دراسة الخصائص المغناطيسيه في الأجسام الصلبه بإستعمال المبادئ الأوليه
Etude ab- inition des propriétés magnétique de composé métalique

عميرات مسعودة * تحت اشراف : بوكراع عمار و داودي باحمد
ماستر فيزياء المواد،قسم علوم المادة ،كلية الرياضيات وعلوم المادة جامعة قاصدي مرباح ورقلة
البريد الالكتروني : amiramesoda@gmail.com

مقدمـــــــــه

جميع المواد على اختلاف انواعها سواء الغازات او السوائل او المواد الصلبة لها خواص مغناطيسية نتيجة لتأثرها بالمجال المغناطيسي ولكن بدرجات متفاوتة, كما ان لدرجة الحرارة اثر كبيرا على هذه الخواص.
ونظرا لاستعمال المواد المغناطيسية في كثير من الاجهزة مثل الميكروفونات والسماعات ووسائل الاتصالات اللاسلكية وكذلك استعمالها في ذاكرات الحاسبات الآلية وغيرها من الاجهزة الحديثة ولذلك اصبح مهما دراسة بعض الخواص المغناطيسية لهذه المواد

الهـــدف

- التنبؤ بالخصائص المغناطيسية للاجسام الصلبة
- التعرف على البنى الالكترونية للانظمة
- ايجاد الاستعمال الأنسب للمركب

الكلمـات المفتاحية

- نظرية الكثافة الوظيفية DFT
- Wien2k
- الخصائص المغناطيسة

خطـــة العمل

- التعرف على نظرية الكثافة الوظيفية DFT
- مبدأ code WIEN2k
- الحساب (التقريبات ,الخصائص الهيكلية , الخصائص المغناطيسية)
- تفسيـر النتائج

الحســـاب

من اجل معرفة الخصائص الالكترونية والمغناطيسية للانظمة البلورية نعتمد على حل **معادلة شرونجر:**

$$\hat{H}=\frac{-\hbar^2}{2}\sum_i\frac{\Delta^2_{\vec{R}_i}}{M_i}-\frac{\hbar^2}{2}\sum_i\frac{\Delta^2_{\vec{r}_i}}{m_e}-\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\sum_{i,j}\frac{e^2Z_i}{|\vec{R}_i-\vec{r}_j|}+\frac{1}{8\pi\varepsilon_0}\sum_{i\neq j}\frac{e^2}{|\vec{r}_i-\vec{r}_j|}+\frac{1}{8\pi\varepsilon_0}\sum_{i\neq j}\frac{e^2Z_iZ_j}{|\vec{R}_i-\vec{R}_j|}$$

من اجل حساب نظام متعدد الذرات بعد التقريب :
بعد تقريب Born-Oppenheimer:

$$H\Psi=E\Psi \quad \text{où}: \quad E=T+V+V_{ext}$$

نستعمل نظرية الكثافة الوظيفية DFT وهي تعتمد على نظريتين اساسيتين :
نظرية هوهانمبرغ و كوهان :هوهانبرغ وكوهان حلا مشكلة معادلة شروذنغرمتعددة الالكترونات . في نظرية الكثافة التابعية اذا استطعنا تشكيل الدالة يسهل ايجاد الحالة الاساسية للنظام في كمون خارجي معطى اذن كل عوائق تكوين الدالة :

$$H[\rho]\equiv E_{V_{ext}}[\rho]$$
$$E_{V_{ext}}[\rho]=\langle\Psi|\hat{H}|\Psi\rangle=\langle\Psi|(\hat{T}+\hat{V}+\hat{V}_{ext})|\Psi\rangle$$
$$=\langle\Psi|(\hat{T}+\hat{V})|\Psi\rangle+\langle\Psi|\hat{V}_{ext}|\Psi\rangle$$
$$=F_{HK}[\rho]+\int\rho(\vec{r})V_{ext}(\vec{r})d\vec{r}$$

معادلة كوهن شام :شام بتحويل جملة الإلكترونات المتفاعلة ضمن الكمون الحقيقي إلى جملة افتراضية غيرمتفاعلة تتحرك فيها الالكترونات ضمن كمون كون-شام الناشئ عن جسيم-وحيد ،صيغة كون-شام تقودنا إلى كثافة الجملة الحقيقية.

$$\underbrace{\left(\frac{-\hbar^2}{2m_e}\vec{\nabla}^2_m+\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\int\frac{\rho(\vec{r}')}{|\vec{r}-\vec{r}'|}d\vec{r}'+\hat{V}_\alpha+\hat{V}_{ext}\right)}_{\hat{H}_{sk}}\Phi_m(\vec{r})=\xi_m\Phi_m(\vec{r})$$

المراجـــع

[1] فيزياء الجوامد الجزء الثالث , د.عبد الفتاح أحمد الشاذلي

[2] Z.G. Wei, R. Sandstron, S. Miyazaki, J. Mater. Sci. 33 (1998) 3743.
[3]S.B.MirmghamROC.Nac.acad.Sci.USA.30.2 44.199
[4]- M.C. Holthausen and W. Koch, *A Chemist's Guide to Density Functional Theory*