

جامعة قاصدي مرباح ورقلة
كلية الرياضيات و علوم المادة

قسم: الفيزياء



مذكرة ماستر اكايمي

الميدان : علوم المادة

التخصص : فيزياء إشعاعية كاشف بصريات الكترونية

يحضر من طرف الطالبة: راضية بن الشيخ

الموضوع :

حساب الخصائص الالكترونية من المبادئ الأولية لعينة VC
Calcul des propriétés électronique ab-initio de VC

يناقش علنا في 2014/06/09 أمام اللجنة المتكونة من :

رئيسة	ا. محاضر بجامعة قاصدي مرباح ورقلة	د. بلعكروم كريمة
ممتحنة	ا. مساعدة بجامعة قاصدي مرباح ورقلة	ا. عياط زهية
مؤطرا	ا. تعليم العالي بجامعة قاصدي مرباح ورقلة	د. عمار بوكراع

السنة الدراسية 2014/2013

التشكرات:

بداية اشكر الله عز وجل على توفيقه لنا في اتمام هذا العمل المتواضع بجامعة قاصدي مرباح -ورقلة ،

اخصص شكري الكبير إلى الأستاذ المشرف : **عمار بوكراع** على تقيمه لهذا العمل

كما لا أنسى بان أتوجه بشكري لرئيسة اللجنة الأستاذة : **بلعكروم كريمة** على قبولها لرئاسة اللجنة ،

واشكر الأستاذة الممتحنة : **عياط زهية** على مناقشتها القيمة و على كل ما قدمته لي من معلومات قيمة ونصح

وتوجيه .

كما أتوجه بخالص مشاعر الفخر و الاعتراز و التقدير لكل افراد عائلتي و اخص بالذكر الوالدين الكريمين

، كما يسعدني ويشرفني بان أتقدم بالشكر الكبير لزوجي السيد : **قيطون السعيد** . على مساعدته ووقوفه الى

جانبي . و اشكر زملائي طلبة 2 ماستر فيزياء إشعاعية لدفعة 2014/2013 و اسأل الله التوفيق لكل ما

يجبه ويرضاه .

راضية

الاهداء

الحمد لله رب العالمين و الصلاة و السلام على خاتم الأنبياء و المرسلين

اهدي هذا العمل إلى :

من رنتني و أنارت دربي و أعانتني بالصلوات و الدعوات ، إلى أعلى إنسانة في هذه الوجود

" أمي الحبيبة "

إلى جميع أساتذة قسم الفيزياء

الفهرس

I	التشكرات
II	الاهداء
III	الفهرس
IV	قائمة الاشكال
V	قائمة الجداول
01	مقدمة
03	الفصل I : عموميات
04	1-I المحاكات في علم البلورات
04	2- I الانظمة البلورية و شبكيات برافية
05	3- I تصنيف الشبكات البلورية المستوية
06	4- I الفئات البلورية السبعة
07	5- I الشبكة المكعبة الممرزة الواجه (CFC)
08	- تصنيف الشبكات البلورية
09	6- I البنية البلورية لمركب كريد الفاناديوم VC
10	7- I الخصائص المميزة لمركب الفاناديوم كريد
11	8- I استخداماته
13	الفصل الثاني : نظرية الكثافة التابعية DFT
14	II- نظرية الكثافة التابعية

14.....	مقدمة
14.....	1-1 -Π معادلة شروذنغر.....
15.....	2-1 -Π تطور الدالة الموجية.....
17.....	3-1 -Π نظرية هوهانبرغ و كوهان
18	التقريبات
20	4-1-Π-معادلات كوهان -شام
21.....	5-1- Π طاقة التبادل و الارتباط.....
22.....	6-1-Π- حلول معادلة كوهان-شام
25.....	الفصل الثالث : شرح كيفية استعمال برنامج المحاكاة WIEN 2k
26	1 - III وصف عام لرمز المحاكاة WIEN2K
27.....	2 - III خوارزمية WIEN2K
27	3 - III الأنظمة الابتدائية للحساب
34.....	الفصل الرابع : النتائج و المناقشة
35.....	1- IV : عينة الفانديوم كريد VC
36.....	2- IV عوامل تهيئة الحساب
36.....	1-2- IV إنشاء دليل جديد 'case-directory'
37.....	2-2- IV ادخال المدخلات الرئيسية للملف 'case.struct'
41.....	3-2- IV نتائج تهيئة حجم خلية الوحدة
42.....	4-2- IV تهيئة عامل RMTmin*Kmax (عامل cut-off)

42.....	IV 5-2- تهيئة عدد النقاط K
45.....	IV 6-2- حساب بعض الخصائص الالكترونية
45.....	IV 7-2- حساب كثافة الحالات
46.....	المناقشة
49.....	IV 8-2- عصابات الطاقة
50.....	IV 9-2- كثافة الشحنة
51.....	الخاتمة
52.....	المراجع
53.....	الملخص

قائمة الاشكال :

الفصل الاول :

- 06..... الشكل (I-1) : شكل الخلية الاولية.
- 07..... الشكل (I-2) : أشكال الشبكات المستوية عدا الشبكة المائلة.
- 08..... الشكل (I-3) : الفئات البلورية السبعة .
- 09..... الشكل (I-4) : خلية الوحدة الاصطلاحية للشبكة المكعبة المركزة الأوجه.
- 10..... الشكل (I-5) : البنية البلورية كبريد الفانديوم VC.
- 12..... الشكل (I-6) : شكل العينة.

الفصل الثاني :

- 24..... الشكل II-1: خوارزمية حل معادلة كوهان شرام.

الفصل الثالث :

- 30..... الشكل III-1 : خوارزمية برنامج WIEN2k.

الفصل الرابع :

- 35..... الشكل (IV-1): البنية البلورية للفانديوم كبريد.
- 36..... الشكل (IV-2): النافذة الرئيسية لw2web.
- 37..... الشكل (IV-3) : ملف البنية "cas struc".
- 38..... الشكل (IV-4) : المدخلات الرئيسية ل VC.
- 39..... الشكل (IV-5) : نافذة تهيئة الحساب في WIEN2k.

- 40..... الشكل (IV-6): دورة SCF في برنامج WIEN2k
- 41..... الشكل IV-7: نافذة تهيئة خلية الوحدة
- 41..... الشكل IV-8: تغيرات الطاقة بالنسبة للحجم ل VC
- 42..... الشكل IV-9 : منحنى الطاقة الكلية بدلالة نتائج RMTmin*Kmax
- 43..... الشكل (IV-10): تغيرات الطاقة بدلالة عدد النقاط Kpoint
- 45..... الشكل IV-11 : تغيرات الطاقة بدلالة الحجم
- 46..... الشكل (IV-12) : نافذة الخصائص الالكترونية في برنامج WIEN2k
- 47..... الشكل (IV-13) : نافذة كثافة الحالة
- 47..... الشكل (IV-14): نافذة كثافة الحالات لمركب الفانديوم كبريد في WIEN2k
- 48..... شكل (IV-15): يوضح كثافة الحالة الجزئية d-eg و d-t2g للفانديوم
- 49..... الشكل (IV-16) : عصابة الطاقة لبلورة الفانديوم كبريد ذو البنية الماسية
- 50..... الشكل (IV-17) : كثافة الشحنة للفانديوم كبريد

قائمة الجداول

الفصل الاول :

الجدول 1 : بعض خصائص الفانديوم كبريد 11

الفصل الرابع :

الجدول 1: المدخلات الرئيسية ل VC..... 38

المقدمة العامة



المقدمة

لفيزياء المواد دور مهم وكبير في التطبيقات التكنولوجية الحالية بحيث تطورت في العديد من المجالات وخاصة المواد الناقلة التي أصبحت ذات أهمية تكنولوجية وتقنية وفي السنوات الأخيرة أصبح العالم مهتما بدراسة خصائص هذه المواد.

تطورت نظرية ميكانيك الكم انطلاقاً من الميكانيك الكلاسيكي ويعد ميكانيك الكم حالياً أفضل تصور متوفر عن العالم الفيزيائي وخاصة عن عالم الذرة، اهتم ميكانيك الكم بدراسة خصائص بعض المواد وذلك باستخدام معادلة شرودينغر وحلول هذه المعادلات لعدد محدد من الذرات و الجزيئات أما في الأنظمة المعقدة فنلجأ الى العديد من التقريبات للحصول على معلومات جد دقيقة حول هذه النظم ومن بين هذه التقريبات نظرية دالتي الكثافة وتقريباتها. و الهدف من هذه الدراسة هو إيجاد الخصائص الفيزيائية و الكيميائية للأنظمة البلورية و من اجل معرفة البنية الالكترونية لهذه الأنظمة . [09]

تناولنا في الفصل الأول : الأنظمة البلورية و شبكات برافيه ، الفئات البلورية السبعة، الشبكة المكعبة الممركزة الأوجه ، البنية البلورية لمركب كبريد الفاناديوم VC ، الخصائص المميزة لمركب كبريد الفاناديوم استخدامها .

والفصل الثاني يتضمن نظرية دالية الكثافة الوظيفية وتقريباتها: (تقريب أونف هايمر). تقريب (هارتري-فوك), تقريب, هوهنبارغ - كوهان, تقريب كوهان - شام). طاقة التبادل- الترابط, تقريب الكثافة المحلي LDA , تقريب التدرج المعمم GGA .

و في الفصل الثالث تناولنا فيه شرح برنامج المحاكاة wien 2k . [09]

كما قمنا في الفصل الرابع بعرض النتائج التي تحصلنا عليها و الغرض منها تحديد الخصائص الالكترونية و البنيوية لبلورة كبريد الفاناديوم الممركز الأوجه و هذا من خلال حساب كثافات الحالة و عصابات الطاقة و كثافات الشحوق لعينة كبريد الفاناديوم

.VC

الفصل

I :

عموميات

I-1 المحاكاة في علم البلورات :

تعرف المحاكاة على أنها تقليد لما يحدث في الواقع ، يقال حاكى الشيء أي قلده .

و تعرف أيضا بأنها نظام بديل لتعليم أنشطة معينة ، لكي تجعل المواد و التدريبات المستخدمة اقرب ما تكون إلى الوضع الطبيعي الذي تمارس فيه هذه العمليات . و تستخدم المحاكاة الحاسوب لدراسة المعلومات و المواقف التي يصعب دراستها و التعرف على خصائصها الواقعية في طبيعتها فيتم محاكاتها باستخدام برامج مختلفة دون التعرض إلى الأخطار المرتبطة بالعالم الواقعي ، وهي نظام يتيح للمتعلم التدرب دون مخاطرة او تكاليف عالية . [01]

إن المحاكاة عبارة عن برامج حاسوبية تتصف بالديناميكية والتفاعلية مع مستخدميها ، و يتم تصميمها لتكون نموذجاً ماثلاً لأصل المعلومات و التجارب التعليمية ليدرسها المتعلم من خلال المشاركة و اكتساب الجوانب المعلوماتية . [02]

وتعرف أيضا بأنها نموذج لنظام أو مشكلة موجودة في الواقع ، حيث يرمج هذا الواقع داخل الحاسب الآلي على شكل معادلات تمثل بدقة العلاقات المتبادلة بين مكوناتها المختلفة . [03]

و تتفق أغلب التعاريف السابقة بان المحاكاة هي عملية تقريب محكم لظاهرة او موقف من الحياة الواقعية ، يتم تبسيطه و نقله عن طريق الحاسب الآلي .

I-2 الأنظمة البلورية و شبكات براهية :

تمثل السمة الرئيسية في بلورة ما في دورية تركيبها ، وحتى يتم وصف هذا التركيب ادخل براهية مفهوم الشبكية الحيزية . فقد اخذ في الحسبان أن الذرات في البلورة تنتظم في تماثل حيزي محدد ، حيث يمكن النظر إلى أن كل الذرات من نفس النوع تكون نظاماً دورياً من النقاط في الفراغ هذا الترتيب يعرف باسم الشبكة الحيزية (الشبكة البلورية) . تصنف الشبكات البلورية على أساس تناظرها إلى أربعة عشر شبكية (تتوزع عليها 230 زمرة فضائية) موزعة على سبعة أنظمة بلورية (تتوزع عليها 32 زمرة نقطية)، عدد شبكات براهية الأربعة عشر والنظم البلورية السبعة محدودة بترتيب العقد داخل الشبكة البلورية . [04]

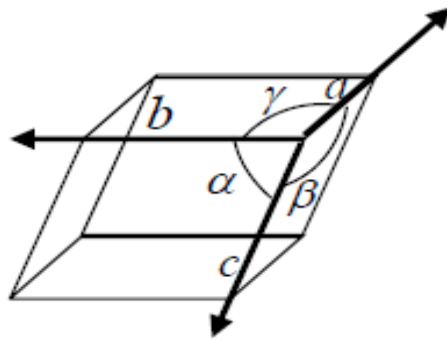
وتكون شبكة برافيه بسيطة إذا كانت العقد متواجدة عند رؤوس الشبكة و يرمز لها بالرمز P ، وعندما تشمل وجود عقد إضافية

فإنها قد تكون ممرزة الأوجه (F) أو ممرزة الجسم (I) أو ممرزة القاعدة (C) . [01]

لتصنيف الشبكات البلورية نختار من الشبكة خلية وحدة لها التناظر النقطي نفسه الذي للشبكة البلورية (نختار خلية وحدة

اصطلاحية) و يتم التصنيف على أساسها تكون هذه الخلية بشكل متوازي سطوح له ستة أوجه - كما هو موضح في الشكل

(1- I) ، مركزه (c) وأحرفه هي (a ، b ، c) . من الممكن أن تنطبق الأشعة \vec{a} ، \vec{b} ، \vec{c} على اشعة الانسحاب الاولية



الشكل (1- I) : شكل الخلية الاولية

3- I تصنيف الشبكات البلورية المستوية :

تكمن أهمية الشبكات المستوية في فهم الخواص الفيزيائية لسطوح المواد الصلبة، و لتصنيفها نختار من الشبكة

البلورية خلية وحدة اصطلاحية ويتم التصنيف على أساسها، تكون هذه الخلية بشكل متوازي أضلاع، مركزه (C)

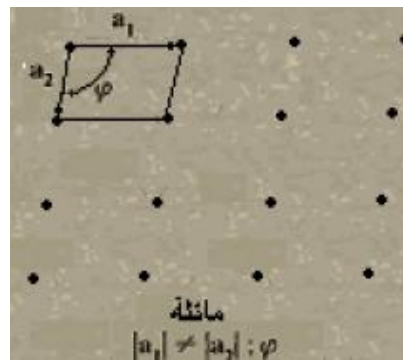
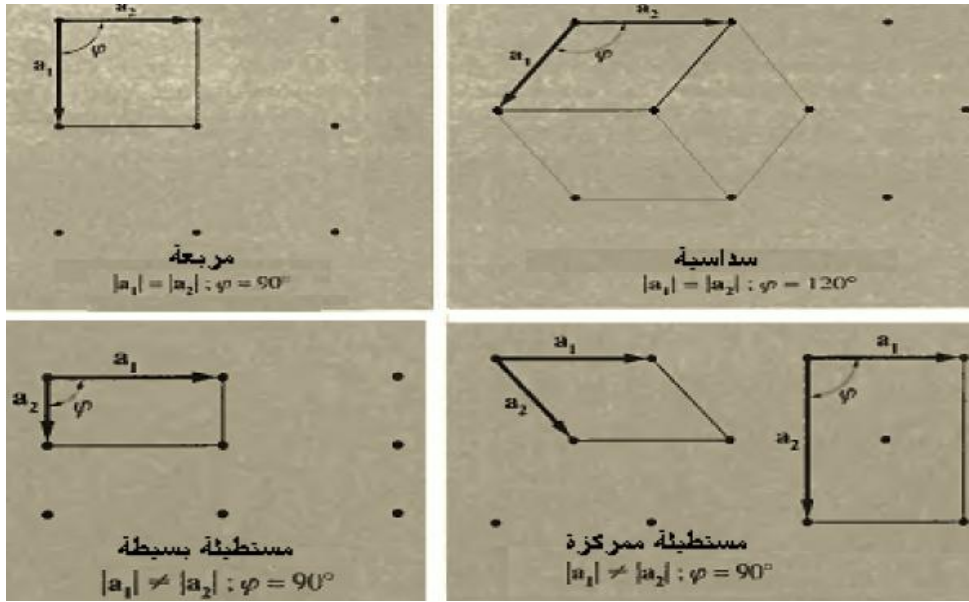
و أحرفه هي a,b يحصران زاوية α أي أن $\alpha = (\vec{a} , \vec{b})$ يمكن تخيل أشكال الشبكات المستوية الممكنة

وذلك حسب أطوال a,b والزوايا المحصورة بينهما . [04]

الشكل العام للشبكة المستوية متوازي أضلاع وهو المسمى بالشبكة المائلة والتي تتميز بكونها مستقلة عن

الانسحاب ومستقلة عن الدورانات بزوايا π ، 2π حول أي عقدة من عقد الشبكة، مثلا استقلال الشبكة عن

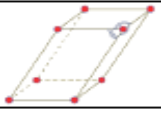
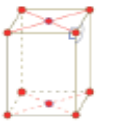
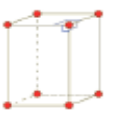
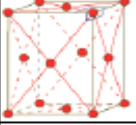
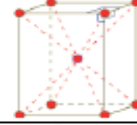
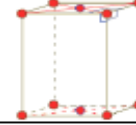
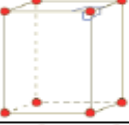
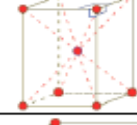

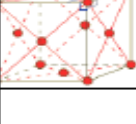
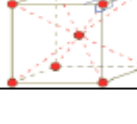
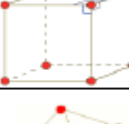
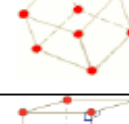
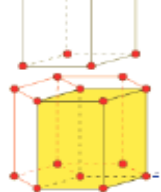
الدوران $2\pi/4$. انظر الشكل (2- I)



الشكل (I-2) : أشكال الشبكات المستوية عدا الشبكة المائتة [09] .

I-4 الفئات البلورية السبعة :

تصنف الفئات البلورية الى سبعة انظمة ممثلة في الجدول التالي :

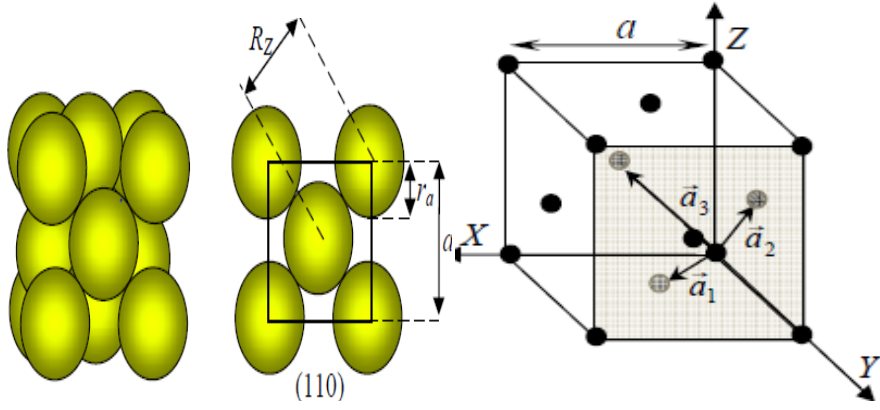
ثوابت خلية الوحدة الاصطلاحية	مركزية الأوجه Face centrée	مركزية الجسم Corps centrée	مركزية القاعدة Base centrée	بسيطة Simple	الغثة البلورية
$a \neq b \neq c$ $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq \pi/2$					ثلاثية الميل Triclinique
$a \neq b \neq c$ $\alpha = \gamma = \pi/2 \neq \beta$					أحادية الميل Monoclinique
$a \neq b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = \pi/2$					المعينية المستقيمة Orthorhombique
$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = \pi/2$					الرباعية Quadratique
$a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma = \pi/2$					المكعبة Cubique
$a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma \neq \pi/2, < 120^\circ$					ثلاثية متساوية الأحرف Rhomboédrique
$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = \pi/2, \gamma = 120^\circ$					السداسية Hexagonal

الشكل (3-I): الفئات البلورية السبعة [04]

I- 5 الشبكة المكعبة الممركزة الأوجه (CFC) :

خلية الوحدة الاصطلاحية في هذه الشبكة عبارة عن مكعب به ثمانية عقد أو ذرات عند زواياها الركنية و ستة عقد أو ذرات في

مراكز الأوجه تتماس مع بعضها وفق أقطار أوجه المكعب أنظر الشكل (4-I) .



الشكل (I-4) : خلية الوحدة الاصطلاحية للشبكة المكعبة المركزة الأوجه [04]

ويمكن تصنيف الجوامد البلورية تبعاً لطبيعة الروابط الذرية الى الأنواع الآتية:

أ البلورات الأيونية Ionic Crystals :

ومنهما كلوريد السيزيوم وكلوريد الصوديوم، وفيها يحدث الترابط بين الذرات المختلفة التي يفقد بعضها، كالصوديوم، شحنات سالبة (إلكترونات) وتصبح أيونات موجبة الشحنة، وتكتسب الذرات الأخرى شحنات سالبة كالكلور من تجاذب Coulomb Forces وتصبح أيونات سالبة، وتنتج من ذلك قوى تنافر من النوع الكولومي أيضاً تنشأ نتيجة لتداخل (السحب الإلكترونية) أو القشرات الأيونية. وتحدد قوتا التجاذب والتنافر بين أيونين بعد كل أيون عن الآخر والشكل النهائي الذي تترتب عليه

الأيونات في البلورة . [09]

ب البلورات التساهمية Covalent Crystals :

ومن أمثلتها الألماس، وفيها تشترك الإلكترونات في الذرات المتجاورة وتستوفي الأغلفة الخارجية لها العدد اللازم من الإلكترونات، ويتحقق بذلك تركيب إلكتروني مستقر . وتفضل ذرات الكربون ($2S^2 2P^2$) في بلورة الألماس أن تتحد مع بعضها بواسطة أربع روابط تميل كل منها على الأخرى بالزاوية الهرمية الثلاثية ومقدارها $108^\circ 54$ بمعنى أن ذرة الكربون تتوسط هرمياً ثلاثياً، وتقع الذرات الأربع المتصلة بها كأقرب جيران عند رؤوس الهرم، وتصبح بذلك جميع ذرات الكربون وكأن بغلافها الخارجي ثماني إلكترونات . وهذا وضع مستقر تنشأ عنه قوى ترابط غاية في القوة، وإن كان الرص في تركيب الألماس متباعداً من الناحية

الهندسية لأن الرابطة الهرمية لا تسمح إلا بأربع ذرات كأقرب جيران، في حين أن التركيب متلاصق الرص به اثنتا عشرة ذرة كأقرب جيران. [09]

ج البلورات الفلزية : Metallic Crystals

تتميز الفلزات بقدرتها على التوصيل الكهربائي والحراري الجيد، ومن ثم فإن بعض الإلكترونات الموجودة في القشرة الخارجية من ذراتها تكون حرة الحركة بحيث تكون سحابة من الشحنات السالبة تحيط بأيونات هذه الذرات. ويعزى ذلك إلى ضعف الرابطة بين الإلكترونات الخارجية والذرات التابعة لها. [09]

يمكن أن نتصور بلورة الفلز تتكون من شبكة من الأيونات الموجبة المغمورة في بحر منتظم من الشحنات السالبة (الإلكترونات الطليقة) ، وينشأ عن ذلك قوى تجاذب تحقق الترابط بين ذرات الفلز، ونشأ الرابطة الفلزية بين الأيونات والسحابة الإلكترونية المحيطة بها داخل البلورة. [09]

د البلورات الجزيئية :Molecular Crystals

ومن أمثلتها الشمع وبعض المركبات العضوية، وتتميز بترابط ضعيف من نوع القوى الكهروستاتيكية قصيرة المدى التي افترضها "فان درفالز" لتفسير بعض قوانين الغازات ولهذا فإن درجة انصهار مثل هذه المواد تكون منخفضة، كما أنها رديئة التوصيل للحرارة والكهربائية، وينتظم ترتيب الذرات في هذا النوع من البلورات بحيث تنشأ "رابطة فان درفالز" عن عزم ثنائي الأقطاب [05]

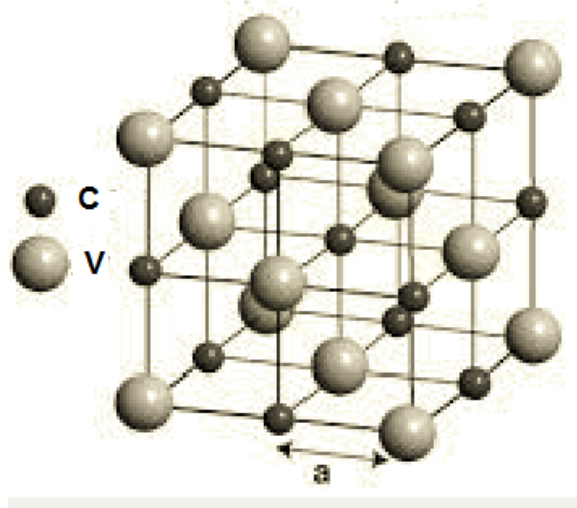
ه البلورات ذات الرابطة الهيدروجينية : Crystals Hydrogen – Bonded

ومن أمثلتها بلورات الثلج، وفيها تحدث الرابطة الهيدروجينية تحت ظروف معينة بين الذرات الأكثر كهروسالبية ، ففي جزئ الماء يكون الاستقطاب أضعف كثيراً . [05]

I – 6 البنية البلورية لمركب كبريد الفاناديوم VC :

تنتمي بلورة كبريد الفاناديوم VC إلى الشبكة المكعبة الممركرة الأوجه (CFC) و هو مركب معدني يتبلور ضمن بنية كلوريد الصوديوم NaCl ، ينتمي إلى الزمرة $Fm\bar{3}m$ ، ثابت البلورة $(a_{VC} = 4.160 \text{ \AA})$ ، و هو مسحوق معدني رمادي اللون [05]

تحتوي هذه البلورة على ذرة الفاناديوم V و ذرة الكربون C ، تقع ذرة الفاناديوم V في مركز كل وجه من أوجه الشبكة المكعبة و في رؤوس الشبكة المكعبة بينما تحتل ذرة الكربون مركز الشبكة الممركزة الأوجه ومنتصف أضلاع الخلية . الشكل (I-5).



الشكل (I-5) : البنية البلورية كريد الفاناديوم VC

I-7 الخصائص المميزة لمركب كريد الفاناديوم :

الفاناديوم هو عنصر كيميائي رمزه V عدده الذري 23 ، اكتشف من قبل العالم أندريس مانويل ديل ريو في عام 1801 في المكسيك من خلال تحليل لمعدن الرصاص الحاملة أسمه " الرصاص البني " ، تم إنشاء الكلوريدات من الفاناديوم في عام 1830 ، من بين خصائص هذا المركب عالي النقاء (99.95 %) ، لديه مقاومة جيدة للتآكل و مستقرة ضد القلويات (الكبريتيك و الهيدروكلوريك والأحماض) ، يتأكسد في الهواء عند (933 K ، 660 ° C ، 1220 ° F) محتوي الكربون 19.08%

والجدول 1 يظهر بعض خصائص كريد الفاناديوم [05] .

العينة	كربيد فاناديوم
صيغة جزيئية	VC
الكتلة المولية	62.9525 g/mol
المظهر	مسحوق بلوري رمادي
الكثافة	5.77 g/cm
نقطة الانصهار	2800 °c
نقطة الغليان	3900 °c
الأبعاد	مايكرو 3-6

الجدول 1 : بعض خصائص كربيد الفاناديوم

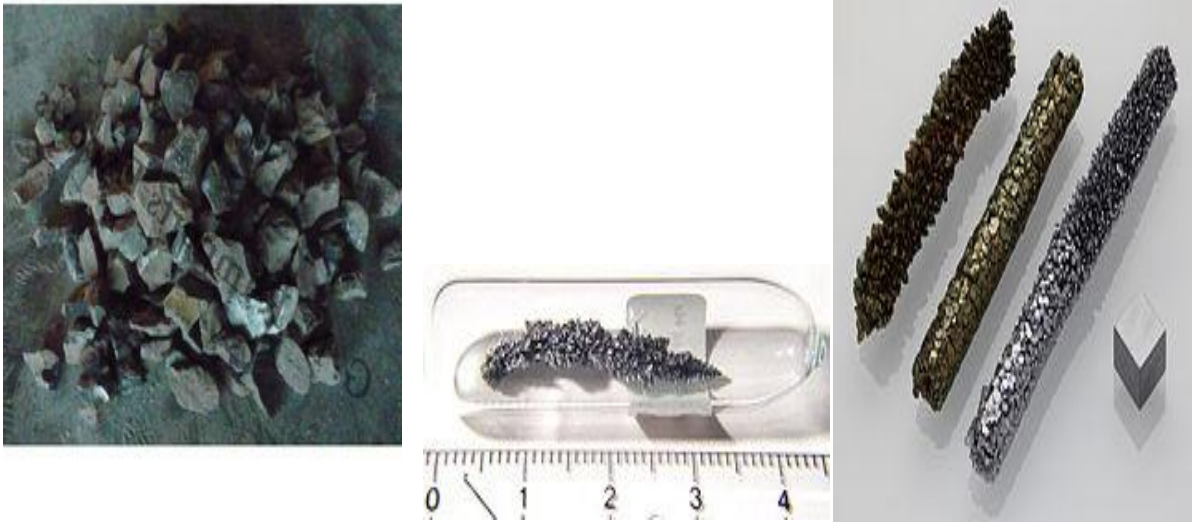
I- 8 استخداماته :

يتم إنتاجه في الصين وروسيا من الصلب المصهر؛ توجد بلدان أخرى تنتج من غبار المداخن من النفط الثقيل ، أو كمنتج ثانوي من استخراج اليورانيوم . وهي تستخدم أساسا لإنتاج سبائك الصلب المتخصصة مثل الفولاذ أداة عالية. تم العثور على كميات كبيرة من أيونات الفاناديوم في عدد قليل من الكائنات الحية ويستخدم كربيد الفاناديوم كمركز نشط من الإنزيمات ، مثل الفاناديوم bromoperoxidase [06]

كربيد الفاناديوم شديدة المقاومة للتآكل بحيث يتم استخدامها عادة لسبيكة الفولاذ المقاوم لصدأ الدرجات . ويستخدم مركب خامس أكسيد الفاناديوم كمحفز لإنتاج حامض الكبريتيك. يكون متاح في المعادن والمركبات مع درجات نقاء من 99 ٪ إلى 99.999 ٪ . من شأنه توفير مساحة فائقة في أبحاث تكنولوجيا النانو والتجارب الأخيرة تثبت إنشاء خصائص ومزايا جديدة و فريدة من نوعها الشكل (I- 6) يظهر شكل العينة.

ويستخدم حوالي 85 ٪ من إنتاج كربيد الفاناديوم كمادة مضافة الصلب. تم اكتشاف زيادة كبيرة في قوة الفولاذ التي تحتوي على كميات صغيرة من الفاناديوم في بداية القرن 20 . الفاناديوم يشكل نيتريدات مستقرة و كربيد ، مما أدى إلى زيادة كبيرة في قوة الصلب. 33 ٪ استخدم للتطبيقات في المحاور ، وإطارات الدراجات الهوائية ، العمود المرفقي ، التروس، و مكونات أساسية

أخرى. هناك مجموعتين من الفاناديوم تحتوي على مجموعات سبائك الصلب . الفاناديوم سبائك الصلب عالية الكربون تحتوي على 0.15 % و 0.25 % يستخدم في الأجهزة والأدوات الجراحية. [07] نسبة عالية من كربيد الفاناديوم في تلك السبائك يزيد من مقاومة التآكل إلى حد كبير. [08] يعد أكسيد الفاناديوم حافزا في عملية الاتصال لإنتاج حامض الكبريتيك .



الشكل (I - 6) : شكل العينة

الفصل الثاني: نظرية الكثافة

التابعة DFT



II- نظرية الكثافة التابعية:

مقدمة :

تحتوي المواد الصلبة على انوية موجبة الشحنة والكترونات سالبة الشحنة تتفاعل كهربائيا فيما بينها (تفاعل نواة -نواة ، إلكترون-نواة ، إلكترون-إلكترون) .

من اجل إيجاد الخصائص الفيزيائية و الكيميائية للأنظمة البلورية و من اجل معرفة البنية الالكترونية لهذه الأنظمة نعلم على حل معادلة شرودنغر المتعددة الالكترونات . إلا أن حل مثل هذه المسائل يكون معقد، لذلك نقوم بتبسيطها إلى نظام معادلات أحادي الالكترونات ليسهل حلها عدديا . ونستعمل لهذا تقريب نظرية الكثافة التابعية . [13]

II-1-1 معادلة شرودنغر :

في سنة 1926 طرح العالم الفيزيائي النمساوي شرودنغر معادلة لإيجاد دالة موجة النظام .

حل معادلة شرودنغر المتعلقة بالزمن لنظام متكون من N جسيمة موضعها $r_1, r_2 \dots r_N$ دالة موجتها

$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2 \dots \vec{r}_N, t)$ تكتب كالتالي :

$$\hat{H}\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2 \dots \vec{r}_N, t) = -i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2 \dots \vec{r}_N, t)}{\partial t} \quad (\text{II. 1})$$

تسمى المعادلة (II.1) معادلة شرودنغر المتعلقة بالزمن حيث \hat{H} المؤثر الهاملتوني للنظام . وهي معادلة تفاضلية من الدرجة الثانية صعبة الحل في الحالة العامة و تكافئ معادلة نيوتن في الميكانيك الكلاسيكي .

في حالة ذرة او جزئ معزول (عدم وجود حقل خارجي متغير بدلالة الزمن ، قوى الجاذبية ضعيفة أو معدومة التفاعل بين الالكترونات و عدد السبين مهمل) . [12]

Π-1-2 تطور الدالة الموجية :

في حالة النظام مستقل عن الزمن حلول $\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2 \dots \vec{r}_N, t)$ يمكن ان تكتب:

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2 \dots \vec{r}_N, t) = \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2 \dots \vec{r}_N, t) e^{-iEt/\hbar} \quad (\text{Π. 2})$$

في هذه الحالة الكمون لا يتعلق بالزمن أي ان المؤثر الهاملتوني \hat{H} مستقل عن الزمن

E : هي طاقة الدالة الموجية المتحصل عليها محل معادلة شرودنغر الغير متعلقة بالزمن

$$\psi \hat{H} = E \psi \quad (\text{Π. 3})$$

الدوال ψ_i حلول معادلة شرودنغر تسمى الحالات المستقرة للنظام ذو الطاقات E_i

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V} \quad (\text{Π. 4})$$

$$\hat{H} = T_{e+} + T_N + V_{NN} + V_{ee} + V_{eN} \quad (\text{Π. 5})$$

معادلة شرودنغر (Π. 4) لنظام مكون من N نواة و n الكترون مستقلة عن الزمن, حيث E هي طاقة المؤثر الهاملتوني للنظام

المتعلق بالمؤثر الهاملتوني الغير نسبي لنظام ذو شحن نقطية [11]

الطاقة الحركية للالكترونون : T_e

$$T_e = \frac{P_1^2}{2m_1} + \frac{P_2^2}{2m_2} + \dots + \frac{P_n^2}{2m_n} \quad (\text{Π. 6})$$

$$P_i = \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}_i \quad (\text{Π. 7})$$

$$P_i^2 = -\hbar^2 \Delta_i \quad (\text{Π. 8})$$

$$T_e = -\frac{\hbar^2}{2m_1} \Delta_1 - \frac{\hbar^2}{2m_2} \Delta_2 - \dots - \frac{\hbar^2}{2m_n} \Delta_n \quad (\text{II. 9})$$

حيث Δ_k دالة لابلاص تكتب على الشكل التالي :

$$\Delta_k = \frac{\partial^2}{\partial x_k^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_k^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_k^2} \quad (\text{II. 10})$$

الطاقة الحركية للنواة :

$$T_N = \frac{\hbar^2}{2M_1} \Delta_1 - \frac{\hbar^2}{2M_2} \Delta_2 - \dots - \frac{\hbar^2}{2M_N} \Delta_N \quad (\text{II. 11})$$

$$T = T_e + T_N \quad (\text{II. 12})$$

$$T = \frac{-\hbar^2}{2m_e} \sum_{i=1}^n \Delta_i + \frac{-\hbar^2}{2} \sum_{i=1}^N \frac{\Delta_i}{M_i} \quad (\text{II. 13})$$

حيث m_e هي كتلة الالكترون .

الطاقة الكامنة :

$$V = V_{NN} + V_{eN} + V_{ee} \quad (\text{II. 14})$$

$$V = \sum_{l=1}^N \sum_{j>l}^N \frac{Z_l Z_j e^2}{4\pi \epsilon_0 |\vec{R}_l - \vec{R}_j|} - \sum_{l=1}^N \sum_{i=1}^n \frac{Z_l e^2}{4\pi \epsilon_0 |\vec{r}_i - \vec{R}_l|} + \sum_{i=1}^n \sum_{j>i}^n \frac{e^2}{4\pi \epsilon_0 |\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \quad (\text{II. 15})$$

$|\vec{r}_i - \vec{r}_j|$: المسافة بين الكترون -الكترون .

$|\vec{r}_i - \vec{R}_l|$: المسافة بين الالكترون و النواة .

$|\vec{R}_l - \vec{R}_j|$: المسافة بين الانوية .

طاقة المؤثر الهاملتوني تكتب :

$$\hat{H} = \frac{-\hbar^2}{2m_e} \sum_{i=1}^n \Delta_i + \frac{-\hbar^2}{2} \sum_{i=1}^N \frac{\Delta_i}{M_i} + \sum_{I=1}^N \sum_{J>I}^N \frac{Z_I Z_J e^2}{4\pi \epsilon_0 |\vec{R}_I - \vec{R}_J|} - \sum_{I=1}^N \sum_{i=1}^n \frac{Z_I e^2}{4\pi \epsilon_0 |\vec{r}_i - \vec{R}_I|} + \sum_{i=1}^n \sum_{j>i}^n \frac{e^2}{4\pi \epsilon_0 |\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \quad (\text{II. 16})$$

m_e : كتلة الالكترونات

M_i : كتلة الانوية

نظرية الكثافة التابعية (*DFT*) :

نظرية الكثافة التابعية تعطى بهدف إيجاد خصائص الحالة الأساسية للنظام المكون من عدد محدد من الالكترونات في حالة تفاعل كولومبي مع انويه نقطية وهذا بمساعدة المعلوم الوحيد وهو الكثافة الالكترونية ، تعتمد على نظريتين أساسيتين وجدتا من طرف العالمين هوهنبرغ و كوهان [13]

II-1-3 نظرية هوهانبرغ و كوهان :

نظرية الكثافة التابعية تعتمد على النظريتين المطروحتين من طرف هوهانبرغ و كوهان عام 1964

المطبقة على كل الأنظمة التي تحتوي على n إلكترون معرضة لكمون خارجي معطية الحالة الأساسية (تسمى **SG** الحالة الأرضية) وتكون غير مولدة . [12]

النظرية الاولى :

الكثافة الالكترونية $\rho_e(r)$ لنظام في حالته الاساسية الغير متوالدة تكتب كالآتي :

$$\rho_e(r) = \int |\Psi (\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_n, \vec{R}_1, \vec{R}_2, \dots, \vec{R}_N)|^2 d\vec{R}_1, d\vec{R}_2, \dots, d\vec{R}_N \quad (\text{II. 17})$$

انطلاقاً من هذه النظرية أصبح المتغير الأساسي في المشكلة ليس دالة الموجة ، المتغير الأساسي هنا هو الكثافة الالكترونية ، و هذا ما يقودنا الى العبارة الثانية لنظرية هوهانبرغ و كوهان . [13]

النظرية الثانية :

$$\rho = |\Psi|^2 \quad (\text{II. 18})$$

حيث : ρ هي الكثافة الكلية

$$\hat{H}\Psi(\vec{r}_i, \vec{R}_i) = E\Psi(\vec{r}_i, \vec{R}_i) \quad (\text{II. 19})$$

$$\Psi^*(\vec{r}_i, \vec{R}_i) \hat{H}\Psi(\vec{r}_i, \vec{R}_i) = E\Psi(\vec{r}_i, \vec{R}_i) \Psi^*(\vec{r}_i, \vec{R}_i) \quad (\text{II. 20})$$

$$\Psi^*(\vec{r}_i, \vec{R}_i) \hat{H}\Psi(\vec{r}_i, \vec{R}_i) = E \rho \quad (\text{II. 21})$$

نكامل على الشوارد :

$$\int \Psi^*(\vec{r}_i, \vec{R}_i) \hat{H} \Psi(\vec{r}_i, \vec{R}_i) d\vec{R}_1, d\vec{R}_2, \dots, d\vec{R}_N = E \rho_e \quad (\text{II. 22})$$

$$\hat{H} [\rho_e] = E \rho_e \quad (\text{II. 23})$$

$$\hat{H} = V_{ext} + (T + V_{ee}) \quad (\text{II. 24})$$

$\{V_{ext}\}$ هي تفاعل بين الايونات و الالكترونات

التقريبات :

لتبسيط المشكل نستعمل تقريبات بورن اوبن هايمر حيث نعتبر الانوية ثقيلة جدا بحيث يمكن فصل الدالة الموجية:

$$F_{hK} = T_e + V_{ee} \quad (\text{II. 25})$$

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_n, \vec{R}_1, \vec{R}_2, \dots, \vec{R}_N) = \Psi_e(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_n) \phi(\vec{R}_1, \vec{R}_2, \dots, \vec{R}_N) \quad (\text{II. 26})$$

$$\hat{H} = T_{e+} + V_{ee} + V_{eN} \quad (\text{II. 27})$$

$$\langle \Psi | A | \Psi \rangle = \int \Psi^*(\kappa) A \Psi(\kappa) \quad (\text{II. 28})$$

$$E \rho_e = \int \Psi^* T \Psi \overrightarrow{dR}_i + \int \Psi^* V_{ee} \Psi \overrightarrow{dR}_i + \int \Psi^* V_{ext} \Psi \overrightarrow{dR}_i \quad (\text{II. 29})$$

$$E \rho_e = F_{he}[\rho] + \int V_{ext} \rho \Psi \overrightarrow{dR}_i \quad (\text{II. 30})$$

$$\hat{H}[\rho_e] = E \rho_e \quad (\text{II. 31})$$

$$(\hat{T} + V_{ee} + V_{ext})[\rho_e] = E \rho_e \quad (\text{II. 32})$$

$$F_{hK}[\rho_e] + V_{ext}[\rho_e] = E \rho_e \quad (\text{II. 33})$$

نبحث على ρ_e بحيث تكون الطاقة E_{minimal}

$$F_{hK}[\rho_e] + V_{ext}[\rho] = E \rho_e \quad (\text{II. 34})$$

حيث F_{hK} هي دالة معرفة

$$F_{hK}[\rho_e] = \int \Psi^* (\hat{T} + V_{ee}) \Psi \overrightarrow{dR}_1, \overrightarrow{dR}_2 \dots \overrightarrow{dR}_N \quad (\text{II. 35})$$

ملاحظة : نظرية هوهانبرغ وكوهان المطبقة على نظام غير مستقطب يمكن تطبيقها على انظمة مستقطبة للحالة الاساسية ، تصبح

دالة مكونة من كثافتي لف :

$$E = E[\rho_{\uparrow}, \rho_{\downarrow}] \quad (\text{II. 36})$$

- بهذه النظرية هوهانبرغ و كوهان حلا مشكلة معادلة شرودنغر متعددة الالكترونات . في نظرية الكثافة التابعة اذا استطعنا تشكيل

الدالة يسهل ايجاد الحالة الاساسية للنظام في كمون خارجي معطى اذن كل عوائق تكوين الدالة $F[\rho]$ حلت [12]

في الواقع لا توجد عبارة تحليلية لدالة كثافة الطاقة $T(\rho)$ الحركية لنظام مكون من N الكترون في حالة تفاعل [01]

Π-1-4- معادلات كوهان -شام :

أساس طريقة كوهان و شام هو العلم مسبقا ان قياس او حساب الطاقة الحركية بصفة دقيقة هو أمر صعب الحل ، لذلك نحاول قدر المستطاع أن نفصل الجزء المعلوم (الطاقة الحركية) عن الجزء الغير معلوم .

هذا المنطق طبق في العبارة التالية:

$$F_{HK} [\rho_{\vec{r}}] = T_0 [\rho(\vec{r})] + J[\rho(\vec{r})] + E_{xc} [\rho(\vec{r})] \quad (\text{Π. 37})$$

$\{T_S\}$: الطاقة الحركية لنظام غير متفاعل .

J : التفاعل الكولومبي .

نعرف بطريقة دقيقة كل الحدود الغير معلومة وتجمع في عبارة طاقة تغير الترابط :

$$\xi_i \Phi_i = \hat{H}_{ks} \Phi_i \quad (\text{Π. 38})$$

$\Phi_i(\vec{r})$: دالة الموجة للجسيمات

ξ_i : طاقة الجسيمات

$$\hat{H}_{ks} = \hat{T}_0 + \hat{V}_H + \hat{V}_{xc} + \hat{V}_{ext} \quad (\text{Π. 39})$$

\hat{T}_0 : مؤثر الطاقة الحركية للالكترتون.

\widehat{V}_H : مؤثر طاقة هارثري فوك للإلكترونات .

\widehat{V}_{xc} : مؤثر طاقة التبادل و الارتباط (Usuda M.2002).

الكثافة الإلكترونية الكلية لجميع الحالات تكتب من الشكل :

$$\rho(\vec{r}) = \sum_{occ} \Phi_i^*(\vec{r}) \Phi_i(\vec{r}) \quad (\text{P. 40})$$

5-1-1- طاقة التبادل و الارتباط :

نعبر عن طاقة الارتباط و التبادل بالعبرة التالية :

$$E_{xc}[\rho(\vec{r})] = F_{HK}[\rho] - T_0[\rho] + \widehat{V}_H[\rho] \quad (\text{P. 41})$$

عبرة طاقة التبادل و الارتباط E_{xc} غير دقيقة لذلك نلجأ الى استعمال تقريب الكثافة المحلية Local Density

Approximation (LDA). طاقة التبادل و الارتباط الكلية تكتب من الشكل التالي:

$$E_{xc}^{LDA}[\rho(\vec{r})] = \int \rho(\vec{r}) \xi_{xc}(\rho(\vec{r})) d\vec{r} \quad (\text{P. 42})$$

ξ_{xc} : كثافة طاقة التبادل و الارتباط للجسيمات (نفرض ان الإلكترونات متجانسة) (Singh D.J.1994).

من اجل تحسين تقريب الكثافة المحلية نستعمل تقريب التدرج المعمم (Generalized Gradient Approximation)

(GGA) الذي يشمل شروط اضافية لتدرج الكثافة الإلكترونية حيث تستبدل $\xi_x(\rho)$ ب $\xi_x(\rho, \Delta\rho)$

[Cottenier. S.2002]

Π-1-6- حل معادلة كوهان-شام :

معادلة كوهان - شام تكتب من الشكل :

$$\left(\frac{-\hbar^2}{2m_e} \Delta_m + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int \frac{\rho(\vec{r}')}{|\vec{r}-\vec{r}'|} d\vec{r}' + \hat{V}_\alpha + \hat{V}_{ext}\right) \Phi_m(\vec{r}) = \xi_m \Phi_m(\vec{r}) \quad (\text{Π. 43})$$

$$\hat{H}_{sp} = \frac{-\hbar^2}{2m_e} \Delta_m + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int \frac{\rho(\vec{r}')}{|\vec{r}-\vec{r}'|} d\vec{r}' + \hat{V}_\alpha + \hat{V}_{ext} \quad (\text{Π. 44})$$

حيث :

\hat{H}_{sp} : المؤثر الهاملتوني للجسيمات .

\hat{V}_α : مؤثر طاقة التبادل و الارتباط.

$\Phi_m(\vec{r})$: دالة لف الجسيمات [Haroun M. 2002]

معادلتى هارترى- فوك وكوهان- شام متشابهة و حلولهما بنفس التقنيات الرياضية ، في حالة اللف الذاتي لمعادلة كوهان-شام

نكتب :

$$\Phi_m = \sum C_{m\alpha} \Phi_\alpha(\vec{r}) \quad (\text{Π. 45})$$

$\Phi_\alpha(\vec{r})$: دالة الحالة الاساسية

حل معادلة كوهان - شام تتعلق بالمعامل $C_{m\alpha}$ الى غاية الحصول على قيمة دنيا للطاقة حيث :

$$(H - \xi_m S)C_m = 0 \quad (\text{Π. 46})$$

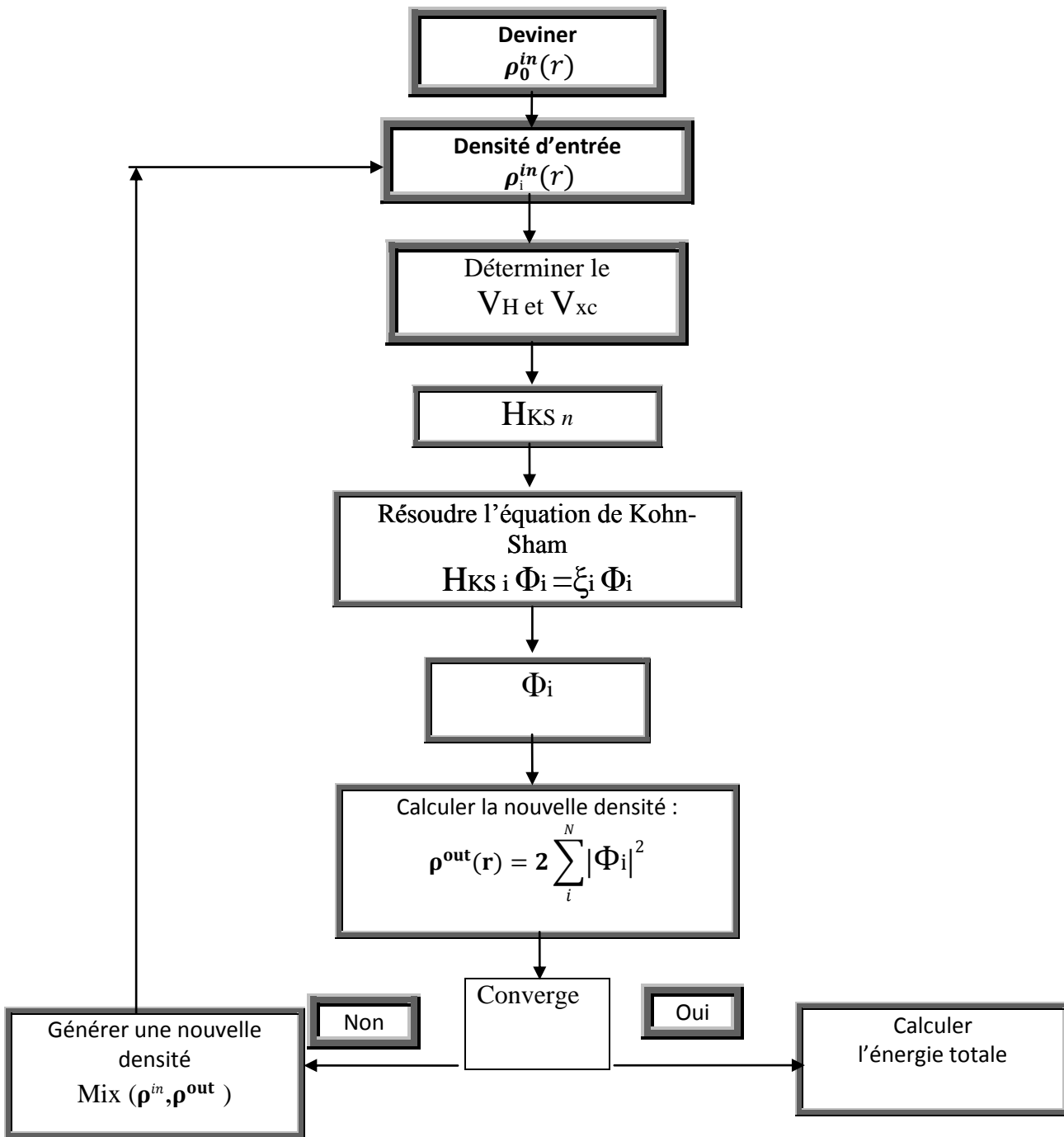
H: المؤثر الهاملتوني لكوهان - شام.

S : مصفوفة التداخل

الكثافة الجديدة ρ^{out} تكتب:

$$\rho^{\text{out}}(\vec{r}) = 2 \sum_i^N |\Phi_i|^2$$

(II. 47)



الشكل (1 - Π): خوارزمية حل معادلة كوهان شام [12]

الفصل الثالث : شرح برنامج

WIEN 2k المحاكاة



الفصل الرابع :

النتائج والمناقشة

الفصل الثالث III

شرح كيفية استعمال برنامج المحاكاة WIEN 2k

III-1 وصف عام لرمز المحاكاة WIEN 2k :

تم تطوير برنامج المحاكاة WIEN2K في معهد كيمياء المواد بالجامعة التقنية في فينا وتم نشره من طرف (Blaha P ، Schwarz ,

K و B. S Trickey) في الحواسيب . [15]

في السنوات التي تلت ذلك اجريت عدت تحديثات ، وقد وضعت الاصدارات من برنامج WIEN الاصيلي ومنها: (WIEN93

، WIEN95 و WIEN97) حيث سميت حسب سنة نشرها. الا ان نسخة WIEN2k لعام 2000 شهدت استخداما كبيرا وهذا

للتحسن الكبير الذي عرفته لاسيما من حيث السرعة و سهولة الاستخدام ، ويعمل هذا البرنامج تحت نظام التشغيل UNIX . [15]

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

الوظيفية (DFT). فيمكن من خلاله حساب :

◀ عصابات الطاقة وكثافة الدوال لسطح فيرمي .

◀ الكثافة الالكترونية وكثافة السبين وعوامل البنية للاشعة السينية .

◀ الطاقة الاجمالية ، القوى النووية ، هندسة توازن الذرات في الفضاء (تحسينات البنيوية).

◀ تدرج الحقل الكهربائي

◀ استقطاب السبين (في حالة ما اذا كانت البنية تتعلق بالعازل الكهربائي الشفاف).

◀ انبعاثات و امتصاصات الاشعة السينية RX .

◀ الخصائص البصرية . [15]

III - 2 خوارزمية الWIEN2k :

يسخدم برنامج ال WIEN2k في الرسم البياني كما هو موضح في الشكل (III-1).

المرحلة الأولى: تهيئة حساب هذا البرنامج لتنفيذ سلسلة من البرامج الصغيرة المساعدة التي من شأنها أن تنتج مدخلات لبرامج رئيسية فهو يبدأ من دليل فرعي (دراسة المواد) وتحديد البنية من خلال (cas.struct) ، حيث يعتمد wien2k على ملف أساسي خاص بالبنية المدروسة يسمى case struct ، ومن اجل إظهار هذا الملف يجب إتباع عدة خطوات أولها نستدعي النافذة "Wien in BOX" (Wien داخل علبة) مع التحكم فيها بالتعليمة Wien، التي توجد على سطح المكتب باختصار أو بسطر الأوامر. ثانيا نرشد "run programme" الموجودة في "Wien in BOX" . ثم "generator" في النافذة "run program" وفي الأخير نحصل على "case struct" .

III - 3 الأنظمة الابتدائية للحساب :

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، فإن رسالة تظهر على الشاشة خطأ. بالإضافة إلى هذا، فإن أبعاد الجوار الأقرب الموالي الأعلى بـ f مرة من بعد الجوار الأقرب f ، لا بد أن تكون محددة تلقائيا تُكتب في ملف مخرجات الذي يسمى case.outputnn .

قطر المجال الذري يسمح باضافة ملف التحكم (cas.struct) وملف الإخراج لهذا الملف يسمى (cas.outputnn).

2-SGROUP: يحدد مجموعات الفضاء للبنية المعرفة في الملف (cas.struct) الذي تكون فيه معلومات عن (نوع

الشبكة، ثابت الخلية، الذرات المركبة) ويحدد فضاء المجموعات ويستخدم الشحنات النووية لإنتاج الاختلافات للذرات

الاستثنائية، كما يمكنه إيجاد أصغر خلية الوحدة، ويجعل ملف الإخراج هو case.struct sgroup اعتمادا على الملف السابق

case.struct، ينفذ هذا البرنامج اعتمادا على الأوامر التالية:

case.outputsgen [-wo case.struct sgroup] case.struct [-wi case.struct sgroup]

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

تكون في الملف (cas.struct) الذي يعطي معلومات عن نوع الشبكة، مواضع الذرات الخ. كما يمكن أن نحدد من

خلاله المواقع النووية المختلفة ومصفوفة التناوب المقابلة. [15]

برنامج LSTART :

ينتج الكثافة الالكترونية للذرات الحرة ويحدد كيفية التعامل مع المدارات 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, inc 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، وكما أن

المعالجة المختلفة تكون في lstart و lapws o [15]

: KGEN

هو برنامج ينتج شبكة نقاط ل K في منطقة بريليون الأولى الغير قابلة للاختزال، النقاط K يمكن استعمالها في تعديل نظام رباعي

الوجه. حيث أن kgen يحتاج إلى إدخال العدد الإجمالي للنقاط K في منطقة بريليون، حيث إذا كان عدد النقاط يقارب الصفر

فإنه يطلب تحديد تقسيمات متبادلة لأشعة خلية الوحدة، حيث يجب الحرص على عدم اختراق التماثل ونختارها بشكل صحيح

وفقا لأشعة الشبكة المعكوسة، إذ لم يتم حاليا انعكاس التناظر فإنه يضاف آليا، إلا إذا كان محدد التغيير SO (للحالات

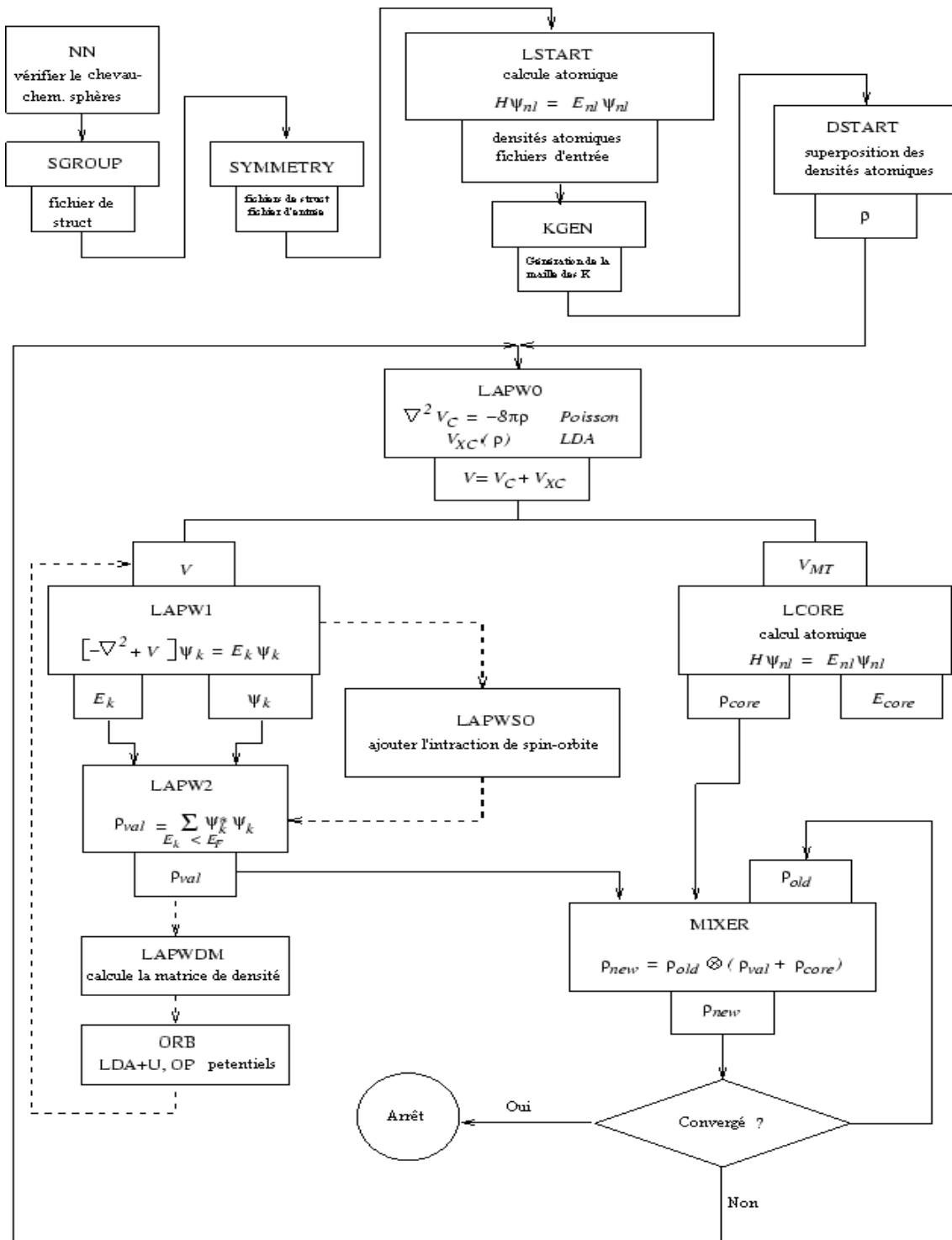
المغناطيسية مع دورانها في مدار الاقتران). يتم إنتاج نقاط k إذ يتناسب مع هذا التناظر المضاف. إذا قبل التماثل فإنه يطلب هل

يمكن أو لا ينبغي أن تحول k، مختلفا عن اتجاهات التناظر العالية حيث أن الملف هو case.klist وكما يستخدمه lapw1 و

case.kgen المستخدم في tetra و lapw2 ليتم استخدام طريقة رباعي الوجه لدمج k في الفضاء للقيام بعملية تنسيق

الملف case.klist . [14]

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.in1 و case.in2 . [14]



[Blaha P. et al 2001]

الشكل III-1 : خوارزمية برنامج WIEN2k .

من اجل تهيئة حساب هذه الحلقة والتي يتم استدعاءها من سطر الأوامر بواسطة run lapw نلجأ لخمسة أنظمة و هي كالآتي :

برنامج LAPW0:

هذا البرنامج يقوم بحساب الكمونات الكلية V_{tot} كطاقة كلوم وطاقة الارتباط V_c باستخدام الكثافة الإجمالية للإلكترون كمدخل. فإنه ينتج الجزء الكروي case.vsp والجزء الغير الكروي case.vns. من خلال أنظمة الاستقطاب البيزي و الكثافة السبينية case.clmup و case.clmdn تؤدي إلى اثنين من أزواج ملفات الطاقة وهي كالتالي: case.vspup case.vnsdn , case.vspdn , case.vnsup .، يتم حساب طاقة كلوم من نشر فوري لمتعدد الأقطاب

بالاستفادة من التقسيم الموقعي لخلية الوحدة والتمثيل المزدوج لكثافة الشحنة، أولاً نحسب متعدد الأقطاب داخل المجال Q -sp، سلسلة فوري لشحنة تمثل أيضاً الكثافة الجزئية. تحسب كثافة الموجة المستوية داخل كل مجال $(Q-pw)$ عن طريق طرح $(Q-pw)$ من $Q-sp$ ، نحصل على نسبة متعدد الأقطاب Q وبالتالي يتم إنشاء سلسلة موجة مستوية جديدة [15]

برنامج ORB:

يقوم بحساب الطاقات المدارية ويعتمد على عدد المواقع المدارية l, m كما يحتاج لمصفوفة الكثافة في lapwdm، حيث يتم تنفيذ أربعة حالات مختلفة (LDA+U، LDA+U(SIC)، LDA+U(AMF)، LDA+U(HMF)). إن استخدام LDA+U يدخل الحقل المداري في الحساب حيث وجود الحقل المداري يخفض التماثل، لذلك يجب استخدام تغيير ل LAPW1، حيث إذا كان LDA+U كبير جداً فإنه يؤدي إلى تقلبات داخلية ل scf لذلك يفضل تشغيل LSDA+(s-o) ثم التحول ببطء إلى LDA+U إذا كان هناك حقل مداري LDA+U فإنه يكفي تشغيل LAPW1 والذي بعد ذلك يجعل الحقل المداري معدوم عندما يكون LAPW1 معقد إضافة متوسط طاقة LDA ضرورية للاستقطاب المداري وتكون طاقته المضافة على شكل $lz \langle Lz \rangle = COP \cdot VOP$. أين COP عامل اللف الذاتي و Lz إسقاط الحركة المدارية حول اتجاه المغنطة P [14]

برنامج HF:

يقوم بحساب المدارات و القيم الذاتية للدوال المهجنة عن طريق استخدام المدارات شبه محلية التي ينتجها lapw1 ويقوم بتخزين المدارات المهجنة في case.vectorhf. عند حساب الدوال المهجنة التي هي أكثر تكلفة من الدوال المحلية من المهم أن نختار بعناية العوامل المختلفة lmaxv، lmaxe، gmax، nband في الملف case.inhf لأن الوقت الحسابي يعتمد عليها بشدة. إن إنشاء حساب هجين يحتاج إلى بعض التمثيلات الإضافية و التمثيل المتوازي هو أيضا ممكن لحساب ثوابتها وكما يمكن أيضا حساب الطاقة الكلية والدوال المهجنة والقيم الذاتية [14]

برنامج LAPW1:

هو برنامج يقوم بحساب مصفوفة التداخل و الهاملتون والمتجهات الذاتية والقيم الذاتية (هذه المخرجات تكون محفوظة في Cas Vacteur). ، والمجموعات الأساسية يمكن أن تكون مختلطة لتحقيق فعالية قصوى. يتم تنفيذ عملية حسابية لكل طاقة من خلال تغير بنية التماثل الخارجي، حيث الهاملتون وعناصر مصفوفة التداخل هي إعداد مركبة كما يجب أن يكون تشغيل البرنامج LAPW1 في اتصال مع LAPW2، حيث أن طريقة التقطير هي أكثر استهلاكاً للوقت .

برنامج LAPW2:

يستخدم ملف case.vector لحساب طاقة فرمي و زيادة كثافة الكترونات التكافؤ نتيجة لكثافة الالكترونات داخل كل ذرة (مثلة بواسطة التوافقية الكروية) وضمن المجال البيئي (مثلة بسلسلة فوري [14]

برنامج SUMPARA:

هو برنامج صغير يلخص مقدار زيادة كثافة لشبه التناظر من ملف case.scf 2 .

برنامج LAPWDM:

يحسب كثافة المصفوفة اللازمة من اجل الطاقة المدارية المستغلة. و يحسب العناصر المدارية المساهمة بمجال الاستقطاب .

برنامج LCORE:

يولد الحالات الأساسية للبنية النسبية والغير نسبية للطاقة، من خلال الجزء الكروي للطاقة يعطي القيم الذاتية المركزية. ملف

case.clmcor الذي يوافق الكثافة المركزية مع كثافة التناظر الأساسية ومساهمة القوى الأساسية للذرات [15]

برنامج MIXER:

في هذا البرنامج تضاف كثافة الالكترونات (المركزية، شبه المركزية، تكافؤ الحالات) من اجل إنتاج الكثافة الإجمالية، كما يقوم بمزج

الكثافة الجديدة مع كثافة المدخلات من اجل تحقيق استقرار تكرار SCF، وكما يقوم بتنفيذ عدة مخططات منها:

-المزج المباشر للكثافات مع عامل المزج Q.

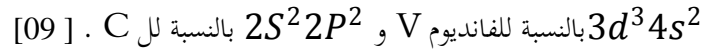
-نظام متعدد المزج وهو يقوم بجمع معاملات توسع الكثافة من عدة تكرارات و كما يقوم MIXER بحساب الطاقة الكلية

والقوى الذرية عن طريق case.scf . [15]

IV: النتائج و المناقشة :

IV-1: عينة كربيد الفانديوم VC:

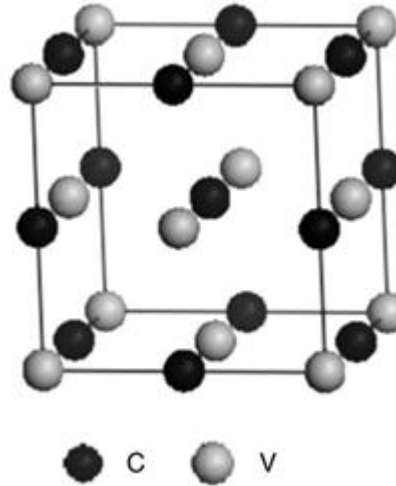
من اجل شرح و تبين أهم الخطوات نبدأ بحساب حلقة متماسكة في شكل دقيق ، نستعمل لذلك عينة كربيد الفانديوم VC غير مغناطيسية ، وهو مركب معدني يتبلور ضمن عينة كلوريد الصوديوم ، التوزيع الالكتروني بالنسبة للذرات المكونة للمركب



من بين خصائصه أن له القدرة على التوصيل المعدني (معدن ناقل)، وذو صلابة مماثلة للماس .

من اجل الحصول البنيات الالكترونية ل (VC) نقوم باستخدام نظرية كثافة الدوال المنفذة ضمن WIEN2k

الشكل (IV-1) يظهر بنية VC .



الشكل (IV-1): البنية البلورية للفانديوم كربيد

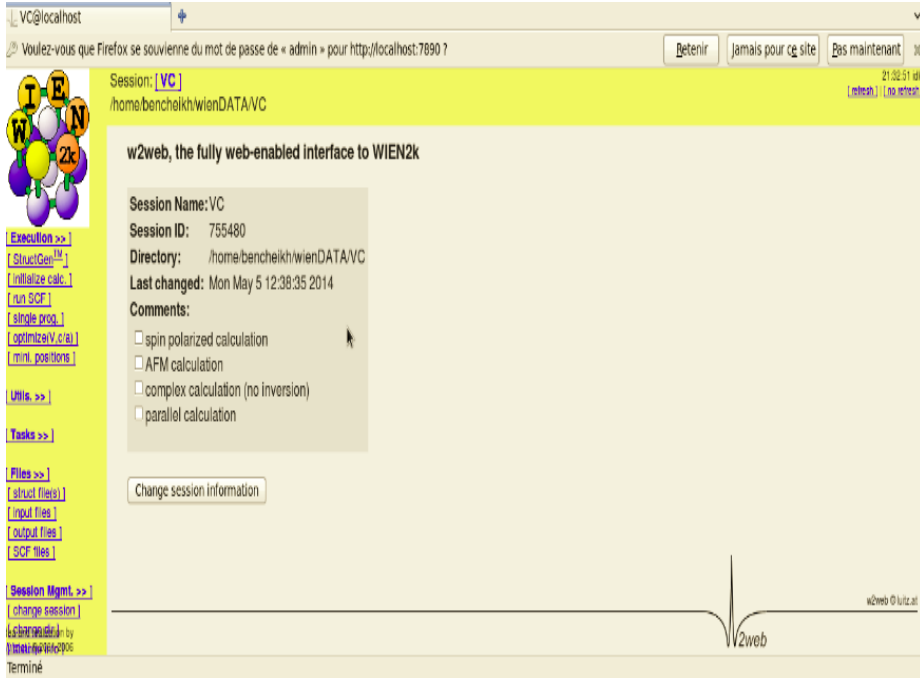
IV -2 عوامل تهيئة الحساب :

IV -2-1 إنشاء دليل جديد 'case-directory' :

باستخدام 'Session Mgmt.' يمكن تغيير الدليل الموجود او انشاء دليل جديد .

في هذا المثال نشئ دليل جديد "Session VC" باستخدام زر 'الإنشاء' 'Create' ، ثم نضغط على الدليل الحالي

بعدها نقر على إعادة تشغيل النافذة الرئيسية **w2web** ليظهر الشكل (IV -2):



الشكل (IV -2): النافذة الرئيسية لـ w2web

نقوم بإنشاء ملف تحت اسم العينة VC ونقوم باستدعاء الواجهة الرسمية باستخدام الأمر WIEN في سطر الأوامر أو باختصار على سطح المكتب ، كما هو موضح في الشكل (IV-3):



الشكل (IV-3) : ملف البنية "cas struc"

IV-2-2 إدخال المدخلات الرئيسية للملف 'case.struct' :

لإنشاء ملف 'case.struct' كخطوة أولى نحدد عدد الذرات (2 ذرة) نبدأ بملف البنية 'StructGen' كما في الشكل (IV-4) فتظهر لنا واجه عليها المعلومات التالية :

اسم العينة VC ، ثابت الخلية المكعبة a ، نوع الخلية CFC ، العدد الذري Z والذي هو 23 بالنسبة ل V

و6 بالنسبة ل C ، الأشعة للمجالات الذرية RMT ويكون 2.17 بور من اجل الفانديوم V و1,65 بور من اجل C

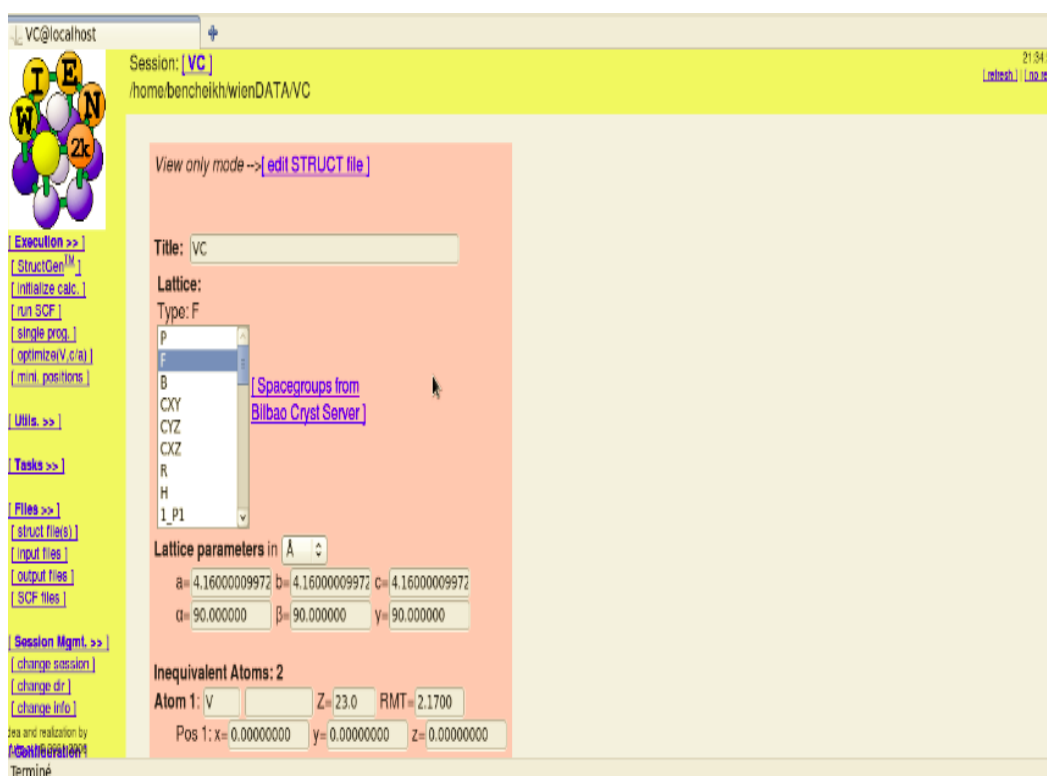
،المواقع ضمن وحدة الخلية حيث يحتل (0.0.0) V ، (0.5.0.5.0.5) C كما في الجدول التالي :

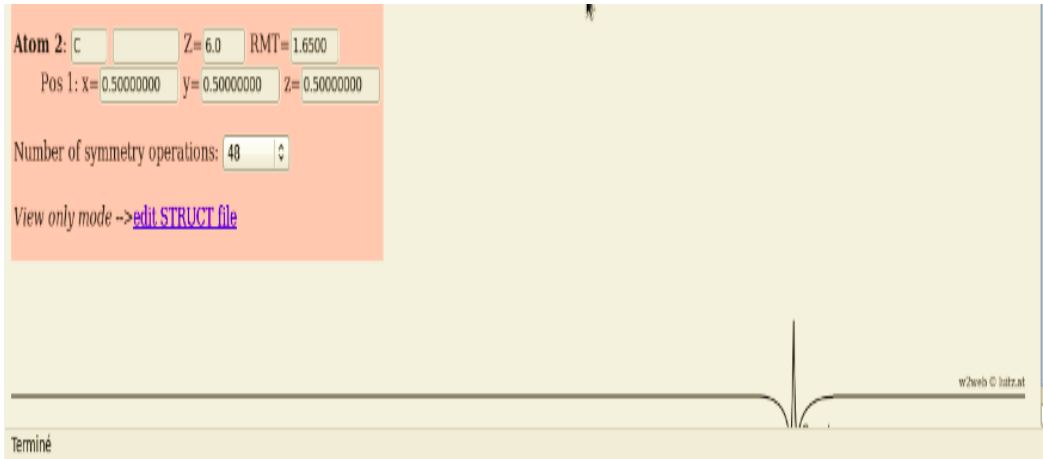
العنوان	VC
نوع الخلية	F (مكعب ممرکز الاوجه)
ثابت الخلية المكعبة	$a = b = c = 4.160 \text{ \AA}$
الزوايا	$\beta = \gamma = 90^\circ = \alpha$
V	تأخذ الموضع (0,0,0)
C	تأخذ الموضع (0,5.0,5.0,5)

الجدول 1: المدخلات الرئيسية ل VC

نضغط على "Save Structure" لحفظ المعلومات التي قمنا بإدخالها لعينة كبريت الفاناديوم حيث يظهر الملف بخلفية مختلفة ،

تسمح هذه الخطوة تلقائيا بإنشاء ملف الإدخال لبرنامج الذرة الحرة (VC.inst) الشكل (IV-5)





الشكل IV-4: المدخلات الرئيسية ل VC

تنفيذ الحساب :

- بعد إدخال المعلومات الخاصة ببنية كريد الفانديوم الموجودة في الملف VC نقوم بالخطوات الموضحة في الشكل (IV-5)



الشكل (IV-5) : نافذة تهيئة الحساب في WIEN2k

كخطوة اولى نقر على x nn الى ان نصل الى الخطوة x dstart ثم نتبع الخطوات التالية :

1. عند الخطوة x symmetry نختار NO .

2. X lstart نختار قيمة الطاقة ($-6Ry$) ونحدد طريقة GGA تقريب التدرج المعمم.

3. عند الخطوة X kgen نختار عدد النقاط K مساو إلى 500 .

4. ViewVC.outputd نضغط على NO لاختيار استقطاب -السبين .

بعد الانتهاء من الخطوات السابقة نقر على ' Continue with SCF '

-حساب SCF : تتكون دورة SCF من الخطوات التالية :

LAPW0 (المحتملة) يولد الكثافة المحتملة

LAPW1 (عصابات) يحسب فرق التكافؤ (القيم الذاتية و المتجهات الذاتية)

LAPW2 (RHO) يحسب كثافة التكافؤ من المتجهات الذاتية

LCORE يحسب الدوال الأساسية و الكثافات

MIXER تختلط المدخلات والمخرجات للكثافات .

بعد اختيار " تشغيل SCF " من القائمة " تنفيذ " ، سيتم فتح نافذة SCF الموضحة في الشكل (IV-6) :

SCF Cycle

Options: (help)

spin polarized FSM 0

AFM calc. no HNS 6

iterative diag in1new 2

iterative(0) q-limit 0.05

in1 orig It-number 4

parallel

spinorbit

dm

orbital pot (LDA+U)

eece (hybrid functionals)

Expert options:

Convergence criteria:

Energy: 0.0001 Ry

Force: 1 mRy/au

Charge: 0.001 e

Type of execution: background

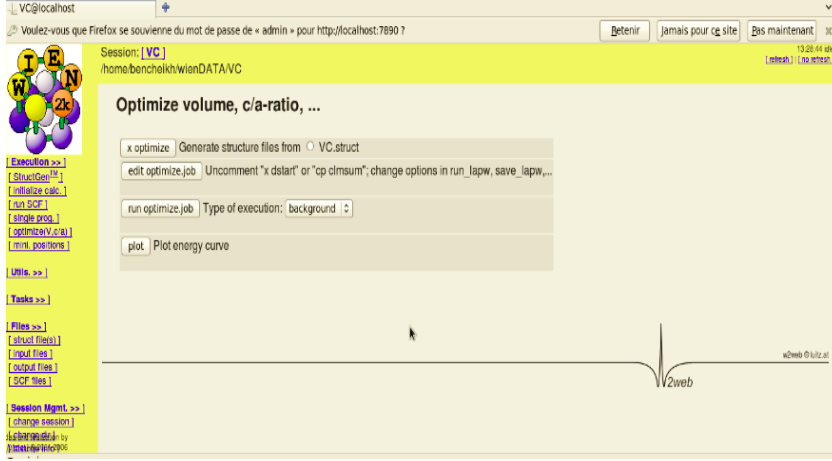
E-mail notification to

start SCF cycle Clear entries only save parameters

الشكل IV-6: دورة SCF في برنامج WIEN2k

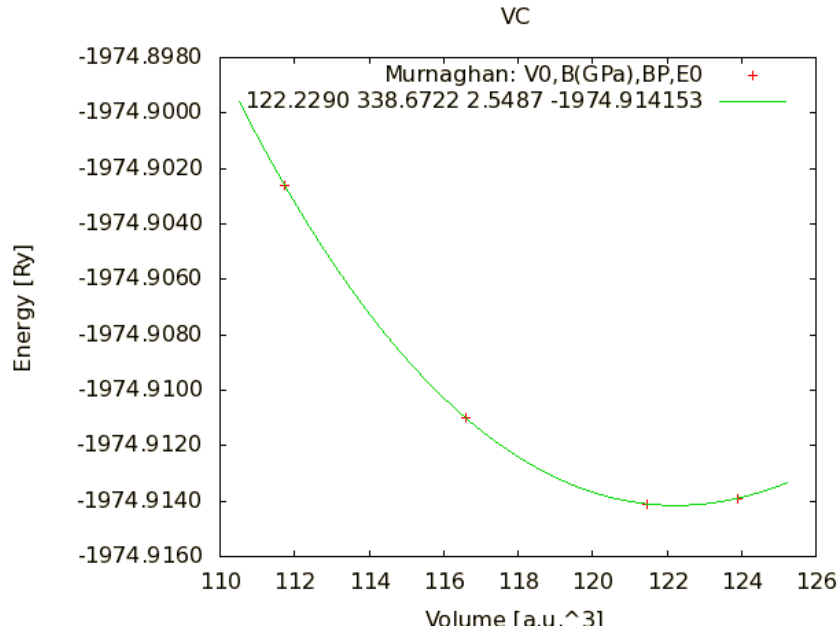
IV-2-3 نتائج تهيئة حجم خلية الوحدة :

من اجل الوصول الى حالة الاستقرار لعينة الفانديوم كبريد نبحث عن الحجم الامثل، نذهب الى optimize x الموضحة في الشكل (IV-7) نختار "Optimize (V,c/a)" وندخل القيم التالية : -8 ، -4 ، 0 ، 2.



الشكل (IV-7) : نافذة تهيئة خلية الوحدة

-فيظهر لنا منحنى الطاقة بدلالة الحجم الممثل في الشكل (IV-8)

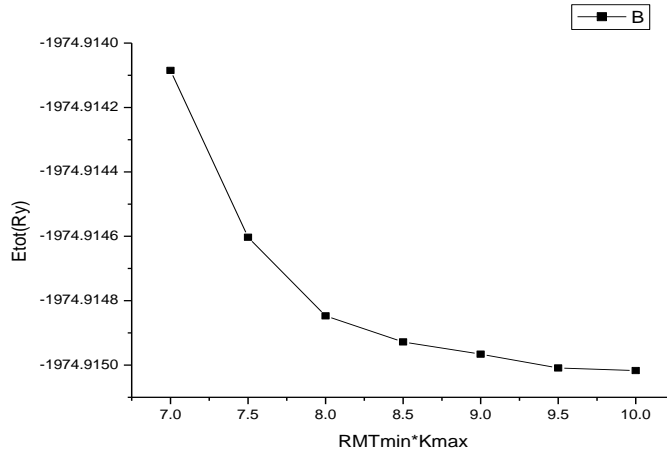


الشكل (IV-8) : تغيرات الطاقة بالنسبة للحجم ل VC .

IV-2-4 تهيئة عامل RMTmin*Kmax (عامل cut-off):

من اجل إيجاد قيمة RMTmin*Kmax التي تكون فيها قيمة الطاقة ثابتة (التقريبات الحسابية من اجل ان تكون الطاقة بقيمة 0.0001 Ry)، نختار عدد النقاط K في منطقة بريليون الأولى والذي يساوي 500 نقطة ونبحث عن قيمة الناتج RMTmin*Kmax حيث RMTmin هو اصغر نصف قطر ذري للخلية المدروسة و Kmax يمثل القيمة الأعظمية للشعاع الموجي في أساس الأمواج المستوية المستخدمة ضمن مجموعة الأنظمة الالكترونية في الفضاء داخل المجال الذري .

القيم التحصل عليها مثلة في منحنى الشكل (IV-9)



الشكل (IV-9) : منحنى الطاقة الكلية بدلالة نتائج RMTmin*Kmax

نختار القيمة 9.5 لان الطاقة تثبت عند القيمة الأفضل لناتج RMTmin*Kmax هي 9.5 الموضحة في منحنى

الشكل (IV-9)

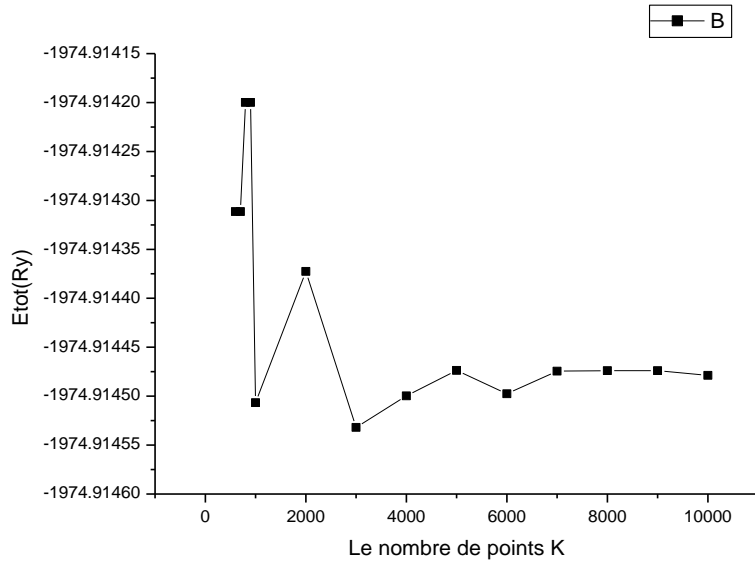
IV-2-5 تهيئة عدد النقاط K :

تعرف على أنها عدد النقاط Kpoint في منطقة بريليوان الأولى منطقة الفضاء المعكوس .

تعيى هذه النقاط من اجل أحسن حد واقصر وقت حسابي، نغير عدد النقاط K ونحتفظ بقيمة ناتج RMTmin*Kmax

ثابت في هذه الحالة وتساوي 9.5 .

. النتائج ممثلة في منحنى الشكل (10- IV) .



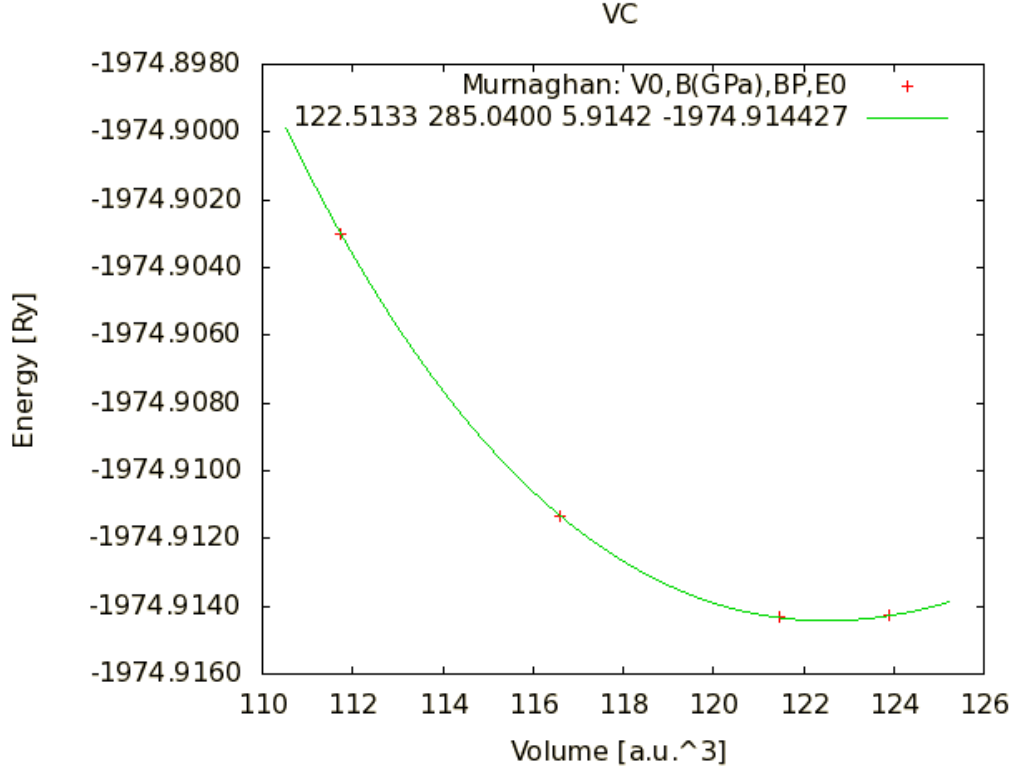
الشكل (10- IV): تغيرات الطاقة بدلالة عدد النقاط Kpoint

نلاحظ من خلال منحنى الشكل 10- IV ان قيمة الطاقة تثبت لما يكون $K_{point} = 7000$.

نستخدم النتائج المتحصل عليها $K_{point} = 7000$ و $RMTmin * Kmax = 9.5$ ، ونقوم بحساب SCF نحصل على

قيمة $a_{Murag han} = 4.1720 \text{ \AA}$ ، نعيد إدخال هذه المدخلات من اجل رسم منحنى الطاقة بدلالة الحجم الشكل (IV)

(11-



الشكل (IV-11) : تغيرات الطاقة بدلالة الحجم

الجدول التالي يوضح النتائج المتحصل عليها و النتائج التحريبية (doi:10.1088/0031-8949/80/05/055601) (6pp) (2009) 055601 Phys. Scr. **80**

(8949/80/05/055601)Department

	FP –LAPW			PP	LCAO		Expt
	LDA	PBE	WC	PBE	P86	PW92	
a (Å°)	4.095	4.162	4.129	4.154	4.175	4.175	4.1720
B(GPa)	349	307	328	304	306	299	285.0400
B'(GPa)	-----			-----	3.34	3.67	5.9142

IV-2-6 حساب بعض الخصائص الالكترونية:

في هذا الجزء نذهب لتشغيل حساب self-consistent للخصائص الالكترونية لمركب ال VC حيث تستخدم النتائج المتحصل عليه سابقا (ندخل الدخالات ال $K_{point} = 7000$ و $RMT_{min} * K_{max} = 9.5$ ، $a_{Murag han} = 4.1720$) ونقوم بحساب SCF لتحصل على طاقة فيرمي بعد التقاء التكرارات التالية لحلقة SCF، نجد طاقة فرمي تساوي إلى $(FERMI Energy TETRAH.M) = 0.8977265953 Ry$. ضمن ملف 2 VC.scf نضغط إذا على القائمة Run .Programs ثم على Tasks من اجل الحصول على الشكل (IV-12) الذي يظهر عدة أنواع للخصائص الالكترونية

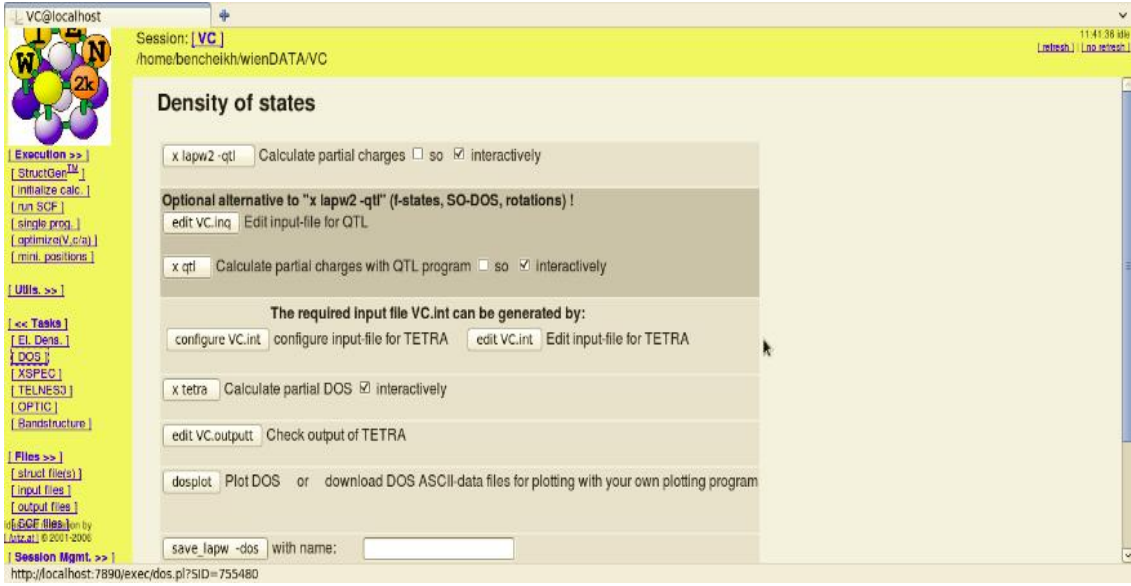


الشكل (IV-12): نافذة الخصائص الالكترونية في برنامج WIEN2k

IV-2-7 حساب كثافة الحالات :

كثافة الحالات (DOS) هو برنامج فيزيائي مهم يستخدم من أجل فهم الحالات الالكترونية في المادة وتأثيرها على الخصائص الفيزيائية . أكبر جزء من خصائص النقل الالكتروني توجد على أساس معرفة كثافة الحالات وهي تسمح لنا كذلك بمعرفة طبيعة الروابط الكيميائية في مادة ما (حساب نسبة الشغل لكل حالة الكترونية) وانتقالات الشحنة بين المدارات. كثافة الحالات للغاز الالكتروني تلعب دورا مهما لهذه الخصائص، كثافة الحالات لمستوى فرمي شرط مهم لفيزياء المعادن. من اجل حساب كثافة الحالات نختار Density of State كما تظهر في الشكل (IV-13)، حيث نضغط على الأزرار بالتوالي - حساب الشحنة الجزئية .

Edit VC.int يكون ملف VC.int كالتالي:



الشكل (IV-13) : نافذة كثافة الحالة

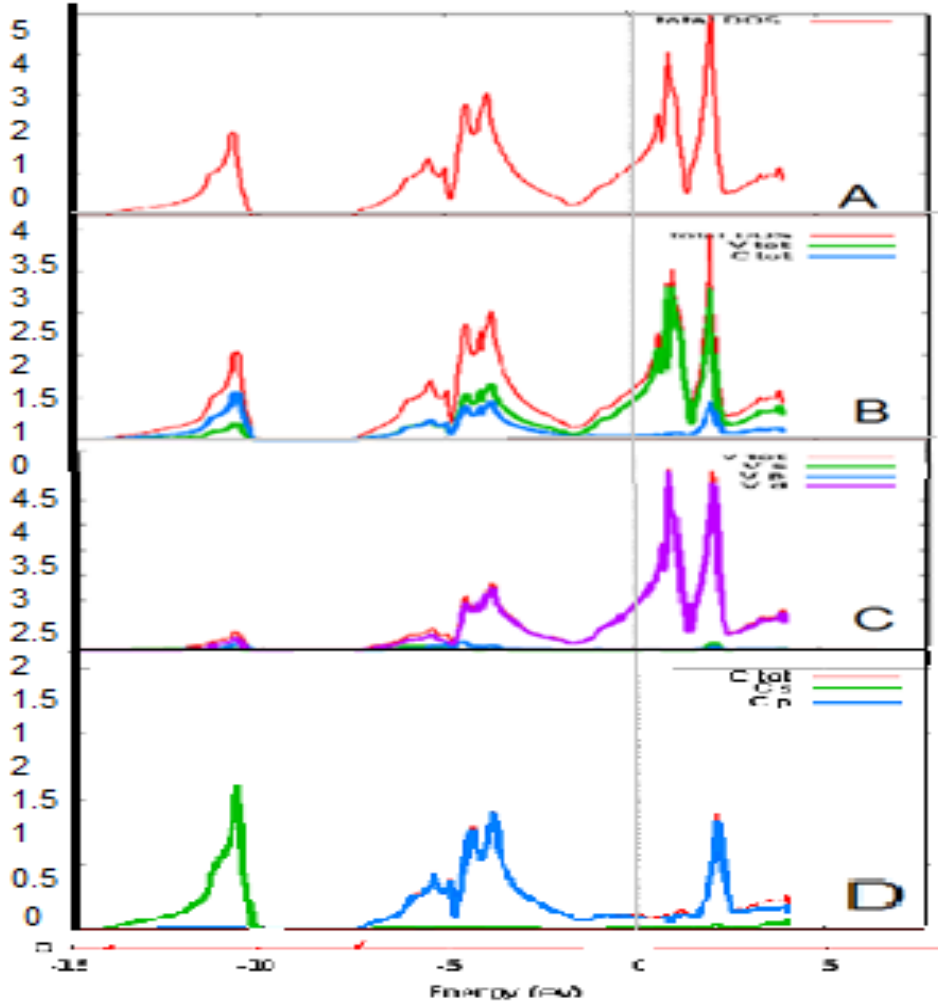
- حساب 'DOS'

- حفظ 'DOS'

استعملنا تقريب التدرج المعمم في حساب كثافة الحالات و يتم من خلالها معرفة توزيع الالكترونات ، و الشكل (IV-14) يمثل نافذة كثافة الحالات لبلورة الفانديوم كبريد. تركيب كثافات الحالات معطى من اجل ذرة V و ذرة C وكثافة الحالات الإجمالية لمركب VC ممثلة في المخططات التالية ، حيث وحدة كثافة الحالات هي الحالة/eV. الطاقة معدومة ضمن هذه المخططات المعبرة لمستوى فيرمي.

المناقشة :

تمثل المخططات A.B.C.D كثافات الحالة لمركب الفانديوم كبريد VC عند درجة حرارة $T = 0^0k$



الشكل (IV-14): نافذة كثافة الحالات لمركب الفانديوم كربيد في WIEN2k .

المخطط A : يمثل مخطط الكثافة الكلية للفانديوم كربيد . نقسم عصابة الطاقة لهذه الحالة الى المجالات التالية :

تكون الذرة مستقرة عند المجال -15 eV و -10 eV .

نلاحظ اندماج لعصابتي الطاقة عند المجال 3 eV و -7 eV تكون حزمة الطاقة عريضة مما يدل على زيادة احتمال وجود

الالكترن و تشكيل روابط الكترونية في هذا المجال .

المنحنى لا يكون منطبق على سلم الطاقات ما بين 3 eV و 1.5 eV وهذا يدل على عدم وجود فجوة الكترونية اي ان الفانديوم

كربيد عبارة عن ناقل (معدن) .

عندما تكون الطاقة مساوية الى 0 ev نسمي هذا المستوى بمستوى فيرمي

بعد مستوى فيرمي وجود عصابات للطاقة ووجود الكترولونات حرة في هذا المجال مع عدم امكانية تشكيل روابط الكترونية .

المخطط C : يمثل كثافة الجزئية للحالات s.p.d لذرة الفانديوم

قبل مستوى فيرمي من 5 ev - الى 2ev - نلاحظ حزمة عريضة للطاقة اي ان الالكترولونات في المخط d بإمكانها تشكيل روابط كيميائية .

بعد مستوي فيرمي عدم تشكيل روابط الكترونية .

المخطط D :الكثافة الجزئية للحالات s.p الخاصة بذرة الكربون

بالنسبة لذرة الكربون نلاحظ وجود محطين طاقيين محط S ومحط P .

وجود عصابة طاقة ضيقة عند 15ev- و 10ev- بالنسبة للمحط S تكون فيها ذرة الكربون مستقرة .

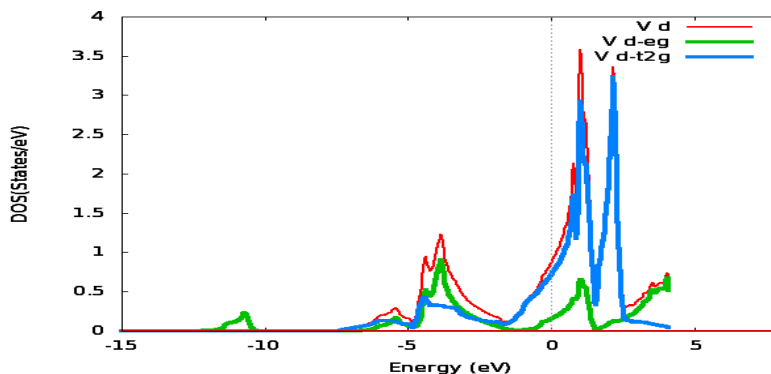
وجود عصابة طاقة عريضة 8ev- و 3ev- في المخط P مع احتمال تشكيل روابط الكترونية ،اذن بالنسبة لذرة الكربون تشكل

الرابطة الكيميائية في المخط P لان الحزمة الالكترونية تكون اكثر عرضا في هذا المجال .

المخطط B: يمثل الكثافة الجزئية لعينة الفانديوم كريد VC هو عبارة عن محصلة للمخططين C و D .

النتائج المتحصل عليها كانت متوافقة مع النتائج التجريبية و النظرية المتوفرة في (2011) Physica B 406 R. Joshi et al. /

2007-2012 حول هذا المركب .

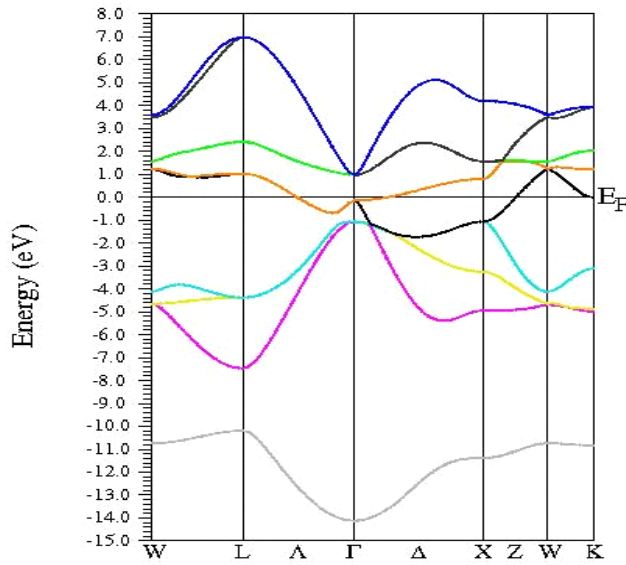


شكل (IV-15): يوضح كثافة الحالة الحرة الجزئية d-eg و d-t2g للفانديوم

IV-2-8 عصابات الطاقة : عصابات الطاقة تعطينا الطاقة الممكنة للإلكترون بدلالة شعاع الموجة، هذه الأمواج

مثلة في الفضاء العكسي ، ومن أجل التبسيط بداية من الاتجاهات بين النقاط العالية التناظر في منطقة بريلوان الأولى، الطيف يميز بوجود عصابتين عصابة التكافؤ، وعصابة النقل أي ان مركب VC عبارة عن معدن .

بنية عصابة الطاقة لبلورة كريد الفانديوم ذو البنية الماسية موضحة في الشكل (IV-16)



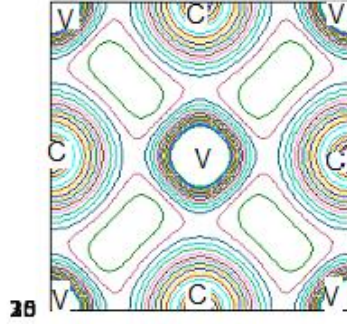
الشكل (IV-16) : عصابة الطاقة لبلورة كريد الفانديوم ذو البنية الماسية.

نلاحظ من خلال الشكل (IV-16) وجود عصابتين للطاقة ، نسمي العصابة تحت مستوى فيرمي بعصابة التكافؤ تكون الالكترونات في هذا المجال مستقرة ، و فوق مستوى فيرمي نسمي عصابات الطاقة بعصابة التوصيل تتميز بوجود الكترونات حرة نلاحظ انه في مستوى فيرمي تتداخل عصابات الطاقة (لا وجود للفجوة $E_{Gap}=0$) أي أن عينة كريد الفانديوم VC معدن ناقل هذه النتائج تتوافق مع النتائج النظرية و التجريبية الموجودة في R. Joshi et al. / Physica B 406 (2011) 2007-

2012

IV-2-9 كثافة الشحنة:

هو برنامج يمكن من خلاله معرفة طبيعة الروابط الكيميائية ، من أجل ملاحظة مميزات البنية الماسية كربيد الفانديوم .قمنا بحساب كثافة شحنة التكافؤ وفق دوائر متساوية القيمة متوضعة في المستوي (111) الذي يحتوي على V إحداثياته (0 0 0) و C ($1/2, 1/2, 1/2$) موضحة في الشكل (IV-17) :



الشكل (IV-17) : كثافة الشحنة كربيد الفانديوم

نوع الرابطة من خلال الشكل (IV-17) هي رابطة معدنية .

الخاتمة :

في يومنا هذا نعتبر المحاكاة جد مهمة لدراسة مختلف المواد الصلبة من خلال برامج افتراضية مختلفة الاستعمال .

وجدنا من خلال دراستنا لعينة كريد الفانديوم VC بان لها عدة تطبيقات او استخدامات مختلفة في الفيزياء

الصلبة لان لها خصائص جد مهمة ، والهدف من هذا هو تحديد الخصائص البنيوية لل VC .

من اجل التوصل إلى أهم هذه الخصائص البنيوية و الالكترونية استخدمنا برنامج المحاكاة WIEN2K الذي

يقوم على نظرية الكثافة التابعة DFT حيث استعملنا تقريبات الكثافة التابعة .

سمحت لنا دراسة هذه الخصائص البنيوية و الالكترونية بمعرفة : بنية VC ، بنية العصابات، كثافات الحالات و

كثافات الشحنة لهذه العينة .

كانت النتائج المتحصل عليها متوافقة مع النتائج النظرية و التجريبية للعينة R. Joshi et al. / Physica B 406

(2007–2012) (2011)

حيث ان نوع الروابط هي روابط معدنية ، و ان مركب ال VC هو عبارة عن معدن (ناقل).

المراجع :

- [01] :الصوفي (1997) معجم التقنيات التربوية .عمان.
- [02] : الموسوعة العربية لمصطلحات التربية وتكنولوجيا التعليم . الرياض 2000.
- [03] :اساليب تدريس العلوم .عمان 2001
- [04] : فيزياءالجوامد للاستاذ مبروك غوالي 2001.
- [05] IOP PUBLISHING PHYSICA SCRIPTA
- [06] Zhukov V P and Gubanov V A 1987 *J. Phys. Chem. Solids*
48 187
- [07] Wolf W and Podloucky R 1999 *Phil. Mag. B* **79** 839
- [08] Zhang X, Comins J D, Every A G and Stoddart P R 1998 *Int*
- [09] Phase equilibria, phases and compounds in the V-C system
#2005 Russian Academy of Sciences and Turpion Ltd
- [10] Cottenier S., Density functional. Theory and the family of (LAPW-methods): a step-bystep introduction, 2002.
- [11] M.C. Holthausen and W. Koch, *A Chemist's Guide to Density Functional Theory*.
Wiley-VCH, Weinheim (Allemagne) (2000).
- [12] S.B.Mirmgham ,ROC.Nac.acad.Sci.USA.30.244.1994.
- [13]-N. V. « Investigation théorique du mécanisme de physisorption: application d'une méthode de partition fondée sur la fonctionnelle de la densité» ;
'Université de Genève ; 2000
- [14] Blaha P., Schwarz K., and Luitz J., Wien2k;an improved and updated version of unix original copyrighted Wien2k code, which was published by Blaha P., Schwarz K.,Sorintin P. and Trickey S. B., *Comput. Phys. Commun.* **59**, 399 (1990).
- [15] User's guide, wien2k 12.1 (release 30.08.2012) Peter BLAHA, Karlheinz SCHWARZ, Georg MADSEN, Dieter KVASNICKA, Joachim LUITZ.

الملخص

قمنا في هذه المذكرة بدراسة الخصائص البنيوية و الالكترونية لبلورة VC نظرا للأهمية الأساسية و التكنولوجية لهذه العينة ، باستعمال برنامج المحاكاة WIEN2k, قمنا بالحسابات اعتمادا على المبادئ الأولية للخصائص الالكترونية لكربيد الفانديوم ، باستعمال نظرية الكثافة التابعية DFT في تقريب التدرج المعمم GGA . بهذه الطريقة قمنا بتحديد كثافات الشحنة ، و كثافات الحالات ، وعصابات الطاقة لمركب VC .

النتائج المتحصل عليها كانت متوافقة مع النتائج التجريبية و النظرية المتوفرة حول هذا المركب .

كلمات مفتاحية : DFT نظرية الكثافة التابعية ، GGA ، WIEN2K

Résumé

La structure électronique des VC est fondamentalement intéressante et technologiquement import ante. Avec le code de simulation WIEN2k, nous avons effectué des calculs de propriétés électroniques en utilisant la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) dans l'approximation de gradient généralisé (GGA). les densités d'états et les structures des bands d'énergie des VC Les résultats obtenus sont en accord avec la littérature et les résultats expérimentaux disponibles.

Mots-clés: *théorie de la fonctionnelle de densité, , WIEN2k ,DFT,GGA*

Abstract

The electronic structure of VC is fundamentally interesting and technologically important. With the WIEN2k simulation code, we have performed calculations of electronic properties for using the density functional theory (DFT) in the generalized gradient approximation (GGA). density of states and energy band structures in these compound. The results are found to agree with the literature and available experimental data.

Keywords: *density functional theory DFT, GGA, WIEN2k.*
