Journal of Acoustical Engineering Society of Iran, Vol. 10, No. 2, 2023

(Research Article)
Investigation of phonon modes and electron charge density of Ti_2InC By using density functional theory

H. Salehi*, M. Einhesari
Department of physics, Faculty of Science, Shahid Chamran University of Ahvaz

Received: 2022/09/19, Accepted: 2023/02/13

Abstract

In this paper, phonon modes and charge density of titanium indium carbide compound are calculated.The calculations have been performed using Pseudopotential method in the framework of density functional theory by the Quantum Espresso package.The number of phonon modes has been reduced from 24 to 16 due to the symmetry of the crystal. Also, the charge density diagram shows a strong bond between carbon and titanium atoms and a weaker bond between titanium and indium atoms. The calculations are in good agreement with other results.

Keywords: Ti_2InC, Density functional theory, Pseudopotential, Quantum espresso, Phonon modes.

pp. 63-69 (In Persian)

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

مجله انجمن مهندسی صوتیّات ایران
سال ۱۴۰۱، دوره: ۱۰، شماره: ۲، صفحات: ۶۳-۶۹

مقاله پژوهشی

بررسی مدهای فونونی و چگالی ابرالکترونی تیتانیوم ایندیوم کربید با استفاده از نظریهٔ تابعی چگالی

حمداله صالحی*، محمد عین‌حصاری
گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه شهید چمران اهواز
دریافت: ۱۴۰۱/۰۶/۲۸، پذیرش: ۱۴۰۱/۱۱/۲۴

چکیده
در این مقاله مدهای فونونی و چگالی ابرالکترونی ترکیب تیتانیوم ایندیوم کربید محاسبه شده است. محاسبات در چارچوب نظریهٔ تابعی چگالی براساس موج تخت و با روش شبه‌پتانسیل توسط بستهٔ نرم‌افزاری کوانتوم اسپرسو انجام گردیده است. تعداد مدهای فونونی به دلیل تقارن بلور از ۲۴ به ۱۶ مد کاهش یافته‌اند. هم‌چنین نمودار چگالی ابرالکترونی بیانگر یک پیوند قوی بین اتم‌های کربن و تیتانیوم و یک پیوند ضعیف‌تر بین اتم‌های تیتانیوم و ایندیوم است. نتایج به‌دست‌آمده سازگاری خوبی با دیگر محاسبات دارند.

کلیدواژه‌ها: تیتانیوم ایندیوم کربید، نظریه تابعی چگالی، شبه‌پتانسیل، کوانتوم اسپرسو، مد فونونی.

۱. مقدمه
تیتانیوم ایندیوم کربید (Ti_2InC) در سال ۱۹۶۳ توسط جیتسکو و همکاران برای اولین بار و به‌صورت پودری ساخته شد [۱-۳]. در سال ۲۰۰۶ توسط گاپتا و همکاران به شکل انبوهه نیز ساخته شده است [۴].

ترکیب تیتانیوم ایندیوم کربید عضو دستهٔ بزرگی از مواد به نام فازهای ماکس[1] (یا فازهای اِچ[2]) معروف به نانولامینت‌ها می‌باشد. ترکیبات فازهای اِچ، دارای خواص جالبی مانند استحکام بالا، مقاومت در برابر آسیب در دمای اتاق، رسانندگی گرمایی و برقی بالا و چکش‌خواری هستند. این ویژگی‌ها فازهای اِچ را گزینه کاربردهای مختلف کرده است. این ترکیب (مانند هم‌خانواده‌هایش) هم دارای خواص فلزی و هم خواص سرامیکی می‌باشد [۲]. تیتانیوم ایندیوم کربید رسانای خوبی است و دارای مقاومت ویژهٔ دو میکروأهم در دمای اتاق می‌باشد. تراکم‌پذیری پایین، خاصیت چکش‌خواری و مکانیکی بالایی دارد و در برابر شوک‌های حرارتی مقاومت بسیار بالایی از خود نشان می‌دهد. بسیاری از ترکیبات فازهای ماکس از جمله ترکیب تیتانیوم ایندیوم کربید توانایی استقامت و حفظ ساختار خود در دماهای بالای ۱۲۰۰ درجهٔ سلسیوس را دارند و به خوبی در برابر فشار و تغییر شکل مقاومت می‌کنند [۵، ۶]. با این که این ترکیب خواص سرامیکی جالبی مانند شکنندگی و مقاومت در برابر آسیب را از خود به نمایش می‌گذارد اما نمی‌توان به سادگی از ویژگی‌های مربوط به حالت فلزی آن چشم‌پوشی کرد. ویژگی‌هایی مانند ابررسانایی، رسانندگی الکتریکی بالا، انرژی همدوسی نسبتاً پائین (در بین هم‌نوع‌هایش)، ظرفیت گرمایی کم، که آن‌را به عنوان یک فلز مناسب مورد توجه قرار داده است. به عنوان مثال دمای ابررسانایی ۳/۱ کلوین برای تیتانیوم ایندیوم کربید در سال ۲۰۰۷ توسط بورتولوزو گزارش شده است [۷]، رسانندگی گرمایی آن در دمای اتاق در حدود ۲۷ Ω/μκ [۸] و ضریب انبساط حرارتی آن در دمای ۱۲۷۰ کلوین برابر $9.5\times10^{-6}\ K^{-1}$ می‌باشد [۲]. هم‌چنین این ترکیب نه تنها دارای خواص فلزی بلکه دارای خواص سرامیکی نیز می‌باشد. مدول انبوههٔ اندازه‌گیری‌شده برای این ترکیب برابر ۱۲۸ گیگاپاسکال می‌باشد [۹] که نشان‌دهندهٔ سختی زیاد آن در برابر فشارهای خارجی است. با توجه به

* نویسنده پاسخگو: salehi_h@scu.ac.ir

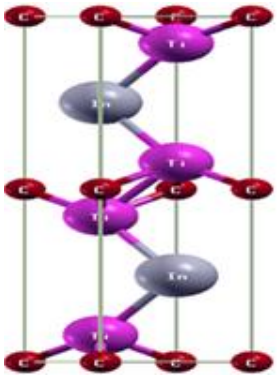
[1] MAX
[2] H

این که تولید این ترکیبات ارزان‌تر و ساده‌تر از آلیاژهای دیگر می‌باشد، در سال‌های اخیر بسیار مورد توجه بوده است و تلاش برای استفادهٔ گسترده از این مواد در صنعت در دماهای بالا مانند ساخت موتورهای جت هم‌چنان ادامه دارد [۵، ۱۰-۱۱]. ترکیبات ماکس به‌صورت کلی به شکل $M_{n+1}AX_n$ با $n=1,2,3$ می‌باشند که در آن M فلز واسطهٔ d، A عنصری از گروه‌های اصلی جدول تناوبی (معمولاً IIIA و IVA) و X کربن یا نیتروژن است. تیتانیوم ایندیوم کربید تنها دارای ساختار بلوری هگزاگونال، شامل لایه‌های TiC که با صفحات In از هم جدا شده‌اند، می‌باشد و با گروه فضایی ۱۹۴ ($P6_3/mmc, D_{6h}^4$) عضوی از زیرگروه ۲۱۱ از فازهای ماکس می‌باشد و ساختار آن از نوع Cr_2AlC است [۶-۷، ۱۲-۱۳]. متبلورشدن فاز ماکس در ساختار هگراگونال با گروه فضایی ($P6_3/mmc$) انجام و از ویژگی‌های این ترکیبات دارا بودن پیوندهای کووالانسی، یونی و یا فلزی می‌باشد و دارای ویژگی فلزی و سرامیکی به‌طور هم‌زمان می‌باشند [۱۴]. هم‌چنین می‌توان برای اطلاعات بیش‌تر در مورد کارهای انجام‌شده روی این ترکیب در حالت انبوهه و نانو به منابع [۱۵-۱۹] رجوع نمود.

جایگاه‌های اتمی ترکیبات ۲۱۱ براساس جایگاه‌های وایکوف به ترتیب برای اتم‌های M، A و X به‌صورت ۴f، ۲d و ۲a [۲۰] به همراه Z_m شبه‌سنج داخلی می‌باشند. پیش‌بینی‌هایی برای استفاده از این ترکیب در بسیاری از صنایع مانند صنایع هوایی و الکترونیک وجود دارد؛ که با بررسی‌های بیش‌تر و روشن‌کردن نقاط قوت و توانایی این ماده قابل‌اعتماد و اجرا خواهند بود. به تازگی خانوادهٔ جدیدی از کربیدهای لایه‌ای سه تایی (یا فازهای اِچ) توجه دانشمندان علم مواد و فیزیکدانان را به خود جلب کرده‌اند. ترکیبات فازهای اِچ؛ دارای خواص جالبی مانند استحکام بالا؛ مقاومت در برابر ضربه در دمای اتاق؛ رسانندگی گرمایی و برقی بالا و چکش‌خواری هستند. این ویژگی‌ها فازهای اِچ را گزینه کاربردهای مختلف کرده‌اند. در ساختار تیتانیوم ایندیوم کربید حضور پیوندهای کووالانسی ترکیب هشت‌وجهی TiC صفحات فشرده‌ای ساخته است که توسط لایه‌های In به یکدیگر متصل شده‌اند. این سازه؛ مجموعه‌ای از ویژگی‌های بی‌نظیر را در خود دارد که تاکنون در هیچ ترکیب فلزی و یا سرامیکی دیده نشده‌اند.

در این کار هدف از بررسی مدهای فونونی تیتانیوم ایندیوم کربید، جدید و ناشناخته بودن این ترکیب می‌باشد به‌طوری که کم‌تر از ۲۰ سال از معرفی این ماده به عنوان گزینه استفاده کردن از آن در صنعت می‌گذرد. پیش‌بینی‌هایی برای استفاده از این ترکیب در بسیاری از صنایع مانند صنایع هوایی و الکترونیک وجود دارد، که با بررسی‌های بیش‌تر و روشن‌کردن نقاط قوت و توانایی این ماده قابل‌اعتماد و اجرا خواهند بود. هم‌چنین بنابر اطلاعات موجود تاکنون مدهای فونونی این ترکیب محاسبه نشده‌اند.

با وجود این‌که کارهای تجربی و نظری زیادی روی این ترکیب انجام نشده اما این امید وجود دارد که برای عملی‌شدن این کاربردها در آینده کارهای تحقیقاتی بیش‌تری؛ هم به‌صورت تجربی و هم نظری، انجام شود. از آن‌جا که این ترکیب فقط دارای ساختار هگزاگونال است، محاسبات برای این فاز انجام شده است و از سوی دیگر به دلیل فلز بودن ترکیب و محدودیت فایل‌های شبه‌پتانسیل تنها از شبه‌پتانسیل‌هایی که با تقریب چگالی موضعی ساخته شده‌اند استفاده گردیده است. بنابراین کلیهٔ محاسبات و نتایج تحت تقریب چگالی موضعی هستند. ساختار Ti_2InC دارای ساختار هگزاگونال و هشت اتم در یاخته واحد است و یاخته قراردادی آن در شکل ۱ نشان داده شده است.



شکل ۱ شکل یاختهٔ قراردادی ترکیب Ti_2InC.

۲. مواد وروش‌ها

محاسبات براساس نظریهٔ تابعی چگالی و با استفاده از پایه‌های موج تخت توسط بستهٔ نرم‌افزاری کوانتوم

اسپرسو انجام گرفته است [۲۱]. در روش تابعی چگالی با استفاده از موج تخت، حجم محاسبات بالاست بنابراین شبه‌پتانسیلی که بتواند خواص بلور را توصیف نماید و هم‌چنین حجم محاسبات را کاهش دهد، بسیار با اهمیت است. در این محاسبات از شبه‌پتانسیل‌های ساخته‌شده به روش فوق‌نرم استفاده شده است و اربیتال‌های ظرفیت برای اتم‌های Ti، In و C به ترتیب (۳d و ۴s)، (۴d و ۵s و ۵p) و (۲s و ۲p) در نظر گرفته شده‌اند. ثابت‌های شبکه‌ای که در این محاسبات از آن‌ها استفاده شده‌اند برابر با a=۳٫۱۳ و c=۱۴٫۰۶ آنگستروم [۲] و شبه‌سنج داخلی ζ=۰٫۰۷۷ [۸] می‌باشند. در محاسبات همگرایی بر مبنای انرژی قرار داده شده است که با نه چرخه و با دقت ۵×۱۰^{-۵} ریدبرگ به همگرایی رسید. نمونه‌برداری از منطقهٔ اول بریلوئن با یک توزیع ۵×۲۰×۲۰ و تعداد ۲۱۰۰ نقطه که به روش مونخورست- پک [۲۲] تولید شده‌اند صورت گرفته است که این محاسبات با تولید ۱۵۳۶۵ بردار موج انجام شده است. انرژی قطع برای حد بالای انرژی توابع موج پایه برابر ۲۷ ریدبرگ تعیین شد. کلیهٔ محاسبات در چارچوب تقریب چگالی موضعی انجام گرفته است. در یک جامد، فونون‌های صوتی عرضی با طول موج بلند امواج صوتی برشی هستند، در حالی‌که فونون‌های صوتی طولی مربوط به موج‌های صوتی تراکمی هستند. به دلیل این‌که معمولاً برش دادن یک بلور راحت‌تر از فشرده‌کردن آن است. هم‌چنین رفتار ترکیب تیتانیوم ایندیوم کربید تحت فشار نیز بررسی شد. در این کار از معادلهٔ مورناگون و با استفاده از رابطهٔ dE=-PdV وابستگی حجم به فشار به‌دست آمد. هم‌چنین با استفاده از شیب نمودار انرژی کل حجم یاختهٔ قراردادی می‌توان مقدار مدول حجمی را محاسبه کرد. مدول حجمی که برابر عکس تراکم‌پذیری است معیاری برای سنجش سختی بلور یا انرژی لازم برای ایجاد یک تغییر شکل معین در آن است.

۳. نتایج

۳-۱. مدهای فونونی

در جدول ۱ بسامدهای فونونی ترکیب تیتانیوم ایندیوم کربید همراه با دیگر داده‌های موجود در فاز هگزاگونال با تقریب چگالی موضعی آورده شده است.

۳-۲. چگالی ابرالکترونی

نمودار چگالی ابرالکترونی ترکیب تیتانیوم ایندیوم کربید در صفحهٔ $(\bar{1}01)$ در شکل ۲ و صفحهٔ $(0\bar{1}1)$ در شکل ۳ رسم شده است.

۴. بحث

۴-۱. مدهای فونونی

در این مقاله ویژگی‌های فونونی و چگالی ابرالکترونی ترکیب تیتانیوم ایندیوم کربید با استفاده از نظریهٔ تابعی چگالی اختلالی و نرم‌افزار کوانتوم اسپرسو صورت گرفته است.

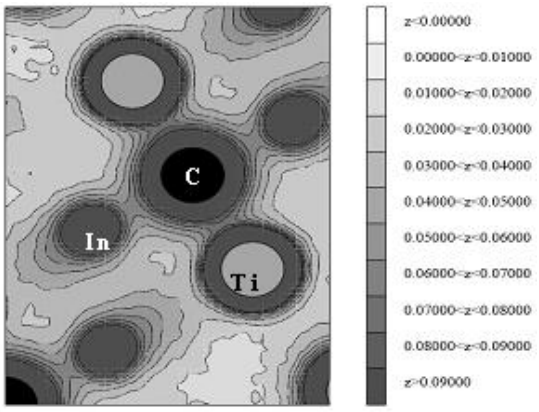
با محاسبهٔ طیف فونونی، بسیاری از خواص مانند ظرفیت گرمایی، رسانایی گرمایی و غیره را می‌توان بررسی کرد. روش متداول برای به‌دست آوردن طیف فونونی، پراکندگی نوترونی است ولی ساخت بلورهای بدون نقص و بررسی پراکندگی نوترونی آن‌ها کار مشکلی است. از این‌رو بررسی پراکندگی فونونی به‌صورت نظری مورد توجه است.

پس از انجام محاسبات ساختار نوارهای انرژی و خواص الکترونی، محاسبات دینامیک شبکه و به‌دست آوردن بسامد مدهای فونونی برای نقطهٔ Γ انجام شده است. این ترکیب شامل چهار عنصر و هشت جایگاه اتمی می‌باشد. بنابراین در سه بعد دارای ۲۴ مد فونونی است که سه شاخه مربوط به مدهای صوتی و ۲۱ شاخهٔ دیگر نوری می‌باشند. هم‌چنین براساس تقارن‌های نقطه‌ای در بلور پیش‌بینی می‌شود این تعداد به ۱۶ مد کاهش یابد. پس از انجام محاسبات ۱۶ مد فونونی به‌دست آمد که در جدول ۱ همراه با دیگر داده‌های موجود جهت مقایسه آورده شده است. علاوه بر این با توجه به این‌که امواج نوری می‌توانند توسط فونون‌ها پراکنده شوند و از آن‌ها می‌توان برای مطالعهٔ منحنی‌های پاشندگی جامدات استفاده کرد وقتی که فونون مربوطه صوتی است فرآیند، پراکندگی بریلوئن و وقتی که فونون نوری است فرآیند، پراکندگی رامان نامیده می‌شود.

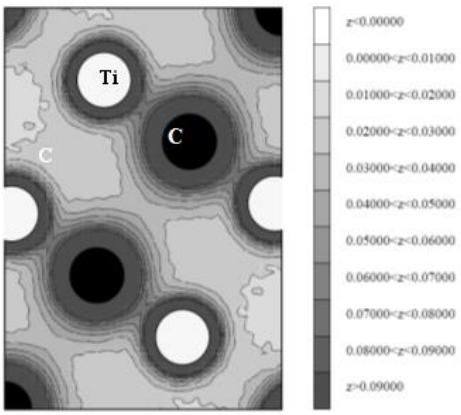
پراکندگی بریلوئن معمولاً برای اندازه‌گیری انرژی‌های فونون به‌کار می‌رود و در بسامدهای پایین غالب است

جدول ۱ بسامد مدهای فونونی ترکیب Ti_2InC.

مد فونونی	نماد تقارنی	نوع مد	کار حاضر		کار دیگران [۲۳]	
			$\chi\mu^{-1}$	محدودهٔ بسامد	کار تجربی	کار نظری
ω_1	A_{2u}	فعال	۳۰/۳	مادون قرمز	-	-
ω_2 و ω_3	E_{1u}	فعال	۹۶/۹	مادون قرمز	-	-
ω_4 و ω_5	E_{2g}	غیرفعال	۱۱۷/۱	رامان	۱۵۹	۶۶
درصد خطا نسبت به مقدار تجربی	-	-	۲۶/۳	-	-	۵۸/۴
ω_6 و ω_7	E_{2u}	-	۱۲۱/۰	خاموش	-	-
ω_8	B_{1u}	-	۱۳۲/۶	خاموش	-	-
ω_9 و ω_{10}	E_{1u}	فعال	۱۴۴/۲	مادون قرمز	-	-
ω_{11}	B_{2g}	-	۱۵۸/۶	خاموش	-	-
ω_{12}	A_{2u}	فعال	۲۲۳/۶	مادون قرمز	-	-
ω_{13} و ω_{14}	E_{1g}	فعال	۲۵۹/۱	رامان	۲۶۲	۲۵۸
درصد خطا نسبت به مقدار تجربی	-	-	۱/۱	-	-	۱/۵
ω_{15} و ω_{16}	E_{2g}	غیرفعال	۲۶۱/۵	رامان	۲۹۲	۲۶۱
درصد خطا نسبت به مقدار تجربی	-	-	۱۰/۴	-	-	۱۰/۶
ω_{17}	A_{2u}	فعال	۳۴۲/۱	مادون قرمز	-	-
ω_{18}	B_{1u}	-	۳۴۵	خاموش	-	-
ω_{19}	A_{1g}	فعال	۳۴۷/۴	رامان	۳۶۸	۳۶۳
درصد خطا نسبت به مقدار تجربی	-	-	۵/۶	-	-	۱/۳
ω_{20}	B_{2g}	-	۳۶۶/۹	خاموش	-	-
ω_{21} و ω_{22}	E_{1u}	فعال	۳۸۳	مادون قرمز	-	-
ω_{23} و ω_{24}	E_{2u}	-	۳۸۳/۹	خاموش	-	-



شکل۲ چگالی ابر الکترونی در صفحهٔ $(\bar{1}01)$.



شکل ۳ چگالی ابر الکترونی در صفحهٔ $(0\bar{1}1)$.

در حالی‌که پراکندگی رامان در بسامدهای بالا غالب است. هم‌چنین شرط وجود ظهور طیف رامان این است که ترکیب دارای قابلیت قطبی‌شدنی باشد که با توجه به مقدار قطبش‌پذیری به‌دست‌آمده صحت آن‌را می‌توان تأیید کرد. از آن‌جا که هر دو پراکندگی رامان و بریلوئن آثار غیرخطی هستند و عموماً بسیار ضعیف هستند، باریکه‌های بسیار با شدت بالا نیاز است تا بتوان یک علامت نسبتاً قوی مشاهده کرد. همین‌طور باریکه‌های بسیار تکفام لازم است تا بتوان علامت‌های پراکنده را به خوبی از هم تفکیک کرد. هم‌چنین وقتی یک تابش نور

مادون قرمز (IP) بر یک بلور یونی می‌تابد، میدان برقی تابش سبب می‌شود تا یون‌های بار مخالف به جهت‌های مختلف کشیده شوند که همین سبب ارتعاش در ناحیهٔ نوری می‌گردد یعنی تابش پرتوهای مادون قرمز عامل برانگیختگی بخش نوری بلور می‌شوند و تقریباً تمامی ترکیباتی که پیوند کووالانسی دارند، اعم از آلی یا معدنی، بسامدهای متفاوتی از پرتو الکترومغناطیسی را در ناحیهٔ مادون قرمز، جذب می‌کنند که در جدول ۱ این موضوع کاملاً مشخص است. براساس این نتایج، این مدها شامل چهار مد رامان؛ شش مد مادون قرمز و شش مد خاموش می‌باشند. در جدول ۱ جهت تاکید، تقارن موجود بین مدها در اولین ستون سمت چپ نشان داده شده است. همان‌طور که مشاهده می‌شود تبهگنی مدها همگی از مرتبهٔ ۲ می‌باشد.

در این جدول هم‌چنین درصد خطای کار حاضر و کار نظری دیگران نسبت به کار تجربی آورده شده است. متأسفانه در کار تجربی-نظری تنها چهار مد رامان محاسبه شده‌اند و امکان مقایسهٔ مدهای دیگر وجود ندارد. مقادیر خطا نشان می‌دهند که نتایج حاضر سازگاری خوبی با نتایج تجربی دارند. بنابراین براساس نتایج تجربی و توضیحات بیان‌شده، مدهای رامان و مادون قرمز مشخص‌شده در جدول همگی نوری می‌باشند و با توجه به کار تجربی انجام‌شده و توضیحات، مدهای صوتی این ترکیب از میان مدهای خاموش می‌باشند.

همان‌طور که مشاهده می‌شود بسامد فونون‌های صوتی وقتی که انرژی آن‌ها به سمت صفر میل می‌کند صفر می‌شوند. در حالی‌که فونون‌های نوری دارای بسامد غیرصفر بوده و تقریباً بدون پاشندگی هستند. هم‌چنین در این جدول‌ها زیرنویس‌های u و g به‌ترتیب بیانگر پاریتهٔ زوج و فرد تحت وارونگی در بلورهای مرکز متقارن هستند. طبق جدول مشخصهٔ گروه نقطه‌ای، A_u و B_u، مدهای فعال رامان و A_g و B_g مدهای فعال مادون قرمز هستند.

۴-۲. چگالی ابرالکترونی

نمودار چگالی ابرالکترونی نحوهٔ توزیع بار در اطراف اتم‌ها را نشان می‌دهد و میزان توزیع بار در اطراف اتم‌ها نوع پیوند بین آن‌ها را مشخص می‌کند. برای درک نوع و شدت پیوند میان اتم‌ها در ترکیب Ti_2InC چگالی ابرالکترونی را برای صفحه‌هایی از این ترکیب که تنوع اتم‌ها در آن‌ها باشد یعنی در صفحهٔ $(10\bar{1})$ در شکل ۲ و صفحهٔ $(0\bar{1}1)$ در شکل ۳ رسم و نشان داده شده است. تراکم زیاد الکترون بین دو اتم نشان‌دهندهٔ قوی بودن پیوند بین آن‌ها است و تراکم کم‌تر الکترون بین دو اتم پیوند ضعیف‌تری را بین آن‌ها نشان می‌دهد. همان‌طورکه در این شکل‌ها دیده می‌شود، به دلیل شدت الکترون‌خواهی اتم کربن نسبت به اتم اینیدیوم، تراکم الکترون‌ها از اطراف اتم تیتانیوم به سمت اتم کربن متمایل شده است و پیوندی یک طرفه و قوی بین اتم‌های کربن و تیتانیوم ایجاد شده است. از طرفی به دلیل تراکم کم الکترون‌ها، پیوند نسبتاً ضعیفی میان اتم‌های تیتانیوم و اینیدیوم به وضوح قابل تشخیص است. این مشاهدات در توافق با نتایج دیگران است [۲۲، ۲۴].

علاوه بر این رفتار ترکیب تیتانیوم ایندیوم کربید نیز تحت فشار بررسی شد و آن‌چه مشخص شد این است که با اعمال فشار تغییر حجم محسوس نمی‌باشد و مقاومت بلور تیتانیوم ایندیوم کربید در برابر فشار چشم‌گیر است. همان‌طور که مشاهده شد تأثیر فشار بر بلور تیتانیوم ایندیوم کربید در راستای محور c بیش‌تر از راستای محور a است. این نشان می‌دهد که تراکم‌پذیری در راستای محور c بیش‌تر از راستای محور a می‌باشد زیرا طول پیوند اتم‌ها در راستای محور c بسیار بزرگ‌تر از راستای a است و این نتیجه کاملاً قابل‌انتظار می‌باشد زیرا بسیاری از ترکیبات فازهای ماکس دارای این ویژگی هستند. این تراکم‌پذیری بیش‌تر دلالت بر این نکته دارد که پیوند Ti-In مقاومت کم‌تری نسبت به پیوند Ti-C دارد.

محاسبات نشان دادند که مدول حجمی تیتانیوم ایندیوم کربید مقدار نسبتاً بالایی دارد و نشان‌دهندهٔ این است که تیتانیوم ایندیوم کربید برای استفاده در صنایع سخت مناسب است.

۵. نتیجه‌گیری

در این مقاله مدهای فونونی و چگالی ابرالکترونی ترکیب Ti_2InC با استفاده از کد محاسباتی کوانتوم اسپرسو با تقریب چگالی موضعی مورد بررسی قرار گرفتند. نتایج

بیانگر این است که این ترکیب دارای ۲۴ مد فونونی است که به دلیل تقارن‌های شبکه به ۱۶ مد تقلیل می‌یابند و تبهگنی در مدها از نوع دوگانه است. این مدها عبارتند از چهار مد رامان، شش مد مادون قرمز و شش مد خاموش احتمالی و پیشنهاد می‌شود که مدهای صوتی این ترکیب از میان مدهای خاموش باشند. علاوه بر این نمودارهای چگالی ابرالکترونی یک پیوند قوی بین اتم کربن و تیتانیوم و پیوند نسبتاً ضعیف‌تری بین اتم‌های تیتانیوم و ایندیوم را نشان می‌دهند. محاسبات انجام‌شده با این روش، سازگاری خوبی با دیگر نتایج دارد.

تقدیر و تشکر

این تحقیق توسط دانشگاه شهید چمران اهواز پشتیبانی شد.

تضاد منافع

این مطالعه تضاد منافع ندارد.

فهرست منابع

[1] M.W. Barsoum, "The $M_{N+1}AX_N$ phases: A new class of solids: Thermodynamically stable nanolaminates," Journal of Solid State Chemistry, vol. 28, pp. 201-281, 2000.

[2] M.W. Barsoum, J. Golczewski, H.J. Siefert, F. Aldinger, "Fabrication and electrical and thermal properties of Ti_2InC, Hf_2InC and $(Ti,Hf)_2InC$," Journal of Alloys and Compounds, vol. 340, pp. 173-179, 2002.

[3] A. Ganguly, M.W. Barsoum, "The 1300°C isothermal section in the Ti–In–C ternary phase diagram," Journal of the American Ceramic Society, vol. 88, pp. 1290–1296, 2005.

[4] S. Gupta, E.N. Hoffman, M.W. Barsoum, "Synthesis and oxidation of Ti_2InC, Zr_2InC, $(Ti_{0.5}, Zr_{0.5})_2InC$ and $(Ti_{0.5}, Hf_{0.5})_2InC$ in air," Journal of Alloys and Compounds, vol. 426, pp. 168-175, 2006.

[5] M.W. Barsoum, M. Radovic, "Mechanical properties of the MAX phases," Encyclopedia of Materials: Science and Technology, 2004.

[6] A. Bouhemadou, "Condensend matter physics; statistical physics; atomic, molecular and optical physics," Modern Physics Letters B, vol. 22, no. 22, pp. 2063-2076, 2008.

[7] A.D. Bortolozo, O.H. Sant'Anna, C.A.M. dos Santos, A.J.S. Machado, "Superconductivity in the hexagonal-layered nanolaminates Ti_2InC compound," Solid State Community, vol. 144, pp. 419-421, 2007.

[8] X. He, Y. Bai, Y. Li,C. Zhu, M. Li, "Ab initio calculations for properties of MAX phases Ti_2InC, Zr_2InC, and Hf_2InC," Solid State Commun, vol. 149, pp. 564-566, 2009.

[9] Y. Medkour, A. Bouhemadou, A. Roumili, "Structural and electronic properties of M_2InC (M = Ti, Zr, and Hf)," Solid State Commun vol. 148, pp. 459-463, 2008.

[10] A.L. Ivanovskii, R.F. Sabriyanov, A.N. Skazkin, V. Zhukovskii, G.P. Shvekin, "Electronic structure and bonding configuration of the H-phases Ti_2MC and Ti_2MN (M = Al, Ga, In)," Inorganic Materials, vol. 36, no. 1, pp. 28-31, 2000.

[11] M.W. Barsoum, T. El-Raghy, "The MAX phases: Unique new carbide and nitride materials: Ternary ceramics turn out to be surprisingly soft and machinable, yet also heat-tolerant, strong and lightweight," American Scientist, vol. 89, no. 4, pp. 334-343, 2001.

[12] P. Eklund, M. Sridharan, G. Singh, "Thermal stability and phase transformations of γ-/amorphous-Al_2O_3 thin films," Thin Solid Films10, pp. 1016, 2009.

[13] M.W. Barsoum, "Phases and their Properties, in Ceramics Science and Technology," Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim, Germany, pp. 299–347, 2014.

[14] M. Magnuson, M. Mattesini, "Chemical bonding and electronic-structure in MAX phases as viewed by X-ray spectroscopy and density functional theory," ThinSolid Films, vol. 621, pp. 108-130, 2017.

[15] V. Louisiane, Xu. Chuan, N. Varun, C. Hui-Ming, R.Wencai, M.W Barsoum, "Overview of the synthesis of MXenes and other ultrathin 2D transition metal carbides and nitrides," Current Opinion in Solid State and Materials Science, vol. 23, pp. 149-163, 2019.

[16] X. He, Y. Bai, Y. Li, C. Zhu, M. Li, "Ab initio calculations for properties of MAX phases Ti_2InC, Zr_2InC, and Hf_2InC," Solid State Commun, vol. 149 , pp. 564-566, 2009.

[17] G. Surucu, "Investigation of structural, electronic, anisotropic elastic, and lattice dynamical properties of MAX phases borides: An Ab-initio study on hypothetical M_2AB (M = Ti, Zr, Hf; A = Al, Ga, In) compounds," Materials Chemistry and Physics, vol. 203, pp. 106-117, 2018.

[18] G. Hug, "Electronic structures of and composition gaps among the ternary carbides Ti_2MC," Physics Review B- Condensed

Matter Materials Physics, vol. 74, pp. 1–7, 2006.

[19] V. Louisiane, N. Varun, C. Michael, M.W. Barsoum, "MXenes: An introduction of their synthesis, select properties, and applications," Trends in chemistry, vol. 1, pp. 656-669, 2019.

[20] M.F. Cover, O. Warschkow, M.M.M. Bilek, D.R. McKenzie, "A comprehensive survey of M_2AX phase elastic properties," Journal of Physics: Condensed Matter, vol. 21, pp. 305403, 2009.

[21] http://www.quantum-espresso.org.

[22] H.J. Monkhorst, J.D. Pack, "Special points for Brillouin-zone integrations," Physics Review B, vol. 13, pp. 5188, 1997.

[23] O.D. Leaffer, S. Gupta, M.W. Barsoum, J.E. Spanier, "On Raman scattering from selected M_2AC compounds," Journal of Materials Research, vol. 22, no. 10, pp. 2651-2654, 2007.

[24] F.D. Murnaghan, "On the invariant theory of the classical groups," Proceedings of the National Academy of Sciences, vol. 38, pp. 966-973, 1952.