بررسی تأثیر نقص نقطه‌ای تهی‌جای بر رفتار مکانیکی و ترموفیزیکی فلز زیرکونیوم

INC29-1161

امیر علی ولی الهی، قاسم اله یاری زاده*، عبدالحمید مینوچهر

گروه چرخه سوخت، دانشکده مهندسی هسته‌ای، دانشگاه شهید بهشتی، ۱۹۸۳۹۶۹۴۱۱، تهران-ایران

چکیده:

فلز زیرکونیوم و آلیاژهای آن به طور وسیعی در راکتورهای هسته‌ای به‌ویژه در ساخت غلاف سوخت به کار می‌روند. بلور زیرکونیوم هنگام قرار گرفتن در محیط عملیاتی راکتور در معرض شار نوترون قرار گرفته و نقص‌های ساختاری مختلفی از جمله نقص‌های نقطه‌ای تهی‌جای، بین نشینی، و جانشینی در آن ایجاد می‌شود. نقص نقطه‌ای تهی‌جای یکی از مهمترین نقص‌های ساختاری است که اثرات زیادی بر روی خواص ساختاری، مکانیکی و حرارتی ماده به جای می‌گذارد. در این پژوهش، با روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی و با استفاده از کد شبیه‌سازی لمپس، خواص مختلف ساختاری، مکانیکی و ترموفیزیکی بلور زیرکونیوم کامل و تاثیر نقص نقطه‌ای تهی‌جای در غلظت‌های مختلف بر این خواص مورد بررسی قرار گرفته است. نتایج شبیه‌سازی نشان می‌دهد که با افزایش نقص تهی‌جای تا مقدار ۲ درصد، ثوابت شبکه، چگالی، مدول حجمی و ضریب پواسون کاهش می‌یابند در حالی‌که مدول برشی، مدول یانگ و دمای دیبای روند صعودی را نشان می‌دهند.

کلیدواژه‌ها: زیرکونیوم، راکتورهای هسته‌ای، شبیه سازی دینامیک مولکولی، نقص تهی‌جای، خواص مکانیکی

Investigating the effects of vacancies on the mechanical and thermophysical behavior of zirconium

Amir Alivaliollahi[1], Ghasem Alahyarizadeh[1*], AbdolHamid Minuchehr[1]

1. Faculty of Engineering, Shahid Beheshti University, 1983969411, Tehran, Iran.

Abstract:

Zirconium and its alloys are widely used in nuclear reactors, especially in nuclear fuel cladding. Zirconium crystal in the operating condition in the nuclear reactor is exposed to the neutron flux which causes various structural defects such as point defects are created in it. In this research, using the molecular dynamics simulation method, the structural, mechanical, and thermophysical properties of the perfect zirconium crystal and the effect of vacancy point defects in different concentrations on these properties have been investigated. The simulation results show that with the increase of the vacancy defect up to 2%, the lattice constants, density, bulk modulus, and Poisson's ratio decrease, while the shear modulus, Young's modulus, and Debye temperature show an upward trend.

Keywords: Zirconium, nuclear reactors, molecular dynamic simulations, vacancy defect, mechanical properties.

۱. مقدمه

زیرکونیوم و آلیاژهای آن به دلیل سطح مقطع جذب نوترون حرارتی پایین، خواص مکانیکی خوب و مقاومت در برابر خوردگی بالا در محیط‌های آبی، به طور گسترده به عنوان غلاف سوخت در راکتورهای هسته‌ای استفاده می‌شوند. بلور زیرکونیوم هنگام قرار گرفتن در محیط عملیاتی راکتور در معرض شار نوترون قرار می‌گیرد. برخورد نوترون با اتم‌های شبکه بلوری زیرکونیوم موجب جابجایی اتم‌ها و پس از آن برخورد اتم‌های جابجا شده با اتم‌های دیگر می‌شود و در نهایت ایجاد یک آبشار جابجایی در ساختار شبکه بلوری می‌شود. این فرآیند غلظت بالایی از نقص‌های نقطه‌ای از جمله تهی‌جای و خود بین نشینی را در منطقه آبشار ایجاد می‌کند[۱،۲]. نقص‌های نقطه‌ای و هم‌چنین میزان غلظت آن‌ها می‌تواند تاثیر قابل توجهی بر خواص مکانیکی و ترموفیزیکی زیرکونیوم داشته باشد[۳].

اخیراً، با استفاده از شبیه سازی‌های کامپیوتری مطالعاتی جهت بررسی اثر تهی‌جای‌ها بر خواص مکانیکی زیرکونیوم انجام شده است. ژنگ و همکاران[۴] با استفاده از نظریه تابعی چگالی ثابت‌های الاستیک زیرکونیوم با وجود نقص تهی‌جای را محاسبه کردند. مطابق با نتایج آن‌ها مقادیر ثوابت $C_{۱۱}$، $C_{۳۳}$ و $C_{۴۴}$ با افزایش درصد نقص تهی‌جای افزایش می‌یابند در حالی که در ثوابت $C_{۱۲}$ و $C_{۱۳}$ روند کاهشی مشاهده شد. اولسون و همکاران[۵] افزایش ناپایداری انرژی انباشتگی و کاهش انرژی سطحی به دلیل وجود نقص تهی‌جای را گزارش کردند که نشان دهنده کاهش شکل پذیری فلز زیرکونیوم می‌باشد. ژو و همکاران[۶] نیز اخیرا با روش مبتنی بر محاسبات اصول اولیه و با محاسبه ثوابت الاستیک، به بررسی برخی خواص مکانیکی فلز زیرکونیوم در حضور غلظت‌های متفاوت نقص‌های بلوری پرداختند. اگرچه تلاش‌های مختلفی در این زمینه صورت گرفته است اما یک مطالعه کامل در مورد تاثیر وجود نقص‌های ساختاری بر خواص فیزیکی، مکانیکی و ترموفیزیکی فلز زیرکونیوم احساس می‌گردد. در پژوهش پیش رو، با استفاده از روش شبیه سازی دینامیک مولکولی به بررسی اثر وجود نقص تهی‌جای در بلور فلز زیرکونیوم و تاثیر آن بر خواص مختلف این ماده پرداخته شده است.

۲. روش کار

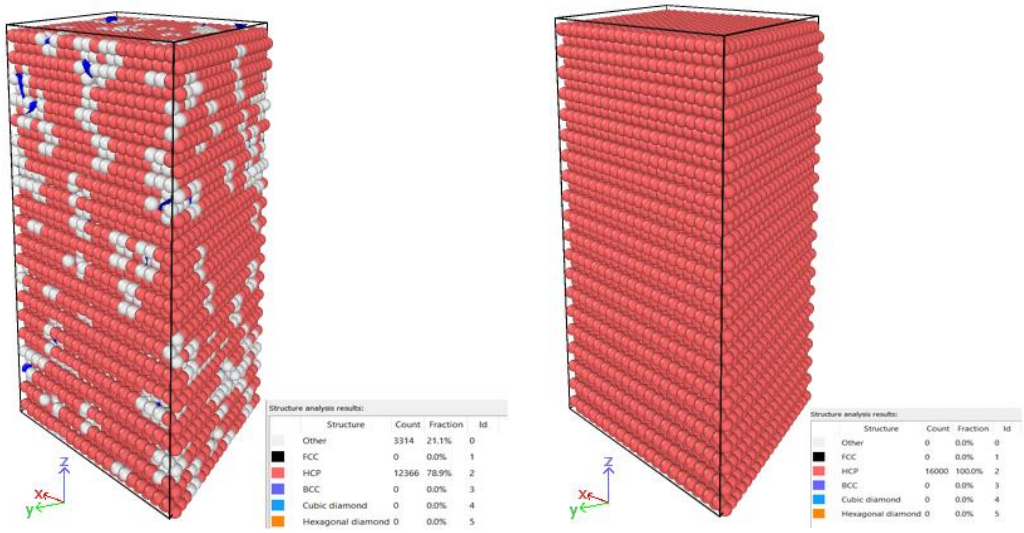
شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی در پژوهش پیش رو با استفاده از کد لمپس[۱][۷] صورت گرفته است. همچنین برای ساخت جعبه‌های شبیه‌سازی و ایجاد نقص‌های تهی‌جای در ساختار بلوری زیرکونیوم از نرم افزار اتمسکا[۲][۸] استفاده شده است.

به منظور انتخاب پتانسیل مناسب برای انجام شبیه‌سازی، پتانسیل‌های مختلفی بررسی شدند و از میان آن‌ها پتانسیل بین اتمی که توسط هوانگ و همکاران[۹] و به روش اتم احاطه شده تعمیم یافته[۳] توسعه پیدا کرده است، برای انجام شبیه سازی‌های اصلی انتخاب شد. جعبه‌های شبیه سازی با ابعاد ۹۸Å/۹۴Å × ۶۴Å/۱۰۲ × ۶۴/۵۵ (شامل ۱۶۰۰۰ اتم) برای فلز زیرکونیوم ساخته شد و درصدهای مختلف ۰/۱، ۰/۵، ۱ و ۲ درصد از نقص تهی‌جای به صورت تصادفی در جعبه‌های شبیه سازی ایجاد گردید. در شکل ۱ جعبه شبیه سازی ساخته شده برای فلز زیرکونیوم کامل در مقایسه با فلز زیرکونیوم با ۲ درصد نقص تهی جای به عنوان نمونه برای ساختارهای دارای نقص، آورده شده‌اند. هم‌چنین در هر سه راستا شرایط مرزی دوره‌ای اعمال شد. برای محاسبه ثابت‌های الاستیک، انرژی سیستم با استفاده از روش حداقل سازی انرژی مزدوج-گرادیان به حداقل رسید سپس با استفاده از آنسامبل‌های هم دما و هم دما-فشار در دمای ۳۰۰

---

[۱] LAMMPS (Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator package, Sandia National Laboratories, Albuquerque, NM, USA)
[2] Atomsk (Atom, Molecule, Material Software Kit, University of Lille, Lille, France)
[3] Modified Embedded Atom Method (MEAM)

کلوین و فشار هیدروستاتیک صفر متعادل سازی گردید. پس از آن، با استفاده از روش نوسانات کرنشی، در راستاهای مثبت و منفی هر سه محور مختصات تغییر شکل‌هایی با آهنگ کرنش از ۰/۰۰۰۱ تا ۰/۰۱ اعمال گردید که با مقایسه نتایج به دست آمده، آهنگ کرنش ۰/۰۰۱ به عنوان آهنگ کرنش بهینه برای سایر شبیه سازی‌ها انتخاب گردید.



ب الف

شکل ۱ جعبه‌های شبیه سازی ساخته شده برای فلز زیرکونیوم الف) با ساختار کامل ب) با ساختار دارای ۲ درصد نقص تهی جای

نتایج محاسبه شده برای ساختار بلوری کامل زیرکونیوم به روش دینامیک مولکولی و نتایج به دست آمده از مطالعات تجربی و تئوری تابعی چگالی قبلی در جدول ۱ ارائه شده است. همان گونه که مشاهده می‌شود، نتایج محاسبه شده به روش دینامیک مولکولی بسیار به نتایج تجربی گزارش شده توسط فیشر و همکاران[۱۰] نزدیک بوده و نسبت به کارهای تئوری قبلی از دقت بالاتری برخوردار می‌باشد.

جدول ۱ پارامترهای شبکه (a و c/a)، خواص الاستیکی (C_{ij}) و مدول‌های مکانیکی (B، G و E) زیرکونیوم آلفا در شرایط محیط محاسبه شده به روش دینامیک مولکولی در مقایسه با مقادیر گزارش شده در کارهای تجربی و تئوری قبلی

منابع	ثابت شبکه (Å)	نسبت c/a	$C_{۱۱}$ (GPa)	$C_{۱۲}$ (GPa)	$C_{۱۳}$ (GPa)	$C_{۳۳}$ (GPa)	$C_{۴۴}$ (GPa)	مدول حجمی (GPa)	مدول برشی (GPa)	مدول یانگ (GPa)
کار حاضر	۳/۲۳۴	۱/۵۹۳	۱۴۹/۲	۷۰/۰	۶۳/۶	۱۵۶/۶	۳۳/۵	۹۴/۴	۳۸/۲	۱۰۱/۰
کار تجربی[۱۰]	۳/۲۳۰	۱/۵۹۳	۱۴۳/۴	۷۲/۸	۶۵/۳	۱۶۴/۸	۳۲/۰	۹۵/۳	۳۶/۰	۹۶/۰
کار تئوری[۶]DFT	۳/۲۳۳	۱/۶۰۶	۱۴۱/۷	۷۲/۶	۶۳/۹	۱۶۲/۱	۲۳/۶	۹۴/۰	۳۱/۶	۸۵/۲
کار تئوری[۱۱،۱۲]DFT	۳/۲۳۰	۱/۵۹۳	۱۴۵/۳	۶۷/۳	۶۹/۵	۱۶۶/۱	۲۴/۳	۹۶/۴	۳۳/۱	۸۹/۱
کار تئوری[۱۳]DFT	۳/۲۳۶	۱/۵۹۷	۱۴۶/۷	۶۸/۵	۷۱/۰	۱۶۳/۳	۲۶/۰	۹۷/۴	۳۳/۸	۹۰/۹

با استفاده از ثوابت الاستیک، می‌توان مدول‌های مکانیکی پلی کریستال‌های همسانگرد را براساس تقریب‌های وویت، رئوس و هیل[1] محاسبه کرد که به ترتیب کران بالا، کران پایین و میانگین آن دو می‌باشند. برای یک بلور شش ضلعی، مدول‌های حجمی، برشی، یانگ و ضریب پواسون هر کدام از تقریب‌ها توسط معادلات ۱ تا ۸ محاسبه می‌شوند:

$$B_V = \frac{2(C_{11}+C_{12})+4C_{13}+C_{33}}{9} \quad (۱)$$

$$G_V = \frac{1}{30}(C_{11}+C_{12}+2C_{33}-4C_{13}+12C_{44}+12C_{66}) \quad (۲)$$

$$B_R = \frac{C_{33}(C_{11}+C_{12})-2C_{13}^2}{C_{11}+C_{12}+2C_{33}-4C_{13}} \quad (۳)$$

$$G_R = \frac{5}{2}\frac{C_{44}C_{66}[C_{33}(C_{11}+C_{12})-2C_{13}^2]}{3B_VC_{44}C_{66}+(C_{44}+C_{66})[C_{33}(C_{11}+C_{12})-2C_{13}^2]} \quad (۴)$$

$$B_H = \frac{B_V+B_R}{2} \quad (۵)$$

$$G_H = \frac{G_V+G_R}{2} \quad (۶)$$

$$E = \frac{9BG}{3B+G} \quad (۷)$$

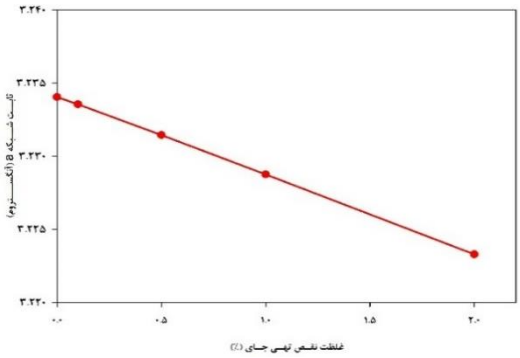
$$\nu = \frac{3B-2G}{2(3B+G)} \quad (۸)$$

در بخش بعدی با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی مقادیر محاسبه شده برای ویژگی‌های ساختاری، ثوابت الاستیک، خواص مکانیکی براساس روابط ارائه شده و برخی خوص ترموفیزیکی فلز زیرکونیوم با ساختار بلوری کامل و دارای نقص تهی‌جای با درصدهای ۰/۱، ۰/۵، ۱ و ۲ ارائه خواهد شد.

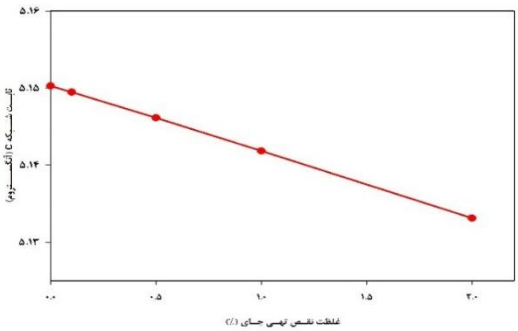
۳. نتایج و بحث

۳.۱ ویژگی‌های ساختاری

در شکل ۲ مقادیر ثابت‌های شبکه a و c و چگالی محاسبه شده برای بلورهای مختلف فلز زیرکونیوم ارائه شده است. نتایج این شکل نشان می‌دهد که با افزایش درصد نقص تهی جای در ساختار بلوری زیرکونیوم، ثابت‌های شبکه در دو راستای x و z کاهش یافته و متعاقبا چگالی نیز کاهش می‌یابد.

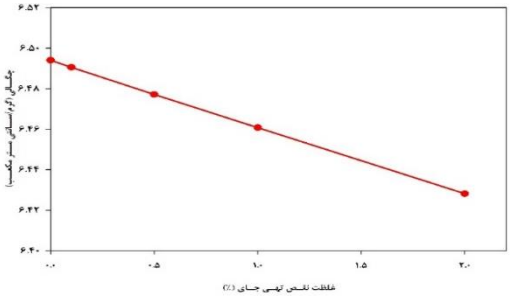


الف



ب

1 Voigt, Reuss, and Hill

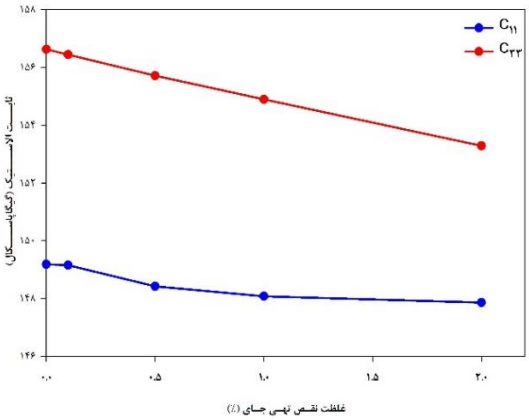


ج

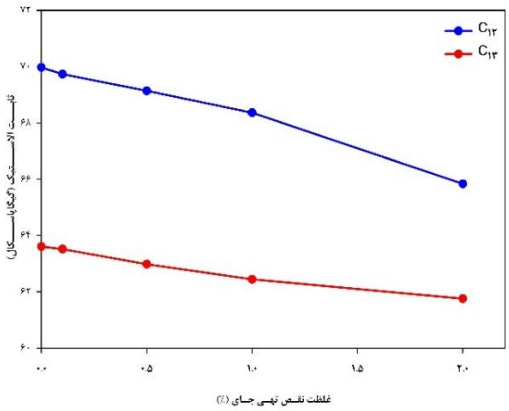
شکل ۲ ویژگی‌های ساختاری الف) ثابت شبکه a ب) ثابت شبکه c و ج) چگالی محاسبه شده برای ساختارهای بلوری مختلف زیرکونیوم با درصدهای ۰، ۰/۱، ۰/۵، ۱ و ۲ درصد نقص تهی جای

۳. ۲ خواص الاستیک

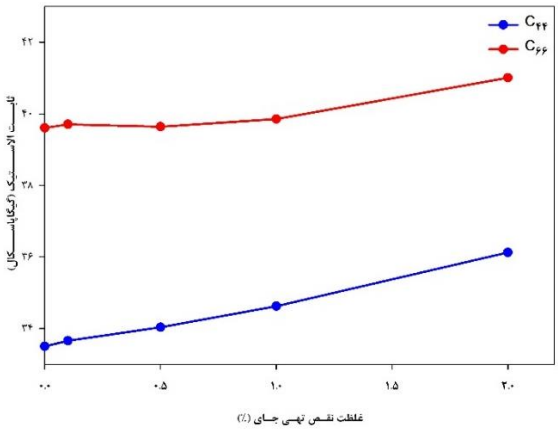
شکل ۳ مقادیر ثوابت الاستیک به دست آمده از شبیه سازی دینامیک مولکولی برای ساختارهای مختلف فلز زیرکونیوم کامل و دارای نقص تهی جای را نشان می‌دهد. با توجه به شکل ۳-الف و ب مشاهده می‌شود که وجود نقص باعث کاهش ثابت‌های الاستیک C_{11}، C_{33}، C_{12} و C_{13} نسبت به حالت کریستال کامل می‌گردد. هم‌چنین شکل ۳-ج نیز نشان می‌دهد که وجود نقص باعث افزایش مقدار ثابت‌های C_{44} و C_{66} خواهد شد.



الف



ب

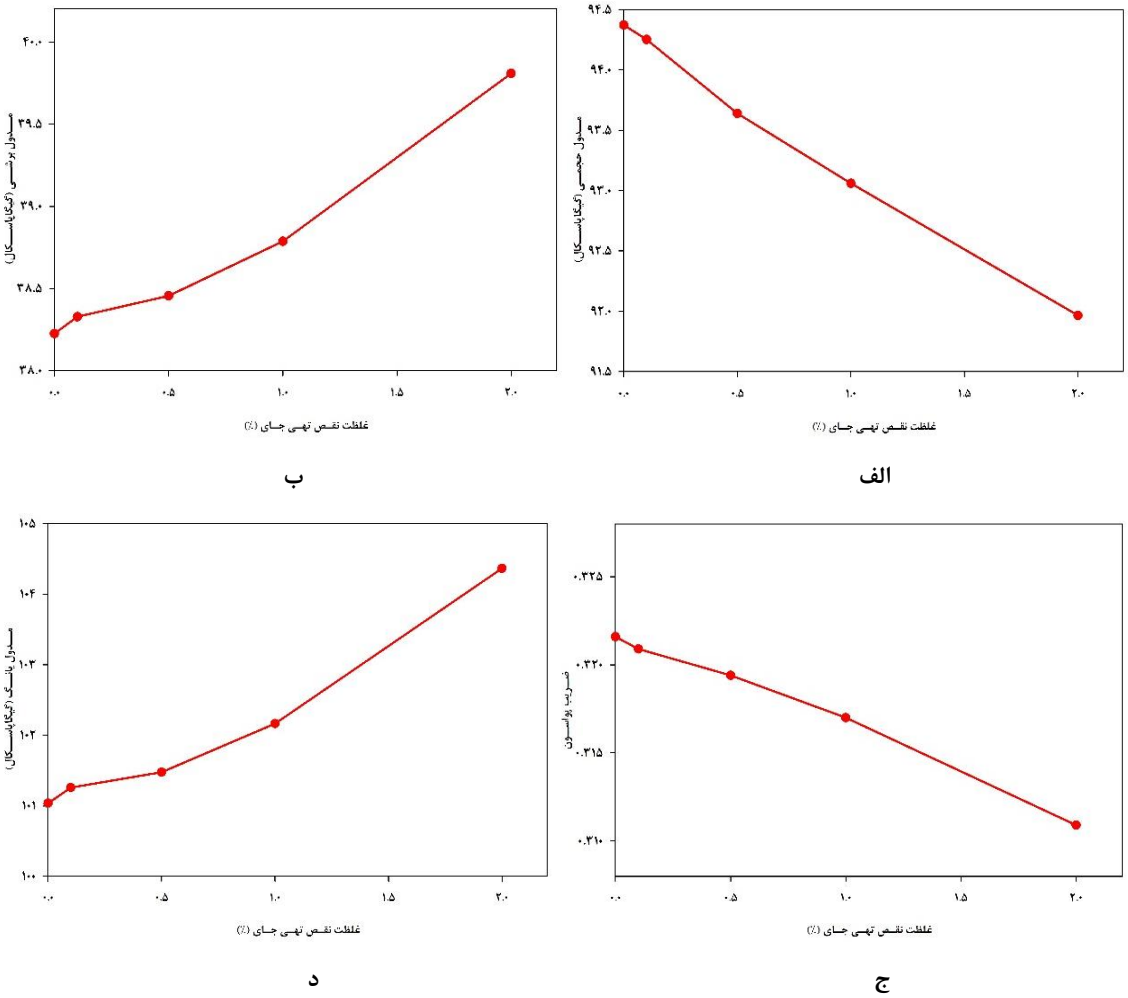


ج

شکل ۳ ثوابت الاستیک الف) C_{11} و C_{33} ب) C_{12} و C_{13} ج) C_{44} و C_{66} محاسبه شده برای ساختارهای بلوری مختلف زیرکونیوم با درصدهای ۰، ۰/۱، ۰/۵، ۱ و ۲ درصد نقص تهی جای

۳. ۳ خواص مکانیکی

تغییرات خواص مکانیکی فلز زیرکونیوم با توجه به غلظت نقص تهی جای در شکل۴ نشان داده شده است. با افزایش میزان نقص، مدول حجمی به طور تقریبا یکنواختی کاهش می‌یابد که بیانگر کاهش مقاومت بلور زیرکونیوم در برابر فشردگی حجمی می‌باشد. در طرف مقابل، مدول‌های برشی و یانگ با افزایش غلظت تهی‌جای افزایش می‌یابند اگرچه ضریب پواسون که به نوعی نشان دهنده انعطاف پذیری ماده می‌باشد با افزایش نقص کاهش می‌یابد. نتایج به دست آمده که به طور دقیقی با نتایج ارائه شده توسط ژو و همکاران[۶] مطابقت دارد نشان می‌دهد که وجود نقص تهی‌جای با غلظت تا ۲ درصد می‌تواند موجب افزایش مقاومت بلور زیرکونیوم در برابر تنش‌های برشی، تنش تک محوره و انقباض‌های عرضی تحت تغییر شکل‌های کششی گردد.



شکل۴ خواص مکانیکی الف) مدول حجمی ب) مدول برشی ج) مدول یانگ د) ضریب پواسون محاسبه شده برای ساختارهای بلوری مختلف زیرکونیوم با درصدهای ۰، ۰/۱، ۰/۵، ۱ و ۲ درصد نقص تهی جای

۳. ۴ خواص ترمودینامیکی

دانش عملی در مورد برخی از ویژگی‌های ترمودینامیکی ماکروسکوپی مواد، مانند دمای دیبای، هدایت حرارتی و گرمای ویژه، توسط ارتعاشات اتمی معروف به فونون‌ها ارائه می‌شود. این ارتعاشات اتمی، رابطه‌ی مستقیمی با انتشار امواج صوتی در بلور جامدات خواهند داشت. لذا محاسبه‌ی سرعت صوتی در جامدات، یکی از راهکارهای دستیابی به پارامترهای فوق‌الذکر است. سرعت صوت در بلورها به وسیله‌ی امواج طولی و عرضی توصیف می‌شود که توسط چگالی ماده و مدول‌های حجمی و برشی به هم مرتبط می‌شوند و با عنوان سرعت‌های صوتی طولی و عرضی تعریف می‌گردند[۱۴]. دمای دیبای نیز، که از تئوری ارتعاش حرارتی اتمی جامدات ناشی می‌شود، نقش مهمی در بسیاری از خواص فیزیکی مواد جامد از جمله کشش، سختی، ظرفیت گرمایی، گرمای ویژه، انبساط حرارتی و نقطه ذوب دارد. به طور کلی، اثرات کوانتومی در یک جامد در دمای پایین‌تر از دمای دیبای اهمیت بیشتری دارد، در حالی که در دماهایی بالاتر از این دما، این اثر ناچیز می‌باشد[۱۵]. خواص ترموفیزیکی بلور زیرکونیوم شامل سرعت‌های صوتی طولی، عرضی، میانگین و دمای دیبای از طریق محاسبه ثوابت الاستیک و روابط زیر محاسبه می‌شوند:

$$V_l = \sqrt{\frac{3B+4G}{3\rho}} \quad (۹)$$

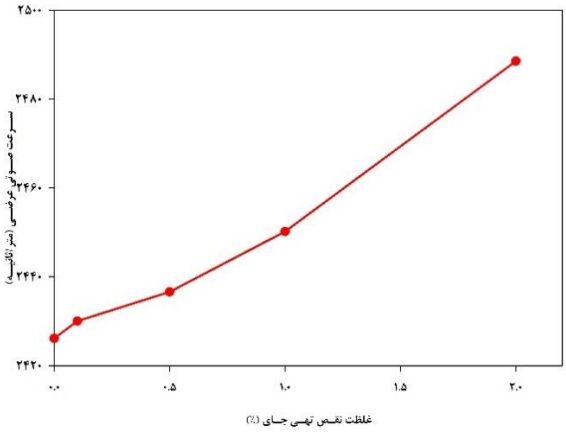
$$V_t = \sqrt{\frac{G}{\rho}} \quad (۱۰)$$

$$V_m = \left[\frac{1}{3}\left(\frac{2}{V_t^3}+\frac{1}{V_l^3}\right)\right]^{-1/3} \quad (۱۱)$$

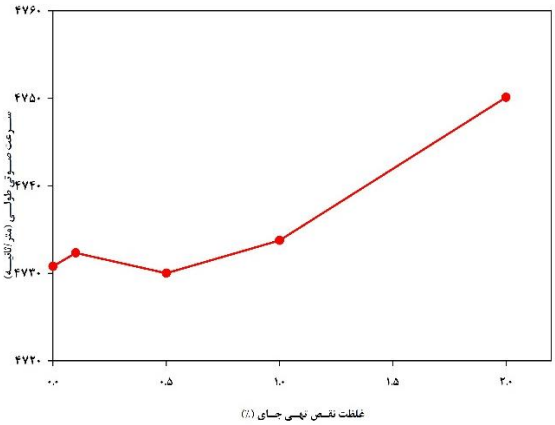
$$\Theta_D = \frac{h}{k_B}\left[\frac{3n}{4\pi}\left(\frac{N_A\rho}{M}\right)\right]^{1/3} V_m \quad (۱۲)$$

که در رابطه ۱۲، h ثابت پلانک، k_B ثابت بولتزمن، n تعداد اتم‌ها در سلول واحد، N_A عدد آووگادرو، ρ چگالی، M جرم اتمی و V_m سرعت صوتی میانگین می‌باشند.

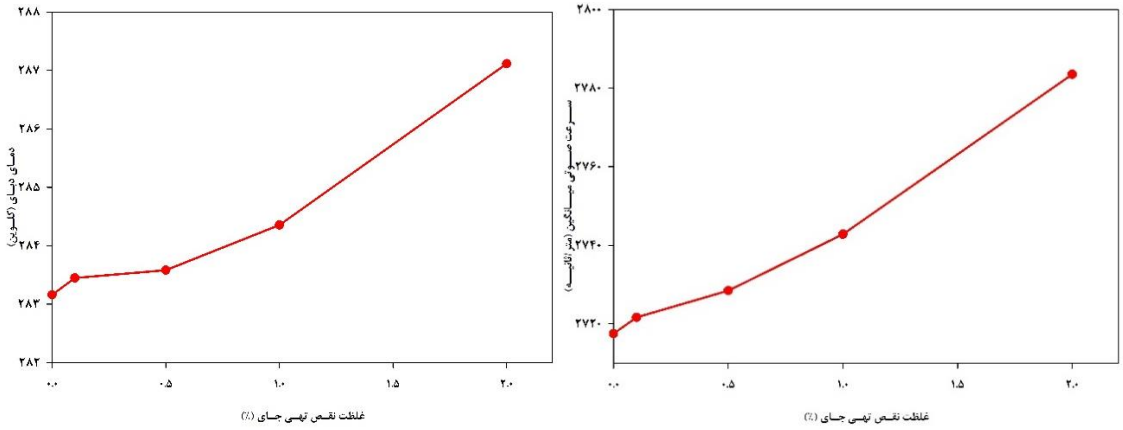
شکل ۵ مقادیر محاسبه شده برای پارامترهای ترموفیزیکی بلور فلز زیرکونیوم با توجه به وجود نقص‌های تهی‌جای را نشان می‌دهد. مطابق با این شکل، سرعت صوتی طولی تقریبا تا ۰/۵ درصد نقص تهی جای تغییر زیادی ندارد اما در ساختارهای بیش از آن روند صعودی دارد، هم‌چنین سرعت‌های صوتی عرضی و میانگین و در نتیجه دمای دیبای با افزایش غلظت نقص‌های تهی‌جای افزایش می‌یابند.



الف



ب



د ج

شکل ۵ خواص ترمودینامیکی الف) سرعت صوتی طولی ب) سرعت طولی عرضی ج) سرعت صوتی میانگین د) دمای دیبای محاسبه شده برای ساختارهای بلوری مختلف زیرکونیوم با درصدهای ۰، ۰/۱، ۰/۵، ۱ و ۲ درصد نقص تهی جای

۴. نتیجه‌گیری

خواص مختلف ساختاری، مکانیکی و ترموفیزیکی بلور زیرکونیوم کامل و درحضور نقص نقطه‌ای تهی‌جای با استفاده از روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی مورد مطالعه قرار گرفت. مقایسه نتایج به دست آمده با نتایج تجربی نشان از دقت بالای نتایج به دست آمده می‌دهد. نتایج شبیه‌سازی نشان می‌دهد که با افزایش نقص تهی‌جای تا مقدار ۲ درصد، ثوابت شبکه، چگالی، مدول حجمی و ضریب پواسون کاهش می‌یابند در حالی‌که مدول برشی، مدول یانگ و دمای دیبای روند صعودی را نشان می‌دهند. نتایج مذکور دلالت بر این نکته دارند که وجود نقص تهی‌جای با غلظت تا ۲ درصد می‌تواند موجب افزایش مقاومت بلور زیرکونیوم در برابر تنش‌های برشی، تنش تک محوره و انقباض‌های عرضی تحت تغییر شکل‌های کششی گردد.

۵. تشکر و قدردانی

با تشکر از دانشکده مهندسی هسته‌ای دانشگاه شهید بهشتی تهران

۶. مراجع

[1] D.O. Northwood, Irradiation damage in zirconium and its alloys, At. Energy Rev. 15 (1977) 547–610.
[2] M. Griffiths, A review of microstructure evolution in zirconium alloys during irradiation, J. Nucl. Mater. 159 (1988) 190–218.
[3] F. Onimus, S. Doriot, J.-L. Béchade, Radiation effects in zirconium alloys, (2020).
[4] J. Zheng, H. Zhang, X. Zhou, J. Liang, L. Sheng, S. Peng, First-principles study of the structural stability and electronic and elastic properties of helium in α-zirconium, Adv. Condens. Matter Phys. 2014 (2014).
[5] P.A.T. Olsson, K. Kese, A.-M.A. Holston, On the role of hydrogen filled vacancies on the embrittlement of zirconium: an ab initio investigation, J. Nucl. Mater. 467 (2015) 311–319.
[6] X. Zhu, X. Gao, H. Song, G. Han, D.Y. Lin, Effects of vacancies on the mechanical properties of zirconium: An ab initio investigation, Mater. Des. 119 (2017) 30–37. https://doi.org/10.1016/j.matdes.2017.01.060.
[7] S. Plimpton, Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular, (n.d.).
[8] P. Hirel, Atomsk: A tool for manipulating and converting atomic data files, Comput. Phys. Commun. 197 (2015) 212–219. https://doi.org/10.1016/j.cpc.2015.07.012.
[9] X. Huang, L. Liu, X. Duan, W. Liao, J. Huang, H. Sun, C. Yu, Atomistic simulation of chemical short-range order in HfNbTaZr high entropy alloy based on a newly-developed interatomic potential, Mater. Des. 202 (2021) 109560.
[10] E.S. Fisher, C.J. Renken, Single-crystal elastic moduli and the hcp→ bcc transformation in Ti, Zr, and Hf, Phys. Rev. 135 (1964) A482.
[11] Y. Wang, S. Curtarolo, C. Jiang, R. Arroyave, T. Wang, G. Ceder, L.Q. Chen, Z.K. Liu, Ab initio lattice stability in comparison with CALPHAD lattice stability, Calphad Comput. Coupling Phase Diagrams Thermochem. 28 (2004) 79–90. https://doi.org/10.1016/j.calphad.2004.05.002.
[12] S.L. Shang, A. Saengdeejing, Z.G. Mei, D.E. Kim, H. Zhang, S. Ganeshan, Y. Wang, Z.K. Liu, First-principles calculations of pure elements: Equations of state and elastic stiffness constants, Comput. Mater. Sci. 48 (2010) 813–826. https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2010.03.041.
[13] B.T. Wang, P. Zhang, H.Y. Liu, W.D. Li, P. Zhang, First-principles calculations of phase transition, elastic modulus, and superconductivity under pressure for zirconium, J. Appl. Phys. 109 (2011). https://doi.org/10.1063/1.3556753.
[14] G.N. Li, Z.Q. Chen, Y.M. Lu, M. Hu, L.N. Jiao, H.T. Zhao, Elasticity, slowness, thermal conductivity and the anisotropies in the Mn3Cu1-xGexN compounds, Int. J. Mod. Phys.

B. 32 (2018) 1–16. https://doi.org/10.1142/S0217979218500716.

[15] M.L. Ali, M.Z. Rahaman, Investigation of different physical aspects such as structural, mechanical, optical properties and Debye temperature of Fe2ScM (M=P and As) semiconductors: A DFT-based first principles study, Int. J. Mod. Phys. B. 32 (2018) 1–14. https://doi.org/10.1142/S0217979218501217.