

Laboratorium badań właściwości ferroelektrycznych i zastosowań metod DFT (p.105N)

1. Spis aparatury i najważniejsze możliwości pomiarowe wraz ze zdjęciami.
 - Zestaw do pomiaru właściwości elektrycznych/dielektrycznych materiałów ferroelektrycznych
 - Miernik LRC GWINSTEK LRC-8110G, 20Hz-10MHz
 - Automatyczny regulator temperatury,
 - Zestaw komputerowy z programem pomiarowym.
 - Zestaw do pomiaru właściwości piroelektrycznych materiałów ferroelektrycznych
 - Elektrometr LCHR 6517A Keithley,
 - Regulator temperatury wraz z zasilaczem,
 - Zestaw komputerowy z programem pomiarowym.
 - Zestaw do pomiarów dylatometrycznych metodą pojemnościową
 - AH 2500A, 1 kHz Automatic Capacitance Bridge,
 - Regulator temperatury
 - Zestaw komputerowy z programem pomiarowym..
 - Skomputeryzowane stanowisko do pomiaru pętli histerezy ferroelektrycznej metodą napięciową/prądową w skład którego wchodzi:
 - Układ Sawyera-Towera,
 - oscyloskop cyfrowy,
 - oscyloskop analogowy,
 - autotransformator,
 - regulator temperatury wraz z zasilaczem,
 - zestaw komputerowy z oprogramowaniem pomiarowym
 - Układ pomiarowy do pomiaru właściwości elektrycznych/dielektrycznych pod naciskiem jedno/dwuosiowym (0-2000 bar) w zakresie temperatur od pokojowej do 600°C.
 - Miernik LRC GWINSTEK LRC-8110G, 20Hz-10MHz
 - Automatyczny regulator temperatury
 - Zestaw komputerowy z programem pomiarowym..
 - Układ pomiarowy do pomiaru współczynnika Seebeck'a w zakresie temperatur od pokojowej do 500°C (wraz z zestawem komputerowym i programem pomiarowym).
 - Piły drutowe UNIPRESS-WS22 do precyzyjnego przecinania próbek materiałów krystalicznych i ceramicznych.

2. Opis możliwości badawczych laboratorium

W laboratorium prowadzone są prace badawcze dotyczące między innymi właściwości dielektrycznych, elektromechanicznych i termodynamicznych kryształów i ceramiek ferroelektrycznych, a także roztworów stałych ferroelektryków na bazie BaTiO_3 , $\text{Na}_{0.5}\text{Bi}_{0.5}\text{TiO}_3$, $\text{K}_{0.5}\text{Bi}_{0.5}\text{TiO}_3$, $\text{K}_{0.5}\text{Na}_{0.5}\text{NbO}_3$ itp., które są pozyskiwane we współpracy z innymi ośrodkami naukowymi i badawczymi w kraju i zagranicą. Badania w laboratorium mają na celu przybliżenie problemu mechanizmów odpowiedzialnych za przemiany fazowe występujące w ferroelektrycznych związkach typu perowskitu (ABO_3) oraz określenie wpływu jaki wywiera na ich przebieg i właściwości fizyczne

wprowadzanie obcych jonów, warunków wytwarzania oraz działanie czynników zewnętrznych (nacisku jedno- i dwuosiowego, stałego i zmiennego pola elektrycznego). Wyposażenie naszego laboratorium pozwala na badanie charakterystyk prądowo napięciowych, a także wykonanie badań impedancyjnych. Wykonywane są również badania właściwości dielektrycznych/ferroelektrycznych materiałów ceramicznych po uprzedniej ich polaryzacji. Badania są przeprowadzane w zakresie temperatur od pokojowej do 600°C.

Dodatkowo na wyposażeniu laboratorium są piły drutowe do precyzyjnego przecinania zarówno próbek materiałów ceramicznych jak i krystalicznych, dzięki którym bezpośrednio przed pomiarem możemy dociąć próbkę badanego materiału do odpowiednich wymiarów (wymaganych do danego pomiaru). Po takim zabiegu próbka wymaga dodatkowego przygotowania, aby pozbyć się wszelkich niedoskonałości, które mogłyby negatywnie wpłynąć na wyniki pomiarów, które również wykonywane jest w laboratorium.

W ramach laboratorium prowadzone są również badania teoretyczne ab initio - **Teoria funkcjonału gęstości DFT** (Density Functional Theory), czyli zbiór wielu metod kwantowo-mechanicznych, służących do modelowania budowy kryształów oraz cząsteczek chemicznych. Wykonywane są obliczenia ab initio kodem komercyjnym VASP (Vienna Ab initio Simulation Package) oraz ogólnie dostępnym Quantum Espresso na klastrach obliczeniowych.

3. Opis tematyki i prowadzonych aktualnie badań, przykładowe wyniki, wizualizacje, wykresy.

Obecnie w laboratorium prowadzone są badania dotyczące wpływu warunków technologicznych na wybrane właściwości fizykochemiczne tytanianu sodowo potasowego KBT, niobianu sodowo potasowego KNN i innych materiałów o strukturze perowskitu (poli- i monokryształów), w szczególności badania właściwości dielektrycznych, piroelektrycznych oraz pętli histerezy ferroelektrycznej, a także badanie zjawiska termoelektrycznego (efekt Seebecka).

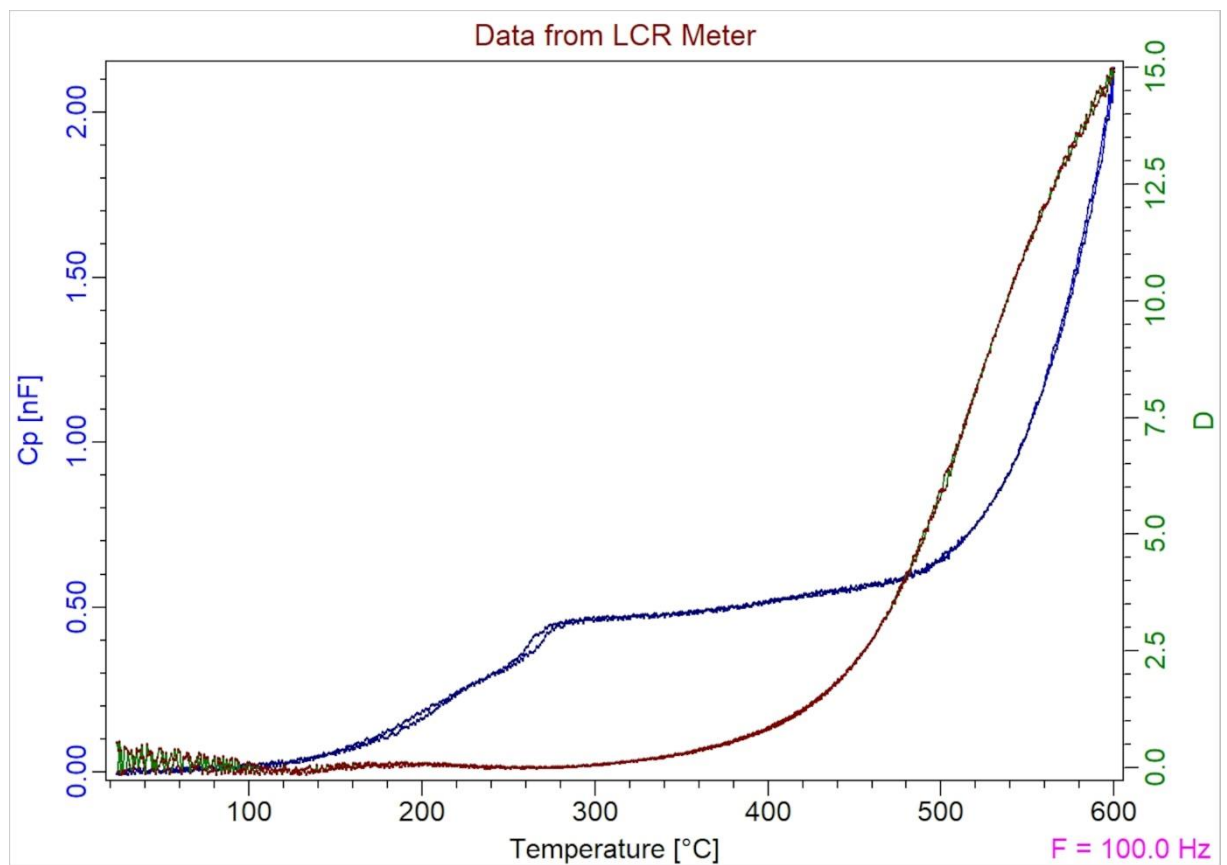
W ramach prowadzonych badań metodami DFT obecnie prowadzone są badania określenia wpływu domieszkowania atomami Co, Sr, Fe, Mn, Nb, Zn roztworów stałych na bazie związków ferroelektrycznych BT, NBT oraz KBT na:

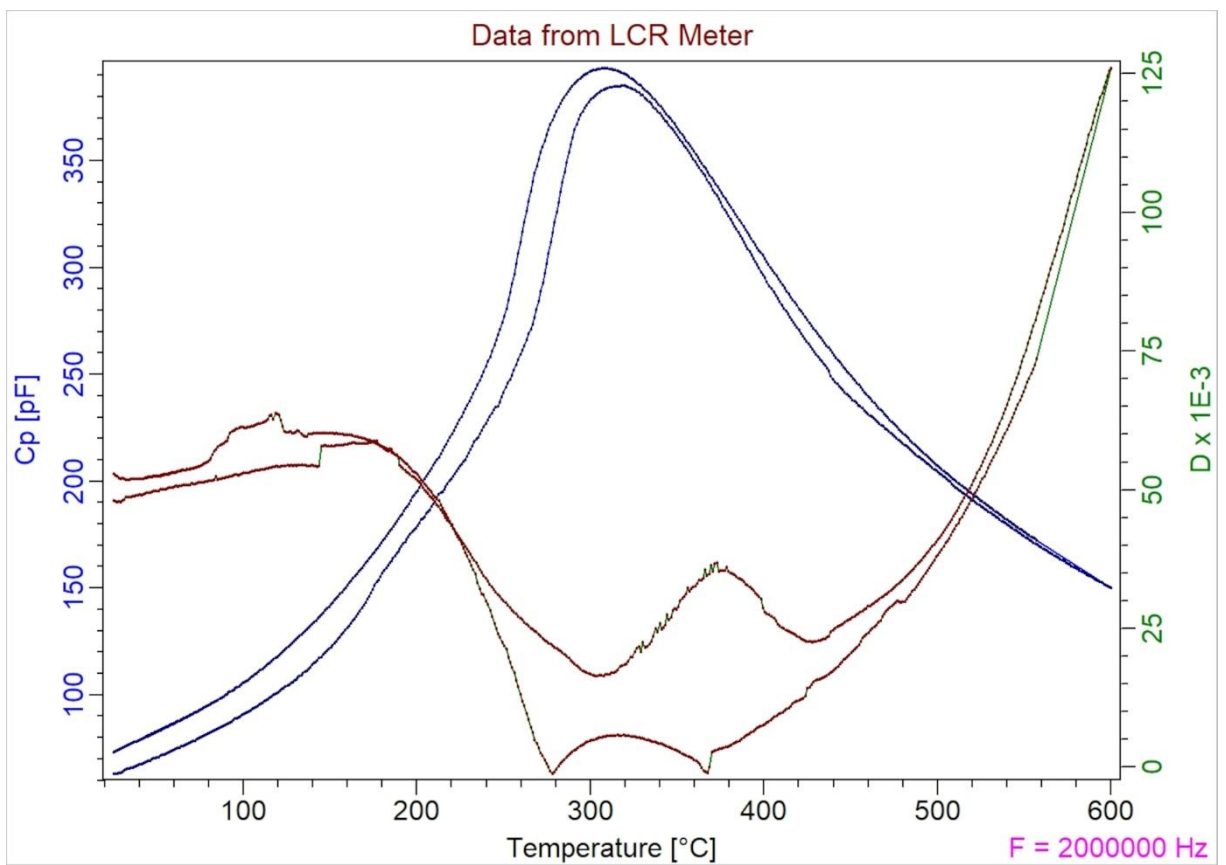
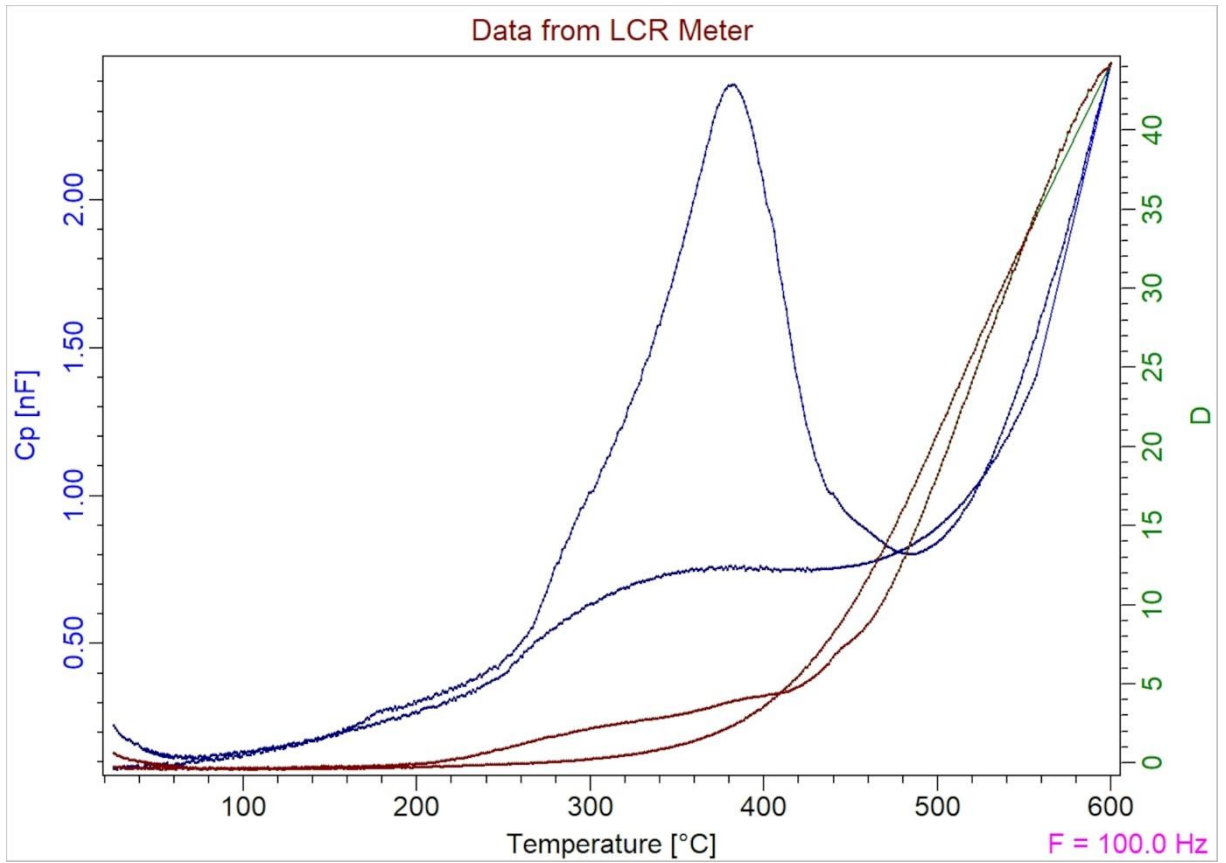
- Dynamikę sieci, polaryzację elektryczną
- Określenie optymalnej przerwy energetycznej dla celów fotowoltaiki
- Wyznaczenie wartości parametrów fizycznych takich, jak:
 - Gęstość stanów fononowych
 - Gęstość stanów elektronowych
 - Struktura pasmowa
 - Efektywne ładunki Borne'a
 - Rozkład gęstości ładunku

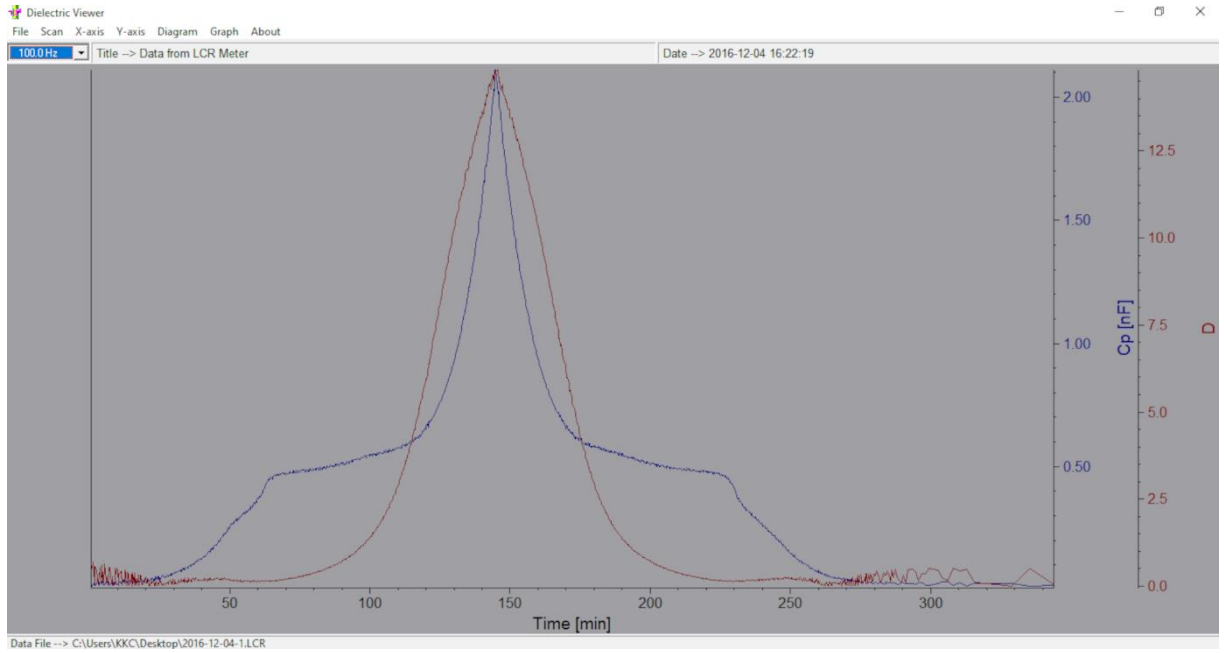
- Przenikalność elektryczna - epsilon
- Widma Ramana
- Widma IR
- Wartość optymalnej przerwy energetycznej w materiałach wykorzystywanych w fotowoltaice

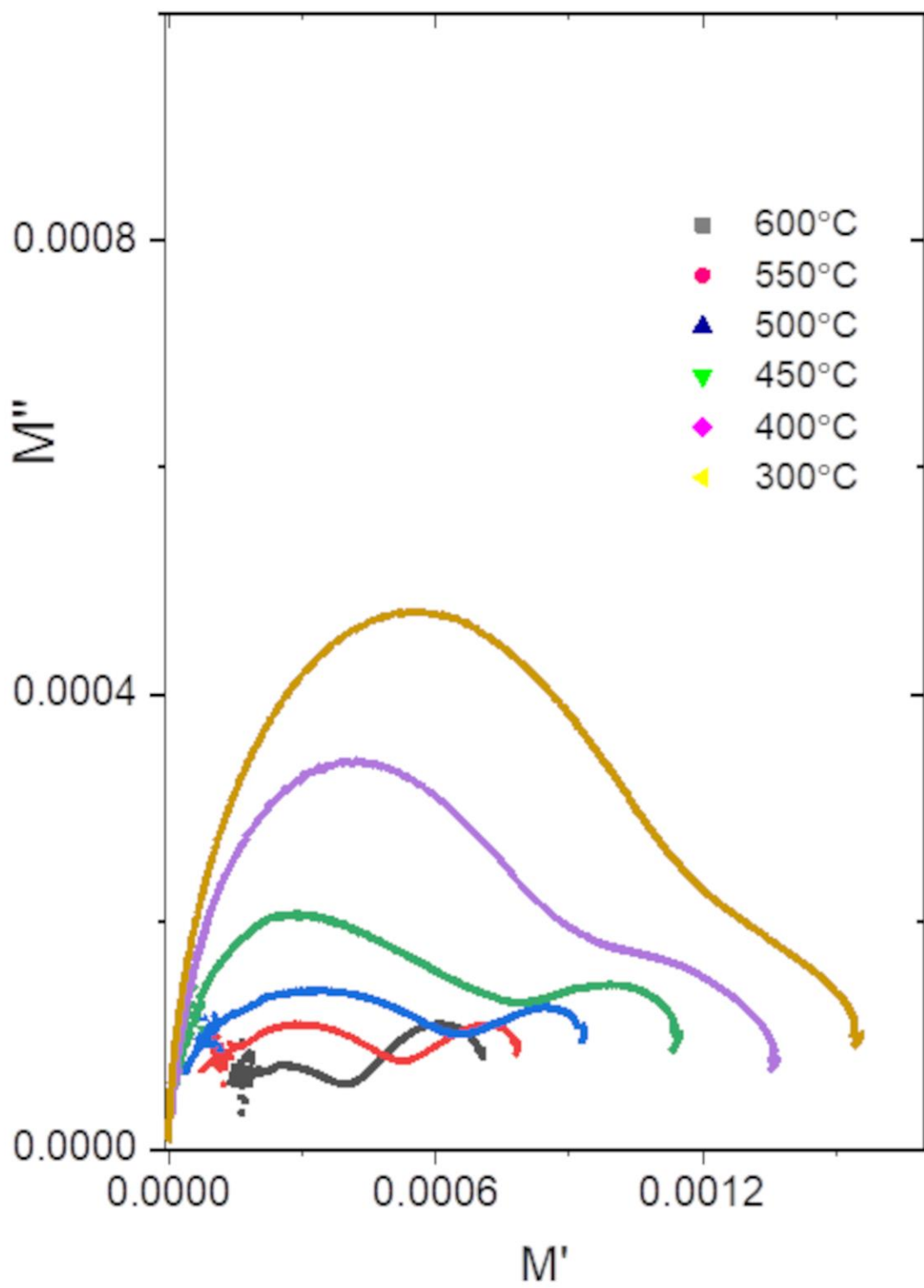
Opracowanie i analiza otrzymanych wyników, np. w programie OriginLab oraz PHONON.

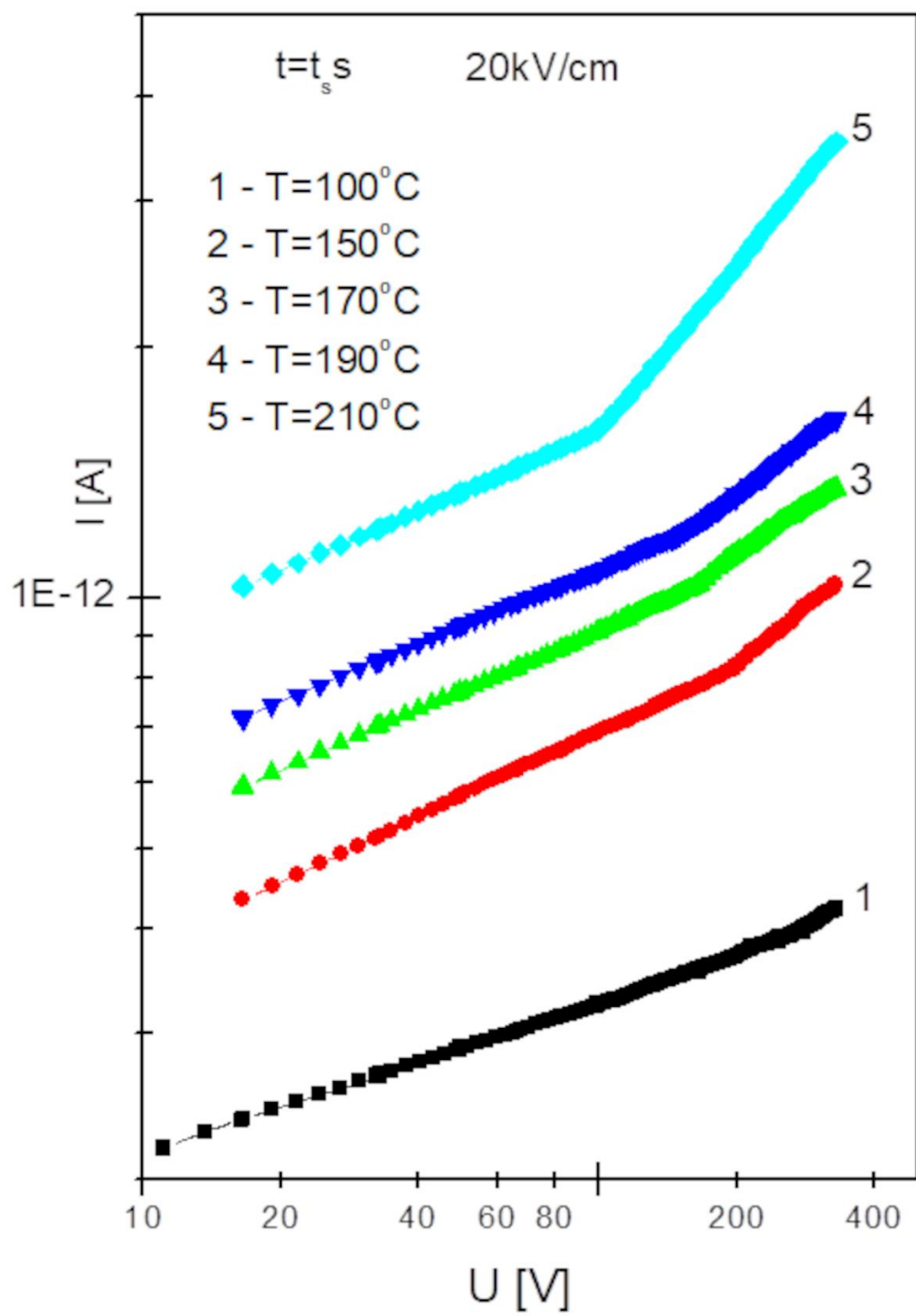
Przykładowe wyniki/wizualizacje/wykresy otrzymane z pomiarów w laboratorium:

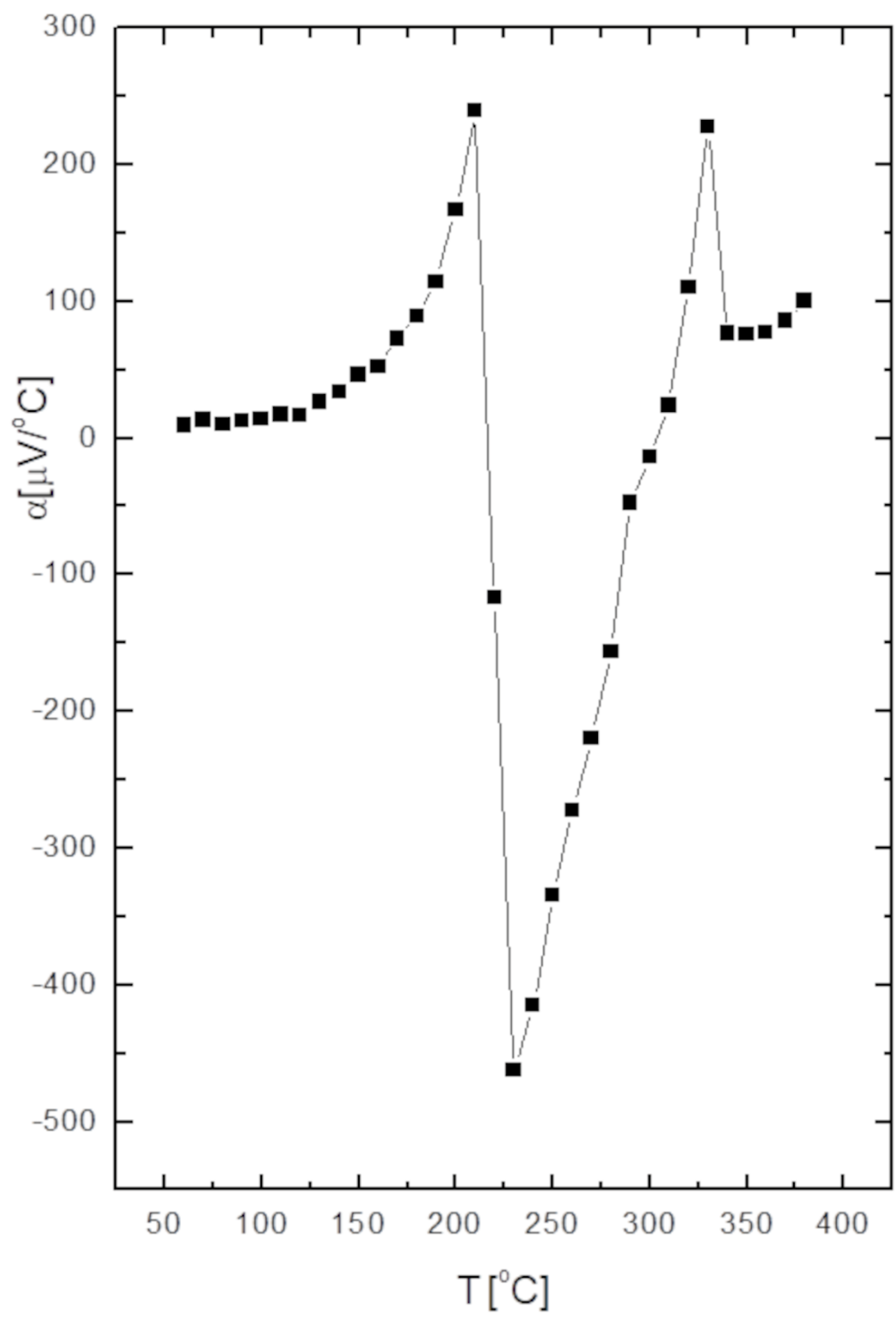








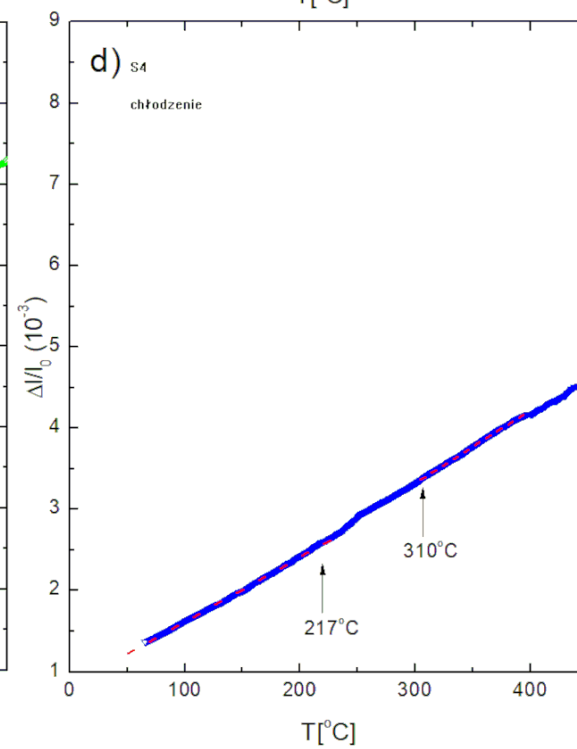
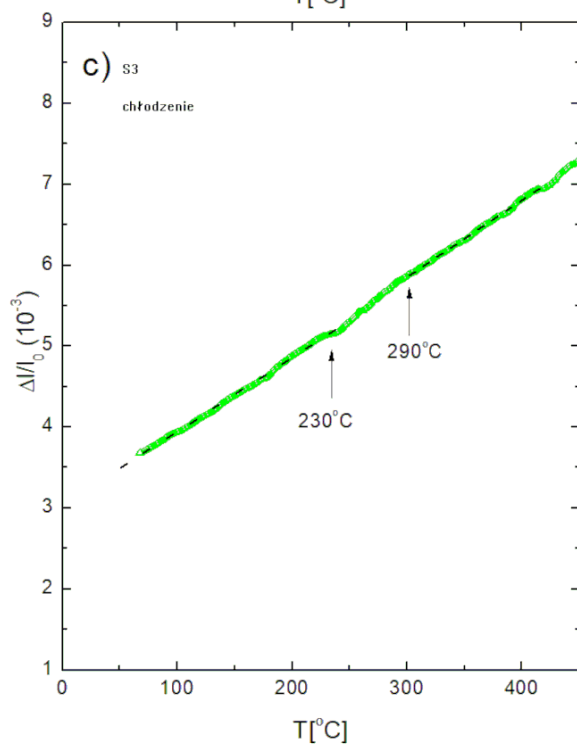
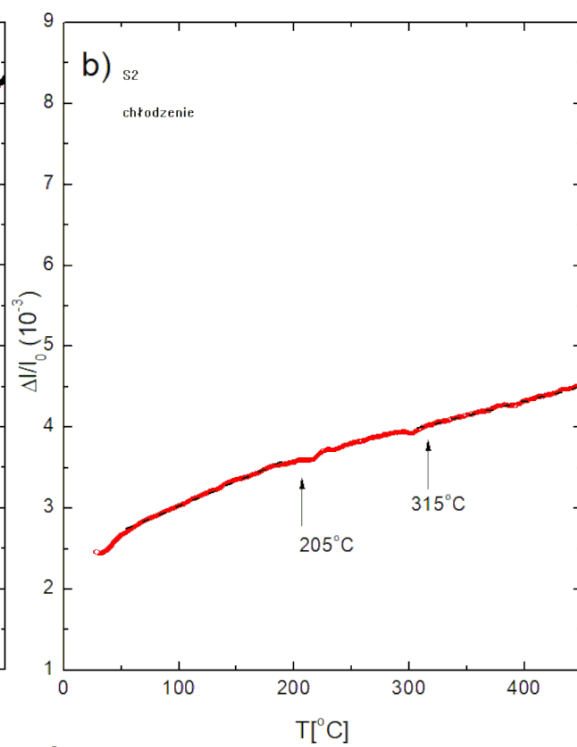
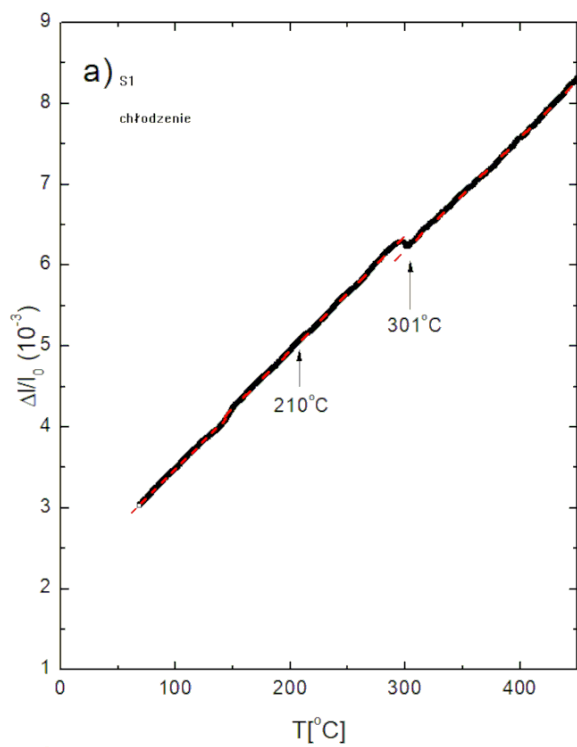




2016-10-27 10:40:49
Operator : |
Laboratory : AP Kraków
Atmosphere : Air
Piston Material : A1203
Sample Length : 1.00 mm
Range : 200 µm
Comments :
NBTcer V spiek

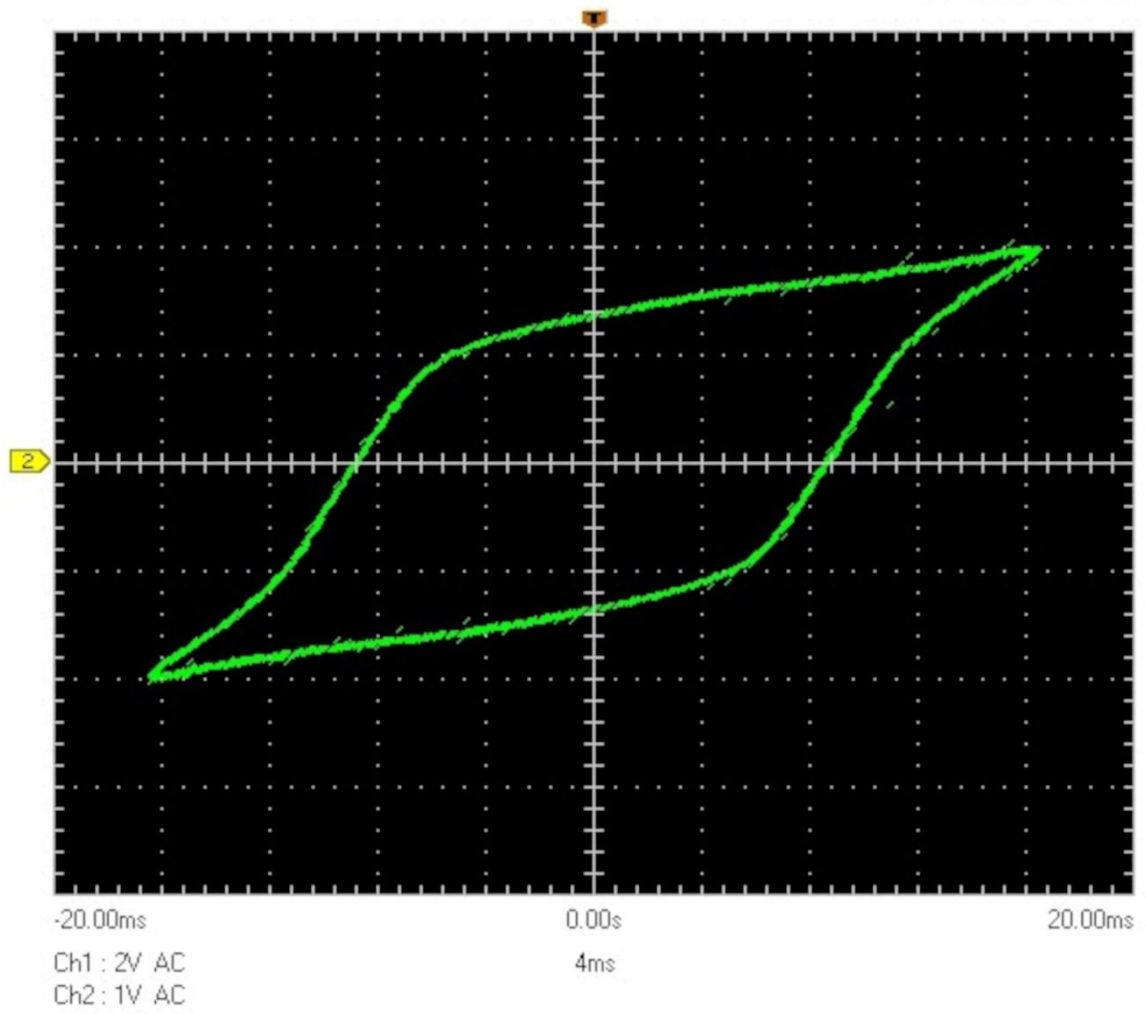
End of Comments

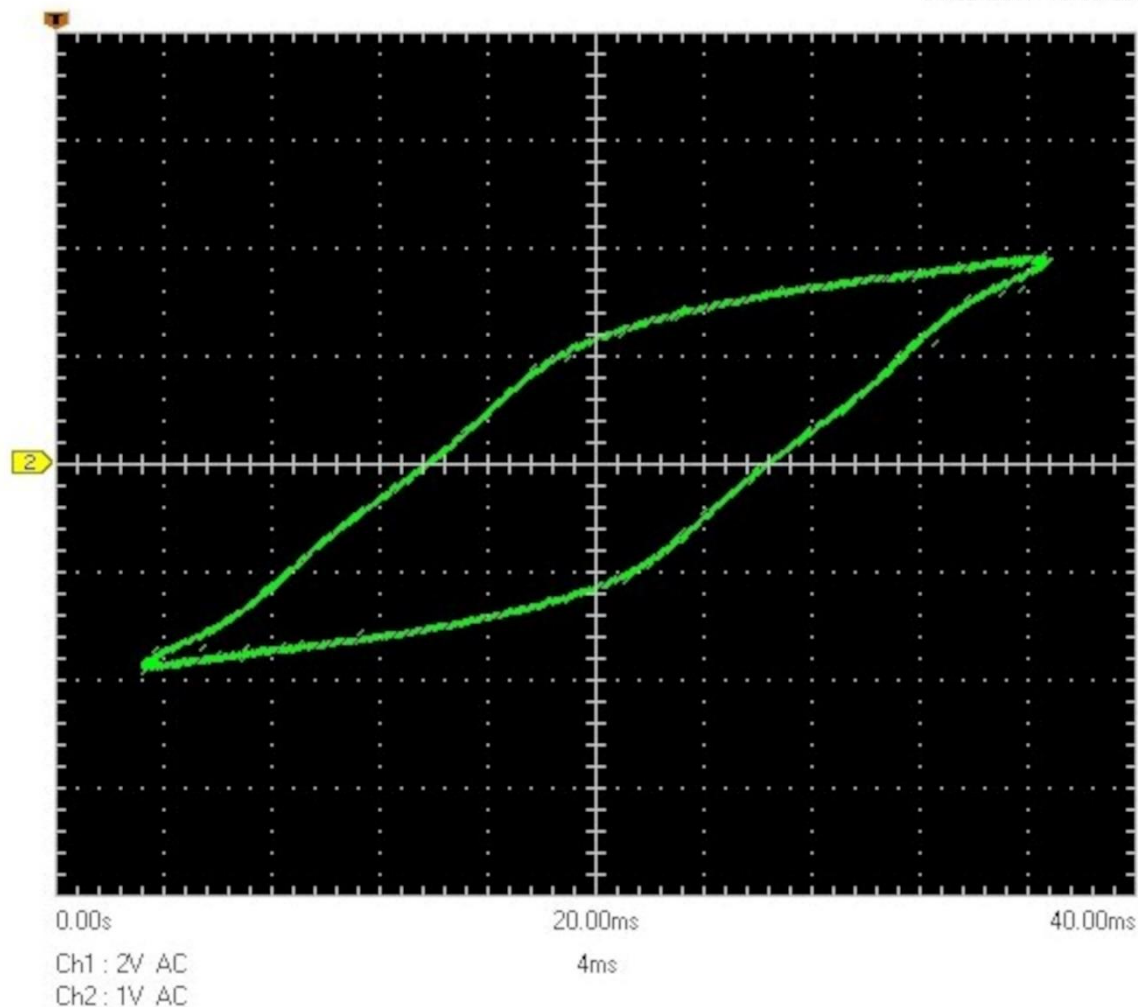
t[s]	Temp[mV]	D11[pF]
11.31	2.012	24.487000
22.56	2.035	24.351000
33.81	2.057	24.161400
44.56	2.077	23.790100
55.89	2.097	23.681800
67.61	2.118	23.563000
78.95	2.138	23.448400
90.28	2.156	23.347700
101.27	2.174	23.242200
112.58	2.192	23.127700
123.73	2.210	23.026700
134.63	2.227	22.927100
145.94	2.244	22.823500
157.39	2.263	22.715800
168.44	2.279	22.606300
179.61	2.298	22.497900
190.47	2.314	22.390000
201.52	2.332	22.282000
212.84	2.352	22.171000
224.27	2.372	22.059200



NBT III sp. II seria

6-Mar-2017 16:47:35





4. Opis możliwości realizacji prac studenckich np. licencjackich, magisterskich ew. innych aktywności studenckich.

Wyposażenie laboratorium pozwala na prowadzenie badań pod kątem wykorzystania zarówno w pracach licencjackich/inżynierskich, magisterskich a także doktorskich w zakresie badań właściwości materiałów dielektrycznych/ferroelektrycznych. Prowadzone badania z wykorzystaniem metod DTF również dają szerokie możliwości w zakresie prowadzenia prac dyplomowych.

Zakres prowadzonych w laboratorium prac daje również możliwość na realizację tematów z zakresu bezpieczeństwa (np. bezpieczeństwa pomiarów).

Studenci chętni do napisania prac dyplomowych obejmujących tematykę prac laboratorium, mogą ustalić konkretny temat po konsultacji z wybranym promotorem/opiekunem.