

## عنوان مقاله:

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

## محل انتشار:

مجله پژوهش فیزیک ایران، دوره 22، شماره 3 (سال: 1401)

تعداد صفحات اصل مقاله: 10

## نویسنده:

محمود پیامی شبستر - پژوهشگاه علوم و فنون هسته ای، سازمان انرژی اتمی ایران، تهران

## خلاصه مقاله:

در برخی سامانه ها معلوم شده است که حالت پایه حالتی تقارن شکسته است که در آن یک خاصیت فیزیکی به صورت متقارن توزیع نشده است. در مورد سامانه های الکترونی با همبستگی قوی، که توسط روش DFT+U بررسی شده اند، محققین نشان داده اند که انرژی کل سامانه یک تابع چند کمینه ای از آرایش الکترونی است و لازم است که حالت پایه را بین آنها تشخیص دهیم. اما روش هایی که تا کنون برای یافتن چنین کمینه هایی مورد استفاده واقع شده، قادر نیستند که تمامی این حالت ها را پیش بینی کنند و لذا امکان دارد حالت پایه واقعی تعیین نشود. در این تحقیق ما یک روش ساده و سراسر SMC را ارائه می دهیم که توسط آن حالت پایه و حالت های شبه پایدار  $UO_2$  پاد فرومغناطیس با نظم  $k_1$  تعیین می شود. با استفاده از این روش نشان داده می شود که حالت پایه سامانه  $UO_2$  یک حالتی با تقارن شکسته اسپینی از مغناطش اسپینی اتم های اکسیژن است. بسته به این که روش SMC را چگونه پیاده سازی می کنیم، تعداد حالت های شبه پایدار متغیر است ولی حالت پایه یکسانی حاصل می شود. نشان داده شده است که خواص مربوط به انرژی، خواص هندسی، توزیع چگالی الکترونی، توزیع چگالی قطبش الکترونی حالت پایه و حالت های شبه پایدار نسبت به هم تفاوت دارند. همچنین نشان داده شده است که این خواص نسبت به اندازه مغناطش اسپینی اولیه اتم های U در آرایش پاد فرومغناطیس با نظم  $k_1$  حساس هستند ولی تعداد حالت های شبه پایدار و خواص حالت پایه نسبت به آن بی تفاوت هستند. با استفاده از تقریب PBESol-GGA برای تابعی تبدالی - همبستگی، حالت پایه توافق بسیار خوبی را با تجربه نشان می دهد.

## کلمات کلیدی:

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

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/1663154>

