


## Ni<sub>2</sub>ZnAl ALAŞIMININ İLK PRENSİPLER YÖNTEMİ İLE İNCELENMESİ

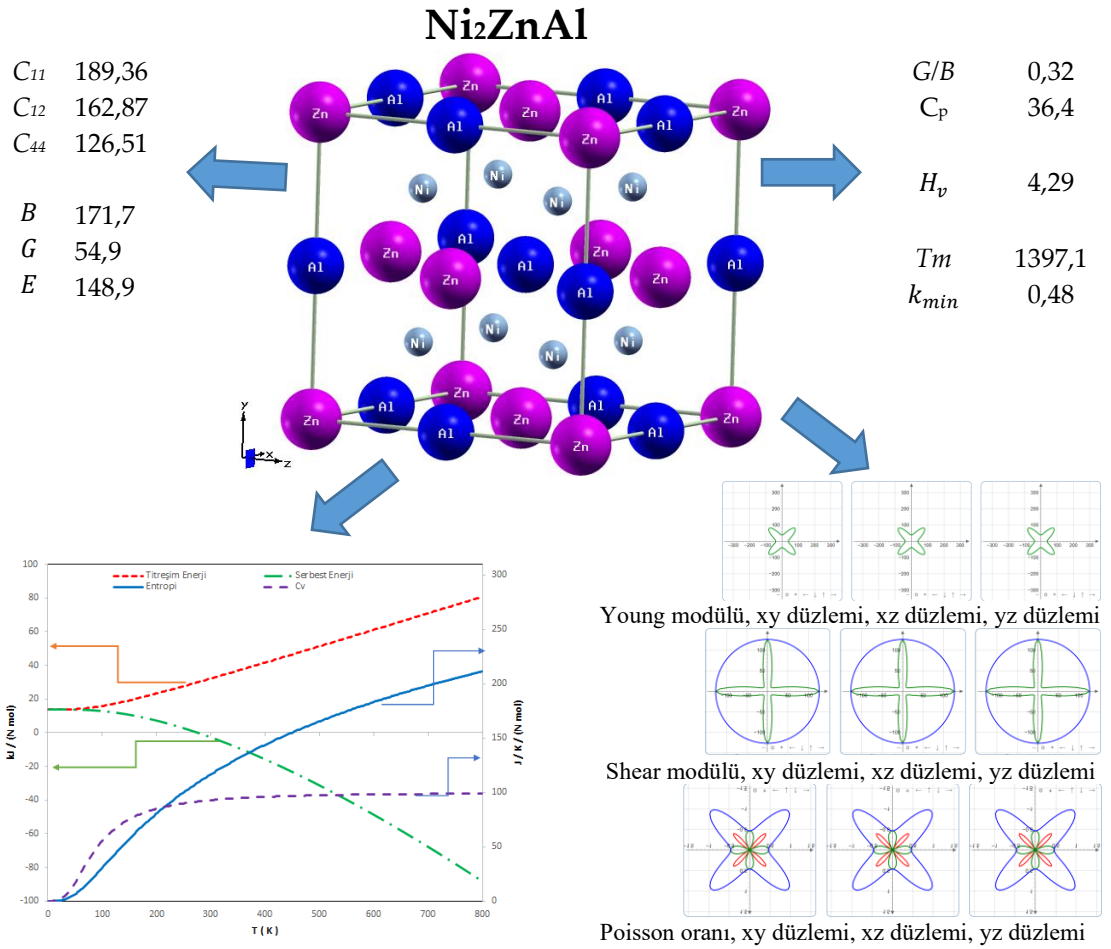
\*Tahsin ÖZER 

Osmaniye Korkut Ata Üniversitesi, Bahçe Meslek Yüksekokulu, Osmaniye, TÜRKİYE  
tahsinozer@osmaniye.edu.tr

### Önemli Katkıları (Highlights)

- Ni<sub>2</sub>ZnAl'nin yapısal, mekanik ve termodinamik özelliklerini sunuyoruz.
- Ortam basıncında mekanik olarak kararlıdır.
- Sünek, yumuşak ve anizotropik bir yapıya sahiptir.

### Grafik Özet (Graphical Abstract)





## Ni<sub>2</sub>ZnAl ALAŞIMININ İLK PRENSİPLER YÖNTEMİ İLE İNCELENMESİ

\*Tahsin ÖZER

Osmaniye Korkut Ata Üniversitesi, Bahçe Meslek Yüksekokulu, Osmaniye, TÜRKİYE  
[tahsinozer@osmaniye.edu.tr](mailto:tahsinozer@osmaniye.edu.tr)

(Geliş/Received: 06.09.2022; Kabul/Accepted in Revised Form: 11.02.2023)

**ÖZ:** Bu çalışmada, Heusler ailesinden L<sub>21</sub> fazında Ni<sub>2</sub>ZnAl alaşımının temel durumdaki yapısal parametreleri optimize edildi. Hesaplanan örgü parametresi ulaşılabilen literatür verisi ile uyum içerisindedir. Optimize parametreler kullanılarak elastik sabitleri hesaplandı. Hesaplanan elastik sabitlerinin Born mekanik kararlılık kriterlerini karşıladığı görüldü. Bu sabitler kullanılarak malzemenin elastik modülü, Vicker sertliği, anizotropik doğası, erime sıcaklığı gibi bir takım mekanik ve termodinamik özellikleri detaylı olarak araştırıldı. Hesaplamalar Ni<sub>2</sub>ZnAl alaşımının, sünek, yumuşak ve anizotropik olduğunu gösterdi. Bu hali ile sertlik gerektirmeyen uygulamalar için aday malzemedir. Ni<sub>2</sub>ZnAl alaşımının serbest enerjisi, titreşim enerjisi, entropisi ve ısı sıçası 0-800 K aralığında yarı harmonik yaklaşım kullanılarak incelendi. Toplam enerji hesaplamalarının tamamı açık kaynak kodlu Quantum Espresso yazılımı ve GGA dikkate alınarak ilk prensipler psödo potansiyel yöntemi kullanılarak gerçekleştirildi. Çalışma sonucunda elde edilen verilere göre, Ni<sub>2</sub>ZnAl alaşımı endüstriyel kullanım için potansiyel bir adaydır.

**Anahtar Kelimeler:** Ni<sub>2</sub>ZnAl, Heusler, Mekanik Özellikler, Termodinamik Özellikler

### Examination of The Ni<sub>2</sub>ZnAl Alloy by First Principles Method

**ABSTRACT:** In this study, ground state properties of Ni<sub>2</sub>ZnAl alloy in L<sub>21</sub> phase from Heusler family were optimized. The calculated parameters are in harmony with the available literature data. Elastic constants were calculated using optimized parameters. The calculated elastic constants were found to meet the Born mechanical stability criteria. By using these constants, some mechanical and thermodynamic properties of the material such as elastic modulus, Vicker hardness, anisotropic nature, melting temperature were investigated in detail. Calculations showed that the Ni<sub>2</sub>ZnAl alloy is ductile, soft, and anisotropic. As such, it is a candidate material for applications that do not require hardness. The free energy, vibrational energy, entropy, and heat capacity of the Ni<sub>2</sub>ZnAl alloy were investigated using a semi-harmonic approach in the range of 0-800 K. All the total energy calculations were performed using the open-source Quantum Espresso software and ab-initio pseudopotential method based on the density functional theory (DFT) scheme within a generalized gradient approximation (GGA). According to the data obtained because of the study, Ni<sub>2</sub>ZnAl alloy is a potential candidate for industrial use.

**Keywords:** Ni<sub>2</sub>ZnAl, Heusler, Mechanical Properties, Thermodynamic Properties

### 1. GİRİŞ (INTRODUCTION)

Heusler bileşikler üçlü inter metalik, yüz merkezli kübik kristallerdir (FCC). Kimyasal formülleri genellikle yarı Heusler için XYZ, tam Heusler için X<sub>2</sub>YZ şeklindedir. Burada X ve Y geçiş metalleri, Z ise ana grup elementidir. X<sub>2</sub>YZ formunda genel olarak, Co<sub>2</sub>FeSi bileşiğinde olduğu gibi, iki kere tekrarlayan element formülün başına ana grup elementi de sonuna yazılır. İstisnai olarak LiCu<sub>2</sub>Sb bileşiğinde olduğu gibi bir element kesin olarak en elektro pozitif olarak tanımlanabiliyorsa bu element bir kere tekrarlamasına rağmen formülün başına konulur. XYZ formunda, MnNiSb örneğindeki gibi en

\*Corresponding Author: Tahsin ÖZER, [tahsinozer@osmaniye.edu.tr](mailto:tahsinozer@osmaniye.edu.tr)

elektropozitif element formülün başına konulur. Heusler bileşiklerinin mümkün olan kombinasyonlarının genel bir görünümü Şekil 1'de verilmiştir. Şekil 1'de gösterildiği gibi sayısız Heusler bileşik vardır/tasarlanabilir. Sayısız üyesi ile Heusler ailesi, ferro manyetiklerden manyetik olmayan yarı iletkenlerden, süper iletkenlere ve topolojik yalıtkanlara kadar geniş bir yelpazede istenen özelliklere sahip malzeme tasarım seçeneği sunmaktadır [1]. Valans elektron sayılarına bakılarak da birçok Heusler bileşiklerinin özellikleri tahmin edilebilmektedir. Örneğin 27 valans elektronu ile manyetik olmayan Heusler bileşikler süper iletkenlerdir. Kimyasal kompozisyonlarının değişimi ile band boşlukları sıfır ile yaklaşık 4 eV aralığında ayarlanabilmektedir. Bundan dolayı hem güneş pili hem de termoelektrik uygulamalar için potansiyel malzemeler olarak dikkat çekmektedir. Üçlü bileşiklerde iki veya daha fazla özelliğin birleşmesi ile çok fonksiyonel tasarımı mümkündür [2].

1												2																							
1	H 2.20											2																							
3	Li 0.98	4	Be 1.57																																
11	Na 0.93	12	Mg 1.31																																
19	K 0.82	20	Ca 1.00	21	Sc 1.36	22	Ti 1.54	23	V 1.63	24	Cr 1.66	25	Mn 1.55	26	Fe 1.83	27	Co 1.88	28	Ni 1.91	29	Cu 1.90	30	Zn 1.65	31	Ga 1.81	32	Ge 2.01	33	As 2.18	34	Se 2.55	35	Br 2.96	36	Kr 3.00
37	Rb 0.82	38	Sr 0.95	39	Y 1.22	40	Zr 1.33	41	Nb 1.60	42	Mo 2.16	43	Te 1.90	44	Ru 2.20	45	Rh 2.28	46	Pd 2.20	47	Ag 1.93	48	Cd 1.69	49	In 1.78	50	Sn 1.96	51	Sb 2.05	52	Te 2.10	53	I 2.66	54	Xe 2.60
55	Cs 0.79	56	Ba 0.89	57-71	LANTHANIDE	72	Hf 1.30	73	Ta 1.50	74	W 1.70	75	Re 1.90	76	Os 2.20	77	Ir 2.20	78	Pt 2.20	79	Au 2.40	80	Hg 1.90	81	Tl 1.80	82	Pb 1.80	83	Bi 1.90	84	Po 2.00	85	At 2.20	86	Rn
87	Fr 0.70	88	Ra 0.90	89-103	ACTINIDE																														
		LANTHANIDE																																	
57	La 1.10	58	Ce 1.12	59	Pr 1.13	60	Nd 1.14	61	Pm 1.13	62	Sm 1.17	63	Eu 1.20	64	Gd 1.20	65	Tb 1.10	66	Dy 1.22	67	Ho 1.23	68	Er 1.24	69	Tm 1.25	70	Yb 1.10	71	Lu 1.27						
		ACTINIDE																																	
89	Ac 1.10	90	Th 1.30	91	Pa 1.50	92	U 1.70	93	Np 1.30	94	Pu 1.28	95	Am 1.13	96	Cm 1.28	97	Bk 1.30	98	Cf 1.30	99	Es 1.30	100	Fm 1.30	101	Md 1.30	102	No 1.30	103	Lr 1.30						

Şekil 1. Heusler bileşikler [1]

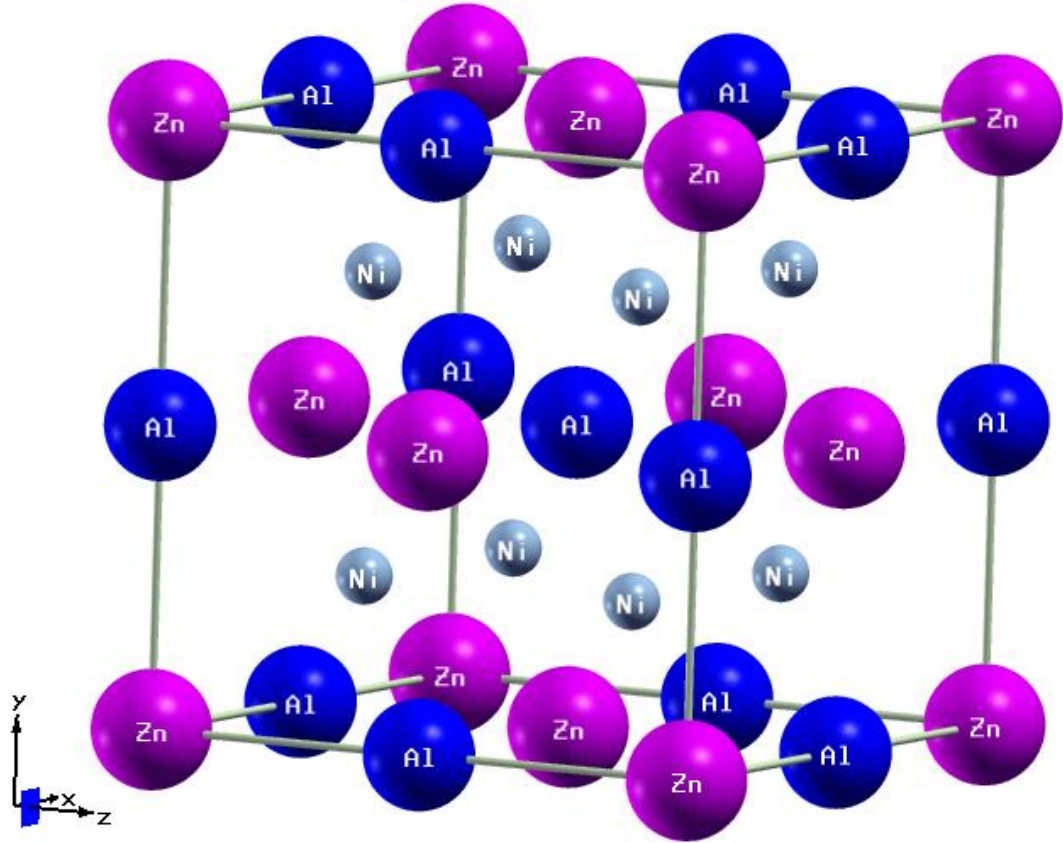
Figure 1. Heusler compounds (Bai et al. 2012)

Heusler bileşikler, 1903 yılında Fritz Heusler tarafından keşfinden bu yana bir asırdan daha fazla zaman geçmesine rağmen, sahip oldukları üstün özelliklerden dolayı hala aktif bir çalışma konusudur [3]. Bir seri Heusler alaşımının oluşum entalpisi ve örgü sabiti Gilleßen (2009) tarafından belirlenmiştir. Söz konusu çalışmada  $Ni_2ZnAl$  alaşımının oluşum entalpisi  $-178,7$  kJ/mol [4] olduğu rapor edilmiştir. Rapor edilen bu sonuca göre  $Ni_2ZnAl$  alaşımı deneysel olarak sentezlenebilir.

Gelişen bilgisayar teknolojisinin hesaplama gücü araştırmalarda kullanılarak sentezlenen veya henüz sentezlenmemiş malzemelerin özellikleri gerçeğe çok yakın bir değerde teorik olarak hesaplanabilmektedir. Bu teorik çalışmalar malzeme ve zaman israfının da önüne geçebilmektedir. Böylece istenen özellikte malzemeler ile çalışılarak/kullanılarak amaçlanan uygulamalara malzeme tasarımı yapılabilmektedir. Bir malzeme hakkında yeteri kadar bilgi elde edilip uygulama safhasına gelindiğinde mekanik özellikleri önem arz etmektedir. Yapılan literatür taramasında  $Ni_2ZnAl$  alaşımının mekanik özelliklerine rastlayamadık. Bu anlamda  $Ni_2ZnAl$  alaşımı ilk defa çalışılacaktır. Teknolojik öneme haiz Heusler ailesinden olan  $Ni_2ZnAl$  alaşımının yapısal ve mekanik özellikleri araştırılarak literatüre katkı yapılması amaçlanmıştır.

## 2. MATERYAL-METOT (MATERIAL-METHOD)

Kübik yapıda,  $Fm-3m$ (no:225) uzay grubunda ve  $L2_1$  fazında çalışılan  $Ni_2ZnAl$  alaşımının optimizasyon parametreleri kullanılarak, XCrySDen yazılımı [5] ile görselleştirilen birim hücresi Şekil 2'de verilmiştir.



Şekil 2. Ni<sub>2</sub>ZnAl alaşımasının birim hücresi

Figure 2. Unit cell of Ni<sub>2</sub>ZnAl compound

Ni<sub>2</sub>ZnAl alaşımı için yapılan tüm hesaplamalarda Quantum-Espresso (QE) [6] internet sitesinde bulunan psödo potansiyellerden USPP (Ultra Soft Pseudo Potansiye) tipi PBESOL fonksiyonel dosyalar ve Genelleştirilmiş Gradyent Yaklaşımı (GGA) tercih edilmiştir. Yapısal optimizasyondan önce hesaplamalarda kullanılan kesilim enerjisi ( $E_{cut} = 160 \text{ Ry}$ ), yük yoğunluğu ( $E_{cutRho} = 1120 \text{ Ry}$ ), smearing parametresi (0,01) ve k-noktaları ( $13 \times 13 \times 13$ ) optimize edilmiştir. Akabinde bu optimize parametreler kullanılarak yapısal optimizasyon gerçekleştirilmiştir. Geometri optimizasyonunda BFGS algoritması kullanılmıştır. Smearing parametresinde methfessel-paxton (mp) metodu [7] tercih edilmiştir. Elastik sabitler, hacim korunumlu zorlamanın (volume-conserving metot) bir fonksiyonu olarak toplam enerji hesaplamalarından yararlanılarak belirlenmiştir [8], [9].

### 3. BULGULAR VE TARTIŞMA (FINDINGS AND DISCUSSION)

Açık kaynak QE yazılımı kullanılarak Ni<sub>2</sub>ZnAl alaşımasının optimize parametrelerle hesaplanan örgü sabiti  $5,71 \text{ \AA}$ . Literatür taramasından, The Open Quantum Database (OQMD) internet sitesinde  $5,751 \text{ \AA}$  [10], [11], Gilleßen (2009) tarafından yapılan çalışmada örgü sabiti  $5,788 \text{ \AA}$  [4] rapor edilmiştir. OQMD rapor edilen veri ile kıyas yapıldığında elde edilen sonucun %0,8 farklı olduğu görülmektedir. Bu hali ile oldukça tutarlıdır. Ni<sub>2</sub>ZnAl alaşımasının yapısal optimizasyonu gerçekleştirildikten sonra, optimize değerler kullanılarak QE yazılım paketi ile dağıtımı yapılan THERMO\_PW scripti ile alaşımın elastik sabitleri hesaplanmıştır (Çizelge 1). Bu çalışma ile bulunan değerlerin kıyaslanabileceği bir veriye ulaşılamadığından Fm-3m uzay grubu ve L<sub>21</sub> fazında Co<sub>2</sub>ScAl [12] ve Rh<sub>2</sub>FeAl [13] bileşikleri için ulaşılan sonuçlar ile kıyaslanmıştır.

Kübik yapıdaki bir kristalin elastik sabitleri  $C_{11}$ ,  $C_{12}$  ve  $C_{44}$  olarak sembolize edilen üç bağımsız değeri vardır. Bu elastik sabitlerin değerlerine bakılarak malzemenin mekanik olarak karlı/kararsız olduğu, eğer

mekanik olarak kararlı ise elastik modülleri, karakteristik Debye sıcaklığı, anizotropi, minimum termal iletkenlik, erime noktası gibi bir takım fiziksel özellikleri incelenebilmektedir. Bir kristalin mekanik olarak kararlı olabilmesi için,

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

kararlılık kriterleri olarak bilinen bu şartları sağlaması gerekmektedir [14], [15].  $C_{11}$  elastik sabiti eksenler boyunca sıkışma direncini,  $C_{44}$  ise malzemenin sertliğini yöneten önemli bir parametredir [16]. Çalışılan bileşik, Eşitlik 1’de verilen şartları sağladığı için mekanik olarak kararlı olduğu söylenebilir.  $Ni_2ZnAl$  alaşımı mekanik olarak kararlı olduğu için bulk, shear ve Young modülleri hesaplanmıştır (Çizelge 1). Hesaplama kullanılan eşitlikler;

Bulk modül,

$$B_V = B_R = (C_{11} + 2C_{12})/3 \quad (2)$$

Shear modül,

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

Young modül,

$$E = 9BG/(3B + G) \quad (4)$$

Modüllerin hesabında kullanılan eşitliklerde geçen alt indislerden “R” Reuss, “V” Voight yaklaşımını göstermektedir. R ve V’nin aritmetik ortalaması olan Hill yaklaşımı, deneysel değerlere en yakın sonucu vermektedir. Hill yaklaşımında herhangi bir alt indis kullanılmamıştır.

**Çizelge 1.** Hesaplanan elastik sabitler ve elastik modül değerleri

*Table 1. Calculated elastic constants and elastic modulus values*

Ref.	Elastik Sabitler (GPa)					Elastik Modül (GPa)				
	$C_{11}$	$C_{12}$	$C_{44}$	$B$	$G_V$	$G_R$	$G$	$E_V$	$E_R$	$E$
Bu çalışma	189,36	162,87	126,51	171,7	81,2	28,62	54,9	210,4	81,34	148,9
Co <sub>2</sub> ScAl	180,16	162,26	150,86	168,2	94,1 <sup>a</sup>	20,5 <sup>a</sup>	57,3 <sup>a</sup>	237,9 <sup>a</sup>	59,2 <sup>a</sup>	154,4
Rh <sub>2</sub> FeAl	258,02	168,24	127,26	198,2	94,3	73,39	83,9	244,2 <sup>a</sup>	196,0 <sup>a</sup>	220,5

<sup>a</sup> Literatürden alınan elastik sabitlerden hesaplandı.

$B$  (171,7),  $G$  (54,91) ve  $E$  (148,86) değerleri malzemenin sertlik/rijitliğini tahmin etmektedir. Bu değerlerin büyüklüğü malzemenin sertliğine işaret etmektedir. Büyüklük görel olduğundan malzemenin sertliğini daha belirgin olarak ifade edebilmek için Vicker sertliği hesaplandı. Bir malzemenin Vicker sertliğini  $B$ ,  $G$  ve  $E$  değerlerinden tahmin eden ampirik bağıntılar literatürde mevcuttur. Bunlardan Tian ve diğ. (2012) önerdiği eşitlik [17],

$$H_v = 0,92 k^{1,137} G^{0,708} \quad (5)$$

Verilen bu eşitlik kullanılarak  $Ni_2ZnAl$  alaşımının Vicker sertliği 4,29 GPa olarak hesaplanmıştır. Co<sub>2</sub>ScAl ve Rh<sub>2</sub>FeAl alaşımları için hesaplanan ortalama Vicker sertlik değerleri sıra ile 4,55 ve 8,36 GPa’dır. Hesaplanan bu sonuçlara göre  $Ni_2ZnAl$  alaşımı Co<sub>2</sub>ScAl ayarında bir sertliğe sahiptir. Literatürde Vicker sertlik değerine göre malzemeler, yumuşak, yumuşak olmayan ve sert malzeme olarak sınıflandırılmıştır. Bu sınıflandırmaya göre Vicker sertlik değeri 10 GPa’dan küçük malzemeler yumuşak malzeme sınıfına

girmektedir[18]. Bu sonuca göre Ni<sub>2</sub>ZnAl, Co<sub>2</sub>ScAl ve Rh<sub>2</sub>FeAl alaşımlarının Vicker sertlik değerlerinin 10 GPa'dan küçük olmasından dolayı yumuşak malzeme kategorisine girdiği söylenebilir.

Malzeme bilimi ve mühendisliğinde bir malzemenin sünek (ductile) veya kırılğan (brittle) özellik gösterdiğinin/göstereceğinin bilinmesi önem arz etmektedir. Bu bakımdan Ni<sub>2</sub>ZnAl alaşımının kırılğan/sünek doğası da analiz edilmiştir. Bir malzemenin  $G/B$  oranı 0,5'ten küçük ise sünek aksi halde kırılğan davranış sergiler[14]. Poisson oranı için kritik değer 0,26'dır[14]. Cauchy basıncında ( $C_p=C_{12}-C_{44}$ )[19] ise pozitif/negatifliğine bakılır. Eğer pozitif ise sünek olduğu söylenir. Yapılan hesaplamalar sonucunda Ni<sub>2</sub>ZnAl, Co<sub>2</sub>ScAl ve Rh<sub>2</sub>FeAl alaşımları için elde edilen sonuçlar Çizelge 2'de verilmiştir. Çizelge 2'den de görüleceği üzere her üç alaşımın  $G/B$  oranı 0,5'ten küçük Poisson oranı 0,26'dan büyük ve Cauchy basıncı pozitif olduğundan sünek karaktere sahiptirler.  $G/B$  oranı, Poisson oranı ve Cauchy basıncı ile ulaşılan yargı kendi aralarında tutarlıdır. Bu tutarlılık hesaplamasının güvenilirliğini arttırmaktadır.

**Çizelge 2.** Hesaplanan elastik sabitlerden hesaplanan  $G/B$  ve Poisson oranı, Cauchy basıncı

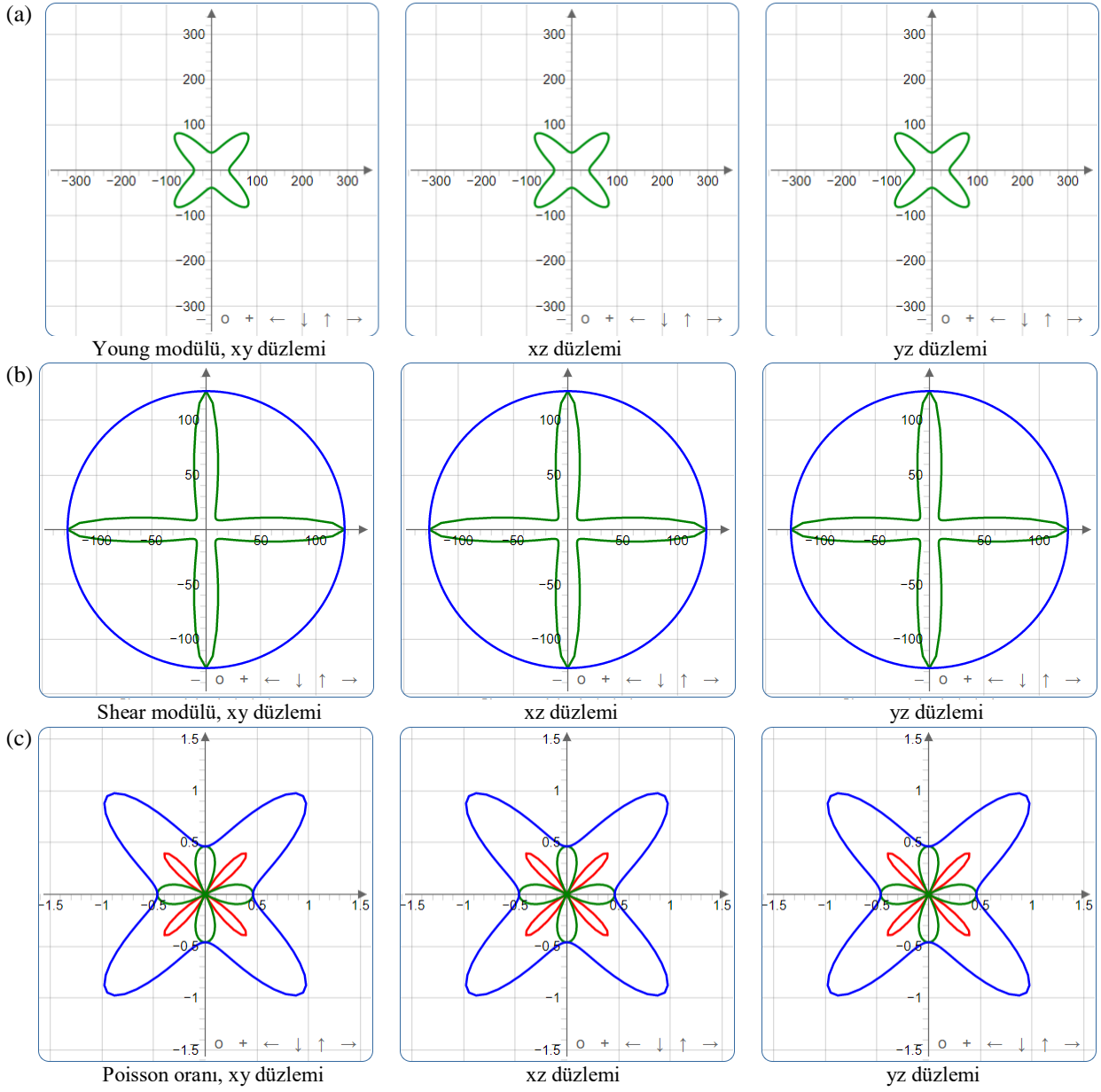
*Table 2.  $G/B$  and Poisson ratio, and Cauchy pressure calculated from the elastic constants.*

Ref.	$G/B$	Poisson oranı	Cauchy basıncı	Karakter
Bu çalışma	0,32	0,36	36,4	Sünek
Co <sub>2</sub> ScAl <sup>a</sup>	0,34	0,35	11,4	Sünek
Rh <sub>2</sub> FeAl <sup>a</sup>	0,42	0,32	41,0	Sünek

<sup>a</sup> Literatürden alınan elastik sabitlerden hesaplandı.

Poisson oranı malzemenin sünek/kırılğan doğası hakkında bilgi vermekle aynı zamanda etkili olan bağ kuvvetleri ve atomik bağlanma hakkında da bilgi vermektedir. Eğer Poisson oranı 0,25-0,50 aralığında ise merkezi kuvvetlerin etkili olduğu söylenir. Buna göre Poisson oranı bu limitler dahilinde olduğundan Ni<sub>2</sub>ZnAl, Co<sub>2</sub>ScAl ve Rh<sub>2</sub>FeAl alaşımlarında merkezi kuvvetler etkindir. Hesaplanan Poisson oranı malzemenin kovalent/iyonik karakteri hakkında da bilgi vermektedir. Poisson oranı 0,1'e yakın ise kovalent, 0,25'e yakınsa iyonik, 0,33 ise metalik malzemedir [15], [20]. Hesaplanan Poisson oranına bakılarak metalik karakterde oldukları söylenilebilir.

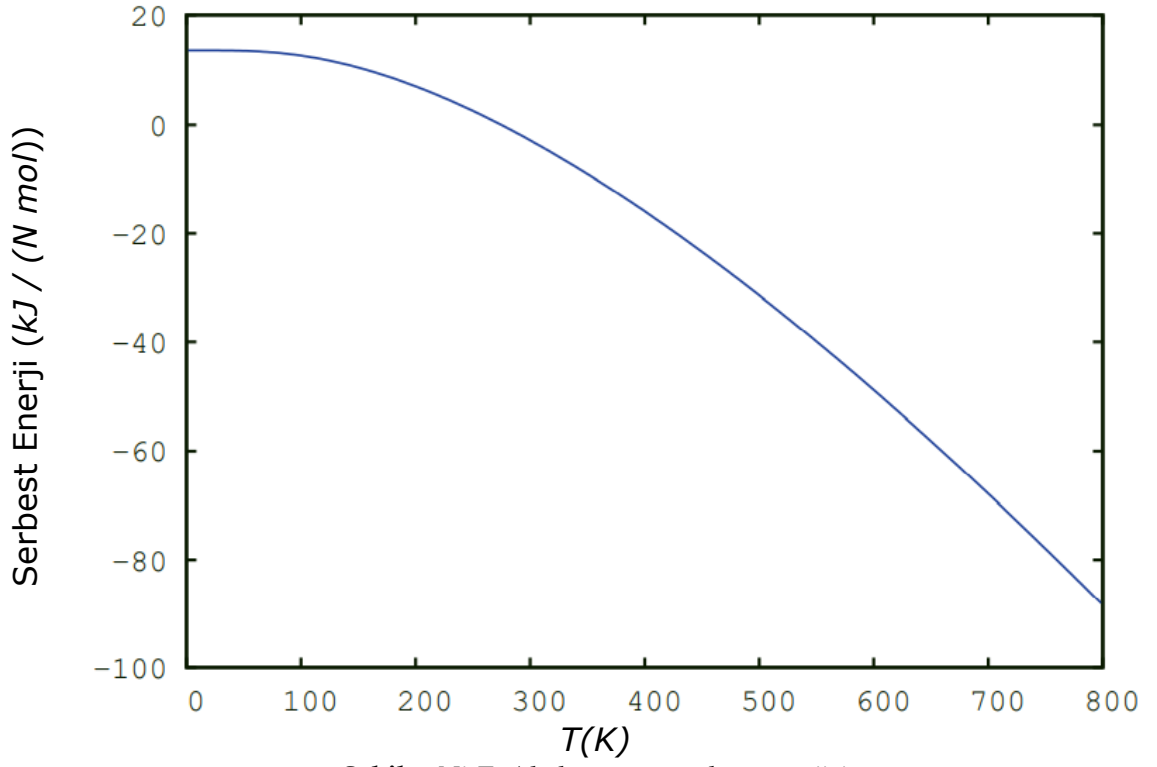
Uygulamalarda önem arz eden bir diğer özellik malzemenin anizotropik doğasıdır. Literatürde, teorik olarak malzemenin anizotropisini tahmin eden evrensel anizotropi ( $A^U$ ) [21] gibi eşitlik/modeller mevcuttur. İzotropik malzemelerde  $A^U$  değeri sıfırdır. Sıfırdan sapma miktarı malzemenin anizotropiğünün derecesini gösterir. Ni<sub>2</sub>ZnAl alaşımının anizotropi değeri 9,187 olarak hesaplanmıştır. Elde edilen bu sonuca göre çalışılan malzemelerin anizotrop olduğu söylenebilir. Anizotropinin daha anlaşılır olması için ELATE [22] yazılımında, minimum değerler yeşil, maksimum değerler mavi renk ile gösterilerek görselleştirilen anizotropik yapı Şekil 3'de verilmiştir. Aşırı derece yüke maruz bırakılan bir malzeme gerilim yönünde uzama eğilimi göstererek deformasyona neden olur. Bundan dolayı, Young modülünün düzlemler boyunca değişimi Şekil 3.a'da verilmiştir. Ni<sub>2</sub>ZnAl alaşımının anizotropisi üzerine yapılmış herhangi bir çalışmaya rastlanılmadığından benzer yapıdaki X<sub>2</sub>Tial (X=Au, Ru, Zr) alaşımlarının anizotropisi [19] ile kıyaslandığında, bu yapılar ve teorik hesaplamalardan elde edilen veriler ile tutarlıdır. Yapılan hesaplamalar ve Şekil 3'de verilen görseller dikkate alındığında, Ni<sub>2</sub>ZnAl alaşımının anizotrop özellik göstereceği söylenebilir.



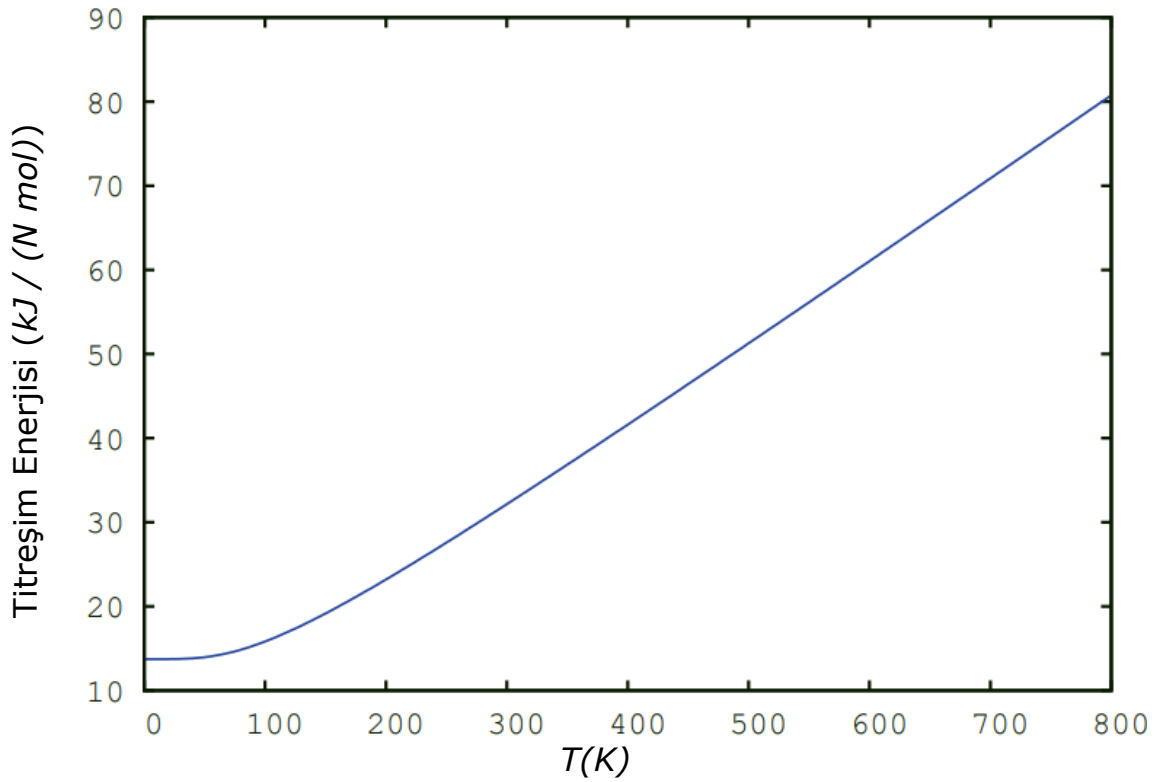
Şekil 3.  $Ni_2ZnAl$  alaşımının anizotropisi

Figure 3. Anisotropy of  $Ni_2ZnAl$  compound

$Ni_2ZnAl$  alaşımının optimize yapısı kuasi harmonik Debye modeli 0-800 K aralığında serbest enerji (Şekil 4), titreşim enerjisi (Şekil 5), entropi (Şekil 6) ve ısı sığası (Şekil 7) QE programına bütünleşmiş thermo\_pw yazılımı ile hesaplanarak Şekil 4-7'de verilmiştir.

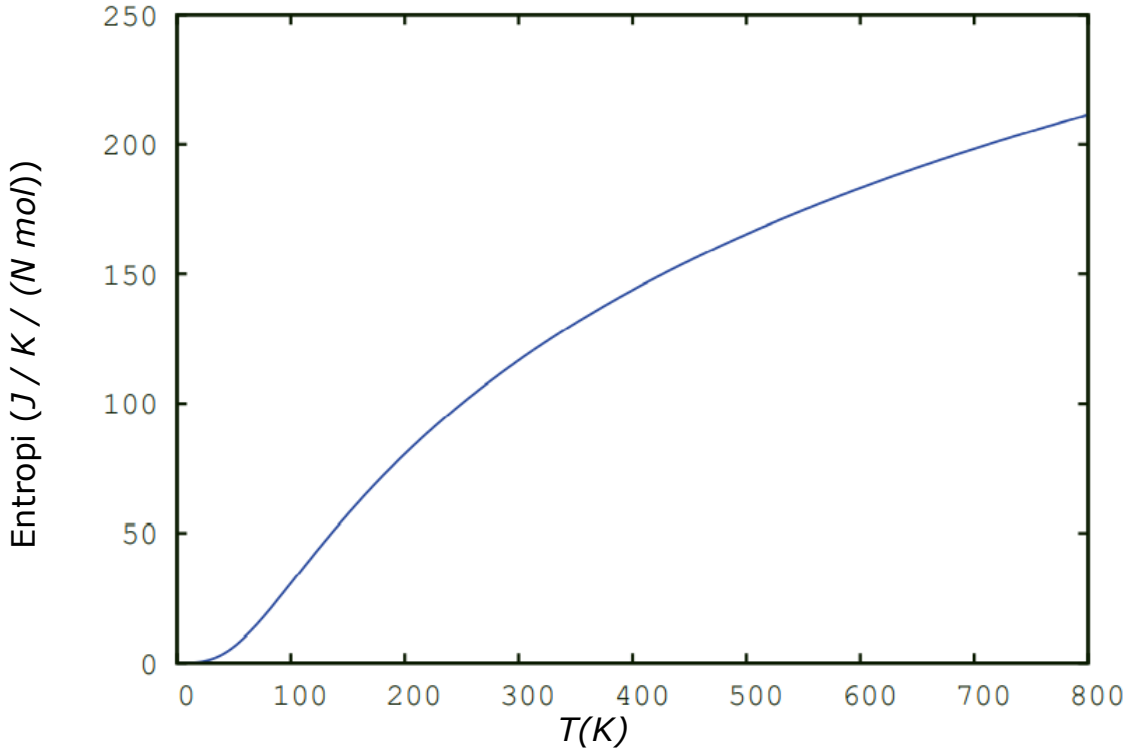


Şekil 4. Ni<sub>2</sub>ZnAl alaşımının serbest enerjisi  
Figure 4. Free energy of Ni<sub>2</sub>ZnAl compound

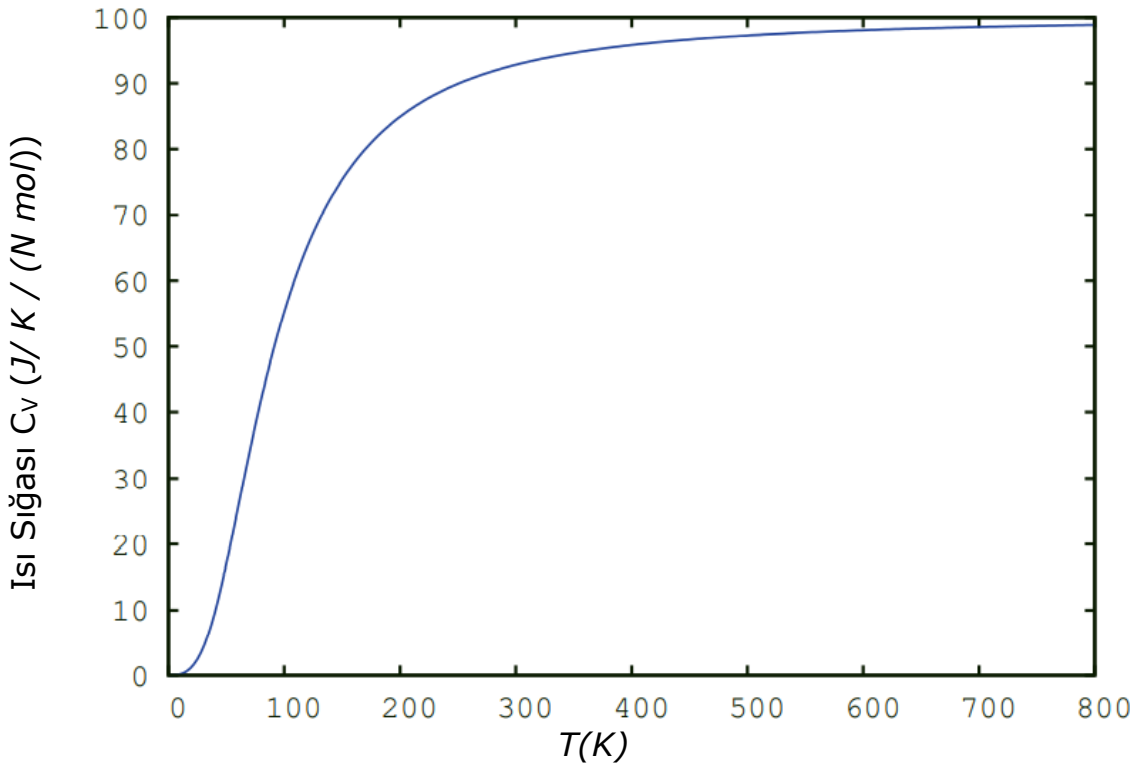


Şekil 5. Ni<sub>2</sub>ZnAl alaşımının titreşim enerjisi  
Figure 5. Vibration energy of Ni<sub>2</sub>ZnAl compound





Şekil 6.  $Ni_2ZnAl$  alaşımının entropisi  
 Figure 6. Entropy of  $Ni_2ZnAl$  compound



Şekil 7.  $Ni_2ZnAl$  alaşımının ısı sığası  
 Figure 7. Heat capacity of  $Ni_2ZnAl$  compound

Şekil 4'ten de görüldüğü gibi serbest enerji sıcaklıkla ters orantılı olarak artmıştır. Yani artan sıcaklık değerlerine karşı serbest enerji değeri azalmıştır. Başka bir ifade ile artan sıcaklık değeri ile serbest enerji değeri daha negatif olmuştur. Negatif serbest enerji değerine sahip bir malzeme termal tepkimeye daha

rahat girer ve yüksek sıcaklıklarda daha iyi termodinamik kararlılık gösterir. Titreşim enerjisi, bir malzemedeki atomların veya moleküllerin etkileşimlerinden üretilen enerjiyi ifade eder. Diğer bir ifade ile sistemde saklanan enerjidir [23]. Şekil 5'te verilen titreşim enerjisini değişimi incelendiğinde, artan sıcaklık değerine karşın titreşim enerjisi de artmıştır. Sıcaklığın artmasıyla artan titreşim enerjisi serbest enerjinin azalmasına neden olmuştur. Şekil 6'da verilen entropi-sıcaklık eğrisinden de görüldüğü gibi artan sıcaklıkla birlikte entropide de bir artış söz konusudur. Çünkü artan sıcaklık atomik hareketi ve sistemin kinetik enerjisini artırır. Serbest enerji, entropik katkıdan ileri geldiğinden entropi ile serbest enerji ilişkilendirilebilir. Böylece serbest enerji ne kadar negatif olursa entropi de o kadar yüksek olur. Entropideki artış, alaşımın atomunun yarı çapı ile doğrudan ilişkilidir. Atomik yarıçap arttıkça entropi değeri de daha hızlı artar [24]. Grafikler kendi aralarında ve benzer yapıdaki Ru<sub>2</sub>YGa (Y=Sc, Ti ve V) ile kıyaslandığında sonuçların tutarlı olduğu görülmektedir. Isı sığasının sıcaklık ile değişim grafiği (Şekil 7) incelendiğinde doygunluğa ulaşmadan önce 200 K kadar hızla hemen hemen doğrusal bir değişim gösterdiği ancak 600 K sıcaklık değerine gelindiğinde Dulong-Petit [25] değerine yaklaştığı görülmektedir. Literatürde benzer yapıdaki Co<sub>2</sub>ScAl bileşiği ile kıyaslandığında sonuçların uyum içerisinde olduğu görülmektedir [12]. Bir malzemede en yüksek frekans modunun uyarıldığı sıcaklık olarak isimlendirilen ve ısı sığasının doyum noktasına ulaşmaya başladığı Debye sıcaklığı 367,102 K olarak hesaplanmıştır.

Uygulamalarda bir diğer önemli özellikte erime sıcaklığıdır. Ni<sub>2</sub>ZnAl alaşımının erime sıcaklığı elde edilen elastik sabitler kullanılarak hesaplanabilir [26].

$$T_m = 560.4 + 7.805C_{11} - 3.094C_{12} - 1.086C_{44} \quad (6)$$

Özer (2018) tarafından bildirilen eşitlik kullanılarak Ni<sub>2</sub>ZnAl alaşımının erime sıcaklığı 1397,1 K olarak tahmin edildi. Tahmin edilen erime sıcaklığı 1000 K üzeri olduğundan Ni<sub>2</sub>ZnAl alaşımı yüksek sıcaklık malzemesi olarak kullanılmaya potansiyel aday malzeme olabilir.

Isı iletkenlik kat sayısı, malzemenin kimyasal ve fiziksel yapısına bağlı olarak ısıyı ne kadar ilettiğinin bir ifadesidir. Literatürde, minimum termal iletkenliği ortalama ses hızı ve  $E'$  den tahmin eden eşitlikler önerilmiştir.

$$k_{min} = \frac{k_B}{2.48} m^3 (2v_t + v_l) \quad (7)$$

$$k_{min} = \left\{ \frac{1}{3} \left[ 2(2 + 2\sigma)^{3/2} + \left( \frac{1}{1-\sigma} - \sigma \right)^{3/2} \right] \right\}^{-1/3} k_B m^{2/3} \left( \frac{E}{\rho} \right)^{1/2} \quad (8)$$

Önerilen bu modeller kullanılarak hesaplanan minimum termal iletkenlik değerleri; 0,326 (Long model), 0,480 (Cahil model), ortalama olarak 0,403 W/mK'dir. Literatürde Ni<sub>2</sub>ZnAl alaşımına yönelik yapılan bir ısı iletkenlik çalışmasına rastlanmadığından herhangi bir kıyaslama yapılamadı. Okuyucunun zihninde kolay bir yargıya ulaşması için bazı yapı malzemelerinin ısı iletkenlik kat sayıları; beton (0,814 W/mK), granit (2,855 W/mK) ve tuğla (0,692 W/mK)[29]. Yapı malzemeleri ile kıyaslandığında Ni<sub>2</sub>ZnAl alaşımının ısı yalıtımı gerektiren uygulamalarda kullanılmasının uygun olacağı düşünülmektedir.

#### 4. SONUÇ ve TARTIŞMALAR (RESULTS and DISCUSSIONS)

Yapılan bu çalışmada öncelikle Ni<sub>2</sub>ZnAl alaşımının temel durumdaki optimize yapısal parametreleri belirlenmiştir. Daha sonra bu parametreler kullanılarak elastik sabitleri hesaplandı. Hesaplanan elastik sabitler mekanik kararlılık kriterlerini sağladığından, Ni<sub>2</sub>ZnAl alaşımı mekanik olarak kararlıdır. Mekanik kararlı bileşiklerin elastik modülleri, sertlik, anizotropi ve Debye sıcaklığı gibi bir takım fiziksel özelliklerine teorik olarak bakılabilmektedir. Yapılan hesaplama ve analizlerin sonucuna göre,

- ✓ Ni<sub>2</sub>ZnAl alaşımının 10 *GPa* Vicker sertliğinden daha küçük bir değere sahip olmasından dolayı sert olmayıp yumuşak bir malzeme olduğu söylenebilir. Bu bakımdan sertlik gerektiren uygulamalarda kullanılması çok da uygun değildir.
- ✓ Çalışılan malzemenin sünek/kırılgan olarak kategorize edilmesi gerekirse sünek sınıfında olduğu görüldü.
- ✓ İzotropi bakımından değerlendirildiğinde, malzeme anizotrop bir yapıya sahiptir.
- ✓ 1000 K üzeri erime sıcaklığı tahmin edildiği için yüksek sıcaklık uygulamalarına potansiyel aday malzeme olarak değerlendirilebileceği yargısına ulaşılmıştır.

#### **Etik Standartlar Bildirimi (Declaration of Ethical Standards)**

Yazarlar deneysel ve sayısal modelleme çalışmalarının yürütülmesinde, ilgili literatürün taranmasında ve verilerin toplanmasında etik ilkelere ve standartlara bağlı kalındığını ve makalenin özgün olduğunu beyan eder.

#### **Yazar Katkı Beyannamesi (Credit Authorship Contribution Statement)**

Grup çalışmasının bir ürünü olmadığından bireysel yazar katkılarının tanımlanması gerek görülmemiştir.

#### **Çıkar Çatışması Beyannamesi (Declaration of Competing Interest)**

Yazarlar herhangi bir çıkar çatışması olmadığını beyan etmektedir.

#### **Destek / Teşekkür (Funding / Acknowledgement)**

Bu çalışmada kullanılan hesaplama kaynakları Ulusal Yüksek Başarımlı Hesaplama Merkezi'nin (UHeM), #1012332022 # numaralı desteğiyle sağlanmıştır. Ayrıca yapılan bu çalışma, "Ni<sub>2</sub>XAl (X=Ni, Zn, Ti, Cu, V, Sc) Bileşiklerinin Yapısal ve Mekanik Özelliklerinin İlk Prensipler Yöntemi ile İncelenmesi" isimli "OKÜBAP-2022-PT1-007" numaralı proje ile Osmaniye Korkut Ata Üniversitesi BAP Koordinasyon Birimi tarafından desteklenmiştir.

#### **Veri Kullanılabilirliği (Data Availability)**

Yazarlar bu çalışmadan elde edilen verilerin diğer araştırmacılar tarafından kullanılabilirliğini ifade etmektedir.

#### **KAYNAKLAR (REFERENCES)**

- [1] Z. Bai, L. Shen, G. Han, ve Y. P. Feng, "Data Storage: Review of Heusler Compounds", *SPIN*, vol. 02, no. 04, pp. 1230006, 2012.
- [2] T. Graf, C. Felser, ve S. S. P. Parkin, "Simple rules for the understanding of Heusler compounds", *Prog. Solid State Chem.*, vol. 39, no. 1, pp. 1–50, 2011.
- [3] T. Graf, C. Felser, ve S. S. P. Parkin, "Simple rules for the understanding of Heusler compounds", *Prog. Solid State Chem.*, vol. 39, no. 1, pp. 1–50, 2011.
- [4] M. Gilleßen, "Maßgeschneidertes und Analytik-Ersatz", RWTH Aachen University, Aachen, 2009.
- [5] A. Kokalj, "Computer graphics and graphical user interfaces as tools in simulations of matter at the atomic scale", içinde *Computational Materials Science*, vol. 28, no. 2, pp. 155–168, 2003.
- [6] P. Giannozzi *vd.*, "QUANTUM ESPRESSO: A modular and open-source software project for quantum simulations of materials", *J. Phys. Condens. Matter*, vol. 21, no. 39, 2009.

- [7] M. Methfessel ve A. T. Paxton, "High-precision sampling for Brillouin-zone integration in metals", *Phys. Rev. B*, vol. 40, no. 6, pp. 3616, 1989.
- [8] O. Örnek, A. İyigör, ve N. Arıkan, "L12 yapıdaki Co<sub>3</sub>Al ve Co<sub>3</sub>Ta alaşımlarının mekanik ve dinamik özellikleri", *Gazi Üniversitesi Mühendislik-Mimarlık Fakültesi Derg.*, vol. 32, no. 2, 2017.
- [9] M. Özdoğan, K. Turgut, N. Arıkan, A. İyigör, ve A. Candan, "The first principle study of Ni<sub>2</sub>ScGa and Ni<sub>2</sub>TiGa", *AIP Conference Proceedings* 2014, 1618, pp. 178–181.
- [10] S. Kirklin *vd.*, "The Open Quantum Materials Database (OQMD): assessing the accuracy of DFT formation energies", *npj Comput. Mater.*, vol. 1, no. 1, pp. 15010, 2015.
- [11] J. E. Saal, S. Kirklin, M. Aykol, B. Meredig, ve C. Wolverton, "Materials Design and Discovery with High-Throughput Density Functional Theory: The Open Quantum Materials Database (OQMD)", *JOM*, vol. 65, no. 11, pp. 1501–1509, 2013.
- [12] N. Arıkan *vd.*, "Electronic and phonon properties of the full-Heusler alloys X<sub>2</sub>YAl (X = Co, Fe and Y = Cr, Sc): a density functional theory study", *J. Mater. Sci.*, vol. 49, no. 12, pp. 4180–4190, 2014.
- [13] S. Al, N. Arıkan, S. Demir, ve A. İyigör, "Lattice dynamic properties of Rh<sub>2</sub>XAl (X=Fe and Y) alloys", *Phys. B Condens. Matter*, vol. 531, pp. 16–20, 2018.
- [14] N. Arıkan, G. Dikici Yıldız, Y. G. Yıldız, ve A. İyigör, "Electronic, Elastic, Vibrational and Thermodynamic Properties of HfIrX (X = As, Sb and Bi) Compounds: Insights from DFT-Based Computer Simulation", *J. Electron. Mater.*, vol. 49, no. 5, pp. 3052–3062, 2020.
- [15] O. Örnek, A. İyigör, A. S. Meriç, M. Çanlı, M. Özdoğan, ve N. Arıkan, "First-Principle Investigations of (Ti<sub>1-x</sub>V<sub>x</sub>)<sub>2</sub>FeGa Alloys. A Study on Structural, Magnetic, Electronic, and Elastic Properties", *Russ. J. Phys. Chem. A*, vol. 95, no. 13, pp. 2592–2599, 2021.
- [16] T. Ozer ve S. Cabuk, "First-principles study of the structural, elastic and electronic properties of SbXI (X=S, Se, Te) crystals", *J. Mol. Model.*, vol. 24, no. 3, s. 66, 2018.
- [17] Y. Tian, B. Xu, ve Z. Zhao, "Microscopic theory of hardness and design of novel superhard crystals", *Int. J. Refract. Met. Hard Mater.*, vol. 33, pp. 93–106, 2012.
- [18] W. Liu, Y. Niu, ve W. Li, "Theoretical prediction of the physical characteristic of Na<sub>3</sub>MO<sub>4</sub> (M=Np and Pu): The first-principles calculations", *Ceram. Int.*, vol. 46, no. 16, pp. 25359–25365, 2020.
- [19] S. Al, N. Arıkan, ve A. İyigör, "Investigations of Structural, Elastic, Electronic and Thermodynamic Properties of X<sub>2</sub>TiAl Alloys: A Computational Study", *Zeitschrift für Naturforsch. A*, vol. 73, no. 9, pp. 859–867, 2018.
- [20] J. Haines, J. Léger, ve G. Bocquillon, "Synthesis and Design of Superhard Materials", *Annu. Rev. Mater. Res.*, vol. 31, no. 1, pp. 1–23, 2001.
- [21] S. I. Ranganathan ve M. Ostoja-Starzewski, "Universal Elastic Anisotropy Index", *APS*, vol. 101, no. 5, 2008.
- [22] R. Gaillac, P. Pullumbi, ve F.-X. Coudert, "ELATE: an open-source online application for analysis and visualization of elastic tensors", *J. Phys. Condens. Matter*, vol. 28, no. 27, s. 275201, 2016.
- [23] A. M. Sarpkaya ve N. Arıkan, "Kübik perovskit LaZnO<sub>3</sub> bileşiğinin yapısal, elektronik, elastik ve termodinamik özelliklerini araştırmak için ab initio hesaplamaları", *Osmaniye Korkut Ata Üniversitesi Fen Edeb. Fakültesi Derg.*, 2022.
- [24] M. Çanlı, E. İlhan, ve N. Arıkan, "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)", *Mater. Today Commun.*, vol. 26, s. 101855, 2021.
- [25] A. T. Petit ve P. L. Dulong, "Recherches sur quelques points importants de la théorie de la chaleur.", *Annales de chimie et de physique*, Paris, 1819, pp. 395–413.
- [26] T. Özer, "Determination of melting temperature", 2018, pp. 87–99.
- [27] D. G. Cahill, S. K. Watson, ve R. O. Pohl, "Lower limit to the thermal conductivity of disordered crystals", *Phys. Rev. B*, vol. 46, no. 10, s. 6131, 1992.
- [28] J. Long, C. Shu, L. Yang, ve M. Yang, "Predicting crystal structures and physical properties of novel superhard p-BN under pressure via first-principles investigation", *J. Alloys Compd.*, vol. 644, pp. 638–644, 2015.

- [29] H. Adin, "Mardin ve Midyat'ta Kullanılan Bina Yapı Taşlarının Bazı Fiziksel Özellikleri", *Mühendis ve Makina*, vol. 48, no. 570, pp. 13-17, 2007.