



مجله پژوهش فیزیک ایران، جلد ۲۳، شماره ۳، پاییز ۱۴۰۲

DOI: 10.47176/ijpr.23.3.41671

گذار فاز ساختاری ناشی از فشار و تأثیر فشار بر خواص الکترونیکی و مکانیکی TiPdSn: یک مطالعه ابتدا به ساکن

م. ی. باباللا* و امامکه ا. ای. انارسهها^۲

۱. دانشکده فیزیک، دانشگاه بنین، نیجریه

۲. دانشکده فیزیک، دانشگاه ایالتی دلتا، آبراکا، نیجریه

پست الکترونیکی: enarosehaomamoke@gmail.com

(دریافت مقاله: ۱۴۰۲/۰۱/۱۷؛ دریافت نسخه نهایی: ۱۴۰۲/۰۳/۲۹)

چکیده

خواص ساختاری، الکترونیکی، مکانیکی و اپتیکی آلیاژ نیمه‌هویسلر TiPdSn و همچنین گذار فاز ساختاری تحت فشار این بلور با استفاده از محاسبات ابتدا به ساکن مورد بررسی قرار گرفت. از شبه‌پتانسیل‌های مبتنی بر امواج بهبود یافته تصویری (PAW) در چارچوب تقریب گرادیان تعمیم یافته (GGA) در طول محاسبه استفاده شد. نتایج به دست آمده نشان داد که TiPdSn یک نیمه‌رسانا با گاف نواری غیرمستقیم است. همچنین خواص مکانیکی محاسبه شده نشان داد که TiPdSn شکل‌پذیر و از نظر مکانیکی پایدار است. مشاهده می‌شود که TiPdSn تحت فشار یک گذار فاز ساختاری از مکعب به دو ساختار متفاوت به نام نوع ۱ و نوع ۲ انجام می‌دهد که در ساختار شش ضلعی متبلور می‌شوند و فشار گذار در حدود ۴/۵۳ گیگاپاسکال برای ساختار نوع ۱ و حدود ۲۵/۳ گیگاپاسکال برای ساختار نوع ۲ پیش‌بینی می‌شود. خواص اپتیکی حاصل نشان داد که TiPdSn دارای ثابت دی‌الکتریک ایستای ۲۱/۴۷ و ضریب شکست ۴/۶۳ می‌باشد. گاف نواری آلیاژ با افزایش فشار ابتدا کاهش و سپس افزایش می‌یابد.

واژه‌های کلیدی: نیمه‌هویسلر، گذار فاز، تابع دی‌الکتیک، نیمه‌هادی، مدول حجمی، گاف نواری

مقاله کامل در بخش انگلیسی همین شماره مجله به چاپ رسیده است.