بسم الله الرّحمن الرّحيم

دانشکده‌ی علوم پایه

پایان نامه جهت دریافت درجه‌ی کارشناسی ارشد **(M.Sc)**

فیزیک گرایش حالت جامد

بررسی خواص الکترونیکی و اپتیکی در اثر تغییر درصد اتم‌های Na و K در ترکیب پیزوالکتریکی $(K_2)_x(Na_2)_{1-x}TiO_3$

استاد راهنما:

دکتر جواد باعدی

استاد مشاور:

دکتر حسین اصغررهنمای علی‌آباد

پژوهشگر:

سمیرا کیمیایی

(بهمن ۱۳۹۲)

سوگند نامه دانش آموختگان دانشگاه تربیت معلم سبزوار

به نام خداوند جان و خرد کزین برتر اندیشه بر نگذرد

اینک که به خواست آفریدگار پاک ، کوشش خویش و بهره گیری از دانش استادان و سرمایه های مادی و معنوی این مرز و بوم، توشه ای از دانش و خرد گردآورده ام، در پیشگاه خداوند بزرگ سوگند یاد می کنم که در به کارگیری دانش خویش، همواره بر راه راست ودرست گام بردارم. خداوند بزرگ، شما شاهدان، دانشجویان و دیگر حاضران را به عنوان داورانی امین گواه می گیرم که ازهمه دانش و توان خود برای گسترش مرزهای دانش بهره گیرم و از هیچ کوششی برای تبدیل جهان به جایی بهتر برای زیستن، دریغ نورزم. پیمان می بندم که همواره کرامت انسانی را در نظر داشته باشم و همنوعان خود را در هر زمان و مکان تا سر حد امکان یاری دهم. سوگند می خورم که در به کارگیری دانش خویش به کاری که با راه و رسم انسانی، آیین پرهیزگاری، شرافت و اصول اخلاقی برخاسته از ادیان بزرگ الهی، به ویژه دین مبین اسلام، مباینت دارد دست نیازم. همچنین در سایه اصول جهان شمول انسانی و اسلامی، پیمان می بندم از هیچ کوششی برای آبادانی و سرافرازی میهن و هم میهنانم فروگذاری نکنم و خداوند بزرگ را به یاری طلبم تا همواره در پیشگاه او و در برابر وجدان بیدار خویش و ملت سرافراز ، بر این پیمان تا ابد استوار بمانم.

نام و نام خانوادگی و امضای دانشجو

سمیرا کیمیایی

تاییدیه ی صحت و اصالت نتایج

بسمه تعالی

اینجانب سمیرا کیمیایی به شماره دانشجویی ۹۰۱۳۷۳۲۰۲۱ رشته فیزیک (حالت جامد) مقطع تحصیلی کارشناسی ارشد تأ ید می نمایم که کلیه نتایج این پایان نامه حاصل کار اینجانب و بدون هرگونه دخل و تصرف و موارد نسخه برداری شده از آثار دیگران را با ذکر کامل مشخصات منبع ذکر کرده ام در صورت اثبات خلاف مندرجات فوق به تشخیص دانشگاه مطابق با ضوابط و مقررات حاکم (قانون حمایت از حقوق مولفان و مصنفان . قانون ترجمه و تکثیر کتب و نشریات و آثار صوتی ضوابط و مقررات آموزشی پژوهشی و انضباطی ...) با اینجانب رفتار خواهد شد . و حق هر گونه اعتراض در خصوص احقاق حقوق مکتسب و تشخیص و تعیین تخلف و مجازات را از خویش سلب می نمایم . در ضمن مسئولیت هر گونه پاسخگویی به اشخاص اعم از حقیقی و حقوقی و مراجع ذی صلاح (اعم از اداری و قضایی) به عهده اینجانب خواهد بود و دانشگاه هیچ گونه مسئولیتی در این خصوص نخواهد داشت .

نام و نام خانوادگی :

تاریخ و امضاء:

مجوز بهره برداری از پایان نامه

بهره برداری از این پایان نامه در چهار چوب مقررات کتابخانه و با توجه به محدودیتی که توسط استاد راهنما به شرح زیر تعیین می شود بلامانع است :

- بهره برداری از این پایان نامه برای همگان بلامانع است
- بهره برداری از این پایان نامه با اخذ مجوز از استاد راهنما بلامانع است
- بهره برداری از این پایان نامه تا تاریخ ..... ممنوع است .

استاد راهنما : استاد راهنمای اول

تاریخ :

امضاء:

تقدیم به:

ای پدر از تو هر چه می‌گویم باز هم کم می‌آورم

خورشیدی شدی و از روشنایی‌ات جان گرفتم و در نا امیدی‌ها نازم را کشیدی و لبریزم کردی از شوق

اکنون حاصل دستان خسته‌ات رمز موفقیتم شد

به خودم تبریک می‌گویم که تو را دارم و دنیا با همه بزرگیش مثل تورا ندارد.

وتوای مادر، ای شوق زیبایی نفس کشیدن

ای روح مهربان هستی‌ام

تورنگ شادی‌هایم شدی وغم‌هارا با تمام وجود از من دور کردی و عمری خستگی‌ها را به جان خریدی تا اکنون توانستی طعم خوش پیروزی را به من بچشانی.

تقدیر و تشکر:

اینک که حاصل همه تلاشها مثمرثمرواقع شد برخود فرض می‌دانم که در کمال ادب و احترام مراتب سپاس و قدردانی خالصانه وصمیمانه را از همه کسانیکه من را در این وادی یاری نموده‌اند ابراز داشته به ویژه از :

جناب آقای دکتر جواد باعدی استاد راهنمایم که بی شک بدون راهنمایی های ایشان تامین این پایان نامه مشکل بود.

از جناب آقای دکتر حسین اصغر رهنما استاد مشاورم و جناب آقای دکتر بهنام آزادگان استاد داورم و همچنین تمامی اساتیدی که مرا در راه علم وتحصیل یاری نمودند صمیمانه سپاسگزارم.

فرم چکیده‌ی پایان‌نامه‌ی دوره‌ی تحصیلات تکمیلی

مدیریت تحصیلات تکمیلی

دانشگاه حکیم سبزواری

نام خانوادگی دانشجو: کیمیایی	**نام:** سمیرا	**ش دانشجویی:** ۹۰۱۳۷۳۲۰۲۱
استاد راهنما: دکتر جواد باعدی	**استاد مشاور:** دکتر حسین اصغررهنمای علی‌آباد	
دانشکده: علوم پایه	**رشته:** فیزیک	**گرایش:** حالت جامد
مقطع: کارشناسی ارشد	**تاریخ دفاع:** ۹۲/۱۱/۱۴	**تعداد صفحات:** ۱۰۶
عنوان پایان‌نامه: بررسی خواص الکترونیکی و اپتیکی در اثرتغییردرصداتم های Na و K در ترکیب پیزوالکتریکی $(K_2)_x(Na_2)_{1-x}TiO_3$		
کلیدواژه‌ها: خواص الکترونیکی و اپتیکی، نظریه تابعی چگالی، تقریب شیب تعمیم یافته، گاف نواری، ضریب شکست.		

چکیده

در این پایان نامه خواص الکترونیکی و اپتیکی ترکیبK_2TiO_3 در حالت خالص و اثر جانشانی اتم Na به جای اتم K و همچنین خواص الکترونیکی و اپتیکی ترکیب $(K_2)_x(Na_2)_{1-x}TiO_3$ مطالعه شده است. محاسبات به روش امواج تخت تقویت شده خطی (FL-LAPW) در چارچوب نظریه تابعی چگالی (DFT) با تقریب شیب تعمیم یافته (GGA) انجام شده است. خواص الکترونیکی شامل: ساختار نواری، چگالی حالت‌های کلی و چگالی ابر الکترونی وهمچنین خواص اپتیکی از جمله: تابع دی الکتریک ، تابع اتلاف انرژی الکترون، بازتابندگی، ضریب جذب، هدایت اپتیکی، ضریب شکست و ضریب خاموشی محاسبه و بررسی شده است. نتایج بدست آمده نشان می‌دهند که ترکیب K_2TiO_3 گاف نواری غیر مستقیمی به اندازه ۳/۵۸ eV دارد و با جانشانی اتم Na این مقدار کاهش می‌یابد. درقسمت اپتیکی ، اثرجانشانی اتم Na به جای K باعث افزایش ضریب شکست و بهبود خواص اپتیکی می‌گردد.

امضای استاد راهنما

فهرست مطالب

عنوان صفحه

فصل اول: معرفی وکاربردالکتروسرامیک های فروالکتریک و پیزوالکتریک.....۱

۱-۱ مقدمه ۲

۱-۲ الکتروسرامیک ها ۲

۱-۲-۱ پیشینه کشف وگسترش الکتروسرامیک ها ۲

۱-۳ طبقه بندی انواع الکتروسرامیک ها..... ۴

۱-۳-۱ فروالکتریک ها ۴

۱-۳-۱-۱ کاربردهای مواد فروالکتریک ۵

۱-۳-۲ پیزوالکتریک ۶

۱-۳-۲-۱ اثر پیزوالکتریک مستقیم ومعکوس ۶

۱-۳-۲-۲ ارتباط اثر پیزوالکتریک با ساختار مولکولی مواد ۷

۱-۳-۲-۳ وابستگی مواد پیزوالکتریک به دما ۷

۱-۳-۲-۴ فرآیندتولید سرامیک های پیزوالکتریک ۸

۱-۳-۲-۵ روابط ساختاری وخواص مواد ۹

۱-۳-۲-۶ کاربرد های پیزوالکتریک.....۱۰

۱-۳-۲-۷ کاربردهای سرامیک در مهندسی برق.....۱۱

۱-۳-۲-۸ شتاب سنج های پیزوالکتریک..... ۱۲

۱-۳-۲-۹ موتور پیزوالکتریک.....۱۵

۱-۳-۲-۱۰شرایط بازار اقتصادی قطعات وتجهیزات پیزوالکتریک ۱۷

۱-۳-۲-۱۱ پیزوالکتریک های بدون سرب.....۱۸

۱-۴ ساختار بلوری پروسکایت..... ۱۸

۱-۵ فرآیند رشد بلورK_2TiO_3 .....۱۹

۱-۶کاربرد های پتاسیم تیتانات.....۲۰

فصل دوم: روش محاسبات الکترواپتیکی بلور ۲۱

۲-۱ مقدمه.....۲۲

بخش اول: محاسبه خواص الکتریکی بلور ۲۳

۲-۲ سیستم های بس ذره‌ای ۲۳

۲-۳ تقریب بورن- اپنهایمر.....۲۴

۲-۴ نظریه تابعی چگالی(DFT) ۲۵

۲-۵ قضایای هوهنبرگ-کان.....۲۶

۲-۵-۱ قضیه اول هوهنبرگ- کان..... ۲۷

۲-۵-۲ قضیه دوم هوهنبرگ-کان.....۲۸

۲-۶معادلات کان-شم ۲۸

۲-۷ پتانسیل تبادلی-همبستگی.....۳۳

۲-۸ تقریب چگالی موضعی (LDA).....۳۳

۲-۹ تقریب شیب تعمیم یافته(GGA) ۳۴

بخش دوم: روش های محاسبه خواص اپتیکی ۳۷

۲-۱۰ مقدمه.....۳۷

۲-۱۱ تابع دی الکتریک.....۳۷

۲-۱۲ روابط کرامرز-کرونیک وثابت های اپتیکی.....۳۸

۲-۱۳تابع اتلاف انرژی..... ۳۹

۲-۱۴بازتابش اپتیکی..... ۴۱

فصل سوم: نتایج: خواص الکترونی ترکیبات K_2TiO_3، Na_2TiO_3, $KNaTiO_3$ ۴۲

۳-۱ مقدمه ۴۳

۳-۲ بخش اول: بررسی خواص الکترونیکی ترکیب K_2TiO_3 ..... ۴۳

۳-۲-۱ روش انجام محاسبات ۴۳

۳-۲-۲ بهینه سازی ثابت‌های شبکه ۴۴

۳-۲-۳ ساختار نواری..... ۴۷

۳-۲-۴ چگالی حالت‌ها..... ۵۰

۳-۲-۵ چگالی ابرالکترونی..... ۵۲

۳-۳ بخش دوم: بررسی خواص الکترونیکی ترکیب Na_2TiO_3 ..... ۵۴

۳-۳-۱ مقدمه ۵۴

۳-۳-۲ تعریف ومعرفی سدیم..... ۵۵

۳-۳-۳ بهینه‌سازی ثابت های شبکه ۵۵

۳-۳-۴ ساختارنواری ۵۷

۳-۳-۵ چگالی حالت‌ها..... ۵۸

۳-۳-۶ چگالی ابر الکترونی..... ۶۰

۳-۴ بخش سوم: بررسی خواص الکترونیکی ترکیب $KNaTiO_3$ ۶۲

۳-۴-۱ مقدمه..... ۶۲

۳-۴-۲ بهینه سازی ثابت های شبکه..... ۶۳

۳-۴-۳ ساختارنواری..... ۶۵

۳-۴-۴ چگالی حالت ها..... ۶۶

۳-۴-۵ چگالی ابرالکترونی..... ۶۹

فصل چهارم: نتایج: خواص اپتیکی ترکیبات$KNaTiO_3$, Na_2TiO_3, K_2TiO_3 ..... ۷۱

۴-۱ مقدمه ۷۲

۴-۲ بخش اول: بررسی خواص اپتیکی ترکیب K_2TiO_3 ..... ۷۳

۴-۲-۱ تابع دی الکتریک ۷۳

۴-۲-۲ تابع اتلاف انرژی ۷۶

۴-۲-۳ بازتابندگی ۷۷
۴-۲-۴ ضریب جذب ۷۹
۴-۲-۵ هدایت اپتیکی ۸۰
۴-۲-۶ ضریب شکست ۸۱
۴-۲-۷ ضریب خاموشی ۸۳
۴-۳ بخش دوم : بررسی خواص اپتیکی ترکیبNa_2TiO_3 ..... ۸۴
۴-۳-۱تابع دی الکتریک ۸۴
۴-۳-۲تابع اتلاف انرژی..... ۸۶
۴-۳-۳ بازتابندگی..... ۸۷
۴-۳-۴ ضریب جذب ۸۹
۴-۳-۵ هدایت اپتیکی ۸۹
۴-۳-۶ ضریب شکست ۹۰
۴-۳-۷ ضریب خاموشی ۹۲
۴-۴ بخش سوم: بررسی خواص اپتیکی ابرشبکه $KNaTiO_3$ ۹۳

۴-۴-۱ تابع دی الکتریک ۹۳

۴-۴-۲ تابع اتلاف انرژی ۹۵

۴-۴-۳ بازتابندگی ۹۶

۴-۴-۴ ضریب جذب ۹۷

۴-۴-۵ هدایت اپتیکی ۹۸

۴-۴-۶ ضریب شکست ۹۹

۴-۴-۷ ضریب خاموشی ۱۰۱

نتیجه گیری ۱۰۲

مراجع ۱۰۳

فهرست جداول

جدول (۳-۱) ۴۴

جدول (۳-۲) ۴۴

جدول (۳-۳) ۴۶

جدول (۳-۴) ۵۰

جدول (۳-۵) ۵۴

جدول (۳-۶) ۵۶

جدول (۳-۷) ۶۲

جدول (۳-۸) ۶۳

جدول (۳-۹) ۶۳

جدول (۳-۱۰) ۶۴

جدول (۴-۱) ۷۴

جدول (۴-۲) ۷۵

جدول (۴-۳).....۷۵

جدول (۴-۴).....۷۸

جدول (۴-۵).....۸۲

جدول (۴-۶).....۸۵

جدول (۴-۷) ۸۵

جدول (۴-۸).....۸۵

جدول (۴-۹).....۸۸

جدول (۴-۱۰).....۹۱

جدول (۴-۱۱) ۹۴

جدول (۴-۱۲).....۹۴

جدول (۴-۱۳) ۹۴

جدول (۴-۱۴).....۹۶

جدول (۴-۱۵).....۱۰۰

فهرست اشکال

شکل (۱-۱) : جهت گیری دوقطبی های یک سرامیک فروالکتریک در حالت الف: غیر قطبیده، ب: در حال قطبیدگی و ج: بعد از قطبیدگی.....۵

شکل (۱-۲): پلاریزاسیون یک پیزوالکتریک..... ۱۰

شکل (۱-۳): شتاب سنج میکروالکترومکانیک ۱۲

شکل(۱-۴): پیزوالکتریک (الف): برشی (ب): فشاری ۱۳

شکل (۱-۵): شتاب سنج پیزوالکتریک.....۱۵

شکل (۱-۶): نمونه ای ازتبدیل حرکت خطی به دورانی ۱۶

شکل (۱-۷): موتور پیزوالکتریک در مقیاس کوچک ۱۷

شکل (۱-۸): نمایش فضایی ساختار پروسکایت.....۱۹

شکل (۱-۹): تصویر اپتیکی یک تک بلورK_2TiO_3 .....۲۰

شکل (۳-۱): نمودار تغییرات انرژی برحسب تغییرات درصدC/a برای ترکیب K_2TiO_3 .....۴۶

شکل(۳-۲): ساختار وجایگاه های اتم ها در بلور K_2TiO_3.....۴۷

شکل (۳-۳): ساختار نوارهای انرژی ترکیب K_2TiO_3 .....۴۹

شکل (۳-۴): مسیر های با تقارن بالا برای ترکیب K_2TiO_3 ..... ۴۹

شکل (۳-۵): چگالی حالت‌های کلی K_2TiO_3ومعرفی سهم اتم ها در آن ۵۱

شکل(۳-۶): مقایسه ی بین گاف چگالی حالت های کلی وساختار نواریK_2TiO_3 ..... ۵۲

شکل (۳-۷): مقایسه ی چگالی حالت‌های کل ترکیب K_2TiO_3 و چگالی حالت های کل هر نوع اتم در ترکیب ۵۲

شکل (۳-۸): موقعیت اتم ها در ساختار حجمی برای ترکیب K_2TiO_3 ..... ۵۳

شکل (۳-۹): چگالی ابرالکترونی در فضای حقیقی در دوبعد برای ترکیب K_2TiO_3 ..... ۵۳

شکل (۳-۱۰): چگالی ابر الکترونی در سه بعد برای ترکیب K_2TiO_3..... ۵۴

شکل (۳-۱۱): نمودار تغییرات انرژی برحسب تغییرنسبت c/a %در بهینه سازی حجم برای ترکیب Na_2TiO_3 ..... ۵۶

شکل(۳-۱۲): ساختار وجایگاه های اتم ها در بلور Na_2TiO_3..... ۵۷

شکل (۳-۱۳): ساختار نوارهای انرژی ترکیب Na_2TiO_3 ..... ۵۸

شکل (۳-۱۴): مسیر های با تقارن بالا در منطقه اول بریلوئن ۵۸

شکل (۳-۱۵): چگالی حالت‌های کلی Na_2TiO_3ومعرفی سهم اتم ها در آن ۵۹

شکل(۳-۱۶): مقایسه ی بین چگالی حالت های کلی وساختار نواریNa_2TiO_3 ..... ۵۹

شکل (۳-۱۷): مقایسه‌ی چگالی حالت‌های کل ترکیب Na_2TiO_3 و چگالی حالت های کل هرنوع اتم در ترکیب ۶۰

شکل (۳-۱۸): موقعیت اتم ها در ساختار حجمی برای ترکیب Na_2TiO_3 .....۶۱

شکل (۳-۱۹): چگالی ابرالکترونی در فضای حقیقی در دوبعد برای ترکیب Na_2TiO_3 .....۶۱

شکل (۳-۲۰): چگالی ابر الکترونی در سه بعد برای ترکیب Na_2TiO_3.....۶۱

شکل (۳-۲۱): تغییرات انرژی برحسب تغییرنسبت در بهینه سازی حجم برای ترکیب $KNaTiO_3$.....۶۴

شکل(۳-۲۲): ساختاربلور وجایگاه اتم ها در بلور $KNaTiO_3$.....۶۵

شکل (۳-۲۳): ساختار نوارهای انرژی ترکیب $KNaTiO_3$ ۶۶

شکل (۳-۲۴): مسیر های با تقارن بالا ۶۶

شکل (۳-۲۵): چگالی حالت‌های کلی ترکیب $KNaTiO_3$ ومعرفی سهم اتم ها در آن ۶۷

شکل(۳-۲۶): مقایسه ی بین چگالی حالت های کلی وساختار نواری$KNaTiO_3$ ۶۸

شکل (۳-۲۷): مقایسه ی بین چگالی حالت‌های کل ترکیب $KNaTiO_3$ وچگالی حالت های کل هرنوع اتم در ترکیب ۶۸

شکل (۳-۲۸): موقعیت اتم ها در ساختار حجمی برای ترکیب $KNaTiO_3$ ۶۹

شکل (۳-۲۹): چگالی ابرالکترونی در فضای حقیقی در دوبعد برای ترکیب $KNaTiO_3$ ۷۰