

AKÜ FEMÜBİD 23 (2023) 025702 (466-473)

AKU J. Sci. Eng. 23 (2023) 025702 (466-473)

DOI: 10.35414/akufemubid.1143362

Araştırma Makalesi / Research Article

Ni₂VAI Bileşiğinin Mekanik, Elastik ve Termodinamik Özelliklerinin İncelenmesi

Tahsin ÖZER¹, Nihat ARIKAN²¹Osmaniye Korkut Ata Üniversitesi, Bahçe Meslek Yüksekokulu, Bahçe, Osmaniye, Türkiye.²Osmaniye Korkut Ata Üniversitesi, Sağlık Hizmetleri Meslek Yüksekokulu, Osmaniye, Türkiye.Sorumlu yazar e-posta¹: tahsinozer@osmaniye.edu.tr. ORCID ID: <https://orcid.org/0000-0003-0344-7118>e-posta²: nihatarikan@osmaniye.edu.tr. ORCID ID: <https://orcid.org/0000-0001-8028-3132>

Geliş Tarihi: 12.07.2022

Kabul Tarihi: 24.03.2023

Öz

Anahtar kelimeler

Heusler bileşikler; L₂₁-tipi Ni₂VAI; Mekanik özellikler; Elastik modülü; Sertlik; Anizotropi; Termodinamik özellikler; İlk prensipler.

Bu çalışmada teknolojik öneme haiz Heusler ailesinden Ni₂VAI bileşiğinin yapısal, mekanik ve termodinamik özellikleri ilk prensipler yöntemi ile teorik olarak incelenmiştir. Öncelikle bileşiğin temel durumunu ve en düşük enerji seviyesini belirlemek için yapısal optimizasyon yapılmış, yapısal optimizasyon neticesinde elde edilen optimize parametreler kullanılarak elastik sabitler hesaplanmıştır. Hesaplanan örgü parametresi önceki çalışmalar ile uyum içeresindedir. Ayrıca belirlenen elastik sabitler mekanik kararlılık kriterlerini karşıladığından elastik modül, Vicker sertliği, erime sıcaklığı, Debye sıcaklığı, ses hızları, minimum termal iletkenlik ve anizotropi incelenmiştir. Çalışılan malzemenin Vicker sertliği ve sünek/kırılgan doğası analiz edilmiştir. Ayrıca iç enerji, titreşim enerjisi, entropi ve özgül ısı kapasitesi 0-800 K sıcaklık aralığında değerlendirilmiştir. Hesaplamalarda açık kaynak Quantum Espresso yazılımı ve bu yazılım ile dağıtımı yapılan thermo_pw paketi tercih edilmiştir. Yapılan çalışma ile Ni₂VAI bileşiğinin mekanik kararlı, sünek, anizotrop ve yumuşak olduğu görüldü.

Investigation of Mechanical, Elastic and Thermodynamic Properties of Ni₂VAI Compound

Abstract

In this study, the structural, mechanical, and thermodynamic properties of Ni₂VAI compound from Heusler family, which has technological importance, were investigated theoretically by first principles method. Firstly, structural optimization was performed to determine the ground state and lowest energy level of the compound, and elastic constants were calculated using the optimized parameters obtained as a result of structural optimization. The calculated lattice parameter agrees with previous studies. In addition, elastic modulus, Vicker hardness, melting temperature, Debye temperature, sound velocities, minimum thermal conductivity and anisotropy were investigated since the determined elastic constants meet the mechanical stability criteria. The Vicker hardness and ductile/brittle nature of the studied material were analyzed. In addition, internal energy, vibrational energy, entropy, and specific heat capacity were evaluated in the temperature range of 0-800 K. In calculations, open-source Quantum Espresso software and thermo_pw package distributed with this software were preferred. With the study, it was seen that the Ni₂VAI compound was mechanically stable, ductile, anisotropic, and soft.

Keywords

Heusler compounds; L₂₁-type Ni₂VAI; Mechanical properties; Elastic modulus; Hardness; Anisotropy; Thermodynamic properties; First principles.

© Afyon Kocatepe Üniversitesi

1. Giriş

Sahip oldukları özellikler ile araştırmacıların ilgisini çeken Heusler bileşikleri tam Heusler, yarım Heusler, Çeyrek Heusler ve ters Heusler olmak üzere farklı sınıflarda gruplandırılmışlardır. Tam Heusler

bileşikleri A₂YZ formundadır. A geçiş metalleri, Y geçiş veya Lantanitlerden Z ise ana grup elementlerinden oluşur (Arıkan & Öztürk, 2021). Heusler alaşımların ideal kristal yapısı kübik L₂₁ yapıdır (Wang & Tung, 2020). Tam Heusler sınıfında

yer alan Ni₂VAI bileşiği, L₂₁ tipi kübik yapıda ve Fm-3m (no:225) uzay gurubunda bulunmakta olup, Al atomları 4a (0, 0, 0) Wyckoff, Ni atomları 8c ($\frac{1}{4}$, $\frac{1}{4}$, $\frac{1}{4}$) Wyckoff ve V atomları 4b ($\frac{1}{2}$, $\frac{1}{2}$, $\frac{1}{2}$) Wyckoff konumunda bulunurlar. Birim hücrelerinde 8 Ni, 4 V ve 4 tane de Al olmak üzere 16 atom vardır (Shi vd., 2019; Wen vd., 2017).

Heusler alaşımlarını tasarlamak, hazırlamak ve özelliklerini geliştirmek için bir takım deneysel ve/veya teorik çalışmalar yapılmaktadır. Yapılan çalışmalar sonucunda Heusler alaşımların ferro manyetik özelliklerinin yanında yarı metalik, ferro manyetik şekil hafıza etkisi ve topolojik yalıtkan gibi fiziksel özelliklere sahip oldukları bildirilmiştir (Luo vd., 2016). Ni-Ti-Al alaşımları yüksek sıcaklık dayanımı, sürünme dayanımı, oksidasyon ve korozyon dayanımı ve düşük yoğunluk nedeni ile potansiyel yüksek sıcaklık malzemeleridir (Shi vd., 2019). Üçlü Heusler L₂₁-faz bileşiklerinden Ni₂XAl'a Ti ilavesinin yüksek sıcaklıkta sürünme mukavemetini büyük oranda arttığı rapor edilmiştir (Lin & Freeman, 1992). Ni₂VAI'ın özgül ısı, kohezif özellikleri ve elektronik yapısı deneysel ve teorik olarak araştırılmıştır. Ayrıca basıncın Ni₂VAI'ın süper iletkenliği, bulk modülü, Debye sıcaklığı ve ısı kapasitesi üzerine etkisi teorik olarak incelenmiştir (Lin & Freeman, 1992; da Rocha vd., 1999; Wen vd., 2017). Erime sıcaklığı, serbest enerji, titreşim enerjisi ve entropi gibi termodinamik özellikler üzerine yapılan deneysel veya teorik çalışmaya rastlanılmamıştır.

Seramik ve polimer malzemeler ile kıyaslandığında metaller, sahip oldukları yüksek mukavemet ve kırılma tokluklarından dolayı yük taşıma uygulamaları için daha uygundur (Niinomi, 2002; Staiger vd., 2006). Gelişen teknoloji ile günümüzde bir takım implant malzemeler üretilmektedir. İmplant malzemelere entegre olarak kullanılan biyo malzemeler bazen de izole edilmiş malzeme olarak da kullanılabilir. İmplant malzemelerde istenen özellikler biyo uyumluluk, mekanik özellikleri ve imalat olarak gruplandırılabilir. Biyo uyumlulukta malzemenin vücut dokusu ile birbirine olumsuz bir etki yaratmadan bir arada bulunabilmesidir. Olumsuz etkilerin varlığı/yokluğu in vitro ve in vivo ortamda yapılan birtakım çalışmalar ile tespit edilebilmektedir. İmalattan

beklenen malzemenin seri üretime uygun olması, ham maddeye erişimin kolay olması ve en nihayetinde uygun maliyet unsurlarını oluşturmaktadır. Mekanik özelliklerden akla ilk gelen ve teorik olarak da deneysel verilere çok yakın değerlerde hesaplanabilen elastikiyet, süneklik ve sertliktir. Yapılan işin doğası gereği zamandan ve kaynaktan tasarruf edebilmek için, malzemenin beklenen mekanik özelliklere haiz olması gerekmektedir. Doğal kemiğin sertliğine yakın ve toksin olmayan bazı alaşımların geliştirilmesi son zamanlarda aktif bir araştırma konusu olmuştur. Yapılan bu çalışma ile yeni malzeme arayışlarına katkı yapılması amaçlanmıştır.

Heusler alaşımları, sahip oldukları çok çeşitli özellikleri nedeni ile önemli bir araştırma konusu olmuşlardır. Bu malzemeler olgunlaşıp ticari uygulamalara daha yakın hale geldikçe mekanik özellikleri hem işlenmeleri hem de nihai kullanım için önemli bir aktör haline gelir (Everhart & Newkirk, 2019). Bu çalışmada, Anizotropi, Vicker sertliği, sünek/gevreklik gibi mekanik özelliklerinin yanında serbest enerji, titreşim enerjisi, entropi ve ısı sığasının sıcaklık ile değişimi, Debye sıcaklığı, erime sıcaklığı ve termal iletkenliği ilk prensipler yöntemi ile teorik olarak araştırılacaktır.

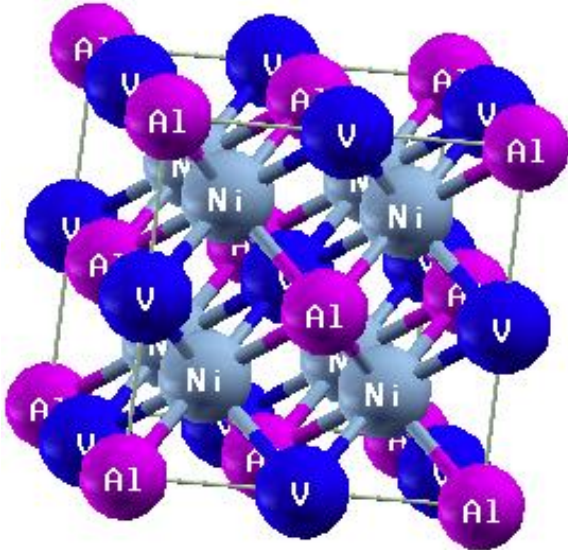
2. Materyal ve Metot

Bileşiğin temel durumunu ve en düşük enerji seviyesini tespit edebilmek için BFGS algoritması (Fischer & Almlöf, 1992) kullanılarak yapısal optimizasyon gerçekleştirildi. Optimize parametreler kullanılarak XCrySDen yazılımı (Kokalj, 2003) ile görselleştirilen birim hücre Şekil 1.'de verilmiştir. Yapısal optimizasyon işleminde optimize Ecut, EcutRho ve k-grid değerleri sırası ile 420 Ry, 1680 Ry ve 5x5x5 kullanıldı. Tüm enerji hesaplamalarında açık kaynak kodlu Quantum Espresso (QE) (Giannozzi vd., 2009), elastik hesaplarında QE paketinde dağıtımı yapılan thermo_pw scripti ile gerçekleştirildi. Enerji hesaplamaları pc'ler, optimizasyon ve elastik sabitlerin hesabında UHEM bilgisayarları kullanıldı. Al, Ni ve Ti atomlarının valans elektron konfigürasyonları sıra ile 3s² 3p¹, 3d⁸ 4s² ve 3s² 3p⁶ 3d² 4s². Valans elektronları ile iyonik çekirdek

arasındaki etkileşimi temsil etmek için QE internet sitesinden temin edilen Ultrasoft (USPP) ve PBESOL tipi fonksiyonel psödo potansiyel dosyaları tercih edildi.

3. Bulgular ve Tartışma

Yapısal optimizasyona, deneysel 5,803 Å (Wen vd., 2017) örgü ve diğer optimize hesaplama parametre değerleri kullanılarak başlanmış, BFGS algoritması ile yapılan yapısal optimizasyon neticesinde örgü sabiti 5,734 Å olarak tahmin edilmiştir. Hesaplanan bu değer ulaşılabilen literatür verileri ile Çizelge 1.'de kıyaslanmıştır. Çizelge 1.'den de açıkça görüleceği üzere; bulunan sonuç, diğer teorik ve deneysel veriler ile uyum içerisinde. Tahmin edilen 5,734 Å değerindeki örgü sabiti Wen ve ark., (2017)'in rapor ettiği deneysel değer ile kıyaslandığında %1,19 farklı olduğu görülmektedir. Bu fark teorik çalışmalar için kabul edilebilir limitler dahilindedir.



Şekil 1. Ni₂VAI bileşiğinin birim hücresi.

3.1. Mekanik Kararlılık ve Elastik Modül

Malzemenin kararlılığı, sertliği, anizotropluğu gibi birtakım özellikleri hakkında, elastik sabitleri bilgi vermektedir. Mekanik özellikleri hakkında bilgi veren elastik sabitler, deneysel olarak ölçülebildiği gibi teorik olarak da büyük doğruluk oranları ile hesaplamak mümkündür. Çalışılan malzeme hakkında bilgiler yeterince olgunlaştıkça ve uygulamaya safhasına yaklaştıkça mekanik özellikler

önem arz etmektedir. Optimize örgü sabiti ve diğer hesaplama parametreleri kullanılarak L₂₁ tipi kübik yapıda Ni₂VAI bileşiğinin elastik sabitleri hesaplanarak ulaşılabilen literatür verileri ile Çizelge 1.'de verilmiştir.

Çizelge 1. L₂₁ tipi kübik yapıda Ni₂VAI bileşiği için hesaplanan örgü parametresi ve elastik sabitler.

Referans	a(Å)	C ₁₁ (GPa)	C ₁₂ (GPa)	C ₄₄ (GPa)
Bu çalışma	5,739	225,3	189,2	119,5
Teori (GGA) ^a	5,81	201,8	171,1	110,8
Deneysel ^a	5,803			

a (Wen vd., 2017)

Kübik yapıdaki malzemelerin elastik sabitleri C₁₁, C₁₂ ve C₄₄ olmak üzere üç tane bağımsız elastik sabit ile karakterize edilmektedir. Bir bileşiğin mekanik olarak kararlı olabilmesi için elastik sabitlerinin Born kararlılık kriterlerini (Beckstein vd., 2001)

$$C_{11} > 0, C_{44} > 0, C_{11} > |C_{12}|,$$

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

sağlaması gerekmektedir. Üzerinde çalışılan Ni₂VAI bileşiğinin kararlılık kriterlerini sağlamasından dolayı bu bileşiğin mekanik olarak kararlı olduğu söylenebilir. Mekanik olarak kararlı olan bileşiklerin elastik sabitleri kullanılarak Bulk modül,

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

Shear modül,

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

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

Young modül,

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

Poisson oranı,

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

hesaplanabilir. Eşitliklerde geçen "V" alt indisi Voigt, "R" alt indisi Reuss yaklaşımını göstermektedir. Yukarıda verilen eşitlikler yardımı ile hesaplanan elastik modüllerin değerleri ulaşılabilen literatür verileri Çizelge 2.'de kıyaslanmıştır.

Çizelge 2. Ni₂VAI bileşiğinin Bulk, Young ve Shear modülleri, Poisson oranı.

	Bu çalışma	Teori (GGA)	Deney
Bulk (GPa)	201,24	181,3 ^a	
Shear (GPa)	G_V	78,89	
	G_R	36,73	
	G	57,81	52,2 ^a
Young (GPa)	158,27	142,8 ^a	
G/B	0,287	0,288 ^a	
Poisson	0,369	0,37 ^b	
Cauchy basıncı (GPa)	69,76	62,33 ^b	
Vicker sertliği (GPa)	1,98		
Yousef	5,05	4,57 ^a	
Tian	3,93		
A^U	5,739	6,428 ^a	
Anizotropi	A_Z	6,632	7,218 ^a
	A_E	1,918	
Ses hızı (m/s)	ϑ_m	3271,4	6210 ^b
	ϑ_s	2902,3	12220 ^b
	ϑ_t	6368,1	5510 ^b
Debye Sıcaklığı (K)	427,6	506,42 ^b	411 ±4,7 ^c
Minimum termal iletkenlik	Clarke	1,112	
	Cahill	1,306	
	Long	0,871	

^a (Wen vd., 2017), ^b (Sreenivasa Reddy & Kanchana, 2014), ^c (da Rocha vd., 1999)

G/B oranı, Cauchy basıncı ve Poisson oranına bakılarak malzemenin sünek(ductile)/kırılgan (brittle) doğası hakkında bilgi edinilebilir. G/B oranı için kritik değer 0,5'tir. Bu kritik değerden küçük ise sünek büyük ise kırılgan davranış sergiler. G/B değeri 0,287 olarak hesaplandığından sünek karakterde olduğu söylenebilir. Poisson oranı için bu kritik değer 0,26'dır. Hesaplanan bu oran 0,369 olduğundan malzeme sünek karakterdedir. Sünek doğaya sahip malzemelerin Cauchy basıncı pozitifdir. Hesaplanan pozitif Cauchy basıncı da G/B ve Poisson oranları ile ulaşılan yargıyı desteklemektedir.

3.2. Vicker Sertliği ve Anizotropi

Young, Shear ve Bulk modüllerinin değerlerinin büyüklüğü malzemenin sertliğinin bir göstergesi olarak kullanılabilir. Bu değerlerin büyük olması malzemenin sertliğine işaret eder. Bu çalışma ile çalışılan malzemenin Bulk modülü (201,24), Young modülü (158,27) ve Shear modülü (57,81) GPa olarak hesaplanmıştır. Malzemenin sertliği hakkında daha tatmin edici bilgiler alınabilmesi için Vicker sertliği (Chen vd., 2011), Yousef (Yousef vd.,

2006) ve Tian (Tian vd., 2012) modelleri geliştirilmiştir.

$$H_v = 2(k^2G)^{0.585} - 3 \quad (6)$$

$$H_v = \frac{(1-2\theta)E}{6(1+\theta)} \quad (7)$$

$$H_v = 0,92 k^{1,137} G^{0,708} \quad (8)$$

Bu eşitlikler yardımı ile Vicker sertliği sırası ile 1,98, 5,05, 3,93 GPa olarak tahmin edilmiştir. Hesaplanan Vicker sertliği 10 GPa'nın altında olduğundan yumuşak malzeme olduğu söylenebilir.

Malzeme bilimi ve mühendislik uygulamaları bakımından malzemenin anizotropisi önem arz etmesinden dolayı Ni₂VAI bileşiğinin anizotropisi incelenmiştir. Anizotropi, evrensel anizotropi (A^U) (Ranganathan & Ostoja-Starzewski, 2008), Chung-Buessem anizotropi (A_G) (Buessem & Chung, 1968), Zener anizotropi (A_Z) (Nye, 1985), elastik anizotropi faktörü (A^E) (Every, 1980) şeklinde ifade edilebilmektedir. İzotropik kristallerde $A_Z=1$, $A^U=0$ ve $A^E=0$ olur. Sıfır ve birden sapmalar anizotropiğin bir göstergesidir. Bu çalışma ile $A_Z(6,632)$, $A^U(5,739)$ ve $A^E(1,918)$ bulunduğundan Ni₂VAI bileşiğinin anizotropik olduğu söylenebilir. Okuyucunun anizotropikleri daha rahat görebilmesini sağlamak için ELATE yazılımı (Gaillac vd., 2016) yazılımı ile görselleştirilerek Şekil 2.'de verilmiştir. Şekil 2.'den de bileşiğin anizotrop olduğu açıkça görülmektedir.

3.3. Termodinamik Özellikler

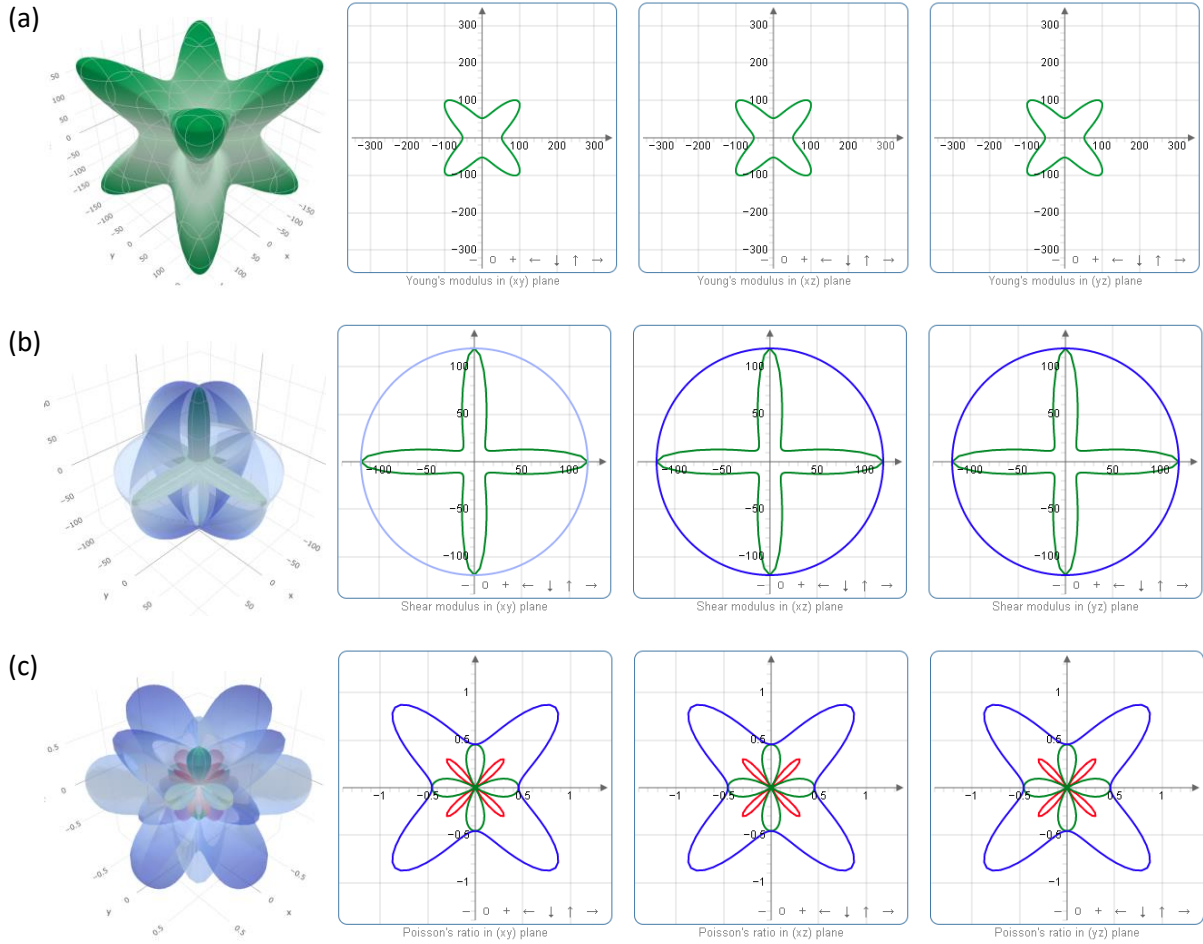
Elastik sabitleri ve bulk modülü ile erime sıcaklığı tahmin edilebilmektedir (Fine vd., 1984; Özer, 2018).

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

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

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

Ni₂VAI bileşiğinin erime sıcaklığı 1603 K (Eşitlik 9); 1884 K (Eşitlik 10), 2478 K (Eşitlik 11) olarak hesaplanmıştır.



Şekil 2. Ni₂VAI bileşiğinin anizotropisinin 2/3D boyutta görselleştirilmesi, (a) Young modülü, (b) Shear modülü, (c) Poisson oranı

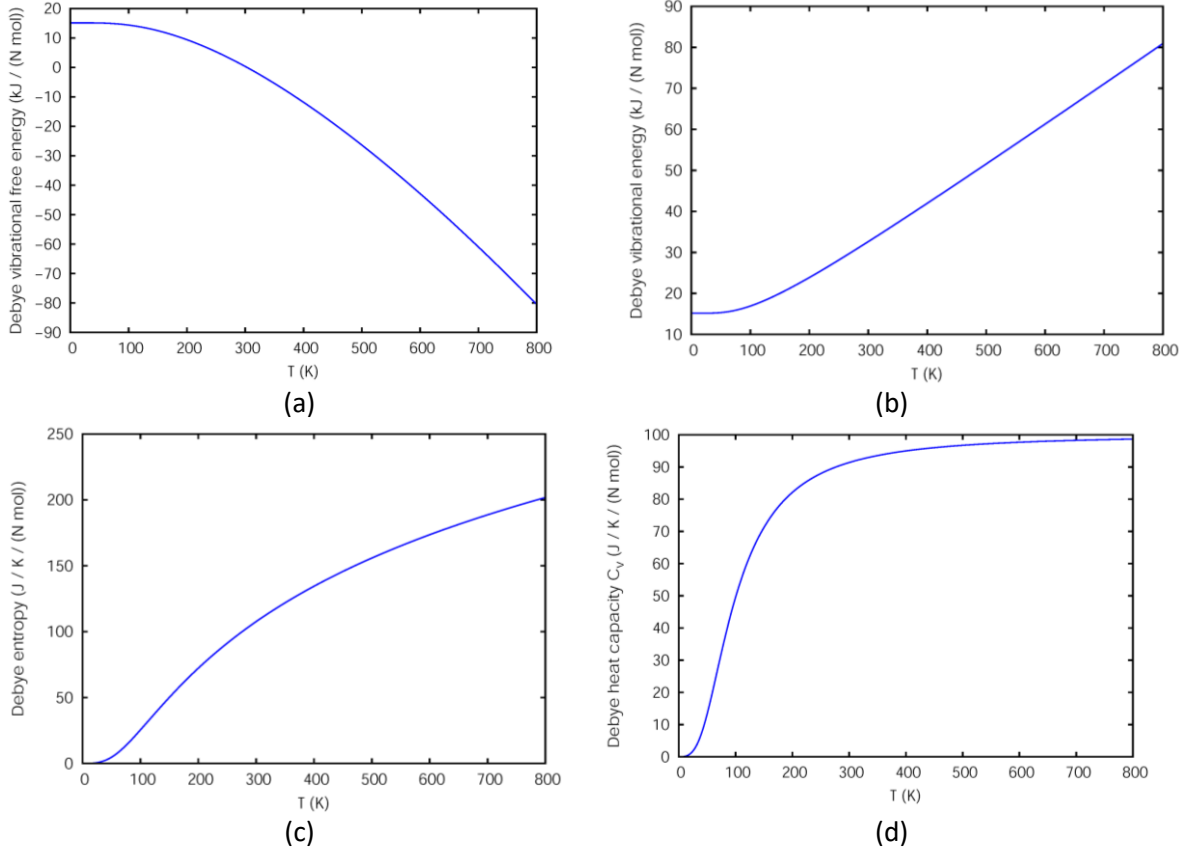
Malzemeler için bir diğer önemli özellik Debye sıcaklığıdır. Debye sıcaklığı, erime sıcaklığı, termal iletkenlik, sertlik vs özellikler ile yakından ilişkilidir. Bir malzemenin Debye sıcaklığının büyük olması termal iletkenliğin ve erime sıcaklığının da büyük olacağına işaret etmektedir (Gencer & Surucu, 2019). Debye sıcaklığı, ısı sığasının doyum noktasına ulaşmaya başladığı yer ve bir materyal için en yüksek frekans modunun uyarıldığı sıcaklık değeri olarak vasıflandırılmaktadır. Debye sıcaklığı ortalama ses hızından teorik olarak hesaplanabilmektedir (Anderson, 1963; Schreiber, 1973). Literatürde verilen eşitlikler kullanılarak hesaplanan Debye sıcaklığı 427,6 K, ortalama ses hızı (\bar{v}_m) 3271,4 m/s, enine ses hızı (\bar{v}_s) 2902,3 m/2, boyuna ses hızı (\bar{v}_t) 6368,1 m/s'dir. Hesaplanan Debye sıcaklığı Rocha ve ark. (1999) deneysel çalışmadaki bildirilen değere çok yakındır. Diğer teorik çalışmalardan bir miktar farklı olması kullanılan yazılım farkından kaynaklı olduğu düşünülmektedir. Kristallerin minimum termal iletkenliklerini hesaplayabilmek için Clarke (Clarke, 2003), Cahill (Cahill vd., 1992) ve Long (Long vd., 2015) ampirik bağıntılar önermiştir. Önerilen bu eşitlikler yardımı ile Ni₂VAI bileşiğinin minimum

termal iletkenlikleri 1,112 (Clarke model), 1,306 (Cahill model) ve 0,871 (long model) W m⁻¹ K⁻¹ olarak hesaplanmıştır.

Quantum-Espresso yazılımı ile dağıtımı yapılan thermo_pw yazılımı ile bileşiğin termodinamik özelliklerine optimize yapıya stres uygulanarak kuasi harmonik Debye modeli ile 0-800 K aralığında bakıldı. Şekil 3.a'da görüleceği üzere serbest enerjinin sıcaklığa bağlı değişiminde, artan sıcaklık ile ters orantılı bir azalmanın olduğu görülebilir. Şekil 3.b'de ise titreşim enerjisinin sıcaklıkla değişim eğrisi görülmektedir. Burada artan sıcaklıkta titreşim enerjisinde de bir artış söz konusudur. Netice itibarı ile, sıcaklığın artması titreşim enerjisinin artışına, serbest enerjisinin azalmasına sebep olmaktadır. Şekil 3.c'de verilen entropi-sıcaklık değişim eğrisinden de görüleceği üzere artan sıcaklıkla entropideki artış beklenen bir sonuçtur. Isı sığasının sıcaklığa bağlı değişimi Şekil 3.d'de verilmiştir. Isı sığası-sıcaklık değişim eğrisinde sıcaklık arttıkça ısı sığasındaki artışı ve yüksek sıcaklıklara doğru

kaydığında da Dulong-Petit limiti (Petit & Dulong, 1819) olarak adlandırılan 3NR (N birim hücredeki

atom sayıları, R gaz sabiti) değerine yaklaştığı görülmektedir.



Şekil 3. Ni₂VAl bileşiğinin kuasi harmonik Debye modeli ile 0-800 K aralığında, (a) serbest enerjinin, (b) titreşim enerjisinin, (c) entropinin, (d) ısı kapasitesinin sıcaklıkla değişim eğrisi.

4. Sonuç

Heusler ailesinden Ni₂VAl bileşiğinin temel durumu ve en küçük enerji seviyesine ulaşmak için yapısal optimizasyonu gerçekleştirilerek örgü sabiti literatürde verilen deneysel değerden %1,19 farklı 5,734 Å olarak tahmin edilmiştir. Optimize değerler kullanılarak kübik sistemlerin C_{11} , C_{12} ve C_{44} bağımsız elastik sabitleri hesaplandı. Hesaplanan bu değerler mekanik kararlılık kriterlerini sağladığından bileşiğin mekanik olarak kararlı olduğu söylenebilir. Mekanik kararlı bileşiğin elastik modülleri, Vicker sertliği, anizotropisi incelendi. Yapılan Cauchy basıncı, Pugh oranı ve Poisson oranı hesapları, incelenen materyalin sünek davranışa sahip olduğunu göstermiştir. Young, shear ve Bulk modülleri sıra ile 158,27, 57,81 ve 201,24 GPa hesaplandı. Üç farklı modele göre hesaplanan Vicker sertliğinin ortalaması 3,65 GPa olduğundan yumuşak bir

malzemedir. Yapılan detaylı izotropi analizlerinden anizotropik olduğu görüldü. 1000 K üzeri erime sıcaklığına sahip olduğundan yüksek sıcaklık uygulamalarına potansiyel aday malzemedir. Ortalama ses hızından Debye sıcaklığı 427,6 K tahmin edildi. Bu tahmin Rocha ve ark.(1999)'un bildirdiği 411K değerine çok yakındır. Elde edilen sonuçların teorik literatür verilerinden, kullanılan yazılım farkından kaynaklı olduğu düşünülen, bir miktar farklılık olmakla birlikte genel olarak uyum içerisinde olduğu görüldü.

Teşekkür

Bu çalışmada kullanılan hesaplama kaynakları Ulusal Yüksek Başarımlı Hesaplama Merkezi'nin (UHeM), #1012332022 # numaralı desteğiyle, sağlanmıştır. Ayrıca yapılan bu çalışma, "Ni₂XAl (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.

5. Kaynaklar

- Anderson, O. L., 1963. A simplified method for calculating the debye temperature from elastic constants. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, **24**, 909–917.
- Arıkan, N., Öztürk, A. İ., 2021. Ab Initio Calculation of Mechanical and Thermodynamic Properties of Ag₂ScAl Compound. *Journal of Kadirli Faculty of Applied Sciences*, **1**, 116-126.
- Beckstein, O., Klepeis, J. E., Hart, G. L. W., Pankratov, O., 2001. First-principles elastic constants and electronic structure of α -Pt₂Si and PtSi. *Physical Review B*, **63**, 134112.
- Buessem, D. H., Chung, W. R., 1968. Anisotropy in Single-Crystal Refractory Compounds (F. W. Vahldiek S. A. Mersol (ed.); 1st editio). Springer US.
- Cahill, D. G., Watson, S. K., Pohl, R. O., 1992. Lower limit to the thermal conductivity of disordered crystals. *Physical Review B*, **46**, 6131.
- Chen, X.-Q., Niu, H., Li, D., Li, Y., 2011. Modeling hardness of polycrystalline materials and bulk metallic glasses. *Intermetallics*, **19**, 1275–1281.
- Clarke, D. R., 2003. Materials selections guidelines for low thermal conductivity thermal barrier coatings. *Surface and Coatings Technology*, **163–164**, 67–74.
- da Rocha, F. S., Fraga, G. L. F., Brandão, D. E., da Silva, C. M., & Gomes, A. A., 1999. Specific heat and electronic structure of Heusler compounds Ni₂TAl (T=Ti, Zr, Hf, V, Nb, Ta). *Physica B: Condensed Matter*, **269**, 154–162.
- Everhart, W., Newkirk, J., 2019. Mechanical properties of Heusler alloys. *Heliyon*, **5**, e01578.
- Every, A. G., 1980. General closed-form expressions for acoustic waves in elastically anisotropic solids. *Physical Review B*, **22**, 1746.
- Fine, M. E., Brown, L. D., Marcus, H. L., 1984. Elastic constants versus melting temperature in metals. *Scripta Metallurgica*, **18**, 951–956.
- Fischer, T. H., Almlöf, J., 1992. General methods for geometry and wave function optimization. *The Journal of Physical Chemistry*, **96**, 9768–9774.
- 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.
- Gencer, A., Surucu, G., 2019. Investigation of structural, electronic and lattice dynamical properties of XNiH (X = Li, Na and K) perovskite type hydrides and their hydrogen storage applications. *International Journal of Hydrogen Energy*, **44**, 15173–15182.
- 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**, 39.
- Kokalj, A., 2003. Computer graphics and graphical user interfaces as tools in simulations of matter at the atomic scale. *Computational Materials Science*, **28**, 155–168.
- Lin, W., & Freeman, A. J., 1992. Cohesive properties and electronic structure of Heusler L21-phase compounds Ni₂XAl (X=Ti, V, Zr, Nb, Hf, and Ta). *Physical Review B*, **45**, 61–68.

- Long, J., Shu, C., Yang, L., Yang, M., 2015. Predicting crystal structures and physical properties of novel superhard p-BN under pressure via first-principles investigation. *Journal of Alloys and Compounds*, **644**, 638–644.
- Luo, H., Xin, Y., Liu, B., Meng, F., Liu, H., Liu, E., Wu, G., 2016. Competition of L₂₁ and XA structural ordering in Heusler alloys X₂CuAl (X = Sc, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni). *Journal of Alloys and Compounds*, **665**, 180–185.
- Niinomi, M., 2002. Recent metallic materials for biomedical applications. *Metallurgical and Materials Transactions A*, **33**, 477–486.
- Nye, J., 1985. Physical properties of crystals: their representation by tensors and matrices. Oxford University Press.
- Özer, T., 2018. Determination of melting temperature (H. Demirkaya, M. Canbulat, A. Pular, M. Eraslan, B. Direkci (ed.); ss. 87–99). 4th International Congress on Multidisciplinary Studies.
- Petit, A. T., Dulong, P. L., 1819. Recherches sur quelques points importants de la théorie de la chaleur. İçinde *Annales de chimie et de physique* (ss. 395–413).
- Ranganathan, S. I., Ostoja-Starzewski, M., 2008. Universal Elastic Anisotropy Index. *APS*, **101**, 5.
- Schreiber, E., 1973. *Elastic constants and their measurement*. McGraw-Hill Book Company.
- Shi, J., Zheng, A., Lin, Z., Chen, R., Zheng, J., Cao, Z., 2019. Effect of process control agent on alloying and mechanical behavior of L₂₁ phase Ni–Ti–Al alloys. *Materials Science and Engineering: A*, **740–741**, 130–136.
- Sreenivasa Reddy, P. V., Kanchana, V., 2014. Ab initio study of Fermi surface and dynamical properties of Ni₂XAl (X = Ti, V, Zr, Nb, Hf and Ta). *Journal of Alloys and Compounds*, **616**, 527–534.
- Staiger, M. P., Pietak, A. M., Huadmai, J., Dias, G., 2006. Magnesium and its alloys as orthopedic biomaterials: A review. *Biomaterials*, **27**, 1728–1734.
- 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.
- Wang, Y.-K., Tung, J.-C., 2020. Structural, electronic and magnetic properties of Ni₂XAl (X = V, Cr, Mn, Fe, and Co) Heusler alloys: An ab initio study. *Physics Open*, **2**, 100008.
- Wen, Z., Zhao, Y., Hou, H., Wang, B., Han, P., 2017. The mechanical and thermodynamic properties of Heusler compounds Ni₂XAl (X = Sc, Ti, V) under pressure and temperature: A first-principles study. *Materials & Design*, **114**, 398–403.
- Yousef, E. S., El-Adawy, A., El-KheshKhany, N., 2006. Effect of rare earth (Pr₂O₃, Nd₂O₃, Sm₂O₃, Eu₂O₃, Gd₂O₃ and Er₂O₃) on the acoustic properties of glass belonging to bismuth–borate system. *Solid State Communications*, **139**, 108–113.