



الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية

وزارة التعليم العالي و البحث العلمي

جامعة الشهيد الشيخ العربي التبسي - تبسة

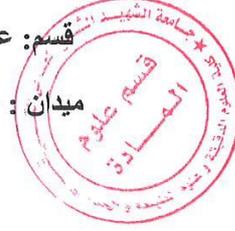
كلية العلوم الدقيقة و علوم الطبيعة و الحياة

قسم: علوم المادة

ميدان : علوم المادة

تخصص: فيزياء المادة المكثفة

شعبة : الفيزياء



مذكرة تخرج لنيل شهادة الماستر

دراسة الخصائص البنيوية، الإلكترونية والمرونية  
للمركب الثنائي ScS

من إعداد الطالب : علي هارون

لجنة المناقشة:

رئيساً	جامعة تبسة	أستاذ محاضر أ	❖ فردي عبد الحميد
مؤطراً	جامعة تبسة	أستاذ محاضر أ	❖ الحساسنة أميرة
ممتحناً	جامعة تبسة	أستاذ محاضر ب	❖ قيرواني تقي الدين

السنة الدراسية 2023 / 2024



République Algérienne Démocratique et Populaire



Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique

Université de Larbi Tébessi -Tébessa-

فakة العلوم الدقة و الطبيعة  
FACULTE DES SCIENCES EXACTES  
ET DES SCIENCES DE LA NATURE ET DE LA VIE

Faculté des Sciences Exactes et des Sciences de la Nature et de la Vie

### Déclaration sur l'honneur de non-plagiat

(À joindre obligatoirement au mémoire, remplie et signée)

Je soussigné(e).

Nom, prénom : ..... علي هاوون

Régulièrement inscrit (e) ..... ماستر متحدا قسم علوم العادة

N° de carte d'étudiant : ..... 181834019629

Année universitaire : ..... 2023/2024

Domaine : ..... علوم العادة

Filière : ..... فيزياء

Spécialité : ..... فيزياء العادة العكسوة

Intitulé du mémoire : ..... دراسة الخصائص البنيوية، الالكترونية والحرارية للمركب التثاقيني SCS

Atteste que mon mémoire est un travail original et que toutes les sources utilisées ont été indiquées dans leur totalité. je certifie également que je n'ai ni recopié ni utilisé des idées ou des formulations tirées d'un ouvrage, article ou mémoire ,en version imprimée ou électronique, sans mentionner précisément leur origine et que les citations intégrales sont signalées entre guillemets.

Sanctions en cas de plagiat prouvé :

L'étudiant sera convoqué de vent le conseil de discipline, les sanctions prévues selon la gravité de plagiat sont :

- L'annulation du mémoire avec possibilité de la refaire sur un sujet différent.
- L'exclusion d'une année du master
- L'exclusion définitive

Fait Tébessa, le .....

Signature de l'étudiant(e).

#aw





Département : Sciences de la matière.

Filière : physique (فيزياء)

Spécialité : physique de la matière condensée (فيزياء المادة المكثفة)

Année universitaire 2023/2024

## Formulaire de levée de réserves après soutenance d'un Mémoire de Master

### Données d'identification du candidat(s) :

Nom et prénom du candidat : ALI HAROUN علي هارون

Intitulé du Sujet :

دراسة الخصائص البنيوية والتركيبية  
والمرونية للمركب الشبكي SCS

### Données d'identification du membre de jury :

Nom et prénom : FERDI ABDELHAMID فربي عبد الحميد

Grade : MCA (Prof)

Lieu d'exercice : Université Larbi Tébessi- Tébessa

Vu le procès-verbal de soutenance de la thèse sus citée comportant les réserves suivantes :

Et après constatation des modifications et corrections suivantes :

الأخطاء المطبعية المشار إليها في المذكرة (الفصول الثلاثة المرجع 1, 11)  
قد تم تصحيحها وإصلاحات المقدمة من طرف لجنة  
المنامة قد أخذت بعين الاعتبار

Je déclare en ma qualité de président de jury de soutenance que le mémoire cité remplit toutes les conditions exigées et permet au candidat de déposer son mémoire en vue de l'obtention de l'attestation de succès.

Le 08/07/2024

Président de jury de soutenance : (Nom/Prénom et signature)

FERDI ABDELHAMID

فربي

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ

# الإهداء

قال الله تعالى :

" وَأَنْ لَيْسَ لِلْإِنْسَانِ إِلَّا مَا سَعَى [39] وَأَنْ سَعْيُهُ سَوْفَ يُرَى [40] "

سورة النجم

بخطوات ثابتة وإرادة متفانية, ها أنا ذا أضع النقاط على الحروف وأطوي آخر

صفحات مذكرتي هذه, فالحمد لله الذي وفقني للوصول

ها أنا أهدي عملي هذا المؤطر في عدة صفحات تحمل الكثير من الآمال و الأحلام

و أولى خطوات النجاح مذكرة تخرجي لنيل شهادة الماستر

الى من سهرت ليال من أجلي الى من ضحت بوقتها و جهدها الى أمي الغالية

حفظها الله

الى من كدّ و جدّ من أجلنا و سعى على تنشئتنا نشأة سليمة , الى أبي الفدّ أطل الله في

عمره و جعله فخراً لنا

الى إخوتي و أخواتي الأفاضل من أرشدوني و أمّدوا لي يد العون حين تعثرت بي

الخطوات

الى الأساتذة الأفاضل أساتذة قسم علوم المادة بالأخص الأساتذة " لحساسنة أميرة "

على جهودها المبذولة معي لإعداد هذا العمل

الى زملاء الدراسة و الرفقة الطيبة

الى أصدقائي و كل من يعرفني من قريب أو بعيد

الى كل من قرأ هذا العمل و انتفع به

# شكر و تقدير

الحمد لله حمداً كثيراً طيباً مباركاً فيه و الصلاة و السلام على سيدنا و نبينا محمد صل الله عليه و سلم

أتقدم بجزيل الشكر الى من ساندني في إنجاز هذا العمل من قريب أو بعيد، الى الذين مهدوا لي طريق العلم و المعرفة... الى جميع أساتذتي الأفاضل أساتذة قسم علوم المادة

كما أخصُ بالشكر و التقدير وأزكى عبارات الامتنان لأساتذتي المشرفة "لحسانة أميرة" التي أخلصت في عملها بإرشادي و توجيهي حتى تمام هذا العمل

كما أتوجه بجزيل الشكر للجنة المناقشة " الأستاذ فردي عبد الحميد رئيساً و الأستاذة لحسانة أميرة مشرفة و الأستاذة فيرواني تقي الدين ممتحنا " على قبولهم مناقشة هاته المذكرة

كما أخصُ بالشكر :

عائلتي الكريمة

زملاء الدفعة تخصص فيزياء المادة المكثفة

## ملخص

في هذا العمل قمنا بدراسة الخصائص البنيوية، الإلكترونية والمرونية للمركب الثنائي ScS وفق حالته البلورية (NaCl) ، باستخدام الأمواج المستوية المتزايدة خطيا (FP-LAPW) و التي تندرج في إطار نظرية دالية الكثافة (DFT), المدمجة في برنامج المحاكاة (wien2k). تمت المحاكاة باستعمال تقريب التدرج المعمم (WC-GGA) المطور من طرف Wu-Cohen و تقريب كثافة الموضع (LDA) ، و لحساب الخصائص الإلكترونية استعمالنا ايضا تقريب (mBJ) Back- Johnson.

بالنسبة للخواص البنيوية قمنا بتحديد ثابت الشبكة البلورية و معامل الانضغاطية و مشتقه حيث كانت النتائج المتحصل عليها موافقة للنتائج التجريبية و النظرية المتوفرة. ومن تحليل نتائج عصابات الطاقة و كذا التطرق لكثافة الحالات وجدنا ان للمركب طابع معدني. أما فيما يتعلق بالخواص المرونية فقد قمنا بتحديد الثوابت المرونية و مناقشتها .

**الكلمات المفتاحية:** نظرية دالية الكثافة DFT ,FP-LAPW ,Wien2k ,ScS.

## Abstract

In this work, we studied the structural, electronic and elastic properties of binary compound ScS in NaCl structure. Using the full potential linearized augmented plane wave method (FP-LAPW), in the general context of the density functional theory (DFT) implemented in the (wien2k) code, using the generalized gradient approximation (WC-GGA) developed by Wu-Cohen and the local density approximation (LDA). And Then the Becke- Johnson approximation (mBJ) was used to calculate the electronic properties.

The structural properties were determined from calculated the lattice parameter, bulk modulus and its derivative, our results are in good agreement with the theoretical and experimental available results. From the band structure and the density of state results, we found that our compound have a metallic character. The elastic properties were determined by calculated the elastic constants.

**Keywords:** DFT, FP-LAPW, Wien2k, ScS.

## Résumé

Dans ce travail, nous avons étudié les propriétés structurales, électroniques et élastiques du composé binaire de ScS qui se cristallise dans la structure NaCl, par la méthode linéaire des ondes planes augmentées (FP-LAPW), dans le cadre de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT), implémentée dans le code (Wien2k), en utilisant l'approximation du gradient généralisée (WC-GGA) développée par Wu-Cohen et l'approximation de la densité locale (LDA). On a utilisé aussi l'approximation de Back-Johnson (mBJ) Pour calculer les propriétés électroniques.

Les propriétés structurales ont été déterminées à partir de l'étude du paramètre de réseau, coefficient de compressibilité et sa dérivé, les résultats obtenus sont on accorde avec les résultats théoriques et expérimentaux disponibles. A partir des structures de bandes et des densités d'états on a trouvé que le composé étudié a un caractère métallique. Pour l'étude des propriétés élastique on a déterminé les constantes élastiques.

**Mots clés :** DFT, FP-LAPW, Wien2k, ScS.

## الفهرس

1.....المقدمة العامة

### الفصل الأول: نظرية دالية الكثافة DFT

- 3.....1.I معادلة شرودينغر للبلورة
- 4.....2.I تقريب بورن ابنهايمر Born-Oppenheimer
- 4.....3.I تقريب هارترى و فوك Hartree et Fock
- 6.....4. I نظرية دالية الكثافة DFT
- 6.....1.4. I مبدأ النظرية
- 6.....2.4. I نظرية هوهنبرغ و كوهن Kohn et Hohenberg
- 7.....3.4. I معادلات كوهن - شام Kohn-Sham
- 7.....4.4. I دالية تبادل - ارتباط Exchange-Correlation Functional
- 8.....5.4. I تقريب كثافة المحلية LDA
- 8.....6.4. I تقريب التدرج المعمم GGA
- 8.....7.4. I حلول معادلات كوهن و شام لجسيم واحد

### الفصل الثاني: طريقة الأمواج المستوية المتزايدة خطيا (FP-LAPW)

- 12.....1.II طريقة الأمواج المستوية المتزايدة (APW)
- 13.....2.II مبدأ طريقة الموجة المستوية خطيا (LAPW)
- 14.....3.II دور الطاقات الخطية
- 14.....4.II بنية الدوال القطرية
- 14.....1.4.II الدوال الشعاعية الغير نسبية
- 15.....2.4.II الدوال الشعاعية النسبية
- 15.....5.II تحديد المعاملات  $A_{lm}^{\alpha}$  و  $B_{lm}^{\alpha}$
- 16.....6.II تمثيل كثافة الشحنة والجهد
- 17.....7.II جهد كولومب
- 17.....8.II جهد التبادل و الترابط
- 17.....9.II برنامج Wien2k
- 17.....10.II مبدأ عمل برنامج Wien2k

### الفصل الثالث: النتائج و المناقشة

- 21.....1.III الخطوات المتبعة في الحساب
- 21.....1.1.III الخواص البنيوية
- 24.....2.1.III الخواص الالكترونية
- 27.....3.1.III كثافة الحالات الجزئية

30.....III.1.4. خواص المرونة

33.....خاتمة عامة

## فهرس الأشكال

الصفحة	العنوان	الشكل
<b>الفصل الأول : نظرية دالية الكثافة DFT</b>		
10	العملية الدورية لحلول معادلة كوهن و شام	1.I
<b>الفصل الثاني: طريقة الأمواج المستوية المتزايدة خطيا (FP-LAPW)</b>		
12	كمون خلية النحل MT	1.II
19	بنية برنامج Wien2k	2.II
<b>الفصل الثالث: النتائج و المناقشة</b>		
23	منحنى يوضح تغير الطاقة الكلية للمركب الثنائي ScS بدلالة الحجم وفق تقريب WC-GGA	1.III
23	منحنى يوضح تغير الطاقة الكلية للمركب الثنائي ScS بدلالة الحجم وفق تقريب LDA	2.III
25	منحنى عصابات الطاقة للمركب ScS وفق تقريب WC_GGA	3.III
25	منحنى عصابات الطاقة للمركب ScS وفق تقريب LDA	4.III
26	منحنى عصابات الطاقة للمركب ScS وفق تقريب WC-GGA(mBJ)	5.III
26	منحنى عصابات الطاقة للمركب ScS وفق تقريب LDA(mBJ)	6.III
27	كثافة الحالات الجزئية للمركب ScS وفق تقريب LDA	7.III
28	كثافة الحالات الجزئية للمركب ScS وفق تقريب LDA (mBJ)	8.III
28	كثافة الحالات الجزئية للمركب ScS وفق تقريب WC-GGA	9.III
29	كثافة الحالات الجزئية للمركب ScS وفق تقريب WC-GGA (mBJ)	10.III

## فهرس الجداول

الصفحة	العنوان	الجدول
الفصل الثالث: النتائج و المناقشة		
24	جدول يوضح نتائج الحساب للمركب ScS	1.III
31	جدول يوضح نتائج معاملات المرونة للمركب ScS	2.III



# مقدمة عامة

---

لطالما اهتم العلماء و الباحثون بدراسة المواد بشكل عام , الصلابة منها بشكل خاص و التطرق الى خواصها المتعددة و تحليل الظواهر التي تقع على المستوى الذري للمادة و هذا ما يعالجه علم فيزياء الحالة الصلبة, وقد صنّف العلماء هاته المواد الصلبة ضمن عائلات وفق عدة خصائص محددة.

من أبرز هاته العائلات نجد عائلة سكانديوم الكالكوجين التي تضم المركبات الثنائية التالية ScS ; ScSe ; ScTe , يعتبر المركب الثنائي ScS من أبرز العناصر البارزة التي تلعب دوراً هاماً في إنتاج مغناط عالية الأداء, بطاريات لها القدرة على إعادة الشحن, السبائك و المحفزات وكذا الإلكترونيات لكونه يمتلك موصلية فائقة [1].

من بين الطرق المتوفرة لدراسة خصائص المواد الصلبة نجد برامج المحاكاة التي تحقق نتائج حسابية مذهلة خاصة في المركبات المعقدة و توفر الجهد المبذول مقارنة بالأبحاث التجريبية , و من أبرز أهداف برامج المحاكاة نجد أنها توفر ميزة تجربة دراسة نظرية لمركبات مختلفة بحثاً عن خواص محددة ليتم تطبيقها تجريباً عند الحصول على النتائج المبتغاة .

في هذا العمل سنتطرق الى الجانب العملي من مذكرتنا و المتمثل في دراسة الخصائص البنيوية، الإلكترونية و مرونية للمركب الثنائي ScS الذي تمت دراسته تجريبياً في المخبر و وجد أنه يتبلور على شكل NaCl و كذا عرض و مناقشة النتائج الحسابية المتحصل عليها وذلك باستخدام برنامج المحاكاة "Wien2k" [2].

يعتمد برنامج المحاكاة بشكل أساسي على نظرية دالية الكثافة "DFT" [3]. التي أخذ عليها العالم هوهنبرغ جائزة نوبل في الفيزياء , تعد نظرية دالية الكثافة من أكثر النظريات الكمية المستعملة في فيزياء المادة المكثفة حيث تستخدم لدراسة أنظمة تحتوي على عدد كبير من الإلكترونات .

عملنا هذا يحتوي مقدمة عامة تطرقنا فيها لشرح الأفكار الأساسية المذكورة في ثلاثة فصول , بداية تطرقنا في الفصل الأول لنظرية دالية الكثافة بشكل مفصل من خلال طرح المبادئ الأساسية لهاته النظرية مع مختلف التقريبات, في حين سنعتمد في الفصل الثاني على طريقة الأمواج المستوية المتزايدة خطياً مع الكمون الكامل FP-LAPW [4] ثم تناولنا في الفصل الثالث دراسة الخصائص البنيوية، الإلكترونية و مرونية على التوالي وفق التقريبات " تقريب الكثافة المحلية LDA [5] و تقريب التدرج المعمم WC-GGA [6]" كما تناولنا تصحيح mBJ [7] الذي يبرز النتائج بشكل أوضح للخصائص الإلكترونية وتم ختام العمل بخلاصة عامة تحتوي على أبرز النتائج المتحصل عليها.

المراجع :

- [1] Pavas et al 2020 J. Phys.: Conf. Ser. 1531 012047
- [2] P.Balaha,K.Shawartz,G.K.H.Maclsen.D.K.Vasnika,Luittz.WIEN2K
- [3] P.Hohenberg and W.Kohn ,Phys.Rev. B864. 136 (1964).
- [4] H.J.F Jansen and A.J.Freeman,Phys .Rev.B 30. 561 (1984).
- [5] J.P.OERDEW, Y. WANG, Phy. Rev. B45. 13244(1992).
- [6] Z. Wu and R. E. Cohen, Phy. Rov B73.5116 (2006).
- [7] D. Koller, F. Tran, P. Blaha, Merits and limits of the modified.



# الفصل الأول

نظرية دالية الكثافة

**DFT**

---

### 1.I. معادلة شرودينغر للبلورة:

تعتبر معادلة شرودينغر هي منطلق كل الدراسات الكمية للنظام الكوانتي للبلورات, يوصف نظام الجسيمات " الكثرونات و أنوية " متفاعلة في حالة السكون بمعادلة شرودينغر [1] و نكتب :

$$\hat{H} \Psi(r_i, R_\alpha) = E \Psi(r_i, R_\alpha) \quad (1.I)$$

حيث :  $\hat{H}$  : يمثل المؤثر هاملتوني.

$E$  : الطاقة الكلية للنظام.

$\Psi$  : دالة الموجة للنظام و تتعلق بمواقع الإلكترونات و الأنوية.

الهاملتونيان الكلي للجملة يكون مؤلف من الطاقة الحركية لكل الجسيمات و طاقة التفاعل بين هاته الجسيمات, كما يجب التنبيه الى أنه يمكن في بعض الحالات إضافة طاقة التفاعل مع الوسط الخارجي.

عند غياب الحقل الخارجي يكتب الهاملتونيان على الشكل التالي :

$$\hat{H} = \hat{T}_e + \hat{T}_n + \hat{V}_{e-e} + \hat{V}_{n-n} + \hat{V}_{e-n} \quad (2.I)$$

حيث:

$$\hat{T}_e = \sum_{i=1}^{N_e} \left( -\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta_i \right) \quad \text{الطاقة الحركية للإلكترونات.}$$

$$\hat{T}_n = \sum_{i=1}^{N_\alpha} \left( -\frac{\hbar^2}{2M_\alpha} \Delta_i \right) \quad \text{الطاقة الحركية للأنوية.}$$

$$\hat{V}_{e-e} = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{|r_i - r_j|} \quad \text{الطاقة الكامنة للتفاعل بين الإلكترونات فيما بينها.}$$

$$\hat{V}_{n-n} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha \neq \beta} \frac{Z_\alpha Z_\beta e^2}{|R_\alpha - R_\beta|} \quad \text{الطاقة الكامنة للتفاعل بين الأنوية فيما بينها.}$$

$$\hat{V}_{e-n} = - \sum_{i=1}^{N_e} \sum_{\alpha=1}^{N_\alpha} \frac{Z_\alpha e^2}{|r_i - R_\alpha|} \quad \text{الطاقة الكامنة للتفاعل بين الإلكترونات و الأنوية.}$$

مع العلم أن :

$$\Delta_i = \nabla_i^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

$M_\alpha$  تمثل كتلة نواة

$m_e$  تمثل كتلة إلكترون

$N_e$  هو عدد الإلكترونات الموجودة في النظام

$N_\alpha$  هو عدد الذرات الكلية الموجودة في النظام

$|r_i - R_\alpha|$  البعد بين النواة  $\alpha$  و الإلكترون  $i$

$|R_\alpha - R_\beta|$  البعد بين النواة  $\beta$  و النواة  $\alpha$

$|r_i - r_j|$  : البعد بين الإلكترون  $i$  و الإلكترون  $j$

إن دالة الموجة للنظام  $\Psi$  هي دالة تحمل احداثيات مواضع الإلكترونات و الأنوية الخاصة بالنظام المراد دراسته و يتم التعبير عنها بالصيغة التالية :

$$\Psi = \Psi(r_1, r_2, \dots, r_{N_e}, R_1, R_2, \dots, R_{N_\alpha}) \quad (3.I)$$

حيث:

. تمثل احداثيات الأنوية في النظام .  $R_1, R_2, \dots, R_{N_\alpha}$

. تمثل احداثيات الإلكترونات في النظام .  $r_1, r_2, \dots, r_{N_e}$

و منه يمكن كتابة معادلة شرودينغر بالصيغة التالية :

$$\begin{aligned} & (\hat{T}_e + \hat{T}_n + \hat{V}_{e-e} + \hat{V}_{n-n} + \hat{V}_{e-n})\Psi(r_1, r_2, \dots, r_{N_e}, R_1, R_2, \dots, R_{N_\alpha}) \\ & = E \times \Psi(r_1, r_2, \dots, r_{N_e}, R_1, R_2, \dots, R_{N_\alpha}) \end{aligned} \quad (4.I)$$

إن معادلة شرودينغر الأخيرة لنظام يحتوي على  $N$  جسيم مستحيلة الحل و لذلك توجد عدة تقريبات تسهل و تيسر إيجاد حلول ملائمة لهاته المعادلة.

## 2.I. تقريب بورن ابنهايمر Born-Oppenheimer :

لتبسيط معادلة شرودينغر نستخدم تقريب بورن ابنهايمر [2] , الذي ينص على فصل حركة الإلكترونات عن الأنوية, أي أن النواة ساكنة بالنسبة للإلكترون و ذلك لأن سرعة النواة صغيرة نسبيا مقارنة بسرعة الإلكترون و كذلك لأن كتلة النواة أثقل مقارنة مع كتلة الإلكترون و بالتالي :

اعتبر أن الطاقة الحركية للأنوية معدومة  $\hat{T}_n = 0$

اعتبر أيضا أن طاقة التفاعل بين الأنوية فيما بينها ثابتة  $\hat{V}_{n-n} = cte$

و منه يعطى الهاملتون  $\hat{H}$  في هذه الحالة بالعلاقة :

$$\hat{H} = \hat{H}_e + \hat{V}_{n-n} \quad (5.I)$$

حيث :  $\hat{H}_e$  يطلق عليه هاملتون الإلكترونات و يكتب بالعلاقة التالية:

$$\hat{H}_e = \hat{T}_e + \hat{V}_{e-e} + \hat{V}_{e-n} \quad (6.I)$$

تصبح معادلة شرودينغر وفق الهاملتوني الجديد تكتب كالتالي :

$$(\hat{T}_e + \hat{V}_{e-e} + \hat{V}_{e-n}) \Psi(r_i, R_\alpha) = E \Psi(r_i, R_\alpha) \quad (7.I)$$

على رغم من أن هذا التقريب أزال حدين من عبارة الهاملتون إلا أنه لا يزال حل معادلة شرودينغر غير ممكن و لهذا توجب السعي نحو تقريبات أخرى للوصول للحل.

## 3.I. تقريب هارترى و فوك Hartree et Fock :

في سنة 1927 م كان للعالم هارترى Hartree [3] الفضل في وضع نموذج كمي يصف فيه الذرات ذات  $N$  الكترون " عدد كبير من الإلكترونات " , في سنة 1930 م قام العالم فوك Fock [4] بتطوير هذا النموذج و أبرز مفهوم جديد في الفيزياء الكمية " نموذج الإلكترون الحر " .

أي أن كل الكترون منفرد بحركته في الحقل المتوسط المتولد عن الأنوية و كذا بقية الإلكترونات الأخرى عيب هذا التقريب أنه لا يمكن تطبيقه على نظام يحوي  $N$  جسيم , بل يصلح فقط للجسيم المنفرد , كما تهمل التفاعلات بين الإلكترونات ومبدأ السبين لنظام الإلكترونات و بالتالي عدم مراعاة مبدأ الاستبعاد لباولي .

و منه يكتب :

$$H = \sum_{i=1}^N H_i \quad (8.I)$$

$$H_i = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta_i + U_i(r_i) + V_i(r_i) \quad (9.I)$$

حيث:

$H$  : الهاملتون الكلي

$V_i(r_i) = V_h(r_i)$  : يمثل الكمون الفعال لهارترتي و يعطى بالعلاقة :

$$V_i(r_i) = -\frac{1}{2} \sum_j \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |r_i - r_j|} \quad (10.I)$$

$U_i(r_i)$  : يمثل الطاقة الكامنة للإلكترون  $i$  مع كل الأيونات  $K$  و يعطى بالعلاقة:

$$V_i(r_i) = -\sum_k \frac{Z_K e^2}{4\pi |r_i - R_K|} \quad (11.I)$$

تكتب دالة الموجة للنظام على شكل جداء دوال الحالة كما يلي :

$$\Psi(r_1, r_2, \dots, r_N) = \prod_{i=1}^N \psi_i(r_i) = \psi_1(r_1) \psi_2(r_2) \dots \psi_N(r_N) \quad (12.I)$$

أما الطاقة الكلية للنظام فتكتب على شكل مجموع الطاقات الموافقة لكل حالة الكترونية كما يلي :

$$E = \sum_{i=1}^N E_i \quad (13.I)$$

و منه نكتب معادلة شرودينغر :

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta_i + U_i(r_i) + V_i(r_i) \right) \times \Psi(r_i, R_\alpha) = \epsilon_i \times \Psi(r_i, R_\alpha) \quad (14.I)$$

أدرج العالم فوك Fock تصحيحا لما طرحه العالم هارترتي Hartree و يمكن التعبير عن فكرته في ما يلي :

تكتب دالة الموجة للنظام على شكل جداء دوال أمواج لجسيم منفرد متعامدة كما يلي :

$$\Psi(r_1, r_2, \dots, r_N) = \prod_{i=1}^N \psi_i(r_i) = \psi_1(r_1) \psi_2(r_2) \dots \psi_N(r_N) \quad (15.I)$$

للمعادلة (15.I) عدة احتمالات حيث توجد  $N!$  احتمال لتموضع  $N$  الكترون على  $N$  موضع

و ترجمت هاته الإحتمالات في محدد سلاتر Slater

$$\Psi(r_1, r_2, r_3, \dots, r_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \Psi_1(r_1) & \Psi_1(r_2) & \dots & \dots & \Psi_1(r_N) \\ \Psi_2(r_1) & \Psi_2(r_2) & \dots & \dots & \Psi_2(r_N) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \Psi_N(r_1) & \Psi_N(r_2) & \dots & \dots & \Psi_N(r_N) \end{vmatrix} \quad (16.I)$$

تسمح طريقة العالم فوك بحل معادلة شرودينغر لنظام متكون من  $N$  الكترون و  $N$  نواة , وهي مراعية

لمبدأ الاستبعاد لباولي الذي ينص على " أنه لا يمكن لإلكترونين أنا يكونا معا في نفس الحالة الكوانتية " .

لكن عند حساب بنية عصابات الطاقة نجد صعوبة في تحديد الكمون الداخلي للبلورة و لهذا نلجأ لاستعمال نظرية دالية الكثافة DFT .

#### I. 4. نظرية دالية الكثافة DFT :

##### I. 1.4.1. مبدأ النظرية :

يتمثل مبدأ هاته النظرية في التعبير عن طاقة نظام متعدد الإلكترونات باستخدام دالية الكثافة الإلكترونية  $\rho(\vec{r})$  و يكمن الأساس في هذا التغيير في التنبؤ بطاقات الارتباط للذرات فيما بينها للنظام المراد دراسته.

في سنة 1928م تمكن العالمان " توماس Thomas [5] و فرمي Fermi [6] " من إبراز إمكانية الاعتماد على دالية الكثافة الإلكترونية, للحصول على مقدار الطاقة الحركية أي حسابها لكن النتائج لم تكن ملائمة و ذلك لإهمالهم الارتباط بين الإلكترونات.

و في سنة 1965 م وبواسطة العالمان هوهنبرغ Hohenberg و كوهن Kohn [7] تم وضع الفكرة الأساسية للنظرية " حساب خصائص النظام انطلاقاً من استغلال الكثافة الثابتة " خاصة بعد اكتشاف البنية الإلكترونية للمادة و في وقت لاحق تابع كوهن Kohn أبحاثه لهاته الفكرة حتى وصل الى تطبيق عملي لـ (DFT).

#### I. 2.4. نظرية هوهنبرغ و كوهن Kohn et Hohenberg :

يمكن تطبيق هاته النظرية على أي نظام ذو N جسيم متفاعلة في وجود حقل خارجي و نميز وجود نظريتين أساسيتين للعالمين هوهنبرغ Hohenberg و كوهن Kohn [7] :

##### النظرية الأولى :

تتركز على أخذ الطاقة الكلية لنظام جسيمات متفاعلة في وجود كمون خارجي  $V_{ext}(\vec{r})$ ، هذا الأخير يتم تحديده بواسطة دالة كثافة الإلكترونات  $\rho(\vec{r})$  و كذا تمكنا هاته الدالة من حساب خصائص النظام . و تكتب عبارة الطاقة كالتالي :

$$E = E(\rho(\vec{r})) \quad (17.I)$$

كما تكتب من الشكل:

$$E[\rho] = T[\rho] + \hat{V}_{e-e} + V_{ext} \quad (18.I)$$

حيث :  $\rho(\vec{r})$  تمثل كثافة الإلكترونات و يمكن إيجادها انطلاقاً من التكامل على كل الفضاء :

$$V_{ext} = \int \rho(\vec{r}) \times V_r dr \quad , \quad \int \rho(\vec{r}) dr = n \quad (19.I)$$

حيث: n هو عدد الإلكترونات

النظرية الثانية :

تنص على أن الكثافة الإلكترونية للحالة الأساسية توافق أقل قيمة للطاقة وكل خصائص الحالة الأساسية هي دالية لكثافة الإلكترونات.

$$E(\rho) = \text{Min } E(\rho) \quad (20.I)$$

**I. 3.4. معادلات كوهن – شام :**

تمثلت الفكرة الأساسية في استبدال جملة الجسيمات المتفاعلة إثر تطبيق حقل خارجي ثابت الى جملة تخيلية غير متفاعلة تتحرك فيها الجسيمات ضمن كمون فعال يشمل الحقل الخارجي يسمى " كمون كوهن – شام Kohn – Sham " مع اعتبار ان كثافة الإلكترونات  $\rho(\vec{r})$  تبقى نفسها .

معادلات كوهن-شام [8], أبرزت طريقة عملية لحساب كثافة الإلكترونات  $\rho(\vec{r})$  وكذا الطاقة الكلية لنظام يتكون من N جسيم متفاعلة عند وجود كمون خارجي و ذلك باستخدام علاقات لمجموعة من معادلات شرودينغر و نوجز ذلك في المعادلات التالية :

$$H_{KS}\Psi_i = E_i\Psi_i \quad (21.I)$$

$$H_{KS} = \left[ -\frac{\hbar^2}{2m_e}\Delta_i + V_{ion}(\vec{r}) + V_H(\vec{r}) + V_{xc}(\vec{r}) \right] \quad \text{حيث :}$$

$V_{xc}(\vec{r})$  هو كمون تبادل-ارتباط يعبر عنه بدلالة  $\rho(\vec{r})$  و نكتب :

$$V_{xc}(\vec{r}) = \frac{\delta E_{xc}\rho(\vec{r})}{\delta\rho(\vec{r})} \quad (22.I)$$

حيث:

$$V_H(\vec{r}) \text{ هو كمون هارثري يعبر عنه بدلالة } \rho(\vec{r}) \text{ و نكتب :}$$

$$V_H(\vec{r}) = e^2 \int \frac{\rho(r')}{|r-r'|} d^3 r' \quad (23.I)$$

$V_{ion}(\vec{r})$  هو كمون الأنوية .

و منه يمكن كتابة معادلة كوهن كما يلي:

$$H_{KS}\Psi_i = [T_e(\vec{r}) + V_{eff}(\vec{r})]\Psi_i = \varepsilon_i\Psi_i \quad (24.I)$$

حيث :

$$V_{eff}(\vec{r}) = V_{ext}(\vec{r}) + V_H(\vec{r}) + V_{xc}(\vec{r}) \quad (25.I)$$

**I. 4.4. دالية تبادل – ارتباط Exchange-Correlation Functional :**

يمكن القول أن طاقة تبادل-ارتباط هي طاقة التفاعل الإلكترونيستاتيكي بين الإلكترون و الجزء المحيط به أي ثقب التبادل و الترابط حيث:

✓ نميز وجود التفاعل الذاتي و مبدأ الاستبعاد لباولي و هما الأساس في طاقة التبادل أما طاقة الارتباط فتنافر كولوم هو المسؤول عنها .

✓ لا يتم إعطاء قيمة مضبوطة لكمون تبادل- ارتباط لذلك يتم استخدام تقريبات تهتم بدراسة تأثير التبادل والارتباط للإلكترونات فيما بينها و أهم تقريبين هما :

تقريب الكثافة المحلية Local Density Approximation وتقريب التدرج المعمم Generalized Gradient Approximation

### I. 5.4. تقريب الكثافة المحلية LDA :

نمذج هذا التقريب بالأساس اعتمادا على أن الكثافة الإلكترونية تشبه كثافة غاز الإلكترونات المتجانس، وهذا يعني ان تفاعلات التبادل و الترابط لها تأثير محلي [9] .

أي ان طاقة التبادل-الارتباط تكون متعلقة فقط بالكثافة الإلكترونية  $\rho(\vec{r})$  و باعتبار قيمتها ثابتة أو يكون تغييرها صغير جدا ، لذا يتم اهماله ومنه يمكن صياغة طاقة التبادل و الارتباط بالمعادلة التالية :

$$E_{xc}^{LDA}[\rho(\vec{r})] = \int \varepsilon_{xc}^{LDA}[\rho]\rho(\vec{r})d^3r \quad (26.I)$$

حيث يمكن كتابة الطاقة  $E_{xc}^{LDA}[\rho(\vec{r})]$  على شكل مجموع كما هو موضح في المعادلة أدناه :

$$\varepsilon_{xc}^{LDA}[\rho] = \varepsilon_x[\rho] + \varepsilon_c[\rho] \quad (27.I)$$

حيث:

$\varepsilon_x[\rho]$  تمثل طاقة التبادل.

$\varepsilon_c[\rho]$  تمثل طاقة الترابط.

يطبق تقريب LDA في حالة غاز الكروني منظم وفي الحقيقة تكون الكثافة الإلكترونية غير منتظمة في حدود منطقة معينة و بالتالي نلجأ الى استخدام تقريب GGA .

### I. 6.4. تقريب التدرج المعمم GGA :

يعد تقريب التدرج المعمم GGA تصحيحا لتقريب الكثافة المحلية LDA، مما يوفر تحسينا واضحا للأخير ، حيث ركز على أخذ مصطلح التبادل و الترابط ليس كدالة كثافة فقط، ولكن كدالة للكثافة  $\rho(\vec{r})$  و تدرجها المحلي  $\nabla\rho(\vec{r})$  [10].  
و منه يعبر عن الطاقة في تقريب GGA بصفة عامة بالمعادلة :

$$E_{xc}^{GGA}[\rho(\vec{r})] = \int \varepsilon_{xc}^{GGA}[\rho(\vec{r})\nabla\rho(\vec{r})]d^3\vec{r} \quad (28.I)$$

### I. 7.4. حلول معادلات كوهن و شام لجسيم واحد:

ترتكز مختلف طرق حساب بنية عصابات الطاقة مبدئيا على " DFT " وترتب حسب استخدامها للكثافة، الكمون ومدارات كوهن- شام [11] .

ومنه دالة الموجة الأساسية هي:

$$\Psi_i(r) = \sum C_{i\alpha}\varphi_{\alpha}(r) \quad (29.I)$$

حيث:  $C_{i\alpha}$  هي معاملات النشر لدالة الموجة  $\varphi_{\alpha}(r)$

حل معادلات كوهن - شام يكون وفق طريقة تكرارية بحكم وجود تنافر بين الإلكترونات، كما يتم إدخال كثافة الشحنة الأولية  $\rho_{in}$  ضمن الحساب.

تعطى الحلول بالمعادلة :

$$H - \varepsilon_i S = 0 \quad (30.I)$$

حيث  $H$  الهاميلتون و  $S$  هي مصفوفة التغطية

- يتم الحصول على كثافة شحنة كلية جديدة  $\rho_{out}$  و يتم مقارنتها مع كثافة الشحنة الأولية  $\rho_{in}$
- نميز الفرق بينهما إذا كان كبير نقوم بخلط هاتين الكثافتين وفق العلاقة :

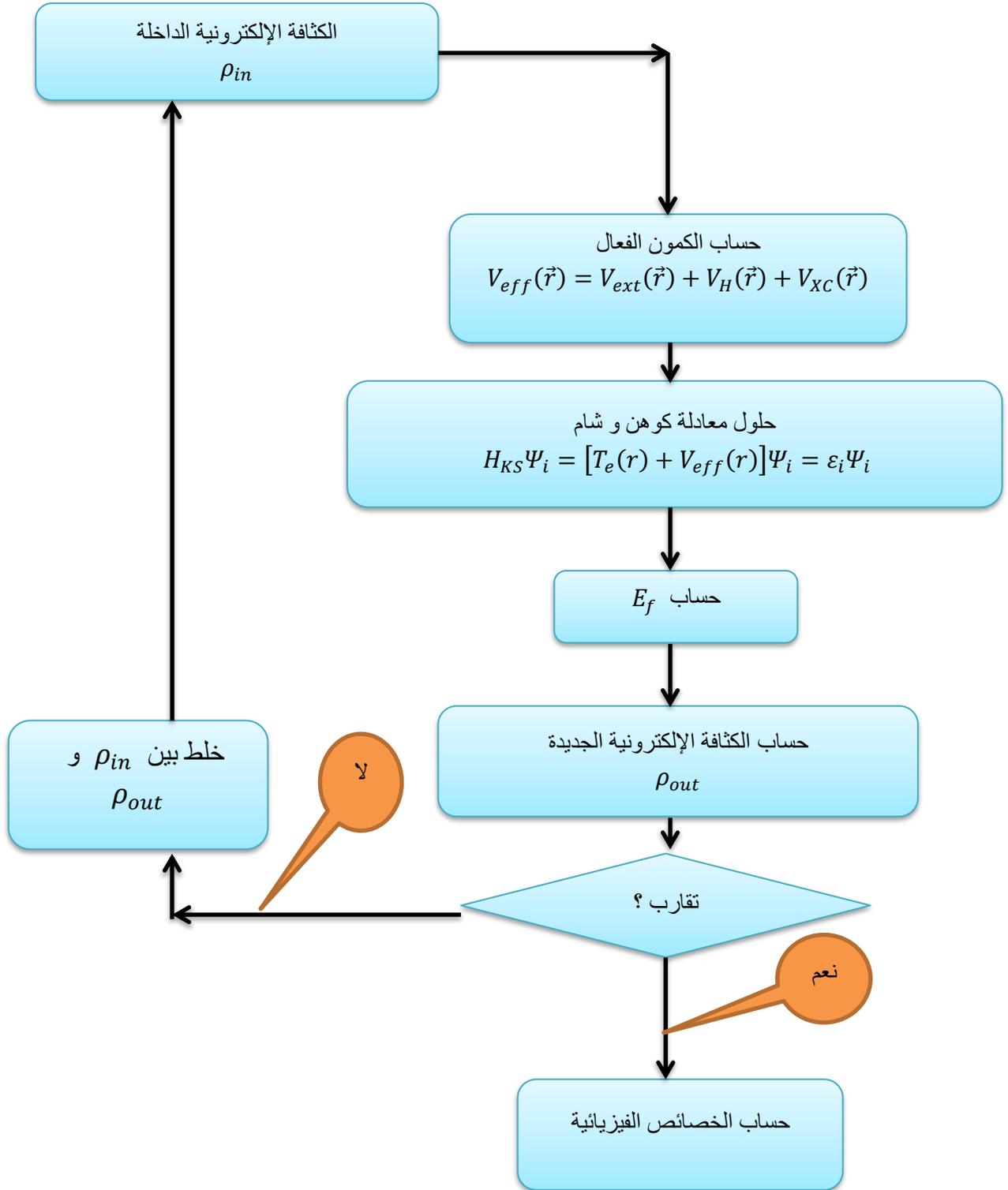
$$\rho_{in}^{i+1} = (1 - \alpha)\rho_{in}^i + \alpha \rho_{out}^i \quad (31.I)$$

حيث  $\alpha$  هو ثابت الذي يتم اختياره عشوائيا بين القيم [0؛ 1].

$i$  هو معدل التكرارات.

- يتم تكرار العملية مع كثافة الشحنة الجديدة حتى نصل الى النتائج المرغوبة

وهذا ما يوضحه الشكل رقم 1.I.



شكل 1.1 : العملية الدورية لحل معادلة كوهن- شام .

## المراجع :

- [1] E. Schrödinger, Annals of Physics 79, 489, (1926)
- [2] M. Born and R. Oppenheimer, Annalen der Physik 389, 457 (1927).
- [3] D. R. Hartree, Proc. Cambridge Philo. Soc. 24, 89 (1928).
- [4] V. Fock, Z. Phys. 61. 126, 795 (1930).
- [5] L. H. Thomas, Proc. Cambridge Phil. Roy. Soc. 23, 542 (1927).
- [6] E. Fermi, Rend. Accad. Naz. Lincei 6, 602 (1927).
- [7] P. Hohenberg and W. Kohn, Phys. Rev. 136, B864 (1964).
- [8] M.H.Cohen, D.Frydel, K. Bruke and E. Engel, J.Chem.Phys. Vol.113, P 2990(2000).
- [9] P.Blaho, K.Schwarz, P.Sorantin, S.B.Tricky, Chem.Phys.Lett.399(1990)
- [10] A. Boumaza, thèse de doctorat .Univ. Annaba . Algérie (2014)
- [11] - E. Fermi .Z. Phys. 48, 73 (1928).



# الفصل الثاني

طريقة الأمواج المستوية

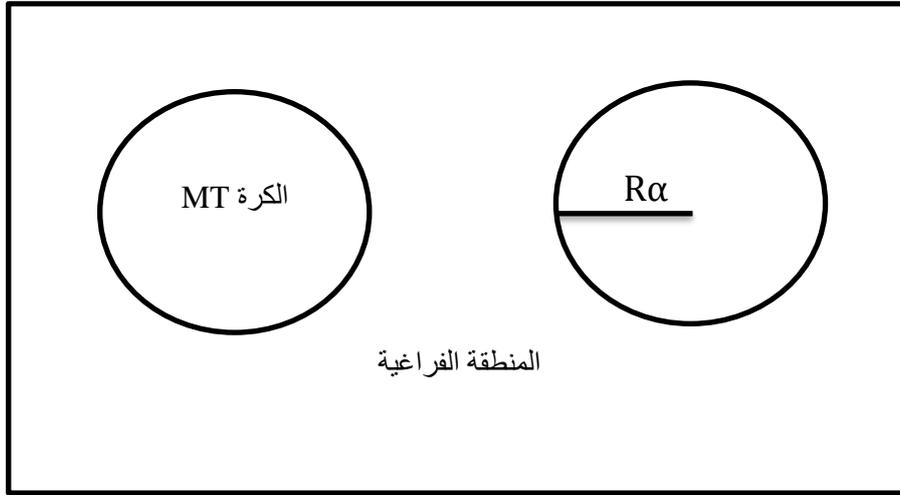
المتزايدة خطيا

**FP-LAPW**

---

## 1.II. طريقة الأمواج المستوية المتزايدة ( APW ) :

في سنة 1937م طرح العالم سلاتر " Slater " [1] طريقة الموجة المستوية المتزايدة ( APW ) وطرح العالم اندرسون " Andersen " [2] طريقة الأمواج المتزايدة خطيا ( LAPW ) في سنة 1969م، وهي طريقة محسنة لطريقة ( APW ) وبعد ذلك عرض طريقة الكمون الكامل ( FP-LAPW ). بالنسبة لطريقة APW قام سلاتر بأخذ دالة الالكترونات الخاصة بكمون " MT " أو كما يدعى بكمون (خلية النحل) و أساسه تقسيم الفضاء المحيط بالذرات إلى منطقتين كما في الشكل 1.II أدناه :



شكل 1.II : شكل كمون (خلية النحل) MT.

**المنطقة الأولى:** تكون داخل كرة " MT " و تحوي مجموع الأنوية و الالكترونات شديدة الارتباط بها " أي إلكترونات القلب "

**المنطقة الثانية:** تدعى بالمنطقة الفراغية تكون محيطة بالكرات وتشمل الالكترونات ضعيفة الارتباط بالأنوية " أي إلكترونات التكافؤ ".

و بذلك نعبّر عن دالة الموجة على أنها موجة مستوية في المنطقة الفراغية، بينما داخل الكرة تكون على شكل أمواج كروية للمدارات الالكترونية للذرة. ومنه تكتب دالة الموجة كالتالي:

$$\varphi(r) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_G C_G e^{i(G+K)r} & r > R_\alpha \\ \sum_{lm} A_{lm}^\alpha U_l^\alpha(r) Y_{lm}(\theta, \varphi) & r < R_\alpha \end{cases} \quad (1.II)$$

حيث :

$\varphi(r)$  تمثل دالة الموجة الكلية

$\Omega$  : يمثل حجم الخلية الواحدة

$U_l^\alpha$  : تمثل الدالة القطرية

$Y_{lm}$  : تمثل الدوال الهرمونية الكروية

$C_G$  : هي معاملات النشر للأمواج المستوية

$U_l^\alpha(r)$  هي حلول لمعادلة شرودينغر " الجزء القطري " و تكون في داخل الكرة MT و التي تكتب من اجل النواة على الشكل :

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

حيث:

$V(r)$  هو الكمون الكروي

$E_l$  هي الطاقة الخطية

نقوم بنشر المعاملات  $A_{lm}^\alpha$  بدلالة المعاملات  $C_G$  و ذلك بهدف مراعاة استمرارية دالة الموجة الكلية  $\varphi(r)$  و منه نكتب:

$$A_{lm}^\alpha = \frac{4\pi i^l}{\sqrt{\Omega} U_l^\alpha(R_\alpha)} \sum_G C_G J_l(|\vec{k} + \vec{G}| R_\alpha) Y_{lm}^*(\vec{k} + \vec{G}) \quad (3.II)$$

وجدت عدة صعوبات في طريقة APW وذلك لأن في حالة المعاملات  $A_{lm}^\alpha$  المعرفة بالعلاقة (3.II) تحتوي على الحد  $U_l^\alpha(R_\alpha)$  في المقام، اذن من الممكن ان نجد قيم ذاتية للطاقة يكون فيها هذا الحد معدوم على سطح الكرة MT. وبالتالي الدوال القطرية تكون منفصلة عن دوال الموجة المستوية في المنطقة البينية.

من اجل حل هذا المشكل ادخل العالمان كولينغ Koelling وأندرسون Anderson [3] مجموعة من التغييرات على طريقة الأمواج المستوية المتزايدة APW تركز أساسا على تمثيل الدالة الموجية  $\varphi(r)$  داخل الكرة MT على شكل تدرج خطي ل  $U_l^\alpha(r)$ ، أي أنه يوجد تركيب خطي بين  $U_l^\alpha(r)$  ومشتقاته بالنسبة للطاقة  $\dot{U}_l^\alpha(r)$ ، وسمي عملهم فيما بعد بطريقة الأمواج المستوية المتزايدة خطيا FP-LAPW.

## 2.II. مبدأ طريقة الموجة المستوية خطيا (LAPW) :

يمكن القول أن الدالة الأساسية تكون موجودة ضمن الكرة MT على شكل تركيبات خطية للدالة  $U_l^\alpha(r)$  و مشتقتها بالنسبة للطاقة  $\dot{U}_l^\alpha(r)$  [4] و منه يمكن كتابة :

$$\varphi(r) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_G C_G e^{i(G+K)r} & r > R_\alpha \\ \sum_{lm} [A_{lm}^\alpha U_l^\alpha(r) + B_{lm}^\alpha \dot{U}_l^\alpha(r)] Y_{lm} & r < R_\alpha \end{cases} \quad (4.II)$$

حيث الدالة  $U_l^\alpha(r)$  تحقق نفس المعادلة القطرية الخاصة بطريقة " APW " ، في حين  $\dot{U}_l^\alpha(r)$  تحقق المعادلة التالية :

$$\left\{ -\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} + V(r) - E_l \right\} r \dot{U}_l^\alpha(r) = r U_l^\alpha(r) \quad (5.II)$$

حيث:

- المعاملات  $B_{lm}^\alpha$  المرافقة للمشتقات  $\dot{U}_l^\alpha(r)$  لها نفس طبيعة المعاملات  $A_{lm}^\alpha$  للذرة  $\alpha$ .
- الدوال LAPW<sub>S</sub> تكون موجة مستوية في المنطقة الفراغية مثل حالة الطريقة APW.

- داخل كرة MT الدوال LAPW<sub>S</sub> أفضل من الدوال APW<sub>S</sub>، باختلاف صغير في الطاقة  $E_l$  عن طاقة عصابة الطاقة  $E$
- داخل كرة MT الدوال LAPW<sub>S</sub> أفضل من الدوال APW<sub>S</sub>، باختلاف صغير في الطاقة  $E_l$  عن طاقة عصابة الطاقة  $E$
- التركيبات الخطية تحسن في الدالة قطرية ل APW<sub>S</sub> ، كذلك الدالة القطرية  $U_l^\alpha(r)$  يمكن ان تستنتج عن طريق النشر المحدود في جوار الطاقة  $E$ .
- طريقة الأمواج المستوية المتزايدة خطيا FP-LAPW تضمن استمرار دالة الموجة على سطح كرة MT. [5]

### 3.II. دور الطاقات الخطية :

تعد الطاقة الخطية  $E_l$  ذات دور مهم في طريقة الأمواج المستوية المتزايدة خطيا FP-LAPW لكن اختيارها بشكل مناسب صعب نوعا ما ونفسر ذلك بأنه عندما تتساوى طاقة العصابة الممنوعة  $E$  مع الطاقة الخطية  $E_l$  فإن طريقة LAPW تختصر الى طريقة APW وتكون الأخطاء على دالة الموجة في حدود  $(E - E_l)^2$  وعلى عصابات الطاقة في حدود  $(E - E_l)^4$ ، و من أجل نتائج جيدة لابد من اختيار الطاقة الخطية  $E_l$  في مركز العصابة الممنوعة .

يتم حساب طاقة النظام الكلية من أجل قيم مختلفة للطاقة الخطية و يتم اختيار المعامل الذي تكون فيه الطاقة أقل قيمة أي دنيا , لكن هاته الطريقة ليست مناسبة دائما لوجود حالات قلبية موسعة " حالات نصف قلبية " التي يكون تأثيرها كبير في الحساب .

مجموعة الدوال  $U_l^\alpha$  و  $\dot{U}_l^\alpha$  تكون متعامدة مع الحالات القلبية داخل الكرات MT و ذلك في حالة عدم وجود نفس العزم الزاوي  $l$  لهاته الحالات القلبية . وعندما لا يتحقق هذا الشرط وجب زيادة نصف قطر الكرة MT ليشغل جل الحالات نصف قلبية [6] .

### 4.II. بنية الدوال القطرية:

تكون مجموعة الدوال الأساسية لطريقة FP-LAPW على شكل موجة مستوية في المنطقة الفراغية و يكون انتشارها على شكل دالة قطرية داخل الكرة , مع مراعاة أن مشتقات الدوال الأساسية بالنسبة للطاقة تضمن الاستمرار على سطح الكرة.

ومنه يمكن تمييز طريقة FP-LAPW بأن الدوال القطرية  $U_l^\alpha(r)$  لها مشتقة بالنسبة للطاقة  $\dot{U}_l^\alpha(r)$  و بأن المعاملات  $A_{lm}$  و  $B_{lm}$  تحقق الشروط الحدودية للاستمرار

نميز وجود نوعين من الدوال الشعاعية

### 1.4.II الدوال الشعاعية الغير نسبية :

معادلة الحل لشرودينغر المعرفة بالعلاقة (2.II) تخضع لشرط التنظيم

$$\int_0^{R_\alpha} r^2 [U_l^\alpha(r)]^2 dr = 1 \quad (6.II)$$

حيث أن:

$U_l^\alpha(r)$  هو حل متجانس للمعادلة الغير متجانسة (5.II)

كل من الدوال القطرية و مشتقاتها متعامدان أي يحققان العلاقة التالية :

$$\int_0^{R_\alpha} r^2 U_l^\alpha(r) \dot{U}_l^\alpha(r) dr = 0 \quad (7.II)$$

وكذلك الدالة  $\dot{U}_l^\alpha(r)$  المعرفة بالعلاقة (5.II) تخضع لشرط التنظيم

$$\int_0^{R_\alpha} r^2 [\dot{U}_l^\alpha(r)]^2 dr = 1 \quad (8.II)$$

يتم تعويض شرط التنظيم في طريقة FP-LAPW بالمعادلة التالية :

$$R_\alpha^2 \left( \frac{\partial U_l^\alpha}{\partial r} \Big|_{r=R_\alpha} \dot{U}_l^\alpha(R_\alpha) - U_l^\alpha(R_\alpha) \frac{\partial \dot{U}_l^\alpha}{\partial r} \Big|_{r=R_\alpha} \right) = 1 \quad (9.II)$$

انطلاقا من المعادلة (9.II) يمكن تحديد قيم  $U_l^\alpha$  و  $\dot{U}_l^\alpha$  عدديا , و ذلك باستخدام النشر المحدود في جوار الطاقة الخطية  $E_l$  من الدرجة الأولى و المعرف بالمعادلة التالية :

$$U_l^\alpha(E, r) = U_l^\alpha(E_l, r) + (E - E_l) \dot{U}_l^\alpha(E, r) + \dots \quad (10.II)$$

### 2.4.II الدوال الشعاعية النسبية :

في طريقة FP-LAPW يتم حساب التأثيرات النسبية داخل الكرة MT ويتم إهمالها في المنطقة الفراغية [7] , ذلك لأن التصحيحات النسبية مهمة فقط عندما تكون سرعة الإلكترون مقاربة لسرعة الضوء .

أي الطاقة الحركية للإلكترونات كبيرة , تؤخذ الآثار النسبية في الاعتبار داخل الكرة أما في المنطقة الفراغية فسرعة الإلكترونات تكون محدودة بالقطع cut-off ضمن الفضاء  $k$  .

### 5.II تحديد المعاملات $A_{lm}^\alpha$ و $B_{lm}^\alpha$ :

لتحديد المعاملات  $A_{lm}^\alpha$  و  $B_{lm}^\alpha$  من أجل كل شعاع موجة مستوية و من أجل كل ذرة و يجب أن تكون الدوال الأساسية و مشتقاتها في طريقة FP-LAPW مستمرة في حدود الكرة  $M$  . يعبر عن الدوال الأساسية في المنطقة الفراغية بالمعادلة التالية :

$$\varphi(r, k_n) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} e^{ik_n \cdot r} / k_n = k + G_n \quad (11.II)$$

حيث ان:

$\Omega$  حجم الخلية العنصرية

$k$  شعاع الموجة

$G_n$  شعاع الشبكة المعكوسة

$k_n$  هو شعاع من الشبكة المرافقة

تكتب الدوال الأساسية داخل الكرة MT على شكل تركيب خطي بالمعادلة التالية :

$$\varphi(r, k_n) = \sum_{lm} [A_{lm}^{\alpha} U_l^{\alpha}(r, E_l) + B_{lm}^{\alpha} \dot{U}_l^{\alpha}(r, E_l)] Y_{lm}(r) \quad (12.II)$$

و تسمح الشروط الحدودية على سطح كرة MT باستخدام نشر موجة رايلي المستوية [9] .

$$\varphi(k_n, R_{\alpha}) = \frac{4\pi}{\sqrt{\Omega}} \sum_{lm} i^l J_l(k_n, R_{\alpha}) Y_{lm}^*(k_n) Y_{lm}(R_{\alpha}) \quad (13.II)$$

انطلاقا من استمرارية العزم الزاوي نجد :

$$A_{lm}^{\alpha}(k_n) = \frac{4\pi}{\Omega^2} R_{\alpha}^2 i^l Y_{lm}^*(k_n) a_l^{\alpha}(k_n) \quad (14.II)$$

$$B_{lm}^{\alpha}(k_n) = \frac{4\pi}{\Omega^2} R_{\alpha}^2 i^l Y_{lm}^*(k_n) b_l^{\alpha}(k_n) \quad (15.II)$$

حيث :

$$a_l^{\alpha}(k_n) = \frac{\dot{U}_l^{\alpha}(R_{\alpha}) \left( \frac{dJ_l(k_n, R_{\alpha})}{dr} \right) - \left( \frac{d\dot{U}_l^{\alpha}}{dr} \right) J_l(k_n, R_{\alpha})}{R_{\alpha}^2 \left[ \left( \frac{dU_l^{\alpha}}{dr} \right) \dot{U}_l^{\alpha}(R_{\alpha}) - U_l^{\alpha}(R_{\alpha}) \left( \frac{d\dot{U}_l^{\alpha}}{dr} \right) \right]} \quad (16.II)$$

$$b_l^{\alpha}(k_n) = \frac{\left( \frac{dU_l^{\alpha}}{dr} \right) J_l(k_n, R_{\alpha}) - U_l^{\alpha}(R_{\alpha}) \left( \frac{dJ_l(k_n, R_{\alpha})}{dr} \right)}{R_{\alpha}^2 \left[ \left( \frac{dU_l^{\alpha}}{dr} \right) \dot{U}_l^{\alpha}(R_{\alpha}) - U_l^{\alpha}(R_{\alpha}) \left( \frac{d\dot{U}_l^{\alpha}}{dr} \right) \right]} \quad (17.II)$$

نقوم بالاشتقاق بالنسبة ل  $r$  و باستعمال علاقة النشر المحدود الموضحة في المعادلة (10.II) مع تعويض  $r = R_{\alpha}$  تصبح المعادلات (16.II) و (17.II) كما يلي :

$$\begin{cases} a_l^{\alpha}(k_n) = \dot{U}_l^{\alpha}(R_{\alpha}) \left. \frac{\partial J_l(k_n, r)}{\partial r} \right|_{r=R_{\alpha}} - \left. \frac{\partial \dot{U}_l^{\alpha}}{\partial r} \right|_{r=R_{\alpha}} J_l(k_n, R_{\alpha}) \\ b_l^{\alpha}(k_n) = \left. \frac{\partial U_l^{\alpha}}{\partial r} \right|_{r=R_{\alpha}} J_l(k_n, R_{\alpha}) - U_l^{\alpha}(R_{\alpha}) \left. \frac{\partial J_l(k_n, r)}{\partial r} \right|_{r=R_{\alpha}} \end{cases} \quad (18.II)$$

## 6.II. تمثيل كثافة الشحنة والجهد :

تملك حلول معادلات كوهن Kohn وشام Sham , كمون التبادل والترابط بالإضافة الى كمون النواة الكولومبي و يمكن صياغته كما يلي :

$$V_H(r) = \begin{cases} \sum_k V_k e^{ikr} & r > R_{\alpha} \\ \sum_{lm}^k V_{lm}(r) Y_{lm}(r) & r < R_{\alpha} \end{cases} \quad (19.II)$$

يضمن هذا الشكل استمرارية الكمون على سطح كرة MT من أجل تبسيط تركيبة كثافة الشحنة وتقليل مصفوفة هاملتون وكذا الزمن المستغرق للحساب [10].

استخدام التناظرات ضروري في طريقة LAPW، حيث يتم اعتبار كثافة الشحنة:

- لديها تناظر الموقع داخل الكرة.
- لديها تناظر المجموعة الفضائية في المنطقة الفراغية .
- الكثافة هي كمية حقيقية.
- الكثافة متطابقة داخل الذرات المكافئة " عملية التناظر " .

## 7.II. جهد كولومب :

يتم تحديد مصطلح جهد كولومب  $V_C(r)$  انطلاقاً من كثافة الشحنة بواسطة معادلة بواسون

$$\nabla^2 V_C(r) = 4\pi\rho(r) \quad (20.II)$$

يتم حل هذه المعادلة باستخدام ما يسمى بطريقة شبه الشحنة [11] , بناءً على الملاحظتين التاليتين:

- كثافة الشحنة مستمرة ، وتختلف بسرعة في مجال الكرة MT ، وتباينها في المنطقة الفراغية بطيء.
- يعتمد جهد كولومب في المنطقة الفراغية على كل من الشحنة البينية وكذا الشحنة داخل الكرة MT

## 8.II. جهد التبادل و الترابط :

يمكننا تحديد جهد التبادل والارتباط باستخدام تقريبيين للكثافة المحلية LDA والتدرج المعمم GGA ، هذا الجهد مختلف عن الجهد الكولومبي ، بعدها يجب حسابه في الفضاء الحقيقي حيث يتم تقطيره في كل نقطة من الشبكة ، باستخدام تحويل فورييه السريع " FFT " [12] .

يتم حساب جهد التبادل والارتباط للحصول على الفضاء الحقيقي للكثافة الفراغية ، ومن ثم التحول من الفضاء الحقيقي  $V_{xc}$  إلى تمثيل الموجة المستوية ، أما داخل الكرة فيتم تطبيق نفس الإجراء مع قيم مختلفة لكثافة الشحنة و كذا الجهد المتماثل كروياً

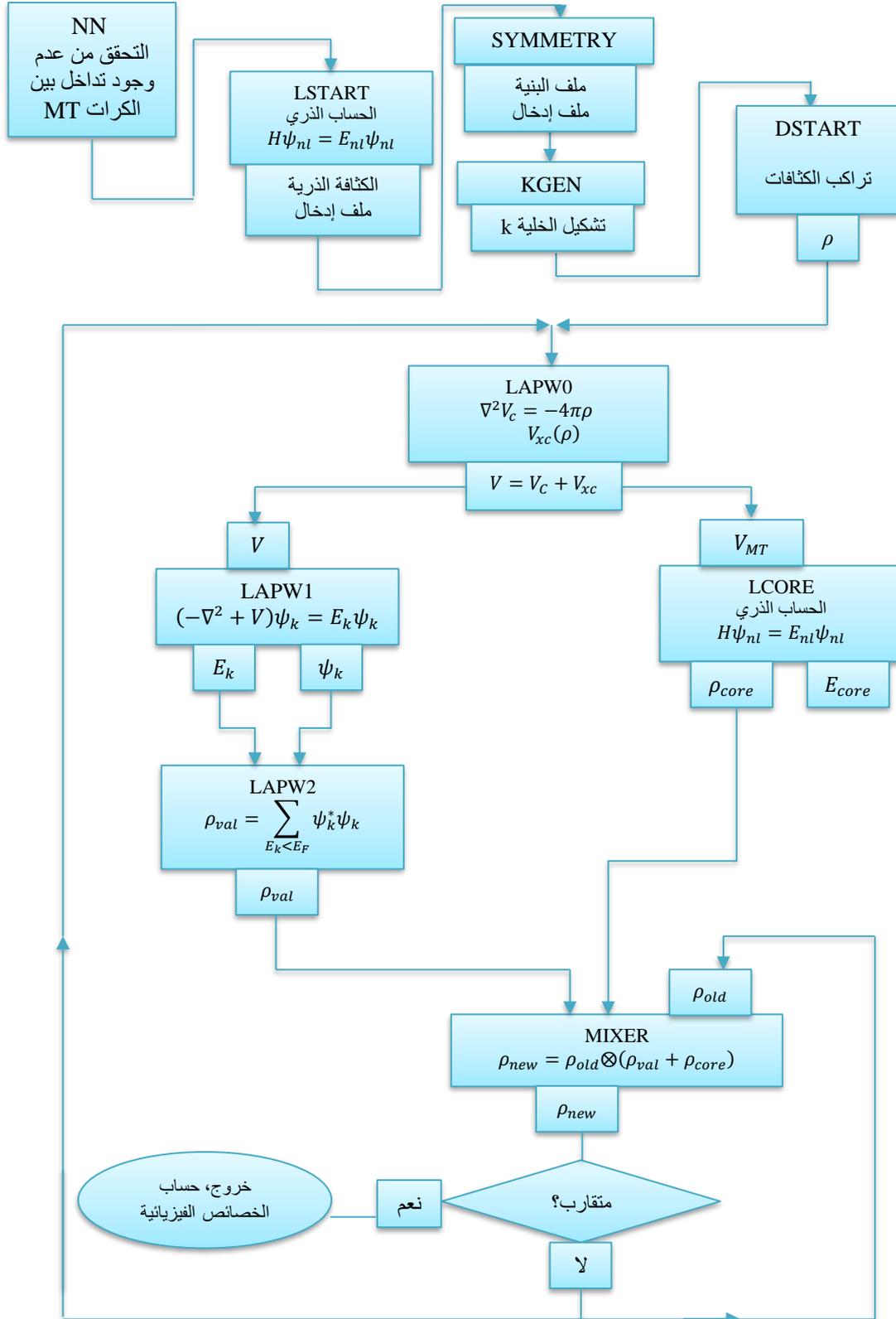
## 9.II. برنامج Wien2k :

أسس هذا البرنامج بواسطة العلماء D Kvasnicka et J luitz, G Madsen, P Blaha , K Schwarz عام 1990 م [13] يرتكز أساس عمله على نظرية دالية الكثافة DFT و يستخدم في الحساب طريقة LAPW , هدفه دراسة خواص البلورات.

## 1.9.II مبدأ عمل برنامج Wien2k :

في دراستنا استخدمنا طريقة الموجة المستوية خطيا المدمجة في برنامج Wien2k , البرنامج يشمل مجموعة من البرامج الفرعية المنفصلة نعرّفها كما يلي :

- برنامج NN : يحدد هذا البرنامج المسافة بين كل ذرة وجوارها الأقرب كما يساعد في تحديد أقطار الذرات.
  - LSTART : يولد هذا البرنامج الكثافة الذرية ويحسب الفرق في طاقة المدارات وبالتالي يحسب بنية عصابات الطاقة .
  - SYMMETRY : يولد عمليات التناظر في الجملة ويحسب المجموعة النقطية لمواقع الخاصة بالذرات يولد المعامل الأساسي لهرمونية الشبكة وحساب مصفوفة الدوران الموضعي
  - KGEN : يولد المكعبات K في منطقة بريلوان
  - DSTART : يولد الكثافة الأولية لبدء دورات الحساب الذاتي SCF المنتجة من الكثافة الذرية والمولدة من LSTART.
- في حين أن دورات الحساب الذاتي SCF محددة في النقاط التالية :
- LAPW0 : حساب الكمون انطلاقا من الكثافة
  - LAPW1 : حساب كثافة التكافؤ القيم الذاتية والأشعة الذاتية
  - LAPW2 : حساب كثافة التكافؤ الجديدة انطلاقا من الأشعة الذاتية
  - LCORE : حساب الحالات القلبية والكثافة
  - MIXER : يخلط الكثافة الداخلة والخارجة و بالتالي الحصول على كثافة الكترونية جديدة للنظام



شكل 2.II : بنية برنامج Wien2k

## المراجع :

- [1] J.C. Slater, Phys. Rev. 51, 846 (1937).
- [2] O. K. Anderson, Phys. Rev. B12, 3060 (1975).
- [3] D. D. Koelling and B. N. Harmon, J. Phys. C10, 3107 (1977).
- [4] D. Singh, planes waves, pseudo-potentials and the LAPW method, Klumar Academic Publishers (1994).
- [5] G.K.H.Madersen,P. Blaha, K. Schwartz, EsjöstedtL. Nordstrom, phys. Rev. BCond. Matter Mater .Phys.64.19.1951341-1951349(2001)
- [6] P. Blaha, D. J. Snigh, P. I. Sorantin and K. Schwarz,Phys. Rev.B46, 1321(1992).
- [7] P. Novak.“Calculation of spin-orbit coupling”,Institute of physics,Cukrovanick 10, 16253 praha6, GzechRe publique
- [8] D.D. koelling and G.O.Arbman,J.Phys.5,2041,(1975)
- [9] S. Ouendadj, thèse de doctorat Univ. Annaba. Algérie (2010)
- [10] W. Kohn, L. J. Sham, Phy. Rev. B140, 1133 (1965)
- [11] R.C.S ingelton,IEEETrans,Audo Electroacoust.AU.17,(1969)
- [12] F. Elhaj Hassan, thèse de doctorat Univ, Metz France (2000)
- [13] P. Balaha, k. Schwartz,G. K. H. Madsen, D. Kvasncka, J. Luittz.WIEN2K,Anaugmented plane Wave local, orbitals program for calculating crystal properties ,Karlheinz



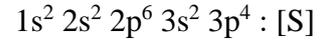
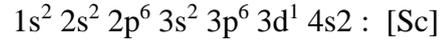
# الفصل الثالث

النتائج و المناقشة

**1.III. الخطوات المتبعة في الحساب:**

تم اجراء حسابات باستخدام طريقة الامواج المستوية المتزايدة خطيا FP-LAPW [1] , و ذلك لحل معادلات كوهن-شام حيث أدرج عملنا في برنامج المحاكاة Wien2k [2] المترکز على نظرية دالية الكثافة DFT [3].

تم حساب كمون التبادل والترابط من خلال تقريب التدرج المعمم WC-GGA [4] و تقريب كثافة الموضع LDA [5] كما تم استخدام تصحيح mBJ [6] لتحسين قيمة فجوة الطاقة. يعطى التوزيع الإلكتروني للعناصر للمركب الثنائي المدروس ScS كما يلي :

**1.1.III. الخصائص البنيوية:**

لحساب الخصائص البنيوية للمركب يتم إجراء عدة خطوات نعبر عنها فيما يلي:

**• تحضير ملف البنية:**

يتم تشغيل النافذة الرئيسية لبرنامج Wien2k ثم نحدد إنشاء مجلد جديد ونسميه "ScS" الذي يحوي جل المعلومات الأساسية للمركب المراد دراسته والمحددة أسفله.

ScS	المركب
NaCl	نوع الخلية
5.199 Å	a = b = c
90°	$\alpha = \beta = \gamma$
(0,0,0)	الذرة الأولى في Sc
(0.5,0.5,0.5)	الذرة الثانية في S
225Fm-3m	زمرة التناظر

**• تهيئة المعاملين  $R_{MT}K_{max}$  :**

نقوم بتثبيت قيمة K في منطقة بريلوان الاولى و نغير في قيم  $R_{MT}K_{max}$  ضمن المجال [ 5-9 ] و نحسب في كل مرة الحلقة SCF و ذلك بهدف إيجاد قيمة  $R_{MT}K_{max}$  التي تكون فيها قيمة الطاقة ثابتة في

$$R_0 = 10^{-4}$$

حيث:

$R_{MT}$  : هو أصغر نصف قطر ذري للمركب ScS

$K_{max}$  : يمثل القيمة الأعظمية للشعاع الموجي.

وجد أن قيمة المعامل  $RMTK_{max}$  هي 8 و ذلك عند ثبات قيمة الطاقة.

• **تهيئة عدد النقاط  $K_{points}$  :**

نقوم بتكرار نفس الخطوات السابقة, لكن في هاته المرحلة نغير من قيمة  $K_{points}$  في منطقة بريلوان الأولى المعكوسة الى أن نلاحظ ثبات في الطاقة.  
وجد أن قيمة  $K_{points} = 1000$  هي الأنسب.

• **نتائج حجم الخلية :**

في هاته المرحلة أخذنا قيمة كل من  $K_{points}$  و كذا قيمة المعامل  $RMTK_{max}$  السابق حسابها ثم قمنا بحساب الطاقة بدلالة حجم الخلية وفق معادلة مورناغان Murnaghan

$$E(V) = E_0 + \frac{B_0 V}{B'_0} \left( \frac{(V_0/V)^{B'_0}}{B'_0 - 1} + 1 \right) - \frac{B_0 V_0}{B'_0 - 1} \quad (1.III)$$

حيث:

$$B_0 = -V \left( \frac{\partial P}{\partial V} \right)_T \quad (2.III)$$

$$B'_0 = \left( \frac{\partial B}{\partial P} \right)_T \quad (3.III)$$

حيث:

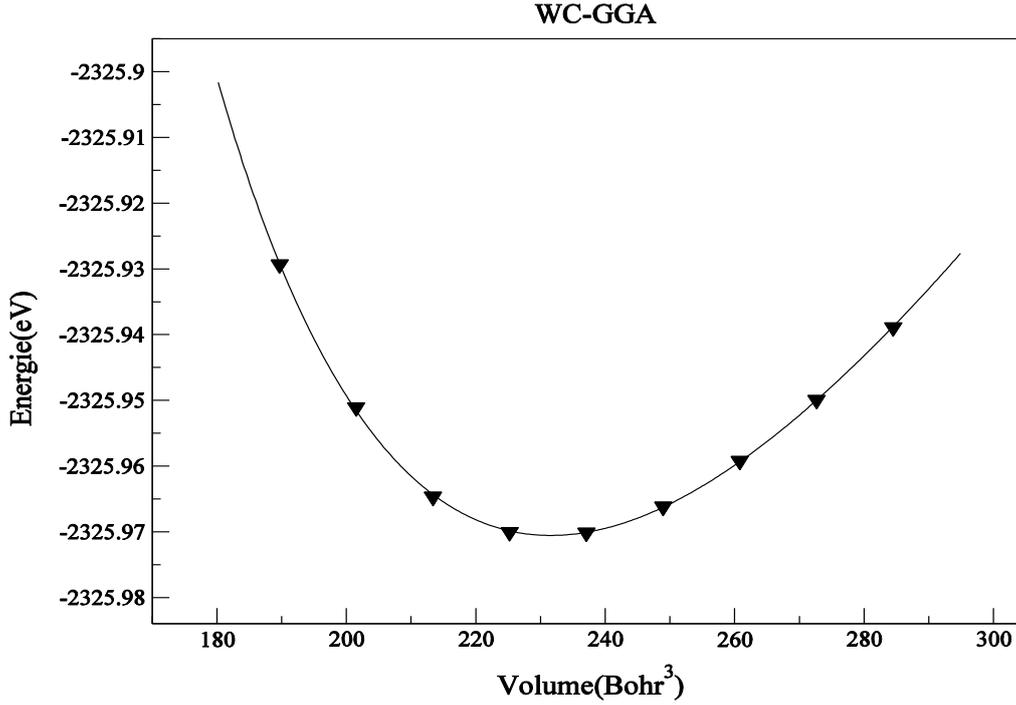
$E_0$  : هي الطاقة الكلية للخلية عند التوازن.

$V_0$  : حجم الخلية الأساسية عند التوازن " الاستقرار " .

$B_0$  : يمثل معامل الأنضغاطية .

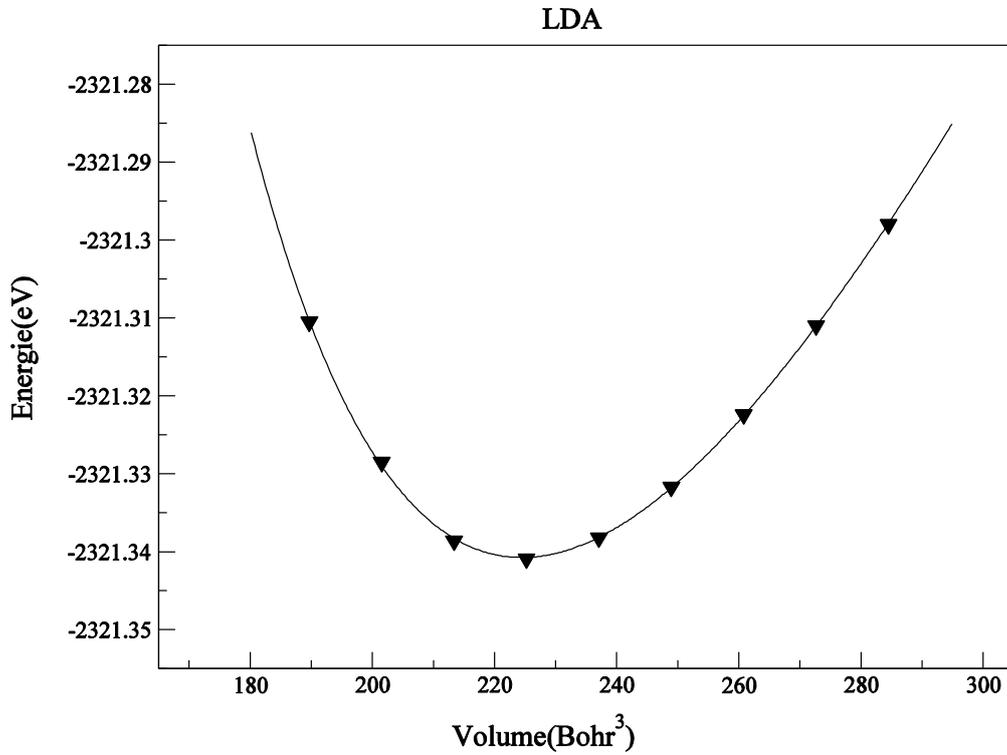
$B'_0$  : يمثل مشتق معامل الإنضغاطية

النتائج المتحصل عليها باستعمال التقريبيين WC-GGA و LDA موضحة في الشكلين 1.III و 2.III على التوالي.



الشكل رقم 1.III : منحني يوضح تغير الطاقة الكلية للمركب الثنائي ScS بدلالة الحجم

وفق تقريب WC-GGA



الشكل رقم 2.III : منحني يوضح تغير الطاقة الكلية للمركب الثنائي ScS بدلالة الحجم وفق تقريب LDA

النتائج المتحصل عليها موضحة في الجدول 1.III , مرفقة بالحسابات التجريبية والنظرية السابقة من اجل المقارنة :

B' (GPa)	B <sub>0</sub> (GPa)	a <sub>0</sub> (Å)	ScS	
4.406	110.397	5.158	WC-GGA	نتائج الحساب
4.562	119.552	5.105	LDA	نتائج تجريبية
...	103.11 [8]	5.199 [7]		نتائج تجريبية
...	115.33 [9]	5.21 [9]		نتائج أخرى
...	113 [10]	5.19 [10]		

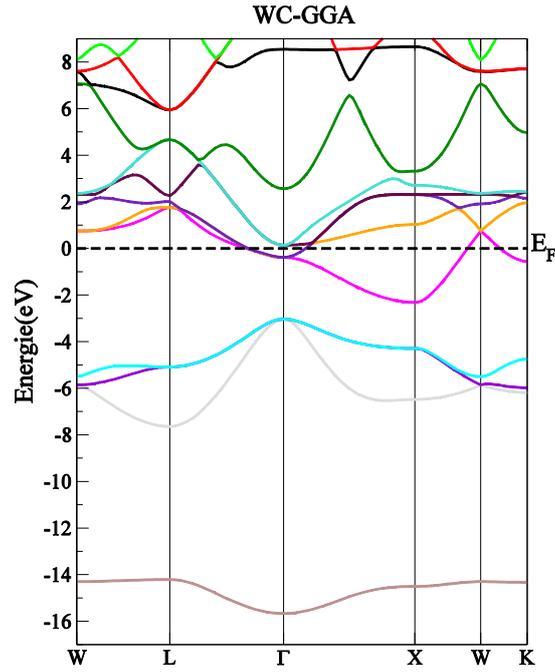
الجدول رقم 1.III : جدول يوضح نتائج الحساب للمركب ScS

من خلال النتائج المتحصل عليها أعلاه نستنتج أن النتائج الحسابية باستعمال كل من التقريبين WC-GGA و LDA للثوابت البلورية و معامل الانضغاطية جد متوافقة ومتقاربة مع تلك التي تم إيجادها في الأعمال السابقة التجريبية [7] ; [8] أو النظرية وهذا ما يؤكد واقعية حساباتنا.

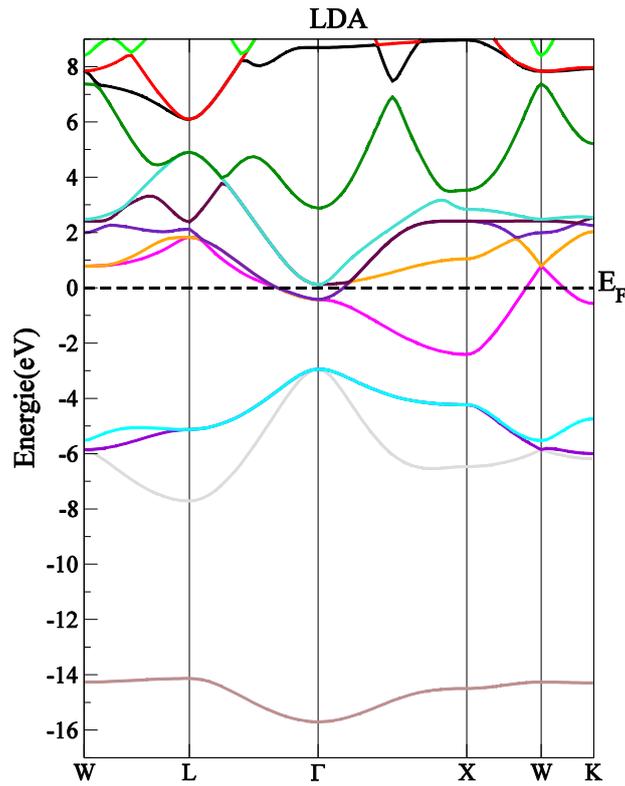
## 2.1.II. الخصائص الإلكترونية :

باستخدام النتائج المتحصل عليها سابقا للمركب الثنائي ScS نقوم بحساب عصابات الطاقة و كثافة الحالات للإلكترونات.

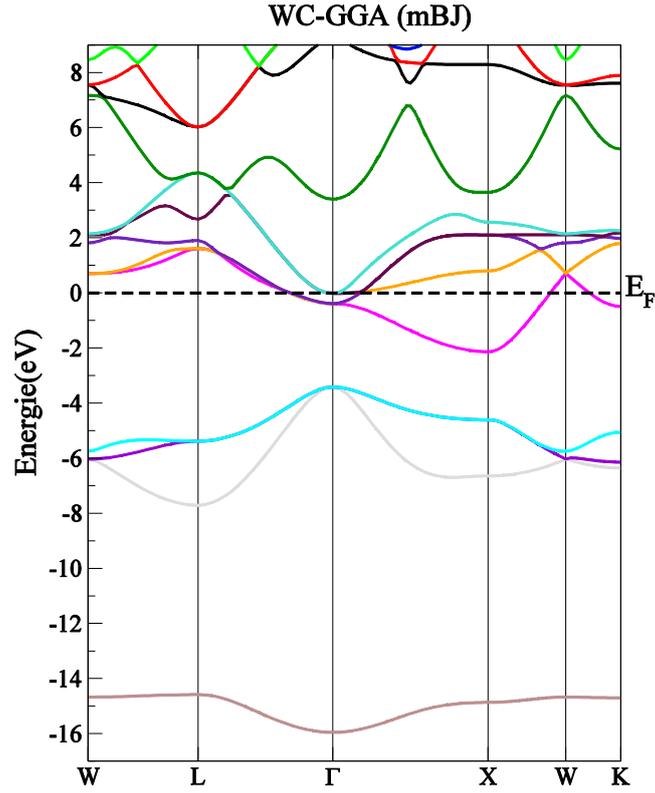
- بالنسبة لتقريب التدرج المعمم WC-GGA النتائج موضحة في الشكل رقم (3.III)
- بالنسبة لتقريب كثافة الموضع LDA النتائج موضحة في الشكل رقم (4.III)



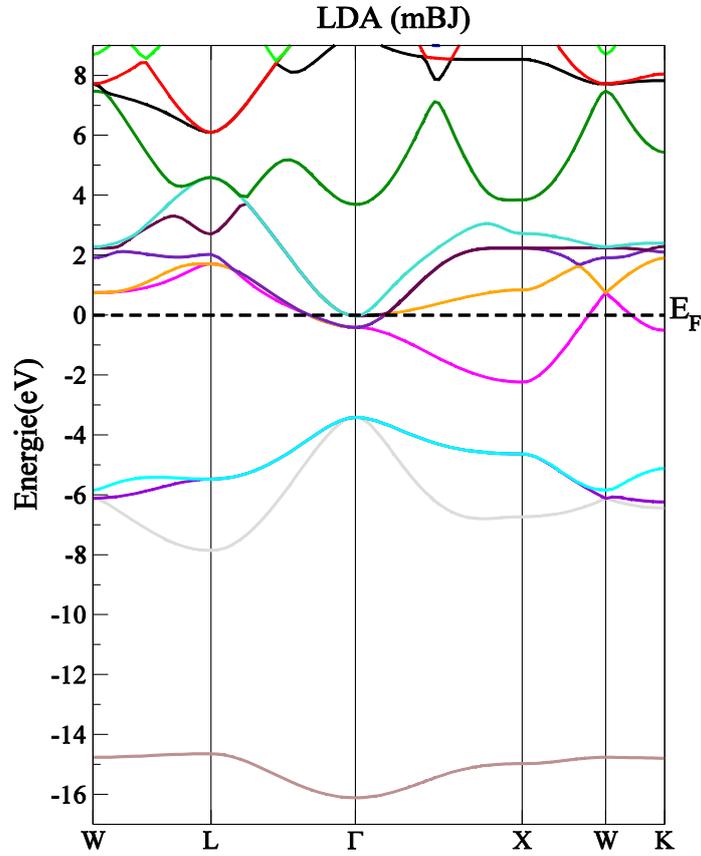
الشكل رقم 3.III : منحني عصابات الطاقة للمركب ScS وفق تقريب WC\_GGA



الشكل رقم 4.III : منحني عصابات الطاقة للمركب ScS وفق تقريب LDA



الشكل رقم 5.III : منحني عصابات الطاقة للمركب ScS وفق تقريب WC-GGA(mBJ)



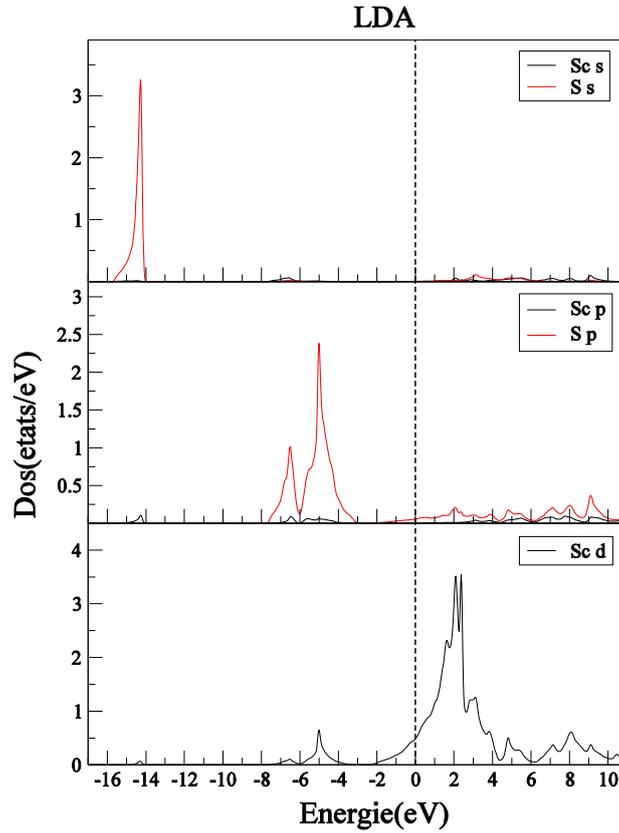
الشكل رقم 6.III : منحني عصابات الطاقة للمركب ScS وفق تقريب LDA(mBJ)

نلاحظ من خلال الشكلين 3.III و 4.III وجود عصابات طاقة متداخلة عند مستوى فيرمي و هذا ما يدل على أن المركب الثنائي ScS له خاصية معدنية وهذا موافق لما وجدناه في النتائج التجريبية [7] ; [8] و بالرغم من استخدام تقريب mBJ كما ف الشكلين 5.III و 6.III , نثبت أن المركب المدروس بقي لديه الخاصية المعدنية.

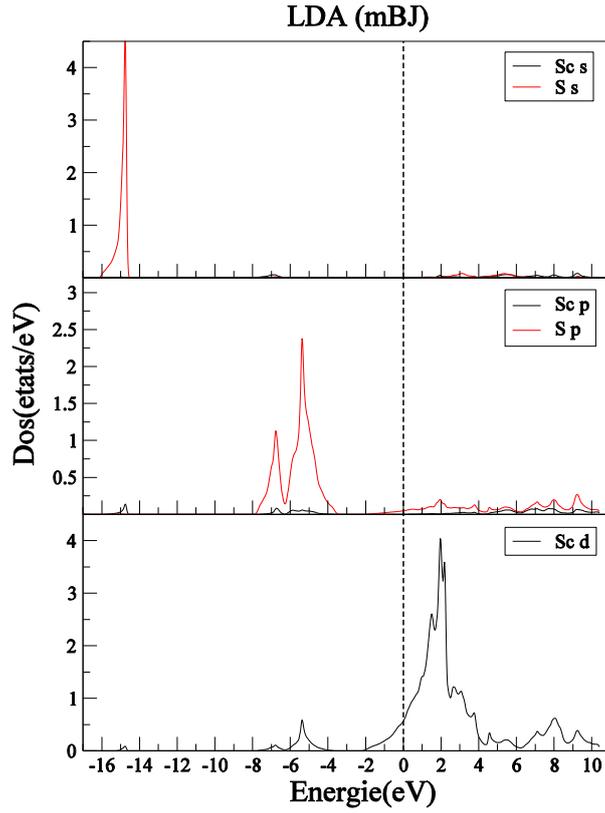
### 3.1.III. كثافة الحالات الجزئية :

تعرف كثافة الحالات الإلكترونية "DOS" على أنها عدد الحالات لكل وحدة طاقة، و تستخدم للحصول على المزيد من التفاصيل حول توزيع الحالات الإلكترونية للنظام وقد تم كذلك حساب كثافة الحالات الجزئية للمركب ScS, باستخدام التقريبات WC-GGA، LDA، و mBJ وذلك من اجل تفسير احسن لنتائج عصابات الطاقة.

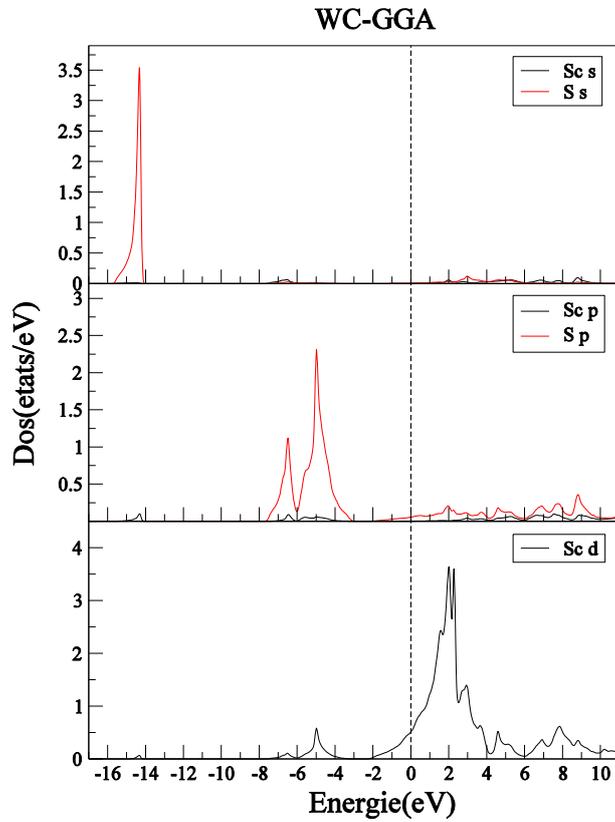
النتائج موضحة في الأشكال أسفله 7.III و 8.III و 9.III و 10.III على التوالي.



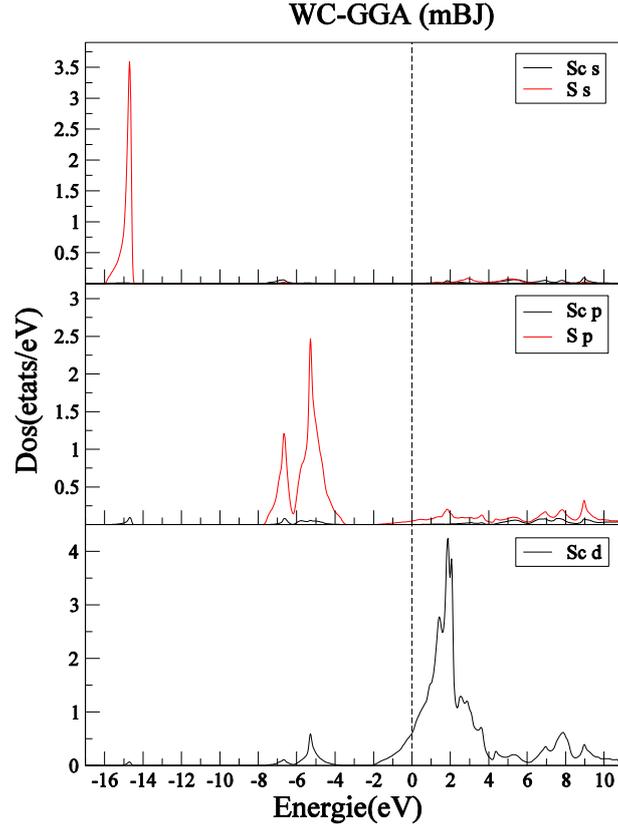
الشكل رقم 7.III : كثافة الحالات الجزئية للمركب ScS وفق تقريب LDA



الشكل رقم 8.III : كثافة الحالات الجزيئية للمركب ScS وفق تقريب LDA (mBJ)



الشكل رقم 9.III : كثافة الحالات الجزيئية للمركب ScS وفق تقريب WC-GGA



الشكل رقم 10.III : كثافة الحالات الجزئية للمركب ScS وفق تقريب WC-GGA (mBJ)

الأشكال 7.III و 8.III و 9.III و 10.III توضح كثافة الحالات الجزئية بدلالة الطاقة , و تقريبا متوافقة حيث نميز وجود :

- ✓ كثافة حالات عالية في المجال الطاقوي [-16 ; -14] تخص المدار s لذرة الكبريت وتتغير شدتها عند تطبيق تقريب mBJ
- ✓ كما نلاحظ وجود كثافة حالات عالية و لكن عرضية في المجال [-8 ; -3] تخص المدار p لذرة الكبريت تقريبا تبقى قيمتها ثابتة حتى عند تطبيق تقريب mBJ
- ✓ في المجال [-2 ; 0] و الخاص بمنطقة التكافؤ نميز وجود زيادة معتبرة في كثافة الحالات
- ✓ في هذا المجال تكون كثافة الحالات عرضية متذبذبة و هي تخص المدار d لذرة السكندنيوم تتغير شدتها عند تطبيق تقريب mBJ
- ✓ إلكترونات التكافؤ لذرة السكندنيوم و جزء معتبر من إلكترونات التكافؤ لذرة الكبريت هما الأصل في كون المركب الثنائي ScS يمتلك خاصية معدنية

### 4.1.III. خصائص المرونة:

تعد الخصائص المرورية ذات أبرز خصائص الحالة الأساسية للجسم الصلب مثل "درجة حرارة ديباي, قساوة و ليونة المواد , التمدد الحراري , الاجهادات ... الخ", يمكن تعريف معاملات المرونة  $C_{ij}$  على أنها الاجهاد المطبق على التشوه الناتج .

تعطى علاقة هوك التي تربط التشوه بالإجهاد كما يلي :

$$\sigma_i = C_{ij} \varepsilon_j \quad (4.III)$$

تعطى مصفوفتي الإجهاد و التشوه على الترتيب كما يلي :

$$[\sigma] = \begin{bmatrix} \sigma_1 & \sigma_6 & \sigma_5 \\ \sigma_6 & \sigma_2 & \sigma_6 \\ \sigma_5 & \sigma_6 & \sigma_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sigma_1 \\ \sigma_2 \\ \sigma_3 \\ \sigma_4 \\ \sigma_5 \\ \sigma_6 \end{bmatrix} \quad (5.III)$$

$$[\varepsilon] = \begin{bmatrix} \varepsilon_1 & \varepsilon_6 & \varepsilon_5 \\ \varepsilon_6 & \varepsilon_2 & \varepsilon_6 \\ \varepsilon_5 & \varepsilon_6 & \varepsilon_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \varepsilon_3 \\ \varepsilon_4 \\ \varepsilon_5 \\ \varepsilon_6 \end{bmatrix} \quad (6.III)$$

لوصف معاملات المرونة  $C_{ij}$  نستخدم خصائص جداء المصفوفة :

$$\begin{bmatrix} \sigma_1 \\ \sigma_2 \\ \sigma_3 \\ \sigma_4 \\ \sigma_5 \\ \sigma_6 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & C_{14} & C_{15} & C_{16} \\ C_{12} & C_{22} & C_{23} & C_{24} & C_{25} & C_{26} \\ C_{13} & C_{23} & C_{33} & C_{34} & C_{35} & C_{36} \\ C_{14} & C_{24} & C_{34} & C_{44} & C_{45} & C_{46} \\ C_{15} & C_{25} & C_{35} & C_{45} & C_{55} & C_{56} \\ C_{16} & C_{26} & C_{36} & C_{46} & C_{56} & C_{66} \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \varepsilon_3 \\ \varepsilon_4 \\ \varepsilon_5 \\ \varepsilon_6 \end{bmatrix} \quad (7.III)$$

المركب ScS ذو بنية بلورية مكعبة من الشكل NaCl و لحساب معاملات المرونة يكفي حساب 3 معاملات فقط

$C_{11}$  و  $C_{12}$  و  $C_{44}$  نظرا لوجود تناظر في البنية المكعبة و بالتالي تصبح المصفوفة من الشكل:

$$\begin{bmatrix} \sigma_1 \\ \sigma_2 \\ \sigma_3 \\ \sigma_4 \\ \sigma_5 \\ \sigma_6 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{12} & C_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \varepsilon_3 \\ \varepsilon_4 \\ \varepsilon_5 \\ \varepsilon_6 \end{bmatrix} \quad (8.III)$$

يرتبط معامل الإنضغاطية B بمعاملات المرونة وفق المعادلة التالية :

$$B = \frac{C_{11} \times 2C_{12}}{3} \quad (9.III)$$

تم حساب معاملات المرونة  $C_{11}$  و  $C_{12}$  و  $C_{44}$  للبنية المكعبة للمركب ScS انطلاقا من قيم تغيرات الطاقة الكلية بدلالة التشوهات المختلفة في الخلية الأساسية بواسطة برنامج Wien2k , بالإضافة الى معامل الإنضغاطية B النتائج موضحة في الجدول رقم 2.III .

B(GPa)	$C_{44}$ (GPa)	$C_{12}$ (GPa)	$C_{11}$ (GPa)	ScS
119.273	35.415	31.837	294.147	LDA نتائج
110.389	31.883	32.951	265.266	WC-GGA الحساب

الجدول رقم 2.III : جدول يوضح نتائج معاملات المرونة للمركب ScS

من نتائجنا يمكننا أن نستنتج ما يلي:

- القيم التي تم الحصول عليها باستخدام تقريب WC-GGA أقل من تلك المحسوبة باستخدام تقريب LDA
- إن معامل الانضغاط المحسوب من الثوابت المرونة للمركب الثنائي يتفق بشكل جيد مع معامل الانضغاط المحسوب من معادلة مورناغان.
- معامل الانضغاط يحقق الشرط  $C_{12} < B < C_{11}$  .
- ثوابت المرونة موجبة وتفي بمعايير الاستقرار الميكانيكي للبلورات المكعبة.  $(C_{11}-C_{12}) > 0$  .  
 $(C_{11}+2C_{12}) > 0$ ;  $C_{11} > 0$ ;  $C_{44} > 0$  و منه يمكن القول أن المركب الثنائي المدروس مستقر.

## المراجع :

- [1] H.J.F Jansen and A.J.Freeman,Phys .Rev. 561 .B 30 (1984).
- [2] P.Balaha,K.Shawartz,G.K.H.Maclsen.D.K.Vasnika,Luittz.WIEN2K
- [3] P.Hohenberg and W.Kohn ,Phys.Rev. 136 .B864 (1964).
- [4] Z. Wu and R. E. Cohen, Phy. Rov.5116.B73 (2006).
- [5] J.P.OERDEW, Y. WANG, Phy. Rev. 13244.B45(1992).
- [6] D. Koller, F. Tran, P. Blaha, Merits and limits of the modified Becke-Johnson exchange potential, Phys. Rev. 195134-1–10. B83. (2011)
- [7] A. Svane, P. Strange, W.M. Temmerman, Z. Szotek, H. Winter, L. Petit, Phys. Stat.Solids .1459 . B 229 (2001) .
- [8] Suhithi. M. Peiris, Michael T. Green, Dion L. Heinz, Jeremy K. Burdett, “Experimental and Theoretical Studies of ScS under Pressure”Inorg. Chem. 35,6933 (1996)
- [9] A. Maachou, H. Aboura, B. Amrani, R. Khenata, S. Bin Omran, Dinesh Varshney, “Structural stabilities, elastic and thermodynamic properties of scandium chalcogenides via first principles calculation”, Computational Materials Science 50 3123-3130 . (2011)
- [10] Pavas et al 2020 J. Phys. Conf. Ser. 1531 012047



# فائمه عامه



## خاتمة عامة:

في عملنا هذا قمنا بدراسة الخصائص البنيوية، الإلكترونية و المرونية للمركب الثنائي ScS الذي يتبلور في بنية كلوريد الصوديوم NaCl و استعملنا طريقة الأمواج المستوية المتزايدة خطيا FP-LAPW المندرجة في إطار نظرية دالية الكثافة و باستعمال برنامج المحاكاة Wien2k و هذه أبرز النتائج المتحصل عليها من دراستنا :

أولا " الخصائص البنيوية " تم حساب ثابت الشبكة البلورية  $a_0$  و معامل الإنضغاطية  $B_0$  وكذا المشتق الأول لمعامل الإنضغاطية  $B'_0$  و كانت النتائج المتحصل عليها تتفق بشكل جيد مع النتائج التجريبية و النظرية وفق طرق حساب أخرى .

ثانيا " الخصائص الإلكترونية " تم توضيح منحنيات عصابات الطاقة و كثافة الحالات و وجد أن المركب الثنائي ScS يمتلك خاصية معدنية و هذا موافق لما وجدناه في الأبحاث التجريبية .

ثالثا " الخواص المرونية " في هذا الجزء قمنا بحساب معاملات المرونة الأساسية الثلاث  $C_{11}$  و  $C_{12}$  و  $C_{44}$  للمركب الثنائي ScS لكونه يتبلور وفق بنية مكعبة بالإضافة الى حساب معامل الإنضغاطية فوجدنا أن ثوابت المرونة تحقق شروط الاستقرار الميكانيكي للبلورات المكعبة، أما بخصوص معامل الانضغاطية فهو يحقق الشرط  $C_{11} < B < C_{12}$  و قيمته موافقة لمعامل الإنضغاطية المتحصل عليه من معادلة مورناغان .