

الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية
وزارة التعليم العالي والبحث العلمي
جامعة محمد بوضياف - المسيلة

ميدان: علوم المادة
فرع: فيزياء



تخصص: فيزياء الطاقة والطاقات المتجددة

كلية العلوم
قسم الفيزياء
رقم:

مذكرة مقدمة لنيل شهادة الماستر أكاديمي

إعداد الطالب(ة): بوختالة سيدعلي

تحت عنوان

التنبؤ ببنية عصابات الطاقة للسبيكة النصف الناقلة
(III, III)-Sb: التطبيق في الخلايا الكهروضوئية

تمت المناقشة يوم 24 / 06 / 2018 امام اللجنة المكونة من:

رئيسا
مشرفا و مقرر
مناقشا

جامعة المسيلة
جامعة المسيلة
جامعة المسيلة

زليخة شريفي
حكيم بعزيز
محمد سالمى

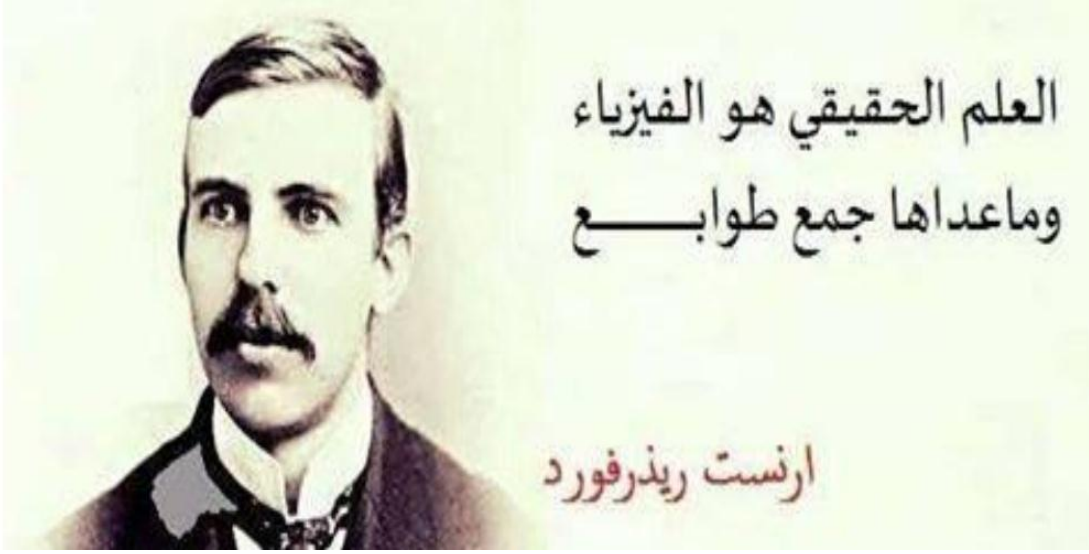
السنة الجامعية: 2018/2017

تقدير وشكر

الحمد لله رب العالمين والصلاة والسلام على قبلة القلوب سيدنا محمد وعلى اله وصحبه
الميامين ومن سار على نهجه واقتفى أثره إلى يوم الدين وبعد:
ومن حق النعمة الذكر، وأقل جزاء للمعروف الشكر... فبعد شكر المولى عز وجل المتفضل
بجليل النعم وعظيم الجزاء...
يجدربي أن أتقدم ببالغ الامتنان، وجزيل العرفان إلى كل من وجهي، وعلمي، وأخذ بيدي في
سبيل إنجاز هذا العمل .. وأخص بذلك مشرفي الأستاذ الفاضل البرفسور: عبد الحكيم
بعزيز الذي قوم، تابع، وصوب بحسن إرشاده لي في كل مراحل العمل، والذي وجدت في
توجيهاته حرص المعلم التي تؤتي ثمارها الطيبة بإذن الله
كما أتقدم بخالص الشكر والتقدير إلى الأستاذة الفاضلة: مختاري جهاد لمساعدتها لي
وحسن النصح
كما أتقدم بجزيل الشكر لجنة المناقشة، الأستاذ الكريم: سامي محمد والأستاذة
الكريمة: شريفي زليخة لقبولهما مناقشة عملي وتصويبه، وفقهما الله وأدام تألقهما...
كما أحمل الشكر والعرفان إلى كل من أمدني بالعلم والمعرفة، وأسدى لي النصح والتوجيه في
جميع مراحل تعليمي

الاهداء

الحمد لله الذي علم بالقلم ، علم الإنسان مالم يعلم ،وأفضل الصلاة والسلام على سيدنا محمد صلى الله عليه وسلم أما بعد.
أتقدم بالشكر الجزيل لكل من ساهم في إنجاز هذه المذكرة، كما أتوجه بخالص مشاعر الفخر والاعتزاز والتقدير لكل أفراد عائلتي وخاصة الوالدين الكريمين أبي مسعود وأمي رويح مليكة وإلى إخوتي فاتح، صلاح، يوسف، اصالة، كمنزة وخطيبتي سارة.
كما يسعدني ويشرفني أن أتقدم الى جمع اصدقائي صلاح صغيري، شريف بن ساعد ، عبد الرحمان مزاري



الفهرس

1.....مقدمة عامة

الفصل الاول

عموميات حول اشباه النواقل

1.....1.1 مقدمة

1.....2.1 الخواص العامة للمواد شبه الموصلية مثل سبائك $Al_xGa_{1-x}Sb$

1.....3.1 نظرية حزم الطاقة للمواد الصلبة ومفهوم فجوة الطاقة المحظورة Eg

3.....4.1 أشباه الموصلات النقية وغير النقية

3.....1.4.1 أشباه الموصلات النقية

4.....2.4.1 التوصيلية الذاتية لأشباه الموصلات النقية

4.....3.4.1 أشباه الموصلات الغير نقية (اللاذاتية)

5.....5.1 التطعيم

5.....1.5.1 اشباه النواقل النوع n

5.....2.5.1 اشباه النواقل النوع p

6.....6.1 تطبيقات اشباه النواقل

8.....7.1 المراجع

الفصل الثاني

نظرية دالية الكثافة DFT

9.....1.2 مقدمة

9.....2.2 معادلة شرودينغر للبلورة

10.....3.2 تقريب Bone-Oppenheime

11.....4.2 تقريب Hartree

12.....5.2 تقريب Hartree-Fock

12.....6.2 نظرية دالية الكثافة (DFT)

12.....1.6.2 نظرية Thomas-Fermi

13.....2.6.2 نظريتي Hohenberg-Koh

14.....3.6.2 معادلة Kohn-Sham

| | |
|---------|--------------------------------|
| 15..... | حلول معادلة Kohn-Sham |
| 16..... | تقريب كثافة الموضع LDA |
| 17..... | تقريب التدرج المعمم GGA |
| 17..... | التقريب المعدل لبريك جونسن mBJ |
| 20..... | المراجع |

الفصل الثالث

طريقة الأمواج المستوية المتزايدة خطيا و الكمون الكامل FP-LAPW

| | |
|---------|-----------------------------------|
| 23..... | 1.3 مقدمة |
| 23..... | 2. 3 طريقة APW |
| 25..... | 3.3 مبد طريقة FP-LAPW |
| 26..... | 4.3 دور الطاقة الخطية E_l |
| 26..... | 5.3 بنية الدوال الشعاعية |
| 26..... | 6.3 الدوال الشعاعية اللانسية |
| 28..... | 7.3 بنية الدوال الشعاعية |
| 30..... | 8.3 حل معادلة Poisson |
| 32..... | 9.3 تحسين طريقة (FP – LAPW) |
| 32..... | 1.9. 3 نوافذ الطاقة المضاعفة |
| 33..... | 2.9.3 النشر على المدارات الموضعية |
| 33..... | 9.3 برنامج Wien2K |
| 36..... | 10.3 المراجع |

الفصل الرابع

النتائج و المناقشة

| | |
|---------|-----------|
| 38..... | 1.4 مقدمة |
|---------|-----------|

| | |
|---------|-----------------------------------------------|
| 38..... | 2.4. البنية البلورية للسبائك $Al_xGa_{1-x}Sb$ |
| 41..... | 3.4. الخصائص البنيوية |
| 41..... | 1.3.4. ايجاد ثوابت البنية |
| 44..... | 2.3.4. دراسة استقرار سبائك $Al_xGa_{1-x}Sb$ |
| 46..... | 4.4. الخصائص الإلكترونية |
| 47..... | 1.4.4. عصابة الطاقة |
| 47..... | 1.1.4.4. مركب GaSb |
| 50..... | 2.1.4.4. سبيكة $Al_{0.25}Ga_{0.75}Sb$ |
| 52..... | 3.1.4.4. مركب AlSb |
| 54..... | 5.4. كثافة الحالات الإلكترونية |
| 62..... | 6.4. المراجع |

قائمة الاشكال

قائمة الجداول

خلاصة عامة

ملخص

مقدمة عامة :

أنصاف النواقل كما هو واضح من اسمها مواد تصنف بين المواد الموصلة والمواد العازلة من حيث توصيلها للتيار الكهربائي. يمكن وصف المادة الجامدة على أنها تجمع حشد كبير من الذرات المنفصلة. عندما تكون هذه الذرات متباعدة عن بعضها البعض فلن يكون هناك تفاعل بين الكترونات هذه الذرات وستتصرف كل ذرة على أنها وحيدة منفصلة عن الذرات الأخرى ولهذا فتركيب مستويات الطاقة لمجموعة الذرات هو عبارة عن تراكب لجميع المستويات الطاقوية في الذرات المنفصلة وإذا بدأت الذرات بالاقتراب من بعضها تبدأ الالكترونات بالتفاعل مع بعضها البعض وهنا يجب اعتبار أن الإلكترون ينتمي لتجمع هذه الذرات وليس خاصا لذرة معينة. وينقسم كل مستوى أصلي إلى مجموعة حزم من المستويات المتقاربة وتسمى هذه الحزم عصابات الطاقة ويزداد عرض العصابة كلما تناقصت المسافة بين الذرات [1,2] في حالة الذرات الأصلية لا تكون كل مستويات الطاقة ممتلئة، بل انه عند درجة حرارة منخفضة تبدأ المستويات في الامتلاء الي أن تصل الي حد أقصى من المستويات ثم بعد هذا الحد تكون المستويات فارغة، وهذا الأمر ينطبق أيضا على شكل العصابات حيث تكون كلها ممتلئة الي حد معين ثم تصبح بعدها العصابات فارغة وتسمى أخر عصابة ممتلئة عصابة التكافؤ وتسمى أول عصابة فارغة عصابة التوصيل والفجوة بينهما تسمى فجوة الطاقة في المواد الموصلة تكون ذرتها محاطة بالإلكترونات حرة تكسب المعدن صفة التوصيل الكهربائي. وعلى العكس المواد العازلة مكونة من ذرات لا تحتوي الكترونات حرة مما يعني عدم توصيلها للتيار الكهربائي [3,4] وهناك تصور شكل العصابات الطاقوية حيث تكون عصابة التكافؤ مليئة بالإلكترونات فيما تكون عصابة التوصيل خالية تماما من الالكترونات ويفصل بين العصابتين فجوة طاقة كبيرة لا تسمح بمرور الالكترونات من عصابة التكافؤ إلى عصابة التوصيل. بين المواد العازلة والموصلة يوجد مادة في غاية الأهمية هي أشباه الموصلات وعند درجة حرارة صغيرة جدا (الصفير مطلق) لا يكون هناك الكترونات حرة حيث تسلك المادة النصف الناقلة سلوك المادة العازلة وبمجرد زيادة درجة الحرارة عن الصفير مطلق تكسب الالكترونات طاقة كافية للتححرر من الذرة ومع زيادة درجة الحرارة يصبح هناك المزيد من الالكترونات المتحررة من ذراتها مما يؤدي إلى زيادة الناقلية الكهربائية للمادة وهذه صفة تختلف فيها المواد النصف الناقلة عن المواد الموصلة حيث تقل الناقلية الكهربائية بزيادة درجة الحرارة [1].

إن فيزياء المواد لها دور مهم وكبير في التطبيقات التكنولوجية الحالية، حيث تطورت في العديد من المجالات وخاصة المواد النصف الناقلة التي أصبحت ذات أهمية تكنولوجية وتقنية مثل الصمامات الثنائية، الصمامات الثنائية الكهروضوئية، صمامات الليزر الأزرق،

الكواشف وفي الطبقات الرقيقة والخلايا الشمسية.

في السنوات الأخيرة أصبح الاهتمام العالم بدراسة خصائص بعض المواد، ويعد ميكانيك الكم حاليا أفضل تصور متوفر عن العالم الفيزيائي وخاصة عن عالم الذرة، تطورت نظرية ميكانيك الكم انطلاقا من الميكانيكا الكلاسيكي وذلك عند صعوبة تفسير بعض الظواهر ودراسة خصائصها وبالتالي أهتم ميكانيك الكم بدراسة خصائص بعض المواد وذلك باستخدام معادلة شرودينغر، حلول هذه المعادلات صالح إلا في حالة بعض الظواهر البسيطة لعدد محدد من الذرات و الجزيئات، أما في الأنظمة المعقدة فنلجأ إلى العديد من التقريبات للحصول على معلومات جد دقيقة حول هذه النظم ومن بين هذه التقريبات نظرية دالة

الكثافة وتقريباتها.

ان الهدف من بحثنا هو دراسة الخصائص البنيوية و الالكترونية لأشبه النواقل نظريا وذلك باستعمال نظرية دالة الكثافة والمدمجة في طريقة الامواج المستوية المتزايدة خطيا، مع العلم ان مذكرتي هذه تحتوي على اربعة فصول بحيث تطرقنا في الفصل الاول الى عموميات حول اشبه النواقل، حيث قمنا بتعريف اشبه النواقل و ذكر خصائصها و انواعها ، بالإضافة الى نظرية حزم الطاقة و الفجوات.

اما في الفصل الثاني، تناولنا معادلة شرودينغر و التقريبات المختلفة من بينها تقريب هاتريفوك و تطرقنا الى نظرية دالة الكثافة (DFT) بتقريباتها تقريب كثافة الموضع (LDA)، تقريب التدرج المعمم (GGA)، تقريب المعدل لبريك جونسن (mBj) .

وفي فصل الثالث تطرقنا لطريقة الموجة المستوية المتزايدة خطيا

اما الفصل الرابع فقد قمنا بدراسة الخصائص البنيوية و الالكترونية لأشباه النواقل باستخدام برنامج المحاكاة wien2k، قمنا بتحليل النتائج المحصل عليها و مناقشتها.

و في الاخير قمنا بتقديم خلاصة عامة لمختلف هذه النتائج.

المراجع :

[1] Thyagaran and A. kGhatak, Laser theory and Applications , plenum pess, Newyork, 1981.

[2] J.wilson and J.F.B. Hawckes, Laser principles and Applications 1STed, perentic Hall Europe, 1981.

[3] christopherc, Davis, Laser and Elect ro – optics fundamental and Engineering 1ST cambridge university perss, 1996.

[4] James J.Brophy, Basic Electronics for scientists 5thed,MCGrow-Hill,Inc,1990.

1.1 مقدمة :

تصنف المواد وفقاً للخصائص الكهربائية إلى ثلاثة فئات منها موصلات، عوازل و أشباه الموصلات، فالنواقل مثل الحديد و النحاس و الفضة و الألمنيوم... الخ، تتميز بوجود الكترونات حرة في الطبقة الخارجية بحيث تكون الكثافة الإلكترونية ما بين

$$(n = 10^{23} \text{ إلى } 10^{22}) \text{ و ذات مقاومة منخفضة جدا } (p \leq 10^{-5} \Omega \cdot \text{cm})$$

العوازل هي المواد الغير موصلة للتيار الكهربائي لديها مقاومة كبيرة $(p \geq 10^8 \Omega \cdot \text{cm})$

من بين هذه المواد الزجاج و البلاستيك و الخشب ... الخ [5].

تتميز أشباه الموصلات بمقاومة تتغير من $10^{-3} \Omega \cdot \text{cm}$ إلى $10^4 \Omega \cdot \text{cm}$ وهي مواد صلبة يتم التحكم في موصليتها الكهربائية بإضافة عناصر أخرى، تكون مقاومته الكهربائية ما بين الموصلات والعوازل، كما يمكن لمجال كهربائي خارجي تغيير درجة مقاومة شبه الموصل، فالأجهزة والمعدات التي يدخل في تصنيعها شبه موصلة هي أساس الإلكترونيات الحديثة والتي تشمل الراديو والكمبيوتر والهاتف والتلفزيون وأجهزة أخرى كثيرة. والأجزاء الإلكترونية التي تعمل بأشباه الموصلات تشمل الخلايا الشمسية والصمامات الثنائية والثنائيات باعثة الضوء وموحدات التيار التي تعمل بالسيليكون [6].

كما تمثل ألواح الطاقة الشمسية أكبر مثال لأجهزة التي تعمل بالمواد شبه الموصلة، حيث تقوم بتحويل الطاقة الضوئية إلى طاقة كهربائية [7].

في الموصلات المعدنية تقوم الإلكترونات بنقل التيار الكهربائي، أما في أشباه الموصلات فينتقل التيار الكهربائي عن طريق سيل من الإلكترونات تتجه إلى القطب الموجب، مصحوباً بسيل من الفجوات (ذات شحنة موجبة) خلال البناء الذري للمادة تتجه إلى القطب السالب.

2.1 الخواص العامة للمواد شبه الموصلة مثل ALSb و GASb :

- تمتلك مقاومة ذات معامل حراري سالب.
- تكون قيمة مقاومتها النوعية بين $(10^4 - 10^{-5})$ أوم – متر).
- إن القدرة الكهربائية الحرارية التي يمكن أن تولدها هذه المواد عالية جداً.
- تمتلك المواد شبه الموصلة على نوعين من حاملات الشحنة وهما الفجوات و الإلكترونات.
- يمكن السيطرة على مقاومة (والتوصيلية) وذلك بإضافة شوائب ثلاثية التكافؤ أو خماسية التكافؤ.

3.1 نظرية حزم الطاقة للمواد الصلبة ومفهوم فجوة الطاقة المحظورة Eg :

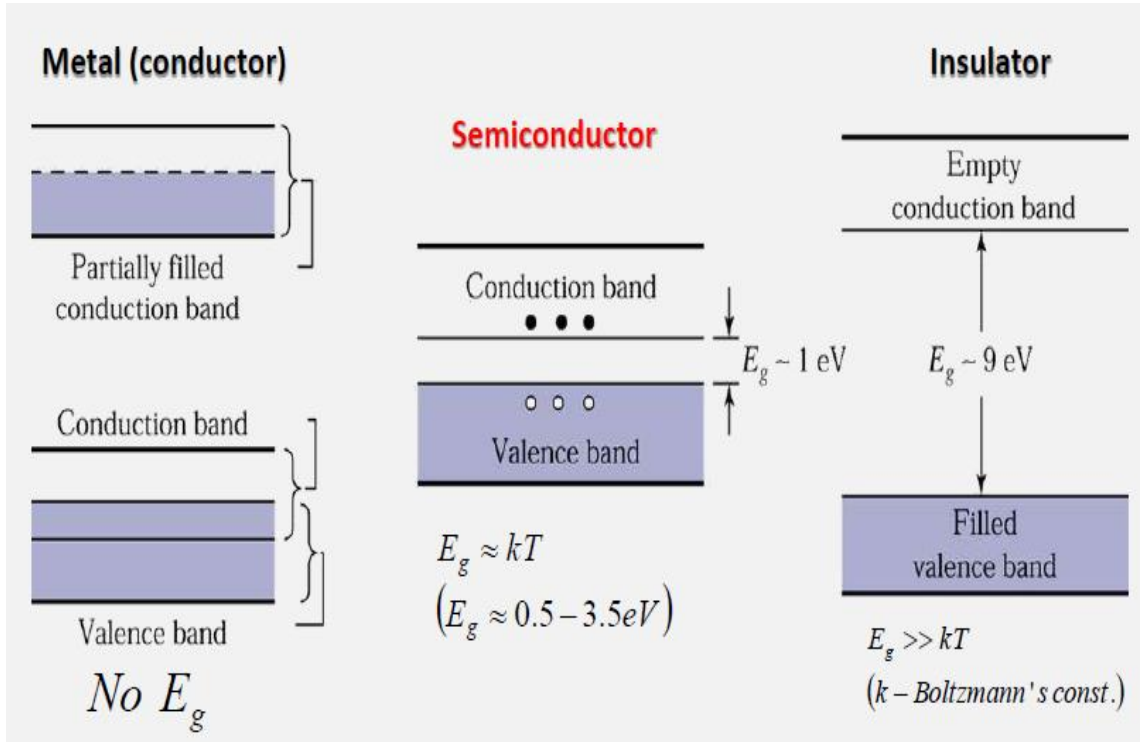
إن المواد الصلبة يمكن ان تصنف الى ثلاثة اصناف وهي مواد موصلة ومواد عازلة ومواد شبه موصلة ، لقد اعتمد التصنيف على اساس تركيب الحزم للمادة وعلى مقدار فجوة الطاقة التي تفصل حزمة التوصيل عن حزمة التكافؤ كما هو موضح في الشكل (1.1).

تعد أشباه الموصلات بأنها مواد عازلة عند درجات الحرارة المنخفضة لكنها تصبح جيدة التوصيل الكهربائي نوعاً ما عند رفع درجة حرارتها، فإذا كانت حزمة التكافؤ مملوءة تماماً بالإلكترونات ولكي يتمكن الإلكترون من عبور فجوة الطاقة الصغيرة نسبياً للوصول إلى حزمة

التوصيل فانه يحتاج طاقه حرارية $K_B T$ وهكذا تلعب الطاقة الحرارية دوراً مهماً في مساعدة الالكترونات على عبور فجوة الطاقة.

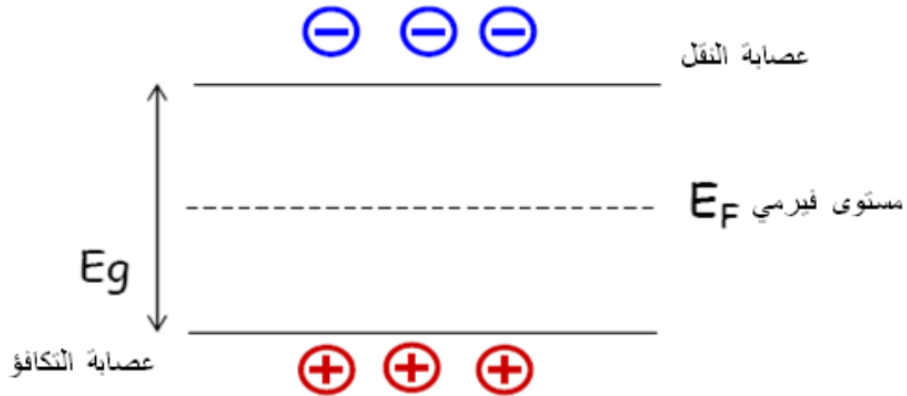
إن التوصيل الكهربائي يتطلب انتقال الالكترون من حزمة التكافؤ المملوءة بالإلكترونات الى حزمة التوصيل الفارغة من الالكترونات عبر الفجوة المحظورة بينهما اي انه يجب على الالكترون ان يكتسب طاقة لكي يتمكن من الانتقال ومن حزمة الى حزمة ويطلق على هذه الطاقة (E_g) بفجوة الطاقة اما بالنسبة الى المواد شبه الموصلة فان الفرق الاساس بينهما وبين المواد العازلة يمكن في قيمة فجوة الطاقة التي تكون اقل بكثير من قيمة فجوة الطاقة في المواد العازلة.

ان التوصيل الكهربائي في المواد العازلة قليل جداً وذلك لكون فجوة الطاقة كبيرة مما تجعل عدد الالكترونات المنقولة الى حزمة التوصيل قليلة في درجات الحرارة الاعتيادية او حتى في درجات الحرارة العالية ان قيمة فجوة الطاقة في الكثير من المواد العازلة تتراوح بين 3-10 إلكترون فولت أما التوصيل الكهربائي في المواد شبه الموصلة فتكون معتدلة نوعاً ما عند درجة الحرارة العالية.



الشكل (1.1): يمثل مخطط حزم الطاقة للمواد الموصلة وأشباه الموصلات والعوازل.

أما عند درجات الحرارة الواطئة فيكون التوصيل الكهربائي قليل جداً وذلك لان حزمة التوصيل تكون فارغة عند درجة حرارة الصفر المطلق وكلما ارتفعت درجات الحرارة ينتقل عدد كبير من الالكترونات الى حزمة التوصيل وترفع قيمة التوصيل الكهربائي إلى حد كبير [8] كما هو موضح في الشكل (2.1).

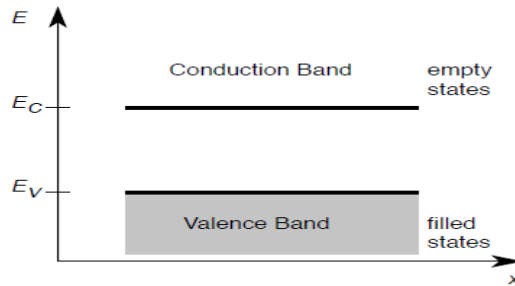


الشكل(2.1) : الفاصل الطاقوي بين عصابة التكافؤ و النقل.

4.1 أشباه الموصلات النقية وغير النقية :

1.4.1 أشباه الموصلات النقية :

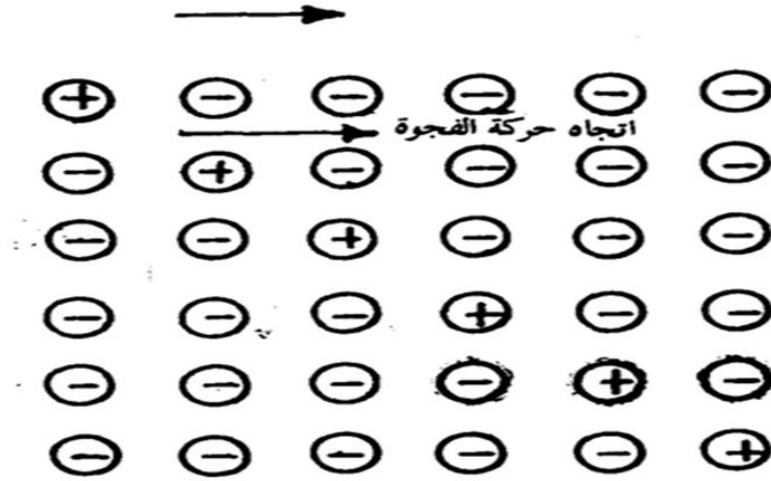
تدعى اشباه الموصلات النقية الخالية من الشوائب بأشباه الموصلات الذاتية حيث ان حزمة التكافؤ تكون مملوءة كلياً بالإلكترونات بينما تكون حزمة التوصيل فارغة من الإلكترونات عند درجات حرارة واطئة. يوضح الشكل (3.1) تخطيطاً لحزمة التكافؤ المملوء وحزمة التوصيل الفارغ وفجوة الطاقة E_g لشبه موصل ذاتي. فاذا رفعت درجة حرارة المادة شبه موصلة الى درجات حرارة عالية نوعاً ما فان عدداً معيناً من الإلكترونات الموجودة في حزمة التكافؤ يمكن ان تثار حرارياً وتنتقل الى حزمة التوصيل تاركين مكانهم فجوات، ان الإلكترونات تصل حزمة التوصيل ستملاً هذه الحزمة جزئياً وستكون جاهزة للتوصيل الكهربائي عند تسليط مجال كهربائي اما بالنسبة الى الفجوات المتكونة في حزمة التكافؤ فانه تحمل شحنة موجبة لانها ناجمة عن فقدان الإلكترون. إن وجود هذه الفجوات يسهل للإلكترون التحرك لشغلها تاركاً فجوة اخرى في مكانها الاصلي وهكذا تسري الإلكترونات متتابعة لتحتل الفجوات وفي كل مرة تترك فجوة اخرى جديدة وهكذا نرى ان للفجوات حركة عشوائية وفي اتجاهات الى الحركة بتجاه المجال وبعكس اتجاه الإلكترونات الحرة وذلك بسبب اختلاف الشحنة لكل منهما.



الشكل(3.1): يمثل مخطط حزمة الطاقة في مادة شبه موصلة.

2.4.1 التوصيلية الذاتية لأشباه الموصلات النقية :

تكن أهمية الفجوة في أنه يمكن اعتبارها ناقلة للتيار الكهربائي مثل الإلكترون، لإيضاح ذلك. فإننا نتخيل ما يحدث وهو أن إلكترون في ذرة مجاورة يمكن أن يتحرك ليملاً تلك الفجوة مخلفاً وراءه فجوة أخرى ليتحرك إلكترون في ذرة مجاورة أخرى أيضاً لملأ تلك الفجوة كما يوضحه الشكل (4.2).



حركة الفجوة في شبه الموصل

الشكل (4.2) : يوضح حركة الفجوة في شبه موصل.

وهكذا يمكننا أن نعتبر نظرياً أن الفجوة تتحرك بعكس اتجاه حركة الإلكترون، وعلى ذلك يمكن اعتبار الفجوة تمثل شحنة موجبة مقدارها يساوي مقدار شحنة الإلكترون وتتحرك في اتجاه معاكس لحركة الإلكترون. عند الصفر المطلق 0K° ، تكون الإلكترونات في أوطاً مستوى من الطاقة وعليه تكون الأواصر التساهمية ممتلئة وعندما يؤثر مجال كهربائي خارجي صغير فإن الإلكترونات لن تتحرك ولذلك فإن شبه الموصل يعتبر عازلاً وبارتفاع درجة الحرارة فإن هذه الطاقة الحرارية تكفي لتحطيم الأسرة التساهمية بإطلاق احد الإلكترونات الأسرة التساهمية من مكانة تاركاً فجوة [8].

3.4.1 أشباه الموصلات الغير نقية (اللاذاتية):

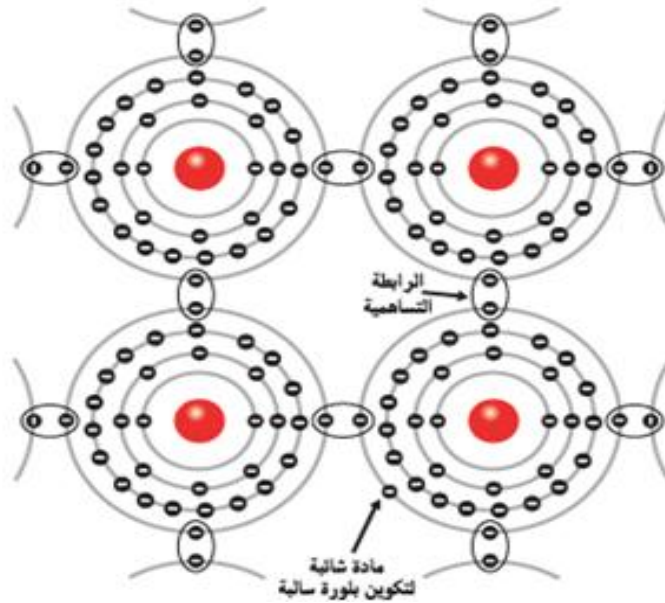
إن التأين الحراري في المواد الصلبة يعتمد كثيراً على درجة الحرارة حيث ان اي تغير طفيف في درجة الحرارة يحدث تغيراً جذرياً في عدد الشحنات الموجودة في شبه الموصل، وبهذا تكون التوصيلية لشبه الموصل حساسة جداً لدرجة الحرارة، إلا أن في الأجهزة الالكترونية من الضروري السيطرة على موصلية المواد لتؤدي الأغراض المطلوبة. ولهذا السبب تعالج أو تشوب (تطعم) المواد شبه الموصل النقية مثل الالمنيوم او الغاليوم بإضافة كميات قليلة من ذرات عناصر غريبة تسمى بالشوائب. فوجود الشوائب في شبه الموصل يزيد من موصليتها ويسيطر عليها من خلال كمية الشوائب المضافة ويختصر الاعتماد على درجة الحرارة ويؤدي إلى ظهور نوع واحد من حاملات الشحنة واختفاء أو تضائل النوع الأخر، وهناك نوعين من أشباه الموصلات الغير نقية : نوع سالب N ونوع موجب P

5.1 التطعيم :

تعد عملية التطعيم لأنصاف النواقل ضرورية في تكنولوجيا انصاف النواقل الهدف منها الحصول على خواص كهربائية مميزة للنصف الناقل وتتم بإضافة الى هذا الاخير كمية قليلة ومتحكم بها من الشوائب المطعمة المناسبة تكسبه خواص فيزيائية تختلف عما هي عليه في حالته النقية [9] [10].

1.5.1 اشباه النواقل النوع n :

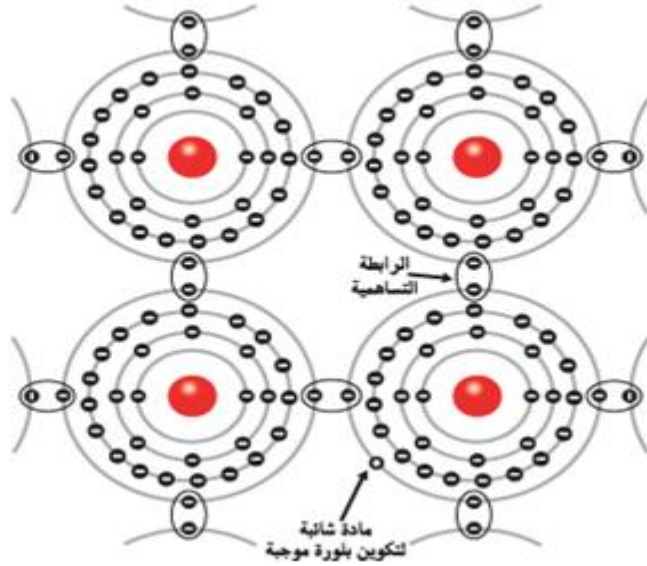
هي مواد شبه موصلة نقية طعمت بذرات خماسية التكافؤ مثل الفوسفور او الزرنيخ هو الانتيمون، مما يجعل عدد الالكترونات الحرة فيها اكبر من عدد الفجوات كما هو موضح في الشكل (5.1).



الشكل (5.1) : التطعيم بالشوائب خماسية التكافؤ لتكوين البلورة السالبة. N.

2.5.1 اشباه النواقل النوع p :

هي مواد شبه موصلة نقية مثل السليكون او الجرمانيوم طعمت بذرات ثلاثية التكافؤ مثل الالمنيوم و الجاليوم و البورون مما يجعل عدد الفجوات فيها اكبر من عدد الالكترونات كما يوضحه الشكل (6.1).



الشكل (6.1): التطعيم بالشوائب ثلاثية التكافؤ لتكوين البلورة الموجبة.

6.1 تطبيقات اشباه النواقل :

تستعمل اشباه النواقل في صناعة الاجهزة الالكترونية على مختلف وظائفها، منها الدارات المتكاملة، المعالج الدقيق Microprocesseur و الضابط الصغير Microcontrôleur وغيرها، تعتبر من الادوات الاساسية في صناعة الالكترونيات.

تستخدم كعدادات لقياس الاشعة السينية و اشعة جاما و عدادات الجسيمات الاولية المستخدمة في فيزياء الجسيمات الاولية.

تلاقي حاليا اهتماما كبيرا في مجال استغلال الاشعة الشمسية لتوليد الطاقة الكهربائية بواسطة الألواح الشمسية كما هي موضحة في الشكل (7.1)، فالخلايا الشمسية المصنوعة من اشباه النواقل مثل الجرمانيوم و السيليسيوم و غيرها تقوم بعملية التحويل الكهروضوئي، ويقصد بالتحويل الكهروضوئي تحويل الإشعاع الشمسي أو الضوئي مباشرة إلى طاقة كهربائية بواسطة الخلايا الشمسية.

إن الخلية الشمسية هي وصلة ثنائية (diode) من أشباه الموصلات بحيث إن الضوء الساقط على سطحها يستطيع أن ينفذ إلى منطقة الاتصال (P-n junction) حيث تتحول الأشعة الساقطة على الخلية الشمسية إلى طاقة كهربائية. خلية شمسية مصنوعة من مادة شبه موصلة اسمها السليكون ورمزها الكيميائي (Si).



الشكل (7.1) : يوضح شكل لوحة شمسية

قائمة المراجع :

- [1] Dr.ah.souici, physique des semi-conducteurs, Groupe de physico-chimie des matériaux et catalyse, faculté des sciences exacte, université de Bejaia Algérie.
- [2] Mehta ,V. K. 2008-01-01 .Principles_of Electronics.
- [3] Feynman, Richar .Feynman Lectures on Physics .Basic Booksc. 1963
- [4] Hani .M.H.Al-Sultani, SEMICONDUCTORS, Department of General Science, University of Babylon.
- [5] charles kittel, Physique de l'état solide, édition, page(220-235, 537-555) (2003) BORDAS, Paris (1983).
- [6] عزيز داخل، مقدمة في فيزياء الجسم الصلب، ديوان المطبوعات الجامعية الجزائر الصفحة (178-163) (1988).

1.2 مقدمة :

من أجل معرفة مختلف الخصائص الفيزيائية للمواد الصلبة علينا دراسة النظام المتعلق بسلوك الإلكترونات حيث تتفاعل كهربائياً مع الأيونات و في ما بينها (تفاعل نواة-نواة ، إلكترون-نواة ، إلكترون-إلكترون). ولهذا تكون معادلة شرودينغر (Schrödinger) مستعصية الحل حسابياً، لذلك تستخدم نظرية دالية الكثافة DFT كوسيلة رياضية من أجل حل معادلات ميكانيك الكم الأساسية.

2.2 معادلة شرودينغر للبلورة :

كل الأجسام البلورية نستطيع إعتبرها كنظام واحد يتكون من جسيمات أخف (الإلكترونات) والثقيلة (الأنوية). والحالة المستقرة للجسيمات توصف بمعادلة شرودينغر [1]:

$$H\psi = E\psi \quad (1 - 2)$$

في حالة السكون معادلة شرودينغر تكون مستقلة عن الزمن

$$H\psi(r, R) = E\psi(r, R) \quad (2 - 2)$$

ψ هي الدالة الموجية و تتعلق بكل إحداثيات (أنوية+إلكترونات) ، E هي القيم الذاتية الموافقة و H يمثل مؤثر الهاملتونيان للبلورة حيث يكون مؤلفاً من الطاقة الحركية لكل الجسيمات و طاقة التفاعل فيما بينها، حيث يكتب في غياب الحقل الخارجي علي الشكل :

$$H = V_{ee} + V_{nn} + V_{ne} + T_n + T_e \quad (3 - 2)$$

1-الطاقة الحركية للإلكترونات:

$$T_e = \sum_{i=1}^N \frac{P_i^2}{2m_e} = \sum_{i=1}^N \frac{-\hbar^2}{2m_e} \Delta_i \quad (4 - 2)$$

حيث m_e كتلة الإلكترونات

2- الطاقة الحركية للأنوية:

$$T_n = \sum_{i=1}^n \frac{P_i^2}{2M_n} = \sum_{i=1}^n \frac{-\hbar^2}{2M_n} \Delta_i \quad (5 - 2)$$

حيث M_n كتلة الأنوية

3- طاقة تفاعل إلكترون-إلكترون:

$$V_{ee} = \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \quad (6 - 2)$$

\vec{r}_{ij} المسافة بين الإلكترونين i, j

4- طاقة تفاعل إلكترون- نواة:

$$V_{en} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i,\alpha} -\frac{e^2 Z e}{|\vec{r}_i - \vec{R}_\alpha|} \quad (7-2)$$

$|\vec{r}_i - \vec{R}_\alpha|$ المسافة بين النواة α و الإلكترون i

5- طاقة تفاعل نواة - نواة :

$$V_{nn} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{2} \sum_{\alpha \neq \beta} \frac{e^2 Z_\alpha Z_\beta}{|\vec{R}_\alpha - \vec{R}_\beta|} \quad (8-2)$$

$|\vec{R}_\alpha - \vec{R}_\beta|$ المسافة بين النواتين α, β

يمكن كتابة هاملتون على النحو التالي:

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{-\hbar^2}{2m_e} \Delta_i + \sum_{i=1}^n \frac{-\hbar^2}{2M_n} \Delta_i + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i,\alpha} -\frac{e^2 Z e}{|\vec{r}_i - \vec{R}_\alpha|} \\ + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{2} \sum_{\alpha \neq \beta} \frac{e^2 Z_\alpha Z_\beta}{|\vec{R}_\alpha - \vec{R}_\beta|} + \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \quad (9-2)$$

تحتوى معادلة شرودينغر على $3(Z+1)N_\alpha$ متغير لمول واحد من الذرات، فنجد في $1cm^3$ من البلورات 10^{22} ذرة، و بهذه الكيفية معادلة شرودينغر مستحيلة الحل إلا من خلال عدد من التقريبات، أولاً تقريب بورن-أوبنهايمر (تقريب الكاسم).

3.2. تقريب Born-Oppenheimer :

المعادلة (9-2) معقدة جداً بحيث لا يمكن حلها من الناحية التحليلية، حيث تم تبسيطها، في عام 1927 من طرف ماكس بورن و روبرت أوبنهايمر اللذان اقترحا حل تقريبي لتبسيط معادلة شرودنغر، يعتمد هذا التقريب على فصل حركة الإلكترونات عن الأنوية، والذي يأخذ بعين الاعتبار الاختلاف الكبير بين كتلة الإلكترونات و كتلة الأنوية، حيث أن كتلة الإلكترون أقل بكثير من كتلة النواة في حين أن سرعة الإلكترونات أكبر بكثير من سرعة النواة [2]، وبذلك تصبح الطاقة الحركية

$$V_{nn} = cte \text{ لأنوية معدومة } (T_n = 0) \text{ و طاقة تفاعل نواة نواة ثابتة } cte$$

أي يصبح الهاميلتونيان الكلي للجملة المؤلفة من هاميلتونيان إلكتروني و هاميلتونيان نووي على الشكل:

$$H_e = T_e + V_{ee} + V_{en} \quad (10.2)$$

H_e يمثل هاميلتونيان الإلكترونات.

إذن تصبح معادلة شرودينغر لإلكترونات هي :

$$H_e \psi(r, R) = E \psi(r, R) \quad (11.2)$$

لا يمكن حل المعادلة بالطرق الرياضية المعروفة لذلك نستخدم تقريب آخر يسمى بتقريب هارترى.

2.4. تقريب Hartree:

في سنة 1928 تمكن العالم الإنكليزي هارترى من وضع أول نموذج كمي لوصف الذرة متعددة الإلكترونات [3]، على نموذج الإلكترون المستقل أي أن كل إلكترون يتحرك منفرد في الحقل المتوسط المتولد عن الأنوية وباقي الإلكترونات الأخرى :

$$H = \sum_i H_i \quad (12.2)$$

تكتب دالة الموجة الكلية للجملة كجداء دوال الحالة لكل الإلكترونات على الشكل :

$$\psi(\vec{r}) = \prod_{i=1}^N \psi_i(\vec{r}_i) \quad (13.2)$$

و تكتب الطاقة الكلية للجملة كمجموعة الطاقة الموافقة لكل حالة إلكترونية :

$$E = \sum E_i \quad (14.2)$$

ومنه معادلة شرودينغر تصبح:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{ext}(\vec{r}_i) + V_H(\vec{r}_i) \right] \psi_i(\vec{r}) = E \psi_i(\vec{r}) \quad (15.2)$$

1- الطاقة الكامنة للإلكترون في حقل الأنوية k:

$$V_{ext}(\vec{r}_i) = - \sum_k \frac{Z_k e^2}{4\pi |\vec{r}_i - \vec{R}_k|} \quad (16.2)$$

R_k يمثل موضع الأنوية.

2- الكمون الفعال لهترى:

$$V_H(\vec{r}_i) = -\frac{1}{2} \sum_j \frac{e^2}{4\pi \epsilon_0 |\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \quad (17.2)$$

2.5. تقريب Hartree-Fock :

في عام 1930 بين فوك أن الدالة الموجية لهارترتي لا تحترم مبدأ إستبعاد باولي [4]، ولذلك قام فوك بتطوير نموذج هارترتي بإدخال مبدأ السبين لنظام الإلكترونات [5] بحيث توجد $N!$ إحتمال لوضع N إلكترون على N موضع $(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N)$. حيث حل محل الدالة الموجية محددات سلاتر [6] التي كتبها على النحو التالي :

$$\psi(r_1, r_2, \dots, r_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_1(r_1) & \dots & \psi_N(r_1) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_1(r_N) & \dots & \psi_N(r_N) \end{vmatrix} \quad (18.2)$$

و المعامل $\frac{1}{\sqrt{N!}}$ هو ثابت التعامد

إن تحديد الكمون داخل البلورة هي من بين الصعوبات التي تصادف حساب بنية عصابات الطاقة ولذلك وجدت طريقة حديثة و هي نظرية دالية الكثافة (DFT)

2.6. نظرية دالية الكثافة (DFT) :

لحساب بنية عصابات الطاقة يتم التركيز على اختيار شكل كمون دالة الموجة ، نستخدم عنصر الكثافة الإلكترونية $\rho(r)$ لتحديد الطاقة E و التي تكون كدالة للإحداثيات (x, y, z) وتعود هذه الفكرة الأساسية إلي النموذج الذي وضعه توماس و فارمي .

2.1.6. نظرية Thomas-Fermi :

في 1927 صاغ توماس-فارمي الطاقة الكلية لغاز الإلكترونات اللامتجانسة كدالة لكثافة الإلكترونات المعروفة لغاز المتجانس [7,8]، وذلك بتقسيم منطقة برليون نجد في آخر تقسيم تعتبر كثافة الإلكترونية ثابتة في كل منطقة من المناطق المقسمة، ومنه تكتب طاقة النظام الكلية E على الشكل التالي:

$$E = \int \varepsilon_i[\rho(r)] dr \quad (19.2)$$

تعطى كثافة غاز المتجانس على الشكل :

$$\rho(\vec{r}) = \frac{1}{3\pi^2} \left(\frac{2m_e}{\hbar} \right)^{3/2} E_f^{3/2} \quad (20.2)$$

حيث E_f طاقة فارمي.

ومنه تكتب طاقة فارمي علي الشكل التالي:

$$E_f = \frac{\hbar^2}{2m_e} (3\pi^2)^{2/3} (\rho(\vec{r}))^{2/3} \quad (21.2)$$

والطاقة الحركية لغاز المتجانس هي :

$$T = \frac{3}{5} \rho E_f \quad (22.2)$$

بتعويض المعادلة (21. I) في (22. I) نجد:

$$T = \frac{3}{5} \frac{\hbar^2}{2m_e} (3\pi^2)^{2/3} (\rho(\vec{r}))^{5/3} \quad (23.2)$$

الطاقة الحركية لتوماس- فارمي هي :

$$T_{TF}(\rho) = \int T dr = \frac{3\hbar^2}{10m_e} (3\pi^2)^{2/3} \int (\rho(\vec{r}))^{5/3} d\vec{r} \quad (24.2)$$

نظرية توماس- فارمي هي تقريب موضعي لكثافة الإلكترونات، ومنه فإن الطاقة الكلية لنظام لإلكترونات في تقريب توماس- فارمي تكتب علي الشكل :

$$E_{TF}(\rho) = \frac{3\hbar^2}{10m_e} (3\pi^2)^{2/3} \int (\rho(\vec{r}))^{5/3} d\vec{r} + \int v(\vec{r})\rho(\vec{r})d\vec{r} + \frac{1}{2} \int \int \frac{\rho(r_1)\rho(r_2)}{|r_1 - r_2|} d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \quad (25.2)$$

في هذا النموذج أجريه بعض التحسينات:

1- فعل التبادل المقترح من طرف ديراك :

$$E_{TFD}(\rho) = E_{TF}(\rho) - C_X \int [\rho(\vec{r})^{4/3}] d\vec{r} \quad (26.2)$$

2- فعل الإرتباط المقترح من طرف فينغنز :

$$E_C(\rho) = - \frac{0.056[\rho(\vec{r})]^{4/3}}{0.079 + [\rho(\vec{r})]^{1/3}} \quad (27.2)$$

هذا النموذج أعطى صورة عن إمكانية الإعتماد على الكثافة الإلكترونية لحساب الطاقة الحركية، و بإهمال الإرتباط بين الإلكترونات تحصل على نتائج ضعيفة.

2.6.2. نظريتي Hohenberg-Kohn :

في سنة 1964 تم إعادة صياغة نظرية الكثافة الدالة (DFT) المقترحة من قبل فارمي و وضع نظرية دقيقة لنظام متعدد الجسيمات وذلك بفضل تقريب هوهنبارغ-كوهن الذي يقوم على النظريتان الأساسيتان:

النظرية الأولى :

تعتمد على أخذ الطاقة الكلية لنظام الإلكترونات المتفاعلة في كمون خارجي $V_{ext}(r)$ (كمون الأنوية) هو دالية وحيدة لكثافة الإلكترونات $\rho(r)$:

$$E = E(\rho) \quad (28.2)$$

حيث أن دالية الطاقة

$$E(\rho) = \langle \psi | H | \psi \rangle = \langle \psi | T + U | \psi \rangle \quad (29.2)$$

حيث أن T و U كمون تفاعل و الطاقة الحركية لإلكترونات على الترتيب

بتطبيق تقريب هار تري فوك نجد:

$$E_{H.K}(\rho) = F_{H.K}(\rho) + \int V_{ext}(r)\rho(r)dr \quad (30.2)$$

$$F_{H.K}(\rho) = \frac{1}{2} \int \int \frac{\rho(r_1)\rho(r_2)}{|r_1 - r_2|} d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 + G(\rho) \quad (31.2)$$

حيث أن $G(\rho)$ تمثل الطاقة الحركية للإلكترونات زائد الفرق بين طاقة التفاعل الحقيقية و طاقة التفاعل لهرتري، دوال الكثافة الإلكترونية تبقى صحيحة مهما كان شكل قوة الكمون الخارجي وعدد الإلكترونات.

النظرية الثانية :

برهنا بأن كثافة الحالة الأساسية تعطي كثافة الحد الأدنى ، وكل خصائص الحالة الأساسية هي دالية الكثافة الإلكترونات كالتالي:

$$E(\rho_0) = \text{Min}E(\rho) \quad (32.2)$$

هو هنبارغ- كوهن برهنا على أن الكثافة الحقيقية للحالة الأساسية تعطي أقل طاقة، وكل الخصائص الأخرى تكون بدلالة كثافة الطاقة الحالة الأساسية في نظام الإلكترونات ، الكمون الخارجي يتم تحديده باستخدام مبدأ التغيرات.

3.6.2 . معادلة Kohn-Sham :

تكتب كثافة الإلكترونات على شكل مجموع كثافة الجسيمات ومن أجل الحصول على طاقة الحالة الأساسية نستعمل مبدأ التغيرات [9]، تعطي كثافة بـ:

$$\rho(\vec{r}) = \sum_{i=1}^N |\phi_i(\vec{r})|^2 \quad (33.2)$$

ϕ_i الحالة المشغولة للإلكترون i

دالية الطاقة الكلية للإلكترونات $E_e(\rho)$:

$$E_e = T + V \quad (34.2)$$

حيث T الطاقة الحركية للجسيمات في حالة التفاعل

و V كمون التفاعل إلكترون-إلكترون.

طاقة هرتري-فوك $E_{H.K}(\rho)$:

$$E_{H.F} = T_0 + V = T_0 + (V_H + V_X) \quad (35.2)$$

حيث الطاقة T_0 الحركية للإلكترونات الحرة.

V_H كمون إرتباط الإلكترونات و V_X كمون تبادل الإلكترونات

دالية $F_{H.F}$ هي:

$$F_{H.F} = T - T_0 + T_0 + V \quad (36.2)$$

$V_C = T - T_0$ كمون إرتباط الإلكترونات.

$$F_{H.F} = (V_C + V_X) + T_0 + V_H \quad (37.2)$$

$V_{XC} = V_C + V_X$ هو كمون تبادل-إرتباط.

ومنه دالية الطاقة الكلية

$$E(\rho) = T_0(\rho) + V_H(\rho) + V_{XC}(\rho) + V_{ext}(\rho) \quad (38.2)$$

معادلة كوهن-شام :

$$(T + V_{ext} + V_H + V_{XC})\phi_i(r) = \varepsilon_i \phi_i(r) \quad (39.2)$$

2.4.6. حلول معادلة Kohn-Sham :

تتركز مختلف الطرق لحساب بنية عصابات الطاقة مبدئياً على DFT و ترتب حسب استخدامها

للكثافة، الكمون و مدارات كوهن-شام [10]، وبالتالي دالة الموجة الأساسية هي :

$$\psi_i(r) = \sum C_{i\alpha} \phi_\alpha(r) \quad (40.2)$$

بحيث أن $\phi_\alpha(r)$ المعادلة الأساسية و $C_{i\alpha}$ هي معاملات النشر لدالة الموجة.

إذا يجب حل المعادلات الأساسية $\phi_\alpha(r)$ لحساب معاملات $C_{i\alpha}$ وذلك بطريقة الدورات التكرارية بحيث تكون الطاقة الكلية في القيمة الدنيا :

حلول معادلة كوهن - شام تعطي:

$$(H - \varepsilon_i O)C_i = 0 \quad (41.2)$$

حيث : O مصفوفة التغطية و H هملتونيان كوهن

و لتبسيط الحساب نحل معادلة كوهن-شام من أجل نقاط تناظر في المنطقة بريلون الأولى و لذلك نستخدم حلقة تكرارية كما في الشكل (I-1) بحيث ندخل الكثافة الأولية للشحنة ρ_{in} في التكرار الأول لحساب كثافة جديدة ρ_{out} . إذا تغيرت كثافة أو الطاقة (معيار التقارب) ، نرجع إلى الخطوى الأولى ونقوم بالمزج بين الكثافتين ρ_{in} و ρ_{out} بالطريقة التالية:

$$\rho_{in}^{i+1} = (1 + \alpha)\rho_{in}^i + \alpha\rho_{out}^i \quad (42.2)$$

i : درجة التكرار

α : معامل المزج

ونواصل الحلقة التكرارية على هذا النحو حتى نتحصل على التقارب المطلوب.

7.2. تقريب كثافة الموضع LDA :

تقريب كثافة الموضع هو تقريب لنظام الإلكترونات اللامتجانسة باعتباره موضعياً متجانس [11]، بحيث تعطى طاقة تبادل-إرتباط في هذا التقريب بـ:

$$E_{XC}^{LDA}(\rho) = \int \varepsilon_{XC}(\rho)\rho(\vec{r})d\vec{r}^3 \quad (43.2)$$

تقريب LDA يعتبر ε_{XC} طاقة كلية وهي مقسمة لجزئين بحيث :

$$\varepsilon_{xc}(\rho) = \varepsilon_x(\rho) + \varepsilon_c(\rho) \quad (44.2)$$

مساهمة طاقة تبادل الإلكترون في هذا التقريب تعطى بالعلاقة لدرالك [12]:

$$\varepsilon_x(\rho) = -\frac{3}{4} \left(\frac{3}{\pi}\right)^{1/3}, \rho^{1/3} = -\frac{3}{4} \left(\frac{3}{4\pi^2}\right)^{1/3} \frac{1}{r_s} \quad (45.2)$$

r_s نصف قطر فيغنر-سيتز [13] (نصف قطر كرة يحتوى الإلكترون).

مساهمة الارتباط من أجل كثافة عالية يعطى بالعلاقة بردي و زنغر [14]:

$$\varepsilon_c(\rho) = C_0 \ln(r_s) - C_1 + C_2 r_s \ln(r_s) - C_3 r_s^3 \quad (46.2)$$

مع

$$C_0 = 0.0031091, C_1 = 0.046644, C_2 = 0.00664, C_3 = 0.01043.$$

مساهمة الارتباط من أجل كثافة منخفضة يعطى بالعلاقة فوسكو، ويلك و نصير [15]:

$$\varepsilon_c(\rho) = -\frac{d_0}{r_s} + \frac{d_1}{r_s^{3/2}} + \dots \quad (47.2)$$

8. 2. تقريب التدرج المعمم GGA :

تقريب تدرج المعمم GGA [16]، تصحيحات LDA المستخدم حاليا أخذت بعين الاعتبار تغير كثافة الإلكترونات $\rho(r)$ عبر تدرج $\Delta\rho(r)$ تأخذ طاقة التبادل-ارتباط الشكل التالي :

$$E_{xc}^{GGA}[\rho(\vec{r})] = \int \rho(\vec{r}) \varepsilon_{xc}[\rho(\vec{r}) \nabla\rho(\vec{r})] d^3 \vec{r} \quad (48.2)$$

$\nabla\rho(\vec{r})$: تدرج الكثافة الإلكترونية.

9. 2. التقريب المعدل لبريك جونسن mBJ :

حيث قدم Tran-Blaha [17] سنة 2009 أطروحة حول نسخة معدلة لدالية بريك جونسن ، هذه الأخيرة برهنة بسرعة نجاعتها بالنسبة لطرق الحساب الأكثر استعمال LDA [11] و GGA [16]. وذلك من أجل حساب فجوة الطاقة بتغيير في الكمون لبريك جونسن علي الشكل:

$$v_{x;\sigma}^{mBJ}(r) = cv_{x;\sigma}^{BR}(r) + (3c - 2) \frac{1}{\pi} \sqrt{\frac{5}{12}} \sqrt{\frac{2t_{\sigma}(r)}{\rho_{\sigma}(r)}} \quad (49.2)$$

حيث

$$\rho_{\sigma}(r) = \sum_{i=1}^{N_{\sigma}} |\psi_{i,\sigma}|^2 \quad \text{كثافة الإلكترونات.}$$

$$t_{\sigma}(r) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N_{\sigma}} |\psi_{i,\sigma}^* \nabla \psi_{i,\sigma}|^2 \quad \text{كثافة الطاقة الحركية.}$$

Becke-Roussel الكمون لـ $v_{x,\sigma}^{BR}$

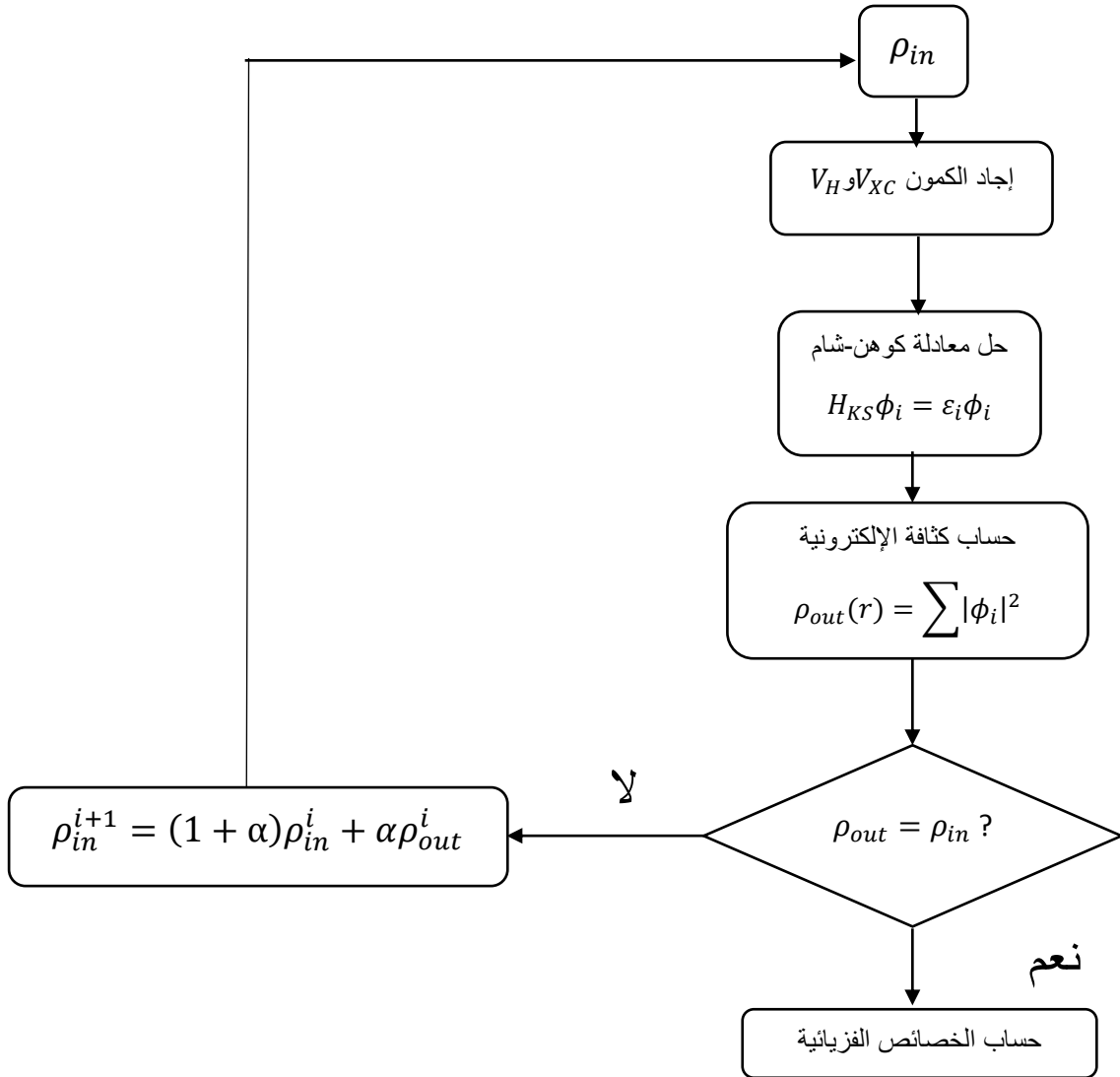
نشير إلي أن إذا أخترنا $c = 1$ لدالية بريك جونسن [18] هذا الثابت المختار يتعلق خطيا مع الجذر

$$\frac{|\nabla \rho(r)|}{\rho(r)} \quad \text{التربيعي المتوسط لـ}$$

الشكل المقترح لـ c كالتالي :

$$c = \alpha + \beta \left(\frac{1}{V_{cell}} \int_{cell} \frac{|\nabla \rho(r)|}{\rho(r)} d^3r \right)^{1/2} \quad (50.2)$$

α و β ثوابت ، V_{cell} حجم الخلية العنصرية للنظام.



الشكل (1.2): مخطط لنظرية دالية الكثافة DFT

المراجع :

- [1] P. Kireev, La physique des semi-conducteurs, 2e édition, édition Mir. Moscou, (1975).
- [2] M. Born, R. Oppenheimer, Ann. Phys. (Leipzig) 84, 87 ,457 (1927).
- [3]. R. Hartree, *Proc. Cambridge Phil. Soc.* 1928, 24, 89.
- [4] W. Pauli Jr., *Z. Physik*, 1925, 31, 765
- [5] V.Z. Fock, *Z. Phys.* 1930, 61, 126.
- [6] J.C. Slater, *Phys. Rev.*, 1929, 34, 1293
- [7] L. H. Thomas. *Proc. Cambridge Philos. Soc* 23 (1928) 542.
- [8] E. Fermi. *Z. Phys* 48 (1928) 73.
- [9] d.j. singh, plane waves, pseudo-potentials, and lapw method, Kluwer academic publisher, boston ,1994.
- [10] S. Cottenier, Density Functional Theory and the family of (L) APW-methods: a stepbystep introduction Belguim August 6, 2004.
- [11] J.P. Perdew, W. Wang, *Phys. Rev. B* 45 (13) (1992) 244; P. Blaha, K. Schwarz, P. Sorantin, S.B. Tricky, *Chem. Phys. Lett.* (1990) 399.
- [12] p.a.m. dirac, *proc. Cambridge philos.soc.* 26,376(1930).
- [13] e. wingner, *phys.rev.*46,1002(1934).
- [14] j.p. perdew, a. zunger, *phys.rev.* b23,5048(1981).
- [15] s.h. vosko, l. wilk, and m. nusair, *can.j.phys.*58,1200(1980).
- [16] D. Langreth, J. Perdew, *Phys. Rev. B* 21 (1980) 5469.
- [17] F. Tran and P. Blaha, *Phys Rev.Lett* 102, 226401 (2009).
- [18] A.D. Becke and E. R. Johnson, *J. Chem. Phys.* 124, 221101 (2006).

3.1.1. مقدمة :

توجد عدة طرق لحساب عصابات الطاقة والتي تنقسم إلى ثلاث أقسام رئيسية هي على النحو التالي:

-الطرق التجريبية التي تتطلب حسابتها نتائج تجريبية.

-الطرق شبه التجريبية والتي تتطلب أثناء الحساب نتائج تجريبية ومعطيات أساسية في نفس الوقت.

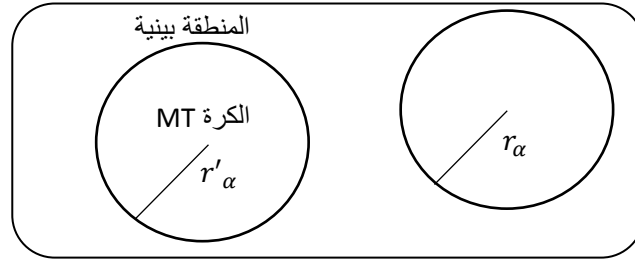
-الطريقة الأساسية التي تتطلب حساباتها معطيات أساسية فقط .

في السنوات الأخيرة ، طور الباحثين طرق حسابات تعتمد بالأساس على مفاهيم نظرية تسمى طرق المبدأ الأول ، من خلالها نستطيع وضع ثلاث مجموعات للطرق لحل معادلة شرودينغر تعتمد على نظرية دالية الكثافة DFT:

- الطرق التي تعتمد على تركيبة خطية للمدرات الذرية (LCAO) [11,12] تستعمل مثلا في العصابات d للمعادن الإنتقالية .
- طرق مشتقة من الأمواج المستوية المتعامدة (OPW) [12,13] وهي الأنسب لعصابات النقل من نوع (S-P) للمعادن البسيطة.
- الطرق الخلية من النوع أمواج مستوية متزايدة (APW) [14] و طريقة الدالية Green Korring ، Kohn و Rostoker (KKR) تنطبق على أكبر مجموعة من المواد.
- طرق الخطية التي وضعها أندرسن [4]: الموجات المستوية المتزايدة خطيا (LAPW) و مدارات « Muffin-Tin » الخطية (LMTO)، تسمح لنا بتوفير كثير من الرتب لهذا المقدار أثناء زمن الحساب

3.2. طريقة APW :

في سنة 1937م نشر سلاتر [1] بحثه المتعلق بطريقة الأمواج المستوية المتزايدة APW ، ولكتابة دالة الموجة الإلكترونية قام بوضع كمون "Muffin-Tin" كتقريب لوصف كمون الشبكة البلورية وذلك بتقسيم الفضاء المحيط بالذرات إلى منطقتين:



الشكل (1.3): كمون « Muffin-Tin » (MT)

المنطقة الأولى (الكرة MT): يتغير فيها الكمون بشدة كبيرة تشمل الأنوية و الإلكترونات شديدة الارتباط.

المنطقة الثانية (المنطقة البينية) : تشمل الإلكترونات ضعيفة الارتباط بالأنوية.

حيث تختلف حلول معادلة شرودينغر حسب المنطقة المعتمدة :

حلول شعاعية لمعادلة شرودينغر داخل كرة MT :

$$\phi(r) = \sum_{lm} A_{lm} U_l(r) Y_{lm}(r) \quad (1.3)$$

$< r_\alpha$

أمواج مستوية في المنطقة الإقحامية :

$$\phi(r) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_{\vec{G}} C_{\vec{G}} e^{i(\vec{k}+\vec{G})r} \quad (2.3)$$

$> r_\alpha$

Ω يمثل حجم خلية الوحدة.

Y_{lm} الدالة التوافقية الكروية

$C_{\vec{G}}, A_{lm}$ معاملات النشر

\vec{G} شعاع الإنتقال في الشبكة المعكوسة

$U_l(r)$ هي الحلول المنتظمة لمعادلة شرودينغر للجزء الكروي (M.T) تكتب كالتالي :

$$\left\{ -\frac{d^2}{d^2r} + \frac{l(l+1)}{r^2} + V(r) - E_1 \right\} rU_1(r) = 0 \quad (3.3)$$

E_1 الطاقة الخطية.

$V(r)$ يمثل الكمون داخل الكرة

تكون الدالة الشعاعية (القطرية) المعرفة في العلاقة السابقة (3.3) متعامدة لكل الحالات الذاتية القلبية داخل الكرة وتنتهي شروط التعامد عند حدودها [2] وتصبح معادلة شرودينغر كالتالي :

$$(E_1 - E_2)rU_1U_2 = U_2 \frac{d^2rU_1}{d^2r} - U_1 \frac{d^2U_2}{d^2r} \quad (4.3)$$

ولضمان إستمرارية الدالة $\phi(\vec{r})$ علي سطح الكرة MT تنتشر المعاملات A_{lm} بدلالة المعاملات C_G الخاصة بالأمواج المستوية في المنطقة الإقحامية وبعد الحسابات الجبرية نجد:

$$A_{lm} = \frac{4\pi i^l}{\sqrt{\Omega}U_L(r)} \sum_G C_G J_l(|k+g|r_\alpha) Y_{lm}^*(k+G) \quad (5.3)$$

الدوال الذاتية G تصبح متوافقة مع الدوال الشعاعية في كرة MT بالتالي نتحصل علي دالة أساسية APWs وهي حلول معادلة شرودينغر داخل الكرة MT الموافقة للطاقة E_1 أي نتحصل علي عصابة الطاقة الموافقة للمعامل G .

لكن وجدت صعوبة في الدوال $U_1(r_\alpha)$ وذلك لأن في حالة نقصان المعاملات A_{lm} تصبح قيم $U_\alpha(r_\alpha)$ معدومة على سطح الكرة وبالتالي الدوال الشعاعية تكون منفصلة على الدوال الموجية في المنطقة الإقحامية، ولحل هذه المشكلة أدخل كولينغ [3] وأندرسن [4] مجموعة من التغيرات على طريقة APW منها تمثيل الدالة الشعاعية $\phi(r)$ خارج كرة MT بترتيبات خطية $U_1(r)$ مع إمتلاكها مشتقات بالنسبة للطاقة $\dot{U}_1(r)$ ،سمية بطريقة الأمواج المستوية المتزايدة خطيا - FP.

LAPW

3.3. مبدأ طريقة FP-LAPW :

قدم أندرسون [4] طريقة الأمواج المستوية المتزايدة خطيا و الكمون الكامل FP-LAPW حيث أن الدالة الأساسية في الكرة MT هي عبارة عن مزيج خطي لدالة الشعاعية $U_l Y_{lm}(r)$ وأشتقاقها $\dot{U}_l Y_{lm}(r)$ بدلالة الطاقة U_l تعرف مثل دالة APW (3.3)، والدالة $\dot{U}_l Y_{lm}(r)$ تخضع لشروط التالية [5]:

$$\left\{ -\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} + V(r) - E_l \right\} r \dot{U}_l(r) = r U_l(r) \quad (6.3)$$

في الحالة اللانسيبية ، الدالة الشعاعية $U_l(r)$ و $\dot{U}_l(r)$ على سطح الكرة (MT) تكون مستمرة مع الموجة المستوية في المنطقة الإقحامية ، إذن دالة الموجة المستوية المتزايدة تصبح دالة أساسية للطريقة FP-LAPW :

$$\phi(\vec{r}) = \begin{cases} \sum_{lm} [A_{lm} U_l(r) + B_{lm} \dot{U}_l(r)] Y_{lm}(r) & r < r_0 \\ \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_{\vec{G}} C_{\vec{G}} e^{i(\vec{K} + \vec{G})\vec{r}} & r > r_0 \end{cases} \quad (7.3)$$

A_{lm} : هي معاملات الموافقة للدالة $U_l(r)$

B_{lm} : هي معاملات الموافقة للدالة $\dot{U}_l(r)$

الدوال LAPWs هي عبارة عن موجة مستوية وحيدة في منطقة الإقحامية مثل طريقة APW ، و الدالة الشعاعية يمكن نشرها بالقرب من E_l كالتالي [6]:

$$U_l(E, r) = U_l(E_l, r) + (E - E_l) \dot{U}_l(E_l, r) + 0(E - E_l)^2 \quad (8.3)$$

حيث أن $0(E - E_l)^2$ يمثل الخطأ الرباعي الطاقوي.

طريقة LAPW تضمن الإستمرار دالة الموجة علي سطح كرة MT .

الطريقة FP-LAPW تدخل خطأ على الدالة الموجية من رتبة $(E - E_1)^2$ وأخرى على عصابات الطاقة من رتبة $(E - E_1)^4$ بالرغم من رتبة هذا الخطأ الدوال LAPWs تشكل قاعدة جيداً، التي تسمح لنا بالطاقة E_1 واحد نتحصل على كل عصابات تكافؤ في أكبر منطقة طاقوية.

4.3. دور الطاقة الخطية E_1 :

الدوال U_1 و U_1^* متعامدتان مع الحالات القلبية علي سطح كرة MT لكن هذه شروط ليست كافية عندما تكون الحالات القلبية موافقة لنفس القيمة 1 ، ومن جهة أخرى نأخذ الخط بين الحالات نصف قلبية مع حالة التكافؤ ، فهو غير معالج في الطريقة APW ، لذلك يجب إختيار الطاقة E_1 بدقة للدوال الغير متعامدة مع أي حالة من حالات إلكترونات القلبية وذلك في طريقة FP-LAPW ، ولهذا يجب تغيير E_1 لإجراء الحساب، ولحل أحسن نستخدم النشر على المدارات الموضع مع أخذ أكبر نصف قطر ممكن لـ MT، لإجراء حساب دقيق للبنية الإلكترونية يجب ملاحظة إختلاف الطاقة الخطية E_1 أنها مستقلة عن بعضها البعض.

5.3. بنية الدوال الشعاعية :

الدوال الأساسية لطريقة الأمواج المستوية المتزايدة خطياً FP-LAPW تكون موجة مستوية في المنطقة الإقحامية، و التي هي تنشر على شكل دالة شعاعية داخل كرة MT، تحت شرط أن الدوال الأساسية لها اشتقاق يكون مستمر على سطح كرة MT فبنية الدوال الأساسية للطريقة FP-LAPW تصبح تحدد بـ:

$$1- \text{دوال شعاعية } U_1(r) \text{ و مشتقتها بالنسبة للطاقة } \dot{U}(r)$$

2- المعاملات A_{lm}, B_{lm} تكفي لتحقيق الشروط الحدودية من أجل إجراء الحساب في القطع المغلق Cutoff و أخذ العزم الزاوي L_{max} ، و لتمثيل القطع المغلق G_{max} يمثل أكبر طول للموجات المستوية خارج الكرة (MT) من أجل نصف قطر الكرة R_α .

- استراتيجياً نختار القطع المغلق Cutoff لضمان التقارب في طريقة FP-LAPW .

6.3. الدوال الشعاعية اللانسية :

في الحالة اللانسية الدوال $U_l(r)$ الشعاعية تكون حلول معادلة شرودينغر التالية للكمون الكروي والطاقة الخطية E_1 .

$$\left\{ -\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} + V(r) - E_l \right\} rU_1(r) = 0 \quad (9.3)$$

أين $V(r)$ هو الكمون الكروي لكرة (MT) .

الإشتقاق بالنسبة للطاقة $\dot{U}_1(r)$:

$$\left\{ -\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} + V(r) - E_l \right\} r\dot{U}_1(r) = rU_1(r) \quad (10.3)$$

تقنين الحلول الشعاعية $U_1(r)$ و $\dot{U}_1(r)$:

$$\int_0^{R_\alpha} r^2 U_1^2(r) dr = 1 \quad (11.3)$$

الدالة $\dot{U}_1(r)$ تكون مقننة .

$$N_1 \equiv \int_0^{R_\alpha} r^2 \dot{U}_1^2(r) dr \quad (12.3)$$

شروط التقنين في طريقة FP-LAPW يمكن تعويضها بالمعادلة التالية:

$$R_\alpha^2 [U_1'(R_\alpha)\dot{U}_1(R_\alpha) - U_1(R_\alpha)\dot{U}_1'(R_\alpha)] = 1 \quad (13.3)$$

مع أن

$$U'_\alpha(E, r) \equiv \frac{\partial U_1'(E, r)}{\partial r} \quad \text{و} \quad \dot{U}_1(E, r) \equiv \frac{\partial U_1(E, r)}{\partial E}$$

هذه المعادلة تستخدم في حل عدديا الدوال U_1 و \dot{U}_1 ، بالتقنين نستطيع كتابة U_1 علي الشكل التالي:

$$U_1(E + \delta) = U_1(E) + \delta\dot{U}_1(E) + \dots \dots \quad (14.3)$$

مع إختيار تقنين $\dot{U}_1(r)$ أي $\|\dot{U}_1(r)\|$ يشير لرتبة عرض الطاقة E_l ، الخطأ على الطاقة الخطية يكون مقبول حسب أندرسن.

$$\|\dot{U}_1(r)\| \cdot |E_l - E| \leq 1 \quad (15.3)$$

إذا كان هذا الاختيار غير ممكن نلجأ إلي :

- 1- يقسم المجال الطاقى إلى نوافذ وتعالج كل نافذة طاقية مفصولة.
- 2- نستخدم النشر على مواضع المدارات (هذا في الواقع طريقة الدرجة الثانية).
- 3- تقليل من الحجم يعني تقليل من تقنين المشتقة.

7.3. بنية الدوال الشعاعية :

في حالة العناصر الثقيلة لديها عدد الذرى كبير ، نأخذ بعين الإعتبار تأثير النسبي.

حيث أن التأثيرات النسبية تدخل فقط في الدالة الشعاعية داخل الكرة (MT) ، ولإدخال هذا التأثير يجب إستبدال المعادلة (9.3) و (10.3) بالمعادلة لدرارك وإشتقاقها بالنسبة للطاقة تقنيا عدة علماء تعرضو [7,4] لحل معادلة ديراك بإهمال تأثير فعل سبين-مدار وإدراجه فيما بعد.

حل معادلة ديراك:

$$\psi_{kv} = \begin{bmatrix} g_k X_{kv} \\ -if\sigma_r X_{kv} \end{bmatrix} \quad (16.3)$$

K : عدد كوانتى نسبي

X_{kv} : سبين-مدار لمركبين و الأحداثية الشعاعية تمت إزالته . Koelling-harmon [15] إستعمل دالة جديدة:

$$\phi_k = \frac{1}{2MC} g'_k \quad (17.3)$$

مع:

$$M = m + \frac{1}{2C^2} (E - V) \quad (18.3)$$

حيث أن g'_k مشتق الشعاعى لـ g_k ، m الكتلة و C سرعة الضوء في الفراغ.

الحل بدلالة العدد الكوانتى كالتالى :

$$\phi_{lms} = \left[\frac{i}{2MC} \sigma_r \begin{pmatrix} g_l Y_{lm} X_s \\ -g'_l + \frac{1}{r} g_l \sigma \end{pmatrix} Y_{lm} X_s \right] \quad (19.3)$$

حيث x_s : سبين-مدار اللانسيبية.

بتحديد $p_1 = rg_1$ و $P_1 = rC\phi_1$ المعادلة السلمية النسبية تصبح:

$$p'_1 = 2MQ + \frac{1}{2}p_1 \quad (20.3)$$

$$Q'_1 = -\frac{1}{2}Q + \left[\frac{l(l+1)}{2Mr^2} + (V - E_1) \right] p_1 \quad (21.3)$$

هذه المعادلة الأخيرة يمكن حلها عدديا كما هو الحال بالنسبة لمعادلة شرودينغر اللانسيبية بإستخدام طريقة إعطاء شروط الحدودية.

$$\lim_{r \rightarrow 0} \frac{Q}{p} = C \frac{1}{(2Z/C)} \left[l(l+1) + 1 - (2Z/C)^{1/2} - 1 \right] \quad (22.3)$$

عبارة سبين-مدار تأخذ من العبارة (20.3) . الإشتقاق بالنسبة الطاقة مشابهة لحالة اللانسيبية.

$$\dot{P}_1 = 2(\dot{M}Q_1 + M\dot{Q}_1) + \frac{1}{r}\dot{p}_1 \quad (23.3)$$

$$\dot{Q}_1 = -\frac{1}{r}\dot{Q}_1 \left[\frac{l(l+1)}{2Mr^2} + (V - E_1) \right] \dot{p}_1 - \left[\frac{l(l+1)\dot{M}}{2M^2r^2} + 1 \right] p_1 \quad (24.3)$$

تحديد الدوال g_1 و f_1 من الحل Q_1 و P_1 ، نفس الدوال تستعمل من أجل حساب كثافة الشحنة و عناصر المصفوفة . وهكذا U_1^2 تستبدل في المعادلة (11.3) بالعبارة $g_1^2 + f_1^2$.

3.8. حل معادلة Poisson :

في معادلة K.S الكمون المستخدم كمون تبادلي-إرتباط وكمون كولوم (مجموع كمون هرتزي و كمون النواة).

باستخدام معادلة بواسون. يمكن تحديد كمون كولوم:

$$\nabla^2 V_C(\vec{r}) = 4\pi\rho(\vec{r}) \quad (25.3)$$

تكامل هذه المعادلة يكون فقط ممكن في فضاء الشبكة المعكوسة ، ولهذا هيومان [8] وفينر [9] إقترحوا طريقة للحل تسمى شبه-الشحنة وتتركز على ملاحظتين :

1- كثافة الشحنة مستمرة وتتغير ببطئ في المنطقة الإقحامية وسريعة جدا داخل الكرة

2- كمون كولوم في المنطقة الإقحامية لايتعلق فقط بشحنة هذه المنطقة لكن أيضا شحنة داخل الكرة.

في المنطقة الإقحامية كثافة الشحن تنشر كسلسلة فورييه:

$$\rho(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} \rho(\vec{G}) e^{i\vec{G}\vec{r}} \quad (26.3)$$

دوال الموجة $e^{i\vec{G}\vec{r}}$ تحسب إنطلاقا من معادلة باسل j_e

$$\int_0^R r^{l+2} j_l(\vec{G}\vec{r}) d\vec{r} = \begin{cases} R^{l+3} \frac{j_l(\vec{G}\vec{r})}{Gr} & G \neq 0 \\ \frac{R^3}{3} \sigma_{l,0} & G = 0 \end{cases} \quad (27.3)$$

$$e^{i\vec{G}\vec{r}} = 4\pi e^{i\vec{G}\vec{r}_\alpha} \sum_{lm} i^l j_l(|\vec{G}||\vec{r} - \vec{r}_\alpha| Y_{lm}^*(\vec{G}) Y_{lm}(\vec{r} - \vec{r}_\alpha)) \quad (28.3)$$

حيث :

r إحداثية الشعاعية و r_α موضع الكرة α .

الكمون كولوم يصبح:

$$V_C(\vec{G}) = \frac{4\pi\rho(\vec{G})}{G^2} \quad (29.3)$$

نكامل المعادلة (29.3) فنجد:

$$V_{PW} = \sum_{lm} V_{lm}^{PW}(r) Y_{lm}(r) = \sum_V V_V^{PW}(r) K_V(r) \quad (30.3)$$

حيث أن V_{PW} كمون المنطقة الأقمامية.

و $K_V(r)$ يعطى بالعلاقة :

$$K_V(r) = \sum_m C_{lm} Y_{lm}(r) \quad (31.3)$$

باستخدام معادلة غرين نقوم بحساب الكمون داخل كرة MT :

$$V_V(r) = V_{lm}^{PW}(r) \left[\frac{r}{R} \right] + \frac{4\pi}{2l+1} \left\{ \frac{1}{r^{l+1}} \int_0^x dr' r'^{l+2} \rho_V(r') + r^l \int_x^R dr' r'^{l-1} \rho_V(r') - \frac{r^l}{R^{2l+1}} \int_0^{R_x} dr' r'^{l+2} \rho_V(r') \right\} \quad (32.3)$$

حيث: $\rho_V(r')$ يمثل الجزء الشعاعي لكثافة الشحنة.

3.9 تحسين طريقة (FP – LAPW) :

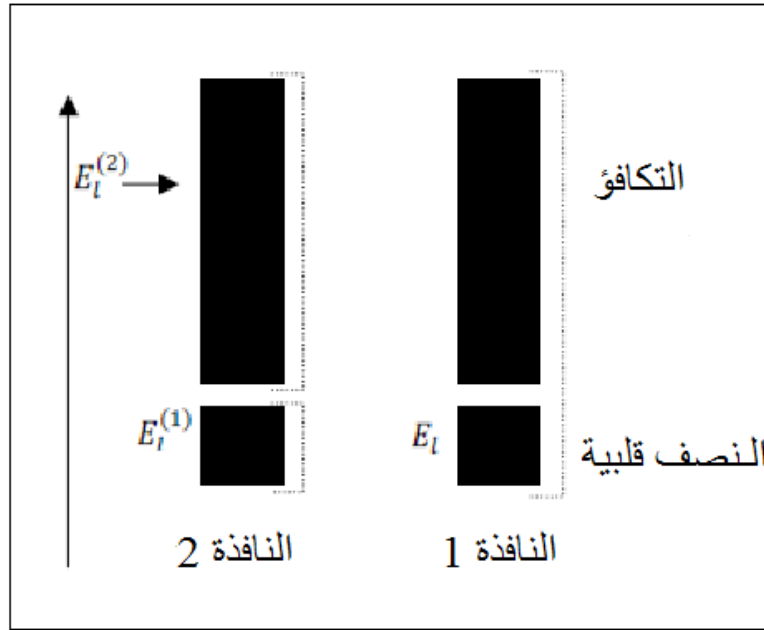
الطاقة الخطية E_l مهمة جداً في طريقة (FP – LAPW) ، لأنه بالقرب من E_l نحسب عصابة الطاقة بدقة. أما في الحالات النصف قلبية التي تكون بين الحالات القلبية وحالات التكافؤ يوجد مشكل أساسي ولحلّه نستعمل طريقتين :

-إستعمال نوافذ الطاقة المضاعفة.

-إستخدام النشر على مدار الموضع.

3.9.1 نوافذ الطاقة المضاعفة :

التقنية المستعملة لمعالجة مشكلة حالات نصف قلبية بتقسيم الطيف الطاقوي إلى نوافذ والتي تكافئ الطاقة E_l [4]. هذه التقنية موضحة في الشكل (2.3).



الشكل (2.3) : عدة نوافذ طاقة

تعالج هذه المسألة بإختيار أي نافذة للحالة المكافئة و ذلك للفصل بين حالات التكافؤ و النصف قلبية.

2.9.3. النشر على المدارات الموضعية :

النشر في طريقة FP – LAPW في المدارات الموضعية وذلك بتغيير المدارات الأساسية من أجل تجنب إستعمال عدة نوافذ للطاقة، وهكذا يتم إيجاد مجموعة عصابات الطاقة إنطلاقا من نافذة واحدة. Singh أعطي للمدار الرمز "Lo" [10] لديه شكل مركب خطي لدالتين شعاعيتين مسؤولة عن طاقتين مختلفتين و الإشتقاق بالنسبة للطاقة لهذه الدوال :

$$\phi_{im} = \begin{cases} 0 & r > r_\alpha \\ |A_{im} U_i(r, E_{1,l}) + B_{im} \dot{U}_1(r, E_{1,l}) + C_{lm} U_1(r, E_{2,l})| Y_{lm}(r) & r < r_\alpha \end{cases} \quad (33.3)$$

المعامل C_{lm} هي من نفس طبيعة المعاملات A_{lm} و B_{lm} .

10.3 برنامج Wien2K :

في عملنا استخدمنا طريقة FP-LAPW ، المدمجة في برنامج Wien2K [16] حيث يشمل برامج فرعية منفصلة الشكل (3.3) :

NN: هذا البرنامج يحدد المسافة بين جوار الأقرب لذرة كما يساعد في إيجاد نصف القطر الذري للكرة

LSTART : برنامج يولد الكثافة الذرية ويحدد كيفية التعامل مع المدرات المختلفة في حساب عصابات الطاقة

SYMMETRY: فهو يولد عملية التناظر في الجملة ، يحسب المجموعة النقطية لمواقع الخاصة بالذرات يولد المعامل الأساسي لتوافقية الشبكة وحساب مصفوفة الدوران الموضعي.

KGEN : يولد الشبكة k في منطقة بريلون

DSTART : يولد كثافة إنطلاق لدورة SCF المنتجة من الكثافة الذرية والمولدة من LASTART.

يقوم بتهيئة الحساب و التكراره إلى غاية الوصول لتقريب المطلوب. وهي منسقة في الخطوات التالية :

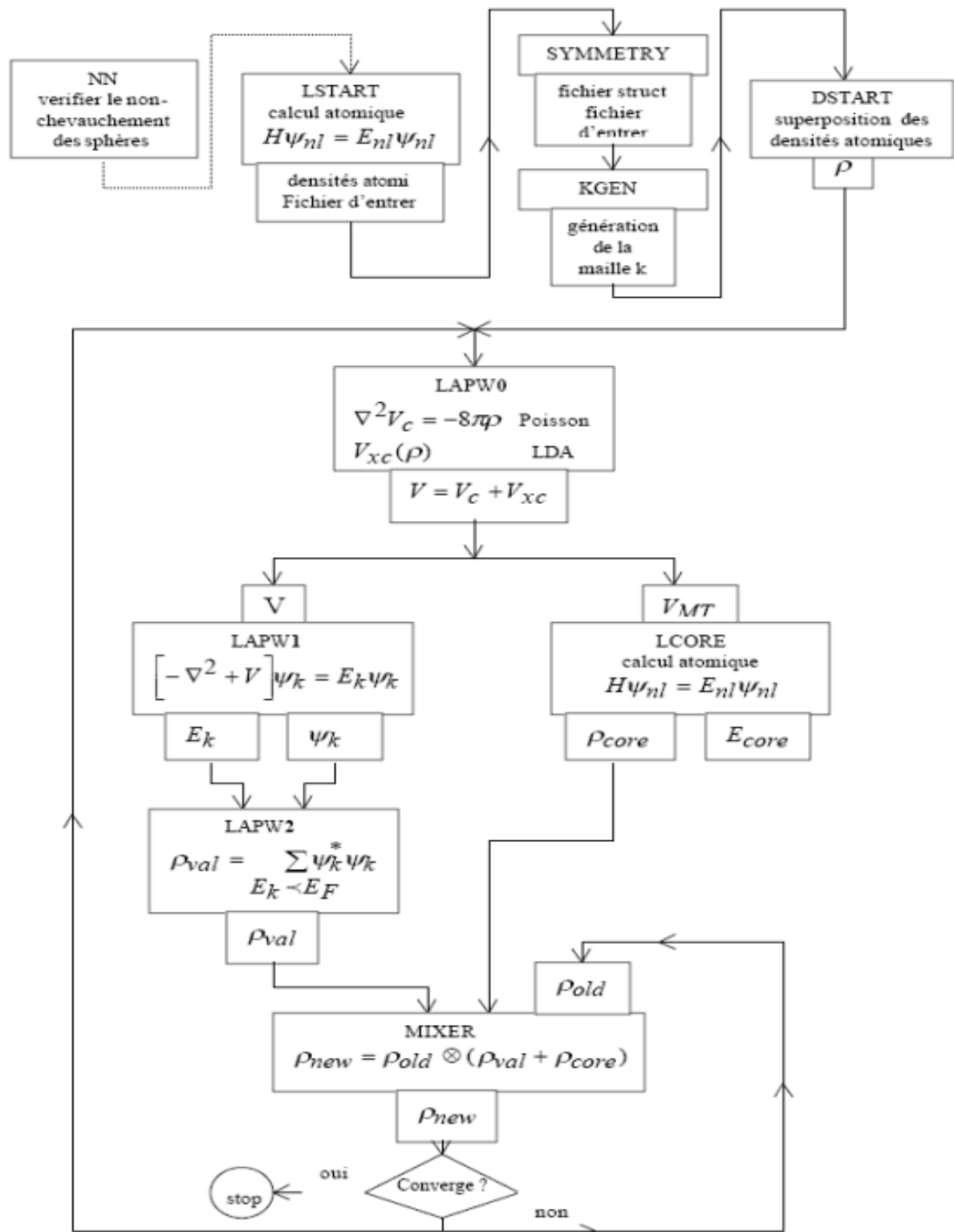
LAPW0 : يولد كمون إنطلاقا من الكثافة.

LAPW1 : حساب عصابة التكافؤ ، القيم الذاتية والأشعة الذاتية.

LAPW2 : حساب كثافة التكافؤ من الأشعة الذاتية.

LCORE : حساب الحالات القلبية والكثافة.

MIXER : يخط الكثافة الداخلة و الخارجة.



الشكل (3.3) : بنية برنامج Wien2K

المراجع:

- [1] J. C. Slater, *Advances in Quantum Chemistry* 1,35 (1964).
- [2] T. L. Loucks, « *The Augmented Plane Wave Method* », Benjamin, New York (1967).
- [3] D. D. Koelling and G. O. Arbman, *J. Phys.* F5, 661 (1979).
- [4] O. K. Andersen, *Phys. Rev. B* 12, 3060 (1975).
- [5] M. B. Kanoun, *Thèse de doctorat, université de Tlemcen* (2004).
- [6] S. Cottenier, ISBN 807215 (2002) 90.
- [7] J.H. Wood and A.M. Boring, *Phys. Rev. B* 18 (1978) 2701.
- [8] D. R. Hamann, *Phys. Rev. Lett.* 42 (1979) 662.
- [9] M. Weinert, *J. Math. Comp.* 17 (1963) 2433.
- [10] D. Singh and H. Krakauer, *Phys. Rev. B* 43 (1991) 1441.
- [11] F. Bloch, *Z.Phys.* 52, 555 (1928).
- [12] J. C. Slater « *Quantum Theory of Molecules and solids* », V2, Ch.8 (1965).
- [13] C.Herring, *Phys.Rev.* 57,1169 (1940).
- [14] J.C.Slater, *Phys.Rev.* 51, 846 (1937).
- [15] D.D. Koelling and G.O. Arbman, *Phys.Rev. B* 33 (1986) 823.
- [16] P. Blaha, K. Schwarz, G. K.H Madsen, D. Kvasnicka and J. Luitz, WIEN2K, an augmented plane-wave+local orbitals program for calculating crystal properties (Karlheinz Schwarz, Techn.Universitat Vienna, Austria), 2001.ISBN 3-9501031-1-2.

1.4 مقدمة:

الهدف من هذا الفصل هو دراسة الخصائص البنيوية (ثابت الشبكة $a(A^\circ)$ ، معامل الانضغاطية β والمشتقة الاولى لهذا المعامل β')، الخصائص الالكترونية (بنية عصابات الطاقة، كثافة الحالات الكلية والجزئية)، والخصائص الميكانيكية لسبائك $Al_xGa_{1-x}Sb$.

تم الحصول على النتائج في سياق نظرية دالية الكثافة DFT وذلك باستخدام طريقة الموجة المستوية المتزايدة خطيا والكمون الكامل (FP-LAPW) [1] والمدمجة في برنامج [2]Wien2k.

من اجل دراسة الخصائص البنيوية والالكترونية استخدمنا التقريبين التاليين:

تقريب التدرج المعمم (GGA) [3]، ومن اجل حصول على نتائج جيدا حول الخصائص الالكترونية وتحسين المانع الطاقى نستعمل تقريب المعدل لبيك جونسون (mBJ) [4].

2.4 البنية البلورية لسبائك $Al_xGa_{1-x}Sb$:

لدراسة الخصائص البنيوية والالكترونية لسبيكة $Al_xGa_{1-x}Sb$ والتي تستعمل في تطبيقات الفعل الكهروضوئي وكذا الخلايا الشمسية والصمامات الثنائية ندرس اولا المركبات الثنائية GaSb وAlSb حيث تتبلور في بنية مكعب ممرکز الاوجه CFC مع تناظر F-43m (زمرة فراغية 216) كما هو موضح في الشكل (a.1.4) وشكل (b.1.4) على التوالي وتحتوي على ذرتين تحتل المواقع التالية:

$$(Ga, Al); (0, 0, 0).$$

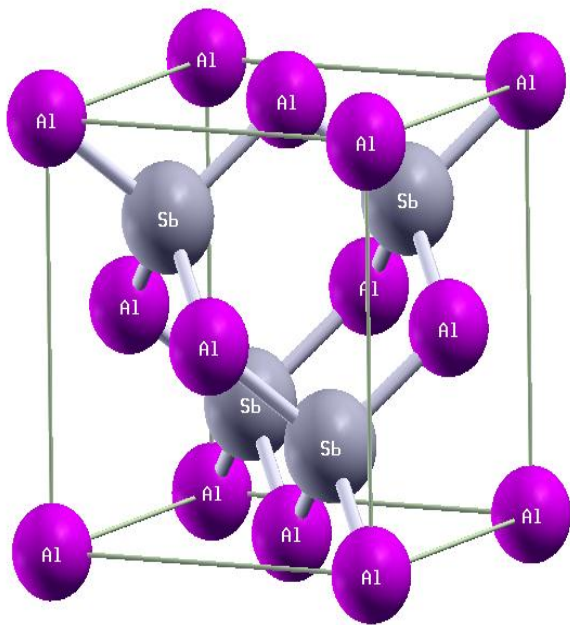
$$(Sb); (1/4, 1/4, 1/4).$$

اما لدراسة السبيكة في حالة العامة فإننا نختار تركيز $x=0.25$ لتصبح السبيكة من الشكل $Al_{0.25}Ga_{0.75}Sb$ بحيث تتبلور في بنية مكعب بسيط CS مع تناظر P-43m (زمرة فراغية 215) كما هو موضح في الشكل (c.1.4) و تحتوي على 3 ذرات تحتل المواقع التالية:

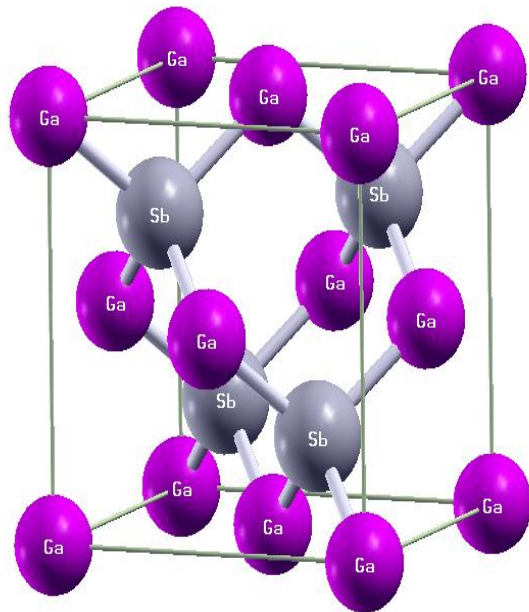
$$(Al); (0, 0, 0).$$

$$(Ga); (0, 0.5, 0.5) / (0.5, 0, 0.5) / (0.5, 0.5, 0).$$

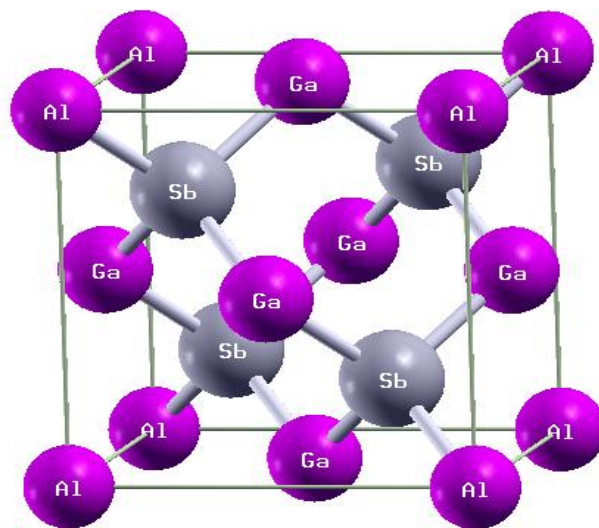
$$(Sb); (0.25, 0.75, 0.75) / (0.75, 0.25, 0.75) / (0.75, 0.75, 0.25) / (0.25, 0.25, 0.25).$$



b.1.4



a.1.4



c.1.4

الشكل (1.4): يمثل البنية البلورية لسبيكة $Al_xGa_{1-x}Sb$ من أجل $x=0,0.25,1$

التوزيع الإلكتروني لكل عنصر كيميائي

$$1S^2 2S^2 2P^6 3S^2 3P^1 : [Al]$$

$$1S^2 2S^2 2P^6 3S^2 3P^6 3d^{10} 4s^2 4P^1 : [Ga]$$

$$1S^2 2S^2 2P^6 3S^2 3P^6 3d^{10} 4s^2 4P^6 4d^{10} 5s^2 5P^3 : [Sb]$$

اول خطوة في الحساب هي إيجاد القيم التالية:

1. اختيار قيمة R_{mt} (نصف قطر الكرة MT) لذرات Al، Ga و Sb يعتمد على شرطين اساسيان:

- تجنب تداخل كرة (MT).
- يجب ان تكون اغلبية الالكترونات القلبية داخل الكرة (MT).

2. معامل RK_{max} يعطى بالعلاقة:

$$RK_{max} = R_{MT}^{\min} \times K_{max} \quad (1.4)$$

R_{MT}^{\min} : اصغر قطر للكرة MT

K_{max} : الشعاع الناظمي للموجة المستوية

3. K_{Point} تعرف على انها عدد النقاط K في منطقة بريليون الاولى.

الجدول (1.4) تم اختيار انصاف الاقطار كرة (MT) وانتقاء اختياري للنقاط الخاصة $(R_{mt} \times K_{max})$ (K_{Point}) حسب تقريب GGA و LDA وذلك باستخدام الحساب الذاتي SCF للسبيكة $Al_xGa_{1-x}Sb$.

| LDA | GGA | الوسائط | السبائك | X |
|------|------|--------------------|------------------------|------|
| 9 | 8.5 | $R_{MT} * K_{max}$ | GaSb | 0 |
| 900 | 900 | K_{points} | | |
| 2.20 | 2.20 | $R_{MT}(Ga)$ | | |
| 2.31 | 2.31 | $R_{MT}(Sb)$ | | |
| 9 | 8.5 | $R_{MT} * K_{max}$ | $Al_{0.25}Ga_{0.75}Sb$ | 0.25 |
| 900 | 900 | K_{points} | | |
| 1.9 | 1.9 | $R_{MT}(Ga)$ | | |
| 1.6 | 1.6 | $R_{MT}(Al)$ | | |
| 1.95 | 1.95 | $R_{MT}(Sb)$ | | |
| 9 | 8.5 | $R_{MT} * K_{max}$ | AlSb | 1 |
| 900 | 900 | K_{points} | | |
| 2.10 | 2.10 | $R_{MT}(Al)$ | | |
| 2.44 | 2.44 | $R_{MT}(Sb)$ | | |

الجدول (1.4): قيم كل من $R_{mt} \times K_{max}$ ، K_{Point} لسبائك $Al_xGa_{1-x}Sb$ حسب تقريب LDA و GGA.

3.4 الخصائص البنيوية:

1.3.4 ايجاد ثوابت البنية:

لقد تم حساب طاقات الحالة الاساسية كدالة لحجم الخلية لسبيكة $Al_xGa_{1-x}Sb$ في حالة بدون سبين والمبينة في الجدول (2.4).

لحساب ثابت الشبكة البلورية $a(A^\circ)$ استخدمنا معادلة الحالة لمرنقهان [5] تعطى بالعلاقة التالية:

$$E(V) = E_0 + \frac{B}{B'(B' + 1)} \left[V \left(\frac{V_0}{V} \right)^{B'} - V_0 \right] + \frac{B}{B'} (V - V_0) \quad (2.4)$$

V_0 : حجم الحالة الاساسية

E_0 : طاقة الحالة الاساسية المسؤولة عن الحجم

B : معامل الانضغاطية ويعرف بالعلاقة التالية:

$$B = V \frac{\partial^2 E}{\partial V^2} \quad (3.4)$$

B' : المشتقة الاولى لمعامل الانضغاطية

$$B' = \frac{\partial B}{\partial P} \quad (4.4)$$

في حالة الاتزان نجد ثابت الشبكة يوافق القيمة الحدية الدنيا للطاقة.

النتائج المتحصل عليها لثابت الشبكة البلورية $a(A^\circ)$ ، معامل الانضغاطية β والمشتقة الأولى لمعامل الانضغاطية β' والحجم V مسجلة في الجدول (2.4):

| النتائج التجريبية | LDA | GGA | الثوابت | السبائك | X |
|-------------------|---------------|---------------|----------------|------------------------|------|
| 6.09593 | 6.0542 | 6.2191 | $a (A^\circ)$ | GaSb | 0 |
| | 374.3753 | 405.7991 | V | | |
| | 54.3582 | 42.4014 | B (GPa) | | |
| | 5.0692 | 4.9405 | B' | | |
| | -16839.046624 | -16855.554791 | $E_{min} (Ry)$ | | |
| 6.32750 | 6.0649 | 6.2192 | $a (A^\circ)$ | $Al_{0.25}Ga_{0.75}Sb$ | 0.25 |
| | 1505.4347 | 1623.2953 | V | | |
| | 53.9676 | 45.5045 | B (GPa) | | |
| | 4.8474 | 5.1083 | B' | | |
| | -63956.827369 | -64019.099286 | $E_{min} (Ry)$ | | |
| 6.1355 | 6.1113 | 6.2285 | $a (A^\circ)$ | AlSb | 1 |
| | 385.0644 | 407.6412 | V | | |
| | 54.6977 | 46.5474 | B (GPa) | | |
| | 4.6482 | 4.7184 | B' | | |
| | -13440.222799 | -13452.954672 | $E_{min} (Ry)$ | | |

الجدول (2.4): قيم كل من ثابت الشبكة $a(A^\circ)$ و معامل الانضغاطية β و المشتقة الأولى لمعامل الإنضغاطية β' ، لسبائك $Al_xGa_{1-x}Sb$.

وكانت النتائج المتحصل عليها كالتالي:

بالنسبة للسبائك GaSb ، $Al_{0.25}Ga_{0.75}Sb$ و AlSb عند الانتقال من x يساوي 0 الى 1

- كانت نتائج الشبكة البلورية $a(A^\circ)$ جيدة بالمقارنة مع القيم النظرية.

- عند الانتقال من $x=0$ الى $x=1$ نلاحظ تزايد في ثابت الشبكة البلورية و معامل الإنضغاطية.

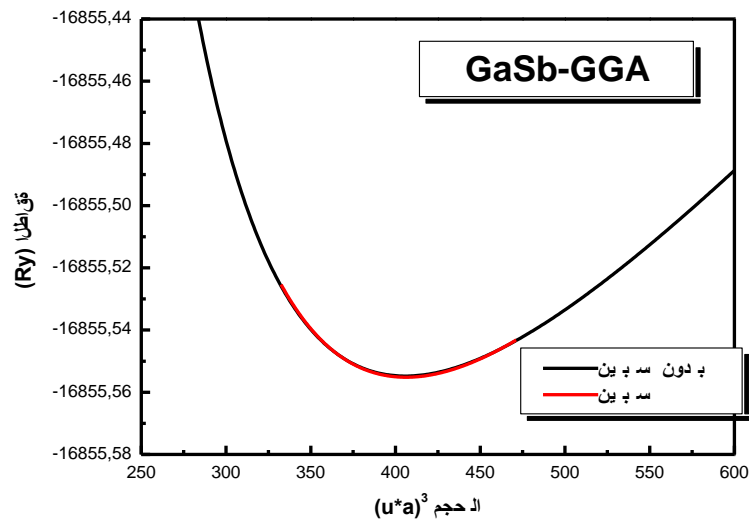
- أما عندما تكون $Al_{0.25}Ga_{0.75}Sb$ نلاحظ قيمة ثابت الشبكة البلورية و معامل الانضغاطية تتوسط القيم للسبائك GaSb ، AlSb.

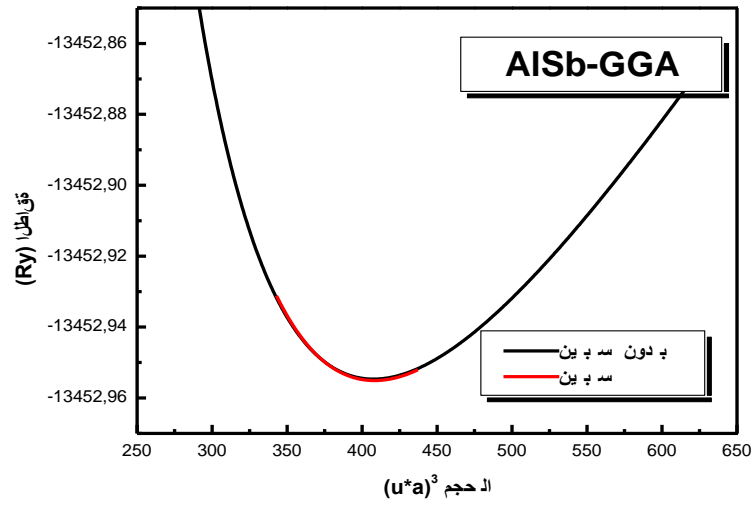
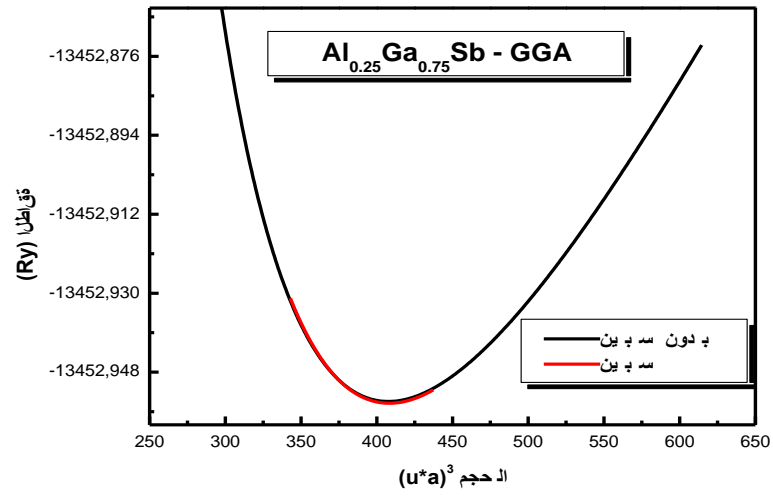
2.3.4 دراسة استقرار سبائك $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Sb}$:

❖ الاستقرار في حالة (سبين/ بدون سبين):

قمنا بحساب الطاقة الكلية بدلالة الحجم من اجل السبائك $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Sb}$ باستعمال تقريب GGA و LDA في حالة استقطاب (سبين/ بدون سبين) من الشكل (2-4) و (3-4) نجد أن الحالة الأكثر استقرارا هي حالة بدون سبين (غير مغناطيسية).

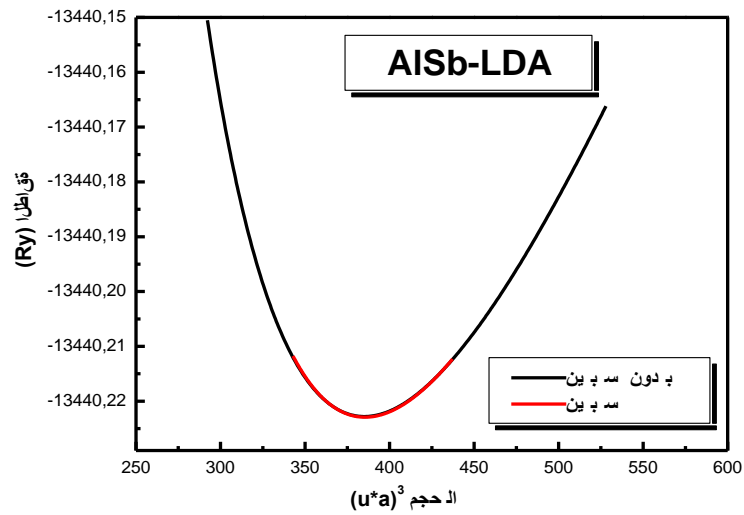
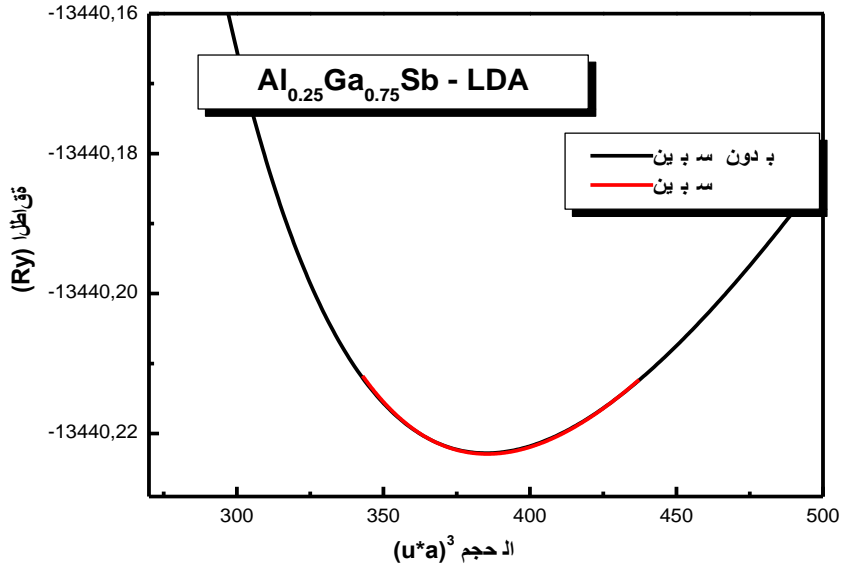
✓ باستعمال تقريب GGA:

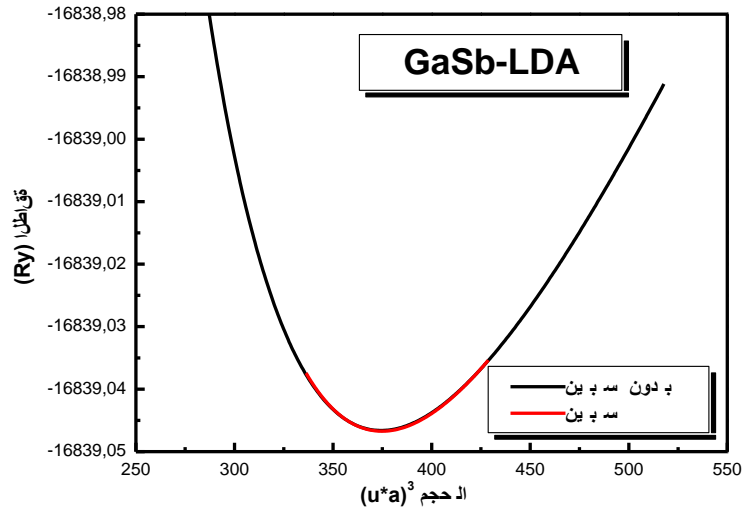




الشكل (2.4): تغير الطاقة الكلية بدلالة الحجم لسبائك $Al_xGa_{1-x}Sb$ من اجل $x=0,0.25,1$ باستعمال تقريب GGA.

باستعمال تقريب LDA:

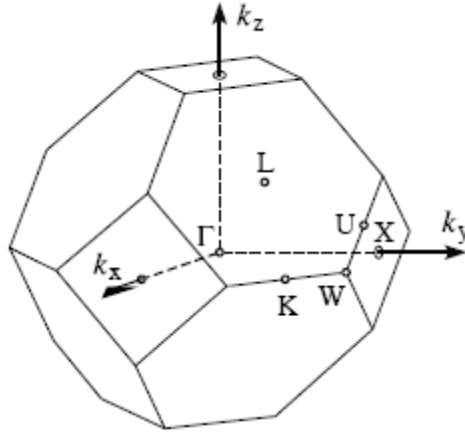




الشكل (3.4): تغير الطاقة الكلية بدلالة الحجم لسبائك $Al_xGa_{1-x}Sb$ من اجل $x=0,0.25,1$ باستعمال تقريب LDA.

4.4 الخصائص الالكترونية:

اهمية الخصائص الالكترونية في المادة تسمح لنا بتحليل وفهم طبيعة الروابط التي تتشكل بين العناصر المختلفة للمادة ، وتشمل هذه الخصائص (عصابات الطاقة، كثافة الشحنة وكثافة الحالة). هذه العصابة تمثل في المنطقة بريليون الاولى للبنية CFC (F-43m) بالشبكة المعكوسة وفق خطوط واصلة بين النقاط عالية التناظر موضحة في الشكل (4.4):



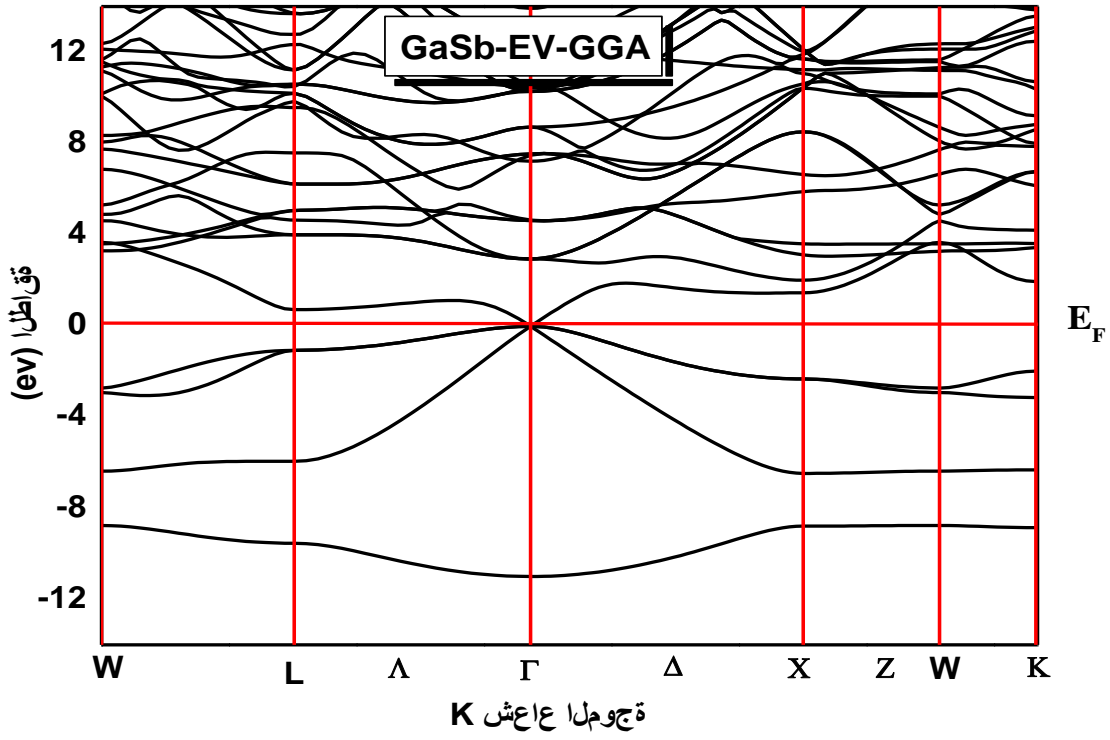
الشكل (4-4) : يمثل منطقة بريليون الاولى CFC

1.4.4 عصابة الطاقة:

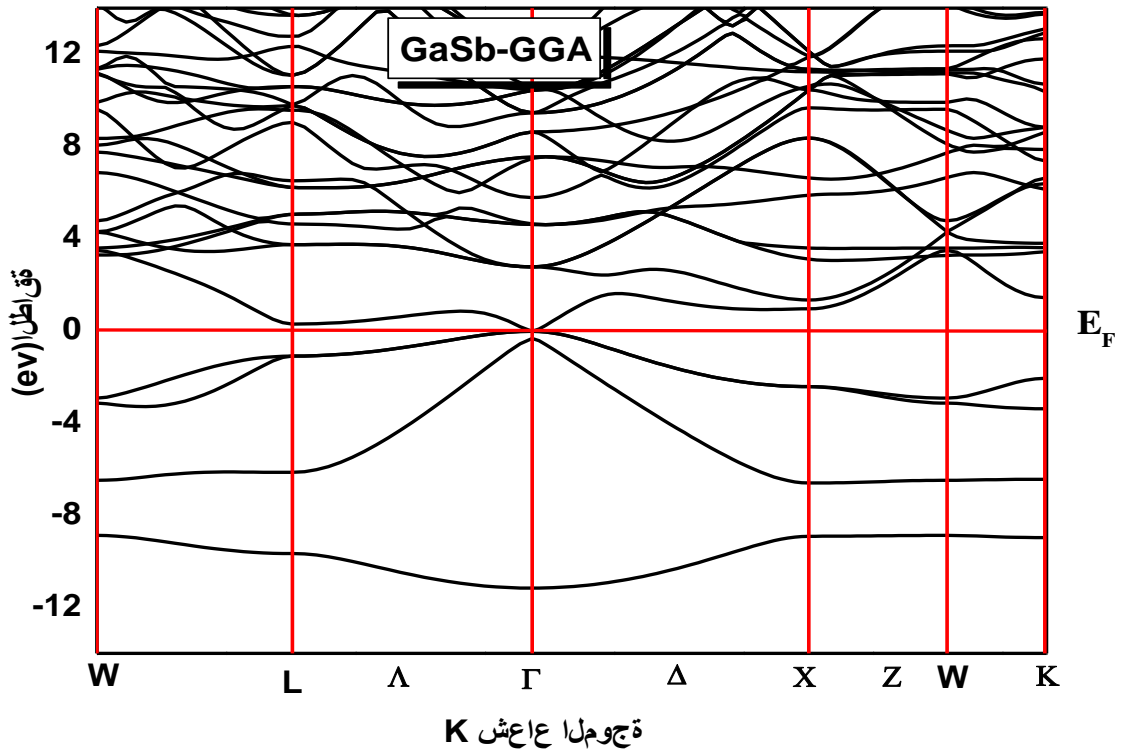
نقوم بدراسة تغيرات الطاقة للإلكترون بدلالة شعاع الموجي K في الفضاء المعكوس ، لا يجاد المانع الطاقي الذي يمثل الفرق بين القيمة الحدية العظمة لعصابة التكافؤ والقيمة الحدية الصغرى لعصابة النقل في نفس النقطة او نقطتين مختلفتين.

1.1.4. مركب GaSb:

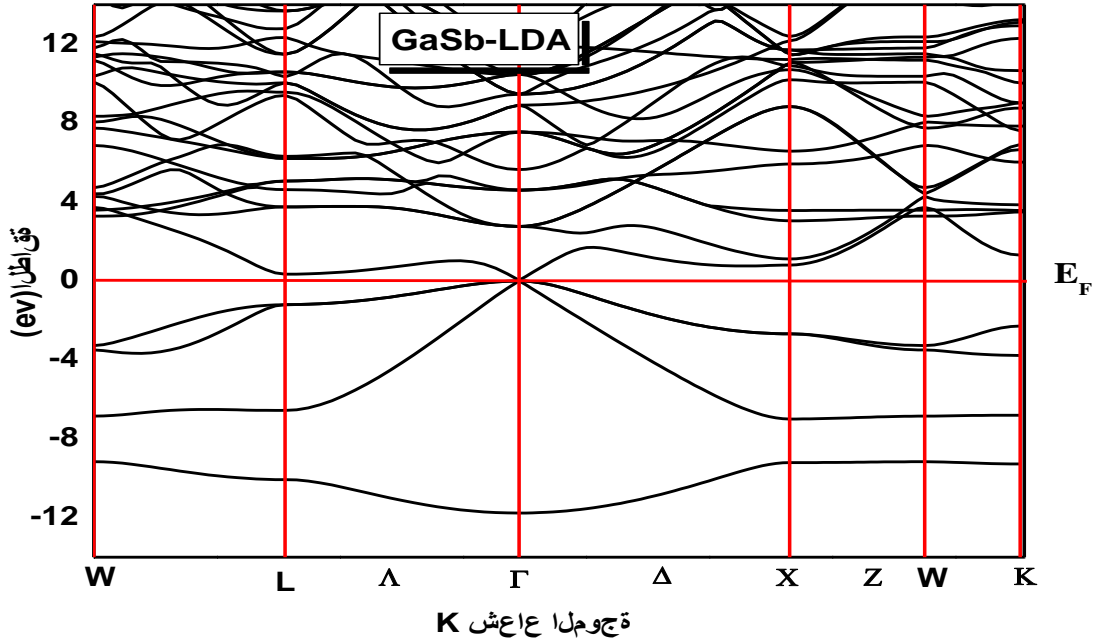
تحصلنا على عصابة الطاقة وفق خطوط عالية التناظر في منطقة بريليون للمركب GaSb وذلك في تقريبات GGA، LDA و كما هو موضح في الشكل (6.4).



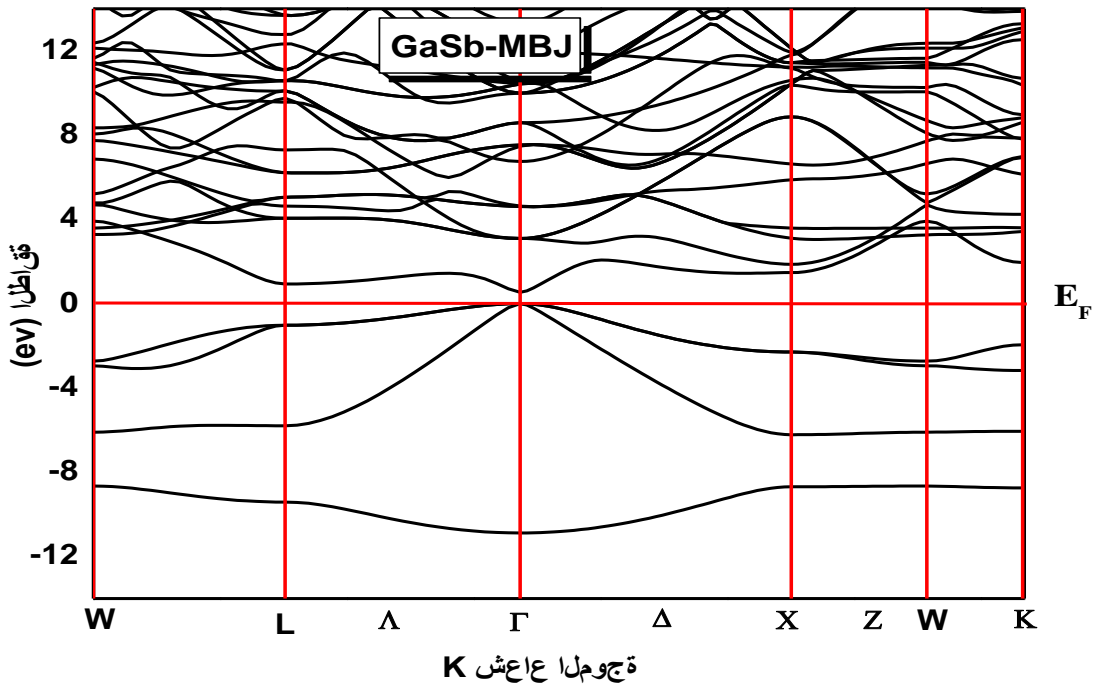
-a-



b



- C -

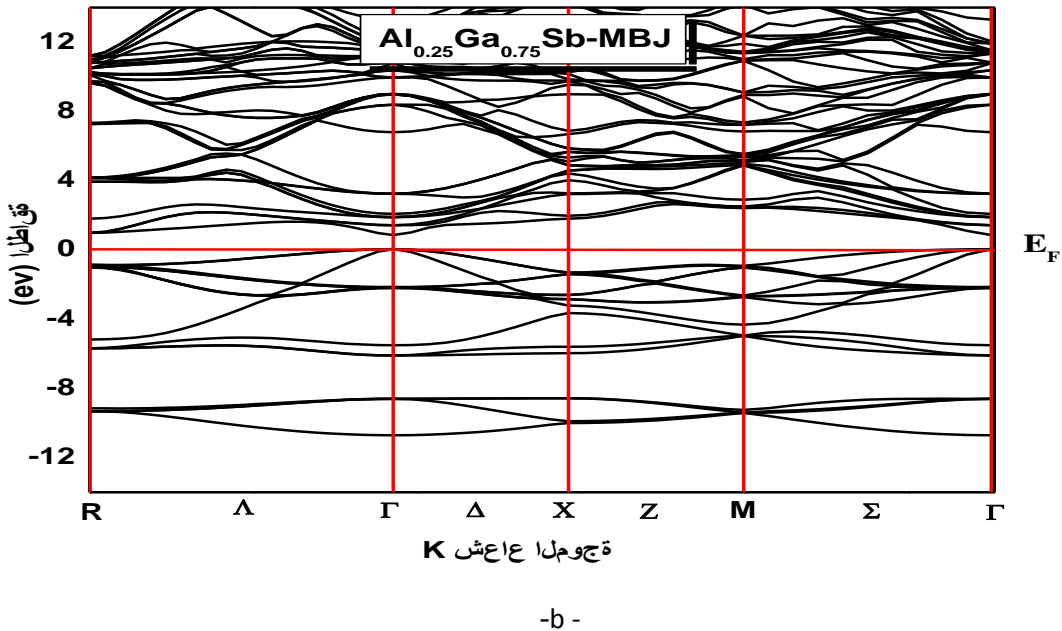
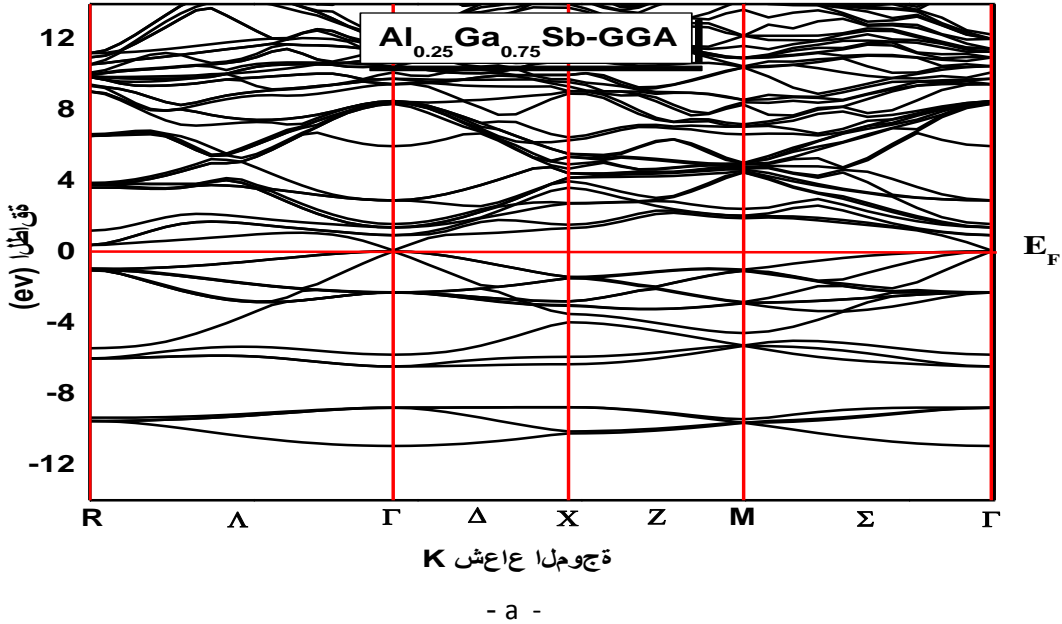


- d -

الشكل (5.4): عصابة الطاقة لسبيكة GaSb المحسوبة في التقريبات EV-GGA(a)، GGA(b)، LDA (c) و mBJ(d)

2.1.4.4 سبيكة $Al_{0.25}Ga_{0.75}Sb$:

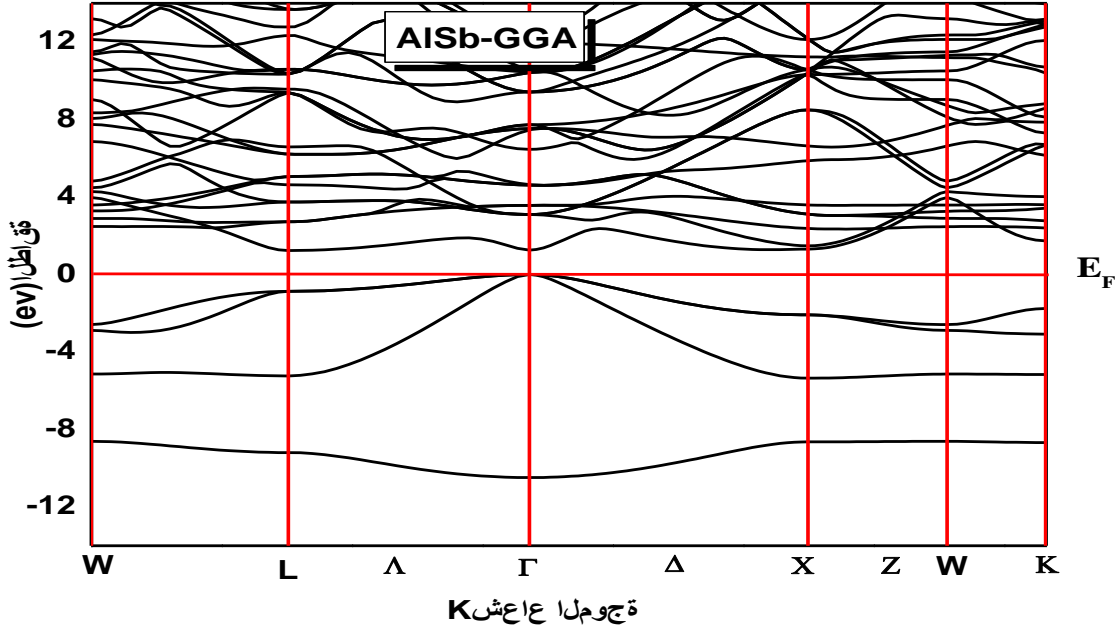
تحصلنا على عصابة الطاقة وفق خطوط عالية التناظر في منطقة بريليون للمركب $Al_{0.25}Ga_{0.75}Sb$ وذلك في تقريب GGA و mBJ كما هو موضح في الشكل (6.4).



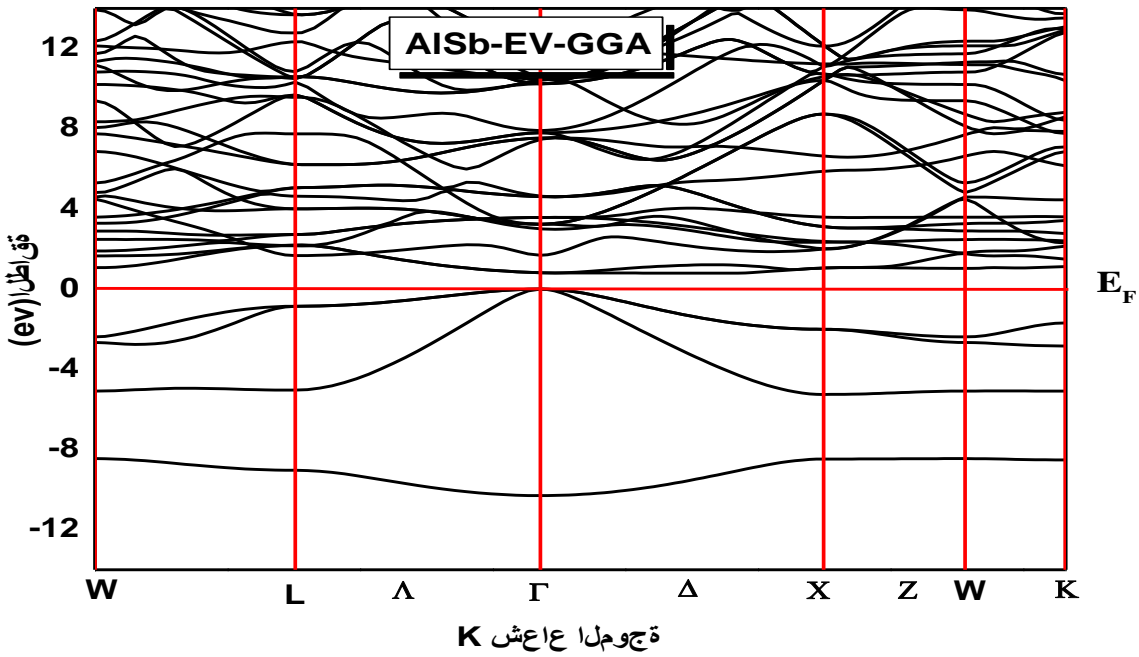
الشكل (6.4): عصابة الطاقة لسبيكة $Al_{0.25}Ga_{0.75}Sb$ المحسوبة في التقريبات GGA(a) و mBJ(b).

3.1.4.4 مركب AISb:

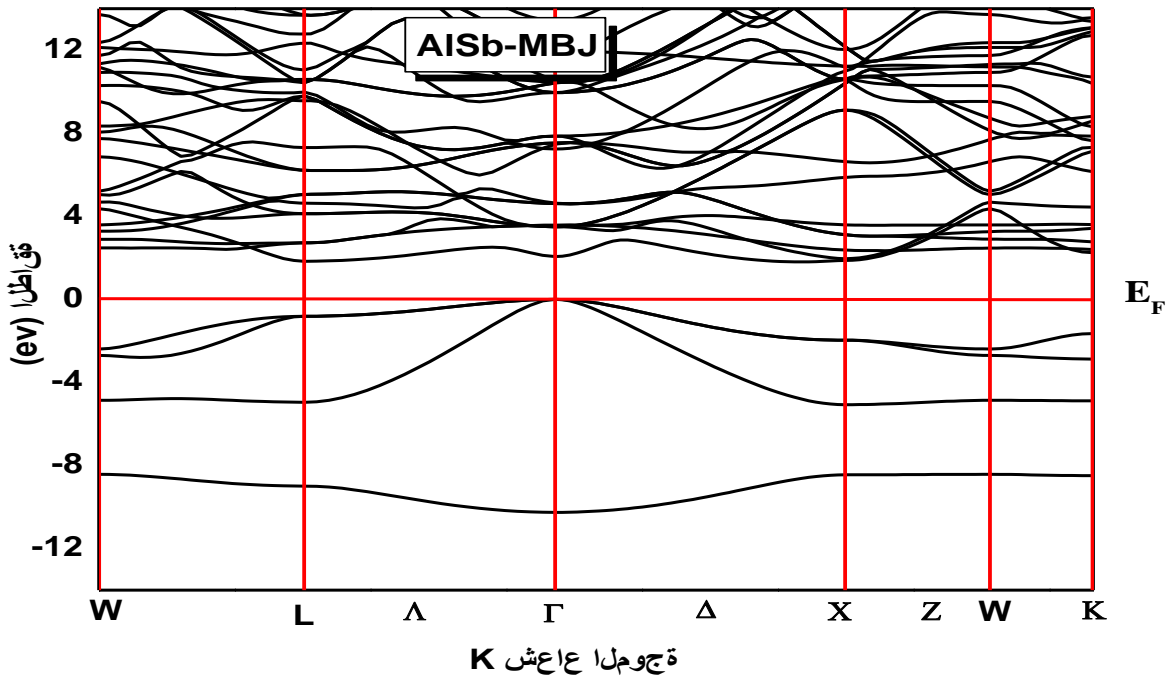
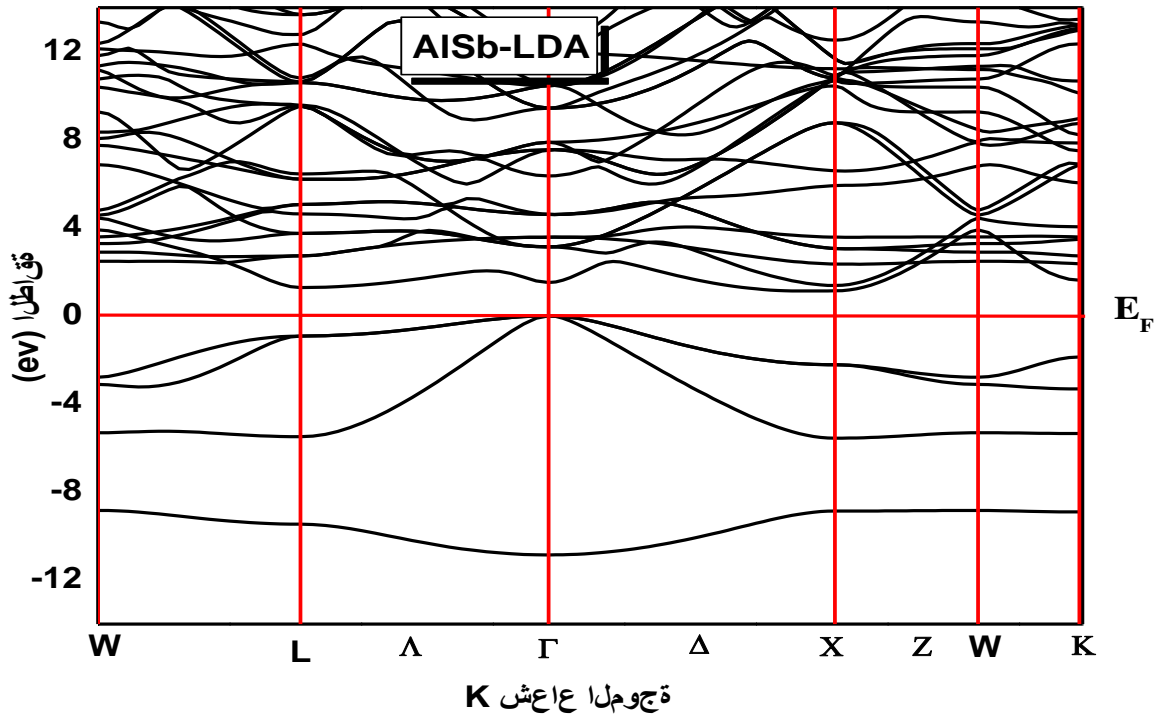
تحصلنا على عصابة الطاقة وفق خطوط عالية التناظر في منطقة بريليون للمركب AISb وذلك في تقريب GGA، LDA، EV-GGA و mBJ كما هو موضح في الشكل (7.4).



-a-



-b-



الشكل (7.4): عصابة الطاقة لسبيكة AISb المحسوبة في التقريبات GGA(a)، EV-GGA(b)،

LDA (c) ، mBJ(d) ،

حسب التمثيل البياني لعصابات الطاقة المبينة في الاشكال (4-5)، (4-6) و (4-7) نجد النتائج التالية :

وجدنا أن سبيكة AISb لديها خاصية نصف ناقل مهما كان التقريب المستعمل GGA و-EV, GGA mBJ وبانتقال غير مباشر (مانع طاقي غير مباشر (L-Γ)).
اما في التقريب المستعمل LDA للمركب السابق له خاصية نصف ناقل وبانتقال غير مباشر (مانع طاقي غير مباشر (X-Γ)).

وجدنا أن سبيكة $Al_{0.25}Ga_{0.75}Sb$ لديها خاصية ناقل في التقريب المستعمل GGA اما في التقريب المستعمل mBJ للمركب السابق له خاصية نصف ناقل وبانتقال مباشر (مانع طاقي مباشر (Γ-Γ)).

وجدنا أن سبيكة GaSb لديها خاصية ناقل مهما كان التقريب المستعمل GGA, EV-GGA و LDA. اما في التقريب المستعمل mBJ للمركب السابق له خاصية نصف ناقل وبانتقال مباشر (مانع طاقي مباشر (Γ-Γ)).

قيمة المانع الطاقي الموجودة في لسبائك $Al_xGa_{1-x}Sb$ الموضحة في الجدول أدناه:

| E _g (eV) | | | | السبائك | X |
|---------------------|---------|---------|---------|------------------------|------|
| mBJ | LDA | GGA | EV-GGA | | |
| 0.54294 | / | / | / | GaSb (عملنا) | 0 |
| 0.72 [6] | / | / | / | GaSb (التجريبي) | |
| 0.81634 | / | / | / | $Al_{0.25}Ga_{0.75}Sb$ | 0.25 |
| 1.83845 | 1.13421 | 1.23728 | 1.67093 | AISb (عملنا) | 1 |
| 2.27 [6] | / | / | / | AISb (التجريبي) | |

الجدول (3.4): قيمة المانع الطاقي من أجل سبائك $Al_xGa_{1-x}Sb$ في التقريب GGA, EV-GGA, LDA و mBJ.

نلاحظ ان قيمة المانع الطاقي الموجودة في لسبائك $Al_xGa_{1-x}Sb$ أثناء استبدال قيمة X ب LDA و EV-GGA , GGA (X=0.25, X=0) تساوي الصفر في التقريبات بينما في التقريب mBJ فان ان قيمة المانع الطاقي تساوي 0.54294 و 0.81634 على الترتيب اما أثناء استبدال قيمة X ب $X=1$ ان قيمة المانع الطاقي موجودة ويزداد بشكل ملحوظ في التقريبات GGA, LDA , EV-GGA و mBJ على الترتيب.

5.4- كثافة الحالات الالكترونية:

من اجل معرفة اصل بنية عصابات الطاقة الالكترونية، قمنا بحساب كثافة الحالات الكلية و الجزئية لسبائك $Al_xGa_{1-x}Sb$ حيث استخدمنا لحسابها GGA , LDA و mbj و EV-GGA. \checkmark مركب GaSb: يبين الشكل (4-8) كثافة الحالات الكلية و الجزئية لسبيكة GaSb لكل من التقريبات GGA , EV-GGA , LDA و mBJ.

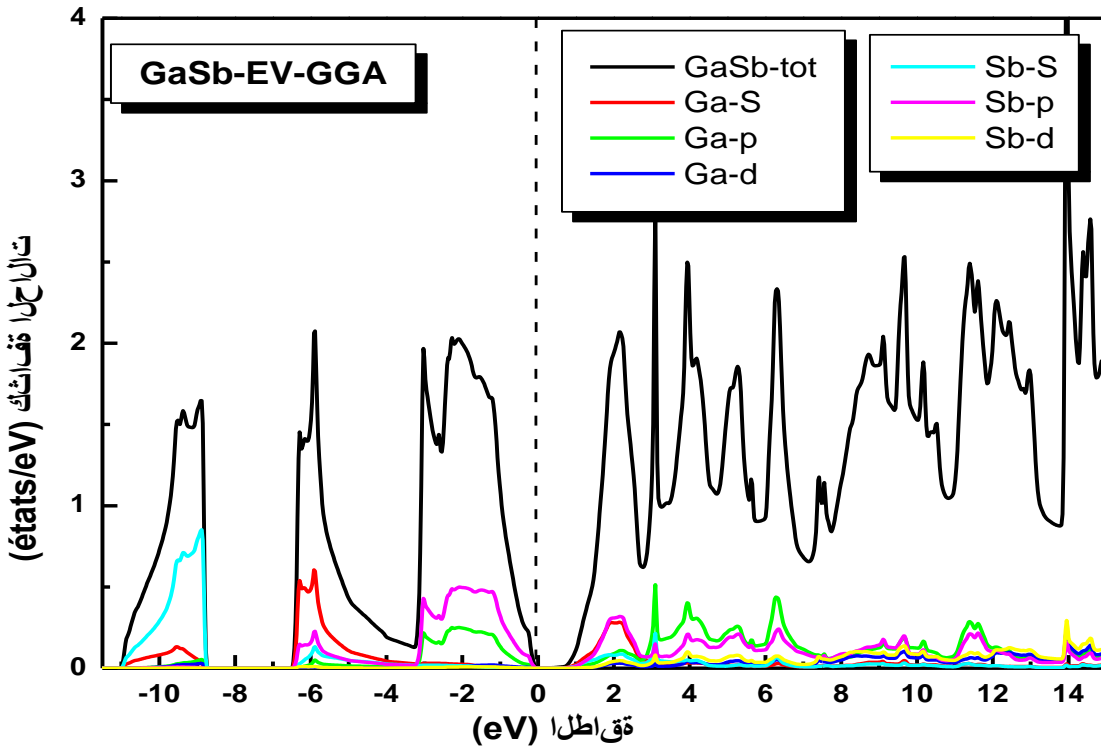
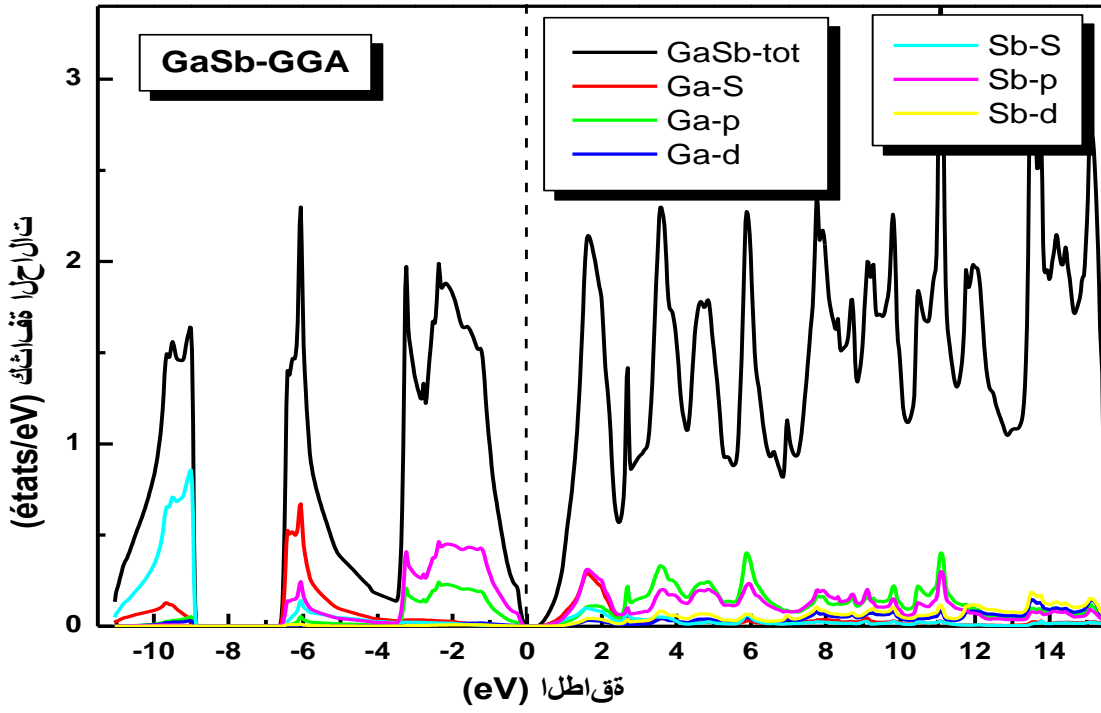
حسب التمثيل البياني لكثافة الحالات الكلية و الجزئية لمركب GaSb المبينة في الشكل (4-8) نجد النتائج التالية:

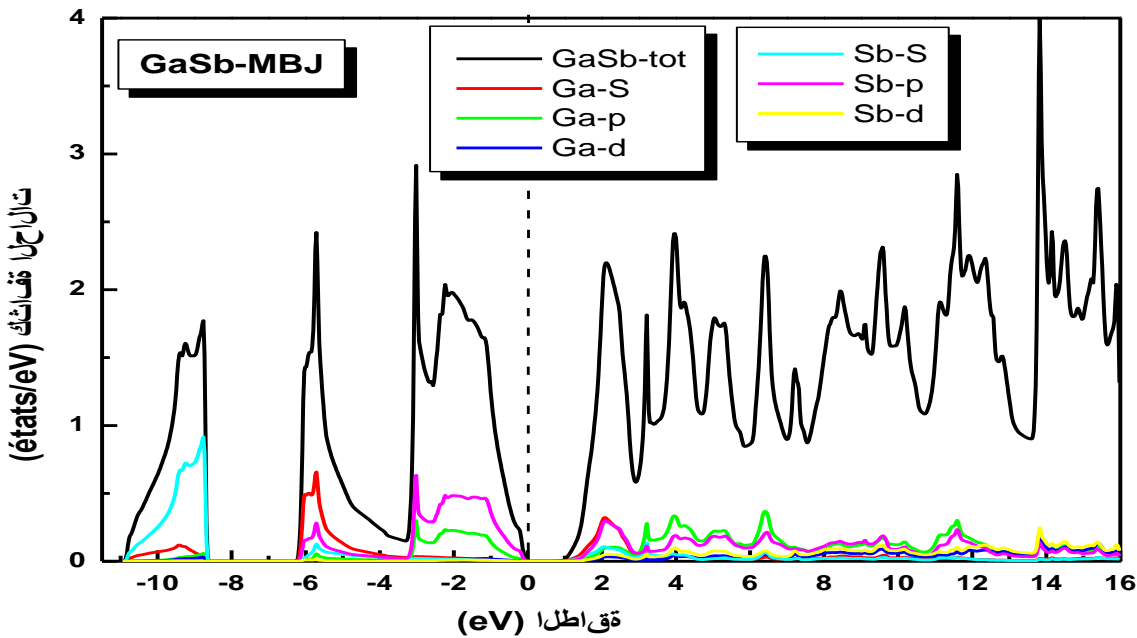
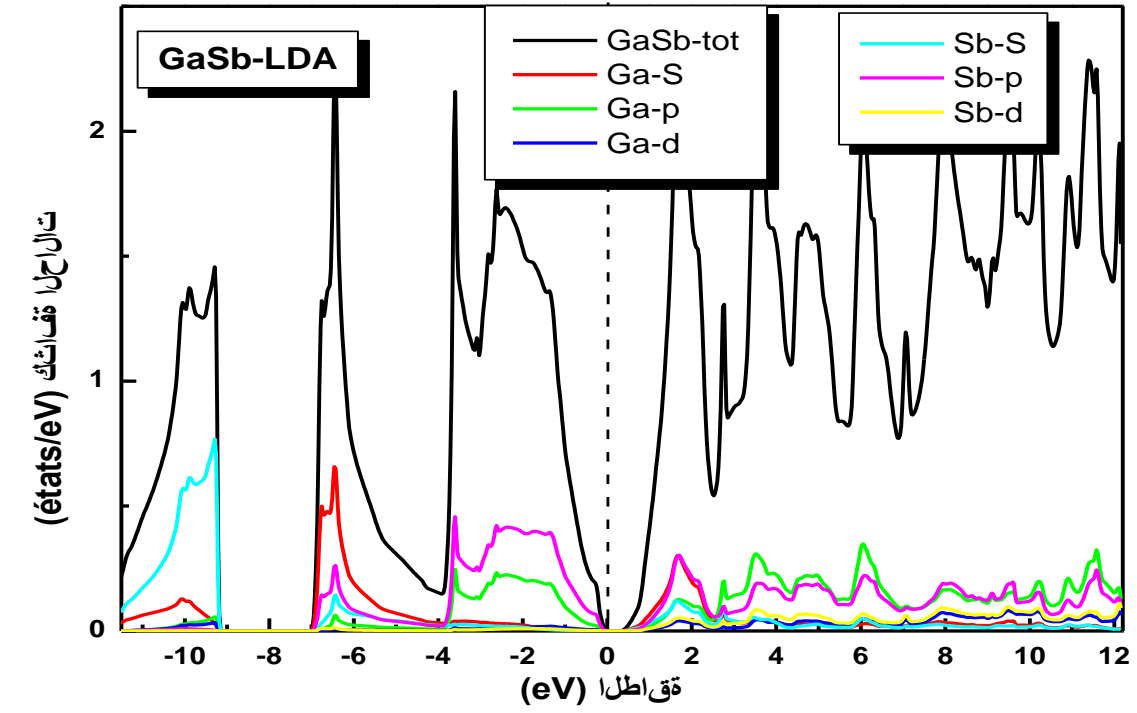
نلاحظ أن كل التقريبات GGA , LDA , EV-GGA و mBJ لديها نفس الشكل العام ، مع وجود منطقتين لعصابة التكافؤ يفصل بينهما فجوة طاقة

المنطقة 1 بين (-9eV و -11eV) يعود تشكل هذه العصابة إلي تجمع إلكترونات السوي الطاقى S لذرات Sb و نجد مساهمة منخفضة جدا من المدار S لذرات Ga

المنطقة 2 بين ($-E_f$ و -6eV) يعود تشكل هذه العصابة إلي تجمع إلكترونات السوي الطاقى P لذرات Sb و من المدار S لذرات Ga و نجد مساهمة منخفضة من المدار P لذرات Ga

المنطقة 3 بين (2eV و 14eV) يعود تشكل هذه العصابة إلي تجمع إلكترونات السوي الطاقى S لذرات Ga و Sb و من المدار P لذرات Ga و Sb و من المدار d لذرات Ga و Sb لكن بمساهمة منخفضة جدا





الشكل (8.4): كثافة الحالة للمركب GaSb في كل من التقريبات LDA، GGA، EV-GGA و mBJ.

✓ الشبكة $Al_{0.25}Ga_{0.75}Sb$:

يبين الشكل (9. 4) كثافة الحالات الكلية و الجزئية للشبكة $Al_{0.25}Ga_{0.75}Sb$ لكل من التقريبات GGA و mBJ.

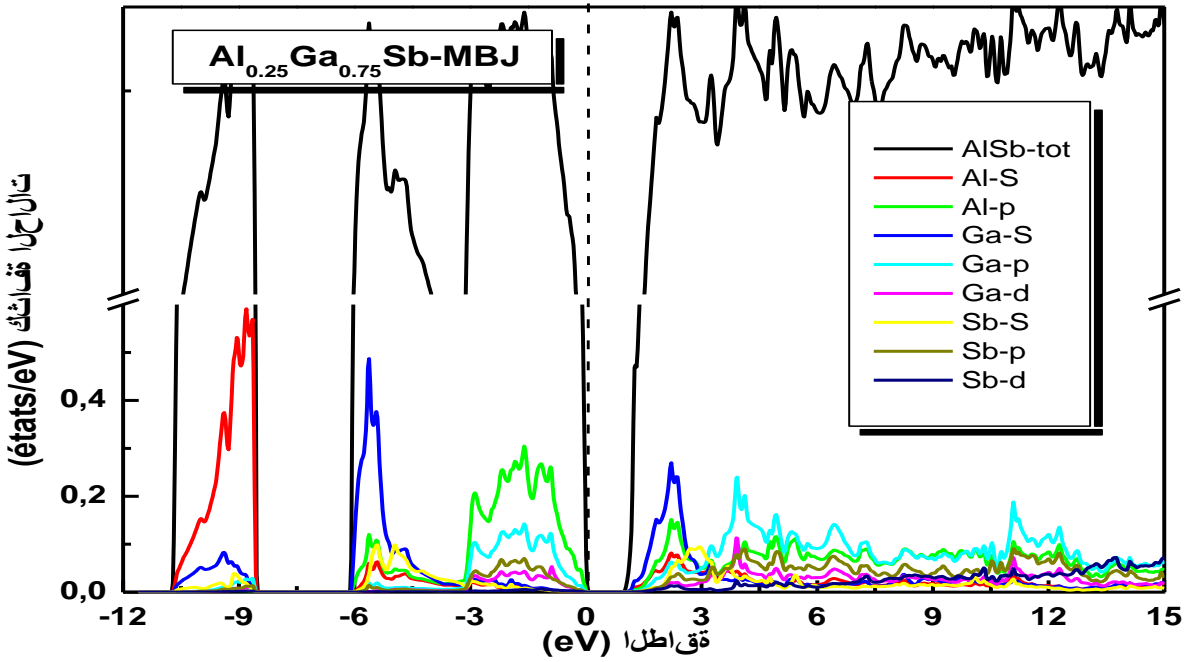
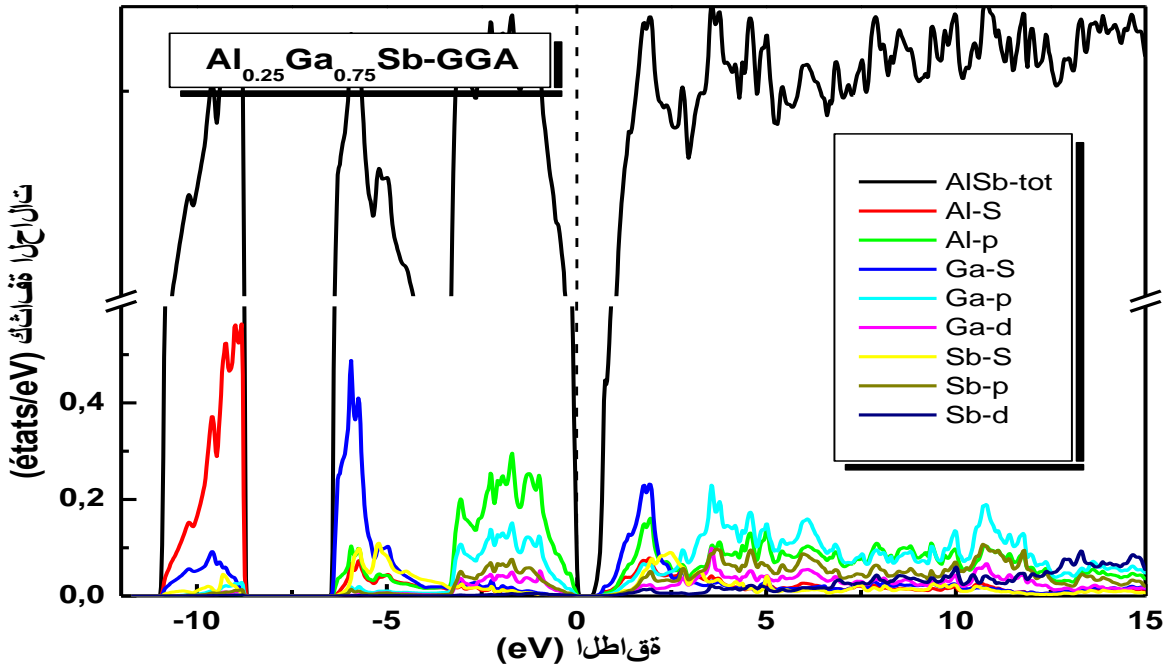
حسب التمثيل البياني لكثافة الحالات الكلية و الجزئية لشبكة $Al_{0.25}Ga_{0.75}Sb$ المبينة في الشكل (8-3) نجد النتائج التالية:

نلاحظ أن كل التقريبات GGA و mBJ لديها نفس الشكل العام ، مع وجود منطقتين لعصابة التكافؤ يفصل بينهما فجوة طاقة

المنطقة 1 بين ($-9eV$ و $-11eV$) يعود تشكل هذه العصابة إلي تجمع إلكترونات السوي الطاقى S لذرات Al و نجد مساهمة منخفضة جدا من المدار S لذرات Ga

المنطقة 2 بين ($-E_f$ و $-6eV$) يعود تشكل هذه العصابة إلي تجمع إلكترونات السوي الطاقى S لذرات Ga و من المدار P لذرات Al و نجد مساهمة منخفضة من المدار P لذرات Ga

المنطقة 3 بين ($1eV$ و $13eV$) يعود تشكل هذه العصابة إلي تجمع إلكترونات السوي الطاقى S لذرات Sb و Ga و من المدار P لذرات Al و Ga ,Sb و من المدار d لذرات Ga و Sb ولكن بمساهمة منخفضة جدا



الشكل (9.4): كثافة الحالة لسبيكة $\text{Al}_{0.25}\text{Ga}_{0.75}\text{Sb}$ في كل من التقريبات GGA و mBJ.

✓ مركب AISb:

يبين الشكل (4. 10) كثافة الحالات الكلية و الجزئية للمركب AISb لكل من التقريبات EV- GGA , LDA , GGA و mBJ.

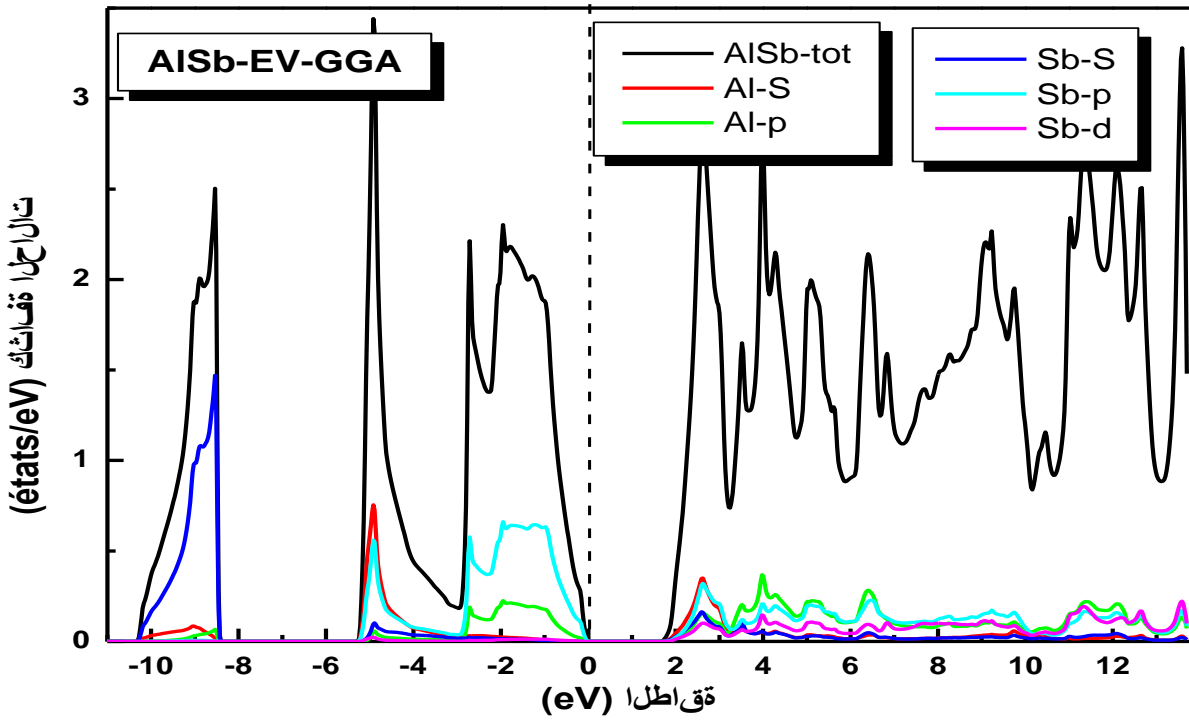
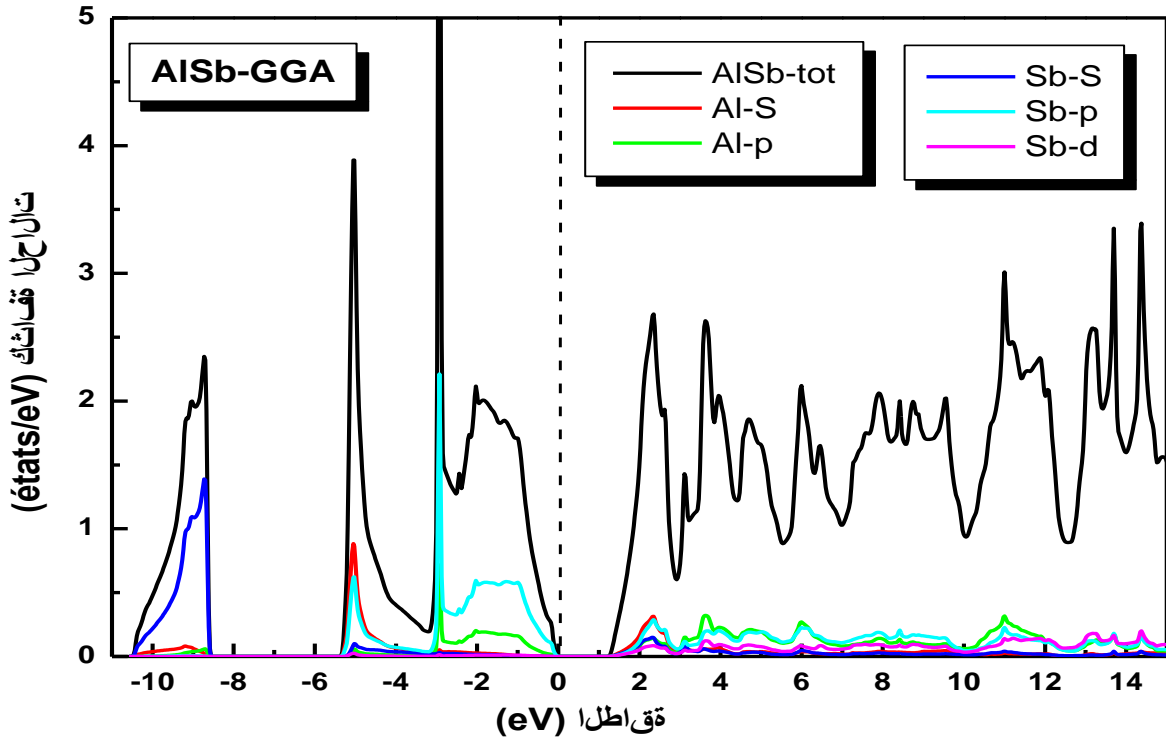
حسب التمثيل البياني لكثافة الحالات الكلية و الجزئية لمركب AISb المبينة في الشكل (4-8) نجد النتائج التالية:

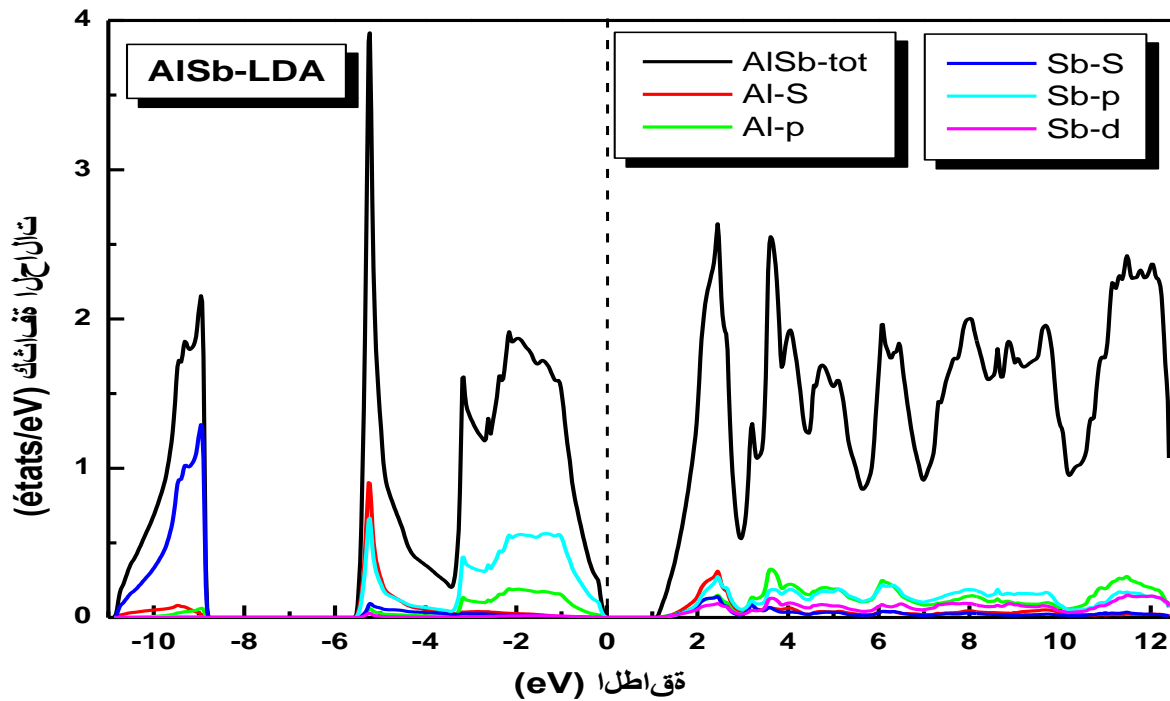
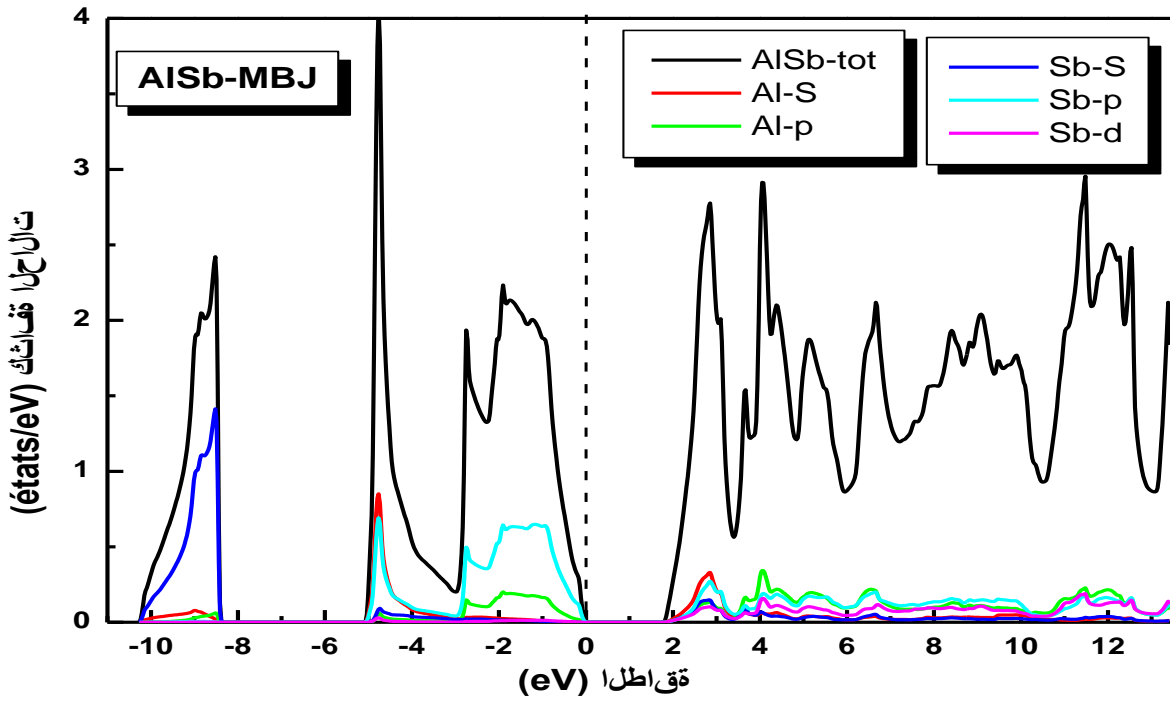
نلاحظ أن كل التقريبات GGA , LDA , EV-GGA و mBJ لديها نفس الشكل العام ، مع وجود منطقتين لعصابة التكافؤ يفصل بينهما فجوة طاقة

المنطقة 1 بين (-9eV و -11eV) يعود تشكل هذه العصابة إلي تجمع إلكترونات السوي الطاقى S لذرات Sb و نجد مساهمة منخفضة جدا من المدار S لذرات Al

المنطقة 2 بين ($-E_f$ و -5eV) يعود تشكل هذه العصابة إلي تجمع إلكترونات السوي الطاقى P لذرات Sb و من المدار S لذرات Al و نجد مساهمة منخفضة من المدار P لذرات Al

المنطقة 3 بين (2eV و 13eV) يعود تشكل هذه العصابة إلي تجمع إلكترونات السوي الطاقى S لذرات Sb و Al و من المدار P لذرات Sb و Al و من المدار d لذرات Sb ولكن بمساهمة منخفضة جدا.





الشكل (10.4): كثافة الحالة لمركب AISb في كل من التقريبات GGA، EV-GGA و LDA و mBJ.

المراجع:

- [1] L. Hedin and B. I. Lundqvist, j. phys. C 4, 2064 (1971).
- [2] P. Blaha, K. Schwarz, P. sorantin, and S. B. TRICKEY? Comput. Phys. Commun. 59,399 (1990)
- [3] J. P. Perdew, S. Burke et M. Ernzerhof, Phys. Lett. 77, 3865 (1996).
- [4] F. Tran and P. Blaha, Phys Rev.lett 102.226401 (2009).
- [5] F.D. Murnaghan, Proc. Natl. Acad. Sci. USA 30 (1944) 244.
- [6] Sadao adachi. properties of semi-conductor aloy (2009) john. wieley& sons .ltd. isbn.

قائمة الاشكال

- الشكل(1.1): يمثل مخطط حزم الطاقة للمواد الموصلة وأشباه الموصلات والعوازل.....2
- الشكل(2.1): الفاصل الطاقوي بين عصابة التكافؤ و النقل.....3
- الشكل(3.1): يمثل مخطط حزمة الطاقة في مادة شبه موصلة.....3
- الشكل(4.1): يوضح حركة الفجوة في شبه موصل.....4
- الشكل(5.1): التطعيم بالشوائب خماسية التكافؤ لتكوين البلورة السالبة N5
- الشكل(6.1): التطعيم بالشوائب ثلاثية التكافؤ لتكوين البلورة الموجبة.....6
- الشكل(7.1): يوضح شكل لوحة شمسية7
- الشكل(1.2): مخطط لنظرية دالية الكثافة DFT.....19
- الشكل (1.3): كمون « Muffin-Tin » (MT).....23
- الشكل(2.3): عدة نوافذ طاقية.....33
- الشكل (3.3): بنية برنامج Wien2K.....35
- الشكل (1.4): يمثل البنية البلورية لسبيكة $Al_xGa_{1-x}Sb$ من اجل $x=0,0.25,1$39
- الشكل (2.4): تغير الطاقة الكلية بدلالة الحجم لسبائك $Al_xGa_{1-x}Sb$ من اجل $x=0,0.25,1$ باستعمال تقريب GGA.....44
- الشكل (3.4): تغير الطاقة الكلية بدلالة الحجم لسبائك $Al_xGa_{1-x}Sb$ من اجل $x=0,0.25,1$ باستعمال تقريب LDA.....46
- الشكل (4-4): يمثل منطقة بريليون الاولى CFC.....46
- الشكل (5.4): عصابة الطاقة لسبيكة GaSb المحسوبة في التقريبات EV-GGA(a)، GGA(b)، LDA (c) و mBJ(d).....49
- الشكل (6.4): عصابة الطاقة لسبيكة $Al_{0.25}Ga_{0.75}Sb$ المحسوبة في التقريبات GGA(a) و mBJ(b).....50

الشكل (7.4): عصابة الطاقة لسبيكة AlSb المحسوبة في التقريبات GGA(a)، EV-
52..... mBJ(d) و LDA (c)، GGA(b)

الشكل (8.4): كثافة الحالة للمركب GaSb في كل من التقريبات LDA، GGA و
56.....mBJ

الشكل (10.4): كثافة الحالة لمركب AlSb في كل من التقريبات LDA، GGA و
58.....mBJ

قائمة الجداول

الجدول (1.4): قيم كل من K_{\max} و R_{mt} ، لسبائك $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Sb}$ حسب تقريب GGA

41.....LDA

الجدول (2.4): قيم كل من ثابت الشبكة $a(\text{Å})$ و معامل الإنضغاطية β و المشتقة الأولى لمعامل الإنضغاطية β' ، لسبائك $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Sb}$.

42.....

الجدول (3.4): قيمة المانع الطاقى من أجل سبائك $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Sb}$ في التقريب EV- GGA

53.....mBJ و GGA , LDA

خلاصة عامة :

في هذا العمل قمنا بدراسة الخصائص البنيوية مثل ثابت الشبكة $a(A^\circ)$ معامل الإنضغاطية B والمشتقة الأولى لهذا المعامل B' وكذا الإستقرار البنيوي، الخصائص الإلكترونية مثل بنية عصابة الطاقة كثافة الحالات الكلية و الجزئية لسبائك $Al_xGa_{1-x}Sb$ من اجل (1 و 0.25 و 0) $x=0$

إعتمدنا في الحسابات على طريقة الموجة المستوية المتزايدة خطياً، المدمجة في برنامج wien2k في الإطار العام لنظرية الكثافة الدالية و ذلك في كل من التقريبي التدرج المعمم (GGA) وتقريب المعدل لبريك جونسن (mBJ) من أجل تحسين الخصائص الإلكترونية.

النتائج المبدئية لعملنا هذا مبينة كما يلي:

❖ كانت نتائج جيدة لثابت لشبكة البلورية $a(A^\circ)$ مقارنة مع القيم النظرية لكل من سبائك $Al_xGa_{1-x}Sb$ من اجل (1 و 0.25 و 0) $x=0$ وتم تحديد معامل الإنضغاطية B والمشتقة الأولى لمعامل الإنضغاطية B' حيث لم يثبت أي حساب نظري وقياس تجريبي لهذين الأخيرين.

❖ عند الانتقال من $x=0$ الى $x=1$ نلاحظ تزايد في ثابت الشبكة البلورية و معامل الإنضغاطية.

❖ اما بالنسبة للسبيكة $Al_{0.25}Ga_{0.75}Sb$ تكون قيمة ثابت الشبكة البلورية و معامل الإنضغاطية تتوسط قيم ثابت الشبكة البلورية و معامل الإنضغاطية للمركبات $Alsb$ و $Gasb$

❖ دراسة استقرار سبيكة $Al_xGa_{1-x}Sb$ في حالة بدون سبين جيدة في التقريب GGA

❖ أما في الخصائص الإلكترونية نجد أن المركب $GaSb$ و السبيكة $Al_{0.25}Ga_{0.75}Sb$ لهما خاصية نصف ناقل في التقريب المعدل mBJ عكس التقريبات الاخرى LDA ، GGA و EV-GGA وهذا راجع الى ان في التقريب المبدأ الاول (ab-initon) لايعطي نتائج جيدة بخصوص المانع الطاقى (التقريب mBJ يعطي نتائج قريبة من النتائج التجريبية)

اما للمركب $Alsb$ له خاصية نصف ناقل ذات مانع طاقى مباشر $(\Gamma-\Gamma)$ في كل التقريب المستعمل LDA ، GGA ، mBJ ، EV-GGA.

ان السبيكة $Al_xGa_{1-x}Sb$ لها خاصية نصف ناقلة ذات مانع طاقى مباشر $(\Gamma-\Gamma)$ تستعمل في التطبيقات الكهروضوئية (لانا لديها مانع طاقى معتبر)

وفي كثافة الحالة وجدنا أن خاصية المركبات متعلقة بالمدار d لي Ga، و لي Al المسؤولة على الانتقال بين عصابة النقل و عصابة التكافئ.

Abstract

The Study of structural, electronic properties by the augmented plane wave method (FP-LAPW) based on DFT We used the generalized gradient approximation (GGA) for the exchange-correlation (XC) potential, moreover the alternative form of the modified Becke-Johnson (mBJ) approximations is also used for the band structure calculations, we found better results than approximation approximation (GGA).

These materials are of technological and technical importance because of their direct energy barrier, for which we use in photovoltaic applications these are useful because we do not have theoretical or experimental calculations concerning ternary alloys, unlike binary compounds.

Résumé

Étude les propriétés structurale, électronique par la méthode de calcul des ondes planes augmentées (FP-LAPW) qui se base sur DFT Nous avons utilisé l'approximation du gradient généralisé (GGA) pour le terme du potentiel d'échange et de corrélation (XC) pour calculer les propriétés structurale, bien que, pour les propriétés électroniques (structure du bande (les gaps)) on a utilisé l'approximations modifié Becke-Johnson (mBJ), nous avons trouvé de meilleurs résultats par comparaison approximation (GGA).

Ces matières ont d'importance technologique et technique par sa barrière énergétique directe, pour cela on utilise dans les applications photovoltaïques ces derniers sont utiles car on ne dispose pas des calculs théoriques ou expérimentaux concernant les alliages ternaires contrairement aux composés binaires.

ملخص

قمنا بواسطة طريقة الأمواج المستوية المتزايدة خطيا والكمون الكامل (FP-LAPW) والتي تتركز علي نظرية دالية الكثافة DFT لدراسة الخصائص البنيوية ، الإلكترونية ، في تقريب التدرج المعمم (GGA) لأجل حساب كمون التبادل-الإرتباط (XC) للسبائك $Al_xGa_{1-x}Sb$ وقد إستعملنا تقريب المعدل لبريك-جونسن (mBJ) بغية حساب عصابات الطاقة و كثافة الحالات فوجدنا تحسن نتائج مقارنة بتقريب (GGA).

هذه المواد لديها أهمية تكنولوجية وتقنية وذلك بامتلاكها مانع طاقي مباشر ولذا تستعمل في تطبيقات الخلايا الكهروضوئية وتعتبر النتائج تنبئية وذلك في ظل عدم توفر القياس التجريبي و الحسابات النظرية الخاصة بالسيكة الثلاثية عكس المركبات الثنائية $Alsb, Gasb$.