دراســـــة الخصـــــــائص المرنـــــة للسيراميـــــك

العمري وردة ، تحت اشراف الاستاذ :داودي باحمد
قسم علوم المادة، ماستر فيزياء المواد كلية الرياضيات وعلوم المادة
جامعة قاصدي مرباح ورقلة
دفعة 2014/2015
warda29111989@gmail.com

ملخص

سنقوم بإنجاز دراسة خصائص مرونة السيراميك (الخزف) باستعمال نظرية تابعية الكثافة(DFT) لتعيين الخواص البنيوية والمرونية وحسابات الحد الأدني والخواص البنيوية والمرونية .

مقدمة

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 انطلاقا من الميكانيك الكلاسيكي ويعدميكانيك الكم حاليا أفضل تصور متوفر عن العالم الفيزيائي

وخاصة عن عالم الذرة .إهتم 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 دالة بتابعية الكثافة وتقريباتها. [1]

معادلة Kohn –Sha:

تتلخص فكرة كوهان-شام بتحويل جملة الإلكترونات المتفاعلة ضمن الكمون الحقيقي إلى جملة افتراضية غير متفاعلة تتحرك فيهاالالكترونات ضمن كمون كون-شام الناشئ عن جسيم-وحيد صيغة كون-شام تقودنا إلى كثافة الجملة الحقيقية.

$$\underbrace{\left(\frac{-\hbar^2}{2m_e}\nabla^2 + \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\int\frac{\rho(\vec{r}')}{|\vec{r}-\vec{r}'|}d\vec{r}' + \hat{V}_a + \hat{V}_{ext}\right)}_{\hat{H}_{eff}}\Phi_n(\vec{r}) = \xi_n\Phi_n(\vec{r})$$

الهدف

إن الهدف الأساسي من هذا البحث هو محاولة دراسة خصائص القاعدية والمرونية للسيراميك و الخصائص البنيوية وكذلك التنبؤ باستعمالات خصائص هذه المواد.

خطة البحث

- الخصائص المرونية للسيراميك
- حوصلة على نظرية تابعية الكثافة (DFT)
- مبدأ برنامج كود WIEN2K
- حسابات (الحد الأدنى— خصائص بنيوية — خصائص مرونية)
- تفسير النتائج

نظرية تابعية الكثافة (DFT)

هي أحد أهم الطرق المستعملة في الفيزياء و الكيمياء النظريين و بواسطتها نستطيع أن نحدد خصائص نظام متعدد الجسيمات (الطاقة الكلية للنظام، الكثافة الإلكترونية للمدارات، المعاملات الفيزيائية والضوئية للمادة....)، وهي واحدة من أكثر الطرق استخداما في العمليات الحسابية الكمومية بسبب إمكانية تطبيقها على أنظمة متنوعة و بتكلفة و سرعة عالية.

تعتمد الطرق التقليدية في حلها على معادلة شرودنغر لنظام مكون من عدة ذرات وفي سنة 1926 طرح العالم الفيزيائي النمساوي شرودنغر معادلة لإيجاد دالة موجة النظام

$$\hat{H} = \frac{-\hbar^2}{2}\sum_I\frac{\Delta_{\vec{R}_I}^2}{M_I} - \frac{\hbar^2}{2}\sum_i\frac{\Delta_{\vec{r}_i}^2}{m_e} - \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\sum_{i,I}\frac{e^2Z_I}{|\vec{R}_I-\vec{r}_i|} + \frac{1}{8\pi\varepsilon_0}\sum_{i\neq j}\frac{e^2}{|\vec{r}_i-\vec{r}_j|} + \frac{1}{8\pi\varepsilon_0}\sum_{I\neq J}\frac{e^2Z_IZ_J}{|\vec{R}_I-\vec{R}_J|}$$

بعد تقريب Born-Oppenheimer

$$H\Psi = E\Psi \quad \text{où :} \quad E = T + V + V_{ext}$$

نظرية Hohenberg et Kohn : هوهانبرغ و كوهان حلا مشكلة معادلة شرودنغر متعددة الالكترونات . في نظرية الكثافة التابعية اذا استطعنا تشكيل الدالة يسهل ايجاد الحالة الاساسية للنظام في كمون خارجي معطى اذن كل عوائق تكوين الدالةحلت[ρ] F حلت.

$$H[\rho] = E_{\nu_{ext}}[\rho]$$

$$E_{\nu_{ext}}[\rho] = \langle\Psi|\hat{H}|\Psi\rangle = \langle\Psi|(\hat{T}+\hat{V}+\hat{V}_{ext})|\Psi\rangle$$

$$= \langle\Psi|(\hat{T}+\hat{V})|\Psi\rangle + \langle\Psi|\hat{V}_{ext}|\Psi\rangle$$

$$= F_{HK}[\rho] + \int\rho(\vec{r})V_{ext}(\vec{r})d\vec{r}$$

عموميات حول السيراميك

حسب تعريف الجمعية البريطانية للسيراميك (1979) فهو عبارة عن مادة صلبة لا هي معدنية ولا عضوية فهي إصطناعية متحصل عليها غالبا بالمعالجة الحرارية لتشكيلها وق تكون عبارة عن أكاسيد حرارية مثل: SiO_2; (Al_2O_3)أوحراريات مثل الكربيدات والنتريدات أو الكربون ومشتقاته قد تحتوي كدلك على الزجاجيات أغلبيتها أكاسيد أو هالوجينات غير بلورية إذ لا تظهر ترتيب للذرات على المدى الكبير [11.4.3]

خصائص السيراميك

تختلف خصائص السيراميك باختلاف انواعها حيث تلعب هده الخصائص دور وأهميةكبيرة في تحديد سلوك المواد المدروسة وتفاعلها مع السط الخارجي ومن أهمها .

الخصائص المرونية : الخاصية المرنة في الصلب ترتبط بالعديد من الخصائص الأساسية للحالة الصلبة مثل معادلة الحالة (eosوالحرارة النوعية والتمددالحراري ودرجة حرارة دوباي ونقطة انصهار في درجة تابثة .

والمرونية تعتمد على المعلومات من نوع روابط في مستوي الذرات المجاورة .

الكلمات المفتاحية

- خصائص السيراميك المرنة
- نظرية تابعية الدالةDFT

المراجع

[1] Phase equilibria, phases and compounds in the V–C system #2005 Russian Academy of Sciences and Turpion Ltd

[2]G. Aliprandi. « *Matéractaires et céramique* » *éditions septima paris* 1979

[3]Britsh ceramic society — ceramInd J, 12,319

[5] M. Born, J.R. Oppenheimer, ann. Phys .87. 457 (1927).

[4] P. Hohenberg, W. Kohn: Phys. Rev. B 136. 864 (1969).