اثر آلاینده کروم روی خواص الکترونی بلور تیتانات استرانسیم

مولاروی، طیبه

دانشکده فیزیک، دانشگاه صنعتی شاهرود

چکیده

در این پژوهش چگالی حالت های جزئی و کلی بلور تیتانات استرانسیم ($SrTiO_3$) و آلیاژ ($Sr_{0.875}Cr_{0.125}TiO_3$) در فاز مکعبی مطالعه شده است. اثر ناخالصی کروم روی خواص الکترونی این بلور مورد بررسی قرار گرفته است. محاسبات با روش پتانسیل کامل امواج تخت تقویت شده خطی (FP-LAPW) در چارچوب نظریه تابعی چگالی (DFT)، با تقریب شیب تعمیم یافته (GGA) صورت گرفته است. نتایج نشان می دهد که هیبریداسیونی قوی بین تراز $3d$ اتم تیتانیم باحالت های $2p$ اکسیژن و همچنین بین اربیتال های $4p$ اتم استرانسیم با $2s$ اتم اکسیژن وجود دارد. بلور تیتانات استرانسیم دارای گاف انرژی حدود $1/85\ eV$ می باشد در حالیکه با افزایش آلاینده کروم، یک گذار عایق به فلز در ترکیب $Sr_{0.875}Cr_{0.125}TiO_3$ مشاهده می شود.

Effect of Cr Doping on Electronic Structure of $SrTiO_3$ Crystal

Movlarooy, Tayebeh

Department of Physics, Shahrood University of Technology, Shahrood, Iran

Abstract

In this work the partial and total density of states (PDOS, DOS) of $SrTiO_3$ crystal and $Sr_{0.875}Cr_{0.125}TiO_3$ compound have been studied in cubic phase. The effect of Cr doping on electronic properties of this crystal has been investigated. The calculations have been performed using the full-potential-linearized augmented-plane wave method (FP-LAPW) within the framework of density functional theory (DFT), with generalized gradient approximation (GGA). The results revealed that there is strong hybridization between Ti-3d and O-2p, and also between Sr-4p and O-2s orbitals. The SrTiO3 crystal has a band gap of about 1.85 eV while seen an insulator-to-metal transition by Cr doping, in the $Sr_{0.875}Cr_{0.125}TiO_3$ compound.

مقدمه

در چند دهۀ اخیر لایه‌های اکسیدی پروسکایت با ثابت دی-الکتریک بالا توجه بسیاری را به خود جلب کرده‌اند. این اکسیدها در ساخت خازن، حافظه‌های دینامیکی قابل دسترس گستره‌ای، وسایل الکترواپتیکی و نمایشگرهای الکترولولیانی کاربرد دارند.

تیتانات استرانسیم ($SrTiO_3$) ماده‌ای پاراالکتریک است که در دمای اتاق ساختار بلوری پروسکایت مکعبی دارد. ساختار این ترکیب در دماهای کمتر از $105\ K$ به شکل چهارگوشی درمی‌آید. تیتانات استرانسیم از جمله مواد نافروالکتریک با ضریب شکست و ثابت دی‌الکتریک بالا، پایداری گرمایی و شیمیایی خوب، فعالیت نوری قابل قبول، و ظرفیت ذخیرۀ بار بالاست [۲-۱]. تیتانات استرانسیم آلاییده با کروم به دلیل گذار عایق-فلز و همچنین نقش ظرفیتی کروم در هدایت و رفتار سوئیچینگ کاربردهای زیادی به عنوان حافظه های مقاومتی دارد[۷-۳]. در شکل۱ یاخته بسیط بلور