مجلهٔ پژوهش فیزیک ایران، جلد ۲۳، شمارهٔ ۳، پاییز ۱۴۰۲
DOI: 10.47176/ijpr.23.3.11777

اثرات نسبیتی در مطالعهٔ خواص ساختاری و الکترونی UO_2 در چارچوب DFT+U

محمود پیامی شبستر* و سمیرا شیخی

پژوهشگاه علوم و فنون هسته‌ای، سازمان انرژی اتمی ایران، تهران، ایران

پست الکترونیکی: mpayami@aeoi.org.ir

(دریافت مقاله: ۱۴۰۲/۰۸/۱۰ ؛ دریافت نسخهٔ نهایی: ۱۴۰۲/۰۹/۰۴)

چکیده

الکترون‌های اوربیتال‌های نزدیک هستهٔ اتم‌های سنگین سرعت‌های قابل مقایسه با سرعت نور در خلأ دارند. لذا جهت مطالعهٔ خواص بلورهای حاوی اتم‌های سنگین، لازم است که اثرات نسبیتی به حساب آورده شوند. در این پژوهش، با استفاده از روش ابتدا به ساکن DFT+U ما ساختار الکترونی و خواص هندسی دی اکسید اورانیوم UO_2 در چارچوب فرمولبندی‌های کاملاً نسبیتی، نسبیتی نرده‌ای، و غیرنسبیتی محاسبه کرده و با هم مقایسه کرده‌ایم. نشان داده شده است که: (الف)- روش غیرنسبیتی نتایجی بسیار متفاوت با تجربه را برای ثابت شبکه و گاف انرژی می دهد و (ب)- در حالت کاملاً نسبیتی، که اثرات اسپین- مدار لحاظ شده است، گاف انرژی کوهن-شم به اندازهٔ ۶/۲٪ افزایش یافته و ثابت شبکه به اندازه ۰/۰۵٪ نسبت به حالت نسبیتی نرده‌ای کاهش می‌یابد. بنابراین، در مطالعهٔ خواص هندسی UO_2 ، محاسبات در چارچوب نسبیتی نرده‌ای منجر به نتایج صحیحی می‌شود و لذا تا موقعی که کاری به مطالعهٔ خواص برانگیختگی الکترونی نداریم، نیازی نیست که محاسبات سنگین کاملاً نسبیتی انجام دهیم.

واژه‌های کلیدی: دی اکسید اورانیوم، پادفرومغناطیس، نظریهٔ تابعی چگالی، اثر اسپین- مدار

مقالهٔ کامل در بخش انگلیسی همین شمارهٔ مجله به چاپ رسیده است.