مطالعه ی ویژگی های الکترونی آلیاژ $Ti_xZr_{1-x}N$ تک لایه با استفاده از محاسبات اصول اولیه ی مکانیک کوانتومی

شیروانی ، فاطمه[۱]؛ شکری، علی اصغر[۱و۲]؛ عابدی روان ، بهرام[۳]

[۱] گروه فیزیک ، دانشگاه پیام نور تهران- شرق ، تهران

مقدمه

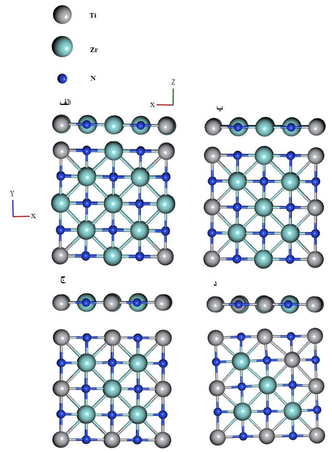
گروه ترکیبات نیتریدی فلزات واسطه با فرمول عمومی (TMN) دارای ویژگی هایی چون خراش ناپذیری ، مقاومت و سختی بالا در برابر فشار، نقطه ی ذوب بالا و ساختار بلوری عمدتاً به شکل نمک طعام می باشند [۱]. صنایع مختلف همچون صنایع ساخت انواع کالاهای خانگی با توجه به نوع نیازشان (به عنوان مثال جهت مقاوم سازی بدنه ی کالاها در برابر فرسایش و خراشیدگی) به هرکدام از این ترکیبات توجه بیشتری نشان می دهند. در این مقاله ما ترکیب زیرکونیوم نتیرید با ساختار بلوری مکعبی مرکز سطحی نمک طعام (با ثابت شبکه ی ٤/٥٨ انگستروم) را انتخاب نموده ایم [۲-٤]و پایداری ترمودینامیکی آلیاژ آن با عنصر تیتانیوم ، $Ti_xZr_{1-x}N$ (با مقادیر ۰/۵ ، ۰/۳۷۵ ، ۰/۲۵ ، ۰/۱۲۵ =x) را مورد بررسی قرار داده ایم.

روش

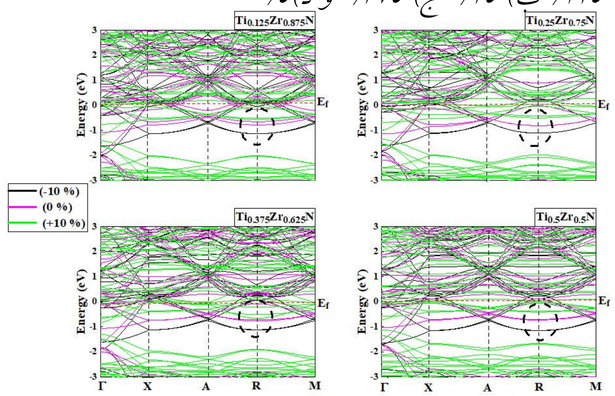
در این مقاله با استفاده از نظریه ی تابعی چگالی، تقریب شیب تعمیم یافته و روش شبه پتانسیل (شبه پتانسیل بار پایسته) ویژگی های الکترونی آلیاژ $Ti_xZr_{1-x}N$(با مقادیر ۰/۵، ۰/۳۷۵ ، ۰/۲۵ ، ۰/۱۲۵ x =) را مورد بررسی قرار داده ایم. در اینجا محاسبات بر روی ساختار تک لایه (در حالت حجمی ساختار مکعبی مرکز سطحی نمک طعام) با در نظر گرفتن ابرسلول ۱ ×۲ × ۲ (شکل ۱) با میزان خلا حد اقل ۱۲ آنگستروم (یک و نیم برابر ثابت شبکه برای هر کدام از آلیاژ ها) صورت گرفته است. برای انجام محاسبات از کد محاسباتی کوانتوم اسپرسو بهره گرفتیم[٤] و نتایج با مقادیر انرژی قطع ۳۸ ریدبرگ و مش بندی نقاط شبکه ی وارون ۱ × ٦ × ٦ به همگرایی رسیدند.

x	۰/۱۲۵	۰/۲۵	۰/۳۷۵	۰/۵
ثابت شبکه	۸/٦۳	۸/٥٤	۸/٤۸	۸/٤۲
Ti-Zr	۳/۰۱	۲/۹۸	۲/۹٦	۲/۹۱
Ti-N	۲/۱۰	۲/۰۸	۲/۰٦	۱/۹۸

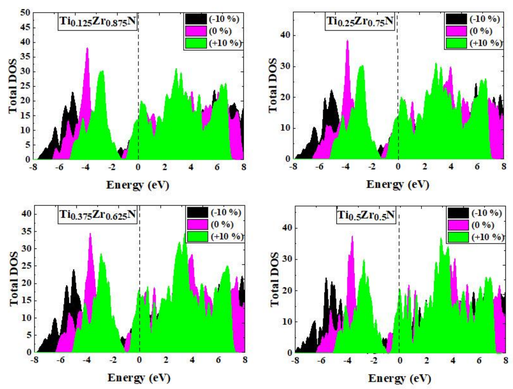
جدول ۱: مقادیر ثابت شبکهو همچنین طول پیوند تیتانیوم با زیرکونیوم و نتیروژن برای ابر سلول $Ti_xZr_{1-x}N$



شکل۱ : :نمای بالایی و پهلویی ساختار ابرسلول تکه لایه ساختار ابرسلول $Ti_xZr_{1-x}N$با مقادیر x برابر با : الف) ۰/۱۲۵ب) ۰/۲۵ ج) ۰/۳۷۵ و د)۰/۵



شکل ۲: ساختار نواری های انرژی $Ti_xZr_{1-x}N$تحت کشش -10، +10درصد و حالت بدون کش‌ش



شکل۳ :چگالی حالت های الکترونی $Ti_xZr_{1-x}N$ تحت کشش -10، +10درصد و حالت بدون کش‌ش

نتایج

جدول ۱ مقادیر ثابت های شبکه و همچنین طول پیوند های اتم تیتانیوم با زیرکونیوم و نیتروژن را نشان می دهد. همان گونه که ملاحظه می کنید با افزایش مقادیر تیتانیوم مقدار ثابت شبکه و همچنین طول پیوند کاهش پیدا می کند که نشان دهنده نیروی های پیوندی قوی تر بین این اتم ها با افزایش مقدار تیتانیوم می باشد.

شکل های ۲ و ۳ نیز مربوط به نمودارهای ساختار نوارهای انرژی و همچنین چگالی حالت های الکترونی بدون کشش و تحت کشش ۱۰- و ۱۰ +درصد می باشد. همانگونه که ملاحظه می نمایید در هر دوی نمودارهای ساختار نواری و چگالی حالت های الکترونی سطح فرمی برای همه ی آلیاژ ها و در همه ی کشش ها قطع می شود که حاکی از ویژگی فلزی این آلیاژ می باشد. همچنین در نمودار های ساختار نواری در کشش مثبت شیب نوارهای انرژی کاهش پیدا می کند (برای نمونه باخط چین دایره ای آن ها را مشخص کرده ایم) که این یعنی طبق رابطه ی جرم موثر با مشتق دوم انرژی و سرعت الکترون ، جرم موثر الکترون در کشش مثبت افزایش و سرعتش کاهش پیدا می کند و در نتیجه با توجه با قانون ویدمان –فرانتس رسانندگی گرمایی کاهش می یابد که این برای کاربرد های ترموالکتریکی مفید می باشد.

نتیجه گیری

- .در نتیجه محاسبات ما به طور کلی نشان می دهد با افزایش میزان تیتانیوم نیروهای پیوندی قوی تر و در کشش مثبت برای کاربرد ترموالکتریکی مفید تر می باشد

مراجع

[1] D. G. Sangiovanni , *Transition Metal Nitrides* , Department of Physics, Chemistry, and Biology (IFM) Linkoping University, Sweden , (2013).

[2] B. Saha, J. Acharya, T. D. Sands, and U. V. Waghmare, *J. Appl. Phys*, **107**, (2010), 033715.

[3 F. Shirvani, A. Shokri, and B. Abedi Ravan. An ab-initio study of structure and mechanical properties of rocksalt zrn and its bilayers. *Solid State Commun.*, **328 (7)** (2021) 114218.

[4] P. Giannozzi, et al, *An Institute of Physics journal*, **21**, Issue number 39, (2009).