بسم الله الرحمن الرحيم

دانشگاه شهید چمران اهواز

دانشکده‌ی علوم

گروه فیزیک

پایان نامه‌ی کارشناسی ارشد

عنوان:

بررسی خواص الکترونی وساختار نوارهای انرژی $CdBr_2$ با استفاده از روش ابتدا به ساکن

نگارش:

نسترن اساره

استاد راهنما:

دکتر حمدا... صالحی

استاد مشاور:

دکتر منصور فربد

دی ماه ۱۳۸۹

((چکیده‌ی پایان نامه))

نام خانوادگی : اساره **نام** : نسترن

عنوان پایان نامه : بررسی خواص الکترونی وساختار نوارهای انرژی $CdBr_2$ با استفاده از روش ابتدا به ساکن

استاد راهنما : دکتر حمدا ...صالحی **استاد مشاور :** دکتر منصور فربد

درجه‌ی تحصیلی: کارشناسی ارشد **رشته** : فیزیک **گرایش** : حالت جامد(نظری)

محل تحصیل : دانشگاه شهید چمران اهواز **دانشکده** : علوم

تاریخ فارغ التحصیلی : دی ماه ۱۳۸۹ **تعداد صفحه**: ۱۰۲

واژه‌های کلیدی: $CdBr_2$ ، نظریه‌ی تابعی چگالی، کد محاسباتی Pwscf ، مدول حجمی، ثابت شبکه، ساختار نواری، چگالی حالت‌ها، چگالی ابر الکترونی

چکیده:

در این پایان نامه، خصوصیات ساختاری و الکترونی ترکیب $CdBr_2$ در فاز رومبوهدرال مورد بررسی و محاسبه قرار می‌گیرد. محاسبات با استفاده از روش شبه پتانسیل، در چارچوب نظریه‌ی تابعی چگالی اختلالی و با کد Pwscf انجام شده است. ثابت‌های شبکه که در محاسبات به کار رفته اند برابر با $a=۳/۹۵۴ \overset{0}{A}$ و $c=۱۸/۶۷۲ \overset{0}{A}$ می‌باشند. در این تحقیق خصوصیات ساختاری ترکیب $CdBr_2$ از جمله ثابت‌های شبکه، مدول حجمی، تراکم پذیری و مشتق آن و خواص اپتیکی محاسبه شده است. نتایج به دست آمده از محاسبات تراکم پذیری خطی نشان دهنده این است که تراکم پذیری در راستای a بیشتر از تراکم پذیری در راستای c است که خود دلیلی بر ناهمسانگردی ترکیب مورد نظر است.

همان طور که گفته شد، خصوصیات الکترونی ترکیب $CdBr_2$ از جمله ساختار نوارهای انرژی، چگالی حالت‌ها وچگالی ابر الکترونی مورد مطالعه قرار گرفته‌اند. نتایج حاصل از بررسی این خصوصیات بیانگر این مطلب هستند که ترکیب $CdBr_2$ یک نیم‌رسانا با گاف نواری پهن۳/۲eV می‌باشد. بررسی چگالی ابر الکترونی در این ترکیب نشان می‌دهد که ترکیب $CdBr_2$ دارای پیوند یونی - کووالانسی می‌باشد.

بررسی ویژگی‌های اپتیکی نشان می‌دهد که ضریب شکست ایستایی این ترکیب برابر با ۲/۱ می‌باشد، هم چنین انرژی پلاسمون به دست آمده برابر با ۱۳eV می‌باشد. نتایج این محاسبات با نتایج تجربی موجود سازگاری خوبی دارد.

پیش گفتار

پایان‌نامه‌ی حاضر به بررسی خواص الکترونی و اپتیکی ترکیب برمیدکادمیوم در فاز رومبوهدرال می‌پردازد. این ترکیب تنها دارای یک فاز است، به همین دلیل در این پایان‌نامه به بررسی ویژگی‌های ترکیب در این فاز می‌پردازیم. ترکیب برمیدکادمیوم یک نیم‌رسانا با گاف نواری پهن از خانواده‌ی نیم‌رسانای $II\text{-}VII_2$ می‌باشد. این بلور دارای ساختار لایه‌ای، از نوع $CdCl_2$ با گروه فضایی D_{3d}^5 است که از ورقه‌های دوتایی تنگ‌پکیده شش‌گوشی شامل یون‌های هالوژنی با کاتیون های فلزی کوچک در میان این پوشش تشکیل شده است، کادمیوم هالوژن‌ها در اکثر موارد به عنوان پرتوهای آشکارساز استفاده می‌شوند.

ترتیب مطالب ارائه شده در این پایان نامه به صورت زیر می‌باشند:

فصل اول به بررسی خواص ترکیب برمیدکادمیوم و مطالعات انجام شده بر روی این ترکیب پرداخته شده است. روش رشد بلور این ترکیب، خواص اپتیکی و دینامیکی آن مورد بررسی قرار گرفته و در نهایت چند کاربرد مهم آن بیان می‌شوند.

در فصل دوم سیستم‌های بس ذره‌ای و نظریه‌ی تک الکترونی مورد بررسی و سپس به بررسی تقریب‌های مهم جهت تبدیل معادله‌ی بس ذره‌ای به معادله‌ی تک ذره‌ای، نظریه‌ی تک الکترونی و نظریه‌ی تابعی چگالی پرداخته می‌شود.

در فصل سوم روش‌های مختلف حل معادلات کوهن - شم و روش انجام محاسبات و کد محاسباتی استفاده شده در این پایان نامه مورد مطالعه قرار می‌گیرند.

فصل چهارم به بررسی محاسبات انجام شده در این پایان‌نامه، بر روی ترکیب برمیدکادمیوم در فاز رومبوهدرال می‌پردازد. در این فصل خواص ساختاری و الکترونی ترکیب از جمله بهینه سازی حجم، ثابت شبکه، مدول حجمی، تأثیر فشار بر روی ترکیب، تراکم پذیری، ساختار نوارهای انرژی،

چگالی حالت‌ها، چگالی ابر الکترونی و ویژگی‌های اپتیکی مورد بررسی قرار می‌گیرند. نتایج ناشی از این محاسبات با نتایج به دست آمده با روش‌های تجربی توسط دیگران مقایسه و نتیجه گیری نهایی ارائه می‌گردد. در انتها نتیجه گیری و چشم اندازی به آینده ارائه می‌شود.

فهرست مطالب

عنوان	صفحه
پیش گفتار	
فصل اول: بررسی ویژگی‌های ساختاری و فیزیکی ترکیب $CdBr_2$	
۱-۱مقدمه	۲
۱-۲ساختار بلوری	۸
۱-۳خواص فیزیکی	۱۰
۱-۴روش ساخت بلور	۱۱
۱-۴-۱رشد بلور	۱۱
۱-۵خواص اپتیکی	۱۳
۱-۶خواص دینامیکی	۱۵
۱-۷کاربردها	۱۶
فصل دوم: بررسی سیستم‌های بس‌ذره‌ای و نظریه‌ی تک‌الکترونی	
۲-۱مقدمه	۱۸
۲-۲ سیستم‌های بس ذره‌ای	۱۹
۲-۲-۱ نظریه‌ی تک الکترونی	۲۰
۲-۲-۲ تقریب بورن- اپن هایمر	۲۰
۲-۲-۳ نظریه‌ی تابعی موج	۲۱

عنوان	صفحه
۲-۳-۱ تقریب هارتری	۲۱
۲-۳-۲ تقریب هارتری- فوک- اسلیتر	۲۲
۲-۴ نظریه‌ی تابعی چگالی	۲۳
۲-۴-۱تقریب چگالی موضعی	۲۶
۲-۴-۲تقریب چگالی موضعی اسپینی	۳۰
۲-۴-۳تصحیحات گرادیان	۳۱
۲-۴-۴تقریب شیب تعمیم یافته	۳۲
۲-۵ شمای کلی DFT	۳۵
فصل سوم: روش‌های حل معادلات کوهن-شم و کد محاسباتی	
۳-۱ مقدمه	۳۷
۳-۲ روش حل معادلات کوهن- شم	۳۷
۳-۲-۱ امواج تخت (PW)	۳۸
۳-۲-۲روش امواج تخت متعامد (OPW)	۳۹
۳-۲-۳روش امواج تخت تقویت شده (APW)	۴۱
۳-۲-۴روش شبه پتانسیل	۴۴
الف: شبه پتانسیل تجربی	۴۶
ب- شبه پتانسیل مدل	۴۷
ج- شبه پتانسیل ابتدا به ساکن	۴۷

عنوان | صفحه

۳-۲-۵ تولید شبه پتانسیل‌های بقاء نرم ۴۸

۳-۳روش انجام محاسبات ۴۸

۳-۳-۱برنامه های اصلی (Main programs) ۴۹

۳-۳-۲فایل ورودی برنامه ۵۰

۳-۳-۳ برنامه Pw.x ۵۱

۳-۳-۴ بررسی خواص الکترونی ترکیب ۵۷

۳-۳-۵ مراحل رسم نمودار ساختار نواری ۵۷

۳-۳-۶رسم نمودار ساختار الکترونی ۵۸

۳-۳-۷ مراحل رسم منحنی چگالی حالت‌های الکترونی(DOS) ۵۸

۳-۳-۸ مراحل رسم منحنی چگالی حالت‌های جزئی(PDOS) ۵۸

فصل چهارم: بررسی خواص الکترونی و اپتیکی ترکیب $CdBr_2$

۴-۱مقدمه ۶۱

۴- ۲ توصیف روش ۶۱

۴-۳ بررسی خواص ترکیب کادمیوم برماید ۶۳

۴-۳-۱ بررسی خواص ساختاری ۶۴

۴-۳-۲ بررسی تاثیر فشار بر روی ساختار ۶۷

۴-۳-۳ تراکم پذیری بلور ۶۹

۴-۳-۴ بررسی خواص الکترونی ساختار$CdBr_2$ ۷۱

الف: ساختار نوارهای انرژی ۷۴

عنوان	صفحه
ب: چگالی حالت‌ها	۷۸
ج: چگالی ابر الکترونی	۸۰
۴-۴ خواص اپتیکی	۸۱
الف: ثابت دی الکتریک	۸۳
ب: تابع اتلاف انرژی	۸۶
ج: ضریب بازتاب	۸۸
د: ضریب جذب	۹۰
۴-۵ بحث و نتیجه گیری	۹۲
۴-۶چشم اندازی به آینده	۹۳
انتشارات	۹۴
مراجع	۹۵
واژه نامه	۹۹
چکیده‌ی لاتین	۱۰۲

فهرست شکل‌ها

عنوان صفحه

فصل اول

شکل۱-۱: الف)یاخته بسیط $CdBr_2$ ب)یاخته قراردادی$CdBr_2$ ج)یاخته بسیط و قراردادی ساختار تری گونال ۷

شکل۱-۲: ساختارشبکه‌ای و طریقه روی هم‌چینی اتم‌ها در بلور کادمیوم برماید ۹

شکل۱-۳:منحنی دمای کوره برای رشد بلور کادمیوم برماید ۱۲

شکل۱-۴:دستگاه رشد بلور کادمیوم برماید ۱۳

شکل۱-۵: طیف بلور $CdBr_2$ ۱۴

شکل۱-۶: طیف رامان $CdBr_2$،$CdCl_2$ و CdI_2 ۱۵

فصل دوم

شکل۲-۱: شمای کلی نظریه‌ی تابعی چگالی ۳۵

فصل سوم

شکل۳-۱:تقسیم بندی فضای درون یاخته بسیط به دو ناحیه(I) و (II) ۴۱

شکل۳-۲:منحنی تغییرات دترمینان مشخصه بر حسب انرژی ۴۳

شکل۳-۳:محیط گرافیکی برنامهPwscf ۴۹

شکل۳-۴: ورودی های برنامهPw.x لیست ورودی Control ۵۰

شکل۳-۵: ورودی‌های برنامهPw.x لیست ورودی Control ۵۲

شکل۳-۶: ورودی برنامه Pw.x لیست ورودی Control ۵۴

شکل۳-۷: ورودی برنامه Pw.x لیست ورودی Lattice&Atomic ۵۵

شکل۳-۸: ورودی برنامه Pw.x لیست ورودی Lattice&Atomic ۵۶

فصل چهارم

شکل۴-۱-الف)یاخته بسیط ترکیب $CdBr_2$ ب)یاخته قراردادی ترکیب $CdBr_2$ ۶۳

شکل۴-۲: نمودار انرژی کل بر حسب پارامتر شبکهa ۶۴

شکل۴-۳: نمودار انرژی کل بر حسب حجم ۶۵

شکل۴-۴: نمودار تغییرات حجم ترکیب $CdBr_2$ بر جسب فشار ۶۸

شکل۴-۵:نمودار a/a_0 بر حسب فشار ۶۸

شکل۴-۶: نمودار تغییرات lna بر حسب حجم ۷۰

شکل۴-۷: نمودار تغییرات lnc بر حسب حجم ۷۰

شکل۴-۸: نمای شماتیکی از اجسام رسانا، نیم‌رسانا وعایق ۷۳

شکل۴-۹: ناحیه اول بریلوئن و مسیرهای تقارنی در بلور مکعبی مرکز سطحی (راست) و بلور مکعبی (چپ) ۷۵

شکل۴-۱۰: الف)ساختار نواری$CdBr_2$ بدون در نظر گرفتن برهمکنش اسپینی ب)با در نظر گرفتن برهمکنش اسپینی ۷۶

شکل۴-۱۱:نمودار چگالی حالت‌های کل $CdBr_2$ ۷۸

شکل۴-۱۲: نمودار چگالی حالت های جزئی $CdBr_2$ ۷۹

شکل ۴-۱۳ نمودارچگالی ابر الکترونی در صفحه $(\bar{1}01)$ ۸۰

شکل۴-۱۴: نمودار چگالی ابر الکترونی در صفحه $(0\bar{1}1)$ ۸۱

شکل۴-۱۵: نمایش الف) سهم حقیقی ب) موهومی تابع دی الکتریک ترکیب $CdBr_2$ ۸۴

شکل۴-۱۶: طیف مربوط به اتلاف انرژی الکترونی$CdBr_2$ ۸۷

شکل۴-۱۷: طیف مربوط به ضریب بازتاب ترکیب$CdBr_2$ ۸۹

شکل ۴-۱۸:نمایش الف) طیف مربوط به ضریب شکست ب) ضریب خاموشی ترکیب$CdBr_2$ ۹۰

شکل۴-۱۹:طیف مربوط به ضریب جذب ترکیب$CdBr_2$ ۹۱

فهرست جدول‌ها

عنوان	صفحه
جدول۱-۱: ایزوتوپ‌ها و فراوانی نسبی فلز کادمیوم	۳
جدول۱-۲: مشخصات ترموشیمیایی برم	۶
جدول۱-۳: ثابت‌های شبکه ساختار $CdBr_2$	۸
جدول۱-۴: مشخصات ترموشیمیایی برمیدکادمیوم	۱۰
جدول ۴-۱: تفکیک آرایش الکترونی اتم‌های Cd و Br	۶۳
جدول۴-۲: پارامترهای ساختاری محاسبه شده در کار حاضر و مقایسه آن با نتایج دیگران	۶۶
جدول۴-۳: تراکم پذیری حجمی و خطی در $CdBr_2$	۷۱
جدول ۴-۴:گاف نواری ترکیب $CdBr_2$ و مقایسه با نتایج تجربی	۷۷
جدول۴-۵: ثابت دی الکتریک ایستایی وضریب شکست $CdBr_2$ و مقایسه با نتایج دیگران	۸۵
جدول۴-۶:انرژی پلاسمون $\hbar\omega_P$ کادمیوم برماید از تابع اتلاف انرژی محاسبه شده با این روش والکترون آزاد	۸۸
جدول۴-۷: مقادیر بازتاب پذیری و ضریب خاموشی ترکیب $CdBr_2$ در کار حاضر و مقایسه با نتایج تجربی	۹۱

نام آزمایش:

ویژگی‌های ساختاری و بررسی ترکیب

$CdBr_2$

۱-۱مقدمه

قبل از این که ویژگی‌های ساختاری و فیزیکی ترکیب $CdBr_2$ توضیح داده شود، ابتدا در مورد عناصر تشکیل دهنده ترکیب و کاربردهای آن بحث می‌کنیم.

کادمیوم[۱] یکی از عناصر شیمیایی جدول تناوبی با نشان Cd و دارای عدد اتمی ۴۸ می‌باشد. این فلز عضو گروه IIB (گروه ۱۲) در جدول تناوبی است. کادمیوم از کلمه ی لاتین Cadmia و کلمه یونانی Kadmeia که اسم قدیمی سنگ توتیا می‌باشد گرفته شده است. کادمیوم در سال ۱۸۱۷ در آلمان توسط فردریچ استرومیر[۲] کشف[۱] و او این عنصر را درون یک ناخالصی در کربنات روی[۳] پیدا کرد. سنگ‌های معدن حاوی کادمیوم کمیاب و در صورت یافت شدن به مقادیر خیلی کم وجود دارند. CdS[۴]، تنها کانی مهم کادمیوم، تقریباً همیشه به ZnS[۵] متصل است. در نتیجه کادمیوم عمدتاً به عنوان یک محصول جانبی از استخراج، خالص‌سازی و تصفیه سولفید اوره حاصل از سنگ معدن روی، و به میزان کمتر سرب و روی تولید می‌شود. فلز دوظرفیتی کادمیوم، نرم، چکش‌خوار، انعطاف پذیر و به رنگ سفید مایل به آبی است که با چاقو به راحتی بریده می‌شود و به مقدار زیاد در پوسته زمین (حدود $0/15\ mg/kg$) و در آب دریا به مقدار $0/11\ mg/L$ یافت می‌شود. تقریباً سه چهارم کادمیوم در باتری‌ها (بخصوص باتری‌های Ni و Cd) استفاده می‌گردد و بیشتر یک سوم باقی مانده آن عمدتاً جهت رنگ‌ها، پوشش‌ها، آب‌کاری و به عنوان مواد ثبات بخش در پلاستیک‌ها به کار می‌رود.

---

[1] - Cadmium

[2] -Friedrich stromeyer

[3] - zinc carbointe

[4] - Greenockite

[5] - Sphalerite

انواع بسیاری از لحیم‌ها حاوی این فلز هستند[۳-۱]. کادمیوم دارای ساختمان شش‌گوش است، چگالی آن حدود $8/69\ g/cm^3$، در دمای $321\ ^0C$ فلز و در $767\ ^0C$ بخار می‌شود، هم چنین در آب حل می‌شود.

آرایش فضایی آن $[kr]4d^{10}5s^2$ می‌باشد. معمولی‌ترین حالت اکسیداسیون آن ۲+ می‌باشد. کادمیوم به طور طبیعی شامل ۸ ایزوتوپ پایدار است. همان طور که در جدول (۱-۱) آورده شده است.

جدول۱-۱: ایزوتوپ‌ها و فراوانی نسبی فلز کادمیوم[۱]

کادمیوم	ایزوتوپ‌ها	درصد فراوانی نسبی
Cd	۱۰۶	۱/۲۵
Cd	۱۰۸	۰/۸۹
Cd	۱۱۰	۱۲/۴۹
Cd	۱۱۱	۱۲/۸۰
Cd	۱۱۲	۲۴/۱۳
Cd	۱۱۳	۱۲/۲۲
Cd	۱۱۴	۲۸/۷۳
Cd	۱۱۶	۷/۴۹

فلز کادمیوم به تدریج در هوای مرطوب در دمای معمولی اکسید می‌شود و یک لایه‌ی محافظ از CdO را تشکیل می‌دهد اما در دمای معمولی و در هوای خشک اکسید نمی‌شود. به هر حال، به محض گرمایش به سهولت به شکل CdO درمی‌آید.

کادمیوم با اسید هیدروکلریک رقیق یا اسید سولفوریک واکنش می‌دهد و هیدروژن آزاد می‌کند که با رابطه‌ی زیر نشان داده می‌شود.

$$Cd + 2HCl \rightarrow CdCl_2 + H_2 \qquad (۱-۱)$$

واکنش‌هایی نیز با اسید نیتریک گرم انجام می‌دهد و اکسیدهای گوناگونی از نیتروژن می‌دهد و هیدروژن آزاد می‌کند.

$$\begin{aligned} &2Cd + 2HNO_3 \rightarrow 2CdO + 2NO_2 + H_2 \\ &4Cd + 2HNO_3 \rightarrow 4CdO + 2NO + H_2 \\ &Cd + 2HNO_3 \rightarrow CdO + N_2O_5 + H_2 \end{aligned} \qquad (۲-۱)$$

کادمیوم جایگزین عناصری می‌شود که در سری‌های فعال در محلول‌های نمک‌شان کمتر الکترون خواه هستند. پتانسیل الکترود استاندارد آن برابر است با:

$$Cd^{2+} + 2e^- \rightarrow Cd \qquad E^\circ = -0.402V \qquad (۳-۱)$$

بنابراین کادمیوم می‌تواند جانشین تعدادی از فلزات مثل سرب، مس، نقره، جیوه، قلع که فعالیت کمتری دارند شود[۱].

$$Cu^{2+}(aq) + Cd(s) \rightarrow Cd^{2}(aq) + Cu(s) \qquad (۴-۱)$$

کادمیوم از معدود عناصری است که هیچ‌گونه نقش ساختاری در بدن انسان ندارد. این عنصر و محلول ترکیبات آن حتی به میزان بسیار کم، سمی و در اندام‌ها ومحیط زیست، ذخیره می‌شوند. استنشاق گرده‌های کادمیوم به سرعت در دستگاه تنفسی و کلیه‌ها ایجاد مشکلاتی می‌کند که می‌تواند کشنده باشند. خوردن هر مقدار قابل ملاحظه‌ای از کادمیوم موجب مسمومیت سریع کبد و کلیه‌ها می‌گردد. علائم آن مسمومیت شدید، استفراغ، اسهال، سردرد، درد عضلانی، ترشح بزاق و شوک هستند. کادمیوم یک ماده قوی مولد سرطان است و کسانی که در حین کار با آن سروکار دارند، بیشتر در معرض سرطان‌های ریه، غده پروستات، لوزالمعده و کلیه می‌باشند. کادمیوم توسط مؤسسه حفاظت محیط زیست به عنوان یک ماده مولد سرطان و یکی از فلزات آلوده کننده ثبت شده است[۳،۲].

دیگر عنصر شیمیایی این ترکیب برم می‌باشد. برم یک عنصر شیمیایی با نماد Br و عدد اتمی ۳۵ از گروه هالوژن است. این عنصر به طور مستقل توسط دو شیمی‌دان آنتیون بالارد [۱][۴] و کارل جاکوب لواینگ [۲] [۵] در سال ۱۸۲۶ و ۱۸۲۵کشف شده است.

بالارد، برم را در بقایای جلبک دریایی از باتلاق مانت پلتیر[۳]در سال ۱۸۲۶ پیدا کرد. جلبک دریایی برای تولید ید استفاده می‌شود اما هم‌چنین برای تولید برم نیز استفاده می‌شود[۴]. کارل جاکوب لواینگ، برم را از یک چشمه آب معدنی در زادگاهش باد کروزناچ[۴] در سال ۱۸۲۵ جدا کرد [۵]. آرایش فضایی آن به صورت $[Ar]\ 3d^{10}4s^24p^5$ می‌باشد، پایدارترین حالت ظرفیت ۵+ و۱- می‌باشد و کم‌ترین حالت های پایا ۳+ و ۱+ می‌باشد، این عنصر یک مولکول دو اتمی (Br_2) است که در گسترده وسیعی از دمـــا به حالت‌های مایع و بخارمی‌باشد. دارای دو ایزوتـــوپ پایـــدار Br-۸۱(٪۴۹/۴۳) , Br- ۷۹(٪۵۰/۵۷) است.

برم مایعی قهوه‌ای تیره مایل به قرمز و تنها عنصر غیرفلزی است که در دمای محیط مایع می‌باشد. چگالی آن در دمای $۲۰\ ^0C$,$۳/۱۲\ g/mL$ می‌باشد. بوی آن به شدت نامطبوع و در حلال های معمولی قابل حل است[۱]. در فشار ۷۵ Gpa برم تبدیل به ساختار ارتورومبیک مرکز سطحی و در ۱۰۰Gpa به شکل ارتورمبیک یک‌اتمی مرکزحجمی تبدیل می‌شود[۶]. خواص ترموشیمیایی برم درجدول (۱-۲) آمده است.

[1] –Antion Balard

[2] –Carl Jacob lowing

[3] –Montpeltier

[4] –Bad kreuznach

جدول۱-۲:مشخصات ترموشیمیایی برم[۱]

آنتالپی	ΔHf°	۲۶/۷۴ $kcal/mol$
انرژی آزاد گیپس	ΔGf°	۱۹/۶۹ $K\,cal/mol$
آنتروپی	S°	۴۱/۸۲ $cal/\deg reemol$
ظرفیت گرمایی	C_ρ	۴/۹۷ $cal/\deg reemol$

برم از آب شور به دست آمده است. نمک‌های برمایدی که از این منابع استخراج شده‌اند با کلر اکسید می‌شوند تا برم را حاصل کنند:

$$2\,NaBr + Cl_2 \rightarrow 2\,NaCl + Br_2 \qquad (۵-۱)$$

برم در محلول آبی، کمی تجزیه می‌شود و شکل ناپایدار اسید هیپوبرموس[۱]، HoBr، را می‌دهد که به اسید هیدروبرمیک[۲] و اکسیژن تجزیه می‌شود. تجزیه توسط نور سریع‌تر انجام می شود[۱].

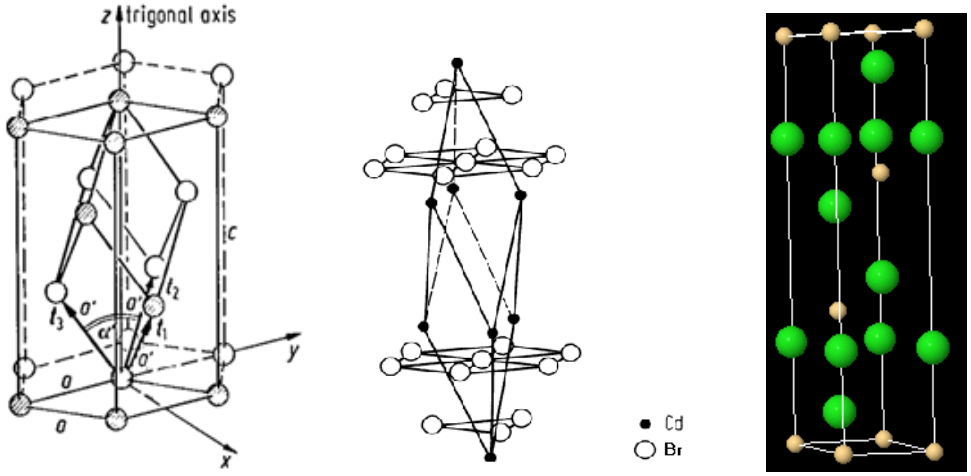
$$\begin{aligned} &Br_2 + H_2O \rightarrow HOBr + HBr \\ &HOBr \rightarrow HBr + O \end{aligned} \qquad (۶-۱)$$

اکثر واکنش‌های برم به شدت گرماده هستند. برم برای چشم و مجاری تنفسی سوزش‌آور است. استنشاق آن می‌تواند موجب سرگیجه، سردرد، سرفه و باعث اشک‌آوری شود. یک پرتودهی کوتاه از آن برای مدت ۱۵ دقیقه برای انسان‌ها کشنده می‌باشد. خوردن آن باعث تهوع، درد شکمی، اسهال و مایع آن باعث فساد تدریجی پوست می‌شود[۱].

[1] - hypobromous

[2] -hydrobromic

دراین پایان نامه باتوجه به اهمیت وکاربردهای نیم‌رساناها، بلور نیم‌رسانای برمیدکادمیوم مورد بررسی قرار گرفته است. برمیدکادمیوم از ترکیبات گروه $II\text{-}VII_2$ جدول تناوبی است که نیم‌رسانا می‌باشد. فرمول شیمیایی آن ($CdBr_2$) می‌باشد، هم‌چنین به شکل تتراهیدرات ($CdBr_2.4H_2O$) نیز دیده می‌شود[۷]. ساختار بلوری آن در سال ۱۹۶۲ توسط میتچل[1] کشف شد. این عنصر از خانواده دی‌هالیدهای کادمیوم $CdI_2,CdCl_2,CdBr_2,...$ بوده و فرمول شیمیایی آنها به صورت AB_2 می‌باشد[۸،۹]. ساختار بلوری برمیدکادمیوم تری گونال (رومبوهدرال) می‌باشد که پایه آن شامل دو اتم است. یاخته قراردادی این ترکیب هگزاگونال می‌باشد. در شکل (۱-۱) هر دو یاخته نشان داده شده است.



(ج) (ب) (الف)

شکل۱-۱: الف) یاخته قراردادی $CdBr_2$ ب) یاخته بسیط$CdBr_2$[۷] ج) یاخته بسیط و قرلردادی ساختار تری گونال[۱۰]

بنابراین برای این ساختار می‌توانیم دو گروه ثابت‌های شبکه تعریف کنیم. در جدول (۱-۳) این ثابت‌ها آورده شده است[۷].

[1] -Mitchell