بسم الله الرحمن الرحیم
MRTsoft

دانشگاه پیام نور

مرکز خوزستان

دانشکده فیزیک

پایان‌نامه برای دریافت مدرک کارشناسی ارشد

رشته فیزیک

گرایش حالت جامد

عنوان پایان‌نامه:

محاسبه‌ی ویژگی‌های ساختاری و الکترونی TaB_2 با استفاده از نظریه‌ی تابعی چگالی اختلالی

دانشجو:

مریم مسعودی

استاد راهنما:

دکتر حمدالله صالحی

استاد مشاور:

دکتر علیرضا رازقی زاده

اسفند ۱۳۹۰

صورتجلسه دفاع از پایان نامه دوره کارشناسی ارشد

جلسه دفاع از پایان نامه دوره کارشناسی ارشد خانم/ آقای مریم سوری

دانشجوی رشته فیزیک (حالت جامد) به شماره دانشجویی: ۸۸۰۰۲۵۱۰

تحت عنوان: جی سی و گپ های ساختاری و الکترونی Tab با استفاده از روش

تابع چگالی اتمی

با حضور هیات داوران در روز چهارشنبه مورخ ۹۰/۱۲/۱۷ ساعت ۸

در محل تحصیلات تکمیلی دانشگاه پیام نور استان خوزستان مرکز اهواز برگزار شد و هیات

داوران پس از بررسی، پایان نامه مذکور را شایسته نمره به عدد ۱۹/۳ به

حروف نوزده و سه دهم با درجه عالی تشخیص داد.

ردیف	نام و نام خانوادگی	هیات داوران	مرتبه دانشگاهی	امضاء
۱	حمید حمدی	استاد راهنما	دانشیار	
۳	علی رازقی زاد	استاد مشاور	استادیار	
۴	سید ابراهیم میرصفقی	استاد داور	استادیار	
۵	مهدی کدخدایی عراقی	نماینده تحصیلات تکمیلی	استادیار	

تقدیم به

آنانی که آدمی را به انسانیتش می‌شناسند و بر او ارج می‌نهند.

سپاس بی کران پروردگار یکتا را که با کمک و یاری همراهان و دلسوزان علم و دانش خرمان موفق به پشت سر گذاشتن مرحله ای دیگر از مراحل زندگی خود شد.

از اساتید ارجمند جناب آقای دکتر محمدرضا صفایی، جناب آقای دکتر رحمت الله فرهمندنسب، اساتید مشاور جناب آقای دکتر سید ضیاءالدین علوی که در طول انجام این پایان نامه از راهنمایی های ارزشمند ایشان بهره برده ام و جناب آقای دکتر سید ابراهیم موسوی بفرمانی که داوری این پایان نامه را پذیرفتند، کمال تشکر را دارم.

همچنین از آقای محمد حسین حصاری به خاطر راهنمایی های سودمندشان و دوستانی که در این مدت همراه من بودند، سپاسگزارم.

و صمیمانه ترین سپاسم را به پدر و مادر مهربانم که وجودشان همیشه یادآور ایثار برای من است و برادرانم که همواره دوست، مشوق و همراه من بوده اند تقدیم میکنم.

چکیده

در این پایان‌نامه پارامترهای ساختاری و ویژگی‌های الکترونی ترکیب TaB_2، در فاز هگزاگونال با گروه فضایی $P6/mmm$ محاسبه و مورد بررسی قرار گرفته است. محاسبات با استفاده از روش امواج تخت با شبه پتانسیل فوق نرم در چارچوب نظریه‌ی تابعی چگالی اختلالی با نرم‌افزار کوانتوم اسپرسو انجام شده است. در این روش برای انرژی همبستگی-تبادلی از تقریب شیب تعمیم یافته $GGA(PBE)$ استفاده شده است. ثابت‌های شبکه استفاده شده در این محاسبات، برابر با $a=۳/۰۸۸\,A^\circ$ و $c=۳/۲۴۱\,A^\circ$ می‌باشند، که به صورت تجربی در دسترس هستند. در این پایان‌نامه تمرکز محاسبات بر روی ویژگی‌های ساختاری TaB_2 از جمله ثابت‌های شبکه، مدول حجمی، تراکم‌پذیری، حجم بهینه همچنین ساختار الکترونی شامل ساختار نواری، چگالی حالت‌های جزئی و کلی، چگالی ابر الکترونی و مدهای فونونی است.

با توجه به مقدار زیاد مدول حجمی و مقدار کم تراکم‌پذیری‌های خطی و حجمی دریافت می‌شود که این ترکیب دارای سختی زیادی می‌باشد و در نتیجه برای استفاده در صنایع سخت، ساختمان ماشین‌ها و متالوژی مواد مناسب است. نمودار ساختار نوارهای انرژی و چگالی حالت‌ها نشان می‌دهد که این ترکیب فلز است. نمودار چگالی حالت‌های جزیی نشان‌دهنده‌ی مشارکت عمده‌ی اربیتال‌های $2p$ اتم B و $5d$ اتم Ta در رسانندگی الکتریکی این ترکیب است. نمودار چگالی ابر الکترونی نشان‌دهنده‌ی پیوند کوالانسی بین اتم‌های Ta و B، همچنین یک پیوند بسیار قوی کووالانسی بین دو اتم B مجاور است. TaB_2 جمعاً دارای ۹ مد فونونی است که به دلیل تقارن‌های شبکه به ۶ مد تقلیل می یابند. این مدها عبارتند از: ۲ مد مادون قرمز و ۲ مد رامان در ناحیه‌ی اپتیکی و ۲ مد در ناحیه‌ی آکوستیکی. نتایج به‌دست آمده در این تحقیق سازگاری خوبی با نتایج تجربی و کارهای دیگران دارند.

فهرست مطالب

عنوان **صفحه**

فهرست شکل‌ها ..... ی
فهرست جدول‌ها ..... ل
پیشگفتار ..... م

فصل اول: بررسی ویژگی‌های ساختاری و فیزیکی ترکیب TaB_2

۱-۱ مقدمه ۱
۱-۲ بررسی عناصر تشکیل دهنده‌ی ترکیب ۲
۱-۳ بررسی ساختار بلوری TaB_2 ..... ۴
۱-۴ بررسی ویژگی‌های فیزیکی ۷
الف)بررسی ویژگی‌های ترمودینامیکی ۸
ب)ویژگی‌های دینامیکی ۹
ج)بررسی ویژگی‌های مکانیکی ۱۰
۱-۸ روش تهیه‌ی پودر دی‌بورید تانتالیم ۱۱
۱-۹ برخی از کاربردهای TaB_2 ..... ۱۲

فصل دوم: روش‌های محاسبه‌ی ساختار الکترونی سیستم‌های بس‌ذره‌ای و توصیف کدمحاسباتی

۲-۱ مقدمه ۱۴
۲-۲ سیستم‌های بس‌ذره‌ای ۱۶
۲-۲-۱ نظریه‌ی تک الکترونی ۱۸
۲-۲-۲ تقریب بورن- اپن هایمر ۱۸

۲-۳ نظریه‌ی تابعی موجی ۲۰
۲-۳-۱ تقریب هارتری فوک- اسلیتر ۲۱
۲-۳-۲ نظریه‌ی تابعی چگالی ۲۲
الف) تقریب چگالی موضعی *(LDA)* ۲۴
ب) تقریب چگالی موضعی اسپینی *(LSDA)* ۲۵
ج) تقریب شیب تعمیم یافته *(GGA)* ۲۵
۲-۳-۳ نظریه‌ی تابعی چگالی اختلالی *(DFPT)* ۲۶
الف) پاسخ خطی ۲۷
۲-۴ روش‌های حل معادلات کوهن- شم ۲۹
۲-۴-۱ روش موج تخت *(PW)* ۲۹
۲-۴-۲ روش موج تخت متعامد *(OPW)* ۳۰
۲-۴-۳ روش امواج تخت تقویت شده *(APW)* ۳۰
۲-۳-۵ روش شبه پتانسیل *(PP)* ۳۲
الف) روش شبه پتانسیل تجربی *(EPM)* ۳۳
ب) شبه پتانسیل‌های مدل ۳۳
ج) شبه پتانسیل‌های بقای نرم ۳۴
د) شبه پتانسیل‌های ابتدا به ساکن ۳۵
ه) شبه پتانسیل‌های فوق نرم ۳۵
۲-۵ کد محاسباتی ۳۶
۲-۵-۱ برنامه *PW.X* ۳۸
۱) *Control* ۴۰
۲) *System* ۴۱
۳) *Electrons* ۴۳

۴) *Lattice&Atomice data* ۴۳
۵) *K-point data* ۴۴

فصل سوم: محاسبه و بررسی ویژگی‌های ساختاری، الکترونی و فونونی ترکیب TaB_2

۳-۱ مقدمه ۴۷
۳-۲ توصیف روش ۴۷
۳-۳ بهینه‌سازی نقاط k و انرژی قطع ۴۹
۳-۵ بررسی خواص ساختاری ترکیب TaB_2 ..... ۵۱
۳-۵-۱ بهینه‌سازی پارامتر شبکه ۵۱
۳-۵-۲ بررسی تأثیر فشار بر روی ساختار ۵۶
۳-۵-۳ تراکم‌پذیری بلور ۵۷
۳-۶ بررسی خواص الکترونی ترکیب TaB_2 ..... ۵۹
۳-۶-۱ ساختار نوارهای انرژی ۶۰
۳-۶-۲ چگالی حالت‌ها *DOS* ۶۲
۳-۶-۳ چگالی ابر الکترونی ۶۸
۳-۷ محاسبه و بررسی مدهای فونونی ۶۹
۳-۸ نتیجه‌گیری ۷۲
۳-۹ تحقیقات پیشنهادی ۷۴
واژه نامه ۷۵
مراجع ۷۷
چکیده انگلیسی ۸۳

فهرست شکل‌ها

عنوان **صفحه**

شکل۱-۱. ساختار بلوری TaB_2 در فاز الف)هگزاگونال $P6_3/mmc$، ۵
ب)اورتورومبیک $Pmmn$، ج)هگزاگونال $P6/mmm$.
شکل۱-۲. الف)ساختار بلوری و ب)یاخته‌ی اولیه برای ترکیب TaB_2 ..... ۶
در فاز هگزاگونال $P6/mmm$.
شکل۱-۳. تغییرات وابسته به دما برای ترکیب TaB_2، الف)انرژی درونی، ۸
ب)انرژی آزاد،ج)ظرفیت گرمایی، د)آنتروپی.
شکل۱-۴. منحنی پراکندگی فونونی برای ترکیب TaB_2 در راستای خطوط تقارنی بالا..... ۱۰
شکل۱-۵. پودر TaB_2 تهیه شده در دمای C ۱۶۰۰ در کوره‌ی آلومینیومی تحت جریان Ar ۱۱
شکل۱-۶. تصویر سطحی محصول TaB_2 چگال از طریق SPS ۱۲
شکل۲-۱. کرات مافین-تین ۳۱
شکل۲-۲. نمودار چگونگی حل خودسازگار معادلات کوهن-شم ۳۸
شکل۲-۳. فایل ورودی مربوط به برنامه $PW.X$ ۳۹
شکل۲-۴. فایل خروجی مربوط به برنامه$PW.X$ برای ترکیب مورد نظر ۴۵
شکل۳-۱. یاخته‌ی بسیط و قراردادی ترکیبTaB_2 ..... ۴۹
شکل۳-۲. منحنی بهینه‌سازی تعداد نقاط K برای ترکیبTaB_2 ..... ۵۰
شکل۳-۳. منحنی بهینه‌سازی انرژی قطع برای ترکیب TaB_2 ..... ۵۱
شکل۳-۴. منحنی بهینه‌سازی پارامتر شبکه c/a برای ترکیب TaB_2 ..... ۵۲
شکل۳-۵. منحنی بهینه‌سازی پارامتر شبکه a برای ترکیب TaB_2 ..... ۵۳
شکل۳-۶. نمودار تغییرات حجم سلول واحد ترکیب TaB_2 بر حسب فشار ۵۶
شکل۳-۷. نمودار تغییرات پارامترهای شبکه‌ی ترکیب TaB_2 بر حسب حجم ۵۷

شکل۳-۸. نمودار تغییرات (۱)*lna* و (۲)*lnc* برحسب حجم برای ساختار TaB_2 .....۵۸

شکل۳-۹. ناحیه‌ی اول بریلوئن و مسیرهای تقارنی در بلور هگزاگونال ۶۰

شکل۳-۱۰. ساختار نواری برای ترکیب TaB_2 در راستای خطوط تقارنی بالا.....۶۱

شکل۳-۱۱. نمودار چگالی حالت‌ها بر حسب انرژی کل برای ترکیب TaB_2 .....۶۳

شکل۳-۱۲. نمودار چگالی حالت‌ها با در نظر گرفتن برهمکنش اسپینی ۶۴
و بدون برهمکنش اسپینی برای TaB_2.

شکل۳-۱۳. منحنی چگالی حالت‌های جزیی اربیتال‌های *2s* و *2p* اتم *B* ۶۴

شکل۳-۱۴. منحنی چگالی حالت‌های جزیی اربیتال‌های *5s* و *5p* اتم *Ta* ۶۵

شکل۳-۱۵. منحنی چگالی حالت‌های جزیی اربیتال‌های *5d*، *6s* و *6p* اتم *Ta* ۶۶

شکل۳-۱۶. نمودار مقایسه‌ی چگالی حالت‌های کل در با چگالی ۶۷
حالت‌های جزیی برای ترکیب TaB_2.

شکل۳-۱۷. چگالی ابر الکترونی برای ترکیب TaB_2 در الف)صفحه‌ی (2,4,0) ۶۸
وب)صفحه‌ی $(0,\bar{1},1)$.

فهرست جدول‌ها

عنوان **صفحه**

جدول۱-۱. ویژگی‌های کلی فیزیکی و شیمیایی عناصر B و Ta ۳

جدول۱-۲. مشخصات فاز هگزاگونال و اورتورومبیک ۵

جدول۲-۱. کد مربوط به ساختارهای مختلف ۴۱

جدول۳-۱. جدول تفکیک آرایش الکترونی اتم‌های Ta و B ۴۸

جدول۳-۲. پارامترهای ساختاری محاسبه‌شده و مقایسه آن‌ها ۵۴
با نتایج دیگران برای ترکیب TaB_2

جدول۳-۳. طول پیوندها و چگالی برای ترکیب TaB_2 در مقایسه با نتایج دیگران ۵۵

جدول۳-۴. مقادیر تراکم‌پذیری برای ترکیب TaB_2 و مقایسه‌ی آن با نتایج دیگران ۵۹

جدول۳-۵. مقدار محاسبه‌شده برای چگالی حالت‌ها در انرژی فرمی و مقایسه با کار دیگر..... ۶۷

جدول۳-۶. محاسبات مربوط به فرکانس‌های نقطه Γ برای ترکیب TaB_2 ..... ۷۱

پیشگفتار

دی‌بورید فلزات واسطه به علت ویژگی‌های فیزیکی و شیمیایی خاص‌شان از قبیل سختی، نقطه‌ی ذوب بالا و ... از دیرباز توجه فیزیکدانان و دانشمندان علم مواد را به خود جلب کرده است. از طرفی مطالعه‌ی خواص فیزیکی و شیمیایی مواد موجود در طبیعت از جمله دی‌بوریدها به دلیل پیچیدگی-های ذاتی ناشی از برهمکنش‌های متعدد ذرات تشکیل دهنده‌ی آن‌ها به راحتی امکان‌پذیر نیست. نظریه‌ی تابعی چگالی اختلالی یکی از نظریه‌های جامعی است که در حال حاضر برمبنای آن خواص ساختاری و الکترونی مواد مختلف مورد مطالعه قرار می‌گیرند. در این تحقیق ویژگی‌های ترکیب دی‌بورید تانتالیم را محاسبه و مورد بررسی قرار می‌دهیم. این ترکیب در دو فاز هگزاگونال با گروه فضایی مختلف و یک فاز اورتورومبیک یافت شده است، که در این تحقیق فاز هگزاگونال با گروه فضایی $P6/mmm$ این ترکیب را بررسی می کنیم.

ترتیب مطالب در این پایان‌نامه به‌صورت زیر است. فصل اول را به معرفی ترکیب دی‌بورید تانتالیم، خواص فیزیکی و شیمیایی آن، توصیف ساختار بلوری، روش تهیه و کاربردهای این ترکیب اختصاص داده‌ایم.

در فصل دوم به بررسی سیستم‌های بس‌ذره‌ای و توصیف نظریه‌ی تابعی چگالی و نظریه‌ی تابعی چگالی اختلالی می‌پردازیم. همچنین روش‌های حل معادلات کوهن–شم را بیان می‌کنیم و در ادامه، کد محاسباتی مورد استفاده در این پایان‌نامه، یعنی نرم‌افزار کوانتوم اسپرسو را معرفی خواهیم کرد.

سرانجام در فصل سوم، شرح کاملی از نتایج محاسبات خود درباره‌ی ساختار ترکیب TaB_2 را بیان کرده و این نتایج را با مقادیر تجربی و نظری به‌دست آمده توسط دیگران از جمله ثابت‌های شبکه، حجم بهینه، مدول حجمی و... مقایسه می‌کنیم. در ادامه کار ساختار نواری، چگالی حالت‌ها، چگالی ابر الکترونی و در نهایت مدهای فونونی برای این ترکیب را بررسی خواهیم کرد.

فصل اول

بررسی ویژگی‌های ساختاری و فیزیکی ترکیب TaB_2

۱–۱ مقدمه

دی‌بورید فلزات واسطه، همچنین ترکیبات و محلول‌های جامد حاصل از این دی‌بوریدها به علت ویژگی‌های فیزیکی و شیمیایی خاص‌شان از قبیل سختی، نقطه ذوب بالا و غیره و همچنین تعلق داشتن به گروهی از مواد که در زمینه مهندسی پهنای گسترده‌ای از کاربردهای صنعتی را داراست، از دیرباز توجه فیزیکدانان و دانشمندان علم مواد را به خود جلب کرده است [۲،۱]. گذشته از این، اخیراً بیشتر این مواد به دلیل داشتن شکل‌هایی با اندازه‌های نانو از قبیل نانوپودرها، نانوسیم‌ها، نانو لوله‌ها و نانوترکیب‌ها بیشتر مورد توجه قرار گرفته‌اند. کشف غیرقابل انتظار ابررسانایی با دمای گذار بحرانی خاص در بعضی از مواد [۳]، یک محرک قوی جدید برای مطالعه‌ی دوباره این گروه از مواد ایجاد کرده است. علاوه بر این، در حال حاضر علاقمندی به دی‌بوریدهای فلزی، به دلیل جستجوی مواد خیلی مستحکم با تراکم‌پذیری خیلی کم افزایش یافته است.

اکثر گروه‌های نمایشگر بوریدها، دی‌بوریدهای شش‌وجهی به صورت لایه لایه هستند که با ساختار شبیه–AlB_2 شکل گرفته‌اند. برخلاف اینکه در سال‌های گذشته نتایج بسیاری در رابطه با ویژگی‌های دی‌بوریدهای شبیه–AlB_2 گزارش شده است، بررسی رفتارهای مکانیکی به اندازه کافی تنها روی چند نمونه از دی‌بوریدها انجام شده است. در حالی که بنابر اطلاعات موجود، برای اکثر دی‌بوریدها این ویژگی ها، نسبتاً محدود است. از طرف دیگر بیشتر کارهای نظری مربوط به رفتار کشسانی دی‌بوریدها توسط تقریب‌های مختلف و به‌ویژه با تک بلورها انجام شده است [۴].

دی‌بورید تانتالیم با وجود ویژگی‌های بی‌نظیرش خیلی کم مورد توجه قرار گرفته و مطالعات کمی روی آن انجام شده است که این مطالعات اغلب روی لایه‌های نازک و یا بلورهای واحد، متمرکز شده‌اند و خیلی کم پودر TaB_2 و چگالش آن را مورد توجه قرار داده‌اند [۵]. در این پروژه محاسبات را با استفاده از تابعی چگالی اختلالی بر روی ویژگی‌های الکترونی ترکیب TaB_2 انجام داده و نتیجه را با نتایج تجربی مقایسه می‌کنیم. قبل از بررسی ویژگی‌های کلی این ترکیب ابتدا ویژگی‌های عناصر تشکیل‌دهنده این ترکیب را مورد بررسی قرار می‌دهیم.

۱-۲ بررسی عناصر تشکیل دهنده‌ی ترکیب

دی‌بورید تانتالیم از دو عنصر بور و تانتالیم تشکیل شده است. نام تانتالیم از واژه تانتالوس شاه افسانه‌ای یونانی گرفته شده است. تانتالیم سی‌امین عنصر فراوان در پوسته‌ی زمین است. تانتالیم عنصری فلزی بسیار سخت به رنگ خاکستری- نقره‌ای با ساختار مکعبی می‌باشد [۶]. این عنصر در سال ۱۸۰۲ توسط اندرس ایکبرگ[1] دانشمند سوئدی کشف شد. اما بسیاری از شیمیدانان تصور می‌کردند که نیوبیم و تانتالیم عناصر مشابهی هستند، تا در سال ۱۸۴۴ نشان داده‌شد که نیوبیک و تانتالیک دو اسید کاملاً متفاوت هستند. تانتالیم به طور معمول در کانی‌های تانتالیت و همواره به همراه نیوبیوم یافت می‌شود. دانشمندان به راحتی توانستند فلز ناخالص را تجزیه کنند [۷]. برای اولین بار مفتول تانتالیم نسبتاً خالص در سال ۱۹۰۳ تهیه شد. Ta دارای عدد اتمی ۷۳، جرم اتمی ۱۸۰/۹۴۷۹ گرم و شعاع اتمی ۲/۰۹ آنگستروم است. آرایش فضایی آن به صورت $[Xe]6s^2 4f^{14} 5d^3$ است که اربیتال‌های s، d و f خود را به اشتراک می‌گذارد. این عنصر در گروه ۵ جدول تناوبی است و به عنوان فلز واسطه در دوره‌ی ۶ قرار دارد.

دیگر عنصر شیمیایی به‌کار رفته در ترکیب مورد نظر بور(بورن) است. بور عنصری شبه فلزی است و به‌صورت پودر بی‌شکل قهوه‌ای تیره و یا جامد بلورین سیاه براق موجود است. این عنصر اولین بار توسط تنارد و همکاران فرانسویش در سال ۱۸۰۸ کشف گردید [۸]. یک ساختار بلورین تتراگونال و دو ساختار رمبوهدرال برای بور شناخته شده است. این عنصر در سنگ تورمالین موجود است و ساده‌ترین روش تهیه‌ی آن احیای تری‌اکسید بور از طریق گرما دادن با منیزیم است که منجر به تولید پودر بی‌شکل این عناصر می‌شود. این عنصر به صورت آزاد در طبیعت یافت نمی‌شود اما اسیدهای بور در آب‌های آتشفشانی و بورات‌ها و کولمانیت یافت می‌شود.

1-Anders Ekbereg

بور عنصری با نماد *B*، جرم اتمی ۱۰/۸۱۱ گرم و شعاع اتمی ۱/۱۷ آنگستروم است. این عنصر عضو گروه *IV* در جدول تناوبی می‌باشد و آرایش فضایی آن به‌صورت $1s^2,2s^2 2p^6$ است، که عنصری شبه فلزی است. برخی ویژگی‌های فیزیکی و شیمیایی عناصر *B* و *Ta* در جدول (۱-۱) آورده شده است:

جدول۱-۱. ویژگی‌های فیزیکی و شیمیایی عناصر *B* و *Ta* [۹].

ویژگی فیزیکی/شیمیایی	*Ta*	*B*
نقطه‌ی ذوب (C°)	۳۰۱۷	۲۰۷۶
نقطه‌ی جوش (C°)	۵۴۵۸	۳۹۲۷
انرژی یونیزاسیون *(KJ/mol)*	۷۶۱	۸۰۰/۶
گرمای فروپاشی *(KJ/mol)*	۳۶/۵۷	۵۰/۲
گرمای تبخیر *(KJ/mol)*	۷۳۲/۸	۴۸۰
گرمای ویژه *(j/ g k)*	۰/۱۴	۱/۰۲
مقاومت الکتریکی *(ohm m)*	$۱/۳۵\times۱۰^{-۷}$	$۱/۸\times۱۰۴$
چگالی ($g/cm^۳$)	۱۶/۶۹	۲/۰۸
الکترونگاتیویته	۱/۵	۲/۰۴

تانتالیم خالص مفتول شدنی است و می‌تواند به‌صورت سیم کشیده‌ای در آید، که به عنوان رشته‌ای برای بخار کردن فلز به‌کار رود. تانتالیم تقریباً به‌صورت کامل در مقابل واکنش شیمیایی در دمای زیر ۱۵۰ درجه‌ی سانتی‌گراد مصون نگه داشته می‌شود و تنها با اسید هیدروفلوئوریک، حلال‌های اسیدی شامل یون فلوئورید و تری‌اکسید سولفور آزاد واکنش می‌دهد. در دماهای بالاتر تانتالیم واکنش‌پذیر است. نقطه‌ی ذوب این عنصر تنها از تنگستن و رنیم بیشتر است. تانتالیم در ساخت گونه‌های مختلف آلیاژها با خواص مطلوب مانند نقطه‌ی ذوب بالا، دوام زیاد، قابلیت مفتول شدن و... کاربرد دارد. این عنصر در دمای بالا گاززدای خوبی است. اکسید آن پایدار است و خواص دی‌الکتریکی دارد. تانتالیم در ابزار جراحی و عمل پیوند استفاده می‌شود زیرا این عنصر با سیالات بدن واکنش نمی‌دهد [۱۰،۱۱].

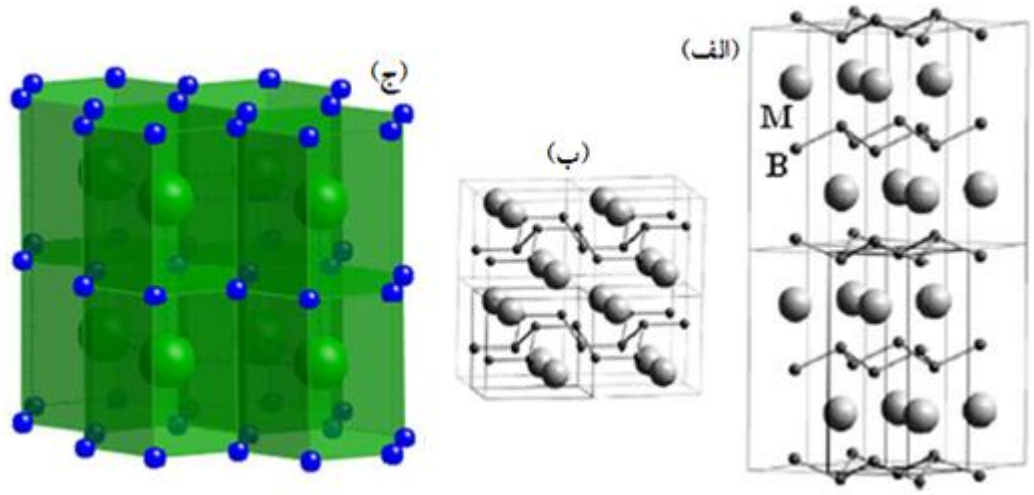
بور ویژگی‌های چرب و روانی مثل گرافیت دارد. هیدرات‌های بور به راحتی اکسید می‌شوند و انرژی زیادی را آزاد می‌کنند و برای مطالعه رآکتورهای هسته‌ای نیز از آن ها استفاده می‌شود. به علت خصوصیات سبک وزنی و استحکام بالا، بور برای استفاده تشکیلات و ساختارهای فضایی مورد استفاده قرار می‌گیرد. نیترید بور برای عایق‌بندی الکتریکی استفاده می‌شود [۱۲].

در سیستم *Ta-B* پنج شکل *TaB* ، TaB_2 ، Ta_2B، Ta_3B_2 و Ta_3B_4 دیده شده است [۱۳]. گذشته از این شکل جدید Ta_5B_6 و ساختار بلوری آن اخیراً توسط بالمگرن شناخته شده است [۱۴]. در میان این ترکیبات تنها *TaB* و TaB_2 در دمای اتاق تا نقطه ذوبشان پایدار هستند [۱۵،۵]. به دلیل ویژگی‌های فیزیکی و شیمیایی خاص دی‌بوریدهای فلزات واسطه، ما روی دی‌بورید تانتالیم- TaB_2- که رفتار فلزی از خود نشان می‌دهد متمرکز شده‌ایم.

۱-۳ بررسی ساختار بلوری TaB_2

دی‌بورید تانتالیم، ساختار بلوری شبیه-AlB_2 ، با گروه فضایی *P6/mmm* به‌صورت لایه‌ای دارد که به شکل یک شبکه شش وجهی ساده از لایه‌های متناوب فلزی مسدود شده با لایه‌ی *B* - شبیه گرافیت- با ترتیب *...AHAH* به صورت عمودی در جهت *C* است [۱۶،۴]. این بلور همچنین به شکل‌های هگزاگونال[1] با گروه فضایی $P6_3/mmc$ شبیه-ReB_2 ، و در فاز اورتورومبیک[2] با گروه فضایی *Pmmn* شبیه-OsB_2 ، نیز یافت شده است [۱۸،۱۷]. در شکل (۱-۱) ساختار بلوری TaB_2 در سه فاز مختلف نشان داده شده است. همچنین مشخصات این فازها در جدول (۱-۲) آورده شده است.

1-Hexagonal
2-Orthorhombic



شکل ۱-۱. ساختار بلوری TaB_2 در فاز الف)هگزاگونال $P6_3/mmc$

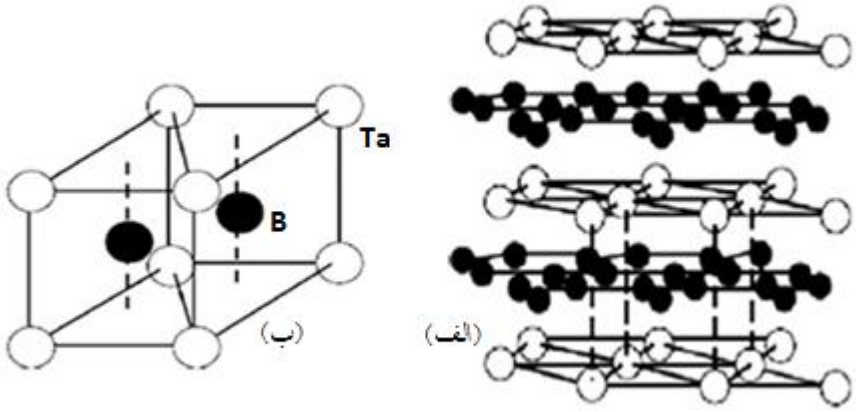
ب)اورتورومبیک $Pmmn$، ج)هگزاگونال $P6/mmm$ [۱۸].

جدول ۱-۲. مشخصات فاز هگزاگونال و اورتورومبیک [۱۹].

فاز	هگزاگونال	اورتورومبیک
مشخصات	a=b≠c α=β=90º , γ=120º	a≠b≠ c α=β=γ=90º

در ساختار هگزاگونال اتم‌های بور در گوشه‌های شش وجهی با سه نزدیک‌ترین همسایه اتم‌های B، در هر صفحه قرار گرفته‌اند. اتم‌های فلزی تانتالیم (Ta) در مرکز شش وجهی B، تقریباً وسط لایه‌های مجاور بور جای دارند. بنابراین اتم‌های B و Ta به ترتیب دارای چند وجهی‌های هماهنگ $[BTa_6B_2]$ و $[TaB_{12}B_8]$ هستند. هر اتم مرکزی تقارن D_{6h} دارد. به عبارت دیگر ۱۲ بور در رئوس منشور شش وجهی قرار دارند. همچنین اتم Ta مرکزی با ۸ اتم Ta از طریق سطوح منشورهای B_{12} هماهنگ شده است [۴]. در محاسبات موجود، یاخته‌ی اولیه به عنوان ساختار اولیه انتخاب شده است که ۳ اتم در یاخته‌ی مجزا وجود دارد. اتم تانتالیم در مرکز $Ta(۰,۰,۰)$ و دو اتم بور در مکان‌های $B(\frac{۱}{۳},\frac{۲}{۳},\frac{۱}{۲})$ و $B(\frac{۲}{۳},\frac{۱}{۳},\frac{۱}{۲})$ قرار گرفته‌اند [۲۱،۲۰]. ساختار شش وجهی TaB_2 با گروه فضایی $P6/mmm$ و یاخته‌ی اولیه آن در شکل (۱-۲) نشان داده شده است. ثابت‌های شبکه در سلول واحد

هگزاگونـال از طریـق انـدازه‌گیـری‌هـای تجربـی بـه‌صـورت $a = ۳/۰۸۸\ A^\circ\ (۵/۸۳۶\ a.u)$ و $c = ۳/۲۴۱\ A^\circ\ (۱/۷۱۵\ a.u)$ می‌باشند [۲۲].



شکل ۱-۲. الف)ساختار بلوری و ب)یاخته‌ی اولیه برای ترکیب TaB_2 در فاز هگزاگونال $P6/mmm$.

تا به امروز کارهای متنوعی بر روی ترکیب دی‌بورید تانتالیم انجام شده است. از جمله، شین و ایوانوسکی ویژگی‌های الاستیکی و ساختار نواری TaB_2 را با استفاده از روش موج تخت تقویت شده‌ی خطی با پتانسیل کامل *(FP-LAPW)*[۱] و روش اربیتال‌های مافین تین خطی *(LMTO)*[۲] مطالعه و دمای ابررسانایی را در ترکیب‌های شبیه- AlB_2 مقایسه کرده‌اند [۲۴،۲۳]. واجستون ساختار الکترونی، ویژگی‌های حالت پایه و اتصال را برای این ترکیب با استفاده از روش اربیتال مافین تین خطی یا تقریب تنگ بست *(TB-LMTO)*[۳] محاسبه کرده‌است [۲۵].

علاوه بر این روزنر و پیک ساختار الکترونی و جفت شدگی الکترون- فونون را در دی‌بورید تانتالیم در مقاسیه با دی‌بورید منیزیم مطالعه کرده‌اند [۲۶]. بعدها ساین برهم‌کنش الکترون- فونون را برای TaB_2 در مقایسه با ZrB_2 با استفاده از نظریه‌ی تابعی چگالی با پتانسیل کامل انجام داده است. ساین به این نتیجه رسید که جفت‌شدگی الکترون فونون در TaB_2 خیلی قوی‌تر از ZrB_2 است و ثابت

1- Full-Potential Linear-Agumented Plane-Wave
2- Linear Muffin-Tin Orbital
3-Tight Binding- Linear Muffin-Tin Orbital