

بررسی نظری ویژگی‌های ساختاری و دینامیکی آلیاژ هویسلر معکوس Li_2AlAg

پریا نصیرزاده^{۱*}، ابراهیم نعمتی کنده^۲، سیما محمودی^۳

^۱ - دانشجوی، رشته شیمی فیزیک، گروه شیمی، دانشکده شیمی، دانشگاه ارومیه

^۲ - دانشیار، رشته شیمی فیزیک، گروه شیمی، دانشکده شیمی، دانشگاه ارومیه، رایانامه: e.nemati@urmia.ac.ir

^۳ - دکتر، رشته فیزیک ماده چگال، گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه ارومیه

واژگان کلیدی: ترکیبات هویسلر معکوس، تئوری تابع چگالی، ویژگی‌های دینامیکی

۱- مقدمه

آلیاژهای هویسلر، ترکیب‌های بین فلزی با ساختار بلوری منظم، نخستین بار در سال ۱۹۰۳ توسط فردریش هویسلر کشف شدند. اولین ترکیب شامل فلزهای مس، منگنز و آلومینیوم بود که به صورت مجزا ویژگی‌های مغناطیسی ندارند، اما پس از آلیاژسازی، ویژگی‌های مغناطیسی جالب توجهی از خود نشان می‌دهند. [1] ویژگی‌های منحصر به فرد آلیاژهای هویسلر از جمله ابررسانایی الکتریکی، رسانایی حرارتی پایین و ویژگی‌های ترموالکتریک برجسته، این مواد را به گزینه‌های مناسبی برای کاربرد در صنایع الکترونیک، ترموالکتریک و اسپینترونیک تبدیل کرده است [2]. در این پژوهش، از محاسبه‌هایی که برپایه نظریه‌ی تابع چگالی هستند، برای تحلیل ویژگی‌های ساختاری و دینامیکی آلیاژ هویسلر معکوس Li_2AlAg استفاده شده است. نتایج به دست آمده نشان داد که ساختار این آلیاژ در حالت بلوری هویسلر معکوس پایدار است. پایداری دینامیکی آلیاژ براساس محاسبه‌های فونونی تایید شد.

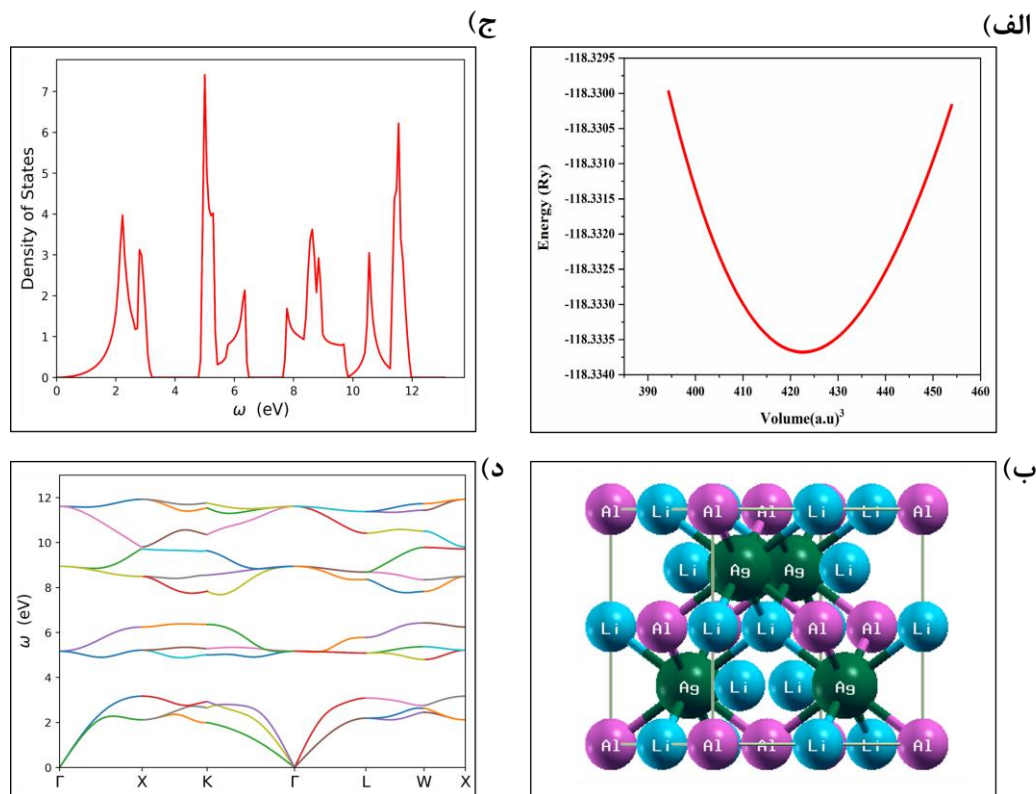
۲- روش انجام محاسبه‌ها

در این پژوهش، از نرم‌افزارها و کدهای مختلفی، از جمله نرم‌افزار کوانتوم اسپرسو که برپایه نظریه تابع چگالی می‌باشد برای محاسبه ویژگی‌های ساختاری و دینامیکی شبکه استفاده شده است. برای محاسبه انرژی تبادلی-هم‌بستگی، تقریب GGA به کار گرفته شد. همچنین نرم‌افزارهای Thermo-pw، phonopy و alamode برای محاسبه پایداری دینامیکی شبکه، از طریق چگالی حالت‌های فونونی و منحنی پراکندگی فونون‌ها، مورد استفاده قرار گرفتند. ساختار بلوری آلیاژ نیز با استفاده از نرم‌افزار Xcrysden رسم شد. پارامترهای محاسباتی به شرح زیر تنظیم شدند:

انرژی قطع تابع موج در 80 Ry ، انرژی قطع گسترش چگالی بار در 320 Ry و ساختارهای شبکه با عدم قطعیت انرژی $10^{-10} \times 1 \text{ Ry}$ بهینه‌سازی شده‌اند. در محاسبات phonopy و alamode از یک سوپرسل $2 \times 2 \times 2$ و با تعداد نقاط $12 \times 12 \times 12$ نقطه k برای مدل‌سازی اولین منطقه بریلوئن استفاده شده است. همچنین در محاسبات Thermo-pw از تعداد نقاط $8 \times 8 \times 8$ q مش استفاده شده است.

۳- بحث و نتایج

آلیاژهای هویسلر معکوس با فرمول شیمیایی X_2YZ دارای ساختار بلوری $F-43m$ با گروه فضایی (۲۱۶) هستند. موقعیت‌های وایکوف عناصر X ، Y و Z به ترتیب $(\frac{3}{4}, \frac{3}{4}, \frac{3}{4})$ ، $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ ، $(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$ و $(0, 0, 0)$ و $Y(0, 0, 0)$ و $Z(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$ می‌باشند. طبق نتایج محاسبه‌های Thermo-pw که در شکل ۱-الف آورده شده است، مقادیر انرژی، منفی به دست آمده که ثابت می‌کند این آلیاژ در ساختار هویسلر معکوس پایدار می‌باشد. در شکل ۱-ب) ساختار بلوری ترکیب هویسلر Li_2AlAg



شکل ۱- (الف) منحنی انرژی بر حسب حجم، (ب) ساختار بلوری آلیاژ، (ج) منحنی چگالی فونونی، (د) منحنی پراکندگی فونونی

مشاهده می‌شود. برای بررسی پایداری دینامیکی آلیاژهای هویسلر Li_2AlAg ، چگالی حالت‌های فونون (شکل ۱-ج) و منحنی‌های پراکندگی فونون (شکل ۱-د) محاسبه شده است. آلیاژهای هویسلر دارای دوازده مد فونون در هر بردار موج هستند که شامل سه مد صوتی و نه مد نوری است، زیرا هر واحد سلول آلیاژ دارای چهار اتم است. فرکانس‌های مثبت در منحنی‌ها نشان می‌دهد این ترکیب در ساختار هویسلر معکوس از لحاظ دینامیکی پایدار می‌باشد.

۴- نتیجه گیری

نتایج به دست آمده نشان می‌دهند که آلیاژ هویسلر Li_2AlAg در ساختار معکوس خود پایدار است. همچنین منحنی‌های پراکندگی فونونی و چگالی حالت‌های فونونی دارای مقادیر مثبت در فرکانس‌ها می‌باشند که پایداری دینامیکی آلیاژ مورد مطالعه را تایید می‌کنند. نتیجه‌ی قابل توجه دیگری که میتوان از منحنی‌های چگالی و پراکندگی فونونی به دست آورد، پایین بودن رسانایی حرارتی شبکه است که کاربرد آن را در دستگاه‌های ترموالکتریک بسیار امیدوارکننده می‌سازد، چراکه مدهای ارتعاشی فونونی و حالت‌های فوتونی دارای گاف نواری قابل ملاحظه‌ای هستند و در نتیجه انتقالات فونون-فوتون با احتمال بسیار کمتری قابل انجام است.

منابع و مراجع

- [1] Tavares, S., Yang, K., & Meyers, M. A. (2023). Heusler alloys: Past, properties, new alloys, and prospects. *Progress in Materials Science*, 132, 101017.
- [2] Mahmoudi, S., Golzan, M. M., & Nemati-Kande, E. (2024). Crystal structure, stability, and transport properties of Li_2BeAl and Li_2BeGa Heusler alloys: a DFT study. *Scientific Reports*, 14(1), 12201.