

Sc₃AlN ve Sc₃InN bileşiklerinin yapısal ve mekanik özelliklerinin Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi ile incelenmesi

An investigation of structural and mechanical properties of Sc₃AlN and Sc₃InN compounds with Density Functional Theory

Belgin KOÇAK*¹ , Yasemin ÖZTEKİN ÇİFTÇİ² 

¹Ostim Teknik Üniversitesi, Meslek Yüksek Okulu, Elektronik ve Otomasyon Bölümü, 06374, Ankara

²Gazi Üniversitesi, Fen Fakültesi, Fizik Bölümü, 06500, Ankara

• Geliş tarihi / Received: 15.04.2025

• Kabul tarihi / Accepted: 01.12.2025

Öz

Sc₃AlN ve Sc₃InN anti-perovskit yapıdaki bileşikler olup, bu gruptaki bileşikler teknolojik uygulamalar için önemli malzemelerdir. Bu çalışmada, teorik olarak Sc₃AlN ve Sc₃InN bileşiklerinin yapısal ve mekanik özellikleri 0-80 GPa basınç aralıklarında incelenmiştir. Hesaplamalar, yoğunluk fonksiyonel teorisi (DFT) çerçevesinde PBEsol tipi genelleştirilmiş gradyent yaklaşımı (GGA) kullanılarak VASP kodu aracılığıyla gerçekleştirilmiştir. Bileşiklerin elastik sabitleri, sünek/kırılgan karakterleri, işlenebilirlik indeksi, bulk modülü, kayma modülü, Young modülü, Cauchy basıncı, Poisson oranı ve sertlik gibi önemli mekanik özellikleri hesaplanarak, basınç ile değişimleri incelenmiştir. Ayrıca bazı mekanik özelliklerin anizotropik yapısı açıklanmıştır. Artan basınçla beraber incelenen bileşiklerin örgü sabiti değerlerinin azaldığı, elastik sabitleri değerlerinin arttığı elde edilmiştir. Sc₃AlN ve Sc₃InN bileşiklerinin 0-80 GPa arasında mekanik olarak kararlı olduğu bulunmuştur.

Anahtar kelimeler: Mekanik özellikler, Yapısal özellikler, Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi

Abstract

Sc₃AlN and Sc₃InN are anti-perovskite compounds, and compounds in this group are important materials for technological applications. In this study, the structural and mechanical properties of Sc₃AlN and Sc₃InN compounds were theoretically investigated in the pressure ranges of 0-80 GPa. The calculations were performed with the VASP code using the PBEsol-type generalized gradient approximation (GGA) within the framework of density functional theory (DFT). Important mechanical properties such as elastic constants, ductile/brittle characters, machinability index, bulk modulus, shear modulus, Young's modulus, Cauchy pressure, Poisson ratio and hardness were calculated and their changes with pressure were examined. Additionally, the anisotropic nature of some mechanical properties was explained. It was obtained that the lattice constant values of these compounds decreased with increasing pressure, while the elastic constants values increased. Sc₃AlN and Sc₃InN compounds were found to be mechanically stable between 0-80 GPa.

Keywords: Mechanical properties, Structural properties, Density functional theory

1. Giriş

1. Introduction

ABX₃ genel formülüne sahip perovskit bileşikler, keşfedildiklerinden beri çok çeşitli endüstriyel uygulamalarda büyük ilgi gören malzemeler olmuştur. Örneğin, ABO₃ oksit perovskit bileşikler, piezo-elektrik, ferro-elektrik ve termo-elektrik malzemeler olarak kullanılmaktadır (Höglund vd., 2008; Nuraje & Su, 2013; Zheng vd., 2018; Wu & Gao, 2018; Hao vd., 2019; Tang vd., 2022). Ayrıca oksijen atomunun yerine halojen atomları yerleştirilerek oluşturulan perovskit bileşikler daha düşük enerji bant aralığına sahip olmaları nedeniyle foto-katalitik, ışık yayan diyotlar, foto-detektörler, lazerler ve enerji depolama uygulamalarında kullanılabilmektedir (Tang vd., 2022; Nobin vd., 2023; Zhang vd., 2024).

Enerji krizinin yaşandığı günümüzde perovskit bileşikler, dünya çapında sürdürülebilirlik çözümleri için önerilen en yaygın ve ucuz malzeme grubudur. Son yıllarda perovskit malzemelerin fotovoltaiik uygulamalarda

*Belgin KOÇAK; belgin.kocak@ostimteknik.edu.tr

kullanılması yaygınlaşmıştır. Ayrıca sahip oldukları termoelektrik özellikleri nedeniyle perovskit malzemeler sera gazı salınımını indirmeye yarayacak sistemlerde kullanılabilme potansiyeline sahiptirler (Haddadi vd., 2012; Rani, 2021; Tang vd., 2022; Nobin vd., 2023). Anti-perovskit veya ters perovskit olarak adlandırılan bileşikler, yüksek manyetik direnci, neredeyse sıfır sıcaklık öz direnç katsayısına sahip olmaları gibi çok yönlü fiziksel ve kimyasal özelliklerinden dolayı oldukça ilgi çekmektedirler. (Magnuson vd. 2008; Mattesini vd., 2009; Mikhaylushkin vd., 2009; Haddadi vd., 2012; Hossain vd., 2013; Rani, 2021).

Perovskit nitrürler, genellikle anti-perovskit (veya ters perovskit) yapıda kristalleşir. Bu malzeme grubu, anti-perovskit bileşiklerle aynı teknolojik ve endüstriyel öneme sahiptir. Ancak bu malzemelerin birçok fiziksel özelliği henüz incelenmemiştir. Anti-perovskit nitrürler, iletken, yalıtkan veya yarı iletken olarak işlev görmelerini sağlamak için değiştirilebilen elektronik özelliklere sahiptir. Bu da onları çok geniş teknolojilerde kullanılabilir hale getirmektedir (Höglund vd., 2008; Mattesini vd., 2009; Kanchana & Ram, 2012). Bu çalışmada anti-perovskit yapıdaki Sc_3AlN ve Sc_3InN bileşiklerinin yapısal ve mekanik özellikleri incelenmiştir. Bu bileşikler önemli mekanik özelliklere sahiptir. R_3NIn ($\text{R}=\text{nadir toprak elementleri}$) bileşiklerinin kristal yapısı ve fiziksel özellikleri Kirchner vd. (2003) tarafından deneysel olarak çalışılmıştır. Höglund vd. (2008), Sc_3AlN bileşiğini perovskit yapıda sentezleyerek, örgü parametresini 4.40 Å değerinde bulmuştur. Magnuson vd. (2008) tarafından Sc_3AlN bileşiğinin elektronik yapısı incelenmiştir. Haddadi vd. (2012), Sc_3AC ($\text{A}=\text{Al, Ga, In, Tl}$) bileşiklerinin yapısal elektronik, elastik ve örgü dinamiği özelliklerini yoğunluk fonksiyonel teorisi ile CASTEP programı kullanarak hesaplamıştır. Kanchana ve Ram (2012) ilk-prensip yaklaşımıyla üçlü Skandiyum tabanlı anti-perovskit Sc_3AC ($\text{A}=\text{Al, Ga, In, Tl}$) ve Sc_3BN ($\text{B}=\text{Al, In}$) bileşiklerinin elektronik yapısı ve elastik özelliklerini WIEN2k programı kullanılarak incelemiştir. Çalışmalarında, Sc_3AlN ve Sc_3InN bileşiklerinin kırılma yapıda ve anizotropiye sahip olduğu öngörülmüştür. Hossain vd. (2013) tarafından Sc_3InX ($\text{X}=\text{B, C, N}$) bileşiklerinin mekanik, termodinamik ve optik özellikleri yoğunluk fonksiyonel teorisi kullanılarak incelenmiştir. Mikhaylushkin vd. (2009), Sc_3EN ($\text{E}=\text{B, Al, Ga, In}$) bileşiklerinin mekanik ve termodinamik kararlılığını ilk-prensip yöntemi kullanarak araştırmıştır. Bağcı vd. (2010) ab-initio yöntem kullanarak Sc_3AlN bileşiğinin yapısal, elastik, elektronik özellikleri ve fonon spektrumlarını hesaplamış ve perovskit yapıda Sc_3AlN bileşiğinin dinamik olarak kararlı olduğunu bulmuşlardır. Ghule vd. (2020) çalışmalarında Sc_3MO ($\text{M}=\text{Al, Ga, In, Tl}$) ve Sc_3MZ ($\text{Z}=\text{B, C, N, O}$) bileşiklerinin yapısal optimizasyonu ve elektronik özelliklerini ilk-prensipler yöntemiyle araştırmıştır.

Bu çalışmada, herhangi bir deneysel parametre kullanmadan teorik olarak hesaplama yapabilen ilk-prensipler yöntemi kullanılarak kübik yapıdaki Sc_3AlN ve Sc_3InN bileşiklerinin fiziksel özelliklerinin basınca bağlı değişimi araştırılmıştır. Makalenin ikinci bölümünde hesaplama yöntemi hakkında ayrıntılara yer verilmiştir. Yapısal ve elastik özelliklerin hesaplamalarına ilişkin sonuçlar üçüncü bölümde sunulmuştur. Son kısımda ise elde edilen sonuçlar özetlenmiştir.

2. Hesaplama yöntemi

2. Calculation method

Bu çalışmada yapılan tüm hesaplamalar yoğunluk fonksiyonel teorisini kullanan VASP kodu (Kresse & Hafner, 1993; Kresse & Furthmüller, 1996a; 1996b) ile gerçekleştirilmiştir. Bir bileşiğin geometrik optimizasyonu doğru hesaplamak ondan elde edilecek diğer özellikleri etkileyeceğinden oldukça önemlidir. Bu nedenle yaptığımız hesaplamalarda katılarda oldukça iyi taban durum özellikleri sonucunu veren PBEsol (Perdew vd., 2008) yaklaşımı kullanılmıştır. Elektron ve iyon etkileşimi PAW metodu (Blöchl, 1994; Kresse & Joubert, 1999) yardımıyla hesaplanmıştır. Yapılan optimizasyon hesaplamalarında düzlem dalga temel setinin kesme enerjisi 650 eV ve toplam yakınsama enerjisi olarak 10^{-6} eV değerinin yeterli olduğu belirlenmiştir. Brillouin bölgesi entegrasyonu, Monkhorst-Pack yöntemi (Monkhorst & Pack, 1976) ile $14 \times 14 \times 14$ k-noktası gridler kullanılarak hesaplanmıştır. Yapısal optimizasyonda tüm atomik konumlar ve örgü parametreleri tamamen serbest bırakılmıştır.

3. Bulgular ve tartışma

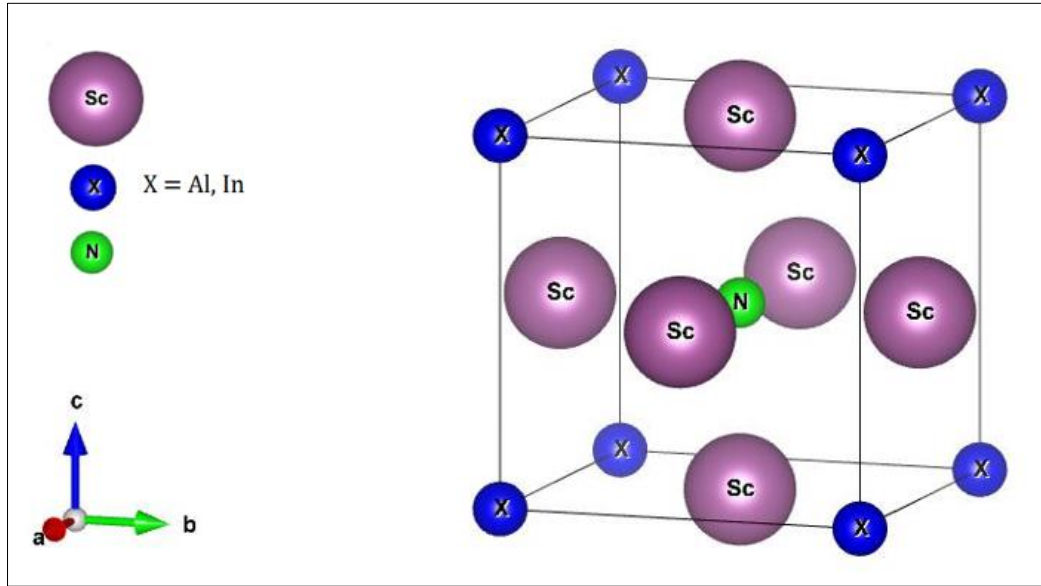
3. Results and discussion

3.1. Yapısal özellikler

3.1. Structural properties

Sc_3AlN ve Sc_3InN anti-perovskit bileşikleri $Pm\bar{3}m$ (No:221) uzay grubunda kristalleşmektedir. Hesaplamalarda Wyckoff konumları Sc: 3c (0.0, 0.5, 0.5), X ($\text{X}=\text{Al, In}$): 1a (0.0,0.0,0.0) ve N: 1b (0.5, 0.5,

0.5) yerleştirilmiştir. VESTA programı (Momma & Izumi, 2011) kullanılarak çizilen bileşiklere ait kristal yapısı Şekil 1 ile sunulmuştur. 10 GPa aralıklarla hesaplanan 0-80 GPa basınç aralıklarındaki denge konumundaki örgü sabitleri mevcut teorik ve deneysel çalışmalarla birlikte Tablo 1 ile verilmiştir. PBEsol yaklaşımı kullanılarak elde edilen sonuçlar literatürdeki çalışmalarla oldukça tutarlıdır. Ayrıca artan basınçla beraber örgü sabiti değerlerinin azaldığı elde edilmiştir.



Şekil 1. Sc_3AlN ve Sc_3InN bileşiklerinin kristal yapısı.

Figure 1. Crystal structure of Sc_3AlN and Sc_3InN compounds.

Tablo 1. PBEsol yaklaşımı altında Sc_3AlN ve Sc_3InN bileşiklerinin farklı basınç değerlerinde örgü sabiti değerleri.

Table 1. Lattice constant values of Sc_3AlN and Sc_3InN compounds at different pressure under the PBEsol approximation.

Bileşik		a (Å)								
		Basınç (GPa)								
		0	10	20	30	40	50	60	70	80
Sc_3AlN	Bu çalışma (PBEsol)	4.367	4.267	4.189	4.126	4.072	4.025	3.983	3.945	3.911
	Deneysel (Höglund vd., 2008)	4.40								
	Teorik (Mattesini vd., 2009)	4.374								
	Teorik (Bağcı vd., 2010)	4.416								
	Teorik (Kanchana & Ram, 2012)	4.42								
	Teorik (Ghule vd., 2020)	4.419								
Sc_3InN	Bu çalışma (PBEsol)	4.415	4.311	4.232	4.167	4.112	4.065	4.023	3.985	3.950
	Deneysel (Kirchner vd., 2003)	4.448								
	Teorik (Mattesini vd., 2009)	4.411								
	Teorik (Kanchana & Ram, 2012)	4.47								
	Teorik (Hossain vd., 2013)	4.47								
	Teorik (Ghule vd., 2020)	4.474								

3.2. Mekanik özellikler

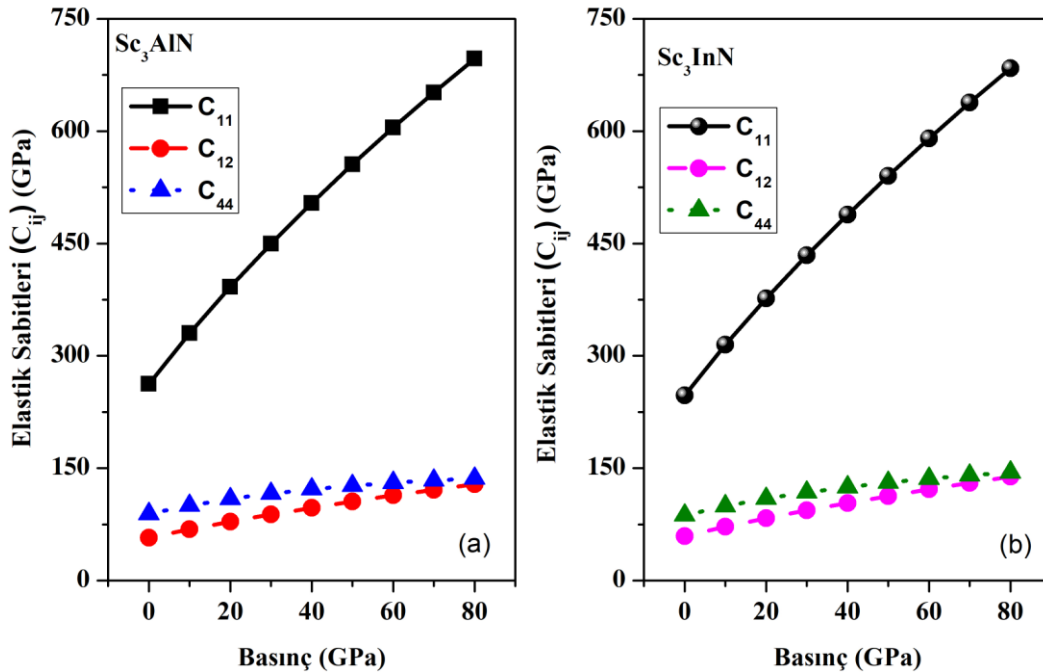
3.2. Mechanical properties

3.2.1. Elastik sabitler (C_{ij})

3.2.1. Elastic constants (C_{ij})

Malzemelerin mekanik özelliklerinin incelenmesi, sertlik, mekanik kararlılık, süneklik/kırılganlık ve elastik anizotropi gibi önemli pek çok fiziksel özellikleri açıklamaya ve çeşitli sektördeki olası uygulamalarını tahmin etmeye yardımcı olur (Saddique vd., 2022). Bu çalışmada, incelenen bileşiklerin 10 GPa aralıklarla 0-80 GPa basınç aralığındaki mekanik özellikleri ilk-prensip yaklaşımı ile zor-zorlanma yöntemi (Le Page & Saxe, 2002) kullanılarak hesaplanmıştır. Sc_3AlN ve Sc_3InN bileşikleri kübik yapıda oldukları için C_{11} , C_{12} ve C_{44} olmak üzere üç tane bağımsız elastik sabiti sahiptir. C_{11} , (100) düzleminde $\langle 100 \rangle$ yönünde uygulanan eksenel gerilimin neden olduğu uzunluğundaki değişime karşı malzemenin direncini tanımlar. C_{12} , (100) düzleminde $\langle 010 \rangle$ yönünde eksenel (boyuna) gerilimden kaynaklanan deformasyona karşı malzemenin direncini gösterir. C_{44} elastik sabiti ise malzemenin (010) düzleminde $\langle 001 \rangle$ yönünde uygulanan teğetsel kesme geriliminden kaynaklanan deformasyona karşı malzemenin direncini ifade eder (Varshney&Shriya, 2013; Khanzadeh & Alahyarizadeh, 2021).

PBEsol yaklaşımı kullanılarak hesaplanan sıfır basınçtaki elastik sabitleri değerleri Tablo 2’de sunulmuştur. Bileşiklerin basınca bağlı olarak elastik sabitleri değişim eğrileri Şekil 2’de gösterilmiştir. Bir bileşiğin mekanik olarak kararlılığını belirten Born kararlılık kriterleri kübik yapı için (Born & Huang, 1996; Mouhat & Coudert, 2014); $C_{11} + 2C_{12} > 0$, $C_{11} > 0$, $C_{44} > 0$, $(C_{11} - C_{12}) > 0$, $C_{11} < B < C_{12}$ şeklindedir. Ayrıca kübik kristallerin izotropik sıkıştırma altında üç bağımsız kararlılık durumu (Wang vd., 1993; Khanzadeh & Alahyarizadeh, 2021; Shah, 2023): $(C_{11} + 2C_{12} + P) > 0$, $(C_{44} - P) > 0$, $(C_{11} - C_{12} - 2P) > 0$ ile ifade edilmektedir. İncelenen bileşiklerin elastik sabit değerleri 0-80 GPa arasında mekanik kararlılık koşullarını sağladıkları için bileşikler $Pm\bar{3}m$ yapıda mekanik olarak kararlıdır. Şekil 2’de verilen grafiğe göre artan basınçla birlikte üç elastik sabiti değeri de basınçla beraber artmaktadır. C_{11} ’deki artış C_{12} ve C_{44} elastik sabitlerine göre daha baskındır.



Şekil 2. a) Sc_3AlN ve b) Sc_3InN bileşikleri için elastik sabitlerinin basınçla değişimi eğrileri.

Figure 2. Variation of elastic constants with pressure for a) Sc_3AlN and b) Sc_3InN compounds.

0 GPa’da elde edilen tüm sonuçlar mevcut çalışmalarla uyumludur. Ancak incelenen bileşiklerin basınç etkisine yönelik çalışmaların literatürde olmaması nedeniyle, bu çalışmada elde edilen basınç etkisi verileri doğrudan literatürle kıyaslanamamıştır. Buna karşın literatürde aynı grupta yer alan Sc_3AC (A = Al, Ga, In and Tl) bileşikleri 0–40 GPa basınç değerleri arasında incelenmiştir. Elde edilen sonuçlar, malzemelerin 40 GPa’ya

kadar mekanik olarak kararlı ve kırılğan olduğunu göstermektedir. Ayrıca basınç artmasıyla beraber elastik sabitleri değerlerinin arttığı bulunmuştur (Haddadi vd., 2012). Bu sonuçlar Sc_3AlN ve Sc_3InN bileşikleri için elde edilen sonuçlarla örtüşmektedir.

Tablo 2. PBESol yaklaşımı altında Sc_3AlN ve Sc_3InN bileşiklerinin 0 GPa’da elastik sabitleri (C_{ij} , GPa).

Table 2. Elastic constants (C_{ij} , GPa) of Sc_3AlN and Sc_3InN compounds at 0 GPa under PBESol approximation.

Elastik Sabitler (C_{ij})	Sc_3AlN	Sc_3InN
C_{11} (GPa)	262.328	246.993
	234.32 (Mattesini vd., 2009)	238.57 (Mattesini vd., 2009)
	223.3 (Bağcı vd., 2010)	210 (Kanchana & Ram, 2012)
	241 (Kanchana & Ram, 2012)	208.7 (Hossain vd., 2013)
C_{12} (GPa)	57.184	59.558
	54.21 (Mattesini vd., 2009)	54.28 (Mattesini vd., 2009)
	48.3 (Bağcı vd., 2010)	54 (Kanchana & Ram, 2012)
	52 (Kanchana & Ram, 2012)	52.8 (Hossain vd., 2013)
C_{44} (GPa)	88.991	87.109
	87.76 (Mattesini vd., 2009)	90.76 (Mattesini vd., 2009)
	85.5 (Bağcı vd., 2010)	80 (Kanchana & Ram, 2012)
	76 (Kanchana & Ram, 2012)	83.7 (Hossain vd., 2013)

3.2.2. Elastik sabitlerine bağlı mekanik özellikler

3.2.2. Mechanical properties depending on elastic constants

Mekanik özellikler, Voigt (üst) (1928) ve Reuss (alt) (1929) sınırlarının geometrik ortalamasını ifade eden Hill (1952) yaklaşımı kullanılarak elastik sabitleri yardımıyla elde edilmiştir. Hesaplamalarda kullanılan denklemler aşağıda yer almaktadır (Voigt, 1928; Reuss, 1929; Hill, 1952; Varshney & Shriya, 2013; Khanzadeh & Alahyarizadeh, 2021; Shah, 2023):

$$B_V = B_R = \frac{C_{11} + 2C_{12}}{3} ; \quad B = \frac{B_V + B_R}{2} \quad (1)$$

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

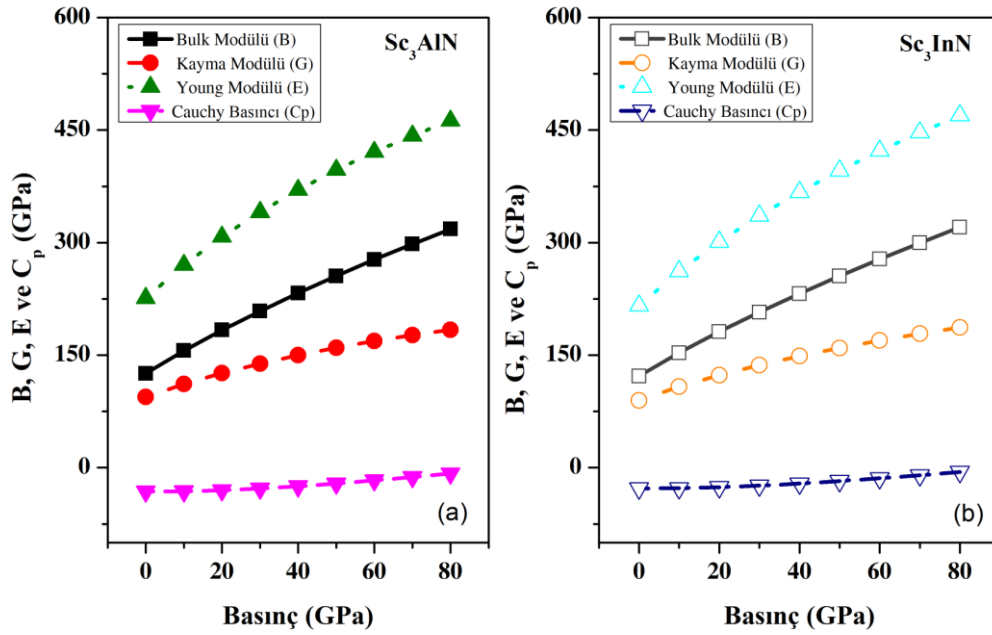
$$E = \frac{9BG}{3B + G} \quad (3)$$

Bulk modülü (B), bir malzemenin hidrostatik basınca maruz kaldığında plastik deformasyona karşı direncini, Young modülü (E) çekme yükü altında gerilim-gerinim oranı, kayma modülü (G) ise kayma gerilimine maruz kaldığında direnci ifade eder. Çok yüksek Young modülü değerine sahip bir malzemenin kabaca sert olabileceği ifade edilebilir (Varshney & Shriya, 2013; Shah, 2023). İncelediğimiz iki bileşiğin 0 GPa basınçtaki hesaplanan mekanik özellikleri Tablo 3 ile verilmiştir. Basınca bağlı olarak değişim eğrileri ise Şekil 3 ile gösterilmiştir. Artan basınçla beraber B, E ve G değerleri artmaktadır. Her iki bileşik içinde elastik modülleri büyüklükleri E (Young modülü) > B (bulk modülü) > G (kayma modülü) şeklindedir. Young modülünün değerleri basınç arttığında yükseldiği için malzemelerin sertliğini önemli ölçüde etkilemektedir. Sc_3AlN bileşiği için elde edilen elastik modülü değerleri Sc_3InN bileşiğinden daha büyük bulunmuştur.

Cauchy basıncı (C_p), bir bileşikteki atomik bağın açılma özelliğini belirler ve kübik kristal yapı için C_{12} ve C_{44} arasındaki fark olarak tanımlanır. Katı kristalin karakterizasyonu için önemli bir mekanik parametre olan Cauchy basıncı, aynı zamanda bir malzemenin kırılğan ve sünek yapısını belirlemeye yarayan bir ifadedir. Pozitif Cauchy basıncı ($C_p > 0$), bir malzemenin iyonik bağını ve süneklik karakterini gösterirken, negatif Cauchy basıncı ($C_p < 0$) ise kovalent bağ ve kırılğanlığı gösterir (Pettifor, 1992; Ahmed vd. 2023; Shah, 2023). İncelediğimiz bileşiklerin basınca bağlı Cauchy basıncı değişim eğrisi Şekil 3’te elastik modüllerinin basınca bağlı değişim grafiklerinin yanında gösterilmiştir. Şekil 3’e göre, 0-80 GPa basınç aralığında Sc_3AlN ve Sc_3InN bileşikleri negatif Cauchy basıncı değerine sahip oldukları için kırılğan malzeme olarak sınıflandırılabilirler.

Tablo 3. PBEsol yaklaşımı altında Sc_3AlN ve Sc_3InN bileşiklerinin 0 GPa’da mekanik özellikleri.**Table 3.** Mechanical properties of Sc_3AlN and Sc_3InN compounds at 0 GPa under the PBEsol approximation.

Bileşik	Referans	B (GPa)	E (GPa)	G (GPa)	ν	C_p (GPa)	B/G	μ_M	H_{makro} (GPa)	H_v (GPa)	H_{mikro} (GPa)
Sc_3AlN	Bu çalışma	125.57	226.06	94.20	0.200	-31.8	1.33	1.41	17.41	16.58	18.84
	Teorik (Mattesini vd., 2009)	114.25	211.33	88.67	0.192						
	Teorik (Bağcı vd., 2010)	106.6									
	Teorik (Kanchana & Ram, 2012)	114.76	201	83.02	0.21	-24.37					
	Teorik (Ghule vd., 2020)	108.7									
Sc_3InN	Bu çalışma	122.04	216.13	89.69	0.205	-27.55	1.36	1.40	16.36	15.64	17.65
	Teorik (Mattesini vd., 2009)	115.71	216.88	91.311	0.188						
	Teorik (Kanchana & Ram, 2012)	106.11	193	80.39	0.20	-27.94					
	Teorik (Hossain vd., 2013)	104.7	193.9	81.4	0.192						
	Teorik (Ghule vd., 2020)	106.0									

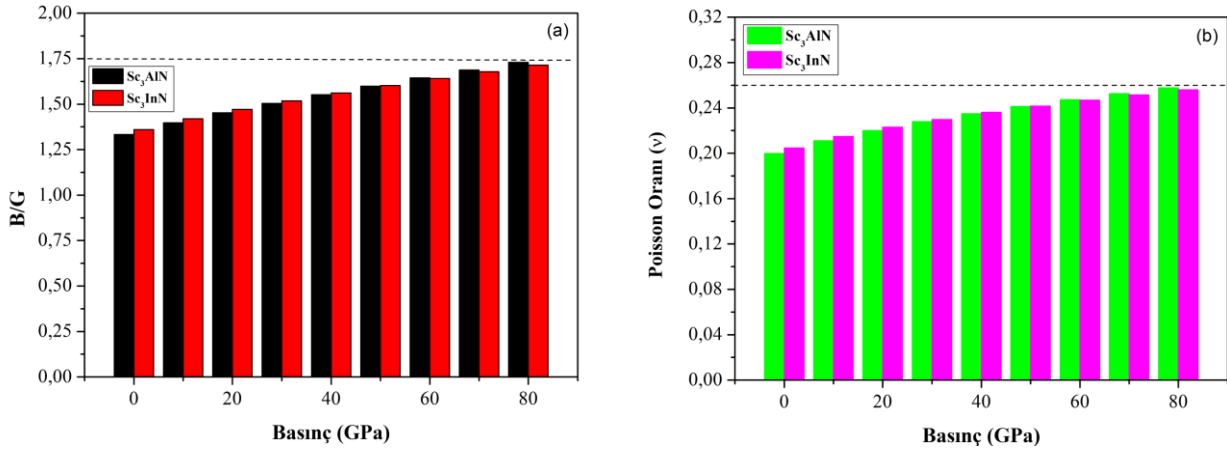
**Şekil 3.** Mekanik özelliklerin basınçla bağlı değişimi a) Sc_3AlN , b) Sc_3InN **Figure 3.** Pressure dependence of the mechanical properties of a) Sc_3AlN , b) Sc_3InN

Pugh oranı (B/G), bulk modülünün kayma modülüne oranıdır. B/G oranının basınçla değişimi grafiği Şekil 4 (a) ile verilmiştir. Sc_3AlN bileşiği için 0 GPa basınçta B/G oranı 1.33 (80 GPa basınçta 1.73), Sc_3InN bileşiği için 1.36 (80 GPa basınçta 1.715) değerinde hesaplanmıştır. Eğer B/G oranı 1.75 değerinden büyükse malzeme sünek, aksi takdirde kırılmalan malzeme olarak sınıflandırılmaktadır (Pugh, 1954; Ahmed vd. 2023). 0-80 GPa basınç aralığında Sc_3AlN ve Sc_3InN bileşikleri için hesaplanan B/G oranı değerleri 1.75 değerinden küçük olduğu için bu bileşikler kırılmalan özellik sergilemektedir. Basınç artışı ile incelenen her iki bileşiğinde B/G oranı değeri artmaktadır.

Poisson oranı (ν) bir malzemenin bağ yapısı ve sünek/kırılmalan özelliklerini ifade etmek için kullanılmaktadır. Poisson oranı,

$$\nu = \frac{3B-2G}{6B+2G} \quad (4)$$

denklemleri kullanılarak hesaplanmıştır. Poisson oran değeri için $\nu = 0.26$ değeri belirleyici bir değerdir. Eğer Poisson oranının değeri 0.26 değerinden büyükse malzeme sünek, 0.26 değerinden küçük ise kırılkan özellik sergilemektedir (Nobin vd., 2023; Shah vd., 2023). Poisson oranının basınçla değişimi grafiği Şekil 4 (b) ile verilmiştir. 0-80 GPa basınç aralıklarında Poisson oranı değerleri 0.26 değerinin altında olduğu için Sc_3AlN ve Sc_3InN bileşikler kırılkan özellik göstermektedir. Ayrıca artan basınçla beraber Poisson oranı değeri her iki bileşik için de artmaktadır. Malzemelerin elastik özelliklerinden kırılkan mı yoksa sünek mi davranış sergilediğini tahmin etmek için Cauchy basıncı (C_p), Pugh oranı (B/G) ve Poisson oranı üç önemli kriterdir. Bu üç kritere göre, Sc_3AlN ve Sc_3InN bileşikler 0-80 GPa basınç aralığında kırılkan özellik sergilemektedir.



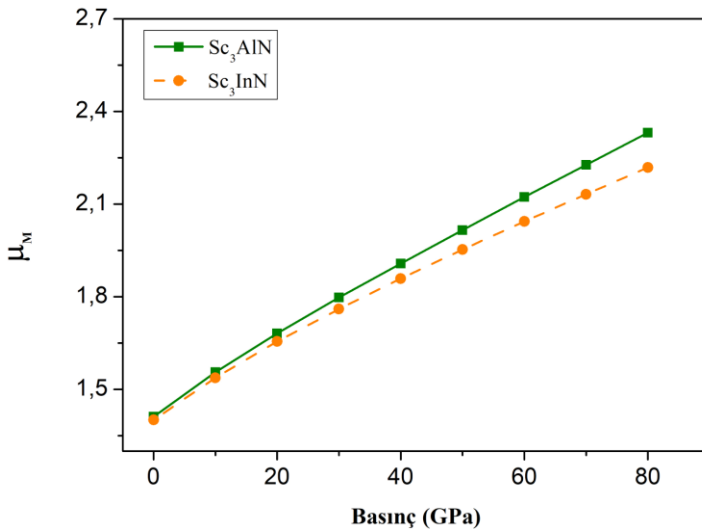
Şekil 4. Sc_3AlN ve Sc_3InN bileşikler için a) B/G oranının basınçla değişimi, b) Poisson oranının basınçla değişimi.

Figure 4. For Sc_3AlN and Sc_3InN compounds, a) the variation of B/G ratio with pressure, b) the variation of Poisson's ratio with pressure.

İleriye dönük mühendislik uygulamaları için çok önemli bir performans parametresi olan işlenebilirlik indeksi, bir katının istenilen şekle getirilme kolaylığını veya zorluğunu gösterir. Bir malzemenin işlenebilirlik indeksi (μ_M) şu şekilde tanımlanabilir:

$$\mu_M = \frac{B}{C_{44}} \quad (5)$$

İşlenebilirlik indeksi C_{44} elastik sabitine oldukça bağlıdır. Yüksek B/C_{44} değeri, bir malzemenin az sürtünmeye ve daha yüksek plastik gerilmeye sahip olduğu anlamına gelir. (Mitro vd., 2021; Parvin & Naqib, 2021; Nobin vd., 2023). İncelenen bileşikler için 0 GPa basınçtaki hesaplanan işlenebilirlik indeksi değerleri Tablo 3'te, basınca bağlı değişim eğrileri Şekil 5'te verilmiştir. Sc_3AlN ve Sc_3InN bileşiklerinin işlenebilirlik indeksi değerleri artan basınçla beraber doğrusal olarak artmaktadır.



Şekil 5. Sc_3AlN ve Sc_3InN bileşikler için işlenebilirlik indeksinin basınçla değişimi.

Figure 5. The variation of machinability index with pressure for Sc_3AlN and Sc_3InN compounds.

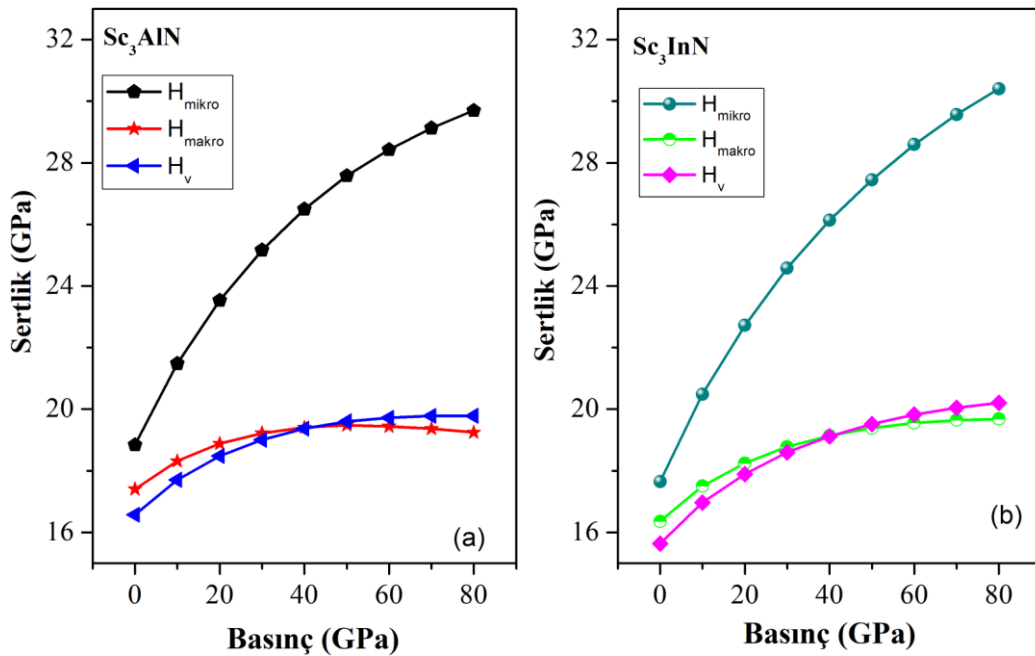
Bir malzemenin sertliği ile ilgili bilgiler, yüksek stres altındaki mekanik ve yapısal tepkilerini anlamak için gereklidir. Bu çalışmada çeşitli sertlik ifadeleri elastik özellikleri yardımıyla hesaplanmıştır (Yousef vd., 2006; Chen vd., 2011; Tian vd., 2012; Ahmed vd. 2023; Islam vd., 2023).

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

$$H_{makro} = 2 \left[\left(\frac{G}{B} \right)^2 G \right]^{0.585} - 3 \quad (7)$$

$$H_V = 0.92 \left(\frac{G}{B} \right)^{1.137} G^{0.708} \quad (8)$$

0 GPa’da hesaplanan sertlik sonuçları Tablo 3’te, basınca bağlı değişim eğrileri ise Şekil 6 ile gösterilmiştir. Sertlik değerlerindeki fark, denklemlerde yer alan farklı parametrelerden kaynaklanmaktadır. Sc₃AlN için hesaplanan sertlik değeri, Höglund vd. (2008) tarafından deneysel olarak bulunan sertlik değeri 14.2 GPa ile uyumludur. 40 GPa üzerindeki malzemeler sertlik açısından süper sert malzeme olarak sınıflandırıldığı için (Teter, 1998), incelediğimiz bileşikler 0 GPa basınç değerinde süper sert malzeme değildir. Ancak Şekil 6’da incelenen iki bileşiğinde artan basınç ile beraber sertlik değerlerinin arttığı görülmektedir.



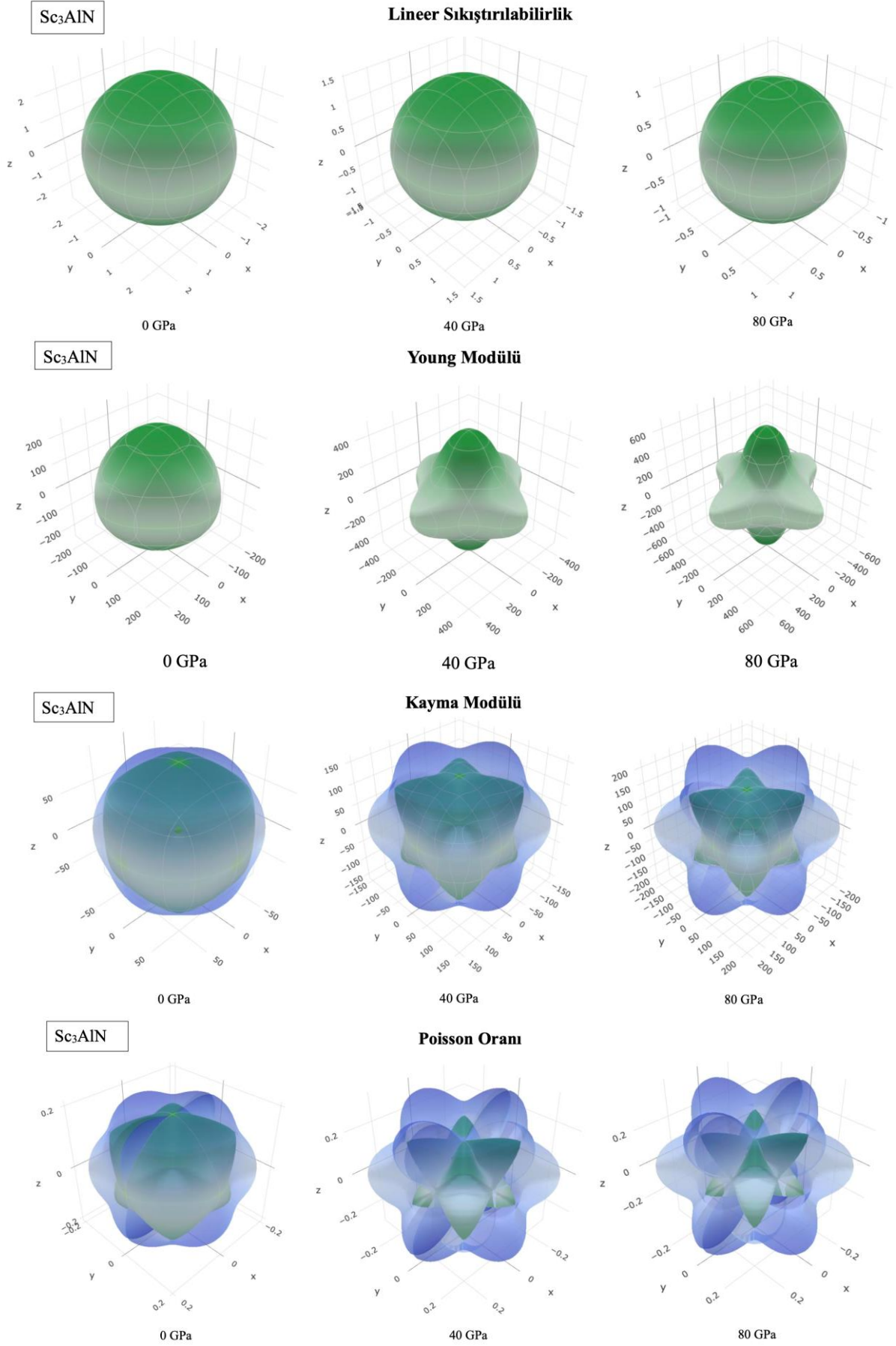
Şekil 6. Basınca bağlı sertlik değişimi a) Sc₃AlN, b) Sc₃InN.

Figure 6. The pressure dependent hardness a) Sc₃AlN, b) Sc₃InN.

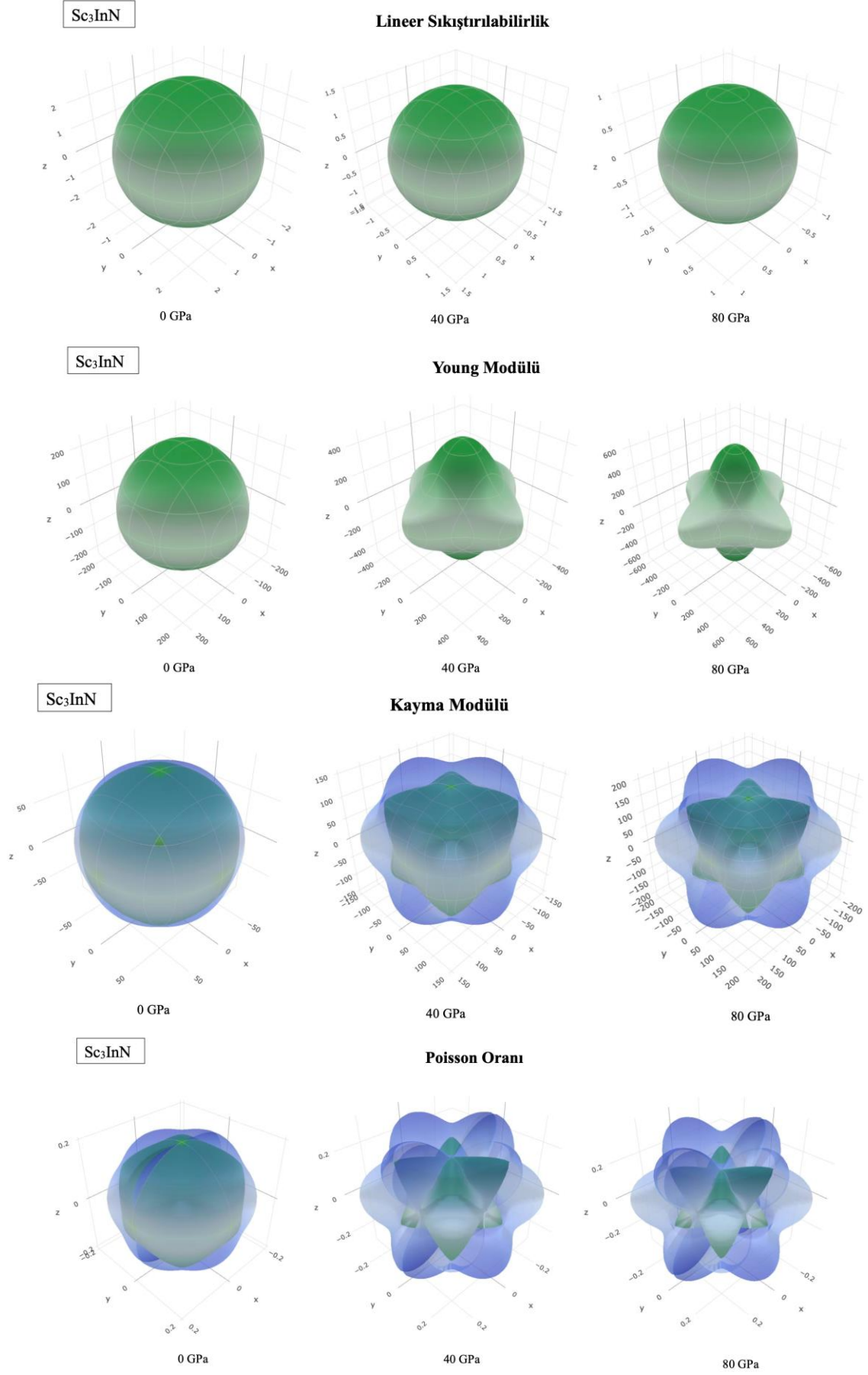
3.2.3. Elastik anizotropi

3.2.3. Elastic anisotropy

ELATE (Gaillac vd., 2016) programı aracılığıyla incelenen bileşiklerin elastik anizotropi özellikleri; Young modülü, lineer sıkıştırılabilirlik, kayma modülü ve Poisson oranının yöne bağlı değişimleri açıklanmıştır. Young modülü, lineer sıkıştırılabilirlik, kayma modülü ve Poisson oranının 0 GPa, 40 GPa ve 80 GPa basınç değerlerindeki 3-boyutlu grafikleri Sc₃AlN bileşiği için Şekil 7’de, Sc₃InN bileşiği için grafikler Şekil 8’de sunulmuştur. 3-boyutlu grafiklerde eğer malzeme izotropik yapıda ise küresel şekil gözlemlenmektedir. Küresel şekilden sapmalar ise bileşiğin sahip olduğu anizotropi derecesini gösterir. İncelenen iki bileşiğin 0 GPa, 40 GPa ve 80 GPa basınç değerlerindeki lineer sıkıştırılabilirlik grafiklerinde küresel şekil gözlenmektedir. Dolayısıyla Sc₃AlN ve Sc₃InN bileşikler lineer sıkıştırılabilirlik açısından izotropik davranış sergilemektedir. İncelenen her iki bileşik için de Young modülü, kayma modülü ve Poisson oranı grafiklerinde küresel şekilden sapmalar meydana geldiği için anizotropik davranış sergilemektedirler. Ayrıca artan basınç ile beraber grafiklerdeki küresel şekilden sapmalar daha baskın olup anizotropi dereceleri artmaktadır.



Şekil 7. Sc₃AlN bileşiğinin 3-boyutta elastik özellikleri grafikleri.
Figure 7. 3-dimensional elastic properties graphs of Sc₃AlN compound.



Şekil 8. Sc₃InN bileşiğinin 3-boyutta elastik özellikleri grafikleri.

Figure 8. 3-dimensional elastic properties graphs of Sc₃InN compound.

0, 40 ve 80 GPa basınç değerlerinde Sc_3AlN ve Sc_3InN bileşikleri için hesaplanan minimum ve maksimum Young modülü (E), lineer sıkıştırılabilirlik (β), kayma modülü (G), Poisson oranı (ν) ve elastik anizotropi değerleri Tablo 4 ile sunulmaktadır. Hesaplama sonuçlarına göre, her iki bileşik için de lineer sıkıştırılabilirlik ($\beta_{\min}$, $\beta_{\max}$) değerlerinin artan basınçla birlikte azaldığı belirlenmiştir. Lineer sıkıştırılabilirlik (β) parametresi basınç değişiminden etkilenmemiştir ve incelenen basınç değerlerinde izotropik bulunmuştur. Buna karşın, Young modülü (E), kayma modülü (G) ve Poisson oranı (ν) değerleri basınç artışıyla birlikte belirgin bir şekilde yükselmekte ve her iki bileşiğin elastik anizotropi değerleri artmaktadır.

Tablo 4. PBEsol yaklaşımı altında Sc_3AlN ve Sc_3InN bileşiklerinin minimum ve maksimum Young modülü ($E_{\min}$, $E_{\max}$), lineer sıkıştırılabilirlik ($\beta_{\min}$, $\beta_{\max}$), kayma modülü ($G_{\min}$, $G_{\max}$) ve Poisson oranı ($\nu_{\min}$, $\nu_{\max}$) değerleri.

Table 4. Minimum and maximum values of Young modulus ($E_{\min}$, $E_{\max}$), linear compressibility ($\beta_{\min}$, $\beta_{\max}$), shear modulus ($G_{\min}$, $G_{\max}$) and Poisson ratio ($\nu_{\min}$, $\nu_{\max}$) of Sc_3AlN and Sc_3InN compounds under the PBEsol approximation.

Mekanik Özellikler		Sc_3AlN			Sc_3InN		
		0 GPa	40 GPa	80 GPa	0 GPa	40 GPa	80 GPa
E	$E_{\min}$ (GPa)	215.96	311.46	358	211.1	317.43	376.83
	$E_{\max}$ (GPa)	241.86	472.55	656.5	223.85	452.27	637.35
	Anizotropi	1.12	1.517	1.834	1.06	1.425	1.691
β	$\beta_{\min}$ (TPa^{-1})	2.65	1.433	1.048	2.731	1.437	1.04
	$\beta_{\max}$ (TPa^{-1})	2.65	1.433	1.048	2.731	1.437	1.04
	Anizotropi	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00
G	$G_{\min}$ (GPa)	88.99	121.96	136.4	87.11	124.79	144.49
	$G_{\max}$ (GPa)	102.57	203.42	283.98	93.72	192.46	272.7
	Anizotropi	1.153	1.668	2.082	1.076	1.542	1.887
ν	$\nu_{\min}$	0.164	0.116	0.096	0.186	0.133	0.111
	$\nu_{\max}$	0.247	0.396	0.481	0.229	0.374	0.452
	Anizotropi	1.503	3.402	5.012	1.233	2.821	4.075

4. Sonuçlar

4. Conclusions

Özetle, bu çalışmada ilk-prensip yöntemi kullanılarak Sc_3AlN ve Sc_3InN anti-perovskit bileşiklerinin yüksek basınçta yapısal, elastik ve elastığe bağlı özellikleri araştırılmıştır. PBEsol yaklaşımı altında hesaplanan sonuçların literatürdeki çalışmalarla uyumlu olduğu görülmüştür. İncelenen bileşiklerin örgü sabitlerinin basınçla beraber azaldığı bulunmuştur. Elastik özellik hesaplamaları, Sc_3AlN ve Sc_3InN bileşiklerinin 0-80 GPa basınç aralığında mekanik olarak kararlı ve kırılğan yapıda olduğunu ortaya çıkarmıştır. Ayrıca elastik özelliklerine bağlı sertlik değerleri artan basınçla beraber artmaktadır. Elde edilen sonuçlar, bu bileşiklerin yüksek basınç altında sertlik ve mekanik kararlılık gerektiren uygulamalarda kullanılma potansiyeline sahip olduğunu göstermektedir. Bu çalışma, DFT hesaplamalarına dayalı olarak, Sc_3AlN ve Sc_3InN anti-perovskit bileşiklerinin teknolojik uygulamalara yönelik tasarımına temel oluşturacak teorik bir yol haritası sunmaktadır.

Teşekkür / Katkı belirtme (Gerekli durumlarda veya tercihen kullanılır)

Acknowledgement

Bu araştırmada yer alan tüm nümerik hesaplamalar TÜBİTAK ULAKBİM, Yüksek Başarım ve Grid Hesaplama Merkezi'nde (TRUBA kaynaklarında) gerçekleştirilmiştir.

Yazar katkısı

Author contribution

Belgin KOÇAK, literatür taraması, kavramsallaştırma, hesaplama, analiz, yazım ve düzenleme. Yasemin ÖZTEKİN ÇİFTÇİ, hesaplama, makalenin gözden geçirilmesi ve düzenlenmesi.

Etik beyanı*Declaration of ethical code*

Bu makalenin yazarları, bu çalışmada kullanılan materyal ve yöntemlerin etik kurul izni ve / veya yasal-özel izin gerektirmediğini beyan etmektedir.

Çıkar çatışması beyanı*Conflicts of interest*

Yazarlar herhangi bir çıkar çatışması olmadığını beyan eder.

Kaynaklar*References*

- Ahmed, R., Mahamudujjaman, M., Afzal, M. A., Islam, M. S., Islam, R. S., & Naqib, S. H. (2023). DFT based comparative analysis of the physical properties of some binary transition metal carbides XC (X= Nb, Ta, Ti). *Journal of Materials Research and Technology*, 24, 4808-4832. <https://doi.org/10.1016/j.jmrt.2023.04.147>
- Bağcı, S., Yalçın, B. G., Tütüncü, H. M., & Srivastava, G. P. (2010). Ground state, phonon spectrum, and superconducting properties of the cubic inverse perovskite Sc_3AlN . *Physical Review B*, 81(5), 054523. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.81.054523>
- Blöchl, P.E. (1994). "Projector augmented-wave method", *Physical Review B*, 50, 1795.
- Born, M., & Huang, K. (1996). Dynamical theory of crystal lattices. Oxford university press.
- Chen, X. Q., Niu, H., Li, D., & Li, Y. (2011). Modeling hardness of polycrystalline materials and bulk metallic glasses. *Intermetallics*, 19 (9), 1275-1281. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.50.17953>
- 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(27), 275201. <https://doi.org/10.1088/0953-8984/28/27/275201>
- Ghule, A. S., Ghule, S. S., Garde, C. S., Pandey, B., & Ramakrishnan, S. (2020). Ab initio study of Sc_3MO (M= Al, Ga, In, Tl) and systematics in Sc_3MZ (Z= B, C, N, O). *Computational Condensed Matter*, 25, e00509. <https://doi.org/10.1016/j.cocom.2020.e00509>
- Haddadi, K., Bouhemadou, A., Zerarga, F., & Bin-Omran, S. (2012). First-principles investigation of the ternary scandium based inverse-perovskite carbides Sc_3AC (A= Al, Ga, In and Tl). *Solid state sciences*, 14(8), 1175-1185. <https://doi.org/10.1016/j.solidstatesciences.2012.04.028>
- Hao, J., Li, W., Zhai, J., & Chen, H. (2019). Progress in high-strain perovskite piezoelectric ceramics. *Materials Science and Engineering: R: Reports*, 135, 1-57. <https://doi.org/10.1016/j.mser.2018.08.001>
- Hill, R. (1952). The elastic behaviour of a crystalline aggregate. *Proceedings of the Physical Society. Section A*, 65(5), 349. <https://doi.org/10.1088/0370-1298/65/5/307>
- Hossain, M. A., Ali, M. S., Parvin, F., & Islam, A. K. M. A. (2013). Mechanical and optical properties of inverse-perovskites Sc_3InX (X= B, C, N). *Computational Materials Science*, 73, 1-8. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2013.02.017>
- Höglund, C., Birch, J., Beckers, M., Alling, B., Czigany, Z., Mücklich, A., & Hultman, L. (2008). Sc_3AlN —A New Perovskite. *Eur. J. Inorg. Chem.*, 2008, 1193–1195. <https://doi.org/10.1002/ejic.200701356>
- Islam, S., Rana, M. R., Hoque, K., Biswas, G. G., Hossain, M. E., Hossain, M. M., Uddin, M. M., Naqib, S. H. & Ali, M. A. (2023). A comprehensive exploration of the physical properties of M_2GaB (M= Ti, Zr, Mo, Hf) through DFT method. *Results in Materials*, 19, 100438. <https://doi.org/10.1016/j.rinma.2023.100438>
- Kanchana, V., & Ram, S. (2012). Electronic structure and mechanical properties of Sc_3AC (A= Al, Ga, In, Tl) and Sc_3BN (B= Al, In): ab-initio study. *Intermetallics*, 23, 39-48. <https://doi.org/10.1016/j.intermet.2011.12.014>

- Khanzadeh, M., & Alahyarizadeh, G. (2021). A DFT study on pressure dependency of TiC and ZrC properties: Interconnecting elastic constants, thermodynamic, and mechanical properties. *Ceramics International*, 47(7), 9990-10005. <https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2020.12.145>
- Kirchner, M., Schnelle, W., Wagner, F. R., & Niewa, R. (2003). Preparation, crystal structure and physical properties of ternary compounds (R_3N) In, R= rare-earth metal. *Solid State Sciences*, 5(9), 1247-1257. [https://doi.org/10.1016/S1293-2558\(03\)00151-1](https://doi.org/10.1016/S1293-2558(03)00151-1)
- Kresse, G., & Furthmüller, J. (1996). Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set. *Physical Review B*, 54 (16), 11169. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.54.11169>
- Kresse, G., & Furthmüller, J. (1996). Efficiency of ab-initio total energy calculations for metals and semiconductors using a plane-wave basis set. *Computational materials science*, 6 (1), 15-50. [https://doi.org/10.1016/0927-0256\(96\)00008-0](https://doi.org/10.1016/0927-0256(96)00008-0)
- Kresse, G., & Hafner, J. (1993). Ab initio molecular dynamics for liquid metals. *Physical Review B*, 47(1), 558. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.47.558>
- Kresse, G., & Joubert, D. (1999). From ultrasoft pseudopotentials to the projector augmented-wave method. *Physical Review B*, 59 (3), 1758. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.59.1758>
- Le Page, Y., & Saxe, P. (2002). Symmetry-general least-squares extraction of elastic data for strained materials from ab initio calculations of stress. *Physical Review B*, 65 (10), 104104. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.65.104104>
- Magnuson, M., Mattesini, M., Höglund, C., Abrikosov, I. A., Birch, J., & Hultman, L. (2008). Electronic structure investigation of the cubic inverse perovskite Sc_3AlN . *Physical Review B*, 78 (23), 235102. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.78.235102>
- Mattesini, M., Magnuson, M., Tasnadi, F., Höglund, C., Abrikosov, I. A., & Hultman, L. (2009). Elastic properties and electrostructural correlations in ternary scandium-based cubic inverse perovskites: A first-principles study. *Physical Review B*, 79(12), 125122. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.79.125122>
- Mikhailushkin, A. S., Höglund, C., Birch, J., Czigany, Z., Hultman, L., Simak, S. I., Alling B., Tasnadi. F. & Abrikosov, I. A. (2009). Stability of the ternary perovskites Sc_3EN (E= B, Al, Ga, In) from first principles. *Physical Review B*, 79(13), 134107. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.79.134107>
- Mitro, S. K., Hadi, M. A., Parvin, F., Majumder, R., Naqib, S. H., & Islama, A. K. M. A. (2021). Effect of boron incorporation into the carbon-site in Nb_2SC MAX phase: Insights from DFT. *Journal of Materials Research and Technology*, 11, 1969-1981. <https://doi.org/10.1016/j.jmrt.2021.02.031>
- Monkhorst, H. J., & Pack, J. D. (1976). Special points for Brillouin-zone integrations. *Physical Review B*, 13 (12), 5188. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.13.5188>
- Momma, K., Izumi, F. (2011). “VESTA 3 for three-dimensional visualization of crystal, volumetric and morphology data”, *Journal of Applied Crystallography*, 44, 1272-1276. <https://doi.org/10.1107/S0021889811038970>
- Mouhat, F., & Coudert, F. X. (2014). Necessary and sufficient elastic stability conditions in various crystal systems. *Physical Review B*, 90(22), 224104. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.90.224104>
- Nuraje, N., & Su, K. (2013). Perovskite ferroelectric nanomaterials. *Nanoscale*, 5(19), 8752-8780. <https://doi.org/10.1039/C3NR02543H>
- Nobin, N. M., Khan, M., & Ali, M. L. (2023). An atomistic modeling study of high-throughput RVO_3 (R= La, Nd) perovskites for efficient solar energy conversion materials. *Physica B: Condensed Matter*, 660, 414879. <https://doi.org/10.1016/j.physb.2023.414879>
- Parvin, F., & Naqib, S. H. (2021). Pressure dependence of structural, elastic, electronic, thermodynamic, and optical properties of van der Waals-type $NaSn_2P_2$ pnictide superconductor: insights from DFT study. *Results in Physics*, 21, 103848. <https://doi.org/10.1016/j.rinp.2021.103848>
- Perdew, J. P., Ruzsinszky, A., Csonka, G. I., Vydrov, O. A., Scuseria, G. E., Constantin, L. A., Zhou, X. Burke, K. (2008). Restoring the density-gradient expansion for exchange in solids and surfaces. *Physical Review Letters*, 100 (13), 136406. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.100.136406>

- Pettifor, D. G. (1992). Theoretical predictions of structure and related properties of intermetallics. *Materials Science and Technology*, 8 (4), 345-349. <https://doi.org/10.1179/mst.1992.8.4.345>
- 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 (367), 823-843. <https://doi.org/10.1080/14786440808520496>
- Rani, U., Kamlesh, P. K., Shukla, A., & Verma, A. S. (2021). Emerging potential antiperovskite materials ANX_3 (A= P, As, Sb, Bi; X= Sr, Ca, Mg) for thermoelectric renewable energy generators. *Journal of Solid State Chemistry*, 300, 122246. <https://doi.org/10.1016/j.jssc.2021.122246>
- Reuss, A. (1929). Berechnung der fließgrenze von mischkristallen auf grund der plastizitätsbedingung für einkristalle. *ZAMM-Journal of Applied Mathematics and Mechanics/Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik*, 9 (1), 49-58. <https://doi.org/10.1002/zamm.19290090104>
- Saddique, J., Husain, M., Rahman, N., Khan, R., Iqbal, A., Sohail, M., Khattak, S.A., Khan, S.N., Khan, A. A., Reshak, A.H & Khan, A. (2022). Modeling structural, elastic, electronic and optical properties of ternary cubic barium based fluoroperovskites $MBaF_3$ (M= Ga and In) compounds based on DFT. *Materials Science in Semiconductor Processing*, 139, 106345. <https://doi.org/10.1016/j.mssp.2021.106345>
- Shah, M. A. H., Nuruzzaman, M., Hossain, A., Jubair, M., & Zilani, M. A. K. (2023). A DFT insight into structural, mechanical, elasto-acoustic, and anisotropic properties of $AePdH_3$ (Ae= Ca, Sr, Ba) perovskites under pressure. *Computational Condensed Matter*, 34, e00774. <https://doi.org/10.1016/j.cocom.2022.e00774>
- Tang, T. Y., Zhao, X. H., Hu, D. Y., Liang, Q. Q., Wei, X. N., & Tang, Y. L. (2022). An ab-initio investigation of novel double halide perovskite Cs_2InCoX_6 (X= F, Cl, Br) materials with direct band structure and broadband light absorption. *Materials Science in Semiconductor Processing*, 152, 107047. <https://doi.org/10.1016/j.mssp.2022.107047>
- Teter, D. M. (1998). Computational alchemy: the search for new superhard materials. *MRS Bulletin*, 23(1), 22-27. <https://doi.org/10.1557/S0883769400031420>
- 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>
- Varshney, D., & Shriya, S. (2013). Elastic, mechanical and thermodynamic properties at high pressures and temperatures of transition metal monocarbides. *International Journal of Refractory Metals and Hard Materials*, 41, 375-401. <https://doi.org/10.1016/j.ijrmhm.2013.05.013>
- Voigt, W. (1928), “*Lehrbuch der Kristallphysik (mit Ausschluss der Kristalloptik)*”, Teubner, Leipzig.
- Wang, J., Yip, S., Phillpot, S. R., & Wolf, D. (1993). Crystal instabilities at finite strain. *Physical Review Letters*, 71(25), 4182. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.71.4182>
- Wu, T., & Gao, P. (2018). Development of perovskite-type materials for thermoelectric application. *Materials*, 11(6), 999. <https://doi.org/10.3390/ma11060999>
- Yousef, E.S., El-Adawy, A., & El-Khesh Khany, 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 (3), 108-113. <https://doi.org/10.1016/j.ssc.2006.05.022>
- Zhang, X., Wang, Y., Zhao, X., Wang, Z., Shan, X., Xu, H., & Liu, Y. (2024). Halide perovskite memristors for optoelectronic memory and computing applications. *Information & Functional Materials*, 1(3), 265-281. <https://doi.org/10.1002/ifm2.23>
- Zheng, T., Wu, J., Xiao, D., & Zhu, J. (2018). Recent development in lead-free perovskite piezoelectric bulk materials. *Progress in Materials Science*, 98, 552-624. <https://doi.org/10.1016/j.pmatsci.2018.06.002>