

عنوان مقاله:

محاسبات ابتدا به ساکن ویژگی های ساختاری، الکترونی، اپتیکی، دینامیکی و ترمودینامیکی ترکیب CuSbTe_2

محل انتشار:

فصلنامه مهندسی متالورژی، دوره 24، شماره 3 (سال: 1400)

تعداد صفحات اصل مقاله: 12

نویسندگان:

حمدا... صالحی - دانشیار، گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه شهید چمران اهواز، اهواز، ایران.

روح ا.. زارع حسن آباد - دانشجوی دکتری، گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه شهید چمران اهواز، اهواز، ایران.

خلاصه مقاله:

در این مقاله ویژگی های ساختاری، الکترونی، اپتیکی، دینامیکی و ترمودینامیکی ترکیب CuSbTe_2 با استفاده از بسته محاسباتی کوانتوم اسپرسو با تقریب های LSDA و GGA در چارچوب نظریه تابعی چگالی انجام شده است. چگالی حالت های الکترونی سطح فرمی را قطع می کند که نشان دهنده رفتار فلزی این ترکیب است. قله هایی که در نمودار چگالی حالت ها در بازه انرژی از صفر تا ۲ الکترون ولت وجود دارد ناشی از همپوشانی اربیتال های p اتم تلوریم و اربیتال s اتم آنتیموان است. برای ترکیب CuSbTe_2 خواص دینامیکی مانند نمودار پاشندگی فونونی و چگالی حالت های فونونی و ویژگی های ترمودینامیکی مانند ظرفیت گرمایی ویژه در حجم ثابت و آنتروپی محاسبه شده اند. ظرفیت گرمایی در حدود دمای اتاق به $R/4$ می رسد و در دماهای بالا ثابت است که سازگاری خوبی با تجربه دارد. عدم وجود بسامد های فونونی منفی نشان دهنده پایداری این ترکیب است. در نمودار سهم موهومی تابع CuSbTe_2 مشاهده می شود در راستاهای x ، y و z سهم موهومی تابع دی الکتریک فاقد گاف اپتیکی است و در انرژی صفر مقدار گاف اپتیکی صفر نبوده و دارای مقادیر ۲، ۵ و ۴ به ترتیب در راستاهای x ، y و z است. همچنین خواص ترموالکتریکی مانند ضریب سبیک برای این ترکیب بر حسب دما محاسبه شده است که در دمای اتاق (300 K) مقدار آن $5/5$ میکروولت بر کلون است. هیچ داده نظری و تجربی برای مقایسه خواص مختلف این ترکیب در دسترس نیست.

کلمات کلیدی:

نظریه تابعی چگالی، CuSbTe_2 ، خواص ترموالکتریکی، ظرفیت گرمایی، بسامدهای فونونی، ضریب سبیک

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/1635606>

