

Ελληνική περίληψη

Η διπλωματική εργασία που ακολουθεί χωρίζεται σε δυο βασικά μέρη, το θεωρητικό και το πειραματικό. Στο θεωρητικό μέρος, αρχικά γίνεται μια σύντομη εισαγωγή στο υλικό TiB_2 , που ανήκει στα διβορίδια μετάλλων μετάπτωσης. Έπειτα παρουσιάζονται εν συντομία τα βασικά δομικά χαρακτηριστικά του υλικού, καθώς και οι φυσικές και μηχανικές του ιδιότητες, που αξιοποιούνται σε πλήθος εφαρμογών. Επίσης αναφέρονται κάποιες από τις μεθόδους παραγωγής του υλικού και ειδικότερα των λεπτών υμενίων του, στις οποίες το υλικό εμφανίζει υπερστοιχειομετρία σε Βόριο. Επιπρόσθετα παρατίθεται το διάγραμμα της ενέργειας καταστάσεων του υλικού (DOS), το οποίο διευκολύνει την εξήγηση της φύσης του δεσμού που αναπτύσσεται ανάμεσα στα συστατικά του υλικού. Συνεχίζοντας στο θεωρητικό τμήμα της παρούσας εργασίας, δίνονται κάποια στοιχεία της μεθοδολογίας που ακολουθήθηκε. Πιο συγκεκριμένα περιγράφονται οι βασικές ιδέες που διέπουν τη Density Functional Theory (DFT), αλλά και οι μέθοδοι που προηγήθηκαν αυτής. Επίσης γίνεται περιγραφή των μεθόδων των ψευδοδυναμικών και των projector augmented waves (PAW), καθώς και των προσεγγίσεων που χρησιμοποιούνται για την περιγραφή της αλληλεπίδρασης των ηλεκτρονίων. Οι παραπάνω είναι οι θεωρίες στις οποίες βασίστηκε η μελέτη των δομικών και ελαστικών ιδιοτήτων του TiB_2 , στην παρούσα εργασία. Στη συνέχεια, γίνεται μια σύντομη εισαγωγή στο grid computing και στα λογισμικά υπολογισμών από πρώτες αρχές, δίνοντας ιδιαίτερη έμφαση στο λογισμικό πακέτο VASP (Vienna ab-initio simulation package). Το παραπάνω λογισμικό, σε συνδυασμό με την χρήση πόρων του HellasGrid, χρησιμοποιήθηκαν σε όλους τους υπολογισμούς που ακολουθούν. Στο πειραματικό τμήμα της εργασίας, παρατίθενται όλα τα αποτελέσματα των υπολογισμών. Αρχικά παρουσιάζεται η δομή του υλικού που προσομοιώθηκε και τα αποτελέσματα της μελέτης των δομικών της χαρακτηριστικών. Έπειτα χρησιμοποιώντας ισότροπες παραμορφώσεις κυψελίδας, υπολογίζεται το bulk μέτρο ελαστικότητας, αξιοποιώντας τα δεδομένα ενέργειας – όγκου των παραμορφωμένων δομών. Στη συνέχεια ασκώντας ανισότροπες παραμορφώσεις στην κυψελίδα, υπολογίζονται οι πέντε διαφορετικές ελαστικές σταθερές, οι οποίες οδηγούν στον υπολογισμό των ελαστικών ιδιοτήτων του υλικού. Σε όλους τους παραπάνω υπολογισμούς γίνεται σύγκριση με θεωρητικά και πειραματικά δεδομένα της βιβλιογραφίας. Στο τέλος του πειραματικού τμήματος, προσομοιώνονται υπερστοιχειομετρικές δομές του υλικού ($2,000 < x < 2,104$) και μελετώνται αντίστοιχα με παραπάνω, το bulk μέτρο ελαστικότητας και οι ελαστικές σταθερές και ιδιότητες. Ακολουθεί η σύγκριση των ιδιοτήτων που υπολογίστηκαν με αυτές του στοιχειομετρικού TiB_2 . Κλείνοντας, παρατίθενται τα συμπεράσματα και κάποια σχόλια που αφορούν τα αποτελέσματα της παρούσας διπλωματικής εργασίας.