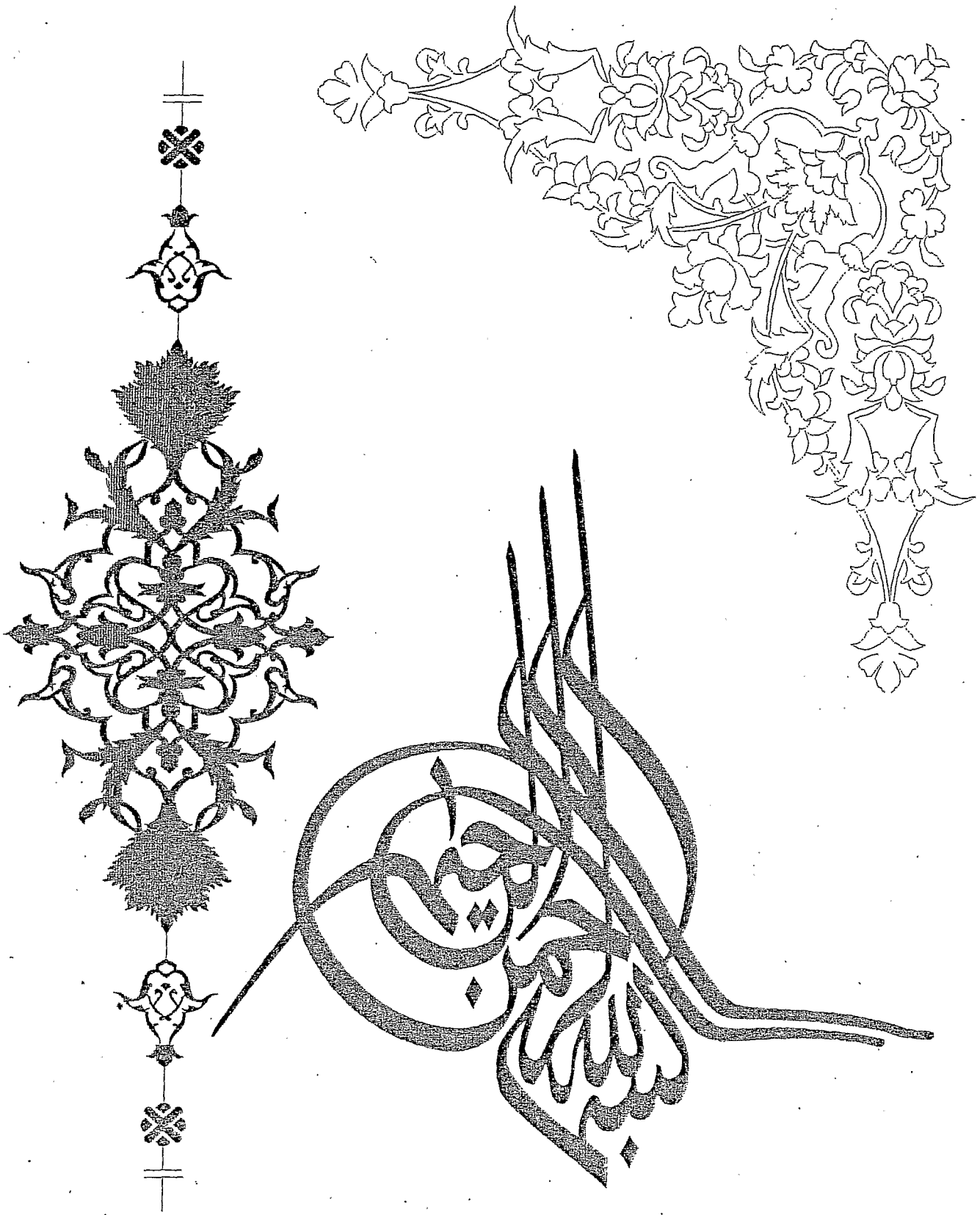


١٣٢٧٠

دانشگاه پیام نور مشهد

پایان نامه جهت اخذ درجه کارشناسی ارشد فیزیک

گرایش حالت جامد

گرادیان میدان الکتریکی $AmRh_3$

استاد راهنما:

آقای دکتر سید مهدی بیضایی

استاد مشاور:

آقای دکتر جمیل آریایی

۱۳۸۸/۱۱/۱۲

نگارش:

زینب جعفری زاده گوغری

شهریور ۸۸

۱۳۱۲۷۰

جمهوری اسلامی ایران
وزارت علوم، تحقیقات و فناوری

تاریخ: ۱۳۸۸/۶/۳۱
شماره: ۸۱/۱۰۶۰۰
پیوست:

دانشگاه پیام نور
خراسان رضوی
باسمه تعالی

صورتجلسه دفاع از پایان نامه

پایان نامه تحت عنوان: گرادیان میدان الکتریکی ترکیب AmRh۳

که توسط زینب جعفری زاده گوغری تهیه و به هیئت داوران ارائه گردیده است مورد تائید می باشد.

تاریخ دفاع: ۱۳۸۸/۶/۲۳ نمره ۱۹/۱ (نوزده و یک) درجه ارزشیابی: عالی

اعضای هیئت داوران:

نام و نام خانوادگی	هیئت داوران	مرتبه علمی	امضاء
دکتر سید مهدی بیضایی	استاد راهنما:	استاد یار	
	استاد راهنمای همکار:		
دکتر جمیل آریایی	استاد مشاور:	استاد یار	
دکتر رضا بنام	استاد داور:	دانشیار	
دکتر افضل رقوی	نماینده گروه امور آموزشی	استادیار	

مشهد: خیابان امام خمینی ۴۰ ـ صندوق پستی: ۹۱۹ تلفن: ۸۵۲۸۵۲۸ (۰۵۱۱)
دورنگار: ۸۵۲۸۵۲۰ (۰۵۱۱) پست الکترونیک: mashhad@pnu.ac.ir

جمهوری اسلامی ایران
وزارت علوم، تحقیقات و فناوری

تاریخ: ۱۳۸۸/۶/۳۱
شماره: ۸۶/۱۲۵۹۹
پیوست:

دانشگاه پیام نور
خراسان رضوی
باسمه تعالی

تصویب نامه پایان نامه

پایان نامه تحت عنوان: گرادیان میدان الکتریکی ترکیب AmRh۳

که توسط زینب جعفری زاده گوغری تهیه و به هیئت داوران ارائه گردیده است مورد تائید می باشد.

تاریخ دفاع: ۱۳۸۸/۶/۲۳ نمره ۱۹/ (نوزده تمام) درجه ارزشیابی: عالی

اعضای هیئت داوران:

نام و نام خانوادگی	هیئت داوران	مرتبه علمی	امضاء
دکتر سید مهدی بیضایی	استاد راهنما:	استاد یار	
	استاد راهنمای همکار:		
دکتر جمیل آریایی	استاد مشاور:	استاد یار	
دکتر رضا بنام	استاد داور:	دانشیار	
دکتر افضل رقوی	نماینده گروه امور آموزشی	استادیار	

مشهد: خیابان امام خمینی ۴۰ ـ صندوق پستی: ۹۱۹ تلفن: ۸۵۲۸۵۲۸ (۰۵۱۱)
دورنگار: ۸۵۲۸۵۲۰ (۰۵۱۱) پست الکترونیک: mashhad@pnu.ac.ir

تقدیم به پدر و مادرم

تقدیم به همسر و فرزندم

تقدیم به همه ی خواهران و برادرانم

و تقدیم به همه ی کسانی که برای یاد دادن عشق می ورزند

سپاسگزاری

حمد و سپاس خداوند مهربان را که به من فرصت ادامه تحصیل را عطا فرمود.

از زحمات استاد ارجمندم دکتر سید مهدی بیضائی استاد راهنما، از دکتر جمیل آریایی استاد مشاور، همچنین از دکتر رضا بنام که داوری این پایان نامه را پذیرفتند و از دکتر رقوی، نماینده گروه، کمال تشکر را دارم، و از دوستانم خانم جلالی، شاداب دباغ، نجمه موسوی که در این کار من را همراهی کردند، متشکرم.

فهرست مطالب

عنوان	صفحه
فصل اول	
تاریخچه	۳
فصل دوم:مطالعه‌ی دستگاه‌های بس ذره‌ای	
۲-۱ مقدمه	٦
۲-۲- مطالعه‌ی کوانتومی دستگاه بس ذره ای	۸
۲-۳- جدا سازی بخش الکترونی و یونی معادله‌ی شرودینگر	۱۰
۲-٤- حل دستگاه بس الکترونی	۱۲
۲ -٤-۱- نظریه‌ی توماس فرمی	۱۳
۲-٤-۲- نظریه‌ی تابع چگالی	۱٤
۲-۵- معادلات تک الکترونی کوهن- شم	۱۷
۲-٦- تابعی تبادلی همبستگی	۲۰
۲-۷ - تقریب شیب تعمیم یافته (GGA)	۲۲

فصل سوم:روش‌های حل معادلات تک الکترونی کوهن- شم

۳-۱ مقدمه ۲٤

۳-۲- روش امواج تخت بهبود یافته، APW ۲٤

۳-۳ - روش امواج تخت بهبود یافته خطی (LAPW) ۲۹

۳-٤- روش تخت امواج بهبود یافته خطی(LAPW+LO) ۳۱

۳-۵ - روش امواج تخت بهبود یافته با اوربیتال موضعی (APW+lo) ۳۲

۳-٦- روش پتانسیل کامل – امواج تخت بهبود یافته‌ی خطی (FP-LAPW) ۳۳

فصل چهارم:برنامه‌ی کامپیوتری وین

٤-۱ مقدمه ۳٦

٤-۲ مرحله اول محاسبات ورود اطلاعات و آماده سازی اطلاعات ۳٦

٤-۳ مرحله دوم محاسبات – اجرای برنامه SCF ٤۷

٤-٤ مرحله سوم محاسبات – استخراج و تحلیل نتایج ۵۱

٤-٤-۱ برنامه DOS ۵۱

٤-٤-۲ برنامه Band structure ۵۳

٤-٤-۳برنامه Optimize ۵٤

٤-٤-٤ محاسبه‌ی گرادیان میدان الکتریکی ۵۷

فصل پنجم:محاسبه‌ی خواص ساختاری،الکترونی وگرادیان میدان الکتریکی ترکیب $AmRh_3$

۵-۱ مقدمه ۵۹

۵-۲ روش انجام محاسبات ترکیب$AmRh_3$ ۶۰

۵-۳ خواص ساختاری ترکیب $AmRh_3$ ۶۲

۵-٤ ساختار نواری ۶۸

۵-۵ محاسبه چگالی حالت‌ها DOS ۷٤

۵-۵-۱ محاسبه چگالی حالت ترکیب $AmRh_3$ ۷۵

۵-۶ ضریب گرمای ویژه الکترونی γ ۸۱

۵-۷ گرادیان میدان الکتریکی ۸۳

۵-۷-۱ تعریف گرادیان میدان الکتریکی ۸۳

۵-۷-۲ تانسور گرادیان میدان الکتریکی ۸۷

۵-۷-۳ منشا گرادیان میدان الکتریکی به بیانی دیگر ۹۰

۵-۷-٤ محاسبه‌ی گرادیان میدان الکتریکی در روش FP-LAPW ۹۱

۵-۷-۵ محاسبات گرادیان میدان الکتریکی ترکیب$AmRh_3$ ۹۳

نتیجه‌گیری ۹۹

پیوست ۱۰۱

منابع ۱۰۲

فهرست شکل‌ها

شکل **صفحه**

شکل (۲-۱) الکترونهای ظرفیت و مغزه ۹

شکل (۳-۱) تقسیم فضا به دو ناحیه مافین تین و ناحیه بین جایگاهی ۲۵

شکل (۳-۲) روش محاسبه‌ی ویژه مقادیر مجاز در روش APW به ازای یک K خاص ۲۷

شکل(۳-۳) نمایی از حل خود سازگار معادلات تک ذره‌ای کوهن- شم در روش APW. ۲۸

شکل (۳-٤) رفتار موج در هنگام عبور از مرز کره موفین- تین نرمتر است. ۳۰

شکل ٤-۱ StructGen ۳۷

شکل ٤-۲ مرحلهٔ initialize ۳۸

شکل ٤-۳ فایل Case.inst ۳۹

شکل ٤-٤ فایل ورودی برنامه اجرایی LAPW۱ ٤۲

شکل ٤-٥ خطی سازی انرژی ٤٤

شکل ٤-٦ فایل ورودی برنامه اجرایی LAPW۲ ٤٦

شکل٤-۷ طرحواره اجرای برنامه در WIEN۲K ٥۰

شکل ٤- ۸فایل ورودی چگالی حالت‌ها ٥۲

شکل ٤-۹ فایل ورودی ساختار نواری ٥۳

شکل ٤-۱۰ analisis ٥٥

شکل ٤-۱۱ سهمهای گرادیان الکتریکی ٥۸

شکل ٥-۲-۱ ساختار ترکیب $AmRh_3$ ٦۱

شکل ۵-۲-۲ مقادیر بهینه kpoint ۶۲

شکل ۵-۳-۱ : محاسبهٔ پارامتر شبکه با استفاده از تقریب GGA و GGA+SO و GGA+Spin-polarized ۶۵

شکل ۵-۳-۲: محاسبهٔ پارامتر شبکه با استفاده از تقریب LDA و تقریب LDA+SO ۶۶

شکل ۵-۳-۳ : محاسبهٔ پارامتر شبکه با استفاده از تقریب GGA+SOC+spin-polarized ۶۷

شکل ۵-۴-۱ : ساختار نواری با استفاده از تقریب GGA+Spin-polarized در اسپین پائین ۷۰

شکل ۵-۴-۲ : ساختار نواری با استفاده از تقریب GGA+Spin-polarized در اسپین بالا ۷۱

شکل ۵-۴-۳ ساختار نواری ترکیب $AmRh_3$ در تقریب GGA ۷۳

شکل ۵-۴-۴ ساختار نواری ترکیب $AmRh_3$ در تقریب GGA+SO ۷۴

شکل ۵-۵-۱ :چگالی حالتهای جزئی در تقریب GGA ۷۶

شکل ۵-۵-۲ :چگالی حالتهای جزئی در تقریبGGA+SO ۷۷

شکل ۵-۵-۳ : چگالی حالت کلی در تقریب GGA ۷۷

شکل ۵-۵-۴ : چگالی حالت کلی در تقریبGGA+SO ۷۸

شکل۵-۵-۵: چگالی حالت کلی در ترکیبRh, Am ,$AmRh_3$ در تقریب GGA ۷۹

شکل ۵-۵-۶ : چگالی حالت کلی در ترکیب$AmRh_3$، Am,Rh در تقریب GGA+SOC ۷۹

شکل ۵-۵-۷: چگالی حالت کلی با تقریبGGA+Spin-polarized ۸۰

شکل ۵-۵-۸: چگالی حالت کلی با تقریب GGA+Spin-polarized+SO در فاز فرومغناطیس ۸۱

شکل ۵-۷-۱ اثر فشار بر روی گرادیان میدان الکتریکی در تقریب GGA و GGA+SO ۹۷

شکل ۵-۷-۲ اثر فشار بر روی گرادیان میدان الکتریکی در تقریب LSDA وLSDA+SO ۹۸

فهرست جدول‌ها

جدول **صفحه**

جدول(٤-١)رابطه‌ی بین اعداد کوانتومی ٤١

جدول ٥-٢-١: . اطلاعات مورد نیاز برای ساختن فایل$struct.AmR_3$ ٦٢

جدول٥-٣-١: مقدار پارامتر شبکه و مدول حجمی و مشتق مدول حجمی ٦٨

جدول ٥-٦-١: محاسبه ضریب گرمای ویژه الکترونی در ترکیب$AmRh_3$ ٨٢

جدول٥-٧-١ مولفهٔ اصلی گرادیان میدان الکتریکی در مکان Rh ٩٤

جدول ٥-٧-٢ مولفه‌ی اصلی گرادیان میدان الکتریکی در مکان Rh ٩٤

جدول ٥-٧-٣ مولفه‌ی اصلی گرادیان میدان الکتریکی در مکان Rh ٩٥

جدول ٥-٧-٤ مولفه‌ی اصلی گرادیان میدان الکتریکی در مکان Rh ٩٥

جدول ٥-٧-٥ عدم تقارن توزیع بار در اوربیتال p و d ٩٥

جدول ٥-٧-٦ عدم تقارن توزیع بار در اوربیتال p و d ٩٦

جدول ٥-٧-٧ محاسب EFG در تقریب‌های مختلف(10^{21} V/m^2) ٩٦

جدول ٥-٧-٨ محاسبه‌ی EFG در تقریب‌های مختلف(10^{21} V/m^2) ٩٦

چکیده

محاسبه خواص ساختاری، الکترونی و گرادیان میدان الکتریکی ترکیب $AmRh_3$ با استفاده از نظریه‌ی تابعی چگالی و امواج تخت بهبود یافته خطی با روش پا روش پتانسیل کامل (FP-LAPW) با استفاده از نرم‌افزار WIEN۲K انجام شده است. ترکیب $AmRh_3$ فرومغناطیس است. یاخته بسیط $AmRh_3$ مکعبی ساده و دارای ساختار $AuCu_3$ است. محاسبات را با استفاده از تقریب GGA و LSDA در حضور برهم‌کنش اسپین مدار و در غیاب آن انجام داده، همچنین برای بررسی خواص مغناطیسی ترکیب اثر-spin polarized را نیز بررسی می‌کنیم. نتایج شامل پارامتر شبکه، مدول حجمی و مشتق آن، ضریب گرمای ویژه الکترونی، گرادیان میدان الکتریکی و اثر فشار بر روی آن است. محاسبات در ترکیب $AmRh_3$ نشان می‌دهد که تقریب GGA+SOC در محاسبه‌ی پارامتر شبکه در توافق خوبی با مقدار تجربی است. گرادیان میدان الکتریکی را در فشارهای مختلف در حضور برهم‌کنش اسپین مدار و در غیاب آن محاسبه کرده‌ایم. سهم اوربیتال‌های مختلف در ایجاد گرادیان میدان الکتریکی نشان می‌دهد که سهم عمده در ایجاد گرادیان میدان را اوربیتال p-p به عهده دارد. همچنین با افزایش فشار گرادیان میدان الکتریکی افزایش پیدا می‌کند.

فصل اول

تاریخچه

بررسی خواص بلورها با لحاظ کردن تمام برهم‌کنش‌های بین ذرات از دیدگاه مکانیک کوانتومی کاری بسیار پیچیده و در عمل بدون اعمال تقریب غیر ممکن است. برای بررسی خواص بلورها تاکنون راهها و تقریب‌های مختلفی ارائه شده است که از میان این روش‌ها نظریه‌ی تابعی چگالی بهترین روش بوده است. قبل ازاینکه نظریه‌ی تابعی چگالی با اثبات قضایای هوهنبرگ-کوهن کامل شود، در سال ۱۹۲۸-۱۹۲۷ توماس و فرمی [۱] از چگالی به عنوان متغییر اصلی استفاده کرده‌اند.

بعدها این نظریه توسط دیراک[۲] در سال ۱۹۳۰ و سپس توسط وایتس ذکر[۳] در سال ۱۹۳۵ کاملتر شد. مشکل تمامی این روش‌ها در آن بود که لازم است برای جمله بزرگ انرژی جنبشی تقریب زده شود. لذا تقریب زیادی در محاسبات وارد می‌شد حال آنکه در نظریه‌ی تابعی چگالی بخش عمده‌ای از انرژی

---

[۱] Tomas,Fèrmi

[۲] Dirak

[۳] Vaits zeker

جنبشی با دقت محاسبه می‌شود و تقریب نهایی تنها بر روی جمله کوچک تبادلی همبستگی اعمال می‌شود، لذا محاسبات از دقت قابل توجهی در مقایسه با روش مبتنی بر توماس-فرمی برخوردار است.

عنصرAm توسط جی.تی.سی‌بورگ[1] وهمکارانش در سال ۱۹٤٥در ایالات‌متحده آمریکا کشف شد.امریکیم چهارمین عنصر بعد ازاورانیم در گروه اکتینیدها است. ایزوتوپ۲٤۱این عنصر از واکنش نوترونی ایزوتوپ اورانیم در راکتورهای هسته‌ای در سال ۱۹٤٤حاصل شد.این عنصر در در حالت تازه بسیار درخشان به رنگ سفید و نقره‌ای است و بسیار چکش خوارتر ازاورانیم ونپتونیم است. این عنصر بسیار سمی است فعالیت اشعه آلفا این عنصرسه بار بیشتر از رادیم است. از ایزوتوپ آمریکیم ۲٤۱ برای منابع سبک اشعه گاما استفاده می‌شود.همچنین از این عنصر برای ساخت شیشه‌های رادیواکتیو با ضخامت بالا در صنایع شیشه سازی صفحه تخت و به عنوان منابع یونیزاسیون برای ردیابهای گازی استفاده می‌شود Am یک فلز واکنش‌پذیر است. دارای عدد اتمی ۹۵، جرم اتمی ۲۳۹/۰۵۲۲ نقطه ذوب $1176C^{o}$ و دارای ظرفیتهای ۳و٤و٥و٦ است .اکتینیدها شامل ۱۵ عنصر هستند که بین Ac و Lr قرار دارد با عدد اتمی بین۱۰۳-۸۹ است. سری اکتینیدها شامل تعدادی از عناصر نادر زمین است. خواص شیمیایی در Ac (اکتنیوم) نسبت به La (لانتانیوم) شباهت کمتری نسبت به همدیگر دارد. همه‌ی اکتینیدها رادیواکتیو و دارای خاصیت فلزی هستند. جفت‌شدگی اسپین-مدار در آن قابل ملاحظه است. مطالعات نشان می‌دهد که ترکیب $AmRh_3$ دارای خاصیت مغناطیسی است. زمانی که فاصله‌ی اکتینید-اکتینید نسبتاً کوچک باشد همپوشانی بین الکترونهای5f اتم‌های همسایه بزرگ است و الکترون‌های 5f به طور قابل ملاحظه از یون‌ها فاصله می‌گیرند و کمتر تحت تاثیر الکترون‌های s مغزه واقع می‌شوند. همچنین فاصله جدایی Am-Am تاثیر مهمی را بر روی رفتار الکترون‌های5f دارند. عامل مهمی که باعث بروز ویژگی‌های گوناگون در ترکیب‌های اکتینید می‌شود ظاهراً جایگزیدگی الکترون‌های 5f به عنوان یک تابعی از افزایش عدد اتمی از انقباض اوربیتال‌های 5f سرچشمه گرفته است و تعداد الکترون‌های 5f را افزایش می‌دهد. در این پایان نامه ترکیب $AmRh_3$ را بررسی می‌کنیم. در فصل دوم به مطالعه‌ی سیستم‌های بس‌ذره‌ای، در

---

[1] G.T.Seaborg

فصل سوم حل معادلات کوهن شم، در فصل چهارم معرفی نرم‌افزار wien۲k و فصل پنجم در مورد خواص ترکیب $AmRh_3$ به ترتیب می‌پردازیم. در ابتدا با محاسبه‌ی انرژی کل بلورها در ثابت شبکه و رسم نمودار انرژی بر حسب حجم، خواص ساختاری شامل پارامتر شبکه تعادلی شبکه، مدول حجمی و مشتق آن محاسبه می‌کنیم و مشاهده می‌کنیم که ترکیب تقریب GGA+SO با مقدار تجربی در توافق خوبی است. سپس محاسبات شامل چگالی حالت‌ها است که در تمام تقریب‌ها انجام داده و مشاهده می‌کنیم در برهم‌کنش اسپین مدار تاثیر زیادی داشته است. همچنین ضریب گرمای ویژه را نیز محاسبه کرده، سپس گرادیان میدان الکتریکی اطراف هسته که ناشی از عدم تقارن توزیع ابر الکترونی است و سهم اوربیتال‌های مختلف در آن، در مکان هر یک از اتم‌ها محاسبه می‌شود.

فصل دوم
مطالعه‌ی دستگاه های بس ذره‌ای

۲-۱- مقدمه

بررسی دستگاه های بس ذره‌ای[1] در فیزیک ماده چگال از اهمیت قابل ملاحظه‌ای برخوردار است. یک دستگاه بس ذره‌ای از تعدادی زیادی ذرات مشابه وغیر مشابه تشکیل شده که با یکدیگر بر هم کنش دارند. اتمها، مولکولها، بلورها جزء دستگاه های بس ذره‌ای به شمار می آیند که هر کدام ازتعدادی الکترون و هسته تشکیل شده‌اند. به دو روش کلاسیک وکوانتومی می توان یک سیستم بس ذره ای را مورد مطالعه و بررسی قرار داد.

در بررسی کلاسیکی دستگاه‌های بس ذره‌ای بین اتمها یک پتانسیل در نظر می گیریم و نیروهای وارد برهر اتم و انرژی کل دستگاه را با استفاده از این پتانسیل به دست می آوریم. مشکل اصلی این روش انتخاب پتانسیل مناسب برای هر ماده است، چون پتانسیل برای تمامی مواد مشابه نیست، باید

---

[1] Many-Bady System

برای هر ماده یک پتانسیل مخصوص به آن ساخته شود، که این پتانسیل نیز با تغییر شرایط نظیر اعمال فشار و گرما به سیستم تغییر می کند. این مشکل را تا حدی با کار بردن پارامترهای بیشتر در پتانسیل برطرف کرد. این کار نیز حجم محاسبات را افزایش می دهد و اگر تعداد پارامترها را کاهش دهیم، دیگر دقت لازم را نداریم بهترین مزیت روش کلاسیکی سرعت بالای محاسبات است که می توان با به کارگیری کامپیوترهای نه چندان سریع دستگاه های بسیار بزرگ را مورد بررسی قرار داد. به عنوان مثال بسیاری از خواص ماکروسکوپی یک بلور را می توان با این مورد بررسی قرارداد.

در بررسی کوانتومی به دلیل آثار کوانتومی موقعیت پیچیده‌ترمی شود. بررسی دقیق آرایه‌ای از اتمهای بلور به عنوان یک دستگاه بس ذره‌ای نیازمند حل معادله‌ی شرودینگر کل بلور جهت تعیین توابع موج و ویژه مقادیر انرژی خواهد بود. حل چنین معادله‌ای به دلیل هامیلتونی پیچیده آن (به خاطر وجود جملات برهمکنشی که معمولا در هیچ دستگاهی قابل جداسازی نیستند) عملا غیر ممکن است. تنها راه موجود استفاده از روشهای تقریبی مختلف است که برای دستگاه های بس ذره ای در فیزیک ماده چگال ارائه شده و توسعه یافته‌اند اکثرخواص فیزیکی بلور، یک دستگاه بس ذره‌ای، به نحوی به انرژی کل و یا تغییر در آن وابسته است. بنابر این انرژی مانند یک دستگاه آزمایشگاهی چند منظوره برای بررسی خواص بلورها به کارگرفته می شود. مثلا در یک بلور با ساختارهای گوناگون به دنبال پیداکردن پایدارترین ساختار در یک دما و فشار خاص باشیم باید کمترین انرژی ساختار را در آن شرایط جستجو کنیم یا اگر پارامتر تعادلی شبکه مورد نظر باشد می توان با محاسبه و مقایسه انرژی بلور به ازای مقادیر مختلف پارامتر شبکه کم انرژی‌ترین حالت را تعیین و پارامتر مربوط به آن را پارامتر تعادلی شبکه انتخاب کرد. اگر چه خواص یک بلور، یک دستگاه بس ذره ای، را از پارامترهای مختلفی می‌توان به دست آورد اما مربوط بودن این خواص به انرژی از جامعیت بیشتری برخوردار است.در روشهای کوانتومی دستگاه را در اولین قدم به دو بخش الکترونی ویونی تقسیم می کنیم و برای هر بخش معادله‌ی شرودینگر مربوط به آن را حل می‌کنیم و با استفاده از ویژه مقادیر و ویژه توابع، خواص دستگاه را استخراج می کنیم . مزیت این روش مستحکم بودن مبنای کار است، زیرا بر پایه‌ی اصول اولیه مکانیک کوانتومی استوار است وتنها دراین روش است که می‌توان خصوصیات کوانتومی دستگاه را مورد بررسی قرار داد. عیب این روش حجم زیاد محاسبات است که می توان با استفاده از خواص تقارنی و اعمال تقریب های مناسب این حجم زیاد محاسبات را تا حدی کاهش دهیم. به دلیل علاقه‌ی ما به بررسی خواص کوانتومی نظیر ساختار نواری انرژی، منحنی چگالی حالتها و گرادیان میدان الکتریکی روش کوانتومی را برای بررسی خواص ترکیب $AmRh_3$ انتخاب کردیم.

۲-۲- مطالعه‌ی کوانتومی دستگاه بس ذره‌ای

هدف اصلی در این روش حل معادله‌ی شرودینگر بس ذره ای است، اگر با استفاده از برخی تقریب‌ها معادله‌ی بس ذره ای را به تعدادی معادله‌ی تک ذره‌ای تبد یل کنیم و این معادلات تک ذره را به صورت خودسازگار حل کنیم، و در نهایت انرژی کل را از حل معادله استخراج کرده و بسیاری از خواص دستگاه را مورد بررسی قرار می‌دهیم.

به دو روش می توان معادله‌ی شرودینگر بس ذره را به معادلات تک ذره تبدیل کرد. در روش اول تابع موج $\psi(x_1\ x_2\ \ldots x_n)$ که شامل $3n$ متغییر است، (nتعداد ذرات است)که به عنوان متغییر اساسی در نظر گرفته می شود و یا استفاده از اصل وردشی معادلات تک ذره هارتری[1] و هارتری – فوک [2]را به دست می آید.

در روش دوم چگالی الکترونی را به عنوان متغییر اساسی در نظر می گیرند و با وردش نسبت به آن معادلات تک ذره (معادلات کوهن – شم[3]) را به دست می آورند. روش دوم برتریهایی نسبت به روش اول دارد که در زیر به آن اشار ه می شود.

اولین مزیت کمتر بودن تعداد متغیر ها در چگال $\rho(r)$ نسبت به تابع موج است زیرا چگالی تنها به سه متغیرمکانی وابسته است حال آنکه تابع موج به سه $3n$ متغیر بستگی دارد. دومین مزیت این است که چگالی یک کمیت قابل اندازه گیری در آزمایشگاه است در حالی که در مورد تابع موج چنین نیست.

قبل از تبدیل معادله‌ی بس ذره ای به دسته معادلات تک ذره ومحاسبه انرژی الکترونهای موجود در بلور را به دو دسته تقسیم می کنیم :

۱- الکترونهای مغزه: بستگی آنها به هسته زیاد است وخواص آنها در بلور و اتم تفاوت زیادی ندارد.

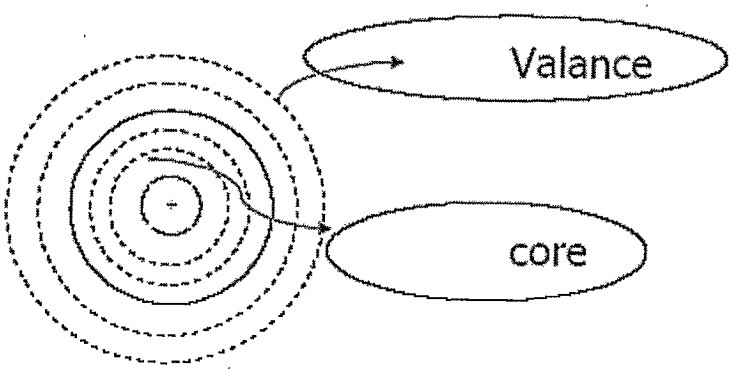
۲- الکترونهای ظرفیت: بستگی آنها به هسته کم است و گسترش آنها بنا به شرایط محیط تغییر می‌کند خواص عمده بلور ناشی از این الکترونها است.

---

[1] Hartree

[2] Hartree-fock

[3] Eqations Kohn-Sham



شکل (۲-۱) الکترونهای ظرفیت و مغزه

مجموعه‌ی هسته والکترونهای مغزه را در بلور یون می نامیم. اکنون می توان هامیلتونی یک دستگاه بس ذره‌ای را به صورت زیر نوشت:

$$H=H^{e}+H^{I}+H^{e\text{-}e}+H^{I\text{-}I}+H^{I\text{-}e}+H^{e}_{ext}+H^{I}_{ext} \qquad (۲\text{-}۱)$$

در رابطه بالا جملات هامیلتونی به ترتیب عملگرهای انرژی جنبشی مربوط به الکترونها، انرژی جنبشی مربوط به یونها بر هم کنش الکترونها، بر هم کنش یونها، بر هم کنش الکترونها و یونها و دو جمله آخر بر هم‌کنش الکترونها و یونها با میدانهای خارجی است که آنها صفر فرض می شوند.

معادله‌ی شرودینگر مجموعه‌ی الکترونها و یونها به صورت $H\Psi\{(\vec{r}_i),\vec{R}_\alpha\}=E\Psi\{(\vec{r}_i),(\vec{R}_\alpha)\}$ است که یونها در مکان $\vec{R}_\alpha$با بار ez_α و الکترونها در مکان $\vec{r}_i$هستند، بنابراین می توان جملات هامیلتونی را به صورت زیر نشان داد:

$$H_{ke}{}^{e}=\sum_i -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2{}_i \qquad (۲\text{-}۲)$$

$$H'_{ke}=\sum_\alpha -\frac{\hbar^2}{2m_\alpha}\nabla^2{}_\alpha \qquad (۲\text{-}۳)$$

$$H^{e-e}=\frac{1}{2}\sum_i\sum_j \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0\left|\vec{r}_i-\vec{r}_j\right|}\rightarrow i\neq j \qquad (۲\text{-}٤)$$