LENREZA

دراسة الخصائص البنيوية والالكترونية والضوئية لعناقيد الذهب Au_n والبلاتنيوم Pt_n (n=2-10)

جامعة قاصدي مرباح ورقلة كلية الرياضيات وعلوم المادة
قسم الفيزياء
مخبر تطوير الطاقات الجديدة والمتجددة في المناطق الجافة والصحراوية
L.E.N.R.E.Z.A
تخصص فيزياء إشعاعية
من إعداد الطالبة : صندالي زهية
sandalizahia93@gmail.com
تحت إشراف الأستاذين: بن طويلة عمر
بن كريمة يمينة

ملخص

من خلال عملنا هذا وباستعمال برنامج (siesta) الذي يستخدم طريقة شبه الكمون والتي ترتكز على نظرية دالية الكثافة (DFT)، قمنا بحساب الخصائص البنيوية والمتمثلة في متوسط طول الرابطة والكترونية والمتمثلة في طاقة الربط Ebin والتغير الثاني في طاقة الربط Δ_2 E(n) بالإضافة إلى كمون التأين العمودي PI_V وكثافة الحالات (DOS) لعناقيد المعادن النبيلة (الذهب والبلاتنيوم) وهذا باستعمال تقريب التدرج المعمم GGA .

الكلمات المفتاحية : DFT ، الخصائص البنيوية والكترونية، عناقيد المعادن النبيلة .

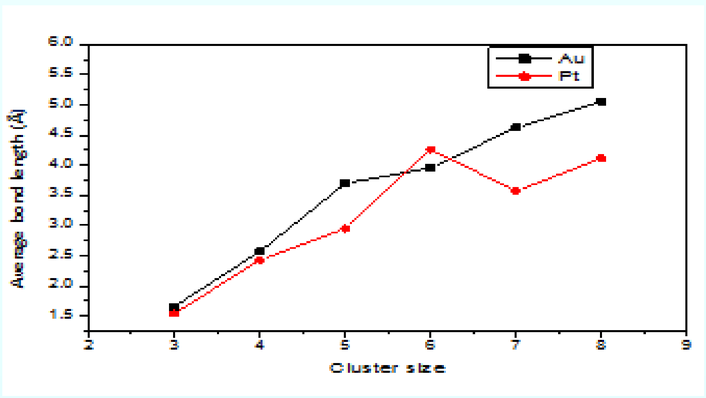
1. المقدمة

تلعب عناقيد المعادن النبيلة و التي من بينها عناقيد الذهب والبلاتنيوم دورا هاما في مختلف المجالات، ولقد ركزت العديد من الدراسات النظرية والتجريبية على دراسة وتطوير الخصائص البنيوية والكترونية لعناقيد هذه المعادن، فهي تعتبر المحط الواصل بين الذرة والبلورة ، حيث تم اختيار دالية الكثافة الوظيفية (DFT) وكذا استعمال تقريب التدرج المعمم (GGA) للحصول على البنى الأكثر استقرارا . من خلال عملنا هذا سنبرز البنى الكترونية التي تم التوصل إليها لبعض عناقيد المعادن النبيلة وذلك انطلاقا من العنقود المكون من ذرتين إلى غاية العنقود المكون من عشرة ذرات [1-2] .

2. النتائج والمناقشة

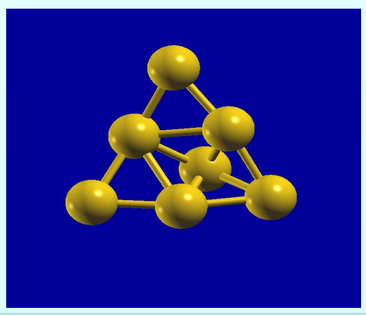
2 .1. الخصائص البنيوية

أ- متوسط طول الرابطة

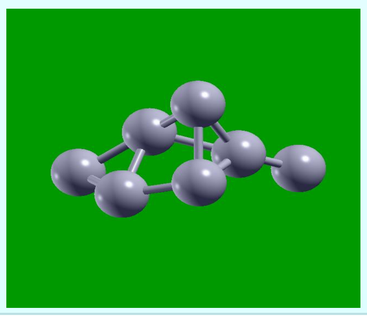


الشكل (1):متوسط طول الرابطة لعناقيد معدني الذهب والبلاتين بدلالة حجم العنقود.

ب- بعض البنى الالكترونية المتحصل عليها لعناقيد معدني الذهب والبلاتين:



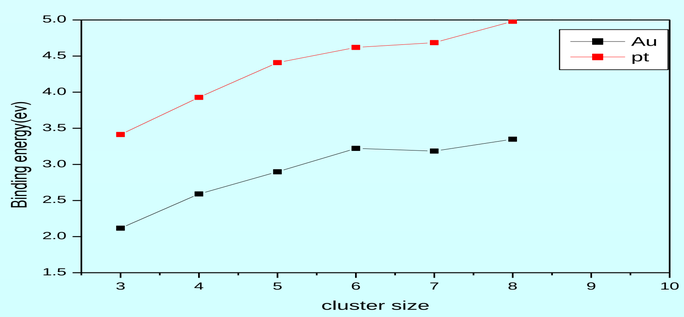
الشكل (2):عنقود الذهب Au5



الشكل (3):عنقود البلاتين Pt5

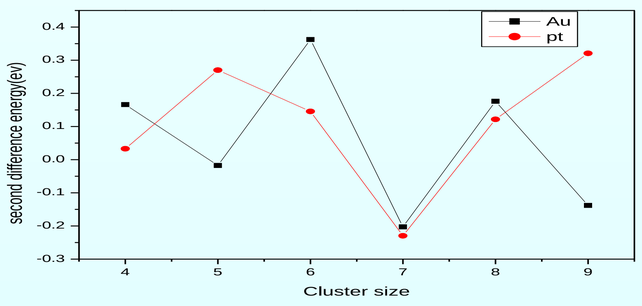
2 .2. الخصائص الكترونية

2 .2 .1. طاقة الربط Ebin



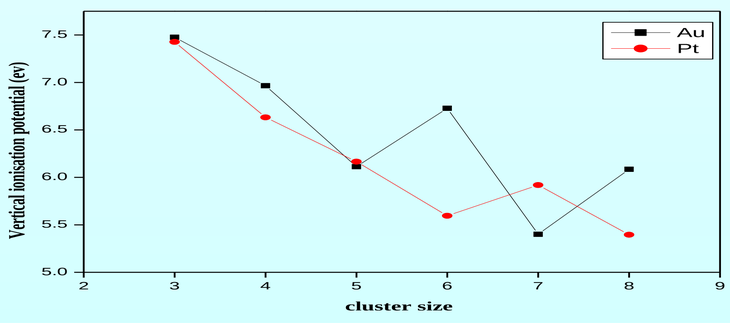
الشكل (4) : طاقة الربط لعناقيد معدني الذهب والبلاتين بدلالة حجم العنقود.

2 .2 .2. التغير الثاني في طاقة الربط Δ_2E(n)



الشكل (5) : التغير الثاني في طاقة الربط لعناقيد معدني الذهب والبلاتين بدلالة حجم العنقود.

2 .2 .3. كمون التأين العمودي PI_V



الشكل (6): كمون التأين العمودي لعناقيد معدني الذهب والبلاتين بدلالة حجم العنقود.

4. الخلاصة

كخلاصة لمراحل البحث المنجزة لحد الآن نجد أن تغير حجم العنقود له تأثير مباشر على مدى استقرارية النظام (البنى الالكترونية) أي يكون النظام أكثر استقرارا كلما زاد حجم العنقود .

المراجع

[1] M.Sofiane , théorie et calcul des propriétés physiques des clusters.PhD thesis , universtiy A/Mira de Bejaia (2007).

[2] L.A.Mancera and D.M.Benoit ,An alternative methodologe to assess the quality of empirical potentials for small gold clusters, Computational and Theoretical Chemistry .Computational and Theoretical Chemistry .1067 (2015).

[3]بن كريمة يمينة ،دراسة الخصائص البنيوية والالكترونية لعناقيد المعادن النبيلة Agn وAun(n=2-9) المتوضعة على سطح نصف ناقل. Zno.مذكرة دكتوراه ، جامعة قاصدي مرباح ورقلة (2017)