

الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية
وزارة التعليم العالي و البحث العلمي
جامعة محمد بوضياف المسيلة
كلية العلوم و الهندسة
قسم الفيزياء

مذكرة

مقدمة لنيل شهادة

الماجستير

في فيزياء وكيمياء المواد

فرع

فيزياء

العنوان

دراسة الخواص الميكانيكية
للمركبات أنصاف النواقل الثنائية ذات بنية
زنك- بلاند (المكعبة)

من طرف

بن سالم فوزية

أمام لجنة المناقشة

جامعة المسيلة	رئيسا	أستاذ	أحمد شيكوش
جامعة المسيلة	مقرا	أستاذ	الذير بوعريسة
جامعة المسيلة	مساعد	أستاذ م.د	عامر والي
جامعة المسيلة	ممتحنا	أستاذ م.د	ع. الحكيم بورصاص
جامعة المسيلة	ممتحنا	أستاذ	يونس بن عريوة
جامعة سطيف	ممتحنا	أستاذ	ن. بن وطاس

الإهداء

أهدي بحثي هذا إلى أمي و أبي شاكرتا لهما على ما قاما به من
أجلي لمواصلة مشواري الدراسي.
كما أهديه إلى العائلة كبيرا و صغيرا على الدعم المعنوي
الذي منحوني إياه.
كما لا أنسى أن أهديه إلى الصديقات العزيزات.

تشكرات

أُتقدم بالشكر الجزيل إلى كل من الأستاذ النذير بوعريسة أستاذ بكلية العلوم والهندسة جامعة محمد بوضياف بالمسيلة و الأستاذ عامر والي أستاذ بقسم الفيزياء كلية العلوم والهندسة جامعة محمد بوضياف بالمسيلة. على إشرافهما و تتبعهما لهذا البحث و على جميع نصائحهم و اقتراحاتهم المقدمة لإنجازه. كما أتقدم بالشكر إلى الأستاذ رابح بشيري على مساعدته و الأستاذ فوزيل سحنون على نصائحه. و شكر خاص إلى الأساتذة أعضاء لجنة المناقشة الأستاذ أحمد شيكوش مدير البحث بجامعة محمد بوضياف بالمسيلة و الأستاذ ن. بن وطاس أستاذ بجامعة سطيف و الأستاذين يونس بن عريوة و عبد الحكيم بورصاص من جامعة المسيلة لموافقته المشاركة في لجنة المناقشة . و في الأخير أشكر جميع الأصدقاء و الزملاء و خاصة ربعة نعمون و كل من ساهم من قريب أو بعيد في إنجاز هذا البحث.

الفهرس

1..... مقدمة

الفصل الأول: خواص مرونة البلورات

3..... 1-I- مقدمة

3..... 2-I- ممتد الإجهاد

11..... 3-I- ممتد التشوه (Tensor of deformation)

17..... 4-I- قانون هوك

21..... 5-I- طاقة المرونة

23..... 6-I- معاملات مرونة البلورات المكعبة

الفصل الثاني: مدارات الروابط

27..... 1-II- مقدمة

27..... 2-II- البنية البلورية

29..... 3-II- إنشاء الهجائن SP^3

30..... 4-II- إنشاء مدارات الروابط

الفصل الثالث : طريقة الكمون الكاذب

33..... 1-III- مقدمة

33..... 2-III- الشكل الرياضي للطريقة

35..... 1-2-III- حساب عناصر مصفوفة الكمون الكاذب

38..... 2-2-III- نماذج الكمون الكاذب

38..... 1-2-2-III- النموذج المحلي

38..... 2-2-2-III- النموذج الغير محلي

39..... 3-2-III- الطريقة التجريبية للكمون الكاذب (E.P.M)

39..... 1-3-2-III- التقريب التجريبي المحلي

النتائج ومناقشتها

الفصل الرابع:

- 43.....1-IV- مقدمة
- 44.....2-IV- الإستقطابية α_p
- 46.....3-IV- الشحنة الفعالة المستعرضة e_T^*
- 50.....4-IV- ثوابت المرونة C_{44}, C_{12}, C_{11}
- 60.....5-IV- معامل المرونة الحجمي β_s
- 64.....6-IV- معامل القص C'
- 66.....7-IV- معامل لا تماثل المناحي A
- 68.....8-IV- الأيونية f_i
- 72.....1-8-IV- النسبة $\frac{\beta}{\alpha}$ بدلالة الأيونية f_i
- 74.....2-8-IV- معامل المرونة الحجمي المختزل β' و معامل القص المختزل C'_s بدلالة الأيونية f_i
- 77.....9-IV- معامل يونغ y_0
- 79.....10-IV- معامل بواسن δ_0
- 81.....الخلاصة العامة
- /.....المراجع

مقدمة عامة

مؤخرا زادت أهمية مركبات أنصاف النواقل V-III لأن طاقة بينة عصاباتهما و ثوابت شبكتها يمكن أن تتغير و تتشكل بشكل مستقل. إن سلوك البنى البلورية الغير متجانسة للأجهزة الكهرو إشعاعية (Electroluminscent) (صمام ثنائي لإصدار الضوء و صمام ثنائي لليزر) يعرف من خلال معرفة ثوابت المرونة و خواصها الخاصة و التي تكون ضرورية [1]. لذلك فإن الخواص المر ونية للمركبات أنصاف النواقل هامة.

تملك أنصاف النواقل V-III بنية بلورية سداسية (Wurtzite) [4,3,2]. بفعل النجاح الذي حققته هذه المجموعة في تصنيع المركبات الكهرو ضوئية، كما أن لها بنية بلورية مكعبة و التي نسميها بنية زنك-بلاند [8,7,6,5]. هذه الأخيرة لها أهمية كبيرة في التكنولوجيا مقارنة بالتي لها بنية سداسية.

إن معالجة خواص الأجسام التي تكون لها استعمالات خاصة فيما بينها، مثل النواقل الكهربائية أو المغناط لا يتم إلا بمعرفة الخواص الميكانيكية لهذه الأجسام الصلبة، أي بسلوك الجسم الصلب تحت تأثير فعل القوة التي يخضع لها. الكثير من النماذج التي أعطتنا عدد كبير من الخدمات كالخواص الحرارية، الكهربائية و المغناطيسية و التي تكون غير كافية بدون معرفة الخواص الميكانيكية للأجسام الصلبة [9].

تدرس نظرية المرونة العلاقة بين التشوهات التي يخضع لها الجسم الصلب و نظام القوى المطبقة عليه. في الحقيقة إذا توقفنا عند حدود التشوهات الصغيرة، فإن تحليل السلوك العكوسي (المروني) لمادة يستوجب دراسة بعض أنواع التشوهات البسيطة و تحديد ثوابت المرونة الموافقة. هذه التشوهات البسيطة مثل الكبس، التمدد، القص الخ [10].

الهدف من هذا البحث هو دراسة الخواص الميكانيكية و حساب ثوابت المرونة للمركبات أنصاف النواقل الثنائية ذات بنية زنك- بلا ند.

في الواقع إن دراسة الخواص الإلكترونية للأجسام الصلبة يتطلب معرفة الخواص الميكانيكية و خاصة ثوابت المرونة التي تعبر عن استجابة الجسم الصلب للإجهاد المطبق عليه [11].

ندرس في هذا العمل الخواص المر ونية للأجسام الصلبة (البلورات المكعبة لأنصاف النواقل الثنائية ذات بنية زنك- بلاند) و المتمثلة في ممتد الإجهاد، ممتد التشوه، قانون هوك و طاقة المرونة ثم نتعرف على معاملات المرونة للبلورات المكعبة. لدراسة الخواص الميكانيكية و حساب ثوابت المرونة اتبعنا في هذا العمل طريقة الكمون الكاذب المقرونة بنموذج Harrison لمدارات الروابط للمركبات أنصاف النواقل الثنائية ذات بنية زنك-بلا ند حتى نستطيع حساب الكميات الفيزيائية التي نرغب في الحصول عليها. خطة عملنا المقدمة في هذه الأطروحة هي كالآتي:

الفصل الأول كان عبارة عن دراسة الخواص المرورية الأجسام الصلبة للمركبات أنصاف النواقل
الثنائية المكعبة.

أما في الفصل الثاني فقد قدمنا فيه نموذج Harrison لمدارات الروابط .

الفصل الثالث عرفنا طريقة الكمون التجريبية التي تستعمل في حساباتنا.

أما في الفصل الرابع فلخصنا النتائج المحصل عليها في هذا العمل، المصحوبة بالمناقشة والتفسير

بمقارنتها ببعض الأعمال النظرية و التجريبية لأنصاف النواقل الثنائية ذات بنية زنك- بلا ند.

أخيراً، نختم عملنا بخلاصة عامة لهذه الدراسة.

خواص مرونة البلورات

1.I مقدمة:

تدرس نظرية المرونة العلاقة بين التشوه الذي نحدثه على جسم صلب والقوى المطبقة عليه. تحليل السلوك العكوسي (المرن) للمادة تأخذ دراسة لبعض أنواع التشوهات البسيطة و تحدد ثوابت المرونة الموافقة. إذا أحدث التأثير الخارجي (القوى الخارجية) ينتقل، بحكم الترابط بين عناصره، إلى بقية مناطق الجسم على هيئة موجات مرونة. حيث يعرف سلوك المادة ببعض العوامل، التي يمكن قياسها. الجسم المتجانس يمكن أن يكون غير متماثل المناحي؛ التشوه المحدث بواسطة إجهاد لا يتعلق بحجمها، لكن يتعلق أيضا باتجاهها. وهذا ما يكون عموما في البلورات. عدد العوامل التي تميز الجسم الصلب تبعا لطبيعة تناظر الوسط؛ الحسابات معقدة لكن يمكن الحصول عليها نظريا.

2.I ممتد الإجهاد:

القوى المؤثرة على دقائق الجسم الصلب تنتقل إليها عن طريق السطح الخارجي. وهذه القوى تكون على علاقة مع المساحة من سطح الجسم الصلب الذي تؤثر عليه، وهي تقاس بالنسبة إلى وحدة المساحة و تسمى عندئذ بالإجهاد. والإجهاد يكون منتظما إذا كانت القوى المؤثرة على عناصر السطح لها هيئة وتوجه معين لا يعتمد على موقع عنصر سطح الجسم.

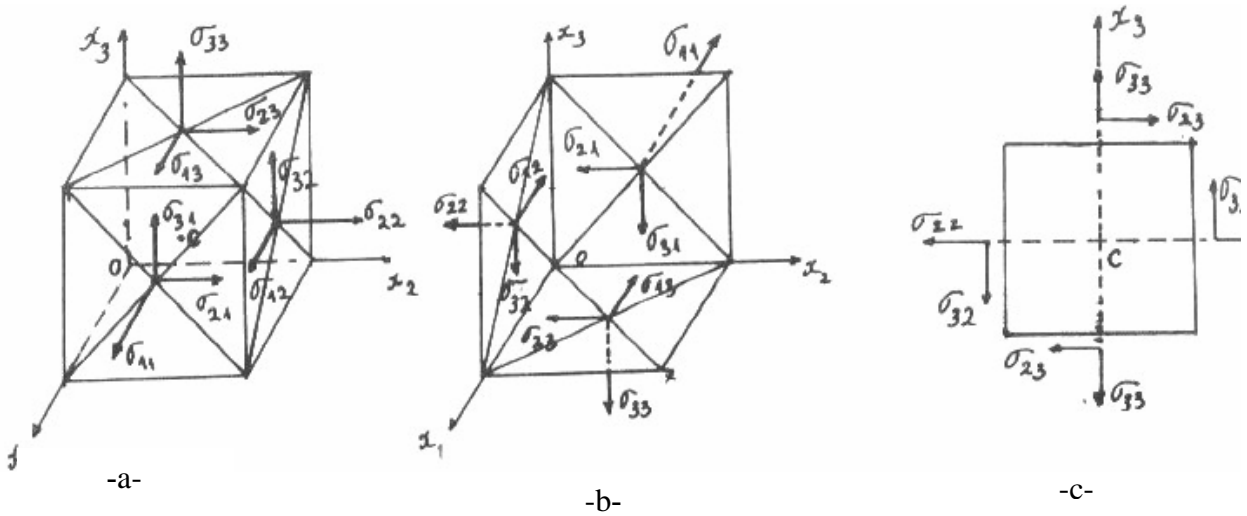
ندرس الحالة التي يكون فيها الإجهاد منتظما في كل الجسم الصلب، بحيث تقع كل عناصر الجسم بوضع التوازن الميكانيكي. وندرس من هذا الجسم مكعبا أحاديا (طول ضلعه وحدة واحدة) و حروفه هي المركبات الكارتيزية كما في الشكل (1.I). خلال كل سطح من سطوح المكعب تنتقل إلى النقاط الداخلية قوة متأتية من الأجزاء الخارجية للجسم. وحيث أن القوة تتحلل إلى ثلاث مركبات، و أن العمود على أي سطح \bar{n} له مركبات كارتيزية أيضا؛ لذلك نرمز بالرمز σ_{ij} للإجهادات.

σ_{ij} : هو مركبة الإجهاد التي تصنعها القوة في الاتجاه ox_i وذلك بتأثيرها على وحدة المساحة العمودية على ox_j . فمثلا σ_{32} هي مركبة الإجهاد الناتجة عن تأثير مركبة القوة باتجاه x_3 و التي تؤثر على وحدة المساحة العمودية على x_2 . والشكل (1a.I) يبين مركبات الإجهاد σ_{ij} الموجبة اصطلاحا (الموجبة هي المركبات الساحبة) الثلاثة وجوه المكعب، والشكل (1b.I) للوجوه الثلاثة الأخرى الغير مرئية بالنسبة للشكل (1a.I). المركبات σ_{ii} تسمى العمودية و المركبات $\sigma_{ij} (i \neq j)$ تسمى المماسية أو الانزياحية.

نأخذ مستويا مارا من منتصف المكعب، موازيا للمستوي $(x_2 - x_3)$ ، ونحدد مركبات الإجهاد المؤثرة عليه كما في الشكل (1c.I). وشروط التوازن الستاتيكي للمركبات الانزياحية تحقق العلاقة العامة التالية:

$$\sigma_{ij} = \sigma_{ji} \quad (i, j=1,2,3) \quad (I.1)$$

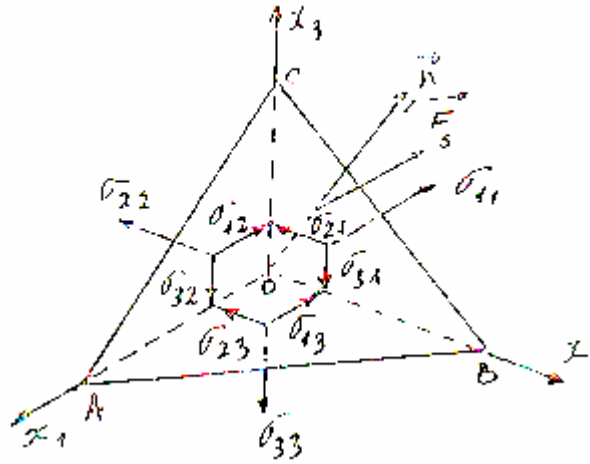
و من هذا يتبين أن حالة الإجهاد توصف كاملة بستة مركبات مستقلة؛ ثلاثة عمودية $\sigma_{11}, \sigma_{22}, \sigma_{33}$ ، وثلاثة انزياحية $\sigma_{12}, \sigma_{13}, \sigma_{23}$. و المعادلة (I.1) تكون صحيحة حتى إذا كان الإجهاد غير منظم، عندئذ لا يقع الجسم في حالة التوازن الستاتيكي.



الشكل I. 1. مركبات الإجهاد σ_{ij} .

بعد وصفنا لحالة الإجهاد نبين الآن أن مركبات الإجهاد تشكل ممتد (tensor) و أن الإجهاد هو كمية فيزيائية ممتدة. و لعمل ذلك يجب توضيح أن مركبات الإجهاد σ_{ij} تربط مركبات شعاعين هما شعاع القوة

المؤثرة على وحدة مساحة \vec{F}_S و الشعاع \vec{n} العمود على تلك المساحة. نختار داخل الجسم المجهد حجم صغير بهيئة رباعي الوجوه كما في الشكل (2.I).



الشكل 2.I تمثيل المركبات الموجبة و السالبة للإجهاد.

نعين على الوجوه OBC , OAB , OAC المركبات الموجبة للإجهاد كما في الشكل (1b.I). القوة \vec{F}_S المؤثرة على وحدة مساحات الوجه ABC (مساحة الوجه ABC تساوي S_{ABC})، لذلك فإن القوة الكلية المؤثرة على الوجه ABC تساوي $\vec{F}_S S_{ABC}$. و القوة \vec{F}_S تميل عن العمود \vec{n} على المساحة ABC . والقوى

المؤثرة على الوجوه الثلاثة المتعامدة OBC , OAB , OAC تستنتج بدلالة مركبات الإجهاد الذي تعاني منه مساحاتها. المجموع الجبري للقوى الموازية للمحور ox_1 و المؤثرة على كل وجوه رباعي الوجوه هو كمية معدومة بسبب التوازن الستاتيكي، أي :

$$F_1 S_{ABC} = \sigma_{11} S_{OBC} + \sigma_{12} S_{OAC} + \sigma_{13} S_{OAB} \quad (I.2)$$

فلو كانت θ, β, α هي زوايا توجيه الشعاع \vec{n} :

$$\vec{n} = (\cos \alpha, \cos \beta, \cos \theta) = (n_1, n_2, n_3) \quad (I.3)$$

$$\vec{n} = n_1 \hat{x}_1 + n_2 \hat{x}_2 + n_3 \hat{x}_3 \quad (I.4)$$

\hat{x}_1 : وحدة الشعاع باتجاه المحور x_1 .

$$S_{ABC} \vec{n} = S_{OBC} \hat{x}_1 + S_{OAC} \hat{x}_2 + S_{OAB} \hat{x}_3 \quad (I.5)$$

و هذه العلاقة تصح للمساحات العنصرية:

$$d\vec{S} = dx_2 dx_3 \hat{x}_1 + dx_1 dx_3 \hat{x}_2 + dx_1 dx_2 \hat{x}_3 \quad (I.6)$$

وبعمل الجداء السلمي لطرفي المعادلة (I.5) مع \hat{x}_1 ثم \hat{x}_2 ثم \hat{x}_3 و بما أن:

$$\vec{n} \hat{x}_1 = n_1 \quad (I.7.a)$$

$$\vec{n} \hat{x}_2 = n_2 \quad (I.7.b)$$

$$\vec{n} \hat{x}_3 = n_3 \quad (I.7.c)$$

نجد:

$$S_{OBC} = S_{ABC} n_1 \quad (I.8.a)$$

$$S_{OAC} = S_{ABC} n_2 \quad (I.8.b)$$

$$S_{OAB} = S_{ABC} n_3 \quad (I.8.c)$$

إذن:

$$F_1 = \sigma_{11}n_1 + \sigma_{12}n_2 + \sigma_{13}n_3 \quad (I.9)$$

و بنفس الأسلوب نجد:

$$F_2 = \sigma_{21}n_1 + \sigma_{22}n_2 + \sigma_{23}n_3 \quad (I.10)$$

$$F_3 = \sigma_{31}n_1 + \sigma_{32}n_2 + \sigma_{33}n_3 \quad (I.11)$$

وتكتب المعادلات (I.9) و (I.10) و (I.11) بالصورة العامة الرمزية:

$$\vec{F}_s = \vec{\sigma} \vec{n} \quad (I.12)$$

حيث :

$\vec{\sigma}$: يرمز إلى ممتد الإجهاد. معنى هذا أن القيم σ_{ij} تربط مركبات شعاعين لذلك فهي تشكل ممتد ثنائي الرتبة عدد عناصره ستة لأنه متناظر، قيم عناصر الممتد $[\sigma_{ij}]$:

$$[\sigma_{ij}] = \begin{bmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & \sigma_{13} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} & \sigma_{23} \\ \sigma_{31} & \sigma_{32} & \sigma_{33} \end{bmatrix} \quad (I.13)$$

تعتمد على اختيار نظام الإحداثيات المرتبطة مع البلورة المجهدة. فإذا غيرنا نظام الإحداثيات من $(\Sigma x_1 x_2 x_3)$ إلى أخرى كارتيزية أيضا $(\Sigma' x'_1 x'_2 x'_3)$ فإن قيم عناصر الممتد ستتغير حسب العلاقة التالية:

$$\sigma'_{ij} = \sum_{k,l} C_{ik} C_{jl} \sigma_{kl} \quad (I.14)$$

حيث :

σ'_{ij} : عناصر الممتد بالنسبة للإحداثيات الجديدة Σ' .

σ_{ij} : عناصر الممتد بالنسبة للإحداثيات القديمة Σ .

c_{jl} و c_{ik} : جيوب تمام التوجيه التي تعين توجهات المحاور الجديدة ($\Sigma'x_1x_2x_3$) بالنسبة للمحاور القديمة ($\Sigma x_1x_2x_3$). فمثلا: c_{12} هي جيب تمام الزاوية بين x_1 و x_2 .

و نذكر بوجود معكوس للعلاقة (I.14) و هي:

$$\sigma_{ij} = \sum_{k,l} C_{ki} C_{lj} \sigma'_{kl} \quad (I.15)$$

حيث:

c_{ki} : (مثلا) هي جيب تمام الزاوية بين المحور x_i و x_k أو هي جيوب تمام توجيه Σ' بالنسبة لـ Σ . و يستفاد من العلاقتين (I.14) و (I.15) فيما يلي:

أ- حساب الإجهاد باتجاه معين و ليكن $\vec{n}(n_1, n_2, n_3)$ بمعرفة ممتد الإجهاد $[\sigma_{ij}]$ بالنسبة للإحداثيات Σ عندئذ نجعل المحور x_3 (في مجموعة إحداثيات Σ') منطبقا على \vec{n} ، وبالتالي فالإجهاد بالاتجاه \vec{n} يساوي:

$$\sigma_n = \sigma_{33} = \sum_{k,l} c_{3k} c_{3l} \sigma_{kl} \quad (I.16)$$

$$\sigma_n = \sum_{k,l} n_k n_l \sigma_{kl} \quad (I.17)$$

ب- باختيار نظام للإحداثيات Σ' نستطيع تحويل الممتد $[\sigma_{ij}]$ - المعادلة (I.13) - إلى ممتد قطري بالشكل التالي:

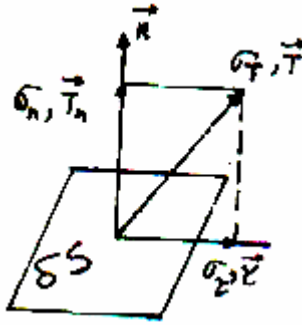
$$\begin{bmatrix} \sigma^{(1)} & 0 & 0 \\ 0 & \sigma^{(2)} & 0 \\ 0 & 0 & \sigma^{(3)} \end{bmatrix} \quad (I.18)$$

هذه الإحداثيات المنتقاة Σ' تسمى بالمحاور الرئيسية، و القيم $\sigma^{(1)}, \sigma^{(2)}, \sigma^{(3)}$ تسمى بالإجهادات الرئيسية. وتتميز المحاور الرئيسية بانعدام الإجهادات الانزياحية (المماسية) المؤثرة على المساحات العمودية؛ على تلك المحاور الرئيسية.

و لمركبات الإجهاد وحدات (القوة / المساحة) أو وحدات (الطاقة / الحجم) ونذكر أن الإجهاد هو كمية تعبر أساسا عن القوة الخارجية المؤثرة على البلورة، لذلك فممتد الإجهاد لا يعتمد على تناظر البلورة المتأثرة به. و يكون للإجهاد معنى ليس فقط للبلورات بل وأيضا للأجسام المتماثلة المناحي الواقعة تحت تأثيره. مثل هذا

الممتد يسمى حقلي و هو على اختلاف مع الممتدات المادية التي تصف خواص البلورة الفيزيائية و المرتبطة مع تناظر البلورة مثل ممتد التوصيلة الكهربائية.

وعند حل المسائل العملية غالبا ما نحتاج إلى الكميات التالية:



الشكل 3.I الإجهاد العمودي والمماسي.

أ- الإجهاد الكلي σ_T المؤثر على مساحة اختيارية (δS ذات العمود $\vec{n} = (n_1, n_2, n_3)$ كما في الشكل (3.I). نعرف أولاً ما يسمى بشعاع الإجهاد الكلي المؤثر على المساحة δS :

$$\vec{T} = \vec{\sigma n} \quad (I.19)$$

مع:

$$T_i = \sum_{j=1}^3 \sigma_{ij} n_j \quad (I.20)$$

حيث:

$\vec{\sigma}$: ممتد الإجهاد المؤثر على الجسم المدروس.

δS : مساحة جزء من الجسم المدروس.

وقيمة هذا الشعاع $|\vec{T}|$ تمثل الإجهاد الكلي σ_T ، أي:

$$\sigma_T = |\vec{T}| \quad (I.21)$$

ب- الإجهاد العمودي σ_n على المساحة δS أعلاه، يحسب من مسقط شعاع الإجهاد الكلي \vec{T} على العمود:

$$\sigma_n = T_n = \vec{T} \cdot \vec{n} = (\vec{\sigma n}) \cdot \vec{n} \quad (I.22)$$

$$\sigma_n = \sum_{i,j} \sigma_{ij} n_i n_j \quad (I.23)$$

ج- الإجهاد المماسي σ_τ للمساحة δS أعلاه يساوي:

$$\sigma_\tau = \sqrt{\sigma_T^2 - \sigma_n^2} \quad (I.24)$$

د- معدل الإجهاد σ_m يساوي:

$$\sigma_m = \frac{(\sigma_{11} + \sigma_{22} + \sigma_{33})}{3} \quad (I.25)$$

و- الإجهاد الفعال:

$$\langle \sigma^2 \rangle = \frac{1}{2} [(\sigma_{11} - \sigma_{22})^2 + (\sigma_{22} - \sigma_{33})^2 + (\sigma_{33} - \sigma_{11})^2 + 3(\sigma_{12}^2 + \sigma_{23}^2 + \sigma_{31}^2)] \quad (I.26)$$

و اعتمادا على فكرة شعاع الإجهاد الرئيسي نستطيع اشتقاق علاقة تحسب منها مركبات الإجهاد بالنسبة للمحاور Σ' المشتركة مع المحاور Σ بنقطة الأصل:

$$\vec{\sigma}' = \vec{A} \cdot \vec{\sigma} \cdot \vec{A}^{-1} \quad (I.27)$$

حيث:

$\vec{\sigma}, \vec{\sigma}'$: هما ممتدا الإجهاد بالنسبة للمحاور Σ و Σ' على التوالي.

\vec{A} : هو ممتد العبور (التحويل)، عناصره متكونة من جيوب تمام توجيه المحاور Σ' بالنسبة للمحاور Σ .

\vec{A}^{-1} : معكوس الممتد \vec{A} و يحسب بالمصفوفات.

حيث:

$\vec{\sigma}, \vec{\sigma}'$: هما ممتدا الإجهاد بالنسبة للمحاور Σ و Σ' على التوالي.

3.I ممتد التشوه (tensor of deformation) :

تحت تأثير القوى الخارجية على جسم ما فإن ذراته ستتحرف عن مواقعها الأصلية (وهذه القوة تنتقل عبر السطح إلى كل الداخل بسبب الرابطة بين الذرات). ويحدث التشوه في الجسم عند حصول الانحراف النسبي لذراته بالنسبة لبعضها. عندما يكون التأثير الخارجي (الإجهاد) قليلا فإن التشوه سيكون قليلا وعكوسيا (reversible) أي أنه بإزالة التأثير الخارجي تعود ذرات الجسم إلى وضعها الأصلي قبل التشوه؛ مثل هذا التشوه يسمى مرنا. ولكنه عندما يكون الإجهاد الخارجي كبيرا فإن التشوه سيكون كبيرا ويتجاوز حدود مرونة الجسم وبالتالي يكون غير عكوسي: أي لا تعود ذرات الجسم إلى مواقعها الأصلية قبل التشوه عند إزالة الإجهاد الخارجي؛ مثل هذا التشوه يدعى لدائني (plastic).

والدراسة التحليلية تتناول التشوه المرن الصغير الذي يحصل تحت تأثير قوى خارجية غير كبيرة نسبيا. و لوصف تشوه الجسم نربط معه إحداثيات كارتيزية Σ' مفترضين عدم تشوها عند تشوه الجسم، أي ندرس انزياحات نقاط الجسم المشوه بالنسبة للإحداثيات الكارتيزية المرتبطة مع الحالة الغير مشوهة للجسم. والشكل (4.I) يمثل نقطتا الجسم A و B اللتان ستحتلان الموقعان A' و B' عند التشوه.

متجه الموقع النسبي قبل التشوه $\Delta \vec{r}$ يصبح $\Delta \vec{r} + \Delta \vec{u}$ بعد التشوه. وإذا كان $\Delta \vec{u} = 0$ لكل نقاط الجسم لا يحدث تشوه. شرط التشوه هو $\Delta \vec{u} \neq 0$ أي أن الانزياح دالة للإحداثيات:

$$\vec{u} = \vec{u}(x_1, x_2, x_3) \quad (\text{I.28})$$

و التشوه المنتظم يعرف على أنه حالة التشوه التي فيها تتناسب مركبات الانزياح \vec{u} لأية نقطة من نقاط الجسم خطيا مع إحداثيات تلك النقطة، أي أن:

$$u_1 = \varepsilon_{11}x_1 + \varepsilon_{12}x_2 + \varepsilon_{13}x_3 \quad (\text{I.29.a})$$

$$u_2 = \varepsilon_{21}x_1 + \varepsilon_{22}x_2 + \varepsilon_{23}x_3 \quad (\text{I.29.b})$$

$$u_3 = \varepsilon_{31}x_1 + \varepsilon_{32}x_2 + \varepsilon_{33}x_3 \quad (\text{I.29.c})$$

أو:

$$u_i = \sum_{j=1}^3 \varepsilon_{ij}x_j \quad (i = 1,2,3) \quad (\text{I.30})$$

أو بالصورة الرمزية:

$$\vec{u} = \vec{\varepsilon} \vec{r} \quad (\text{I.31})$$

معنى هذا أن ثوابت التناسب ε_{ij} تربط مركبات شعاعين، لذلك فهي تشكل ممتد:

$$[\varepsilon_{ij}] = \begin{bmatrix} \varepsilon_{11} & \varepsilon_{12} & \varepsilon_{13} \\ \varepsilon_{21} & \varepsilon_{22} & \varepsilon_{23} \\ \varepsilon_{31} & \varepsilon_{32} & \varepsilon_{33} \end{bmatrix} \quad (\text{I.32})$$

$[\varepsilon_{ij}]$: يسمى ممتد الانزياحات الصغيرة. و لمعرفة عناصر ممتد الانزياحات الصغيرة ندرس نمو مركبات

شعاع الانزياح، بحيث أن: $u_1(x_1, x_2, x_3), u_2(x_1, x_2, x_3)$ و $u_3(x_1, x_2, x_3)$ ، إذن نمو المركبات u_3, u_2, u_1 داخل الجسم المشوه تشوها منتظما:

$$\Delta u_1 = \frac{\partial u_1}{\partial x_1} \Delta x_1 + \frac{\partial u_1}{\partial x_2} \Delta x_2 + \frac{\partial u_1}{\partial x_3} \Delta x_3 \quad (\text{I.33.a})$$

$$\Delta u_2 = \frac{\partial u_2}{\partial x_1} \Delta x_1 + \frac{\partial u_2}{\partial x_2} \Delta x_2 + \frac{\partial u_2}{\partial x_3} \Delta x_3 \quad (\text{I.33.b})$$

$$\Delta u_3 = \frac{\partial u_3}{\partial x_1} \Delta x_1 + \frac{\partial u_3}{\partial x_2} \Delta x_2 + \frac{\partial u_3}{\partial x_3} \Delta x_3 \quad (\text{I.33.c})$$

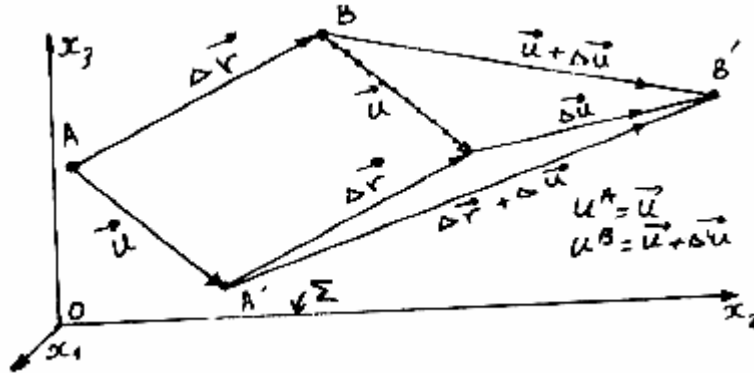
و الكميات:

$$\varepsilon_{ij} = \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \quad (\text{I.34})$$

التي لا تعتمد على قيم الانزياحات هي مركبات ممتد التشوه وتكتب المعادلات (I.33.a)، (I.33.b) و (I.33.c) بالشكل التالي:

$$\Delta u_i = \sum_{j=1}^3 \varepsilon_{ij} \Delta x_j \quad (i = 1,2,3) \quad (\text{I.35})$$

أي أن عناصر ممتد التشوه تربط مركبات شعاعين هما $\Delta \vec{u}$ و هو شعاع الإزاحة النسبية لنقاط الجسم و $\Delta \vec{r}(\Delta x_1, \Delta x_2, \Delta x_3)$ متجه الموضع النسبي قبل التشوه الشكل (4.I).



الشكل 4.I عناصر ممتد التشوه.

وعلى العموم نقول أن ε_{ii} ($i = 1,2,3$) هي معاملات تصف التمدد النوعي بموازاة مع ox_1 و ox_2 و ox_3 على التوالي و تكون موجبة في حالة التمدد. والممتد $[\varepsilon_{ij}]$ يكون عموماً غير متناظر، وهو كأى ممتد من

الرتبة الثانية يمكن تصوره كمجموع ممتدين الأول متناظر و الثاني ضد متناظر (الممتد المتناظر يتميز بكون $\varepsilon_{ij} = \varepsilon_{ji}$ و الممتد الضد – متناظر يتميز بكون $\varepsilon_{ij} = -\varepsilon_{ji}$ و كون $\varepsilon_{ii} = 0$ أي أن:

$$\varepsilon_{ij} = e_{ij} + w_{ij} \quad (I.36)$$

حيث:

$$e_{ij} = \frac{1}{2}(\varepsilon_{ij} + \varepsilon_{ji}) = e_{ji} \quad (I.37)$$

$$w_{ij} = \frac{1}{2}(\varepsilon_{ij} - \varepsilon_{ji}) = -w_{ji} \quad (I.38)$$

مع:

e_{ij} : الممتد المتناظر.

w_{ij} : الممتد الضد – متناظر.

ندرس الممتد ضد – متناظر المتميز بالخصائص التالية:

$$w_{ij} = 0 \quad (i = j) \quad (I.39)$$

$$w_{ij} + w_{ji} = 0 \quad (i \neq j) \quad (I.40)$$

عندئذ نحصل على:

$$du_i = \sum_{j=1}^3 w_{ij} dx_j \quad (I.41)$$

وبضرب الطرفين في dx_i وإجراء الجمع نحصل على:

$$\sum_{i=1}^3 du_i dx_i = \sum_{i,j=1}^3 w_{ij} dx_i dx_j = 0 \quad (I.42)$$

و ذلك بتطبيق شروط الممتد الضد – متناظر. الطرف الأيسر للمعادلة (I.41) يمثل الجداء السلمي بين شعاع الانزياح و شعاع متجه الموقع لأية نقطة من نقاط الجسم وهو كمية معدومة. و هذا يعني تعامد شعاع

انزياح أية نقطة من نقاط الجسم الصلب مع متجه الموقع المحسوبان بالنسبة لنقطة مثبتة o' من نقاط الجسم. إن هذا بدوره يعني أن الممتد $[w_{ij}]$ مناسب لعملية دوران محض لنقاط الجسم حول محور يمر بنقطة الجسم o' . لهذا، فالجزء المتناظر من الممتد $[e_{ij}]$ (و هو $[e_{ij}]$ الذي يصف التشوه) و يأخذ الشكل التالي:

$$[e_{ij}] = \begin{bmatrix} e_{11} & e_{12} & e_{13} \\ e_{21} & e_{22} & e_{23} \\ e_{31} & e_{32} & e_{33} \end{bmatrix} \quad (I.43)$$

$$[e_{ij}] = \begin{bmatrix} \varepsilon_{11} & \frac{1}{2}(\varepsilon_{12} + \varepsilon_{21}) & \varepsilon_{13} \\ \frac{1}{2}(\varepsilon_{12} + \varepsilon_{21}) & \varepsilon_{22} & \frac{1}{2}(\varepsilon_{23} + \varepsilon_{32}) \\ \frac{1}{2}(\varepsilon_{13} + \varepsilon_{31}) & \frac{1}{2}(\varepsilon_{23} + \varepsilon_{32}) & \varepsilon_{33} \end{bmatrix} \quad (I.44)$$

و الانزياح بسبب التشوه فقط يخضع للعلاقة التالية:

$$\Delta u_i = \sum_{j=1}^3 e_{ij} \Delta x_j \quad (i = 1,2,3) \quad (I.45)$$

المركبات القطرية للممتد $[e_{ij}]$ تحمل نفس معنى المركبات القطرية لممتد الانزياحات الصغيرة $[\varepsilon_{ij}]$ أي تصف التمدد أو الكبس الطولي. بينما المركبات اللاقطرية فتصف الانزياح الزاوي.

إن التشوه هو عملية تغيير الأطوال و زوايا العينة البلورية و بالتالي يحدث تغييرا بالحجم. ندرس الآن التغير النسبي بالحجم تحت تأثير الكبس الهيدروستاتيكي الموصوف بممتد الإجهاد التالي:

$$[\sigma_{ij}] = \begin{bmatrix} -\Delta P & 0 & 0 \\ 0 & -\Delta P & 0 \\ 0 & 0 & -\Delta P \end{bmatrix} \quad (I.46)$$

$$\sigma_{ij} = -\Delta p \delta_{ij} \quad (I.47)$$

تحت تأثير هذا الإجهاد يتغير حجم متوازي السطوح (العينة) من الكمية $V = \Delta x_1 \Delta x_2 \Delta x_3$ إلى $V' = \Delta x'_1 \Delta x'_2 \Delta x'_3$ (مفترضين عدم تغيير الزوايا بين الأحرف المنطبقة على الإحداثيات الكارتيزية). بما أن e_{ii} هو التشوه النسبي الطولي على امتداد x_i ، إذن:

$$e_{ii} = \frac{\Delta x'_i - \Delta x_i}{\Delta x_i} \quad (I.48)$$

(حالة الكبس: $e_{ii} < 0$).

حيث $\Delta x'_i$ هو الطول الجديد لـ Δx_i بسبب التشوه، إذن:

$$\Delta x'_i = (1 + e_{ii})\Delta x_i \quad (I.49)$$

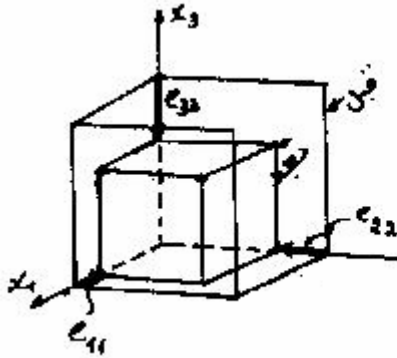
و منه نجد الحجم الجديد بعد التشوه:

$$V' = \Delta x'_1 \Delta x'_2 \Delta x'_3 = V(1 + e_{11})(1 + e_{22})(1 + e_{33}) \quad (I.50)$$

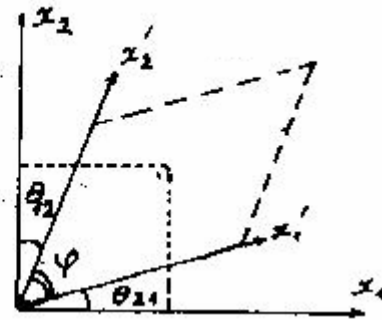
و التغير النسبي في الحجم يساوي:

$$\delta = \frac{\Delta V}{V} = \frac{V' - V}{V} \approx e_{11} + e_{22} + e_{33} = \sum_{i=1}^3 e_{ii} \quad (I.51)$$

بعد إهمال الحدود المتكونة من ضرب معاملات التشوه الصغيرة (مثلا $e_{11}e_{33}$)؛ انظر الشكل (a.5.I).



-a-



-b-

الشكل 5.I تغير حجم متوازي المستطيلات تحت تأثير الإجهاد.

و يجب أن لا يفوتنا أن نذكر بأن ممتد التشوه $[e_{ij}]$ يخضع لجميع الأساليب الرياضية في التعامل مع الممتدات المتناظرة من الرتبة الثانية. فمثلا بالإمكان جعل ممتد التشوه $[e_{ij}]$ قطريا باختيار ملائم للإحداثيات التي تسمى عندئذ بالمحاور الرئيسية:

$$\begin{bmatrix} e_{11} & e_{12} & e_{13} \\ e_{21} & e_{22} & e_{23} \\ e_{31} & e_{32} & e_{33} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} e^{(1)} & 0 & 0 \\ 0 & e^{(2)} & 0 \\ 0 & 0 & e^{(3)} \end{bmatrix} \quad (\text{I.52})$$

حيث $e^{(1)}, e^{(2)}, e^{(3)}$ تسمى معاملات التشوه الرئيسية.

نعلم أن رد فعل البلورة الموصوف بممتد التشوه لا يمثل خاصية فيزيائية متعلقة بها وحدها. فرد الفعل هذا لا يعتمد على البلورة و على التأثير الخارجي. معنى هذا أن ممتد التشوه حقلي. و عندما يكون التشوه غير منتظم تصح كل العلاقات أعلاه في نقطة واحدة من نقاط الجسم، أي أن العلاقات أعلاه ستعتمد على موقع نقطة الجسم.

I.4 قانون هوك:

قلنا بأن تشوه جسم يكون عكوسيا إذا لم يبلغ الإجهاد المسلط حدا معيناً يسمى حد المرونة، بعد حد المرونة يكون التشوه غير عكوسي. وهذا الحد يعتمد على نوع المادة و يعرف تجريبيا. وعند التشوهات الصغيرة (ضمن حدود المرونة) لوحظ عمليا بأن التشوه متناسب مع الإجهاد المسبب له بعلاقة خطية: و لأغلب المواد الصلبة يستعمل قانون هوك المعمم لوصف علاقة التشوه بالإجهاد: مركبات ممتد التشوه $[e_{ij}]$ في نقطة ما من نقاط الجسم تكون متناسبة مع مركبات ممتد الإجهاد و العكس صحيح، أي:

$$e_{ij} = \sum_{l,m=1}^3 S_{ijlm} \sigma_{lm} \quad (\text{I.53})$$

S_{ijlm} : تسمى معاملات المرونة المطاوعة (أو ثوابت المرونة).

و هذه تمثل تسعة معاملات، كل واحدة تحتوي على تسعة حدود، عدد المعاملات S_{ijlm} يساوي 81 مصفوفة. و من قانون هوك المعكوس نجد:

$$\sigma_{ij} = \sum_{l,m=1}^3 C_{ijlm} e_{lm} \quad (i, j = 1, 2, 3) \quad (\text{I.54})$$

$[C_{ijlm}]$: تسمى مصفوفة معاملات مرونة الصلابة، يبلغ عددها 81 .

حيث أن قيم عناصر المصفوفة تعتمد على اختيار الإحداثيات، معنى هذا أنه عند الانتقال من مجموعة الإحداثيات $(\Sigma x_1, x_2, x_3)$ إلى الإحداثيات $(\Sigma' x'_1, x'_2, x'_3)$ فإن قيم المعاملات S_{ijlm} و C_{ijlm} ستتغير إلى S'_{ijlm} و C'_{ijlm} طبقا للقانون:

$$S'_{knop} = \sum_{i,j,l,m=1}^3 C_{ki} C_{nj} C_{ol} C_{pm} S_{ijlm} \quad (I.55)$$

$$C'_{knop} = \sum_{i,j,l,m=1}^3 C_{ki} C_{nj} C_{ol} C_{pm} C_{ijlm} \quad (I.56)$$

حيث $C_{pm}, C_{ol}, C_{nj}, C_{ki}$ هي جيوب تمام توجيه الإحداثيات Σ' بالنسبة للإحداثيات Σ . لذلك فكل معامل S و C له معنى و قيمة معينة بالنسبة لمجموعة إحداثيات مرتبطة مع البلورة. فإذا كانت مجموعة الإحداثيات منطبقة على مجموعة الإحداثيات الرئيسية للبلورة سميت المعاملات الرئيسية. ولكن ليست كل معاملات المرونة مستقلة و تختلف عن الصفر. فتناظر ممتد التشوه و الإجهاد يجعل مصفوفتا معاملات المرونة S و C متناظران أيضا:

$$S_{ijlm} = S_{imlj}, C_{ijlm} = C_{imlj} \quad (i \leftrightarrow m) \quad (I.57.a)$$

$$S_{ijlm} = S_{ljim}, C_{ijlm} = C_{ljim} \quad (j \leftrightarrow l) \quad (I.57.b)$$

و هذه العلاقات تقلل عدد العناصر المستقلة لمصفوفة معاملات المرونة من 81 إلى 36 عنصر مستقل. أي أن كل قيم S_{ijlm} تحدد ستة قيم لـ il هي :

(11) $x_1 x_1 = 11, x_2 x_2 = 22, x_3 x_3 = 33, x_1 x_2 = 12, x_1 x_3 = 31, x_2 x_3 = 23$ مع ستة قيم لـ jm ، و نلاحظ أن معاملات المرونة لا تتغير عند استبدال $(ij \leftrightarrow lm)$ وبذلك يهبط عددها من 36 إلى 21 معامل مستقل. و بالإمكان إنفاص هذا العدد كثيرا على تناظر البلورة لأن معاملات المرونة S و C تشكل ممتد مادي. كما أنه عند استبدال $(i \leftrightarrow j)$ و $(l \leftrightarrow m)$ لا يؤثر على قيم معاملات المرونة.

و بسبب تناظر مصفوفات معاملات المرونة تستخدم الصيغة الثنائية التعليم S_{pg} و C_{pg} بدلا من الصيغة الرباعية التعليم S_{knop} و C_{knop} . و طبقا لأسلوب التعليم يختصر كل رقمين (ij) أو (lm) برقم واحد p أو g :

$$. 11 \rightarrow 1 , 22 \rightarrow 2 , 33 \rightarrow 3 , 23 \rightarrow 4 , 31 \rightarrow 5 , 12 \rightarrow 6$$

عندئذ تأخذ المعاملات (I.53) و (I.54) الهيئة التالية بالتعليم الثنائي الجديد:

$$e_p = \sum_{g=1}^6 S_{pg} \sigma_g \quad (I.58)$$

$$\sigma_p = \sum_{g=1}^6 C_{pg} e_g \quad (I.59)$$

و هذه المعادلات تعطينا العلاقة بين الكميات e_{ij} و σ_{ij} حيث $(i, j = 1, 2, 3, 4, 5, 6)$ ، أي نحسب كل عناصر الممتد $[e_{ij}]$ من الممتد $[\sigma_{ij}]$. و هذا يحدث بسبب تناظر الممتدان $[e_{ij}]$ و $[\sigma_{ij}]$. أما العلاقة بين S_{ijlm} و S_{pg} فهي كالتالي:

أ- عندما p و g يساويان 1 أو 2 أو 3.

$$S_{ijlm} = S_{pg} \quad (I.60.a)$$

ب- عندما p و g يساويان 4 أو 5 أو 6.

$$2S_{ijlm} = S_{pg} \quad (I.60.b)$$

ج- عندما p أو g يساويان 4 أو 5 أو 6.

$$4S_{ijlm} = S_{pg} \quad (I.60.c)$$

إذا استوجبت الضرورة التحول من التعليم الثنائي ثم إلى التعليم الرباعي و بعد ذلك العودة إلى التعليم الثنائي فلا نحتاج إلى المعادلات (I.60.a)، (I.60.b)، (I.60.c). و كذلك يفضل استخدام المعادلات (I.54) عند حساب $[e_{ij}]$ بدلالة $[\sigma_{ij}]$. معاملات المرونة مرتبطة مع بعضها بالعلاقات التالية:

$$S_{pg} = \frac{(-1)^{p+g} \Delta_{pg}^c}{\Delta^c} \quad (\text{I.61})$$

حيث:

Δ_{pg}^c : هو المحدد الأصغر (minor) يتحصل عليه بإلغاء السطر الأفقي p و العمود g للمحدد المتناظر.

Δ^c : محدد متكون من معاملات المرونة $[C_{pg}]$:

$$\Delta^c = |C_{pg}| = \begin{vmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & C_{14} & C_{15} & C_{16} \\ C_{21} & C_{22} & C_{23} & C_{24} & C_{25} & C_{26} \\ C_{31} & C_{32} & C_{33} & C_{34} & C_{35} & C_{36} \\ C_{41} & C_{42} & C_{43} & C_{44} & C_{45} & C_{46} \\ C_{51} & C_{52} & C_{53} & C_{54} & C_{55} & C_{56} \\ C_{61} & C_{62} & C_{63} & C_{64} & C_{65} & C_{66} \end{vmatrix} \quad (\text{I.62})$$

و بنفس الأسلوب لدينا :

$$C_{pg} = \frac{(-1)^{p+g} \Delta_{pg}^S}{\Delta^S} \quad (\text{I.63})$$

و كذلك لدينا:

$$e_{pg} = \sum_{g=1}^6 S_{pg} \sigma_g = \sum_{g=1}^2 \sum_{r=1}^6 S_{pg} S_{gr} e_r \quad (\text{I.64})$$

إذن:

$$\sum_{g=1}^6 S_{pg} C_{gr} = \delta_{pr} \quad (\text{I.65})$$

حيث δ_{pr} هو رمز كرونكر.

5.I طاقة المرونة:

العمل المنجز على تشوه وحدة حجم بلورة، تشوها بسيطاً يعطى بالعلاقة:

$$dW = \sum_{p=1}^6 \sigma_p de_p \quad (I.66)$$

و ذلك باستعمال قانون هوك المعمم. و عندما يتم التشوه ببطء بحيث يمكن اعتبار عملية التشوه عكوسية ضمن المفاهيم الديناميكية الحرارية فإن التغير النوعي (لوحدة الحجم) المصاحبة للتشوه للطاقة الداخلية dU يحقق المعادلة:

$$dU = dW + dQ \quad (I.67)$$

dQ : كمية التبادل الحراري .

$$dQ = TdS \quad (I.68)$$

حيث:

T : درجة الحرارة المطلقة. و S : الأنتروبي.

إذن:

$$dU = \sum_p \sigma_p de_p + TdS \quad (I.69)$$

و التغير بالطاقة الحرة لوحدة الحجم يساوي:

$$dF = dU - TdS - SdT \quad (I.70)$$

$$dF = \sum_p \sigma_p de_p - SdT \quad (I.71)$$

و نميز حالتين:

أ- عندما تكون عملية التشوه أدياتيكية حيث $dQ = 0$, $dS = 0$ فإن:

$$dU = \sum_p \sigma_p de_p \quad (I.72)$$

ومنه نجد أن:

$$\sigma_p = \sigma_{ij} = \left(\frac{\partial U}{\partial e_{ij}} \right)_S \quad (I.73)$$

ب- عندما تكون عملية التشوه أيزوتارمية حيث $dT = 0$ عندئذ:

$$dF = dW = \sum_p \sigma_p de_p \quad (I.74)$$

$$dF = \sum_{p,g} C_{pg} e_g de_p \quad (I.75)$$

إذن:

$$\left(\frac{\partial F}{\partial e_p} \right)_T = \sum_g C_{pg} e_g \quad (I.76)$$

$$\left(\frac{\partial F}{\partial e_{ij}} \right)_T = \sigma_p = \sigma_{ij} \quad (I.77)$$

و بتفاضل طرفي المعادلة (I.75) جزئيا بالنسبة لـ e_g نجد:

$$\frac{\partial}{\partial e_g} \left(\frac{\partial F}{\partial e_p} \right)_T = C_{pg} \quad (I.78)$$

حيث أن F دالة تعتمد فقط على حالة الجسم، لذلك فإن ترتيب التفاضلات في المعادلة (I.78) لا يؤثر على النتيجة، معنى هذا أن:

$$C_{pg} = C_{gp} \quad (I.79)$$

و على هذا المنوال يكون:

$$S_{pg} = S_{gp} \quad (I.80)$$

أي أن مصفوفتا معاملات و ثوابت المرونة متناظرتان، وبالتالي يهبط عدد المعاملات أو الثوابت المستقلة من 36 إلى 21. و نذكر أن مصفوفتا معاملات و ثوابت المرونة يعتمدان على تناظر البلورة المدروسة، و سنقوم بتحديدتهما للبلورات المكعبة.

من المعادلة (I.65)، نعرف كثافة طاقة التشوه بأنها العمل لوحدة الحجم المنجز لصنع تشوه $[e_{ij}]$ في البلورة. باعتبار C_{pg} متناظرا، و بإجراء التكامل نجد كثافة طاقة التشوه كدالة تربيعية للتشوه:

$$W = \frac{1}{2} \sum_{p,g=1}^6 C_{pg} e_g e_p \quad (I.81)$$

6.I معاملات مرونة البلورات المكعبة :

إن عدد ثوابت أو معاملات المرونة المستقلة يمكن أن يكون أقل من 21 اعتمادا على تناظر البلورة. و سنبين وجود ثلاثة معاملات مستقلة فقط تصف مرونة البلورات المكعبة. و لمعرفة معاملات المرونة نتبع الخطوات التالية:

1- نجري عمليات التناظر الخاصة بالبلورة على المحاور الإحداثية $\Sigma x_1 x_2 x_3$ المرتبطة معها (المحور البلورية لها).

2- نكتب ممتد معاملات المرونة بصيغة التعليم الرباعية:

$$[C_{pg}] \rightarrow [C_{ijlm}] \equiv [C_{x_i x_j x_l x_m}] \quad (I.82)$$

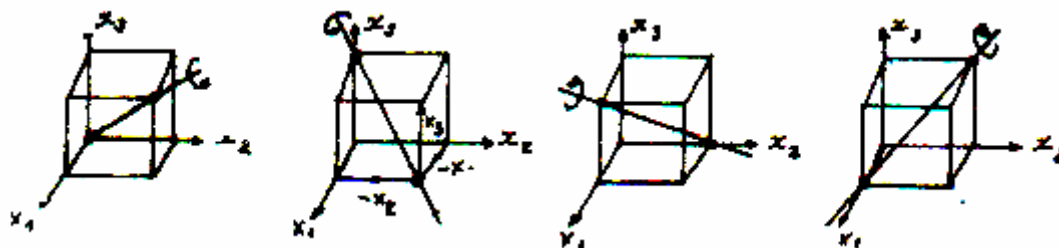
3- نطبق عملية تناظر البلورة على المصفوفة لنحصل على مصفوفة جديدة تقارن مع المصفوفة الأصلية (قبل حدوث عملية التناظر).

4- تجرى عملية التناظر وفقا لقاعدة فومي (قاعدة الاختيار المباشر)؛ تتحول بشكل مشابه لجداء الإحداثيات الكارتيزية لأية نقطة بالشكل التالي:

$$x'_i x'_j x'_k x'_l = C_{im} C_{jn} C_{ko} C_{lp} x_m x_n x_o x_p \quad (I.83)$$

أية بلورة تابعة للفئة المكعبة تتميز كحد أدنى بأربعة محاور تناظر من الدرجة $n = 3$ منطبقة على الاتجاهات $\langle 111 \rangle$. أي أن ثوابت و معاملات المرونة لا تتغير عند تغيير الإحداثيات نتيجة عملية التناظر،

وهي هنا الدوران بزواوية $120^\circ = \frac{2\pi}{3}$ حول أحد الأقطار الفضائية الأربعة للمكعب $\langle 111 \rangle$.



الشكل 6.I محاور التناظر للبلورات المكعبة.

ملاحظات:

• $-x_1 \rightarrow x'_3$

• إن تغير الإحداثيات (نتيجة عملية التناظر) يؤثر على أرقام تعليم ثوابت و معاملات المرونة الموصوفة بالصيغة الرباعية التعليم.

• ضرب الإشارات يتم بالشكل الطبيعي في التحويل :- $1123 \rightarrow -3312$. $x_1x_2x_3x_4 \equiv 1123$

مصفوفة معاملات المرونة $[C_{pg}]$ المتناظرة تكتب بالصورة $[pg]$ أي بهيئة تعليم عناصر المصفوفة، ثم تتحول (pg) إلى $(ijlm)$ كما ورأينا سابقا:

$$(A) \equiv [C_{pg}] = \begin{bmatrix} 11 & 12 & 13 & 14 & 15 & 16 \\ & 22 & 23 & 24 & 25 & 26 \\ & & 33 & 34 & 35 & 36 \\ & & & 44 & 45 & 46 \\ & & & & 55 & 56 \\ & & & & & 66 \end{bmatrix} \quad (I.84)$$

$$(B) \equiv [C_{pg}] = \begin{bmatrix} 1111 & 1122 & 1133 & 1123 & 1131 & 1112 \\ & 2222 & 2233 & 2223 & 2231 & 2212 \\ & & 3333 & 3323 & 3331 & 3312 \\ & & & 2323 & 2331 & 2312 \\ & & & & 3131 & 3112 \\ & & & & & 1212 \end{bmatrix} \quad (I.85)$$

نطبق على عناصر المصفوفة (B) عملية التناظر حتى نتحصل في النهاية على ثلاثة عناصر لا تساوي صفرا. مصفوفة معاملات المرونة ستكون:

$$\begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{12} & C_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} \end{bmatrix} \quad (I.86)$$

و كثافة طاقة المرونة للبلورة المكعبة تساوي [12] :

$$W = \frac{1}{2} \sum_{p,g=1}^6 C_{pg} e_p e_g \quad (\text{I.87})$$

مدارات الروابط

1.II مقدمة:

اقترح Hall [13] نموذج بسيط يسمى التركيب الخطي للمدارات الذرية لعصابة التكافؤ للبنى الماسية. Coulson، Redel و Stocker [14] وسعوا ذلك على الأجسام المؤينة جزئياً و عرفوا الأيونية كطرف في هذا النموذج. حيث اختار العالمان Friedel و Co-Workers [15] نفس الفكرة لمناقشة خواص الرابطة و المواد. تم دراسة الشحنة الفعالة المستعرضة [16] من طرف Lanoo و Decarpigny. تتكون عصابات التكافؤ من تركيبات شديدة الارتباط للمدارات الذرية، حيث يحتوي كل تركيب على هجائن $s - p$ ، وهذا ما يدعو إلى التفكير في الحالات الفيزيائية و الكيميائية للأجسام الصلبة [17].

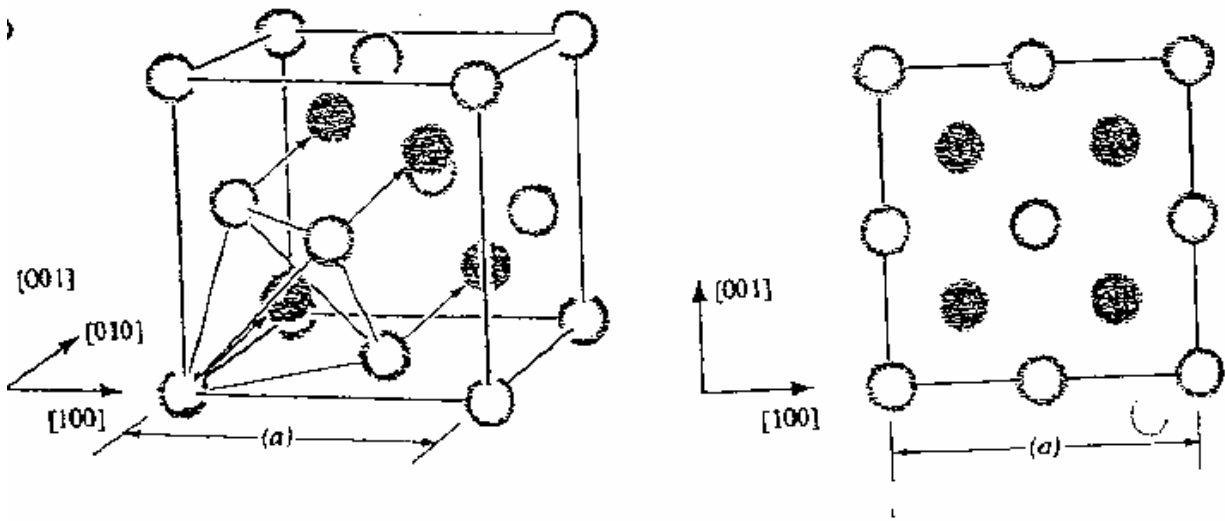
الافتراض الأساسي في دراسة و مناقشة الجزيئات ثنائية الذرة والبلورة CsCl لا يمكن كتابتها على شكل تركيب خطي للمدارات الذرية. إلا أننا لسنا في حاجة للانطلاق من هذا الافتراض بل سنبدأ بوصف الحالات الإلكترونية في الأجسام الصلبة كتركيب خطي للمدارات الرابطة، لأن هذه الأخيرة يمكن كتابتها كتركيب خطي للمدارات الذرية و العكس صحيح. المدارات الرابطة و المدارات الذرية تمثيلاتها متكافئة، إلا أن التفكير في صيغة المدارات الرابطة و المضادة للربط و التي يمكن أن تعد لتتوافق مع الحالات المشغولة و الحالات الفارغة في الأجسام الصلبة التكافؤية- ضرورية لإجراء التقريبات [18].

في طريقنا سنختار التركيبات الخطية أولاً ثم نقوم بتشكيل العناصر المصفوفية للهاملتونيان فيما بينها. لأن هاته العناصر المصفوفية هي المعاملات التي نحتاجها لحساب حالات الرابطة و طاقتها [18].

2.II البنية البلورية:

بداية سوف نتحدث عن البنية البلورية لبنية زنك-بلا ند و التي البنية الماسية حالة خاصة منها. بنية زنك- بلا ند تتشكل أساساً من توزيع منتظم لذرات الزنك Zn وفق مكعب ممرکز الوجوه، و هذا ما يعني أن الذرات تتموضع وفق شبكة مكعبة بسيطة بالإضافة إلى شغلها مراكز وجوه المكعب كما هو مبين في الشكل (1.II). في بنية زنك- بلا ند يوجد عدد مساوي من ذرات الكبريت S كل منها تتموضع على بعد $\frac{a}{4}[111]$ من كل ذرة زنك Zn. (a هو ثابت الشبكة البلورية). لذا نعتبر شبكة زنك - بلا ند عبارة عن شبكتين مكعبتين ممرکزتي الوجوه متداخلتين على طول $\frac{\sqrt{3}}{4}a$ من القطر الرئيسي، واحدة للزنك (Zn) و

أخرى للكبريت (S)، إنها الشبكة التي تتبلور فيها كل المركبات V-III و بعض المركبات VI-II [18]. كل ذرة من العمود III تملك جوار رباعي مع ذرة من العمود V تكون الروابط بين الذرات المختلفة جزئياً تكافؤية و جزئياً أيونية، حيث أن الرابطة التكافؤية هي الغالبة (الطاغية على الرابطة الأيونية). الخلية الأولية تحتوي على ذرة من العمود III و ذرة من العمود V [19].



الشكل II.2 يمثل بنية زنك- بلاندا.

3.II إنشاء الهجائن SP^3 :

إن التركيب الخطي لمدارين من النوع P هو ببساطة مدار آخر من النوع P ذو اتجاه مختلف. من ناحية أخرى التركيب الخطي للمدار P مع المدار S (يدعى بالمدار الهجين SP) الذي يوافق توزيع احتمالي غير متناظر، إذ يميل توزيع الشحنة الإلكترونية يميل في اتجاه محاور المدار P . نختار في الأجسام الصلبة الرباعية أربع هجائن SP ، تكون دوال الموجة لكل منها متعامدة فيما بينها، و تكون كثافة الشحنة الإلكترونية أعظمية في اتجاه ذرات الجوار الأقرب [18]. إذا ما رمزنا بـ $|P_x\rangle, |P_y\rangle, |P_z\rangle$ لدوال الموجة المقننة P وفق المحاور الإحداثية و بـ $|S\rangle$ للمدار S ، فإن دوال الموجة للهجائن SP^3 و الاتجاهات التي تكون فيها كثافة الشحنة الإلكترونية أعظمية هي:

1- في الاتجاه [111] تكون:

$$|h_1\rangle = \frac{1}{2} [|S\rangle + |P_x\rangle + |P_y\rangle + |P_z\rangle] \quad (\text{II.1a})$$

2- في الاتجاه $[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$ تكون:

$$|h_2\rangle = \frac{1}{2} [|S\rangle + |P_x\rangle - |P_y\rangle - |P_z\rangle] \quad (\text{II.1b})$$

3- في الاتجاه $[\bar{1}\bar{1}1]$ تكون:

$$|h_3\rangle = \frac{1}{2} [|S\rangle - |P_x\rangle + |P_y\rangle - |P_z\rangle] \quad (\text{II.1c})$$

4- في الاتجاه $[\bar{1}1\bar{1}]$ تكون:

$$|h_4\rangle = \frac{1}{2} [|S\rangle - |P_x\rangle - |P_y\rangle + |P_z\rangle] \quad (\text{II.1d})$$

من السهل توضيح بأن دوال الموجة للهجين تكون عمودية (orthonormal) بالشكل التالي:

$$\langle h_i | h_j \rangle = \delta_{ij} \quad (\text{II.2})$$

ليس للهجائن قيم ذاتية بل توجد قيمة متوسطة [18] للطاقة (المعدلة) تدعى بطاقة الهجين [20]:

$$\epsilon_h = (\epsilon_s + 3\epsilon_p)/4 \quad (\text{II.3})$$

حيث [18]:

$$\varepsilon_s = \langle S | H | S \rangle \quad (\text{II.4})$$

$$\varepsilon_p = \langle P_x | H | P_x \rangle = \langle P_y | H | P_y \rangle = \langle P_z | H | P_z \rangle \quad (\text{II.5})$$

حيث:

H : هاملتون البلورة.

ε_h : طاقة الهجين SP^3 .

ε_s : طاقة المدار S.

ε_p : طاقة المدار P.

بالنسبة للأجسام الصلبة التكافؤية القطبية تكون الطاقات الهجينة مختلفة، فإذا ما رمزنا بـ ε_h^1 بالطاقة الأدنى و بـ ε_h^2 للطاقة العظمى، فإننا نستطيع أن نعرف بطريقة مشابهة الطاقة القطبية الهجينة و التي تتناسب مع الفرق بينهما [18]:

$$V_3^h = (\varepsilon_h^2 - \varepsilon_h^1) / 2 \quad (\text{II.6})$$

نعرف عناصر المصفوفة و التي تسمى بالطاقة المعدنية [20]:

$$V_1 = \frac{1}{4(\varepsilon_p - \varepsilon_s)} \quad (\text{II.7})$$

توجد عناصر مصفوفية خاصة ومهملة، هي تلك المشكلة بين الهجائن فيما بينها، والتي تسمى عناصر المصفوفة بالطاقة التكافؤية للهجين و تعطى بالعلاقة التالية:

$$V_2^h = -\langle h^1 | H | h^2 \rangle \quad (\text{II.8})$$

4.II إنشاء مدارات الروابط:

بطريقة مشابهة لدراسة رابطة قطبية بسيطة في جزيء ثنائي الذرة نقوم بكتابة التركيب الخطي لهجينين بالشكل الآتي [18]:

$$|\Psi\rangle = u_1|h^1\rangle + u_2|h^2\rangle \quad (\text{II.9})$$

و تقلل (تنقص) قيمة الطاقة المحسوبة كما يلي:

$$\frac{\langle\Psi|H|\Psi\rangle}{\langle\Psi|\Psi\rangle} = \frac{u_1^2\varepsilon_h^1 - 2u_1u_2V_2 + u_2^2\varepsilon_h^2}{u_1^2 + u_2^2} \quad (\text{II.10})$$

حيث u_2, u_1 متغيرات .

كما في دراسة جزيء بسيط، نعتبر هجينين المشكلان للمدار الرابط متعامدان، $\langle h^1|h^2\rangle = 0$. نهمل العديد من المفاهيم المعقدة لتفاعلات إلكترون - إلكترون، ومعالجتها بدلا من ذلك في عبارة الكمون المتوسط لكل إلكترون [18]. عملية البحث عن القيم الدنيا لطاقة الهجين تقود إلى المعادلتين التاليتين:

$$\varepsilon_h^1 u_1 - V_2 u_2 = E u_1 \quad (\text{II.11.a})$$

$$-V_2 u_1 + \varepsilon_h^2 u_2 = E u_2 \quad (\text{II.11.b})$$

نعيد كتابة المعادلتين (II.11.a) و (II.11.b) بدلالة متوسط طاقة الهجين كما يلي :

$$\bar{\varepsilon} = (\varepsilon_h^1 + \varepsilon_h^2)/2 \quad (\text{II.12})$$

و الطاقة القطبية من المعادلة (II.6) فنحصل على:

$$-V_3 u_1 - V_2 u_2 = (E - \bar{\varepsilon})u_1 \quad (\text{II.13.a})$$

$$-V_2 u_1 + V_3 u_2 = (E - \bar{\varepsilon})u_2 \quad (\text{II.13.b})$$

بحل جملة المعادلات (II.11.a)، (II.11.b)، (II.12)، (II.13.a) و (II.13.b) و بالتعويض نتحصل على طاقة الرابطة:

$$\varepsilon_b = \bar{\varepsilon} - \sqrt{V_2^2 - V_3^2} \quad (\text{II.14})$$

و قيم u_2 و u_1 للمدار الرابط هي:

$$u_1^b = \left(\frac{1 + \alpha_p}{2} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (\text{II.15})$$

$$u_2^b = \left(\frac{1 - \alpha_p}{2} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (\text{II.16})$$

α_p : هي الإستقطابية و تعطى بالعلاقة التالية [20]:

$$\alpha_p = V_3 / (V_2^2 + V_3^2)^{\frac{1}{2}} \quad (\text{II.17})$$

بالمثل الحالة المضادة للربط، دوال الموجة التي تكون عمودية على الحالة الرابطة، تملك طاقة [18]:

$$\varepsilon_a = \bar{\varepsilon} + \sqrt{V_2^2 + V_3^2} \quad (\text{II.18})$$

مع الوسائط:

$$u_1^a = \left(\frac{1 - \alpha_p}{2} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (\text{II.19})$$

$$u_2^a = - \left(\frac{1 + \alpha_p}{2} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (\text{II.20})$$

هذه التحويلات تسمح لنا بإنشاء المدارات الرابطة و المضادة للربط انطلاقا من المدارات S و P دون أي تقريبات إضافية.

طريقة الكمون الكاذب

1.III مقدمة:

قدمت هذه الطريقة من طرف Fermi سنة 1934 أثناء دراساته حول الحالات الذرية للطبقات الرقيقة. بعد ذلك بسنوات اقترح Hellman [21] طريقة الكمون الكاذب لإيجاد مستويات الطاقة لذرات المعادن الألكانية. وفي سنة 1950 عممت استعمالات طريقة الكمون الكاذب وفضل Phillips-Kleinman في 1959 اعتبروا أن طريقة الكمون الكاذب هي امتداد لطريقة الأمواج المستوية المتعامدة (O.P.W) [22]. هذه الطريقة لا تعتبر إلا إلكترونات التكافؤ، إلكترونات القلب تعتبر محاصرة داخل التوزيع الذري و إلكترونات التكافؤ تتحرك داخل كمون ضعيف لإلكترون واحد وهو الكمون الكاذب. هذا الأخير يمكن معالجته باستعمال طريقة الإلكترون شبه الحر (N.F.E.M) أو بتقنية أخرى لحل معادلة شرودنغر. تطبق هذه الطريقة من أجل حساب البنى الإلكترونية للأجسام الصلبة و المائعة، التفاعلات إلكترون - فونون، اهتزازات شبكة الروابط و البنى البلورية، الخ.

2.III الشكل الرياضي للطريقة:

الشكل الرياضي لطريقة الكمون الكاذب (P.M) يعطى بما يلي: دالة الموجة Ψ_k التي تصف البلورة، في طريقة الأمواج المستوية المتعامدة (O.P.W) [24,23] تعطى كمجموع لدوال الموجات المستوية Φ_k^v و الحالات المستقرة للقلب Φ_k^c :

$$\Psi_k(r) = \Phi_k^v(r) + \sum_c \mu_c \Phi_k^c(r) \quad (\text{III.1})$$

دالة الموجة Ψ_k تكون عمودية على حالات القلب Φ_k^c :

$$\langle \Phi_k^c | \Psi_k \rangle = 0 \quad (\text{III.2})$$

$$\Rightarrow \Psi_k = \Phi_k^v - \sum_c \langle \Phi_k^c | \Phi_k^v \rangle \Phi_k^c \quad (\text{III.3})$$

دالة الموجة Ψ_k تحقق معادلة شرودنغر:

$$H\Psi_k = E_k \Psi_k \quad (\text{III.4})$$

نعوض العبارة (III.3) في العبارة (III.4) و نتحصل على:

$$H\Phi_k^v - H \sum_c \langle \Phi_k^c | \Phi_k^v \rangle \Phi_k^c = E_k \Psi_k \quad (III.5)$$

نعلم أن:

$$H\Phi_k^c = E_k^c \Phi_k^c \quad (III.6)$$

إذن:

$$H\Phi_k^v - E_k^c \sum_c \langle \Phi_k^c | \Phi_k^v \rangle \Phi_k^c = E_k \Psi_k \quad (III.7)$$

$$H\Phi_k^v - E_k^c \sum_c \langle \Phi_k^c | \Phi_k^v \rangle \Phi_k^c = E_k \left[\Phi_k^v - \sum_c \langle \Phi_k^c | \Phi_k^v \rangle \Phi_k^c \right] \quad (III.8)$$

$$H\Phi_k^v + \sum_c (E_k - E_k^c) \langle \Phi_k^c | \Phi_k^v \rangle \Phi_k^c = E_k \Phi_k^v \quad (III.9)$$

نضع:

$$V_R \Phi_k^v = \sum_c (E_k - E_k^c) \Phi_k^c \quad (III.10)$$

المعادلة (III.9) يمكن كتابتها بشكل مختصر:

$$(H + V_R) \Phi_k^v = E_k \Phi_k^v \quad (III.11)$$

يعطى هاملتون البلورة H بالعبارة التالية:

$$H = \frac{P^2}{2m} + V_c \quad (III.12)$$

إذن نعيد كتابة المعادلة (III.11) بالشكل التالي: نضع $V_p = V_c + V_R$.

$$\left(\frac{P^2}{2m} + V_c + V_R \right) \Phi_k^v = E_k \Phi_k^v \quad (III.13)$$

أين:

V_p : كمون كاذب والذي يكون ضعيف.

V_c : كمون جاذب للقلب السالب.

V_R : كمون نافر موجب.

الكمون V_p يكون ضعيف، يمكن اعتبار الكمون الكاذب كاضطراب، إذن لحل معادلة شرودنغر، نستعمل طريقة الإلكترون شبه الحر (N.F.E.M) [25,24,23].

1.2.III حساب عناصر مصفوفة الكمون الكاذب:

الكمون الكاذب V_p مؤثر لا يملك عبارة محلية $V_p(r)$ ، ولا يمكن إظهاره في الحساب إلا على شكل وسيط في عناصر مصفوفته. إذن من أجل معرفة جملة عناصر مصفوفته المحسوبة على قاعدة متكاملة للدوال، والتي تكون مبدئياً كيفية. بالخصوص إن مقارنة الكمون الكاذب التام مع ظاهرة ذات شكل محلي لا يمكن أن تكون إلا بمقارنة عناصر مصفوفته المحسوبة على التوالي على نفس القاعدة. القاعدة المتكاملة للدوال التي تستعمل غالباً هي التي تكون مشكلة من طرف مجموعة كاملة من الأمواج المستوية [24]:

$$K = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \exp(ikr) \quad (\text{III.14})$$

في حالة القاعدة المتكاملة الشعاع الموجي K هو شعاع كيفي من الفضاء المعكوس، لا يجب أن ينتمي إلى منطقة بريلمان. في هذه القاعدة العنصر المصفوفي V_p بين موجتين مستويتين لهما شعاعين موجيين K و $K+q$ يشار إليه $\langle K+q|V_p|K \rangle$.

بالتعريف [21]:

$$V_p = V_c + \sum_c (E_k - E_k^c) |\Phi_k^v\rangle \langle \Phi_k^c| \quad (\text{III.15})$$

$$\langle K+q|V_p|K \rangle = \langle K+q|V_c|K \rangle + \sum_c (E_k - E_k^c) \langle K+q|\Phi_k^c\rangle \langle \Phi_k^c|K \rangle \quad (\text{III.16})$$

الكمون الحقيقي V_c له عبارة محلية $V_c(r) = \sum_c (r-R)$ ، ومن السهل ملاحظة أن كل عنصر من عناصر المصفوفة $\langle K+q|V_c|K \rangle$ لا يتعلق بالشعاع الموجي K ، ولكن فقط مع q ، ليكن:

$$\langle K + q | V_c | K \rangle = \frac{1}{\Omega} \int V_c \exp(-iqr) d^3 r \quad (\text{III.17})$$

$$\langle K + q | V_c | K \rangle = \frac{1}{\Omega} \frac{1}{N_m} \sum_R \exp(-iqR) \int V_c(r-R) e^{(-iq(r-R))} d^3 r \quad (\text{III.18})$$

أين نكون أدخلنا عامل الشكل لكل الكمونات الذرية:

$$V_p = \frac{1}{\Omega_0} \int V(r) \exp(-iqr) d^3 r \quad (\text{III.19})$$

كذلك بالنسبة لعامل بنية الجملة المشكل من مجموعة أيونات في نمط كيفي أين يشغل كل أيون موضع R الذي لا ينطبق بالضرورة مع موقع دوري $R^{(0)}$ لشبكة برافي للبلورة. لا يجب الخلط بين هذا العامل للبنية مع عامل البنية S_q للطراز البلوري:

$$\tilde{S} = \frac{1}{N_m} \sum_R \exp(-iqR) \quad (\text{III.20})$$

لدينا أيضا:

$$\langle \Phi_k^c | K \rangle = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \int \Phi_k^{c*}(r-R) \exp(iKr) d^3 r \quad (\text{III.21})$$

$$\langle \Phi_k^c | K \rangle = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \exp(iKR) \int \Phi_k^{c*}(r-R) \exp(iK(r-R)) d^3 r \quad (\text{III.22})$$

و:

$$\langle K + q | \Phi_k^c \rangle = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \exp(-i(K+q)R) \int \Phi_k^c(r-R) \exp(iK(r-R)) d^3 r \quad (\text{III.23})$$

إذن:

$$\langle K + q | \Phi_k^c \rangle \langle \Phi_k^c | K \rangle = \frac{1}{N_m} \exp(-iqR) f_{n,k}^* f_{n,k+q} \quad (\text{III.24})$$

أين نضع:

$$f_{n,k} = \frac{1}{\sqrt{\Omega_0}} \int_{\Omega} \Phi_k^c(r) \exp(-iKr) d^3r \quad (\text{III.25})$$

بالنتيجة المعادلة (III.18) تصبح:

$$\langle K+q|V_p|K\rangle = \tilde{S}_q V_q + \tilde{S}_q \sum_c (E_k - E_k^c) f_{n,k}^* f_{n,k+q} \quad (\text{III.26})$$

$$\langle K+q|V_p|K\rangle = \tilde{S}_q \tilde{W}_q \quad (\text{III.27})$$

$$\tilde{W}_q = V_q + \sum_c (E_k - E_k^c) f_{n,k}^* f_{n,k+q} \quad (\text{III.28})$$

\tilde{W}_q : يسمى عامل الشكل للكمون الكاذب. وجميع الصعوبات في حساب الكمون الكاذب تدخل في حساب عامل شكله \tilde{W}_q .

على العموم إن تعلق العنصر المصفوفي $\langle K+q|V_p|K\rangle$ بالشعاع الموجي K والشعاع الموجي q ينتج من أن الكمون الكاذب V_p لا يملك عبارة محلية $V_p(r)$ ، ولكنه مؤثر شكل معقد كثيرا خلافا مع الكمون الحقيقي $V_c(r)$ ، ولكن هذا التعلق بـ K يختفي إذا أدخل نموذج محلي ظاهري $V_p(r)$ لـ V_p . عندما يعوض الكمون الكاذب التام V_p بشكل محلي تقريبي $V_p(r)$ [26]. محولة فورييه للشكل المحلي التقريبي تساوي جداء $V_q = \tilde{S}_q \tilde{W}_q$ إذن محولة فورييه العكسية تساوي جداء التلاف (convolution):

$$V(r) = \tilde{W}(r) * \sum_R \delta(r-R) - \sum_R \tilde{W}(r-R) \quad (\text{III.29})$$

أين يعرف $\tilde{W}(r)$ كمحولة فورييه العكسية لعامل الشكل \tilde{W}_q . العلاقة (III.29) تبين أن الشكل المحلي التقريبي $V_p(r)$ للكمون الكاذب يمكن اعتباره دائما كمجموع كمونات كاذبة $\tilde{W}(r-R)$ الممركزة على مختلف المواقع الذرية R .

2.2.III نماذج الكمون الكاذب:**1.2.2.III النموذج المحلي:**

النموذج الأكثر بساطة يتمثل في كمون محلي متعلق بالمتغير r ، ولأجل هذا فرضت عدة أشكال للكمون

الكاذب:

النموذج الأول [27] تمثل كمون كولمب بمسافة بعيدة وكمون ثابت في المنطقة القلبية. هذا الكمون يأخذ

الشكل:

$$V(r) = \begin{cases} -\frac{Ze}{r} & r > r_c \\ 0 & r \leq r_c \end{cases} \quad (\text{III.30})$$

أين:

Z : عدد إلكترونات التكافؤ.

r_c : نصف قطر القلب.

أدخل (Heine -Abarencov) هين و ابرنكوف بعض المرونة في هذا التقريب باعتبار أن الكمون A ثابت في منطقة القلب [24]. في هذه الحالة يكون الكمون على الشكل:

$$V(r) = \begin{cases} -\frac{Ze}{r} & r > r_c \\ A & r \leq r_c \end{cases} \quad (\text{III.31})$$

2.2.2.III النموذج الغير محلي:

الكمون الكاذب هو أصلا غير محلي و متعلق ب r و الطاقة E و بأخذ مفعول غير المحلية

فإن التصحيح المضاف للكمون المحلي [28] يعطى بـ:

$$V_M(r, E) = \sum_I A_I(E) F_I(r) P_I \quad (\text{III.32})$$

أين:

 $A_I(E)$: دالة تعلق الكمون الكاذب بالطاقة لحالات القلب. P_I : مؤثر إسقاط المركبة الأولى للعزوم الزاوية. $F_I(r)$: دالة تمثل فعل حالة القلب، ولها أشكال أخرى كثيرة من بينها دالة Ashcroft [28]، Heine -Abarenkov [29] و شكل غوص (Gauss) [30]. الشكلين الأخيرين هما الأكثر استعمالاً.

بسبب الطبيعة الغير محلية للكمون الكاذب، عوامل الشكل $V(G)$ هي ليست تابعة G فقط لكن تتعلق أيضا بشعاع الموجة K . لأجل الأشكال المربعة و الغوصية العبارات التحليلية لعناصر هذه المصفوفة قد أنجزت. التصحيحات الغير محلية مهمة لأجل أنصاف النواقل لكن يمكن تغيير طوبولوجية علاقة الانتشار (التشتت) لبعض بنية العصابات و بعد الموانع الطاقية.

III.2.3 الطريقة التجريبية للكمون الكاذب (E.P.M):

هي تعبير آخر لطريقة الكمون الكاذب، كما أنها غير مستعملة لدراسة المعادن و لكن تطبق بنجاح في عدة أنصاف النواقل ذات بنية الماس و زنك الرصاص [31]. التطبيق الأول لهذا النجاح كان على السيلسيوم و الجرمانيوم [32]. في الطريقة التجريبية للكمون الكاذب، تحسب بنية العصابات باستعمال بعض حدود $V(G)$ فقط التي يمكن إيجادها بواسطة تقريبات نظرية بالملاحظة على الانعكاس و الامتصاص للبلورات [24]. قيم $V(G)$ للعناصر مرتبة و ممثلة في منشورة Heine et Cohen [24] لهذه الطريقة E.P.M تقريبين مهمين هما:

1- تقريب تجريبي محلي.

2- تقريب تجريبي غير محلي.

III.2.3.1 التقريب التجريبي المحلي:

يعطى هاملتون إلكترون في بلورة بـ:

$$H = \frac{P^2}{2m} + V_p(r) \quad (\text{III.33})$$

في التقريب المحلي يمثل الكمون $V_p(r)$ بتركيب خطي للكمونات الذرية:

$$V_p(r) = \sum_{R,\tau} V_a(r-R-\tau) \quad (\text{III.34})$$

أين:

R : شعاع الشبكة المباشرة.

τ : شعاع القاعدة.

إذا امتد الكمون $V_p(r)$ في الشبكة المعكوسة يكون له الشكل:

$$V_p(r) = \sum_G V(G)S(G)e^{iGr} \quad (\text{III.35})$$

حيث $S(G)$ عامل البنية يعطى بـ:

$$S(G) = \frac{1}{N_a} \sum_r e^{-iGr} \quad (\text{III.36})$$

$V(G)$: عامل الشكل.

N_a : عدد ذرات القاعدة.

يعتمد التقريب المحلي على الاستعمال لعوامل الشكل ابتداء من انبعاث فوتوني للأشعة $x(x.p.s)$ ، و انبعاث فوتوني للأشعة فوق بنفسجية $(u.p.s)$ ، وتجارب الانعكاسية [24]. و يكون الكمون ضعيفا من أجل G كبيرا. ويمكن أن تقتصر على بعض عوامل الشكل، فمثلا من أجل بنية الماس و زنك الرصاص نستعمل ثلاث عوامل للشكل ($V(G) = 3, 8, 11$) بوحدة $\left(\frac{2\pi}{a}\right)^2$. علما أن عوامل الشكل الضد التناظرية معدومة في حالة المركبات التي تملك بنية الماس.

عندما يعين الكمون، حساب أشباه الدوال للموجة و طيف الطاقة يكون مباشر ويمكن إتمامه بواسطة طريقة الإلكترون شبه الحر (N.F.E.M) [25,24,23]:

$$\left[\frac{p^2}{2m} + V_p(r) \right] \Psi_{n,k}(r) = E_n(k) \Psi_{n,k}(r) \quad (\text{III.37})$$

n : دليل العصابة.

$V_p(r)$: الكمون الكاذب.

$\Psi_{n,k}(r)$: دوال بلوخ والتي يمكن نشرها في سلسلة موجة مستوية.

المهم في هذا الحساب هو معرفة، عوامل الشكل و عوامل البنية. لأجل أنصاف النواقل من نوع الماس أو زنك الرصاص [32]:

$$V(G) = V^s(G) \cos(G\tau) + iV^a(G) \sin(G\tau) \quad (\text{III.38})$$

أين:

$$V^s(G) = \frac{1}{2}[V_A(G) + V_B(G)] \quad (\text{III.39})$$

$$V^a(G) = \frac{1}{2}[V_A(G) - V_B(G)] \quad (\text{III.40})$$

حيث $\tau = +\frac{1}{8}(1,1,1)a$.

a : ثابت الشبكة.

$V^s(G)$ و $V^a(G)$ على التوالي عوامل الشكل الذرية المتناظرة و ضد المتناظرة.

طريقة الحساب لـ E.P.M كما المخطط التالي هي:

- اختيار $V(G)$.

- تحتوي البنية على عامل البنية و معادلة شرود نغر و تحل من أجل القيم الذاتية $E(K)$ للطاقة و لأشبه

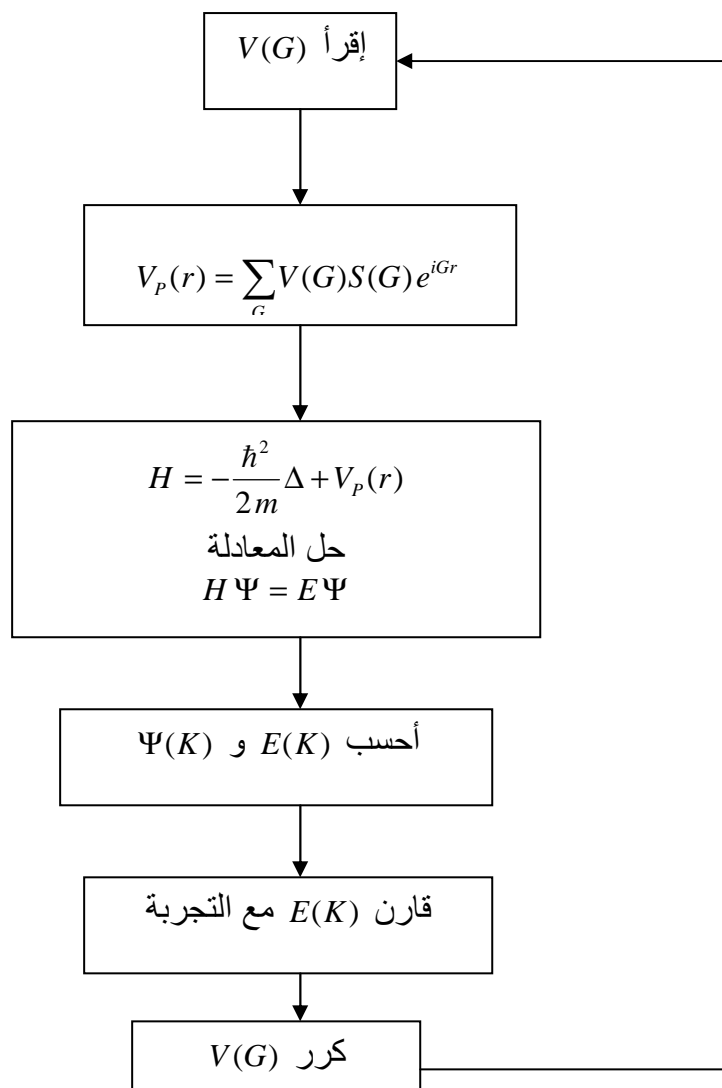
الدوال $\Psi_{n,k}(r)$.

- تقارن هذه الطاقات مع التجربة و يغير $V(G)$ إذا لم نتحصل على توافق جيد بين التجربة و النظري. تعاد

الطريقة إلى غاية الحصول على توافق جيد بين التجربة والنظري. زيادة على E.P.M التي تمثل الطريقة

الأكثر استعمالاً في حساب بني العصابات، توجد عدة اختلافات لهذه الطريقة تكون قد حسنت، يشار إليها

بالطريقة الذاتية (self-consiste) و Ab-initio.



بيان سير العملية بطريقة E.P.M المحلية

النتائج و مناقشتها

1.IV مقدمة:

تستعمل طريقة الكمون الكاذب (E.P.M) المقرونة بنموذج محطات الروابط لـ Harrison لدراسة الخواص الميكانيكية للمركبات أنصاف النواقل الثنائية V-III و ذلك بغية معرفة ثوابت المرونة، معاملات المرونة الحجمية، معدل بواسن، معامل يونغ، الخ. نحدد وسائط الكمون الكاذب بطريقة التربيعة المصغرة [33]. عوامل الشكل المعدلة وكذا ثوابت الشبكة لبعض المركبات أنصاف النواقل الثنائية V-III مدونة في الجدول (1.IV).

الجدول 1.IV عوامل الشكل المتناظرة (V_S) و ضد المتناظرة (V_A) معدلة بـ (Ryd) للمركبات أنصاف النواقل الثنائية وثابت شبكتها (a).

ثابت الشبكة a [Å]	عوامل الشكل (Ryd)						المواد
	$V_A(11)$	$V_A(8)$	$V_A(3)$	$V_S(11)$	$V_S(8)$	$V_S(3)$	
5.6611	0.0075	0.05	0.068833	0.092750	0.00	-0.212694	AlAs
5.6533	0.01	0.05	0.06536	0.059625	0.0126	-0.239833	GaAs
6.0584	0.03	0.05	0.094714	0.047107	0.00	-0.182147	InAs
6.1355	0.016475	0.058960	0.057	0.02599	0.068246	-0.233314	AlSb
6.118	0.00	0.03	0.045340	0.043533	0.005	-0.191206	GaSb
6.49	0.015	0.03	0.064645	0.028443	0.01	-0.201822	InSb
5.451	0.02	0.07	0.132668	0.072244	0.03	-0.210510	GaP
5.869	0.03	0.06	0.088818	0.070499	0.00	-0.213862	InP

2.IV الإستقطابية α_p :

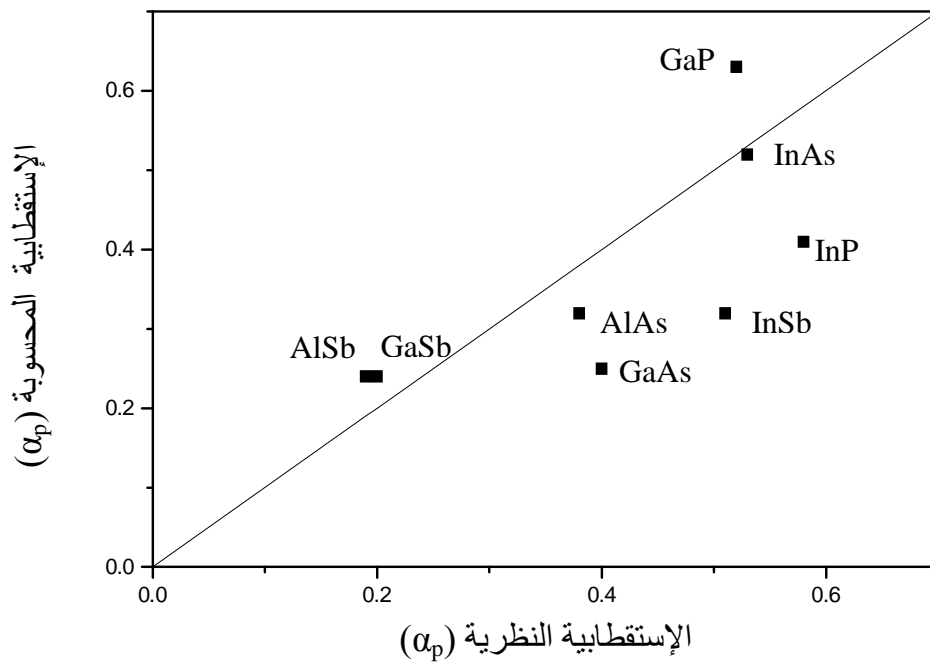
باستعمال عوامل الشكل للكذب المتناظرة وضد المتناظرة في الاتجاه $G(111)$ يمكننا حساب الإستقطابية α_p و ذلك باستعمال تعريفا مطابق لتعريف Vogl [34] :

$$\alpha_p = -\frac{V_A(3)}{V_S(3)} \quad (IV.1)$$

حيث $V_A(3)$ و $V_S(3)$ هما عوامل الشكل المتناظرة وضد المتناظرة عند الاتجاه $G(111)$ للكومون الكاذب على الترتيب. قمنا بحساب الإستقطابية وفقا للعلاقة أعلاه كما أدرجنا النتائج المحسوبة في هذا العمل و نتائج أعمال نظرية أخرى بهدف المقارنة في الجدول (2.IV) لبعض مركبات أنصاف النواقل الثنائية. من خلال الجدول (2.IV) يظهر بأنه هناك توافق جيد بين الإستقطابية المستخلصة في هذا العمل و التي تحصل عليها al et Christensen [35] و بعض المراجع الأخرى. الشكل (1.IV) يبين تغيرات الإستقطابية المحسوبة بدلالة الإستقطابية النظرية. نلاحظ توافق معتبر بين نتائج الإستقطابية المحسوبة مع النظرية مثلا المركب InAs.

الجدول 2.IV قيم الإستقطابية المحسوبة (α_p) ومقارنتها مع أعمال نظرية أخرى .

الإستقطابية (α_p)		المواد
الحسابية (Cal)	النظرية (théo)	
0.32	0.44 [20]	AIAs
	0.38 [35]	
0.25	0.50 [20]	GaAs
	0.40 [35]	
0.52	0.53 [20]	InAs
0.24	0.54 [20]	AlSb
	0.19 [35]	
0.24	0.44 [20]	GaSb
	0.20 [35]	
0.32	0.51 [20]	InSb
0.63	0.52 [20]	GaP
0.41	0.58 [20]	InP



الشكل 1.IV تغير الإستقطابية المحسوبة (α_p) بدلالة الإستقطابية النظرية.

3.IV الشحنة الفعالة المستعرضة e_T^* :

تعتبر الشحنة الفعالة المستعرضة للأيونات مقدارا أساسيا في دراسة ديناميك الشبكات البلورية، كما يمكن أخذ هذا المقدار كقياس لأيوناتها [36] :

$$2e_T^* = -\Delta Z + \frac{8\alpha_P}{(1+\alpha_P^2)} \quad (IV.2)$$

حيث:

α_P : تمثل الإستقطابية المعرفة وفقا للعلاقة (IV.1).

ΔZ : تمثل الفرق في عدد إلكترونات التكافؤ للذرات V.III على التوالي.

مع:

$$\Delta Z = -Z_A + Z_B \quad (IV.3)$$

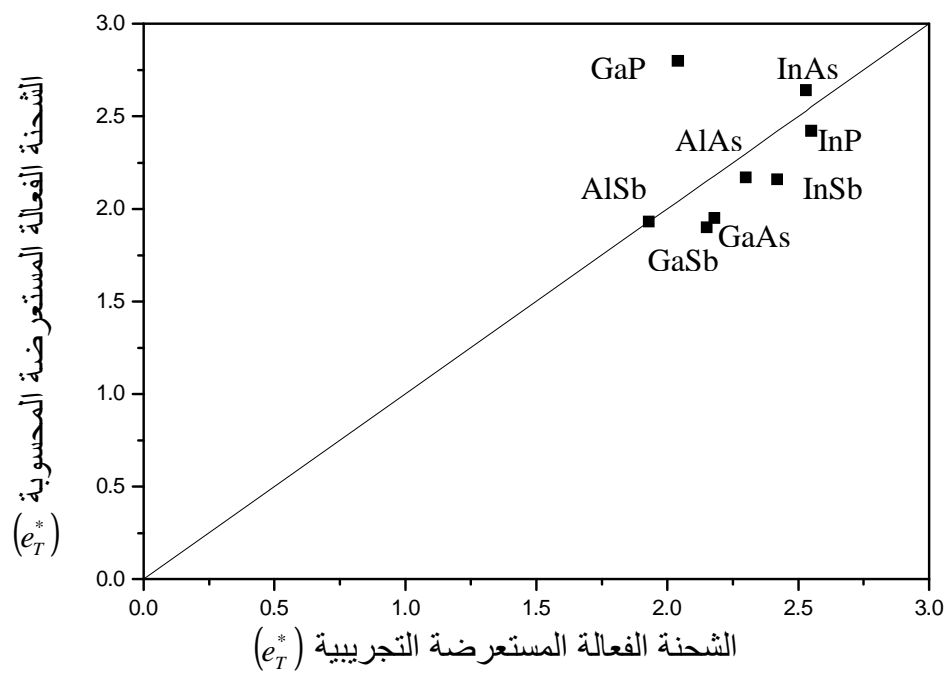
أين Z_B و Z_A هما عدد إلكترونات التكافؤ للذرتين A و B على التوالي حيث A هي ذرة من العمود الخامس و B هي ذرة من العمود الثالث.

الجدول 3.IV قيم الشحنة الفعالة المستعرضة المحسوبة e_T^* ومقارنتها مع بعض

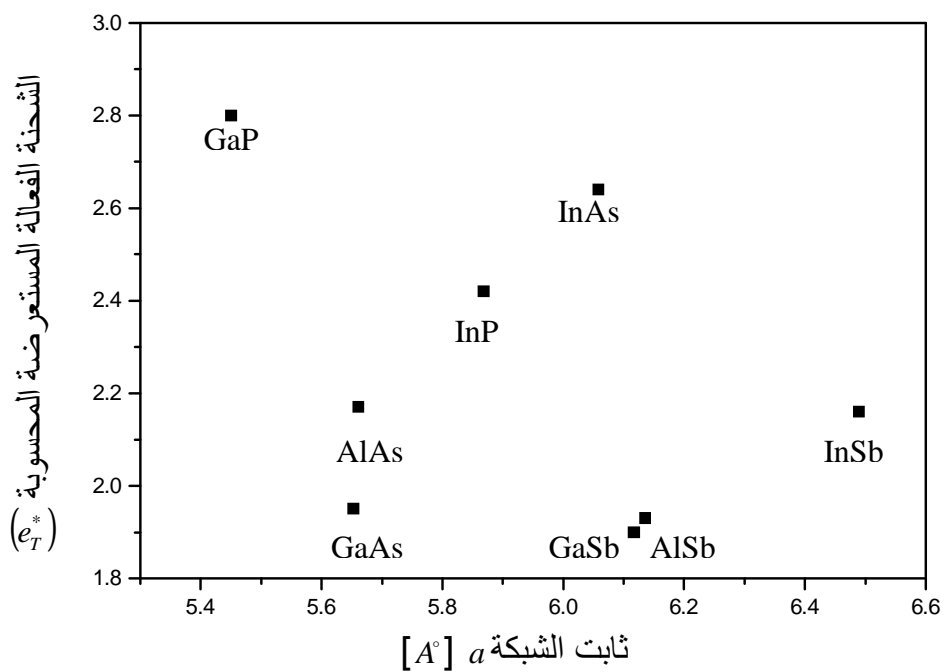
الحسابات النظرية والنتائج التجريبية.

ثابت الشبكة $a [A^\circ]$	الشحنة الفعالة المستعرضة (e_T^*)		المواد
	المحسوبة (Cal)	التجريبية (Exp)	
5.6611	2.17	2.3 [35]	AlAs
5.6533	1.95	2.16 [35] 2.18 [37]	GaAs
6.0584	2.64	2.53 [18]	InAs
6.1355	1.93	1.93 [35]	AlSb
6.118	1.90	2.15 [35]	GaSb
6.49	2.16	2.42 [18]	InSb
5.451	2.80	2.04 [18]	GaP
5.869	2.42	2.55 [18]	InP

لقد تم إعطاء النتائج الخاصة بحساب e_T^* في الجدول (3.IV). حيث قارنا نتائج الشحنة الفعالة المستعرضة المحصل عليها في هذه الدراسة مع التقديرات النظرية الأخرى و النتائج التجريبية. إن نتائجنا متطابقة مع النتائج التجريبية [37,35,18]. وهي أحسن من تلك المستخلصة من الحسابات النظرية، وهذا ما يبرهن على نوعية عوامل الشكل المعدلة للكمون الكاذب في حساباتنا. الشكل (2.IV) يوضح تغيرات الشحنة الفعالة المستعرضة المحسوبة بدلالة التجريبية لبعض مركبات أنصاف النواقل الثنائية ذات بنية الزنك- بلا ند (المكعبة). فمن خلال الشكل يظهر تقارب النتائج المحسوبة للشحنة الفعالة المستعرضة مع التجريبية. كذلك يوجد توافق معقول بين نتائجنا الحسابية في هذا العمل و تلك التي تحصل عليها العالمان Maradudin -Bennet [38]. علما أنه تدرس نظريا توزيع الشحنة الكهربائية التي تستعمل نظرية الكمون الكاذب [40,39].



الشكل 2.IV تغير الشحنة الفعالة المستعرضة المحسوبة (e_T^*) بدلالة الشحنة الفعالة المستعرضة التجريبية.



الشكل 3.IV تغير الشحنة الفعالة المستعرضة المحسوبة (e_T^*) بدلالة ثابت الشبكة a [Å].

4.IV ثوابت المرونة C_{44}, C_{12}, C_{11} :

من خلال وصف Baranowski [41] و التفاعلات التكافئية و المتداخلة داخل الرابطة في المركبات رباعية الجوار (tétraédrique). وبعد التبسيط تعطى عبارات ثوابت المرونة كما يلي [42]:

$$C_{11} = \frac{\sqrt{3}}{4d^5} \left[4.37 \frac{\hbar^2}{m} (5 + \lambda) (1 - \alpha_p^2)^{3/2} - 0.6075 (1 - \alpha_p^2)^{1/2} \frac{\hbar^2}{m} \right] \quad (\text{IV.4})$$

$$C_{12} = \frac{\sqrt{3}}{4d^5} \left[4.37 \frac{\hbar^2}{m} (3 - \lambda) (1 - \alpha_p^2)^{3/2} - 0.6075 (1 - \alpha_p^2)^{1/2} \frac{\hbar^2}{m} \right] \quad (\text{IV.5})$$

$$C_{44} = \frac{\sqrt{3}}{4d} (\alpha + \beta) - 0.1365 C_0 - C \xi^2 \quad (\text{IV.6})$$

أين:

$$d = \frac{\sqrt{3}}{4} a \quad \text{يمثل مسافة الجوار الأقرب (} a \text{ هو ثابت الشبكة).}$$

λ : إحداثي بعدي ثابت القيمة و يساوي 0.738 [45].

$$S = \frac{Z^{*2}}{\varepsilon} \quad (\text{IV.7})$$

$$C_0 = \frac{e^2}{d^4} \quad (\text{IV.8})$$

تعطى عبارة الشحنة الفعالة Z^* بالعبارة [20, 18]:

$$Z^* = e_T^* - \frac{8}{3} \alpha_p (1 - \alpha_p^2) \quad (\text{IV.9})$$

حيث:

ε : هو ثابت العازلية الكهربائية الإلكترونية.

e : الشحنة الكهربائية.

C_0 : عبارة عن ثابت مروني له نفس أبعاد ثوابت المرونة.

تحصلنا على C من المرجع [43].

$$C = \frac{\sqrt{3}}{4d} (\alpha + \beta) - 0.2665 C_0 \quad (\text{IV.10})$$

β, α يمثلان ثوابت القوة تمدد الرابطة و كبس الرابطة على الترتيب. و باستعمال العلاقات الموجودة بين

ثابتي المرونة C_{11} و C_{12} الموجودة في المرجع [43]، و بعد التبسيط عبارات β, α تكون كما يلي:

$$\alpha = \frac{d}{\sqrt{3}} (C_{11} + C_{12}) + \frac{d}{3\sqrt{3}} (1.4735 C_0) \quad (\text{IV.11})$$

$$\beta = \frac{d}{\sqrt{3}} [(C_{11} - C_{12}) - 0.053SC_0] \quad (IV.12)$$

ξ: يكون إحدائي الإجهاد الداخلي المعرف من طرف العالم Kleinman [44] و الذي له علاقة بـممتد الإجهاد الداخلي [43]. باستعمال العلاقة بين ξ و ثوابت المرونة المطابقة للمرجع [43] تكون عبارته:

$$\xi = \frac{(2C_{12} - C')}{(C_{11} + C_{12} - C')} \quad (IV.13)$$

بحيث:

$$C' = 0.314SC_0 \quad (IV.14)$$

بعد تعويض C' بعبارته من المعادلة (IV.14) في المعادلة (IV.13) نحصل على:

$$\xi = \frac{(2C_{12} - 0.314SC_0)}{(C_{11} + C_{12} - 0.134SC_0)} \quad (IV.15)$$

الجدول 4.IV قيم ثابت المرونة C_{11} المحسوب للمركبات أنصاف النواقل الثنائية و مقارنتها مع المعطيات التجريبية و قيم ثابت الشبكة a [A°].

ثابت الشبكة a [A°]	ثابت المرونة C_{11} (10^{11} dyn/cm^2)		المواد
	التجريبي	الحسابي	
5.6611	11.99±0.12 [45] 11.93±0.07 [46]	12.35	AlAs
5.6533	11.84±0.04 [47] 11.81 [43]	13.32	GaAs
6.0584	8.33 [43]	6.43	InAs
6.1355	8.94 [43]	8.90	AlSb
6.118	8.84 [43]	9.08	GaSb
6.49	6.67 [43]	6.26	InSb
5.451	14.12 [43]	8.13	GaP
5.869	10.22 [43]	9.14	InP

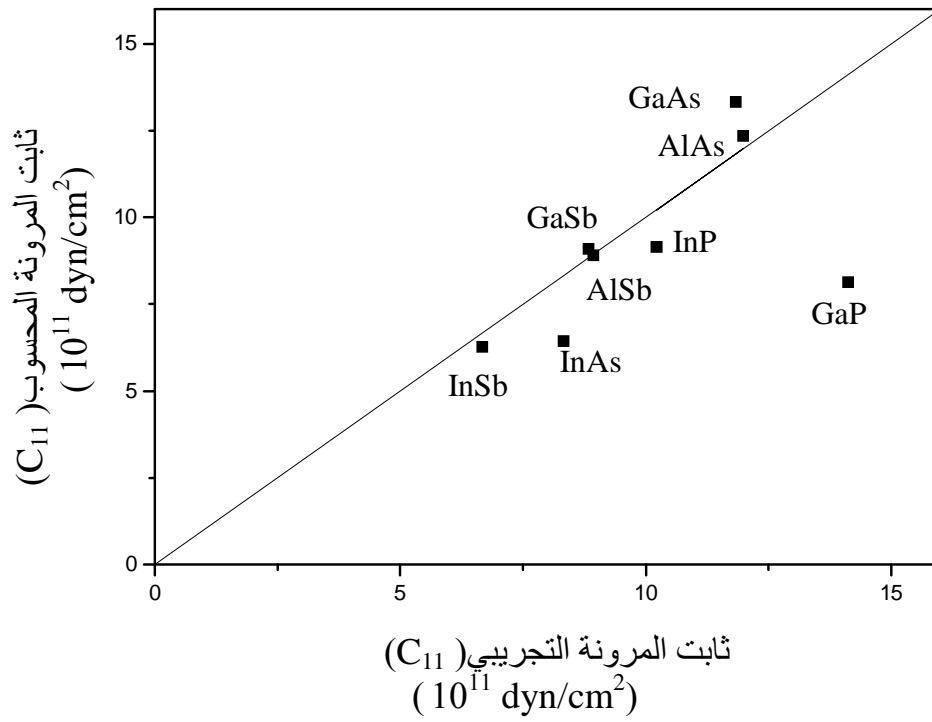
الجدول 4.IV قيم ثابت المرونة C_{12} المحسوب للمركبات أنصاف النواقل الثنائية و مقارنتها مع المعطيات التجريبية و قيم ثابت الشبكة a [Å].

ثابت الشبكة a [Å]	ثابت المرونة C_{12} (10^{11} dyn/cm^2)		المواد
	التجريبية	الحسابي	
5.6611	5.75±0.13 [45] 5.72±0.1 [46]	5.35	AlAs
5.6533	5.37±0.15 [47] 5.32 [43]	5.74	GaAs
6.0584	4.53 [43]	2.84	InAs
6.1355	4.43 [43]	3.84	AlSb
6.118	4.03 [43]	3.91	GaSb
6.49	3.65 [43]	2.71	InSb
5.451	6.25 [43]	3.68	GaP
5.869	5.76 [43]	3.99	InP

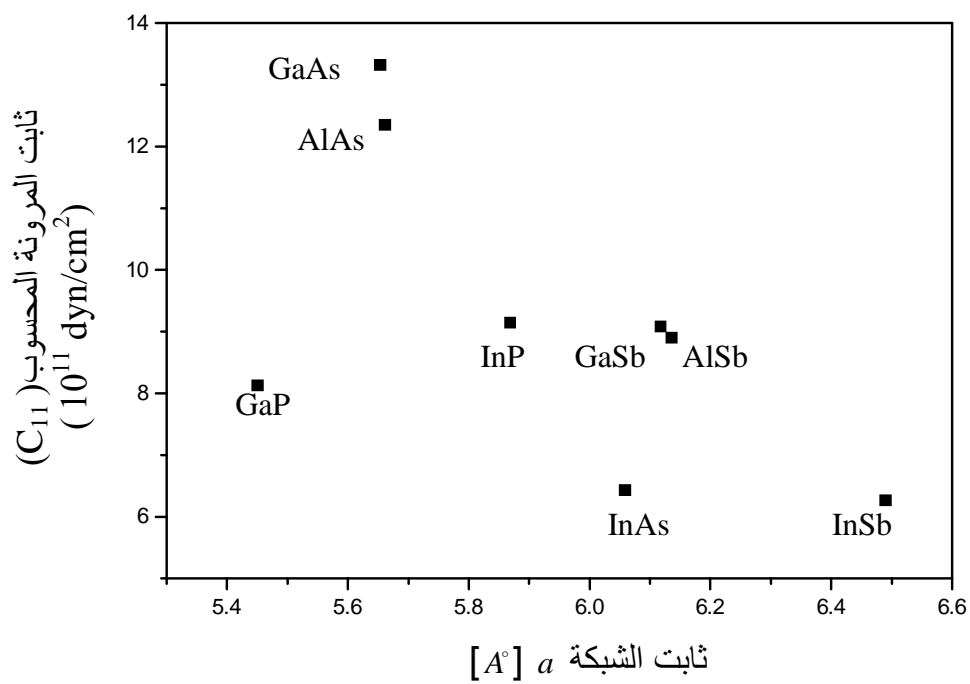
الجدول 4.IV ج قيم ثابت المرونة C_{44} المحسوب للمركبات أنصاف النواقل الثنائية و مقارنتها مع المعطيات التجريبي و قيم ثابت الشبكة a [Å].

ثابت الشبكة a [Å]	ثابت المرونة C_{44} (10^{11} dyn/cm^2)		المواد
	التجريبي	الحسابي	
5.6611	5.66±0.07 [45] 5.72±0.04 [46]	5.75	AlAs
5.6533	5.91±0.02 [47] 5.92 [43]	6.16	GaAs
6.0584	4.16 [20]	4.13	AlSb
6.1355	3.96 [43]	3.00	InAs
6.118	4.32 [43]	4.19	GaSb
6.49	3.02 [43]	2.90	InSb
5.451	7.05 [43]	3.89	GaP
5.869	4.60 [43]	4.26	InP

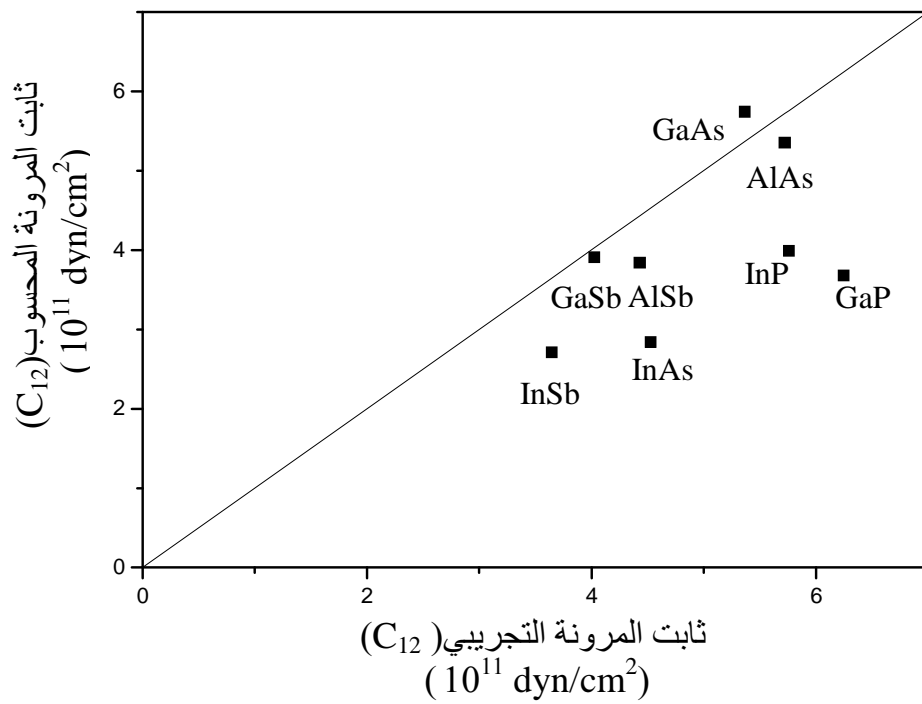
قمنا بحساب ثوابت المرونة للمركبات أنصاف النواقل الثنائية ذات بنية زنك- بلا ند (المكعبة) و النتائج مدونة في الجدول (4.IV). بالمقارنة بين المعطيات التجريبية الموجودة يظهر توافق معقول بين نتائجنا المحسوبة في هذه الدراسة و المعطيات التجريبية المتوفرة. فالأشكال (4.IV) و (6.IV) و (8.IV) تبين تغيرات ثوابت المرونة C_{44}, C_{12}, C_{11} المحسوبة بدلالة التجريبية حيث نلاحظ تطابق جيد بين قيم ثوابت المرونة المحسوبة و التجريبية للمركبات أنصاف النواقل الثنائية ذات بنية زنك- بلا ند (المكعبة). أما الأشكال (5.IV) و (7.IV) و (9.IV) فهي تبين تغير ثوابت المرونة C_{44}, C_{12}, C_{11} بدلالة ثابت الشبكة a و الذي يظهر أنه تغير غير منتظم.



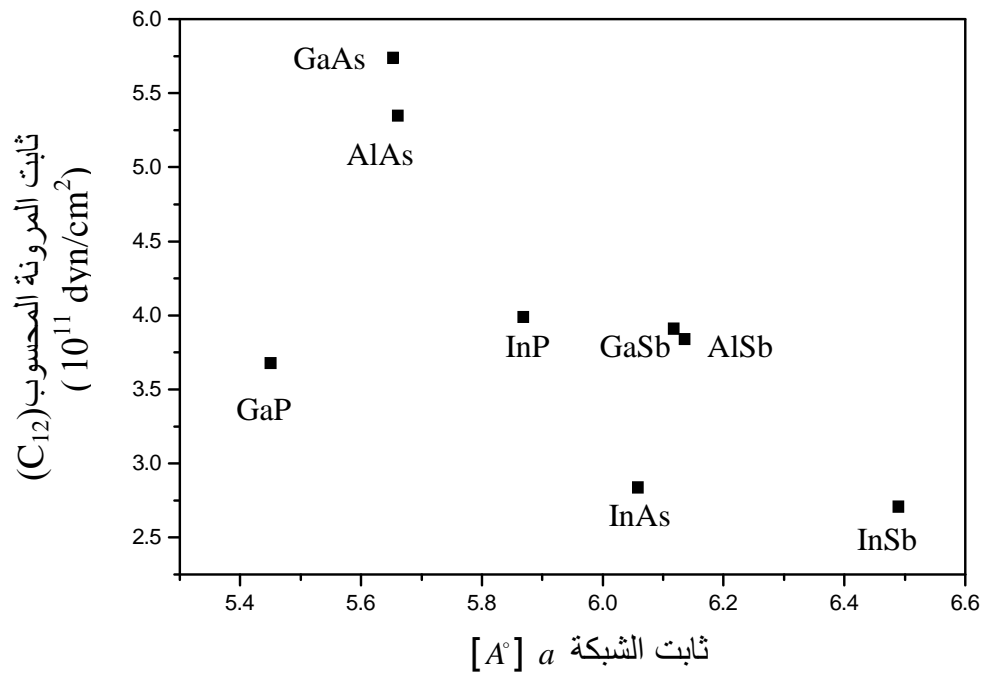
الشكل 4.IV تغير ثابت المرونة المحسوب (C_{11}) بدلالة ثابت المرونة التجريبي للمواد أنصاف النواقل الثنائية.



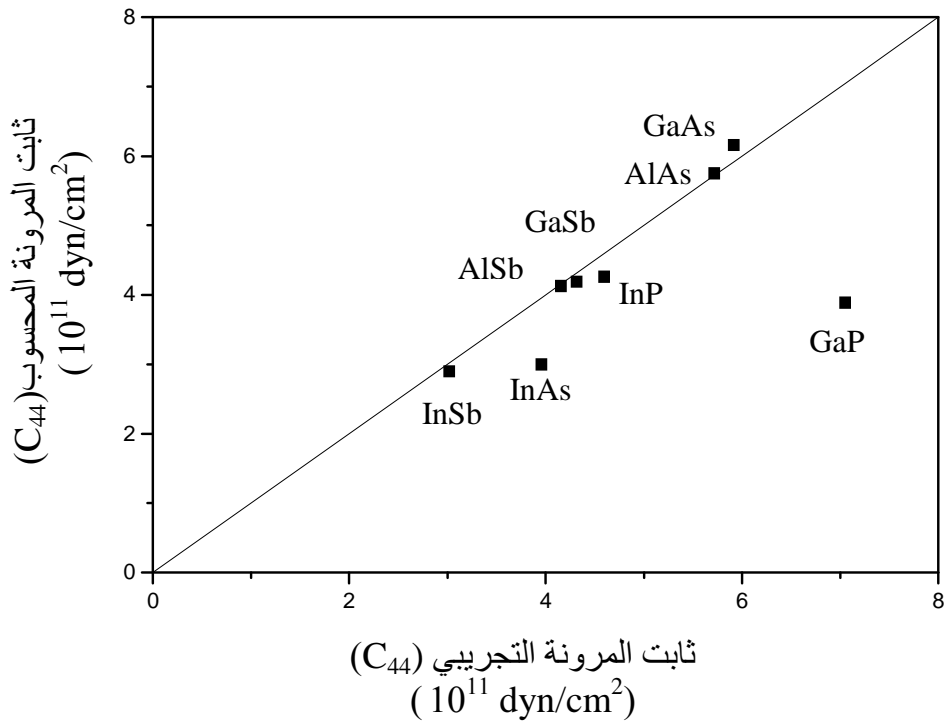
الشكل 5.IV تغير ثابت المرونة المحسوب ((C_{11} بدلالة ثابت الشبكة a [\AA]) للمواد أنصاف النواقل الثنائية.



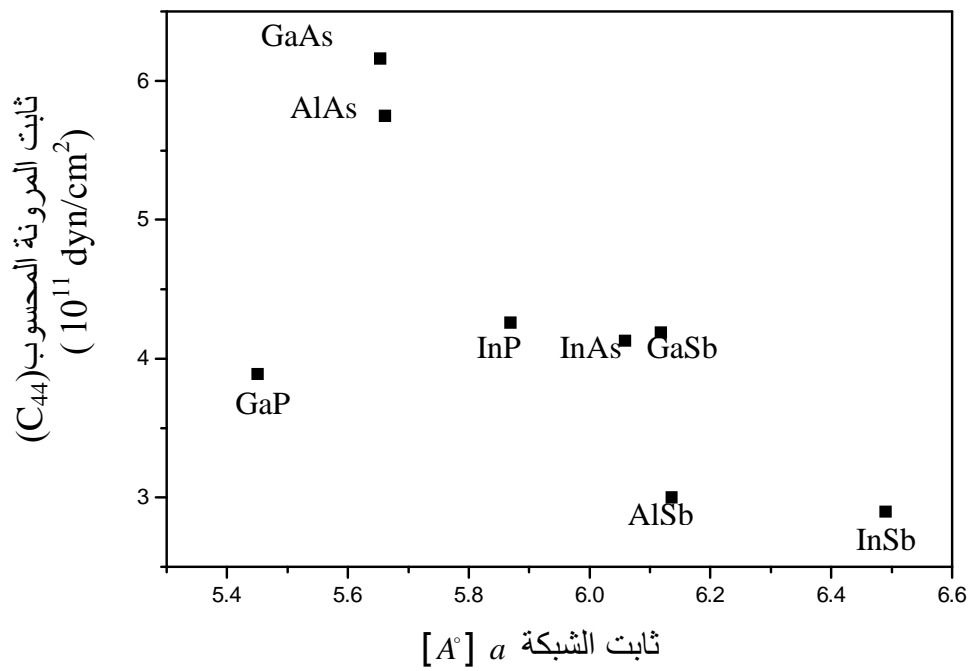
الشكل 6.IV تغير ثابت المرونة المحسوب (C_{12}) بدلالة ثابت المرونة التجريبي للمواد أنصاف النواقل الثنائية.



الشكل 7.IV تغير ثابت المرونة المحسوب (C_{12}) بدلالة ثابت الشبكة a [Å] للمواد أنصاف النواقل الثنائية.



الشكل 8.IV تغير ثابت المرونة المحسوب (C_{44}) بدلالة ثابت المرونة التجريبي للمواد أنصاف النواقل الثنائية.



الشكل 9.IV تغير ثابت مرونة المحسوب (C_{44}) بدلالة ثابت الشبكة a [Å] للمواد أنصاف النواقل الثنائية.

ندرج في الجدول (5.IV) نتائجنا الحسابية لثوابت القوة تمدد الرابطة (α) و كبس الرابطة (β) و كذلك معامل الإجهاد الداخلي (ζ) للمركبات أنصاف النواقل ذات بنية زنك-بلا ند (المكعبة). و المقرونة بالنتائج الموجودة في المراجع. بالنظر للجدول (5.IV) يمكننا الإشارة إلى أن نتائجنا الحسابية في هذا العمل متوافقة مع النتائج الموجودة في المراجع [43,35] و المحصل عليها من حسابات المبدأ الأول و كذلك مشتقة من المعطيات التجريبية المذكورة في المرجع [43].

الجدول 5.IV قيم ثابت قوة تمدد الرابطة (α) و ثابت قوة كبس الرابطة (β) و معامل الإجهاد الداخلي (ζ) للمركبات أنصاف النواقل الثنائية و مقارنتها مع نتائج حسابات المبدأ الأول [35] و التقديرات النظرية المشتقة من المعطيات التجريبية [43].

المواد	$(n/m) \alpha$		$(n/m) \beta$		ζ	
	التجريبي	الحسابي	التجريبي	الحسابي	التجريبي	الحسابي
AlAs	.	41.15	.	9.80	0.58 [35]	0.595
GaAs	41.19 [35]	43.8	8.95 [35]	10.64	0.53 [35] 0.60 [43]	0.597
InAs	35.18 [43]	23.37	5.50 [43]	5.6	0.682 [43]	0.599
AlSb	35.35 [43]	31.82	6.77 [43]	7.72	0.649 [43]	0.596
GaSb	33.16 [43]	32.23	7.22 [43]	7.86	0.612 [43]	0.597
InSb	29.61 [43]	23.70	4.77 [43]	5.72	0.695 [43]	0.598
GaP	47.32 [43]	27.91	10.44 [43]	5.87	0.589 [43]	0.595
InP	43.03 [43]	31.78	6.24 [43]	7.47	0.699 [43]	0.597

5.IV معامل المرونة الحجمي (β_s) (bluk modulus):

قمنا بحساب ثوابت المرونة C_{11} ، C_{44} و C_{12} و لأنها تدخل في حساب العديد من العوامل مثل معامل المرونة الحجمي (β_s) الذي تعطى عبارته الموافقة لـ [48].

$$\beta_s = \frac{C_{11} + 2C_{12}}{3} \quad (IV.16)$$

أدرجنا في الجدول (6.IV) النتائج الحسابية لمعامل المرونة الحجمي (β_s) للمركبات أنصاف النواقل الثنائية ذات بنية زنك-بلاند المقرونة بالمعطيات النظرية المستخلصة النتائج التجريبية لثوابت المرونة [20]. إن معامل المرونة الحجمي مرتبط مع كافة طاقة المرونة بالعلاقة التالية [12].

$$W = \frac{1}{2} \beta \delta^2 \quad (IV.17)$$

W : طاقة المرونة.

δ : دلتا كرونیکا.

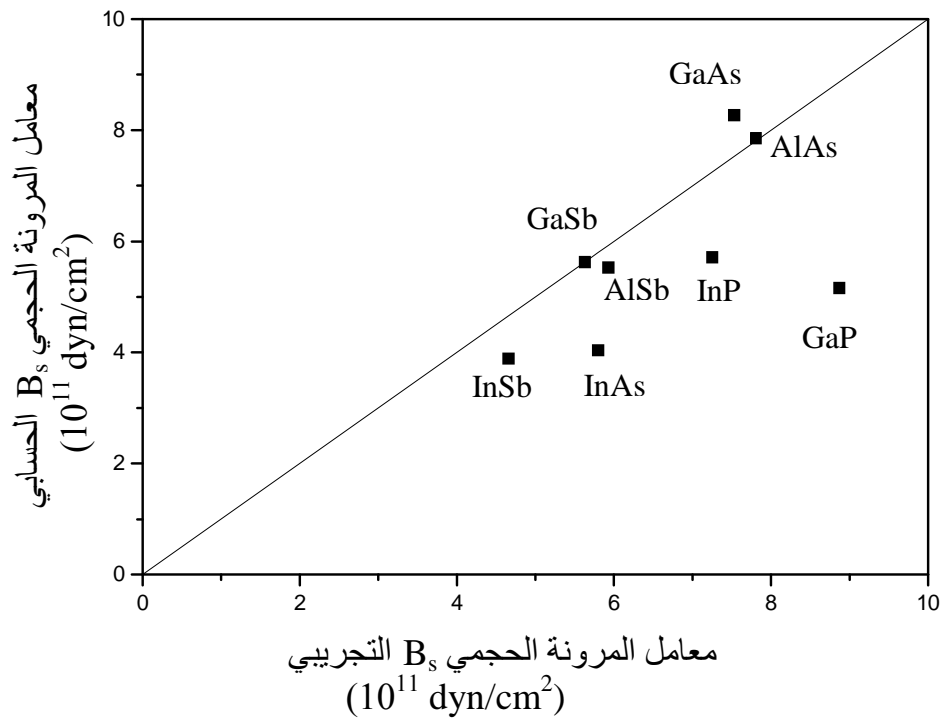
$$\frac{\delta}{3} = e_{11} + e_{22} + e_{33} \quad (IV.18)$$

e_{ij} ($i = j = 1, 2, 3$) معاملات التشوه.

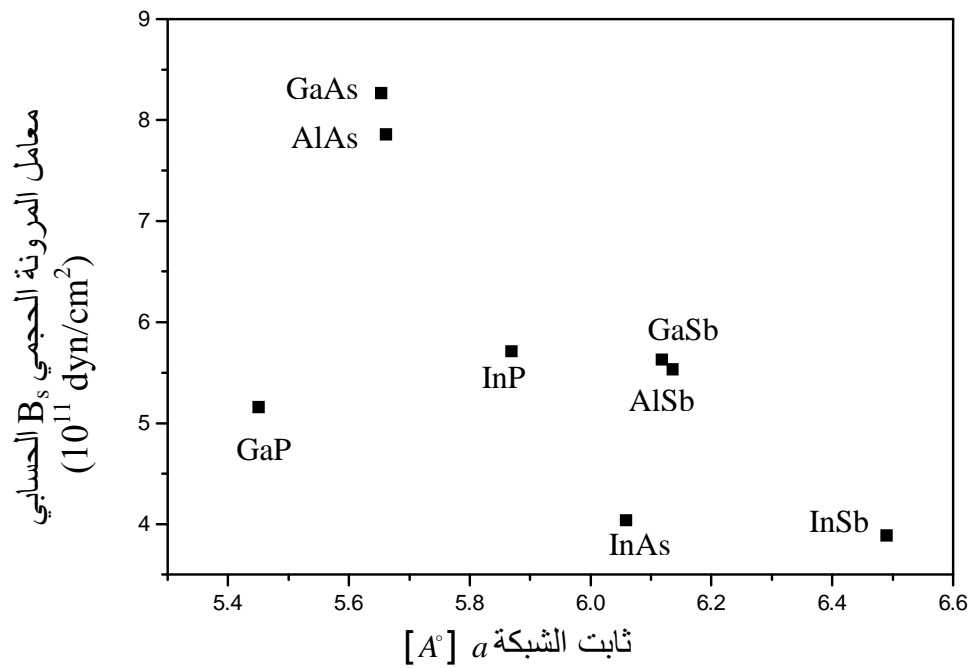
كما هو موضح في الجدول (6.IV) و الشكل (6.IV) يظهر توافق جيد بين القيم الحسابية و التجريبية لمعامل المرونة الحجمي.

الجدول 6.IV القيم الحسابية لمعامل المرونة الحجمي (β_s) و مقارنتها مع المعطيات التجريبية والنظرية.

ثابت الشبكة a [Å]	معامل المرونة الحجمي (β_s) (10^{11} dyn/cm^2)		المواد
	التجريبي [43]	الحسابي	
5.6611	7.81	7.86	AlAs
5.6533	7.53	8.27	GaAs
6.0584	5.80	4.04	InAs
6.1355	5.93	5.53	AlSb
6.118	5.63	5.63	GaSb
6.49	4.66	3.89	InSb
5.451	8.87	5.16	GaP
5.869	7.25	5.71	InP



الشكل 10.IV تغيرات معامل المرونة الحجمي (B_s) الحسابي بدلالة معامل المرونة الحجمي التجريبي.



الشكل 11.IV تغيرات معامل المرونة الحجمي (B_s) الحسابي بدلالة ثابت الشبكة a [A°].

6.IV معامل القص C' (The shear modulus):

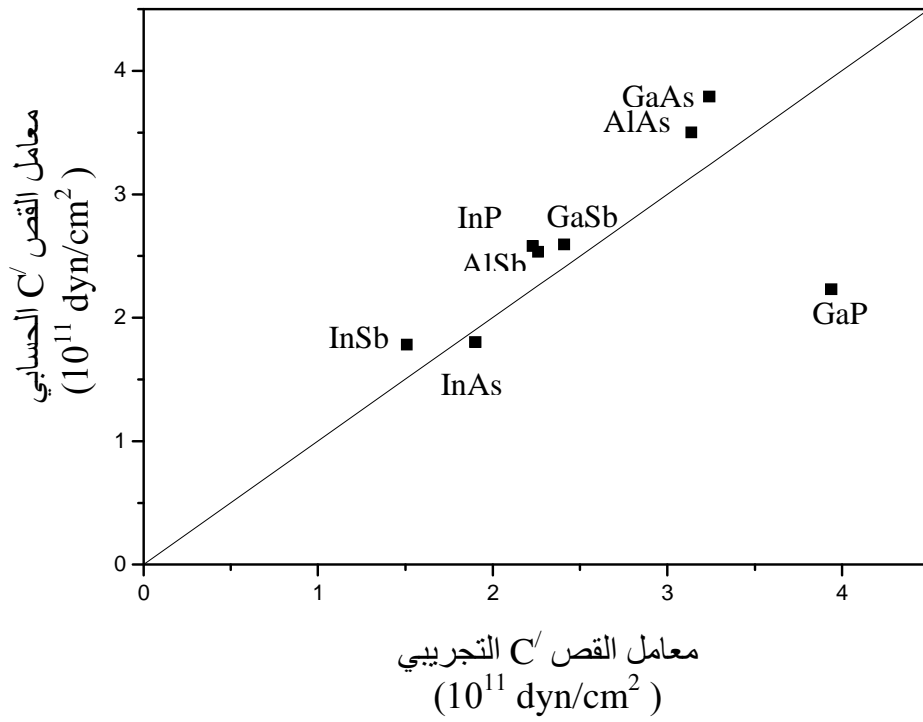
يعرف معامل القص وفقا للعلاقة [48]:

$$C' = \frac{C_{11} - C_{12}}{2} \quad (IV.19)$$

عندما نحدث تشوه قصي فإنه ينتج عنه انحناء (إلتواء) الرابطة. هذا التشوه يصنع هجينين في الرابطة ذات الطاقة التكافئية الهجينة و طاقة التداخل. حساب ثابت الانحناء (القص) يتضمن فقط التغير في الطاقة التكافئية للهجين [18] لأن التغير في طاقة التداخل يعوض بالتغير في الطاقة التكافئية الهجينة. و بالتالي معامل القص ينتج عن التغير في طاقة التداخل. أدخل مفهوم الهجين الصلب من طرف العالمان Harrison Phillips - [49] و تم إدخاله حديثا في نظرية ديناميك الشبكات [50]. إذن يمكن حساب معامل القص المروني انطلاقا من العلاقة (IV.19) لكل أنصاف النواقل الثنائية. ففي الجدول (7.IV) دونت النتائج الحسابية لمعامل القص في هذه الدراسة مقرونة بالنتائج الحسابية المستخلصة من القيم التجريبية لثوابت المرونة (C_{11} ، C_{44} و C_{12}). الشكل (12.IV) يبين تغيرات معامل القص (C') الحسابي بدلالة التجريبي فنلاحظ توافق جيد قيمنا الحسابية و تلك المستخلصة من التجربة [43]. إذ نلاحظ قيم معامل القص متطابقة بالنسبة لأنصاف النواقل رباعية الجوار (tétrédrique).

الجدول 7.IV قيم معامل القص الحسابي C' و مقارنتها مع التقديرات التجريبية.

معامل القص C' (10^{11} dyn/cm^2)		المواد
التجريبي	الحسابي	
3.14	3.5	AlAs
3.24	3.79	GaAs
1.9	1.80	InAs
2.26	2.53	AlSb
2.41	2.59	GaSb
1.51	1.78	InSb
3.94	2.23	GaP
2.23	2.58	InP



الشكل IV.12 تغيرات معامل القص الحسابي (C') بدلالة معامل القص التجريبي.

7.IV معامل لا تماثل المناحي A (Anisotropy):

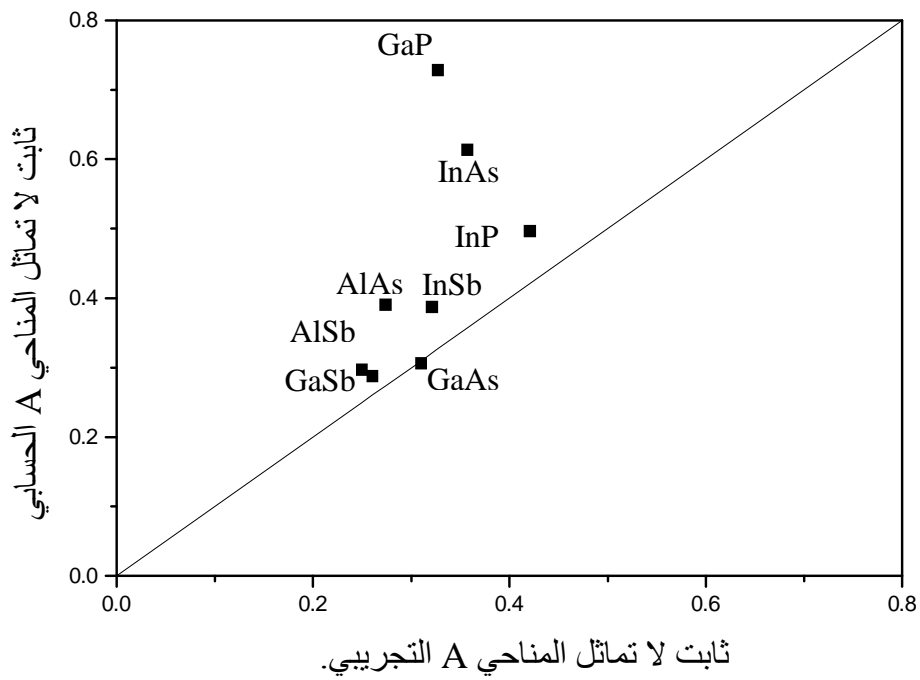
عبارة معامل لا تماثل المناحي مطابقة للتعريف [48]:

$$A = \frac{C_{11} - C_{12}}{4C_{44}} \quad (IV.20)$$

ففي الجدول (8.IV) أعطينا القيم الحسابية لمعامل لا تماثل المناحي A و قارناها مع الحسابات المستخلصة من القيم التجريبية. الشكل (13.IV) يبين تغيرات معامل لا تماثل المناحي الحسابي للمركبات أنصاف النواقل الثنائية ذات بنية زنك- بلانند بدلالة التجريبي. فهناك توافق معقول بين نتائجنا الحسابية في هذا العمل ومع تلك المستخلصة من التجربة.

الجدول 8.IV معامل لا تماثل المناحي الحسابي (A) للمركبات أنصاف النواقل الثنائية ذات بنية زنك- بلانند و مقارنتها مع المعطيات التجريبية.

معامل لا تماثل المناحي (A) [43]		المواد
التجريبي	الحسابي	
0.55	0.61	AlAs
0.55	0.62	GaAs
0.48	0.60	InAs
0.54	0.61	AlSb
0.56	0.62	GaSb
0.50	0.61	InSb
0.56	0.57	GaP
0.49	0.61	InP



الشكل IV.13 تغيرات ثابت لا تماثل المناحي الحسابي (A) بدلالة التجريبي للمركبات أنصاف النواقل الثنائية.

8.IV الأيونية f_i (Ionicity) :

إن حساب الأيونية يتطلب معرفة الإستقطابية و باستعمال العلاقة [20] :

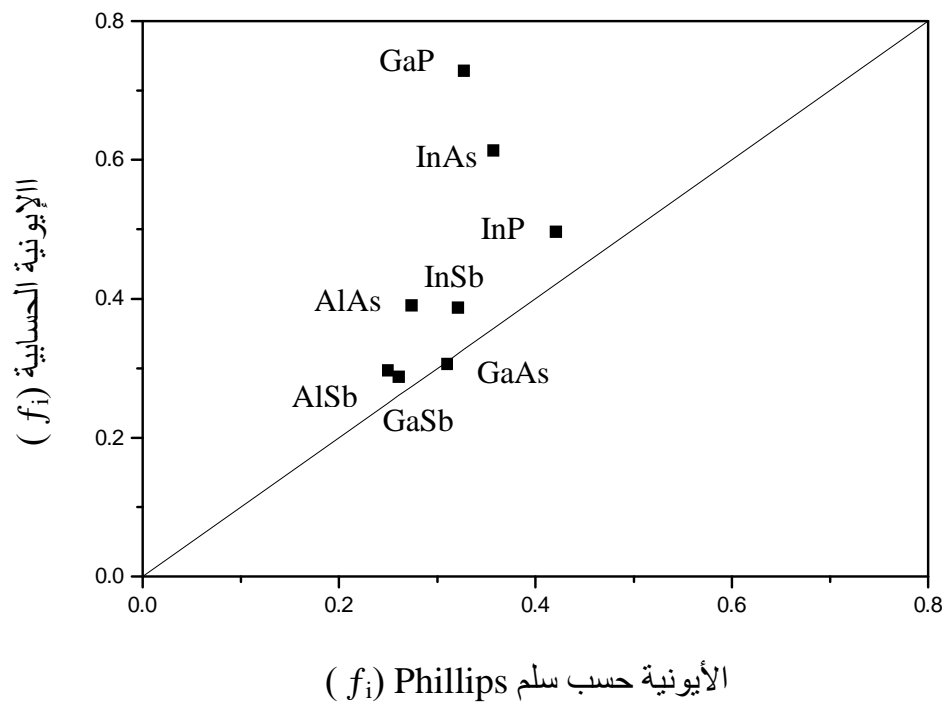
$$f_i = \left[1 - (1 - \alpha_p^2)^{3/2} \right]^{1/2} \quad (IV.21)$$

إن اهتمامنا في هذا العمل أعطي للمناقشة النوعية للأيونية للمواد المدروسة، ففي الجدول (9.IV) أعطيت النتائج الحسابية للأيونية (f_i) في هذه الدراسة مقرونة بالنتائج التي تحصل عليها Phillips [51] و كذلك نتائج Garcia-Cohen [52]. علما أن الأيونية تكون متزايدة في المركبات V-III [19].

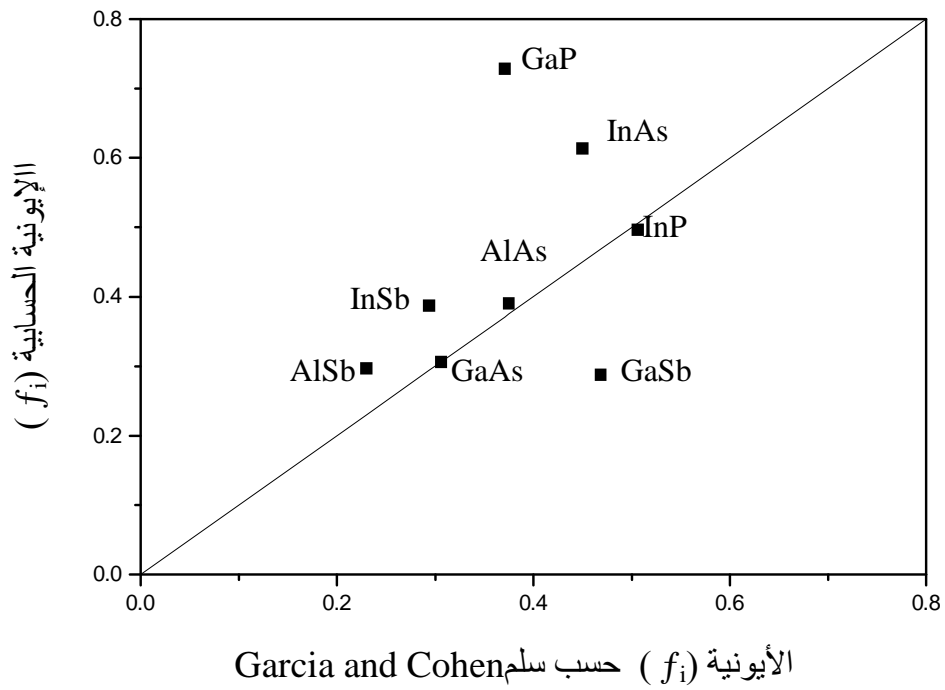
الجدول 9.IV قيم الأيونية المحسوبة (f_i) و مقارنتها بالأيونية حسب سلم Phillips [51] و كذلك حسب سلم Garcia and Cohen [52] و النطاق الطاقوي الممنوع (E_g) [19].

النطاق الطاقوي الممنوع E_g (ev)	الأيونية (f_i)			المواد
	سلم Garcia and Cohen	سلم Phillips	الحسابية	
2.16	0.375	0.274	0.391	AIAs
1.43	0.316	0.310	0.306	GaAs
0.36	0.450	0.357	0.614	InAs
1.60	0.230	0.250	0.297	AlSb
0.68	0.469	0.261	0.288	GaSb
0.17	0.294	0.321	0.387	InSb
2.25	0.371	0.327	0.729	GaP
1.27	0.506	0.421	0.497	InP

من الشكلين (14.IV) و (15.IV) يمكن أن نستنتج فيما يخص تغيرات الأيونية f_i المحسوبة للمركبات أنصاف النواقل الثنائية ذات بنية زنك- بلاند بدلالة الأيونية حسب سلم Phillips [51] و كذلك حسب سلم Cohen-Garcia [52] أنه يوجد توافق معقول كما هو موضح في الشكلين (14.IV) و (15.IV) على التوالي. أما الشكل (16.IV) يبين تغير الأيونية بدلالة النطاق الطاقوي الممنوع و الذي هو تغير غير منتظم. كما أننا سندرس تغير بعض المعاملات بدلالة الأيونية، و ذلك نظرا لأهميتها في دراسة خواص أنصاف النواقل الثنائية ذات بنية زنك- بلا ند (المكعبة).

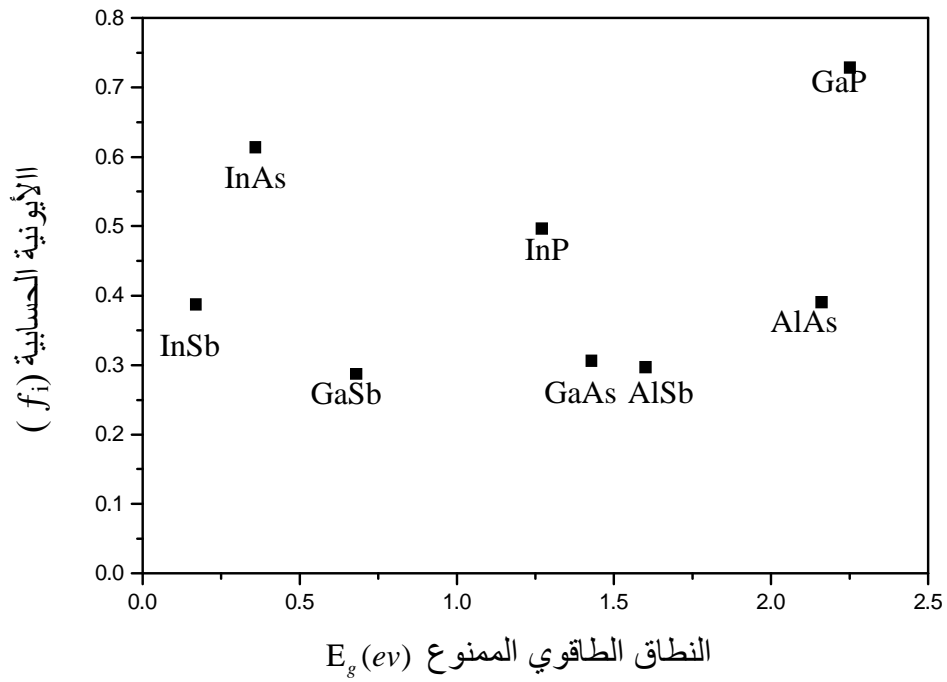


الشكل 14.IV تغيرات الأيونية الحسابية (f_i) بدلالة الأيونية حسب سلم Phillips.



الشكل 15. IV تغيرات الأيونية الحسابية (f_i) بدلالة الأيونية (f_i) حسب

سلم Garcia and Cohen.



الشكل 16.IV تغيرات الأيونية الحسابية (f_i) بدلالة

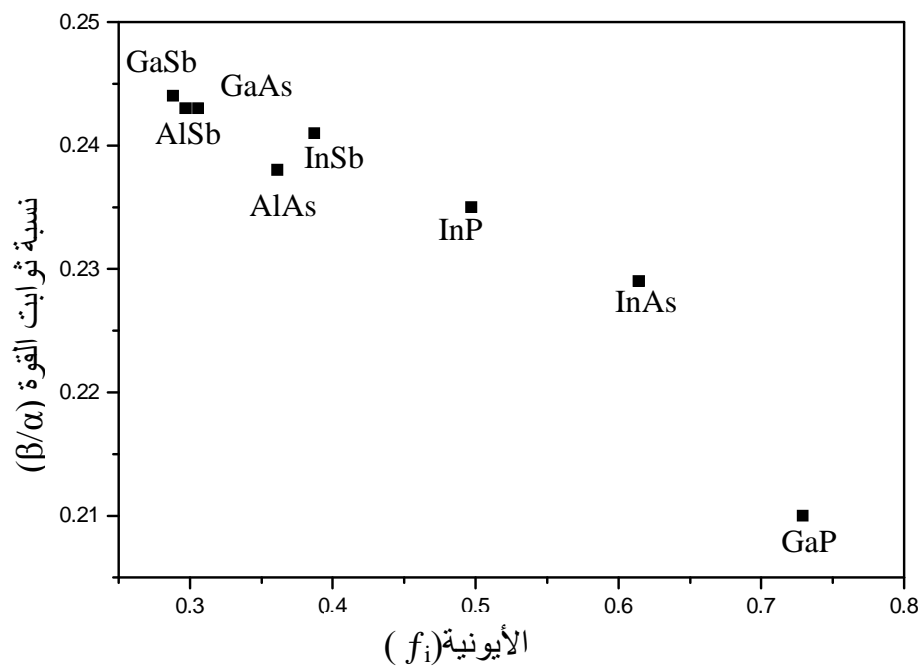
النطاق الطاقوي الممنوع E_g (eV).

1.8.IV النسبة $\frac{\beta}{\alpha}$ بدلالة الأيونية f_i :

كما عرفنا سابقا ثوابت القوة α و β حسب العلاقات (IV.11) و (IV.12) و الأيونية f_i الموافقة للعبارة (IV.21). باستعمال النتائج الموجودة في الجدول (10.IV)، حيث نعالج تغير النسبة $\frac{\beta}{\alpha}$ بدلالة الأيونية f_i . طبعا إن ثوابت المرونة مركبة من ثوابت القوة α و β ، حيث α هو ثابت تمدد الرابطة و β هو ثابت كبس الرابطة. من الجدول (10.IV) نلاحظ أن النسبة $\frac{\beta}{\alpha}$ تزداد بسرعة عندما الأيونية f_i تتناقص كما هو موضح في الشكل (17.IV).

الجدول 10.IV قيم النسبة بين ثوابت القوة المحسوبة $(\frac{\beta}{\alpha})$ بدلالة الأيونية المحسوبة (f_i) .

النسبة $(\frac{\beta}{\alpha})$ المحسوبة	الأيونية المحسوبة (f_i)	المواد
0.238	0.391	AlAs
0.243	0.306	GaAs
0.229	0.614	InAs
0.243	0.297	AlSb
0.244	0.288	GaSb
0.241	0.387	InSb
0.210	0.729	GaP
0.235	0.497	InP



الشكل 17.IV تغير النسبة لثوابت القوة المركزية (β/α) بدلالة الأيونية (f_i).

2.8.IV معامل المرونة الحجمي المختزل β^* و معامل القص المختزل C_s^* بدلالة الأيونية f_i :

نعرف كل من معامل المرونة الحجمي المختزل β^* و معامل القص المختزل C_s^* وفقا [20]:

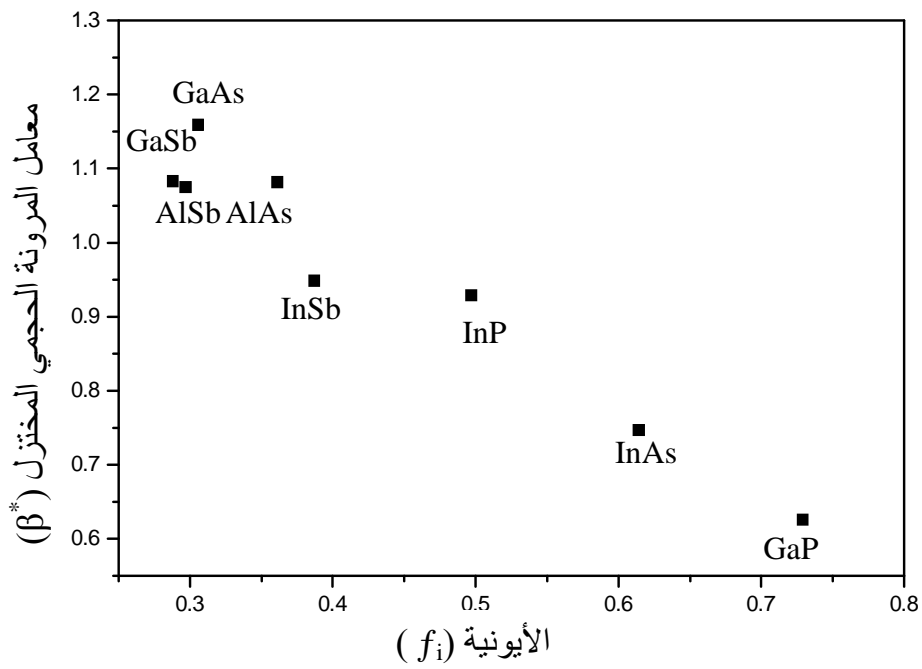
$$\beta^* = \frac{(C_{11} - 2C_{12})}{3C_0} \quad (IV.22)$$

$$C_s^* = \frac{(C_{11} - C_{12})}{2C_0} \quad (IV.23)$$

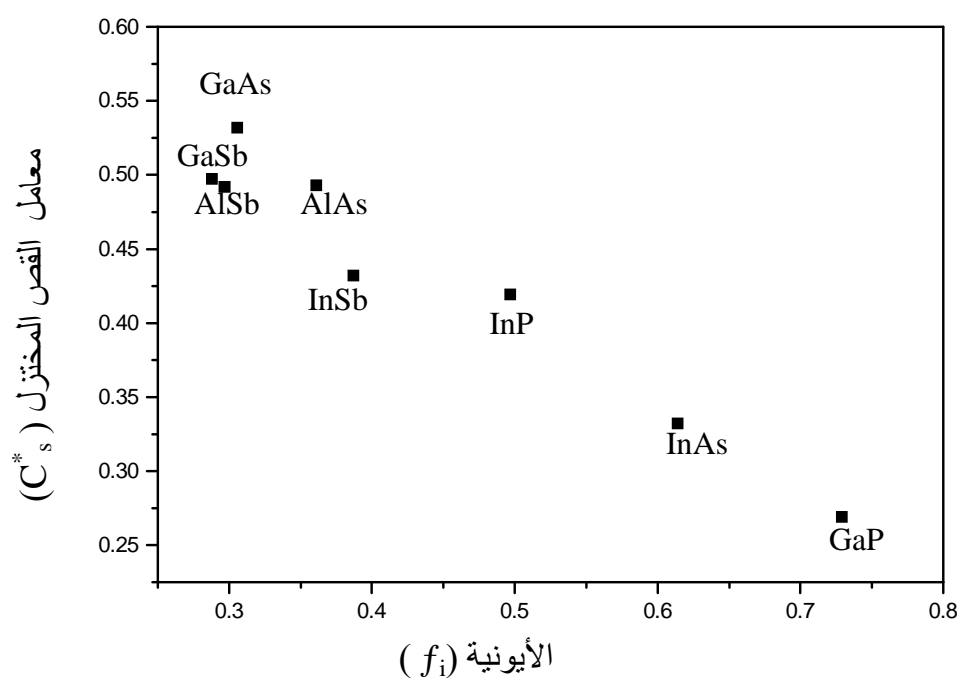
حيث C_0 و C_{12} و C_{11} تعبر عن ثوابت المرونة المعرفة حسب العلاقات (IV.4) و (IV.5) و (IV.8) حسب [20]. ندرج قيم معامل المرونة الحجمي المختزل β^* و قيم معامل القص المختزل C_s^* و قيم الأيونية في الجدول (11.IV) و في الشكلين (18.IV) و (19.IV) يعبران عن تغير المعاملات المختزلة β^* و C_s^* بدلالة الأيونية f_i . نلاحظ في الشكل (18.IV) أن تغير معامل المرونة الحجمي المختزل β^* غير منتظم بدلالة الأيونية f_i . ونفس الملاحظة بالنسبة لتغير معامل القص المختزل C_s^* بدلالة الأيونية f_i ، بحيث أن قيم كل من معامل المرونة الحجمي المختزل و معامل القص المختزل تزداد بينما قيم الأيونية تتناقص كما هو مبين في الشكلين (18.IV)، (19.IV).

الجدول 11.IV قيم معامل المرونة الحجمي المختزل الحسابي (β^*) و قيم معامل القص المختزل (C_s^*) بدلالة قيم الأيونية المحسوبة (f_i).

المواد	الأيونية المحسوبة (f_i)	معامل المرونة الحجمي المختزل الحسابي (β^*)	معامل القص المختزل الحسابي (C_s^*)
AlAs	0.391	1.082	0.493
GaAs	0.306	1.159	0.532
InAs	0.614	0.747	0.332
AlSb	0.297	1.075	0.492
GaSb	0.288	1.083	0.497
InSb	0.387	0.949	0.432
GaP	0.729	0.626	0.269
InP	0.497	0.929	0.419



الشكل 18.IV تغير معامل المرونة الحجمي المختزل (β^*) بدلالة الأيونية (f_i).



الشكل 19.IV تغير معامل القص المختزل (Cs*) بدلالة الأيونية fi.

9.IV معامل يونغ (Young) y_0 :

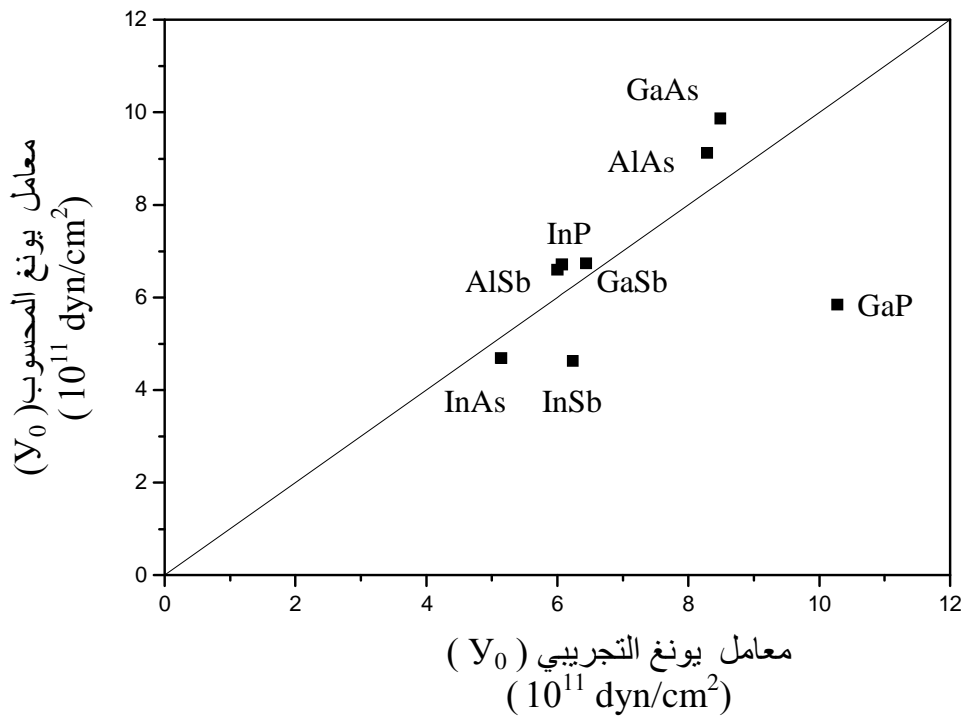
لوصف خواص الوسط غالبا يستخدم معامل يونغ y_0 الذي يصف خواص مرونة هذا الوسط في اتجاه معين، وهو يحدد بنسبة الإجهاد بذلك الاتجاه على قيمة التشوه في نفس ذلك الاتجاه [12]. تعطى عبارته بما يلي:

$$y_0 = \frac{(C_{11} + 2C_{12})(C_{11} - C_{12})}{(C_{11} + C_{12})} \quad (IV.24)$$

ففي الجدول (12.IV) أدرجنا النتائج لمعامل يونغ المقرونة بالحسابات المستخلصة من القيم التجريبية لثوابت (C_{44}, C_{12}, C_{11}) المرونة لهذا المعامل للمركبات أنصاف النواقل الثنائية ذات بنية زنك-بلا ند. من خلال الشكل (20.IV) الذي يبين تغيرات معامل يونغ الحسابي بدلالة التجريبي الذي يظهر توافق معقول بين نتائجنا الحسابية و تلك المستخلصة من القيم التجريبية لثوابت المرونة

الجدول 12.IV قيم معامل يونغ الحسابي (y_0) و معدل بواسن الحسابي (δ_0) و مقارنتها مع التقديرات التجريبية.

المواد	قيم معامل يونغ (y_0) $(10^{11} \text{ dyn/cm}^2)$		معدل بواسن (δ_0)	
	الحسابي	التجريبي	الحسابي	التجريبي
AlAs	9.12	8.29	0.302	0.323
GaAs	9.86	8.49	0.301	0.312
InAs	4.69	5.14	0.306	0.352
AlSb	6.59	6.00	0.301	0.331
GaSb	6.73	6.44	0.301	0.313
InSb	4.62	6.24	0.302	0.354
GaP	5.84	10.28	0.312	0.307
InP	6.71	6.07	0.304	0.360



الشكل IV. 20 تغير معامل يونغ المحسوب (Y_0) بدلالة معامل يونغ التجريبي.

10.IV معامل بواسن δ_0 (Poisson):

من بين العوامل التي تصف خواص الوسط معامل بواسن δ_0 الذي يحدد بنسبة التشوه الانكماشية

العرضي على التشوه، يعطى بالعلاقة [12]:

$$\delta_0 = \frac{C_{12}}{C_{11} + C_{12}} \quad (\text{IV.25})$$

النتائج الحسابية لمعامل بواسن مدونة في الجدول (12.IV). الشكل (21.IV) يبين تغيرات معامل بواسن للمركبات الثنائية لأنصاف النواقل ذات بنية زنك-بلاند (المكعبة) بدلالة القيم الحسابية المستخلصة من التجربة لثوابت المرونة، من الشكل يظهر توافق معقول.

60060

الشكل IV. 21. تغير معدل بواسن المحسوب (δ_0) بدلالة معدل بواسن التجريبي.

معدل بواسن المحسوب (δ_0)

GaP	AlAs	AlSb		InP
GaAs	GaSb	InAs	InSb	

معدل بواسن التجريبي (δ_0)

الخلاصة العامة

في هذا العمل قمنا بدراسة الخواص الميكانيكية و حساب ثوابت المرونة للمركبات أنصاف النواقل الثنائية ذات بنية زنك-بلاند (المكعبة)، معتمدين في ذلك على الشكل المبسط للكمون الكاذب التجريبي (E.P.M) المقرون بنموذج مدارات الروابط لـ Harrison. ويمكن تلخيص أهم النتائج المحصل عليها في هذا البحث في النقاط التالية:

- إن قيم الإستقطابية المحسوبة α_p في هذا العمل بطريقتنا من أجل مركبات أنصاف النواقل الثنائية ذات بنية زنك-بلاند (المكعبة) موافقة مع الحسابات النظرية الأخرى.
- أما فيما يخص الشحنة الفعالة المستعرضة e_T^* فإن القيم التي حصلنا عليها موافقة جدا للقيم التجريبية و الحسابات النظرية الأخرى، كما أن تغير الشحنة الفعالة المستعرضة بدلالة ثابت الشبكة a فهو تغير غير منتظم.

تحصلنا على قيم ثوابت المرونة C_{44}, C_{12}, C_{11} للمركبات أنصاف النواقل الثنائية ذات بنية زنك- بلاند (المكعبة) بطريقة الكمون الكاذب (E.P.M) المقرون بنموذج مدارات الروابط لـ Harrison. إن نتائجنا المحصل عليها في هذا العمل عموما هي على توافق جيد مع تقديرات المعطيات التجريبية الموجودة.
الحصول على ثوابت المرونة يسمح لنا بحساب المعاملات الميكانيكية فبخصوص كل من قيم معامل المرونة الحجمي و قيم معامل القص المحسوبة في هذا العمل فيظهر توافق جيد مع المعطيات المستخلصة من القيم التجريبية لثوابت المرونة أما معامل لا تماثل المناحي عدم توافق مع المعطيات التجريبية، أما عن تغير معامل المرونة الحجمي بدلالة ثابت الشبكة a فهو غير منتظم.

نتائج الأيونية التي حصلنا عليها في هذا العمل وبمقارنتها مع القيم التي تحصل عليها كل من Phillips و Garcia-Cohen فهو توافق لا بأس به. أما عن تغير الأيونية الحسابية f_i بدلالة النطاق الطاقوي الممنوع E_g فهو تغير غير منتظم. كذلك قمنا بدراسة تغير النسبة β/α بدلالة الأيونية f_i حيث أنه كلما زادت النسبة تناقصت الأيونية. كما أننا درسنا تغير كل من معامل المرونة الحجمي المختزل β^* و معامل القص المختزل C_s^* بدلالة الأيونية الذي هو غير منتظم، بحيث عندما تزداد الأيونية يتناقص β^* و C_s^* .

- من خلال الحسابات التي قمنا بها لمعامل يونغ γ_0 و معامل بواسن δ_0 و بمقارنتها مع القيم المستخلصة من القيم التجريبية لثوابت المرونة عموما يوجد توافق حسن.

قائمة الأشكال

رقم الصفحة	عنوان الشكل	رقم الشكل	الرقم
4	مركبات الإجهاد σ_{ij} .	1. I	1
5	تمثيل المركبات الموجبة و السالبة للإجهاد.	2.I	2
9	الإجهاد العمودي والمماسي.	3.I	3
13	عناصر ممتد التشوه.	4.I	4
16	تغير حجم متوازي المستطيلات تحت تأثير الإجهاد.	5.I	5
24	محاور التناظر للبلورات المكعبة.	6.I	6
28	يمثل بنية زنك- بلاند.	1.II	7
45	تغير الإستقطابية المحسوبة (α_p) بدلالة الإستقطابية النظرية).	1. IV	8
48	تغير الشحنة الفعالة المستعرضة المحسوبة (e_T^*) بدلالة الشحنة الفعالة المستعرضة التجريبية.	2.IV	9
49	تغير الشحنة الفعالة المستعرضة المحسوبة (e_T^*) بدلالة ثابت الشبكة a $[A^\circ]$.	3.IV	10
54	تغير ثابت المرونة المحسوب (C_{11}) بدلالة ثابت المرونة التجريبي للمواد أنصاف النواقل الثنائية.	4.IV	11
55	تغير ثابت المرونة المحسوب (C_{11}) بدلالة ثابت الشبكة a $[A^\circ]$ للمواد أنصاف النواقل الثنائية.	5.IV	12

56	تغير ثابت المرونة المحسوب (C_{12}) بدلالة ثابت المرونة التجريبي للمواد أنصاف النواقل الثنائية.	6.IV	13
57	تغير ثابت المرونة المحسوب (C_{12}) بدلالة ثابت الشبكة a [A°] للمواد أنصاف النواقل الثنائية.	7.IV	14
58	تغير ثابت المرونة المحسوب (C_{44}) بدلالة ثابت المرونة التجريبي.	8.IV	15
59	تغير ثابت المرونة المحسوب (C_{44}) بدلالة ثابت الشبكة a [A°] للمواد أنصاف النواقل الثنائية.	9.IV	16
62	تغيرات معامل المرونة الحجمي (B_s) الحسابي بدلالة معامل المرونة الحجمي التجريبي.	10.IV	17
63	تغيرات معامل المرونة الحجمي (B_s) الحسابي بدلالة ثابت الشبكة a [A°].	11.IV	18
65	تغيرات معامل القص الحسابي (C') بدلالة معامل القص التجريبي.	12.IV	19
67	تغيرات ثابت لا تماثل المناحي الحسابي (A) بدلالة التجريبي للمركبات أنصاف النواقل الثنائية.	13.IV	20
69	تغيرات الأيونية الحسابية (f_i) بدلالة الأيونية حسب سلم Phillips.	14.IV	21
70	تغيرات الأيونية الحسابية (f_i) بدلالة الأيونية (f_i) حسب سلم Garcia and Cohen.	15.IV	22

71	تغيرات الأيونية الحسابية (f_i) بدلالة النطاق الطاقوي الممنوع $E_g (ev)$.	16.IV	23
73	تغير النسبة لثوابت القوة المركزية (β/α) بدلالة الأيونية (f_i).	17.IV	24
75	تغير معامل المرونة الحجمي المختزل (β^*) بدلالة الأيونية (f_i).	18.IV	25
76	تغير معامل القص المختزل (C_s^*) بدلالة الأيونية f_i .	19.IV	26
78	تغير معامل يونغ المحسوب (γ_0) بدلالة معامل يونغ التجريبي.	20.IV	27
80	تغير معدل بواسن المحسوب (\bar{D}_0) بدلالة معدل بواسن التجريبي.	21. IV	28

رقم الصفحة	عنوان الجدول	رقم الجدول	الرقم
43	عوامل الشكل المتناظرة (V_s) و ضد المتناظرة (V_A) معدلة بـ (Ryd) للمركبات أنصاف النواقل الثنائية وثابت شبكتها (a).	1.IV	1
44	قيم الإستقطابية المحسوبة (α_p) ومقارنتها مع أعمال نظرية أخرى.	2.IV	2
46	قيم الشحنة الفعالة المستعرضة المحسوبة e_T^* ومقارنتها مع بعض الحسابات النظرية والنتائج التجريبية	3.IV	3
51	قيم ثابت المرونة C_{11} المحسوب للمركبات أنصاف النواقل الثنائية و مقارنتها مع المعطيات التجريبية و قيم ثابت الشبكة a $[A^\circ]$.	4.IV أ	4
52	قيم ثابت المرونة C_{12} المحسوب للمركبات أنصاف النواقل الثنائية و مقارنتها مع المعطيات التجريبية و قيم ثابت الشبكة a $[A^\circ]$.	4.IV ب	5
53	قيم ثابت المرونة C_{44} المحسوب للمركبات أنصاف النواقل الثنائية و مقارنتها مع المعطيات التجريبي و قيم ثابت الشبكة a $[A^\circ]$.	4.IV ج	6
60	قيم ثابت قوة تمدد الرابطة (α) و ثابت قوة كبس الرابطة (β) و معامل الإجهاد الداخلي (ξ) للمركبات أنصاف النواقل الثنائية و مقارنتها مع نتائج حسابات المبدأ الأول [35] و التقديرات النظرية المشتقة من المعطيات التجريبية [43]	5.IV	7
61	القيم الحسابية لمعامل المرونة الحجمي (β_s) و مقارنتها مع المعطيات التجريبية والنظرية	6.IV	8
64	قيم معامل القص الحسابي C' و مقارنتها مع التقديرات التجريبية	7.IV	9
66	معامل لا تماثل المناحي الحسابي (A) للمركبات أنصاف النواقل الثنائية ذات بنية زنك- بلاند و مقارنتها مع المعطيات التجريبية.	8.IV	10
68	قيم الأيونية المحسوبة (f_i) و مقارنتها بالأيونية حسب سلم Phillips [50] و كذلك حسب سلم Garcia and Cohen [51] و النطاق الطاقوي الممنوع (E_g) [19].	9.IV	11
72	قيم النسبة بين ثوابت القوة المحسوبة ($\frac{\beta}{\alpha}$) بدلالة الأيونية المحسوبة (f_i).	10.IV	12
74	قيم معامل المرونة الحجمي المختزل الحسابي (β^*) و قيم معامل القص المختزل (C_s^*) بدلالة قيم الأيونية المحسوبة (f_i).	11.IV	13
77	قيم معامل يونغ الحسابي (y_0) و معدل بواسن الحسابي (δ_0)	12.IV	14

المراجع

- [1] K. Kim, W. R. L. Lambrecht, B. Segall, *phys. Rev. B* 53 (1996) 16310.
- [2] S. Strite, H. Morkoc, *J. Vac. Sci. B* 10 (1992) 1237.
- [3] M. Hao, S. Mahanty, R. S. Qhalid Fareed, S. Tottori, K. Nishino and S. Sakai, *Appl. Lett.* 74 (1999) 2788.
- [4] V. V. Sobolev and M. A. Zlobina, *Semiconductors* 33 (1999) 385.
- [5] S. C. Jain, M. Willander, J. Narayan and R. Van Overstraeten, *J. Appl. Phys.* 87 (2000) 965.
- [6] D. Vogel, P. Kruger and J. Pollman, *Phys. Rev. B* 55 (1997) 12836, and references cited therein.
- [7] K. K. H. Ploog, D. Brandt, H. Yang, J. Menniger, R. Klann, *Solid-State Electron* 41 (1997) 235.
- [8] S. K. Pugh, D. J. Dugdale, S. Brand and R. A. Abram, *Semicon. Sci. Technol.* 14 (1999) 23.
- [9] A. Guinir, R. Jellien, 'La matière de l'état solide', Ed. Liaison Scientifique, Paris, 1987.
- [10] W. Kurz, J. P. Mercier and Zambelli, 'Introduction à la science des matériaux', Ed. Suisse, 1995.
- [11] N. Bouarissa, K. Kassali, *Phys. Stat. Sol. B* 228 (2001) 663.
- [12] H. A. Dakhel, 'Introduction à la physique de solide', Ed. Algeria, 1991.
- [13] G. G. Hall, *Philips. Mag.* 43 (1952) 338.
- [14] C. A. Coulson, L. R. Redel and D. Stocker, *Proc. R. Soc. Lond.* 270 (1962) 357.
- [15] G. Lenman and J. Friedel, *J. Appl. Phys.* 33 (1962) 281.
- [16] M. Lannoo and J. N. Decarpigny, *Phys. Rev. B* 8 (1973) 5704.
- [17] W. A. Harrison, *Phys. Rev. B* 8 (1973) 4487.
- [18] W. A. Harrison, 'Electronic structure and the properties of solids', Freeman, San Francisco, CA 1980.

- [19] H. Mathieu, 'Physique des semiconducteurs et des composants Electroniques', 4 Ed. Masson 1998.
- [20] W. A. Harrison, S. Ciraci, Phys. Rev. B10 (1974) 1516,1517,1524.
- [21] M. L. Cohen and J. R. Chelikowsky, 'In Electronic structure and optical properties of semiconductors', Springer series in solid-state sciences Ed. Springer, New-York, 1988.
- [22] R. N. West, 'Positron studies in condensed matter', Taylor and Francis, London, 1974.
- [23] N. W. Acshroft and N. D. Mermin, 'Solid state physics', Ed. Holt, Rinehart and Winston Philadelphia, 1976.
- [24] Z. Charifi, 'Thèse de Magistère', Univ. De Sétif, Algeria, 1997, and references cited therein.
- [25] P. Kréev, 'La Physique des semiconducteurs', Ed. Mir. Moscou, 1975.
- [26] N. Bourissa, Modern. Phys. Lett. B 19 (1999) 599.
- [27] N. W. Acshroft, Phys. Rev. Lett. 23 (1996) 48.
- [28] S. Laoui, 'Thèse de Magistère', Univ. de Sétif, Algeria, (1996), and references cited therein.
- [29] I. V. Abarenkov and V. Heine, Phil. Mag. 12 (1965) 529.
- [30] H. Nara and T. Kobayasi, J. Phys. Soc. Japan 41 (1976) 1429.
- [31] K. J. Chang, S. Froyen, and M. L. Cohen, Phys. Rev. B 28 (1983) 4736.
- [32] J. R. Chelikowsky and M. L. Cohen, Phys. Rev. B 14 (1976) 556.
- [33] T. Kobayasi, H. Nara, Bull. Coll. Med. Sci. Tohoku. Univ.2 (1993) 7.
- [34] P. Vogl, J. Phys. C 11 (1978) 251.
- [35] N. E. Christensen, S. Staphy, . Pawlowska, Phys. Rev. B 36 (1987) 1032.
- [36] N. Bourissa, Phys. Lett. A 245 (1998) 285.
- [37] T. Sengstag, N. Binggeli, A. Balderdshi, Phys. Rev. B 52 (1995) R 8613.

- [38] B. I. Bennet and A. A. Maradudin, Phys. Rev. B 5 (1972) 4146.
- [39] P. K. Vinsome and D. Richardson, J. Phys. C 4 (1971) 3177.
- [40] C. V. De Ahvarez, J. P. Walter, R. W. Boyd, and M. L. Cohen, J. Phys. Chem. Solids 34 (1973) 337.
- [41] J. M. Baranowskiki, J. Phys. C 17 (1984) 6287.
- [42] N. Bouarissa, R. Bachiri Phy. Rev. B 322 (2002) 195.
- [43] R. M. Martin, Phys. Rev. B 1 (1970) 4005, 4006.
- [44] K. Kreinman, Phys. Rev. 128 (1962) 2614.
- [45] M. Krieger, H. Sigg, N. Herres, K. Bachem, K. Köhler, Appl. Lett. 66 (1995) 682.
- [46] S. Gehrsitz, H. Sigg, N. Herres, K. Bachem, K. Köhler, F. R. Reinhart, Phys. Rev. B 60 (1999) 11601.
- [47] R. I. Cottam, G. A. Saunders, J. Phys. C 6 (1973) 2105.
- [48] M. Levinshtein, . Rumayntsev and M. Shur (Eds), Handbook series on semiconductor parametrs, Vol. 2, World scientific publ. CO, Singapore 1999.
- [49] W. A. Harrison and J. Phillips, Phys. Rev. Lett. 33 (1974) 410.
- [50] M. T. Yin and M. Cohen, Phys. Rev. B 26 (1982) 3259.
- [51] J. C. Phillips, 'Bonds and Bands in semiconductors', Academic Press, New York, 1973.
- [52] A. Garcia and M. L. Cohen, Phys. Rev. B 47 (1993) 4221.

ملخص

الهدف من هذا البحث هو دراسة الخواص الميكانيكية لأنصاف التواكل الثنائية ذات بنية زنك-بلاند (المكعبة):

III-V: AlAs, GaAs, InAs, AlSb, GaSb, InSb, GaP, InP.

في هذا العمل اقترحنا دراسة الخواص الميكانيكية و ذلك لمعرفة ثوابت المرونة و معرفة العديد من الخواص. باستعمال طريقة الكمون الكاذب التجريبية المحلية E.P.M المقرونة بنموذج Harrison لمدارات الروابط حتى نتمكن من الحصول على الكميات الفيزيائية المطلوبة. المقارنة مع النتائج النظرية لأعمال أخرى أوضحت التوافق الحسن مع نتائجنا. مما يسمح لنا القول بأن التقريب المطبق في هذا العمل صالحا لوصف الخواص الميكانيكية لمركباتنا.

الكلمات الدليّة: أنصاف النواقل، الخواص الميكانيكية، ثوابت المرونة، الكمون الكاذب، نموذج مدارات الروابط.

Résumé

Le but de ce travail est l'étude des propriétés mécaniques des semi-conducteurs binaires dans la phase Zinc-blende (cubique):

III-V: AlAs, GaAs, InAs, AlSb, GaSb, InSb, GaP, InP.

Dans ce travail, nous nous proposons d'étude théoriquement les propriétés mécaniques à savoir, les constantes élastiques des semi-conducteurs dans la structure Zinc-blende (cubique).

La méthode des Pseudopotentiels sera combinée avec le model de Harrison (The Bond-orbital model) afin de calculer les différentes quantités physiques désirées. La confrontation des résultats avec ceux disponibles dans les différentes littératures révèle une bonne concordance. Ce qui nous permet de conclure que la méthode adoptée dans cette étude est très valide dans la description des propriétés mécaniques des matériaux étudiés dans le cadre de ce travail.

Mots clés: semi-conducteurs, propriétés mécaniques, constantes élastiques, Pseudopotentiel, Model de liaisons orbitales.

Abstract

The purpose of this work is to the study the mechanical properties in the semiconductors crystallizing in the Zinc-blende phase:
III-V: AlAs, GaAs, InAs, AlSb, GaSb, InSb, GaP, InP.

This, by calculating the elastic constants, and judicious way to the analysis of a large number of properties. For that, the empirical pseudopotential (E.P.M) combined with the bond-orbital of Harrison have been used.

The comparison between the obtained results and those of the available literatures has revealed a good concordance. This let us to conclude that adopted method in this study is very successful in describing the mechanical properties of the materials studied in this work.

Key words: Semiconductors, Mechanical properties, elastic constants, Pseudopotential, Bond-orbital model.