

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

ميدان: علوم المادة
فرع: الفيزياء
تخصص: فيزياء المواد



كلية: العلوم
قسم: الفيزياء
رقم: PH/MAT/04/2022

مذكرة مقدمة لنيل شهادة الماستر أكاديمي
إعداد الطالبة: جبلاحي بشرى
تحت عنوان

دراسة الخصائص الأساسية لسبائك أنصاف النواقل III-V

تمت المناقشة يوم: / / 2022 أمام اللجنة المكونة من:

رئيسا	جامعة المسيلة	سايب سليمة
مشرفا ومقررا	جامعة المسيلة	بن يطو سامية
ممتحنا	جامعة المسيلة	فراحتية سامية

السنة الجامعية: 2022/2021

تشكرات

أولاً **أشكر الله** على توفيقه لي بإنجاز هذا العمل المتواضع،

كما أتوجه بخالص الشكر الى الأستاذة المشرفة **بن يطو سامية**

لما قدمته من متابعة ونصح وتوجيه،

كما أشكر أعضاء لجنة التحكيم المكونة من الأستاذة الفاضلة

سايب سليمة أستاذة التعليم العالي بجامعة محمد بوضياف

بالمسيلة رئيسة والأستاذة الكريمة **فراحتية سامية** أستاذة محاضرة

أ بجامعة محمد بوضياف لقبولهم تقبيهم هذا العمل.

جبلاحي بشرى

اهداء

الى امي...

الى ابي...

اخوتي... اخواتي

الى كل الأصدقاء ...

إلى كل أولئك الذين ساعدوني من قريب أو بعيد...

جبل احي بشرى

قائمة الجداول

الصفحة	العنوان	الجدول
35	ثابت الشبكة البلورية a_0 ، معامل الانضغاط B_0 ومشتقاته B_0' في الطور زنك بلاند للخليط $\text{InSb}_x\text{P}_{1-x}$ من اجل $0 \leq x \leq 1$	1.3
40	قيم معاملات المرونة C_{ij} في الطور زنك بلاند للخليط $\text{InSb}_x\text{P}_{1-x}$ من اجل $0 \leq x \leq 1$	2.3
43	قيم كل من E ، B/G في الطور زنك بلاند للخليط $\text{InSb}_x\text{P}_{1-x}$ من اجل $0 \leq x \leq 1$	3.3

قائمة الاشكال

الصفحة	العنوان	الشكل
8	يمثل التنفيذ الحسابي لتقريب بورن أوبنهايمر	1.1
11	مخطط يعطي العلاقة بين عدد كبير من عناصر النظام في الحقيقة والتأثيرات المطبقة على النظام لكوهن - شام	2.1
14	خوارزمية حل معادلة كوهن - شام	3.1
23	أنواع مختلفة من شبه الكمون	1.2
26	كمون إلكترونات التكافؤ ودالة الموجة الموافقة له	2.2
28	منطقة بريليون الأولى المرفقة بنقاط عالية التناظر	3.2
32	بنية زنك بلاند (Zinc-blende)	1.3
34	تغيرات الطاقة الكلية بدلالة الحجم للخليط $\text{InSb}_x\text{P}_{1-x}$ في الطور زنك بلاند من اجل $x=0, 0.5, 1$	2.3
36	تغيرات ثابت الشبكة a_0 بدلالة التركيز Sb	3.3
36	تغيرات معامل الانضغاطية B_0 بدلالة التركيز Sb	4.3
41	تغيرات معاملات المرونة C_{ij} في الطور زنك بلاند للخليط $\text{InSb}_x\text{P}_{1-x}$ من اجل $0 \leq x \leq 1$	5.3

الفهرس

الفهرس

شكر

إهداء

- 1.....مقدمة عامة
- 4.....قائمة المراجع

الفصل 1: نظرية الكثافة الوظيفية DFT

- 6.....1. المقدمة
- 7.....1.1. معادلة شرود ينغر للبلورة
- 8.....1.1.1 تقريب يورن - أوبنهايمر (Born-Oppenheimer)
- 9.....2.1.1 تقريب هارترى-فوك (Hartee-Fock)
- 10.....2.1. نظرية الكثافة الوظيفية DFT
- 10.....1.2.1 نظرية هوهنبرغ - كوهن
- 12.....2.2.1 كوهن - شام (Kohn-Sham)
- 14.....3.2.1 حلول معادلة كوهن-شام
- 16.....3.1. تابع تبادل-ارتباط
- 17.....3.1.1 تقريب كثافة الموضع LDA
- 18.....2.3.1 تقريب التدرج المعمم GGA
- 19.....قائمة المراجع

الفصل 2: شبه الكمون والموجة المستوية (PP-PW)

- 22.....2. المقدمة
- 22.....1.2. طريقة شبه الكمون
- 23.....1.1.2 بناء شبه الكمون

24.....	2.1.2. نظرية بلوخ.....
25.....	3.1.2. طريقة الأمواج المستوية.....
26.....	4.1.2. تقريب شبه الكمون.....
27.....	5.1.2. أمثلة عن شبه الكمون.....
27.....	1.5.1.2. الكمون ذو الطويلة المحفوظة.....
28.....	2.5.1.2. الكمون فائق الليونة لفاندربيلت (ultra-soft).....
28.....	3.2. منطقة بريليون الأولى.....
30.....	قائمة المراجع.....

الفصل 3: النتائج والمناقشة

32.....	1. المقدمة.....
32.....	3. 1. طريقة الحساب.....
33.....	2.3. الخصائص البنيوية للخليط $\text{InSb}_x\text{P}_{1-x}$
39.....	3.3. الخصائص المرورية والميكانيكية للخليط $\text{InSb}_x\text{P}_{1-x}$
39.....	1.3.3. حساب خصائص المرونة للخليط $\text{InSb}_x\text{P}_{1-x}$
43.....	2.3.3. حساب الخصائص الميكانيكية للخليط $\text{InSb}_x\text{P}_{1-x}$
45.....	قائمة المراجع.....
47.....	خلاصة عامة.....

مقدمة عامة

مقدمة عامة

تعتبر فيزياء الجسم الصلب من اهم المجالات التي تختص في دراسة الاجسام وتحديد طبيعتها سواء كانت ناقلة، نصف ناقلة او معدنية او غير ذلك، وترتبط دراسة المواد ووصفها وتحديد خصائصها بالتطور التكنولوجي وذلك لاهتمام الباحثين بنوع المادة وأهميتها قبل ادراجها في تكنولوجيا معينة، حيث ان كل خاصية او ميزة لمركب معين تمتلك أهمية في مجال ما.

ومن اهم المواد التي أعطت بعدا اخر للتطور التكنولوجي هي المواد نصف ناقلة فهي تمتلك دورا هاما في تطبيقات عديدة من أشهرها الترانزستور، كما لها دورا هاما في الأبحاث المستقبلية المتعلقة بتصغير حجم الأجهزة مع الزيادة في قدرتها الكهربائية وذلك لما تتمتع به من خصائص تجعل منها أساس لصناعة المركبات الالكترونية والالكترو ضوئية، ... [1]

انصاف النواقل هي مواد تقع بين النواقل والعوازل من حيث الناقلية الكهربائية، تعد مواد عازلة عند درجات الحرارة المنخفضة ولكنها تصبح جيدة التوصيل الكهربائي نوعا ما عند رفع درجة حرارتها، وبالتالي فناقلية انصاف النواقل تتأثر بالحرارة والضوء والمجال المغناطيسي ووجود كميات ضئيلة من الشوائب [2].

ومع مرور الوقت دفع التقدم العلمي علماء الفيزياء الى التركيز على انصاف النواقل من الفصيلة III-V (التي تتكون من عناصر من العمود الثالث والخامس، من الجدول الدوري)، هذه المواد النصف ناقلة فتحت افاق علمية واعدة لعقود من الزمن بسبب تطبيقاتها التكنولوجية في الأجهزة الإلكترو ضوئية العالية الجودة مثل صمامات الليزر التي تعمل في المجال الطيفي الأزرق الفوق البنفسجي والخلايا الشمسية وبالأحرى، الايونية العالية لهذه المركبات تجعلها الأكثر ترشحا للتزواج الالكترو ضوئي والالكتروميكانيكي العال [3].

تتقسم طرق دراسة المواد الى ثلاثة اقسام متنوعة، أولها هي الدراسة التجريبية والتي تعتمد على مواد ومعطيات ومخبر عمل، والطريقة الثانية هي طريقة نصف تجريبية وتعتمد على معطيات قبلية مع القيام ببعض التجارب، وأخيرا الطريقة النظرية وهي من اهم الدراسات في العصر الحديث وذلك لأنها تعتمد على الجانب النظري البحث، وتتم فيه الدراسة عن طريق جهاز الكمبيوتر وبرنامج متخصص مثل ABINIT, VASAP ... [2].

ABINIT هو عبارة عن مجموعة متكاملة من رموز الحاسوب، الهدف منها هو إجراء عمليات حسابية للبنية الإلكترونية، والمواد القائمة على نظرية الكثافة الوظيفية DFT ونظرية الكثافة الوظيفية المضطربة DFPT، وذلك باستخدام طريقة الموجات المستوية PW وشبه الكمون PP وهو برنامج مجاني مفتوح المصدر من المركز الوطني للمحاكاة.

في هذا العمل قمنا بدراسة الخصائص البنيوية والمرونية للخليط $\text{InSb}_x\text{P}_{1-x}$ في الطور زنك بلاندا.. هذه الحسابات تمت باستخدام برنامج Abinit. معتمدين في ذلك على طريقة الكمون الكاذب والموجات المستوية (pp-pw) والتي تركز على نظرية الكثافة الوظيفية (DFT) في تقريب كثافة الموضع LDA لأجل حساب كمون التبادل - الارتباط وتحت تقريب البلورة الوهمية (VCA) وأيضا استعملنا نظرية الكثافة الوظيفية المضطربة (DFPT) لأجل حساب ثوابت المرونة.

وينقسم هذا العمل الى ثلاثة فصول:

في الفصل الأول تناولنا الجانب النظري لهذا العمل وجاء فيه ملخص حول معادلة شرودينغر والتقريبات المختلفة من بينها تقريب بورن - ابنهايمر وتقريب هارترتي وهارترتي - فوك وتطرقنا أيضا لنظرية الكثافة الوظيفية (DFT) والى كل من تقريب كثافة الموضع LDA وتقريب التدرج المعمم GGA.

أما فيما يخص الفصل الثاني قمنا بعرض تفصيلي لطريقة شبه الكمون والموجة المستوية مع ذكر امثلة على ذلك.

وفي الفصل الثالث والأخير قمنا بمناقشة وتفسير مختلف النتائج المتحصل عليها ومقارنتها ببعض

الاعمال النظرية والتجريبية المتوفرة.

وفي الأخير قدمنا خلاصة عامة لمختلف النتائج المتحصل عليها.

قائمة المراجع

[1] P. Arnaud, (chimie physique), édition dunod (2001).

[2] مقدمة في فيزياء الجسم الصلب (الجزء الثاني)، الدكتور عزيز داخل، ديوان المطبوعات الجامعية، (1988).

[3] O. Hildebrandt, wolfgang Kuebart. M. H. Pilkuhn, Applied Physics Letters .37(1980) 801–803.

الفصل 1

نظرية الكثافة الوظيفية

DFT

1. المقدمة:

في بداية القرن العشرين، اكتشف الفيزيائيون أن قوانين الميكانيك الكلاسيكية لا تجعل من الممكن وصف سلوك الجسيمات الصغيرة مثل الإلكترونات [1] أو الانوية أو الجزيئات. تخضع هذه بالفعل لقوانين ميكانيكا الكم والتي ستجعل من الممكن حساب الخصائص الفيزيائية والكيميائية للأنظمة الذرية والجزيئية والتنبؤ بها.

تحتل المحاكاة العددية مكاناً جيداً في العلوم الفيزيائية. فقد أصبح من الشائع الإشارة إليها على أنها "تجارب رقمية". وهي تتعلق بكل من الأساليب التجريبية والنظرية. حيث تقوم بمراقبة سلوك المادة بكل دقة على النطاق المطلوب: في هذا يمكن أن تدعم المحاكاة العددية التجارب. من ناحية أخرى نقارن النتائج التي تم الحصول عليها مع التجارب المتاحة كما تجعل من الممكن التحقق من صحة ملاءمة الأساليب النظرية التي تكون عمليات المحاكاة فيها تطبيقات رقمية فقط.

تعتبر طرق Ab-initio (المبادئ الأولى) أداة قوية في مجال المحاكاة العددية لخصائص المادة الجزيئية أو المكثفة. تستخدم هذه الطرق فقط الثوابت الذرية كمعاملات إدخال لحل معادلة شرودنغر. أما DFT فهي أحد أهم الطرق المستعملة في الفيزياء والكيمياء النظريين وبها نستطيع تحديد خصائص نظام متعدد الجسيمات، وهي واحدة من أكثر الطرق استخداماً في العمليات الحسابية الكمومية بسبب إمكانية تطبيقها على أنظمة متنوعة.

في هذا الفصل، نناقش المستويات المختلفة للتقريب اللازم لحل معادلة شرودنغر لنظام معقد. كما نقوم بتقديم مجموعة من الطرق والتقريبات المختلفة المستعملة في حساب الخصائص الإلكترونية في الأجسام الصلبة، بعد إظهار حدود التقريبات المعتمد بشكل مباشر على دالة الموجة بـ N جسم سنقوم بتقديم نظرية الكثافة الوظيفية (DFT) التي تعتمد على نظرية هوهنبرغ وكوهن (Kohn-Hohenberg)، بعد هذا سنقوم بتقديم شرح خاص لمعادلات كوهن -شام المستعملة في العمل وكذلك أهمية LDA, GGA.

1.1. معادلة شرودنغر للبلورة:

يتكون النظام البلوري من نوعين من الجسيمات: النواة والإلكترونات.

معادلة شرودنغر عبارة عن معادلة تفاضلية جزئية تصف كيفية تغير الحالة الكمية لنظام فيزيائي مع

الزمن، وقد صاغها عالم الفيزياء النمساوي إرفين شرودنغر في 1962 [2].

ان هذه المعادلة معقدة للغاية ولا يمكن حلها تمامًا للأنظمة ذات الحجم الكبير والتي تشتمل على عدد

كبير من الجسيمات، بدون التقريبات المختلفة التي سنقوم بتعدادها في هذا الفصل. ستكون جميع المواقف التي

تمت دراستها ثابتة، لذلك سنركز على معادلة شرودنغر المستقلة عن الوقت لمادة صلبة متضمنة الإلكترونات

والانوية [3] و التي تعطى بالعلاقة .

$$H|\psi\rangle = E|\psi\rangle \quad (1.1)$$

حيث:

E : هي الطاقة الكلية للنظام.

ψ : هي دالة الموجة البلورية.

H : هي الهاميلتونيان.

تتكون البلورة من جزيئات (أيونات وإلكترونات) تتفاعل مع بعضها البعض بواسطة قوى إلكتروستاتيكية

(تجاذب وتنافر) مما يؤدي إلى ظهور ما يسمى بلورة هاميلتونيان، والتي تتم كتابتها على النحو التالي:

$$H = T_e + T_N + V_{e-e} + V_{e-N} + V_{N-N} \quad (1.2)$$

$$T_e = \sum_{i=1}^{N_e} \frac{p_i^2}{2m_i} = \sum - \frac{\hbar^2 (\nabla_i^2)}{2m_i} \quad \text{الطاقة الحركية للإلكترونات}$$

$$T_N = \sum_{\alpha=1}^{N_\alpha} \frac{P_\alpha^2}{2M_\alpha} = \sum_{\alpha=1}^{N_\alpha} - \frac{\hbar^2 (\nabla_\alpha^2)}{2M_\alpha} \quad \text{الطاقة الحركية للأنوية}$$

$$V_{e-e} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i \neq j} \frac{1}{2} \left(\frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \right) \quad \text{طاقة تفاعل إلكترون-إلكترون}$$

$$V_{N-N} = \frac{1}{2} \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{\alpha \neq \beta} \frac{Z_\alpha Z_\beta e^2}{|\vec{R}_\alpha - \vec{R}_\beta|} \quad \text{طاقة تفاعل نواة-نواة}$$

$$V_{e-N} = - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i,\alpha} \frac{e^2 Z_\alpha}{|\vec{r}_i - \vec{R}_\alpha|} \quad \text{طاقة تفاعل إلكترون-نواة}$$

e : شحنة الإلكترون.

m : كتلة الإلكترون.

M : كتلة النواة.

المعاملات j, i خاصة بالإلكترونات.

المعاملات α و β خاصة بالانوية.

$z_\alpha e$ شحنة الانوية.

$|\vec{R}_\alpha - \vec{R}_\beta|$: المسافة بين النواتين.

$|\vec{R}_\alpha - \vec{R}_\beta|$: المسافة بين النواة α والإلكترون i.

الحل العام لمعادلة شرود ينغر مستحيل لأنها تحتوي على $N(N+1)$ 3 متغير حيث N عدد ذرات البلورة،

من أجل تبسيط حل هذه المعادلة، اقترح ماكس بورن وروبرت أوبنهايمر تقريبًا لتبسيطها .

1.1.1 تقريب يورن - أوبنهايمر (Born-Oppenheimer) :

بما أن كتلة الإلكترونات صغيرة جدا مقارنة بكتلة النواة وسرعتها أكبر بكثير، فإنه يتم حل المعادلات

بإهمال اهتزازات النواة ويعتبرها غير متحركة (ساكنة) هذا التقريب يسمى أدياباتيك أو بورن-أوبنهايمر [3].

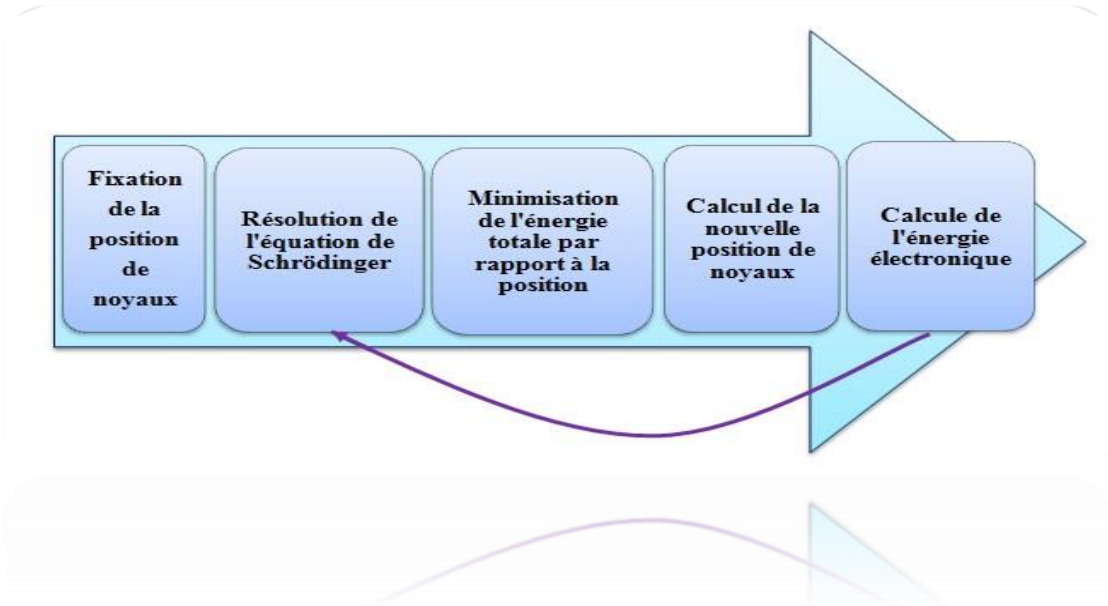
يتم تقسيم الهاملتونيان الكلي إلى جزأين، الجزء الإلكتروني والجزء النووي :

$$H_e = T_e + V_{e-e} + V_{e-N} \quad (1.3)$$

يمكن بعد ذلك كتابة معادلة شرودنجر الإلكترونية على النحو التالي:

$$\left(\sum_{i=1}^{N_e} -\frac{\hbar^2 \Delta_i}{2m_i} + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i \neq j} \frac{1}{2} \left(\frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \right) - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i,\alpha} \frac{e^2 Z_\alpha}{|\vec{r}_i - \vec{R}_\alpha|} \right) \psi_e = E_e \psi_e \quad (1.4)$$

وهذا التقريب ادياباتيك (approximation adiabatique) (ثابت الحرارة) سهل حل المشكلة. ومع ذلك فإن الإلكترونات لا تتحرك بشكل مستقل عن بعضها البعض بسبب وجود تفاعلات قوية إلكترون-إلكترون، لذلك من الضروري اللجوء الى تقريبات لحل هذه المشكلة كتقريب هارترى-فوك.



الشكل 1.1: يمثل التنفيذ الحسابي لتقريب بورن أوبنهايمر.

2.1.1. تقريب هارترى-فوك (Hartree-Fock):

في عام 1928 كان هارترى أول من اقترح تقريباً [4]، يعتمد فيه على نموذج الإلكترون المستقل اي أن كل إلكترون يتحرك منفردا في الحقل المتوسط المتولد عن الانوية وباقي الإلكترونات الأخرى، وبذلك فإن هذا التقريب يقلل مشكلة الكثرونات متعددة إلى إلكترون واحد (منفرد).

وبالتالي، يمكن [5، 6] وضع هاميلتونيان بالشكل التالي:

$$H_e = \sum_i H_i \quad (1.5)$$

حيث يكون هاميلتونيان المقابل للإلكترون (i) هو:

$$H = -\frac{1}{2}\nabla^2 + V_{ext}(\vec{r}) + V_H(\vec{r}) . \quad (1.6)$$

$V_{ext}(\vec{r})$ يمثل الطاقة الكامنة للإلكترون i في حقل الانوية k .

$V_H(\vec{r})$ تمثل الكمون الفعلي لهارترى.

2.1. نظرية الكثافة الوظيفية DFT:

تعتبر نظرية الكثافة الوظيفية (DFT). واحدة من أكثر الطرق الكمية المستخدمة على نطاق واسع

في مجالات فيزياء الحالة الصلبة وكيمياء الكم، وتستخدم لتحديد الكميات الفيزيائية للنظام (خاصة الأنظمة التي تحتوي على عدد كبير من الإلكترونات) [6].

اهتم مكانيك الكم بدراسة خصائص بعض المواد باستخدام معادلة شرود نغر وحلولها لعدد محدد من الذرات والجزيئات أما في الأنظمة المعقدة تستخدم العديد من التقريبات للحصول على معلومات جد دقيقة ومن بيننا نظرية الكثافة الوظيفية DFT والهدف منها هو إيجاد الخصائص الفيزيائية والكيميائية للأنظمة من خلال معرفة البنية الإلكترونية، حيث يتم الحساب في برنامج [7، 8].

تاريخياً، يعود أصل نظرية الكثافة الوظيفية DFT إلى عمل توماس [9، 10] وفيرمي في أواخر العشرينات، وفي منتصف الستينات أسس هوهنبرغ-كوهن وشام [11، 12] النظرية الشكلية التي تستند إليها الطريقة الحالية.

نظرية الكثافة الوظيفية DFT (Density Functional Theory) هي نظرية التخلي عن استعمال الدوال الموجية واستبدالها بدالة الكثافة الإلكترونية التي يمكن قياسها معملياً. والدافع وراء هذا هو تقليل عدد المتغيرات التي تدخل في الحساب. ولذا، فإن حل معادلة شرود نغر (الضروري لحساب طاقة الذرة وبيان شكل مداراتها). [8،7]

1.2.1. نظرية هوهنبرغ - كوهن:

بدأ تطوير النظرية عامي 1964 و1965 مع ما تم نشره من أبحاث من طرف هوهنبرغ وكوهن [13].

تستخدم نظرية هوهنبرغ كوهن لحساب البنية الإلكترونية في الأجسام الصلبة البلورية حيث تحدد هذه

النظرية الطاقة الكلية في الحالة الأساسية، وهي دالة وحيدة الكثافة الإلكترونية $\rho_{e(r)}$ [15،14].

✓ النظرية الأولى:

تتعلق هذه النظرية بالكمون الخارجي (ext) والكثافة الإلكترونية ρ_e .

$$E[\rho] = T[\rho(r)] + V_{ee}[\rho(r)] + V_{ext}[\rho(r)] \quad (1.7)$$

أو:

$$E[\rho] = F_{HK}[\rho(r)] + \int \rho(r)V_{ext}(r) dr \quad (1.8)$$

$$F[\rho] = T_e[\rho(r)] + V_{ee}[\rho(r)] \quad (1.9)$$

حيث

$F(\rho)$: دالة شاملة للكثافة الإلكترونية.

$T(e)$: الطاقة الحركية.

$V_{ee}[\rho]$: طاقة التفاعل إلكترون-إلكترون.

✓ النظرية الثانية:

أظهر هوهنبرغ-كوهن أن الكثافة الحقيقية للحالة الأساسية هو الذي يقلل من الطاقة $E(\rho)$

وجميع الخصائص الأخرى المساوية لدالة الكثافة.

$$E(\rho_0) = \min E(\rho) \quad (1.10)$$

ρ : كثافة الحالة الأساسية.

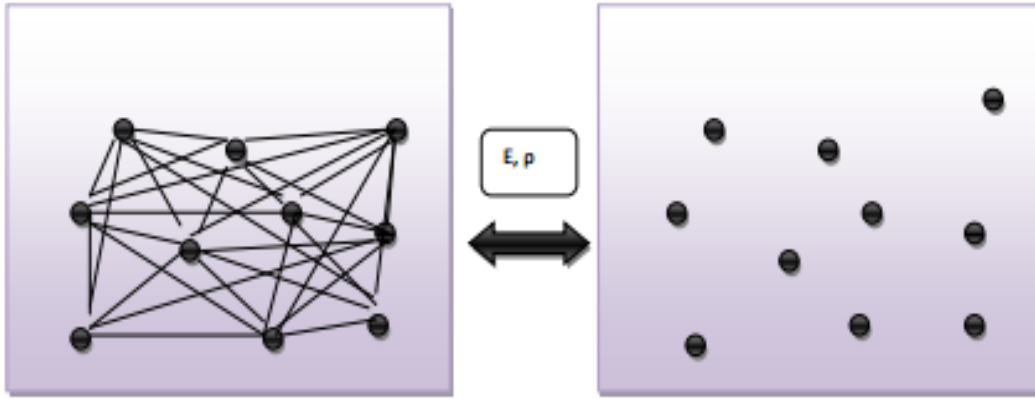
بنظرية هوهنبرغ-كوهن حلا لمشكلة معادلة شرود ينغر متعددة الإلكترونات، وفي نظرية دالة الكثافة

استطعنا تشكيل الدالة مما سهل إيجاد الحالة الأساسية للنظام في كمون خارجي معطى اذن كل عوائق تكوين

الدالة $F(\rho)$ حلت في الواقع لا توجد عبارة تحليلية لدالة كثافة الطاقة الحركية $T(\rho)$ لنظام مكون من N إلكترون في حالة تفاعل [16].

2.2.1. كوهن -شام (Kohn-Sham):

إن حركة الإلكترونات يصعب وصفها بشكل دقيق من خلال كثافتها الإلكترونية، كما أن مبدأ باولي يجعل الأمور أكثر تعقيدا بسبب الدوال المختلفة التي يجب أخذها بعين الاعتبار. ولتحقيق هذه الغاية، اقترح كوهن -شام سنة 1365 منهج لتغلب على هذه المشكلة باستخدام نظام فعلي للإلكترونات مستقلة (غير متفاعلة) تخضع لكمونات خارجية فعالة $V_{eff}(r)$ ، بحيث يكون لديها نفس الكثافة الإلكترونية للنظام الحقيقي، مع الأخذ بعين الاعتبار مبدأ باولي، استخدم كوهن - شام [9] الخصائص المتغيرة للحصول على وصف لدالة ولتحديد طاقة الحالة الأساسية.



الشكل 2.1 : مخطط يعطي العلاقة بين عدد كبير من عناصر النظام في الحقيقة والتأثيرات المطبقة

على النظام لكوهن -شام.

وتعطى طاقة كوهن -شام بـ:

$$F[\rho(r)] = T_0[\rho(\vec{r})] + E_H[\rho(\vec{r})] + E_{xc}[\rho(\vec{r})] + \int[\rho(\vec{r})] + \int \rho(\vec{r})V_{ext}(r)d_r^3 \quad (1.11)$$

حيث افترض العالمين كوهن-شام العبارة التالية:

$$T_0[\rho] = T_s[\rho] + (T_e[\rho] - T_s[\rho]) \quad (1.12)$$

T_e : هي الطاقة الحركية للإلكترونات بدون تأثيرات خارجية وبنفس الكثافة.

أين تعرف $T_s[p]$ بالعبارة التالية:

$$T_s = \sum_{i=1}^{Ne} \left\langle \psi_i \left| \frac{-\hbar^2}{2m} \Delta_i \right| \psi_i \right\rangle \quad (1.13)$$

اين تكتب عبارة الكمون $V_{e-e}[\rho]$:

$$V_{e-e}[P] = E_H[P] + (v_{e-e}[P] - E_{1-1}[P]) \quad (1.14)$$

$E_H[P]$: هي طاقة هاتري حيث طاقة التأثير إلكترون - إلكترون معرفة بالمعادلة التالية.

$$E_H[p(r)] = \frac{e^2}{2} \int \frac{P(r)P(r^1)}{|r-r^1|} d^3r d^3r^1 \quad (1.15)$$

في الأخير $F[\rho]$ تكتب بثلاثة أجزاء:

$$F[\rho] = T_s[\rho] + E_H[\rho] + E_{xc}[\rho] \quad (1.16)$$

اين تعرف طاقة تبادل -ارتباط:

$$E_{xc}[p] = (T_e[p] - T_s[p]) + (v_{e-e}[P] - E_H[P]) \quad (1.17)$$

المعادلة المعبرة عن الكثافة تكتب بالشكل:

$$E_{ks}[P] = T_H[\rho] + E_H[\rho] + E_{xc}[\rho] + \int V_{ext}(r)\rho(r) d^3r \quad (1.18)$$

اذن:

$$\frac{\delta E_{ks}}{\delta \psi_i^*(r)} = \frac{\delta E_s}{\delta \psi_i^*(r)} \left[\frac{\delta E_H}{\delta P(r)} + \frac{\delta E_{xc}}{\delta p(r)} + \frac{\delta E_{ext}}{\delta p(r)} \right] \frac{\delta P(r)}{\delta \psi_i^*(r)} \quad (1.19)$$

وفي الأخير تكتب معادلة كوهن-شام لألكترون:

$$H_{ks}\psi_i(r) = (T_s + V_{ext}(r))\psi_i(r) = \epsilon_i\psi_i(r) \quad (1.20)$$

العيب الرئيسي في نهج كوهن - شام هو غموض عبارة كمون (التبادل . ارتباط) في المعادلة، ما

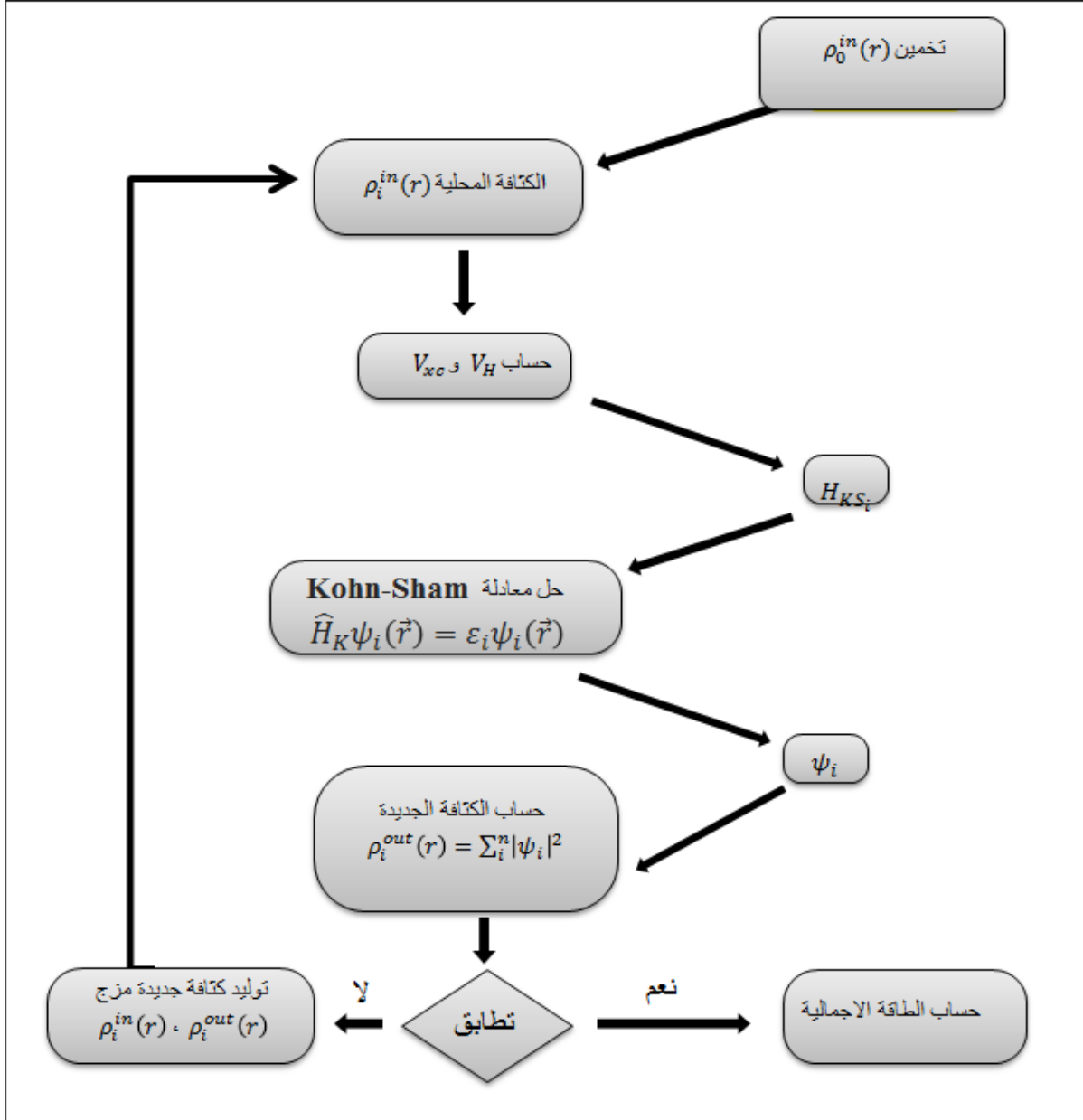
يجعل حل المعادلات صعبا. ولكي نكون قادرين على القيام بالحساب، و نحتاج الآن إلى تقريبات.

$$\varepsilon_{xc} = \varepsilon_x + \varepsilon_c \quad (1.21)$$

لهذا تم اعتماد على العديد من كمونات التبادل . ارتباط التقريبية، ولحد الآن لم يتم التوصل إلى الشكل المضبوط لهذا الكمون.

3.2.1. حلول معادلة كوهن -شام :

يتم حل معادلات كوهن - شام بشكل متكرر باستخدام حلقة تكرارية (*Le cycle auto-cohérent*) كما هي موضحة في الشكل (3.1) ، وذلك من أجل النقاط عالية التناظر في منطقة بريليون الأولى التي تسمح بتبسيط الحساب. نبدأ بالكثافة الابتدائية $\rho_{in}(r)$ للتكرار الأول، ثم نحل معادلة كوهن -شام، في هذه المرحلة يتم حساب كثافة جديدة $\rho_{out}(r)$ ، إذا تغيرت الكثافة أو الطاقة كثيرا (معيار التقارب) نعود الى المرحلة الأولى من خلال مزج كثافتي الشحن $\rho_{in}(r)$ و $\rho_{out}(r)$.



الشكل 3.1: خوارزمية حل معادلة كوهن - شام

تطورات نظرية الكثافة الوظيفية (DFT) عبر التاريخ ملخصة كما يلي :

العلماء (الباحثون)	السنة	التطور في النظرية
توماس وفيرمي	1927 م	صاغ كل من توماس وفارمي الطاقة الكلية لغاز الإلكترونات اللامتجانس كدالة لكثافة الإلكترونات المعروفة لغاز متجانس، حيث تم تقسيم منطقة بريلوين إلى تقسيمات صغيرة جداً، الإلكترونية ثابتة في كل منطقة من المناطق المقسمة، وتعتبر هذه النظرية هي تقريب موضعياً لكثافة الإلكترونات الذي لا يأخذ بعين الاعتبار ارتباط الإلكترونات.
ديراك	بعض السنوات التي تلت 1930م	إنطلق من نموذج الغاز الإلكترون المستقل، حيث أضاف فعل التبادل للتحسين في نظرية توماس - فيرمي. والعائق الرئيسي في هذا النموذج هو عدم قدرته على تكرار البنية الإلكترونية لطبقة من الذرات.
هوهنبرغ وكوهن	1964 م	وكانت البداية الحقيقية للنظرية وذلك من خلال نظريتهم الأساسية، والحالة الأساسية وكثافة المتمثلة في إيجاد علاقة تابعة بين الطاقة والإلكترونات.
ماكس بورن - روبارت أوبن هايمر	(1882 م - 1970 م) (1904 م - 1967 م)	اقترحوا تقريب لتبسيط معادلة شرودينغر، حيث اعتبر هذا التقريب مواضع الأنوية ثابتة لذا يمكن إهمال طاقتها الحركية وحد تفاعل الأنوية يكون ثابت.
كوهن وشام	1965 م	كوهن وشام يجب أن تحل بطريقة ذاتية وذلك لإيجاد كثافة الحالة طاقة الارتباط.

3.1. تابع تبادلي-ارتباط:

إن مشكلة DFT وفقاً لمعادلة كوهن-شام هو إيجاد تقريب جيد لتابع طاقة تبادلي-ارتباط فهناك

العديد من التقريبات لكمون تبادلي-ارتباط، ولكي نكون قادرين على القيام بالحساب نحتاج الان الى تقريبات.

3.1.1. تقريب كثافة الموضع LDA:

من أجل حل مشكلة وظيفة التبادل-ارتباط، اقترح كوهن وشام تقريب الكثافة الموضعية LDA الذي يعتبر أن أغلب المواد الصلبة قريبة من حدود غاز الإلكترونات المتجانس [17].
 طرح هذا التقريب في 1965 [18] هو تقريب أسس وفق نموذج الغاز المتجانس للإلكترون لتوماس-فارمي [19،20] الذي يحتوي على أقرب مفهوم يشرح بتبسيط طاقة تبادل-ارتباط. إلا ان الكثافة الإلكترونية لغاز المتجانس يمكن اعتبارها موضعياً متجانسة.
 وتكتب طاقة تبادل-ارتباط بالشكل التالي:

$$E_{xc}^{LDA}[P] = \int P(r) \varepsilon_{xc}[P(r)] d^3r \quad (1.22)$$

هي طاقة تبادل-ارتباط الجسيم في غاز الإلكترونات المتجانسة له كثافة إلكترونية، يمكن تقسيم المقدار إلى قسمين طاقة تبادل وطاقة ارتباط.

$$E_{xc}[p] = E_x [p(r)] + E_c [p(r)] \quad (1.23)$$

يمكن حساب طاقة التبادل تحليلياً:

$$\varepsilon_x [P(r)] = -\frac{3}{4} \left(\frac{3P(r)}{\pi} \right)^{1/3} \quad (1.24)$$

تتيح هذه الطريقة الحصول على طاقة الارتباط التبادلي عن طريق تقسيم المادة إلى أحجام صغيرة لها كثافة إلكترون ثابتة. نتيجة لذلك، يثبت LDA أنه فعال للغاية للأنظمة التي تختلف كثافتها قليلاً. لكن النتائج أقل جودة للأنظمة التي تكون فيها كثافة الإلكترون أقل تجانساً [21]، في هذه الحالة من الضروري تطوير تقريب آخر مثل GGA.

2.3.1 تقريب التدرج المعمم GGA:

تقريب التدرج المعمم GGA هو تحسين LDA في معالجة طاقة الارتباط التبادلي التي تتمثل في جعلها لا تعتمد فقط على كثافة الإلكترون ولكن أيضًا على تدرجها $|\nabla p(r)|$. وبالتالي فإن الحسابات الدوال $E_{xc}^{LDA}[P]$ للطابع غير المنتظم لغاز الإلكترون.

$$ExcGGA[\rho(r)] = \int \epsilon_{xc}[\rho(r), \nabla \rho(r)] \rho(r) d r \quad (1.25)$$

يحقق:

$$E_{xc}^{LDA}[\rho(r)] = \int \epsilon_{xc}[\rho(r), \nabla \rho(r)] \rho(r) d r \quad (1.26)$$

تسعى GGA للحفاظ على الخصائص الدقيقة التي تم التحقق منها بالفعل من قبل LDA، وذلك بواسطة

عامل التحسين f . الذي يحقق:

$$E_{xc}^{LDA}[P] = \int f[\rho(r), \nabla \rho(r)] \rho(r) d r \quad (1.27)$$

بشكل عام تعمل GGA على تحسين LDA بعدد من الخصائص مثل طاقة الارتباط او الطاقة الكلية،

ولكنها تؤدي إلى وصف دقيق لجميع خصائص مادة أنصاف الموصلات (semiconducteur)، (كمعرفة

خصائصها الإلكترونية) [22].

قائمة المراجع

- [1] W. Heisenberg, Z. Physik, 43 (1927) 172.
- [2] E. Schrödinger, Phys. Rev, 28 (1926) 1049.
- [3] M. Born and R. Oppenheimer, Annalen der Physik, 389 (20) (1927) 457- 484.
- [4] D. R. Hartree, the calculation of atomic structures, John Wiley and Sons, New York, 376 (1957) 76.
- [5] عمریات مسعودة. دراسة الخصائص المغناطيسية بواسطة المبادئ الاولية. جامعة ورقلة (2015) .
- [6] D. R. Hartree, Proc. Cambridge philos.Soc, 24 (1928) 89.
- [7] Roi Baer, Electron Density functional Theory lecture notes (rough draft) October (2009).
- [8] kieron. Burke, J. Chem. Phys, 136 (2012) 150901.
- [9] W. Khon and L. J. Sham, phys.Rev.140 (1965) 1133.
- [10] L. H. Thomas, Proc. Combridge. philos. SOC, 23 (1927) 542.
- [11] E. Fermi, Z. phys, 5 (1927) 2466.
- [12] A. Benmakhlof, Simulation des propriétés optiques, électroniques, Magnétiques et structurales des matériaux semi-conducteurs et/ou métallique, thèse de doctorat, Université A. MIRA Bejaia, (2017).
- [13] P. Hohenberg, W. Kohn, Phys. Rev, B 136 (1964) 864
- [14] Pan Wei and Zheng Qing Qi, Phys. Rev, B 49 (1994) 12154.
- [15] J. C. Slater, Phys. Rev, 51 (1937) 846.
- [16] M. A. El Khakani, M. Chaker, Journal of Vacuum Science and Technology, B 11(1993) 2930– 2937
- [17] J. Perdew, W. Wang, phys. Rev, B45. 13 (1992) 244.
- [18] P. Blaha, K. Schwarz, P. Sorantin, S. B. Tricky, Chem. Phys. Lett, 399 (1990).
- [19] L. H. Thomas, Proc. Camp. Philos. Soc, 23 (1927) 542-548.
- [20] E. Fermi, Z. Phys, 48 (1928) 73-79.
- [21] K. Burke, J. P. Perdew, M. Ernzerhof, J. Chem. Phys, 109 (1998) 3760.

[22] J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, Phys. Rev. Lett, 77 (1996) 3865.

الفصل 2

شبه الكمون والموجة المستوية

(*PP-PW*)

2. المقدمة:

يستخدم شبه الكمون (PP) لوصف التفاعلات الإلكترونية كميًا في إطار DFT. ويتكون من اقتراح الموجات المستوية وشبه كمون عن طريق تقنية تحويل فورييه [1]. هذه الطريقة دقيقة للغاية وسريعة بشكل معقول لمحاكاة المواد وقد أثبتت بالفعل فعاليتها في دراسة أنواع مختلفة من المواد [2]. ومن المعروف الآن أن الجمع بين قوة تقنية الموجة المستوية ومفهوم شبه كمون مفيد للغاية لوصف الترابط الكيميائي [3]، وسيتم توضيحه في هذا الفصل.

1.2. طريقة شبه الكمون:

قام فرمي (Fermi) بعرض هذه الطريقة في سنة (1934) وذلك في معرض تناوله لدراسة الحالة الذرية للطبقات الرقيقة، والتي استعان بها فيما بعد هيلمان (Hellman) سنة (1950) عند دراسته لمستويات الطاقة للألكانات [4] ومن ثم إيجاد خواص أنصاف النواقل، والتي تعتبر امتدادًا لطريقة الموجة المستوية المتعامدة (OPW) [5,6].

تأسست الفكرة الأساسية لطريقة الكمون الزائف (الكمون الكاذب) والتي تتمثل في الحصول على حالات التكافؤ لنظام ذري والجزئي وبلوري... الخ. دون الحاجة لحساب حالات القلب التي تعتبر ليست ضرورية من أجل وصف خصائص النظام. وبشكل آخر هي عبارة عن اختزال النظام (النواة + مجمع الإلكترونات) إلى نظام إلكترونات التكافؤ وذلك باستبدال كمون النواة وإلكترونات القلب التي ترتبط ارتباطًا وثيقًا بالنواة بكمون أيوني فعال يؤثر على إلكتروناتك التكافؤ. وبذلك سيتم تبسيط الحسابات فقط إلى إلكترونات التكافؤ التي سيتم اختيارها [7,8,9].

ومن بين أهم البرامج التي تستند إلى تقريب شبه الكمون نذكر منها [10]:

ABINT ➤

VASP ➤

SIESTA >

1.1.2. بناء شبه الكمون:

شبه الكمون يجب ان يحقق الخصائص التالية [11,12]:

> يجب ان يكون تجميعي (تكميلي) مما يعني ان شبه الكمون الكلي لعدة ذرات هو مجموع شبه الكمون للذرات الفردية.

> يجب ان يكون شبه الكمون تحويلي، مما يعني انه في الأوساط الكيميائية المختلفة يمكن استعمال نفس شبه كمون.

> ينتج من التغيرات المنخفضة للكمون كما في حالة القلب الحقيقي، وذلك عن طريق تقليل عدد الموجات المستوية اللازمة لوصف دوال الموجة.

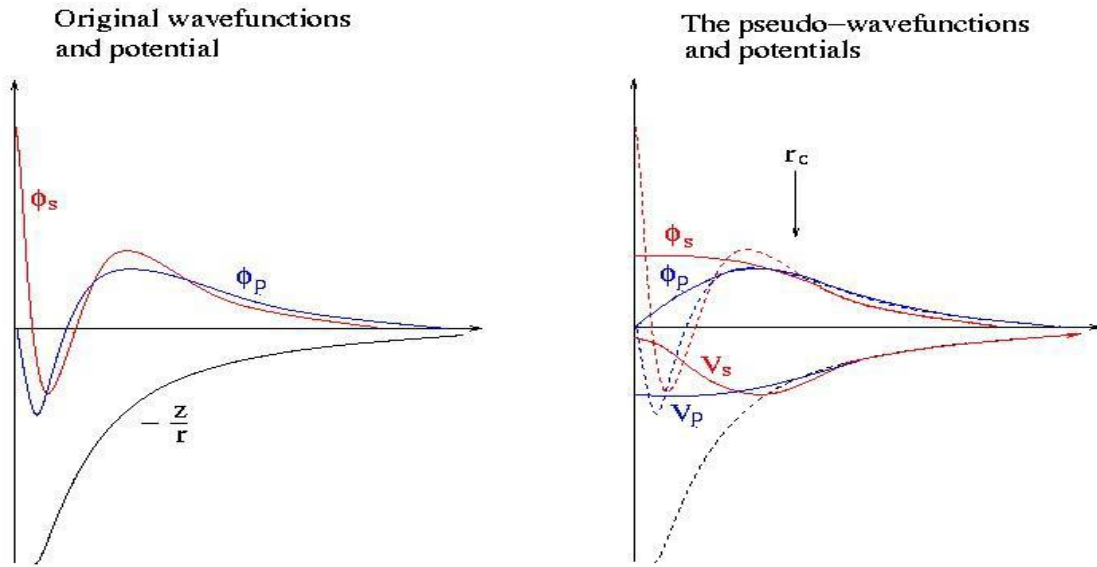
> من الضروري استعمال شبه كمونات مختلفة من اجل الحالات (s.p.d) بمعنى شبه كمون يتعلق بالعزم الزاوي.

لتوليد شبه كمونات توجد العديد من الطرق. وكل طريقة تختلف عن الأخرى حيث تنقسم طرق انشاء

شبه كمون الي مجموعتين:

طرق حفظ المعيار (طويلة محفوظة) norm-conserving pseudopotentials وطرق أخرى غير

حافطة للمعيار Non-linear heart.



الشكل 1.2: أنواع مختلفة من شبه الكمون.

2.1.2. نظرية بلوخ:

سميت على اسم الفيزيائي السويسري فيليكس بلوخ في فيزياء المادة المكثفة، تنص نظرية بلوخ على

أن حلول معادلة شرودنغر في الجهد الدوري تأخذ شكل موجة مستوية يتم تعديلها بواسطة وظيفة دورية.

تنص نظرية بلوخ [13] على انه في درجة حرارة 1 كلفن وفي بلورة مثالية، الذرات تكون مرتبة

بطريقة دورية مثالية، بحيث انه في نقطة r يمكن كتابة $v(r) = v(r+R)$ ، مع R شعاع الشبكة المباشرة.

يمكن كتابة دالة الموجة بدلالة أشعة الشبكة بالعلاقة التالية:

$$\psi_i(r) = e^{ik \cdot r} f(r) \quad (2.1)$$

حيث k شعاع الشبكة المعكوسة.

الحد الثاني في هذه المعادلة هو دالة الموجة ضمن الخلية الأولية. يمكن نشرها إلى سلسلة من الأمواج

المستوية مع اشعة الأمواج الشبكة المعكوسة بالشكل التالي:

$$f_i(r) = \sum_G C_G(k) e^{iGr} \quad (2.2)$$

بدمج المعادلتين (2.1) و(2.2) نحصل على دالة الموجة وحيدة الجزيء والتي تكتب في شكل مجموع

أمواج مستوية:

$$f_i(r) = \sum_G C_G(k) e^{i(k+G).r} \quad (2.3)$$

لكتابة دالة موجة وحيدة الجزيء نحتاج الى عدد لا نهائي من الأمواج المستوية. لكن مع هذا فان العدد عمليا محدود بطاقة قطع نرمز لها بالرمز E_{cut} ، هذه الطاقة تسمح بتحديد القاعدة بالنسبة للأمواج المستوية اين يحقق الشعاع $G+K$ مايلى:

$$\frac{\hbar^2}{2m} |k + G|^2 \leq E_{cut} \quad (2.4)$$

حيث m هي كتلة الالكترون.

الزيادة في الطاقة E_{cut} ينتج توسع في القاعدة مع زيادة في زمن الحساب.

3.1.2. طريقة الأمواج المستوية:

باتباع نظرية بلوخ، يمكن تمثيل دالة الموجة عند كل نقطة k باستخدام أساس موجة مستوية منفصلة. من حيث المبدأ، لتمثيل دالة الموجة بشكل صحيح، نحتاج إلى عدد كبير جداً من الموجات المستوية. ومع ذلك، فإن المعاملات $C_{i, \vec{k}+\vec{G}}$ للموجات المستوية للطاقة الحركية الصغيرة أكبر من تلك المرتبطة بالموجات المستوية ذات الطاقة الحركية العالية [14].

$$\frac{\hbar^2}{2m} |k + G|^2 \quad (2.5)$$

نتيجة لذلك، يمكن أن يكون أساس الموجة المستوية يقتصر على الموجات المستوية التي لها طاقة حركية أقل من القيمة الحرجة "cut-off énergie". يؤدي تقييد قاعدة الموجة المستوية إلى أخطاء في حساب إجمالي الطاقة. يمكن تقليل ترتيب حجم هذا الخطأ عن طريق زيادة قيمة الطاقة الحرجة. من حيث المبدأ، يجب زيادة قيمة الطاقة الحرجة حتى يتقارب إجمالي الطاقة، مما يعني أن اختيار E_{cut} يحدد درجة دقة الحساب.

يمثل تمثيل الدالة الموجية في قاعدة الموجة المستوية مشكلتين رئيسيتين، حتى مع استخدام الطاقة الحرجة. أولاً، تصبح الحسابات أكثر تكلفة (بمرور الوقت) مع زيادة حجم الذرات. ثانياً، حقيقة أن مدارات

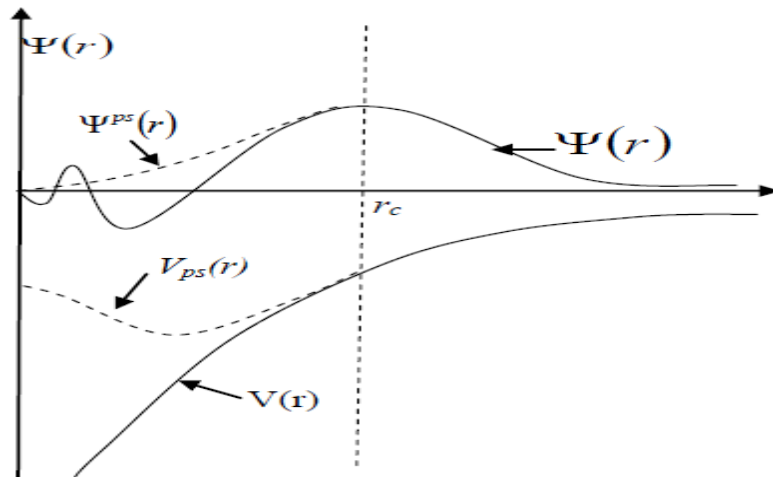
Kohn-Sham يجب أن تكون متعامدة مع بعضها البعض، تؤدي إلى زيادة كبيرة في الطاقة الحركية القصوى. في هذا السياق، يمكن نمذجة عناصر معينة من الجدول الدوري مع الكثير من الكفاءة، بينما تتطلب العناصر الأخرى، مثل العناصر الثقيلة أو المعادن الانتقالية، موارد حسابية كبيرة للغاية.

يمكن تجنب المشكلة الأولى باستخدام l'approximation du cœur gelé "تقريب النواة المجمدة" "Frozen core approximation"، ويمكن الحد من الثانية باستخدام طريقة شبه الكمون la méthode -potentiel du pseudo.

4.1.2. تقريب شبه الكمون:

يعتمد المفهوم الأساسي لشبه الكمون (PP) على استبدال كمون coulomb للنواة، وتأثير الإلكترونات المرتبطة ارتباطاً وثيقاً بالنواة (إلكترونات القلب) بواسطة كمون أيوني فعال يؤثر على إلكترونات التكافؤ. في هذا التقريب يتم استبدال دوال الموجة $\psi(r)$ التي تمثل إلكترونات التكافؤ بشبه دوال الموجة $\psi^{ps}(\vec{r})$ انظر الشكل (2.2) يتم فرض المساواة $\psi^{ps}(\vec{r}) = \psi(r)$ خارج منطقة القلب وداخل هذه المنطقة يتم اختيار شكل $\psi^{ps}(\vec{r})$ لإزالة العقدة والذبذبات الناتجة عن تعامد دوال الموجة [14].

تقدم شبه دوال الموجة التي تم الحصول عليها بهذه الطريقة ميزة التمثيل في فضاء فورييه بعدد صغير جداً من الموجات المستوية، وهذا من شأنه أن يقلل بشكل كبير الحسابات العددية. يتم اختيار شكل شبه الكمون بحيث تكون شبه دوال الموجة ودوال موجة التكافؤ لهما نفس الطاقات [15].



الشكل 2.2: كمون إلكترونات التكافؤ ودالة الموجة الموافقة له [15].

5.1.2. أمثلة عن شبه الكمون:

1.5.1.2. الكمون ذو الطويلة المحفوظة:

في عام 1979 قام Chiang و Schluter و Hamann بثورة في هذا المجال [12]، عندما اقترحوا طريقة لاستخراج أحسن شبه كمون من المبدأ الأول للحساب ab-initio، حيث كان لإنشاء "الكمون ذو الطويلة المحفوظة" مكاناً خاصاً في تطوير شبه الكمونات في حسابات المبدأ الأول ab-initio، لأنه يبسط تطبيقها، ويجعلها أكثر دقة، ويمكن تحويلها، حيث يجب أن تكون شبه دالة الموجة ودوال الموجة الحقيقية متطابقة خارج منطقة القلب، وأن تتقارب الشحنة الموجودة في منطقة القلب مع الشحنة الحقيقية في تلك المنطقة، لهذا السبب يقال أن هذا النوع من شبه الكمون ذو الطويلة المحفوظة.

1.1.5.1.2. شبه الكمون لـ Hartwigzen Geodcker Hutter:

يتم إعطاء الجزء المحلي من شبه الكمون بواسطة [16،17]:

$$V_{loc}(r) = \frac{-Z_{ion}}{r} \operatorname{erf}\left(\frac{r}{\sqrt{2}r_{loc}}\right) + \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{r}{r_{loc}}\right)^2\right] \times \left[c_1 + c_2 \left(\frac{r}{r_{loc}}\right)^2 + c_3 \left(\frac{r}{r_{loc}}\right)^4 + c_4 \left(\frac{r}{r_{loc}}\right)^6 \right] \quad (2.6)$$

حيث:

erf : هي دالة الخطأ Z_{ion} وهي الشحنة الأيونية للنواة الذرية، أي الشحنة الكلية مطروحًا منها شحنة التكافؤ.

يتم تقديم المساهمة غير المحلية في الكمونات الزائفة من خلال:

$$V_l(r, r') = \sum_{i=1}^{i=3} \sum_{j=1}^{j=3} \sum_{m=-l}^{m+l} Y_{l,m} p_i^l(r) h_i^l p_j^l(r') Y_{l,m}^*(r') \quad (2.7)$$

حيث:

$Y_{l,m}$ هي التوافقيات الكروية.

l هي العزم الزاوي.

$P_i^l(r)$ أجهزة العرض غاوسي من الشكل:

$$p_i^l(r) = \frac{\sqrt{2} r^{l+2(i-1)} \exp\left(-\frac{r^2}{2r_l^2}\right)}{r_l^{l+(4i-1)/2} \sqrt{\Gamma\left(l+\frac{4i-1}{2}\right)}} \quad (2.8)$$

حيث: Γ دالة جاما.

2.5.1.2. الكمون فائق الليونة لفاندريلت (ultra-soft):

في عام 1990 قام فاندريلت بإنشاء شبه كمون جديد سمي بالكمون الفائق الليونة [18]، بحيث

تكون شبه دوال الموجة سلسلة في داخل منطقة القلب، الهدف منه تقليص قيمة طاقة القطع، وذلك عن طريق

استعمال قطر قطع أكبر من المستعمل في شبه الكمون ذو الطويلة المحفوظة.

بالمقارنة مع الكمون ذو الطويلة المحفوظة فإن الكمون فائق الليونة حقق تحسنا واضحا من حيث

الدقة والليونة لدوال الموجة، ولكن هذه الطريقة تزيد من تعقيد المشكلة وكذلك زمن الحساب.

3.2. منطقة بريليون الأولى:

منطقة بريليون الأولى هي خلية أولية محددة بشكل فريد في الفضاء المعكوس حيث يتم تقييم المناطق

الى بريليون بنفس طريقة تقسيم شبكة Bravais الى خلايا wigner-setiz في الشبكة الحقيقية.

منطقة بريليون لها أهمية في وصف موجات بلوخ لنظام الدوري حيث وجد ان الحلول يمكن وصفها

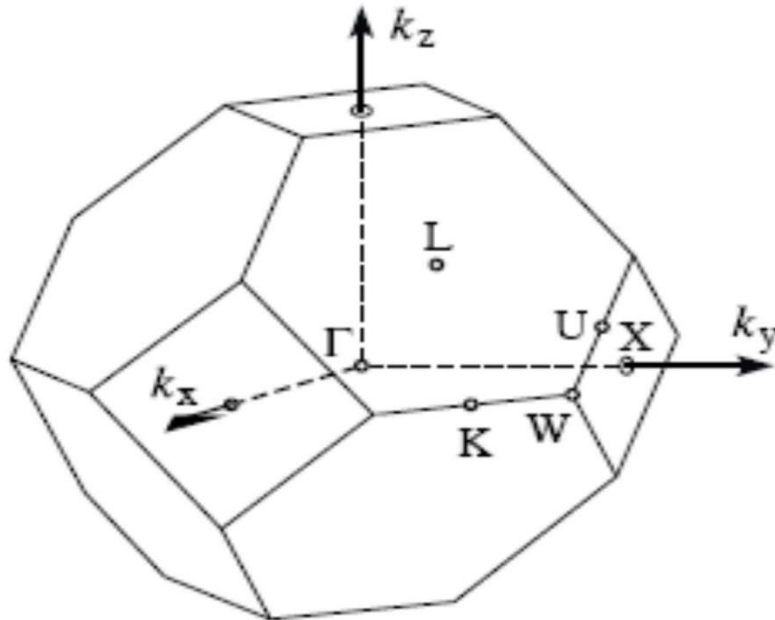
بالكامل بسلوكها في أحد مناطق بريليون بمجموع منفصل من النقاط NK بالشكل التالي:

$$\frac{1}{\Omega} \int_{zB} dk \rightarrow \frac{1}{r_k} \sum_k \quad (2.9)$$

مع الأخذ بعين اعتبار التناظرات في النظام المدروس الذي يقلل من عدد الحدو الواجب حسابها في المجموع

السابق، وبالتالي نكسب زمن في الحساب، وهذا راجع الى تقليل عدد نقاط k فيقتصر على منطقة بريليون

الأولى الغير قابلة للاختزال. الشكل (2.3) يمثل منطقة بريليون الأولى مرفقة بنقاط عالية التناظر.



الشكل 3.2: منطقة بريليون الأولى المرفقة بنقاط عالية التناظر

قائمة المراجع

- [1] M. D. Segall, P. J. D. Lindan, M. J. Probert, C. J. Pickard; P. J. Hasnip, S. J. Clark, M. C. Payne, J. Phys. Condens. Matter, 14 (2002) 2717-2743.
- [2] M. Mattesini, proposition et modélisation ab initio de nouveaux matériaux ultras-durs, thèse de Doctorat, Université de Bordeaux I, (2001).
- [3] M. C. Payne, M. P. Teter, D. C. Allan, T. A. Arias and J. D. Joannopoulos, Rev. Mod. Phys, 64 (1992) 1045-1097.
- [4] J. M. Soler, E. Artacho, J. D. Gale, A. García, J. Junquera and P. Ordejón, D. Sánchez Portal, J. Phys. Condens. Matter, 14 (11) (2002) 2745-2779.
- [5] H. Hellmann and W. Kassatotschkin, Acta. Physico. chim, 5 (1936) 23-44.
- [6] C. Herring, Phys. Rev, 57(12) (1940) 1169.
- [7] M. Fuchs, M. Scheffler, Computer Physics Communications, 119(1) (1999) 67-98.
- [8] Shah, R, Payne, M. C, Gale, J. D. Acid-base catalysis in zeolites from first principles. International journal of quantum chemistry, 61(3) (1997) 393-398.
- [9] Von Barth, U, Gelatt, C. D. Validity of the frozen-core approximation and pseudopotential theory for cohesive energy calculations. Physical Review, B 21(6) (1980) 2222.
- [10] A. REGGAD, Etude calcul Abinito des propriétés structurales et optoelectronique de Bismuthinite Bi₂S₃, université Ibn khaldountraret (2013).
- [11] Troullier, N, Martins, J. L. Efficient pseudopotentials for plane-wave calculations. Physical review, B 43(3), 1993. (1991).
- [12] D. R. Hamman, M. Schluter, C. Chiang, Phys. Rev. Lett, 43 (1981) 1494.
- [13] N. W. Ashcroft, N. D. Mermin, Solid State Physics. Saunders College Publishing, Florida, (1976).
- [14] A. Zaoui and F. Elhadj Hassan, J. Phys. Condens. Matter, 18 (2006) 3647.
- [15] M. Ferhat, A. Zaoui, M. certier et al, Physica, B 252 (1998) 2295.
- [16] C. Hartwigsen, S. Geodecker and J. Hutter. Phys. Rev, B58 (1998) 3641.
- [17] S. Geodecker, M. Teter and J. Hutter. Phys. Rev, B54 (1996) 1703.
- [18] G. Bastard, "wave mechanics applied to semiconductor heterostrucures", les Editions de physique, paris, (1988).

الفصل 3

النتائج والمناقشة

3. المقدمة:

تمت دراسة أنصاف النواقل من الفصيلة (III-V) على نطاق واسع لعقود من الزمن بسبب تطبيقاتها التكنولوجية في الأجهزة الإلكترونية ضوئية عالية الجودة مثل صمامات الليزر التي تعمل في المجال الطيفي الأزرق فوق البنفسجي والخلايا الشمسية وبالأحرى، الأيونية العالية لهذه المركبات تجعلها الأكثر ترشحا للتزاوج الإلكتروني والالكتروميكانيكي العال [1].

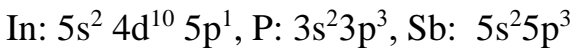
من خلال هذا الفصل سنتطرق الى دراسة الخصائص البنيوية والمرونية للسبائك الثلاثية

InSb_xP_{1-x} في بنية كبريت الزنك (Zinc-blende) باستعمال برنامج ABINIT.

3. 1. طريقة الحساب:

تم اجراء الحسابات التالية باستخدام طريقة الموجة المستوية (PP-PW) في إطار نظرية الكثافة الوظيفية DFT [2]، ونظرية الكثافة الوظيفية المضطربة DFPT المدمجة في برنامج ABINIT [3]، وقد تم تقييم التركيز الذري من خلال تقريب البلورة الوهمية VCA وباستخدام طاقة القطع 120 Ry كما استخدم تقريب الكثافة المحلية LDA على شكل Alder و Ceperey [4] وذلك لحساب تابع تبادل-ارتباط المعدلة بواسطة Wang و Perdew [5]، والذي يعالج تفاعلات الإلكترونات مع أنوية الأيونات، يوصف هذا الارتباط باستخدام شبه الكمون pseudo-potentials ذو الطويلة المحفوظة norm-conserving التي اقترحها Troullier- Martins [6].

الحالات الإلكترونية لإلكترونات التكافؤ المستخدمة هي:

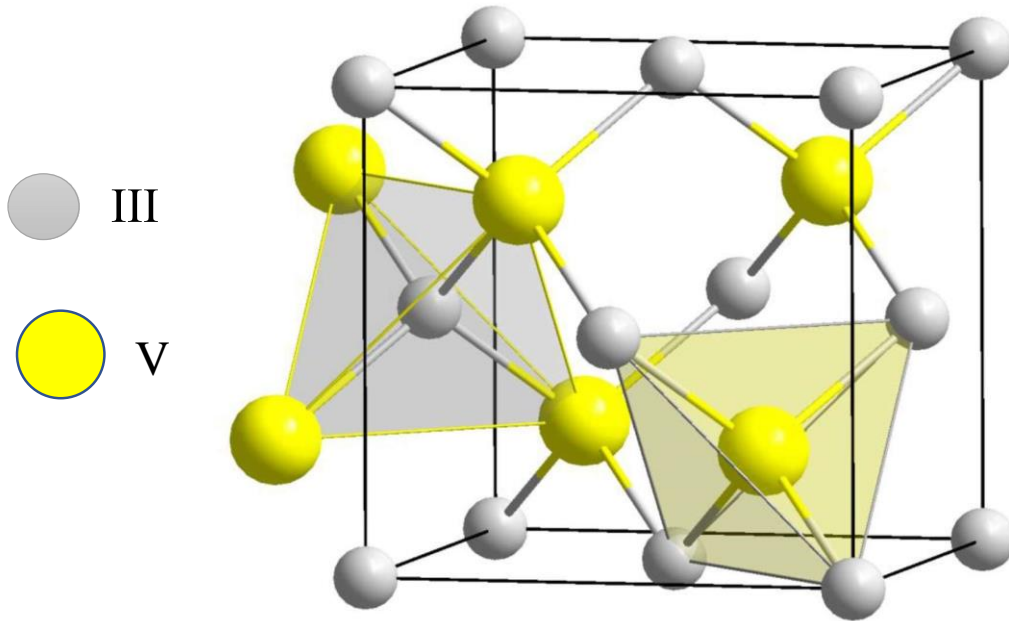


كما تم استخدام طريقة Monkhorst et Pack [7] للتكامل في منطقة برليون (ZB) باستخدام

مجموعة من النقاط (6x6x6) k-point.

2.3. الخصائص البنيوية للخليط $InSb_xP_{1-x}$:

يتبلور كل من (InSb) و (InP)، في بنية كبريت الزنك (Zinc-blende)، في فضاء المجموعة (Space group) $F-43m$ ، وتقع ذرات عناصر العمود III (In) في المواقع (0,0,0) وذرات عناصر العمود V (Sb,P) في المواقع $(1/4, 1/4, 1/4)$ [8]. تتميز هذه البنية بثوابت الشبكة $a=b=c$. الشكل (1.3) يمثل بنية الزنك بلاند.



الشكل 1.3: بنية زنك بلاند (Zinc-blende).

ان حساب الخصائص البنيوية للخليط $InSb_xP_{1-x}$ مهم جدا لدراسة أي مادة، لأنها تتيح لنا استخدام النتائج المتحصل عليها في تحديد الخصائص الفيزيائية الأخرى (إلكترونية، مرونية... إلخ) هذا الحساب يهدف إلى تحديد حجم الخلية عند التوازن الموافق للحد الأدنى للطاقة E_{TOT} ، وكذلك حساب معامل الانضغاطية (B_0) والمشتق الأول لمعامل الانضغاطية (B_0')، وذلك باستخدام معادلة Murnaghan [9]، والتي تعطى بالعلاقة التالية:

$$E_{TOT}(V) = E_0(V) + \frac{B_0V}{B_0'} + \frac{B_0V}{B_0'} \left[\frac{V_0/V}{B_0'-V} + 1 \right] - \frac{B_0V}{B_0-1} \quad (3.1)$$

حيث:

V_0 : حجم الخلية الأساسية.

E_0 : طاقة الحالة الأساسية المسؤولة على الحجم.

$E(V)$: الطاقة الإجمالية كدالة للحجم V .

B_0 معامل الانضغاط المعرف بواسطة:

$$B_0 = V_0 \left(\frac{\delta^2 E}{\delta E} \right) \quad (3.2)$$

يتم الحصول على مشتق معامل الانضغاط B_0 من خلال:

$$B'_0 = \frac{\delta B_0}{\delta P} \quad (3.3)$$

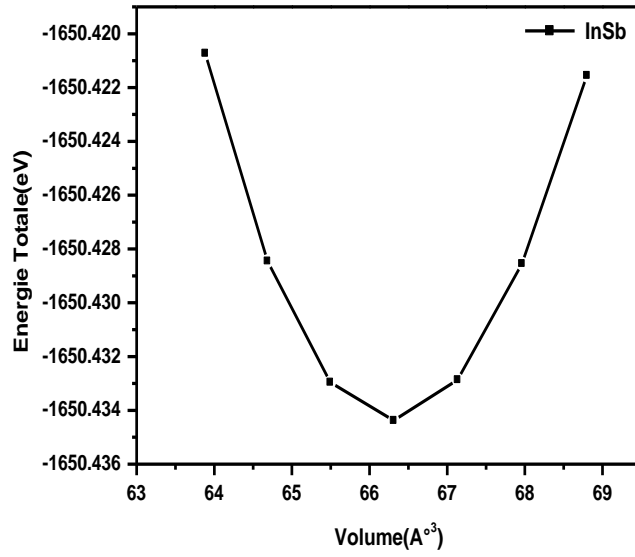
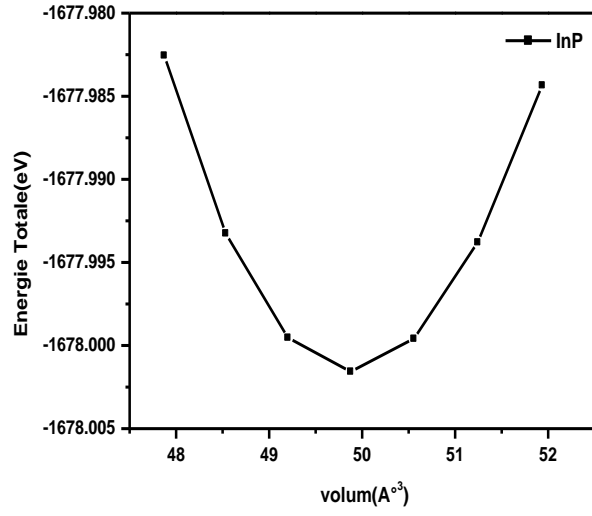
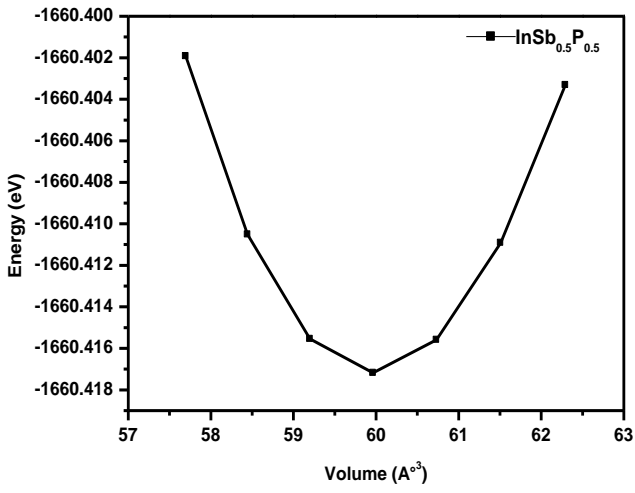
يمثل الشكل (2.3) تغيرات الطاقة الكلية بدلالة الحجم للخليط $\text{InSb}_x\text{P}_{1-x}$ في الطور زنك بلاند من

اجل $x=0, 0.5, 1$. حيث يتم تحديد ثابت الشبكة a_0 عند التوازن الموافق للحد الأدنى للمنحنى $E_{\text{TOT}}(V)$.

القيم المتحصل عليها لثوابت الشبكة البلورية (a_0) ومعامل الانضغاطية (B_0) والمشتقة الأولى

لمعامل الانضغاطية (B'_0) للخليط $\text{InSb}_x\text{P}_{1-x}$ في الطور زنك بلاند من اجل $0 \leq x \leq 1$. مدونة في الجدول

(1.3)، حيث تم مقارنتها مع بعض النتائج التجريبية والنظرية المتوفرة.



الشكل 2.3: تغيرات الطاقة الكلية بدلالة الحجم للخليط $\text{InSb}_x\text{P}_{1-x}$ في طور زنك بلاند من اجل

$x=0, 0.5, 1$

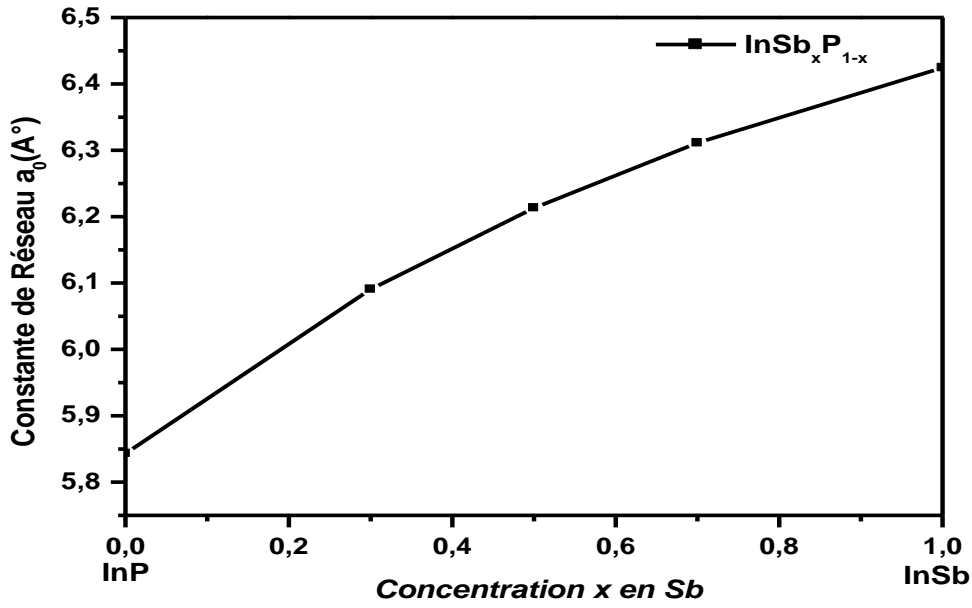
الجدول 1.3: ثابت الشبكة البلورية a_0 ، معامل الانضغاط B_0 ومشتقاته B_0' في الطور زنك بلاند للخليط

$$0 \leq x \leq 1 \text{ من } \text{InSb}_x\text{P}_{1-x}$$

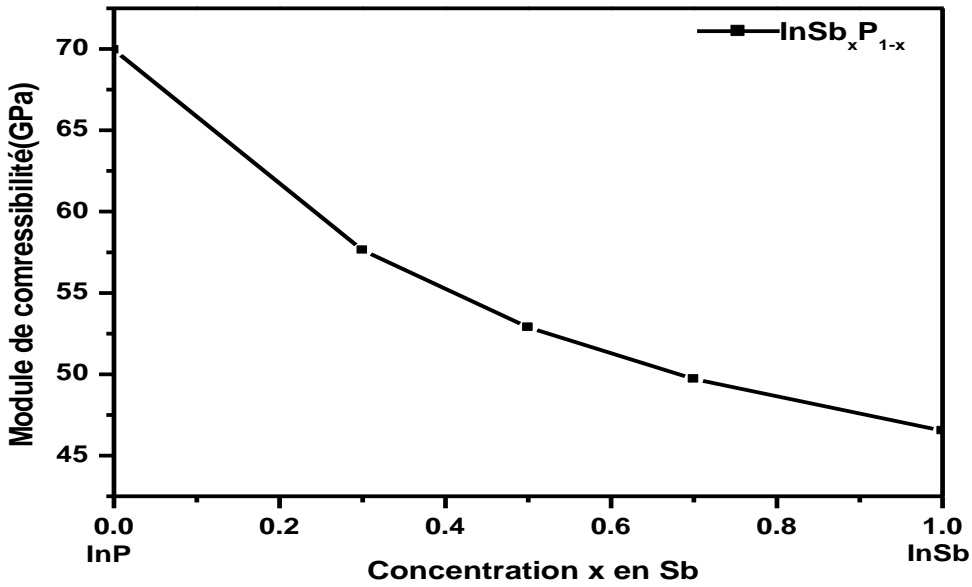
المواد	$a_0(\text{Å})$	$B_0(\text{GPa})$	B_0'	المراجع
InP	5.84 ^{a)} ,	69.95 ^{a)} ,	4.65 ^{a)} ,	عملنا الحالي ب LDA
	5.935 ^{b)} ,5.9814 ^{c)} ,	60.65 ^{b)} ,59.85 ^{c)} ,	4.74 ^{b)} ,5.18 ^{c)} ,	المراجع النظرية
	6.00 ^{d)} ,5.74 ^{e)} ,	62.39 ^{d)} ,76 ^{e)} ,	4.35 ^{d)} ,4.5 ^{e)} ,	
	5.869 ^{f)}	71,1 ^{g)}	4.59 ^{h)}	المراجع التجريبية
InSb _{0.30} P _{0.70}	6.09 ^{a)}	57.63 ^{a)}	4.65 ^{a)}	عملنا الحالي ب LDA
InSb _{0.50} P _{0.50}	6.21 ^{a)}	52,88 ^{a)}	4,75 ^{a)}	عملنا الحالي ب LDA
	, 6.147 ^{j)}			المراجع النظرية
InS _{0.70} P _{0.30}	6.31 ^{a)}	49,71 ^{a)}	4,77 ^{a)}	عملنا الحالي ب LDA
InSb	6.42 ^{a)}	46.52 ^{a)}	4.79 ^{a)}	عملنا الحالي ب LDA
	,6.36 ^{e)}	, 48 ^{e)}	,4.8 ^{e)}	المراجع النظرية
	, 6.464 ⁱ⁾	, 48.3 ⁱ⁾		المراجع التجريبية

a الحساب الحالي ب LDA ; b المرجع [10] ; c المرجع [11] ; d المرجع [12] ; e المرجع [13] ; f المرجع [14] ; g ;

المرجع [15] ; h المرجع [16] ; i المرجع [17] ; j المرجع [18]



الشكل 3.3 : تغيرات ثابت الشبكة a_0 بدلالة التركيز Sb.



الشكل 4.3: تغيرات معامل الانضغاطية B_0 بدلالة التركيز Sb.

استنادا للجدول (1.3) نلاحظ ان قيم ثابت الشبكة a_0 المحسوبة باستخدام تقريب LDA للمركبين

الثنائيين InP ($a=5.84 \text{ Å}$) و InSb ($a=6.42 \text{ Å}$) تتوافق بشكل معقول مقارنة بالقيم التجريبية من

المرجع [14، 17] والنظرية من المرجع [13] بخطأ نسبي قدره (1.9%، 0.9%) على التوالي لكل من InSb و InP.

فيما يتعلق بالخليط InSbxP_{1-x} ومن أجل تركيز في $\text{Sb } x = 0.50$ ، فإن النتيجة التي توصلنا إليها بخصوص ثابت الشبكة a_0 تتوافق بشكل جيد مع النتائج النظرية الواردة في المرجع [18] مع خطأ نسبي قدره (1%).

بالنسبة للتركيزات $x = 0.3$ و $x = 0.7$ ، فإن نتائجنا عبارة عن تنبؤات وقد تكون بمثابة مرجع للدراسات المستقبلية.

كما نلاحظ أن ثابت الشبكة للمركب InSb أكبر من ثابت الشبكة للمركب InP، و بما أن الذرة الشاردة هي نفسها في كل من المركبين، وبالتالي يمكن تفسير هذه النتيجة بسهولة من خلال النظر إلى نصف القطر الذري للعنصر P (1\AA) وللعنصر Sb (1.48\AA)، أي أن ثابت الشبكة يزداد مع زيادة نصف القطر الذري للأيون .

الشكل (3.3) يمثل تغيرات ثابت الشبكة a_0 بدلالة تركيز Sb، حيث نلاحظ من هذا المنحنى زيادة قيمة a_0 بطريقة رتيبة وغير خطية بزيادة التركيز في Sb من InP ($x=0$) إلى InSb ($x=1$). وباستخدام الشكل التربيعي نحصل على معادلة من الشكل:

$$a(x) = -0.32x^2 + 0.89x + 5.85 \quad (3.4)$$

حيث $b=-0.32$ يسمى معامل الانحناء، ومن الشكل (3.3) يلاحظ انحراف بسيط عن قانون فيجار (Loi de Vegard) (التقريب الخطي) ويرجع هذا الانحراف إلى عدم تطابق ثوابت الشبكة بين المركبات الثنائية الأساسية التي تشكل السبائك الثلاثية.

أما بالنسبة لمعامل الانضغاطية B_0 و المشتقة الأولى لمعامل الانضغاط B_0' لكل من المركبين InP و InSb التي تم الحصول عليها فهي في توافق جيد مع القيم التجريبية الواردة في المراجع [15]، [16]، [17]. مع خطأ نسبي في حدود 4٪، والنظرية من المرجح [13] مع خطأ نسبي اقل من 8٪.

من الدراسة النظرية نعلم ان هناك علاقة قوية بين معامل الانضغاطية B_0 وصلابة المواد، وبالتالي المركبين InP و InSb لا يمتلكا نفس الدرجة من الصلابة، وبما أن معامل الانضغاطية للمركب InP (69.95 Gpa) أكبر من معامل الانضغاطية للمركب InSb (46.52 Gpa)، بمعنى ان المركب InP أكبر صلابة من المركب InSb. كما نلاحظ انه مع انخفاض معامل الانضغاطية B_0 يزداد حجم الخلية الأولية أي في InP (199.176 \AA^3) ويكون (264.609 \AA^3) في InSb.

الشكل (4.3) يمثل تغيرات B_0 بدلالة تركيز Sb للخليط $\text{InSb}_x\text{P}_{1-x}$ في الطور زنك بلاند، حيث نلاحظ تناقص B_0 بشكل رتيب وغير خطي مع زيادة تركيز Sb في الخليط $\text{InSb}_x\text{P}_{1-x}$. وباستخدام الشكل التربيعي نحصل على معادلة B من الشكل:

$$B(x) = 21.36x^2 - 43.47x + 69.20 \quad (3.5)$$

3.3 الخصائص المرورية والميكانيكية للخليط $\text{InSb}_x\text{P}_{1-x}$:

1.3.3 حساب خصائص المرورية للخليط $\text{InSb}_x\text{P}_{1-x}$:

1.1.3.3 المقدمة:

تعتبر ثوابت المرورية C_{ij} من بين أهم المعلمات التي تميز الخصائص الفيزيائية للبلورات. من وجهة نظر عملية، تقيس الثوابت المرورية مقاومة الضغوط المطبقة العيانية الصلبة إلى الخارجية وتميز قدرتها على استعادة شكلها الأصلي بعد إزالة الضغط.

وبالتالي، فإنها توفر معلومات مهمة فيما يتعلق بالخصائص الميكانيكية للمواد، مثل الهشاشة والليونة والصلابة. بالإضافة إلى ذلك، بعض معاملات المرورية العيانية، مثل معامل الانضغاط، ومعامل يونغ،

ومعامل القص ونسبة بواسون، والتي تميز الخواص الميكانيكية للمواد الصلبة، تتعامل نظرية المرونة مع سلوك المواد التي لها خاصية استئناف أبعادها وأشكالها عند إزالة القوى التي تنتج التشوهات.

في المنطقة القريبة من موقع توازن الذرات، يمكن للمرء أن يعتبر طاقة المادة الصلبة كدالة تربيعية لمعاملات المادة الصلبة.

تربيع الطاقة يجعل من الممكن التعبير عن علاقة خطية هي قانون HOOK. يتم تعريف هذه العلاقة بفضل الثوابت المرنة.

هناك عدة طرق أولية للحصول على الثوابت المرنة، وأكثرها استخدامًا هي طريقة نيلسن ومارتن [19] Nielsen et Martin والتي تعتمد على شد البلورة في اتجاهات مختلفة وحساب الانفعال الناتج باستخدام ميكانيكا الكم. يتم حل العلاقات بين الإجهاد والانفعال عن طريق تحليل القيمة المفردة للحصول على الثوابت المرنة.

في الآونة الأخيرة همان Hamman [20] طور طريقته، والتي يمكن حسابها باستخدام نظرية الاضطراب الوظيفي للكثافة (DFPT). أظهرت الطريقتان السابقتان نجاحهما في حساب الثوابت المرنة ويمكن استخدامه للتنبؤ بالخصائص المرنة التي لم يتم إنشاؤها تجريبيًا بعد.

تم الحصول على ثوابت المرونة باستعمال برنامج Abinit، بناءً على نظرية الكثافة الوظيفية المضطربة (DFPT)، باستخدام التقريب LDA.

تعتبر الخصائص المرنة للمادة الصلبة مهمة لأنها مرتبطة بخصائص الحالة الصلبة الأساسية المختلفة مثل الإمكانات بين الذرية ومعادلة الحالة وأطياف الفونون. بالنسبة للهيكل المكعب مثل الحالة هنا، هناك ثلاثة ثوابت مرنة مستقلة، وهي C_{11} و C_{12} و C_{44} . يعطي C_{11} المقاومة للضغط أحادي الاتجاه، C_{12} هو معامل التمدد عند الضغط، وبعكس C_{44} مقاومة تشوه القص. في العمل الحالي، تم حساب هذه الثوابت المرنة للخليط InSbxP_{1-x} في الطور زنك بلاند من أجل $0 \leq x \leq 1$.

النتائج التي تم الحصول عليها مدونة في الجدول (2.3)، ولإجراء مقارنة بين النتائج قمنا بالبحث عن المعطيات التجريبية والنظرية المتاحة التي تم اجرائها سابقا. ومن خلال هذا وجدنا ان معاملات المرونة المحسوبة عدديا تتفق بشكل معقول مع القيم التجريبية الواردة في المرجع [22] مع خطأ نسبي أقل من 4% لكل من المركبين InP و InSb. الثوابت المرنة C_{ij} المحسوبة أقرب إلى تلك التي حددت في المرجع [23] مقارنة مع نتائج عبد الرازق الدغدي وآخرون في المرجع [21].

وتجدر الإشارة إلى أن ثوابت المرونة لـ InP أكبر من تلك الموجودة في InSb. يشير هذا إلى أن InP أقوى ميكانيكياً من InSb.

الجدول 2.3: قيم معاملات المرونة C_{ij} في الطور زنك بلاند للخليط $\text{InSb}_x\text{P}_{1-x}$ من اجل $0 \leq x \leq 1$

المواد	C_{11}	C_{12}	C_{44}	المراجع
InP	98.97 ^{a)}	55.58 ^{a)}	44.71 ^{a)} ,	عملنا الحالي ب LDA
	,98.956 ^{b)} , 109.5 ^{d)}	,22.957 ^{b)} , 55.7 ^{d)}	39.889 ^{b)} , 52.6 ^{d)}	المراجع النظرية
	102.2 ^{c)} ,	57.6 ^{c)} ,	,46 ^{c)}	المراجع التجريبية
InSb _{0.30} P _{0.70}	82.03 ^{a)}	45.40 ^{a)}	37.10 ^{a)}	عملنا الحالي ب LDA
	, 88.528 ^{b)}	,33.30 ^{b)}	, 35.723 ^{b)}	المراجع النظرية
InSb _{0.50} P _{0.50}	75.64 ^{a)}	41.58 ^{a)}	34.29 ^{a)}	عملنا الحالي ب LDA
	, 81.672 ^{b)}	, 34.21 ^{b)}	, 32.972 ^{b)}	المراجع النظرية
InSb _{0.70} P _{0.30}	71.26 ^{a)}	38.95 ^{a)}	32.38 ^{a)}	عملنا الحالي ب LDA
	,75.170 ^{b)}	, 34.81 ^{b)}	,30.358 ^{b)}	المراجع النظرية
InSb	67.03 ^{a)} ,	36.34 ^{a)} ,	30.52 ^{a)}	عملنا الحالي ب LDA
	65.314 ^{b)} , 72.0 ^{d)}	8.217 ^{b)} , 35.4 ^{d)} ,	,26.380 ^{b)} 34.1 ^{d)}	المراجع النظرية
	, 66.7 ^{c)}	36.2 ^{c)}	, 30.2 ^{c)}	المراجع التجريبية

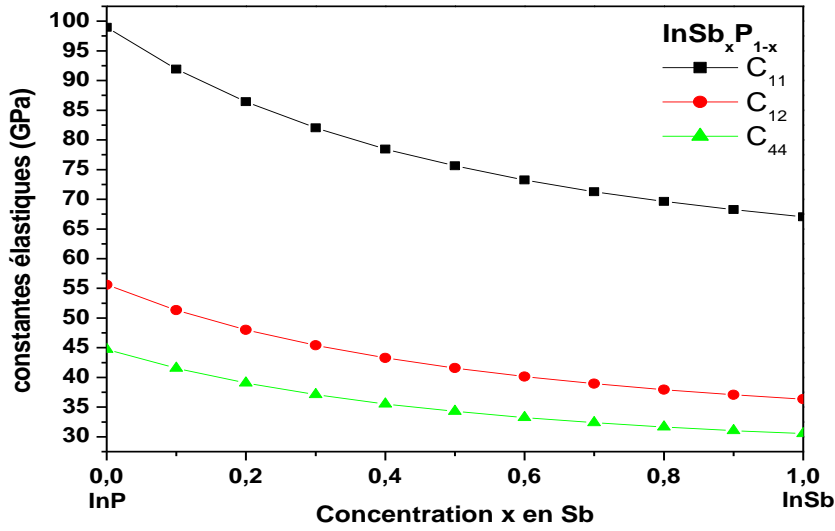
a الحساب الحالي ب LDA ; b المرجع [21] ; c المرجع [22] ; d المرجع [23]

في ضوء هذه الأرقام، ومن الشكل (5.3) يمكن للمرء أن يلاحظ أن جميع معاملات المرونة تتناقص بشكل رتيب مع زيادة تركيز Sb في الخليط $\text{InSb}_x\text{P}_{1-x}$ من أجل $0 \leq x \leq 1$. وتكون التغيرات التحليلية للشوايت C_{ij} بدلالة x من الشكل:

$$C_{11} = 29.55x^2 - 59.69x + 97.95$$

$$C_{12} = 17.54x^2 - 35.68x + 54.94 \quad (3.6)$$

$$C_{44} = 13.37x^2 - 26.71x + 44.23$$



الشكل 5.3: تغيرات معاملات المرونة C_{ij} في الطور زنك بلاند للخليط $\text{InSb}_x\text{P}_{1-x}$ من أجل $0 \leq x \leq 1$

وبتطبيق قاعدة الاستقرار التالية الخاصة بالعينات المكعبة [24].

$$C_{11} - C_{12} > 0$$

$$C_{11} > 0, C_{44} > 0 \quad (3.7)$$

$$C_{11} + 2C_{12} > 0$$

نلاحظ من خلال الجدول (2.3) أن كل ثوابت المرونة للخليط $\text{InSb}_x\text{P}_{1-x}$ من اجل $0 \leq x \leq 1$ موجبة وتخضع لشرط الاستقرار .

2.3.3. حساب الخصائص الميكانيكية للخليط $\text{InSb}_x\text{P}_{1-x}$:

تتيح لنا معرفة ثوابت المرونة حساب معامل الانضغاطية B_0 ، ومعامل يونغ E ومعامل القص G ، الذي يحدد قساوة المادة الصلبة لتغيرات او الانزلاقات للمستويات الذرية بالنسبة للمستويات الاصلية. بالإضافة إلى معامل بواسون ν من خلاله أيضا نحدد نوع الرابطة بين المستويات الذرية المتجاورة. وكل هذه معاملات مهمة في التطبيقات التكنولوجية وتوفر وصفاً أساسياً للسلوك الميكانيكي للمواد.

بالنسبة لحالة الهيكل المكعب، يتم حساب معامل القص G ، ومعامل يونغ E ، ومعامل بواسون من الصيغ أدناه: [25، 26].

$$B = \frac{(C_{11}+2C_{12})}{3} \quad (3.8)$$

$$G = \frac{1}{2} \cdot (G_R + G_V) \quad (3.9)$$

$$G_V = \frac{C_{11}-C_{12}+3C_{44}}{5} \quad (3.10)$$

$$G_R = \frac{5(C_{11}-C_{12})C_{44}}{3(C_{11}-C_{12})+4C_{44}} \quad (3.11)$$

كل من ν و E تعتمد على قيم B و G المحسوبة مسبقاً والتي يتم تحديدها من خلال العلاقات التالية:

$$E = \frac{9BG}{3B+G} \quad (3.12)$$

$$\nu = \frac{3B-E}{6B} \quad (3.13)$$

النتائج التي تم الحصول عليها ممثلة في الجدول (3.3)، تم مقارنتها بالبيانات النظرية المتاحة.

استنادا الى الجدول (3.3) فان القيم المحسوبة لمعامل القص G ، معامل يونغ E ، والقيمة B/G للمركب

الثنائي InP موافقة للقيم النظرية الموجودة في المرجع [27]. كما نلاحظ أن معامل الانضغاطية B للخليط

$\text{InSb}_x\text{P}_{1-x}$ في الطور زنك بلاند من اجل $0 \leq x \leq 1$ أكبر قيمة مقارنة مع القيم المحسوبة لمعامل القص G ، وبالتالي فان المادة المدروسة تكون أكثر مقاومة لتغير الحجم من تغير الشكل.

القاعدة التجريبية الخاصة بقساوة وهشاشة المادة والمحسوبة من معامل الانضغاطية B ومعامل القص

G ، إذا كانت قيمة B/G أكبر من 1.75 تصنف المواد على انها مواد قابلة للسحب وإذا كانت قيمة B/G

أقل من 1.75 تكون سريعة لانكسار (هشة)، النتائج مدونة في الجدول (3.3) تدل على ان المركب

$\text{InSb}_x\text{P}_{1-x}$ هي مواد قابلة للسحب (قاسية) من اجل $0 \leq x \leq 1$.

الجدول 3.3: قيم كل من E ، B/G في الطور زنك بلاند للخليط $\text{InSb}_x\text{P}_{1-x}$ من اجل $0 \leq x \leq 1$

المواد	G	E	B/G	المراجع
InP	33.45 ^{a)}	86.55 ^{a)}	2.09 ^{a)}	عملنا الحالي ب LDA
	34.5 ^{b)}	60.7 ^{b)}	2.05 ^{b)}	المراجع النظرية
	22.5 ^{c)}	61 ^{c)}	3.155 ^{c)}	المراجع التجريبية
$\text{InSb}_{0.30}\text{P}_{0.70}$	27.95 ^{a)}	72.17 ^{a)}	2.06 ^{a)}	عملنا الحالي ب LDA
$\text{InSb}_{0.50}\text{P}_{0.50}$	25.89 ^{a)}	66.77 ^{a)}	2.04 ^{a)}	عملنا الحالي ب LDA
$\text{InSb}_{0.70}\text{P}_{0.30}$	24.49 ^{a)}	63.11 ^{a)}	2.03 ^{a)}	عملنا الحالي ب LDA
InSb	23.16 ^{a)}	59.59 ^{a)}	2.01 ^{a)}	عملنا الحالي ب LDA

a الحساب الحالي ب LDA ; b المرجع [27] ; c المرجع [15] ;

قائمة المراجع:

- [1] O. Hildebrandt, W. Kuebart, M. H. Pilkuhn, Appl. Phys. Lett, 38(1981) 580.
- [2] P. Hohenberg, W. Kohn, Phys. Rev, 136 (1964) 864; W. Kohn, L. J. Sham, Phys. Rev, 140 (1965) 1133.
- [3] X. Gonze, J. -M. Beuken, R. Caracas, F. Detraux, M. Fuchs, G. -M. Rignanese, L. Sindic, M. Verstraete, G. Zerah, F. Jollet, M. Torrent, A. Roy, M. Mikami, Ph. Ghosez, J. -Y. Raty, and D. C. Allan, Comput. Mater. Sci, 25 (2002) 478.
- [4] D. M. Ceperley, B. J. Alder, Phys. Rev. Lett, 45 (1980) 566.
- [5] J. P. Perdew, Y. Wang, Phys. Rev, B 45 (1992) 13244.
- [6] N. Troullier, J. L. Martins, Phys. Rev, B 43 (1991) 1993.
- [7] H.J. Monkhorst, J.D. Pack, Phys. Rev, B 13 (1976) 5188.
- [8] أ.د. نعيمة عبد القادر أحمد, أ.د. محمد أمين سليمان, علم البلورات والأشعة السينية، دار الفكر العربي الطبعة الأولى, 2015.
- [9] F. D. Murnaghan, Proceedings of the National Academy of Sciences, 30 (1944) 244-247.
- [10] W. Zhang, W. Wu, X. Cheng, J. Phys. Rev, B 405 (2010) 4536-4540.
- [11] N. Bouarissa S. A. Siddiqui, M. Boucenna, Crystal Research and Technology, 52(7) (2017) 1700018.
- [12] O. Arbouche, B. Belgoumene, B. Soudinia, Y. Azzaz, H. Bendaoud, K. Amara, , Journal of Computational Materials Science, 47 (2010) 685-692.
- [13] S. Massidda, A. Continenza, A. J. Freeman, T.M. de Pascale, F. Meloni, M. Serra, J. Phys. Rev, B 41 (1990) 12079.
- [14] R. Zallen, W. Paul, Handbook on Semiconductors, 1(1982).
- [15] D.N. Nichols, D.S. Rimai, R.J. Sladek, Sol. Stat. Comm, 36 (1980) 667.
- [16] O. Madelung, Semiconductors. Group IV elements and III-V compounds, Berlin ; New York : Springer-Verlag, 3 (1991).
- [17] H. Landolt and R. Börnstein, Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology, Madelung Springer Berlin. (1984).
- [18] D. Chen, N. M. Ravindra, Journal of Emerging Materials Research, 2(2) (2013) 109-113
- [19] O. H. Nielsen, R. M. Martin, Phys. Rev. Lett, 50 (1983) 697.
- [20] D. R. Hamman, X. Wu, K. M. Rabe and D. Vanderbilt, Phys. Rev, B 71 (2005) 035117.
- [21] A. Degheidy, E. B. Elkenany, O. A. Alfrnwani, Journal of Computational Condensed Matter, 16 (2018) 1-7.
- [22] R. Weil, W.O. Groves, urnal of Applied Physics, 39 (1968) 4049.
- [23] S.Q. Wang and H.Q. Ye1, Journal of Physical Status Solidi, B 240 (2003) 45-54.

- [24] Z.-J. Wu, E. -J. Zhao, H. -P. Xiang, X.-F. Hao, X. -J. Liu, J. Meng, Phys. Rev, B 76 (2007) 054115
- [25] W. Voigt, Lehrbuch der Kristall physik, Leipzig, Teubner, (1928).
- [26] R. Hill, Phys. Soc. London, 65 (1952) 349.
- [27] P. Pluengphon, T. Bovornratanaraks, U. Pinsook, Journal of Alloys and Compounds, 700 (2017) 98-105.

خلاصة عامة

خلاصة عامة:

في هذا العمل قمنا بدراسة الخصائص البنيوية والمرونية والميكانيكية للخليط $\text{InSb}_x\text{P}_{1-x}$ في طور زنك بلاند (Zinc-blende). وذلك باستعمال طريقة الكمون الكاذب والموجات المستوية (PP-PW)، في اطار نظرية الكثافة الوظيفية (DFT) باستعمال تقريب الكثافة المحلية (LDA) تحت تقريب البلورة الوهمية (VCA)، ونظرية الكثافة الوظيفية المضطربة (DFPT) لحساب ثوابت المرونة، النتائج المتحصل عليها من هذا العمل هي كالتالي:

✓ الثوابت البنيوية المحسوبة مثل ثوابت الشبكة ومعامل الانضغاطية لكلا المركبين InP و InSb تتفق جيداً مع النتائج التجريبية والنظرية المتوفرة. اما بالنسبة للتراكيز $x = 0.3$ و $x = 0.7$ ، فإن نتائجنا عبارة عن تنبؤات وقد تكون بمثابة مرجع للدراسات المستقبلية.

✓ أظهرت حساب معاملات المرونة (C_{44}, C_{12}, C_{11}) أن كل ثوابت المرونة للخليط $\text{InSb}_x\text{P}_{1-x}$ من اجل $0 \leq x \leq 1$ موجبة وتخضع لشرط الاستقرار، وقد كانت جيدة مقارنة بالقيم التجريبية لكل من المركبين InP و InSb .

✓ كل من معامل يونغ E ، ثابت القص G والقيمة B/G للمركب الثنائي InP موافقة للقيم النظرية المتاحة.
 ✓ كما استنتجنا أن معامل الانضغاطية B للخليط $\text{InSb}_x\text{P}_{1-x}$ في طور زنك بلاند من اجل $0 \leq x \leq 1$ أكبر قيمة مقارنة مع القيم المحسوبة لمعامل القص G ، وبالتالي فان المادة المدروسة تكون أكثر مقاومة لتغير الحجم من تغير الشكل.

✓ كذلك تم دراسة القاعدة التجريبية الخاصة بقساوة او هشاشة المادة والمحسوبة من معامل الانضغاطية، وثابت القص G ، ووجدنا ان الخليط $\text{InSb}_x\text{P}_{1-x}$ المدروس في التقريب LDA من طبيعة قاسية (مواد قابلة للسحب).

وفي الأخير هذا العمل يفتح العديد من وجهات النظر فيما يتعلق بأساليب الحساب، وهناك طرق مختلفة لدراسة خصائص فيزيائية أخرى مثل: الخصائص الترموديناميكية، الالكترونية، الضوئية والمغناطيسية...

Résumé :

L'objectif de cette thèse est d'étudier les propriétés structurales et élastiques de l'alliage $\text{InSb}_x\text{P}_{1-x}$ dans la phase zinc blende par les méthodes du premier principe. Nos calculs sont basés sur la méthode des pseudo-potentiels et ondes planes (PP-PW), basée sur la théorie fonctionnelle de la densité (DFT) dans l'approximation de la densité locale (LDA) sous le rapprochement de cristal virtuel (VCA) et la théorie des perturbations de la fonctionnelle de la densité (DFPT). Nos résultats sont, d'une part, en bon accord avec les résultats expérimentaux et Théoriques disponibles, et d'autre part constituent une fiable prédiction.

Mots clés : calcul Ab-initio, Semi-conducteurs, la méthode de pseudo-potentiel, DFT, DFPT, semi-conducteurs de type III-V, constants élastiques.

Abstract:

The objective of this thesis is to study the structural and elastic of the $\text{InSb}_x\text{P}_{1-x}$ alloy properties in both zinc blend phase with ab-initio methods. Our calculations are based on the method of the pseudo-potentials and plane waves (PP-PW), Our study is based on functional theory (DFT) in the local density approximation (LDA) under the virtual Crystal approximation (VCA) and the density functional perturbation theory (DFPT). On the one hand, our results are in agreement with the available experimental results and theoretical, and on the other hand are a reliable prediction.

Key words: Ab-initio calculation, the method of pseudo-potential, DFT, DFPT, semiconductor of III-V type, Elastic Constant.

ملخص:

الهدف من هذه الأطروحة هو دراسة الخصائص البنيوية والمرونية للخليط $\text{InSb}_x\text{P}_{1-x}$ في طور زنك بلاند. وتستند حساباتنا على طريقة الكمون الكاذب والموجات المستوية (PP-PW)، دراسة مبنية أساساً على أساس نظرية الكثافة الوظيفية (DFT) باستعمال تقريب الكثافة المحلية (LDA) تحت تقريب البلورة الوهمية (VCA) ونظرية الكثافة الوظيفية المضطربة (DFPT). نتائجنا التي توصلنا إليها هي من جهة مقارنة مع النتائج التجريبية والنظرية الموجودة ومن جهة أخرى هناك نتائج لأول مرة يمكن استعمالها كمرجع.

الكلمات المفتاحية: حساب المبدأ الأول، طريقة الكمون الكاذب، DFT، DFPT، انصاف النواقل من نوع V-

III، ثوابت المرونة.