الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية
وزارة التعليم العالي والبحث العلمي
جامعة محمد بوضياف - المسيلة

كليـــة: العلـــــــوم
قســم: الفيـــــــزياء
رقم : Ph/APP/02/2023

ميدان: عـــلـــوم المادة
فرع: الفـــيزيـاء
تخصص: فيزياء تطبيقية

## مذكرة مقدمة لنيل شهادة الماستر أكاديمـــي

**إعداد الطالب:** بن يطو بوبكر

تحت عنوان:

# دراسة نظرية للخواص الفيزيائية للمركبات ذات التركيب البيروفسكيت العكسي

# $XBPt_3$ (X = Nb,Lu)

نوقشت بتاريخ:18 /2023/06

أمام الجنة المكونة من السادة الأساتذة

| | | | |
|---|---|---|---|
| د- عـــلالـــي جمـــال | جامعة محمد بوضياف – المسيلة | أ. محاضر- أ | رئيســا |
| د- بن عامـــــر عـــلي | المدرسة العليا للأساتذة - بوسعادة | أ. محاضر- أ | مشرفـــا |
| د- خلف الله عبد القادر | المدرسة العليا للأساتذة - بوسعادة | أ. محاضر- ب | مشرفا مساعدا |
| د- سعـد سعود صابـــر | جامعة محمد بوضياف – المسيلة | أ. محاضر- أ | ممتحنـــا |

السنة الدراسية:2023/2022

# الإهداء

بسم الله الرحمن الرحيم

وصلى الله على صاحب الشفاعة سيدنا محمد النبي الكريم ، و على آله و صحبه أجمعين و من تبعهم بإحسان إلى يوم الدين و بعد:

أحمد الله تعالى و أشكره أن وفقت لإنجاز هذا العمل المتواضع ، فالحمد لله حمدًا كثيرا

إلى من افتقده في مواجهة الصعاب ، و لم تمهله الدنيا لأرتوي من حنانه إلى روح أبي الطاهر رحمة الله عليه.

إلى من تعلمت منها الصمود مهما كانت الصعوبات ، التي أنارت دربي بنصائحها و منحتني القوة و العزيمة لمواصلة الدرب ، إلى الغالية " أمي " أطال الله في عمرها.

إلى من ألجأ إليهم في وقت الضيق و المصاعب فأجدهم دائما بجانبي :" سهيلة ، حليمة ، إيمان ، خولة ، شهرة " دمتم في حياتي.

إلى من ساندتني و خطت معي خطواتي و يسرت لي الصعاب الى زوجتي العزيزة

الى زهرتي و فلذة كبدي ابنتي رزان

إلى سبب سعادتي و بسمتي ، إلى القلوب الصافية النقية :أبرار – أريج – أمير – وصال – أماني – نور اليقين – ساجدة– إياد – سراج – زينب

إلى كل من أحببتهم و صادقتهم طيلة السنوات خلال مشواري الجامعي

إلى الزملاء و الزميلات الذين كانوا معنا مسيرة الدراسة الجامعية مع تمنياتي لهم بالتوفيق

**بوبكر بن يطو**

# شكر وتقدير

عملا بقول الرسول " ﷺ" من لم يشكر الناس لم يشكر الله أحمد الله تعالى حمدا كثيرا طيبا مباركا ملئ السموات و الأرض على ما أكرمني به من إتمام هذا العمل ، الذي أرجو أن أكون قد وفقت في انجازه

و كل الشكر و التقدير إلى الأستاذ الدكتور المشرف "بن عامر علي"

والدكتور "خلف الله عبد القادر" على كل ما قدماه لي من توجيهات و معلومات قيمة.

و أتقدم أيضا بشكري الجزيل الى أساتذتي الكرام "عـلالـي جمـال" و "سعـد سعود صابـر" لموافقتهم المشاركة في لجنة المناقشة

و الشكر موصول لكل أساتذتي الذين تتلمذت على أيديهم في كل مراحل دراستي لأصل إلى ما أنا عليه الآن.

أرجو أن يكون هذا العمل فيه الفائدة و نسأل الله أن يجعله نبراسا لكل طالب علم ، و أن تكلل المجهودات المبذولة في رسالة

الماستر بالنجاح و القبول من جانب أعضاء لجنة المناقشة المبجلين .

**شكرا جزيل الشكر**

# الفهـــــرس

مقدمة عامة..... 01

## الفصل الأول: التقريب الحسابي

1-1- مقدمة..... 04
1-2- معادلة شرودنغر..... 04
1-3- التقريبات التي تم إجراؤها على معادلة شرودنغر..... 06
1-3-1- تقريب اوبنهايمر..... 07
1-3-2- تقريب هارتري..... 07
1-3-3- تقريب هارتري فوك..... 08
1-4- نظرية دالية الكثافة ..... 10
1-5- نظرية توماس فارمي..... 11
1-6- نظرية هوهنبارغ و كوهن..... 13
1-7- معادلات كوهن شام..... 14
1-8- حلول معادلة كوهن شام..... 15
1-9- دالية التبادل و الارتباط..... 16
1-10- تقريب كثافة الموضع LDA..... 16
1-11- تقريب التدرج المعمم GGA..... 17

## الفصل الثاني:الخواص الميكانيكية

2-1- مقدمة..... 19
2-2- مبادئ أساسية في علم البلورات..... 19
2-2-1- عموميات على البلورة..... 19
2-2-2- عمليات التناظر..... 22
2-3- الطاقة و ممتد ثوابت المرونة..... 22
2-4- ممتد التشوه..... 23
2-5- ممتد الإجهاد..... 23
2-6- العلاقة بين الإجهاد و التشوه..... 24
2-7- البلورة في نظام مكعب..... 26
2-8- معامل بواسن..... 27

2-9- معامل القص..... 27
2-9-1- تأثير درجة الحرارة والضغط على معامل القص..... 28
2-9-2- جدول قيم معامل القص..... 29
2-10- معامل الانضغاطية..... 29
2-11- تباين مناحي الخصائص المرونية..... 31
2-12- معامل يونغ..... 32

## الفصل الثالث:النتائج والمناقشة

3-1- مقدمة..... 35
3-2- مركبات البيروفسكايت..... 35
3-3- مركبات البيروفسكايت العكسي..... 35
3-4- برنامج الحساب**CASTEP**..... 35
3-5- طرق الأمواج المستوية ..... 36
3-6- اختيار طريقة الحساب..... 37
3-7- حدود التقارب..... 37
3-7-1- دراسة التقارب لدالة الطاقة الكلية بدلالة معامل القطع..... 37
3-7-2- دراسة تقارب الطاقة الكلية بدلالة قيم الشبكة NKpt..... 39
3-8- الخصائص البنيوية ..... 40
3-9- الخصائص الالكترونية..... 45
3-9-1- بنية عصابة الطاقة الالكترونية..... 45
3-9-2- كثافة الحالات الالكترونية..... 45
3-10- الخصائص المرونية..... 48
خاتمة عامة..... 51
المراجع..... 52
الجداول ..... 57
الأشكال..... 58
الملخص..... 60

# مقدمة عامة

# ﴿مقدمة عامة﴾

تعتبر فيزياء المواد من أهم المجالات التي تختص في دراسة الأجسام و تحديد طبيعتها سواء كانت ناقلة، نصف ناقلة أو معدنية أو غير ذلك، وترتبط دراسة المواد و وصفها وتحديد خصائصها بالتطور التكنولوجي و ذلك لاهتمام الباحثين بنوع المادة و أهميتها قبل إدراجها في تكنولوجيا معينة [1].

تنقسم طريقة دراسة المواد إلى ثلاثة أقسام مختلفة ، أولها الدراسة التجريبية و تعتمد على المواد و البيانات والعمل المخبري ، و الطريقة الثانية هي طريقة شبه تجريبية و التي تعتمد على البيانات القبلية مع العديد من التجارب، و أخيرا الطريقة النظرية و هي واحدة من أهم الدراسات في الوقت لأنها تعتمد على المحاكاة ذات الجوانب النظرية البحتة، بالإضافة إلى ذلك يتم إجراء الدراسة الدقيقة من خلال جهاز الكمبيوتر و برامج خاصة أظهر هذا النوع من الأبحاث فعاليته في الدراسة الدقيقة للخصائص الفيزيائية و الكيميائية المميزة للمواد [2]. و قبل اختيار المادة المستخدمة في الدراسة لمعرفة خصائصها من الضروري التأكد من أنها مناسبة للتطبيق المستخدم فيها.

إن حساب الخصائص الفيزيائية (البنيوية، المرونية، الإلكترونية، الضوئية،...) من طرف الفيزيائيين و الباحثين في مجال المواد الصلبة، شكل أداة فعالة لفهم العلاقات المختلفة الموجودة بين البنى البلورية [3]. وحاليا تستخدم الكثير من الطرق لمعرفة خصائص هذه المواد خاصة طرق Ab initio التي تعتبر وسيلة فعالة لمعرفة الخصائص الفيزيائية للبنى البلورية المعقدة و بالتالي معرفة مواقع استخدامها في التطبيقات التكنولوجية المختلفة، و جاءت أيضا هذه الطرق كبديل عن التجارب العلمية المكلفة التي يصعب إنجازها في المخبر. في هذا العمل المتواضع سنقوم بدراسة نظرية لمحاكاة الخصائص البنيوية و المرونية للمركبين التاليين $XBPt_3$ ($X=Lu، Nb$) حيث يمكن أن يشكلا مركبين ينتميان إلى عائلة البيروفسكيت العكسية Les antiperovskite و لذلك فهي تشكل قاعدة أساسية للعديد من التطبيقات التكنولوجية الحديثة.

الغرض الأساسي من هذه الدراسة هو اكتساب منهجية علمية أثناء البحث و بالتالي الحصول على مجموعة من المعارف و المهارات، كاستعمال طريقة المبادئ الأساسية الأولية Ab initio لحساب الخصائص الفيزيائية للمواد، و التمكن من برنامج المحاكاة CASTEP

(**C**ambridge **S**erial **T**otal **E**nergy **P**ackage) ، الذي يعمل بمبدأ بنظرية دالية الكثافة **DFT** (**D**ensity **F**unctional **T**heory) و يستعمل تقنية للدمج بين طريقة الأمواج المستوية (PW) و أشباه الكمونات (الكمون الكاذب) (PP :Pseudo Potentiel) [4]، بحيث يسمح بالحصول على الطاقة الكلية للنظام في الحالة الأساسية. و التمكن أيضا من اكتساب مهارات التحكم في استخدام برنامج رسم البيانات Origin.

و ينقسم هذا العمل إلى ثلاثة فصول كالآتي:

- ❖ في الفصل الأول تطرقنا إلى الجانب النظري المتعلق بهذه الدراسة ، و جاء فيه ملخص حول معادلة شرودنغر و التقريبات المختلفة من بينها تقريب بورن ابنهايمر و تقريب هارتري و هارتريفوك و تطرقنا أيضا لنظرية دالية الكثافة (DFT) بتقريباتها، تقريب كثافة الموضع LDA و تقريب التدرج المعمم GGA.
- ❖ يتناول الفصل الثاني دراسة الخواص الفيزيائية (البنيوية و المرونية) للمواد الصلبة و أهم ما يميزها كمواد تجرى عليها العديد من التجارب المخبرية لاستخداماتها العديدة.
- ❖ أما الفصل الثالث و الأخير، فقد خصص لتقديم وصف موجز لبرنامج CASTEP و كذا طريقة استعماله مع التطرق إلى ذكر النتائج المتمثلة في شروط التقارب للمركبين المدروسين و خصائصهما البنيوية والالكترونية و المرونية و تفصيلها.

نختتم هذا العمل بملخص شامل لكل ما تم تغطيته في هذه الدراسة، على أمل أن تكون ذات فائدة لجميع طلاب العلوم في مثل هذه الدراسات.

# الفصل الأول

# التقريب الحسابي

{ نظرية دالية الكثافة }

[DFT]

## 1.1.مقدمة:

في عشرينات القرن الماضي تم التعبير عن حركة مجموعة من الإلكترونات و الأنوية بعبارة رياضية عن طريق العالم اروين شرودنغر(Erwin Schrödinger)، العبارة تعرف بدالة الموجة و هي أساس الفيزياء الكمية، لكن للأسف هذه المعادلة لا تمتلك حلا مضبوطا إلا في حالة واحدة و هي نظام نووي أو جزيئي يحتوي على إلكترون وحيد، لهذا السبب فان إيجاد حل المعادلة في اغلب الحالات هي مهمة جد معقدة ويكون حلها مجرد تقريب. الهدف الأساسي في الفيزياء الكمية هو إيجاد حل لمعادلة شرودنغر بحيث يقترب قدر الإمكان من القيمة التي تعبر عن نظام فيزيائي حقيقي، من العوائق الفيزيائية التي تشكل تحديا بالنسبة للفيزيائيين في مجال المادة هو الفهم الدقيق لانتظام الجزيئات المشكلة للبلورات[5].

نقدم في هذا الفصل الصيغ المختلفة المستعملة في حساب الخصائص البنيوية و المرونية و الالكترونية في الأجسام الصلبة، بعد إظهار حدود التقريبات التي تعتمد بشكل مباشر على الدالة الموجية، سنقوم بتقديم نظرية دالية للكثافة (DFT) التي تعتمد على نظرية هوهنبارغ وكوهن و التي سيتم استخدامها كجانب نظري في هذا العمل، بعد هذا سنقوم بتقديم شرح خاص بمعادلات كوهن وشام المستعملة في العمل و كذلك أهمية ترميز التبادل و الارتباط مع مختلف أنواع الداليات مثل تقريب كثافة الموضع LDA و تقريب التدرج المعمم GGA،...

## 2.1.معادلة شرودنغر :

تعتبر معادلة شرودنغر المعادلة الأساسية في مكانيك الكم، حيث تصف كيفية تغير الحالة الكمومية لنظام فيزيائي دقيق بتطور الزمن، و قد صاغها العالم النمساوي (ارفين شرودنغر). تدرس هذه المعادلة حالات النظم الكمومية المستقلة على الزمن، و لها أهمية خاصة في ميكانيك الكم حيث تعتبر كقانون التحريك الثاني لنيوتن في الفيزياء الكلاسيكية، و تعطى العلاقة العامة لها[6] بـ :

$$H\Psi = E\Psi \qquad (1)$$

حيث :

H : هاميلتون النظام

E : الطاقة الكلية للنظام

$\psi$ : دالة الموجة للنظام و هي دالة لإحداثيات الأنوية و الالكترونات (الفرميون) ، و تحتوي على جميع المعلومات عن النظام.

إن هاميلتون نظام بلوري يحتوي على عدد كبير جدا من الجسيمات المتفاعلة الالكترونات "الخفيفة و الأنوية " الثقيلة" و في غياب التفاعل مع الوسط الخارجي تعطى:

$$H = T_e + T_n + V_{e_e} + V_{e_n} + V_{n_n} \quad (02)$$

$$T_{\mathrm{e}} = -\frac{\hbar^2}{2\mathrm{M_e}}\sum_{\mathrm{i=1}}^{\mathrm{N_e}}\nabla_{\mathrm{i}}^2 \quad (03)$$

$$T_n = -\frac{\hbar^2}{2M_n}\sum_{i=1}^{N_n}\nabla_i^2 \quad (04)$$

$$V_{e-e=}\sum_{i,i\neq j}\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{2}\left(\frac{e^2}{\left|\vec{r_i}-\vec{r_j}\right|}\right) \quad (05)$$

$$V_{n-n=}\sum_{\alpha\neq\beta}\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{2}\left(\frac{Z_\alpha Z_\beta e^2}{\left|\vec{R}_\alpha-\vec{R}_\beta\right|}\right) \quad (06)$$

$$V_{n-e=}\sum\nolimits_{i.\alpha}-\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\left(\frac{Z_\alpha e^2}{\left|\vec{r}_i-\vec{R}_\alpha\right|}\right) \quad (07)$$

حيث :

$T_e$: الطاقة الحركية للالكترونات.

$T_n$: الطاقة الحركية للانوية.

$V_{e-e}$: طاقة التفاعل الكترون–الكترون .

$V_{e-n}$: طاقة التفاعل الكترون– نواة .

$V_{n-n}$: طاقة التفاعل نواة– نواة.

$i$ و $j$ قرائن خاصة بالالكترونات.

$\alpha$ و $\beta$ قرائن خاصة بالأنوية.

$M_e$ ، $M_n$ كتل الالكترونات و الأنوية على التوالي

$Z_\alpha$،$Z_\beta$ الأعداد الذرية للأنوية $\alpha$ و $\beta$ على التوالي

$|\vec{r}_i - \vec{r}_j|$ المسافة بين الإلكترونين i و j

$|\vec{R}_\alpha - \vec{R}_\beta|$ المسافة بين النواتين $\alpha$ و $\beta$

$|\vec{r}_i - \vec{R}_\alpha|$ المسافة بين الإلكترون i و النواة $\alpha$

$Z_\alpha e$ شحنة النواة.

مؤثر لابلاس $\nabla^2 = \frac{\partial}{\partial X^2} + \frac{\partial}{\partial Y^2} + \frac{\partial}{\partial Z^2}$

يمكن إيجاد الطاقة و الدوال الموجية للنظام بحل معادلة شرودنغر (1) .

يمكن إيجاد حلول لهذه المعادلة المستقلة عن الزمن بدقة في حالة أنظمة الهيدروجين فقط. في حالة وجود نظام متعدد الالكترونات، بسبب التفاعلات الالكترونية، فإن حل معادلة شرودنغر يزداد صعوبة [7] و لذلك قام العلماء ببعض التقريبات لغرض تبسيطها.

## 3.1.التقريبات التي تم إجراؤها على معادلة شرودنغر:

لإيجاد حلول تقريبية مقبولة لمعادلة شرودنغر تم إجراء مجموعة من التقريبات :

### 1.3.1.تقريب اوبنهايمر (Born-Oppenheimer):

من اجل تبسيط الحل للمعادلة السابقة نستعمل تقريب اوبنهايمر، حيث يفترض هذا التقريب أن النواة ساكنة بالنسبة للإلكترون و ذلك نظرا لحركة الالكترونات السريعة جدا بالنسبة لحركة الأنوية، أي أن الطاقة الحركية للأنوية مهملة أمام حركة الالكترونات.

$T_n \cong 0$ وطاقة التفاعل بين الأنوية ثابتة $V_{n-n} = cte$ [8].

أي يصبح الهاملتوني الكلي بالصيغة التالية :

$$H_e = T_e + V_{e-e} + V_{e-n} \qquad (08)$$

و يسمى $H_e$ بهاملتوني الالكترونات.

$$H_e = \sum_{i=1}^{N} \frac{-\hbar^2}{2m_e}\Delta_i + \frac{1}{2}\sum_{i\neq j}\frac{e^2}{|\vec{r_i} - \vec{r_j}|} - \sum_{i,\alpha}^{n}\frac{Z_\alpha e^2}{|\vec{r_i} - \overrightarrow{R_\alpha}|} \qquad (09)$$

إذن معادلة شرودنغر للالكترونات هي :

$$H_e \psi_e = E_e \psi_e \qquad (10)$$

هذه الأخيرة لا يمكن حلها بالطرق الرياضية المعروفة لذلك نستخدم تقريب أخر يسمى تقريب هارتري، يستخدم هذا الأخير بكثرة في الكيمياء الكمية لدراسة الجزيئات و الذرات، بينما في فيزياء المواد فتستعمل عدة طرق حديثة و أكثر دقة و فعالية مثل نظرية دالية الكثافة (DFT) [9].

### 2.3.1.تقريب هارتري :

هذا التقريب يعرف أيضا بتقريب الحقل المتوسط، أين يفترض أن كل الكترون يتحرك بشكل مستقل في حقل متوسط خلقته الالكترونات و الأنوية الأخرى. و بذلك فإن هذا التقريب يحول مشكلة جسيمات متعددة إلى مشكلة إلكترون واحد(منفرد) [10،11].

و هذا يجعل من الممكن وصف الدالة الموجية للنظام الالكتروني بجداء مباشر لدوال الموجة الأحادية الالكترونية بحيث[12] :

$$\Psi_e(\vec{r}_1, \vec{r}_2, ..) = \prod_{i=1}^{N_e}\Psi_i(\vec{r}_i) = \Psi_1(\vec{r}_1)\Psi_2(\vec{r}_2) \dots \dots \Psi_{N_e}(\vec{r}_{N_e}) \qquad (11)$$

$N_e$ : العدد الكلي للإكترونات.

و بالتالي فان طاقة النظام تساوي مجموع طاقات جميع الإلكترونات :

$$E_e = \sum_{i=1}^{N_e} E_i \qquad (12)$$

و تكتب معادلة شرودنغر ذات الجسيم الواحد و التي تسمى معادلة هارتري على النحو التالي :

$$H_i = \frac{-\hbar^2}{2m}\nabla_i{}^2 + U_i(\vec{r}_i) + V_i(\vec{r}_i) \qquad (13)$$

حيث :

$$V_i(\vec{r}_i) = \frac{1}{2}\sum_{i,i\neq j}\left(\frac{Ke^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|}\right) \qquad (14)$$

الكمون الفعال لهارتري .

$$U_i(\vec{r}_i) = -\sum_{\alpha}\frac{Z_\alpha Ke^2}{|\vec{r}_i - \vec{R}_\alpha|} \qquad (15)$$

$U_i$ الطاقة الكامنة لإلكترون $i$ في حقل الأنوية

### 3.3.1.تقريب هارتري فوك:

يعتمد التقريب على نموذج الإلكترون المستقل حيث افترض هارتري أن كل الكترون يتحرك منفردا في الحقل المتوسط المتولد عن الأنوية وباقي الإلكترونات الأخرى (نموذج الإكترونات الحرة)، و بالتالي يصبح المشكل لدينا يتغير من عدد كبير من الإلكترونات إلى عدد وحيد، و يكتب الهاملتوني للجملة : [14،13]

$$H=\sum_{i=1}^{N} H_i \qquad (16)$$

حيث:

$$H_i = \frac{-h^2}{2m}\nabla^2 + U_i(\vec{r}_i) + V_i(\vec{r}_i) \qquad (17)$$

يمثل $H_i$ هاملتونيان الإلكترون $i$ .

$$\left[\frac{-h^2}{2m}\nabla^2 + U_i(\vec{r}_i) + V_i(\vec{r}_i)\right]\psi_i(\vec{r}) = E\psi_i(\vec{r}) \qquad (18)$$

حيث:

$$U_i(\vec{r}_i) = -\sum_k \frac{Z_k e^2}{|\vec{r}_i - \vec{R}_k^0|} \qquad (19)$$

تمثل الطاقة الكامنة للإلكترون في حقل الأنوية

$R_K^0$ :يمثل موضع الأنوية.

$$V_i(\vec{r}_i) = V_H(\vec{r}_i) = -\int d\overrightarrow{r'}\rho\left(\overrightarrow{r'}\right)\frac{1}{\left|\vec{r}_i - \overrightarrow{r'}\right|} \qquad (20)$$

الكمون الفعال لهارتري

و تكتب المعادلة ب(18):

$$H_i = \frac{-h^2}{2m}\Delta_i + V_{eff}(\vec{r}_i) \qquad (21)$$

و التعبير عن الكمون الفعال على أنه مجموع لهذه التوزيعات بالعلاقة:

$$V_{eff}(\vec{r}) = V_H(\vec{r}_i) + V_{ext}(\vec{r}_i) \qquad (22)$$

إذن بإضافة الكمون الفعال لمعادلة شرودنغر للإلكترونات نجد:

$$\left[\frac{-h^2}{2m}\Delta_i + V_{eff}(\vec{r})\right]\psi_i(\vec{r}) = \varepsilon_i\psi_i(\vec{r}) \qquad (23)$$

حيث:

$\psi_i(\vec{r})$ : دالة الموجة للإلكترون المستقل.

تكتب دالة الموجة الكلية للجملة كجداء دوال الحالة لكل الالكترونات على الشكل:

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2 \dots\dots\dots) = \prod_{i=1}^{N}\psi_i(\vec{r}_i) \qquad (24)$$

و تكتب الطاقة الكلية للجملة كمجموع الطاقات الموافقة لكل حالة الكترونية:

$$\mathrm{E} = \sum E_i \qquad (25)$$

في عام 1930 بين فوك أن الدالة الموجية لهارتري لا تحترم مبدأ استبعاد باولي، فقام بتحسين نموذج هارتري و ذلك بإدخال مبدأ السبين لنظام الإكترونات بحيث توجد N! احتمال لوضع N إلكترون على N موضع $\vec{r}_1 \vec{r}_2 \dots \dots \dots \vec{r}_N$ [15].

عند تطبيق كل التبديلات نحصل على N! حدا لنفس النوع.

دالة الموجة هي مجموع كل الحدود مع الأخذ بعين الإعتبار الإشارتين(+) و (−) لتصبح بشكل محدد يدعى محدد سلاتر(Déterminat de Slater).

$$\psi(\vec{\mathrm{r}}_1, \vec{\mathrm{r}}_2, \dots \dots \dots, \vec{\mathrm{r}}_\mathrm{n}) = \frac{1}{\sqrt{\mathrm{N!}}} \begin{bmatrix} \psi_1 & \cdots & \psi_\mathrm{n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_\mathrm{n} & \cdots & \psi_\mathrm{n} \end{bmatrix} \qquad (26)$$

و الثابت $\frac{1}{\sqrt{N!}}$ هو ثابت التعامد. و من بين الصعوبات التي تصادف حساب بنية عصابات الطاقة هو تحديد الكمون داخل البلورة.

معادلة شرودنغر بعد التصحيح بالعبارة التالية:

$$\frac{-\nabla^2}{2m}\psi_i(\vec{r}) + V_i(\vec{r})\psi_i(\vec{r}) + V_H(\vec{r})\psi(\vec{r}) - \sum_j \int \frac{dr}{|\vec{r}-\vec{r'}|}\psi_j^*\left(\vec{r'}\right)\psi_i\left(\vec{r'}\right)\psi_j(\vec{r}) = E_i\psi_i(\vec{r}) \qquad (27)$$

الحد الذي أحدث الفرق بين تقريب هارتري و تقريب هارتريفوك هو كمون التبادل الذي يعطى بالعلاقة:

$$V_X = -\sum_j \int \frac{dr}{|\vec{r}-\vec{r'}|}\psi_j^*\left(\vec{r'}\right)\psi_i\left(\vec{r'}\right)\psi_j(\vec{r}) \qquad (28)$$

## 4.1. نظرية دالية الكثافة:

المفهوم الأساسي لنظرية دالية الكثافة هو أنه يمكن التعبير عن طاقة نظام الكتروني بدلالة كثافته.

$$E = E(\rho) \qquad (29)$$

و ينص مبدأ نظرية DFT على إعادة صياغة المسألة الكمومية و تحويلها من مسألة نظام متعدد الجسيمات إلى مسألة أحادية الجسيمة عن طريق التخلي عن التعامل مع دالة الموجة و الاستعانة بدالية الكثافة الإلكترونية التي يمكن قياسها تجريبيا بثلاث متغيرات فقط و جعلها كقاعدة للحساب، و الدافع وراء هذا هو تقليل عدد المتغيرات التي تدخل في تعقيد الحسابات [16] .

الهدف الرئيسي لنظرية دالية الكثافة هو التنبؤ بطاقات الإرتباط الموجودة بين الذرات بالإعتماد على مبادئ ميكانيكا الكم. ظهرت الفكرة الأساسية لهذه النظرية عام1927على يد العالمان (توماس– فيرمي)، حيث تعتمد طريقة توماس فيرمي على نموذج إحصائي لتقريب التوزيع الإلكتروني حول الذرات، هذا النموذج أعطى صورة عن إمكانية الإعتماد على الكثافة الإلكترونية لحساب الطاقة الحركية، لكن هذا النموذج أعطى نتائج ضعيفة لأنهما أهملا الإرتباط بين الالكترونات[17].

في عام 1964 قام كل من العالمان Hohenberg وكوهن Kohn بوضع القاعدة الأساسية للنظرية من خلال نظريتهما التي أثبتت إمكانية استغلال الكثافة في حساب خصائص النظام لكنها بقيت من غير تطبيق إلى أن أكمل العالم كوهن ما بدأ به واوجد تطبيقا لها[18].

## 5.1. نظرية توماس_فارمي:

في عام1927 صاغ (توماس_فارمي) الطاقة الكلية لغاز الإكترونات اللامتجانسة كدالة لكثافة الإكترونات المعروفة لغاز متجانس [19،20]، و ذلك بإجراء عدة تقسيمات عنصرية على منطقة بريلون ، حيث أنه عند آخر تقسيم تعتبر الكثافة الإلكترونية ثابتة في كل منطقة من المناطق بريلون إذن تكتب الطاقةالكليةعلى الشكل:

$$E = \int \varepsilon_i[\rho(\vec{r})]\, dr \qquad (30)$$

تعطى كثافة غاز متجانس ب:

$$\rho = \frac{1}{3\pi^2}\left(\frac{2m_e}{h^2}\right)^{\frac{2}{3}} E_F^{\frac{3}{2}} \qquad (31)$$

$E_F$ : طاقة فارمي

الطاقة الحركية لغاز متجانس هي:

$$\mathrm{T} = \frac{3}{5}\rho E_F \qquad (32)$$

من المعادلتين (29) و(30) نجد المعادلتين التاليتين:

$$E_F = \frac{\rho^{\frac{2}{3}}}{\frac{2m_e}{h^2}}\left(3\pi^{\frac{2}{3}}\right)^{\frac{2}{3}} \qquad (33)$$

$$\mathrm{T} = \frac{3}{5}\frac{h^2}{2m_e}(3\pi^2)^{\frac{2}{3}}\rho^{3\frac{5}{3}} \qquad (34)$$

الطاقة الحركية لتوماس– فارمي هي:

$$T_{TF} = \int T dr \rightarrow T_{TF} = \frac{3}{5}\frac{h^2}{2m_e}(3\pi^2)\int \rho^{\frac{5}{3}} dr \qquad (35)$$

نظرية (توماس– فارمي) هي تقريب موضعي لكثافة الإلكترونات لا يأخذ بعين الاعتبار ارتباط الإلكترونات، إذن الطاقة الكلية لنظام الإلكترونات في تقريب (توماس_فارمي) تأخذ الشكل التالي:

$$E_{TF} = \frac{3}{5}\frac{h^2}{2m_e}(3\pi^2)^{\frac{2}{3}}\int \rho^{\frac{5}{3}}dr + \int V(\vec{r})\,\rho(\vec{r})dr + \int \frac{\rho(\vec{r})\rho(\vec{r'})}{|\vec{r}-\vec{r}'|}drdr' \qquad (36)$$

أولا: فعل التبادل المقترح من طرف ديراك:

$$E_{TFD} = E_{TF} - C_x\int \rho^{\frac{4}{3}}dr \qquad (37)$$

ثانيا: فعل الإرتباط المقترح من طرف فيغنز:

$$E_C[\rho] = -\frac{0.056\rho^{\frac{4}{3}}}{0.079 + \rho^{\frac{1}{3}}} \qquad (38)$$

## 6.1.نظرية هوهنبارغ وكوهن:

اخذ هوهنبارغ وكوهن الطاقة الكلية لنظام الالكترونات المتفاعلة في كمون خارجي (كمون الأنوية) هي دالية وحيدة لكثافة الالكترونات$\rho(\vec{r})$ أي:

$$E = E(\rho) \tag{39}$$

حيث قاما ببرهان أن الكثافة التي تعطي الحد الأدنى هي كثافة الحالة الأساسية للجسيمات بالضبط، و كل خصائص الحالة الأساسية هي دالية لكثافة الالكترونات كالتالي:

$$\mathrm{E}(\rho_0) = \mathrm{Min}\,\mathrm{E}(\rho) \tag{40}$$

بحيث يعبر عن دالية الطاقة ب:

$$\mathrm{E}(\rho_0) = \mathrm{M} \tag{41}$$

$$\mathrm{E}(\rho) = \langle\Psi|H|\Psi\rangle \tag{42}$$

$$F_{H.K}(\rho) = \langle\Psi|T + U|\Psi\rangle \tag{43}$$

أين U،T كمون التفاعل و الطاقة الحركية للالكترونات على الترتيب .

باستخدام تقريب هرتري نجد :

$$\begin{aligned} F_{H.K}(\rho) &= \frac{1}{2}\iint 2\frac{\rho(\vec{r})\rho(\vec{r})}{|\vec{r}-\vec{r}|}\mathrm{drd}\grave{r} + \mathrm{G}(\rho) \\ &= F_{H.K}(\rho) + \int V_{ext}\,(\vec{\mathrm{r}})\rho(\vec{\mathrm{r}})\mathrm{dr} \end{aligned} \tag{44}$$

حيث $\mathrm{G}(\rho)$ تمثل الطاقة الحركية للالكترونات زائد الفرق بين طاقة التفاعل الحقيقية و طاقة تفاعل هرتري، كما اثبت هوهنبارغ كوهن أن كثافة الحالة الأساسية هي كثافة الحد الأدنى $F_{\mathrm{HK}}$.

### 7.1.معادلات كوهن – شام:

في 1965 كتب كوهن – شام كثافة الالكترونات كمجموع كثافة الجسيمات مع استخدام مبدأ التغاير للحصول على طاقة الحالة الأساسية، بحيث تعطى كثافة احتمال تواجد الشحنة بـ :

$$\rho(\vec{r}) = \sum \Psi_i^* (\vec{r})\Psi_i(\vec{r}) \qquad (45)$$

دالية الطاقة الكلية للالكترونات $E_e$ (ρ) و $E_{H.F}(\rho)$ طاقة هرتري – فوك تعطى ب:

$$E_{H.F} = T_0 + (V_H + V_x) \qquad (46)$$

حيث:

$V_x$ : كمون تبادل الالكترونات و الذي يعرف بـ : $V_x = V - V_H$

$V_H$ : كمون هرتري.

$T_0$ :الطاقة الحركية للالكترونات الحرة.

V : كمون التفاعل إلكترون– إلكترون.

$V_c$ : كمون ارتباط الالكترونات و الذي يعرف بـ : $V_c = T - T_0$

T: الطاقة الحركية للجسيمات في حالة التفاعل.

إذن الدالية $F_{H.K}$ هي :

$$F_{HK} = T + V + T_0 - T_0$$
$$= T_0 + V_H + (V_x + V_c) \qquad (47)$$

$V_{xc} = V_x + V_c$ هو كمون تبادل– ارتباط.

أي دالية الطاقة الكلية هي :

$$E(\rho) = T_0(\rho) + V_H + V_{xc} + V_{ext}(\rho) \qquad (48)$$

$$E_e = T + V \qquad (49)$$

معادلة كوهن– شام [21] هي:

$$(T + V_{ei}(\vec{r}) + V_H(r) + V_{xc}(\vec{r}))\varphi_i(\vec{r}) = \varepsilon_i\varphi_i(\vec{r}) \qquad (50)$$

### 8.1.حلول معادلة كوهن– شام :

ترتكز معظم حسابات عصابات الطاقة مبدئيا على نظرية دالية الكثافة و هذا حسب استخدامها للكثافة، الكمون و مدارات كوهن–شام، و بالتالي تعطى دالة الموجة الأساسية كما يلي[22]:

$$\Psi_i(\vec{r}) = \sum C_{ij}\, \Phi_j(\vec{r}) \qquad (51)$$

حيث:

$C_{ij}$: معاملات النشر لدالة الموجة .

$\Phi_j$: دالة الموجة.

حل معادلة كوهن – شام يتطلب تعريف المعامل $C_{ij}$ لكل مدار مشغول، بحيث تكون الطاقة الكلية عند القيمة الدنيا، و تنطبق على نقاط عالية التناظر في منطقة بريلوان الأولى لتسهيل الحساب، و بحكم وجود التنافر بين الالكترونات تستخدم حلقة تكرارية و لأجل تحقيق التقريب المطلوب أدخلت الكثافة الأولية للشحنة $\rho_{in}$ في الحساب.

حيث:

$\rho_{in}$: الكثافة الأولية لشحنة الإلكترون أي الكثافة الشحنية.

حلول معادلة كوهن شام تعطى:

$$(\mathrm{H} - \varepsilon_i\, \mathrm{s})\; C_i = 0 \qquad (52)$$

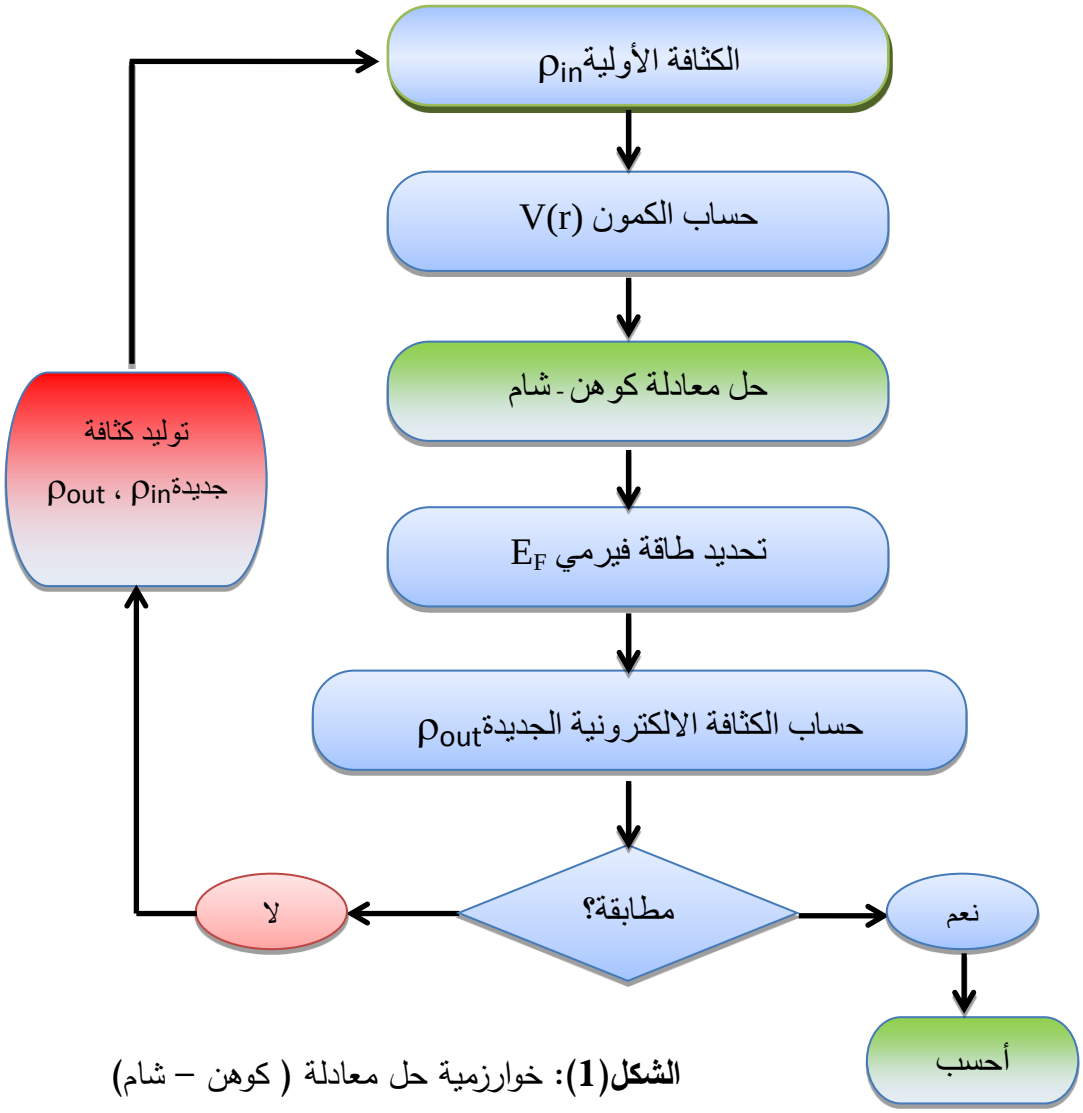
H: هاملتون كوهن– شام[23].

الكثافة الكلية التي يتحصل عليها من جمع كل المدرات المشغولة هي التي تستخدم في الحساب، و في حالة عدم الحصول على التقريب المطلوب نقوم بالمزج بين الكثافتين بالطريقة التالية:

$$\rho_{in}^{i+1} = (1+\alpha)\; \rho_{in}^{i} + \alpha \rho_{out}^{i} \qquad (53)$$

حيث: $\rho_{out}$ هي كثافة الشحنة الجديدة مؤلفة بالأشعة الذاتية الخاصة لمعادلة الحل.

$i$ درجة التكرار و $\alpha$ برمتر (parametre) الخليط و نواصل الحلقة التكرارية على هذا النحو حتى نحصل على التقارب المطلوب [24] .




**الشكل(1):** خوارزمية حل معادلة ( كوهن – شام)

### 9.1.دالية التبادل والارتباط:

الدالة تطبق في المجال القريب من تقريب كوهن وشام و لكن تبقى صعبة التطبيق لأن دالة تبادل– ارتباط $E_{xc}[\rho]$ غير معلومة القيمة أو العبارة حيث إذا كانت قيمة الطاقة تبادل – ارتباط محددة فان الكثافة $E_{xc}$ تصبح بقيمة دقيقة، و هذا يعني إن قيمة طاقة تبادل ارتباط في الحالة العامة غير محددة مما يجبرنا على الانتقال إلى تقريب أخر [25].

### 10.1.تقريب كثافة الموضع(LDA):

يكون تقريب كثافة الموضع (LDA) في نظام متجانس و اللامتجانس (غاز الالكترونات منتظم حيث يكون ρ ثابت ). و طاقة التبادل و الارتباط متعلقة فقط بالكثافة الالكترونية في

نقطة r بإهمال كل التأثيرات التي تجعل النظام غير متجانس ( نعتبر الكثافة ثابتة أو تتغير ببطء شديد) يعبر عن طاقة التبادل و الارتباط لجزء $xc$ بالشكل :

$$E_{xc}^{LDA}[\rho] = \int \varepsilon_{xc}\,[\rho(\vec{r})]\rho(\vec{r})d^3r \qquad (54)$$

تقريب LDA يعتبر $\varepsilon_{xc}$ طاقة كلية و هي مقسمة لجزئين بحيث:

$$\varepsilon_{xc}(\rho) = \varepsilon_x(\mathrm{p}) + \varepsilon_c(p) \qquad (55)$$

مع $c$ طاقة الارتباط و $\varepsilon_x$ طاقة التبادل، هذا التقريب لا يستعمل إلا في حالة غاز الكتروني منتظم و نعلم انه في الأنظمة الحقيقية الكثافة الالكترونية لا تكون منتظمة محليا (في منطقة معينة) لهذا السبب يستعمل في الغالب تقريب التدرج المعمم (GGA) .

## 11.1.تقريب التدرج المعمم(GGA):

تقريب التدرج المعمم (GGA) جاء لتصحيح تقريب كثافة الموضع (LDA) المستخدم حاليا أخذت بعين الاعتبار كثافة الالكترونات $\rho(\vec{r})$ و التدرج $|\nabla\rho(\vec{r})|$لا يعتمد عليه كخاصية منتظمة للغاز الالكتروني.

تأخذ طاقة التبادل و الترابط الشكل التالي [26 ]:

$$E_{xc}^{GGA}(\rho) = \int f[\rho(\vec{r}), \nabla\rho(\vec{r})]\, d^3r \qquad (56)$$

# الفصل الثاني

# الخواص الميكانيكية

## 1.2.مقدمة :

المواد الصلبة تتشكل من ذرات متراصة بشكل كثيف مع قوى ربط قوية بين الذرات، و تكون قوى الترابط هذه مسؤولة عن الخواص الميكانيكية للمواد الصلبة مثل الصلادة و المرونة و ما إذا ذلك ، و اعتمادا على نوع المادة و الظروف التي أنشات فيها يمكن ان تصنف الذرات إما الى ذرات ذات نمط هندسي منتظم (مواد صلبة بلورية) على سبيل المثال المعادن و الجليد المصنوع من الماء العادي أو ذرات ذات نمط غير منتظم (مواد صلبة غير بلورية) مثل زجاج النوافذ المستخدم في المنازل [27].

تعتمد الخصائص المرنة على الثوابت المرنة، تؤسس هذه الثوابت المرنة ارتباطا بين السلوك الميكانيكي و الديناميكي للبلورة و توفر معلومات مهمة حول طبيعة القوى التي تعمل في المادة الصلبة، على وجه الخصوص، أنها تعطي معلومات عن استقرار و صلابة و تباين المواد [28].

في هذا الفصل ندرس الخواص الميكانيكية التي تمثلها الخصائص المرونية و البنيوية و كذا نحدد ممتد الإجهاد و التشوه في بلورة و ممتد الثوابت المرونية و المعاملات المتمثلة في معامل بواسن و معامل يونغ و معامل الإنضغاطية.

## 2.2..مبادئ أساسية في علم البلورات:

### 1.2.2.عموميات على البلورة:

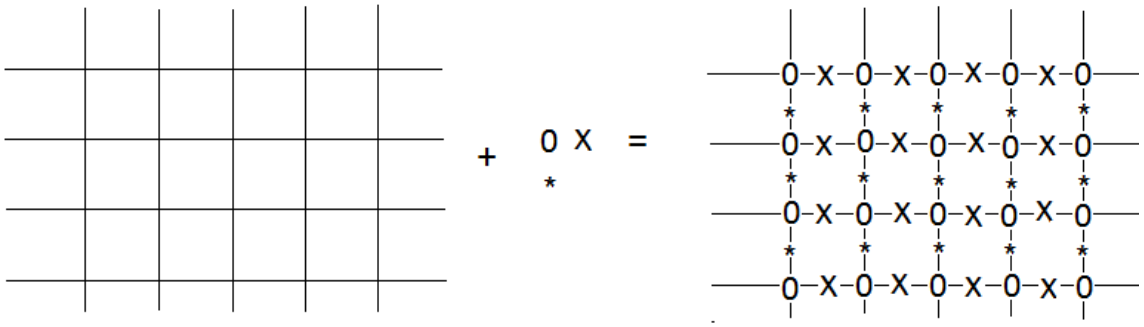
**البلورة:** تصنف المواد الصلبة عموما إلى صنفين، مواد بلورية مثل المعادن و السبائك و معظم المركبات الكيميائية، و بعض المواد السائلة والغازية عند تجمدها تتحول إلى مواد بلورية كالثلج و الغازات الخاملة. و مواد لا بلورية كالزجاج و الشمع و القرميد و تتميز البلورة في شكلها الخارجي بسطح مستو أملس يسمى وجه البلورة. و تختلف البلورات باختلاف وجوهها و زواياها، فالتركيب الداخلي لها عبارة عن توزيع فضائي للذرات أو الجزيئات أو تجمعاتها، و يعطى عند تكراره في الفضاء نمطا منتظما يسمى التركيب البلوري.

**الأساس أو القاعدة :** هي عبارة عن ذرة أو مجموعة ذرات تدعى الوحدات أو القواعد التي تمثل البناء البلوري الحقيقي.

**الشبكة البلورية:** إذا مثلنا كل ذرة من المادة المنتظمة بنقطة هندسية (عقدة) من الفضاء، فان مجموعة العقد الموزعة بانتظام و بدورية في الفضاء تشكل ما نسميه بالشبكة البلورية، و هي نظام هندسي متكرر في الفضاء بشكل منتظم.

التركيب البلوري = الشبكة + القاعدة

مثال في مستوي ذو بعدين



**الشكل02:** التركيب البلوري

و نميز من الشبكات البلورية شبكة برافي BRAVAIS

**متجهات الانتقال في الخلية الأساسية أو المتجهات الأولية للشبكة البلورية:** نعبر عن مواضع الذرات المرتبة في الفضاء الثلاثي الأبعاد بثلاث متجهات انتقالية أساسية غير متساوية عموما و ترتبط مع بعضها البعض بشعاع الانسحاب الأساسي:

$$\vec{R} = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + n_3\vec{a}_3 \qquad (57)$$

حيث $n_1$ ارقام صحيحة و $\vec{a}_1$ اشعة الانسحاب الاساسية التي تؤلف من فضاء الشبكة البلورية اصغر متوازي السطوح نستطيع بتكراره توليد البنية البلورية و يسمى بالخلية الأساسية، أبعادها الأساسية $(\vec{a}, \vec{b}, \vec{c})$ و زواياها الاساسية $(\alpha, \beta, \gamma)$.

**الخلية البدائية:** و هي اصغر مكون للشبكة البلورية محددة و بمتوازي السطوح الذي أضلاعه $(\vec{a}, \vec{b}, \vec{c})$ و هذه الخلية يمكن ان تملا الفضاء كله عن طريق انسحابات الشعاع $\vec{R}$ الذي يعيد الخلية الى الوضع

المشابه للوضع الأول كلما تكورت زوايا الدوران . و يحمل نفس تناظر الشبكة. يعطى حجم الخلية البدائية بالعلاقة

التالية:

$$V = |\vec{a}.(\vec{b}.\vec{c})| \qquad (58)$$

$$V = \left|\overrightarrow{a_1}.\left(\overrightarrow{b_2}.\overrightarrow{c_3}\right)\right| \qquad (59)$$

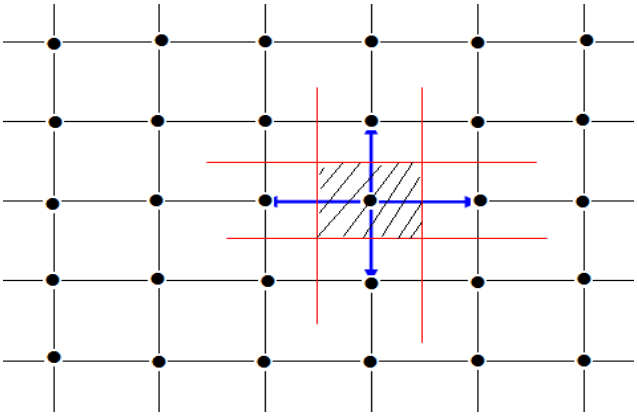
وإذا كانت الشبكة مستوية (ذات بعدين فقط ) فان سطح الخلية البدائية هو:

$$S = |\vec{a}.\vec{b}| \qquad (60)$$

$$S = |\overrightarrow{a_1}.\overrightarrow{a_2}| \qquad (61)$$

**خلية وينغر- زيتس** (wigner-seitz): و هي خلية مماثلة في الحجم للخلية البدائية و تعين وفق المعايير التالية:

- نختار عقدة ما من عقد الشبكة البلورية.
- نصل بين العقدة المختارة و العقد المجاورة لها مباشرة .(عقد الجوار الأقرب) بخطوط مستقيمة.
- نرسم منصفات لهذه الخطوط بمستويات تكون متعامدة معها.
- اصغر حجم محصور بين هذه المستويات هو خلية وينغر- زيتس



**الشكل(3)**: خلية وينغر- زيتس

**ثابت الشبكة:** و هو أصغر مسافة عمودية بين مستويات الشبكة البلورية، و يرمز له عادة بالرمز a [29].

## 2.2.2.عمليات التناظر:

تتميز الشبكات البلورية بعمليات تناظر محددة نذكر أهمها:

**التناظر الدوراني:** و يقاس بالدرجة $n = 2\pi/\theta$ حيث $n = 1,2,3,4,6$ و $\theta$ أقل زاوية دوران للشبكة البلورية حول محور يسمى محور التناظر الدوراني، رمزه $C_n$ لكي تنطبق على نفسها ثانية.

**التناظر المراتي:** بالانعكاس خلال مستوي بلوري يرمز له بالرمز $m$ .

**التناظر الانقلابي:** و هو عملية تناظر انعكاس خلال نقطة تسمى مركز الانقلاب $(i)$ بحيث تتماثل النقطتان $\vec{r}$ و $-\vec{r}$ (مركز المحاور).

**عمليات التناظر المركبة:** نستنتج من تراكب العمليات أعلاه و تسمى زمرة نقطية و التي عند جمعها مع عملية التناظر الإنسحابي نحصل على الزمرة الكاملة، و طبقا للزمرة النقطية نميز سبع فئات بلورية و لكن على أساس الزمرة الكاملة نميز $(14)$ نوعا مختلفا لشبكات برافي:

ثلاثية الميل(أساسية)، أحادية الميل(أساسية و ممركزة القاعدة)، المعينية المستقيمة (أساسية، ممركزة القاعدة، ممركزة الجسم، ممركزة الوجوه)، الرباعية(أساسية، ممركزة الجسم)، المكعبة (أساسية، ممركزة الجسم$CC$، ممركزة الوجوه$CFC$)، الثلاثية المتساوية الأحرف(أساسية)، السداسية(أساسية)[30].

## 3.2.الطاقة و ممتد الثوابت المرونية:

إخضاع بلورة مثالية لضغوط خارجية من اجل تقدير مقاومتها للتشوه (الصلابة)، يكون التشوه في هذه الحالة متناسبا مع معامل القص المرن، بينما في حالة المادة الصلبة الحقيقية يتم تحديد هذه المقاومة من خلال العيوب البلورية (الاضطرابات). يمكن التعبير عن معامل الانضغاط و القص باعتبارها مزيج خطي من مجموعة من الثوابت المرنة$C_{ij}$ و تعتبر حاليا افضل العوامل التي تعبر عن صلابة و صلادة المواد الصلبة[31].

## 4.2.ممتد التشوه:

تتشوه الأجسام تحت تأثير القوى الخارجية مما يؤدي إلى تغيير الشكل و الحجم. تقاس تشوهات المادة عموما من الموضع الأولي و هو موضع المادة عندما لا يتم تطبيق قوة عليه يتم تعريف عناصر ممتد التشوه $\varepsilon_{ij}$ من خلال العلاقة التالية:

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i}\right) \qquad (62)$$

حيث:

$u_i$ : مقدار الإزاحة $\qquad X_1 = X,\ X_2 = Y,\ X_3 = Z$

ممتد التشوه المتناظر يكتب:

$$\varepsilon = \begin{pmatrix} \varepsilon_{xx} & \varepsilon_{yy} & \varepsilon_{xz} \\ \varepsilon_{xy} & \varepsilon_{yy} & \varepsilon_{yz} \\ \varepsilon_{xz} & \varepsilon_{yz} & \varepsilon_{zz} \end{pmatrix} \qquad (63)$$

العناصر القطرية لهذا الممتد تحدد تشوهات الاستطالة و يعبر عن تغيرات الطول وفق الاتجاهات x ,y ,z منه التشوهات تعطى ب$\varepsilon_{zx}, \varepsilon_{yz}, \varepsilon_{xy}$ تمثل تغيرات الزاوية بين المحاور OZ، OY،OX .

مكونات التشوه هي نسب أطوال و بالتالي ليس بعد.

الاستطالة النسبية $\left(\frac{\delta I}{I}\right)$ تقاس في اي اتجاه يشير اليه متجه الوحدة $\vec{d} = (\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)$ تعطى

بالحساب أدناه[31]:

$$\left(\frac{\delta I}{I}\right)_{(\alpha_1,\alpha_2,\alpha_3)} = (\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)\begin{pmatrix} \varepsilon_{xx} & \varepsilon_{xy} & \varepsilon_{xz} \\ \varepsilon_{xy} & \varepsilon_{yy} & \varepsilon_{yz} \\ \varepsilon_{xz} & \varepsilon_{yz} & \varepsilon_{zz} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \alpha_3 \end{pmatrix} \qquad (64)$$

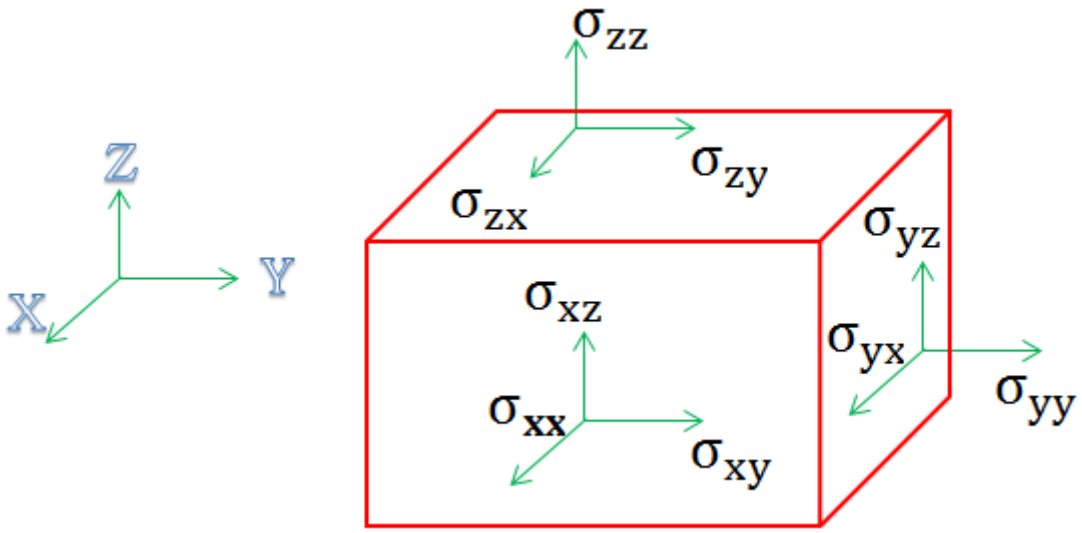
## 5.2.ممتد الإجهاد:

يعرف الإجهاد بأنه القوة التي تمارس على سطح مادة صلبة.

ممتد إجهاد المشار إليه σ،يتم تمثيله بمصفوفة 3×3 متماثلة مثل ممتد التشوه.

$$\sigma = \begin{bmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & \sigma_{xz} \\ \sigma_{xy} & \sigma_{yy} & \sigma_{yz} \\ \sigma_{xz} & \sigma_{yz} & \sigma_{zz} \end{bmatrix} \qquad (65)$$

في هذا الترميز $\sigma_{ij}$ يشير الرمز الأول الى اتجاه و يشير الرمز الثاني الى الوضع الطبيعي للوجه الذي يتم تطبيق القوة عليه (أنظر الشكل 05).




**الشكل 04:** عناصر ممتد الإجهاد

إجهادات $\sigma_{ii}$ هي اجهادات طبيعية، لأنها تطبق بشكل عمودي على الوجه في الوضع الطبيعي $Ox$، $Oy$أو $Oz$.

العناصر $\sigma_{ij}$ حيث هي إجهادات عرضية لأنها تعمل على مستوى السطح. عناصر الإجهاد لها بعد القوة لكل $1m^2$ وحدة مساحة أو بعد الطاقة لكل وحدة حجم $1m^3$ [32].

## 6.2.العلاقة بين الإجهاد والتشوه

يمكن تعريف ممتدين من الرتبة الثانية ممتد الإجهاد $\sigma_{ij}$ و ممتد التشوه $\varepsilon_{ij}$ كلاهما متناظران، لأن

$$\varepsilon_{ij} = \varepsilon_{ji} \quad و \quad \sigma_{ij} = \sigma_{ji}$$

في نظرية المرونة الخطية، توجد علاقة خطية بين $\sigma_{ij}$ و $\varepsilon_{ij}$ تعطى بواسطة قانون هوك المعمم [33]

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl}\varepsilon_{kl} \qquad (66)$$

$C_{ijkl}$ : هو ممتد من الرتبة الرابعة يسمى الممتد المرن للصلابة و يحدد الثوابت المرنة للمادة. عدد التركيبات الممكنة لأربعة مؤشرات $ijkl$ هو $3^4$=81 عنصر. في الحالة العامة و بسبب تناظر $\varepsilon_{ij}$ و بتطبيق علاقة ماكسويل $C_{ijkl} = C_{klij}$، تقل العناصر C الى 21 عنصر مستقل[33].

بالإضافة إلى ذلك فان تناظر المادة المتبلورة يقلل بشكل كبير من هذا الرقم [34]. يتم الإشارة إلى الثوابت $C_{ijkl}$ بواسطة طريقة جديدة $(notation\ de\ voiget)$ و هو $C_{\alpha\beta}$، بحيث يتم اختصار المؤشرات $ij$ و $kl$ عن طريق استبدال كل زوج من المؤشرات تضاعف في البداية أربع مرات بمؤشر واحد α β و هكذا، تكون الاختصارات على النحو التالي:

$11 \rightarrow 1$ $\qquad$ $23$ أو $32 \rightarrow 4$

$22 \rightarrow 2$ $\qquad$ $13$ أو $31 \rightarrow 5$

$33 \rightarrow 3$ $\qquad$ $12$ أو $21 \rightarrow 6$

**مثال:** $\boldsymbol{C_{1111} = C_{11},\ C_{1112} = C_{16},\ C_{2232} = C_{24}}$

يمكن أن يكتب قانون هوك المعمم في شكل مصفوفة:

$$\begin{pmatrix}\sigma_{11}\\ \sigma_{22}\\ \sigma_{33}\\ \sigma_{23}\\ \sigma_{31}\\ \sigma_{12}\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}C_{11} & C_{12} & C_{13} & C_{14} & C_{15} & C_{16}\\ C_{21} & C_{22} & C_{23} & C_{24} & C_{25} & C_{26}\\ C_{31} & C_{32} & C_{33} & C_{34} & C_{35} & C_{36}\\ C_{41} & C_{42} & C_{43} & C_{44} & C_{45} & C_{46}\\ C_{51} & C_{52} & C_{53} & C_{45} & C_{55} & C_{56}\\ C_{61} & C_{62} & C_{63} & C_{64} & C_{65} & C_{66}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\varepsilon_{11}\\ \varepsilon_{22}\\ \varepsilon_{33}\\ \varepsilon_{23}\\ \varepsilon_{31}\\ \varepsilon_{12}\end{pmatrix} \qquad (67)$$

$$\begin{pmatrix}\sigma_{xx}\\ \sigma_{yy}\\ \sigma_{zz}\\ \sigma_{yz}\\ \sigma_{zx}\\ \sigma_{xy}\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}C_{11} & C_{12} & C_{13} & C_{14} & C_{15} & C_{16}\\ C_{21} & C_{22} & C_{23} & C_{24} & C_{25} & C_{26}\\ C_{31} & C_{32} & C_{33} & C_{34} & C_{35} & C_{36}\\ C_{41} & C_{42} & C_{43} & C_{44} & C_{45} & C_{46}\\ C_{51} & C_{52} & C_{53} & C_{54} & C_{55} & C_{56}\\ C_{61} & C_{62} & C_{63} & C_{64} & C_{65} & C_{66}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\varepsilon_{xx}\\ \varepsilon_{yy}\\ \varepsilon_{yz}\\ \varepsilon_{zx}\\ \varepsilon_{zx-}\\ \varepsilon_{y}^{x}\end{pmatrix} \qquad (68)$$

تعتمد عدد معاملات $C_{\alpha\beta}$ المستقلة على تناظر المادة.

| عدد الثوابت المستقلة | الهيكل(مع مجموعة نقاط) |
|---|---|
| 21 | Triclinique |
| 13 | Monoclinique |
| 9 | Orthorhombique |
| 7 | Tétragonal (4,−4,4/m) |
| 6 | Tétragonal (422,4mm,−4 2/m, 4/mmm) |
| 7 | Hexagonal et rhomboédrique (3,−3) |
| 6 | Hexagonal et rhomboédrique (32,3m,−32/m) |
| 5 | Hexagonal (6,−6,6/m, 622,6mm,−62m,−6/mmm) |
| 3 | Cubique |

**الجدول01:** يمثل عدد الثوابت المرنة المستقلة لبنية بلورية مختلفة مع مجموعاتهم المخصصة [21،35].

## 7.2.البلورة في النظام المكعب:

المواد في النظام المكعب تتميز بثلاث ثوابت مرنة مستقلة، ممتد الثوابت المرونية يمثل بواسطة مصفوفة تأخذ الشكل التالي:

$$C = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{11} & C_{11} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{12} & C_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} \end{bmatrix} \qquad (69)$$

من اجل نظام مكعب معايير الاستقرار الميكانيكي[36] تعطى بالعلاقة التالية:

$$\begin{cases} C_{11} - C_{12} \geq 0 \\ C_{11} + 2C_{12} \geq 0 \end{cases} \quad \text{و} \quad C_{44} \geq 0 \qquad (70)$$

## 8.2.معامل بواسن (coefficient de poisson):

يتعلق هذا المعامل بالتشوه العرضي و التشوه الطولي لمادة خاضعة لاختبار الشد، عندما تستطيل المادة تترافق استطالتها مع انكماش في الاتجاهات المتعامدة مع الاستطالة (التشوه الطولي يكون موجبا و التشوه العرضي يكون سالبا )[37].

التشوهات النسبية في اتجاه y و z تعطى بالعلاقة [38]:

$$\varepsilon_y = \frac{\Delta y}{y_0} \quad \text{و} \quad \varepsilon_z = \frac{\Delta z}{z_0} \qquad (71)$$

منه تعطى نسبة بواسن كتالي:

$$V = \frac{-\varepsilon_y}{\varepsilon_x} = \frac{-\varepsilon_z}{\varepsilon_x} \qquad (72)$$

## 9.2, معامل القص(coefficcient de cisaisallement):

يتم تعريف معامل القص على انه نسبة إجهاد القص إلى انفعال القص، يعرف أيضا باسم معامل الصلابة و يمكن الإشارة إليه بواسطة حرف G أو بواسطة حرف μ.

وحدة معامل القص هي الباسكال (Pa)، و لكن عادة ما يتم التعبير عن القيم ب جيقا باسكال (Gpa).

- تشير قيمة معامل القص الكبير إلى أن المادة الصلبة شديدة الصلابة، بمعنى أخر هناك حاجة إلى قوة كبيرة لإنتاج التشوه.
- تشير قيمة معامل القص الصغير إلى أن المادة طرية مرنة، القليل من القوة تستطيع تشويهها.
- أحد تعريفات المائع هو أن معامل القص لديه يساوي صفرا، أي قوة تشوه سطحه [39].

انطلاقا من مصفوفة ممتد الثوابت المرونية للبلورة في النظام المكعب، نحسب معامل القص باستعمال العلاقة التالية:

$$\boldsymbol{\mu} = \frac{A - B + 3C}{5} \quad (73)$$

$$\mathrm{A} = \frac{C_{11} + C_{22} + C_{33}}{3} \quad (74)$$

$$\mathrm{B} = \frac{C_{12} + C_{23} + C_{31}}{3} \quad (75)$$

$$\mathrm{C} = \frac{C_{44} + C_{55} + C_{66}}{3} \quad (76)$$

الآن سندرس الهياكل البلورية الثلاثة الشائعة بين المعادن: مكعب بسيط (CS)، مكعب ممركز الوجوه (CFC)، مكعب ممركز الجسم (CC). البنية CS: في مكعب متماثل لا يوجد سوى ثلاث وحدات (معاملات ) مستقلة $C_{11}$،$C_{12}$ و $C_{44}$. و غالبا ما يكون من الأنسب تقديم الثوابت G و $G'$ و التي يتم تعريفها بالشكل التالي :

$$G = C_{44} \quad (77)$$

$$\mathrm{G}' = \frac{C_{11} - C_{12}}{2} \quad (78)$$

و تسمى بـ : معاملات القص، حيث G تصف تشويه معيني الوجوه للشبكة و $G'$ تصف تشوه معيني الشكل.

### 1.9.2 تأثير درجة الحرارة و الضغط على معامل القص:

كما هو متوقع فان استجابة المادة للقوة المطبقة تتغير مع تغير درجة الحرارة و الضغط في المعادن، يتناقض معامل للتنبؤ بتأثيرات درجة الحرارة و الضغط على معامل القص و هي:

- نموذج إجهاد التدفق البلاستيكي (MTS).
- عتبة الإجهاد الميكانيكي(NP).
- نموذج معامل القص (SCG).

### 2.9.2.جدول قيم معامل القص:

هذا جدول لقيم معامل القص في درجة حرارة الغرفة، تميل المواد اللينة إلى أن يكون لها قيم معامل قص منخفضة، المعادن الأساسية لها قيم وسيطية، المعادن و السبائك لها قيم عالية، الألماس له معامل قص مرتفع للغاية[40]

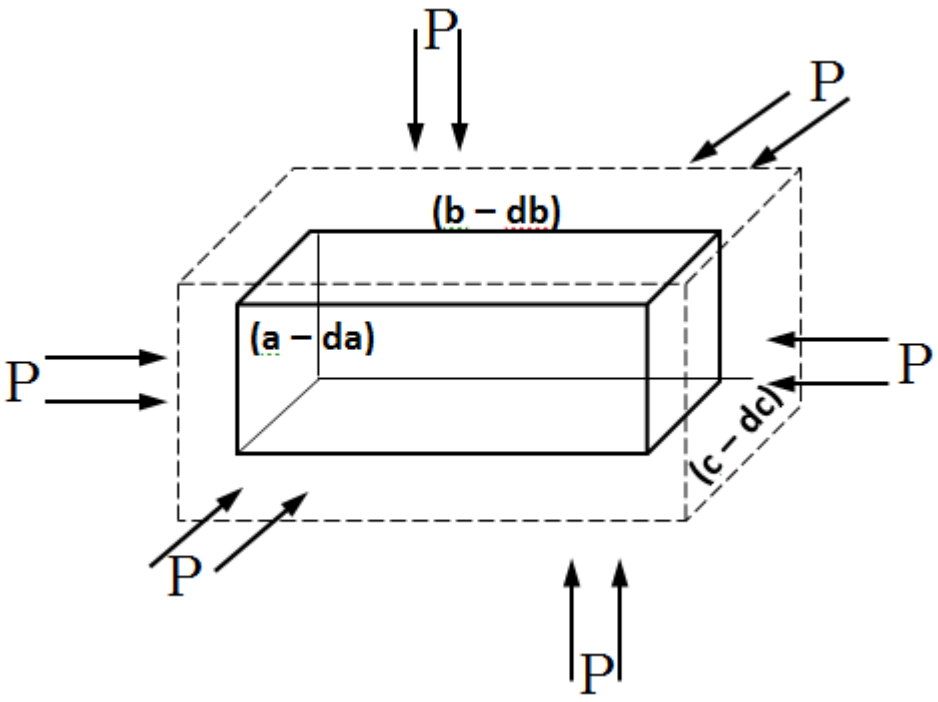
| معامل القص (GPa) | المادة |
|---|---|
| 0.0006 | ممحاة |
| 0.62 | خشب |
| 13.1 | رصاص |
| 16.5 | مغنزيوم |
| 21 | اسمنت |
| 25.5 | ألمنيوم |
| 26.5 | زجاج |
| 40 | نحاس |
| 52.5 | حديد |
| 478.0 | ألماس |

**الجدول02:** قيم معاملات القص لبعض المواد

### 10.2.معامل الإنضغاطية (module de compressibilité):

انضغاطية المادة B هي مقياس لقابلية المادة للانضغاط، أي أن الانضغاطية هي مجرد مقلوب معامل المرونة الحجمية.

الانضغاط المنتظم يعني أن المادة الصلبة تخضع لضغط هيدروستاتيكي.




**الشكل05:** ضغط هيدروستاتيكي مطبق في جميع الاتجاهات

معامل الانضغاطية هو ثابت بين الضغط الهيدروستاتيكي و التغير النسبي للحجم، حيث:

$$P = -B\frac{\Delta V}{V} \qquad (79)$$

الإشارة (−) تشير إلى أن الضغط P و $\Delta V$ في اتجاهين مختلفين.

معامل الانضغاطية B يسمح بوصف استجابة المادة للتغير في الحجم [41]. يمكن تبسيطه وفق النظام البلوري للمركب المدروس، مثلا في النظام المكعبي يكتب معامل الانضغاطية بالشكل:

$$B = \frac{1}{3}(C_{11} + 2C_{12}) \qquad (80)$$

و في مقاربة Voigt لنظام مكعبي يأخذ الشكل :

$$B_V = \frac{1}{3}(C_{11} + 2C_{12}) \qquad (81)$$

و في مقاربة Reuss:

$$B_R = \frac{1}{3S_{11} + 6S_{12}} \qquad (82)$$

أثبت Hill أن معامل الانضغاطية لمركب ينحصر بين قيمتين حديتين، القيمة العظمى لمعامل Voigt و القيمة الدنيا لمعامل Reuss:

$$B_R \leq B_H \leq B_V \qquad (83)$$

حيث مقاربة Voigt–Reuss–Hill (VRH) تساوي إلى :

$$B = \frac{1}{2}(B_R + B_V) \qquad (84)$$

## 11,2.تباين مناحي الخصائص المرونية:

تباين مناحي الخصائص المرونية يمثل الاستجابة المرونية للمادة البلورية في اتجاه التأثير المطبق عليها. و هي معرفة بمؤشر التباين الذي يعبر عنه كدالة للمعاملات $B_R$، $B_V$، $G_V$ و $G_R$ [42].

$$A^U = 5\frac{G_V}{G_R} + \frac{B_V}{B_R} - 6 \qquad (85)$$

حيث:

$B_V$ : معامل الانضغاطية في مقاربة Voigt (المعادلة90).

$B_R$: معامل الانضغاطية في مقاربة Reuss (المعادلة91).

$G_R$: هو معامل القص في مقاربة Reuss معرف بالعبارة:

$$G_R = \frac{5(C_{11} - C_{12})C_{44}}{4C_{44} + 3(C_{11} - C_{12})} \qquad (86)$$

$G_V$: هو معامل القص في مقاربة Voigt معطى بالعلاقة:

$$G_V = \frac{1}{5}(C_{11} - C_{12} + 3C_{44}) \qquad (87)$$

إذا كان المؤشر $A^U = 0$ هذا معناه أن الخصائص المرونية للمادة متماثلة المناحي أي متماثلة في جميع الاتجاهات (مثالية). و كلما ارتفعت قيمة المؤشر $A^U$ كلما قل التماثل أي ارتفعت درجة عدم التماثل (التباين) للسلوك المرن للبلورات [42].

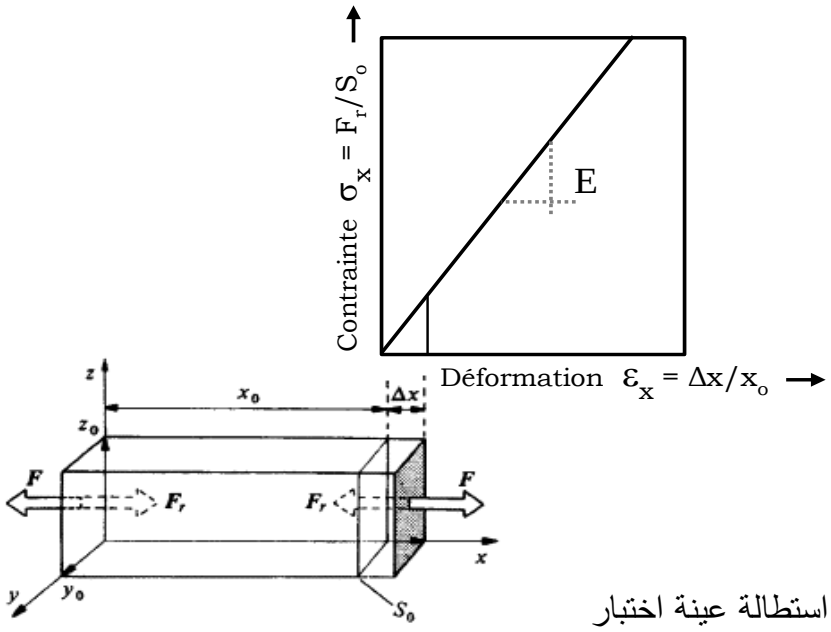
## 12.2.معامل يونغ:

يمكن تقييم التشوه للمادة المرنة من معامل يونغ أو معامل المرونة الطولي. يقاس الإجهاد الميكانيكي الذي يولد استطالة بنسبة 100% من الطول الأولي للمادة (ضعف الطول). في الواقع النسبة بين إجهاد الشد المطبق على مادة (ε) هي ثابتة طالما ظل هذا التشوه صغيرا و لم يتم الوصول إلى حد المرونة[43]. يتم إعطاء قانون المرونة من خلال قانون هوك حيث يكون هو قانون يونغ الذي له أبعاد الضغط. و يعبر عنه قانونيا بـ Pa أو $(\mathrm{N.m}m^{-2})$MPa.

$$\boldsymbol{\sigma} = E\boldsymbol{\varepsilon} \qquad (88)$$

يقال أن المادة ذات معامل يونغ العالي تكون صلبة جدا مثل (الفولاذ، الألماس، الأريديوم) بينما المواد مثل الألمنيوم أو الرصاص تكون أقل صلابة منها و المواد البلاستيكية العضوية ليست شديدة الصلابة[43].

إذا طبقنا قوة شد F على عينة اختبار موشورية (الشكل07)




**الشكل (6):** استطالة عينة اختبار

استطالة عينة الاختبار يتناسب مع طولها الأولي $(X_0)$:

$$\varepsilon = \frac{\Delta x}{x_0} \qquad (89)$$

ظهور قوة تراجع تساوي القيمة المطلقة و معاكسة للقوة.

إذا كانت التشوهات صغيرة يكون:

$$\sigma_x = \frac{F_r}{S_0} = E\varepsilon_x \qquad (90)$$

معامل يونغ يميز مقاومة الجسم الصلب للتشوه أحادي المحور .

يعتمد هذا المعامل على [44]:

- طاقة الروابط بين الذرات.
- طبيعة قوى الإسترجاع المرنة.
- هيكل المادة (بلوري– غير متبلور) .

# الفصل الثالث

# النتائج و المناقشة

## 1.3.مقدمة:

الغرض الرئيسي من العمل المنجز في هذا الفصل هو معرفة المزيد من التفاصيل عن الخصائص البنيوية و الالكترونية و المرونية للمركبين $NbBPt_3$ و $LuBPt_3$ عن طريق مناقشة و تحليل نتائج دراستنا التي تم الحصول عليها عن طريق إجراء حسابات في إطار نظرية الكثافة الدالية DFT. نحرص من خلال هذا العمل إلى تزويد المكتبة العربية بدراسة مختصة في فيزياء المواد و جعلها مرجعا متواضعا للباحثين في هذا الميدان. سنقدم فيما يلي تفاصيل حول النتائج الحسابية المحصل عليها في العمل الحالي باستخدام برنامج (CASTEP)، و كذلك ستتم مناقشة هذه النتائج و المعلومات المستخلصة منها.

## 2.3.مركبات البيروفسكايت pérovskite:

سميت مركبات البيروفسكيت بهذا الاسم نسبة إلى عالم المعادن الروسي ليف ألكسفيش فون بيروفسكي (Lev Aleksevich Von Peroveski ) ، و تعتبر البنى البيروفسكيتية (Les pérovskites) من أوسع عائلات الأكاسيد البلورية التي أخذت وصفها البنيوي من معدن أكسيد كالسيوم التيتانوم CaTiO3 بالإضافة إلى أنها تظهر خصائص متنوعة تتيح تطبيقاتها في عدة مجالات كالذكاء الاصطناعي و غير ذلك. (انظر الشكل 10 ) [45].

## 3.3 مركبات البيروفسكايت العكسي Anti pérovskite :

الصيغة العامة لبنية البيروفسكايت العكسي هي $MXA_3$ و هو تركيب بلوري ينتمي إلى المجموعة ($Pm\bar{3}m$. N0: 221) حيث M و A هما كاتيونات من أنصاف أقطار أيونية مختلفة حيث X يمكن ان يأخذ ذرات البور B أو الازوت N أو الكربون C. أما البنية المثالية هي مكعب بسيط حيث تحيط الكاتيونات A بـ 12 أنيون بتنسيق مكعب– ثماني السطوح ، بينما الكاتيونات B محاطة بـ 6 أنيونات بتنسيق ثماني السطوح [45].

## 4.3.برنامج الحساب CASTEP:

أجرينا الحسابات في هذا العمل بواسطة برنامجCASTEP صمم تحت اسم CASTEP الذي يأخذ الحرف الأول من كل كلمة **Ca**mbridge **S**erial **T**otal **E**nergy **P**ackage، و تم تطوير هذا البرنامج في جامعة كامبريدج ببريطانيا[46] .هو برنامج حساب في ميكانيك الكم يوظف نظرية الكثافة

الدالية (DFT) لإجراء محاكاة لحساب خصائص الجوامد، السطوح و السطوح البينية لعدد كبير من المواد (المعادن، أشباه النواقل و السيراميك).حيث يسمح هذا البرنامج بإجراء حسابات (Ab initio) لإيجاد الخصائص الفيزيائية و الكيميائية للمركبات البلورية، ثوابت الشبكة، الهندسة الجزيئية، الخصائص البنيوية، البنية الالكترونية (عصابات الطاقة و كثافة الحالة و كثافة الشحنة) و الخصائص الضوئية بالإضافة إلى الخصائص المرونية. CASTEP هو برنامج يستخدم طريقة الأمواج المستوية في حساب الطاقة الكلية للنظام. تمتد دوال الموجة الالكترونية عبر مجموعة من قواعد الأمواج المستوية، و يمكن إدراج تأثيرات التبادل و الارتباط سواء عن طريق تقريب كثافة الموضع (LDA) أو تقريب التدرج المعمم (GGA). إن استعمال مجموع قواعد الأمواج المستوية يسمح بشكل كبير بتحسين هندسة الجزيئات، الجوامد، الأسطح والسطوح البينية[47].

CASTEP يعمل على نظام ويندوز و لينيكس. الواجهة الرسومية تتوافق مع معايير ميكروسوفت ويندوز، تسمح للمستعمل بالتفاعل مع النماذج الرسومية ثلاثية الأبعاد، و ترتيب الحسابات و تحليل النتائج من خلال نافذة حوار بسيطة و مألوفة إلى أي مستخدم Windows[48].

## 5.3.طرق الأمواج المستوية:

هذه الطريقة تشكل قاعدة لمجموعة الطرق المسماة الأمواج المستوية، مثل قاعدة الأمواج المستوية المتعامدة. من اجل حل معادلة شرودنغر مع مراعاة دورية الشبكة البلورية نختار دالة الموجة المصاغة من طرف Bloch.

$$\Psi_k(\vec{r}) = U_k(\vec{r})e^{i(\vec{k}.\vec{r})} \qquad (91)$$

هذا الحساب يتطلب إن يكون عدد الأمواج المستوية كبير بشكل كافي. و هذا ما يجعل المهمة صعبة و التقارب ضعيف[49].

## 6.3.اختيار طريقة الحساب:

في هذا العمل درسنا المركبين التاليين $NbBPt_3$ و $LuBPt_3$ بطريقة حساب المبادئ الأساسية Ab initio لحساب الطاقة الكلية باستعمال مقاربة الأمواج المستوية (Plans waves PW) المدرجة ضمن برنامج CASTEP.كما قمنا بمعالجة التفاعلات الكترون _ايون باعتبار الحالات الإلكترونية التالية كحالات تكافؤ:

| | |
|---|---|
| **Nb**: $4s^2\ 4P^6\ 4d^4\ 5s^1$ | **Pt**: $5d^9\ 6s^1$ |
| **Lu:** $4f^{14}5P^6\ 5d^1\ 6s^2$ | **B**: $2s^2\ \ 2P^1$ |

تم استخدام تقريب التدرج المعمم GGA المعدل من طرف Perdew -Burk-Ernzerhof، و ذلك لوصف طاقة التبادل و الارتباط للوصول إلى نتائج متقاربة و دقيقة لتحديد عناصر البنية البلورية مثل: طاقة القطع $E_{cut_off}$ ، قيم الشبكة K_points ، ثابت الشبكة $a$، طاقة الاستقرار، معامل الإنظغاطية و مشتق معامل الإنظغاطية و كذلك حساب الثوابت المرونية لهذه المركبات. و قد كانت المعطيات الأولية للحساب كالتالي : معدل الإنتقال الأعظمي كان ضمن$(A^\circ)$ $5.10^{-6}$ ، معدل الضغط في حدود 0,02 GB، الفرق في الطاقة الكلية في حدود $5.10^{-6}$(eV/atome) و القوة العظمى قدرت بـ$0,01(eV/A^\circ)$.

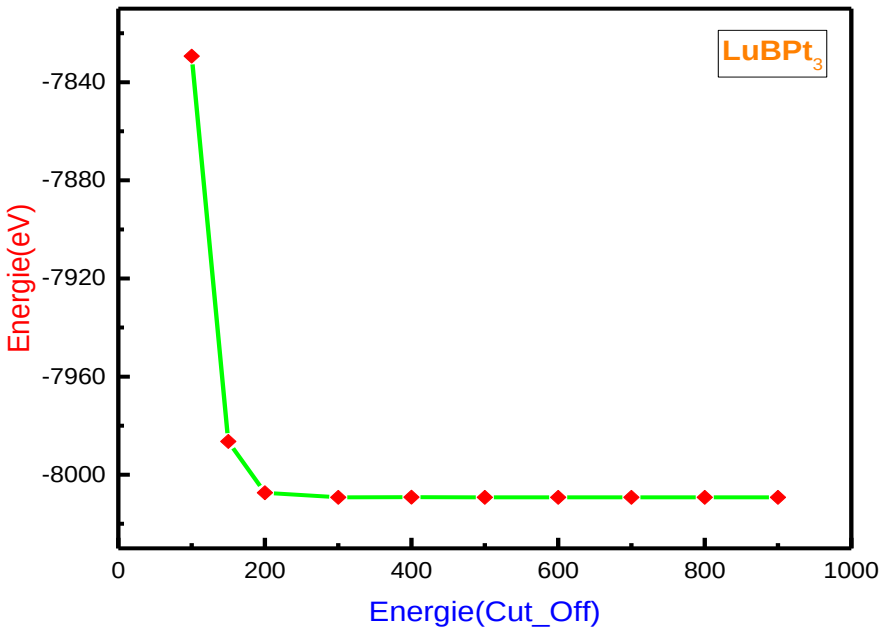
## 7.3.حدود التقارب:

كخطوة أولى لوصف الخصائص الفيزيائية يجب أن نقوم بإجراء اختبارات تقارب لبعض المعطيات مثل طاقة القطع $E_{cut_off}$ و عدد النقاط في منطقة بريلوان الأولى NKpt. تعتبر اختبارات التقارب هذه مهمة جدا بقدر ما تسمح لنا بتوفير قدر كبير من وقت الحساب.

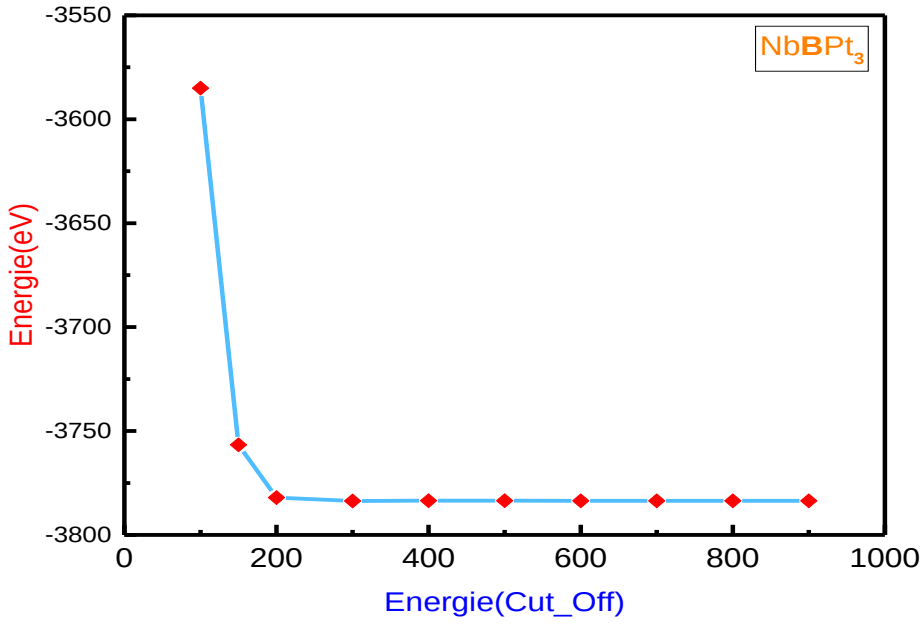
### 1.7.3.دراسة التقارب لدالة الطاقة الكلية بدلالة معامل القطع:

تستعمل طاقة القطع لتصحيح عدد الأمواج المستوية في قاعدة البيانات، و ذلك بدلا من الاختيار المباشر لعدد الأمواج المستوية. عادة ما تختبر طاقة القطع عن طريق دراسة التقارب لدالة الطاقة بدلالة تغير قيمة طاقة القطع $E_{cut_off}$. إن الزيادة في طاقة القطع $E_{cut_off}$ ستزيد حتما من عدد الأمواج المستوية والذي بدوره سيعطي وصفا أكثر دقة لدالة الموجة [50]. وذلك بتثبيت قيمة K–points على قيم

عشوائية، حيث لوحظ ان طاقة القطع $E_{cut_off}$ تستقر كليا عند القيمة 400 eV لكل من المركبين $LuBPt_3$ و $NbBPt_3$




**الشكل 07**:تقارب الطاقة الكلية $E_T$ بدلالة طاقة القطع $E_{cut_off}$ للمركب $LuBPt_3$



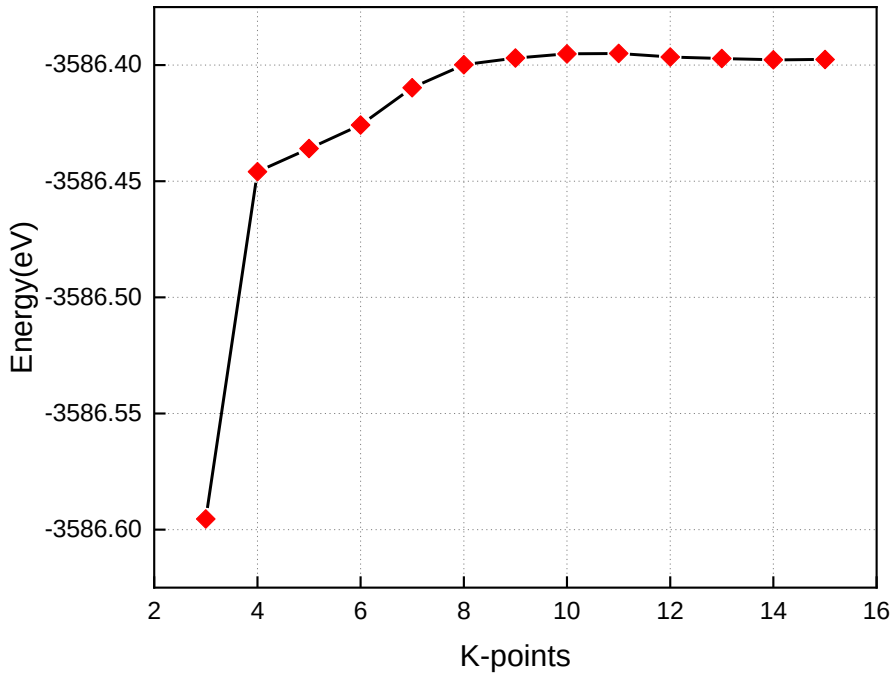

**الشكل08**:تقارب الطاقة الكلية $E_T$ بدلالة طاقة القطع$E_{cut_off}$ للمركب $NbBPt_3$

### 2.7.3 دراسة تقارب الطاقة الكلية بدلالة قيم الشبكة NKpt:

الطاقة الكلية للنظام لا تساوي بالضرورة مجموع طاقات الجسيمات الفعلية، بل نتحصل عليها انطلاقا من التكامل على منطقة بريلوان (ZB). من الناحية النظرية من الضروري حساب القيم الخاصة للهاملتوني لسلسلة لا متناهية من نقاط NKpt حتى الوصول إلى الطاقة الكلية للنظام، و طبيعة التناظر في المركبات تسهل هذه العملية. تسمح الطريقة التي اقترحها Monkhorst و Pack[51]، بتقريب التكامل إلى مجموع حدود محسوبة على شبكة NKpt ثلاثية الابعاد و محدودة. الفكرة الأساسية هي أن دوال الموجة لا تتغير بصورة كبيرة في جوار نقطة من نقاط NKpt، بحيث يمكن تجميع المعلومات على كل منطقة بريلوان في نقطة وحيدة [52].

في مرحلة ثانية و من أجل اختيار عدد النقاط NKpt للوصول إلى دقة حساب كبيرة قمنا بدراسة تغير الطاقة الكلية بدلالة قيم الشبكة NKpt.وذلك بتثبيت قيمة الطاقة المحسوبة انفا $E_{cu\text{-}off}$=400 eV

حسب الشكل-9 وقع التقارب على قيم 12x12x12 لكلا المركبين: $LuBPt_3$ و $NbBPt_3$



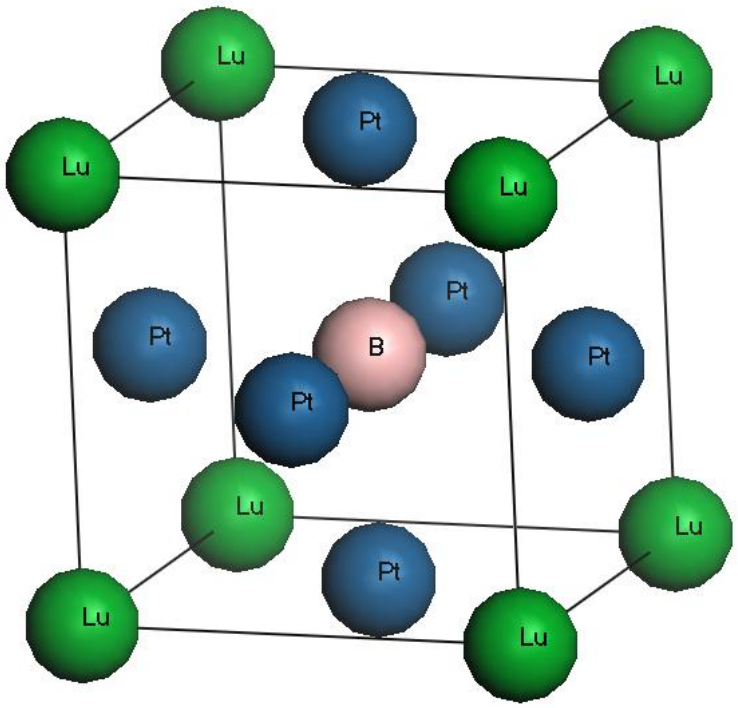

**الشكل09:**تقارب قيم K-points بدلالة الطاقة الكلية للمركب $NbBPt_3$

## 8.3.الخصائص االبنيوية:

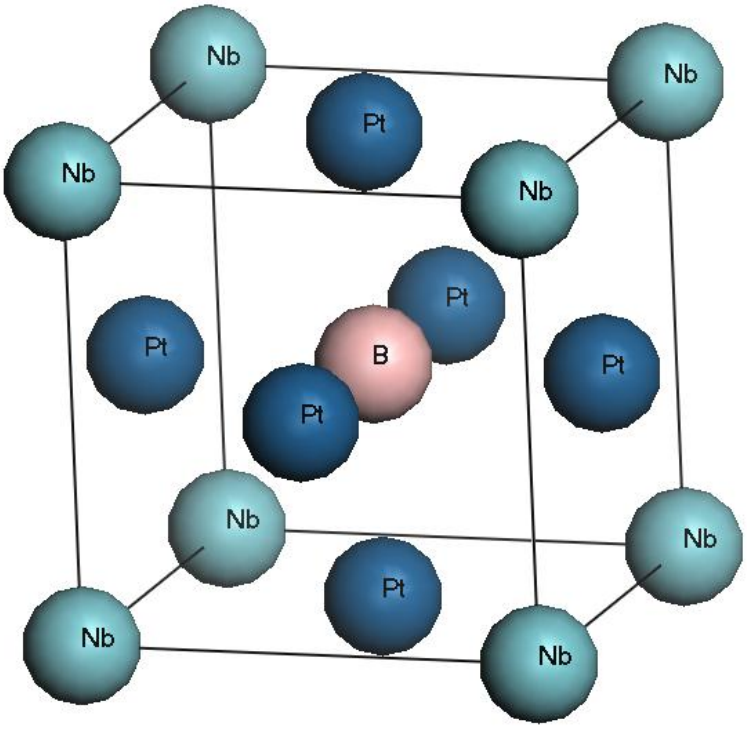
يتبلور $NbBPt_3$ و $LuBPt_3$ في فضاء المجموعة 221 أو (Space group $Pm\bar{3}m$) تتميز هذه البنية بثوابت الشبكة $a = b = c$ و الزوايا $\alpha = \beta = \gamma = 90$ حيث تكون مواقع الذرات كما يلي :

| | |
|---|---|
| **B** $(1/2, 1/2, 1/2)$ | **Lu** (0،0،0) |
| **Pt** $(1/2, 1/2, 0)$ | **Nb** (0،0،0) |

الشكلين التاليين يمثلان التركيب البلوري للمركبين:




**الشكل10:** يمثل بنية المركب $LuBPt_3$




**الشكل11**: يمثل بنية المركب $NbBPt_3$

إن حساب الخصائص البنيوية مهم جدا لدراسة أي مادة، لأنها تتيح لنا استخدام النتائج المتحصل عليها في تحديد الخصائص الفيزيائية الأخرى. هذا الحساب يهدف إلى تحديد حجم الخلية عند التوازن الموافق للحد الأدنى للطاقة E . وكذلك حساب معامل الانضغاطية $B$ و مشتقته الأولى $B'$، وحساب ثابت الشبكة للمركبين بتقريب GGA [53]. و ذلك باستخدام معادلة الحالة لـ:Birch Murnaghan **بيرش-مورناغان** : و التي تعطى بالعلاقة التالية:

$$E(V) = E_0 + \frac{B}{B'(B'-1)}\left[V\left(\frac{V_0}{V}\right)^{B'} - V\right] + \frac{B}{B'}(V - V_0) \qquad (92)$$

حيث:

$E(V)$: الطاقة الكلية.

$E_0$: طاقة الحالة الأساسية المسؤولة عن الحجم $V_0$.

$B'$: قيمة مشتق معامل الصلابة فيما يتعلق بالضغط عند التوازن.

$B$: معامل الضغط الذي يقيس صلابة البلورة ، و يعطى عند التوازن (عند الصفر المطلق) بالعلاقة:

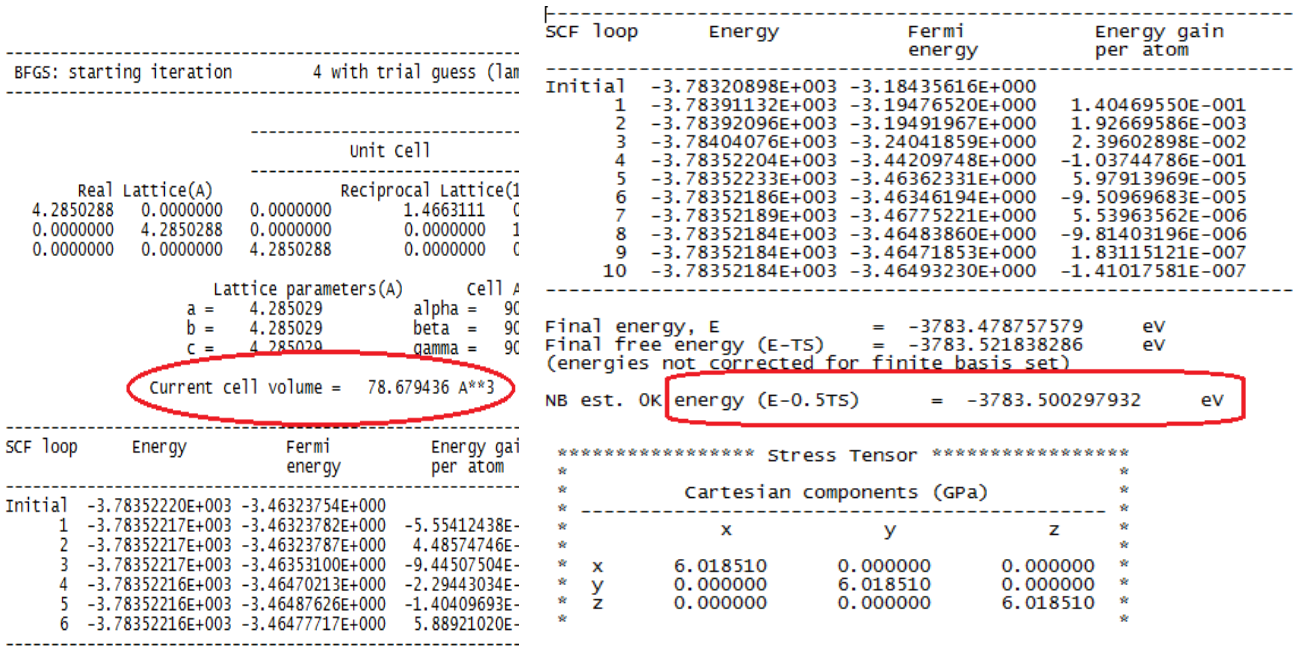
$$B = V\frac{\partial^2 E}{\partial V^2} \qquad (93)$$

النتائج المتحصل عليها لثوابت الشبكة البلورية و معامل الانضغاطية و مشتق معامل الانضغاطية مدونة في الجدول التالي:

| المركب | ثابت الشبكة a (A°) | معامل لانضغاطية B(GPa) | مشتق معامل لانضغاطية B'(GPa) |
|---|---|---|---|
| **$LuBPt_3$** | 4.32 | 186,34 | 4,96 |
| **$NbBPt_3$** | 4.33 | 220,72 | 5,01 |

**الجدول03:** يمثل قيم ثابت الشبكة و الانضغاطية ومشتقها للمركبين

هناك علاقة قوية بين معامل الانضغاطية **B** و صلابة المواد وبالتالي المركبان لا يمتلكان نفس الدرجة من الصلابة، معامل الانضغاطية **B** للمركب $NbBPt_3$ أكبر من معامل الانضغاطية للمركب $LuBPt_3$ و هذا يعني أن المركب $NbBPt_3$ أكبر صلابة من المركب $LuBPt_3$.



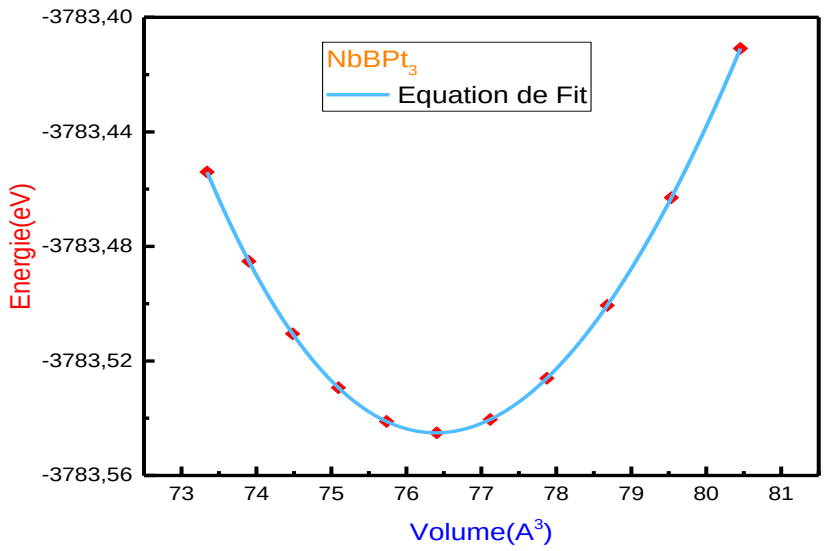

**الشكل12:** يمثل طاقة و حجم المركب$NbBPt_3$عند ضغط يساوي (−6 GPa)

بتغيير قيم الضغط للمركبين $NbBPt_3$ و $LuBPt_3$ باستعمال برنامج CASTEP نتحصل على قيم كل من الحجم و الطاقة المدونة في الجدول التالي:

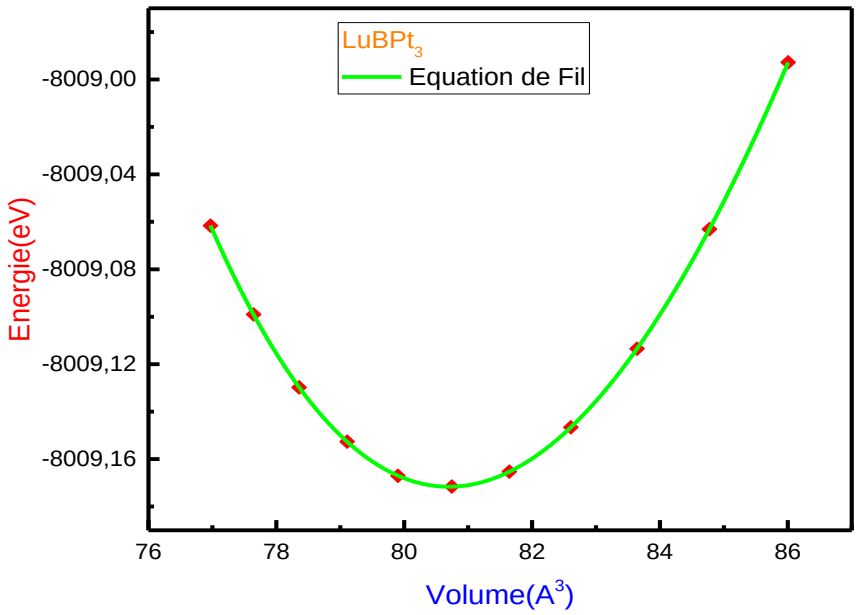
| P(GPa) | $NbBPt_3$ | | $LuBPt_3$ | |
|---|---|---|---|---|
| | $V(A^3)$ | E(eV) | $V(A^3)$ | E(eV) |
| **-8** | 79,53 | -3783,46299 | 84,77 | -8009,06307 |
| **-6** | 78,67 | -3783,50062 | 83,64 | -8009,11345 |
| **-4** | 77,87 | -3783,52604 | 82,60 | -8009,14662 |
| **-2** | 77,11 | -3783,54043 | 81,64 | -8009,16531 |
| **0** | 76,40 | -3783,54511 | 80,74 | -8009,17159 |
| **2** | 75,73 | -3783,54113 | 79,90 | -8009,16701 |
| **4** | 75,09 | -3783,52935 | 79,10 | -8009,15264 |
| **6** | 74,48 | -3783,51051 | 78,35 | -8009,12979 |
| **8** | 73,89 | -3783,48521 | 77,64 | -8009,09901 |

**الجدول 04:** تغيرات الطاقة للمركبين $LuBPt_3$ و $NbBPt_3$ بدلالة الحجم

للحصول على طاقة استقرار المركبين نرسم البيان انطلاقا من الجدولين باستعمال برنامج **Origine** فنتحصل على المنحنيين التاليين:




**الـشكل 13:** تغير الطاقة للمركب $NbBPt_3$ بدلالة الحجم




**الـشكل 14 :** تغير الطاقة للمركب $LuBPt_3$ بدلالة الحجم

يمثل المنحنيين تغيرات الطاقة لكل من المركبين $NbBPt_3$ و $LuBPt_3$ بدلالة الحجم حيث لاحظنا أن منحنى تغيرات الطاقة يتناقص إلى قيمة سفلى ثم يزداد، أي أن هناك قيمة حدية سفلى $E_{min}$ توافق حجم معين، تمثل طاقة الاستقرار **Energie de stabilitée.** الجدول التالي يمثل قيم طاقة لاستقرار و الحجم الموافق للمركبين.

| المركب | طاقة الاستقرار (eV) | الحجم($A^3$) |
|---|---|---|
| **$LuBPt_3$** | -8009.17159 | 80,74552 |
| **$NbBPt_3$** | -3783,54510 | 76,40565 |

**الـجدول 05 :** قيم طاقة الاستقرار و الحجم الموافق للمركبين

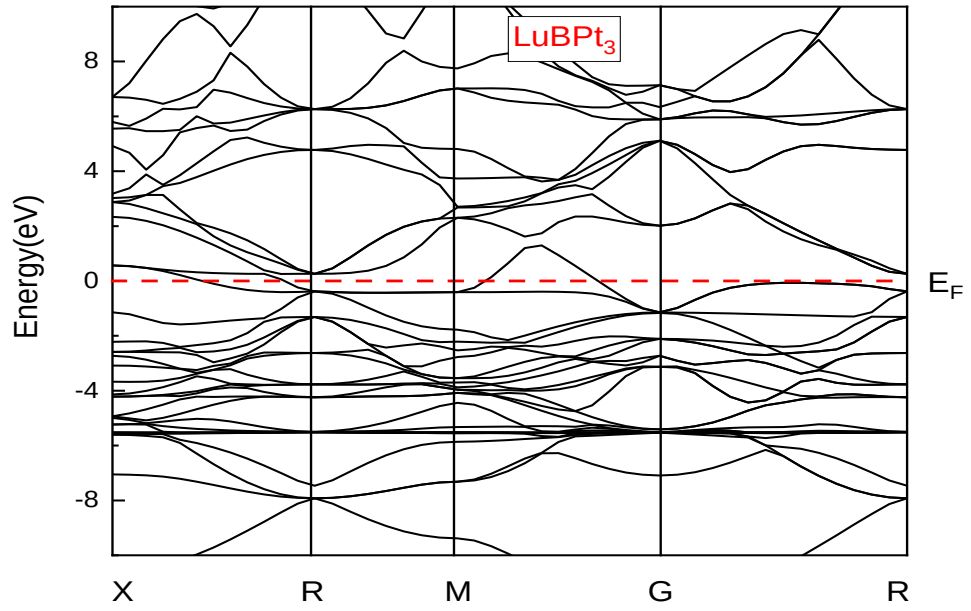
نلاحظ من الجدول أن طاقة الاستقرار للمركب $LuBPt_3$ تكون عند eV -8009.17159 أقل من طاقة الاستقرار للمركب $NbBPt_3$ الذي له eV -3783,54510

## 9.3 الخواص الالكترونية :

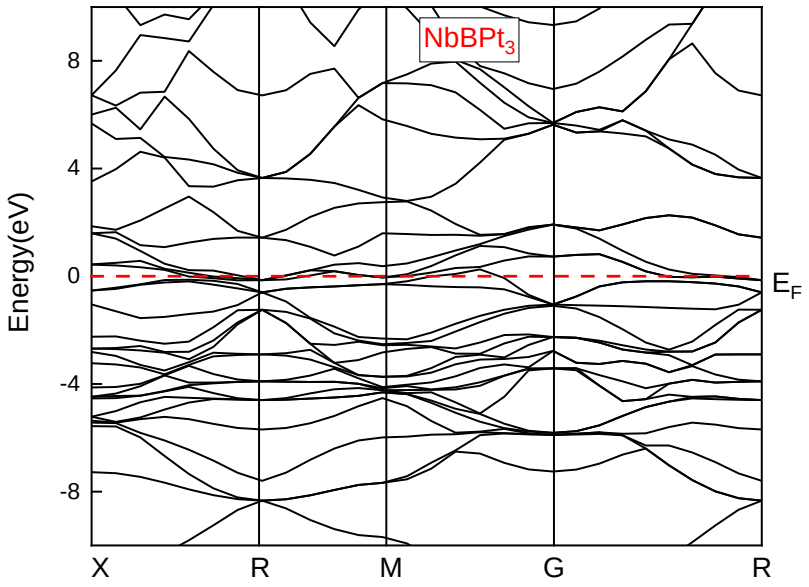
دراسة الخصائص الالكترونية للمركبات تسمح بتحديد ماهية المركب سواء كان عازلا ناقل أو نصف ناقل، وكذلك تحديد الروابط بين ذراته وذلك للفهم الجيد للخصائص الفيزيائية للجسم

### 1.9.3 بنية عصابة الطاقة الإلكترونية:

تعرف عصابة الطاقة على أنها تمثيل لقيم الطاقة بالنسبة للإلكترون بدلالة شعاع الموجة K في الشبكة المعكوسة، و للتبسيط يتم التعامل فقط مع اتجاهات التناظر الأعلى في منطقة brillouin الأولى، ويمكن تعريف المانع الطاقي $E_g$ على أنه الفرق بين أعلى قيمة لعصابة التكافؤ و أدنى قيمة لعصابة النقل في نقاط تناظرية محددة




**الشكل15:** بنية عصابات الطاقة للمركب $LuBPt_3$




**الشكل16:** بنية عصابات الطاقة للمركب $NbBPt_3$

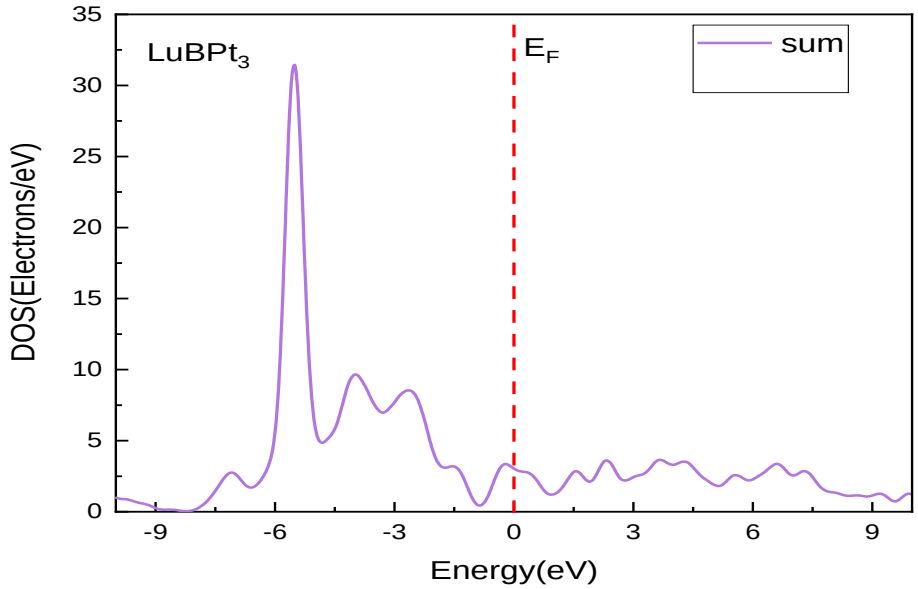
من خلال بنية عصابات الطاقة التي حصلنا عليها (**الشكل** 15-16) بالتقريب المعمم GGA في كلا المركبين $NbBPt_3$ و $LuBPt_3$ هناك تداخلا بين عصابات النقل مع عصابات التكافؤ في عدة نقاط على مستوى منطقة فارمي $E_F$ يمثلها الخط الافقي الاحمر والذي يظهر بوضوح غياب فجوة المانع الطاقي ويشهد هذا على الطابع العدني " أي انهما موصلان " و مما هو متعارف عليه فان تقريب GGA يقلل من قيمة العصابة الممنوعة المحسوبة على القيمة التجريبية [43,41]

### 2.9.3 كثافة الحالات الالكترونية: Density Of States (DOS)

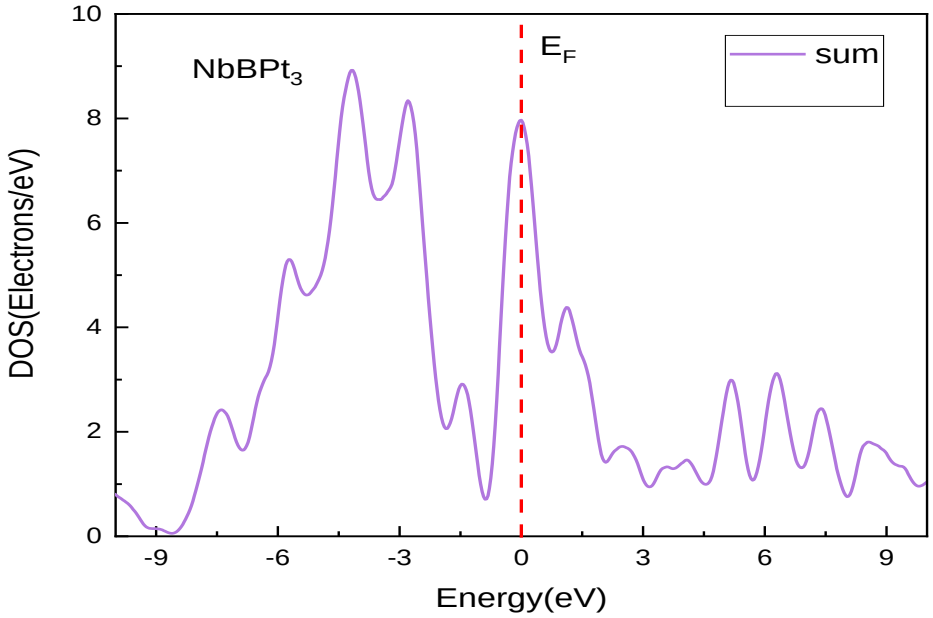
كثافة الإلكترون للحالات (DOS) هي واحدة من أكثر الخصائص الإلكترونية إثارة للاهتمام في فيزياء الجوامد. في الواقع، تسمح لنا حسابات الكثافة الإلكترونية للحالات بتحديد التوزيع العام للحالات كدالة للطاقة ، و معرفة الطبيعة و الحالات المسؤولة عن الروابط ، و نوع التهجين ، لتحديد الصفة السائدة لكل منطقة و يمكنها أيضا تحديد قيمة الطاقة لفجوة نطاق أشباه الموصلات، لفهم بنية النطاق الإلكتروني للمركب بشكل أفضل، نقوم بتحليل كثافة الحالة الكلية TDOS الممثلة في (**الشكل** 17 و18) [42]

عموما المركبين ليس لهما نفس الشكل العام لكثافة الحالات الكلية و هذا راجع إلى وجود ذرات مختلفة و أحجام مختلفة

- بالنسبة للمركب $LuBPt_3$ (الشكل 17) يعود تشكل هذه العصابة حول مستوي فارمي $E_F$ عن إسهام إلكترونات السويات الطاقية
- بالنسبة للمركب $NbBPt_3$ (الشكل 18) يعود تشكل هذه العصابة حول مستوي فارمي $E_F$ عن تراكب إلكترونات السويات الطاقية




**الشكل17:** كثافة الحالة الكلية TDOS للمركب $LuBPt_3$




**الشكل18:** كثافة الحالة الكلية TDOS للمركب $NbBPt_3$

## 10.3.الخصائص المرونية:

ثوابت المرونة $C_{ij}$ تبين مدى استجابة المادة للقوى (الإجهادات) الخارجية، و هي تلعب دورا مهما في المقاومة الميكانيكية للمواد. و تزودنا بمعلومات عن طبيعة الروابط بين المستويات الذرية المتجاورة. كما تعطي معلومات حول تماثل أو تباين المناحي في الخصائص المرونية. و في الأخير دراسة ثوابت المرونة يحيلنا إلى الحديث عن الاستقرار الميكانيكي للمركبات البلورية[44]. المركبين محل الدراسة $NbBPt_3$ و $LuBPt_3$ يتبلوران في النظام المكعبي، و نظرا للتناظر الكبير في هذا النظام ينخفض عدد عناصر مصفوفة المرونة العامة $C_{ij}$ من 36 عنصر إلى 3 ثوابت مرونة مستقلة $C_{11}$، $C_{12}$، $C_{44}$. قمنا بحساب ثوابت المرونة باستعمال طريقة (إجهاد– تشوه) [46] و ذلك بوضع المركب تحت الضغط و النتائج المتحصل عليها كالتالي:

أولا: بالنسبة للمركب $NbBPt_3$

| $C_{44}$ | $C_{12}$ | $C_{11}$ | $NbBPt_3$ |
|---|---|---|---|
| −47,15290 | 126,49065 | 257,98145 | |

**الجدول 06 :** قيم ثوابت المرونة $C_{ij}$ للمركب $NbBPt_3$

```
Stress intercept :      -8.639664

       4       4        -0.138461        -0.003000
       4       4        -0.047490        -0.001000
       4       4         0.048566         0.001000
       4       4         0.143873         0.003000
C (gradient)     :     -47.152900
Error on C       :       0.400063
Correlation coeff:      -0.999928
Stress intercept :       0.001622


 ============================
 Summary of elastic constants
 ============================

id  i  j       Cij (GPa)
1   1  1     257.98745 +/-   1.687
4   4  4     -47.15290 +/-   0.400
7   1  2     126.49065 +/-   0.138

    ====================================
    Elastic Stiffness Constants Cij (GPa)
    ====================================

  257.98745   126.49065   126.49065     0.00000     0.00000     0.00000
  126.49065   257.98745   126.49065     0.00000     0.00000     0.00000
  126.49065   126.49065   257.98745     0.00000     0.00000     0.00000
    0.00000     0.00000     0.00000   -47.15290     0.00000     0.00000
    0.00000     0.00000     0.00000     0.00000   -47.15290     0.00000
    0.00000     0.00000     0.00000     0.00000     0.00000   -47.15290

    ====================================
```

**الشكل 19:** قيم $C_{ij}$ للمركب$NbBPt_3$.

ثانيا: بالنسبة للمركب $LuBPt_3$

| $C_{44}$ | $C_{12}$ | $C_{11}$ | $LuBPt_3$ |
|---|---|---|---|
| 21,74070 | 401,53135 | 753,67260 | |

**الجدول 07 :** قيم ثوابت المرونة $C_{ij}$ للمركب $LuBPt_3$

```
       4        4         0.060671         -0.003000
       4        4         0.021850         -0.001000
       4        4        -0.022301          0.001000
       4        4        -0.069550          0.003000
C (gradient)     :      21.740700
Error on C       :       0.670949
Correlation coeff:       0.999049
Stress intercept :      -0.002332

  ============================
  Summary of elastic constants
  ============================

 id  i  j       Cij (GPa)
 1   1  1    753.67260 +/-   3.804
 4   4  4     21.74070 +/-   0.671
 7   1  2    401.53135 +/-   1.745

     ====================================
     Elastic Stiffness Constants Cij (GPa)
     ====================================

   753.67260   401.53135   401.53135     0.00000     0.00000     0.00000
   401.53135   753.67260   401.53135     0.00000     0.00000     0.00000
   401.53135   401.53135   753.67260     0.00000     0.00000     0.00000
     0.00000     0.00000     0.00000    21.74070     0.00000     0.00000
     0.00000     0.00000     0.00000     0.00000    21.74070     0.00000
     0.00000     0.00000     0.00000     0.00000     0.00000    21.74070

     ========================================
     Elastic Compliance Constants Sij (1/GPa)
     ========================================

  0.0021073  -0.0007325  -0.0007325   0.0000000   0.0000000   0.0000000
 -0.0007325   0.0021073  -0.0007325   0.0000000   0.0000000   0.0000000
 -0.0007325  -0.0007325   0.0021073   0.0000000   0.0000000   0.0000000
```

**الشكل 20:** قيم $C_{ij}$ للمركب $LuBPt_3$.

من خلال هذه القيم نستخلص ما يلي:

قيم ثوابت المرونة $C_{11}$، $C_{12}$، $C_{44}$ المحسوبة للمركبين $NbBPt_3$ و $LuBPt_3$ تحقق شروط الاستقرار الميكانيكي [44] و هي في النظام المكعبي تعطى ب :

$$C_{11} + 2C_{12} > 0$$

$$C_{11} > C_{12}$$

$$C_{11} > 0$$

و بالتالي المركبين المدروسين مستقرين ميكانيكيا.

القيمة المرتفعة لثابت المرونة $C_{11}$ للمركبين تبين أن لهما مقاومة جيدة للضغط تحت فعل الإجهاد المحوري باتجاه المحاور الرئيسية الثلاث X، Y وZ ومركب $LuBPt_3$ أكثر مقاومة لهذه الإجهادات من مركب $NbBPt_3$.

ثابت المرونة $C_{44}$ أصغر من ثابت المرونة $C_{11}$ لكلا المركبين $NbBPt_3$ و $LuBPt_3$ هذا يدل على أن مقاومة المركبات لتشوهات الضغط أعلى من مقاومتها لتشوهات القص.

# خاتمة عامة

الهدف من هذه المذكرة هو تقديم دراسة نظرية للخصائص الفيزيائية ( البنيوية والالكترونية والمرونية) للمركبين التاليين$NbBPt_3$ و $LuBPt_3$ و ذلك باستخدام طرق حساب المبادئ الاولية Ab initio في إطار نظرية الكثافة الدالية مع استعمال قاعدة الأمواج المستوية من خلال برنامج CASTEP. و قد تم الحساب باستخدام تقريب التدرج المعمم GGA و يمكن تلخيص النتائج المتحصل عليها في هذا العمل كالتالي:

- ✓ قمنا أولا بدراسة تقارب الطاقة الكلية للبلورة بدلالة طاقة القطع Energie de coupure و قيم الشبكة ثم تعديل البنية الهندسية للحصول على بنية مستقرة توافق أدنى قيمة للطاقة الكلية.
- ✓ الخصائص البنيوية للحالة الأساسية المحسوبة لكلا المركبين هي قيم متقاربة بامتياز مع القيم النظرية المتاحة، حيث كانت جيدة لثابت الشبكة ($A^{\circ}$)a.
- ✓ أما بالنسبة للخصائص الإلكترونية للمركبين $NbBPt_3$ و $LuBPt_3$ وجدنا بأنهما مادة معدنية وكذا بالنسبة للحالات الإلكترونية فتم تحديدها عن طريق تحليل كثافة الحالات الإلكترونية الكلية.
- ✓ معامل الإنظغاطية B للمركب$LuBPt_3$ أكبر من معامل الإنظغاطية للمركب $NbBPt_3$ و هذا يعني أن المركب$LuBPt_3$ أكثر صلابة من المركب$NbBPt_3$. و تم تحديد المشتقة الأولى لمعامل الإنظغاطية و الحجم لكلا المركبين.
- ✓ تم حساب طاقة استقرار المركبين حيث وجد أن المركب $NbBPt_3$ أكثر استقرارا من المركب $LuBPt_3$.
- ✓ و قمنا أيضا بدراسة الخصائص المرونية و حساب المعاملات$(C_{11}, C_{12}, C_{44})$ الخاصة بالبنية المكعبة مع تطبيق قاعدة الاستقرار الميكانيكي...

# المراجع


[1]: زنات حليمة، دراسة الخصائص البنيوية والإلكترونية لمركب ذو أهمية في البصريات غير الخطية، مذكرة ماستر أكاديمي، جامعة محمد بوضياف مسيلة، كلية العلوم قسم الفيزياء، ص.1.(2017).

[2]:P.Amaud, (chimie physique) édition dunod (2001).

[3]:A.Rouabhia, étude ab initio des propriétés structurales et Magnétiques des antiperovskite Fe3MC (M=Zn, AL, Ga, et Sn), in Université des Sciences et de la Technologie 2010,Oran.

[4]:ClarK, S.J, et al, First principles methodes using CASTEP. Zeitschrift fur Kristallographie _(rystalline Materials, 2005. 220(5/6):p.567_570.

[5]: رباحي وداد، مفتاح رفيدة، دراسة الخصائص الفيزيائية للمركبين XAs (X=B, Al) في إطار نظرية دالية الكثافة (DFT)، المدرسة العليا للأساتذة بالأغواط، 2018.

[6]: شاء الله رجاء، ذرة الهيدروجين والذرات الشبيهة لها في معادلة ديراك، مذكرة ماستر، جامعة قاصدي مرباح ورقلة، كلية الرياضيات وعلوم المادة، (2018).

[7]:M.BORN. R.J.Oppenheimer .On the quantum theory of Molecules ,Ann phys,84 ,457(1927) .

[8]:.P.Perdew.J.A Chevary, S.H.Vosko, K.A. Jackson, M.R. Pederson, D.J.Singh,and C.Filhais ,phys .Rev.B46,6671(1992) .

[9]:A.MEZIANI,Thése de Doctorat, Université Badji Mokhtar Annaba(2012).

[10]:D.R.Hartree,Proc.Cambridge philos Soc,24,89(1928).

[11]:D.R.Hartree,the calculation of atomic structures,John Wiley and Sons,New York. P376,(1957).

[12]: V.Fock,Z.physih, 61,126(1930).

[13]:L. Isaenko and I. Vasilyeva, "Nonlinear LiB III C YI 2crystals for mid-IR and far-IR: Novel aspects in crystal growth," Journal of crystal Growth,vol.310pp. 1954-1960, 2008.

[14]:J. Kim and T. Hughbanks, "Synthesis and Structures of New TernaryAluminum Chalcogenides:LiAlSe2,α- LiAlTe2,and β-LiAlTe2,"Inorganic Chemistry,vol. 39, pp. 3092-3097 , 2000.

[15]:J. Kim and T. Hughbanks, "Synthesis and Structures of Ternary Chalcogenides of Aluminum and Gallium with Stacking Faults:KMQ 2 (M= Al,Ga; Q = Se, Te) "Journal of solid state chemistry, vol. 149,pp. 242-251 , 2000

[16]:V.Fock,Z.phys.61, 126(1930).

[17]:عميرات مسعودة. دراسة الخصائص المغناطيسية بواسطة المبادئ الأولية. جامعة ورقلة2015.

[18]: P. Hohenberg, W. Kohn, Phys. Rev. B 136, (1964) 864

[19]: H.J.Monkhorst.J.D.Pack.phys.Rev B 13 (1976)5188.

[20]: F.D.Murnaghan.Proc.Nat.Sci.USA 30(1944)244.

[21]: BENAMER, Ali. Etude des propriétés physiques de quelques composés intermétalliques binaires: APt3 (A= Mg, Sc, Y et Zr). Effet du bore et de la pression hydrostatique. Thèse de doctorat. 2018.

[22]:S.cottenier, Density functional theory and the family of (L) APW-methods:a step -by-step introduction, 6august(2004).

[23]: مروة رزاق زواوي، دراسة بنيوية ومطيافية لمركب ثنائي كلورو ميثيل انيلين باستخدام نظرية الدالية الوظيفية للكثافة، ماستر اكاديمي، جامعة الشهيد حمه لخضر بالوادي،ص12.(2019).

[24]:العمري وردة، دراسة الخصائص المرنة لسيراميك مركب نتريد البورون BN بنظرية دالية الكثافة، مذكرة ماستر اكاديمي، جامعة قاصدي مرباح ورقلة، ص17.(2015).

[25]:عبد المجيد اعمر، الخصائص البنيوية و الالكترونية لبعض مركبات هسلر، مذكرة ماستر، جامعة محمد خيضر بسكرة، ص19.(2020).

[26] D. Langreth, J. Perdew, Phys. Rev. B 21 (1980) 5469

[27]: حريس سلامة عواد، فيزياء الحالة الصلبة، الطبعة الأولى، المملكة الأردنية الهاشمية، دار أمجد للنشر و التوزيع، 2017.

[28]:CHIHI Tayeb,contribution à l´ètude des nitrures à baze mètaux de transitiondes groupes IV et V : phases stables et mètastables , Doctorat , Dèpartement de Physique, Universite FARHAT ABBAS-SETIF.

[29]: مطبوعة دروس الأستاذ بن عامر علي، المدرسة العليا لأساتذة بوسعادة.

[30] : عبد العزيز عقيل ، مقدمة في فيزياء الجسم الصلب.

[31 ]:GATT FAYROUZ, Etude ab initio des propriétés structurales électroniques élastiques et optiques des composés III-P, MASTER , Facultédes siences Exactes, Université MED KHIDER Biskra, 2013-2014 .

[32]:A , Gicquel, diamond,and Related Materiais,20(7)(2011)875.

[33]:T.Ouisse,D.Chaussender,L.Auvray,J.Appl.Crys,43(2010)122.

[34]:E.Dieulesaint, D.Royer.Ondes élastiques dans les solides. Application au traitements du signal. Ed.Masson,Paris6,1974,407p.

[35]:P.Pavlov,A.Khokhlov.Physique du solides.Ed.Mir,Moscou,1989,416p.

[36]:J.Nye,proprietes des cristause(Edition dunod, paris, 1961).

[37]:Michel Dufour et Michel pillu, Biomécanique fonctionnelle, rappelsanatomiques, stabilités, mobilités,contraintes, membres.Téte,tronc(2006).

[38]:Ahmed Gueddouh thèse magister:université de laghouat 2009.

[39]:Grandall, Dahl, lardner(1959).An introduction to the mechanics of solids. boston: Mc Graw-Hill.

[40]:Zener(c), Elasticity and anelasticity of metals, p16.University of chicago press, chicago(1948).

[41]: A. Benamer, Y. Medkour, S. Sâad Essaoud, S. Chaddadi, and A. Roumili, Ab-Initio Study of the Structural, Electronic, Elastic and

Thermodynamic Properties of Sc3XB (X=Sn, Al, Hf). Solid State Commun. 331, 114305 (2021).

[42]: Benamer A, Roumili A, Medkour Y, Charifi Z. First principle study of structural, elastic and electronic properties of APt3 (A = Mg, Sc, Y and Zr). Philos. Mag. 2018;98(5):408.

[43] : A. Benamer, A. Roumili, Y. Medkour, D. Maouche. Effect Of Interstitial Atom X On Structural, Elastic And Electronic Properties of NbRu3, NbXRu3 WITH (X= B or C) 3ème conférence Internationale des énergies renouvelables CIER-2015 Proceedings of Engineering and Technology - PET, Special issue, Volume 11 (2015).

[44]:C.Kittel. Introduction a la physique de l'état solide. Dunode(1997).

[45]: A. Benamer, A. Roumili, Y. Medkour. Theory study of structural, electronic and elastic properties of ternary borides MgBPd3 (2017).

[46]: A. Benamer, A. Roumili, Y. Medkour. First-principles Study of Structural, Electronic, Elastic and Thermal Properties of XBPd3 (X= Ca, Mg). AIJR 166-166 (2022).

[47] : بري السعدي، تأثير الضغط على الخصائص الإلكتروضوئية محسوبة بطريقة FP–LAPW للبلورات الثنائية. 2008.

[48] :M.D.Segall, P.J.D Lindan, M.J.Probert,C. J.Pickard, P.J.Hasnip, S.J.clark and M. C.Payne,J.Phys.Cond.Matter.2002,14,2717.

[49] :Gerald Bastard,Wave mechanics applied to semiconductor heterostructures, Les éditions de physique, paris, (1998).

[50] :cmt.dur.ac.uk/sjc/thesis-dlg/node39.html.

[51]:I.Sosnows.ka,W.Schafer,W.Kockelmann,K.H.Andersen,andI.O.Troyanchuk. Crystalstructure, and spiral magnetic ordering of bifeo3 doped withmanganese.Appl. Phys. A:Mater.Sci.Proc, 74:s1040, 2002.

[52]: Hartree, D.R. The Wave mechanics of an atom With a non-Coulomb centralfield. part 1. Theory and methods . in Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society.1928.Cambridge Univ Press.

[53]: F.Murnaghan. Proceedings of the National Acadmy of Sciences .30(1944)244 .

# الجـــداول

**الجدول 01:** عدد الثوابت المرنة المستقلة لبنية بلورية مختلفة عن مجموعاتهم المخصصة 26

**الجدول 02:** قيم معاملات القص لبعض المواد 29

**الجدول03:** يمثل قيم ثابت الشبكة و الانضغاطية و مشتقها للمركبين 42

**الجدول 04:** تغيرات الطاقة للمركبين NbBPt3 و NbBPt3 بدلالة الحجم 43

**الجدول 05:** قيم طاقة الاستقرار و الحجم الموافق للمركبين 44

**الجدول06:** قيم ثوابت المرونة $C_{ij}$ للمركب $NbBPt_3$ 48

**الجدول07:** قيم ثوابت المرونة $C_{ij}$ للمركب $LuBPt_3$ 49

# الأشكـــال


**الشكل1:** خوارزمية حل معادلة كوهن – شام 16

**الشكل02:** التركيب البلوري 20

**الشكل03:** خلية وينغر– زيتس 21

**الشكل 04:** عناصر ممتد الإجهاد 24

**الشكل05:** ضغط هيدروستاتيكي مطبق في جميع الاتجاهات 30

**الشكل06:** استطالة عينة اختبار 32

**الشكل 07:** تقارب الطاقة الكلية $E_T$ بدلالة طاقة القطع $E_{cut_off}$ للمركب$LuBPt_3$ 38

**الشكل08:** تقارب الطاقة الكلية $E_T$ بدلالة طاقة القطع $E_{cut_off}$ للمركب $NbBPt_3$ 38

**الشكل09:** تقارب قيم k–points بدلالة الطاقة الكلية للمركبين $NbBPt_3$ ,$LuBPt_3$ 39

**الشكل10:** يمثل بنية المركب $LuBPt_3$ 40

**الشكل11:** يمثل بنية المركب $NbBPt_3$ 41

**الشكل12:** يمثل طاقة و حجم المركب $NbBPt_3$ عند ضغط يساوي (6 **G**Pa–) 42

**الشكل13:** تغير الطاقة للمركب$NbBPt_3$ بدلالة الحجم 43

**الشكل14:** تغيرات الطاقة للمركب $LuBPt_3$ بدلالة الحجم 44

**الشكل15:** بنية عصابات الطاقة للمركب المركب $LuBPt_3$ 45

**الشكل16:** بنية عصابات الطاقة للمركب المركب $NbBPt_3$ 46

**الشكل17:** كثافة الحالة الكلية TDOS المركب $LuBPt_3$ 47

**الشكل18:** كثافة الحالة الكلية TDOS المركب $NbBPt_3$ 47

**الشكل19:** قيم $C_{ij}$ للمركب$NbBPt_3$ 48

**الشكل20:** قيم $C_{ij}$ للمركب$LuBPt_3$. 49

## ملخص

في هذا العمل ، قمنا بحساب الخصائص الفيزيائية للمركبات الثلاثية $NbBPt_3$ و $LuBPt_3$ النوع البروفيسكيت العكسي ، الهدف من العمل هو دراسة الوسائط كمعامل شبكة والخصائص البنيوية والالكترونية و المرونية و معامل الانضغاط وذلك باستخدام كود CASTEP الذي يستحدم الكمون الكاذب على أساس نظرية الكثافة الدالية DFT استخدمنا تقريب التدرج المعمم GGA لجهد التبادل و الارتباط كما تم حساب الثوابت المرونية للشبكة ومعامل الانضغاطية ومشتقتها للضغط الخاصة بها و مقارنتها بالنتائج المتاحة



## Résumé

Dans ce travail, nous avons étudié les propriétés structurales , électroniques élastiques des composésternaires **$NbBPt_3$** et **$LuBPt_3$** de type antipérovskite.Le but du travailest l'investigation des paramètres physiques tels que le paramètre de réseau à l'équilibre, le module de compressibilité, en utilisant le code CASTEP qui utilise la méthode de pseudo potentielle basée sur la théorie fonctionnelle de densité (DFT).Nous avons utilisé l'approximationgradient généralisée (GGA) pour le potentiel d'échange et de corrélation. Les constantes élastiquesle réseau d'équilibre et le module de compressibilité et sa dérivée de pression sont calculés et comparés aux résultatsdisponibles.