

# جامعة قاصدي مرباح

كلية الرياضيات وعلوم المادة

قسم علوم المادة



مذكرة: ماستر أكاديمي

فرع: علوم المادة

قسم: فيزياء

تخصص: فيزياء المواد

من إعداد الطالبة: عميرات مسعودة

الموضوع:

دراسة الخصائص المغناطيسية لمركب  $Ni_2MnSi$

بواسطة المبادئ الأولية

نوقشت علنا: 2015/05/28

أمام لجنة المناقشة المكونة من:

د. باحمد داودي	رئيسا	جامعة قاصدي مرباح
أ. محمدي الأزهر	ممتحنا	جامعة قاصدي مرباح
أ. دبوكراع عمار	مقررا	جامعة قاصدي مرباح

السنة الجامعية: 2015/2014

# شكر و تقدير

تكمل سعادتنا و نحن نضع آخر لمسات البحث ،ان

أشكر الله عز وجل على توفيقه لنا بإتمام هذا العمل المتواضع، و أن نسدي الشكر لمستحقيه

فلولاهم ما اكتمل البحث

نتقدم بفائق التقدير وأوفى شكر و امتنان للأستاذ د. بوكراع عمار . على اقتراحه موضوع البحث ثمّ

قبوله الإشراف عليه و متابعة البحث حتى مراحل اكتماله .

وللأساتذة المناقشين الأفاضل نتقدم بالشكر لقبولهم مناقشة بحثنا.

و نتقدم بأجزل شكر و أوفى حمد لأساتذتنا الأفاضل و أستاذاتنا الفضليات على اجتهادهم و مثابرتهم

طيلة عام دراسيّ مُضْن ، و تبليغهم رسالة العلم بإتقان و صدق

و نعترف أنّ باكورة هذا العمل إنما هي ثمرة غرسهم الطيب

و لأستاذنا الكريم الدكتور باحمد داودي الذي كان ملجأنا لكل إشكال و مرشدنا في كلّ عويصة

شكر خاصّ و عرفانّ

و لأستاذتنا الفاضلة عياط زهية كذلك شكرّ و عرفان خاصين

كما اشكر ايوب لغريسي على النصائح الثمينة.

و إلى زميلاتي وصديقاتي في الدراسات إلى من ساهم في إتمام البحث من قريب أو بعيد

لكلّ هؤلاء نتقدّم بشكر و امتنان و تقدير و عرفان.

## الإهداء

... إلى والدي العزيزين الدين

غرسا في حبّ العلم والمعرفة.

ولمنعلّمنا الحرف الأوفى ملحقه عمر بن عبد العزيز

أجزل الله لها المثوبة .

وإلى طلب العلم وهواة المعرفة في كل مكان .

... وإلى من ساند في إتمام هذا البحث .

... نهدي هذا الجهد المتواضع .

## قائمة المحتويات

1.....	مدخل
الفصل الأول: اعموميات عن سبائك هاسلر Heusler	
2.....	1.1 المقدمة
2.....	2.1 سبائك هاسلر Heusler
2.....	1.2.1 الخصائص البلورية
4.....	2.2 الخصائص المغناطيسية
4.....	1. 2.2.1 سبائك حديدية المغنطة Ferromagnétisme
5.....	2.2.2.1 سبائك حديدية مضادة Antiferromagnétisme
6.....	3.2.2.1 سبائك فيرر مغناطيسية Ferrimagnetique
6.....	3.2.1 تطبيقات سبائك هاسلر
6.....	1. 3.2.1 تطبيق سبائك هاسلر في الالكترونيات (spintroniques)
8.....	2.3.2.1 تطبيقات اخرى
الفصل الثاني: نظرية الكثافة التابعة DFT	
9.....	1.1.1.1 نظرية الكثافة الوظيفية
9.....	1.1.1.2 مقدمة
9.....	1.2.1.2 معادلة شرودينجر
10.....	3.1.1.2 تقريب بورن ابنهايمر Born-Oppenheimer
11.....	4.1.1.2 تقريب هارتري-فوك Hartree-Fock
12.....	2.1.1.2 نظرية الكثافة التابعة DFT
12.....	1.2.1.2 نظرية هوهنبارغ - كوهن Hohenberg et Kohn

13.....	2.2.II	معادلة كوهن شام Kohn-Sham
16.....	3.II	التقريبات
16.....	1.3.II	تقريب الكثافة الموضوع LDA
16.....	2.3.II	تقريب التدرج المعمم GGA
17.....	4.II	أساسات حل معادلة كوهن شام
17.....	1.4.II	طريقة الأمواج المستوية المتزايدة APW
19.....	2.4.II	طريقة الأمواج المستوية المتزايدة خطياً LAPW
19.....	5.II	برنامج Wien2k
20.....	6.II	خوارزمية Wien2k

### الفصل III: مناقشة النتائج

23.....	1.III	مقدمة
23.....	2.III	الخصائص البنيوية
23.....	1. 2.III	العينة $Ni_2MnSi$
24.....	2.2. III	انشاء دليل case-directory
24.....	3.2.III	ادخال المدخلات الرئيسية للملف case.struct
26.....	4.2.III	تهيئة الحساب
27.....	5.2.III	حساب SCF
28.....	6.2.III	تهيئة عامل $K_{max} * R_{MTmin}$ (عامل cut-off)
29.....	7.2 .III	تهيئة عدد النقاط K
30.....	8.2.III	تحسين الطاقة optimisation du calcul

31.....	3.III الخصائص الالكترونية.
32.....	2.3.III عصابات الطاقة.
33.....	2.3.III كثافة الحالات <i>DOS</i>
36.....	1.2.3.III مناقشة <i>DOS</i>
36.....	4.III الخصائص المغناطيسية
36.....	1.4.III العزم المغناطيسي واستقطاب السبين

## قائمة الأشكال

- 3 ..... بنية سبيكة هاسلر الشكل (1.I)
- 4 ..... البنى البلورية لسبيكة هاسلر الشكل (2.I)
- 5 ..... ترتيب العزوم في حالة فيرومغناطيسية الشكل (3.I)
- 5 ..... ترتيب العزوم في حالة فيرومغناطيسية الشكل (4.I)
- 6 ..... ترتيب العزوم في حالة انفيرومغناطيسية الشكل (5.I)
- 7 ..... صمام العزم المغزلي vanes de spin الشكل (6.I)
- 8 ..... مقاومة مغناطيسية نفقية الشكل (7.I)
- 15 ..... حوارزمية حل معادلة كوهن شام الشكل (1.II)
- 17 ..... شكلكمون M.T الشكل (2.II)
- 24 ..... النافذة الرئيسية ل w2web الشكل (1.III)
- 25 ..... المدخلات الرئيسية ل  $Ni_2MnSi$  الشكل 2.III
- 26 ..... البنية البلورية  $MnSi Ni_2$  الشكل 3.III
- 26 ..... نافذة تهيئة الحساب في Wien2k الشكل 4.III
- 27 ..... حساب الاستقطاب\_ سبين  $Ni_2MnSi$  الشكل 5.III
- 28 ..... تغير الطاقة بدلالة  $R^*K$  الشكل 6.III

28	..... تغير الطاقة بدلالة عدد النقاط K	الشكل 7.III
30	..... نافذة optimize	الشكل 8.III
30	..... تغيرات الطاقة بدلالة الحجم	الشكل 9.III
31	EOS2، Murnaghan ، Birch – Murnaghan :قيم متغيرات الحالة لكل من معادلة الحالة	الشكل 10.III
32	..... : مخطط العصابة الطاقة	(الشكل 11.III)
33	..... عصابة الطاقة للمركب $Ni_2MnSi$	شكل 12.III
34	..... DOS : نافذة برامج	الشكل 13.III
35	..... كثافة الحالات ل $Ni_2MnSi$	الشكل 14.III

### قائمة الجداول

28	..... : تغير الطاقة بدلالة $R_{MTmin}^*$ MAX	الجدول 1.III
29	..... تغير الطاقة بدلالة K	الجدول 2.III
31	..... مقارنة نتائج حسابنا مع النتائج السابقة.	الجدول 3.III
37	..... مقارنة بين النتائج التجريبية و المحسوبة للعزم المغناطيسي.	الجدول (4.III)



# مدخل

تعتبر دراسة المواد المغناطيسية من المواضيع المتقدمة التي تتعلق بالكثير من التطبيقات الكهربائية التي تدخل في الصناعات الحديثة , كالمولدات الكهربائية والمحولات الكهربائية وأجهزة حفظ الذاكرة .

كما ان لها دور مهم في صناعات التكنولوجيا الحديثة من بين هذه المواد المغناطيسية سندرس في بحثنا عن الخصائص

المغناطيسية في السبيكة  $Ni_2 MnSi$  التي تنتمي لسبائك الهاسلر ذات الصيغة  $X_2YZ$  حيث العنصرين  $X$  ,  $Y$  تنتميان للمعادن الانتقالية و العنصر  $Z$  هو عنصر لا مغناطيسي [1] .

عموما مركبات هاسلر  $Ni_2 MnSi$  ,  $Co_2FeGa$  ,  $Cu_2MnAl$  تبلور في بنية متماسكة ومستقرة هيبنية مكعبة

$L_{2l}[2]$

لدراسة الخصائص البنيوية، الإلكترونية، المغناطيسية استخدمنا طريقة الموجة المستوية المتزايدة خطياً  $Lapw$  , وإجراء هذه

الحسابات في إطار نظرية الكثافة الإلكترونية (DFT) ضمن التقريب الانحدار المعمم  $GGA$  , اتبعنا في انجاز بحثنا الخطوات التالية :

الفصل الاول: تطرقنا الى عموميات حول سبائك هاسلر التي تنتمي اليها سبيكة  $Ni_2 MnSi$  بالاضافة الى تطبيقاتها

الفصل الثاني: قمنا بشرح نظرية DFT وتقريباتها  $GGA$  ,  $LDA$  ثم قمنا بعرض تفصيلي حول برنامج المحاكاة

wien2k

الفصل الثالث : تناولنا مختلف النتائج المتحصل عليها :

الخصائص البنيوية : ثابت الشبكة

الخصائص الإلكترونية :بنية عصابات الطاقة،كثافة الحالاتDOS ثم الخصائص المغناطيسية لهذا المركب

وفي الأخير قدمنا خلاصة عامة لمختلف النتائج المتحصل عليها .

الفصل \_\_\_\_\_ ل I:

عموميات عن سبائك هاسلر Heusler

## 1.I مقدمة:

تعد السبائك المتذكّرة للشكل (Shape Memory Alloys) شكل جديد من اشكال المادة الذكية التي تتمتع بخواص ميكانيكية خارقة غير متوافرة في جميع المواد والسبائك التي جرت العادة على إستخدامها في التطبيقات الهندسية وغيرها بحيث تتميز تلك السبائك بقدرتها على استعادة شكلها الأصلي عند تسخينها, تعد سبيكة النيكل-اليتانيوم أو ما يسمى بالنتنول أهم أنواع السبائك المتذكّرة للشكل وأعلىها سعرا, و من السبائك المتداولة أيضا في هذا المجال سبيكة النحاس-الألمنيوم-النيكل بالإضافة الى سبائك هاسلر , في هذا الفصل سنتطرق لسبيكة  $Ni_2MnSi$  التي تنتمي لعائلة سبائك هاسلر.[1]

## 2.I سبائك هاسلر Heusler :

سبائك Heusler سميت نسبة لمكتشفها فريدريك Heusler ففي عام 1903 عندما كان يعمل على سبيكة (MnCu) لاحظ أنها غير مغناطيسية لكن عند اضافة عناصر (sp) مثل (Al, In, Sn, Sb, Bi) تم الحصول على سبيكة حديدية المغنطة (Ferromagnétisme) بقي فهم البنية البلورية وتركيب هذه السبائك غامض الى غاية 1929 باستعمال الاشعة السينية تم معرفة العديد من المعلومات على تركيبها , بنيتها البلورية .....[2]

### 1.2.I الخصائص البلورية :

تصنف سبائك Heusler إلى عائلتين وفقا لتركيبها الكيميائي.

• العائلة الأولى هي عائلة كامل هاسلر Full-Heuslers , لها صيغة كيميائية من الشكل  $X_2YZ$  , حيث X

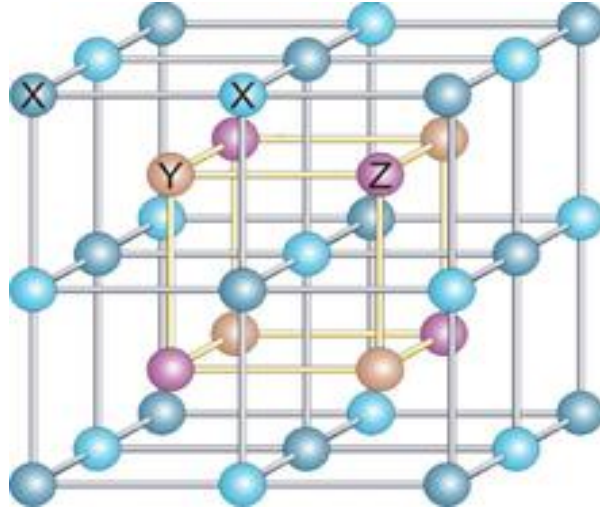
من المعادن الانتقالية مثل: Ni, Cu, Co اما Y فهي عادة (Mn أو Fe) و Z فهي نصف ناقل

(Si, Ge) او Al.

• العائلة الثانية نصف هاسلر semi-Heuslers السبيكة في هذه العائلة تكون صيغته من الشكل  $XYZ$ .

• حيث X: تتموقع في (0,0,0) و  $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$  و Y:  $(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$  و Z:  $(\frac{3}{4}, \frac{3}{4}, \frac{3}{4})$

• تتبلور سبائك هاسلر في بنية مكعبة FCC. (الشكل 1.I)[4]



الشكل (1.I): بنية سبيكة هاسلر

هناك تصنيف جديد يستند على ترتيب الذرات داخل شبكة بلورية, بحيث يكون ترتيب هذه الذرات تحت ثلاث أطوار بلورية مختلفة :

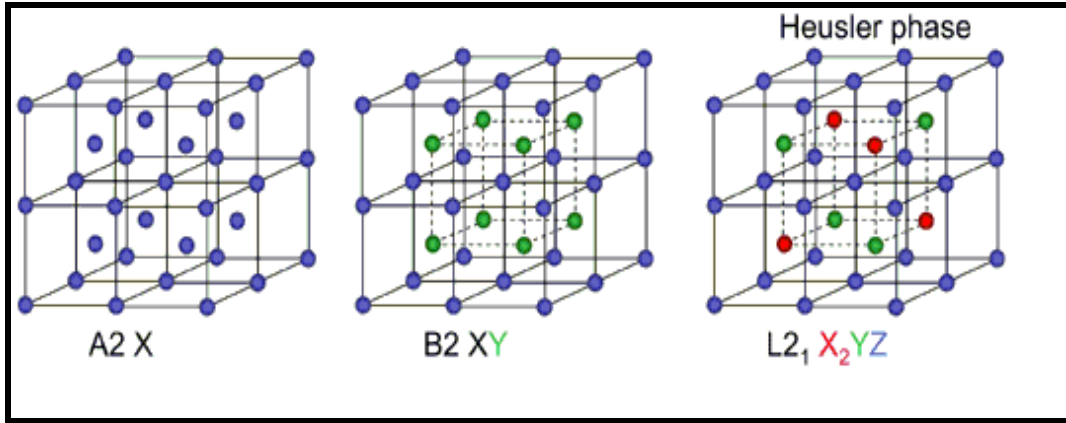
البنية الأولى  $L2_1$  : حيث تترتب الذرات بشكل تام ودقيق .

البنية الثانية B2 : في هذه البنية تكون مواقع الذرات Y و Z عشوائية .

البنية الثالثة A2 : في هذه البنية تكون مواقع الذرات Y و Z بالإضافة ل A عشوائية, انظر (الشكل 2.I)

• ترتيب البلورات يمكن أن يغير كثيرا من الخواص المغناطيسية للسبائك Heusler مثل مغنطة التشبع ودرجة حرارة كوري

[5]



(الشكل 2.1): البنى البلورية لسبيكة هاسلر

## 2.2.1 الخصائص المغناطيسية :

تمتلك سبائك Heusler خواص مغناطيسية مثيرة جدا للاهتمام. حيث يمكن للمرء في نوع واحد من سبائك دراسة سلسلة من الظواهر المغناطيسية متنوعة. و تصنف هذه السبائك حسب الخصائص المغناطيسية الى [6]:

### 1.2.2.1 سبائك حديدية المغنطة Ferromagnétisme :

تتمتع مواد المغنطة الحديدية بامتلاكها للمغنطة الذاتية (بدون وجود حقل خارجي ممغنط) تتميز المواد المغناطيسية الحديدية بنفاذية مغناطيسية عالية ( $\mu_r \gg 1$ ). تنشأ المغنطة الذاتية الفيرومغناطيسية من تفاعل ثنائيات القطب المغناطيسية حيث يمكن لهذه الثنائيات أن تنتظم في اتجاه واحد و في غياب الحقل المغناطيسي الخارجي حيث يكون لها عزم مغناطيسي كلياً غير معدوم (الشكل 3.1)، لقد بينت النظرية الكمية فيما بعد أن المغنطة الذاتية تنشأ عن التفاعل السبيني المتبادل بين ذرات أو جزيئات المادة بسبب مبدأ باولي.

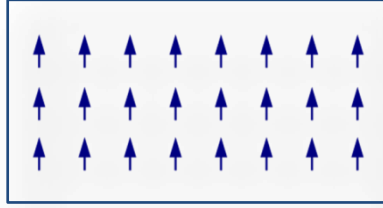
- تظهر خاصية فيرومغناطيسية على بلورات المعادن الانتقالية مثل الحديد (Fe) والكوبلت (Co) والنيكل (Ni) التي

$$\gg 1.5 \frac{d}{a} \quad \text{: تحقق فيها الشرط}$$

d: قطر الذرة .

a : قطر الغلاف الالكتروني. [7]

- اغلب سبائك هاسلر تكون حديدية المغنطة Ferromagnétisme التي تشيع في مجال مغناطيسي ضعيف, و بعد القيام بدراسات معمقة على الخصائص المغناطيسية في السبيكة  $X_2YZ$  اكتشف ان تركيز (sp) العنصر X له دور هام جدا في انشاء الخواص المغناطيسية كما يؤثر في العزم المغناطيسي و تصنيف نوع الخاصية المغناطيسية (فيرومغناطيسية .....). [8]

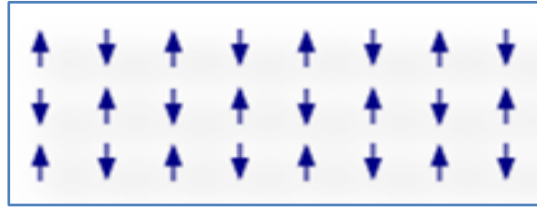


الشكل 3.I: ترتيب العزوم في حالة فيرومغناطيسية

### 2.2.2.I سبائك حديدية مضادة Antiferromagnétisme :

تتميز بتعاكس اتجاهات العزوم المغناطيسية (الشكل 4.I) و لهذا تنعدم المغنطة الذاتية ايعند جمع العزوم يساوي صفر , كما انها تتميز بدرجة حرارة تدعى درجة نييل (Neel)  $T_N$  وهي الحد الفاصل بين الطور المغناطيسي و طور الحديد المضاد.

- على الرغم من ان معظم سبائك هاسلر فيرو مغناطيسية إلا ان بعضها يكون فيرومغناطيسي مضاد Antiferromagné سيما العناصر التي تكون Y هي Mn , تتبلور السبائك المضادة ببنية B2 وغالبا يكون  $(x=Ni, Z=Al, In)$ . [7]



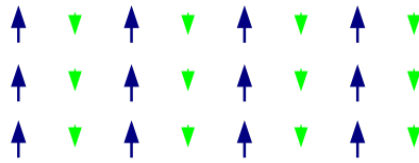
الشكل 4.I: ترتيب العزوم في حالة فيرومغناطيسية

### 3.2.2.I سبائك فيريمغناطيسية Ferrimagnetique :

تشابه الفريمغناطيسية مع المغناطيسية المضادة من حيث أن العزم المغناطيسي لنصف عدد الذرات في المادة يكون اتجاهه عكسيا بالنسبة لنصف عدد الذرات الأخرى ولكن عزومها المغناطيسية ليست متساوية بحيث تظهر للمادة مغناطيسية ذاتية اي جمع عزومها لا يساوي الصفر (الشكل 5.I).

هذه الخاصية نادرة الوجود في سبائك هاسلر حيث تم الكشف عنها الا في السبائك:  $CoMnSb$  و  $Mn_2VAl$  و

$Mn_2VG$ .



الشكل 5.I: ترتيب العزوم في حالة فيرومغناطيسية

### 3.2.I تطبيقات سبائك هاسلر :

تتصف سبائك هاسلر بخاصية تذكر الشكر فهي تدعى السبائك المتذكرة للشكل تتمتع السبائك المتذكرة للشكل بخصائص فريدة لا تتوفر في كثير من السبائك كما لها تطبيقات عديدة منها:

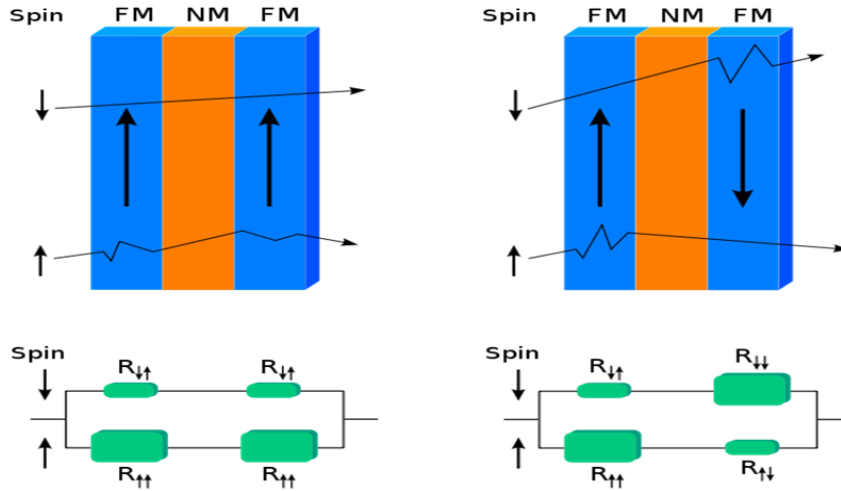
### 3.2.I.1 تطبيق سبائك هاسلر في الالكترونيات (spintroniques):

- تم اكتشاف تأثير المغناطيسية العملاقة (GMR) في متعددة الطبقات المغناطيسية في عام 1986 من قبل P. غرونبرغ (Grünberg) و A. فير (A. Fert) قد أحدثت ثورة في مجال تكنولوجيا المعلومات.

نحن نرى استعمال لإلكترونيات الدورانية spintroniques في حياتنا اليومية، من خلال صمامات العزم المغزلي spin على أساس تأثير GMR، والتي تستخدم في الحساسات المغناطيسية ورؤوس قراءة الأقراص الصلبة كما تستخدم في ذاكرة وصول عشوائي المغناطيسية MRAM. يتكون صمام العزم المغزلي من طبقتين فيرومغناطيسيتين يمكن تغيير قطبيتها في وجود مجال مغناطيسي ضعيف، بينهما طبقة رقيقة جدا معدنية غير مغناطيسية.

التأثير GMR يجعل المقاومة الكهربائية للعينة يعتمد على اتجاه المغناطيسية في الطبقات المغناطيسية، وتكون المقاومة أعلى في حالة أن يكون اتجاه المغناطيسية في الطبقات معاكسة، بعكس المقاومة عندما تكون مغناطيسية الطبقات في نفس

الاتجاه. (الشكل 3.I)



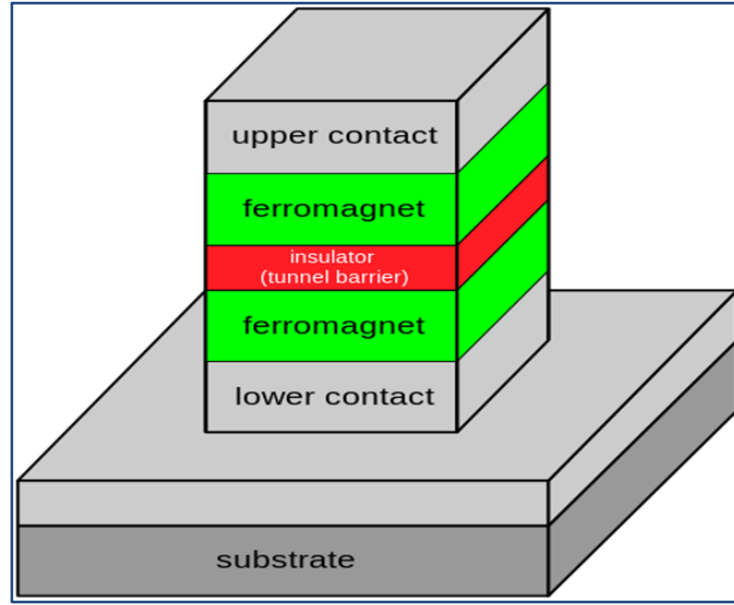
الشكل 6.I: صمام العزم المغزلي vannes de spin

- مقاومة مغناطيسية نفقية (Magnétorésistance à effet tunnel): وتتكون هذه المقاومة من طبقتين مغناطيسيتين حديديتين وبينهما طبقة رقيقة جدا من مادة عازلة. فعندما تصل سمك الطبقة الرقيقة عدة نانومتر فيمكن للإلكترونات الانتقال بين المغناطيسين طبقا لظاهرة نفق ميكانيكا الكم، يكون مبدأ عملها بتطبيق مجال مغناطيسي خارجي على تلك العينة يمكن ضبط اتجاه المغناطيسية في أي من الطبقتين المغناطيسيتين بدون إلزام للطبقة الأخرى. فعندما تكون الطبقتان المغناطيسيتان في اتجاه واحد يكون احتمال مرور إلكترونات بين الطبقتين كبير متخللا الطبقة العازلة، وإذا كان اتجاه المغناطيسية في الطبقتين المغناطيسيتين معكوسا يقل التيار المار بينهما (الشكل 4.I).

تستخدم في رؤوس القراءة التي تقوم بقراءة المعلومات على الأقراص الصلبة الحديثة باستخدام المقاومة المغناطيسية النفقية. كما يوجد نوع جديد من الذاكرة MRAM يعمل بواسطة المقاومة المغناطيسية النفقية، وكذلك تستخدم

في الحساسات مثلما في أنظمة الكبح الحديثة في السيارات. [8]





الشكل 7.I: مقاومة مغناطيسية نفقية

### 2.3.2.I تطبيقات اخرى:

- تستخدم في الجانب الهندسي مثل البنيان المقاوم للزلازل لأنها تتميز بخصائص ميكانيكية خارقة .
- الأجنحة الذكية المستغلة في الطائرات حيث يجب أن يتكيف شكل الجناح مع البيئة المحيطة.
- في مجال صناعة الفضاء بفضل مقاومتها للاجهادات .

- [1] **EDWARD.B STPHENSON**, " Megnitic Proprties of Heusle" , university of illinois, 2007
- [2]**GUILLERMO ORTIZ HERNANDEZ**," Elaboration et étude des propriétés physiques de couches minc monocristallines d'alliage de Heusler à faible amortissement magnétique pour composants hyperfréquences", l'universit de toulouse, 2013
- [3] **K.M. WONG, S.M. ALAY-E-ABBAS, Y. FANG, A. SHAUKAT, Y. LEI**, J. Appl. Phys. 114 (2013) 034901.
- [4] **QING-LONG FANG, JIAN-MIN ZHANG, XU-MEI ZHAO, KE-WEI XU**, Vincent Ji, Journal of Magnetism and Magnetic Materials, Volume 362, August 2014, Pages 42-46
- [5]**ZENASNI HOCINE**," etude théorique des propriétés magnétiques, électroniques et structurales des alliages heusler", universite abou bakr belkaïd – tlemcen, 2013
- [6] **M. Belkhouane, S. Amari, A. Yakoubi, A. Tadjer, S. Méçabih, G. Murtaza, S. Bin Omran, R. Khenata**, Journal of Magnetism and Magnetic Materials, Volume 377, 1 March 2015, Pages 211-214.
- [7] عزيز داخل , "مقدمة في الجسم الصلب " , الجزء الثاني , ديوان المطبوعات الجامعية , بن عكنون .الجزائر1988
- [8]**HANIFE TUZCUOGLU**, docteur de l'universite paris 2013

الفصل II :

نظرية الكثافة التابعية **DFT**

## 1.II. نظرية الكثافة الوظيفية :

### 1.1.II. مقدمة :

تستخدم نظرية الكثافة الوظيفية (DFT) كوسيلة رياضية من أجل حل مشاكل الكم للعديد من الاجسام. فالمواد الصلبة تحتوي على أنوية موجبه والكترونات سالبة التي تتفاعل كهربائيا بواسطة شحناتها (تفاعل نواة-نواة، الكترون-الالكترون، ونواة -إلكترون). ويطلق على البحث عن حلول لهذا النظام العياني (الطاقة والذالة الموجية) مشكلة العديد من الجسم (أو N-الجسم). بإهمال تفاعل spin

### 2-1-II معادلة شرودينجر :

تعتبر معادلة شرو ذينجر منطلق كل الدراسات الكمية للنظام الكوانتي للبلورات، يوصف نظام الجسيمات ( أيونات + الكترونات) المتفاعلة بالمعادلة شرودينجر التالية:

$$\psi H = E \psi \quad (1.II)$$

H: هاملتون

$\psi$  : دالة موجية

E : طاقة الجملة

تكتب هاملتون هذا النظام كالتالي :

$$H = T_N + T_e + V_{eN} + V_{ee} + V_{NN} \quad (2.II)$$

$$H = \frac{-\hbar^2}{2} \sum_i \frac{\Delta_{\vec{R}_i}^2}{M_i} - \frac{-\hbar^2}{2} \sum_i \frac{\Delta_{\vec{r}_i}^2}{m_e} - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i,j} \frac{e^2 Z_i}{|\vec{R}_i - \vec{r}_j|} + \frac{1}{8\pi\epsilon_0} \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} + \frac{1}{8\pi\epsilon_0} \sum_{i \neq j} \frac{e^2 Z_i Z_j}{|\vec{R}_i - \vec{R}_j|}$$

$M_i$ : كتلة نواة ذات الاحداثيه  $\vec{R}_i$

$m_e$  : كتلة الالكترون ذات الاحداثيه  $\vec{r}_i$

الطاقة الحركية للانوية:  $T_N = \frac{-\hbar^2}{2} \sum_i \frac{\Delta_{\vec{R}_i}^2}{M_i}$

الطاقة الحركية للإلكترونات:  $T_e = \frac{-\hbar^2}{2} \sum_i \frac{\Delta_{\vec{r}_i}^2}{m_e}$

$$V_{eN} = \frac{1}{4\pi\epsilon} \sum_{i,j} \frac{e^2 Z_i}{|\vec{R}_i - \vec{r}_j|}$$

تفاعل كولبي بين الإلكترونات و الأنوية

$$V_{ee} = \frac{1}{8\pi\epsilon_0} \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|}$$

تفاعل كولبي بين الاكترونات

$$V_{NN} = \frac{1}{8\pi\epsilon_0} \sum_{i \neq j} \frac{e^2 Z_i Z_j}{|\vec{R}_i - \vec{R}_j|}$$

تفاعل كولبي بين الانوية [1], [2].

### 3.1.II تقريب بورن ابنهايمر Born–Oppenheimer :

من اجل تبسيط حل المعادلة السابقة نستعمل تقريب بورن ابنهايمر Born–Oppenheimer

بما أن كتلة الالكترون صغيرة فالتالي يكون التنقل كبير مقارنة مع النواة الثقيلة نسبيًا يكون تنقلها صغير جدا وبالتالي نقوم

باهمال الطاقة الحركية للنواة

$$T_N = 0$$

أي أن

$$V_{NN} = \frac{1}{8\pi\epsilon_0} \sum_{i \neq j} \frac{e^2 Z_i Z_j}{|\vec{R}_i - \vec{R}_j|} = \text{cte}$$

ونأخذ حدتفاعلا لأنوية فيما بينها ثابتي:

و منه يصبح المهمتونية الكلي للجملة مكون من هملتونية الكتروني وهملتونية النواة على الشكل :

$$H = (3.II)$$

$$V_{NN} + H_e$$

$$H_e = T_e + V_{ee} + V_{eN} \quad (4.II)$$

حيث :

$H_e$ : هاملتون الالكتروني

و منهمعادلة شرودينغر للإلكتروناقي:

$$H_e \psi_e(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = [T_e + V_{ee} + V_{eN}] \psi_e(\mathbf{r}, \mathbf{R}) \quad (5.II)$$

هذهالمسألة الأخيرة لا يمكن حلها بالطرق الرياضية المعروفة لذلك نستخدم تقريباً آخر يسمى تقريبهري -فوك.

## 4.1.II تقريب هارترتي - فوك Hartree-Fock :

في عام 1928 كان هارترتي [3] أول من اقترح تقريب حيث افترض أن كل إلكترون يتحرك بشكل مستقل في حقل متوسط الذي تنتجه الإلكترونات والنوى الأخرى , ومنه يتغير المشكل لدينا من عدد كبير من الإلكترونات إلى إلكترون وحيد, وبالتالي يكتب الهاملتونية للحملة كالتالي:

$$H = \sum_i H_i \quad (6.II)$$

حيث :

$$H_i = \frac{-\hbar^2}{2m} \Delta_i + U_i(\mathbf{r}_i) + V_i(\mathbf{r}_i) \quad (7.II) - \sum_k \frac{e^2 Z_k}{4\pi |\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_k^0|} U_i(\mathbf{r}_i)$$

= تمثل الطاقة الكامنة للإلكترون  $i$  في حقل الأنوية  $k$ .

$\mathbf{R}_k^0$  : يمثل موضع الأنوية.

$$V_i(\mathbf{r}_i) = - \frac{1}{8\pi\epsilon_0} \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}$$

تكتب المعادلة (7.II) على الشكل :

$$H_i = - \frac{\hbar^2}{2m} \Delta_i + V(\mathbf{r}_i) \quad (8.II)$$

تكتب المعادلة الموجة الكلية للحملة كجاءدوال الحالة لكل الإلكترونات على الشكل:

$$\Psi(\mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2 \dots \dots \mathbf{r}_N) = \prod_{i=1}^N \Psi_i(\mathbf{r}_i) \quad (9.II)$$

وتكتب الطاقة الكلية للحملة كمجموع الطاقات الموافقة للحالة الكترونية :

$$E = \sum E_i \quad (10.II)$$

إذا معادلة شرودينجر للإلكترونات تصبح:

$$\left[ \frac{-\hbar^2}{2m} \Delta_i + U_i(\mathbf{r}_i) + V_i(\mathbf{r}_i) \right] \Psi_i(\mathbf{r}_i) = \epsilon_i \Psi_i(\mathbf{r}_i) \quad (11.II)$$

في عام 1930 بين فوك أن الدالة الموجية لهارترتي لا تحترم مبدأ استبعاد باولي، لأنه ليس متمائل antisymmetric. لذلك حسن فوك تقريب هارترتي وذلك بإدخال مبدأ السبين لنظام الإلكترونات بحيث توجد  $N!$  احتمال لوضع  $N$  الكترون في

$$N \text{ موضع } (\mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2 \dots \dots \mathbf{r}_N)$$

لحساب سبين الإلكترونات و حل معادلة شرودنجر بتطبيق مبدأ استبعاد باولي، وبالتالي فإن دالة موجة الإلكترونات تكتب في شكل محدد سلاتر.

$$\Psi(\mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2 \dots \dots \mathbf{r}_N) = (12.II) \left[ \begin{array}{ccc} \varphi_1(\mathbf{r}_1) & \dots & \varphi_1(\mathbf{r}_n) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \varphi_n(\mathbf{r}_1) & \dots & \varphi_n(\mathbf{r}_n) \end{array} \right] \frac{1}{\sqrt{N!}}$$

ثابت التعامد :  $\frac{1}{\sqrt{N!}}$

## 2.II نظرية الكثافة التابعية DFT :

المفهوم الأساسي لنظرية الكثافة الوظيفية هو أنه يمكن التعبير عن طاقة نظام إلكتروني بدالة كثافته.

ظهرت الفكرة الأساسية لهذه النظرية عام 1927 على يد العالمان توماس وفيرمي، حيث تعتمد طريقة توماس فيرمي على نموذج إحصائي لتقريب التوزيع الإلكتروني حول الذرات. هذا النموذج أعطى صورة عن إمكانية الاعتماد على الكثافة الإلكترونية لحساب الطاقة الحركية. لكن هذا النموذج أعطى نتائج ضعيفة لانهما اهملا الارتباط بين الإلكترونات .

### 1.2.II نظرية هوهنبارغ - كوهن Hohenberg et Kohn :

هي نظرية قابلة للتطبيق على أي نظام من الجسيمات المتفاعلة و تقوم على نظريتين:

**النظرية الأولى :** هناك علاقة بين الكمون الخارجي ( $V_{ext}$ ) و الكثافة ( $\rho$ ) في الحالة الدنيا (الاکثر استقرار) لنظام متعدد الإلكترونات

$$E = E[\rho(\mathbf{r})] \quad (13.II)$$

**النظرية الثانية:** هي برهان أن الكثافة التي تعطي الحد الأدنى هي كثافة الحالة الأساسية للجسيمات بالضبط، وكل

خصائص الحالة الأساسية هي دالية لكثافة الإلكترونات كالتالي:

$$E = \min E(\rho) \quad (14.II)$$

$$= \langle \Psi | T$$

$$E[\rho(\mathbf{r})] = F_{H.K}[\rho(\mathbf{r})] + \int V_{ex}(\mathbf{r}) \rho(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad (15.II)$$

$$F_{H.K}(\rho) + U | \Psi \rangle \quad (16.II)$$

$T, U$  : كمون التفاعل للإلكترونات والطاقة الحركية على الترتيب

باستخدام تقريب هارترتري فوك نجد :

$$F_{H.K}(\rho) = \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' + G(\rho) \quad (17.II) \quad \frac{1}{2} \iint 2 \frac{\rho(\mathbf{r})\rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}$$

حيث  $G(\rho)$  تمثل الطاقة الحركية للإلكترونات زائد الفرق بين طاقة التفاعل الحقيقية و طاقة تفاعل

هارترتري , كما أثبت هونبارغ - كهون أن كثافة الحالة الأساسية هي كثافة الحد الأدنى  $F_{H.K}$  [4].

## 2.2.II. معادلة كوهن شام Kohn-Sham :

اعتبر كوهن-شام كثافة الإلكترونات كمجموع كثافة الجسيمات مع استخدام مبدأ التغيرات للحصول على طاقة الحالة

الأساسية، بحيث تعطى كثافة احتمال تواجد الشحنة ب:

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum \Psi_i^*(\mathbf{r}) \Psi_i(\mathbf{r}) \quad (18.II)$$

دالية الطاقة الكلية للإلكترونات  $E_e(\rho)$  و طاقة هارترتري فوك  $E_{H.F}(\rho)$  تعطى من الشكل :

$$E_e = T + V \quad (19.II)$$

$T$  : الطاقة الحركية للجسيمات في حالة التفاعل

$V$  : كمون التفاعل إلكترون - إلكترون

$$E_{KF} = T_0 + (V_H + V_x) \quad (20.II)$$

$T_0$  : الطاقة الحركية للإلكترونات الحرة

$V_H$  : كمون هارترتري

$V_x$  : كمون تبادل للإلكترونات والذي يعرف ب:  $V_x = V_H - V$

لدينا كمون ارتباط للإلكترونات  $V_c = T - T_0$  :

$$E_{KF} = T + V + T_0 - T_0 \quad :$$



$$=T_0 + (21.II) V_H + (V_x + V_c)$$

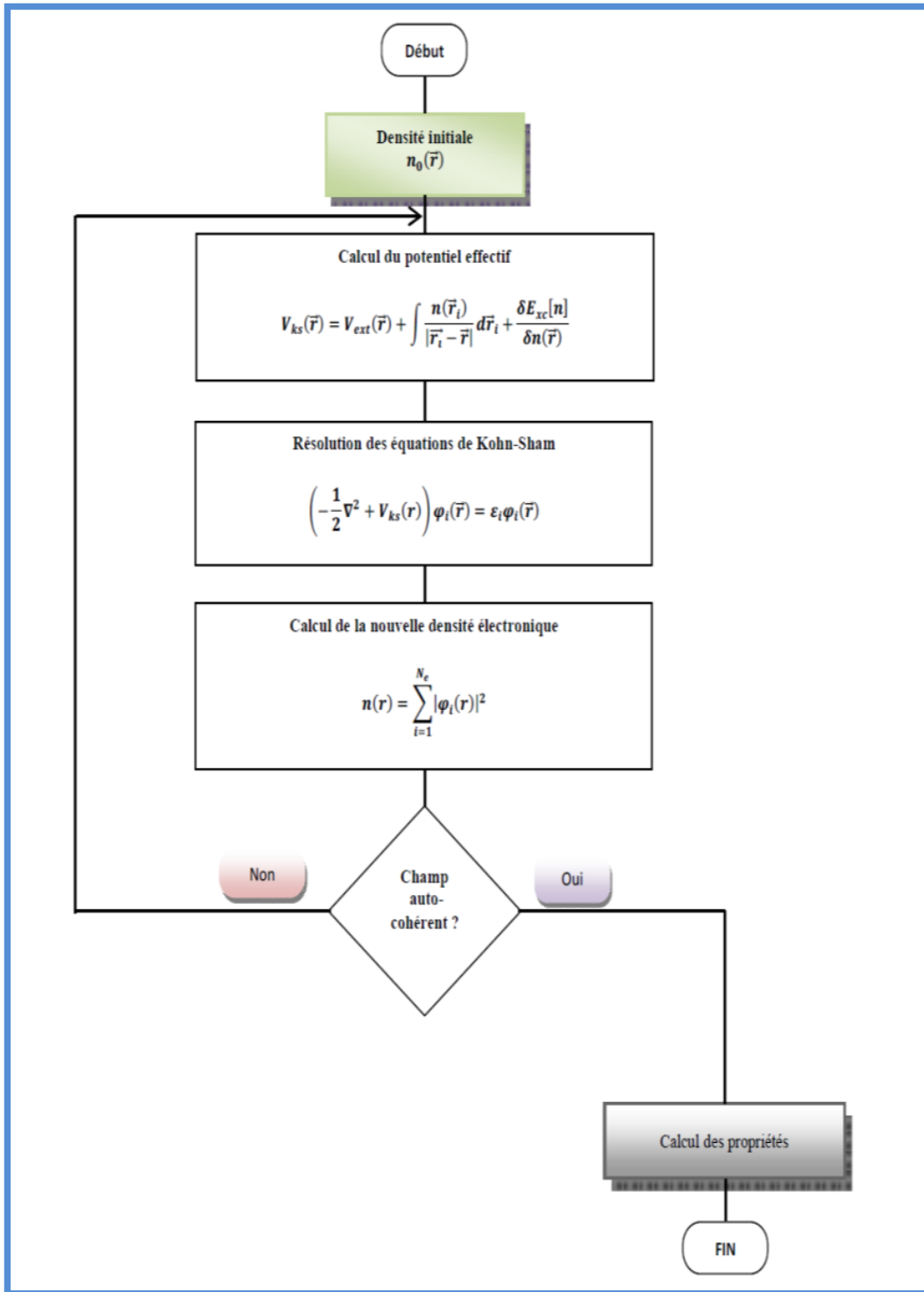
$$V_{xc} = (V_x + V_c) \text{ كمون تبادل - ارتباط}$$

و بالتالي دالة الطاقة الكلية هي:

$$E(\rho) = T_0(\rho) + V_H + V_{xc} + V_{ext}(\rho) \quad (22.II)$$

معادلة كوهن- شام تكتب بالشكل :

$$\epsilon_i \Phi_i(\mathbf{r}) = (T + V_{ei}(\mathbf{r}) + V_H(\mathbf{r}) + V_{xc}(\mathbf{r})) \Phi_i(\mathbf{r}) \quad (23.II)$$



الشكل II.1: خوارزمية حل معادلة كوهن شام

### 3.II. التقريبات :

تعتبر نظرية DFT هامة جدا اساسها معادلات Khon-Sham , فعند حساب الكثافة الإلكترونية فهي تمثل بدقة كثافة نظام مكون من N إلكترون في حالة تفاعل . ومع ذلك، تبقى DFT غير قابلة للتطبيق لأن كمون التبادل-الارتباط (الذي يحتوي أيضا على تصحيح للطاقة الحركية) ما زال مجهولا. ولذلك من الضروري إيجاد أحسن تقريب لكمون التبادل-الارتباط لكي نستطيع العمل . يوجد بشكل عام نوعين من التقريب:

#### 1.3.II تقريب الكثافة الموضع LDA :

يتعامل مع نظام غير متجانس كأنه متجانس موضعيا، بحيث تعطى طاقة تبادل-إرتباط بهذا التقريب كالتالي :

$$E_{xc}^{LDA}(\rho) = \int \rho(r) \varepsilon_{xc}(\rho) dr \quad (24.II)$$

وباستخدام مبدأ أسبينيكتب طاقة تبادل-ارتباط :

$$E_{xc}^{LSDA}(\rho \uparrow, \rho \downarrow) = \int \rho(r) \varepsilon_{xc}(\rho \uparrow, \rho \downarrow) dr \quad (25.II)$$

#### 2.3.II تقريب التدرج المعمم GGA :

تصحيات LDA المستخدمة محالياً أخذت بعين الاعتبار تغير كثافة الإلكترونات  $\rho(r)$  عبر تدرج

$\nabla\rho(r)$  أي أن النتيجة المحصل عليها في تقريب كثافة الموضع LSDA نعيد ترجمتها كسلسلة لنشور تايلور، إذن طاقة تبادل -

إرتباط في تقريب التدرج المعمم تأخذ الشكل التالي:

$$E_{xc}^{GGA}(\rho \uparrow(\mathbf{r}), \rho \downarrow(\mathbf{r})) = \int f(\rho \uparrow, \rho \downarrow, \nabla\rho \uparrow, \nabla\rho \downarrow) dr^3 \quad (26.II)$$

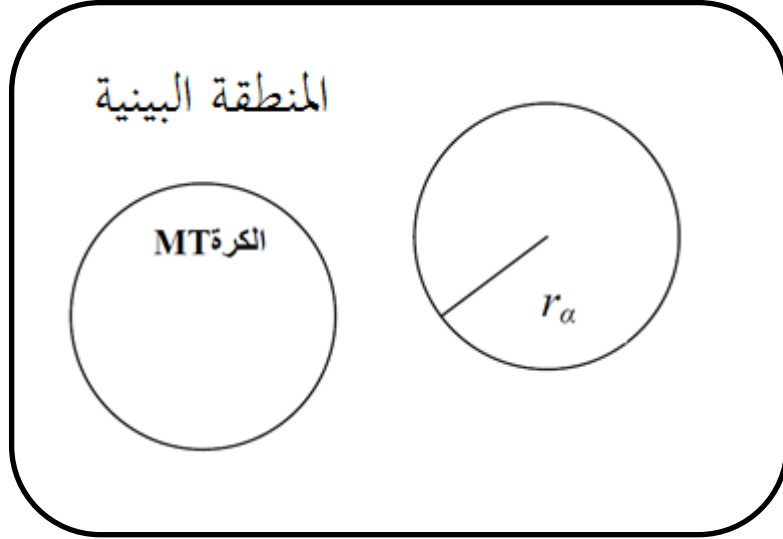
#### 4.II أساسيات حل معادلة كوهن شام:

#### 1.4.II طريقة الأمواج المستوية المتزايدة APW:

عام 1937 منشور سلتر طريقة الموجة المستوية المتزايدة، وكتابة دالة موجة الإلكترونات تأخذ شكل

دالة الإلكترونات الخاصة بكمون M.T , او ما يسمى كمون (خلية النحل) والذي يقسم الفضاء المحيط بالذرات إلى منطقتين (الشكل

(1.II



الشكل 2.II: شكل كمون M.T

المنطقة الأولى داخل الكرة M.T تشمل كل من الأنوية والالكترونات تشديدة الارتباط بها.

المنطقة الثانية المنطقة البينية تحيط بالكرات , وتشمل الالكترونات ضعيفة الارتباط بالأنوية.

حيث  $r_\alpha$  يمثل نصف قطر الكرة M.T

حيث تعطى بالشكل التالي :

$$\Phi(\mathbf{r}) = \begin{cases} \frac{1}{\Omega^{1/2}} \sum_G C_G e^{i(G+K)r} & r > r_\alpha \\ \sum_{lm} A_{lm} U_l(r) Y_{lm}(r) & r < r_\alpha \end{cases} \quad (27.II)$$

$\Omega$ : يمثل حجم الخلية الموحدة

$Y_{lm}$ : الدالة الهرمونية (التوافقية) الكروية.

$C_G$ : معاملات النشر.

وحلول معادلة شرودينجر تكون:

❖ حلول شعاعية داخل الكرة M.T

❖ موجة مستوية في المنطقة الإقحامية

$U_l(r)$  هي الحلول المنتظمة لمعادلة شرودينغر للجزء الشعاعي الذي يكتب :

$$\left\{ -\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} + V(r) - E_l \right\} rU_l(r) = 0 \quad (28.II)$$

$V(r)$  : يمثل الجزء الخاص بالكمون الكروي و  $U$  تمثل الطاقة الخطية ,

فيحين أن الدالة الشعاعية المعرفة في العلاقة (28.II) تكون معامدة لكل الحالات الذاتية القلبية، تنتهي شروط التعامد عند

حدود كرة M.T من أجل الدوال الشعاعية  $U_1$  و  $U_2$  الموافقة للقيم الذاتية  $E_1$  و  $E_2$  تصبح معادلة شرودينغر كالتالي

$$(E_1 - E_2)rU_1U_2 = U_2 \frac{d^2rU_1}{d^2r} - U_1 \frac{d^2U_2}{d^2r} \quad (29.II)$$

ولضمان إستمرارية الدالة  $\phi(r)$  على سطح الكرة M.T ننشر المعاملات  $A_{lm}$  بدلالة المعاملات  $C_G$  الخاصة بالأمواج

المستوية في المنطقة البينية، المعاملات الطاقوية  $E_l$  تسمى معاملات التغيرات في الطريقة APW.

بعد الحسابات الجبرية نحصل على

$$A_{lm} = \frac{4\pi i^l}{\Omega^2 U_l(R_l)} \sum_G C_G J_l(|K + g|R_\alpha) Y_{lm}^*(K + G) \quad (30.II)$$

الدوال الذاتية المعرفة ب:

$G$  تصبح متوافقة مع الدوال الشعاعية في كرة M.T وبالتالي نتحصل على دالة أساسية  $APW_G$  الدوال  $A_G$  هي حلول

معادلة شرودينغر داخل كرة M.T الموافقة للطاقة  $E_l$  نتحصل على عصابة الطاقة الموافقة للمعامل  $G$ .

## II.4.2 طريقة الأمواج المستوية المتزايدة خطيا LAPW:

طور العالم اندرسون طريقة APW حيث ادخل بعض التغيرات عليها فتصبح المعادلة كالتالي:

$$\phi(\mathbf{r}) = \begin{cases} \frac{1}{\Omega^{1/2}} \sum_G C_G e^{i(G+K)\mathbf{r}} & \mathbf{r} \in I \\ \sum_{lm} [A_{lm} U_l(\mathbf{r}) + B_{lm} U_l(\mathbf{r})] Y_{lm}(\mathbf{r}) & \mathbf{r} \in S \end{cases} \quad (31.II)$$

$B_{lm}$ : معاملات مشتقات الدالة الشعاعية فيما يتعلق بالطاقة [6]

الدالة  $U_l$  تعرف مثل دالة الطريقة (APW)، والدالة  $U_l^{(1)}(\mathbf{r}) Y_{lm}(\mathbf{r})$  تخضع لشروط التالي

$$\mathbf{r} U_l^{(1)}(\mathbf{r}) \left\{ \frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} + V(\mathbf{r}) - E_l \right\} = \mathbf{r} U_l(\mathbf{r}) \quad (32-II)$$

في الحالة اللانسيبية الدوال  $U_l$  و  $U_l^{(1)}$  المضمونة الاستمرارية على سطح كرة (M.T) أي الاستمرارية مع الموجة المستوية في

الخارج. إذن الدالة APW تصبح دالة أساسية للطريقة APWEP-L أين المعاملات  $B_{lm}$  المكافئة للدالة  $U_l^{(1)}$

لها نفس طبيعة الدالة APWsL تكون الموجة المستوية الوحيدة في المنطقة البينية. داخل الكرة الدالة APWs تعتمد على

الدالة الدالة APWs لما تختلف  $l$  قليلا عنصباية الطاقة  $E$ . الترتيبات الخطية تنتج أحسن دالة شعاعية APWs معناه أن

الدالة  $U_l$  يمكن أن تنتشر على الدالة المشتقة والطاقة  $E_l$  بالشكل:

$$U_l(E, \mathbf{r}) = U_l$$

حيث:  $0((E - E_l)^2)$  تمثل الخطأ الرابع للطاقة [5]

## 5.II برنامج Wien2k:

تتم تطوير برنامج الحاكاة wien2k في معهد كيمياء بالجامعة التقنية في فيينا وتم نشره من طرف K. Blaha , P. Schwarz , و S.

Trickey) في الحاسب , اجريت على Wien2k عدة تحديثات من اجل تحسين وتسهيل استعمالها حيث تسمى حسب

سنة نشرها , عملنا سيكون في برنامج (wien2k 14) يعمل هذا البرنامج في نظام تشغيل Linux.

ويتكون هذا البرنامج من عدة برامج مستقلة لاجراء عمليات حسابية للبنية الالكترونية في المواد الصلبة و هذا اعتمادا على

نظرية الكثافة الوظيفية DFT حيث يمكن من خلاله حساب :

- الخصائص الالكترونية , الخصائص البنيوية.
- الطاقة الكلية
- الخصائص المغناطيسية (العزم المغناطيسي ) و الاستقطاب السبيني

- الخصائص البصرية
- تدرج الحقل الكهربائي
- انبعاث وامتصاص الأشعة X
- الخصائص الديناميكية (انتالي ...)

## 6.II خوارزمية Wien2k :

قبل أن ينتقل إلى حساب خصائص المواد المختلفة، على المرء أن يذهب إلى حساب كميات الأساسية مثل كثافة الإلكترونات، وظائف محددة المحتملة والطاقة النظيفة. هذا الحساب الأول يقام في ثلاث خطوات:

### الخطوة 1 : تحضير ملف البنية case.struct :

يتم إعداد بنية الملف case.struct من بيانات ab-initio كالتالي:

- اعدادات الشبكة
- مواضع الذرات

### الخطوة الثانية: التهيئة او التمهييد Initialisation:

(1) NN (أبعاد الجوار الأقرب): هذا البرنامج يستعمل الملف case.struct والذي تكون فيه المواقع الذرية في خلية

الوحدة محددة، من اجل حساب أبعاد الجوار الأقرب لكل الذرات ويتحقق من أنها لا تتجاوز أنصاف الأقطار الذرية

المرافقة إذا كان هناك تجاوز تضرر خطأ. النتيجة تظهر في ملف مخرجات يدعى case.outputnn.

(2) SGROUP : يحدد مجموعات الفضاء للبنية المعرفة في الملف case.struct تظهر في ملف

case.struct.sgroup

(3) التماثل (SYMMETRY): يولد البرنامج الذي يسمح بحساب عمليات التناظر للمجموع الفضائي حيث المعلومة

الواردة تكون في الملف case.struct.st

(4) برنامج LSTART : ينتج الكثافة الإلكترونية للذرات الحرة ويحدد كيفية التعامل مع الذرات المختلفة في حساب

عصابة الطاقة حيث أن هذا النظام ينتج الكثافات الذرية التي يستخدمها dstart حتى يجد كثافة الحالات الذرية

الأولية من خلال حسابات scf, والتي لها مجموعة من الملفات من اجل إدارتها والتي هي in0, in1, in2, و inm

كما يستطيع حساب ثابت الطاقة للذرات المتجاورة في الخلية بالإضافة إلى ذلك يحدد الكمونات الذرية ويختار كثافة تكافؤ الذرات التي يستخدمها lapw5 من أجل مقارنة الكثافات. حيث أن الطاقة الكلية للعنصر تكون محددة فنستطيع من خلالها حساب الطاقة المشتركة كما ان المعالجة المختلفة تكون في lapw5 و lstart.

(5) KGEN: هو برنامج ينتج شبكة نقاط ل K في منطقة بريليون الأولى الغير قابلة للاختزال.

(6) DSTART: هذا البرنامج ينتج لنا كثافة الشحنة للبلور الابتدائي في case.Clmsum عن طريق تركيب

الكثافات الذرية ( case.rsp ) المعلومات مع قيم LM التمثيلات التوافقية للشبكة وعدد معاملات فوري للكثافة البينية تعطى ضمن case.in2 و case.in1 .

### الخطوة الثالثة: اعداد دورة scf :

بعد إنشاء كافة الملفات المدخلات الضرورية، نشرع في عملية حساب scf التي تتمثل في تحقيق التقارب بين الطاقة و التقارب و تتم دورة SCF كالتالي :

- LAPW0 (المحتملة ) حساب الكثافة المحتملة
- LAPW1 (العصابات) بحسب فرق التكافؤ (القيم الذاتية و المتجهات الذاتية )
- LAPW2 (RHO) بحسب كثافة التكافؤ من المتجهات الذاتية
- LCORE بحسب الدوال الأساسية و الكثافات
- MIXER تختلط المدخلات والمخرجات للكثافات [4],[5],[7]



- [1] **ZAHIA AYAT.**, thèse de magister, université d'Ouargla 2006.
- [2] **E. SHRODINGER.** Ann. Physik, , (1926).
- [3] **P. HOHENBERG, W. KOHN,** Inhomogenous Electron Gas, Phys. Rev. 136 (1964) B864.
- [4] **W. KOHN, L.J. SHAM,** Self -Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects, Phys. Rev.
- [5] 2013 , بري السعدي , شهادة دكتوراه في العلوم , جامعة سطيف ,
- [6] **REGGAD ABDERRAHMANE,** Université Ibn Khaldoun – Tiaret, 2013
- [7] **BLAHA. K. SCHWARZ, G. MADSEN. D. KVASNICKA. J. LUITZ,** "User's Guide, WIEN2k 14.2", 2014

# الفصل III:

## مناقشة النتائج

### III.1 مقدمة :

لقد احدث اكتشاف سبائك هاسلر ثورة كبيرة في المجتمع العلمي لذلك حازت اهتمام هائل سواء في الجانب

التجريبي او النظري بسبب الخصائص الخارقة التي تتمتع بها , حيث يوجد عدد من البحوث حول خصائص

سبائك هاسلر من الشكل  $X_2YZ$ .

في عملنا هذا سنقوم بتحديد الخصائص البنيوية، الالكترونية، المغناطيسية لسبيكة  $Ni_2MnSi$ [1].

استخدمنا طريقة الموجة المستوية المتزايدة خطياً ( LAPW ) و المدججة في برنامج wien2k . وتم إجراء هذه

الحسابات في إطار نظرية دالية الكثافة الإلكترونية DFT حيث أنه لحساب كمون تبادل ارتباط استخدمنا

التقريب المعمم GGA

### III.2 الخصائص البنيوية :

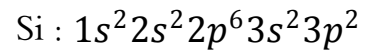
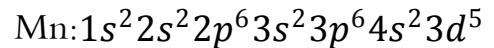
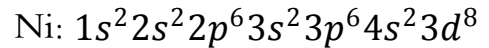
#### III.2.1 العينة $Ni_2MnSi$ :

هي من مركبات هاسلر التي تتميز عن كثير من المركبات بخاصية السبينالالكتروني و خاصية تذكر الشكل

حيث تتميز تلك السبائك بقدرتها على استعادة شكلها الأصلي عند تسخينها , عموماً تتبلور سبيكة هاسلر في بنية

متماسكة ومستقرة  $L2_1$  (fcc) وهي فيرومغناطيسية.

لتحديد الخصائص السابقة يعطى التوزيع الالكتروني للعناصر الكيميائية على الشكل :



### III.2.2 : انشاء دليل case-directory

نقوم في اول خطوة بإنشاء دليل نسميه  $Ni_2MnSi$  الذي يتم فيه بتعيين عدد الذرات و اسم المركب

(الشكل III.1)



الشكل III.1: النافذة الرئيسية ل w2web

### III.2.3 : ادخال المدخلات الرئيسية للملف case.struct

لادخال المدخلات نتتبع مايلي :

- تحديد عدد الذرات: لدينا في العينة  $Ni_2MnSi$  اربعة ذرات .
- نضغط على StructGen
- نقوم بادخال المعلومات التالية في الواجهة (الشكل III.2)

Ni <sub>2</sub> MnSi	العنوان
Fcc مكعب ممرکز الاوجه	نوع الخلية
A°5.696	c,b, a
RMT=2.18, $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ و $(0,0,0)$ :Ni	الذرة 1
RMT=2.18, $(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$ :Mn	الذرة 2
RMT=1.85, $(\frac{3}{4}, \frac{3}{4}, \frac{3}{4})$ :Si	الذرة 3

- نقوم بحفظ العمل بالضغط على SaveStructure فتظهر الواجهة بلون وردي, تسمح هذه الخطوة

تلقائيا بإنشاء ملف الإدخال لبرامج الذرة الحرة ((Ni<sub>2</sub>MnSi.inst

**Title:** Ni2MnSi

**Lattice:**  
Type: F

P  
F  
B  
CXY  
CYZ  
CXZ  
R  
H  
I\_P1

[ [Spacegroups from Bilbao Cryst Server](#) ]

**Lattice parameters in Å**

a= 5.69599984 b= 5.69599984 c= 5.69599984  
α= 90.000000 β= 90.000000 γ= 90.000000

**Inequivalent Atoms: 4**

**Atom 1: Ni** Z= 28.0 RMT= 2.1800  
Pos 1: x= 0.00000000 y= 0.00000000 z= 0.00000000

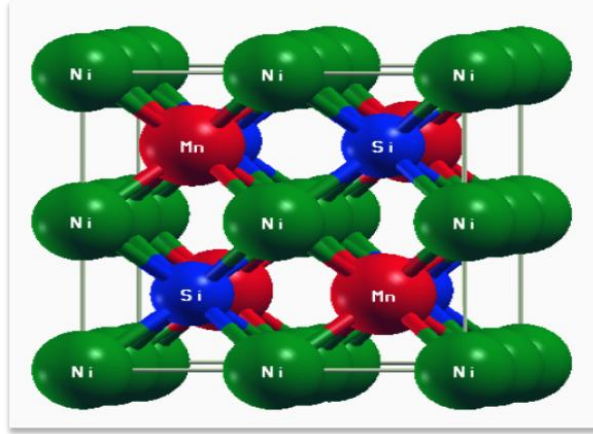
**Atom 2: Mn** Z= 25.0 RMT= 2.1800  
Pos 1: x= 0.25000000 y= 0.25000000 z= 0.25000000

**Atom 3: Ni** Z= 28.0 RMT= 2.1800  
Pos 1: x= 0.50000000 y= 0.50000000 z= 0.50000000

**Atom 4: Si** Z= 14.0 RMT= 1.8500  
Pos 1: x= 0.75000000 y= 0.75000000 z= 0.75000000

الشكل 2.III: المدخلات الرئيسية ل Ni<sub>2</sub>MnSi

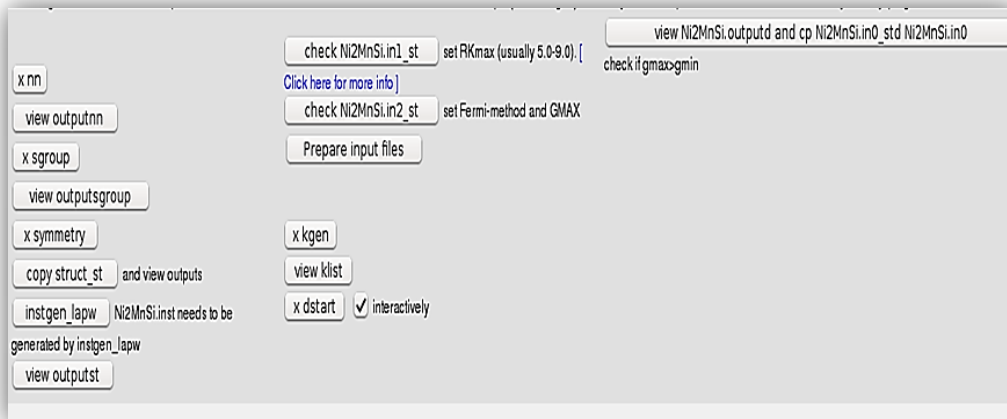
- بعد ادخال جميع المعلومات كما يوضحة الشكل (الشكل 2.III) نتأكد من مدخلاتنا باستعمال برنامج Xcrysden كما يوضحه الشكل (الشكل 3.III)



الشكل 3.III: البنية البلورية Ni<sub>2</sub>MnSi

### 4.2.III تهيئة الحساب :

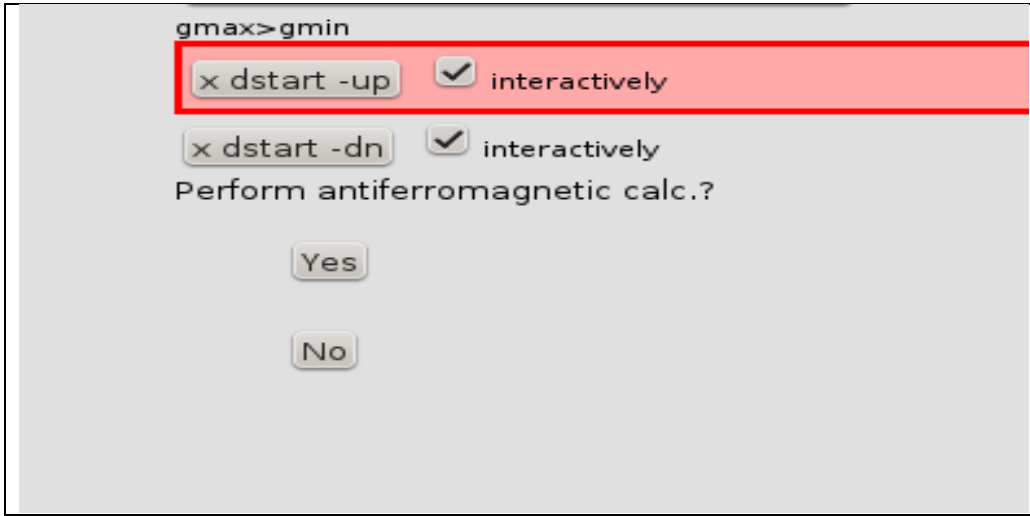
- بعد انشاء ملف قاعدة الملفات structNi<sub>2</sub>MnSi نقوم بعملية تهيئة الحساب من خلال (الشكل 4.III). حيث نبدأ ب xnn الى ان نصل الى الخطوة xdstart ونتبع الخطوات التالية :



الشكل 4.III : نافذة تهيئة الحساب في Wien2k

نقوم باجراء التغييرات التالية:

1. عند اختيار x symmetry نختار No
2. في xlstart نختار طريقة GGA
3. عند xKGen نضع في البداية عدد النقاط  $k \text{ points} = 100$
4. بعد الخطوة ViewNi<sub>2</sub>MnSi.outputd نجد سؤال (-) perform spin polarizedcalc نختار Yes لحساب الاستقطاب - السبين. فتظهر خطوات جديدة (الشكل 5.III).
5. عندما نصل الى perform antiferromagnetic calc نختار No لان Ni<sub>2</sub>MnSi يعتبر فيرومغناطيسية



الشكل 5.III : حساب الاستقطاب\_ سبين Ni<sub>2</sub>MnSi

### 52.III. حساب SCF:

- بعد الانتهاء من الخطوات السابقة نقوم بحساب SCF وذلك باستعمال الامر (runsp\_lapw) في

[2]. Konsole

### 6.2.III تهيئة عامل $R_{MTmin} * K_{max}$ (عامل cut-off) :

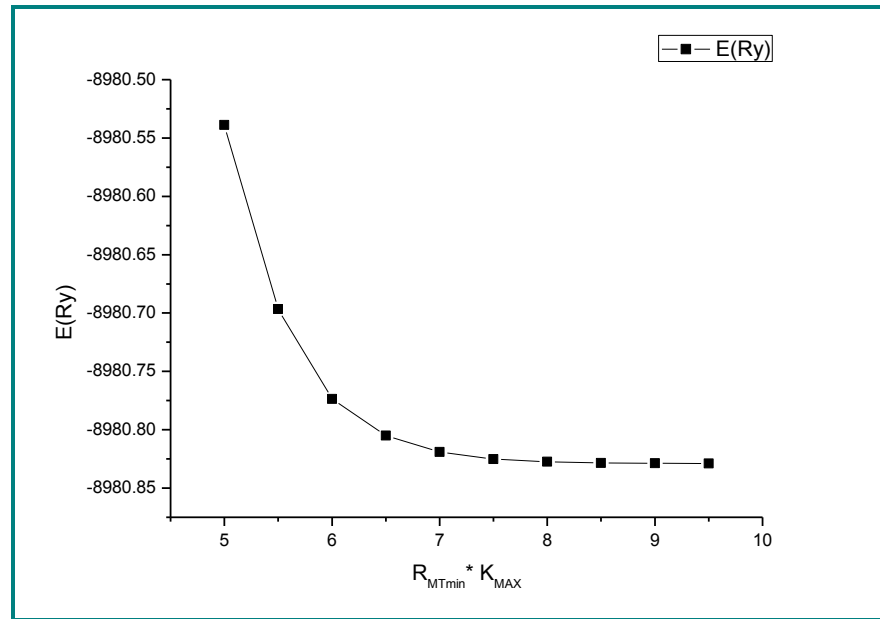
من اجل إيجاد قيمة  $R_{MTmin} * K_{max}$  التي تكون فيها قيمة الطاقة ثابتة

قمنا باستخراج قيمة الطاقة الكلية الموافقة لكل قيمة من الجدء من الملف "scfNi<sub>2</sub>MnSi". (الجدول (1-III))

ثم بواسطة برنامج Origin8 نرسم الشكل (6.III) الذي يوضح تغيرات الطاقة بدلالة قيمة الجدء.

$E(Ry)$	$R_{MTmin} * K_{MAX}$	$E(Ry)$	$R_{MTmin} * K_{max}$
-8980.82515522	7.5	-8980.53874966	5
-8980.82746517	8	-8980.69668979	5.5
-8980.82838359	8.5	-8980.77373336	6
-8980.82872691	9	-8980.80503890	6.5
-8980.82886461	9.5	-8980.81903454	7

الجدول 1.III: تغير الطاقة بدلالة  $R_{MTmin} * K_{MAX}$



الشكل 6.III: تغير الطاقة بدلالة  $R * K$



نختار  $9 = R_{MTmin} * K_{MAX}$  لانها افضل قيمة تثبت فيها الطاقة

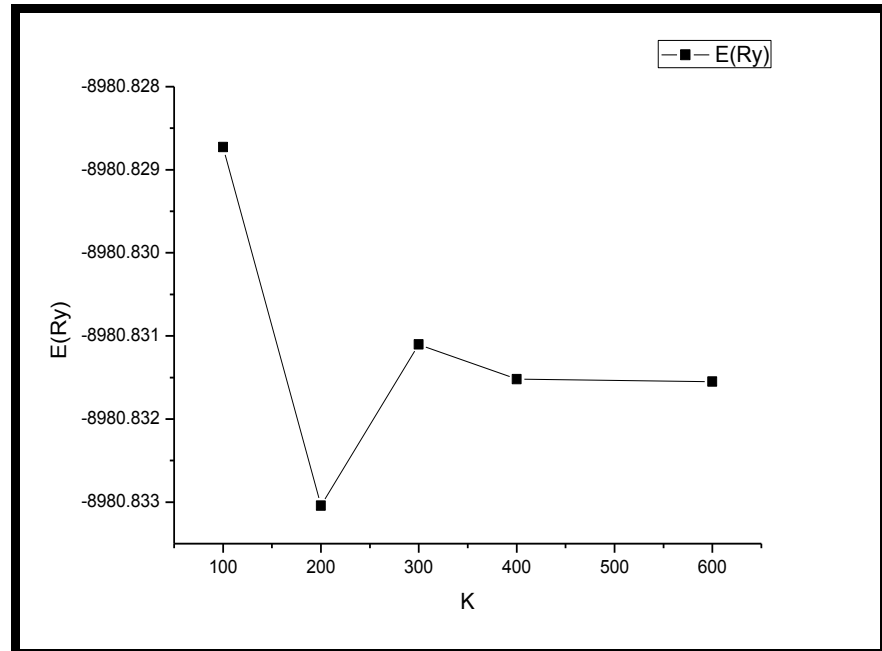
### III. 7.2 تهيئة عدد النقاط K :

تعرف على أنها عدد النقاط K في منطقة بريلوان الأولى منطقة الفضاء العكسي , تهيئ هذه النقاط من اجل

أحسن حد واقصر وقت حسابي. مع الاحتفاظ ب  $9 = R_{MTmin} * K_{MAX}$  فنجد قيم الطاقة التالية

K	$E(Ry)$
100	-8980.82872691
200	-8980.83304196
300	-8980.83110119
400	-8980.83152237
600	-8980.83154945

الجدول 2.III: تغير الطاقة بدلالة K



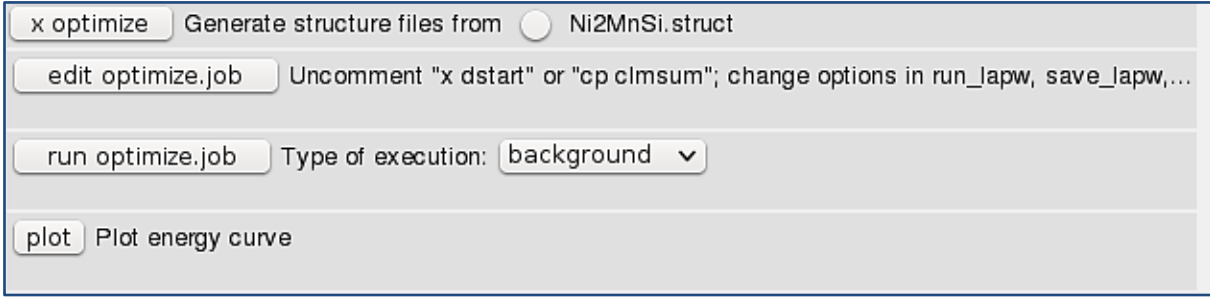
الشكل 7.III: تغير الطاقة بدلالة عدد النقاط K

من خلال (الشكل 7.III) نلاحظ ان قيمة الطاقة تثبت عند القيمة  $K=400$

### 8.2.III تحسين الطاقة optimisation du calcul:

نقوم في هذه المرحلة بتحديد الطاقة المثالية التي تكون فيه الخلية في حالة استقرار ويتم ذلك من خلال عملية

optimize (الشكل 8.III)

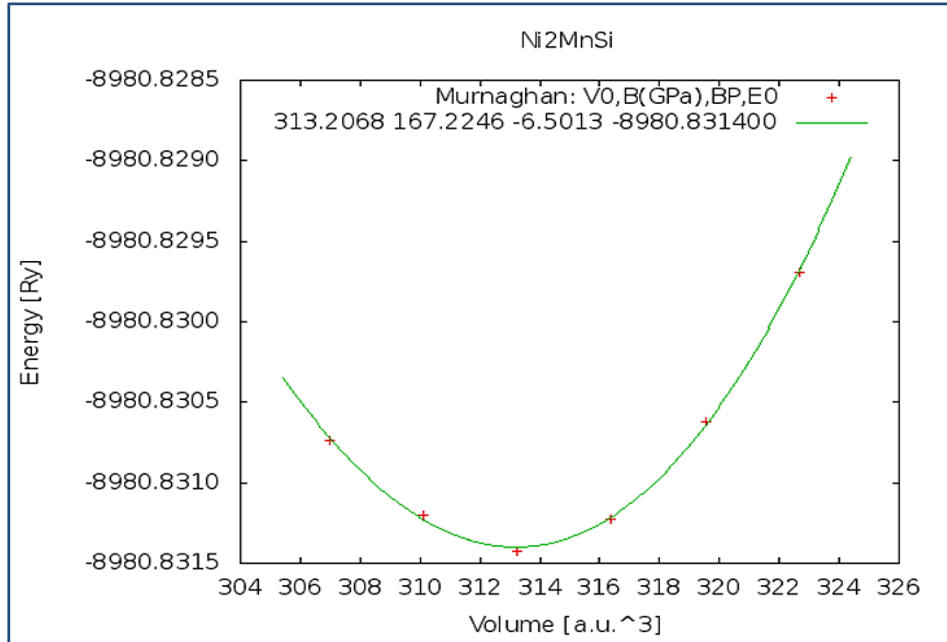


الشكل 8.III : نافذة optimize

- نقوم باتباع جميع الاوامر الموضحة في الشكل (8.III):

✓ في x optimize نقوم بادخال القيم: (-2, -1, 0, 1, 2, 3)

✓ عندما ينتهي الحساب تظهر النتائج في (الشكل 9.III)



الشكل 9.III: تغييرات الطاقة بدلالة الحجم

```

Equation of state: Murnaghan          info          2
E=E0+[B*V/BP*(1/(BP-1)*(V0/V)**BP+1)-B*V0/(BP-1)]/14703.6
Pressure=B/BP*((V0/V)**BP-1)
V0,B(GPa),BP,E0          313.2068          167.2246          -6.5013          -8980.831400
cubic lattice parameter: 10.7803 bohr = 5.7047 Ang
vol          energy          de (EOS2)          de (Murnaghan)          Pressure (GPa)
310.1268          -8980.831199          -0.000030          -0.000032          1.601
306.9942          -8980.830735          0.000010          0.000011          3.141
313.2594          -8980.831422          0.000023          0.000022          -0.028
316.3920          -8980.831230          0.000016          0.000018          -1.749
319.5246          -8980.830620          -0.000028          -0.000028          -3.566
322.6571          -8980.829695          0.000010          0.000009          -5.484
Sigma:          0.000021          0.000022
    
```

الشكل 10.III: قيم متغيرات الحالة لكل من معادلة الحالة EOS2 ، Murnaghan ، Birch – Murnaghan

من الشكل السابق يمكن استخراج ثابت الشبكة و مقارنتها بالنتائج النظرية حسب الجدول (3.III)

ثابت الشبكة (Å)		
	نتيجة حسابنا	النتيجة التجريبية [3]
0.008	6.704	6.696

الجدول 3.III: مقارنة نتائج حسابنا مع نتائج تجريبية

من الجدول نلاحظ ان النتائج متقاربة و نسبة الخطأ تساوي 0.008

### 3.III الخصائص الالكترونية:

✓ تعديل ملف البنية "Ni<sub>2</sub>MnSi.struct" بإدخال قيمة ثابت الشبكة  $a$  عند التوازن المتحصل عليه

في مرحلة "optimize volume" من معادلة ميرناغا (Murnaghan)  $a$ .

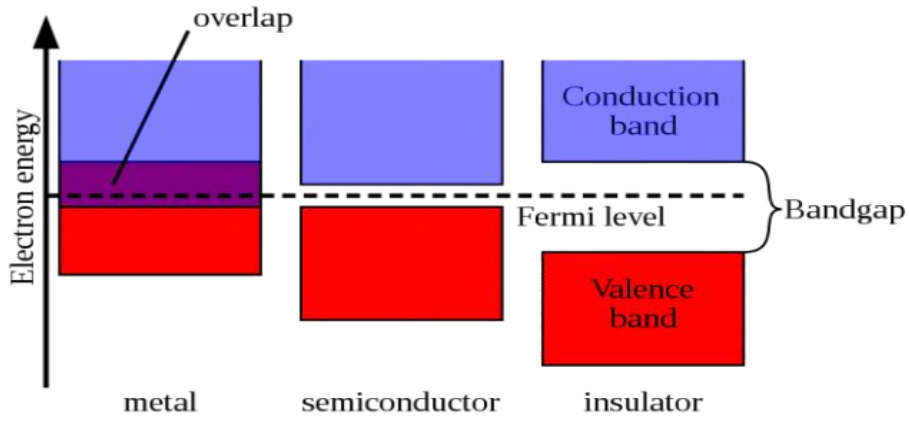
✓تهيئة أنظمة الاستعدادات الاولية "initialize calculation" بأخذ قيم نتائج المرحلة

حسابات الحد الادنى لطاقة (  $K_{point} = 400$  و  $R_{MT min} * K_{max} = 9$  )

✓ حراب حلقة "SCF cycle".

### III.2.3. عصابات الطاقة :

هي نمذجة لقيم الطاقة التي يمكن ان يتخذها الالكترن داخل المواد الصلبة , تشكل هذه القيم نطاقات تسمى عصابات الطاقة تنقسم الى نوعين عصابات مسموحة "عصابة التكافؤ , عصابة التوصيل" واخرى ممنوعة (الشكل III.11) بواسطة عرض العصابة الممنوعة نقوم بتصنيف المواد الى ناقل او شبه ناقل او عازل [4][5] .



(الشكل III.11): مخطط لعصابة الطاقة

و للحصول على عصابة الطاقة ل  $Ni_2MnSi$  باستخدام Wien2k نقوم بح سابها و رسمها بتباع الخطوات التالية:

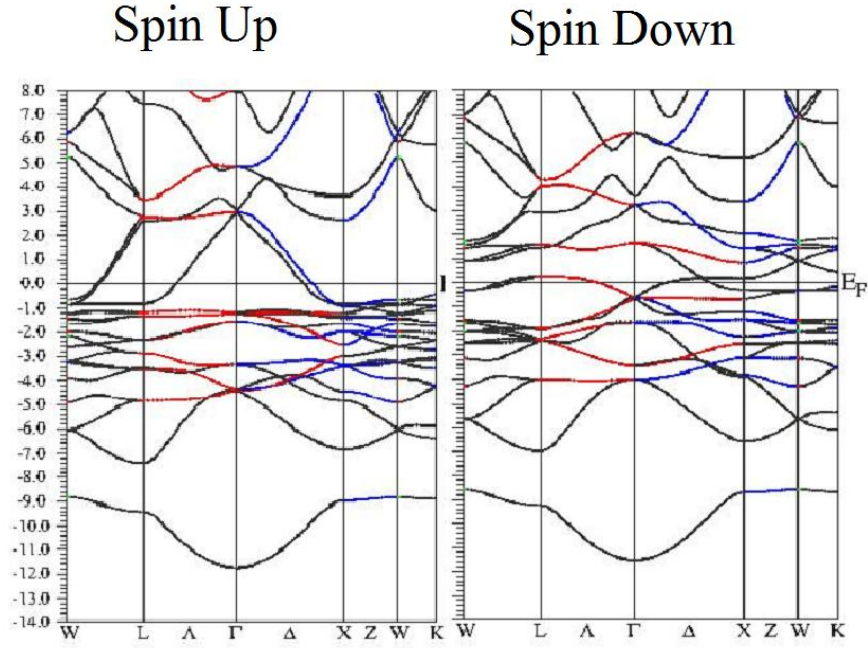
- فتح مساحة عمل جديدة باسم "Band struct" ونسخ ملفات نتائج حساب "SCF cycle" فيه .

تنفيذ برامج نافذة "Band Struct" الموجودة في قائمة "Tasks" على الواجهة الرسومية للبرنامج مع

تعديل ملف "edit.insp" بإدخال قيمة مستوي فارمي من ملفي:

$$E_F = 0.7473077438 \text{ تساوي } "Ni_2MnSi.scf2up"$$

$$E_F = 0.7473077438 \text{ تساوي } Ni_2MnSi.scf2dn$$



الشكل 12.III:

عصابة الطاقة للمركب  $Ni_2MnSi$

نلاحظ من خلال الشكل 12.III أن المركب  $Ni_2MnSi$  هو مركب معدني سواء بالنسبة لسينياً أعلى أو سينا سفلأً بالتحام كامل من عصابتي النقل والتكافؤ على النحو التالي :

بالنسبة لسين أعلى : يوجد التحام بين عصابتي التكافؤ و عصابة النقل في الاتجاهين  $[W-L]$  و  $[X-K]$  تحت مستوى فيرمي

كما ان سويات طاقة متداخلة تحت مستوى فيرمي في الاتجاه  $[X-K]$

بالنسبة لسين اسفل : يوجد تلامس بين عصابتي النقل و التكافؤ  $[X-K]$

### 2.3.III كثافة الحالات DOS:

لحساب كثافة الحالات نقوم باتباع المراحل التالية:

- فتح مساحة عمل جديدة باسم "DOS" ونسخ ملفات نتائج حساب "SCF cycle" فيه.
- تنفيذ برامج نافذة "DOS" الموجودة في قائمة "Tasks" على الواجهة الرسومية للبرنامج

(الشكل 13.III)

### Band structure

fcc  [\[ Brillouinzones from Bilbao Cryst Server \]](#)

Calculate Eigenvalues  interactively

**needed only for continuous lines in the plot (not for non-symmorphic spacegroups)!**

Calculate irreducible representations  so  interactively

**for band character plots only!**

Calculate partial charges ("qtl"-file)  so  interactively

Insert correct EF

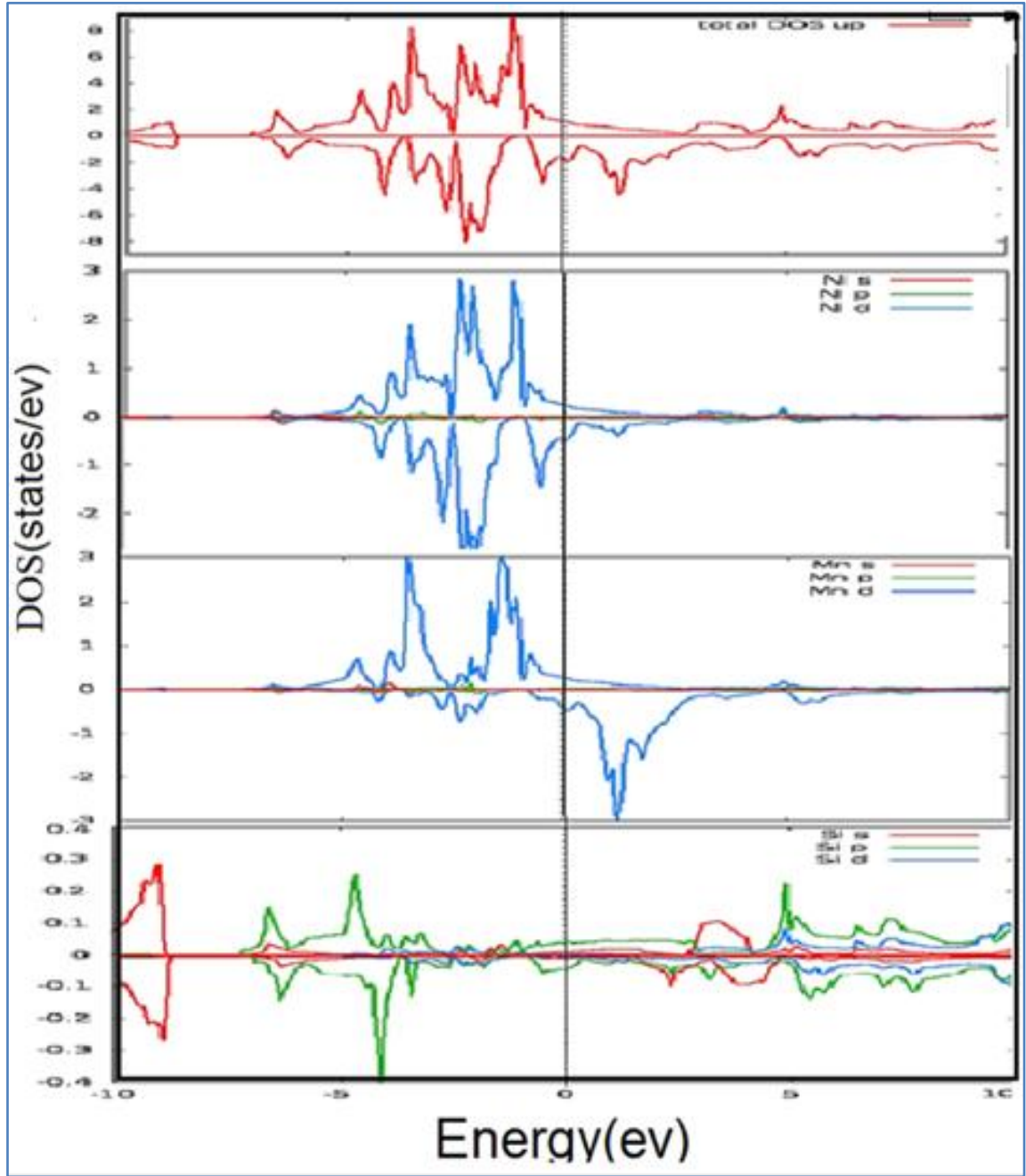
Calculate bandstructure  so  interactively

Plot bandstructure or

with name:

الشكل 13.III: نافذة برامج DOS

- بعد اكمال كل خطوات DOS تظهر منحنيات كثافة الحالات حسب الشكل (14.III)



الشكل III.14: كثافة الحالات لـ  $Ni_2MnSi$

### III.1.2.3 DOS مناقشة:

بصفة عامة نلاحظ في الشكل ( III-14 ) ، الذي يمثل مجموعة منحنيات كثافة الحالات الكلية

للمركب  $Ni_2MnSi$ :

- ✓ من  $eV(10-)$  إلى  $eV(6-)$  طاقة منخفضة تنشأ من حالة (s) للعنصر Si
- ✓ العصابة المتواجدة بالقرب من  $5eV$  ناتجة عن الحالة (p) للعنصر Si
- ✓ العصابات حول مستوى فيرمي ناتجة عن تراكب الحالة "d" للعنصر Ni مع الحالة "d" للعنصر Mn
- ✓ من الواضح ان كثافة الحالة Ni و  $Mn-3d$  مختلفة , فحالة Ni مشغولة كلياً حيث لا توجد كثافة حالات بعد مستوى فيرمي , لذلك ف Ni تملك عزم مغناطيسي صغير فهي لا تساهم في المغناطيسية.
- ✓ في الذرة Mn في المجال الممتد من  $4-eV$  إلى  $2 eV$  يظهر انقسام متبادل ( exchange splitting) بين حالة السبين اعلى واسفل .

### III.4 الخصائص المغناطيسية :

#### III.1.4 العزم المغناطيسي واستقطاب السبين :

إن جهة استقطاب الالكترونات (P) عند مستوى فارمي ( $E_F$ ) للمواد تعرف بالعلاقة :

$$P = \frac{\rho \uparrow(E_F) - \rho \downarrow(E_F)}{\rho \uparrow(E_F) + \rho \downarrow(E_F)}$$

اين يعرف  $\rho \uparrow(E_F)$  و  $\rho \downarrow(E_F)$  بدلالة كثافة حالات السبين المشغولة عند مستوى فارمي ( $E_F$ )

السهمين  $\uparrow$  و  $\downarrow$  إشارة سبيناً أعلى و سبيناً أسفل على التوالي , P تؤول للصر في حالة المواد اللامغناطيسية

(paramagnetique) و المواد ضد مغناطيسية (anti-ferromagnetique) و تؤول للصر عند العبور

من الحالة المغناطيسية (ferromagnetique) إلى الحالة اللامغناطيسية باستخدام درجة حرارة كوري  $T_C$ ,

إذا كانت احدى الحالتين  $\rho \uparrow(E_F)$  او  $\rho \downarrow(E_F)$  معدومة فان استقطاب الالكترونات عند مستوى فيرمي

$E_F$  يكون كاملاً اي (P=100%)



تأخذ قيم العزم المغناطيسي ( $\beta$ ) من الملف  $Ni_2MnSi.scf$ , الجدول (4.III) يظهر نتائجنا و نتائج حساب تجريبية حسب المرجع [3]

3.81	-	3.339	0.263	نتائج تجريبية [3]
3.79	0.027-	3.26	0.22	نتائج حسابنا

الجدول (4.III): مقارنة بين النتائج التجريبية و المحسوبة للعزم المغناطيسي

من خلال المقارنه بين القيم التجريبية و القيم المحسوبة نلاحظ انها متقاربة .

- النتائج المحسوبة تم مقارنتها بالمرجع [3]. [6]

- 
- [1] **ZAHIA AYAT.**, thèse de magister, université d’Ouargla 2006.
- [2] **E. SHRODINGER.** Ann. Physik, , (1926).
- [3] **P. HOHENBERG, W. KOHN,** Inhomogenous Electron Gas, Phys. Rev. 136 (1964) B864.
- [4] **W. KOHN, L.J. SHAM,** Self -Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects, Phys. Rev.
- [5] بري السعدي , شهادة دكتوراه في العلوم , جامعة سطيف , 2013
- [6] **REGGAD ABDERRAHMANE,** Université Ibn Khaldoun – Tiaret, 2013
- [7] **BLAHA. K. SCHWARZ, G. MADSEN. D. KVASNICKA. J. LUITZ,** "User’s Guide, WIEN2k 14.2", 2014

## خلاصة

قمنا في بحثنا بدراسة الخصائص البنوية، الالكترونية، الخصائص المغناطيسية لسبيكة  $Ni_2MnSi$  معتمدين على طريقة الموجة المستوية خطيا المدجة في برنامج Wien2k في الإطار العام لنظرية الكثافة الدالية DFT وذلك في التقريب GGA. معظم النتائج المتحصل عليها لثابت الشبكة  $a(A^\circ)$  كانت جيدة مقارنة مع القيمة التجريبية.

- اما الخصائص الالكترونية فوجدنا أن طبيعة المركب منفعة النواقل في الحالتين السبين أعلى أو السبين أسفل.
- اما كثافة الحالات الكلية وجدنا ان سبب تشكل عصابة الطاقة في المجال الطاقى من (-10ev) الى (-5ev) تجمع الكروونات السوي الطاقى (p, s), للذرة Si, كما لاحظنا ان Ni لا تساهم في المغناطيسية. المجال من (-4)eV الى (2)eV يظهر جليا انقسام تبادلي في ذرة Mn
- بالنسبة للخصائص المغناطيسية، تم تحديد العزم المغناطيسي الكلي، الجزئي و الخاص بالمنطقة البينية للمركب  $Ni_2MnSi$  هاسلر باستخدام تقريب GGA كانت قيمة العزم المغناطيسي الكلي تساوي

$$M_{tot} = 3.79\mu_B \text{ وكانت قريبة من النتيجة التجريبية } 3.81\mu_B.$$

إن ما أنجزناه في هذا العمل دفعنا إلى طرح إقتراحات وأفكار أخرى قد تكون منطلقات لأعمال أخرى:

- يمكننا تغيير العنصر Si بعنصر اخر من عناصر (sp) ثم نقوم بمقارنة النتائج و معرفة تأثيره على خصائص سبيكة هاسلر

- الهدف من هذه الدراسة اكتشاف سبيكة هاسلر جديدة بخصائص جيدة

## ملخص

الهدف من عملنا حساب الخصائص الهيكلية و الالكترونية و المغناطيسية بالاستعمال المبادئ الاولية (**ab initio**) في الحساب على اساس DFT في قاعدة الامواج المستوية متزايدة خطيا في تقريب التدرج GGA في هذه الطريقة قمنا بتحديد الثوابت البلورية كثافة الحالات و عصابة الطاقة و العزم المغناطيسي لسبيكة  $Ni_2MnSi$  التي تنتمي لعائلة هاسلر الكاملة.

**كلمات المفتاحية:** سباتك هاسلر, نظرية الكثافة الوظيفية, العزم المغناطيسي , الاستقطاب.

## résumé

Le but de notre travail compte les caractéristiques structurelles et les premiers principes électroniques et l'utilisation magnétique (ab initio) dans le compte sur la base de DFT dans les vagues plane de base écrit en arrondi gradient GGA de montage De cette façon, nous avons identifié des constantes cristallines densité d'états et de la bande de l'énergie et le moment magnétique de l'alliage  $Ni_2MnSi$  qui appartiennent à la famille des Hassler complète.

**Mot-clé:** Alliage Hassler, théorie fonctionnelle de densité, moment magnétique, polarisation.

## Abstract

The goal of our work account the structural characteristics and Electronic and magnetic use first principles (ab initio) in the account on the basis of DFT in waves planar mounting base written in rounded gradient GGA In this way we have identified crystalline constants density of states and energy band and the magnetic moment of the alloy  $Ni_2MnSi$  that belong to the family of Hasslerfull.

**Keyword:** Alloy Hassler, Density Functional Theory, magnetic moment, polarization.