

Ag₂ScAl Bileşiğinin Mekanik ve Termodinamik özelliklerinin Ab İnitio Hesabı

Nihat ARIKAN^{1*}, Ali İhsan ÖZTÜRK²

¹Osmaniye Korkut Ata Üniversitesi, Sağlık Hizmetleri Meslek Yüksekokulu, Osmaniye

²Osmaniye Korkut Ata Üniversitesi, Fen Edebiyat Fakültesi Kimya Bölümü, Osmaniye

¹<https://orcid.org/0000-0001-8028-3132>

²<https://orcid.org/0000-0002-3912-0670>

*Sorumlu yazar: nihatarikan@osmaniye.edu.tr

Araştırma Makalesi

Makale Tarihiçesi:

Geliş tarihi: 12.10.2021

Kabul tarihi: 23.11.2021

Online Yayınlanma: 08.12.2021

Anahtar Kelimeler

Ag₂ScAl

Heusler

Erime sıcaklığı

Minimum termal iletkenlik

Anizotropi

ÖZET

Heusler ailesinin bir üyesi olan kübik Ag₂ScAl bileşiğinin yapısal optimizasyonu yapılmış, optimize değerler kullanılarak elastik sabitleri hesaplanmıştır. Hesaplanan elastik sabitler mekanik kararlılık kriterlerini sağladığından elastik modülleri hesaplanmıştır. Anizotropisi detaylı olarak araştırılmıştır. Malzeme bilimi ve mühendisliği açısından önem arz eden Debye sıcaklığı, erime sıcaklığı, minimum termal iletkenlik ve Vicker sertliği gibi bir takım fiziksel özellikler incelenmiştir.

Ab Initio Calculation of Mechanical and Thermodynamic Properties of Ag₂ScAl Compound

Research article

Article History:

Received: 12.10.2021

Accepted: 23.11.2021

Available online: 08.12.2021

Keywords:

Ag₂ScAl

Heusler

Melting temperature

Minimum thermal conductivity

Anisotropy

ABSTRACT

Structural optimization of the cubic Ag₂ScAl compound, a member of the Heusler family, was made, and its elastic constants were calculated using optimized values. Since the calculated elastic constants meet the mechanical stability criteria, their elastic modulus was calculated. Its anisotropy has been studied in detail. A number of physical properties such as Debye temperature, melting temperature, minimum thermal conductivity and Vicker hardness, which are important in terms of materials science and engineering, were investigated.

To Cite: Arıkan N, Öztürk Aİ., 2021. Ag₂ScAl bileşiğinin mekanik ve termodinamik özelliklerinin Ab initio hesabı. Kadirli Uygulamalı Bilimler Fakültesi Dergisi, 1(2): 116-126.

Giriş

Heusler bileşikler, genellikle Half-Heusler olarak adlandırılan 1:1:1 bileşimi veya yüzlerce kübik bileşik üye içeren 2:1:1 bileşimi (Benndorf ve ark., 2015) ile dikkat çekici bir intermetalik malzeme sınıfıdır. Bu bileşikler, 1903 yılında Fritz Heusler tarafından keşfedilmelerinden bu yana, hala aktif bir araştırma alanıdır. Yapılan araştırmalar sonucunda sürekli olarak yeni özellikleri ve potansiyel uygulama alanları ortaya çıkmaktadır. Uygulama

alanları arasında enerji teknolojileri, güneş pili ve termoelektrik uygulamalar, özellik olarak geniş manyetik X_2YZ bileşikleri sınıfı manyeto-optik, manyetokalorik ve manyeto-yapısal özellikler gibi her türlü manyetik davranışı ve çok işlevli manyetik özellikler sayılabilir. Heusler fazlarının farklı özelliklerine genel bir bakış literatürde verilmektedir (Graf ve ark., 2011).

Genel olarak, Half-Heusler malzemeleri XYZ kimyasal formunda, bir kovalent ve bir iyonik kısımdan oluşan bileşikler olarak söylenebilir. X ve Y atomları belirgin bir katyonik karaktere sahipken Z, anyonik karşılık olarak görülebilir. Şekil 1.'de verilen periyodik tablodaki elementlerin renk şemasına uygun olarak elementlerin farklı birleştirilmeleri sonucunda çok fazla Heusler malzeme oluşturulabilir (Graf ve ark., 2011).

X_2YZ Heusler Bileşikler

H 2.20																	He	
Li 0.98	Be 1.57											B 2.04	C 2.55	N 3.04	O 3.44	F 3.98	Ne	
Na 0.93	Mg 1.31											Al 1.61	Si 1.90	P 2.19	S 2.58	Cl 3.16	Ar	
K 0.82	Ca 1.00	Sc 1.36	Ti 1.54	V 1.63	Cr 1.66	Mn 1.55	Fe 1.83	Co 1.88	Ni 1.91	Cu 1.90	Zn 1.65	Ga 1.81	Ge 2.01	As 2.18	Se 2.55	Br 2.96	Kr 3.00	
Rb 0.82	Sr 0.95	Y 1.22	Zr 1.33	Nb 1.60	Mo 2.16	Tc 1.90	Ru 2.20	Rh 2.28	Pd 2.20	Ag 1.93	Cd 1.69	In 1.78	Sn 1.96	Sb 2.05	Te 2.10	I 2.66	Xe 2.60	
Cs 0.79	Ba 0.89			Hf 1.30	Ta 1.50	W 1.70	Re 1.90	Os 2.20	Ir 2.20	Pt 2.20	Au 2.40	Hg 1.90	Tl 1.80	Pb 1.80	Bi 1.90	Po 2.00	At 2.20	Rn
Fr 0.70	Ra 0.90																	
		La 1.10	Ce 1.12	Pr 1.13	Nd 1.14	Pm 1.13	Sm 1.17	Eu 1.20	Gd 1.20	Tb 1.10	Dy 1.22	Ho 1.23	Er 1.24	Tm 1.25	Yb 1.10	Lu 1.27		
		Ac 1.10	Th 1.30	Pa 1.50	U 1.70	Np 1.30	Pu 1.28	Am 1.13	Cm 1.28	Bk 1.30	Cf 1.30	Es 1.30	Fm 1.30	Md 1.30	No 1.30	Lr 1.30		

Şekil 1. Periyodik tablodaki elementlerin renk şeması ile birleştirilerek Heusler malzeme oluşturulabilir (Graf ve ark., 2011).

Üçlü Heusler bileşikler, X_2YZ genel formunda bulunurlar. Genel formülde bulunan, X geçiş metallere, Y geçiş metallere veya Lantanitlerden, Z ise ana grup elementlerinden oluşur (Şekil 1).

Doğada bulunan, sentezlenen veya henüz sentezlenmemiş bileşiklerin özellikleri teorik olarak ilk prensipler hesaplamaları ile araştırılabilir. Yapılan bu teorik çalışmalar, deneysel çalışmalara çok yakın sonuçlar vermektedir (Özer ve Öztürk, 2019). Full ve inverse Heusler bileşikler üzerine çok sayıda ilk prensipler hesaplamalar ile teorik çalışmalar yapılmıştır (Bacon ve Plant, 1971; Gilleßen ve ark., 2009, 2010). Ancak yapılan literatür taramasında Ag_2ScAl bileşiğinin mekanik ve termodinamik özellikleri üzerine yapılmış deneysel veya teorik bir çalışmaya rastlanılmamıştır. Bu bakımdan ilk kez bu çalışma ile Ag_2ScAl

bileşiminin mekanik ve termodinamik özellikleri araştırılmıştır. Bu çalışmada, Ag_2ScAl bileşiminin yapısal optimizasyonundan sonra elastik sabitlerinin hesaplanması, akabinde hesaplanan bu elastik sabitler kullanılarak elastik modül, anizotropi ve Debye sıcaklığı, erime sıcaklığı, minimum termal iletkenlik gibi termodinamik özelliklerin araştırılması amaçlanmıştır.

Materyal ve Metot

Enerji hesaplamaları, yoğunluk fonksiyoneli teorisi (DFT)'ne dayanan açık kaynak Quantum Espresso (QE) yazılımı (Giannozzi ve ark., 2009) kullanılarak yapılmıştır. Hesaplamalarda GGA yaklaşıklığı (Generalized Gradient Approximation) ve elektron-elektron etkileşiminin exchange-correlation terimi için PBE (Perdew – Burke - Ernzerhof) fonksiyoneli (Perdew ve ark., 1996) tercih edilmiştir. Çekirdek elektronlar ile valans elektronların etkileşimi için yazılımın internet sitesinden temin edilen pseudo potansiyel dosyaları kullanılmıştır. Yapılan tüm enerji hesaplamalarında kinetik enerji cutoff değeri olarak 40 Ry, ecutrho değeri olarak 400 Ry optimize değeri tercih edilmiştir. Elastik sabitlerin hesaplanmasında QE yazılımı ile dağıtılan THERMO_PW scripti, anizotropiyi görselleştirmek için ELATE yazılımı (Gaillac ve ark., 2016) kullanılmıştır.

Bulgular ve Tartışma

XYZ genel formunda olan Half-Heusler malzemeler kübik yapıda ve 216, F-43m, $C1_b$ uzay grubunda kristalleşirler. X, Y ve Z atomları sırası ile 4a (0, 0, 0), 4b (1/2, 1/2, 1/2) ve 4c (1/4, 1/4, 1/4) Wyckoff pozisyonunda bulunurlar. Heusler bileşikler ise X_2YZ formunda, kübik yapıda ve 225, Fm-3m uzay grubunda kristalleşirler. X atomları, 8c (1/4, 1/4, 1/4), Y ve Z atomları 4a (0, 0, 0) ve 4b (1/2, 1/2, 1/2), Wyckoff pozisyonunda bulunurlar (Graf ve ark., 2011).

Ag_2ScAl bileşiği kübik yapıda ve Fm-3m, 225 uzay grubunda kristalleştiği ve örgü sabitinin 6,564 Å olduğu rapor edilmiştir (Villars ve ark., 2013). Yapılan optimizasyon sonucunda Ag_2ScAl bileşiminin örgü sabiti 6,57 Å olarak hesaplanmıştır. Bulunan bu değer literatür verisi ile uyumludur.

Optimize cutoff, ecutrho ve örgü sabitleri kullanılarak Ag_2ScAl bileşiminin elastik sabitleri hesaplanmış ve değerleri 110,065 (C_{11}), 87,493 (C_{12}) ve 59,444 (C_{44}) GPa olarak bulunmuştur. Bulunan bu elastik sabitler mekanik kararlılık kriterlerini (Beckstein ve ark., 2001) karşılamaktadır. Elastik sabitlerin mekanik kararlılık kriterlerini sağlamasından dolayı

Ag₂ScAl bileşiğinin mekanik olarak kararlı olduğu söylenebilir. Mekanik kararlı bileşiklerin elastik modülleri (Bulk, Shear, Young modülleri ve Poisson oranı) hesaplanabilir. Literatürde bu modüllerin hesaplanması için kullanılan eşitlikler mevcuttur (Özer, 2019a). Bulk, shear, Young modülü ve poisson oranı (9) gibi fiziksel özellikler Voight (Voigt, 1966), Reuss (Reuss, 1929) ve Hill (Hill, 1952) yaklaşımında hesaplanarak Tablo 1’de verilmiştir.

Tablo 1. Ag₂ScAl bileşiği için hesaplanan elastik modüller.

	Voigt	Reuss	Hill
Bulk modülü (GPa)	95,02	95,02	95,02
Shear modülü (GPa)	40,18	21,96	31,07
Young modülü (GPa)	105,65	61,17	84,05
Poisson oranı	0,315	0,393	0,353

Poisson oranı, G/B oranı ve Cauchy basıncına bakılarak malzemenin sünek (Ductile)/kırılgan (Brittle) doğası tahmin edilebilmektedir. Sünek özellik gösteren malzemelerde Poisson oranı 0,26’dan büyük (Özer, 2021), G/B oranı 0,5’den küçük (Özer, 2019b), Cauchy basıncı pozitif (Surucu ve Erkisi, 2018) değer alır. Yapılan hesaplamalarda Poisson oranı 0,353, G/B oranı 0,327 ve Cauchy basıncı 28,049 olarak hesaplanmıştır. Bu sonuca göre Ag₂ScAl bileşiğinin sünek özellik göstermesi beklenmektedir. Poisson oranı malzemede etkili olan bağ kuvvetleri hakkında da bilgi vermektedir. Merkezi kuvvetler için alt limit 0,25, üst limit 0,50’dir (Özer ve Çabuk, 2019). Hesaplanan Poisson oranı bu limitler dahilinde olduğu için merkezi kuvvetlerin etkisi altında olduğu söylenebilir.

Elastik modüller malzemenin sertliği hakkında bilgi vermektedir. Değerlerin büyük olması malzemenin sertliğine işaret etmektedir. Sadece elastik modüllere bakarak malzemenin sertliği hakkında bilgi edinmek yeterli olmadığından ayrıca Vicker sertliği de tanımlanmıştır. Literatürde Vicker sertliğini tanımlayan birtakım modeller vardır. Bunlardan bazıları,

Chen modeli (Chen ve ark., 2011),

$$H_v = 2(k^2 G)^{0.585} - 3 \quad (1)$$

Yousef modeli (Yousef ve ark., 2006),

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

Tian modeli (Tian ve ark., 2012),

$$H_v = 0,92 k^{1,137} G^{0,708} \quad (3)$$

Yukarıda verilen eşitlikler kullanılarak Ag₂ScAl bileşiği için Vickers sertliği 1,037 (Chen), 3,054 (Yousef) ve 2,940 GPa (Tian) olarak hesaplanmıştır. Vicker sertliği 10 GPa'dan küçük olduğunda yumuşak (Liu ve ark., 2020), 40 GPa'dan büyük olduğunda süper sert malzeme (Haines ve ark., 2001; Vepek, 2008) olarak sınıflandırılmaktadır. Bu sınıflandırmaya göre Ag₂ScAl bileşiği yumuşak malzeme sınıfına girmektedir. Bu yüzden sertlik gerektiren delici ve kesi uygulamalarda kullanılması beklenilmemektedir.

Malzemenin elastik sabitleri ile erime sıcaklığı arasında da bir ilişki vardır. Bu ilişki neticesinde malzemenin erime sıcaklığını tahmin eden bir takım ampirik bağıntılar vardır. Bu bağıntılar vasıtası ile malzemenin erime noktası teorik olarak hesaplanabilmektedir. Erime noktasını tahmin eden modeller

Fine model (Fine ve ark., 1984),

$$T_m = 553 + 5.91 C_{11} \quad (4)$$

$$T_m = 607 + 9.3 B \quad (5)$$

Özer model (Özer, 2018),

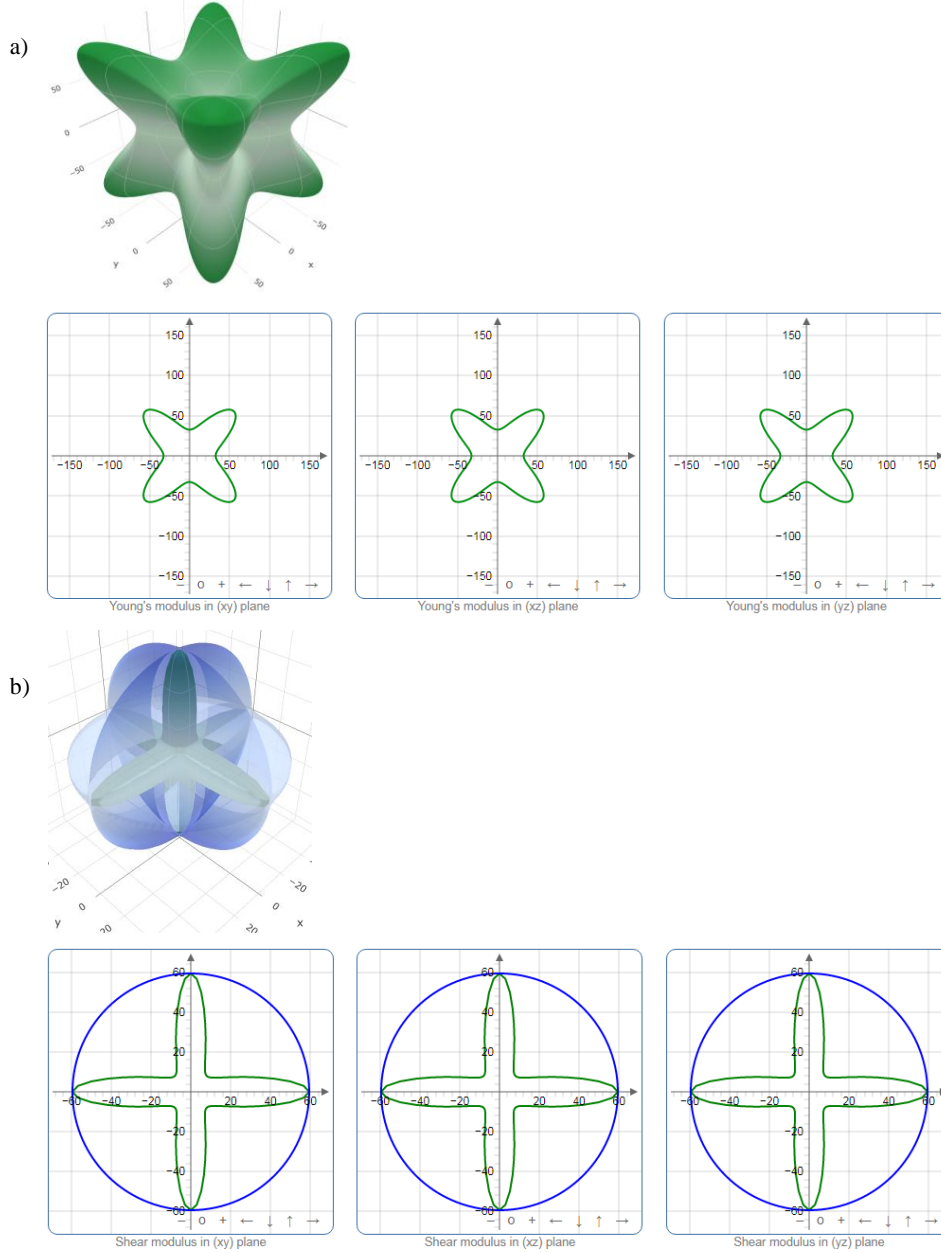
$$T_m = 560.4 + 7.805 C_{11} - 3.094 C_{12} - 1.086 C_{44} \quad (6)$$

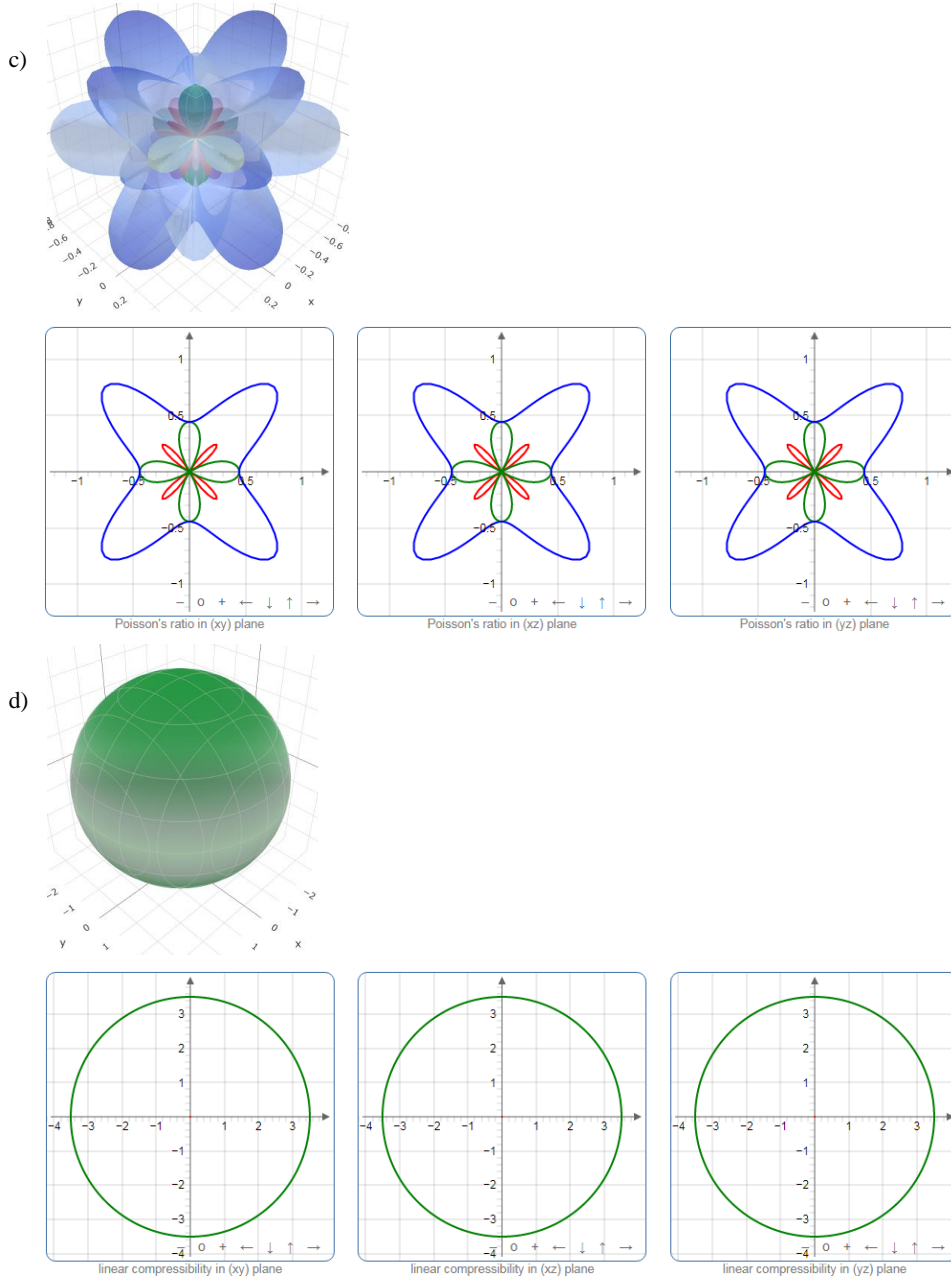
Yukarıdaki eşitlikler kullanılarak Ag₂ScAl bileşiğinin erime noktası 1203 (eşitlik 4), 1490 (eşitlik 5) ve 1084 K (eşitlik 6) olarak hesaplanmıştır.

Yine elastik sabitler ve ortalama ses hızlarından karakteristik Debye sıcaklığı ve minimum termal iletkenlikler hesaplanabilir. Yapılan hesaplamalar sonucunda Debye sıcaklığı 347 K, minimum termal iletkenliği 0,496 (Clarke, 2003), 0,572 (Cahill ve ark., 1992) ve 0,390 Wm⁻¹K⁻¹ (Long ve ark., 2015) olarak hesaplanmıştır. Hesaplanan minimum termal iletkenliklerin küçük olmasından dolayı Ag₂ScAl bileşiğinin termal yalıtkanlık gerektiren uygulamalarda kullanılabileceği beklenilmektedir.

Malzemenin fiziksel ya da mekanik özelliklerinin yöne bağlı olarak değişmesi, anizotropi olarak tanımlanabilmektedir. Malzeme bilimi ve uygulamaları bakımından malzemenin anizotropisinin de bilinmesi önem arz etmektedir. Bu nedenle yöne bağlı malzeme özelliklerinin ve altındaki mekanizmanın anlaşılması farklı özellikler gerektiren uygulamalara yönelik uygun malzeme seçiminde yardımcı olabilecektir. Malzemenin anizotropisi, evrensel anizotropi index (Ranganathan ve Ostoja-Starzewski, 2008), Chung-Buessem anizotropi index (Buessem ve Chung, 1968), Zener anizotropik index (Nye, 1985) ve elastik anizotropi faktörü (Every, 1980) gibi farklı şekillerde ifade edilebilmektedir.

Yapılan hesaplamalarda evrensel anizotropi 4,148, Chung-Buessem anizotropi 29,32, Zener anizotropi 5,26 ve elastik anizotropi faktörü 1,903 olarak bulunmuştur. Bulunan bu sonuçlara göre Ag_2ScAl bileşiğinin anizotropik davranış sergilemesi beklenilmektedir. Malzemenin anizotropisi ELATE yazılımı (Gaillac ve ark., 2016) ile görselleştirilerek Şekil 2’de verilmiştir.





Şekil 2. Ag₂ScAl bileşiğinin anizotropisinin görselleştirilmesi. (a) Young's modülü, (b) Shear modülü, (c) Poisson'nın oranı, (d) linear sıkıştırılabilirliğinin 3D ve 2D şekilleri

Şekilde küresellikten sapmalar anizotropiyi göstermektedir. Şekil 2.'den de açıkça görüleceği üzere Ag₂ScAl bileşiğinin anizotropik davranması beklenmektedir.

Sonuç ve Öneriler

Enerji hesaplamaları açık kaynak QE yazılımı ile yapılan bu çalışmada Ag₂ScAl bileşiğinin yapısal optimizasyonu yapılmış ve optimizasyon sonucunda örgü sabiti 6,57 Å olarak hesaplanmıştır. Optimize değerler kullanılarak kübik yapının elastik sabitleri 110,065 (C_{11}), 87,493 (C_{12}) ve 59,444 (C_{44}) GPa olarak hesaplanmıştır. Elastik sabitleri mekanik

kararlılık kriterlerini karşıladığından malzeme mekanik olarak kararlıdır. Mekanik kararlı malzemenin elastik sabitleri kullanılarak elastik modülü hesaplanmış ve anizotropisi incelenmiştir. Detaylı anizotropi araştırılmasından malzemenin anizotropik davranış sergilemesi beklenmektedir. Malzeme bilimi ve mühendisliği için önem arz eden Vicker sertliği, Debye sıcaklığı, erime sıcaklığı ve minimum termal iletkenlikleri hesaplanmıştır. Yapılan hesaplamalar sonucunda malzemenin yumuşak olduğu görülmüş, termal yalıtkan olarak kullanılabilmesi yargısına ulaşılmıştır.

Araştırmacıların Katkı Oranı Beyan Özeti

Yazarlar makaleye eşit oranda katkı sağlamış olduklarını beyan ederler.

Çıkar Çatışması Beyanı

Makale yazarları aralarında herhangi bir çıkar çatışması olmadığını beyan ederler.

Kaynaklar

Bacon GE, Plant JS., 1971. Chemical ordering in Heusler alloys with the general formula A_2BC or ABC . *Journal of Physics F. Metal Physics*, 1(4): 524. <https://doi.org/10.1088/0305-4608/1/4/325>

Beckstein O, Klepeis JE, Hart GLW, Pankratov O., 2001. First-principles elastic constants and electronic structure of α -Pt₂Si and PtSi. *Physical Review B*, 63(13): 134112. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.63.134112>

Benndorf C, Niehaus O, Eckert H, Janka O., 2015. ²⁷Al and ⁴⁵Sc NMR spectroscopy on ScT₂Al and Sc(T_{0.5}T'_{0.5})₂Al (T = T' = Ni, Pd, Pt, Cu, Ag, Au) heusler phases and superconductivity in Sc(Pd_{0.5}Au_{0.5})₂Al. *Zeitschrift Für Anorganische Und Allgemeine Chemie*, 641(2): 168-175. <https://doi.org/10.1002/ZAAC.201400509>

Buessem DH, Chung WR., 1968. Anisotropy in single-crystal refractory compounds (F. W. Vahldiek & S. A. Mersol, Eds.; 1st edit). Springer US. <https://doi.org/10.1007/978-1-4899-5307-0>

Cahill DG, Watson SK, Pohl RO., 1992. Lower limit to the thermal conductivity of disordered crystals. *Physical Review B*, 46(10): 6131. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.46.6131>

Chen XQ, Niu H, Li D, Li Y., 2011. Modeling hardness of polycrystalline materials and bulk metallic glasses. *Intermetallics*, 19(9): 1275-1281. <https://doi.org/10.1016/j.intermet.2011.03.026>

Clarke DR., 2003. Materials selections guidelines for low thermal conductivity thermal barrier coatings. *Surface and Coatings Technology*, 163-164: 67-74. [https://doi.org/10.1016/S0257-8972\(02\)00593-5](https://doi.org/10.1016/S0257-8972(02)00593-5)

Every AG., 1980. General closed-form expressions for acoustic waves in elastically anisotropic solids. *Physical Review B*, 22(4): 1746. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.22.1746>

Fine ME, Brown LD, Marcus HL., 1984. Elastic constants versus melting temperature in metals. *Scripta Metallurgica*, 18(9): 951-956. [https://doi.org/10.1016/0036-9748\(84\)90267-9](https://doi.org/10.1016/0036-9748(84)90267-9)

Gaillac R, Pullumbi P, Coudert FX., 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>

Giannozzi P, Baroni S, Bonini N, Calandra M, Car R, Cavazzoni C, Ceresoli D, Chiarotti GL, 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 RM., 2009. Quantum Espresso: A modular and open-source software project for quantum simulations of materials. *Journal of Physics Condensed Matter*, 21(39). <https://doi.org/10.1088/0953-8984/21/39/395502>

Gilleßen M., Dronskowski R., 2009. A combinatorial study of full Heusler alloys by first-principles computational methods. *Wiley Online Library*, 30(8): 1290-1299. <https://doi.org/10.1002/jcc.21152>

Gilleßen M, Dronskowski R., 2010. A combinatorial study of inverse Heusler alloys by first-principles computational methods. *Wiley Online Library*, 31(3): 612-619. <https://doi.org/10.1002/jcc.21358>

Graf T, Felser C, Parkin SSP., 2011. Simple rules for the understanding of Heusler compounds. *Progress in Solid State Chemistry*, 39(1): 1-50. <https://doi.org/10.1016/j.progsolidstchem.2011.02.001>

Haines J, Léger J, Bocquillon G., 2001. Synthesis and design of superhard materials. *Annual Review of Materials Research*, 31(1): 1-23. <https://doi.org/10.1146/annurev.matsci.31.1.1>

Hill R., 1952. The elastic behaviour of a crystalline aggregate. proceedings of the physical society. Section A, 65(5): 349-354. <https://doi.org/10.1088/0370-1298/65/5/307>

Liu W, Niu Y, Li W., 2020. Theoretical prediction of the physical characteristic of Na₃MO₄ (M=Np and Pu): The first-principles calculations. *Ceramics International*, 46(16): 25359-25365. <https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2020.07.003>

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. <https://doi.org/10.1016/J.JALLCOM.2015.04.229>

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, Eds.; pp. 87–99). 4th International Congress on Multidisciplinary Studies.

Özer T., 2019a. Study of first principles on anisotropy and elastic constants of YA13 compound. *Chinese Journal of Physics*, 98(4): 357-363. <https://doi.org/10.1139/CJP-2018-0448>

Özer T., 2019b. Study of first principles on anisotropy and elastic constants of Y3Al2 compound. *Chinese Journal of Physics*, 61: 180-189. <https://doi.org/10.1016/J.CJPH.2019.08.011>

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>

Özer T, Çabuk S., 2019. Investigation of structural and mechanical properties of rutile SnO₂. *Materials Research Express*, 6(8): 085069. <https://doi.org/10.1088/2053-1591/ab1fd2>

Özer T, Öztürk Aİ., 2019. Theoretical investigation of the effect of pressure on structural parameters of ferroelectric SbSI Crystal. In B. Kurt, C. Çarboğa, Z. B. Öztürk, & N. Küçükdeveci (Eds.), *IMSTEC 2019* (pp. 176–179).

Perdew JP, Burke K, Ernzerhof M., 1996. Generalized gradient approximation made simple. *Physical Review Letters*, 77(18): 3865. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.77.3865>

Ranganathan SI, Ostoja-Starzewski M., 2008. Universal elastic anisotropy index. *APS*, 101(5). <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.101.055504>

Reuss A., 1929. Berechnung der Fließgrenze von Mischkristallen auf Grund der Plastizitätsbedingung für Einkristalle . ZAMM - Zeitschrift Für Angewandte Mathematik Und Mechanik, 9(1): 49-58. <https://doi.org/10.1002/zamm.19290090104>

Surucu G, Erkisi A., 2018. The first principles investigation of structural, electronic, mechanical and lattice dynamical properties of the B and N doped M₂AX Type MAX phases Ti₂AlB_{0.5}C_{0.5} and Ti₂AlN_{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>

Vepek S., 2008. Nanostructured superhard materials. In Handbook of Ceramic Hard Materials (pp. 104–139). Wiley-VCH Verlag GmbH. <https://doi.org/10.1002/9783527618217.ch4>

Villars P, Cenzual K, Gladyshevskii R., 2013. Part 3. In >Inorganic Substances. Handbook. DE GRUYTER. <https://doi.org/10.1515/9783110276596.172>

Voigt W., 1966. Lehrbuch der Kristallphysik. In Lehrbuch der Kristallphysik. Vieweg+Teubner Verlag. <https://doi.org/10.1007/978-3-663-15884-4>

Yousef ES, 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(3): 108-113. <https://doi.org/10.1016/J.SSC.2006.05.022>