

## Ab initio Yöntemler ile Ni<sub>2</sub>ScAl Bileşiğinin Mekanik ve Termodinamik Özelliklerinin İncelenmesi

Tahsin ÖZER<sup>1\*</sup>, Nihat ARIKAN<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Osmaniye Korkut Ata Üniversitesi Bahçe Meslek Yüksekokulu, Bahçe/Osmaniye/Türkiye

<sup>2</sup>Osmaniye Korkut Ata Üniversitesi Sağlık Hizmetleri Meslek Yüksekokulu, Osmaniye/Türkiye

<sup>1</sup><https://orcid.org/0000-0003-0344-7118>

<sup>2</sup><https://orcid.org/0000-0001-8028-3132>

\*Sorumlu yazar: tahsinozer@osmaniye.edu.tr

### Araştırma Makalesi

### ÖZ

#### Makale Tarihi:

Geliş tarihi: 08.10.2021

Kabul tarihi: 14.03.2022

Online Yayınlanma: 18.07.2022

#### Anahtar Kelimeler:

Ni<sub>2</sub>ScAl

Heusler

Elastik sabitler

Termodinamik

Çalışmada Ni<sub>2</sub>ScAl full Heusler bileşiğinin mekanik ve termodinamik özellikleri araştırılmıştır. Bu amaçla, önce yapısal optimizasyon yapılmış akabinde elastik sabitler hesaplanmıştır. Hesaplanan elastik sabitlerin kararlılık kriterlerini sağladığından dolayı elastik modülü hesaplanmış ve anizotropisi incelenmiştir. Debye sıcaklığı, Gruneisen sabiti ve termal iletkenlikleri tahmin edilmiştir. Yapılan hesaplamalar sonucunda Ni<sub>2</sub>ScAl bileşiği sert olmayıp, anizotrop ve sünek özellik göstermesi beklenmektedir. Küçük minimum termal iletkenliğe sahip olmasından dolayı, ısı yalıtkan olarak kullanılabilir.

## Investigation of Mechanical and Thermodynamic Properties of Ni<sub>2</sub>ScAl Compound by Ab initio Methods

### Research Article

### ABSTRACT

#### Article History:

Received: 08.10.2021

Accepted: 14.03.2022

Published online: 18.07.2022

#### Keywords:

Ni<sub>2</sub>ScAl

Heusler

Elastic constant

Thermodynamic

In this study, the mechanical and thermodynamic properties of Ni<sub>2</sub>ScAl full Heusler compound were investigated. For this purpose, first structural optimization was made, and then elastic constants were calculated. Since the calculated elastic constants meet the stability criteria, the elastic modulus was calculated, and its anisotropy was examined. Debye temperature, Gruneisen constant and thermal conductivities were estimated. As a result of the calculations, it is expected that the Ni<sub>2</sub>ScAl compound is not hard but will show anisotropic and ductile properties. It can be used as a thermal insulator due to its small minimum thermal conductivity.

**To Cite:** Özer T., Arıkan N. Ab initio Yöntemler ile Ni<sub>2</sub>ScAl Bileşiğinin Mekanik ve Termodinamik Özelliklerinin İncelenmesi. Osmaniye Korkut Ata Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Dergisi 2022; 5(2): 861-870.

### 1. Giriş

1903 yılında keşfedilen Heusler alaşımlar manyetik elementler olmaksızın ferromanyetik özellik göstermesinden dolayı ilgi çekmiştir. Çok çeşitli özelliklerinin istenen ihtiyaca göre uyarılma potansiyelinden dolayı 2015 yılından bu yana binlerce çalışma yapılmıştır. Full-Heusler bileşikler X<sub>2</sub>YZ formunda olup, X ve Y atomları tipik geçiş elementleri ya da lantanitlerden olurken Z atomu III veya IV gruptan olur (Everhart ve Newkirk, 2019). X<sub>2</sub>YZ genel formuna sahip Heusler bileşiğinin günümüzde yüzlerce temsilcisi olan büyük bir kübik bileşik ailesidir (Benndorf ve ark., 2015). Ni<sub>2</sub>ScAl üçlü bileşiği intermetalik Heusler bileşiği olup L2<sub>1</sub>-yapı olarak da bilinmektedir. Bu bileşik

Benndorf ve ark., (2015) tarafından yakın zamanlarda sentezlenmiştir. Mekanik ve termodinamik özelliklerine, basıncın ve sıcaklığın etkisi Wen ve ark., (2017) tarafından incelenmiştir. Heusler bileşikler mükemmel ferromanyetik özelliğe sahiptir (Wen ve ark., 2017).

Ab initio metotlar kullanılarak bir malzemenin yapısal, mekanik, elektronik, optik ve termodinamik özelliklerini deneysel değerlere çok yakın hesaplamak mümkündür (Özer ve Öztürk, 2019). Ab initio metotlar ile hesaplama yapılacak malzeme, daha önce sentezlenmiş hatta birtakım özellikleri deneysel veya teorik olarak çalışılmış olabileceği gibi henüz hiç sentezlenmemiş malzemeler de olabilir. Sentezlenmemiş malzemelerin sentezlenip sentezlenemeyeceğine dahi bakılabilmektedir. Bu şekilde teorik olarak malzemenin tüm özelliklerinin belirlenmesi uygulamalarda kullanılacak aday malzeme seçiminde önem arz etmektedir (Özer, 2020a).

Bu çalışmada,  $Ni_2ScAl$  bileşiğinin yapısal optimizasyonu yapılmış, sonrasında elastik sabitleri hesaplanmıştır. Hesaplanan bu elastik sabitler kullanılarak elastik modül, anizotropi ve termodinamik özellikler (Debye sıcaklığı, erime sıcaklığı, minimum termal iletkenlik vs.)'in araştırılması amaçlanmıştır.

## 2. Materyal ve Metot

Quantum Espresso (QE) yazılımı ile yapılan DFT hesaplamalarında GGA (Generalized Gradient Approximation) yaklaşımında elektron-elektron etkileşiminin exchange-correlation terimi için PBE (Perdew – Burke - Ernzerhof) (Perdew ve ark., 1996) fonksiyoneli tercih edilmiştir. QE internet sitesinden temin edilen USPP (Ultrasoft Pseudo Potansiyel) tipi ve PBESOL fonksiyonel Pseudopotansiyel dosyaları kullanılmıştır. Tüm hesaplamalarda kinetik enerji cut off değeri olarak 540 Ry, ecutrho için 3780 Ry, k-noktaları için 6x6x6 optimize değerler kullanılmıştır. Elastik sabitlerin hesaplanması, açık kaynak QE yazılımının bir parçası olan THERMO\_PW sicipti ile yapılmıştır.

## 3. Bulgular ve Tartışma

$Ni_2ScAl$  bileşiği kübik yapıda ve Fm-3m (no:225) uzay gurubunda bulunmaktadır. Al atomları 4a Wyckoff konumunda ve (0, 0, 0) koordinatta, Ni atomları 8c Wyckoff konumunda ve (1/4, 1/4, 1/4) koordinatta, Sc atomları 4b Wyckoff konumunda ve (1/2, 1/2, 1/2) koordinatta bulunur (Wen ve ark., 2017).

Araştırmaya  $Ni_2ScAl$  bileşiğinin yapısal optimizasyonu ile başlanmıştır. Yapısal optimizasyon sonucunda bileşiğin örgü sabiti 5,98 Å olarak hesaplanmıştır. Yapılan literatür taramasında Wen ve ark., (2017) 6,028 Å (GGA) ve 5,914 Å (LDA) olarak hesaplamışlar ve deneysel olarak 5,990 Å (Dwight ve Kimball, 1987) olduğu rapor edilmiştir. Bu çalışma ile bulunan değer, deneysel olarak ölçülen değere daha yakındır.

### 3.1. Mekanik ve Anizotropik Elastik Özellikler

Malzemenin mekanik kararlılığını belirleyebilmek için elastik sabitler ( $C_{ij}$ ) elde edilir. Bu sabitler malzemenin teknolojik uygulamalarında önem arz etmektedir. Kübik yapıdaki kristaller için gerekli olan elastik sabitler  $C_{11}$ ,  $C_{12}$  ve  $C_{44}$  olup literatür verileri ile Tablo 1’de verilmiştir.  $Ni_2ScAl$  bileşiği herhangi bir deneysel çalışmaya konu olmamış ancak Wen ve ark. (2017) tarafından CASTEP yazılımı ile teorik olarak çalışılmıştır. Tablo 1’den de görüleceği gibi bu çalışma ile bulunan değer, literatür verisi ile ortalama %6,5 farklıdır. Teorik hesaplamalar için bu fark normal olup, kullanılan yazılım farklılığından olduğu düşünülmektedir.

**Tablo 1.**  $Ni_2ScAl$  bileşiği için hesaplanan elastik sabitler

Referans	$C_{11}$	$C_{12}$	$C_{44}$
Bu çalışma	191,94	116,73	88,34
Wen ve ark. (2017)	190,2	101,0	85,6
de Jong ve ark. (2015)	189	105	69

Hesaplanan sabitler Born kararlılık kriterleri (Born, 1940; Mouhat ve Coudert, 2014) olarak bilinen şartları sağlamaktadır. Bundan dolayı  $Ni_2ScAl$  bileşiğinin mekanik olarak kararlı yapıda olduğu söylenebilir. Mekanik olarak kararlı olmasından dolayı çalışılan bileşiğin mekanik özellikleri araştırılmıştır. Bulk, shear, Young (E) modulu ve poisson oranı ( $\nu$ ) gibi fiziksel özellikler elastik sabitlerinin yardımı ile Voight (Voigt, 1966), Reuss (Reuss, 1929) ve Hill (Hill, 1952) yaklaşımında hesaplanarak Tablo 2’de verilmiştir. Tablolarda “V” alt indisi Voight, “R” Reuss ve “H” Hill yaklaşımını sembolize etmektedir. Voight yaklaşımı üst, Reuss yaklaşımı alt limite ve Hill yaklaşımı bunların aritmetik ortalamasına karşılık gelmektedir. Hill yaklaşımı genellikle deneylere en yakın değeri vermektedir.

**Tablo 2.**  $Ni_2ScAl$  bileşiği için hesaplanan elastik sabitler

Referans	B			G			E			$\nu$		
	$B_V$	$B_R$	$B_H$	$G_V$	$G_R$	$G_H$	$E_V$	$E_R$	$E_H$	$\nu_V$	$\nu_R$	$\nu_H$
Bu çalışma	141,8	141,8	141,8	68,0	57,4	62,7	176,0	151,7	164,0	0,29	0,32	0,31
Wen ve ark. (2017)	-	-	130,7	-	-	65,9	-	-	169,3	-	-	-
de Jong ve ark. (2015)	133	133	133	58,2	54,88	56,54	152,37	144,75	148,57	0,30	0,31	0,31

Bulk, shear, Young modüllerin değerlerinin büyüklüğü malzemenin sertliğini göstermektedir. Yapılan çalışmada  $Ni_2ScAl$  bileşiği için Bulk, shear ve young modülleri sıra ile 141,8 GPa, 62,7 GPa ve 164,0 GPa olarak hesaplanmıştır. Hesaplanan bu değerler, literatür taramasından bulunan veriler ile uyumludur (de Jong ve ark., 2015; Wen ve ark., 2017). Bir malzemenin sertliğini sadece Bulk, shear ve Young modüllerine bakarak değerlendirmek yeterli değildir. Bu yüzden Vicker sertliği de hesaplanmalıdır. Literatürde Vicker sertliğini tanımlayan birkaç tane eşitlik mevcuttur. Bu çalışmada Vicker sertliğini (Chen ve ark., 2011) hesaplamak için takip eden eşitlik tercih edilmiştir.

$$H_v = 2(k^2 G)^{0.585} - 3 \quad (1)$$

Eşitlikte geçen  $k$  değeri “G/B” oranını göstermektedir. Verilen bu eşitlik yardımı ile Ni<sub>2</sub>ScAl bileşiğinin Vicker sertliği 5,7 GPa olarak hesaplanmıştır. Vicker sertliği 10 GPa altında olan malzemeler, sert olmayan yumuşak malzeme olarak sınıflandırılmaktadır (Liu ve ark., 2020). Bu sınıflandırılmaya göre Ni<sub>2</sub>ScAl bileşiği yumuşak bir malzemedir. Malzemenin bir başka enteresan mekanik özelliği de mikro sertliğidir. Malzemenin mikro sertliğini, Young modülü ve Poisson oranını kullanarak tahmin etmek için Yousef’in önerdiği deneysel bağıntı (Yousef ve ark., 2006),

$$H = \frac{(1 - 2\nu)E}{6(1 + \nu)} \quad (2)$$

Yousef’in önerdiği eşitlik yardımı ile malzemenin mikro sertliği 8,06 GPa olarak hesaplanmıştır. Wen ve ark, (2017) bu değeri 9,48 GPa olarak rapor etmişlerdir. Bu bakımdan da bulunan sonuç literatür verisi ile uyumludur.

Malzemenin sünek (ductile), kırılğan (brittle) doğasını belirlemek için B / G oranı kullanılmaktadır. Kırılğan doğaya sahip malzemelerde B / G oranı 1,75’den küçük, sünek doğaya sahip malzemelerde bu oran 1,75’den büyük olmaktadır (Pugh, 1954). Çalışılan malzeme için B / G oranı 2,26 olarak hesaplandığından sünek doğaya sahip olduğu söylenebilir. Literatürde “C<sub>12</sub> - C<sub>44</sub>” değeri Cauchy basıncı olarak ifade edilmektedir. Kırılğan (sünek) doğaya sahip malzemelerde Cauchy basıncı negatif (pozitif) değer almaktadır. Cauchy basıncı pozitif olduğundan sünek doğaya sahip olduğu söylenebilir. Cauchy basıncı ile ulaşılan yargı, B / G oranı ile ulaşılan yargıyı doğrulamaktadır. Ayrıca Wen ve ark. (2017) yaptıkları çalışmada Ni<sub>2</sub>ScAl bileşiğini sünek davranış sergileyeceğini bildirmişlerdir. Bu bakımdan da bu çalışma ile ulaşılan yargı literatür ile de tutarlıdır.

Aynı zamanda G / B oranı malzemedeki bağların doğasını anlamak için de kullanılmaktadır. Eğer G / B oranı 0,6 civarında ise iyonik bağ, 1,1 civarında ise kovalent bağ baskındır (Surucu, 2018). Ni<sub>2</sub>ScAl bileşiği için G / B oranı 0,4 olarak hesaplanmıştır. Ayrıca Poisson oranı da malzemedeki bağların doğası hakkında bilgi vermektedir. Eğer Poisson oranı 0,1 civarında olursa malzemedeki kovalent bağlar baskındır, eğer 0,25 civarında ise iyonik bağlar baskındır. Poisson oranı 0,31 olarak hesaplandığından Ni<sub>2</sub>ScAl bileşiğinde hem kovalent hem de iyonik bağlar mevcuttur. Burada olduğu gibi atomlar arası bağların kısmen iyonik kısmen de kovalent olması mümkündür. Tabiatta sadece birkaç bileşik sadece kovalent veya sadece iyonik bağlardan oluşur. Bir bileşikteki iyonik ve kovalent bağın derecesi periyodik tabloda atomların bağıl konumlarına veya elektronegatiflik değerleri arasındaki farka bağlıdır. Atomların elektronegatiflik değerleri arttıkça iyonik bağ özelliği de artar. Periyodik tabloda elementler birbirine ne kadar yakın iseler veya elektronegatiflik farkları küçük ise bu durumda koavalentlik derecesi de o kadar yüksek olacaktır. A ve B elementleri arasındaki iyonik bağın yüzdesi takip eden eşitlik yardımı ile hesaplanabilir (Callister ve Rethwisch, 2011; Özer, 2020b).

$$\% \text{ iyonik özellik} = \left\{ 1 - \exp \left[ -\frac{(X_A - X_B)^2}{4} \right] \right\} \times 100 \quad (3)$$

Eşitlikte geçen  $X_A$  ve  $X_B$  ilgili elementlerin elektronegatiflik değerleridir.

Malzeme biliminde ve uygulamalarında mikro çatlaklar önem arz ettiğinden anizotropi incelenmesi gereken bir özelliktir.  $\text{Ni}_2\text{ScAl}$  Heusler bileşiğinin anizotropisi elastik sabit ve modüllere dayanan farklı metotlar ile ifade edilebilir. Malzemenin anizotropisi, herhangi bir kristal yapıya uygulanabilen evrensel anizotropi index ( $A^U$ ) (Ranganathan ve Ostoja-Starzewski, 2008), Chung-Buessem anizotropi index ( $A_G$ ) (Buessem ve Chung, 1968), sadece kübik kristallere uygulanabilen Zener anizotropik index ( $A_Z$ ) (Nye, 1985) ve elastik anizotropi faktörü ( $A^E$ ) (Every, 1980) olarak farklı şekillerde ifade edilebilmektedir. İzotropik sistemlerde  $A_Z$  bir,  $A^U$ ,  $A_G$ ,  $A^E$  değerleri sıfır olur. Bu değerlerin sıfır ve birden sapma miktarları anizotropikliğin ölçüsüdür. Anizotropinin farklı ifadeleri ile hesaplanan değerleri Tablo 3’de verilmiştir. Tablo 3’den de açıkça görüleceği üzere  $\text{Ni}_2\text{ScAl}$  bileşiği anizotropik bir davranış sergilemesi beklenmektedir. Ulaşılan bu yargı Wen ve ark., (2017) yaptığı çalışma ile tutarlıdır.

$$A^U = 5 \frac{G_V}{G_R} + \frac{B_V}{B_R} \geq 0 \quad (4)$$

$$A_Z = \frac{2G_{44}}{C_{11} - C_{12}} \quad (5)$$

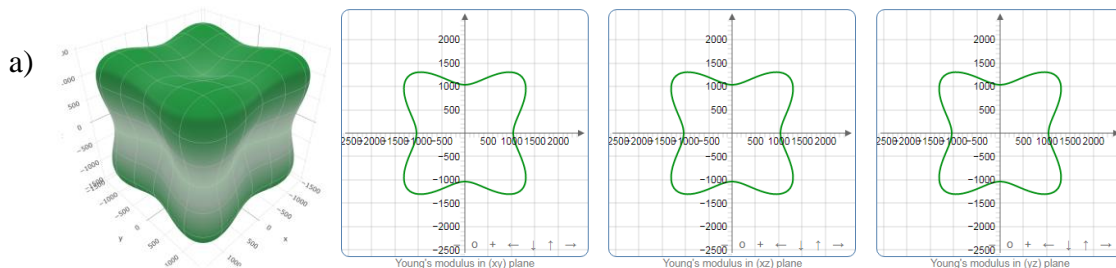
$$A_G = \frac{G_V - G_R}{G_V + G_R} \times 100 \quad (6)$$

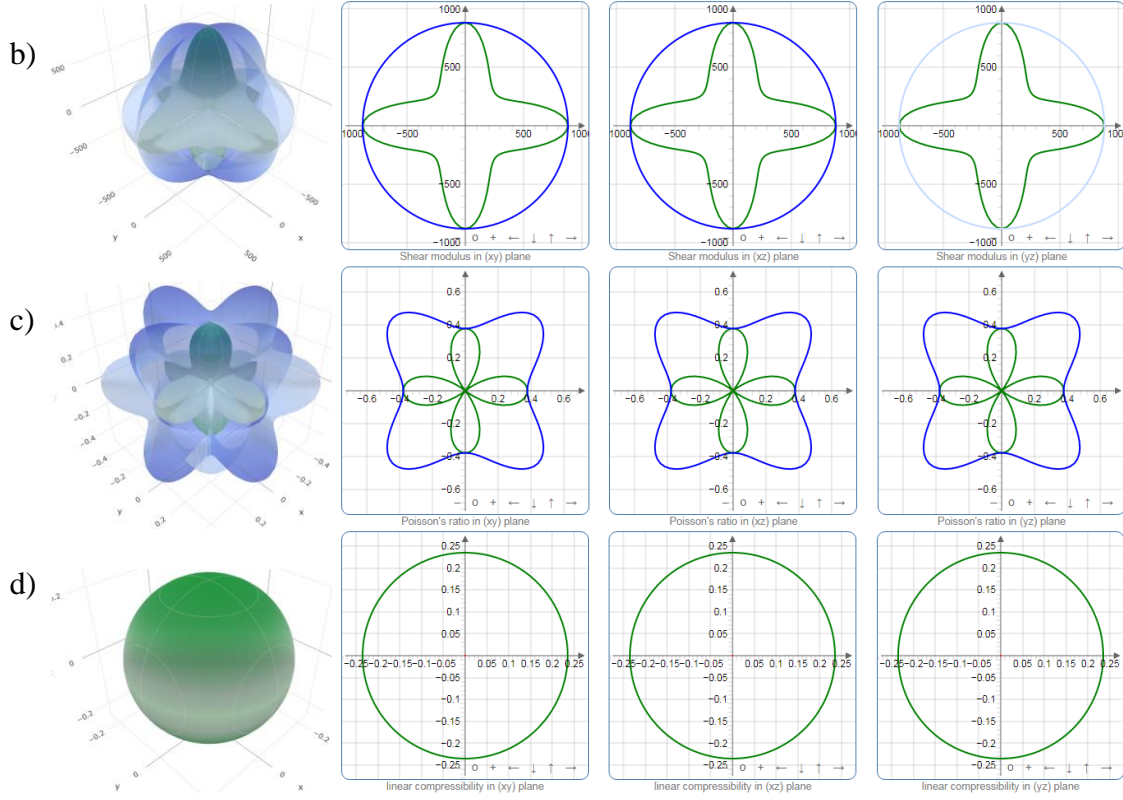
$$A^E = \frac{C_{11} - C_{12} - 2C_{44}}{C_{11} - C_{44}} \quad (7)$$

**Tablo 3.** Hesaplanan anizotropi oranları.

	$A^U$	$A_Z$	$A_G$	$A^E$
Bu çalışma	0,93	2,35	8,50	-0,98
Wen ve ark., (2017)	0,53	1,92	5,00	-

Çalışılan malzemenin anizotropisinin daha rahat görülebilmesi için anizotropi ELATE yazılımı (Gaillac ve ark., 2016) ile 3D ve 2D olarak görselleştirilerek Şekil 1’de verilmiştir.





**Şekil 1.** Bileşiğin anizotropisi (a) Young's modülü, (b) Shear modülü, (c) Poisson'ın oranı, (d) linear sıkıştırılabilirliğinin 3D and 2D şekilleri.

Grafikteki yeşil şekiller minimum parametreyi gösterirken mavi şekiller maksimum parametreyi göstermektedir. Görseller, izotropik malzemelerde küre şeklinde olmaktadır. Küre şeklinden sapmalar anizotropikliğin göstergesidir. Şekilden de açıkça görüleceği gibi lineer sıkıştırılabilirlik izotropik olduğu halde Poisson oranı, Young ve Shear modülleri izotropik olmayıp anizotropiktir.

### 3.2. Termodinamik Özellikler

Debye sıcaklığı, ortalama ses hızı, erime sıcaklığı gibi bir takım fiziksel özellikler büyük doğruluk oranları ile teorik olarak hesaplanabilmektedir. Debye sıcaklığı, erime sıcaklığı ve termal iletkenlik gibi bazı fiziksel özellikler ile yakından ilişkilidir. Yüksek Debye sıcaklığı, malzemelerde yüksek termal iletkenlik ve yüksek erime sıcaklığına işaret etmektedir (Gencer ve Surucu, 2019). Literatürde verilen eşitlikler (Anderson, 1963; Schreiber, 1973) yardımı ile Debye sıcaklığı ( $\theta_D$ ) 577 K, ortalama ses hızı ( $v_m$ ) 7302 m/s, enine ses hızı ( $v_s$ ) 6531 m/s ve boyuna ses hızı ( $v_l$ ) 12382 m/s olarak hesaplanmıştır. Hesaplanan bu Debye sıcaklığını kıyaslayacak bir literatür verisine ulaşamadığından okuyucuya fikir vermesi açısından  $\text{Ir}_2\text{ScGa}$  ve  $\text{Rh}_2\text{ScGa}$  bileşiklerinin Debye sıcaklıkları 324 ve 326 K olarak rapor edilmiştir (Çanlı ve ark., 2021).

Akustik Gruneisen sabiti  $\gamma_a$  atom ve moleküller arasındaki etkileşimin anharmonikliğin bir ölçüsüdür. Termal genişleme ve termal iletkenlik gibi önemli fiziksel süreçleri kontrol eder. Gruneisen sabiti bir

ve iki arasında bir deęer alır. Gruneisen sabiti termal iletkenlik ile ters orantılıdır. Akustik Gruneisen sabiti (Okoye, 2014; Arab ve ark., 2016; Kou ve ark., 2020),

$$\gamma_a = \frac{3}{2} \left( \frac{3v_l^2 - 4v_s^2}{v_l^2 + 2v_s^2} \right) \quad (8)$$

Eşitlik 8 yardımı ile akustik Gruneisen sabiti 1,82 olarak hesaplanmıştır. Gruneisen sabitinin 2' ye yakın olması ve termal iletkenlik ile ters orantılı olmasından dolayı termal iletkenliğinin küçük bir deęerde olması beklenmektedir. Malzemenin minimum termal iletkenliği Clarke (Clarke, 2003), Cahill (Cahill ve ark., 1992) ve Long (Long ve ark., 2015) yöntemleri ile sırası ile 0,894, 0,998, 0,710 W m<sup>-1</sup> K<sup>-1</sup> olarak hesaplanmıştır. Hesaplanan minimum termal iletkenliğin deęerinin küçük olması Gruneisen sabiti ile tutarlıdır. Ni<sub>2</sub>ScAl bileşiğinin minimum termal iletkenliğinin küçük olmasından dolayı termal yalıtkan malzeme olarak uygulamalarda kullanılabilir. Gruneisen sabiti ve minimum termal iletkenlik deęerlerini kıyaslayabilecek herhangi bir veri bulunamamıştır. Bu bakımdan literatürdeki bu eksikliğin tamamlandığı söylenebilir.

Elastik sabit ve modüller yardımı ile malzemenin kaynama noktası teorik olarak hesaplanabilir. Literatürde erime noktasını tahmin eden eşitlikler (Fine ve ark., 1984; Özer, 2018)

$$T_m = 560.4 + 7.805 C_{11} - 3.094 C_{12} - 1.086 C_{44} \quad (9)$$

$$T_m = 553 + 5.91 C_{11} \quad (10)$$

$$T_m = 607 + 9.3 B \quad (11)$$

Eşitlikte geçen C<sub>ij</sub> elastik sabitlere (GPa) ve B= ( C<sub>11</sub> + 2C<sub>12</sub> ) / 3, ifadesine karşılık gelmektedir. Ni<sub>2</sub>ScAl bileşiğinin erime sıcaklığı 1601 K (Eşitlik 9), 1687 K (Eşitlik 10) ve 1925 K (Eşitlik 11) olarak hesaplanmıştır. Ni<sub>2</sub>ScAl bileşiğinin erime sıcaklığının tayinine yönelik herhangi bir deneysel veya teorik çalışma bulunamadığından hesaplanan sonuçlar kıyaslanamamıştır.

#### 4. Sonuç

Bu çalışmada, Ni<sub>2</sub>ScAl bileşiğinin yapısal optimizasyonu yapılarak elastik sabitler elde edilmiş bu sabitler kullanılarak elastik modül, anizotropi ve termal özellikler detaylı olarak incelenmiştir. Enerji hesaplamalarında açık kaynak QE kodu, anizotropikliği görselleştirebilmek için ELATE yazılımı kullanılmıştır. Çalışma sonucunda, Ni<sub>2</sub>ScAl bileşiğinin hesaplanan elastik sabitleri Born kararlılık kriterlerini karşılamaktadır bu bakımdan mekanik olarak kararlı olduğu söylenebilir. Yine yapılan hesaplamalar neticesinde bileşiğin yumuşak, anizotropik özellik ve sünek karakterde olacağı tahmin edilmiştir. Bileşiğin Debye sıcaklığı, Akustik Gruneisen sabiti ve termal iletkenlik deęerleri elde edilmiştir. Termal iletkenliğinin küçük olmasından dolayı ısıl uygulamalarda termal yalıtkan malzeme olarak kullanılabilceği düşünülmektedir.

## **Çıkar Çatışması Beyanı**

Makale yazarları herhangi bir çıkar çatışması olmadığını beyan ederler.

## **Araştırmacıların Katkı Oranı Beyan Özeti**

Yazarlar makaleye eşit oranda katkı sağlamış olduğunu beyan ederler.

## **Kaynakça**

- Anderson OL. A simplified method for calculating the debye temperature from elastic constants. *Journal of Physics and Chemistry of Solids* 1963; 24(7): 909–917.
- Arab F., Sahraoui FA., Haddadi K., Bouhemadou A., Louail L. Phase stability, mechanical and thermodynamic properties of orthorhombic and trigonal MgSiN<sub>2</sub>: an ab initio study. *Phase Transitions* 2016; 89(5): 480–513.
- Benndorf C., Niehaus O., Eckert H., Janka O. 27Al and 45Sc NMR Spectroscopy on ScT<sub>2</sub>Al and Sc(T<sub>0.5</sub>T'<sub>0.5</sub>)<sub>2</sub>Al (T = T' = Ni, Pd, Pt, Cu, Ag, Au) heusler phases and superconductivity in Sc(Pd<sub>0.5</sub>Au<sub>0.5</sub>)<sub>2</sub>Al. *Zeitschrift Für Anorganische Und Allgemeine Chemie* 2015; 641(2): 168–175.
- Born M. On the stability of crystal lattices. I. *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society* 1940; 36(2): 160–172.
- Buessem DH., Chung WR. *Anisotropy in single-crystal refractory compounds*. 1st ed. US: Springer; 1968.
- Cahill DG., Watson SK., Pohl RO. Lower limit to the thermal conductivity of disordered crystals. *Physical Review B* 1992; 46(10): 6131.
- Çanlı M., İlhan E., Arıkan N. First-principles calculations to investigate the structural, electronic, elastic, vibrational and thermodynamic properties of the full-Heusler alloys X<sub>2</sub>ScGa (X = Ir and Rh). *Materials Today Communications* 2021; 26: 101855.
- Chen XQ., Niu H., Li D., Li Y. Modeling hardness of polycrystalline materials and bulk metallic glasses. *Intermetallics* 2011; 19(9): 1275–1281.
- Clarke DR. *Materials selections guidelines for low thermal conductivity thermal barrier coatings*. *Surface and Coatings Technology* 2003; 163–164: 67–74.
- de Jong M., Chen W., Angsten T., Jain A., Notestine R., Gamst A., Sluiter M., Ande CK., van der Zwaag S., Plata JJ., Toher C., Curtarolo S., Ceder G., Persson KA., Asta M. Charting the complete elastic properties of inorganic crystalline compounds. *Scientific Data*, 2015; 2.
- Dwight AE., Kimball CW. ScT<sub>2</sub>X and LnT<sub>2</sub>X compounds with the MnCu<sub>2</sub>Al-type structure. *Journal of the Less Common Metals*, 1987; 127(C): 179-182.
- Everhart W., Newkirk J. Mechanical properties of Heusler alloys. *Heliyon* 2019; 5(5): e01578.



- Every AG. General closed-form expressions for acoustic waves in elastically anisotropic solids. *Physical Review B* 1980; 22(4): 1746.
- Fine ME., Brown LD., Marcus HL. Elastic constants versus melting temperature in metals. *Scripta Metallurgica* 1984; 18(9): 951–956.
- Gaillac R., Pullumbi P., Coudert FX. ELATE: an open-source online application for analysis and visualization of elastic tensors. *Journal of Physics: Condensed Matter* 2016; 28(27): 275201.
- Gencer A., Surucu G. Investigation of structural, electronic and lattice dynamical properties of XNiH (X = Li, Na and K) perovskite type hydrides and their hydrogen storage applications. *International Journal of Hydrogen Energy* 2019; 44(29): 15173–15182.
- Hill R. The Elastic behavior of a crystalline aggregate. *Proceedings of the Physical Society. Section A*, 1952; 65(5): 349–354.
- Kou J., Zhou Y., Li KL., Gan LH. The stability, electronic, mechanical and thermal properties of three novel superhard carbon crystals. *Computational Materials Science* 2020; 182, 109758.
- Liu W., Niu Y., Li W. Theoretical prediction of the physical characteristic of Na<sub>3</sub>MO<sub>4</sub> (M=Np and Pu): The first-principles calculations. *Ceramics International* 2020; 46(16): 25359-25365.
- Long J., Shu C., Yang L., Yang M. Predicting crystal structures and physical properties of novel superhard p-BN under pressure via first-principles investigation. *Journal of Alloys and Compounds* 2015; 644, 638–644.
- Mouhat F., Coudert FX. Necessary and sufficient elastic stability conditions in various crystal systems. *Physical Review B* 2014; 90(22): 224104.
- Nye J. *Physical properties of crystals: their representation by tensors and matrices*. Oxford University Press, 1985.
- Okoye CMI. Structural, elastic and electronic structure of LiCu<sub>2</sub>Si, LiCu<sub>2</sub>Ge and LiAg<sub>2</sub>Sn intermetallic compounds. *Computational Materials Science* 2014; 92: 141–148.
- Özer T. Study of first principles on anisotropy and elastic constants of YAl<sub>3</sub> compound. *Canadian Journal of Physics*, 2020a; 98(4).
- Özer T. Yüksek basınç altında SbSeI'nin elektronik özelliklerin ilk ilk hesaplamalar ile incelenmesi. *International Journal of Advances in Engineering and Pure Sciences* 2020b; 2021(1): 64–72.
- Özer T. Determination of melting temperature. 4 th International Congress on Multidisciplinary Studies, 18-19 October 2018, sayfa no: 87–99, Kyrenia-TRNC.
- Özer T., Öztürk Aİ. Theoretical Investigation of the effect of pressure on structural parameters of ferroelectric SbSI crystal. *IMSTEC 2019*, 18-20 Ekim 2019, sayfa no: 176–179, Kızılcahamam-Ankara.
- Perdew JP., Burke K., Ernzerhof M. Generalized gradient approximation made simple. *Physical Review Letters* 1996; 77(18): 3865.

- Pugh SF. XCII. Relations between the elastic moduli and the plastic properties of polycrystalline pure metals. The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science, 1954; 45(367): 823–843.
- Ranganathan SI., Ostoja-Starzewski M. Universal Elastic anisotropy index. APS, 2008; 101(5).
- Reuss A. Berechnung der fließgrenze von mischkristallen auf grund der plastizitätsbedingung für einkristalle . ZAMM - Zeitschrift Für Angewandte Mathematik Und Mechanik 1929; 9(1): 49–58.
- Schreiber E. Elastic constants and their measurement. London: McGraw-Hill Book Company; 1973.
- Surucu G. Investigation of structural, electronic, anisotropic elastic, and lattice dynamical properties of MAX phases borides: An Ab-initio study on hypothetical M2AB (M = Ti, Zr, Hf; A = Al, Ga, In) compounds. Materials Chemistry and Physics 2018; 203: 106–117.
- Voigt W. Lehrbuch der kristallphysik. Wiesbaden: Vieweg+Teubner Verlag; 1966.
- Wen Z., Zhao Y., Hou H., Wang B., Han P. The mechanical and thermodynamic properties of Heusler compounds Ni<sub>2</sub>XAl (X = Sc, Ti, V) under pressure and temperature: A first-principles study. Materials & Design 2017; 114: 398–403.
- William D. Callister Jr., Rethwisch DG. Materials Science and Engineering. 8th edn. United States of America: John Wiley and Sons, 2011.
- Yousef ES., El-Adawy A., El-KheshKhany N. Effect of rare earth (Pr<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, Nd<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, Sm<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, Eu<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, Gd<sub>2</sub>O<sub>3</sub> and Er<sub>2</sub>O<sub>3</sub> ) on the acoustic properties of glass belonging to bismuth–borate system. Solid State Communications 2006; 139(3): 108-113.