

# Kübik HfZnO<sub>3</sub> Bileşiğinin Yapısal, Mekanik ve Termodinamik Özelliklerinin ab Initio Yöntemi ile İncelenmesi

Tahsin ÖZER<sup>1\*</sup>, Nihat ARIKAN<sup>2</sup>, Ali İhsan ÖZTÜRK<sup>3</sup>

<sup>1</sup> Osmaniye Korkut Ata Üniversitesi, Bahçe Meslek Yüksekokulu Kimya ve Kimyasal İşleme Teknolojileri Bölümü, Osmaniye, Türkiye.

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

<sup>3</sup> Osmaniye Korkut Ata Üniversitesi, FEN-Edebiyat Fakültesi, Osmaniye, Türkiye.

Sorumlu yazar e-posta\*: tahsinozer@osmaniye.edu.tr.

ORCID ID: <http://orcid.org/0000-0003-0344-7118>

nihatarikan@osmaniye.edu.tr.

ORCID ID: <http://orcid.org/0000-0001-8028-3132>

aliihsanozturk@osmaniye.edu.tr.

ORCID ID: <http://orcid.org/0000-0002-3912-0670>

Geliş Tarihi: 11.03.2023

Kabul Tarihi: 17.08.2023

## Anahtar kelimeler

HfZnO<sub>3</sub>  
Mekanik özellikler  
Termodinamik özellikler  
Erime Sıcaklığı  
Vicker sertliği  
Anizotropi

## Öz

Açık kaynak Quantum Espresso (QE) kodu ile kübik, Pm-3m uzay grubu(no:221) HfZnO<sub>3</sub> bileşiğinin yapısal optimizasyonu ile örgü sabiti 3,78 Å olarak tahmin edildi. Hesaplanan bu değer önceki teorik çalışma ile mükemmel uyum sağlamaktadır. Ortam basıncında hesaplanan elastik sabitleri C<sub>11</sub>(304,8), C<sub>12</sub>(134,3) ve C<sub>44</sub>(19,1) GPa. Hesaplanan elastik sabitlerinden elastik modül, anizotropi, sertlik, erime sıcaklığı, Debye sıcaklığı gibi mekanik ve termodinamik özellikler incelendi. Yapılan hesaplamalar sonucunda HfZnO<sub>3</sub> bileşiği mekanik olarak kararlı, yumuşak ve sünek karakterde olduğu görüldü. Quasi-harmonik model ile 0-800 K sıcaklığında titreşim enerjisi, serbest enerji, entropi ve özgül ısı kapasitesi değerlendirildi.

## Investigation of Structural, Mechanical and Thermodynamic Properties of Cubic HfZnO<sub>3</sub> Compound by Ab Initio Method

### Abstract

The lattice parameter was estimated as 3.78 Å by the structural optimization of the cubic Pm-3m space group (no:221) HfZnO<sub>3</sub> compound with the open-source Quantum Espresso (QE) code. This calculated value is in perfect agreement with the previous theoretical work. The elastic constants calculated at ambient pressure are C<sub>11</sub>(304,8), C<sub>12</sub>(134,3) and C<sub>44</sub>(19,1) GPa. Mechanical and thermodynamic properties such as elastic modulus, anisotropy, hardness, melting temperature, Debye temperature from the calculated elastic constants were investigated. As a result of the calculations, it was seen that the HfZnO<sub>3</sub> compound was mechanically stable, soft, and ductile. Vibration energy, free energy, entropy, and specific heat capacity were evaluated at 0-800 K temperature with the Quasi-harmonic model.

### Keywords

HfZnO<sub>3</sub>  
Mechanical properties  
Thermodynamic properties  
Vickers's hardness  
Anisotropy.

© Afyon Kocatepe Üniversitesi

### 1. Giriş

Yer kabuğunda en çok bulunan bileşiklerden biri olan perovskitler ABC<sub>3</sub> formundadır. Bu formda A ve B metal katyonları, C ise anyonu ifade etmektedir. Perovskit yapı tasarlanırken A ve B atomlarının değerliklerinin toplamı +6 olacak şekilde ayarlanır. A ve B katyonları genellikle alkali metal, toprak alkali metal, geçiş metalleri veya nadir toprak elementleri olabilmektedir. ABC<sub>3</sub> formda C yerine oksijen

anyonu konularak Perovskit oksit yapısı elde edilmektedir. Bu yapıda oksijen iyonları A veya B katyonu etrafında oktahedron yapıyı oluşturmaktadır. Kübik perovskit yapılarda A katyonu küpün köşesinde, B katyonu merkezde ve Oksijen iyonları yüzey merkezde konumlanmaktadır (Şekil 1).

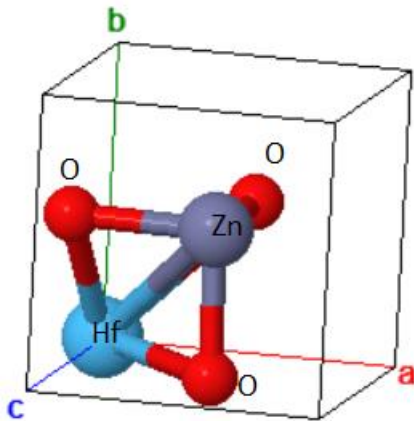
Perovskit oksitler elektronik bakımdan metal, yarıiletken, yalıtkan ve süper iletken davranış

sergileyebilmektedir. Ayrıca çoğu perovskitlerin manyetik düzende olduğu bulunmuştur (Erkişi vd., 2016). Dielektrik, piezoelektrik, piroelektrik ve iletkenlik gibi çok farklı fiziksel özellikler sergilediğinden oldukça geniş bir alanda ve birçok uygulamada kullanılabilir. Kullanım alanının bu kadar çok olmasından dolayı literatürde perovskit ailesi hakkında kapsamlı çalışmalar vardır. Foto kromik, elektro kromik, piezoelektrik, ferroelektrik, dielektrik, piroelektrik ve enerji depolama cihazları gibi oldukça büyük ve önemli alanlarda Perovskit ailesi çalışılmıştır (Erkişi vd., 2016).

Şimdiye kadar BaTiO<sub>3</sub>, PbTiO<sub>3</sub>, PnZrO<sub>3</sub>, (Ba, Sr)TiO<sub>3</sub>, ZnZrO<sub>3</sub> gibi birçok perovskit oksit sentezlenmiş (Zhu vd., 2014) ancak HfZnO<sub>3</sub> bileşiği sentezlenmemiştir. Yapılan literatür taramasından HfZnO<sub>3</sub> bileşiğinin mekanik ve termodinamik özellikleri hakkında yapılmış bir çalışmaya rastlanılmamıştır. Bu çalışmada, Pm-3m uzay grubu (no: 221) kübik fazda kararlı olan HfZnO<sub>3</sub> bileşiğinin yapısal, mekanik ve termodinamik özelliklerinin kapsamlı bir çalışması sunulmuştur. Böylece literatüre bu anlamda bir katkı yapılması amaçlanmıştır.

## 2. Materyal ve Metot

HfZnO<sub>3</sub> bileşiği kübik Pm-3m uzay grubu (no:221)'nda kristalleşip Perovskit yapıdadır. Örgü sabiti 3,76 Å olup Hf atomu 1a (0 0 0), Zn atomu 1b (½ ½ ½) ve O atomları 3c (½ ½ 0) Wyckoff pozisyonunda bulunurlar (Şekil 1) (Kirklin vd., 2015).



Şekil 1. HfZnO<sub>3</sub> bileşiğinin kristal yapısı (Kirklin vd., 2015).

Enerji hesaplamalarında açık kaynak QE yazılımı (Giannozzi vd., 2009) tercih edilmiştir. Valans

elektronları ile iyon kolları arasındaki etkileşimi temsil edebilmek için QE yazılımının internet sitesinden temin edilen PBE fonksiyonel tipinde PAW tipi psödo potansiyel dosyaları kullanılmıştır. Valans elektronları olarak Hf (4f<sup>14</sup> 6s<sup>2</sup> 5d<sup>2</sup>), Zn (4s<sup>2</sup> 3d<sup>10</sup>) ve O (2s<sup>2</sup> 2p<sup>4</sup>) alındı. Bileşiğin temel durumunu belirleyebilmek ve hesaplamaların güvenilirliğini arttırabilmek için yapısal optimizasyondan önce hesaplama parametreleri Ecut (50 Ry), Ecutrho (500 Ry), k-nokta seti (8×8×8) optimize edildi. Smearing parametresinde methfessel-paxton (mp) metodu (Methfessel & Paxton, 1989) ve 0,05 degauss değeri tercih edilerek BFGS algoritması (Fischer & Almlöf, 1992) kullanılarak geometrik optimizasyon gerçekleştirilmiştir. Yapısal optimizasyondan sonra elastik sabitler belirlenmiştir.

## 3. Bulgular ve Tartışma

Optimize parametreler kullanılarak yapılan hesaplamalarda HfZnO<sub>3</sub> bileşiğinin örgü sabiti 3,78 Å olarak elde edilmiştir. Bu değer literatürde 3,77 Å (Kirklin vd., 2015) olarak rapor edilmiştir. Bu çalışma ile hesaplanan değer literatür verisi ile kıyaslandığında %0,26 farklı olduğu görülmekte olup oldukça uyumlu bir sonuçtur.

Malzemenin elastik sabitleri kullanılarak sertliği, anizotropluğu, erime sıcaklığı gibi bir takım fiziksel özellikleri hakkında bilgi edinilebilmektedir. Bu bakımdan elastik sabitlerin hesabı önem arz etmektedir. Kübik fazda bir malzemenin elastik sabitleri, C<sub>11</sub>, C<sub>12</sub> ve C<sub>44</sub> bağımsız elastik sabitleri ile karakterize edilmektedir. Bir malzemenin mekanik olarak kararlı olması için Born kriteri olarak bilinen şartları sağlaması gerekir (Beckstein vd., 2001; Özer, 2020). Bu şartlar,

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

HfZnO<sub>3</sub> bileşiği için hesaplanan elastik sabitler Born kriterlerini karşılamaktadır. Bu nedenle HfZnO<sub>3</sub> bileşiği mekanik olarak kararlıdır. Yapılan literatür taramasında HfZnO<sub>3</sub> bileşiğinin teorik veya deneysel olarak çalışılmış elastik sabitlerine rastlayamadık. Bu neden ile bulunan sonuçlar HfZnO<sub>3</sub> bileşiğine benzer yapıdaki (Jain vd., 2013) kübik LaCrO<sub>3</sub> bileşiği ile kıyaslanacaktır. Tablo 1.'den de görüleceği üzere C<sub>11</sub> değeri C<sub>12</sub> ve C<sub>44</sub> değerinden daha büyüktür. Bunun

fiziksel anlamı malzemenin tek yönlü sıkıştırmaya kayma deformasyonundan daha dirençli olmasıdır (Koriba vd., 2022).

**Tablo 1.** HfZnO<sub>3</sub> için hesaplanan elastik sabitler ( $C_{ij}$ , GPa), elastik modül ( $B, G, E$  GPa) ve Poisson oranı.

	Bu Çalışma	LaCrO <sub>3</sub> (Koriba vd., 2022)
$C_{11}$	304,8	272,3
$C_{12}$	134,3	71,0
$C_{44}$	19,1	84,8
$B$	191,1	137,3
$G_V$	45,5	90,9
$G_R$	27,7	90,3
$G$	36,6	90,6
$E$	103,2	222,9
$\nu$	0,41	0,22
$G/B$	0,19	0,66

HfZnO<sub>3</sub> bileşiği mekanik olarak kararlı olduğu için hesaplanan elastik sabitler kullanılarak Bulk modülü  $B$ , shear modülü  $G$ , Young modülü  $E$  ve Poisson oranı  $\nu$ , Voigt-Reus-Hill yaklaşıklığında (Beckstein vd., 2001; Özer, 2020) hesaplanarak Tablo 1.'de verilmiştir.

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

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

$$G = \frac{G_R + G_V}{2} \quad (3)$$

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

$$\nu = \frac{3B - 2G}{2(3B + G)} \quad (5)$$

Eşitliklerde Voigt ( $V$ ), Reus ( $R$ ) alt indisi ile gösterilmiştir.  $B, G, E$  değerleri sırası ile 191,1, 36,6, 103,2 GPa olarak hesaplanmıştır.  $B$  hacim,  $G$  kayma deformasyonuna karşı direnç göstergesidir.  $B, G, E$  değerleri ne kadar büyük ise malzeme o kadar sert olduğu anlamına gelir. Ayrıca  $B$  ve  $G$  değerleri homolog özellik hakkında da bilgi verir.  $B$  ve  $G$  değerleri büyüdükçe homolog özellikte iyileşir (Pugh, 1954). HfZnO<sub>3</sub> bileşiği LaCrO<sub>3</sub> bileşiği ile kıyaslandığında HfZnO<sub>3</sub> bileşiğinin hacim deformasyonuna karşı, LaCrO<sub>3</sub> bileşiğinin de kayma deformasyonuna karşı daha dirençli olduğu söylenebilir. Malzemenin sertliği hakkında daha doğru tahminde bulunan  $E$  değerine göre

kıyaslandığında LaCrO<sub>3</sub> bileşiği daha sert bir malzemedir.  $B, G, E$  değerleri malzemenin sertliği hakkında her ne kadar bilgi verse de bu yeterli değildir. Malzemenin Vicker sertliğini tahmin eden Yousef (Yousef vd., 2006) ve Tian (Tian vd., 2012) model sırası ile,

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

$$H_V = 0,92 k^{1,137} G^{0,708} \quad (7)$$

Yousef ve Tian modelleri ile tahmin edilen Vicker sertliğinin ortalaması HfZnO<sub>3</sub> bileşiği için 1,9, LaCrO<sub>3</sub> bileşiği için 15,1 GPa'dır. Literatürde 10 GPa altı Vicker sertliğine sahip malzemeler yumuşak malzeme olarak sınıflandırılmıştır. Bu sınıflandırmaya göre HfZnO<sub>3</sub> bileşiği yumuşak bir malzemedir. Bu neden ile delici, kesici gibi sertlik gerektiren uygulamalar için uygun malzeme değildir.

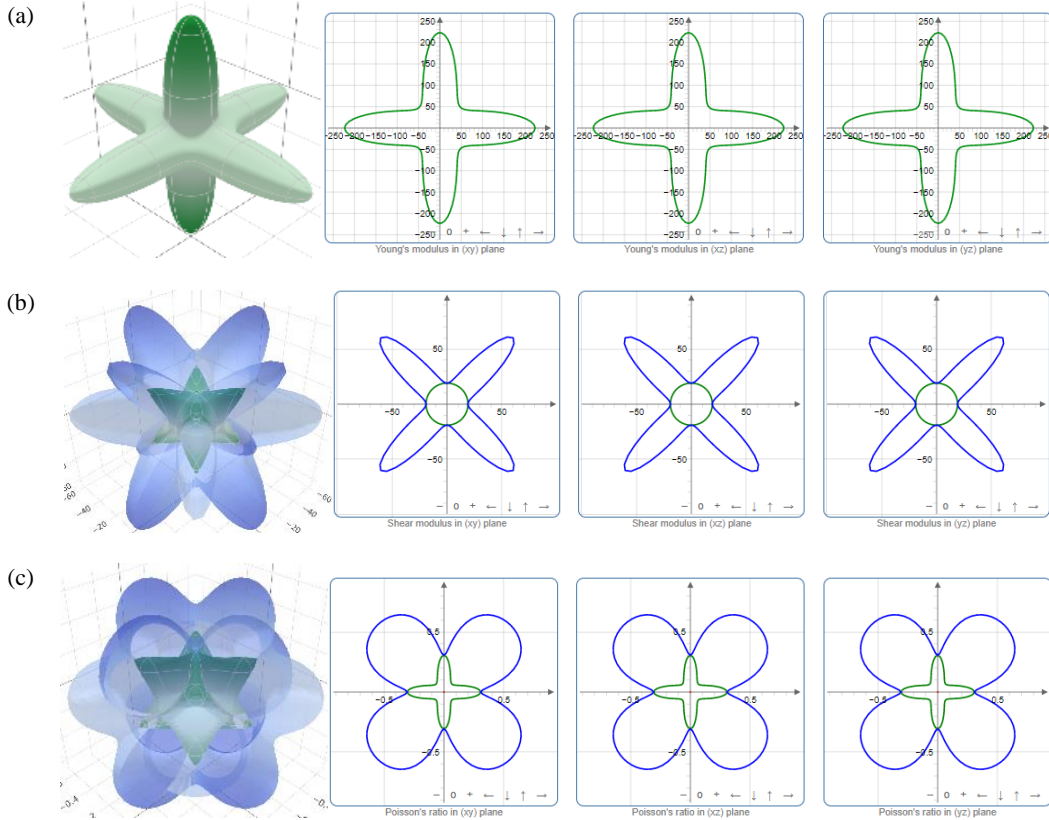
Uygulama safhasında önemli olan bir diğer özellik malzemenin sünek/kırılgan yapısının bilinmesidir. Malzemenin sünek/kırılgan doğası Poisson,  $G/B$  oranı veya Cauchy basıncından tahmin edilebilmektedir. Sünek özellik gösteren malzemelerin Poisson oranı 0,26'dan büyük (Özer, 2021),  $G/B$  oranı 0,5'ten küçük (Özer, 2019) ve Cauchy basıncı ( $C_{12} - C_{44}$ )'nın pozitif (Surucu & Erkisi, 2018) değer alır. Aksi durumda malzemenin kırılmalı bir yapıya sahip olması beklenir. Cauchy basıncı negatif olursa malzemenin kovalent karakterli ve kırılmalı, pozitif olması halinde malzemenin metalik karakterde ve sünek yapısına işaret etmektedir (Sarpkaya & Arıkan, 2022). Yapılan hesaplamalarda HfZnO<sub>3</sub> bileşiğinin Poisson oranı 0,41,  $G/B$  oranı 0,19 ve Cauchy basıncı 115,2 GPa olarak hesaplanmıştır. Elde edilen bu sonuca göre HfZnO<sub>3</sub> bileşiği sünek ve metalik karakterdedir.

Mikro çatlakların önlenmesi bakımından, malzemenin anizotropisinin bilinmesi önem arz eder. Bir malzemenin fiziksel özellikleri yönlerine bağlı olarak değişmiyor ise izotrop aksi halde anizotrop olarak isimlendirilmektedir. Literatürde anizotropluğu ifade eden birtakım eşitlikler mevcuttur. Herhangi bir kristal yapıya uygulanabilen evrensel anizotropi değeri (Ranganathan & Ostoja-Starzewski, 2008)

$$A^U = 5 \frac{G_V}{G_R} + \frac{B_V}{B_R} \geq 0 \quad (8)$$

izotropik kristallerde  $A^U$  değeri sıfırdır. Sıfırdan sapmalar anizotropikliğin bir göstergesidir. HfZnO<sub>3</sub> bileşiği için hesaplanan  $A^U$  değeri 3,2'dir. Elde edilen bu sonuca göre HfZnO<sub>3</sub> bileşiği anizotropiktir. Çalışılan malzemenin anizotropikliğinin daha

anlaşılır olmasını sağlamak için ELATE yazılımı (Gaillac vd., 2016) ile görselleştirilerek Şekil 2.'de verilmiştir. Şekilde minimum değer yeşil, maksimum değer mavi renkte gösterilmiştir. Küresel/dairesel şekiller izotropik malzemeler içindir. Küresel/dairesellikten sapmalar anizotropikliği göstermektedir. Şekil 2.'den HfZnO<sub>3</sub> bileşiğinin anizotropik olduğu açıkça görülmektedir.



Şekil 2. HfZnO<sub>3</sub> bileşiğinin anizotropisinin 2D/3D gösterimi, a- Young modülü, b- shear modülü, c- Poisson oranı

Malzemenin erime sıcaklığı ile elastik sabitler arasında bir ilişki vardır. Bu nedenle elastik sabitlerinden ve Bulk modülünden erime sıcaklığı hesaplanabilir (Fine vd., 1984; Özer, 2018).

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

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

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

Bu eşitlikler kullanılarak hesaplanan erime sıcaklıkları sıra ile 2354, 2385 ve 2502 K'dir. Bunların ortalaması olan 2413 K değeri HfZnO<sub>3</sub> bileşiğinin erime sıcaklığı olarak alınabilir. HfZnO<sub>3</sub> bileşiğinin

erime sıcaklığı 1000 K'den büyük olduğu için yüksek sıcaklık uygulamalarında kullanılabilir.

Normal titreşim modunun en yüksek sıcaklığı olarak tanımlanan Debye sıcaklığı, özgül ısı, erime sıcaklığı ve elastik sabitler gibi birçok fiziksel özellikler ile ilişkili olup termal genişleme, termal iletkenlik ve ısı kapasitesi gibi çeşitli özellikler hakkında bilgi sağlayan önemli bir parametredir (Arıkan vd., 2020). Bu öneminden dolayı Debye sıcaklığı da hesaplanmıştır. Debye sıcaklığı takip eden eşitliklerden hesaplanabilir (Sarpkaya & Arıkan, 2022),

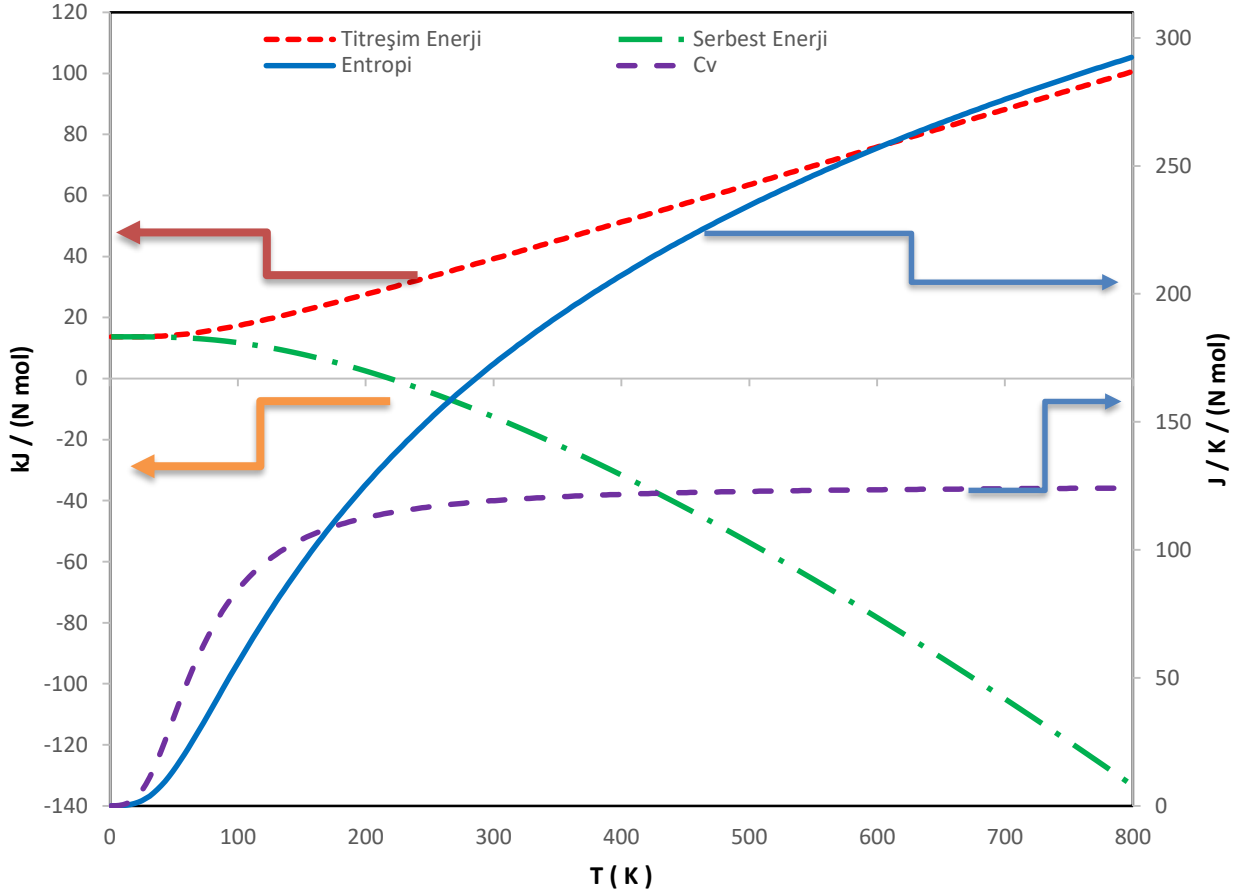
$$\theta_D = \frac{h}{k_B} \left( \frac{3}{4\pi V_a} \right)^{1/3} v_m \quad (12)$$

$$v_m = \left[ \left( \frac{2}{v_s^3} + \frac{1}{v_l^3} \right) / 3 \right]^{-1/3} \quad v_l = \sqrt{(B_x + 4G_x/3)/\rho}$$

$$v_s = \sqrt{G_x/\rho} \quad (13)$$

Eşitlik 13'te  $B$  ve  $G$  altında geçen  $x$  indisi; Voigt (V), Reus (R) ve Hill (H) yaklaşımlarından herhangi birini göstermektedir. Yukarıda verilen eşitlikler kullanılarak HfZnO<sub>3</sub> bileşiğinin Debye sıcaklığı

308,39K, ortalama ses hızı 2290,3 m/s olarak hesaplandı. 308,39K'den büyük sıcaklıklarda HfZnO<sub>3</sub> bileşiğinde yüksek salınım modları beklenir. Titreşim enerjisi, serbest enerjisi, entropi ve özgül ısı ( $C_v$ ) quasi-harmonik yaklaşımda Debye model kullanılarak QE yazılımı ile dağıtımı yapılan thermo\_pw scriptinde 0-800 K sıcaklığında incelenerek Şekil 3.'de verilmiştir.



**Şekil 3.** HfZnO<sub>3</sub> bileşiğinin hesaplanan verileri ile elde edilen Titreşim enerjisi, Titreşim serbest enerjisi, Entropisi ve Özgül ısı kapasitesi ( $C_v$ )

Titreşim (iç) enerjisi malzemeyi oluşturan atom veya moleküllerin etkileşiminden üretilen enerjiyi ifade etmektedir. Diğer bir ifade ile sistem içerisinde gömülü olan ve termodinamik bakımından sistemi inşa etmek veya üretmek için gerekli olan enerjidir. İç enerji, parçacıkların dönme gibi çeşitli hareket türlerinin kinetik enerjisi, elektronik enerji ve parçacıklar arasındaki etkileşim enerjilerinin toplamıdır. İç enerjinin sıcaklık ile doğrusal olarak arttığı görülmektedir. Şekilden serbest enerjinin

artan sıcaklık ile daha negatifleştiği görülmektedir. Negatif serbest enerji değerine sahip malzemenin daha iyi termal tepkimeye gireceği ve yüksek sıcaklıklarda daha iyi termodinamik kararlılık sergileyeceği söylenebilir. Artan sıcaklık, bir sistemdeki kinetik enerjiyi ve atomik hareketi arttıracığından sıcaklık artışı entropiyi arttıracaktır. Bu bakımdan sıcaklığın bir fonksiyonu olarak verilen entropi eğrisinde, artan sıcaklıkta entropinin artması beklenen bir durumdur. Serbest enerji

entropik katkıdan elde edildiğinden, entropi serbest enerji ile de ilişkilendirilebilir. Dolayısı ile serbest enerji negatifleştikçe entropi artacaktır. Şekilden de görüldüğü gibi C<sub>v</sub> yaklaşık 150 K kadar lineer değişim daha sonrasında yüksek sıcaklıklar için Petit-Dulong sınır değerinde sabit kalmaktadır.

#### 4. Sonuç

Yapılan hesaplamalar sonucunda kübik perovskit HfZnO<sub>3</sub> bileşiğinin ortam koşullarında yapısal, mekanik ve termodinamik özellikler bakımından kararlılığı incelenmiştir. Mekanik ve termodinamik olarak kararlı olan HfZnO<sub>3</sub> bileşiği Cauchy basıncı, Pugh oranı (G/B) ve Poisson oranına göre sünek davranışa sahip olduğu görülmüştür. Hesaplanan Vicker sertliğine göre yumuşak bir malzemedir. Elde edilen evrensel anizotropi değerine göre HfZnO<sub>3</sub> bileşiğinin anizotropik olduğu görülmüş olup anizotropi iki ve üç boyutta incelenmiştir. 1000K üzeri erime sıcaklığına sahip olduğundan yüksek sıcaklık uygulamalarına aday bir malzemedir. Quasi-harmonik yaklaşımda 0-800 K sıcaklığında titreşim enerjisi, serbest enerjisi, entropi ve C<sub>v</sub> incelenmiştir. Sonuç olarak HfZnO<sub>3</sub> bileşiği için elde edilen verilerden, HfZnO<sub>3</sub> bileşiğinin endüstriyel amaçlar için kullanılabileceği görülmüştür.

#### 5. Kaynaklar

- Arikan, N., Dikici Yıldız, G., Yıldız, Y. G., İyigör, A., 2020. Electronic, Elastic, Vibrational and Thermodynamic Properties of HfIrX (X = As, Sb and Bi) Compounds: Insights from DFT-Based Computer Simulation. *Journal of Electronic Materials*, **49**, 3052–3062. <https://doi.org/10.1007/s11664-020-08029-6>
- Beckstein, O., Klepeis, J. E., Hart, G. L. W., & Pankratov, O., 2001. First-principles elastic constants and electronic structure of  $\alpha$ -Pt<sub>2</sub>Si and PtSi. *Physical Review B*, **63**, 134112. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.63.134112>
- Erkişi, A., Gökoğlu, G., Sürücü, G., Ellialtıoğlu, R., Yıldırım, E. K., 2016. First-principles investigation of LaGaO<sub>3</sub> and LaInO<sub>3</sub> lanthanum perovskite oxides. *Philosophical Magazine*, **96**, 2040–2058.

<https://doi.org/10.1080/14786435.2016.1189100>

- Fine, M. E., Brown, L. D., Marcus, H. L., 1984. Elastic constants versus melting temperature in metals. *Scripta Metallurgica*, **18**, 951–956. [https://doi.org/10.1016/0036-9748\(84\)90267-9](https://doi.org/10.1016/0036-9748(84)90267-9)
- Fischer, T. H., Almlöf, J., 1992. General methods for geometry and wave function optimization. *The Journal of Physical Chemistry*, **96**, 9768–9774. <https://doi.org/10.1021/j100203a036>
- Gaillac, R., Pullumbi, P., Coudert, F.-X., 2016. ELATE: an open-source online application for analysis and visualization of elastic tensors. *Journal of Physics: Condensed Matter*, **28**, 275201. <https://doi.org/10.1088/0953-8984/28/27/275201>
- Giannozzi, P., Baroni, S., Bonini, N., Calandra, M., Car, R., Cavazzoni, C., Ceresoli, D., Chiarotti, G. L., Cococcioni, M., Dabo, I., Dal Corso, A., De Gironcoli, S., Fabris, S., Fratesi, G., Gebauer, R., Gerstmann, U., Gougoussis, C., Kokalj, A., Lazzeri, M., ... Wentzcovitch, R. M., 2009. QUANTUM ESPRESSO: A modular and open-source software project for quantum simulations of materials. *Journal of Physics Condensed Matter*, **21**. <https://doi.org/10.1088/0953-8984/21/39/395502>
- Jain, A., Ong, S. P., Hautier, G., Chen, W., Richards, W. D., Dacek, S., Cholia, S., Gunter, D., Skinner, D., Ceder, G., Persson, K. A., 2013. Commentary: The Materials Project: A materials genome approach to accelerating materials innovation. *APL Materials*, **1**, 011002. <https://doi.org/10.1063/1.4812323>
- Kirklin, S., Saal, J. E., Meredig, B., Thompson, A., Doak, J. W., Aykol, M., Rühl, S., Wolverton, C., 2015. The Open Quantum Materials Database (OQMD): assessing the accuracy of DFT formation energies. *npj Computational Materials*, **1**, 15010. <https://doi.org/10.1038/npjcompumats.2015.10>

- Koriba, I., Lagoun, B., Cheriet, A., Guibadj, A., Belhadj, S., Ameer, A., Aissani, L., Alhussein, A., 2022. Phase stability, mechanical and optoelectronic properties of lanthanum chromite-based perovskite oxide. *Applied Physics A*, **128**, 82. <https://doi.org/10.1007/s00339-021-05150-z>
- Methfessel, M., Paxton, A. T., 1989. High-precision sampling for Brillouin-zone integration in metals. *Physical Review B*, **40**, 3616. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.40.3616>
- Özer, T., 2018. *Determination of melting temperature* (H. Demirkaya, M. Canbulat, A. Pular, M. Eraslan, B. Direkci (ed.); ss. 87–99). 4 th International Congress on Multidisciplinary Studies.
- Özer, T., 2019. Study of first principles on anisotropy and elastic constants of  $Y_3Al_2$  compound. *Chinese Journal of Physics*, **61**, 180–189. <https://doi.org/10.1016/j.cjph.2019.08.011>
- Özer, T., 2020. Study of first principles on anisotropy and elastic constants of  $YAl_3$  compound. *Canadian Journal of Physics*, **98**(4), 357–363. <https://doi.org/10.1139/cjp-2018-0448>
- Özer, T., 2021. Investigation of pressure dependence of mechanical properties of SbSI compound in paraelectric phase by Ab Initio method. *Computational Condensed Matter*, **28**, e00568. <https://doi.org/10.1016/J.COCOM.2021.E00568>
- Pugh, S. F., 1954. 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*, **45**, 823–843. <https://doi.org/10.1080/14786440808520496>
- Ranganathan, S. I., Ostoja-Starzewski, M., 2008. Universal Elastic Anisotropy Index. *APS*, **101**. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.101.055504>
- Sarpkaya, A. M., Arıkan, N., 2022. Kübik perovskit  $LaZnO_3$  bileşiminin yapısal, elektronik, elastik ve termodinamik özelliklerini araştırmak için ab initio hesaplamaları. *Osmaniye Korkut Ata Üniversitesi Fen Edebiyat Fakültesi Dergisi*. <https://doi.org/10.54990/okufed.1215703>
- Surucu, G., Erkisi, A., 2018. 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. *Journal of Boron*. <https://doi.org/10.30728/boron.333855>
- Tian, Y., Xu, B., Zhao, Z., 2012. Microscopic theory of hardness and design of novel superhard crystals. *International Journal of Refractory Metals and Hard Materials*, **33**, 93–106. <https://doi.org/10.1016/J.IJRMHM.2012.02.021>
- Yousef, E. S., El-Adawy, A., El-KheshKhany, N., 2006. Effect of rare earth ( $Pr_2O_3$ ,  $Nd_2O_3$ ,  $Sm_2O_3$ ,  $Eu_2O_3$ ,  $Gd_2O_3$  and  $Er_2O_3$ ) on the acoustic properties of glass belonging to bismuth–borate system. *Solid State Communications*, **139**, 108–113. <https://doi.org/10.1016/J.SSC.2006.05.022>
- Zhu, X., Zhou, J., Zhu, J., Liu, Z., Li, Y., Al-Kassab, T., 2014. Structural Characterization and Optical Properties of Perovskite  $ZnZrO_3$  Nanoparticles. *Journal of the American Ceramic Society*, **97**, 1987–1992. <https://doi.org/10.1111/jace.12883>