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

كلية العلوم
قسم الفيزياء
رقم:

ميدان: علوم المادة
فرع: فيزياء
تخصص: فيزياء المواد

مذكرة مقدمة لنيل شهادة الماستر أكاديمـــي

إعداد الطالب: وليد مناصري

تحت عنوان

دراسة الخصائص البنيوية ،الإلكترونية، المغناطسية و المرونية لسبائك هسلر الرباعية

المناقشة بتاريخ: 2017/06/08

أمام لجنة المناقشة المكونة من :

زليخة شريفي	جامعة محمد بوضياف-المسيلة	رئيســا
حكيم بعزيز	جامعة محمد بوضياف-المسيلة	مشرفا و مقررا
تركية غلاب	جامعة محمد بوضياف-المسيلة	مناقشا
كريم بوفراش	جامعة محمد بوضياف-المسيلة	مناقشا

السنة الجامعية: 2017/2016

شكر وتقدير

الحمد لله الذي أنار لنا درب العلم والمعرفة وأعاننا على أداء هذا الواجب ووفقنا إلى انجاز هذا العمل .

نتوجه بجزيل الشكر والامتنان إلى كل من ساعدنا من قريب أو من بعيد على انجاز هذا العمل وفي تذليل ما واجهناه من صعوبات، ونخص بالذكر الأستاذ المشرف البروفيسور بعزيز حكيم الذي لم يبخل علينا بتوجيهاته ونصائحه القيمة التي كانت عونا لنا في إتمام هذا البحث.

ولا يفوتنا أن نشكر كل من الأستاذة غلاب تركية و بوضياف خديجة .

اهـــــــــــــداء

إلى من لا يمكن للكلمات أن توفي حقهما

إلى من لا يمكن للأرقام أن تحصي فضائلهما

إلى والدي العزيزين أدامهما الله لي

إلى إخوتي و أخواتي أيمن ، خليصة ، شهيناز و محمد

إلى الأصدقاء: ميلي إلياس ، ميمون يحي ، كمال محمد ، حرايز مروان،بوزيدي إلياس درارجة عماد

و بوعبد الله نور الدين

إلى كل من سقط من قلمي سهوا

أهدي هذا العمل

الفهرس

مقدمة عامة.....1

الفصل الأول

نظرية دالية الكثافة DFT

I .1 مقدمة.....3

I .2 معادلة شرودينغر للبلورة.....3

I .3 تقريب Boen-Oppenheimer.....4

I .4 تقريب Hartree.....5

I .5 تقريب Hartree-Fock.....5

I .6 نظرية دالية الكثافة (DFT).....6

I .1.6 نظرية Thomas-Fermi.....6

I .2.6 نظريتي Hohenberg-Kohn.....7

I .3.6 معادلة Kohn-Sham.....8

I .4.6 حلول معادلة Kohn-Sham.....9

I .7 تقريب كثافة الموضع LDA.....10

I .8 تقريب التدرج المعمم GGA.....11

I .9 التقريب المعدل لبريك جونسن mBJ.....11

المراجع.....14

الفصل الثاني

طريقة الأمواج المستوية المتزايدة خطيا و الكمون الكاملFP-LAPW

II .1 مقدمة.....15

II .2 طريقة APW.....15

II .3 مبدأ طريقة FP-LAPW.....17

II .4 دور الطاقة الخطية E_l.....18

II .5 بنية الدوال الشعاعية.....18

II .6 الدوال الشعاعية اللانسبية.....19
II .7 بنية الدوال الشعاعية.....20
II .8 حل معادلة Poisson.....22
II .9 تحسين طريقة (FP – LAPW) 23
II .1.9 نوافذ الطاقة المضاعفة.....23
II .2.9 النشر على المدارات الموضعية 24
II .9 برنامج Wien2K 24
المراجع.....27

الفصل الثالث

النتائج و المناقشة

III.1 مقدمة.....28
III.2 البنية البلورية للمركبات CoMnYZ (Y=Ti, V و Z=Al, As).....28
III.3 الخصائص البنيوية.....30
III.1.3 إيجاد ثوابت البنية.....30
III.2.3 إستقرار المركب CoMnYZ (Y=Ti, V وZ=Al, As).....32
III.1.2.3 إستقرار في حالة (سبين/ بدون سبين) 32
III.2.2.3 الإسقرار بين الأنماط الثلاثة في كل مركب.....34
III.4 الخصائص الإلكترونية.....35
III.1.4 عصابة الطاقة.....35
III.1.1.4 المركب CoMnTiAl.....35
III.2.1.4 المركب CoMnTiAs 39
III.2.1.4 المركب CoMnVAs 43
III.2.4 .الكثافة الحالة الإلكترونية.....47

III.4.2.1 المركب CoMnTiAl.....48
III.4.2.2 المركب CoMnTiAs.....52
III.4.2.2 المركب CoMnVAs.....57
III.5 الخصائص المغناطسية.....62
III.5.1 مقدمة.....62
III.5.2 تصنيف المواد المغناطسية.....63
III.5.2.1 الديا مغناطسية.....63
III.5.2.2 البارامغناطسية.....63
III.5.2.3 المواد الحديدومغناطسية.....63
III.5.2.4 الحديد والمغناطسية المضادة.....64
III.5.3 العزم المغناطيسي للمركبات CoMnYZ (Y=Ti, V و Z=Al, As).....64
III.6 خصائص المرونة.....65
III.6.1 مقدمة.....65
III.6.2 ثوابت المرونة للسبائك CoMnYZ (Y=Ti, V و Z=Al, As).....67
خلاصة عامة.....68
المرجع.....70
قائمة الجداول
قائمة الأشكال
ملخص

مقدمة عامة

مقدمة عامة:

إن التطور التكنولوجي في البحث العلمي الذي شهدته علوم المواد في مجلات مختلفة من بينها المواد المغناطسية التي تستخدم في بناء الأجهزة الحساسة للحقل المغناطيسي مثلا المقاومات المغناطسية ، وفي الكثير من التطبيقات الكهربائية من بينها المولدات الكهربائية والمحولات الكهربائية و أجهزة حفظ الذاكرة.

من بين هذه المواد ذات الأهمية التكنولوجية والتقنية مركبات هسلر (Heusler) ذات الصيغة الكميائية XX'YZ ، حيث العناصر X,X' و Y ينتمون للمعادن الإنتقالية والعنصر Z هو عنصر لا مغناطيسي.

إنصب الإهتمام حول هذه المركبات لإمتلاكهم خاصية (spintronics) التي وجدت أيضا في المواد من رتبة النانو وبعض المركبات الجزيئية .

عموما مركبات هسلر CoMnTiAl ، CoMnTiAs و CoMnVAs تتبلور في بنية متماسكة ومستقرة LiMgPdSb .

ولدراسة الخصائص البنيوية ، الإلكترونية ، المغناطسية وخصائص المرونة إستخدمنا طريقة الموجة المستوية المتزايدة خطيا (FP-LAPW) والتي تكون مبنية علي كمون (MT) ، الذي يأخذ دالة موجة إلكترونات الحالة القلبية علي شكل دالة شعاعية و إلكترونات الحالة الإحلالية كدالة موجة مستوية ، مع أخذ التقريب دالة الحالة النسبية ، والذي يعتبر أن سرعة الإلكترونات تكون قريبة من سرعة الضوء.

وتم إجراء هذه الحسابات في إطار نظرية دالية الكثافة الإلكترونية (DFT) حيث أنه لحساب كمون تبادل -إرتباط إستخدمنا التقريبات التالية :

تقريب التدريج المعمم (GGA) : بحيث يأخذ هذا التقرب تدرج كثافة الإلكترونية في منطقة بريلوان

تقريب المعدل لبيك-جونسون (mBj) :الهدف من هذا التقريب هو الحصول علي نتائج جيدة حول خصائص الإلكترونية وتحسين المانع الطاقي.

إتبعنا في إنجاز بحثنا الخطوات التالية:

تناولنا في الفصل الأول معادلة شرودينغر و التقريبات المختلفة من بينها تقريب الأدياتيكي وتقريب هاتري-فوك وتطرقنا أيضا لنظرية دالة كثافة (DFT) بتقريباتها تقريب كثافة الموضع LDA وتقريب التدريج المعمم GGA ، وتقريب المعدل لبريك جونسن mBJ .

وتطرقنا في الفصل الثاني : لطريقة الموجة المستوية المتزايدة خطيا (FP-LAPW)

أما الفصل الثالث تطرقنا إلي النتائج المحصل عليها والمتمثلة في الخصائص البنيوية (ثابت الشبكة a(A°) معامل الإنضغاطية B والمشتقة الأولي لهذا المعامل B') ، الخصائص الإلكترونية (بنية عصابة الطاقة كثافة الحالات الكلية و الجزيئية) ، الخصائص المغناطسية لهذه المركبات مع تحديد أصل العزم المغناطيسي و أيضا حساب معاملات المرونة C_{ij} وتحديد طبيعة الروابط بين المستويات الذرية المتجاورة.

وفي الأخير قمنا بتقديم خلاصة عامة لمختلف النتائج المتحصل عليها.

الفصل الأول
نظرية دالية الكثافة
DFT

I .1.مقدمة :

من أجل معرفة مختلف الخصائص الفزيائية للمواد الصلبة علينا دراسة النظام المتعلق بسلوك الإلكترونات حيث تتفاعل كهربائيا مع الأيونات و في ما بينها (تفاعل نواة-نواة ، إلكترون-نواة ، إلكترون-إلكترون). ولهذا تكون معادلة شرودينغر (Schrödinger) مستعصية الحل حسابيا، لذلك تستخدم نظرية دالية الكثافة DFT كوسيلة رياضية من أجل حل معادلات ميكانيك الكم الأساسية.

I .2.معادلة شرودينغر للبلورة :

كل الأجسام البلورية نستطيع إعتبارها كنظام واحد يتكون من جسيمات أخف (الإلكترونات) والثقيلة (الأنوية). والحالة المستقرة للجسيمات توصف بمعادلة شرودينغر[1]:

$$H\psi = E\psi \qquad (1-\text{I})$$

في حالة السكون معادلة شرودينغر تكون مستقلة عن الزمن

$$H\psi(r,R) = E\psi(r,R) \qquad (2-\text{I})$$

$\boldsymbol{\psi}$ هي الدالة الموجية و تتعلق بكل إحداثيات (أنوية+إلكترونات) ، Eهي القيم الذاتية الموافقة و **H** يمثل مؤثر الهاملتونيان للبلورة حيث يكون مؤلفاً من الطاقة الحركية لكل الجسيمات وطاقة التفاعل فيما بينها، حيث يكتب في غياب الحقل الخارجي علي الشكل :

$$H = V_{ee} + V_{nn} + V_{ne} + T_n + T_e \qquad (\mathbf{3-I})$$

1-الطاقة الحركية للإلكترونات:

$$\boldsymbol{T_e = \sum_{i=1}^{N} \frac{P_i^2}{2m_e} = \sum_{i=1}^{N} \frac{-\hbar^2}{2m_e}\Delta_i} \qquad (\mathbf{4-I})$$

حيث m_e كتلة الإلكترونات

2- الطاقة الحركية للأنوية:

$$\boldsymbol{T_n = \sum_{i=1}^{n} \frac{P_i^2}{2M_n} = \sum_{i=1}^{n} \frac{-\hbar^2}{2M_n}\Delta_i} \qquad (\mathbf{5-I})$$

حيث M_n كتلة الأنوية

3- طاقة تفاعل إلكترون -إلكترون:

$$\boldsymbol{V_{ee} = \frac{1}{2}\cdot\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\sum_{i\neq j}\frac{e^2}{|\,\overrightarrow{r_i} - \overrightarrow{r_j}\,|}} \qquad (\mathbf{6-I})$$

$\vec{r}_{ij}$المسافة بين الإلكترونين i,j

4- طاقة تفاعل إلكترون- نواة:

$$\boldsymbol{V_{en} = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\sum_{i,\alpha} -\frac{e^2 Ze}{|\vec{r}_i - \vec{R}_\alpha|}} \qquad (7-\mathbf{I})$$

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

5- طاقة تفاعل نواة - نواة :

$$\boldsymbol{V_{nn} = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{2}\sum_{\alpha\neq\beta}\frac{e^2 Z_\alpha Z_\beta}{|\vec{R}_\alpha - \vec{R}_\beta|}} \qquad (8-\mathbf{I})$$

$|\vec{R}_\alpha - \vec{R}_\beta|$ المسافة بين النواتين α, β

يمكن كتابة هاملتون على النحو التالي:

$$\boldsymbol{H = \sum_{i=1}^{N}\frac{-\hbar^2}{2m_e}\Delta_i + \sum_{i=1}^{n}\frac{-\hbar^2}{2M_n}\Delta_i + \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\sum_{i,\alpha} -\frac{e^2 Ze}{|\vec{r}_i - \vec{R}_\alpha|} + \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{2}\sum_{\alpha\neq\beta}\frac{e^2 Z_\alpha Z_\beta}{|\vec{R}_\alpha - \vec{R}_\beta|} + \frac{1}{2}\cdot\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\sum_{i\neq j}\frac{e^2}{|\vec{r_i} - \vec{r_j}|}} \qquad (9-\mathbf{I})$$

تحتوى معادلة شرودينغر على $3(Z+1)N_\alpha$ متغير لمول واحد من الذرات ،فنجد في $1cm^3$ من البلورات 10^{22} ذرة ، و بهذه الكيفية معادلة شرودينغر مستحيلة الحل إلا من خلال عدد من التقريبات، أولا تقريب بورن-أوبنهايمر (تقريب الكاضم).

I .3.تقريب Born-Oppenheimer :

المعادلة $(9-I)$ معقدة جدا بحيث لا يمكن حلها من الناحية التحليلية، حيث تم تبسيطها، في عام1927من طرف ماكس بورن و روبرت أوبنهايمر اللذان اقترحا حل تقريبي لتبسيط معادلة شرودنغر، يعتمد هذا التقريب على فصل حركة الإلكترونات عن الأنوية، والذي يأخذ بعين الإعتبار الإختلاف الكبير بين كتلة الإلكترونات و كتلة الأنوية ، حيث أن كتلة الإلكترون أقل بكثير من كتلة النواة في حين أن سرعة الإلكترونات أكبر بكثير من سرعة النواة[2]،وبذلك تصبح الطاقة الحركية للأنوية معدومة $(T_n = 0)$ و طاقة تفاعل نواة نواة ثابتة $\mathrm{v_{nn}} = \mathrm{cte}$

أي يصبح الهاميلتونيان الكلي للجملة المؤلفة من هاميلتونيان إلكتروني و هاملتونيان نووي على الشكل:

$$H_e = T_e + V_{ee} + V_{en} \qquad (10.\mathrm{I})$$

H_e يمثل هاميلتونيان الإلكترونات.

إذن تصبح معادلة شرودينغر لإلكترونات هي :

$$H_e\psi(r,R) = E\psi(r,R) \qquad (11.\text{I})$$

لا يمكن حل المعادلة بالطرق الرياضية المعروفة لذلك نستخدم تقريب آخر يسمى بتقريب هارتري.

I .4.تقريب Hartree:

في سنة 1928 تمكن العالم الإنكليزي هارتري من وضع أول نموذج كمي لوصف الذرة متعددة الإلكترونات[3]، على نموذج الإلكترون المستقل أي أن كل إلكترون يتحرك منفرد في الحقل المتوسط المتولد عن الأنوية وباقي الإلكترونات الأخرى :

$$H = \sum_i H_i \qquad (12.I)$$

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

$$\psi(\vec{r}) = \prod_{i=1}^{N} \psi_i(\vec{r}_i) \qquad (13.I)$$

و تكتب الطاقة الكلية للجملة كمجموعة الطاقة الموافقة لكل حالة إلكترونية :

$$E = \sum E_i \qquad (14.I)$$

ومنه معادلة شرودينغر تصبح:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V_{ext}(\vec{r}_i) + V_H(\vec{r}_i)\right]\psi_i(\vec{r}) = E\psi_i(\vec{r}) \qquad (15.I)$$

1-الطاقة الكامنة للإلكترون في حقل الأنوية k:

$$V_{ext}(\vec{r}_i) = -\sum_k \frac{Z_k e^2}{4\pi|\vec{r}_i - \vec{R}_k|} \qquad (16.\text{I})$$

R_k يمثل موضع الأنوية.

2-الكمون الفعال لهرتري:

$$V_H(\vec{r}_i) = -\frac{1}{2}\sum_j \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \qquad (17.\text{I})$$

I .5. تقريب Hartree-Fock :

في عام 1930 بين فوك أن الدالة الموجية لهارتري لا تحترم مبدأ إستبعاد باولي[4]، ولذلك قام فوك بتطوير نموذج هارتري بإدخال مبدأ السبين لنظام الإلكترونات[5] بحيث توجد $N!$ إحتمال لوضع N إلكترون على N موضع $(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \ldots\ldots\ldots, \vec{r}_N)$.

حيث حل محل الدالة الموجية محددات سلاتر[6] التي كتبها على النحو التالي :

$$\psi(r_1, r_2, \ldots\ldots, r_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_1(r_1) & \cdots & \psi_N(r_1) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_1(r_N) & \cdots & \psi_N(r_N) \end{vmatrix} \qquad (18.\text{I})$$

و المعامل $\frac{1}{\sqrt{N!}}$ هو ثابت التعامد

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

I .6.نظرية دالية الكثافة (DFT) :

لحساب بنية عصابات الطاقة يتم التركيز على اختيار شكل كمون دالة الموجة ، نستخد عنصر الكثافة الإلكترونية $\rho(r)$ لتحديد الطاقة E و التي تكون كدالة للإحداثيات (x, y, z) وتعود هذه الفكرة الأساسية إلي النموذج الذى وضعه توماس و فارمي .

I .1.6.نظرية Thomas-Fermi :

في 1927 صاغ توماس-فارمي الطاقة الكلية لغاز الإلكترونات اللامتجانسة كدالة لكثافة الإلكترونات المعروفة لغاز المتجانس[8,7]، وذلك بتقسيم منطقة برليوين نجد في أخر تقسيم تعتبر كثافة الإلكترونية ثابتة في كل منطقة من المناطق المقسمة، ومنه تكتب طاقة النظام الكلية E على الشكل التالي:

$$E = \int \varepsilon_i[\rho(r)]dr \qquad (19.\text{I})$$

تعطى كثافة غاز المتجانس على الشكل :

$$\rho(\vec{r}) = \frac{1}{3\pi^2}\left(\frac{2m_e}{\hbar}\right)^{3/2} E_f^{3/2} \qquad (20.\text{I})$$

حيث E_f طاقة فارمي.

ومنه تكتب طاقة فارمي علي الشكل التالي:

$$E_f = \frac{\hbar^2}{2m_e}(3\pi^2)^{2/3}(\rho(\vec{r}))^{2/3} \qquad (21.\text{I})$$

والطاقة الحركية لغاز المتجانس هي :

$$T = \frac{3}{5}\rho E_f \qquad (22.\text{I})$$

بتعويض المعادلة (21.I) في (22.I) نجد:

$$T = \frac{3}{5}\frac{\hbar^2}{2m_e}(3\pi^2)^{2/3}(\rho(\vec{r}))^{5/3} \qquad (23.\text{I})$$

الطاقة الحركية لتوماس- فارمي هي :

$$T_{TF}(\rho) = \int T\, dr = \frac{3\hbar^2}{10m_e}(3\pi^2)^{2/3}\int \left(\rho(\vec{r})\right)^{5/3} d\vec{r} \qquad (24.\text{I})$$

نظرية توماس- فارمي هي تقريب موضعي لكثافة الإلكترونات، ومنه فإن الطاقة الكلية لنظام لإلكترونات في تقريب توماس- فارمي تكتب علي الشكل :

$$E_{TF}(\rho) = \frac{3\hbar^2}{10m_e}(3\pi^2)^{2/3}\int \left(\rho(\vec{r})\right)^{5/3} d\vec{r} + \int v(\vec{r})\rho(\vec{r})d\vec{r} + \frac{1}{2}\int\int \frac{\rho(r_1)\rho(r_2)}{|r_1 - r_2|} d\overrightarrow{r_1} d\overrightarrow{r_2} \qquad (25.\text{I})$$

في هذا النموذج أجرية بعض التحسينات:

1- فعل التبادل المقترح من طرف ديراك :

$$E_{TFD}(\rho) = E_{TF}(\rho) - C_X \int \left[\rho(\vec{r})^{4/3}\right] d\vec{r} \qquad (26.\text{I})$$

2- فعل الإرتباط المقترح من طرف فينغنز :

$$E_C(\rho) = -\frac{0.056[\rho(\vec{r})]^{4/3}}{0.079 + [\rho(\vec{r})]^{1/3}} \qquad (27.\text{I})$$

هذا النموذج أعطى صورة عن إمكانية الإعتماد على الكثافة الإلكترونية لحساب الطاقة الحركية، و بإهمال الإرتباط بين الإلكترونات تحصل على نتائج ضعيفة.

I .2.6.نظريتي Hohenberg-Kohn :

في سنة 1964 تم إعادة صياغة نظرية الكثافة الدالة (DFT) المقترحة من قبل فارمي و وضع نظرية دقيقة لنظام متعدد الجسيمات وذلك بفضل تقريبب هوهنبارغ-كوهن اللذي يقوم على النظريتان الأساسيتان:

النظرية الأولى :

تعتمد على أخذ الطاقة الكلية لنظام الإلكترونات المتفاعلة في كمون خارجي $V_{ext}(r)$ (كمون الأنوية) هو دالية وحيدة لكثافة الإلكترونات $\rho(r)$:

$$E = E(\rho) \qquad (28.\text{I})$$

حيث أن دالية الطاقة

$$E(\rho) = \langle\psi|H|\psi\rangle = \langle\psi|T + U|\psi\rangle \qquad (29.\text{I})$$

حيث أن U و T كمون تفاعل و الطاقة الحركية لإلكترونات على الترتيب

بتطبيق تقريب هارتري فوك نجد:

$$E_{H.K}(\rho) = F_{H.K}(\rho) + \int V_{ext}(r)\rho(r)dr \qquad (30.\text{I})$$

$$F_{H.K}(\rho) = \frac{1}{2}\int\int \frac{\rho(r_1)\rho(r_2)}{|r_1 - r_2|} d\overrightarrow{r_1} d\overrightarrow{r_2} + \text{G}(\rho) \qquad (31.\text{I})$$

حيث أن $\text{G}(\rho)$ تمثل الطاقة الحركية للإ لكترونات زائد الفرق بين طاقة التفاعل الحقيقية و طاقة التفاعل لهرتري، دوال الكثافة الإلكترونية تبقى صحيحة مهما كان شكل قوة الكمون الخارجي وعدد الإلكترونات.

النظرية الثانية :

برهنا بأن كثافة الحالة الأساسية تعطى كثافة الحد الأدني ، وكل خصائص الحالة الأساسية هي دالية الكثافة الإلكترونات كالتالى:

$$E(\rho_0) = MinE(\rho) \qquad (32.\text{I})$$

هوهنبارغ- كوهن برهنا على أن الكثافة الحقيقية للحالة الأساسية تعطي أقل طاقة، وكل الخصائص الأخرى تكون بدلالة كثافة الطاقة الحالة الأساسية في نظام الإلكتروني ، الكمون الخارجي يتم تحديده بإستخدام مبدأ التغاير.

I .3.6. معادلة Kohn-Sham :

تكتب كثافة الإلكترونات على شكل مجموع كثافة الجسيمات ومن أجل الحصول على طاقة الحالة الأساسية نستعمل مبدا التغاير[9]، تعطى كثافة بـ:

$$\rho(\vec{r}) = \sum_{i=1}^{N} |\phi_i(\vec{r})|^2 \qquad (33.\text{I})$$

ϕ_i الحالة المشغولة للإلكترون i

دالية الطاقة الكلية للإلكترونات$E_e(\rho)$:

$$E_e = T + V \qquad (34.\text{I})$$

حيث T الطاقة الحركية للجسيمات في حالة التفاعل

و V كمون التفاعل إلكترون-إلكترون.

طاقة هرتري- فوك $E_{H.K}(\rho)$:

$$E_{H.F} = T_0 + V = T_0 + (V_H + V_X) \qquad (35.\text{I})$$

حيث الطاقةT_0 الحركية لإللكترونات الحرة.

V_H كمون إرتباط الإلكترونات و V_X كمون تبادل الإلكترونات

دالية$F_{H.F}$ هي:

$$F_{H.F} = T - T_0 + T_0 + V \qquad (36.\text{I})$$

$V_C = T - T_0$ كمون إرتباط الإلكترونات.

$$F_{H.F} = (V_C + V_X) + T_0 + V_H \qquad (37.\text{I})$$

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

ومنه دالية الطاقة الكلية

$$E(\rho) = T_0(\rho) + V_H(\rho) + V_{XC}(\rho) + V_{ext}(\rho) \qquad (38.\text{I})$$

معادلة كوهن-شام :

$$(T + V_{ext} + V_H + V_{XC})\phi_i(r) = \varepsilon_i \phi_i(r) \qquad (39.\text{I})$$

I .4.6. حلول معادلة Kohn-Sham :

تتركز مختلف الطرق لحساب بنية عصابات الطاقة مبدئيا على DFT و ترتب حسب استخدامها للكثافة، الكمون و مدارات كهون- شام[10]، وبالتالي دالة الموجة الأساسية هي :

$$\psi_i(r) = \sum C_{i\alpha}\, \phi_\alpha(r) \qquad (40.\text{I})$$

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

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

حلول معادلة كوهن - شام تعطي:

$$(H - \varepsilon_i O)C_i = 0 \qquad (41.\text{I})$$

حيث : O مصفوفة التغطية و H هملتونيان كوهن

و لتبسيط الحساب نحل معادلة كوهن-شام من أجل نقاط تناظر في المنطقة بريلوان الأولى و لذلك نستخدم حلقة تكرارية كما في الشكل (1-I) بحيث ندخل الكثافة الأولية للشحنة ρ_{in}في التكرار الأول لحساب كثافة جديدة ρ_{out} . إذا تغيرت كثافة أو الطاقة (معيار التقارب) ، نرجع إلى الخطوى الأولى ونقوم بالمزج بين الكثافتين ρ_{out} و ρ_{in} بالطريقة التالية:

$$\rho_{in}^{i+1} = (1 + \alpha)\rho_{in}^{i} + \alpha\rho_{out}^{i} \qquad (42.\text{I})$$

i: درجة التكرار

α : *معامل* المزج

ونواصل الحلقة التكرارية على هذا النحو حتى نتحصل على التقارب المطلوب.

I .7. تقريب كثافة الموضع LDA :

تقريب كثافة الموضع هوتقريب لنظام الإلكترونات اللامتجانسة باعتباره موضيعيا متجانس[11]،بحيث تعطى طاقة تبادل-إرتباط في هذا التقريب بـ:

$$E_{XC}^{LDA}(\rho) = \int \varepsilon_{XC}(\rho)\rho(\vec{r})d\vec{r}^{3} \qquad (43.\text{I})$$

تقريب LDA يعتبر ε_{XC} طاقة كلية وهي مقسمة لجزئين بحيث :

$$\varepsilon_{xc}(\rho) = \varepsilon_x(\rho) + \varepsilon_c(\rho) \qquad (44.\text{I})$$

مساهمة طاقة تبادل الإلكترون في هذا التقريب تعطى بالعلاقة لدراك[12]:

$$\varepsilon_x(\rho) = -\frac{3}{4}\left(\frac{3}{\pi}\right)^{1/3}, \rho^{1/3} = -\frac{3}{4}\left(\frac{3}{4\pi^2}\right)^{1/3}\frac{1}{r_s} \qquad (45.\text{I})$$

r_s نصف قطر فيغنر-سيتز[13] (نصف قطر كرة يحتوى الإلكترون).

مساهمة الإ رتباط من أجل كثافة عالية يعطى بالعلاقة بردي و زنغر[14]:

$$\varepsilon_c(\rho) = C_0 Ln(r_s) - C_1 + C_2 r_s \ln(r_s) - C_3 r_3 \qquad (46.\text{I})$$

مع

$$C_0 = 0.0031091, C_1 = 0.046644, C_2 = 0.00664, C_3 = 0.01043.$$

مساهمة الإرتباط من أجل كثافة منخفضة يعطى بالعلاقة فوسكو، ويلك و نصير[15]:

$$\varepsilon_c(\rho) = -\frac{d_0}{r_s} + \frac{d_1}{r_s^{3/2}} + \cdots \qquad (47.\text{I})$$

I .8. تقريب التدرج المعمم GGA :

تقريب تدرج المعمم GGA [16]، تصحيحات LDA المستخدم حاليا أخذت بعين الأعتبار تغير كثافة الإلكترونات $\rho(r)$ عبر تدرج $\Delta\rho(r)$ تأخذ طاقة التبادل-إرتباط الشكل التالي :

$$E_{xc}^{GGA}[\rho(\vec{r})] = \int \rho(\vec{r})\varepsilon_{xc}[\rho(\vec{r})\,\nabla\rho\,(\vec{r})]d^3\,\vec{r} \qquad (48.\text{I})$$

$\nabla\rho\,(\vec{r})$:تدرج الكثافة الإلكترونية.

I .9. التقريب المعدل لبريك جونسن mBJ :

حيث قدم Tran-Blaha [17]سنة 2009 أطروحة حول نسخة معدلة لدالية بريك جونسن ،هذه الأخيرة برهنة بسرعة نجاعتها بالنسبة لطرق الحساب الأكثر إستعمال LDA [11]و GGA [16]. وذلك من أجل حساب فجوة الطاقة بتغير في الكمون لبريك جونسن علي الشكل:

$$\upsilon_{x;\sigma}^{mBJ}(r) = c\upsilon_{x;\sigma}^{BR}(r) + (3c-2)\frac{1}{\pi}\sqrt{\frac{5}{12}}\sqrt{\frac{2t_\sigma(r)}{\rho_\sigma(r)}} \qquad (49.\text{I})$$

حيث

$\rho_\sigma(r) = \sum_{i=1}^{N_\sigma}|\psi_{i,\sigma}|^2$ كثافة الإلكترونية.

$t_\sigma(r) = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N_\sigma}|\psi_{i,\sigma}^*\nabla\psi_{i,\sigma}|^2$ كثافة الطاقة الحركية.

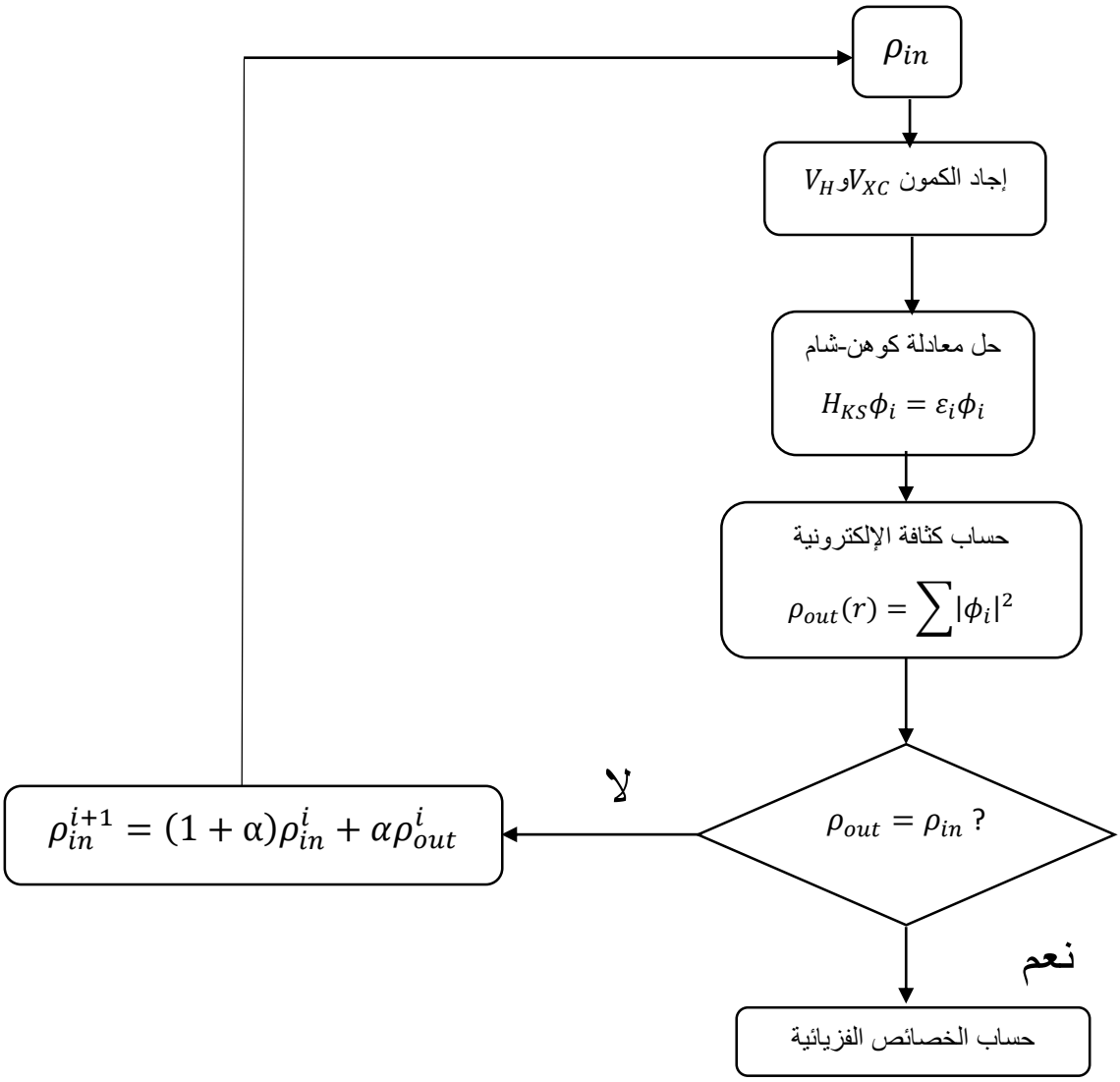
$\upsilon_{x;\sigma}^{BR}$ الكمون لـ Becke-Roussel

نشير إلي أن إذا أخترنا $c = 1$ لدالية بريك جونسن [18] هذا الثابت المختار يتعلق خطيا مع الجذر التربيعي المتوسط لـ $\frac{|\nabla\rho(r)|}{\rho(r)}$.

الشكل المقترح لـ c كالتالي :

$$c = \alpha + \beta\left(\frac{1}{V_{cell}}\int_{cell}\frac{|\nabla\rho(r)|}{\rho(r)}d^3r\right)^{1/2} \qquad (50.\text{I})$$

β و α ثوابت ، V_{cell} حجم الخلية العنصرية للنظام.



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

المراجع :

[1]P. Kireev, La physique des semi-conducteurs, 2e édition, édition Mir. Moscou, (1975).

[2] M. Born, R. Oppenheimer, Ann. Phys. (Leipzig) 84, 87 ,457 (1927).

[3]. R. Hartree, *Proc. Cambridge Phil*. *Soc*. 1928, *24*, 89.

[4] W. Pauli Jr., *Z. Physik,* 1925, *31*, 765

[5] V.Z. Fock, *Z. Phys*. 1930, *61*, 126.

[6] J.C. Slater, *Phys. Rev.*, 1929, *34*, 1293

[7] L. H. Thomas. Proc. Cambridge Philos. Soc 23 (1928) 542.

[8] E. Fermi. Z. Phys 48 (1928) 73.

[9]d.j. singh, plane waves, pseudo-potentential, and lapw method, Kluwer academic publisher, boston ,1994.

[10]S. Cottenier, Density Functional Theory and the family of (L) APW-methods: a stepbystep introduction BelguimAugust 6, 2004.

[11]J.P. Perdew, W. Wang, Phys. Rev. B 45 (13) (1992) 244; P. Blaha, K. Schwarz, P. Sorantin, S.B. Tricky, Chem. Phys. Lett. (1990) 399.

[12] p.a.m. dirac, proc. Cambridge philos.soc. 26,376(1930).

[13] e. wingner, phys.rev.46,1002(1934).

[14]j.p. perdew, a. zunger, phys.rev. b23,5048(1981).

[15] s.h. vosko, l. wilk, and m. nusair, can.j.phys.58,1200(1980).

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

[17]F. Tran and P. Blaha, Phys Rev.Lett 102, 226401 (2009).

[18]A.D. Becke and E. R. Johnson, J. Chem. Phys. 124, 221101 (2006).

الفصل الثاني
طريقة الأمواج
المستوية المتزايدة
خطيا و الكمون الكامل
FP-LAPW

II .1.مقدمة :

توجد عدة طرق لحساب عصابات الطاقة والتي تنقسم إلى ثلاث أقسام رئيسية هي على النحو التالي :

-الطرق التجريبية التي تتطلب حسابتها نتائج تجريبية .

-الطرق شبه التجريبية والتي تتطلب أثناء الحساب نتائج تجريبية ومعطيات أساسية في نفس الوقت .

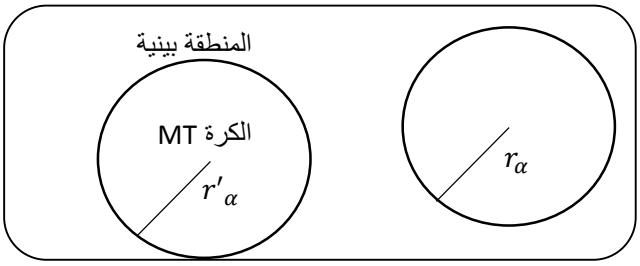
-الطريقة الأساسية التي تتطلب حساباتها معطيات أساسية فقط .

في السنوات الأخيرة ، طور الباحثين طرق حسابات تعتمد بالأساس على مفاهيم نظرية تسمى طرق المبدأ الأول ، من خلالها نستطيع وضع ثلاث مجموعات للطرق لحل معادلة شرودينغر تعتمد على نظرية دالية الكثافة DFT:

- الطرق التي تعتمد على تركيبة خطية للمدرات الذرية (LCAO) [11,12]تستعمل مثلا في العصابات d للمعادن الإنتقالية .
- طرق مشتقة من الأمواج المستوية المتعامدة (OPW) [12,13]وهي الأنسب لعصابات النقل من نوع (S-P) للمعادن البسيطة.
- الطرق الخلوية من النوع أمواج مستوية متزايدة (APW) [14] و طريقة الدالية Green Korring، Kohn و Rostoker (KKR) تنطبق على أكبر مجموعة من المواد.
- طرق الخطية التي وضعها أندرسن [4]: الموجات المستوية المتزايدة خطيا (LAPW) و مدارات « Muffin-Tin » الخطية (LMTO)، تسمح لنا بتوفير كثير من الرتب لهذا المقدار أثناء زمن الحساب

II .2.طريقة APW :

في سنة 1937م نشر سلاتر[1] بحثه المتعلق بطريقة الأمواج المستوية المتزايدة APW ، ولكتابة دالة الموجة الإلكترونات قام بوضع كمون "Muffin-Tin" كتقريب لوصف كمون الشبكة البلورية وذلك بتقسيم الفضاء المحيط بالذرات إلى منطقتين:



الشكل (1.II): كمون « Muffin-Tin » (MT)

المنطقة الأولى (الكرة MT): يتغير فيها الكمون بشدة كبيرة تشمل الأنوية و الإلكترونات شديدة الإرتباط.

المنطقة الثانية (المنطقة البينية) : تشمل الإلكترونات ضعيفة الإرتباط بالأنوية.

حيث تختلف حلول معادلة شرديغر حسب المنطقة المعتبرة :

حلول شعاعية لمعادلة شرودينغر داخل كرة MT :

$$\phi(r) = \sum_{lm} A_{lm} U_l(r) Y_{lm}(r) \qquad r < r_\alpha \qquad (1.II)$$

أمواج مستوية في المنطقة الإقحامية :

$$\phi(r) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_{G} C_G e^{i(\vec{k}+\vec{G})r} \qquad r > r_\alpha \qquad (2.II)$$

Ω يمثل حجم خلية الوحدة.

Y_{lm} الدالة التوافقية الكروية

C_G, A_{lm} معاملات النشر

$\vec{G}$ شعاع الإنتقال في الشبكة المعكوسة

$U_l(r)$ هي الحلول المنتظمة لمعادلة شرودينغر للجزء الكروي (M.T) تكتب كالتالي :

$$\left\{ -\frac{d^2}{d^2 r} + \frac{l(l+1)}{r^2} + V(r) - E_l \right\} r U_l(r) = 0 \qquad (3.II)$$

E_l الطاقة الخطية.

$V(r)$ يمثل الكمون داخل الكرة

تكون الدالة الشعاعية (القطرية) المعرفة في العلاقة السابقة (3.II)متعامدة لكل الحالات الذاتية القلبية داخل الكرة وتنتهي شروط التعامد عند حدودها[2] وتصبح معادلة شرودينغر كالتالي :

$$(E_1 - E_2) r U_1 U_2 = U_2 \frac{d^2 r U_1}{d^2 r} - U_1 \frac{d^2 U_2}{d^2 r} \qquad (4.II)$$

ولضمان إستمرارية الدالة $\phi(\vec{r})$ علي سطح الكرة MT تنتشر المعاملات A_{lm} بدلالة المعاملات C_G الخاصة بالأمواج المستوية في المنطقة الإقحامية وبعد الحسابات الجبرية نجد:

$$A_{lm} = \frac{4\pi i^{l}}{\sqrt{\Omega}U_{L}(r)}\sum_{G} C_{G}J_{l}(|k+g|r_{\alpha})Y_{lm}^{*}(k+G) \qquad (5.II)$$

الدوال الذاتية G تصبح متوافقة مع الدوال الشعاعية في كرة MT بالتالي نتحصل علي دالة أساسية APWs وهي حلول معادلة شرودينغر داخل الكرة MT الموافقة للطاقة E_l أي نتحصل علي عصابة الطاقة الموافقة للمعامل G .

لكن وجدت صعوبة في الدوال $U_l(r_\alpha)$ وذلك لأن في حالة نقصان المعاملات A_{lm} تصبح قيم $U_\alpha(r_\alpha)$ معدومة على سطح الكرة وبالتالي الدوال الشعاعية تكون منفصلة على الدوال الموجية في المنطقة الإقحامية، ولحل هذه المشكلة أدخل كولينغ [3]وأندرسن[4] مجموعة من التغيرات على طريقة APW منها تمثيل الدالة الشعاعية $\phi(r)$ خارج كرة MT بترتيبات خطية $U_l(r)$ مع إمتلاكها مشتقات بالنسبة للطاقة $\dot{U}_l(r)$،سمية بطريقة الأمواج المستوية المتزايدة خطيا $FP-LAPW$.

II .3. مبدأ طريقة FP-LAPW :

قدم أندرسون [4] طريقة الأمواج المستوية المتزايدة خطيا والكمون الكامل FP-LAPW حيث أن الدالة الأساسية في الكرة MT هي عبارة عن مزيج خطي لدالة الشعاعية $U_l Y_{lm}(r)$وأشتقاقها $\dot{U}_l Y_{lm}(r)$بدلالة الطاقة U_l تعرف مثل دالة APW (3. II)، والدالة $\dot{U}_l Y_{lm}(r)$ تخضع لشروط التالية[5] :

$$\left\{-\frac{d^2}{dr^2}+\frac{l(l+1)}{r^2}+V(r)-E_l\right\}r\dot{U}_l(r) = rU_l(r) \qquad (6.II)$$

في الحالة اللانسبية ، الدالة الشعاعية $U_l(r)$ و $\dot{U}_l(r)$ على سطح الكرة (MT) تكون مستمرة مع الموجة المستوية في المنطقة الإقحامية ، إذن دالة الموجة المستوية المتزايدة تصبح دالة أساسية للطريقة FP-LAPW :

$$\phi(\vec{r}) = \begin{cases} \sum_{lm}\left[A_{lm}U_l(r)+B_{lm}\dot{U}_l(r)\right]Y_{lm}(r) & r < r_0 \\ \frac{1}{\sqrt{\Omega}}\sum_{G} C_G e^{i(\vec{K}+\vec{G})\vec{r}} & r > r_0 \end{cases} \qquad (7.II)$$

A_{lm}:هي معاملات الموافقة للدالة $U_l(r)$

B_{lm}:هي معاملات الموافقة للدالة $\dot{U}_l(r)$

الدوال LAPWs هي عبارة عن موجة مستوية وحيدة في منطقة الإقحامية مثل طريقةAPW ، و الدالة الشعاعية يمكن نشرها بالقرب من E_l كالتالي[6] :

$$U_l(E,r) = U_l(E_l,r) + (E - E_l)\dot{U}_l(E_l,r) + 0(E - E_l)^2 \qquad (8.II)$$

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

طريقة LAPW تضمن الإستمرار دالة الموجة علي سطح كرة MT .

الطريقة FP-LAPW تدخل خطأ على الدالة الموجية من رتبة $(E - E_l)^2$ وأخرى على عصبات الطاقوية من رتبة $(E - E_l)^4$ بالرغم من رتبة هذا الخطأ الدوال LAPWs تشكل قاعدة جيدا، التي تسمح لنا بالطاقة E_l واحد نتحصل على كل عصبات تكافؤ في أكبر منطقة طاقوية.

II .4. دور الطاقة الخطية E_l:

الدوال U_l و U_l^* متعامدتان مع الحالات القلبية علي سطح كرة MT لكن هذه شروط ليست كافية عندما تكون الحلات القلبية موافقة لنفس القيمة l ، ومن جهة أخري نأخذ الخلط بين الحالات نصف قلبية مع حالة التكافؤ ، فهو غير معالج في الطريقة APW ، لذلك يجب إختيار الطاقة E_l بدقة للدوال الغير متعامدة مع أي حالة من حلات إلكترونات القلبية وذلك في طريقة FP-LAPW ، ولهاذا يجب تغير E_l لإجراء الحساب، ولحل أحسن نستخدم النشر على المدارات الموضع مع أخذ أكبر نصف قطر ممكن لـMT ،لإجراء حساب دقيق للبنية الإلكترونية يجب ملاحضة إختلاف 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، و التي هي تنشرعلى شكل دالة شعاعية داخل كرة MT، تحت شرط أن الدوال الأساسية لها اشتقاق يكون مستمر على سطح كرة MT فبنية الدوال الأساسية للطريقة FP-LAPW تصبح تحدد بـ:

1-دوال شعاعية $U_l(r)$ و مشتقتها بالنسبة للطاقة $\dot{U}(r)$

2-المعاملاتB_{lm}, A_{lm} تكفي لتحقيق الشروط الحدودية من أجل إجراء الحساب في القطع المغلق Cutoff و أخذ العزم الزاوي L_{max} ، و لتمثيل القطع المغلقG_{max} يمثل أكبر طول للموجات المستوية خارج الكرة (MT) من أجل نصف قطر الكرةR_α

- استراتجيا نختار القطع المغلق Cutoff لضمان التقارب في طريقةFP-LAPW .

II .6. الدوال الشعاعية اللانسبية :

في الحالة اللانسبية الدوال الشعاعية $U_l(r)$ تكون حلول معادلة شرودينغر التالية للكمون الكروي والطاقة الخطيةE$_l$.

$$\left\{-\frac{d^2}{dr^2}+\frac{l(l+1)}{r^2}+V(r)-E_l\right\}rU_l(r)=0 \qquad (9.II)$$

أين$V(r)$ هو الكمون الكروي لكرة(MT) .

الإشتقاق بالنسبة للطاقة $\dot{U}_l(r)$:

$$\left\{-\frac{d^2}{dr^2}+\frac{l(l+1)}{r^2}+V(r)-E_l\right\}r\dot{U}_l(r)=rU_l(r) \qquad (10.II)$$

تقنين الحلول الشعاعية $U_l(r)$ و$\dot{U}_l(r)$:

$$\int_0^{R_\alpha} r^2U_l^2(r)dr=1 \qquad (11.II)$$

الدالة $\dot{U}_l(r)$ تكون مقننة.

$$N_1\equiv\int_0^{R_\alpha} r^2U_l^2(r)dr \qquad (12.II)$$

شروط التقنين في طريقةFP-LAPW يمكن تعويضها بالمعادلة التالية:

$$R_\alpha^2\left[U_l'(R_\alpha)\dot{U}_l(R_\alpha)-U_l(R_\alpha)\dot{U}_l'(R_\alpha)\right]=1 \qquad (13.II)$$

مع أن

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

هذه المعادلة تستخدم في حل عدديا الدوال U_l و $\dot{U}_l$ ، بالتقنين نستطيع كتابة U_l علي الشكل التالي:

$$U_l(E+\delta)=U_l(E)+\delta\dot{U}(E)+\cdots\cdots \qquad (14.II)$$

مع إختيار تقنين $\dot{U}_l(r)$ أي $\left\|\dot{U}_l(r)\right\|$ يشير لرتبة عرض الطاقة E_l ، الخطأ على الطاقة الخطية يكون مقبول حسب أندرسن.

$$\left\|\dot{U}(r)\right\|.|E_l - E| \leq 1 \qquad (15.II)$$

إذاكان هذا الإختيار غير ممكن نلجأ إلي :

1-يقسم المجال الطاقي إلى نوافذ وتعالج كل نافذة طاقية مفصولة.

2-نستخدم النشر علي مواضع المدارات(هذا في الواقع طريقة الدرجة الثانية).

3-تقليل من الحجم يعني تقليل من تقنين المشتقة.

II .7.بنية الدوال الشعاعية :

في حالة العناصر الثقيلة لديها عدد الذرى كبير ، نأخذ بعين الإعتبار تأثير النسبي.

حيث أن التأثيرات النسبية تدخل فقط في الدالة الشعاعية داخل الكرة (MT) ، ولإدخال هذا التأثير يجب إستبدال المعادلة (9.II) و (10.II) بالمعادلة لدراك وإشتقاقها بالنسبة للطاقة تقنيا عدة علماء تعرضو [7,4]لحل معادلة ديراك بإهمال تأثير فعل سبين-مدار وإدراجه فيما بعد.

حل معادلة ديراك:

$$\psi_{kv} = \begin{bmatrix} g_k x_{kv} \\ -if\sigma_r x_{kv} \end{bmatrix} \qquad (16.II)$$

K : عدد كوانتي نسبي

x_{kv}: سبين-مدار لمركبين و الأحداثية الشعاعية تمت إزالته . Koelling-harmon [15] إستعمل دالة جديدة:

$$\phi_k = \frac{1}{2MC} g'_k \qquad (17.II)$$

مع:

$$M = m + \frac{1}{2C^2}(E - V) \qquad (18.II)$$

حيث أن g'_k مشتق الشعاعي لـ g_k ، m الكتلة و C سرعة الضوء في الفراغ.

الحل بدلالة العدد الكوانتي كالتالي :

$$\phi_{lms} = \left[\frac{i}{2MC}\sigma_r \begin{pmatrix} g_l Y_{lm} x_s \\ -g'_l + \frac{1}{r} g_l \sigma \end{pmatrix} Y_{lm} x_s\right] \qquad (19.II)$$

حيث x_s : سبين-مدار اللانسبية.

بتحديد $p_l = rg_l$ و $P_l = rC\phi_l$ المعادلة السلمية النسبية تصبح:

$$p'_l = 2MQ + \frac{1}{2}p_l \qquad (20.II)$$

$$Q'_l = -\frac{1}{2}Q + \left[\frac{l(l+1)}{2Mr^2} + (V - E_l)\right]p_l \qquad (21.II)$$

هذه المعادلة الأخيرة يمكن حلها عدديا كما هو الحال بالنسبة لمعادلة شرودينغر اللانسبية بإستخدام طريقة إعطاء شروط الحدودية.

$$\lim_{r\to 0}\frac{Q}{p} = C\frac{1}{(2Z/C)}\left[l(l+1) + 1 - (2Z/C)^{1/2} - 1\right] \qquad (22.II)$$

عبارة سبين-مدار تأخذ من العبارة $(20.II)$. الإشتقاق بالنسبة الطاقة مشابهة لحالة اللانسبية.

$$\dot{P}_l = 2\left(\dot{M}Q_l + M\dot{Q}_l\right) + \frac{1}{r}\dot{p}_l \qquad (23.II)$$

$$\dot{Q}_l = -\frac{1}{r}\dot{Q}_l\left[\frac{l(l+1)}{2Mr^2} + (V - E_l)\right]\dot{p}_l - \left[\frac{l(l+1)\dot{M}}{2M^2r^2} + 1\right]p_l \qquad (24.II)$$

تحديد الدوال g_l و f_l من الحل Q_l وP_l ، نفس الدوال تستعمل من أجل حساب كثافة الشحنة و عناصر المصفوفة . وهكذا U_l^2 تستبدل في المعادلة $(11.II)$ بالعبارة $g_l^2 + f_l^2$.

II .8.حل معادلة Poisson :

في معادلة K.S الكمون المستخدم كمون تبادل-إرتباط وكمون كولوم (مجموع كمون هرتري و كمون النواة).

بإستخدام معادلة بواسون. يمكن تحديد كمون كولوم:

$$\nabla^2 V_C(\vec{r}) = 4\pi\rho(\vec{r}) \qquad (25.II)$$

تكامل هذه المعادلة يكون وفقط ممكن في فضاء الشبكة المعكوسة ، ولهذا هيومان [8] وفينر [9] إقترحو طريقة للحل تسمى شبه-الشحنة وتتركز على ملاحظتين :

1- كثافة الشحنة مستمرة وتتغير ببطئ في المنطقة الإقحامية وسريعة جدا داخل الكرة

2- كمون كولوم في المنطقة الإقحامية لايتعلق فقط بشحنة هذه المنطقة لكن أيضا شحنة داخل الكرة.

في المنطقة الإقحامية كثافة الشحن تنشر كسلسلة فوريه:

$$\rho(\vec{r}) = \sum_{G} \rho(\vec{G}) e^{i\vec{G}\vec{r}} \qquad (26.II)$$

دوال الموجة e^{iGr} تحسب إنطلاقا من معادلة باسل j_e

$$\int_0^R r^{l+2} j_l(\vec{G}\vec{r}) d\vec{r} = \begin{cases} R^{l+3} \dfrac{j_l(\vec{G}\vec{r})}{Gr} & G \neq 0 \\ \dfrac{R^3}{3}\sigma_{l,0} & G = 0 \end{cases} \qquad (27.II)$$

$$e^{i\vec{G}\vec{r}} = 4\pi e^{i\vec{G}\vec{r}_\alpha} \sum_{lm} i^l j_l\left(|\vec{G}||\vec{r} - \vec{r}_\alpha| Y_{lm}^*(\vec{G}) Y_{lm}(\vec{r} - \vec{r}_\alpha)\right) \qquad (28.II)$$

حيث :

r إحداثية الشعاعية و r_α موضع الكرة α .

الكمون كولوم يصبح:

$$V_C(\vec{G}) = \frac{4\pi\rho(\vec{G})}{G^2} \qquad (29.II)$$

نكامل المعادلة (29.II) فنجد:

$$V_{PW} = \sum_{lm} V_{lm}^{PW}(r) Y_{lm}(r) = \sum_{V} V_V^{PW}(r) K_V(r) \qquad (30.II)$$

حيث أن V_{PW} كمون المنطقة الأقحامية.

و $K_V(r)$ يعطى بالعلاقة :

$$K_V(r) = \sum_m C_{lm} Y_{lm}(r) \qquad (31.II)$$

بإستخدام معادلة غرين نقوم بحساب الكمون داخل كرة MT :

$$V_V(r) = V_{lm}^{PW}(r)\left[\frac{r}{R}\right] + \frac{4\pi}{2l+1}\left\{\frac{1}{r^{l+1}}\int_0^x dr' r'^{l+2}\rho_V(r') + r^l\int_x^R dr' r'^{l-1}\rho_V(r') - \frac{r^l}{R^{2l+1}}\int_0^{R_x} dr' r'^{l+2}\rho_V(r')\right\} \qquad (32.II)$$

حيث: $\rho_V(r')$ يمثل الجزء الشعاعي لكثافة الشحنة.

II .9.تحسين طريقة $(FP-LAPW)$:

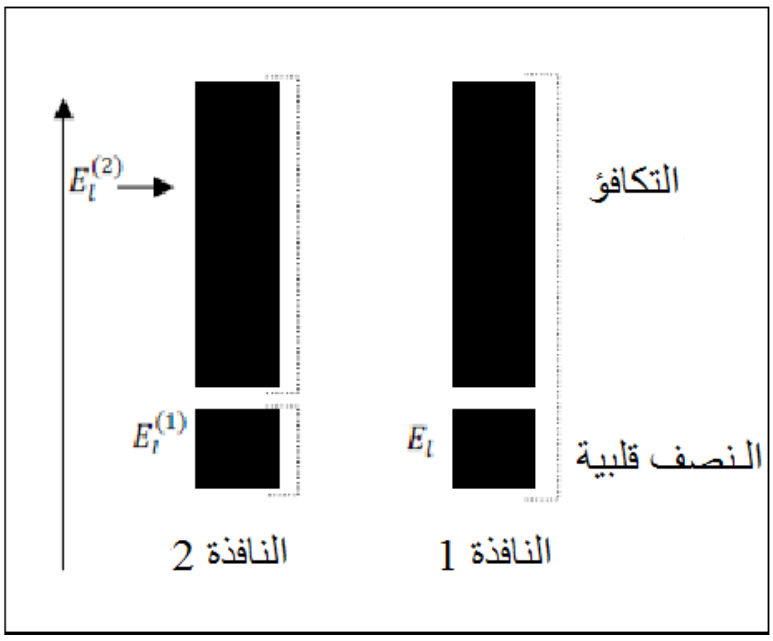
الطاقة الخطية E_l مهمة جدا في طريقة $(FP-LAPW)$ ، لأنه بالقرب من E_l نحسب عصابة الطاقة بدقة .أما في الحالات النصف قلبية التي تكون بين الحالات القلبية وحالات التكافؤ يوجد مشكل أساسي ولحله نستعمل طريقتين :

-إستعمال نوافذ الطاقة المضاعفة.

-إستخدام النشر على مدار الموضع.

II .1.9.نوافذ الطاقة المضاعفة :

التقنية المستعملة لمعالجة مشكلت حالات نصف قلبية بتقسيم الطيف الطاقوي إلى نوافذ والتي تكافئ الطاقة E_l [4] .هذه التقنية موضحة في الشكل (**2. II**).



الشكل(**2. II**) : عدة نوافذ طاقية

تعالج هذه المسألة بإختيار أي نافذة للحالة المكافئة و ذلك للفصل بين حالات التكافؤ و النصف قلبية.

II .2.9.النشر على المدارات الموضعية :

النشر في طريقة $FP - LAPW$ في المدارات الموضعية وذلك بتغير المدارات الأساسية من أجل تجنب إستعمال عدة نوافذ للطاقة، وهكذا يتم إجاد مجموعة عصابات الطاقة إنطلاقا من نافذة واحدة.

Singh أعطي للمدار الرمز"Lo" [10] لديه شكل مركب خطي لدالتين شعاعيتين مسؤولة عن طاقتين مختلفتين و الإشتقاق بالنسبة للطاقة لهذه الدوال :

$$\phi_{im} = \begin{cases} 0 & r > r_\alpha \\ \left|A_{im}U_i(r,E_{1,l}) + B_{im}\dot{U}_l(r,E_{1,l}) + C_{lm}U_l(r,E_{2,l})\right|Y_{lm}(r) & r < r_\alpha \end{cases} \quad (33.II)$$

المعامل C_{lm} هي من نفس طبيعة المعاملات A_{lm} و B_{lm}.

II .9 برنامج Wien2K :

في عملنا استخدمنا طريقة FP-LAPW ، المدمجة في برنامج Wien2K [16]حيث يشمل برامج فرعية منفصلة الشكل (3.II) :

NN: هذا البرنامج يحدد المسافة بين جوار الأقرب لذراة كما يساعد في إجاد نصف القطر الذري للكرة

LSTART : برنامج يولد الكثافة الذرية ويحدد كيفية التعامل مع المدرات المختلفة في حساب عصبات الطاقة

SYMMETRY: فهو يولد عملية التناظر في الجملة ، يحسب المجموعة النقطية لمواقع الخاصة بالذرات يولد المعامل الأساسي لتوافقية الشبكة وحساب مصفوفة الدوران الموضعي.

KGEN : يولد الشبكة k في منطقة بريلون

DSTART : يولد كثافة إنطلاق لدورة SCF المنتجة من الكثافة الذرية والمولدة من LASTART.

يقوم بتهئة الحساب و التكراره إلى غاية الوصول لتقريب المطلوب. وهي منسقة في الخطوات التالية :

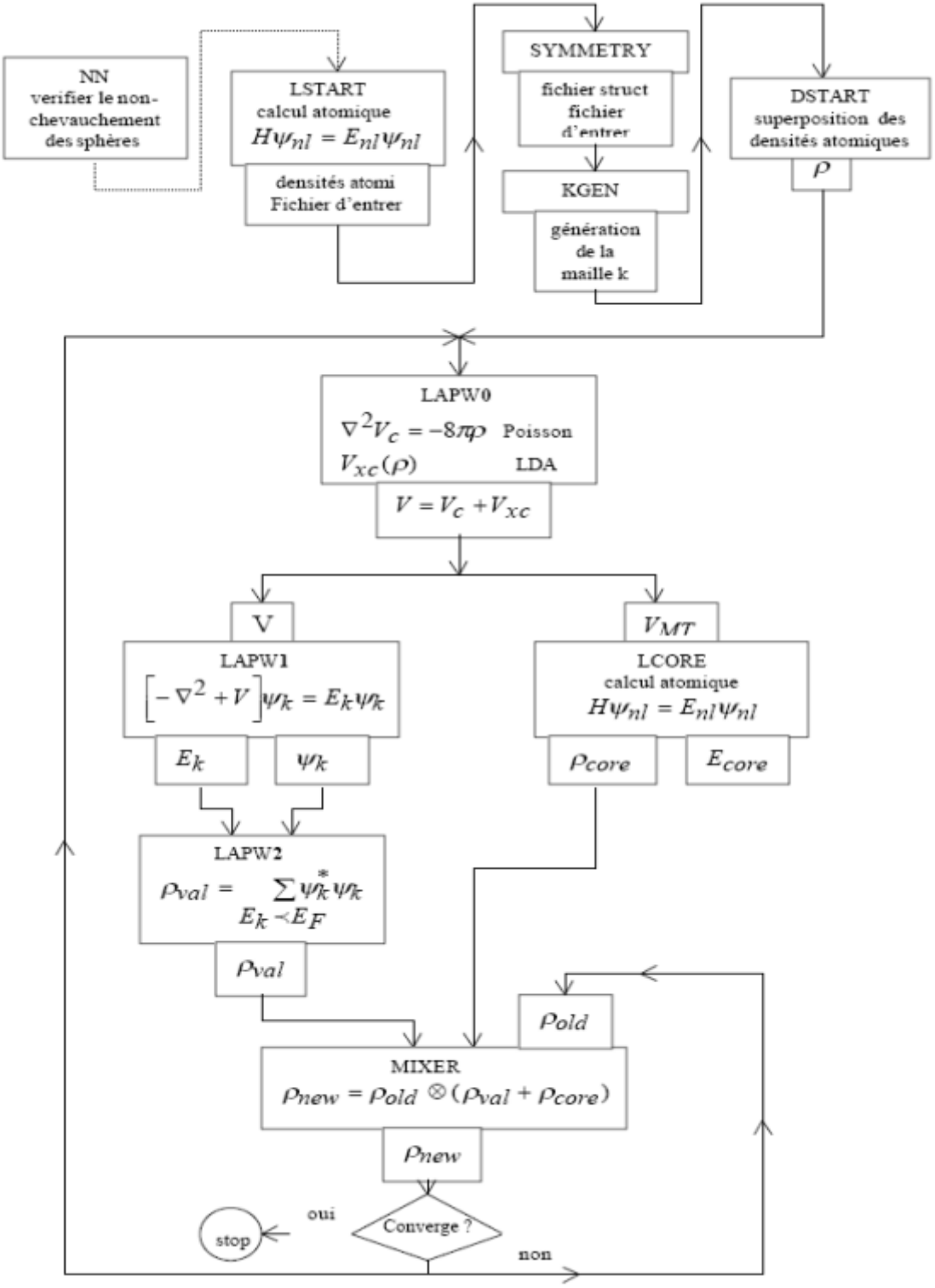
LAPW0 : يولد كمون إنطلاقا من الكثافة.

LAPW1 : حساب عصابة التكافؤ ، القيم الذاتية والأشعة الذاتية.

LAPW2 : حساب كثافة التكافؤ من الأشعة الذاتية.

LCORE : حساب الحالات القلبية والكثافة.

MIXER : يخلط الكثافة الداخلة و الخارجة.



الشكل (3.II) : بنية برنامج Wien2K

المراجع:

[1] J. C. Slater, Advances in Quantum Chemistry 1,35 (1964).

[2] T. L. Loucks, « The Augmented Plane Wave Method », Benjamin, New York (1967).

[3] D. D. Koelling and G. O. Arbman, j. phys. F5, 661 (1979).

[4] O. K. Andersen, phys. Rev. B 12, 3060 (1975).

[5] M. B. Kanoun, Thése de doctorat, université de Tlemcen (2004).

[6] S. Cottenier, ISBN 807215 (2002) 90.

[7] J.H. Wood and A.M. Boring, Phys. Rev. B18 (1978) 2701.

[8] D. R. Hamann, Phys. Rev. Lett. 42 (1979) 662.

[9] M. Weinert, J. Math. Comp. 17 (1963) 2433.

[10] D. Sigh and H. Krakauer, Phys. Rev. B 43 (1991) 1441.

[11]F. Bloch, Z.Phys. 52, 555 (1928).

[12]J. C. Slater « Quantum Theory of Molecules and solids », V2, Ch.8 (1965).

[13] C.Herring, Phys.Rev. 57,1169 (1940).

[14] J.C.Slater, Phys.Rev.51, 846 (1937).

[15] D.D. Koelling and G.O. Arbman, Phys.Rev. B 33 (1986) 823.

[16] P. Blaha, K. Schwarz, G. K.H Madsen, D. Kvasnicka and J. Luitz, WIEN2K, an augmented plane-wave+local orbitals program for calculating crystal properties (Karlheinz Schwarz, Techn.Universitat Wienna, Austria), 2001.ISBN 3-9501031-1-2.

الفصل الثالث
النتائج و المناقشة

1.III . مقدمة :

الهدف من هذا الفصل هو دراسة الخصائص البنيوية (ثابت الشبكة $a(A^{\circ})$ ، معامل الإنضغاطية β والمشتقة الأولى لهذا المعامل β') ، الخصائص الإلكترونية (بنية عصابات الطاقة، كثافة الحالات الكلية و الجزئية)، الخصائص المغناطسية و الخصائص الميكانيكية لمركبات هسلر CoMnTiAs , CoMnTiAl و CoMnVAs .

تم الحصول على النتائج في سياق نظرية دالية الكثافة DFT وذلك بإستخدام طريقة الموجة المستوية المتزايدة خطيا و الكمون الكامل (FP-LAPW)[1] و المدمجة في برنامج wien2k [2].حيث أنه لحساب كمون تبادل-إرتباط أستخدمنا التقريبين التاليين :

تقريب التدريج المعمم (GGA) [3]، ومن أجل حصول علي نتائج جيدا حول الخصائص الإلكترونية وتحسين المانع الطاقي نستعمل تقريب المعدل لبيك-جونسون [4](mBJ).

كما أخذ التقريب النسبي لدالة الموجة داخل كرة (M.T) ، مع الأخذ بعين الإعتبار العزم الزاوي

$L_{max} = 10$.

2.III .البنية البلورية للمركبات (Y=Ti, V و Z=Al, As) CoMnYZ :

مركبات CoMnTiAl ، CoMnTiAs و CoMnVAs تتبلور في بنية مكعب ممركز الأوجه CFC مع تناظر F-43m (زمرة فراغية 216) كما هو موضح في الشكل (1.III). يوجد ثلاثة أنماط مختلفة تنتظم فيهم الذرات في مركبات هسلروهي كالتالي [5]:

Y-type1 : Co (0,0,0), Mn (0.25,0.25,0.25), Y (0.50,0.50,0.50), Z (0.75,0.75,0.75)

Y-type2 : Co (0,0,0), Mn (0.50,0.50,0.50), Y (0.25,0.25,0.25), Z (0.75,0.75,0.75)

Y-type3 : Co (0,0,0), Mn (0.25,0.25,0.25), Y (0.75,0.75,0.75), Z (0.50,0.50,0.50)

التوزيع الإلكتروني لكل عنصر كيميائي هو :

$1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2\ 3p^6\ 3d^7\ 4s^2$: $[Co]$

$1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2\ 3p^6\ 3d^5\ 4s^2$: [Mn]

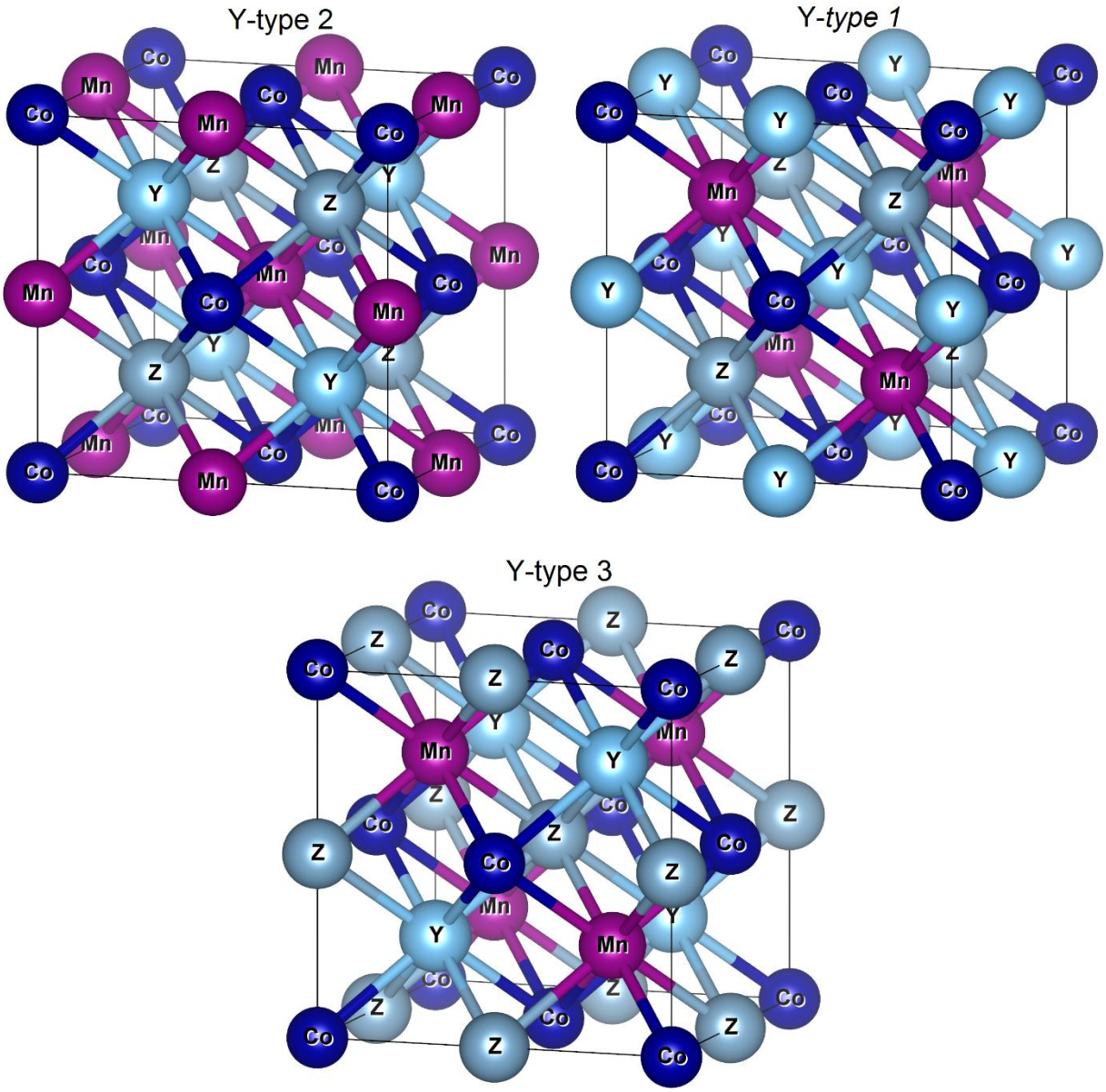
$1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2\ 3p^6\ 3d^2\ 4s^2$: [Ti]

$1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2\ 3p^6\ 3d^3\ 4s^2$: [V]

$1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2\ 3p^1$: [Al]

$1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2\ 3p^6\ 3d^{10}\ 4s^2\ 4p^3$: [As]

تمثيل البنية البلورة لـ CoMnYZ هو :



الشكل (1.III): البنية البلورية للمركبات $\mathbf{CoMnYZ(Y = Ti, V}$ و $\mathbf{Z = Al, As)}$ من أجل الأنماط الثلاث.

أول خطوة في الحساب هي إيجاد القيم التالية :

- إختيار قيمة R_{mt} (نصف قطر الكرة MT) لذرات Co, Mn, Ti, Al, V و As يعتمد على شرطين أساسيان:

1- تجنب تداخل كرة (MT) .

2- يجب أن تكون أغلبية الإلكترونات القلبية داخل الكرة (MT)

- معامل $R.K_{max}$ يعطى بالعلاقة :

$$R.K_{max} = R_{MT}^{min} * K_{max} \qquad (1 - III)$$

R_{MT}^{min} : أصغر قطر للكرة MT

K_{max} : الشعاع الناضمي للموجة المستوية.

- K_{point} تعرف على أنها عدد النقاط K في منطقة بريليون الأولى.

في الجدول (1.III) تم إختيار أنصاف الأقطار كرة (MT) وإنتقاء إختباري للنقاط الخاصة ($R_{MT*}K_{max}$)، (K_{point}) حسب تقريب GGA و ذلك بإستخدام الحساب الذاتي SCF للمركبات CoMnTiAl ، CoMnTiAs و CoMnVAs في الأنماط الثلاثة.

R_{mt}(Z)	R_{mt}(Y)	R_{mt}(Mn)	R_{mt}(Co)	K_{point}	$R_{mt}*K_{max}$	النمط	المركبات
2,15	2,27	2,33	2,33	1000	8,5	1	CoMnTiAl
				1000	8,5	2	
				1000	8,5	3	
2,26	2,26	2,38	2,38	1000	8,5	1	CoMnTiAs
				1000	8,5	2	
				1000	8,5	3	
2,24	2,24	2,29	2,29	1000	8,5	1	CoMnVAs
				1000	**8,5**	**2**	
				1000	**8,5**	**3**	

الجدول (1.III): قيم كل من R_{mt}, K_{point} , $R_{mt}*K_{max}$ للمركبات CoMnYZ (Y=Ti,V و Z=Al ,As)

3.III .الخصائص البنيوية :

1.3.III .إيجاد ثوابت البنية :

لقد تم حساب طاقات الحالة الأساسية كدالة لحجم الخلية للمركبات CoMnTiAl ، CoMnTiAs و CoMnVAs في حالة سبين و بدون سبين في التقريب GGA والمبينة في الجدول (2.III).

لحساب ثابت الشبكة البلورية a(A°) إستخدمنا معادلة الحالة لمرنقهان[6] تعطى بـ:

$$E(V) = E_0 + \frac{B}{B'(B'+1)}\left[V\left(\frac{V_0}{V}\right)^{B'} - V_0\right] + \frac{B}{B'}(V - V_0) \qquad (2-III)$$

V_0 : حجم الحالة الأساسية

E_0: طاقة الحالة الأساسية المسؤولة عن الحجم V_0.

β : معامل الإنضغاطية ويعرف بالعلاقة التالية :

$$\beta = V\frac{\partial^2 E}{\partial V^2} \qquad (3-III)$$

B' : المشتقة الأولى لمعامل الإنضغاطية :

$$\beta' = \frac{\partial B}{\partial P} \qquad (4-III)$$

في حالة الإتزان نجد ثابت الشبكة يوافق القيمة الحدية الدنيا للطاقة.

النتائج المتحصل عليها لثابت الشبكة البلورية a(A°) ، معامل الإنضغاطية β والمشتقة الأولى لمعامل الإنضغاطية β' مسجلة في الجدول رقم (2.III).

المركب	الثوابت	GGA						القيم النظرية
		سبين			بدون سبين			
		النمط 1	النمط 2	النمط 3	النمط 1	النمط 2	النمط 3	
CoMnTiAl	a(A°)	6,0142	5,8718	6,0405	5,9167	5,8598	5,9286	5,86[7]
	β(Gpa)	132,2213	179,512	133,7122	153,6001	179,911	168,0608	
	β'	4,512	4,6706	4,9354	5,4928	4,4155	4,222	
	E_{min}(Ry)	-7297,6	-7297,67	-7297,62	-7297,56	-7297,67	-7297,55	
CoMnTiAs	a(A°)	5,9199	5,8476	5,8479	5,9942	5,8429	5,9059	5,83[7]
	β (Gpa)	173,8885	207,0688	206,5953	142,1707	200,3173	183,7787	
	β'	5,3372	6,0269	5,8847	5,464	5,8027	5,4553	
	E_{min}(Ry)	-11334,1	-11334,2	-11334,2	-11334,1	-11334,2	-11334,1	
CoMnVAs	a(A°)	5,8875	5,7685	5,8773	5,7959	5,7692	5,7964	5,77[7]
	β (Gpa)	153,5222	234,2336	124,2855	203,6643	214,272	222,336	
	β'	5,1749	11,3564	4,6135	5,2375	5,6959	6,2137	
	E_{min}(Ry)	-11525,2	-11525,1	-11525,1	-11525,1	-11525,1	-11525,1	

الجدول (2.III) : قيم كل من ثابت الشبكة a(A°) و معامل الإنضغاطية β و المشتقة الأولى لمعامل الإنضغاطية β′ ، للمركبات CoMnTiAl ، CoMnTiAs و CoMnVAs .

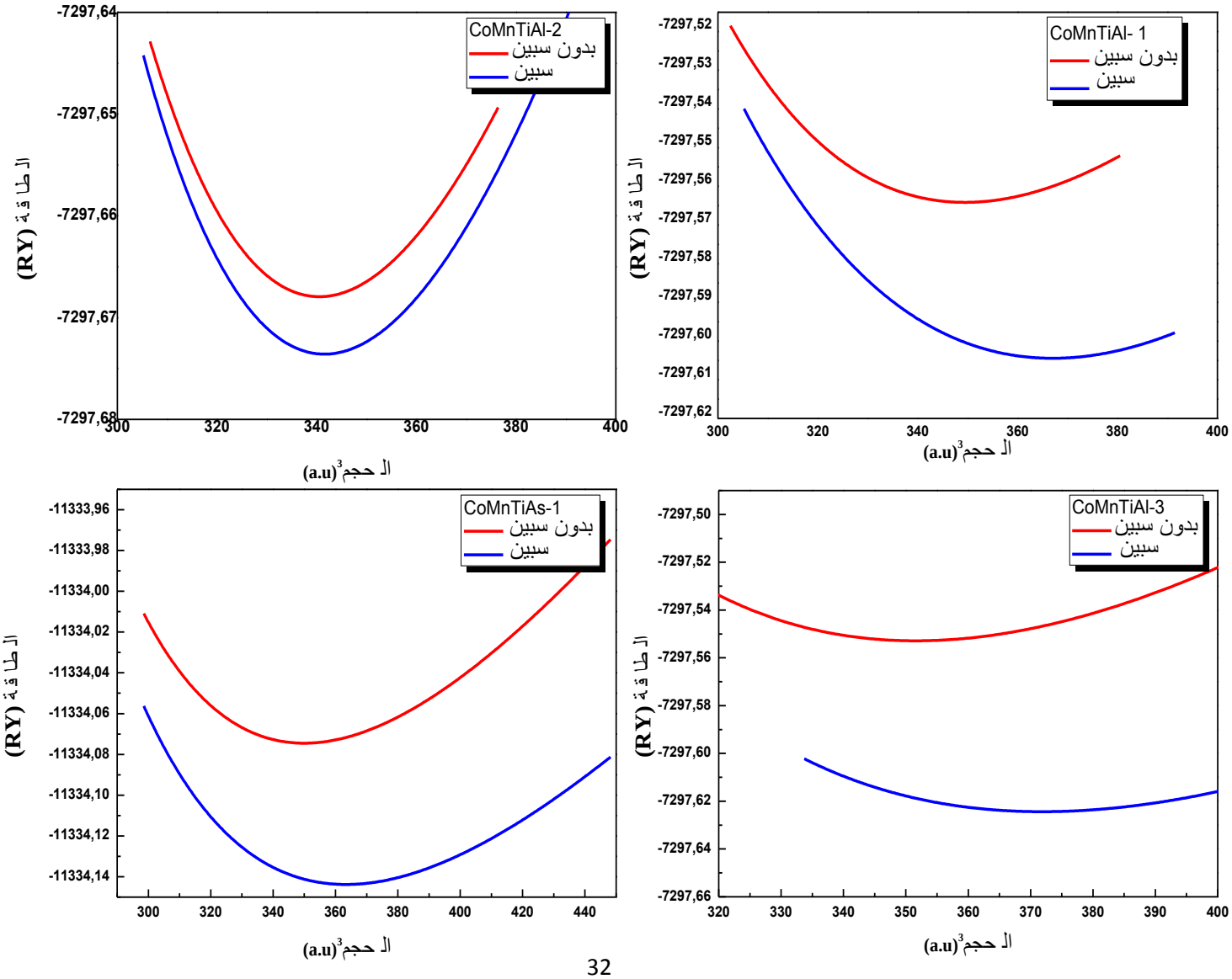
وكانت النتائج المتحصل عليها كالتالي :

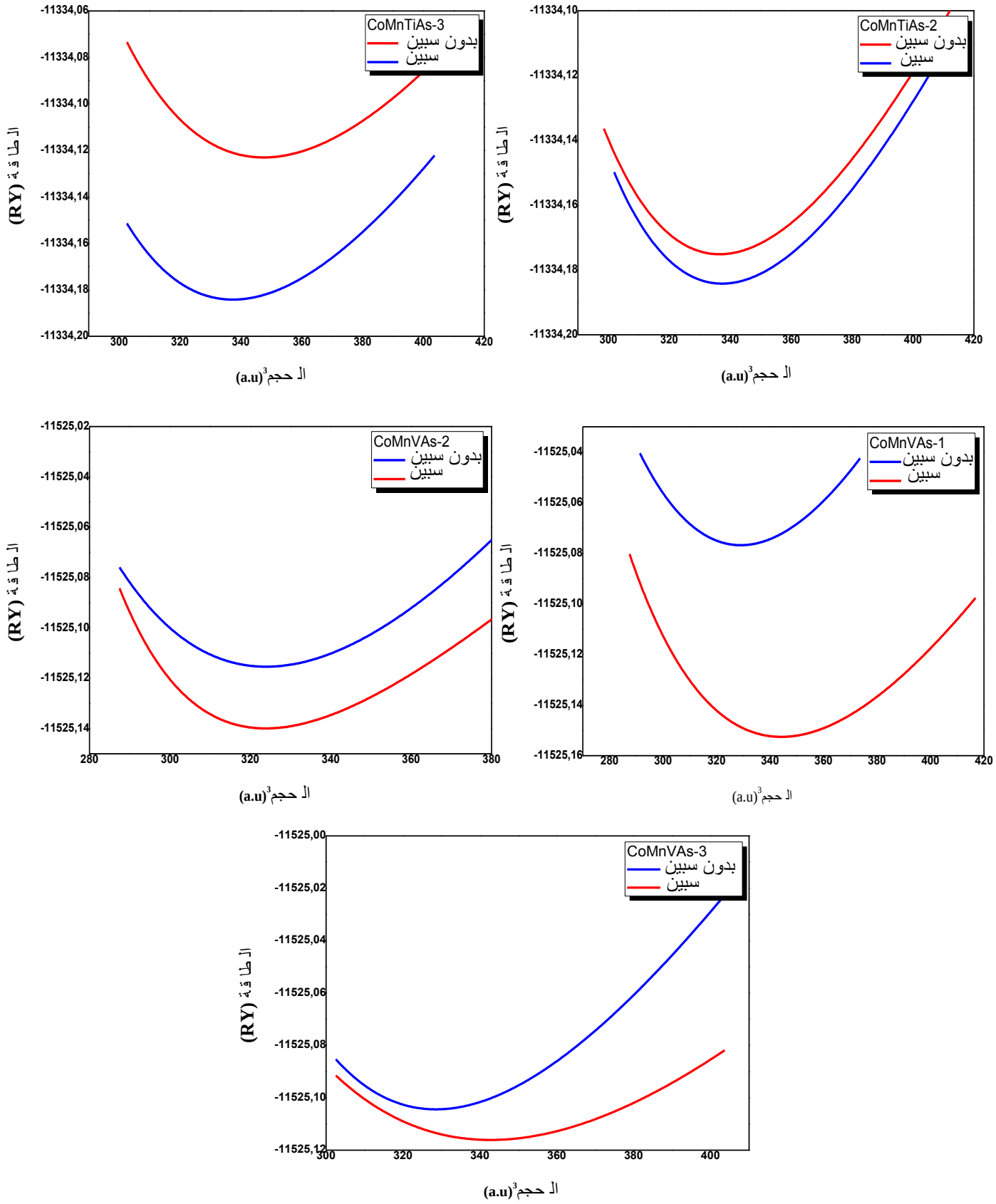
- بالنسبة للمركبات CoMnTiAl ، CoMnTiAs و CoMnVAs كانت نتائج الشبكة البلورية a(A°) جيدة بالمقارنة مع القيم النظرية وخاصة النمط 2
- عند إستبدال الذرة Al بالذرة As نلاحظ تناقص في ثابت الشبكة البلورية وزيادة معامل الإنضغاطية
- أما عند إستبدال الذرة V بالذرة Ti نلاحظ زيادة في ثابت الشبكة البلورية.

2.3.III . دراسة إستقرار المركبات CoMnYZ (Y=Ti, V وZ=Al, As) :

1.2.3.III .الإستقرار في حالة (سبين/ بدون سبين) :

قمنا بحساب الطاقة الكلية بدلالة الحجم من أجل المركبات CoMnYZ (Y=Ti, V و Z=Al, As) ، بإستعمال تقريب GGA في حالة إستقطاب (سبين/ بدون سبين) من الشكل (2.III) نجد أن الحالة الأكثر إستقرارا هي حالة سبين (مغناطيسية) .

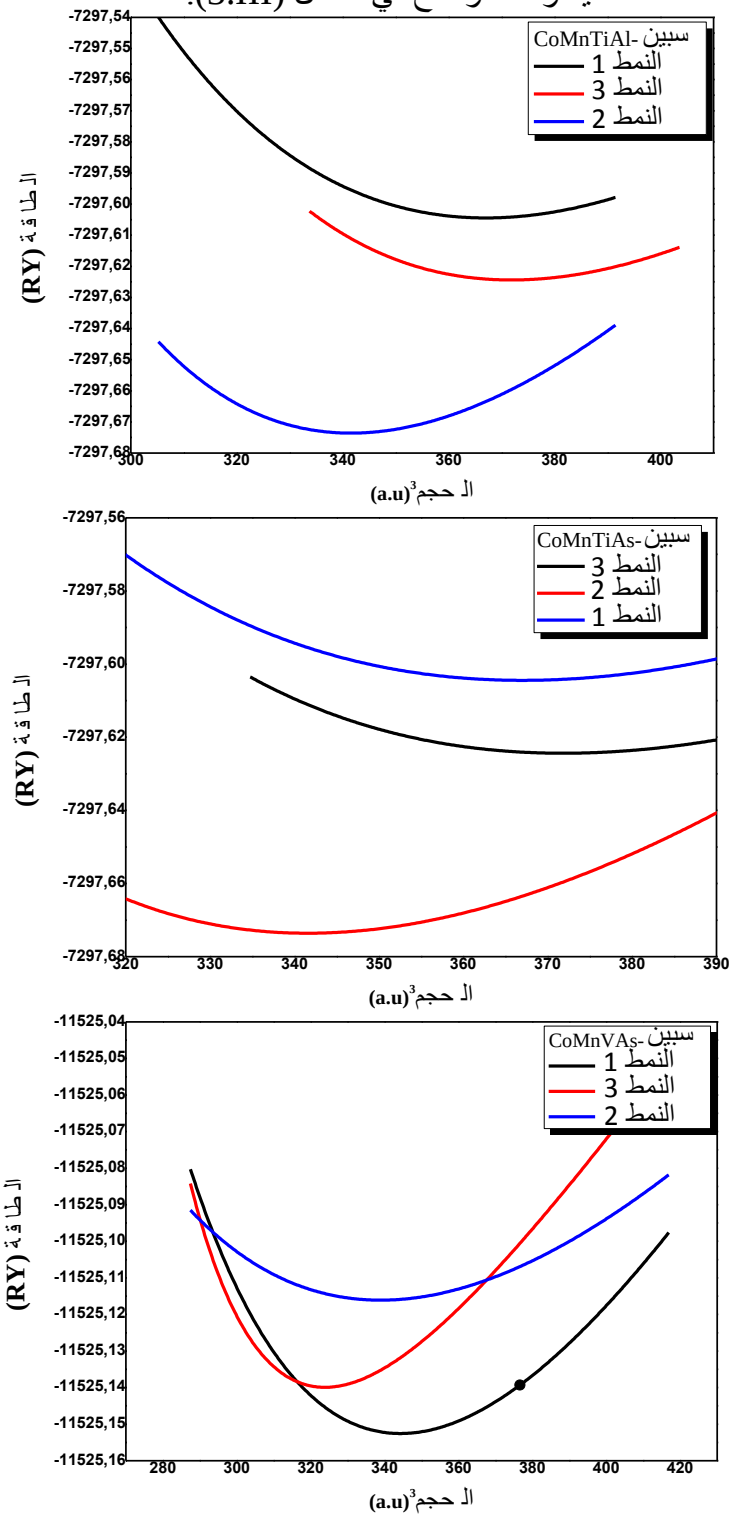




الشكل (2.III): تغير الطاقة الكلية بدلالة الحجم للمركبات CoMnTiAl ، CoMnTiAs و CoMnVAs في الأنماط الثلاث

2.2.3.III . الإسقرار بين الأنماط الثلاثة في كل مركب :

بدراسة الطاقة الكلية بدلالة الحجم لإجاد النمط الأكثر إستقرارا للمركبات CoMnTiAl ، CoMnTiAs و CoMnVAs في الحالة المغناطسية و هذا موضح في الشكل (3.III).



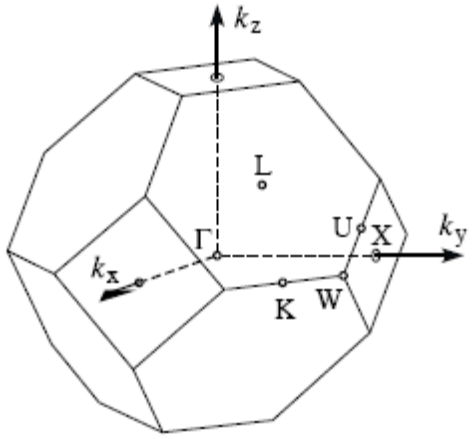
الشكل (3.III): تغير الطاقة الكلية بدلالة الحجم للمركبات CoMnYZ (Y=Ti, V و Z=Al, As) محسوبة بطريقة GAA

من الشكل (3.III) نجد أن المركبين CoMnTiAl ، CoMnTiAs هما أكثر إستقرارا في النمط 2 أما المركب CoMnVAs فهو مستقر في النمط 1.

4.III .الخصائص الإلكترونية:

أهمية الخصائص الإلكترونية في المادة ، تسمح لنا بتحليل و فهم طبيعة الروابط التي تتشكل بين العناصر المختلفة للمادة ، وتشمل هذه الخصائص (عصابات الطاقة ، كثافة الشحنة و كثافة الحالة).

هذه العصابة تمثل في المنطقة بريليون الأولى للبنية CFC (F-43m) بالشبكة المعكوسة وفق خطوط واصلة بين النقاط عالية التناظر موضحة في الشكل(4.III):



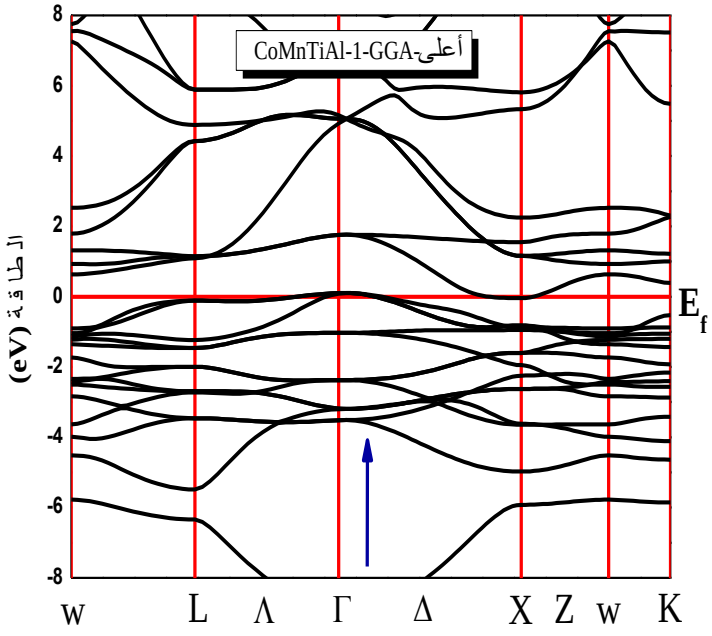
الشكل (4.III): يمثل المنطقة بريليون الأولى (CFC)

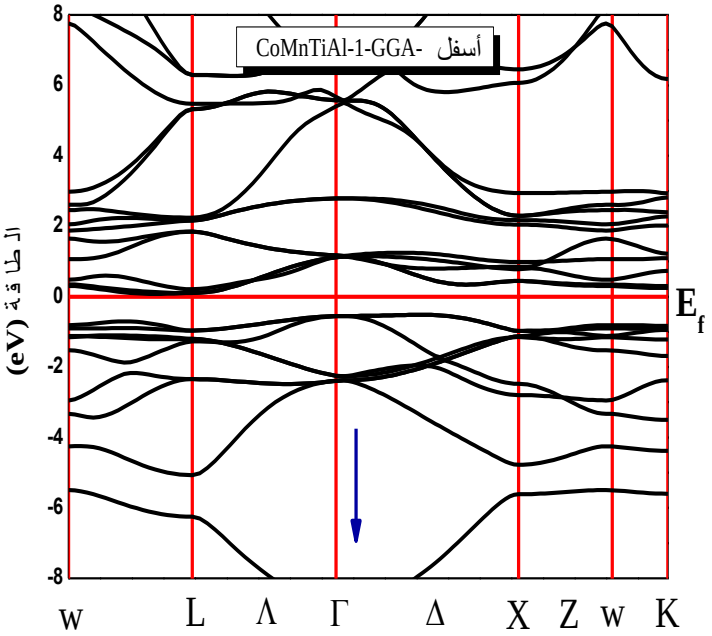
1.4.III .عصابة الطاقة :

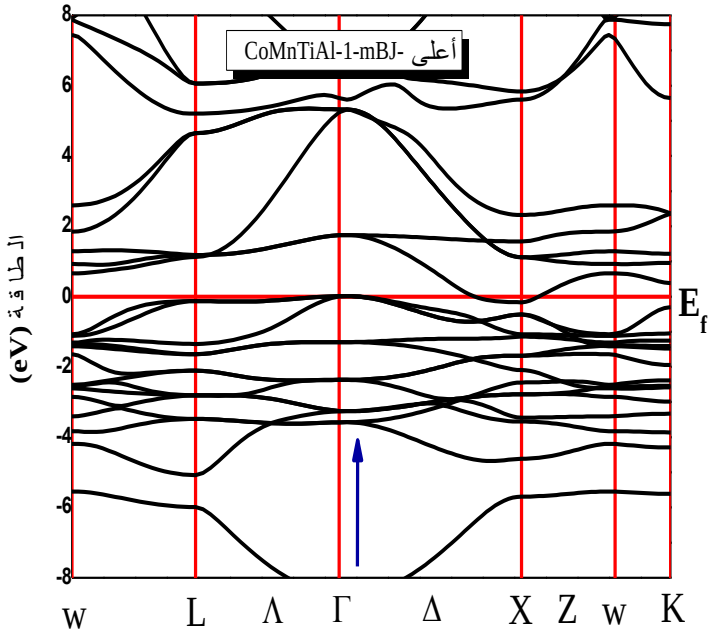
نقوم بدراسة تغيرات الطاقة للإلكترون بدلالة الشعاع الموجي K في الفضاء المعكوس ، لإجاد المانع الطاقي اللذي يمثل الفرق بين القيمة الحدية العظمى لعصابة التكافؤ والقيمة الحدية الصغرى لعصابة النقل في نفس النقطة أو نقطتين مختلفتين.

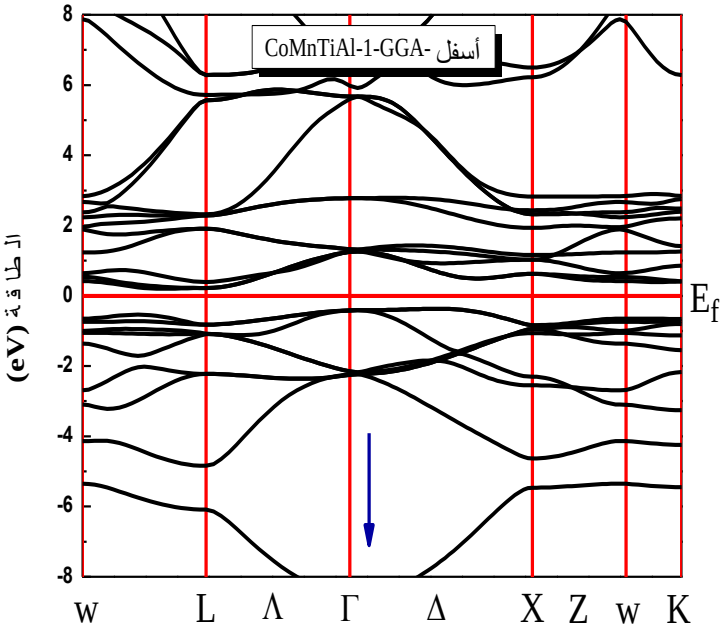
1.1.4.III .المركب CoMnTiAl :

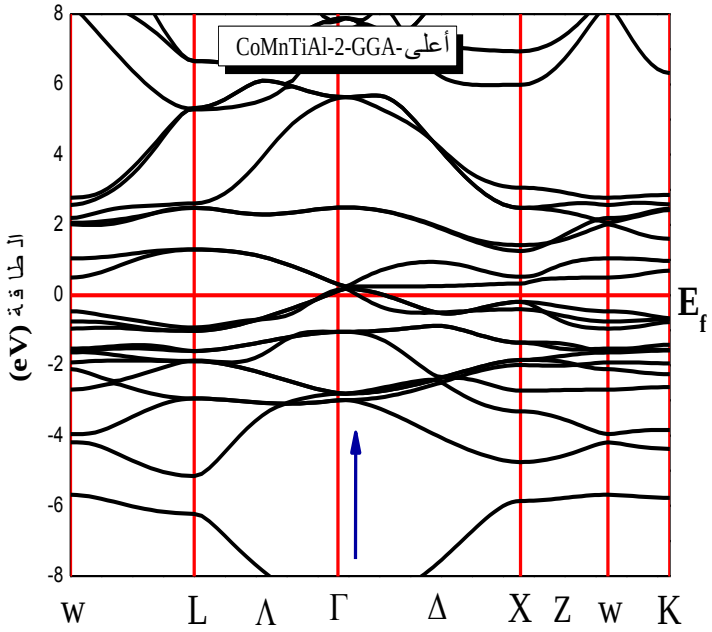
تحصلنا علي عصابة الطاقة وفق خطوط عالية التناظر في منطقة بريليون للمركب CoMnTiAl وذلك في التقريبات mBJ و GGA لكل من (سبين أعلى/سبين أسفل) كما في الشكال (5.III).

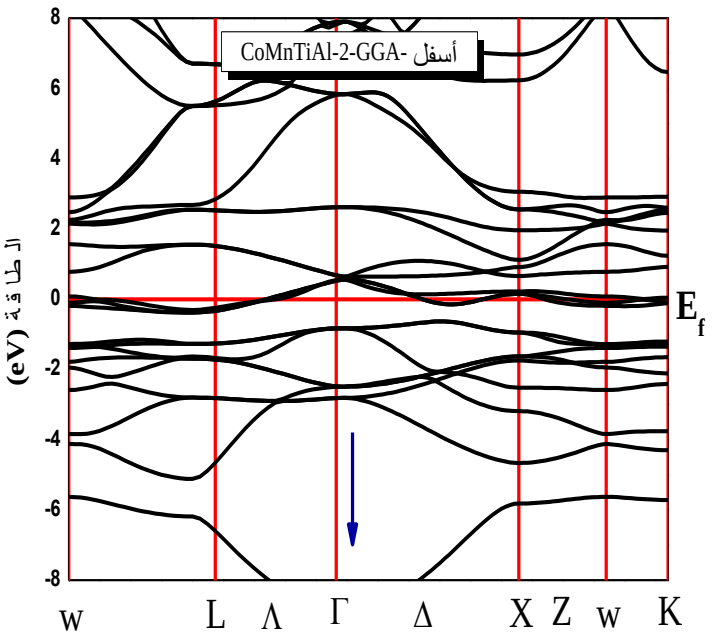

CoMnTiAl-1-GGA-أعلى
الطاقة (eV)
8
6
4
2
0
-2
-4
-6
-8
E_f
w L Λ Γ Δ X Z w K

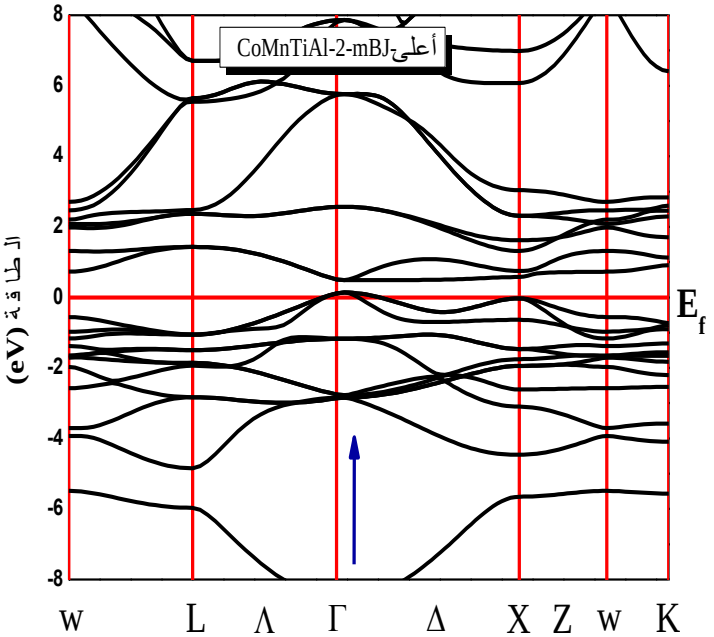

CoMnTiAl-1-GGA- أسفل
الطاقة (eV)
8
6
4
2
0
-2
-4
-6
-8
E_f
w L Λ Γ Δ X Z w K

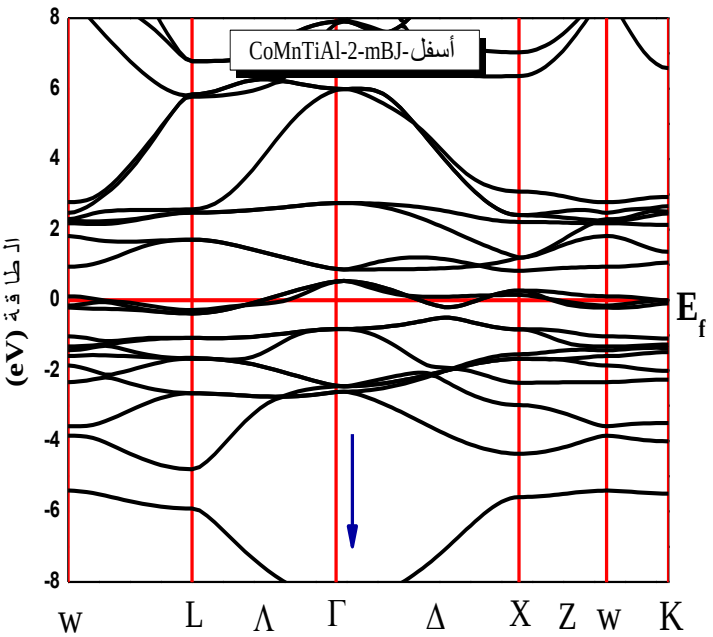

CoMnTiAl-1-mBJ- أعلى
الطاقة (eV)
8
6
4
2
0
-2
-4
-6
-8
E_f
w L Λ Γ Δ X Z w K

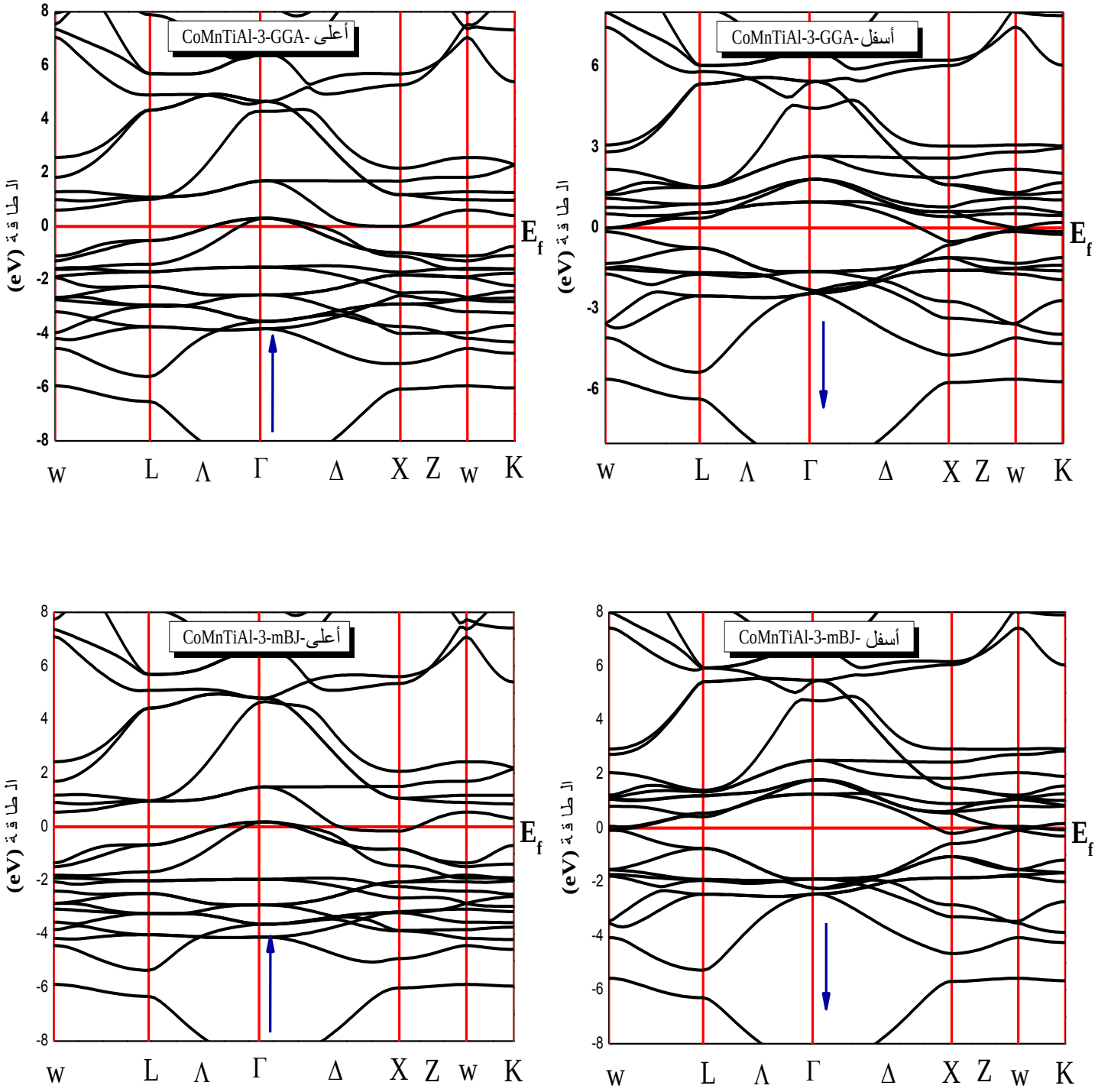

CoMnTiAl-1-GGA- أسفل
الطاقة (eV)
8
6
4
2
0
-2
-4
-6
-8
E_f
w L Λ Γ Δ X Z w K


CoMnTiAl-2-GGA-أعلى
الطاقة (eV)
8
6
4
2
0
-2
-4
-6
-8
E_f
w L Λ Γ Δ X Z w K


CoMnTiAl-2-GGA- أسفل
الطاقة (eV)
8
6
4
2
0
-2
-4
-6
-8
E_f
w L Λ Γ Δ X Z w K


CoMnTiAl-2-mBJ-أعلى
الطاقة (eV)
8
6
4
2
0
-2
-4
-6
-8
E_f
w L Λ Γ Δ X Z w K


CoMnTiAl-2-mBJ-أسفل
الطاقة (eV)
8
6
4
2
0
-2
-4
-6
-8
E_f
w L Λ Γ Δ X Z w K



الشكل (5.III): عصابة الطاقة للمركب CoMnTiAl من أجل الأنمط الثلاث محسوبة في التقريبات GGA و mBJ .

حسب التمثيل البياني لعصابات الطاقة المبينة في الشكال (5.III) نجد النتائج التالية :

وجدنا أن المركب CoMnTiAl لديه خاصية معدن في النمط الأول لسبين أعلى مهما كان التقريب المستعمل GGA و mBJ. اما في حالة سبين اسفل فان للمركب السابق له خاصية نصف معدن وبانتقال غير مباشر (مانع طاقي غير مباشر (Γ-L)).

وفي النمط الثاني فان للمركب CoMnTiAl له خاصية نصف معدن غير مثالي في الحالة سبين اسفل و في الحالة العكسية سبين اعلى فان له الخاصية المعدنية مهما كان التقريب المستعمل .

وفي النمط الثالث فان للمركب CoMnTiAl له خاصية المعدنية في الحالتين سبين اعلى وسبين اسفل مهما كان التقريب المستعمل GGA و mBJ.

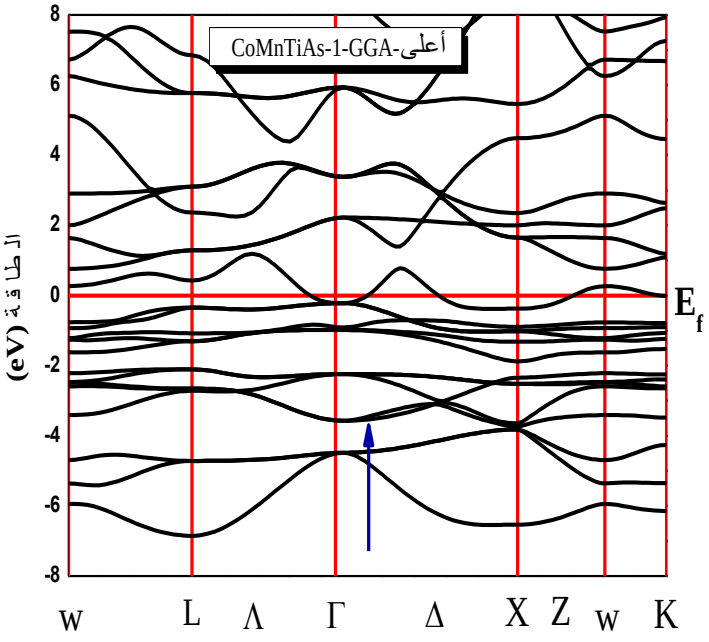
قيمة المانع الطاقي الموجودة في النمط الأول لسبين أسفل الموضحة في الجدول أدناه :

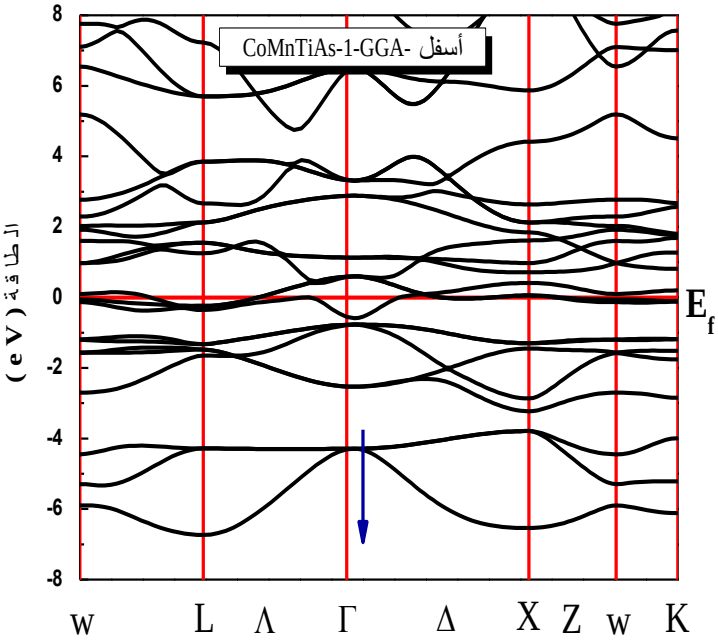
المركب	السبين	التقريب	النمط	Eg(ev)
CoMnTiAl	أسفل	GGA	1	0.6361
	أسفل	mBJ	1	0.5686
	أسفل	mBJ	2	0.3454
	أعلي	mBJ	2	0.3267

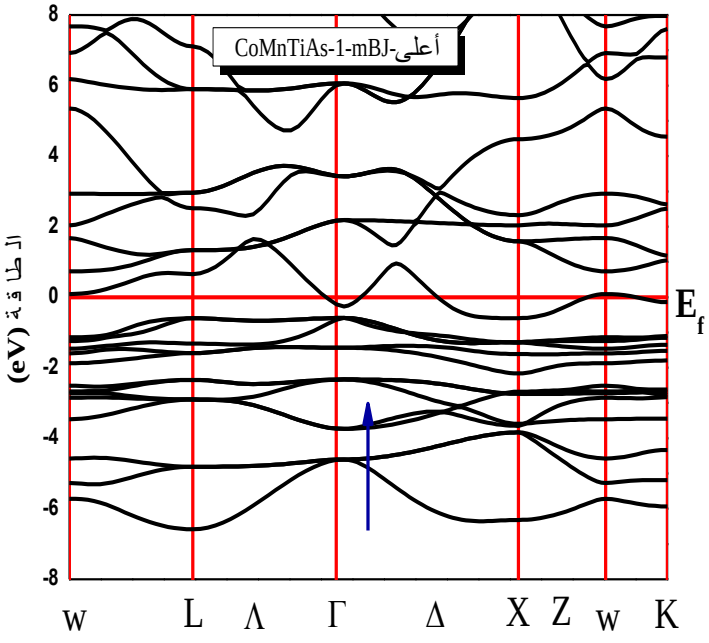
الجدول (3.III) : قيمة المانع الطاقي من أجل المركب CoMnTiAl لنمط الأول و الثاني في التقريب GGA وmBJ.

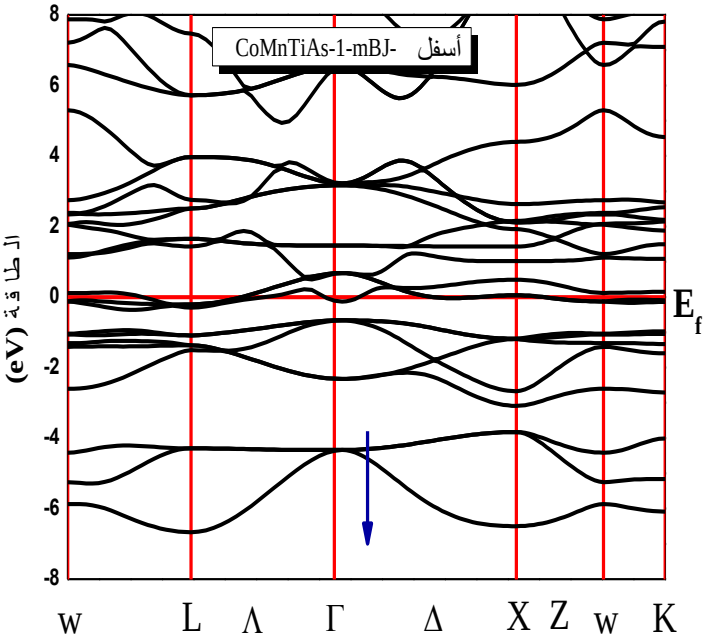
2.1.4.III .المركب CoMnTiAs :

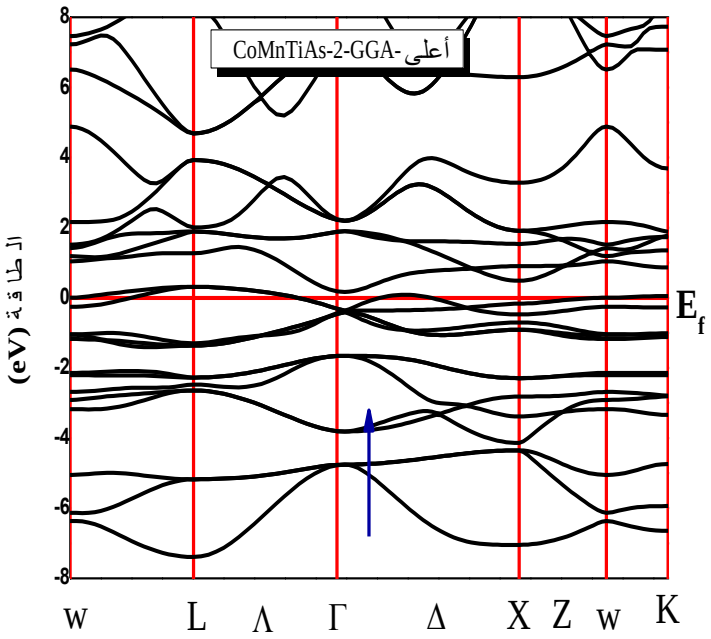
تحصلنا علي عصابة الطاقة وفق خطوط عالية التناظر في منطقة بريليون للمركب CoMnTiAs وذلك في التقريبات mBJ و GGA لكل من (سبين أعلي / سبين أسفل) كما في الشكال (6.III).

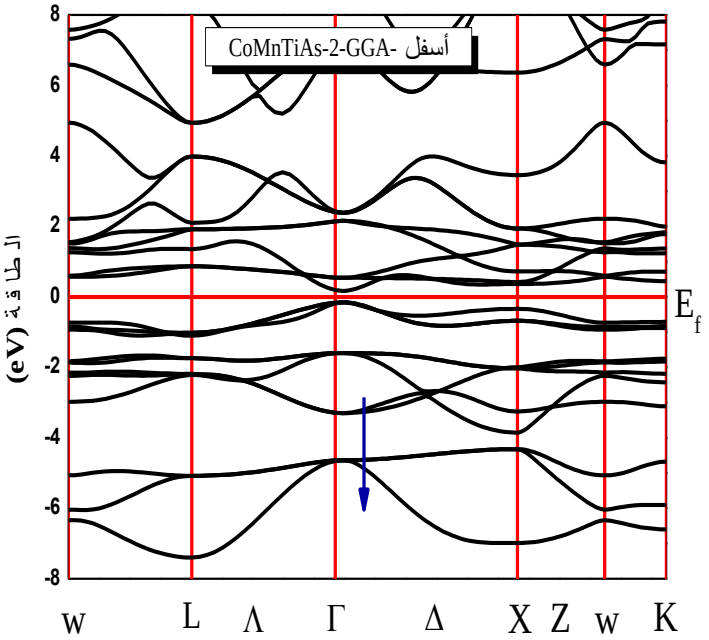

CoMnTiAs-1-GGA-أعلى
الطاقة (eV)
8
6
4
2
0
-2
-4
-6
-8
E_f
w L Λ Γ Δ X Z w K

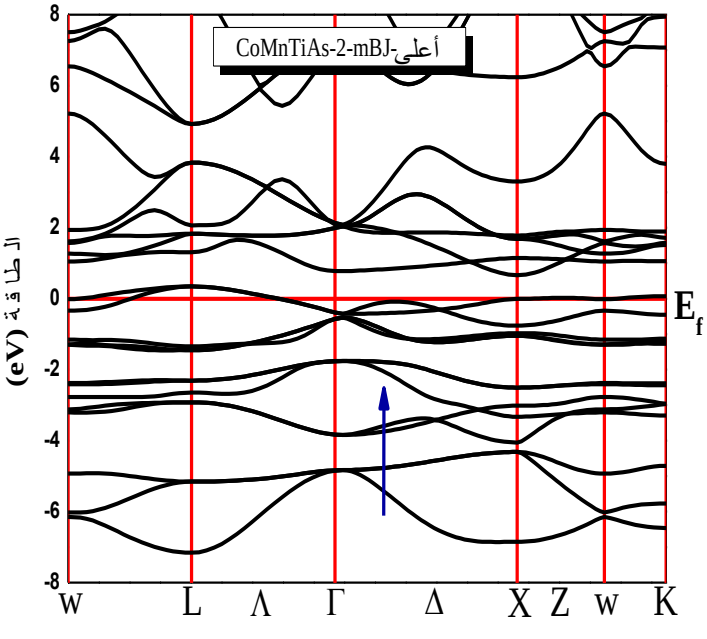

CoMnTiAs-1-GGA- أسفل
الطاقة (e V)
8
6
4
2
0
-2
-4
-6
-8
E_f
w L Λ Γ Δ X Z w K

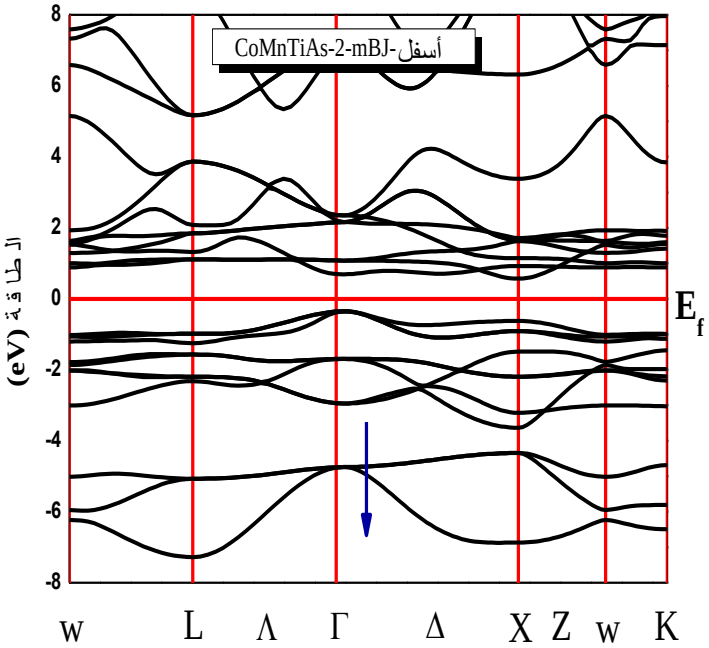

CoMnTiAs-1-mBJ-أعلى
الطاقة (eV)
8
6
4
2
0
-2
-4
-6
-8
E_f
w L Λ Γ Δ X Z w K

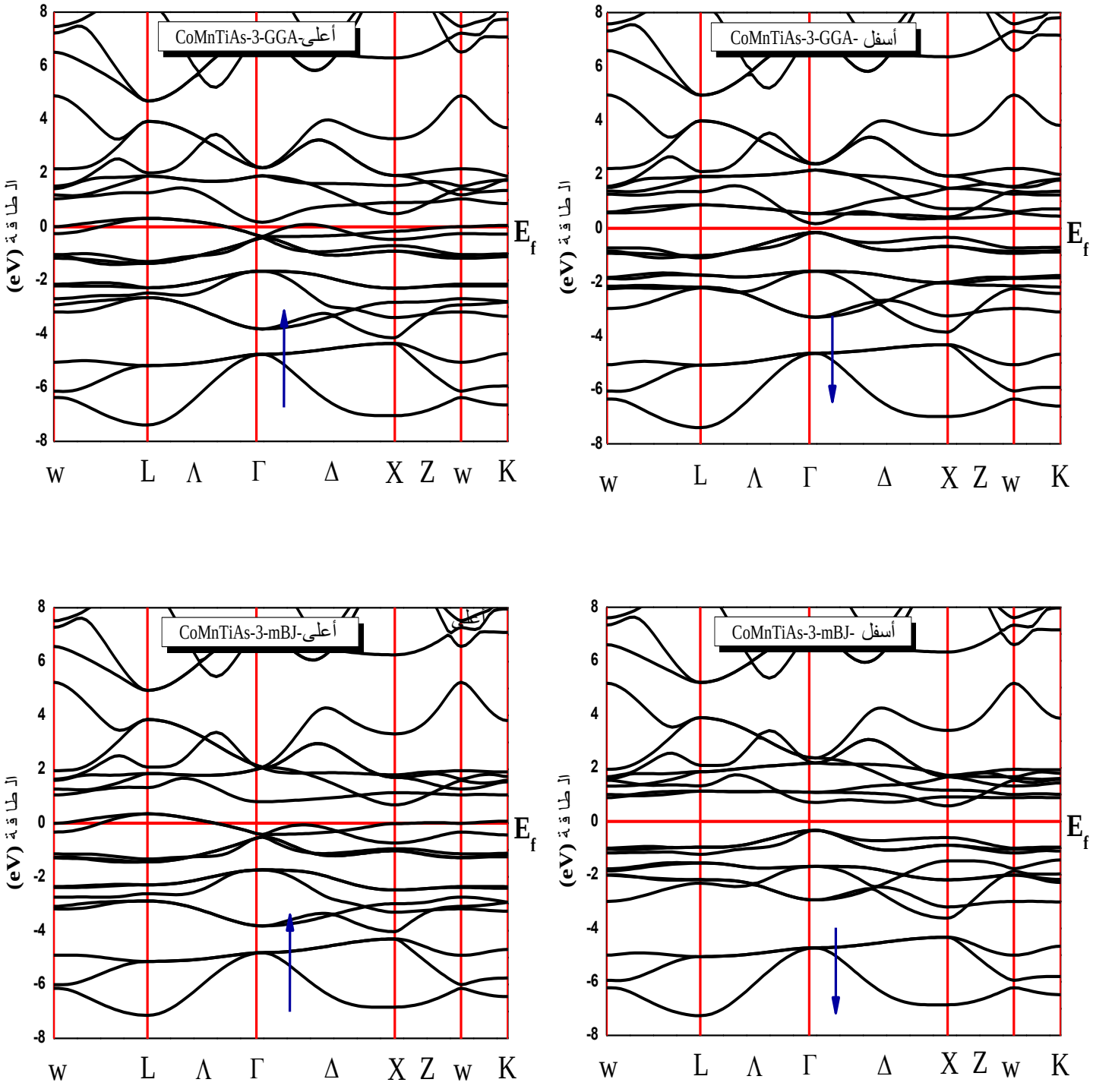

CoMnTiAs-1-mBJ- أسفل
الطاقة (eV)
8
6
4
2
0
-2
-4
-6
-8
E_f
w L Λ Γ Δ X Z w K


CoMnTiAs-2-GGA-أعلى
الطاقة (eV)
8
6
4
2
0
-2
-4
-6
-8
E_f
w L Λ Γ Δ X Z w K


CoMnTiAs-2-GGA- أسفل
الطاقة (eV)
8
6
4
2
0
-2
-4
-6
-8
E_f
w L Λ Γ Δ X Z w K


CoMnTiAs-2-mBJ-أعلى
الطاقة (eV)
8
6
4
2
0
-2
-4
-6
-8
E_f
w L Λ Γ Δ X Z w K


CoMnTiAs-2-mBJ-أسفل
الطاقة (eV)
8
6
4
2
0
-2
-4
-6
-8
E_f
w L Λ Γ Δ X Z w K



الشكل (6.III): عصابة الطاقة للمركب CoMnTiAs من أجل الأنمط الثلاث محسوبة في التقريبات GGA و mBJ .

حسب التمثيل البياني لعصابات الطاقة المبينة في الشكل (6.III) نجد النتائج التالية :

وجدنا أن المركب CoMnTiAs في النمط الأول له خاصية نصف معدن غير مثالي في حالة سبين أعلى وفي الحالة العكسية سبين أسفل فإن له خاصية معدنية مهما كان التقريب المستعمل GGA و mBJ.

وفي النمط الثاني والثالث فإن للمركب CoMnTiAl له خاصية معدن لسبين أعلى مهما كان التقريب المستعمل GGA وmBJ ، أما في حالة سبين أسفل فإن للمركب السابق له خاصية نصف معدن بإنتقال مباشر (مانع طاقي مباشر Γ)

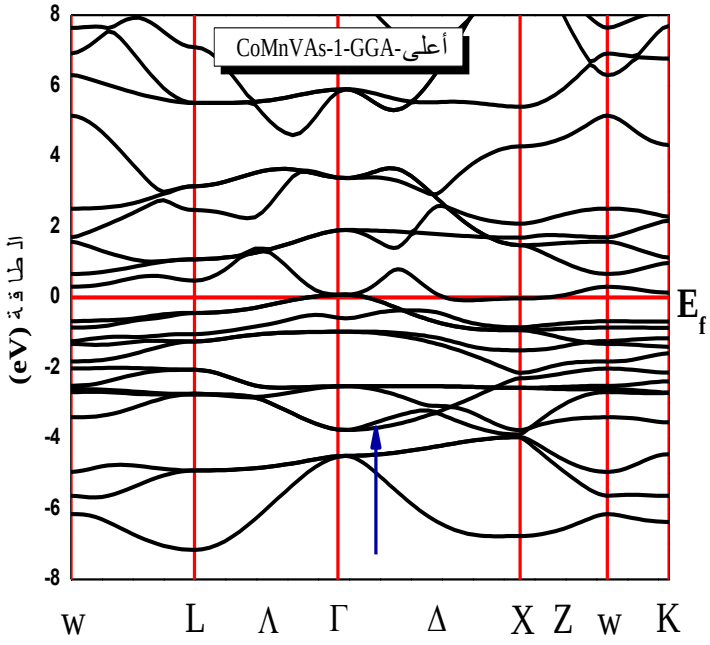
قيمة المانع الطاقي الموجودة في النمط الثاني والثالث لسبين أسفل الموضحة في الجدول أدناه :

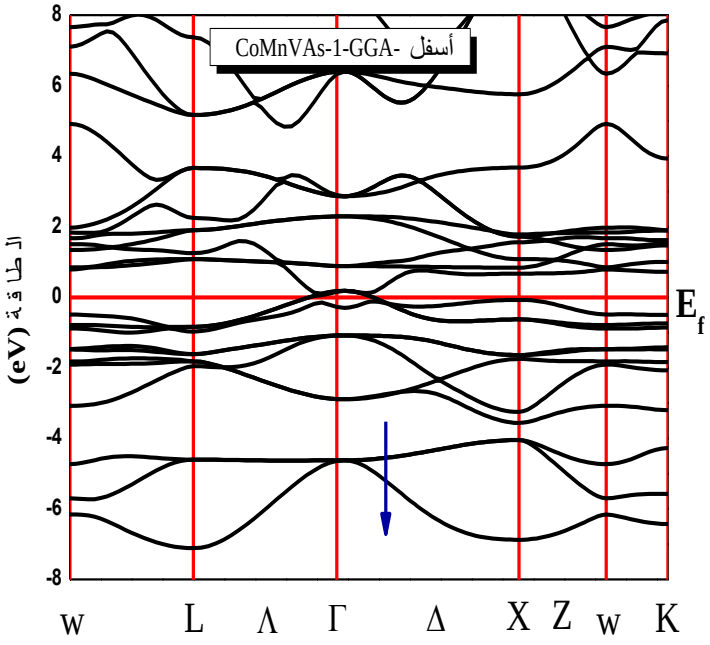
المركب	السبن	النمط	التقريب	Eg (ev)
CoMnTiAs	أسفل	2	Mbj	1,04037
	أسفل		GGA	0,325706
	أسفل	3	Mbj	0,91541
	أسفل		GGA	0,32432

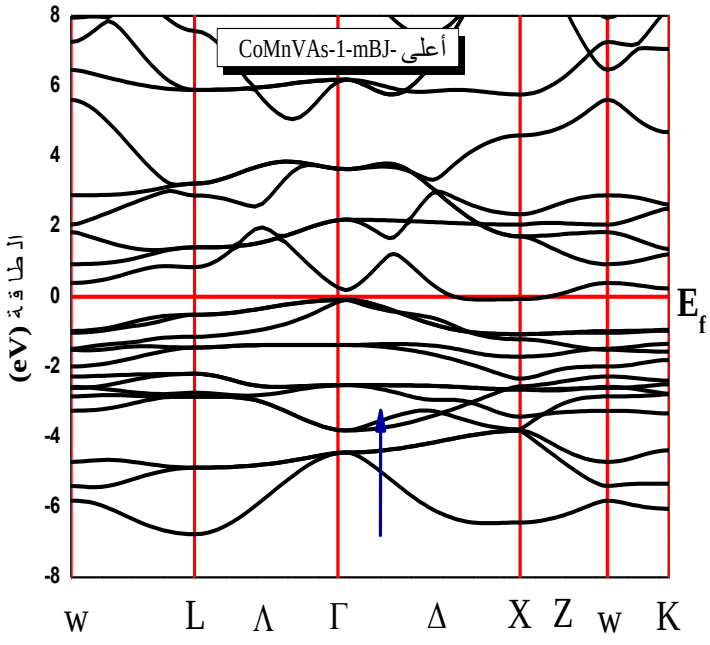
الجدول (4.III) : قيمة المانع الطاقي من أجل المركب CoMnTiAs لنمط الثاني والثالث لسبين أسفل في كل من التقريبات mBJ و GGA.

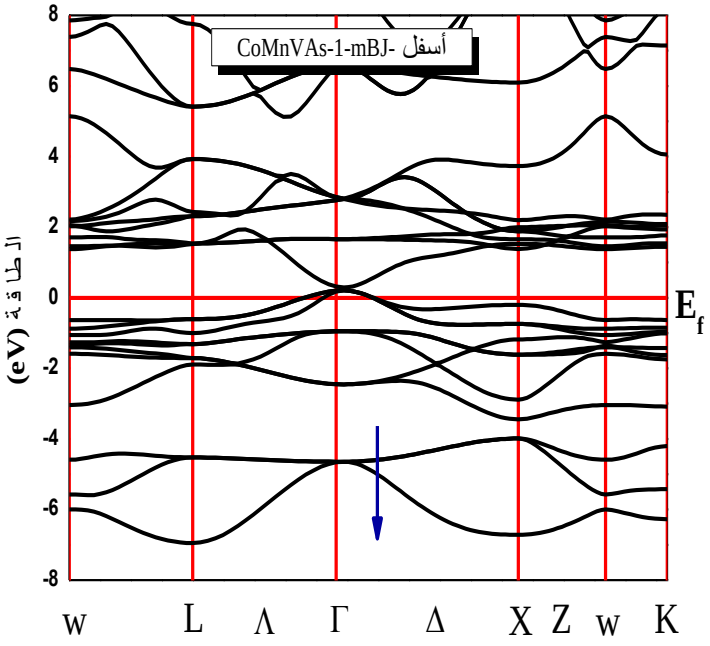
2.1.4.III. المركب CoMnVAs :

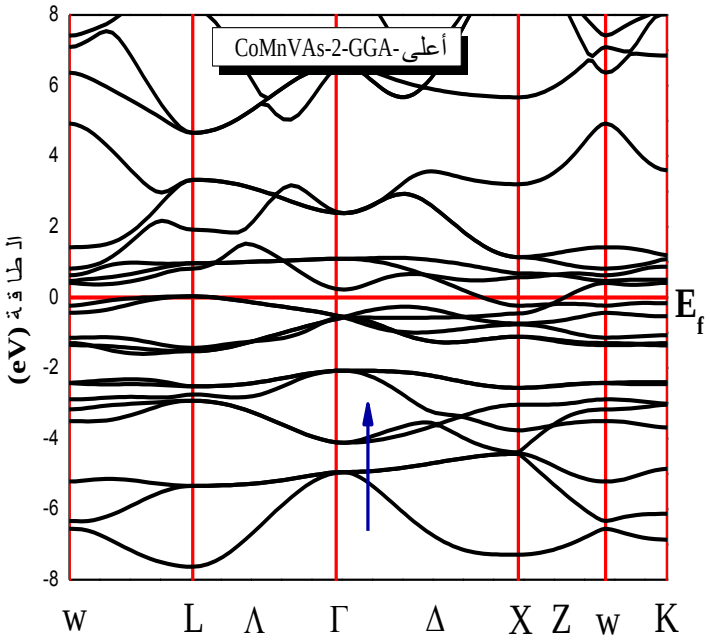
تحصلنا علي عصابة الطاقة وفق خطوط عالية التناظر في منطقة بريليون للمركب CoMnVAs وذلك في التقريبات mBJ و GGA لكل من (سبين أعلى / سبين أسفل) كما في الشكل (7.III).

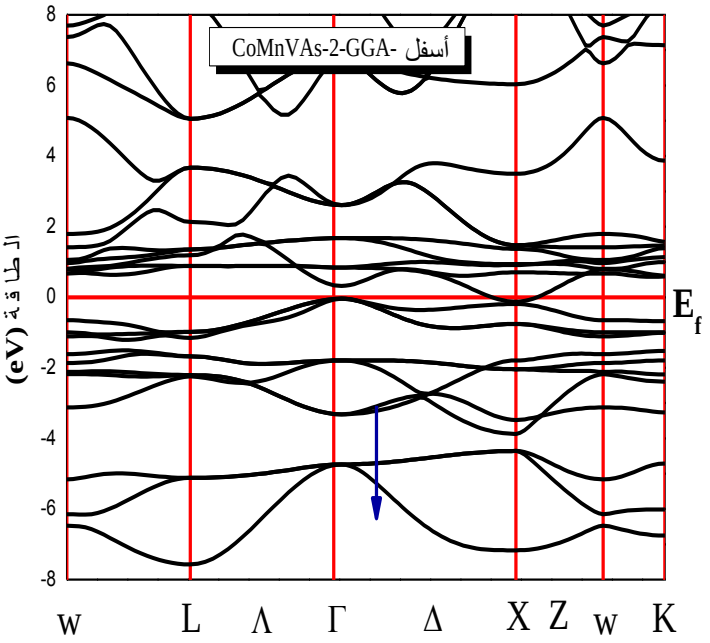

CoMnVAs-1-GGA-أعلى
الطاقة (eV)
8
6
4
2
0
-2
-4
-6
-8
E_f
w L Λ Γ Δ X Z w K

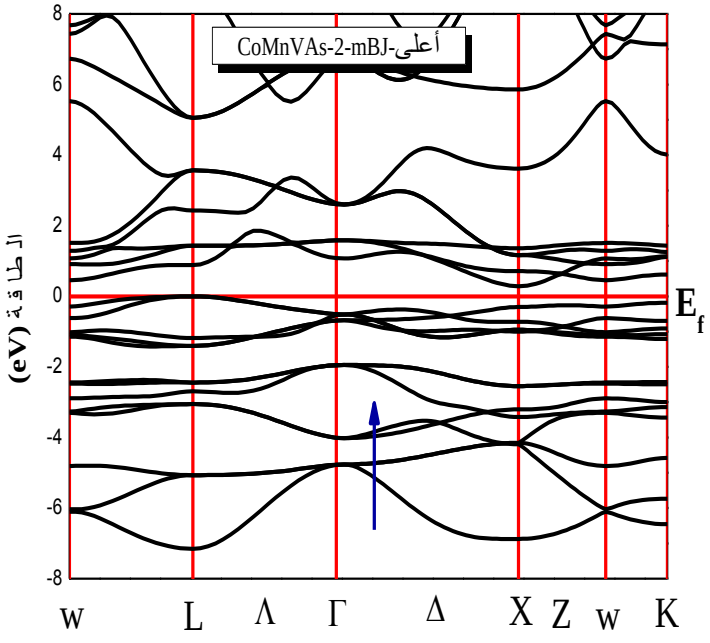

CoMnVAs-1-GGA- أسفل
الطاقة (eV)
8
6
4
2
0
-2
-4
-6
-8
E_f
w L Λ Γ Δ X Z w K

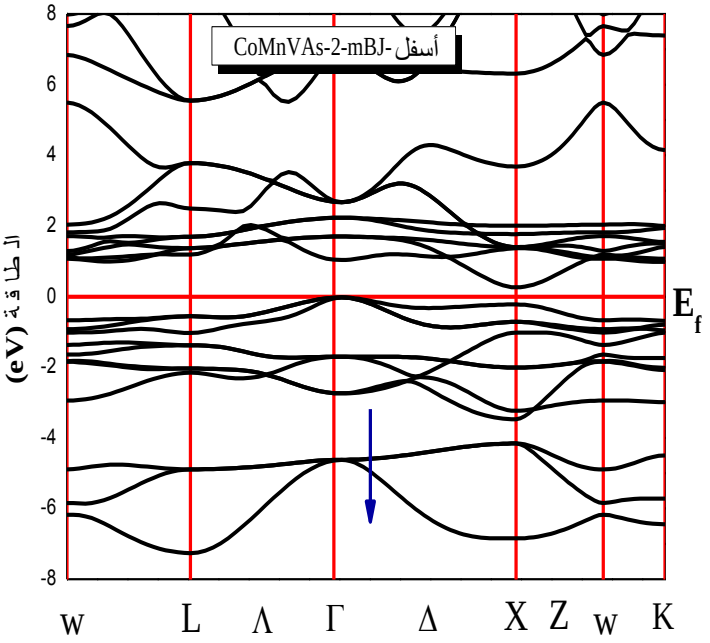

CoMnVAs-1-mBJ- أعلى
الطاقة (eV)
8
6
4
2
0
-2
-4
-6
-8
E_f
w L Λ Γ Δ X Z w K

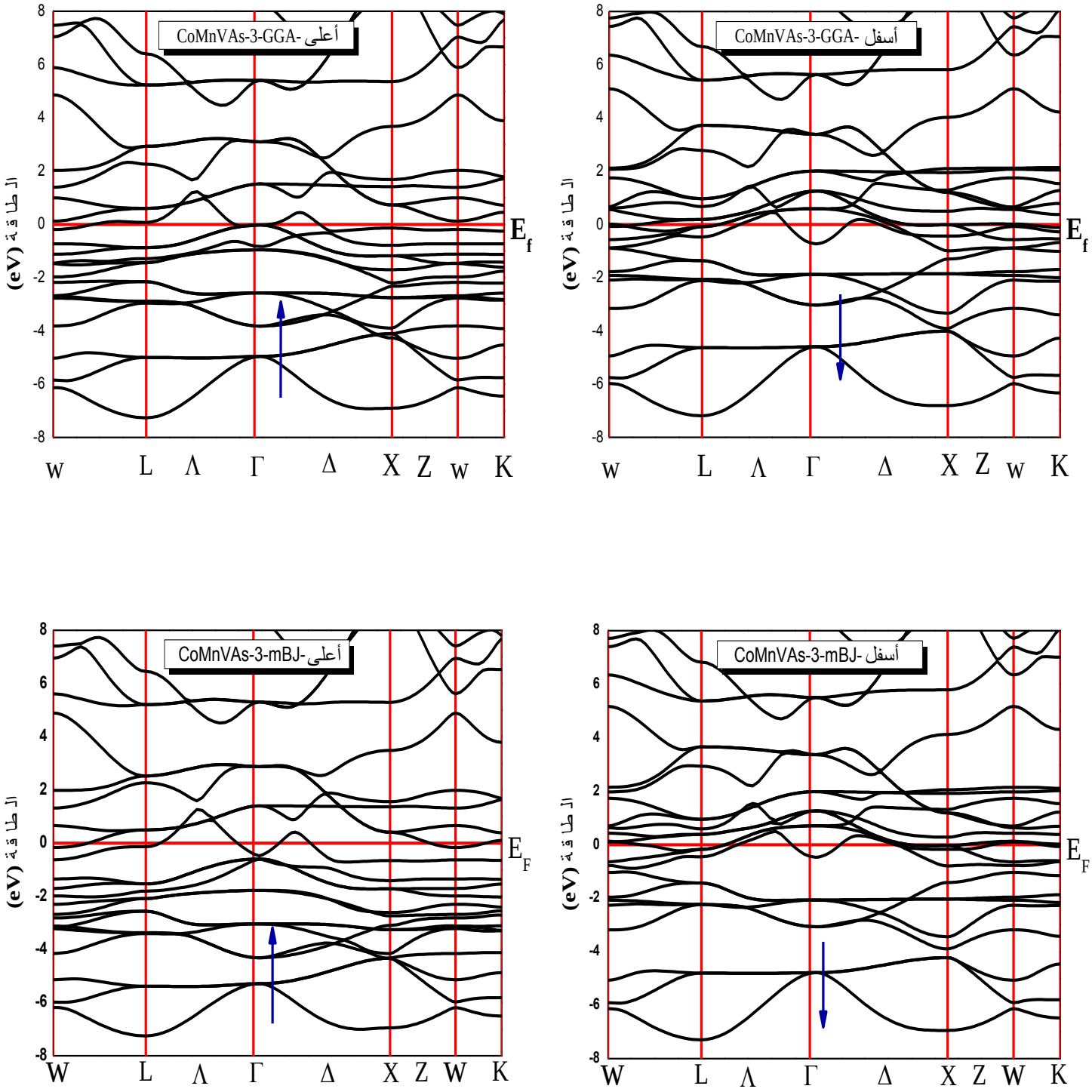

CoMnVAs-1-mBJ- أسفل
الطاقة (eV)
8
6
4
2
0
-2
-4
-6
-8
E_f
w L Λ Γ Δ X Z w K


CoMnVAs-2-GGA-أعلى
الطاقة (eV)
8
6
4
2
0
-2
-4
-6
-8
E_f
w L Λ Γ Δ X Z w K


CoMnVAs-2-GGA- أسفل
الطاقة (eV)
8
6
4
2
0
-2
-4
-6
-8
E_f
w L Λ Γ Δ X Z w K


CoMnVAs-2-mBJ-أعلى
الطاقة (eV)
8
6
4
2
0
-2
-4
-6
-8
E_f
w L Λ Γ Δ X Z w K


CoMnVAs-2-mBJ-أسفل
الطاقة (eV)
8
6
4
2
0
-2
-4
-6
-8
E_f
w L Λ Γ Δ X Z w K



الشكل (7.III): عصابة الطاقة للمركب CoMnVAs من أجل الأنمط الثلاث محسوبة في التقريبات GGA و mBJ .

حسب التمثيل البياني لعصابات الطاقة المبينة في الشكل (7.III) نجد النتائج التالية:

وجدنا أن المركب CoMnVAs في النمط الأول له خاصية نصف معدن غير مثالي أعلى وفي الحالة العكسية سبين أسفل فإن له خاصية معدنية مهما كان التقريب المستعمل GGA و mBJ.

وفي النمط الثاني فإن للمركب CoMnVAs له خاصية معدن لسبين أعلى مهما كان التقريب المستعمل GGA و mBJ ، أما في حالة سبين أسفل فإن للمركب السابق له خاصية نصف معدن بإنتقال غير مباشر (مانع طاقي غير مباشر (X- Γ))

وأما النمط الثالث فان للمركب CoMnVAs له خاصية المعدنية في الحالتين سبين اعلى وسبين اسفل مهما كان التقريب المستعمل GGA و mBJ.

قيمة المانع الطاقي الموجودة في النمط الثاني والثالث لسبين أسفل الموضحة في الجدول أدناه :

المركب	السبين	النمط	التقريب	Eg (ev)
CoMnVAs	أعلى	1	Mbj	0.0074
	أسفل	2	Mbj	0 .2840

الجدول (5.III) : قيمة المانع الطاقي من أجل المركب CoMnVAs لنمط الثاني في التقريب mBJ.

2.4.III .كثافة الحالات الإلكترونية :

من أجل معرفة أصل بنية عصابات الطاقة الإلكترونية ، قمنا بحساب كثافة الحالات الكلية والجزئية للمركبات CoMnTiAl ، CoMnTiAs وCoMnVAs في الأنماط الثلاثة حيث إستخدمنا لحسابها تقريب GGA و mBJ .

من أجل إثبات وجود مانع طاقي نحسب الكثافة الكلية في مستوى فارمي (E_f) حيث تعرف علاقة الإستقطاب الإلكترونات (P) [8]:

$$P = \frac{\rho \uparrow (E_f) - \rho \downarrow (E_f)}{\rho \uparrow (E_f) + \rho \downarrow (E_f)} \qquad (5.III)$$

$\rho \uparrow (E_f)$:مقدار كثافة الحالات عند مستوى فارمي في حالة سبين أعلى.

$\rho \downarrow (E_f)$: مقدار كثافة الحالات عند مستوى فارمي في حالة سبين أسفل.

يوجد ثلاث حالات للإستقطاب الإلكترونات:

المواد البارامغناطسية	المواد الحديدومغناطسية	نصف معدن
P=0	0<P<1	P=1

1.2.4.III .المركب CoMnTiAl:

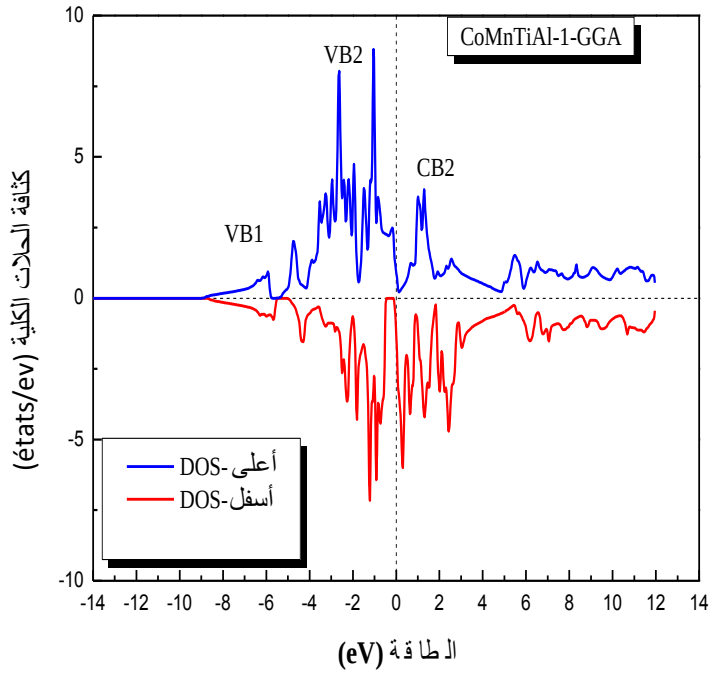
النتائج المتحصل عليها للإستقطاب الإلكترونات (P) موضحة في الجدول أدناه:

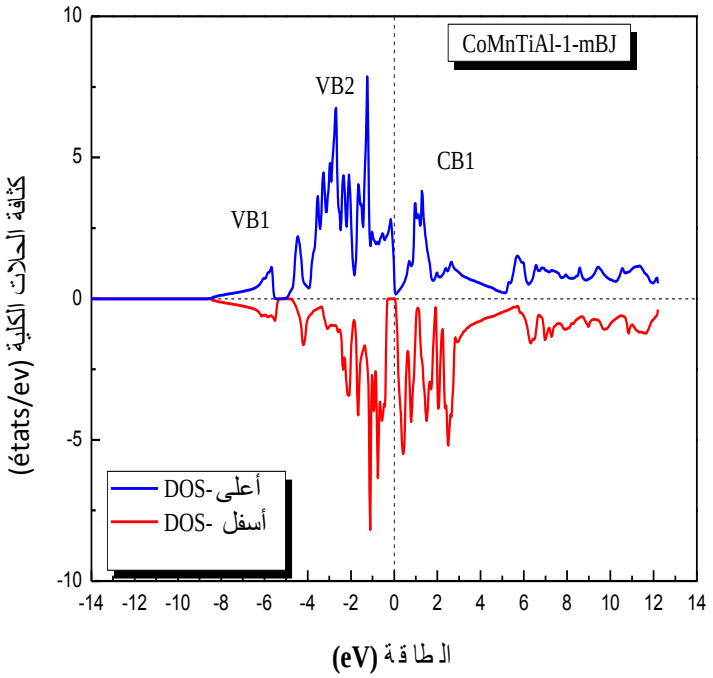
المركب	التقريب	النمط	N(Ef)		P
			N(Ef)↑	N(Ef)↓	
CoMnTiAl	GGA	1	12,97	14,83	0,07
		2	0,74	58,07	0,97
		3	9,94	13,8	0,16
	mBJ	1	9,43	0	1
		2	0,77	49,44	0,97
		3	11,98	31,11	0,44

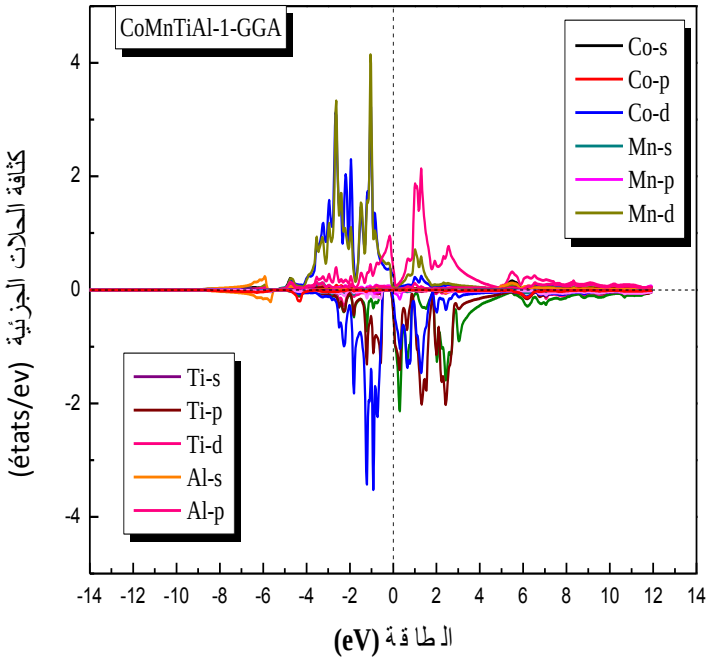
الجدول (6.III) : النسبة المئوية لإستقطاب الإلكترونات P للمركب CoMnTiAl لكل من التقريبات GGA و mBJ .

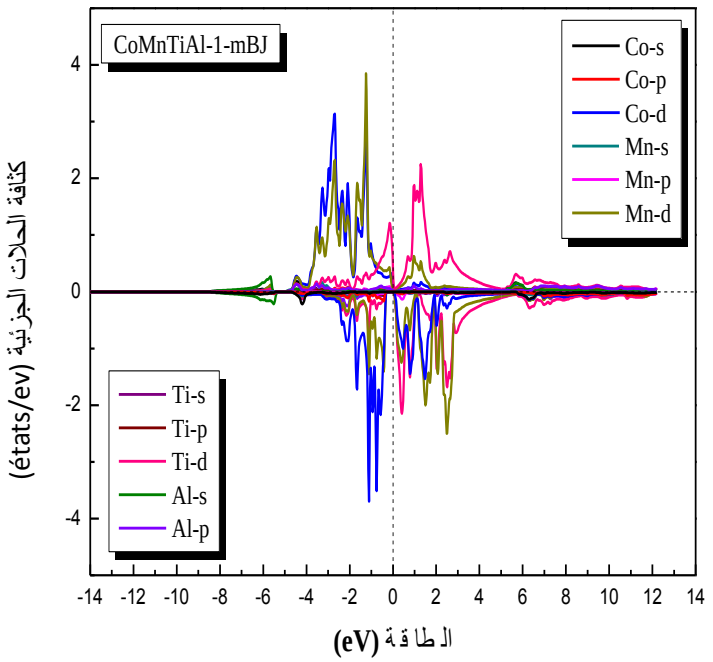
من الجدول نجد أن كل الأنماط للمركب CoMnTiAl في التقريبات GGA و mBJ تملك خاصية الحديدومغناطسية ماعدا النمط 1 في تقريب mBJ يملك خاصية نصف معدن.

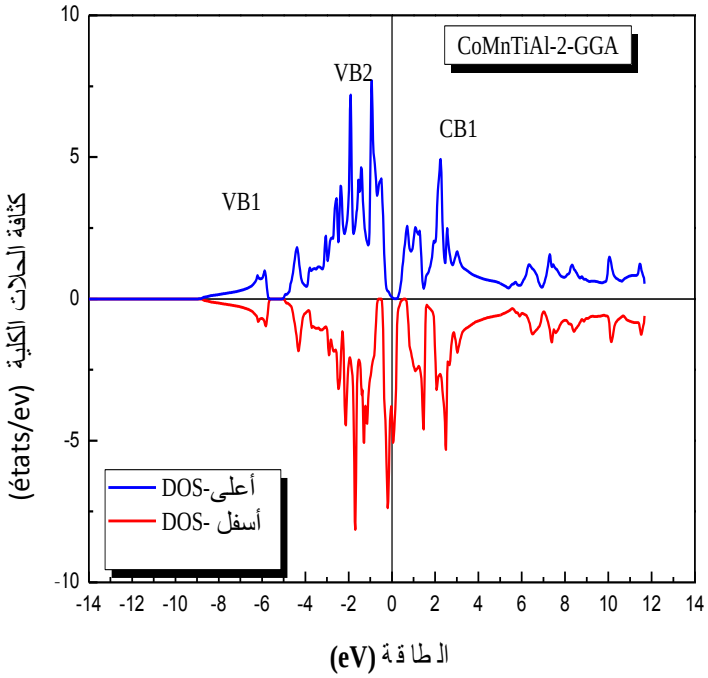
يبين الشكل (8.III) كثافة الحالات الكلية و الجزئية للمركب CoMnTiAl في الأنماط الثلاث لكل من التقريبات GGA و mBJ .

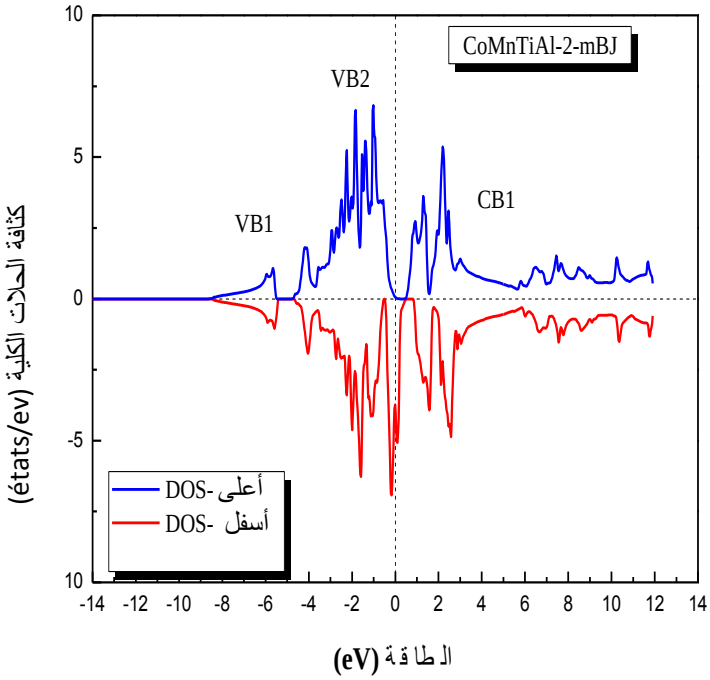

CoMnTiAl-1-GGA
VB1
VB2
CB2
DOS-أعلى
DOS-أسفل
كثافة الحالات الكلية (états/ev)
الطاقة (eV)

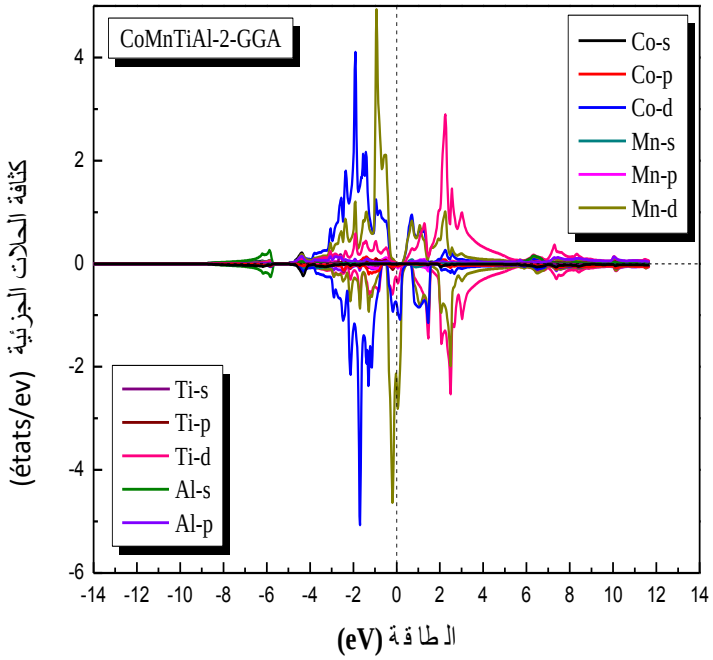

CoMnTiAl-1-mBJ
VB1
VB2
CB1
DOS-أعلى
DOS- أسفل
كثافة الحالات الكلية (états/ev)
الطاقة (eV)

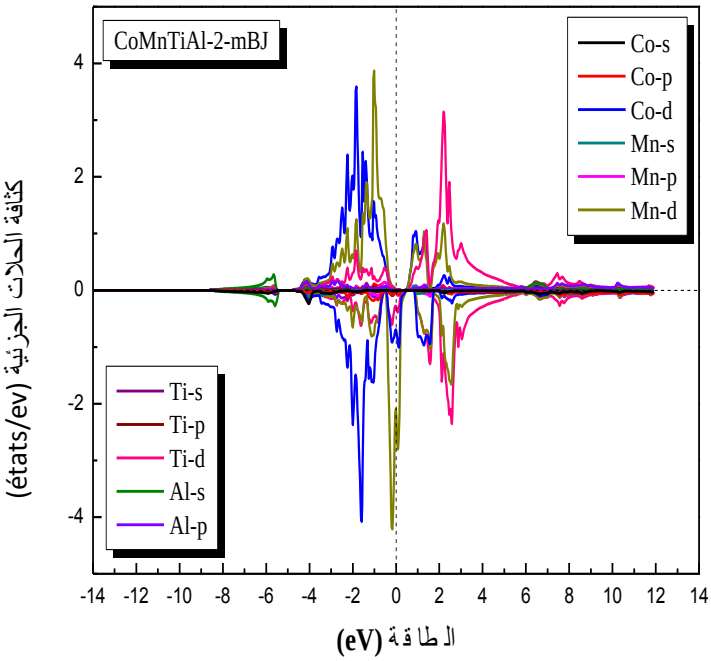

CoMnTiAl-1-GGA
Co-s
Co-p
Co-d
Mn-s
Mn-p
Mn-d
Ti-s
Ti-p
Ti-d
Al-s
Al-p
كثافة الحالات الجزئية (états/ev)
الطاقة (eV)

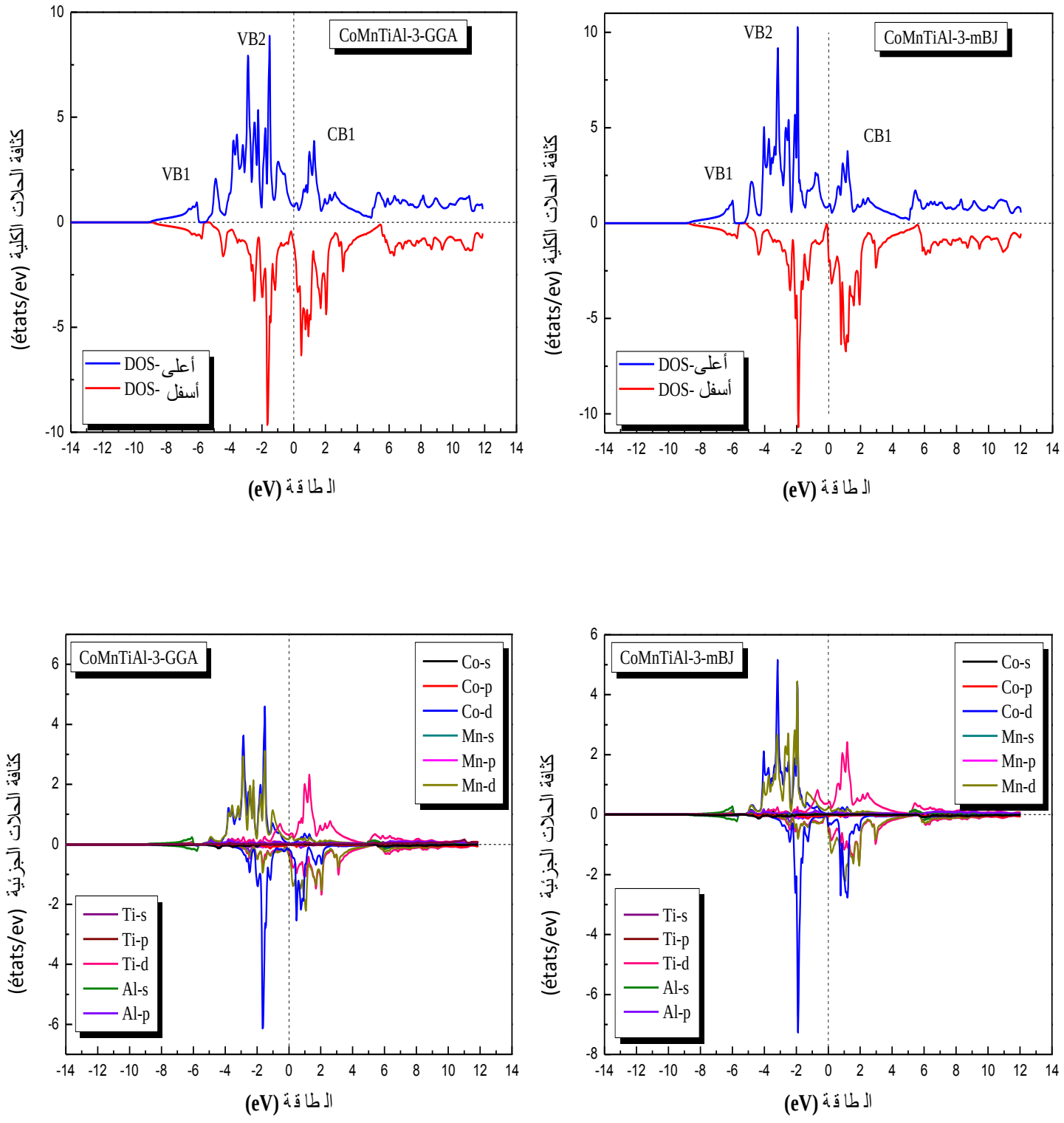

CoMnTiAl-1-mBJ
Co-s
Co-p
Co-d
Mn-s
Mn-p
Mn-d
Ti-s
Ti-p
Ti-d
Al-s
Al-p
كثافة الحالات الجزئية (états/ev)
الطاقة (eV)


CoMnTiAl-2-GGA
VB1
VB2
CB1
DOS-أعلى
DOS- أسفل
كثافة الحلات الكلية (états/ev)
الطاقة (eV)


CoMnTiAl-2-mBJ
VB1
VB2
CB1
DOS-أعلى
DOS- أسفل
كثافة الحلات الكلية (états/ev)
الطاقة (eV)


CoMnTiAl-2-GGA
Co-s
Co-p
Co-d
Mn-s
Mn-p
Mn-d
Ti-s
Ti-p
Ti-d
Al-s
Al-p
كثافة الحلات الجزئية (états/ev)
الطاقة (eV)


CoMnTiAl-2-mBJ
Co-s
Co-p
Co-d
Mn-s
Mn-p
Mn-d
Ti-s
Ti-p
Ti-d
Al-s
Al-p
كثافة الحلات الجزئية (états/ev)
الطاقة (eV)



الشكل (8.III) : كثافة الحالة الكلية و الجزيئية للمركب CoMnTiAl في الأنماط الثلاث في كل من التقريبات GGA و mBJ .

حسب التمثيل البياني لكثافة الحالات الكلية والجزئية المبينة في الشكل (8.III) نجد النتائج التالية :

نلاحظ أن لكل الأنماط و التقريبات GGA و mBJ لديها نفس شكل العام ، مع وجود منطقتين لعصابة التكافئ (VB1 ,VB2) يفصل بينهما فجوة طاقية .

المنطقة VB1 بين (9eV- و 5.5eV-) نجد مساهمة كبيرة بشدة منخفظة من المدار S لذرات Al من أجل السبين أعلى وأسفل .

المنطقة VB2 بين (5.5 eV- و E_f) من أجل سبين أعلى يعود تشكل هذه العصابة إلي تجمع إلكترونات السوي الطاقي d لذرات Co و Mn ، أما في السبين أسفل تكون مساهمة كبيرة من المدار d لذرات Co .

عصابة النقل CB1 بين (E_f و 13eV) من أجل سبين أسفل يعود تشكل هذه العصابة إلى تجمع إلكترونات السوى الطاقي d لذرات Co، Mn وTi ، أما في السبين أعلى تكون مساهمة كبيرة من المدار d لذرات Ti.

2.2.4.III .المركب CoMnTiAs :

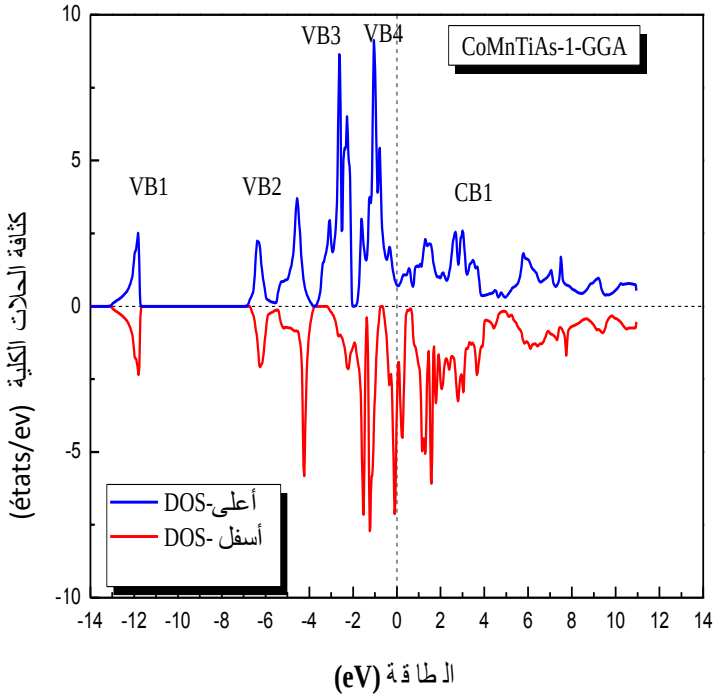
النتائج المتحصل عليها من إستقطاب الإلكترونات (P) موضحة في الجدول أدناه:

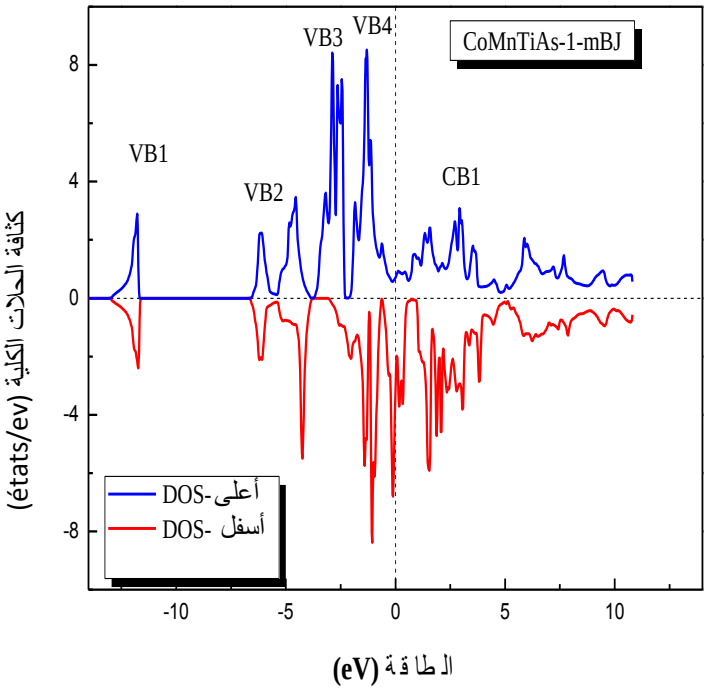
المركب	التقريب	النمط	N(Ef)		p
			N(Ef)↑	N(Ef)↓	
CoMnTiAs	GGA	1	38,91	106,01	0,46
		2	43,88	0	1,00
		3	43,59	0	1,00
	mBJ	1	9,54	40,15	0,62
		2	54,53	0	1,00
		3	51,95	0	1,00

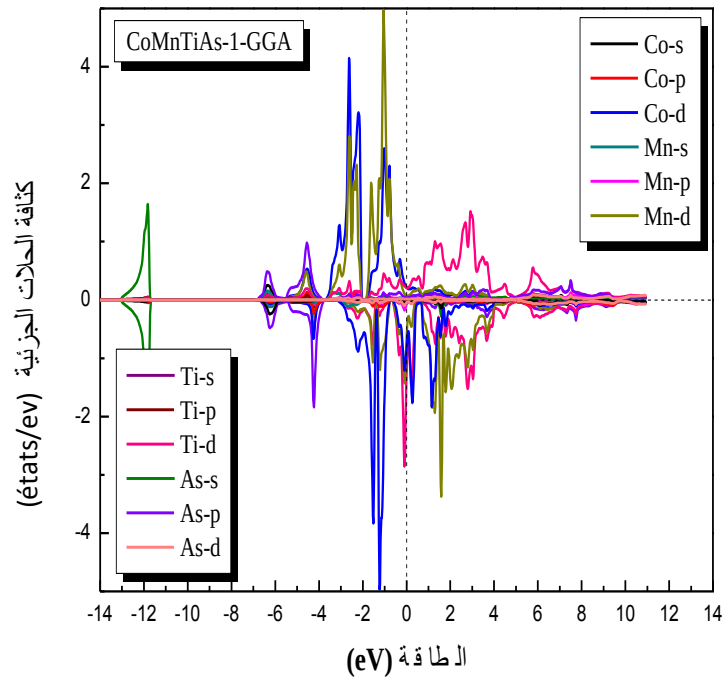
الجدول (7.III) : النسبة المئوية لإستقطاب الإلكترونات P للمركب CoMnTiAs لكل من التقريبات GGA و mBJ .

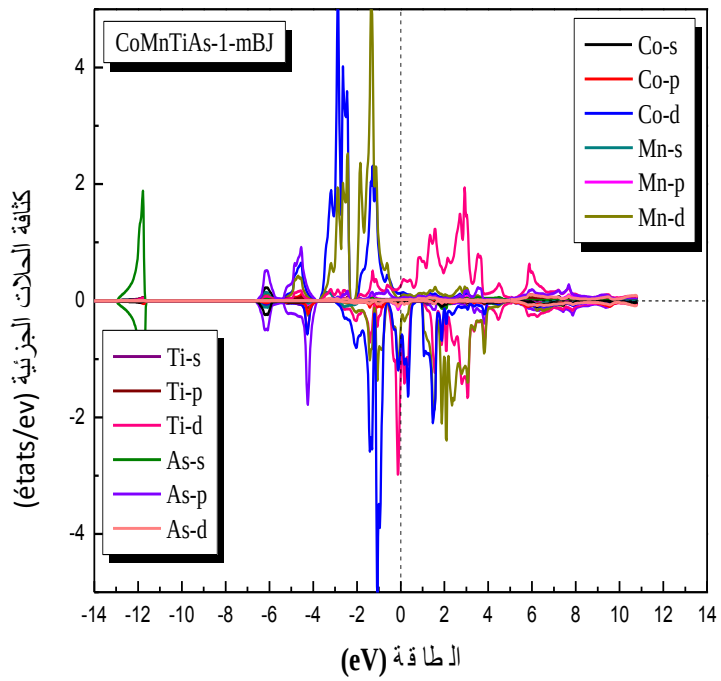
من الجدول نجد أن النمط 2 و3 للمركب CoMnTiAs في التقربات GGA و mBJ تملك خاصية نصف معدن أما النمط 2 يملك خاصية حديدومغناطسية في كل من التقريبات السابقة.

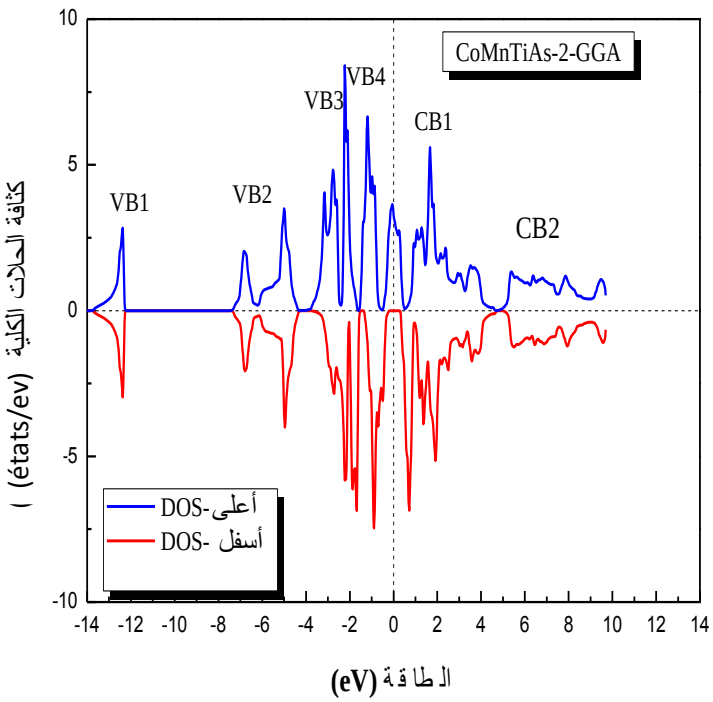
يبين الشكل (9.III) كثافة الحالات الكلية و الجزئية للمركب CoMnTiAl في الأنماط الثلاث لكل من التقريبات GGA و mBJ .

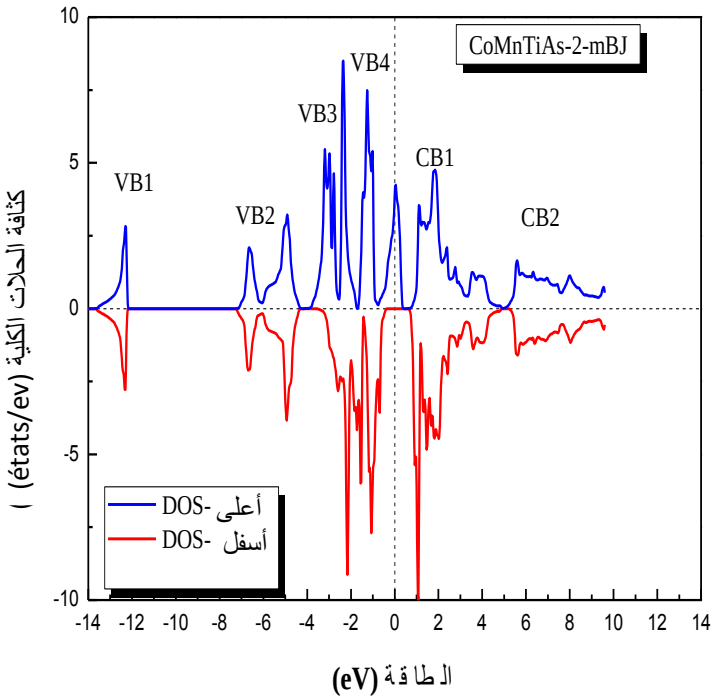

CoMnTiAs-1-GGA
VB1
VB2
VB3
VB4
CB1
DOS-أعلى
DOS- أسفل
كثافة الحلات الكلية (états/ev)
الطاقة (eV)

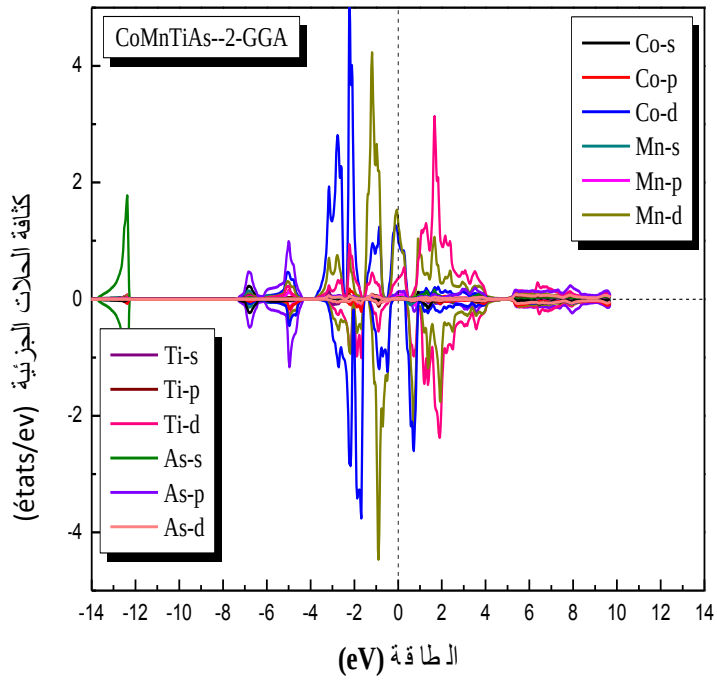

CoMnTiAs-1-mBJ
VB1
VB2
VB3
VB4
CB1
DOS-أعلى
DOS- أسفل
كثافة الحلات الكلية (états/ev)
الطاقة (eV)

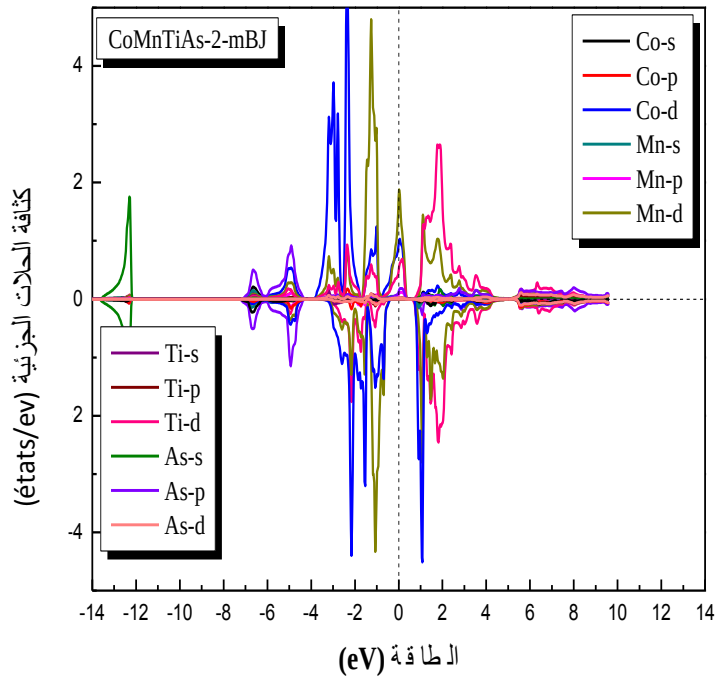

CoMnTiAs-1-GGA
Co-s
Co-p
Co-d
Mn-s
Mn-p
Mn-d
Ti-s
Ti-p
Ti-d
As-s
As-p
As-d
كثافة الحلات الجزئية (états/ev)
الطاقة (eV)

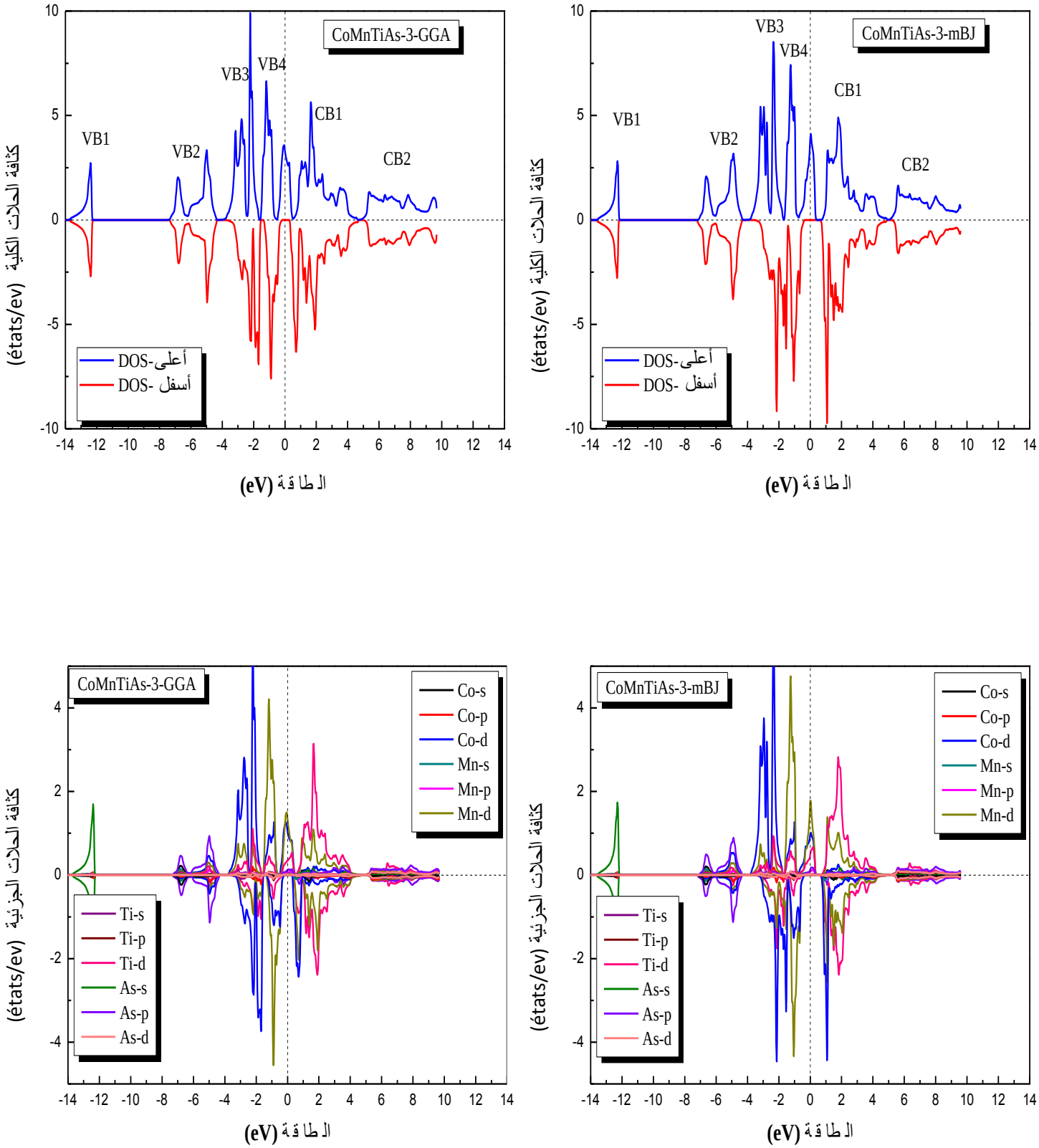

CoMnTiAs-1-mBJ
Co-s
Co-p
Co-d
Mn-s
Mn-p
Mn-d
Ti-s
Ti-p
Ti-d
As-s
As-p
As-d
كثافة الحلات الجزئية (états/ev)
الطاقة (eV)


CoMnTiAs-2-GGA
VB1
VB2
VB3
VB4
CB1
CB2
DOS-أعلى
DOS- أسفل
كثافة الحالات الكلية (états/ev)
الطاقة (eV)


CoMnTiAs-2-mBJ
VB1
VB2
VB3
VB4
CB1
CB2
DOS-أعلى
DOS- أسفل
كثافة الحالات الكلية (états/ev)
الطاقة (eV)


CoMnTiAs--2-GGA
Co-s
Co-p
Co-d
Mn-s
Mn-p
Mn-d
Ti-s
Ti-p
Ti-d
As-s
As-p
As-d
كثافة الحالات الجزئية (états/ev)
الطاقة (eV)


CoMnTiAs-2-mBJ
Co-s
Co-p
Co-d
Mn-s
Mn-p
Mn-d
Ti-s
Ti-p
Ti-d
As-s
As-p
As-d
كثافة الحالات الجزئية (états/ev)
الطاقة (eV)



الشكل (9.III) : كثافة الحالة الكلية و الجزيئية للمركب CoMnTiAs في الأنماط الثلاث في كل من التقريبات GGA و mBJ .

حسب التمثيل البياني لكثافة الحالات الكلية والجزئية المبينة في الشكل (9.III) نجد النتائج التالية :

نلاحظ أن التقريبات GGA و mBJ لديها نفس شكل العام ، وجود أربع مناطق لعصابة التكافئ (VB1 ,VB2 , VB3,VB4) و منطقتين لعصابة النقل (CB1 ,CB2) يفصل بينهما فجوة طاقية .

في النمط 1 نجد:

المنطقة VB1 بين (14eV- و 11eV-) نجد مساهمة كبيرة بشدة منخفظة من المدار S لذرات As في السبين أعلى وأسفل .

المنطقة VB2 بين (7eV- و 3.5eV-) نجد مساهمة كبيرة من المدار p لذرات As في السبين أعلى وأسفل .

المنطقة VB3 بين (3.5 eV- و 2-) من أجل سبين أعلى و أسفل يعود تشكل هذه العصابة إلي تجمع إلكترونات السوي الطاقي d لذرات Co و Mn .

المنطقة VB4 بين (2eV- و E_f) يعود تشكل هذه العصابة إلي تجمع إلكترونات السوي الطاقي d لذرات Co و Mn من أجل سبين أعلى و أسفل.

عصابة النقل CB1 بين (E_fو 13eV-) من أجل سبين أسفل يعود تشكل هذه العصابة إلى تجمع إلكترونات السوى الطاقي d لذرات Co، Mn وTi ، أما في السبين أعلى تكون مساهمة كبيرة من المدار d لذرات Ti.

أما بالنسبة للنمط 2 و3 نجد :

المنطقة VB1 بين (14eV- و 11eV-) نجد مساهمة كبيرة بشدة منخفظة من المدار S لذرات As في السبين أعلى وأسفل .

المنطقة VB2 بين (7eV- و 4eV-) نجد مساهمة كبيرة من المدار p لذرات As في السبين أعلى وأسفل.

المنطقة VB3 بين (4eV- و2eV-) يعود تشكل هذه العصابة إلي الإلكترونات السوي الطاقي d لذرات Co من أجل سبين أعلى و أسفل.

المنطقة CB4 بين (2eV- و E_f) يعود تشكل هذه العصابة إلي الإلكترونات السوي الطاقي d لذرات Mn من أجل سبين أعلى و أسفل.

المنطقة CB1 بين (E_f و 5eV) من أجل سبين أسفل يعود تشكل هذه العصابة إلى تجمع إلكترونات السوى الطاقي d لذرات Co، Mn و Ti ، أما في السبين أعلى تكون مساهمة كبيرة من المدار d لذرات Ti.

المنطقة CB2 بين (5eV و 11eV) من أجل سبين أسفل و أعلى تتشكل هذه العصابة من تجمع إلكترونات السوى الطاقي d لذرات Co و Ti

3.2.4.III. المركب CoMnVAs :

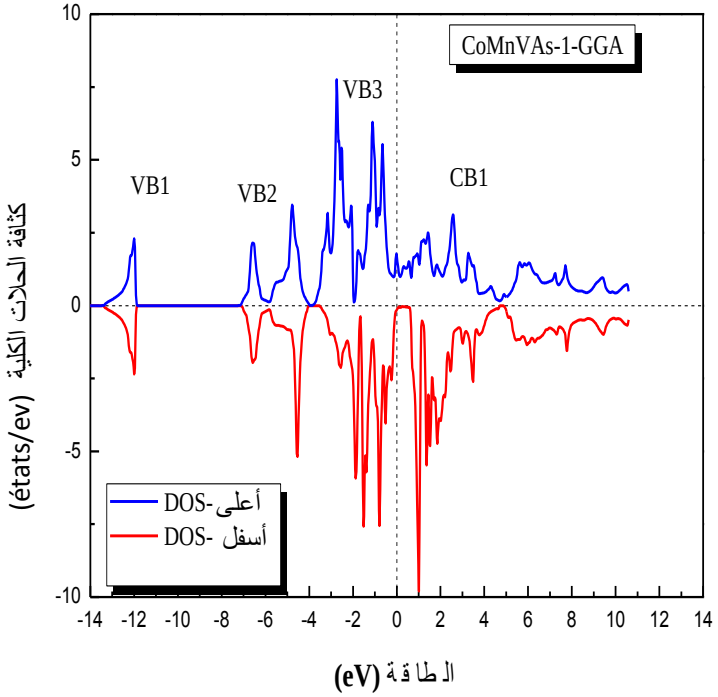
النتائج المتحصل عليها من إستقطاب الإلكترونات (P) موضحة في الجدول أدناه:

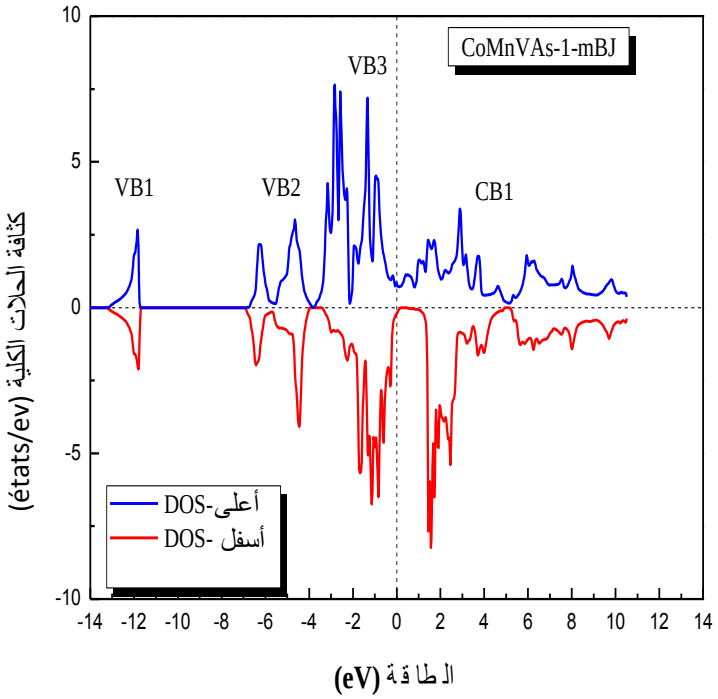
المركب	التقريب	النمط	N(Ef)		p
			N(Ef)↑	N(Ef)↓	
CoMnVAs	GGA	type 1	23,20	1,94	0,85
		type 2	42,08	0,55	0,97
		type 3	18,16	65,61	0,57
	mBJ	type 1	11,73	2,82	0,61
		type 2	4,03	0	1,00
		type 3	20,50	86,63	0,62

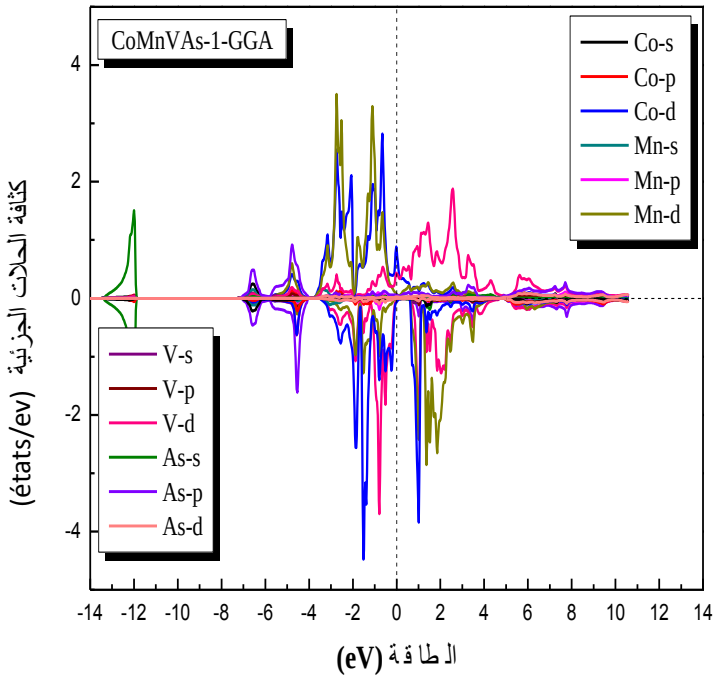
الجدول (8.III) : النسبة المئوية لإستقطاب الإلكترونات P للمركب CoMnVAs لكل من التقريبات GGA و mBJ .

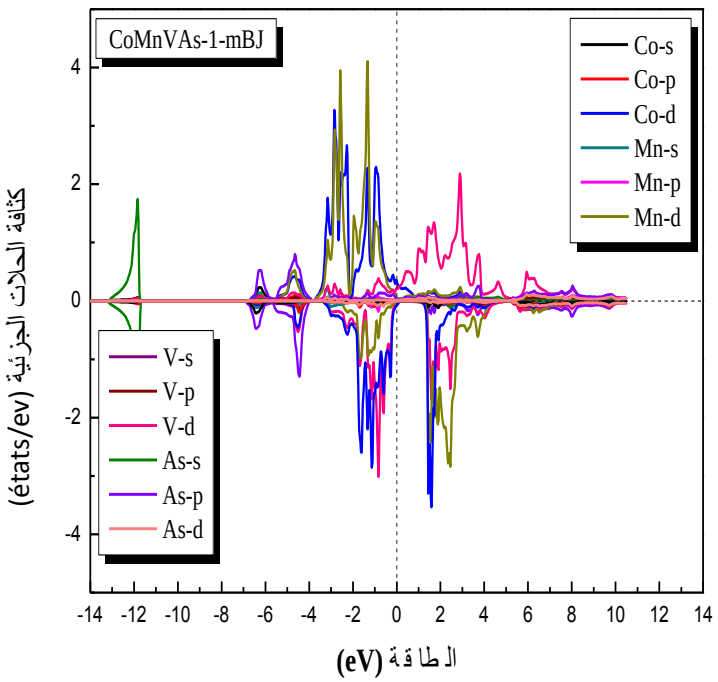
من الجدول نجد أن كل الأنماط للمادة CoMnVAs في التقريبات GGA و mBJ تملك خاصية الحديدومغناطسية ماعدا النمط 2 في تقريب mBJ يملك خاصية نصف معدن.

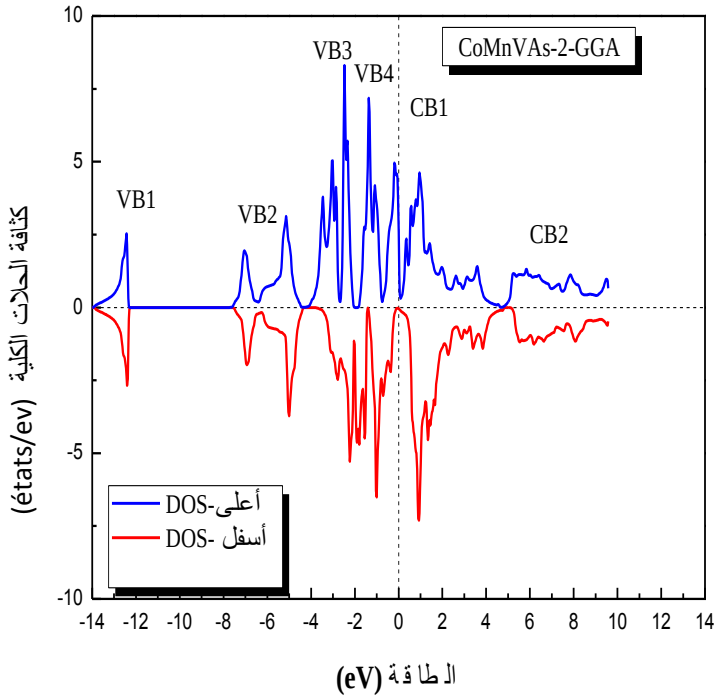
يبين الشكل (10.III) كثافة الحالات الكلية و الجزئية للمركب CoMnVAs في الأنماط الثلاث لكل من التقريبات GGA و mBJ .

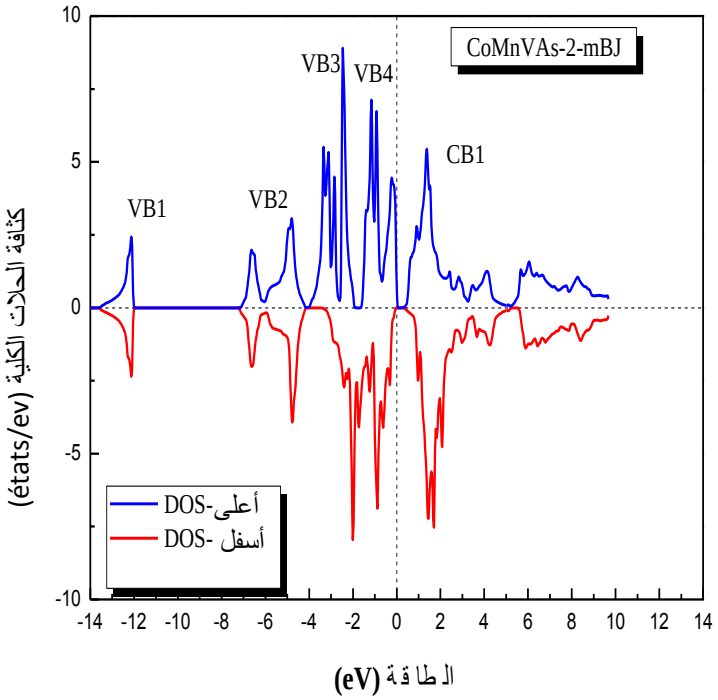

CoMnVAs-1-GGA
VB1
VB2
VB3
CB1
DOS-أعلى
DOS- أسفل
كثافة الحالات الكلية (états/ev)
الطاقة (eV)

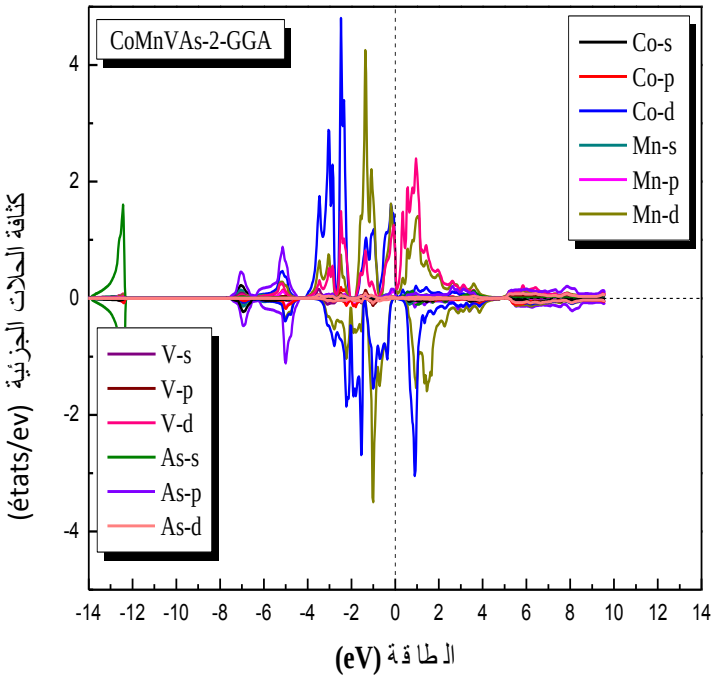

CoMnVAs-1-mBJ
VB1
VB2
VB3
CB1
DOS-أعلى
DOS- أسفل
كثافة الحالات الكلية (états/ev)
الطاقة (eV)

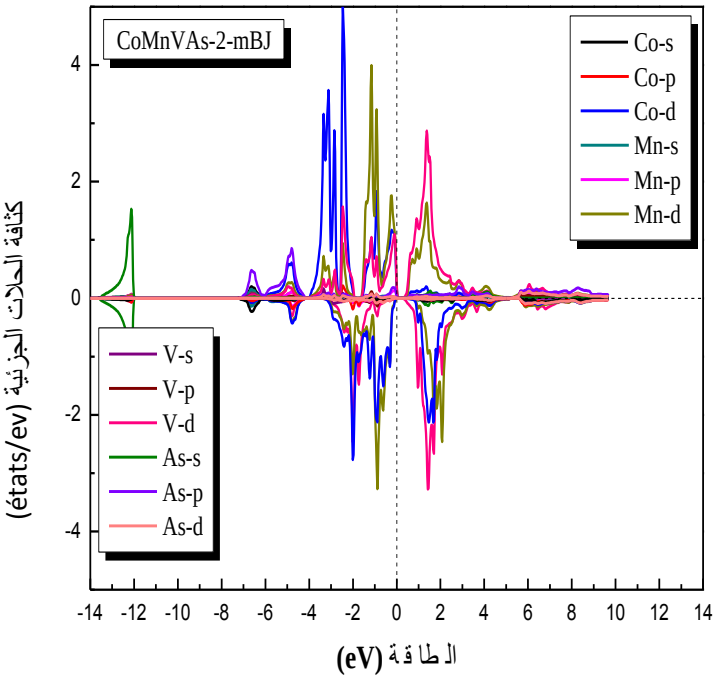

CoMnVAs-1-GGA
Co-s
Co-p
Co-d
Mn-s
Mn-p
Mn-d
V-s
V-p
V-d
As-s
As-p
As-d
كثافة الحالات الجزئية (états/ev)
الطاقة (eV)

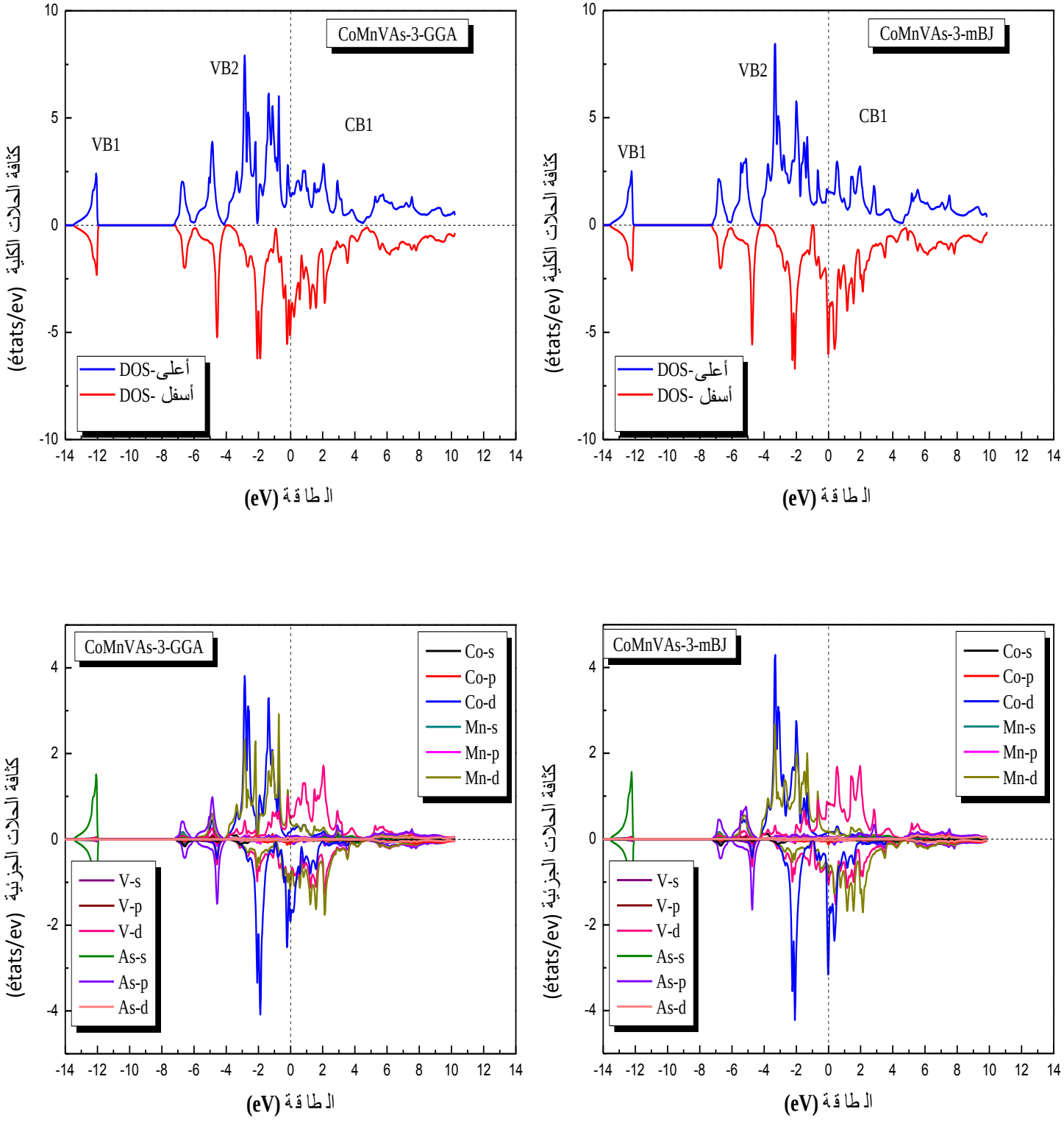

CoMnVAs-1-mBJ
Co-s
Co-p
Co-d
Mn-s
Mn-p
Mn-d
V-s
V-p
V-d
As-s
As-p
As-d
كثافة الحالات الجزئية (états/ev)
الطاقة (eV)


CoMnVAs-2-GGA
VB1
VB2
VB3
VB4
CB1
CB2
DOS-أعلى
DOS- أسفل
كثافة الحلات الكلية (états/ev)
الطاقة (eV)


CoMnVAs-2-mBJ
VB1
VB2
VB3
VB4
CB1
DOS-أعلى
DOS- أسفل
كثافة الحلات الكلية (états/ev)
الطاقة (eV)


CoMnVAs-2-GGA
Co-s
Co-p
Co-d
Mn-s
Mn-p
Mn-d
V-s
V-p
V-d
As-s
As-p
As-d
كثافة الحلات الجزئية (états/ev)
الطاقة (eV)


CoMnVAs-2-mBJ
Co-s
Co-p
Co-d
Mn-s
Mn-p
Mn-d
V-s
V-p
V-d
As-s
As-p
As-d
كثافة الحلات الجزئية (états/ev)
الطاقة (eV)



الشكل (10.III) : كثافة الحالة الكلية و الجزيئية للمركب CoMnVAs في الأنماط الثلاث في كل من التقريبات GGA و mBJ .

حسب التمثيل البياني لكثافة الحالات الكلية والجزئية المبينة في الشكل (10.III) نجد النتائج التالية :

في النمط 1 نلاحظ وجود ثلاث مناطق لعصابة التكافئ (VB1 ,VB2 , VB3) و يفصل بينهما فجوة طاقية. ومنه نجد:

المنطقة VB1 بين (14eV- و 12eV-) نجد مساهمة كبيرة بشدة منخفظة من المدار S لذرات As من أجل كل سبين أعلى وأسفل .

المنطقة VB2 بين (7eV- و 3.5eV-) نجد مساهمة كبيرة من المدار p لذرات As من أجل كل سبين أعلى وأسفل .

المنطقة VB3 بين (3.5eV- و E_f) من أجل سبين أسفل يعود تشكل هذه العصابة إلى تجمع إلكترونات السوى الطاقي d لذراتCo و V ، أما في السبين أعلى تتشكل أيضا من تجمع إلكترونات السوى الطاقيd لذرات Co و Mn .

عصابة النقل CB1 بين (E_fو 13eV-) من أجل سبين أسفل يعود تشكل هذه العصابة إلى تجمع إلكترونات السوى الطاقي d لذرات Co، Mn وTi ، أما في السبين أعلى تكون مساهمة كبيرة من المدار d لذرات Ti.

في النمط 2 نلاحظ وجود أربعة مناطق لعصابة التكافئ (VB1 ,VB2 , VB3, VB4) و يفصل بينهما فجوة طاقية .ومنه نجد:

المنطقة VB1 بين (14eV- و 11eV-) نجد مساهمة كبيرة بشدة منخفظة من المدار S لذرات As من أجل كل سبين أعلى وأسفل .

المنطقة VB2 بين (7eV- و 4eV-) نجد مساهمة كبيرة من المدار p لذرات As من أجل كل سبين أعلى وأسفل.

المنطقة VB3 بين (4 eV- و 1.5-) من أجل سبين أسفل يعود تشكل هذه العصابة إلى تجمع إلكترونات السوى الطاقي d لذرات Co و V ، أما في السبين أعلى تكون مساهمة كبيرة من المدار d لذرات Co.

المنطقة VB4 بين (1.5eV- و E_f) من أجل سبين أسفل يعود تشكل هذه العصابة إلى تجمع إلكترونات السوى الطاقي d لذرات Co و Mn ، أما في السبين أعلى تكون مساهمة كبيرة من المدار d لذرات Mn.

عصابة النقل CB1 بين (E_f و 13eV-) نجد مساهمة كبيرة من المدار d لذرات V من أجل كل سبين أعلى وأسفل .

في النمط 3 نلاحظ وجود منطقتين لعصابة التكافئ (VB1 ,VB2) يفصل بينهما فجوة طاقية.ومن هذا نجد:

المنطقة VB1 بين (14eV- و 12eV-) نجد مساهمة كبيرة بشدة منخفظة من المدار S لذرات As من أجل كل سبين أعلى وأسفل .

المنطقة VB2 بين (eV 4- و7-) من أجل سبين أعلى يعود تشكل هذه العصابة إلي تجمع إلكترونات السوي الطاقي d لذرات Co و Mn ، أما في السبين أسفل تكون مساهمة كبيرة من المدار d لذرات Co .

عصابة النقل CB1 بين (eV 4- و7-) من أجل سبين أسفل يعود تشكل هذه العصابة إلي تجمع إلكترونات السوي الطاقي d لذرات V و Mn ، أما في السبين أعلى تكون مساهمة كبيرة من المدار d لذرات V .

5.III . الخصائص المغناطسية :

1. 5.III. مقدمة:

المواد المغناطيسية لها أهمية تكنولوجية كبيرة وذلك بفضل سلوكها ، من ناحية أخرى المغناطيسية تلعب دورا مهما في وصف الخصائص الأساسية للمادة[9].

يعرف حديدية المغنطة على أنها قدرة المادة على جذب بقوة تحت تأثير الحقل المغناطيسي خارجي ، من أجل فهم كيف أن بعض العناصر الكيميائية أو السبائك قد تمتلك هذه الخاصية يجب علينا أولا وقبل كل شئ أن نهتم بالمغناطسية في المستوى الذرى .

بالنسبة لبعض الذرات العزم المغناطيسي الذري غير معدوم تحت تأثير حقل مغناطيسي خارجي ، العزم المغناطيسي يتحرك في نفس الجهة المغناطسية [10].ونسمي هذه الضاهرة بالبارامغناطسية.

في الصورة الكوكبية للذرة تخضع العناصر لحركتين :

- العزم المغناطيسي الإلكتروني الناتج عن حركته حول النواة "العزم المغناطيسي المداري" $\vec{L}$.
- عزم المغناطيسي المغزلي المسؤول عن العزم السبيني $\vec{S}$.

يكون للذرات التي طبقتها الإلكترونية ممتلئة جزئيا عزوم مغناطيسة مدارية ($\vec{L}$) أو سبنية ($\vec{S}$) غير معدومة.

الخاصية المغناطسية للمركبات ناتجة عن التفاعلات الممثلة للعزم $\vec{L}$ و $\vec{S}$ المرتبطة بكل ذرة مغناطسية ، وفق لمكانيك الكم يتم كتابة العزم المغناطيسي (كمجموع عزوم مغناطسية مدارية وسبنية) كالتالي :

$$\vec{m} = \vec{m}_0 + \vec{m}_s = -\mu_B \vec{L} - 2\mu_B \vec{S} \qquad (6.III)$$

μ_B : بور ماجنيتون وهو كم العزم المغناطيسي

2.5.III .تصنيف المواد المغناطسية :

1.2.5.III . الديا مغناطسية :

حسب قانون لورنز ترجع الديامغناطسية إلى تغير في الحركة المدارية للإلكترونات تحت تأثير مجال مغناطيسي خارجي ، فتتمغنط عكسه وبسبب ذلك تتحرك من المناطق التي تكون فيها شدة المجال كبيرة إلي المناطق التي تكون فيها شدة المجال ضعيفة ، ومنه تكون إشارة قابلية التمغنط سالبة للمواد الديامغناطسية، وتظهر هذه الخاصية بوضوح في المواد التي تكون عزومها المغناطسية الذرية الكلية منعدمة[9].

2.2.5.III .البارامغناطسية :

تتمغنط مثل هذه المواد في نفس اتجاه المجال الخارحي و لذلك فإنها تنجذب إلي المناطق التي تكون فيها شدة المجال أكبر ، وبهذا تكون إشارة قابلية التمغنط موجبة وتعتمد على شدة المجال المغناطيسي الخارجي ودرجة الحرارة[10].

3.2.5.III .المواد الحديدومغناطسية :

يكون للجسم الممغنط عزم مغناطيسى M يتكون من عزوم مغناطيسية ذرية ذات اتجاه منتظم ولها كمية تحرك زاوية ذات اتجاه منتظم ، يعد الحديد نموذجا مثاليا للمواد الحديدومغناطسية ، تكون إشارة قابلية التمغنط موجبة لكنها أكبر كثيرا من تلك المواد البارا مغناطسية ، عند تسخين المواد الحديدومغناطيسية تصبح خصائصها المغناطسية أقل وضوحا وصولا إلى درجة حرارة كوري T_C(متعلقة بكل مادة) عندها تفقد المادة خصائصها وتتحول إلى مواد بارامغناطسية[11].

4.2.5.III .الحديد والمغناطسية المضادة :

ترجع ظاهرة الحديد والمغناطسية المضادة إلى تآثر بين الذرات في الشبكة يعمل على ترتيب منتظمة لكنه لا يوجد مغنطة تلقائية لأن عزوم المغازل في المواقع المجاورة لشبكية تكون في حالة توازى مضاد ويعادل

بعضها البعض ، ويوجد هذا التركيب فقط تحت درجة حرارة معينة تسمى نقطة نيل T_N حيث عند إجتيازها تتحول المادة من الحديد والمغناطسية المضادة إلي الديا مغناطسية[11].

3.5.III .العزم المغناطيسي للمركبات (Z=Al, As و Y=Ti, V) CoMnYZ :

قيم العزوم المغناطيسية المحسوبة في هذا العمل بواسطة التقريبين GGA و mBJ قورنة بالنتائج النظرية المتوفرة .

الجدول (9.III) يمثل النتائج المحصل عليها

القيم النظرية	μ_{tot}	μ_y	μ_x	μ_{Mn}	μ_{Co}	μ_{int}	النمط	التقريب	المركب
−0.98[7]	**4,90362**	**-0,03357**	**0,50856**	**2,84045**	**1,43001**	**0,15817**	**1**	**GGA**	**CoMnTiAl**
	0,99346	**0,01227**	**0,16445**	**0,96841**	**0,2182**	**-0,01644**	**2**		
	4,69127	**-0,01309**	**-0,01935**	**3,1926**	**1,49776**	**0,03336**	**3**		
	5,00007	**-0,05129**	**0,49437**	**2,93481**	**1,59441**	**0,02777**	**1**	**Mbj**	
	0,99662	**-0,01323**	**-0,18824**	**1,0337**	**0,16701**	**-0,00262**	**2**		
	4,84597	**-0,02881**	**-0,05332**	**3,31601**	**1,67245**	**-0,06037**	**3**		
1.00[7]	**3,371**	**0,02034**	**-0,55516**	**2,81432**	**1,19988**	**-0,10838**	**1**	**GGA**	**CoMnTiAs**
	1,00001	**0,00166**	**-0,09185**	**0,49807**	**0,65713**	**-0,065**	**2**		
	0,99992	**0,00177**	**-0,09148**	**0,49818**	**0,65732**	**-0,06587**	**3**		
	3,5168	**0,04572**	**-0,74426**	**3,00204**	**1,47723**	**-0,26393**	**1**	**Mbj**	
	0,99995	**0,00371**	**-0,0954**	**0,26808**	**0,95503**	**-0,13147**	**2**		
	0,99995	**0,0055**	**-0,08438**	**0,23215**	**0,97928**	**-0,1326**	**3**		
2.00[7]	**2,01875**	**0,02195**	**-1,49922**	**2,94937**	**0,72085**	**-0,17421**	**1**	**GGA**	**CoMnVAs**
	1,99644	**0,01704**	**0,35338**	**0,42619**	**1,21701**	**-0,01719**	**2**		
	2,87917	**-0,0055**	**-0,57244**	**2,52633**	**1,03255**	**-0,10178**	**3**		
	2,03282	**0,0541**	**-1,97315**	**3,18053**	**1,13158**	**-0,36022**	**1**	**Mbj**	
	1,99998	**0,02709**	**0,25856**	**0,39698**	**1,42409**	**-0,10674**	**2**		
	3,69459	**0,02578**	**-0,62674**	**3,05855**	**1,39836**	**-0,16136**	**3**		

الجدول (9.III) : العزم المغناطيسي الكلي $(\mu_B)\mu_{tot}$ مع العزم المغناطيسي الجزئي للذرات (Co ,Mn ,Ti Al, V, As) محسوبة بواسطة التقريبين GGA و mBJ.

حسب الجدول (9.III) نلاحظ :

- المساهمة الأكثر في قيمة العزم المغناطيسي هي مساهمة الذرات Mn, Co, V لكل من المركبات الثلاث.

- نشير إلي أن العزم المغناطيسي الكلي يساوي $\mu_B = 0.98$ للمركب CoMnTiAl في النمط الثاني الأكثر إستقرارا ويساوي $\mu_B = 1$ للمركب CoMnTiAs في النمط الثاني الأكثر إستقرارا ، ويساوي $\mu_B = 2$ للمركب CoMnVAs في النمط الأول الأكثر إستقرارا.

- قيم العزوم المغناطسية المحسوبة في الأنماط الأكثر إستقرارا هي متوافقة مع النتائج النظرية المتوفرة .

6.III .خصائص المرونة :

1.6.III .مقدمة :

خصائص المرونة للحالة الصلبة من أهم خصائص الحالة الأساسية للمواد الصلبة ، حيث أنها تزودنا بمعلومات عن معادلة الحالة الأساسية (EOS) ، السعة الحرارية ، الضغط الخارجي ، درجة الحرارة ديباي، وتحدد أيضا من خلالها على طبيعة الروابط بين المستويات المتجاورة الذرية وقساوة وليونة المواد.

تعرف معاملات المرونة C_{ij} على أنها الإجهاد المطبق على التشوه الناتج وتعطى بالعلاقة التالية :

$$\sigma_i = C_{ij}\varepsilon_i$$

بحيث توصف مصفوفتي الإجهاد و التشوه $\sigma = [\sigma]$ و $\varepsilon = [\varepsilon]$ علي الشكل التالي[13] :

$$[\sigma] = \begin{bmatrix} \sigma_1 & \sigma_6 & \sigma_5 \\ \sigma_6 & \sigma_2 & \sigma_6 \\ \sigma_5 & \sigma_6 & \sigma_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sigma_1 \\ \sigma_2 \\ \sigma_3 \\ \sigma_4 \\ \sigma_5 \\ \sigma_6 \end{bmatrix}$$

$$[\varepsilon] = \begin{bmatrix} \varepsilon_1 & \varepsilon_6 & \varepsilon_5 \\ \varepsilon_6 & \varepsilon_2 & \varepsilon_6 \\ \varepsilon_5 & \varepsilon_6 & \varepsilon_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \varepsilon_3 \\ \varepsilon_4 \\ \varepsilon_5 \\ \varepsilon_6 \end{bmatrix}$$

ولوصف معاملات المرونة C_{ij} نستخدم خصائص جداء المصفوفة[13].

$$\begin{bmatrix}\sigma_1\\ \sigma_2\\ \sigma_3\\ \sigma_4\\ \sigma_5\\ \sigma_6\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}C_{11} & C_{12} & C_{13} & C_{14} & C_{15} & C_{16}\\ C_{12} & C_{22} & C_{23} & C_{24} & C_{25} & C_{26}\\ C_{13} & C_{23} & C_{33} & C_{34} & C_{35} & C_{36}\\ C_{14} & C_{24} & C_{34} & C_{44} & C_{45} & C_{46}\\ C_{15} & C_{25} & C_{35} & C_{45} & C_{55} & C_{56}\\ C_{16} & C_{26} & C_{36} & C_{46} & C_{56} & C_{66}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\varepsilon_1\\ \varepsilon_2\\ \varepsilon_3\\ \varepsilon_4\\ \varepsilon_5\\ \varepsilon_6\end{bmatrix}$$

ونظرا لتناظر العينات المكعبة عناصر المصفوفة C_{ij} تصبح[13] :

$$[C_{ij}]=\begin{bmatrix}C_{11} & C_{12} & C_{12} & 0 & 0 & 0\\ C_{12} & C_{11} & C_{12} & 0 & 0 & 0\\ C_{12} & C_{12} & C_{11} & 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0\\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44}\end{bmatrix}$$

إذن في حالة العينات مكعبة تكفي المعاملات C_{44} ، C_{12} و C_{11} لتحديد معاملات المرونة.

ثوابت المرونة C_{44} ، C_{12} و C_{11} حسبت إنطلاقا من حسابات التقريب الأول من أجل المواد أحادي البلورة .

الشروط الإستقرارالميكانيكية التقليدية في البنية المكعبة يعبرعنها بدلالة ثوابت المرونة كالتالي[12] :

$$C_{11}>0\,,C_{44}>0,C_{11}-C_{12}>0,(C_{11}+2C_{12})>0\,,C_{11}>B>C_{12}$$

معامل يونغ E يعرف على أنه النسبة بين الإجهاد والتشوه إنطلاقا من تجربتي الإنضغاط و التمدد، يستعمل هذا المعامل من أجل قياس صلابة الجسم الصلب ويعطى بالشكل التالي:

$$E=\frac{(C_{11}-C_{12})(C_{11}+2C_{12})}{(C_{11}+C_{12})}$$

ومعامل تماثل المناحي يعطى بالعبارة التالية[14] :

$$A=\frac{2C_{44}}{C_{11}-C_{12}}$$

2.6.III .ثوابت المرونة للسبائك CoMnYZ (Y=Ti, V و Z=Al, As) :

القيم المحسوبة لثوابت المرونة عند الضغط $P = 0GPa$ و $T = 0\ K°$ هي مدونة في الجدول (10.III) من أجل المركبات CoMnYZ (Y=Ti, V و Z=Al, As) مع غياب قيم النتائج التجربية والحسابات النظرية للمقارنة.

T	v	E	G	B	A	$C_{11}+2C_{12}$	$C_{11}-C_{12}$	C_{44}	C_{12}	C_{11}		المركبات
386.45	**0,38**	**123,10**	**44,50**	**175,54**	**26,87**	**183,82**	**9,42**	**126,60**	**172,39**	**181,82**	1	CoMnTiAl
563.41	**0,27**	**247,18**	**97,19**	**180,44**	**1,62**	**279,43**	**145,47**	**118,00**	**131,95**	**277,43**	2	
466.47	**0,29**	**166,64**	**64,41**	**134,55**	**5,76**	**165,98**	**44,14**	**127,03**	**119,84**	**163,98**	3	
0	**0,74**	**-231,42**	**-66,32**	**157,54**	**-2,43**	**127,22**	**-48,49**	**58,93**	**173,71**	**125,22**	1	CoMnTiAs
311.52	**0,41**	**101,85**	**36,05**	**194,64**	**12,19**	**206,31**	**14,50**	**88,42**	**189,81**	**204,31**	2	
311.79	**0,42**	**102,25**	**36,06**	**207,49**	**11,96**	**219,30**	**14,72**	**88,03**	**202,58**	**217,30**	3	
345.92	**0,38**	**124,49**	**45,13**	**171,69**	**3,88**	**200,25**	**39,84**	**77,30**	**158,41**	**198,25**	1	CoMnVAs
315.31	**0,42**	**107,48**	**37,85**	**223,68**	**4,87**	**244,96**	**28,93**	**70,45**	**214,04**	**242,96**	2	
551.88	**0,17**	**283,87**	**120,94**	**144,95**	**-1,00**	**86,08**	**-91,31**	**45,94**	**175,39**	**84,08**	3	

الجدول (10.III): ثوابت المرونة C_{ij} وقيم كل من A، B ، G ، E ، v ، T_D لكل من المركبات CoMnYZ (Y=Ti, V و Z=Al, As)

نلاحظ من خلال الجدول (10.III) مايلي :

-أن كل الثوابت موجبة وتخضع لشرط الإستقرار بإستثناء معاملات المرونة في النمط 1 للمركب CoMnTiAs ، والنمط 3 للمركب CoMnVAs .

-بالنسبة للأنماط المستقرة كان معامل تماثل المناحي أكبر من الواحد (A>1) ومنه فإن المادة أكثر صلابة في الإتجاه [111]

-كانت قيمة معامل بواسن ($v \approx 0,3$) للأنماط التي تحقق شرط الإستقرار ، دلالة على أن نوع الروابط بين الذرات أيونية.

المراجع:

[1] L. Hedin and B. I. Lundqvist, j. phys. C 4, 2064 (1971).

[2] P. Blaha, K. Schwarz, P. sorantin, and S. B. TRICKEY? Comput. Phys. Commun. 59,399 (1990)

[3] J. P. Perdew, S. Burke et M. Ernzerhof, Phys. Lett. 77, 3865 (1996).

[4] F. Tran and P. Blaha, Phys Rev.lett 102.226401 (2009).

[5] Xu Dai, G. Liu, G.H. Fecher, C. Felser, Y. Li, H. Liu, J. Appl. Phys. 105 (2009) 07E901.

[6] F.D. Murnaghan, Proc. Natl. Acad. Sci. USA 30 (1944) 244.

[7] C. Felser and A. Hirohata (eds.), *Heusler Alloys*,Springer Series in Materials Science 222, DOI 10.1007/978-3-319-21449-8 (2016)

[8] : R.J. Soulen Jr., et al., Science 282 (1998) 85.

[9] M. Gerl et J. B. Issi, Traité des Matériaux volume 8, physique des Matériaux, presses polytechniques et Universitaires Romandes (1997).

[10] S.I. Tomonaga, University of Chicago press, 1997. ISBN 0-226-80794-0 (1997).

[11] Charles Kittel, introduction to Solid State Physics, New York, JOHN wiley and Sons,1996, ISBN 978-0471111818

[12] B. Holm, R. Ahuja, Y. Yourdshahyan, B. Johanson, B.I. Lundqvist, Phys. Rev 59 (1999) 12777.

[13] N. Labgaa, Thése de Doctorat en physique du solide, Université Ferhat Abbas-Sétif (2011)

[14] M.J. Mehl, J.E. Osburn, D.A. Papaconstatopoulos and B.M. Klein, Phys. Rev. B 42 (1991) 5362

خلاصة عامة :

في هذا العمل قمنا بدراسة الخصائص البنيوية مثل ثابت الشبكة a(A°) معامل الإنضغاطية B والمشتقة الأولي لهذا المعامل B' وكذا الإستقرار البنيوي في الحالتين المغناطسية والغير المغناطسية ، الخصائص الإلكترونية مثل بنية عصابة الطاقة كثافة الحالات الكلية و الجزيئية ، الخصائص المغناطسية و المتمثلة في العزم المغناطيسي الكلي والجزئي وأخيرا الخصائص المرونية مثل ثوابت المرونة مع بعض الوسائط المتعلقة بها لسبائك هسلر الرباعية CoMnYZ (Y=Ti, V و Z=Al, As).

إعتمدنا في الحسابات على طريقة الموجة المستوية المتزايدة خطيًا، المدمجة في برنامج wien2k في الإطار العام لنظرية الكثافة الدالية و ذلك في كل من التقريبي التدرج المعمم (GGA) وتقريب المعدل لبريك جونسن (mBJ) من أجل تحسين الخصائص الإلكترونية .

النتائج المبدئية لعملنا هذا مبينة كما يلي:

- كانت نتائج جيدة لثابت لشبكة البلورية a(A°) مقارنة مع القيم النظرية لكل من المركبات CoMnTiAl ، CoMnTiAs و CoMnVAs وتم تحديد معامل الإنضغاطية B والمشتقة الأولى لمعامل الإنضغاطية B' حيث لم يثبت أي حساب نظري وقياس تجريبي لهذين الأخيرين.
- عند إستبدال الذرة V بالذرة Ti نلاحظ زيادة في الثابت الشبكة البلورية، أما عند إستبدال الذرة Al بالذرة As نلاحظ تناقص في ثابت الشبكة البلورية وزيادة معامل الإنضغاطية.
- الحالة الأكثر إستقرارا للمركبات CoMnYZ (Y=Ti, V و Z=Al, As) هي الحالة المغناطسية أي السبين في تقريب GGA .
- النمط 2 الأكثر إستقرارا للمركبات CoMnTiAl و CoMnTiAs ، أما المركب CoMnVAs فهو أكثر إستقرارا في النمط 1 من التقريب GGA.
- أما في الخصائص الإلكترونية نجد أن المركب CoMnTiAl لديه خاصية معدن في النمط الأول لسبين أعلى مهما كان التقريب المستعمل GGA و mBJ. اما في حالة سبين اسفل فان للمركب السابق له خاصية نصف معدن وبانتقال غير مباشر (مانع طاقي غير مباشر (Γ-L)).

  وفي النمط الثاني فان للمركب CoMnTiAl له خاصية نصف معدن غير مثالي في الحالة سبين اسفل و في الحالة العكسية سبين اعلى فان له الخاصية المعدنية مهما كان التقريب المستعمل .

  وفي النمط الثالث فان للمركب CoMnTiAl له خاصية المعدنية في الحالتين سبين اعلى وسبين اسفل مهما كان التقريب المستعمل GGA و mBJ.

- وجدنا أن المركب CoMnTiAs في النمط الأول له خاصية نصف معدن غير مثالي في حالة سبين أعلى وفي الحالة العكسية سبين أسفل فإن له خاصية معدنية مهما كان التقريب المستعمل GGA و mBJ.

  وفي النمط الثاني والثالث فإن للمركب CoMnTiAl له خاصية معدن لسبين أعلى مهما كان التقريب المستعمل GGA وmBJ ، أما في حالة سبين أسفل فإن للمركب السابق له خاصية نصف معدن بإنتقال مباشر (مانع طاقي مباشر Γ).
- وجدنا أن المركب CoMnVAs في النمط الأول له خاصية نصف معدن غير مثالي أعلى وفي الحالة العكسية سبين أسفل فإن له خاصية معدنية مهما كان التقريب المستعمل GGA و mBJ.

  وفي النمط الثاني فإن للمركب CoMnVAs له خاصية معدن لسبين أعلى مهما كان التقريب المستعمل GGA و mBJ ، أما في حالة سبين أسفل فإن للمركب السابق له خاصية نصف معدن بإنتقال غير مباشر (مانع طاقي غير مباشر (X- Γ))

  وأما النمط الثالث فان للمركب CoMnVAs له خاصية المعدنية في الحالتين سبين اعلى وسبين اسفل مهما كان التقريب المستعمل GGA و mBJ.
- وفي كثافة الحالة وجدنا أنا خاصية المركبات متعلقة بالمدار d لكل من Mn، Co ، Ti و V المسؤولة على الإنتقال بين عصابة النقل وعصابة التكافئ
- قيم العزوم المغناطسية المحسوبة في الأنماط الأكثر إستقرارا هي متوافقة مع النتائج النظرية المتوفرة حيث أن العزم المغناطيسي الكلي يساوي $\mu_B = 0.98$ للمركب CoMnTiAl ويساوي $\mu_B = 1$ للمركب CoMnTiAs ، ويساوي $\mu_B = 2$ للمركب CoMnVAs في الحالة الأكثر إستقرارا.
- في الخصائص المرونة نجد بأن كل الأنماط مستقرة بإستثناء النمط 1 للمركب CoMnTiAs ، والنمط 3 للمركب CoMnVAs ، أما بالنسبة للأنماط المستقرة فإن المادة أكثر صلابة في الإتجاه [111] ، و الروابط بين الذرات أيونية

قائمة الجداول

الجدول (1.III) : قيم كل من R_{mt} , K_{point} , $R_{mt}*K_{max}$ للمركبات CoMnYZ (Y=Ti,V و Z=Al ,As)

30

الجدول (2.III) : قيم كل من ثابت الشبكة a(A°) و معامل الإنضغاطية B و المشتقة الأولى لمعامل الإنضغاطية B' ، للمركبات CoMnTiAl ، CoMnTiAs و CoMnVAs .

31

الجدول (3.III) : قيمة المانع الطاقي من أجل المركب CoMnTiAl لنمط الأول و الثاني في التقريب GGA وmBJ.

39

الجدول (4.III) : قيمة المانع الطاقي من أجل المركب CoMnTiAs لنمط الثاني والثالث لسبين أسفل في كل من التقريبات mBJ و GGA.

43

الجدول (5.III) : قيمة المانع الطاقي من أجل المركب CoMnVAs لنمط الثاني في التقريب mBJ

47

الجدول (6.III) : نسبة المئوية لإستقطاب الإلكترونات P للمركب CoMnTiAl لكل من التقريبات GGA و mBJ

48

الجدول (7.III) : نسبة المئوية لإستقطاب الإلكترونات P للمركب CoMnTiAs لكل من التقريبات GGA و mBJ

52

الجدول (8.III) : نسبة المئوية لإستقطاب الإلكترونات P للمركب CoMnVAs لكل من التقريبات GGA و mBJ

57

الجدول (9.III) : العزم المغناطيسي الكلي $\mu_{tot}(\mu_B)$ مع العزم المغناطيسي الجزئي للذرات (Co ,Mn ,Ti Al, V, As) محسوبة بواسطة التقريبين GGA و mBJ.

64

الجدول (10.III) : ثوابت المرونة C_{ij} وقيم كل من A، B ، G ، E ، ν ، T_D لكل من المركبات CoMnYZ (Y=Ti, V و Z=Al, As)

67

قائمة الأشكال

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

الشكل (1.II): كمون « Muffin-Tin » (MT) 15

الشكل(2. II) : عدة نوافذ طاقية 24

الشكل (3.II) : بنية برنامج Wien2K 26

الشكل (1.III): البنية البلورية للمركبات CoMnYZ (Y=Ti, V و Z=Al, As) من أجل الأنماط الثلاث 29

الشكل (2.III): تغير الطاقة الكلية بدلالة الحجم للمركب CoMnTiAl ، CoMnTiAs و CoMnVAs في الأنماط الثلاث 33

الشكل (3.III): تغير الطاقة الكلية بدلالة الحجم للمركبات CoMnYZ (Y=Ti, V و Z=Al, As) 34

الشكل (4.III): يمثل المنطقة برليون الأولى (CFC) 35

الشكل (5.III): عصابة الطاقة للمركب CoMnTiAl من أجل الأنمط الثلاث محسوبة في التقريبات GGA و mBJ 38

الشكل (6.III) : عصابة الطاقة للمركب CoMnTiAs من أجل الأنمط الثلاث محسوبة في التقريبات GGA و mBJ 42

الشكل (7.III) : عصابة الطاقة للمركب CoMnVAs من أجل الأنمط الثلاث محسوبة في التقريبات GGA و mBJ 46

الشكل (8.III) : كثافة الحالة الكلية و الجزيئية لمركب CoMnTiAl للأنماط الثلاث في كل من القريبات GGA و mBJ 51

الشكل (9.III) : كثافة الحالة الكلية و الجزيئية لمركب CoMnTiAs للأنماط الثلاث في كل من القريبات GGA و mBJ 55

الشكل (10.III) : كثافة الحالة الكلية و الجزيئية لمركب CoMnVAs للأنماط الثلاث في كل من القريبات GGA و mBJ 60

Abstract

By the method of linearized augmented plane waves with total potential (FP-LAPW) which based on density functional theory (DFT). We studied the structural, electronic, magnetic and elastic properties in generalized gradient approximation (GGA) (Y = Ti, V and Z = Al, As) in the three types, we used the modified Becke-Johnson (mBJ) approximation to calculate the energy bands and the density of the states. We found results better than an approximation (GGA).

These materials have technological and technical importance because of their spintronic character, these materials are classified in ferromagnetic compounds of semi-metal property They have an energy gap in a single direction of spin, the bonds between the atoms are ionic, the results are prophetic in the absence of experimental measurements and theoretical calculations.

Résumé

Par la méthode des ondes planes augmentées linéarisées à potentiel total (FP-LAPW) qui est basée sur la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT). Nous avons étudié les propriétés structurelles, électroniques, magnétiques et élastiques dans l'approximation du gradient généralisé (GGA) (Y = Ti, V et Z = Al, As) dans les trois types, nous avons utilisé l'approximation modifiée de Becke-Johnson (mBJ) pour calculer Les bandes d'énergie et la densité des états. Nous avons trouvé des résultats meilleurs que l’approximation (GGA).

Ces matériaux ont une importance technologique et technique en raison de leur caractère spintronique, ces matériaux sont classés dans des composés ferromagnétiques de propriété semi-métallique Ils ont un gap d'énergie dans une seule direction de spin, les liens entre les atomes sont ioniques, les résultats sont prophétiques dans l'absence de mesures expérimentales et de calculs théoriques.

ملخص

قمنا بواسطة طريقة الأمواج المستوية المتزايدة خطيا والكمون الكامل (FP-LAPW) والتي تتركز علي نظرية دالية الكثافة DFT لدراسة الخصائص البنيوية ، الإلكترونية ، المغناطسية و المرونية في تقريب التدرج المعمم (GGA)للمركبات هسلر الرباعي CoMnYZ (Y=Ti, V و Z=Al, As) في الأنماط الثلاث وقد إستعملنا تقريب المعدل لبريك-جونسن (mBJ) بغية حساب عصابات الطاقة و كثافة الحالات فوجدنا تحسن نتائج مقارنتا بتقريب (GGA).

هذه المواد لديها أهمية تكنولوجية وتقنية بخاصيتها السبين الإلكتروني ، تصنف هذه المواد ضمن مركبات حديدومغناطسية بخاصية نصف معدن به مانع طاقي في إتجاه واحد للسبين،حيث أن الروابط بين الذرات أيونية و تعتبر النتائج تنبئية وذلك في ظل عدم توفر القياس التجريبي و الحسابات النظرية.