

جامعة قاصدي مرباح ورقلة

كلية الرياضيات وعلوم المادة

قسم علوم المادة



مذكرة: ماستر أكاديمي

المجال : علوم المادة

فرع: فيزياء

تخصص : فيزياء اشعاعية

إعداد الطالبة: خليفة سعيدة

بعنوان :

دراسة لخصائص عناقيد الزرنخ النقي  $As_{n+1}(n=1-16)$

و المطعم بالكروم  $CrAs_n (n=1-10)$

نوقشت يوم: 10/06/2018

أمام لجنة المناقشة المكونة من:

رئيسا	جامعة قاصدي مرباح ورقلة	استاذ محاضر قسم "أ"	بن طويلة عمر
مناقشا	جامعة قاصدي مرباح ورقلة	استاذ مساعد قسم "ب"	عياط زهية
مدعوا	جامعة قاصدي مرباح ورقلة	استاذ	بن عيدة مريم
مشرفا	جامعة قاصدي مرباح ورقلة	استاذ تعليم عالي	عيادي كمال الدين

السنة الجامعية: 2017م/2018م

## الأمهات

بسم الله الرحمن الرحيم

(قل اعملوا فسيري الله اعمالكم ورسوله والمؤمنون)

صدق الله العظيم

الهي لا يطيب النهار الى بطاعتك .. ولا تطيب اللحظات إلا بذكرك .. ولا تطيب الآخرة إلا بعفوك .. ولا تطيب الجنة إلا برويتك والله  
الى من بلغ الرسالة وادى الامانة .. ونصح الأمة الى نبي الرحمة ونور العالمين ..

سيدنا محمد ﷺ

الى من كلله الله بصبة والوقار .. الى من علمني العطاء بدون انتظار .. الى من احمل اسمه بكل افتخار .. ارجوا من الله ان يمد في  
عمرك لتري ثمار قد حان قطافها بعد طول انتظار وستبقى كلماتك نجوم امتدي

بها اليوم وفي الغد والى الابد .. والدي الغالي

الى ملاهي في الحياة .. الى معنى الحب والى معنى الحنان والتفاني .. الى بسمه الحياة وسر الوجود الى من كان  
دعائها سر نجاحي وحنانها بلمس جراحي الى ائلي الحبايب

اهي الحبيبة

الى من بما احبر وعليه اعتمد .. الى شمعة متقدة تنير ظلمة حياتي .. الى من بوجودها اكتسبت قوة ومحبة لا حدود لها ..

اختي الكبرى حنان

الى اخي ورفيق دربي وهذه الحياة بدونك لاشي معك اكون انا بدونك اكون مثل اي شيء .. في نهاية مشواري  
اريد ان اشكرك على مواقفك النبيلة الى من تطلعني لنجاحي بنظرات الامل

اخى الكبير محمد

والى ائلي الاخوي التي عشق معاهم الحلوة والمرارة الى اجمل ما املك من معنى الحياة معهم مباركة وصباح وفاتمة وظاهر ونجاح  
الى اخواتي التي لم تلدمن اهي .. الى من تحلو بالإناء وتميزوا بالوفاء والعطاء الى يبايع الصدق الصافي الى من معهم سعديت  
، وورفتهم في دروب الحياة الحلوة والعزينة سررت الى من كانوا معي في طريق النجاح والخير الى من عرفنت كيف اجدهم  
وعلموني ان لا اصيهم

صديقاتي .. قادري وفاء ، قادري عبير ، قادري نسرين وهيبة ، والى عرابي امال

## شكر ومعرفة

" كُن عالماً.. فإن لم تستطيع فكن متعلماً، فإن لم تستطيع فأحب العلماء،

فإن لم تستطيع فلا تبغضهم "

بعد رحلة بحث وجهد واجتهاد تكلفت بإنجاز هذا البحث، نحمد الله عز وجل على نعمة التي من

بها علينا فهو العلي القدير، كما ليسعنا إلا أن نخص بأسمى عبارات الشكر والتقدير الى

الاستاذ . الدكتور " عيادي كمال الدين " لما قدم لنا من جهد ونصح ومعرفة

طيلة انجاز هذا البحث .

كما نتقدم بجزيل الشكر الى اللجنة المناقشة على رأسهم الاستاذ " بن طويلة عمر "

وأستاذة المناقشة " العياط زهية "

كما نختص بالشكر والتقدير الى استاذة " بن عيدة مريم "

كما نتقدم بالشكر الجزيل لكل من اسهم في تقديم يد العون لإنجاز هذا البحث،

ونختص بالذكر اساتذتنا الكرام الذين اشرفوا على تكوين هذه الدفعة تخصص فيزياء بكامل

تخصصاتها في جامعة قاصدي مرباح - ورقلة والأساتذة القائمين على عمادة وإدارة كلية الرياضيات

و علوم المادة، كما لا انسى ان اتقدم بأرقى واثمن عبارات الى جميع اساتذة في الجامعة بدون استثناء

الى الذين كانوا عون لنا في بحثنا هذا ونورا يضيء الظلمة التي كانت تقف احيانا في طريقنا

الى من زرعوا التفاؤل في دربنا وقدموا لنا المساعدات والتسهيلات والمعلومات، فلهم منا كل الشكر

وقبل وبعد كل شيء، فالشكر لله و لله الحمد

في الاولى والأخير .

رقم الصفحة	رقم العنصر	قائمة المحتويات
/	/	الإهداء
/	/	شكر وعرفان
/	/	الفهرس
<b>الفصل الأول</b>		
<b>(الزرنينخ النقي As)</b>		
01	/	مقدمة عامة
02	1. I	مقدمة الفصل
02	1.2 . I	تعريف الزرنينخ
3-2	2.2. I	أشكال تواجد الزرنينخ
4-3	3.2.I	البنية البلورية
5	4.2. I	الفاصل الطاقى
6-5	5.2. I	الخصائص الكيمائية والفيزيائية للزرنينخ
7-6	6.2. I	استخدامات الزرنينخ
7	3. I	تكنولوجيا النانو
7	4.I	تعريف العناقيد
8	5. I	الخلاصة
10-9	/	المراجع
<b>الفصل الثانى</b>		
<b>التعريف ببرنامج ال siesta ومبدأ الحساب</b>		
11	1. II	مقدمة الفصل
11	2. II	برنامج SIESTA
14-11	1.2. II	تعريف بالبرنامج ومبدأ الحساب
15-14	2.2. II	تشغيل الحساب
17-15	3.2. II	بعض التطبيقات الحسايبية على البرنامج خلال الدراسة
18	4. II	الخلاصة
21-19	/	المراجع
<b>الفصل الثالث</b>		
<b>(نتائج ومناقشة)</b>		

22	III	مقدمة الفصل
22	2. III	تفاصيل الحساب
23	3. III	النتائج والمناقشة
23	1.3.III	حالة العناقيد الزرنخيقي نقي $As_{n+1}$
29-23	1.1.3. III	الخصائص البنوية
32-29	2.1.3.III	الاستقرار النسبي (الخصائص الطاقية)
33	3.1.3.III	الخصائص الالكترونية
34	4.1.3. III	الخصائص المغناطيسية
35	2.3.III	حالة عناقيد الزرنخيقي المطعمة بالكروم $CrAs_n$
36-35	1.2.3.III	الخصائص البنوية
39-36	2.2.3. III	الاستقرار النسبي (الخصائص الطاقية)
40-39	3.2.3. III	الخصائص الالكترونية
41-40	4.2.3.III	الخصائص المغناطيسية
42-41	4.III	الخلاصة
43	/	المراجع
44	/	الخاتمة

➤ قائمة الأشكال :

رقم الصفحة	رقم العنصر	الأشكال
3	1.I	رمادي فلزي للزرنينخ
3	2.I	الخلية الاصطلاحية للزرنينخ
4	3.I	البنية البلورية للزرنينخ
5	4.I	مخطط عصابة الطاقة للعوازل
15	1. II	صورة للملفات التي سيتم حسابها
16	2.II	صورة لجميع الملفات التي تم حسابها في الملف الواحد
16	3.II	صورة على طريقة إدخال الأوامر لبدأ الحساب
17	4.II	صورة لبعض النتائج بعد الحساب
25-24	1.III	بنيات العناقيد الأكثر استقرار وايزوميراتها المقابلة $As_n(n=1-16)$
30	2. III	تغيرات طاقة الارتباط لكل ذرة بدلالة حجم العنقود للعناقيد الأكثر استقرار $(n=1-16) As_{n+1}$
31	3.III	تغيرات طاقة التجزئة بدلالة حجم العنقود للعناقيد الأكثر استقرار $As_{n+1}$ $(n=1-16)$
32	4.III	تغير الثاني لطاقة الربط للنظام بدلالة حجم العنقود للعناقيد الأكثر استقرار $(n=1-16) As_{n+1}$
33	5.III	تغيرات فجوة الطاقة بدلالة حجم العنقود للعناقيد الأكثر استقرار $As_{n+1}$ $(n=1-16)$
35	6.III	تغيرات العزم المغناطيسي الكلي بدلالة حجم العنقود للعناقيد النقية الأكثر استقرار $As_{n+1} (n=1-16)$
36	7.III	بنيات عناقيد الزرنينخ المطعمه الأكثر استقرار $(n=1-10) CrAs_n$
38	8.III	تغيرات طاقة الربط لكل ذرة بدلالة حجم العنقود للعناقيد النقية و المطعمه الأكثر استقرار $(n=1-10) As_n$ و $(n=1-11) As_{n+1}$
39	9.III	تغيرات طاقة التجزئة بدلالة حجم العنقود للعناقيد النقية و المطعمه الأكثر استقرار $(n=1-10) As_n$ و $(n=1-11) As_{n+1}$

40	10.III	تغير الثاني لطاقة الربط بدلالة حجم العنقود للعناقيد النقية و المطعمة الأكثر استقرار $As_n$ و $As_{n+1}$ ( $n=1-10$ ) و ( $n=1-11$ )
41	11.III	تغيرات فجوة الطاقة بدلالة حجم العنقود للعناقيد النقية و المطعمة الأكثر استقرار $As_n$ و $As_{n+1}$ ( $n=1-10$ ) و ( $n=1-11$ )
42	12.III	تغيرات العزم المغناطيسي الكلي بدلالة حجم العنقود للعناقيد النقية و المطعمة الأكثر استقرار $As_n$ و $As_{n+1}$ ( $n=1-10$ ) و ( $n=1-11$ )

➤ قائمة الجداول :

رقم الصفحة	رقم العنصر	الجدول
6-5	1.I	يوضح بعض الخصائص الكيميائية والفيزيائية للزرنيخ
23	1.III	يوضح طول الرابطة بين ذرتي الزرنيخ $a(A^\circ)$ و طاقة الارتباط لكل ذرة $E_b$ (eV/atom)
28-26	2.III	يوضح التناظر, طاقة الارتباط لكل ذرة $E_b$ , عصابة الطاقة $\Delta E(eV)$ , طول الرابطة بين ذرتي الزرنيخ و العزم المغناطيسي الكلي
37-36	3.III	يوضح التناظر, طاقة الارتباط لكل ذرة $E_b$ , عصابة الطاقة $\Delta E$ , طول الرابطة بين ذرتي الزرنيخ $As-As$ وبين ذرتي الزرنيخ والكروم $As-Cr$ و العزم المغناطيسي الكلي $\mu$

مقدمة عامة



الفصل الأول

الزرنيخ النقي (*As*)

# الفصل الأول

السزرنبخ النقي As

---

# الفصل الأول

الزرنيخ النقي As

## 1.I المقدمة:

إن دراسة الخصائص العنقودية أدت إلى فهم الشامل لتطورات المادة من ذرات إلى بلورات من الناحية خصائصها الفيزيائية والكيميائية وذلك من خلال حجم وتعقيد العنقود. فالزرنيخ هو عنصر مهم في الصناعة كما وجد تطبيقات واسعة في مجالات عدة منها أشباه الموصلات ، والبصريات الضوئية ، لذا انصب اهتمامنا لدراسة الخصائص البنوية والالكترونية و المغناطيسية على هيئة عنقود . بحيث تم تطرق من خلال هذا الفصل إلى تعريف الزرنيخ وأشكاله كما تم تعريف بالبنية البلورية له والفاصل الطاقى وذكر أهم الخصائص الفيزيائية و الكيميائية للزرنيخ كما ذكرنا أهم استخداماته وتعريف تكنولوجيا النانو والعناقيد . [1]

## 1.2.I تعريف الزرنيخ :

اشتق اسم الزرنيخ من الكلمة الفارسية التي تعني الرهح الاصفر ، كما ترتبط كلمة الزرنيخ أيضا بالكلمة اليونانية والتي تعني المذكر أو القوي ، فعرف الزرنيخ للمرة الأولى في بداية القرن الرابع قبل الميلاد باعتباره واحد من المركبات الكبريتيد وأطلق عليه اسم الرصاص الأحمر ، ولكن الكيميائي والفيلسوف الألماني ألبرت ماغنس أول من عزل هذا العنصر عام 1250 فهو عنصر هام للصناعة والبيئة و له خصائص وتطبيقات في مجالات واسعة مثل في أشباه الموصلات والبصريات الضوئية والبيولوجية الصيدلانية مما جعلته قيد الدراسة في الآونة الأخيرة ، فمن المهم أن نفهم خصائصه الفيزيائية والكيميائية . [3]

## 2.2. I أشكال تواجد الزرنيخ :

يوجد ثلاث أنواع من الزرنيخ و هي تصنف من حيث النوع واستقرار، الزرنيخ الأصفر والزرنيخ الأسود والزرنيخ الرمادي وهو الأكثر استقرار.

الزرنيخ الرمادي : هو الأكثر استقرارا وهو الشكل المعتاد للعنصر ، له مظهر براق وهو موصل جيدا معتدل الحرارة والكهرباء ، لكن الزرنيخ الرمادي متقصف ويتكسر بسهولة .وعندما يسخن إلى 613 درجة مئوية ، فان الزرنيخ الرمادي يتسامى أي يتحول مباشرة إلى بخار دون أن ينصهر

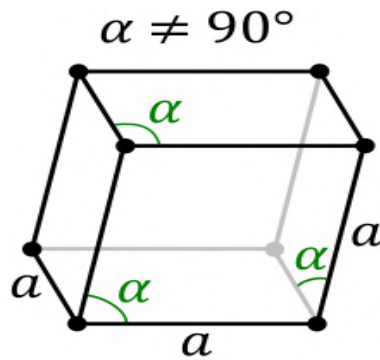
عندما يرتبط بالعمود الثالث من الجدول الدوري مثل الجرمانيوم فيصبح شبه ناقل وموصل جيدا . [3-4]



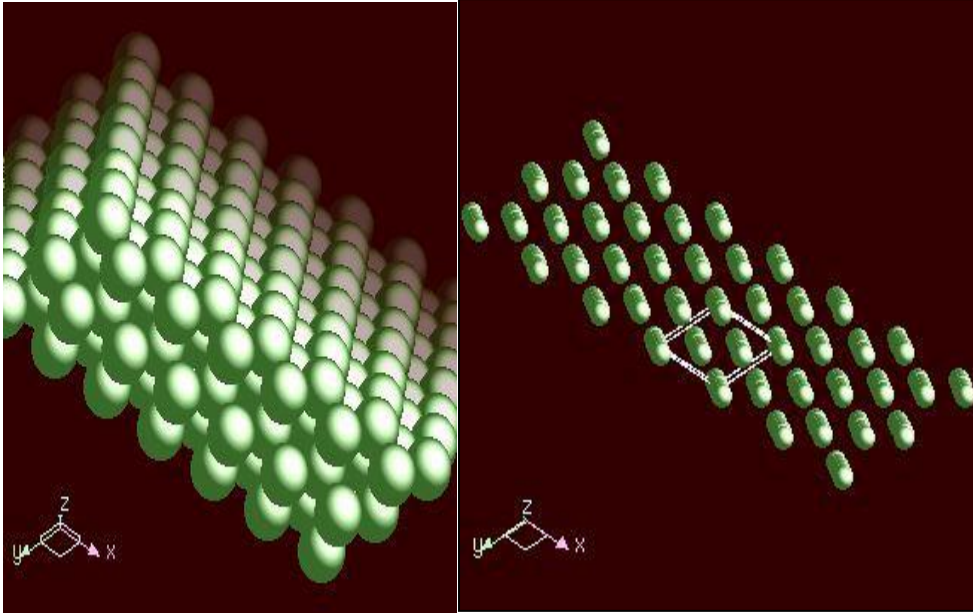
الشكل (1.I): رمادي فلزي

### 3.2.I البنية البلورية :

توجد المعادن على أشكال بلورية بأشكال هندسية مختلفة عن بعضها البعض بحيث صنفت هذه الأشكال على شكل أنظمة معينة وهي سبعة أنظمة، بحيث يأخذ الزرنيخ نظام بلوري ثلاثي. أي نظام بلورة ثلاثي أحادي الميل و  $\alpha \neq \beta, \alpha \neq \gamma$  و  $\alpha = 120^\circ$  و  $\beta = \gamma = 90^\circ$  يتكون من ثلاث محاور يتقاطعون معا بزوايا ثابتة ، بحيث اثنان من تلك المحاور لها نفس الطول على نفس المستوى والمحور ثالث رئيسي .



الشكل (2. I): الخلية الاصطلاحية



الشكل (3. I): البنية البلورية للسزنيخ. [9]

بجيث أن أبعاد الخلية الواحدة للسزنيخ هي:

a:  $375.98 \text{ pm} = 3.75 \text{ \AA}$  ○

b:  $375.98 \text{ pm} = 3.75 \text{ \AA}$  ○

c:  $1054.75 \text{ pm} = 10.5475 \text{ \AA}$  ○

$\alpha$ :  $90.000^\circ$  ○

$\beta$ :  $90.000^\circ$  ○

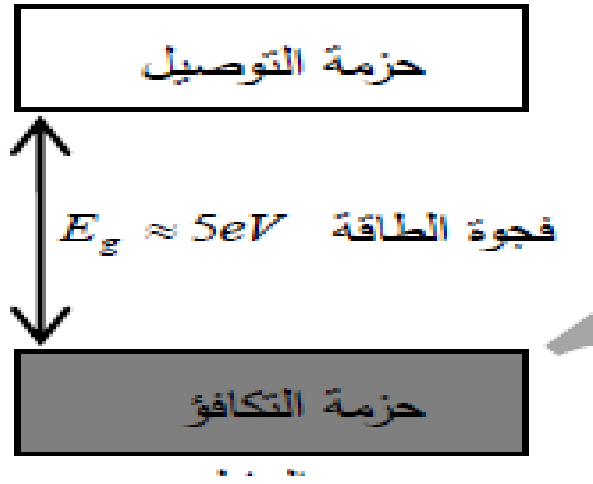
$\gamma$ :  $120.000^\circ$  ○

## الفصل الأول

الزرنيخ النقي As

### I 4.2. الفاصل الطاقي

العوازل (أنصاف المعادن) هي مواد لها فاصل طاقي كبير جدا (فجوة الطاقة) (الشكل (2.I)) ، نجد أن حزمة التوصيل فارغة تقريبا وحزمة التكافؤ مملوءة لذا لا تستطيع الالكترونات التحرك فيها ونجد أن فجوة الطاقة تساوي ( $E_g = 5eV$ ) بحيث تتمكن الطاقة الحرارية من إثارة الالكترونات عصابة التكافؤ لنقلها إلى عصابة التوصيل وتصبح ذلك ناقلة عند  $T > 0$ ، تسمى عازلة لان ناقليتها اقل بكثير الكثير من النواقل ، ولكنها تزداد بزيادة درجة الحرارة على عكس النواقل.



الشكل (4.I) : مخطط عصابات الطاقة للعوازل.

### I 5.2. الخصائص الكيميائية والفيزيائية للزرنيخ :

نلخص أهم الخصائص الفيزيائية والكيميائية للزرنيخ النقي في الجدول (1.I).

الجدول(1.I): يوضح بعض الخصائص الكيميائية والفيزيائية للزرنيخ [2-6-7]

الخصائص	الزرنيخ As
33	العدد الذري
74.92160 kg/mol	الوزن الذري

## الفصل الأول

الزرنيخ النقي As

الكثافة	5.776g/cm <sup>3</sup>
درجة الغليان	603°C
درجة الانصهار	817°C
تصنيف	أشباه فلزات
الحالة السائدة	صلبة
مصدره	مياه الشرب, القشرة الارضية
نظام البلوري	نظام بلوري ثلاثي
ثابتة الخلية	a=3.76 Å
نصف قطر الذرة	r = 2.103 Å
المغناطيسية	مغناطيسية المعاكسة
مقاومة كهربائية	333Ωn.m
ناقلية الحرارية	50.2Wm <sup>-1</sup> k <sup>-1</sup>
التوزيع الالكتروني	[Ar]4s <sup>2</sup> 3d <sup>10</sup> 4p <sup>3</sup>

### 6.2.I استخدامات الزرنيخ :

يستخدم مركب زرنيخيد الغاليوم (Ge - As) في الليزر ، بحيث يتم تطعيم أنصاف النواقل عناصر العمود الثالث من

جدول الدوري بالعوازل أي عناصر العمود الخامس من جدول الدوري ( عناصر مانحة أو مستقبلة ) لتصبح على شكل وصلة

موجبة - سالبة أي ثنائي ولذا يطلق على هذا نوع من الليزرات ، بثنائي الليزر . بحيث تتميز الليزرات النصف ناقلة بصغر

حجمها مما يمكن تصنيع أعداد كبيرة منها على نفس القاعدة و بسهولة ، عملية الضخ فيها من خلال استخدامها التيار

الكهربائي إلى جانب إمكانية إنتاجها بكميات كبيرة . [3-4] . كما وجدت استخداماتها في مجالات أخرى أهمها :

## الفصل الأول

الزرنيخ النقي As

- يستخدم غالباً كعامل لزيادة الكفاءة في الأجهزة الترانستورية .
- استخدم في بطاريات السيارات .
- كما شاع في استخدامه في صناعة الزجاج .
- يحسن من كروية طلقات الرصاص.
- كما تستخدم مركبات الزرنيخ مثل زرنيخات الكالسيوم وزرنيخات الرصاص ، كميبيدات الحشرية في العديد من السموم.

### 3.I تكنولوجيا النانو :

"النانو" هي كلمة إغريقية وتعني القزم بحيث تعني بما كل ما هو صغير وهي تقنية المواد المتناهية الصغر أو يطلق عليها بالتكنولوجيا المهجرية الدقيقة بحيث تعتمد تقنية النانو على التقاط الذرات المتناهية الصغر لأي مادة والتلاعب بها وتحريكها من مواضعها الأصلية إلى مواضع أخرى ثم دمجها مع ذرات مواد أخرى لتكوين شبكة بلورية لكي نحصل على مواد نانوية الأبعاد متميزة الخواص عالية الأداء . [9-10]

### 4.I تعريف العناقيد :

عناقيد الزرنيخ هي توضع آلاف الذرات الزرنيخ بأشكال هندسية مختلفة ومعقدة . كما أن دراسة الخصائص الفيزيائية والكيميائية للعناقيد تعتمد على حجم و الطريقة المعقدة للعنقود. فإن دراسة الخصائص العنقودية للزرنيخ تأخذ كوسيلة لفهم الشامل لتطورات المادة من الذرات إلى بلورات . أما الزرنيخ في هيئة عنقود له خصائص أفضل مم يكون عليه في شكل صلب ، فهو عنصر هام للصناعة . فمن المهم أن نفهم الخصائص الفيزيائية والكيميائية له من خلال دراسة الخصائص البنوية و الالكترونية والمغناطيسية . [1]

### 5.I الخلاصة:



## الفصل الأول

الزرنيخ النقي As

من خلال هذا الفصل وضحنا بشكل بسيط عن تعريف وتاريخ الزرنيخ و أهميته في الصناعة كما وجدنا أن له أهمية كبيرة  
تأثر على البيئة وله فضاء واسع في الصناعة كما تم توضيح بنيتة البلورية والفاصل الطاقى له . ومخطط عصابات الطاقة (فجوة  
النطاق) الزرنيخ وخصائصه الفيزيائية والكيميائية وذكرنا شرح مبسط عن تعريف تكنولوجيا النانو وشرح عن العناقيد.

المراجع :

[1] - Safer, S., et al. "Properties of neutral and charged cobalt-doped arsenic CoAs<sub>n</sub> (0±1)(n= 1–15) clusters by density functional theory." Computational and Theoretical Chemistry 1090 (2016): 23–33.

[2] - stable isotopes and properties of arsenic ، 1-415-440-4433 | USA and canada  
Tall Free 1-888-399-4433 | Fax 1-415-563-4433 po Box29475 | San  
Francisco ,CA 94129 USA | iso flex .ca

[3]-<http://www.miningfacts.org/Environnement/Quel-est-le-role-de-larsenic-danslindustrie-miniére/>

[4] -Arsenic and Gallium Arsenide are fundamental to Semiconductor (Microchip) Manufacturing (2007)

[5] -<https://www.futura-sciences.com/sciences/definitions/chimie-arsenic-5956/>

[6]- V. Laperche, F. Bodéan, M.C. Dictor, Ph. Baranger. Guide méthodologique de l'arsenic appliqué à la gestion des sites et sols pollués. BRGM/RP-52066-FR janvier 2003.

[7]-suiling wang , catherine N.Mulligan. occurrence of arsenic contatamination in canada :sources,behavior and distribution366(2006) 701-721.

[8]-<http://www.webelements.com/arsenic/contents.html/>

[9] - مدخل الى علم النانويات وتقانتها ، ترجمة د.مُجد عبد الستار الشبخلي ، د.حاتم النجدي ، د.يمن الاتاسي ، د.ابراهيم

رشيدي ، المنظمة العربية للترجمة ، ص [11-7]

## الفصل الأول

السزنيخ النقي As

[10] – مدخل الى الالكترونيات النانوية ، ترجمة د.علي السكاف ، المنظمة العربية للترجمة ، ص [3-27]

## الفصل الثاني

تعريف بالبرنامج *SIASTA* ومبدأه

## الفصل الثاني

التعريف ببرنامج ال siesta ومبدأه

### II. 1. المقدمة :

برنامج ال SIESTA أو المبادرة الاسبانية للمحاكاة الالكترونية جاء لفك عدة مشاكل كانت تواجهها الفيزياء من أهمها دراسة وفهم بعض خصائص المواد بشكل عناقيد. لذا في هذا الفصل سنقوم بتقديم نظرة مختصرة على البرنامج المستخدم في الدراسة ألا وهو SIESTA . وذلك من خلال تعريفه ومبدأ عمله والتعليمات المستخدمة في طريقة الحساب من خلال المحاكاة وكيفية تشغيل الحساب وتم تطرق إلى بعض التطبيقات الحاسوبية في البرنامج خلال الحساب.

### II. 2. برنامج ال SIESTA :

#### II. 1. 2. تعريف بالبرنامج ومبدأ الحساب :

برنامج SIESTA أو ما يعرف بالمبادرة الاسبانية للمحاكاة الالكترونية مع الآلاف من الذرات [13-14] هو برنامج لدراسة البنية الالكترونية يعتمد على حساب كمون الديناميكية الجزئية من خلال هذه المحاكاة لدراسة الأجسام الصلبة أو الجزئيات. وقد استخدمنا نسخة مكتوبة للفورتران 90. واهم التعليمات الرئيسة في التعليمات البرمجية هي : [24]

- 1- يستخدم الكمون شروط الحدود الدورية
- 2- يستخدم الكمون الزائف المحتملة غير المحلية في الشكل (Kleinman-Bylander) التي تم إنشائها بواسطة برنامج آخر .
- 3- القاعدة المستخدمة هي القاعدة محلية من المدارية الذرية الزائفة الرقمية (أساس POA) .
- 4- حساب (كمونات ,وظائف الموجية وعناصر المصفوفة ) تتم على شبكة في فضاء الحقيقي ووظائف الموجية الالكترونية والكثافة المتوقعة (projetées) لشبكة من المساحة الحقيقية لحساب العناصر المصفوفة بالتالي إمكانات هارتي و إمكانات التبادل - ارتباط .
- 5- تتم الحسابات لدينا في إطار DFT (نظرية الكثافة الوظيفية ) وفق لمعادلة كوهن - شام ويمكن اختيار العديد من الوظائف لتبادل وتبادل - ارتباط. [2]

## الفصل الثاني

التعريف ببرنامج ال siesta ومبدأه

تخصص الكمون الديناميكية الذاكرة المطلوبة من قبل المشكلة لذلك نحن لا نحتاج إلى إعادة ترجمة في كل مرة لتغيير حجم النظام , كما يمكن تجميعها لتنفيذ المتسلسل أو موازية في الجهاز كمبيوتر مع قدرات الحاسوبية الكافية . ويتيح البرنامج الحصول على مايلي :

1- الطاقة الكلية لنظام بمساهمة مختلفة

2- القوى العاملة على الذرات

3- التوتر لتوتر (le tenseur de contraintes)

4- الكثافة الالكترونية

5- العزم ثنائي الاقطاب

6- التحليلي السكاني الالكتروني (حسب مواقع لمدارات الذرة )

نوضح بعض هذه النقاط عن طريقة تحديد التعليمات الغير خاصة بالبرنامج بحد ذاته بل المعومات التي تخص الحساب . فالنظام مستنسخ بنفس التوتر ، يكفي تحديد الخلية الأولية فقط ، مع إعطاء زوايا وقواعد المتجهات الثلاثة التي تحدها ، ثم إعطاء الموقع الذرات [13-14] في هذه الخلية . فعند دراسة الأنظمة الجزئية مثل العناقيد ، يجب وضعها في خلايا ذات أبعاد كبيرة بما يكفي لتجنب التفاعلات النظام وصور للخلايا المجاورة كما يجب أن لا تسجل هذه التفاعلات لأنها لا أساس لها من الناحية العملية حيث أنها الصور الموجودة لتعكس فقط شروط الحدودية الدورية . كما يسمح البرنامج بدراسة الأنظمة المشحونة كهربائيا ، في هذه الحالة ينبغي توخي الحذر الشديد لان التفاعلات الكهروستاتيكية هي تفاعلات بعيدة المدى . عندما يتم شحن الخلية الأولية فمن الضروري تعويض هذه الشحنة عن طريقة بحر من الالكترونات ، وإلا فإن الطاقة الكهروستاتيكية تتباعد لذلك نظيف مصطلح الطاقة الكهروستاتيكية في الطاقة الكلية .

من المتفق عليه أن هذا المصطلح الاخير لا يمثل مشكلة من اخذ خلية كبيرة ومتناظرة بشكل كاف . فيما المدارات الذرية الكاذبة موضعية  $\Phi_{nl}$  أي أنها تلغى بعضها البعض من اجل  $r > r_c$  وطاقات  $E_{nl}$  عن طريق حل المعادلة التالية :

$$\left[ \frac{1}{2} \nabla^2 + \nabla_{nl}^{pp} - \right] \Phi_{nl} = (\epsilon_{nl} + \Delta E) \Phi_{nl} \quad [1]$$

## الفصل الثاني

التعريف برنامج ال siesta ومبدأه

حيث الطاقة  $\Delta E$  هي المعلومة التي تحدد قطع نصف القطر  $r_c$ . بحيث يمكن استخدام القاعدة متعددة لكل (nl) قاعدة بسيطة  $\xi(ZS)$  هذا المصطلح يأتي من استخدام مدارات slater ، حيث  $\xi$  (هو الأس الذي يصف الجزء الشعاعي) [15] يساوي اخذ مستوى مدار الواحد  $\phi_{nl}$  (مستوى (nl)) في حين أن  $\xi(DZP)$  يساوي اخذ مدارين مع نصف قطر قطع المختلف لكل (nl) [16-17]. من الممكن أيضا استخدام قاعدة المستقطبة (SZP مزدوج المستقطب ) ، أي أننا نضيف مدارا لكل حركة مدارية l اكبر من  $l = \max$  تشغلها الالكترونات في حالة الذرة المعزولة على سبيل المثال قاعدة DZP . [11-12]

في عملنا من اجل كل ذرة من الزنبيخ تأخذ:

- 1- اثنان من المدارات الذرية الزائفة لوصف إلكترون 4S .
- 2- اثنان من المدارات الزائفة الذرية لوصف إلكترون 3d .
- 3- اثنان من المدارات الذرية الزائفة لوصف إلكترون 4P .

المدارات الذرية الزائفة المستقطبة ، والتي تصف الالكترونات ثلاثية الأبعاد ، فمن الواضح انه كلما زاد الحجم القاعدة كلما ازدادت درجات الحرية وكلما كانت النتيجة أكثر دقة ، ولكن في هذه الحالة الحساب يأخذ وقت أطول .

فهناك أيضا معلومة أخرى مهمة على وقت ودقة الحساب، هي أن قيمة خطوة الشبكة المستخدمة في تكامل في

الفضاء الحقيقي . يتم استخدام فيها الطاقة  $E_{\text{mesh}}$  والذي يحدد موجه الموجة  $k$  للموجة المستوية . ثم يتم تعريف شبكة من خلال الفترة المكانية المقابلة . كما يمكن أن تكون عدد النقاط  $k$  في منطقة برلويين الأولى المستخدمة لحل المعادلات الذاتية المنسقة لمعادلات كوهن - شام لها تأثير كبير على النتيجة في حالة الأنظمة الجزئية ، بحيث يتم فصل الجزئيات أو الذرات في كل خلية بشكل جيد ، وشبكات الطاقة (أي المستويات الجزئية أو الذرية ) مسطحة يكفي بعد ذلك أخذ نقطة واحدة  $k$  (في معظم الحالات نأخذ  $k=0$  والذي يسمى بتقريب النقطة  $\Gamma$  ) . ومن ناحية الأخرى من اجل الحصول على مادة صلبة ، من الضروري أن نأخذ نقطة كافية لتمثيل بنية العصابات بشكل جيد .

## الفصل الثاني

التعريف ببرنامج ال siesta ومبدأه

ويتم استخدام برنامج SIESTA [16-17] لاختبار وظيفي لتوضيح العلاقة بين LDA (كثافة التقريب المحلي) و LSD (كثافة التدوير التقريب المحلي) من برودو- وانغ [18] او برودو- زنجير [19] و GGA (تقريب التدرج المعمم) المطور من برودو- بارك - انزهوف [20].

يجب أن تكون الوظيفة المستخدمة لحساب الإمكانيات الزائفة هي نفسها المستخدمة في حساب الكثافة الالكترونية، علاوة على ذلك من الممكن اللعب في بعض المعايير من اجل تحسين التقارب بين الكثافة الالكترونية .

ويتم الاسترخاء الهيكلي عن طريق التقليل من المجموعات الطاقة مع أي أسلوب ثابت مثل طريقة المترافقة التدرج (في هذه الطريقة نعتبر المسألة، مسألة تقليل الطاقة وذلك من خلال تحريك في مساحة الترتيب وليس وفق لأعظم المنحدر، ولكن في اتجاه يسرع التقارب) أو بطريقة ديناميكية (Nosé، Vrelet، والمحاكاة الصلبة... الخ) من اجل ذلك نقوم باستخدام الحد الأقصى للقوة المسموح بها من كل ذرة. بحيث يمكن أيضا فرض قيود خلال استرخاء النظام عن طريق نظام التجميد على سبيل المثال وضعية بعض الذرات. [25]

### II.2.2 تشغيل الحساب :

بعد تثبيت برنامج SIESTA يلزم ملف به

- 1- siesta (executable) .
- 2- ملف المدخلات fdf مثال As.fdf .
- 3- pseudopoteutel (As.psf) يتم إنشائه من صفحة الويب لل siesta .

لتشغيل الحساب:

- نفتح terminal .
- ندخل ملف العمل .
- كتابة الأمر :

```
./siesta<As.fdf>As.out
```

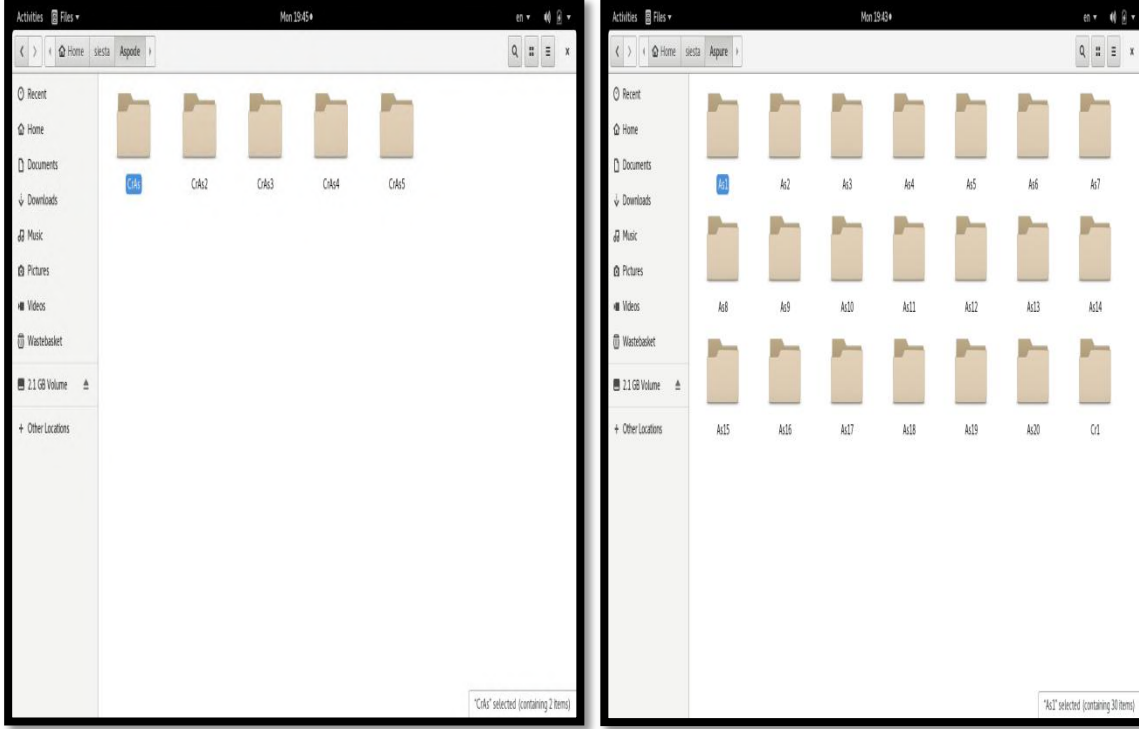


## الفصل الثاني

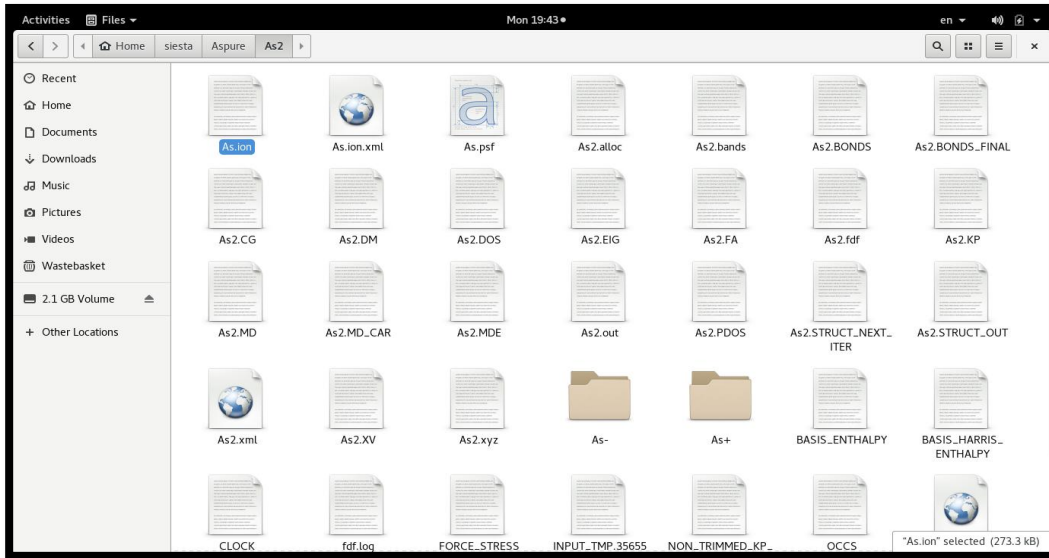
التعريف ببرنامج ال siesta ومبدأه

### II. 3.2 بعض تطبيقات الحسائية في برنامج الـ SIESTA خلال الدراسة :

نلخص في الأشكال التالية أهم الخطوات للحساب.



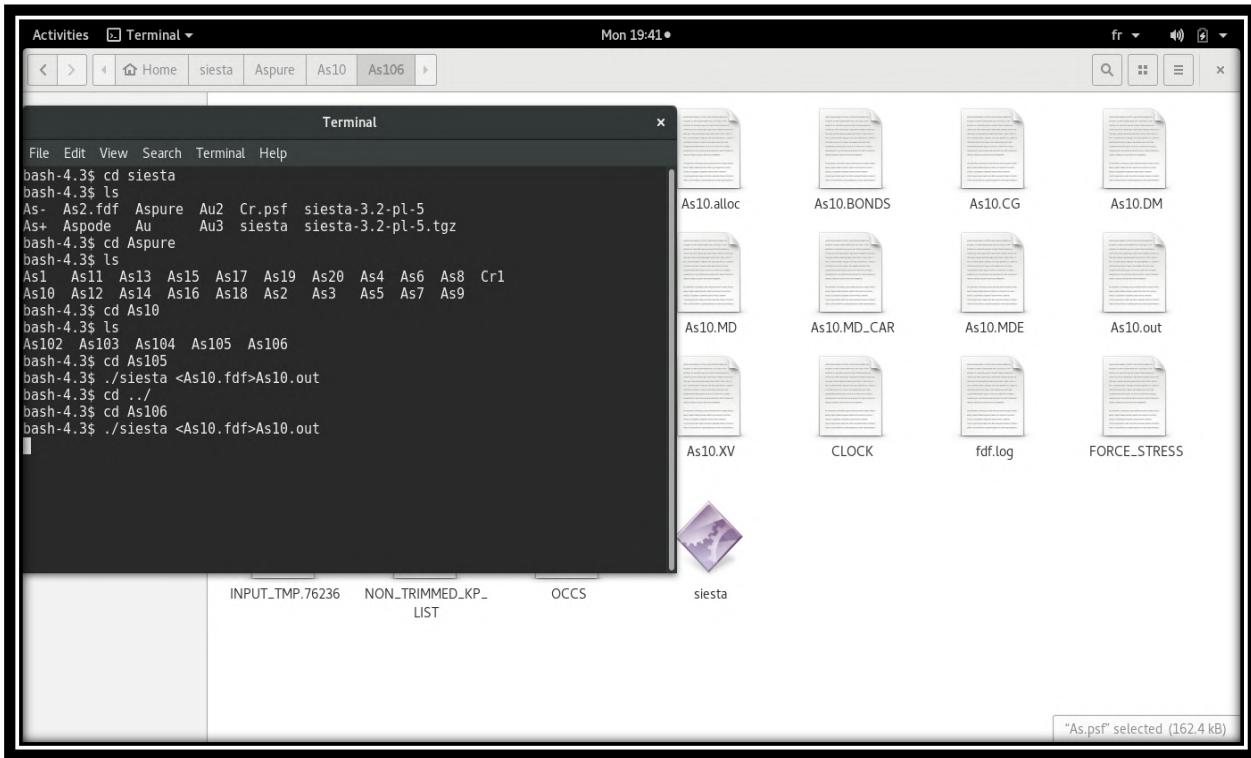
الشكل (II. 1): صورة للملفات التي سيتم حسابها



الشكل (II. 2): صورة عن جميع الملفات التي تم حسابها في الملف الواحد

## الفصل الثاني

التعريف ببرنامج ال siesta ومبدأه

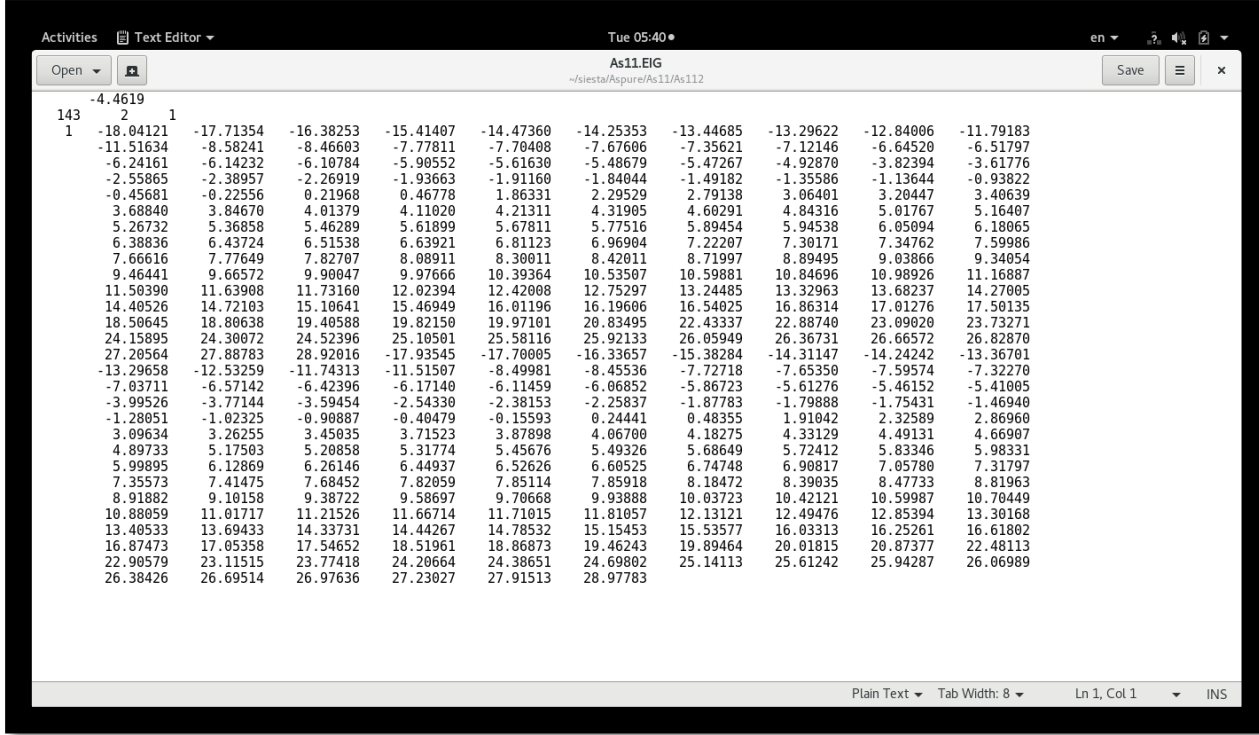


الشكل (3.II) : صورة عن طريقة إدخال الأوامر لبدأ الحساب.



## الفصل الثاني

التعريف ببرنامج ال siesta ومبدأه



The screenshot shows a text editor window titled "As11.EIG" with the following content:

```
143 2 1
1 -18.04121 -17.71354 -16.38253 -15.41407 -14.47360 -14.25353 -13.44685 -13.29622 -12.84006 -11.79183
-11.51634 -8.58241 -8.46603 -7.77811 -7.70408 -7.67606 -7.35621 -7.12146 -6.64520 -6.51797
-6.24161 -6.14232 -6.10784 -5.90552 -5.61630 -5.48679 -5.47267 -4.92870 -3.82394 -3.61776
-2.55865 -2.38957 -2.26919 -1.93663 -1.91160 -1.84044 -1.49182 -1.35586 -1.13644 -0.93822
-0.45681 -0.22556 0.21968 0.46778 1.86331 2.29529 2.79138 3.06491 3.20447 3.40639
3.68840 3.84670 4.01379 4.11020 4.21311 4.31905 4.60291 4.84316 5.01767 5.16407
5.26732 5.36858 5.46289 5.61899 5.67811 5.77516 5.89454 5.94538 6.05094 6.18065
6.38836 6.43724 6.51538 6.63921 6.81123 6.96904 7.22207 7.30171 7.34762 7.59986
7.66616 7.77649 7.82707 8.08911 8.30011 8.42011 8.71997 8.89495 9.03866 9.34054
9.46441 9.66572 9.90047 9.97666 10.39364 10.53507 10.59881 10.84696 10.98926 11.16887
11.50390 11.63908 11.73160 12.02394 12.42088 12.75297 13.24485 13.32963 13.68237 14.27005
14.40526 14.72103 15.10641 15.46949 16.01196 16.19606 16.54025 16.86314 17.01276 17.50135
18.50645 18.80638 19.40588 19.82150 19.97101 20.83495 22.43337 22.88740 23.09020 23.73271
24.15895 24.30072 24.52396 25.10501 25.58116 25.92133 26.05949 26.36731 26.66572 26.82870
27.20564 27.88783 28.92016 -17.93545 -17.70005 -16.33657 -15.38284 -14.31147 -14.24242 -13.36701
-13.29658 -12.53259 -11.74313 -11.51507 -8.49981 -8.45536 -7.72718 -7.65350 -7.59574 -7.32270
-7.03711 -6.57142 -6.42396 -6.17140 -6.11459 -6.06852 -5.86723 -5.61276 -5.46152 -5.41005
-3.99526 -3.77144 -3.59454 -2.54330 -2.38153 -2.25837 -1.87783 -1.79888 -1.75431 -1.46940
-1.28051 -1.02325 -0.90887 -0.40479 -0.15593 0.24441 0.48355 1.91042 2.32589 2.86960
3.09634 3.26255 3.45035 3.71523 3.87898 4.06700 4.18275 4.33129 4.49131 4.66907
4.89733 5.17503 5.20858 5.31774 5.45676 5.49326 5.68649 5.72412 5.83346 5.98331
5.99895 6.12869 6.26146 6.44937 6.52626 6.60525 6.74748 6.90817 7.05780 7.31797
7.35573 7.41475 7.68452 7.82059 7.85114 7.85918 8.18472 8.39035 8.47733 8.81963
8.91882 9.10158 9.38722 9.58697 9.70668 9.93888 10.03723 10.42121 10.59987 10.70449
10.88059 11.01717 11.21526 11.66714 11.71015 11.81057 12.13121 12.49476 12.85394 13.30168
13.40533 13.69433 14.33731 14.44267 14.78532 15.15453 15.53577 16.03313 16.25261 16.61802
16.87473 17.05358 17.54652 18.51961 18.86873 19.46243 19.89464 20.01815 20.87377 22.48113
22.90579 23.11515 23.77418 24.20664 24.38651 24.69802 25.14113 25.61242 25.94287 26.06989
26.38426 26.69514 26.97636 27.23027 27.91513 28.97783
```

الشكل (4.II): صورة لبعض النتائج بعد الحساب.

## الفصل الثاني

التعريف ببرنامج ال siesta ومبدأه

### 4.II الخلاصة :

في هذا الفصل نكون قد وضحنا ولو بشكل مختصر وبسيط البرنامج SIESTA الذي هو عبارة عن مبادرة اسبانية . بما في ذلك التعليمات المستخدمة فيه ،ومبدأ العمل ،وكيفية التشغيل ،وبعض الأعمال التي تم من خلال مدة الحساب .

### المراجع :

- [1] - Safer, S., et al. "Properties of neutral and charged cobalt-doped arsenic  $\text{CoAs}_n$  ( $0 \pm 1$ )( $n= 1-15$ ) clusters by density functional theory." Computational and Theoretical Chemistry 1090 (2016): 23-33.
- [2] - Kohn, Walter, and Lu Jeu Sham. "Self-consistent equations including exchange and correlation effects." Physical review 140.4A (1965): A1133.
- [3] - Schwarz, Karlheinz, Peter Blaha, and Georg KH Madsen. "Electronic structure calculations of solids using the WIEN2k package for material sciences." Computer Physics Communications 147.1-2 (2002): 71-76.
- [4] - Mooser, Emmanuel, and W. B. Pearson. "The crystal structure and properties of the group VB to VIIB elements and of compounds formed between them." Journal of Physics and Chemistry of Solids 7.1 (1958): 65-77.
- [5] - Mooser, E. "The crystal structure and properties of the group VB to VIIB elements and of compounds formed between them." Journal of Physics and Chemistry of Solids 7 (1958): 65-77
- [6] - MOOSER, E., and WB PEARSON. "THE CRYSTAL STRUCTURE AND PROPERTIES OF THE GROUP VB TO VIIB ELEMENTS AND OF COMPOUNDS FORMED BETWEEN THEM."
- [7] - Phillips, R. T., A. J. Mackintosh, and A. D. Yoffe. "Electrical and Optical Properties of UHV Sublimed a-As." Le Journal de Physique Colloques 42.C4 (1981): C4-869.

- [8] - Mahtout, S., N. Amatusse, and F. Rabilloud. "Structural, electronic and magnetic properties of  $Pn+1$  and  $FePn$  ( $n=1-14$ ) clusters." *Computational and Theoretical Chemistry* 1122 (2017): 16-26.
- [9] - Soler, José M., et al. "The SIESTA method for ab initio order-N materials simulation." *Journal of Physics: Condensed Matter* 14.11 (2002): 2745.
- [10] - Perdew, John P., and Alex Zunger. "Self-interaction correction to density-functional approximations for many-electron systems." *Physical Review B* 23.10 (1981): 5048.
- [11] - Perdew, John P., Kieron Burke, and Matthias Ernzerhof. "Generalized gradient approximation made simple." *Physical review letters* 77.18 (1996): 3865.
- [12] - Belkhir, M. A., et al. "Structure and electronic property of medium-sized silicon clusters." *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures* 31.1 (2006): 86-9
- [13] P. Ordejón, E. Artacho and J. M. Soler, *Phys. Rev. B (Rapid Comm.)* 53 (1996) 10441- 10443.
- [14] J. M. Soler, E. Artacho, J. D. Gale, A. García, J. Junquera, P. Ordejón, and D.
- [15] J.-L. Rivail, *Elements de chimie quantique à l'usage des chimistes (InterEdition/CNRS Editions (1994) Chap. 4 p. 85.*
- [16] O.F. Sankey and D.J. Niklewski, *Phys. Rev. B* 40 (1989) 3979.
- [17] D. Sanchez-Portal, E. Artacho and J.M. Soler, *J. Phys. Condens. Matter* 8 (1996) 3859.

- [18] J.P. Perdew and A. Zunger, Phys. Rev. B 25 (1981) 5048–5079.
- [19] J.P. Perdew and Y. Wang, Phys. Rev. B 45 (1992) 13244.
- [20] J.P. Perdew, K. Burke, and M. Ernserhof, Phys. Rev. Lett. 77 (1996) 3865.
- [21] M.C. Payne, M.P. Teter, D.C. Allan, T.A. Arias and J.D. Joannopoulos, Rev. Mod. Phys. 64 (1992) 1045.
- [22] J.P. Perdew, J.A. Chevary, S.H. Vosko, K.A. Jackson, D.J. Singh, and C. Fiolha, Phys. Rev. B 46, 6671 (1992).
- [23] M.A. Belkhir, S. Mahtout, I. Belabbas and M. Samah, Physica E 31 (2006) 86–92.
- [24] S. Mahtout, M.A. Belkhir, Act. Phys. Pol. A Vol. 109 N° 6 (2006) 685-693.2.
- [25]- S.MAHTOUT ‘Théorie et calcul des propriétés physiques des clusters , Université de Bejaia , 2007.

## الفصل الثاني

التعريف ببرنامح ال siesta ومبدأه

---



## الفصل الثالث

النتائج ومناقشة

## الفصل الثالث

### نتائج المناقشة

### III مقدمة:

تهدف من خلال دراستنا النظرية إلى نمذجة و محاكاة عناقيد الزرنيخ في شكله النقي  $As_{n+1}$  من اجل  $n=1$  إلى  $n=16$  ، و في حالته المطعمة بذرة كروم واحدة  $CrAs_n$  من اجل  $n=1$  إلى  $n=10$ . بهدف تحديد الخصائص البنوية و الالكترونية وكذا المغناطيسية. و من خلال هذا الفصل سنقوم بشرح مراحل الحساب باستخدام برنامج **SIESTA** و عرض مختلف النتائج المتحصل عليها ومناقشتها.

### 2.III تفاصيل الحساب:

اعتمدنا في حسابنا على برنامج **SIESTA** الذي يركز على تقريب الكمون الزائف كأساس لحل معادلات كوهان-شام ضمن نظرية الكثافة التابعة **DFT**. معتمدين تقريب التدرج المعمم **GGA**[4]، لتقييم طاقة ارتباط التبادل المطورة من قبل **Perdew (PBE)** و **Zunger و Perdew و Burke Ernserhof**. أجريت الحسابات بمعيار تقارب  $10^{-4}$  أعلى الطاقة الكلية وكثافة الإلكترون. استخدمنا أساساً مزدوجاً **(DZP)** مع وظيفة الاستقطاب لذرتي **As** و **Cr**. مع طاقة تحويل  $50 \text{ meV}$  ، تم حساب كثافة التغيير في شبكة فضائية حقيقية منتظمة بطاقة قطع  $150\text{Ry}$ . وضعت العناقيد في مكعب كبير طول حرفه  $40 \text{ \AA}$ . [1]

لقد بحثنا في البداية عن هياكل الطاقة الأقل للعناقيد النقية  $As_{n+1}$  في نطاق يتراوح من 1 إلى 16 ذرة من خلال استكشاف عدد كبير من الأيزومرات الممكنة. ثانياً ، تطعيم هياكل الحالة الأرضية الأكثر استقراراً لعناقيد الزرنيخ بواسطة ذرة كروم واحدة. و تم اختبار صلاحية الطريقة الحسابية الحالية على خصائص  $As_2$  و  $As_3$  و  $As_4$  و يتم تلخيص النتائج التي تم الحصول عليها في الجدول الجدول (1.III) ومقارنتها بالبيانات النظرية والتجريبية المتاحة ، والتي تثبت موثوقية مخططنا الحسابي الذي يظهر متوافق مع الحسابات السابقة. [3]

## الفصل الثالث

### نتائج المناقشة

الجدول (1.III): يوضح طول الرابطة بين ذرتي الزرنيخ  $a$  ( $\text{Å}$ ) و طاقة الارتباط لكل ذرة  $E_b$  ( $\text{eV/atom}$ ) .

نتائج الأعمال السابقة		النتائج النظرية المتحصل عليها		حجم العنقود $n$
$E_b$ ( $\text{eV/atom}$ )	$a$ ( $\text{Å}$ )	$E_b$ ( $\text{eV/atom}$ )	$a$ ( $\text{Å}$ )	
<sup>[1]</sup> 1.763	<sup>[1]</sup> 2.189	1.686	2.143	$As_2$
<sup>[1]</sup> 1.694	<sup>[1]</sup> 2.485	2.145	2.212	$As_3$
<sup>[1]</sup> 2.213	<sup>[1]</sup> 2.568	2.711	2.480	$As_4$
<sup>[1]</sup> 2.050	<sup>[1]</sup> 2.620	2.514	2.514	$As_5$

### 3.III النتائج ومناقشة :

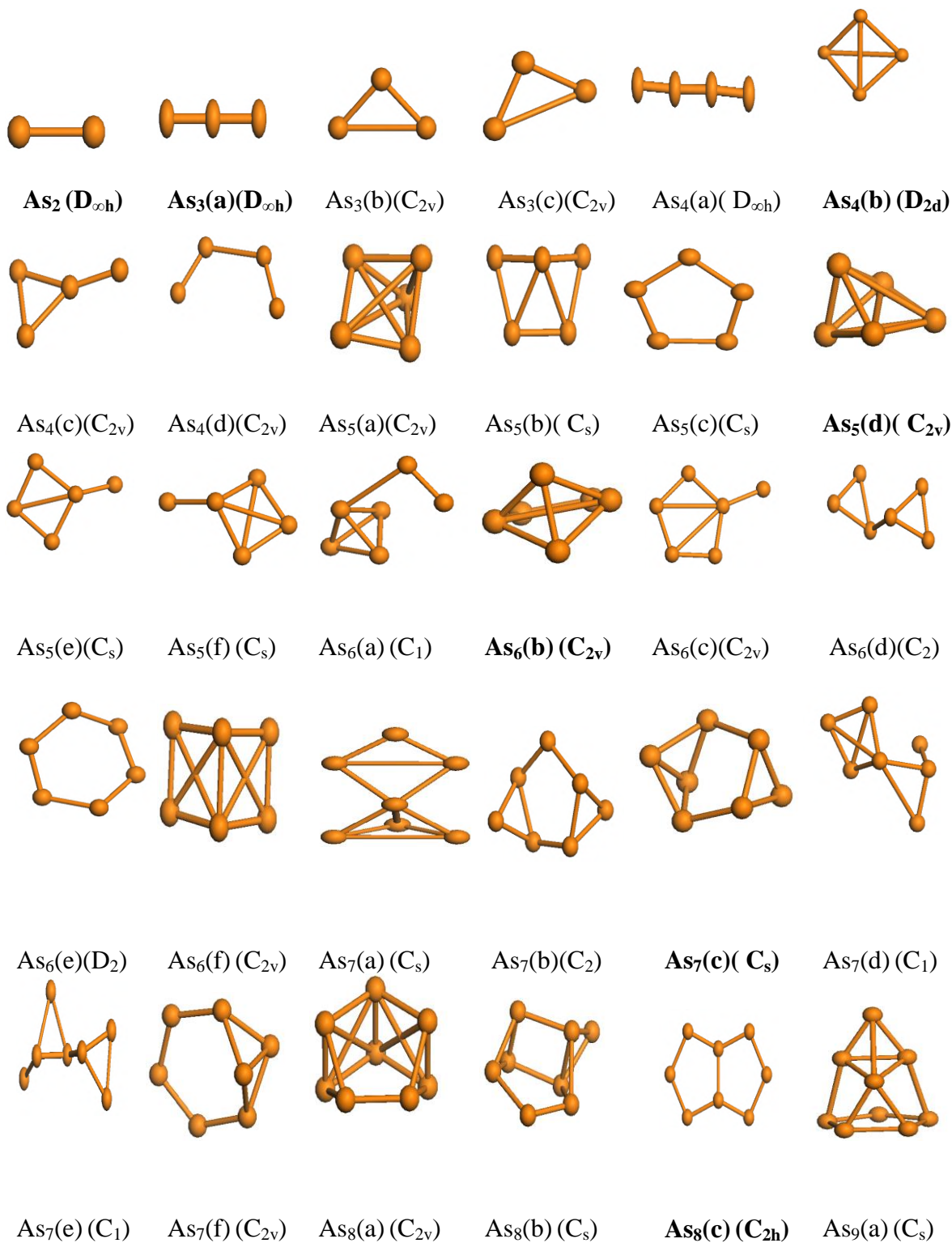
#### 1.3.III حالة عناقيد الزرنيخ النقي :

##### 1.1.3.III الخصائص البنيوية :

إن البنية الهندسية في فيزياء العناقيد هي ميزة مهمة تؤثر بشكل كبير على الخصائص الإلكترونية والمغناطيسية للعنقود. لذلك، فإن البحث عن هيكل الطاقة الأقل طاقة هو عملية مهمة للغاية وليس من السهل التعامل مع هذه المهمة لأن عدد الأيزومرات يزداد أضعافا مضاعفة مع زيادة عدد الذرات في العنقود. في هذا العمل ، نعرض فقط أفضل الهياكل المحسوبة لكل حجم الكتلة. وللمقارنة، فإننا نورد في الشكل (1.III) الهياكل الدنيا للطاقة التي تم الحصول عليها من أجل الزرنيخ النقي  $As_{n+1}$  وأيزومراتها المقابلة.

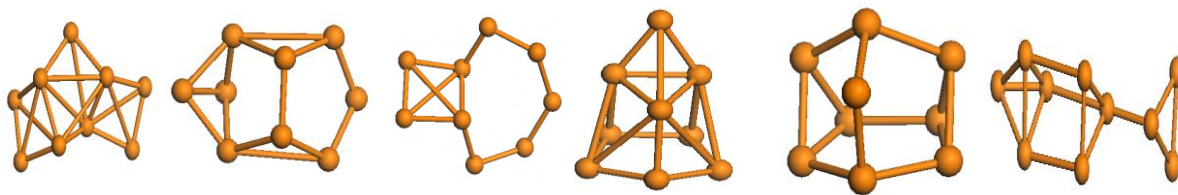
# الفصل الثالث

## نتائج المناقشة



## الفصل الثالث

### نتائج المناقشة



$As_9(b)(C_1)$

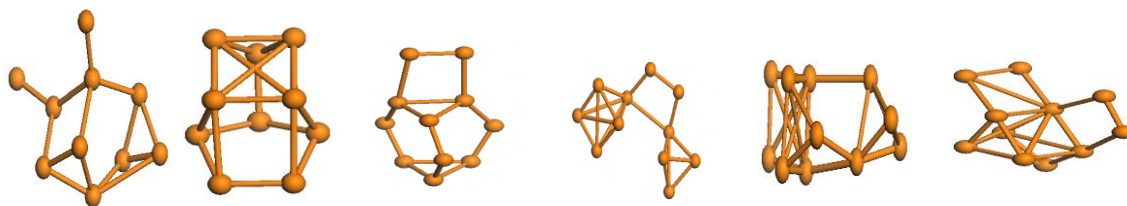
$As_9(c)(C_s)$

$As_9(d)(C_2)$

$As_9(e)(C_s)$

$As_9(f)(C_s)$

$As_{10}(a)(C_1)$



$As_{10}(b)(C_1)$

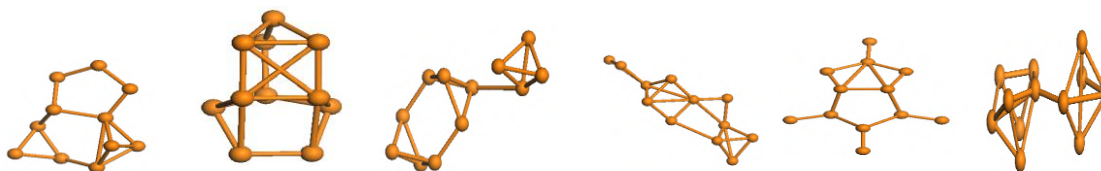
$As_{10}(c)(C_s)$

$As_{11}(C_1)$

$As_{11}(b)(C_1)$

$As_{11}(c)(C_1)$

$As_{11}(d)(C_1)$



$As_{11}(e)(C_1)$

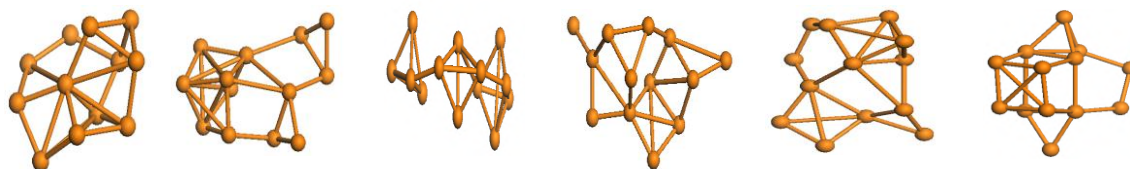
$As_{11}(f)(C_s)$

$As_{12}(a)(C_1)$

$As_{12}(b)(C_1)$

$As_{12}(c)(C_s)$

$As_{12}(d)(C_1)$



$As_{12}(e)(C_1)$

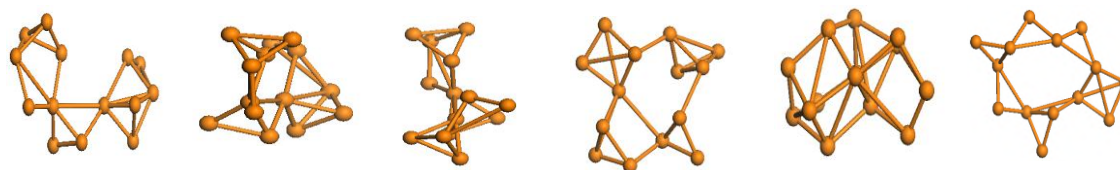
$As_{13}(a)(C_1)$

$As_{13}(b)(C_1)$

$As_{13}(c)(C_1)$

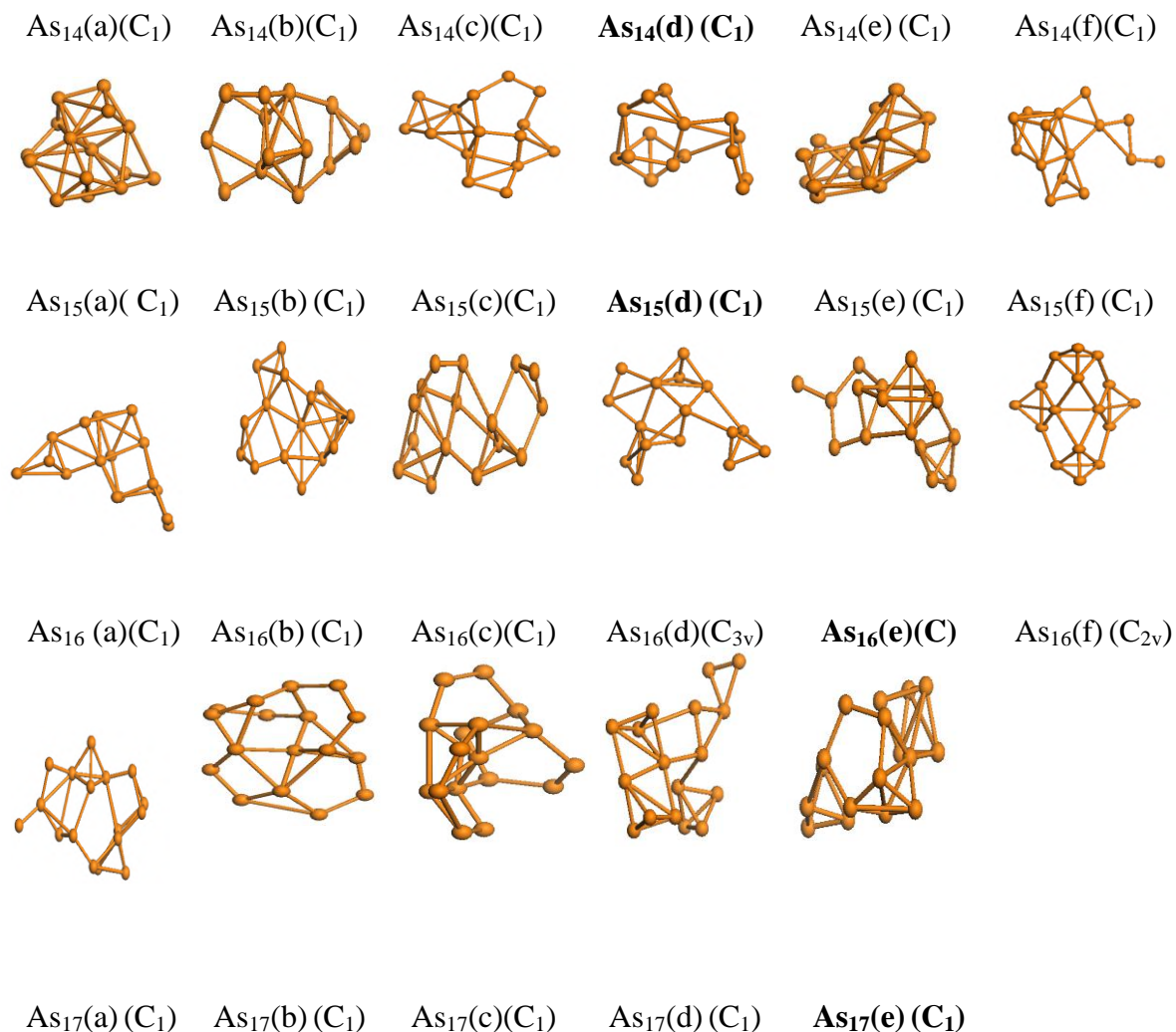
$As_{13}(d)(C_1)$

$As_{13}(e)(C_1)$



## الفصل الثالث

### نتائج المناقشة



الشكل (III. 1) : بنيات العناقيد الأكثر استقرارا ويزوميراتها المقابلة  $As_{n+1}$  ( $n=1-16$ ).

في حالة عناقيد الزرنيخ النقي، العديد من أفضل الهياكل التي تم الحصول عليها تتفق مع الدراسات النظرية السابقة. توضح حساباتنا أن جميع الذرات تقريباً توجد على السطح وتظهر نمطاً نموذجياً تظهر فيه الهياكل المستوية للأحجام الذرية الصغيرة جداً بينما تهيمن التراكيب ثلاثية الأبعاد من  $n = 4$  حتى  $n = 16$ ، تتنافس الهياكل ذات الشكل الموسع مع هياكل كروية تقريباً، يتم

## الفصل الثالث

### نتائج المناقشة

إعطاء الترتيب الايزومرات في الجدول (2.III) والذي يوضح مختلف الخصائص البنيوية والمتمثلة في زمرة التناظر والبعد الذري بين كل ذرتي زرنينخ.

الجدول(2.III): يوضح التناظر, طاقة الارتباط لكل ذرة  $E_b$ , عصابة الطاقة  $\Delta E(eV)$ , طول الرابطة بين ذرتي الزرنينخ و العزم المغناطيسي الكلي.

العزم المغناطيسي الكلي	طول الرابطة بين ذرتي الزرنينخ (Å)	عصابة الطاقة $\Delta E(eV)$	طاقة الارتباط لكل ذرة $E_b(eV/atom)$	التناظر	حجم العنقود (n+1)
<b>0.000</b>	<b>2.143</b>	<b>3.003</b>	<b>1.686</b>	<b>D<sub>∞h</sub></b>	1
<b>1.000</b>	<b>2.212</b>	<b>0.002</b>	<b>1.667</b>	<b>D<sub>∞h</sub></b>	2
0.999	2.415	0.557	2.145	C <sub>2v</sub>	
1.000	2.415	0.556	2.145	C <sub>2v</sub>	
-0.000	2.144	2.892	2.463	D <sub>∞h</sub>	3
2.000	2.421	1.480	2.658	D <sub>2d</sub>	
-0.000	2.370	0.121	2.210	C <sub>2v</sub>	
<b>-0.000</b>	<b>2.480</b>	<b>1.916</b>	<b>2.711</b>	<b>C<sub>2v</sub></b>	4
1.000	2.604	1.902	2.514	C <sub>2v</sub>	
0.999	2.533	0.907	2.300	C <sub>s</sub>	
0.999	2.369	0.393	2.387	C <sub>s</sub>	
<b>1.000</b>	<b>2.514</b>	<b>1.901</b>	<b>2.514</b>	<b>C<sub>2v</sub></b>	
0.999	2.509	0.422	2.113	C <sub>s</sub>	
2.999	2.443	1.314	2.138	C <sub>s</sub>	5
-0.000	2.440	2.436	2.494	C <sub>1</sub>	
<b>-0.000</b>	<b>2.474</b>	<b>1.371</b>	<b>2.609</b>	<b>C<sub>2v</sub></b>	
1.999	2.364	1.250	2.335	C <sub>2v</sub>	
0.000	2.535	1.218	2.439	C <sub>2</sub>	
-0.000	2.361	1.765	2.442	D <sub>2</sub>	
-0.000	2.449	1.661	2.508	C <sub>2v</sub>	6
4.988	2.563	1.020	2.099	C <sub>s</sub>	
2.999	2.478	1.304	2.439	C <sub>2</sub>	

## الفصل الثالث

### نتائج المناقشة

<b>1.000</b>	<b>2.493</b>	<b>1.793</b>	<b>2.651</b>	<b>C<sub>s</sub></b>	
4.999	2.454	1.209	2.117	C <sub>1</sub>	
2.999	2.469	0.941	2.281	C <sub>1</sub>	
1.000	2.467	0.952	2.506	C <sub>2v</sub>	
<b>0.000</b>	<b>2.512</b>	<b>2.032</b>	<b>2.749</b>	<b>C<sub>2v</sub></b>	
-0.000	2.517	1.039	2.611	C <sub>s</sub>	7
0.000	2.375	1.661	2.529	C <sub>2h</sub>	
1.000	2.497	1.214	2.558	C <sub>s</sub>	
1.000	2.475	1.014	2.506	C <sub>1</sub>	
0.999	2.469	0.952	2.655	C <sub>s</sub>	8
0.000	2.423	0.525	2.430	C <sub>2</sub>	
1.000	2.568	1.089	2.570	C <sub>s</sub>	
<b>1.000</b>	<b>2.496</b>	<b>0.974</b>	<b>2.716</b>	<b>C<sub>s</sub></b>	
-0.000	2.471	1.192	2.570	C <sub>1</sub>	9
0.000	2.502	0.362	2.387	C <sub>1</sub>	
<b>0.000</b>	<b>2.582</b>	<b>1.888</b>	<b>2.785</b>	<b>C<sub>s</sub></b>	
10.999	2.499	0.857	2.450	C <sub>1</sub>	
1.000	1.497	1.104	2.546	C <sub>1</sub>	10
0.999	2.520	1.056	2.612	C <sub>1</sub>	
0.000	2.566	0.871	2.512	C <sub>1</sub>	
0.999	2.478	0.508	2.571	C <sub>1</sub>	
<b>-1.000</b>	<b>2.538</b>	<b>1.012</b>	<b>2.696</b>	<b>C<sub>s</sub></b>	
<b>-0.000</b>	<b>2.498</b>	<b>2.189</b>	<b>2.697</b>	<b>C<sub>1</sub></b>	
1.999	2.476	0.874	2.460	C <sub>1</sub>	11
1.999	5.514	0.713	2.229	C <sub>s</sub>	
0.000	2.524	1.371	2.665	C <sub>1</sub>	
-0.000	2.538	0.555	2.628	C <sub>1</sub>	
4.999	2.496	1.110	2.348	C <sub>1</sub>	
0.999	2.215	1.023	2.650	C <sub>1</sub>	
<b>1.000</b>	<b>2.547</b>	<b>1.490</b>	<b>2.678</b>	<b>C<sub>1</sub></b>	12
-0.999	2.489	0.149	2.433	C <sub>1</sub>	
0.999	2.546	0.694	2.534	C <sub>1</sub>	
0.999	2.583	0.804	2.563	C <sub>1</sub>	
1.999	2.484	0.436	2.535	C <sub>1</sub>	13



## الفصل الثالث

### نتائج المناقشة

3.999	2.513	0.710	2.444	C <sub>1</sub>	
3.999	2.491	0.557	2.451	C <sub>1</sub>	
1.999	2.515	0.846	2.563	C <sub>1</sub>	
<b>-0.000</b>	<b>2.532</b>	<b>0.683</b>	<b>2.668</b>	<b>C<sub>1</sub></b>	
3.993	2.471	0.884	2.464	C <sub>1</sub>	
0.000	2.575	0.645	2.625	C <sub>1</sub>	14
0.999	2.900	0.221	2.689	C <sub>1</sub>	
0.999	2.524	0.890	2.556	C <sub>1</sub>	
<b>0.980</b>	<b>2.493</b>	<b>0.904</b>	<b>2.691</b>	<b>C<sub>1</sub></b>	
0.999	2.561	0.329	2.689	C <sub>1</sub>	
0.999	2.563	0.867	2.545	C <sub>1</sub>	
2.000	2.532	1.016	2.580	C <sub>1</sub>	
0.0000	2.522	0.994	2.604	C <sub>1</sub>	15
1.996	2.540	0.720	2.633	C <sub>1</sub>	
0.000	2.547	1.884	2.634	C <sub>3v</sub>	
<b>1.999</b>	<b>2.485</b>	<b>0.351</b>	<b>3.032</b>	<b>C</b>	
1.997	2.476	0.956	2.586	C <sub>2v</sub>	
1.000	2.581	0.397	2.565	C <sub>1</sub>	16
1.000	2.661	0.890	2.576	C <sub>1</sub>	
0.999	2.520	0.447	2.599	C <sub>1</sub>	
0.999	2.520	0.447	2.599	C <sub>1</sub>	
<b>0.999</b>	<b>2.513</b>	<b>0.829</b>	<b>3.134</b>	<b>C<sub>1</sub></b>	

نلاحظ في عنايد الزرنيخ النقي أن في العنقود 1 أي As<sub>2</sub> الذي يكون بشكل خطي و الذي يوافق التناظر D<sub>∞h</sub> وطول الرابطة بين ذرتي الزرنيخ 2.143Å . العنقود 2 أي As<sub>3</sub> الهيكل الأكثر استقرار هو الذي يأخذ شكل الخطي من بين الأشكال الموضحة في الشكل (III. 1) و الذي لديه تناظر D<sub>∞h</sub> وطول الرابطة بين ذرتي الزرنيخ 2.212Å والموضحة في الجدول (III.1). وبالنسبة للعنقود 3 فالهيكل الأكثر استقرار هو As<sub>4</sub> الذي لديه تناظر C<sub>2v</sub> وطول الرابطة بين ذرتي الزرنيخ 2.480 Å . أما بالنسبة للعنقود 4 فان الهيكل الأكثر استقرار هو الذي لديه التناظر C<sub>2v</sub> وطاقة ارتباط بين ذرتي الزرنيخ 2.514Å . بالنسبة للعنقود As<sub>6</sub> فان الهيكل الأكثر استقرار هو الذي لديه التناظر C<sub>2v</sub> ذو طول ارتباط بين ذرتي الزرنيخ 2.474 Å ، وبالنسبة للعنقود 6 أي As<sub>7</sub> فان الهيكل الأكثر استقرار نجده بالتناظر C<sub>s</sub> وطول الرابطة بين ذرتي الزرنيخ له هي Å

## الفصل الثالث

### نتائج المناقشة

2.493 ، وكما نجد في العنقود 7 أي  $As_8$  الهيكل الأكثر استقرار هو الهيكل الذي تناظر  $C_{2v}$  وطول الرابطة بين ذرتي الزرنيخ  $2.512\text{\AA}$  ، و في العنقود 8 أي  $As_9$  نجد الهيكل الأكثر استقرار كما يوضحه الجدول أعلاه هو ذو تناظر  $C_s$  وطول الارتباط بين ذرتي الزرنيخ  $2.496\text{\AA}$  ، وفي العنقود 9 أي  $As_{10}$  الهيكل الأكثر استقرار هو الذي لديه التناظر  $C_1$  وطول الارتباط بين ذرتي الزرنيخ  $2.502\text{\AA}$  ، أما في العنقود  $As_{11}$  الهيكل الأكثر استقرار هو الهيكل الذي يأخذ التناظر  $C_s$  وطول الرابطة بين ذرتي الزرنيخ هي  $2.538\text{\AA}$  والذي لديه الشكل موشور بالتقريب ، أما بالنسبة للعناقيد من  $n=12$  إلى  $n=17$  ذرة تأخذ هياكل غير منتظمة بتناظر  $C_1$  وطول الرابطة بين ذرتي الزرنيخ هي  $2.498\text{\AA}$  ،  $2.547\text{\AA}$  ،  $2.532\text{\AA}$  ،  $2.493\text{\AA}$  ،  $2.485\text{\AA}$  ،  $2.513\text{\AA}$  على الترتيب.

### 2.1.3.III الاستقرار النسبي (الخصائص الطاقية):

#### ➤ طاقة الارتباط لكل ذرة $E_b$

من أجل التنبؤ بالثبات النسبي لعناقيد الزرنيخ غير المتعممة  $As_{n+1}$  ، قمنا بحساب طاقة الربط الخاصة بهم لكل ذرة ( $E_b$ ) باستخدام الصيغة التالية:

$$E_{b/atom}(As_n) = [(n)E(As) - E(As_n)] / (n) \dots \dots \dots (1.III)$$

بحيث:

$E(As)$ : تمثل طاقة ذرة زرنيخ معزولة.

$E(As_n)$ : تمثل الطاقة الكلية للعنقود ذو  $n$  ذرة.

تم عرض النتائج التي تم الحصول عليها في الجدول (2.III). و يوضح الشكل (2.III) تطور طاقات الارتباط لعناقيد الزرنيخ

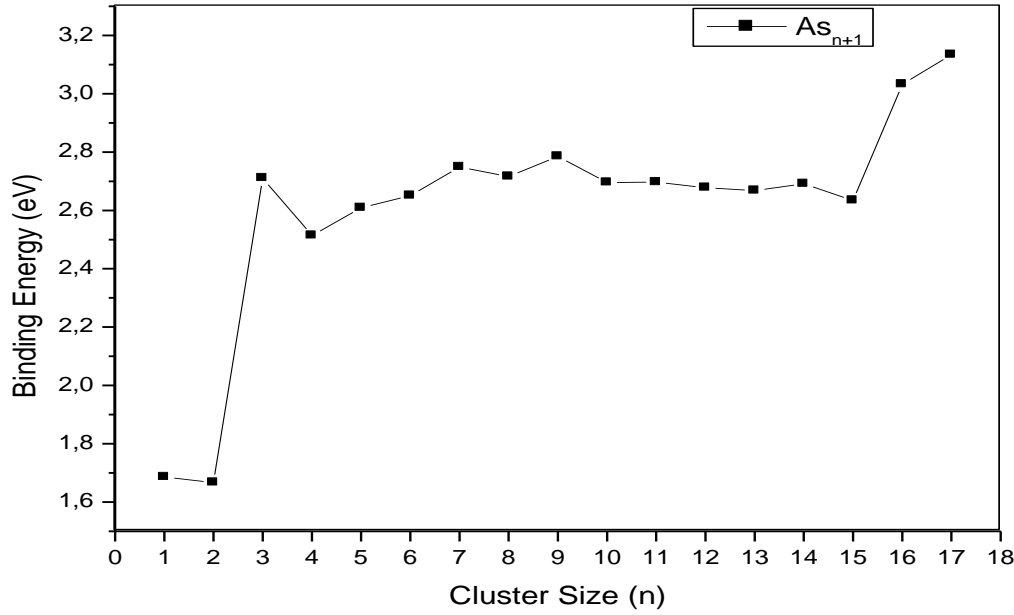
$As_{n+1}$  كدالة للحجم من أجل الأيزومرات الأكثر استقرارًا. نلاحظ أن هذه العناقيد يمكن أن تكتسب باستمرار الطاقة خلال

## الفصل الثالث

### نتائج المناقشة

عملية النمو . كما هو متوقع، فإن طاقة الترابط تزداد تدريجيًا مع زيادة الحجم ، ومن المحتمل أن يرتبط ذلك بزيادة متوسط عدد

الجيران لكل ذرة . أقصى قيمة لطاقة الربط لكل ذرة للعنقود ذو 17 ذرة بقيمة تقدر ب : 3.134 eV/atom.



الشكل (2.III) : تغيرات طاقة الارتباط لكل ذرة بدلالة حجم العنقود للعناقيد الأكثر استقرار  $As_{n+1}$  ( $n=1-16$ ).

### ➤ طاقة التجزئة ( $E_f$ ) (Fragmentation Energy)

تعتبر طاقة التجزئة معيارًا جيدًا للتنبؤ بالاستقرار النسبي للعناقيد . هنا نقارن ثبات العناقيد الأكثر استقرار بحساب طاقات التجزئة

( $E_f$ ) عندما نتجاهل تأثير تغيرات الطاقة الحرة وحاجز التفكك . وتحسب قيم  $E_f$  لعناقيد الزرنيخ بالصيغة التالية:

$$E_f(As_n) = E(As_{n-1}) + E(As) - E(As_n) \dots \dots \dots (2. III)$$

بحيث:

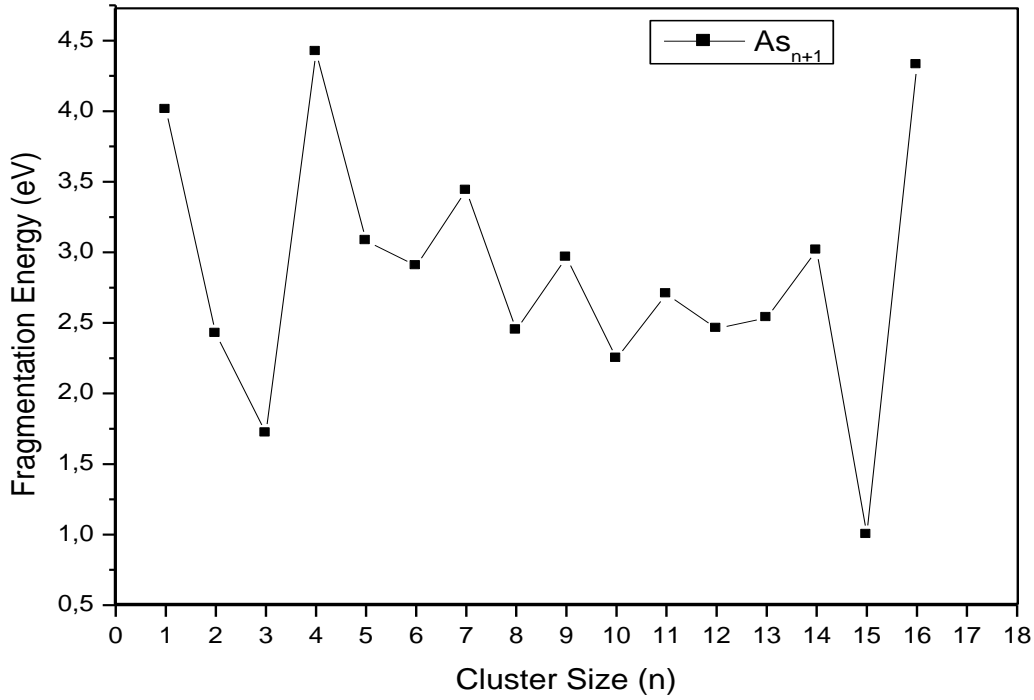
## الفصل الثالث

### نتائج المناقشة

$E(As)$ : تمثل طاقة ذرة زرنيخ معزولة.

$E(As_n)$  و  $E(As_{n-1})$ : تمثل الطاقة الكلية للعنقود ذو  $n$  و  $n-1$  ذرة على الترتيب.

يتم رسم النتائج التي تم الحصول عليها متغيرة كدالة للحجم في الشكل (3.III). و نلاحظ أن هناك سلوكيات متذبذبة في تطور طاقة التجزئة لجميع العناقيد. في الفيزياء العنقودية، تكون العناقيد ذات القيمة الكبيرة من  $E_f$  أقوى نسبياً في الثبات الديناميكي الحراري من العناقيد المجاورة. وبالتالي، فإن العناقيد  $As_2$   $As_5$   $As_8$   $As_{17}$  هي الأقوى والأكثر ثباتاً نسبياً من العناقيد المجاورة.



الشكل (3.III): تغيرات طاقة التجزئة بدلالة حجم العنقود للعناقيد الأكثر استقرار  $As_{n+1}$  ( $n=1-16$ ).

➤ طاقة الثاني للطاقة ( $\Delta_2 E$ ) (Second Order Difference):

## الفصل الثالث

### نتائج المناقشة

اختلاف الترتيب الثاني من إجمالي الطاقة هو معيار حساس يعكس الثبات النسبي للعناقيد. هنا، يتم الحصول على فروق الطاقة

المحسوبة من الدرجة الثانية لعناقيد الزرنبيخ باستخدام العبارة:

$$\Delta_2 E(As_n) = E(As_{n+1}) + E(As_{n-1}) - 2E(As_n) \dots \dots \dots (3. III)$$

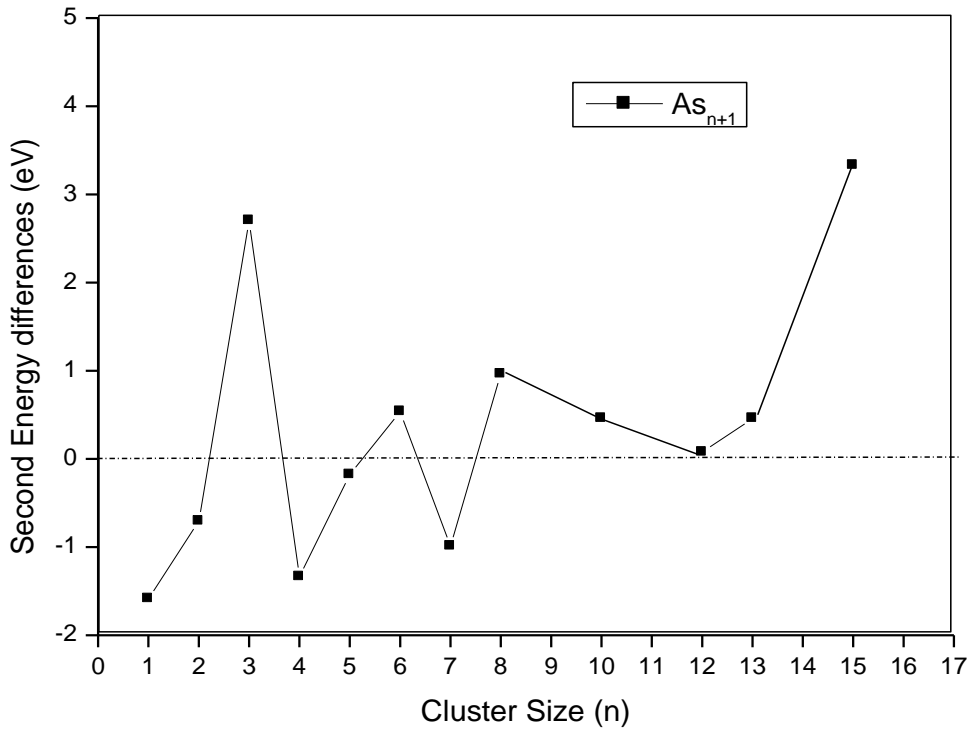
بحيث:

$E(As_{n-1}) / E(As_{n+1}) / E(As_n)$ : تمثل الطاقة الكلية للعنقود ذو  $n$  و  $n+1$  و  $n-1$  ذرة على الترتيب.

تشير القيمة الموجبة الأكبر إلى استقرار أكبر وتشير القيمة السالبة إلى استقرار أقل في العناقيد. يتم رسم قيم طاقة النظام الثاني

كدالة للحجم  $n$  لعناقيد الزرنبيخ غير المطعم الأكثر استقرارا في الشكل (4.III). ويظهر المنحنى قمم في نطاق الحجم

$n = 3 ; 6 ; 8 ; 10 ; 13 ; 15$  ذرة ، مما يوحي بأن هذه التجمعات أكثر استقرارًا مقارنة بجيرانها .



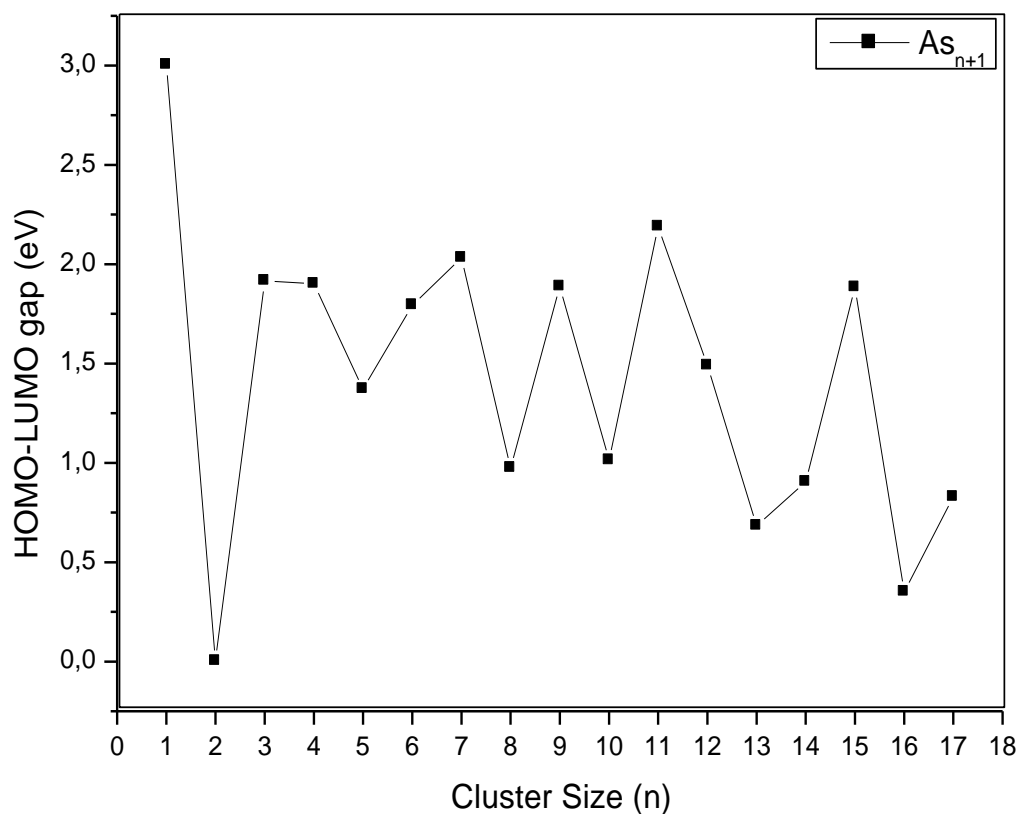
الشكل (4.III) : تغيرات الثاني لطاقة بدلالة حجم العنقود للعناقيد الأكثر استقرار  $As_{n+1}$  ( $n=1-16$ ).

## الفصل الثالث

### نتائج المناقشة

#### 3.1.3.III الخصائص الالكترونية :

قمنا بحساب وتحليل الفجوة بين HOMO LUMO فرق الطاقة بين أعلى المدارات الجزيئية المشغولة (HOMO) أي عصابة التكافؤ وأدنى مدارات جزيئية (LUMO) أي ما يعرف بعصابة التوصيل من أجل الحصول على نظرة ثاقبة للاستقرار عناقيد الزرنخ ، وتعتبر معياراً هاماً من حيث الثبات الإلكتروني للعناقيد ويمثل قدرة الكتلة أو العنقود على المشاركة في التفاعلات الكيميائية . وترد النتائج التي تم الحصول عليها في الجدول (2.III). وفي الشكل (5.III) نعرض العناقيد الأكثر استقراراً من كل حجم .



الشكل (5.III) : تغيرات فجوة الطاقة بدلالة حجم العنقود للعناقيد الأكثر استقراراً (n=1-16) As<sub>n+1</sub>.

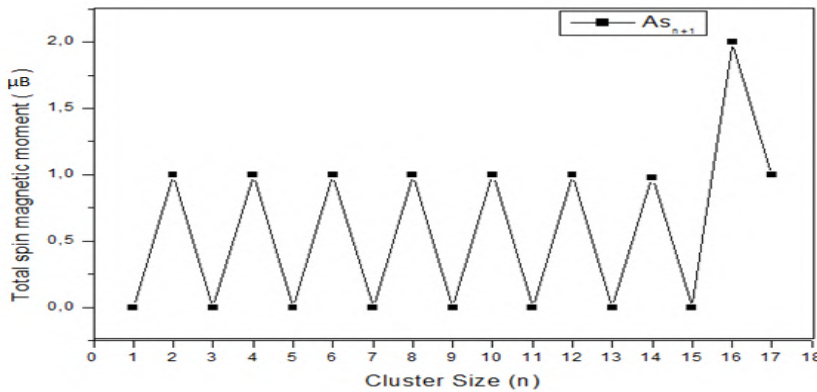
## الفصل الثالث

### نتائج المناقشة

#### III.1.3.4 الخصائص المغناطيسية :

السلوك المغناطيسي هو واحد من الخصائص الأكثر أهمية التي تجعل خاصية مميزة لهذه الأنظمة العنقودية. في الواقع ، يمكننا مراقبة مجموعات صغيرة للغاية مع استجابة مغناطيسية محددة للغاية والتي يمكن أن يكون لها العديد من التطبيقات الهامة في تقنيات النانو.

يتم تعريف إجمالي العزم المغناطيسي الدوراني على أنه الفرق بين إجمالي تجمعات شحنة للإلكترونات ذات الدوران الأعلى والإلكترونات ذات الدوران السفلي. يتم تقييم الخصائص المغناطيسية من خلال تقييم العزم المغناطيسي الكلي للدوران لكل حجم عنقودي. تم تسجيل القيم الإجمالية العزم المغناطيسية الدورانية المحسوبة للعناقيد العامة في الجدول (2.III) ونعرض في الشكل (6.III) منحنى تغيرات العزم المغناطيسي بدلالة تغيرات حجم العنقود. نلاحظ أن جميع الحالات الأرضية للعناقيد هي هياكل غير مغناطيسية بشكل ذات  $n$  ذو القيمة الفردية باستثناء  $n=17$  في حين  $n$  ذات القيمة الزوجية لها عزم مغناطيسي مساوي للـ  $1\mu B$  ، باستثناء حالة الـ  $As_{16}$  التي لها عزم مغناطيسي كامل لتدفق  $2\mu B$ .



الشكل (6.III) : تغيرات طاقة الربط للنظام الثاني بدلالة حجم العنقود للعناقيد الأكثر استقراراً  $As_{n+1}$  ( $n=1-16$ ).

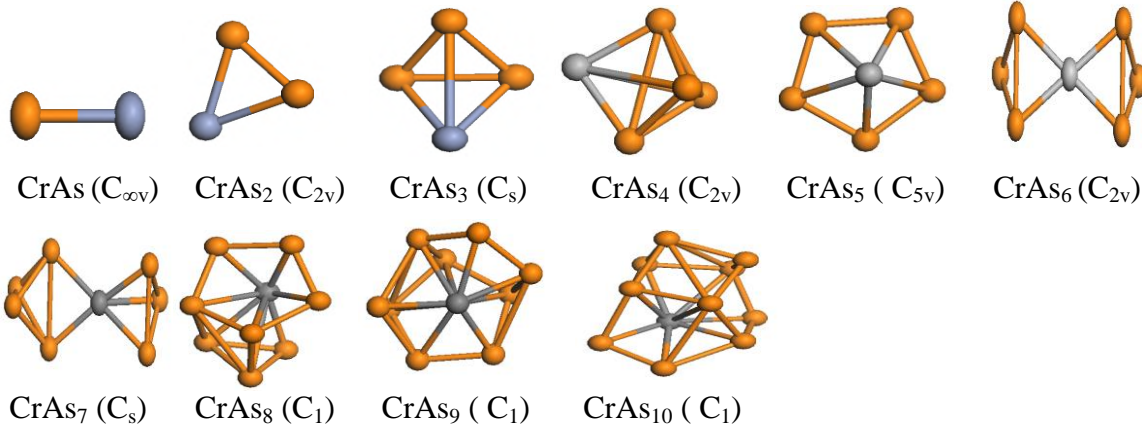
#### III.2.3 حالة عناقيد الزرنيخ المطعمة بالكروم $CrAs_n$ :

## الفصل الثالث

### نتائج المناقشة

### 1.2.3.III الخصائص البنيوية:

في هذا القسم نعرض النتائج الخاصة بعناقيد الزرنيخ المطعمة بذرة واحدة من الكروم ( $\text{CrAs}_n$ ,  $n=1-10$ ). الهياكل البنيوية الأكثر استقرارا موضحة في الشكل (7.III). والنتائج المتحصل عليها في الجدول (3.III).



الشكل (7.III): بنيات عناقيد الزرنيخ المطعمة الأكثر استقرار  $\text{CrAs}_n$  ( $n=1-10$ ).

تأخذ البنى المطعمة لعناقيد الزرنيخ هياكل مشابهة لحد ما لتلك النقية المقابلة لها من  $n=1$  إلى  $n=3$  و ابتداء من  $n=4$  تأخذ البنى هياكل جديدة تختلف عما يقابلها في الحالة النقية وتأخذ ذرة الكروم مواقع داخل قفص العنقود ما يدل على تأثير ذرة الكروم في الخصائص البنيوية.



## الفصل الثالث

### نتائج والمناقشة

الجدول (III.3) : يوضح التناظر, طاقة الارتباط لكل ذرة  $E_b$ , عصابة الطاقة  $\Delta E$ , طول الرابطة بين ذرتي الزرنيخ As-As وبين ذرتي الزرنيخ والكروم As-Cr و العزم المغناطيسي الكلي  $\mu$ .

العزم المغناطيسي الكلي $\mu$ ( $\mu_b$ )	طول الرابطة بين الذرتين ( $\text{\AA}$ )		عصابة الطاقة $\Delta E$ (eV)	طاقة الارتباط لكل ذرة $E_b$ (eV/atom)	التناظر	حجم العنقود N
	As-Cr	As-As				
6.999	2.622	/	1.295	0.519	$C_{\infty v}$	1
4.000	2.569	2.3043	0.820	1.659	$C_{2v}$	2
5.000	2.637	2.461	0.898	1.990	$C_s$	3
4.000	2.536	2.511	1.556	2.357	$C_{2v}$	4
5.000	2.788	2.408	1.608	2.482	$C_{5v}$	5
7.969	2.718	2.242	1.165	2.405	$C_{2v}$	6
4.998	2.7008	2.539	0.630	2.471	$C_s$	7
3.999	2.733	2.509	0.927	2.635	$C_1$	8
3.000	2.737	2.531	0.731	2.665	$C_1$	9
4.000	2.827	2.557	0.919	2.644	$C_1$	10

### III.2.2.3.2.3 الاستقرار النسبي (الخصائص الطاقية) :

#### ➤ طاقة الارتباط لكل ذرة $E_b$

تحسب طاقة الارتباط لكل ذرة بالنسبة للعناقيد  $CrAs_n$  وفق العبارة :

$$E_b(CrAs_n) = (n E(As) + E(Cr) - E(CrAs_n)) / (n+1) \dots\dots\dots (4. III)$$

بحيث:

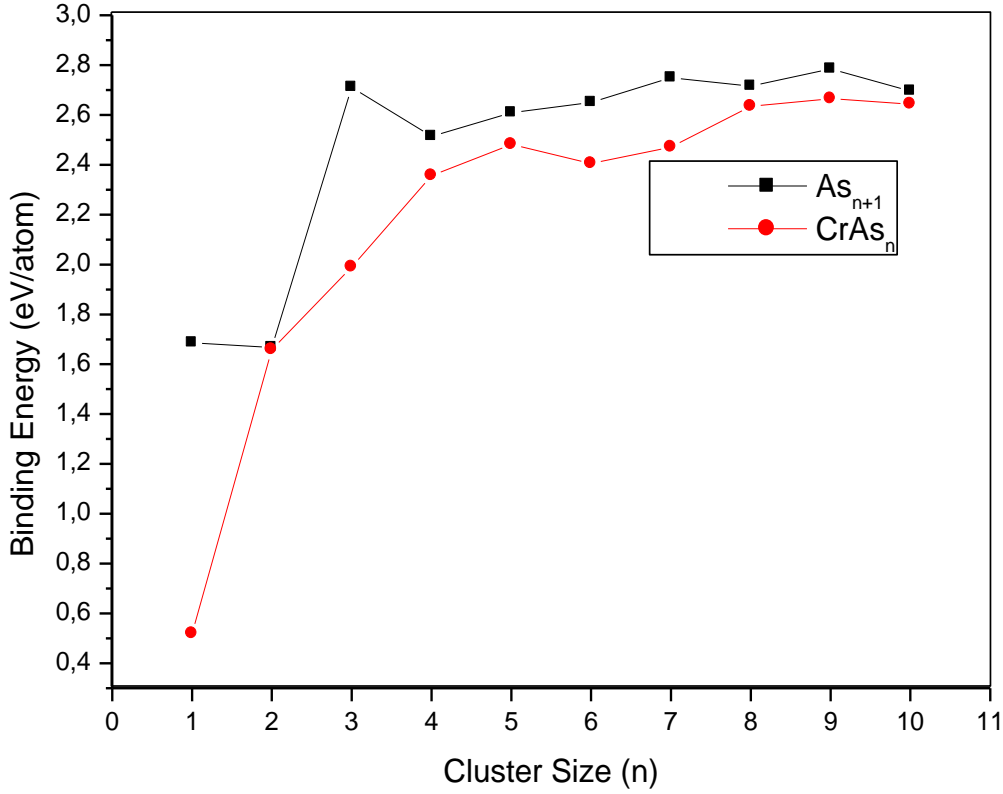
$E(As)$  و  $E(Cr)$  تمثل طاقة ذرة معزولة لكل من الزرنيخ والكروم على الترتيب.

$E(CrAs_n)$  تمثل الطاقة الكلية للعنقود  $CrAs_n$ .

## الفصل الثالث

### نتائج المناقشة

النتائج التي تم الحصول عليها تعرض في الجدول (3.III). و يوضح الشكل (8.III) تطور طاقات الربط لعناقيد الزرنيخ  $As_{n+1}$  و  $CrAs_n$  ( $n=1-10$ ) كدالة للحجم من أجل الأيزومرات الأكثر استقرارًا. نلاحظ أن هذه العناقيد يمكن أن تكتسب باستمرار الطاقة خلال عملية النمو . كما نلاحظ أن طاقات الارتباط للعناقيد المطعمة تكون دائما اقل من عناقيد الزرنيخ في الحالة النقية ما يدل على ان ذرة الكروم لا تعزز من استقرار عناقيد الزرنيخ. تزداد طاقة الارتباط بسرعة من  $1.659 \text{ eV}$  بالنسبة إلى  $CrAs$  إلى  $2.482 \text{ eV}$  بالنسبة للعنقود ذو  $n = 5$  ، ثم يتم ملاحظة نمو بطيء وغير موحد حتى  $n = 10$  .



الشكل (8.III): تغيرات طاقة الربط لكل ذرة بدلالة حجم العنقود للعناقيد النقية و المطعمة الأكثر استقرار  $As_{n+1}$  ( $n=1-11$ ) و  $CrAs_n$  ( $n=1-10$ ).

➤ طاقة التجزئة ( $E_f$ ) (Fragmentation Energy)

## الفصل الثالث

### نتائج والمناقشة

تحسب طاقة التجزئة للعناقيد المطعمة بالعبارة :

$$E_f(\text{CrAs}_n) = E(\text{CrAs}_{n+1}) + E(\text{As}) - E(\text{CrAs}_n) \dots\dots\dots (5. \text{ III})$$

بحيث:

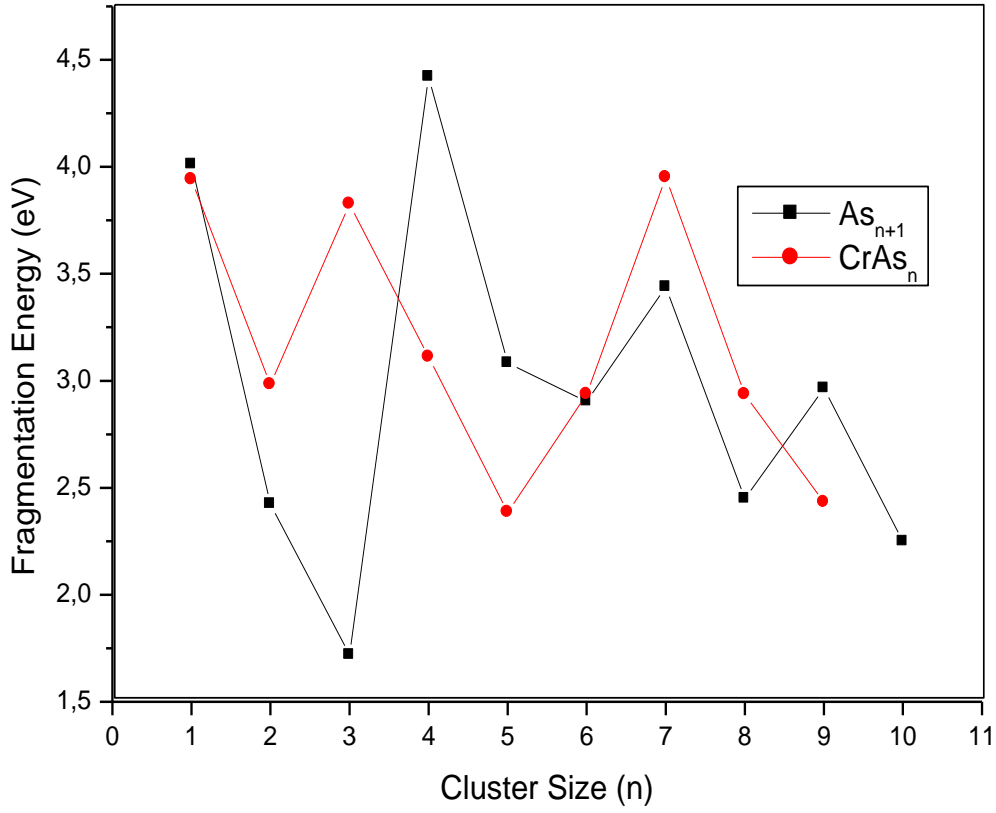
$E(\text{As})$ : تمثل طاقة ذرة الزرنيخ معزولة.

$E(\text{CrAs}_n)$  و  $E(\text{CrAs}_{n+1})$ : تمثل الطاقات الكلية للعناقيد الموافقة.

يتم رسم النتائج التي تم الحصول عليها وتطورها كدالة للحجم في الشكل (9.III). نلاحظ أن هناك سلوك متذبذب في تطور طاقة التجزئة لجميع الأنواع وفي غالب العناقيد نجد أن إضافة ذرة الكروم لا يعزز من الاستقرار النسبي لعناقيد الزرنيخ إذ تنقص قيمة طاقة التجزئة بعد التطعيم باستثناء العناقيد ذات  $n=3$  و  $n=7$ . في الفيزياء العنقودية، تكون العناقيد ذات القيمة الكبيرة من  $E_f$  أقوى نسبياً في الثبات الديناميكي الحراري من العناقيد المجاورة كما أسلفنا القول سابقاً. وبالتالي  $\text{CrAs}_2$ ،  $\text{CrAs}_3$  و  $\text{CrAs}_7$  هي العناقيد الأكثر استقراراً.

## الفصل الثالث

### نتائج المناقشة



الشكل (9.III) : تغيرات طاقة التجزئة بدلالة حجم العنقود للعناقيد النقية و المطعمة الأكثر استقرار  $As_{n+1}$  ( $n=1-11$ ) و  $CrAs_n$  ( $n=1-$ )

(10).

➤ تغير الثاني لطاقة ( $\Delta_2 E$ ) (Second Order Difference):

تحسب طاقة تغير الثاني لطاقة وفق العبارة التالية:

$$\Delta_2 E (CrAs_n) = E(CrAs_{n+1}) + E(CrAs_{n-1}) - 2E(CrAs_n). \dots\dots\dots (6. III)$$

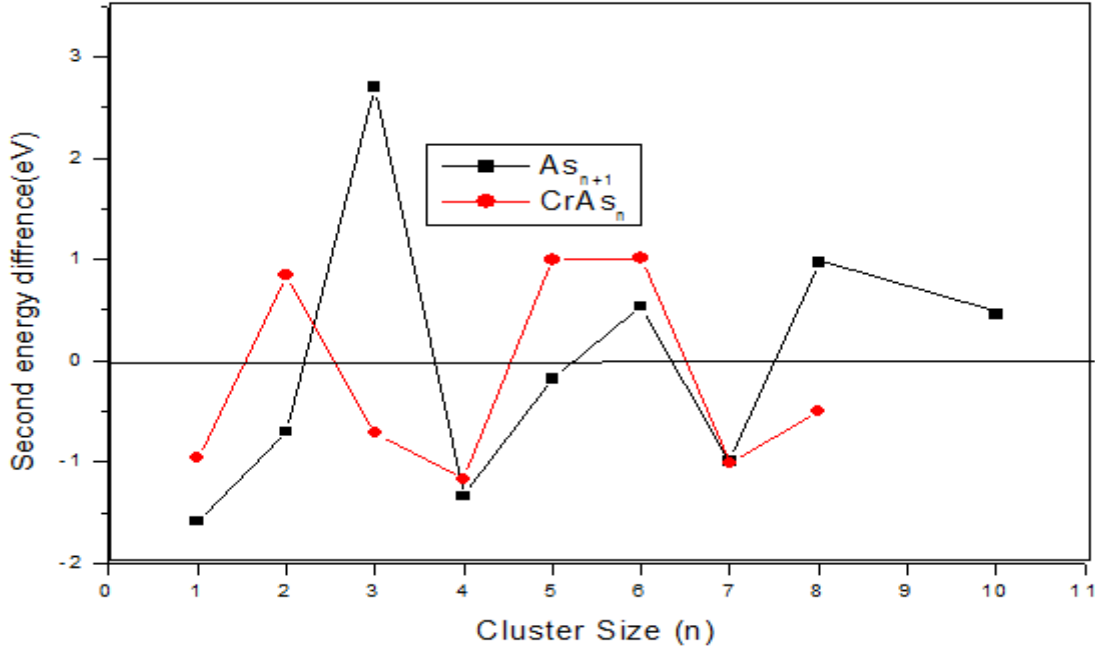
بحيث :

$CrAs_{n+1}$  ،  $CrAs_{n-1}$  ،  $CrAs_n$  الطاقة الكلية للأنظمة الموافقة لها.

## الفصل الثالث

### نتائج المناقشة

يتم رسم النتائج التي تم الحصول عليها وتطورها كدالة للحجم في الشكل (10.III). بحيث نلاحظ أن وجود ذرة الكروم عزز من استقرار العناقيد ذات 2، 5 و 6 ذرات. اما العناقيد ذات 3 و 8 ذرات فقد تراجع استقرارها النسبي بعد إضافة ذرة الكروم.



الشكل (10.III): تغيرات التغير الثاني لطاقة بدلالة حجم العنقود للعناقيد النقية و المطعمه الأكثر استقرار  $As_{n+1}$  ( $n=1-11$ ) و  $CrAs_n$  ( $n=1-10$ ).

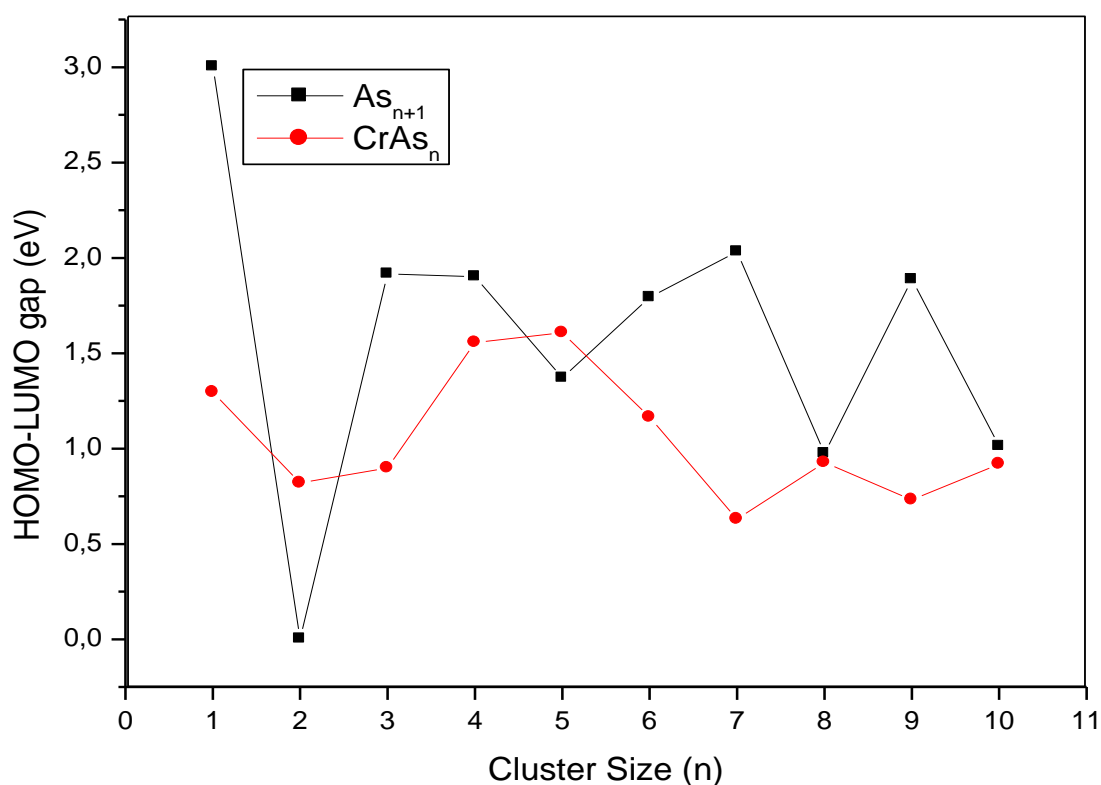
### 3.2.3.III الخصائص الالكترونية :

من أجل الحصول على نظرة ثاقبة لاستقرار مجموعات  $CrAs_n$  قمنا بحساب فجوة الطاقة HOMO-LUMO وتعرض النتائج في الشكل (11.III). تم الإبلاغ أيضًا عن فجوات HOMO-LUMO لمجموعات  $As_{n+1}$  النقية الأكثر استقرار من أجل المقارنة. تكون فجوة  $CrAs_n$  أقل من فجوة الطاقة للعناقيد  $As_{n+1}$  النقية، باستثناء العناقيد ذات الأحجام  $n=2$  و  $n=5$ ، وتتذبذب قيمة الفجوة للعناقيد المطعمه تقريبًا بين  $0.630\text{ eV}$  و  $1.608\text{ eV}$ ، مما يشير إلى أن استبدال الذرة في عناقيد الزرنيخ بذرة كروم واحدة يؤدي إلى انخفاض كبير في فجوات HOMO-LUMO بالمقارنة مع حالة العناقيد النقية

## الفصل الثالث

### نتائج المناقشة

للزرنخ لنفس الحجم. ويعني هذا أن النشاط الكيميائي للعناقيد المطعمة أعلى منه في العناقيد النقية، وتزيد من الطابع المعدني لمجموعات في حالة التطعيم بذرة كروم.



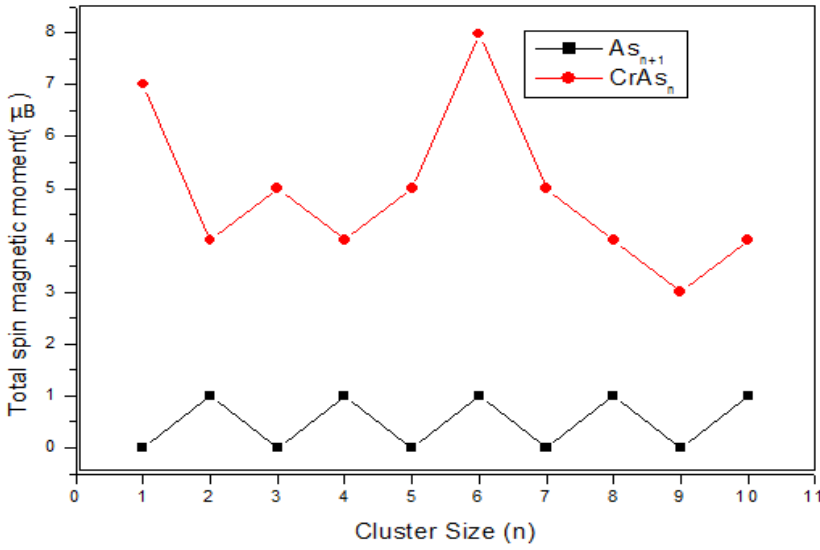
الشكل (11.III): تغيرات فجوة الطاقة بدلالة حجم العنقود للعناقيد النقية و المطعمة الأكثر استقرار  $As_{n+1}$  ( $n=1-11$ ) و  $CrAs_n$  ( $n=1-10$ ).

### 4.2.3.III الخصائص المغناطيسية :

تم تسجيل القيم الإجمالية للحظة المغناطيسية الدورانية المحسوبة للعناقيد المطعمة والنقية المقابلة لها في الجدول (3.III) ونعرض في الشكل (12.III) منحنى تغيرات العزم المغناطيسي بدلالة تغيرات حجم العنقود. نلاحظ أن إضافة ذرة كروم لعناقيد الزرنخ اثر بشكل كبير وملحوظ في قيمة العزم المغناطيسية بحيث تتراوح بين القيمة 3.000 إلى أعلى قيمة 7.969 الموافقة للعنقود ذو 6 ذرات.

## الفصل الثالث

### نتائج المناقشة



الشكل (12.III): تغيرات العزم المغناطيسي الكلي بدلالة حجم العنقود للعناقيد النقية و المطعمة الأكثر استقرار  $As_{n+1}$  ( $n=1-11$ ) و  $CrAs_n$  ( $n=1-10$ ).

### III. 4. خلاصة:

في هذا الفصل استعرضنا النتائج المتحصل عليها لكل من عنقيد الزرنيخ النقية  $As_{n+1}$  من اجل  $n=1$  إلى  $n=16$  و عنقيد الزرنيخ المطعم بالكروم  $CrAs_n$  من اجل  $n=1$  إلى  $n=10$  وتوصلنا إلى أن خصائص الزرنيخ تتغير بشكل كبير في حالة تواجده بشكل عنقيد و تتغير هاته الخصائص مع تغير حجم العنقود وهذا ما يجعلها مهمة في الاستخدامات المحتملة في مجال الالكترونيات والليزر على مستوى سلم النانو. وان إضافة ذرة كروم لهاته العناقيد يؤثر على خصائصها بشكل عام. النتائج التي تم التحصل عليها متوافقة لحد ما مع النتائج التجريبية والدراسات السابقة.

#### المراجع :

- [1] - Safer, S., et al. "Properties of neutral and charged cobalt-doped arsenic  $\text{CoAs}_n$  ( $0 \pm 1$ )( $n= 1-15$ ) clusters by density functional theory." Computational and Theoretical Chemistry 1090 (2016): 23-33.
- [2] - Soler, José M., et al. "The SIESTA method for ab initio order-N materials simulation." Journal of Physics: Condensed Matter 14.11 (2002): 2745.
- [3]- S.MAHTOUT 'Théorie et calcul des propriétés physiques des clusters , Université de Bejaia , 2007.
- [4] - Kohn, Walter, and Lu Jeu Sham. "Self-consistent equations including exchange and correlation effects." Physical review 140.4A (1965): A1133.



خاتمة عامة

الخاتمة:

من خلال هذا العمل قمنا بدراسة عناقيد الزرنيخ  $As_{n+1}$  من  $n=1$  الى  $n=16$  لتحديد الخصائص البنيوية والاستقرار النسبي والخصائص الالكترونية والمغناطيسية. اعتمدنا في حساباتنا على برنامج SIESTA فاستخدمنا GGA (تقريب التدرج المعمم) واستخدمنا POA قاعدة محلية من المدرات الذرية ، وتتم الحسابات لدينا في اطار نظرية DFT وفق معادلة كوهن - شام و يمكن اختيار العديد من الوظائف تبادل - تبادل ارتباط .

من اهم ما توصلنا اليه :

- انه يمكن التغير خصائص الزرنيخ من خلال دراسته على هيئة عنقود مقارنة بالزرنيخ وهو بلور .
  - الخصائص البنيوية والالكترونية و الطاقوية (الاستقرار النسبي) كما تحصلنا على الخصائص المغناطيسية لعناقيد الزرنيخ نقي و مطعم .
  - وتوصلنا على انه CF لا يعزز من استقرار الزرنيخ .
  - كما توصلنا ان CF يرفع من الخاصية المغناطيسية للزرنيخ .
- وكنتيجة هامة توصلنا اليها من خلال دراسة ان خصائص الزرنيخ تتغير بشكل كبير في حالة تواجده بشكل عناقيد مما يجعله مهم في استخدامات محتملة في مجال الالكترونيات و الليزر على سلم النانوا .

ملحق

(نظرية الكثافة الوظيفية DFT)





## نظرية الكثافة الوظيفية (DFT):

هي إحدى أهم الطرق المستعملة في الفيزياء والكيمياء النظريتين وبواسطتها نستطيع أن نحدد خصائص النظام متعدد الجسيمات (الطاقة الكلية للنظام، الكثافة الإلكترونية للمدارات، المعاملات الضوئية للمادة ...)، وهي واحدة من أكثر الطرق استخداماً في العماليات الحاسوبية الكمومية بسبب إمكانية تطبيقها على أنظمة متنوعة وبتكلفة وسرعة عالية .

تعتمد الطرق التقليدية في حلها معادلة شرودينغر لنظام مكون من عدة ذرات ولاسيما نظرية هارترتي-فوك والطرق المستنبطة منها على الدالة الموجية ذات  $3N$  متغير (بحيث  $N$  هو العدد الإجمالي لجزيئات النظام ) ، لذلك تكون لمعادلات المراد حلها جد معقدة وتتطلب جهداً كبيراً . الهدف الرئيسي لنظرية الكثافة الوظيفية هو استبدال الدالة الموجية بالدالة الكثافة الوظيفية ذات ثلاثة متغيرات فقط وجعلها كقاعدة حساب ، لذلك بالتعامل معها كمفهوم رياضي أو فيزيائي هو أسهل بكثير ، فمبدأ DFT هو إعادة صياغة المسألة لنظام متعدد الجسيمات إلى مسألة أحادية الجسيمية .

وكما تعرف أيضاً بأنها نظرية حاولت أن تفك كل القيود لمعادلة شرودينغر من اجل إيجاد طرق لحساب بنية عصابات الطاقة لمركبات ، وذلك بعدة تقريبات مثل تقريب الاديباتكي وتقريب هارتي فوك واستخدام نظريتين آلا وهما نظرية توماس - فارمي ونظرية هوهنبارغ-كوهن وباستخدام حلول معادلة كوهن- شام .

### ● معادلة شرودينغر :

تعتبر معادلة شرودينغر مهمة في الدراسة الكمية للنظام الكوانتي للبلورات كما تعد المبدأ الأساسي والمطلق لهذه الدراسات ، كما يوصف النظام الجسيمات ( ايونات + الكترولونات ) المتفاعلة:

$$H\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) = E\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N)$$

الجملة المؤلفة من الطاقة حركية لكل الجسيمات وطاقة التفاعل فيما بينها . إذا المهميلتونيان الكلي للجملة يمكن مؤلف من هاتين الطاقتين وعند إقصاء طاقة التفاعل مع الوسط الخارجي لهاته الجملة ، أي عند غياب الحقل الخارجي المهميلتونيان يكتب :

$$H = T_e + T_N + V_{ee} + V_{eN} + V_{NN}$$

أين :

$$T_e = - \sum_i^n \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 \text{ : الطاقة الحركية للإلكترونات.}$$

$$T_N = - \sum_\alpha^N \frac{\hbar^2}{2M} \nabla_\alpha^2 \text{ : الطاقة الحركية للأنوية.}$$

$$V_{n-N} = - \sum_{i,\alpha} \frac{Z_\alpha e^2}{|r_i - R_\alpha|} \text{ : الطاقة الكامنة لتفاعل إلكترون نواة.}$$

$$V_{e-e} = \frac{1}{2} \sum_{i,j \neq i} \frac{e^2}{|r_i - r_j|} \text{ : الطاقة الكامنة للتفاعل بين الإلكترونات.}$$

$$V_{N-N} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha,\beta \neq i} \frac{Z_\alpha Z_\beta}{|R_\alpha - R_\beta|} \text{ : الطاقة الكامنة للتفاعل بين الأنوية.}$$

المعاملات  $i$  و  $j$  خاصة بالإلكترونات. و المعاملات  $\alpha$  و  $\beta$  خاصة بالأنوية.

$M$  و  $m$  كتل الأنوية والإلكترونات على الترتيب. و  $Z$  العدد الشحني للأنوية.

$i$ . والنواة  $\alpha$ : المسافة بين الإلكترون  $|r_i - R_\alpha|$

$|r_i - r_j|$  : المسافة بين الإلكترونين  $i$  و  $j$ .

$\alpha$  و  $\beta$  : المسافة بين النواتين  $|R_\alpha - R_\beta|$

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

في حالة السكون معادلة شرودينغر تكون مستقلة على الزمن :

$$H\psi(\vec{r}_1, R) = E\psi(\vec{r}_1, R)$$

دالة الموجة وتتعلق بكل مواقع الجسيمات (الكترونات + انويه)،  $E$  تمثل القيم الذاتية الموافقة لدالة الموجة

$\psi$  بحيث تمثل معادلة شرودينغر لـ  $N$  ذرة تحتوي  $(Z+1)N$  متغير مثلا عند  $Z=33$  في  $1 \text{ سم}^3$  يصبح لدينا

$6.14 \times 10^{25}$  مجهول تقريبا . أي المعادلة شرودينغر مستحيلة الحل لذا وضعت عدة تقريبات لتبسيط هذه المعادلة نذكر منها

• تقريب الاديايتيكي :

بأخذ بعين الاعتبار الاختلاف الكبير بين الكتل الالكترونات وكتل الانوية . بحيث أن كتلة الإلكترون اقل بكثير من

كتلة النواة أي يعني بإهمال الطاقة الحركية للنواة بصيغة أخرى باعتبارها ساكنة أما الإلكترون وبأخذ حد تفاعل الانوية فيما بينها

$$T_{NN} = 0 \quad \text{و} \quad V_{NN} = \text{cet} \quad \text{ثابت. اي :}$$

أي يصبح اهميلتونيان الكلي المؤلف للجمله من هميلتونيان الكتروني و تفاعل نووي على الشكل :

$$H = V_{NN} + H_e$$

$$H_e = T_e + V_{ee} + V_{eN}$$

إذا معادلة شرودينغر للالكترونات هي :

$$H_e \psi = (V_{Ne} + V_{ee} + T_{Ne}) e \psi (r_0, R)$$

وهذا الأخير لايمكن حلها بالطرق الرياضية المعروفة لذلك يستخدم تقريب آخر يسمى تقريب هاتري - فوك .

• تقريب هرتري-فوك :

• تقريب هرتري :

في هذا التقريب يهمل حد التفاعل إلكترون - إلكترون أي يعتمد على نموذج الإلكترون المستقل (المنفرد) في البداية

بحيث تكتب دالة الموجة الكلية للجمله كجداء الدوال الحالة لكل الالكترونات على الشكل :



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

وتكتب الطاقة الكلية للجملية كمجموع الطاقات الموافقة لكل حالة الكترونية كالتالي :

$$E = \sum E_i$$

ومنه تصبح المعادلة شرودينغر للإلكترون تصبح :

$$H\psi_i(r, R) = E \psi_i(r, R)$$

ومع العلم أن الإلكترون في حالة تفاعل دائم ، وبإدخال حد التفاعل الإلكترون-إلكترون يصبح الهاميلتونيان على الشكل التالي :

$$H_e = -\sum \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 + \frac{1}{4\pi\epsilon} \sum_{i,j} -\frac{z.e^2}{|r_i - R_j|} + \frac{1}{4\pi\epsilon} \frac{1}{2} \sum_{i,j \neq i} \frac{e^2}{|r_i - R_j|}$$

$$H_e = H_i + H_{ij}$$

$$H_i \psi_n^e = E_n^e \psi_n^e$$

وتعطي الطاقة الكلية للجملية بـ

$$E_n = \frac{\langle \psi_n^e / H_e / \psi_n^e \rangle}{\langle \psi_n^e / \psi_n^e \rangle}$$

بإدخال حد التعامد نجد :

$$E_n = \sum_i \langle \psi_i / H_i / \psi_i \rangle + \frac{1}{4\pi\epsilon} \frac{1}{2} \sum \langle \psi_i \psi_j / \frac{1}{|r_i - r_j|} / \psi_i \psi_j \rangle$$

هذه الحلول تمثل القيمة المتوسطة للطاقة لاختيار كفي لـ  $\psi_i$  حسب مبدأ التغير

• تقريب هارترى فوك :

احتمال لوضع  $N$  إلكترون على  $N$  موضع  $N!$  يعتمد هذا التقريب على ادخال مبدأ الـ spin لنظام الإلكترونات بحيث توجد

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

مثلا أول إمكانية هي :

$$\psi_1(r_1)\psi_2(r_2)\psi_3(r_3) \dots \dots \dots \psi_N(r_N)$$

وثاني إمكانية هي :

$$\psi_1(r_1)\psi_3(r_2)\psi_2(r_3) \dots \dots \dots \psi_N(r_N)$$

$N!$  عند تطبيق كل التبادلات نحصل على

حد من نفس النوع ودالة الموجة هي مجموع كل الحدود مع الاخذ بعين الاعتبار الاشارتين (+) و (-) لتصحيح بشكل محدد :

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) = \frac{1}{N!} \begin{vmatrix} \psi_1(r_1) & \dots & \psi_N(r_1) \\ \psi_1(r_2) & \dots & \psi_N(r_2) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_1(r_N) & \dots & \psi_N(r_N) \end{vmatrix}$$

وهناك نظريتين تعتمد عليهما كثافة الحالة التابعة ألا وهي نظرية توماس-فارمي و نظرية هوهنبارغ-كوهن .

### ● نظرية توماس-فارمي

بحيث اعتبر الإلكترون اللامتجانس للغاز وكأنها للإلكترونات للغاز المتجانس ، أي قامة بدراسة الطاقة الكلية للغاز الإلكتروني اللامتجانس كدالة لكثافة الإلكترونات المعروفة لغاز متجانس وذلك بإجراء عدة تقسيمات عنصرية على منطقة بريلوين حيث عند آخر تقسيم تعتبر الكثافة الإلكترونية ثابتة في كل منطقة من مناطق المقسمة إذن تكتب الطاقة الكلية للنظام  $E$  على الشكل :

$$E = \int \epsilon_i[\rho(r)] dr$$

$$\rho = \frac{1}{3\pi^2} \left( \frac{2me}{\hbar^2} \right)^{2/3} E_f^{3/2}$$

تعطى كثافة الغاز المتجانس بـ

$$T = \frac{3}{5} \rho E_f$$

كما نعلم ان الطاقة الحرة لغاز متجانس هي

$$T = \frac{3}{5} \frac{\hbar^2}{2me} (3\pi^2)^{2/3} \rho^{5/3} \text{ و } E_f = \frac{\hbar^2}{2me} (3\pi^2)^{2/3} \rho^{5/3}$$

ومنه الطاقة الحركية لتوماس - فارمي هي :

$$T_{TF} = \int T dr \Rightarrow T_{TF} = \frac{3}{5} \frac{\hbar^2}{2me} (3\pi^2)^{2/3} \int \rho^{5/3} dr$$

نظرية توماس - فارمي تختص فقط لكثافة الالكترونات لا تأخذ بعين الاعتبار ارتباط الالكترونات ومنه الطاقة الكلية لنظام

الالكترونات في تقريب توماس - فارمي تأخذ الشكل التالي :

$$T_{TF} = \frac{3}{5} \frac{\hbar^2}{2me} (3\pi^2)^{2/3} \int \rho^{5/3} dr + \int V(r) \rho(r) dr + \frac{1}{2} \int \frac{\rho(r)\rho(r')}{|r-r'|} dr dr'$$

• هوهانبرغ كوهن :

بمجرد اخذ الطاقة الكلية للنظام الالكترونات المتفاعلة في كمون الخارجي (كمون الانوية) هو دالة الوحيدة لكثافة

الإلكترون  $\rho$  بحيث :

$$E = \rho E(r)$$

وذلك برهان على أن الحالة الأساسية للجسيمات هي الكثافة التي تعطي الحد الأدنى بحيث وضع كل الخصائص الحالة الأساسية

هي الدالة لكثافة الالكترونات كالتالي :

$$E(\rho_0) = \text{Min} \rho E(r)$$

بمجرد تعطي دالة الطاقة :

$$E = (\rho) = \langle (\psi/H)/\psi \rangle$$

$$= F_{HK} + \int V_{ext}(r)\rho(r)dr$$

بحيث :

$$E_{HK}(\rho) = \langle \psi/T + U/\psi \rangle$$

U, T هما كمونا التفاعل والطاقة الحركية للإلكترون باستخدام تقريب هارترتي نجد

$$F_{HK}(\rho) = \frac{1}{2} \iint 2 \frac{\rho(r)\rho(r')}{|r-r'|} dr dr' + G(\rho)$$

G(ρ) هي الطاقة الحركية للإلكترون زائد الفرق بين طاقة التفاعل الحقيقي وطاقة التفاعل هارترتي

• معادلة كوهن - شام :

بحيث استخدمنا مبدأ التغير للحصول على طاقة الحالة الأساسية فافتراضا على أن الكثافة الالكترونيات كمجوع كثافة

الجسيمات بحيث تعطى كثافة الاحتمال تواجد الشحنة ب:

$$\rho(r) = \sum \psi^*(r)\psi(r)$$

دالة الطاقة الكلية للإلكترون  $E_e(\rho)$  و  $E_{HK}(\rho)$  طاقة هارترتي - فوك تعطى ب :

$$T = E_e + V$$

$$E_{HK} = T_0 + (V_H + V_X)$$

حيث  $T_0$  الطاقة الحركية للجسيمات في حالة تفاعل .

V كمون التفاعل إلكترون - إلكترون.

$V_H$  كمون هارترتي .

$$V_X = V - V_H \text{ كمون التبادل الإلكترون والذي يعرف ب}$$

$V_C = I I_0$  كمون ارتباط الإلكترون والذي يعرف بـ  $V_C$

إذن الدالة  $F_{HK}$  هي :

$$F_{HK} = T + V + T_0 - T_0$$

$$= T_0 + V_H + (V_X + V_C)$$

$$V_{XC} = V_X + V_C \text{ كمون تبادل ارتباط}$$

والطاقة الكلية هي :

$$E(\rho) = T_0(\rho) + V_H + V_X + V_{EXT}(\rho)$$

من خلال ما سبق من تفسيرات تكون معادلة كوهان - شام الآتي :

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

• **حلل معادلة كوهان - شام :**

بحيث تركز طرق الحساب بنية عصابات الطاقة على (DFT) وترتيب حسب استخداماتها . كثافة - كمون - مدارات

كوهان - شام - طريقة LAPW-PF تعتمد على مدارات كوهان - شام .

إذ أن الدالة الموجة الأساسية هي:

$$\psi_I(r) = \sum C_{i\alpha} \varphi_\alpha(r)$$

$C_{i\alpha}$  هي معاملات نشر لدالة الموجة.

• **تقريب كثافة الموضع (LDA) :** تقريب كثافة الموضع هو باعتبار نظام إلكترون اللامتجانس , موضعيا متجانس

. وتعطى طاقة تبادل - ارتباط :

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

وباستعمال مبدأ Spin :

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

بحيث  $\varepsilon_{xc}$  تنقسم الى قسمين :

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

أين

$\varepsilon_x(\rho)$ : تمثل طاقة التبادل و  $\varepsilon_c(\rho)$  : تمثل طاقة الارتباط.

التابع  $\varepsilon_{xc}$  يمكن أن يكون ثابت.

### • تقريب تدرج المعمم (GGA) :

وهو تقريب استخدم من اجل تكملة بعض النقاىص لم يستطيع التقريب LDA التوصل إليها. بحيث تصحيحات المستخدمة حاليا أخذت بعين الاعتبار تغير الكثافة الالكترونات  $\rho(r)$  عبر التدرج  $\nabla\rho(r)$ . أي أن النتيجة المتحصل عليها في التقريب كثافة الموضع LDA تعيد ترجمتها كسلسلة تايلور في التقريب التدرج المعمم (GGA) بحيث الطاقة في التدرج المعمم تعطى بالشكل التالي:

$$E_{xc}^{GGA}(\rho) = \int \varepsilon_{xc}(\rho(\vec{r}), \nabla\rho(\vec{r})) d^3\vec{r}$$

وهذه الشروح تم من خلال العمل بالكمونات التالية :

### • طريقة كمون كل إلكترونات:

على عكس كمون الكاذب الذي يختص إلا الالكترونات التكافؤ ، فان كمون كل الكترونات يأخذ كل الكترونات النظام في الحساب كما تستخدم هذه الطريقة من اجل إيجاد المعلومات المحتواة حول منطقة النواة المتعلقة بالحقول الفائقة الدقة وإثارة مستويات الداخلية ومن أهم البرامج المستخدمة للحساب بهذه الطريقة هي :

1- CRYSTAL

2- WIEN2K

## • طريقة الكمون الكاذب :

إن من أهم الدراسات التي تختص في دراسة الخصائص الفيزيائية والكيميائية تنصب بشكل كبير على الالكترونات التكافؤ (الكترونات المدار الخارجي) و لا تهتم بالالكترونات الطبقات الداخلية كما أنها لا تتأثر بتغيرات الوسط ولا تشارك في الروابط الكيميائية .ومن هذا المبدأ جاءت فكرت الكمون الكاذب والتي تدرس الكترونات التكافؤ لنظام الذرة ,جزئي ,بلورة دون أن تراعي الكترونات الداخلية لأنها ليست بضرورية لحساب الخصائص الفيزيائية والكيميائية ,فعند دراسة في الدالة الموجية نلاحظ أن الالكترونات تقسم أي تفصل إلى قسمين ,الكترونات التكافؤ (الكترونات المدار الخارجي لذرة ) والالكترونات الداخلية (المتواجدة في المدارات الداخلية للذرة ) بحيث من أهم البرامج المستخدمة للكمون الكاذب أو ما يطلق عليه كمون الزائف :

1- SIESTA

2-ABINIT

3-VASP

## ملخص:

يتمثل عملنا هذا في الحساب الخصائص البنوية و الطاقوية ، الالكترونية و المغناطيسية لعناقيد الزنيخ ( $As_{n+1}$  ( $n=1-16$ ) و عناقيد الزنيخ المطعمة بالكروم ( $CrAs_n$  ( $n=1-10$ )). وله تطبيقات واستخدامات واسعة النطاق في مجال الكترونيات الضوئية وتكنولوجيا النانو . استعملنا لذلك برنامج SIESTA الذي يركز على تقريب الكمون الزائف كأساس لحل معادلات كوهان-شام ضمن نظرية الكثافة التابعة DFT و معتمدين تقريب التدرج المعمم GGA و النتائج المتحصل عليها متوافقة مع النتائج التجريبية والنظرية وتبين ان الخصائص العناقيد تختلف خصائص البلور وان الكروم له دور في ذلك .

الكلمات المفتاحية: عناقيد  $As_{n+1}$  و  $CrAs_n$ , برنامج SIESTA , تقريب GGA .

## Résumé :

L'objectif de notre travail est calculer les caractéristiques structurelles et énergétique et électroniques et magnétiques des l'arsenic clusters de  $As_{n+1}$  ( $n = 1-16$ ) de l'arsenic dopé du chrom  $CrAs_n$  ( $n = 1-10$ ). à raison de ses larges applications et utilisations dans le domaine de l'électronique et optoélectronique et nanotechnologie. Les simulations sont effectuées par le code SIESTA, qui est basé sur une approximation de pseudo-potentiel comme base pour résoudre des équations de Cohan -Cham dans la théorie de DFT. en utilisant approximation accréditée du gradient de généralisé GGA . Les résultats obtenus sont en accord avec les résultats expérimentaux et théoriques, et montre que .les caractéristiques des clusters sont différence .celle que .cristeux dont le chrom Cr jour le rode .

**Mots clés:** clusters  $As_{n+1}$ ,  $CrAs_n$ , programme SIESTA, rapprochement GGA rapprochement LDA.

## Abstract:

The aim of this work is to compute the structural of energitic , electronic et magnetic  $As_{n+1}$  arsenic and characteristics of arsenic clusters ( $n = 1-16$ ) and arsenic doped chrom eleesters  $CrAs_n$  ( $n = 1-10$ ).for their wid applications and uses in electronics ,optoelectronicsand nanotechngy.field .the Simulations are performed. by SIESTA code , which is based on a pseudo-potentiel approximation as a basis for solving Cohan-Cham equations in DFT theory. We use approximation of the generalized gradient GGA .The results obtained are in agreement with the experimental and theoretical results , and show That the clusters caractéristiques are différents .the cristale ones ,in some which the chrom is responsible .

**Keywords:**  $As_{n+1}$ ,  $CrAs_n$  clusters, SIESTA program approximation GGA approximation LDA.