

قاصدي مرياح ورقلة

كلية الرياضيات وعلوم المادة

قسم الفيزياء



مذكرة ماستر أكاديمي

مجال: علوم المادة

فرع: فيزياء

تخصص: فيزياء المواد

من إعداد الطالبتين: حمداوي غزلان و راشدي ناوية

بعنوان:

تأثير الضغط الهيدروستاتيكي على كثافة الحالات لهيدريد
الليثيوم LiH_225

توقفت يوم: 2017/05/23

أمام لجنة المناقشة المكونة من الأساتذة:

رئيس اللجنة	جامعة ورقلة	أ. محاضر أ	أ. بن مبروك لزهري
مناقشا	جامعة ورقلة	أ. محاضر ب	أ. عاشوري عبد الرحيم
مشرفا	جامعة ورقلة	أ. محاضر أ	أ. محمدي لزهري

الموسم الجامعي 2017/2016

الأهداء

بسم الله الرحمن الرحيم ﴿قل اعملوا فسيرى الله عملكم ورسوله والمؤمنين﴾ صدق الله العظيم

إلهي لا يطيب الليل إلا بشكرك ولا يطيب النهار إلا بطاعتك

ولا تطيب اللحظات إلا بذكرك ولا تطيب الآخرة

إلا بعفوك ولا تطيب الجنة إلا برويتك

إلى من بلغ الرسالة وأدى الأمانة ونصح الأمة

إلى نبي الرحمة ونور العالمين سيدنا محمد صلى الله عليه وسلم

إلى من سهر وربيا وتعبا من اجلنا إلى الوالدين الكريمين

إلى كل من العائلتين الكريمتين عاش معنا

الحياة الجامعية بحلوها ومرها إلى زملائنا وزميلاتنا في الدراسة

بسم الله الرحمن الرحيم

ربي أوزعني أن أشكر نعمتك التي أنعمت علينا

وعلى والدينا وأن أعمل صالحا ترضاه الحمد والشكر لله أن وفقنا لإتمام هذا العمل المتواضع .

نتوجه بآيات الشكر وخالص الشناء ومواقف التقدير والعرفان

إلى الأستاذ المشرف محمدي لزهري الذي كان له الفضل في انجاز هذا العمل مراجعة وإشرافا والأستاذ

بن مبروك لزهري كرئيس و الأستاذ عاشوري عبد الرحيم مناقشا

كما نتوجه الشكر إلى الأستاذة عياط زهية على الإرشاد والنصائح.

وفي الأخير شكرا كل من كانت له يد العون في انجاز هذا العمل ولو بكلمة طيبة أو سؤالاً عنا

فشكرا جزيلا

فهرس المحتويات

Erreur ! Signet non défini.....	الإهداء
Erreur ! Signet non défini.....	تشكوات
.....IV.....	فهرس المحتويات
.....VII.....	قائمة الأشكال
.....VIII.....	قائمة الجداول
.....1.....	المقدمة العامة
.....4.....	الفصل الأول: النظرية التابعية للكثافة
.....5.....	1.1 مقدمة.
.....5.....	2.1 معادلة شرودنجر للبلورة
.....7.....	3.1 تقريب بورن اوبنهايمر the Born–oppenheimer approsimation
.....8.....	4.1 نظرية التابعية للكثافة (Density Functional Theory) DFT
.....8.....	5.1 نظريات هوهانبرغ وكوهان (The Theorems of Hohenberg and Kohn)
.....10.....	6.1 معادلات كوهن شام Equations de Kohn_Sham
.....11.....	7.1 حلول معادلة كون شام
.....13.....	8.1 تقريب الكثافة المحلية LDA:
.....14.....	9.1 تقريب التدرج المعمم GGA:
.....15.....	الفصل الثاني: برنامج WIEN2k
.....16.....	1.2 مقدمة
.....16.....	2.2 مميزات برنامج WIEN2K

.....17.....	3.2 خوارزمية برنامج WIEN2K
.....18.....	4.2 برامج الإعدادات الأولية
.....18.....	1.4.2 برنامج حساب البعد NN
.....18.....	2.4.2 برنامج فضاء المجموعة SGROUP
.....18.....	3.4.2 برنامج التناظر SYMMERTY
.....18.....	4.4.2 برنامج LSTART
.....19.....	5.4.2 برنامج DSTART
.....19.....	5.4.2 برنامج KGEN
.....20.....	5.2 برنامج حساب حلقة SCF
.....20.....	1.5.2 برنامج LAPW0
.....20.....	2.5.2 برنامج LAPW1
.....20.....	3.5.2 برنامج lapw2
.....21.....	4.5.2 برنامج lcore
.....21.....	5.5.2 برنامج MIXER
..... 22	الفصل الثالث النتائج والمناقشة
.....23.....	1.3 مقدمة
.....23.....	2.3 بنية الليثيوم Li_229 وهيدريد الليثيوم LiH_225
.....26.....	3.3 إعداد ملفات البنية تفاصيل لـ Li_225 و Li_229
.....27.....	4.3 الطاقة الكلية لـ Li_229
.....27.....	5.3 الطاقة الكلية لـ LiH_225 بدلالة الحجم والضغط الهيدروستاتيكي
.....31.....	6.3 كثافة الحالات للهيدريد LiH_225 في حالة الاتزان
.....30.....	7.3 تأثير فعل الضغط الهيدروستاتيكي على كثافة الحالات للهيدريد LiH_225

.....33.....
.....34.....
.....36.....

الخاتمة العامة

المراجع

الملخص

قائمة الأشكال

الصفحة	الشكل
الفصل الأول	
13	الشكل 1.1: يمثل الحالة التكرارية للحساب.
الفصل الثاني	
17	الشكل 1.2: خوارزمية برنامج WIEN2K
19	الشكل 2.2: مخطط الاستعدادات الأولية
الفصل الثالث	
24	الشكل 1.3: بنية الليثيوم Li_229
25	الشكل 2.3: بنية هيدريد الليثيوم LiH_225
29	الشكل 3.3: الطاقة الكلية لـ LiH_225 بدلالة الحجم
30	الشكل 4.3: كثافة الحالات لهيدريد الليثيوم LiH_225
31	الشكل 5.3: كثافة الحالات لهيدريد الليثيوم LiH_225 الموافقة لـ 11 ضغط هيدروستاتيكي

قائمة الجداول

الصفحة	الجدول
	الفصل الثالث
24	الجدول 1.3: خصائص الليثيوم Li_229
25	الجدول 2.3: خصائص هيدريد الليثيوم LiH_225
26	الجدول 3.3: ملف البنية Li_225
26	الجدول 4.3: ملف البنية LiH_225
28	الجدول 5.3: الطاقة الكلية لـ LiH_225 بدلالة الحجم

المقدمة العامة

المقدمة العامة

تلعب فيزياء المواد دورا مهما في تطبيقات التكنولوجيا الحالية بحيث تطورت في العديد من المجالات

ونظرا لأهمية المعادن في الصناعة والتكنولوجيا، خاصة بعد اكتشاف شعاع الطاقة (الهيدروجين) الذي ينقل الطاقة من مكان إلى مكان آخر.

يعد تخزين الهيدروجين مشكل من المشاكل التي تواجه العلماء لأن صعوبة تخزين علي شكل غاز تواجهنا مشكلة الحجم، وإن تم تخزينه على شكل سائل يتولد عنه أخطار وتكلفة كبيرة. فالطريقة الأمثل لتخزين الهيدروجين تتمثل في تخزينه على شكل ذري داخل سبيكة معدنية بواسطة الامتصاص. في الوقت الحالي هناك العديد من الأبحاث بهدف إيجاد المعدن الذي يمكنه تخزين واسترجاع الهيدروجين بسهولة ويكون بكمية كبيرة.

من بين المواد ذات الأهمية التكنولوجية والتقنية مركب الليثيوم الذي تم اكتشافه على يد العالم يوهان أرفو يدوسون في عام 1817م ذات الصيغة Li وعدده الذري 3 وفي الجدول الدوري يقع الليثيوم في المجموعة الأولى مع المعادن القلوية، بحيث طور هذا في الكثير من المجالات، ونظرا لأهميتها الأولى مع المعادن القلوية. وباعتبار معدن الليثيوم أخف العناصر المعدنية يمكن اعتماده كأساس لتخزين الهيدروجين بكمية معتبرة في هيدريد LiH₂.

الليثيوم يتفاعل بصعوبة مع الهيدروجين لتشكيل هيدريد الليثيوم بسبب درجة الحرارة الجمد مرتفعة حيث تقارب 700°C (F°930) ويستفاد من هذا التفاعل في تخزين الهيدروجين الذي يكون بكمية كبيرة لكن إدخال أو فصل ذرات الهيدروجين من الهيدريد يكون جد صعب ويتطلب درجة الحرارة السالفة الذكر.

والهدف من هذه الدراسة يتمثل في دراسة تأثير الضغط الهيدروستاتيكي على استقرار هيدريد الليثيوم باستخدام كثافة الحالات. لحساب كثافة الحالات استخدمنا البرنامج WIEN2K. الذي يعتمد على جزئين أساسيين وهما نظرية التابعية للكثافة وأساس الأمواج المستوية المتزايدة الخطية.

هذه المذكرة تحتوي على مقدمة عامة وثلاثة فصول:

الفصل الأول:

يتضمن نظرية التابعية للكثافة وأهم تقريباتها: (معادلة شرودنجر ، تقريب بورن _ أوبنهايمر ,تقريب هارترى _ فوك، نظرية هوهانبرغ_ كوهن، معادلة كوهن _شام) تقريب الكثافة المحلية LDA، تقريب التدرج المعمم GGA .

الفصل الثاني:

يتضمن دراسة برنامج WIEN2K برامج التهيئة الأولية

❖ برنامج حساب البعد NN

❖ برنامج فضاء المجموعة SGROUP

❖ برنامج التناظر SYMMETRY

❖ برنامج LSTART

❖ برنامج KGEN

❖ برنامج DSTART

و برامج حلقة SFC برنامج

❖ برنامج LAPW0

❖ برنامج LAPW1

❖ برنامج LAPW2

❖ برنامج LCORE،

❖ برنامج MIXER.

الفصل الثالث :

سنتناول في هذا الفصل دراسة فعل الضغط الهيدروستاتيكي على هيدريد الليثيوم LiH بلاضافة الي مناقشة بعض

النتائج

الفصل الأول: النظرية التابعية للكثافة

1.1 مقدمة.

تحتوي المواد الصلبة على عدد كبير من الجسيمات المتفاعلة، (للإلكترونات السالبة و الأنوية الموجبة). في المواد الصلبة البلورية يتم ترتيب نوى الذرات في عقد تخضع لخصائص هذا النظام من خلال الإلكترونات الناشئة عن الأيونات وفقا لميكانيك الكم، حيث توصف الحالة الثابتة في ميكانيك الكم بواسطة معادلة شرودنجر المستقلة عن الزمن إلا أن حل مثل هذه المسائل يكون معقد لذلك نقوم بتبسيطها إلى نظام معادلات أحادي الإلكترونات، ليسهل حلها عدديا. ونستعمل لذلك تقريبي نظرية التابعية للكثافة DFT

2.1 معادلة شرودنجر للبلورة

تعتبر معادلة شرودنجر هي منطلق كل الدراسات الكمية للنظام الكوانتي للبلورات [1]. يوصف نظام متعدد الجسيمات (أيونات + إلكترونات) المتفاعلة بمعادلة شرودنجر التالية:

$$H\psi = E\psi \quad (1.1)$$

حيث:

H : الهاملتون

E : طاقة النظام التي تمثل مقدار الهاملتون

ψ : الدالة الموجية المعرفة في الأساس المستخدم (في حالتنا الأساس المستخدم هو أساس الأمواج المستوي المتزايدة الخطية).

الهاملتون الكلي للجملة يكون مؤلف من مؤثرات الطاقة الحركية لكل الجسيمات (الأنوية و الإلكترونات) و مؤثرات طاقة التفاعل فيما بينها وعند الاقتضاء طاقة التفاعل مع الوسط الخارجي. عند غياب الحقل الخارجي يكتب الهاملتون:

$$\hat{H} = \hat{T}_e + \hat{T}_N + \hat{V}_{ee} + \hat{V}_{eN} + \hat{V}_{NN} \quad (2.1)$$

أين:

$$\hat{T}_e = \sum_i \frac{p_i^2}{2m_i} = \sum \frac{\hbar^2}{2m} (\nabla_i^2)$$

تمثل مؤثر الطاقة الحركية للإلكترونات.

$$T_N = \sum_\alpha \frac{p_\alpha^2}{2M_\alpha} = \sum -\frac{\hbar^2}{2M} (\nabla_\alpha^2)$$

تمثل مؤثر لطاقة الحركية للأنوية.

$$V_{ee} = \sum_{i,j \neq i} \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{1}{2} \left(\frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \right)$$

تمثل مؤثر طاقة التفاعل إلكترون-إلكترون.

$$V_{eN} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i \neq \alpha} -\frac{e^2 z_e}{|\vec{r}_i - R_\alpha|}$$

تمثل مؤثر طاقة التفاعل إلكترون-نواة.

$$V_{NN} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta} \frac{e^2 z_\alpha z_\beta}{|R_\alpha - R_\beta|}$$

تمثل مؤثر طاقة التفاعل نواة-نواة.

المعاملات i, j خاصة بالإلكترونات، المعاملات α, β خاصة بالأنوية و m, M تمثل كتل الإلكترونات والأنوية على الترتيب.

$z_\alpha e$ شحنة الأنوية.

$$|R_\alpha - R_\beta| \text{ المسافة بين النواتين } \alpha \text{ و } \beta.$$

$$|r_i - R_\alpha| \text{ المسافة بين النواة } \alpha \text{ والإلكترون } i.$$

$$|r_i - r_j| \text{ المسافة بين الإلكترونين } i \text{ و } j.$$

$$\nabla_i^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

مؤثر لابلاس. في حالة السكون.

معادلة شرودنجر تكون مستقلة عن الزمن وتكتب بالشكل الآتي:

$$H\psi(r, R) = E\psi(r, R) \quad (3.1)$$

بحيث $\psi(r, R)$ تمثل الدالة الموجية وتتعلق بكل إحداثيات الجسيمات (إلكترونات+أنوية) وهذه الدالة تكون معرفة في عملنا هذا في أساس الأمواج المستوية المتزايدة الخطية (LAPW (Linear Augmented Plane Wave).

E تمثل القيم الذاتية لمؤثر الهاملتون.

معادلة شرودنجر لـ N ذرة تحوي على $3(z + 1)N$ متغير، مثلا عندما يكون $z=14$ في 1 سنتيمتر مكعب يصبح لدينا 2.10^{24} مجهول تقريبا، أي أن حل معادلة شرودنجر بهذه الكيفية تكون مستحيلة الحل، لذلك وضعت عدة

تقريبات لتبسيط هذه المعادلة. بداية هذه التقريبات تكون بـ: [2]

3.1 تقريب بورن اوبنهايمر the Born–oppenheimer approximation

يكتب مؤثر الهاملتون لمجموع الأنوية والإلكترونات بالشكل العام الآتي:

$$\hat{H} = \hat{T}_e + \hat{T}_N + \hat{V}_{ee} + \hat{V}_{eN} + \hat{V}_{NN} \quad (4.1)$$

بورن-أوبن هايمر اعتبروا أن الأنوية ثقيلة مقارنة بمقارنتنا بالإلكترونات. ينتج عن ذلك:

$$\checkmark \text{ مؤثر الطاقة الحركية يكون يساوي إلى الصفر } \hat{T}_N = 0$$

$$\checkmark \text{ مؤثر طاقة التفاعل بين الأنوية يكون ثابت ويساوي إلى الصفر } \hat{V}_{NN} = 0$$

$$\checkmark \text{ مؤثر طاقة التفاعل بين الإلكترونات والأنوية } \hat{V}_{ext} \text{ هو عبارة عن الطاقة الكامنة بين السحابة الإلكترونية}$$

والكمون الخارجي الناتج من فعل الأنوية.

في هذه الحالة النظام سوف ينتقل من نظام يحتوي على إلكترونات وأنويه إلى نظام يحتوي على إلكترونات ويكتب مؤثر

الهاملتون بالشكل الآتي:

$$\hat{H} = \hat{T}_e + \hat{V}_{ee} + \hat{V}_{ext} \quad (5.1)$$

يُبقى حل معادلة شرودنجر صعب المنال لذلك نلجأ إلى نظرية الكثافة للكتافة (Density Functional Theory) (DFT)

4.1 نظرية الكثافة للكتافة (Density Functional Theory) (DFT)

هي أحد أهم الطرق المستعملة في الفيزياء والكيمياء بواسطتها نستطيع دراسة نظام متعدد الجسيمات (مثل الإلكترونات) وتحديد خصائصه (مثل الطاقة الكلية للنظام، الكثافة الحالات عصابات الطاقة... الخ) وهي وسيلة رياضية لحل مشاكل ميكانيك الكم وذلك باستعمال معادلة شرودنجر إلا أن حل هذه المسائل يكون معقد جدا لذا نقوم بتبسيطها إلى نظام معادلات أحادي الإلكترونات ليسهل حلها عدديا كما تصف لنا تركيب الإلكترونات في ذرة ما من خلال حساب الطاقة الإجمالية التقريبية على أنها دالة وظيفية لكثافة الإلكترونية والهدف منها هو استبدال الدالة الموجية بالدالة التابعية للكثافة.

تعطى نظرية الكثافة التابعية بهدف إيجاد خصائص الحالة الأساسية لنظام مكون من عدد محدد من الإلكترونات في حالة تفاعل كولومبي مع أنوية نقطية، حيث تعتمد على نظريتين أساسيتين وضعتا من قبل العالمين هوهنبرغ وكوهان وتستعمل لحل المسائل ذات متغيرات (الإلكترونات-أنوية).

الهدف الرئيسي لنظرية الكثافة الدالية هو التنبأ بطاقات الارتباط الموجودة بين الذرات بالاعتماد على مبادئ ميكانيك الكم.

5.1 نظريتي هوهانبرغ وكوهان (The Theorems of Hohenberg and Kohn)

نظرية الكثافة التابعية DFT تعتمد على النظريتين المطروحتين من طرف هوهانبرغ وكوهان. عمل هذان العالمان على أخذ الطاقة الكلية للإلكترونات [3] المتفاعلة في الكمون الخارجي (كمون الأنوية) حيث هو دالة وحيدة لكثافة الإلكترونات $\rho(r)$ حيث قام ببرهان أن الكثافة التي تعطى الحد الأدنى هي كثافة الحالة الأساسية للجسيمات. كل الخصائص الحالة الأساسية هي دالة لكثافة الإلكترونات كالتالي:

$$E(\rho_0) = \text{MINE}(\rho) \quad (6.1)$$

حيث يعبر عن دالة الطاقة بـ:

$$E(\rho) = \langle \psi | H | \psi \rangle \quad (7.1)$$

$$E(\rho) = F_{H.K}(\rho) + \int V_{ext}(r) \rho(r) dr \quad (8.1)$$

بحيث:

$$F_{H.K}(\rho) = \langle \psi | T + U | \psi \rangle \quad (9.1)$$

أين $U.T$ كمون التفاعل و الطاقة الحركية للإلكترونات على الترتيب .

النظرية الأولى: الطاقة الكلية لغاز الإلكترونات في وجود كمون خارجي هي تابع وحيد للكثافة الإلكترونية

$$E = E[\rho(r)] \quad (10.1)$$

النظرية الثانية : اظهر كل من هوهانبرغ إن الكثافة التي تعطى القيمة الدنيا هي كثافة الحالة الأساسية للجسيمات

بالتحديد ، كل الخصائص الحالة الأساسية هي تابع لكثافة الإلكترونات.

$$E(\rho_0) = \text{min}E[\rho(r)] \quad (11.1)$$

ρ_0 كثافة الحالة الأساسية

مع ذلك فإن نظريات هوهانبرغ وكوهان لا تعطي إمكانية لإيجاد الطاقة E_{ρ_0}

6.1 معادلات كوهن شام Equations de Kohn-Sham

وضع كل من كوهان وشام في عام 1965م كثافة الالكترونات كمجموع كثافة الجسيمات مع إستخدام مبدأ التغير للحصول على

طاقة حالة الأساسية. بحيث تعطي كثافة احتمال تواجد الشحنة ب:

$$\rho(r) = \sum \psi_i^*(r)\psi_i(r) \quad (12.1)$$

تابع الطاقة الكلية للالكترونات $E_e(\rho)$ و $E_{H,F}(\rho)$ طاقة هارترى_فوك تعطي ب:

$$E_e = T + V \quad (12.1)$$

$$E_{H,F} = T_0 + (V_H + V_x) \quad (13.1)$$

✓ T: الطاقة الحركية للجسيمات في حالة تفاعل.

✓ V: كمون التفاعل إلكترون_إلكترون.

✓ V_H : كمون هارترى_فوك.

✓ T_0 : الطاقة الحركية للالكترونات الحرة.

✓ V_x : كمون تبادل الالكترونات والذي يعرف ب:

$$V_x = V - V_H \quad (14.1)$$

V_c كمون ارتباط الالكترونات والذي يعرف ب:

$$V_c = T - T_0 \quad (15.1)$$

إذن تابع الكثافة الحد الأدنى $F_{H,K}$ يكون من الشكل

$$F_{H,K} = T_0 + V_H + (V_x + V_c) \quad (16.1)$$

$V_{xc} = V_x + V_c$ هو كمون تبادل-إرتباط

$$(\rho) = T_0(\rho) + V_H + V_{xc} + V_{ext}(\rho)E \quad (17.1)$$

إذن معادلة كوهان شام هي :

$$(T + V_{ei}(r) + V_H(r) + V_{xc}(r))\varphi_i(r) = \varepsilon_i \varphi_i(r) \quad (18.1)$$

7.1 حلول معادلة كون شام

ترتكز مختلف طرق حساب بنية عصابات الطاقة مبدئيا على DFT وهذا حسب استخدامها للكثافة، الكمون

ومدارات كوهان _ شام . طريقة الموجة المستوية المتزايدة خطيا FP-LAPW تعتمد على مدارات كوهان _ شام و

بالتالي الدالة الأساسية هي

$$\psi_i(r) = \sum c_{i\alpha} \varphi_\alpha(r) \quad (19.1)$$

بحيث أن $C_{i\alpha}$ هي معاملات النشر لدالة الموجة.

عمليا لحساب المعاملات $C_{i\alpha}$ يجب حل المعادلات الأساسية بطريقة الدورات التكرارية بحيث تؤخذ طاقة النظام أصغرية.

حلول معادلة كوهان_شام هي:

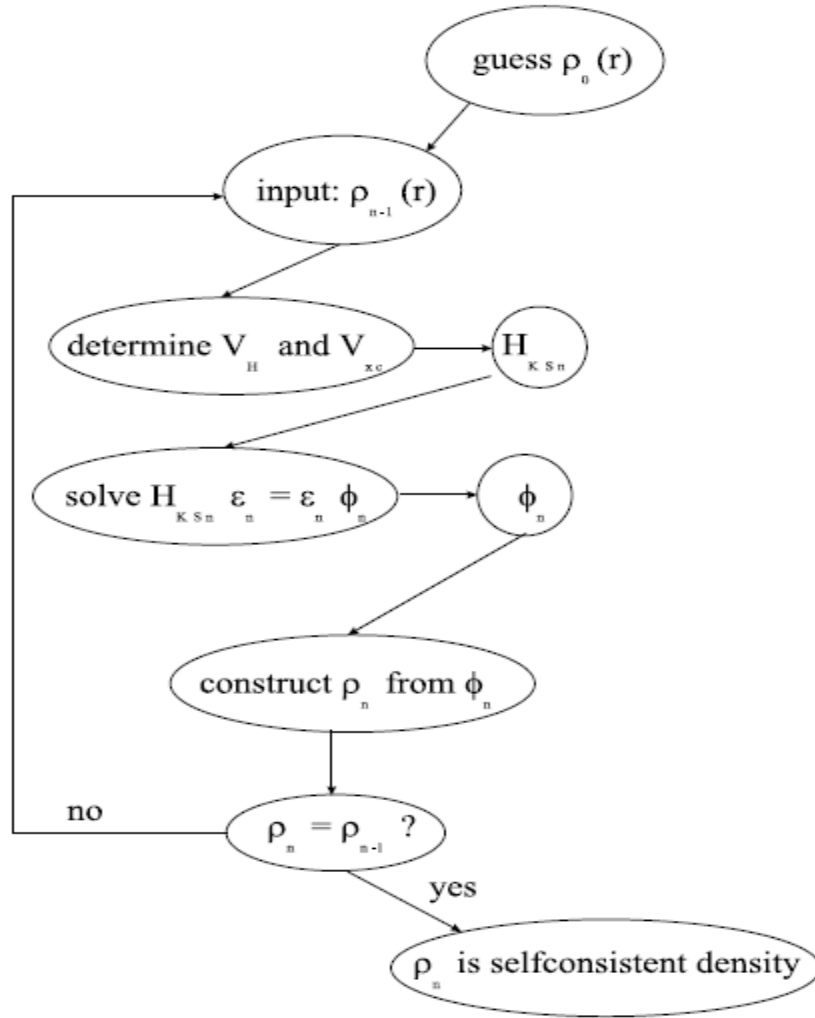
$$(H - \epsilon_i O)C_i = 0 \quad (20.1)$$

أين H هاملتون كوهان_شام، O مصفوفة التغطية .

حل معادلة كوهان_شام يسمح لنا بإيجاد الكثافة الإلكترونية بدقة، شريطة أن تكون طاقة التبادل_ارتباط

$E_{xc}[\rho(r)]$ محددة بدقة، حل هذه المعادلات هو تكراري وفقا لعملية SCF ويؤدي إلى معرفة الطاقة الإلكترونية

الإجمالية للنظام كما هو موضح في المخطط التالي



الشكل 1.1: يمثل الحلقة التكرارية للحساب

8.1 تقريب الكثافة المحلية LDA:

تقريب الكثافة المحلية هو تقريب موضعي لنظام الإلكترونات الامتجانس باعتباره موضعيا متجانس بحيث تعطي طاقة التبادل

الارتباط .

$$E_{XC}^{LDA}(\rho) = \int \rho(r) \varepsilon_{xc}(\rho(r)) dr^3 \quad (21.1)$$

وباستخدام مبدأ سبين مدار تكتب طاقة التبادل _ ارتباط ب:

$$E_{xc}^{LDA}(\rho \uparrow, \rho \downarrow) = \int \rho(r) \varepsilon_{xc}(\rho \uparrow(r), \rho \downarrow(r)) dr^3 \quad (22.1)$$

مع العلم أن طاقة تبادل _ ارتباط و ε_x طاقة التبادل

ولحساب كثافة الإلكترونات يتم الجمع على كل المدارات المشغولة أي :

$$\rho(r) = \sum \varphi_i^*(r) \varphi_i(r) \quad (23.1)$$

9.1 تقريب التدرج المعمم GGA:

أدخل لتحسين دقة النتيجة المتحصل عليها في LDA حيث يتم كتابة طاقة التبادل والارتباط كدالة للكثافة

الإلكترونية $\rho(r)$ والتدرج $|\nabla\rho(r)|$ لا يؤخذ كخاصية منظمة الإلكتروني [4]

إذن: طاقة تبادل _ ارتباط في تقريب التدرج المعمم تأخذ الشكل التالي :

$$E_{xc}^{LDA}(\rho) = \int f[\rho(r)](\rho(r), \nabla\rho(r)) dr^3 \quad (24.1)$$

يعبر عن تدرج $\nabla\rho(r)$

الفصل الثاني: برنامج WIEN2k

1.2 مقدمة

في سنة 1990 م بمعهد كيمياء المواد بجامعة التقنيات بفينا ظهر برنامج WIEN، حيث شهد هذا الأخير تطورا ملحوظا فظهرت عدة إصدارات له؛ سميت اعتمادا على سنة نشره وهي WIEN93، WIEN95، WIEN97 واستمرت نظوره حتى سنة 2000م؛ وهي السنة التي ظهر فيها برنامج WIEN2K وشهد هذا الأخير تحسنا كبيرا من حيث السرعة و الشمولية والقابلية الاستخدام .

يعمل برنامج WIEN2K على برنامج التشغيل LUnix [5] في الحواسيب الشخصية والمعالجات انتال Intel، وهو يتألف من عدة برامج مستقلة لأجراء العمليات الحسابية على بنية الالكترونية للأجسام الصلبة المتبلورة في أنضمه مختلفة إسنادا على نظرية الدوال للكثافة ، ويمكن حساب عدة خصائص لهذه الأجسام منها :

-عصابات الطاقة ، كثافة الحالات ومساحة فيرمي

-كثافة الالكترونات

-الطاقة الكلية والقوى الذرية

2.2 مميزات برنامج WIEN2K

يتم العمل فيه من خلال إدخال البنية (إحداثيات الذرات، معاملات الشبكة البلورية ، المجموعة الفراغية ، نوع الذرات) يمكنه العمل بإرفاق برامج كبرنامج Xcreys Den يعطي صورة ثلاثية الأبعاد لبنية المادة والكثافة الالكترونية يرسم بعض المنحنيات تلقائيا مع إرفاقه بالبيانات اللازمة واستنتاج المعاملات الفيزيائية بفضل قاعدة البيانات التي تتضمن معلومات حول عناصر الجدول الدوري .

يحسب مجموعة من الخصائص للمادة مثل (عصابات الطاقة، كثافة الحالات ، مساحات فرمي، الكثافة الالكترونية،

كثافة السبين، معاملات البنية للأشعة X، الطاقة الكلية، الخصائص البلورية، الخصائص الكهربائية، طيف الإصدار

والامتصاص أشعة X) [6]

3.2 خوارزمية برنامج WIEN2K

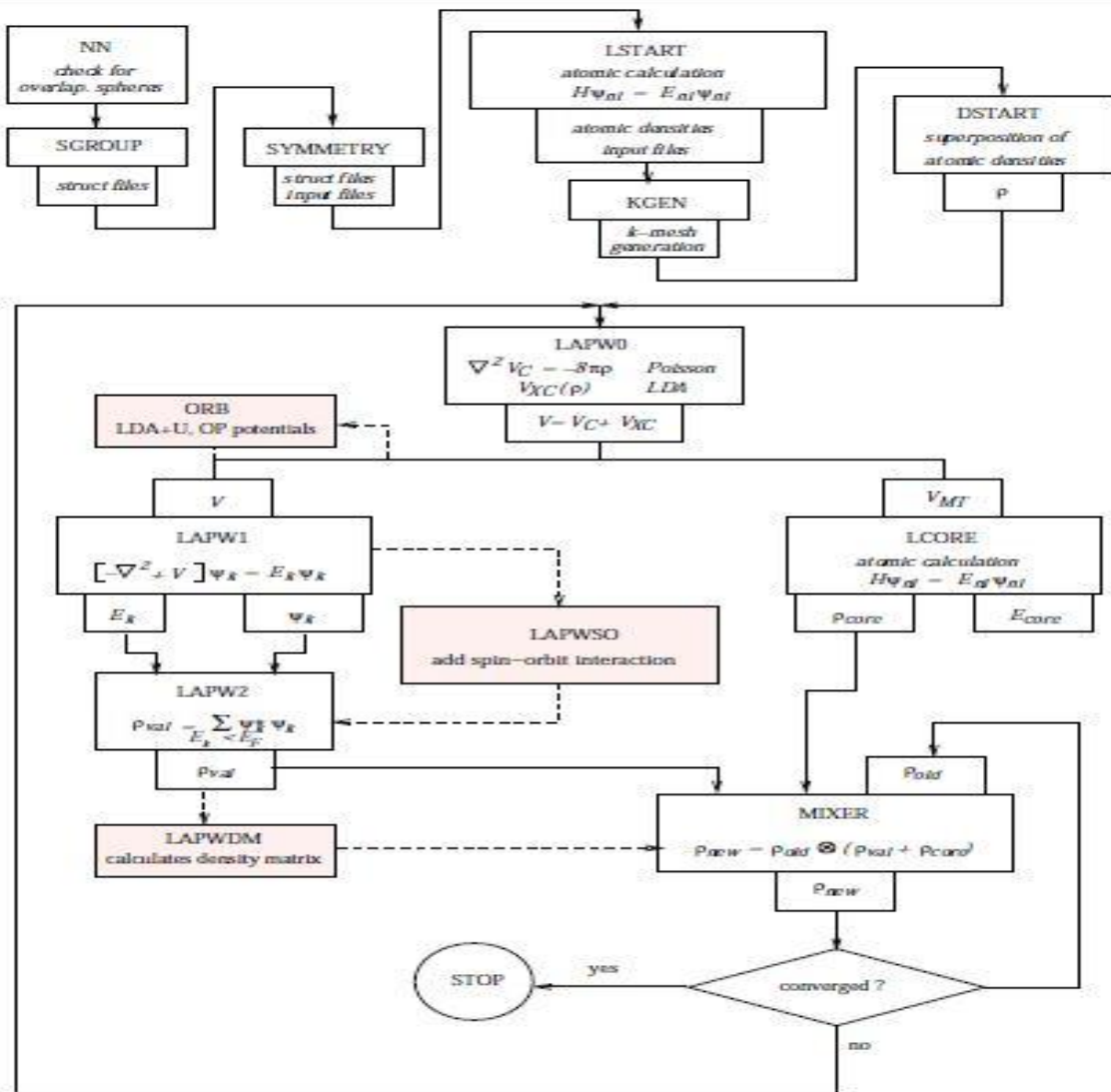
يستخدم برنامج WIEN2k في الرسم البياني كما هو موضح في الشكل (1-2)

يعرض أشكال تخطيطية ، وأول خطوة تعليمية له في الحساب هي استخدام سلسلة من البرامج الصغيرة المساعدة على

إدخال البرامج الرئيسية ، يبدأ بدليل فرعي يسمح بتحديد ملف الإدخال case.struct كما أنه يدير البرامج الفرعية

بواسطة .init-lapw 6

الشكل 1.2: خوارزمية برنامج WIEN2K



4.2 برامج الإعدادات الأولية

1.4.2 برنامج حساب البعد NN

هذا البرنامج يستعمل لحساب المسافات بين الذرات ابتداء من مسافة الجوار الأقرب إلى مسافة الجوار من الرتبة الرابعة. يستعمل هذا البرنامج الملف الأساسي case.struct، والذي تكون فيه المواقع الذرية في خلية الوحدة محددة من أجل حساب الأبعاد بين الذرات، وكشرط يجب أن تكون مسافة الجوار الأقرب بين الذرتين أكبر من مجموع أنصاف أقطارهما. يتم وضع جميع حسابات في ملف يسمى case. Outputnn.

2.4.2 برنامج فضاء المجموعة SGROUP

يستخدم معلومات case.struct (نوع الشبكة، ثابت الخلية، الذرات المركبة) ويحدد فضاء المجموعات وكذلك الفضاءات النقطية ذات المواقع اللاتناضرية حيث يستخدم الشحنات النووية لإنتاج الاختلافات اعتمادا على case.struct للذرات الاستثنائية، كما يمكنه إيجاد اصغر خلية الوحدة، ويستطيع أيضا إنتاج ملف البنية الجديد case struct sgroup الملف السابق.

3.4.2 برنامج التناظر SYMMERTY

هو برنامج الذي يسمح بحساب عمليات التناظر للمجموعة الفضائية حيث المعلومات الواردة تكون في الملف (case.struct) الذي يعطي معلومات عن نوع الشبكة، مواضع الذرات، الخ. كما يمكن أن نحدد من خلاله المواقع النووية المختلفة ومصنوفة التناوب المقابلة. لأن أهم ما يميز الشبكة البلورية هي عملية التناظر بهدف إعادة البناء البلوري لوضعه الأصلي وذلك لتقليص مدة حسابات WIEN2K.

4.4.2 برنامج LSTART

هذا البرنامج يقوم بحساب الكثافة الإلكترونية للذرات البنية يحدد كيفية التعامل مع المدرات في حسابات بنية الشريط (الحالات الداخلية core وحالات الشريط band، مع أو بدون المدرات المحلية).

هنا يجب اختيار نوع طاقة الارتباط _التغير (GGA,LDA) وطاقة الفصل بين حالات الداخلية وحالات التكافؤ. هذا البرنامج يتولد عنه ملف قابل للتحرير (التغير) اسمه case.outputst. هذا الأخير يمكننا من فحص المخرج (هل خصصت أعداد ذرية خاصة، هل البرنامج lstart يتقارب وهل الإلكترونات الداخلية محبوسة داخل الكرة الذرية؟). البرنامج lstart يتولد عنه أيضا عدة ملفات قابلة للتحرير (التغير) وهي: case.in0-st, in1-st, in2-st, inc-st, st و .inm.

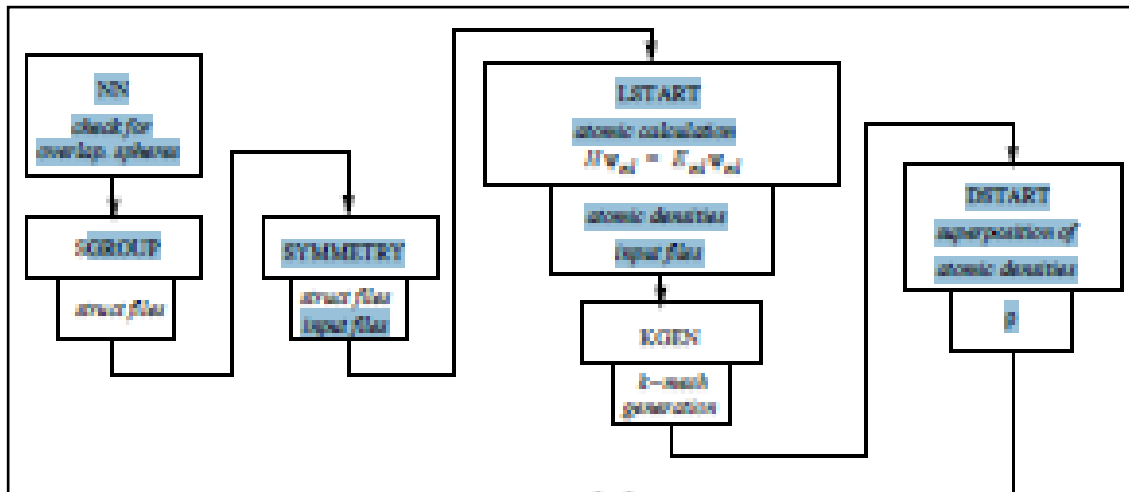
5.4.2 برنامج DSTART

هذا البرنامج يتولد عنه الكثافة الإلكترونية الأولية (ρ_0) قصد إدخالها في حسابات حلقة SCF بواسطة جمع الكثافات الناتجة من lstart في الملف case.outputd تأكد من أن gmax أكبر من gmin.

5.4.2 برنامج KGEN

هذا البرنامج يتولد عنه تقسيمات K صغيرة جدا في منطقة بريليون الأولى. يجب تحديد نقاط K في منطقة بريليون الأولى (يستعمل العدد 1000 الذي يمثل نقاط عدد K للمقارنة وزيادة في هذا العدد لتحسين دقة الحساب). يتولد عن هذا البرنامج ملف case.Klist الذي يمكننا من تحقق من عدد نقاط K في منطقة بريليون الأولى ومجال الطاقة من أجل نقطة K الأولى. يمكننا من إعادة البرنامج KGEN (قصد توليد نقاط K مختلفة)

الشكل 2.2: مخطط الاستعدادات الأولية



5.2 برنامج حساب حلقة SCF

حسابات الحلقة SCF تعتمد على عدة برامج فرعية وهي :

1.5.2 برنامج LAPW0

هذا البرنامج يقوم بحساب الطاقة الكلية V_{tot} لحالة المدروسة وهي جمع طاقة هارترلي (طاقة النظام الإلكتروني بدون تفاعل) مع طاقة الارتباط _التغير V_{xc} باستخدام الكثافة الإلكترونية الأولية (ρ_0) كمدخل.

ينتج عن هذا البرنامج ملف مسؤول عن الجزء الكروي و `case.vsp` وملف آخر مسؤول عن الجزء الغير

الكروي `case.vns` بالنسبة للأنظمة التي يكون فيها الاستقطاب الذاتي، كثافة الإلكترونات الذاتية `case.clmup`

و `case.clmudn` تقودنا إلى زوج من الملفات الطاقة تسمى `case.vsup` `case.vnsup` و

`case.vspdn` ، `case.vnpdn`.

2.5.2 برنامج LAPW1

هو برنامج يقوم بحساب مصفوفة التداخل ومصفوفة الهاملتون. بواسطة تقطير مصفوفة الهاملتون أي البحث على القيم

الذاتية (الطاقات) والمتجهات الذاتية (الأساس الذي يمثل حلول معادلة شرودنجر) المتواجدة في الملف

`case.vector`. لكي الحساب ذو فعالية يستعمل أساس LAPW و الأساس APW+lo.

3.5.2 برنامج LAPW2

هذا البرنامج يقوم بحساب توزيع الكثافة الإلكترونية للإلكترونات التكافؤ . يستخدم ملفات

`case.vector` و `case.energy` لحساب طاقة فرمي و توزيع الكثافات الإلكترونية لكل حل مشغولة (فيها

إلكترونية) وكل شعاع موجي k .

4.5.2 برنامج LCORE

يقوم هذا البرنامج بحساب الحالات الداخلية بالنسبة للجزء الكروي (case.vsp). يتم حساب القيم الذاتية وتوضع في ملف case.clmcor مع الكثافات الإلكترونية.

5.5.2 برنامج MIXER

في هذا البرنامج يقوم بجمع جميع كثافات الالكترونات (الحالات المركزية ، الحالات شبه مركزية و حالات التكافؤ) من أجل إنتاج الكثافة الإجمالية ، كما يقوم بمزج الكثافة الجديدة مع كثافة المدخلات من أجل تحقيق استقرار تكرار SCF .

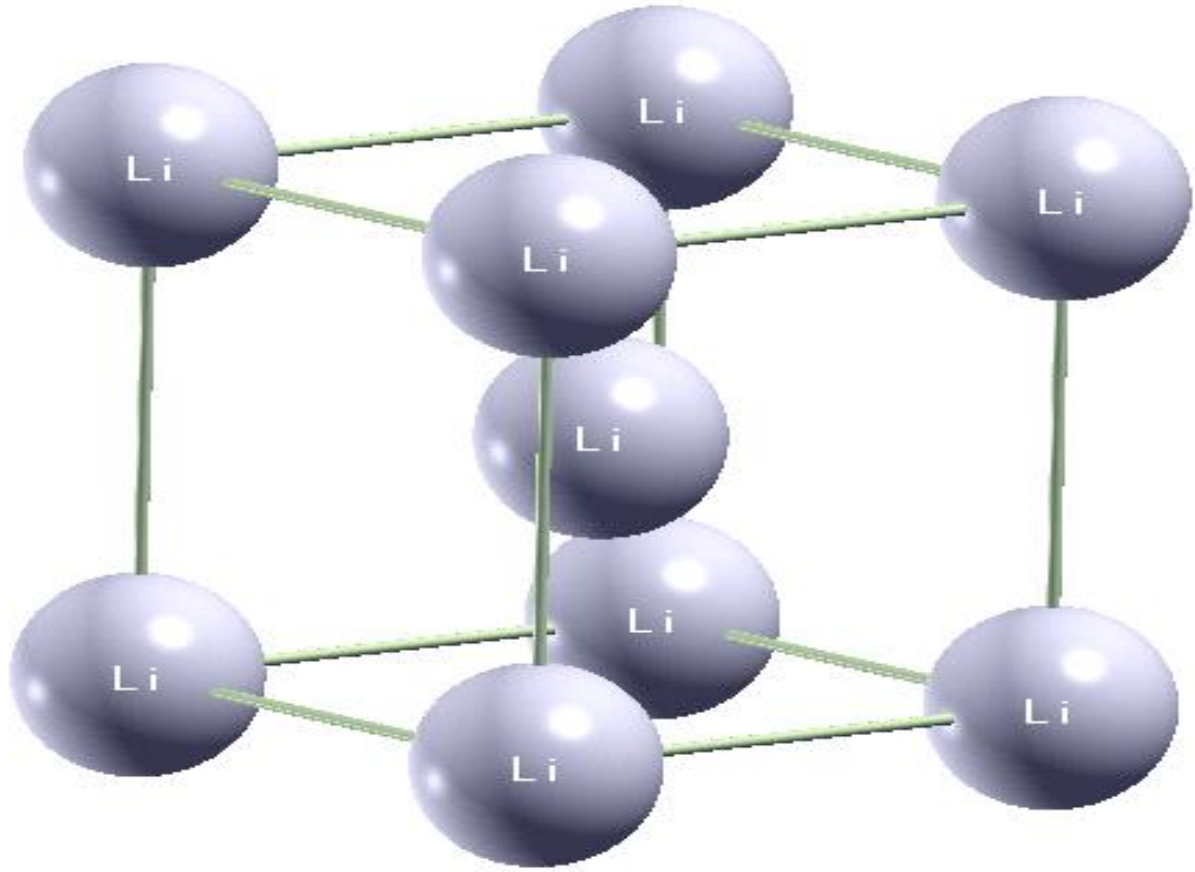
الفصل الثالث النتائج والمناقشة

1.3 مقدمة

تناولنا في هذا البحث دراسة فعل الضغط الهيدروستاتيكي على هيدريد الليثيوم LiH ، الذي له بنية مكعبة. الزمرة الفضائية لهذا الهيدريد هي LiH_{225} . سندرس مدى تأثير الضغط الهيدروستاتيكي على كثافة الحالات لهيدريد الليثيوم.

2.3 بنية الليثيوم Li_{229} وهيدريد الليثيوم LiH_{225}

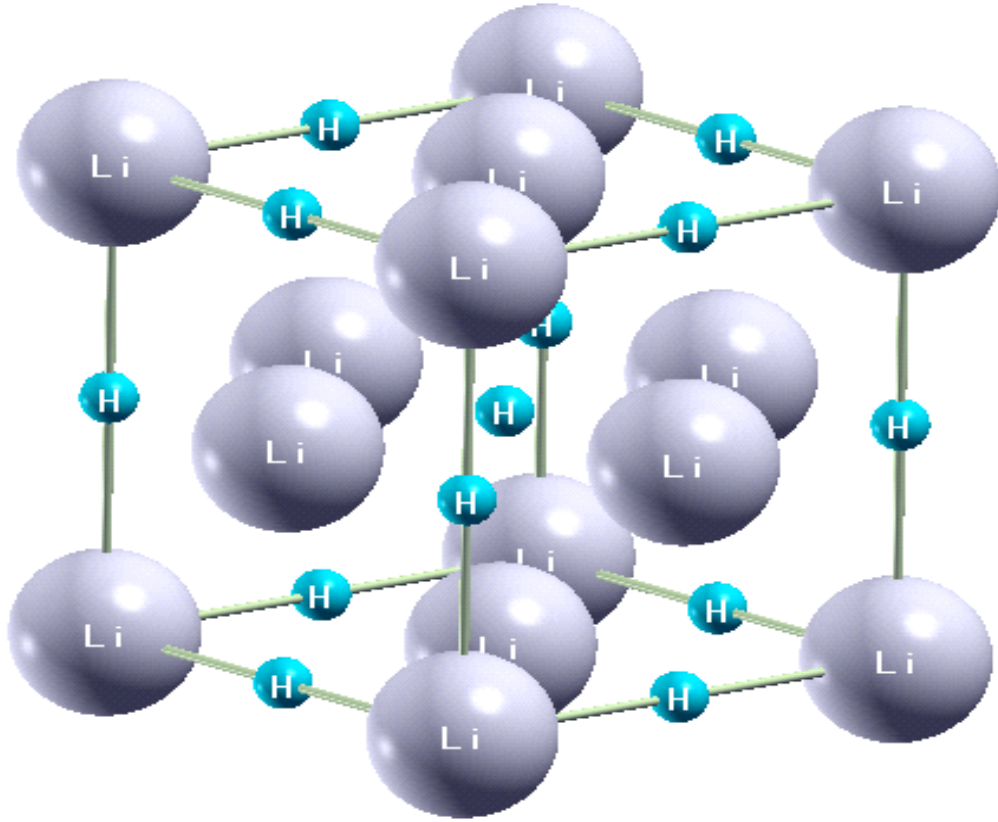
الليثيوم هو عنصر كيميائي رمزه Li يقع في الجدول الدوري ضمن عناصر الدورة الثانية وفي المجموعة كأول الفلزات القلوية وله بنية مكعبة ممرزة الشكل (1.3) ويتميز بالخواص المبنية في الجدول 2.3 يتبلور الليثيوم مع الهيدروجين لتشكيل هيدريد الليثيوم الذي هو عبارة مركب كيميائي له الصيغة LiH ، ويكون على شكل مسحوق بلوري ابيض رمادي. مركب هيدريد الليثيوم مثل هيدريدات الفلزات القلوية ذو بنية أيونية وله بنية بلورية مشابهة لكوريد الصديوم (شكل 3.2) ويتميز بالخواص المبنية في الجدول 3.3



الشكل 1.3: بنية الليثيوم _Li_229

الجدول 1.3 : خصائص الليثيوم Li_229

المميزات الفيزيائية والكيميائية	تعين الخاصية
3	العدد الذري
	الكتلة الذرية
1.0	الكهروسالبية
0.06nm	نصف القطر الأيوني
0.145nm	نصف القطر الذري
	توزيع الإلكترونات



الشكل 2.3: بنية هيدريد الليثيوم LiH₂₂₅

جدول 2.3 : خصائص هيدريد الليثيوم LiH₂₂₅

المميزات الفيزيائية والكيميائية	تعيين الخاصية
LiH	الصيغة الكيميائية
225_Fm'3m	المجموعة الفراغية
a=4.00Å°	ثابت الشبكة
بنية كلوريد الصوديوم (fcc)NaCl	البنية البلورية
h=(0.5,0.5,0.5) وLi=(0,0,0)	الإحداثيات
z(Li)=3 وZ(H)=1	العدد الذري

3.3 إعداد ملفات البنية تفاصيل لـ LiH_225 و Li_229

لدراسة مركب هيدريد الليثيوم LiH_225 و Li_229 يجب تحضير الملف الأساسي للبنية وذلك بإتباع الخطوات

التالية:

فتح البرنامج WIEN2K

فتح النافذة STRUCT GEN

إدخال المعطيات وفق المبينة في الجداول

الجدول 3.3.: مدخلات ملف البنية للليثيوم

المركب	الشبكة	الزمرة	ثابت الشبكة المدخل بـ A°	مواضع فيكوف	إحداثيات Li	Rmt Bohr
Li_229	مكعب	229	3.491	1a	(0.0.0).	1.8

الجدول 4.3 : مدخلات ملف البنية لهيدريد الليثيوم

المركب	الشبكة	الزمرة	ثابت الشبكة المدخل بـ A°	العنصر	مواضع فيكوف	إحداثيات	Rmt (Bohr)
LiH_225	مكعب	225	4.00	LI	4a	(0.0.0)	1.8
				H	4b	(0.5,0.5,0.5)	1.2

4.3 الطاقة الكلية لـ Li_229

تم حساب الطاقة الكلية لليثيوم Li_229 بإجراء حساب حلقة SCF وباستخدام الوسائط الآتية:

- ثابت الشبكة $a=3.491\text{\AA}$ [7]

- وسيط معيار التقارب نقاط K يساوي إلى 3000

- وسيط معيار التقارب $R_{mt} * K_{max}$ يساوي إلى 9

وجدت قيمة الطاقة الكلية لليثيوم Li_229 تساوي إلى $E=15.04392325\text{Ry}$

5.3 الطاقة الكلية لـ LiH_225 بدلالة الحجم والضغط الهيدروستاتيكي

نختار 10 حجوم مختلفة عن بعضها باتجاه الإنضغاطية وباتجاه التمدد قصد مسح مواضع حالة الاتزان (الحساب يتم في

درجة الصفر كلفن مطلقة). نقوم برسم منحنى الطاقة بدلالة الحجم وفق إسقاط معادلة مرناقا شكل 3.3 [5] [6]

من خلال الجدول نستخرج النتائج ونضعها في الشكل نلاحظ من منحنى الطاقة الكلية لـ Li_225 بدلالة الحجم

النتائج التالية :

توافق حالة توازن الحجم $V_{eq} = 108.2022(\text{Bohr})^3$ التي توافقت طاقة الكلية

نقوم بتقسيم المنحنى إلى مجالين حالة الحجم أصغر من الحجم في حالة توازن والحجم أكبر من الحجم في حالة التوازن.

في هذا المجال [107.0300 – 95.8227] نلاحظ الحجم أقل من الحجم في حالة التوازن أي زيادة الحجم مع

نقص في الطاقة أي حدوث حالة إنضغاطية.

في هذا المجال [117.1166 – 109.2715] نلاحظ الحجم أكبر من الحجم في حالة التوازن أي زيادة الحجم

مع زيادة في الطاقة أي حدوث حالة تمدد.

الجدول 5.3 يوضح التغير في الطاقة بدلالة الضغط الهيدروستاتيكي نلاحظ من المنحنى الطاقة الكلية لـ LiH-225

بدلالة الضغط الهيدروستاتيكي النتائج الآتية:

✓ توافق حالة توازن $P_{eq} = -1.356 GPa$ التي توافقت فيها الطاقة الكلية $E = -16.272090 Ry$

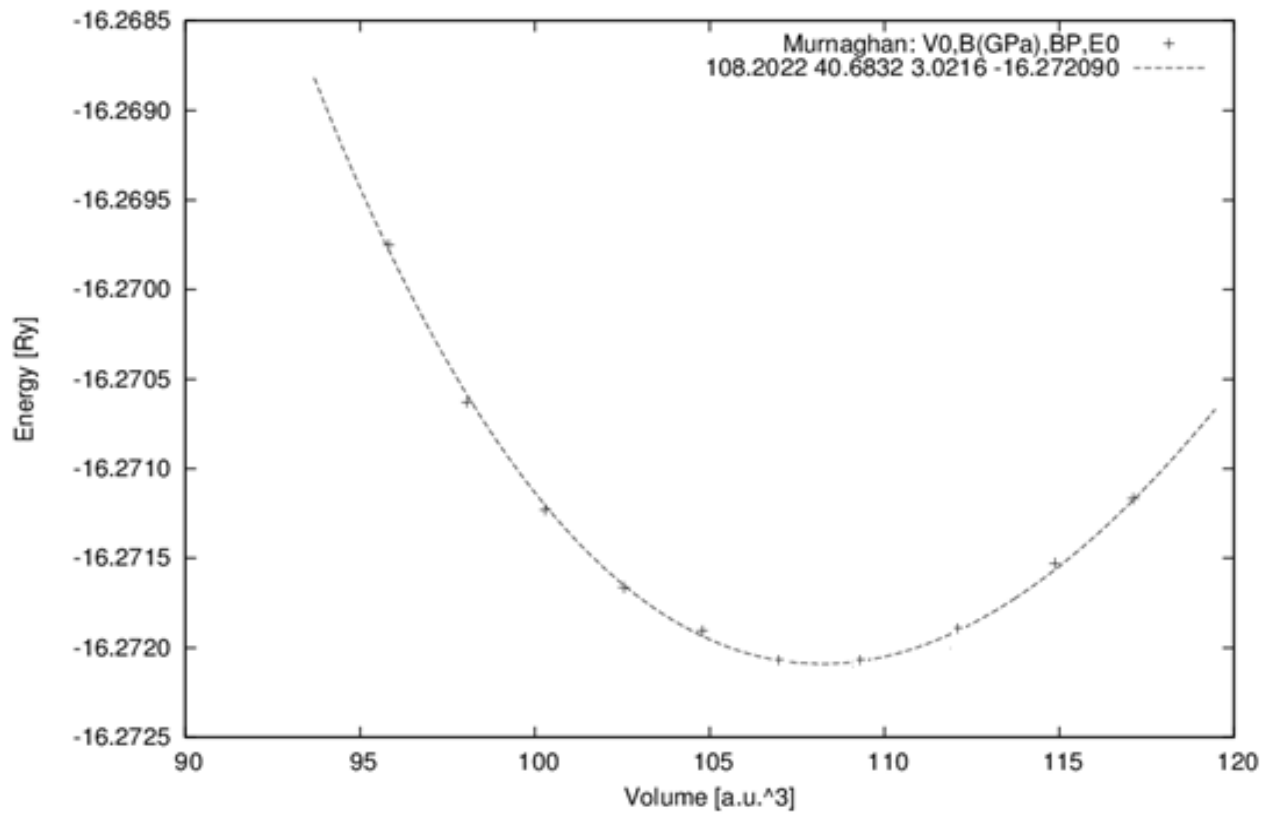
✓ الضغوط السالبة الأقل من الضغط في حالة التوازن نلاحظ الطاقة تتناقص تدريجياً بزيادة الضغط

✓ الضغوط الموجبة الأكبر من الضغط في حالة التوازن نلاحظ الطاقة تتزايد تدريجياً بزيادة الضغط

الجدول 5.3: الطاقة الكلية لـ LiH_225 بدلالة الحجم

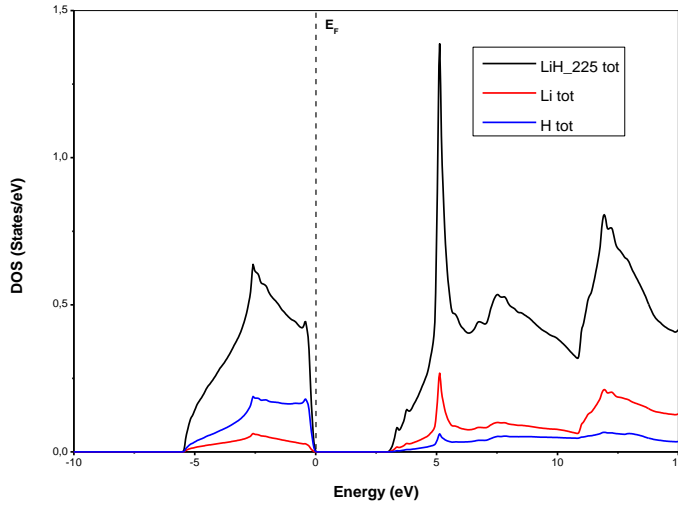
النقطة	الطاقة الكلية بـ Ry	الضغط الهيدروستاتيكي (Gpa)	الحجم بـ $(Boh)^3$	ثابت الشبكة (A°)
1	-16.271230	3.464	100.3056	3.902977243297
2	-16.270629	4.661	98.0641	3.873685708816
3	-16.269749	5.972	95.8227	3.843944373885
4	-16.272004	-0.394	109.2715	4.015964999629
5	-16.272020	0.450	107.0300	3.988315501379
6	-16.271906	1.369	104.7886	3.960277058034
7 حالة الاتزان	-16.272090	-1.356	108.2022	4.002000000000
8	-16.271662	2.371	102.5471	3.931835910992
9	-16.271801	-1.371	112.0733	4.050000076738
10	-16.271528	-2.227	114.8752	4.083472638696
11	-16.271167	-2.865	117.1166	4.109861108155

الشكل 3.3 الطاقة الكلية لـ LiH_225 بدلالة الحجم



6.3 كثافة الحالات للهيدريد LiH_225 في حالة الاتزان

الشكل 5.3 يوضح كثافة الحالات للهيدريد LiH_225 في حالة الاتزان. منحني كثافة الحالات يبين أن هذا الهيدريد هو عازل بسبب كبر العصابة المانعة 3eV . الجزء المسؤول على الروابط الكيميائية يتمثل في الحالات الرابطة (المملوءة بالإلكترونات) الموجودة في عصابة التكافؤ المحددة بالمجال $[-5.5-0\text{eV}]$. نلاحظ في هذا الجزء أن الهيدروجين هو الغالب مقارنة مع الليثيوم. التفاعل بين الحالة $1s$ للهيدروجين و الحالة $2s$ لليثيوم يحدث خاصتنا عند الطاقة الموافقة لـ -2.5eV . هذا التفاعل هو عبارة عن تفاعل ذو طبيعة أيونية بين الشاردين Li^+ و H^- يسمح بنقل الإلكترون المتواجد في الطبقة الخارجية لليثيوم إلى الطبقة الخارجية للهيدروجين. الحالات المتواجدة في عصابة طاقة التوصيل هي حالات شاغرة من الإلكترونات وهي تعبر عن الحالات الغير رابطة.



شكل 4.3: كثافة الحالات للهيدريد الليثيوم LiH_225

7.3 تأثير فعل الضغط الهيدروستاتيكي على كثافة الحالات للهيدريد LiH_225

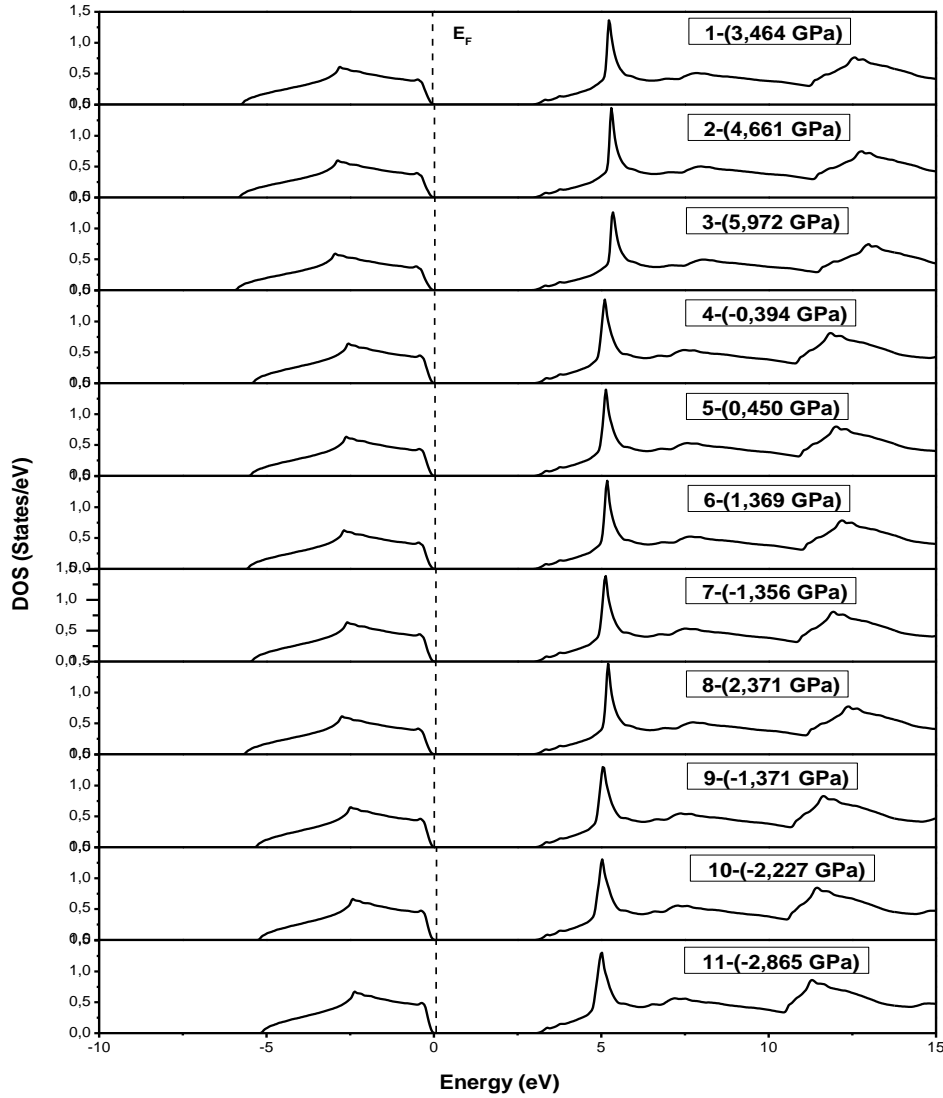
لدراسة تأثير فعل الضغط الهيدروستاتيكي على كثافة الحالات أخذنا 11 ضغط هيدروستاتيكي الموافقة للحجوم الخلية الأساسية للهيدريد الليثيوم وقمنا بحساب كثافة الحالات الموافقة لكل ضغط (شكل 6.3). نلاحظ ما يلي:

❖ عندما يرتفع الضغط من الضغط -2.865 Gpa إلى الضغط 3.464 Gpa ينتج عن ذلك زيادة في عرض عصابة التكافؤ.

❖ عندما يرتفع الضغط من الضغط -2.865 Gpa إلى الضغط 3.464 Gpa ينتج عن ذلك نقصان في

العصابة المانعة.

الزيادة في عرض عصابة التكافؤ ناتج عن نقصان الطابع الأيونية وظهور الطابع التساهمي مما يؤدي إلى تهمج قوي بين الحالات القريبة من بعضها البعض تحت تأثير الضغط الهيدروستاتيكي. ارتفاع الضغط يؤدي إلى نقصان الطاقة الضرورية لنزع إلكترون المدار الخارجي لليثيوم لكي ينتقل إلى المدار الخارجي للهيدروجين (ربطة أيونية) إلى طاقة تسمح بمشاركة (ارتباط تشاركي) بين الإلكترون الخارجي لليثيوم والإلكترون الخارجي للهيدروجين (الربطة التساهمية). هذه الطاقة هي الموافقة لطاقة التهمج بين الحالة 1s للهيدروجين و الحالة 2s لليثيوم على مستوى الخط المتواجد في عصابة التكافؤ.



شكل 5.3: كثافة الحالات للهيدريد الليثيوم LiH_225 الموافقة لـ 11 ضغط كهروستاتيكي

نقصان في العصابة المانعة يدل على وجود انزياح في عصابة التكافؤ نحو الطاقات المنخفضة في حين أن عصابة التوصيل تنزاح نحو الطاقات المرتفعة. نقصان في العصابة المانعة يرافقه نقصان في استقرار الهيدريد. الضغط الهيدروستاتيكي الذي

يوافق الضغط 5.972 GPa يكون فيه الهيدريد أقل استقرار ودرجة حرارة اللازمة لاسترجاع (تفكيك) ذرات الهيدروجين من هذا الهيدريد تكون أقل بكثير من الدرجة 700°C .

نفس هذه النتائج تم الحصول عليها بخصوص تأثير الضغط على المركبات KZnF_3 و CsCdF_3 [8].

الخاتمة العامة

في هذا العمل قمنا بدراسة تأثير الضغط الهيدروستاتيكي على استقرار هيدريد الليثيوم باستخدام كثافة الحالات لهيدريد الليثيوم. تم أخذ 11 ضغط كهروستاتيكي بما فيها حالة التوازن (الموافقة لضغط السابع) من جهة التقلص والامتداد لهيدريد الليثيوم. كثافة الحالات تم حسابها لكل ضغط باستخدام البرنامج WIEN2K الذي يركز على نظرية التابعية للكثافة، طريقة الأمواج المستوية الخطية المتزايدة و الكمون الكلي (أخذ جميع الحالات بعين الاعتبار في الحساب). ارتفاع الضغط يؤدي إلى زيادة في عرض عصابة التكافؤ. مما ينتج عنه نقصان في الطاقة الضرورية لنزع إلكترون المدار الخارجي لليثيوم لكي ينتقل إلى المدار الخارجي للهيدروجين (ربطة أيونية) إلى طاقة تسمح بمشاركة (ارتباط تشاركي) بين الإلكترون الخارجي لليثيوم والإلكترون الخارجي للهيدروجين (الرابعة التساهمية). ارتفاع الضغط يؤدي إلى نقصان في العصابة المانعة مما ينتج عنه وجود إنزياح في عصابة التكافؤ نحو الطاقات المنخفضة وفي عصابة التوصيل نحو الطاقات المرتفعة. هذا النقصان في العصابة المانعة يرافقه نقصان في استقرار الهيدريد LiH_{225} مما يسمح بإسترجاع (تفكيك) ذرات الهيدروجين من هذا الهيدريد بأقل تكلفة (درجة الحرارة المستعملة لتفكيك ذرات الهيدروجين من الهيدريد تكون أقل بكثير من الدرجة $700^{\circ}C$). كنتيجة لذلك الضغط الكهروستاتيكي يلعب دور كبير في جعل الهيدريد أكثر استقرار أو أقل استقرار. الهيدريد الأقل الاستقرار هو الهيدريد الذي يسمح بتخزين الهيدروجين بأقل تكلفة وبدون أخطار وكمقاربة لذلك مثل الأسفنجة للماء.

- [1] [tp ://fr.wikipedia.org/wiki/Stockage_d27hydrogC3A8ne](http://fr.wikipedia.org/wiki/Stockage_d27hydrogC3A8ne) 27 avril2(internat)
- [2] بري السعدي ، أطروحة شهادة الدكتوراه في العلوم ، جامعة سطيف (2003)
- [3] Blaha.P, Schwarz.K, Luitz J, Madsen GKH, Kvasnicka D.wien2K. Vienna, Austria: Technical University of Vienna; (2001).
- [4] Perdew JP, Burke K, Ernzerhof M.GGA Made simple. Phys Rev Lett (1996) ;77 :3865-8.
- [5] JohnP. Perdew, Kieron Burk, and MattiasErnzerhof. Generalized gradientapproximation made simple. Phys. Rev.Lett, 77(18) :3868,oct 1996. Doi :10 . 1103/Phys-RevLett.45.566
- [6] User's guide, wien2K 12.1(release15.1 0.2014) Peter BLAHA, Karlheinz SCHWARZ, Georg MADSEN, Dieter KVASNICKA, Joachim LUITZ
- [7] C. Kittel, Physique de l'état solide, 8^{ème} édition, Dunod Paris,(2007).
- [8] A. Meziani, Etude des propriétés structurales, électroniques, élastiques et optiques des composés fluoro-pérovskites CsCdF₃ et KZnF₃, Thèse de doctorat, Université Badji Mokhtar-Annaba (2012).

الملخص

قمنا في هذه المذكرة بدراسة فعل الضغط الهيدروستاتيكي على كثافة الحالات لمركب هيدريد الليثيوم LiH_225. كثافة الحالات الموافقة لكل ضغط تم حسابها باستخدام البرنامج WIEN2K الذي يركز على نظرية التابعية للكثافة، طريقة الأمواج المستوية الخطية المتزايدة و الكمون الكلي (أخذنا جميع الحالات بعين الاعتبار في الحساب). ارتفاع الضغط يؤدي إلى نقصان في العصابة المانعة مما ينتج عنه وجود انزياح في عصابة التكافؤ نحو الطاقات المنخفضة وفي عصابة التوصيل نحو الطاقات المرتفعة. هذا النقصان في العصابة المانعة يرافقه نقصان في استقرار الهيدريد LiH_225 مما يسمح باسترجاع (تفكيك) ذرات الهيدروجين من هذا الهيدريد بأقل تكلفة (درجة الحرارة المستعملة لتفكيك ذرات الهيدروجين من الهيدريد تكون أقل بكثير من الدرجة 700°C).

الكلمات المفتاحية: نظرية التابعية للكثافة DFT، برنامج WIEN2K، الليثيوم

Summary:

In this research we study the effect of hydrostatic pressure on the density of state for the lithium hydride LiH_225 compound. The density of state relative to any pressure was calculated using the WIEN2K package ; which is based on the density functional theory (DFT) and the full potential linearized augmented wave (FP-LAPW) (take all cases in account for the computational). It has been found that the increase of pressure leads to decrease of the gap energy, in other wise the valence band moves to lower energy whereas the conduction band moves to higher energy levels. Narrowing of gap energy is related to the decrease of the stability of LiH_225 hydride which allows the dissociation of hydrogen atoms from this compound with the lowest cost (the temperature of this dissociation is less than 700°C)

. **key words:** the density functional theory (DFT), WIEN2K package, lithium

Résumé:

Dans ce travail on a étudié l'effet de pression hydrostatique sur la densité des états de la composé d'hydrolithium. la densité d'état approuvés pour chaque pression calculé par le programme WIEN2K qui est basé sur la théorie fonctionnelle de la densité, la méthode des ondes planes linéaires croissantes et latence globale. la pression élevée conduit à une diminution de bande interdite qui donne en présence de déplacement de la bande de valence sauf l'énergie diminuée, et la bande de conduction vers les énergies élevées, cette baisse au niveau de bande interdite résulte une baisse de la stabilité hydride ce qui permet la récupération des atomes d'hydrogène de le hydride le plus bas coût (la température utilisé pour le dissociation des atomes d'hydrogène de l'hydride est plus grande que 700°C)

Mots clés: théorie fonctionnelle de la densité DFT, programme WIEN2K, lithium