

# İlk prensipler yöntemi ile Ni<sub>2</sub>TiAl bileşiğinin elastik ve termodinamik özelliklerinin incelenmesi

Tahsin ÖZER<sup>1\*</sup>, Ali İhsan ÖZTÜRK<sup>2</sup>

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

<sup>2</sup>Osmaniye Korkut Ata Üniversitesi Fen-Edebiyat Fakültesi, Osmaniye, Türkiye.

Geliş Tarihi (Received Date): 20.05.2022

Kabul Tarihi (Accepted Date): 31.01.2023

## Öz

Bu çalışmada Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi (DFT)'ne dayanan Quantum-Espresso yazılımı kullanılarak kübik L<sub>21</sub> yapıda Ni<sub>2</sub>TiAl bileşiğinin yapısal, elastik ve termodinamik özellikleri incelenmiştir. Bileşiğin mekanik kararlı olduğu görüldükten sonra elastik modülü, anizotropisi, Vicker sertliği ve erime sıcaklıkları hesaplanmıştır. Hesaplamalar ve analizler sonucunda bileşiğin 1000K üzeri erime sıcaklığına sahip olmasından dolayı yüksek sıcaklık uygulamaları için aday malzeme olabileceği düşünülmektedir. 10 GPa altı Vicker sertliğine sahip olmasından dolayı yumuşak malzeme sınıfına girmektedir. Anizotropi analizlerinden malzemenin anizotrop olduğu görüldü.

**Anahtar kelimeler:** Ni<sub>2</sub>TiAl, elastik özellikler, termodinamik özellikler, DFT.

## Investigation of elastic and thermodynamic properties of Ni<sub>2</sub>TiAl compound by first principles method

### Abstract

In this study, structural, elastic and thermodynamic properties of Ni<sub>2</sub>TiAl compound in cubic L<sub>21</sub> structure were investigated by using Quantum-Espresso software based on Density Functional Theory (DFT). After it was seen that the compound was mechanically stable, its elastic modulus, anisotropy, Vicker hardness and melting temperatures were calculated. As a result of calculations and analyzes, it is thought that the compound may be a candidate material for high temperature applications, since it has a melting temperature of over 1000K. Since it has a Vicker hardness of less than 10 GPa, it is in the soft material class. Anisotropy analysis showed that the material was anisotropic.

**Keywords:** Ni<sub>2</sub>TiAl, elastic properties, thermodynamic properties, DFT.

\*Tahsin ÖZER, tahsinozer@osmaniye.edu.tr, <https://orcid.org/0000-0003-0344-7118>

Ali İhsan ÖZTÜRK, aliihsanozturk@osmaniye.edu.tr, <https://orcid.org/0000-0002-3912-0670>

## 1. Giriş

Nominal bileşim formülü  $A_2BC$  olan  $L2_1$  yapılu bileşikler Heusler bileşikleri olarak bilinmektedir.  $L2_1$  yapı sekiz basit bcc ( $B_2$ ) birim hücreden meydana gelmektedir [1].  $A_2BC$  formunda A ve B geçiş metali elementleri, C ise ana grup elementidir. Heusler alaşımlarda  $(0,0,0)$ ,  $(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$ ,  $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$  ve  $(\frac{3}{4}, \frac{3}{4}, \frac{3}{4}, \frac{3}{4})$  olmak üzere dört tane Wyckoff-pozisyonu vardır [2]. Bu çalışmada Sahariya ve ark. (2012)'nin bildirdiği Ni  $(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$  ve  $(\frac{3}{4}, \frac{3}{4}, \frac{3}{4}, \frac{3}{4})$ , Ti  $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$  ve Al  $(0,0,0)$  atomik konumlar [3] alındı. Heusler alaşımlar yarı metalik, termodinamik, süper iletkenlik, ferro magnetik şekil hafıza etkisi vardır [4,5]. Akımın sadece malzemenin kenarları boyunca ilerleyip hareketin tek bir yönde mümkün olduğu topolojik yalıtkanlık gibi enteresan fiziksel özelliklere sahiptirler [2]. Birçok deneysel ve teorik çalışmalar ile Heusler alaşımlar tasarlanmakta ve hazırlanmakta, sahip oldukları özelliklerin iyileştirilmesine devam edilmektedir [2]. Yapılan çalışmalar sonucunda Heusler alaşımların yeni özellikleri ve yeni kullanım alanları da bulunmaya devam edilmektedir [6].

$Ni_2TiAl$  bileşiğinin yapısal özelliklerini elektron mikroskobu ve x-ray kullanarak Taylor ve Floyd (1952) çalıştılar [7]. Aşırı doymuş TiNi şekil hafızalı alaşımlardan  $Ni_2TiAl$  Heusler bileşiğinin çökeltme davranışına ilişkin deneysel bir çalışma Jung ve diğerleri tarafından yapılmıştır [8,9].  $Ni_2TiAl$  bileşiğinin teorik ve deneysel olarak elektronik yapısı ve özgül ısı [1,10], teorik olarak dinamik özellikleri [11,12] çalışılmıştır.

Malzemelerin uygulama safhasına yaklaştıkça mekanik özellikleri önem arz etmektedir. Mekanik özellikler deneysel olarak belirlenebildiği gibi teorik olarak da belirlenebilmektedir. Uygulamalar için potansiyel alaşımların sayısı fazla olduğundan çok bileşenli alaşımlarda mikro yapı ve denge karakteristiklerini teorik olarak tahmin etmek zaman ve kaynakların optimal kullanımı bakımından avantajlıdır. Bu şekilde teorik çalışmalar, deneysel alaşımların tasarımını kolaylaştırabilir. Bu yüzden çalışma ile  $Ni_2TiAl$  bileşiğinin yapısal, mekanik ve termodinamik özellikleri teorik olarak incelenmesi amaçlanmıştır. Amaç doğrultusunda anizotropi, Vicker sertliği, erime noktası ve termal iletkenlikleri detaylı olarak analiz edilmiştir.

## 2. Materyal metot

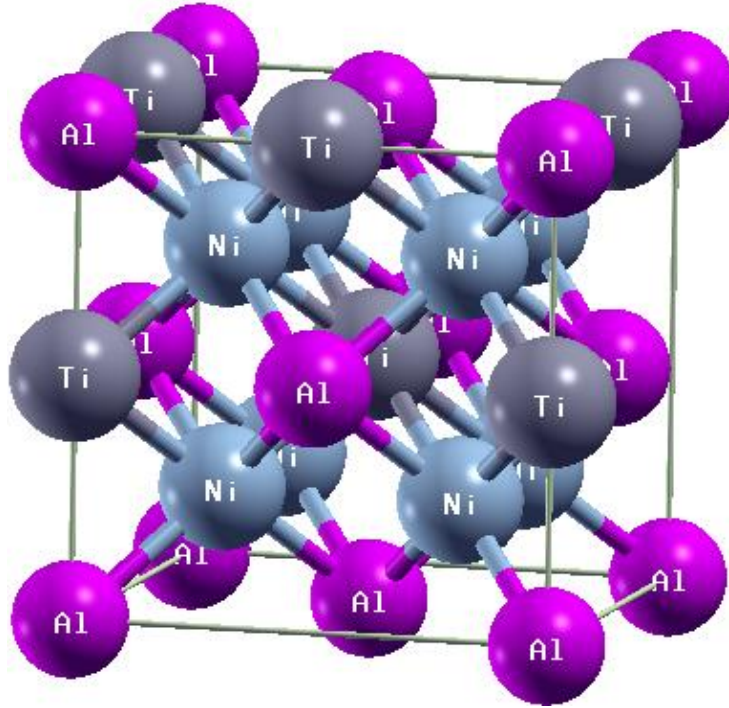
$Ni_2TiAl$  bileşiğinin tüm ilk prensipler hesaplaması Yoğunluk Fonksiyonel Teorisine (DFT) [13] dayanan açık kaynak kodlu Quantum Espresso (QE) [14] yazılımı ile yapıldı. QE, nano ölçekte elektronik yapı hesaplamaları ve malzeme modellemesi için entegre bir Açık Kaynak bilgisayar kodları paketidir. Yoğunluk-fonksiyonel teori, düzlem dalgalar ve psödopotansiyellere dayanmaktadır. Exchange korelasyon fonksiyoneli olarak Genel Gradyen Yaklaşımı(GGA)'nın Perdew-Burke-Emzerhof (PBE) versiyonu [15] ile düzlem dalga ultrasoft psödo potansiyel metot tercih edildi. QE internet sitesinden temin edilen PBESOL fonksiyonel ve USPP tipi psödo potansiyel dosyaları kullanıldı. Valans elektronları olarak Ni ( $3d^84s^2$ ), Ti ( $3d^24s^2$ ) ve Al ( $3s^23p^1$ ) alındı. Hesaplamaların verimi ve doğruluğu için optimize Ecut 400 Ry, EcutRho 2400 Ry ve k-nokta seti olarak  $7 \times 7 \times 7$  alındı.  $Ni_2TiAl$  bileşiğinin temel durumunu ve en düşük enerji seviyesini bulabilmek için Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno (BFGS) algoritması [16] kullanıldı. Kendi kendine tutarlı alan (SCF) yakınsama eşiği  $10^{-12}$ , toplam enerji üzerine yakınsama eşiği  $10^{-4}$ , kuvvetler üzerine yakınsama eşiği  $10^{-3}$  Ry değerleri tercih edildi. Elastik sabitlerin hesabına yönelik modeller ve bu modelleri baz alan birtakım yazılımlar geliştirilmiş olup

bunlara yönelik detaylı bilgi literatürde mevcuttur. Bu çalışmada elastik sabitlerin hesabında QE yazılımı ile dağıtım yapılan thermo\_pw kullanılmıştır. Detaylı özellikleri yazılımın internet sitesinde verilmekle birlikte, thermo\_pw ile elastik sabitler ve Yarı Harmonik Yaklaşımında Titreşimsel (Quasi-Harmonic Approximation) özellikler incelenebilmektedir.

### 3. Bulgular ve tartışma

#### 3.1. Yapısal özellikler

$Ni_2TiAl$  Heusler bileşiği  $L2_1$  tipi kübik yapıda ve  $Fm-3m$  (no:225) uzay gurubundadır. Al atomları 4a Wyckoff konum ve (0, 0, 0) koordinatta, Ni atomları 8c Wyckoff konum ve  $(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$  koordinatta ve Ti atomları 4b Wyckoff konum ve  $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$  koordinatta bulunurlar.  $Ni_2TiAl$  bileşiğinin konvensiyonal hücresinde 4 Al, 8 Ni ve 4 Ti atomları olmak üzere toplam 16 atom vardır. Elde edilen optimize parametreler kullanılarak oluşturulan birim hücre Şekil 1’de verilmiştir Yapısal optimizasyon sonucunda örgü sabiti 5,89 Å olarak bulunmuş, diğer deneysel ve teorik çalışmalar ile Tablo 1’de kıyaslanmıştır. Bu çalışma ile bulunan 5,89 Å değeri Wen ve ark. (2017) bildirdiği 5,895 Å değerinden %0,08 oranında farklıdır. Bu oldukça güzel bir sonuçtur. Ayrıca diğer çalışmaların sonuçları ile de uyumludur. Bu uyumluluk yapılan hesaplamaların güvenilirliğini arttırmaktadır.



Şekil 1.  $Ni_2TiAl$  bileşiğinin birim hücresi.

#### 3.2. Mekanik özellikler

İnsanlık tarih boyunca beslenme, barınma ve giyinmeden oluşan üç temel ihtiyacı karşılamak için sürekli çalışmıştır. Bu temel ihtiyaçların giderilmesinde hep malzemeye ihtiyaç duyulmuştur. Tarih öncesi zamanların isimlendirilmesi yontma taş devri, cilalı taş devri gibi kullanılan malzemeye göre yapılmıştır. Kullanılan teknolojinin gelişimi hep

malzeme ile paralel olmuştur. Amaçlanan uygulamaya uygun malzeme yapımı gerçekleştirildikçe yeni teknolojiler üretilebilmiştir. Teorik çalışmalar malzemelerin tasarım ve üretimlerinde kolaylıklar sunup, zaman kaybı ve malzeme israfının önüne geçebilmektedir. İşin doğası gereği henüz sentezlenmemiş, üretilmemiş, deneysel ve teorik olarak hiç çalışılmamış malzemelerin özellikleri dahi teorik olarak çalışılabilmektedir. Bu şekilde herhangi bir malzeme hakkında yeterince bilgiler toplanarak uygulama safhasına yaklaştıkça, malzemenin mekanik özellikleri önem arz etmektedir. Malzemenin mekanik özellikleri elastik sabitler aracılığı ile tahmin edilebilmektedir. Kübik kristal yapılar  $C_{11}$ ,  $C_{12}$  ve  $C_{44}$  olmak üzere üç bağımsız elastik sabitle karakterize edilmektedir. Mekanik olarak kararlı olan bir kristal, kararlılık kriterlerini sağlarlar. Bu kriterler,

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

Tablo 1’den de görüleceği üzere  $Ni_2TiAl$  bileşiğinin bağımsız elastik sabitleri, Wen ve ark. (2017) rapor ettikleri  $C_{11}$  değerinden %5,  $C_{12}$  değerinden %20,  $C_{44}$  değerinden %2 farklıdır. Bu farklılık kullanılan yazılım farkından kaynaklı olduğu düşünülmektedir.  $Ni_2TiAl$  bileşiğinin mekanik kararlılık şartlarını karşıladığından, mekanik olarak kararlı olduğu söylenebilir.

Tablo 1.  $Ni_2TiAl$  bileşiğinin örgü sabiti ( $a_0$ , Å), bulk ( $B$ , GPa), shear ( $G$ , GPa) ve Young ( $E$ , GPa) modülleri, elastik sabitleri ( $C_{ij}$ , GPa).

Materyal	Referans	$a_0$	$B$	$G$	$E$	$C_{11}$	$C_{12}$	$C_{44}$	$\sigma$
$Ni_2TiAl$	Bu çalışma	5,89	179,9	51,8	141,6	203,8	168,0	101,6	0,369
	Teorik	5,87 <sup>a</sup> , 5,91 <sup>b</sup>	164,9 <sup>b</sup>	67,5 <sup>b</sup>	178,1 <sup>b</sup>	215,8 <sup>b</sup>	139,4 <sup>b</sup>	98,7 <sup>b</sup>	
	Deney	5,872 <sup>a</sup> , 5,895 <sup>b</sup>							

<sup>a</sup>Lin & Freeman, 1992, <sup>b</sup>Wen vd., 2017

Detaylı hesaplama formülleri referansta verilen [17] mekanik nicelikler (Bulk modül  $B$ , shear modül  $G$  ve Young modül  $E$ )  $C_{ij}$  elastik sabitlerden Hill yaklaşıklığında hesaplanarak Tablo 1’de verilmiştir. Bulk modül hacim, shear modül kayma deformasyonuna karşı direncin göstergesidir.  $B$  ve  $G$  değeri ne kadar büyük ise malzemenin homolog özelliği de o kadar iyidir [18]. Young modülü katının sertliğini temsil etmektedir,  $E$  değerinin büyük olması daha iyi sertliğe işaret eder. Bu çalışmada  $B$ ,  $G$  ve  $E$  değerleri sıra ile 179,9, 51,8, 141,6 GPa olarak hesaplanmıştır. Hesaplanan bu değerler yeterince büyük değerlerdir. Bu bakımdan çalışılan malzemenin sert bir malzeme olmadığı söylenebilir. Her ne kadar  $B$ ,  $G$  ve  $E$  değerlerine bakılarak malzemenin sertliği hakkında fikir edinilebilse de bu yeterli olmadığından literatürde malzeme sertliğini tanımlayan bir takım ampirik bağıntılar, modeller önerilmiştir. Bunlardan Chen modeli [19],

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

Yousef modeli [20],

$$H_v = \frac{(1 - 2\theta)E}{6(1 + \theta)} \quad (3)$$

Tian modeli [21],

$$H_v = 0,92 k^{1,137} G^{0,708} \quad (4)$$

Yukarıda verilen eşitlikler kullanılarak  $Ni_2TiAl$  bileşiğinin Vicker sertliği  $1,681 GPa$  (Chen model),  $4,525 GPa$  (Yousef model) ve  $3,645 GPa$  (Tian model) olarak tahmin edilmiştir. Her üç model de malzemenin sertliği  $10 GPa$ 'nın altındadır. Çalışılan malzemenin Vicker sertliği  $10 GPa$ 'dan küçük olmasından dolayı yumuşak malzeme sınıfına girmektedir. Bundan dolayı sertlik gerektiren uygulamalarda kullanılması beklenilmemektedir.

Uygulamada malzemenin sünek (Ductile)/kırılgan (Brittle) doğasının da bilinmesi, uygulama açısından önem arz etmektedir. Teorik olarak çalışılan malzemenin sünek/kırılgan doğası Poisson oranı,  $G/B$  oranı ve Cauchy basıncına bakılarak tahmin edilebilmektedir. Poisson oranı için sınır değer  $0,26$  [22],  $G/B$  için sınır değer  $0,5$  [23]. Poisson oranı sınır değerinden büyük olursa,  $G/B$  oranı sınır değerinden küçük olursa ve Cauchy basıncı pozitif değer alırsa [24] malzemenin sünek aksi durumda kırılgan karakterde olması beklenilir. Yapılan hesaplamalarda Poisson oranı  $0,369$ ,  $G/B$  oranı  $0,288$  ve Cauchy basıncı  $66,397 GPa$  olarak hesaplandığından  $Ni_2TiAl$  bileşiğinin sünek karakterde olması beklenilmektedir.

Malzeme bilimi ve malzeme mühendisliği açısından bir diğer önemli olan özellik de malzemenin anizotropisidir. Malzemenin fiziksel özelliği yönlere göre değişiyorsa anizotrop, değişmiyorsa izotrop olarak isimlendirilmektedir. Literatürde malzemenin anizotropluğu farklı şekillerde ifade edilebilmektedir. Herhangi bir kristal yapıya uygulanabilen evrensel anizotropi index [25]

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

Chung-Buessem anizotropi index [26]

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

Zener anizotropi index [27]

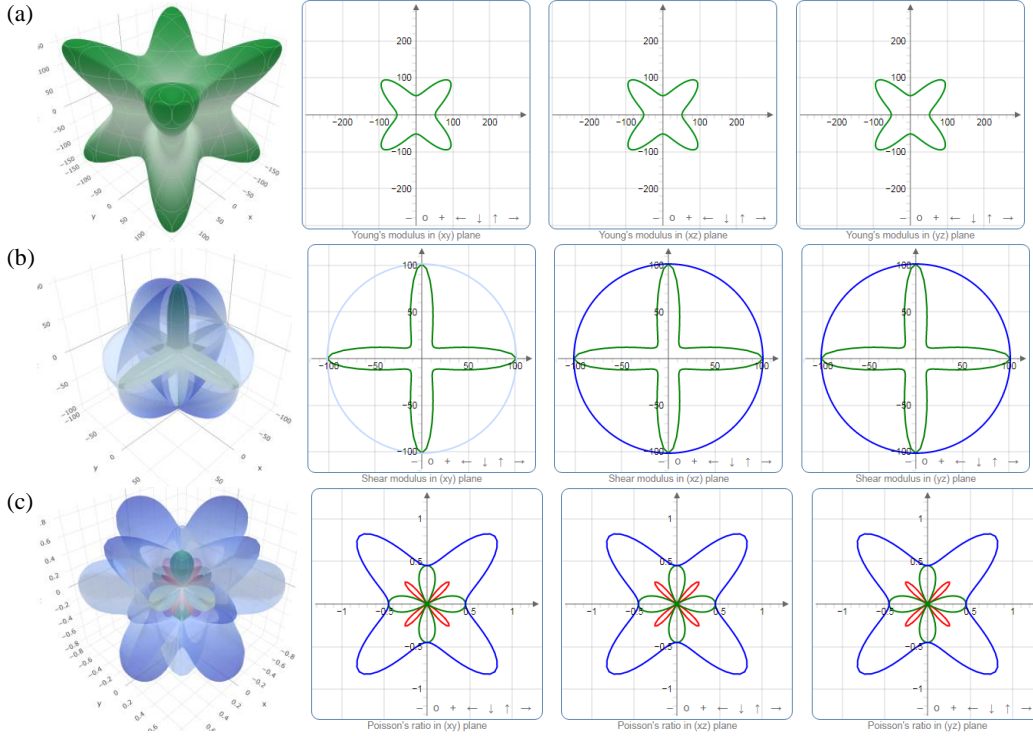
$$A_Z = \frac{2G_{44}}{C_{11} - C_{12}} \quad (7)$$

Elastik anizotropi faktörü [28]

$$A^E = \frac{C_{11} - C_{12} - 2C_{44}}{C_{11} - C_{44}} \quad (8)$$

İzotropik kristallerde Zener anizotropi index değeri bir, evrensel anizotropi, Chung-Buessem anizotropi, elastik anizotropi index değerleri ise sıfır'dır. Bir'den ve sıfır'dan sapma miktarları anizotropi derecesini gösterir. Yapılan hesaplamalar ile  $A^U(4,632)$ ,  $A_G(31,659)$ ,  $A_Z(5,684)$  ve  $A^E(1,639)$  bulunduğundan bu sonuçlara göre  $Ni_2TiAl$  bileşiği anizotropiktir. Anizotropiklik ELATE yazılımı [29] ile görselleştirilerek

Şekil 2’de verilmiştir. İzotropik malzemenin şekli küre/daire şeklindedir. Küresellik/daireden sapmalar anizotropiyi göstermektedir. Şekil 2’den Ni<sub>2</sub>TiAl bileşiğinin anizotropluğu incelendiğinde, şekillerde küresellik/dairesellikten sapmalar barizdir. Ni<sub>2</sub>TiAl bileşiğinin anizotropluğu Şekil 2’den açıkça görülmektedir.



Şekil 2. Ni<sub>2</sub>TiAl bileşiğinin, (a) Young modülü, (b) Shear modülü, (c) Poisson oranı anizotropisinin 3D ve 2D gösterimi. Şekilde minimum değerler yeşil, maksimum değerler mavi renkte gösterilmiştir.

### 3.3. Termodinamik özellikler

Malzeme bilimi ve mühendisliğinde karakteristik Debye sıcaklığı, erime sıcaklığı ve minimum termal iletkenlik değerleri önemlidir. Debye sıcaklığı bir kristalin normal titreşim modunun en yüksek sıcaklığı olarak tanımlanır. Bu sıcaklık fononlar, termal genleşme, termal iletkenlik, ısı kapasitesi ve kafes entalpisi gibi çeşitli özellikler hakkında bilgi sağlayan en önemli parametrelerden biri Debye sıcaklığıdır [30]. Debye sıcaklığı, erime sıcaklığı ve minimum termal iletkenlik değerleri ortalama ses hızından ve elastik sabitlerden hesaplanabilmektedir. Malzemenin erime sıcaklığı [31,32],

$$T_m = 553 + 5,91 C_{11} \quad (9)$$

$$T_m = 607 + 9,3 B \quad (10)$$

$$T_m = 560,4 + 7,805 C_{11} - 3,094 C_{12} - 1,086 C_{44} \quad (11)$$

Ni<sub>2</sub>TiAl bileşiğinin erime sıcaklığı 1757,21 K (Eşitlik 9), 2280,29 K (Eşitlik 10) ve 1520,6 K (Eşitlik 11) olarak tahmin edilmiştir. Çalışılan bileşiğin erime sıcaklığı 1000K üzeri tahmin edildiği için yüksek sıcaklık gerektiren uygulamalarda kullanılabileceği

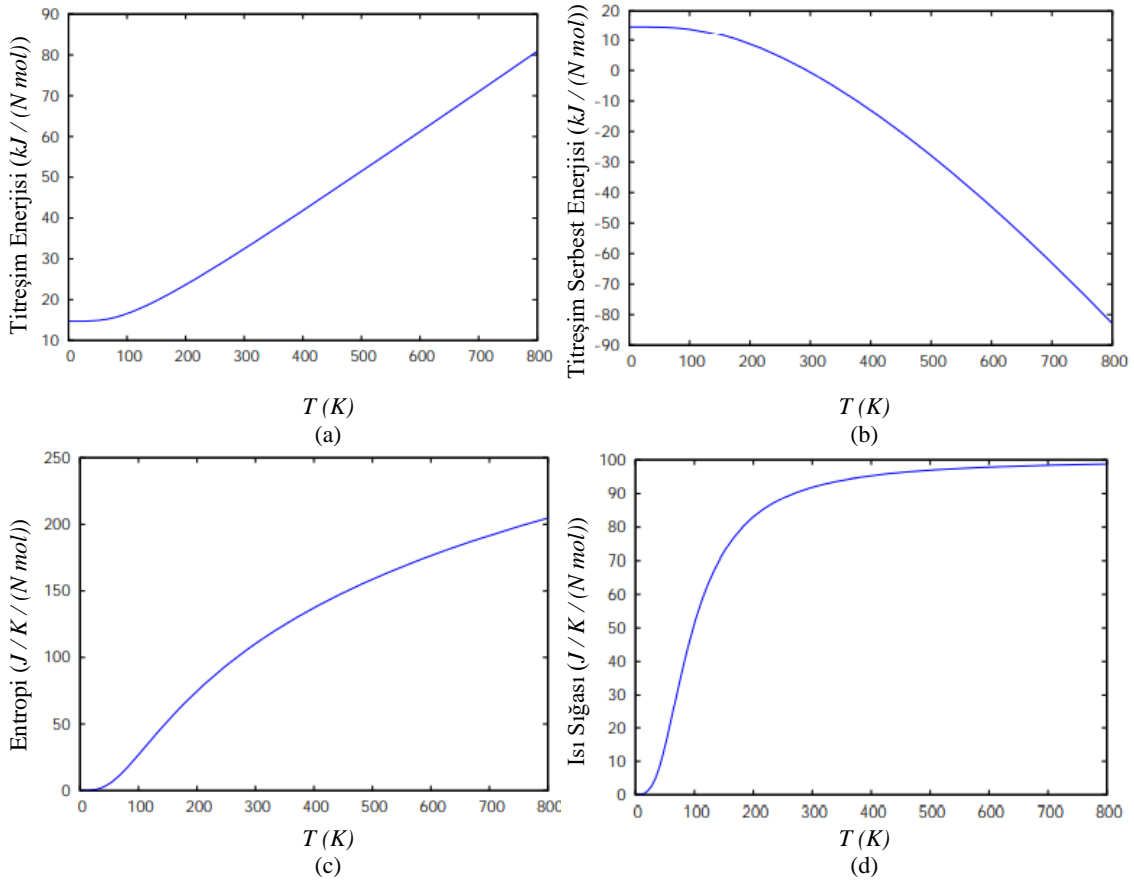
düşünülmektedir. Debye sıcaklığı 520,5 K olarak hesaplanmıştır. Minimum termal iletkenlik [33–35],

$$k_{min} = \frac{k_B}{2.48} m^{\frac{2}{3}} (2v_t + v_l) \quad (12)$$

$$k_{min} = 0.87 k_B M_a^{-2/3} E^{1/2} \rho^{1/6} \quad (13)$$

$$k_{min} = \left\{ \frac{1}{3} \left[ 2(2 + 2\sigma)^{3/2} + \left( \frac{1}{1 - \sigma} - \sigma \right)^{3/2} \right] \right\}^{-\frac{1}{3}} k_B m^{2/3} \left( \frac{E}{\rho} \right)^{1/2} \quad (14)$$

Eşitliklerde geçen  $k_{min}$  termal iletkenlik,  $k_B$  Boltzman sabiti,  $m$  molekuldeki atomların sayısı,  $M_a$  ortalama atomik kütle,  $\rho$  bileşiğin yoğunluğu göstermektedir. Bu eşitlikler yardımı ile  $Ni_2TiAl$  bileşiğinin minimum termal iletkenliği 0,976, 0,831 ve 0,650  $Wm^{-1}K^{-1}$ . Tahmin edilen bu termal iletkenlikler küçüktür, bu nedenle termal yalıtkanlık gerektiren uygulamalar için potansiyel aday malzeme olabileceği düşünülmektedir. 0-800 K sıcaklık aralığında hesaplanan serbest enerji, titreşim enerjisi, entropi ve ısı sığasının sıcaklık ile değişim eğrileri Şekil 3'te verilmiştir.



Şekil 3.  $Ni_2TiAl$  bileşiğinin 0-800 K sıcaklık aralığında (a) titreşim enerjisinin, (b) titreşim serbest enerjisinin, (c) entropinin, (d) ısı sığasının sıcaklık değişim eğrileri.

Şekil 3.a'da görülen titreşim enerjisinin sıcaklığa bağlı değişiminde, artan sıcaklıkla beraber titreşim enerjisinde de bir artış, Şekil 3.b'de ise sıcaklık artışı ile ters orantılı bir azalmanın olduğu görülebilir. Sonuç olarak, sıcaklık artışı titreşim enerjisinin artmasına, serbest enerjinin azalmasına sebep olmaktadır. Şekil 3.c'de verilen entropi-sıcaklık değişim eğrisinde artan sıcaklıkla entropideki artış beklenen bir durumdur. Şekil 3.d'de Sıcaklık-ısı sığası grafiğinde, sıcaklık arttıkça ısı sığası artmış ve 600 K gibi yüksek sıcaklıklara gelindiğinde Dulong-Petit limiti [36] yaklaştığı görülmektedir.

### 3. Sonuçlar

$Ni_2TiAl$  bileşiğinin yapısal, elastik ve termodinamik özelliklerinin ilk prensipler yöntemi ile incelenmesinde ilk adım olarak yapısal optimizasyon gerçekleştirilmiş ve bu optimizasyon sonucunda örgü sabiti 5,89 Å olarak hesaplanmış ve sonrasında optimize hesaplama parametreler kullanılarak elastik sabitler hesaplanmıştır. Hesaplanan elastik sabitler mekanik kararlılık kriterlerini sağladığı için  $Ni_2TiAl$  bileşiği mekanik olarak kararlıdır. Elastik modül ve Vicker sertliği hesaplamalarından yumuşak, anizotropi analizlerinden anizotrop olduğu görülmüştür. 1000 K üzeri erime sıcaklığı tahmin edildiğinden yüksek sıcaklık uygulamaları için potansiyel aday malzeme olması beklenilmektedir.

### Teşekkür

Bu çalışmada kullanılan hesaplama kaynakları Ulusal Yüksek Başarımlı Hesaplama Merkezi'nin (UHeM), #1012332022 # numaralı desteğiyle, sağlanmıştır. Ayrıca yapılan bu çalışma, “ $Ni_2XAl$  (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.

### Kaynaklar

- [1] Lin, W., Freeman, A. J., Cohesive properties and electronic structure of Heusler L21-phase compounds  $Ni_2XAl$  (X=Ti, V, Zr, Nb, Hf, and Ta), **Phys. Rev. B**, 45, 61–68, (1992).
- [2] Luo, H. *vd.* Competition of L2<sub>1</sub> and XA structural ordering in Heusler alloys  $X_2CuAl$  (X = Sc, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni), **J. Alloys Compd.**, 665, 180–185, (2016).
- [3] Sahariya, J., Ahuja, B. L., Electronic structure of  $Ni_2TiAl$ : Theoretical aspects and Compton scattering measurement, **Phys. B Condens. Matter**, 407, 4182–4185, (2012).
- [4] Al, S., Arıkan, N., İyigör, A., Investigations of Structural, Elastic, Electronic and Thermodynamic Properties of  $X_2TiAl$  Alloys, A Computational Study. **Zeitschrift für Naturforsch. A**, 73, 859–867, (2018).
- [5] Surucu, G., Candan, A., Erkisi, A., Gencer, A., Güllü, H. H., First principles study on the structural, electronic, mechanical and lattice dynamical properties of  $XRhSb$  (X = Ti and Zr) paramagnet half-Heusler antimonides, **Mater. Res. Express**, 6, 106315, (2019).



- [6] Arıkan, N., Öztürk, A. İ., Ag<sub>2</sub>ScAl Bileşiğinin Mekanik ve Termodinamik özelliklerinin Ab İnitio Hesabı, **Kadirli Uygulamalı Bilimler Fakültesi Dergisi**, 116–126, (2021).
- [7] 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, **Mater. Des.**, 114, 398–403, (2017).
- [8] Jung, J., Ghosh, G., Isheim, D., Olson, G. B., Precipitation of Heusler phase (Ni<sub>2</sub>TiAl) from B2-TiNi in Ni-Ti-Al and Ni-Ti-Al-X (X = Hf, Zr) alloys, **Metall. Mater. Trans. A Phys. Metall. Mater. Sci.**, 34 A, 1221–1235, (2003).
- [9] Jung, J., Ghosh, G., Olson, G. B., A comparative study of precipitation behavior of Heusler phase (Ni<sub>2</sub>TiAl) from B2-TiNi in Ni-Ti-Al and Ni-Ti-Al-X (X=Hf, Pd, Pt, Zr) alloys, **Acta Mater.**, 51, 6341–6357, (2003).
- [10] da Rocha, F. S., Fraga, G. L. F., Brandão, D. E., da Silva, C. M., Gomes, A. A., Specific heat and electronic structure of Heusler compounds Ni<sub>2</sub>TAl (T=Ti, Zr, Hf, V, Nb, Ta), **Phys. B Condens. Matter**, 269, 154–162, (1999).
- [11] Sreenivasa Reddy, P. V., Kanchana, V., Ab initio study of Fermi surface and dynamical properties of Ni<sub>2</sub>XAl (X = Ti, V, Zr, Nb, Hf and Ta), **J. Alloys Compd.**, 616, 527–534, (2014).
- [12] Sreenivasa Reddy, P. V., Kanchana, V., Vaitheeswaran, G., Singh, D. J., Predicted superconductivity of Ni<sub>2</sub>VAl and pressure dependence of superconductivity in Ni<sub>2</sub>NbX (X = Al, Ga and Sn) and Ni<sub>2</sub>VAl, **J. Phys. Condens. Matter**, 28, 115703, (2016).
- [13] Perdew, J. P., Density-functional approximation for the correlation energy of the inhomogeneous electron gas, **Phys. Rev. B**, 33, 8822–8824, (1986).
- [14] Giannozzi, P. *vd.* QUANTUM ESPRESSO: A modular and open-source software project for quantum simulations of materials, **J. Phys. Condens. Matter**, 21, (2009).
- [15] Perdew, J. P., Burke, K., Ernzerhof, M., Generalized Gradient Approximation Made Simple, **Phys. Rev. Lett.**, 77, 3865, (1996).
- [16] Fischer, T. H., Almlof, J., General methods for geometry and wave function optimization, **J. Phys. Chem.**, 96, 9768–9774, (1992).
- [17] Hill, R., The Elastic Behaviour of a Crystalline Aggregate, **Proc. Phys. Soc. Sect. A**, 65, 349–354, (1952).
- [18] Pugh, S. F., XCII. Relations between the elastic moduli and the plastic properties of polycrystalline pure metals, *London, Edinburgh, Dublin Philos. Mag. J. Sci.* 45, 823–843 (1954).
- [19] Chen, X.-Q., Niu, H., Li, D., Li, Y., Modeling hardness of polycrystalline materials and bulk metallic glasses, **Intermetallics**, 19, 1275–1281, (2011).
- [20] Yousef, E. S., 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 Commun.**, 139, 108–113, (2006).
- [21] Tian, Y., Xu, B., Zhao, Z., Microscopic theory of hardness and design of novel superhard crystals, **Int. J. Refract. Met. Hard Mater.**, 33, 93–106, (2012).
- [22] Özer, T., Investigation of pressure dependence of mechanical properties of SbSI compound in paraelectric phase by Ab Initio method, **Comput. Condens. Matter**, 28, e00568, (2021).
- [23] Özer, T., Study of first principles on anisotropy and elastic constants of Y<sub>3</sub>Al<sub>2</sub> compound, **Chinese J. Phys.**, 61, 180–189, (2019).

- [24] Surucu, G., Erkisi, A., The First Principles Investigation of Structural, Electronic, Mechanical and Lattice Dynamical Properties of the B and N Doped  $M_2AX$  Type MAX Phases  $Ti_2AlB_{0.5}C_{0.5}$  and  $Ti_2AlN_{0.5}C_{0.5}$  Compounds, **J. Boron**, (2018).
- [25] Ranganathan, S. I., Ostoja-Starzewski, M., Universal Elastic Anisotropy Index. **APS**, 101, (2008).
- [26] Buessem, D. H., Chung, W. R., *Anisotropy in Single-Crystal Refractory Compounds*. (Springer US, 1968).
- [27] Nye, J., *Physical properties of crystals: their representation by tensors and matrices*. (Oxford University Press, 1985).
- [28] Every, A. G., General closed-form expressions for acoustic waves in elastically anisotropic solids, **Phys. Rev. B**, 22, 1746, (1980).
- [29] Gaillac, R., Pullumbi, P., Coudert, F.-X., ELATE: an open-source online application for analysis and visualization of elastic tensors, **J. Phys. Condens. Matter**, 28, 275201, (2016).
- [30] Arikan, N., DikiCi Yildiz, G., Yildiz, Y. G., İyigör, A., Electronic, Elastic, Vibrational and Thermodynamic Properties of  $HfIrX$  ( $X = As, Sb$  and  $Bi$ ) Compounds: Insights from DFT-Based Computer Simulation., **J. Electron. Mater.**, 49, 3052–3062, (2020).
- [31] Özer, T., Determination of melting temperature. içinde (ed. Demirkaya, H., Canbulat, M., Pulur, A., Eraslan, M. & Direkci, B.) 4 th International Congress on Multidisciplinary Studies, 87–99, (2018).
- [32] Fine, M. E., Brown, L. D., Marcus, H. L., Elastic constants versus melting temperature in metals, **Scr. Metall.**, 18, 951–956, (1984).
- [33] Clarke, D. R., Materials selections guidelines for low thermal conductivity thermal barrier coatings, **Surf. Coatings Technol.**, 163–164, 67–74, (2003).
- [34] Cahill, D. G., Watson, S. K., Pohl, R. O., Lower limit to the thermal conductivity of disordered crystals, **Phys. Rev. B**, 46, 6131, (1992).
- [35] 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, **J. Alloys Compd.**, 644, 638–644, (2015).
- [36] Petit, A. T., Dulong, P. L., Recherches sur quelques points importants de la théorie de la chaleur. içinde **Annales de chimie et de physique**, 395–413, (1819).