

(Research Article)
Investigation of structural, phononic and thermodynamic properties of sodium sulfide compound in the cubic phase (zinc-blend) using pseudopotential method

H. Salehi*, M.M. Jamei, M. Azizi

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

Received: 2023/09/10, Accepted: 2024/02/18

Abstract

In this paper, the structural, phononic and thermodynamic properties of sodium sulfide compound in the cubic phase (zinc-blend) have been studied. The calculations were done using the ultrasoft pseudopotential method in the framework of the density functional theory and using the Quantum Espresso software using the generalized gradient approximation (GGA). The value of lattice constant and volume modulus after optimization were obtained as 6.18 Angstroms and 1.15 Gigapascals, respectively, then by calculating the phonon scattering, we get the scattering diagram with 6 phonon branches in the symmetrical direction W-L- Γ -X-W-K. and we noticed the existence of a frequency gap from 101.19 to 226.58 Hz in the scatter diagrams and also the examination of the thermal properties show that the heat capacity of the compound present in the zinc blend phase at low temperatures according to experience is proportional to the third power of the temperature and reaches a saturation value at high temperatures, which indicates that it is no longer dependent on temperature.

Keywords: Quantum Espresso, Sodium sulfide, Phononic properties, Structural properties, Thermodynamic properties.

pp. 48-54 (In Persian)

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

بررسی خواص ساختاری، فونونی و ترمودینامیکی ترکیب سدیم سولفید در فاز مکعبی (بلند-روی) با استفاده از روش شبه پتانسیل

حمدا له صالحی*، محمد مهدی جامعی، مریم عزیزی

گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه شهید چمران اهواز

دریافت: ۱۴۰۲/۰۶/۱۹، پذیرش: ۱۴۰۲/۱۱/۲۹

چکیده

در مقاله حاضر خواص ساختاری، فونونی و ترمودینامیکی ترکیب سدیم سولفید در فاز ساختاری مکعبی (بلند-روی) مورد بررسی قرار می‌گیرد. محاسبات با استفاده از روش شبه پتانسیل فوق نرم در چارچوب نظریه تابعی چگالی و با استفاده از نرم افزار کوانتوم اسپرسو با استفاده از تقریب شیب تعمیم یافته (جی جی ای) انجام شده است. مقدار ثابت شبکه و مدول حجمی پس از بهینه سازی به ترتیب مقادیر ۶۱۸ آنگستروم و ۱۵۱ گیگاپاسکال بدست آمدند، سپس با محاسبه پراکندگی فونونی مشخص شد نمودار پراکندگی دارای ۶ شاخه فونونی در راستای پرتقارن W-L-T-X-W-K می باشد و گاف بسامدی از بسامد ۱۰۱/۱۹ تا ۲۲۶/۵۸ هرتز در نمودارهای پراکندگی وجود دارد. هم چنین بررسی خواص گرمایی نمایش می دهد که ظرفیت گرمایی ترکیب حاضر در فاز بلند-روی در دماهای پایین مطابق تجربه متناسب با توان سوم دما بوده و در دماهای بالا به یک مقدار اشیاع می رسد که بیان کننده این است که دیگر به دما وابستگی ندارد.

کلیدواژه ها: کوانتوم اسپرسو، سدیم سولفید، خواص فونونی، خواص ساختاری، خواص ترمودینامیکی.

۱. مقدمه

و بیش تر به لحاظ ظاهری مانند بلورهای زرد رنگ که در کانی های سولفید و سولفات به دست می آید یافت می شود [۱]. این عنصر در مقادیر کم از زغال سنگ و نفت که هنگام سوختن دی اکسید گوگرد تولید می کنند به دست می آید. ترکیب عناصر سدیم فلزی با گوگرد نافلزی را، سدیم سولفید می نامند که با نماد NaS نمایش داده می شود و این ترکیب از جمله فرومغناطیس های نیم فلزی هستند که اولین پیشگویی راجع به این مواد، در ترکیبات هویسلر بوده که در سال ۱۹۸۳ توسط گروت و همکاران بیان شد و اولین فرومغناطیس از آلیاژ نیم هویسلر NiMnSb را پیش بینی کرد [۲]. یعنی سال ها پیش خواص مغناطونوری غیرعادی چندین آلیاژ هویسلر باعث شد تا ساختار الکترونی آنها مورد مطالعه پژوهشگران قرار گیرد و مطالعات انجام شده نتیجه غیرمنتظره ای را در برداشت. آنها متوجه شدند که برخی از این آلیاژها خواص فلزات را مانند عایق ها، وابسته به جهت اسپین نشان می دهند. این دسته از مواد فرومغناطیس، نیم فلز نام گرفتند و پس از

به طور کلی ترکیبات شیمیایی از گرد هم آمدن اتم های گوناگون تشکیل شده اند و ترکیب سدیم سولفید که در مقاله حاضر به خواص آن پرداخته شده، از کنار هم قرار گرفتن عناصر سدیم و گوگرد یا سولفور پدیدار شده است. در این ترکیب سدیم با نماد Na و عدد اتمی ۱۱ در گروه نخست جدول تناوبی قرار می گیرد. عناصر گروه اول جدول تناوبی شامل (لیتیم، سدیم، پتاسیم، روبیدیم، سزیم و فرانسیم) را فلزات قلیایی می گویند، هیدروژن در صدر این گروه قرار دارد ولی جز فلزات قلیایی شمرده نمی شود [۱]. این مواد دارای ظاهری براق، نرم و خاصیت واکنش پذیری بالا در دما و فشار استاندارد هستند و در لایه ظرفیت خود فقط دارای یک الکترون می باشند. عنصر گوگرد با نماد S و عدد اتمی ۱۶ در گروه شانزدهم جدول تناوبی قرار می گیرد که یک نافلز بدبو، بدمزه و چند ظرفیتی می باشد

* نویسنده پاسخگو: salehi_h@scu.ac.ir

ترکیبات بدست آوردند [۸]. در سال ۲۰۱۵ افزایش و همکاران خواص ساختاری، الکترونی و مغناطیسی ترکیب NaS را در سطح و ساختار نمک طعام با استفاده از کد محاسباتی^۲، با تقریب شیب تعمیم یافته (جی جی ای)^۳ مورد بررسی قرار دادند و نمودارهای ساختار نواری و میزان گاف نواری را برای این ترکیب در دو فاز ساختاری مختلف بدست آوردند [۹]. سدیم سولفید گزینه مناسبی برای منبع نیرو، سلول سوختی، باتری حالت جامد و تجهیزات فضایی فرابنفش است [۱۰]. از این مواد می توان به عنوان منبع نیرو در ادوات الکترونیکی قابل حمل مانند لپ تاپ، تلفن های خورشیدی و دوربین های رقومی استفاده کرد. این ترکیب با افزایش سرعت واکنش و افزایش اکسیداسیون سطح نیم رساناها نقش مهمی در بهبود فوتوکاتد دارد [۱۰]. از دیگر کاربردهای این ترکیب می توان به خمیر سلولزی (کاغذ)، لاستیک، صنعت چرم سازی، ابریشم مصنوعی، هیدرومتالوژی سنگ های معدن طلا، حکاکی، لیتوگرافی، چیت و پزشکی اشاره کرد [۹]. با توجه به ویژگی های شگرف این ترکیب در مقاله حاضر به آن پرداخته شده است، لذا در این مقاله ابتدا خواص ساختاری ترکیب، مورد بررسی قرار می گیرد سپس بررسی خواص فونونی و ترمودینامیکی این ترکیب در ساختار مکعبی (بلند-روی) انجام می شود.

۲. مواد و روش ها

محاسبات کار حاضر در چارچوب نظریه تابعی چگالی و با اعمال شبه پتانسیل فوق نرم و تقریب شیب تعمیم یافته^۴ انجام و تمامی محاسبات با استفاده از کد محاسباتی^۲، توسط بسته محاسباتی کوانتوم- اسپرسو انجام شد [۱۱]. انتگرال های منطقه اول بریلوئن به وسیله اعمال تقریب شیب تعمیم یافته پس از بهینه سازی مقدار $7 \times 7 \times 7$ برای نقطه شبکه وارون k در نظر گرفته شده است. تمامی مؤلفه ها اعم از انرژی قطع تابع موج، نقاط k و ثابت های شبکه ابتدا بهینه سازی شده و سپس در محاسبات به کار رفته اند. انرژی قطع تابع موج پس از بهینه سازی ۶۰

آن ترکیب های فراوانی یافت شد که دارای این خاصیت بودند [۳]. در ترکیبات نیم فلزی یکی از دو کال (کانال) اسپینی نیم رسانا یا عایق و دیگری فلز است. بنابراین این ترکیبات دارای قطبش اسپینی ۱۰۰ درصد در سطح فرمی هستند [۴]، لذا باعث ایجاد یک جریان کاملاً اسپین-قطبیده می شوند به همین دلیل در صنعت اسپینترونیک مورد توجه بسیاری قرار گرفته اند. پس از آن گروه های مختلفی از فرومغناطیس های نیم فلزی به طور نظری یا آزمایشگاهی پیش بینی شده اند و توجه بسیاری از محققان را در سال های اخیر به خود جلب کرده اند [۵]. از جمله، آلیاژهای نیم هویسلر و تمام هویسلر، برخی اکسیدهای مغناطیسی و برخی پنکتیدها و کلکوژنیدهای فلزات واسطه با ساختار بلند-روی هستند. برای پنکتید و کلکوژنید، فاز بلند-روی ساختار پایدار آن هاست و حالت پایه، فاز NiAs است که نیم فلز نیست. به هر حال، ساختار بلند-روی فیلم ها یا چند لایه ای هایی از CrAs، CrSb و MnAs روی GaAs به طور موفقیت آمیزی رشد داده شده اند [۶]. این مطالعات باعث تحقیقات گسترده ای برای کشف و یافتن نیم فلزهای فرومغناطیس در ساختار بلند-روی شد. آنچه که در این ترکیبات باعث پدیدار شدن خاصیت مغناطیسی و به دنبال آن نیم فلزی است، اختلاف زیاد الکترون خواهی آنیون، کاتیون و هم چنین وجود نوار انرژی با پهنای کم (تیز) در سطح فرمی است. ترکیبات MS ($M=Li, Na, K$) اولین بار توسط گائو و همکاران در سال ۲۰۱۱ از روش امواج بهبود یافته خطی با پتانسیل کامل با استفاده از کد محاسباتی^۱، ساختار الکترونی و خواص مغناطیسی مورد بررسی قرار گرفت. آن ها با رسم نمودار چگالی حالات و ساختار نواری متوجه حضور خاصیت نیم فلزی در ترکیبات فوق شدند [۷]. در سال ۲۰۱۳ سلطانی و همکاران خاصیت نیم فلزی ترکیبات MS ($M=Li, Na, K$) در ساختار بلند-روی تحت فشار از طریق نظریه تابعی چگالی با استفاده از نرم افزار کوانتوم اسپرسو با استفاده از تقریب شیب تعمیم یافته برای LiS، NaS و KS مورد بررسی قرار دادند و نمودارهای چگالی حالات کلی و جزئی را برای این

² PWscf

³ GGA

⁴ GGA-pbe

¹ Wien2k

می‌شود و مدی را که جهت انتشار اجزای آن در جهت انتشار بردار موج باشد را مد طولی و مدی را که جهت انتشار آن خلاف جهت بردار موج باشد را مد عرضی می‌نامند. ارتعاشات در شبکه در دماهای مختلفی اتفاق می‌افتد و اهمیت زیادی در خواص گرمایی ترکیب دارد. در نمودار پاشندگی فونونی، تعداد شاخه‌های هر مد در یک ترکیب به تعداد اتم‌های تشکیل‌دهنده ترکیب بستگی دارد، بدین شکل که اگر بلور دارای n اتم باشد، سامانه بلوری دارای $3n$ شاخه فونونی می‌شود که از این تعداد فقط ۳ شاخه صوتی است و $3n-3$ شاخه دیگر شاخه نوری می‌باشند [۱۳]. تعداد مدهای موجود در واحد گستره بسامد را چگالی مدها $g(\omega)$ می‌گویند که از رابطه زیر به دست می‌آید [۱۳-۱۴]:

$$g(\omega) = \sum_s \int \frac{ds}{(2\pi)^3} \frac{1}{|\nabla_s \omega(K)|} \quad (2)$$

در رابطه بالا $\nabla_s \omega(K)$ معرف سرعت گروه است که به ازای مقادیری از ω صفر شده و سبب تکینگی در چگالی مدها می‌گردد که به تکینگی‌های وان‌هوف مشهورند [۱۳]. هم‌چنین برای بررسی میزان نقش هر اتم در چگالی حالت‌ها و نمودار پاشندگی فونونی، به بررسی چگالی حالت فونونی جزئی پرداخته می‌شود. ظرفیت گرمایی در حجم ثابت که با نماد C_v نمایش داده می‌شود در یک سامانه، نسبت گرمای اضافه‌شده یا حذف‌شده سامانه به نسبت تغییر دما می‌باشد. ظرفیت گرمایی ویژه را می‌توان در شرایط فشار ثابت یا حجم ثابت اندازه‌گیری کرد و اختلاف بین C_p و C_v برای مایعات و جامدات مقدار ناچیزی را می‌دهد ولی ظرفیت گرمایی در حجم ثابت به نسبت ظرفیت گرمایی در فشار ثابت کمیت مفیدتری است به این سبب از طریق آن انرژی سامانه یافت می‌شود [۱۵].

$$dQ = dU - dW = dU - pdV \quad (3)$$

اگر حجم ثابت باشد آن‌گاه گرمای ویژه در حجم ثابت می‌شود:

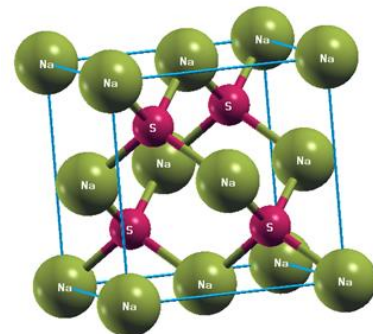
$$C_v = \left[\frac{\partial Q}{\partial T} \right]_v = \left[\frac{\partial U}{\partial T} \right]_v = T \left[\frac{\partial S}{\partial T} \right]_v \quad (4)$$

با توجه با نتایج تجربی که بیان می‌کند در حوالی صفر مطلق کاهش C_v برحسب دما بصورت T^3 است [۱۶]. با استفاده از داده‌های محاسباتی فونونی و کد محاسباتی

ریدبرگ در محاسبات منظور شد. در اجرای واهلش، همگرایی انرژی با دقت 1×10^{-6} ریدبرگ اعمال شد و ثابت شبکه پس از بهینه‌سازی شبه‌سج ساختاری برابر با 6.18 آنگستروم به دست آمد که با مقدار تجربی آن، 5.75 [۷]، سازگاری خوبی دارد. شبه پتانسیل انتخابی از نوع فوق‌نرم بوده که در آن آرایش الکترونی لایه ظرفیت برای اتم سدیم $3s^1$ و برای اتم سولفور $3s^2 3p^4$ در نظر گرفته شده است سپس با برآزش نمودارهای انرژی بر حسب حجم و استفاده از معادله مورناگون [۱۲]:

$$E(V) = E_0 + \left[\frac{V}{V_0} + \frac{(V/V_0)^{-B'} - B'}{B' - 1} \right] \quad (1)$$

که در رابطه فوق، V حجم سلول اولیه، E_0 انرژی حالت پایه در دما و فشار صفر B و B' به ترتیب مدول حجمی و مشتق آن هستند و از طریق نمودار فوق نمودار انرژی بر حسب حجم و مقدار مدول حجمی بدست می‌آید. هم‌چنین در شکل ۱، شکل بلوری NaS توسط نرم‌افزار ترسیم ساختارهای مولکولی و بلوری^۱ رسم شده است.



شکل ۱ ساختار بلوری سدیم سولفید در فاز مکعبی (بلند-روی).

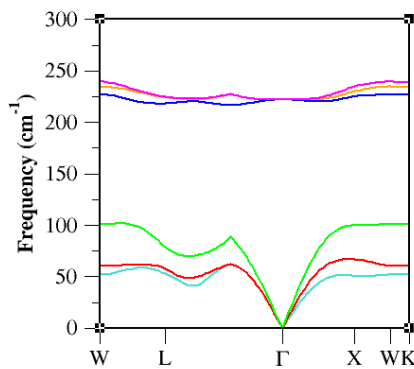
به طور کلی اتم‌های یک بلور در دمای صفر مطلق با ارتعاش همراه هستند و با افزایش دمای بلور، انرژی بدست می‌آورند و همین امر سبب افزایش ارتعاش بلور می‌شود و در اصطلاح این حرکت بلور، ارتعاش شبکه نام‌گذاری می‌شود. ارتعاشات شبکه در بلور به صورت موجی شکل اتفاق می‌افتند و هر موج از دو کمیت بسامد ω و بردار موج k تشکیل می‌شود که از ترکیب این دو کمیت رابطه پاشندگی حاصل می‌شود. به طور کلی مدهای ارتعاشی در هر بلور در دو نوع مدهای طولی و مدهای عرضی یافت

^۱ XCrySDen

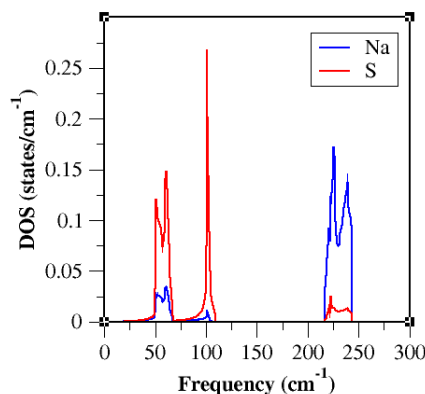
جدول ۱ مؤلفه‌های ساختاری محاسبه‌شده در این کار همراه با نتایج دیگران [۷].

ترکیب	مقادیر	جی‌جی‌ای	دیگران [۷]
سدیم سولفید	ثابت شبکه a.(A.)	۶,۱۸	۵,۷۵
مدول حجمی	B (گیگاپاسکال)	۱۵,۱	-
مشتق مدول حجمی	B'	۴	-

فونونی و نمودار پاشندگی فونونی، به بررسی چگالی حالت فونونی جزئی پرداخته شد، و با مشاهده هر دو شکل در بسامدهای مشابه تطابق دو شکل با یکدیگر مشاهده می‌شود.



شکل ۳ پراکندگی فونونی در مسیر پرتقارن ترکیب NaS.



شکل ۴ چگالی حالت‌های جزئی فونونی در مسیر پرتقارن ترکیب NaS.

کیوچ‌ای^۱ ظرفیت گرمایی ویژه در دماهای گوناگون بدست می‌آید و ظرفیت گرمایی در حجم ثابت با استفاده از تقریب دبای^۲ از طریق رابطه (۵) حاصل می‌شود [۱۶]:

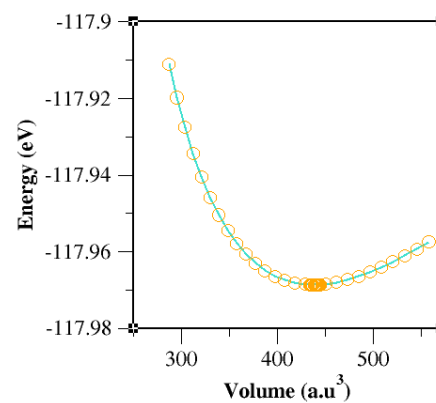
$$C_v = \int_0^{\omega_M} \left(\frac{\hbar\omega}{k_B T} \right)^2 \frac{e^{\frac{\hbar\omega}{k_B T}}}{\left(e^{\frac{\hbar\omega}{k_B T}} - 1 \right)^2} g(\omega) d(\omega) \quad (5)$$

در معادله (۵)، $g(\omega)$ طیف بسامدهای فونونی و ω_M بیش‌ترین بسامد مرتبط با فونون‌ها را نشان می‌دهند. که با افزایش دما در سامانه، آنتروپی سامانه افزایش پیدا می‌کند و در دماهای نسبتاً کم ظرفیت گرمایی، مقدار قابل توجهی افت می‌کند. هم‌چنین با افزایش دما مقدار کمیت C_v هم به یک مقدار اشباع می‌رسد که مستقل از دماست و این مقدار برابر با $3Nk_B$ در کلیه جامدات می‌باشد.

۳. نتایج

۳-۱. خواص ساختاری

نمودار انرژی بر حسب حجم، مقدار مدول حجمی و مشتق مدول حجمی به‌دست‌آمده در شکل ۲ و جدول ۱ بیان شده است که مقدار ۱۵/۱ گیگاپاسکال برای مدول حجمی میزان سختی بلور را می‌دهد.



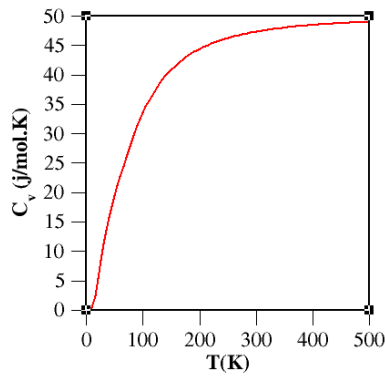
شکل ۲ نمودار تغییرات حجم بر حسب انرژی ترکیب سدیم سولفید.

۳-۲. خواص فونونی

در شکل ۳ نمودار پراکندگی فونونی ترکیب سدیم سولفید در فاز ساختاری بلند-روی آورده شده است و در شکل ۴ به منظور بررسی میزان نقش هر اتم در چگالی حالت‌های

^۱ QHA

^۲ Debaye

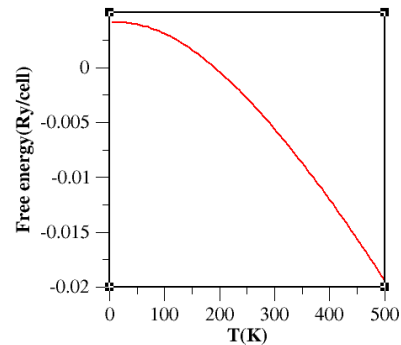


شکل ۷ نمودار ظرفیت گرمایی ویژه در حجم ثابت بر حسب دما.

حجم بر حسب انرژی رسم شده است که از طریق معادله مورناگون مقدار حجم بهینه 438.24 a.u.^3 به دست آمد. شبه سنج شبکه (پارامتر شبکه) پس از بهینه سازی در جدول ۱ قرار داده شده و پس از مقایسه این شبه سنج با داده های دیگران [۷] که از طریق پتانسیل کامل این ماده را مورد بررسی قرار دادند، مشخص می شود که مقدار محاسباتی ثابت شبکه در دو روش پتانسیل کامل و شبه پتانسیل اختلاف محدودی با یکدیگر دارند ولی با توجه به این که دیگر مقادیر محاسباتی این ترکیب برای نخستین بار مورد محاسبه قرار گرفته اند مرجعی برای مقایسه آن ها وجود ندارد. با استفاده از داده های محاسباتی و جای گذاری در معادله ۱ کمیت مدول حجمی که نسبتی از سختی ماده دارد به دست آمد و در جدول ۱ قرار گرفت. از طرف دیگر در ساختار ترکیب NaS، ۲ اتم وجود دارد یعنی ساختار بلوری ترکیب NaS در نمودار پاشندگی دارای ۶ شاخه می باشد که از این ۶ شاخه، ۳ شاخه آن صوتی هستند و ۳ شاخه دیگر آن نوری هستند. شاخه های صوتی از ۲ شاخه عرضی TA و ۱ شاخه طولی LA تشکیل شده اند که این شاخه ها در طول موج های بلند در نقطه Γ دارای بسامد صفر هستند که دلیل این پدیده در جامدات این است که شاخه های صوتی عرضی، طولی و امواج برشی زیرمجموعه موج های صوتی متراکم هستند، به همین ترتیب سرعت شاخه های صوتی از طولی به دلیل این که برش یک بلور راحت تر از متراکم کردن آن است، کم تر می باشد. ۳ شاخه دیگر به عنوان شاخه های نوری شناخته می شوند. در شکل ۳ نمودار پراکندگی فونونی ترکیب NaS در تقریب شیب تعمیم یافته محاسبه شده است که دارای ۶ شاخه فونونی در راستای مسیر پرتقارن

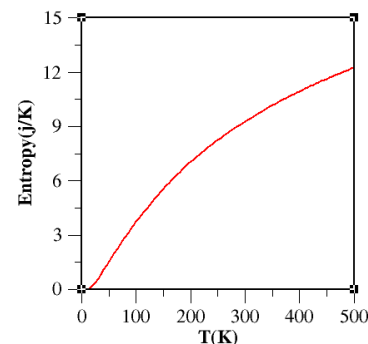
۳-۳. خواص ترمودینامیکی

در کار حاضر به وسیله تقریب شبه هماهنگ، خواص ترمودینامیکی ترکیب سدیم سولفید هم چون، انرژی آزاد نوسانی، آنتروپی و ظرفیت گرمایی ویژه در حجم ثابت مورد بررسی قرار می گیرد. تغییرات میزان انرژی آزاد نوسانی برای سدیم سولفید در فشار صفر بر حسب دما در شکل ۵ آورده شده است.



شکل ۵ نمودار تغییرات انرژی آزاد نوسانی بر حسب دما.

در شکل ۶ تغییرات آنتروپی بر حسب دما رسم شده است.



شکل ۶ نمودار تغییرات آنتروپی بر حسب دما.

ظرفیت گرمایی یکی از مهم ترین ویژگی های ترمودینامیکی در کاربرد یک ترکیب شمرده می شود و در شکل ۷ نمودار تغییرات ظرفیت گرمایی نسبت به دما محاسبه و رسم شده است.

۴. بحث

در مقاله حاضر خواص ساختاری، فونونی و ترمودینامیکی ترکیب سدیم سولفید در فاز بلندروی از طریق نظریه تابعی چگالی و با استفاده از کد محاسباتی کوانتوم اسپرسو مورد بررسی قرار گرفته است. در شکل ۲ نمودار تغییرات

آن به صفر میل می‌کند.

۵. نتیجه‌گیری

در پژوهش فوق خواص ساختاری، فونونی و ترمودینامیکی ترکیب سدیم سولفید در فاز ساختاری بلند روی از طریق نظریه‌ی تابعی چگالی و تقریب شیب تعمیم‌یافته با استفاده از کد محاسباتی کوانتوم اسپرسو مورد بررسی قرار گرفته‌اند. نتایج حاصل بیانگر این نکات هستند که ظرفیت گرمایی این ترکیب در دماهای بالا به یک مقدار اشباع می‌رسد و در دماهای پایین طبق تجربه با توان سوم دما متناسب می‌باشد و از بررسی خواص فونونی مشخص می‌شود که در بسامد پایین تا مقدار کم‌تر از $10/19$ هرتز این ساختار گاف بسامدی ندارد اما بعد از آن در محدوده‌ی بسامدی $10/19$ تا $226/58$ هرتز در این ساختار گاف بسامدی مشاهده می‌شود و این نتیجه بیانگر این نکته است که در این نواحی سرعت گروه صفر می‌باشد و با محاسبه چگالی حالت‌های جزئی این موضوع مشخص شد که بیش‌ترین اتم تأثیرگذار در مدهای صوتی اتم S و در مدهای نوری اتم Na می‌باشند.

تقدیر و تشکر

بدینوسیله از راهنمایی‌های دلسوزانه اساتید بزرگوار تقدیر و تشکر بعمل می‌آید.

تضاد منافع

این مطالعه تضاد منافع ندارد.

فهرست منابع

- [1] T.X. Gentner, R.E. Mulvey, "Alkali-Metal Mediation: Diversity of Applications in Main-Group Organometallic Chemistry," *Angewandte Chemie International Edition*, vol. 60, no. 17, pp. 9247-9262, 2021.
- [2] R.A. De Groot, F.M. Mueller, P.G. Van Engen, K.H.J. Buschow, "New class of materials: Half-metallic ferromagnets," *Physical Review*, vol. 50, pp. 25, 1983.
- [3] P. Rasaili, N.K. Sharma, A. Bhattarai, "Comparison of ferromagnetic materials: Past work, recent trends, and applications," *Condensed Matter*, vol. 7, no. 12, pp. 1-20, 2022.

W-L- Γ -X-W-K می‌باشد که هیچ مقدار بسامد منفی در نمودار پاشندگی فونونی مشاهده نشد که این نشان‌دهنده‌ی پایداری ساختار است. در نمودار پراکندگی فونونی به فاصله‌ی بین شاخه نوری و شاخه صوتی گاف بسامدی گفته می‌شود. در شکل ۳ مشاهده می‌شود که از بسامد $10/19$ تا $226/58$ هرتز دارای گاف بسامدی می‌باشد و در این بازه هیچ مد فونونی صوتی (طولی و عرضی) و نوری وجود ندارد که در این بسامدها سرعت گروه صفر می‌باشد. هم‌چنین برای بررسی میزان نقش هر اتم در چگالی حالت‌ها و نمودار پاشندگی فونونی، چگالی حالت فونونی جزئی بررسی شده است، که در شکل ۴ چگالی حالت‌های جزئی ترکیب نمایش داده شده و گاف فونونی به خوبی در آن نمایش داده شده است. همان‌طور که مشاهده می‌شود در نمودار چگالی حالت‌ها در میان مدهای صوتی بالاترین نقش را اتم S دارد و سهم اتم Na در مدهای صوتی ناچیز است ولی در مدهای نوری اتم Na بالاترین نقش را ایفا کرده و دارای دو قله بیشینه می‌باشد و نقش اتم S در مدهای نوری ضعیف است.

هم‌چنین مقدار انرژی آزاد نوسانی نقطه‌ی صفر کلوین در فشار صفر با استفاده از تقریب شیب تعمیم‌یافته برابر با $0/0038$ (Ry/Cell) می‌باشد. با توجه به شکل ۵ نتیجه گرفته می‌شود که مقدار این انرژی از حدود دمای 50 کلوین به سرعت کاهش می‌یابد و در 300 کلوین دمای اتاق برابر با $-0/0075$ (Ry/Cell) می‌شود. در شکل ۶ مشاهده می‌شود که میزان آنتروپی با افزایش دما، افزایش پیدا می‌کند و از نمودار این‌طور برداشت می‌شود که آنتروپی از دمای 25 کلوین به سرعت افزایش یافته و در دمای 300 کلوین که دمای اتاق است، به مقدار $8/853 k_B$ می‌رسد. همان‌طور که مشخص است با افزایش دما آنتروپی سامانه در حال افزایش می‌باشد و ظرفیت گرمایی ویژه نیز باید افزایش یابد. در دماهای پایین ظرفیت گرمایی به طور قابل توجهی افت می‌کند و ظرفیت گرمایی در دماهای بسیار پایین با توان اول دما متناسب می‌باشد. با توجه به قانون دولن-پتی در دماهای بالا مقدار ظرفیت گرمایی ویژه، به یک مقدار اشباع می‌رسد، در دماهای پایین، مقدار ظرفیت گرمایی افت کرده و با نسبت T^3 رفتار می‌کند به گونه‌ای که در دمای صفر مطلق دمای

- [14] P. Baettig, C.F. Schelle, R. LeSar, U.V. Waghmare, N.A. Spaldin, "Theoretical prediction of new high-performance lead-free piezoelectrics," *Chemistry of materials*, vol. 17, no. 6, pp. 1376-1380, 2005.
- [15] S.W. Koch, "Quantum theory of the optical and electronic properties of semiconductors," World Scientific Publishing Company Incorporated, 1994.
- [16] J. Tan, G. Ji, X. Chen, L. Zhang, Y. Wen, "The high-pressure phase transitions and vibrational properties of zinc-blende XTe (X= Zn, Cd, Hg): Performance of local-density-approximation density functional theory," *Materials Science*, vol. 48, no. 4, pp. 796-801, 2010.
- [4] H. Zhang, X. Zhang, Y. Liu, X. Dai, G. Chen, G. Liu, "Possibility of fully spin-polarized nodal chain state in several spinel half metals," *Physical Review B*, vol. 102, no. 19, pp. 1-9, 2020.
- [5] M. Geshi, K. Kusakabe, H. Tsukamoto, N. Suzuki, "New half materials with an alkaline earth element," *Condensed Matter*, vol. 16, no. 48, pp. 5639-5644, 2004.
- [6] M.V. Kazimov, G.B. Ibragimov, G.I. Isakov, S.K. Dadasheva, E.K. Dadashev, "Synthesis and structural analysis of InSb-CrSb and InAs-CrAs eutectic composites," In *АКТУАЛЬНЫЕ НАУЧНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ*, vol. 501, pp. 35-38, 2022.
- [7] G.Y. Gao, K.L. Yao, M.H. Song, Z.L. Liu, "Half-metallic ferromagnetism in rocksalt and zinc-blende MS (M= Li, Na and K): A first-principles study," *Magnetism and Magnetic Materials*, vol. 323, no. 21, pp. 2652-2657, 2011.
- [8] Z. Kamkar, "Half-metallic ferromagnetism in the zinc-blende MS (M=Li, Na, K) under pressure," Thesis Submitted for the Award of M.Sc In Solide State Physics, Payame Noor University Faculty of Science , pp. 118, 2013.
- [9] M. Afshari, M. Moradi, M. Rostami, "Structural, electronic and magnetic properties of the (001), (110) and (111) surfaces of rocksalt sodium sulfide: A first-principles study," *Physics and Chemistry of Solids*, vol. 76, pp. 94-99, 2015.
- [10] S.M. Alay-e-Abbas, N. Sabir, Y. Saeed, A. Shaukat, "First-principles study of structural and electronic properties of alkali metal chalcogenides: M₂CH [M: LI, NA, K, RB; CH: O, S, SE, TE]," *Modern Physics B*, vol. 25, no. 29, pp. 3911-3925, 2011.
- [11] P. Giannozzi, S. Baroni, N. Bonini, M. Calandra, R. Car, C. Cavazzoni, R.M. Wentzcovitch, "Quantum Espresso: A modular and open-source software project for quantum simulations of materials," *Condensed Matter*, vol. 21, no. 39, pp. 1-20 2009.
- [12] H. Tashakori, B. Khoshnevisan, F. Kanjouri, "Ab initio systematic study of chirality effects on phonon spectra, mechanical and thermal properties of narrow single walled carbon nanotubes," *Materials Science*, vol. 83, pp. 16-21, 2014.
- [13] C. Kittel, "Intrduction to Solid State Physics," John Willey & Sons, Inc. New York, 2005.