به نام خداوند مهربان

دانشگاه تربیت معلم سبزوار

دانشکده علوم پایه

گروه فیزیک

پایان نامه جهت دریافت درجه کارشناسی ارشد فیزیک گرایش حالت جامد

عنوان:

مطالعه ساختار $In(BrO_3)_3$ و بررسی اثرات جانشینی Ga ,Al در ترکیب $In_x(Al,Ga)_{1-x}(BrO_3)_3$ در خواص اپتوالکترونیک

استاد راهنما:

دکتر جواد باعدی

استاد مشاور:

دکتر حسین اصغر رهنمای علی‌آباد نگارش:

سیده زینب ساداتی

بهمن ۱۳۹۰

دانشگاه علوم سبزواری
معاونت آموزشی و تحصیلات تکمیلی
مدیریت تحصیلات تکمیلی

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 سرمایه‌های مادی و معنوی این مرز و بوم، توشه‌ای از دانش و خرد گردآورده‌ام، در پیشگاه خداوند بزرگ سوگند یاد می‌کنم که در به کارگیری دانش خویش، همواره بر راه راست و درست گام بردارم. خداوند بزرگ، شما شاهدان، دانشجویان و دیگر حاضران را به عنوان داورانی امین گواه می‌گیرم که از همه‌ی 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 می‌بندم 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 می‌خورم 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 می‌بندم 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. ان شاءالله

نام و نام خانوادگی و امضای دانشجو: سیده زینب سادات

تقدیر و تشکر:

حمد و سپاس فراوان به درگاه ایزد منان که دگر بار لطف خود را شامل حال حقیر نموده تا این مقطع از تحصیل را پشت سر گذارم.

توفیق انجام این کار تحقیقاتی با زحمت‌ها و کمک‌های بی‌دریغ استاد گرامی و بزرگوارم جناب آقای دکتر جواد باعدی که همواره مرا راهنمایی نمودند، میسر گردید. لذا از محضر ایشان صمیمانه تشکر می‌نمایم.

از جناب آقای حسین اصغر رهنمای علی آباد که استاد مشاور اینجانب بوده‌اند کمال تشکر و قدر دانی را بجا می‌آورم.

با سپاس فراوان از دوستان مهربانم که همواره در کنارم بوده و مرا یاری نمودند.

و با سپاس بی‌پایان از خانواده عزیزم که همواره حمایت‌های همه‌جانبه‌شان را احساس نمودم.

تقدیم به

همسایه پر از دعای من، ضامن پر از اجابتم، امام رضا(ع).

تقدیم به

پدر و مادر مهربانم که همچون بال های مستحکم، رویای پروازم را جامه ی عمل پوشاندند.

و

همه آن هایی که دوستشان دارم،

به پاس همه ی محبت هایی که جبرانش برایم ممکن نیست...

فرم چکیده‌ی پایان‌نامه‌ی دوره‌ی تحصیلات تکمیلی

دفتر مدیریت تحصیلات تکمیلی

نام خانوادگی دانشجو: ساداتی	**نام: سیده زینب**	**ش دانشجویی:** ۸۸۲۳۷۳۲۱۴۰
استاد راهنما: دکتر جواد باعدی	**استاد مشاور:** دکتر حسین اصغر رهنمای علی‌آباد	
دانشکده: علوم پایه	**رشته:** فیزیک	**گرایش:** حالت جامد
مقطع: کارشناسی ارشد	**تاریخ دفاع:** ۱۳۹۰/۱۱/۲۵	**تعداد صفحات:** ۹۱
عنوان پایان‌نامه: مطالعه ساختار $In(BrO_3)_3$ و بررسی اثرات جانشینی Al, Ga در ترکیب $In_x(Al,Ga)_{1-x}(BrO_3)_3$ در خواص اپتوالکترونیک		
کلیدواژه‌ها: تقریب GGA، روش FP-LAPW، خواص الکترواپتیکی، تبدیلات کرامرز کرونیک		

چکیده

هدف از اجرای این پروژه، بررسی نظری خواص الکترونی و اپتیکی $In(BrO_3)_3$، در فاز هگزاگونال، در حالت خالص و آلائیده با ناخالصی گالیوم (Ga) و آلومینیم (Al)، می‌باشد. در انجام محاسبات از روش پتانسیل کامل موج تخت افزوده شده‌ی خطی (FP-LAPW) و تقریب تعمیم یافته (GGA) استفاده گردیده است. نتایج به دست آمده از ساختار نواری نشان می‌دهد که $In(BrO_3)_3$، یک نیمه‌رسانا با گاف نواری غیر مستقیم در راستای L-M به Γ، به اندازه ۲/۴eV است. سهم عمده در چگالی حالت‌ها در پایین نوار رسانش و بالای نوار ظرفیت، ناشی از همپوشانی اربیتال 2p اتم اکسیژن و اربیتال 4p اتم برم، می‌باشد. با توجه به نمودارهای مربوط به چگالی ابر الکترونی $In(BrO_3)_3$، نتیجه می‌شود که تمامی پیوندهای این ترکیب کوالانسی است. در قسمت نتایج اپتیکی، نوسانات پلاسمونی، در انرژی‌های بالا در راستای x، ۲۵/۶eV و در راستای z، ۲۵/۴eV محاسبه شد. همچنین ضریب شکست استاتیک برای $In(BrO_3)_3$ خالص، در راستای x، ۲/۴۷ و در راستای z، ۲/۰۱ به دست آمده است. محاسبات مشابهی با جانشینی اتم آلومینیم و گالیوم، و با ناخالصی آلومینیم و گالیوم در $In(BrO_3)_3$، انجام شد. نتایج بیانگر این امر است که افزودن ناخالصی Al و Ga، سبب کاهش گاف نواری در حالت آلائیده می‌شود.

امضای استاد

راهنما

دکتر جواد

باعدی

فهرست مطالب

عنوان

صفحه

فصل اول: مقدمه و تاریخچه مواد پیروالکتریک

۱-۱ تاریخچه پیروالکتریک-

ها..... ۲

۱-۲ نظریه‌های اولیه در مورد

پیروالکتریک..... ۲

۱-۳ رابطه بین فروالکتریسیته، پیزوالکتریسیته و

پیروالکتریسیته..... ٤

۱-٤ مثلث

ارتباط..... ۵

۱-۵ کاربردهای مواد

پیروالکتریک..... ۹

۱-۵-۱ حسگرهای مادون

قرمز..... ۹

۱-۵-۲ سیستم‌های آشکارساز

متحرک..... ۹

۱-۵-۳ کنترل

آلودگی..... ۱۰

۱-۵-٤ تصویربرداری حرارتی..... ۱۰

فصل دوم: خواص الکترواپتیکی

۲-۱ مقدمه..... ۱۳

۲-۲ روش‌های محاسبه ساختار نواری..... ۱۳

۲-۳ سیستم‌های بس‌ذره‌ای..... ۱٤

۲-٤ نظریه‌ی تابعی چگالی..... ۱۵

قضیه‌ی اول: چگالی به عنوان یک متغییر اساسی..... ۱۵

قضیه‌ی دوم: اصل وردشی انرژی..... ۱٦

۲-۵ مقدمه‌ای بر خواص اپتیکی مواد..... ۱۸

۲-٦ تابع دی‌الکتریک $\varepsilon(\omega, q)$ ۱۸

۲-۷ روابط کرامرز-کرونیک و ثابت‌های اپتیکی..... ۱۹

۲-۸ اتلاف انرژی ذرات سریع در جامد (EELS) ۲۰
۲-۹ بازتابش اپتیکی ۲۲
فصل سوم: نتایج خواص الکترواپتیکی بلور $In(BrO_3)_3$ و اثر جانشینی Ga و Al روی آن
۳-۱ مقدمه ۲۵
۳-۲ روش محاسبات ۲۵
۳-۳ بهینه‌سازی حجم ۲۷
۳-٤ نتایج خواص الکترونی بلورهای $In(BrO_3)_3$، $Ga(BrO_3)_3$ و $Al(BrO_3)_3$ ۳۰
۳-٤-۱ ساختار نوارهای انرژی ۳۰
۳-٤-۲ چگالی حالت-ها ۳۱
۳-٤-۳ چگالی ابر الکترونی ۳٤
الف) چگالی ابر الکترونی بلور $In(BrO_3)_3$ ۳٤
ب) چگالی ابر الکترونی بلور $Ga(BrO_3)_3$ ۳٦

ج) چگالی ابر الکترونی بلور $Al(BrO_3)_3$.....۳۸

۳-۵ نتایج خواص اپتیکی بلورهای $In(BrO_3)_3$، $Ga(BrO_3)_3$ و $Al(BrO_3)_3$.....۴۱

۳-۵-۱ تانسور دی-الکتریک.....۴۱

الف) قسمت حقیقی تابع دی-الکتریک.....۴۱

ب) قسمت موهومی تابع دی-الکتریک.....۴۴

۳-۵-۲ تابع اتلاف انرژی.....۴۶

۳-۵-۳ هدایت اپتیکی.....۴۸

۳-۵-۴ ضریب جذب.....۵۰

۳-۵-۵ بازتابندگی.....۵۲

۳-۵-۶ ضریب شکست و ضریب خاموشی.....۵۴

فصل چهارم: نتایج خواص الکترواپتیکی بلورهای $In_{0.75}Ga_{0.25}(BrO_3)_3$ و $In_{0.75}Al_{0.25}(BrO_3)$

٤-١ مقدمه..... ٦٠

٤-٢ روش محاسبات..... ٦٠

٤-٣ نتایج خواص الکترونی بلور $In_{0.75}Ga_{0.25}(BrO_3)_3$ و $In_{0.75}Al_{0.25}(BrO_3)$..... ٦٤

٤-٣-١ ساختار نوارهای انرژی..... ٦٤

٤-٣-٢ چگالی حالت-ها..... ٦٦

٤-٤ بررسی نتایج اپتیکی بلورهای $In_{0.75}Ga_{0.25}(BrO_3)_3$ و $In_{0.75}Al_{0.25}(BrO_3)_3$..... ٦٨

٤-٤-١ قسمت حقیقی تابع دی-الکتریک..... ٦٨

٤-٤-٢ قسمت موهومی تابع دی-الکتریک..... ٦٩

٤-٤-٣ هدایت اپتیکی..... ٧١

٤-٤-٤ ضریب شکست و ضریب خاموشی..... ٧٢

نتیجه-گیری..... ٧٦

فهرست

منابع.....۷۸

مقالات.....

.....۸۱

فهرست جداول

عنوان

صفحه

جدول (۳-۱) شعاع کره مافین-تین اتم-

ها.....۲۵

جدول(۳-۲): ثابت‌های شبکه (بر حسب Å) برای $In(BrO_3)_3$، $Ga(BrO_3)_3$ و $Al(BrO_3)_3$.....۲۸

جدول(۳-۳): گاف اپتیکی بلورهای $In(BrO_3)_3$، $Ga(BrO_3)_3$ و $Al(BrO_3)_3$.....٤٨

جدول(۳-٤): ضریب شکست استاتیک بلورهای $In(BrO_3)_3$، $Ga(BrO_3)_3$ و $Al(BrO_3)_3$.....۵۵

جدول(٤-۱): ثابت‌های شبکه (بر حسب Å) برای $In_{0.75}Ga_{0.25}(BrO_3)_3$ و $In_{0.75}Al_{0.25}(BrO_3)_3$.....٦٣

جدول(٤-۲): گاف اپتیکی بلورهای $In_{0.75}Ga_{0.25}(BrO_3)_3$ و $In_{0.75}Al_{0.25}(BrO_3)_3$ ۷۱

جدول(٤-۳): ضریب شکست استاتیک بلورهای $In_{0.75}Ga_{0.25}(BrO_3)_3$ و $In_{0.75}Al_{0.25}(BrO_3)_3$.....۷۳

فهرست اشکال

عنوان

صفحه

شکل(۱-۱): رابطه بین فروالکتریسیته، پیزوالکتریسیته و پیروالکتریسیته.....٤

شکل (۱-۲): مثلث ارتباط.....٦

شکل (۱-۳): طبقه‌بندی مواد پیروالکتریک و پیزوالکتریک از نظر تقارن بلوری ٨

شکل(۳-۱): ساختار ترکیب و موقعیت اتم‌ها برای الف) $In(BrO_3)_3$ ب) $Ga(BrO_3)_3$ ج) $Al(BrO_3)_3$.....٢٦

شکل(۳-۲): نمودار بهینه سازی انرژی برحسب درصد c/a برای الف) $In(BrO_3)_3$ ب) $Ga(BrO_3)_3$ ج) $Al(BrO_3)$

.....٢٩

شکل (۳-۳): مسیر رسم ساختار نواری انرژی منطقه اول بریلوئن بلورهای $In(BrO_3)_3$، $Ga(BrO_3)_3$ و $Al(BrO_3)_3$

.....٣٠

شکل (۳-٤): ساختار نوارهای انرژی برای (الف) $In(BrO_3)_3$ (ب) $Ga(BrO_3)_3$ (ج) $Al(BrO_3)_3$.....٣٠

شکل (۳-۵): چگالی حالت‌های کلی ترکیب‌های الف) $In(BrO_3)_3$ **ب)** $Ga(BrO_3)_3$ ج) $Al(BrO_3)_3$.....۳۲

شکل(۳-٦-الف): موقعیت اتم‌ها در راستای (۱۱۰) در ساختار بلوری $In(BrO_3)_3$ در دو نمای مختلف.....۳۵

شکل(۳-٦-ب و ج): چگالی ابر الکترونی در فضای حقیقی در صفحه (۱۱۰) برای ترکیب $In(BrO_3)_3$ در ۲ و ۳ بعد.....۳۵

شکل(۳-۷-الف): موقعیت اتم‌ها در راستای (۱۱۱) در ساختار بلوری $In(BrO_3)_3$ در دو نمای مختلف....۳٦

شکل(۳-۷-ب و ج): چگالی ابر الکترونی در فضای حقیقی در صفحه (۱۱۱) برای ترکیب $In(BrO_3)_3$ در ۲ و ۳ بعد.....۳٦

شکل(۳-۸-الف): موقعیت اتم‌ها در راستای (۱۱۰) در ساختار بلوری $Ga(BrO_3)_3$ در دو نمای مختلف...۳۷

شکل(۳-۸-ب و ج): چگالی ابر الکترونی در فضای حقیقی در صفحه (۱۱۰) برای ترکیب $Ga(BrO_3)_3$ در ۲ و ۳ بعد.....۳۷

شکل(۳-۹-الف): موقعیت اتم‌ها در راستای (۱۱۱) در ساختار بلوری $Ga(BrO_3)_3$ در دو نمای مختلف...۳۸

شکل(۳-۹-ب و ج): چگالی ابر الکترونی در فضای حقیقی در صفحه (۱۱۱) برای ترکیب $Ga(BrO_3)_3$ در ۲ و ۳ بعد.....۳۸

شکل(۳-۱۰-الف): موقعیت اتم‌ها در راستای (۱۱۱) در ساختار بلوری $Al(BrO_3)_3$ در دو نمای مختلف.۳۹

شکل(۳-۱۰-ب و ج): چگالی ابر الکترونی در فضای حقیقی در صفحه (۱۱۱) برای ترکیب $Al(BrO_3)_3$ در ۲ و ۳ بعد.....۳۹

شکل(۳-۱۱-الف): موقعیت اتم‌ها در راستای (۱۱۱) در ساختار بلوری $Al(BrO_3)_3$ در دو نمای مختلف.۴۰

شکل(۳-۱۱-ب و ج): چگالی ابر الکترونی در فضای حقیقی در صفحه (۱۱۱) برای ترکیب $Al(BrO_3)_3$ در ۲ و ۳ بعد.....۴۰

شکل (۳-۱۲): قسمت حقیقی تابع دی‌الکتریک در راستای x و z برای الف) $In(BrO_3)_3$ **ب)** $Ga(BrO_3)_3$ ج) $Al(BrO_3)_3$.....۴۳

شکل (۳-۱۳): قسمت موهومی تابع دی‌الکتریک در راستای x و z برای الف) $In(BrO_3)_3$ **ب)** $Ga(BrO_3)_3$ ج) $Al(BrO_3)_3$.....۴۵

شکل (۳-۱۴): تابع اتلاف انرژی در راستای x و z برای الف) $In(BrO_3)_3$ **ب)** $Ga(BrO_3)_3$ ج) $Al(BrO_3)_3$.....۴۷.....

شکل (۳-۱۵): قسمت حقیقی هدایت اپتیکی در راستای x و z برای الف) $In(BrO_3)_3$ **ب)** $Ga(BrO_3)_3$ ج) $Al(BrO_3)_3$.....۴۹.....

شکل (۳-۱۶): تغییرات جذب اپتیکی در راستای x و z برای الف) $In(BrO_3)_3$ **ب)** $Ga(BrO_3)_3$ ج) $Al(BrO_3)_3$ ۵۱

شکل (۳-۱۷): تغییرات بازتاب اپتیکی در راستای x و z برای الف) $In(BrO_3)_3$ **ب)** $Ga(BrO_3)_3$ ج) $Al(BrO_3)_3$ ۵۳

شکل (۳-۱۸): ضریب شکست بلور در راستای x و z برای الف) $In(BrO_3)_3$ **ب)** $Ga(BrO_3)_3$ ج) $Al(BrO_3)_3$ ۵۶

شکل (۳-۱۹): ضریب خاموشی بلور در راستای x و z برای الف) $In(BrO_3)_3$ **ب)** $Ga(BrO_3)_3$ ج) $Al(BrO_3)_3$ ۵۸

شکل (٤-۱): سلول واحد الف) $In(BrO_3)_3$ ب) $In_{0.75}Ga_{0.25}(BrO_3)_3$ ج) $In_{0.75}Al_{0.25}(BrO_3)_3$ ٦١

شکل (٤-۲): نمودار انرژی بر حسب Kpoint ٦٢

شکل(٤-۳): نمودار بهینه‌سازی انرژی برحسب درصد c/a برای الف) $In_{0.75}Ga_{0.25}(BrO_3)_3$ ب) $In_{0.75}Al_{0.25}(BrO_3)_3$ ٦٣

شکل (٤-٤): مسیر رسم ساختار نواری انرژی منطقه اول بریلوئن بلورهای $In_{0.75}Ga_{0.25}(BrO_3)_3$ و $In_{0.75}Al_{0.75}(BrO_3)_3$ ٦٤

شکل (٤-۵): ساختار نوارهای انرژی برای الف) $In_{0.75}Ga_{0.25}(BrO_3)_3$ ب) $In_{0.75}Al_{0.25}(BrO_3)_3$ ٦٥

شکل (٤-٦): چگالی حالت‌های کلی ترکیب‌های **الف)** $In_{0.75}Ga_{0.25}(BrO_3)_3$ ب) $In_{0.75}Al_{0.25}(BrO_3)_3$ ٦٦

شکل (٤-٧): قسمت حقیقی تابع دی‌الکتریک در راستای x و z برای الف) $In_{0.75}Ga_{0.25}(BrO_3)_3$ **ب)** $In_{0.75}Al_{0.25}(IO_3)_3$ ٦٩

شکل (٤-٨): قسمت موهومی تابع دی‌الکتریک در راستای x و z برای الف) $In_{0.75}Ga_{0.25}(BrO_3)_3$ **ب)** $In_{0.75}Al_{0.25}(BrO_3)_3$ ٧٠

شکل (٤-٩): قسمت حقیقی هدایت اپتیکی در راستای x و z برای الف) $In_{0.75}Ga_{0.25}(BrO_3)_3$ **ب)** $In_{0.75}Al_{0.25}(BrO_3)_3$ ٧٢

شکل (٤-١٠): ضریب شکست بلور در راستای x و z برای الف) $In_{0.75}Ga_{0.25}(BrO_3)_3$ ب) $In_{0.75}Al_{0.25}(BrO_3)_3$ ٧٤

شکل (٤-١١): ضریب خاموشی بلور در راستای x و z برای الف) $In_{0.75}Ga_{0.25}(BrO_3)_3$ ب) $In_{0.75}Al_{0.25}(BrO_3)_3$ ٧٥