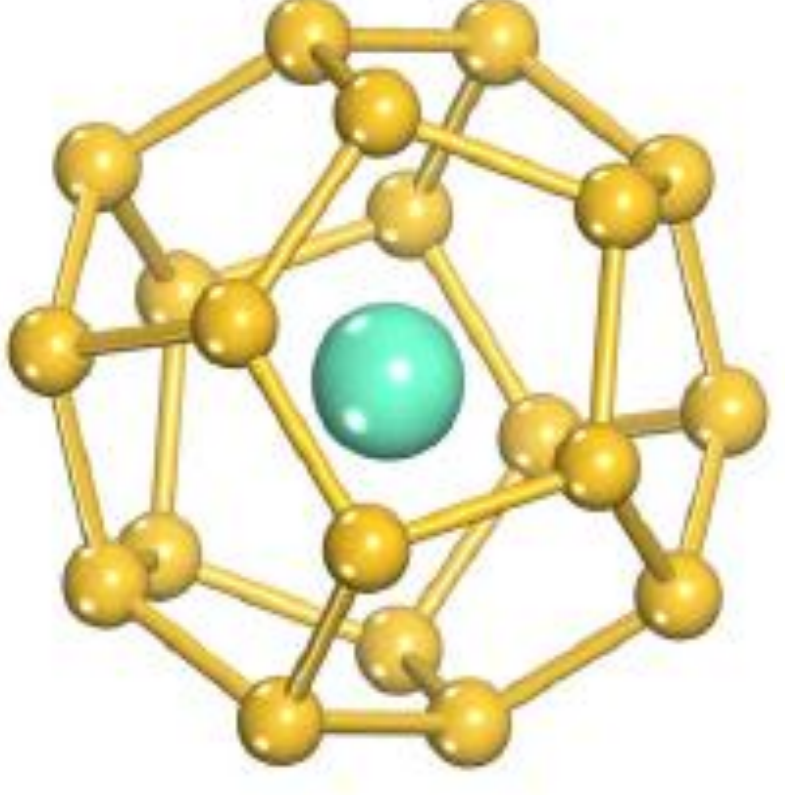
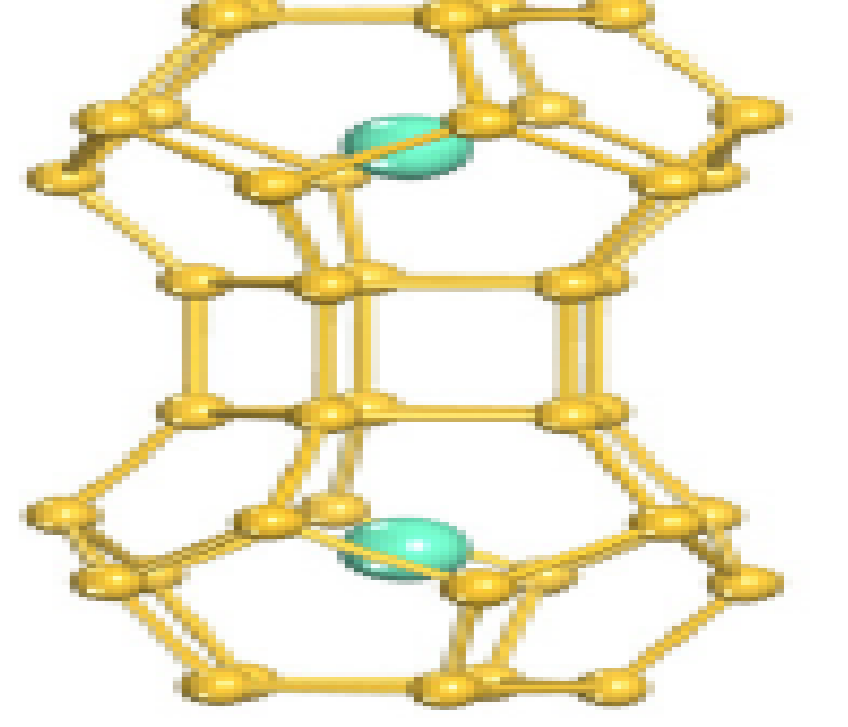


تحديد الخصائص الفيزيائية لمجاميع السيليسيوم Si_n ($n \geq 2$) باستخدام برنامج WIEN2k

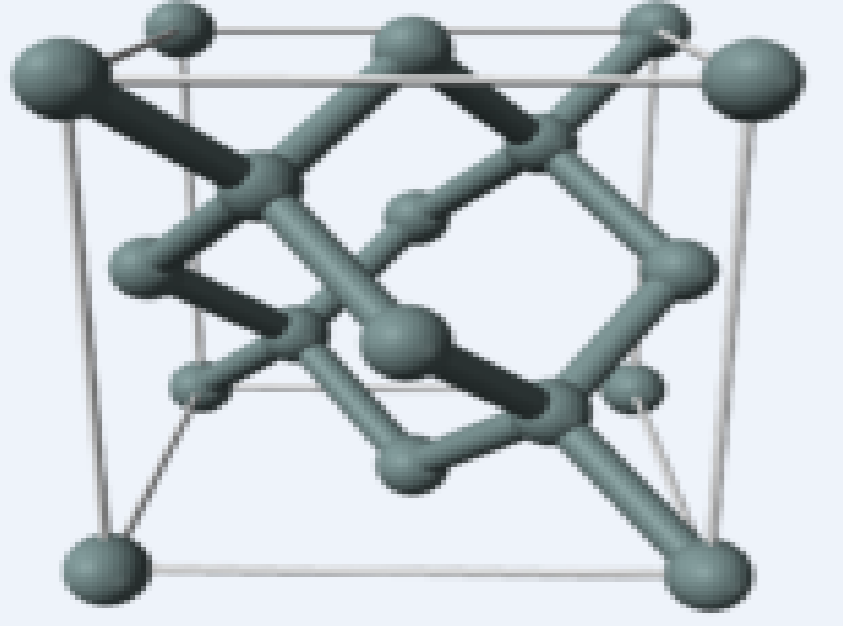


مريم بن عيدة*، ع. بن طويلة
قسم الفيزياء، كلية الرياضيات وعلوم المادة، جامعة قاصدي مرباح ورقلة
2015/2014
البريد الإلكتروني: * meriembenaida@gmail.com



المقدمة

بخصائص فيزيائية وكيميائية ذات أهمية تكنولوجية وتقنية، ما أهلها أن تكون محل دراسة على نطاق واسع وتزايد هذا الاهتمام تتمتع مجاميع السيليسيوم في العقد الأخير بسبب تطبيقاتها المحتملة في الكترنيات النانو والليزر.



الهدف

✓ دراسة الخصائص البنيوية والالكترونية لمجاميع السيليسيوم لتحديد الهياكل الأقل الطاقة باستعمال نظرية الكثافة التابعية DFT مع تقريب التدرج المعمم GGA باستخدام برنامج Wien2k.



برنامج المحاكاة WIEN2k وكيفية استخدامه

يعمل هذا البرنامج تحت نظام التشغيل UNIX . ويتكون هذا البرنامج من عدة برامج مستقلة لإجراء عمليات حسابية للبنية الالكترونية في المواد الصلبة وهذا اعتمادا على نظرية الكثافة التابعية [4].

نظرية الكثافة التابعية DFT

تسمح لنا نظرية الكثافة التابعية DFT بتحديد خصائص الحالة الدنيا (الطاقة الكلية) للجملّة وذلك من خلال توابع كثافة الالكترونات، ويتم تطبيق هذه النظرية بالاعتماد على صيغة كوهان - شام التي تنتقل بنا من هاملتوني لجسيمات متعددة والكترونات متفاعلة في كمون إلى هاملتوني وحيد لمجموعة من الجسيمات في كمون زائف. [3] وتعتمد نظرية الكثافة التابعية DFT على نظريتين أساسيتين وجدتا من طرف العالمين هوهانبرغ وكوهان. [2] معادلات كوهان - شام: اساس هذه الطريقة هو فصل الجزء المعلوم (الطاقة الحركية) عن جزء غير معلوم.

$$F_{HK}[\rho_T] = T_0[\rho(\vec{r})] + [\rho(\vec{r})] + E_{xc}[\rho(\vec{r})]$$

{TO} الطاقة الحركية لنظام غير متفاعل
J : التفاعل الكولومبي.

خطة العمل

- ✓ خصائص واستخدامات السيليسيوم
- ✓ نظرية الكثافة التابعية DFT
- ✓ برنامج المحاكاة wien2k وكيفية استخدامه
- ✓ النتائج والمناقشة
- ✓ ملخص عام للدراسة

المراجع

- [1] Wolf W and podloucky R 1999 phil. Mag. B79 839
- [2] Zhang X .Comins J D. Every A G and Stoddart P R 1998 Int Cottenier S.Density functional.
- [3] Theory and the family of (LAPW-methods) : a step-by step introduction.2002.
- [4] Zhukov V P and Gubanov V A 1987 J.Phys. Chem. Solids 48 187

- [5] الموسوعة العربية لمصطلحات التربية وتكنولوجيا التعليم لرياض 2000.
- [6] الصوفي (1997) معجم التقنيات التربوية . عمان.

النتائج والمناقشة

نقوم بمناقشة النتائج التي سنتحصل عليها من خلال تغيير عدد النقاط k-point على أساس قيمة الطاقة الكلية ومقارنتها بالدراسات السابقة والنتائج التجريبية ومنها تحديد المجاميع المستقرة للسيليسيوم. [1]