دراســـة الخصائـص الديناميكيــة لمــركب بإستعمـــال الـمبـدأ الأول

حساني منـــال1*تحت إشراف الأستاذ: داودي باحمد

1*ماستر فيـــزياء المــــواد، قســـم علـــوم المـــادة، كلية الرياضيات وعلوم المادة

جامعة قاصدي مرباح ورقلة ،دفعـــــة 2014-2015

1 manelhassani@gmail.com

مقدمـــــة:

- معظم المواد البلورية التي نراها في الحياة اليومية هي مواد متعددة البلورات أن يحدث لها إهتزاز ات في تشكيلاتها البلورية وهذا مايعرف في فيزياء الجسم الصلب **بالفونونات (phonons)** وهي عبارة عن حالة اهتزازية كمومية تلعب دورا كبيرا في تحديد الكثيرمن **الخواص الديناميكية(propriétes dynamique)** مثل الناقلية واستجابة المواد الصلبة للقوى الخارجية المؤثرة عليها كالموجات الصوتية والإشعاعات الكهرومغناطيسية .
- نعمل في دراستنا هذه على التنبؤ ببعض الخصائص الديناميكية انطلاقا من البنية الهيكلية والإلكترونية للجسم وهذا بالاعتماد على **نظرية الكثافة التابعية (Théorie de la densité fonctionnelle)** المجسدة في برنامج **WIEN2K**.

الكلمات المفتاحية :

Phonons، propriétés Dynamique،DFT ،WIEN2K.

الأهداف:

- ✓ ايجاد البنية الإلكترونية للمركب.
- ✓ التنبؤ بالخصائص الديناميكية لجسم صلب انطلاقا من البنية الإلكترونية له.
- ✓ تحديد مجال الاستعمال الانسب لهذا المركب.

خطة العمل:

- ✓ التعرف على DFT.
- ✓ تهيئة ملف العمل Initiation de code WIEN2K .
- ✓ الحسابات (الحد الأدنى مستوى الطاقة الأساسي، والخصائص البلورية، والخصائص الديناميكية).
- ✓ تفسير النتائج.
- ✓ الكتابة الذاكرة.

نمذجة رياضية:

معادلة شرويديغر:

من أجل ايجاد الخصائص الفيزيائية والبنية الإلكترونية للأنظمة البلورية لابد من حل معادلة شرودينغر المتعددة الالكترونات التالية:

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

- **بعد تقريب Born-Oppenheimer:** $H\Psi = E\Psi \quad \text{où}: \; E = T + V + V_{ext}$
- **نظرية Hohenberg et Kohn:**

هوهانبرغ و كوهان حلا مشكلة معادلة شروذنغر متعددة الالكترونات . في نظرية الكثافة التابعية اذا استطعنا تشكيل الدالة يسهل ايجاد الحالة الاساسية للنظام في كمون خارجي معطى اذن كل عوائق تكوين الدالة F [ρ] حلت.

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

- **معادلة Kohn –Sham:**

تتلخص فكرة كوهان-شام بتحويل جملة الإلكترونات المتفاعلة ضمن الكمون الحقيقي إلى جملة افتراضية غير متفاعلة تتحرك فيها الالكترونات ضمن كمون كون-شام الناشئ عن جسيم-وحيد V_{SK} صيغة كون-شام تقودنا إلى كثافة الجملة الحقيقية.

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

المراجع:

[1] R. Dreizler, in Relativistic Density Functional Theory, edited by S. Fiolhais, F.Nogueira and M. Marques (Springer-Verlag, Berlin, 2003(

[2] Zahia AYAT., thèse de magister, université d'Ouargla 2006.

[3] Tafs_CHABANE ,mémoire master, , université d'Ouargla 2013