



مجله پژوهش فیزیک ایران، جلد ۲۲، شماره ۳، پاییز ۱۴۰۱

DOI: 10.47176/ijpr.22.3.81568

حالت پایه با تقارن شکسته اسپینی برای UO_2 در رهیافت $DFT+U$: روش SMC

محمود پیامی

پژوهشگاه علوم و فنون هسته ای، سازمان انرژی اتمی ایران، تهران

پست الکترونیکی: Mpayami@aeoi.org.ir

(دریافت مقاله: ۱۴۰۱/۰۶/۸؛ دریافت نسخه نهایی: ۱۴۰۱/۰۸/۱۴)

چکیده

در برخی سامانه‌ها معلوم شده است که حالت پایه حالتی تقارن شکسته است که در آن یک خاصیت فیزیکی به صورت متقارن توزیع نشده است. در مورد سامانه‌های الکترونی با همبستگی قوی، که توسط روش $DFT+U$ بررسی شده اند، محققین نشان داده اند که انرژی کل سامانه یک تابع چند کمینه‌ای از آرایش الکترونی است و لازم است که حالت پایه را بین آنها تشخیص دهیم. اما روش‌هایی که تا کنون برای یافتن چنین کمینه‌هایی مورد استفاده واقع شده، قادر نیستند که تمامی این حالت‌ها را پیش‌بینی کنند و لذا امکان دارد حالت پایه واقعی تعیین نشود. در این تحقیق ما یک روش ساده و سراسر SMC را ارائه می‌دهیم که توسط آن حالت پایه و حالت‌های شبه پایدار UO_2 پاد فرومغناطیس با نظم $1k$ تعیین می‌شود. با استفاده از این روش نشان داده می‌شود که حالت پایه سامانه UO_2 یک حالتی با تقارن شکسته اسپینی از مغناطش اسپینی اتم‌های اکسیژن است. بسته به این که روش SMC را چگونه پیاده سازی می‌کنیم، تعداد حالت‌های شبه پایدار متغیر است ولی حالت پایه یکسانی حاصل می‌شود. نشان داده شده است که خواص مربوط به انرژی، خواص هندسی، توزیع چگالی الکترونی، توزیع چگالی قطبش الکترونی حالت پایه و حالت‌های شبه پایدار نسبت به هم تفاوت دارند. همچنین نشان داده شده است که این خواص نسبت به اندازه مغناطش اسپینی اولیه اتم‌های U در آرایش پاد فرومغناطیس با نظم $1k$ حساس هستند ولی تعداد حالت‌های شبه پایدار و خواص حالت پایه نسبت به آن بی تفاوت هستند. با استفاده از تقریب PBESol-GGA برای تابعی تبدلی-همبستگی، حالت پایه توافق بسیار خوبی را با تجربه نشان می‌دهد.

واژه‌های کلیدی: دی اکسید اورانیوم، نظریه تابعی چگالی، پاد فرومغناطیس، سامانه همبسته قوی، حالت شبه پایدار

مقاله کامل در بخش انگلیسی همین شماره مجله به چاپ رسیده است.