



الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية

وزارة التعليم العالي والبحث العلمي

جامعة قاصدي مرباح ورقلة

كلية الرياضيات وعلوم المادة

قسم الفيزياء

مجال: علوم المادة

شعبة: الفيزياء

تخصص: فيزياء طبية

مذكرة ماستر مهني

مقدمة من طرف الطالبتين: بن ساسي بلقيس، بن حاجة إكرام

بعنوان:

دراسة باستعمال نظرية الكثافة التابعية DFT لنقل فانق يستعمل في جهاز الرنين
المغناطيسي

نوقشت يوم 2024/06/12 أمام لجنة المناقشة المكونة من:

رئيسا	جامعة قاصدي مرباح – ورقلة	أستاذ محاضر ب	لمقدم سمية
مناقشا	جامعة قاصدي مرباح – ورقلة	أستاذ تعليم عالي	بن طويلة عمر
مشرفا	جامعة قاصدي مرباح – ورقلة	أستاذ محاضر أ	بوعدة/ حسين إيمان

الموسم الجامعي 2023/2024

الإهداء

قال تعالى ﴿ قُلْ اَعْمَلُوا فَسَيَرَى اللهُ عَمَلَكُمْ وَرَسُولُهُ وَالْمُؤْمِنُونَ ﴾

الحمد لله

الذي مآ تمَّ جُهْدٌ إِلَّا بِعَوْنِهِ وَمَا خَيْمَ سَعْيِي إِلَّا بِفَضْلِهِ وَمَا اسْتُسْهِلَ سَبِيلُ إِلَّا بِتَوْفِيقِهِ

الى خاتم الأنبياء خير خلق الله صلوات ربي وسلامه عليه

محمد رسول الله

الى سكان قلبي ..

الى سندي ، بطلي الأوحد واستقامة ظهري .. أبي الحبيب .. بارك الله في عمره

الى من لا توفيتها الكلمات حقها ، زمردتي ومهجة قلبي ، الى التي كانت دعواتها سبيل نجاحي .. أمي الغالية .. حفظها الله

الى أحبتي ، جيشي الخفي .. إخوتي .. عبد القدوس ، مارية ، عربية ، هديل ، سعد محمد باي .. حفظهم الله

الى رفيقات الدرب وهبات الله لي .. صديقاتي .. أمانى وشيماء وأميمة

الى التي تشاركت معها عناء وتعب انجاز هذه المذكرة شريكتي وزميلتي .. بن حاجة أكرام .. انار الله دربها بالعلم والإيمان

الى الذين كان لهم الفضل في إتمام مشواري الدراسي بعلمهم وتعليمهم .. اساتذتي .. كل باسمه

الى زميلاتي وزملائي في الدراسة وكل من كان له فضل علي ..

اليكم اهدي هذا العمل

بلقيس

الإهداء

قال تعالى: "وأخر دعواهم أن الحمد لله رب العالمين"

الحمد لله الذي ما انتهى درب ولا ختم جهد ولا تم سعي الا بفضلله وتوفيقه

الى من بلغ الرسالة وأدى الأمانة خير خلق الله محمد صلى الله عليه وسلم

الى سندي في الحياة . . . الى من أحمل اسمه بكل افتخار . . . أبي الغالي حفظه الله ورعاه

الى هديتي من الله . . . من كان دعاؤها سر نجاحي . . . الى التي مهما قلت فيها لن أوفيتها حقها

أمي حبيبتي حفظها الله

الى زهرات قلبي اخواتي الغاليات حسيبة، سمية، نسبية وأنيسة .

الى من وهبني الله نعمة وجودهم في حياتي . . الى العقد المتين إخوتي محمد الفاتح، محمد علي ومحمد رياض .

الى من كاتفتني ونحن نشق الطريق معا نحو النجاح في مسيرتنا العلمية . . الى رفيقة دربي وزميلتي . . بن ساسي بلقيس . .

حفظها الله وبارك فيها .

الى صديقاتي وزميلاتي في الدراسة

الى كل من ساعدني من قريب او بعيد في اتمام مسيرتي الدراسية

سائلة المولى أن يجزي الجميع خير الجزاء

اليكم أهدي هذا العمل

إكرام

الشكر

ما كان التوفيق بيّتا نسكنه، ولا شخصا نعاشره ولا ثوبا نرتديه . . التوفيق غيث إن أذن الله بهطوله على حياتنا ماشقيناً أبداً، فالحمد والشكر لله إن وفقنا سبحانه وتعالى لإنجاز هذا العمل ويسر لنا البدايات وأكمل لنا النهايات وبلغنا الغايات ، الحمد لله الذي بنعمته تتم الصالحات .

تقدم بخالص الشكر والتقدير الى الأستاذة المشرفة الدكتوراة "بوعزة/حسين ايمان" لإشرافها على هذا البحث وعلى مجهوداتها المبذولة بكل اخلاص وصبر، وعلى ارشاداتها وتوجيهاتها لنا لإخراج البحث بالمستوى المطلوب .

حفظها الله وجعلها ذخرا للطلبة العلم

ويسرُّنا أيضاً أن نشكر أعضاء لجنة المناقشة الأستاذة لمقدم سمية رئيساً والأستاذ بن طويلة عمر ممتحناً على قبولهم مناقشة مذكرة تخرجنا

وجزيل الشكر والامتنان لكل من أسهم وساعد في إتمام هذا العمل من القريب أو البعيد وحتى ولو بالدعاء .

بارك الله فيكم وجزاكم عنا كل خير

بلقيس وكرام

فهرس المحتويات	
الصفحة	العنوان
I	إهداء بن ساسي بلقيس
II	إهداء بن حاجة إكرام
III	الشكر
IV	فهرس المحتويات
VI	قائمة الأشكال
VII	قائمة الجداول
01	مقدمة
الفصل الأول: نظرية الكثافة التابعية DFT وبرنامج Wien2k	
03	تمهيد
03	1.1. معادلة شرودينجر
05	2.1. تقريب لورين-اوبن هامبر
05	3. I نظرية الكثافة التابعية (Density Function Theory) DFT
06	1. 3. I نظرية هوهنبرج-كوهن Hohenberg-Kohn
07	2. 3. I معادلة كوهن-شام Kohn-Sham
09	1.2. 3. I تقريب كثافة الموضوع LDA (Local Density Approximation)
09	2.2. 3. I تقريب التدرج المعمم (Generalized Gradient Approximation)
10	3. 3. I 3 حلول معادلة كوهن-شام Kohn-Sham
10	4. 3. I أهمية نظرية DFT في البحث العلمي
11	4.1. برنامج WIEN2K
12	1.4.1. مميزات برنامج Wien2K
الفصل الثاني: جهاز التصوير بالرنين المغناطيسي MRI	
14	تمهيد
14	1.II. جهاز التصوير بالرنين المغناطيسي MRI (Magnetic resonance imaging machine)
14	1.1. II التعريف بالجهاز
15	2.1. II مكونات جهاز MRI
15	1.2.1. II المغناطيس
16	2.2.1. II لفائف التدرج
16	3.2.1. II لفائف الترددات اللاسلكية (هوائيات الترددات الراديوية) Radio frequency antennas
16	4.2.1. II لفائف شيم (Shim coils)
17	5.2.1. II جهاز كمبيوتر
17	6.2.1. II وحدة التحكم عن بعد

17	7.2.1. II . سرير الفحص
18	3.1.1.II . مبدأ عمل جهاز MRI
18	1.3.1. II . العزم المغناطيسي
18	2.3.1.II . سلوك البروتونات
20	3.3.1.II . تردد لارمور
20	4.3.1. II . إشارة الرنين المغناطيسي
22	5.3.1.II . صورة الرنين المغناطيسي
23	2.II . النواقل الفائقة Superconductor
23	1.2.II . مواد فائقة التوصيل منخفضة الحرارة (Low temperature superconductor)
24	2.2.II . مواد فائقة التوصيل عالية الحرارة (High temperature superconductor)
24	3.2.II . أهمية استخدام النواقل الفائقة في جهاز الرنين المغناطيسي
25	4.2.II . المركب فائق التوصيل CaB_2
26	1.4.2.II . الخصائص المميزة للمركب CaB_2
الفصل الثالث: المناقشة والنتائج	
28	تمهيد
28	1.III . إنشاء ملف البنية الرئيسي
30	2.III . تهيئة الحساب
30	3.III . الخواص البنوية
30	3.III . 1. تحسين حجم البنية وحساب ثوابت الشبكة
32	4.III . الخواص الالكترونية
32	1.4.III . عصابات الطاقة
32	2.4.III . كثافة الشحنة الإلكترونية
34	3.4.III . كثافة الحالات DOS
34	1.3.4.III . كثافة الحالات الكلية
34	2.3.4.III . كثافة الحالات الجزئية
39	خاتمة
41	قائمة المصادر والمراجع

قائمة الأشكال

الصفحة	رقم الشكل وعنوانه
15	الشكل (II - 1): أنواع جهاز الرنين المغناطيسي
16	الشكل (II - 2): رسم تخطيطي للهيكل الداخلي لمكونات جهاز MRI الأساسية
17	الشكل (II - 3): مخطط تركيب مكونات جهاز التصوير بالرنين المغناطيسي
18	الشكل (II - 4): الحركة الدورانية للبروتون (العزم المغناطيسي)
19	الشكل (II - 5): سلوك البروتونات في الحالة الطبيعية
19	الشكل (II - 6): سلوك البروتونات عند تطبيق مجال مغناطيسي خارجي B_0
19	الشكل (II - 7): المحصلة النهائية في اتجاه المجال المغناطيسي
21	الشكل (II - 8): حالة الاتزان للبروتونات
21	الشكل (II - 9): حالة الاستثارة من المغنطة الطولية الى المغنطة العرضية
25	الشكل (II - 10): استبدال ذرات المغنيزيوم Mg بذرات الكالسيوم Ca في التركيب الذري للشكل السداسي البسيط للمركبين MgB_2 و CaB_2
25	الشكل (II - 11): عصابات الطاقة للمركبين (a) MgB_2 و (b) CaB_2
29	الشكل (III - 1): البنية البلورية للمركب $Ca_{0.75}Be_{0.25}B_2$
30	الشكل (III - 2): منحنى تغير الطاقة بدلالة الحجم للمركب $Ca_{0.75}Be_{0.25}B_2$
32	الشكل (III - 3): بنية عصابات الطاقة للمركب $Ca_{0.75}Be_{0.25}B_2$
33	الشكل (III - 4): كثافة الشحنة الإلكترونية للمركب $Ca_{0.75}Be_{0.25}B_2$
34	الشكل (III - 5): منحنيات الكثافة الكلية للمركبات $B, Be, Ca, Ca_{0.75}Be_{0.25}B_2$.
35	الشكل (III - 6): كثافة الحالات الكلية لذرات Ca وكثافة الحالات الجزئية لمداراتها s, p و d.
35	الشكل (III - 7): كثافة الحالات الكلية لذرات Ca وكثافة الحالات الجزئية لمستوى الطاقة d ومداراته الجزئية
36	الشكل (III - 8): كثافة الحالات الكلية لذرة Be والكثافة الجزئية لمداراتها s, p و d.
37	الشكل (III - 9): كثافة الحالات الكلية لذرات B والكثافة الجزئية لمداراتها s و p

قائمة الجداول	
الصفحة	رقم الجدول وعنوانه
23	الجدول (II - 1): أنواع صورة الرنين المغناطيسي لمقطع عرضي من الدماغ
29	الجدول (III - 1): احداثيات ذرات العينة $\text{Ca}_{0.75}\text{Be}_{0.25}\text{B}_2$
31	الجدول (III - 2): مقارنة ثوابت الشبكة للمركبات CaB_2 ، $\text{Ca}_{0.75}\text{Be}_{0.25}\text{B}_2$
37	الجدول (III - 3): مقارنة عدد الحالات $N(E_F)$ للمركبات CaB_2 ، $\text{Ca}_{0.75}\text{Be}_{0.25}\text{B}_2$ ، $\text{Ca}_{0.75}\text{K}_{0.25}\text{B}_2$ ، MgB_2

المقدمة العامة

المقدمة العامة:

أصبح من الممكن استخدام التقنيات فائقة التوصيل في تطوير أنظمة التصوير الطبي عالية الدقة، مثل الرنين المغناطيسي مما يساهم في تحسين جودة الصور وبالتالي دقة التشخيص.

تعتمد أجهزة الرنين المغناطيسي في تصميمها على مغناط تنتج مجالات مغناطيسية قوية، من بينها المغناطيس فائق التوصيل الذي يركز بدوره على مركبات تتميز بحالة الناقلية الفائقة عند درجات حرارة حرجة عالية، كمركب ديبوريد المغنيزيوم MgB_2 ، مما جعل الدراسات الحديثة تفتح مجالات واسعة للتعرف على مركبات مشابهة لها، مثل الناقل الفائق المركب ثنائي بوريد الكالسيوم CaB_2 المعتمد عليه في الدراسة البحثية لهذه المذكرة أين تمّ تطعيمه بعنصر البيريليوم Be بنسبة 25% بهدف تحسين المركب وبالتالي إمكانية استخدامه في تطوير أجهزة التصوير بالرنين المغناطيسي.

تمت الدراسة البحثية بواسطة أهم نظريات الفيزياء الحديثة والمتمثلة في نظرية الكثافة التابعية Density Function Theory (DFT)، التي توفر طريقة حسابية بسيطة وفعّالة لتحديد حالة النظام الكمي بالكامل من خلال تحديد الكثافة الإلكترونية فقط، وذلك اعتماداً على أهم البرامج الحاسوبية Wien2k.

يتألف بحثنا من ثلاث فصول:

الفصل الأول قمنا فيه بدراسة نظرية الكثافة التابعية (DFT)، نشأتها، نظرياتها وأهم تقريباتها، كما تناولنا أهم برنامج يعتمد على هذه النظرية ألا وهو برنامج Wien2k.

وفي الفصل الثاني تطرّقنا الى التعريف بجهاز التصوير بالرنين المغناطيسي، مكوناته ومبدأ عمله من جهة، ومن جهة أخرى تناولنا مفهوم النواقل الفائقة وأهميتها في الجهاز مع ذكرنا لمركب دراستنا CaB_2 شبيه المركب فائق التوصيل MgB_2 .

أما في الفصل الثالث قمنا فيه بمناقشة النتائج المتحصل عليها في هذه الدراسة البحثية.

الفصل الأول:

نظرية الكثافة التابعية DFT وبرنامج

Wien2k

تمهيد:

تُعتبر معادلة شرودينجر من أكثر المعادلات تعقيداً في الفيزياء الكمومية، وقد واجهت العديد من الصعوبات والعوائق أبرزها العجز عن التعامل مع الأنظمة الكمومية الكبيرة والتي تحتوي على عدد كبير من الإلكترونات، مما دفع الباحثين إلى السعي لإيجاد طرق بديلة لحساب الخصائص الإلكترونية لهذه الأنظمة الكبيرة، ومن أهم ما قاموا بتطويره هو نظرية الكثافة التابعية DFT التي تعتمد على تقريبات أقل تعقيداً من معادلة شرودينجر وهذا يجعلها أكثر فعالية مع الأنظمة الكمومية المعقدة.

في هذا الفصل، سنقدم نظرة شاملة عن نظرية DFT، بدءاً من نشأتها ومروراً بأهم تقريباتها، وصولاً إلى أهميتها في البحث العلمي. كما سنتطرق إلى التعريف بالبرنامج المستعمل في دراستنا البحثية وهو برنامج WIEN2K.

1.1. معادلة شرودينجر:

تُعتبر معادلة شرودينجر للبلورة أساس أنظمة البلورات وحساب الطاقة الكلية لها. إذ تعطى بالشكل الآتي [2،1]:

$$\hat{H}\psi(r) = E\psi(r_1, r_2, \dots, r_N) \quad (1 - I)$$

حيث:

\hat{H} تمثل دالة هاملتون.

E تمثل الطاقة الكلية للنظام.

$\psi(r_1, r_2 \dots r_N)$ تمثل دالة الموجة وتتعلق بمواقع الجسيمات (أنوية، إلكترونات).

دالة هاملتون الكلي للنظام تتكون من الطاقة الحركية للجسيمات وطاقة التفاعل فيما بينها، وعند غياب الحقل الخارجي تكتب كما يلي [2،1]:

$$H = T_e + T_N + V_{e-N} + V_{e-e} + V_{N-N} \quad (2 - I)$$

يُمثل الحد الأول والثاني الطاقة الحركية للإلكترونات والأنوية على الترتيب وبقية الحدود تُمثل الطاقة الكامنة لتجاذب أيون-إلكترون تنافر إلكترون-إلكترون وتنافر أيون-أيون على التوالي.

حيث:

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

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

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

$$V_{e-e} = \frac{1}{2} \sum_{i,j \neq i} \frac{e^2}{r_i - r_j} \text{ : تمثل الطاقة الكامنة لتفاعل إلكترون-إلكترون.}$$

$$V_{N-N} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha,\beta \neq \alpha} \frac{Z_\alpha Z_\beta}{R_\alpha R_\beta} \text{ : تمثل الطاقة الكامنة لتفاعل نواة-نواة.}$$

فتصبح المعادلة (I - 2) كالتالي:

$$H = - \sum_i^n \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 - \sum_\alpha^N \frac{\hbar^2}{2M} \nabla_\alpha^2 - \sum_{i,\alpha}^N \frac{Ze^2}{r_i r_\alpha} + \frac{1}{2} \sum_{i,j \neq i} \frac{e^2}{r_i r_j} + \frac{1}{2} \sum_{\alpha,\beta \neq \alpha} \frac{Z_\alpha Z_\beta}{R_\alpha R_\beta} \quad (3 - I)$$

بحيث:

n, N : عدد الأنوية والإلكترونات

m, M : كتلة الأنوية و الإلكترونات.

R, Z : شحنة الأنوية وموقعها.

e, r : موضع وشحنة الإلكترون

i, j : معاملات تخصّ الإلكترونات.

α, β : معاملات تخصّ الأنوية.

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

$|r_i - r_j|$: المسافة بين إلكترونين.

$|R_\alpha - R_\beta|$: المسافة بين نواتين.

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

2.I. تقريب لورن-اوبن هايمر:

وَصَلَ هذا التَّقْرِيْبُ إِلَى أن الطاقَة الحركية للنَّوَاة تُعْتَبَرُ مُهْمَلَةٌ، وَذَلِكَ بِإِعْتِبَارِهَا سَاكِنَةٌ مُقَارَنَةً بِالْإِلِكْتْرُونَاتِ، بِسَبَبِ الْإِخْتِلَافِ بَيْنَ كُتْلِ الْأَنْوِيَةِ وَالْإِلِكْتْرُونَاتِ، حَيْثُ أَنَّ النَّوَاةَ أَثْقَلُ بِكَثِيرٍ وَبِالتَّالِيِ فَإِنَّ سُرْعَةَ الْإِلِكْتْرُونَاتِ أَكْبَرُ بِكَثِيرٍ مِنْ سُرْعَةِ النَّوَاةِ، أَيْ أَنَّ الطاقَة الحركية لها معدومة $T_N = 0$ ، وَبِالنَّسْبَةِ لِحَدِّ تَفَاعُلِ الْأَنْوِيَةِ فِيمَا بَيْنَهَا فَيُعْتَبَرُ ثَابِتًا $V_{N-N} = C^{te}$ [3].

بِمَا أَنَّ الطاقَة الحركية للنَّوَاة معدومة وَحَدِّ تَفَاعُلِ الْأَنْوِيَةِ فِيمَا بَيْنَهَا ثَابِتٌ يَتَبَقَّى لَدَيْنَا حَدِّ الطاقَة الحركية لِلْإِلِكْتْرُونِ، الطاقَة الكَامِنَةُ لِتَفَاعُلِ الْكْتْرُونِ-الْكْتْرُونِ وَالطاقَة الكَامِنَةُ لِتَفَاعُلِ الْكْتْرُونِ-أْيُونِ. إِذْنِ الْهَامَلْتُونِ الْكُلِّي لِلْجُمْلَةِ يَكُونُ كَالتَّالِيِ:

$$H = T_e + V_{e-e} + V_{e-N} \quad (4 - I)$$

ومنه تصبح معادلة شرودينجر:

$$(T_e + V_{e-e} + V_{e-N})\psi = E\psi \quad (5 - I)$$

تُعْتَبَرُ مُشْكَلَةُ الْجِسْمِ الْكَمِّيِّ الَّتِي تَمَّ الْحُصُولُ عَلَيْهَا بَعْدَ تَقْرِيْبِ لُورْنِ-أُوبِنِ هَايْمَرِ أَبْسَطِ مِنَ الْمَشْكَلَةِ الْأَصْلِيَّةِ وَلَكِنْ لَا يَزَالُ حَلُّهَا صَعْبًا لِلْغَايَةِ [3]. تَوْجَدُ طُرُقٌ أُخْرَى لِتَبْسِيطِ هَذِهِ الْمَشْكَلَةِ وَمِنْ بَيْنِهَا نَظْرِيَّةُ الْكثَافَةِ التَّابِعِيَّةِ

3.I. نظرية الكثافة التابعية (Density Function Theory) DFT:

دِرَاسَةُ نَظْرِيَّةِ الْكثَافَةِ التَّابِعِيَّةِ DFT هِيَ مَوْضُوعٌ شَائِعٌ فِي الْبَحُوثِ الْعِلْمِيَّةِ فِي مَجَالِ الْكِيمِيَاءِ الْحَدِيثَةِ وَالْفِيْزِيَاءِ، وَقَدْ حَقَّقَتْ قِصَّةَ نَجَاحٍ ضَخْمَةٍ فِي عِدَّةِ مَجَالَاتٍ. وُلِدَتْ نَظْرِيَّةُ DFT فِي بَحْثِ اسْتِنْتَائِيِ عَامِ 1964 بِقَلَمِ وَالتَّرِ كُوهِنِ (Walter Kohn) وَبِيِيرِ هُونْبِيرْجِ (Pierre Hohenberg)، حَيْثُ وَضَّحَا أَنَّهَا تَعْتَمِدُ عَلَى مَفْهُومِ الْكثَافَةِ الْإِلِكْتْرُونِيَّةِ كَمَعْلُومٍ أُسَاسِيٍّ لِحِسَابِ الْخِصَائِصِ الْإِلِكْتْرُونِيَّةِ لِلنَّظَامِ. تَمَّ تَطْوِيرُ النَظْرِيَّةِ لِأَوَّلِ مَرَّةٍ مِنْ قِبَلِ وَالتَّرِ كُوهِنِ وَلُويْسِ شَامِ فِي مَقَالٍ بِعَنْوَانِ " Inhomogeneous Electron Gas " الِذِي نُشِرَ فِي مَجَلَّةِ " Physical Review "، وَيُعْتَبَرُ هَذَا الْمَقَالُ هُوَ الْأَسَاسُ النَّظْرِيَّ لِنَظْرِيَّةِ الْكثَافَةِ التَّابِعِيَّةِ وَقَدْ أُسْهِمَ بِشَكْلِ كَبِيرٍ فِي تَقَدُّمِ حَقْلِ الْفِيْزِيَاءِ الْكَمُومِيَّةِ [4].

تَهْدَفُ نَظْرِيَّةُ تَابِعِيَّةِ الْكثَافَةِ إِلَى إِيجَادِ خِصَائِصِ الْحَالَةِ الْأَسَاسِيَّةِ لِنِظَامِ مُتَعَدِّدِ الْجِسْمِيَّاتِ، وَمِنْ بَيْنِ هَذِهِ الْخِصَائِصِ الطاقَة الْكُلِّيَّةِ لِلنَّظَامِ. وَلِتَحْقِيقِ هَذَا الْهَدْفِ تَمَّ التَّحَلِّيُّ عَنِ الدَالَةِ الْمَوْجِيَّةِ الْمَعْقَدَةِ لِلْعَدِيدِ مِنَ الْأَجْسَامِ،

والتي هي حل معادلة شرودينجر، لصالح الكثافة الالكترونية $\rho(r)$ التي تعتمد فقط على الإحداثيات المكانية الثلاثة (x,y,z) [5].

ونكتب الطاقة الكلية للنظام بالشكل التالي:

$$E = E(\rho) \quad (6 - I)$$

1.3.I. نظرية هوهنبيرج-كوهن (Hohenberg-Kohn):

تم إنشاء النظريتين الأساسيتين لنظرية DFT من قبل هوهنبيرج وكوهن وهما [6]:

النظرية الأولى:

تتضمن النظرية على أنّ الطاقة الكلية E لنظام متعدد الجسيمات (N إلكترون) في الحالة الأساسية تتعلق بالكمون الخارجي $V_{ext}(r)$ لأنوية وهي دالة وحيدة وفردية للكثافة الالكترونية $\rho(r)$ بالشكل التالي:

$$E(\rho) = F(\rho) + \int \rho(r) V_{ext}(r) dr^3 \quad (7 - I)$$

حيث: $F(\rho)$ هي دالة شاملة للكثافة الإلكترونية تعطى بالشكل التالي:

$$F(\rho) = T(\rho) + Ve-e[\rho(r)] \quad (8 - I)$$

$T(\rho)$: الطاقة الحركية

$Ve-e$: طاقة التفاعل إلكترون-إلكترون

النظرية الثانية:

تُقر هذه النظرية بأنه وفي حالة وجود كمون خارجي ثابت $V_{ext}(r)$ ، يمكن تحديد طاقة الحالة الأساسية E_0 عن طريق تقليل الطاقة الكلية للنظام $E(\rho)$. تُعرف كثافة الإلكترونات $\rho(r)$ التي تتوافق مع الحد الأدنى للطاقة بكثافة الحالة الأساسية ρ_0 .

حيث:

$$E_0 = E(\rho_0) = \min E(\rho) \quad (9 - I)$$

ومنه:

$$E(\rho_0) = \min [F(\rho_0) + \int \rho_0(r) V_{ext}(r) dr^3] \quad (10 - I)$$

رُغم كل ما تحمله النظرية من أهمية بالغة، إلا أنّها لا تحوي إجراءات كافية لحساب الطاقة E_0 انطلاقاً من كثافة الحالة الأساسية، ولا كيفية تحديدها دون تحديد دالة الموجة، لهذا قام العالمان كوهن وشام بتطوير النظرية ووضع نظرية تقريبية مساعدة.

2.3.I. معادلة كوهن-شام: Kohn-Sham

في عام 1965 قام العالمان كوهن وشام باقتراح فكرة وهي استبدال الطاقة الحركية للإلكترونات المتفاعلة بالطاقة الحركية لنظام غير متفاعل مكافئ [7]. بحيث لهما نفس كثافة إلكترون الحالة الأرضية لكن الكمون الخارجي مختلف [8].

وبالتالي فإنّ المعادلات عبارة عن إجراء عملي للحصول على كثافة الحالة الأرضية [3].

لدينا الطاقة الكلية للإلكترونات $E_e(p)$ ودالة هارترتي فوك E_{HF} .

$$E_e = T + V \quad (11 - I)$$

$$E_{HF} = T_0 + V_H + V_x \quad (12 - I)$$

بحيث:

T : الطاقة الحركية للجسيمات.

V : كمون تفاعل إلكترون-إلكترون.

T_0 : الطاقة الحركية لغاز الإلكترون الغير متفاعل.

V_H : كمون هارترتي.

V_x : كمون التبادل (تبادل الإلكترونات).

ب طرح المعادلة (12 - I) من المعادلة (11 - I) نحصل على كمون ارتباط الإلكترونات.

$$E_e - E_{HF} = T + V - \left[T_0 + \left(\frac{V_H + V_x}{V} \right) \right]$$

$$E_e - E_{HF} = T + V - T_0 - V$$

$$E_e - E_{HF} = T - T_0$$

$$V_c = T - T_0 \quad (13 - I)$$

V_c : كمون ارتباط الإلكترونات.

كمون التبادل موجود في حل هارترى فوك ولكن غائب في حل هارترى.

$$E_H = T_0 + V_H \quad (14 - I)$$

يمكن كتابته بالشكل:

$$V_x + V - V_H \quad (15 - I)$$

إذن تكتب دالة هارترى فوك F_{HK} كالتالي:

$$\begin{aligned} F_{HK} &= T + V + T_0 - T_0 \\ &= T_0 + V + \underbrace{T - T_0}_{V_c} \\ &= T_0 + V + V_c + V_H - V_H \\ &= T_0 + V_H + V_c + \underbrace{V - V_H}_{V_x} \\ &= T_0 + V_H + \underbrace{V_x + V_c}_{V_{xc}} \quad (16 - I) \end{aligned}$$

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

ومنه دالة الطاقة تكتب كالتالي:

$$E_{V_{ext}}[\rho] = T_0[\rho] + V_H[\rho] + V_{xc}[\rho] + V_{ext}[\rho] \quad (17 - I)$$

هاملتوني كوهن وشام:

$$\begin{aligned} \hat{H}_{KS} &= \hat{T}_0 + \hat{V}_H + \hat{V}_{xc} + \hat{V}_{ext} \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_i^2 \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int \frac{\rho(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d\vec{r}' + V_{xc} + V_{ext} \quad (18 - I) \end{aligned}$$

بحيث:

$$\hat{V}_{xc} = \frac{\delta V_{xc}[\rho]}{\delta \rho} \quad (19 - I)$$

إن كثافة الحالة الأرضية $\rho(r)$ للإلكترون:

$$\rho(\vec{r}) = \sum_{i=1}^N \phi_i(\vec{r})^* \phi_i(\vec{r}) \quad (20 - I)$$

ومعادلة كوهن وشام هي:

$$H_{KS} \phi_i = \epsilon_i \phi_i \quad (21 - I)$$

1.2.3.I. تقريب كثافة الموضع (Local Density Approximation): LDA

تم اقتراحه من قبل كوهن وشام، وهو أول تقريب لتبادل الطاقة ينص على أن قيمة كثافة الطاقة في أي نقطة في الفضاء يتم الحصول عليها من خلال كثافة الطاقة (طاقة تبادل ارتباط) لغاز الكترولون متجانس [9]. أي أنه اعتبار الأنظمة الإلكترونية العامة غير المتجانسة متجانسة موضعياً [7].

بحيث تعطى طاقة التبادل والارتباط في هذا التقريب كالتالي:

$$E_x^{lda}[\rho] = \int \rho(r) \epsilon_{xc}^{lda}[\rho] dr \quad (22 - I)$$

مع العلم أن طاقة تبادل ارتباط هي كالتالي:

$$\epsilon_{xc}(\rho) = \epsilon_x(\rho) + \epsilon_c(\rho) \quad (23 - I)$$

إن ما يُعادل LDA في الأنظمة المستقطبة الدورانية هو تقريب كثافة الدوران الموضعي Lsda

وتعطى كما يلي [7]:

$$E_{xc}^{lsda}[\rho \uparrow (r), \rho \downarrow (r)] = \int [\rho \uparrow (r) + \rho \downarrow (r)] \epsilon_{xc}[\rho \uparrow (r), \rho \downarrow (r)] dr \quad (24 - I)$$

ولتحسين تقريب كثافة الموضع نستعمل التدرُّج المعمَّم GGA

2.2.3.I. تقريب التدرج المعمم (Generalized Gradient Approximation) :GGA

هو إحدى الطرق المستخدمة في نظرية DFT، إذ يعمل على تحسين دقة النتيجة المتحصل عليها بتقريب LDA اعتماداً على تقدير تدرج الكثافة الإلكترونية $\nabla\rho(r)$ بشكل أكثر دقة.

$$(\rho) = \int F[\rho(r), \nabla\rho(r)] dr^3 E_{xc}^{GGA} \quad (25 - I)$$

3.3.I. حلول معادلة كوهن-شام: Kohn-Sham

مختلف الطرق في حساب بنية عصابات الطاقة مبدئياً على DFT، حيث أن ترتيبها يعتمد على استخدامها لكثافة الكمون ومدارات كوهن شام، ومن بين الطرق المستخدمة الطريقة الموجية المستوية المتزايدة خطياً FP-LAPW تعتمد على مدارات كوهن وشام. إذن فدالة الموجة الأساسية تكتب بالشكل التالي [10]:

$$\psi_i(r) = \sum C_{ia} \phi_a(r) \quad (26 - I)$$

حيث:

C_{ia} : تمثل معاملات النشر لدالة الموجة

ومنه حلول معادلة كوهن وشام هي:

$$(H - \epsilon_i) C_i = 0 \quad (27 - I)$$

H : هاملتونيان كوهن-شام

0: مصفوفة صفرية.

4.3.I. أهمية نظرية DFT في البحث العلمي:

أدت نظرية DFT الى إحداث تغييرات جذرية في علم المواد الحاسوبية، حيث لم تعد تقتصر النظرية فقط على دراسة خصائص المواد بل يمكن من خلالها أيضاً التنبؤ بمواد جديدة تماماً ذات خصائص محددة تساهم في تطوير تطبيقات مبتكرة في مجالات مختلفة مثل الطاقة، الإلكترونيات والطب.. الخ [11].

يُمكن اعتبار نظرية DFT أداة قوية وفعالة نوعاً ما في توفير فرص للبحث والابتكار وإيجاد حلول للتحديات العلمية والتكنولوجية الحديثة نظراً لما تتميز به من خصائص، بما في ذلك:

- المساهمة في الدراسات العميقة للظواهر الفيزيائية على المستوى الذري، وهذا يُساعد في تحليل وتصميم المواد.
 - سرعتها في إجراء الحسابات وفعاليتها مقارنة بالتقنيات التقليدية المعقدة في الحساب.
 - إمكانيةها في تقدير الخصائص البنيوية والالكترونية للمواد.
 - القدرة على التعامل مع الأنظمة الكمومية الكبيرة.
- يمكن تطبيق نظرية DFT انطلاقاً من تطبيقات حاسوبية وبرامج حسابية وبخطوات مختلفة، ومن بين هذه البرامج WIEN2K.

4.1. برنامج WIEN2K:

في إطار مشروع بحثي بهدف تطوير أداة حاسوبية متقدمة وحديثة من أجل دراسة الخصائص الإلكترونية للمواد الصلبة، طور فريق من الباحثين عام 1990 في جامعة فيينا في النمسا برنامج أطلقوا عليه اسم Wien (الاسم الألماني لفينا) نسبة للمكان الذي ظهر فيه، ومع التغييرات السريعة ظهرت إصدارات جديدة وهي wien93، wien95، wien97، نسبة لسنة نشرها، وفي عام 2000 تم إصدار البرنامج الأكثر استخداماً وهو wien2k المستمر الى يومنا هذا نظراً لسرعة أدائه ومميزاته .

يعتمد برنامج wien2k على نظرية الكثافة التابعية DFT باستعمال إحدى تقريباتها السابقة الذكر، حيث يركز مبدأ عمل البرنامج على طريقة الأمواج المستوية الخطية المتزايدة LAPW، ويعمل بشكل رئيسي في FORTRAN 90 تحت نظام تشغيل (LINUX) [12] ومؤخراً أصبح بالإمكان استعماله تحت نظام WINDOWS.

يضم برنامج WIEN2K عدّة برامج فرعية لحل العمليات الحسابية وهي:

NN: يعمل على حساب مسافة الجوار الأقرب بين الذرات مع شرط أن لا تتجاوز هذه المسافة بين ذرتين نصف قطريهما، وهذا باستخدام ملف case struct.

LSTART: يقوم بحساب ثابت الطاقة للذرات مع تحديد الكمونات الذرية، كما يسمح بإدخال الكثافة الإلكترونية للذرات وتحديد التعامل الأنسب مع مختلف الذرات لحساب بنية الحزم الإلكترونية.

SYMMETRY: وهو برنامج يُستخدم لتحديد التناظرات المختلفة في الشبكة البلورية، حيث يقوم بإجراء جميع عمليات التناظر لفضاء المجموعة.

KGEN: يسمح بإدخال النقاط K في منطقة بريلمان الأولى ويحدد عدد العناصر داخل المنطقة.

DSTART: يسمح بإنتاج كثافة الشحنة الإلكترونية للبلور الابتدائي بغرض إدخالها في الحلقة SCF عن طريق تركيب الكثافة الذرية الناتجة. أين تكون الحلقة SCF منسقة فيما يلي:

LAPW0: وفقا للكثافة يقوم بحساب الكمون الكلي.

LAPW1: يعمل على حساب عصابات التكافؤ، القيم والأشعة الذاتية لحلول معادلة شرودينجر.

LAPW2: حساب طاقة فيرمي انطلاقا من ملف cas.ector، حساب الكثافة الإلكترونية للتكافؤ من الأشعة الذاتية.

LCORE: يحسب الحالات شديدة الارتباط للكمون في الجزء الكروي.

MIXER: وهو برنامج فرعي يستعمل الكثافة الإلكترونية القلبية، الحالات النصف قلبية وحالات التكافؤ تخط لإنتاج الكثافة الكلية الجديدة.

1.4.I. مميزات برنامج Wien2K:

- يحتوي البرنامج على واجهة تطبيقية، كذلك يحتوي على صيغة أخرى حديثة وتتمثل في العمل مباشرة على الإنترنت أي إمكانية العمل في أي مكان تتواجد فيه.
- يتم العمل على برنامج WIEN2K بإدخال معطيات منها معاملات البنية البلورية ومواقع الذرات في البلورة ونوعها ثم القيام بتحديد اختيارات طريقة الحساب مثل شبه الكمون المستعمل ، دقة الحساب ثم تشغيل دورة SCF ومباشرة حساب الخصائص البنيوية و الإلكترونية.
- يقوم البرنامج برسم بعض المنحنيات تلقائيا مع إرفاقها بالبيانات اللازمة ثم تلقائيا يقوم باستنتاج المعاملات الفيزيائية بفضل قاعدة بيانات التي تحتوي على معلومات عناصر الجدول الدوري.
- إمكانية إرفاقه ببرامج كبرنامج XCeysDen الذي يسمح بمُشاهدة ثلاثية الأبعاد لبنية المادة والكثافة الإلكترونية.
- البرنامج غير مجاني لكن غير باهظ الثمن كالبرامج الأخرى مثل VASP وCastep [13].

الفصل الثاني:

جهاز التصوير بالرنين المغناطيسي MRI

تمهيد:

يُعد التصوير الطبي جزءاً مهماً وأساسياً في المجال الطبي والرعاية الصحية، حيث حقق تقدماً ملحوظاً على مدار السنوات الماضية، إذ يسمح بتشخيص الأمراض بشكل أفضل ويفتح آفاقاً نحو علاج العديد منها. يمثل التصوير الطبي مجموعة من التقنيات المتعددة والمختلفة والتي تجتمع في عملية توليد صور طبية لمختلف أجزاء الجسم. ومن بين تقنيات التصوير الطبي نذكر تقنية التصوير بالرنين المغناطيسي والتي تعتبر موضوعاً هاماً في العلوم الطبية والفيزيائية، حيث تساهم في تطوير التشخيص والعلاج والبحوث العلمية لفهم عمق عملية التشريح والوظائف الجسمية، وذلك من خلال توفير صور دقيقة ومفصلة لأعضاء الجسم والأنسجة الداخلية. وهي موضوع دراستنا البحثية في هذا الفصل، حيث سنتعرف على الجهاز الذي يعمل بهذه التقنية، مكوناته ومبدأ عمله، بهدف تحسين أداء الجهاز وتوفير تكاليف العلاج وضمان راحة أفضل للمرضى، وسنتطرق أيضاً للحديث عن النواقل الفائقة المستعملة في الجهاز وأهميتها في تحسين حدود استعمال الجهاز.

1.II. جهاز التصوير بالرنين المغناطيسي (Magnetic Resonance Imaging)

:MRI (Machine)

1.1. II. التعريف بالجهاز:

هو عبارة عن جهاز تصوير طبي تم اختراعه عام 1950 تقريباً، يستخدم تقنية الرنين المغناطيسي التي تمّ وصفها تاريخياً لأول مرة بواسطة العالمين الفيزيائيين **فليكس بلوخ (Felix Bloch)** و**ادوارد ميلز بورسيل (Edward Mills Purcell)** عام 1946، حيث كانت تسمى آنذاك تقنية الرنين المغناطيسي النووي وغيّر اسمها للرنين المغناطيسي فقط، نظراً للخوف الذي كان يعتري المرضى من كلمة النووي.

وهي تقنية تشخيصية غير جراحية تعتمد على المجالات المغناطيسية والإشعاع الكهرومغناطيسي لإنتاج صور ثنائية أو ثلاثية الأبعاد بدقة عالية لأجزاء مختلفة من جسم الإنسان، بهدف الكشف عن الأمراض والإصابات في الأعضاء الداخلية. ويعتبر جهاز الرنين المغناطيسي آمناً ولا يحتوي على أي نوع من الأشعة المؤينة أو الضارة، ويتواجد بعدة تصاميم وله أربعة أنواع الشكل (I - II) وهي: جهاز الرنين المغناطيسي المفتوح، المغلق، المتحرك، وجهاز الرنين المغناطيسي للأطراف (وهو جهاز مخصص لأجزاء محدّدة من الجسم كاليد والقدمين) [14، 15].



الشكل (II - 1): أنواع جهاز الرنين المغناطيسي [20].

II. 2.1. مكونات جهاز MRI:

يتكون جهاز التصوير بالرنين المغناطيسي من العناصر التالية [16] الشكل (II - 3):

II. 1.2.1. المغناطيس:

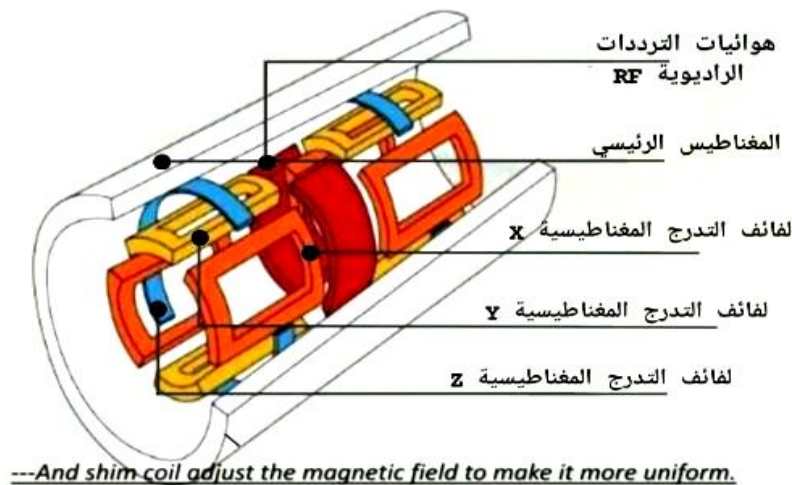
- هو الجزء الأساسي من الجهاز يُستخدم لتوليد وإنتاج مجال مغناطيسي قوي تصل شدته ما يزيد عن 2 تسلا (تسلا (T) هي وحدة قياس شدة المجال المغناطيسي) [17]. وتوجد ثلاث أنواع من المغناطيس وهي:
- 1. المغناطيس الدائم:** يتكون من مواد مُمغنطة بشكل دائم، إذ أنها لا تحتاج إلى كهرباء أو غازات مبردة كالهليوم السائل ولا نظام تبريد عند إنتاج مجال مغناطيسي. ومن بين عيوبها شدتها ووزنها.
 - 2. المغناطيس المقاوم:** يتكون من ملفات أسلاك كهربائية حيث عند تغذيتها بتيار كهربائي تُولّد مجال مغناطيسي. ومن بين عيوبها حاجتها بشكل كبير للكهرباء والتبريد.
 - 3. مغناطيس فائق التوصيل:** يستعمل مواد فائقة التوصيل والتي عند تعرّضها لدرجة حرارة منخفضة تفقد مقاومتها وذلك بهدف زيادة شدة المجال المغناطيسي. ومن بين عيوبها تكلفة الغازات المبرّدة.

II. 2.2.1. لفائف التدرج:

تُعد مجموعة لفائف التدرج أحد أهم المكونات الرئيسية في جهاز التصوير بالرنين المغناطيسي، إذ يختلف عددها اعتماداً على نوع الجهاز والتصميم الخاص به. عادة ما يكون هناك ثلاث لفائف تدرج (X، Y، Z) الشكل (II - 2) تعمل على توليد حقل مغناطيسي متغير بشكل تدريجي ومتسلسل، ولها القدرة على التصوير بشكل مباشر على طول المحاور (X، Y، Z) عن طريق تغيير الترددات المسبقة [18].

II. 3.2.1. لفائف الترددات اللاسلكية (هوائيات الترددات الراديوية) Radio frequency antennas:

وهي أحد المكونات الرئيسية في التصوير بالرنين المغناطيسي بحيث تعمل كجهاز إرسال فتيح إمكانية بث إشارة الإثارة (من المغناطيس إلى الجسم) وكذلك تعمل كجهاز استقبال فتقوم بتجميع الإشارة المنبعثة من الجسم في وقت الاسترخاء.



بالإضافة إلى لفائف شيم لضبط المجال المغناطيسي لجعله أكثر تجانساً

الشكل (II - 2): رسم تخطيطي للهيكل الداخلي لمكونات جهاز MRI الأساسية [18].

II. 4.2.1. لفائف شيم (Shim coils):

هي ملفات كهربائية تستخدم في الجهاز لتعديل تشوهات الحقل المغناطيسي بغرض تحسين جودة الصور المتحصل عليها، وتساعد أيضاً في تحسين دقة القياسات التي تجرى خلال الفحص [19].

II. 5.2.1. جهاز كمبيوتر:

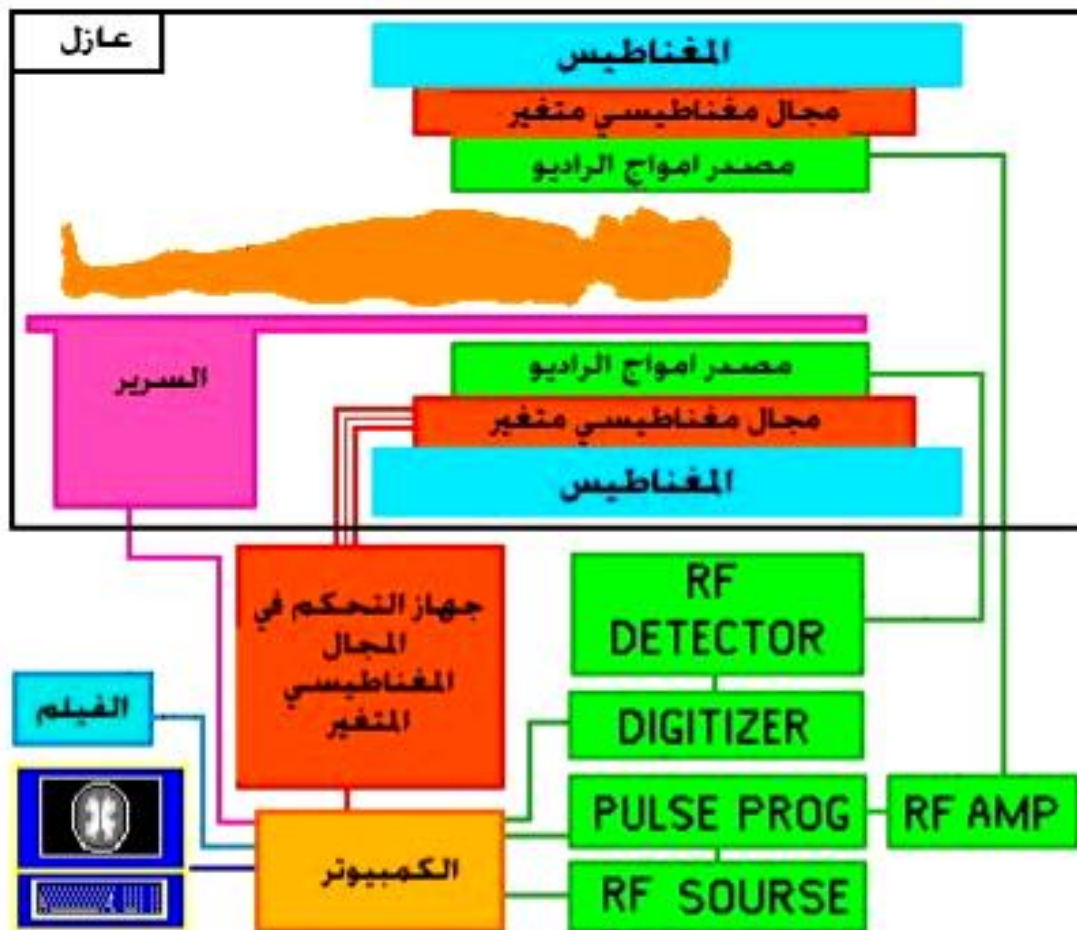
لمعالجة الإشارات وتحويلها الى صور ثلاثية وثنائية الأبعاد.

II. 6.2.1. وحدة التحكم عن بعد:

لتحديد متطلبات الفحص من مدة ودقة وغيرها.

II. 7.2.1. سرير الفحص:

أين يتم وضع المريض من أجل الفحص.



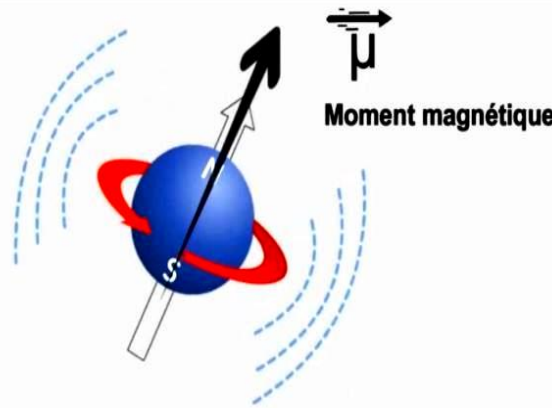
الشكل (II - 3): مخطط تركيب مكونات جهاز التصوير بالرنين المغناطيسي [17].

3.1.II. مبدأ عمل جهاز MRI:

عمل جهاز التصوير بالرنين المغناطيسي (MRI) يعتمد على تكنولوجيا الحقول المغناطيسية والموجات الكهرومغناطيسية لإنتاج صور دقيقة للأنسجة والأعضاء داخل الجسم. هذه التقنية تعتمد على مراقبة الرنين المغناطيسي لبروتونات ذرات الهيدروجين الموجودة بكثرة في أغلب الأنسجة والأعضاء نظرا لنسبة الماء التي تمثل 70% من جسم الإنسان. ثم إن شدة الإشارة الملتقطة تعتمد على زيادة تركيز البروتونات وزمن استرخاءها.

II 1.3.1. العزم المغناطيسي:

عُموما كل نواة لها شحنة تدور حول محورها النووي تُؤد ثنائي القطب المغناطيسي ويتم التعبير عنه بالعزم المغناطيسي ويرمز له $\vec{\mu}$ الشكل (II - 4)، وبروتونات ذرات الهيدروجين تتصرف كالمغناطيس نظرا للخصائص التي تميزها والمتمثلة في الشحنة الموجبة والحركة المغزلية (spin) [15].

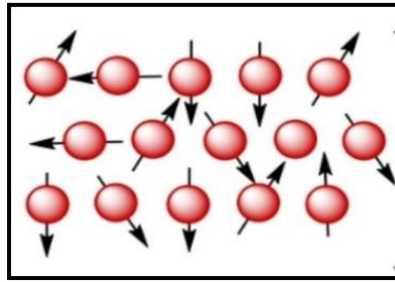


الشكل (II - 4): الحركة الدورانية للبروتون (العزم المغناطيسي) [15].

II 2.3.1. سلوك البروتونات:

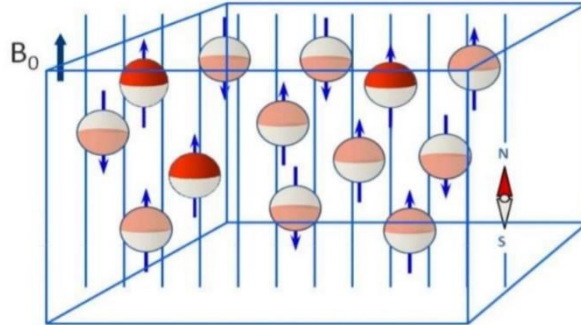
طبيعيا لا يوجد أي تأثير كلي للبروتونات في الجسم كونها تمثل مغناطيسات صغيرة لأنها تكون في اتجاهات مختلفة فتلغي بعضها البعض الشكل (II - 5)، ويمكننا القول أن مجموع العزم المغناطيسي الكلي للبروتونات يساوي الصفر، ولا يتم تسجيل أي إشارة عبر ملفات التردد اللاسلكية المشكلة للإشارة التي تسمح بالحصول على الصورة [20].

$$\sum \vec{\mu} = \vec{0} \quad (1 - II)$$

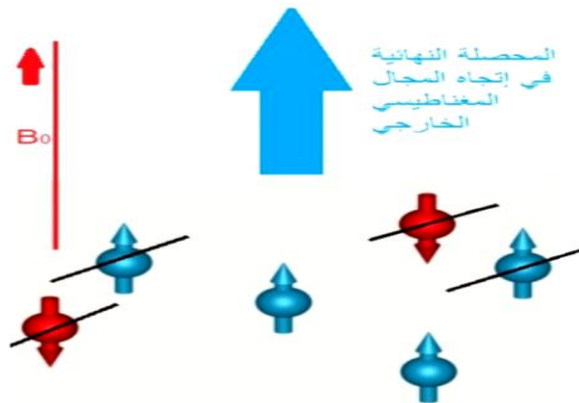


الشكل (II - 5) : سلوك البروتونات في الحالة الطبيعية [20].

ولكن عند تطبيق مجال مغناطيسي خارجي B_0 (المجال المغناطيسي الموجود داخل جهاز MRI) تصبح البروتونات حساسة وتحاول أن تغير من اتجاهها نحو المجال B_0 ، بحيث أن كل العزوم المغناطيسية (البروتونات) تصبح موازية للمجال B_0 فتأخذ إتجاهين متعاكسين الشكل (II - 6)، جزء يتحرك عكس إتجاه B_0 بينما الجزء الأكبر يأخذ نفس إتجاه المجال B_0 ، فتلغي العزوم المغناطيسية المتعاكسة في الاتجاه تأثيرها، وتبقى التي في نفس إتجاه المجال المغناطيسي الخارجي والتي تستخدم في إشارة الرنين المغناطيسي ويسمى هذا المتجه بالمغطة الطولية [15، 20] الشكل (II - 7).



الشكل (II - 6) : سلوك البروتونات عند تطبيق مجال مغناطيسي خارجي B_0 [15].



الشكل (II - 7) : المحصلة النهائية في إتجاه المجال المغناطيسي [20].

3.3.1.II. تردد لارمور:

ذكرنا سابقا أن للبروتونات حركة مغزلية عند دورانها حول نفسها بالإضافة الى هذا وعند تطبيق مجال B_0 تكتسب البروتونات حركة دائرية حول خطوط المجال B_0 تسمى بحركة لارمور الدورانية، هذه الأخيرة لها سرعة تتغير بتغير قوة المجال المغناطيسي المطبق، وكذلك لها تردد يزيد بزيادة المجال B_0 ويسمى تردد لارمور [20] ويستخدم لتحفيز الإشارات الراديوية "إشارات الرنين المغناطيسي" وتحديد كيفية إستجابة الأنسجة لهذا التحفيز ويعطى بالعلاقة التالية:

$$F = \Gamma B_0 \quad (2 - II)$$

حيث:

F: تردد حركة لارمور الدورانية.

B_0 : قوة المجال المغناطيسي الخارجي.

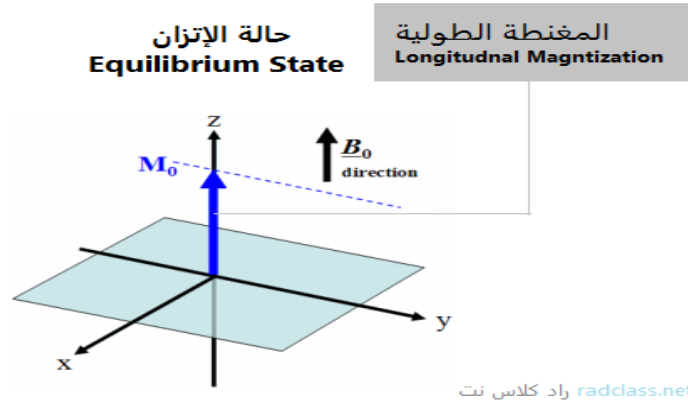
Γ : معدل المغناطيسية الدورانية للبروتون (كل ذرة لها معدل مغناطيسية دورانية ثابت).

4.3.1. II. إشارة الرنين المغناطيسي:

تمر الإشارة بثلاث حالات مهمة قبل أن يتم تجميعها بواسطة ملفات التردد اللاسلكية لإنتاج صور ثنائية أو ثلاثية الأبعاد [20] وهي:

1. حالة الاتزان:

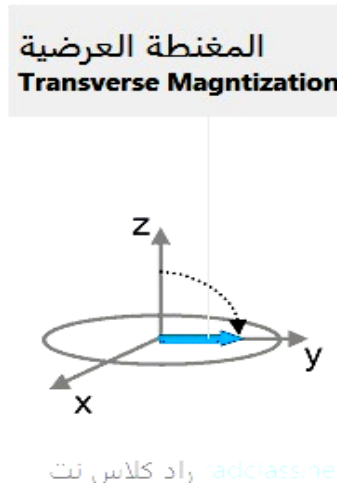
وهي الحالة التي تكون فيها المغنطة الطولية في نفس إتجاه المجال المغناطيسي الخارجي B_0 ، وفي هذه الحالة لا يتم أخذ أي إشارة الشكل (II-8).



الشكل (II - 8): حالة الإتزان للبروتونات [20].

2. حالة الاستثارة:

يتم استثارة البروتونات بواسطة موجات راديو RF. موجات الراديو عبارة عن طاقة تعطى للبروتونات بحيث تكون لها القدرة على تغيير اتجاهها من مغطة طولية الى مغطة عرضية (تغيير اتجاه البروتونات بعيدا عن اتجاه المجال المغناطيسي الخارجي B_0) الشكل (II - 9)، بشرط ان يكون تردد RF مساوي لتردد حركة لارمور الدورانية للبروتونات.



الشكل (II - 9): حالة الإستثارة من المغطة الطولية الى المغطة العرضية [20].

3. حالة الاسترخاء:

عند إيقاف موجات الراديو تفقد البروتونات طاقتها المكتسبة من هذه الموجات وتعود الى حالة الإتزان (المغطة الطولية). فقدان الطاقة هو عبارة عن إشارة الرنين المغناطيسي، بحيث كلما زادت قوة المغطة العرضية كانت إشارة الرنين المغناطيسي قوية والعكس صحيح. وفي النهاية تترجم هذه الإشارة الى صورة.

5.3.1.II. صورة الرنين المغناطيسي:

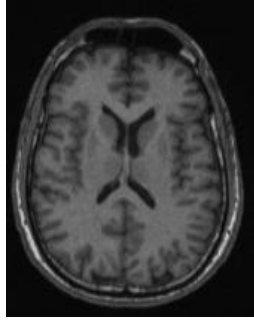
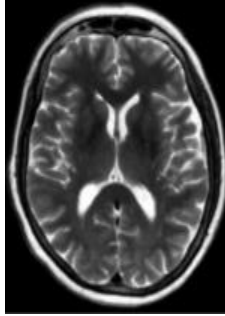
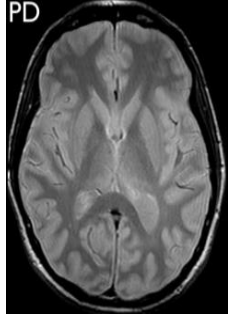
الصور الناتجة هي تدرج بين اللونين الأبيض والأسود، بحيث كلما كانت الإشارة أقوى كانت الصورة أقرب للبياض، وتكون هذه الأخيرة أقرب للون الأسود كلما كانت الإشارة ضعيفة [20]. يتحكم في تباين ونوع صورة الرنين المغناطيسي عاملين أساسيين هما:

- **زمن التكرار (TR repetition time):** وهو الوقت ما بين موجات تردد الراديو RF المتعاقبة.
- **زمن الصدى (TE echo time):** يشير الى الوقت الذي يستغرقه الجهاز لقياس الإشارة بعد إرسال موجة تردد الراديو RF.

بالتحكم في هذين العاملين يمكننا الحصول على ثلاث أنواع من الصور الجدول (II - 1) وهي:

1. **صورة الزمن الأول الموزونة T1-weighted image:** يتحكم فيها زمن التكرار TR ولا بد أن يكون هو وزمن الصدى TE قصيران للحصول على هذا النوع.
2. **صورة الزمن الثاني الموزونة T2-weighted image:** المتحكم في هذا النوع هو زمن الصدى TE. من أجل الحصول على صورة الزمن الثاني يجب أن يكون زمن التكرار وزمن الصدى طويلان.
3. **صورة كثافة البروتون الموزونة Proton Density Weighted Image:** للحصول على هذا النوع يتم اختيار زمن تكرار TR طويل، وزمن صدى TE قصير. هذا النوع من الصور يعتمد بشكل كبير على كثافة البروتونات في الأنسجة.

الجدول (II - 1): أنواع صورة الرنين المغناطيسي لمقطع عرضي من الدماغ [20].

صورة الزمن الأول الموزونة T1-weighted image	صورة الزمن الثاني الموزونة T2-weighted image	صورة كثافة البروتون الموزونة PD-weighted image
		

2.II. النواقل الفائقة: Superconductor

الناقلية الفائقة هي إحدى حالات المادة التي تم اكتشافها عن طريق خطأ تجريبي في مادة الزئبق بواسطة العالم الفيزيائي هايك كامرلينغ أونز (Heike Kamerlingh Onnes) عام 1911، والتي تتطلب شرطا أساسيا وهو درجة حرارة التحول (درجة الحرارة الحرجة) القريبة من الصفر المطلق، تنتقل فيها المادة الناقلة من حالة الناقلية العادية الى حالة الناقلية الفائقة. تسمى المواد المُمَيَّزة بالناقلية الفائقة مواد فائقة التوصيل. هذه الأخيرة تتمتع بقدرتها على توصيل التيار الكهربائي بدون مقاومة، أي بدون ضياع للتيار الكهربائي ويكون مردود نقل الطاقة مثاليا. كما تتسم هذه المواد بخاصية المغناطيسية المعاكسة (diamagnetic) المتمثلة في إنشاء حقل مغناطيسي معارض لأي حقل مغناطيسي خارجي [21، 22]. ومن بين المركبات فائقة التوصيل نذكر مركب MgB_2 ، $YBa_2Cu_3O_7$ (YBCO)، Nb_3Sn ، و CaB_2 [23].

تصنف المواد فائقة التوصيل الى صنفين حسب درجة الحرارة الحرجة [21، 22]:

1.2.II. مواد فائقة التوصيل منخفضة الحرارة: (Low temperature superconductor)

تسمى مواد فائقة التوصيل التقليدية، وتدعى أيضا نواقل فائقة من النوع الأول. من خصائصها أنه عندما يتجاوز المجال المطبق B_0 المجال الحرج H_c يتحول الناقل الفائق كليا الى الحالة الطبيعية (ناقل عادي) أي اختراق المجال المغناطيسي الخارجي للناقل بصورة كلية.

II.2.2. مواد فائقة التوصيل عالية الحرارة: (High temperature superconductor)

وتسمى مواد فائقة التوصيل من النوع الثاني. تختلف اختلافاً كلياً عن النوع الأول، وتتميز بقيمتين من المجال الحرج H_{c1} ، H_{c2} . يخترق المجال المغناطيسي المطبق B_0 المادة جزئياً عند مجال حرج H_{c1} أقل، بحيث لا يتحول الناقل الفائق إلى الحالة الطبيعية، بل يصل حالة جديدة تدعى الحالة المختلطة. يزداد الاختراق حد الوصول إلى الاختراق الكلي للناقل الفائق عند H_{c2} أعلى ويعود الناقل إلى حالته الطبيعية.

II.3.2. أهمية استخدام النواقل الفائقة في جهاز الرنين المغناطيسي:

استخدام النواقل الفائقة في المجال الطبي، وبشكل خاص في تقنية التصوير بالرنين المغناطيسي (MRI) له أهمية كبيرة نظراً للفوائد العديدة التي تقدمها هذه التقنية. إذ تلعب النواقل الفائقة دوراً مهماً في عملية تشغيل جهاز MRI، حيث تضمن إستدامة وقوة الحقل المغناطيسي اللازم لإنتاج صور عالية الجودة. وبفضل قدرتها على توجيه التيار الكهربائي بدون مقاومة، فإن النواقل الفائقة تساهم في تحسين كفاءة ودقة جهاز MRI وتوفير نتائج تشخيصية دقيقة للمرضى.

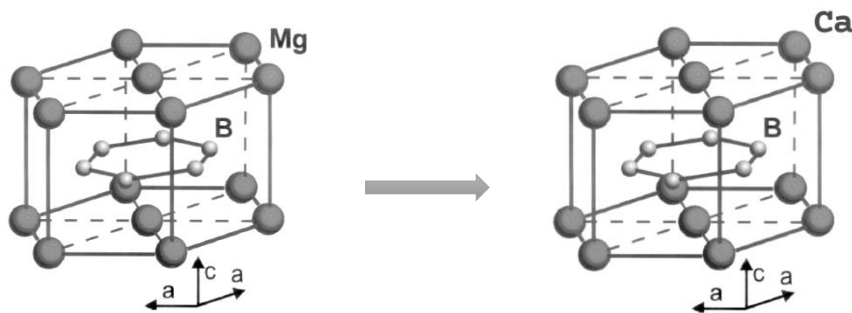
كذلك تُستخدم النواقل الفائقة كمبردات لبعض أجزاء جهاز الرنين المغناطيسي وذلك للحفاظ على حرارتها المنخفضة تجنباً لتلفها أو ذوبانها بسبب قوة المجال المغناطيسي وطاقته الكبيرة.

تتواجد النواقل الفائقة في الجزء الرئيسي من جهاز MRI المتمثل في المغناطيس الرئيسي (مغناطيس فائق التوصيل)، حيث تُنَبَّت داخل ملفات مغناطيسية خاصة، وتكون محمية بأنايب تبريد تحتوي على سوائل تبريد مثل الهيليوم السائل والنيتروجين السائل للحفاظ على درجة الحرارة المنخفضة.

من بين المركبات المستخدمة في الجهاز نذكر على سبيل المثال المركب فائق التوصيل MgB_2 ذو البنية البلورية السداسية البسيطة والخصائص المتفوقة، إذ يتميز بدرجة حرارته العالية (39 كلفن) [24]، بالإضافة إلى طول فترة حياته كناقل فائق عند تعرُّضه لمجال مغناطيسي مرتفع مقارنة بالموصلات الفائقة القائمة على Nb، وبالتالي يمكن استخدامه كمادة مغناطيسية في أجهزة MRI الخالية من المبردات [25]. ومن بين الهياكل المشابهة للمركب MgB_2 نذكر الناقل الفائق المركب CaB_2 الذي اعتمدنا عليه في دراستنا البحثية إذ قمنا بتهجينه (تطعيمه) بعنصر البيريليوم Be وذلك بنسبة 25% بهدف تحسين المركب وذلك من أجل استخدامه في أجهزة التصوير بالرنين المغناطيسي وغيرها من الإستخدامات.

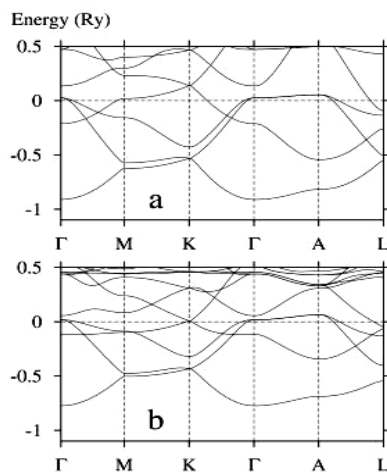
4.2.II. المركب فائق التوصيل CaB_2 :

يُسمى ثنائي بوريد الكالسيوم أو ديبوريد الكالسيوم (Calcium diporide)، ويتكون من عنصرين؛ ذرة الكالسيوم (Ca) وذرتي البورون (B). يتمتع ببنية بلورية مشابهة لبنية المركب ديبوريد المغنيزيوم MgB_2 المتمثلة في البنية البلورية السداسية البسيطة (Simple hexagonal)، حيث يملك نفس تناظره البلوري أين تستبدل جميع ذرات المغنيزيوم Mg بذرات الكالسيوم Ca الشكل (II - 10) [26]. يحتوي ديبوريد الكالسيوم CaB_2 على خلية وحدة أكبر من المركب MgB_2 (كل من ثوابت الشبكة a و c أطول) وقيمة أكبر لكثافة الحالات (DOS) عند طاقة فيرمي E_F [24].



الشكل (II - 10): استبدال ذرات المغنيزيوم Mg بذرات الكالسيوم Ca في التركيب الذري للشكل السداسي البسيط للمركبين CaB_2 و MgB_2 [26].

كما اتضح أيضاً أنّ عصابات الطاقة لكل من المركبين CaB_2 و MgB_2 المتساوية الحالة الإلكترونية والمتساوية البنية متشابهة نوعاً ما الشكل (II - 11)، ويمكن أن ترجع الاختلافات البسيطة الى التغيرات في المسافات داخل الطبقات البينية اعتماداً على نصف القطر الذري، حيث بالنسبة لذرة المغنيزيوم $r=0.74 \text{ \AA}$ و $r=1.04 \text{ \AA}$ بالنسبة لذرة الكالسيوم (Ca) [27].



الشكل (II - 11): عصابات الطاقة للمركبين CaB_2 (b) و MgB_2 (a) [27]

1.4.2.II. الخصائص المميزة للمركب CaB_2 :

- أظهرت الحسابات للهيكال الالكتروني أن CaB_2 له طابع معدني [28].
- يتميز ديبوريد الكالسيوم بأنه مستقر ميكانيكيا وديناميكيا [28].
- تمّ الحصول على تشتت الفونون الكاملة في منطقة بريلوان الأولى [28].
- تمّ العثور على قيمة درجة الحرارة الإنتقالية H_c (الدرجة) لتكون 48 كلفن [29].

الفصل الثالث:

المناقشة والنتائج

تمهيد:

اعتمدنا في دراستنا على برنامج Wien2k المُركّز على نظرية الكثافة التابعية DFT وباستعمال أحد أهم تقريباتها المتمثل في تقريب التدرج المعمم GGA، حيث قمنا بدراسة الخواص البنيوية و الإلكترونيّة للمركب $Ca_{0.75}Be_{0.25}B_2$ المتحصل عليه عن طريق تضخيم بنية المركب الأصلي CaB_2 وتطعيمه بنسبة 25% من عنصر البريليوم Be. وسنناقش النتائج المتحصل عليها في هذا الفصل.

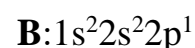
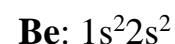
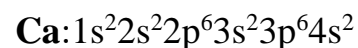
يتم رسم البنية ثلاثية الأبعاد للمركب $Ca_{0.75}Be_{0.25}B_2$ الموضحة في الشكل (III - 1) وذلك باستخدام برنامج XcreysDen.

2.III. تهيئة الحساب :

كل من طاقة القطع و عدد النقاط في منطقة بريلوان الأولى مستمدّة من عمل سابق [29]

حيث: $E_{cut\ off}=9$ و $k_{poits}=1100$ ، كما اعتبرنا عتبة الطاقة محددة ب 10^{-4} Ry.

التوزيع الإلكتروني المستخدم لذرات المركب $Ca_{0.75}Be_{0.25}B_2$ كالتالي:

**3.III. الخواص البنيوية:****1.3.III. تحسين حجم البنية وحساب ثوابت الشبكة:**

نختار التعلّيمية $optimize(V)$ لتحسين حجم البنية الذرية للمركب $Ca_{0.75}Be_{0.25}B_2$ وذلك بأخذ قيم مجاورة للقيمة النظرية للحجم (بالزيادة والنقصان) لتنتصل على المنحنى الموضح في الشكل (III - 2).

من الشكل (III - 2) يمكن استخراج القيم الخاصة بالبنية من ثوابت الشبكة (a, b, c) ، حجم البنية V_0 ، معامل الضغط B، مشتق معامل الضغط B' و الطاقة E_0 عند حالة الاستقرار بمطابقة النتائج بمعادلة الحالة لميرنغان (III - 1).

$$E(V) = E_0 + \frac{B_0 V}{B'_0} \left(\left(\frac{V_0}{V} \right)^{B'_0} + 1 \right) - \frac{B_0 V_0}{B'_0 - 1} \quad (1 - III)$$

حيث:

V_0 : حجم الخلية عند الاستقرار.

B_0 : معامل الانضغاطية.

B'_0 : المشتق الأول لمعامل الانضغاطية بالنسبة للضغط.

قمنا بمقارنة نتائج الخصائص البنيوية للمركب $Ca_{0.75}Be_{0.25}B_2$ التي تحصلنا عليها بنتائج نظرية سابقة [30،29] للمركب الأصلي فائق التوصيل CaB_2 في الجدول (III - 2). يتضح لنا أن محاور هذا النظام متعامدة $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$ وغير متساوية في الطول، وقيمة ثابت الشبكة $a=3.355212 \text{ \AA}$ التي تحصلنا عليها قريبة من القيمة النظرية $a=3.322 \text{ \AA}$ للمركب الأصلي CaB_2 . ونظرا لتضخيم بنية المركب CaB_2 وتطعيمه بنسبة 25% من عنصر البيريليوم نلاحظ ارتفاع قيمة ثابت الشبكة C ، مع زيادة حجم البنية V_0 .

الخلاصة العامة

الخلاصة العامة:

في هذا العمل قمنا بدراسة الخواص البنيوية والإلكترونية للمركب $\text{Ca}_{0.75}\text{Be}_{0.25}\text{B}_2$ الذي تحصلنا عليه من خلال عملية تهجين (تطعيم) المركب الأصلي دييوريد الكالسيوم CaB_2 شبيه المركب الفائق دييوريد المغنيزيوم MgB_2 المستخدم في جهاز التصوير بالرنين المغناطيسي بعنصر البيريليوم Be و بنسبة 25% ، وذلك باستخدام برنامج Wien2k الذي يعتمد على نظرية الكثافة التابعية DFT التي لها عدّة تقريبات أهمها تقريب التدرج المعمم GGA المعتمد عليه في هذه الدراسة. تمكّننا من تحديد الخواص البنيوية المتمثلة في ثوابت الشبكة وحجم البنية الذرية والخواص الإلكترونية المتمثلة في كثافة الحالات الإلكترونية وتوزيع كثافة الشحنة للمركب $\text{Ca}_{0.75}\text{Be}_{0.25}\text{B}_2$ وعصابات الطاقة، حيث استنتجنا منهما أن محاور النظام متعامدة وغير متساوية الطول وأن المدارات الفرعية p لذرة البور B هي الأكثر مساهمة في عملية النقل وأن الرابطة المعدنية بين ذرات الكالسيوم هي التي ساهمت في خاصية التوصيل الكهربائي. ومن طاقة المركب السالبة المتحصل عليها في هذا العمل اتّضح لنا في حدود بحثنا أن هذا المركب قابل للتشكيل وبالتالي يمكن تصنيعه مخبرياً. ومن الممكن أيضاً أن يكون فائق الناقلية لتوفر فيه إحدى سمات الناقلية الفائقة $N(E_F)$.

قائمة المصادر و المراجع

- [1] Wolfgang Demtroder, An Introduction to Atomic-,Molecular-and Quantum physics. 2018.
- [2] A. F. Kracklauer, “Comment on derivation of the schrödinger equation from newtonian mechanics,” Phys. Rev. D, vol. 10, no. 4, pp. 1358–1360, 1974, doi: 10.1103/PhysRevD.10.1358.
- [3] Stefaan Cottenier, Density Functional Theory and the Family of (L)APW-methods: a step-by-step introduction, no. L. 2013.
- [4] E. X. Superzeure and E. X. Superieure, “Inhomogeneous Electron Gas*,” vol. 155, no. 1962, 1964.
- [5] C. H. Fanta, J. W. Watson, P. G. Lacouture, and J. M. Drazen, “In vivo bronchodilator activity of nifedipine in the guinea pig,” Am. Rev. Respir. Dis., vol. 136, no. 1, pp. 76–79, 1987, doi: 10.1164/ajrccm/136.1.76.
- [6] “Parallélisation d’un code de calcul de structure électronique,” no. Umr 8536.
- [7] J. Kohanoff, N. I. Gidopoulos, S. Wilson, J. Kohanoff, and N. I. Gidopoulos, Density Functional Theory : Basics , New Trends and Applications Chapter 26 Density Functional Theory : Basics , New Trends and Applications, vol. 2. 2003.
- [8] R. C. Parr, “DENSITY-FUNCTIONAL THEORY STRUCTURE OF MOLECULES ’,” 1995.
- [9] F.- Villeurbanne, T. Burnus, and P. Gr, “Libxc : a library of exchange and correlation functionals for density functional theory,” no. 4.
- [10] ق. ف. الزهراء، “دراسة نظرية باستعمال نظرية الكثافة التابعة للخصائص البنوية والإلكترونية لأكسيد النحاس”، جامعة ورقلة-قاصدي مرباح، 2021.
- [11] A. Jain, Y. Shin, and K. A. Persson, “Computational predictions of energy materials using density functional theory,” Nat. Rev. Mater., vol. 1, no. 1, 2016, doi: 10.1038/natrevmats.2015.4.
- [12] P. Blaha, K. Schwarz, F. Tran, R. Laskowski, G. K. H. Madsen, and L. D. Marks, “WIEN2k: An APW+lo program for calculating the properties of solids,” J. Chem. Phys., vol. 152, no. 7, 2020, doi: 10.1063/1.5143061.
- [13] User’s guide, wien2k 12.1 (release 30.08.2012) Peter BLAHA, Karlheinz SCHWARZ, Georg MADSEN, Dieter KVASNICKA, Joachim LUITZ.
- [14] B. Kastler and D. Vetter, Comprendre l ’ IRM. 2011.
- [15] S. C. A. Cu, “Imagerie par résonance magnétique,” pp. 5–6, 1990.

- [16] H.A.S, “Evaluation des Irm dediees et a champs modere < 1T,” pp. 1–82, 2008.
- [17] أجهزة التشخيص الطبية، الدكتور حازم فلاح سكيك، vol. 6, no. 1. 2013. [Online]. Available: <https://www.scribd.com/document/371422332/كتاب-اجهزة-التشخيص-الطبية>
- [18] Ashim Budhathoki, “MRI-magnetic Imaging resonance.” [Online]. Available: <https://www.slideshare.net/AshimBudhathoki/mri-by-ashim-budhtahoki>
- [19] P. Jezzard, F. Centre, J. R. Hospital, and O. Ox, “Shim Coil Design, Limitations and Implications,” pp. 0–5.
- [20] “أنور السلمي،” شرح فيزياء الرنين المغناطيسي Accessed: Apr. 20, 2024. [Online]. Available: <https://radclass.net/شرح-فيزياء-الرنين-المغناطيسي/>
- [21] M. Tinkham, “Introduction to Superconductivity: Second Edition (Dover Books on Physics) Second Edition.” pp. 1–472, 2004.
- [22] W. Nicolas and S. Edouard, “Les matériaux supraconducteurs Rapport d’Epistemologie Table des matières,” 2002.
- [23] P. Reviewed, L. Berkeley, and B. Cancer, “Lawrence Berkeley National Laboratory Lawrence Berkeley National Laboratory,” no. July, pp. 35–43, 2010.
- [24] H. J. Choi, S. G. Louie, and M. L. Cohen, “Prediction of superconducting properties of CaB₂ using anisotropic Eliashberg theory,” *Phys. Rev. B - Condens. Matter Mater. Phys.*, vol. 80, no. 6, pp. 1–5, 2009, doi: 10.1103/PhysRevB.80.064503.
- [25] Z. Yu et al., “Superconductive materials with MgB₂ -like structures from data-driven screening,” *Phys. Rev. B*, vol. 105, no. 21, 2022, doi: 10.1103/PhysRevB.105.214517.
- [26] Al Rey Villagrancia, “Crystal structure of MgB₂,” 2013, [Online]. Available: https://www.researchgate.net/figure/Crystal-structure-of-MgB2_fig1_259980024
- [27] S. V. Okatov, A. L. Ivanovskii, Y. E. Medvedeva, and N. I. Medvedeva, “The electronic band structures of superconducting MgB₂ and related borides CaB₂, MgB₆ and CaB₆,” *Phys. Status Solidi Basic Res.*, vol. 225, no. 1, pp. 44–46, 2001, doi: 10.1002/(SICI)1521-3951(200105)225:1<R3::AID-PSSB99993>3.0.CO;2-S.
- [28] C. P. Nabeel Ibrahim Ahmed Ahmed, “First-principles calculations on mechanical and electronical properties of AlB₂-type CaB₂.” [Online]. Available: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2352492824002708>

- [29] I. Hassaine and A. Ouahab, "Prediction of Structural and Electronic Properties of Doped Compounds - $\text{Ca}_{0.75}\text{X}_{0.25}\text{B}_2$ ($\text{X} = \text{Fe}, \text{Cd}, \text{K}$) Using Density Functional Theory," *J. Electron. Mater.*, vol. 53, no. 2, pp. 557–570, 2024, doi: 10.1007/s11664-023-10806-y.
- [30] Morton E. Jones and Richard E. Marsh, "The preparation and structure of magnesium boride, MgB_2 ," 1954.

المخلص

في هذا العمل قمنا بدراسة الخواص البنيوية والإلكترونية للمركب $\text{Ca}_{0.75}\text{Be}_{0.25}\text{B}_2$ المتحصل عليه من تطعيم عنصر الكالسيوم في المركب الأصلي ديبيوريد الكالسيوم بنسبة 25% من عنصر البيريليوم Be ، وقد تمت الدراسة باستعمال برنامج wien2k المرتكز على نظرية الكثافة التابعية DFT وبتقريب التدرج المعمم GGA. بهدف حساب ثوابت الشبكة وحجم البنية بالإضافة الى تحديد كثافة الحالات الإلكترونية وكثافة الشحنة. تطلعا لاستخدام المركب في تطوير وتحسين حدود استعمال جهاز التصوير بالرنين المغناطيسي وبعض الاستخدامات الأخرى.

الكلمات المفتاحية: ديبيوريد الكالسيوم CaB_2 ، نظرية الكثافة التابعية DFT ، برنامج wien2k ، جهاز التصوير بالرنين المغناطيسي MRI.

Résumé

Dans cette étude ,nous avons examiné les propriétés structurales et électroniques du composé $\text{Ca}_{0.75}\text{Be}_{0.25}\text{B}_2$ obtenu par dopage du composé d'origine diporide de calcium avec 25% de béryllium Be. L'étude a été réalisée en utilisant le programme wien2k basé sur la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) avec une approximation de gradient généralisé(GGA). Le but était de calculer les constantes du réseau et le volume de la structure, ainsi que de déterminer la densité des états électroniques et la densité de charge. Nous espérons utiliser ce composé pour améliorer les limites d'utilisation de l'imagerie par résonance magnétique et d'autres application.

Mots clés: diporide de calcium CaB_2 , théorie de la densité dépendante(DFT), programme wien2K, appareil IRM,

Abstract

In this work, we studied the structural and electronic properties of the compound $\text{Ca}_{0.75}\text{Be}_{0.25}\text{B}_2$ obtained by doping the original compound calcium diboride with 25% beryllium (Be). The study was conducted using the wien2k program based on density functional theory (DFT) with a generalized gradient approximation (GGA). The aim was to calculate the lattice constants and volume of the structure, as well as to determine the density of electronic states and charge density. We aimed to use this compound to enhance and improve the limits of application in magnetic resonance imaging and other application.

Keywords: calcium diboride CaB_2 , Density Functional Theory DFT, wien2k program, magnetic Resonance Imaging MRI