



## درون‌بینی ویژگی‌های الکترونیکی و کشسانی پادپروسکایت غنی از لیتیوم $\text{Li}_3\text{OCl}$ تحت فشار هیدرواستاتیک

ف. ردجم<sup>۱\*</sup>، ک. سولج<sup>۱</sup>، ب. لاگون<sup>۲</sup>، ه. مبارکی<sup>۳</sup>، و د. لیچیج<sup>۳</sup>

۱- آزمایشگاه مطالعه و توسعه مواد نیم رسانا و دی الکتریک (LEDMSD)، دانشگاه عمار تلجی، لاغواط، الجزیره

۲- آزمایشگاه فیزیک مواد (LPM)، دانشگاه عمار تلجی، لاغواط، الجزیره

۳- آزمایشگاه کاربرد و ارزش‌گذاری انرژی‌های تجدید پذیر (LMAVER)

پست الکترونیکی: f.redjem@lagh-univ.dz

(دریافت مقاله: ۱۴۰۳/۰۲/۰۱؛ دریافت نسخه نهایی: ۱۴۰۳/۰۵/۱۴)

### چکیده

محاسبات ابتدا به‌ساکن برای بررسی ویژگی‌های ساختاری، کشسانی و الکترونیکی  $\text{Li}_3\text{OCl}$  که یک ترکیب پادپروسکایت مکعبی است، تحت فشارهای مختلف انجام شد. این محاسبات با استفاده از اصول اولیه نظریه تابعی چگالی، مبتنی بر روش موج تخت خطی شده پتانسیل کامل (FP-LAPW) انجام شد که در بسته نرم‌افزاری وینک اجرا شده بود. تقریب گرادیان تعمیم‌یافته پردو-برگ-انزروهوف (PBE\_GGA) به عنوان پتانسیل همبستگی و تبدلی برای بررسی پارامترهای ساختاری تعادل، ساختار نوار انرژی، چگالی حالت‌ها، و ویژگی‌های کشسانی ترکیب  $\text{Li}_3\text{OCl}$  مورد استفاده قرار گرفت. مدول یانگ، نسبت پواسون و عامل ناهمسانگردی برای این ترکیب، با استفاده از پارامترهای کشسانی محاسبه شدند. نتیجه‌گیری شد که این ماده براساس معیارهای پایداری بورن از نظر مکانیکی پایدار بوده و به سرعت شکننده رفتار می‌کند که به شاخص پو اشاره دارد. نتایج ما نشان می‌دهند که مقادیر پارامترهای ساختاری پیش‌بینی‌شده در فشار صفر گیگاپاسکال با مطالعات قبلی سازگارند. علاوه‌براین مشخص شده است که این ماده در فشار یک گیگاپاسکال یک تغییر فاز را تجربه می‌کند.

**واژه‌های کلیدی:** پادپروسکایت، ویژگی‌های کشسانی، ساختار الکترونیکی، محاسبات ابتدا به ساکن، باتری لیتیومی

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