

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/05/2020

مذكرة مقدمة لنيل شهادة الماستر أكاديمي

إعداد الطالبة: هذلي أسماء

تحت عنوان

حساب المبدأ الأول لبعض الخصائص الفيزيائية لأنصاف
النواقل $\ln X$ ($X = P, Sb$)

تمت المناقشة يوم 30 / 09 / 2020 أمام اللجنة المكونة من:

رئيسا	جامعة المسيلة	سايب سليمة
مشرفا و مقررا	جامعة المسيلة	بن يطو سامية
مناقشا	جامعة المسيلة	فراحتية سامية

السنة الجامعية: 2020/2019

اهداء

الى من لا يمكن للكلمات ان توفي حقهما

الى من لا يمكن للأرقام ان تحصي فضائلهما

الى والدايا العزيزين أدامهما الله لي

الى زوجي صلاح وابني جود

الى رفيقات الدرب وفراشات القلب اخواتي وصديقاتي

الى طلاب العلم وهواة المعرفة في كل مكان

أهدي هذا العمل المتواضع

الطالبة: هنلي أسماء

تشكرات

تكمل سعادتني وأنا أضع آخر لمسات البحث، أن أشكر الله عز وجل على توفيقه لنا بإتمام هذا العمل المتواضع، وإن أسدي الشكر لمستحقه فلولاهم ما اكتمل هذا البحث.

أتوجه بجزيل الشكر والامتنان إلى الأستاذة المشرفة بن يطو سامية التي لم تبخل علي بتوجيهاتها ونصائحها التي كانت عوناً لي.

كما أتقدم بجزيل الشكر و التقدير إلى أعضاء لجنة المناقشة المكونة من الأستاذة الفاضلة سايب سليمة أستاذ التعليم العالي بجامعة محمد بوضياف بالمسيلة رئيسا والأستاذة الكريمة فراحية سامية أستاذ محاضر أ بجامعة محمد بوضياف بالمسيلة مناقشا لقبولهم مناقشة عملي و تصويبه أدام الله تألقهم. وأشكر كل من ساعدني على إتمام هذه المذكرة وقدم لي العون و المساعدة.

إلى جميع أفراد أسرتي.

إلى زملاء الدفعة تخصص فيزياء المواد 2020/2019.

وأسأل الله التوفيق لكل ما يحبه ويرضاه.

قائمة الجداول

الصفحة	العنوان	الجدول
27	ثابت الشبكة البلورية a ، ومعامل الانضغاطية β ، والمشتقة الأولى لمعامل الانضغاطية B' والطاقة $E(ev)$ للمركبين lnP و $lnSb$.	(1.3)
29	قيم معاملات المرونة C_{ij} للمركبين lnP و $lnSb$.	(2.3)
31	قيم كل من A ، E ، G ، θ ، B ، B/G للمركبين lnP و $lnSb$.	(3.3)

قائمة الاشكال

الصفحة	العنوان	الشكل
12	يمثل خوارزمية حل معادلة كوهن-شام	(1.1)
14	أنواع مختلفة من الكمونات الزائفة	(1.2)
17	كمون إلكترونات التكافؤ ودالة الموجة الموافقة له	(2.2)
18	منطقة بريلوين الأولى مرفقة بنقاط عالية التناظر	(3.2)
21	تغير الطاقة الكلية بدلالة طاقة القطع للمركبين InSb و InP	(1.3)
22	تغير الطاقة الكلية بدلالة عدد النقاط للمركبين InSb و InP	(2.3)
23	يمثل بنية زنك بلاند	(3.3)
24	تغير الطاقة الكلية بدلالة الحجم للمركب InSb و InP	(4.3)
26	تغير الطاقة الكلية بدلالة الحجم للمركب InP	(5.3)
26	تغير V/V_0 بدلالة درجة الحرارة للمركبين InSb و InP	(6.3)
32	تغير الطاقة الكلية بدلالة الحجم للمركب InSb	(7.3)
33	تغير B/B_0 بدلالة درجة الحرارة للمركبين InSb و InP	(8.3)
34	تغير C_V بدلالة درجة الحرارة للمركبين InSb و InP	(9.3)
35	تغير C_p بدلالة درجة الحرارة للمركبين InSb و InP	(10.3)
36	تغير لانتروبي S بدلالة درجة الحرارة للمركبين InSb و InP	(11.3)
37	تغير معامل التمدد الحراري α بدلالة درجة الحرارة للمركبين InSb و InP	(12.3)

الفهرس

الفهرس

1مقدمة عامة.
3المراجع.

الفصل الأول: نظرية الكثافة التابعية (DFT)

41.1 مقدمة.
42.1 معادلة شرودنغر للبلورة
53.1 تقريب بورناوبنهايمر
64.1 تقريب هارترى
75.1 تقريب هارترى فوك.
76.1 نظرية الكثافة التابعية (DFT)
71.6.1 الكثافة الالكترونية.
82.6.1 نظرية توماس . فارمى.
93.6.1 نظرية هوهنبارغ . كوهن.
94.6.1 نظرية كوهن . شوم.
117.1 تابع تبادل . ارتباط.
111.7.1 تقريب كثافة الموضع LDA
112.7.1 تقريب التدرج المعمم GGA.
12المراجع

الفصل الثاني : شبه الكمون و الموجة المستوية (PP-PW)

132 مقدمة
131.2 طريقة شبه الكمون
131.1.2 انشاء شبه الكمون
142.1.2 نظرية بلوخ.
153.1.2 طريقة الأمواج فالمستوية مع الكمون الزائف.
152.2 مدارات ذرية وذرية زائفة ممتدة.
161.2.2 تقريب شبه الكمون.
172.2.2 امثلة عن شبه الكمون.
171.2.2.2 الكمون ذو الطويلة المحفوظة

17 2.2.2.2 الكمون فائق الليونة لفاندريلت (ultra-soft)
17 3.2 منطقة بريليون الأولى
19 المراجع

الفصل الثالث: النتائج والمناقشة

20 3. مقدمة
20 1.3. طريقة الحساب
20 2.3. اختبار التقارب
23 3.3. الخصائص البنيوية
28 4.3. الخصائص المرورية
32 5.3. الخصائص الترموديناميكية
38 المراجع
40 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 [1]، حيث ان كل خاصية او ميزة لمركب معين تمتلك أهمية في مجال ما من غيرها.

تنقسم 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 انها تعتمد على الجانب النظري البحث، وتتم فيه الدراسة عن طريق جهاز الكمبيوتر وبرنامج متخصص. ومن اهم المواد التي أعطت بعدا اخر للتطور التكنولوجي هي المواد نصف ناقلة فهي تمتلك دورا هاما في تطبيقات عديدة من أشهرها الترانزستور، ولها دورها في الأبحاث المستقبلية المتعلقة بتصغير حجم الأجهزة مع الزيادة في قدرتها الكهربائية وذلك لما تتمتع به من خصائص تجعل منها أساس لصناعة المركبات الالكترونية والالكتروضوئية،

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].

مع مرور الوقت دفع التقدم العلمي علماء الفيزياء الى التركيز على مركبات من النوع III-V (تتكون من عناصر من العمود الثالث والخامس، من الجدول الدوري)، هذه المواد النصف موصلة فتحت افاق علمية واعدة [3،4،5].

تعتبر انصاف النواقل III-V في حالة البنية النانوية موضوعا هاما وبارزا نظرا للتطبيقات التكنولوجية المتعددة. تتمتع البلورات النانوية لأشباه الموصلات هذه بالخصائص التي يمكن وصفها في مجال الكهرباء النانوية الدقيقة، الكهروضوئية، او حتى الضوئية [6،7].

برنامج Abinit استعمل في مجالات عديدة، من بينها فيزياء المواد، نظرية دالية الكثافة DFT، التي فازت بجائزة نوبل عام 1998.

في هذا العمل قمنا بدراسة الخواص البنيوية والمرونية والخواص التارموديناميكية لأنصاف النواقل $\ln X (P, Sb)$. 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. وأيضا استعملنا نظرية الكثافة التابعة المضطربة (DFPT) لحساب ثوابت المرونة. وقد تم حساب الخصائص التارموديناميكية باستخدام برنامج GIBBS الذي يعتمد على النموذج شبه التوافقي ل Debye .

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 هارترى وهارترى . فوك وتطرقنا أيضا لنظرية دالة الكثافة (DFT) بتقريباتها, تقريب كثافة الموضع LDA وتقريب التدرج المعمم GGA.

وتطرقنا في الفصل الثاني الى طريقة شبه الكمون والموجة المستوية مع ذكر امثلة على ذلك.

وفي الأخير عرضنا مختلف النتائج المتحصل عليها وهي: الخصائص البنيوية, المرونية والتارموديناميكية، ثم قمنا بالتفسير ومقارنة النتائج ببعض الاعمال النظرية والتجريبية المتوفرة وأنهينا هذا البحث بخلاصة عامة لمختلف النتائج المتحصل عليها.

المراجع:

- [1] P. Amaud, (chimie physique) édition dunod (2001).
- [2] الدكتور عزيز داخل ، مقدمة في فيزياء الجسم الصلب (الجزء الثاني), ديوان المطبوعات الجامعية (1988) .
- [3] I. Vurgaftman, J. RMeyer and L. R.Ram-Mohan, J.Appl.Phys, 89 (2001) 5815.
- [4] S. Bhrgava, H-R. Blank, E. Hall, M. A. Chin, H.Kroemer and V. Narayanamurti, Appl. Phys. Lett, 74 (1999) 1135 .
- [5] H.-R. Blank, S. Mathis, E. Hall, S. Bhargava, A. Behres, M. Heuken, H.Kroemerand V.Narayanamurti, J.Cryst.Growth, 187 (1998) 18.
- [6] F. D. Murnaghan, Proc. Nalt. Acad. Sci. USA, 30 (1944) 244.
- [7] F. El haj Hassan, A. Breidia, S. Ghemid, B. Amrani, H. Meradgi,O.pages Journal of Alloys and compounds, 499 (2010) 80-89.

الفصل الاول
نظرية الكثافة التابعية

DFT

1.1.1 مقدمة :

الهدف الأساسي في الفيزياء الكمية هو إيجاد حل لمعادلة شرودينغر بحيث يقترب قدر الإمكان من القيمة التي تعبر عن نظام فيزيائي حقيقي، من العوائق الفيزيائية التي تشكل تحدياً بالنسبة للفيزيائيين في مجال المادة هو الفهم الدقيق لانتظام الجزيئات المشكلة للبلورات. في هذا الفصل سنقوم بتقديم مجموعة من الطرق أو التقريبات المختلفة المستعملة في حساب الخصائص الإلكترونية في الأجسام الصلبة، بعد إظهار حدود التقريبات المعتمد بشكل مباشر على دالة الموجة ب N جسيم حيث سنقوم بتقديم نظرية دالية الكثافة (DFT) التي تعتمد على نظرية هوهنبرغ وكوهن والتي سيتم استخدامها كجانب نظري في هذا العمل، بعد هذا سنقوم بشرح خاص بمعادلات كوهن وشام المستعملة في العمل وكذلك أهمية ترميز التبادل - الارتباط مع مختلف أنواع الداليات مثل (LDA ;GGA).

2.1 معادلة شرودنغر للبلورة:

تعتبر معادلة شرودنغر هي منطق كل الدراسات الكمية للنظام الكوانتي للبلورات [1]، حيث يوصف نظام الجسيمات المتفاعلة من ايونات والكترونات بالمعادلة التالية:

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

حيث H يمثل الهاملتونيان، E يمثل طاقة النظام و ψ دالة الموجة الهاملتونيا الكلي للجملة يكون مؤلف من الطاقة الحركية لكل الجسيمات و طاقة التفاعل فيما بينها و في بعض الحالات طاقة التفاعل مع الوسط الخارجي في غياب الحقل الخارجي يكتب الهاملتون بالشكل التالي :

$$H = T_e + T_n + V_e + V_{e-n} + V_{n-n} \quad (1.2)$$

حيث :

$$T_e = \sum_i \frac{p_i^2}{2m_i} = \sum_i \frac{-\hbar^2}{2m} (\nabla_i)^2 \quad (1.3)$$

تمثل الطاقة الحركية للإلكترونات

$$T_n = \sum_i \frac{p_i^2}{2M_i} = \sum_i \frac{-\hbar^2}{2M_i} (\nabla_i)^2 \quad (1.4)$$

تمثل الطاقة الحركية للأنوية

$$V_{ee} = \frac{1}{4\pi\epsilon} \sum_{i,j \neq i} \frac{e^2}{2|r_i - r_j|} \quad (1.5)$$

تمثل طاقة التفاعل الكرون - الكرون

$$V_{en} = -\frac{1}{4\pi\epsilon} \sum_{i;\alpha} \frac{e^2 Z \alpha}{2|r_i - R_\alpha|} \quad (1.6)$$

تمثل طاقة التفاعل الكرون - نواة

$$V_{nn} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{2} \sum_{\alpha;\beta} \frac{e^2 z_\alpha z_\beta}{2|\vec{R}_\alpha - \vec{R}_\beta|} \quad (1.7)$$

تمثل طاقة التفاعل نواة - نواة

حيث المعاملات α و β خاصة بالانوية (الذرات) و المعاملات i و j خاصة بالالكترونات و m ; M تمثل كتل الانوية والالكترونات على الترتيب.

$Z_\alpha e$ تمثل شحنة الانوية .

$|\vec{r}_i - \vec{r}_j|$ تمثل المسافة بين النواتين α و β .

$|\vec{r}_i - \vec{R}_\alpha|$ تمثل المسافة بين الالكترون و النواة α .

$|\vec{R}_\alpha - \vec{R}_\beta|$ تمثل المسافة بين الالكترونين α و β .

و في حالة السكون تصبح معادلة شرودنغر مستقلة عن الزمن :

$$H \psi(r,R) = E \psi(r,R) \quad (1.8)$$

بحيث ψ تمثل دالة الموجة و تتعلق بكل احداثيات الجسيمات سواء الكترونات او أنوية، E القيم الذاتية الموافقة.

معادلة شرودنغر ل N ذرة تحتوي على $3(Z+1)N$ متغير وبهذا تعتبر معادلة شرودنغر مستحيلة الحل ومن اجل تبسيطها و تسهيل حلها وضعت مجموعة من التقريبات نذكر منها : [2]

3.1. تقريب بورن - اوبنهايمر:

يعتمد هذا التقريب على فصل حركة الالكترونات عن الانوية ،حيث أن كتلة الالكترون اقل بكثير من كتلة النواة في حين أن سرعة الالكترونات اكبر بكثير من سرعة النواة [3]. معناه اهمال الطاقة الحركية للنواة بحيث تعتبر ساكنة امام الالكترونات و يؤخذ حد تفاعل الانوية فيما بينها ثابت أي :

$$T_{nn} = 0, \quad V_{nn} = cte$$

أي يصبح الهاملتونيان الكلي للجملة مؤلف من هاملتونيان الكتروني و هاملتونيان نووي على الشكل :

$$H = V_{nn} + H_e \quad (1.9)$$

بحيث :

$$H_e = T_e + V_{ee} + V_{en} \quad (1.10)$$

و يسمى H_e بهاملتونيان الالكترونات .

اذن معادلة شرودنغر للالكترونات هي:

$$\psi e(r,R) = (T_e + V_{ee} + V_{en}) \psi e(r,R) \quad (1.11)$$

4.1. تقريب هارترى :

يرتكز هذا النظام على نموذج الالكترون الحر، حيث أن كل الكترون يتحرك منفرد في الحقل المتوسط الناتج عن الانوية وباقي الالكترونات الأخرى، أي يتحول الشكل لدينا من عدد كبير من الالكترونات الى الكترون وحيد، وبالتالي يتم اهمال حد التفاعل (الكترن - الكترن)، ليكتب بذلك الهاملتونيان الكلي للجملة على النحو التالي [4]:

$$H = \sum_i H_i \quad (1.12)$$

حيث H_i تكتب على الشكل:

$$H_i = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_i + U_i(r_i) + V_i(r_i) \quad (1.13)$$

$U_i(r_i)$: تمثل الطاقة الكامنة للالكترن i في حقل الانوية k وتكتب على الشكل :

$$U_i(r_i) = -\sum_k \frac{Z_k e^2}{4\pi |r_i - R^o|}$$

$V_i(r_i)$: تمثل الكمون الفعلي لهارترى و يكتب كالتالي:

$$V_i(r_i) = -\frac{1}{2} \sum_k \frac{e^2}{4\pi \epsilon |r_i - R_j|}$$

R^o يمثل موضع الانوية

ومنه نكتب :

$$H_i = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_i + V_i(r_i) \quad (1.14)$$

و تكتب دالة الموجة الكلية للنظام كجاء دوال الحالة لجميع الالكترونات على الشكل :

$$\psi(r_1, r_2, \dots) = \prod_{i=1}^n \psi_i(r_i) \quad (1.15)$$

اذن يمكن كتابة الطاقة للنظام الكلية كمجموع الطاقات الموافقة لكل حالة الكترونية على النحو التالي :

$$E = \sum E_i \quad (1.16)$$

اذن معادلة شروجنغر للالكترونات تكتب على النحو التالي :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_i + U_i(r_i) + V_i(r_i) \right] \psi_i(r) = \epsilon_i \psi_i(r)$$

1- 5 . تقريب هارترى فوك:

حسن فوك [5] ، تقريب هارترى و ذلك بإدخال مبدأ السبين لنظام الالكترونات بحيث توجد $N!$ احتمال لوضع N الكترون على N موضع.

مثلا اول إمكانية هي:

$$\psi_1(r_1) \psi_2(r_2) \psi_3(r_3) \dots \dots \dots \psi_n(r_n) \quad (1.17)$$

و ثاني إمكانية هي :

$$\psi_1(r_1) \psi_3(r_2) \psi_2(r_3) \dots \dots \dots \psi_n(r_n) \quad (1.18)$$

عند تطبيق كل التبديلات نحصل على $N!$ حد لنفس النوع .

دالة الموجة هي مجموع كل الحدود مع الاخذ بعين الاعتبار الاشارتين (-) و (+) لتصبح بشكل محدد يدعى محدد سلتر :

$$\begin{aligned} & \psi(r_1, r_2, \dots, r_n) \\ &= \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_1(r_1) & \dots & \psi_n(r_1) \\ \psi_1(r_2) & \dots & \psi_n(r_2) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_1(r_n) & \dots & \psi_n(r_n) \end{vmatrix} \end{aligned} \quad (1.19)$$

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

ان تحديد الكمون داخل البلورة هي من بين الصعوبات التي تصادف حساب بنية عصابات الطاقة و لذلك وجدت طريقة جديدة وحديثة هي نظرية دالية الكثافة (DFT) .

1. 6. نظرية الكثافة التابعية (DFT) :

لحساب بنية عصابات الطاقة يتم التركيز على اختيار شكل كمون دالة الموجة ، نستخدم عنصر دالة الكثافة $\rho(r)$ لتحديد الطاقة E و التي تكون كدالة الاحداثيات (X, Y, Z) و تعود هذه الفكرة الأساسية الى النموذج الذي وضعه توماس و فارمي .

1.6.1. الكثافة الالكترونية :

يتم التعبير على احتمال العثور على الكترون من بين الكترونات N للنظام في عنصر حجم $d\vec{r}$ يتمركز في الموضع \vec{r} على النحو التالي :

$$\rho(\vec{r}) d\vec{r} \quad (1.20)$$

حيث $\rho(\vec{r})$ هي كثافة الاحتمال الالكترونية التي تعرف بالشكل التالي :

$$\rho(\vec{r}) = N \int |\Psi(r_1, r_2, \dots, r_n)|^2 d\vec{r}_1 \dots \dots d\vec{r}_n \quad (1.21)$$

كثافة الاحتمال لها خاصتين مهمتين :
يتم تعريفها في كل نقطة و تكون موجبة تماما

$$\rho(\vec{r})d\vec{r} = N \quad (1.22)$$

قيمتها معدومة عندما لانهاية :

$$\lim_{r \rightarrow \infty} (\rho(\vec{r})) = 0 \quad (1.23)$$

كثافة الالكترونات غنية بالمعلومات ، ومعرفة الكثافة الالكترونية هي كل ما نحتاج اليه لتحديد كامل الخواص الجزيئية .

1.6.2. نظرية توماس-فارمي :

في 1927 صاغ توماس-فارمي الطاقة الكلية لغاز الالكترونات اللامتجانسة كدالة لكثافة الالكترونات المعروفة لغاز متجانس [7,6] وذلك بإجراء عدة تقسيمات عنصرية على منطقة بريلوين، حيث أنه عند آخر تقسيم تعتبر الكثافة الالكترونية ثابتة في كل منطقة من المناطق بريلوين المقسمة. إذن تكتب الطاقة الكلية للنظام E على الشكل:

$$E = \int \varepsilon_i [\rho(r)] dr \quad (1.24)$$

تعطى كثافة غاز متجانس ب:

$$\rho = \frac{1}{3\pi^2} \left(\frac{2m_e}{h^2}\right)^{3/2} E_f^{3/2} \quad (1.25)$$

E_f هي طاقة فارمي

الطاقة الحركية لغاز متجانس هي :

$$T = \frac{3}{5} \rho E_f \quad (1.26)$$

من المعادلتين السابقتين نجد :

$$T = \frac{5}{2} \frac{h^2}{2m_e} (3\pi^2)^{2/3} \rho^{5/3}$$

و

$$E_f = \frac{\rho^{2/3}}{\frac{2m_e}{h^2}} (3\pi^2)^{2/3} \quad (1.27)$$

و منه الطاقة الحركية لتوماس فارمي هي:

$$(1.28) \quad T_{TF} = \int T d_r \Rightarrow T_{TF} = \frac{3}{5} \frac{h^2}{2m_e} (3\pi^2)^{5/3} \int \rho^{5/3} d_r$$

نظرية توماس-فارمي هي تقريب موضعي لكثافة الإلكترونات لا يأخذ بعين الاعتبار ارتباط الإلكترونات، إذن الطاقة الكلية لنظام الإلكترونات في تقريب توماس-فارمي تأخذ الشكل التالي:

$$E_{TF} = \frac{3}{5} \frac{h^2}{2m_e} (3\pi^2)^{5/3} \int \rho^{5/3} d_r + \int V(r)\rho(r)d_r + \frac{1}{2} \int \frac{\rho(r)\rho(r')}{|r-r'|} d_r d_{r'} \quad (1.29)$$

1. 6. 3. نظرية هوهنبارغ-كوهن :

نظرية الكثافة تركز على نظريتين هما كوهن و هوهنبارغ .

✓ **النظرية الأولى:** يتم فيها تعريف الطاقة الكلية E لنظام N الكترون المتفاعلة في الحالة الأساسية

بوجود كمون خارجي V_{ext} للانوية و على انها دالة وحيدة للكثافة $\rho(\mathbf{r})$ بالشكل التالي :

$$E(\rho) = F(\rho) + \int \rho(r)V_{ext}(r)d_r^3 \quad (1.30)$$

حيث :

$$F[\rho(r)] = T[\rho(r)] + V_{e-e}[\rho(r)] \quad (1.31)$$

مع $F[\rho(r)]$ دالة شاملة للكثافة الالكترونية ، T طاقة حركية ، V_{e-e} طاقة التفاعل الكترون- الكترون

✓ **النظرية الثانية :** تظهر ان الكثافة الالكترونية للحالة الأساسية توافق اقل قيمة للطاقة ، وكل

الخصائص الأخرى تكون تابعة لهذه الكثافة .

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

ρ_0 هي كثافة الحالة الأساسية .

و تحديد هذه الدالة يمكننا من تحديد الطاقة الكلية و كثافة الشحنة للحالة الأساسية من اجل كمون

خارجي معطى لكن للأسف هذا ما عجزت عنه النظرية .

1. 4. 6. نظرية كوهان-شوم:

يتم فيها كتابة معادلة الطاقة بالشكل التالي :

$$F[\rho(r)] = T_0[\rho(\vec{r})] + E_H[\rho(\vec{r})] + E_{xc}[\rho(\vec{r})] + \int [\rho(\vec{r})] + \int \rho(\vec{r})V_{ext}(r)d_r^3 \quad (1.32)$$

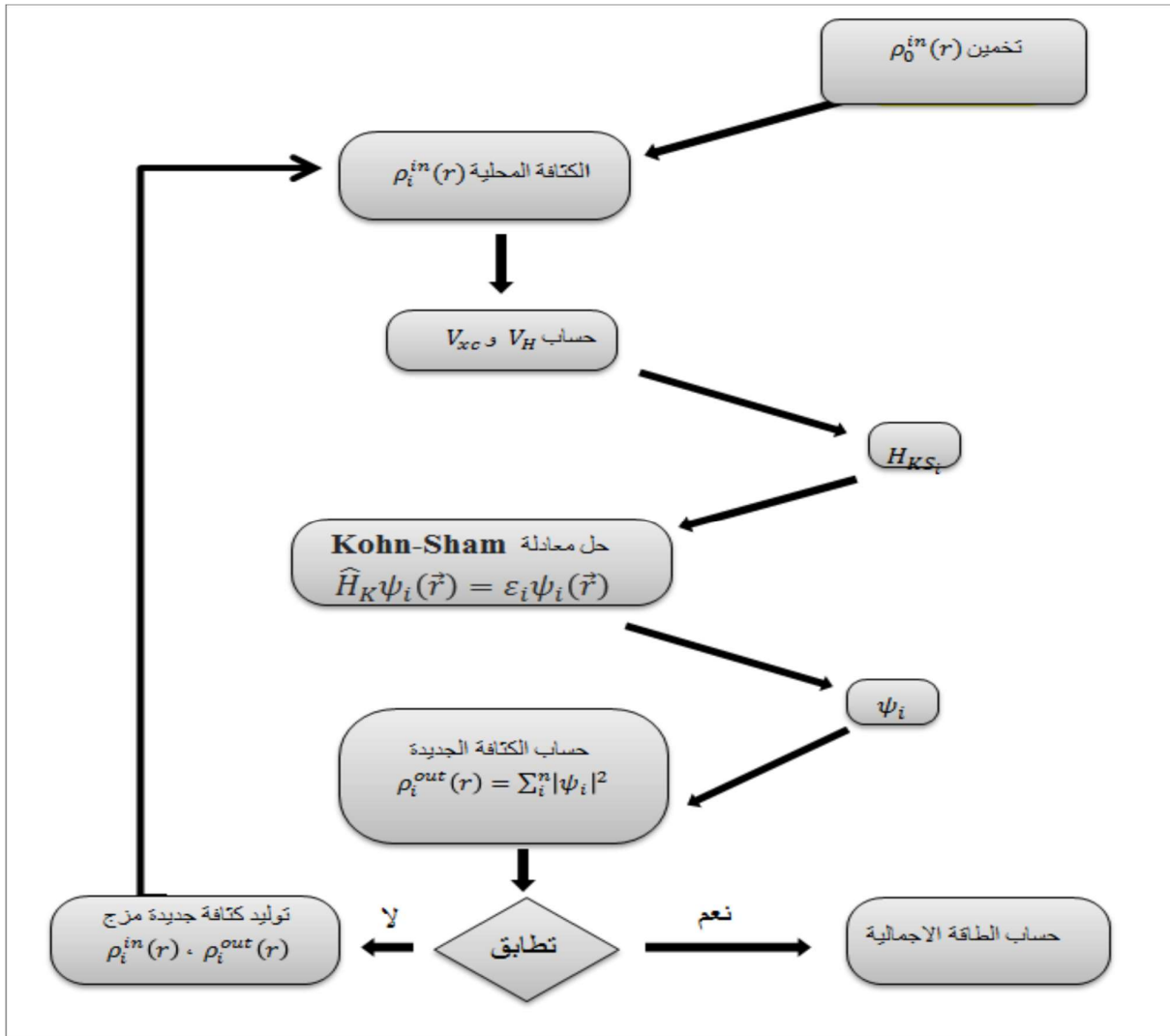
حيث: $T_0[\rho(\vec{r})]$ الطاقة الحركية للغاز الالكتروني في الحالة الاساسية (الاستقرار).

$E_H[\rho(\vec{r})]$ حد هرتري للالكترونات

$E_{xc}[\rho(\vec{r})]$ طاقة التبادل و الارتباط

V_{ext} كمون خارجي يؤثر على النظام الالكتروني

ونلخص حل هذه المعادلة في المخطط التالي [8]:



الشكل (1.1): يمثل خوارزمية حل معادلة كوهن-شام.

1.7.1 . تابع تبادُل -ارتباط :

ان مشكلة DFT وفقاً لمعادلة كوهن-شام هي إيجاد تقريب جيد لتابع طاقة تبادُل-ارتباط، فهناك العديد من التقريبات لكمون تبادُل-ارتباط، ولكي نكون قادرين على القيام بالحساب، نحتاج الآن إلى تقريبات.

1.7.1.1. تقريب كثافة الموضع LDA:

طرح هذا التقريب من طرف كوهن وشام في 1965 ، وقد اعتبرا نظام الالكترونات اللامتجانس كنظام متجانس محليا [9]، و تكتب طاقة تبادُل . ارتباط بالمعادلة التالية :

$$E_{XC}^{LDA}(\rho) = \int \rho(r) \varepsilon_{XC}^{LDA}(\rho(\vec{r})) d_r^3 \quad (1.33)$$

مع العلم ان طاقة تبادُل . ارتباط تقسم الى قسمين :

$$\varepsilon_{XC}^{LDA}(\rho) = \varepsilon_X^{LDA}(\rho) + \varepsilon_C^{LDA}(\rho) \quad (1.34)$$

1.7.1.2. تقريب التدرج المعمم GGA :

هذا التقريب هو تصحيح لتقريب كثافة الموضع حيث يتجاوزه في الدقة ويضيف في اعتباراته تغيرات كثافة الالكترونات $\rho(r)$ عبر تدرج الكثافة الالكترونية $\nabla\rho(r)$ [10]، تكتب عبارة الطاقة على الشكل التالي:

$$E_{XC}^{GGA}(\rho \uparrow(r), \rho \downarrow(r)) = \int f_{XC}^{GGA}(\rho(\vec{r}), \vec{\nabla}\rho(\vec{r})) d_r^3 \quad (1.35)$$

. $\vec{\nabla}\rho(\vec{r})$ يعبر على تدرج الكثافة الالكترونية .

f_{XC}^{GGA} يعتمد أساسا على التدرج المعمم GGA المستعملة .

بشكل عام تعمل GGA على تحسين LDA بعدد من الخصائص مثل الطاقة الكلية او طاقة الارتباط ، و لكنها لا تؤدي الى وصف دقيق لجميع خصائص المادة لانصاف النواقل ، كمعرفة خصائصها الالكترونية [10] .

المراجع:

- [1] [tp://fr.wikipedia.org/wiki/Stockage_d27hydrogC3A8ne](http://fr.wikipedia.org/wiki/Stockage_d27hydrogC3A8ne) 27 avril 2.
- [2] بري السعدية, أطروحة شهادة الدكتوراه في العلوم, جامعة سطيف, (2003)
- [3] P. Blaha, K. Schwarz, G.K.H. Madsen, D. Kvasnicka, J. Luitz, WIEN2K, An Augmented Plane Wave pLocal Orbitals Program for Calculating Crystal Properties, Karlheinz Schwarz, Technische Universität, Wien, Austria, (2001).
- [4] M. Born and J. R. Oppenheimer, ZurQuanttheorie der Moleculen, Ann. Phys, 20 (1927) 84.
- [5] V. Fock, Z.Phys, 61 (1930) 126-148.
- [6] L. H. Thomas. Proc. Camb. Phil. Soc, 23 (1928) 542-548.
- [7] E. Fermi, Z. Phys, 48 (1928) 73.
- [8] User's guide, wien2k 12.1 (release 30.08.2012) Peter BLAHA, Karlheinz
- [9] P. Blaha, K.Schwarz,P. Sorantin,S. B.Tricky, Comp. Phys. Comm, 59 (1990) 399-415 .
- [10] J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, Phys. Rev. Lett, 77 (1996) 3865.

الفصل الثاني

شبه الكمون والموجة المستوية

(PP-PW)

2. مقدمة :

يستعمل شبه الكمون لوصف التفاعلات الالكترونية كيميا، وذلك في إطار نظرية الكثافة التابعة DFT، على الاقتران الناتج بين الأمواج المستوية وشبه الكمون عبر الطريقة التحويلية لفوريي. تعتبر هذه الطريقة جد دقيقة وسريعة إلى حد ما (اختصار الالكترونات الباطنية) في تجسيد المواد [1] .

1.2. طريقة شبه الكمون :

من المعلوم في فيزياء الجوامد ان معظم الخصائص الفيزيائية و الكيميائية للمواد تعتمد على الكترونات التكافؤ بشكل كبير، و من هذا تاسست الفكرة الأساسية لطريقة شبه الكمون و التي تتمثل في الحصول على حالات التكافؤ لنظام (ذرة ،جزيء ،بلورة) ،دون اللجوء لالكترونات القلب التي تعتبر غير ضرورية من اجل وصف الخصائص الفيزيائية و من اهم البرامج التي تستند الى تقريب شبه الكمون نذكر منها [2] :

• ABINIT

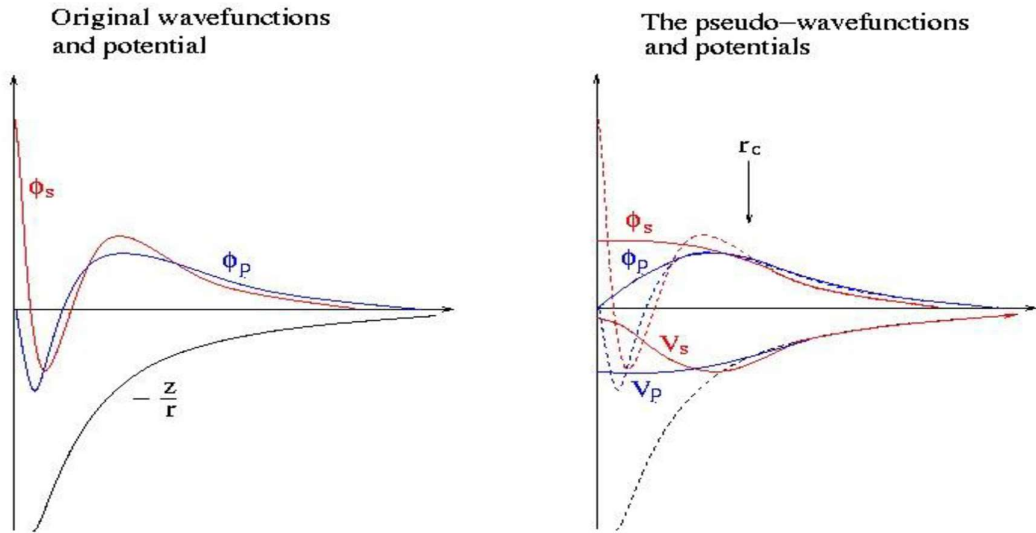
• VASP

• SIESTA

2. 1. 1. انشاء شبه الكمون :

يجب أن يحقق شبه الكمون الخصائص التالية:

- يجب أن يكون تجميعي، مما يعني أن الكمون الكلي لعدة ذرات هو مجموع شبه الكمون لذرات فردية .
- يجب أن يكون تحويلي، مما يعني أنه في الأوساط الكيميائية المختلفة يمكن استعمال نفس شبه الكمون.
- ينتج من التغيرات المنخفضة للكمون كما في حالة كمون القلب الحقيقي، وذلك عن طريق تقليل عدد الموجات المستوية اللازمة لوصف دوال الموجة.
- من الضروري استعمال كمونات زائفة مختلفة من أجل الحالات (S,p ,d) بمعنى الكمون الزائف يتعلق بالعزم الزاوي (كمون كاذب غير محلي) ، و هو ما تم إدراجه في الصورة (1.1) .



الشكل (1.2): أنواع مختلفة من الكمونات الزائفة

لتوليد الكمونات الزائفة توجد العديد من الطرق، كل طريقة تختلف عن الأخرى بشروط خاصة إضافية، تنقسم طرق إنشاء الكمون الزائف إلى مجموعتين: طرق حفظ المعيار و طرق أخرى غير حافظة للمعيار [3].

2.1.2 . نظرية بلوخ :

تنص نظرية بلوخ [4] على انه في بلورة مثالية وفي درجة حرارة 0 كلفن، 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 بالعبارة التالية :

$$\Psi_i(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\vec{r}} u_i(\vec{r}) \quad (2.1)$$

حيث k شعاع الشبكة المعكوسة . الحد الثاني في هذه المعادلة هو دالة الموجة ضمن الخلية الأولية . يمكن نشرها الى سلسلة من الأمواج المستوية ، مع اشعة الأمواج للشبكة المعكوسة بالشكل التالي :

$$u_i(\vec{r}) = \sum_G C_{iG} e^{i\vec{G}\vec{r}} \quad (2.2)$$

بدمج المعادلتين (2.1) و (2.2) نحصل على دالة الموجة وحيدة الجزيء والتي تكتب في شكل مجموع أمواج مستوية المعادلة (2.3)

$$\Psi_{ik}(\vec{r}) = \sum_G C_{i,\vec{k}+\vec{G}} e^{i(\vec{k}+\vec{G})\vec{r}} \quad (2.3)$$

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

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

حيث m كتلة الالكترن.

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

2.1.3. طريقة الأمواج المستوية مع الكمون الزائف:

قام بيتر بلوكل عام 1994 بتطوير خوارزمية [5] PAW وذلك بدمج المبادئ المتعلقة بطريقة الكمونات الزائفة من جهة وطريقة الأمواج المستوية LAPW تكتب دالة الموجة في سياق طريقة PAW بتركيب عدة حدود:

1. موجة مستوية.
2. دالة موجة زائفة.

2.2. مدارات ذرية وذرية زائفة ممتدة.

يسمح الحد الأول بتحديد المنطقة المحاطة وكذلك أثار دالة الموجة، ولكن استعمال هذا الحد وحده فقط يتطلب قاعدة كبيرة لوصف كل هزازات دالة الموجة القريبة من النواة بصورة صحيحة. نجد هذا المفهوم الأخير في الحد الثالث أين يكون اعتبار التغيرات في درجات الحرية لهذه الأثار غير معتبرة، إذا طريقة PAW هي طريقة جامعة لكل المفاهيم السابقة في قاعدة محددة بطريقة جيدة. لتفادي الجهد في الحسابات المزدوجة (موجة مستوية ومدار ذري) طريقة الأمواج المستوية لا تحدد معاملات

المدارات الذرية في إطار التباين، بالإضافة إلى أن هذه الأخيرة يتم معالجتها على أنها معاملات لموجة مستوية.

القيم الناتجة عن هذه الحسابات كالطاقة الكلية وغيرها تكون متكونة من ثلاث مساهمات متعلقة ترتيباً بالموجة المستوية مع زوج من المدارات الذرية الممتدة.

بالنسبة لمساهمة المدارات فينسب إلى كل ذرة على حدى، وهذا ما يعني تقليص الحساب لغياب الترابط بين المدارات للمواقع المختلفة.

تكتب دالة الموجة للحالات الباطنية في كمون الطريقة PAW بالشكل التالي:

$$|\psi^c\rangle = |\psi_{pseudo}^c\rangle + |\phi^c\rangle - |\phi_{pseudo}^c\rangle$$

حيث ان :

$|\psi_{pseudo}^c\rangle$ هي دالة الموجة الزائفة الباطنية/القلبية .

$|\phi^c\rangle$ دالة الموجة لكل الالكترونات في الكمون الباطني.

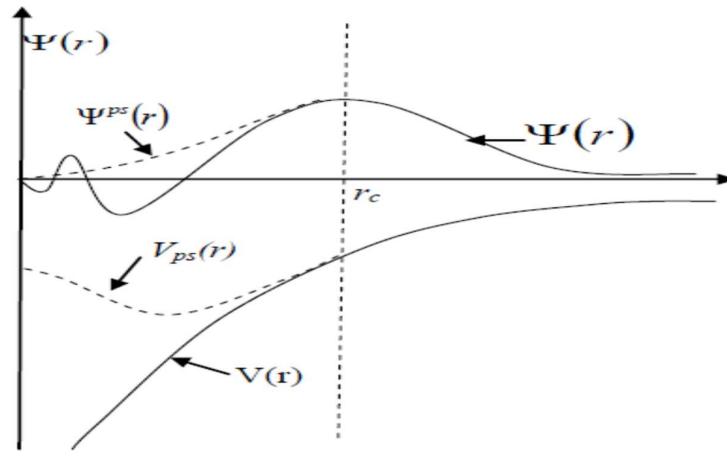
$|\phi_{pseudo}^c\rangle$ دالة الموجة الزائفة الجزئية للحالات الباطنية .

تستطيع طريقة PAW أن تعالج الحالات النصف باطنية على أنها حالات تكافؤية وهذا ما يعطي نتائج أحسن من طريقة الكمون فائق السلاسة بالنسبة للأنظمة المغناطيسية [6] ، بالإضافة إلى أن كمون PAW أقل سلاسة من الكمون الزائف لكمونات فائقة السلاسة.

2. 1.2. تقريب شبه الكمون:

يعتمد المفهوم الأساسي لشبه الكمون 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 (\vec{r}) ψ^{ps} 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 [7] .

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 [8].



الشكل (2.2) : كمون إلكترونات التكافؤ ودالة الموجة الموافقة له [8].

2.2.2. أمثلة عن شبه الكمون:

2.2.2.1. الكمون ذو الطويلة المحفوظة:

في عام 1979 قام Chiang و Schluter و Hamann بثورة في هذا المجال [9]، 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.

2.2.2.2. الكمون فائق الليونة لفاندربيلت (ultra-soft):

في عام 1990 قام فاندربيلت بإنشاء شبه كمون جديد سمي بالكمون الفائق الليونة [10]، 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 تحسناً واضحاً من حيث الدقة والليونة لدوال الموجة، ولكن هذه الطريقة تزيد من تعقيد المشكلة وكذلك زمن الحساب.

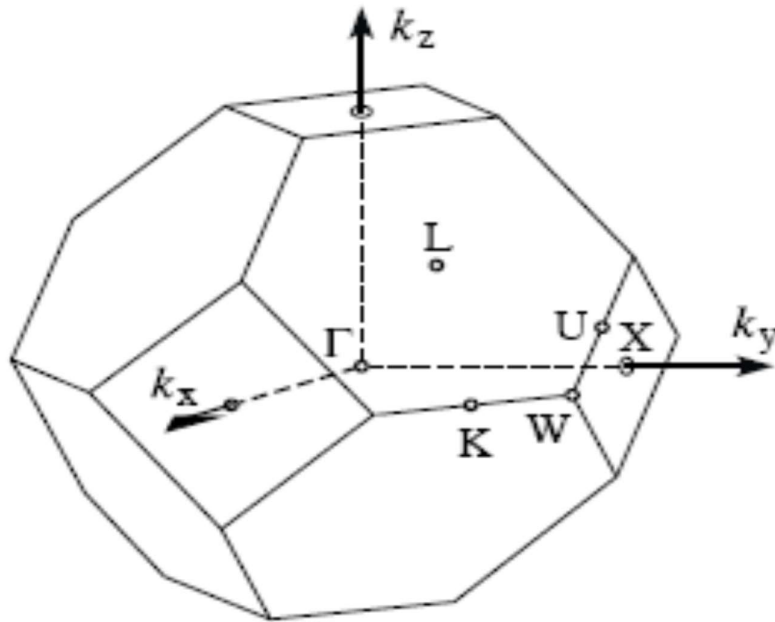
2.3. منطقة بريليون الأولى:

منطقة بريليون الأولى هي خلية أولية محددة بشكل فريد في الفضاء المعكوس، حيث يتم تقسيم مناطق بريليون بنفس طريقة تقسيم شبكة Bravais إلى خلايا Wigner-Seitz في الشبكة الحقيقية .

منطقة بريليون لها أهمية في وصف موجات بلوخ للنظام الدوري حيث وجد أن الحلول يمكن وصفها بالكامل بسلوكها في أحد مناطق بريليون فقط. وعند إجراء عملية حسابية، يمكننا استبدال التكامل على منطقة بريليون بمجموع منفصل من نقاط Nk بالشكل التالي:

$$\frac{1}{\Omega} \int_{ZB} dk \rightarrow \frac{1}{N_k} \sum_k \quad (5.2)$$

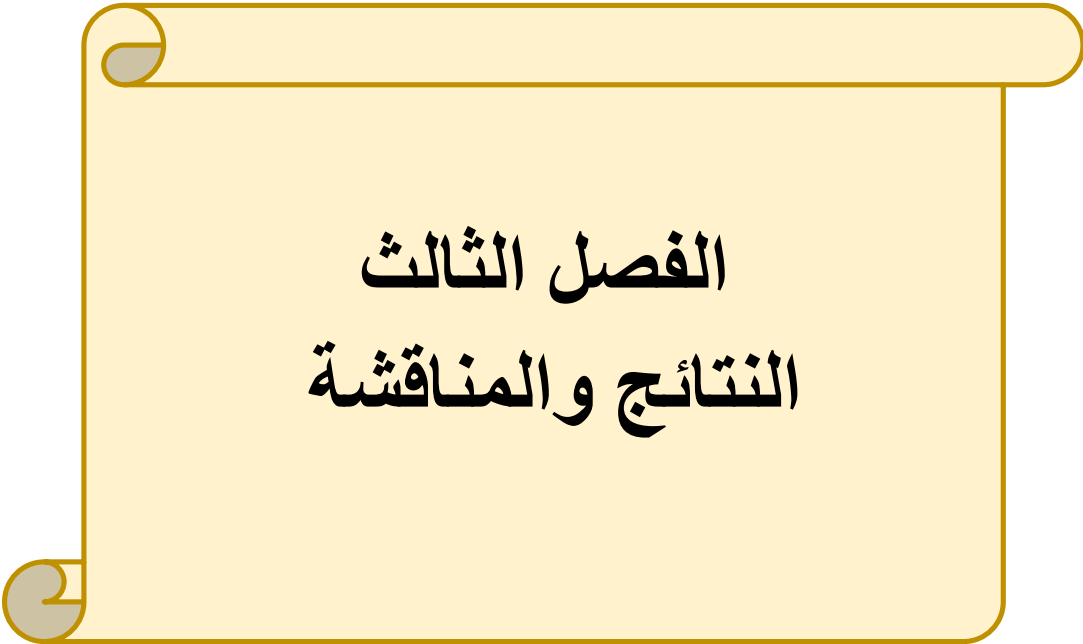
مع الأخذ في عين الاعتبار التناظرات في النظام المدروس، الذي يقلل من عدد الحدود الواجب حسابها في المجموع السابق، وبالتالي نكسب زمن في الحساب، وهذا راجع إلى تقليل عدد النقاط k فيقتصر على منطقة بريليون الأولى غير القابلة للاختزال. والشكل المقابل (3.2) يمثل: منطقة بريليون الأولى مرفقة بنقاط عالية التناظر.



الشكل (3.2): منطقة بريليون الأولى مرفقة بنقاط عالية التناظر

المراجع:

- [1] H. Zenasni, Etude théorique des propriétés magnétiques, électroniques et structurales des alliages Heusler, Thèse de doctorat, Université de ABOU BAKR BELKAID, Telemcen, (2013).
- [2] A.Reggad, Etude calcul Abinito des propriétés structurales et optoelectronique de Bismuthinite Bi_2S_3 , Université Ibn khaldoumtraret ,(2013).
- [3] M. Ferhat, B.Bouhafs, A.Zaoui et al, J. Phys. Condens. Matter, 10 (1995) 7995.
- [4] N.W. Ashcroft, N.D.Mermin, Solid. State. Physics. Saunders. College Publishing, Florida, (1976).
- [5] P.E. Bl chl, Projector augmented-wave method, Phys. Rev, B 50 (1994) 17953.
- [6] G. Kresse, D. Joubert, From ultrasoft pseudopotentials to the projector Augmented-wave method, Phys. Rev, B 59 (1999) 1758.
- [7] A. Zaoui and F. Elhadj Hassan, J. Phys. Condens. Matter, 18 (2006) 3647.
- [8] M. Ferhat, A. Zaoui, M. certier et al, Physica. B 252 (1998) 2295.
- [9] D. R. Hamman, M. Schluter, C. Chiang, Phys. Rev. Lett, 43 (1981) 1494.
- [10] G. Bastard, "wave mechanics applied to semiconductor heterostructures", les Editions de physique, paris, (1988).



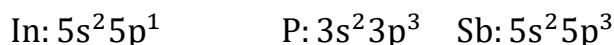
الفصل الثالث
النتائج والمناقشة

3. مقدمة:

من خلال هذا الفصل سنتطرق الى دراسة الخصائص البنيوية والمرونية والترموديناميكية للمركبين InP و InSb في البنية كبريت الزنك (Zinc-blende) باستعمال برنامج ABINIT.

3.1. طريقة الحساب:

تم اجراء الحسابات التالية باستخدام طريقة الموجة المستوية في إطار نظرية الكثافة التابعة DFT [1]، ونظرية الكثافة التابعة المضطربة DFPT المدمجة في برنامج ABINIT [2]، وقد تم استخدام تقريب الكثافة المحلية LDA على شكل Alder و Ceperey [3] وذلك لحساب تابع تبادل-ارتباط المعدلة بواسطة Perdew و Wang [4]، والذي يعالج تفاعلات الالكترونات مع أنوية الأيونات، يوصف هذا الارتباط باستخدام شبه الكمون pseudo potentiels ذو الطويلة المحفوظة -norm conserving [5]. بالنسبة للخصائص الترموديناميكية استخدمنا نموذج ديبياي المدمج في برنامج جيبس (GIBBS). الحالات الإلكترونية لإلكترونات التكافؤ المستخدمة هي:



كما تم استخدام طريقة Monkhorst et Pack [28] للتكامل في منطقة برليون (ZB) باستخدام مجموعة من النقاط k-point.

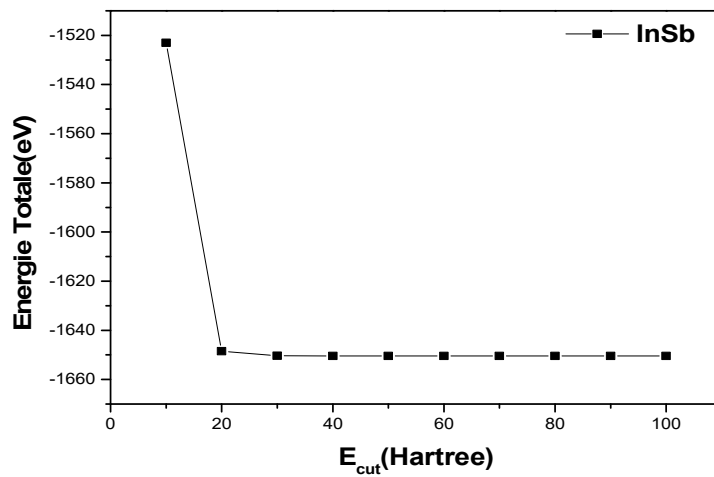
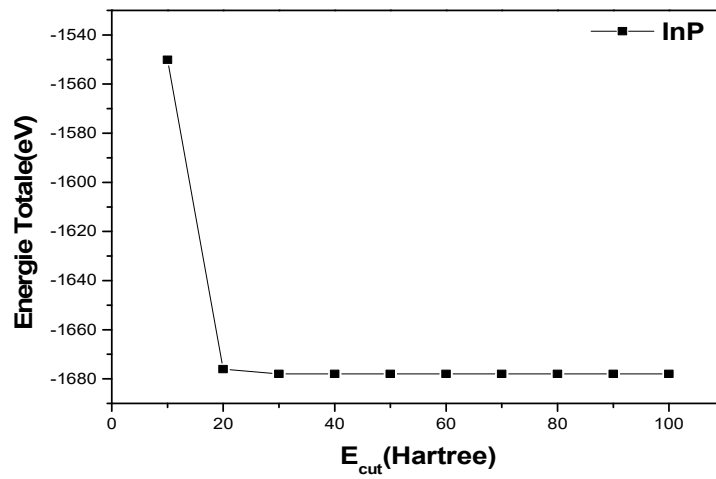
3.2. اختبار التقارب:

خطوة أولى لوصف الخصائص الفيزيائية يجب أن نقوم باجراء اختبارات تقارب لبعض المعطيات مثل طاقة القطع Ecut وعدد النقاط في منطقة برليون الأولى nkpt. تعتبر اختبارات التقارب هذه مهمة جدا بقدر ما تسمح لنا بتوفير قدر كبير من وقت الحساب.

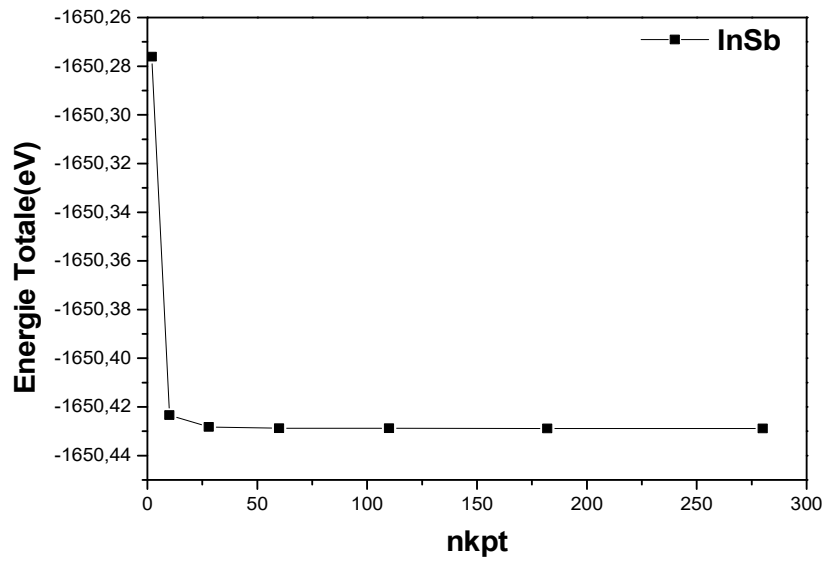
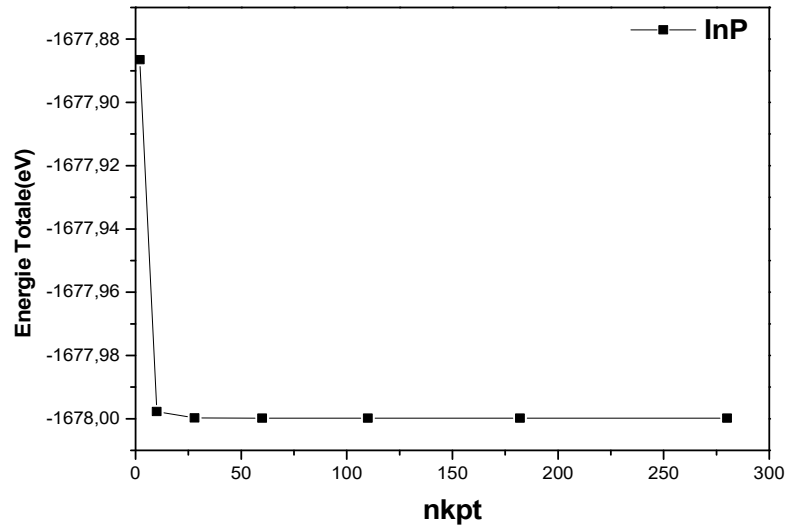
يمثل الشكلين (3، 1، 2) تغيرات الطاقة الكلية Etot بدلالة طاقة القطع Ecut وعدد النقاط nkpt للمركبين InP و InSb.

ومن خلال الشكل (1.3) نلاحظ بالتقريب ثبوت قيمة طاقة القطع Ecut عند القيمة Ecut= 30 Hartree بالنسبة لكل من المركبين InP و InSb. وبالتالي فان طاقة القطع المستخدمة في هذا العمل هي: Ecut= 30 Hartree لكلا المركبين.

وباستخدام طريقة Monkhorst et Pack للتكامل في منطقة برليون (ZB) تم استخدام مجموعة من النقاط k-point (6x6x6) لكل من المركبين InP و InSb كما هو مبين في الشكل (2.3).



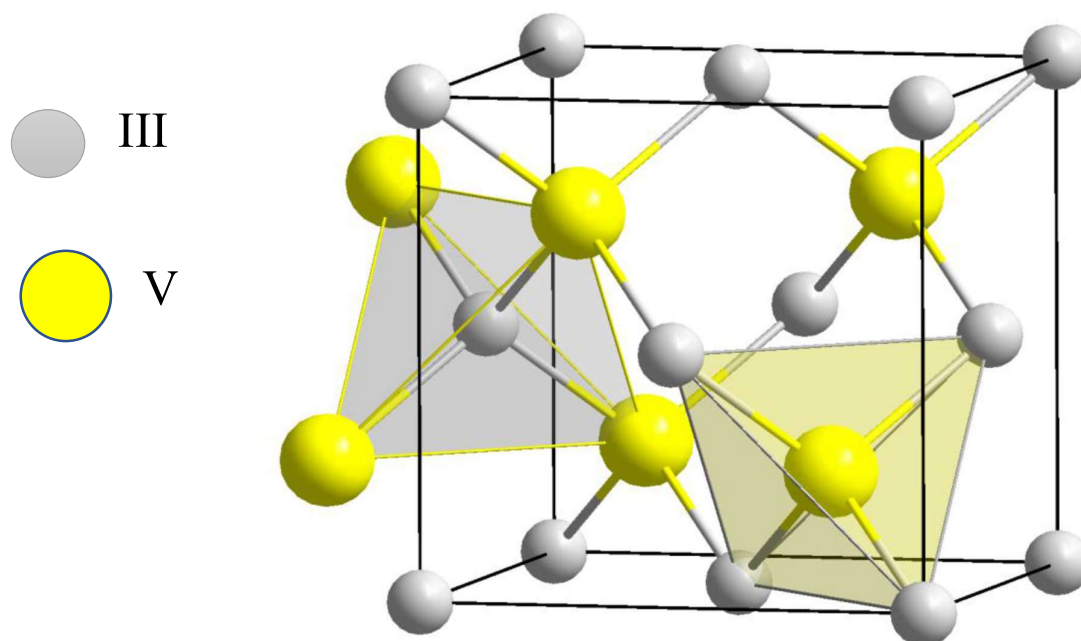
الشكل (1.3): تغير الطاقة الكلية بدلالة طاقة القطع للمركبين InSb و InP



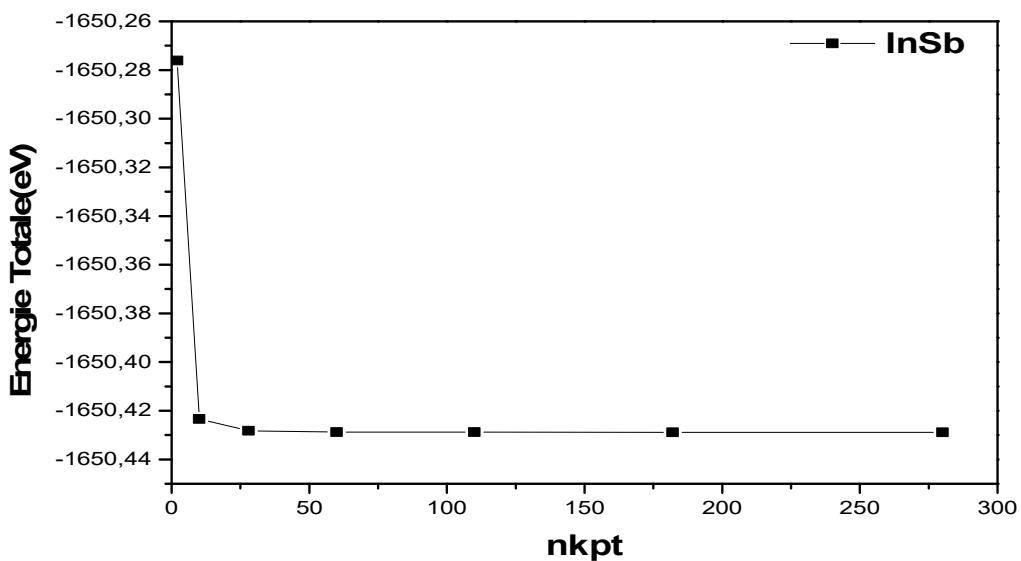
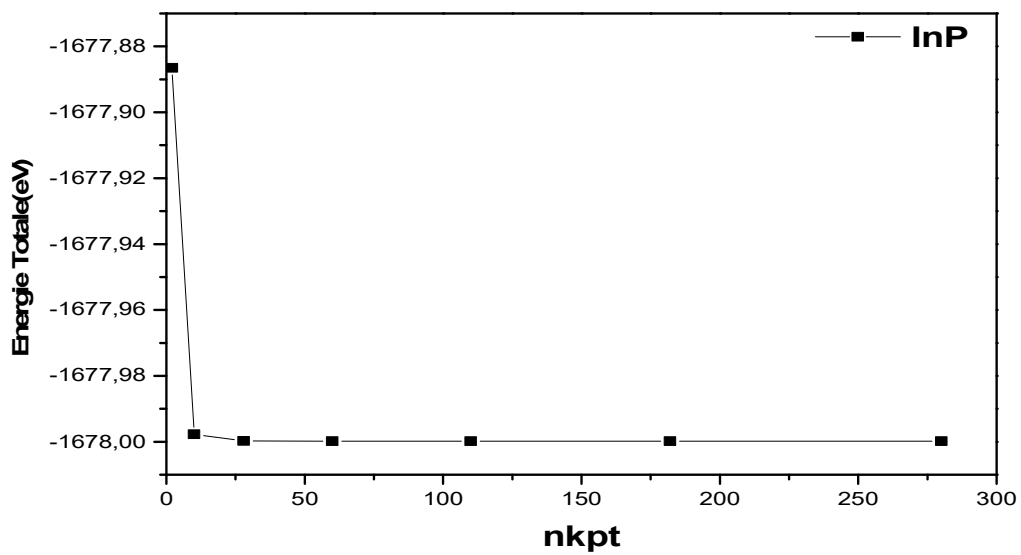
الشكل (2.3): تغير الطاقة الكلية بدلالة عدد النقاط للمركبين InSb و InP.

3.3. الخصائص البنيوية:

يتبلور InP و InSb في بنية كبريت الزنك (Zinc-blende) في فضاء المجموعة (Space group) $F-43m$ حيث تقع ذرات عناصر العمود III (In) في المواقع $(0,0,0)$ و ذرات عناصر العمود V (Sb,P) في المواقع $(1/4, 1/4, 1/4)$ [6]. تتميز هذه البنية بثوابت الشبكة $a=b=c$ [6]. الشكل التالي يمثل بنية الزنك بلاند:



الشكل (3.3): يمثل بنية زنك بلاند



الشكل (4.3): تغير الطاقة الكلية بدلالة عدد النقاط للمركبين InP و InSb.

ان حساب الخصائص البنيوية مهم جدا لدراسة أي مادة، لأنها تتيح لنا استخدام النتائج المتحصل عليها في تحديد الخصائص الفيزيائية الأخرى. هذا الحساب يهدف إلى تحديد حجم الخلية عند التوازن الموافق للحد الأدنى للطاقة E ، وكذلك حساب معامل الانضغاطية ومشتقه الأول وذلك باستخدام معادلة Murnaghan [7]، والتي تعطى بالعلاقة التالية:

$$E_{tot}(V) = E_0(v) + \frac{B_0 V}{B_0'} + \frac{B_0 V}{B_0'} \left[\frac{(V_0/V) B_0'}{B_0' - 1} + 1 \right] - \frac{B_0 V_0}{B_0' - 1} \quad (1.3)$$

V_0 : حجم الحالة الأساسية.

E_0 : طاقة الحالة الأساسية المسؤولة عن الحجم V .

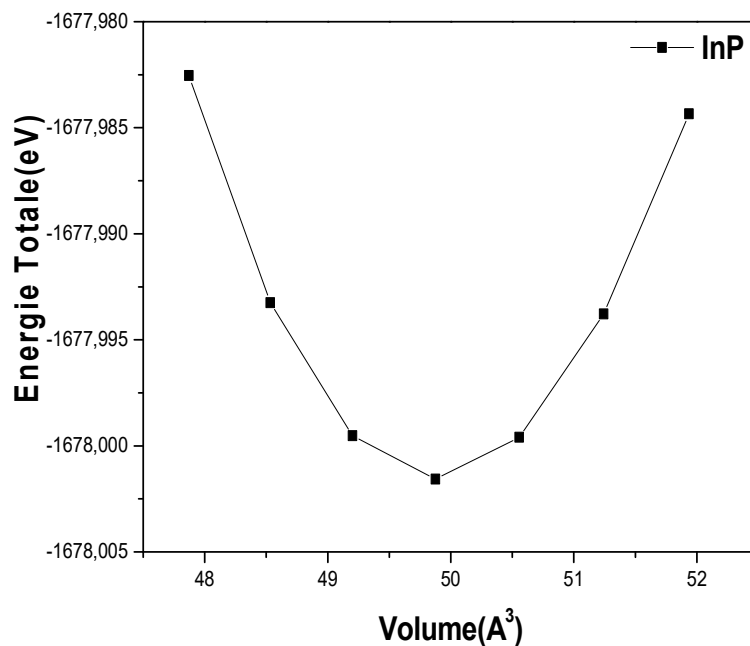
B_0 : معامل الانضغاطية و الذي يعطى كالتالي:

$$B_0 = V_0 \left(\frac{\delta^2 E}{\delta V^2} \right) \quad (2.3)$$

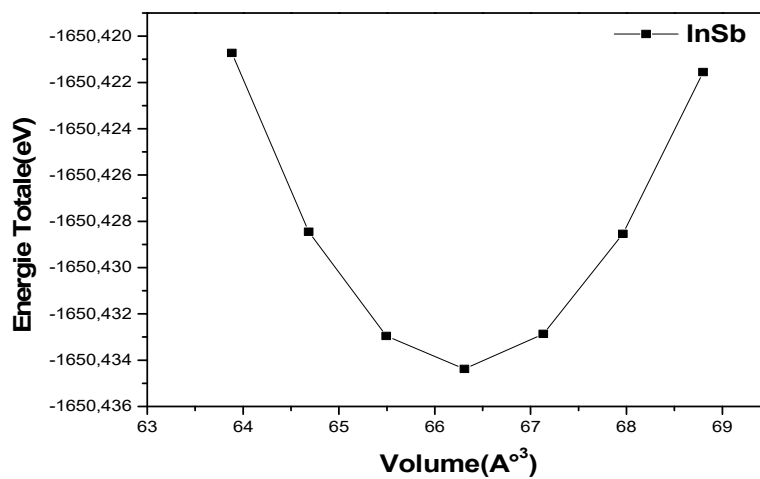
ومشتق معامل الانضغاطية B_0 يعطى بالعلاقة التالية:

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

ويمثل الشكلين (4.3) و (5.3) تغيرات الطاقة الكلية بدلالة الحجم للمركبين InSb و InP. القيم المتحصل عليها لثوابت الشبكة البلورية a ومعامل الانضغاطية β والمشتقة الأولى لمعامل الانضغاطية B' مدونة في الجدول التالي (1.3)، ولقد تم مقارنتها مع بعض النتائج التجريبية والنظرية المتاحة.



الشكل (5.3): تغير الطاقة الكلية بدلالة الحجم للمركب InP



الشكل (6.3): تغير الطاقة الكلية بدلالة الحجم للمركب InSb.

المراجع	E(eV)	B'	β (GPa)	a(A°)	المركب
العمل الحالي	-1678	4.65	69.95	5.84	InP
القيم التجريبية	/	4.59[c]	71.1[b]	5.869[a]	
القيم النظرية	/	5.18[d]	59.85[d]	5.9814[d]	
		4.5[e]	76[e]	5.74[e]	
العمل الحالي	-1650.43	4.79	46.52	6.42	InSb
القيم التجريبية	/	/	48.3[f]	6.464[f]	
القيم النظرية	/	4.8[e]	48[e]	6.36[e]	

a.Refs [8]. b. Refs [9]. c. Refs [10].d. Refs [11]. e. Refs [12]. f. Refs[13].

الجدول (1.3): ثابت الشبكة البلورية a، ومعامل الانضغاطية β ، والمشتقة الأولى لمعامل

الانضغاطية B' والطاقة E للمركبين InP و InSb.

استنادا للجدول (1.3) نلاحظ ان قيم ثابت الشبكة a التي تحصلنا عليها من أجل InP ($a=5.84 \text{ A}^\circ$) ، و InSb ($a=6.42 \text{ A}^\circ$) ، هي جيدة مقارنة بالقيم التجريبية من المرجع [8 ، 13] والنظرية من المرجع [12] بخطأ نسبي قدره (1.7% ، 0.9%) على التوالي لكل من InP و InSb .

كما نلاحظ ان ثابت الشبكة للمركب InSb اكبر من ثابت الشبكة للمركب InP، و بما ان الذرة الشاردة هي نفسها في كل من المركبين، وبالتالي يمكن تفسير النتيجة بسهولة من خلال النظر الى نصف القطر الذري للعنصر P (1 A°) وللعنصر Sb (1.48 A°) ، أي انه يزداد ثابت الشبكة مع زيادة نصف القطر الذري للأيون .

اما بالنسبة لمعامل الانضغاطية β لكل من المركبين InP و InSb التي تم الحصول عليها في توافق جيد مع القيم التجريبية المتاحة في المرجع [9، 13] على التوالي، والنظرية من المرجع [12] مع خطأ نسبي اقل من 8%.

من المعروف هناك علاقة قوية بين معامل الانضغاطية β وصلابة المواد، وبالتالي المركبين لا يمتلكا نفس الدرجة من الصلابة، معامل الانضغاطية للمركب InP أكبر من معامل الانضغاطية للمركب InSb. وهذا يعني أن المركب InP أكبر صلابة من المركب InSb.

كما نلاحظ انه مع انخفاض معامل الانضغاطية β يزداد حجم الخلية الأولية في InP ($199.18A^\circ$) ويكون ($264.61A^\circ$) في InSb.

ونجد كذلك ان قيم المشتقة الأولى لمعامل الانضغاطية B' المحسوبة للمركب InP (4.65) وللمركب InSb (4.79) تتوافق بشكل جيد مع النتائج النظرية وذلك من المرجع [12] مع خطأ نسبي قدره (3.3%، 0.2%) على التوالي لكل من المركبين InP و InSb. والتجريبية كذلك من المرجع [10] بالنسبة للمركب InP مع خطأ نسبي قدره 1.3%.

4.3. الخصائص المرئية:

خصائص المرنة للحالة الصلبة من أهم خصائص الحالة الأساسية للمواد الصلبة، حيث أنها تزودنا بمعلومات عن معادلة الحالة الأساسية، السعة الحرارية، الضغط الخارجي، درجة حرارة ديباي و نحدد أيضا من خلالها طبيعة الروابط بين المستويات المتجاورة الذرية وقساوة وليونة المواد. تتيح ثوابت المرنة أيضا تحديد الاستقرار الميكانيكي للمادة الصلبة في مواجهة التشوه، في الواقع لكي تكون نقطة التوازن نقطة توازن مستقر، يجب ان يكون الشكل التريبيعي للطاقة موجبا مما يفرض شروط على ثوابت المرنة [14].

هناك عدة طرق أولية للحصول على ثوابت المرنة، اكثرها استخداما Nielsen و Martin [15] والذي يعتمد على تشوه البلورة في اتجاهات مختلفة وحساب التشوه الناتج باستخدام ميكانيك الكم. ويتم الحصول على ثوابت المرنة المحسوبة في العمل الحالي بطريقة Hamman المطبقة في برنامج Abinit.

تعرف معاملات المرنة C_{ij} على أنها الإجهاد المطبق على التشوه الناتج، وفي حالة العينات المكعبة تكفي المعاملات (C_{44}, C_{12}, C_{11}) لتحديد معاملات المرنة. وفي هذا العمل قمنا بحساب هذه المعاملات للمركبين InP و InSb. الحسابات تمت باستعمال برنامج Abinit، بناء على نظرية الكثافة الوظيفية المضطربة (DFPT) [16، 17]، باستخدام التقريب LDA [18].

النتائج التي تم الحصول عليها مدونة في الجدول (2.3) و (3.3) بواسطة التقريب LDA في البنية زنك بلاند، ولإجراء مقارنة بين النتائج قمنا بالبحث عن البيانات والمعطيات التجريبية والنظرية المتاحة والتي تم اجرائها سابقا ومن خلال هذا وجدنا ان المعاملات المحسوبة عدديا تتفق بشكل معقول مع القيم التجريبية الواردة في المرجع [19].

❖ الخصائص الميكانيكية:

تمت صياغة النظر في الاستقرار الميكانيكي للشبكة البلورية في الأصل بواسطة Huang و Born [22،23]، الذين اظهروا انه من خلال تطوير الطاقة الداخلية للبلورة الى سلسلة من قوة الاجهاد، من الممكن الحصول على معايير الاستقرار من حيث الشروط على ثوابت المرونة، مع الاخذ بعين الاعتبار الطاقة الإيجابية، وبالتالي فان الشرط الضروري للاستقرار الميكانيكي هو ان يتم تعريف مصفوفة الثوابت المرنة ويتحقق شرط الاستقرار إذا كانت ثوابت المرونة موجبة. بتطبيق قاعدة الاستقرار التالية الخاصة بالعينات المكعبة [24]:

المركب	C_{11}	C_{12}	C_{44}	المراجع
InP	98.97	55.58	44.71	العمل الحالي
	102.2[a]	57.65[a]	46[a]	القيم التجريبية
	98.956[b]	22.957[b]	39.889[b]	القيم النظرية
	109.5[d]	55.7[d]	52.6[d]	
InSb	67.03	36.34	30.52	العمل الحالي
	66.7[a]	36.2[a]	30.2[a]	القيم التجريبية
	65.314[b]	28.217[b]	26.380[b]	القيم النظرية
	72.0[d]	35.4[d]	34.1[d]	

a. Ref [19]. b. Refs [20]. d. Refs [21].

الجدول (2.3): قيم معاملات المرونة C_{ij} للمركبين InSb و InP.

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

$$C_{11} > 0, C_{44} > 0 \dots\dots\dots(4.3)$$

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

نلاحظ من خلال الجدول ان كل ثوابت المرونة موجبة وتخضع لشرط الاستقرار.

تم أيضا حساب المعاملات التالية:

معامل تماثل المناعي A , معامل الانضغاطية B وثابت القص ورمزه G والذي يحدد قساوة المادة الصلبة لتغيرات او انزلاقات المستويات الذرية بالنسبة للمستويات الاصلية, معامل يونغ E ومعامل بواسون ν الذي نحدد من خلاله نوع الرابطة بين المستويات الذرية المتجاورة ويتم التعبير عن هذه المعاملات بالعلاقات التالية:

$$E = \frac{9BG}{3B+G} \tag{5.3}$$

$$G = \frac{1}{2} \cdot (G_R + G_V) \tag{6.3}$$

$$G_V = \frac{C_{11}-C_{12}+3C_{44}}{5} \tag{7.3}$$

$$G_R = \frac{5(C_{11}-C_{12})C_{44}}{3(C_{11}-C_{12})+4C_{44}} \tag{8.3}$$

$$B = \frac{(C_{11}+ 2C_{12})}{3} \tag{9.3}$$

$$A = \frac{2C_{44}}{C_{11}-C_{12}} \tag{10.3}$$

$$\vartheta = \frac{3B-E}{6B} \tag{11.3}$$

النتائج المحسوبة بالنسبة للمركبين المدروسين وفي التقريب LDA مدونة في الجدول (3.3):

المراجع	B/G	A	Θ	E(GPa)	G(GPa)	B (GPa)	المركب
العمل الحالي	2.09	2.06	0.294	86.57	33.45	70.04	
القيم النظرية	2.05[a]	/	0.357[a]	60.7[a]	34.5[a]	70.8[a]	InP
القيم التجريبية	3.155[b]	/	0.360[b]	61[b]	22.5[b]	71[b]	
العمل الحالي	2.01	1.99	0.29	59.63	23.16	46.57	InSb

a.Ref [25]. b. Refs [26].

الجدول (3.3): قيم كل من A، E، G، B، Θ ، B/G للمركبين InP و InSb.

القيم المحسوبة لمعامل القص G، معامل يونغ E، معامل بواسون ν و القيمة B/G للمركب InP موافقة للقيم النظرية الموجودة في المرجع [25]. معامل الانضغاطية B أكبر قيمة مقارنة مع القيم المحسوبة لمعامل القص G، وبالتالي فإن المواد المدروسة تكون أكثر مقاومة لتغير الحجم (الضغط) من تغير الشكل (القص).

كما نلاحظ أن معامل التماثل الناحي $A > 1$ لكلا المركبين InP و InSb وبالتالي فإن المركبين خواصهما متباينة وأكثر صلابة على طول الاتجاهات القطرية $\langle 111 \rangle$.

إذا كانت قيم معامل بواسون ν اقل من 0.1 تكون الروابط بين الذرات تساهمية، أما إذا كانت القيمة تساوي 0.25 فالروابط أيونية [27]. فإمنا كانت مقاربة ل $\nu \approx 0.3$ دلالة على أن الرابطة بين الذرات أيونية.

نعود لنذكر بالقاعدة 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 أنها مواد قابلة للسحب وإذا كانت قيمة B/G اقل من 1.75 تكون سريعة الانكسار، النتائج مدونة في الجدول (3.3) تدل على أن المركبين InP و InSb هي مواد قابلة للسحب (قاسية).

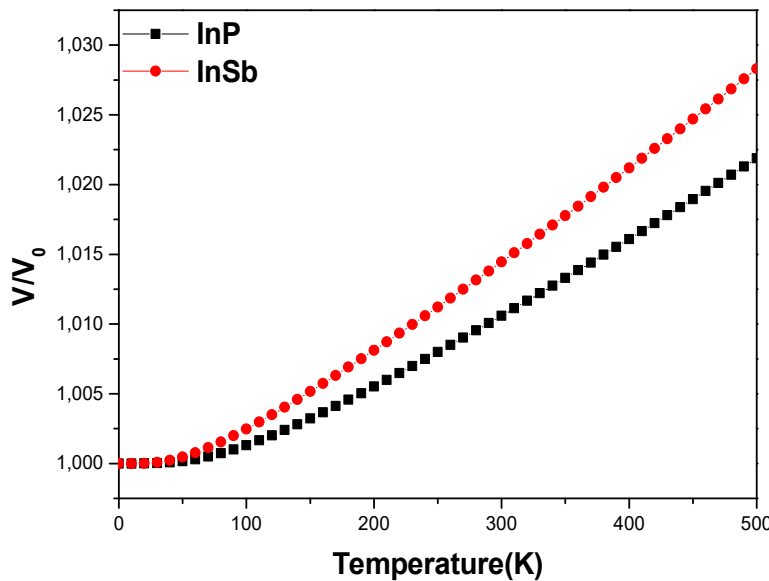
5.3. الخصائص الترموديناميكية:

1.5.3. مقدمة:

ظهرت كلمة الترموديناميك عام 1850 في القرن التاسع عشر وفي هذه الفترة تطور هذا العلم تحت قيادة علماء مثل Laplace وعلماء آخرين، ورافق تطور هذا العلم ظهور المحركات الحرارية. الترموديناميك هو العلم الذي يدرس خصائص المادة المتعلقة بدرجة الحرارة والضغط والطاقة وغيرها. في هذا العمل تم حساب الخصائص الترموديناميكية بواسطة برنامج GIBBS الذي يعتمد على النموذج الشبه التوافقي ل Debye .

2.5.3. الحجم:

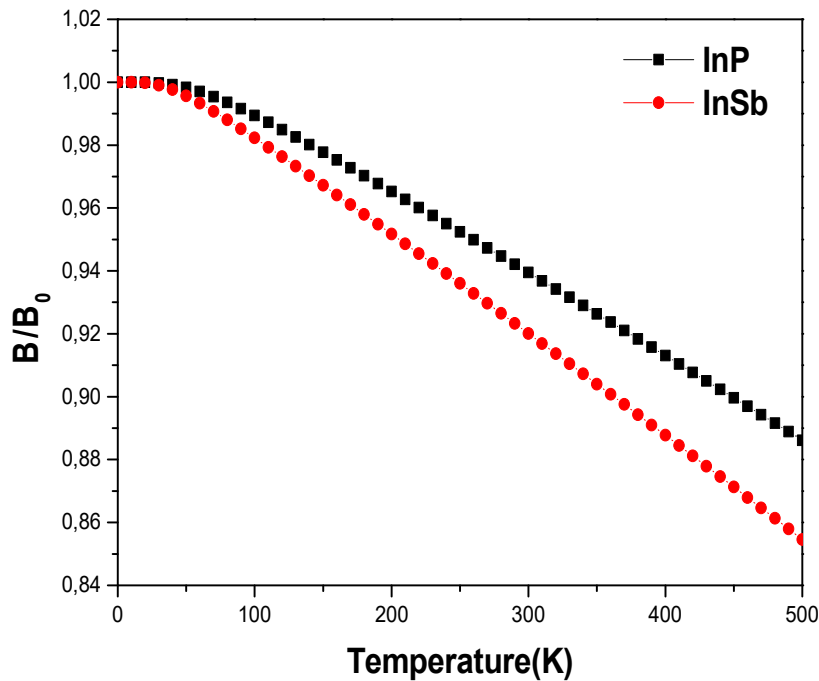
في الشكل (7.3) قمنا بعرض البيان V/V_0 بدلالة درجة الحرارة للمركبين InP و InSb. يمكننا ملاحظة أن الحجم يزداد بشكل شبه خطي مع زيادة درجة الحرارة، كما يمكننا أن نلاحظ أن الحجم ثابت تقريبا في نطاق درجة الحرارة $0-100K$ لكلا المركبين InP و InSb، ويفسر هذا بعدم تمدد الشبكة الا فوق هذه الدرجة.



الشكل (7.3): تغير V/V_0 بدلالة درجة الحرارة للمركبين InP و InSb.

3.5.3. معامل الانضغاطية B/B_0 :

في الشكل (8.3) قمنا بعرض البيان B/B_0 بدلالة درجة الحرارة للمركبين InP و InSb. نلاحظ من خلال الشكل ان معامل الانضغاطية يتناقص تدريجيا بدلالة درجة الحرارة. لما تكون درجة الحرارة أكبر من او تساوي 100 K° فان معامل الانضغاطية للمركبين InP و InSb يتناقص خطيا بزيادة درجة الحرارة. نفسر تناقص معامل الانضغاطية مع زيادة درجة الحرارة بزيادة حجم المادة المدروسة الناتج عن زيادة درجة الحرارة. معامل الانضغاطية عند الدرجة $T=300\text{ K}^\circ$ يساوي الى 64.65 GPa بالنسبة ل InP و 42.24 GPa بالنسبة ل InSb.

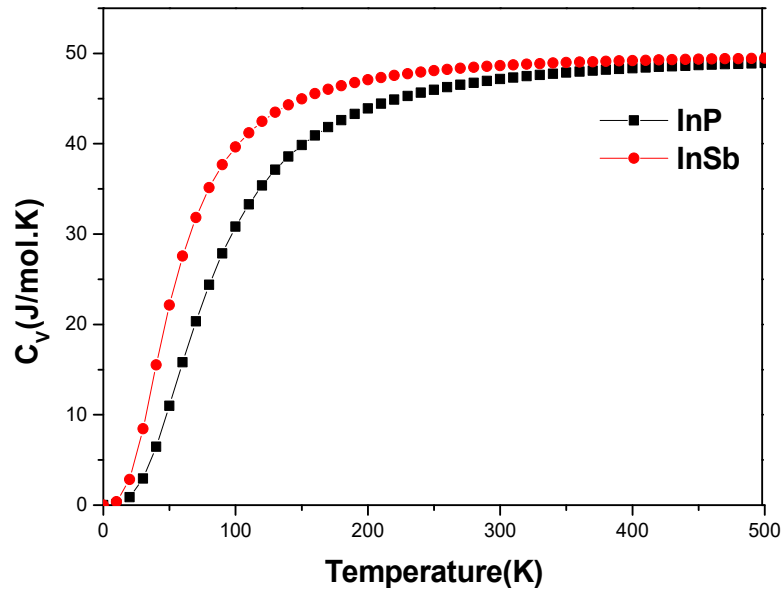


الشكل (8.3): تغير B/B_0 بدلالة درجة الحرارة للمركبين InP و InSb.

4.5.3. السعة الحرارية بثبوت الحجم C_V :

ان معرفة السعة الحرارية لمادة ما لا توفر فقط المعطيات الأساسية لخصائصها الاهتزازية ولكنها ضرورية أيضا في العديد من التطبيقات. بالنسبة للمواد الصلبة تعرف السعة الحرارية C_V على

انها مشتق الطاقة الداخلية U بالنسبة لدرجة الحرارة T بثبوت الحجم. الشكل (9.3) يبين تغير C_V بدلالة درجة الحرارة للمركبين InSb و InP باستخدام التقريب LDA. في درجات الحرارة المنخفضة السعة الحرارية بثبوت الحجم C_V تتزايد بسرعة مع زيادة درجة الحرارة وتتناسب مع T^3 ، كما تتزايد ببطيء في درجات الحرارة العالية، وتقرب من قيمة حدية مثل باقي المركبات الصلبة وتسمى هذه القيمة ب قيمة دولينغ-بيتي (Dulong-Petit) و تساوي الى $(C_V(T) \sim 3nR \cong 49.86 \text{ J.mol}^{-1}.\text{K}^{-1})$. من هذه النتيجة يتبين لنا أن السعة الحرارية مستقلة عن درجة الحرارة وهذا السلوك شائع عند جميع المواد الصلبة في درجات الحرارة العالية مما يشير الى أن الطاقة الحرارية عند درجات الحرارة المرتفعة تثير جميع أنماط الفونون. قيم السعة الحرارية C_V المحسوبة عند الدرجة $T=300 \text{ K}$ تساوي الى $47.15 \text{ J.mol}^{-1}.\text{K}^{-1}$ بالنسبة ل InP و $48.64 \text{ J.mol}^{-1}.\text{K}^{-1}$ بالنسبة ل InSb .



الشكل (9.3): تغير C_V بدلالة درجة الحرارة للمركبين InSb و InP .

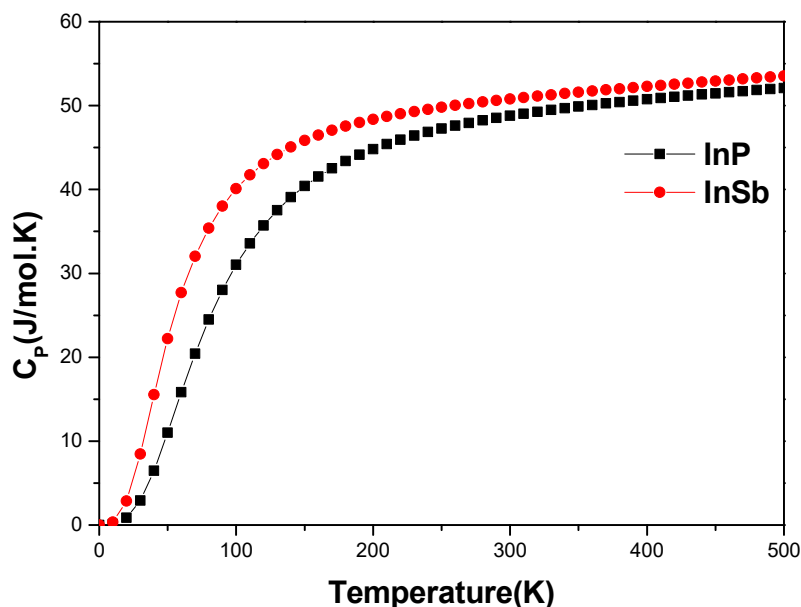
5.5.3. السعة الحرارية بثبوت الضغط C_p :

السعة الحرارية بثبوت الضغط تعبر عن الطاقة او عدد الفونونات المطلوبة بدلالة درجة الحرارة

للمواد و الشكل (10.3) يمثل تغير السعة الحرارية بثبوت الضغط C_p بدلالة درجة الحرارة للمركبين InP

و InSb . في درجات الحرارة المنخفضة تتشابه أشكال منحنيات كل من السعة الحرارية بثبوت الحجم

C_V و السعة الحرارية بثبوت الضغط C_P حيث تتزايد بسرعة مع زيادة درجة الحرارة وتتناسب مع T^3 ، أما في درجات الحرارة العالية عند $T > 400K$ تتصرف السعة الحرارية بثبوت الضغط C_P عن السعة الحرارية بثبوت الحجم C_V وتتسلق سلوك خطي بدلالة درجة الحرارة لكلا المركبين InP و $InSb$. قيم السعة الحرارية المحسوبة عند الدرجة $T = 300 K$ تساوي إلى $48.79 J.mol^{-1}.K^{-1}$ بالنسبة ل InP و $50.79 J.mol^{-1}.K^{-1}$ بالنسبة ل $InSb$.

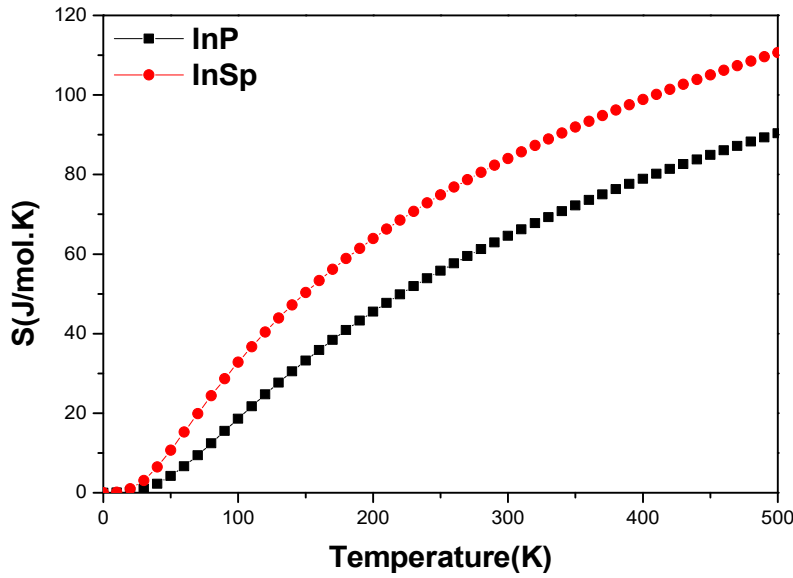


الشكل (3. 10): تغير C_p بدلالة درجة الحرارة للمركبين InP و $InSb$.

6.5.3. لانتروبي S:

على النطاق المجهرى يمكن تعريف لانتروبي S على انه مقياس لاضطراب النظام. تغير لانتروبي S بدلالة درجة الحرارة موضح في الشكل (11.3). يبدو ان لانتروبي S يأخذ نفس السلوك تحت تأثير درجة الحرارة لكلا المركبين InP و $InSb$ باستخدام التقريب LDA. نلاحظ ان لانتروبي S

يزداد بسرعة مع زيادة درجة الحرارة وذلك في درجات الحرارة المنخفضة و الأقل من 200 K° وهذا راجع الى أن اثاره الذرات تنشأ فقط من الاهتزازات الصوتية . و في درجات الحرارة العالية لانتروبي يزداد ببطئ ويصبح أكثر تشابها مع السلوك تحت الخطي (sous-linéaire أي لانتروبي يتناسب مع T^α و $\alpha < 1$). قيم لانتروبي المحسوبة عند الدرجة $T=300\text{ K}^\circ$ هي $64.58\text{ J.mol}^{-1}.\text{K}^{-1}$ بالنسبة ل InP و $84.03\text{ J.mol}^{-1}.\text{K}^{-1}$ بالنسبة ل InSb .

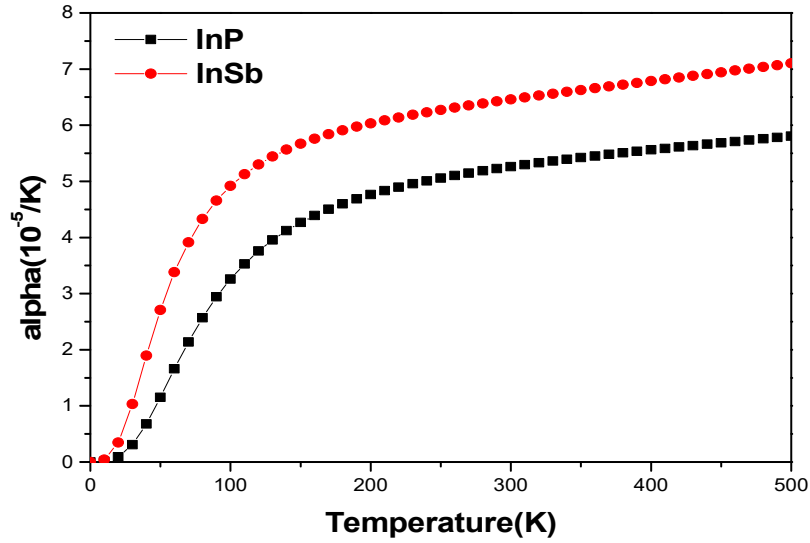


الشكل (3. 11): تغير لانتروبي S بدلالة درجة الحرارة للمركبين InP و InSb .

7.5.3. معامل التمدد الحراري α :

باستخدام النموذج الشبه توافقي لديباي قمنا بحساب معامل التمدد الحراري α ، و النتائج المحصل عليها للمركبين InP و InSb ممثلة في الشكل (3. 12). من هذا البيان نلاحظ أن معامل التمدد الحراري α يزداد بزيادة درجة الحرارة حتى الدرجة 200 K° . فوق درجة الحرارة هذه تكون الزيادة في معامل

التمدد الحراري بطيئة وخطية تقريبا. عند درجة الحرارة $T=300\text{ K}^\circ$ معامل التمدد الحراري α يساوي الى $5.26 \times 10^{-5}\text{ K}^{-1}$ بالنسبة ل InP و $6.46 \times 10^{-5}\text{ K}^{-1}$ بالنسبة ل InSb.



الشكل (12.3): تغير معامل التمدد الحراري α بدلالة درجة الحرارة للمركبين InP و InSb.

المراجع:

- [1] P. Hohenberg, W. Kohn, Phys. Rev, 136 (1964) 864; W. Kohn, L. J. Sham, Phys. Rev, 140 (1965) 1133.
- [2] 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.
- [3] D. M. Ceperley, B. J. Alder, Phys. Rev. Lett, 45 (1980) 566.
- [4] J. P. Perdew, Y. Wang, Phys. Rev, B 45 (1992) 13244.
- [5] N. Troullier, J. L. Martins, Phys. Rev, B 43 (1991) 1993.
- [6] أ.د. نعيمة عبد القادر أحمد , أ.د. محمد أمين سليمان، علم البلورات والأشعة السينية، دار الفكر العربي الطبعة الأولى, 2015.
- [7] F. D. Murnaghan, Proceedings of the National Academy of Sciences, 30 (1944) 244.
- [8] R. Zallen, W. Paul, Handbook on Semiconductors, 1 (1982).
- [9] D.N. Nichols, D.S. Rimai, R. J. Sladek, Sol. Stat. Comm, 36 (1980) 667.
- [10] L. Borstein, Semiconductors: Physics of Group IV Elements and III-V compounds, 3 (1992).
- [11] A. Bouhemadou, R. Khenata, M. Kharoubi, T. Seddik, A. H. Reshak, Y.A. Douri, Comput. Mater. Sci, 45 (2009) 474.
- [12] S. Massidda, A. Continenza, and A. J. Freeman, phys. Rev, B 41 (1990) 17.
- [13] Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology-Crystal and Solid State Physics, Vol. 17a of Landolt-Bornstein, edited by O. Madelung (Springer, Berlin, 1984).
- [14] A. F. Wringht, Appl. Phys, 82 (1997)2833.
- [15] O. H. Nielsen, and R. M. Martin, Phys. Rev. Lett, 50 (1983) 697.
- [16] P. Giannozzi, S. de Gironcoli, p. pavone and S. Baroni, phys. Rev, B 43 (1991) 7231.

- [17] Ph. Ghosez, J. P. Michenaud and X. Gonze, Phys. Rev, B 58 (1998) 6224.
- [18] D. M. Ceperley, B. J. Alder, Phys. Rev. Lett, 45 (1980) 566.
- [19] R. Weil and W. O. Groves, J. Appl. Phys, 39 (1968) 4049 .
- [20] Abdel Razik Degheidy, Elkenany Brens Elkenany, Omnia. A. Alfrnwani, Computational Condensed Matter, 16 (2018) 1-7.
- [21] S. Q. Wang and H. Q. Ye1, Phys. Stat. Sol, 240 (2003) 45–54.
- [22] M. Born, proc.Cambridge. philos.Sàc, 36 (1940) 160.
- [23] M.Born et K.Huang,Dynamical Theory of Crystal Lattice,etide par Clarendon,Oxford (1956).
- [24] B. Holm, R. Ahuja, Y. Yourdshahyan, B. Johanson, B.I. Lundqvist, Phys. Rev 59 (1999) 12777.
- [25] P. Pluengphon, T. Bovornratanaraks, U. Pinsook, Journal of Alloys and Compounds, 700 (2017) 98-105.
- [26] D.N. Nichols, D.S. Rimai, R.J. Sladek, Sol. Stat. Comm, 36 (1980) 667.
- [27] J. Haines, J.M. Leger, G. Bocquillon, Ann. Rev. Mater. Res. 31 (2001) 1.
- [28] M. Methfessel, A.T. Paxton, Phys. Rev, B 40 (1989) 3616.

خلاصة عامة

خلاصة عامة

في هذا العمل قمنا بدراسة الخواص البنيوية، المرورية والخواص الترموديناميكية لأنصاف النواقل InX (P,Sb) . 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 الكثافة المحلية (LDA) لأجل حساب كمون التبادل-الارتباط (XC)، أيضا استعملنا نظرية الكثافة التابعة المظطرية (DFPT) لحساب ثوابت المرورية. وقد تم حساب الخصائص الترموديناميكية باستخدام برنامج GIBBS الذي يعتمد على النموذج الشبه التوافقي ل Debye. والنتائج المتحصل عليها من هذا العمل هي كالتالي:

- ✓ الخصائص البنيوية للحالة الأساسية المحسوبة لكلا المركبين InP و InSb هي قيم متقاربة بامتياز مع القيم التجريبية والنظرية المتاحة، حيث كانت جيدة لثابت الشبكة $a(A^\circ)$.
- ✓ تم تحديد أيضا معامل الانضغاطية β (GPa) والمشتقة الأولى لمعامل الانضغاطية B' ، وكان هناك توافق بين القيم المحسوبة والقيم النظرية والتجريبية لكلا المركبين InP و InSb .
- ✓ وقمنا أيضا بدراسة الخصائص المرورية وحساب المعاملات (C_{44}, C_{12}, C_{11}) الخاصة بالبنية المكعبة مع تطبيق قاعدة الاستقرار وجدنا كل ثوابت المرورية موجبة وتخضع لشرط الاستقرار في البنية زنك بلاند، وتم أيضا حساب معامل يونغ E ، ثابت القص G ، المعاملات A و B ومعامل بواسون ν ومن خلاله حددنا نوع الرابطة بين المستويات الذرية المتجاورة على أنها من طبيعة أيونية.

✓ تناولنا أيضا القاعدة التجريبية الخاصة بقساوة او هشاشة المادة والمحسوبة من معامل الانضغاطية B، وثابت القص G، ووجدنا ان كل من المركبين InP و InSb المدروسين في التقريب LDA من طبيعة قاسية(مواد قابلة للسحب).

✓ و باستخدام نموذج ديبياي قمنا بدراسة تغير المعاملات الترموديناميكية بدلالة درجة الحرارة مثل: الحجم، معامل الانضغاطية، السعة الحرارية بثبوت الحجم، السعة الحرارية بثبوت الضغط، لانتروبي، معامل التمدد الحراري لكل من المركبين InP و InSb. كملاحظة أخيرة أظهرت هذه النتائج تماثلا مع القيم التجريبية والنظرية السابقة والمتاحة في حدود أخطاء الحساب.

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

Résumé :

Dans ce travail, nous avons étudié les propriétés structurales, élastiques et thermodynamique de semi-conducteurs InX (P, Sb) à pression nulle. Les calculs ont été effectués par la méthode des pseudos potentiels et des ondes planes (PP-PW) implémentée dans le code abinit qui se base sur la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT). Nous avons utilisé l'approximation de la densité locale (LDA) pour le terme du potentiel d'échange et de corrélation (XC). Ainsi, nous avons utilisé la Théorie de Perturbation de la Fonctionnelle de la Densité (DFPT) pour le calcul des constantes élastiques. Les propriétés thermodynamiques ont été explorées avec le programme GIBBS qu'est basé sur le modèle quasiharmonique de Debye). Les résultats de notre simulation ont été interprétés et comparés aux résultats théoriques et expérimentaux disponibles.

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

Abstract:

In this work, we have studied the structural, elastic and thermodynamic properties of semiconductor InX (P, Sb) under zero pressure. one, have been investigated by employing first principles methods, using the plane wave pseudo potential calculations (PP-PW) implemented in the abinit package within density functional theory (DFT) and the local density approximation (LDA) for the term of the potential for exchange and correlation (XC). We used the density functional perturbation theory (DFPT) for the calculation of elastic constants. The thermodynamic properties have been investigated by using the GIBBS program which is based on the quasi-harmonic model of Debye. The results of our simulations are performed and compared to experimental and theoretical results when available.

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

ملخص:

في هذا العمل قمنا بدراسة الخواص البنوية، المرورية والخواص الترموديناميكية لأنصاف النواقل InX (P,Sb) وذلك تحت الضغط صفر. هذه الحسابات تمت باستخدام برنامج Abinit, ان جميع هذه الدراسات تستند على الكمون الكاذب والموجات المستوية (PP-PW) والتي تركز على نظرية الكثافة الوظيفية (DFT) في تقريب الكثافة المحلية (LDA) لأجل حساب كمون التبادل -الارتباط (XC), أيضا استعملنا نظرية تابع الكثافة المثار (DFPT) لحساب ثوابت المرورية. تم حساب الخصائص الترموديناميكية باستخدام برنامج GIBBS الذي يعتمد على النموذج الشبه التوافقي ل Debye. كما قمنا بمقارنة نتائجنا مع النتائج التجريبية والنظرية المتوفرة.

الكلمات المفتاحية: حساب ab-initio, طريقة الكمون الكاذب, DFT, DFPT, GIBBS, انصاف النواقل من نوع

III-V, ثوابت المرورية, ترموديناميك.