

به نام خدا



مرکز مشهد

گروه فیزیک، گرایش حالت جامد

عنوان پایان نامه:

محاسبه نظری اثر نا خالصیها بر گاف انرژی لیتیم نیوبات ($LiNbO_3$)

نگارش:

ملیحه گریوانی

ارائه شده جهت اخذ درجه کارشناسی ارشد در رشته فیزیک گرایش حالت جامد

اساتید راهنما:

دکتر محمد رضا بنام

دکتر هادی عربشاهی

استاد مشاور:

جناب آقای حسین اصغر رهنما علی آبادی

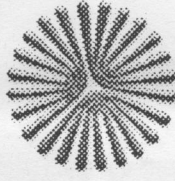
شهریور ۱۳۸۷

۱۳۸۷ / ۷ / ۲۱

تاریخ:

شماره: ۰۸۱۴۰۵۸۹

پیوست:



وزارت علوم تحقیقات و فناوری

دانشگاه پیام نور

مرکز مشهد

بسمه تعالی

تصویب نامه پایان نامه

پایان نامه تحت عنوان: اثر ناخالصیها روی گاف انرژی بلور LiNbO_3

که توسط خانم ملیحه گریوانی تهیه و به هیئت داوران ارائه گردیده است مورد تأیید می باشد.

تاریخ دفاع: 1387/6/27 نمره: ۱۸۱۲۵
درجه ارزشیابی: *بسیار خوب*

اعضای هیأت داوران:

امضا	مرتبه علمی	نام و نام خانوادگی	هیأت داوران
	استادیار	دکتر محمد رضا بنام	استاد راهنما
	دانشیار	دکتر هادی عربشاهی	استاد راهنمای همکار
	مربی	حسین اصغر رهنما	استاد مشاور
	دانشیار	دکتر احمد کمپانی	استاد ممتحن
	استادیار	دکتر جمیل آریایی	نماینده گروه امور آموزشی

رونوشت:

- 1- امتحانات
- 2- تحصیلات تکمیلی
- 3- پرونده دانشجو
- 4- دانشجو

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ

تقدیم به:

یگانہ خالق هستی بخش

تقدیم به :
تقدیم به :

پاپدر و مادر عزیزم

تقدیم به ::

همسر مهربانم
همسر مهربانم

قدردانی:

سپاس و ستایش، پروردگاری راسزاست که کرامت نامحدودش در آراستن انسان به زیور علم و دانش متجلی است. پروردگارا تو را سپاس می گویم که مرا مشمول لطف و عنایت خود ساختی و نعمت خود را بر من تمام کردی و چنان کردی که من از شکر و سپاسگزاری آن عاجزم.

اکنون که به یاری خداوندمنان این پایان نامه به اتمام رسیده است بر خود لازم می دانم که از زحمات و راهنمایی های ارزشمند اساتید راهنمای آقایان دکتر محمد رضا بنام و دکتر هادی عربشاهی تشکر و قدردانی نمایم. و سپاس بی کران را تقدیم جناب آقای حسین اصغر رهنمایی نمایم که با راهنمایی و زحمات فراوان و صبر و حوصله از آغاز تا پایان این پژوهش مرا یاری فرمودند و از ایشان کمال تشکر و قدر دانی رادارم. از دوستان بسیار عزیزم خانم ها عباسی و فیضی که در تهیه این رساله مرا یاری نمودند بسیار سپاسگذارم.

در نهایت جادارد از همسر عزیزم که در تمامی مراحل همراه و پشتیبان من بوده و از پدر و مادرم که سپاس و تقدیر از ایشان در قالب کلام نمی گنجد تشکر و قدر دانی نمایم.

ملیحه گریوانی

چکیده

هدف از اجرای این پروژه ، بررسی نظری اثر ناخالصی های Fr, Cs, Rb, K, Na روی گاف انرژی LiNbO_3 در فاز فروالکتریک می باشد. برای این منظور از روش نظریه ی تابعی چگالی استفاده کرده ایم. نتایج محاسبات ساختار نواری و چگالی حالتها نشان می دهد که LiNbO_3 خالص یک گاف نواری مستقیم به اندازه $3/4\text{eV}$ در نقطه Γ دارد. با افزودن ناخالصی از گروه **IA** جدول تناوبی (فلزات قلیایی) گاف انرژی ترکیب $\text{Li}_x\text{M}_{1-x}\text{NbO}_3$, که در آن $x = 0/5$ و **M** یک فلز قلیایی است ، تغییر می کند. در حقیقت با افزایش عدد اتمی عنصر **M** گاف انرژی کاهش یافته و در نهایت از بین می رود. باتوجه به این حقیقت که کنترل گاف انرژی در کاربردهای الکترواپتیکی از اهمیت خاصی برخوردار است ، این مطالعه می تواند برای بهینه سازی خواص الکترواپتیکی آن در صنعت بسیار مفید باشد.

Abstract

The propose of this work is to study the effect of Na, K, Rb, Cs and Fr impurities on the energy gap of LiNbO_3 in its ferroelectric phase. We have used Density Functional Theory (DFT) for this propose. The result of Band Structure (BS) and Density Of State (DOS) calculations show that the pure LiNbO_3 has direct band gap of about 3.4 eV at Γ point.

With adding alkali metal to the $\text{Li}_x\text{M}_{1-x}\text{NbO}_3$ compound, in which $x = 0.0$ and M is an alkali metal, the band gap has changed. In fact with increasing the atomic number of the M element the energy gap decreases and finally disappears. Due to this fact that the contrl of band gap is very important in electro-optical applications, this study could be usefull in optimizing the electro-optical properties of LiNbO_3 in industry.

فهرست مندرجات

فصل اول: خواص جامدات یونی

- ۱-۱ خاصیت فروالکتریسیته..... ۱
- ۲-۱ خاصیت پیزوالکتریک..... ۲
- ۳-۱ خاصیت پیروالکتریسیته..... ۴

فصل دوم: خواص و کاربردهای LiNbO_3

- ۱-۲ معرفی LiNbO_3 ۶
- ۲-۲ ساختار بلوری LiNbO_3 و خواص الکترونیکی و اپتیکی..... ۸
- ۳-۲ کاربردهای LiNbO_3 ۱۱

فصل سوم: محاسبات ساختار نواری

- مقدمه..... ۱۴
- ۱-۳ سیستم های بس ذره ای..... ۱۴
- ۲-۳ تقریب بورن این هایمر..... ۱۵
- ۳-۳ تقریب هارتری..... ۱۶
- ۴-۳ تقریب هارتری-فوک اسلیتر..... ۱۷
- ۵-۳ نظریه تابعی چگالی..... ۱۸
- ۶-۳ قواعد هوهنبرگ و کوهن..... ۱۸
- ۷-۳ معادلات کوهن-شم..... ۱۹
- ۸-۳ تقریب چگالی موضعی (LDA)..... ۲۱
- ۹-۳ تقریب شیب تعمیم یافته (GGA)..... ۲۱
- ۱۰-۳ روش های حل معادلات کوهن-شم..... ۲۲

- ۳-۱۱ روش امواج تخت تقویت شده (APW)..... ۲۲
- ۳-۱۲ روش موج تخت تقویت شده خطی (LAPW)..... ۲۴
- ۳-۱۳ روش امواج تخت تقویت شده خطی با پتانسیل کامل: (FP-LAPW)..... ۲۵

فصل چهارم: آشنایی با نرم افزار Wein2k

- ۲۶.....مقدمه
- ۴-۱ ورودی: (Structure)..... ۲۶
- ۴-۲ مقدار دهی اولیه..... ۲۷
- ۴-۳ چرخه میدان خود سازگار (SCF)..... ۲۹
- ۴-۴ نکاتی در مورد چرخه SCF..... ۳۱

فصل پنجم: نتایج و محاسبات

- ۳۴.....مقدمه
- ۵-۱ محاسبات LiNbO_3 در حالت خالص..... ۳۴
- الف-۵-۱ چگالی حالتها و ساختار نواری LiNbO_3 ۳۷
- الف-۵-۱-۱ چگالی حالت های کلی..... ۳۸
- الف-۵-۱-۲ چگالی حالت های جزئی..... ۳۹
- الف-۵-۱-۳ ساختار نواری انرژی..... ۴۴

ب-۵ چگالی حالت ها و ساختار نواری مربوط به اثر ناخالصی های Rb, K, Na

- ۴۵..... Fr, Cs بر خواص الکترونیکی LiNbO_3
- ب-۵-۱ چگالی حالت ها..... ۵۰
- ب-۵-۱-۱ چگالی حالت های کلی و جزئی $\text{Li}_{0.5}\text{Na}_{0.5}\text{NbO}_3$ ۵۰
- ب-۵-۱-۲ چگالی حالت های کلی و جزئی $\text{Li}_{0.5}\text{K}_{0.5}\text{NbO}_3$ ۵۶
- ب-۵-۱-۳ چگالی حالت های کلی و جزئی $\text{Li}_{0.5}\text{Rb}_{0.5}\text{NbO}_3$ ۶۰

٦٤.....	ب-٥-١-٤ چگالی حالت های کلی و جزئی $\text{Li}_{0.5}\text{Cs}_{0.5}\text{NbO}_3$
٦٨.....	ب-٥-١-٥ چگالی حالت های کلی و جزئی $\text{Li}_{0.5}\text{Fr}_{0.5}\text{NbO}_3$
٧٤.....	ب-٥-٢ ساختار نواری انرژی.....
٧٤.....	ب-٥-٢-١ ساختار نواری انرژی $\text{Li}_{0.5}\text{Na}_{0.5}\text{NbO}_3$
٧٥.....	ب-٥-٢-٢ ساختار نواری انرژی $\text{Li}_{0.5}\text{K}_{0.5}\text{NbO}_3$
٧٦.....	ب-٥-٢-٣ ساختار نواری انرژی $\text{Li}_{0.5}\text{Rb}_{0.5}\text{NbO}_3$
٧٧.....	ب-٥-٢-٤ ساختار نواری انرژی $\text{Li}_{0.5}\text{Cs}_{0.5}\text{NbO}_3$
٧٨.....	ب-٥-٢-٥ ساختار نواری انرژی $\text{Li}_{0.5}\text{Fr}_{0.5}\text{NbO}_3$
٨١.....	نتیجه گیری.....
٨٢.....	مراجع.....

فصل اول:

خواص الکتریکی جامدات یونی

مقدمه: در این فصل با خواص الکتریکی از قبیل خاصیت فروالکتریسیته، پیروالکتریسیته و پیزوالکتریسیته آشنا می شویم.

۱-۱ خاصیت فروالکتریسیته

از نظر تاریخی، عبارت فروالکتریسیته از فرومغناطیس گرفته شده که البته این به خاطر تشابه ظاهری بود که در خواص آنها مشاهده شده بود. وجود قطبش خود به خودی در یک بلور سبب پیدایش خاصیت فروالکتریسیته می شود. این پدیده زمانی رخ می دهد که انرژی بدست آمده در اثر میدان موضعی از انرژی مورد نیاز برای ایجاد دو قطبی ها بیشتر باشد. بلورهای فروالکتریک حتی در غیاب میدان الکتریکی خارجی از خودگشتاور دو قطبی الکتریکی نشان می دهند. در حالت فروالکتریک، مرکز بارهای مثبت و منفی بر هم منطبق نبوده و در نتیجه در ماده قطبش ماکروسکوپی را خواهیم داشت. از خصوصیات اصلی فروالکتریکها، وجود حلقه پسماند است. همچنین این مواد از نظر ساختاری حوزهای راتشکیل می دهند که در آن حوزه ها دارای

سمت گیریهای اتفاقی در جهت های مختلف هستند. این حوزه ها توسط دیواره هایی از هم جدا شده اند. ضخامت دیواره ها بستگی به نوع حوزه ها دارد. مثلا برای حوزه هایی که نسبت به هم زاویه 180° می سازند، ضخامت دیواره حدود ۴ آنگستروم می باشد. ضخامت دیواره حوزه های 60° و 71° و 90° و 109° در بازه ی ۶۰ تا ۱۰۰ آنگستروم است.

با اعمال یک میدان الکتریکی به ماده ای که قطبش ماکروسکوپی ندارد می توان جهت گیری حوزه ها را به سمت این میدان متمایل نمود. با افزایش این میدان، همسویی حوزه ها بیشتر شده تا اینکه به یک حد بیشینه و اشباع می رسد. با قطع میدان حوزه هاتقریبا در همان حالت باقی خواهند ماند. با عوض کردن جهت میدان و اضافه کردن میدان می توان جهت گیری حوزه ها را مجددا عوض نموده تا به یک حد اشباع برسد. با ادامه عمل، حلقه پسماند را مشاهده خواهیم کرد که بیانگر تغییرات قطبش برحسب میدان اعمالی است. و نشان از روند کاهش انرژی است و مقدار آن از روابط ترمودینامیکی بدست می آید.

پدیده فروالکتریسیته مواد، عموما در دمای خاصی به نام دمای کوری^۱، از بین می رود. در دماهای بالاتر ماده به فاز پارالکتریک گذار فاز انجام می دهد و قطبش کلی را نخواهد داشت. برای تعیین

۱ - Curie Temperature.

این دما راههای مختلفی وجود دارد که از آن جمله می توان استفاده از حلقه پسماند و نیز بررسی تغییرات ثابت دی الکتريک با دما را نام برد. گذار از حالت پارا الکتريک به حالت فروالکتريک از گذار یک بارنامنظم به بار منظم نتیجه می شود. بلورهای فروالکتريک عموماً به دو دسته منظم-بی نظم و جابجا شونده تقسیم می شوند [۱].

فروالکتريکها گروه به خصوصی از پیروالکتريکها^۱ می باشند که دو یا چند راستای قطبش دارند. جهت قطبش در فروالکتريکها^۲ به وسیله میدان الکتريکی تغییر و قابل تغییر می باشد [۲]. تمام بلورهای فروالکتريک، پیروالکتريک^۳ هستند، زیرا شرایط تقارن برای یک بلور فروالکتريک مشکل تراز شرایط پیروالکتريک می باشد. چرا که وجود یا عدم وجود خاصیت پیروالکتريک به مشخصه های تقارن بلوری بستگی دارد. از جمله سرامیکهای فروالکتريک می توان به سرامیکهای $PbNb_2O_6, KNbO_3, PZT, BaTiO_3, PbTiO_2$... اشاره کرد. سرامیکهای فروالکتريک فوق کاربرد گسترده ای در صنعت دارند؛ از جمله این کاربردها می توان به موارد زیر اشاره کرد: خازنهای با ثابت دی الکتريک بالا، مبدل‌های پیروالکتريک، قطعات با ضریب حرارتی مثبت (PTC) اولتراسونیک پیروالکتريکی، فیلترهای ارتباطات، قطعات محافظ امنیتی پیروالکتريکی، مولدهای تشخیص پزشکی، بلندگوها، زنگ اخبارها، جرقه زنها، کلیدها، سنسورهای مختلف، موتورهای اولتراسونیک و حافظه های لایه نازک فروالکتريکی.

۱-۲ خاصیت پیروالکتريک

پیروالکتريسیته، خاصیتی است که گروه خاصی از مواد دارا هستند و اولین بار در سال ۱۸۸۰ توسط ژاکبوس^۴ و برادران کوری^۵ در طی مطالعات سیستماتیکی اثر فشار در تولید بار الکتريکی در بلورهای چون کوارتز^۶ و ترمالین^۷ کشف گردید. نام «پیرو» از لغات یونانی به معنای «فشار دادن» مشتق شده است، بنابراین پیروالکتريسیته، تولید الکتريسیته در نتیجه فشار مکانیکی است. خاصیت

1-Pyroelectric

2-Ferroelectrics.

3-Pizeoelectric.

4-jacques.

5- Pierre curie.

6-covartz

7-Termalin

پیزوالکتریسیته، ایجاد قطبش الکتريکی در اثر اعمال تنش مکانیکی به رده خاصی از بلورها می باشد [۴۳].

این قطبش وقتی که جابجایی یونهای مثبت و منفی، در بلور تحت تنش، یکسان نباشد به وجود می آید. به عبارت دیگر در پدیده پیزوالکتریسیته، بلور در اثر اعمال تنش خارجی قطبیده می شود و این بدین معنی است که تنش خارجی باعث یک تغییر شکل (کرنش) در بلور، به گونه ای است که مرکز ثقل بارهای مثبت و منفی بر هم منطبق نباشد. در پدیده فروالکتريک همین عدم انطباق اتفاق می افتد، با این تفاوت که منشأ تنش انرژی برهمکنش خود دو قطبی هاست.

از این رو برای آنکه این عمل اتفاق بیفتد، باید قطبش پذیری به قدر کافی بزرگ باشد. خاصیت پیزوالکتریسیته به مشخصه های تقارن بلوری بستگی دارد و در واقع مشخصه های تقارن بلوری است که وجود یا عدم وجود پیزوالکتریسیته را در یک بلور خاص مشخص می کند [۲].

کل بلورها را می توان به ۳۲ دسته یا گروه نقطه ای مختلف تقسیم کرد که با استفاده از این مشخصه های تقارنی، به دست آمده اند. این ۳۲ گروه نقطه ای برگرفته از ۷ سیستم بلوری اصلی می باشند که عبارتند از: سه میلی^۱، تک میلی^۲، راستگوشه^۳، چارگوشی^۴، لوزی رخ (سه وجهی)^۵، شش گوشه^۶ و مکعبی^۷. از این ۳۲ گروه نقطه ای، ۲۱ دسته فاقد مرکز تقارن اند (یک شرط لازم برای وجود پیزوالکتریسیته) و از این تعداد ۲۰ دسته پیزوالکتریسیته هستند. یک دسته، اگرچه فاقد مرکز تقارن است، ولی به خاطر مشخصه های تقارنی ترکیبی دیگر پیزوالکتریکی نیست. فقدان مرکز تقارن برای وجود پیزوالکتریسیته بسیار مهم است، زیرا ملاحظه می شود که یک فشار یکسان از دو طرف، دارای تقارن مرکزی است و نمی تواند یک نتیجه غیر تقارنی همچون قطبش برداری ایجاد کند، مگر اینکه ماده نظیر کوارتز فاقد یک مرکز تقارن باشد. در این صورت یک جابجایی خالص یونهای منفی و مثبت نسبت به یکدیگر ایجاد دو قطبهای الکتريکی یعنی قطبش می نماید.

اثر پیزوالکتریسیته خطی و برگشت پذیر است و مقدار قطبش به مقدار فشار بستگی دارد. علامت بار ایجاد شده به نوع فشار (کشش یا تراکم) وابسته است. فرآیند قطبی کردن، پایه و اساس در

1-Tri Clinic.

2- MonoClinic..

3- Orthorhombic.

4-Tetragonal.

5- Rhombohedral trigonal.

6- Hexagonal.

7- Cubic.

قابلیت بخشیدن به استفاده از اثر پیزوالکتریک در یک سرامیک فروالکتریک می باشد. در یک نمونه قطبی شده، یک بردار قطبش خالص و مخالف صفر پیدا می شود و باعث می گردد که سرامیک به صورت ناهمسانگرد درآمده و شدیداً پیزوالکتریک شود. از این رو یک ماده پیزوالکتریک یک سرامیک فروالکتریک قطبی شده می باشد که بعد از انجام عمل قطبش به عنوان یک جسم پیزوالکتریک دائمی رفتار می کند و توانایی تبدیل انرژی مکانیکی به انرژی الکتریکی و بالعکس را دارد [5].

همانطور که قبلاً اشاره شد تمام بلورهای فروالکتریک پیزوالکتریک هستند، زیرا شرایط تقارنی برای آنکه یک بلور فروالکتریک باشد، مشکل تر از شرایط پیزوالکتریک می باشد. در مورد پیزوالکتریک کافیسیت که گروه نقطه ای فاقد مرکز تقارن باشد، ولی در مورد فروالکتریک ها نامتقارن بودن نمونه توسط تنش مکانیکی یا میدان الکتریکی خارجی ایجاد می شود. لذا تمام پیزوالکتریکها، فروالکتریک نیستند.

۱-۳- خاصیت پیزوالکتریسیته^۱

به القاء بار الکتریکی آزاد در ماده در اثر تغییر دما، پیزوالکتریسیته گفته می شود. واز سال ۱۹۶۰ کاربردهای عملی از پدیده پیزوالکتریسیته به صورت جدی مورد توجه قرار گرفت. این اثر نتیجه ای از وابستگی دمائی قطبش خود به خودی P_s یک ماده قطبی است و بنابراین توسط مواد فروالکتریک ظاهر می شود، علی رغم اینکه تک بلور، بس بلور و یا سرامیکهای قطبیده باشند. چون هر تغییری در قطبش یک جامد، همراه با تغییر در بارهای سطحی آن می باشد لذا می توان آن را به صورت یک جریان القائی در یک مدار خارجی مشاهده نمود. اگر ماده پیزوالکتریک به صورت کامل از محیط اطرافش ایزوله شود بارهای سطحی به دلیل رسانندگی ذاتی ماده خنثی خواهند شد. خنثی شدن موثر، در زمانی تقریباً برابر با ثابت زمانی ρ_ϵ ، که ϵ نفوذپذیری ماده و ρ چگالی آن می باشد، صورت می گیرد.

در بلورهای یونی عامل ایجاد قطبش فشردگی یا پکیدگی بلور است. در بلورهای مولکولی عامل ایجاد قطبش صف بندی پیوندهای کووالانسی قطبی، و در بلورهای با پیوند هیدروژن به سبب کنترل جابجایی های اتمی به وسیله مکان یون های هیدروژن می باشد.

از نظر کمی، اثر پیروالکترونیک با یک بردار توصیف می شود. ضریب پیروالکترونیک p به وسیله تغییرات قطبش P_s نسبت به دما توصیف می شود:

$$P_s = P \cdot \Delta T \quad (1-1)$$

همان طور که دیده می شود ضریب پیروالکترونیک یک بردار است. در کاربردهای عملی چون الکترودهایی که بارهای سطحی را جمع می کنند عمود بر محور قطبی قرار دارند، این کمیتها عموماً به صورت اسکالر بیان می شوند. در اکثر موارد بزرگترین اثرات پیروالکترونیک در گروه مواد فروالکترونیک دیده شده است که در آن، جهت گشتاور دو قطبی را می توان با اعمال یک میدان عوض کرد. در این مواد فاز با تقارن کم، در دمای کوری T_c به فاز با تقارن بیشتر گذار می کند. چون مواد پیروالکترونیک قطبی اند بنابراین غالباً خواص پیروالکترونیک را نیز از خود نشان می دهند. برای اینکه ماده از خود خاصیت پیروالکترونیک نشان دهد لزومی ندارد که قطبش مربوط به آن ماده برگشت پذیر باشد. با توجه به این مطالب می توان گفت که تمام مواد فروالکترونیک، پیروالکترونیک هستند، اما عکس آن صادق نیست.

در واقع فروالکترونیک ها گروه بخصوصی از پیروالکترونیکها می باشند که دو یا چند راستای قطبی دارند. جهت قطبش در فروالکترونیک ها به وسیله ی میدان الکتریکی قابل تغییر و حتی معکوس شدن می باشد [۲].

از ۲۰ گروه نقطه ای که خاصیت پیروالکترونیک دارند، ۱۰ گروه دارای یک محور قطبی یگانه بوده و پیروالکترونیک اند. برای اینکه بهترین خواص پیروالکترونیک از سرامیک بدست آید انتخاب پارامترهای مختلف در ساخت و آماده سازی آن نقش اساسی دارد.

از این نوع سرامیک ها استفاده زیادی به ویژه برای کنترل دقیق دما می شود. پیروالکترونیکها کاربردهای زیادی در صنعت دارند که یکی از آنها در آشکار سازهاست. از جمله می توان آشکارسازهای طیف مادون قرمز، زنگ خطر آتش، نشان دادن آلودگی و آنالیز (تجزیه) گاز را نام برد.

فصل دوم:

LiNbO₃ خواص و کاربردهای

مقدمه: در این فصل، با ساختار لیتیم نیوبات و برخی خواص بسیار مهم و کاربردهای الکترونیکی و اپتیکی آن آشنا می شویم. لیتیم نیوبات به صورت خالص، تک بلور یا بس بلور دارای کاربردهای گسترده ای می باشد. علاوه بر این، حضور ناخالصی ها و افزودنی ها خواص آن را تحت تأثیر قرار می دهد، به نحوی که با افزودن مقدار لازم از ناخالصی مناسب می توان خواص مورد نیاز را به دست آورده و یا به نحوی مقتضی تعدیل کرد.

۲-۱ معرفی $LiNbO_3$

لیتیم نیوبات یکی از مهم ترین بلور های نوری فروالکتریکی و غیر خطی است و کاربرد های فراوانی در صنعت دارد. اما مطالعات نظری کمتری بر روی آن انجام شده است. ساختار نواری و ویژگی های نوری این بلور با استفاده از نظریه DFT^1 و با تقریب GGA^2 محاسبه می شود. توسعه سریع اپتوالکترونیک^۳، آکستو الکترونیک^۴ و فوتونیک نیازمند مواد جدید با ویژگیهای بهتر است. مواد فروالکتریک در این زمینه به دلیل قابلیت بالا و ضرایب بالای پیرو الکتریک، پیزوالکتریک، والکترونوری بسیار مورد استفاده قرار می گیرند [۶]. لیتیم نیوبات به دلیل ویژگیهای خاص پیزوالکتریکی و اپتیکی در حافظه های هولوگرافی^۵ (سه بعد نگاشتی)، ابزار شکست نورو ساختار محافظ موج در میان مواد فروالکتریک، بسیار استفاده می شود [۷].

$LiNbO_3$ در دو فاز با تقارن مثلثی^۶ یافت می شود. در فاز فروالکتریک ساختار بلوری $LiNbO_3$ با گروه فضایی $R3C$ مشخص می شود، در حالیکه بالای T_c به فاز پارا الکتریک گذار فاز انجام می دهد.

علیرغم اتخاذ فرایندهای خاص رشد بلوری، بلور $LiNbO_3$ با تجمع بالای نقایص ذاتی و شامل حفره های ساختاری خاص و دیگر معایب ذاتی است. وجود این معایب اثر ناخالصیهای افزوده

1- Density Functional Theory.

2- Generalized Gradient Approximation.

3-Optoelectronic

4-Acoustoelectronic

5-Holographic

6-Trigonal.

شده را برای کاربردهای مورد نیاز مشکل می سازد. جبران معایب ایجاد شده بوسیله اتمهای ناخالصی باعث توزیع و تعادل بارداخلی می شود. بنابراین آلاینده های مختلف از جمله فلزات خاکی نادر و یونهای فلزی را می توان به آسانی به صورت بلوری تهیه کرد، این آلاینده ها تاثیر اساسی بر ویژگی های شکست نور، ضرایب الکترو نوری و جذب نورماده دارند [۸].

اطلاع از محیط شبکه ای و حالت های شیمیایی چنین آلاینده هایی برای درک کمی از تاثیرات ناخالصی از جنبه های نظری و تجربی ضروری است. بنابراین بررسی ها در مورد معایب بیرونی و درونی لیتیم نیوبات دارای اهمیت بسیار است. و موجب نتیجه گیری های جالبی می شود.

نتایج تجربی جدید نشان می دهد که مدل تهی جای **Li** در تشریح ساختار ناقص بلورهای لیتیم نیوبات منطقی است و اینکه اغلب آلاینده ها ترجیحا جایگاه **Li** را در هشت وجهی اکسیژن در امتداد محور متقارن مثلثی بلور، اشغال می کنند. تاکنون تاثیر ترکیب آلاینده ها در واکنش نوری غیر خطی بلورهای لیتیم نیوبات به لحاظ کمی بررسی شده است. مطالعات قبلی در باره بلورهای لیتیم نیوبات آلاییده شده با **Mg** و **Zn** نشان می دهد که آلاینده های **Mg** و **Zn** تاثیرات کاملا واضحی بر واکنش دی الکتریک بلورهای لیتیم نیوبات آلاییده دارند [۹].

علاوه بر مطالعات تجربی و ویژگی های نوری فرو الکتریک ها و مواد مرتبط، بیشتر دانشمندان از روش نظری برای نشان دادن اصول اساسی برخی از پدیده های فیزیکی و شیمیایی استفاده می کنند. **Y. X. Wang** و همکارانش ضریب جذب نوری و انعکاس پذیری 5LiNbO_3 و **KTa** در مراحل مختلف را با استفاده از روش $^1\text{FP-LAPW}$ محاسبه کردند و **W. Y. Ching** و همکارانش ویژگی های الکترونیکی و نوری LiNbO_3 را با استفاده از روش اولیه ^2LDA در سال ۱۹۹۴ مورد بحث قرار دادند. **M. Veithen** و همکارانش نیز ویژگی های الکترونیکی و دی الکتریک و دینامیکی دو فاز LiNbO_3 را محاسبه کرده اند. مطالعات اساسی و نظری کمتری درباره LiNbO_3 خالص در ساختار الکترونیکی و ویژگیهای ناهمسانگرد آن وجود دارد [۸]. بزرگترین دلیل برای اینکه تاکنون تحقیقات کمتری صورت گرفته این است که این بلور تقارن کمتری نسبت به بلورهای دیگر دارد. جدول ۱-۲ برخی از خواص فیزیکی و اصلی لیتیم نیوبات را بیان می کند [۹].

1- Full Potential Linearized Augmented Plane Wave.
2-Local Density Approximation.