

بررسی خواص مکانیکی، گرمایی و صوتی ترکیبات $CsPbX_3$ ($X=Br, I$) با استفاده از روش نظریهٔ تابعی چگالی

حسین میلانی مقدم*، مهدی فلاح

گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه مازندران

چکیده

پروسکیت‌های هالیدی بازدهی بسیار بالایی در یاخته‌های خورشیدی دارند، اما دگرگونی ساختار در اثر تغییر دمای سطح که به دلیل تجمع گرمایی تابش‌های خورشیدی است، از مهم‌ترین نقاط ضعف آن‌هاست. تحلیل ساختار و ترابرد گرمایی می‌تواند در افزایش بازدهی مفید باشد. در این مقاله خواص مکانیکی، صوتی و گرمایی پروسکیت‌های $CsPbI_3$ و $CsPbBr_3$ در حالت مکعبی شکل با استفاده از نظریهٔ تابعی چگالی، در تقریب شیب تعمیم‌یافته (PBE-GGA) بررسی شدند. ثابت‌های کشسانی با استفاده از روش تنش کرنش به‌دست آمدند. با استفاده از ثابت‌های کشسانی، پایداری مکانیکی، ناهمسانگردی، ضرایب کشسانی، دمای دپای و سرعت انتشار صدا در بلور بررسی شدند. دو ماده علی‌رغم داشتن پایداری در شرایط ایستا به دلیل ناهمسانگردی بالا (حدود ۲/۹) در کاربردهای صنعتی امکان ناپایداری دارند. $CsPbBr_3$ نسبت به $CsPbI_3$ با داشتن دمای دپای ۱۲۰ و ۱۰۱ کلوین و سرعت انتشار صدای ۱۷۷۴ و ۱۵۸۷ متر بر ثانیه علاوه بر پیوندهای قوی تری بین عناصر سازنده دارای ترابرد فونونی بالاتری نیز هست. رسانندگی گرمایی با استفاده از الگوی اسلک مورد بررسی قرار گرفت که برای $CsPbBr_3$ و $CsPbI_3$ به ترتیب برابر با ۰/۳۴۹ و ۰/۲۷۴ W/mK به دست آمد. رسانندگی گرمایی بالاتر ماده $CsPbBr_3$ به دلیل تجمع گرمایی کم‌تر روی سطح، می‌تواند این ماده را به گزینه مناسب‌تر کاربرد در یاخته‌های خورشیدی معرفی کند.

کلیدواژه‌ها: پروسکیت، سرعت صدا، رسانندگی گرمایی، ناهمسانگردی.

۱. مقدمه

دارند در حوزه‌های مختلفی از جمله نیمه‌رساناها، آشکارساز پرتو [۲]، فروکافت^۲ [۳] و یاخته‌های خورشیدی [۴] مورد توجه جدی بسیاری از محققان قرار گرفته است. اخیراً بازدهی تبدیل انرژی یاخته‌های خورشیدی به دلیل خواص عالی پروسکیت‌های معدنی (حاوی یون متیل‌آمونیم MA) و غیرمعدنی (حاوی یون سزیم) $(APbX_3, A=MA, Cs, X=Br, I)$ پیش‌رفت قابل ملاحظه‌ای کردند، به طوری که در چند سال اخیر بازدهی آن‌ها از ۳/۸ به ۲۵/۲ درصد رسیده است [۴]. بنابراین مواد پروسکیت‌هالیدی $APbX_3$ در کانون توجه بسیاری از محققین این حوزه قرار گرفته است [۴-۵]. در کاربردهای عملی استفاده از مواد مختلف در یاخته‌های خورشیدی، توجه ویژه به خاصیت مکانیکی و ثبات بازدهی طی گذر زمان بسیار مهم است. متأسفانه در کنار بازدهی

گرم‌شدن کورهٔ زمین و هم‌چنین نگرانی از اتمام سوخت‌های فسیلی، استفاده از منابع انرژی تجدیدپذیر را بسیار پراهمیت جلوه داده است. یاخته‌های خورشیدی به‌عنوان یک منبع انرژی تجدیدپذیر برای چند دهه است که به‌طور محدود مورد استفاده قرار می‌گیرند. دلیل این محدودیت بازدهی پایین آن‌ها در مقابل انرژی دریافتی و هزینهٔ بالای ساخت اولیه آن‌ها است. پروسکیت‌ها با فرمول عمومی ABX_3 شامل بسیاری از کاتیون‌ها و آنیون‌های جدول تناوبی می‌شوند که نخستین‌بار توسط کانی‌شناس روسی لیو پروسکی^۱ به‌منظور توضیح ترکیب $CaTiO_3$ کشف شدند [۱]. تحقیق و توسعه نظری و تجربی این مواد به دلیل خواص اپتیکی، الکترونی و مغناطیسی خوبی که

* نویسنده پاسخگو: milani@umz.ac.ir

¹ Lev Perovski

² Catalysis

[۹]. رسانندگی گرمایی فونونی متناسب با سرعت گروه فونونی است [۱۰]، لذا یکی از مشخصه‌های اصلی تعیین‌کننده رسانندگی گرمایی، سرعت انتشار صدا در مواد است. به عبارت دیگر، سرعت انتشار صدا در بلور و به طبع آن ترابرد فونونی می‌تواند در میزان تجمع گرما روی سطح بلور تأثیر مستقیم بگذارد. برای به دست آوردن سرعت انتشار صدا در بلور لازم است مشخصه‌های کشسانی و پیوندی بین اتم‌ها در مواد مورد بررسی قرار بگیرد که بر اهمیت شناخت مکانیکی ماده صحت می‌گذارد. لازم به ذکر است با توجه به دانش ما، تا به حال عمده مطالعات نظری و تجربی در مورد این مواد به مبحث خواص الکترونی آن‌ها از جمله تنظیم گاف الکترونی [۱۱]، تحرک پذیری حاملین بار [۱۲]، سنتز آسان [۱۳]، امکان ساخت پایدار این مواد در فاز مکعبی در دمای اتاق [۱۴] معطوف بوده‌اند. پی‌سونی و همکاران برای نخستین بار در سال ۲۰۱۴ میلادی طی بررسی‌های تجربی خواص گرمایی MAPbI_3 در فاز چهار گوشه دریافتند این ماده در دمای اتاق دارای رسانندگی گرمایی بسیار پایین در حدود 0.5 W/mK است. آن‌ها در تحقیقات خود در مورد خواص الکترونی، صوتی و گرمایی فاز مکعبی این مواد اطلاعاتی ارائه ندادند. گو و همکاران در سال ۲۰۱۶ میلادی رسانندگی گرمایی بلور CsMI_3 ($M=\text{Sn, Pb}$) را با هدف بررسی خواص گرمابرقی محاسبه کردند [۱۶]. آن‌ها با استفاده از محاسبات نسبتاً پیچیده و دشوار مقدار کمیت رسانندگی گرمایی را برای CsPbI_3 برابر با 0.25 W/mK در دمای اتاق به دست آوردند. آن‌ها در مورد ماده CsPbBr_3 ، خواص مکانیکی، صوتی و مبحث مدیریت گرمایی هیچ‌گونه تحلیلی ارائه ندادند. مبحث مدیریت گرمایی در پروسکیت‌های هالیدی (مواد مشابه) تنها توسط مینگشاو در سال ۲۰۱۶ میلادی برای پروسکیت‌های هالیدی مطرح شد [۱۰]. بررسی‌های مینگشاو نشان داد، به منظور داشتن یاخته خورشیدی کاربردی از جنس پروسکیت، در نظر گرفتن مباحث رسانندگی گرمایی تأثیر بسیار زیادی در عملکردشان دارد، و حتی این محاسبات می‌تواند عامل تعیین‌کننده (علی‌رغم بازدهی کم‌تر) در انتخاب نهایی ماده برای کاربرد در یاخته‌های خورشیدی باشد. تفاوت مقاله حاضر با پژوهش قبلی، جایگزینی

بسیار عالی یاخته‌های خورشیدی بر پایه پروسکیت، عدم ثبات در بازدهی به دلیل دگرگونی ساختار از مهم‌ترین ضعف عملکرد گزارش شده آن‌هاست [۶]. لذا با توجه به بازدهی بسیار بالای این مواد نسبت به یاخته‌های خورشیدی تجاری بر پایه سیلیکات، شناخت ساختار این مواد به منظور کمک به حل مشکلات کاربردی آن، از اهمیت ویژه‌ای برخوردار است.

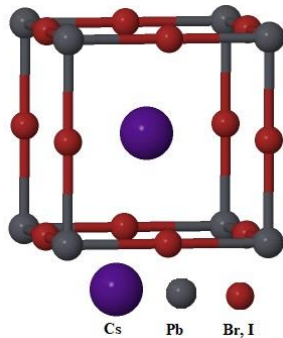
ساختار پروسکیت‌های بر پایه CsPbX_3 ($X=\text{Br, I}$) (به منظور ساده‌سازی محاسبات از کاتیون سزیم در جایگاه A استفاده می‌شود) در حین افزایش دما دچار تغییر فاز می‌شوند. با افزایش تدریجی دمای این مواد از صفر کلون، ساختار آن‌ها از فاز راست‌لوزی^۱ به چهارگوشه‌ای^۲ و در دمای بالای ۳۲۰ درجه سلسیوس به حالت مکعبی تغییر شکل می‌دهد [۷]. افزایش دمای سطح یاخته‌های خورشیدی پروسکیتی، از راه گرمای انرژی خورشید تابیده شده در قالب فونون تامین می‌شود. در نتیجه ثبات در بازدهی یاخته‌های خورشیدی هالیدی به دلیل نزدیکی دمای تغییر فاز بین حالت مکعبی و چهارگوشه‌ای و دمای کار (بین ۱۵ الی ۷۰ درجه سلسیوس) دچار اختلال می‌شود، که این فرآیند می‌تواند بر عمر و عملکرد یاخته‌های خورشیدی تأثیر زیادی بگذارد [۸].

از آنجایی که وجود گرمای اضافی روی سطح، منشأ عدم ثبات در بازدهی این نوع از یاخته‌های خورشیدی است، لذا مطالعه و شناخت اصولی مبحث مدیریت گرمایی در یاخته‌های خورشیدی عامل بسیار مهمی است که حتماً باید بررسی و در نظر گرفته شوند. بخش تعیین‌کننده در مدیریت گرمایی، ضریب رسانندگی گرمایی است که می‌تواند با سرعت‌های مختلف گرمای اضافی ایجاد شده را به خارج از یاخته هدایت کند و بدین صورت مانع از تغییر بازدهی یاخته شود.

ضریب رسانندگی گرمایی مواد به صورت مجموع سهم گرمایی الکترونی و فونونی تعریف می‌شود. در دماهای پایین و میانی (از ۲۷۳- الی ۱۳۰ درجه سلسیوس) سهم رسانندگی گرمایی الکترونی پروسکیت‌ها پایین است، در نتیجه عامل تعیین‌کننده، رسانندگی گرمایی فونونی است

¹ Orthorhombic² Tetragonal

به این دو دلیل ذکر شده در محاسبات از حالت مکعبی استفاده شده که ساختار این مواد در شکل ۱ نمایش داده شده است.



شکل ۱ ساختاری مکعبی CsPbX₃.

به منظور دست‌یابی به مشخصه‌های صوتی مواد ابتدا بایستی کمیت‌های کشسانی مواد به طور دقیق به‌دست بیاید که این امر نیازمند تعیین دقیق خواص الکترونی آن‌هاست. به منظور تعیین خواص الکترونی تمامی محاسبات، بر پایه نظریه تابعی چگالی با استفاده از امواج تخت موجود در کد کوانتوم اسپرسو^۴ [۲۰] و با کمک توابع همبستگی تبادلی دی‌افتی^۵ از تقریب شیب تعمیم‌یافته^۶ انجام گرفت. شبه‌پتانسیل‌های مورد استفاده از نوع فوق‌نرم^۷ بوده‌اند. الکترون‌های لایه ظرفیت به‌صورت زیر برای اتم سزیم $5s^2/5p^6/6s^1$ ، اتم سرب $5s^2/5p^6/6p^2/6d^{10}/6s^1$ ، اتم برم $4s^2/4p^5$ و اتم ید $5s^2/5p^6$ نظر گرفته شدند. برای به‌دست آوردن نتایج مطلوب در استخراج خواص کشسانی شرط خودسازگاری در R_y^{-1} 1×10^4 و شرط همگرایی نیرو برابر $4 \times 10^{-4} R_y$ ، انرژی قطع تابع موج برابر با $45 R_y$ و هم‌چنین تعداد نقاط K در فضای بریلوئن به‌صورت پرتراکم و برابر با $30 \times 30 \times 30$ در نظر گرفته شد.

۳. نتایج و بحث

به‌دلیل ساختار کاملاً مشابه این ترکیبات نمودار بهینه‌سازی انرژی قطع و تعداد نقاط شبکه تنها برای

کاتیون تک‌ظرفیتی سزیم به‌جای متیل‌آمونیم، استفاده از الگوی اسلک^۱ در محاسبه رسانندگی گرمایی (پیش‌بینی خوبی از حد بالای رسانندگی گرمایی می‌دهد [۱۷]) و بررسی دقیق خواص مکانیکی با استفاده از کمیت‌های ناهمسانگردی عام و خاص مواد است. بنا به بررسی‌هایی که انجام شد، تا به حال در مورد مبحث مدیریت گرمایی برای $(CsPbX_3 (X=Br, I))$ گزارشی منتشر نشده است.

به همین منظور در این مطالعه با استفاده از روش نظریه تابعی چگالی مشخصه‌های مکانیکی، صوتی و گرمایی پروسکیت‌های بر پایه $(CsPbX_3 (X=Br, I))$ مورد مطالعه قرار می‌گیرد. با توجه به اهمیت کاربردی این مواد، ثابت‌ها و ضرایب کشسانی و هم‌چنین انواع ناهمسانگردی مواد با دقت بالا مورد محاسبه قرار گرفتند. در پایان با استفاده از داده‌های انتشار صوتی مواد، ضریب رسانندگی گرمایی آن‌ها محاسبه شدند. نتیجه نشان داد که انباشت گرما در $CsPbBr_3$ کم‌تر از $CsPbI_3$ بوده لذا ثابت بازدهی در ماده $CsPbBr_3$ بهتر است و می‌تواند گزینه مناسب‌تری جهت کاربردهای تجاری و صنعتی باشد.

۲. روش تحقیق

پروسکیت‌ها دارای فرمول عمومی ABX_3 هستند که در این مقاله، مواد به‌صورت $CsPbX_3 (X=Br, I)$ انتخاب شدند. سزیم انتخاب‌شده در مکان A به‌دلیل علاقه فراوانی است که در این سال‌ها به پروسکیت‌های معدنی وجود دارد [۱۸]، علاوه بر آن الگوسازی پروسکیت‌های حاوی کاتیون سزیم به‌دلیل وجود تقارن کروی از لحاظ محاسبات بسیار آسان‌تر از کاتیون مشابه خود به نام متیل‌آمونیم (CH_3NH_3) است. ساختار پروسکیت‌ها با افزایش دما به دلیل چرخش^۲ و تنظیم مجدد^۳ دچار تغییر فاز می‌شوند. فازهای این مواد در بازه دمایی ۳۱۷ تا ۱۳۰ کلوین و از ۱۳۰ الی ۰ کلوین به ترتیب فاز چهارگوشه‌ای و راست‌لوزی می‌باشند. معمولاً این مواد در دمای بالای ۳۱۷ کلوین در فاز مکعبی هستند [۱۹]. با در نظر گرفتن حالت مکعبی به‌دلیل وجود تقارن بالا زمان محاسبات نیز کاهش می‌یابد

^۴ Quantum Espresso

^۵ DFT

^۶ PBE-GGA

^۷ Ultrasoft

^۱ Slack model

^۲ Rotation

^۳ Rearrangement

سخت‌تر میزان خطا را کاهش داد. همانطور که در جدول ۱ نشان داده شده است، ثابت‌های شبکه محاسبه‌شده در این مقاله اختلاف بسیار کمی با مقادیر تجربی دارند و می‌توان ادامه محاسبات را با استفاده از این ثابت‌های شبکه انجام داد. به طور کلی در پروسکیت‌ها که با ساختار ABX_3 هستند کاتیون A معمولاً عنصر بزرگی است که توسط ۱۲ آنیون بزرگ احاطه می‌شود. این ساختار شامل شبکه‌ای از هم‌آرایی ۸ وجهی BX_6 است، که در آن B اتم کاتیون فلزی سرب و X آنیون هیبریدی (Bf یا I) است. در این ساختار این هشت وجهی مانند لولایی اجازه تغییر زاویه پیوند بین B-X-B را تحت دماهای مختلف می‌دهد و به همین خاطر ساختار پروسکیت‌ها دارای انواع متفاوتی از نوع چهارگوشه‌ای، راست‌لوزی و مکعبی در دماهای مختلف هستند [۲۵]. ساختارهای مختلف به دلیل تفاوت در آرایش الکترونی، دارای بازدهی عملکرد متفاوت در یاخته‌های خورشیدی هستند به همین دلیل شناخت مشخصه‌های صوتی و کشسانی بسیار مهم می‌باشند.

۴. مشخصه‌های مکانیکی و صوتی

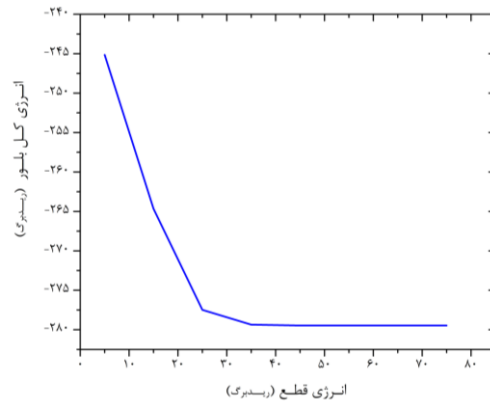
تحلیل مشخصه‌های مکانیکی و به دنبال آن تعیین مشخصه‌های انتشار صدا در بلورها، کاربردهای بسیار مهمی در به‌کارگیری آن‌ها در صنعت دارد. دلیل این اهمیت در توضیح و شبیه‌سازی رفتار مکانیکی (تنش، کرنش، مکانیک شکست و تغییر شکل لایه‌های جذب‌کننده جامد) و صوتی (مدیریت گرما، عایق صوتی و ریزترک) آن‌هاست.

در این مقاله خواص مکانیکی با استفاده از روش تنش کرنش بر پایه محاسبات ابتدا به ساکن بررسی شده‌اند. ثابت‌های کشسانی از راه محاسبه انرژی کل بر حسب تابعی از تغییر شکل مناسب بلور به‌دست آمده‌اند. ثابت‌های کشسانی به‌صورت زیر تعریف می‌شوند [۲۶]:

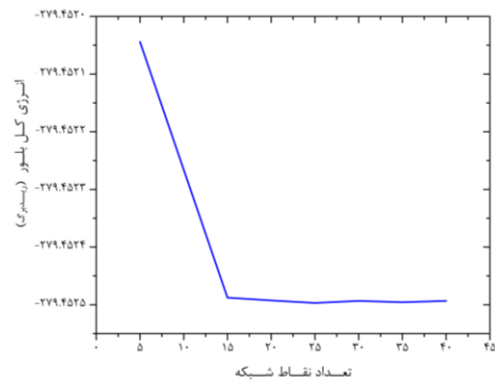
$$C_{ij} = \frac{1}{V} \left(\frac{\partial^2 E}{\partial \varepsilon_i \partial \varepsilon_j} \right) \quad (1)$$

که در آن E انرژی، V حجم یاخته اصلی و ε نماد کرنش است. مقادیر محاسبه‌شده ثابت‌های کشسانی برای هر دو ماده در جدول ۲ ارائه شده‌اند.

$CsPbBr_3$ در شکل‌های ۲ و ۳ ارائه شده‌اند. بهینه‌سازی ابتدا برای انرژی قطع تا رسیدن به اختلاف میلی‌ریدیدرگ انجام شد، سپس با انتخاب شعاع قطع مناسب، بهینه‌سازی تعداد نقاط شبکه ادامه یافت.



شکل ۲ نمودار بهینه‌سازی انرژی قطع.



شکل ۳ نمودار بهینه‌سازی تعداد نقاط شبکه در فضای وارون.

مقادیر ثابت شبکه محاسبه‌شده برای $CsPbBr_3$ و $CsPbI_3$ جهت مقایسه با مقادیر تجربی و نظری دیگران (انجام‌شده با تقریب شیب تعمیم‌یافته) در جدول ۱ ارائه شده‌اند.

جدول ۱ مقادیر ثابت شبکه (واحدها بر حسب A).

نام ماده	تجربی	نظری	کار حاضر	درصد خطا
$CsPbBr_3$	5.844^A	6.005^B	6.004	۲٫۲ درصد
$CsPbI_3$	6.289^B	6.382^C	6.398	۱٫۷ درصد

ت: [۲۳] پ: [۲۳] ب: [۲۲] آ: [۲۱]

واضح است که استفاده از روش تقریب شیب تعمیم‌یافته، همواره موجب بزرگ‌تر شدن مقدار اندازه ثابت شبکه می‌شود [۲۴]، اما می‌توان با انتخاب شرط همگرایی

$$Y_{R,V} = \frac{9BG}{3B + G} \quad (9)$$

$$v_{R,V} = \frac{Y}{2G} - 1 \quad (10)$$

$$K_{VRH} = \frac{1}{3}(K_V + K_R) \quad (11)$$

جدول ۳ مقادیر محاسبه شده ضرایب کشسانی (واحدها برحسب kbar).

نام ماده	تقریب	B	G	Y	v
CsPbBr ₃	ویت	۱۸۴٫۵۶	۹۷٫۴۹	۲۴۸٫۶۸	۰٫۲۷۵
		۱۴۷٫۱۹	۸۰٫۷۰	۲۰۴٫۷۰	۰٫۲۶۸
CsPbI ₃	رُس	۱۸۴٫۵۶	۶۱٫۷۷	۱۶۶٫۷۰	۰٫۳۴۹
		۱۴۷٫۱۹	۵۰٫۸۹	۱۳۶٫۸۹	۰٫۳۴۵
CsPbBr ₃	ویت-رُس	۱۸۴٫۵۶	۷۹٫۶۳	۲۰۷٫۶۹	۰٫۳۰۴
		۱۴۷٫۱۹	۶۵٫۸۰	۱۷۰٫۷۹	۰٫۲۹۸

برای ترکیبات پروسکیت‌های هیبریدی ثابت کشسانی C_{11} دارای بزرگ‌ترین مقدار عددی بین دیگر متغیرهای کشسانی هستند. هم‌چنین مقدار ثابت کشسانی C_{44} نشان‌دهنده مقدار مقاومت کم به برش در صفحه (۱۰۰) است. طبق جدول ۳ که نشان‌دهنده کمیت‌های کشسانی دو ماده با یکدیگر است، مشاهده می‌شود مقدار مدول انبوهه‌ای کشسانی از ۱۴۷ به ۱۸۴ کیلوبار، مدول یانگ از ۱۷۰ به ۲۰۷ کیلوبار و مدول برشی از ۶ به ۸۰ کیلوبار تغییر می‌یابد. از مقایسه این مقادیر این نتیجه حاصل می‌شود که مقادیر ضرایب کشسانی CsPbBr₃ از CsPbI₃ بیشتر هستند. این اختلاف را می‌توان در تفاوت شعاع یونی و الکترونگاتیوی اتم‌ها جستجو کرد. شعاع یونی Br و I به ترتیب برابر با ۱٫۳ و ۲٫۲۰ آنگستروم هستند و الکترونگاتیوی آن‌ها برابر با ۲٫۸ و ۲٫۵ است [۲۵]. الکترونگاتیوی بیشتر و شعاع یونی کمتر میزان تمایل و جذب بیشتر پیوند را در یک ترکیب شیمیایی نشان می‌دهد، در نتیجه جاذبه اتم‌ها در میان عناصر سازنده CsPbBr₃ بیشتر است.

دمای دَبای^۹ (نشان‌دهنده میزان قدرت پیوندهاست) و هم‌چنین انواع حالت‌های سرعت انتشار صدا در بلور که

جدول ۲ ثابت‌های کشسانی مواد (واحدها برحسب کیلوبار).

نام ماده	C_{11}	C_{12}	C_{44}	شرط پایداری
CsPbBr ₃	۴۲۳٫۵۵	۶۵٫۰۷	۴۲٫۹۹	پایدار
CsPbI ₃	۳۴۵٫۴۵	۴۸٫۰۶	۳۵٫۳۸	پایدار

شرط پایداری مکانیکی این مواد به صورت زیر تعریف می‌شود [۲۶]:

$$C_{11} > |C_{12}| \quad C_{11} + |C_{12}| > 0 \quad C_{44} > 0 \quad (2)$$

همان‌طور که در جدول ۲ مشاهده می‌شود شرایط پایداری مکانیکی این مواد برآورده می‌شود، لذا این مواد از لحاظ مکانیکی در شرایط ایستا پایدار هستند. ثابت‌های کشسانی C_{11} ، C_{12} به ترتیب نشان‌دهنده تغییر شکل محوری در راستاهای (۱۰۰) و (۰۱۰) هستند، هم‌چنین C_{44} نشان‌دهنده تغییر شکل برشی خالص^۱ روی صفحه بلوری (۱۰۰) می‌باشد. با استفاده از ثابت‌های کشسانی محاسبه شده، ضرایب ماتریس نرمی^۲ (S_{ij}) مدول انبوهه‌ای کشسانی (B)^۳، مدول تراکم‌پذیری هم‌دمای^۴ (κ)، مدول برشی (G)، مدول یانگ (Y)^۵ و نسبت پواسون (v) با تقریب‌های ویت (V)^۶، رُس (R)^۷ و میانگین هر دو تقریب به نام ویت-رُس-هیل (وی آراچ)^۸ (در رابطه ۱۱، K یک کمیت دلخواه است) با استفاده از روابط زیر به دست آمدند [۲۶] که در جدول ۳ نشان داده شده‌اند.

$$S_{ij} = C_{ij}^{-1} \quad (3)$$

$$B_V = \frac{1}{3}[C_{11} + 2C_{12}] \quad (4)$$

$$\kappa = \frac{3}{C_{11} + 2C_{12}} \quad (5)$$

$$G_V = \frac{1}{5}[C_{11} - C_{12} + 3C_{44}] \quad (6)$$

$$B_R = \frac{1}{3S_{11} + 6S_{12}} \quad (7)$$

$$G_R = \frac{5}{4S_{11} - 4S_{12} + 3S_{44}} \quad (8)$$

¹ Pure deformation potential

² Compliance matrix

³ Bulk modulus

⁴ Isothermal compressibility

⁵ Young modulus

⁶ Voigt

⁷ Reuss

⁸ VRH; Voigt-Reuss-Hill

⁹ Debye

کشسانی باشد) با استفاده از روابط زیر تعریف می‌شوند [۲۵]:

$$A^U = \epsilon \frac{G_V}{G_R} + \frac{B_V}{B_R} - \epsilon \quad (16)$$

$$A(B, G, Y, \nu) = \frac{K_V - K_R}{K_V + K_R} \quad (17)$$

برای ساختارهای همسانگرد تمامی شاخص‌های ناهمسانگردی بالا برابر با صفر هستند، عدم برابری این شاخص‌ها با مقدار صفر نشان‌دهنده وجود ناهمسانگردی در این مواد است. نتایج محاسبه‌شده برای این مواد در جدول ۵ نشان داده شده‌اند.

جدول ۵ مقادیر شاخص‌های ناهمسانگردی عم، انبوه‌ای و برشی محاسبه‌شده برای CsPbBr_۳ و CsPbI_۳.

نام ماده	A _U	A _B	A _G	A _Y	A _V
CsPbBr _۳	۲,۸۹۱	۰	۰,۲۲۴	۰,۱۹۷	۰,۱۱۸
CsPbI _۳	۲,۹۲۹	۰	۰,۲۲۶	۰,۱۹۸	۰,۱۲۵

به‌منظور درک بهتر رفتار ناهمسانگردی کشسانی موجود در این دو ماده، تغییرات فضایی ماده CsPbBr_۳ در قالب نمودارهای سه-بعدی در شکل‌های ۴ تا ۷ رسم گردیدند. با توجه به اینکه مدول یانگ تابعی از تنها یک بردار پایه (با مشخصات رابطه ۱۸) است، بنابراین تغییرات فضایی این کمیت در قالب مختصات کروی با دو زاویه θ و φ نمایش داده می‌شود [۲۷]: $0 \leq \theta \leq \pi$, $0 \leq \varphi \leq 2\pi$.

$$a = \begin{cases} \sin(\theta) \cos(\varphi) \\ \sin(\theta) \sin(\varphi) \\ \cos(\theta) \end{cases} \quad (18)$$

یکی دیگر از کمیت‌های مهم مدول کشسانی، تراکم‌پذیری هم‌دما است.

زمانی که فشار آواپستایی به بلور وارد می‌شود، تراکم‌پذیری هم‌دما نسبت کشش القاشده در امتداد یک خط مشخص به فشار است. به‌جز در حالت تقارن مکعبی که تراکم‌پذیری هم‌دما همسانگرد است (شکل ۵)، در بقیه موارد، این کمیت به جهت خط بستگی دارد.

مدول برشی و نسبت پواسون برخلاف مدول یانگ و مدول انبوه‌ای کشسانی به‌دلیل وابستگی به دو بردار پایه عمود برهم (a و b) نمی‌توانند به آسانی مانند مدول یانگ

وابستگی نظری بین سرعت گروه فونونی و ضرایب کشسانی در مواد است با استفاده از روابط زیر محاسبه شدند [۲۵].

$$V_t = \sqrt{\frac{G}{\rho}} \quad (12)$$

$$V_l = \sqrt{\frac{\left(B + \frac{4}{3}G\right)}{\rho}} \quad (13)$$

$$V_m = \left[\frac{1}{3} \left(\frac{2}{V_l^2} + \frac{1}{V_t^2} \right) \right]^{-\frac{1}{2}} \quad (14)$$

$$\Theta_D = \frac{h}{k_B} \left(\frac{3N}{4\pi V} \right) V_m \quad (15)$$

در روابط بالا V_t و V_l ، V_m به ترتیب سرعت‌های میانگین، طولی و عرضی انتشار صدا در بلور هستند، هم‌چنین Θ_D نماد دمای دبی، V حجم یاخته، h ثابت پلانک و k_B نماد ثابت بولتزمن می‌باشد. مقادیر محاسبه‌شده کمیت‌های بالا در جدول ۴ ارائه شده‌اند.

جدول ۴ مقادیر محاسبه‌شده دمای دبی (بر حسب کلین) و انواع حالت‌های سرعت انتشار صدا در بلور (بر حسب متر بر ثانیه).

نام ماده	تقریب	V_l	V_t	V_m	Θ_D
CsPbBr _۳	ویت-رُس-	۲۵۵۶	۱۳۳۸	۱۷۷۴	۱۲۰
CsPbI _۳	هیل	۲۲۶۷	۱۲۰۰	۱۵۸۷	۱۰۱

همان‌طور که بیان شد دمای دبی نشان‌دهنده میزان میانگین قدرت پیوند شیمیایی است. در جدول ۴ مشخص است که مقدار دمای دبی مربوط به ترکیب Br بزرگ‌تر از ترکیب I است. شاهد دیگر بر این مدعا مقایسه سرعت انتشار صدا در بلور است همان‌طور که در جدول ۴ مشاهده می‌شود میانگین سرعت انتشار صدا در بلور CsPbBr_۳ بزرگ‌تر از بلور CsPbI_۳ است و این یعنی پیوندهای عناصر سازنده اتم CsPbBr_۳ قوی‌تر از CsPbI_۳ است که موجب انتشار صدا با سرعت بیش‌تر در آن می‌شود.

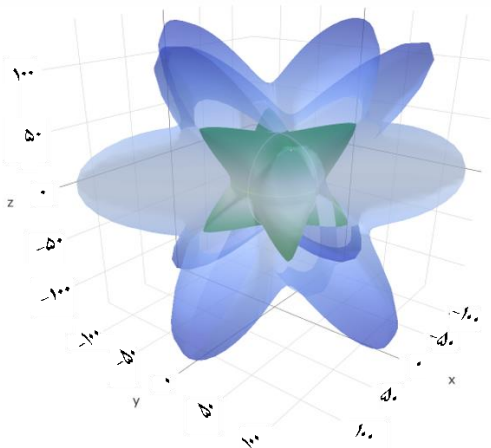
به منظور بحث در مورد ناهمسانگردی پیوندهای شیمیایی و مشخصه‌های مکانیکی، شاخص جامع ناهمسانگردی^۱ و ناهمسانگردی‌های نسبی (K) می‌تواند هر یک از ضرایب

^۱ Universal anisotropic index

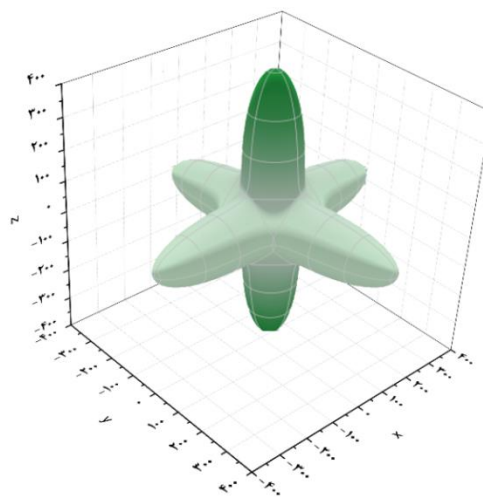
A^U و A^K که در جدول ۴ آمده‌اند، توضیح داده شود. شاخص ناهمسانگردی عام، نشان‌دهنده بهتری از ناهمسانگردی نسبت به دیگر شاخص‌هاست که می‌تواند نتایج یکتا و استواری از ناهمسانگردی کشسانی ترکیبات پروسیت را در اختیار قرار دهد.

نمایش داده شوند. در این حالت بردارهای a و b طبق رابطه‌های ۱۸ و ۱۹ تعریف می‌شوند، که در آن $0 \leq \chi \leq 2\pi$ می‌باشد [۲۷].

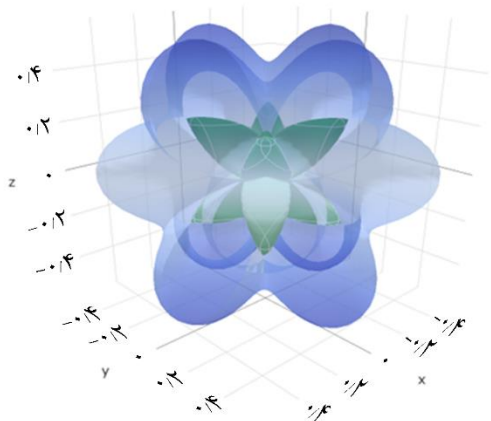
$$b = \begin{Bmatrix} \cos(\theta)\cos(\varphi)\cos(\chi) - \sin(\theta)\sin(\chi) \\ \cos(\theta)\sin(\varphi)\cos(\chi) + \cos(\theta)\sin(\chi) \\ -\sin(\theta)\cos(\chi) \end{Bmatrix} \quad (19)$$



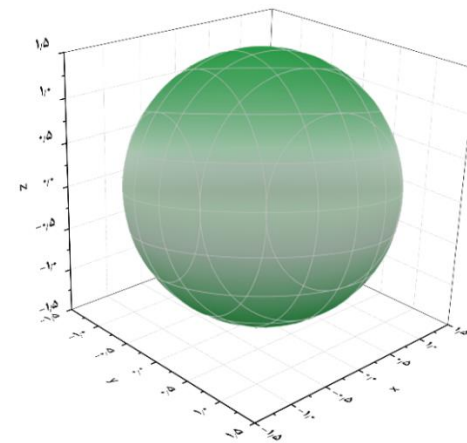
شکل ۶ تغییرات فضایی مدول برشی ماده CsPbBr_3 (برحسب کیلوپار).



شکل ۴ تغییرات سه-بعدی مدول یانگ ماده CsPbBr_3 (برحسب کیلوپار).



شکل ۷ تغییرات فضایی نسبت پواسون ماده CsPbBr_3 (بدون واحد).



شکل ۵ تغییرات سه-بعدی مدول مدول انبوهه‌ای کشسانی ماده CsPbBr_3 (برحسب کیلوپار).

به‌علت کوچکی مقدار C_{44} به همراه متغیر برشی وابسته آن، شاخص عام این دو ماده بالاتر از ۲/۸۹ و ۲/۹۲ است. ضرایب کشسانی و شاخص ناهمسانگردی عام این مواد در جهت‌های مختلف بلوری تغییر بسیار زیادی دارند که مقادیر محاسبه‌شده شاخص‌های دیگر، این نتیجه‌گیری را پشتیبانی می‌کنند. بنابراین ناهمسانگردی بسیار زیاد این مواد می‌توانند مشکلات تغییر ساختار را در حین کاربردهای مختلف نشان دهند. برای حل این مشکل،

از روی شکل ۶ و ۷ که تغییرات فضایی مدول برشی و نسبت پواسون را نشان می‌دهند، مشخص است که این دو مدول، ناهمسانگردی بسیار زیادی را به دلیل پایین‌تر بودن شاخص C_{44} از C_{11} تجربه می‌کنند.

ناهمسانگردی یک موضوع مهم در مباحث کاربردی است که می‌تواند از روی ضرایب کشسانی به وسیله شاخص‌های

فونونی در این مواد، می‌توان از الگوی اسلک که به داده‌های انتشار صدا در بلور نیاز دارد، استفاده کرد. لازم به ذکر است این الگو توسط بسیاری از محققین برای توضیح رفتار رسانندگی گرمایی فونونی استفاده شده و جواب‌های قابل قبولی در مقایسه با پژوهش‌های تجربی داده است (مراجع). براساس الگوی اسلک، کمینه رسانندگی گرمایی فونونی به صورت زیر تعریف می‌شود [۱۷]:

$$\kappa_{min} = \frac{1}{6} \left(\frac{\pi}{6} \right)^{\frac{1}{3}} k_B V^{-\frac{2}{3}} (2V_t + V_l) \quad (21)$$

که در آن V حجم میانگین هر اتم در یاخته واحد، k_B ثابت بولتزمن و V_l و V_t به ترتیب سرعت طولی و عرضی صدای انتشار یافته در بلور هستند. بر طبق این الگو، هر چه سرعت انتشار صدا در مواد بیشتر باشد، کمینه رسانندگی فونونی آن‌ها نیز بیشتر خواهد بود. رسانندگی گرمایی فونونی CsPbBr_3 و CsPbI_3 طبق الگوی اسلک به ترتیب برابر با 0.349 W/mK و 0.274 به دست آمدند. به منظور بررسی صحت محاسبات انجام شده مقدار ضریب رسانندگی گرمایی به دست آمده از روش اسلک برای ماده CsPbI_3 با مقدار محاسبه شده توسط گو و همکاران که برابر با 0.25 W/mK گزارش شده بود [۱۶]، مقایسه گردید که نشان دهنده مزیت روش انجام شده است. توجه شود که با وجود حجم میانگین بیشتر CsPbI_3 ، هم‌چنان رسانندگی گرمایی آن کمتر از CsPbBr_3 است که این می‌تواند اهمیت سرعت انتشار صدا در تبادل گرمایی مواد را برساند. در واقع ماده CsPbBr_3 به دلیل داشتن پیوندهای اتمی قوی تر نسبت به CsPbI_3 دارای ضرایب کشسانی بالاتر هستند. بنابراین صدا در بلور CsPbBr_3 با سرعت بیشتری انتشار می‌یابد و این به معنی تراورد بهتر فونون‌ها در بلور است. لذا با توجه به مقدار ناچیز رسانندگی گرمایی الکترونی، رسانندگی کل بلور تحت تأثیر مستقیم سرعت تراورد فونونی در ماده قرار می‌گیرد و این منجر به کم‌تر شدن انباشت گرمایی CsPbBr_3 نسبت به CsPbI_3 می‌شود.

۶. نتیجه‌گیری

در این مقاله، مشخصه‌های مکانیکی، صوتی و گرمایی پروسکیت‌های مکعبی شکل CsPbI_3 و CsPbBr_3 مورد

تحقیقات بیشتر در خصوص تأثیر اضافه کردن ناخالصی و ارتعاشات در دماهای بالاتر بر میزان پایدارکنندگی ساختار است.

بحث بعدی در مورد امکان کاربرد این مواد در شکل‌های مختلف در صنعت است که عامل تعیین‌کننده آن تفسیر متغیرهای شکل‌پذیری^۱ و سختی ویکرز^۲ است.

سختی ویکرز می‌تواند به طور نظری از راه نسبت G/B که به نسبت پاق^۳ مشهور است، به دست بیاید [۲۸]:

$$H_V = 2 \left[\left(\frac{G}{B} \right)^2 G \right]^{0.85/3} - 2 \quad (20)$$

مقادیر محاسبه شده سختی ویکرز برای CsPbBr_3 و CsPbI_3 به ترتیب برابر با 0.67 و 0.6 گیگاپاسکال است که نشان دهنده سختی نسبتاً پایین این مواد می‌باشد.

شکل‌پذیری این مواد بدین صورت تعریف می‌شود [۲۸] که اگر مقدار B/G آن‌ها از 1.75 بیش‌تر باشد، می‌تواند به راحتی با حفظ خواص تغییر شکل داده و کشیده، خمیده و یا فشرده شوند. مقدار این نسبت در CsPbBr_3 و CsPbI_3 به ترتیب برابر با 2.31 و 2.23 است. دلیل اصلی وجود این انعطاف‌پذیری و شکل‌پذیری نسبتاً بالای آن‌ها، پایین بودن مقدار مدول برشی این پروسکیت‌ها است. هم‌چنین نسبت پواسون جامدات شکل‌پذیر معمولاً بزرگ‌تر از 0.26 است که در این مواد این نسبت بزرگ‌تر از 0.29 می‌باشد. بنابراین از مجموعه این مباحث می‌توان نتیجه گرفت که این مواد انعطاف‌پذیری بالایی دارند که از این ویژگی می‌توان به عنوان لایه نازک و هم‌چنین کاربردهای مرتبط با مهندسی کرنش استفاده کرد.

۵. مشخصه گرمایی

همان‌طور که پیش‌تر بیان شد، رسانندگی گرمایی کل بلور به صورت مجموع سهم رسانندگی الکترونی و فونونی (شبکه) تعریف می‌شود، در این مواد در دماهای پایین و میانی سهم رسانندگی الکترونی ناچیز بوده و می‌توان با محاسبه سهم رسانندگی فونونی، مشخصه گرمایی کل بلور را به دست آورد. به منظور بحث در مورد انتشار گرمای

¹ Ductility

² Vicker's Hardness

³ Pugh

- [3] X. Liuab, J. Fu, G. Chen, "First-principles calculations of electronic structure and optical and elastic properties of the novel ABX₃-type LaWN₃ perovskite structure," RSC Advances, vol. 10, pp. 17317-17326, 2020.
- [4] C. Liu, Y. Yang, X. Xia, Y. Ding, "Soft template-controlled growth of high-quality cspbi₃ films for efficient and stable solar cells," Journal of Advanced Energy Materials, vol. 10, 2020.
- [5] S. Rahmany, L. Etgar, "Semitransparent perovskite solar cells," Journal of ACS Energy Letters, vol. 5, pp. 1519-1531, 2020.
- [6] T.A. Berhe, W.N. Su, C.H. Chen, "Organometal halide perovskite solar cells: Degradation and stability," Journal of Energy & Environmental Science, vol. 9, pp. 323-356, 2016.
- [7] W. Zhou, F. Su, G. Zhong, "Lattice Dynamics and Thermal Stability of Cubic Phase CsPbI₃ Quantum Dots," Journal of Physical Chemistry Letters, vol. 9, no. 17, pp. 4915-4920, 2018.
- [8] W. Shockley, H.J. Queisser, "Detailed balance limit of efficiency of p-n junction solar cells," Journal of Applied Physics, vol. 32, no. 3, pp. 510-519, 1961.
- [9] X. Mettan, R. Pisoni, P. Matus, "Tuning of the thermoelectric figure of merit of CH₃NH₃MI₃ (M=Pb,Sn) photovoltaic perovskites," Journal of Physical Chemistry C, vol. 119, no. 21, pp. 11506-11510, 2015.
- [10] W. Mingchao, L. Shangchao, "Anisotropic and ultralow phonon thermal transport in organic-inorganic hybrid perovskites: Atomistic insights into solar cell thermal management and thermoelectric energy conversion efficiency," Journal of Advanced Energy Materials, vol. 26, no. 29, pp. 5297-5306, 2016.
- [11] H. Sun, K. Deng, J. Xiong, L. Li, "Graded bandgap perovskite with intrinsic n-p homojunction expands photon harvesting range and enables all transport layer-free perovskite solar cells," Journal of Advanced Energy Materials, vol. 10, no. 1903347, 2020.
- [12] S.T. Cruz, M. Saliba, M.T. Mayer, "Enhanced charge carrier mobility and lifetime suppress hysteresis and improve efficiency in planar perovskite solar cells," Journal of Energy & Environmental Science, vol. 11, pp. 78-86, 2018.
- [13] N. Guo, T. Zhang, G. Li, F. Xu, "A simple fabrication of CH₃NH₃PbI₃ perovskite for solar cells using low-purity PbI₂," Journal of Semiconductors, vol. 38, no. 014004, 2018.
- [14] F. Palazon, D. Pérez, B. Dänekamp, "Room-temperature cubic phase crystallization and

مطالعه قرار گرفتند. در این مطالعه مشخص شد هر دو ماده در شرایط ایستا دارای پایداری مکانیکی هستند، اما در حین کاربردهای مختلف امکان عدم ناپایداری آن‌ها به دلیل وجود شاخص جامع ناهمسانگردی بالا (حدود ۲/۹) وجود دارد. لذا به تحقیقات پیش‌تر در خصوص عوامل پایدارکننده ساختار که ممکن است شامل اضافه کردن ناخالصی و ارتعاشات در دمای بالا باشد نیاز است. دمای دبای که بالاتر بودن آن نشان‌دهنده میزان قدرت پیوند بین اتم‌های سازنده است مورد بررسی قرار گرفت که برای CsPbBr_۳ و CsPbBr_۳ به ترتیب برابر با ۱۲۰ و ۱۰۱ کلوین بوده است. انواع حالت‌های انتشار صدا در بلور مورد بررسی قرار گرفت، که نشان از سرعت انتشار صدای نسبتاً پایین آن‌ها در بلور است. مقدار این کمیت برای CsPbBr_۳ و CsPbBr_۳ برابر با ۱۷۷۴ و ۱۵۸۷ متر بر ثانیه به دست آمد. سرعت بالاتر انتشار صدا در ماده CsPbBr_۳، مقدار بیش‌تر ترابرد فونونی و در نتیجه رسانندگی گرمایی آن را نسبت به CsPbI_۳ به دنبال دارد. مقدار رسانندگی گرمایی به دست آمده از الگوی اسلک برای CsPbI_۳، ۰/۲۷۴ W/mK، با توافق خوبی با الگویی که توسط گو و همکاران برابر با ۰/۲۵ W/mK به دست آمده بود، دارد. مقدار این کمیت برای CsPbBr_۳ برابر با ۰/۳۴۹ W/mK به دست آمد که نشان از سرعت بالاتر در هدایت گرمایی است. بنابراین، مقدار بالاتر رسانندگی گرمایی CsPbBr_۳ نسبت به CsPbI_۳ می‌تواند تجمع گرما در سطح این ماده را تا حدود بیش‌تری برطرف کند و مانع از تغییرات دمایی زیاد و دگرگونی ساختار شود. بنابراین ماده CsPbBr_۳ به علت توانایی بیش‌تر در حفظ ساختار می‌تواند ثبات بازدهی بهتری را در کاربردهای یاخته خورشیدی از خود نشان دهد.

فهرست منابع

- [1] M. Rizwan, Z. Usman, M. Shakil, "Electronic and optical behaviour of lanthanum doped CaTiO₃ perovskite," Materials Research Express, vol. 7, no. 015920, 2020.
- [2] B. Kang, Q. Feng, K. Biswas, "Comparative study of perovskite-type scintillator materials CsCaI₃ and KCaI₃ via first-principles calculations," Journal of Physics D: Applied Physics, vol. 51, no. 065303, 2018.

- International Journal of Thermophysics, vol. 40, no. 104, 2019.
- [25] J. Feng, "Mechanical properties of hybrid organicinorganic $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{BX}_3$ (B = Sn, Pb; X = Br, I) perovskites for solar cell absorbers," *Journal of APL Materials*, vol. 2, no. 081801, 2014.
- [26] M. Jamal, S.J. Asadabadi, I. Ahmad, H.A. Rahnamaye, "Elastic constants of cubic crystals," *Journal of Computational Materials Science*, vol. 95, pp. 592-599, 2014.
- [27] A. Marmier, Z.A. Lethbridge, R.I. Waltonb, "ElAM: A computer program for the analysis and representation of anisotropic elastic properties," *Journal of Computer Physics Communications*, vol. 181, pp. 2102-2115, 2010.
- [28] E. Haque, M.A. Hossain, "Origin of ultra-low lattice thermal conductivity in $\text{Cs}_2\text{BiAgX}_6$ (X=Cl, Br) and its impact on thermoelectric performance," *Journal of Alloys and Compounds*, vol. 748, pp. 63-72, 2018.
- high stability of vacuum-deposited methylammonium lead triiodide thin films for high-efficiency solar cells," *Journal of Advanced Materials*, vol. 31, no. 1902692, 2019.
- [15] A. Pisoni, J. Jacimovic, O. Barisic, "Ultra-low thermal conductivity in organic-inorganic hybrid perovskite $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$," *Journal of Physical Chemistry Letters*, vol. 5, no. 14, pp. 2488-2492, 2014.
- [16] S.D. Guo, J.L. Wang, "Potential thermoelectric materials CsMI_3 (M=Sn and Pb) in perovskite structures from the first-principles calculations," *Journal of Rsc Advances*, vol. 6, pp. 101552-101559, 2016.
- [17] J. Lia, C. Zhangb, Y. Yana, "Predicting excellent anisotropic thermoelectric performance of the layered oxchalcogenides BiAgOCh (Ch=S, Se, and Te)," *Journal of Computational Materials Science*, vol. 171, no. 109273, 2020.
- [18] B. Parida, S. Yoon, S.M. Jeong, "Recent progress on cesium lead/tin halide-based inorganic perovskites for stable and efficient solar cells: A review," *Journal of Solar Energy Materials and Solar Cells*, vol. 204, no. 110212, 2020.
- [19] S. Sharma, N. Weiden, A. Weiss, "Phase diagrams of quasibinary systems of the type: $\text{ABX}_3\text{-A}'\text{BX}_3$; $\text{ABX}_3\text{-AB}'\text{X}_3$, and $\text{ABX}_3\text{-ABX}'_3$; X = Halogen," *Journal of Zeitschrift für Physikalische Chemie*, vol. 175, no. 1, 1992.
- [20] P. Giannozzia, <http://quantum-espresso.org/>.
- [21] P. Cottingham, R. Brutchey, "On the crystal structure of colloiddally prepared CsPbBr_3 quantum dots," *Journal of Chemical Communicaton*, vol. 52, pp. 5246-5249, 2016.
- [22] D. Trots, S. Myagkota, "High-Temperature Structural Evolution of Caesium and Rubidium Triiodoplumbates," *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, vol. 69, pp. 2520-2526, 2008.
- [23] A. Rehman, M. Shafiq, R. Ahmad, "Structural, electronic and optical properties of CsPbX_3 (X=Cl, Br, I) for energy storage and Hybrid Solar cell applications," *Journal of Alloys and Compounds*, no.705, pp. 828-839, 2017.
- [24] M. Siddique, A. Rahman, "A systematic first-principles investigation of structural, electronic, magnetic, and thermoelectric properties of thorium monpnictides ThPn (Pn = N, P, As): A comparative analysis of theoretical predictions of LDA, PBEsol, PBE-GGA, WC-GGA, and LDA+U methods,"

(Research Article)

**Investigation of mechanical, thermal and acoustical properties of CsPbX₃
(X = Br, I) compounds using the density functional theory**

H. Milani Moghaddam^{*}, M. Fallah

Department of physics, Faculty of Basic Sciences, University of Mazandaran

Abstract

Halide Perovskites have great energy conversion efficiency, but their structural degradation due to change in surface temperature arise from heat accumulation of solar radiation is one of their most important drawbacks. Analysis of structure and thermal transport can be useful in increasing their efficiency. In this paper mechanical, acoustical and thermal properties of CsPbI₃ and CsPbBr₃ in cubic phase were studied using density functional theory with PBE-GGA approximation. Elastic constants obtained with stress-strain methodology. Using elastic constants, mechanical stability, anisotropy, elastic coefficients, Debye temperature and various sound propagation modes in the materials investigated. Despite mechanical stability in static conditions, the existence of high anisotropy (~2.9) in these perovskites revealed that, they may become unstable in commercial applications. CsPbBr₃ compared to CsPbI₃ due to higher Debye temperature (120 and 101 K) and more speed of sound propagation (1774 and 1587 m/s), has stronger bonds between the components, in addition to, having higher phonon transport. Thermal conductivity was investigated using the Slack model, which obtained 0.349 and 0.274 W mK/s for CsPbI₃ and CsPbBr₃, respectively. Higher thermal conductivity of CsPbBr₃ leads to less heat accumulation on the surface, so it can be introduced as a better choice for use in solar cell applications.

Keywords: Perovskite, Sound velocity, Thermal conductivity, Anisotropic.

pp. 68-77 (In Persian)

^{*} Corresponding author E-mail: milani@umz.ac.ir