

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



ميدان: علوم المادة

قسم: الفيزياء

كلية: الفيزياء

تخصص: فيزياء تطبيقية

رقم: Ph APP 11/2020

مذكرة مقدمة لنيل شهادة الماستر
من إعداد الطالبة: سوامية حنان
تحت عنوان:

دراسة الخصائص الفيزيائية للمركب
 Sr_2GdReO_6

تحت إشراف اللجنة المناقشة:

رئيسا
مشرفا
مناقشة

أستاذ جامعة مسيلة
أستاذ جامعة المسيلة
أستاذة جامعة المسيلة

ابريير الميلود
بري السعدي
مقاق نفيسة

2019/2020

كلمة شكر

نشكر الله عز وجل الذي وفقنا في انجاز هذا العمل ، ونتقدم بجزيل الشكر إلى أستاذ
المشرف الدكتور بري سعدي الذي لم يبخل علينا بنصائحه وارشاداته طيلة قيامنا بهذا
العمل، كما اتوجه بشكري لرئيس اللجنة استاذ ابرير الميلود والاستاذة فاضلة مفاق نفيسة
لمناقشتهم مذكرتي ،والى أخ الذي قدم لي يد العون نقاز وليد مع تمنياتي له بنجاحات دائمة .الى
كل من درسني في قسم الفيزياء . كما نتقدم بالشكر الى كل من ساعدنا لإتمام هذا العمل سواء
من قريب او بعيد الى كل افراد عائلتي
الى كل من ساعدنيوشكرا

اهداء

إلى الذي لن يأتي مثله أحد ولن يكون بعده أحد إلى أبي الغالي إلى سندي وإستقامة ظهري في الحياة، وإلى نور عيوني أُمي حفصهما الله ورعاهما.

إلى زوجي العزيز: فيصل

إلى الغالي أخي وزوجته: علي وصوفيا

إلى أخي: أيمن

إلى إخوتي وصديقاتي: نبيلة، أحلام، ليلى، هدى، هاجر، حنيفة.....

إلى حبيبة قلبي: سجاد

وإلى صغار العائلة: مرام، جمانة، رفيف، أسما، إسراء، معين، محمد

إلى كل الأقارب

وإلى كل من ساندني لإتمام هذا العمل. أستاذ بري السعدي.

إلى كل الأساتذة الأفاضل في قسم الفيزياء.

الفهرس

01.....	مقدمة عامة
03.....	المراجع
<u>الفصل الأول</u>	
DFT نظرية دالية الكثافة	
04.....	1.I- مقدمة
04 .	2.I- معادلة شرودينغر
05	3.I- تقريب الأديابتيكي. Born-Oppenhaier
05.....	4.I- تقريب هارتري-فوك Hartree-Fock
.07.....	5.I- نظرية دالية الكثافة DFT
07.....	1. 5. I . نظرية توماس فارمي Tomas-Farmi
08.....	2. 5.I . نظرية هوهنبارغ-كوهن Hohenberg-kohn
09..	3.5.I . معادلة كوهن-شام Kohn-sham
10.....	4. 5.I . حلول معادلة كوهن -شام
11.....	5. 5.I . تقريب كثافة الموضع LDA
12.....	6. 5.I . تقريب التدرج المعمم GGA
12	8. 5.I . تقريب GGA+U
13...	المراجع

الفصل الثاني

طريقة الأمواج المستوية المتزايدة خطيا والكمون الكامل FP-LAPW

15.....	1.II- مقدمة
---------	-------------

15.....	1.II طريقة APW
16.....	2.II مبدأ طريقة FP-LAPW
17	3.II دور الطاقات الخطية
17.....	4.II بنية الدوال الشعاعية
18.....	5. II الدوال الشعاعية اللانسية
19.....	6. II الدوال الشعاعية النسبية
21.....	7.II تحديد الكمونات
22.....	8.II برنامج Wien2K
24.....	المراجع

الفصل الثالث

النتائج والمناقشة

25.....	1. III مقدمة
26.....	2.III الخصائص البنيوية
28.....	3.III الخصائص الإلكترونية
28.....	4.III عصابة الطاقة
29.....	5.III كثافة الحالات الكلية والجزئية
30.....	6.II الخصائص المغناطيسية
32	المراجع
3 4.....	خلاصة عامة
.....	الملخص

قائمة الأشكال

الفصل الأول

الشكل (1. I) : مخطط لنظرية دالية الكثافة DFT 11

الفصل الثاني

الشكل (1. II) : شكل الكمون M.T 15

الشكل (2. II) : خوارزمية برنامج Wien2K 23

الفصل الثالث

الشكل (1. III) : البنية البلورية للمركب Sr_2GdReO_6 26

الشكل (2. III) : تغيرات الطاقة الكلية للمركب Sr_2GdReO_6 بدلالة الحجم في تقريبي $GGA + U$ و GGA 27

الشكل (3. III) : منطقة بريليون الأولى مرفقة بنقاط عالية التناظر 28

الشكل (4. III) : عصابة الطاقة للمركب Sr_2GdReO_6 في تقريبي $GGA + U$ و GGA 29

الشكل (5. III) : كثافة الحالات الكلية للمركب Sr_2GdReO_6 في تقريبي $GGA + U$ 30

الشكل (6. III) : كثافة الحالات الجزئية للمركب Sr_2GdReO_6 في تقريبي GGA 30

قائمة الجداول

الجدول (1. III): ثابت الشبكة $a(A^\circ)$ ومعامل الانضغاطية B والمشتقة الاولى لمعامل الانضغاطية B`

27..... للمركب Sr_2GdReO_6

الجدول (2. III): قيم العزم المغناطيسي الكلي والجزئي للمركب Sr_2GdReO_6 31.....

مقدمة عامة



مقدمة عامة:

إن فيزياء المواد تلعب دوراً مهماً وكبيراً في التطبيقات التكنولوجية الحالية بحيث تطورت في العديد من المجالات ، وفي السنوات الأخيرة أصبح العالم مهتم بدراسة خصائص بعض المواد .

ويعد ميكانيك الكم أفضل تصور متوفر عن العالم الفيزيائي وخاصة عن عالم الذرة ، وتطورت نظرية ميكانيك الكم انطلاقاً من الميكانيك الكلاسيكي وذلك عند تفسير صعوبة بعض الظواهر ودراسة بعض خصائصها وبالتالي اهتم ميكانيك الكم بدراسة خصائص بعض المواد وذلك باستخدام معادلة شرودينغر وحلولها الصالحة إلا في حالة بعض الظواهر البسيطة لعدد محدد من الذرات والجزيئات أما في الأنظمة المعقدة فنلجأ إلى العديد من التقريبات للحصول على معلومات جد دقيقة حول هذا نظم ، ومن أبرز هذه التقريبات نظرية دالية الكثافة DFT وتقريباتها .

البيروفسكايت هي فئة من المواد ذات البنية معينة وصيغته الجزيئية ABX_3 اكتشف لأول مرة عام 1839 وسمي على اسم العالم الروسي L. A. Perovski (1792–1856). الصيغة الكيميائية العامة لمركبات البيروفسكايت هي ABX_3 ، حيث "A" و "B" هما كأيونات ذات أحجام مختلفة جداً ، و X عبارة عن أنيون يرتبط بكليهما. الذرات "A" أكبر من ذرات "B" [1] .

وتقدم مادة البيروفسكايت بعض المزايا المثيرة للاهتمام فمن المحتمل ان يكون تصنيعها ارخص من سيليكون [2] ، ويمكن ان تكون شفافاً جزئياً ، مما يتيح تطبيق تقنيات جديدة مثل تولد التيار الكهربائي [3]. ونضيف ان تنوع استخدامات البيروفسكايت يؤدي الي انخفاض تكلفة المواد والتصنيع الي جانب امكانية تحقيق كفاءة عالية للغاية في انتاج الطاقة .واكبر مشكلة في مجال بيروفسكايت حالياً هي عدم الاستقرار علي المدى الطويل لأسباب مختلفة ومن بين هذه الأسباب خواص المادة. يمكن ضبط فجوة النطاق الفعلية لثلاثي الرصاص من فورمامدينوم (FA) عند 1.48 فولت ، وهو أقرب إلى طاقة فجوة النطاق المثالية البالغة 1.34 فولتاً لتحقيق أقصى كفاءة لتحويل الطاقة من الخلايا الشمسية أحادية الوصلة ، والتي تنبأ بها Shockley Queisser Limit. في الأونة الأخيرة ، تم تحقيق طاقة فجوة النطاق 1.3 eV بنجاح مع $(CsSnI_3)_x (FAPbI_3)_{1-x}$ خلية هجينة ، والتي لديها طاقة فجوة نطاق قابلة للضبط (على سبيل المثال) من 1.24 - 1.41 فولت [4].

لدراسة الخصائص البنيوية ، الالكترونية، المغناطيسية استخدمنا طريقة الموجة المستوية المتزايدة خطياً (FP-LAPW) والتي تكون مبنية على كمون (M.T)، الذي يأخذ دالة الموجة إلكترونيات الحالة القلبية على شكل دالة شعاعية وإلكترونات الحالة الإحلالية كدالة موجة مستوية، مع أخذ التقريب دالة الحالة النسبية ، والذي يعتبر أن سرعة الإلكترون تكون قريبة من سرعة الضوء وتم اجراء هذه الحسابات في إطار نظرية دالية الكثافة الالكترونية (DFT) حيث أنه لحساب كمون تبادل -ارتباط استخدمنا تقريبات التالية:

- تقريب التدرج المعمم (GGA) بعد إجراء كل تقسيمات منطقة بريلوين تأخذ بعين الاعتبار تدرج للكثافة الالكترونية دون إهمال أي منطقة.

- تقريب كثافة الموضع (LSDA) بحيث يأخذ هذا تقريب آخر تقسيم في منطقة بريلوين والذي يجعل من كثافة الالكترونيات ثابتة في تلك المنطقة.

- تقريبي (LSDA .GGA)+U الهدف من هاذين تقريبين اعطاء نتائج جيدة خاصة في المركبات التي تحوي في ذراتها المعادن الانتقالية أو العناصر الأرضية النادرة .

ولإنجاز هذه الدراسة تم تقسيم هذا البحث إلى ثلاثة فصول ، الفصل الأول والثاني نظريين أما الثالث فارتأينا أن يكون تجريبياً بحثاً

_ الفصل الاول: ابتدأناه بمعرفة معادلة شرودينغر للبلورات ثم تطرقنا لبعض التقريبات المختلفة كتقريب الأديابتيكي وتقريب هارترى-فوك يليها نظرية دالة الكثافة (DFT) بتقريباتها تقرب كثافة الموضع LDA وتقريب التدرج المعمم GGA ، وتقريب .GGA+U

_ الفصل الثاني: تطرقنا فيه لطريقة الموجة المستوية المتزايدة خطيا (FP-LPAW) التي سنعتمدها في هذا العمل .

_ الفصل الثالث : وهو الجانب العلمي أو العمل التجريبي والذي يفسر ما تطرقنا إليه في الفصول السابقة والذي ندرس فيه (ثابت الشبكة) $a(A^0)$ معامل الانضغاطية B والمشتقة الاولى لهذا المعامل B' ، الخصائص الالكترونية (بنية عصابة الطاقة ، كثافة حالات الكلية والجزئية) ، والخصائص المغناطيسية لهذا المركب .

وأخيرا أنهينا مذكرتنا بخاتمة تم فيها تلخيص في الاخير قمنا بتقديم خلاصة عامة لمختلف النتائج المتحصل عليها .

- [1] : Wenk, Hans-Rudolf; Bulakh, Andrei (2004). Minerals: Their Constitution and Origin. New York, NY: Cambridge University Press. ISBN 978-0-521-52958-7 .
- [2] :Park, N.-G. (2015). "Perovskite solar cells: an emerging photovoltaic technology". *Materials Today*. 18 (2): 65–72.
- [3]: Yingyue Zhang,Qishun Yao, Jiangchao Qian,Xiaohui Zhao,Dongdong Li,Qixi Mi *Chemical Physics Letters* 754(2020) 137637
- [4] : Zong, Yingxia; Wang, Ning; Zhang, Lin; Ju, Ming-Gang; Zeng, Xiao Cheng; Sun, Xiao Wei; Zhou, Yuanyuan; Padture, Nitin P. (2017-09-05). "Rücktitelbild: Homogenous Alloys of Formamidinium Lead Triiodide and Cesium Tin Triiodide for Efficient Ideal-Bandgap Perovski Solar Cells (*Angew. Chem.* 41/2017)". *Angewandte Chemie*. 129 (41): 12966.

الفصل الأول

نظرية الكثافة الدالية

DFT

1.I مقدمة :

تحتوي المواد الصلبة على عدد كبير من الجسيمات المتفاعلة، للإلكترونات السالبة والأنوية الموجبة. في المواد الصلبة البلورية يتم ترتيب نوى الذرات في عقد بحالاته الفيزيائية من الكريستال المشبك الذي يحتوي على الدورية المكانية، تخضع خصائص هذا النظام من خلال الإلكترونات الناشئة عن الأيونات وفقا لميكانيك الكم، حيث توصف الحالة الثابتة في ميكانيك الكم بواسطة معادلة شرودينغر المستقلة عن الزمن. إلا أن حل مثل هذه المسائل يكون معقد لذلك نقوم بتبسيطها إلى نظام معادلات أحادي الإلكترونات، ليسهل حلها عدديا. ونستعمل لذلك نظرية الكثافة الدالية [1.2].

2.I معادلة شرودينغر للبلورات :

كل الاجسام البلورية نستطيع اعتبارها كنظام واحد يتكون من جسيمات خفيفة (الإلكترونات) والثقيلة (الأنوية). توصف بمعادلة شرودينغر [3].

$$H\psi = E\psi \quad (1.I)$$

ψ هي الدالة الموجية وتتعلق بكل إحداثيات (أنوية+إلكترونات)، E هي طاقة النظام H مؤثر هاميلتونيان للبلورة حيث يكون مؤلفا من الطاقة الحركية لكل الجسيمات وطاقة التفاعل فيما بينهم، حيث نكتب في غياب الحقل الخارجي على الشكل التالي:

$$H = T_e + T_N + V_{ee} + V_{eN} + V_{NN} \quad (2.I)$$

حيث :

$$T_e = \sum_i \frac{p_i^2}{2m_i} = \sum -\frac{\hbar^2}{2m} (\nabla_i^2)$$

الطاقة الحركية للإلكترونات.

$$T_N = \sum_\alpha \frac{p_\alpha^2}{2M_\alpha} = \sum -\frac{\hbar^2}{2M} (\nabla_\alpha^2)$$

الطاقة الحركية للأنوية.

$$V_{ee} = \sum_{i,j \neq i} \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{2} \left(\frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \right)$$

طاقة تفاعل إلكترون-إلكترون.

$$V_{eN} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i,\alpha} -\frac{e^2 Z_\alpha}{|\vec{r}_i - \vec{R}_\alpha|}$$

طاقة تفاعل إلكترون-نواة.

$$V_{NN} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{2} \sum_{i,\alpha} -\frac{e^2 Z_\alpha Z_\beta}{|\vec{R}_\alpha - \vec{R}_\beta|}$$

طاقة تفاعل نواة-نواة.

المعاملات i, j خاصة بالإلكترونات.

المعاملات α, β خاصة بالأنوية.

M, m كتل الإلكترونات والأنوية على ترتيب.

$Z_\alpha e$ شحنة الأنوية.

$|R_\alpha - R_\beta|$ المسافة بين النواتين α و β .

$|r_i - R_\alpha|$ المسافة بين النواة α والإلكترون i .

المسافة بين الإلكترونين i, j $|r_i - r_j|$

$$\nabla_i^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \text{ مؤثر لابلاس.}$$

في حالة السكون معادلة شرود ينغر تكون مستقلة عن الزمن .

$$H \psi (r ,R) = E \psi (r,R) \quad (3 . I)$$

بحيث تمثل ψ دالة الموجة وتتعلق بكل احداثيات الجسيمات (الإلكترونات+النوية)، E تمثل القيم الذاتية الموافقة.

معادلة شرودينغر ل N ذرة تحوي $3(Z+1)N$ متغير، مثلا عندما $Z=14$ في 1 سم^3 يصبح لدينا 2.10^{24} مجهول تقريبا، أي أن معادلة شرودينغر بهذه الكيفية مستحيلة الحل، لذلك وضعت عدة تقريبات لتبسيط هذه المعادلة نذكر منها.

3. I تقريب بورن-اوبنهايمر:

من أجل تبسيط الحل للمعادلة السابقة نستعمل تقريب بورن -اوبنهايمر، حيث يفترض أن النواة ساكنة بالنسبة للإلكترون وذلك نظرا لحركة الإلكترونات السريعة جدا بالنسبة لحركة الأنوية، أي أن الطاقة الحركية للأنوية معدومة أمام حركة الإلكترونات $T_N \approx 0$ وطاقة تفاعل بين أنوية ثابتة $V_{NN} = \text{cte}$ [4] .

أي يصبح الهاملتونيان الكلي للجملة مؤلف من هاملتونيان إلكتروني وهاملتونيان نووي على الشكل :

$$H = V_{NN} + H_e \quad (4.I)$$

بحيث:

$$H_e = T_e + V_{ee} + V_{eN} \quad (5 . I)$$

ويسمى H_e هاملتونيان الإلكترونات.

إذن معادلة شرود ينغر للإلكترونات هي :

$$H_e \psi_e (r, R) = [T_e + V_{ee} + V_{eN}] \psi_e (r, R) \quad (6 . I)$$

هذه الاخيرة لا يمكن حلها بالطرق الرياضية المعروفة لذلك نستخدم تقريب آخر يسمى تقريب هارترى_فوك، يستخدم هذا الأخير بكثرة في الكيمياء الكمية لدراسة الجزيئات والذرات بينما في جسم الصلب فتستعمل عدة طرق حديثة وأكثر دقة وفعالية مثل نظرية دالية الكثافة (DFT). [5]

4.I تقريب هرتري:

يعتمد تقريب هارترى-فوك [6]، على نموذج إلكترون مستقل أي أن كل إلكترون يتحرك منفرد في الحقل المتوسط المتولد علي

الأنوية وباقي r الالكترونات الاخرى، أي يتغير المشكل لدينا من عدد كبير من الإلكترونات إلي إلكترون وحيد ، وبالتالي يكتب الهاملتونيان للجملة ب:

$$H = \sum_i H_i \quad (7-I)$$

مع ان:

$$H_i = \frac{-\hbar^2}{2m} \Delta_i + U_i(r_i) + V_i(r_i) \quad (8.I)$$

$U_i(r_i) = -\sum_k \frac{z_k e^2}{4\pi |r_i - R_k^0|}$ تمثل الطاقة الكامنة للإلكترون i في حقل الأنوية K .

R_k^0 يمثل موضع الأنوية .

$V_i(r_i) = -\frac{1}{2} \sum_j \frac{e^2}{4\pi \epsilon_0 |r_i - r_j|}$ يمثل الكمون الفعال لهرتري .

وتصبح (8.I) المعادلة علي نحو التالي:

$$H_i = \frac{\hbar^2}{2m} \Delta_i + V(r) \quad (9.I)$$

نكتب دالة الموجة الكلية للجملة كجداء دوال الحالة لكل الإلكترونات علي الشكل:

$$(r_1 \cdot r_2 \dots) = \prod_{i=1}^N \psi_i(r_i) \quad (10.I)$$

وتكتب الطاقة الكلية للجملة كمجموع الطاقات الموافقة لكل حالة الكترونية :

$$E = \sum E_i \quad (11.I)$$

إذن معادلة شرودينغر للإلكترونات تصبح:

$$\left[-\frac{1}{2} \frac{\hbar^2}{m} \Delta_i + U_i(r_i) + V_i(r_i) \right] \psi_i(r) = \epsilon_i \psi_i(r) \quad (12.I)$$

حسن فوك [7] , تقريب هرتري وذلك بإدخال مبدأ السبين لنظام الإلكترونات بحيث توجد $N!$ احتمال لوضع N إلكترون على N موضع

$$\vec{r}_1, \vec{r}_2 \dots \vec{r}_N$$

مثلا أول إمكانية هي:

$$\psi_1(r_1) \psi_2(r_2) \psi_3(r_3) \dots \dots \dots \psi_N(r_N) \quad (13.I)$$

وثاني إمكانية هي:

$$\psi_1(r_1) \psi_3(r_2) \psi_2(r_3) \dots \dots \dots \psi_N(r_N) \quad (14.I)$$

عند تطبيق كل التبديلات نحصل على $N!$ حد لنفس النوع.

دالة الموجة هي مجموعة كل الحدود مع الأخذ بعين الاعتبار الإشارتين (-) و (+) لتصبح بشكل محدد يدعى محدد سلتر.

$$\psi(r_1, r_2, \dots, r_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_1(r_1) & \dots & \psi_N(r_1) \\ \dots & \dots & \dots \\ \psi_1(r_N) & \dots & \psi_N(r_N) \end{vmatrix} \quad (15.I).$$

والمعامل $\frac{1}{\sqrt{N!}}$ هو ثابت التعامد .

إن تحديد الكمون داخل البلورة هي من بين الصعوبات التي تصادف حساب البنية عصابات الطاقة ولذلك وجدت طريقة حديثة هي نظرية دالية الكثافة (DFT).

5.I نظرية دالية الكثافة DFT:

يمكن التعبير عن طاقة النظام الإلكتروني بواسطة نظرية دالية الكثافة DFT وتكمن الفكرة الرئيسية لها في التخلي عن استعمال الدوال الموجية واستبدالها بدالة الكثافة الإلكترونية التي يمكن قياسها عمليا وذلك قصد التقليل في عدد المتغيرات التي تدخل في حساب اي انه يمكن التعبير عن طاقة النظام الكلية E بواسطة الكثافة الإلكترونية $\rho(r)$ والتي تكون كدالة للإحداثيات (x, y, z) أي تكتب الطاقة الكلية E لنظام الإلكترونات بالشكل:

$$E = E(\rho) \quad (16.I)$$

1.5.I نظرية توماس- فارمي:

في عام 1927 صاغوا الطاقة الكلية لغاز الإلكترونات اللامتجانسة كدالة لكثافة الإلكترونات المعروفة لغاز متجانس [7,8]، وذلك بإجراء عدة تقسيمات عنصرية علي منطقة بريلوين، حيث أنه عند آخر تقسيم تعتبر كثافة الإلكترونات ثابتة في كل منطقة من المناطق بريلوين المقسمة.

إذن تكتب الطاقة الكلية لنظام E على الشكل:

$$E = \int \varepsilon_i[\rho(r)] dr \quad (17.I.)$$

تعطى كثافة غاز متجانس ب:

$$\rho = \frac{1}{3\pi^2} \left(\frac{2m_e}{h^2} \right)^{3/2} E_f \quad (18.I)$$

الطاقة الحركية لغاز متجانس هي:

$$T = \frac{3}{5} \rho E_f \quad (19.I)$$

من المعادلتين (18.I) (19.I) نجد:

$$E_f = \frac{\rho^{2/3}}{2m_e} (3\pi^2)^{2/3} \quad ; \quad T = \frac{3}{5} \frac{h^2}{2m_e} (3\pi^2)^{2/3} \rho^{5/3} \quad (20.I)$$

الطاقة الحركية لتوماس _ فارمي هي :

$$T_{Tf} = \int T dr \Rightarrow T_{Tf} = \frac{3}{5} \frac{h^2}{2m_e} (3\pi^2)^{2/3} \int \rho^{5/3} dr \quad (21.I)$$

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:

$$E_{TF} = \frac{3}{5} \frac{h^2}{2m_e} (3\pi^2)^{2/3} \int \rho^{5/3} dr + \int V(r) \rho(r) dr + \frac{1}{2} \int \frac{\rho(r)\rho(r')}{|r-r'|} dr dr' \quad (22.I)$$

كما أجريت بعض التحسينات لهذه النظرية:

أولاً-فعل التبادل المقترح من طرف ديراك:

$$E_{DFT} = E_{TF} - C_x \int \rho^{4/3} dr \quad (23.I)$$

ثانياً-فعل الارتباط المقترح من طرف فيغنز:

$$E[\rho] = - \frac{0.056\rho^{4/3}}{0.079+\rho^{1/3}} \quad (24.I)$$

نعود لنذكر أن تقريب توماس-فارمي هو تقريب موضعي لكثافة الإلكترونات.

2.5.I. نظرية هوهنبارغ-كوهن:

أخذ هوهنبارغ-كوهن [9]، الطاقة الكلية لنظام الإلكترونات المتفاعلة في كمون خارجي (كمون الأنوية) كدالية وحيدة لكثافة الإلكترونات $p(r)$ أي:

$$E=E(\rho) \quad (25.I)$$

حيث قاما ببرهان أن الكثافة التي تعطى الحد الأدنى هي كثافة الحالة الأساسية للجسيمات بالضبط، وكل خصائص الحالة الأساسية هي دالية لكثافة الإلكترونات كالتالي:

$$E(p_0) = \text{Min } E(p) \quad (26.I)$$

بحيث يعبر عن دالية الطاقة ب:

$$E(\psi) = \langle \psi | H | \psi \rangle \quad (27.I)$$

ودالية كثافة الحد الأدنى ب:

$$F_{H,k}(p) = \langle \psi | T + U | \psi \rangle \quad (28.I)$$

حيث T و U يمثلان كمون التفاعل والطاقة الحركية للإلكترونات علي الترتيب .

$$\begin{aligned} F_{H,k}(\rho) &= \frac{1}{2} \iint 2 \frac{\rho(r_1)\rho(r_2)}{|r_1-r_2|} dr_1 dr_2 + G(\rho) \\ &= F(p) + \int V_{ext}(p)p(r) dr \end{aligned} \quad (29.I)$$

حيث أن $G(\rho)$ تمثل الطاقة الحركية للإلكترونات زائد الفرق بين طاقة التفاعل الحقيقية وطاقة التفاعل لهرتري، كما أثبت هوهانبرغ-كوهن أن الكثافة الحد الأدنى F_{HK} .

3.5.I معادلة كوهن-شام:

في 1965 كوهن شام [10] برهن أن كثافة الإلكترونات هي مجموع كثافة الجسيمات مع استخدام مبدأ التغيرات للحصول على طاقة الحالة الأساسية، بحيث تعطى كثافة احتمال التواجد للإلكترون ب :

$$P(r) = \sum \psi^*(r)\psi_i \quad (30.I)$$

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

$$E_e = T + V \quad (31.I)$$

$$E_{H.F} = T_0 + (V_H + V_X) \quad (32.I)$$

حيث T الطاقة الحركية للجسيمات في حالة التفاعل.

V كمون التفاعل إلكترون-إلكترون

V_H كمون هرتري.

T_0 الطاقة الحركية للإلكترونات الحرة.

V_X كمون تبادل الإلكترونات والذي يعرف ب: $V_X = V - V_H$

V كمون ارتباط الإلكترونات والذي يعرف ب: $V_C = T - T_0$

إذن دالية كثافة الحد الأدنى $F_{H.K}$ هي:

$$F_{H.K} = T + V = T_0 + V_H + (V_X + V_C) \quad (33.I)$$

$V_{XC} = V_X + V_C$ هو كمون تبادل-ارتباط .

أي دالية الطاقة الكلية للنظام هي:

$$E(\rho) = T_0(\rho) + V_H + V_{XC} + V_{ext}(\rho) \quad (34.I)$$

معادلة كوهن شام هي:

$$(T + V_{ei}(r) + V_H(r) + V_{XC}(r))\phi(r) = \epsilon\phi(r) \quad (35.I)$$

4.5.I. حلول معادلة كوهن-شام :

ترتكز مختلف طرق حساب بنية عصابات الطاقة مبدئياً على DFT وترتب حسب استخدامها للكثافة ، الكمون ومدارات كوهن-شام [11] ، الطريقة الموجة المستوية المتزايدة خطياً تعتمد على مدارات كوهن شام وبالتالي دالة الموجة الأساسية هي :

$$\psi_i(r) = \sum C_{i\alpha} \phi_\alpha(r) \quad (36.I)$$

حيث أن $\phi_\alpha(r)$ المعادلة الأساسية، $C_{i\alpha}$ هي معاملات النشر لدالة الموجة .

إذا يجب حل المعادلات الأساسية $\phi_\alpha(r)$ لحساب معاملات وذلك بطريقة الدورات التكرارية بحيث تكون الطاقة الكلية في القيمة الدنيا:

حلول معادلة كوهن-شام تعطي:

$$(37.I)$$

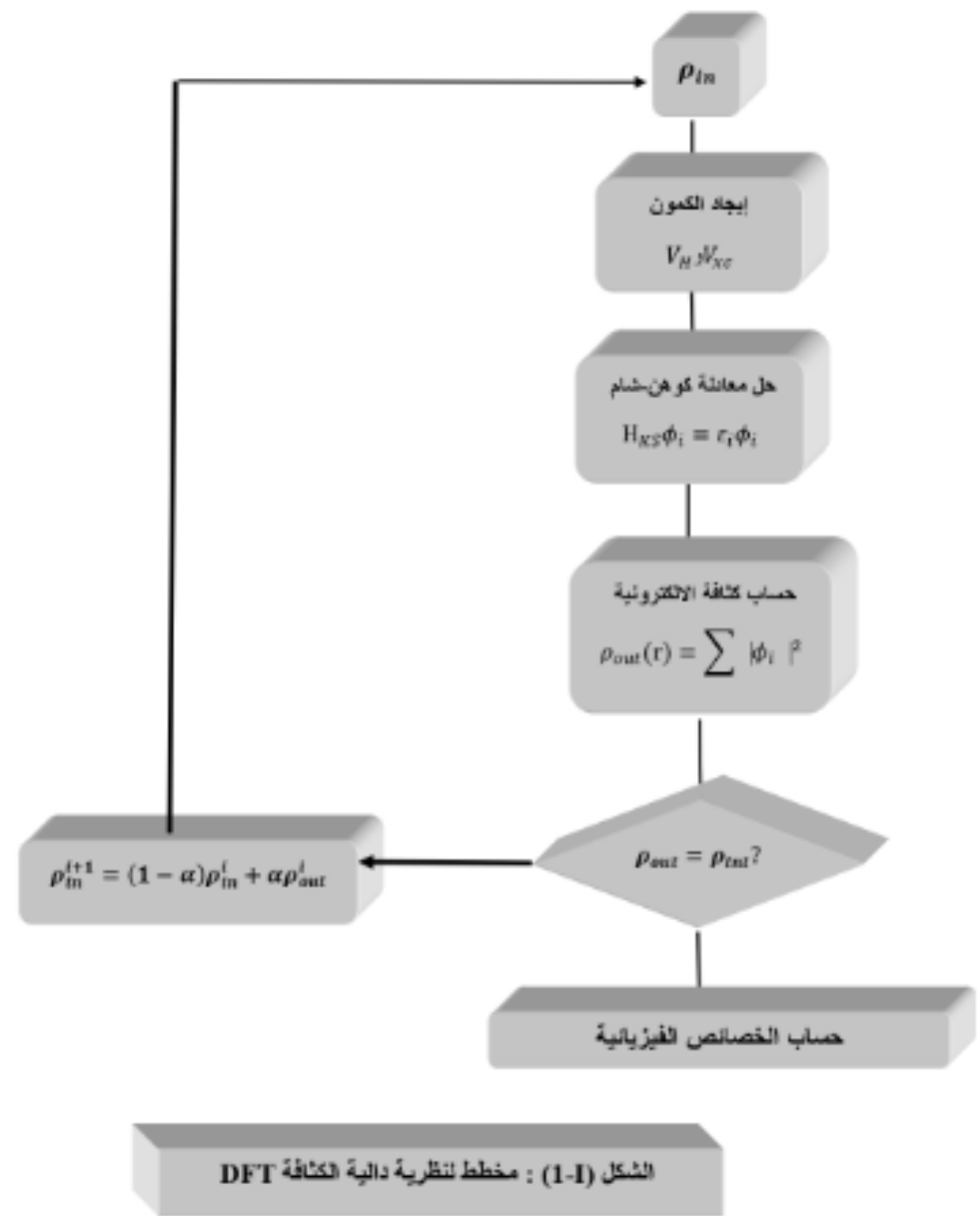
H هاملتونيان كوهن-شام.

O مصفوفة التغطية .

ϵ_i قيم الطاقة

C_i معاملات النشر لدالة الموجة.

$$(H - \epsilon_i O)C_i = 0$$



5.1.5 تقريب كثافة الموضع LDA:

تقريب كثافة الموضع هو تقريب لنظام الإلكترونات اللامتجانس باعتباره موضعياً متجانساً [11] بحيث تعطى طاقة تبادل-ارتباط في هذا التقريب ب:

$$E_{xc}^{LDA}(\rho) = \int \rho(r) \varepsilon_{xc}(\rho(r)) dr^3 \quad (38.1)$$

وباستخدام مبدأ سبين تكتب طاقة تبادل-ارتباط ب:

$$E_{xc}^{LSDA}(\rho \uparrow, \rho \downarrow) = \int \rho(r) \varepsilon_{xc}(\rho \uparrow(r), \rho \downarrow(r)) dr^3 \quad (39.1)$$

مع العلم ان طاقة تبادل-ارتباط تقسم على قسمين.

$$\varepsilon_{xc}(\rho) = \varepsilon_x(\rho) + \varepsilon_c(\rho) \quad (40.1)$$

طاقة التبادل هي: $\varepsilon_c = -0.4582/r_s$ وذلك باستخدام الوحدات الذرية و $\rho = \left(4\pi r_s^3/3\right)^{-1}$.

$$\epsilon_c = \frac{-0.44}{r_s + 7.8} \text{ هي طاقة ارتباط هي}$$

ولحساب كثافة الإلكترونات يتم الجمع على كل المدارات المشغولة أي:

$$\rho(r) = \psi_i^*(r)\psi_i(r) \quad (41.I)$$

5.1.6. تقريب التدرج المعمم GGA:

تقريب تدرج المعمم [12] GGA تصحيحات LDA المستخدم حاليا أخذت بعين الاعتبار تغير كثافة الإلكترونات $\rho(r)$ عبر التدرج $\Delta\rho(r)\rho$ تأخذ طاقة التبادل-ارتباط الشكل التالي:

$$E_{xc}^{GGA}(\rho \uparrow (r), \rho \downarrow (r)) = \int f(\rho \uparrow, \rho \downarrow, \nabla\rho \uparrow, \nabla\rho \downarrow) dr^3 \quad (42.I)$$

$\nabla\rho(r)$ يعبر عن تدرج الكثافة الإلكترونية.

5.1.7. تقريب GGA+U:

تقريبات DFT+U موضوعة أساسا لمعالجة الأنظمة التي تحوي المعادن الانتقالية او العناصر الارضية النادرة [13] أي بمعنى الأنظمة المحتواة التفاعل الكولومبي بين مدارات d و F وذلك بإضافة حد هيبارد وتعطى الطاقة ب:

$$E^{GGA+U} = E^{GGA} + \left(\frac{\bar{U}}{2} - \frac{\bar{J}}{2}\right) \sum_{\sigma} \left[\left(\sum_m n_{m,m}^{\sigma} \right) - \left(\sum_{m,m'} n_{m,m'}^{\sigma} \right) \right] \quad (43.I)$$

\bar{U} و \bar{J} هما مقلوب العناصر المصفوفة لتفاعل الكولومبي

n المصفوفة الخاصة بالمدارات المشغولة لسوي الطاقى 3d

m أو m' تأخذ القيم -2, -1, 0, 1, 2 تشير لمختلف المدارات d

$\sigma = 1$ و $\sigma = -1$ تشير الى حالات السبين.

المراجع :

- [1] : J .F. Nage «*propriétés physique des cristaux* » . Dunda paris 1961 .
- [2] :N.V «*invertiyation , théorique du mécanisme ,de physisorption ;application d`un méthode de partition fonde sur la fonctionnelle ,de la densité*» ,université de Genève 2000 .
- [1]: p. Kireev, La physique des semi conducteurs , 2^{ème} édition , édition Mir. Moscou, (1975).
- [2]: P.Perdew, J .A .chevary , S.H .vosko ,K .A.Jackson ,M.R.Pederson,D-J.Singh,and C.Fiolhais,phys.Rev.B46.6671(1992).
- [3]:A.Meziani ,these de Doctorat ,Universities Badji Mokhter Annaba (2012).
- [4]: D. R. Hartree, Proc. Combridge philos. soc. 245(1928)89 .
- [5]: V. Fock, Zphys. 61.126(1930)795.
- [6]: L. H. Thomas. Proc. Cambridge philos. soc23.542(1928).
- [7]: E. Fermi. Z. Phys48.73(1922).
- [8]: P. Hohenberg. w. kohn. phy. Rev. ./36, (1964)B864.
- [9]: d. j. singh. plane waves, predo
– potentials, and lapw method, kluwer academic publisher, boston, 1994.
- [10]: S. Cottenier. Density Functional theory and the family of (L)APW – methods: a step
– by step introduction Belguim August 6(2004).
- [11]: J. P. Perdew. w. wang. phys. Rev. B45(13)(1992)244; Blaha. k. schwarz, P. Sorantin. S. B. Tricky. chem. phys.Lett(1990) 399.
- [12]: D. Langreth. J. Perdew. phy. Rev. B21(1980)5469.
- [13]: C. Loshen, J. Carrasco, K. M. Neyman, F. Illas, phy. Rev. B75,035115(2007).

الفصل الثاني

طريقة الأمواج المستوية

المتزايدة خطيا

و

الكمون الكامل

FP-LAPW

1.II مقدمة:

توجد عدة طرق تستعمل في ايجاد خصائص الجسم الصلب وتعتمد علي نظرية دالية الكثافة ، تختلف في كيفية معالجة الالكترونات وتختلف ايضا في تمثيل الكمون وكثافة الشحنة للدوال الموجية ،ومن بين العديد من الطرق نذكر منها:

طرق مشتقة من الأمواج المستوية المتعامدة (OPW) [1.2] وهي الأنسب لعصابات النقل من نوع (S - P) للمعادن البسيطة .

F الطرق التي تعتمد على تركيبية خطية للمدارات الذرية [1.2] (LCAO) تستعمل مثلا في العصابات d للمعادن الانتقالية.

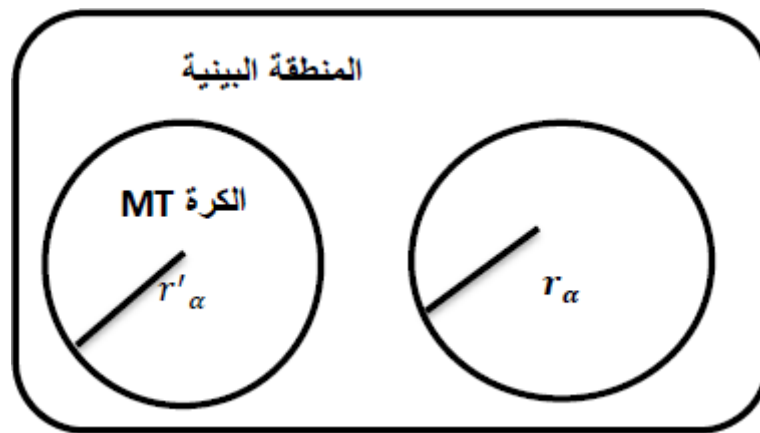
الطرق الخلوية من النوع امواج مستوية متزايدة [3] (APW) وطريقة الدالية (KKR) kohn;rostopker; koring Green تنطبق على اكبر مجموعة من المواد.

طرق الخطية التي وضعها اندرسن: [4] الموجات المستوية المتزايدة خطيا (LAPW) ومدارات (Muffin - Tin) الخطية (LMTO) وتسمح لنا بتوفير كثير من الرتب لهذا المقدار أثناء زمن الحساب

2.II طريقة الأمواج المستوية المتزايدة خطيا APW:

في سنة 1937 نشر سلاتر [5] بحثه المتعلق بطريقة الأمواج المستوية المتزايدة APW وكتابة دالة موجة الالكترونات قام

بوضع كمون (Muffin Tin) كتقريب لوصف كمون الشبكة البلورية وذلك بتقسيم الفضاء المحيط بالذرات إلى منطقتين :



الشكل (2. II): كمون (MT) (Muffin Tin)

المنطقة الاولى داخل كرة M.T تشمل كل من الأنوية والالكترونات شديدة الارتباط بها .

المنطقة الثانية المنطقة البيئية التي تحيط بالكرات ،وتشمل الالكترونات ضعيفة الارتباط بالأنوية .

حيث r_α يمثل نصف قطر كرة M.T.

وتعطى دوال الموجة بالعلاقة التالية:

$$\phi(r) = \begin{cases} \frac{1}{1/2} \sum_G C_G e^{i(G+K)r} & r > r_\alpha \\ \sum A_{lm} U_l(r) Y_{lm}(r) & r < r_\alpha \end{cases} \quad (1. II)$$

Ω يمثل حجم الخلية الموحدة .

Y_{lm} الدالة الهرمونية (التوافقية) الكروية.

C_G معاملات النشر

وحلول معادلة شرودينغر تكون :

-أولا: حلول شعاعية داخل الكرة M.T.

ثانيا :موجة مستوية في المنطقة البينية .

في حين أن $U_l(r)$ هي الحلول المنتظمة لمعادلة شرودينغر للجزء الشعاعي الذي يكتب :

$$-\left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} + V(r) - E_l\right] rU_l(r) = 0 \quad (2. II)$$

$V(r)$ يمثل الجزء الخاص بالكمون الكروي و E_l وتمثل الطاقة الخطية، في حين أن الدالة الشعاعية المعرفة في العلاقة (2. II) تكون معامدة لكل الحالات الذاتية القلبية ، تنتهي شروط التعامد عند حدود كرة M.T من أجل الدوال الشعاعية $U_1 U_2$ و الموافقة للقيم الذاتية $E_1 E_2$ و تصبح معادلة شرودينغر كالتالي:

$$(E_1 - E_2)rU_1 U_2 = U_2 \frac{d^2 rU_1}{d^2 r} - U_1 \frac{d^2 U_2}{d^2 r} \quad (3. II)$$

ولضمان استمرارية الدالة $\emptyset(r)$ على سطح الكرة M.T تنشر المعاملات A_{lm} بدلالة المعاملات C_G الخاصة بالأمواج المستوية في منطقة الإقحامية ، المعاملات الطاقوية E_l تسمى معاملات التغاير في الطريقة APW بعد الحسابات الجبرية نحصل على :

$$A_{lm} = \frac{4\pi i^l}{\Omega^2 U_l(R_l)} \sum_G C_G j_l (|K + g|R_\alpha) Y_{lm}^*(K + G) \quad (3. II)$$

الدوال الذاتية المعرفة ب:G تصبح متوافقة مع الدوال الشعاعية في كرة M.T وبالتالي نتحصل على دالة أساسية APW_S

الدوال APW_S هي حلول معادلة شرودينغر داخل كرة M.T الموافقة للطاقة E_l ، أي نتحصل على عصابة الطاقة الموافقة للمعامل G.

لكن وجدت صعوبة في الدوال $U_l(r_\alpha)$ وذلك لأن في حالة نقصان المعاملات A_{lm} تصبح قيم $U_l(r_\alpha)$ معدومة على سطح الكرة

وبالتالي الدوال الشعاعية تكون منفصلة على الدوال الموجبة في المنطقة الإقحامية ولحل هذه المشكلة ادخل كولينغ [6] واندرسون

[22] مجموعة من التغيرات على طريقة APW منها تمثيل الدالة الشعاعية $\emptyset(r)$ خارج كرة M.T بترتيبات خطية $U_l(r)$ مع

امتلاكها مشتقات بالنسبة للطاقة U_l ، سميت بطريقة الامواج المستوية المتزايدة خطيا والكمون الكامل FP-LAPW.

II. 3. مبدأ طريقة الأمواج المستوية المتزايدة خطيا والكمون الكامل FP-LAPW:

في طريقة الأمواج المستوية المتزايدة خطيا والكمون الكامل FP-LAPW، الدالة الأساسية داخل كرة M.T تكون على شكل

ترتيبات خطية للدالة الشعاعية $U_l(r)Y_{lm}(r)$ وتمتاز باشتقاق $\dot{U}_l(r)Y_{lm}(r)$ بالنسبة للطاقة ، الدالة U_l تعرف مثل دالة الطريقة

APW، والدالة $\dot{U}_l(r)Y_{lm}(r)$ بالنسبة للطاقة ، الدالة U_l تعرف مثل دالة الطريقة APW، والدالة $\dot{U}_l(r)Y_{lm}(r)$ تخضع للشرط

التالي :

$$\left\{ \frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} + V(r) - E_l \right\} r \dot{U}_l(r) = r U_l(r) \quad (4. II)$$

في الحالة اللانسيبية الدوال U_l و \dot{U}_l مضمونة الاستمرارية على سطح الكرة M.T أي استمرارية هذه الدوال مع الموجة المستوية في المنطقة البينية (خارج الكرة M.T)، إذن دالة الموجة المستوية المتزايدة ($LAPW_S$) تصبح دالة أساسية لطريقة FP-LAPW:

$$\varnothing(r) = \begin{cases} \frac{1}{\Omega^{1/2}} \sum_G C_G e^{i(G+K)r} & r > r_\alpha \\ \sum_{lm} \{ A_{lm} U_l(r) + B_{lm} \dot{U}_l(r) \} Y_{lm}(r) & r < r_\alpha \end{cases} \quad \text{الخطية (5. II)}$$

أين المعاملات U_{lm} الموافقة للدالة \dot{U}_l لها نفس طبيعة المعاملات A_{lm} .

الدوال $LAPW_S$ تكون الموجة المستوية الوحيدة في المنطقة الإقحامية مثل حالة طريقة APW، داخل الكرة M.T

الدوال $LAPW_S$ أفضل من الدوال APW_S ، باختلاف E_l قليلا عن عصابة الطاقة E الترتيبات الخطية تنتج أحسن دالة

شعاعية APW_S والدالة U_l يمكن أن تنشر على الدالة المشتقة والطاقة E_l بالشكل:

$$U_l(E, r) = U_l(E_l, r) + (E - E_l) U_l(E, r) + O((E - E_l)^2) \quad (6. II)$$

أين $0(E - E_l)^2$ يمثل الخطأ الرباعي الطاقوي.

طريقة الأمواج المستوية المتزايدة خطيا والكمون FP-LAPW تضمن استمرار دالة الموجة على سطح كرة M.T.

4.II. دور الطاقات الخطية E_l :

الدوال U_l و \dot{U}_l متعامدتان مع الحالات القلبية على سطح كرة M.T لكن هذه الشروط ليست كافية عندما تكون الحالات القلبية

موافقة لنفس القيمة 1، ومن جهة أخرى نأخذ الخلط بين الحالات نصف قلبية مع حالة التكافؤ، فهو غير معالج في الطريقة APW

لذلك يجب اختيار الطاقة E_l بدقة للدوال الغير متعامدة مع أي حالة من حالات إلكترونات القلبية وذلك في طريقة FP-LAPW، ولهذا

يجب تغيير E_l لإجراء الحساب، ولحل أحسن نستخدم النشر على المدارات الموضع مع أخذ أكبر نصف قطر ممكن ل M.T، لإجراء

حساب دقيق للبنية الإلكترونية يجب ملاحظة اختلاف الطاقة الخطية E_l أنها مستقلة عن بعضها البعض.

II. 5. بنية الدوال الشعاعية:

الدوال الأساسية لطريقة الأمواج المستوية المتزايدة خطيا FP-LAPW تكون موجة مستوية في المنطقة الإقحامية، والتي هي

تنشر على شكل دالة شعاعية داخل الكرة M.T تحت شرط أن الدوال الأساسية لها اشتقاق يكون مستمر على سطح كرة M.T فبنية

الدوال الأساسية للطريقة FP-LAPW تصبح تحدد ب:

1- دوال شعاعية $U_l(r)$ ومشتقتها بالنسبة للطاقة $U(r)$

2- المعاملات A_{lm} و B_{lm} تكفي لتحقيق الشروط الحدودية من أجل إجراء الحساب في القطع المغلق Cutoff وأخذ العزم الزاوي

l_{max} ، ولتمثيل القطع المغلق G_{max} يمثل أكبر طول للموجات المستوية خارج الكرة (M.T) من أجل نصف قطر الكرة R_α

_ استراتيجيا نختار القطع المغلق Cutoff لضمان التقارب في طريقة FP-LAPW.

6.II. الدوال الشعاعية اللانسيبية :

في الحالة اللانسيبية الدوال الشعاعية $U_l(r)$ تكون حلول معادلة شرودينغر التالية للكمون الكروي والطاقة الخطية E_l وتصبح معادلة شرودينغر على النحو التالي :

$$\left\{ \frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} + V(r) - E_l \right\} rU_l(r) = 0 \quad (7. II)$$

حيث $V(r)$ هو جزء الكمون الكروي لكرة $M.T$ في $L=0$. الشروط الحدودية مطبقة أي $rU_l(0) = 0$

الاشتقاق بنسبة لطاقة U هو :

$$\left\{ \frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} + V(r) - E_l \right\} rU_l(r) = rU_l(r) \quad (8. II)$$

الحلول الشعاعية تصبح مقننة في كرة $M.T$:

$$\int_0^{R_\alpha} r^2 U_l^2(r) dr = 1 \quad (9. II)$$

حيث أن U_l هو حل متجانس للمعادلة (8. II) على الشكل :

$$h_l U_l - E U_l = U_l \quad (10. II)$$

باستخدام شروط التقنين (9. II) يتضح أن الدالة U_l ومشتقاتها تكونا متعامدتان .

$$\int_0^{R_\alpha} r^2 U_l(r) \dot{U}_l(r) dr = 0 \quad (11. II)$$

والدالة \dot{U}_l تكون مقننة .

$$N_l \equiv \int_0^{R_\alpha} r^2 U_l^2(r) dr \quad (12. II)$$

شروط التقنين في طريقة FP-LAPW يمكن تعويضها بالمعادلة التالية :

$$R_\alpha^2 \left(U_\alpha(R_\alpha) \dot{U}_\alpha(R_\alpha) - U_l(R_\alpha) \dot{U}_\alpha(R_\alpha) \right) = 1 \quad (13. II)$$

مع أن :

$$U_{\alpha}(E, r) \equiv \frac{\partial U_l(E, r)}{\partial r} \text{ و } \dot{U}_l(E, r) = \frac{\partial U_l(E, r)}{\partial E}$$

يمكن حلها المعادلة عدديا ، الدوال U_l و \dot{U}_l من شروط التقنين يمكن أن ننشر U_l على الشكل :

$$U_l(E + \delta) = U_l(E) + \delta \dot{U}_l(E) + \dots \quad (14. II)$$

مع هذا الاختيار ، تقنين $U_l(r)$ أي $\|\dot{U}_l(r)\|$ ، يشير لرتبة عرض الطاقة E_l ، الخطأ على الطاقة الخطية يكون مقبول حسب أندرسن [8] عندما :

$$\|\dot{U}_l(r)\| |E_l - E| \leq 1$$

إذا كان هذا الاختيار غير ممكن ، نلجأ إلى :

_ تقسيم المجال الطاقوي إلى نوافذ طاقة ويعالج كل نافذة طاقة مفصولة ، مع أخذ طاقة كل حالة .

_ نستخدم النشر على مواضع المدارات .

7.II . الدوال الشعاعية النسبية :

عندما تقترب سرعة الإلكترون من سرعة الضوء تصحح الدالة الشعاعية اللانسيبية إلى دالة شعاعية نسبية ، بحيث أن التأثيرات النسبية تدخل في الحساب داخل كرة M. T وتهمل في المنطقة الإقحامية ، التغيرات النسبية تعتمد أساسا بتعويض (8. II) (9. II) في معادلة ديراك المكافئة [9] تقنيا تعرض عدة علماء [12.9] . لحل معادلة ديراك مع أخذ الكمون كروي وإهمال في البداية تأثير فعل سبين-مدار وأدراجه فيما بعد .

هاملتونيان ديراك يعطي ب :

$$H_D = Cap + (\beta - 1)mc^2 + V(r) \quad (15. II)$$

α, β تأخذ الشكل المصفوفي التالي :

$$\alpha = \begin{bmatrix} 0 & \sigma \\ \sigma & 0 \end{bmatrix} ; \quad \beta = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \quad (16. II)$$

يكتب الشعاع الذاتي ψ لهاملتونيان ديراك H_D كما يلي :

$$\psi \begin{bmatrix} \phi \\ \chi \end{bmatrix} \quad (17. II)$$

حيث \emptyset تدعى المركبة الكبيرة للدالة الموجة و \mathcal{X} المركبة الصغيرة .

إذن معادلة شرودينغر تصبح :

$$c(\sigma p)\mathcal{X} = (\varepsilon - V)\emptyset \quad (18. II)$$

$$c(\sigma p)\emptyset = (\varepsilon - V + 2mc^2)\mathcal{X} \quad (19. II)$$

من المعادلتين (18. II) و (19. II) ينتج

$$\frac{1}{2m}(\sigma p) \left(1 + \frac{\varepsilon - V}{2mc^2}\right)^{-1} (\sigma p)\emptyset + V\emptyset = \varepsilon\emptyset \quad (20. II)$$

باستخدام التقريب :

$$\left(1 + \frac{\varepsilon - V}{2mc^2}\right)^{-1} \approx 1 - \frac{\varepsilon - V}{2mc^2} \quad (21. II)$$

ومع العلاقة :

$$pV = Vp - i\hbar\nabla V \quad (22. II)$$

ينتج:

$$(\sigma\nabla V)(\sigma p) = (\sigma\nabla p) + i\sigma[\nabla, p] \quad (23. II)$$

نعود لنحصل على معادلة تفاضلية تحقق الدالة \emptyset :

$$\left[\left(1 - \frac{\varepsilon - V}{2mc^2}\right) \frac{p^2}{2m} - V \right] \emptyset - \frac{\hbar^2}{4m^2c^2} (\nabla V \nabla \emptyset) + \frac{\hbar^2}{4m^2c^2} (\sigma[\nabla V, p]\emptyset) = \varepsilon\emptyset \quad (24. II)$$

في حالة الكمون يقبل تناظر كروي:

$$\left[\frac{p^2}{2m} + V - \frac{p^4}{8m^3c^2} - \frac{\hbar^2}{4m^2c^2} \frac{dV}{dr} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{2m^2c^2} \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} (L \cdot S) \right] \emptyset = \varepsilon\emptyset \quad (25. II)$$

لما يكون الحد الأخير دالة ذاتية للعزم والسبين تكون حلول معادلة ديراك داخل كرة M. T هي :

$$\Psi_{kv} = \begin{matrix} g_k \mathcal{X}_{kv} \\ -if_k \sigma_r \mathcal{X}_{kv} \end{matrix} \quad (26. II)$$

في حين أن الدوال f_k و g_k تحقق المعادلة الشعاعية الآتية:

$$\frac{df_k}{dr} = f_k' = \frac{1}{C} (V - E)g_k + \left(\frac{k-1}{r}\right) f_k \quad (27. II)$$

$$\frac{df_k}{dr} \equiv g_k' = -\frac{(k-1)}{r} g_k + 2Mc f_k \quad (28. II)$$

8.II تحديد الكمونات :

الكمون المستخدم في معادلة كوهن-شام S.K يشتمل على حد تبادل ارتباط وحد الكمون الكولمبي $V_C(r)$ ، حد الكمون الكولمبي هو مجموع كمون هرتري $[V_H(r)]$ ، وكمون النواة $V_C(r)$ الذي يحسب من معادلة بواسن من كثافة الشحن (إلكترونات وأيونية):

$$\nabla^2 V_C(r) = 4\pi p(r) \quad (29. II)$$

تكامل هذه المعادلة يكون فقط ممكن في فضاء الشبكة المعكوسة و طريقة الحل تسمى شبه-الشحنة [14. 13] وتتركز على ملاحظتين: أولاً-كثافة الشحنة مستمرة وتتغير ببطيء في المنطقة الإقحامية وسريعة جدا داخل الكرة .

ثانيا-الكمون الكولمبي في المنطقة الإقحامية متعلق مرة بالشحنة الإقحامية ومتعددة الشحن داخل الكرة .

في المنطقة الإقحامية كثافة الشحن تنشر كسلسلة فورييه :

$$p(r) = \sum_G p(G) e^{iGr} \quad (30. II)$$

دوال الموجة $e^{iG.r}$ تحسب انطلاقا من معادلة باسل J_e

$$\int_0^R r^{l+2} J_l(G.r) \vec{dr} = \begin{cases} R^{l+3} \frac{J_l(G.r)}{Gr} & G \neq 0 \\ \frac{R^3}{3} \sigma_{l,0} & G = 0 \end{cases} \quad (31. II)$$

$$e^{i\vec{G}\vec{r}} = 4\pi e^{iGr} \sum_{lm} i^l J_l(|G|r - r_\alpha) Y_{lm}^*(G) Y_{lm}(r - r_\alpha) \quad (32. II)$$

أين

r الإحداثيات الكروية .

r_α نصف قطر الكرة .

الكمون الكولمبي يصبح على الشكل :

$$V_C(\vec{G}) = \frac{4\pi p(\vec{G})}{G^2} \quad (33. II)$$

نكامل المعادلة (33. II) فنحصل على :

$$V_{pW} = \sum_{lm} V_{lm}^{PW}(r) Y_{lm}(r) = \sum_V V_V^{PW}(r) K_v(r) \quad (34. II)$$

حيث V_{PW} يمثل الكمون المنطقة الإقحامية .

لما

$$K_v(r) = \sum_m C_{lm} Y_{lm}(r) \quad (3.5.II)$$

نقوم بحساب الكمون داخل كرة MT باستخدام معادلة غرين .

$$V_V(r) = V_{lm}^{PW}(r) \left[\frac{r}{R} \right] + \frac{4\pi}{2l+1} \left\{ \frac{1}{r^{l+1}} \int_0^x dr' r'^{l-1} p_v(r') + r^l \int_x^R dr' r'^{l-1} p_v(r') - \frac{r'}{r^{2l+1}} \int_0^{R_x} dr' r'^{l+2} p_v(r') \right\} \quad (3.6.II)$$

أين $p_v(r)$ يمثل الجزء الشعاعي لكثافة الشحنة

II . 9 . برنامج Wien2K :

في حساباتنا استخدمنا طريقة الموجة المستوية المتزايدة خطيا المدمجة في برنامج [15] Wien2K.

البرنامج يشمل مجموعة من البرامج الفرعية المنفصلة الشكل (II . 2):

NN: يحدد هذا البرنامج المسافة بين كل ذرة وجوارها الأقرب كما يساعد في تحديد أقطار الذرات.

LSTART: يولد هذا البرنامج الكثافة الذرية ويحسب الفرق في طاقة المدارات وبالتالي يحسب بنية عصابات الطاقة .

SYMMETRY: يولد عمليات التناظر في الجملة ويحسب المجموعة النقطية لمواقع الخاصة بالذرات ويولد المعامل الأساسي لهرمونية الشبكة وحساب مصفوفة الدوران الموضعي .

KGEN: يولد المكعبات K في منطقة بريلوين .

DSTART: يولد الكثافة الأولية لبداية دورات (خوارزمية) الحساب الذاتي SCF المنتجة من الكثافة الذرية والمولدة من LSTART.

في حين أن خوارزمية الحساب الذاتي SCF محددة في النقاط التالية :

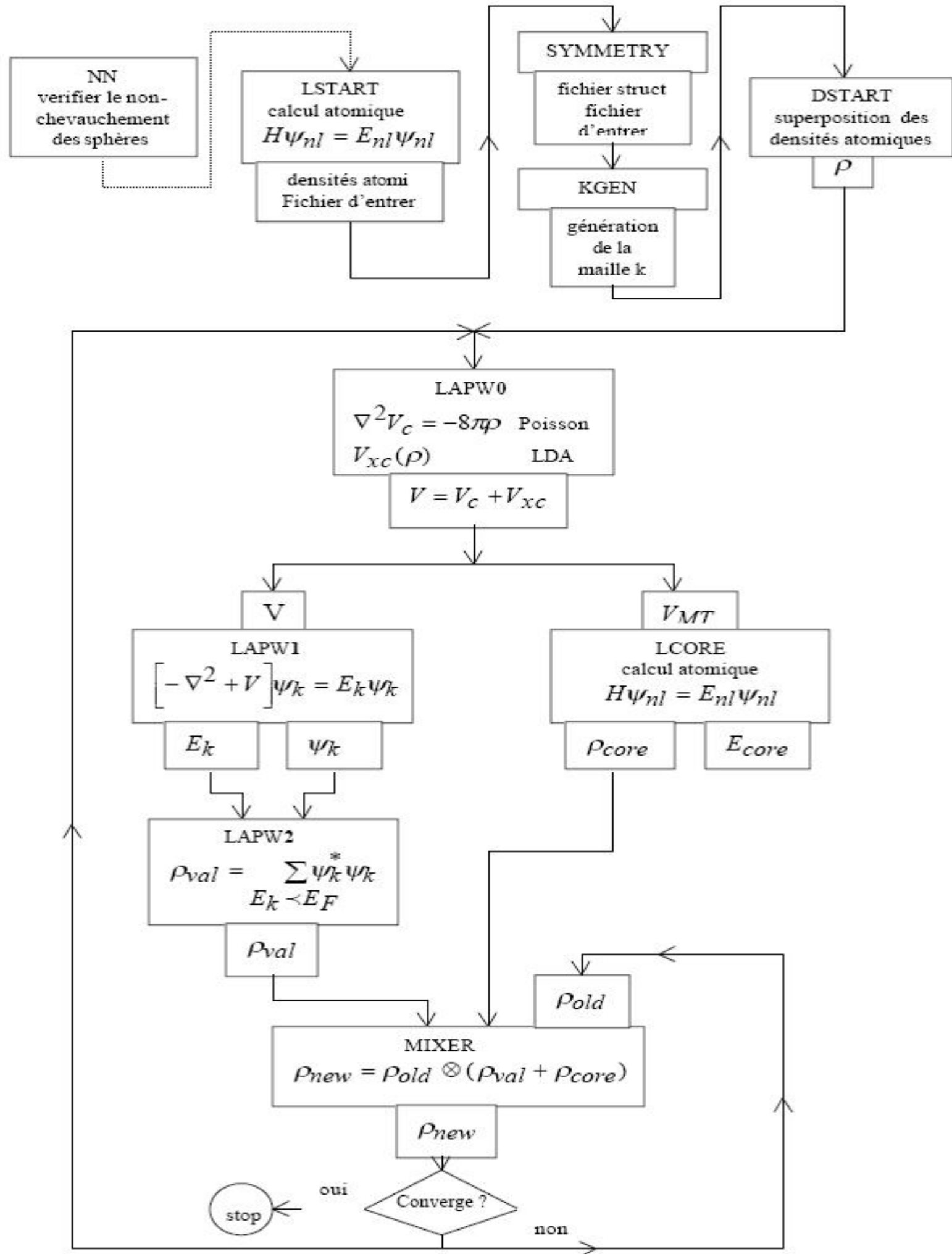
LAPW0 : ينتج الكمون انطلاقا من الكثافة الإلكترونية.

LAPW1 : حساب عصابات التكافؤ والقيم الذاتية والأشعة الذاتية.

LAPW2 : حساب كثافة التكافؤ انطلاقا من الأشعة الذاتية وطاقة فارمي.

LCORE: حساب الطاقة والحالات القلبية .

MIXER: يخلط الكثافة الداخلة والخارجة.



الشكل (II . 2): خوارزمية برنامج Wien2K

مراجع:

- [1]: *J. C. Slater, « Quantum theory of Molecules and solids ». V2. Ch8(1965).*
- [2] : *F. Bloch, Z. Phys. 52,555(1928).*
- [3]: *C. Herring, Phys. Rev. 57,1169(1940).*
- [4]: *J. C. Slater, Phys. Rev. 51.846(1937).*
- [5]: *J. C. Slater, Advances in Quantum chemistrys, 35(1964).*
- [6]: *D. D. Koelling and G. O. Arbman, J. phys. F5.661(1979)*
- [7]: *O. K. Andersen, phys. Rev. B, 2.3060(1975).*
- [8]: *J. Hubbard, Prec. Roy. Soc. (London), A276,238 (1963).*
- [9]: *O. K. Andersen, Phys. Rev. B12,3060(1975).*
- [10]: *D. D. Koelling and G. O. Arbman, j. Phys. F5,2041(1975).*
- [11]: *F. Rosicky, P. Weinberg and F. Mark, J. Phys. B9,2971(1976).*
- [12]: *J. H. Wood and A. M. Boring, Phys. Rev. B18,2701(1978).*
- [13]: *T. Takeda, J. Phys. Rev. F9,815(1997).*
- [14]: *A. H. Macdonald, W. E. Pickett and D. D. Koelling, J., Phys. C13,2675(1980).*
- [15]: *P. Blaha, K, Schwarz, G. K. H. Madsen, D. Kvasnicka, J. Luitz, Karlheinz Schwarz, Technische Universität, Wien, Austria, ISBN3-9501031-1-2(2001)* .

الفصل الثالث

النتائج والمناقشة

1.III مقدمة:

لدراسة الخصائص البنيوية والإلكترونية والمغناطيسية استخدمنا طريقة الموجة المستوية المتزايدة خطيا والكمون الكامل ($F P - LAPW$) والتي تكون مبنية على كمون ($M. T$) أو ما يسمى كمون خلية النحل . الذي يأخذ دالة موجة إلكترونات الحالة القلبية على شكل دالة شعاعية وإلكترونات الحالة البينية كدالة موجة مستوية والمدمجة في برنامج Wien2k ، وتم إجراء هذه الحسابات في إطار نظرية دالية الكثافة الإلكترونية (DFT) ، حيث أنه لحساب كمون تبادل -ارتباط استخدمنا تقريبات التالية:

تقريب GGA وتقريب GGA+U المدمجة في برنامج Wien2k وتم اختيار النقاط الخاصة كالتالي:

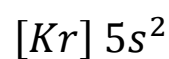
$$R_{MT}(Sr)= 2 \quad ; \quad l_{max}= 10 \quad ; \quad K_{point}= 1000 \quad ; \quad K_{MT}K_{max}=8$$

$$R_{MT}(Gd) = 2.1 \quad ; \quad R_{MT}(Re) = 2.2 \quad ; \quad R_{MT}(O) = 1.8$$

يعطى التوزيع الإلكتروني للعناصر الكيميائية بالشكل :

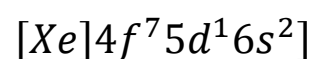
بالنسبة لذرة سترونتيوم Sr التوزيع الإلكتروني هو :

Sr38 سترونتيوم



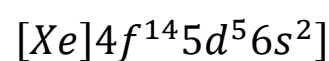
بالنسبة لذرة غادولينيوم Gd التوزيع الإلكتروني هو:

Gd64 غادولينيوم



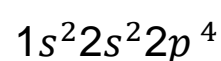
بالنسبة لذرة الرينيوم Re التوزيع الإلكتروني هو :

Re75 رينيوم



بالنسبة لذرة الاوكسجين O التوزيع الإلكتروني هو:

O8 أكسجين

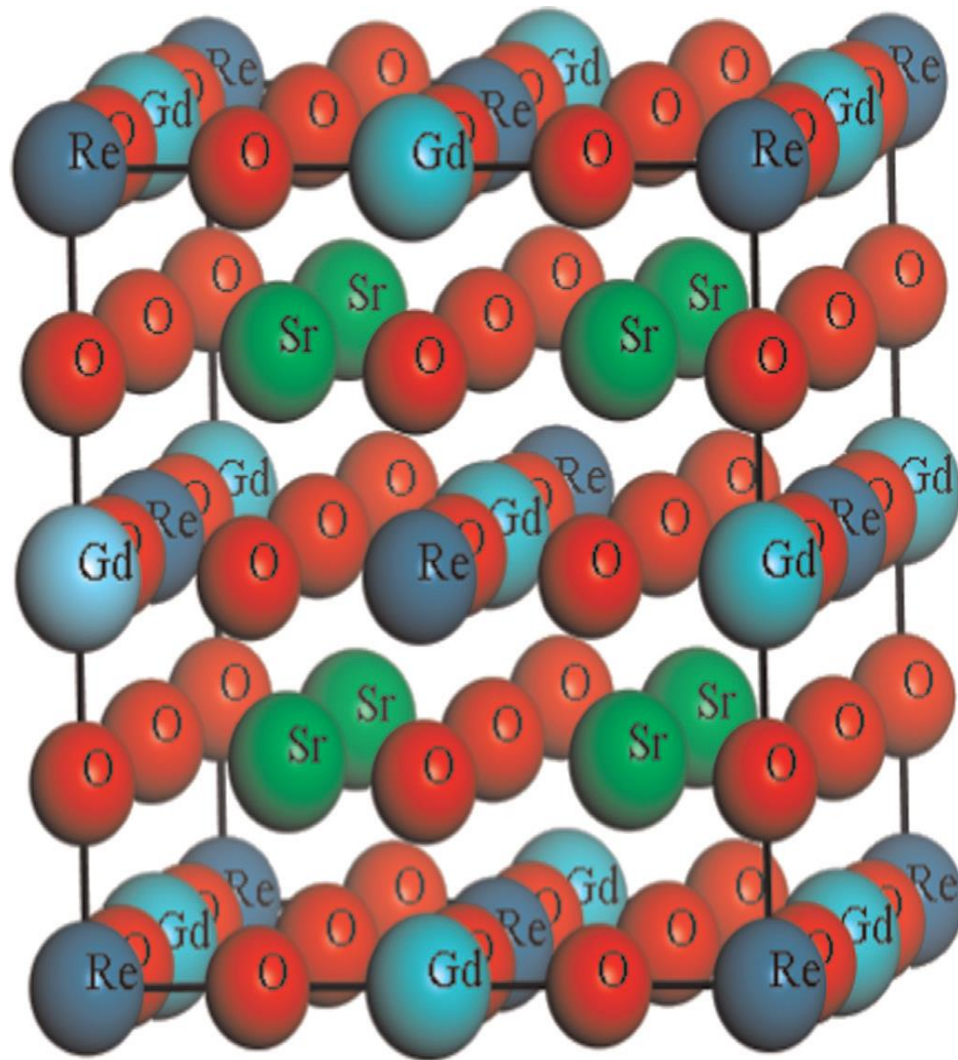


ولإدخال مواقع الذرات تم الاستعانة بالنموذج البلوري التجريبي ل schimek ومساعدوه [1]. حيث يتميز هذا المركب بالمجموعة

الفضائية $Fm\bar{3}m- 225$ ($space\ group$) أين تأخذ الذرات سترونتيوم (Sr)، غادولينيوم

(Gd)، رينيوم (Re)، وأوكسجين (O) المواقع:

O24e(0.25, 0 , 0); Re4a (0,0 ,0) ; Gd4b (0.5, 0.5, 0.5) ; Sr8c(0.25, 0.25, 0.25) على التوالي .



الشكل (1. III): البنية البلورية للمركب Sr_2GdReO_6

III. 2 الخصائص البنيوية:

حساب الخصائص البنيوية يسمح لنا بتحديد الخصائص الفيزيائية وبالتالي فدراسة وحساب الخصائص مهم جدا لدراسة اي مادة . وهذا الحساب يهدف إلى تحديد حجم الخلية موافق للحد الأدنى من الطاقة E وكذا حساب معامل الانضغاطية B والمشتقة الأولى بالنسبة للضغط .

ولقد تم حساب طاقة الحالة الاساسية كدالة لحجم الخلية لمركب Sr_2GdReO_6 في تقريب $GGA+U$ و GGA في حالة مغناطيسية ولامغناطيسية مبينة في شكل (2. III) ولحساب ثوابت الشبكة البلوري $a(\text{Å})$ ، و معامل الانضغاطية B ، والمشتقة الأولى لهذا المعامل B' استخدمنا معادلة لمرنقهان التالية [2]:

$$E(V) = E_0 - \frac{B_0 V_0}{B_0 - 1} + \frac{B_0 V}{B_0} \left[\frac{\left(\frac{V_0}{V}\right)^{B_0}}{B_0 - 1} + 1 \right] \quad (1. III)$$

النتائج المتحصل عليها لثابت الشبكة معامل الانضغاطية B والمشتقة الاولى لمعامل الانضغاطية مرفقة بالقيم التجريبية لهذا المركب في جدول التالي . بالنسبة لقيم المتحصل عليها لثوابت الشبكة $a(\text{Å})$ و في تقريب $GGA+U$ و GGA

متوافقة مع القيم التجريبية [3] أما بالنسبة لمعامل الانضغاطية ومشتقة الأولى لم يثبت أي دراسة تجريبية أو نظرية في الأعمال السابقة.

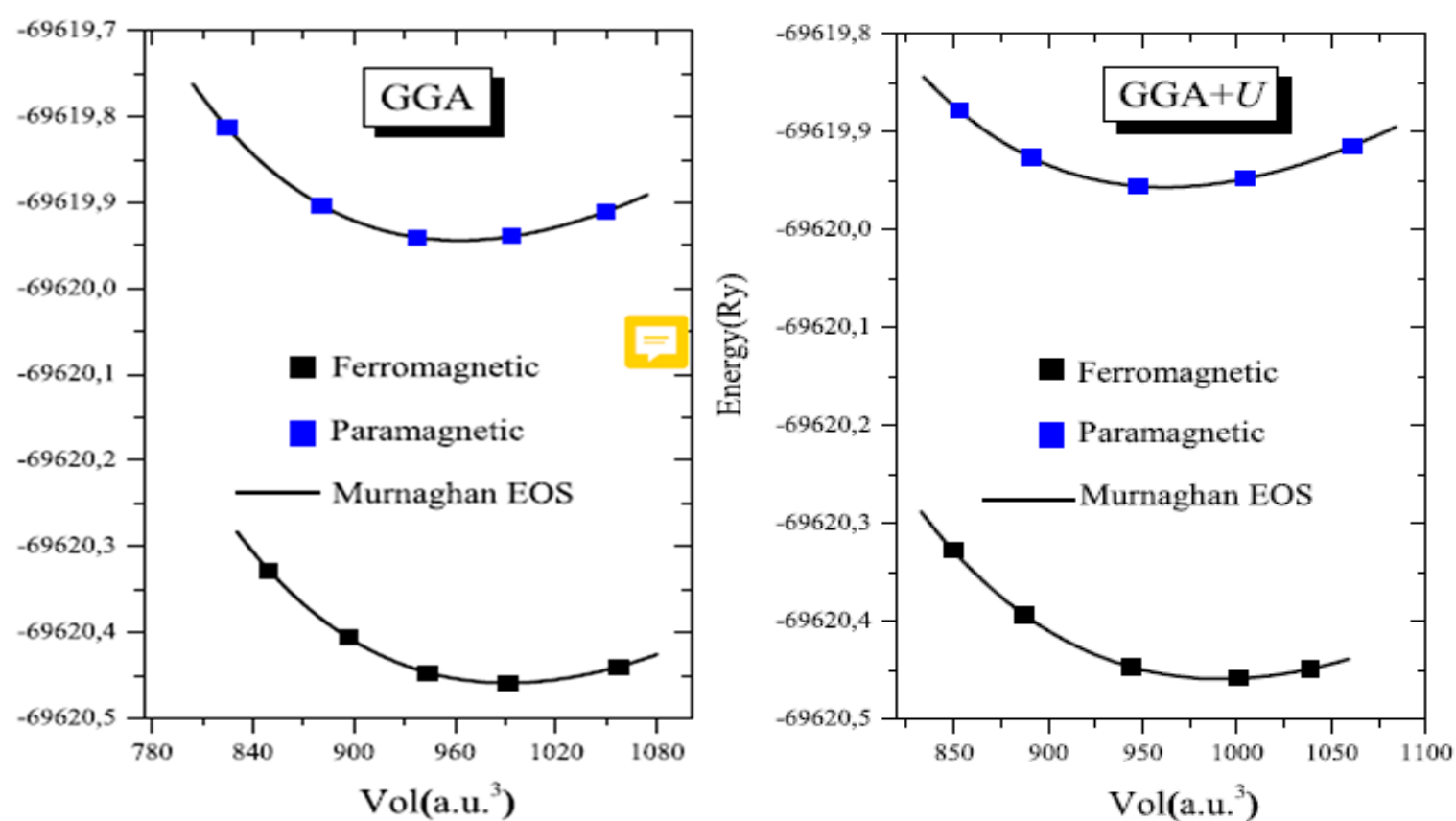
بالقيم التجريبية لهذا المركب بالنسبة لقيم المتحصل عليها لثوابت الشبكة $a(A^0)$ وجدنا أن طور المغناطيسي أكثر استقرار من حالة اللامغناطيسية.

والجدير بالذكر أن الحالة المغناطيسية بالنسبة للمركب $Sr_2 GdReO_6$ أكثر استقرار من الحالة اللامغناطيسية .

الجدول (1. III) :

يمثل ثابت الشبكة $a(A^0)$ ومعامل الانضغاطية B والمشتقة الأولى لمعامل الانضغاطية B' للمركب $Sr_2 GdReO_6$ في تقريب GGA و GGA +U .

Sr2GdReO6		a	B	B'
GGA	FM	8.369	1.4273	4.36
	PM	8.294	1.4643	4.42
GGA +U	FM	8.376	1.4643	4.14
	PM	8.291	1.4469	4.85
EXP[3]		8.279	-	-

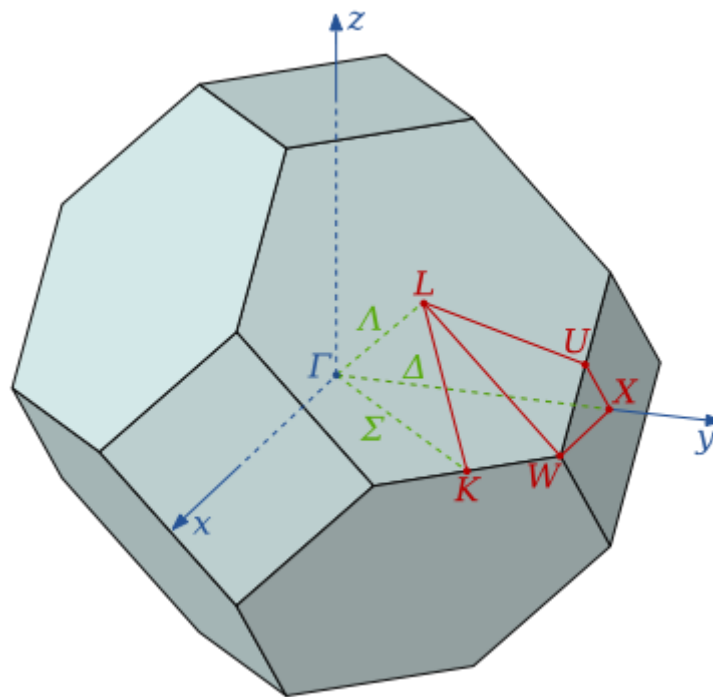


الشكل (2. III) : تغيرات الطاقة الكلية للمركب $Sr_2 GdReO_6$ بدلالة الحجم في تقريبي GGA و GGA +U

3. III الخصائص الإلكترونية:

في هذا الجزء سنقوم بدراسة الخصائص الإلكترونية لعصابة الطاقة، كثافة الحالات الكلية والجزئية للمركب $Sr_2 GdReO_6$ تم في مجال الطاقى المحصور بين $-8.0 eV$ إلى $8.0 eV$ باستخدام طريقة الموجة المستوية المتزايدة خطياً

والكمون الكامل ($FP - LAPW$) تحصلنا على عصابات الطاقة في النقاط عالية التناظر في منطقة بريليون الأولى للمركب Sr_2GdReO_6 في تقريب GGA و $GGA+U$ المعرفة في فضاء الشبكة المعكوسة والمميزة بنقاط عالية التناظر الموضحة في الشكل (3.III).



الشكل (3.II): منطقة بريليون الأولى مرفقة بنقاط عالية التناظر

1.3.III عصابة الطاقة :

نقوم بدراسة تغيرات طاقة الإلكترون بدلالة الشعاع الموجي K في الفضاء المعكوسة، لإيجاد المانع الطاقى الذي يمثل الفرق بين القيمة الحدية العظمى لعصابة التكافؤ والقيمة الحدية الصغرى لعصابة النقل في نفس النقطة أو نقطتين مختلفتين .

وجدنا أن المركب Sr_2GdReO_6 هو مركب معدني بالنسبة لسبين أعلى ونصف ناقل بالنسبة لسبين أسفل (4.III)، من الواضح أن النهاية الحدية الصغرى لعصابة النقل (CBM) مفصولة عن النهاية الكبرى لعصابة التكافؤ (VBM) على طول المتجه (W K) و بالنسبة لسبين الأعلى وجدنا أن عصابة التكافؤ للمركب تقطع مستوى فارمي E_F .

الفجوة النصف ناقل [4.5]، والتي يتم تحديدها على أنها الحد الأدنى بين أقل طاقة لنطاقات توصيل الأغلبية (الأقلية) فيما يتعلق بمستوى فيرمي والقيم المطلقة لأعلى طاقة للأغلبية حيث نطاقات التردد هي 1.82 eV لكلا الطريقتين .

إن المانع الطاقى لكل من تقريب GGA و $GGA + U$ هي 2.02 eV ، وهي قريبة من قيم فجوة الطاقة للمركب

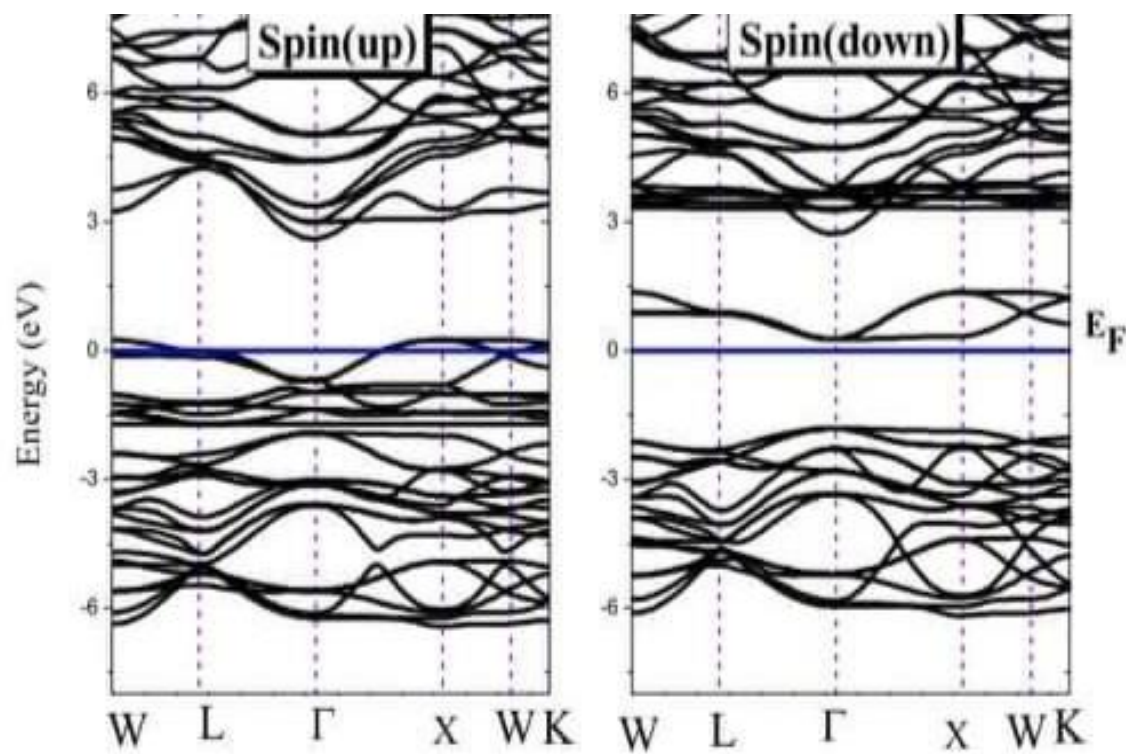
La_2CrZnO_6 [6].

هذا استقطاب سبيني يكون 100% على مستوى فارمي نطاق السبين الأقلية إلى استقطاب سبيني 100% على مستوى فارمي

مما يؤكد أن المركب هو مركب نصف معدني في حالة التوازن .

ويوضح الشكل (4.III) سبين أعلى جهة اليسار وسبين أسفل جهة اليمين بتقريب $GGA + U$ حيث مستوى فارمي موجود عند

0.00 eV (نفس شكل بالنسبة لتقريب GGA)

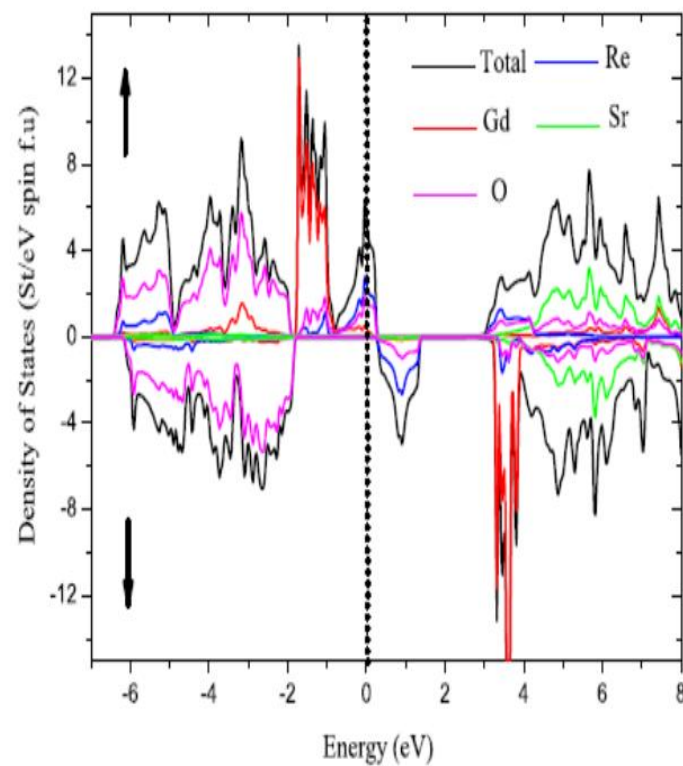


الشكل (4.III) : عصابة الطاقة للمركب Sr_2GdReO_6 في تقريب $GGA + U$

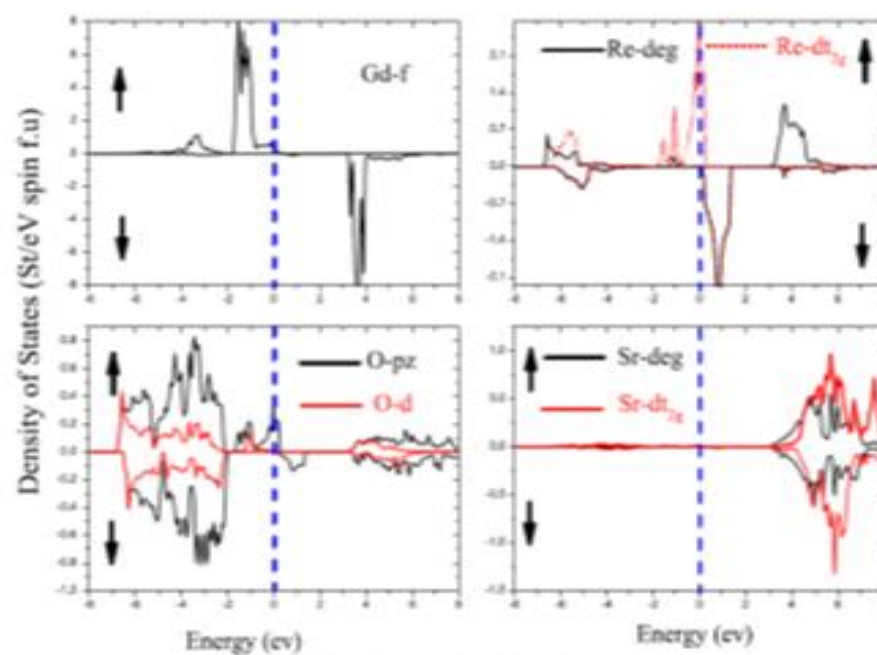
2.3.III كثافة الحالات الكلية و الجزئية:

لتحديد طبيعة بنية عصابات الطاقة للمركب Sr_2GdReO_6 قمنا بحساب كثافة الحالات الكلية والجزئية بطريقة (Tetrahedron) حيث استخدمنا 72 من النقاط الخاصة $Kmesh$ ، يمثل الشكل (5.III) كثافة الحالات الكلية للمركب، أما الشكل (6.III) فيوضح مساهمة المدارات الذرية في منطقة الحالات القلبية في المجال الطاقى -8 eV إلى 2 eV تأتي من الكترولونات pz و d للعنصر O . في طاقة فارمي يختلف الوضع بشكل ملحوظ، حيث يخلق المدار f لحالات Gd و t_{2g} لذرات Re نطاقات مشغولة بالكامل ويكون تقسيم التبادل بين النطاقات الفرعية السبين إلى أعلى والتدوير الأسفل لحالات $Gd 4f$ حوالي $4.75V$ وهو المساهم الرئيسي في المغناطيسية لحظة هذا المركب. بالتقسيم المجال من -8 eV إلى -2 eV مساهمة مدارات O_{pz} و d في تشكل عصابة التكافؤ ومن -2 eV إلى 2 eV مساهمة $Gd-f$ و $Re-p$ في بناء المركب الإلكتروني علي مستوى فارمي مساهمة ومن $Sr_{-d_{t2g}}$ - $Sr_{-d_{ag}}$ في عصابة النقل.

في الشكل (5.III) يتم تقديم TDOS للمركب Sr_2GdReO_6 عند ثوابت مختلفة وفي دوان الأقلية مع تمدد الشبكة لوحظ تغير واضح في موضع مستوى فيرمي. يظهر بوضوح في شكل (5.III) أن للمركب طبيعة نصف معدنية أعلى من قيمة ثابت الشبكة البالغة $837^\circ A$.



الشكل (5.III): كثافة الحالات الكلية للمركب Sr_2GdReO_6 في تقريب GGA+U



الشكل (6.III): كثافة الحالات الجزئية للمركب Sr_2GdReO_6

4.III الخصائص المغناطيسية :

المواد المغناطيسية لها أهمية تكنولوجية كبيرة وذلك بفضل سلوكها، ومن ناحية أخرى المغناطيسية تلعب دور مهما في وصف الخصائص الأساسية للمادة [7].

وفي عملنا هذا تم دراسة الحالة المغناطيسية (FM)، حيث تم حساب العزم المغناطيسي الكلي m_{total} والجزئي للمركب Sr_2GdReO_6 في حالة الدالة الموجة النسبية باستخدام كل من التقريبين GGA و GGA +U المبينة في الجدول (3.III).

الجدول (3. III) : يمثل قيم العزم المغناطيسي الكلي والجزئي للمركب Sr_2GdReO_6

	m_{Gd}	m_{Re}	m_{Sr}	m_O	$m_{interstitial}$	m_{total}
GGA	6.72563	1.31451	0.0088	0.04382	0.67677	9.00
GGA +U	6.75414	1.34922	0.0072	0.03992	0.64067	9.00

من خلال الجدول (3. III) لاحظنا أن قيمة العزم المغناطيسي الكلي لم تتغير بالنسبة للمركب Sr_2GdReO_6 في التقريبين GGA و GGA +U .

ووجدنا أن العزم الكلي للمغناطيسي للمركب مدروس هو $m_{total} = 9 \mu_B$ لكلا تقريبين هنا، ترجع المساهمة الرئيسية في إجمالي العزم المغناطيسي إلى ذرة الغادولينيوم Gd والرينيوم Re، والعزم المغناطيسي على ذرات السترونتيوم Sr و الأكسجين صغير (المساهمة ضعيفة) نتأجنا للعزم المغناطيسي لذرات Gd تتفق مع دراسات سابقة [8.9] وتتوافق اللحظات المغناطيسية لذرات الرينيوم مع البيانات النظرية [10] .

المراجع

- [1] : G.L. Schimek , P.T . Wood, Joseph W . Kolis, Supercritical ammonia synthesis and characterization of four new alkali metal silver antimony sulfides : Mg_2SbS_4 And M_2AgSbS_4 (M K,Rb), Solid state Chem
- [2] : F. D .Murnaghan , Proc , Natl . Acad .Sci .USA 30 (1944)
- [3] : G. Baud, M . Capestan, *Bull. Soc. Chim. Fr* 11 (1969)3608 – 3612 .
- [4] : Y . –Q. Xu, B.–G. Liu, D.G. Pettifor , *Phy . Rev . B* 66 (2002) 184435 .
- [5] : B. –G. Liu , *Phys. Rev . B*–67 (2003) 172411 .
- [6] : Y.P. Liu, S. H.R. Fuh, Y.K. Wang, *Commun . Comput. Phys.* 14(2013) 174–185 .
- [7] : M. Gerl et J . B . Issi, *Traité des Matériaux volume 8 , physique des Matériaux , presses polytechniques et Universitaires Romandes* (1997) .
- [8] : Y.P.Liu ,S .H .Chen , H.R. Fuh, Y.K. Wang, *Commun. Comput.Phys.* 14 (2013) 174 –185 .
- [9] : B. Antic, M. Mitric, D. Rodic , Y.Zhong , Y. Artemov, S. Bogdanovich, J. R. Friedman, *Phys. Rev . B*58(1998) 3212–3217 .
- [10] : Y.K. Wang, G.Y. Guo, *Phys. Rev. B*73 (2006) 064424 .

خلاصة عامة

في هذا العمل قمنا بدراسة الخصائص البنيوية والالكترونية والمغناطيسية للمركب ثنائي البيروفسكايت Sr_2GdReO_6 معتمدين على طريقة الأمواج المستوية المتزايدة خطيا والكمون الكامل FP-LAPW، والمدمجة في برنامج Wien2K في الاطار العام لنظرية دالية الكثافة DFT وذلك في كل من التقريبين $GGA + U$ و GGA .

يمكن تلخيص النتائج المبدئية المحصل عليها كما يلي :

_بالنسبة للمركب Sr_2GdReO_6 هو مركب نصف معدني يتميز بالمجموعة الفضائية $Fm3m-225$ ، معظم النواتج المتحصل عليها لثوابت الشبكة ($a(A^\circ)$) في تقريب $GGA + U$ و GGA متوافقة مع القيم التجريبية ، أما بالنسبة لمعامل الانضغاطية ومشتقة الأولى لم يثبت أي دراسة تجريبية أو نظرية في الأعمال السابقة .

_ الحالة المغناطيسية للمركب ثنائي البيروفسكايت اكثر استقرارا من الحالة اللامغناطيسية .

_أما الخصائص الإلكترونية فوجدنا أن طبيعة المركب Sr_2GdReO_6 مركب معدني بالنسبة لسبين أعلى ونصف ناقل بالنسبة لسبين أسفل ، ومصدر الحالات لعصابة التكافؤ والنقل تم تحديدها عن طريق تحليل كثافة الحالات الكلية والجزئية .

_الخصائص المغناطيسية تم تحديد العزم المغناطيسي الكلي والجزئي للمركب Sr_2GdReO_6 في التقريبين $GGA + U$ و GGA ، وجدنا العزم الكلي للمغناطيسي للمركب هو $m_{tot} = 9.00\mu\beta$ ، ترجع المساهمة الرئيسية في اجمالي العزم المغناطيسي الى ذرة الغادولينيوم Gd والرينيوم Re وضعيفة بالنسبة لذرة الاوكسجين O و السترونتيوم Sr .

_نتائج العزم المغناطيسي لذرة Gd تتفق مع دراسات السابقة .

ومن خلال بحثنا هذا نستطيع القول ان المركب ثنائي البيروفسكايت هو مركب نصف معدني ويمكن استغلاله في كثير من مجالات التكنولوجيا في الحياة .

ملخص

تم دراسة الخصائص البنيوية والإلكترونية والمغناطيسية لـ Sr_2GdReO_6 باستخدام طريقة الموجة المستوية المتزايدة خطياً و الكمون الكامل . تُظهر المقارنة بين الثوابت البلورية المحسوبة ونظيراتها التجريبية وجود اتفاق جيد جداً بينهما. تؤكد بنية عصابات الطاقة و كثافة الحالات الطبيعية نصف المعدنية لمركب المدروس.

Abstract

The structural, electronic and magnetic properties of Sr_2GdReO_6 have been investigated using the full-potential linearized augmented plane wave method. A comparison between the computed crystal structure parameters and the corresponding experimental counterparts shows a very good agreement between them. The band structures (BS) and density of states (DOS) ensure the half-metallic nature of the doped complex perovskite.

Résumé

Les propriétés structurales, électroniques et magnétiques de Sr_2GdReO_6 ont été étudiées à l'aide de la méthode des ondes planes augmentées linéarisées à plein potentiel. Une comparaison entre les paramètres de structure cristalline calculés et les contreparties expérimentales correspondantes montre un très bon accord entre eux. Les structures de bandes (BS) et la densité d'états (DOS) garantissent la nature semi-métallique de la pérovskite complexe étudiée.