

جامعة ملحد خيضر بسكرة
كلية العلوم الدقيقة وعلوم الطبيعة والحياة
قسم علوم المادة



مذكرة ماستر

علوم المادة
فيزياء
فيزياء المادة المكثفة

رقم: أدخل رقم تسلسل المذكرة

إعداد الطالب:
عبد المجيد أعر
يوم: 28/09/2020

الخصائص البنيوية والالكترونية لبعض مركبات هسلر

لجنة المناقشة:

رئيس	أ.مساعد أ جامعة بسكرة	ناصر أمال
مقرر	أ.مساعد أ جامعة بسكرة	بوذيب ليلي
مناقش	أ.محاضر ب جامعة بسكرة	لعياضي

السنة الجامعية : 2020/2019

شكر و عرفان

الحمد لله الذي أنار لي درب العلم والمعرفة وأعانني على أداء هذا
الواجب ووفقني إلى إنجاز هذه المذكرة

أتوجه بجزيل الشكر والامتنان إلى كل من ساعدني من قريب أو من
بعيد على إنجاز هذه المذكرة وأخص بالذكر الأستاذة المشرفة

بوذيب ليلي

التي لم تبخل علي بتوجيهاتها ونصائحها القيمة، مساعدتها الدائمة وتعبها
لأجل تمييز هذا العمل، كما أشكر الأساتذة الأفاضل أعضاء اللجنة

المناقشة

كما أتقدم بأجل الشكر وأوفى العرفان لكل من زرع في التفاضل
والتفاني والمضي قدما نحو المبتغى، لكل من كان لي سندا خلال مسار
دراسي حافل وأخص بالذكر الأستاذ عمراوي محمد وجميع الأساتذة
الذين درست عندهم

كما لا أنسى رفيق الدرب محمد و كل الزملاء والزميلات الذين قاسمتهم
حجرة الدراسة ، زملاء الدفعة تخصص فيزياء

لكل هؤلاء أتقدم بأسمى تعابير الشكر والامتنان والتقدير والعرفان

الإهداء

إلى من علمتني الصمود وجعلتني رابط الجأش، التي أنجبت وربت
وسهرت و مازالت لحد الآن رمزا للصبر والعطاء ، شعلة أهلي أمي
الغالية أدامها الله

إلى من كان لي سندا و ذخرا و قدوة طوال هذه الحياة ، أحمل اسمه
بكل فخر أبي الغالي شفاه الله

إلى أغلى ما ملكت إخوتي ابراهيم ، عبد الحميد ، عبد الرحمان ، عبد
الحفيظ وأخواتي وأسرتي جميعا

إلى رفقاء الدرب بن عبد ربه ممد ، صباح سيفه الله ، بن يحيى علي
وزملاء الدراسة زكرياء ، عبد الناصر ، بلقاسم ، عز الدين ، سفيان ، رابع
، عبد الرؤوف ، حسين ، حسان ،

إلى كل من علمني حرفا سنا برفقه أضاء الطريق أمامي



1 مقدمة

الفصل الأول: نظرية دالة الكثافة (Density Functional Theory) DFT

12 1. I مقدمة

12 2. I نظرية دالة الكثافة (DFT)

12 1.2. I معادلة شرودينجر (Schrödinger)

13 2.2. I تقريب بورن-أوبنهايمر (Born-Oppenheimer approximation)

14 3.2. I تقريب هارتري-فوك (Hartree-Fock)

15 4.2. I نظرية دالية الكثافة DFT

16 1. 4.2. I نظرية هوهنبارغ-كوهن (Hohenberg-Kohn)

16 2. 4.2. I معادلة كهون-شام (Kohn-Sham)

19 3. 4.2. I دالية تبادل ارتباط

19 5.2. I تقريبات دالية الكثافة

19 1. 5.2. I تقريب كثافة الموضع LDA (The Local Density Approximation)

20 2. 5.2. I تقريب التدرج المعمم GGA (Generalized Gradient Approximation)

21 المراجع

الفصل الثاني: طريقة الأمواج المستوية المتزايدة خطيا والكمون الكامل

24 1. II مقدمة

24 2. II طريقة الأمواج المستوية APW (Augmented Plane Wave)

25 3. II مبدأ طريقة الأمواج المستوية المتزايدة خطيا LAPW

26 4. II مبدأ طريقة الأمواج المستوية المزادة خطيا والكمون الكامل FP – LAPW

27 1. 4. II برنامج Wien2K

28 Wien2K برنامج استخدامات	II .4. 2
30 المراجع	

الفصل الثالث: سموميات من سبائك هسلر (Heusler)

32 1. مقدمة	III
32 2. سبائك هسلر (Heusler)	III
32 1.2. الخصائص البلورية	III
34 2.2. الخصائص المغناطيسية	III
34 1.2.2. اسبائك حديدية المغنطة (Ferromagnetisme)	III
35 2.2.2. سبائك حديدية مضادة (Antiferromagnetisme)	III
35 3.2.2. سبائك فيريمغناطيسية (Ferrimagnetique)	III
36 3.2. تطبيقات سبائك هسلر	III
37 1.3.2. تطبيق سبائك هسلر في الالكترونيات (spintroniques)	III
37 2.3.2. تطبيقات أخرى	III
38 المراجع	

الفصل الرابع: النتائج والمناقشة

40 1. مقدمة	VI
42 2. دراسة التقارب	VI
42 1.2. تهيئة عامل $R_{MTmin} * K_{max}$	VI
43 2.2. تهيئة عدد النقاط Kpoint	VI
45 3. الخصائص البنيوية	VI
45 4. الخصائص الالكترونية	VI
45 1.4. عصابات الطاقة	VI
49 2.4. كثافة الحالات الكلية و الجزئية	VI
52 المراجع	
53 خلاصة عامة	
54 ملخص	

قائمة الأشكال

الصفحة	العنوان	الرقم
17	مخطط يعطي العلاقة بين عدد كبير من العناصر النظام في الحقيقة والتأثيرات المطبقة على النظام لكوهن - شام.	1. I
18	خوارزمية حل معادلة كوهن - شام	2.I
24	شكل كمن MT	1.II
29	بنية برنامج Wien2K	2.II
33	بنية شبكة هاسلر	1.III
33	البنى البلورية لشبكة هاسلر	2.III
34	ترتيب العزوم في حالة فيرومغناطيسية	3.III
35	ترتيب العزوم في حالة فيرو مغناطيسية	4.III
35	ترتيب العزوم في حالة فيرومغناطيسية	5.III
36	صمام العزم المغزلي vannes de spin	6.III
37	مقاومة مغناطيسية نفقية	7.III
41	البنية البلورية للمركبين CO_2ZrSn و CO_2TiSn	1.VI
42	منحنى تغير الطاقة بدلالة $RMT * KMAX$	2.VI
43	منحنى الطاقة الكلية بدلالة نتائج Kpoint.	3.VI
44	تغيرات الطاقة الكلية للمركبين CO_2ZrSn و CO_2TiSn بدلالة الحجم	4.VI
48	مخطط لعصابة الطاقة	5.VI
49	عصابة الطاقة للمركبين CO_2ZrSn و CO_2TiSn .	6.VI
50	كثافة الحالات الكلية للمركبين CO_2ZrSn و CO_2TiSn	7.VI
51	كثافة الحالات الجزئية للمركب CO_2ZrSn	8.VI
52	كثافة الحالات الجزئية للمركب CO_2ZrSn	9.VI

قائمة الجداول

الصفحة	العنوان	الرقم
41	بعض خصائص المركبين CO_2ZrSn و CO_2TiSn	1.VI
45	قيم كل من ثابت الشبكة و معامل الانضغاطية للمركبين CO_2ZrSn و CO_2TiSn	2.VI
47	مقارنة النتائج بأعمال أخرى	3.VI

مؤتممة عامة

تعتبر دراسة المواد المغناطيسية من المواضيع المتقدمة التي تتعلق بالكثير من التطبيقات الكهربائية التي تدخل في الصناعات الحديثة ، كالمولدات الكهربائية والمحولات الكهربائية و أجهزة حفظ الذاكرة .

كما أن لها دور مهم في الصناعات التكنولوجية الحديثة من بين هذه المواد المغناطيسية سندرس في بحثنا عن الخصائص البنيوية والالكترونية للسببكتين Co_2ZrSn و Co_2TiSn التي تنتمي لسبائك هسلر ذات الصيغة X_2YZ حيث العنصرين X ، Y تنتميان للمعادن الانتقالية و العنصر Z هو عنصر لا مغناطيسي.

لدراسة الخصائص البنيوية، الإلكترونية، استخدمنا طريقة الموجة المستوية المتزايدة خطيا $Lapw$ ، ولإجراء هذه الحسابات في إطار نظرية دالية الكثافة الإلكترونية (DFT) ضمن التقريب الانحدار المعمم GGA , اتبعنا في انجاز بحثنا الخطوات التالية :

➤ الفصل الأول: تطرقنا الى نظرية دالة الكثافة DFT و تقريباتها LDA ، GGA ثم قمنا بعرض تفصيلي حول برنامج المحاكاة $Wien2k$

➤ الفصل الثاني: قمنا بشرح طريقة الأمواج المستوية المتزايدة خطيا والكمون الكامل والتعرف على مبادئها

➤ الفصل الثالث : تطرقنا الى عموميات حول سبائك هاسلر التي تنتمي اليها السببكتين بالاضافة إلى تطبيقاتها

➤ الفصل الرابع : تناولنا مختلف النتائج المتحصل عليها :

دراسة التقارب : تهيئة كل من عامل $K_{max}^* R_{MTmin}$ و عدد النقاط K_{point}

الخصائص البنيوية : ثابت الشبكة

الخصائص الالكترونية : بنية عصابات الطاقة ، كثافة الحالات DOS

وفي الأخير قدمنا خلاصة عامة لمختلف النتائج المتحصل عليها.

الفصل الأول : نظرية دالية الكثافة

DFT

1.1 مقدمة

نظرية دالية الكثافة DFT هي إحدى الطرق الكمية الأكثر استعمالاً في ميدان فيزياء المواد من أجل إيجاد القيم الفيزيائية الكمية لنظام معين (نظام يحتوي على عدد كبير من الإلكترونات). في هذا الفصل سنتطرق إلى الأساس الذي بنيت عليه نظرية دالية الكثافة DFT التي تعتمد على نظرية هوهنبارغ وكوهن التي قمنا بالتعقيب عليها كجاناب نظري، ثم قمنا بتقديم معادلات كوهن-شام مع طرح مختلف التقريبات المستعملة من أجل إيجاد حل لمعادلة شرودينغر و تحديد قيمة الطاقة الكامنة للتبادل - ارتباط

الهدف الأساسي من نظرية دالية الكثافة هي تعويض دالة الموجة المتعددة الإلكترونات ببالة موجة معرفة بكثافة الكترونية على أساس مكمم من أجل الحساب ومحاولة إيجاد حل لمعادلة شرودينغر .

I . 2 . نظرية دالية الكثافة (DFT)

I . 2 . 1 . معادلة شرودينغر (Schrodinger) :

في الدراسات الكمية للنظام الكوانتي للبلورات تعتبر معادلة شرودينغر [1] هي الأساس ، حيث يصف حالة النظام والجسيمات المتفاعلة من الكتلونات وايونات بالمعادلة التالية:

$$(1.I) \quad \hat{H} \Psi = E \Psi$$

\hat{H} يمثل الهاملتونيان

Ψ دالة الموجة

E طاقة النظام

حيث جميع معلومات النظام متعلقة بإحداثيات الأنوية والإلكترونات:

$$(2.I) \quad \Psi = \Psi(r_1, r_2 \dots , R_1, R_2, \dots)$$

وفي غياب الحقل الخارجي يكتب الهاملتونيان [2] بالشكل التالي :

$$(3.I) \quad \hat{H} = \hat{T}_n + \hat{T}_e + \hat{V}_{n-n} + \hat{V}_{e-e} + \hat{V}_{n-e}$$

أين

$$\hat{T}_n = \sum_a T_a = \sum_{a=1}^{Na} \left(\frac{-\hbar^2 \Delta_a}{2M} \right) \quad \text{الطاقة الحركية للأنوية}$$

$$\hat{T}_e = \sum_{i=1}^{Ne} T_i = \sum_{i=1}^{Ne} \left(\frac{-\hbar^2 \Delta_i}{2m} \right) \quad \text{الطاقة الحركية للإلكترونات}$$

$$\hat{V}_{n-n} = \frac{1}{2} \sum_{a \neq \beta} \frac{Z_a Z_\beta e^2}{|R_a - R_\beta|} = \frac{1}{2} \sum_{a \neq \beta} \hat{V}_{a\beta} \quad \text{طاقة التفاعل نواة - نواة}$$

$$\hat{V}_{e-e} = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{|r_i - r_j|} = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \hat{V}_{ij} \quad \text{طاقة التفاعل إلكترون - إلكترون}$$

$$\hat{V}_{n-} = - \sum_{i=1}^{N_e} \sum_{a=1}^{N_a} \frac{Z_a e^2}{|r_i - R_a|} = \sum_{i=1}^{N_e} \sum_{a=1}^{N_a} \hat{V}_{ia} \quad \text{طاقة إلكترون - نواة}$$

المعاملات i, j خاصة بالإلكترونات

المعاملات α, β خاصة بالأنوية

m : كتلة الإلكترون

$Z_a e$: شحنة الأنوية

$|R_a - R_\beta|$: المسافة بين نواتين α, β

$|r_i - R_a|$: المسافة بين نواة α والإلكترون i

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

ومنه تكتب معادلة شرودينغر كالتالي :

$$(4.I) \quad (\hat{T}_n + \hat{T}_e + \hat{V}_{n-n} + \hat{V}_{e-e} + \hat{V}_{n-e})\Psi = E\Psi(r_1, r_2 \dots \dots, R_1, R_2 \dots \dots)$$

إن معادلة شرودينغر تصبح مستحيلة الحل بسبب وجود عدد كبير من المجاهيل ومنه وضعت تقريبات لتبسيط المعادلة نذكر منها

2.2. I. تقريب بورن-اوبنهايمر (Born - Oppenheimer approximation)

يستعمل تقريب بورن-اوبنهايمر [3] في مجموعة من الحسابات في فيزياء المواد [4،5] وتعتمد على فصل حركة الإلكترونات عن الأنوية، والذي يأخذ بعين الاعتبار الاختلاف الكبير بين كتلة الإلكترونات وكتل الأنوية، حيث أن كتلة الإلكترون أقل بكثير من كتلة النواة في حين أن السرعة الإلكترونات أكبر بكثير من سرعة النواة، إذن نستطيع إهمال الطاقة الحركية للنواة ويؤخذ حد تفاعل الأنوية فيما بينها ثابت، ومنه يصبح الهاملتونيان بالشكل التالي:

$$(5.I) \quad \hat{H}_e = \hat{T}_e + \hat{V}_{e-e} + \hat{V}_{n-e}$$

ومنه تكتب معادلة شرودينغر كالتالي:

$$(6.I) \quad \hat{H}_e \Psi_e = E_e \Psi_e$$

$$(7.I) \quad \left[\sum_{i=1}^{N_e} \left(\frac{-\hbar^2 \Delta_i}{2m} \right) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{|r_i - r_j|} - \sum_{i=1}^{N_e} \sum_{a=1}^{N_a} \frac{Z_a e^2}{|r_i - R_a^0|} \right] \Psi_e(r, R_a^0) \\ = E_e(R_a^0) \Psi_e(r, R_a^0)$$

E_e تمثل طاقة الإلكترونات التي تتأثر بحقل ناتج عن أنويه ثابتة. وتبقى هذه المسألة مستحيلة الحل بالطرق الرياضية المعتادة فتستعين بتقريب آخر.

I . 3.2 تقريب هارترى - فوك (Hartree - Fock approximation) :

في عام 1928 وضع هذا التقريب من طرف العالمين هارترى وفوك [6] حيث وضع العالم الانجليزي هارترى أول نموذج كمي لوصف الذرة متعددة الإلكترونات وبعد سنوات قام العالم فوك بتطوير نموذج هارترى وكان ذلك عام 1930 وهو نموذج الإلكترون المستقل، أي أن كل إلكترون يتحرك منفرد في الحقل المتوسط المتولد عن الأنوية وباقي الإلكترونات الأخرى أي ننقل من مشكلة عدد كبير من الإلكترونات إلى مشكلة إلكترون وحيد و تكتب دالة الموجة الكلية للجملة كجاء دوال الحالة لكل الإلكترونات على الشكل:

$$(8.I) \quad \Psi_e(r_1, r_2, \dots) = \prod_{i=1}^{N_e} \Psi_i(r_i)$$

$$(9.I) \quad E_e = \sum_{i=1}^{N_e} E_i$$

وتكتب الطاقة الكلية للجملة كمجموع الطاقات الموافقة لكل حالة الكترونية:

$$(10.I) \quad \hat{H}_e = \sum_{i=1}^{N_e} \hat{H}_i$$

وتكتب معادلة شرودينغر في الذرات أحادية الإلكترون كالتالي:

$$(11.I) \quad \hat{H}_i \Psi_i = E_i \Psi_i$$

\hat{H}_i

يمثل الهاملتونيان الخاص بالذرة أحادية الإلكترون حيث:

$$(12.I) \quad \hat{H}_i = \left(\frac{-\hbar^2 \Delta_i}{2m} \right) + V_{ext}(r) + V_i(r)$$

$$(13.I) \quad V_i(r) = \int \frac{\rho(r')}{|r-r'|} d^3 r' \quad \text{حيث}$$

$\rho(r')$ يمثل كثافة الإلكترون

$$(14.I) \quad \rho(r) = \sum_{j=1}^{N_e} |\Psi_j(r)|^2$$

ف نجد معادلة هارترتي التي عبارتها كالتالي:

$$(15.I) \quad \frac{-\hbar^2}{2m} \Delta \Psi_i(r) + V_{ext}(r) \Psi_i(r) + \sum_{j=1, j \neq i}^{N_e} \int \frac{|\Psi_j(r')|^2}{|r-r'|} d^3 r' \Psi_i(r) = E_i \Psi_i(r)$$

فتصبح دالة الموجة هي مجموع الحدود لتكون على شكل محدد سلتر . [7]:

$$(16.I) \quad \Psi_e(r_1 \sigma_1, r_2 \sigma_2, \dots, r_{N_e} \sigma_{N_e}) = \frac{1}{\sqrt{N_e!}} \begin{vmatrix} \Psi_1(r_1 \sigma_1) & \Psi_1(r_2 \sigma_2) & \dots & \Psi_1(r_{N_e} \sigma_{N_e}) \\ \Psi_2(r_1 \sigma_1) & \Psi_2(r_2 \sigma_2) & \dots & \Psi_2(r_{N_e} \sigma_{N_e}) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \Psi_{N_e}(r_1 \sigma_1) & \Psi_{N_e}(r_2 \sigma_2) & \dots & \Psi_{N_e}(r_{N_e} \sigma_{N_e}) \end{vmatrix}$$

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

ومنه معادلة هارترتي فوك تكتب كالتالي :

$$(17.I) \quad \left[\frac{-\hbar^2}{2m} \Delta_i + V_{ext}(r) + \sum_{j=1, j \neq i}^{N_e} \int \frac{|\Psi_j(r')|^2}{|r-r'|} d^3 r' + V_{HF} \right] \Psi_i(r) = E_i \Psi_i(r)$$

حيث:

$$(18.I) \quad V_{HF} = - \sum_{j=1, j \neq i}^{N_e} \delta_{\sigma_i \sigma_j} \int \frac{\Psi_j^*(r) \Psi_i(r)}{|r-r'|} d^3 r'$$

نشير إلى أن من أهم المشاكل في حساب بنية عصابات الطاقة هو تحديد الكمون الداخلي للبلورة

4.2.I نظرية دالية الكثافة (Density Functional Theory) DFT

هناك طرق متعددة في حساب بنية عصابات الطاقة والاهم هو التركيز على شكل كمون دالة الموجة، وذلك ومن اجل حساب الطاقة الكلية للنظام فنستخدم لحساب الطاقة الكلية للنظام E، الكمون ودالة الموجة المكتوبين بدلالة الكثافة الكترونية وتكون على شكل دالة للإحداثيات (X, y, Z) والهدف من ذلك هو تقليل عدد المتغيرات التي تدخل في الحساب.

في عام 1964 قام العالمان هوهنبارغ وكوهن بوضع القاعدة الأساسية للنظرية حيث قاما بإثبات إمكانية استغلال الكثافة في حساب خصائص النظام، لكنها بقيت غير مجسدة إلى أن أكمل كوهن عمله ووجد تطبيقا لها .

1.4.2. I . نظرية هولنبرغ-كوهن (Holenberg Kohn theorems) :

اعتبر كل من العالمان هولنبرغ-كوهن أن الطاقة الكلية لنظام الكثرونات المتفاعلة في كمون خارجي كمون الأنوية- هو دالة وحيدة لكثافة الالكترونات [8] $\rho(r)$ بحيث يعبر عن دالية الطاقة بـ:

$$(19.I) \quad E = \langle \Psi[\rho] [\hat{H}] \Psi[\rho] \rangle$$

من اجل نظام يحتوي على الكثرونات متفاعلة يكتب الهاملتونيان كالتالي:

$$(20.I) \quad \hat{H} + \hat{T}_e + \hat{V}_{e-e} + \hat{V}_{ext}$$

ومنه تصبح المعادلة (19. I) بالشكل التالي:

$$(21.I) \quad E = E[\rho] = \langle \Psi[\rho] | \hat{T}_e + \hat{V}_{e-e} | \Psi[\rho] \rangle + \langle \Psi[\rho] | \hat{V}_{ext} | \Psi[\rho] \rangle$$

ومنه تكتب العبارة :

$$(22.I) \quad E[\rho] = F[\rho] + \int \hat{V}_{ext}(r) \rho(r) dr$$

أي

$$(23.I) \quad F[\rho] = T_e[\rho] + V_{e-e}[\rho]$$

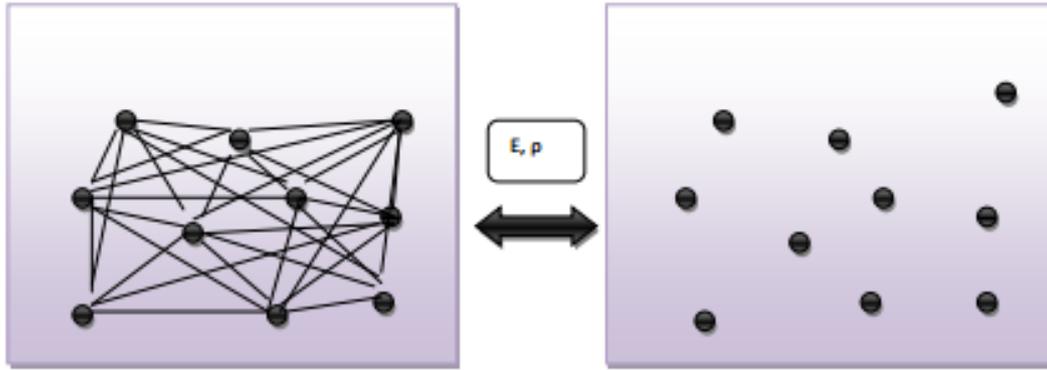
حيث برهن كل من العالمان أن الكثافة التي تعطي الحد الأدنى هي كثافة الحالة الأساسية للجسيمات، وكل الخصائص المرتبطة بهذه الحالة هي دالة لكثافة الالكترونات وعبارتها كالتالي:

$$(24.I) \quad E[\rho_0(r)] = \min E[\rho(r)]$$

نظرية هولنبرغ كوهن تؤكد وجود دالية الكثافة بدلالة طاقة النظام لكن لا تعطي أي معلومات على حل هذا المشكل .

2.4.2. I . معادلات كهون - شام (Kahn - Sham equations) :

درس في عام 1965 العالمان كوهن و شام [9] تغير الكثافة النظرية الوظيفية بطريقة عملية للحصول على كثافة الحالة الأساسية وفق العالمين هارترى- فوك



الشكل I . 1 : مخطط يعطي العلاقة بين عدد كبير من العناصر النظام في الحقيقة والتأثيرات المطبقة على النظام لكوهن - شام.

حيث افترضنا العالمين كوهن - شام العبارة التالية:

$$(25.I) \quad T_e[\rho] = T_s[\rho] + (T_e[\rho] - T_s[\rho])$$

T_e هي الطاقة الحركية للإلكترونات بدون تأثيرات خارجية و بنفس الكثافة.

أين تعرف $T_s[\rho]$ بالعبارة التالية:

$$(26.I) \quad T_s = \sum_{i=1}^{N_e} \langle \Psi_i | \left| \frac{-\hbar^2}{2m} \Delta_i \right| \Psi_i \rangle$$

أين تكتب عبارة الكمون $V_{e-e}[\rho]$

$$(27.I) \quad V_{e-e}[\rho] = E_H[\rho] + (V_{e-e}[\rho] - E_H[\rho])$$

$E_H[\rho]$ هي طاقة هاتري حيث طاقة التأثير إلكترون - إلكترون معرفة بالمعادلة التالية:

$$(28.I) \quad E_H[\rho(r)] = \frac{e^2}{2} \int \frac{\rho(r)\rho(r')}{|r-r'|} d^3 r d^3 r'$$

في الأخير $F[\rho]$ تكتب بثلاث أجزاء :

$$(29.I) \quad F[\rho] = T_s[\rho] + E_H[\rho] + E_{xc}[\rho]$$

أين يعرف طاقة تبادل - ارتباط :

$$(30.I) \quad E_{xc}[\rho] = (T_e[\rho] - T_s[\rho]) + (V_{e-e}[\rho] - E_H[\rho])$$

المعادلة المعبرة عن الكثافة تكتب بالشكل:

$$(31.I) \quad E_{KS}[\rho] = T_s[\rho] + E_H[\rho] + E_{xc}[\rho] + \int V_{ext}(r)\rho(r)d^3 r$$

إذن:

$$(32.I) \quad \frac{\delta E_{KS}}{\delta \Psi_i^*(r)} = \frac{\delta T_s}{\delta \Psi_i^*(r)} \left[\frac{\delta E_H}{\delta \rho(r)} + \frac{\delta E_{XC}}{\delta \rho(r)} + \frac{\delta E_{ext}}{\delta \rho(r)} \right] \frac{\delta \rho(r)}{\delta \Psi_i^*(r)}$$

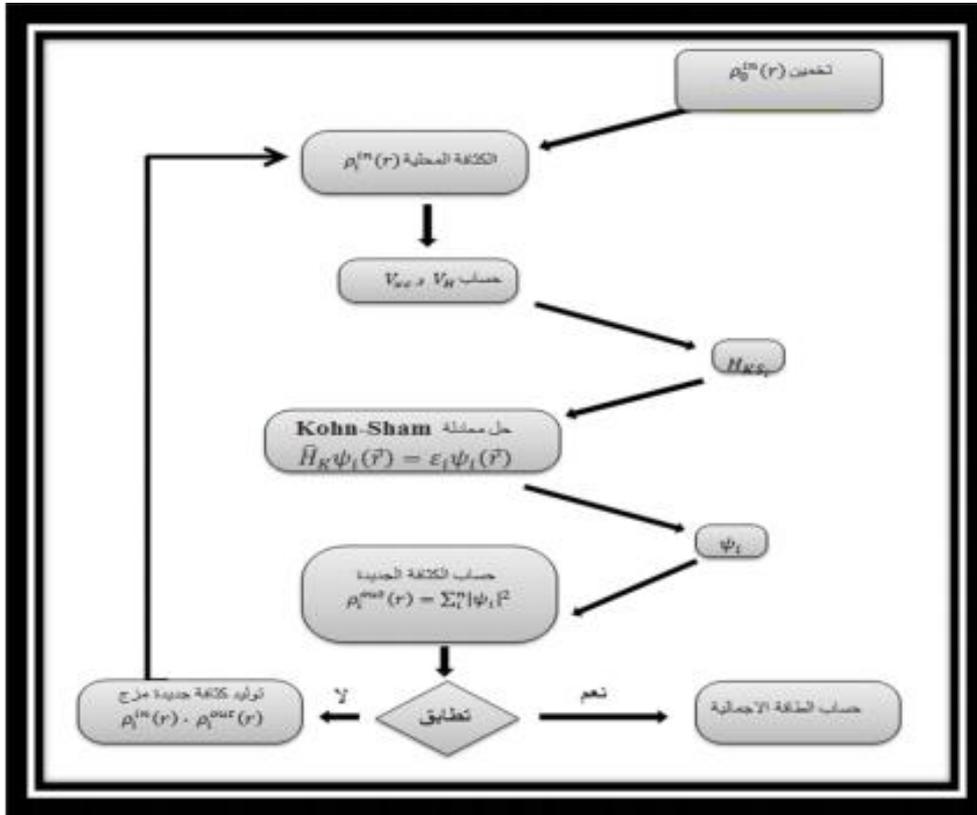
و في الأخير تكتب معادلة كوهن - شام لإلكترون:

$$(33.I) \quad H_{KS}\Psi_i(r) = (T_s + V_{eff}(r))\Psi_i(r) = \epsilon_i\Psi_i(r)$$

الكثافة في هذه الحالة تكتب كالتالي:

$$(34.1) \quad \rho(r) = \sum_{i=1}^{occ} |\Psi_i(r)|^2$$

أين المجموع هو عبارة عن الحالات المشغولة



الشكل I. 2. خوارزمية حل معادلة كوهن -شام

الكومون الفعال V_{eff} هو الكومون الذي يحتوي على كومون خارجي V_{ext} في التوزيع الكلاسيكي [10]

$$(35.I) \quad V_{eff}(r) = V_H + V_{XC} + V_{ext}$$

$$(36.I) \quad V_{eff}(r) = \frac{\delta E_H}{\delta \rho(r)} + \frac{\delta E_{XC}}{\delta \rho(r)} + \frac{\delta E_{ext}}{\delta \rho(r)}$$

$V_{XC} = \frac{\delta E_{XC}}{\delta \rho(r)}$ هو كومون تبادل - ارتباط أين تعتبر معادلة كوهن- شام أكثر فاعلية لأنها بدلالة E_{XC} حيث اذا كانت قيمة الطاقة تبادل - ارتباط محددة فان الكثافة والطاقة الكلية تصبح بقيمة دقيقة، لكن في الحالة العامة هي غير معروفة القيمة مما يجبرنا على الانتقال إلى تقريب آخر.

3.4.2.1 دالية تبادل ارتباط

الدالة تطبق في المجال القريب من تقريب كوهن وشام ولكن تبقى غير قابلة للتطبيق لان دالية تبادل-ارتباط $E_{xc}[\rho]$ غير معلومة القيمة أو العبارة حيث إذا كانت قيمة الطاقة تبادل ارتباط محددة فان الكثافة E_{xc} تصبح بقيمة دقيقة ، وهذا يعني أن قيمة طاقة تبادل ارتباط في الحالة العامة غير محددة مما يجبرنا على الانتقال إلى تقريب آخر.

1.2.5. تقريبات دالية الكثافة :

1.2.5.1. تقريب كثافة الموضع LDA (The Local Density Approximation)

هو تقريب أسس وفق نموذج الغاز المتجانس للإلكترون لتوماس فارمي [11،12] الذي يحتوي على اقرب مفهوم يشرح بتبسيط طاقة تبادل-ارتباط. إلا أن الكثافة الالكترونية لغاز لا متجانس يمكن اعتبارها موضعيا متجانسة.

طاقة تبادل -ارتباط يمكن كتابتها بالشكل:

$$(37.I) \quad E_{xc}^{LDA}[\rho] = \int \rho(r) \varepsilon_{xc}[\rho(r)] d^3r$$

$E_{xc}^{LDA}[\rho]$ تمثل طاقة تبادل-ارتباط الخاصة بالإلكترون في غاز الالكترونات الموزعة توزيعا منظما أي أين:

ε_{xc} هو مجموع طاقة تبادل ε_c مع وطاقة الارتباط ε_x

$$(38.I) \quad \varepsilon_{xc} = \varepsilon_x + \varepsilon_c$$

توزيع التبادل يعطى بمعادلة ديراك [13] للغازات المتجانسة :

$$(39.I) \quad \varepsilon_x^{LDA} = -\frac{3}{4} \left(\frac{3}{\pi} \right)^{1/3} \rho(r)^{1/3} = -\frac{3}{4} \left(\frac{9}{4\pi^2} \right)^{1/3} \frac{1}{r_s}$$

حيث

$r_s = \left(\frac{4\pi\rho}{3} \right)^{-1/3}$ الذي هو نصف قطر واينر سايتز Wigner - Seitz [14] (نصف قطر الدائرة التي تحتوي على إلكترون واحد).

وجد أن الكمون غير معلوم لهذا يمكن كتابته بمتغير حسب المعادلة التالية:

$$(40.I) \quad V_{xc}^{LDA}(r) = \frac{\delta(\rho(r)\varepsilon_{xc}[\rho(r)])}{\delta\rho(r)}$$

هناك عدة أعمال تعبر عن x_c مثل فرضيات Vosko و Wilk [15] , Perdew - Wang [16] غالباً ما تكون طريقة LDA ممتازة النتائج خاصة اذا كانت قيمة التغير في الكثافة ضعيف، وقد ثبت أن النتائج المتحصل عليها خاصة البنيوية للمادة والحالة المستقرة لها غالباً ما تكون مرضية بالنسبة للمواد مكثفة البنية و تعطي قيم اقل للفصل الطاقوي.

I . 2 . 2.5 . تقريب التدرج المعمم (Generalized Gradient Approximation) GGA

هو تقريب يأخذ بعين الاعتبار عدم التجانس في الكثافة الالكتروني $\rho(r)$ عبر التدرج $\nabla \rho(r)$ أي ان تقريب GGA هو تصحيح لتقريب LDA حيث ان طاقة تبادل - ارتباط لا تتعلق فقط بالكثافة الالكترونية الموضوعية بل تتعلق كذلك بتدرج الكثافة الالكترونية العبارة المتحصل عليها نعيد ترجمتها كسلسلة لمنشور تايلور في تقريب التدرج المعمم GGA إذن طاقة تبادل - ارتباط في تقريب التدرج المعمم تأخذ الشكل التالي:

$$(41.I) \quad E_{xc}^{GGA}[\rho(r)] = \int \rho(r) \varepsilon_{xc}[\rho(r), \nabla \rho(r)] d^3r$$

$\nabla \rho(r)$ يعبر عن تدرج الكثافة الالكترونية

هناك عدد من العبارات المقترحة لتقريب GGA، ومن ابرز العبارات الأكثر استعمالاً تلك التي اقترحت من طرف كل Perdew - Wang [17] (PW91) , Perdew - Burke , Ernzerhof على شكل [18]. (PBE)

غالبا عند حساب ثابت الشبكة في الحالات الفيزيائية الصلبة تكون القيم المحصل عليها اكبر من القيم التجريبية بأخطاء من رتبة 1%-2% فظهرت تصحيحات أخرى GGA من أهمها PBEsol [19] التي هي تصحيح لـ GGA- PBE تطبق على الأجسام الصلبة والتي أعطت قيم مقارنة للتجربة بامتياز [20]

إذا كانت القيم المتحصل عليها بمشتقات دالية الكثافة LDA و GGA- PBE و GGA- PBEsol قريبة من القيم التجريبية سواء بالزيادة أو بالنقصان تقوم بتصحيح TB- mBJ الخاصة بالعالم تران وبلاها المعدلة من طرف بيك جونسون Tran and Blaha modified Becke- Johnson [21]

Références

- [1] E. Schrodinger, Quantisierung als Eigenwertproblem (Dritte Mitteilung), Ann. Phys. (Leipzig) 385, 437-490, (1926); E. Schrodinger, Quantisierung als Eigenwertproblem (Vierte Mitteilung), Ann. Phys. (Leipzig) 386, 109-139 (1926).
- [2] H. Mathieu, Physique des semiconducteurs et des composants électroniques, 5e éditions, Dunod, Paris, 2004.
- [3] M. Born, R. Oppenheim, Quantum theory of the molecules. Ann. d. Physik 84, 457-484 (1927).
- [4] M. Levy, Proc. Natl .Acad. Sci 76, (1979) 6062.
- [5] L. H. Thomas., Proc. Cam. Phil. Soc, 23, (1928) 542.
- [6] D.R. Hartree, The wave mechanics of an atom with a non-Coulomb central field. Part I. Theory and methods, Proc. Cambridge. Philos. Soc. 24, 89-110 (1928).
- [7] J. C. Slater, A Simplification of the Hartree-Fock Method, Phys, Rev. 81, 385-390 (1951).
- [8] P. Hohenberg, W. Kohn, Phy Rev.B 136, 864 (1964)
- [9] W. Kohn and L. J. Sham, Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects, Phys. Rev. 140, A 1133-A1338 (1965).
- [10] A. Benmakhlouf, thèse de Doctorat (Université A. MIRA Bejaia, 2017).
- [11] L. H. Thomas, The Calculation of Atomic Fields, Proc. Camp. Philos. Soc. 23, 542-548 (1927)
- [12] E. Fermi, Eine statistische Methode zur Bestimmung einiger Eigenschaften des Atoms und ihre Anwendung auf die Theorie des periodischen Systems der Elemente, Z. Phys. 48, 73-79 (1928).
- [13] P. A.M. Dirac, Quantum mechanics of many-electron systems, Proc.Roy.Soc (London) 123, 714-733 (1929)
- [14] E. Wigner, On the interaction of electrons in Metals, Phys. Rev. 46, 1002-2011(1934).
- [15]S. H. Vosko, L. Wilk, and M. Nusair, Accurate spin- dependent electron liquid correlation energies for local spin density calculations: a critical analysis. Can .J .phys. 58, 1200-1211 (1980).
- [16] J. P. Perdew and Y. Wang, Accurate and simple analytic representation of the electron-gas correlation energy, Phys. Rev. B 45, 13244-13249 (1992).

- [17] J. P. Perdew and A. Zunger, self-interaction correction to density functional approximations for many-electron systems, *Phys. Rev. B* 23, 5048-5079 (1981).
- [18] J. P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof, Generalized Gradient Approximation Made Simple. *Phys. Rev. Lett.* 77, 3865-3868 (1996).
- [19] J. P. Perdew, A. Ruzsinszky, G. I. Csonka, O. A. Vydrov, G. E. Scuseria, L. A. Constantin, X. Zhou, and K. Burke, Restoring the Density-Gradient Expansion for Exchange in Solids and Surfaces, *Phys. Rev. Lett.* 100, 136406: 1-4 (2008).
- [20] L. He, F. Liu, G. Hautier, M.J.T. Oliveira, M. A. L. Marques, F. D. Vila, J. J. Rehr, G. M. Rignanese, and Aihui Zhou, Accuracy of generalized gradient approximation functionals for density-functional perturbation, *Phys. Rev. B* 89, 064435: 1-15(2014).
- [21] Half-metallic full-Heusler compound Ti_2NiAl : A first-principles study
Lei Feng, Chengchun Tang, Shuangjin Wang, Wenchen He, *Journal of Alloys and Compounds* 509 (2011) 5187–5189

الفصل الثاني : طريقة الامواج المستوية

المتزايدة خطيا والكمون الكامل

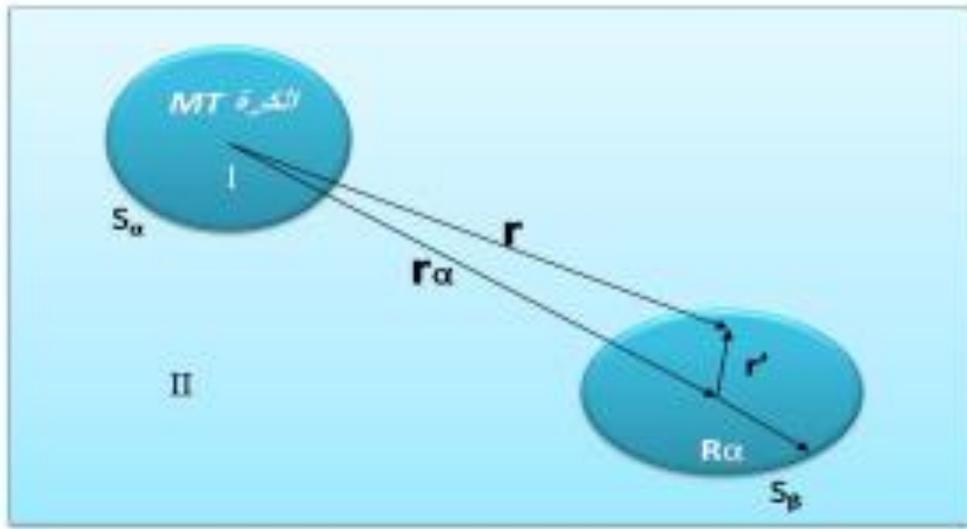
II . 1 . مقدمة:

في الفصل السابق عرجنا على الحلول لمشاكل طاقة التبادل للإلكترونات مع بعضها ومع النواة، فتطرقنا من تقريب بورن- أوبنهايمر إلى غاية نظرية دالية الكثافة الجزيئية وحيدة التي تتأثر هذه الأخيرة بكمونات خارجية باعتبار النواة ساكنة والإلكترونات حولها، أما في هذا الفصل سنحاول شرح معنى الأمواج المستوية المزادة APW وسبب دمجها مع الكمون الكلي، ومبدأ عمل هذه الطريقة مع ذكر البرنامج الحسابي المستعمل في هذا العمل وخصائصه .

II . 2 . طريقة الأمواج المستوية (Augmented Plane Wave) APW :

اقترح سلتر [5, 6] هذه الطريقة من اجل إيجاد حل لمعادلة شرودنغر لإلكترون وحيد، اعتمد مبدأ هذه الطريقة على ان الإلكترونات المجاورة للنواة (الإلكترونات القلبية) تتصرف مثل النواة أما الإلكترونات البعيدة نسبياً فهي تتصرف تصرف إلكترونات حرة.

ومن هذا المنطلق تقسم خلية الوحدة إلى منطقتين كما هو موضح في الشكل II.1 [7, 9]:



الشكل II.1 . شكل كمون MT

r_a يمثل نصف قطر كرة MT

المنطقة الأولى I : تشمل كل من الأنوية والإلكترونات شديدة الارتباط بها داخل كرة MT .

المنطقة الثانية II : المنطقة البينية تحيط بالكرات. وتشمل الإلكترونات ضعيفة الارتباط بالانوية .

وبالتالي يعبر عن الدالة وحيدة الموجة بالعلاقة:

$$(1. II) \quad \varphi_{\vec{k}}^n(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} C_{\vec{G}}^{n,\vec{k}} \varphi_{\vec{G}}^{\vec{k}}(\vec{r})$$

$$(2. II) \quad \varphi_{\vec{k}}^n(\vec{r}) = f(x) = \begin{cases} \Omega^{-1/2} e^{i(\vec{k}+\vec{G})\vec{r}}, \vec{r} \in I \\ \sum_{lm} A_{lm}^{\vec{k}+\vec{G}} u_l(r) Y_m^l(\hat{r}), \vec{r} \in S_a \end{cases}$$

أين

Ω : يمثل حجم الخلية الموحدة

y_{lm} : الدالة التوافقية الكروية

C_G : معاملات النشر

حل معادلة شرودينغر في الأخير تكون كالتالي :

$$(3. II) \quad \left[-\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{l(l+1)}{r^2} + V(r) - E_L \right] r u_l(r) = 0$$

$V(r)$: يمثل الجزء الخاص بالكمون الكروي

E_i تمثل الطاقة الخطية

3.II. مبدأ طريقة الامواج المستوية المتزايدة خطيا LAPW :

طور أندرسون (Anderson) طريقة LAPW استنادا على طريقة APW [10] الخاصة بالعالم

سلتر. تتميز طريقة LAPW بان دالة الكرة MT تكون على شكل ترتيبات خطية للدالة الشعاعية

$u_l(r) Y_m^l(\hat{r})$ ومشتقاتها $u_l(r) \dot{Y}_m^l(\hat{r})$ بالنسبة للطاقة E_i ، $u_l(r)$ مماثلة للصيغة وشبيهة لدالة

الطريقة APW حيث تخضع الدوال $u_l(r)$ للشرط التالي:

$$(4. II) \quad \left[-\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{l(l+1)}{r^2} + V(r) - E_L \right] r u_l(r) = r u_l(r)$$

وتعطى عبارات الدوال الأساسية كالتالي :

$$(5.II) \quad \varphi_{\vec{G}}^{\vec{K}}(\vec{r}) = f(x) = \begin{cases} \Omega^{-1/2} e^{i(\vec{k}+\vec{G})\vec{r}}, \vec{r} \in I \\ \sum_{lm} \left[A_{lm}^{\vec{k}+\vec{G}} u_l(r) + B_{lm}^{\vec{k}+\vec{G}} \dot{u}_l(r) \right] Y_m^l(\hat{r}), \vec{r} \in S_a \end{cases}$$

أين المعاملات $B_{lm}^{\vec{k}+\vec{G}}$ الموافقة للدالة $\dot{u}_l(r)$ لها نفس طبيعة المعاملات $A_{lm}^{\vec{k}+\vec{G}}$

إذا حسبت الدالة القطرية $u_l(r)$ من أجل الطاقة E_l التي تختلف قليلا عن طاقة العصابة ϵ يمكن استعمال نشر تايلر لإيجاد الطاقة المجاورة لها حيث تكتب العبارة من الشكل :

$$(6.II) \quad u_l(r, \epsilon) = u_l(r, E_l) + (\epsilon - E_l) \dot{u}_l(r, \epsilon) + 0(\epsilon - E_l)^2$$

أين:

$$\dot{u}_l(r, \epsilon) = \frac{\partial u_l(r, \epsilon = E_l)}{\partial \epsilon}$$

$0(\epsilon - E_l)^2$ هو الخطا الرباعي الطاقوي .

4.II: مبدأ طريقة الأمواج المستوية المزادة خطيا والكمون الكامل FP - LAPW :

طريقة الأمواج المستوية المزادة خطيا والكمون الكامل FP - LAPW [11, 12] هي دمج بين LAPW والكمون الكامل FP و كثافة الشحنات الالكترونية ، بدون أي تقريبات في المجال البيئي أو داخل الكرة MT. هذه العلاقة العامة ترتبط بكمون المنطقة البيئية V_I والعلاقة الخاصة بالكرة V_{MT} (MT) تنشر المعادلة بدالة توافقية داخل الكرة MT وباستعمال سلاسل فوري في المنطقة البيئية:

$$(7.II) \quad V(\vec{r}) = \begin{cases} \sum_{\vec{G}} V_I^{\vec{G}} e^{i\vec{G}\vec{r}}, \vec{r} \in I \\ \sum_{lm} V_{MT}^{lm}(\vec{r}) Y_m^l(\hat{r}), \vec{r} \in S_a \end{cases},$$

و بالمثل يمكن التعبير عن ρ باستعمال العبارة (II. 12) وذلك باستبدال فقط V بـ ρ :

$$(8.II) \quad \rho(\vec{r}) = \begin{cases} \sum_{\vec{G}} \rho_I^{\vec{G}} e^{i\vec{G}\vec{r}}, \vec{r} \in I \\ \sum_{lm} \rho_{MT}^{lm}(\vec{r}) Y_m^l(\hat{r}), \vec{r} \in S_a \end{cases},$$

II. 4. 1 برنامج Wien2K :

استخدمنا في حساباتنا البرنامج Wien2K الذي هو برنامج غير مجاني تم تطويره في معهد كيمياء المواد بالجامعة التقنية في فيينا من طرف (Blaha P, S Trickey, B, k Schwarz) [13] ويعتمد على نظرية دالية الكثافة بدمج طريقة الأمواج المستوية المتزايدة خطيا و الكمون الكامل - FP - LAPW ، وهو واحد من أحسن البرامج لمعرفة خصائص البلورات ، أول إصدار كان سنة 1990 وهو يشهد تطورا سريعا في السنوات الأخيرة حيث أجريت عدة تحديثات على برنامج Wien الأصلي نذكر منها (WIEN93 , ...) WIEN93 الذي عرفته نسخه ولاسيما من حيث السرعة وسهولة الاستخدام. حيث أضيفت له تحسينات متنوعة، فهو يحتوي على مجموعة من البرامج الفرعية المنفصلة التي تساهم في إجراء العمليات الحسابية الخواص الفيزيائية حيث نتبع الخطوات التالية:

1. تحضير ملف البنية (Structure generator)

من أجل تحضير ملف البنية يجب إنشاء ملف أساسي والذي يحوي جميع المعلومات المتعلقة بالبنية منها: ثابت الشبكة البلورية التجريبي، الزمرة الفضائية (space group) ، مواقع الذرات ونصف قطر كرة MT لكل ذرة (RMT)

2 . برنامج الإعداد (Initialization):

يقوم هذا البرنامج بوضع جميع المعطيات الحل معادلة كوهن-شام وذلك بالاس بتاد على عدة برامج فرعية مستقلة منها:

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

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

KGEN: يولد المكعبات في منطقة بريلوين K.

DSTART: يولد الكثافة الذرية الأولية لبداية دورات الحساب الذاتي SCF الناتجة من الكثافة الذرية

. المولدة من LSTART .

SYMMETRY : يولد عمليات التناظر في الجملة و يحسب المجموعة النقطية لمواقع الخاصة بالذرات يولد المعامل الأساسي لهرمونية الشبكة وحساب مصفوفة الدوران الموضوعي.

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

LAPW₀ : يولد الكمون انطلاقا من الكثافة الالكترونية

LAPW₁ : حساب عصابات التكافؤ، القيم الذاتية والأشعة الذاتية

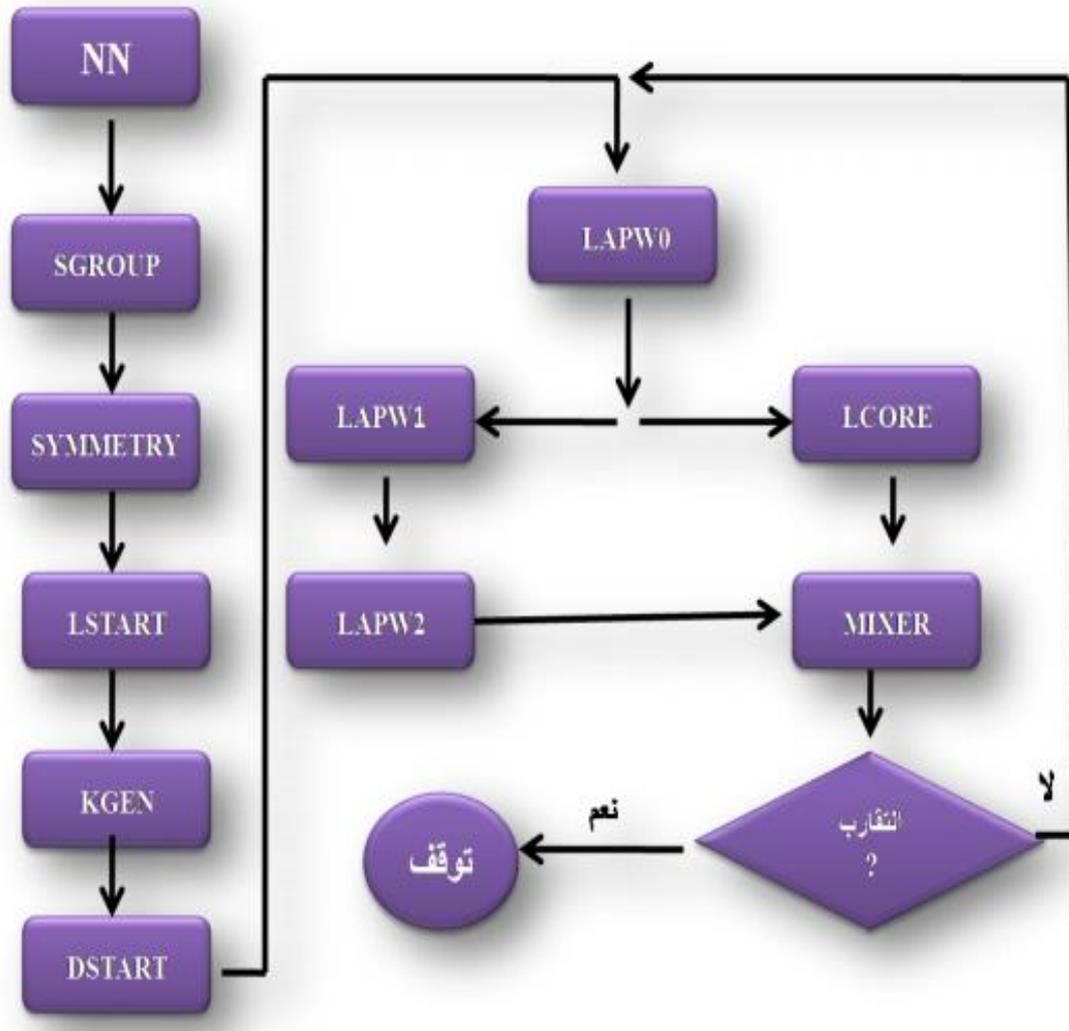
LAPW₂: حساب كثافة التكافؤ من الأشعة الذاتية.

LCORE: حساب الحالات القلبية و الكثافة القلبية.

MIXER: يخط الكثافة الداخلة والخارجة (الالكترونات التكافؤ و الالكترونات القلبية).

II. 4. 2 استخدامات برنامج Wien2K :

- حساب عصابات الطاقة وكثافة الدوال لسطح فرمي .
- إيجاد الكثافة الالكترونية وكثافة سبين وعوامل البنية للأشعة السينية .
- معرفة معلومات حول الطاقة الإجمالية ، القوى النووية ، هندسة توازن الذرات في الفضاء التحسينات البنيوية)
- تدرج الحقل الكهربائي .
- (استقطاب سبين) في حالة ما إذا كانت البنية تتعلق بالعازل الكهربائي الشفاف
- تحديد الخصائص المغناطيسية، البصرية، المرنة،
- تحديد طاقة انبعاث وامتصاص الأشعة السينية RX



الشكل II. 2: بنية برنامج Wien2K

Références

- [1] F. Bloch, *Über die Quantenmechanik der Elektronen in Kristallgittern*, Z. Physic 52,555-600 (1928).
- [2] S. Cottenier, *Density Functional Theory and the Family of (L) APW-methods: astep-by-step introduction*, Ghent University, Belgium, 2013.
- [3] W. C. Herring and A. G. Hill, *The theorecal constitution of metallic beryllium*, Phys, Rev. Rep. 9,115-198 (1989).
- [4] U. von Barth, C. D. Gelatt. *Validity of the frozen-core approximation and pseudo-potential theory for cohesive energy calculation*, Phys. Rev. B21, 2222-2228 (1980).
- [5] J. C. Slater, *Wave Functions in a Periodic Potential*, Phys, Rev. 51,846-851 (1937).
- [6] J. C. Slater, *Energy Band Calculation by the Augmented Plane Wave Method*, Advances in Quantum Chemistry 1, 35-58 (1964).
- [7] D. J. Singh, L. Nordstrom, *Planewaves, Pseudopotentials, and the LAPW Method*, 2nd Ed, Springer Science + Business Media, Inc., USA, 2006
- [8] T. L. Loucks, *The Augmented plane wave Method*, W. A. Benjamin, Inc., New York, 1967.
- [9] S. Cottenier, *Density Functional theory and the family of (L)APW-methods: a step-by-step introduction*, Ghent University, Belgium, 2003.
- [10] O. K. Andersen, *Linear methods in band theory*, Phys. Rev. B 12,3060-3083(1975).
- [11] D. R. Hamann, *Semiconductor Charge Densities with Hard-core and SoftCore Pseudopotentials*, Phys. Rev. Lett. 42, 665 (1979).
- [12] E. Wimmer, H. Krakauer, M. Weinert, and A. J. Freeman, Full potential self consistent Linearized-augmented-plane-wave method for calculating the electronic structure of molecules and surfaces: O2 molecule, Phys. Rev. B 24, 864-875 (1981).
- [13] P. Blaha, K. Schwarz, G.K.H. Madsen, D. Kvasnicka, J. Luitz, WIEN2k, *an Augmented Plane Wave + Local Orbitals Program for Calculating Crystal Properties*, Karlheinz Schwarz, Techn. University at Wien, Austria, ISBN 3 9501031.1.2 (2001)

الفصل الثالث : جمعيات عن سبائك هوسلر

(Heusler)

1.III. مقدمة:

تعد السبائك المتذكّرة للشكل (Shape MemoryAlloys) شكل جديد من اشكال المادة الذكية التي تتمتع بخواص ميكانيكية خارقة غير متوافرة في جميع المواد والسبائك التي جرت العادة على استخدامها في التطبيقات الهندسية وغيرها بحيث تتميز تلك السبائك بقدرتها على استعادة شكلها الأصلي عند تسخينها، تعد سبيكة النيكل - التيتانيوم أو ما يسمى بالتول أهم أنواع السبائك المتذكّرة للشكل وأعلاها سعرا، و من السبائك المتداولة أيضا في هذا المجال سبيكة النحاس - الألمنيوم - النيكل بالإضافة إلى سبائك هسلر و في هذا الفصل سنتطرق لسبيكة Ni_2MnSi التي تنتمي لعائلة سبائك هسلر. [1]

III. 2. سبائك هاسلر (Heusler):

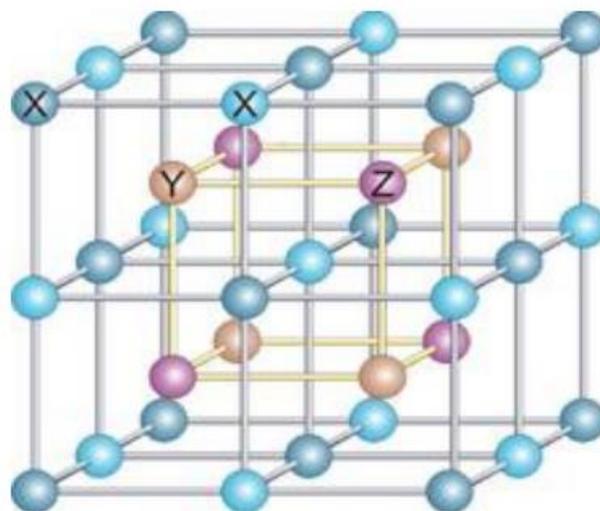
سبائك Heusler سميت نسبة لمكتشفها فريدريك Heusler ففي عام 1903 عندما كان يعمل على سبيكة (MnCu) لاحظ أنها غير مغناطيسية لكن عند اضافة عناصر (SP) مثل (Al , In , Sn , Sb ,) (Bi) تم الحصول على سبيكة حديدية المغنطة (Ferromagnetisme) بقي فهم البنية البلورية وتركيب هذه السبائك غامض الى غاية 1929 باستعمال الأشعة السينية تم معرفة العديد من المعلومات على تركيبها، بنيتها البلورية الخ [2]

III. 1.2. الخصائص البلورية :

تصنف سبائك Heusler إلى عائلتين وفقا لتركيبها الكيميائي.

- العائلة الأولى هي عائلة كامل هسلر Full - Heuslers ، لها صيغة كيميائية من الشكل X_2YZ ، حيث X من المعادن الانتقالية مثل: Cu ، Ni او Co اما Y فهي عادة (Mn أو Fe) و Z فهي نصف ناقل (Si, Ge) أو Al .
- العائلة الثانية نصف هسلر semi - Heuslers السبيكة في هذه العائلة تكون صيغته من الشكل $XYZ[3]$. حيث X: تتوقع في (0.0.0) (2/1 , 2/1 , 2/1) و Y (4/4,1/4,1/1) و Z: (4/4,3/4,3/4).

تتبلور سبائك هسلر في بنية مكعبة FCC. (الشكل III. 1) [4]



الشكل (III . 1) : بنية سبيكة هاسلر

هناك تصنيف جديد يستند على ترتيب الذرات داخل شبكة بلورية، بحيث يكون ترتيب هذه الذرات تحت ثلاث أطوار بلورية مختلفة

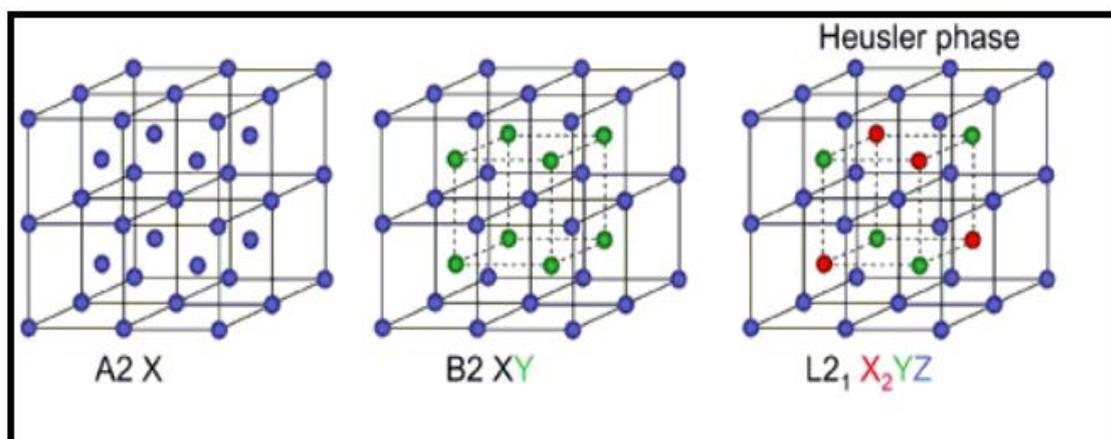
البنية الأولى $L2_1$: حيث تترتب الذرات بشكل تام ودقيق .

البنية الثانية $B2$: في هذه البيئة تكون مواقع الذرات Z Y عشوائية .

البنية الثالثة $A2$: في هذه البنية تكون مواقع الذرات Z ، Y بالإضافة الى A عشوائية، انظر الشكل

(III . 2) .

ترتيب البلورات يمكن أن يغير كثيرا من الخواص المغناطيسية للسبائك Heusler مثل مغنطة التشبع و درجة حرارة كوري. [5]



الشكل (III . 2): البنى البلورية لسبيكة هسلر

III . 2 . 2 الخصائص المغناطيسية :

تمتلك سبائك Heusler خواص مغناطيسية مثيرة جدا للاهتمام. حيث يمكن للمرء في نوع واحد من سبائك دراسة سلسلة من الظواهر المغناطيسية متنوعة، و تصنف هذه السبائك حسب الخصائص المغناطيسية الى [6]:

III . 2 . 2 . 1 اسبائك حديدية المغنطة (Ferromagnetisme) :

تتمتع مواد المغنطة الحديدية بامتلاكها للمغنطة الذاتية (بدون وجود حقل خارجي ممغنط) تتميز المواد المغناطيسية الحديدية بنفاذية مغناطيسية عالية ($\mu_r \gg 1$)، تنشأ المغنطة الذاتية الفيرومغناطيسية من تفاعل ثنائيات القطب المغناطيسية حيث يمكن لهذه الثنائيات أن تنتظم في اتجاه واحد و في غياب الحقل المغناطيسي الخارجي حيث يكون لها عزم مغناطيسي كلياً غير معدوم الشكل (III . 3)، لقد بينت النظرية الكمية فيما بعد أن المغنطة الذاتية تنشأ عن التفاعل السبيني المتبادل بين ذرات أو جزيئات المادة بسبب مبدأ ياولي.

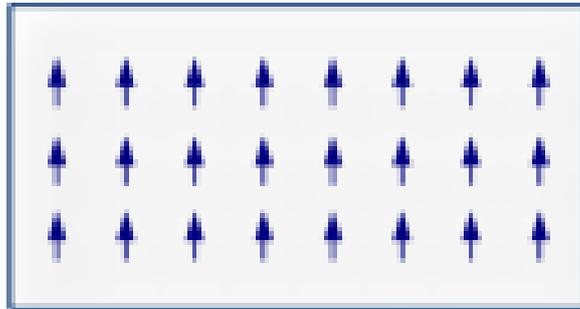
- تظهر خاصية فيرو مغناطيسية على بلورات المعادن الانتقالية مثل الحديد (Fe) والكوبلت (Co) والنيكل

$$(Ni) \text{ التي تتحقق فيها الشرط } \frac{d}{a} \gg 1.5$$

d: قطر الذرة .

a: قطر الغلاف الالكتروني. [7]

• اغلب سبائك هسلر تكون حديدية المغنطة Ferromagnetisme التي تشبع في مجال مغناطيسي ضعيف، و بعد القيام بدراسات معمقة على الخصائص المغناطيسية في السبيكة X_2YZ اكتشف أن تركيز (sp) العنصر X له دور هام جدا في انشاء الخواص المغناطيسية كما يؤثر في العزم المغناطيسي و تصنيف نوع الخاصية المغناطيسية (فيرو مغناطيسية). [8]

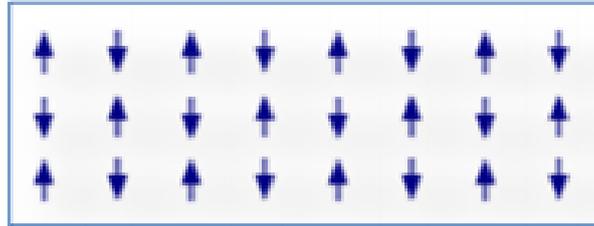


الشكل (III . 3): ترتيب العزوم في حالة فيرومغناطيسية

III . 2 . 2 . 2 : سبائك حديدية مضادة (Antiferromagnetisme)

تتميز بتعاكس اتجاهات العزوم المغناطيسية (الشكل III . 4) و هذا تتعدم المغنطة الذاتية اي عند جمع العزوم يساوي صفر، كما انها تتميز بدرجة حرارة تدعى درجة نيل (Neel) T_N وهي الحد الفاصل بين الطور المغناطيسي و طور الحديدي المضاد.

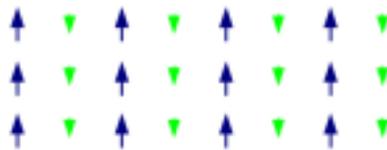
- على الرغم من أن معظم سبائك هسلر فيرو مغناطيسية إلا أن بعضها يكون فيرو مغناطيسي مضاد .
Antiferromagnetic لا سيما العناصر التي تكون Y هي Mn، تتبلور السبائك المضادة بنية B2 و غالبا يكون $[7](x=Ni, Z=Al, In)$



الشكل (III . 4): ترتيب العزوم في حالة فيرو مغناطيسية

III . 2 . 2 . 3 : سبائك فيرومغناطيسية (Ferrimagnetique)

تشابه الفيرومغناطيسية مع المغناطيسية المضادة من حيث أن العزم المغناطيسي لنصف عدد الذرات في المادة يكون اتجاهه عكسيا بالنسبة للنصف عدد الذرات الأخرى ولكن عزومها المغناطيسية ليست متساوية بحيث تظهر للمادة مغناطيسية ذاتية اي جمع عزومها لا يساوي الصفر (الشكل III . 5).
هذه الخاصية نادرة الوجود في سبائك هسلر حيث تم الكشف عنها الا في السبائك: Mn_2VAl و Mn_2VG



الشكل (III . 5): ترتيب العزوم في حالة فيرومغناطيسية

III. 2 . 3 تطبيقات سبائك هسلر :

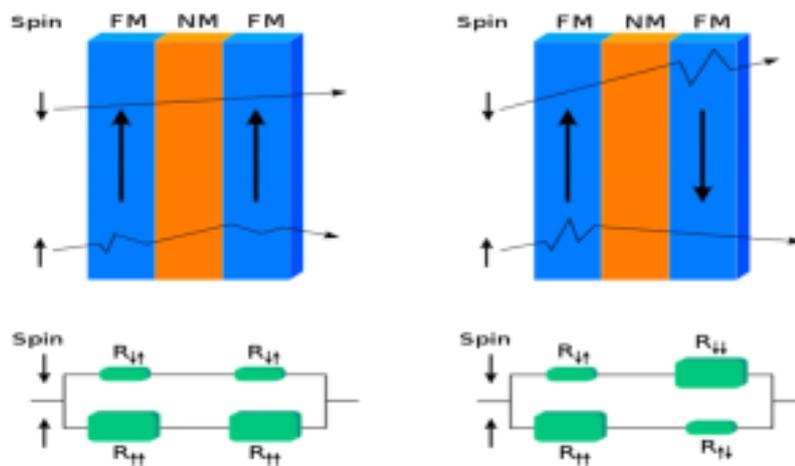
تتصف سبائك هسلر بخاصية تذكر الشكر فهي تدعى السبائك المتذكرة للشكل تتمتع السبائك المتذكرة للشكل خصائص فريدة لا تتوافر في كثير من السبائك كما لها تطبيقات عديدة منها:

III. 2 . 3 . 1 تطبيق سبائك هسلر في الإلكترونات (spintroniques):

تم اكتشاف تأثير المغناطيسية العملاقة (GMR) في متعددة الطبقات المغناطيسية في عام 1986 من قبل P. Grönberg (A. Grinberg . A . Fier) قد أحدثت ثورة في مجال تكنولوجيا المعلومات.

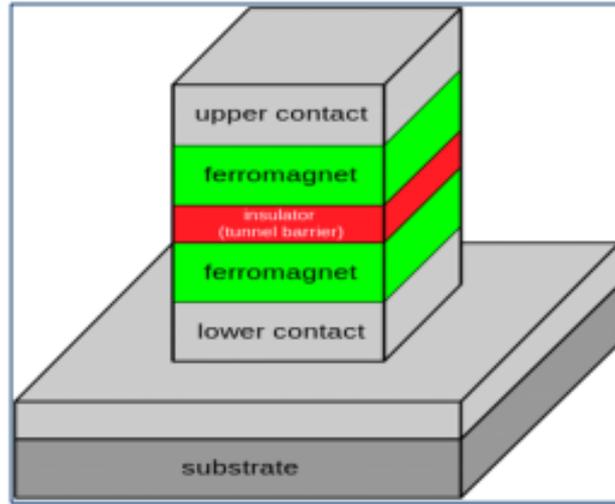
نحن نرى استعمال الإلكترونات الدورانية spintroniques في حياتنا اليومية، من خلال صمامات العزم المغزلي spin على أساس تأثير GMR ، والتي تستخدم في الحساسات المغناطيسية ورؤوس قراءة الأقراص الصلبة كما تستخدم في ذاكرة وصول عشوائي المغناطيسية MRAM. يتكون صمام العزم المغزلي من طبقتين فيرومغناطيسيتين يمكن تغيير قطبيتها في وجود مجال مغناطيسي ضعيف و بينهما طبقة رقيقة جدا معدنية غيرمغناطيسية.

التأثير GMR يجعل المقاومة الكهربائية للعينة يعتمد على اتجاه المغناطيسية في الطبقات المغناطيسية، وتكون المقاومة أعلى في حالة أن يكون اتجاه المغناطيسية في الطبقات معاكسة، بعكس المقاومة عندما تكون مغناطيسية الطبقات في نفس الاتجاه . (الشكل III . 3)



الشكل (III.6): صمام العزم المغزلي vanes de spin

• مقاومة مغناطيسية نفقية (Magnetoresistance a effet tunnel): وتتكون هذه المقاومة من طبقتين مغناطيسيتين حديديتين وبينهما طبقة رقيقة جدا من مادة عازلة. فعندما تصل سمك الطبقة الرقيقة عدة نانومتر فيمكن للإلكترونات الانتقال بين المغناطيسين طبقا لظاهرة نفق ميكانيكا الكم، يكون مبدأ عملها بتطبيق مجال مغناطيسي خارجي على تلك العينة يمكن ضبط اتجاه المغناطيسية في أي من الطبقتين المغناطيسيتين بدون إلزام للطبقة الأخرى، فعندما تكون الطبقتان المغناطيسيتان في اتجاه واحد يكون احتمال مرور إلكترونات بين الطبقتين كبير متخللا الطبقة العازلة، وإذا كان اتجاه المغناطيسية في الطبقتين المغناطيسيتين معكوسا يقل التيار المار بينهما (الشكل 4.III) تستخدم في رؤوس القراءة التي تقوم بقراءة المعلومات على الأقراص الصلبة الحديثة باستخدام المقاومة المغناطيسية النفقية. كما يوجد نوع جديد من الذاكرة MRAM يعمل بواسطة المقاومة المغناطيسية النفقية، وكذلك تستخدم في الحساسات مثلما في أنظمة الكبح الحديثة في السيارات. [8]



الشكل (7.III): مقاومة مغناطيسية نفقية

III . 2 . 3 . 2 تطبيقات أخرى:

- تستخدم في الجانب الهندسي مثل البنيان المقاوم للزلازل لأنها تتميز بخصائص ميكانيكية خارقة.
- الأجنحة الذكية المستغلة في الطائرات حيث يجب أن يتكيف شكل الجناح مع البيئة المحيطة
- في مجال صناعة الفضاء يفضل مقاومتها للإجهادات .

Références

- [1] EDWARD.B STPHENSON, "Megnitic Proprties of Heusle", university of illinois, 2007
- [2] GUILLERMO ORTIZ HERNANDEZ ", Elaboration et étude des propriétés physiques de couches minc monocristallines d'alliage de Heusler à faible amortissement magnétique pour composants hyperfréquences", l'université de toulouse, 2013
- [3] K.M. WONG, S.M. ALAY-E-ABBAS, Y. FANG, A. SHAUKAT, Y.LEI, J. Appl. Phys. 114 (2013) 034901.
- [4] QING-LONG FANG, JIAN-MIN ZHANG, XU-MEI ZHAO, KE-WEI XU, Vincent Ji, Journal of Magnetism and Magnetic Materials, Volume 362, August 2014, Pages 42-46
- [5] ZENASNI HOCINE," etude théorique des propriétés magnétiques, électroniques et structurales des alliages heusler", universite abou bakr belkaïd – tlemcen, 2013
- [6] M. Belkhouane, S. Amari, A. Yakoubi, A. Tadjer, S. Méçabih, G. Murtaza, S. Bin Omran, R. Khenata, Journal of Magnetism and Magnetic Materials, Volume 377, 1 March 2015, Pages 211-214.
- [7] عزيز داخل، " مقدمة في الجسم الصلب"، الجزء الثاني، ديوان المطبوعات الجامعية، بن عكنون، الجزائر 1988
- [8] HANIFE TUZCUOGLU, docteur de l'universite paris 2013

الفصل الرابع : النتائج والمناقشة

1.VI مقدمة

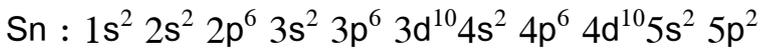
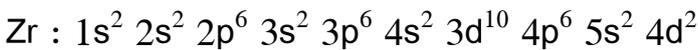
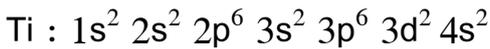
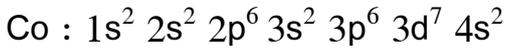
لقد احدث اكتشاف سبائك هسلر ثورة كبيرة في المجتمع العلمي لذلك حازت اهتمام هائل سواء في الجانب التجريبي أو النظري بسبب الخصائص الخارقة التي تتمتع بها، حيث يوجد العديد من البحوث حول خصائص سبائك هسلر من الشكل X_2YZ .

في عملنا هذا سنقوم بتحديد الخصائص البنيوية، الالكترونية، المغناطيسية للسببكتين Co_2XSn حيث

($X= Zr, Sn$)، استخدمنا طريقة الموجة المستوية المتزايدة خطيا (LAPW) والدمجة في برنامج Wien2k. وتم إجراء هذه الحسابات في إطار نظرية دالية الكثافة + تبادل- ارتباط استخدمنا التقريب المعمم GGA .

العينتين (CO_2TiSn) (CO_2ZrSn) هي من مركبات هسلر التي تتميز عن كثير من المركبات بخاصية السبين الالكتروني و خاصية تذكر الشكل حيث تتميز تلك السبائك بقدرتها على استعادة شكلها الأصلي عند تسخينها، عموما تتبلور سبيكة هسلر في بنية مكعبة متماسكة ومستقرة L21 (CFC) وهي فيرو مغناطيسية .

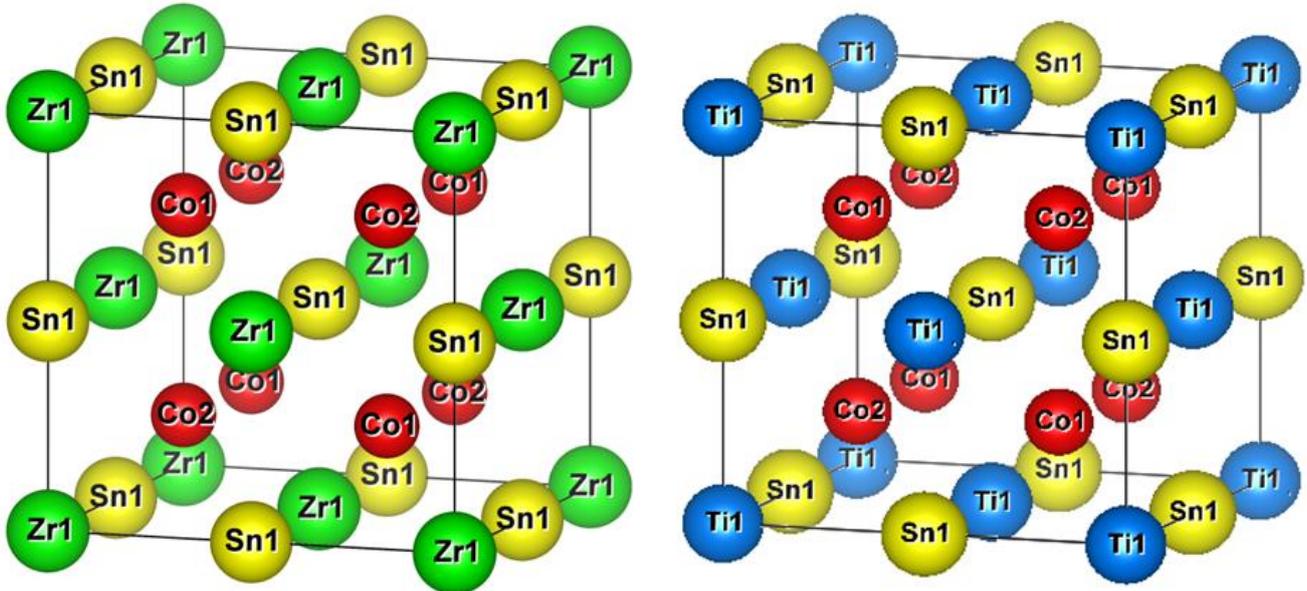
لتحديد الخصائص السابقة يعطى التوزيع الالكتروني للعناصر الكيميائية على الشكل:



CO ₂ ZrSn	CO ₂ TiSn	العينة
CFC (225fm-3m)	CFC (225fm-3m)	نوع الخلية
Co : (1/4,1/4,1/4) ; (3/4,3/4,3/4) RMT=2.00 Zr: (0,0,0) ; RMT=2.20 Sn : (1/2,1/2,1/2) ; RMT=2.5	Co : (1/4,1/4,1/4) ; (3/4,3/4,3/4) RMT=2.31 Ti : (0,0,0) ; RMT=2.25 Sn : (1/2,1/2,1/2) ; RMT=2.31	تموضع الذرات

الجدول (1-VI) بعض خصائص المركبين Co₂ZrSn و Co₂TiSn.

بعد ادخال جميع المعلومات نتأكد من مدخلاتنا باستعمال برنامج Xcrysden كما يوضحه الشكل (1-VI) للعينتين Co₂ZrSn و Co₂TiSn.



الشكل (1-VI). البنية البلورية للمركبين CO₂ZrSn و CO₂TiSn.

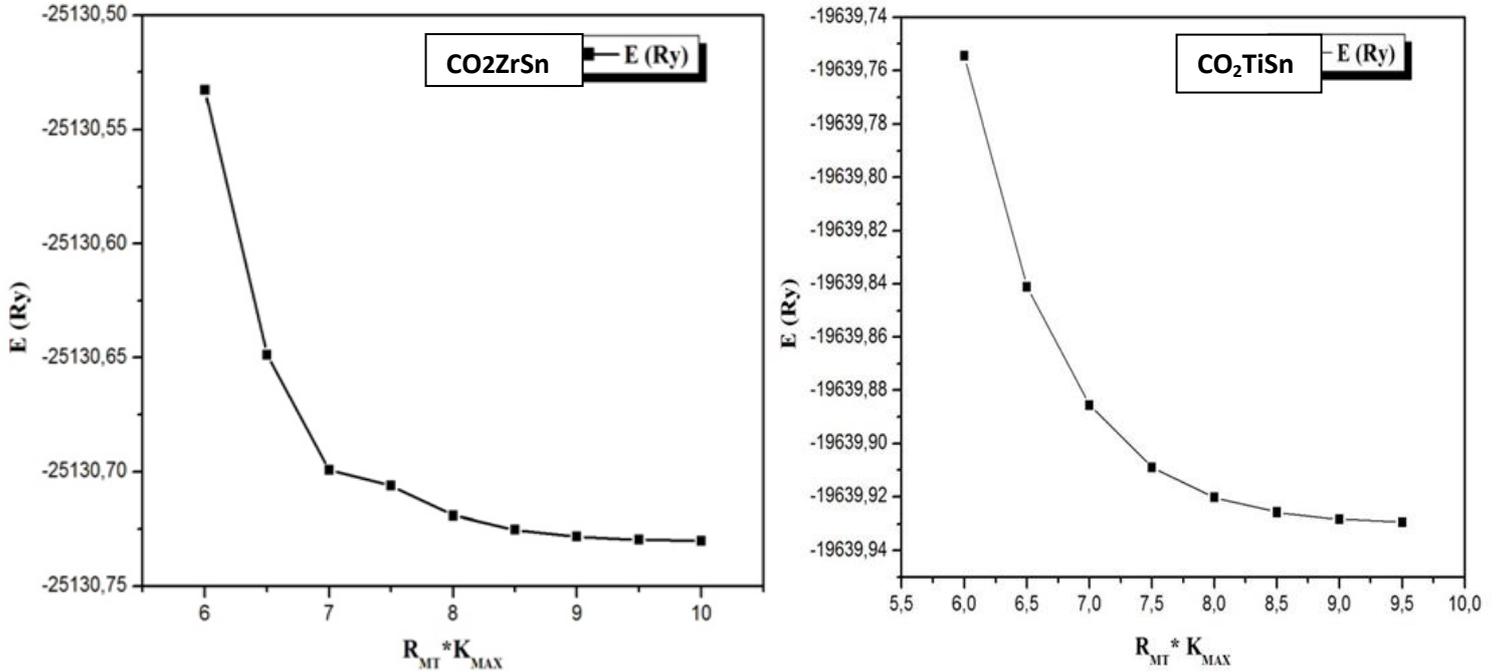
2.VI دراسة التقارب:

في هذه المرحلة نقوم بدراسة تقارب الحجم من أجل تحسين النتائج ويتم ذلك باختيار عدد النقاط Kpoint والعامل $R_{MTmin} * K_{max}$ التي تثبت عندها الطاقة.

1.2.VI تهيئة عامل $R_{MTmin} * K_{max}$:

من أجل إيجاد قيمة $R_{MTmin} * K_{max}$ التي تكون فيها قيمة الطاقة ثابتة (التقريبات الحسابية من أجل ان تكون الطاقة بقيمة 0.0001 Ry), نثبت قيمة K في منطقة بريلوان الأولى والتي أخذناها 1000. ونغير في كل مرة قيمة $R_{MTmin} * K_{max}$ ومجال تغييرها يكون من 5 إلى 9. وفي كل مرحلة نغير فيها هذه الأخيرة نحسب حلقة SCF مع اعادة مرحلة calc initialize الى ان تثبت الطاقة.

حيث R_{MTmin} هو أصغر نصف قطر ذري للخلية المدروس، K_{max} القيمة الأعظمية للشعاع الموجي في أساس الأمواج المستوية المستخدمة ضمن مجموعة الأنظمة الإلكترونية في الفضاء داخل المجال الذري.



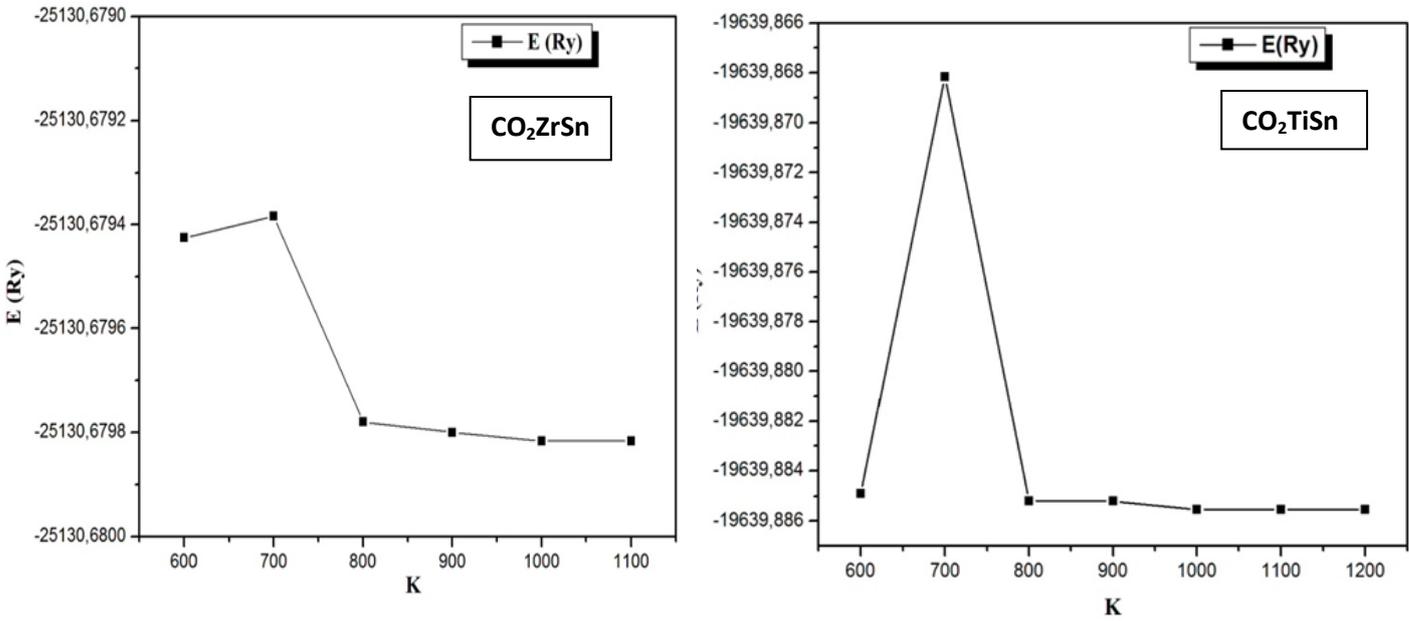
الشكل (2-VI). منحنى تغير الطاقة بدلالة $R_{MT} * K_{MAX}$.

من خلال الشكل (2-VI) نلاحظ أن الطاقة تثبتت في القيمة 9 بالنسبة لعامل التهيئة $R_{MTmin} * K_{max}$.

2.2.VI تهيئة عدد النقاط K_{point} :

نعيد نفس المراحل التي قمنا بها سابقا في تهيئة عامل $K_{max} * R_{MTmin}$ لكن في هذه المرحلة نغير قيمة K_{point} في منطقة بريوان الأولى منطقة الفضاء العكسي، من 500 الى ما فوق مع تثبيت قيمة $R_{MTmin} * K_{max}$ المتحصل عليها سابقا 9، إلى أن تثبت الطاقة ، المنحنى يوضح ذلك.

من خلال المنحنى نلاحظ ان الطاقة تثبت عند $K_{point} = 1000$ والشكل (3-VI) يبين ذلك.



الشكل (3-VI). منحنى الطاقة الكلية بدلالة نتائج K_{point} .

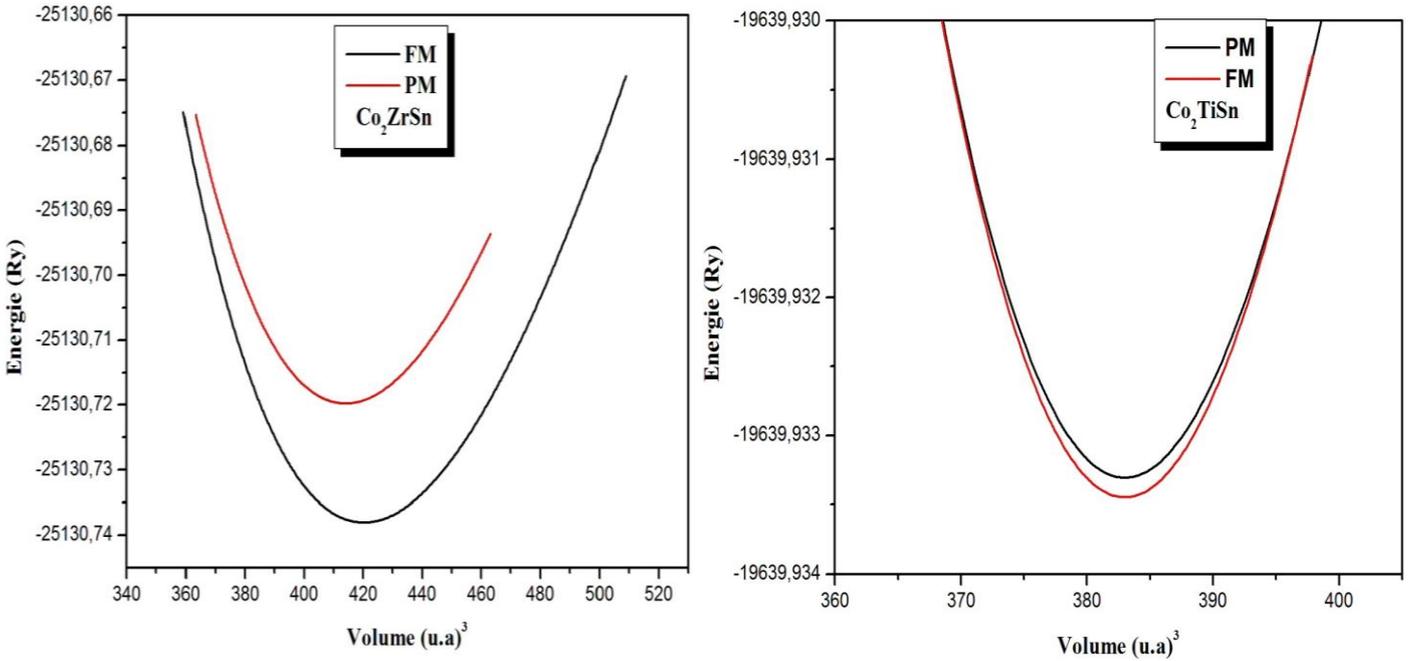
3.VI الخصائص البنيوية:

حساب الخصائص البنيوية مهم جدا لدراسة أي مادة لأنها تتيح لنا استخدام النتائج المتحصل عليها في تحديد الخصائص الفيزيائية الأخرى. هذا الحساب يهدف الى تحديد حجم الخلية عند التوازن الموافق للحد الأدنى من الطاقة E وكذا حساب معامل الإنضغاطية B. لقد تم حساب طاقات الحالة الأساسية كدالة لثابت الشبكة البلورية $a(A^\circ)$ للمركبين Co_2ZrSn و Co_2TiSn في الحالتين الفيرومغناطيسية (FM) و البارامغناطيسية (PM) بتقريب GGA والمبينة في الشكل (4-VI). أما النتائج المتحصل عليها لثابت الشبكة البلورية $a(A^\circ)$ و معامل الانضغاطية B مدونة في الجدول (5-VI).

حيث لاحظنا ان منحنى تغيرات الطاقة يتناقص إلى قيمة سفلى ثم يزداد (أي هناك قيمة حدية سفلى E_{min} توافق حجم معين) هذه القيمة تتوافق مع قيمة كثافة الحالة الأساسية للجسيمات حيث ترتبط جميع الخصائص الفيزيائية بهذه الحالة $E[\rho_0(r)] = \min E[\rho(r)]$.

نلاحظ أن هناك فرق في الطاقة الكلية للمركبين في الطورين الفيرومغناطيسية (FM) و الطور البارامغناطيسية (PM). إضافة الى ذلك فإن الطور الفيرومغناطيسية هو الأكثر استقرارا من الطور البارامغناطيسية. بالنسبة للمركبين معا Co_2TiSn و Co_2ZrSn . أما النتائج المتحصل لثابت الشبكة البلورية $a(A^\circ)$ للمركبين كانت مقارنة جدا للقيم التجريبية حسب الجدول (2-6).

من المعروف أن هناك علاقة قوية بين معامل الإنضغاطية B وصلابة المواد وبالتالي المركبين عمليا لا يمتلكان نفس الدرجة من الصلابة. معامل الأنضغاطية B للمركب Co_2TiSn اكبر من معامل الإنضغاطية للمركب Co_2ZrSn و هذا يعني أن المركب Co_2TiSn اكبر صلابة من المركب Co_2ZrSn .



الشكل (4-6). تغيرات الطاقة الكلية للمركبين Co_2ZrSn و Co_2TiSn بدلالة الحجم.

معامل الانضغاط $B_0(\text{GPa})$	ثابت الشبكة (Å°)		العينة
	نتيجة الحساب $a_{\text{cal}} (\text{Å}^\circ)$	النتيجة التجريبية $a_{\text{exp}}(\text{Å}^\circ)$	
172.6746	6.1002	6.0579 [1]	CO_2TiSn
153.0937	6.2919	6.2544 [2]	CO_2ZrSn

الجدول (2-VI) قيم كل من ثابت الشبكة و معامل الانضغاطية للمركبين Co_2TiSn و Co_2ZrSn .

4. VI الخصائص الإلكترونية :

في هذا الجزء سنقوم بعرض ومناقشة عصابات الطاقة وكثافة الحالات الكلية للمركبات السابقة، مع تحديد الطبيعة الإلكترونية لهذه المواد، ولدراسة الطبيعة الإلكترونية لهذه المركبات سنقوم بتحديد مساهمة كل من المدارات الإلكترونية للذرات المشكلة لهذه المركبات في المجال الطاقوي المحصور بين 14 eV الى 14eV

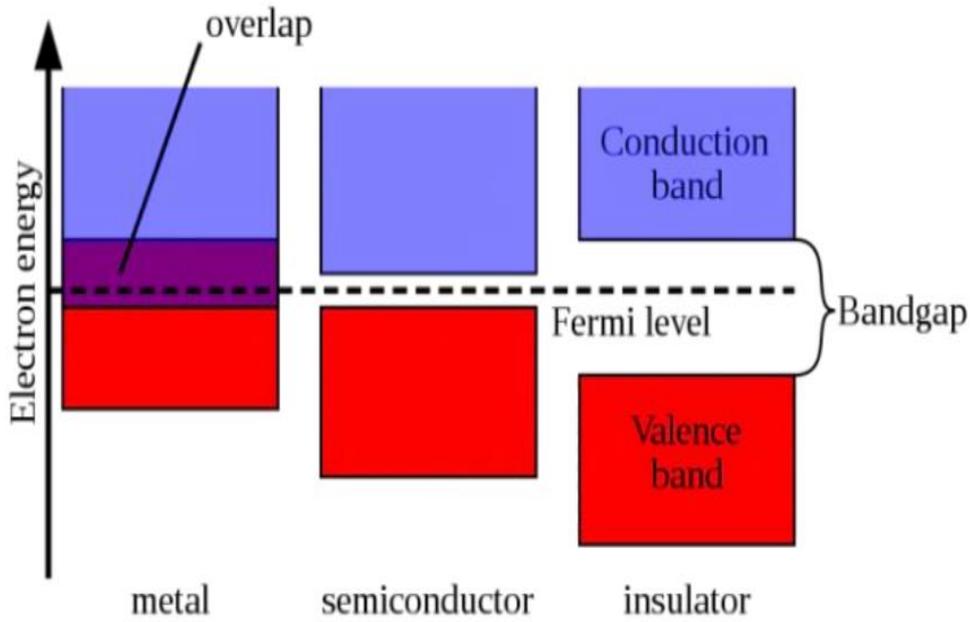
باستخدام طريقة الامواج المستوية المتزايدة خطيا والكمون الكامل FP-LAPW تحصلنا على عصابات الطاقة في النقاط عالية التناظر في منطقة بريلوان الاولى للمركبين Co_2TiSn و Co_2ZrSn في تقريب .GGA

ويتم ذلك باستخدام النتائج المتحصل عليها سابقا.

$$(R_{\text{MTmin}} * K_{\text{max}} = 9, K_{\text{point}} = 1000, a_{\text{Co}_2\text{TiSn}} = 6.1002 \text{ Å}^\circ, a_{\text{Co}_2\text{ZrSn}} = 6.2919 \text{ Å}^\circ)$$

1.4. VI عصابات الطاقة :

هي نمذجة لقيم الطاقة التي يمكن أن يتخذها الإلكترون داخل المواد الصلبة، تشكل هذه القيم عصابات الطاقة وتنقسم إلى نوعين عصابات مسموحة "عصابة التكافؤ، عصابة التوصيل" وأخرى ممنوعة وبواسطة عرض العصابة الممنوعة نقوم بتصنيف المواد الى ناقل أو شبه ناقل أو عازل كما يوضحه الشكل (5-VI) [3].



الشكل (VI-5). مخطط لعصابة الطاقة.

عموما نلاحظ هناك تشابه كبير في عصابات الطاقة للمركبين Co_2ZrSn و Co_2TiSn . وجدنا ان المركبين السابقين هما مركبين معدنيين بالنسبة لسبين أعلى ونصفا ناقل بالنسبة لسبين أسفل. بالنسبة لسبين أعلى: يوجد التهام بين عصابتي التكافؤ وعصابة النقل في الاتجاهين [XK] بالنسبة للمركبين معا مع ثبات غياب الفجوة الطاقوية، كما لاحظنا أن بنية عصابة الطاقة للمركبين تقريبا متشابهة. بالنسبة لسبين أسفل: من الواضح أن النهاية الحدية الصغرى لعصابتي النقل (CBM) مفصولة عن النهاية الكبرى لعصابتي التكافؤ (VBM) على طول المتجه (WK)، كما لاحظنا أن عصابة التكافؤ للمركبين تقع فوق مستوى فرمي، قيمة الفجوة الممنوعة E_g (gap) للمركبين Co_2ZrSn و Co_2TiSn تساوي :

$$E_{g(r-x)}^{\downarrow} = 0.52 \text{ ev} ; \quad E_{g(r-x)}^{\uparrow} = 0.48 \text{ ev}$$

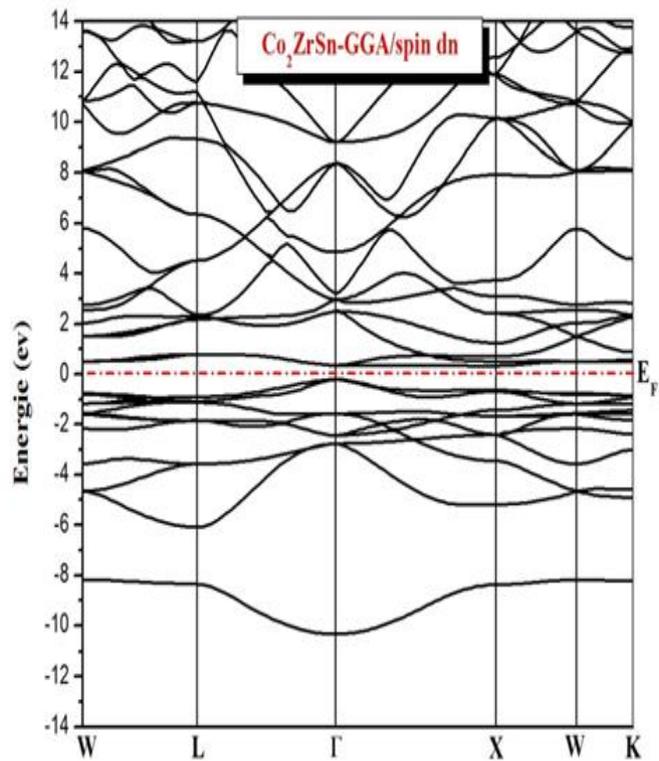
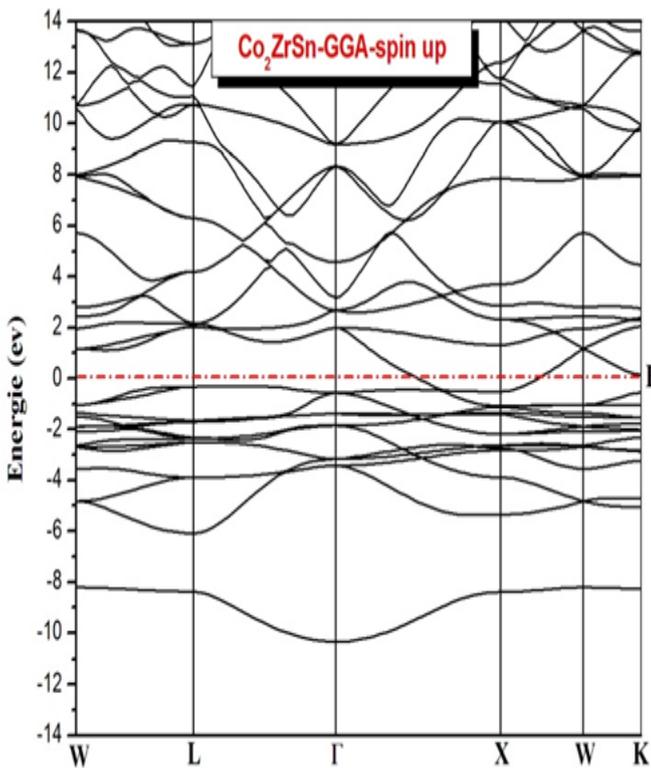
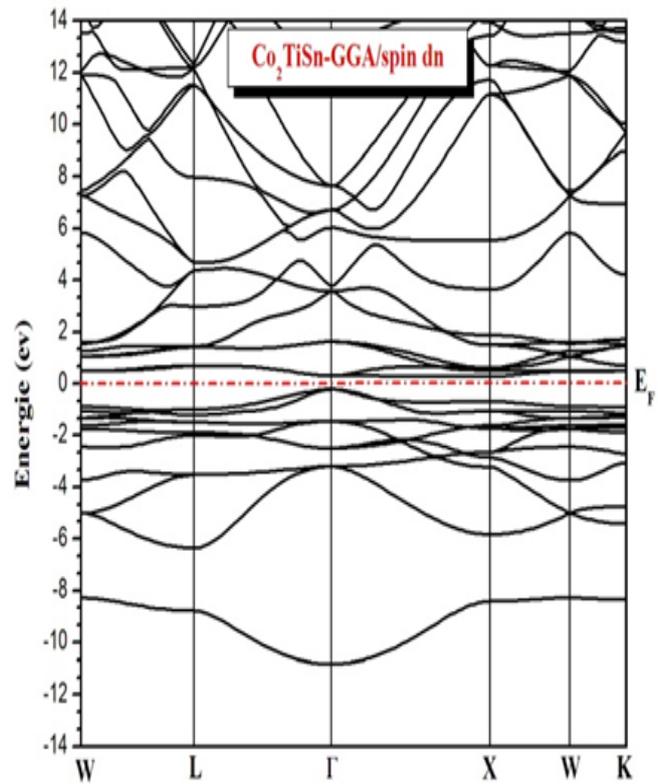
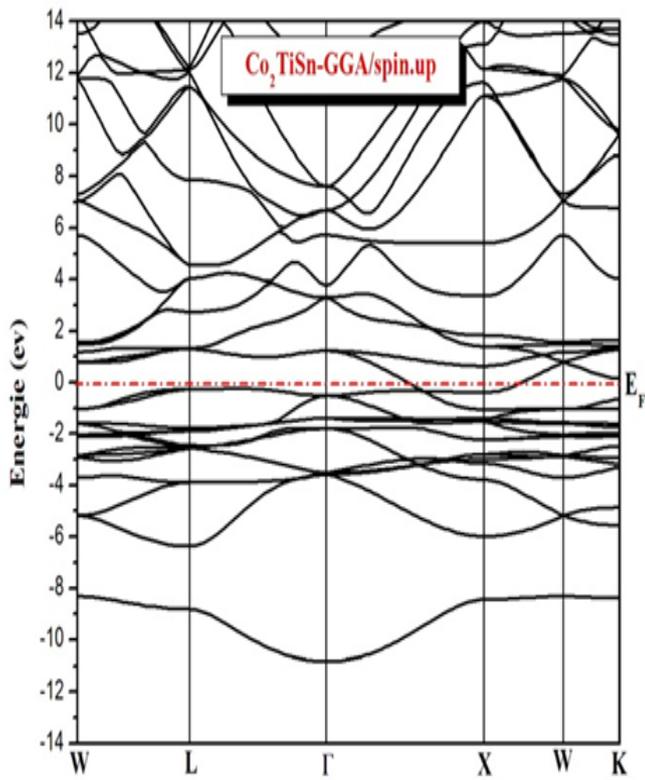
كما قمنا بمقارنة هذه النتائج مع نتائج اعمال أخرى هو موضح في الجدول (VI-3) حيث لاحظنا أن النتائج متقاربة

ومنه المركبين يسلكان سلوك نصف معدن في الحالة الأساسية (equilibrium state)

نتائج أعمال أخرى (ev)	نتائج الحساب (ev)	العينة
$E_{g_{cal}}=0.18[1]$	$E_{g_{cal}}=0.48$	CO_2TiSn
$E_{g_{cal}}=0.14 [1]$ ، $E_{g_{exp}}=0.2 [2]$	$E_{g_{cal}}=0.52$	CO_2ZrSn

الجدول (3-VI) مقارنة النتائج مع نتائج أعمال أخرى

يوضح الشكل (6-VI) بنية عصابات الطاقة لسبين أعلى وسبين أسفل للمركبين Co_2ZrSn و Co_2TiSn في تقريب GGA حيث مستوي فيرمي موجود عند 0 eV .



الشكل (VI-6) عصابة الطاقة للمركبين Co_2ZrSn و Co_2TiSn .

VI. 2.4. كثافة الحالات الكلية و الجزئية:

تم حساب كثافة الحالات الكلية و الجزئية للمركبين Co_2ZrSn و Co_2TiSn في تقريب GGA كما يعبر عنه الشكل (VI-7-8-9). عموما المركبين ليس لهما نفس الشكل العام لكثافة الحالات الكلية و هذا راجع الى وجود ذرات مختلفة و احجام مختلفة.

بالنسبة للمركب Co_2ZrSn بصفة عامة نلاحظ في الشكل :

* من -10 ev إلى -8 ev طاقة منخفضة تنشأ من حالة s للعنصر Sn.

* من -4 ev إلى مستوى فارمي فإن مساهمة المستوى الذي d للعنصر Co تكون كبيرة مقارنة مع المستوى d للعنصر Zr و يحدث العكس من مستوى فارمي إلى 4 ev ، أما المستويات الأخرى فإن مساهمتها تكاد تكون شبه معدومة في حالتي سبين أعلى و سبين أسفل.

* العصابة المتواجدة من 5 ev إلى 10 ev ناتجة عن تراكب الحالة p للعنصر Sn والحالة d للعنصر Zr.

* العصابة حول مستوى فارمي ناتجة عن تراكب الحالة d للعنصر Co و الحالة d للعنصر Zr في حالتي سبين أعلى و سبين أسفل.

* من الواضح ان كثافة الحالات للعنصر Co والعنصر Zr مختلفة فحالة Co مشغولة كليا حيث لا توجد كثافة حالات بعد مستوى فارمي من أجل سبين أعلى.

بالنسبة للمركب Co_2TiSn بشكل عام نلاحظ في الشكل مايلي:

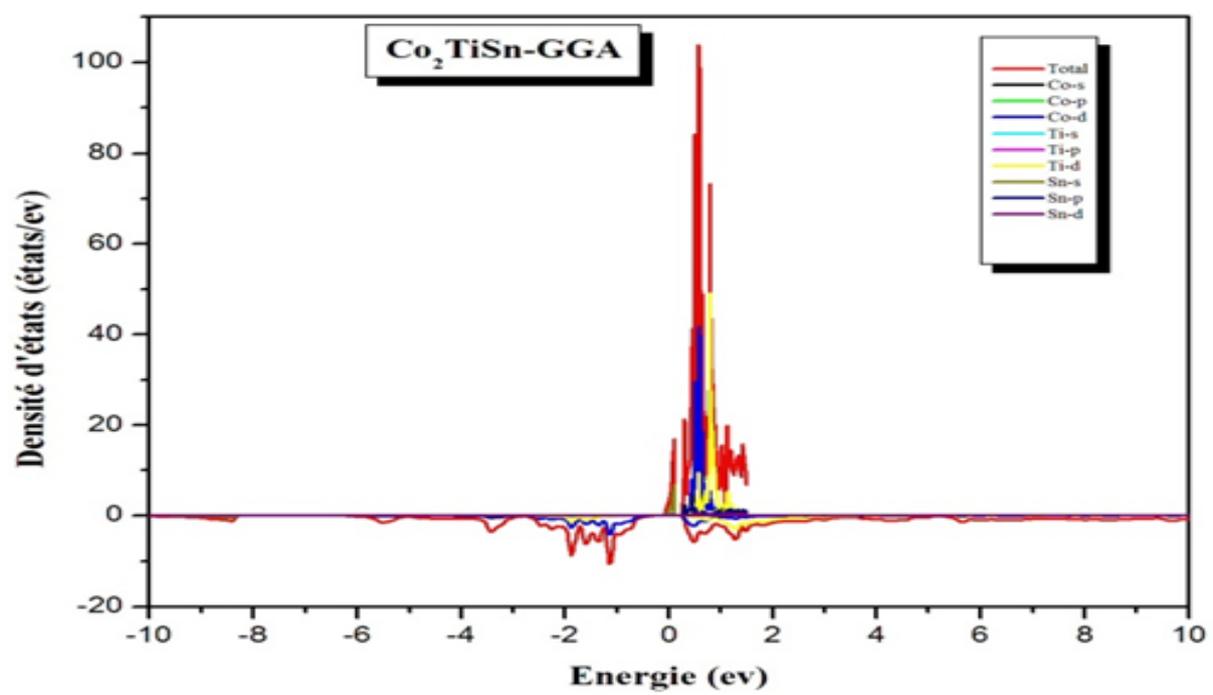
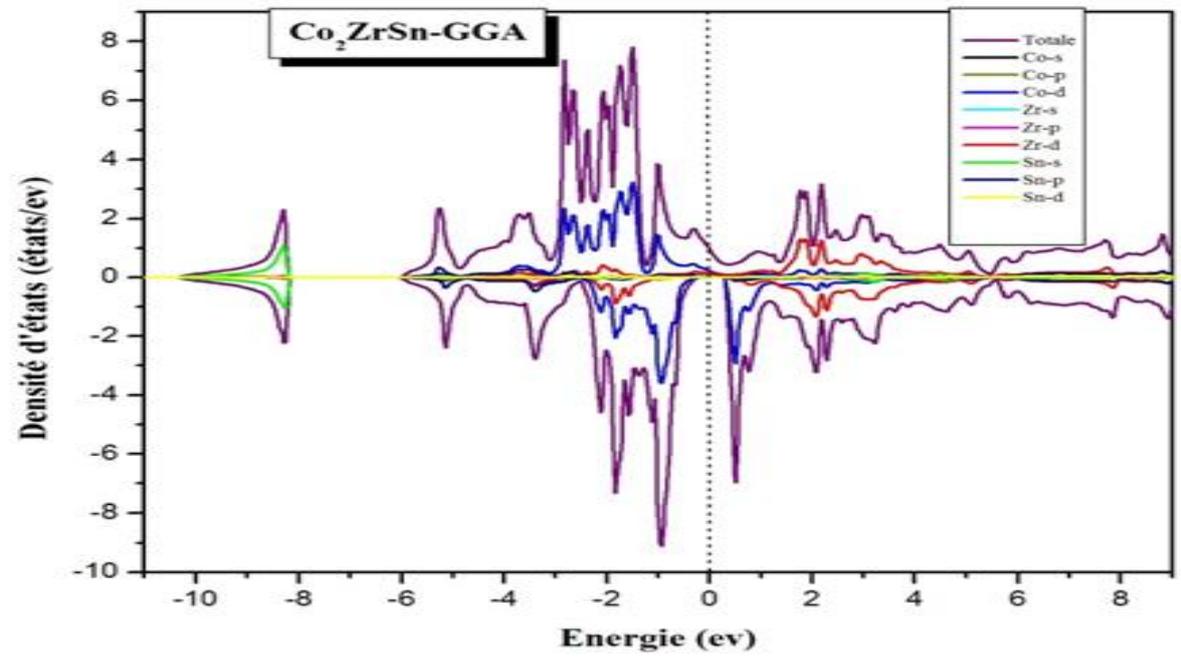
* من -10 ev إلى -8 ev طاقة ضعيفة ناتجة عن الحالة s للعنصر Sn.

* قبل مستوى فارمي فإن كثافة الحالات تكون معدومة بالنسبة لسبين اعلى و ضعيفة بالنسبة لسبين اسفل وهي ناتجة عن الحالة d للعنصر Co.

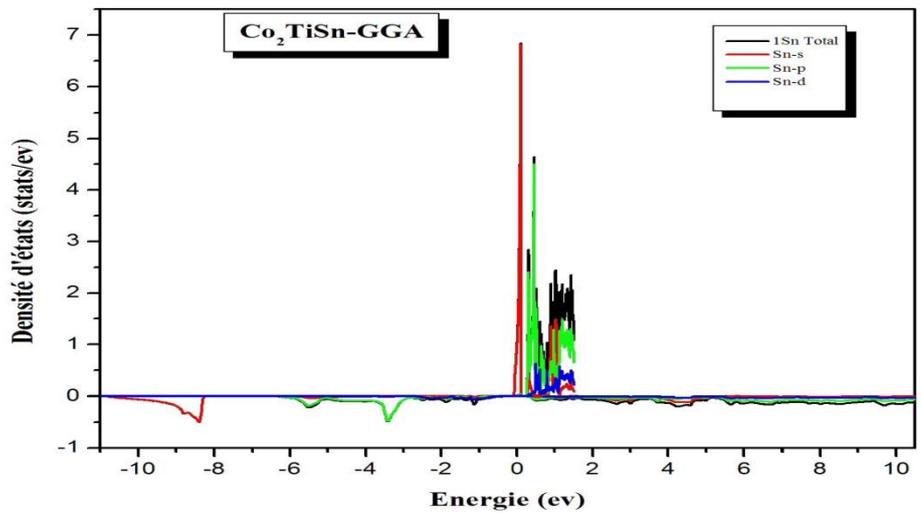
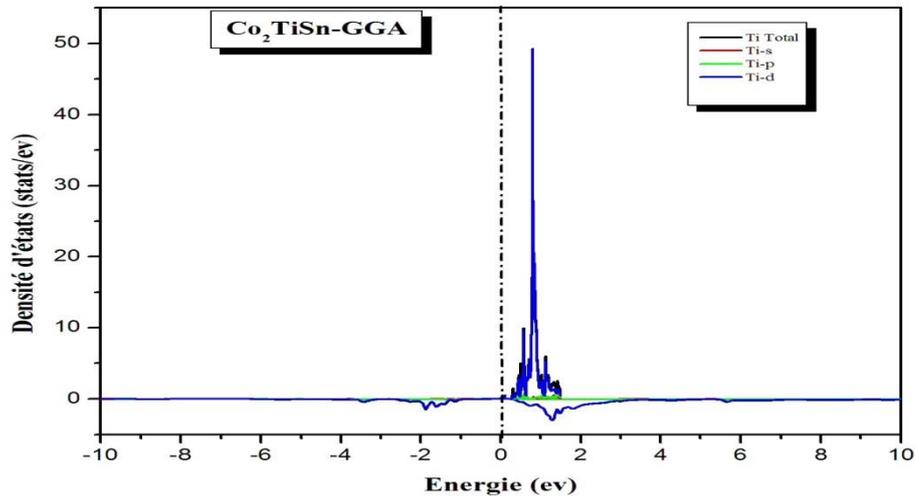
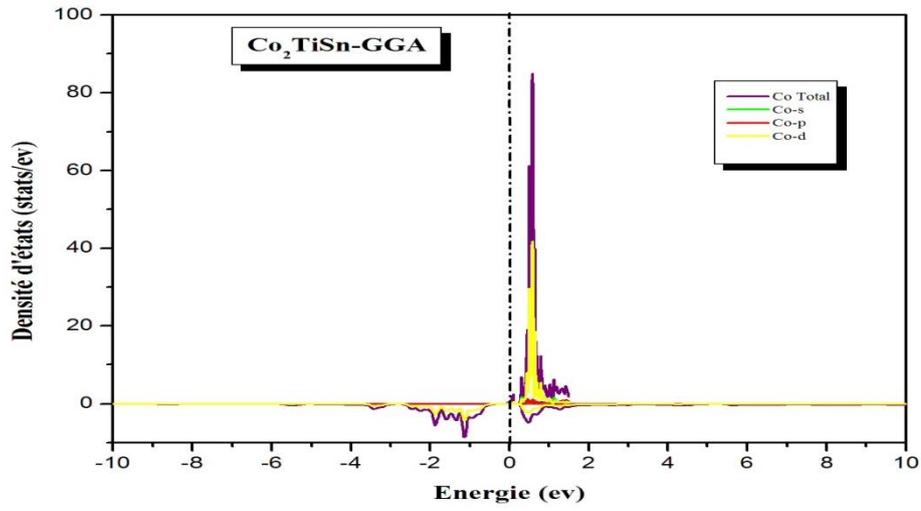
* بعد مستوى فيرمي فإن مساهمة الحالة d لكل من Co و Ti تكون اكبر من اجل سبين أعلى وشبه معدومة من سبين أسفل.

* من $(2/10) \text{ ev}$ و $(-4/-10) \text{ ev}$ كثافة الحالات شبه معدومة من اجل سبين اعلى و سبين اسفل.

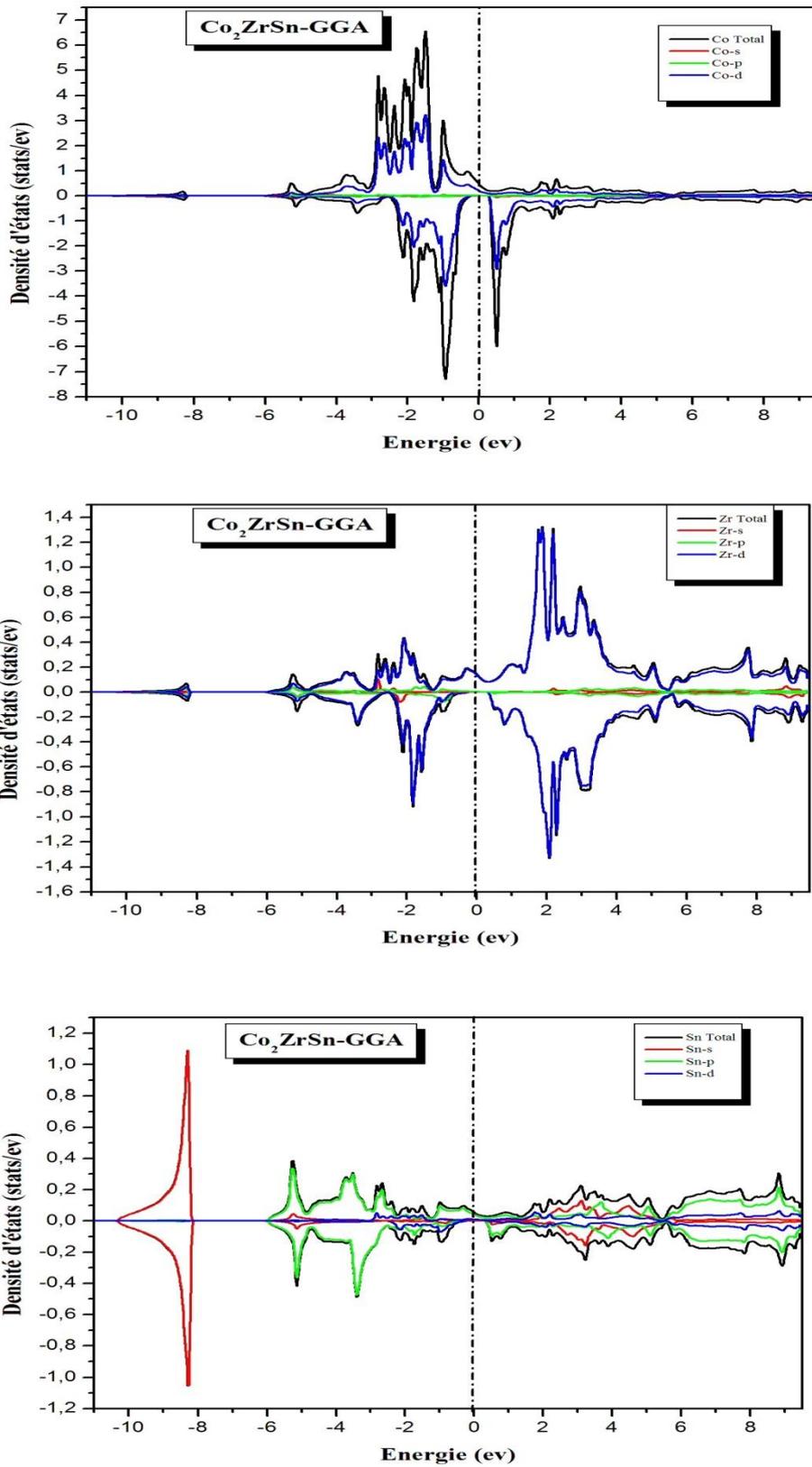
* عموما حول مستوى فيرمي العصابة ناتجة عن تراكب الحالة d لكل من Co و Ti, أما باقي الحالات فإن مساهمتها تكون شبه معدومة من أجل سبين اسفل.



الشكل (7-VI) كثافة الحالات الكلية للمركبين Co_2ZrSn و Co_2TiSn .



الشكل (8-VI) كثافة الحالات الجزئية للمركب Co₂ZrSn



الشكل (9-VI) كثافة الحالات الجزيئية للمركب Co_2ZrSn

Références

- [1] L.V.Bekenov 1 , V.N.Antonov 1 , A.P.Shpak 1 , A.N.Yaresko
Condensed Matter Physics, 2005, Vol. 8, No. 3(43), pp. 565–577.
- [2] A. Slebarski , A. Jezierski, M. Neumann, and S. Plogmann, Eur. Phys. J. B 12,
519–523 (1999).
- [3] W. KOHN, L.J. SHAM, Self -Consistent Equations Including Exchange and
Correlation Effects, Phys. Rev.

خلاصة عامة

قمنا في بحثنا بدراسة الخصائص البنيوية و الالكترونية للسببكتين CO_2TiSn ، CO_2ZrSn معتمدين على طريقة الموجة المستوية خطيا المدمجة في برنامج Wien2k في الإطار العام لنظرية الكثافة الدالية DFT وذلك في التقريب GGA.

كانت النتائج كما يلي:

-فيما يخص ثابت الشبكة a كانت النتائج جيدة مقارنة مع القيم التجريبية.

-معامل الانضغاطية B للمركب CO_2TiSn اكبر من معامل الانضغاطية للمركب CO_2ZrSn و هذا يعني أن المركب CO_2TiSn اكبر صلابة من المركب CO_2ZrSn .

-المركبين CO_2TiSn ، CO_2ZrSn يسلكان سلوك نصف معدن في الحالة الأساسية و قيمة الفجوة الممنوعة E_g (gap) للمركبين CO_2TiSn و CO_2ZrSn تساوي:

$$E_{g(r-x)}^+ = 0.52 \text{ ev} ; E_{g(r-x)}^+ = 0.48 \text{ ev}$$

إضافة إلى ذلك، لاحظنا أن الطور فيرو مغناطيسي (FM) أكثر استقرارا من الطور البارامغناطيسي (PM).

- عموما هناك تشابه كبير في عصابات الطاقة (Band) للمركبين CO_2TiSn و CO_2ZrSn على عكس منحنيات كثافة الحالات الكلية (Dos) و هذا راجع الى وجود ذرات مختلفة و احجام مختلفة.

إن ما أنجزناه في هذا العمل دفعنا إلى طرح اقتراحات وأفكار أخرى قد تكون النطلاقات لأعمال أخرى.

ملخص

في هذا العمل قمنا بدراسة نظرية (ab initio) للخصائص البنيوية، الالكترونية لمركبي هسلر CO_2ZrSn و CO_2TiSn . الهدف هو التحقق من الوسائط الفيزيائية مثل ثابت التوازن، كثافة الحالات، بنية عصابات. الطريقة المستخدمة هي طريقة الأمواج المستوية المتزايدة خطيا والكمون الكامل المدمجة في برنامج WIEN2K و ذلك في إطار نظرية دالية الكثافة في تقريب GGA. كلمات مفتاحية: سبائك هسلر، نظرية الكثافة الوظيفية DFT، الفيرومغناطيسية.

Résumé

Dans ce travail, nous avons étudié la théorie (ab initio) des propriétés structurales et électroniques du Hessler CO_2ZrSn et CO_2TiSn . L'objectif est de vérifier les milieux physiques tels que l'équilibre constant, la densité des cas et la structure des bandes. La méthode utilisée est la méthode d'onde plate linéairement augmentée et la latence complète intégrée dans WIEN2K sous la théorie de la dalia de densité de l'approximation de GGA.

Mots clés: Alliages Hessler, Ddtheory DFT fonctionnelle, Ferromagnétique.

Abstract

In this work we studied the theory (ab initio) of the structural, electronic properties of the Hessler CO_2ZrSn end CO_2TiSn . The goal is to check physical media such as constant balance, density of cases, and structure of bands. The method used is the linearly increased flat wave method and full latency integrated into WIEN2K under the density dalia theory of GGA approximation.

Keywords: Hessler alloys, Functional DFT Ddtheory, Ferromagnetic.