2015/2014

وزارة التعليم العالي و البحث العلمي
جامعة قاصدي مرباح – ورقلة -
قسم الفيزياء

2015/2014

معلقة تخرج لنيل شهادة ماستر فيزياء المواد

دراسة الخصائص المرنة في معدن بستخدام نظرية الكثافة التابعية

إعداد الطالبة زقعيط مسعودة ,تحت إشراف الأستاذ داودي باحمد و الأستاذ بوكراع عمار
البريد الإلكتروني: massoudazagaite@gmail.com

هدف الدراسة:

الهدف الرئيسي من دراسة الخصائص القاعدية عموما للمعدن هو التنبؤ بإمكانية استخدامه في تقنية معينة.

1)مقدمة:

لا يوجد تعريف بسيط للمعدن إلا أنه أي عنصر يحتوي على الخصائص المعدنية يمكن تصنيفه كمعدن وتشتمل هذه الخصائص على (اللمعان ,التوصيل الحراري والكهربائي,سهولة التشكيل في درجة حرارة عادية) و التغير في هذه الخصائص يودي إلى تغير الاستخدامات ونظرا لأهمية المعادن في الصناعة و التكنولوجيا فإن لدراست خصائصها أهمية كبيرة أيضا وذلك لمعرفة الاستخدام الصحيح لها وقد تطرقنا في بحثنا هذا إلى دراسة الخاصية المرنة وذلك باستعمال نظرية الكثافة التابعيةDFT.

2)لمحة عامة عن نظرية الكثافة التاعية DFT:

اهتم مكانيك الكم بدراسة خصائص بعض المواد باستخدام معادلة شرود نجر وحلولها لعدد محدد من الذرات و الجزيئات أما في الأنظمة المعقدة تستخدم العديد من التقريبات للحصول على معلومات جد دقيقة و من بينها نظرية الكثافة التابعية DFT والهدف منها هو إيجاد الخصائص الفيزيائية و الكيمائية للأنظمة من خلال معرفة البنية الإلكترونية.حيث يتم الحساب في برنامج wien2k الفكرة الرئيسية في :

نظرية DFT (Density Functional Theory) هي التخلي عن استعمال الدوال الموجية واستبدالها بدالة الكثافة الإلكترونية التي يمكن قياسها معمليا. والدافع وراء هذا هو تقليل عدد المتغيرات التي تدخل في الحساب.

لنعطي مثالا إذا أردنا التعامل مع ذرة كذرة كربون ، التي تحتوي علي ستة إلكترونات، فإن الدالة الموجية للذرة سيكون بها ثمانية عشر متغيرا (متغير x ومتغير y ومتغير z لكل إلكترون بالذرة). ولذا، فإن حل معادلة شرود نجر (الضروري لحساب طاقة الذرة وبيان شكل مداراتها) سيتطلب حل مصفوفة حجمها ثمانية عشر صفا وثمانية عشر عمودا.لكن باستخدام نظرية دالية الكثافة دفتي DFT، سيمكننا من الحصول علي نفس الحل باستخدام ثلاثة متغيرات فقط ،

3) تعريف:

الخاصية المرنة نقول عن جسم صلب أنه مرن إذا كان يتشوه بتطبيق قوة عليه ويعود لشكله الأصلي فور زوالها و تتعلق بمجموعة من الخصائص الأساسية للحالة الصلة وهي معادلة الحالة (eos),التمدد الحراري ,درجة الحرارة دوباي,درجة الانصهار,كما تعتمد على نوع الروابط بين المستويات الذرية ونوع الروابط بين ذرات في العينة التي تشكل البنية المستقرة.

4) خطة البحث:

1) حوصلة على DFT
2)كود wien2k
3)حساب (الحد الأدنى, الخصائص البنيوية,الخصائص المرنة)
4)تفسير النتائئج
5)ملخص المذكرة

5) المراجع

1)Electron Density functional Theory lecture notes (rough draft) october 2009
2) THE JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 136, 150901 (2012)
3) Présentée en vue de l’obtention du diplôme de Doctorat(Etude des propriétés structurales, électroniques,élastiques et optiques des composés fluoro-pérovskites CsCdF3 et KZnF) Par Amel MEZIANI
4)علم المعادن