مجلهٔ پژوهش فیزیک ایران، جلد ۲۳، شمارهٔ ۳، پاییز ۱۴۰۲
DOI: 10.47176/ijpr.23.3.11820

CC BY NC

مقایسهٔ نتایج SMC و OMC در تعیین جواب‌های حالت پایه و حالت‌های شبه‌پایدار برای UO_2 در روش DFT+U

محمود پیامی شبستر

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

پست الکترونیکی: mpayami@aeoi.org.ir

(دریافت مقاله: ۱۴۰۲/۱۰/۲۲ ؛ دریافت نسخهٔ نهایی: ۱۴۰۲/۱۲/۱۲)

چکیده

پیش‌بینی صحیح رفتار بلور UO2 که یک سامانهٔ پادفرومغناطیس با الکترون‌های همبستهٔ قوی است، با استفاده از روش اصلاح شدهٔ DFT+U امکان‌پذیر است. در چارچوب DFT+U انرژی بلور تابعی با چندین کمینهٔ موضعی است که به آنها حالت‌های شبه‌پایدار گفته می‌شود و پایین‌ترین انرژی از بین آنها حالت پایه است. OMC روشی است که در DFT+U برای تعیین حالت پایه استفاده می‌شده است. اخیراً روش SMC پیشنهاد شده است که آن هم ساختاری با چند کمینه انرژی در DFT+U دارد و منجر به نتایجی شده است که توافق خوبی با تجربه دارد. در این پژوهش، روش‌های SMC و OMC مقایسه شده و نشان داده شده که اگرچه حالت‌های پایه در این دو روش، انرژی و هندسهٔ مشابهی دارند، ولی ساختار الکترونی آنها تفاوت چشمگیری دارد. به علاوه، گاف انرژی در SMC توافق بهتری با تجربه دارد. علاوه‌برآن، نشان می‌دهیم که انرژی حالت پایه حاصل از SMC به اندازهٔ ۰/۰۰۲۲ ریدبرگ به ازای واحد فرمول بالاتر از حالت پایهٔ OMC قرار دارد. حالت‌های پایهٔ متفاوت حاصل از این دو روش به معنای آن است که در این دو روش، جستجو برای حالت پایه بر روی زیرفضاهای متفاوتی از چگالی الکترونی صورت می‌گیرد و هر یک از این روش‌ها به تنهایی قادر نیست که حالت با انرژی کمینهٔ مطلق را بدهد. بنابراین برای یافتن حالت با انرژی کمینهٔ مطلق بایستی جستجو بر روی زیرفضاهای بزرگ‌تری صورت گیرد که به طور همزمان شامل ماتریس اشغال اتم U و مغناطش اولیهٔ اتم O می‌شود.

واژه‌های کلیدی: نظریهٔ تابعی چگالی، الکترون‌های همبستهٔ قوی، پادفرومغناطیس، کنترل ماتریس اشغال، کنترل مغناطش اولیه

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