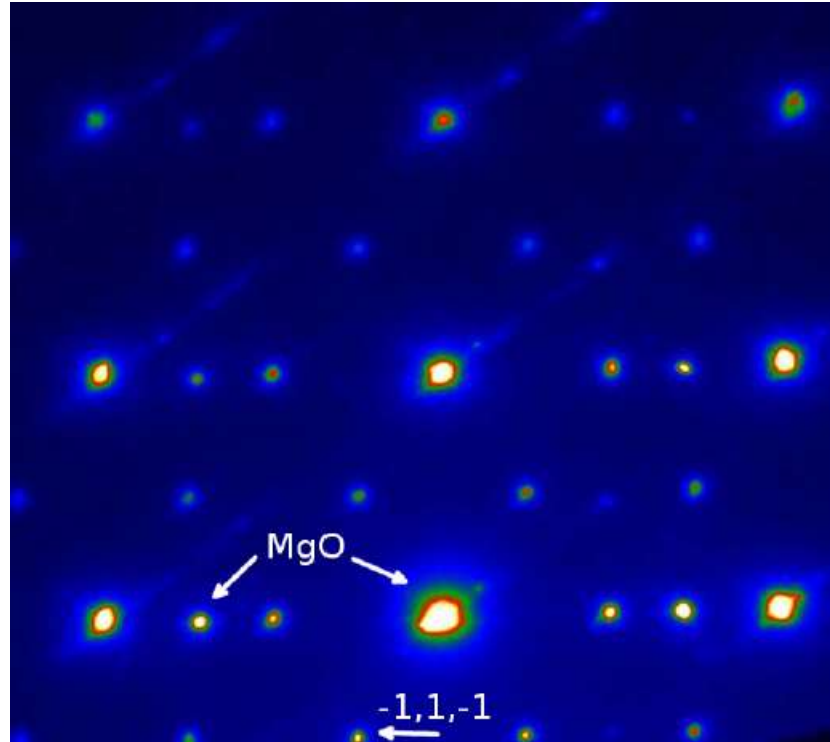
Oda sıcaklığında ve düşük sıcaklıklarda alınan elektron kırınım verileri, elektron kırınım veritabanı bulunan elektron demeti kırınım hesaplama (Electron beam diffraction calculation) programı (<http://terpconnect.umd.edu/~zhangx/html/TEM.xml>, 2011) ile karşılaştırılmıştır. Buna göre, beklendiği gibi, manyetik ince filmin yüksek sıcaklık Austenit olduğu bölgede kübik yapı, düşük sıcaklık Martensitik bölgede ise 4O yapısı gözlemlenmiştir. Daha önceden sıcaklığa ve manyetik alan bağlı direnç ölçümü



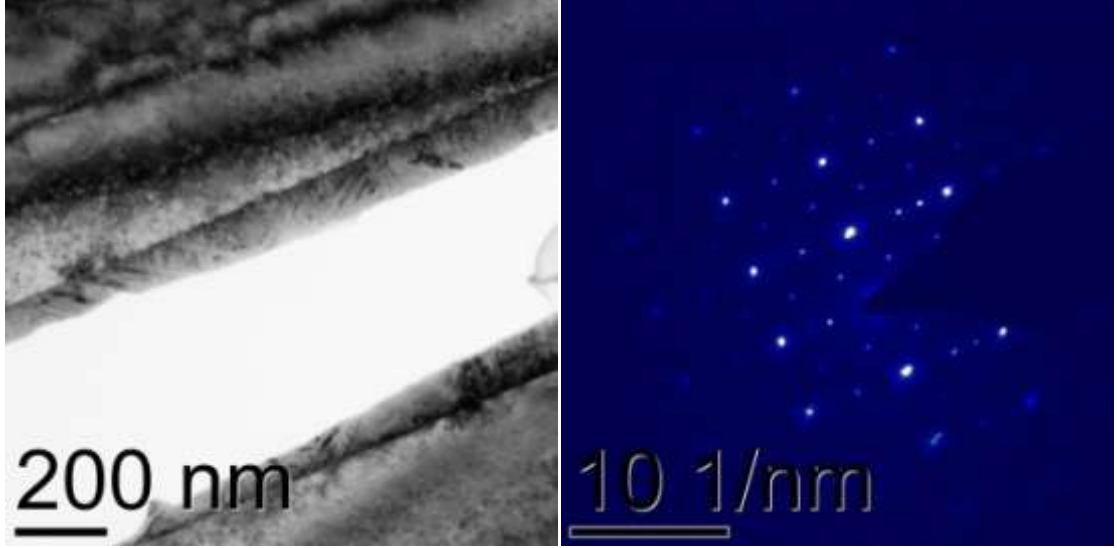
ve sıcaklığa manyetik ölçümlerle kanıtlanan Martensitik faz dönüşümü, elektron kırınım deneyleriyle de yapısal yönden Martensitik faz dönüşümü kanıtlanmıştır.



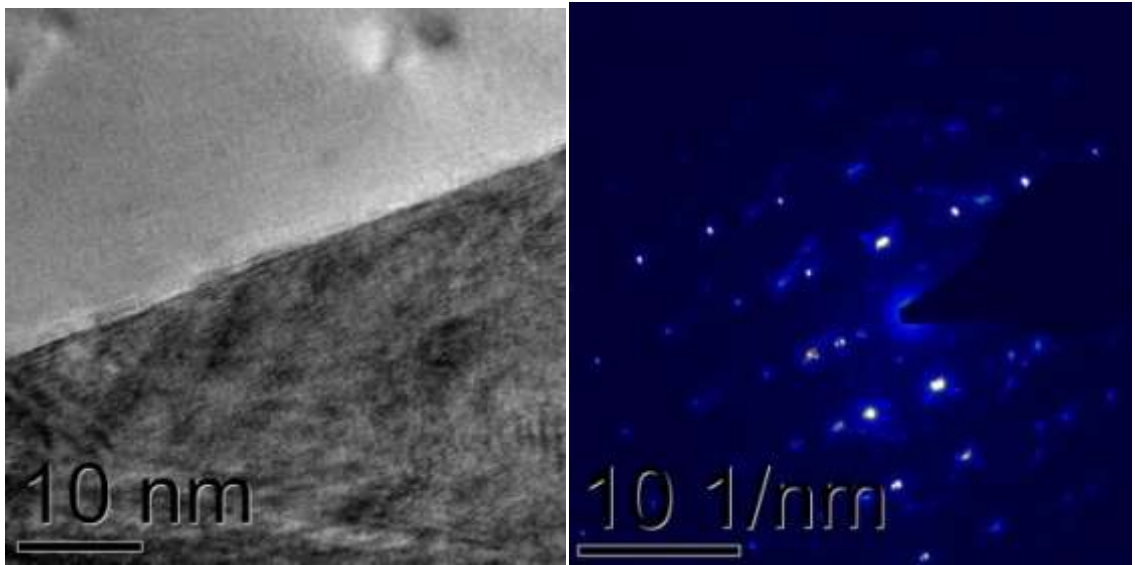
Şekil 4.63 İnce Film 10'un HRTEM resmi



Şekil 4.64 İnce film 13'un elektron kırınım deseni.



Şekil 4.65 İnce film 12'nin oda sıcaklığında alınmış HRTEM resmi ve elektron kırınım deseni.



Şekil 4.66 İnce film 12'nin -185 C alınmış HRTEM resmi ve elektron kırınım deseni.

#### 4.2.10 $Ni_{50}Mn_{34}Sn_{16}$ kompozisyonunda ve farklı kalınlıklarda manyetik ince filmlerin elde edilmesi ve yapısal karakterizasyonu:

Değişik kalınlıklarda üretilen kompozisyon dışı  $Ni_{50}Mn_{34}Sn_{16}$  sisteminin manyetik ince filmleri, Bielefeld Üniversitesi Nano Fizik bölümündeki manyetik alanda sıçratma cihazı yardımıyla elde edilmiştir.

Manyetik ince filmleri elde etmek için manyetik alanda sıçratma cihazında Ni, Mn ve Sn hedefleri kullanılmış ve bu manyetik ince filmler örgü uyumsuzluğunun en aza indirmek amacıyla MgO (100) tek kristal alt taş üzerine büyütülmüştür.  $Ni_{50}Mn_{34}Sn_{16}$  kompozisyonunda üretilen manyetik ince filmlerin verileri ışığında, kompozisyon dışı  $Ni_{50}Mn_{34}Sn_{16}$  sisteminde üretilen manyetik ince filmleri, farklı sıçratma zamanları seçilerek, manyetik ince film kalınlıkları 20 nm, 35 nm, 50 nm, 75 nm, 100 nm ve 200 nm olarak üretilmiştir. Farklı kalınlıklarda üretilen manyetik ince filmler kalınlıklarına göre yeniden isimlendirilmiştir.

- **20 nm** kalınlığında üretilen örnek, **İnce Film 14**
- **35 nm** kalınlığında üretilen örnek, **İnce Film 15**
- **50 nm** kalınlığında üretilen örnek, **İnce Film 16**
- **100 nm** kalınlığında üretilen örnek, **İnce Film 17**
- **200 nm** kalınlığında üretilen örnek, **İnce Film 18**

İstenilen kompozisyondaki ince filmleri elde etmek için:

- Ni, Mn ve Sn hedeflerine uygulanan gerilim, akım ve güç değerleri,
- Alttaş sıcaklığı,
- Alttaşın dönme hızı,
- Sıçratma süresi,

gibi parametrelerin en uygun değerleri belirlenmişti. Bu bilgiler kullanılarak, bu dönemde değişik kalınlıklardaki ince filmler elde edilmiştir. Elde edilen her bir manyetik ince filmin üzerine dış etkenler nedeni ile aşınmasını ve bozunmasını, ayrıca

kristal yapının bozulmasını önlemek için koruyucu tabaka olarak, ince film üretildikten sonra 2 nm kalınlığında MgO kaplanmıştır.

Çizelge 4.8’de farklı kalınlıklarda üretilen manyetik ince filmlerin üretim parametreleri verilmektedir. Buna göre, bu elde edilmek istenilen yeni manyetik ince filmlerde Mn azaltması ve Sn artması uygulanmıştır. Bu kapsamda uygulanan güç değerleri,  $Ni_{50}Mn_{35}Sn_{15}$  kompozisyonunda elde edilen manyetik ince filmlerle bulunan en uygun değerlerle aynıdır. Farklı kalınlıklarda manyetik ince filmler elde edebilmek amacıyla sıçratma süreleri birbirinden farklıdır. Bu sıçratma süreleri bulunurken ise Bielefeld Üniversitesinde manyetik alanda sıçratma cihazı için bulunan daha önceden teorik olarak hesaplanan süreler ve yapılan ön deneylerin sonuçları kullanılmıştır. Ayrıca ince film üretiminden önce MgO alttaşın yüzeyindeki olası kirliliklerden kurtulmak için MgO alttaş temizlenip manyetik ince film üretim sistemine yerleştirilmiştir.

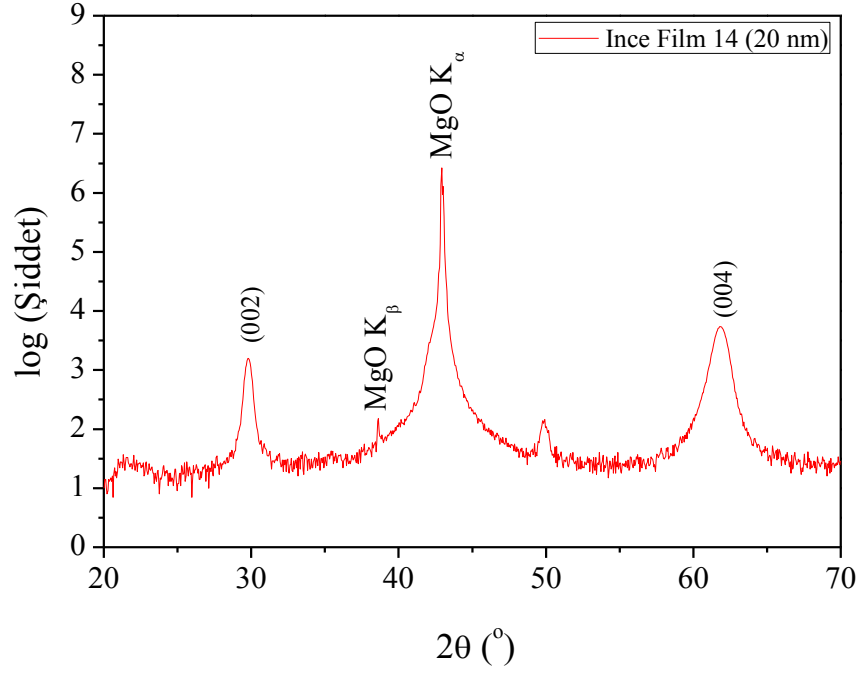
Çizelge 4.8  $Ni_{50}Mn_{34}Sn_{16}$  manyetik ince filmini farklı kalınlıklarda elde etme için kullanılan parametreler

Örnek İsmi	İnce Film 14	İnce Film 15	İnce Film 16	İnce Film 17	İnce Film 18
<b>Hedef 1</b>	Ni	Ni	Ni	Ni	Ni
<b>Hedef 1 için Güç (Watt)</b>	263	263	263	263	263
<b>Hedef 1 için Gerilim (V)</b>	467	467	46	467	475
<b>Hedef 2</b>	Mn	Mn	Mn	Mn	Mn
<b>Hedef 2 için Güç (Watt)</b>	143	143	143	143	143
<b>Hedef 2 için Gerilim (V)</b>	358	358	358	358	358
<b>Hedef 3</b>	Sn	Sn	Sn	Sn	Sn
<b>Hedef 3 için Güç (Watt)</b>	48	48	48	48	48
<b>Hedef 3 için Gerilim (V)</b>	351	351	351	351	351
<b>Hedef Sıçratma Süresi (s)</b>	30	62	155	302	605

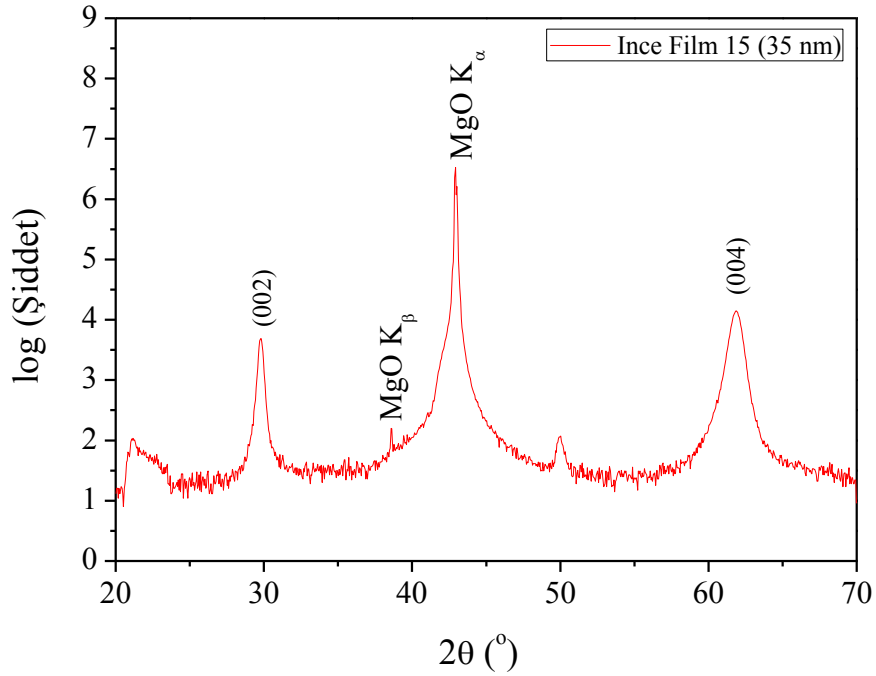
<b>Alttaş Sıcaklık (°C)</b>	600	600	600	600	600
<b>Alttaşın Dönme Hızı (m/s)</b>	20	20	20	20	20
<b>Alttaş</b>	MgO	MgO	MgO	MgO	MgO
<b>İnce Film Kalınlığı (nm)</b>	20	35	50	100	200
<b>2 nm MgO Koruyucu Tabaka</b>	Var	Var	Var	Var	Var

Üretilen bu farklı kalınlıklardaki  $Ni_{50}Mn_{34}Sn_{16}$  kompozisyonuna ait manyetik ince filmlerin yapısal ve kompozisyon karakterizasyonlarını belirlemek için x-ışını kırınımı-XRD, x-ışını reflektometri-XRR ve x-ışını floresans-XRF spektrometre ölçümleri gerçekleştirilmiştir.

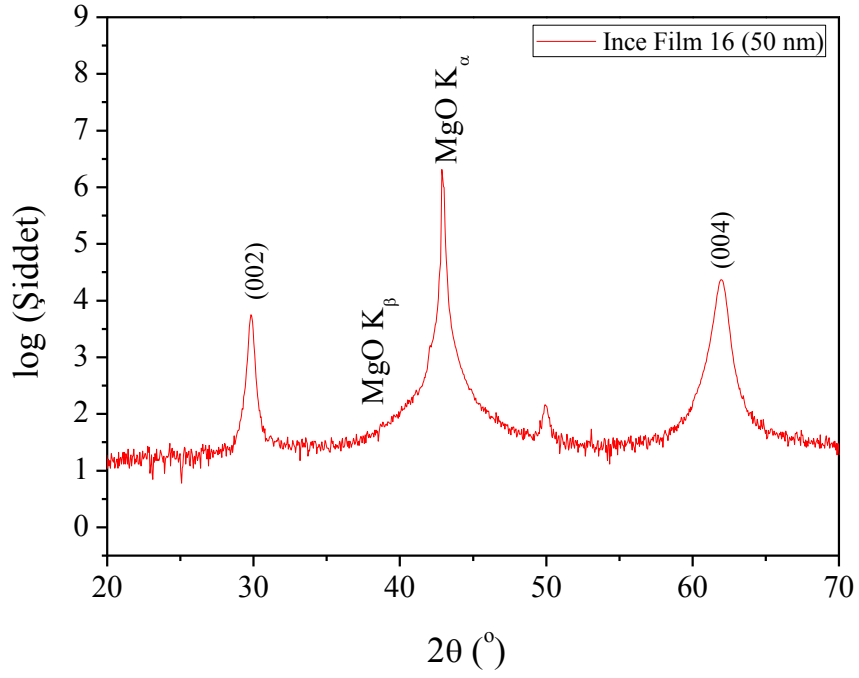
Oda sıcaklığındaki XRD ölçümleri Philips X-pert model Cu hedefli x-ışını toz kırınım metresi kullanılarak yapılmıştır. İnce filmlerin, şekil 4.67 - 4.72'de bu manyetik ince filmlerin x-ışını toz kırınım desenleri görülmektedir. Bu şekillerde de görüldüğü gibi, kırınım desenindeki  $2\theta = 29.8^\circ$  ve  $2\theta = 61.3^\circ$  civarındaki pikler kübik Heusler fazından gelmektedir. T. Krenke ve arkadaşlarının yaptığı bir çalışmada Ni-Mn-Sn hacimsel alaşımında da kırınım desenindeki  $2\theta = 29.8^\circ$  ve  $2\theta = 61.3^\circ$  civarındaki pikler kübik fazdan geldiğini bulmuşlardır (Krenke vd. 2006). Ayrıca  $43,0^\circ$  derece civarındaki pik MgO alttaştan gelmektedir (ICDD). Heusler alaşımın karakteristik olan  $29.8^\circ$  (200) ve  $61.3^\circ$  (400) şiddetlerinin birbirine göre oranı, MgO alttaş üzerine büyütülen manyetik ince filmler neredeyse aynıdır, bu sonuç manyetik ince filmlerin MgO alttaş üzerinde epiktaksiyel olarak büyüdüğünü kanıtlamaktadır. Ayrıca şekil 4.72'de  $Ni_{50}Mn_{34}Sn_{16}$  kompozisyonunda üretilen tüm manyetik ince filmlerin X-ışını kırınımını gösterilmektedir.



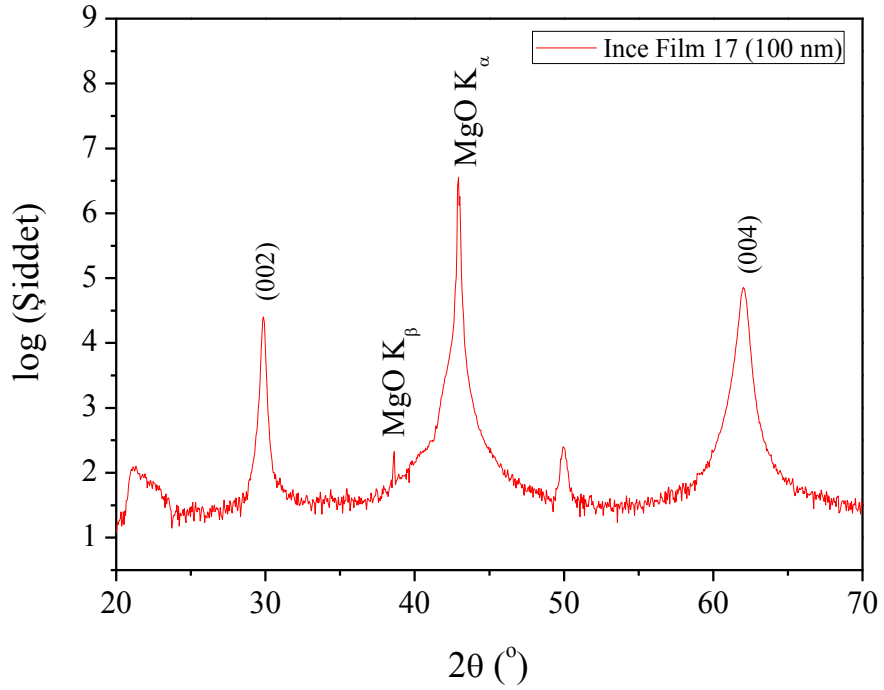
Şekil 4.67 Üretilen manyetik ince film-İnce Film 14'un x-ışını kırınım deseni



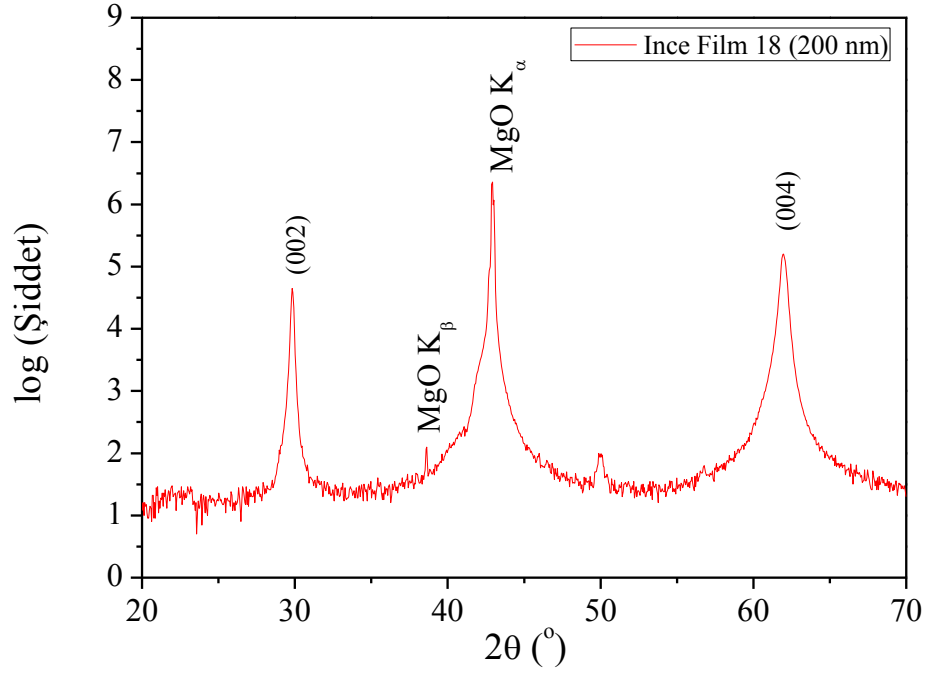
Şekil 4.68 Üretilen manyetik ince film-İnce Film 15'in x-ışını kırınım deseni



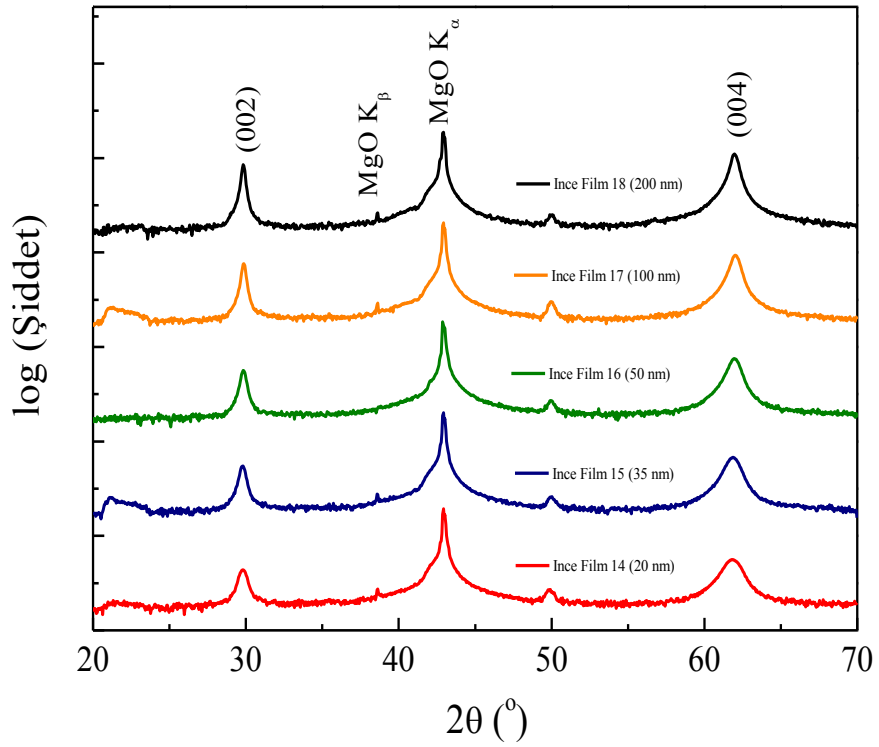
Şekil 4.69 Üretilen manyetik ince film-İnce Film 16'in x-ışını kırınım deseni



Şekil 4.70 Üretilen manyetik ince film-İnce Film 17'nin x-ışını kırınım deseni



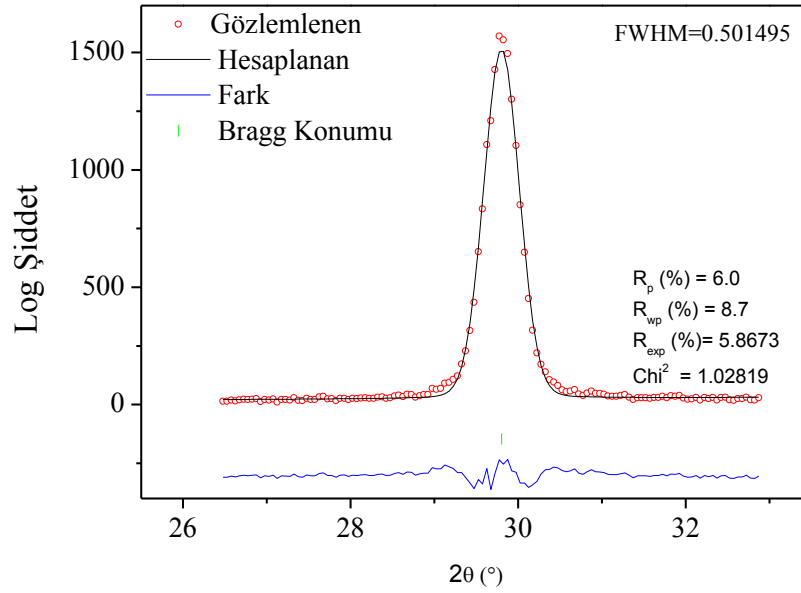
Şekil 4.71 Üretilen manyetik ince film-Ince Film 18'in x-ışını kırınım deseni



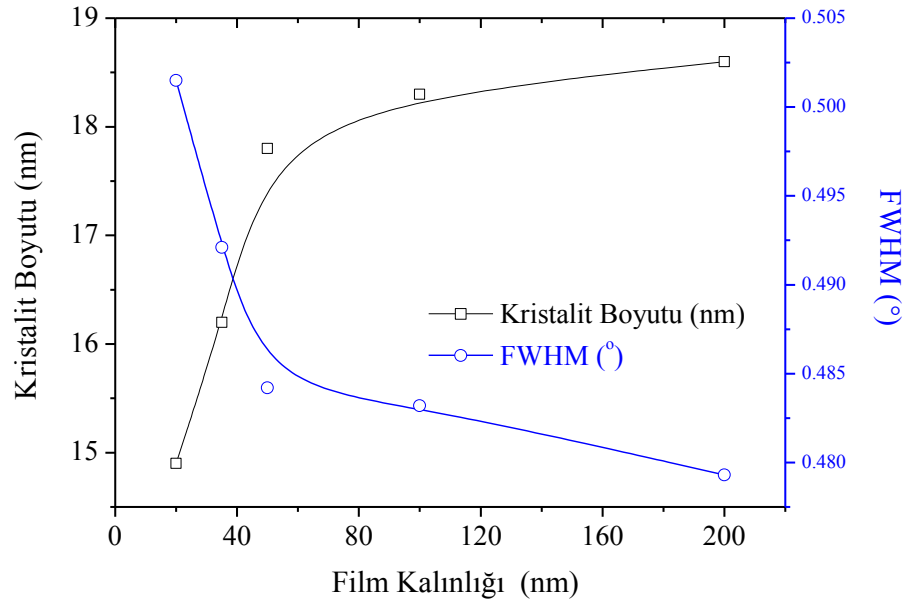
Şekil 4.72  $\text{Ni}_{50}\text{Mn}_{34}\text{Sn}_{16}$  kompozisyonunda üretilen manyetik ince filmlerin x-ışını kırınım desenleri



Elde edilen deęişik kalınlıktaki manyetik ince filmlerin paracık boyutları XRD desenlerinden Scherrer formülü kullanılarak hesaplanmıştır. Bunun için  $2\theta=29.8^\circ(200)$ 'daki Bragg yansıma şiddeti analiz edilmiştir ve İnce film 14 için analiz sonuçları Şekil 4.73'de görölmektedir. Bu manyetik ince filmler için hesaplanan ortalama kristal boyutları ve yarı genişlikleri şekil 4.74'de verilmiş ve İnce Film 14 (20 nm) 14.9 nm, İnce Film 15 (35 nm) 16.2 nm, İnce Film 16 (50 nm) 17.8 nm, İnce Film 17 (100 nm) 18.3 nm ve İnce Film 18 (200 nm) 18.6 nm bulunmuştur. Daha önceden belirtildięi gibi, R. Vishnoi ve arkadaşlarının yaptığı bir alıřmada Ni-Mn-Sn Heusler alařımının 1  $\mu\text{m}$  kalınlığında ince filmini elde etmiş ve bu ince filmin deęişik altař sıcaklıęıda kristalografik ve manyetik özellięini incelemiřlerdir. Bu alıřmaya göre altař sıcaklıęının 600  $^\circ\text{C}$  olduęunda kristalit büyüklüęünün 21 nm olduęu hesaplanmıştır (Vishnoi vd. 2010). XRF ölçümlerine göre bu ince filmlerin kompozisyonu  $\text{Ni}_{50.2}\text{Mn}_{33.7}\text{Sn}_{16.1}$  olarak belirlenmiştir.

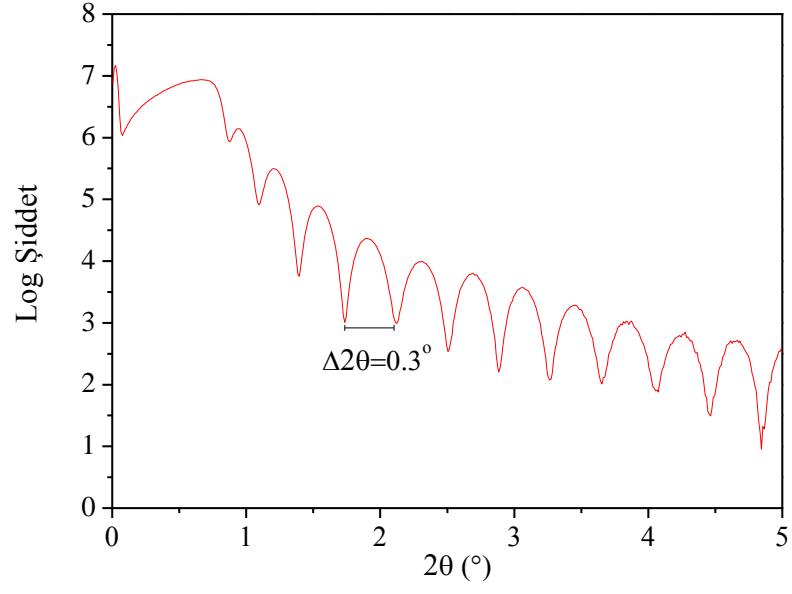


Şekil 4.73 Üretilen İnce Film 14 (20 nm) manyetik ince filminin x-ışını kırınım deseni ve Rietvelt analizi sonucu

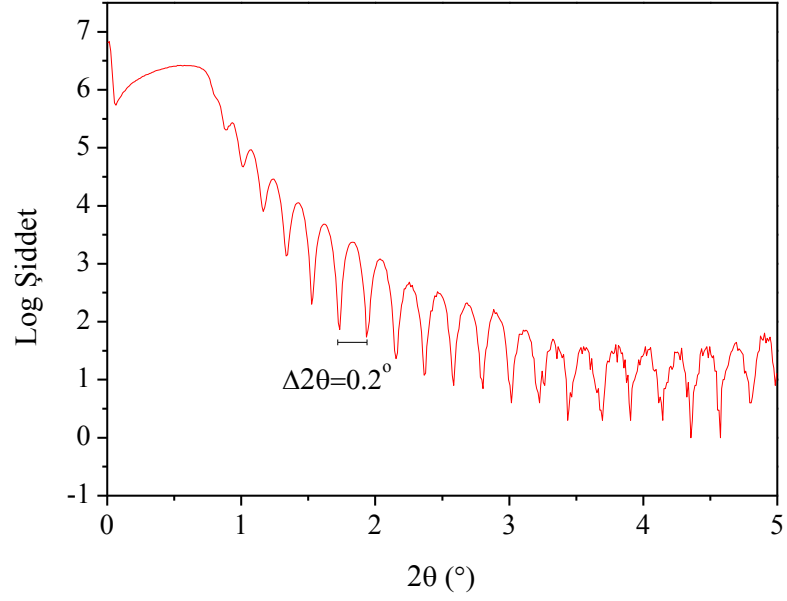


Şekil 4.74 Değişen manyetik ince film kalınlığına göre, kristal boyutu ve yarı genişlikler eğrileri

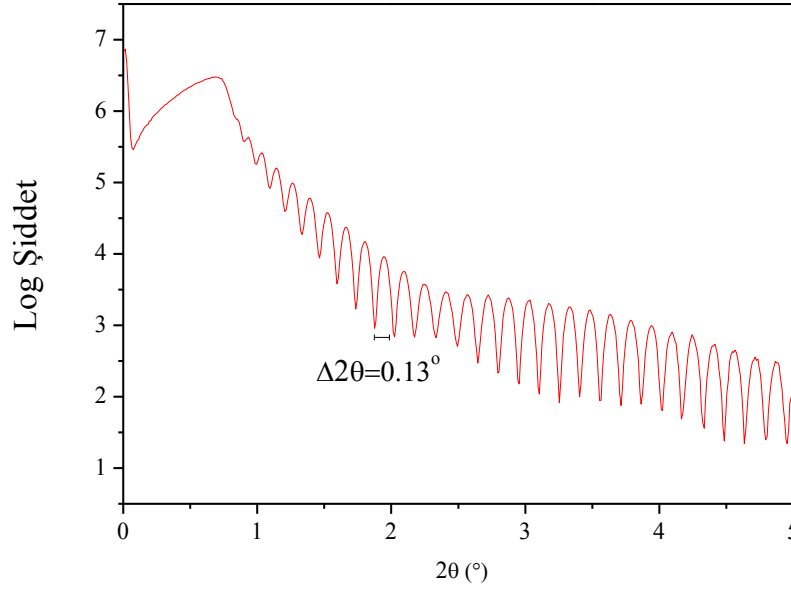
Üretilen bu manyetik ince filmlerin reflektometri desenleri şekil 4.75-4.77’de görülmektedir. XRR desenlerindeki ardışık piklerin birbirine yakınlığı ve sayısının artması film kalınlığını arttığını açıkça göstermektedir. Bu desenlerden, manyetik ince filmlerin ortalama kalınlığının İnce Film 14 için 20.1 nm ( $\pm 0.5$ ), İnce Film 15 için 35.1 nm ( $\pm 0.2$ ), İnce Film 16 için 50.2 nm ( $\pm 0.4$ ), İnce Film 17 için 100.3 nm ( $\pm 0.2$ ) ve İnce Film 18 için ise 199.7 nm ( $\pm 0.3$ ) civarında olduğu bulunmuştur. Bu sonuçlara göre seçilen üretim parametreleri olan güç ve voltaj değerlerin oldukça uygun olduğunu ve sıçratma cihazının kalibrasyonun tam olduğunu kanıtlamaktadır.



Şekil 4.75 Üretilen manyetik ince film-İnce Film 14'un reflektometri deseni



Şekil 4.76 Üretilen manyetik ince film-İnce Film 15'in reflektometri deseni



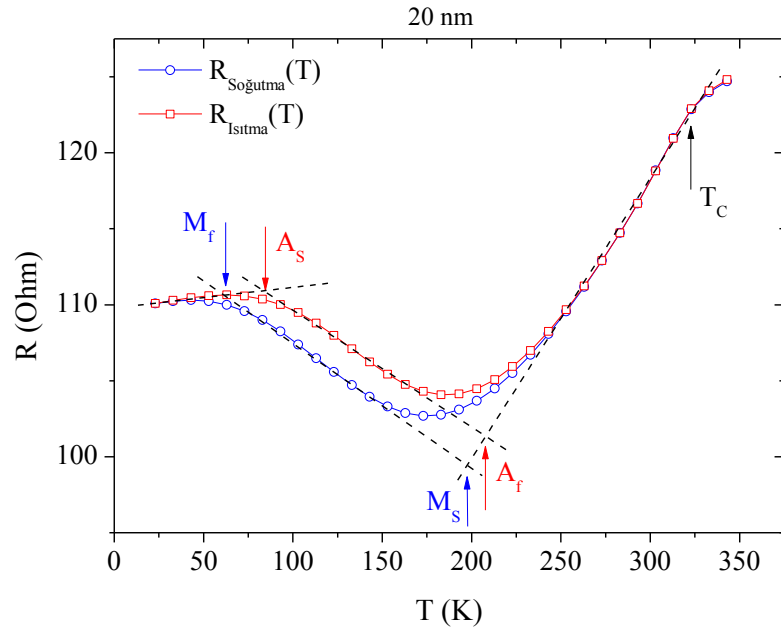
Şekil 4.77 Üretilen manyetik ince film-İnce Film 16'in reflektometri deseni

#### 4.2.11 $\text{Ni}_{50}\text{Mn}_{34}\text{Sn}_{16}$ kompozisyonunda ve farklı kalınlıklarda manyetik ince filmlerin direnç özelliklerinin karakterizasyonu:

İstenilen kompozisyonda ve homojen bir yapıya sahip manyetik ince filmlerde Martensit faz geçişini görebilmek için 20-290 K sıcaklık aralığında, sıcaklığın azalması ve artması yönünde olmak üzere 4 nokta kontak yöntemiyle direnç ölçümleri yapılmıştır. Elektriksel kontaklar yapıldıktan sonra direnç ölçümü, Bielefeld Üniversitesindeki ev yapımı 0-1 Tesla manyetik alan altında 20-360 K sıcaklık aralığında direnç ölçümü yapabilen bir sistemde yapılmıştır. Direnç ölçümü için, 35 nm, 50 nm ve 100 nm kalınlığında elde edilen manyetik ince filmlerin sıcaklığa bağlı direnç ölçümleri gerçekleştirilmiştir.

Şekil 4.78'de 20 nm kalınlığındaki ince filmin sıfır manyetik alan altında sıcaklığa bağlı olarak 23-343 K sıcaklık aralığında sıcaklık artış ve azalış yönünde alınan öz direnç eğrileri-R(T) görülmektedir. Bu R(T) eğrilerine göre sıcaklık azalırken direnç değerindeki ilk anormal değişiklik 320 K civarında gözlenmektedir. R(T) eğrisindeki bu anormal değişiklik literatürdeki benzer çalışmalara (Bonini vd. 2007) göre bu manyetik ince filmin Curie sıcaklığı ile ilgilidir. Daha alçak sıcaklıklara gidildiğinde R(T)'de bir artış gözlenmiştir. Metalik özelliğe sahip bu manyetik ince filmin direncindeki bu artış

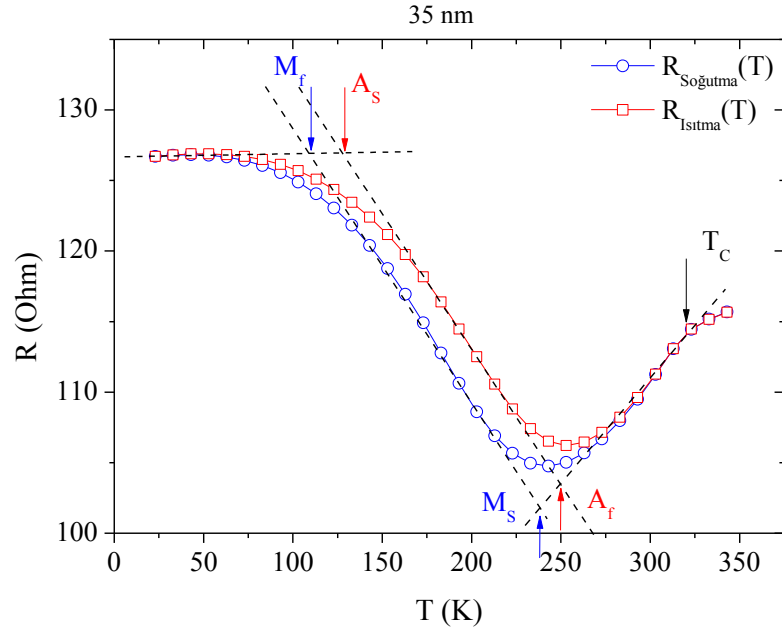
ince filmin kristal yapısının deęiřtięini gstermektedir. nk metalik zellik gsteren malzemenin zdirenci, sıcaklık azalırken artıř gstermemektedir. Literatrdeki alıřmalardan bilindięi gibi (Diner vd. 2010), Ni-Mn-Sn alařımlarında Martensit fazın zdirenci Austenit fazı zdirencinden byktr. Bylece bu manyetik ince filmin yapısal faz geiři gsterdięi R(T) lmleri ile belirlenmiřtir. Ayrıca sıcaklık azalırken ve artarken llen R(T) eęrilerinde gzlenen ısıl histerisis ve zdiren histerisis bu manyetik ince filmin Martensit faz geiři gsterdięini kanıtlamaktadır. Bu lm sonularından yararlanarak Martensit geiř sıcaklıkları Őekil 4.78’da grldę gibi belirlenmiřtir.



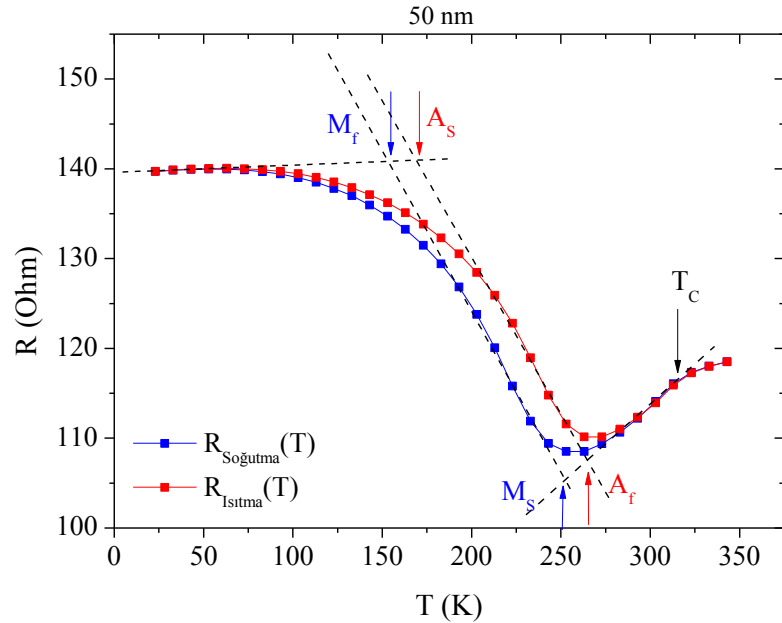
Őekil 4.78 20 nm kalınlıęında Ni<sub>50</sub>Mn<sub>34</sub>Sn<sub>16</sub> ince filmin sıcaklıęa baęlı zdiren eęrisi

Őekil 4.79-4.82’de sırasıyla 35, 50, 100 ve 200 nm kalınlıęındaki manyetik ince filmlerin sıcaklıęa baęlı sıfır manyetik alan altındaki zdiren eęrileri grlmektedir. Bu deęiřik kalınlıktaki manyetik ince filmler 20 nm’lik manyetik ince filmde olduęu gibi sıcaklık artıř ve azalıř ynnde bir ısıl histerisis gstermektedirler. Bu manyetik ince filmlerde de Martensit faz geiři gzlenmekte ve Martensit faz geiř sıcaklıkları Őekil 4.79-4.82’de verilmektedir. 35, 50 ve 100 nm kalınlıęındaki manyetik ince filmlerin sıcaklıęa baęlı diren eęrilerine dikkatli bakıldıęında yapısal faz dnřm sıcaklıklarının artan ince film kalınlıęı ile yksek sıcaklıklara doęru kaydıęı gzlenmiřtir. Malygin yaptıęı teorik alıřmada ince filmlerin kalınlıęı artıka bu

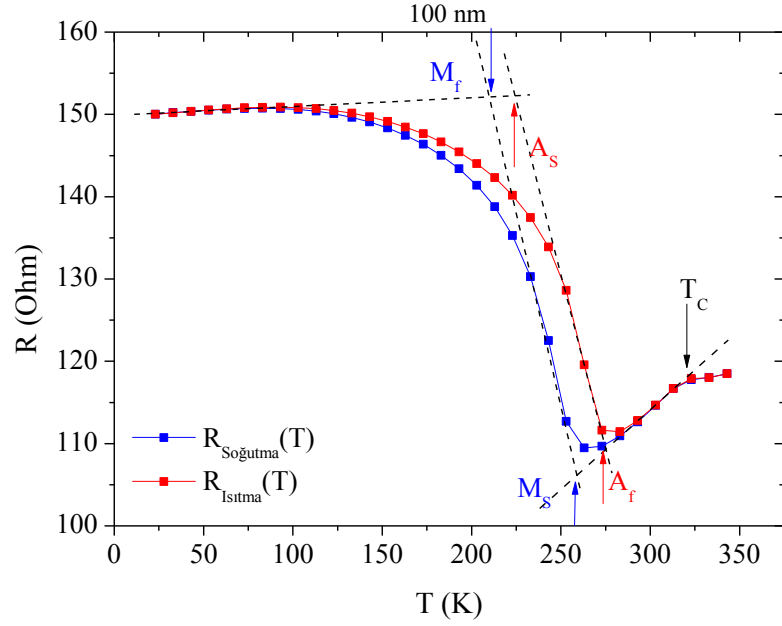
gözlemlenen yapısal faz dönüşümün yüksek sıcaklıklara doğru kayması gerektiği gösterilmiştir (Malygin 2003, Malygin 2009). Bunun en önemli nedenini ise düşük sıcaklıklarda gözlemlenen Martensit fazın, kalınlık arttıkça magneto kristal anizotropisi artmaktadır. Artan magneto kristal anizotropiyle, yapısal faz dönüşümü için gerekli olan dönüşüm enerjisi, daha yüksek enerjilere yani daha yüksek sıcaklıklara ihtiyaç duymaktadır.



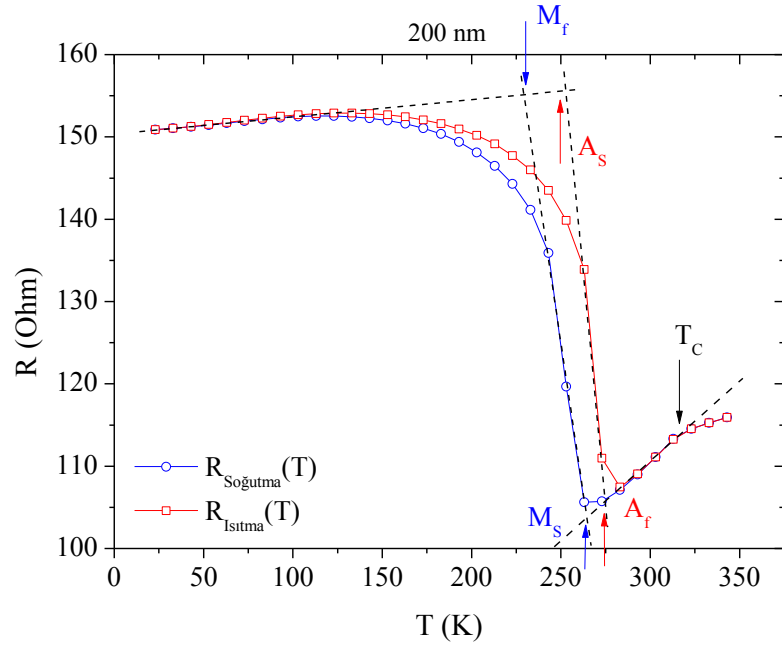
Şekil 4.79 35 nm kalınlığında  $\text{Ni}_{50}\text{Mn}_{34}\text{Sn}_{16}$  ince filmin sıcaklığa bağlı öz direnç eğrisi



Şekil 4.80 50 nm kalınlığında  $\text{Ni}_{50}\text{Mn}_{34}\text{Sn}_{16}$  ince filmin sıcaklığa bağlı öz direnç eğrisi



Şekil 4.81 100 nm kalınlığında  $\text{Ni}_{50}\text{Mn}_{34}\text{Sn}_{16}$  ince filmin sıcaklığa bağlı öz direnç eğrisi

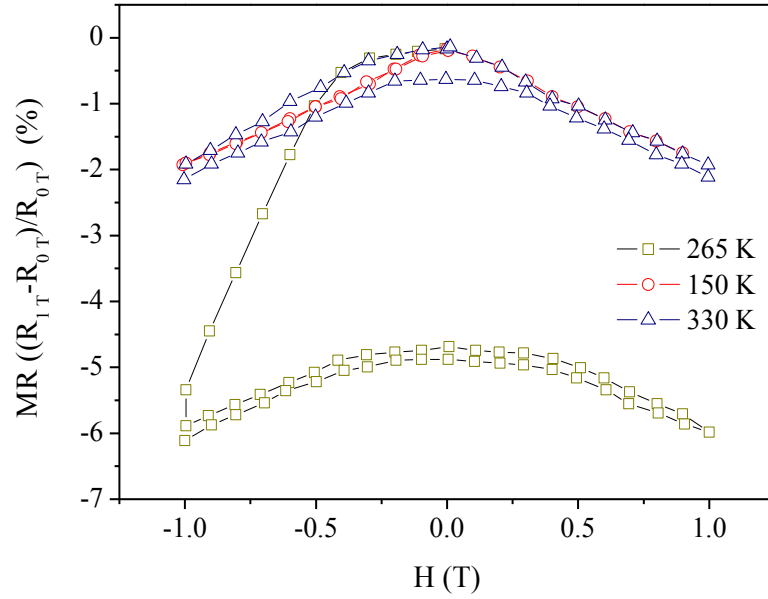


Şekil 4.82 200 nm kalınlığında  $\text{Ni}_{50}\text{Mn}_{34}\text{Sn}_{16}$  ince filmin sıcaklığa bağlı öz direnç eğrisi

En ilginç manyetik ve elektriksel özellikler gösteren manyetik ince film olan 200 nm kalınlığındaki ince filme Austenit, Martensit ve Austenit, Martensit karışık olan sıcaklık bölgelerinin manyetik alana bağlı manyetodirenç ölçümleri yapılmıştır. Yapılan ölçümler, Şekil 4.83'de verilmektedir. Manyetik alana bağlı manyetodirenç ölçümlerinin

yapılacağı 3 farklı sıcaklık seçilmiştir. Bu sıcaklıklar, martensit bölgede (150 K), Martensit-Austenit fazlarının iç içe olduğu bölgede (265 K) ve sadece austenit fazın olduğu bölgededir (330 K). Sadece Martensit ve Austenit fazların içinde alınan ölçümlere göre, manyetik alan artırılırken ve azaltılırken manyetodirenç değerinde büyük bir değişim gözlemlenmiştir. Martensit-austenit fazların iç içe olduğu sıcaklık yakınların en yüksek manyetodirenç değeri gözlemlenmiştir. Bunun nedeni, martensit fazda gerçekleşen ikizlenmeler ile manyeto kristal anizotropinin çok büyük olmasındandır. Manyetokristal anizotropinin artması ise, yüksek bir manyetodirenç etkisi gözlemlenmesine neden olmaktadır. 150 K ve 330 K’de yapılan elektriksel direnç verilerine göre, manyetik alanın artış ve azalış yönündeki elektriksel direnç değerleri aynı çıkmaktadır (Şekil 4.83). Bu durumda bu faz geçişi tersinirdir. Ancak Martensit bölge içinde, alınan alana bağlı direnç ölçümlerinde çok büyük bir direnç histerisisi gözlemlenmiştir. Burada gözlenen tersinmez davranışının nedeni, martensit fazda gözlemlenen büyük zordur (strain). Uygulanan manyetik alanla birlikte sistem yüksek sıcaklık fazına doğru zorlanmaktadır. Manyetik alanın büyüklüğü ve yönü değiştiğinde bile manyetik ince filmin üzerinede oldukça büyük bir zor kalıp, düşük sıcaklık fazına gelememektedir. Burada gözlediğimiz etki, benzer bir şekilde NiMnGa alaşımında da gözlemlenmiştir (Ranzieri vd. 2013). Bu ikizlenmeye maruz kalan yapının, manyetoplastik özelliklerinin büyük olduğu anlamına gelmektedir.



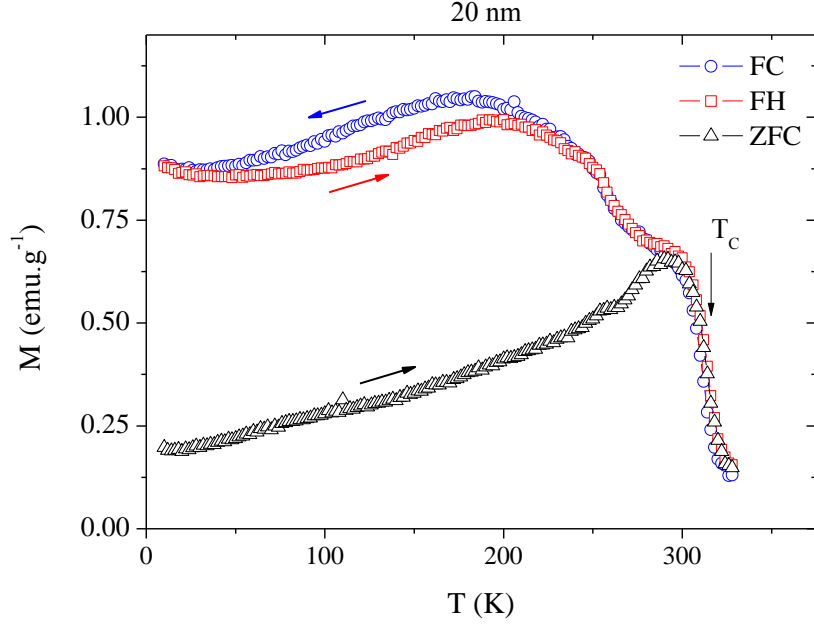


Şekil 4.83 200 nm kalınlığında elde edilen manyetik ince filmlerin manyetik alan bağı ve farklı sıcaklıklarda elde edilen manyetodirenç değerleri

#### 4.2.12 Ni<sub>50</sub>Mn<sub>34</sub>Sn<sub>16</sub> kompozisyonunda ve farklı kalınlıklarda manyetik ince filmlerin manyetik özelliklerinin karakterizasyonu:

Elde edilen değişik kalınlıktaki manyetik ince filmlerin manyetik özelliklerini belirlemek için zayıf manyetik alanda sıcaklığa bağlı mıknatıslanma ölçümleri yapılmıştır. Şekil 4.84'de 20 nm kalınlığındaki ince filmin, sıfır alan soğutmalı, alan ısıtmalı ve alan soğutmalı sıcaklığa bağlı olarak 25-350 K sıcaklık aralığında alınan mıknatıslanma eğrileri-M (T) görülmektedir. Şekil 20'de görülen M(T) eğrisine göre sıcaklık azalırken mıknatıslanmadaki artış 320 K civarında olmaktadır. M(T) eğrisindeki gözlemlenen bu mıknatıslanmadaki artış, bu manyetik ince filmin Curie sıcaklığını vermektedir. Bu değer direnç ölçümlerinden belirlenen Curie sıcaklığı ile uyum içersindedir. Sıcaklık azalırken mıknatıslanmada bir azalma gözlenmiştir. Ferromanyetik özelliğe sahip bu manyetik ince filmin mıknatıslanmasındaki bu azalma, ince filmin kristal yapısının değiştiğini göstermektedir. Bilinmektedir ki, Ni-Mn-Sn alaşımlarında, Martensit bölgenin kendiliğinden mıknatıslanma değeri Austenit bölgeninkinden daha büyüktür. Martensit bölgede gerçekleşen ikizlenmeler ve buna bağlı olarak manyeto kristal anizotropinin çok büyük değerlere sahip olması bunun en büyük nedenidir. Gerçekleştirilen bu çalışmalar ile, bu manyetik ince filmin yapısal faz

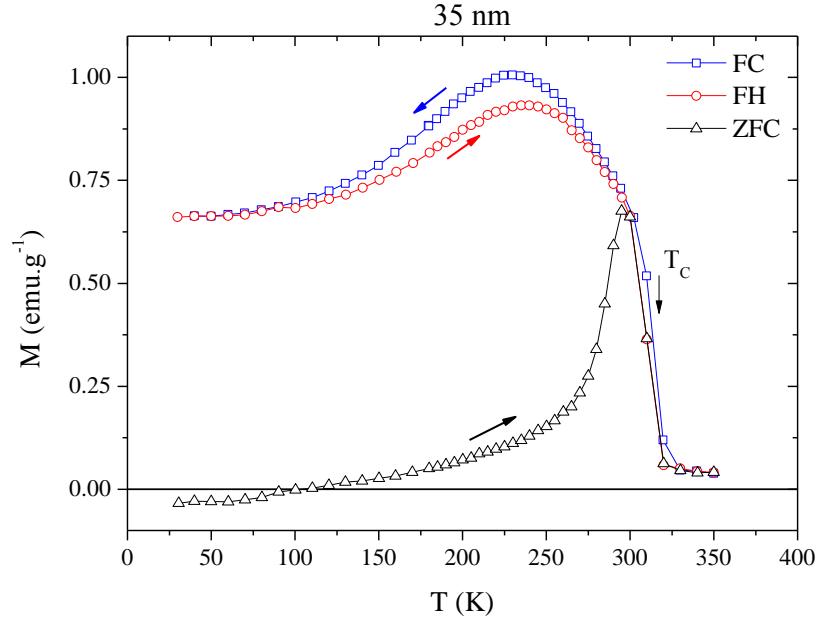
geçiş gösterdiği  $M(T)$  ölçümleri ile de belirlenmiştir. Ayrıca sıcaklık azalırken ve artarken ölçülen  $M(T)$  eğrilerinde gözlenen ısıl histerisis ve manyetik histerisis bu manyetik ince filmin Martensit faz geçiş gösterdiğini kanıtlamaktadır.



Şekil 4.84 20 nm kalınlığında ince filmin sıcaklığa bağlı mıknatıslanma eğrisi- $M(T)$ .

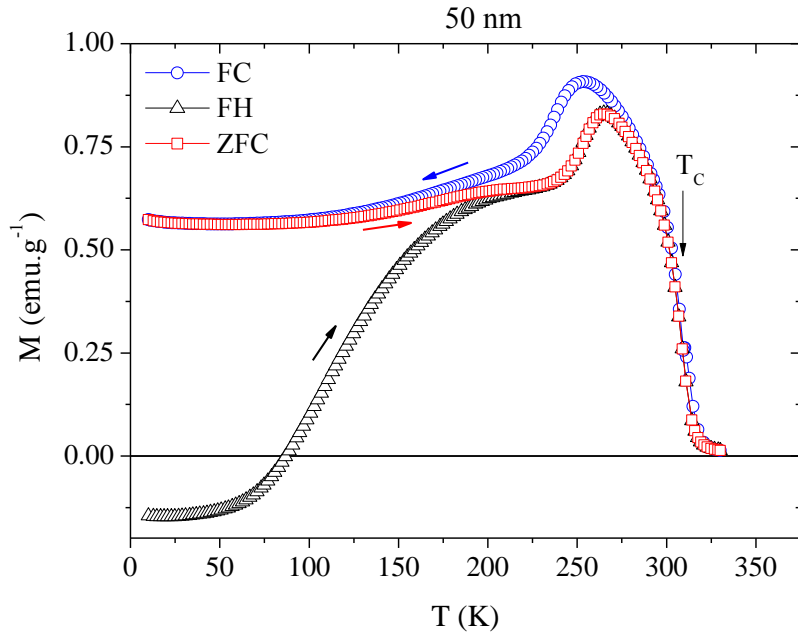
Buradaki oklar sıcaklığın artış ve azalışını göstermektedir.

Şekil 4.85- Şekil 4.88’de sırasıyla 35, 50, 100 ve 200 nm kalınlığındaki manyetik ince filmlerin sıcaklığa bağlı 150 Oe’lık dış manyetik alan altındaki mıknatıslanma eğrileri sıfır alan ısıtma, ısıtma ve soğutma yönlerinde verilmektedir. Bu değişik kalınlıktaki manyetik ince filmler 20 nm’lik manyetik ince filmde olduğu gibi sıcaklığın artış ve azalış yönünde bir ısıl histerisis göstermektedirler.

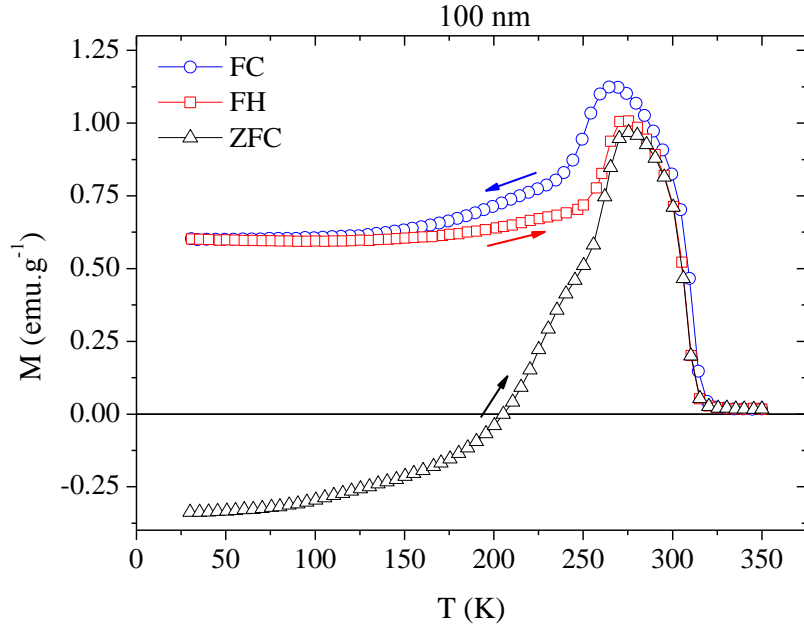


Şekil 4.85. 35 nm kalınlığında ince filmin sıcaklığa bağlı mıknatıslanma eğrisi-M(T)

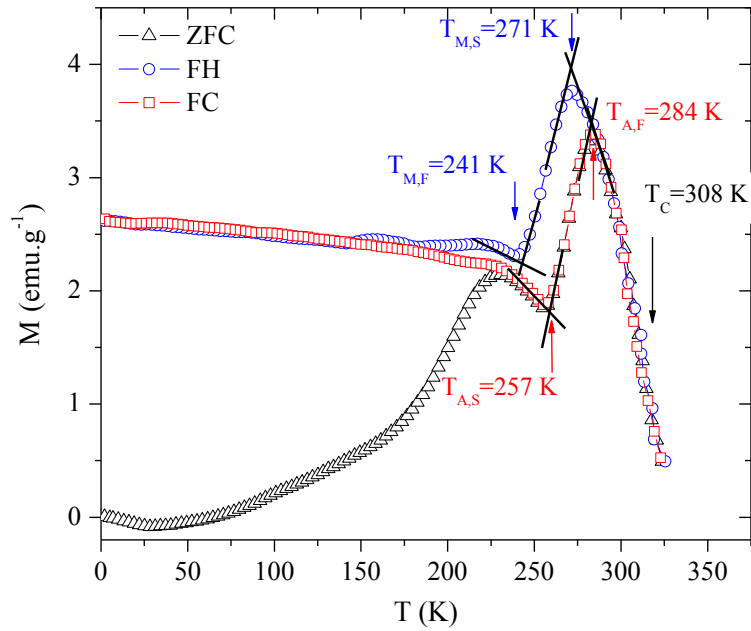
Buradaki oklar sıcaklığın artış ve azalışını göstermektedir.



Şekil 4.86 50 nm kalınlığında ince filmin sıcaklığa bağlı mıknatıslanma eğrisi-M(T)



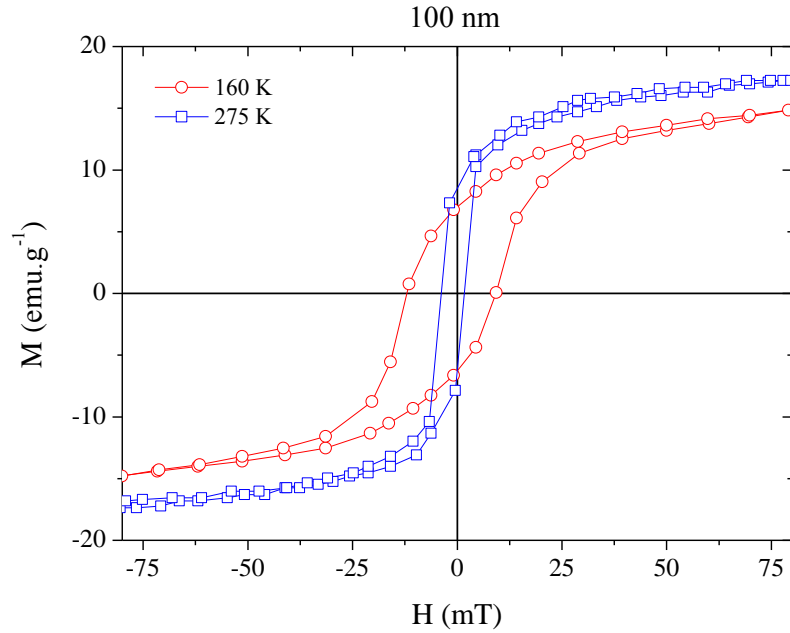
Şekil 4.87 100 nm kalınlığında ince filmin sıcaklığa bağlı mıknatıslanma eğrisi-M(T)



Şekil 4.88 200 nm kalınlığında ince filmin sıcaklığa bağlı mıknatıslanma eğrisi-M(T)

Martensit ve Austenit bölgedeki manyetik özelliklerini daha iyi belirlemek için, 100 nm kalınlığındaki ince filmin 160 K ve 275 K’de histerisin eğrileri ölçülmüştür (Şekil 4.89). Martensit bölgede bu ince filmin mıknatıslanması, Austenit bölgeden daha küçüktür ve

daha büyük zorlayıcı alana- $H_C$  sahiptir.  $H_C$  değerleri Martensit bölgede yaklaşık 11 mT iken Austenit bölgede yaklaşık 1.6 mT olarak gözlenmiştir.

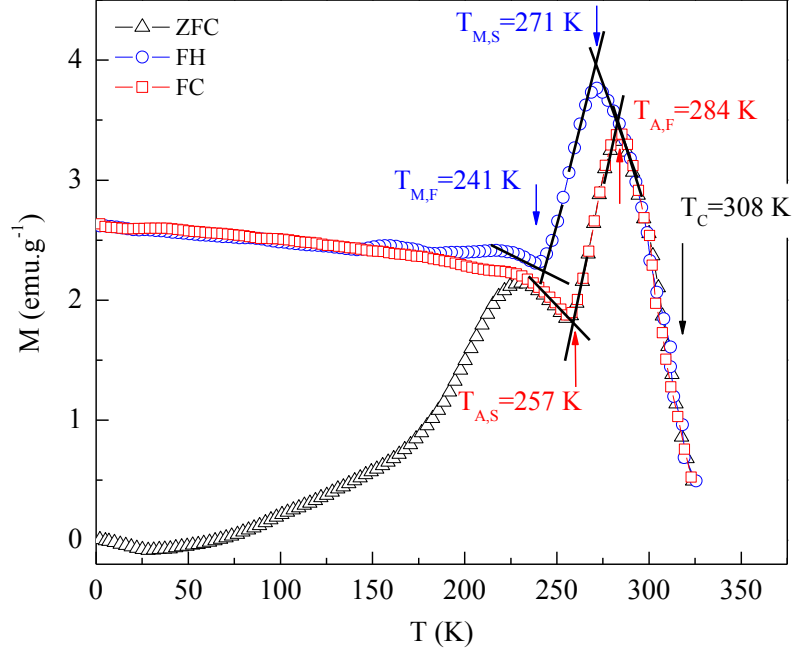


Şekil 4.89 100 nm kalınlığındaki ince filmin 160 K ile 275 K'de alınan histerisis eğrileri.

#### 4.2.13 200 nm kalınlığında ve $Ni_{50}Mn_{34}Sn_{16}$ kompozisyonunda ince filmin manyetik ve manyetokalorik özellikleri:

200 nm kalınlığındaki manyetik ince filmin mıknatıslanma ve direnç ölçümlerine göre, oda sıcaklığı yakınlarında manyetoyapısal faz değişimi gösterdiği bulunmuştur. Ayrıca bu faz dönüşümü sırasında, sıcaklığa bağlı mıknatıslanma değişimi değeri, diğer ince filmlerden daha büyüktür. Bu sıcaklığa bağlı mıknatıslanma değerinin büyük olması, Maxwell denklemi gereği (Denklem 2.62), manyetokalorik etkinin büyük olacağı anlamına gelmektedir. Bu nedenlerden dolayı, 200 nm kalınlığında manyetik ince filmin manyetokalorik özelliklerini incelemek amacıyla farklı manyetik alanlarda sıcaklığa bağlı mıknatıslanma eğrileri alınmıştır. İlk olarak, düşük manyetik alanlar altında manyetik davranışını incelemek amacıyla, 150 Oe dış manyetik alan altında alınan ısıtma (FH), soğutma (FC) ve sıfır alan soğutma (ZFC) kiplerinde mıknatıslanma ölçümleri alınmış ve şekil 4.90'de verilmektedir. Martensit dönüşüm sıcaklığı yakınlarında mıknatıslanma değerleri diğer örneklerdeki gibi azalmaktadır. Bu geçiş sırasında belirli bir sıcaklık histersisi oluşmaktadır. 150 Oe' dış manyetik alan için bu

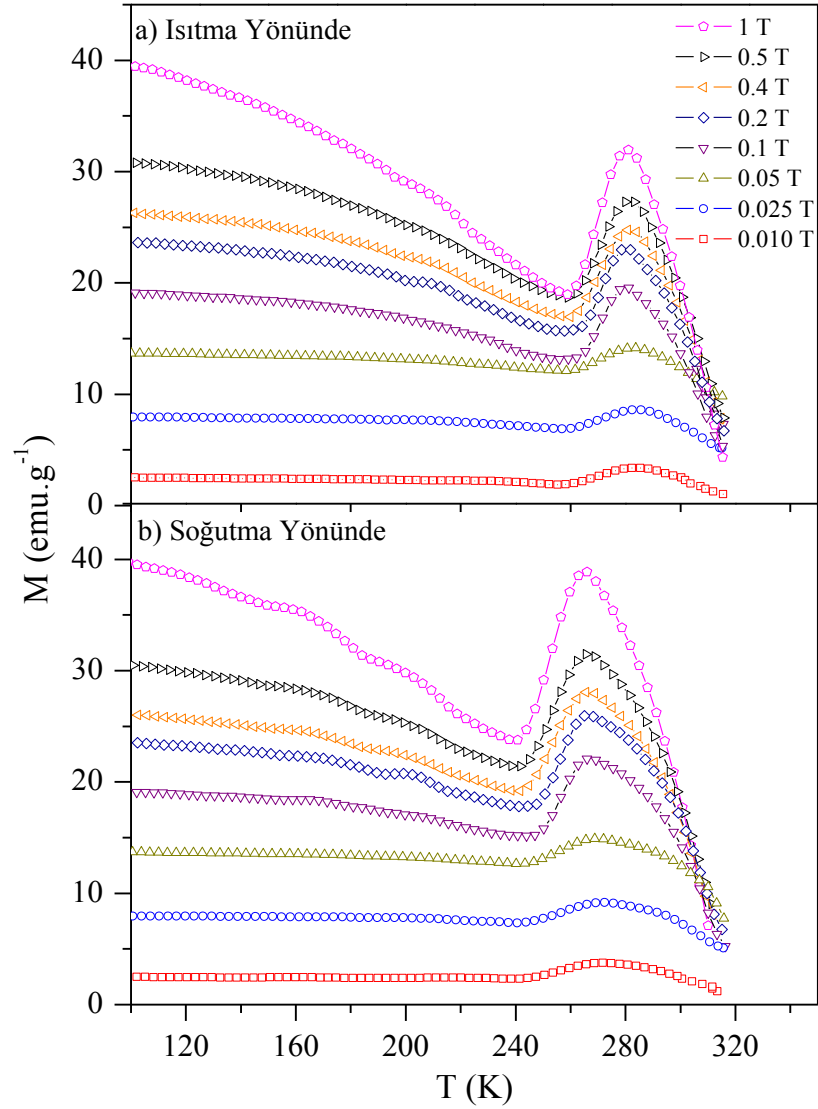
sıcaklık histerisisi 18 K olarak bulunmuştur. Bu bulunan değer literatürdeki alayım örnekleriyle uyumludur.



Şekil 4.90 İnce Film 18'in (200 nm) ZFC, FC, FH kiplerinde alınan sıcaklığa bağılı mıknatıslanma eğrileri

Bilindiği gibi literatürde manyetokalorik etkiyi belirlemek için, sabit sıcaklıklarda manyetik alana bağılı mıknatıslanma ölçümleri gerçekleştirilip Maxwell denklemi yardımıyla (Denklem 2.62) manyetik entropi değişimi hesaplanmaktadır. Ancak bu denklem bu tür manyetoyapısal faz dönüşümü gösteren sistemlere uygulandığında bazı ısıl denge bozuklukları ve tersinmez süreçlerin gözlemlendiğinden dolayı gerçek sonuçlar vermemektedir. Bu nedenle, bu tez çalışması sırasında, manyetokalorik etkinin büyüklüğünü gösteren manyetik entropi değişim hesabı için, sabit sıcaklıklarda manyetik alana bağılı mıknatıslanma ölçümleri almak yerine, sabit manyetik alan altında sıcaklığa bağılı mıknatıslanma ölçümleri gerçekleştirilmiştir. 200 nm kalınlığındaki manyetik ince filmin manyetik alana bağımlılığını anlayabilmek için, 150 Oe dış manyetik alan altında alınan ölçümlere benzer ölçümler farklı manyetik alan altında gerçekleştirilmiştir. Bu alınan ölçümler ısıtma ve soğutma yönlerinde Şekil 4.91 a ve b'de verilmektedir. Şekil 4.91 a ve b'ye göre farklı manyetik alan değerleri için Curie sıcaklığı neredeyse hiç değişmemektedir. Ayrıca yapısal geçiş sırasında oluşan sıcaklık histerisisinin büyüklüğü de neredeyse hiç değişmemektedir. Hem ısıtma hem de

soğutma yönlerinde elde edilen mıknatıslanma eğrileri manyetik alan artıkça düşük sıcaklıklardaki değerleri artmaktadır. Bu etkinin nedeni, Martensit fazın Curie sıcaklığından kaynaklanmaktadır.

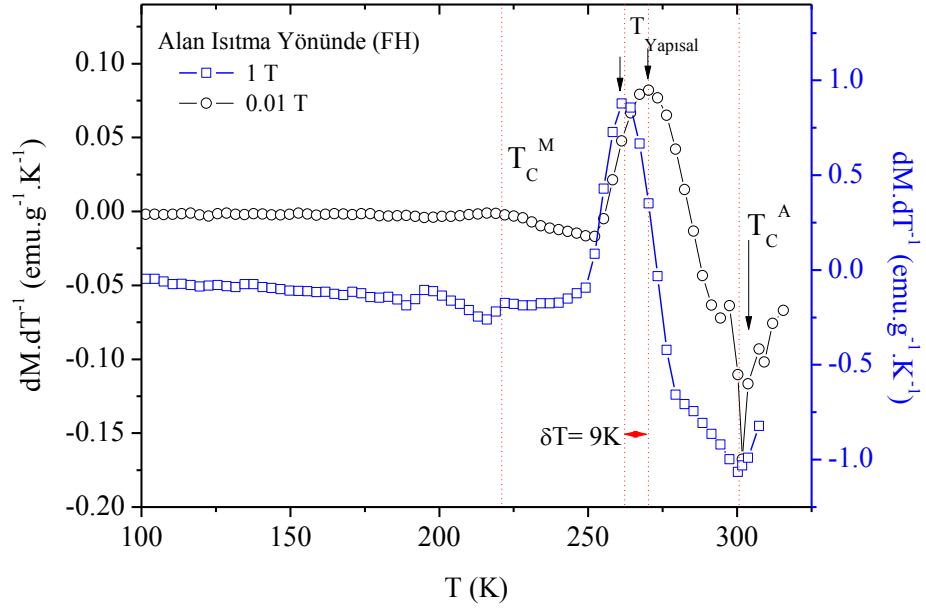


Şekil 4.91 İnce Film 18'ın (200 nm) FH (a) ve FC (b) yönlerinde alınan sıcaklığa bağlı mıknatıslanma eğrileri

Geçiş sıcaklıklarının manyetik alana bağımlılığını daha iyi anlayabilmek için, bu farklı manyetik alan altında ısıtma ve soğutma yönlerinde alınan mıknatıslanma eğrilerinin sıcaklığa bağlı türevi alınarak sıcaklığa bağlı olarak şekil 4.92 ve 4.93 sırasıyla çizdirilmiştir. Şekil 4.92 ve 4.93'e verilen eğrilere göre aşağıdaki sonuçlar bulunmuştur.

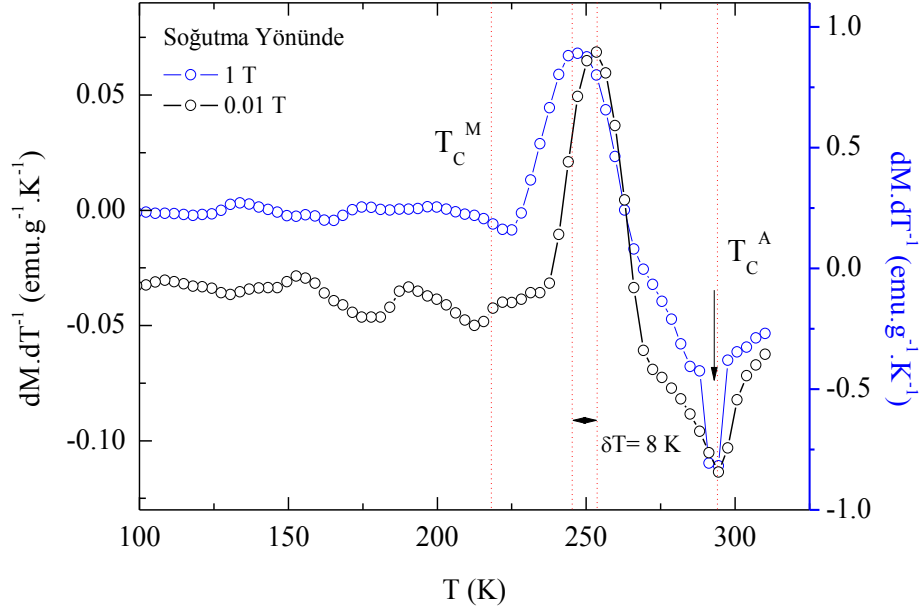
- Alan ısıtma ve soğutma yönlerinde alınan sıcaklığa bağlı mıknatıslanma ölçümlere göre, 200 nm kalınlığındaki manyetik ince film, 3 farklı faz geçişine sahiptir. Düşük sıcaklıklardan başlayarak alan ısıtma yönünde ilk olarak, manyetik ince film için 225 K civarlarında sıcaklık zorlamalı ferromanyetik fazdan anti-ferromanyetik yada paramanyetik faza geçişi gözlemlenmektedir. Bu manyetik faz geçiş sıcaklığı, Martensit bölgenin Curie sıcaklığıdır ( $T_C^M$ ). İkincil olarak ise, sıcaklığın artırıldığında mıknatıslanmanın arttığı bölgede ise, sıcaklık ve manyetik alan zorlamalı Martensit faz geçişidir ( $T_{Yapısal}$ ). Üçüncüsü ise, sıcaklık zorlamalı bir ferromanyetik fazdan - paramanyetik faza geçişi gözlemlenmiştir. Bu manyetik faz geçiş sıcaklığı, Austenit bölgenin Curie sıcaklığıdır ( $T_C^A$ ). Bu bulunan sıcaklıklar grafiklerde daha iyi anlaşılabilmesi için, kırmızı dikey çizgilerle ve oklarla gösterilmiştir.
- Düşük sıcaklıklardaki alan ısıtma ve soğutma yönlerindeki  $dM/dT$  verileri incelendiğinde görülecektir ki; 1T'lık dış manyetik alan altındaki verilerin büyüklüğü sıfırdan farklıdır. Bunun en olası açıklaması, incelenilen sıcaklık civarlarında Martensit Curie sıcaklığından daha düşük sıcaklıklarda olmasıdır. Literatürde Flores ve arkadaşları Ni-Mn-In alaşımlarında yaptığı çalışmada da benzer bir etkiyle karşılaşmışlardır (Flores vd. 2009). Bu etkiyi, Martensit Curie sıcaklığının yol açtığı değiş-tokuş yanlı etkisi (exchange bias effect) olarak açıklamışlardır.
- Bu tür alaşımlarda gözlemlenen birinci dereceden faz geçişi olarak da bilinen yapısal faz geçişi (Martensitik faz geçişi) 265 K civarlarında gerçekleşmiştir. Bu gerçekleşen faz dönüşümü, sıcaklık artma yönünde düşük sıcaklık fazından (Martensit durumdan) yüksek sıcaklık fazına (Austenit duruma) doğru gerçekleşmektedir.





Şekil 4.92 İnce Film 18'in (200 nm) soğutma yönünde 0.01 T'lık ve 1 T'lık dış manyetik alan altında alınan mıknatıslanma değerlerinin türevinin sıcaklıkla değişimi eğrileri

- Bu yapısal faz geçişi, manyetik alan zorlamalı bir faz geçişi (manyeto-yapısal) olduğunda manyetik alan uygulandığında faz geçiş sıcaklığı düşük sıcaklıklara doğru kaymaktadır. Şekiller yakından incelendiğinde, manyetik alan uygulanması ile birlikte, bir sıcaklık histeresis oluşmuştur. 0.01 T'lık ve 1T'lık dış manyetik alan altında elde edilen bu eğrilerde sıcaklık histeresis değerleri, alan soğutma ve ısıtma yönlerinde sırasıyla 8 K ve 9 K olarak bulunmuştur. Manyetik alan uygulanması ile elde edilen bu sıcaklık histeresis değerleri literatürde benzer alaşımlarla kıyaslanabilir düzeydedir. Örneğin, manyetik alan büyüklüğü 1T olduğunda,  $\text{Ni}_{50}\text{Mn}_{37}\text{Sn}_{13}$  hacimsel alaşımında bu değer 11 K (Umetsu vd. 2008) ve  $\text{Ni}_{50}\text{Mn}_{34}\text{In}_{16}$  hacimsel alaşımında ise 9 K (Khovaylo vd. 2010) olarak bulunmuştur.

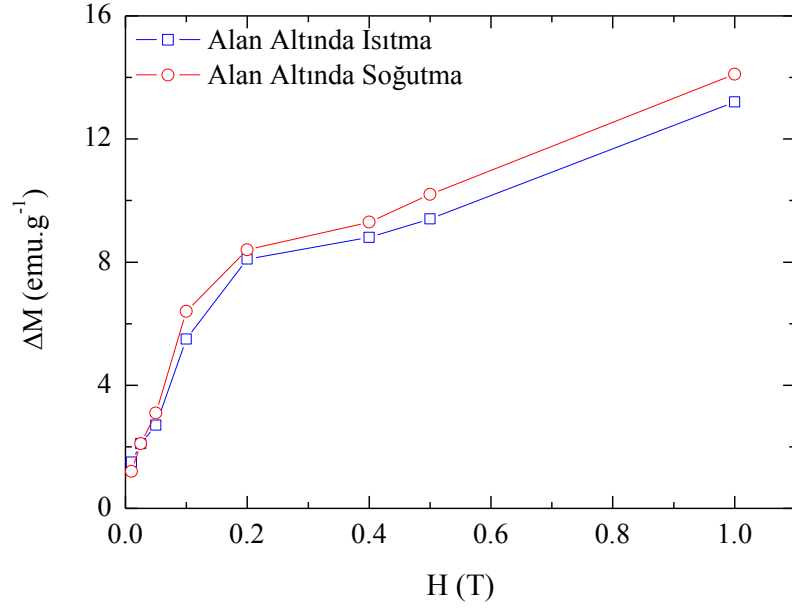


Şekil 4.93 İnce Film 18'ın (200 nm) ısıtma yönünde 0.01 T'lık ve 1 T'lık dış manyetik alan altında alınan mıknatıslanma değerlerinin türevinin sıcaklıkla değişimi eğrileri

- Bu manyetik ince filmde gözlemlenen bu etkiyi daha iyi anlamak amacıyla Clausius-Clapeyron denkleminde yararlanılmıştır. Buna göre, uygulanan manyetik alan değeriyle birlikte alaşımın dönüşüm sıcaklığındaki değişim, fazların oluşum entropisiyle ters orantılıdır. Bu aşağıdaki denklem ile verilir

$$\Delta S = \Delta M \frac{\Delta H}{\Delta T} \quad (4.5)$$

Burada verilen,  $\Delta S$ , Martensit yada Austenit fazın oluşabilmesi için gerekli olan oluşum entropisini,  $\Delta M$ , fazların arasındaki mıknatıslanma farkını,  $\Delta H$ , uygulanan manyetik alan değişimini,  $\Delta T$  ise, uygulanan manyetik alan ile birlikte geçiş sıcaklığındaki değişimi göstermektedir. Denklem 4.5 manyetik bir malzeme için Clausius-Clapeyron denklemdir. Bu denkleme göre, 200 nm kalınlığındaki manyetik ince film için Martensit (Isıtma yönündeki  $dM/dT$  verilerinden) ve Austenit (Soğutma yönündeki  $dM/dT$  verilerinden) durumlar için oluşum entropisi hesaplandığında  $1.42 \text{ J.Kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$  ve  $1.51 \text{ J.Kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$  olarak bulunmuştur.



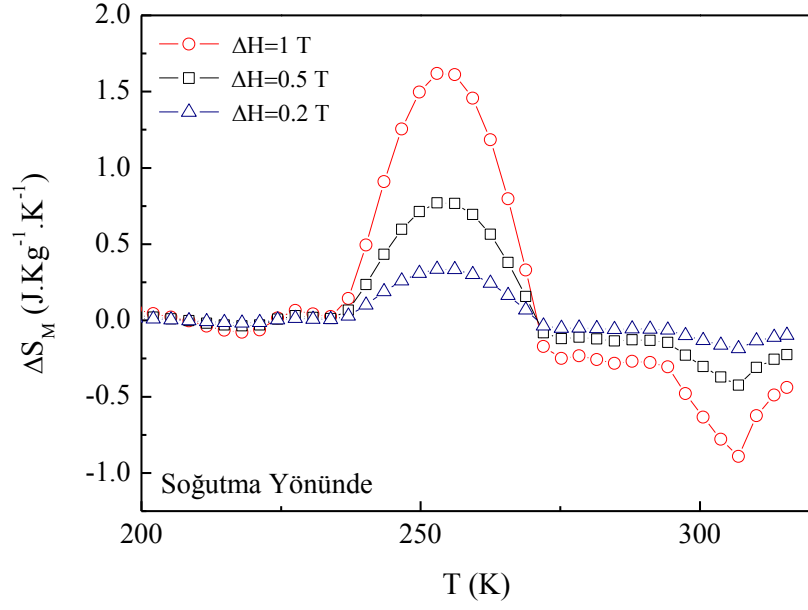
Şekil 4.94 İnce Film 18'in (200 nm) alan ısıtma ve soğutma yönünde dış manyetik alana bağlı mıknatıslanma fark ( $\Delta M$ ) eğrileri

Clausius-Clapeyron denklemiyle oluşum entropisi değerlerini hesaplayabilmek için Austenit ve Martensit durumlardaki mıknatıslanma farklarından ( $\Delta M$ ) yararlanılmıştır.  $\Delta M$  değerlerinin artan yada azalan manyetik alan göre değişimi, malzemenin faz geçişi sırasında manyetik alana bağlı tepkisini ve ne tür manyetik düzenlenime sahip olduğunu göstermektedir. Bu tepkiyi gözlemleyebilmek amacıyla farklı alanlarda sıcaklığa bağlı alınan mıknatıslanma eğrilerinden geçiş sıcaklığı yakınlarındaki mıknatıslanma farkları alınarak,  $\Delta M$  değerleri manyetik alanlara bağlı olarak şekil 4.94'te çizilmiştir. Buna göre, hem alan ısıtma hemde alan soğutma yönlerinde bulunan manyetik alana bağlı  $\Delta M$  değerleri, düşük manyetik alanlarda hızlı bir şekilde artmakta, manyetik alanın 0.2 T'lık değerlerinden sonra, doyuma yaklaşmaktadır. Bu etkinin benzeri Flores ve arkadaşlarının yaptığı çalışmada da bulunmuştur (Flores vd. 2009). Ayrıca bu eğriler artı bir eğime sahiptirler, manyetik ince filmlerin bu artı eğime sahip olmaları, yerleşmiş manyetik momentlere sahip olduğunu göstermektedir.

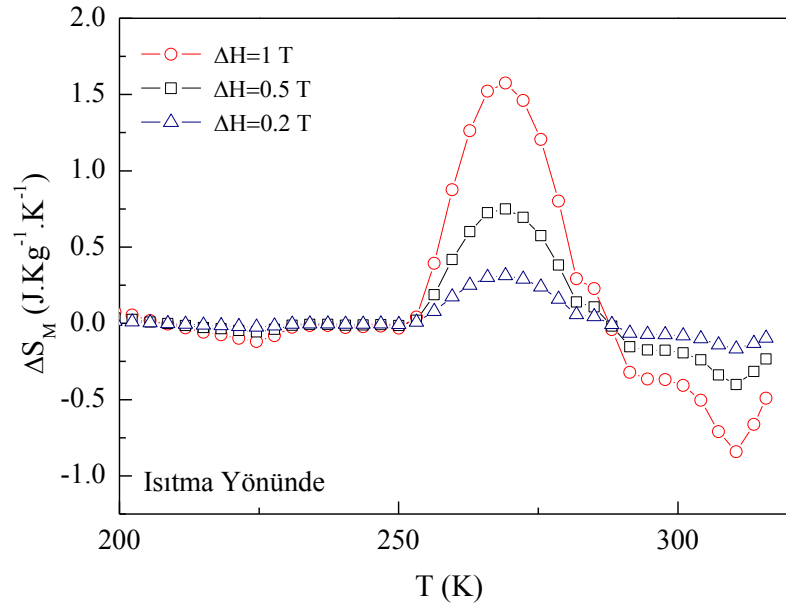
200 nm kalınlığındaki manyetik ince filmin manyetik alana bağlı manyetik entropi değerleri alan ısıtma ve soğutma yönlerinde hesaplanmış ve şekil 4.95 ve şekil 4.96'da sırasıyla verilmiştir. Bu yöntem yardımıyla ısıtma ve soğutma yönlerinden hesaplanan

manyetokalorik etkinin büyüklüğü dinamik olarak hesaplanabilmiştir. Literatürde manyetokalorik değer hesabı yapılırken, manyetik alana bağlı mıknatıslanma eğrilerinden gidilerek hesap yapılmaktadır. Ancak yapılan bu hesap statik olduğundan yapısal faz geçişi gösteren sistemlerde yanlış sonuçlar verebilmektedir.

Bu tez çalışması sırasında 1T'lık dış manyetik alan değişimi sırasında Martensit faz dönüşümü bölgesinde elde edilen en büyük manyetik entropi değişimi ısıtma yönünde 1.6 J/Kg.K ve soğutma yönünde ise, 1.5 J/Kg.K'dır. Martensit bölge yakınlarında, manyetik entropi artı değerli çıkmıştır. Bu değerlerin artı değerli çıkması geçişin ters manyetokalorik etki gösterdiğini vurgulamaktadır. Diğer yandan, 200 nm kalınlığındaki manyetik ince filmin Curie sıcaklığı yakınlarında ise bu manyetik entropi değişimleri ısıtma yönünde -0.9 J/Kg.K ve soğutma yönünde ise -0.9 J/Kg.K olarak bulunmuştur. Görülmektedir ki, burada bulunan eksi değerler normal manyetokalorik etkinin gözlendiğini göstermektedir. Bu değerler büyüklük olarak literatürde bu tür ince filmlerde elde edilen örneklerle kıyaslanabilir düzeydedir. Ayrıca Martensit bölgede bulunan manyetik entropi değişim değerleri, Clausius-Clapeyron denklemi (Denklem 4.5) ile elde edilen entropi değişim değerleriyle uyumlu olarak çıkmıştır.



Şekil 4.95 İnce Film 18'in (200 nm), 1 , 0.5 ve 0.2 T'lık farklı dış manyetik alan altında soğutma yönünde hesaplanmış manyetik entropi değişim eğrileri



Şekil 4.96 İnce Film 18'in (200 nm), 1, 0.5 ve 0.2 T'lık dış manyetik alan altında ısıtma yönlerinde hesaplanmış manyetik entropi değişim eğrileri

## 5. TARTIŞMA VE SONUÇ

Bu tez çalışmasında, içinde bir çok fiziksel fonksiyon barındıran manyetik malzemelerden olan Ni-Mn-Sn Heusler sisteminin teorik ve deneysel bulguları incelenmiştir. Bu incelemeler ışığında, tartışma ve sonuç kısmı farklı alt başlıklarda toplanmıştır.

- **Teorik sonuçlar açısından özellikler,**

Elektronik yapı hesaplamaları, öz uyumlu Kuantum Espresso ve SPR-KKR paket programları kullanılarak yapılmıştır.  $Ni_{50}Mn_{35}Sn_{15}$  kompozisyonda hesaplanan teorik sonuçlara göre, sistemde yaratılan tetragonal bir bozulma ile 250 K civarlarında yapısal faz dönüşümüne sahip olduğu bulunmuştur. Bu teorik sonuçlar deneylerle elde edilen sonuçlarla (Krenke vd. 2006, Krenke vd. 2007) iyi uyum içersindedir. Daha sonra aynı sistemin Curie sıcaklığını kestirilmesi için spin sarmalı çalışması yapılmıştır. Bu hesaplamalardan, sistemin Curie sıcaklığı 370 K olarak bulunmuştur. Bu sistemin Curie sıcaklığı ise, oda sıcaklığı yakınlarındadır. Curie sıcaklığında bulunan farkın, literatür incelediğinde mümkün olacağı görülmüştür. Bunun temel sebebinin ise, yapısal dönüşüm sıcaklığının Curie sıcaklığına yakın olduğunda durumlarda aradaki farkın spin dalgalanmalarından kaynakladığı belirtilmektedir (Y. Zhou vd. 1997, Grebennikov vd. 1999). Bu tez çalışması sırasında elde edilen Curie sıcaklıklarına ait teorik sonuçların, literatürdeki benzer çalışmalara uygun olduğu bulunmuştur. Tez çalışması sırasında yapılan tüm teorik hesapların literatürle oldukça uyumlu olduğu bulunmuştur. Özellikle Ni-Mn-Sn sisteminde gözlemlenen yapısal dönüşüm sıcaklığı teorik çalışma ile bulunması, daha sonra yapılacak deneysel çalışmaların önünü açacak niteliktedir.

- **Nano yapılar açısından özellikler,**

Özel uygulamalarda (spinelektroniği, minyatür manyetik soğutma vb.) kullanılmak amacıyla, manyetik alanda sıçratma sistemiyle üretilen ince filmlerin nano yapılarını en uygun şekilde elde etmek, kaplama parametrelerinin tam olarak belirlenmesi ve uygun koşulların sağlanmasıyla mümkündür. Bu uygun koşulların sağlanması, manyetik ince filmlerin alttaş üzerinde büyümesi sırasında ve daha sonrasında oluşan ve gelişen nano yapıların kontrol mekanizmalarının iyice anlaşılmasıyla gerçekleşmektedir. Dolayısıyla, nano oluşumu ve evrimi karakterizasyonu bu bilgilerin elde edilmesi için

gereklidir (Ohring vd. 2002). Bu kapsamda, bu belirtilen özel uygulamalarda kullanılmak üzere, Ni-Mn-Sn sisteminin nanoyapılı manyetik ince filmleri örnek olarak seçilmiştir. Ni-Mn-Sn sisteminin erime sıcaklığının yarısı yakınlarında alttaş sıcaklığı seçilip, uygun nano parçacık büyüklüğünün ayarlanması bu tez çalışmasının başka bir sonucudur. Bu sonuç kapmasında, uygun yapısal, elektriksel ve manyetik özellikler ortaya konulmuştur.

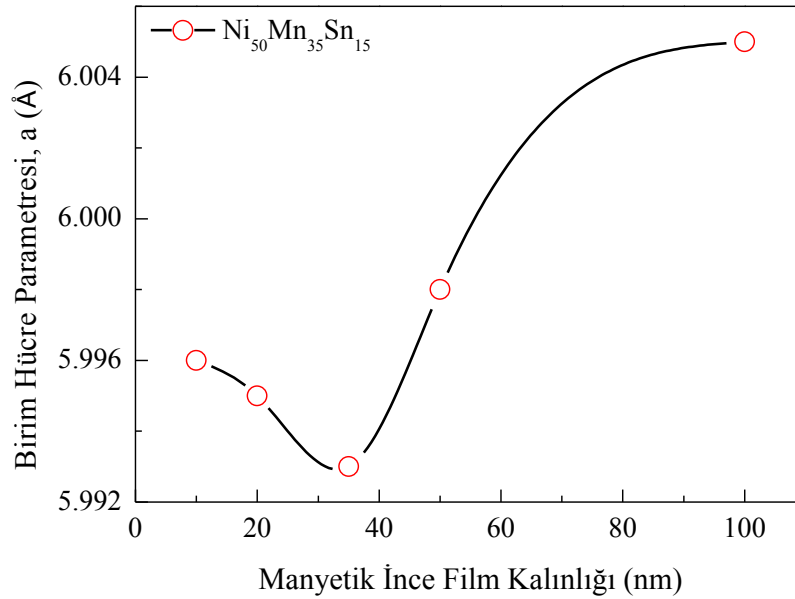
- **Manyetik ince filmlerin yapısal özellikleri açısından özellikler,**

Tezin deneysel kısmında ise, minyatür manyetik soğutucularda ve manyetik tünelleme eklemlerinde kullanılabilecek olan Ni-Mn-Sn sistemine ait manyetik ince filmler farklı koşullarda üretilip yapısal, elektriksel ve manyetik karakterizasyonu gerçekleştirilmiştir. Bu çalışma başlamadan önce alaşım olarak, yüksek uzama ve büzülme gösteren Ni-Mn-Sn sisteminden  $Ni_{50}Mn_{35}Sn_{15}$  ve  $Ni_{50}Mn_{34}Sn_{16}$  kompozisyonları seçilmiştir. Bu alaşımın hacimsel örneği oda sıcaklığında kübik yapıdadır. Bu tez çalışmasında, kullanılan alttaşın kristal yapısı kübik ve birim hücre parametresi ise  $4.2 \text{ \AA}$  mertebesindedir. Buna göre MgO üzerinde büyüyen manyetik ince filmler yüzey ile  $45^0$  açıyla epitaksiyel olarak elde edilmiştir. Bu nedenle tek kristal MgO (100) alttaşın üzerine (110) düzleminde epitaksiyel olarak büyüebilmiştir.

Stokiometri dışı  $Ni_{50}Mn_{35}Sn_{15}$  ve  $Ni_{50}Mn_{34}Sn_{16}$  kompozisyonunda üretilen ince filmlerin, istenilen stokiometrik kompozisyonun oluşup oluşmadığının kontrol edilmesi için alaşımın XRF ölçümleri, Bielefeld Üniversitesi Fizik Bölümünde bulunan Philips marka Expert model XRD sistemi ile gerçekleştirilmiştir. Elde edilen XRF analizlerinden manyetik ince filmlerin istenilen kompozisyonda oluştuğu bulunmuştur.

İnce filmlerin x-ışını kırınım desenleri, bakır (Cu) kaynaklı Bielefeld Üniversitesi Fizik Bölümünde bulunan Philips marka Expert model model X-ışını kırınım metresi kullanılarak alınmıştır. Hazırlanan örneklerin desenleri  $20^0$  ile  $70^0$  arasında oda sıcaklığında 1 saatlik ölçümler şeklinde alınmıştır. Rietveld arıtımının yapıldığı FullProf bilgisayar programı kullanılarak, birim hücre parametresi ve parçacık boyutları hesaplanmıştır. 10 nm kalınlığında elde edilen  $Ni_{50}Mn_{35}Sn_{15}$  kompozisyonunda elde edilen manyetik ince filmin  $L2_1$  kübik yapıda olduğu bulunmuş ve birim hücre parametresi ise  $5.996 (4) \text{ \AA}$  olarak Rietveld analizi ile belirlenmiştir. Devamında farklı

kalınlıklarda üretilen manyetik ince filmlerin birim hücre parametreleri ise, şekil 5.1'de verilmektedir. Buna göre, 35 nm kalınlığına kadar manyetik ince filmlerin kalınlığı artıkça birim hücre parametresi azalırken, 35 nm daha büyük olan manyetik ince filmlerin kalınlığı artıkça birim hücre parametresi artmaktadır. Bu azalma ve artma eğilimi, XRD desenlerinde (002) ve (004) düzlemlerinden gelen Bragg kırınımının yakınlarında gözlemlenen omuzların şiddetleriyle de uyumlu olduğu gözlemlenmiştir. Bu omuzlar, Martensit faz geçişinin bir kanıtıdır ve artan manyetik ince film kalınlığıyla doğru orantılı olarak omuzların şiddeti de artmaktadır. Bu sonuçlar, Martensit faz dönüşümünün artan manyetik ince film kalınlığıyla düşük sıcaklıklardan yüksek sıcaklığa doğru kaydığının bir göstergesidir. Ayrıca, manyetik ince film kalınlığının 10 nm'den 35nm'ye kadar azalmasının nedeni ise, MgO alttaş nedeniyle örgünün sıkıştırılmasından kaynaklandığı şeklinde açıklanabilmektedir. Bu değerler literatürle karşılaştırılmış (5.995 Å) ve oldukça uyumlu olduğu görülmüştür (Krenke vd. 2005).

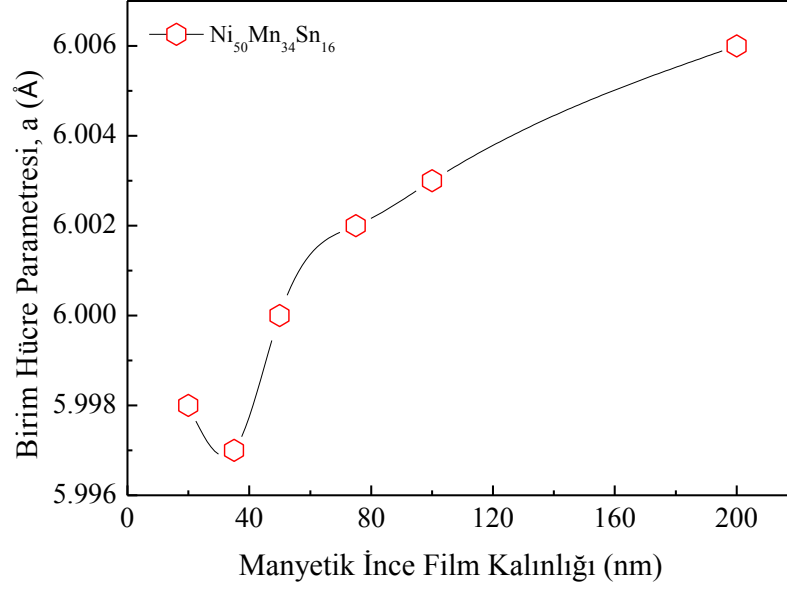


Şekil 5.1  $Ni_{50}Mn_{35}Sn_{15}$  kompozisyonunda elde edilen manyetik ince filmin kalınlıklarına bağlı  $L2_1$  kübik yapıda hesaplanan birim hücre parametreleri

10 nm kalınlığında elde edilen  $Ni_{50}Mn_{34}Sn_{16}$  kompozisyonunda elde edilen manyetik ince filmin  $L2_1$  kübik yapıda olduğu bulunmuş ve birim hücre parametresi ise 5.998 (2)



Å olarak Rietveld analizi ile belirlenmiştir. Bu değer literatürle karşılaştırılmış (5.99 Å) ve oldukça uyumlu olduğu görülmüştür (Krenke vd. 2005).



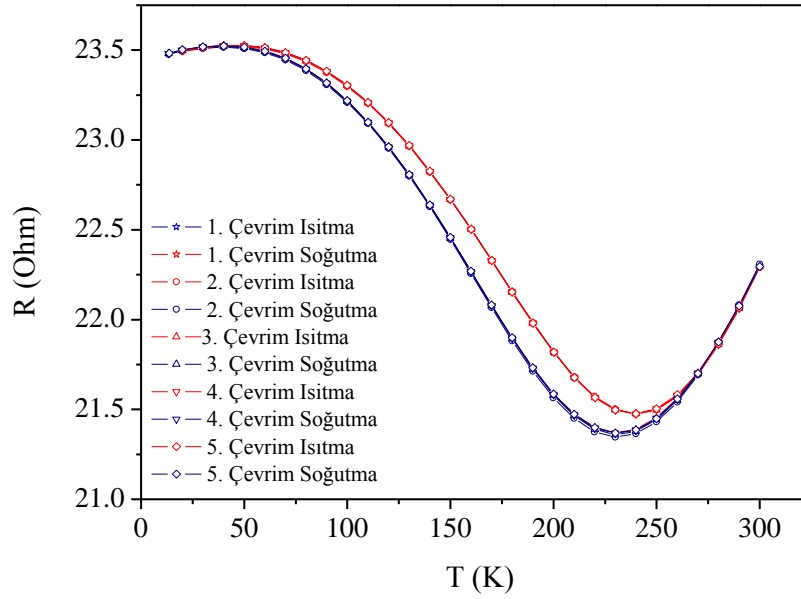
Şekil 5.2  $Ni_{50}Mn_{34}Sn_{16}$  kompozisyonunda elde edilen manyetik ince filmin kalınlıklarına bağlı  $L2_1$  kübik yapıda hesaplanan birim hücre parametreleri

- **Elektriksel özellikleri açısından özellikleri,**

Sıfır ve 1 T'lık dış manyetik alan altında alınan direnç eğrilerinde, Martensit geçiş sıcaklığı yakınılarında direnç değerlerinde hızlı bir artma ve azalma gözlemlenmiştir. Bu taşınım özelliklerinin birden azalması ve artması Martensit dönüşüm sıcaklıklarında beklenen bir olgudur (Chen vd. 2013). Bu etkinin arkasında elektron-fonon ve elektron-spin saçılmalarının Austenit ve Martensit durumlarda birinde oldukça farklı olması yatmaktadır. Bu durum aslında, Ni-Mn-Sn alaşımında eşzamanlı olarak gerçekleşen manyetik ve yapısal faz geçişi sırasında ikizlenme sınırları arayüzeylerinin artması spinlere ve fononlara bağlı elektriksel saçılmaların sayısının artmasıdır. Elektriksel saçılmaların sayısının artması elektriksel direnci artırmakta ve elektriksel iletkenliği azaltmaktadır.

Üretilen manyetik ince filmlerin, Martensit faz dönüşümü etkisini tekrarlanabilirliğini görmek amacıyla 20 nm kalınlığındaki manyetik ince film için ısıtma ve soğutma yönlerinde direnç ölçümleri 5 kez tekrarlanmıştır. Yapılan bu ölçüm şekil 5.3'te verilmektedir. Buna göre,

- Şekil 5.3 yakından incelendiğinde tüm sıcaklık değerleri için elde edilen direnç değeri hep aynı kalmaktadır. Martensit faz dönüşümünün karakteristik özelliği olan sıcaklık artıka dirençin artması tüm tekrarlanan ölçümlerde açıkça görülmektedir. Bu sonuçlar bize üretilen manyetik ince filmlerde gözlemlenen Martensit dönüşümün tekrarlanabilir olduğunu kanıtlamaktadır. Bu, teknolojik açıdan oldukça önemli bir olgudur. Çünkü bu Martensit dönüşüm etkisi teknolojik bir cihazda kullanıldığında kendi tekrar edebilmesi ve etkinin aynen gözlemlenmesi oldukça önemli ve şarttır.
- Bu ölçüm ile yapısal faz geçişinin oldukça büyük bir sıcaklık aralığında gerçekleştiğini vurgulamaktadır. Bu elde edilen manyetik ince filmin oldukça geniş bir sıcaklık aralığında bu etkiyi göstermesi, nano parçacıklardan oldukça iyi oluştuğunun bir göstergesidir.
- Ayrıca bu sonuçlar, ilk kez 20 nm kalınlığındaki manyetik ince filmlerde bu kadar açık bir şekilde gözlemlenmiştir ve Martensit faz geçişinin elastik özelliklerinin olduğunu göstermektedir.



Şekil 5.3 20 nm kalınlığında ve  $Ni_{50}Mn_{35}Sn_{15}$  kompozisyonunda elde edilen manyetik ince filmin sıcaklığa bağlı 5 çevrimle alınan direnç eğrileri

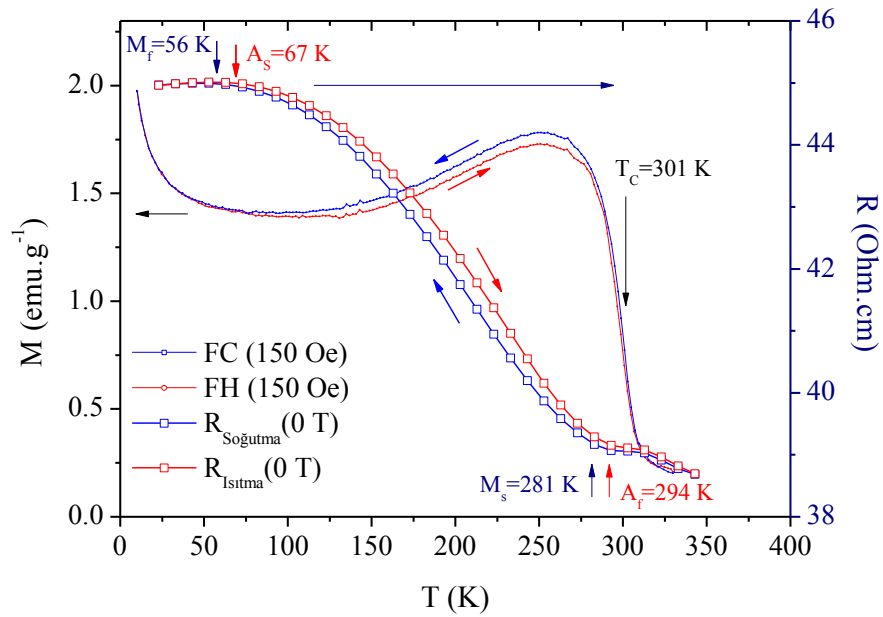
- **Manyetik özellikleri açısından,**

Manyetik ince filmlerin manyetik özelliklerini değişen kalınlıklarına göre belirlemek için sıcaklığa ve manyetik alana bağlı mıknatıslanma ölçümleri gerçekleştirilmiştir. Sıcaklığa bağlı mıknatıslanma ölçümleri sıfır alan soğutmalı, alan ısıtmalı ve alan soğutmalı olarak 3 yönde gerçekleştirilmiştir. Buna göre, bütün manyetik ince filmler Austenit Curie sıcaklığının altındaki sıcaklıklarda ferromanyetik özellik göstermektedirler. Bu Curie sıcaklıklarının değeri, mıknatıslanma eğrilerin türevi alınarak değişimin en küçük olduğu noktadan ( $dM/dT=en$  küçük) bulunmuştur.  $Ni_{50}Mn_{35}Sn_{15}$  kompozisyonunda üretilen manyetik ince filmler, 50 K üstündeki sıcaklıklardan başlayarak oda sıcaklığı yakınlarına kadar ısıtma ve soğutma eğrileri birbirini takip etmektedir. Isıtma ve soğutma yönlerinde alınan mıknatıslanma eğrilerinin arasında belirli bir sıcaklık histeresis mevcuttur. 1. dereceden faz geçişi gösteren sistemlerde bu sıcaklık histeresisi beklenen bir olgudur (Santana vd. 2011). Santana ve arkadaşları yaptıkları kuramsal çalışma ile bu tür Heusler sistemlerinden gözlemlenen sıcaklık histeresisinin, yerleşmiş manyetik momentlerin neden olduğu manyetoelastik etkileşimlerden kaynakladığını bulmuşlardır. Bulunan bu sonuca göre

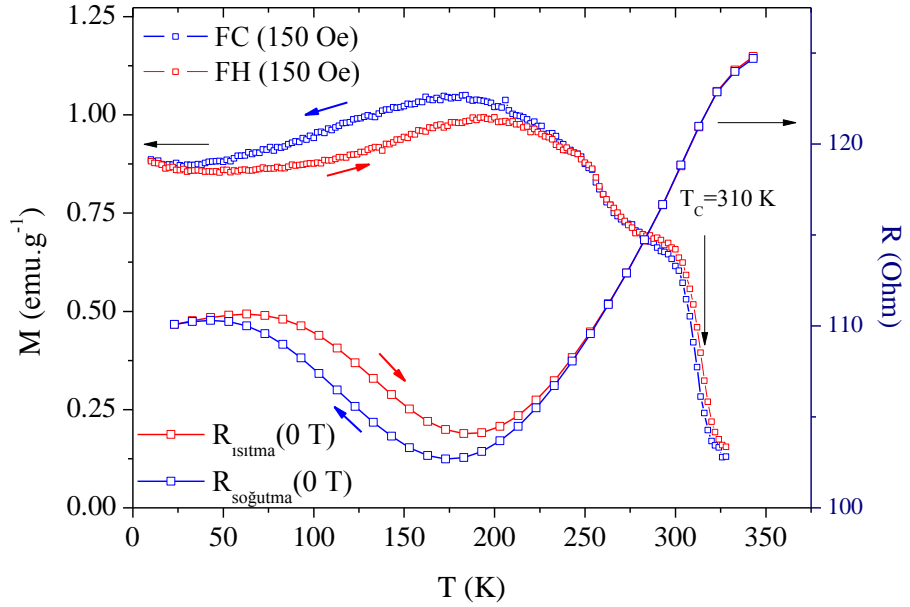
manyetoelastik çiftlenim ne kadar büyük olursa okadar büyük olursa, geçiş sırasında gözlemlenen sıcaklık histeresis okadar büyük olmaktadır. Isıtma yönünde histeresis başladığı ve bittiği noktalardan Austenit başlangıç, bitiş ve soğutma yönünde histeresis başladığı ve bittiği noktalardan ise Martensit başlangıç ve bitiş noktaları bulunmuştur. Bu sıcaklık histeresis büyüklüğü hacimsel örneklerin sıcaklık histeresinden daha büyüktür (Krenke vd. 2005). Ni-Mn tabanlı Heusler sistemlerinde, Mn konsantrasyonu artıkça toplam manyetik moment büyüklüğünün azalması beklenmektedir. Bunun nedeni, Mn-Mn atomları arasındaki bağların boyunun azalması sonucu ortaya çıkan antiferromanyetik etkileşimlerdir (Krenke vd. 2006). Ni-Mn-Sn ve Ni-Mn-Ga Heusler sistemlerinde de bu tez çalışmasındaki benzer kompozisyonlarına yakın kompozisyonlar için artan Mn miktarı ile antiferromanyetik etkileşimler artmaktadır (Enkovaaro vd. 2003). Bu referanslarda belirttiği gibi, herhangi bir antiferromanyetik etkileşimin oluşması, ZFC yönünde alınan mıknatıslanma ölçümlerinin FC ölçümlerini izlememesi anlamına gelmektedir. Çünkü sıfır manyetik alan altında sistem soğutulurken sistemde bulunan antiferromanyetik bir faz, ona yakın olan ferromanyetik fazın manyetik momentlerini kilitlemekte ve toplam mıknatıslanma değerini artmasını engellemektedir. Bu olgu, alınan tüm ZFC eğrilerinde Martensit faz dönüşümü gerçekleştikten sonra gözlemlenmektedir. Bu da bize üretilen tüm manyetik ince filmlerde antiferromanyetik bir birleşen olduğunu kanıtlamaktadır.

Şekil 5.4'te 10 nm kalınlığında ve  $Ni_{50}Mn_{35}Sn_{15}$  kompozisyonunda elde edilen manyetik ince filmin sıcaklığa bağlı mıknatıslanma ve direnç eğrileri aynı grafik içinde gösterilmektedir. Aynı şekilde, şekil 5.5'te 20 nm kalınlığında ve  $Ni_{50}Mn_{34}Sn_{16}$  kompozisyonunda elde edilen manyetik ince filmin sıcaklığa bağlı mıknatıslanma ve direnç eğrileri aynı grafik içinde gösterilmektedir. Şekil 5.4 ve şekil 5.5'ten mıknatıslanma verilerinden elde edilen sonuçlar, elde edilen sıcaklığa bağlı direnç ölçümleri ile de çok iyi uyum içinde olduğu açıkça görülmektedir. Martensit geçiş sıcakları (Martensit başlangıç, bitiş ve Austenit başlangıç ve bitiş sıcaklıkları) elde edilen bu sıcaklığa bağlı mıknatıslanma ve direnç eğrilerinden bulunmuş ve şekil 5.4'te dikey oklarla belirtilmiştir. Buna göre Martensit faz geçişi gözlemlendiği sıcaklıklarda ısıtma ve soğutma yönünde alınan mıknatıslanma eğrilerinde belirgin bir sıcaklık histeresis gözlemlenmektedir. Martensit geçiş sıcaklıklarından başlayarak direnç eğrisinde de bir sıcaklık histeresis mevcuttur. Günümüze kadar Ni-Mn tabanlı manyetik

ince filmlerde uygulamaya dönüşebilecek bir çok çalışma yapılmış ve yapılmaktadır (Chernenko vd. 2005, Paolo vd. 2012, Ma vd. 2012 ve Dubowik vd. 2012). Bu yapılmış olan çalışmalara göre, Martensit dönüşüm sadece ve sadece 200-300 nm kalınlığına kadar olan ince filmlerde gözlemlenebilmiştir. 200 nm kalınlığında daha düşük kalınlıklarda elde edilen manyetik ince filmlerde yapısal faz dönüşümü gözlemlenmemiştir. Literatürde bunun sebebinin, spin orbital çiftleniminden ortaya çıkan magnetokristal anizotropinin Martensit bölgedeki varyant büyüklüğünün kısıtlamasından dolayı bu etkinin gözlemlenmediği savunulmaktadır. Ancak bu tez çalışmasında 100, 50, 35, 20 ve hatta 10 nm kalınlığındaki manyetik ince filmlerde bile, Martensit dönüşümün gerçekleşebileceği ispatlanmıştır. Bu kadar düşük kalınlıkta manyetik ince filmlerin elde edilmesi ileride olası kullanım alanlarının artmasına neden olabilecektir. Manyetik tünelleme eklemlerine Martensit bölgede uygulanabilecek zor ile bu eklemlerin verimi artırılabilir. Ayrıca mikron boyutta yapılabilecek olan soğutma ile de özellikle işlemcilerin soğutulmasında kullanılmasının önü açılmıştır.



Şekil 5.4 10 nm kalınlığında ve  $\text{Ni}_{50}\text{Mn}_{35}\text{Sn}_{15}$  kompozisyonunda elde edilen manyetik ince filmin sıcaklığa bağlı mıknatıslanma ve direnç eğrileri



Şekil 5.5 20 nm kalınlığında ve  $\text{Ni}_{50}\text{Mn}_{34}\text{Sn}_{16}$  kompozisyonunda elde edilen manyetik ince filmin sıcaklığa bağlı mıknatıslanma ve direnç eğrileri

- **Manyetik ince filmlerin manyetik ve yapısal faz diyagramları**

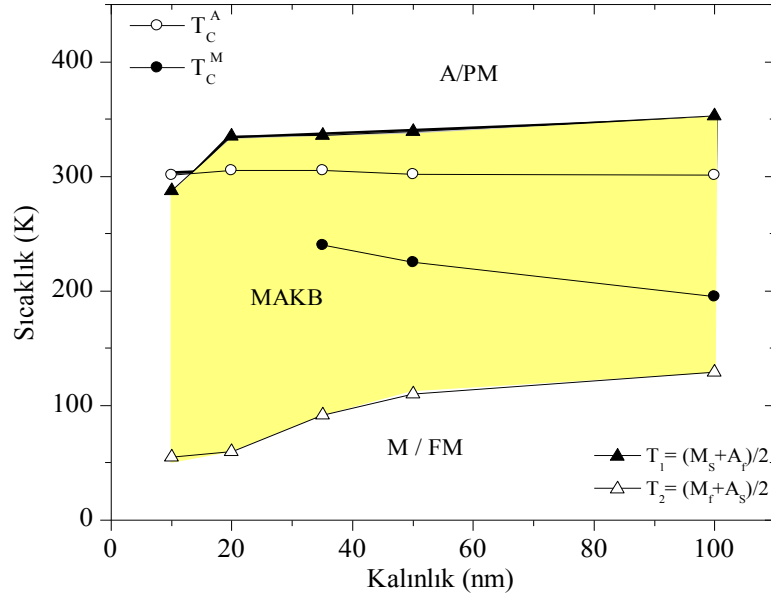
$M(T)$  ve  $R(T)$  eğrilerinden elde edilen yapısal ve manyetik faz geçiş sıcaklıklarından yararlanarak,  $\text{Ni}_{50}\text{Mn}_{35}\text{Sn}_{15}$  ve  $\text{Ni}_{50}\text{Mn}_{34}\text{Sn}_{16}$  kompozisyonlarında elde edilen manyetik ince filmler için yapısal ve manyetik faz diyagramı oluşturulmuştur. Bu faz diyagramları,  $\text{Ni}_{50}\text{Mn}_{35}\text{Sn}_{15}$  ve  $\text{Ni}_{50}\text{Mn}_{34}\text{Sn}_{16}$  kompozisyonları için Şekil 5.6 ve Şekil 5.7'de sırasıyla görülmektedir.  $\text{Ni}_{50}\text{Mn}_{35}\text{Sn}_{15}$  kompozisyonunda üretilen manyetik ince filmler için faz diyagramına göre, ince filmlerin Austenit Curie sıcaklıkları hemen hemen kalınlıktan bağımsızdır. Ancak Martensit Curie sıcaklıkları ise 35 nm kalınlığındaki manyetik ince filmde başlayarak, kalınlık arttıkça azalmaktadır. Martensit başlangıç, bitiş ve Austenit başlangıç, bitiş sıcaklıkları birbirine oldukça yakın olduklarında dolayı karmaşık bir faz diyagramı etmemek için literatürde de oldukça yaygın olarak kullanılan bir yöntem olan başlangıç-bitiş modeli yardımıyla bu sıcaklıklar çizdirilmiştir. Bu modele göre, Austenit durum sıcaklığı

$$T_1 = \frac{M_s + A_f}{2} \quad (5.1)$$

Martensit durum sıcaklığı ise,

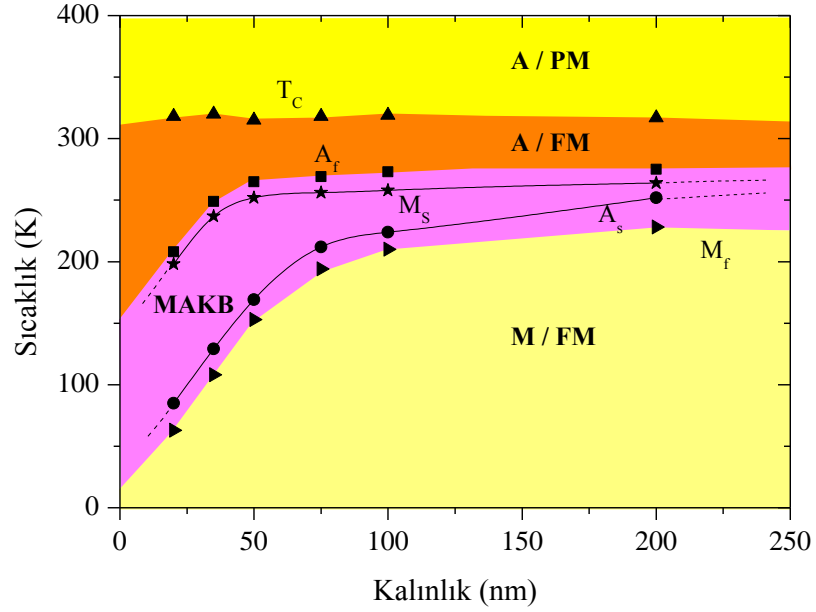
$$T_2 = \frac{M_f + A_s}{2} \quad (5.2)$$

ile verilmektedir. Buna duruma göre verilen Şekil 4.56'e göre, Austenit durum sıcaklıkları neredeyse kalınlıkla değişmemektedir. Buna karşın, Martensit durum sıcaklıkları ise kalınlıkla beraber artmaktadır. Bu durum, üretilen ince filmler nano yapılı bir özellik göstermelerinden dolayı yapısal faz dönüşüm sıcaklıkları nano parçacıklardaki gibi, parçacık boyutu arttıkça yüksek sıcaklığa doğru kaydığı şeklinde açıklanabilir. Ayrıca, Martensit faz dönüşümü gösteren Ni-Mn-X (X: Sn, Sb ve In) tabanlı Heusler sistemlerinde spin-örgü çiftlenimi oldukça güçlüdür. Spin-Örgü çiftleniminin oldukça güçlü olduğu durumda nanoparçacıkların boyutundaki değişim, spin-örgü çiftlenimini değiştirmektedir. Değişen bu spin-örgü çiftlenimi, küçük kalınlıklarda (10 nm gibi) düşük sıcaklıklarda gözlemlenen Martensit dönüşüm sıcaklıklarını, manyetik ince filmin kalınlığının artmasıyla Martensit dönüşüm sıcaklıklarını yüksek sıcaklıklara doğru kaydırmaktadır.



Şekil 5.6 Ni<sub>50</sub>Mn<sub>35</sub>Sn<sub>15</sub> serisinin faz diyagramı

A: Austenit fazı, M: Martensit fazı, PM: Paramanyetik düzeni, FM: Ferromanyetik düzeni, MAKB: Martensit ve Austenit karışık bölgesini göstermektedir



Şekil 5.7  $\text{Ni}_{50}\text{Mn}_{34}\text{Sn}_{16}$  serisinin faz diyagramı.

Burada, A: Austenit fazı, M: Martensit fazı, PM: Paramanyetik düzeni, FM: Ferromanyetik düzeni, MAKB: Martensit ve Austenit karışık bölgesini göstermektedir. Ayrıca  $M_s$ : Martensit başlangıç,  $M_f$ : Martensit bitiş,  $A_s$ : Austenit başlangıç ve  $A_f$ : Austenit bitiş sıcaklıklarını göstermektedir

$\text{Ni}_{50}\text{Mn}_{35}\text{Sn}_{15}$  ve  $\text{Ni}_{50}\text{Mn}_{34}\text{Sn}_{16}$  kompozisyonlarında üretilen manyetik ince filmlerin manyetik ve yapısal faz diyagramları yakından incelendiğinde, Martensit dönüşüm sıcaklıklarının kalınlık arttıkça artmasıdır. Bu durum Malygin tarafından, sistemin Martensit fazının oluşabilmesi için gerekli enerjinin sisteme verilmesi durumu ile açıklanabilmektedir. Buna göre, Martensit yada Austenit durumlardan birinde olma koşulu, bu iki faz arasında tanımlanan enerji bariyerinin aşılması için gerekli olan ısısal etkiyle ilgilidir. Eğer enerji bariyeri aşılsa, makroskopik boyutta bir ikizlenme gerçekleşir ve Martensit durum gözlemlenir. Bu, atomik düzeyde keskin ikizlenme sınırlarına ve kolaylık değiştirilebilen örgü kusurlarına neden olmaktadır. Bunun en önemli nedenini ise, düşük sıcaklıklarda gözlemlenen Martensit faz, kalınlık arttıkça magneto kristal anizotropisi artmaktadır. Artan magneto kristal anizotropiyle, yapısal faz dönüşümü için gerekli olan dönüşüm enerjisi, daha yüksek enerjilere yani daha yüksek sıcaklıklara ihtiyaç duymaktadır.



- **Manyetodirenç özellikleri açısından,**

Bu tez çalışması sırasında farklı kalınlıklarda ve kompozisyonlarda elde edilen ve karşılaştırmak amacıyla literatürden alınan manyetik ince filmlerin manyetodirenç değerleri Çizelge 5.1'de verilmektedir. Buna göre, bu tez çalışması sırasında elde edilen manyetik ince filmler kalınlık olarak literatürle kıyaslandığında Martensit dönüşüm gösteren ve ultra ince filmlerdir. Ayrıca tezin bulgular kısmında da değinildiği gibi, Austenit, Martensit ve Austenit, Martensit karışık bölgeler için elde edilen manyetodirenç değerleri literatürdeki diğer değerlerden oldukça büyüktür. Bu bulgular ışığında bu manyetik ince filmlerle elde edilebilecek manyetik tünelleme eklemleri ile, hafıza birimlerinde yazma ve saklama teknolojilerinde kullanılabilecek cihazlar yapmak mümkün ve olasıdır.

Çizelge 5.1 Bu tez çalışması sırasında elde edilen en ince kalınlık ve en yüksek manyetodirenç (MR) değerleri ve literatür ile kıyaslanması

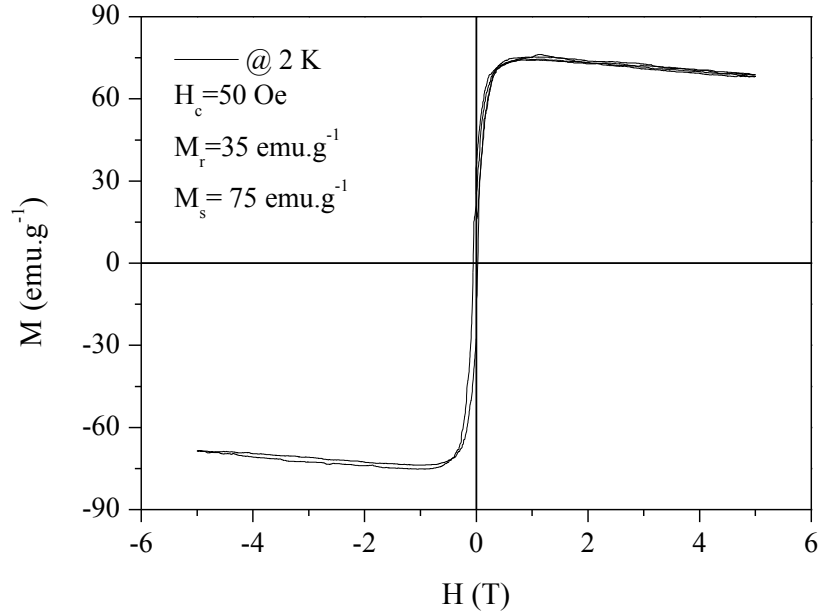
Kaynak	Kalınlık (nm)	MR (%) ( $\Delta H=1T$ ) A.Bölgesi	MR (%) ( $\Delta H=1T$ ) M.Bölgesi	MR (%) ( $\Delta H=1T$ ) A.+M.Bölgesi
Bu tez, $Ni_{50}Mn_{35}Sn_{15}$	10	0.1	0.4	0.8
Bu tez, $Ni_{50}Mn_{34}Sn_{16}$	20	1.9	2.2	6.5
V A Chernenko, Ni-Mn-Ga	100	-	0.3	0.7
J.Dubowik, $Ni_{50}Mn_{35}Sn_{15}$	400	0.4	1.6	0.6
W. R. Branford, Ni-Mn-Sb	110	0.4	1.1	1.7
M. van Zalk, $LaSrCuO_4$	400	0.1	0.3	0.5
K. Koike, Ni-Mn-Ga-Fe	5000	-	1.4	-

A.: Austenit, M.: Martensit ve A.+M.: Austenit ve Martensit karışık bölge

- **Manyetokalorik özellikleri açısından,**

200 nm kalınlığında ve  $Ni_{50}Mn_{34}Sn_{16}$  kompozisyonunda olan manyetik ince filmin düşük sıcaklıklarda ve manyetik alana bağımlılığını belirlemek amacıyla, 2 K'de manyetik alan bağlı mıknatıslanma ölçümleri gerçekleştirilmiştir. Gerçekleştirilen bu ölçüm Şekil 5.8'de ayrıntılı olarak verilmiştir. Buna göre, 200 nm kalınlığında elde edilen manyetik ince filmin doyum mıknatıslanma değeri ( $M_S=76 \text{ emu.g}^{-1}$ ), hacimsel

alaşımlarla elde elde mıknatıslanma değeriyle ( $M_s=85 \text{ emu.g}^{-1}$ ) kıyaslanabilir düzeydedir (Krenke vd. 2006). Ayrıca kalıcı mıknatıslanma değeri ( $M_r=35 \text{ emu.g}^{-1}$ )  $\text{Ni}_{50}\text{Mn}_{34}\text{Sn}_{16}$  kompozisyonunda üretilmiş hacimsel alaşımın değerinden ( $M_r=8 \text{ emu.g}^{-1}$ ) ve bu alaşımdan üretilen nanoparçacıkların değerinden ( $M_r=15 \text{ emu.g}^{-1}$ ) çok daha yüksek bir değerdedir (Sharma vd. 2007). Bu değer hacimsel alaşımın değerine yaklaşması ince filmin alttaş yüzeyinde oldukça iyi büyüdüğü bir göstergesidir. Şekil 5.8'e göre, zorlayıcı alan değeri (50 Oe) ise oldukça küçüktür. Bu değer çok küçük çıkması manyetik ince filmin çok küçük alanlarla yöneliminin değişmesine ve kolaylık teknolojik uygulamalarda kullanılması neden olabilir.



Şekil 5.8 İnce Film 18'in (200 nm) 2 K'de elde edilmiş manyetik alana bağlı mıknatıslanma eğrisi

Çizelge 5.2'de bu tez çalışması sırasında elde edilen 200 nm kalınlığındaki manyetik ince filmin ve literatürde benzer çalışmaların farklı manyetik alanlar altında hesaplanmış manyetik entropi değişimleri verilmektedir. Çizelge 5.2 yakından incelendiğinde benzer manyetik alanlar altında bulunan manyetik entropi değişim değerleri, bu tez çalışması sırasında elde edilen 200 nm kalınlığındaki manyetik ince film için, literatürde bulunan diğer ince filmlerde daha büyük olduğu görülmektedir. Bulunan bu değer literatürdeki diğer çalışmalardan daha büyük çıkması, bu tür ince

filmlerin manyetik soğutma teknolojisinde kullanılma şansını bir adım ileriye taşımaktadır.

Çizelge 5.2'de literatürden elde edilen manyetik ince filmlerin manyetokalorik etki değerleri normal manyetokalorik etki (eksi manyetik entropi değişimi) gösterdikleri bulunmuştur . Bu tez çalışması sırasında elde edilen 200 nm kalınlığındaki manyetik ince film ise ters manyetokalorik etki göstermektedir. Bu literatürde, bu tür ince filmlerde ilk defa gözlemlenen bir olgudur.

Deneysel bulgular kısmında da belirtildiği gibi, Curie sıcaklığı yakınların eksi manyetokalorik etki gözlemlenirken, Martensit bölgede ise artı manyetokalorik etki gözlemlenmektedir. Bu, Martensit bölgede manyetik uygulanınca sıcaklığın azalacağı, Curie sıcaklığı yakınlarında ise manyetik alan uygulanınca sıcaklığın artacağı anlamına gelmektedir. Ni-Mn-Sn Heusler sisteminin 200 nm kalınlığında üretilen manyetik ince filminin Curie sıcaklığı Austenit bitiş sıcaklığına oldukça yakındır. Bu sıcaklıkların birbirine yakın olması, bu manyetik alan uygulanınca sistemin sıcaklık artış ve azalışı kullanılarak çift yönlü çalışabilen minyatür soğutma sistemleri yapılmasına olanak sağlayacaktır.

Çizelge 5.2 Bu tez çalışması sırasında elde edilen en büyük manyetik entropi değişim değerleri ve literatürden bulunan Martensit faz geçişi gösteren ince filmlerin en büyük manyetik entropi değişim değerleri

Kaynak	Kalınlık (nm)	Geçiş Sıcaklık (K)	MKE (J.kg.K) ( $\Delta H=0.2T$ )	MKE (J.kg.K) ( $\Delta H=0.5T$ )	MKE (J.kg.K) ( $\Delta H=1T$ )
Bu tez, Ni <sub>50</sub> Mn <sub>34</sub> Sn <sub>16</sub>	200	280	0.3	0.7	1.6
V A Chernenko, Ni <sub>55</sub> Mn <sub>32</sub> Ga <sub>13</sub>	300	350	-	-0.3	-0.7
J.Dubowik Ni <sub>50</sub> Mn <sub>35</sub> Sn <sub>15</sub>	400	220	-0.2	-0.5	-0.9
C.W. Miller, Gd İnce Film	600	290	-0.3	-0.5	-1.2
V. Vega, NiMnIn	19000	220	-0.2	-0.4	-0.7

- **Ferromanyetik Şekil Hafıza özellikleri açısından,**

Ferromanyetik Şekil Hafıza Alaşımları-FŞMA oda sıcaklığı yakınlarında manyetik alan zorlamalı gerilme gösterdikleri için Şekil Hafıza Alaşımlarından-ŞHA daha büyük bir öneme sahiptir, çünkü manyetik alana karşı tepkileri sıcaklık tepkisinden daha hızlı olmaktadır. Ayrıca manyetik alanla birlikte fiziksel özelliklerinde (manyetik, elektriksel ve ısısal) değişim gözlemlenmektedir. Bu önemli özelliklerinden dolayı, son yıllarda FŞHA, gösterdikleri ilginç manyetik alan zorlamalı Martensitik geçişten dolayı oldukça yoğun bir ilgiyle incelenmektedir. Ni-tabanlı Heusler alaşımlarından Ni<sub>2</sub>MnGa'da FŞMA gözlenmesi daha sonra Ni-Mn-Sn ve Ni-Mn-In'da bu özelliğin gözlenmesi ilgiyi bu alaşımlara çevirdi (Krenke 2006, Krenke vd 2010, Porcar vd. 2012, Ma vd. 2012, Dubowik vd. 2012). Bu tür Heusler alaşımlarının hacimsel alaşımlarının yapısal, manyetik ve direnç özellikleri yapılan birçok çalışma ile incelenmiştir. Bu alaşımların ince filmleri üzerine oldukça az çalışma yapılmıştır. Bu tür Heusler alaşımlarının ultra ince filmlerinin özellikle 100 nm'nin altındaki kalınlıklarda hiç çalışma yapılmamıştır. Ayrıca bu tez çalışmasında elde edilen sonuçlara göre literatürde ilk defa 10 nm gibi çok ince bir manyetik ince filmde Martensit geçiş 225 K gibi çok geniş bir sıcaklık aralığında gözlenmiştir.

Manyetoyapısal faz geiři gsteren sistemlere (Ni-Mn-X X:Sn,In,Sb) manyetik alan uygulandıęında, yapısal ve manyetik zellikler arasında gl bir iftlenim gstermelerinden dolayı malzemede byk deformasyonlara yol amaktadır (Ullakko vd. 1966, Sozinov vd. 2002, Kainuma vd. 2006). Bundan dolayı, yapısal dnřm sıcaklıęı yakınlarında, uygulanan manyetik alan ve mekanik zor ile byk entropi deęiřimleri beklenebilmektedir. Yapısal ile manyetizma arasındaki iftlenimden doęan bu ilgin zellięe, iki iyi ayrılmıř uzunluk leęinde bakılmaktadır. Birincisi, Martensit varyantlar leęinde, bu durum, yksek simetriden dřk simetriye faz geiři gerekleřiirken malzemenin magnetokristal anizotropisinin artması ile kontrol edilmektedir. Bu etkileřim, manyetik řekil hafıza zelliklerini belirlemektedir. Daha mikroskopik dzeyde ise etkin manyetik deęiřtokuř enerjisinin deęiřimi ile kontrol edilmektedir. Bu etkileřim ise, manyetik alan zorlamalı yapısal faz geiřlerinin ortaya ıkmasını ya da zelliklerini belirlemektedir (Kainuma vd. 2006). Bu tez alıřması sırasında elde edilen manyetik alan zorlamalı faz geiři gsteren Ni-Mn-Sn sistemine ait manyetik ince filmler, Cluasis-Clepeyron denklemi ile entropi deęiřimleri incelenmiřtir. R. Kainuma ve arkadaşlarının alıřmalarında deęinildięi gibi, manyetik deęiř-tokuř etkileřmelerinden kaynaklı manyetik alan zorlamalı faz geiřleri bu tez alıřması sırasında incelenilen manyetik ince filmlerde de gzlemlenmiřtir. Tezin bulgular kısmında da belirtildięi gibi, byk entropi deęiřimini ve Martensit dnřmn sıcaklıkları yakınlarında sıcaklık artıř ve azalıř ynnde gzlemlenen byk sıcaklık histersisin nedeni bu etkiden kaynaklanmaktadır.

Sonuç olarak, bu tez alıřması sırasında yapılan tm teorik hesaplamalar ve deneysel bulgular ultra ince hazırlanmıř Ni-Mn-Sn Heusler ince filminin, spintronik ve minyatr soęutma uygulamalar iin uygun ve yeterli zelliklere sahip olduęu ortaya koymaktadır.

## KAYNAKLAR

- Awschalom, D. D., Flatte, M.E. and Samarth, N., 2002, "Spintronics" Scientific American Vol 42, pp. 34-69.
- Balke, B., Fecher, G. H., Kandpal, H. C., Felser, C., Kobayashi, K., Ikenaga, E., Kim, J. J., and Ueda, S., 2006, Phys. Rev. B. Vol.74, pp. 104405.
- Barna, P. B. and Adamik, M., "Fundamental structure forming phenomena of polycrystalline films and the structure zone models", Thin Solid Films Vol. 317, pp. 27-34.
- Baroni S., Dalcorso A., de Gironcoli S. and Giannozzi P., <http://www.pwscf.org> and <http://www.quantum-espresso.org>, Erişim Tarihi: 04.05.2012.
- Bhattacharya, K., 1999. Microstructure of Martensite (Oxford University Press, Oxford. Thermodynamics. Academic Press, 0123550459.
- Bradley, A.J. and Rogers, J.W., 1934, "The Crystal Structure of the Heusler Alloys". Proc. Roy. Soc. A144 Vol: 852,pp. 340-346.
- Casper, F., Graf, T., Chadov, S., Balke B., ve Felser, C., 2006. Half-Heusler compounds: novel materials for energy and spintronic applications Semicond. Sci. Technol. Vol: 27, pp. 063001-063006.
- Cheary, R. W. and Coelho, A. 1992. "A Fundamental Parameters Approach to X-ray Line-Profile Fitting", Journal of Applied Crystallography Vol. 25, pp. 109-113.
- Chernenko, V. A., Lvov, V. A., Golub, V., Aseguinolaza, I. R. and Barandiar, J. M., 2011. Magnetic anisotropy of mesoscale-twinned Ni-Mn-Ga thin films, Phys. Rev. B 84 054450.
- Chernenko, V., Mohtsuka, A., Kohl, M., Khovailo. V. V., and Takagi, T., 2005. Transformation behavior of Ni-Mn-Ga thin films, Smart Mater. Struct. Vol. 14, pp. S245-249.
- Chernenko, V. A. Lopez Anton R., Kohl, M. Ohtsuka, M. Orue I. ve Barandiaran, J. M., 2005. Magnetic domains in Ni-Mn-Ga martensitic thin films, J. Phys.: Condens. Matter 17, 5215-5224.

- Chen, L. Hu, F.X. Wang, J. Bao, L.F. Zheng, X.Q. Pan, L.Q. Yin, J.H. J.R. Sun B.G. Shen, 2011. Magnetic entropy change and transport properties in  $\text{Ni}_{45}\text{Co}_5\text{Mn}_{36.6}\text{In}_{13.4}$  melt-spun ribbons *Journal of Alloys and Compounds*, Vol: 549, pp. 170–174.
- Corso, D. A. and de Gironcoli S., 2003. Ab-initio phonon dispersions of Fe and Ni, *Phys. Rev. B* Vol: 62, pp. 273-278.
- Cococcioni, M. and Stefano de Gironcoli, 2005. Linear response approach to the calculation of the effective interaction parameters in the LDA+U method, *Physical Review B* Vol: 71, pp. 035105-035110.
- Cullity, B.D. 1972. *Introduction to Magnetic Materials*, Addison Wiley, Reading.
- Dubowik, J., Goscianska, I., Szlaferek, A. ve Kudryavtsev, Y.V. 2007. *Material Science- Poland*, 25, n.2.
- Daughton, J.M., Pohm, A.V. Fayfield, R.T. Smith, C.H. 1999. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 32 R169.
- Dincer, İ., Yüzüak, E., Elerman, Y., 2010. Influence of irreversibility on inverse magnetocaloric and magnetoresistance properties of the  $(\text{Ni,Cu})_{50}\text{Mn}_{36}\text{Sn}_{14}$  alloys, *Journal of Alloys and Compounds* 506, 508.
- Dubowik, J. K. Zaeski, I. Goscianska, H. Głowinski ve A. Ehresmann, Magnetoresistance and its relation to magnetization in  $\text{Ni}_{50}\text{Mn}_{35}\text{Sn}_{15}$  shape-memory epitaxial films, *Applied Physics Letters*, 100, 162403 (2012).
- Endo, K., Ohoyama, T., ve Kimura, R., 1964. "On the Magnetic Moment of Mn in Aluminum Heusler Alloy". *J. Phys. Soc. Japan* Vol: 19 (8), pp 1494–1495.
- Entel, P., Buchelnikov, V. D., Khovailo, V. V., Zayak, A. T., Adeagbo, W. A., Gruner, M. E., Herper, H. C. ve Wassermann, E. F. 2006. Modelling the phase diagram of magnetic shape memory Heusler alloys. *Journal of Physics D. Applied Physics*, Vol: 39, pp. 865-869.
- Fert, A. 1988. "Giant Magnetoresistance of (001)Fe/(001)Cr Magnetic Superlattices" *Physical Review Letters*, Vol: 61, pp. 2472-2478.
- Flores, R. C. Sánchez, T. Rosa, W.O. García, J. González-LegarretaL., SeranteD., Prida V.M., Escoda, Ll. Suñol, J.J. Hernando, B., 1998. On tuning the magnetocaloric effect in Ni–Mn–In Heusler alloy ribbons with thermal treatment, *Journal of Alloys and Compounds*, Vol: 545, pp. 216-220.

- Grebennikov, V. I. Gudin, S. A. 1999. Spin fluctuations and Curie temperature in the compounds  $R_2M_{17}$  with nonmagnetic elements, *Physics of the Solid State*, Vol: 41, pp. 67-71.
- Groot, R.A., Mueller, F.M., van Engen, P.G., ve Buschow, 1998. K.H.J.. *Phys. Rev. Lett.*, Vol: 50, pp. 2024.
- Heusler, F., 1903. "Über magnetische Manganlegierungen" *Verhandlungen der Deutschen Physikalischen Gesellschaft* Vol: 5, pp. 219-225.
- Helmholdt, R.B., Buschow, K.H.J., 1987. Crystallographic and magnetic structure of  $Ni_2MnSn$  and  $NiMn_2Sn$ , *Journal of the Less Common Metals*, Vol: 128, pp 167-172.
- Hartree, A., et al. 1935. Grundzustand des Moleküls und entspricht der *Hartree-Fock* Wellenfunktion, *Phys. Rev.* Vol: 36, pp. 02554-02558.
- Ishida, S., Fujii, S., Kashiwagi, S., ve Asano, S., 1995, Search for Half-Metallic Compounds in  $Co_2MnZ$  ( $Z=IIIb, IVb, Vb$  Element), *J. Phys. Soc. Jpn.* 64, 2152.
- Ivanov, V. A., Aminov, T. G., V. M. Novotortsev ve Kalinnikov V. T. 2004, Spintronics and spintronics materials, *Russian Chemical Bulletin*, *Russian Chemical Bulletin*, Vol: 53, pp. 2357-2405.
- Kainuma, R., Imano, Y., Ito W., Sutou, Y., Morito, H., Okamoto, S., Kitakami, S., Oikawa, O., Fujita, A., Kanomata, T., and Ishida, K., 2006. *Nature (Londn)* Vol: 439, pp. 957-965.
- Khovaylo, V.V., Buchelnikov, V.D., Kainuma, Koledov, R. V.V. Ohtsuka, M. Shavrov, V.G. Takagi, T. Taskaev, S.V. Vasiliev, A.N., 2005. Phase transitions in  $Ni_2Cu_xMn_{1-x}Ga$  with a high Ni excess. *Phys. Rev. B* Vol: 72, pp. 224408-224412.
- Klug, H. P. and Alexander, L. E. *X-ray diffraction procedures*, 2nd ed. (JohnWiley & Sons, Inc., New York, 1974).
- Kohn W. et al. *Phys. Rew.* 140 1965 *Hartree-Fock-Slater Method for Materials Science*, Springer Series in Materials Science Vol: 84, pp. 36256-36261.



- Kohn, W. and Hohenberg, 1963. P. "Inhomogeneous Electron Gas Phys. Rev. Vol: 136, pp. 864-869.
- Krenke, T., Moya, X., Aksoy, S., Acet, M., Entel, P., Mañosa, L., Planes, A., Elerman, Y., Yüce A. I., Wassermann E.F., Electronic aspects of the martensitic transition in Ni-Mn based Heusler alloys, Vol: 310, pp. 2788-2792.
- Krenke, T., Acet, M., Eberhard, Wassermann F, Moya, X., L. Mañosa, and A. Planes 2007. Martensitic transitions and the nature of ferromagnetism in the austenitic and martensitic states of Ni-Mn-Sn alloys, Physical Review B Vol: 72, pp. 014412-014415.
- Krenke, T., Doktora Tezi, "Untersuchung der martensitischen Umwandlung und der magnetischen Eigenschaften Mangan-reicher Ni-Mn-In-und Ni-Mn-Sn-Heusler-Legierungen" 2007.
- Krenke, T. Aksoy, S., Duman, E. Acet, M. Moya, X. Mañosa, L. Planes, A., 2010. Hysteresis effects in the magnetic-field-induced reverse martensitic transition in magnetic shape-memory alloys, Applied Physics Letters, Vol: 108, pp. 043914-043917.
- Knowlton, A.A. ve Clifford, O.C., 1912. "The Heusler alloys". Trans. Faraday Soc. Vol: 8, pp. 195.
- Litvinov D. ve S. Khizroev, 2005, Perpendicular magnetic recording: Playback J. Appl. Phys. Vol: 97, pp. 071101.
- L'vov, V.A., Chernenko, V.A., Cesari, E. and Pons, J. 2002. Thermodynamics of thermoelastic transformations: experiment and theory, Recent Res. Devel. Mat. Sci. Eng. Vol: 1, pp. 673-733,
- Ma, L., Wang, S. Q., Li, Y. Z., Zhe, C. M., Hou, D. L., Wang, W. H., Chen, J. L. and G. Wu, H., 2012. Martensitic and magnetic transformation in  $Mn_{50}Ni_{50-x}Sn_x$  ferromagnetic shape memory alloys, J. Appl. Phys. Vol: 112, pp. 083902-907.
- Marcos, J., Mañosa, L., Planes, A., Casanova, F., Batlle, X. and Labarta, A. 2003. Multiscale origin of the magnetocaloric effect in Ni-Mn-Ga shape-memory alloys. Physical Review B, Vol: 68, pp. 094401.
- Martin, R. M., 2008. "Electronic Structure, Basic theory and practical methods", 2. Bölüm.

- Marioni, M.A. O’Handley, R.C. Allen, S.M. Hall, S.R. Paul, D.I. Richard, M.L. Feuchtwanger, J. Peterson, B.W. Chambers, J.M. Techapiesancharoenkij, R. 2005. The ferromagnetic shape-memory effect in Ni–Mn–Ga. *J. Magn. Mater.* Vol: 35, pp. 290–291.
- Malygin, G. 2003. “Heterogeneous nucleation of martensite at dislocations and the martensitic-transformation kinetics in shape memory alloys,” *Physics of the Solid State*, Vol. 45, pp. 345-349.
- Malygin, G., 2003. “Heterogeneous nucleation of martensite on precipitates and the martensitic-transformation kinetics in shape memory alloys,” *Physics of the Solid State*, Vol. 45, pp. 1566-1571.
- Malygin, G., 1996. Size effects under martensitic deformation of shape memory alloys, *Technical Physics*, Vol. 54, pp. 1782–1785,
- Malygin, G., 2003. Heterogeneous nucleation of martensite at dislocations and the martensitic-transformation kinetics in shape memory alloys, *Physics of the Solid State*, vol. 45, pp. 345–351.
- Musil, J., and Vlcek, J. 1998. Magnetron sputtering of films with controlled texture and grain size”, *Materials Chemistry and Physics* Vol: 54, pp. 116.
- Ohring, M., *The Materials Science of Thin Films*, 2nd ed. (Academic Press Inc., San - Diego, 2002).
- Ortiz, G. ve Ballone, A., 1994. The local field of electron gas, *P. Phys. Rev. B*, Vol: 50 pp. 1391-1397.
- Oxley, D.P., Tebble R.S. and Williams K.C., 1963. "Heusler Alloys". *J. Appl. Phys.* Vol: 34, pp. 1362-1365.
- Passamani, E.C., Nascimento, V.P., Larica C., Takeuchi, A.Y., Alvesb, A.L., Provetib J.R., Pereira, M.C., Fabris, J.D., 2011. The influence of chemical disorder enhancement on the martensitic transformation of the Ni<sub>50</sub>Mn<sub>36</sub>Sn<sub>14</sub> Heusler-type alloy, Vol: 508, pp. 7826-7830.
- Paxton A. T., and Methfessel M., 1998. Full-Potential Electronic Structure Method: Energy and Force *Phys. Rev. B* Vol: 40, pp. 3616-3624.
- Perdew, J. P. and Burke, K., 1996. Comparison shopping for a gradient-corrected density functional, *Int. J. Quant. Chem*, Vol: 57, pp. 309-315.

- Perdew, J.P., Burke K. and Ernzerhof M., 1996. Generalized Gradient Approximation Made Simple, *Phys. Rev. B* Vol: 77, pp. 3865-3876.
- Perdew, J.P. ve Wang, Y., 1992. Generalized gradient approximation for the exchange correlation hole of a many-electron system, *Phys. Rev. B* Vol: 45, pp. 13244-13249.
- Porcar, L. D. Bourgault, and Courtois, P., 2012. Large piezoresistance and magnetoresistance effects on  $\text{Ni}_{45}\text{Co}_5\text{Mn}_{37.5}\text{In}_{12.5}$  single crystal, *Appl. Phys. Lett.* Vol: 100, pp. 152405-152409
- Ranzieri, P. Fabbrici, S. Lucia Nasi, Righi, L. Francesca Casoli Volodymyr A. Chernenko Elena Villaf, Franca Albertinia, 2013. Epitaxial Ni–Mn–Ga/MgO (1 0 0) thin films ranging in thickness from 10 to 100 nm, *Acta Materialia*, Vol: 61, pp. 263-265.
- Reinhold, M., Watson, C., William, K., Knowlton, B. and Müllner, P., 2010. "Transformation twinning of Ni–Mn–Ga characterized with temperature-controlled atomic force microscopy" *J. Appl. Phys.* Vol: 107, pp. 113501.
- Roy, S. B., and Chaddah, P., 2004. *Phase Transit.* 77 767, Chaikin P and Lubensky T 1995. *Principles of Condensed Matter Physics* (Cambridge: Cambridge University Press).
- Sasso, C. P., Küperling, M., L. Giudici, Basso, V. and Pasquale, M., 2008. Direct measurements of the entropy change and its history dependence in Ni-Mn-Ga alloys. *Journal of Applied Physics*, Vol: 103, pp. 07B306-07B310.
- Sasioglu,, E. .Sandratskii, L.M., Bruno, P., 2004. First-principles calculation of the intersublattice exchange interactions and Curie temperatures of the full Heusler alloys  $\text{Ni}_2\text{MnX}$  (X=Ga,In,Sn,Sb), *Physical Review B*, Vol:70, pp. 024427.
- Santana, R.P. Oliveira, N.A. de., Ranke, P.J. von, 2011. Magnetocaloric properties of compounds with first order phase transition:Hysteresis effect, *Journal of Alloys and Compounds*, Vol:509, pp. 6346–6349.
- Sharma, V. K. Chattopadhyay, M.K. Kumar, R. Ganguli, T. Tiwari P. and S. B. Roy, 2007. Magnetocaloric effect in Heusler alloys  $\text{Ni}_{50}\text{Mn}_{34}\text{In}_{16}$  and  $\text{Ni}_{50}\text{Mn}_{34}\text{Sn}_{16}$ , *J.Phys.: Condens. Matter* Vol: 19, pp. 496207-496210.

- Sozinov, A., Likhachev, A.A., Lanska, N., Ullakko, K., 2002. Giant magnetic-field-induced strain in NiMnGa seven-layered martensitic phase. *Appl. Phys. Lett.* 80, 1746
- Smogunov, A., Dal Corso, A., Tosatti, E., 2006. Ballistic conductance of magnetic Co and Ni nanowires with ultrasoft pseudo-potentials *Phys. Rev. B* Vol: 70, pp. 045417-045417.
- Sozinov, A. Likhachev, A.A. N. Lanska, K. Ullakko, 2002. Giant magnetic-field-induced strain in NiMnGa seven-layered martensitic phase. *Appl. Phys. Lett.* Vol: 80, pp. 1746-1752.
- Tan, C.L. Huang, Y.W., Tian, X.H., Jiang, J.X. Cai, W., 2012. Origin of magnetic properties and martensitic transformation of Ni-Mn-In magnetic shape memory alloys, *Applied Physics Letters*, Vol: 100, pp. 132402-132405.
- Thompson, C. V. 1999. Grain growth in thin films, *Annual Review of Materials Science* Vol: 20, pp. 245-250.
- Thompson, C. V., 2000. Structure Evolution During Processing of Polycrystalline Films”, *Annual Reviews of Materials Science* Vol: 30, pp. 159-165.
- Ullakko, K., Huang, J. K., Kantner, C., O’Handley, R. C., and Kokorin, V. V., 1996. Large magnetic-field-induced strains in Ni<sub>2</sub>MnGa single crystals *Appl. Phys. Lett.* Vol: 69, pp. 1966.
- Vladimir O. Golub, Andriy Ya. Vovk, Leszek Malkinski, and Charles J.O’Connor, Zhenjun Wang and Tang, J., 2008 "Anomalous magnetoresistance in NiMnGa thin films, *Journal Of Applied Physics*, Vol: 96, pp. 2204-2208.
- Vishnoi, R., Singhal, R., Kaur, D., Thickness dependent phase transformation of magnetron-sputtered Ni–Mn–Sn ferromagnetic shape memory alloy thin films, *J. Nanopart Res.* Vol: 13, pp. 3975–3990.
- Vishnoi, R., and Kaur, D., 2010. Structural and magnetic properties of magnetron sputtered Ni–Mn–Sn ferromagnetic shape memory alloy thin films, *Journal of Applied Physics*, Vol: 107, pp. 103907-103912.
- Vishnoi, R., Singhal, R , Asokan, K. Kanjilal, D. Kaur, D. 2010. Phase transformation in Ni- Mn–Sn ferromagnetic shape memory alloy thin films induced by dense ionization, *Appl. Phys. A*, Vol: 107, pp. 925–934.

- Vishnoi, R., Kaur, D., 2010. Structural and magnetic properties of magnetron sputtered Ni–Mn–Sn ferromagnetic shape memory alloy thin films, *J. Appl. Phys.* Vol: 107, pp. 103907-103910.
- Vossen J. L. ve Kern, W. *Thin Film Processes II* (Academic Press, Inc., San Diego, 1991.
- White, R.M., 2001. Magnetic recording-Pushing back the superparamagnetic barrier, *J.Magn. Mag. Mater.*, Vol: 226, pp. 2042-2046.
- Wang, H., S. Mitani, Sato, A. Saito, K. Takanashi, K. and Yakushiji, K. 2007. *J. Appl. Phys.* 101, 09J510.
- Warren, B. E., 1990. *X-ray Diffraction* Dover Publications, Inc., New York.
- Wolf, S.A., Awschalom, D.D., Buhrman, R.A., Daughton, J.M., Von Molnar, S., M.L., Chtchelkanova A.Y., ve Treger D.M.. 2007, *Science*, Vol: 294, pp. 1488-1492.
- Wolf, S. A. , Awschalom, D. D., Buhrman, R. A., J. M. Daughton, S. von Molnár, M. L. Roukes, A. Y. Chtchelkanova and D. M. Treger, 2001. *Spintronics: A Spin-Based Electronics Vision for the Future Science*, Vol: 29, pp 1488-1495.
- Zalk, M. van, Brinkman, A., and Hilgenkamp. H., 2011 Conductance anisotropy and linear magnetoresistance in  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$  thin films, *J. Phys.: Condens. Matter* Vol: 23, pp. 205602-205608.
- Zhang, R. A. Hughes, J. F. Britten, Dube, P. A., Preston, J. S., Botton, G. A. and Niewczas, M., 2011. Magnetocaloric effect in Ni-Mn-Ga thin films under concurrent magnetostructural and Curie transitions, *Journal of Applied Physics* Vol: 110, pp. 013910-013915.
- Zhou, Y. and Lai, W., 1997. Calculations of the band structure and Curie temperature for  $\text{Y}_2\text{Fe}_{17}$  and  $\text{Y}_2\text{Fe}_{17}\text{N}_3$ , *J. Phys.: Condens. Matter* Vol: 9, pp. 2759-2765.
- Zutic, I., Fabian, J., ve Sarma, S., 2004, *Spintronics: Fundamentals and applications*, *Das. Rev. Mod. Phys.*, Vol: 76, pp. 323-328.

## ÖZGEÇMİŞ

**Adı, Soyadı** : Ercüment YÜZÜAK  
**Doğum Tarihi** : 13.03.1983  
**Adres** : Ankara Üniversitesi, Mühendislik Fakültesi  
Fizik Mühendisliği Bölümü,  
06100 Besevler, Ankara, Türkiye  
**E-Mail** : ercumentyuzuak@yahoo.com  
**Tel** : +90 (542) 673 1440

### Eğitim:

**Lisans** : Ankara Üniversitesi, Mühendislik Fakültesi, Fizik Mühendisliği Bölümü, (2005).  
**Y. Lisans** : Ankara Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Fizik Mühendisliği Anabilim Dalı, Ankara, Türkiye (2005-2008).  
**Tez Adı** :  $Tb_5Si_{2-x}Ge_{2-x}T_{2x}$  (T=Fe, Mn) alaşımlarının yapısal ve manyetik özelliklerinin incelenmesi (Danışman: Prof. Dr. Yalçın Elerman).  
**Doktora** : Ankara Üniversitesi, Mühendislik Fakültesi, Fizik Mühendisliği Anabilim Dalı, Ankara, Türkiye (2008 - 2013).  
**Tez Adı** : Çok Tabakalı İnce Filmlerin Yapısal, Elektriksel, Manyetik Özelliklerinin İncelenmesi ve Spintroniğe Uygulanması (Danışman: Prof. Dr. Yalçın Elerman).

### Kariyer

Başlık	İş Veren	Yıl
Araştırmacı	Ankara Üniversitesi, Türkiye	2006-2008
Araştırmacı	Ankara Üniversitesi, Türkiye	2009-2012

### Proje Deneyimi:

1. Araştırmacı (Başlık: The Research of Magnetocaloric Materials, TÜBİTAK Türkiye-JÜLICH German, 2005)
2. Araştırmacı (Başlık: Developing the material for magnetic refrigeration systems, Ankara University 2008)
3. Araştırmacı (Başlık: Magnetic materials research and development, TÜBİTAK SAN-TEZ Project, 2005)
4. Araştırmacı (Başlık: Production of permanent magnet materials BOREN-Turkey 2008)
5. Araştırmacı (Başlık: The investigate of structural, magnetic and electrical properties of CuMnIn and CuMnSn alloys, Ankara University- BAP, 2009)
6. Araştırmacı (Başlık: SuBuTu-Determination of The Influence of Interfacial Strain or Stress Introduced by a Superelastic NiMnIn Bufferlayer on the Magnetic Properties and Spin Polarization and Resulting Tunnelling Magnetoresistance of Co<sub>2</sub>MnAl and Co<sub>2</sub>FeAl Thin Heusler Films Incorporated as Magnetic Electrodes in Magnetic Tunnel Junctions, TÜBİTAK, Turkey - BMBF, Germany - IntenC program, 2010)

7. Arařtırmacı (Bařlık: Design of Magnetic Cooling Device, Aselsan, 2011)

**Uluslar arası Denevımleri:**

- 07.2010-10.2010 Yabancı Arařtırmacı (Thin Films and Physics of Nanostructures Bielefeld University, Bielefeld, Germany)
- 09.2011-10.2011 Yabancı Arařtırmacı (Thin Films and Physics of Nanostructures Bielefeld University, Bielefeld, Germany)
- 06.2012-08.2012 Yabancı Arařtırmacı (Thin Films and Physics of Nanostructures Bielefeld University, Bielefeld, Germany)

**Konferanslar**

1. **E. Yüzüak**, Y. Elerman, ve A. Yücel  
" The structural and magnetic characterization  $Tb_5Si_2Ge_2$  doped Fe"  
13. Yoęun Madde Fizięi Toplantısı, 2006.
2. **E.Yüzüak**, Y. Elerman, A. Yücel,  
"The Magnetocaloric properties of  $Tb_5Si_2Ge_2$  Alloys Adding Fe and Mn"  
THERMAG Portoroz, Slovenia (2007).
3. Y. Elerman, İ. Dinçer, B. Emre, **E. Yüzüak**, S. Ener  
"Magnetic Properties of Nanostructure NdFeB adding Zr and Nb"  
NanoTR-III Conference (2007).
4. **E. Yüzüak**, Y. Elerman, ve A. Yücel  
"Hysteresis effect of Doped Fe and Mn  $Tb_5Si_2Ge_2$  "  
14. Yoęun Madde Fizięi Toplantısı (YMF-14), Hacettepe Üniversitesi, 2007.
5. I. Dincer, **E. Yüzüak**, Y. Elerman.,  
" The addition of Ni instead of Cu in Ni-Mn-Sn Heusler alloys Properties of magnetic, magnetocaloric and magnetoresistivity Effect"  
15. Yoęun Madde Fizięi Toplantısı (YMF-15), Bilkent Üniversitesi, 2008, Ankara, Turkey.



6. B. Emre, M. Yavuz, **E. Yüzüak**, S. Ener, İ. Dinçer, Y. Elerman  
Balkan Condensed Matter Congress (2008).
7. S. Ener, M. Yavuz, B. Emre, **E. Yüzüak**, İ. Dinçer, Y. Elerman  
NanoTR-IV Conference (2008).
8. S. ENER, S. AKSOY, **E. YÜZÜAK**, M.ACET, Y. ELERMAN  
*"The relationship between structural and magnetic transitions in  
Gd<sub>5</sub>Si<sub>2.025</sub>Ge<sub>1.925</sub>In<sub>0.05</sub>"*  
21-24, 2008 25. Turkish Physics Congress, Bodrum.
9. **Ercüment Yüzüak**, İlker Dinçer ve Yalçın Elerman  
" Magnetocaloric Properties of Gd<sub>5</sub>Si<sub>1.95-x</sub>Ge<sub>2.05-x</sub>Mn<sub>2x</sub> (2x= 0.02 ve 0.06)  
Alloys"  
**2009**, 16. Solid State Meeting, Ankara, Turkey.
10. İlker Dinçer, **Ercüment Yüzüak** ve Yalçın Elerman  
*"(Ni-Cu)<sub>50</sub>Mn<sub>34</sub>In<sub>16</sub> Alloys and Magnetocaloric Properties of Magnetic  
Resistance"*  
**2009**, 16. Yoğun Madde Fiziği Toplantısı, Ankara, Turkey.
11. **E. Yüzüak**, B. Emre, İ. Dinçer, S. Ener, A. Yücel and Y. Elerman  
*"Magnetic phase transition and magnetocaloric effect in Pb and Sn doped  
Tb<sub>5</sub>Si<sub>2</sub>Ge<sub>2</sub>"*  
9-13 Mayıs 2008, Balkan Physics, Muğla, Türkiye.
12. I. Dincer, Y. Elerman, **E. Yüzüak**, M. Hölzel, A. Senyshyn, E. Duman, T.  
Krenke, *"Magnetostructural and magnetocaloric properties of Ni<sub>50-x</sub>  
Cu<sub>x</sub>Mn<sub>36</sub>Sn<sub>14</sub> by magnetic measurements and neutron diffraction  
experiments"*,  
26. European Crystallographic Meeting (ECM-26), 2010, Darmstadt,  
Germany.

- 13. Y. Elerman, E. Yüzüak, I. Dincer**  
*"Structural, magnetic and magnetocaloric effect in the off-stoichiometric  $Gd_5Ge_{2.05-x}Si_{1.95-x}Mn_{2x}$  alloys"*,  
26. European Crystallographic Meeting (ECM-26), 2010, Darmstadt, Germany.
- 14. I. Dincer, E. Yüzüak, Y. Elerman,**  
*"The Effects of Magnetoplastic Properties on Magnetoresitivity and Magnetocaloric Effects on (Ni-Cu)-Mn-Z (Z:In and Sn)"*  
European Congress and Exhibition on Advanced Materials and Processes- EUROMAT, 2011, Montpellier, Fransa.
- 15. O. Tozkoparan, O. Yıldırım, E. Yüzüak, D. Terin, S. Venig, E. Duman, I. Dinçer ve Y. Elerman**  
*"Magnetic Characterization of Plasma Arc Evaporated Fe Nanoparticles"*  
NanoTR-7, 2011, İstanbul, Türkiye. Poster.
- 16. O. Tozkoparan, O. Yıldırım, E. Yüzüak, D. Terin, S. Venig, E. Duman, I. Dinçer ve Y. Elerman**  
*"Magnetic Characterization of Plasma Arc Evaporated Ni Nanoparticles"*  
NanoTR-7, 2011, İstanbul, Turkey.
- 17. A. Auge, N. Teichert, M. Meinert, I. Ennen, I. Dincer, E. Yüzüak, Y. Elerman, A. Hutten:** *"Martensitic transformation and magnetoresistance in off-stoichiometric Ni-Mn-Sn thin films"*  
Intermag 2011, Taipei, Taiwan.
- 18. A. Auge, N. Teichert, M. Meinert, I. Ennen, I. Dincer, E. Yüzüak, Y. Elerman, I. Ennen, P. Schattschneider, A. Hutten**  
*"Martensitic transformation and electron energy loss magnetic chiral dichroism in off-stoichiometric Ni-Mn-Sn thin films"*  
APMAS 2011, Antalya, Turkey.

- 19. E. Yüzüak**, I. Dinçer, Y. Elerman, A. Auge, M. Meinert, ve A. Hütten  
*"The investigation of structural, electrical and magnetic properties of epitaxial ultra thin Ni–Mn–Sn films"*  
18. Yoğun Madde Fiziği Toplantısı – ODTÜ 2011.
- 20. İlker Dinçer, Ercüment Yüzüak**, Gizem Durak, Yalçın Elerman  
*"Magnetocaloric properties of nanostructured CoMnGe<sub>0.95</sub>Ga<sub>0.05</sub> powders"*  
2012, NanoTR-7, Ankara, Turkey.
- 21. İ. Dinçer, E. Yüzüak**, Y. Elerman, A. Auge, N. Teichert, M. Meinert, G. Reiss, A. Hütten, I. Ennen, P. Schattschneider,  
*"Structural, magnetic, and magnetoresistivity properties of epitaxial Ni-Mn-Sn ultra-thin films"*  
2012, NanoTR-7, Ankara, Türkiye.
- 22. İ. Dinçer, O. Tozkoparan, E. Yüzüak**, E. Duman, Y. Elerman  
*"The structural, magnetic and magnetocaloric properties of CoMn<sub>1-x</sub>Ti<sub>x</sub>Ge alloy."*  
Thermag V 2012, France.
- 23. E. Duman, O. Yıldırım, İ. Dinçer, E. Yüzüak**, Y. Elerman  
*"The influence of annealing process on the structural, magnetic and magnetocaloric properties of CoMn<sub>1-x</sub>V<sub>x</sub>Ge ."*  
Thermag V 2012, France.
- 24. Y. Elerman, G. Durak, İ. Dinçer, E. Yüzüak**, A.M.T. Bell, H. Ehrenberg  
*"The magnetic and magnetocaloric properties of bulk and nanostructured of CoMnGe<sub>0.95</sub>Ga<sub>0.05</sub>"*  
Thermag V 2012, France.

**Yayınlar :**

**1. E.Yüzüak, B.Emre, A.Yücel, Y.Elerman**

*“Magnetocaloric Effect in the  $Tb_5Si_{2-x}Ge_{2-x}Fe_{2x}$  ( $0 < 2x < 0.1$ ) compounds”*

Journal of Alloys and Compounds 476 (2009) 929.

**2. E.Yüzüak, B.Emre, Y.Elerman, A. Yücel**

*“Giant magnetocaloric effect in  $Tb_5Ge_{2-x}Si_{2-x}Mn_{2x}$  compounds”*

Chinese Physics B 19 (2010) 057501.

**3. E.Yüzüak, B.Emre, Y.Elerman, A. Yücel**

*“Giant magnetocaloric effect in the  $Gd_5Ge_{2.025}Si_{1.925}In_{0.05}$  compound”*

Chinese Physics B 19 (2010) 037502.

**4. E.Yüzüak, I.Dinçer, Y. Elerman**

*“The magnetocaloric properties of the  $Gd_5Si_{2.05-x}Ge_{1.95-x}Mn_{2x}$  compounds”*

Journal of Rare Earths 28 (2010) 477.

**5. I. Dincer, E. Yüzüak, Y. Elerman**

*“Influence of irreversibility on inverse magnetocaloric and magnetoresistance properties of the  $(Ni,Cu)_{50}Mn_{36}Sn_{14}$  alloys “*

Journal of Alloys and Compounds 506 (2010) 508.

**6. I. Dincer, E. Yüzüak, Y. Elerman**

*“The effect of the substitution of Cu for Ni on magnetoresistance and magnetocaloric properties of  $Ni_{50}Mn_{34}In_{16}$ ”*

Journal of Alloys and Compounds 509 (2011) 794.

**7. E.Yüzüak, I.Dinçer, Y. Elerman**

*“The effects of Mn Doping on magnetocaloric effect in the off-stoichiometric Ge rich- $Gd_5Ge_{2.05}Si_{1.95}$  alloy”*

Journal of Rare Earths 30 (2012) 3.

**8. A. Auge, N. Teichert, M. Meinert, G. Reiss, A. Hütten, E. Yüzüak, I. Dincer, Y. Elerman, I. Ennen, P. Schattschneider**

*“Thickness dependence of the martensitic transformation, magnetism, and magnetoresistance in epitaxial Ni-Mn-Sn ultrathin films”*

Phys. Rev. B 85 (2012) 214118.

**9. I. Dincer, E. Yüzüak, G. Durak, Y. Elerman, A.M.T. Bell, H. Ehrenberg**

*“Exploring the details of the martensitic phase transition and magnetocaloric effect of  $CoMnGe_{0.95}Ga_{0.05}$  by synchrotron and magnetic measurements”*

Journal of Alloys and Compounds 542 (2012) 236.

**10. E. Yüzüak, G. Durak, I. Dincer, Y. Elerman**

*“The magnetic and magnetocaloric properties of nanostructured  $CoMnGe_{0.95}Ga_{0.05}$ ”*

Journal of Alloys and Compounds 541 (2012) 256.

**Diğer Yayınlar:**

**1. E.Yüzüak, B.Emre, S.Ener, Y.Elerman**

*“Influence of Antimony on the Giant Magnetocaloric Effect of  $Gd_5Ge_{2.05}Si_{1.95}$ ”*

Balkan Physics Letters, Special Issue, Boğaziçi University Press, ISSN 1301- 8329 (2008).

**2. E. Yüzüak, B. Emre, İ. Dinçer, S. Ener, A. Yücel and Y. Elerman**

*“Magnetic phase transition and magnetocaloric effect in Pb and Sn doped  $Tb_5Si_2Ge_2$ ”,*

*Journal of Optoelectronics and Advanced Materials Symposia, 1, 612, (2009).*