دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی

دانشکده علوم - گروه فیزیک

پایان نامه کارشناسی ارشد رشته فیزیک گرایش حالت جامد

اثر فشار بر روی خواص مغناطیسی و الکتریکی نانوزنجیرهای linear and dimerized در تیتانیوم

پژوهشگر:

زینب سهرابی کیا

استاد راهنما:

دکتر محمود جعفری

بهمن ماه ۱۳۹۰

دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی

دانشکده علوم - گروه فیزیک

پایان نامه کارشناسی ارشد رشته فیزیک گرایش حالت جامد

اثر فشار بر روی خواص مغناطیسی و الکتریکی نانوزنجیرهای linear and dimerized در تیتانیوم

پژوهشگر:

زینب سهرابی کیا

استاد راهنما:

دکتر محمود جعفری

مشاور:

مهندس حسن جم نژاد

بهمن ماه ۱۳۹۰

بسم الله الرحمن الرحيم

تقدیم به

مادرم، دل انگیزترین رایحه مهر که دامان پر مهرش یگانه پناهم است

و پدرم، استوارترین پشتوانه زندگی ام که همواره چتر محبتش بر سرم است

سپاس خدایی راکه صبح روشن را با نطق فصیح اشراق و زبان گویای نور هویدا ساخت و شب تار را با قطعات سیاه ظلمت هول انگیز به عالم فرستاد. آسمان را با گردشی به حد معین و نظمی زیبا و متقن برانگیخت و شعشعه نور خورشید تابان را پرتوی فروزان عطا کرد. خدایی که هستی اش دلیل هستی اوست. هم او که آفرینش را از هستی خویش برآورد بی آنکه اندیشه را به کار انداخته باشد، یا از آزمایشی سود جسته باشد یا دست به حرکتی زده باشد یا دچار تردید شده باشد.

عمیق ترین قدردانی ام تقدیم به عزیزترین کسانم، پدر و مادر مهربانم که در سایه درخت پربار وجودشان آسودم و از ریشه آن ها شاخ و برگ گرفتم و خواهر و برادران مهربانم که وجودشان مایه دلگرمی ام بوده است، پایدار باد سایه حضورشان.

ارج می نهم حضور و یاری استاد محترم جناب آقای دکتر محمود جعفری را که از راهنمایی هایشان بهره برده ام.

اکنون می دانم که آن دست های یاریگر و کلمات امید بخش از سوی یاریگر همیشگی آمده بود، همراهی دوستانی دانا و یاورانی مهربان که یاریم کردند: دکتر بهرام عابدی، حبیبه گلوانی، حمیدرضا حاجیانی، الهام گردانیان و فاطمه سادات رسولی، درخشان باد لحظه هایشان.

چکیده

در دهه های اخیر خواص مختلف فیزیکی مواد در مقیاس نانو مورد توجه دانشمندان قرار گرفته است. علت این امر خصوصیات ویژه ای است که در نانو ساختار ها وجود دارد. یکی از انواع نانو ساختار ها، نانو سیم های فوق نازک یا همان نانو زنجیر ها هستند. نانو زنجیر ها همواره خواصی غیر قابل پیش بینی از خود نشان می دهند به طوری که حتی در برخی موارد نانو زنجیر های عناصر نارسانا خاصیت رسانندگی بیشتری از نانو زنجیر های فلزی دارند. اخیراً مطالعاتی در زمینه های تجربی و نیز تئوری در مورد نانو زنجیر های تیتانیوم انجام شده است. خواص ویژه مغناطیسی این نانو زنجیر ها از موارد جالب توجه است. تولید این نانو زنجیر ها بر روی نانو لوله های کربنی انجام شده است. مطالعات تئوری نشان داده است که نانو زنجیر های تیتانیوم دارای چهار ساختار مختلف خطی، دایمر، نردبانی و زیگزاگی است. در این پژوهش خواص فیزیکی نانو زنجیر های خطی و دایمر تیتانیوم مورد مطالعه قرار گرفته است. بدین منظور ساختار ها با استفاده از نرم افزار WIEN۲K و با بکارگیری تکنیک ابر سلول شبیه سازی شدند. این نرم افزار با استفاده از نظریه تابعی چگالی به مطالعه سیستم های بس ذره ای می پردازد. پس از یافتن طول بهینه بر مبنای کمینه انرژی به بررسی خواص الکترونی، مغناطیسی و اپتیکی این ساختار ها پرداختیم. انجام محاسبات مغناطیسی مؤید وجود خاصیت مغناطیسی در این ساختار ها است. با رسم نمودارهای چگالی حالت خواص الکترونی را بررسی کردیم. پیوستگی طیف چگالی حالت در این نمودارها نشان می دهد که نانو زنجیر های تیتانیوم نیز مانند حالت حجم این عنصر فلزی هستند. پس از مقایسه انرژی های کل هر ساختار در هر دو حالت مغناطیسی و غیر مغناطیسی و یافتن حالت پایدار تر، خواص اپتیکی مورد مطالعه قرار گرفت. در ادامه با تغییر دادن طول ابر سلول خواص فیزیکی یاد شده مورد بررسی قرار گرفت. تغییر طول باعث تغییر حجم ساختار ها شده و در نتیجه آن فشار وارد شده بر ساختار ها تغییر می کند. ما در این محاسبات دریافتیم که ممان مغناطیسی ساختار ها با تغییر دادن طول ابر سلول تغییر می کند. هم چنین تغییراتی در خواص الکترونی و اپتیکی ایجاد شده است.

کلمات کلیدی: نانو زنجیر ها، نظریه تابعی چگالی، تیتانیوم، انرژی کل، تغییر طول، فشار

فهرست مطالب

عنوان.....صفحه

فصل اول:بررسی ساختارهای گوناگون تیتانیوم

مقدمه..... ۱

۱-۱) منابع تیتانیوم..... ۲

۱-۲) ویژگی های اتمی..... ۲

۱-۳) کاربرد تیتانیوم..... ۳

۱-۴) ساختارهای تیتانیوم در حالت انبوهه..... ۴

۱-۴-۱) ساختار $\alpha - Ti$..... ۵

۱-۴-۲) ساختار ω -Ti..... ۵

۱-۴-۳) ساختار $\beta - Ti$..... ۶

۱-۵) نانوساختارهای تیتانیوم..... ۶

۱-۵-۱) نانوسیم ها..... ۷

۱-۵-۲) نانوزنجیرها..... ۱۰

فصل دوم:نظریه تابعی چگالی

۲-۱) مطالعه کوانتومی بلور..... ۱۵

۲-۲) سیستم های بس ذره ای..... ۱۶

۲-۲-۱) تقریب الکترون مستقل..... ۱۸

۲-۲-۲) قضایای هوهنبرگ-کوهن..... ۱۹
۲-۳) رهیافت کوهن-شم..... ۲۱
۲-۳-۱) تقریب چگالی موضعی(LDA)..... ۲۴
۲-۳-۲) تقریب چگالی موضعی اسپینی(LSDA)..... ۲۵
۲-۳-۳) تقریب شیب تعمیم یافته(GGA)..... ۲۶
۲-۴) شبه پتانسیل..... ۲۷
۲-۴-۱) روش تولید شبه پتانسیل..... ۲۸
۲-۴-۲) شبه پتانسیل بار-پایسته..... ۲۸
۲-۴-۳) شبه پتانسیل بار-پایسته غیرموضعی..... ۳۱
۲-۴-۴) شبه پتانسیل های فوق نرم..... ۳۲
۲-۵) امواج تخت تقویت شده..... ۳۴
۲-۶) مطالعات مغناطیسی در چارچوب نظریه تابعی چگالی..... ۳۵
۲-۶-۱) نظم های مغناطیسی..... ۳۶
۲-۶-۲) اسپین..... ۳۹
۲-۷) تعمیم اسپینی نظریه تابعی چگالی..... ۴۱
۲-۷-۱) معادلات اسپینی کوهن-شم برای مغناطش هم خط..... ۴۲
۲-۷-۲) معادلات اسپینی کوهن-شم برای مغناطش ناهم خط..... ۴۴
۲-۸) تصحیح اسپین مدار..... ۴۶
۲-۹) نرم افزار WIEN۲K ۴۹

فصل سوم:بررسی اثر فشار بر روی خواص اپتیکی ساختارهای تیتانیوم در حالت انبوهه

مقدمه..... ۵۱

۳-۱) خواص اپتیکی..... ۵۲
۳-۱-۱) تابع دی الکتریک..... ۵۲
۳-۱-۲) تابع اتلاف انرژی..... ۵۳
۳-۱-۳) رسانندگی اپتیکی..... ۵۳
۳-۱-۴) بازتابندگی اپتیکی..... ۵۴
۳-۲) معادلات حالت..... ۵۴
۳-۲-۱) معادله حالت گازها..... ۵۵
۳-۲-۲) معادله حالت سیالات..... ۵۶
۳-۲-۲-۱) معادله حالت FLRW ۵۶
۳-۲-۳) معادله حالت جامدات..... ۵۶
۳-۲-۳-۱) معادله حالت جهانی..... ۵۶
۳-۲-۳-۲) معادله حالت موریاگان..... ۵۷
۳-۲-۳-۳) معادله حالت بیرچ-موریاگان..... ۵۸
۳-۳) اثر فشار بر روی ساختارهای تیتانیوم..... ۵۹
۳-۴) خواص اپتیکی تحت تاثیر فشار..... ۶۱
۳-۴-۱) تابع دی الکتریک..... ۶۱
۳-۴-۲) تابع اتلاف انرژی و رسانندگی اپتیکی..... ۶۲
۳-۴-۳) ضرایب جذب و بازتابندگی اپتیکی..... ۶۴

فصل چهارم:خواص ساختاری،الکترونی،مغناطیسی و اپتیکی نانو زنجیرهای خطی و دایمر تیتانیوم

مقدمه..... ۶۵

۴-۱) شبیه سازی نانو زنجیرهای تیتانیوم ۶۶
۴-۱-۱) بهینه سازی K-point و R_{MT}-K_{Max} ۷۰
۴-۲) نانو زنجیرهای خطی ۷۴
۴-۲-۱) خواص الکتریکی ۷۴
۴-۲-۱-۱) کانتورهای چگالی بار ۷۴
۴-۲-۱-۲) چگالی حالت ها و ساختار نواری ۷۶
۴-۲-۲) خواص مغناطیسی ۷۷
۴-۲-۳) خواص اپتیکی ۸۰
۴-۲-۳-۱) تابع دی الکتریک ۸۰
۴-۲-۳-۲) تابع اتلاف انرژی و رسانندگی اپتیکی ۸۱
۴-۲-۳-۳) ضرایب جذب و بازتابش اپتیکی ۸۲
۴-۳) نانو زنجیرهای دایمر تیتانیوم ۸۳
۴-۳-۱) خواص الکتریکی ۸۳
۴-۳-۱-۱) کانتورهای چگالی بار ۸۳
۴-۳-۱-۲) چگالی حالت ها و ساختار نواری ۸۴
۴-۳-۲) خواص مغناطیسی ۸۶
۴-۳-۳) خواص اپتیکی ۸۹
۴-۳-۳-۱) تابع دی الکتریک ۸۹
۴-۳-۳-۲) تابع اتلاف انرژی و رسانندگی اپتیکی ۹۰
۴-۳-۳-۳) ضرایب جذب و بازتابش اپتیکی ۹۰

فصل پنجم:خواص فیزیکی نانوزنجیرهای خطی و دایمر تیتانیوم با تغییر طول ابرسلول

مقدمه ۹۲

۵-۱) رابطه فشار و تغییر طول ابرسلول ۹۳

۵-۲) خواص الکتریکی ۹۷

۵-۲-۱) کانتورهای چگالی بار ۹۷

۵-۲-۲) نمودارهای چگالی حالت ۱۰۰

۵-۳) خواص مغناطیسی ۱۰۴

۵-۴) خواص اپتیکی ۱۰۷

۵-۴-۱) تابع دی الکتریک ۱۰۷

۵-۴-۲) تابع اتلاف انرژی و رسانندگی اپتیکی ۱۱۱

۵-۴-۳) ضرایب جذب و بازتابش اپتیکی ۱۱۴

بحث و نتیجه گیری ۱۱۷

پیوست ۱۱۹

پیشنهاد هایی برای ادامه کار ۱۲۴

لیست مقالات ارائه شده مستخرج از پایان نامه ۱۲۵

مراجع ۱۲۶

فهرست شکل‌ها

عنوان شکل .....صفحه
شکل ۱-۱: ساختار α-Ti ۵
شکل ۱-۲: ساختار ω-Ti ۶
شکل ۱-۳: ساختار β-Ti ۶
شکل ۱-۴: نانو سیم های تیتانیوم ساخته شده در ۱۸۰°C ۹
شکل ۱-۵: نانو سیم های تیتانیوم ۱۰
شکل ۱-۶: لایه نشانی تیتانیوم بر روی نانو لوله کربنی و تولید زنجیره های اتمی طلا ۱۱
شکل ۱-۷: رشد اتم تیتانیوم بر روی نانو لوله کربنی ۱۲
شکل ۱-۸: نانوزنجیر های تیتانیوم ۱۳
شکل ۲-۱: تقسیم بندی سلول واحد ۳۵
شکل ۲-۲: نمای طرح ار انواع نظم های موجود در سیستم های مغناطیسی ۳۸
شکل ۲-۳: شمایی از الگوریتم برنامه Wien۲k ۵۰
شکل ۳-۱: رابطه حجم سلول واحد و فشار اعمال شده به ساختار های α، β وω تیتانیوم ۶۰
شکل ۳-۲: قسمت های حقیقی و موهومی تابع دی الکتریک ساختار های
α، β وω تیتانیوم در فشار های مختلف ۶۱
شکل ۳-۳: تابع اتلاف انرژی و رسانندگی اپتیکی ساختار های α، β وω
تیتانیوم در فشار های مختلف ۶۳
شکل ۳-۴: تغییرات نقاط بیشینه تابع اتلاف انرژی و رسانندگی اپتیکی
ساختار های α، β وω تیتانیوم نسبت به فشار ۶۴
شکل ۳-۵: ضریب جذب و بازتابندگی اپتیکی ساختار های α، β وω
تیتانیوم در فشار های مختلف ۶۴
شکل ۴-۱: ساختار نانو زنجیرهای تیتانیوم، خطی و دایمر ۶۶

شکل ۴-۲:بهینه سازی حجم ابر سلول ساختار های خطی و دایمر نسبت
به انرژی کل در حالت غیر مغناطیسی و فرو مغناطیسی ۶۷
شکل ۴-۳ بهینه سازی طول ابر سلول ساختار های خطی و دایمر نسبت
به انرژی کل در حالت غیر مغناطیسی و فرو مغناطیسی ۶۸
شکل ۴-۴: منحنی تغییرات انرژی کل بر حسب تعداد نقاط K برای نانو
زنجیرهای خطی و دایمر تیتانیوم در حالت غیر مغناطیسی و فرو مغناطیسی.....۷۳
شکل ۴-۵: منحنی تغییرات انرژی کل بر حسب تعداد $R_{MT}.K_{max}$ برای نانو
زنجیرهای خطی و دایمر تیتانیوم در حالت غیر مغناطیسی و فرو مغناطیسی..... ۷۴
شکل ۴-۶ :کانتور های چگالی بار نانو زنجیر های خطی تیتانیوم
در راستای زنجیر ها در حالت غیر مغناطیسی و فرو مغناطیسی ۷۵
شکل ۴-۷: ساختار نواری و چگالی حالت کلی نانو زنجیر های خطی غیر مغناطیسی ۷۶
شکل ۴-۸: چگالی حالت های اوربیتال های مختلف d، p و s
مربوط به نانو زنجیرهای خطی غیر مغناطیسی ۷۷
شکل ۴-۹: ساختار نواری و چگالی حالت کلینانو زنجیر های خطی غیر مغناطیسی..... ۷۸
شکل ۴-۱۰: چگالی حالت های اوربیتال های مختلف d ساختار خطی فرو مغناطیسی..... ۷۹
شکل ۴-۱۱: قسمت های حقیقی و موهومی تابع دی الکتریک
نانو ساختار های خطی تیتانیوم در راستای x و z..... ۸۱
شکل ۴-۱۲: تابع اتلاف انرژی و رسانندگی اپتیکی
نانو ساختار های خطی تیتانیوم در راستای x و z..... ۸۱
شکل ۴-۱۳: ضریب جذب و بازتابندگی اپتیکی
نانو ساختار های خطی تیتانیوم در راستای x و z..... ۸۲
شکل ۴-۱۴: کانتور های چگالی بار نانو زنجیر های دایمر تیتانیوم
در راستای زنجیر ها در حالت غیر مغناطیسی و فرو مغناطیسی ۸۳
شکل ۴-۱۵:ساختار نواری و چگالی حالت های کلی و جزئی

نانو زنجیر های غیر مغناطیسی دایمر ۸۵
شکل ۴-۱۶: چگالی حالت های اوربیتال های مختلف d و p
ساختار دایمر غیر مغناطیسی ۸۶
شکل ۴-۱۷: چگالی حالت های ساختار دایمر فرو مغناطیسی ۸۷
شکل ۴-۱۸ : چگالی حالت های اوربیتال های مختلف d و p
ساختار دایمر فرو مغناطیسی ۸۸
شکل ۴-۱۹: قسمت های حقیقی و موهومی تابع دی الکتریک
نانو ساختار های دایمر تیتانیوم در راستای x و z ۸۹
شکل ۴-۲۰: تابع اتلاف انرژی و رسانندگی اپتیکی
نانو ساختار های دایمر تیتانیوم در راستای x و z ۹۰
شکل ۴-۲۱: ضریب جذب و بازتابندگی اپتیکی
نانو ساختار های دایمر تیتانیوم در راستای x و z ۹۰
شکل ۵-۱: تغییرات فشار با تغیی طول ابرسلول ساختار های خطی و دایمر ۹۶
شکل ۵-۲: کانتور های چگالی بار ساختار خطی با طول های مختلف ابر سلول ۹۸
شکل ۵-۳ کانتور های چگالی بار ساختار دایمر با طول های مختلف ابر سلول ۹۹
شکل ۵-۴: چگالی حالت های کل و اوربیتال d ساختار خطی با طول های مختلف ابر سلول ۱۰۲
شکل ۵-۵: چگالی حالت های کل و اوربیتال d ساختار دایمر با طول های مختلف ابر سلول.... ۱۰۳
شکل ۵-۶ تغییرات ممان مغناطیسی با طول ابر سلول ساختار خطی و دایمر ۱۰۶
شکل ۵-۷: قسمت های حقیقی و موهومی تابع دی الکتریک
برای طول های مختلف ابر سلول ساختار خطی ۱۰۹
شکل ۵-۸: قسمت های حقیقی و موهومی تابع دی الکتریک
برای طول های مختلف ابر سلول ساختار دایمر ۱۱۰
شکل ۵-۹: تابع اتلاف انرژی نانو ساختار های خطی و دایمر تیتانیوم ۱۱۲
شکل ۵-۱۰: رسانندگی اپتیکی نانو ساختار های خطی و دایمر تیتانیوم ۱۱۳

شکل ۵-۱۱: بازتابندگی اپتیکی نانو ساختار های خطی و دایمر تیتانیوم ۱۱۵
شکل ۵-۱۲ ضریب جذب نانو ساختار های خطی و دایمر تیتانیوم.....۱۱۶

فهرست جدول‌ها

عنوان جدول ..... صفحه

جدول ۱-۱ طول های پیوند و زوایای بهینه نانو سیم های

β و ω تیتانیوم و تفاوت آن ها نسبت به حالت انبوهه (Δ)..... ۹

جدول ۳-۱ثابت های شبکه، مدول حجمی و مشتق مدول حجمی برای

ساختار های α، β وω تیتانیوم در حالت تعادل..... ۶۰

جدول ۴-۱: خصوصیات ساختاری و پارامتر شبکه بار نانو زنجیر های

خطی و دایمرتیتانیوم در حالت های مغناطیسی و غیر مغناطیسی..... ۶۹

جدول ۴-۲: بهینه سازی تعداد نقاط K بر حسب انرژی کل ساختار خطی..... ۷۱

جدول ۴-۳: بهینه سازی تعداد نقاط K بر حسب انرژی کل ساختار دایمر..... ۷۱

جدول ۴-۴: بهینه سازی $R_{MT}.K_{max}$ بر حسب انرژی کل ساختار خطی ۷۲

جدول ۴-۵: بهینه سازی $R_{MT}.K_{max}$ بر حسب انرژی کل ساختار دایمر ۷۲

جدول ۴-۶: ممان مغناطیسی و قطبش اسپینی نانو ساختار های تیتانیوم..... ۸۸

جدول ۵-۱: مقادیر بهینه حجم، مدول حجمی و مشتق مدول حجمی

برای دو ساختار خطی و دایمر..... ۹۴

جدول ۵-۲: تغییرات فشار و حجم ساختار خطی با تغییر طول ابر سلول..... ۹۵

جدول ۵-۳: تغییرات فشار و حجم ساختار دایمر با تغییر طول ابر سلول..... ۹۵

جدول ۵-۴: ممان مغناطیسی ساختار خطی با طول های

متفاوت و مقادیر فشار مربوط به آن ها..... ۱۰۵

جدول ۵-۵: : ممان مغناطیسی ساختار دایمر با طول های

متفاوت و مقادیر فشار مربوط به آن ها..... ۱۰۵

جدول ۵-۶: مقادیر مختلف مربوط به قسمت حقیقی تابع دی الکتریک

برای طول های مختلف ابر سلول نانو زنجیر های خطی..... ۱۰۷

فهرست جدول ها

جدول ۵-۷: مقادیر مختلف مربوط به قسمت حقیقی تابع دی الکتریک

برای طول های مختلف ابر سلول نانو زنجیر های دایمر.....۱۰۸

جدول ۵-۸: مقادیر مختلف مربوط به قسمت بازتابندگی اپتیکی

برای طول های مختلف ابر سلول نانو زنجیر های خطی.....۱۱۴

جدول۵ -۹: مقادیر مختلف مربوط به قسمت بازتابندگی اپتیکی

برای طول های مختلف ابر سلول نانو زنجیر های دایمر..... ۱۱۴

فصل اول

بررسی ساختار های گوناگون تیتانیوم

مقدمه

تیتانیوم عنصری فلزی است که رنگ سفید-نقره ای براق دارد. این عنصر در سال ۱۷۹۱ توسط ویلیام گریگور[۱] دانشمند انگلیسی کشف گردید. نام تیتانیوم بعد ها توسط دانشمندی آلمانی به نام مارتین کلپرت وقتی دی اکسید آن را در کانی های ایلمنیت[۲]، روتیل[۳] و ... یافت، به آن داده شد. تیتانیوم در دمای زیر $^{\circ}C$ ۸۸۰ ساختار بلورین هگزاگونال دارد و بالای این دما تبدیل به ساختار مکعبی می شود. این فلز بسیار سخت است و چگالی پایینی دارد. این فلز دارای خاصیت چکش خواری است. تیانیوم پس از منیزیم، آهن و آلومینیوم چهارمین فلز پرمصرف می باشد. ترکیبات تیتانیوم به صورت وسیعی در طبیعت توزیع شده است. یکی از روش های تهیه این فلز شامل عبور دادن کلر از روی ایلمنیت یا روتیل که با کربن تا نقطه قرمز شدن حرارت دیده است، می باشد. با این

[۱] William Gregor
[۲] ilmenite
[۳] rutile

کار تتراکلرید تیتانیوم تشکیل می شود که با تقطیر جزءبه جزء می توان به تیتانیوم خالص دست یافت. تیتانیوم ناخالص در سال ۱۸۸۷ توسط نیلسون و پترسون به دست آمد و فلز خالص آن در سال ۱۹۱۰ از طریق گرما دادن تتراکلرید تیتانیوم با سدیم در بمب های فولادی توسط هانتر تولید شد.

۱-۱ منابع تیتانیوم

تیتانیوم در شهاب سنگ ها و خورشید وجود دارد. سنگ های به دست آمده از مأموریت آپولوی ۱۷ از ماه حدود ۱۲.۱٪ اکسید تیتانیوم داشته است. باند های اکسید تیتانیوم در طیف سنجی از ستاره های نوع M میزان بالایی را نشان داده است. این عنصر از نظر فراوانی نهمین عنصر در پوسته زمین به حساب می آید که به صورت ترکیب با سایر عناصر از سنگ های آتشفشانی و رسوبات حاصل از آن ها به دست می آید. این عنصر در کانی های روتیل، ایلمنیت، بروکیت[۱]، لئوکاکسین[۲]، پراوسکیت[۳]، آناتاس[۴] و اسفن[۵] وجود دارد. به دلیل این که این فلز در دمای بالا به شدت با اکسیژن و کربن واکنش می دهد، تهیه عنصر خالص آن بسیار مشکل است.

۱-۲ ویژگی های اتمی

اتم تیتانیوم در گروه IVB جدول تناوبی قرار دارد و جزء فلزات واسطه می باشد. این فلز دارای ۲۲ الکترون آزاد می باشد. آرایش اتمی این فلز به صورت $1s^2/2s^2/2p^6/3s^2/3p^6/3d^2/4s^2$ است. الکترون های تراز های 1s,2s,2p، که به الکترون های مغزه معروفند، شدیداً به هسته مقیدند و در واکنش ها نقش چندانی ندارند. الکترون های تراز های 3s,3p,3d,4s، الکترون های ظرفیت هستند و در پیوند ها شرکت کرده و تعیین کننده خواص مختلف فیزیکی هستند. تیتانیوم دارای ۶ ایزوتوپ ناپایدار و ۵ ایزوتوپ پایدار است. ایزوتوپ ۴۸ با بیشترین فراوانی (۷۳.۸٪) و ایزوتوپ ۴۴ با نیمه عمر ۶۳ پایدارترین ایزوتوپ تیتانیوم است.

---

[۱] brookite
[۲] leucoxene
[۳] perovskite
[۴] anatas
[۵] sphene

۳-۱ کاربرد تیتانیوم

مصرف عمده تیتانیوم به علت استحکام بالا، وزن سبک، چگالی کم، مقاومت در برابر زنگ زدگی و خوردگی در صنعت هواپیمایی، پزشکی، صنایع هوافضا، نیروگاه ها و دستگاه های شیرین کننده آب می باشد.

یکی از دلایل مقاومت بالای تیتانیوم در برابر خراشیدگی و عدم انفعال پذیری این عنصر در برابر مواد شیمیایی، پوسته ای است که بر روی آن تشکیل می شود. هنگامی که تیتانیوم با اکسیژن تماس می یابد، سطح آن به سرعت واکنش داده و اکسید می شود. در اثر این فعل وانفعال شیمیایی، پوسته ای بسیار مقاوم تشکیل می شود که مانع از هرگونه فعل و انفعال می گردد. این لایه محافظ علاوه بر ایجاد مقاومت در برابر خراشیدگی، حد تحمل بیولوژیک فلز را نیز افزایش می دهد. ولی با این وجود بعضی از ترکیبات شیمیایی نظیر فلورین می توانند این پوسته محافظ را تخریب کنند.

از دیگر کاربرد های تیتانیوم می توان به استفاده از این عنصر در ساخت عینک ها و مهندسی های ظریف، مهندسی کنترل و فن آوری پزشکی و در اشیاء قیمتی نظیر ساعت مچی و جواهرات نیز اشاره کرد.

مواد تیتانیومی از قدرت تحمل بسیار بالایی برخوردارند و همچنین نقطه تسلیم آن ها در برابر نیروی کششی وارد شده بسیار بالاست، ولی استفاده از مقدار کمی منیزیم، سدیم و تتراکلرید تیتانیوم باعث شکسته شدن تیتانیوم می گردد.

یکی از کاربرد های جدید تیتانیوم استفاده در توربین های بخار است. استفاده از تیتانیوم این امکان را برای مهندسان فراهم می کند تا بتوانند طول پره های توربین را افزایش داده و بدین ترتیب نسبت نیروی تولید شده را بالا برند.

در صنایع خودروسازی کاربرد های جدید و جالبی برای تیتانیوم پیدا شده است. جایگزین کردن تیتانیوم با فولاد در موتور مولد قطار باعث کاهش ۶۰٪ وزن این وسیله شده است.