

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^{۱،۲}؛ عابدی روان ، بهرام^۳

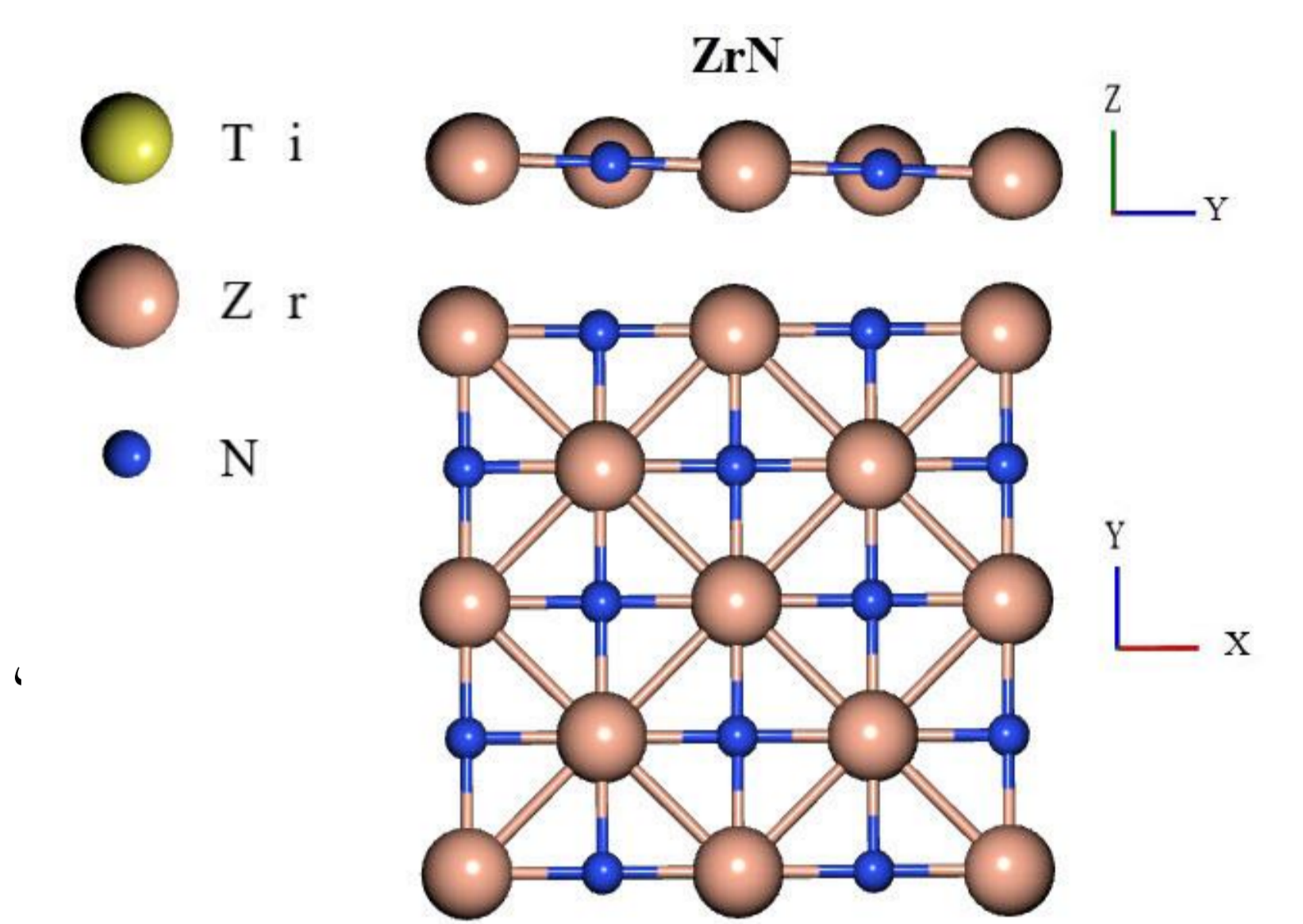
^۱ گروه فیزیک ، دانشگاه پیام نور تهران- شرق ، تهران

مقدمه

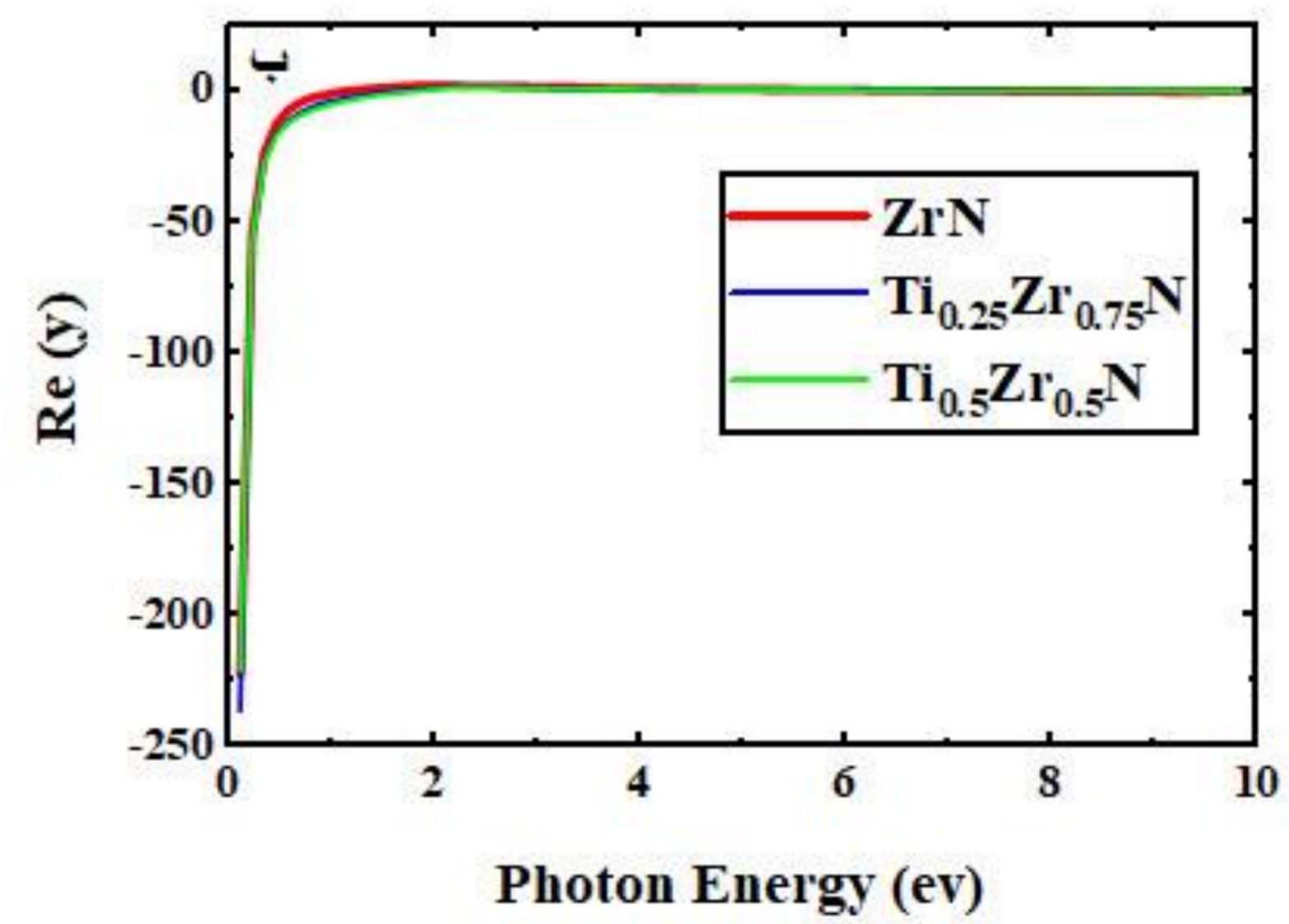
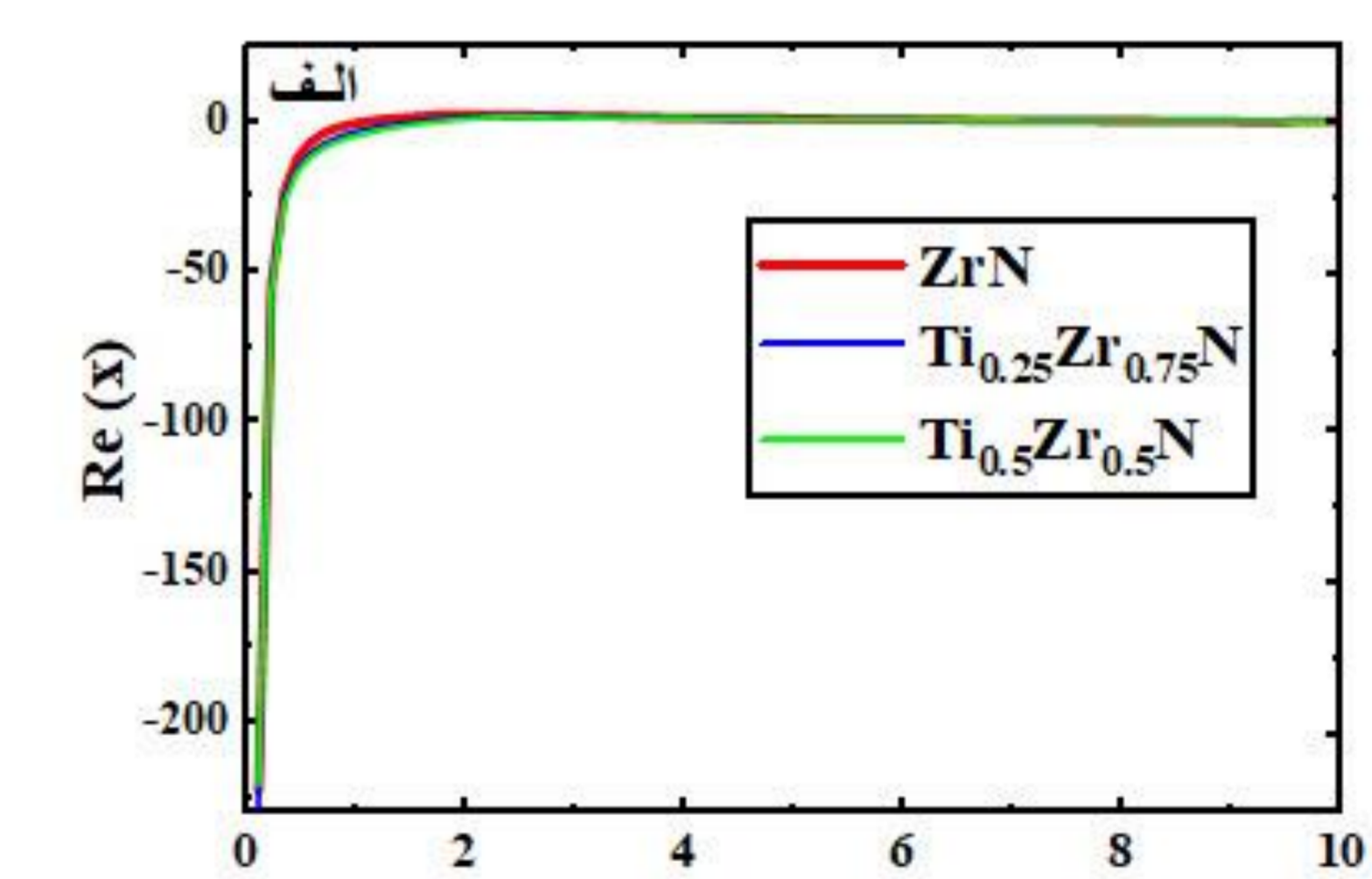
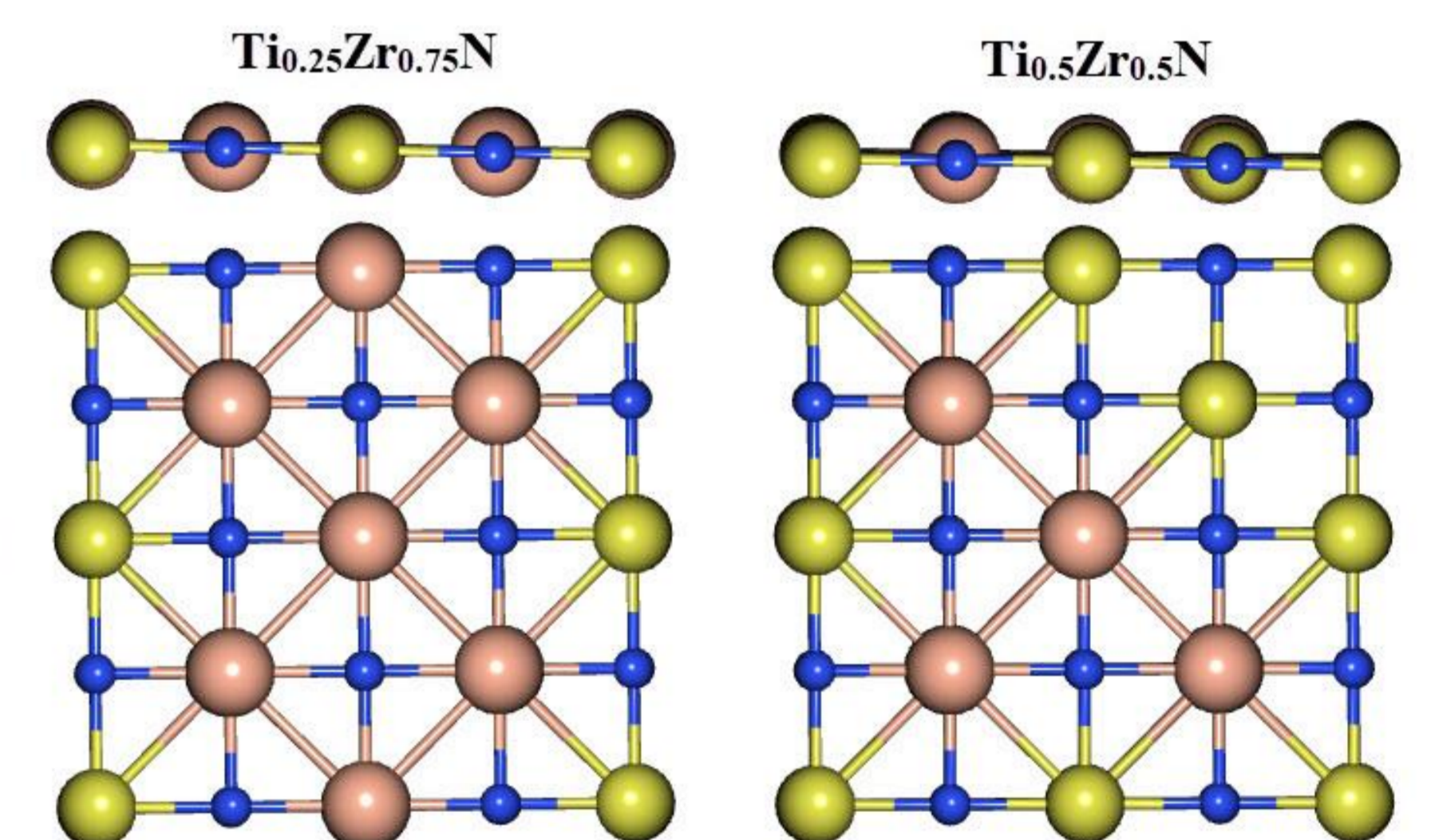
ترکیب زیرکونیوم نیتريد به عنوان عضوی از گروه ترکیبات نیتريدی فلزات واسطه علاوه بر خواص عمومی این گروه ترکیبات، مانند میزان سختی بالا، مقاوم بودن در برابر خراش و فرسودگی، دارای ویژگی‌های منحصر به فردی چون طول عمر بالا، سازگاری با محیط زیست و خود تمیزشوندگی می‌باشد. این ترکیب در صنایعی مانند صنعت دندانپزشکی، ساخت اشیاء زیستی، صنایع ابزار ترموالکتریکی و ساخت بدنه‌ی انواع کالاهای خانگی و وسایل نقلیه کاربرد دارد [۱-۶]. در این مقاله علاوه بر زیرکونیوم نیتريد خالص آلیاژ آن با تیتانیوم که به نسبت دارای جرم مولی کمتر و سبک‌تر می‌باشد را در نظر گرفته‌ایم و ویژگی‌های اپتیکی آن‌ها را با استفاده از نظریه‌ی تابعی چگالی مورد بررسی قرار داده‌ایم. مقادیری که برای تیتانیوم در نظر گرفته‌ایم به ترتیب ۲۵/۰ و ۵/۰ می‌باشد که بجای زیرکونیوم وارد ساختار تک لایه‌ی زیرکونیوم نیتريد شده‌است. در ادامه به شرح روش محاسبات خواهیم پرداخت و پس از آن نتایج مربوط به نمودارهای قسمت حقیقی و موهومی تابع دی‌الکتريک، ضریب جذب و طیف بازتاب را در دو بعد و برحسب انرژی فوتون ورودی بررسی خواهیم نمود

روش

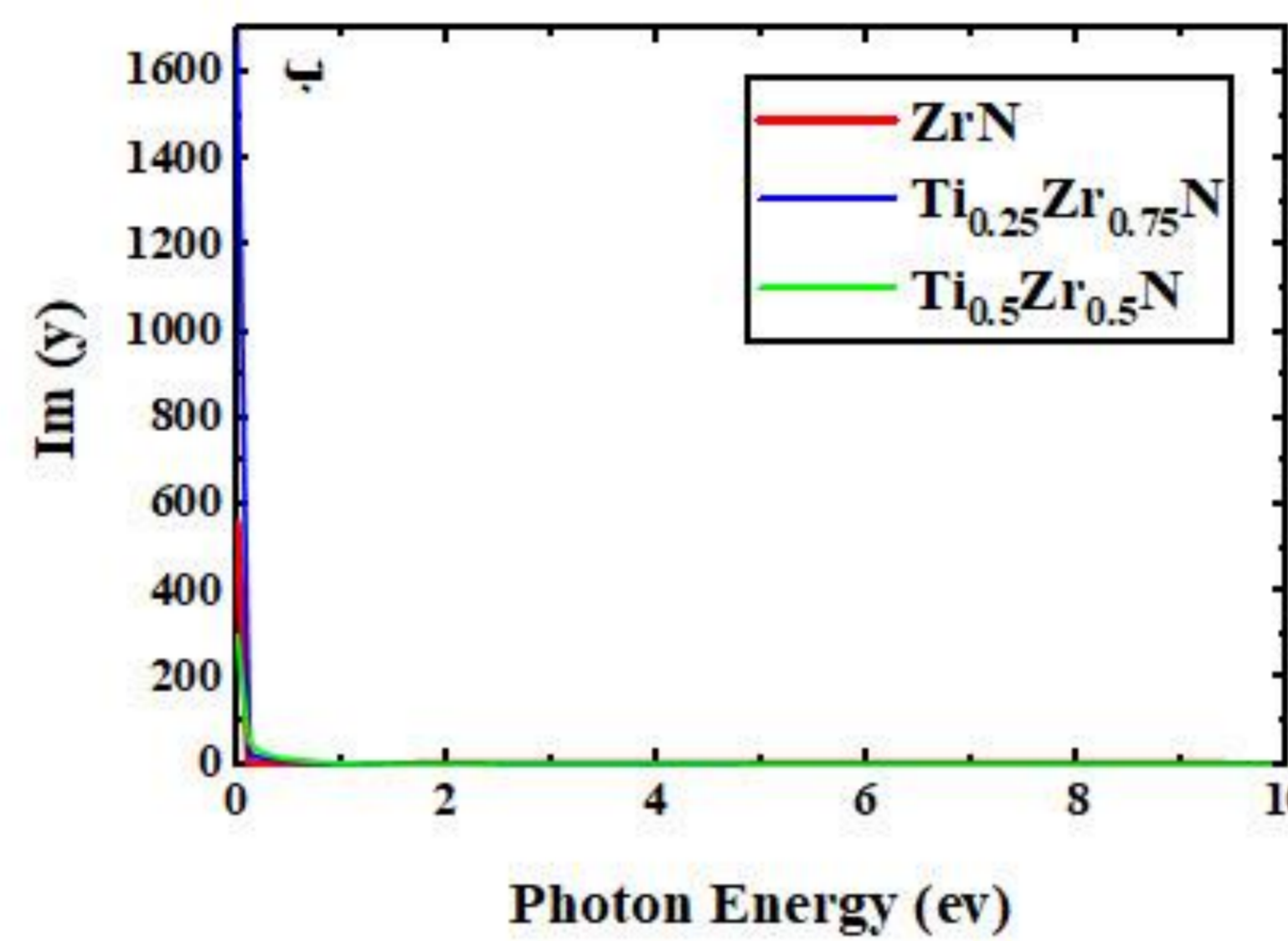
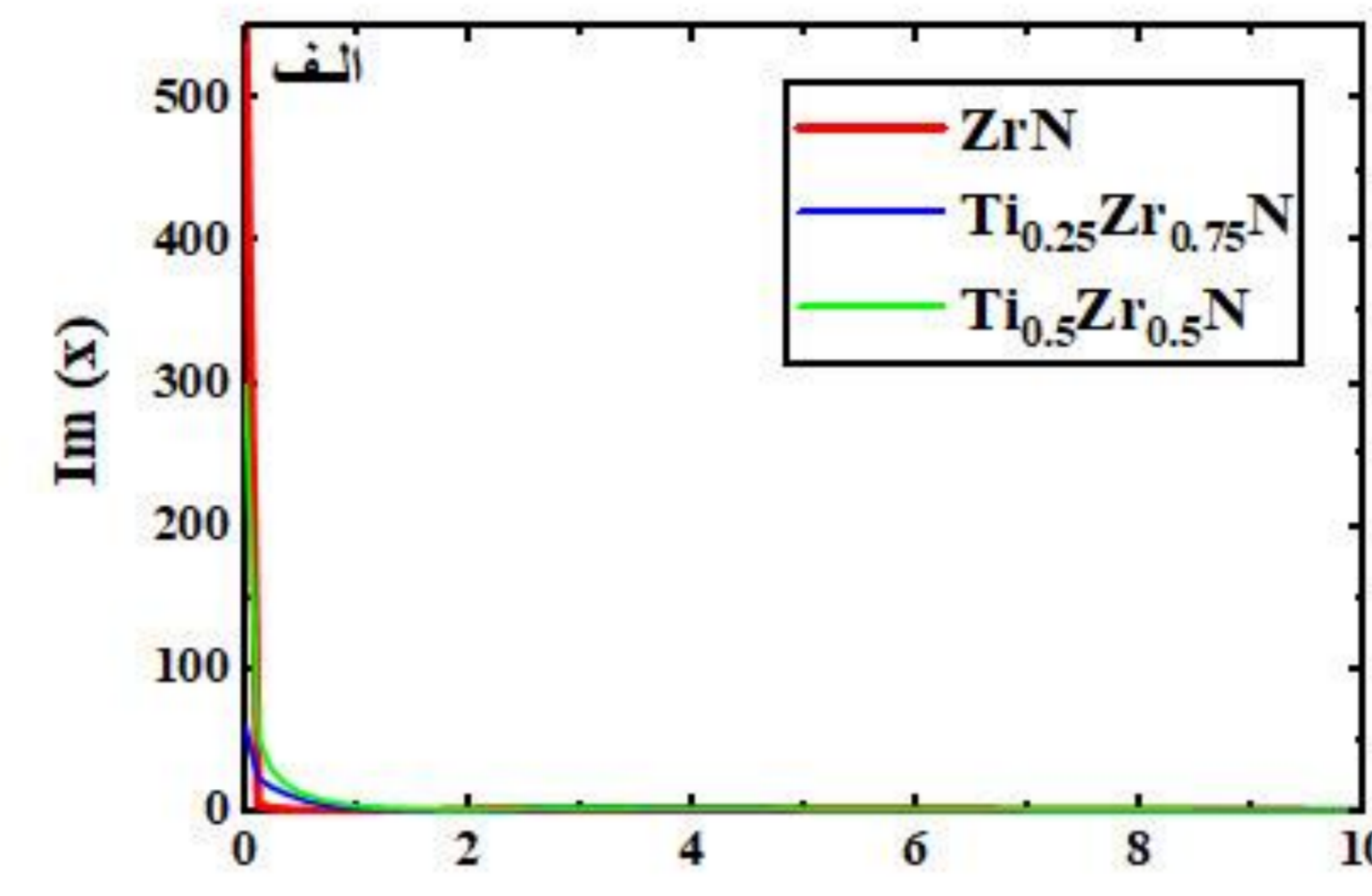
در اینجا با استفاده از نظریه‌ی تابعی چگالی و تقریب شیب تعمیم یافته و شبه پتانسیل بارپایسته (بسته‌ی محاسباتی کوانتوم اسپرسو) محاسبات میدان خودسازگار را برای ابر سلول $2 \times 2 \times 1$ (شکل ۱) ساختار تکه لایه‌ی زیرکونیوم نیتريد و آلیاژ آن با تیتانیوم (در حالت حجمی مکعبی مرکزسطحی نمک طعام) به انجام رسانده‌ایم [۷]. محاسبات بهینه سازی با در نظر گرفتن مش بندی نقاط شبکه‌ی وارون $6 \times 6 \times 1$ ، انرژی قطع ۳۸ ری‌دبرگ و میزان خلاء ۱۴ آنگستروم بین دو لایه (جهت نادیده گرفتن برهمکنش بین لایه‌ها) صورت گرفت. در بخش بعد به بررسی نمودارهای قسمت‌های حقیقی و موهومی تابع دی الکتريک، ضریب جذب و طیف بازتاب برحسب انرژی فوتون ورودی خواهیم پرداخت



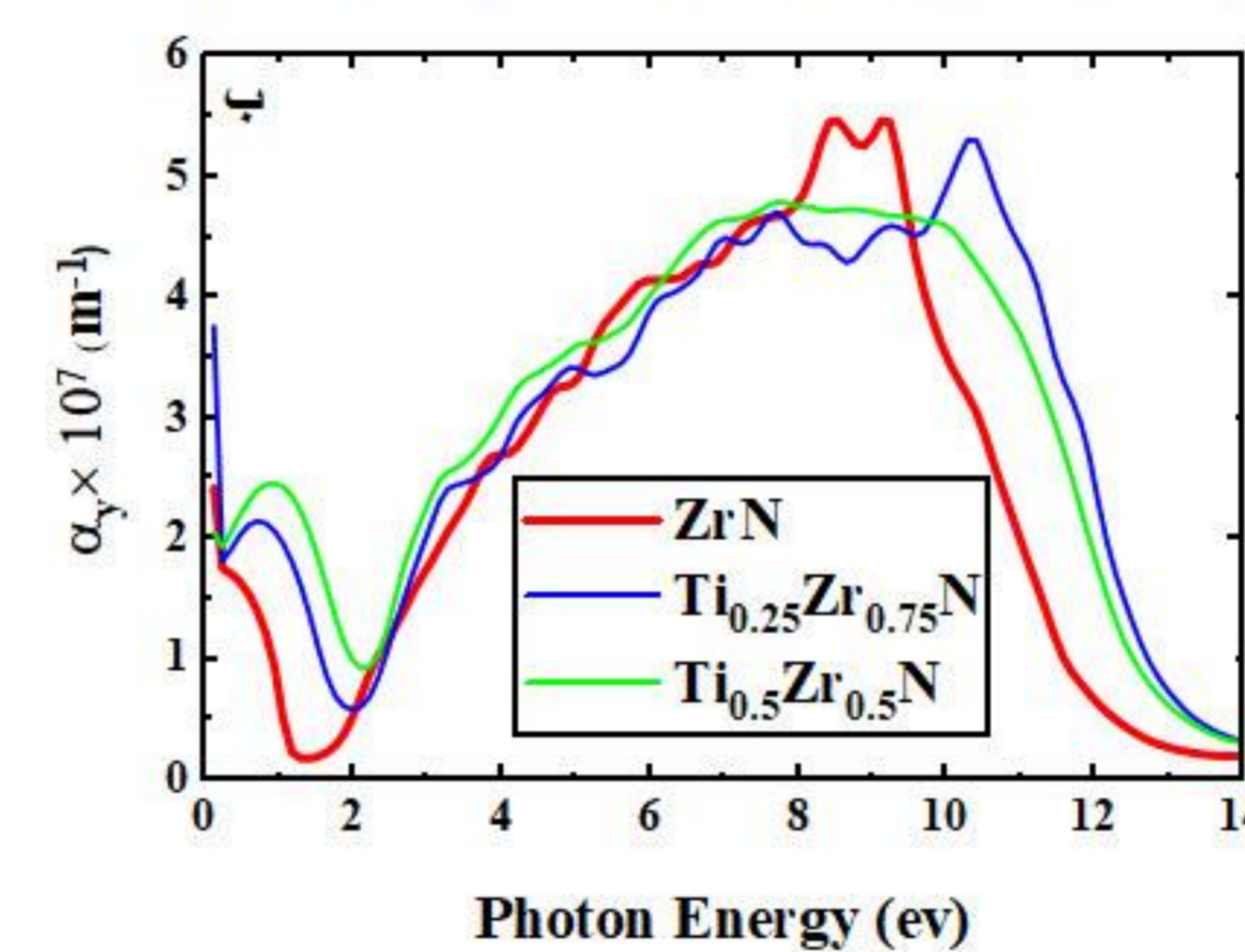
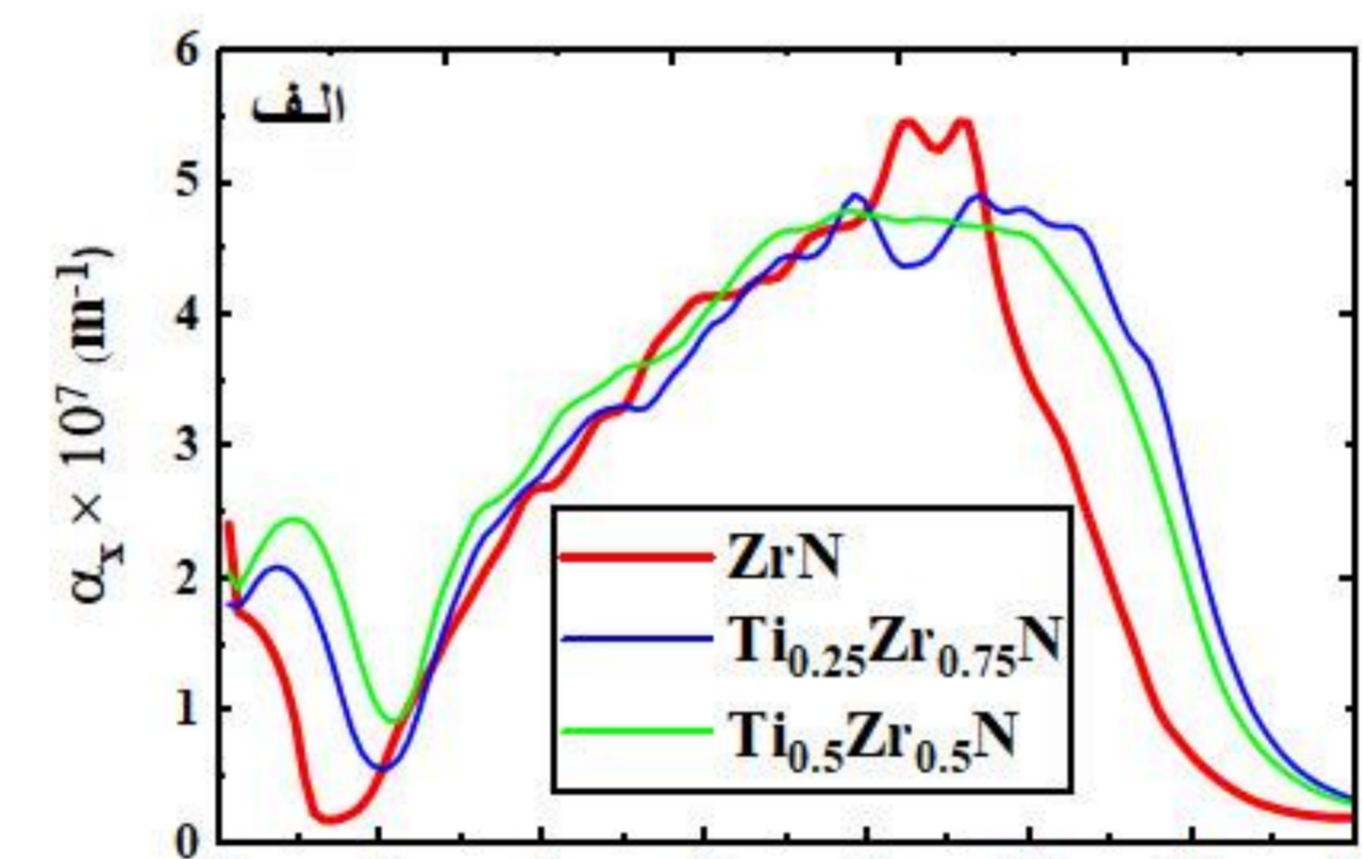
، لایه‌ی زیرکونیوم نیتريد و آلیاژهای 0.25 و 0.5 تیتانیو



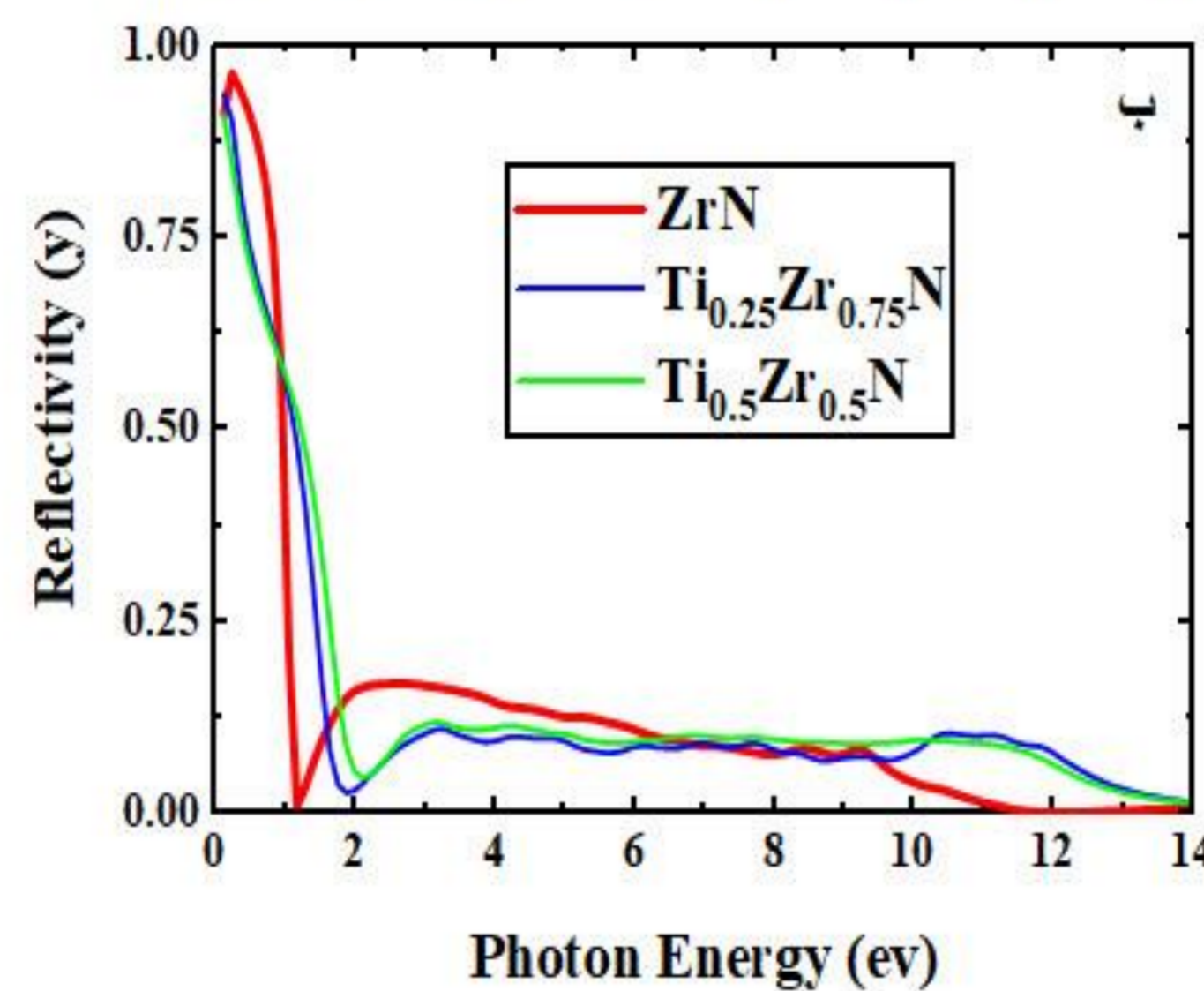
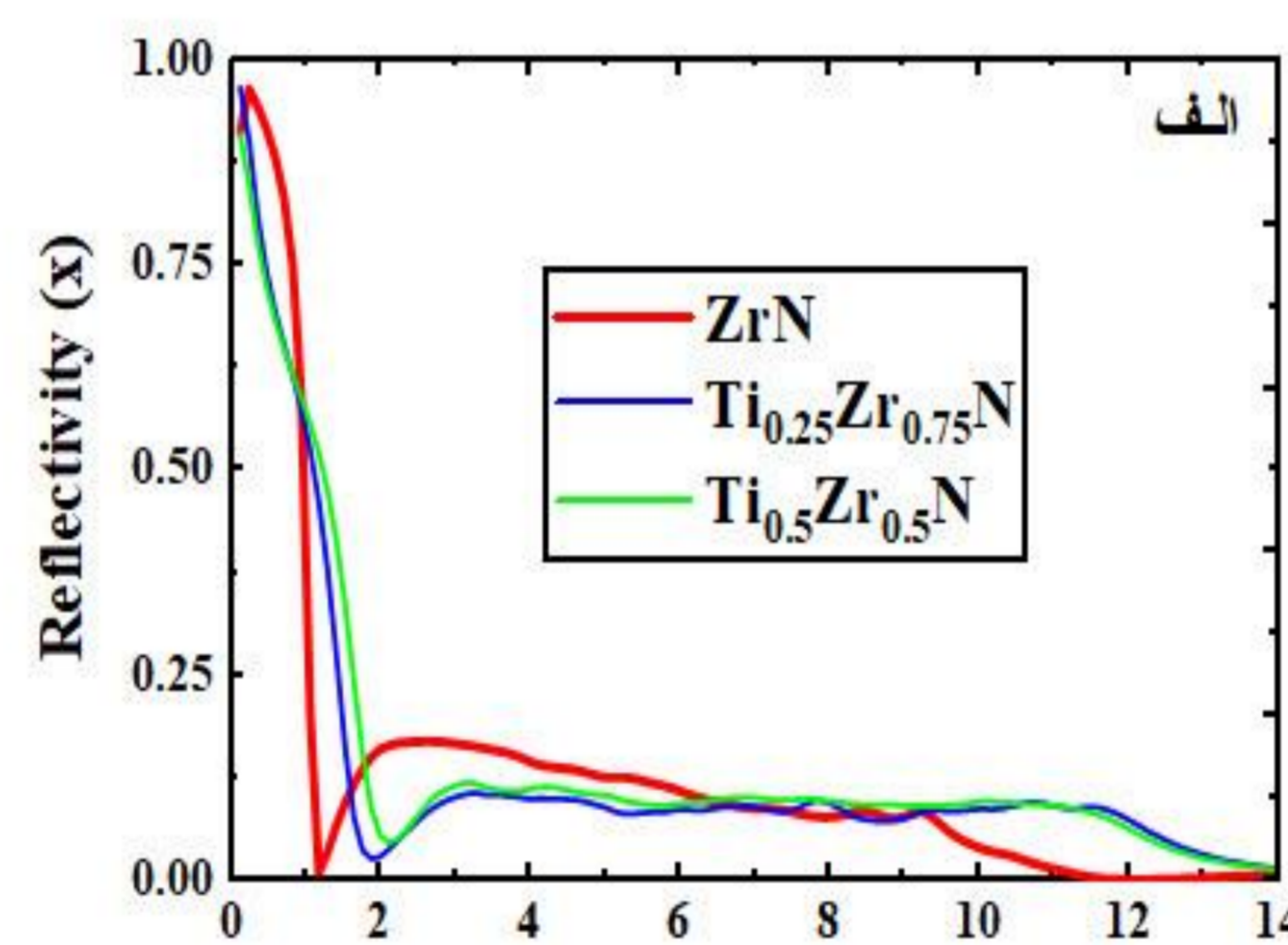
شکل 2 : قسمت حقیقی تابع دی الکتريک ترکیب زیرکونیوم نیتريد و آلیاژ آن با تیتانیوم 0.25 و 0.5 برحسب انرژی فوتون ورودی و در دو راستای الف) x و ب) y



شکل 3: قسمت موهومی تابع دی الکتريک ترکیب زیرکونیوم نیتريد و آلیاژ آن با تیتانیوم 0.25 و 0.5 برحسب انرژی فوتون ورودی و در دو راستای الف) x و ب) y



شکل 4: ضریب جذب ترکیب زیرکونیوم نیتريد و آلیاژ آن با تیتانیوم 0.25 و 0.5 برحسب انرژی فوتون ورودی و در دو راستای الف) x و ب) y



شکل 5: طیف بازتاب ترکیب زیرکونیوم نیتريد و آلیاژ آن با تیتانیوم 0.25 و 0.5 برحسب انرژی فوتون ورودی و در دو راستای الف) x و ب) y

شکل‌های 2 و 3 به ترتیب نمودارهای قسمت‌های حقیقی و موهومی تابع دی‌الکتريک را برای زیرکونیوم نیتريد خالص و آلیاژ آن با تیتانیوم با مقادیر 0.25 و 0.5 برحسب انرژی فوتون ورودی (در بازه‌ی انرژی صفر تا 10 الکترون‌ولت) و در دو راستای x و y نشان می‌دهد. همانگونه که مشاهده می‌نمایید مقادیر منفی بزرگ برای قسمت حقیقی تابع دی الکتريک حاکی از خاصیت فلزی این ترکیبات می‌باشد. علاوه بر این قله‌های قسمت حقیقی تابع دی‌الکتريک در نزدیکی نقطه‌ی صفر انرژی قرار گرفته‌اند که این نیز نشان‌دهنده‌ی خاصیت فلزی است. شکل 4 نیز نمودارهای ضریب جذب را در دو بعد (در بازه‌ی انرژی صفر تا 14 الکترون‌ولت) نشان می‌دهد. اولین قله برای کلیه‌ی ترکیبات و در هر دو بعد در نقطه‌ی صفر می‌باشد. همچنین قله‌های دیگری در اطراف انرژی 1 الکترون‌ولت (در محدوده‌ی طول موج فرسرخ) برای هر سه ترکیب دیده می‌شود که در این محدوده بالاترین قله مربوط به تیتانیوم با مقدار 0.5 است. علاوه بر این در محدوده‌ی طول موج فرابنفش (بین 3 تا 11 الکترون‌ولت) قله‌های دیگری نیز مشاهده می‌شود که در این بین بالاترین قله مربوط به زیرکونیوم نیتريد خالص و در اطراف 11 الکترون‌ولت است. این قله‌ها بیانگر این است که ترکیبات می‌توانند گزینه‌ی مناسب جهت استفاده در صنایع آشکارسازهای فرسرخ و فرابنفش باشند. شکل 5 نیز نمودارهای طیف بازتاب را بر حسب انرژی فوتون ورودی در دو بعد نشان می‌دهد. بیشترین مقدار بازتاب برای کلیه ترکیبات در نزدیکی نقطه‌ی صفر رخ می‌دهد که بالای 0.9 می‌باشد. کمترین مقدار بازتاب نیز برای زیرکونیوم نیتريد خالص در اطراف انرژی 1 الکترون‌ولت (فرسرخ) و برای آلیاژهای آن با تیتانیوم در اطراف انرژی 2 الکترون‌ولت (نور مرئی) می‌باشد که تقریباً برابر صفر است. همچنین در اطراف انرژی 10 تا 14 الکترون‌ولت برای زیرکونیوم نیتريد خالص بازتابی نزدیک به صفر داریم. بازتاب صفر (ماده‌ی شفاف) در محدوده‌ی طول موج فرسرخ، نور مرئی و فرابنفش نشان می‌دهد این ترکیبات می‌توانند در صنعت آشکار سازهای فرسرخ فوتوکاتالیست‌ها و آشکار سازهای فرابنفش کاربرد داشته باشند.

نتیجه گیری

• ما محاسبات خود را با استفاده از نظریه‌ی تابعی چگالی و تقریب شیب تعمیم یافته بر روی زیرکونیوم نیتريد خالص و آلیاژ آن با تیتانیوم به انجام رساندیم. نمودارهای قسمت حقیقی و موهومی که به ترتیب دارای مقادیر منفی بالا و قله‌هایی در نقطه‌ی صفر بودند بیانگر خاصیت فلزی ترکیبات می‌باشند. همچنین قله‌های ضریب جذب در محدوده‌های انرژی فرسرخ و فرابنفش و نیز بازتاب نزدیک به صفر در محدوده‌های انرژی فرسرخ، نور مرئی و فرابنفش نشانگر این است که ترکیبات می‌توانند گزینه‌ی مناسبی جهت استفاده در صنایع آشکارساز فرسرخ ، فرابنفش و فوتوکاتالیست باشند. آلیاژهای تیتانیوم نیز علاوه بر اینکه تا حدود زیادی ویژگی‌های گفته شده را برای زیرکونیوم نیتريد حفظ می‌کنند یک بازتاب تقریباً صفر در محدوده‌ی نور مرئی دارند و ضمن اینکه نسبت به زیرکونیوم نیتريد سبک‌تر و ارزان‌تر است، استفاده از آن‌ها در صنایع گفته شده می‌تواند مقرون به صرفه‌تر باشد.

مراجع

- [1] S. T. Oyama. The Chemistry of Transition Metal Carbides and Nitrides. Springer Netherlands, Dordrecht, (1996).
- [2] L. E. Toth. Transition metal carbides and nitrides. Refractory materials. Academic Press (1971).
- [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 Communications*. **328**, No 7, (2021), 114218.
- [4] F. Shirvani, A. Shokri, and B. Abedi Ravan. Electronic, elastic and thermodynamic properties of $Ti_xZr_{1-x}N$ compounds determined via first-principles calculations, *Physica B Condensed Matter*. **618**, (2021), 413135
- [5] B. Saha, T. D. Sands, and U. V. Waghmare, Electronic structure, phonons, and thermal properties of ScN, ZrN, and HfN: A first-principles study, *Journal of Applied Physics*, **109**, Issue number 7, (2011)
- [6] A. T. Asvini Meenaatci. Pressure induced phase transition of ZrN and HfN: a first principles study, *Journal of Atomic and Molecular Science*, **4**, No 4, (2018) 321.
- [7] P. Giannozzi, S. Baroni, N. Bonini, M. Calandra, R. Car, C. Cavazzoni, D. Ceresoli, G. L. Chiarotti, M. Cococcioni, I. Dabo, A. Dal Corso, S. de Gironcoli, S. Fabris, G. Fratesi, R. Gebauer, U. Gerstmann, Ch. Gougousis, A. Kokalj, M. Lazzeri, L. Martin-Samos, N. Marzari, F. Mauri, R. Mazzarello, S. Paolini, A. Pasquarello, L. Paulatto, C. Sbraccia, S. Scandolo, G. Sclauzero, A. P. Seitsonen, A. Smogunov, P. Umari, and R. M. Wentzcovitch. Quantum espresso: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials. *Journal of physics. Condensed matter: An Institute of Physics journal*, **21**, No 39, (2009).