



درون بینی ویژگی های الکترونیکی و کشسانی پادپروسکایت غنی از لیتیوم Li_3OCl تحت فشار هیدرواستاتیک

ف. ردجم^{۱*}، ک. سولج^۱، ب. لاگون^۲، ه. مبارکی^۳، و د. لیچیج^۳

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

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

۳- آزمایشگاه کاربرد و ارزش گذاری انرژی های تجدید پذیر (LMAVER)

پست الکترونیکی: f.redjem@lagh-univ.dz

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

چکیده

محاسبات ابتدا به ساکن برای بررسی ویژگی های ساختاری، کشسانی و الکترونیکی Li_3OCl 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 نرم افزاری وینک اجرا شده بود. تقریب گرادیان تعمیم یافته پردو-برگ-انزروهوف (PBE_GGA) به عنوان پتانسیل همبستگی و تبدلی برای بررسی پارامترهای ساختاری تعادل، ساختار نوار انرژی، چگالی حالت ها، و ویژگی های کشسانی ترکیب Li_3OCl مورد استفاده قرار گرفت. مدول یانگ، نسبت پواسون و عامل ناهمسانگردی برای این ترکیب، با استفاده از پارامترهای کشسانی محاسبه شدند. نتیجه گیری شد که این ماده براساس معیارهای پایداری بورن از نظر مکانیکی پایدار بوده و به سرعت شکننده رفتار می کند که به شاخص پو اشاره دارد. نتایج ما نشان می دهند که مقادیر پارامترهای ساختاری پیش بینی شده در فشار صفر گیگاپاسکال با مطالعات قبلی سازگارند. علاوه بر این مشخص شده است که این ماده در فشار یک گیگاپاسکال یک تغییر فاز را تجربه می کند.

واژه های کلیدی: پادپروسکایت، ویژگی های کشسانی، ساختار الکترونیکی، محاسبات ابتدا به ساکن، باتری لیتیومی

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