

محاسبات ابتدا به ساکن ویژگی‌های کشسانی، مکانیکی و صوتی ترکیبات

بریلیوم - ایکس (ایکس=گوگرد، سلنیوم، تلوریم)

حمدالله صالحی*، پیمان امیری، فاطمه هاشمی

گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه شهید چمران اهواز

دریافت: ۱۳۹۹/۰۷/۱۵، پذیرش: ۱۳۹۹/۱۲/۱۲

چکیده

در این کار ویژگی‌های کشسانی، مکانیکی (پایداری مکانیکی، ضریب ناهمسانگردی و ضریب پواسون) و صوتی (سرعت طولی و عرضی) ترکیبات بریلیوم-ایکس (ایکس=گوگرد، سلنیوم، تلوریم) مورد بررسی قرار گرفته‌اند. محاسبات با استفاده از روش امواج تخت بهبودیافته خطی با پتانسیل کامل در چارچوب نظریه تابعی چگالی با تقریب‌های مختلف ال‌دی‌ای، جی‌جی‌ای و ام‌بی‌جی با بسته محاسباتی وین‌۲کی انجام گرفته‌اند. ویژگی‌های کشسانی از قبیل ثابت‌های کشسانی، مدول برشی، مدول یانگ و دمای دبابی با تقریب‌های مختلف در فازهای ساختاری مکعبی مرکز وجهی و هگزاگونال محاسبه شده‌اند. محاسبات کشسانی در این فاز ساختاری بیانگر پایداری کشسانی و ناهمسانگردی این ترکیبات می‌باشد. همچنین نتایج بیانگر این هستند که این ترکیبات در فاز مکعبی دارای خاصیت شکنندگی و در فاز هگزاگونال دارای خاصیت چکش‌خواری بیش‌تری هستند. در واقع میزان شکل‌پذیری این ترکیبات در فاز ساختاری مکعبی مرکز وجهی کم است و می‌توان آن‌ها را در دسته مواد غیرشکل‌پذیر جای داد.

کلیدواژه‌ها: نظریه تابعی چگالی، خواص صوتی، خواص کشسانی، پایداری کشسانی.

۱. مقدمه

گذار فاز برای بریلیوم سولفید در فشار ۵۸ گیگاپاسکال، برای بریلیوم سلنید در فشار ۵۶ گیگاپاسکال [۲] و برای بریلیوم تلوراید در فشار ۳۵ گیگاپاسکال [۳] رخ می‌دهد. در این پژوهش به بررسی خواص ساختاری، الکترونی و کشسانی ترکیبات مذکور در فاز مکعبی مرکز وجهی پرداخته می‌شود. بریلیوم علی‌رغم وزن بسیار کم، نقطه ذوب غیرمعمول بالایی دارد. چگالی کمی دارد ولی نسبت استحکام به وزن آن بسیار بالاست. بریلیوم از آلومینیوم سبک‌تر است ولی به اندازه ۴۰ درصد از فولاد سخت‌تر است و همین‌طور هدایت الکتریکی و گرمایی عالی دارد. بنابراین می‌توان گفت، ترکیبات بریلیوم انرژی بسیار بالایی دارند و به همین دلیل خواص غیرعادی کشسانی، ارتعاشی و الکترونیکی از خود به نمایش می‌گذارند که همین خواص منحصر به فرد، آن‌ها را به گزینه مناسبی برای استفاده در وسایل کاربردی از جمله دیوهای لیزری تبدیل می‌سازد. با توجه به کاربردهای متنوع ترکیبات بریلیوم، پژوهشگران به صورت نظری و تجربی به مطالعه روی این ترکیبات پرداختند که می‌توان به برخی از این مطالعات اشاره نمود. لازم به ذکر است که به دلیل ماهیت سمی این مواد عمده

نیم‌رساناهای گروه II-V به‌طور کلی به‌عنوان کلکوژن‌های قلیایی خاکی شناخته شده‌اند. کلکوژن‌های قلیایی خاکی به‌طور کلی در ساختار نمک‌سنگی متبلور می‌شوند. ترکیبات بریلیوم-ایکس (ایکس=گوگرد، سلنیوم، تلوریم) در شرایط محیط استثنائاً در ساختار بلندروی (مکعبی مرکز وجهی) متبلور می‌شوند. این ترکیبات یک گروه بسیار مهم از جامدات با گاف نواری پهن هستند، که به علت خواص جالب الکترونی مورد توجه قرار گرفته‌اند، این مواد بالاترین درجه پیوند کووالانسی را در مقایسه با دیگر نیم‌رساناهای با گاف پهن گروه II و VI دارند. این ترکیبات در فاز ساختاری مکعبی مرکز وجهی دارای ساختار افسی‌سی^۱ با گروه فضایی (۲۱۶) $Fm\bar{3}m$ می‌باشند که در فشار کم در ساختار روی اورانیت^۲ متبلور می‌شوند [۱]. با افزایش فشار اولین گذار فاز از ساختار روی اورانیت به ساختار نیکل آرسنید (هگزاگونال) اتفاق می‌افتد که این

* نویسنده پاسخگو: salehi_h@scu.ac.ir

^۱ FCC, Face Centered Cubic^۲ ZnS

تقریب‌های ال‌دی‌ای^۳، دابلویسی‌جی‌جی‌ای^۴، پی‌بی‌اسول-جی‌جی‌ای^۵، پی‌بی‌ای-جی‌جی‌ای^۶ و ام‌بی‌جی^۷ و همچنین کد محاسباتی وین‌۲کی^۸ استفاده شده است. انرژی جدایی^۶-ریدبرگ برای جداسازی حالت‌های ظرفیت از حالت‌های مغزه مبنا قرار گرفتند. شعاع کره‌ی مافین-تین برای بریلیوم، گوگرد، سلنیوم و تلوریم به ترتیب برابر با ۱٫۶۵، ۱٫۶۵، ۱٫۸۵ و ۲٫۱ بوه‌ر در نظر گرفته شده است، وجود بیشینه بار در درون کره‌های مافین-تین نشان از انتخاب مناسب شعاع مافین-تین دارد. در مسیر محاسبات $G_{\max}=12$ انتخاب شده است. برای محاسبه مقادیر بهینه تعداد نقاط در منطقه وارون با تعیین مبنای همگرایی ۰٫۰۰۰۱ ریدبرگ برای انرژی، به انجام محاسبات خود سازگار پرداخته شده است و تغییرات انرژی برحسب تعداد نقاط درون منطقه وارون به دست آمده‌اند. تعداد نقاط k درون منطقه وارون برای بریلیوم سولفید، بریلیوم سلنید و بریلیوم تلوراید به ترتیب ۷۰۰، ۸۰۰ و ۴۰۰ به دست آمدند. علاوه بر این در این محاسبات مقدار Rk_{\max} برای بریلیوم سولفید، بریلیوم سلنید و بریلیوم تلوراید به ترتیب ۷٫۵، ۸ و ۷٫۵ در نظر گرفته شده است.

۳. نتایج

۳-۱. ویژگی‌های کشسانی

به منظور تأیید رابطه پایداری ساختار بورن ثابت‌های کشسانی ترکیبات بریلیوم در فاز مکعبی مورد محاسبه و بررسی قرار گرفتند. نتایج مربوط به این ثابت‌ها با تقریب‌های مختلف در جدول ۱ ارائه شده‌اند. حال ثابت‌های کشسانی در ساختار هگزگونال محاسبه و در جدول ۲ مقادیر ثابت‌های کشسانی فاز ساختاری هگزگونال به دست آمده در تقریب‌های مختلف نشان داده شده‌اند. جدول ۳ مقادیر مدول حجمی، مدول برشی، مدول یانگ و ضریب پواسون محاسبه شده در تقریب‌های مختلف را نشان می‌دهد.

مطالعات بر روی این ترکیبات نظری می‌باشد. در سال ۱۹۹۶ گونزالز و همکاران با استفاده از روش ابتدا به ساکن با تقریب چگالی موضعی توانستند ثابت کشسانی و مرتبه اول آن را محاسبه کنند [۴]. خناتا و همکاران در سال ۲۰۰۶ از روش اربیتال‌های مافین-تین خطی با پتانسیل کامل ثابت‌های کشسانی را برای این ترکیبات به دست آوردند [۵]. هر سیلی و همکاران نیز در سال ۲۰۰۷ با استفاده از تقریب چگالی موضعی و شیب تعمیم‌یافته به محاسبه ثابت‌های کشسانی پرداختند [۶]. لارف و همکاران در سال ۲۰۱۲ با استفاده از نظریه تابعی چگالی اختلالی (دی‌اف‌پی‌تی)^۱ و با کد محاسباتی کوانتوم-اسپرسو خواص گرمایی و کشسانی این ترکیبات را بررسی و به نتایج خوبی در مقایسه با کارهای قبلی رسیدند [۷]. ژانگ و همکاران در سال ۲۰۱۳ خواص الکترونی، نوری و کشسانی این ترکیبات را مورد مطالعه قرار دادند [۸]. در سال ۲۰۱۳ ژئو و همکاران با استفاده از روش امواج تخت بر مبنای شبه پتانسیل (پی‌دابلو-پی‌پی)^۲ در تقریب شیب تعمیم‌یافته ثابت‌های کشسانی را محاسبه کردند [۹]. کالپانا و همکاران نیز در سال ۱۹۹۸ به بررسی خواص کشسانی این ترکیبات پرداختند [۱۰]. فانجی کونگ و همکارش در سال ۲۰۰۹ با تقریب شیب تعمیم‌یافته ثابت کشسان و خواص ترمودینامیکی بریلیوم سلنید را محاسبه کردند [۱۱]. بنوسمن در سال ۲۰۰۱ با استفاده از تقریب چگالی موضعی مجموعه کاملی از ثابت‌های کشسان مرتبه اول بریلیوم سولفید را به دست آورد [۱۲]. هم‌چنین می‌توان برای اطلاعات بیش‌تر روی کارهای انجام‌شده به مراجع [۱۳-۱۸] مراجعه نمود. لذا هدف در این پژوهش بررسی ویژگی‌های کشسانی، دمای دبای، شکل‌پذیری، ضریب ناهمسانگردی کشسانی برای ترکیبات مورد نظر با استفاده از روش امواج تخت بهبود یافته خطی با پتانسیل کامل در چارچوب نظریه تابعی چگالی می‌باشد.

۲. مواد و روش‌ها

در این محاسبات از امواج تخت بهبود یافته خطی با پتانسیل کامل در چارچوب نظریه تابعی چگالی و

³ LDA

⁴ WCGGA

⁵ PBEsol-GGA

⁶ PBE-GGA

⁷ MBJ

⁸ Wien2k

¹ DFPT

² PW-PP

جدول ۱ ثابت های کشسانی و برشی ترکیبات برلیوم برحسب گیگاپاسکال در تقریب های مختلف همراه با کار نظری دیگران [۱۹].

C_s	C_{44}	C_{12}	C_{11}	تقریب	
۴۸,۴۱۴	۹۲,۶۶۶۵	۵۸,۴۸۵۳	۱۵۵,۳۱۴۶	ال دی ای	برلیوم سولفید
۴۸,۴۲۲	۹۲,۸۳۶۳	۶۳,۹۲۵۸	۱۶۰,۷۶۹۸	پی بی ای - جی جی ای	
۴۶,۷۶۷	۹۳,۱۷۹۲	۶۲,۶۱۳۲	۱۵۶,۱۴۸۶	دابل یوسی جی جی ای	
۴۶,۹۴۴	۹۴,۱۴۷۲	۶۲,۱۷۲۶	۱۵۶,۰۶۲۳	پی بی اسول - جی جی ای	
-	۱۰۵	۶۸	۱۶۷	کار نظری	
۳۹,۶۸۵	۷۷,۰۱۴۲	۴۷,۸۰۱۷	۱۲۷,۱۷۳۳	ال دی ای	برلیوم سلنید
۳۹,۷۴۶	۷۹,۰۰۸۶	۵۳,۴۲۱۷	۱۳۲,۹۱۴۴	پی بی ای - جی جی ای	
۳۸,۳۵۳	۷۸,۴۷۶۳	۵۲,۰۸۵۴	۱۲۸,۷۹۱۸	دابل یوسی جی جی ای	
۳۸,۶۰۸	۷۸,۸۳۸۹	۵۱,۳۴۹۸	۱۲۸,۵۶۶۲	پی بی اسول - جی جی ای	
-	۴۴	۵۶	۱۵۳	کار نظری	
۳۰,۷۰۰	۵۳,۱۷۷۶	۳۶,۵۸۷۵	۹۷,۹۸۸۰	ال دی ای	برلیوم تلوراید
۳۰,۱۸۵	۵۵,۰۰۷۴	۴۰,۹۳۰۰	۱۰۱,۳۰۰۷	پی بی ای - جی جی ای	
۲۹,۵۱۵	۵۴,۱۹۶۱	۳۹,۷۹۱۹	۹۸,۸۲۲۲	دابل یوسی جی جی ای	
۲۹,۶۲۲	۵۴,۳۶۸۳	۳۹,۱۴۱۶	۹۸,۳۸۷۰	پی بی اسول - جی جی ای	
-	۶۸	۴۴	۹۹	کار نظری	

جدول ۲ مقادیر ثابت های کشسانی ترکیبات برلیوم برحسب گیگاپاسکال در فاز ساختاری هگزگونال.

C_{55}	C_{33}	C_{12}	C_{11}	تقریب	
۱۳,۲۰	۲۳۳,۹۳	۳۷,۵۳	۸۵,۳۱	ال دی ای	برلیوم سولفید
۱۸,۶۸	۲۴۵,۲۰	۴۴,۴۷	۸۷,۵۲	پی بی ای - جی جی ای	
۱۷,۳۸	۲۴۰,۷۶	۴۲,۴۵	۸۷,۹۶	دابل یوسی جی جی ای	
۱۸,۰۱	۲۳۹,۱۸	۴۱,۶۹	۸۶,۵۲	پی بی اسول - جی جی ای	
۱۴,۴۴	۱۴۹,۸۵	۵۳,۷۹	۶۰,۲۳	ال دی ای	برلیوم سلنید
۵۲,۹۳	۵۳,۷۹	۵۳,۳۱	۶۱,۳۸	پی بی ای - جی جی ای	
۱۴,۴۴	۱۴۹,۸۵	۵۳,۷۹	۶۰,۲۳	دابل یوسی جی جی ای	
۱۴,۶۴	۱۴۷,۱۸	۵۲,۹۳	۵۹,۶۸	پی بی اسول - جی جی ای	
۶,۷۸	۱۲۳,۹۴	۴۷,۰۲	۵۰,۸۸	ال دی ای	برلیوم تلوراید
۱۲,۰۴	۱۳۴,۹۲	۵۴,۷۷	۵۴,۲۶	پی بی ای - جی جی ای	
۱۰,۲۶	۱۲۵,۵۴	۵۱,۲۹	۵۴,۲۴	دابل یوسی جی جی ای	
۱۰,۳۹	۱۲۵,۴۱	۵۲,۱۴	۵۲,۶۶	پی بی اسول - جی جی ای	

جدول ۳ مقادیر مدول حجمی، مدول برشی، مدول یانگ و ضریب پواسون محاسبه شده از ثابت های کشسانی در فاز مکعبی.

γ	E	G	B	تقریب	
۰,۱۸۸	۱۹۶,۷۱۸	۷۱,۴۱۰	۹۰,۷۶۱	ال دی ای	برلیوم سولفید
۰,۲۰۲	۱۷۱,۸۹۸	۷۱,۴۱۰	۹۶,۲۰۷	پی بی ای - جی جی ای	
۰,۱۸۵	۱۳۹,۹۷۵	۵۹,۰۲۰	۷۴,۲۵۸	ال دی ای	برلیوم سلنید
۰,۱۹۹	۱۴۳,۹۰۷	۵۹,۹۶۷	۷۹,۹۱۹	پی بی ای - جی جی ای	
۰,۱۸۵	۱۰۲,۴۴۲	۴۲,۶۵۸	۵۷,۰۵۴	ال دی ای	برلیوم تلوراید
۰,۱۹۹	۱۰۴,۹۳۴	۴۳,۲۳۵	۶۱,۰۵۳	پی بی ای - جی جی ای	

جدول ۴ مقادیر سرعت طولی، عرضی، متوسط، دمای دمای، شبه‌سنج ناهمسانگردی و نسبت B/G به دست آمده از ثابت‌های کشسانی برای ترکیب بریلیم سولفید.

	پای بی‌ای - جی جی‌ای	دابل‌یوسی جی جی‌ای	پای بی‌ای - جی جی‌ای	ال دی‌ای	
θ_D (K)	۷۴۰٫۰۱۲	۷۳۷٫۳۸۱	۷۴۱٫۹۹۲	۷۴۰٫۴۶۸	
V_l (m/s)	۸۹۰۳٫۱۵	۸۸۹۳٫۵۵	۸۹۷۶٫۶۸	۸۸۴۵٫۵	
V_t (m/s)	۵۴۷۳٫۲۵	۵۴۵۲٫۲۲	۵۴۸۴٫۳۸	۵۴۸۱٫۵	
V_m (m/s)	۶۰۳۹٫۹۴	۶۰۱۸٫۴۷	۶۰۵۶٫۱	۶۰۴۳٫۶۶	
A	۴٫۰۱۰۹	۴٫۰۲۶۰	۳٫۸۳۰۰	۳٫۸۲۸۰	
نسبت B/G	۱٫۳۱۲۷	۱٫۳۲۷۴	۱٫۳۴۵۶	۱٫۲۷۰۹	

جدول ۵ مقادیر سرعت طولی، عرضی، متوسط، دمای دمای، شبه‌سنج ناهمسانگردی و نسبت B/G به دست آمده از ثابت‌های کشسانی برای ترکیب بریلیم سلنید.

	پای بی‌ای - جی جی‌ای	دابل‌یوسی جی جی‌ای	پای بی‌ای - جی جی‌ای	ال دی‌ای	
θ_D (K)	۴۷۴٫۰۶	۴۷۲٫۹۳۳	۴۷۷٫۴۲۶	۴۷۲٫۹۳۷	
V_l (m/s)	۶۰۲۱٫۳۹	۶۰۲۴٫۰۸	۶۰۹۵٫۴۳	۵۹۶۱٫۹۸	
V_t (m/s)	۳۷۰۹	۳۶۹۸٫۹۶	۳۷۳۳٫۰۱	۳۷۰۳٫۵۱	
V_m (m/s)	۴۰۹۲٫۱۸	۴۰۸۲٫۴۴	۴۱۲۱٫۲۳	۴۰۸۲٫۴۸	
A	۴٫۰۸۰۰	۴٫۱۱۰۰	۳٫۶۷۵۶	۳٫۸۲۸۰	
نسبت B/G	۱٫۳۰۲۲	۱٫۳۱۸۹	۱٫۳۳۲۷	۱٫۲۵۸۱	

جدول ۶ مقادیر سرعت طولی، عرضی، متوسط، دمای دمای، شبه‌سنج ناهمسانگردی و نسبت B/G به دست آمده از ثابت‌های کشسانی برای ترکیب بریلیم تلوراید.

	پای بی‌ای - جی جی‌ای	دابل‌یوسی جی جی‌ای	پای بی‌ای - جی جی‌ای	ال دی‌ای	
θ_D (K)	۳۳۸٫۰۰۷	۳۳۷٫۵۵۲	۳۴۰٫۶۶۴	۳۳۷٫۹۱۳	
V_l (m/s)	۴۷۵۷٫۴۵	۴۷۶۵٫۴۱	۴۸۱۸٫۶۶	۴۷۲۰٫۸۸	
V_t (m/s)	۲۸۸۷٫۰۷	۲۸۸۲٫۲۲	۲۹۰۸٫۱۷	۲۸۸۸٫۷	
V_m (m/s)	۳۱۹۰٫۲۱	۳۱۸۵٫۹۲	۳۲۱۵٫۲۹	۳۱۸۹٫۳۲	
A	۳٫۶۷۰۷	۳٫۶۴۴۶	۳٫۶۰۲۲	۳٫۴۶۳۸	
نسبت B/G	۱٫۳۸۲۰	۱٫۱۰۰۳	۱٫۴۱۲۱	۱٫۳۳۷۴	

کافی‌ها، تنش به صورت مستقیم در محدوده معینی از این مقادیر با کرنش متناسب است. این رابطه بعد از رابرت هوک که برای اولین بار آن را بیان کرد، به قانون هوک مشهور است. خواص کشسانی یک جامد از اهمیت خاصی برخوردار است و با پتانسیل بین اتمی، خواص مکانیکی مواد و طیف فونونی در ارتباط هستند. برای بلور مکعبی سه ثابت کشسانی مستقل C_{11} ، C_{12} و C_{44} وجود دارد که این ثابت‌ها برای تعیین پایداری مواد لازم می‌باشند. برطبق پایداری ساختار بورن، ثابت‌های کشسانی از شرایط زیر باید پیروی کنند [۱۹].

$$C_{11} + 2C_{12} > 0, \quad C_{11} - C_{12} > 0, \quad C_{11}, C_{44} > 0 \quad (1)$$

مقادیر محاسبه شده شبه‌سنج ناهمسانگردی و نسبت B/G در جدول‌های ۴ تا ۶ با تقریب‌های مختلف ارائه شده‌اند. هم‌چنین نتایج حاصل از محاسبه دمای دمای، سرعت صوتی طولی، عرضی و متوسط برای هر یک از ترکیبات بریلیم در جدول‌های ۴ تا ۶ ارائه شده‌اند.

۴. بحث

هنگامی که یک نیروی خارجی به یک ماده اعمال می‌شود تنش روی ماده ایجاد می‌کند، این تنش باعث تغییر شکل ماده می‌شود. نسبت میزان تغییر شکل به اندازه اصلی، کرنش نامیده می‌شود. برای بسیاری از مواد شامل فلزات و

در فاز هگزاگونال نیز از لحاظ کشسانی پایدار هستند. در این جا زیرنویس‌های V (Voigt) و R (Reuss) اشاره به تقریب وی‌آراچ^۱ دارند که مدول حجمی و برشی مربوط به این تقریب براساس ثابت‌های کشسانی بلور مکعبی با روابط زیر نشان داده می‌شود [۲۴]:

$$B_R = B_V = \frac{C_{11} + 2C_{12}}{3}, G_V = \frac{3C_{44} - C_{12} + C_{11}}{5}, \quad (6)$$

$$G_R = \frac{5}{4S_{11} - 4S_{12} + 3S_{44}}$$

روابط بالا نشان می‌دهند که مدول حجمی به ثابت‌های کشسانی C_{11} و C_{12} وابسته می‌باشند. این مدول اطلاعاتی درباره کشش پیوند مواد و اندازه‌های از مقاومت آن‌ها در مقابل تغییر شکل به می‌دهد. کمیت‌هایی که به مدول‌های حجمی و برشی وابسته هستند، مدول یانگ (E) و ضریب پواسون (ν) می‌باشند. مدول یانگ چگونگی کشیدگی یا فشردگی یک ماده را در واکنش یک نیروی اعمالی توصیف می‌کند و نسبت تنش به کرنش است، در واقع معیاری برای سختی مواد است و هر چه مدول یانگ بیش تر باشد، ماده سخت تر خواهد بود. هم‌چنین رفتار نرمی و سختی مواد را می‌توان با ضرایب پواسون سنجید [۲۴].

$$E = \frac{9BG_H}{2B + G_H}, \quad \nu = \frac{3B - 2G_H}{2(3B + 2G_H)} \quad (7)$$

در واقع ضریب پواسون برای مواد شکننده بسیار کوچک و برای موادی با خاصیت مفتول‌شدگی به‌طور معمول برابر ۰.۳۳ است. هم‌چنین اطلاعات دیگری که می‌توان از ضریب پواسون استخراج کرد نوع پیوند در جسم جامد است. اگر مقدار ضریب پواسون در جامدات از ۰.۱ تا ۰.۲۵ باشد پیوند آن کووالانسی (جامد کووالانسی) و اگر بین ۰.۲۵ تا ۰.۵ باشد پیوند آن یونی (جامد یونی) است. با توجه به جدول ۳ مشاهده می‌شود که نتایج حاصل از ضریب پواسون با نتایج حاصل از چگالی ابرالکترونی هم‌خوانی دارد. از این جدول مشاهده می‌شود که این ترکیبات داری پیوند کووالانسی هستند و با نتایج مربوط به چگالی ابرالکترونی هم‌خوانی دارد. مدول برشی مقاومت در مقابل تغییر شکل پلاستیکی است.

همان‌طور که در جدول ۳ مشاهده می‌کنیم مدول حجمی برای بریلیوم-سولفید نسبت به بریلیوم-سلنید و

برای مثال برای بریلیوم-سولفید در تقریب ال‌دی‌ای به‌صورت ذیل می‌باشد:

$$C_{11} + 2C_{12} = 2(58,48) + 155,310$$

$$C_{11} - C_{12} > 0 \rightarrow 155,58 - 31,48 > 0$$

لذا همان‌طور که مشاهده می‌شود تمام شرایط پایداری برای ساختار مکعبی برقرار است.

هم‌چنین با استفاده از جدول ۱ که ثابت‌های کشسانی ترکیبات بریلیوم در فاز مکعبی در آن با تقریب‌های مختلف آورده شده است؛ می‌توان شبه‌سنج‌هایی را که توصیف‌کننده خواص یک جامد هستند به‌دست آورد. یکی از این شبه‌سنج‌ها، ثابت برشی هست که با نماد G نمایش داده می‌شود و برای یک بلور مکعبی بر حسب ثابت‌های کشسانی C_{11} و C_{12} با فرمول زیر نمایش داده می‌شوند [۲۰]:

$$C_s = \frac{1}{2}(C_{11} - C_{12}) \quad (2)$$

همان‌طور که در جدول ۱ مشاهده می‌شود شرایط پایداری مکانیکی این ترکیبات برآورده می‌شود. لذا این مواد از لحاظ مکانیکی در شرایط پایدار هستند. دو شبه‌سنج مهم دیگر مدول حجمی (B) و مدول برشی (G) می‌باشند که با رابطه ۳ نمایش داده می‌شوند [۲۱]:

$$B = \frac{B_V + B_R}{2}, \quad G = \frac{G_V + G_R}{2} \quad (3)$$

دانستن ثابت‌های کشسانی برای تعیین پایداری بلور (مواد) لازم است. بر طبق پایداری ساختار بورن، ثابت‌های کشسانی بلور مکعبی از شرایط زیر باید پیروی کنند [۲۲]:

$$C_{11} + 2C_{12} > 0, \quad C_{11} - C_{12} > 0, \quad C_{11}, C_{44} > 0 \quad (4)$$

لذا همان‌طور که مشاهده می‌شود تمام شرایط پایداری برای ساختار مکعبی برقرار است. با توجه به ثابت‌های کشسانی محاسبه‌شده در ساختار هگزاگونال که در جدول ۲ آورده شده‌اند آشکار می‌شود که در این فاز ساختاری تاکنون فعالیتی صورت نگرفته است. برای ساختار هگزاگونال شرایط پایداری بورن طبق رابطه ۵ می‌باشد [۲۳]:

$$C_{11} > |C_{12}|, \quad 2C_{13} < C_{33}(C_{11} + C_{12}),$$

$$\frac{C_{11} - C_{12}}{2} > 0 \quad (5)$$

با بررسی شرایط فوق به این نتیجه حاصل می‌شود که ترکیبات بریلیوم-ایکس (ایکس=گوگرد، سلنیوم، تلوریم)

¹ VRH; Voigt-Reuss-Hill

دارد.

سرعت صوتی: کمیت دیگری که با استفاده از خواص کشسانی مواد می‌توان به دست آورد سرعت صوتی است، سرعت‌های صوتی طولی V_l عرضی V_t و متوسط V_m به صورت زیر به دست می‌آیند [۲۵].

$$V_l = \left(\frac{\nu B_H + \epsilon G_H}{\rho} \right)^{1/2}, \quad V_t = \left(\frac{G_H}{\rho} \right)^{1/2}, \quad (9)$$

$$V_m = \left[\frac{1}{3} \left(\frac{\nu}{V_t^2} + \frac{1}{V_l^2} \right) \right]^{-1/2}$$

نتایج حاصل برای سرعت‌های طولی، عرضی و متوسط همراه با دمای دبای برای هر یک از ترکیبات بریلیوم-ایکس (ایکس=گوگرد، سلنیوم، تلوریم) در جدول‌های ۴ تا ۶ ارائه شده‌اند.

دمای دبای: شبه‌سنج مهم دیگری که به خواص فیزیکی مانند دمای ذوب و گرمای ویژه وابسته است دمای دبای است. برای تشخیص نواحی بین دماهای بالا و پایین، یک جامد از این دما استفاده می‌شود. اگر دمای جسم از دمای دبای بیشتر باشد همهٔ مداه انرژی $k_B T$ دارند و اگر دمای جسم از دمای دبای کم‌تر باشد مدهای دارای بسامد بالا بدون تحرک هستند، یعنی ارتعاشات برانگیخته از ارتعاشات صوتی تولید می‌شوند. بنابراین در دماهای پایین دمای دبای از ارتعاشات صوتی محاسبه می‌شود [۲۶]. دمای دبای نشان‌دهندهٔ میزان میانگین قدرت پیوند شیمیایی است. دمای دبای با استفاده از ثابت‌های کشسانی به صورت زیر است:

$$\theta_D = \frac{h}{k_B} \left(\frac{\nu}{4\pi V_a} \right)^{1/2} V_m \quad (10)$$

که در آن h ثابت پلانک، ثابت بولتزمن، V_a حجم اتمی است. نیز همان‌طور که پیش‌تر بیان شد سرعت متوسط صوتی است.

با توجه به جدول‌های ۴ تا ۶ می‌توان نتیجه گرفت که با افزایش عدد اتمی اتم کلکوژن (اتم ایکس) در ترکیبات بریلیوم-ایکس (ایکس=گوگرد، سلنیوم، تلوریم) و سنگین شدن ترکیب دمای دبای و متعاقباً سرعت‌های طولی، عرضی و متوسط کاهش پیدا می‌کنند. در واقع سنگین شدن ترکیب سبب کاهش ارتعاشات یون‌ها در بلور می‌گردد و در نتیجه موج صوتی با سرعت کندتری در

بریلیوم‌تلوراید بیش‌تر است. در نتیجه در هر دو فاز ساختاری ترتیب استحکام در برابر تغییر شکل به قرار $BeS > BeSe > BeTe$ است.

هم‌چنین مشخص شد که سه تقریب ویت^۱، روس^۲ و هیل^۳ نتایج یکسانی را برای B ، مدول حجمی در فاز مکعبی مرکز وجهی می‌دهند. بنابراین ناهمسانگردی مدول حجمی، برای آن‌ها برابر صفر می‌شود. یعنی در برابر فشار هیدرواستاتیکی، همسانگرد عمل می‌کنند. هم‌چنین مقاومت در مقابل تغییر شکل پلاستیکی هم مانند استحکام است. هم‌چنین همان‌طور که مشاهده می‌شود مدول برشی این ترکیبات در فاز ساختاری مکعبی مرکزوجهی بیش‌تر از فاز ساختاری هگزاگونال است که این موضوع می‌تواند ناشی از تقارن بیش‌تر بلور در فاز ساختاری مکعبی مرکزوجهی است.

شکل‌پذیری^۴: یک خاصیت ذاتی و کیفی ماده است و نقش کلیدی را در ساخت مواد به عهده دارد. معمولاً موادی که ترد و شکننده هستند شکل‌پذیر نیستند، اگر نسبت B/G حدود $1/75$ یا بیش‌تر از آن باشد در نتیجه آن ماده شکل‌پذیر است [۲۴].

ضریب ناهمسانگردی کشسانی: شبه‌سنج مهمی در علم مواد است و نشان‌دهندهٔ تفاوت خواص در جهات مختلف بلور است. ناهمسانگردی زینر یکی از مشهورترین شبه‌سنج‌ها است که با A نشان داده می‌شود [۲۴]. میزان تفاوت ضریب ناهمسانگرد زینر با عدد یک، درجهٔ ناهمسانگردی کشسانی را نشان می‌دهد. هر چه این مقدار کوچک‌تر یا بزرگ‌تر از ۱ باشد نشان‌دهندهٔ ناهمسانگردی آن ماده است. در نتیجه قدر مطلق اختلاف آن از عدد ۱ درجهٔ ناهمسانگردی کشسانی را نشان می‌دهد [۲۵].

$$A = \frac{2C_{44}}{(C_{11} - C_{12})} \quad (8)$$

نتایج محاسبات نشان از این می‌دهد که در فاز ساختاری مکعبی نسبت به فاز ساختاری هگزاگونال درجهٔ ناهمسانگردی بیش‌تر است.

نتایج جدول‌های ۴ تا ۶ نشان از عدم شکل‌پذیری این مواد

¹ Voigt

² Reuss

³ Hill

⁴ Ductility

فهرست منابع

- [1] D.J. Stukel, "Energy-band structure of BeS, BeSe, and BeTe," *Physical Review B*, vol. 2, pp. 1852-1856, 1970.
- [2] Y. Al-Douri, et al. "Density functional study of optical properties of beryllium chalcogenides compounds in nickel arsenide B8 structure," *Physica B: Condensed Matter*, vol. 407, pp. 286-296, 2012.
- [3] H. Luo, et al. "Phase transformation of BeSe and BeTe to the NiAs structure at high pressure," *Physical Review B* 52, pp. 7058-7062, 1995.
- [4] M. Gonzalez-Diaz, P. Rodriguez-Hernandez, A. Munoz, "Elastic constants and electronic structure of beryllium chalcogenides BeS, BeSe, and BeTe from first-principles calculations," *Physical Review B*, vol. 55, pp. 14043, 1997.
- [5] R. Khenata, A. Bouhemadou, M. Hichour, H. Baltache, D. Rached, M. Rerat, "Elastic and optical properties of BeS, BeSe and BeTe under pressure," *Solid-State Electronics* 50, pp. 1382-1388, 2006.
- [6] D. Heciri, L. Beldi, S. Drablia, H. Meradji, N. E. Derradji, H. Belkhir, B. Bouhafs, "First-principles elastic constants and electronic structure of beryllium chalcogenides BeS, BeSe and BeTe," *Computational Materials Science*, 38, pp. 609-617, 2007.
- [7] S. Laref, A. Laref, "Thermal properties of BeX (X= S, Se and Te) compounds from ab initio quasi-harmonic method," *Computational Materials Science*, vol. 51, pp. 135-140, 2012.
- [8] I. Khan, I. Ahmad, D. Zhang, H.R. Aliabad, S. J. Asadabadi, "Electronic and optical properties of mixed Be-chalcogenides," *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, vol. 74, pp. 181-188, 2013.
- [9] L. Guo, G. Hu, S. Zhang, W. Feng, Z. Zhang, "Structural, elastic, electronic and optical properties of beryllium chalcogenides BeX (X= S, Se, Te) with zinc-blende structure," *Journal of Alloys and Compounds*, vol. 561, pp. 16-22, 2013.
- [10] G. Kalpana, G. Pari, A. Mookerjee, A.K. Bhattacharyya, "Ab initio electronic band structure calculations for beryllium chalcogenides," *International Journal of Modern Physics B*, vol. 12, pp. 1975-1984, 1998.
- [11] F. Kong, G. Jiang, "Phase transition, elastic, thermodynamic properties of zinc-blend BeSe from first-principles," *Physica B: Condensed Matter*, vol. 404, pp. 3935-3940, 2009.
- [12] N. Benosman, N. Amrane, S. Mecabih, H. Aourag, "Structural and electronic

شبکه منتشر می‌گردد. لذا می‌توان گفت که خواص کشسانی بس بلورها به ثابت‌های کشسانی تک بلورهایی که بس بلور را تشکیل داده‌اند و نیز چگونگی اتصال آن‌ها بستگی دارد. ثابت‌های کشسانی مؤثر بس بلور را می‌توان از تک‌بلور و خواص ساختاری محاسبه کرد. هم‌چنین رفتار سختی و نرمی این مواد با استفاده از ضریب پواسون نشان داد که این مواد در فاز مکعبی مرکز وجهی نسبت به فاز هگزاگونال شکننده‌تر می‌باشند.

۵. نتیجه‌گیری

محاسبات با روش امواج تخت بهبود یافته خطی با پتانسیل کامل و با کد محاسباتی وین ۲ کی براساس نظریه تابعی چگالی و با تقریب‌های ال‌دی‌ای، پی‌بی‌ای - جی‌جی‌ای و ام‌بی‌جی انجام شده است. محاسبات ویژگی‌های کشسانی به‌دست آمده نشان از پایداری کشسانی این مواد در این فاز ساختاری دارد. میزان ناهمسانگردی بالای به‌دست آمده نشان می‌دهد که این مواد در برابر اعمال فشار رفتار متفاوتی در جهت‌های مختلف از خود نشان می‌دهند. نسبت‌های B/G به‌دست آمده معرف آن هستند که این مواد شکل‌ناپذیر هستند. در انتها دمای دبای و سرعت صوتی در این مواد در تقریب‌های مختلف محاسبه شده‌اند و نتایج نشان می‌دهند که با افزایش عدد اتمی در این ترکیبات دمای دبای و هم‌چنین سرعت صوتی کاهش پیدا می‌کند. بر طبق محاسبات انجام‌شده با تقریب ویت-هیل مدول برشی، مدول حجمی و مدول یانگ در هر دو فاز ساختاری مکعبی مرکزوجهی و هگزاگونال از الگوی BeTe $> \text{BeS} > \text{BeSe}$ یعنی با افزایش اندازه آنیون از گوگرد به تلوریم در این ترکیبات میزان سختی، مقاومت در مقابل تغییر شکل پلاستیکی و کشسانی کاهش می‌یابد. رفتار سختی و نرمی این مواد با استفاده از ضریب پواسون نشان داد که این مواد در فاز مکعبی مرکزوجهی نسبت به فاز هگزاگونال شکننده‌تر می‌باشند.

۶. تقدیر و تشکر

بدینوسیله از معاونت پژوهشی دانشگاه شهید چمران اهواز تقدیر و تشکر می‌گردد.

- electronic and optical properties of ZnS, ZnSe and ZnTe under pressure,” *Computational Materials Science*, vol. 2, pp. 263-270, 2006.
- [20] D. Rached, M. Rabah, N. Benkhetou, R. Khenata, B. Soudini, Y. Al-Douri, H. Baltache, “First-principle study of structural, electronic and elastic properties of beryllium chalcogenides BeS, BeSe and BeTe,” *Computational materials science*, vol. 37, pp. 292-299, 2006.
- [21] R. Hill, “The elastic behavior of a crystalline aggregate,” *Proceedings of the Physical Society*, Section A, vol. 65, pp. 349-362, 1952.
- [22] C.F. Cline, L.D. Harold, W.H. Glenn, “Elastic constants of hexagonal BeO, ZnS, and CdSe,” *Journal of Applied Physics*, pp. 1944-1948, 1967.
- [23] W. Voigt, “Theoretische Studien fiber die Elastizitätsverhältnisse der Kristalle (Theoretical studies on the elasticity relationships of crystals),” *Abh. Gesch. Wissenschaften*, pp. 34-43, 1887.
- [24] S.F. Pugh, “Relations between the elastic moduli and the plastic properties of polycrystalline pure metals,” *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science*, vol. 45, pp. 823-843, 1954.
- [25] C. Zener, “Elasticité et anélasticité des métaux”, 1955.
- [26] M. Jamal, et al. “Mechanical and thermodynamical properties of hexagonal compounds at optimized lattice parameters from two-dimensional search of the equation of state,” *RSC Advances*, vol. 4, pp. 57903-57915, 2014.
- properties of bulk BeS,” *Physica B: Condensed Matte*, vol. 304, pp. 214-220, 2001.
- [13] D.P. Rai, M.P. Ghimire, R.K.Thapa, “A DFT study of BeX (X = S, Se, Te) semiconductor: Modified Becke Johnson (MBJ) potential,” *Semiconductors*, vol. 48, no. 11, pp. 1447-1457, 2014.
- [14] S. Zhang, W. Feng, Z. Zhang, “Structural, elastic, electronic and optical properties of beryllium chalcogenides BeX (X = S, Se, Te) with zinc-blende structure,” *Journal of Alloys and Compounds*, vol. 561, pp. 16-22, 2013.
- [15] J. Zhou, et al, “Bond-Energy-Electron Relaxation of Be_N Nanoclusters and BeX Alloys,” *Adv. Theroy Simulation*, vol. 1, pp. 1-8, 2018.
- [16] K. Bhojani, Himadri R. Soni, Prafulla K. Jha, “Strain induced modifications in the structural, electronic, and vibrational properties of beryllium chalcogenides,” *AIP Advances* 10, pp. 015046, 2020.
- [17] B. Doumi, A. Tadjer, F. Dahmane, A. Djedid, A. Yakoubi, Y. Barkat, M. OuldKada, A. Sayede, L. Hamada, “First-principles investigation of half-metallic ferromagnetism in V-doped BeS, BeSe, and BeTe,” *Journal of Supercond Novel Magnetism*, pp. 293-300, 2014.
- [18] B. Iyozzor, M. Babalola, E. Aigbekaen, “Ab initio calculation of the structural, mechanical and thermodynamic properties of beryllium sulphide (BeS),” *Journal of Applied Sciences and Environmental Management*, vol. 22, pp. 41-46, 2018.
- [19] A. Bouhemadou, R. Khenata, F. Zegrar, M. Sahnoun, H. Baltache, A.H Reshak, “Elastic,

(Research Article)
**Ab-initio calculation of elastic, mechanical and acoustic properties of
BeX (X= S, Se, Te) compounds**

H. Salehi*, P. Amiri, F. Hashemi

Department of Physics, Faculty of Science, Shahid Chamran University of Ahvaz

Abstract

In this paper the elastic, mechanical (stability, anisotropy and Poisson's coefficients) and acoustic properties of BeX (X= S, Se, Te) have been investigated. Calculations with Full potential linear augmented plane wave have been performed in the framework of density functional theory with LDA, PBE-GGA and MBJ approximations by using Wien2k computational package. Elastic properties such as, elastic constants, Shear modulus, Young modulus and Debye temperature were calculated within various approximations for cubic and hexagonal structural phases. The calculated elastic properties indicate the give rise to an elastic stability and anisotropy property of the compounds. The results also indicate that these compounds are more brittle in the cubic phase and more malleable in the hexagonal phase. In fact, the ductility of these compounds in the cubic structural phase is low and they can be placed in the category of non-formable materials.

Keywords: Density functional theory, Acoustic properties, Elastic properties, Elastic stability.

pp. 96-103 (In Persian)

* Corresponding author E-mail: salehi_h@scu.ac.ir