عنوان طرح: مطالعه و محاسبة تئوري تغييرات خواص الكتروني و اپتيكي آلومينا با افزودن ناخالصيهاي فلزات واسط

مجري طرح : دكتر محمدرضا بنام

مدت اجرا : ۱۲ ماه

چكيده

در اين تحقيق آلومينا درفازكروندم ($\alpha - Al_2o_3$)آن كه از نظر ترموديناميكي نسبت به فازهاي ديگرآن پايدارتر مي‌باشد، انتخاب و مورد مطالعه تئوري قرار گرفته است.آلومينا داراي كاربردهاي زيادي در صنعت است. سختي بالاي آلومينا ، باعث شده است كه در برابر سايش مقاومت داشته و از اين رو كاربردهاي گوناگوني در پوشش لوله‌ها ،ظروف و واشرهاي شير آب داشته باشد. ثابت دي الكتريک بالا در كنار اتلاف دي الكتريک پايين آن در فركانس‌هاي پايين، باعث شده است تا در موجبرها و قطعات توان بالا به كار گرفته شود. مقاومت حجمي و استقامت دي‌الكتريكي بالا، آلومينا را يک عايق الكتريكي عالي ساخته كه منجر به كاربردهايي درالكترونيک، به صورت بسترها واتصال‌دهندها و در مقياس پايين به صورت عايق‌ها و دو شاخه‌هاي جرقه‌اي، شده است. مهمترين كاربرد الكتريكي آن در صنعت قطعات الكترونيكي نظير ترانزيستورهاي اثر ميدان به عنوان عايق گيت مي‌باشد كه مي‌تواند جايگزيني مناسبي براي SiO_2 باشد. آلومينا با ثابت دي‌الكتريک بالا $(\varepsilon_R = 9)$ و با ساختار مناسب و كنترل شده‌اي كه دارد، در نقشه راه نيمرساناهاي با ابعاد نانو قرار گرفته است. براي بهبود خواص الكتريكي آن، مثلا افزايش ثابت دي‌الكتريک آن، مي‌توانيم از افزودن فلزات واسط به آن كمک بگيريم.

دراين پروژه تحقيقاتي از نرم افزار $WIEN\ \ 2K$ ، كه بر پايه تئوري تابعي چگالي نوشته شده، استفاده شده است. در اين نرم افزار هدف حل يك مسئله بس ذره‌اي كوانتمي است كه در حل معادلة شرودينگر مربوط به آن از چگالي تابع موج به جاي خود تابع موج و تقريب موج تخت افزوده شده خطي با پتانسيل كامل استفاده شده است. بعد از انجام محاسبات اوليه (محاسباتScf) ، چگالي حالت‌ها، اتلاف انرژي الكترون نزديك لبة ساختار خواص اپتيكي و ساختار نواري آلومينياي خالص ($\alpha - Al_2o_3$)وآلومينا‌تهاي آن با فلزات واسط گروه IIIB با فرمول

α -Al2-xTxO3 (كه در آن T فلز واسط Sc , Y, La , Ac و x = 0.5 است) محاسبه و با يكديگر و نتايج تجربي مقايسه شده است. نتايج محاسبات نشان مي‌دهد كه افزودن فلز واسط Yو Sc تغيير زيادي در گاف انرژي آلومينا نمي‌دهد اما افزودن ناخالصيهاي Ac و La باعث كاهش قابل ملاحظه‌اي در گاف انرژي (حدود ۵۰ تا۶۰ درصد) و بنابراين افزايش ثابت دي الكتريک آن مي‌گردد.