

جامعة قاصدي مرباح ورقلة

كلية الرياضيات وعلوم المادة

قسم الفيزياء



مذكرة

ماستر أكاديمي

مجال: علوم المادة

فرع: إشعاع

تخصص: فيزياء الإشعاعات، كاشف و بصريات الكترونية

من إعداد: عوينات بشيرة

بعنوان:

دراسة الخصائص الضوئية لبلورات

(Si, Ge, SiC, GeC, SiC)

نوقشت يوم: 2016/05/26

:

رئيسا

. محمدي لزهري

. بن طويلة عمر

مقررا

جامعة قاصدي مرباح ورقلة

. عيادي كمال الدين

السنة الجامعية 2015/2016

# شكر وعرفان

الفضل والمنة لك ربنا وفققتنا لإتمام هذا العمل فنحمدك حمدا لا يحصى ونثني على كمال ذاتك

وعظيم صفاتك ما يليق بمقام سلطانك فلك الحمد حتى ترضى

ولك الحمد إذا رضيت ولك الحمد بعد الرضا.

أولا أتقدم بجزيل الشكر والتقدير الى الاستاذ الدكتور "عيادي كمال الدين" الذي مد لي يد

العون وذل لي الصعاب بملاحظاته وتوجيهاته وكان لي مرشدا طوال مشوار هذا العمل.

كما أشكر الأستاذ "محمدي الأزهر" على قبوله ترؤس لجنة المناقشة.

والاستاذ "بن طويلة عمر" على قبوله مناقشة وتقييم عملي هذا.

كما أخص بالشكر طالبة الدكتوراه "جعدي سمية" التي لم تبخل علي لا بجهدا ولا بوقتها

فلها جزيل الشكر والامتنان على صبرها وتعاونها معي.

في هذا المقام لا يمكن أن أنسى أساتذة قسم الفيزياء فلهم جزيل الشكر على كل ما بذلوه من

جهود خلال مشوارنا الجامعي وإلى كل من ساعدني من قريب أو بعيد .



بشيرة

2..... مقدمة عامة

## الفصل الأول: عموميات حول انصاف النواقل

4.....مقدمة

4..... 1- تصنيف المواد الصلبة

5..... 2- أنصاف النواقل

5..... 1-2- تعريف أنصاف النواقل

5..... 2-2- أنواع أنصاف النواقل

7..... 3- الانتقالات الالكترونية

7..... 1-3- الانتقالات الالكترونية المباشرة

7..... 2-3- الانتقالات الالكترونية الغير مباشرة

8..... 4- البنية البلورية

10..... - البنيات الماسية

10..... - بنية كبريت الزنك

11..... 5- الجرمانيوم ولسليسيوم

11..... 1-5- تعريف

12..... 2-5- خصائص الجرمانيوم والسليسيوم

13..... 3-5- الاستخدامات

17..... 6- الخصائص الضوئية

17..... 1-6- معامل الامتصاص الضوئي

18..... 2-6- الانعكاسية

19..... 3-6- قرينة الانكسار

19..... 4-6- معامل الخمود

20..... 5-6- ثابت العزل

20.....	6-6 أهمية معرفة الخصائص الضوئية.
21.....	مراجع الفصل الأول

### الفصل الثاني: نظرية الكثافة التابعة

24.....	مقدمة
24.....	1- معادلة شرودينغر للبلورة
26.....	2- تقريب هاتري فوك
28.....	3- نظرية الكثافة التابعة
28.....	3-1 نظرية هوهانبرغ وكوهان
30.....	3-2 معادلات كوهان-شام
31.....	3-3 حلول معادلات كوهان-شام
33.....	4- تقريبات الكثافة المحلية والتدرج المعمم
34.....	5- الكمونات الزائفة
34.....	6- تقديم برنامج SIESTA
35.....	مراجع الفصل الثاني

### الفصل الثالث: النتائج والمناقشة

38.....	مقدمة
38.....	III-1 تفاصيل الحساب
39.....	III-2 النتائج الخاصة بالطاقة
42.....	III-3 الخصائص الضوئية
42.....	III-3-1 الخصائص الضوئية لعنصر Si
42.....	III.3.1.1 معامل الامتصاص ( ) لبلورة « Si »
42.....	III.3.1.2 معامل الانكسار (N) لبلورة « Si »

43.....	3.III 3.1. الانعكاسية (R) لبلورة « Si »
44.....	III-23- الخصائص الضوئية لعنصر Ge
44.....	3.III 1.2. معامل الامتصاص ( ) لبلورة « Ge »
45.....	3.III 2.2. معامل الانكسار (N) لبلورة « Ge »
45.....	3.III 3.2. الانعكاسية (R) لبلورة « Ge »
46.....	III-3-3 الخصائص الضوئية لعنصر SiC
47.....	3.III 1.3. معامل الامتصاص ( ) لبلورة « SiC »
47.....	3.III 2.3. معامل الانكسار (N) لبلورة « SiC »
48.....	3.III 3.3. الانعكاسية (R) لبلورة « SiC »
48.....	III-3-4 الخصائص الضوئية لعنصر GeC
49.....	3.III 1.4. معامل الامتصاص ( ) لبلورة « GeC »
49.....	3.III 2.4. معامل الانكسار (N) لبلورة « GeC »
50.....	3.III 3.4. الانعكاسية (R) لبلورة « GeC »
50.....	III-3-5 الخصائص الضوئية لعنصر SiGe
50.....	3.III 1.5. معامل الامتصاص ( ) لبلورة « SiGe »
51.....	3.III 2.5. معامل الانكسار (N) لبلورة « SiGe »
51.....	3.III 3.5. الانعكاسية (R) لبلورة « SiGe »
53.....	مراجع الفصل الثالث
56.....	خلاصة عامة

فهرس الأشكال

- الشكل (1. I): يمثل مخطط حزم الطاقة للمواد الناقلة وأنصاف النواقل والعوازل.....4
- الشكل (2. I): يوضح حزمتي التكافؤ والتوصيل في أنصاف النواقل.....6
- الشكل (3. I): يوضح أنواع الانتقالات الالكترونية.....8
- الشكل (4. I): يوضح البنية الماسية.....10
- الشكل (5. I): يبين بنية كبريت الزنك.....10
- الشكل (6. I): يبين التركيب الذري للسليسيوم والجرمانيوم.....11
- الشكل (7. I): يبين الأغلفة الخارجية لذرتي للسليسيوم والجرمانيوم.....11
- الشكل (8. I): يبين تأثير فجوة الطاقة على درجة الحرارة للسليسيوم والجرمانيوم.....12
- الشكل (9. I): يمثل رسم مقطعي مبسط لخلية كهرو ضوئية.....16
- الشكل (1. II): يمثل مخطط لخوارزمية حلول معادلات كون شام.....32
- الشكل (1. III): يمثل بنية عصابات الطاقة لمختلف عناصر الدراسة.....40
- الشكل (2. III): يمثل منحنى معامل الامتصاص لعنصر « Si » بدلالة طاقة الفوتون.....42
- الشكل (3. III): يمثل منحنى معامل الانكسار لعنصر « Si » بدلالة طاقة الفوتون.....43
- الشكل (4. III): يمثل الشكل منحنى الانعكاسية لعنصر « Si » بدلالة طاقة الفوتون.....43
- الشكل (5. III): يمثل منحنى معامل الامتصاص لعنصر « Ge » بدلالة طاقة الفوتون.....44
- الشكل (6. III): يمثل منحنى معامل الانكسار لعنصر « Ge » بدلالة طاقة الفوتون.....45
- الشكل (7. III): يمثل منحنى الانعكاسية لعنصر « Ge » بدلالة طاقة الفوتون.....45
- الشكل (8. III): يمثل منحنى معامل الامتصاص لعنصر « SiC » بدلالة طاقة الفوتون.....46
- الشكل (9. III): يمثل منحنى معامل الانكسار لعنصر « SiC » بدلالة طاقة الفوتون.....47
- الشكل (10. III): يمثل منحنى الانعكاسية لعنصر « SiC » بدلالة طاقة الفوتون.....47
- الشكل (11. III): يمثل منحنى معامل الامتصاص لعنصر « GeC » بدلالة طاقة الفوتون.....48
- الشكل (12. III): يمثل منحنى معامل الانكسار لعنصر « GeC » بدلالة طاقة الفوتون.....49
- الشكل (13. III): يمثل منحنى الانعكاسية لعنصر « GeC » بدلالة طاقة الفوتون.....49
- الشكل (14. III): يمثل منحنى معامل الامتصاص لعنصر « SiGe » بدلالة طاقة الفوتون.....50
- الشكل (15. III): يمثل منحنى معامل الانكسار لعنصر « SiGe » بدلالة طاقة الفوتون.....51
- الشكل (16. III): يمثل منحنى الانعكاسية لعنصر « SiGe » بدلالة طاقة الفوتون.....51

فهرس الجداول

- الجدول (1. I): يمثل مختلف أنواع بنيات المادة.....9
- الجدول (2. I): يمثل خصائص السليسيوم والجرمانيوم.....12
- الجدول (1. III): يوضح مختلف معطيات الحساب.....38
- الجدول (2. III): يمثل قيم الطاقة ومستوي فيرمي.....39
- الجدول (3. III): يمثل قيم الفاصل الطاقي لعناصر الحساب.....41

# مقدمة عامة



---

## مقدمة عامة

تلعب فيزياء المواد دورا مهم وكبير في التطبيقات التكنولوجية الحالية ، وقد طور هذا الدور في الكثير من المجالات وخاصة مجال المواد النصف ناقلة التي أصبحت من أهم المواد التكنولوجية والتقنية ، وذلك لما تتمتع به من خصائص تجعل منها أساس لصناعة المركبات الالكترونية و الالكتروضعوية . أهم هذه المواد النصف الناقلة وأشهرها السليسيوم والجرمانيوم .

من خلال هذا العمل نسعى لدراسة الخصائص الضوئية لبلورات (Si, Ge, SiC, GeC, SiGe) قصد معرفة مجال استعمال كل بلورة والاضافة التي يعطيها الكربون لكل من السليسيوم والجرمانيوم، والجرمانيوم للسليسيوم. تقوم هذه الدراسة باستخدام برنامج *siesta.3* الذي يعمل في نظام تشغيل *Linux*. بالإضافة الى نظرية الكثافة التابعة *DFT* وتقريب التدرج المعمم *GGA*.

من الفصل الأول عموميات حول أشباه النواقل بالإضافة الى أهم خصائص السليسيوم والجرمانيوم وأهم استعمالتهما. أما الثاني فتضمن وصف لنظرية الكثافة التابعة *DFT* بالإضافة الى مختلف التقريبات مثل تقريب التدرج المعمم *GGA*، كذلك تعريف لبرنامج *siesta.3*. ويحتوي الفصل الثالث على مختلف المعطيات التي يتضمنها الحساب بالإضافة الى نتائج الحساب ومناقشتها.

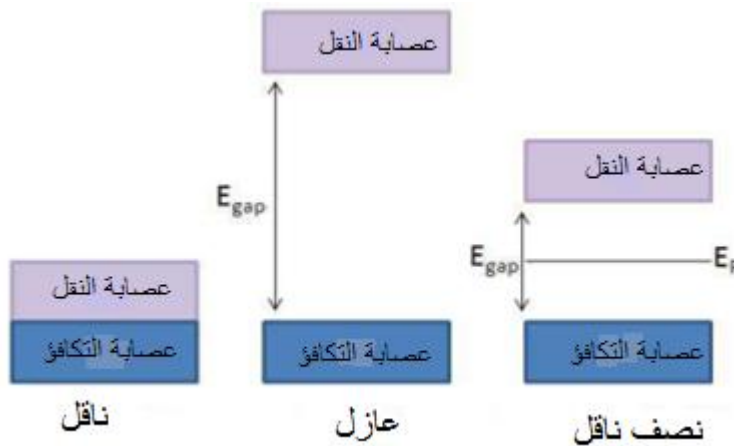
وأخيرا خلاصة تشمل أهم الاستنتاجات التي توصلنا إليها من خلال هذه الدراسة

عمومیات

توجد المادة في أربعة حالات هي : الحالة الصلبة والسائلة والغازية بالإضافة الى البلازما ، اذ يختلف التركيب البنائي للمادة من حالة لأخرى حسب قوى الربط المسيطرة على المادة ، ففي الغازات تكون قوى الربط بين الجزيئات صغيرة جدا أو منعدمة تقريبا، وفي الحالة السائلة تكون أكبر فهي أكثر تماسكا من سابقتها أما الصلبة فتكون قوى الربط فيها كبيرة وهذا ما يجعلها تأخذ شكلا بنائيا ثابت ومحدد ، بالنسبة للبلازما فهي وجود المادة على هيئة أنوية ذرية (غاز مؤين) ، طبعا يمكن تحويل المادة من شكل الى آخر وذلك بتغيير الظروف المحيطة مثل الضغط ودرجة الحرارة. [1]

## -[تصنيف المواد الصلبة

تصنف المواد الصلبة حسب ناقليتها الى ثلاثة اصناف وهي مواد ناقلة ومواد عازلة ومواد شبه ناقلة، ولقد أعتد التصنيف على اساس تركيب الحزم (Band) للمادة وعلى مقدار فجوة الطاقة التي تفصل حزمة التوصيل (conduction) عن حزمة التكافؤ (valance) حيث تكون كبيرة في العوازل وأقل في أشباه النواقل ومنعدمة في النواقل. يتطلب التوصيل الكهربائي انتقال الالكترون من حزمة التكافؤ المملوءة بالإلكترونات الى حزمة التوصيل الفارغة من الالكترونات عبر الفجوة المحظورة بينهما اي انه يجب على الالكترون ان يكتسب طاقة لكي يتمكن من الانتقال ومن حزمة الى حزمة ويطلق على هذه الطاقة ( $E_g$ ) بفجوة الطاقة أما بالنسبة الى المواد شبه الناقلة فإن الفرق الاساسي بينها وبين المواد العازلة يكمن في قيمة فجوة الطاقة التي تكون أقل بكثير من قيمة فجوة الطاقة في المواد العازلة [9].



الشكل (1-1): مخطط حزم الطاقة للمواد الناقلة وأنصاف النواقل والعوازل

## عموميات حول أشباه النواقل

وكما موضح في الشكل (I-1) إن التوصيل الكهربائي في المواد العازلة قليل جداً، وذلك لكون فجوة الطاقة كبيرة مما تجعل عدد الإلكترونات المنقولة الى حزمة التوصيل قليلة في درجات الحرارة الاعتيادية، أو حتى في درجات الحرارة العالية فإن قيمة فجوة الطاقة في الكثير من المواد العازلة تتراوح بين 3- 10 إلكترون فولت، أما التوصيل الكهربائي في المواد النصف ناقلة فتكون معتدلة نوعاً ما عند درجات الحرارة العالية. أما عند درجات الحرارة المنخفضة فيكون التوصيل الكهربائي قليل جداً وذلك لأن حزمة التوصيل تكون فارغة عند درجة حرارة الصفر المطلق، وكلما ارتفعت درجات الحرارة ينتقل عدد كبير من الإلكترونات الى حزمة التوصيل وترفع قيمة التوصيل الكهربائي الى حد كبير.

### 2- أنصاف النواقل:

#### 2- 1- تعريف أنصاف النواقل

أنصاف النواقل هي مواد تقع بين النواقل والعوازل من حيث الناقلية الكهربائية، تتميز بوجود ثلاث عصابات وهي عصابة النقل وعصابة التكافؤ بينهما عصابة ممنوعة، أهم هذه المواد السليسيوم والجرمانيوم. وتعد أنصاف النواقل بأنها مواد عازلة عند درجات الحرارة المنخفضة لكنها تصبح جيدة التوصيل الكهربائي نوعاً ما عند رفع درجة حرارتها، فلن يمكن الإلكترون من عبور فجوة الطاقة الصغيرة نسبياً للوصول الى حزمة التوصيل فإنه يحتاج طاقة حرارية  $K_B T$  وهكذا تلعب الطاقة الحرارية دوراً مهماً في مساعدة الإلكترونات على عبور فجوة الطاقة. فناقلية شبه الموصل تتأثر بالحرارة والضوء والمجال المغناطيسي وتؤثر فيها وجود كميات ضئيلة من الذرات الشائبة . و حساسية شبه الموصل تجاه هذه العوامل تجعل منه مادة بالغة الأهمية في التطبيقات الإلكترونية [2].

### أنواع أنصاف النواقل:

أ- نصف ناقل ذاتي: نقول عن نصف ناقل ذاتي إذا كان عدد الإلكترونات يساوي عدد الفجوات أي أن كثافة الإلكترونات في حزمة التوصيل تساوي كثافة الفجوات في حزمة التكافؤ [14].

ب- نصف ناقل الغير ذاتي (مطعم):

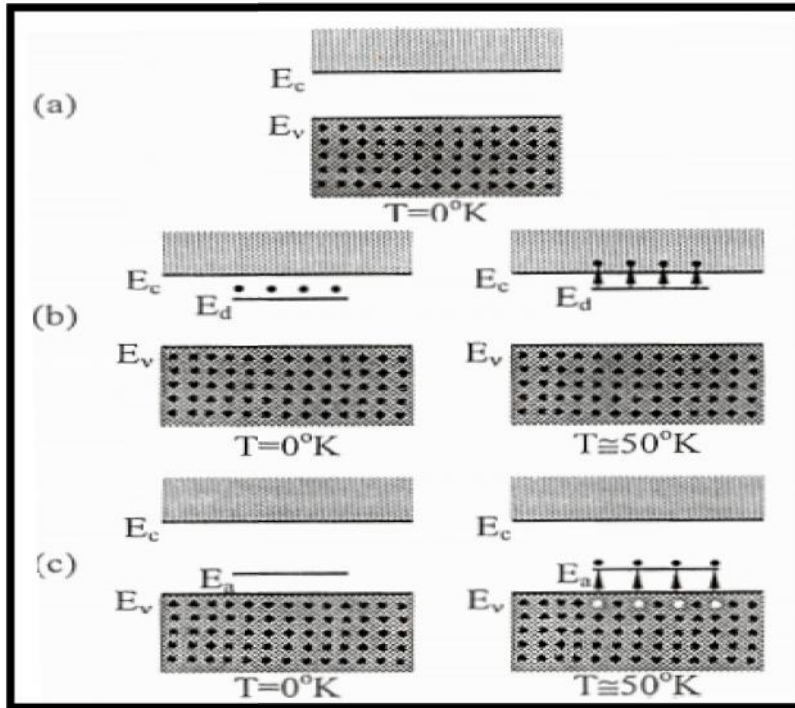
نقول عن نصف ناقل أنه غير ذاتي إذا أضفنا له بعض الشوائب فيؤدي ذلك إلى زيادة نوع من حاملات الشحنة على حساب الآخر فتتغير مختلف خواصه ، وهو نوعان: نصف ناقل N ونصف ناقل P [14].

النوع N :

نأخذ كمثال السليسيوم أو الجرمانيوم الذين يتبلوران في بنية ماسية، حيث تكون كل ذرة مربوطة بأربع ذرات قريبة بروابط تكافؤية. ندخل ذرة تحتوي على خمس الكترونات تكافؤ (الفوسفور P، الزرنيخ As،....) لكي نعوض ذرة من البلورة. من بين الالكترونات الشوائب أربعة تشارك في الروابط التكافؤية مع الأقارب والخامسة تبقى منفردة ، ذرة الشوائب مربوطة بمستوى يسمى المستوى المعطي الموجود تحت عصابة التوصيل، في هذه الحالة نسمي نصف الناقل من نوع N [15.16].

النوع P :

إذا أدخلنا ذرة لها ثلاث الكترونات تكافؤ (بور B، ألنيوم Al.....) هذه الذرة لا يمكنها تشكيل سوى ثلاث روابط تكافؤية ، إذن تبقى رابطة تكافؤية لذرة التشويب غائبة ومتعلقة بمستوى الطاقة الواقع فوق عصابة التكافؤ، هذا المستوى يسمى المستوى المستقبل في هذه الحالة نسمي نصف ناقل من النوع P [15][16].



الشكل (I-2) : يوضح حزمتي التكافؤ والتوصيل في أنصاف النواقل [8].

(a) النقية (b) المطعمة (c) المطعمة (n-type) (p-type)

### 3 - الانتقالات الالكترونية

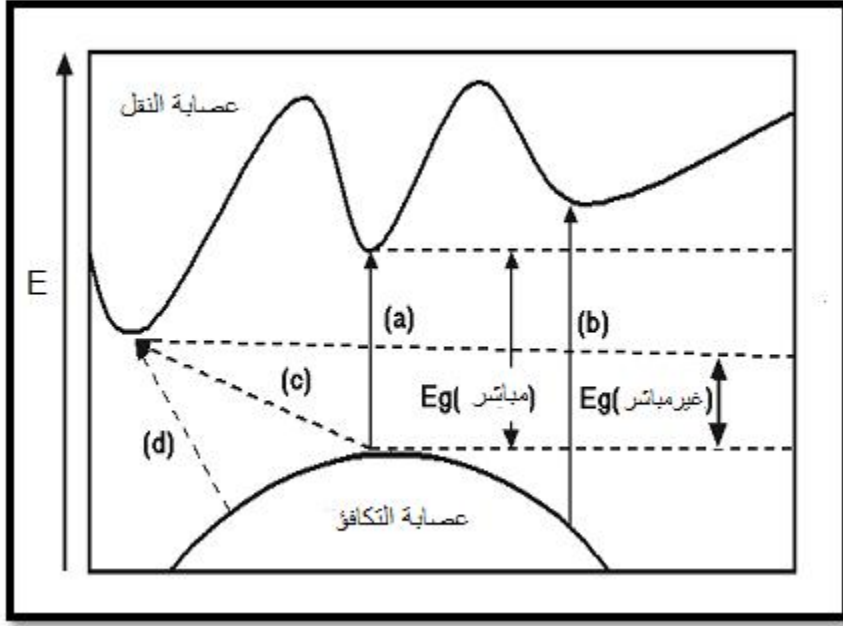
#### 3- 1 الانتقالات الالكترونية المباشرة

في أنصاف النواقل ذات الفاصل الطاقي المباشر هناك نوعان من الانتقالات الالكترونية. فعند انتقال الالكترون من قمة حزمة التكافؤ الى قعر حزمة التوصيل عند النقطة نفسها ، يسمى هذا الانتقال بالانتقال المباشر المسموح . وعندما يكون الانتقال من المناطق المحاورة للانتقال المباشر المسموح عندها يسمى الانتقال انتقال مباشر ممنوع [18] [19].

#### 3- 2 الانتقالات الالكترونية الغير مباشرة

يحصل الانتقال غير المباشر للإلكترونات عند عدم تطابق طاقتي قمة حزمة التكافؤ مع قعر حزمة التوصيل، بحيث يكون الانتقال بين نقطة في حزمة التكافؤ وأي نقطة في حزمة التوصيل بصورة غير عمودية. وتدعى أنصاف النواقل التي تمتلك هذه الانتقالات بأنصاف النواقل ذات الفجوة غير المباشر [18].

و هذه الانتقالات علسنوعين ايضا، فالنوع الاول يكون عندما ينتقل الإلكترون بين أعلى نقطة في حزمة التكافؤ وأوطأ نقطة في حزمة التوصيل وبصورة غير عمودية ويسمى عندها بالانتقال غير مباشر المسموح . و أما النوع الثاني فيكون عندما ينتقل الإلكترون من المناطق ناورة لأعلى نقطة في حزمة التكافؤ إلى أوطأ نقطة في حزمة التوصيل وبصورة غير عمودية ويسمى بالانتقال المباشر الممنوع [20].



الشكل (I-3) : يوضح أنواع الانتقالات الالكترونية [21].

(a) مباشر مسموح. (b) مباشر ممنوع (c) غير مباشر مسموح (d). غير مباشر ممنوع

#### 4- البنية البلورية :

بنية البلورية هي عبارة عن تجمع عدد لا نهائي من الوحدات الذرية المتماثلة تتكرر بشكل دوري ومنتظم (اذا كانت مثالية) في جميع

اتجاهات الفضاء. تتميز البنية البلورية باستقرارها غالبا وامتلاكها لكثافة أصغرية وهذا التميز يحقق المعالم التالية: [1]

1- تحافظ على الاعتدال الكهربائي في البلور.

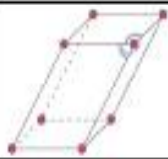




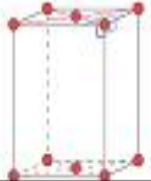



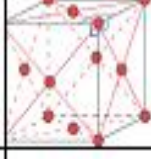
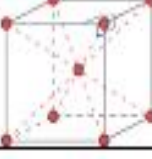
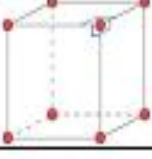

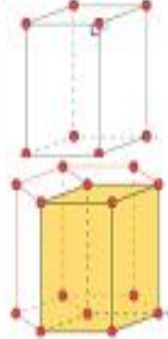
2- تكون جميع الروابط بين الذرات محددة.

3- تبقى شدة التدافع الناجمة عن (أيون - أيون) أصغرية.

4- تجتمع الذرات معا لتحتل حجما أصغريا.

## عموميات حول أشباه النواق

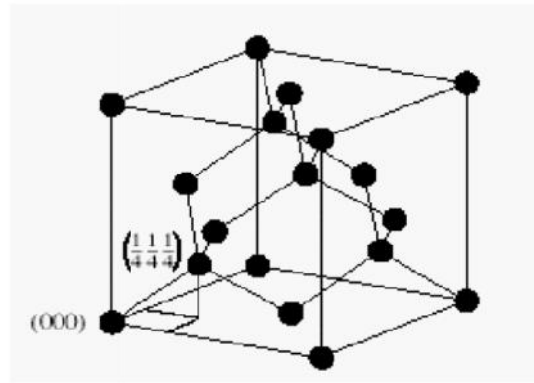
الجدول (1-I): جدول يمثل مختلف أنواع بنيات المادة [1]

ثوابت خلية الوحدة الاصطلاحية	مركزة الأوجه Face centrée	مركزة الجسم Corps centrée	مركزة القاعدة Base centrée	بسيطة Simple	الفئة البلورية
$a \neq b \neq c$ $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq \pi/2$					ثلاثية الميل Triclinique
$a \neq b \neq c$ $\alpha = \gamma = \pi/2 \neq \beta$					أحادية الميل Monoclinique
$a \neq b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = \pi/2$					المعينية للمستقيمة Orthorhombique
$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = \pi/2$					الرباعية Quadratique
$a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma = \pi/2$					المكعبة Cubique
$a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma \neq \pi/2, < 120^\circ$					ثلاثية متساوية الأحرف Rhomboédrique
$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = \pi/2, \gamma = 120^\circ$					السداسية Hexagonal



أ- البنية الماسية:

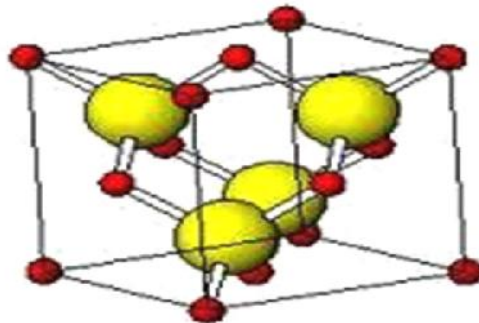
الماس هو كربون متبلور ينتمي الى النظام المكعب متمركز الأوجه والوحدة البنائية الأساسية (القاعدة) المرافقة لكل نقطة في شبكيته تتكون من ذرتي كربون احدائيهما هي : (000) و ( $1/4, 1/4, 1/4$ ) ويحيط بكل ذرة أربع ذرات هي أقرب جيرانها (عدد التناسق)، وتحوي الوحدة ثماني ذرات حقيقية .ويمكن اعتبار التركيب الماسي مكونا من شبكتين فرعيتين من نوع المكعب متمركز الأوجه (CFC)، ثم تداخلت هاتان الشبكتان الفرعيتان بإزاحة قدرها  $1/4$  طول قطر المكعب [7].



الشكل (4-I) يوضح البنية الماسية

ب- بنية كبريت الزنك ( Zinc blend )

إن بنية بلورة كبريت الزنك تشبه تماما بنية بلورة الماس إلا أنها تختلف عنها في أنها تتكون من نوعين من الذرات تشغل الاولى (الزنك) المواقع ((Zn)) (0.0.0) والثانية (الكبريت (S)) المواقع ( $1/4, 1/4, 1/4$ ). [1]

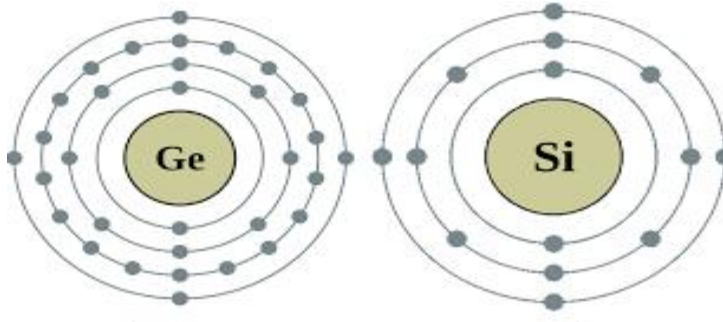


الشكل (5-I) : يبين بنية كبريت الزنك

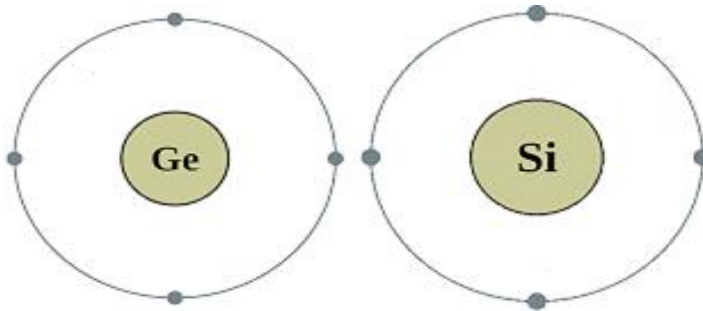
5 - الجرمانيوم والسليسيوم

5 - 1 تعريف :

يعد الجرمانيوم والسليسيوم من أهم أنواع أنصاف النواقل التي تستخدم في الاجهزة الالكترونية وهما عنصران من عناصر  
 وعة الرابعة من الجدول الدوري أي أن الغلاف الخارجي في كل منهما يحتوي اربعة الكترونات . وتحتوي ذرة الجرمانيوم على نواة  
 بها 32 بروتون يحيط بها 32 الكترون تتوزع بنمط ثابت تملأ الأغشية المحيطة بالنواة . ونفس الشيء بالنسبة لذرة السليسيوم فهي  
 مكونة من نواة بها 14 بروتون يحيط بها 14 الكترون .  
 وتكون الروابط بين هذه الذرات في البلورة روابط تساهمية حيث ان كل ذرة ن تكون محاطة بأربعة ذرات وتشارك الاربعة هذه في  
 ملئ الغلاف الخارجي للذرة الوسطية وذلك بمساهمة الالكترون من كل واحد منه . فعند درجات الحرارة المنخفضة يعتبر  
 السليسيوم والجرمانيوم عازلين بالرغم من تكافؤهما الرباعي [3].



الشكل (6-I) : التركيب الذري للسليسيوم والجرمانيوم .

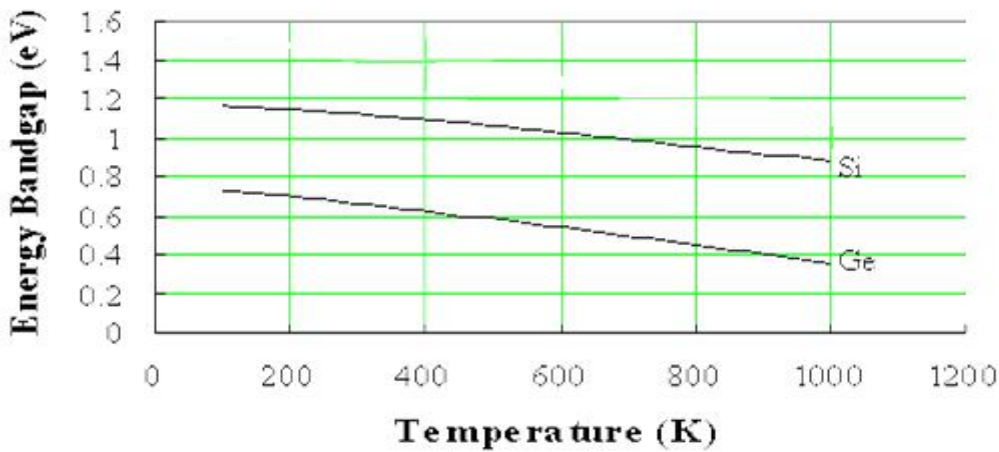


الشكل (7-I) : الأغلفة الخارجية لذرتي للسليسيوم والجرمانيوم .

5- 2 خصائص السليسيوم والجرمانيوم

الجدول (2-I): جدول يمثل خصائص السليسيوم والجرمانيوم [17].

الخصائص	السليسيوم	الجرمانيوم
البنية	ماسية	ماسية
الكثافة (g/cm <sup>3</sup> )	2.328	5.3276
N <sub>C</sub> (cm <sup>-3</sup> )	2.8×10 <sup>19</sup>	1.04×10 <sup>19</sup>
N <sub>V</sub> (cm <sup>-3</sup> )	1.04×10 <sup>19</sup>	6×10 <sup>18</sup>
E <sub>g</sub> (ev)	1.12	0.66
قرينة الانكسار	3.44	3.97
ثابت الشبكة (Å <sup>o</sup> )	5.43	5.66
ثابت العزل	11.9	16



الشكل (8-I) : يبين تأثير فجوة الطاقة على درجة الحرارة للسليسيوم والجرمانيوم [17].

لقد تم استخدام المواد النصف ناقلة في صناعة الترانزستور و النبائط ذات الطرفين كالمقومات والثنائيات الضوئية وغيرها. لما تتميز به هذه المواد من خصائص فريدة عند توصيلها للكهرباء، فهي تختلف عن المواد الموصلة للكهرباء بإمكانية التحكم في درجة توصيلها من خلال إضافة شوائب من عناصر محددة في بنيتها البلورية. وتتوفر المواد النصف ناقلة على الأرض إما على شكل عناصر فيزيائية خالصة تقع في العمود الرابع من الجدول الدوري وهي عنصر الجرمانيوم و السليسيوم، أو من مواد مركبة ناتجة عن خلط بعض عناصر العمود الثالث كالبور والألمنيوم والأنديموم والكالسيوم مع عناصر العمود الخامس كالفوسفور والزرنيخ (الأرسنيد) منتجة مواد نصف ناقلة كفسفيد الأنديموم وأرسنيد الغاليوم وغيرها من المركبات التي قد تتفوق على العناصر النصف ناقلة الخالصة في بعض خصائصها الكهربائية. لقد كان الجرمانيوم هو العنصر المستخدم في صناعة الترانزستورات في بداية عهدها لم تكن تعمل بشكل موثوق إلا عند درجات الحرارة التي تقل عن أربعين درجة مئوية وذلك بسبب حساسية الجرمانيوم العالية للحرارة، والتي تعود لتدني قيمة فجوة الطاقة (energy gap) بين نطاقي التكافؤ والتوصيل فيها والتي يبلغ 0.7 إلكترون فولت.

وفي عام 1954م تمكن المهندسون من استخدام السليسيوم في صناعة الترانزستور بعد التغلب على بعض المشاكل التصنيعية. ويتميز السليسيوم على الجرمانيوم بكبر قيمة فجوة الطاقة فيه حيث تبلغ 1.1 إلكترون فولت، مما يعطيه ثباتا كبيرا في خصائصه الكهربائية يمتد على نطاق واسع من درجات الحرارة. ومن حسنات السليسيوم أن مادته الخام وهي ثاني أكسيد السليسيوم ( $SiO_2$ ) متوفرة بكميات كبيرة في الطبيعة خاصة في رمال الصحراء. وفضلاً عن ذلك فإن السليسيوم في الوقت الحاضر هو أرخص المواد النصف ناقلة الداخلة في النبائط مقارنة بالمواد النصف ناقلة الأخرى [8] [4].

### الثنائيات الكاشفة للضوء (Photodiodes)

يقوم الثنائي الكاشف للضوء بعكس مهمة الثنائي الباعث للضوء حيث يقوم وهو في وضع الانحياز العكسي بتحويل الضوء الساقط عليه إلى تيار كهربائي تتناسب قيمته طردياً مع شدة الضوء الساقط. وتتلخص آلية عمل هذا الثنائي على النحو التالي: فعندما يسقط فوتون ضمن المنطقة المنضبة وتكون طاقته أكبر من عرض فجوة النطاق للمادة نصف ناقلة المستخدمة فإنه سيحرر إلكترون من أحد الذرات ويضعه في نطاق التوصيل مخلفاً وراءه فجوة في نطاق التكافؤ.

## عموميات حول أشباه النواقل

وبسبب وجود مجال كهربائي عالي في المنطقة المنضبة بسبب الانحياز العكسي فإن هذا المجال سيسحب الإلكترون باتجاه القطب الموجب والفجوة باتجاه القطب السالب فيسري بذلك تيار كهربائي في الدائرة الخارجية تتناسب قيمته مع عدد فوتونات الضوء الساقطة على الثنائي . ولا يشترط لعمل هذا الثنائي وجود مواد نصف ناقلة بفجوة نطاق مباشرة كما هو الحال في الباعث



الضوئي بل يمكن استخدام السليسيوم والجرمانيوم كمواد لتصنيع هذا الثنائي، حيث يستجيب ثنائي السليسيوم للضوء بطول موجة تمتد من 190 نانومتر إلى 1100 نانومتر بينما يستجيب ثنائي الجرمانيوم للضوء بطول موجة تمتد من 400 نانومتر إلى 1700 نانومتر. وكلاهما يغطي طيف الجزء المرئي من الضوء إلا أن ثنائي الجرمانيوم يغطي كذلك الطيف تحت الأحمر الذي تعمل عنده أنظمة الاتصالات الضوئية.

لكي يتمكن الثنائي من جمع أكبر كمية من الضوء ضمن المنطقة المنضبة فإنه يتم تصنيعه بحيث يوجد منطقة غير مطعممة بين المنطقة الموجبة والسالبة لتغطي بذلك المنطقة المنضبة جزء من المنطقة الموجبة والسالبة وكامل المنطقة غير المطعممة ويسمى الثنائي الضوئي الناتج بثنائي (PIN).

تستخدم الثنائيات الكاشفة للضوء في تطبيقات كثيرة كما في مستقبلات أنظمة الاتصالات الضوئية ومستقبلات أنظمة التحكم عن بعد وفي الأقراص المدججة وغيرها. ويمكن أن يستخدم هذا الثنائي في حالة غياب الانحياز لتحويل الطاقة الشمسية إلى طاقة كهربائية بما يسمى الخلايا الشمسية، وإلى جانب هذه الثنائيات الرئيسية يوجد أنواع أخرى من الثنائيات تستخدم في تطبيقات مختلفة منها الثنائيات النفقية (Tunnel Diodes) التي اخترعها الياباني ليونا إيساكي في عام 1958م. وتتميز هذه الثنائيات بوجود ظاهرة المقاومة السلبية في منحنى التيار مع الجهد وهي في حالة الانحياز الأمامي حيث ينقص التيار مع زيادة الجهد في منطقة معينة على المنحنى ويتم تصنيع هذه الثنائيات من خلال زيادة تركيز التطعيم بشكل كبير في الوصلة. وتستغل ظاهرة المقاومة السلبية في هذه الثنائيات لتصميم المذبذبات ذات الترددات العالية التي تزيد عن 300 ميغا هيرتز.

## عموميات حول أشباه النواقل

وتظهر المقاومة السلبية أيضا في ثنائي آخر وهو ثنائي قن (Gunn diode) نسبة لمخترعه الإنكليزي جون قن (John Gunn) في عام 1963م. والذي يختلف عن باقي الثنائيات بأنه مصنع من مادة نصف ناقلة مطعمة بنوع واحد من التطعيم وهو النوع السالب، وعند تسليط جهد كهربائي مباشر على هذا الثنائي فإنه يبدأ بالعمل كمذبذب تتحد قيمة تردده من طول الثنائي ونوع المادة المصنع منها والتي غالبا ما تكون زرنيخيد الجاليوم، ويستخدم هذا الثنائي كمذبذب في نطاق الموجات الدقيقة أو الميكروويف [4].

### الثنائيات الباعثة للضوء وثنائيات الليزر (Light Emitting Diodes & laser diodes)

تم تصنيع أول ثنائي باعث للضوء المرئي على يد العالم الأمريكي نك هولونياك (Nick Holonyak) وذلك في عام 1962م. فعند تسليط جهد بانحياز أمامي على وصلة موجب - سالب فإن تيارا كهربائيا سيسري بها، وتكون الإلكترونات التي تتحرك بعكس اتجاه التيار أي باتجاه المنطقة المنضبة هي الحاملات الرئيسية لهذا التيار في المنطقة السالبة. بينما تكون الفجوات التي تتحرك بنفس اتجاه التيار أي باتجاه المنطقة المنضبة أيضا هي الحاملات الرئيسية لهذا التيار في المنطقة الموجبة. وعندما تلتقي الإلكترونات مع الفجوات في داخل المنطقة المنضبة فإن عملية اتحاد تتم بينهما وتحرر كمية من الطاقة تمثل الفرق بين مستويات الطاقة للإلكترونات الموجودة في نطاق التوصيل (conduction band) ومستويات الطاقة للفجوات الموجودة في نطاق التكافؤ (valence band).

إن شكل الطاقة المتحررة يتحدد من طبيعة المادة النصف ناقلة التي يتكون منها الثنائي ففي عناصر السليسيوم والجرمانيوم تضيع هذه الطاقة على شكل حرارة تعمل على تسخين الثنائي وذلك بسبب أن فجوة النطاق لهذه المواد من النوع غير المباشر (indirect bandgap). ويمكن الاستفادة من هذه الطاقة المتحررة لتنبعث على شكل ضوء في حالة استخدام مواد نصف ناقلة مركبة من عناصر العاود الثالث والخامس في الجدول الدوري حيث أن لها فجوة نطاق من النوع المباشر (direct bandgap). ومن خلال التحكم بنسب العناصر المكونة للمادة نصف ناقلة يمكن تحديد طول الموجة للضوء المنبعث من هذه الثنائيات، والذي يقع في الغالب في الجزء المرئي وما تحت الأحمر من الطيف الضوئي. فعلى سبيل المثال فإن زرنيخ الغاليوم والألمنيوم (AlGaAs) يشع اللون الأحمر والأشعة تحت الحمراء غير المرئية، ويشع فوسفيد الغاليوم والألمنيوم (AlGaP) الضوء الأخضر، ويشع فوسفيد الزرنيخ والغاليوم (GaAsP) الضوء الأصفر والبرتقالي، ويمكن لفوسفيد القاليوم

## عموميات حول أشباه النواق

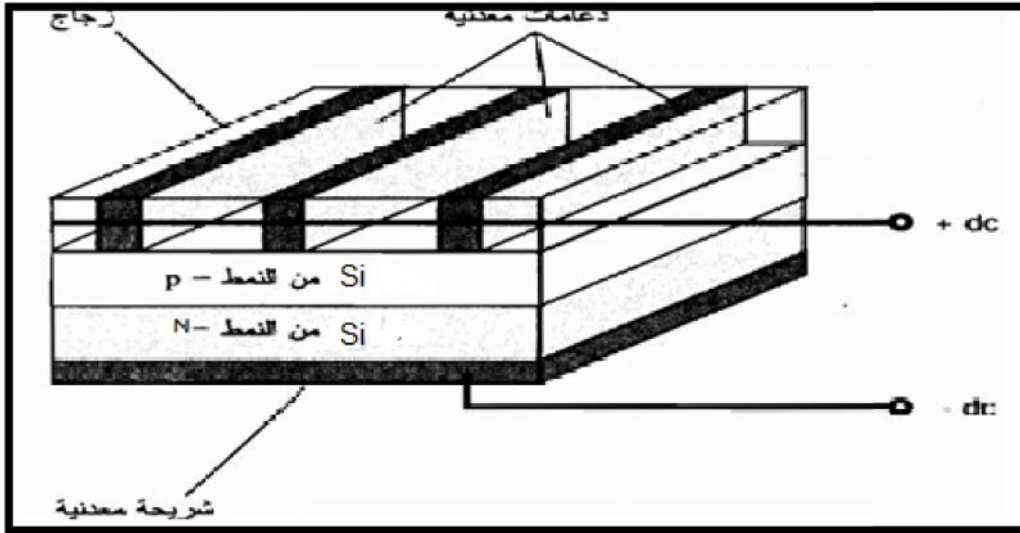
(GaP) أن يشع جميع ألوان الطيف وذلك حسب نسبة مكوناته ويشع نتريد القاليوم والأنديموم (InGaN) الضوء الأزرق. وتستخدم الثنائيات الباعثة للضوء في تطبيقات لا حصر لها كما في أنظمة الاتصالات الضوئية وأجهزة التحكم عن بعد في الأجهزة المنزلية، والتي تستخدم الأشعة تحت الحمراء غير المرئية وكمؤشرات ضوئية لمختلف أنواع الأجهزة الكهربائية وكذلك لأغراض الإنارة الخفيفة.

لا تختلف ثنائيات الليزر عن الثنائيات الباعثة للضوء من حيث أنها تتكون من وصلة موجب- سالب وتستخدم نفس المواد النصف ناقلة وتعمل تحت الانحياز الأمامي. إلا أنه في حالة الليزر يتم وضع الوصلة في داخل فجوة زرينللحصول على ما يسمى بالانبعاث المستثار بدلا من الانبعاث التلقائي في حالة الثنائي الباعث للضوء. ويتميز ضوء الليزر على ضوء الثنائي الباعث للضوء بأن له شعاع عالي التوجيه حيث يكون على مقطع شعاعه ضيق جدا ويسير لمسافات طويلة دون أن يتشتت وكذلك فإن ضوءه عالي النقاء، والذي يعني أن نطاق الترددات التي يشعها أضيق بكثير من تلك التي للثنائي الباعث للضوء. ويستخدم ثنائي الليزر في التطبيقات التي لا يمكن للثنائي الباعث للضوء أن يعمل فيها كما في جميع أنواع الأقراص المدججة وفي أجهزة المساحة وفي الرادارات الضوئية وفي أجهزة تصحيح النظر وغير ذلك من التطبيقات [4].

### الخلايا الكهروضوئية

تستطيع بعض ديودات السليسيوم توليد تيار مستمر بنفسها إذا ارتطمت طاقة كافية من IR أو الضوء المرئي أو UV بوصلات p-n الخاصة بها. يدعى ذلك بالتأثير الكهروضوئي ، وهو مبدأ عمل الخلايا الشمسية [5].

تكون مساحة سطح الوصلة في الخلايا الكهروضوئية (PV كبيرة، وذلك يزيد من كمية الطاقة المرتطمة بالوصلة بعد مرورها عبر الطبقة الرقيقة من المادة ذات النمط P. تنتج خلايا السليسيوم الواحدة 0.6 فولط تقريبا في أشعة الشمس المباشرة تحت شروط الالاحمل (أي عندما لا تكون موصولة بأي جهاز يستهلك تيار منها) . تعتمد الكمية العظمى من التيار الذي تستطيع خلية PV تسليمه على مساحة سطح الوصلة p-n .



الشكل (I-9): رسم مقطعي مبسط لخلية كهرو ضوئية

توصل خلايا السليسيوم الكهرو ضوئية بتشكيلات تسلسلية - تفرعيه لتزود الأجهزة الالكترونية ذات الحالة الصلبة كالراديوهات المحمولة بالقدرة الشمسية. .... الخ.

### ➤ بطاقة تقنية للكربون

الكربون هو عنصر كيميائي رمزه C و عدده الذري 6، ويقع ضمن المجموعة الرابعة عشري الجدول الدوري، ويصنّف الكربون ضمن اللا فلزّات، وهو عنصر رباعي التكافؤ، بحيث أنّ لديه أربع إلكترونات متاحة من أجل تشكيل روابط تساهمية، كما أنّ له القدرة على الارتباط مع عدد من العناصر الأخرى [22].

## - 6 الخصائص الضوئية

عادة يطلق على الكميات الثلاث معامل الامتصاص ومعامل الانكسار الحقيقي  $n$  ومعامل الانكسار التخيلي K اسم الثوابت الضوئية. وهذه تختلف من مادة إلى أخرى تبعاً لاختلاف طبيعتها. [6]

### - 6-1 معامل الامتصاص الضوئي

عندما يمر أو يخترق الضوء جامداً ، فإنه يتفاعل معه ويحدث تبادل طاقي بينهما فيمتص جزء منه.



يخضع الضوء الممتص أثناء عملية الاحتراق إلى قانون بورجر - لامبرت (Bourguer-Lambert). [6]

حيث :

$I_0$  : شدة الضوء الوارد

: معامل الامتصاص

$X$ : المسافة التي قطعها الضوء

$R$ : معامل الانعكاس

$I(X)$  : شدة الضوء الممتص

ويمكن التعبير عن معامل الإمتصاص أيضا بالعلاقة التالية:

## -6- 2 الانعكاسية

يعرف الإنعكاس على أنه النسبة بين شدة الشعاع المنعكس أثناء سقوط حزمة ضوئية ذات طول موجي معين .وشدة الشعاع الوارد

ويعطى بالعلاقات التالية : [6] [10]

حيث :

$I_R$  : شدة الضوء المنعكس

$I_0$  : شدة الضوء الوارد

$R$  : الانعكاسية

إذ أن :

$n$  : قرينة الانكسار

$K$  : معامل التخماد

### - 6 - 3 قرينة الانكسار

تعرف قرينة الانكسار بأنها النسبة بين سرعة الضوء في الفراغ ( $C$ ) وسرعته في الوسط ( $V$ ) وهو الجزء الحقيقي من معامل

الانكسار المركب ( $n$ ) ، ويعبر عنه بالعلاقات التالية : [11]

### - 6 - 4 معامل الخمود

يعرف معامل الخمود بأنه كمية ما تمتصه الكثرونات المادة من طاقة فوتونات الاشعاع الساقط عليها . ويرتبط معامل الخمود بمعامل

الامتصاص بالعلاقات التالية [12] :

: الطولالموجيلللشعاعالساقط

K : الجزء التحليلي لمعامل الإنكسار المركب وفق العلاقة التالية :

### - 6 - 5 ثابت العزل

يمثل ثابت العزل قابلية المادة على الاستقطاب ، إذ يمثل استجابة المادة لترددات مختلفة وبسلوك معقد، وعند الترددات البصرية الممثلة بالموجات الضوئية تكون الاستقطابية الالكترونية هي السائدة فقط على بقية أنواع الاستقطاب الأخرى، نعب عن ثابت العزل المركب بالعلاقة التالية [13]:

إذ أن هيثابتالعزلالمركب

1 و 2 تمثلالجزءالحقيقيوالتحليليعلىالترتيب .

ويمكن حساب ثابت العزل بدلالة معامل الإنكسار، إذ يرتبط ثابت العزل المركب بمعامل الإنكسار المركب بالعلاقة التالية :

أي

اذن

### - 6 - 6 أهمية معرفة الخصائص الضوئية

تعد دراسة الخواص البصرية لشبه الموصل من المصادر المهمة جدا في اعطاء معلومات حول تركيب الحزمة الالكترونية والعيوب والترتيب بالاضافة الى فجوة الطاقة وتردد الأنماط البصرية والسماحية بالنتيجة تؤدي هذه المعلومات الى تطبيقات صناعية ومختبرية. [23]

---

[1] علم البلورات والأشعة السينية ، أ.د نعيمة عبد القادر أحمد و أ.د محمد أمين سليمان ، دار الفكر العربي . الطبعة الأولى .2005.

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

[3] مقالة في أشباه الموصلات ،لأسامة العشي،ترجمة للفصل الأول من كتاب "دوائر الترانستور" للمؤلف مالفيينو (الطبعة الثانية)

[4] الإلكترونيات ،الدكتور منصور العبادي ، جامعة العلوم والتكنولوجيا الأردنية .

[5] كشف أسرار الفيزياء لستان جيليسكو، ترجمة بسلام صقر العقباني ،الدار العربية للعلوم ناشرونو كلمة، الطبعة الأولى .2009.

[6] فيزياء الجوامد (الجزء الثالث)، د. عبد الفتاح الشاذلي ،جامعة عين شمس .

[7] فيزياء الحالة الصلبة، د. صبحي الراوي ، د. شاكر جابر شاكر ، د. يوسف مولود حسن. جامعة الموصل(1990).

[8] الكترونيات اشباه الموصلات ،عامر عباس ابراهيم ،هناؤ متي عبد الاحد ،الجامعة المستنصرية (1990).

[9]S. M. Sze, "Semiconductors Devises Physics and Technology", Translated to Arabic by F. G. Hayaty and H. A. Ahmed, Baghdad, (1990)

[10] L. Chopra, "Thin Film Phenomena " , Mc. Graw-Hill, New York, (1985).

[11] S. O. Kasap, "Principles of Electronic Materials and Devices", 2<sup>nd</sup>ed., McGraw-Hill, New York, (2002) .

[12]H. U. Lgwe, O. E. Ekpe and E. I. Ugwu, "Eeffect of thermal Annealing on the optical properties of Titaniumoxidethin films prepared by chemical Bath DepositionTechique", J. Applied science , Engineering and technology, vol. 2, P. 447 , (2010) .

[13]C. Hamaguchi "Basic Semiconductorphysics" Book,2<sup>nd</sup>Edition ،Springer,(2001).

- 
- [14] J. Tauc, "Amorphous and liquid Semiconductors", Plenum press, London, N.Y., (1974) .
- [15] T. L. Floyd, "Electronic Devices, Conventional Current Version ", 7<sup>th</sup> edition, Pearson Prentice Hall, (2005) .
- [16] A. Madan, and M. P. Show, "The physics and Application of Amorphous semiconductor", Academic Press, Inc., (1986) .
- [17] TARARBITA Abderahmane ,Rapport "Etude sur les différentes propriétés des semi-conducteurs (Si, Ge, SiC, GaAs, NGe)," Université Mouloud Mammeri de Tizi-Ouzou.
- [18] Fahrenbruch A. L. and Bube R. H. Led "Fundamentals of Solar Cells", Academic, New York, (1993).
- [19] R. A. Levy, "Principles of Solid State Physics", 5<sup>th</sup> edition, New York (1972) .
- [20] B. G. Streeman, "Solid state Electronic Devices ", 2<sup>nd</sup> edition, Prentice-Hall, Inc., Englewood cliffs, N.J . (1980).
- [21] J. Bardeen, F. J. Blatt, and L. H. Hall, "Processes Photoconductivity Conference", Atlantic City, Wiley, New York, (1956).
- [22] Chemistry Operations (December 15, 2003). "Carbone". Los Alamos National Laboratory.
- [23] C. Kittel, "Introduction to solid state physics", 6<sup>th</sup> ed, Wiley, (1986) .

التابعة

نظرية

### مقدمة

البرامج التي تعتمد على الحساب من البدء تعتمد على حل معادلة شرودينغر. هاته البرامج تسمح لنا بإيجاد الخصائص الفيزيائية والكيميائية للنظام وكذلك بنيته الالكترونية، وطاقة تأيينه أو طاقة ذوبانه، حل معادلة شرودينغر للذرات متعددة الالكترونات معقدة، تبسيطها إلى نظام معادلات أحادي الالكترونات يسهل حلها عدديا، بفضل العديد من التقريبات مثل تقريب هارثري فوك وتقريب نظرية الكثافة التابعة .

### II-1 معادلة شرودينغر للبلورة

تعتبر معادلة شرودينغر هي منطلق كل الدراسات الكمية للنظام الكوانتي للبلورات، يوصف نظام الجسيمات

(أيونات +الكترونات) المتفاعلة بمعادلة شرودينغر التالية :

$$H\psi =$$

H : هاملتونيان

: دالة الموجة

E : طاقة النظام

الهاملتون الكلي للجسملة يكون مؤلف من الطاقة الحركية لكل الجسيمات وطاقة التفاعل فيما بينها وعند الاقتضاء طاقة التفاعل مع الوسط الخارجي ، عند غياب الحقل الخارجي يكتب الهاملتون:

أين

$T_e$ : الطاقة الحركية للإلكترونات

$T_N$ : الطاقة الحركية للأنوية

$V_{ee}$ : طاقة تفاعل الكترون- الكترون

$V_{eN}$ : طاقة تفاعل الكترون- نواة

$V_{NN}$ : طاقة تفاعل نواة- نواة

المعاملات  $i$  و  $j$  خاصة بالإلكترونات .

المعاملات  $\alpha$  خاصة بالانوية .

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

المسافة النواة والالكترون  $i$   $|\vec{r}_i - \vec{R}_\alpha|$  .

المسافة الالكترون  $i$  والالكترون  $j$   $|\vec{r}_i - \vec{r}_j|$  .

مؤثر لابلاس  $\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$  .



في حالة السكون معادلة شرودينغر تكون مستقلة عن الزمن .

بحيث تمثل دالة الموجة وتتعلق بكل احداثيات الجسيمات ( الكترونات + أنوية )  $E$  تمثل القيم الذاتية الموافقة .

معادلة شرودينغر لـ  $N$  ذرة تحوي  $(Z+1)N$  متغير، مثلا عندما  $Z=14$  في سم<sup>3</sup> يصبح لدينا  $2.10^{24}$  مجهول تقريبا ، أي أن معادلة شرودينغر بهذه الكيفية مستحيلة الحل ، لذلك وضعت عدة تقريبات لتبسيط هذه المعادلة نذكر منها [1].

### - 2-تقريب هاتري - فوك

في عام 1928 كان هاتري أول من اقترح تقريب حيث افترض أن كل الكترون يتحرك بشكل مستقل في حقل متوسط الذي تنتجه الالكترونات والنوى الأخرى، ومنه يتغير المشكل لدينا من عدد كبير من الالكترونات الى الكترون وحيد، وبالتالي يكتب الهاملتونية للحملة كالتالي [2] [10] :

مع أن:

$U_i(r_i)$  يمثل الطاقة الكامنة للالكترون  $i$  في حقل الأنوية  $K$ .

$V_i(r_i)$  يمثل الكمون الفعال لهاتريك.

$R_k^0$  يمثل موضع الأنوية.

وتكتب المعادلة (2-5) على الشكل:

تكتب دالة الموجة الكلية للحملة كجاء دوال الحالة لكل الالكترونات على الشكل:

وتكتب الطاقة الكلية للحملة كمجموع الطاقات الموافقة لكل حالة الكترونية :

اذن معادلة شرودينغر لالالكترونات تصبح :

حسن فوك تقريب هرتري وذلك بادخال مبدأ السبين لنظام الالكترونات بحيث توجد  $N!$  احتمال لوضع  $N$  الالكترون على  $N$  موضع [11].

مثلا أول امكانية هي :

وثاني امكانية هي :

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

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

$$\text{والمعامل } \frac{1}{N!} \text{ هو ثابت التعامد.}$$

ومن بين الصعوبات التي تصادف حساب بنية عصابات الطاقة هو تحديد الكمون داخل البلورة.

### II-3 نظرية الكثافة التابعية (DFT)

تسمح لنا نظرية الكثافة التابعية (*Density Functional Theory*) بتحديد خصائص الحالة الدنيا (مثل الطاقة

الكلية) للحملة وذلك من خلال توابع كثافة الإلكترونات. والمفهوم الاساسي لهذه النظرية هو أنه يمكن التعبير عن طاقة نظام

الكروني بدالة كثافته [4]. ظهرت الفكرة الاساسية لهذه النظرية عام 1927 على يد العالمان توماس و فيرمي ، حيث تعتمد طريقة

توماس فيرمي على نموذج احصائي لتقريب التوزيع الالكروني حول الذرات. هذا النموذج أعطى صورة عن امكانية الاعتماد على

الكثافة الالكرونية لحساب الطاقة الحركية . لكن هذا النموذج أعطى نتائج ضعيفة لانهما اهملا الارتباط بين الالكترونات [2].

في الحسابات العددية لا يمكن تطبيق نظرية الكثافة التابعية الا بالرجوع إلى عدد من التقريبات : تقريب الكثافة المحلية (LDA)

أوالتقريب الذي استعملناه في حساباتنا وهو تقريب التدرج المعمم (GGA) [4].

### - 3-1 نظرية هوهانبرغ - كوهن :

أخذ هوهانبرغ - كوهن [13]، الطاقة الكلية لنظام الإلكترونات المتفاعلة في كمون خارجي (كمون الأنوية) هو دالية

وحيدة لكثافة الإلكترونات ( $r$ ) أي:

حيث قاما ببرهان أن الكثافة التي تعطي الحد الأدنى هي كثافة الحالة الأساسية للجسيمات بالضبط، وكل خصائص الحالة

الأساسية هي دالية لكثافة الإلكترونات كالتالي:

بحيث يعبر عن دالية الطاقة بـ

بحيث:

بحيث  $U$  و  $T$  كمون تفاعل والطاقة الحركية للإلكترونات على الترتيب.

باستخدام تقريب هرتري نجد:

حيث  $G(\rho)$  تمثل الطاقة الحركية للإلكترونات زائد الفرق بين طاقة التفاعل الحقيقية وطاقة تفاعل هرتري، كما أثبت

هوهنبارغ-كهون أن كثافة الحالة الأساسية هي كثافة الحد الأدنى  $F_{HK}$ .

### - 3-2 معادلات كوهان-شام:

وضع كل من كوهان و شام في عام 1965م، كثافة الإلكترونات كمجموع كثافة الجسيمات مع استخدام مبدأ التغيرات

للحصول على طاقة الحالة الأساسية. بحيث تعطى كثافة احتمال تواجد الشحنة كما يلي [8] [9]:

تابع الطاقة الكلية للإلكترونات  $E_c$  و  $E_{H.F}$  طاقة هرتري - فوك تعطى بـ :

$T$ : الطاقة الحركية للجسيمات في حالة التفاعل.

$V$ : كمون التفاعل إلكترون - إلكترون.

$T_0$ : الطاقة الحركية للجسيمات في حالة التفاعل.

$V_H$ : كمون التفاعل إلكترون - إلكترون.

$V_x$ : كمون تبادل الإلكترونات والذي يعرف بـ :

$V_C$ : كمون ارتباط الإلكترونات والذي يعرف بـ :

إذن تابع كثافة الحد الأدنى  $F_{H,K}$  يكون من الشكل :

$$V_{xc} = V_x + V_C \text{ هو كمون تبادل - ارتباط.}$$

أي تابع الطاقة الكلية هو:

إذن معادلة كوهان - شام هي:

(T +

### -3-3- حلول معادلات كوهان - شام:

ترتكز مختلف طرق حساب بنية عصابات الطاقة مبدئياً على DFT وترتب حسب استخدامها للكثافة ، الكمون

ومدارات كوهان- شام ، طريقة الموجة المستوية المتزايدة خطياً FP-LAPW تعتمد على مدارات كوهان-شام .

وبالتالي دالة الموجة الأساسية هي [8] :

بحيث أن  $C_i$  هي معاملات النشر لدالة الموجة.

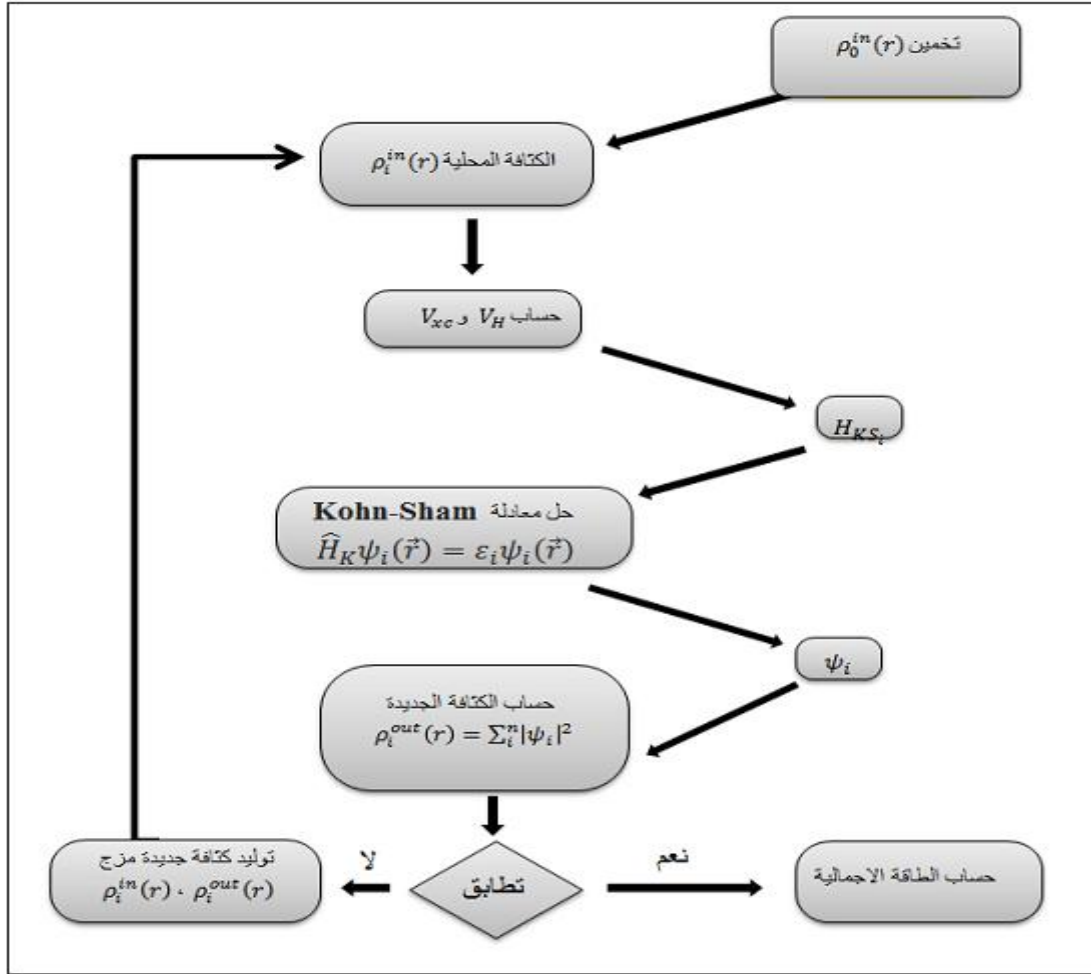
عمليا لحساب المعاملات  $C_i$  يجب حل المعادلات الأساسية بطريقة الدورات التكرارية الممثلة في الشكل (1.II) بحيث تؤخذ

طاقة النظام أصغرية :

حلول معادلة كوهان - شام هي :

H: هاميلتونكوهان - شام

O: مصفوفة التغطية



الشكل (II-1) مخطط لخوارزمية حلول معادلات كون - شام [3]

#### 4- تقريبات الكثافة المحلية والتدرج المعمم :

##### تقريب الكثافة المحلية LDA

الصعوبة الاساسية في تطور صيغة كون شام تكمن في طاقة تباديل - تلازم . التقارب المحلي تعتبر الكثافة كأنها محلية

دائمة وبه نستطيع أن نعرف طاقة تباديل - تلازم بالطريقة التالية [7]:

أين  $\epsilon_{xc}$  هي كثافة طاقة تباديل - تلازم .

هذا التقارب يجري على الغاز المتجانس الكترونيا. وتعطى طاقة تبادل - تلازم بالعلاقة التالية :

نستطيع ان نستعمل طاقة التبادل المقترحة من طرف ديراك :

✓ المشكلة في تقريب الكثافة المحلية هو انها غير مناسبة لكتابة أنظمة تتكون من توضع مبعثر للإلكترونات من أجل ذلك

نفضل في هذه الحالة تقريب التدرج المعمم (GGA) [12].

### تقريب التدرج المعمم GGA

ان الكثافة الالكترونية لنظام ما ليست وحيدة الشكل ، ويمكن ان تتغير بسرعة في الفضاء مثلا عندما نمرر ذرة الى أخرى

في الجزئيء في هذه الحالة تقريب LDA لا يكون صالحا للحساب . اذن يمكن ان نجري تغييرا بسيطا على هذا التقريب بالتعبير عن

دالة طاقة تبادل - تلازم باستعمال الكثافة الالكترونية وتبدلها في نفس الوقت .

اذن نكتب طاقة تبادل - تلازم بالعلاقة التالية [7]:

حيث  $\epsilon_{XC}^{GGA}$  كثافة طاقة تبادل التلازم.

## II-5 الكمونات الزائفة:

ان الحالة الاساسية الالكترونية لنظام ما يمكن ان تكون موصوفة بعدة طرق مختلفة ، لكن المشكل المطروح هو أن

الحسابات تصبح معقدة شيئا فشيئا مع تزايد عدد وحجم الذرات بسبب زيادة عدد الالكترونات . وفي أغلب الاحيان فان



## نظرية الكثافة التابعية

الكثرونات التكافؤ هي التي تتدخل في خصوصية الانظمة المدروسة . مثلا الروابط الكيميائية الكثرونات القلب ليست معنية بها فهي معزولة داخل الذرة .

هذا الاعتبار يسمح بتجميعها مع الأنوية لتأليف أيونات صلبة تسمى بالقلوب الذرية . كذلك بوجود هذا التقريب يقل عدد الالكثرونات المدروسة مقارنة بالعدد الحقيقي لذلك تصبح قابلة للحساب .

ان التفاعل بين الكثرونات التفاعل والقلوب الذرية الايونية هي ممثلة بالكمون الكاذب . الكمون الكاذب يجب أن يكون محصلا عن طريق الحسابات على الذرة . كذلك يجب أن نكون قادرين على استعمال نفس الكمونات الكاذبة الذرية في عدة ظروف كيميائية مختلفة [7] .

### 6-تقديم برنامج(SIESTA)المبادرة الاسبانية للمحاكاة الالكترونية مع آلاف الذرات )

(Spanish Initiative for Electronic Simulation with Thousands of Atoms)

هو قانون لحساب من البدء البنية الالكترونية ومحاكاة حركية الجزيء لدراسة المواد الصلبة والجزيئات . ولقد استعملت نسخة مكتوبة بالفور ترون 90[5] .

البرنامج يسمح بالحصول على :

- الطاقة العامة للنظام مع المساهمات لمختلف الحدود .
- القوى الممارسة على الذرات.
- شدة المعوقات .
- الكثافة الالكترونية .
- اللحظة ثنائية القطب.
- التحليل للكثافة الالكترونية ( الموقع ، المدار ،... الخ).

✓ خلاصة

من خلال ما تطرقنا إليه في هذا الفصل نجد أنه لدراسة أي نظام نحن بحاجة لاستخدام نظريات وتقريبات لتسهيل وتبسيط طريقة الدراسة . وبرامج المحاكاة المعتمدة تستند لهذه النظريات ومن ابرز هذه البرامج برنامج SIESTA . وهو البرنامج الذي استخدمناه في محاكاة البلورات المدروسة في الفصل التالي وهي بلورات (Si.Ge.SiC.GeC.SiGe).

- 
- [1] . السعدي ،مساهمة في دراسة الخصائص الفيزيائية  $X_2GdIn(X=Au,Ag,Cu)$  سطيف،2013 .
- [2] . عميرات ، دراسة الخصائص المغناطيسية لمركب  $Ni_2MnSi$  بواسطة المبادئ الأولية . 2015
- [3] . حساني ، دراسة الخصائص الديناميكية لمركب  $VH_2$  بواسطة المبادئ الأولية . 2015
- [4] حساب من البدء لبنية بعض المواد وخواصها بإستخدام الكمون الزائف ، ع.بايزيد و ف. صائم الدهر،مجلة جامعة دمشق للعلوم الأساسية،المجلد 21 .
- [5]S.MAHTOOUT , Théorie et calcul des propriétés physiques des clusters , Université A/Mira de Bejaia,2007.
- [6]XANES :approche monoélectctronique Delphine cabart.Aussois,juin2006
- [7]CRISTINA-ELENA SPOREA ,Structures et propriétés d'agrégats de silicium dopés avec des alcalins, l'UNIVERSITE CLAUDE BERNARD - LYON1,2007.
- [8]J.A.Pope et al , Kohn-Shamdensity-functionaltheorywithin a finite basis set, 14 Sep1992.
- [9]W.TIDJEDIT ,Propriétés structurales électroniques,magnéto-optiques et stabilité. Structurale des semi-métaux magnétiques, Université de Tlemcen,2012.
- [10]D.R .Hartree ,Proc. Cambridge philos.Soc.24(1928)89.
- [11]V.Fock,Z.Phys.61,126(1930)795.
- [12]M . O. « Etude par la Théorie de la Fonctionnelle de la Densité des propriétés électroniques et magnétiques de complexes de fer.Application aux systèmes de types Catalase et Fer-Soufre» ; Université Joseph Fourier ;2007.
- [13]P.Kohenberg and W. Kohn , Phys. Rev.136 (1964) B864.



## مقدمة

ستتطرق في هذا الفصل إلى نتائج التي توصلنا إليها من خلال محاكاة بلورات (Si, Ge, SiC, GeC, SiGe)، ومناقشة مختلف خصائصها الضوئية (معامل الامتصاص، قرينة الانكسار، الانعكاسية) بالإضافة لبنية عصابات الطاقة لهذه العناصر.

### 1.III. تفاصيل الحساب

في هذا العمل بنية كل من بلورتي Si و Ge هي بنية الماس أما بنية بلورات SiC, GeC و SiGe فهي بنية كبريت الزنك. والبرنامج المستعمل لحساب الخصائص الضوئية وبنية عصابات الطاقة هو برنامج siesta.3، كذلك استعملنا نظرية الكثافة التابعية DFT وتقريب التدرج المعمم (GGA) كما ذكرنا سابقا. أما باقي تفاصيل الحساب فهي ممثلة في الجدول التالي:

الجدول (1.III): جدول يوضح مختلف معطيات الحساب

SiGe	GeC	SiC	Ge	Si	
2	2	2	1	1	عدد الأنواع الكيميائية
2	2	2	2	2	عدد الذرات
Si 14 Ge 32	Ge 32 C 6	Si 14 C 6	32	14	العدد الذري لكل بلورة
Si $\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$ Ge $\begin{pmatrix} 1 \\ 4 \\ 1 \\ 4 \\ 1 \\ 4 \\ 1 \\ 4 \end{pmatrix}$	Ge $\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$ C $\begin{pmatrix} 1 \\ 4 \\ 1 \\ 4 \\ 1 \\ 4 \\ 1 \\ 4 \end{pmatrix}$	Si $\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$ C $\begin{pmatrix} 1 \\ 4 \\ 1 \\ 4 \\ 1 \\ 4 \\ 1 \\ 4 \end{pmatrix}$	Ge(1) $\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$ Ge(2) $\begin{pmatrix} 1 \\ 4 \\ 1 \\ 4 \\ 1 \\ 4 \\ 1 \\ 4 \end{pmatrix}$	Si(1) $\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$ Si(2) $\begin{pmatrix} 1 \\ 4 \\ 1 \\ 4 \\ 1 \\ 4 \\ 1 \\ 4 \end{pmatrix}$	مواقع الذرات

5.55	4.61	4.36	5.66	5.43	ثابت الشبكة ( $A^\circ$ )
30 0 من					مجال الحساب (eV)

### 2.III النتائج الخاصة بالطاقة

➤ طاقة الربط  $E_{coh}$  :

تعرف طاقة الربط فيزيائيا على أنها الفرق بين متوسط طاقة الذرات الصلبة  $E_{tot}$  (لاسيما البلورة) وطاقة الذرات الحرة  $E_{at}$ .

وتحسب بالعلاقة التالية :

حيث  $n$  عدد الذرات المكونة للبلورة. [11]

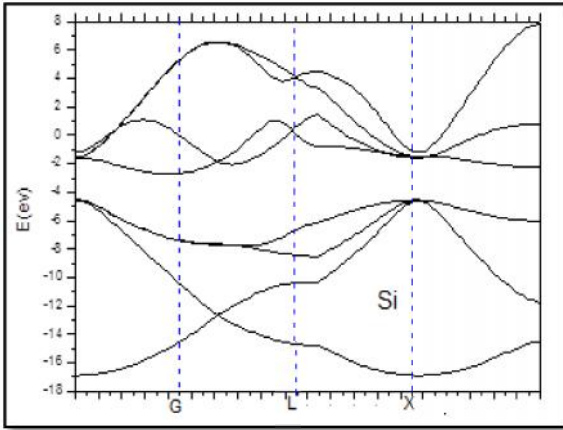
النتائج المتحصل عليها من الحساب ممثلة في الجدول التالي :

جدول (2.III): يمثل قيم الطاقة ومستوي فيرمي

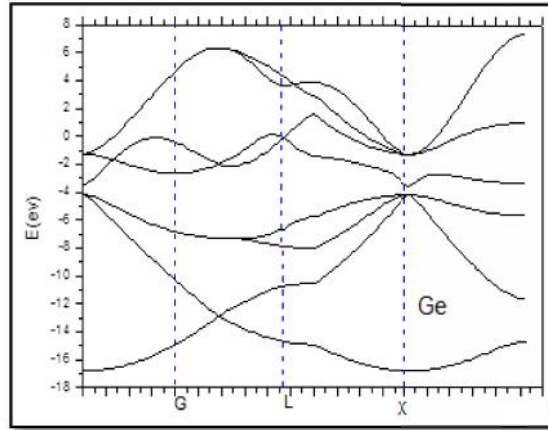
البلورة الطاقة	$E_{tot}(eV)$	$E_{coh}(eV)$	$E_F(eV)$
Si	-259.084019	-6,589331	<b>-3.1791</b>
Ge	-230.804869	-10,20323	<b>-3.8314</b>
SiC	-269.294603	-13,2836	<b>-1.6129</b>
GeC	-240.204585	-26,427052	<b>-2.6236</b>
SiGe	-258.467242	-47,38597	<b>-3.3778</b>

يمثل الجدول (2.III) قيم الطاقة ومستوي فيرمي للبلورات المدروسة ، حيث نلاحظ أن الطاقة الكلية لبلورة SiC هي الأكبر. وطاقة كل من بلورتي Si و SiGe جد متقاربتين.

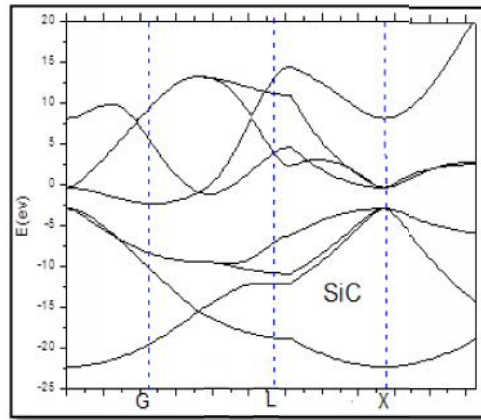
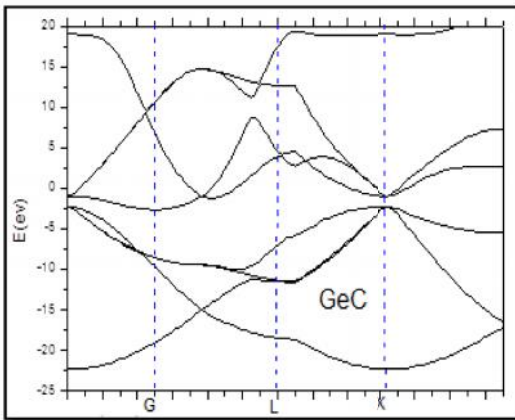
➤ بنية عصابات الطاقة



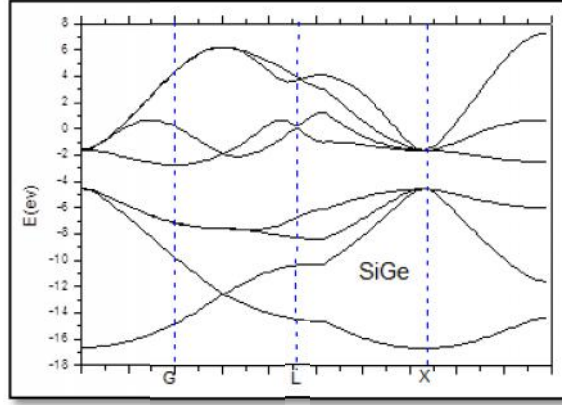
(b)



(a)



(c)(d)



(e)

الشكل (1.III) : يمثل بنية عصابات الطاقة لمختلف عناصر الدراسة.

يمثل الشكل (1.III) بنية عصابات الطاقة للبلورات المدروسة، حيث من الشكل (1.III)(a)، (1.III)(b)

(1.III)(e) نلاحظ أن بلورة الجرمانيوم والسليسيوم و SiGe على الترتيب لها فاصل طاقي غير مباشر، ومن الشكل

(1.III)(c)، (1.III)(d) نلاحظ أن بلورتي كل من SiC و GeC على الترتيب كذلك لها فاصل طاقي غير مباشر، لكن

عرض كل من عصابة التكافؤ و عصابة النقل أكبر من باقي بلورات الدراسة، وهذه النتائج قريبة جدا من نتائج دراسات نظرية

سابقة. [2] [6] [7]

✓ قيم الفاصل الطاقي « Eg »

النتائج المتحصل عليها مدونة في الجدول التالي:

جدول (3.III): يمثل قيم الفاصل الطاقي لعناصر الحساب.

نوع الفاصل الطاقي	في أعمال اخرى	في هذا العمل	البلورة
غير مباشر	1.1	1.21	Si
غير مباشر	0.66	0.78	Ge
غير مباشر	$1.36^a - 1.24^b - 1.25^c$	1.32	SiC



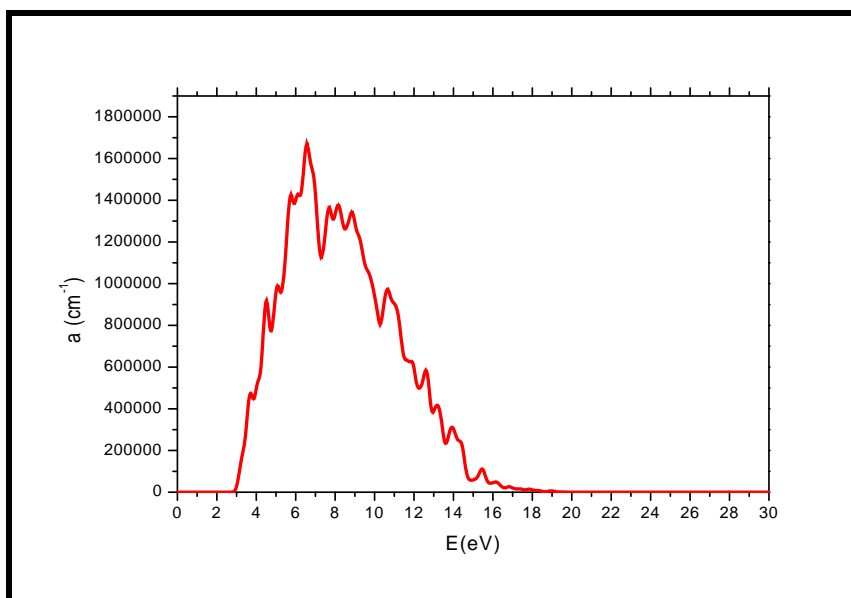
	$1.6^{d,f} - 1.22^{e,g} - 1.38^h$		
غير مباشر	$1.65^a - 1.59^b - 1.52^c$ $2.5^{d,f} - 1.4^{e,g}$	0.80	<b>GeC</b>
غير مباشر	$0.70^i$	1.83	<b>SiGe</b>

<sup>a</sup> مرجع [1]، <sup>b</sup> مرجع [2]، <sup>c</sup> مرجع [3]، <sup>d</sup> مرجع [4]، <sup>e</sup> مرجع [5]، <sup>f</sup> مرجع [8]، <sup>g</sup> مرجع [9]، <sup>h</sup> مرجع [10]، <sup>i</sup> مرجع [7]

### 3.III الخصائص الضوئية

#### 1. 3.III الخصائص الضوئية لبلورة « Si »

##### 1.1. 3.III معامل الامتصاص ( ) لبلورة « Si »



الشكل (2.III) : يمثل الشكل منحنى معامل الامتصاص لبلورة « Si » بدلالة طاقة الفوتون

نلاحظ من الشكل (2.III) أن مجال الامتصاص لبلورة السليسيوم يكون تقريبا [3 (eV) 18]، أي في المجال

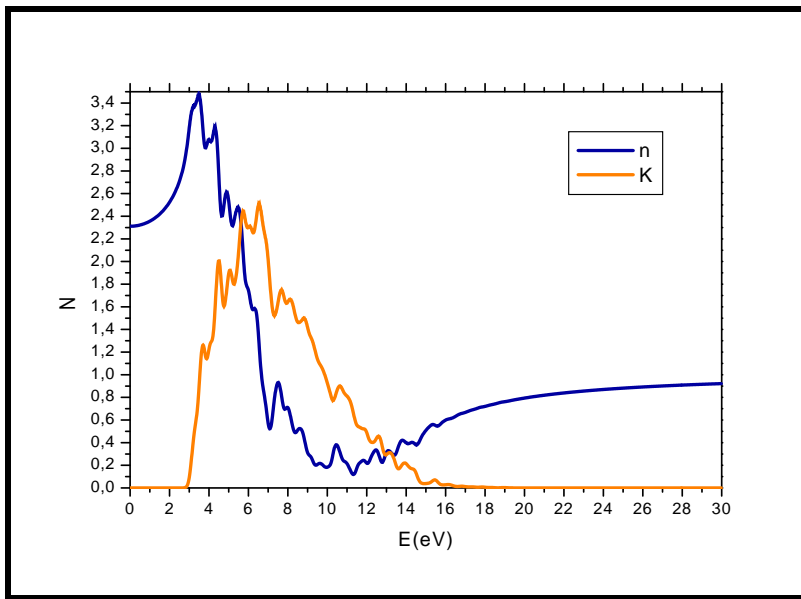
((68 nm) 413.33)، وأكبر قيمة للامتصاص تكون عند القيمة (6.56 eV) أي عند طول الموجة 189 nm،

أما باقي المجال فلا يوجد امتصاص.

### III.3.1.2 معامل الانكسار (N) لبلورة « Si »

حيث:

n : الجزء الحقيقي لقرينة الانكسار ، K : الجزء التخيلي لقرينة الانكسار.



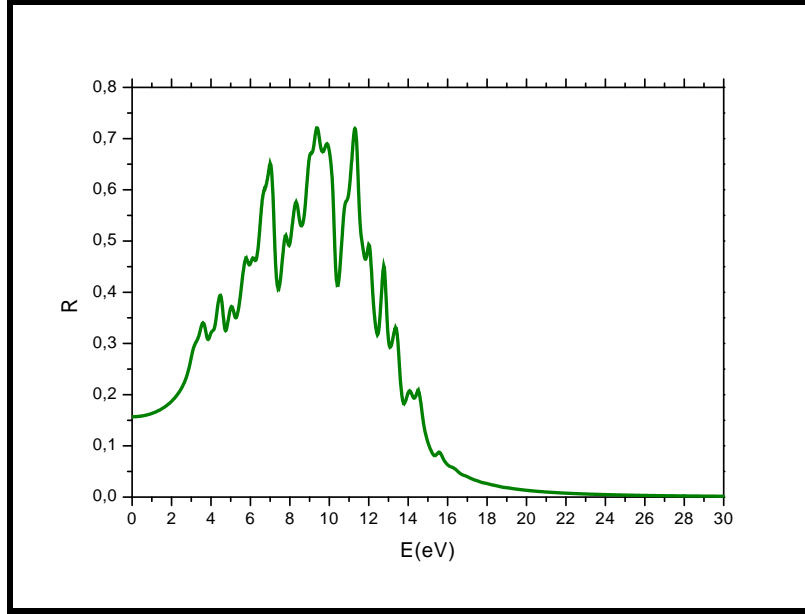
الشكل (3.III) : يمثل الشكل منحنى معامل الانكسار لبلورة « Si » بدلالة طاقة الفوتون

من الشكل (3.III) نلاحظ أن قرينة الانكسار للسليسيوم تساوي بالتقريب (2.31)، و أكبر قيمة لها تساوي

بالتقريب (3.46) وهذا عند القيمة (eV) 3.44 أي 360.46 nm، أيضا أصغر قيمة لقرينة الانكسار تساوي

بالتقريب (0.11) عند القيمة (eV) 11.38 أي 108.9 nm.

### III.3.1.3 الانعكاسية (R) لبلورة « Si »



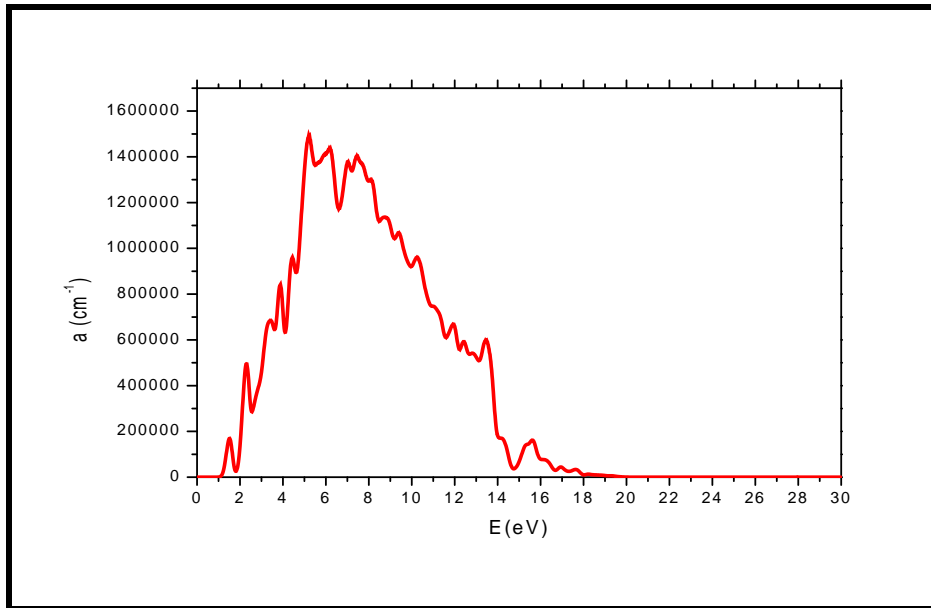
الشكل (4.III) : يمثل الشكل منحنى الانعكاسية لبلورة « Si » بدلالة طاقة الفوتون

نلاحظ من الشكل (4.III) أن انعكاسية السليسيوم تساوي بالتقريب (0.15) عندما تقترب من 0، و أكبر قيمة

لهاتساوي بالتقريب (0.72) عند القيمة (9.34 eV)، أيعند الطول الموجي 132.76nm.

### 2. 3.III الخصائص الضوئية لبلورة « Ge »

#### 1.2. 3.III معامل الامتصاص ( ) لبلورة « Ge »



الشكل (5.III) : يمثل الشكل منحنى معامل الامتصاص لبلورة « Ge » بدلالة طاقة الفوتون

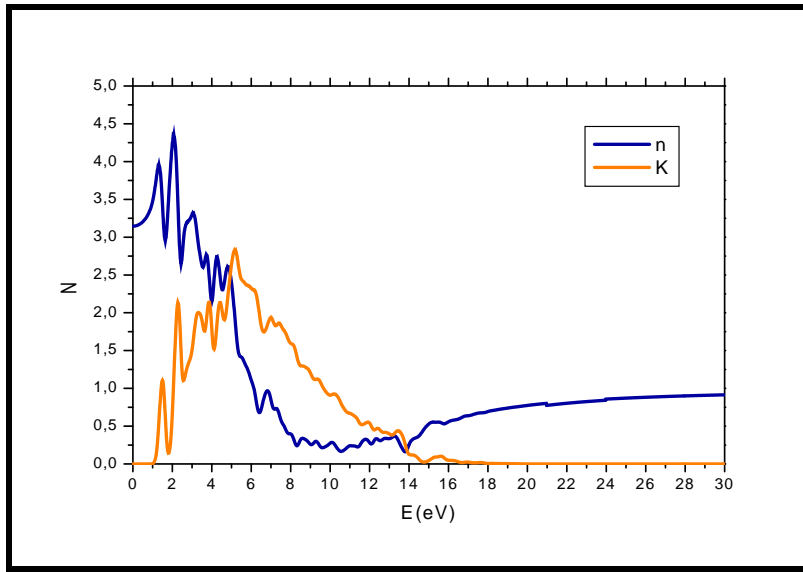
نلاحظ من الشكل (5.III) أن مجال الامتصاص لبلورة الجرمانيوم يكون تقريبا  $(68.88nm \leftarrow 1240nm)$ ،

فهو يشمل كل مجال الطيف المرئي وجزء من طيف الأشعة تحت الحمراء و طيف الأشعة فوق البنفسجية.

أكبر قيمة للامتصاص تكون عند القيمة  $(5.2eV)$  أي عند الطول الموجي  $2183.09nm$ ، وهذه النتائج قريبة من نتائج دراسات

حسابية سابقة. [6]

### III.3.2.2 معامل الانكسار (N) لبلورة « Ge »

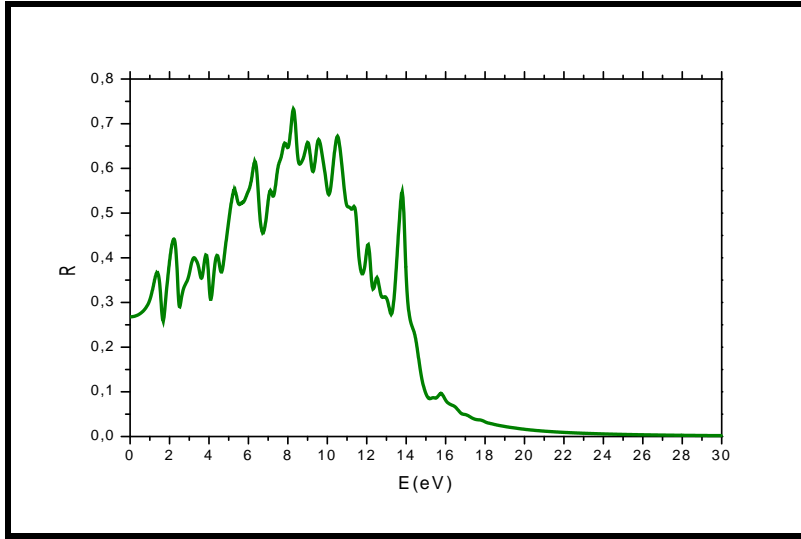


الشكل (6.III) : يمثل الشكل منحنى معامل الانكسار لبلورة « Ge » بدلالة طاقة الفوتون

نلاحظ من الشكل (6.III) أن قرينة الانكسار لبلورة « Ge » تساوي بالتقريب  $(3.14)$ ، وتأخذ قيمة أعظمية عند

$(2.08eV)$  تساوي  $(4.34)$ ، وأصغر قيمة لها تساوي بالتقريب  $(0.16)$  عند القيمة  $(10.56eV)$ .

### 3.III. 3.2 الانعكاسية (R) لبلورة « Ge »



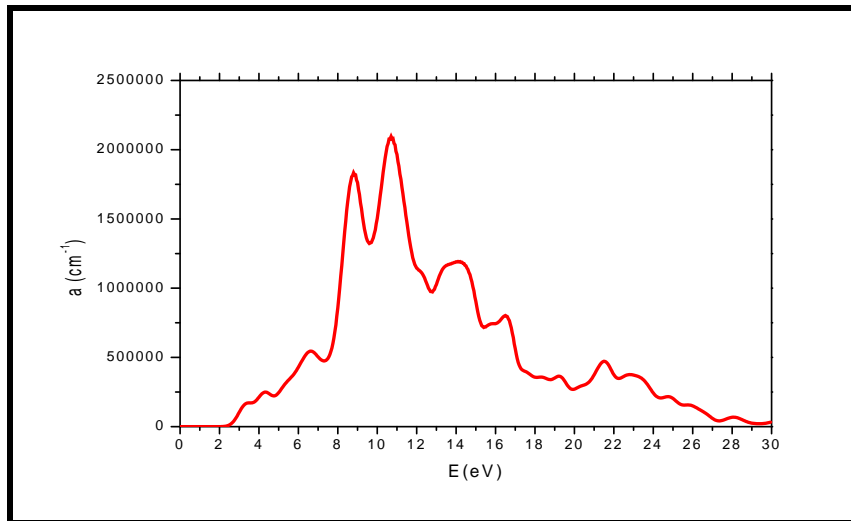
الشكل (7.III) : يمثل الشكل منحنى الانعكاسية لبلورة « Ge » بدلالة طاقة الفوتون

من الشكل (7.III) نلاحظ أن الانعكاسية تساوي بالتقريب (0.26) عندما تقترب من 0، كذلك نلاحظ أن أكبر

قيمة للانعكاسية تساوي بالتقريب (0.73) عند القيمة (8.28 eV) أي 150 nm .

### 3.III. 3. الخصائص الضوئية لبلورة « SiC »

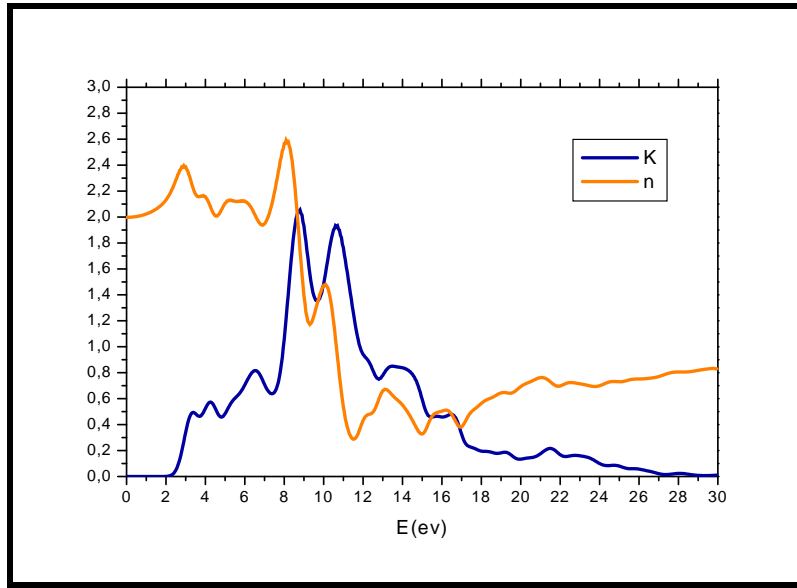
#### 3.III. 1.3 معامل الامتصاص ( ) لبلورة « SiC »



الشكل (8.III) : يمثل الشكل منحنى معامل الامتصاص لبلورة « SiC » بدلالة طاقة الفوتون

نلاحظ من الشكل (8.III) أن مجال الامتصاص لبلورة «SiC» يكون تقريبا على كامل مجال الدراسة بداية من القيمة 2.5 إلى آخر مجال الدراسة أي (eV) 30. (496 41.3nm) فهو يغطي جزء من الطيف المرئي وطيف الأشعة فوق البنفسجية، وهذه النتائج قريبة جدا من نتائج دراسات نظرية سابقة [6]. حيث أكبر قيمة للامتصاص تكون عند القيمة (eV) 10.70 (nm) 115.87.

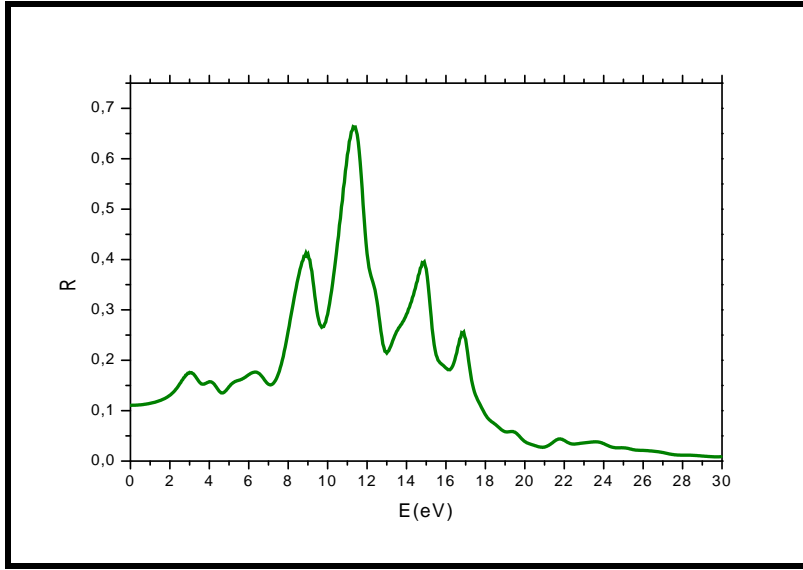
### 3.III. 2.3. معامل الانكسار (N) لبلورة «SiC»



الشكل (9.III) : يمثل الشكل منحنى معامل الانكسار لبلورة «SiC» بدلالة طاقة الفوتون

نلاحظ من الشكل (9.III) أن قرينة الانكسار تساوي بالتقريب (2)، و أكبر قيمة تأخذها تساوي بالتقريب (2.56) عند القيمة (eV) 8.05، وتأخذ قرينة الانكسار قيمة أصغرية تساوي بالتقريب (0.28) عند القيمة (eV) 11.5.

### 3.III.3. الانعكاسية لبلورة «SiC» (R)



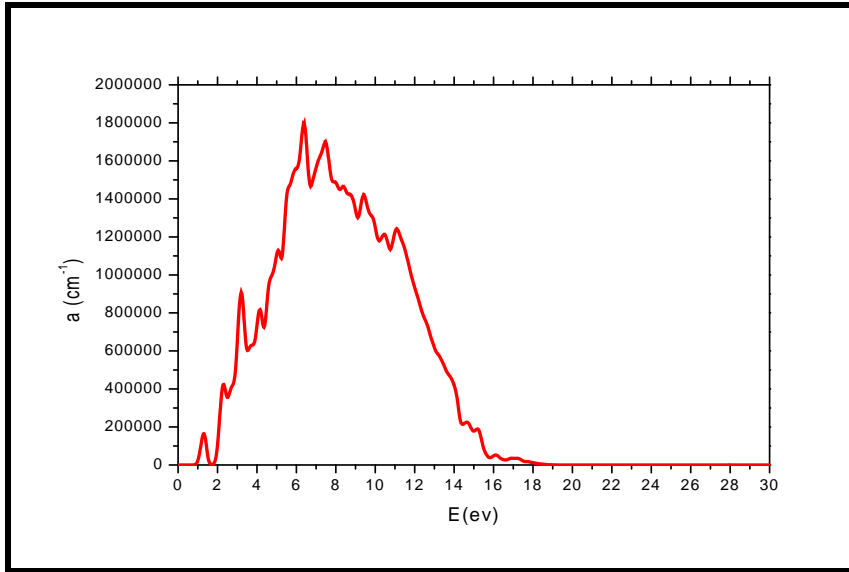
الشكل (10.III) : يمثل الشكل منحنى الانعكاسية لبلورة «SiC» بدلالة طاقة الفوتون

من الشكل (10.III) نلاحظ أن الانعكاسية تساوي بالتقريب (0.11) عندما نقرب من 0، وتكون لها قيمة أعظمية

تساوي بالتقريب (0.66) عند القيمة (11.4 eV) أي 108.77 nm.

### 3.III.4. الخصائص الضوئية لبلورة «GeC»

#### 3.III.1.4. معامل الامتصاص ( ) لبلورة «GeC»



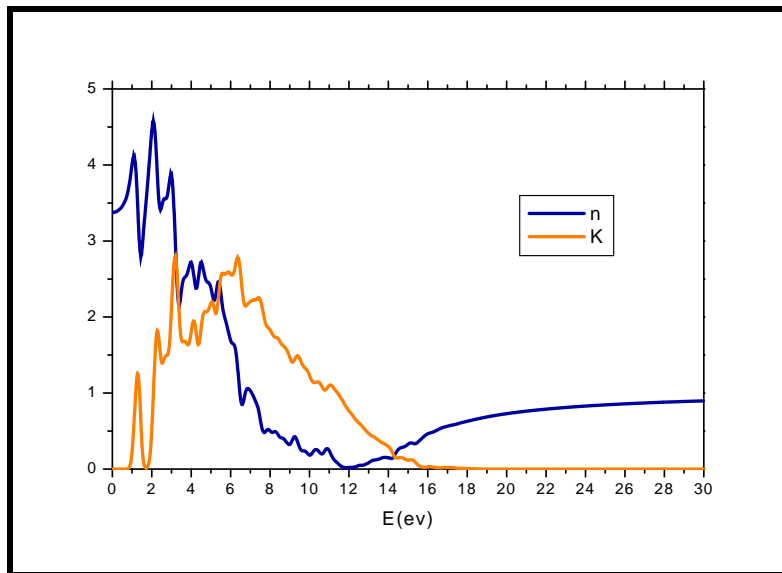
الشكل (11.III) : يمثل الشكل منحنى معامل الامتصاص لبلورة «GeC» بدلالة طاقة الفوتون

نلاحظ من الشكل (11.III) أن مجال الامتصاص لبلورة «GeC» يكون تقريبا في المجال  $[1 \text{ (eV)} - 18]$ ، أي من  $68.88 \text{ nm}$  إلى  $1240 \text{ nm}$ ، فهو كذلك يغطي كامل الطيف المرئي وجزء من طيف الأشعة تحت الحمراء وطيف الأشعة فوق بنفسجية، و يأخذ الامتصاص قيمة أعظمية عند القيمة  $(6.36 \text{ eV})$  أي  $194.96 \text{ nm}$ .

✓ ملاحظة

بلورة GeC لها نفس مجال الامتصاص لبلورة الجرمانيوم تقريبا.

### III.3.4.2 معامل الانكسار (N) لبلورة «GeC»

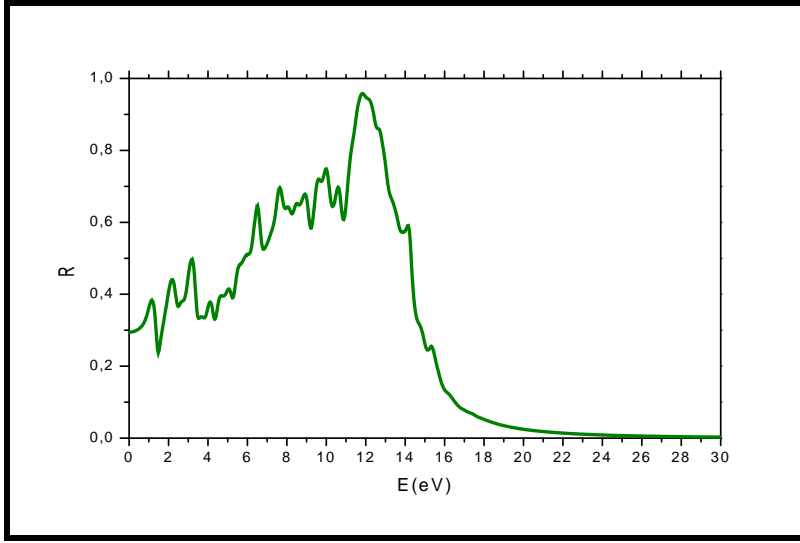


الشكل (12.III) : يمثل الشكل منحنى معامل الانكسار لبلورة «GeC» بدلالة طاقة الفوتون

نلاحظ من الشكل (12.III) أن قرينة الانكسار لبلورة «GeC» تساوي بالتقريب  $(3.37)$ ، وتأخذ قيمة أعظمية تساوي بالتقريب  $(4.57)$  عند القيمة  $(2.08 \text{ eV})$ ، أي عند الطول الموجي  $596 \text{ nm}$ ، ونلاحظ قيمة صغرى تساوي بالتقريب  $(0.018)$  عند القيمة  $(11.84 \text{ eV})$ .



### 3.III. 3.4 الانعكاسية لبلورة «GeC» (R)



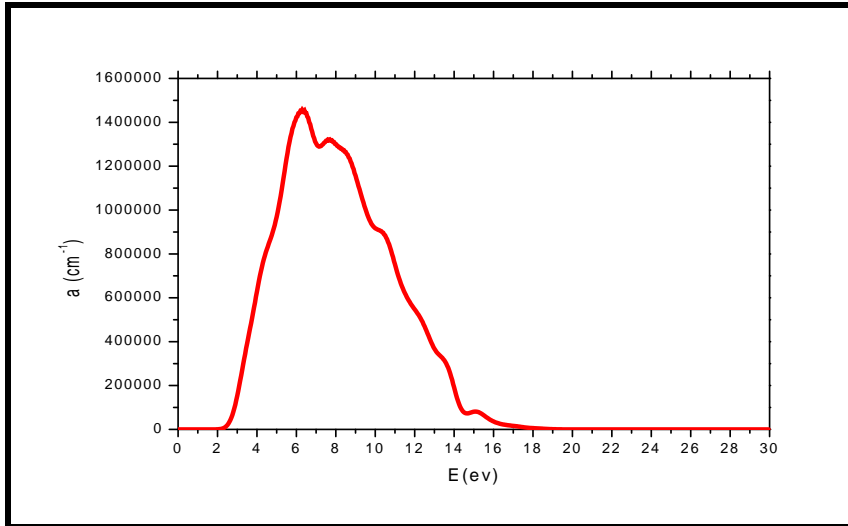
الشكل (13.III) : يمثل الشكل منحنى الانعكاسية لبلورة «GeC» بدلالة طاقة الفوتون

من الشكل (13.III) نلاحظ أن قيمة الانعكاسية لبلورة GeC تساوي بالتقريب 0.29 عندما تقترب من 0(eV)، وتأخذ

قيمة أعظمية تصل الى 0.97 عند القيمة (11.84 eV). أي عند الطول الموجي 104.7 nm يصبح كأنه مرآة.

### 3.III. 5 الخصائص الضوئية لبلورة «SiGe»

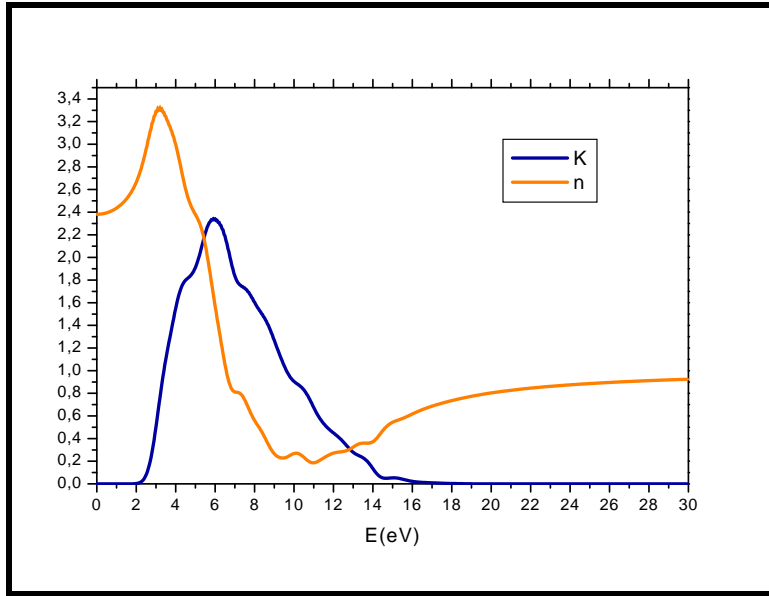
#### 3.III. 1.5 معامل الامتصاص ( ) لبلورة «SiGe»



الشكل (14.III) : يمثل الشكل منحنى معامل الامتصاص لبلورة «SiGe» بدلالة طاقة الفوتون

نلاحظ من الشكل (14.III) أن مجال الامتصاص لبلورة «SiGe» يكون تقريبا نفس مجال الامتصاص لبلورة السليسيوم تقريبا  $69 \text{ nm}$  (563 nm)، وتعطي هذه البلورة قيمة أعظمية للامتصاص عند القيمة (eV) 6.3، أي  $196.825 \text{ nm}$ . وهذا ما يتفق مع دراسات نظرية وتجريبية سابقة أهمها [7]. تغطي هذه البلورة جزء من الطيف المرئي وطيف الأشعة تحت الحمراء.

### III.3.2.5 معامل الانكسار (N) لبلورة «SiGe»



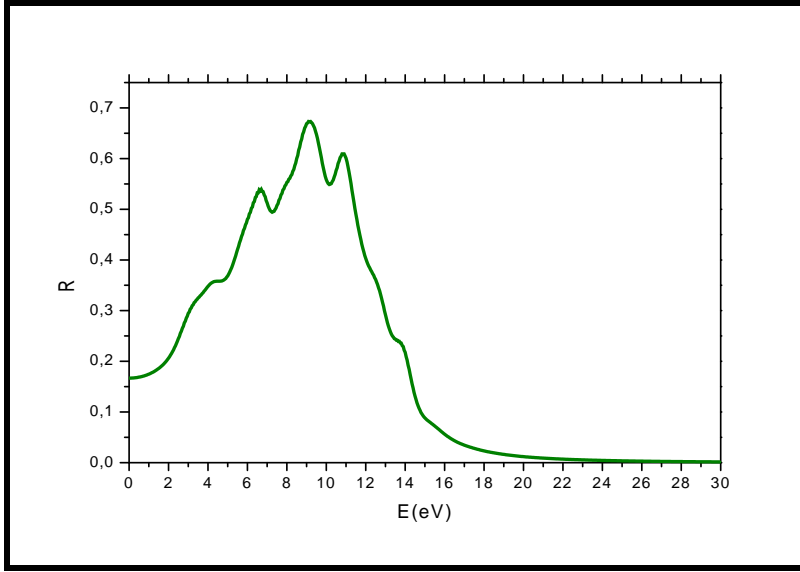
الشكل (15.III) : يمثل الشكل منحنى معامل الانكسار لبلورة «SiGe» بدلالة طاقة الفوتون

من الشكل (15.III) نلاحظ أن قرينة الانكسار لبلورة «SiGe» تساوي بالتقريب (2.38)، وتأخذ

قيمة عظمى تساوي بالتقريب (3.32) عند القيمة (eV) 3.2، وقيمة صغرى (0.18) عند القيمة (eV) 11.

هذه النتائج قريبة من نتائج بلورة السليسيوم.

### III.3.5. الانعكاسية (R) لبلورة «SiGe»



الشكل (III.16) : يمثل الشكل منحنى الانعكاسية لبلورة «SiGe» بدلالة طاقة الفوتون

نلاحظ أن أكبر قيمة للانعكاسية تساوي بالتقريب 0.67 عند القيمة 9.2 إلكترون فولط أي 134.78nm،  
أما عند ما تقترب من 0 فهيتساوي بالتقريب 0.16.

#### ➤ مناقشة النتائج

بالمقارنة بين مختلف النتائج نجد ان:

✓ البلورات المدروسة (Si, Ge, SiC, GeC, SiC) كلها لها فاصل طاقي غير مباشر، وهذه النتائج تتطابق مع دراسات

نظرية وتجريبية سابقة. [2] [6] [7]

✓ مقارنة مختلف نتائج الخصائص الضوئية

• بلورة Si مع بلورة SiC: مجال الامتصاص لبلورة SiC أكبر بكثير من مجال الامتصاص لبلورة Si، أما قرينة

الانكسار والانعكاسية فهي أكبر في بلورة Si.

• بلورة Ge مع بلورة GeC: مجال الامتصاص لبلورة GeC قريب جدا من مجال الامتصاص لبلورة Ge، كذلك

قرينة الانكسار، أما الانعكاسية فهي أكبر في بلورة GeC حيث تصل قيمتها عند طول الموجة

104.7 nm الى 0.97 أي 97%.

• بلورة Si وبلورة Ge مع بلورة SiGe: خصائص بلورة SiGe (معامل الامتصاص، قرينة الانكسار،

---

الانعكاسية ) قريبة من خصائص بلورة Si.

- النتائج الخاصة ببلورات Si و Ge و SiC مطابقة لنتائج دراسات سابقة. [6]

## ❖ نتيجة

اضافة الكربون للسليسيوم تعطي زيادة في عرض عصابات الطاقة للبلورة (عصابة التكافؤ وعصابة النقل و العصابة الممنوعة)،  
الزيادة في عرض عصابة التكافؤ تعني الزيادة في عدد المستويات وبالتالي تزيد عدد الانتقالات من عصابة التكافؤ الى عصابة النقل  
وهذا يؤدي الى الزيادة في مجال طيف الامتصاص.

---

[1]Ahmed DJEDID<sup>1</sup>, Boucif ABBAR<sup>1</sup>and Oukacha ABBES<sup>2</sup>, First-principles calculations of structural, electronic and optical properties of Zinc-blende  $\text{Si}_x$

$\text{Ge}_{1-x}\text{C}$  alloys, Turk J Phys 33 (2009) , 261 – 270.

[2] Madu, Chinyere Ada, Electronic and Structural Properties of the Silicon and Germanium Carbides, Research Journal of Physical Sciences 2320–4796 ,ISSN Vol. 2(4), 1-5, July (2014) Res. J. Physical Sci.

[3]Khenata R., Baltache H., Sahnoun M., Driz M., Rerat M. and Abbar B., Full potential linearized augmented plane wave calculations of structural and electronic properties of GeC, SnC and GeSn, Physica, B 336, 321 (2003).

[4]Pandey R., Rerat M., Darrigan C. and Causa M., A theoretical study of stability, electronic and optical properties of GeC and SnC, J Appl Phys., 88, 6462 (2000).

[5] Sankey O.F., Demkov A.A., Petusky W.T. and McMillan P.T., Energetics and electronic structure of the hypothetical cubic zinc blend form of GeC, Model, Simul. Mater. Sci. Eng., 1, 741 (1993)

[6]Xuejie Liu<sup>1</sup>, Liangfang Li<sup>1</sup>; Feng Lu<sup>1</sup>, Optical properties and Mechanical properties of C, Si, Ge and 3C-SiC Materials Calculated from First Principles Theory 1, School of Mechanical Engineering, Inner Mongolia University of Science & Technology, Baotou, Inner Mongolia 014010, PR China ,arXiv:1301.1745v2 [cond-mat.mtrl-sci] 15 Jan 2013.

[7]Badal H. Elias, Structural, electronic, elastic, optical and thermodynamical properties of zinc-blende SiGe, SiSn and GeSn from first principles, Advances in Physics Theories and Applications ISSN 2224-719X (Paper) ISSN 2225-0638 (Online) Vol.25, 2013 .

---

[8]RavindraPandey,Michel Re´ rat and Clovis Darrigan,Mauro Causa ,A theoreticalstudy of stability, electronic, and opticalproperties of GeCandSnC.No. F49620-96-1-0319. Received 18 January 2000; accepted for publication 26 May 2000.

[9]O. F. Sankey, A. A. Demov, W. T. Petuskey, and P. F. McMillan, Modell. Simul. Mater. Sci. Eng. 1,741~1993.

[10]For example, W. R. L. Lambrecht, B. Segall, M. Yoganathan, W. Suttrop, R. P. Devaty, W. J. Choyke, J. A. Edmond, J. A. Powell, and M. Alouani, Phys. Rev. B 50, 10 722 ~1994.

[11]S.MAHTOOUT , Théorie et calcul des propriétés physiques des clusters , Université A/Mira de Bejaia,2007.

# خلاصة عامة

## خلاصة عامة

من خلال هذا العمل قمنا بدراسة الخصائص الضوئية لبلورة السليسيوم و بلورة الجرمانيوم كذلك بلورة « SiC » وبلورة « GeC » ،بالإضافة لبلورة « SiGe » لتحديد قيمة فجوة الطاقة « Eg » بالإضافة الى الثوابت الضوئية (معامل الامتصاص، قرينة الانكسار، الانعكاسية). استخدمنا للحساب برنامج siesta.3 ونظرية DFT، معتمدين على تقريب GGA . وتحصلنا في نهاية الحساب على ما يلي:

### ➤ الطاقة

- ✓ الطاقة الكلية لبلورة SiC (269.29 eV) أكبر من الطاقة الكلية لباقي البلورات.
- ✓ الطاقة الكلية لبلورة SiGe (258.46 eV) و الطاقة الكلية لبلورة Si (259.08 eV) متقاربتين.
- ✓ كل البلورات التي قمنا بدراستها في هذا العمل لها فاصل طاقي غير مباشر.
- ✓ قيمة فجوة الطاقة في جل البلورات قريبة جدا من قيم تجريبية ودراسات نظرية سابقة.

### ➤ الخصائص الضوئية

- ✓ مجال الامتصاص لبلورة SiC هو الأكبر مقارنة بباقي البلورات المدروسة (41.3 496nm)، أي أن الكربون غير في معامل الامتصاص للسليسيوم.
- ✓ تعطي بلورة GeC عند الطول الموجي (104.7 nm) انعكاسية عظمى تصل الى 97% .
- ✓ خصائص كل من بلورتي السليسيوم و SiGe متقاربة جدا.
- ✓ تغطي كل من بلورتي الجرمانيوم و GeC مجال الطيف المرئي كاملا بالإضافة الى جزء منطيف الأشعة تحت الحمراء وطيف الأشعة فوق البنفسجية.



قمنا في هذا العمل بدراسة الخصائص الضوئية (معامل الامتصاص، قرينة الانكسار، الانعكاسية) وبنية عصابات (Si, Ge, SiC, GeC, SiGe) وذلك لما لها من أهمية بالغة واستعمال واسع في مجال الإلكترونيات والإلكترونيات والالكترونيات الضوئية. للحساب استعملنا المحاكاة العددية وذلك عن طريق برنامج SIESTA ونظرية الكثافة التابعية DFT باستخدام تقريب التدرج المعمم GGA . النتائج المتحصل عليها قريبة جدا من النظرية والتجريبية السابقة. الكلمات المفتاحية : Si ;Ge ; DFT ;SISTA ;GGA ; الخصائص الضوئية.

## Abstract

In this work, we studied the optical properties (absorption coefficient, refractive index, reflectivity) and electronic band structure of the crystals (Si, Ge, SiC, GeC, SiGe) for their great importance and widely use in the electronics and optoelectronics fields. For the calculation we used a numerical simulation through SIESTA program and the density functional theory DFT, utilizing the generalized gradient approximation GGA and Pseudo potential. Our results are close to previous theoretical and experimental results. Key words: Si ;Ge ; SIESTA ;DFT ; GGA ; Optical properties.

## Résumé

Dans ce travail, nous avons étudié des propriétés optiques (coefficient d'absorption, l'indice de réfraction, réflectivité) et les structures électroniques des bandes des cristaux (Si, Ge, SiC, GeC, SiGe) pour leurs grande importance et large utilisions dans le domaine de l'électronique et de l'optoélectronique. Pour le calcul, nous avons utilisé une simulation numérique SIESTA et la théorie de la densité fonctionnelle DFT en se servant de l'approximation gradient généralisé GGA et le pseudo potentiel. Les résultats obtenus sont proches des résultats théoriques et expérimentaux antérieurs.

Mots clés: Si ;Ge ; SIESTA ;DFT ;GGA ;propriétés optiques.