

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



ميدان: علوم المادة
فرع: الفيزياء.
تخصص: الفيزياء الطاقوية و
الطاقات

كلية: العلوم.
قسم: الفيزياء.

رقم: Ph/ENR/11/2023

مذكرة مقدمة لنيل شهادة الماستر أكاديمي

إعداد الطالب(ة):

حليتهم امال

حيجولي فاطنة

تحت عنوان

المواد الشالكوجينية الرباعية بقاعدة المعادن الانتقالية:
دراسة التقريب الأول

تمت المناقشة يوم .. / 06 / 2023 أمام اللجنة المكونة من:

رئيسا	اسم ولقب الاستاذ(ة): غلاب تركية	جامعة محمد بوضياف المسيلة
مشرفا ومقررا	اسم ولقب الاستاذ(ة): شريفي زليخة	جامعة محمد بوضياف المسيلة
مناقشا	اسم ولقب الاستاذ(ة): بعزیز حكيم	جامعة محمد بوضياف المسيلة

السنة الجامعية: 2023/2022

شكر وتقدير

الحمد لله الذي يسر لنا سبيل العلم والمعرفة ووفقنا لإتمام هذه المذكرة

أما بعد فإننا نتوجه بالشكر الجزيل لكل من ساهم وساندنا في هذا العمل

ونخص بالذكر الأستاذة المشرفة شريفي زليخة التي لم تبخل علينا بتوجيهاتها

ونصائحها التي كانت خير سند لنا في إتمام هذا البحث.

كما نتقدم بجزيل الشكر للجنة المناقشة، الأستاذ الكريم: حكيم بعزیز والأستاذة

الكريمة: غلاب تركية لقبولهما مناقشة عملنا وتصويبه، وفقهما الله وأدام تألقهما...

كما نحمل الشكر والعرفان إلى الأستاذ ورئيس قسم الفيزياء سالمى محمد والى كل

من أمدنا بالعلم والمعرفة، وأسدى لنا النصح والتوجيه في جميع مراحل تعليمنا

ولا ننسى زملائنا طلبة قسم فيزياء الطاقة وطلبة الدكتوراه الذين كان لهم الفضل في

توجيهنا ومساعدتنا والى القائمين على مخبر الفيزياء بجامعة المسيلة وجميع الباحثين

حيث شكروا أسرة واحدة طيلة السنة.

إهداء

بسم الله، اللهم لك الحمد ولك الشكر كما ينبغي لجلال وجهك وعظيم سلطانك،
والصلاة والسلام على خير عباد الله محمد المبعوث رحمة للعالمين أما بعد:

أهدي هذا العمل المتواضع الذي هو ثمرة جهدي

الى التي حملتني تسعاً، وسهرت لأجلي فكانت لي نبراساً ينير دربي ومنبع الحنان
ورمز العطاء، ومنبع طموحي أمي الحبيبة حفظها الله.

الى من كان حبه واهتمامه قوام عزيمتي، الى روح ابي الطاهرة ضياء حياتي الغالي
رحمة الله عليه .

وكل من ساندني من اخوتي واخواتي الاحباء الذين كانوا لي دعماً في مواصلة دراستي
ووصولي الى هذا المستوى والى كافة العائلة كبيراً وصغيراً.

الى البراعم: اسراء , مسعود عبد الرؤوف و عبد الجليل حفظهم الله ورعاهم .

الى زميلتي ورفيقة دربي أمال حليتييم وفقها الله.

إهداء

الحمد لله وكفى والصلاة على الحبيب المصطفى واهله ومن وفى اما بعد:
الحمد لله الذي وفقنا لتثمين هذه الخطوة في مسيرتنا الدراسية بمذكرتنا هذه ثمرة الجهد
والنجاح بفضلته تعالى.

مهدة الى الوالدين الكريمين حفصهما الله وادامهما نورا لدربي.
لكل العائلة الكريمة التي ساندتني ولا تزال من اخوة واخوات،
الى رفيقة المشوار التي قاسمتني لحظاته فاطنة حيجولي رعاها الله ووفقها.
الى كل من كان لهم أثر على حياتي، والى كل من أحبهم قلبي ونسيهم قلمي.

فهرس

شكر وتقدير

إهداء

1..... مقدمة عامة

الفصل الأول: معلومات أساسية حول الطاقة الكهروضوئية

4..... 1.I مقدمة

4..... 2.I الطاقة الشمسية

4..... 1.2.I الشمس

5..... 2.2.I أهمية وخصائص الطاقة الشمسية

6..... 3.2. I الطاقة الشمسية الكهروضوئية

6..... 3. I نبذة تاريخية حول الخلايا الكهروضوئية

7..... 1.3.I مبدأ عمل الخلية الكهروضوئية

9..... 4.I خصائص التيار- الجهد (I-V)

11..... 5.I انواع الخلايا الشمسية

12..... 1.5.I الخلايا الشمسية السيليكونية المتبلورة

12..... 2.5.I الخلايا الشمسية السيليكونية أحادية التبلور

13..... 3. 5.I الخلايا الشمسية متعددة البلورات

14..... 4.5.I الخلايا الشمسية من الشرائح الرقيقة (TFSC)

15..... 5.5.I الخلايا الشمسية من السيليكون الغير متبلور

15..... 6.5.I الخلايا الشمسية من كادميوم التيلوريد

16..... 7.5.I الخلايا الشمسية المتبلورة الشريطية

17..... 6.I إيجابيات وسلبيات الطاقة الكهروضوئية

18..... 7.I الجانب البيئي للخلايا الكهروضوئية

18..... 8.I وحدات كهروضوئية

20.....إعادة تدوير الألواح الكهروضوئية.....9.I

20.....الخاتمة.....

21.....قائمة المراجع.....

الفصل الثاني: نظرية دالية الكثافة

23 1.II مقدمة.....

23 2.II معا دلة شرودينغر للبلورة.....

25 3.II المستوى الأول: تقريب Born-Oppenheimer.....

25 4.II المستوى الثاني : نظرية دالية الكثافة.....

27 1.4.II نظرية Thomas-Fermi.....

27 2.4.II نظريتي هوهنبارغ وكوهن Hohenberg-Kohn.....

28 3.4.II معادلة كوهن- شام Kohn-Sham.....

29 5.II المستوى الثالث : حلول معادلة كوهن - شام Kohn-Sham.....

29 6.II دالية تبادل - ارتباط.....

30 1.6.II تقريب كثافة الموضع (LDA).....

30 2.6.II تقريب التدرج المعمم (GGA).....

31 3.6.II التقريب المعدل لبريك جونسن mbj.....

23..... قائمة المراجع.....

الفصل الثالث: طريقة الأمواج المستوية المتزايدة خطيا

33 1.III مقدمة.....

33 2.III طريقة الموجة المستوية المتزايدة APW.....

35 3.III طريقة الموجة المستوية المتزايدة خطيا LAPW.....

36 4.III إيجابيات طريقة الموجة المستوية المتزايدة خطيا LAPW.....

36 5.III طريقة الموجة المستوية المتزايدة خطيا LAPW والكمون الكامل.....

36 6.III تعريف برنامج Wien2K.....

36 7.III برنامج Wien2K.....

37 8.III استخدامات برنامج Wien2K.....

39..... قائمة المراجع.....

الفصل الرابع: تحليل النتائج ومناقشتها

40.....	1. IV مقدمة
40.....	2. IV . البنية البلورية للمركب $TiCuCrS_4$
42.....	3. IV التوزيع الالكتروني لكل عنصر
42..	4. IV تفاصيل الحساب
44.....	5. IV الخصائص البنيوية للمركب $TiCuCrS_4$
44.....	6. IV دراسة استقرار المركب $TiCuCrS_4$
44.....	7. IV الخصائص الالكترونية للمركب $TiCuCrS_4$
45.....	8. IV بنية عصابة الطاقة الالكترونية للمركب $TiCuCrS_4$
47.....	9. IV كثافة الحالات الالكترونية
47.....	10. IV الخواص الضوئية
47.....	1.10. IV تذكير نظري
47.....	2.10. IV انعكاس الموجات المستوية
47.....	3.10. IV تحديد دالة العزل بواسطة برنامج Wien2K
47.....	4.10. IV النتائج والمناقشة
47.....	5.10. IV الجزء التخليبي لدالة العزل الضوئي
47.....	6.10. IV الجزء الحقيقي لدالة العزل
47.....	7.10. IV قرينة الانكسار
47.....	8.10. IV معامل الانطفاء

47.....	9.10. IV طيف الانعكاسية
47.....	10.10. IV معامل الامتصاص
47.....	12.10. IV دالة الضياع في الطاقة
50.....	قائمة المراجع
51.....	خاتمة عامة

فهرس الأشكال

الفصل الاول : عموميات حول الفعل الكهروضوئي

5.....	الشكل 1.I عرض امتصاص الإشعاع الشمسي من انبعائه حتى يصل إلى سطح الأرض
5.....	الشكل 2.I أطيف الإشعاع الشمسي AM0 و AM1.5
7.....	الشكل 3.I مخطط نطاق الطاقة لأشباه الموصلات
8.....	الشكل 4.I مختلف التفاعلات بين الفوتون واشباه الموصلات
8.....	الشكل 5.I مخطط التقاطع p-n
9.....	الشكل 6.I البنية القاعدية للخلايا الشمسية الكهروضوئية
10.....	الشكل 7.I خصائص التيار-توتر لخلية كهروضوئية
13.....	الشكل 8.I بنية خلية شمسية أحادية الطور
14.....	الشكل 9.I بنية خلية شمسية متعددة البلورات
15.....	الشكل 10.I خلية شمسية من السيليكون الغير متبلور
17.....	الشكل 11.I خلايا شمسية شريطية متعددة الطبقات
19.....	الشكل 12.I تكوين وحدة فلطانية ضوئية بلورية من السيليسيوم
19.....	الشكل 13.I أنواع مختلفة من الوحدات الكهروضوئية

الشكل 11.I : تقنيات مختلفة لترسيب الأغشية الرقيقة.....19

الفصل الثاني: نظرية دالية الكثافة

الشكل 1.II مخطط لنظرية دالية الكثافة DFT.....26

الفصل الثالث: طريقة الأمواج المستوية المتزايدة خطياً

الشكل 1.III كيون (MT) « Muffin-Tin »33

الشكل 2.III خوارزمية عمل برنامج Wien2K.....38

الفصل الرابع: تحليل النتائج ومناقشتها

الشكل IV 1. البنية البلورية للمركب $TiCuCrS_4$ 41

الشكل IV 2. تغيير الطاقة الكلية بدلالة الحجم للمركب $TiCuCrS_4$ باستخدام تقريب GGA و LDA44

الشكل IV 3. عصابة الطاقة للمركب $TiCuCrS_4$ المحسوبة باستخدام التقريب GGA45

الشكل IV 4. عصابة الطاقة للمركب $TiCuCrS_4$ المحسوبة باستخدام التقريب LDA46

الشكل IV 5. عصابة الطاقة للمركب $TiCuCrS_4$ المحسوبة باستخدام التقريب GGA- mbj46

الشكل IV 6. عصابة الطاقة للمركب $TiCuCrS_4$ المحسوبة باستخدام التقريب LDA- mbj47

الشكل IV 7. عصابة الطاقة للمركب $TiCuCrS_4$ المحسوبة باستخدام التقريب GGA- eV47

الشكل IV 8. كثافة الحالات الكلية للمركب $TiCuCrS_4$ باستخدام تقريب GGA و LDA48

الشكل IV 9. كثافة الحالات الكلية للمركب $TiCuCrS_4$ باستخدام تقريب GGA- mbj و LDA49

الشكل IV 10. كثافة الحالات الكلية للمركب $TiCuCrS_4$ باستخدام تقريب GGA- eV50

الشكل IV 11. تغيرات دالة العزل الجزء التخيلي من $\epsilon_2(\omega)$ و الجزء الحقيقي $\epsilon_1(\omega)$ بدلالة الطاقة

المركب $TiCuCrS_4$ باستخدام التقريبات GGA و LDA و EV-GGA58

الشكل IV. 12. تغيرات معامل الانكسار $n(\omega)$ بدلالة الطاقة للمركب TiCuCrS_4 باستعمال التقريبات GGA و LDA و EV-GGA	59
الشكل IV. 13. تغيرات معامل الانطفاء $k(\omega)$ بدلالة الطاقة للمركب TiCuCrS_4 باستعمال التقريبات GGA و LDA و EV-GGA	60
الشكل IV. 14. تغير أطيف الانعكاسية $R(\omega)$ للمركب TiCuCrS_4 بدلالة الطاقة باستعمال التقريبات GGA و LDA و EV-GGA	61
الشكل IV. 15. معامل الامتصاص $I(\omega)$ بدلالة الطاقة للمركب TiCuCrS_4 باستعمال التقريبات GGA و LDA و EV-GGA	62
الشكل IV. 16. التغير في الموصلية الضوئية بدلالة الطاقة للمركب TiCuCrS_4 باستعمال التقريبات GGA و LDA و EV-GGA	63
الشكل IV. 17. دالة ضياع الطاقة الالكترونية بدلالة الطاقة للمركب TiCuCrS_4 باستعمال التقريبات GGA و LDA و EV-GGA	65

فهرس الجداول

الجدول IV. 1. قيم كل من $K_{\text{Point}} \times R_{\text{mt}} \times K_{\text{max}}$ للمركب TiCuCrS_4	42
الجدول IV. 2. قيم كل من ثوابت الشبكة $a(A^\circ)$ و $b(A^\circ)$ و $c(A^\circ)$, معامل الانضغاطية β و المشتقة الأولى لمعامل الانضغاطية β' للمركب TiCuCrS_4	44
الجدول IV. 3. قيم $n(0)$ و $\epsilon_1(0)$ المحسوبة للمركب TiCuCrS_4 بواسطة GGA و LDA و EV-GGA	47

مقدمة عامة

مقدمة عامة

مقدمة عامة:

تعتبر طاقة الشمس المصدر الرئيسي للطاقة على كوكب الأرض، ويمثل الإشعاع الشمسي الذي تتلقاه الأرض أكثر من 10 000 ضعف الاستهلاك العالمي، لذلك فهي طاقة متجددة ووفيرة، يمكن أن تغطي تماما كل احتياجاتنا من الطاقة في المستقبل أو جزءا كبيرا منها. واستغلال الطاقة الشمسية لم يكن وليد اليوم انما استخدمها الانسان منذ القدم في تطبيقات بسيطة، واخذت هذه الاستخدامات في التوسع والتطور مع تطور أنظمة الطاقة الشمسية.

من المعروف ان الطاقة الشمسية الكهروضوئية هي الطاقة الأكثر صداقة للبيئة، يتكون مصطلح " الكهروضوئية " PHOTOVOLTAIQUE من كلمتين: "Photo" تعني الضوء "Volta" تعني الكهرباء مشتقة من اسم العالم الفيزيائي أليساندرو فولتا مخترع البطارية الكهربائية في عام 1800 [1]. وهو يشير إلى تحويل الإشعاع الشمسي إلى كهرباء بواسطة الخلايا الشمسية والوحدات الضوئية على أساس مواد أشباه الموصلات، وهذا التحويل يسمى التأثير الكهروضوئي

يعود اكتشاف الخلايا الضوئية الى العالم الفرنسي "Bacquerel" حيث اكتشف في سنة 1839 ان بعض المواد تنتج تيار كهربائي صغير عند تعرضها للضوء، وبعد اجراء عدة تطورات على هذه المواد، تم الإعلان عن اول خلية شمسية مصنعة من طرف مجموعة من العلماء الأمريكيين في عام 1942، ولكن لم يبدأ الاستخدام الفعلي لها الا في عام 1958 حيث اعتمد على الخلايا الشمسية كمصدر رئيسي للكهرباء في التطبيقات الفضائية. وقد بدأ التفكير الجدي في توسيع استخدام الخلايا الشمسية لتوليد الكهرباء لمختلف الاستخدامات كبديل عن المصادر التقليدية للطاقة ابتداء من عام 1975. [2]

تقدم تطبيقات الحسابات النظرية دعما كبيرا للفيزياء الطاقوية، حيث تمكنا هذه الأخيرة من المعرفة الدقيقة للجسم المدروس، بعيدا عن استخدام الوسائل التجريبية أو الخوض في التجارب المعقدة. ولقد تطورت نظرية ميكانيك الكم انطلاقا من الميكانيك الكلاسيكي، واهتم ميكانيك الكم بدراسة خصائص بعض المواد باستخدام معادلة شرودينجر وحلها لعدد محدد من الذرات و الجزيئات، أما في الأنظمة المعقدة تستخدم العديد من التقريبات للحصول على معلومات جد دقيقة ومن بينها نظرية الدالة الوظيفية للكثافة DFT والتي تهدف إلى إيجاد الخصائص الفيزيائية والكيميائية للأنظمة من خلال معرفة البنية الإلكترونية. لقد اعتمدنا في عملنا هذا على نظرية الدالة الوظيفية للكثافة (DFT) هذه الطريقة تعتمد على معادلة شرودينجر ولكن الاختلاف يكمن في الدالة الموجية، أي بدلا من استخدام الدالة الموجية يتم الاستعاضة عنها بالتوزيع الإلكتروني مباشرة (دالة الكثافة الإلكترونية)، والدالة الوظيفية هي عبارة عن دالة ينتج عن

مقدمة عامة

حلها دالة أخرى أي دالة الدالة، وبالتالي يتم اعتبار الطاقة تابع لدالة الكثافة. وطريقة الامواج المستوية المتزايدة خطيا والكمون الكامل (FP-LAPW).

درسنا في هذا العمل، الخصائص البنيوية والالكترونية والضوئية للمركب TiCuCrS_4 حيث تناولنا أربعة فصول:

الفصل الاول: قمنا بدراسة أساسية حول الفعل الكهروضوئي والطاقة الشمسية.

الفصل الثاني: تطرقنا الى دراسة نظرية دالية الكثافة DFT

الفصل الثالث: درسنا طريقة الأمواج المستوية المزادة خطيا والكمون الكامل "FP-LAPW" والمدمجة في برنامج Wien2k.

الفصل الرابع: قمنا بتحليل النتائج ومناقشتها وذلك من اجل دراسة الخصائص البنيوية والإلكترونية والضوئية وذلك باستخدام التقريبات التالية: تقريب التدرج المعمم GGA وكذا تقريب كثافة الموضع، LDA و التقريب المعدل لبريك جونسون (LDA-mBJ), من اجل حصول على نتائج جيدة حول الخصائص الالكترونية وتحسين المانع الطاقى.

وفي الاخير قمنا بتقديم خلاصة عامة لمختلف هذه النتائج.

مقدمة عامة

قائمة المراجع

- [1] A. E. Becquerel, Comptes Rendus de l'Académie des Sciences, 9, 145-149 (1839).
- [2] Solar Cells 2011 Katja Vozel.

الفصل الأول

معلومات أساسية حول الطاقة الكهرو ضوئية

1. I مقدمة :

تعتبر طاقة الشمس المصدر الرئيسي للطاقة على كوكب الأرض، ويمثل الإشعاع الشمسي الذي تتلقاه الأرض أكثر من 10 000 ضعف الاستهلاك العالمي ، لذلك فهي طاقة متجددة و وفيرة، يمكن أن تغطي تماما كل احتياجاتنا من الطاقة في المستقبل أو جزءا كبيرا منها. واستغلال الطاقة الشمسية لم يكن وليد اليوم انما استخدمها الانسان منذ القدم في تطبيقات بسيطة ، واخذت هذه الاستخدامات في التوسع والتطور مع تطور أنظمة الطاقة الشمسية.

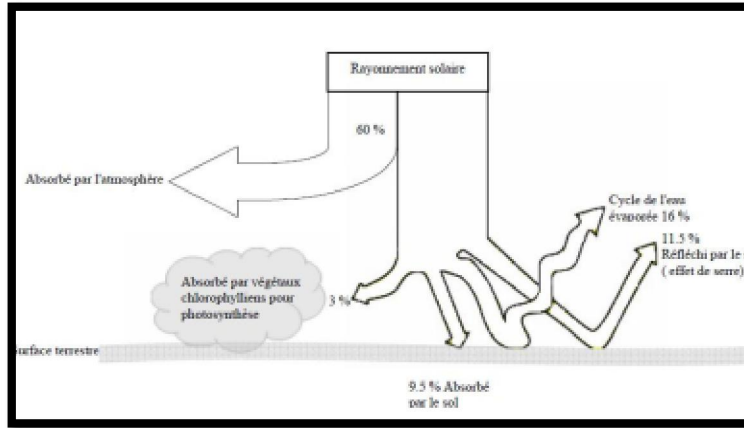
2. I الطاقة الشمسية :**1.2. I الشمس :**

الشمس هي كوكب او نجم ، حجمها اكثر من مليون مرة من حجم الأرض، موجودة على مسافة تناهز 150 مليون كلم من الأرض . وتتكون أساسا من 75% من الهيدروجين و 25% من الهيليوم. درجة حرارة سطحها 5800K ، ويمكن أن تزيد إلى 15 مليون درجة في المركز، يتم تحويل 564 مليون طن من الهيدروجين إلى 560 مليون طن من الهيليوم عن طريق الاندماج النووي ، 4 مليون طن هو الفرق في الطاقة الملزمة بين الهيدروجين و بروتونات الهيليوم ،التي تعطي طاقة في شكل إشعاع، تقدر بـ $3.7 \cdot 10^{26}$ ج/ثا . وفي هذه الدرجة ذاتها، تبلغ استطاعة هذا الإشعاع الذي يصل إلى الغلاف الجوي للأرض (الإشعاع الشمسي الكلي) 1366 واط/م². عندما يمر عبر الغلاف الجوي، يتم امتصاص جزء من الطيف بواسطة غازات مختلفة مثل O₃ و CO₂ (امتصاص الأشعة فوق البنفسجية) أو أبخرة الماء (امتصاص الأشعة تحت الحمراء) [1]. ويبين الشكل (1-I) توزيع الإشعاع الشمسي .

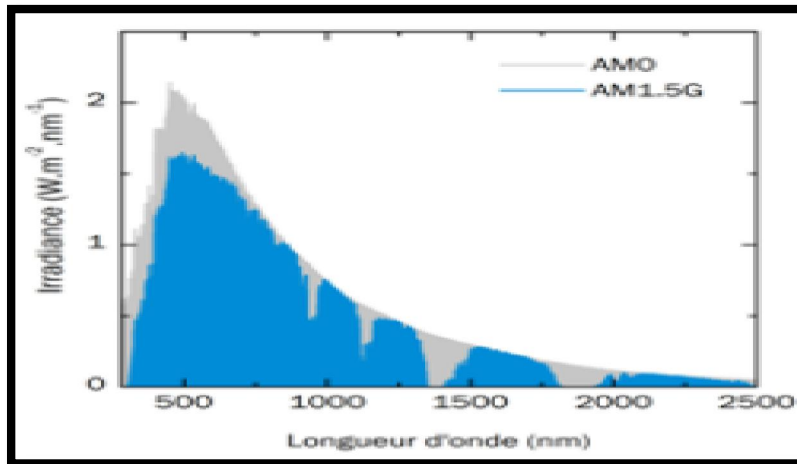
إذاً الطيف الشمسي يختلف بين الفضاء و سطح الكرة الأرضية. وهكذا، يتم تقليل الطاقة الشمسية المتاحة على سطح الأرض، اعتمادا على المسافة التي تعبرها في الغلاف الجوي من الإشعاع يسمى هذا كتلة الهواء ووفقا للزاوية بين الإشعاع العمودي والشمسي.

$$AM = 1/\cos\theta$$

كتلة الهواء تصبح :



الشكل 1.I: عرض امتصاص الإشعاع الشمسي من انبعائه حتى يصل إلى سطح الأرض



الشكل 2.I: أطيف الإشعاع الشمسي AM0 و AM1.5

ويعني تعريفه أن AM0 يتوافق مع الطيف خارج الأرض، وقد تم تعريف AM1.5 (Global) كمرجع دولي، وهذا الطيف المقابل للكتلة الهوائية 1.5 وزاوية 48.2 درجة [2]، ويأخذ في الاعتبار الإشعاع المباشر وكذلك الإشعاع المنتشر. ويقارن المنظران في الشكل 2-I.

2.2.I أهمية وخصائص الطاقة الشمسية:

للطاقة الشمسية أهمية كبيرة في جميع جوانب الحياة ، نذكر منها النقاط التالية :

- ✓ الطاقة الشمسية طاقة هائلة من حيث مخزونها وكميتها، من حيث المخزون الشمس منبع لا ينتهي من الطاقة، ومن حيث كميتها ما يصل الى الأرض من الأشعة يعادل عدة أضعاف من الاحتياجات البشرية للطاقة .
- ✓ تعد هذه الطاقة مصدرا نظيفا من حيث تأثيرها على البيئة.
- ✓ كثافة الطاقة القصوى التي يتم تلقيها على مستوى الأرض ($1\text{kW}/\text{m}^2$) منخفضة، لذلك فإننا ندعوها الطاقة المنتشرة. وهي متقطعة ومتغيرة بسبب بالتناوب ليلا ونهارا، والاختلافات الموسمية واليومية في ضوء الشمس. تتميز بالوفرة، وكوكبنا يتلقى أكثر من 104 أضعاف الطاقة التي تستهلكها البشرية.
- ✓ الطاقة التي يتلقاها سطح معين غير قابلة للاسترداد في مجملها، ويرجع فقدان الطاقة في أشكال موصلة، الحمل الحراري أو الإشعاع.
- ✓ هناك تقنيات مختلفة لالتقاط بعض من هذه الطاقة: الطاقة الشمسية الحرارية، والطاقة الشمسية الديناميكا الحرارية والطاقة الشمسية الكهروضوئية.

I. 3.2 الطاقة الشمسية الكهروضوئية :

من المعروف ان الطاقة الشمسية الكهروضوئية هي الطاقة الأكثر صداقة للبيئة ، يتكون مصطلح " الكهروضوئية " PHOTOVOLTAIQUE من كلمتين: "Photo" تعني الضوء "Volta" تعني الكهرباء مشتقة من اسم العالم الفيزيائي أليساندرو فولتا مخترع البطارية الكهربائية في عام 1800 [3]. وهو يشير إلى تحويل الإشعاع الشمسي إلى كهرباء بواسطة الخلايا الشمسية والوحدات الضوئية على أساس مواد أشباه الموصلات، وهذا التحويل يسمى التأثير الكهروضوئي.

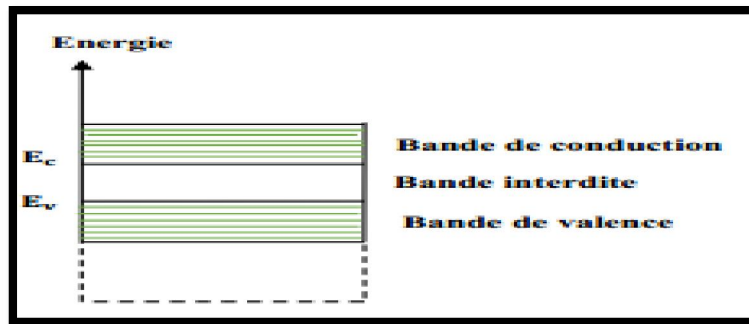
I. 3. نبذة تاريخية حول الخلايا الكهروضوئية :

يعود اكتشاف الخلايا الضوئية الى العالم الفرنسي "Bacquerel" حيث اكتشف في سنة 1839 ان بعض المواد تنتج تيار كهربائي صغير عند تعرضها للضوء، وبعد اجراء عدة تطورات على هذه المواد، تم الإعلان عن اول خلية شمسية مصنعة من طرف مجموعة من العلماء الأمريكيين في عام 1942، ولكن لم يبدأ الاستخدام الفعلي لها الا في عام 1958 حيث اعتمد على الخلايا الشمسية كمصدر رئيسي للكهرباء في التطبيقات الفضائية . وقد بدأ التفكير الجدي في توسيع استخدام الخلايا الشمسية لتوليد الكهرباء لمختلف الاستخدامات كبديل عن المصادر التقليدية للطاقة ابتداء من عام 1975. [4]

I.3.1 مبدأ عمل الخلية الكهروضوئية:

الخلايا الضوئية هي محولات الطاقة، وتتألف من مادة أشباه الموصلات التي تمتص الطاقة الخفيفة وتحول مباشرة إلى التيار الكهربائي وعناصر أخرى. في الواقع، يعتمد إنتاج الطاقة الكهروضوئية على خصائص مواد أشباه الموصلات. هذه الأخيرة قادرة على استيعاب فوتونات الطاقة $E_{\text{photon}} = h\nu$ أكبر من عرض الفجوة المحظورة: على سبيل المثال $E_g = E_c - E_v$ [5] مع E_c ، E_v هي على التوالي الطاقة القصوى من الفجوة التكافؤ والحد الأدنى من الفجوة، على سبيل المثال هو قيمة عتبة مناسبة لكل مادة من أشباه الموصلات وتتراوح من 1 إلى 1.8 إلكترون فولت للتطبيقات الكهروضوئية.

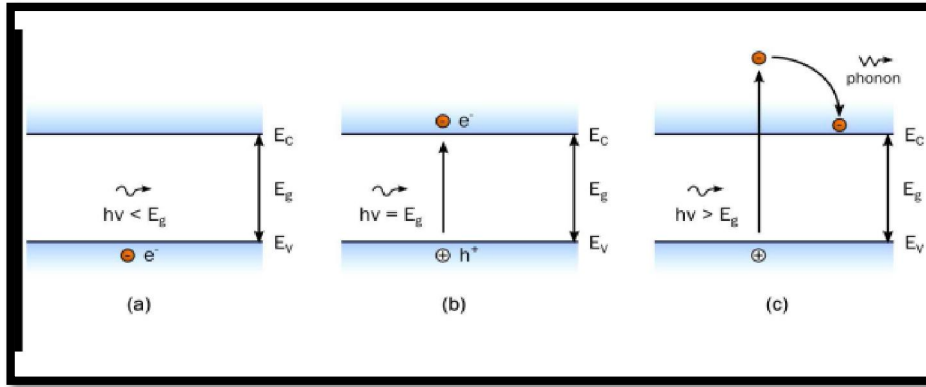
يظهر مخطط نطاق الطاقة لأشباه الموصلات في الشكل I.3



الشكل 3.I : مخطط نطاق الطاقة لأشباه الموصلات

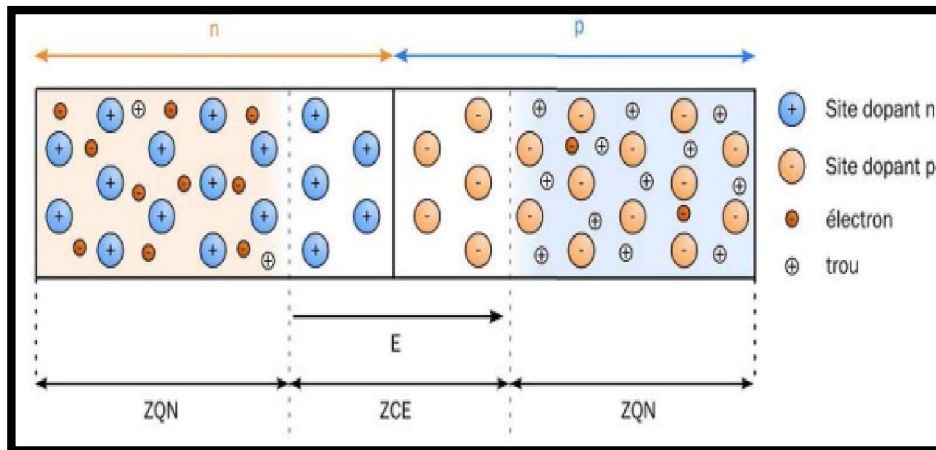
في أشباه الموصلات، تكون المقاومة متوسطة بين تلك الخاصة بالموصلات والعوازل. هناك نوعان من أشباه الموصلات: النوع n والنوع p وهذا حسب نوع الحاملات الغالبة (الإلكترونات أو الثقوب). عندما يدخل الضوء إلى أشباه الموصلات، توفر فوتوناته الطاقة اللازمة التي تسمح للإلكترونات في نطاق التكافؤ بالتحرك والتحرك نحو النطاق التوصيل في مادة أشباه الموصلات وبالتالي يخلق زوجاً من الثقوب الإلكترونية.

يتم تمثيل التفاعلات المختلفة بين الفوتون وأشباه الموصلات في الشكل (4.I)



الشكل 4.I: مختلف التفاعلات بين الفوتون وأشباه الموصلات

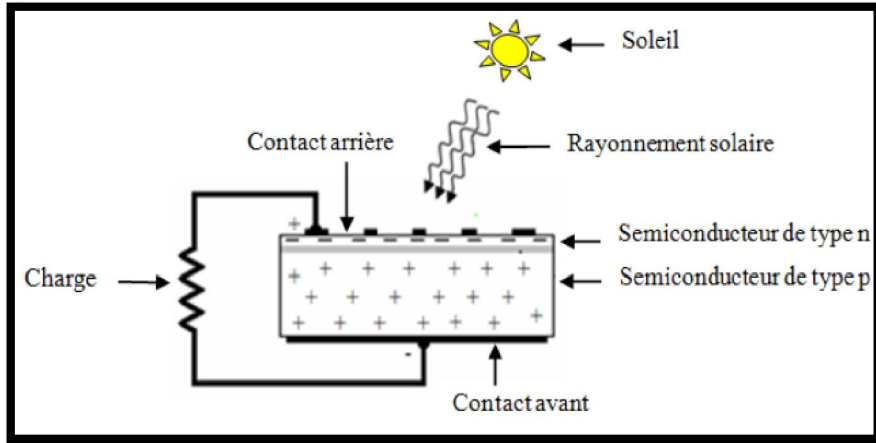
ومع ذلك ، فإن المواد أشباه الموصلات وحدها لا تولد الحالة الكهربائي. إذاً، فإن التأثير الضوئي يظهر نفسه عندما يتم امتصاص الفوتون في أشباه الموصلات p-doped (موجب) و n (سلبى) ، ويشار إليه باسم تقاطع p-n (أو n-p)، لذلك يتم استخدام تقاطع p-n بدلاً من أشباه الموصلات البسيطة لإنشاء تيار. الحقل الكهربائي الذي شكله هذا التقاطع والحاضر في شحنة الفضاء (ZCE) حيث تفصل الإلكترونات والثقوب. كل نوع من الناقل إلى المنطقة حيث هو حامل الأغلبية (الإلكترونات إلى المنطقة n والثقوب إلى المنطقة p) ويبين الشكل 5.I رسماً بيانياً للتقاطع p-n.



الشكل 5.I مخطط التقاطع p-n

في الخلية شمسية يكون واحدا فقط من اثنين من مكونات تقاطع (n أو p) تستخدم كمادة تمتص الضوء، يتم إجراء الاتصال الأمامي بشبكة والتلامس الخلفي يحتل الجانب الخلفي بأكمله من الخلية.

يوضح الشكل 6.I البنية القاعدية للخلايا الشمسية الكهروضوئية .



الشكل 6.I البنية القاعدية للخلايا الشمسية الكهروضوئية

من أجل إنتاج المزيد من الطاقة، يتم الجمع بين الخلايا على التسلسل أو التفرع مع تشكيل وحدة نمطية أو لوحة.

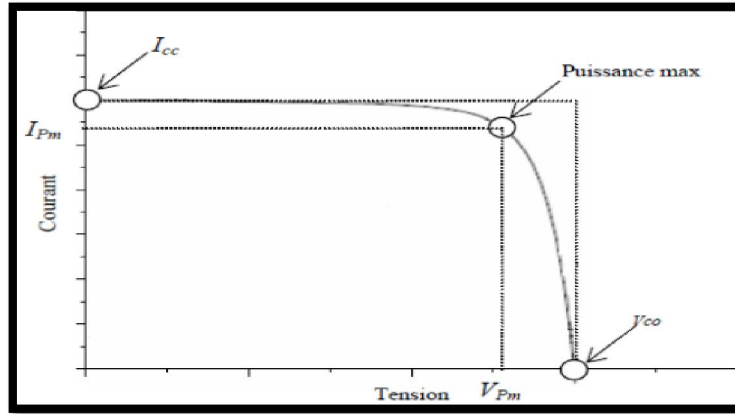
4.I خصائص التيار-الجهد (I-V):

الخاصية المميزة للخلايا الشمسية من دون أي إشعاعية (خاصية الاظلام) تتوافق مع الخاصية المميزة للدايود (1)، وعند سقوط الأشعة على الخلايا الشمسية تنزحزح هذه الخاصية بمقدار التيار الضوئي I_{photo} في الاتجاه المانع لمرور التيار (خاصية الإضاءة). ويتم إيجاد هذه الخاصية للخلايا الشمسية بتوصيل مقاومة حمل متغيرة والرسم بيانياً بين التيارات والجهود الكهربائية الناتجة لقيم مختلفة.

$$P_{opt} = I_{sc} \cdot V_{oc} \quad (1. I)$$

ويستند تعريف معلومات الخلية على العلاقة I(V) [5]

الإضاءة معينة مثل ما يقدمه المنحنى الموضح في الشكل 7.I.



الشكل 7.I خصائص التيار-توتر لخلية كهروضوئية

جهد الدارة المفتوح (V_{co}) هو الجهد الذي يتوافق مع انعدام التيار. يتم الحصول عليه بربط فولتمتر مباشرة بأطراف الخلية.

التيار القصير الدائرة (I_{cc}) هو التيار الذي يتوافق مع انعدام الجهد. يتم الحصول على قيمته عن طريق توصيل أمبيرمتر في محطات الخلية.

الطاقة الأعظمية المثالية هي النقطة التي توافق القيمة الاعظمية لناتج جداء الجهد والتيار. يتم قياس هذه النقطة في اطراف الخلية كهروضوئية بالواط.

$$P_{max\ idéal} = V_{co} \times I_{cc} \quad (2.I)$$

يتم تعريف عامل الشكل (ff) بالعبرة :

$$ff = \frac{P_{max}}{V_{co}I_{cc}} = \frac{V_{pm}I_{pm}}{V_{co}I_{cc}} \quad (3.I)$$

يشير المعامل (η) إلى كفاءة التحويل في الطاقة ويتم حسابها من العلاقة التالية :

$$\eta = \frac{ffV_{co}I_{co}}{P_{in}} \quad (4.I)$$

مع P_{in} استطاعة الضوء الساقط. تعتمد كفاءة الألواح الشمسية على الموقع الجغرافي ، والغطاء السحابي ، والوقت من العام ، وما إلى ذلك.

كفاءة الكم الخارجية ($E(QE)$) هي نسبة عدد الإلكترونات في الدائرة الخارجية وعدد الفوتونات الساقطة ويتم تعريفها من خلال:

$$E(QE) = \frac{I_{cc}}{eP_{in}} \frac{hc}{\lambda}$$

e: شحنة الإلكترون

h: ثابت بلانك

c: سرعة الضوء

λ : الطول الموجي

I.5 أنواع الخلايا الشمسية :

تصنف الخلايا الشمسية حسب الأجيال (تطورها) الى خلايا الجيل الأول ،الثاني ،الثالث . الجيل الاول خاص بالخلايا القائمة على رقاقة مصنوعة من السيليسيوم البلوري ،خلايا الجيل الثاني هي خلايا شمسية رقيقة الطبقات ،تشمّل السيليسيوم غير المتبلور نلخص هنا الأنواع المختلفة من المولدات الضوئية Cdte وخلايا CIGS ، الجيل الثالث من الخلايا الشمسية يتضمن عددا من تقنيات الطبقات الرقيقة الحديثة ، من بين انصاف النواقل الحديثة نذكر العضوية والغير عضوية وكذلك الهجينة التي تشمل كلا النوعين . [7]

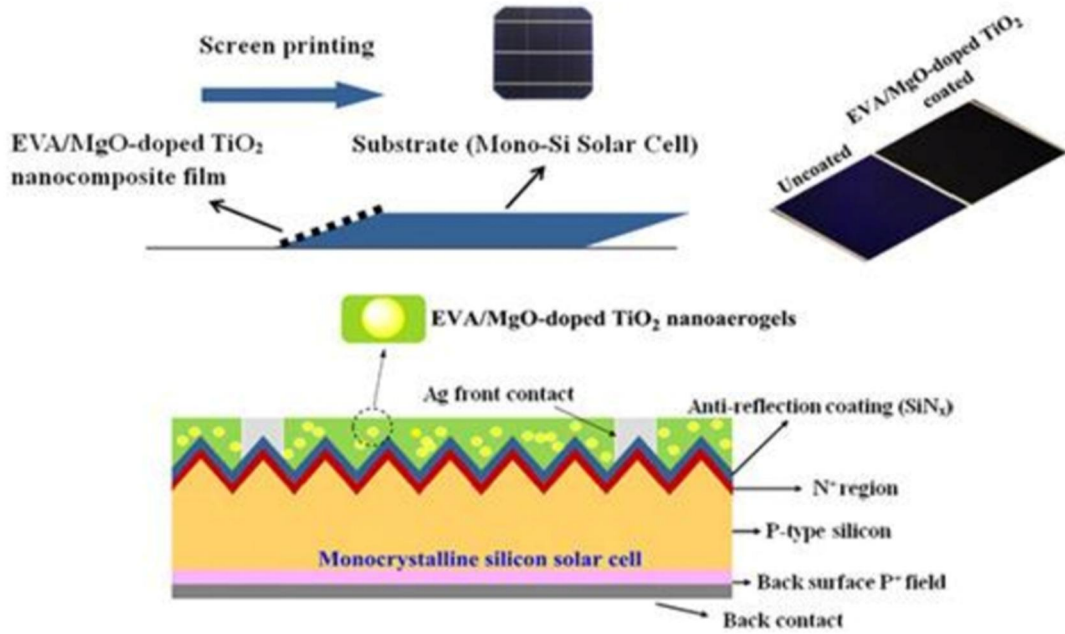
I.1.5 الخلايا الشمسية السيليكونية المتبلورة :

غالبية الوحدات الشمسية الموجودة في السوق اليوم مصنوعة من السيليكون، حسب بعض التقديرات بنسبة تصل لـ 90%. ومعنى ذلك، يمكن للسيليكون ان يتخذ اشكالا مختلفة. تتميز الاختلافات بدرجة نقاء السيليكون، بحيث انه كلما زاد نقاء السيليكون زادت كفاءة الخلايا الشمسية في تحويل الاشعاع الشمسي الى كهرباء. غالبية الخلايا الشمسية القائمة على السيليكون في السوق، تتكون من السيليكون البلوري. [8] هناك نوعان من هذه الخلايا:

I.2.5.1 الخلايا الشمسية السيليكونية أحادية التبلور :

تسمى أيضا Monocrystalline silicon او single-crystal silicon [8]

تم تصنيع اول خلية شمسية متوفرة في تجاريا من السيليكون أحادي البلورة وهو سيليكون نقي للغاية لتحضير هذه الأخيرة يتم سحب بلورة من si المنصهر مما يخلق سبيكة اسطوانية. [9] ثم يتم نشر هذه البلورة ميكانيكيا في شرائح رقيقة مصقولة ومطعمة لإنشاء الوصلة PN المطلوبة. بعد إضافة طبقة مضادة للانعكاس و اتصال المعادن الامامية و الخلفية يتم في النهاية توصيل الخلية وتعبئتها جنبا الى جنب مع العديد من الخلايا الأخرى في لوحة شمسية كاملة [9]. تجعل درجة نقاء السيليكون العالية من هذا النوع من اللوح الشمسية واحدا من اعلى معدلات الكفاءة، كما يتميز هذا النوع من الخلايا بعزل عالي وتحمل مساحة اقل وتدوم أطول مما يجعلها اغلى من نظيراتها الكريستالية. وهي تميل أيضا انها اقل تائيرا بدرجة الحرارة [8].

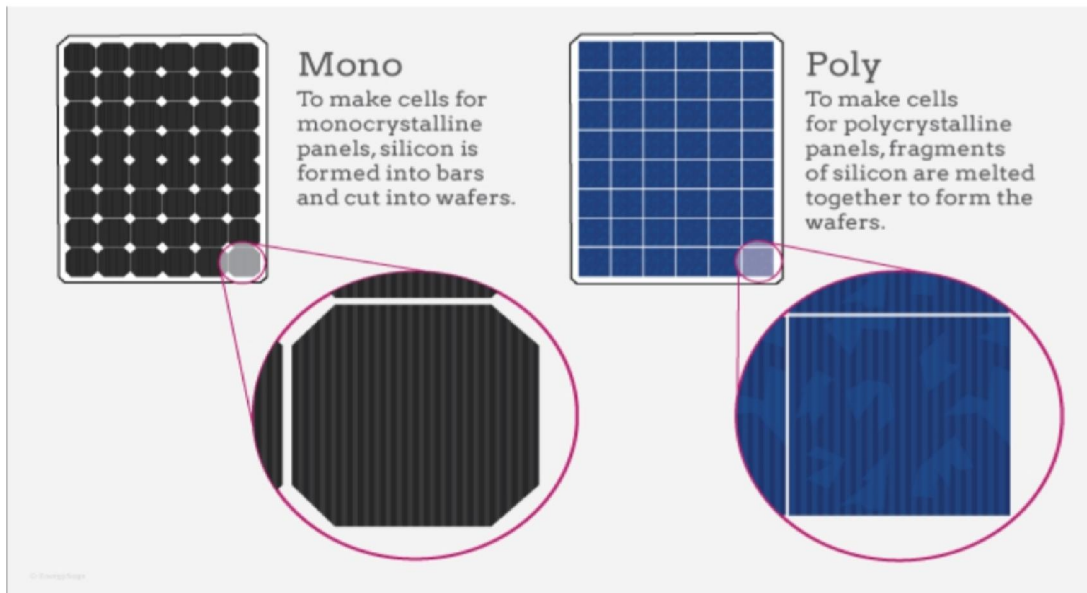


الشكل 3.5 . بنية خلية شمسية احادية التبلور

3.5.I الخلايا الشمسية متعددة البلورات:

يمكن تمييز هذا النوع بسرعة لان الخلايا تكون مربعة الشكل ولا يتم قطع زواياه له مظهر ازرق، وهي مصنوعة من ذوبان السيليكون الخام. [8] من خلال عملية تنقية كيميائية تسمى "Siemens" تتضمن هذه العملية تقطير مركبات السيليكون وتحللها الى Si في درجات حرارة عالية .

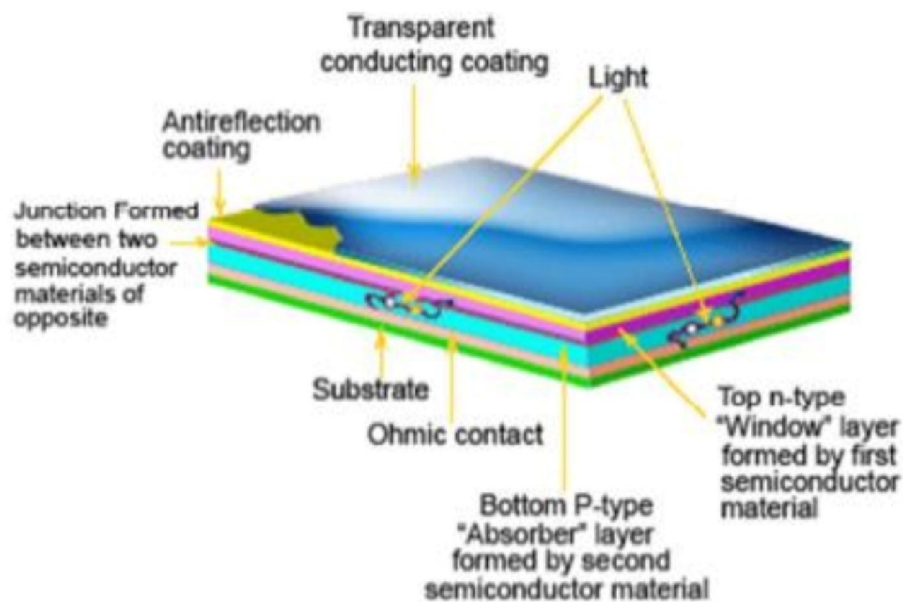
يوجد أيضا السيليكون المعدني المطور (UMG-Si) ناتج عن صناعة الطاقة الضوئية، باستخدام عمليات التنقية المعدنية بدلا من عمليات التنقية الكيميائية عند انتاجه لصناعة الالكترونيات يحتوي متعدد السيليكون على مستويات شوائب اقل من جزء واحد من (PPB) ، في حين ان السيليكون متعدد البلورات من الدرجة الشمسية (SoG-Si) يكون اقل نقاء بشكل عام . [10]



الشكل 2.5. بنية خلية شمسية متعددة البلورات

4.5.I الخلايا الشمسية من الشرائح الرقيقة (TFSC):

يوجد العديد من التقنيات والمواد لتصنيع الخلايا الشمسية ذات الطبقات الرقيقة تجارياً، بما في ذلك (CdTe) و(CIGS) وSi غير المتبلور وغيرها. حيث يتم تصنيعها بوضع طبقة رقيقة أو أكثر من المواد الكهروضوئية مثل Si أو النحاس على مسند مثل الزجاج أو البلاستيك أو المعدن. [11]

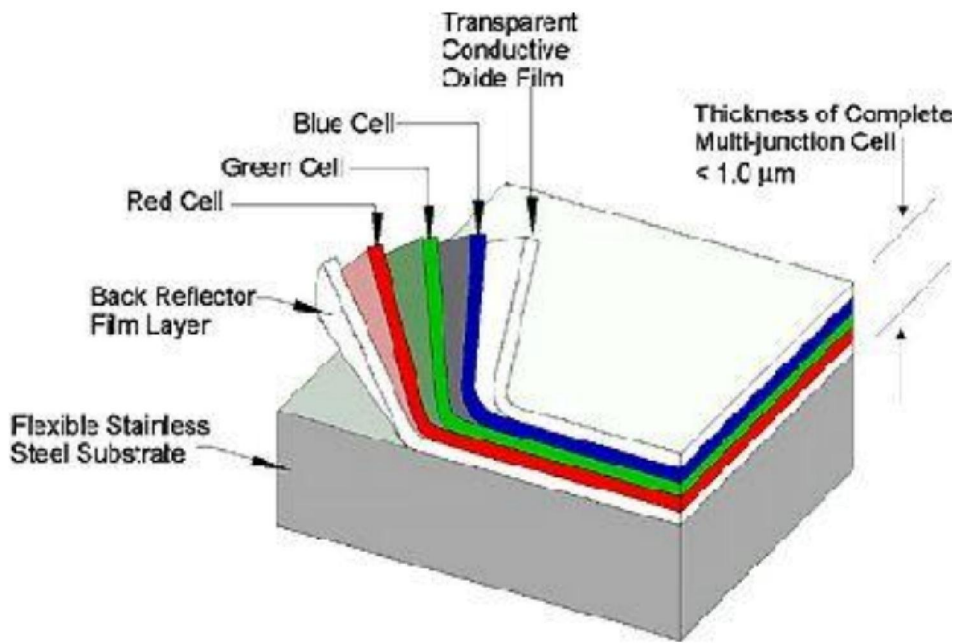


الشكل 6.3 بنية الخلايا الشمسية الرقيقة

5.5.1 الخلايا الشمسية من السيليكون الغير متبلور :

استخدمت الخلايا الشمسية ذات الطبقات الرقيقة المصنوعة من السيليكون الغير متبلور بداية في التطبيقات الصغيرة بما في ذلك الآلات حاسبة وغيرها. [7]

حيث انه يتم تشكيل الواح السيليكون الغير متبلور عن طريق ترسيب غازي لطبقة رقيقة من مادة السيليكون يبلغ سمكها حوالي 1 ميكرومتر على مسند او ركيزة مثل الزجاج او المعدن. الشبكة البلورية هنا في ابسط اشكالها تحتوي على تسلسل واحد من الطبقات p-i-n، في حين يحقق السيليكون البلوري مردود تحويل بنسبة 18% تقريبا ويصل مردود الخلايا الشمسية الغير متبلورة 7% تقريبا. الميزة الرئيسية للخلايا الشمسية الغير متبلورة هي تكاليف تصنيعها المنخفضة مما يجعلها تنافسية للغاية. [12][13]

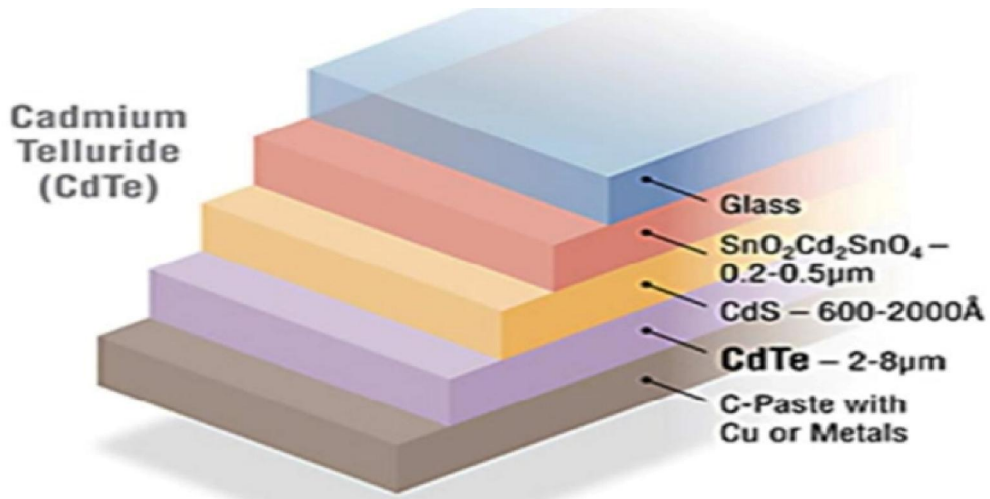


الشكل 3.7 خلية شمسية من السيليكون الغير متبلور

6.5.1 الخلايا الشمسية من كاديوم التيلوريد :

هي طبقة رقيقة من أشباه الموصلات القائمة على الكاديوم مثل: CdTe و CdS و CdSe مصممة لامتصاص وتحويل ضوء الشمس الى كهرباء. [24] خلايا تيلورايد الكاديوم كفاءة تحويل عالية إلى حد

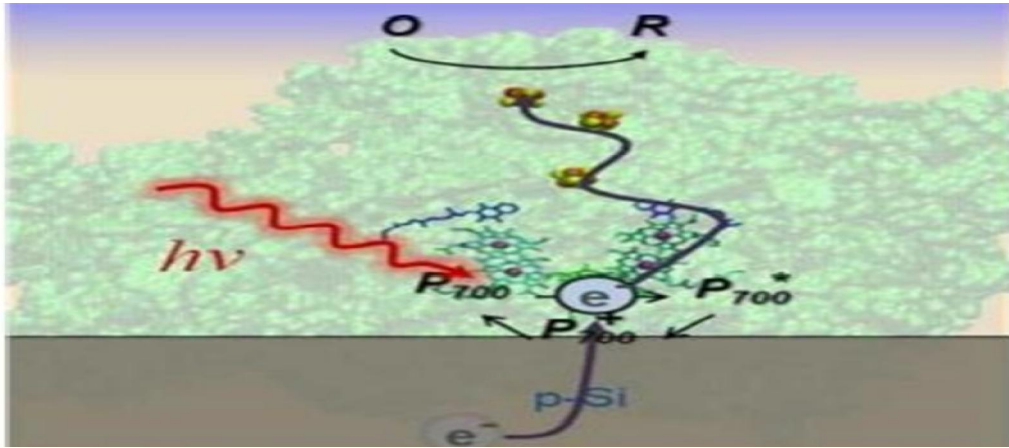
ما تبلغ حوالي 21% [13] ، وهو ما يفسر على الأرجح نجاحها الحالي. يستخدم الكادميوم تيلورايد كأشباه موصلات مخدرة P ، ويوفر استخدام الأخير العديد من المزايا للخلايا ؛ يكفي فقط 1 إلى 8 ميكرومتر من CdTe لامتصاص كمية كبيرة من الضوء. وقد واجه هذا القطاع صعوبات أهمها: وجود مادة الكادميوم وهي مادة سامة للإنسان والبيئة.



الشكل 4.8 رسم بياني يوضح الطبقات الخمسة التي تتكون منها الخلايا الشمسية CdTe

7.5.I الخلايا الشمسية المتبلورة الشريطية:

الخلية الشمسية الهجينة العضوية هي احد أنواع الالواح الشمسية،التي لا تزال في مرحلة البحث وقد اكتشفه فريق من الخبراء في جامعة فاندر بيلت.والفكرة الكامنة وراء التكنولوجيا الجديدة هي الاستفادة من البناء (التركيب الضوئي) [8] وهو مجمع بروتين نشط ضوئي يقع في غشاء تيلاكويد ، لاعادة انشاء العملية الطبيعية لعملية البناء الضوئي للحصول على كفاءة اكبر في تحويل الطاقة الشمسية ، هذه الخلايا الشمسية الهجينة العضوية هي نوع جديد من الطاقة المتجددة تعمل على محاكاة العملية الطبيعية لعملية البناء الضوئي. [12] [13]



1. الشكل 5.9 خلايا شمسية شريطية متعددة الطبقات

6.I إيجابيات وسلبيات الطاقة الكهروضوئية :

تتمتع التكنولوجيا الكهروضوئية بعدد من المزايا [15]

(أ) الإيجابيات:

- ✓ تدوم لفترات طويلة حيث تبقى فعاليتها لمدة 25 الى 30 عامًا من قبل معظم الشركات المصنعة.
- ✓ ثابتة فهي لا تحتوي على أجزاء متحركة ، مما يجعلها مناسبة بشكل خاص للمناطق النائية. هذا هو سبب استخدامه على المركبات الفضائية.
- ✓ تسمح الطبيعة المعيارية للألواح الكهروضوئية بالتجميع البسيط والقابل للتكيف مع احتياجات الطاقة المختلفة.
- ✓ تكاليف تشغيلها منخفضة للغاية بسبب انخفاض الصيانة ولا تتطلب وقودًا أو نقلًا أو موظفين متخصصين للغاية.
- ✓ توفير عامل الأمان البيئي حيث ان الطاقة الشمسية هي طاقة نظيفة للغاية.

(ب) السلبيات :

- ومع ذلك ، فإن النظام الكهروضوئي له عيوب [15].
- ✓ يتضمن تصنيع الوحدة الكهروضوئية تقنية عالية ويتطلب استثمارات عالية التكلفة.
- ✓ احتلال مساحة للمنشآت الكبيرة.
- ✓ لا يمكنها انتاج الطاقة في الليل.
- ✓ كفاءة التحويل الفعلية للوحدة منخفضة (الحد النظري لخلية السيليسيوم البلورية هو 28٪).
- ✓ يجب استخدامها على الفور ،لانه عندما يكون تخزين الطاقة الكهربائية في شكل كيميائي (بطارية) ضروريًا ، تزداد تكلفة المولد الكهروضوئي.

7.I الجانب البيئي للخلايا الكهروضوئية:

يعتبر إنتاج الكهرباء الكهروضوئية خالٍ من التلوث على المستوى المحلي وكذلك على المستوى العالمي، بحيث لا ينتج عنها الاحتباس الحراري، ويمكن دمجها بسهولة في البيئة. هذه الخصائص تجعل الخلايا الكهروضوئية واحدة من أكثر الخلايا الواعدة والأكثر ملائمة على المدى المتوسط والطويل لإنتاج الكهرباء العالمي، في كل من البلدان الغنية (منظمة التعاون والتنمية في الميدان الاقتصادي) والبلدان النامية [16]. إلا أنه، قبل إنتاج الكهرباء، يتطلب تصنيع وتركيب ثم تفكيك وإعادة تدوير المعدات الهالكة قدرًا معينًا من الطاقة، والتي يجب أولاً "سددها" مقابل استخدام المعدات. يمكن أن تكون الكهرباء الكهروضوئية متجددة ونظيفة.

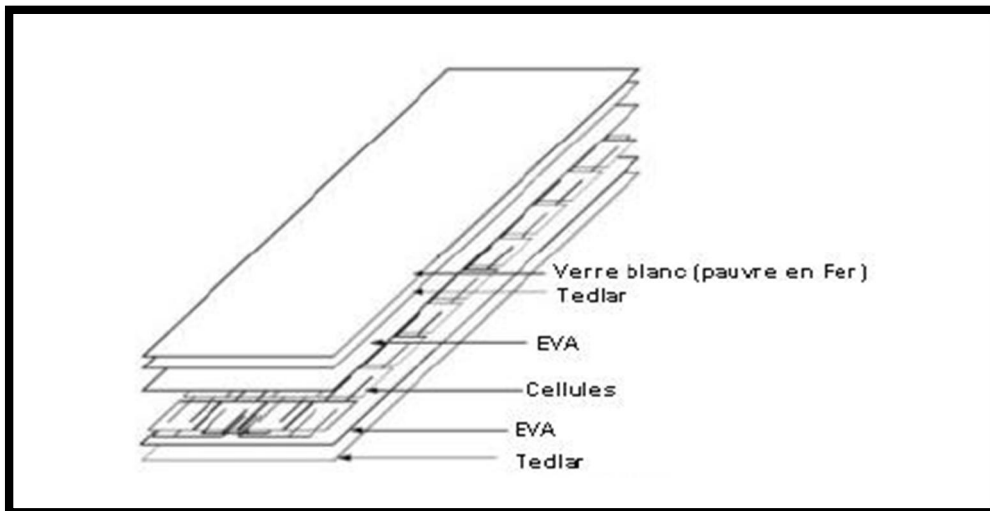
من المثير للاهتمام تذكر مؤشرين لتقييم البصمة البيئية لنظام الضوئية:

1. عدد سنوات استرداد الطاقة التي يستغرقها النظام للتعويض محتوى الطاقة اللازم لتصنيعها وتركيبها.

2. معامل الأداء: عدد مرات النظام الكهروضوئي سوف تسد محتواها من الطاقة على مدى عمرها.

8.I وحدات كهروضوئية:

تطور خلايا طاقة منخفضة نسبيًا (حوالي 3 وات) وهي هشة للغاية وحساسة للعناصر الخارجية. لاستخدام الطاقة الكهروضوئية على نطاق واسع، يتم توصيل الخلايا معًا في سلسلة لزيادة الجهد وبالتوازي لزيادة التيار. ثم يتم تغليفها بين لوح زجاجي وشفافة Tedlar باستخدام بوليمر [17].



الشكل 9.I: تكوين وحدة فلتانية ضوئية بلورية من السيليسيوم

يبلغ حجم الوحدات النمطية الأكثر شيوعًا 1580×808 مم 2 وتحتوي على 72 خلية بقوة 200 واط. توجد وحدات بأحجام مختلفة تتراوح من خلية واحدة (100 مم \times 100 مم) حتى الطرز ذات التكامل الأمامي 1645×2631 (117 كجم لـ Wp 580). حاليًا ، يتم تطوير وحدات Wp 300 وأكثر في السوق.



الشكل 10.I: أنواع مختلفة من الوحدات الكهروضوئية

إن المظهر الجانبي لخاصية الجهد الحالي للوحدة الكهروضوئية هو نفسه الموجود في الخلية الكهروضوئية. نظرًا لأن الخلايا متصلة في سلسلة ، يتم إضافة الفولتية لكل خلية. وبالتالي ، فإن خاصية الجهد الحالي للوحدة الكهروضوئية تزداد.

9.I إعادة تدوير الألواح الكهروضوئية:

الوحدات قابلة لإعادة التدوير في نهاية عمرها الافتراضي (بعد 25 إلى 30 عامًا). ويتم استخدام الزجاج والالمنيوم والسيليسيوم مرة أخرى . تعمل عملية إعادة التدوير هذه على تقليل تكلفة الطاقة للوحدات التالية ، حيث لم يعد جزء من عمليات الاستخراج والتكرير ضروريًا [18].

بحلول عام 2020 ، تقدر الكمية السنوية للنفايات المراد معالجتها بـ 35000 طن ، في مواجهة هذه المشكلة ، يهتم منتج اللوحات بإدراج إعادة تدوير الألواح في تفكيرهم.

الخاتمة :

في هذا الفصل ، قدمنا دراسة عامة مبسطة حول الطاقة الشمسية الكهروضوئية كطاقة نظيفة ومتجددة للمستقبل. حيث تعتبر هذه الأخيرة مصدرا جذابا للطاقة ، فاستخدامها في الأساس كبديل للطاقة التقليدية ، و قدمنا أيضا لمحة عامة عن مبدأ التشغيل الأساسي للخلية الكهروضوئية وخصائصها الحالية والجهد ، وكذلك أنواع الخلايا المختلفة للطاقة الشمسية. وفي الأخير لكل طاقة مزايا وعيوب ، ومعى التقدم الكبير الذي أحدثته تكنولوجيا الطاقة المتجددة والخلايا الشمسية وتنوع تطبيقاتها ، فهي بالتالي مادة مفتاحية للتقدم التكنولوجي معى باقي تقنيات انتاج الطاقة النظيفة.

قائمة المراجع

- [1] A. Labouret, J. P. Braun, P. Cumunel, B. Faraggi. Cellules solaires: les bases de l'énergie photovoltaïque. 5e édition, (2010).
- [2] American Society for Testing and Materials (ASTM), G173-03, ISO 9845-1 (1992).
- [3] A. E. Becquerel, Comptes Rendus de l'Académie des Sciences, 9, 145-149 (1839).
- [4] Solar Cells 2011 Katja Vozel.
- [5] A. Labouret, J.P, Braun, P. Cumunel, B. Faraggi. Cellules solaires : les bases de l'énergie photovoltaïque . 5 édition , (2010).
- [6] <http://www.solarstik.com/stikopedia/stiktm-u>
- [7] <http://www.altenergy.org/solar/common-types-of-solar-cells.html>.
- [8] Askari Mohammed Bagher, Mirzaei Mahmoud Abadi Vahid, Mirhabibi Mohsen. Types of Solar Cells and Application. American Journal of Optics and Photonics. Vol 3, No. 5, 2015, pp. 94-133. Doi . 10.11648/j.ajop.2150305.17
- [9] Stephen Peake. Renewable Energy : Power for a Sustainable Future, 4th ed. Oxford, UK: Oxford University Press, (2018) .
- [10] Krebs et. al., Solar Energy Materials and Solar Cells 2009
10.1016/j.solmat.2008.10.004. . K
- [11] (Photovoltaics Report). Fraunhofer ISE. 28 July 2014. Archived From the Original (PDF) on 31 August 2014. Retrieved 31 August 2014.
- [12] Yehezkeli, Omer, Ran Tel-Vered, Julian Wasserman, Alexander Trifonov, Dorit Michaeli, Rachel Nechushtai, Itmar Willner (13 March 2012) Integrated Photosystem II Based Photoelectrochemical Cells . Nature Communication . doi: 10.1038/ncomms1741.
- [13] Ciesielskia, Peter N; Frederick M; Hijazib; Amanda M; Scott, Christopher J; Faulkner; Lisa Beard; Kevin Emmett; Sandra J. Rosenthal; David Cliffel; G. Kane Jennings (May 2010). "Photosystem I-Based biohybrid Photoelectrochemical Cells". Biosource Technology 101 (9)
:3047_3053. doi:10.1016/J.biortech.2009.12.045. Retrieved 24 October 2013.
- [14] First Solar Press Release, First solar builds the highest efficiency thin film PV cell on.
- [15] A. Labouret, J. P. Braun, P. Cumunel, B. Faraggi. Cellules solaires : les bases de l'énergie.
- [16] www.nrel.gov le 1/2/2018.

[17] Le photovoltaïque-Module 3- Fonctionnement et technologies, (2010).

McGraw-Hill, 640 (1998).

[18] www. Grenoble-isere.com, (2010). Materials and Solar Cells, 49, 407–414 (1997).

الفصل الثاني

نظرية دالية الكثافة

DFT

II. 1. مقدمة :

نظرية دالية الكثافة DFT من أكثر الطرق المستخدمة في الحسابات الكمية للبنية الإلكترونية للمادة (الذرات الجزيئات و المواد الصلبة) في فيزياء المواد المكثفة .

بما أن الخواص الفيزيائية للمادة الصلبة مرتبطة بديناميكية الجسيمات الخفيفة فان وصف هذه الجملة يتطلب استخدام قوانين الميكانيك الكمي. توصف حركية هذه الجملة من الجسيمات الخفيفة في ميكانيكا الكم بواسطة معادلة شرود ينغر المستقلة عن الزمن.

معادلة شرود ينغر (Schrödinger) مستعصية الحل حسابيا، لذلك تستخدم نظرية دالية الكثافة DFT كوسيلة رياضية من أجل حل معادلات ميكانيك الكم الأساسية.

II. 2. معادلة شرود ينغر للبلورة :

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

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

في حالة السكون معادلة شرودينغر تكون مستقلة عن الزمن

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

ψ هي الدالة الموجية و تتعلق بكل إحداثيات (أنوية+إلكترونات)

E هي القيم الذاتية الموافقة

H مؤثر الهاملتونيان للبلورة حيث يكون مؤلفاً من الطاقة الحركية لكل الجسيمات وطاقة التفاعل فيما بينها، حيث يكتب في غياب الحقل الخارجي علي الشكل :

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

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

1- T_e الطاقة الحركية للإلكترونات، حيث m_e كتلة الإلكترونات.

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

2- T_n الطاقة الحركية للأنوية، حيث M_n كتلة الأنوية.

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

3- طاقة تفاعل الكترون - الكترون ، حيث \vec{r}_{ij} المسافة بين الإلكترونين i, j .

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

4- طاقة تفاعل الكترون- نواة ، حيث $|\vec{r}_i - \vec{R}_\alpha|$ المسافة بين النواة α و الإلكترون i .

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

5- طاقة تفاعل نواة - نواة ، حيث $|\vec{R}_\alpha - \vec{R}_\beta|$ المسافة بين النواتين α, β .

يمكن كتابة هاملتون على النحو التالي:

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

$$+ \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{2} \sum_{\alpha \neq \beta} \frac{e^2 Z_\alpha Z_\beta}{|\vec{R}_\alpha - \vec{R}_\beta|} + \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|}$$

m : كتلة الالكترتون الحر .

e : الشحنة العنصرية .

M : كتلة النواة وتساوي 10^3 الى 10^3 من كتلة الالكترتون m .

تحتوى معادلة شرودينغر (1.1) على $3(Z + 1)N_\alpha$ متغيرا، حيث N عدد الذرات في البلورة لمول واحد من الذرات ، فنجد في 1cm^3 من البلورات 5×10^{22} ذرة ، وبوضع $Z=14$ فان عدد المتغيرات سيكون مساويا ل 2×10^{24} متغيرا [2]. و بهذه الكيفية معادلة شرودينغر مستحيلة الحل إلا من خلال عدد من التقريبات، حتى تصبح قابلة للحل. عموما ، يتم ادخال ثلاثة تقريبات على ثلاث مستويات مختلفة.

II. 3. المستوى الأول: تقريب بورن -ابنهايمر Born-Oppenheimer:

لا يمكن حل معادلة هاملتونيا من الناحية التحليلية لأنها معقدة، حيث تم تبسيطها من طرف العالمان ماكس بورن و روبرت أوبنهايمر عام 1927. اللذان اقترحا حل تقريبي لتبسيط معادلة شرودينغر، يعتمد هذا التقريب على فصل حركة الإلكترونات عن الأنوية، حيث أن كتلة الإلكترون أقل بكثير من كتلة النواة في حين أن سرعة الإلكترونات أكبر بكثير من سرعة النواة [3]، وكنتيجه لهذا التقريب تصبح الطاقة الحركية للأنوية معدومة ($T_n = 0$) و طاقة تفاعل نواة نواة ثابتة $v_{nn} = cte$

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

$$H_e = T_e + V_{ee} + V_{en} \quad (10. II)$$

H_e يمثل هاميلتونيان الإلكترونات.

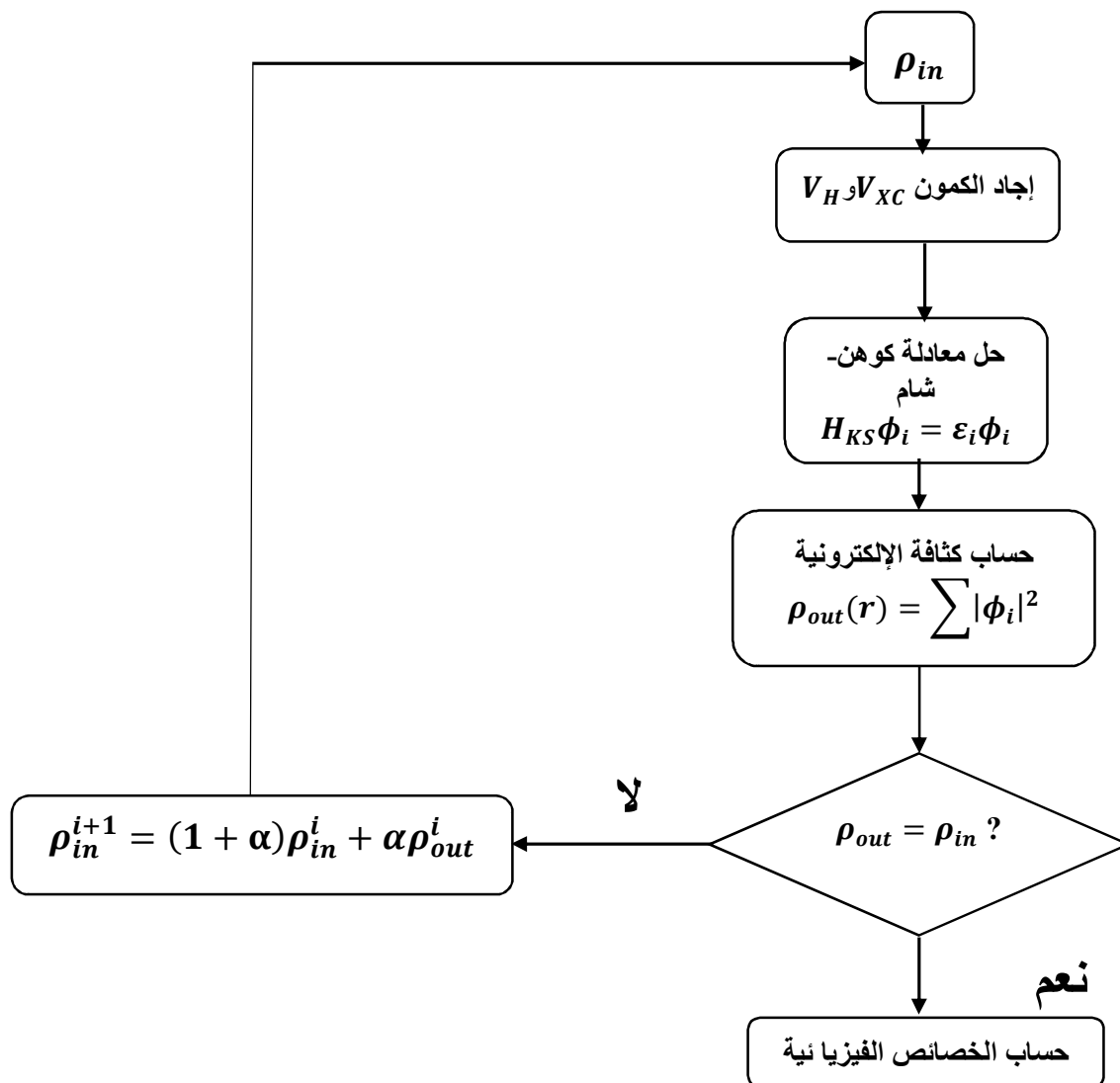
إذن تصبح معادلة شرودينغر لإلكترونات هي :

$$H_e \psi(r, R) = E \psi(r, R) \quad (11. II)$$

بفضل تقريب بورن -ابنهايمر تم تبسيط المسألة، لذلك لا يمكن حل المعادلة بالطرق الرياضية المعروفة . من أجل حل معادلة شرودينغر نذكر طريقة هارترى (Hartree) التي ظهرت في سنة (1928) , هاتري- فوك (Hartree-Fock) في سنة (1930) ونظرية دالية الكثافة سنة (1927). إن تحديد الكمون داخل البلورة هي من بين الصعوبات التي تصادف حساب بنية عصابات الطاقة ولذلك وجدت طريقة حديثة وهي نظرية دالية الكثافة (DFT).

II. 4. المستوى الثاني: 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 .



الشكل (II. 2): مخطط لنظرية دالية الكثافة DFT

II. 1.4. نظرية Thomas-Fermi :

في 1927 صاغ توماس-فارمي الطاقة الكلية لغاز الإلكترونات اللامتجانسة كدالة لكثافة الإلكترونات المعروفة لغاز المتجانس [4, 5]، تعتبر كثافة الإلكترونية ثابتة في كل منطقة من المناطق المقسمة، ومنه تكتب طاقة النظام الكلية E على الشكل التالي:

$$E = \int \varepsilon_i[\rho(r)]dr \quad (12. II)$$

$$\rho(\vec{r}) = \frac{1}{3\pi^2} \left(\frac{2m_e}{\hbar} \right)^{3/2} E_f^{3/2} \quad (13. II)$$

حيث E_f طاقة فارمي.

ومنه تكتب طاقة فارمي على الشكل التالي:

$$E_f = \frac{\hbar^2}{2m_e} (3\pi^2)^{2/3} (\rho(\vec{r}))^{2/3} \quad (14. II)$$

II. 2.4. نظريتي هوهنبارغ وكوهن Hohenberg-Kohn :

تم إعادة صياغة نظرية الكثافة الدالة (DFT) المقترحة من قبل فارمي في سنة 1964. حيث تم تأسيس النظرية على أساس نظري متين في نظريتين لهوهنبارغ وكوهن [6]، الذي يقوم على النظريتين الأساسيتين:

النظرية الأولى :

تعتمد هذه النظرية على أخذ الطاقة الكلية لنظام الإلكترونات المتفاعلة في كمون خارجي $V_{ext}(r)$ (كمون الأنوية)، باستعمال دالية الكثافة الإلكترونية للحالة الأساسية $\rho(\vec{r})$

$$E = E(\rho) \quad (15. II)$$

حيث أن دالية الطاقة

$$E(\rho) = \langle \psi | H | \psi \rangle = \langle \psi | T + U | \psi \rangle \quad (16. II)$$

T و U كمون تفاعل و الطاقة الحركية لإلكترونات على الترتيب.

النظرية الثانية :

تبين هذه النظرية ان الكثافة الإلكترونية للحالة الأساسية تعطي كثافة الحد الأدنى وهي التي تقابل القيمة الصغرى للطاقة الكلية للجملة، حيث ان الكمون الخارجي يتم تحديده باستخدام مبدأ التغير.

وكل خصائص الحالة الأساسية هي دالية الكثافة الإلكترونية تعطي كالتالي:

$$E(\rho_0) = \text{Min}E(\rho) \quad (17. \text{II})$$

II. 3.4. معادلة كوهن-شام Kohn-Sham :

تكتب كثافة الإلكترونات على شكل مجموع كثافة الجسيمات ومن أجل الحصول على طاقة الحالة الأساسية نستعمل مبدأ التغيرات [7]، تعطى كثافة بـ:

$$\rho(\vec{r}) = \sum_{i=1}^N |\phi_i(\vec{r})|^2 \quad (18. \text{II})$$

ϕ_i الحالة المشغولة للإلكترون i

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

$$E_e = T + V \quad (19. \text{II})$$

حيث T الطاقة الحركية للجسيمات في حالة التفاعل

و V كمون التفاعل إلكترون-إلكترون.

طاقة هرتري-فوك $E_{H,K}(\rho)$:

$$E_{H.F} = T_0 + V = T_0 + (V_H + V_X) \quad (20. \text{II})$$

حيث الطاقة T_0 الحركية للإلكترونات الحرة.

V_H كمون إرتباط الإلكترونات و V_X كمون تبادل الإلكترونات

دالية $F_{H.F}$ هي:

$$F_{H.F} = T - T_0 + T_0 + V \quad (21. \text{II})$$

الإلكترونات إرتباط كمون $V_C = T - T_0$

$$F_{H.F} = (V_C + V_X) + T_0 + V_H \quad (22. \text{II})$$

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

ومنه دالية الطاقة الكلية

$$E(\rho) = T_0(\rho) + V_H(\rho) + V_{XC}(\rho) + V_{ext}(\rho) \quad (23. II)$$

معادلة كوهن-شام :

$$(T + V_{ext} + V_H + V_{XC})\phi_i(r) = \varepsilon_i\phi_i(r) \quad (24. II)$$

II. 5. المستوى الثالث: حلول معادلة كوهن-شام Kohn-Sham :

تتركز مختلف الطرق لحساب بنية عصابات الطاقة مبدئياً على DFT و ترتب حسب استخدامها للكثافة، الكمون و مدارات كهون-شام [8]، وبالتالي دالة الموجة الأساسية هي :

$$\psi_i(r) = \sum C_{i\alpha} \phi_\alpha(r) \quad (25. II)$$

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:

$$(H - \varepsilon_i O)C_i = 0 \quad (26. II)$$

حيث : O مصفوفة التغطية و H هملتونيان كوهن.

II. 6. دالية تبادل-ارتباط:

لا توجد هناك عبارة رياضية محددة لدالية تبادل-ارتباط $E_{XC}(\rho(\vec{r}))$. يوجد حالياً عدة اختيارات متاحة لمعالجة كمون تبادل-ارتباط سنذكر منها

II. 6. 1. تقريب كثافة الموضع LDA :

تم اقتراحه لأول مرة من طرف كوهن وشام (Kohen and Sham) في سنة 1965، حيث أن تقريب كثافة الموضع هو تقريب لنظام الإلكترونات اللامتجانسة باعتباره متجانس موضعياً [9]، بحيث تعطي طاقة تبادل-ارتباط في هذا التقريب بـ:

$$E_{XC}^{LDA}(\rho) = \int \varepsilon_{XC}(\rho)\rho(\vec{r})d\vec{r}^3 \quad (27. II)$$

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

$$\varepsilon_{xc}(\rho) = \varepsilon_x(\rho) + \varepsilon_c(\rho) \quad (28. II)$$

مساهمة طاقة تبادل الإلكترون في هذا التقريب تعطى بالعلاقة لدرالك [9]:

$$\varepsilon_x(\rho) = -\frac{3}{4} \left(\frac{3}{\pi}\right)^{1/3} \rho^{1/3} = -\frac{3}{4} \left(\frac{3}{4\pi^2}\right)^{1/3} \frac{1}{r_s} \quad (29. II)$$

r_s نصف قطر فيغنر-سيتز [10] (نصف قطر كرة يحتوى الإلكترون).

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

$$\varepsilon_c(\rho) = C_0 \ln(r_s) - C_1 + C_2 r_s \ln(r_s) - C_3 r_s^3 \quad (30. II)$$

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 [11]:

$$\varepsilon_c(\rho) = -\frac{d_0}{r_s} + \frac{d_1}{r_s^{3/2}} + \dots \quad (31. II)$$

II. 6. 2. تقريب التدرج المعمم GGA :

اعطى تقريب التدرج المعمم GGA [12]، نتائج متوافقة جيدا مع النتائج التجريبية في الكثير من الحالات، حيث اخذت تصحيحات LDA المستخدمة حاليا بعين الاعتبار تغير كثافة الإلكترونات $\rho(r)$ عبر تدرج $\Delta\rho(r)$. تأخذ طاقة التبادل-إرتباط الشكل التالي :

$$E_{xc}^{GGA}[\rho(\vec{r})] = \int \rho(\vec{r}) \varepsilon_{xc}[\rho(\vec{r}) \nabla\rho(\vec{r})] d^3 \vec{r} \quad (32. II)$$

لهذا السبب تم ادخال التدرج في كثافة الإلكترونات مما يقودنا الى تقريب التدرج المعمم

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

II. 3.6. 3. التقريب المعدل لبريك جونسن mBJ :

قدم Tran-Blaha [13] سنة 2009 أطروحة حول نسخة معدلة لدالية بريك جونسن، هذه الأخيرة برهنة بسرعة نجاعتها بالنسبة لطرق الحساب الأكثر إستعمال LDA [11] و GGA [16]. وذلك من أجل حساب فجوة الطاقة بتغير في الكمون لبريك جونسن علي الشكل:

$$v_{x;\sigma}^{\text{mBJ}}(r) = cv_{x;\sigma}^{\text{BR}}(r) + (3c - 2) \frac{1}{\pi} \sqrt{\frac{5}{12}} \sqrt{\frac{2t_{\sigma}(r)}{\rho_{\sigma}(r)}} \quad (33. \text{II})$$

حيث

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

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

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

نشير إلي أن إذا أختارنا $c = 1$ لدالية بريك جونسن [14] هذا الثابت المختار يتعلق خطيا مع الجذر التربيعي

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

الشكل المقترح لـ c كالتالي :

$$c = \alpha + \beta \left(\frac{1}{V_{\text{cell}}} \int_{\text{cell}} \frac{|\nabla \rho(r)|}{\rho(r)} d^3r \right)^{1/2} \quad (34. \text{II})$$

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

المراجع :

- [1] P. Kireev, La physique des semi-conducteurs, 2e édition, édition Mir. Moscou, (1975).
- [2] P. Kireev, La physique des semi-conducteurs édition, (édition, édition Mir. Moscou, (1979)).
- [3]. R. Hartree, *Proc. Cambridge Phil. Soc.* 1928, 24, 89.
- [4] L. H. Thomas. *Proc. Cambridge Philos. Soc* 23 (1928) 542.
- [5] E. Fermi. *Z. Phys* 48 (1928) 73.
- [6] P.Hohenberg.W.Kohn,*Phys.Rev.B*136(1964)864.
- [7]d.j. singh, plane waves, pseudo-potentials, and lapw method, Kluwer academic publisher, boston ,1994.
- [8]S. Cottenier, Density Functional Theory and the family of (L) APW-methods: a stepbystep introduction BelguimAugust 6, 2004.
- [9] L.J.Sham,W.Kohn,*Phys.Rev* 145 (1966) 561.
- [10] e. wingner, *phys.rev.*46,1002(1934).
- [11] s.h. vosko, l. wilk, and m. nusair, *can.j.phys.*58,1200(1980).
- [12] D. Langreth, J. Perdew, *Phys. Rev. B* 21 (1980) 5469.
- [13]F. Tran and P. Blaha, *Phys Rev.Lett* 102, 226401 (2009).
- [14]A.D. Becke and E. R. Johnson, *J. Chem. Phys.* 124, 221101 (2006).

الفصل الثالث

طريقة الأمواج المستوية

المتزايدة خطيا والكمون

الكامل

FP-LAPW

III.1. مقدمة :

تستمد الطرق الحسابية الحديثة المبينة على أساس المبادئ الأولى فعاليتها من فاعلية ودقة نظرية دالية الكثافة. لقد بنيت العديد من الطرق الحسابية، ومن بين الطرق الأكثر دقة لحساب البنية الإلكترونية للمواد الصلبة طريقة الأمواج المستوية المزادة خطيا LAPW.

توجد عدة طرق لحساب عصابات الطاقة والتي تنقسم إلى:

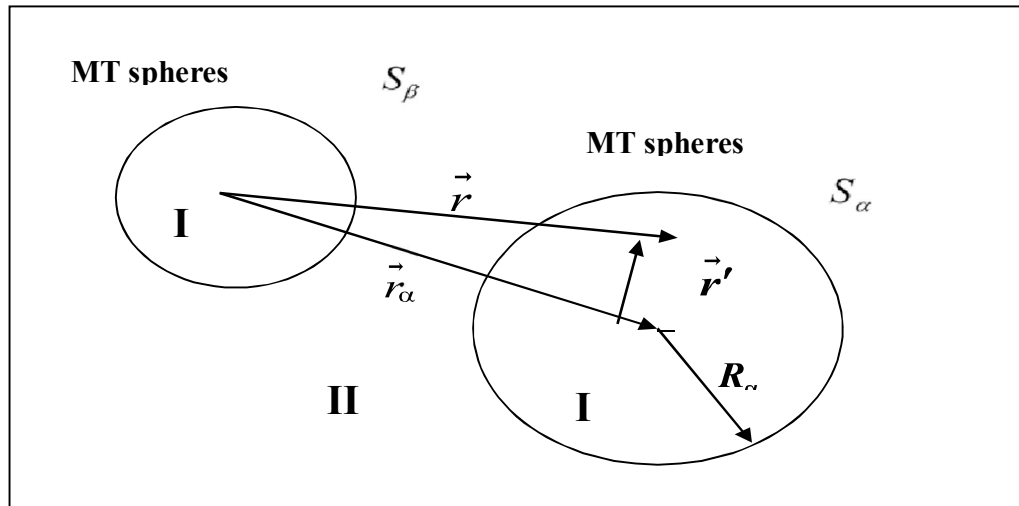
-الطرق التجريبية التي تتطلب حسابتها نتائج تجريبية.

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

-الطريقة الأساسية التي تتطلب حساباتها معطيات أساسية فقط.

III.2. طريقة الموجة المستوية المزادة APW :

تم تطوير طريقة الموجة المستوية المزادة APW في سنة 1937م بواسطة سلاتر [1]، لإيجاد حل لمعادلة شرودينغر للإلكترون واحد، ولكتابة دالة الموجة الإلكترونية قام بوضع كمون "Muffin-Tin" كتقريب لوصف كمون الشبكة البلورية وذلك بتقسيم الفضاء المحيط بالذرات إلى منطقتين:



الشكل (1.III): كمون «Muffin-Tin» (MT)

الفصل الثالث

طريقة الأمواج المستوية المتزايدة خطياً

المنطقة 1 (الكرة MT): تشمل الأنوية و الإلكترونات شديدة الارتباط , تشغلها كرات غير متداخلة فيما بينها تسمى كرات ميفينتين.

المنطقة 2 (المنطقة البينية): وهي المنطقة المحددة بالفضاء غير المشغول بالكرات، تشمل الإلكترونات ضعيفة الارتباط بالأنوية.

حيث تختلف حلول معادلة شرودينغر حسب المنطقة المعتمدة:

حلول شعاعية لمعادلة شرودينغر داخل كرة MT:

$$\phi(r) = \sum_{lm} A_{lm} U_l(r) Y_{lm}(r) \quad r < r_\alpha \quad (1. III)$$

أمواج مستوية في المنطقة الإقحامية:

$$\phi(r) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_{\mathbf{G}} C_{\mathbf{G}} e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{G})r} \quad r > r_\alpha \quad (2. III)$$

Ω : يمثل حجم خلية الوحدة.

Y_{lm} : الدالة التوافقية (الهرمونية) الكروية.

$C_{\mathbf{G}}, A_{lm}$: معاملات النشر في الأمواج المستوية والدوال الهرمونية الكروية.

\vec{G} : شعاع الموجة في المنطقة الأولى وشعاع الانتقال في الشبكة المعكوسة.

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

$$\left\{ -\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} + V(r) - E_l \right\} r U_l(r) = 0 \quad (3. III)$$

E_l : الطاقة الخطية.

$V(r)$: يمثل الكمون داخل كرة ميفينتين (Muffin-tin).

تكون الدالة الشعاعية (القطرية) المعرفة في العلاقة السابقة (3. III) متعامدة لكل الحالات الذاتية داخل الكرة وتنتهي شروط التعامد عند حدودها [2] وتصبح معادلة شرودينغر كالتالي :

$$(E_1 - E_2)rU_1U_2 = U_2 \frac{d^2rU_1}{d^2r} - U_1 \frac{d^2U_2}{d^2r} \quad (4. III)$$

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:

$$A_{lm} = \frac{4\pi i^l}{\sqrt{\Omega}U_L(r)} \sum_G C_G J_l(|k + g|r_\alpha) Y_{lm}^*(k + G) \quad (5. III)$$

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

لكن وجدت صعوبة في الدوال $U_l(r_\alpha)$ وذلك لأن في حالة نقصان المعاملات A_{lm} تصبح قيم $U_\alpha(r_\alpha)$ معدومة على سطح الكرة ، ولحل هذه المشكلة أدخل كولينغ [3] وأندرسن [4] مجموعة من التغييرات على طريقة APW منها تمثيل الدالة الشعاعية $\phi(r)$ خارج كرة MT بترتيبات خطية $U_1(r)$ ، سميت بطريقة الأمواج المستوية المتزايدة خطيا LAPW

3. III. طريقة الموجة المستوية المزادة خطيا LAPW :

في طريقة الموجة المستوية المزادة خطيا ، تكون الدالة الأساسية في كرة ميفينتين MT عبارة عن مزيج خطي للدالة الشعاعية $U_l Y_{lm}(r)$ واشتقاقها بالنسبة للطاقة $\dot{U}_l Y_{lm}(r)$ تعرف مثل دالة APW (3. II)، لكن الطاقة E_1 تكون ثابتة وتخضع الدالة $\dot{U}_l Y_{lm}(r)$ [5] للشروط التالي :

$$\left\{ -\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} + V(r) - E_1 \right\} r\dot{U}_l(r) = rU_l(r) \quad (6. III)$$

إن دالة الموجة المستوية المتزايدة تصبح دالة أساسية للطريقة LAPW :

$$\phi(\vec{r}) = \begin{cases} \sum_{lm} [A_{lm} U_l(r) + B_{lm} \dot{U}_l(r)] Y_{lm}(r) & r < r_0 \\ \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_{\vec{G}} C_{\vec{G}} e^{i(\vec{K} + \vec{G})\vec{r}} & r > r_0 \end{cases} \quad (7. III)$$

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

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

III. 4. إيجابيات طريقة الموجة المستوية المزادة خطيا LAPW :

- الحصول على شرائط الطاقة لعدد نقاط (k) .
 - طريقة الأمواج المستوية المزادة خطيا سريعة في حساب شرائط الطاقة .
- في طريقة الموجة المستوية المزادة خطيا LAPW التقارب سريع مقارنة مع طريقة الموجة المستوية المزادة APW .

III. 5. طريقة الموجة المستوية المزادة خطيا والكمون الكامل FP-LAPW :

طريقة الأمواج المستوية المزادة خطيا والكمون الكامل [7.6] هي دمج بين LAPW والكمون الكامل FP وكثافة الشحنات الإلكترونية بدون أي تقريبات داخل كرة ميفيتين .

هذه العلاقة العامة ترتبط بكمون المنطقة البيئية V_1 والعلاقة الخاصة بالكرة V_{MT} (MT) .

III. 6. تعريف برنامج Wien2K :

صدر برنامج Wien2K سنة 1990 اذ يعتبر أحسن البرامج لمعرفة خصائص البلورات , حيث يشهد تطورا كبيرا في السنوات الأخيرة , فقد تم تطويره في معهد كيمياء المواد من طرف (Blaha P, B.K Schwarz ,S Trickey) بالجامعة التقنية في فيينا [8].

يعتمد هذا البرنامج على نظرية الكثافة بدمج طريقة الأمواج المستوية المزادة خطيا مع الكمون الكامل .

III. 7. برنامج Wien2K:

استخدمنا طريقة الأمواج المستوية المتزايدة خطياً LAPW، المدمجة في برنامج Wien2K

[9]. لإجراء عمليات حسابية للبنية الإلكترونية باستخدام برنامج Wien2K الشكل (III. 2):

NN: هذا البرنامج يقوم بحساب المسافات بين الذرات، انطلاقاً من مسافة الجوار الأقرب الأول. كما يساعد في إيجاد نصف القطر الذري للكرة.

LSTART: برنامج يولد الكثافة الذرية، ويحدد كيفية معالجة المدارات المختلفة في حساب عصابات الطاقة.

SYMMETRY: يسمح هذا البرنامج بحساب عملية التناظر لفضاء المجموعة، باستخدام معلومات ملف البنية للأجل تقليص مدة الحساب.

KGEN: يقوم هذا البرنامج بتوليد الشبكة k في منطقة بريلون.

DSTART: - يولد كثافة إنطلاق دورات الحساب SCF المنتجة من الكثافة الذرية والمولدة من LASTART.

-يقوم بتهيئة الحساب وتكراره إلى غاية الوصول للتقريب المطلوب. وهي منسقة في الخطوات التالية:

LAPW0: يولد كمون إنطلاقاً من الكثافة.

LAPW1: حساب عصابة التكافؤ، القيم الذاتية والأشعة الذاتية.

LAPW2: حساب كثافة التكافؤ من الأشعة الذاتية.

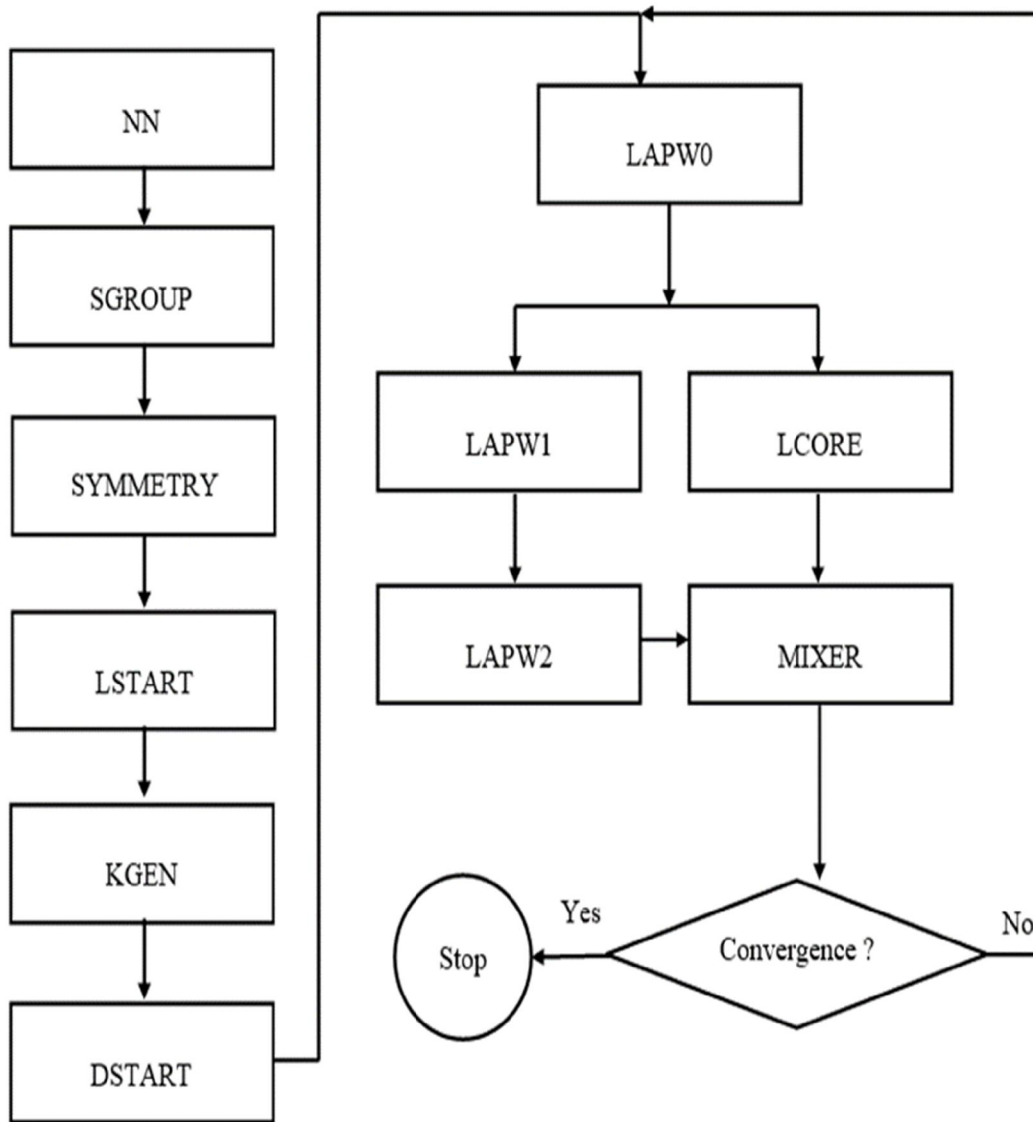
LCORE: حساب الحالات والكثافة القلبية.

MIXER: يمزج الكثافة الداخلة و الخارجية.

III. 8. إستخدامات برنامج Wien2K:

- إيجاد كثافة سبين والكثافة الإلكترونية .
- تحديد الخصائص المغناطيسية، المرنة، البصرية،.....
- تحديد طاقة إنبعث الأشعة السينية RX وإمتصاصها .

- تدرج الحقل الكهربائي .
- حساب كثافة الدوال لسطح فارمي .
- حساب عصابات الطاقة لسطح فارمي .



الشكل (III. 2) خوارزمية عمل برنامج Wien2K

- [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] D.R. Hamann ,Semiconductor Charge Densities with Hard-core and SoftCore Pseudopotentials ,Phys. Rev. Lett. 42, 655 (1979).
- [7] E. Wimmer, H. Krakauer, M. Weinert, and A. J. Freeman, Full Potential self consistent Linearized-augmented-plan-wave method for calculating the electronic structure of molecules and surfaces:O₂ molecule, Phys. Rev. B 24, 864-875 (1981).
- [8] P.Blaho, K, Schwarz, G.K.H. Madsen, D.Kvasnicka, J. Luitz, WIEN2K, an Augmented Plan Wave + Local Orbitals Program for Calculating Crystal Properties, Karlheinz Schwarz,Techn. University at Wien, Austria, ISBN 39501031. 1. 2 (2001).
- [9] 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.

الفصل الرابع النتائج والمناقشة

IV.1. مقدمة

في هذا الفصل نريد دراسة الخصائص البنيوية والخصائص الالكترونية و الضوئية للمركب $TiCuCrS_4$ تحصلنا على النتائج في سياق نظرية دالية الكثافة DFT باستخدام طريقة الموجة المستوية المتزايدة

خطيا (LAPW) [1] والمدمجة في برنامج Wien2k [2]

من اجل دراسة الخصائص البنيوية والإلكترونية والضوئية استخدمنا التقريبات التالية:

تقريب التدرج المعمم (GGA) [1] تقريب كثافة الموضع (LDA) [3] والتقريب المعدل لبيك جونسون (mbj-LDA) [4]، والتقريب (EV-GGA) من اجل الحصول على نتائج جيدة حول الخصائص الإلكترونية.

IV.2. البنية البلورية للمركبات :

لدراسة الخصائص البنيوية والالكترونية والضوئية للمركب $TiCuCrS_4$ حيث يعتبر من المركبات التي تستعمل في تطبيقات الفعل الكهرو ضوئي وكذا الخلايا الشمسية والصمامات الثنائية،

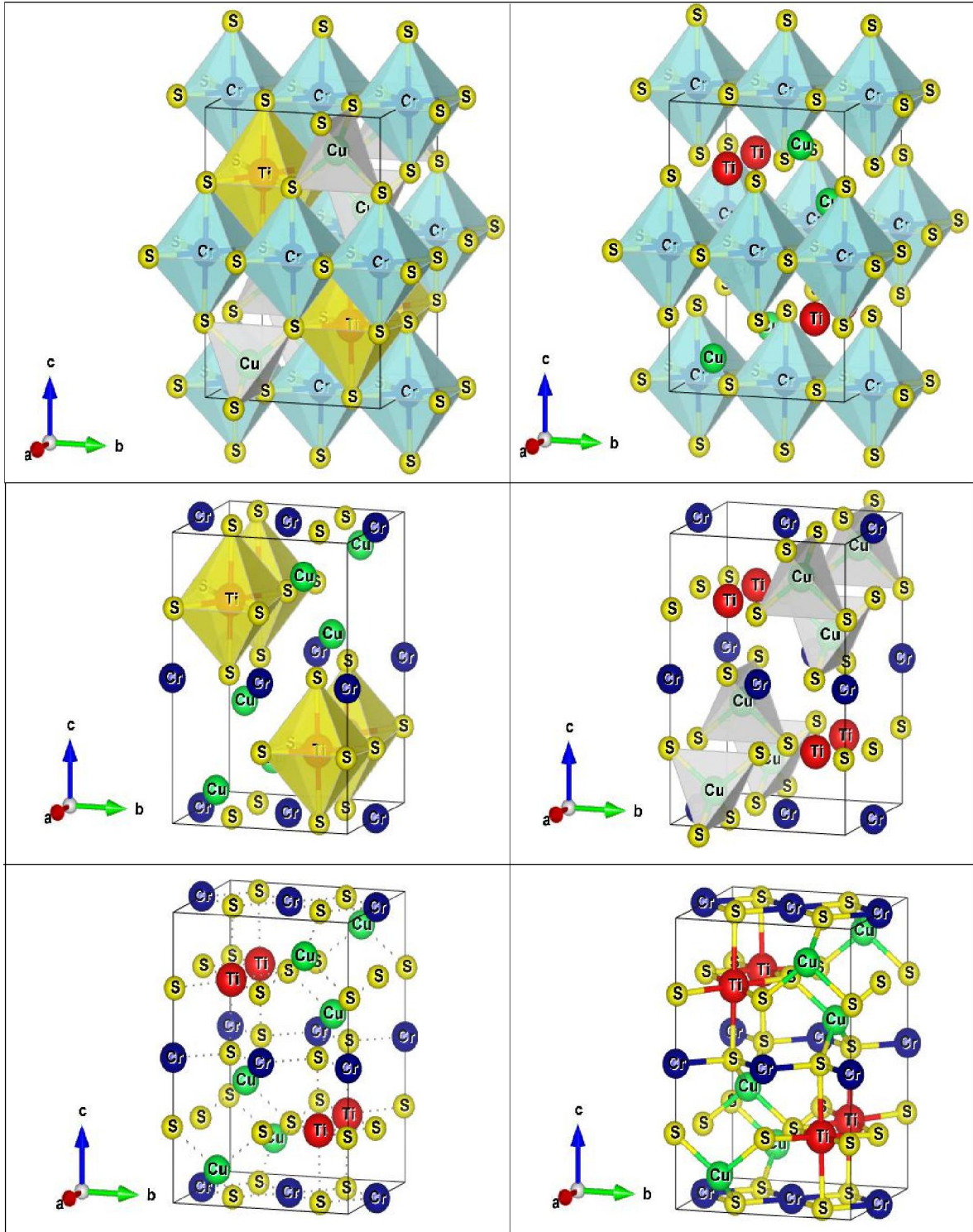
حيث يتبلور في بنية رباعي مع تناظر (زمرة $Imma_{74}$) كما هو موضح في الشكل (IV.1)

تحتوي البنية على 4 ذرات تحتل المواقع التالية :

Ti :	(0.2500	0.7500	0.2500)
Cr :	(0.0000	0.0000	0.5000)
Cu :	(0.0000	0.7500	0.8761)
S ₁ :	(0.5000	0.9925	0.2389)
S ₂ :	(0.7722	0.2500	0.4996)

IV.3. التوزيع الإلكتروني لكل عنصر كيميائي:

[Ti]:	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^2 4s^2$
[Cr]:	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^3 4s^2$
[Cu]:	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^1$
[S ₁]:	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^4$
[S ₂]:	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^4$



الشكل (1. IV) : البنية البلورية للمركب $TiCuCrS_4$

IV. 4. تفاصيل الحساب:

في هذا الحساب تم تحديد قيم المعاملات ($K_{point}, R_{mt}, R_{max}$). في طريقة FP_LAPW يتم تطوير كثافة الشحنة والكمون من حيث التوافقيات الكروية داخل كرة (MT) للحصول على قيمة قصوى تبلغ $L_{max}=12$ والموجة المستوية في المنطقة الحدودية $G_{max}=12$

الخطوة الأولى:

1- اختيار قيمة R_{mt} (نصف قطر كرة MT) لذرات Ti, Cu, Cr و S_4 وفقا للشرطين التاليين:

- تجنب تداخل كرة (MT).

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

2 - يعطى معامل RK_{max} بالعلاقة:

$$RK_{max} = R_{min} MT \times K_{max} \quad (1. IV)$$

R_{MTmin} : أصغر قطر للكرة MT

K_{max} : القيمة الأعظمية للشعاع الموجي

3- K_{Point} تعرف على أنها عدد النقاط K في منطقة بريليون الأولى منطقة الفضاء العكسي.

تم اختيار انصاف الاقطار كرة (MT) وانتقاء اختياري للنقاط الخاصة ($R_{mt} \times K_{max}$) (K_{Point})

حسب تقريب GGA و LDA و mbj-GGA و EV-GGA باستخدام الحساب الذاتي SCF

للمركب $TiCuCrS_4$. باستخدام الحساب الذاتي SCF للمركب $TiCuCrS_4$ حسب تقريب

GGA و LDA و

EV-GGA mbj-GGA تم اختيار أنصاف الأقطار كرة (MT) وانتقاء اختياري للنقاط الخاصة

$$(K_{Point}) (R_{mt} \times K_{max})$$

R _{mt} (S ₂)	R _{mt} (S ₁)	R _{mt} (Cu)	R _{mt} (Cr)	R _{mt} (Ti)	G _{max}	K _{point}	R _{mt} * K _{max}	المركب
1.8100	1.8100	2.2200	2.2800	2.3500	12	800	9	TiCrCuS ₄ Imma

الجدول (1. IV) : قيم K_{Point} R_{mt} K_{max} للمركب TiCuCrS₄

5. IV الخصائص البنيوية للمركب TiCuCrS₄ :

لحساب الخاصية البنيوية للمركب TiCuCrS₄ (أي ثابت الشبكة a(Å), معامل الانضغاط B ومشتقها B' بالنسبة للضغط) تم تطبيق حساب منسق ذاتيا من الطاقة الكلية لعدة معاملات من الشبكة «c/a» و «a» تكون متقاربة من المعاملات النظرية a₀ من الشبكة البدائية, ثم القيم التي يتم الحصول عليها من معادلة الحالة Murnaghan [5] والتي يتم التعبير عنها كالتالي :

$$E(V) = E_0 + \frac{B}{B'(B' + 1)} \left[V \left(\frac{V_0}{V} \right)^{B'} - V_0 \right] + \frac{B}{B'} (V - V_0) \quad (2. IV)$$

V₀: حجم الحالة الأساسية
E₀: طاقة الحالة الأساسية المسؤولة عن الحجم
B: معامل الانضغاطية ويعرف بالعلاقة التالية:

$$B = V \frac{\partial^2 E}{\partial V^2} \quad (3. IV)$$

B': المشتقة الأولى لمعامل الانضغاطية

$$B' = \frac{\partial B}{\partial P} \quad (4. IV)$$

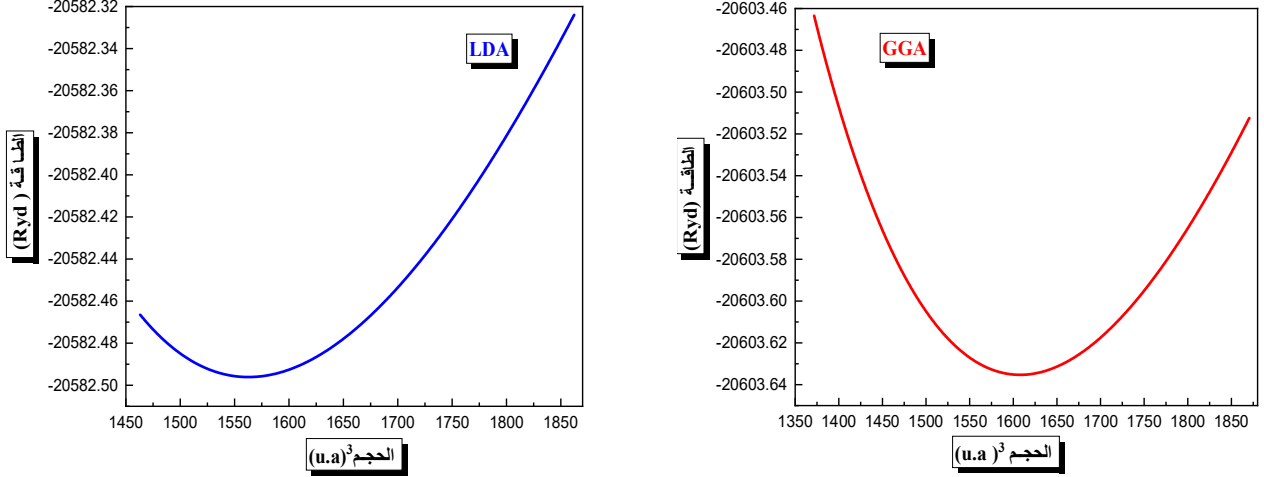
في حالة الاتزان نجد ثابت الشبكة يوافق القيمة الحدية الدنيا للطاقة.

الجدول (1. IV) . يوضح النتائج المتحصل عليها لثوابت الشبكة البلورية $a(A^\circ)$ و $c(A^\circ)$ و $b(A^\circ)$ معامل الانضغاطية β والمشتقة الأولى لمعامل الانضغاطية β' .

LDA	GGA	الثوابت	المركب
13.592827	13.592827	$a (A^\circ)$	TiCrCuS ₄
13.886771	13.886771	$b(A^\circ)$	
19.378551	19.378551	$c(A^\circ)$	
1.416983	1.417431	c/a	
120.5053	110.1700	$B (GPa)$	
4.2461	4.2964	B'	
-20582.496047	-20603.635403	$E_0(R_V)$	
1562.9505	1607.8371	V_0	

الجدول (2. IV) : قيم كل من ثوابت الشبكة $a(A^\circ)$ و $c(A^\circ)$ و $b(A^\circ)$ معامل الانضغاطية β و المشتقة الأولى لمعامل الانضغاطية β' للمركبات TiCrCuS₄

IV.6. دراسة استقرار المركب $TiCrCuS_4$



الشكل (2. IV): تغير الطاقة الكلية بدلالة الحجم للمركب $TiCuCrS_4$ باستعمال تقريب GGA و LDA

تحليل المنحنى: نلاحظ من خلال منحنى الطاقة بدلالة الحجم أن الطاقة الدنيا المحسوبة في كل من

التقريبين GGA و LDA على التوالي هي $-20603.63Ry$ و $-20582.50 Ry$

IV.7 الخصائص الإلكترونية للمركب $TiCuCrS_4$:

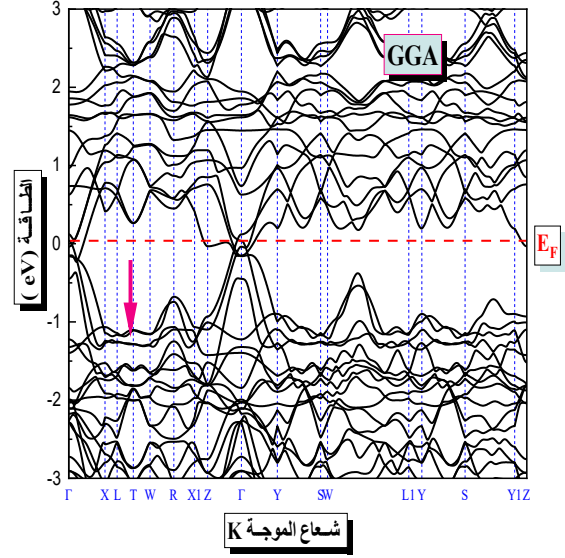
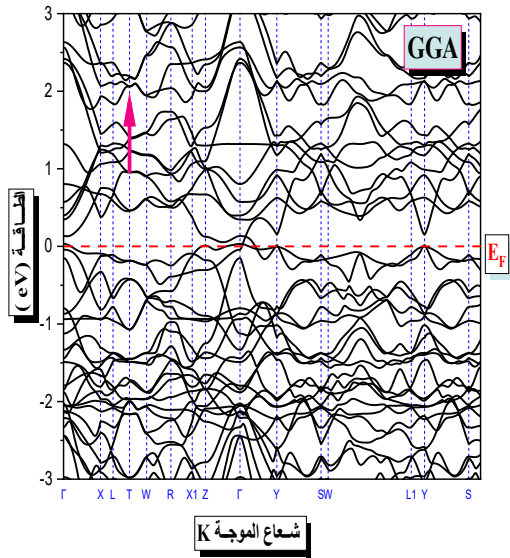
للفهم الجيد للخصائص الفيزيائية للجسم سمحت لنا دراسة الخصائص الإلكترونية للمركبات بتحديد ما اذا كان المركب عازلا او ناقل أو نصف ناقل، وكذلك تحديد الروابط بين ذراته.

IV.8. بنية عصابات الطاقة الإلكترونية للمركب $TiCuCrS_4$:

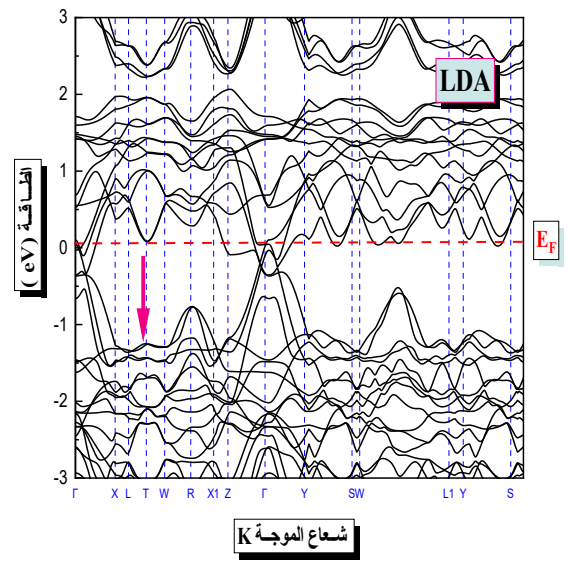
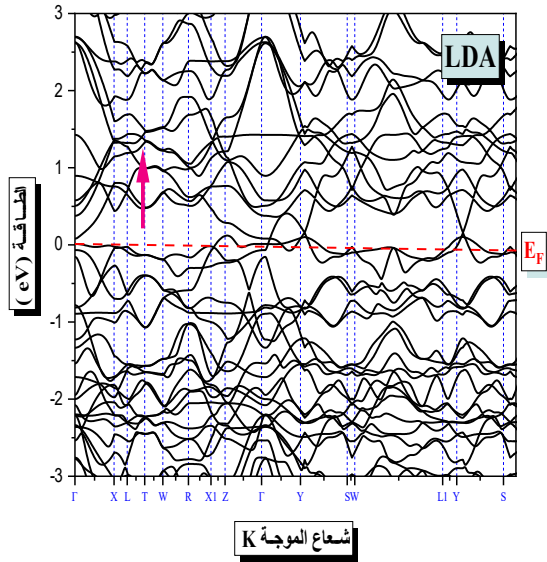
عصابة الطاقة هي تمثيل قيم الطاقة بالنسبة للإلكترون بدلالة شعاع الموجة في الشبكة المعكوسة، وللتبسيط يتم التعامل فقط مع اتجاهات التناظر الأعلى في منطقة Brillouin الأولى، ويمكن تعريف المانع الطاقى على انه الفرق بين أعلى قيمة لعصابة التكافؤ وأدنى قيمة لعصابة النقل في نقاط تناظرية محددة.

عصابات الطاقة الإلكترونية للمركب $TiCuCrS_4$ الممثلة في الاشكال (3.IV), (4.IV), (5.IV)

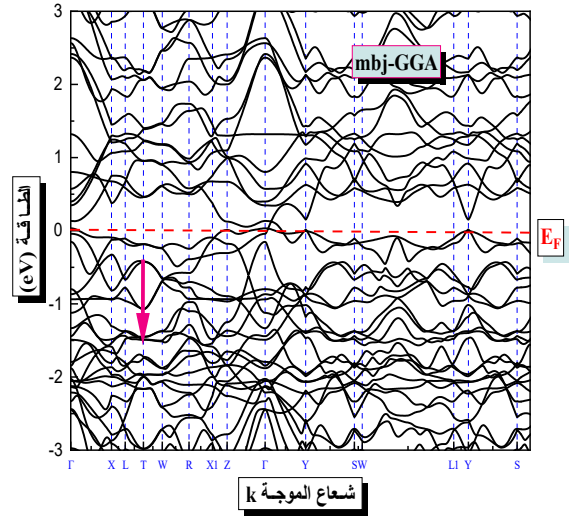
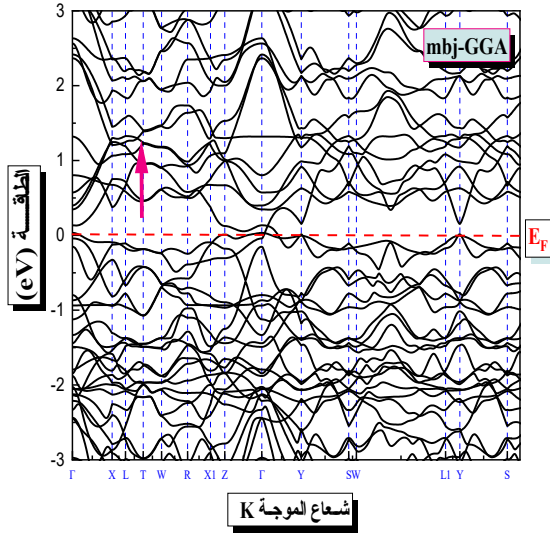
(6.IV), (7.IV)



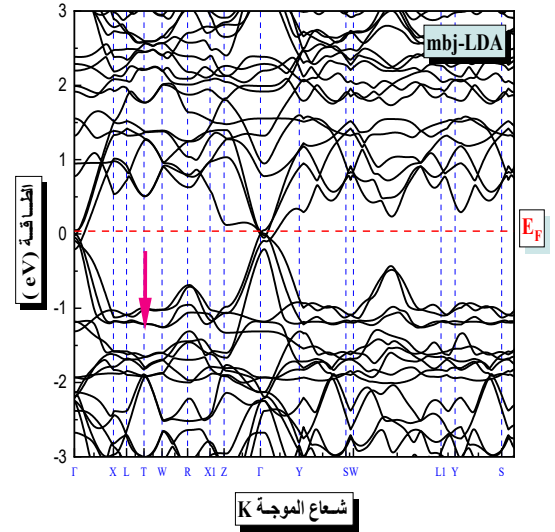
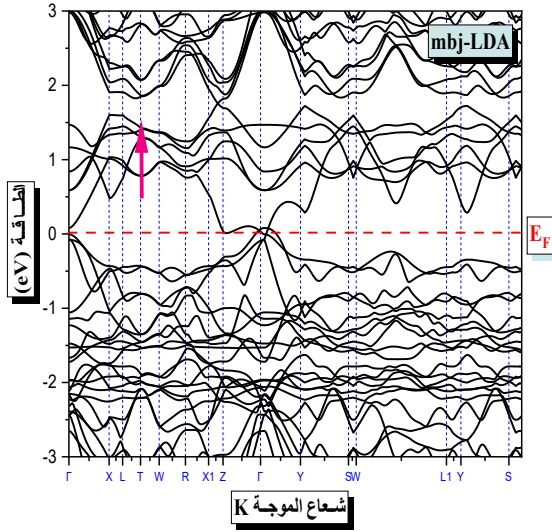
الشكل (3.IV): عصابة الطاقة للمركب $TiCuCrS_4$ المحسوبة باستعمال تقريب GGA



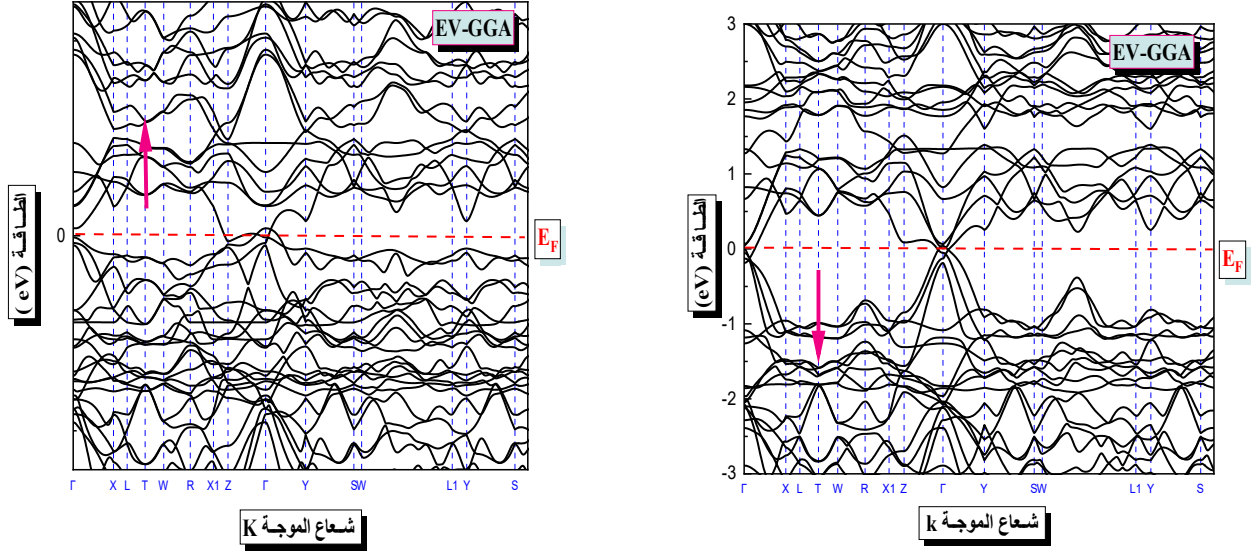
الشكل (4.IV): عصابة الطاقة للمركب $TiCuCrS_4$ المحسوبة باستعمال تقريب LDA



الشكل (5.IV): عصابة الطاقة للمركب TiCuCrS_4 المحسوبة باستعمال تقريب mbj- GGA



الشكل (6.IV): عصابة الطاقة للمركب TiCuCrS_4 المحسوبة باستعمال تقريب mbj- LDA



الشكل (7.IV): عصابة الطاقة للمركب $TiCuCrS_4$ المحسوبة باستعمال تقريب EV-GGA

من خلال منحنيات عصابات الطاقة وجدنا ان المانع الطاقى معدوم وبالتالي فان المركب هو ناقل في البنية المقترحة المحسوبة بالتقريبات التالية واخص بالذكر: GGA و LDA و mBJ-GGA و mBJ-LDA و EV-GGA اللذان يستعملان في تحسين المانع الطاقى.

حسب معلوماتنا فان المركب هو نصف ناقل في بنية بلورية تدعى سبينال (spinel) دراستنا تعتبر تنبؤ فقط.

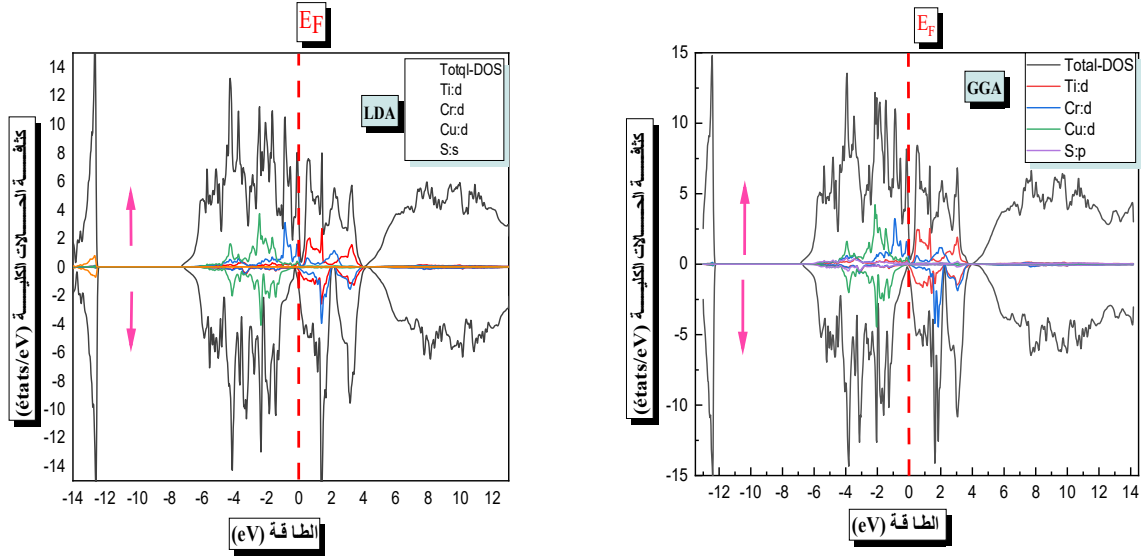
9. IV . كثافة الحالات الإلكترونية :

منحنيات كثافة الحالة الالكترونية تمثل عدد الحالات الالكترونية بدلالة الطاقة. لتمثيل Dos، أصل الطاقات ثابت بشكل عام على مستوى فرمي.

لتوضيح طبيعة شرائط الطاقة الالكترونية، قمنا بحساب كثافة الحالات الكلية والجزئية للمركب $TiCuCrS_4$ باستخدام التقريبات التالية EV-GGA, mbj-LDA, LDA, mbj-GGA, GGA

حيث يعطينا التمثيل البياني لكثافة الحالات الكلية والجزئية للمركب $TiCuCrS_4$ المبين في الاشكال

(8. IV), (9. IV), (10. IV), نجد النتائج التالية.



الشكل (IV. 8): كثافة الحالات الكلية للمركب $TiCuCrS_4$ باستعمال تقريب LDA و GGA

يمكن تقسيم DOS الى اربع مناطق متميزة للمركب $TiCuCrS_4$ في تقريب GGA :

المنطقة الأولى: تقع بين (-13 eV و -12.2 eV) نلاحظ مساهمة قوية للمدار d لذرات (Cr و Ti و Cu) ومساهمة ضعيفة للمدار p لذرة S

المنطقة الثانية: تقع بين (-6.8 eV و 0 eV) هناك هيمنة في المساهمة قوية للمدار d لذرتي Cu و Cr و المدار P لذرة S و مساهمة ضعيفة للمدار d لذرة Ti

المنطقة الثالثة: تقع بين (0 eV و 3.8 eV) حيث توجد مساهمة قوية للمدار d لذرتي Ti و Cr ومساهمة ضعيفة للمدار p لذرة S .

المنطقة الرابعة: تقع بين (4 eV الى 14 eV) توجد هناك مساهمة القوية للمدار d لذرة Ti ومساهمة ضعيفة للمدار d لذرة Cu.

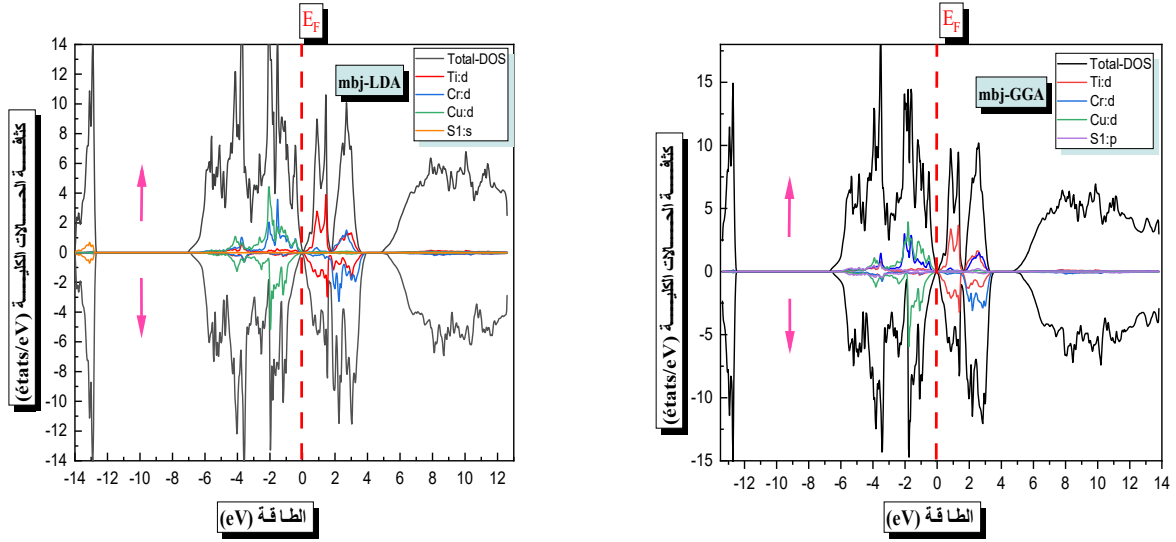
- وأيضا وجود اربع مناطق للمركب $TiCuCrS_4$ في تقريب LDA :

المنطقة الأولى: من (-13 eV الى -12.2 eV) نلاحظ مساهمة قوية للمدار d لذرات Cr و Ti و Cu ، و مساهمة الضعيفة للمدار p لذرة S .

المنطقة الثانية: تقع بين (-7.17 eV الى 0 eV) نلاحظ مساهمة قوية للمدار d لذرات Cu و Cr و Ti و مساهمة ضعيفة للمدار s لذرة S .

المنطقة الثالثة: تقع بين (0 eV الى 4.06 eV) نلاحظ مساهمة قوية للمدار d لذرتي Cr و Ti ومساهمة ضعيفة للمدار s لذرة S .

المنطقة الرابعة: من (4 eV الى 14 eV) نلاحظ مساهمة قوية للمدار d لذرتي Cr و Ti ومساهمة ضعيفة للمدار s لذرة S .



الشكل (IV. 9): كثافة الحالات الكلية للمركب $TiCuCrS_4$ باستخدام تقريب mbj- LDA و mbj- GGA

وأیضا وجود اربع مناطق للمركب $TiCuCrS_4$ في تقريب mbj-GGA :

المنطقة الأولى: تقع بين (-13.3 eV الى -12.4 eV) نلاحظ هيمنة مطلقة في المساهمة القوية للمدار d لذرة Ti و المدار d لذرة Cr ، و المساهمة الضعيفة للمدار p لذرة S .

المنطقة الثانية: تقع بين (0 eV الى -6.5 eV) وجود مساهمة قوية للمدار d لذرة Cu ومساهمة الضعيفة للمدار s لذرة S والمدار d لذرة Ti.

المنطقة الثالثة: تقع بين (0 eV الى 3.3 eV) نلاحظ مساهمة قوية للمدار d لذرتي Cr و Ti ومساهمة ضعيفة للمدار p لذرة S

المنطقة الرابعة: تقع بين (4.8 eV الى 14 eV) نلاحظ وجود مساهمة قوية للمدار d لذرة Ti و المدار d لذرة Cr ومساهمة ضعيفة للمدار p لذرة S.

- وأیضا وجود اربع مناطق للمركب $TiCuCrS_4$ في تقريب mbj-LDA :

المنطقة الأولى: تقع بين (-14 eV الى -12.5 eV) وجود هيمنة في المساهمة القوية للمدار s لذرة S ، و مساهمة ضعيفة للمدار d لذرة Cu .

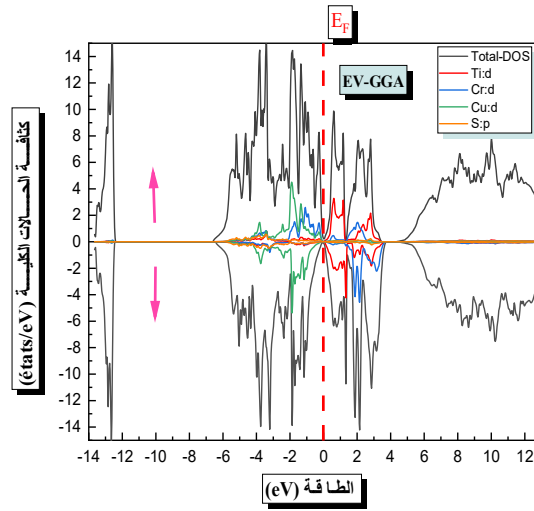
الفصل اربع

النتائج والمناقشة

المنطقة الثانية: تقع بين (6.9 eV الى 0 eV) نلاحظ مساهمة قوية للمدار d لذرة Cu و مساهمة ضعيفة للمدار s لذرة S.

المنطقة الثالثة: تقع بين (0 eV الى 3.8 eV) حيث وجود مساهمة قوية للمدار d لذرة Ti و المدار d لذرة Cr ومساهمة الضعيفة للمدار d لذرة Cu

المنطقة الرابعة: تقع بين (4.8 eV الى 14 eV) مساهمة قوية للمدار d لذرة Ti و المدار d لذرة Cr ومساهمة ضعيفة للمدار s لذرة S و المدار d لذرة Cu.



الشكل (10. IV) : كثافة الحالات الكلية للمركب $TiCuCrS_4$ باستعمال تقريب EV- GGA

- وأيضا وجود اربع مناطق للمركب $TiCuCrS_4$ في تقريب EV-GGA :

المنطقة الأولى: تقع بين (-13.6 eV الى -12.3 eV) نلاحظ مساهمة قوية للمدار d لذرة Cr، و مساهمة ضعيفة للمدار p لذرة S .

المنطقة الثانية: تقع بين (-6.5 eV الى 0 eV) نلاحظ هيمنة في المساهمة القوية للمدار d لذرة Cu و ضعف في المساهمة للمدار p لذرة S .

المنطقة الثالثة: تقع بين (0eV الى 3.6 eV) نلاحظ وجود مساهمة قوية للمدار d لذرة Cr و المدار d لذرة Ti ومساهمة ضعيفة للمدار d لذرة S .

المنطقة الرابعة: تقع بين (4.5 eV الى 14 eV) نلاحظ مساهمة قوية للمدار d لذرتي Ti و Cr ومساهمة ضعيفة للمدار d لذرة Cu و المدار p لذرة S .

IV. 10. الخواص الضوئية :

في فيزياء الجسم الصلب سنرى سلوك الالكترونات تذهب الى ابعد من ذلك لتشرح لنا انعكاس الضوء بواسطة بعض المواد الصلبة، بينما يمتصه البعض والبعض الاخر شفاف. كما يقدم لنا تفسير بعض المواد الصلبة على اصدار الضوء في ظل ظروف معينة

من الواضح ان العديد من المناطق التي يتفاعل فيها الضوء مع المادة ذات أهمية عالية.

اثبتت دراسة الخصائص البصرية للمواد الصلبة (الامتصاص، الانعكاس، النقل.....) انها أداة قوية لفهم التركيب والذري لهذه المواد [6] [7].

IV. 10. 1 تذكير نظري :

- تفاعل مادة - الاشعاع:

هناك تفاعلات المادة الاشعاعية وبشكل أكثر تحديدا عندما يكون هناك تبادل للطاقة، كما هو الحال في مكونات الالكترونية والضوئية، يكون تمثيل الجسيمات للإشعاع أكثر ملائمة.

اقترح أينشتاين ان طاقة الاشعاع لم تنتشر في جميع انحاء الفضاء ولكنها تتركز في مناطق معينة وتنتشر مثل الجسيمات التي أطلق عليها الفوتونات وتعطى بالعلاقة التالية [6]:

$$E = hv = \hbar \omega \quad (5. IV)$$

IV. 10. 2 انعكاس الموجات المستوية :

حيث تنتشر موجة مستوية بين وسطين لهما ثوابت عازلة مختلفة، وتنقسم الى اثنين، موجة منعكسة وموجة منكسرة. يعطى معامل الانكسار N بالعلاقة التالية:

$$N(\omega) = n(\omega) + ik(\omega) \quad (6. IV)$$

$n(\omega)$: معامل الانكسار الحقيقي

$k(\omega)$: معامل الانطفاء

الوقوع الطبيعي للإشعاع على سطح مادة صلبة، يكتب معامل الانعكاس:

$$R = \frac{|N-1|^2}{|N+1|^2} = \frac{(n-1)^2 + k^2}{(n+1)^2 + k^2} \quad (7. IV)$$

من اجل $K=0$ يكون n حقيقيا ويصبح معامل الانعكاس:

$$R = \left| \frac{N-1}{N+1} \right|^2 = \frac{(n-1)^2}{(n+1)^2}$$

(8.IV)

يوفر قياس انعكاس الضوء معلومات أكثر احتمالاً عن الأنظمة الالكترونية [8]:

خصائص دالة العزل $\varepsilon(\omega)$:

يمكن وصف استجابة الالكترون للمادة الصلبة بشكل مجهري، من خلال ثابت العزل المعقد $\varepsilon(\vec{k}, \omega)$ الذي يربط متجه المجال الكهرومغناطيسي \vec{E} و الحث الكهربائي في المادة الصلبة \vec{D} . هذه الوظيفة لها عواقب مهمة على الخصائص الفيزيائية للمواد الصلبة.

تسمى العلاقات التي تربط الجزء الحقيقي والتخيلي بثابت العزل الكهربائي بعلاقة كرامر – كروني. يتم الحصول على ثابت العزل بواسطة [9-10]:

$$\varepsilon = \varepsilon_1 + i\varepsilon_2 \quad (9.IV)$$

يربط متجه المجال الكهرومغناطيسي \vec{E} والازاحة في المادة الصلبة \vec{D} بواسطة العلاقة .

$$\vec{D}(\vec{k}, \omega) = \varepsilon(\omega)\vec{E}(\vec{k}, \omega) \quad (10.IV)$$

هذا صحيح فقط للمركبات المتناظرة الخواص ، الجزء التخيلي ε_2 يترجم امتصاص المادة بينما الجزء الحقيقي ε_1 مرتبط باستقطاب الوسط . يتناسب الجزء التخيلي ε_2 من اجل تردد ω الجي يتناسب مع مجموع كل الانتقالات بين الحالات المشغولة والحالات الفارغة المفصولة في الطاقة [11-12]:

$$\varepsilon_2(\omega) = \left(\frac{4\pi^2 e^2}{m^2 \omega^2} \right) \sum_{i,j} \int |\langle i|M|j \rangle|^2 f_i(1-f_j)\delta(E_f - E_i - \hbar\omega) d^3k \quad (11.IV)$$

$\langle i|M|j \rangle$: يمثل مكونات مصفوفة العزم ثنائي القطب i و j يمثلان الحالة الأولية والنهائية على التوالي ، f_i هي دالة توزيع فارمي الخاصة بي $i^{\text{éme}}$ و E_i طاقة الالكترون الخاصة بي $i^{\text{éme}}$. المنتج

$$|\langle i|M|j \rangle|^2 f_i(1-f_j) = P_{vc}$$

الفصل اربع

النتائج والمناقشة

هو عنصر مصفوفة تمثل احتمالات الانتقال بين حالات i لنطاق التكافؤ و j حالات نطاق التوصيل. الحفاظ على الطاقة اثناء التحولات ممثلة بدالة ديراك $\delta(E_f - E_i - \hbar\omega)$.

في الواقع يتم إعطاء الأجزاء الحقيقية والخيالية لدالة العزل الكهربائي من خلال العلاقة كرامر - كروني

[14-13]

$$\varepsilon_1(\omega) = 1 + \frac{2}{\pi} P \int_0^{\infty} \frac{\omega' \varepsilon_2(\omega')}{(\omega'^2 - \omega^2)} d\omega' \quad (12. IV)$$

$$\varepsilon_2(\omega) = -\frac{2\omega}{\pi} P \int_0^{\infty} \frac{\varepsilon_1(\omega') - 1}{(\omega'^2 - \omega^2)} d\omega' \quad (13. IV)$$

حيث ω هو تردد و P جزء رئيسي من تكامل كوشي، المحدد بواسطة:

$$P = \lim_{a \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\omega-a} \frac{\alpha(\omega')}{\omega' - \omega} d\omega' + \int_{\omega+a}^{+\infty} \frac{\alpha(\omega')}{\omega' - \omega} d\omega' \quad (14. IV)$$

في هذه المعادلات يتم اهمال التشتت في الفضاء (الاختلاف مع k)، لأنه بالنسبة لمعظم الظواهر الضوئية، يكون الطول الموجي للضوء كبيراً مقارنة بأبعاد النظام. هذه النتائج صالحة فقط في حالة عدم وجود مجال مغناطيسي.

في حالة وجود وسط مناحي الخواص او بلورة مكعبة تتخفف قيمة ε الى عدد قياسي يمكن بعد ذلك وصف استجابة

النظام لموجة مستوية كهرومغناطيسية باستخدام مؤشر الانكسار: $N(\omega) = n(\omega) + ik(\omega)$

هاتان الكميتان مرتبطتان بالعلاقة: $\varepsilon = N^2$ مع

$$\varepsilon_1(\omega) = n^2 - k^2 \quad (15. IV)$$

$$\varepsilon_2(\omega) = 2nk \quad (16. IV)$$

المقادير $n(\omega)$ و $k(\omega)$ تسمى معامل الانكسار و معامل الانطفاء على التوالي . ويتم تعريفهما بالعلاقات التالية:

$$n(\omega) = ([\{\varepsilon_1^2(\omega) + \varepsilon_2^2(\omega)\}^{\frac{1}{2}} + \varepsilon_1(\omega)]^{1/2}) / \sqrt{2} \quad (17. IV)$$

$k(\omega)$: الجزء التخيلي لمعامل الانكسار وهو معامل وهو معامل الخمود ويعطى بالعلاقة:

$$k(\omega) = ([\{\varepsilon_1^2(\omega) + \varepsilon_2^2(\omega)\}^{\frac{1}{2}} - \varepsilon_1(\omega)]^{1/2}) / \sqrt{2} \quad (18. IV)$$

معامل الامتصاص $I(\omega)$ الذي تم الحصول عليه مباشرة من العلاقة [15، 16]:

$$I(\omega) = \alpha(\omega) \quad \text{حيث}$$

$$\alpha(\omega) = \frac{\sqrt{2}}{c} \omega \sqrt{-\varepsilon_1(\omega) + \sqrt{\varepsilon_1(\omega)^2 + \varepsilon_2(\omega)^2}} \quad \text{ويستنتج طيف (19.IV)}$$

ويستنتج طيف الانعكاسية $R(\omega)$ بالنسبة لوقوع الطبيعي على سطح البلورة ، من العلاقة [13] :

$$R(\omega) = \left| \frac{\sqrt{\varepsilon(\omega)-1}}{\sqrt{\varepsilon(\omega)+1}} \right|^2 \quad \text{(20.IV)}$$

10. IV 3 تحديد دالة العزل بواسطة كود *Wien2k* :

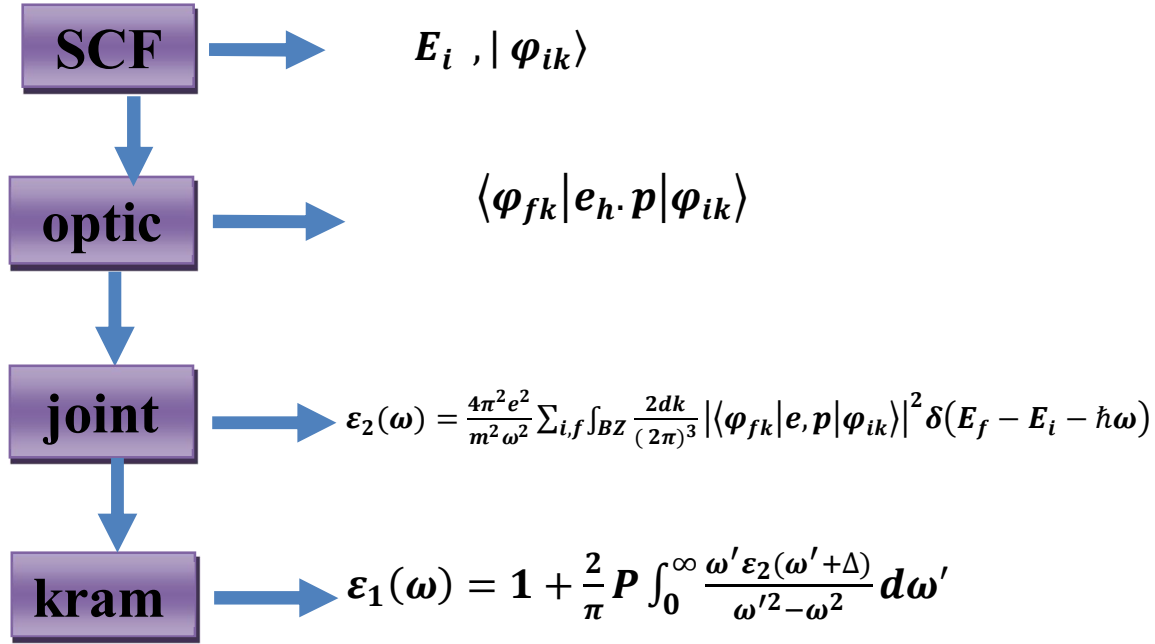
لتمثيل الخصائص البصرية بشكل صحيح من الضروري استخدام أفضل عينة ممكنة من منطقة بريليون. ولهذا الغرض وبعد حساب الهيكل الالكتروني عن طريق الاتساق الذاتي (مجال متسق ذاتيا SCF) يتم حساب القيم الذاتية E_i و المتجهات الذاتية $\langle \varphi_{ik} |$ الموافقة لعدد كبير جدا من النقاط K .

سنقوم الان بتفصيل الطريقة المستخدمة في *Wien2k* لحساب دالة العزل الموضحة في الشكل

يحسب الروتين "البصري" لكل مقطة K ولكل مجموعة من النطاق المشغول / النطاق الفارغ. حيث مكونات مصفوفة العزم ثنائي القطب $\langle \varphi_{fk} | e.p | \varphi_{ik} \rangle$.

حساب مكونات $\varepsilon_2(\omega)$ و التكامل في منطقة بريليون يتم من خلال الروتين "مرافق" ، من اجل طاقة انتقالية 0 الى 30 الكترون فولط . لاحظ أنه من الممكن اختيار النطاقات التي نحسب لها التحولات المحتملة. بعد تحديد الطابع المداري لكل نطاق، من الممكن فصل المكونات المختلفة للطيف. هذا صحيح فقط إذا كانت نطاقات الفرق منفصلة جيداً.

يتم تطبيق صيغة كرامرز-كرونيج لحساب مكونات روتين «كرام». على هذا المستوى يتم إعطاء قيمة «عامل المقص» Δc يتم تحديد هذه القيمة من خلال الفرق بين الفجوة البصرية المقاسة والفجوة البصرية المحسوبة. الممكن أيضاً إضافة توسيع، والذي يفسر التوسيع التجريبي باستخدام برنامج *Wien2k*. تم تأطير إجراءات البرنامج المختلفة وتظهر الصيغة المستخدمة كالتالي.



الشكل (11. IV): رسم تخطيطي لمراحل مختلفة لحساب دالة العزل .

10. IV. 4 النتائج والمناقشة:

يتم تحديد الخصائص البصرية للبلورات بشكل أساسي من خلال دالة العزل الكهربائي

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_1(\omega) + i\epsilon_2(\omega) \quad (21. IV)$$

الذي يميز الاستجابة الخطية للمادة للإشعاع الكهرومغناطيسي. الجزء التخيلي $\epsilon_2(\omega)$ تمثل الدالة العازلة الامتصاص البصري في البلورة. مساهمة في الجزء التخيلي من $\epsilon(\omega)$ يتم حسابها عن طريق إضافة التحولات من الحالات المشغولة إلى غير المشغولة في منطقة Brillouin ، ويمكن استخراج الجزء الحقيقي من دالة العزل الكهربائي من الجزء التخيلي باستخدام علاقة كرامرز- كرونيج .

لوصف سلوك المركب $TiCuCrS_4$ المعرض للإثارة الخارجية (الضوء) قمنا بحساب دالة العزل. توصيف كل هذه الخصائص الضوئية، يكفي حساب الجزء التخيلي من دالة العزل.

باستخدام ثابت الشبكة المحسنة، تم اجراء حسابات باستخدام تقريبات كل من LDA و GGA و EV-GGA في نطاق الطاقة من 0 الى 35 الكترون فولط.

10. IV. 5 الجزء التخيلي لدالة العزل الضوئي :

يبين الشكل (8.III) تغيرات الجزء التخليبي $\epsilon_2(\omega)$ لدالة العزل بدلالة الطاقة للمركب TiCuCrS_4 ، الذي يعكس امتصاص المادة، يمكننا الحصول على الانتقالات المختلفة بين النطاقات و يؤدي تناظر الرباعي المعيني الى ظهور عناصر من دالة العزل الكهربائي $\epsilon_2^{\text{xx}}(\omega)$ و $\epsilon_2^{\text{yy}}(\omega)$ و $\epsilon_2^{\text{zz}}(\omega)$

يقع الحد الأقصى للامتصاص للمركب عند 0.36735eV و 0.34014eV و 2.00eV للمحاور XX و YY و ZZ على التوالي بتقريب GGA

ويقع الحد الأقصى عند 0.36735eV , 0.34014eV , 2.02725eV على طول المحاور XX و YY و ZZ على التوالي بتقريب LDA . وأيضا عند 0.20409eV و 0.39457eV و 2.21773eV على طول المحاور XX و YY و ZZ بتقريب EV-GGA ولوحظ تغير طفيف للمركب وتحدث الذروة الرئيسية عند 0.36735eV و 0.34014eV و 0.20409eV بتقريبات GGA و LDA و EV-GGA على التوالي

IV .10. 6 الجزء الحقيقي لدالة العزل

يتم الحصول على الجزء الحقيقي من دالة العزل الكهربائي من الجزء التخليبي عن طريق تحويلات كرامر-كرونيغ [14] كما هو موضح في الشكل (8.III) تم حساب ثوابت العزل الكهربائي $\epsilon_1(\omega)$ من حيث التردد وتم سردها في الجدول التالي ونلاحظ ان هذه الاطياف البصرية الممثلة في هذا الشكل متشابهة مع اختلاف طفيف (موضع القمم وارتفاعها) حيث يوضح الشكل (8.III) النتائج المحسوبة للجزء الحقيقي من دالة العزل للمركب TiCuCrS_4 يعني المرور الى الصفر من الاطياف الى عدم وجود انتشار .

عندما يكون التشتت عند قيمة معدومة لطاقة يكون الامتصاص هو الحد الأقصى ويوضح الشكل (8.III)

انه من خلال قيم $\epsilon_1(0)$ يحدث لجزء الحقيقي يتناقص مع تزايد طاقة للفوتونات الى ان ينعدم بعد المرور بقيم سالبة للجزء المتشتت عند القيمة 9.7825eV وينعدم من جديد عندما تكون الطاقة تساوي 21.37455eV يختفي الجزء الحقيقي لدالة العزل عند الطاقة 9.67365eV وعند الذروة الرئيسية تكون بنية متذبذبة حول الصفر ثم يصبح الطيف سالبا تقدم بطيئ نحو الصفر [15].

باستخدام الجزء التخليبي والجزء الحقيقي التي تم الحصول عليها من دالة العزل المعتمدة على التردد حيث يمكن تقدير الخصائص البصرية الأخرى مثل معامل الامتصاص $I(\omega)$ واطياف الانعكاسية $R(\omega)$

تم حساب معامل الانكسار الذي يصف سلوك الموجة الكهرو مغناطيسية في الوسط ويتم عرض الاطياف في الشكل (8.III) حيث يمكن ملاحظة مؤشر الانكسار يتبع بشكل عام الجزء الحقيقي المرتبط به

بالعلاقة

$$n(0) = \sqrt{\epsilon_1(0)} \quad (22. IV)$$

الفصل اربع

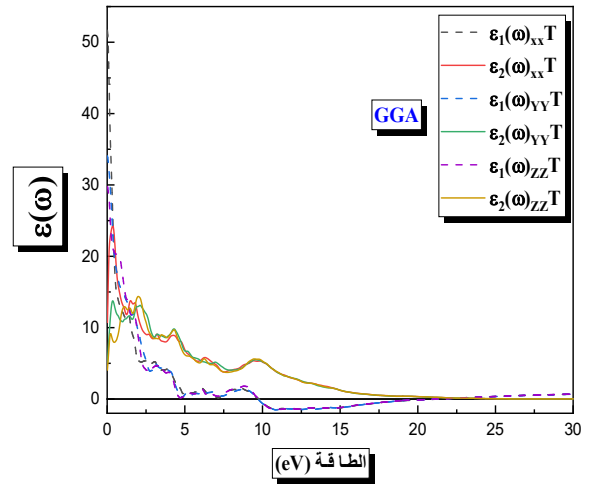
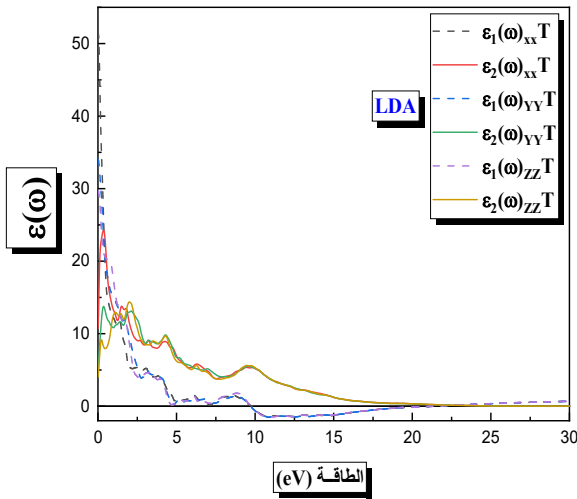
النتائج والمناقشة

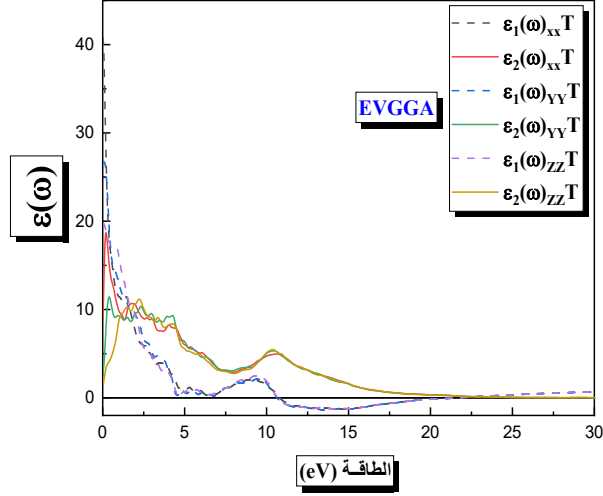
يتم تلخيص معامل الانكسار المحسوب $n(0)$ في نفس الجدول مع $\epsilon_1(0)$ ولا توجد قيم تجريبية متاحة لمقارنة . النتائج المحسوبة تظهر أيضا ان الجزء الحقيقي $\epsilon_1(\omega)$ ومعامل الانكسار $n(\omega)$ متماثل المنحى قليلا.

$\epsilon(0)$						المركب	
Down			Up				
EV-GGA	LDA	GGA	EV-GGA	LDA	GGA		
13.3401	27.4698	16.1391	28.4621	26.2256	36.5460	ϵ_{xx}	
11.0941	20.1048	15.1005	16.5447	20.7848	19.9833	ϵ_{yy}	
10.0485	16.3828	17.6167	10.7126	15.9359	13.1808	ϵ_{zz}	
$n(0)$							
6.6672	5.2942	4.0221	5.3670	5.1427	6.0917		n_{xx}
3.3328	4.5015	3.8936	4.0733	4.5725	4.4838		n_{yy}
3.1720	4.0532	4.2112	3.2744	4.0036	3.6339	n_{zz}	

الجدول (3. IV): يمثل $n(0)$ و $\epsilon_1(0)$ المحسوبة للمركب TiCuCrS_4 بواسطة GGA و

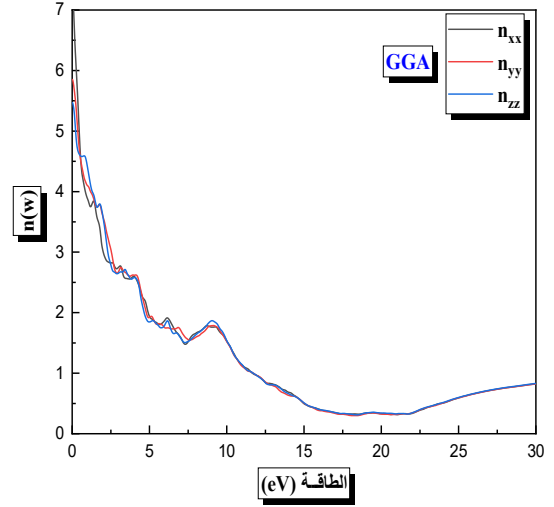
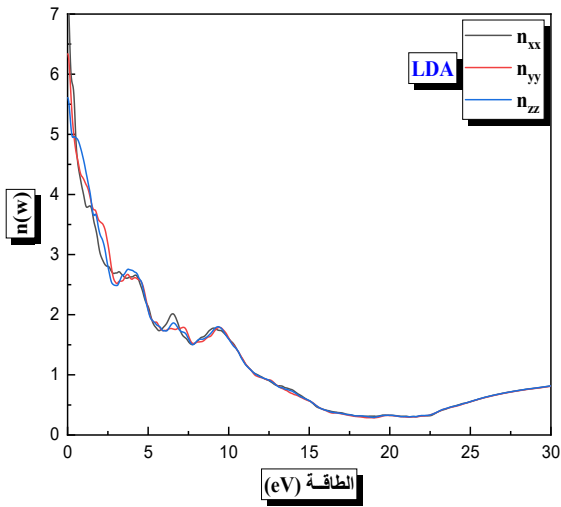
EV- GGA وLDA

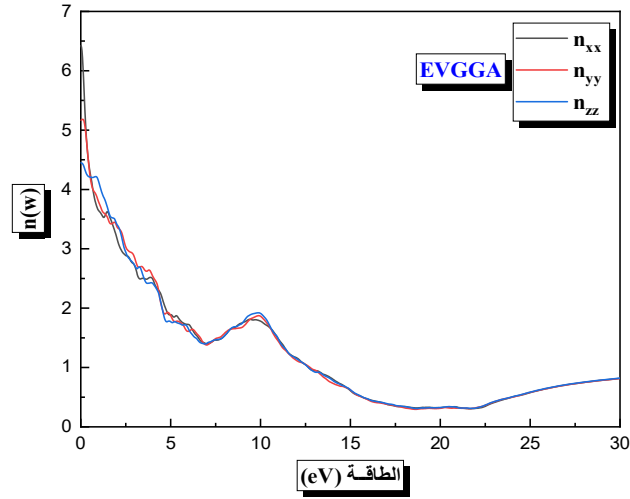




الشكل (11. IV): تغيرات دالة العزل الجزء التخيلي من $\epsilon_2(\omega)$ و الجزء الحقيقي $\epsilon_1(\omega)$ بدلالة الطاقة للمركب TiCuCrS_4 باستعمال التقريبات GGA و LDA و EV-GGA

7.10. IV قرينة الانكسار $n(\omega)$:

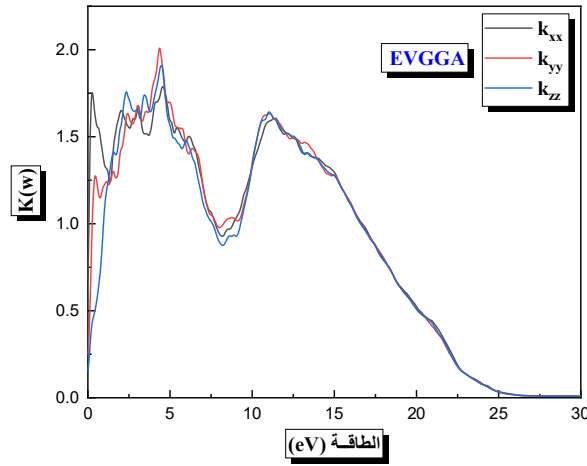
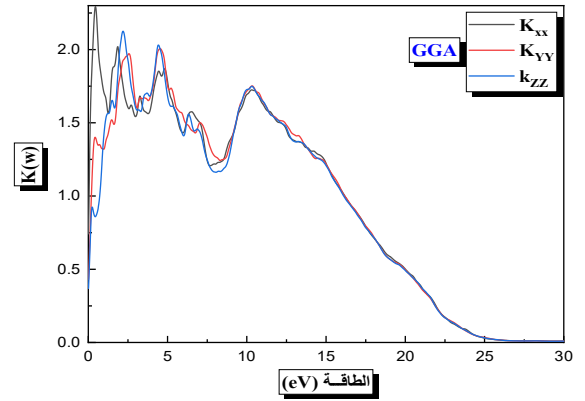
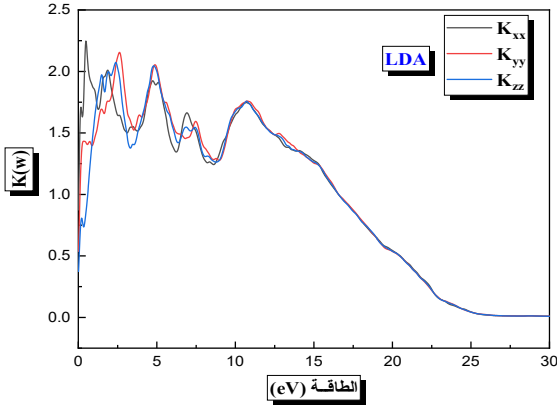




الشكل (12. IV) : تغيرات معامل الانكسار $n(\omega)$ للمركب TiCuCrS_4 بدلالة الطاقة باستعمال التقريبات EV-GGA و LDA و GGA

8.10. IV معامل الانطفاء $k(\omega)$:

يظهر تطور معامل الانطفاء للمركب المدروس في الشكل حيث نلاحظ الاطياف متشابهة مع اختلاف طفيف حيث توجد القيمة العظمى لمعامل الانطفاء عند الطاقات 0.4489eV و 4.5034eV و 2.1905eV على طول المحاور ZZ, YY, XX باستعمال التقريب GGA وعند القيم 0.4762eV و 2.5986eV و 4.7756eV على طول المحاور ZZ, YY, XX باستعمال التقريب LDA وعند القيم 4.36743eV و 4.5307eV و 4.4490eV على طول المحاور ZZ, YY, XX باستعمال التقريب EV-GGA الطاقة التي يصل فيها معامل الانطفاء الى قيمته العظمى هي التي يكون فيها الجزء الحقيقي من دالة العزل معدوم.



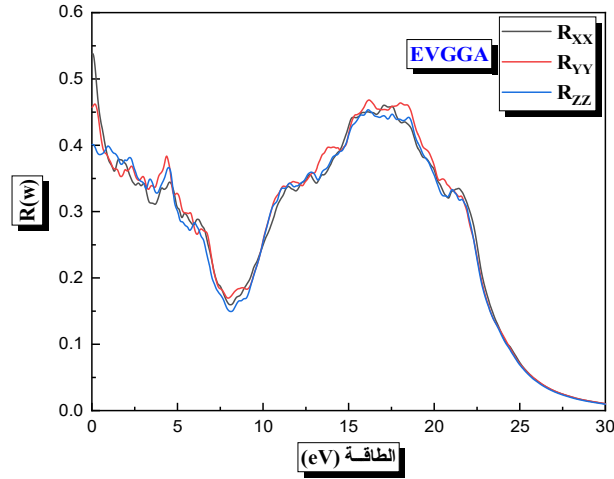
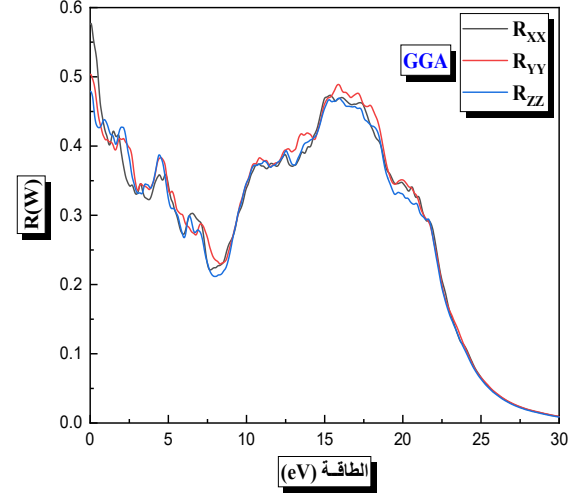
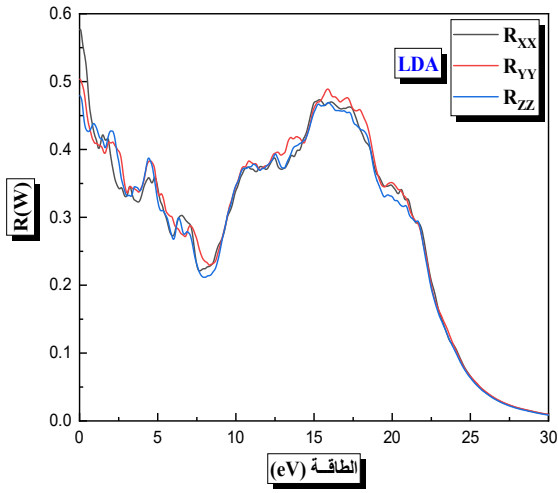
الشكل (13. IV) تغير معامل الانطفاء $k(\omega)$ للمركب TiCuCrS_4 بدلالة الطاقة باستعمال التقريبات LDA وGGA وEV-GGA

10. IV. وطيف الانعكاسية $R(\omega)$:

وفقا الشكل (14. IV) نلاحظ عند الطاقات المنخفضة تتميز هذه المواد بانعكاسية عالية.

يبدا عند 57.63% و 50.35% و 47.90% بالنسبة للمحاور ZZ, YY, XX باستعمال التقريب GGA وعند 57.6362% و 35.0150% و 47.9091% بالنسبة للمحاور ZZ, YY, XX باستعمال التقريب LDA. و 53.7601% و 46.7467% و 45.3545% بالنسبة للمحاور ZZ, YY, XX على الترتيب باستعمال التقريب EV-GGA.

يحدث الحد الأقصى من الانعكاسية على طول المحاور XX , YY , ZZ و عند الطاقات 0eV عند كل من التقريبات GGA و LDA على التوالي وعند التقريب $EV-GGA$ يحدث عند الطاقات 0eV و 16.14eV و 16.20eV بالنسبة للمحاور XX , YY , ZZ .



الشكل (IV. 14): تغير أطياف الانعكاسية للمركب TiCuCrS_4 بدلالة الطاقة باستعمال GGA و LDA و $EV-GGA$

IV. 10. معامل الامتصاص $I(\omega)$

معامل الامتصاص للمركب $TiCuCrS_4$ موضحة في الشكل (IV. 15) نلاحظ عند الطاقات المنخفضة يزيد معامل الامتصاص بشكل كبير ليصل الى قيمته العظمى عند طاقات اعلى.

يكون معامل الامتصاص $I(\omega)$ اكبر من (10^4 cm^{-1}) ويزيد بسرعة . بالنسبة للمركب $TiCuCrS_4$

نلاحظ ذروة قوية عند القيم 13.6193eV , 13.3199eV , 14.6805eV بالنسبة للمحاور ZZ , YY , XX باستعمال التقريب GGA اما بالنسبة للتقريب LDA نجد الذروة عند الطاقات

14.2451eV , 11.007eV , 14.6261eV بالنسبة للمحاور ZZ , YY , XX على التوالي

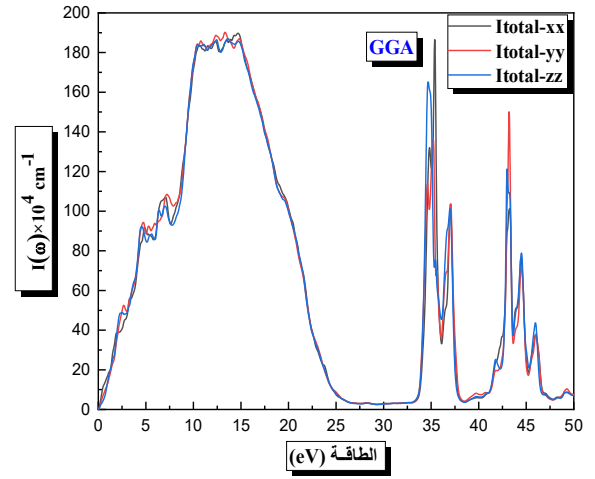
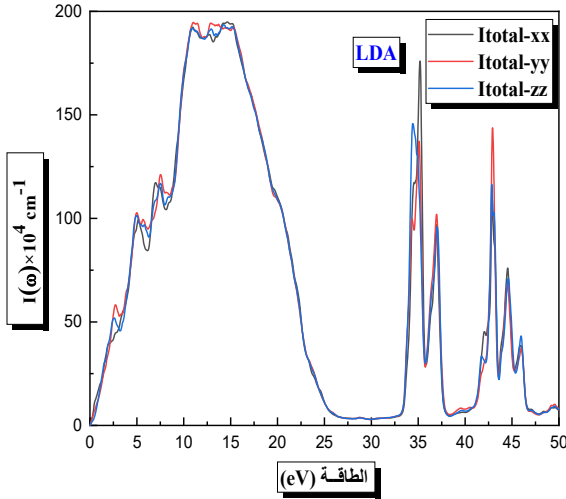
وتبلغ ذروة عند الطاقات في التقريب $EV-GGA$ 13.3199 eV , 35.9870 eV , 35.4700 eV

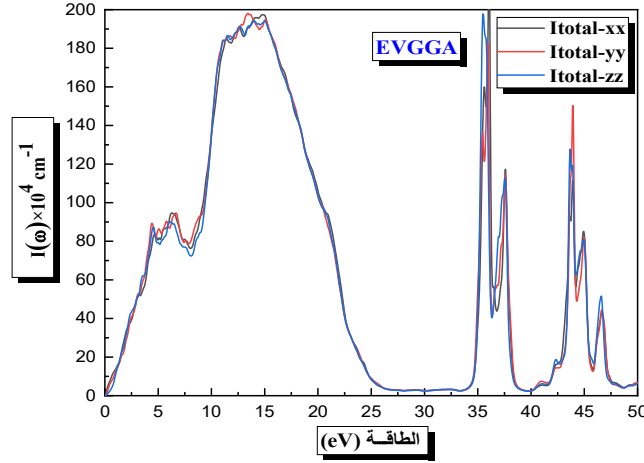
بالنسبة للمحاور ZZ , YY , XX على التوالي , وتظهر أطيف الامتصاص الحد الأقصى في مجال نطاق الطاقة

[08.4471 eV الى 19.5513 eV] في التقريب GGA

و [09.0205 eV الى 19.1704 eV] في التقريب LDA و [09.4015 eV الى 20.6398 eV] في التقريب

$EV-GGA$





الشكل (15. IV): معامل الامتصاص $I(\omega)$ بدلالة الطاقة للمركب TiCuCrS_4 باستعمال التقريبات GGA و LDA و EV-GGA

IV. 10. 11 الموصلية البصرية :

تربط الموصلية الضوئية بالمجال الكهربائي المتذبذب بكثافة التيار بالعلاقة التالية [24] :

$$j(\omega) = E(\omega)\sigma(\omega) \quad (23. IV)$$

ومن اجل $\omega \rightarrow 0$ يتحول الى توصيل كهربائي ولها علاقة مباشرة بالجزء التخيلي لدالة العزل الكهربائي ، ويمكن حساب الجزء الحقيقي منها بالعلاقة التالية [17]:

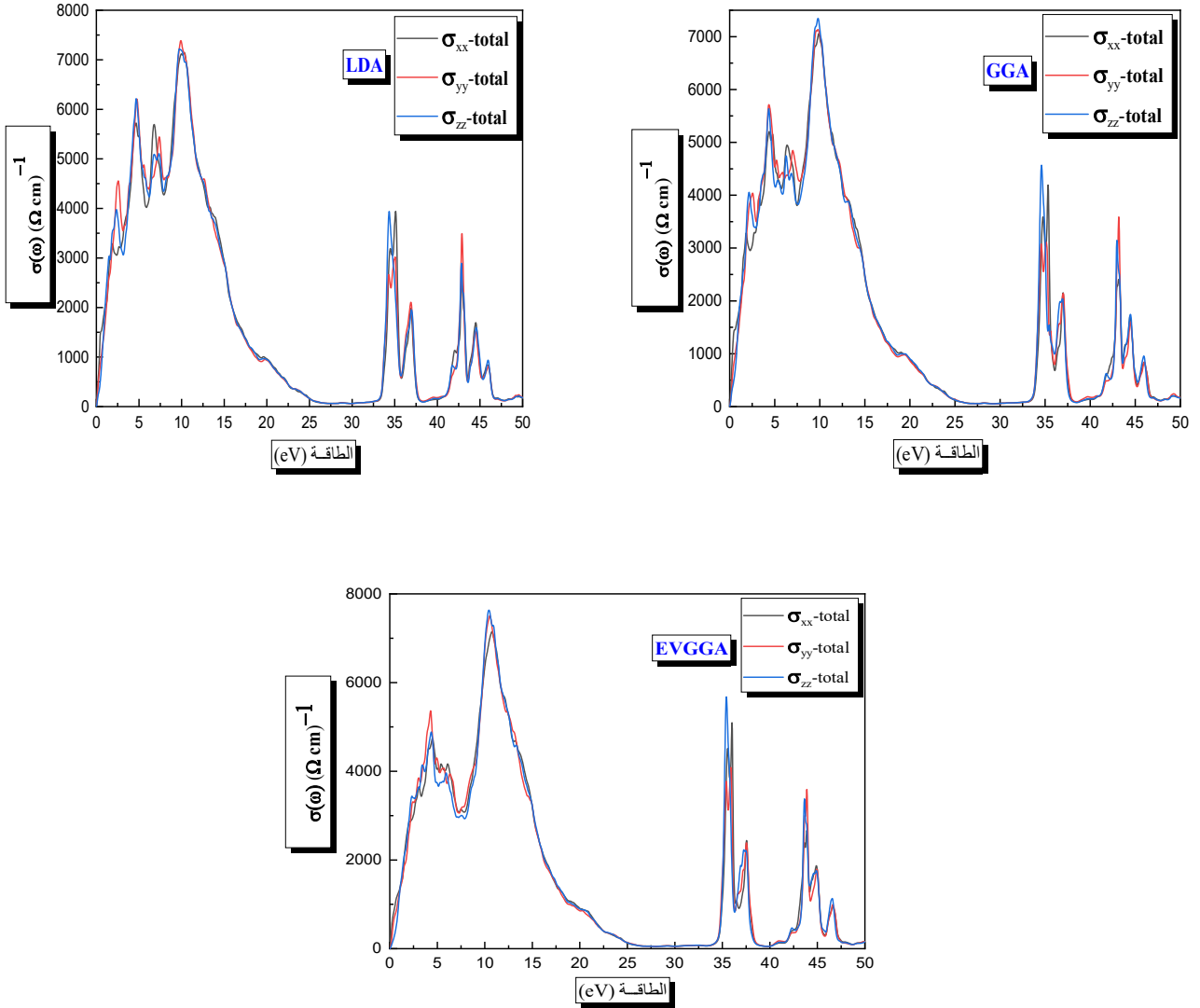
$$\sigma(\omega) = \frac{\omega}{4\pi} \varepsilon_2 \quad (24. IV)$$

نلاحظ قمم تقابل التحولات بين النطاقات في طيف التوصيل الضوئي المعروف في الشكل (17.IV) بالنسبة للمركب TiCuCrS_4 تحدث الذروة الرئيسية عند الطاقات 9.89 eV و 9.78 eV و 9.8 eV على طول المحاور

ZZ, YY, XX على التوالي باستعمال التقريب GGA وباستعمال تقريب LDA نلاحظ الذروة الرئيسية عند الطاقات 10.32 eV و 9.91 eV و 9.72 eV على طول المحاور ZZ, YY, XX على الترتيب

كما نلاحظ حدوث الذروة الرئيسية عند الطاقات 10.73 eV و 10.51 eV و 10.43 eV على طول المحاور XX ,

ZZ, YY على الترتيب باستعمال تقريب EV-GGA



الشكل (16.IV): التغير في الموصلية الضوئية بدلالة الطاقة للمركب $TiCuCrS_4$

باستعمال التقريبات LDA و GGA و EV-GGA

IV. 10. 12 دالة الضياع في الطاقة :

تعتبر دالة فقد الطاقة عاملا أساسيا في وصف فقدان طاقة للإلكترونات داخل المادة

ويمكن حساب فقد الطاقة بالعلاقة التالية

$$L(\omega) = \text{Im} \left(-\frac{1}{\varepsilon(\omega)} \right) \quad (25.IV)$$

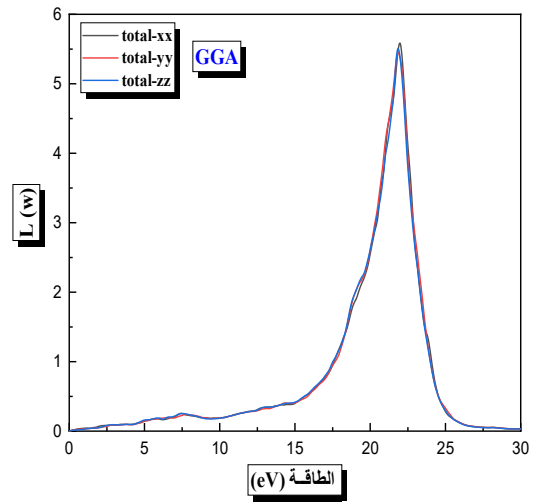
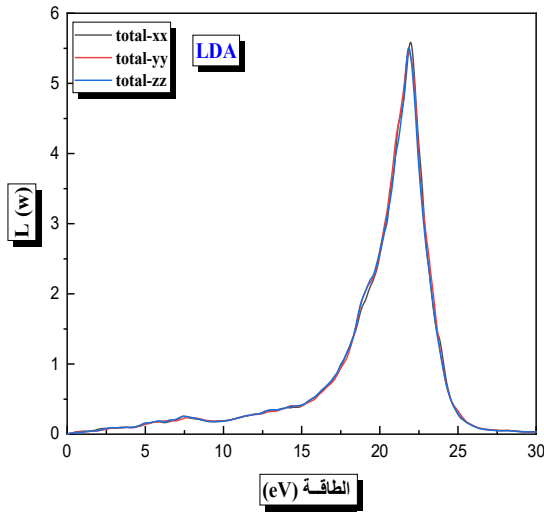
والتي يمكن كتابتها على النحو التالي

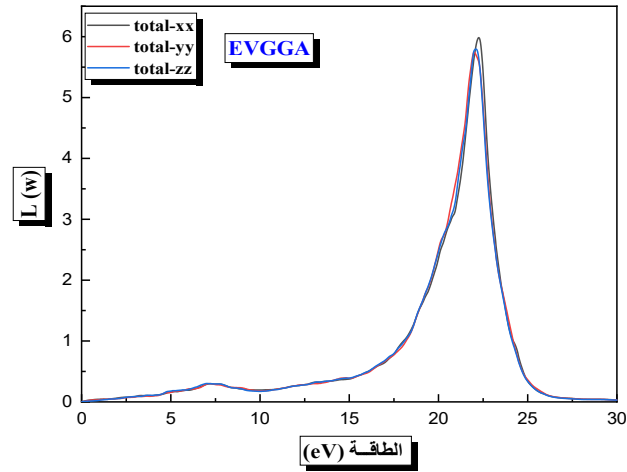
$$L(\omega) = \left(\frac{\varepsilon_2(\omega)}{\varepsilon_1(\omega)^2 + \varepsilon_2(\omega)^2} \right) \quad (26. IV)$$

ونجد النتائج التي تم الحصول عليها موضحة في الشكل (18. IV) بالنسبة للمركب $TiCuCrS_4$ حيث فقدان كبير للطاقة بين المجال $22.87eV-20.50eV$ بالنسبة للمحور xx و بين $22.81eV-20.25eV$ بالنسبة للمحور yy وبين $22.86eV-20.74 eV$ بالنسبة للمحور zz باستعمال تقريب GGA

اما بالنسبة للتقريب LDA نلاحظ فقدان الطاقة عالي في المجال $22.80eV - 20.47eV$ بالنسبة للمحور xx و بين $22.76eV - 20.42eV$ بالنسبة للمحور yy وبين $22.81eV - 20.34eV$ بالنسبة للمحور zz باستعمال تقريب LDA

كما نلاحظ في التقريب EV-GGA كبير للطاقة في المجال $23.44eV - 19.41eV$ بالنسبة للمحور xx و بين $24.06eV- 18.02eV$ بالنسبة للمحور yy وبين $23.46eV - 19.36eV$ بالنسبة للمحور zz باستعمال تقريب EV-GGA





الشكل (IV. 17): دالة ضياع الطاقة الإلكترونية للمركب $TiCuCrS_4$ باستعمال تقريبات

GGA و LDA و EV-GGA

قائمة 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] M. Ouled Ali, Propriétés optoélectroniques du semi-conducteur Cu (In, Ga) Se2Appliquée aux cellules photovoltaïques, Mémoire de Magister en physique, Ecole Normale Supérieure de l'Enseignement Technologique d'Oran, Algérie, 1022 [26] A.
- [7] N. Bouarissa, Optik 138 (2017) 263
- [8] C. Kittel, Physique de l'état solide, Ed. Dunod Université 287, 325. (1983)
- [9] J.S. Tell, Phys. Rev. 104. 1760. (1956).
- [10] R.De.L. Kronig, J. Opt. Soc. Am. 12 547. (1926).
- [11] F. Bassani, G. Pastroi, Parravicini, Electronic States and Optical Transitions in Solids, Pergamon Press, Oxford. (1973).
- [12] C. Ambrosch-Draxl, R. Abt, The Calculation of Optical Properties Within WIEN97, ICTP Lecture Notes 1998, unpublished; S. Sharma, C. Ambrosch-Draxl, M.A. Khan, P. Blaha, S. Auluck. Phys. Rev. B 60. 8610. (1999) .

- [13] C. A. Draxl, R. Abt, ICTP lecture notes, unpublished. (1998).
- [14] P. Y. Yu, M. Cardona, Fundamentals of Semiconductors, Physics and Materials Properties. Berlin: Springer-Verlag. 233. (1999).
- [15] Landolt-Börnstein, in Condensed Matter, Ternary Compounds, Organic Semiconductors.
- [16] P. Nayebi et al. / Physica B 416 .55-63. (2013).
- [17] C. Ambrosch-Draxl, J.O. Sofo: *Computer Physics Communications* 1 (2006) 175.

خاتمة عامة

خاتمة عامة

يهدف هذا العمل إلى دراسة الخصائص الهيكلية (معامل الشبكة، معامل الانضغاط B ومشتقاته B') والخصائص الإلكترونية (بنية النطاق وكثافة الحالات الإلكترونية) والخصائص البصرية (الوظيفة العازلة، معامل الانكسار، الانعكاسية، الامتصاص وفقدان الطاقة، الموصلية الضوئية) للمركب TiCuCrS_4 ، هذا باستعمال طريقة الموجات المستوية المعززة الخطية (FP-LAPW) في إطار الكثافة الوظيفية (DFT) بالتقديرات: LDA و GGA و mBJ و EV-GGA

الخصائص البنيوية:

بالنسبة لمركب TiCuCrS_4 ، وجدنا أن LDA يعطي نتائج جيدة لثوابت الشبكة، مقارنة باستخدام GGA. لاحظ أننا وجدنا قيمًا متطابقة لنسبة c/a والمعلمة الداخلية u مع تقريب LDA و GGA في الختام. خصائص الإلكترونية:

تظهر حساباتنا أن TiCuCrS_4 لها صفة ناقل والتي يتم حسابها بتقديرات GGA و LDA و mbj-LDA و mbj-GGA.

درسنا أيضًا الكثافة الكلية والجزئية للحالات (DOS) لمركب TiCuCrS_4 ، وتمكننا من تمييز نوع الذرة والمدار الذي يتشكل بين العناصر المختلفة لكل مركب. خصائص البصرية:

حسبنا الخصائص البصرية بتقريبات GGA و LDA و mbj-LDA و mbj-GGA حيث لاحظنا أن النتائج $\epsilon(0)$ و $n(0)$ حيث نتائج LDA احسن من GGA.

لقد قدمنا أيضًا وظائف العزل المعقدة لمركبات TiCuCrS_4 .

وُستخدم نتائجنا للأجزاء التخيلية لإنتاج الأجزاء الحقيقية للدالة العازلة ومعاملات الانكسار والانعكاسية والامتصاص البصري والموصلية البصرية.

ملخص

ملخص

تهدف هذه المذكرة إلى دراسة الخصائص البنيوية والالكترونية والبصرية للمركب $TiCuCrS_4$ الذي يتبلور في بيئة رباعي متناظر، بواسطة نظرية دالية الكثافة DFT وطرق الحساب " طريقة الأمواج المستوية المتزايدة خطيا والكمون الكامل FP-LAPW. في تقريب التدرج المعمم (GGA) وتقريب كثافة الموضع (LDA) استعملنا تقريب المعدل لبريك-جونسون (mBJ) والتقريب (eV-GGA) بغية حساب عصابات الطاقة وكثافة الحالات والخصائص البصرية فوجدنا تحسن نتائج مقارنة بتقريب (GGA) و (LDA). هذه المواد لديها أهمية تكنولوجية وتقنية لذا تستعمل في تطبيقات الخلايا الكهروضوئية

Abstract

The aim of this note is to study the structural, electronic and optical properties of $TiCuCrS_4$ Which crystallizes in a symmetrical quadrilateral, by density function theory DFT and calculation methods "Linearly increasing planar wave method and full latency FP-LAPW. In the generalized gradient approximation (GGA) and the position density approximation (LDA) we used the average Breck-Johnson approximation (mBJ) and the eV approximation -GGA) in order to calculate the energy bands, density of states, and optical properties, and we found improved results compared to the (GGA) and (LDA) approximations.

These materials have technological and technical importance, so they are used in photovoltaic applications

Résumé

L'objectif de cette note est d'étudier les propriétés structurales, électroniques et optiques de $TiCuCrS_4$

Qui cristallise dans un quadrilatère symétrique, par théorie de la fonction de densité DFT et méthodes de calcul "Méthode des ondes planes croissantes linéairement et pleine latence FP-LAPW. Dans l'approximation de gradient généralisé (GGA) et l'approximation de densité de position (LDA) nous avons utilisé la moyenne de Breck- l'approximation de Johnson (mBJ) et l'approximation (eV - GGA) afin de calculer les bandes d'énergie, la densité d'états et les propriétés optiques, et nous avons trouvé des résultats améliorés par rapport aux approximations (GGA) et (LDA).

Ces matériaux ont une importance technologique et technique, ils sont donc utilisés dans les applications photovoltaïques.