ویژگی‌های فیزیکی ترکیب پادپروسکایت $TaCRu_3$ با استفاده از محاسبات فونونی و مطالعه‌ی مقایسه‌ای با دو ترکیب $NbCRu_3$ و $VCRu_3$

سمیرا حداد [۱]، علی مختاری [۱،۲]

[۱] گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه شهرکرد، شهرکرد، ایران

[۲] پژوهشکده فناوری نانو، دانشگاه شهرکرد، شهرکرد، ایران

دریافت: ۱۳۹۶/۸/۲۱ پذیرش: ۱۴۰۳/۹/۱۲

چکیده

در این مقاله به شبیه‌سازی و بررسی خواص الکترونی، دینامیکی و کشسانی ترکیب $TaCRu_3$ با استفاده از بسته‌ی محاسباتی اسپرسو بر مبنای نظریه‌ی تابعی چگالی و نظریه‌ی تابعی چگالی اختلالی، به کمک شبه پتانسیل فوق هموار و تقریب شیب تعمیم یافته(GGA)پرداخته‌ایم. با محاسبه چگالی حالت‌ها و ساختار نواری، برخی خواص الکترونی از جمله فلز و مغناطیسی بودن ترکیب را نتیجه گرفتیم. برای بررسی خواص دینامیکی و کشسانی در ابتدا مدهای بسامدی و چگالی حالت‌های فونونی را محاسبه کرده و ضرایب کشسانی را بدست آورده‌ایم. سپس مدول حجمی، مدول برشی، مدول یانگ، ضرایب لامه، نسبت پواسون، پارامتر ناهمگنی کشسانی، دمای دبای و نیز پارامتر مربوط به چکش خواری این ترکیب محاسبه شده است. نتایج حاضر را با کارهای دیگران و نتایج مربوط به دو ترکیب $NbCRu_3$ و$VCRu_3$ مقایسه کرده‌ایم. پارامتر شبکه به اندازه‌ی ۲/۶۲ درصدنسبت به تجربه کمتر برآورد شده است. در بقیه پارامترهای محاسبه شده، بین این کار و کار دیگران حداقل ۰/۱۲ و حداکثر ۲۲/۹ درصد اختلاف وجود دارد. این مقدار خطاها در حالت کلی در فیزیک ماده چگال محاسباتی قابل توجیه است.

کلیدواژگان: نظریه تابعی چگالی، شبه‌پتانسیل، خواص دینامیکی

مقدمه

در سال‌های اخیر، خانواده پادپروسکایت‌ها به علت سختی و استحکام بسیار بالا و نیز خصوصیات دیگری از جمله نیم‌رسانایی و در برخی موارد ابررسانایی، مغناطیسی، فروالکتریکی، پیزوالکتریکی و کاربرد فراوان در صنعت و فناوری مورد توجه بسیاری از محققان در حوزه*های* علوم و مهندسی قرار گرفته‌اند [۱۰-۱]. فرمول شیمیایی ترکیب‌های پادپروسکایت AMX_3 است که A کاتیون‌های دو یا سه ظرفیتی (فلزات s-d گونه)، Xعناصر دو یا سه ظرفیتی و M معمولاً اتم نیتروژن و یا کربن است. در این ترکیب اتمM در مرکز مکعب سلول واحد و در مرکز لبه‌های سطحی عنصر X و در گوشه‌های مکعب عنصر A قرار می‌گیرند.

این دسته از مواد با خواص جالب خود کاربردهای متعددی در دستگاه‌های فروالکتریکی و در مبدل‌های الکترواپتیکی، الکترومکانیکی و پیزوالکتریکی دارند. از جمله‌ی این کاربردها می‌توان به ساخت حافظه‌های فروالکتریکی با سرعت و قدرت ذخیره‌ی بالا، حسگرهای مغناطیسی، کاتالیزورهای فروالکتریکی، تمیز کننده‌های فراصوتی، درایوهای دیسک مغناطیسی، حسگرهای زیستی، حسگرهای دما، فشار و رطوبتی و در ابزارهای برشی و پوشش‌های سخت اشاره کرد [۱۳-۵]. در این میان، ترکیب‌های ابررسانای با پایه‌ی اتم کربن [۱۴، ۳-۱] از اهمیت قابل ملاحظه‌ای برخوردار هستند.

یکی از این پادپروسکایت‌ها $TaCRu_3$ است که در سال ۲۰۰۹ برای اولین بار حدادی و همکاران ویژگی‌های ساختاری و الکترونی این ترکیب را مورد بررسی قرار دادند [۱۴]. تاکنون بررسی‌های تجربی و نظری چندانی در زمینه مدهای فونونی، خواص دینامیکی و مکانیکی این ترکیب صورت نگرفته و از طرف دیگر به‌دلیل کاربرد فراوان این ترکیب‌ها در صنعت و فناوری، در سال‌های اخیر خانواده بزرگ ترکیب‌های پاد پروسکایت مورد توجه محققان قرار گرفته است. در کار حاضر ویژگی‌های ساختاری، الکترونی، مکانیکی این ترکیب را با استفاده از بسته‌ی محاسباتی اسپرسو [۱۵] که مبتنی بر نظریه‌ی تابعی چگالی [۱۶-۱۸] و تابعی چگالی اختلالی است،[۱۹] مورد بررسی قرار داده‌ایم.

خواص ساختاری

ابتدا برای انجام محاسبات، مقادیر بهینه‌ی انرژی قطع تابع موج (۴۵ ریدبرگ)، انرژی قطع چگالی (۲۷۰ ریدبرگ) و تعداد نقاط k مجاز در منطقه‌ی بریلوئن کاهش یافته (۱۲) را برای فاز مکعبی مغناطیسی بهینه و تعیین کرده‌ایم. سپس انرژی حالت پایه‌ی ترکیب را به ازای حجم‌های مختلف، اطراف حجم تعادلی محاسبه کرده و منحنی انرژی بر حسب حجم را با معادله‌ی حالت مورناگون [۲۰] برازش داده‌ایم. ثابت شبکه‌ی تعادلی، مدول حجمی و مشتق آن نسبت به فشار در جدول ۱ گزارش شده است. نتایج کار حاضر تطابق خوبی با کار دیگران و نتایج تجربی موجود دارد. *پارامتر شبکه به* اندازه‌ی ۲/۶۲ درصد نسبت به تجربه کمتر برآورد شده است. مدول حجمی نیز ۹/۹ درصد نسبت به کار نظری دیگران کمتر بدست آمده

است. مقدار عددی بین ۳ تا ۶/۵ برای مشتق مدول حجمی *نسبت به فشار، نشان‌دهنده برازش خوب نتایج در معادله حالت مورناگون است که* نتیجه مورد نظر برای این ترکیب خوب بوده است.

جدول۱: پارامتر شبکه بهینه شده $a_0(\mathring{A})$، مدول حجمی $B_0(GPa)$ و مشتق آن نسبت به فشار B_0' برای ترکیب $TaCRu_3$ در مقایسه با دو ترکیب $VCRu_3$ و $NbCRu_3$ از نتایج دیگران [۱۴].

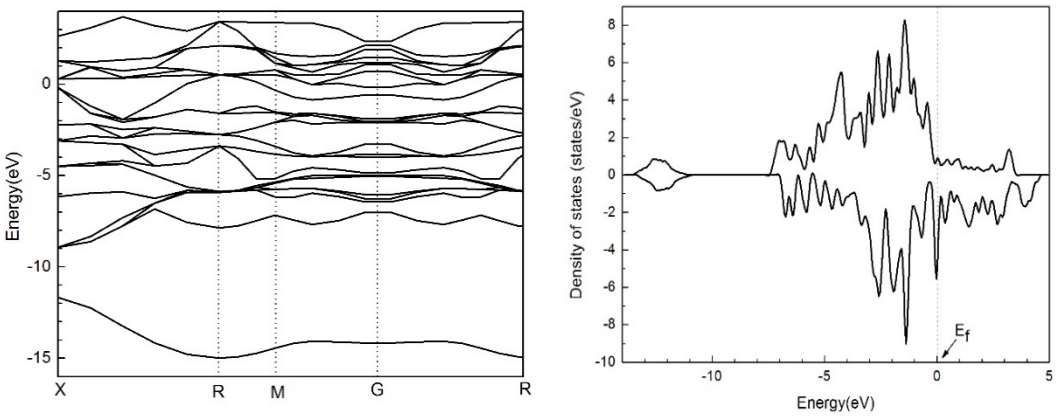
ترکیب	a_0	B_0	B_0'
$TaCRu_3$	۴/۰۳۱(٪+۲/۶۲)	۲۷۹/۳(٪-۹/۹)	۴/۲۶
	۴/۰۴۵، [a]۳/۹۲۸	۳۱۰/۰[a]	[a]۴/۵۳
$NbCRu_3$ [a]	۴/۰۱۴، ۳/۹۰	۳۰۷/۰	۴/۴۰
$VCRu_3$[a]	۳/۹۶، ۳/۸۹	۳۰۲/۱	۴/۴۳

[a] Ref. [14]

خواص الکترونی

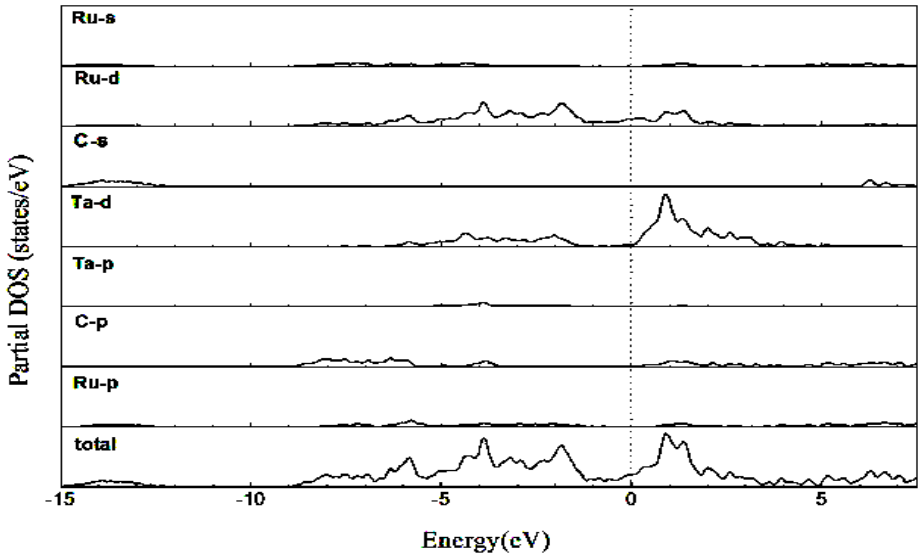
با محاسبه‌ی ویژه مقادیر کوهن- شم در نقاطی از منطقه‌ی اوّل بریلوئن کاهش یافته، چگالی حالت‌های کلی و جزئی مربوط به اوربیتال‌های مختلف را به دست آورده‌ایم. با توجه به شکل ۱، مشاهده می‌شود مقدار چگالی در سطح فرمی (که روی نقطه صفر انرژی تنظیم شده است) برای ترکیب $TaCRu_3$ غیرصفر است و این بیانگر رسانا بودن ترکیب است. همچنین نمودار چگالی حالتهای الکترونی برای اسپین بالا و پایین نامتقارن است و این عدم تقارن بیانگر مغناطیسی بودن این ترکیب است که با نتایج انجام شده در این زمینه هم خوانی دارد [۱۴].

با توجه به نمودار ساختار نواری ترکیب $TaCRu_3$ (شکل ۱)، پایین‌ترین نوارهای ظرفیت که بین ۱۵- تا ۱۰- الکترون ولت گسترش یافته‌اند مربوط به اوربیتال s اتم کربن است و اوربیتالهای هیبریدی بالای انرژی ۸/۱- الکترون‌ولت توزیع شده‌اند. با توجه به عدم تقارن بین حالت‌های اسپین بالا و پایین، مقدار مغناطش ۲/۱ (مگنتون بوهر) برای این ترکیب بدست آورده‌ایم. در شکل ۲، نمودار چگالی حالت‌های کل و سهم اوربیتال‌های مختلف هر یک از اتم‌ها رسم شده‌است و چگالی حالت‌ها در ناحیه‌ی زیر انرژی فرمی به سه قسمت تقسیم می‌شوند. در دورترین ناحیه از سطح فرمی اوربیتال s اتم کربن بیشترین سهم را در چگالی حالتها دارد. این حالت‌ها با اوربیتال‌های دیگر همپوشانی قابل توجهی ندارد. در ناحیه دوم از سطح فرمی، اوربیتال d اتم Ta و اوربیتال p اتم کربن بیشترین سهم را در چگالی حالت‌ها دارند و همچنین این اوربیتال‌ها در ناحیه‌ی کوچکی جایگزیده شده‌اند.



شکل۱: الف) نمودار چگالی حالت‌های الکترونی (چپ) و ب) ساختار نواری (راست) ترکیب $TaCRu_3$.

پهنای چگالی حالت‌های این قسمت کم است، بنابراین این اوربیتال‌ها در پیوند بین اتم‌ها نقش خاصی ایفا نمی‌کنند و نیز اوربیتال d اتم Ta با وجود قله‌ی قابل توجهی که در نواحی دور از سطح فرمی دارد نقش مهمی در ویژگی‌های الکترونی ترکیب ندارد. در نواحی نزدیک سطح فرمی که از اهمیت بیشتری در مقایسه با دو ناحیه‌ی اول برخوردار است، همپوشانی اوربیتال d اتم‌های Ru را با اوربیتال p اتم کربن، می‌توان مشاهده کرد. این اوربیتال‌ها نقش بسزایی در منحنی چگالی حالت‌های کل دارند. پهنای چگالی حالت این ناحیه نسبت به ناحیه اول بیشتر است، که بیانگر نقش مهم این اوربیتال‌ها در پیوندهای کوالانسی- یونی (نوع پیوند با درصد بیشتری یونی و با درصد کمتری کووالانسی)این ترکیب است و نیز اوربیتال d اتم Ru سهم مؤثری در فلز بودن ترکیب دارد.



شکل۲: نمودار چگالی حالت‌های کل و سهم اوربیتال‌های مختلف هر یک از اتم‌ها

خواص دینامیکی

با محاسبه‌ی انرژی کل بلور در دمای صفر می‌توانیم خواص ساختاری از جمله ثابت تعادلی شبکه و مدول حجمی را در دمای صفر به دست آوریم. در دمای غیر صفر، انرژی ارتعاش اتم‌ها نیز به انرژی ساختاری بلور اضافه می‌شود. انرژی ارتعاش را می‌توان مجموع انرژی تمامی مدهای ارتعاشی آن دانست مشروط بر آن‌که از برهم کنش این مدها صرفنظر شود. در بحث بررسی خواص دینامیکی، محاسبات ابتدا به ساکن و بر پایه‌ی نظریه‌ی تابعی چگالی اختلالی [۱۹] با استفاده از تقریب شیب تعمیم یافته GGA [۲۱] صورت گرفته است.

پس از محاسبه‌ی مدهای بهنجار فونونی در جهت‌های تقارنی فضای وارون با استفاده از نظریه‌ی تابعی چگالی اختلالی، منحنی پراکندگی فونونی را برای این ترکیب به دست آورده‌ایم (شکل۳). منطقه‌ی ممنوعه در محدوده‌ی بسامد ۴۰۰ تا ۶۱۰ (cm^{-1}) قرار دارد که هیچ مد فونونی با چنین بسامدی در این محدوده نمی‌تواند انتشار یابد و از این ویژگی در ساخت صافی مکانیکی می‌توان بهره گرفت. بسامدهای فونونی حقیقی و مثبت نشاندهنده‌ی پایداری ترکیب در ساختار مکعبی مغناطیسی است.

یکی از مسائل مهم در صنعت و فناوری، دانستن خصوصیات مکانیکی و گرمایی مواد مختلف است، تا بتوان بهترین ماده را برای استفاده در صنعت و فناوری شناسایی و بررسی کرد. ثابت‌های کشسانی، یکی از کمیت‌های مهم در بررسی و پیش‌بینی خصوصیات مکانیکی، چکش‌خواری، مفتول شدگی، سختی و .... مواد است. این ثابت‌ها معیاری از سختی بلور است و به علت وجود تقارن در ساختار مکعبی، این ثابت‌ها به C_{11}، C_{44}، C_{12} تقلیل می‌یابند. در ساختار مکعبی ترکیب $TaCRu_3$ ثابت‌های کشسانی را با استفاده از تغییرات بسامد فونونی در مسیر [۱۰۰] به صورت زیر محاسبه کرده‌ایم [۲۲]:

$$C_{11} = \rho(d\omega / dK)^2_{LA[100]} \quad (۱)$$

$$C_{44} = \rho(d\omega / dK)^2_{TA[100]} \quad (۲)$$

در رابطه‌ی بالا، $(d\omega / dK)$ شیب نمودار پراکندگی فونونی در راستای [۱۰۰] برای شاخه‌های آکوستیکی عرضی و طولی، ρ چگالی بلور وC_{ij}ها ثابت‌های کشسانی هستند. ثابت کشسانی C_{12} را از رابطه‌ی ضریب ناهمگن کشسانی با داده‌ی A برابر با ۰/۸۳۹ از کار نظری دیگران [۱۴] به صورت زیر محاسبه کرده‌ایم [۲۴، ۲۳]:

$$A = [2C_{44} / (C_{11} - C_{12})] \quad (۳)$$

برای بررسی پایداری این ترکیب در فاز مکعبی مغناطیسی، ثابت‌های کشسانی محاسبه شده را تحت شرایط پایداری زیر بررسی کرده‌ایم [۲۲]:

$$C_{11} > 0 \text{ ، } C_{11} + 2C_{12} > 0 \text{ ، } C_{11} - C_{12} > 0 \text{ ، } C_{44} > 0 \text{ ،} \quad (۴)$$

که برای ترکیب موردنظر، تمام شرط‌های بالا برقرار است و می‌توان گفت که ترکیب از لحاظ مکانیکی پایدار است. مقادیر محاسبه شده از روابط بالا به همراه کار نظری دیگران، در جدول ۲ قابل مشاهده است. همخوانی (۹۹/۲۷ درصد) مقدار مدول

حجمی بدست آمده از ضرایب کسشانی با مقدار مربوط به معادله حالت مورناگون، علاوه بر تامین ضریب اطمینان از محاسبات دینامیکی، اعتبار بقیه پارامترهای محاسبه شده را ضمانت می‌کند. مرتبه بزرگی این اعداد نسبت به دو ترکیب دیگر هم خانواده ترکیب مورد مطالعه نیز تاییدی بر دقت محاسبات دارد.

جدول۲. ضرایب سختی کشسانی (GPa)، مدول حجمی (GPa) و ضریب ناهمگنی *A*

ترکیب		C_{11}	C_{12}	C_{44}	B	A
$TaCRu_3$	کار حاضر	۵۳۸/۱۰(۱٪/۴۵)	۱۵۳/۰۱(۱۸٪/۲)	۱۶۱/۵۰(۷٪/۷)	۲۸۱/۳۵(۸٪/۳۵)	۰/۸۴۰(۰٪/۱۲)
	[۱۴]	۵۴۶/۰	۱۸۷/۰	۱۵۰/۰	۳۰۷/۰	۰/۸۳۹
$NbCRu_3$	[۱۴]	۵۶۶	۱۷۸	۱۴۷	۳۰۷	۰/۷۵۶
$VCRu_3$	[۱۴]	۶۱۵	۱۴۳	۱۴۶	۳۰۱	۰/۶۱۸

در ادامه، با استفاده از تقریب‌های وویت، رآس و هیل [۲۴-۲۲]، کمیت‌های کشسانی دیگری از جمله مدولهای برشی (G) وویت، رآس و هیل، مدول حجمی (B) و مدول یانگ (E) که نسبت تنش به کرنش است، نسبت پواسون (σ) و ضرایب لامه (λ و μ) را محاسبه و در جدول ۳ گزارش کرده‌ایم [۲۶ , ۲۵]:

$$G_V = (3C_{44} + C_{11} - C_{12})/5$$
$$G_R = (5(C_{11} - C_{12})C_{44})/(4C_{44} + 3(C_{11} - C_{12}))$$
$$G_H = (C_R + C_V)/2 \quad (۵)$$

$$B = (C_{11} + 2C_{12})/3\ ;\ E = \frac{9BG_H}{3B + G_H} \quad (۶)$$

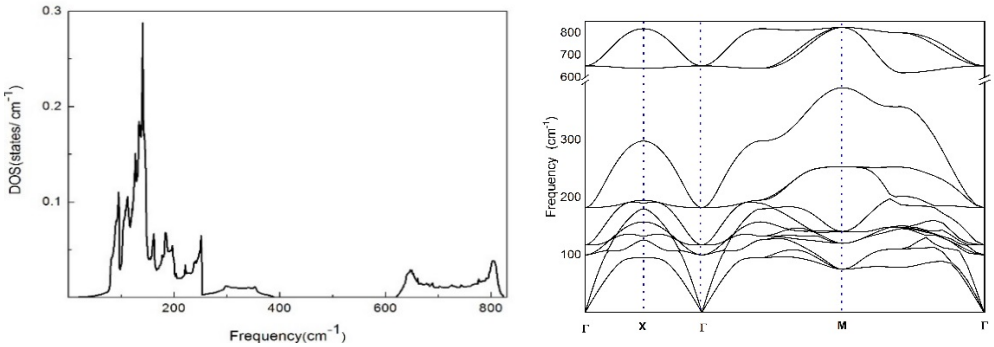
$$\sigma = 1/2[1 - (E/3B)] \quad (۷)$$

$$\lambda = \sigma E/[(1+\sigma)(1-2\sigma)] \quad (۸)$$

$$\mu = E/2(1+\sigma) \quad (۹)$$

مدول یانگ معیاری از سختی جامدات است که مقدار آن در این سه ترکیب از بالا به پایین برای اتمهای موجود در ستون VB جدول تناوبی (به ترتیب V، Nb و Ta) کاهش می یابد. این کاهش در تطابق با این نکته فیزیکی است که در یک ستون جدول تناوبی از بالا به پائین بدلیل پدیده استتار، الکترونهای لایه های آخر کمتر با لایه های داخلی تر اتمها برهمکنش می کنند و به همین دلیل هم قدرت پیوند آنها کمتر خواهد شد. مقدار ضریب ناهمگنی کشسانی A، برای ترکیب $TaCRu_3$ برابر با ۰/۸۳۸۹ بدست آمد. این نتیجه دارای انحراف از عدد یک، نشان می‌دهد که ترکیب مورد بررسی دارای ساختاری

ناهمگن است. تفاوت میان مدول یانگ و مدول برشی در تقریب وویت [۲۲] و رآس [۲۳] ناهمگنی این ترکیب را نشان می‌دهد.



شکل۳: الف) نمودار پراکندگی فونونی (چپ) و ب) رفتار چگالی حالت‌های فونونی (راست) برای ترکیب $TaCRu_3$.

پوگ [۲۷] به صورت تجربی نشان داد مقدار G_H/B_0 برای موادی با خاصیت چکش‌خواری و مفتول شدگی، کوچکتر از ۰/۵۷ است که با توجه به مقدار محاسبه شده در جدول ۳، ترکیب $TaCRu_3$ خاصیت چکش‌خواری دارد. ضریب پواسون که در واقع به صورت نسبت کرنش عرضی به کرنش طولی است و میزان پایداری بلور را در مقابل تغییر شکل برشی نشان می‌دهد، مقداری بین ۱- تا ۰/۵[۱۴] دارد که بیشینه‌ی آن برای موادی مانند لاستیک است که مقاومت آنها در مقابل فشردگی بسیار زیاد است. از طرف دیگر مقدار ضریب پواسون در یک ماده کوالانسی و یونی به ترتیب برابر ۰/۱ و ۰/۲۵ است. مقدار محاسبه شده‌ی برای این ترکیب، بیانگر این است که پیوندها در این ترکیب از نوع یونی است. نتایج به دست آمده از محاسبات کار حاضر، با نتایج محاسباتی دیگران تطابق خوبی دارد.

جدول۳. مدول برشی، مدول یانگ، ضریب پواسون و ضرایب لامه (برحسب گیگاپاسکال)

ترکیب	G_V, G_R	G_H	E	σ	G_H/B_0	λ	μ
$TaCRu_3$	۱۷۳/۹۰	۱۷۳/۲۶[۷٪/۳۵	۴۳۱/۲۴[۴٪/۶۷]	۰/۲۶[۳٪/۷۰]	۰/۶۱[۵٪/۲۰]	۱۶۵/۸۴[-۱۶/۷	۱۷۳/۲۶
[۱۴]	۱۷۲/۶۲	]	۴۱۲/۰[a]	۰/۲۷[a]	۰/۵۸[a]	٪]	
		۱۶۱/۴۰[a]				۱۹۹/۲۰[a]	
$NbCRu_3$[۱۴]	-	۱۶۴/۲۰	۴۱۸/۰	۰/۲۷	۱/۸۷	۱۹۷/۵	-
$VCRu_3$[۱۴]	-	۱۷۷/۲۰	۴۴۴/۴	۰/۲۵	۱/۷۰	۱۸۲/۴	-

[a] Ref. [14]

محاسبه دمای دبای به علت رابطه‌ی نزدیک با خواص فیزیکی مواد از جمله گرمای ویژه، دمای ذوب و ... از اهمیت ویژه‌ای برخوردار است. این پارامتر را از رابطه‌ی زیر به دست آورده‌ایم [۲۸]:

$$\theta_D = \frac{h}{k_B}[\frac{3nN_A\rho}{4\pi M}]^{\frac{1}{3}}\upsilon_m \qquad (۱۰)$$

که در این رابطه، مؤلفه‌های طولی و عرضی سرعت صوت و سرعت میانگین در راستای [۱۰۰] از روابط زیر محاسبه شده است [۱۴، ۲۶، ۲۸]:

$$\upsilon_S = \sqrt{G_H / \rho} \qquad (۱۱)$$

$$\upsilon_L = \sqrt{(B + 4/3G_H)/\rho} \qquad (۱۲)$$

$$\upsilon_m = [1/3((2/\upsilon_S^3) + (1/\upsilon_L^3))]^{-1/3} \qquad (۱۳)$$

در رابطه‌ی (۱۰)، N_A عدد آووگادرو، M وزن مولکولی شبکه، n تعداد اتم‌های هر شبکه و ρ چگالی ترکیب است. مقادیر سرعت‌های صوت، میانگین آن و دمای دبای در جدول ۴ درج شده است. نتایج کار حاضر و دیگران (علاوه بر تطابق خوب) نشان می‌دهد که مقدار دمای دبای بطور نسبی عدد بالایی است، بنابراین دارای رسانندگی گرمایی خوبی است [۱۴]. افزایش دمای دبای از $TaCRu_3$ به $VCRu_3$ *سازگار* با افزایش تدریجی سرعت صوت میانگین است.

جدول۴. مؤلفه‌های طولی و عرضی سرعت صوت، سرعت میانگین (km/s) و دمای دبای (کلوین).

پارامتر	v_L	υ_T	v_m	θ_D
$TaCRu_3$	۶/۸۸[۶٪/۱۷]	۴/۰۰[۱۱٪/۱]	۳/۰۸۱[٪-۲۲/۹]	۴۸۰/۴۲[٪-۴/۸۹]
	۶/۴۸[a]	۳/۶۰[a]	۴/۰۰[a]	۵۰۵/۱۰[a]
$NbCRu_3$ [14]	-	-	-	-
	۷/۰۸۵	۳/۹۵۸	۴/۴۰۷	۵۵۹/۱۰
$VCRu_3$ [14]	-	-	-	-
	۷/۳۹۷	۴/۲۵۰	۴/۴۷۲	۶۰۷/۷۰

[a] Ref. [14]

نتیجه گیری

در چارچوب نظریه‌ی تابعی چگالی و تابعی چگالی اختلالی با استفاده از تقریب شیب تعمیم یافته (GGA) خواص ساختاری الکترونی، کشسانی ترکیب $TaCRu_3$ شبیه سازی شده است. در بررسی ساختار شبکه، ثابت شبکه و مدول حجمی محاسبه شده در فاز پایدار مکعبی مغناطیسی توافق خوبی با داده‌های نظری در دسترس دارد. با توجه به منحنی چگالی حالت‌ها و ساختار نواری پیش‌بینی می‌شود ترکیب فوق رسانا و مغناطیسی است. در نواحی نزدیک سطح فرمی اوربیتال d اتم Ru سهم عمده‌ای در چگالی حالت‌های کل دارد که این اوربیتال نقش مهمی در پیوندهای ترکیب و همچنین خاصیت فلزی آن دارد. با توجه به ویژگی کشسانی ترکیب می‌توان پیش‌بینی کرد که ترکیب $TaCRu_3$ ناهمگن و بسیار سخت و دارای خاصیت مفتول شدگی و چکش‌خواری است. همچنین از این ترکیب می‌توان در ساخت صافی‌های مکانیکی بهره گرفت.

منابع

[1] X. Yuanhui, G. Faming, H. Xianfeng, L. Zhiping, Electronic structure and magnetism in superconductor $ZnNNi_3$ a comparative study with $ZnCNi_3$ and $ZnNi_3$, *Comput. Mater. Sci. Phys* **50** (2010) 737.

[2] C. M. I. Okoye, Structural elastic and electronic properties of new antiperovskite-type superconductor $ZnNNi_3$ from first-principles, *Physica B* **405** (2010) 1562.

[3] C. Li, W.G. Chen, F. Wang, S.F. Li, Q. Sun, S. Wang, Y. Jia, First-principles study of mechanical stability and thermal properties of $MNNi_3$ (M = Zn, Mg, Al) under pressure, *J. Appl. Phys*.**105** (2009) 123921.

[4] T. He et al. Superconductivity in the non-oxide perovskite $MgCNi_3$**,** *Nature* **54** (2001) 411.

[5] M. Sieberer, P.Mohn, G. Redinger, Role of carbon in $AlCNi_3$ and $GaCNi_3$: A density functional theory study, *Phys. Rev. B* **75** (2007) 024431.

[6] B. He, C. Dong, L. Yang, L. Ge, H. J. Chen, Preparation and physical properties of antiperovskite-type compounds $CdNCo_3$−zNiz ($0 \leq z \leq 3$), *Solid State Chem.* **184** (2011) 1939.

[7] M. Uehara, A. Uehara, K. Kozawa, T. Yamazaki, Y. Kimishima, New antiperovskite superconductor $ZnNNi_3$ and related compounds $CdNNi_3$ and $InNNi_3$, *Physica C* **470** *(2010) S688.*

[8] L. Liu, X. Wu, R. Wang, L. Gan, Q.Wei, Effect of Pressure on Elastic Constants, Generalized Stacking Fault Energy and Dislocation Properties in Antiperovskite-Type Ni-Rich Nitrides $ZnNNi_3$ and $CdNNi_3$, *J. Supercond. Nov. Magn,* **14** *(2014) 2628.*

[9] I. R. Shein, V. V. Bannikov, A. L. Ivanovskii, Structural, elastic and electronic properties of superconducting anti-perovskites $MgCNi_3$, $ZnCNi_3$ and $CdCNi_3$ from first principles, *Physica C* **468** (2008) 1.

[10] Y. Medkour, A. Roumili, D. Maouche, M. Maamache, First-principles study of the structural, electronic and magnetic properties of $InCCo_3$ and $InNCo_3$, *Solid State Commun*. **151** (2011) 1916.

[11] W. H. Cao, B. He, C. Z. Liao, L. H. Yang, L. M. Zeng, C. Dong, Preparation and properties of antiperovskite-type nitrides $InNNi_3$ and $InNCo_3$**,** *J. Solid State Chem*. **182** (2009) 3353.

[12] Z. F. Hou, Elastic properties and electronic structures of antiperovskite-type $InNCo_3$ and InNNi3, *Solid State Commun*. **150** (2010)1874.

[13] I. R. Shein, V. V. Bannikov, A. L. Ivanovskii, Elastic and electronic properties of the new perovskite-like superconductor $ZnNNi_3$ in comparison with $MgCNi_3$**,** *Phys. Statas Solidi b* **247** (2010) 72.

[14] K. Haddadi, A. Bouhemadou, L. Louail, M. Maamache, Density functional study of the structural, electronic, elastic and thermodynamic properties of $ACRu_3$ (A = V, Nb and Ta) compound, *Intermetallics* **19** (2009) 476.

[15] S. Baroni et. al., http://www.pwscf.org

[16] S. Baroni, P. Giannozzi, A. Testa, Green's-function approach to linear response in solids, *Phys. Rev. Lett*. **58** (1987) 1861.

[17] P. Hohenberg, W. Kohn, Inhomogeneous Electron Gas, *Phys. Rev*. **136** (1964) B864.

[18] W. Kohn, L. J. Sham, Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects, *Phys. Rev*. **140** (1965) A1133.

[19] S. Baroni, S. Gironcoli, A. Dal Corso, P. Giannozzi, Phonons and related crystal properties from density-functional perturbation theory, *Rev. Mod. Phys*. **73** (2001) 515.

[20] F. D. Murnaghan, The Compressibility Of Media Under Extreme Pressures, *Proc. Nat. Acad. Sci. U.S.A* **30** (1944) 244.

[21] J. P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof, Generalized Gradient Approximation Made Simple, *Phys. Rev. Let*.**77** (1996) 3865.

[22] M. Born, K. Huang, Dynamical Theory of Crystal Lattices Clarendon, Oxford, 1956.

[23] W. Voigt**,** Macroscopic symmetry and properties of crystals, *Lehrbuch der kristallphysik*, Taubner Leipzig, 1928.

[24] A. Reuss, Z. Angew, Density functional theory for calculation of elastic properties of orthorhombic crystals: Application to $TiSi_2$, *Math. Mech*. ***9*** *(1929) 55.*

[25] R. Hill, A simplified method for calculating the debye temperature from elastic constants, *Proc. Phys. Soc. Lond*. **65** (1952) 350.

[26] K. Haddadi, A. Bouhemadou, L. Louail, S. Maabed, D. Maouche**,** Structural and elastic properties under pressure effect of the cubic antiperovskite compounds $ANCa_3$ (A = P, As, Sb, and Bi), *Phys. Lett. A* **373** (2009) **1777.**

[27] S. F. Pugh, Relations between the elastic moduli and the plastic properties of polycrystalline pure metals, *Phil. Mag*. **45** (1954) 823.

[28] O.L. Anderson, A simplified method for calculating the debye temperature from elastic constants, *J. Phys. Chem. Solids* **24** (1963) 909.

Physical properties of the non-oxide antiperovskite TaCRu3 by phonon calculations:A comparative study with the VCRu3 and NbCRu3

Samira Hadad[1], Ali Mokhtari[2]

[1]Physics Faculty, Shahrekord University

2 Nanotechnology School, Shahrekord University

Abstract

In the present work, we have studied and simulated the electronic, dynamical and elastic properties of the $TaCRu_3$ compound using Quantun Espreeso code within the framework of density functional theory and density functional perturbation theory using the generalized gradient approximation (GGA). We have concluded some properties of this compound such as metallic and magnetic behavior by obtaining the density of states and band structure. In order to study the dynamical and elastic properties, at first we have calculated the phonon dispersion and phonon density of the states and then obtained the elastic constants. Then the bulk, Shear and Young modulus, Lames coefficients, poisons ratio, elastic heterogeneity parameter, Debye temperature and also ductility parameter are calculated. We have compared the results with available experimental and theoretical data for this compound and also for the $NbCRu_3$ and $VCRu_3$ compounds. The lattice parameter is estimated about 2.62 % less than experimental data. For other calculated parameters, there are 0.12 and 22.9 as minimum and maximum percent difference between this work and others theoretical works. These values are predicable in the computational condensed matter physics.

Keywords: Density functional theory; Pseudo-potential; Dynamical properties.