

جامعة قاصدي مرباح ورقلة

كلية: العلوم و علوم التكنولوجيا و علوم المادة

القسم: الفيزياء



مذكرة ماستر أكاديمي

الميدان: علوم المادة

إختصاص: فيزياء إشعاعية مطيافية و كشف بصريات

يحضر من طرف الطالبة : العالمة حامدي

الموضوع:

دراسة نظرية للبنية البلورية و الإلكترونية لنصف ناقل
باستعمال نظرية الكثافة التابعية: حالة الجرمانيوم

يناقش علنا : يوم / / أمام اللجنة المتكونة من:

أ.د. عيادي كمال الدين رئيسا

د. داودي باحميد مناقشا

د. وهاب عبد الوهاب مقررا

السنة الجامعية 2012-2013

جامعة قاصدي مرباح ورقلة

مقدمة:

انصاف النواقل كما هو واضح من اسمها مواد تصنف بين المواد الموصلة والمواد العازلة من حيث توصيلها للتيار الكهربائي .

يمكن وصف المادة الجامدة على انها تجمع حشد كبير من الذرات المنفصلة .

عندما تكون هذه الذرات متباعدة عن بعضها البعض فلن يكون هناك تفاعل بين الكترونات هذه الذرات وستتصرف كل ذرة على انها وحيدة منفصلة عن الذرات الاخرى ولهذا فتركيب مستويات الطاقة لمجموعة الذرات هو عبارة عن تراكب لجميع المستويات الطاقوية في الذرات المنفصلة واذا بدأت الذرات بالاقتراب من بعضها تبدا الالكترونات بالتفاعل مع بعضها البعض وهنا يجب اعتبار ان الالكترون ينتمي لتجمع هذه الذرات وليس خاصا لذرة معينة . وينقسم كل مستوى اصلي الى مجموعة حزم من المستويات المتقاربة وتسمى هذه الحزم عصابات الطاقة ويزداد عرض العصابة كلما تناقصت المسافة بين الذرات [1 , 2]

في حالة الذرات الاصلية لا تكون كل مستويات الطاقة ممثلة ، بل انه عند درجة حرارة منخفضة تبدا المستويات في الامتلاء الي ان تصل الي حد اقصى من المستويات ثم بعد هذا الحد تكون المستويات فارغة ، وهذا الامر ينطبق ايضا على شكل العصابات حيث تكون كلها ممثلة الي حد معين ثم تصبح بعدها العصابات فارغة وتسمى اخر عصابة ممثلة عصابة التكافؤ وتسمى اول عصابة فارغة عصابة التوصيل والفجوة بينهما تسمى فجوة الطاقة

في المواد الموصلة تكون ذرتها محاطة بالكترونات حرة تكسب المعدن صفة التوصيل الكهربائي.

وعلى العكس المواد العازلة مكونة من ذرات لا تحتوي الكترونات حرة مما يعني عدم توصيلها للتيار الكهربائي [3 , 4] وهناك يمكن تصور شكل العصابات الطاقوية كما في الشكل - ب- حيث تكون عصابة التكافؤ مليئة بالالكترونات فيما تكون عصابة التوصيل خالية تماما من الالكترونات ويفصل بين العصابتين فجوة طاقة كبيرة لا تسمح بمرور الالكترونات من عصابة التكافؤ الي عصابة التوصيل.

بين المواد العازلة والموصلة يوجد مادة في غاية الاهمية هي اشباه الموصلات وعند درجة حرارة صغيرة جدا (الصفير مطلق) لا يكون هناك الكترونات حرة حيث تسلك المادة النصف الناقلة سلوك المادة العازلة وبمجرد زيادة درجة الحرارة عن الصفير مطلق تكسب الالكترونات طاقة كافية للتحرك من الذرة ومع زيادة درجة الحرارة يصبح هناك المزيد من الالكترونات المتحررة من ذراتها مما يؤدي الى زيادة الناقلية الكهربائية للمادة وهذه صفة تختلف فيها المواد النصف الناقلة عن المواد الموصلة حيث تقل الناقلية الكهربائية بزيادة درجة الحرارة. [1]

والشكل -1- يوضح مقارنة عصابات الطاقة للنواقل والعوازل وانصاف النواقل

التشكرات

الحمد لله الذي علم بالقلم ، علم الإنسان ما لم يعلم ، وأفضل الصلاة والسلام على سيدنا محمد صلى الله عليه وسلم أما بعد .

أتقدم بالشكر الجزيل لكل من ساهم في إنجاز هذه المذكرة، وأخص بالذكر مع الشكر والتقدير للأستاذ وهاب المشرف على المذكرة عن كل ما بذله من جهد ونصح وتوجيه. كما أتقدم بالشكر للأستاذة إيمان حسين وما قدمته من مساعدة وكذلك الطالبة والزميلة رحيم رميصاء، وإلى كل اساتذة وطلبة قسم ماستر فيزياء إشعاعية . كما أتوجه بخالص مشاعر الفخر والاعتزاز والتقدير لكل أفراد عائلتي وخاصة الوالدين الكريمين أبي أحمد وأمي مسعودي مبروكة وإلى إخوتي نبيل، فاطمة، فوزية، بشرى، مباركة، أسامة والصغرين محمد وشريفة وإلى والدي زوجي العزيز مفتاح مخلوفي و كريمة مسعودي، وكل أفراد العائلة وإلى كل أخواي وأعمامي وأزواجهم ، كما يسعدني ويشرفني أن أتقدم بالشكر الكبير لزوجي عبد الوهاب مخلوفي عن مساعدته ووقوفه إلى جانبي ولا أنسى حبي وتحياتي لإبنتي الصغيرة رهف .

قائمة الأشكال

- الشكل (I - 1) يوضح مقارنة عصابات الطاقة للنواقل والعوازل وأنصاف النواقل.....2
- الشكل (I - 1-أ) البنية البلورية للجرمانيوم.....3
- الشكل (I - 1-2) التركيب الذري لمادتي السيلسيوم والجرمانيوم.....4
- الشكل (I - 2-2) يوضح الرابطة التساهمية.....4
- الشكل (I - 1-3) يوضح توصيل شبه موصل الجرمانيوم.....5
- الشكل (I - 1-4) يوضح حركة الفجوات.....6
- الشكل (I - 1-5 - أ) التطعيم بالشوائب خماسية التكافؤ لتكوين البلورة السالبة N.....8
- الشكل (I - 1-5 - ب) التطعيم بالشوائب خماسية التكافؤ لتكوين البلورة السالبة N.....9
- الشكل (I - 2-5 - أ) التطعيم بالشوائب ثلاثية التكافؤ لتكوين البلورة الموجبة P.....10
- الشكل (I - 2-5 - ب) التطعيم بالشوائب ثلاثية التكافؤ لتكوين البلورة الموجبة P.....11
- الشكل (I - 2-5 - ج) يوضح الحاملات الأغلبية والحاملات الأقلية.....12
- الشكل (I - 1-6 - أ) يوضح حاملات التيار والذرات الثابتة.....13
- الشكل (I - 2-6 - ب)

الفهرس

التشكرات

المحتويات

مقدمة عامة

قائمة الأشكال

الفصل I: مقدمة عامة حول أنصاف النواقل الصفحة:

I.1 خصائص الجرمانيوم.....5

I.1.أ البنية البلورية.....5

I.1.ب التوزيع الالكتروني.....6

I.2 أنصاف النواقل النقية.....7

I.3 التوصيل في نصف الناقل الجرمانيوم.....8

I.4 مفهوم الفحوات.....9

I.5 أنصاف النواقل المطعمة.....11

I.5.1 أنصاف النواقل المطعمة من نوع N.....11

I.5.2 أنصاف النواقل المطعمة من نوع P.....13

6.I منطقة بريلوا 15

الفصل II: طرق الحساب النظرية

1.II تاريخ بداية نظرية الكثافة الوظيفية 19

2.II تقريب أوبرن هايمر 19

3.II تقريب هاتري فوك 20

3.1.II تقريب هاتري 20

3.2.II تقريب هاتري-فوك 21

4.II نظرية توماس-فيرمي 22

II.5 هوهينبارغ-كوهين 22

6.II معادلات كوهين-شام 23

7.II طاقة تبادل الترابط 24

8.II نظرية دالية الكثافة DFT 25

II.9 تقريب كثافة الموضع 26

10.II تقريب التدرج المعمم GGA 27

11.II الكمون الكاذب 27

الفصل III: طرق الحساب التطبيقية

III 1. مفهوم المحاكاة 29

III 2. الخصائص البنيوية 31

31.....	ecufwc حساب III.1.2
32.....	point. K حساب 2.2.III
34.....	ceIIdm حساب 3.2.III
35.....	الطاقة بدلالة الحجم 3.III
38.....	حساب طاقة الترابط 4.III
40.....	الخصائص الالكترونية 5.III
40.....	كثافة الشحنة III.1.5
40.....	كثافة الحالات 2.5.III
41.....	عصابات الطاقة 3.5.III
41.....	مناقشة النتائج 4.5.III

مقدمة عامة

ان فيزياء المواد لها دور مهما وكبير في التطبيقات التكنولوجية الحالية بحيث تطورت في العديد من المجالات وخاصة المود النصف الناقله التي أصبحت ذات أهمية تكنولوجية وتقنية مثل الصمامات الثنائية والترنستورات والصمامات الثنائية الكهروضوئية وصمامات اليزر الأزرق والكواشف وفي الطبقات الرقيقة والخلايا الشمسية .

وفي السنوات الأخيرة أصبح الأهتمام العالم بدراسة خصائص بعض المواد .

ويعد ميكانيك الكم حالياً أفضل تصور متوفر عن العالم الفيزيائي وخاصة عن عالم الذرة , وتطورت نظرية ميكانيك الكم انطلاقاً من الميكانيك الكلاسيكي وذلك عند تفسير صعوبة تفسير بعض الظواهر ودراسة خصائصها وبالتالي أهتم ميكانيك الكم بدراسة خصائص بعض المواد وذلك باستخدام معادلة شرودينغر وحلول هذه المعادلات صالح ألاً في حالة بعض الظواهر البسيطة لعدد محدد من الذرات و الجزيئات أما في الأنظمة المعقدة فنلجأ ألى العديد من التقريبات للحصول على معلومات جد دقيقة حول هذه النظم ومن بين هذه التقريبات نظرية دالة الكثافة وتقريباتها .

ففي الفصل الأول يتناول مقدمة عامة حول أنصاف النواقل والفصل الثاني يتضمن نظرية دالية الكثافة وتقريباتها (تقريب أبرن هايمر, تقريب هار تري- فوك ,تقريب توماسوفيرمي ,هوهنبارغ- كوهين , كوهين شام, طاقة التبادل –الترباط, تقريب الكثافة المحلي , تقريب التدرج المعمم, الكمون الكاذب), وفي الفصل الثالث حساب الخصائص الالكترونية و البنيوية.

أنصاف النواقل كما هو واضح من اسمها مواد تصنف بين المواد الموصلة والمواد العازلة من حيث توصيلها للتيار الكهربائي .

يمكن وصف المادة الجامدة على أنها تجمع حشد كبير من الذرات المنفصلة .

عندما تكون هذه الذرات متباعدة عن بعضها البعض فلن يكون هناك تفاعل بين إلكترونات هذه

الذرات وستصرف كل ذرة على أنها وحيدة منفصلة عن الذرات الأخرى ولهذا فتركيب

مستويات الطاقة لمجموعة الذرات هو عبارة عن تراكب لجميع المستويات الطاقوية في

الذرات المنفصلة وإذا بدأت الذرات بالاقتراب من بعضها تبدأ الإلكترونات بالتفاعل مع بعضها

البعض وهنا يجب إعتبار أن الإلكترون ينتمي لتجمع هذه الذرات وليس خاصا لذرة معينة

.وينقسم كل مستوى أصلي الى مجموعة حزم من المستويات المتقاربة وتسمى هذه الحزم

عصابات الطاقة ويزداد عرض العصابة كلما تناقصت المسافة بين الذرات [1 , 2] .

في حالة الذرات الاصلية لا تكون كل مستويات الطاقة ممثلة، بل أنه عند درجة حرارة

منخفضة تبدأ المستويات في الإمتلاء الي ان تصل الي حد اقصى من المستويات ثم بعد هذا

الحد تكون المستويات فارغة ، وهذا الأمر ينطبق ايضا على شكل العصابات حيث تكون كلها

ممثلة الي حد معين ثم تصبح بعدها العصابات فارغة وتسمى آخر عصابة ممثلة عصابة

التكافؤ وتسمى أول عصابة فارغة عصابة التوصيل والفجوة بينهما تسمى فجوة الطاقة

في المواد الموصلة تكون ذرتها محاطة بإلكترونات حرة تكسب المعدن صفة التوصيل

الكهربائي.

وعلى العكس المواد العازلة مكونة من ذرات لا تحتوي إلكترونات حرة مما يعني عدم

توصيلها للتيار الكهربائي [3 , 4] وهناك يمكن تصور شكل العصابات الطاقوية كما في

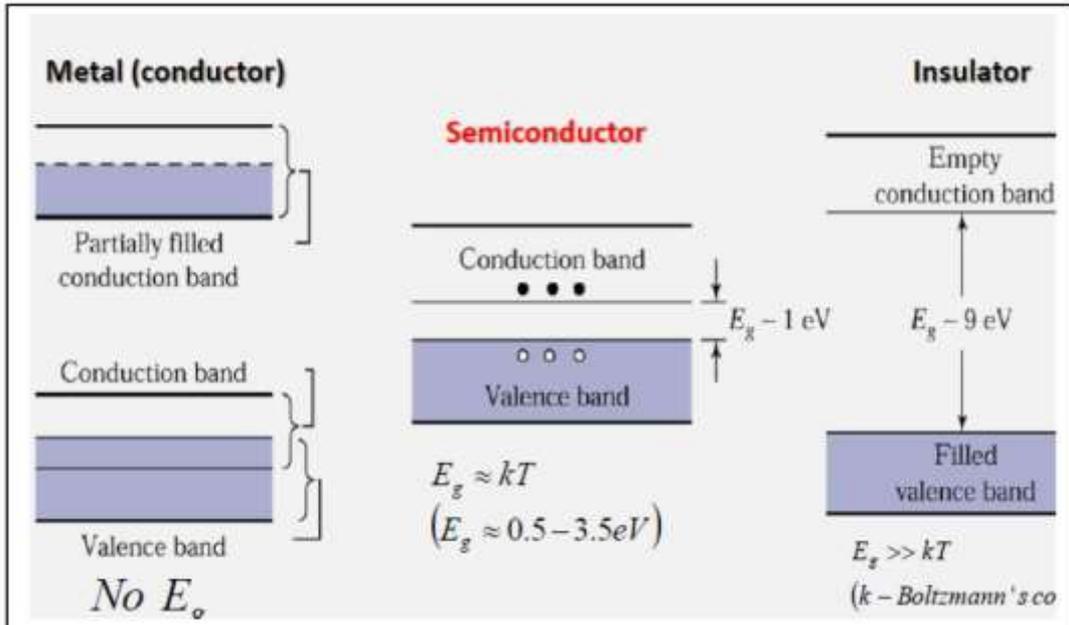
التشكل - ب - حيث تكون عصابة التكافؤ مليئة بالإلكترونات فيما تكون عصابة التوصيل خالية

تماما من الإلكترونات ويفصل بين العصابتين فجوة طاقة كبيرة لا تسمح بمرور الإلكترونات

من عصابة التكافؤ الى عصابة الوصيل.

بين المواد العازلة والموصلة يوجد مادة في غاية الأهمية هي أشباه الموصلات وعند درجة حرارة صغيرة جدا (الصفر مطلق) لا يكون هناك إلكترونات حرة حيث تسلك المادة النصف الناقلة سلوك المادة العازلة وبمجرد زيادة درجة الحرارة عن الصفر مطلق تكسب الإلكترونات طاقة كافية للتحرر من الذرة ومع زيادة درجة الحرارة يصبح هناك المزيد من الإلكترونات المتحررة من ذراتها مما يؤدي إلى زيادة الناقلية الكهربائية للمادة وهذه صفة تختلف فيها المواد النصف الناقلة عن المواد الموصلة حيث تقل الناقلية الكهربائية بزيادة درجة الحرارة . [1]

والشكل 1.I يوضح مقارنة عصابات الطاقة للنواقل والعوازل وأنصاف النواقل



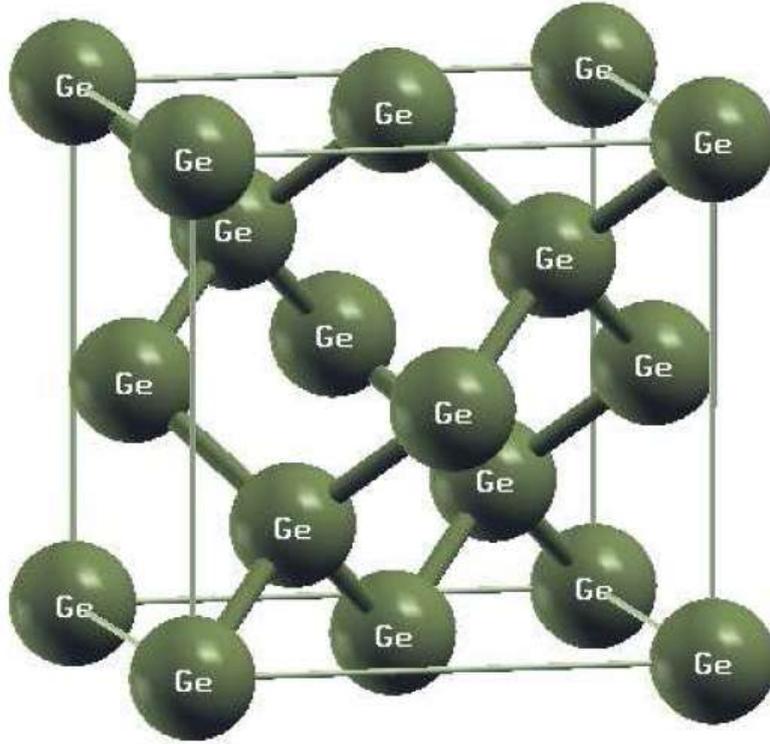
والشكل 1.I يوضح مقارنة عصابات الطاقة للنواقل والعوازل وأنصاف النواقل

1.I خصائص الجرمانيوم :

1.I. أ البنية البلورية : الجرمانيوم يتبلور ضمن بنية الألماس حيث أن المدار الخارجي يحتوي على أربعة إلكترونات فهذا يعني أن المدار ينقصه أربعة إلكترونات للوصول إلى حالة التشبع وحقبة أن ذرات الجرمانيوم أثناء إرتباطها لتكوين المادة فان مدارها الخارجي يحتوي

على ثمانية إلكترونات فان أربعة من هذه الثمانية ستكون إلكترونات تساهمية من الذرات الأربعة المجاورة هذا الترتيب للذرات المجاورة يدعى بالتكوين البلوري [6,5] .

والشكل I.1 أ بين البنية البلورية للجرمانيوم وكيفية تكوين الروابط التساهمية للجرمانيوم والذرات المجاورة.



الشكل I.1 أ بين البنية البلورية للجرمانيوم

I.1. ب التوزيع الإلكتروني للجرمانيوم:

يمتلك الجرمانيوم 32 إلكترون ويصنف ضمن المجموعة الرابعة في الجدول الدوري وهو نصف ناقل نادر. والجدول التالي يوضح التوزيع الإلكتروني للجرمانيوم [7] .

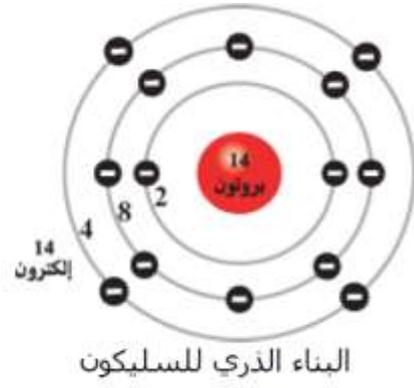
$1s^2$	$2s^2$	$2p^6$	$3s^2$	$3p^6$	$3d^{10}$	$4s^2$	$4p^2$
2	8		18			4	

2.I انصاف النواقل النقية :

تنتمي مادة الجرمانيوم الى عائلة انصاف النواقل تحتوي ذرة الجرمانيوم على اربعة الكترونات تكافؤ هي الكترونات المدار الخارجي للذرة وتساهم في التفاعلات الكيميائية والاختلاف بينها وبين السليكون حيث هذا الاخير يحتوي على 14 الكترون بينما الجرمانيوم يحتوي على 32 الكترون والشكل 2.1.I التالي يوضح التركيب الذري لمادتي السليكون والجرمانيوم [9,8] .



البناء الذري للجرمانيوم

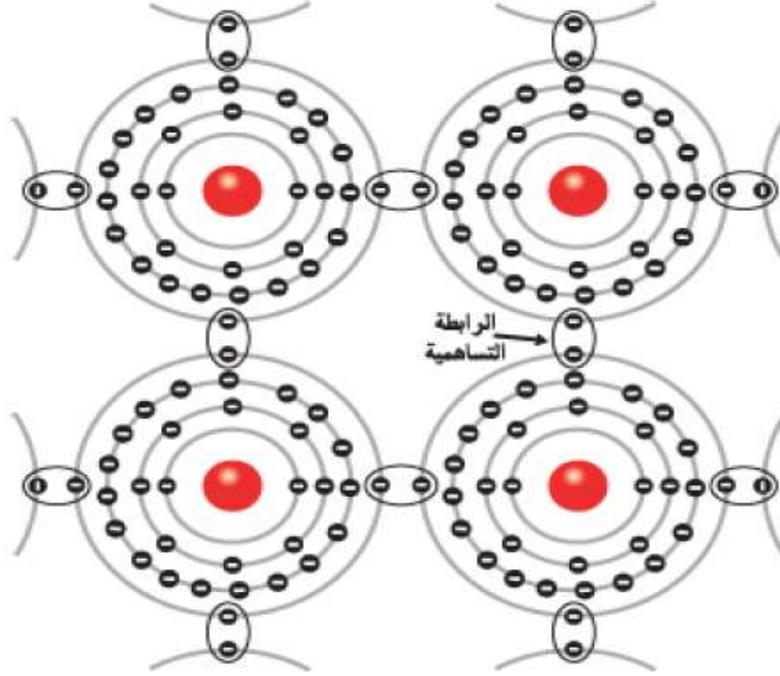


البناء الذري للسليكون

الشكل 2.1.I التالي يوضح التركيب الذري لمادتي السليكون

وحتى يكتمل نطاق التكافؤ للجرمانيوم فانه لا بد من وجود ثمانية الكترونات في المدار الخارجي وعلى ذلك فان كل ذرة تشارك الذرات الاربع التي حولها في الصورة الموضحة في

الشكل ويطلق عليها بالرابطة التساهمية و الشكل 2.2.I يوضح ذلك:



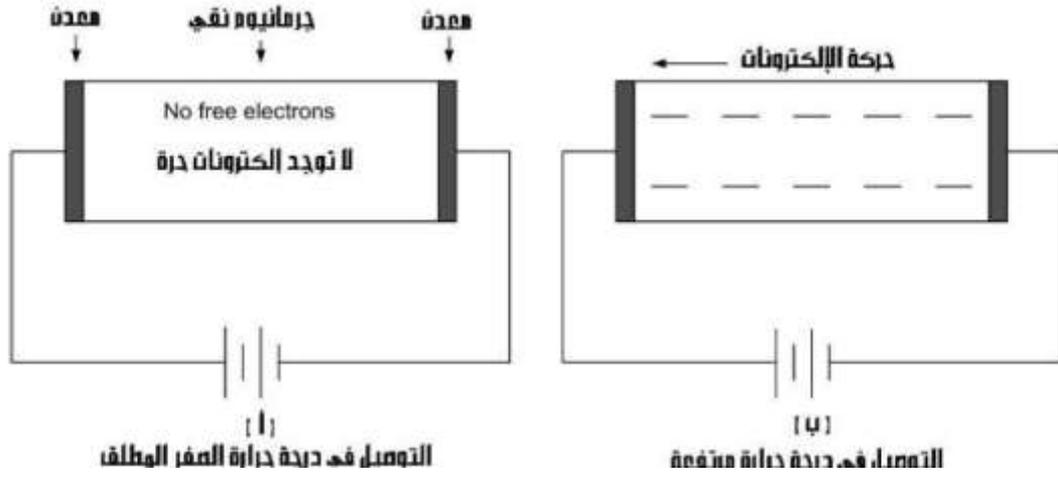
الشكل I. 2.2 يوضح الرابطة التساهمية

وفي هذه الرابطة تبدو الذرة وكأنها محاطة بثمانية إلكترونات (الاربع ذرات الاصلية والاربع الذرات الاخرى بواسطة الرابطة التساهمية) وبالتالي فان الذرة في هذه الحالة لا تكون قابلة للتوصيل حيث لا توجد إلكترونات حرة لنقل الطاقة. وبالتالي فان الجرمانيوم في صورته النقية اقرب الى المواد العازلة .

I.3.1 التوصيل في نصف الناقل الجرمانيوم:

عند توصيل بلورة الجرمانيوم النقي بالبطارية , فعندما تكون الحرارة في درجة الصفر المطلق سنجد بأنه ليس هناك تيار في الدوائر , وسبب ذلك هو أنه لا توجد إلكترونات حرة بداخل البلورة أن الإلكترونات التي تكون في المدار الخارجي تكون ذات توصيل جيد ضمن الذرات المنفردة ولا يمكنها المساهمة في التيار المار . بينما في البلورة وبسبب التماسك للإلكترونات باتجاه الذرة فانه لا يمكنها المشاركة في التيار المار , لذلك فان درجة الصفر المطلق في بلورة

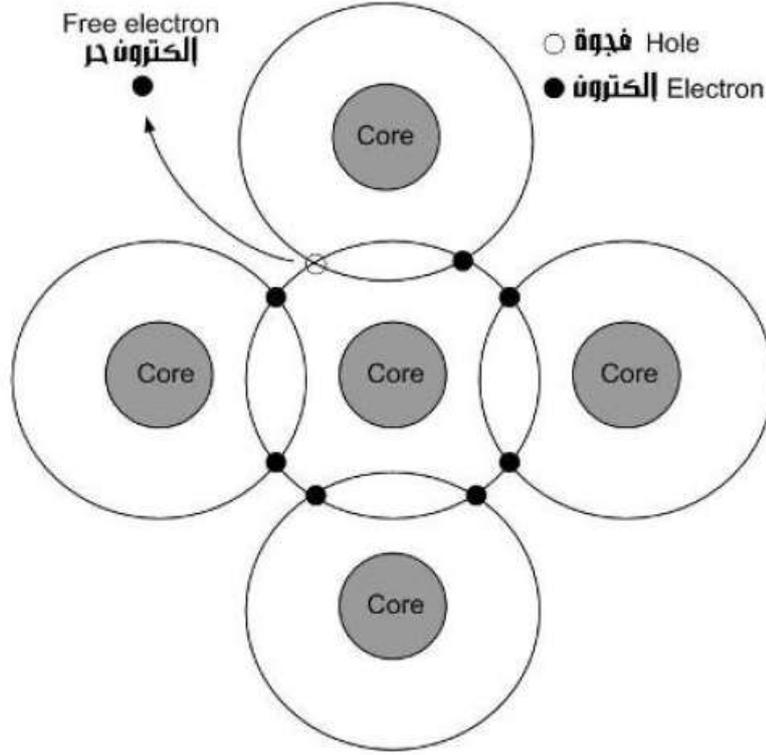
الجرمانيوم هي درجة العزل (عدم مرور التيار) . الشكل 1-3-1 يوضح توصيل شبه موصل جرمانيوم [9,10]



الشكل I. 3.1 يوضح توصيل شبه موصل الجرمانيوم

اثناء زيادة درجة حرارة البلورة فان الطاقة الحرارية ستعمل على ازاحة الكترولونات المدار الخارجي للذرة (وذلك من أجل توفيرها لمرور التيار) هذه الالكترولونات المزاحة تدعى بالالكترولونات الحرة والشكل 1.3.1 ب يشير الى هذه الالكترولونات الحرة بالاشارات السالبة , ونعني بالحررة أن لهذه الالكترولونات السماحية في الحركة باتجاه واحد وذلك حسب الشكل من اليمين الى اليسار والتي هي في الحقيقة تمثل مرور التيار , ان قيمة هذا التيار صغيرة جدا لسبب العدد الذي ربما هو قليل جدا من الالكترولونات المتحررة بفعل الطاقة الحرارية وبالطبع فانه اثناء زيادة درجة الحرارة الى حد كبير فانه سيتحرر عدد أكبر من الالكترولونات الحرة من المدارات الخارجية للذرات , وهذا يعني مرور تيار أكبر في البلورة

4.I مفهوم الفجوت: ان مفهوم الفجوات أمر يثير الاهتمام, واكي نفهم هذا الأمر بشكل أكثر وضوح حيث نرى نموذج لذرة الجرمانيوم محاطة بأربع ذرات متجاورة , وكما علمنا ان الطاقة الحرارية تعمل على ازاحة الكترولونات من المدار الخارجي [9 , 10] .



الشكل 4.1.I يوضح حركة الفجوات

عندما ما يحدث هذا سيصبح الإلكترون المنزوع حر الحركة وقادر على التحرك في داخل البنية البلورية , وأثناء مغادرته لمكانه الأصلي فإنه سيترك مكانا شاغرا في المدار الخارجي للذرة يدعى بالفجوة , هذه الفجوة ستنتصرف وكأنها شحنة موجبة تعمل على أسرو جذب أي الكترون في الجوار وبشكل فوري , وفي الحقيقة انه يوجد نوعان من مكونات التيار في اشباه الموصلات أن صح التعبير , حركة الالكترونات هي المكون الأول , وحركة الفجوات هي المكون الثاني.

والفجوات هي الأخرى تتحرك أيضا.

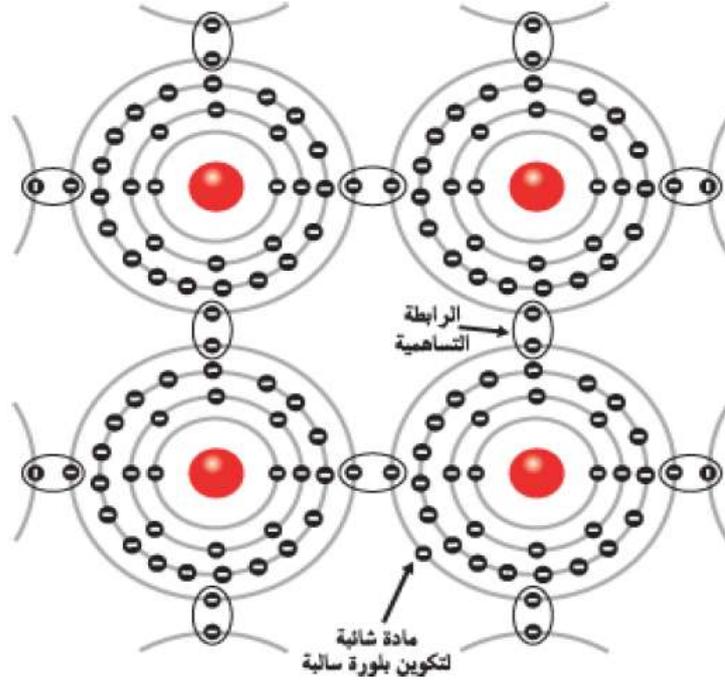
وعند الناحية اليمنى من الشكل , حيث نرى أن المجاور لهذه الفجوة هو رابطة إلكترون (عند الموضع A) , ستعمل هذه الفجوة على جذب رابطة الالكترون إليها , وعند حدوث ذلك فأن الفجوة الأصلية ستختفي وتظهر فجوة جديدة في الموضع A , ومرة أخرى ستعمل الفجوة الجديدة (التي في الموضع A) على جذب رابطة الالكترون التي في الموضع B , وعند حدوث ذلك فأن الفجوة ستختفي في الموضع A وتظهر في الموضع الجديد B.

5.I أنصاف النواقل المطعمة : الألكترونات الحرة والفجوات تنتج بواسطة الطاقة

الحرارية وذلك أثناء تأثيرها في شبه الموصل النقي , ولكن من ناحية عملية فان الطاقة الحرارية لن تنتج الا عدد قليل جدا من الألكترونات والفجوات (أي تيار قليل جدا) وحتى نريد عدد الألكترونات الحرة و الفجوات فاننا سنعتمد على طريقة جديدة تدعى بعملية اضافة الشوائب الى شبه الموصل التي تدعى بالتطعيم , وهي تعني ببساطة انه يمكننا اضافة شوائب ذرية الى بلورة الجرمانيوم [7 , 10] .

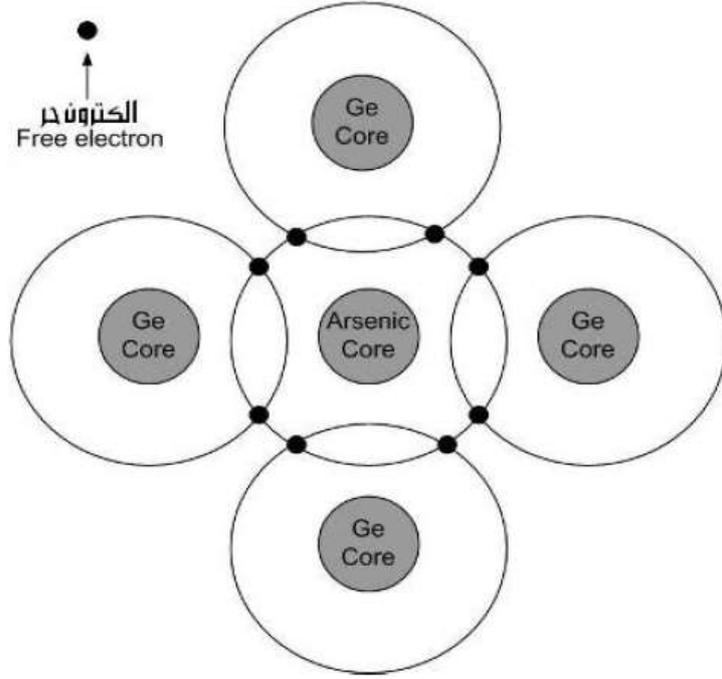
5.I.1 أنصاف النواقل المطعمة من نوع N :

ان الطريقة الوحيدة لتطعيم الجرمانيوم النقي هي بتحطيم البنية البلورية وذلك بصهرها , ثم اضافة كمية من المادة الشائبة التي تحتوي على خمسة الكترونات في مدارها الخارجي مثل الزرنيخ, [7 , 10] الفوسفور,الانتيمون. لوأضفنا كمية صغيرة من عنصر الزرنيخ ,فان ذرات كافة انحاء الجرمانيوم المنصهر,وأثناء برود الجرمانيوم فان *الزرنيخ سوف تنتشر في البلورة الصلبة سوف تتشكل ,ومر أخرى فاننا نجد ان كل ذرة داخل التركيب البلوري تحيط بها اربع ذرات متجاورة تشارك معا في الكترونات المدار الخارجي . لكن بفحص البلورة على المستوى الذري فاننا نجد أن أغلب الذرات هي ذرات الجرمانيوم ,ومن حين الى آخر نجد ذرة الزنيخ تأخذ مكان ذرة الجرمانيوم في التركيب البلوري , وكنتيجة لذلك فانه سيكون لها أربع ذرات متجاورة كما يوضحه الشكل I. 5.1. أ



الشكل I.5.1.أ التطعيم بالشوائب خماسية التكافؤ لتكوين البلورة السالبة N

نرى أن ذرة الزرنيخ المركزية تمتلك ثمانية إلكترونات في المدار الخارجي، هذه الذرة لها خمسة إلكترونات في مدارها الخارجي وكل ذرة جرمانيوم ستشارك بالإلكترون واحد مع ذرة الزرنيخ المركزية، وبما أن ذرة الزرنيخ المركزية تمتلك خمس إلكترونات في مدارها الخارجي فإنها تحتاج إلى ثلاث إلكترونات لكي تصل إلى حالة التشبع وهي ثمانية إلكترونات وبالتالي فإنها تحتاج إلى ثلاث إلكترونات من الذرات المجاورة، عندها سيكون هناك إلكترون زائد، هذا الإلكترون سيصبح حر كما يوضحه الشكل I.5.1. ب [10]

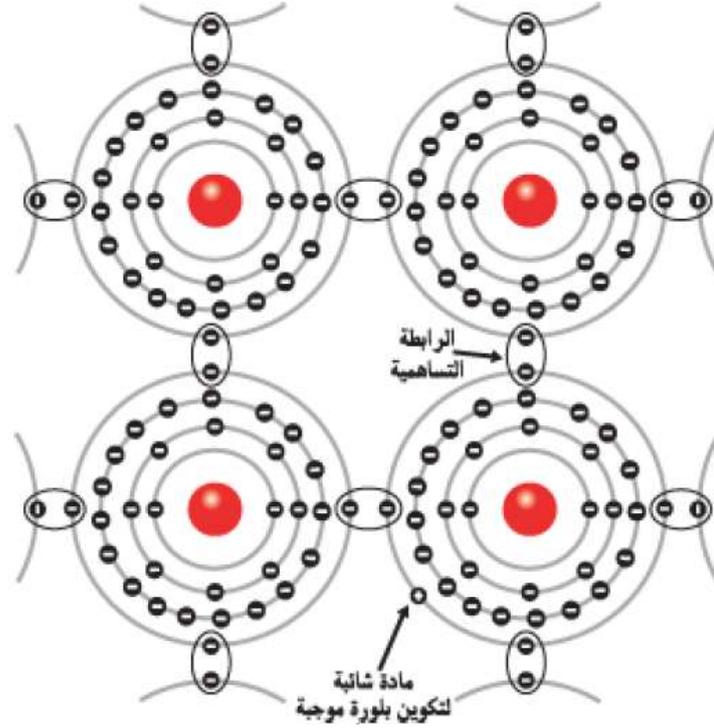


الشكل I.5.1. ب التطعيم بالشوائب خماسية التكافؤ البلورة السالبة N

إذا أنه من الواضح أن كل ذرة زرنيخ تضاف الى شبه الموصل الجرمانيوم ستكون سببا في إنتاج إلكترون حر جديد ,وبواسطة التحكم في كمية الزرنيخ المضافة يمكننا التحكم في عدد الإلكترونات الحرة المنتجة في البلورة الطعمة , وبالتالي زيادة الإلكترونات الحرة في البلورة الجرمانيوم المطعمة سيغلب على عدد الفجوات التي أنتجت بفعل الطاقة الحرارية , عندها ستكون الإلكترونات الحرة هي الحاملات الاغلبية بينما الفجوات هي الحاملات الأقلية .

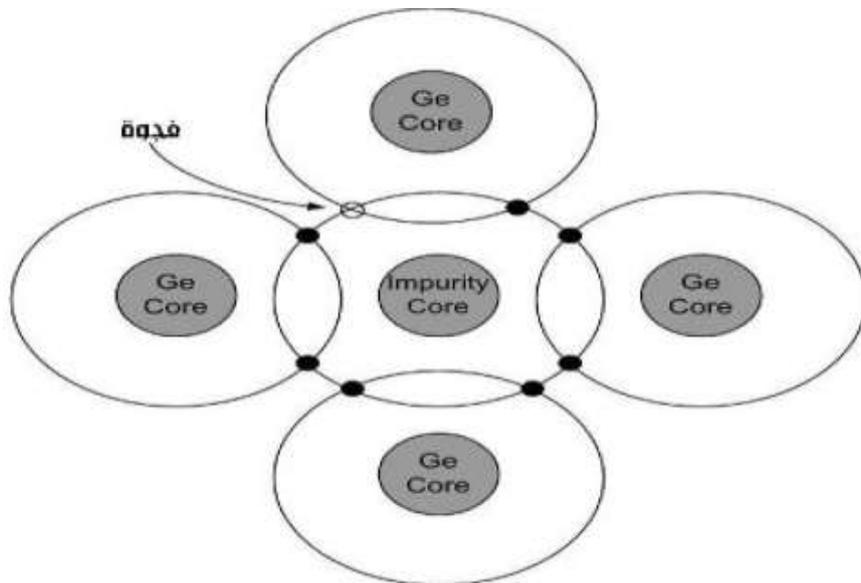
I.5.1. 2 انصاف النواقل المطعمة من نوع P:

بصهر البلورة النقية للجرمانيوم ثم إضافة عنصر الشائبة الذي يحتوي على ثلاث إلكترونات في مداره الخارجي مثل البرون ,الألمنيوم ,الجاليوم ,ومرة أخرى فاننا سنجد أن أغلب الذرات في التركيب البلوري هي ذرات جرمانيوم ,ومن حين الى آخر سنجد ذرة عنصر الشائبة وكما نلاحظ الشكل I.5.2 أ الذي يوضح ذلك [7 , 10].



الشكل I. 5.2 أ. التطعيم بالشوائب ثلاثية التكافؤ البلورة الموجبة P

وبالتالي فان عنصر الشائبة محاطة بأربعة ذرات مجاورة ,كما في الشكل 5-2ب سبعة إلكترونات فقط في المدار الخارجي (ثلاثة منها خاصة بذرة الشائبة ,والاربعة الباقية هي تابعة للذرات الاربعة المجاورة) ,وكانتيجة لذلك فانه سيكون هناك فجوة واحدة في المدار الخارجي لذرة الشائبة ,وبالتحكم في كمية عنصر الشائبة يمكننا التحكم في كمية الفجوات بداخل البلورة وبالتالي تصبح الفجوات الحاملات الاغلبية والإلكترونات الحاملات الاقلية [10].



الشكل I.5.2. ب يوضح التطعيم بالشوائب ثلاثية التكافؤ البلورة الموجبة P

وكما يوضح الشكل التالي الحاملات الاغلبية والحاملات الاقلية في انصاف النواقل

المطعمة من نوع N والمطعمة من P



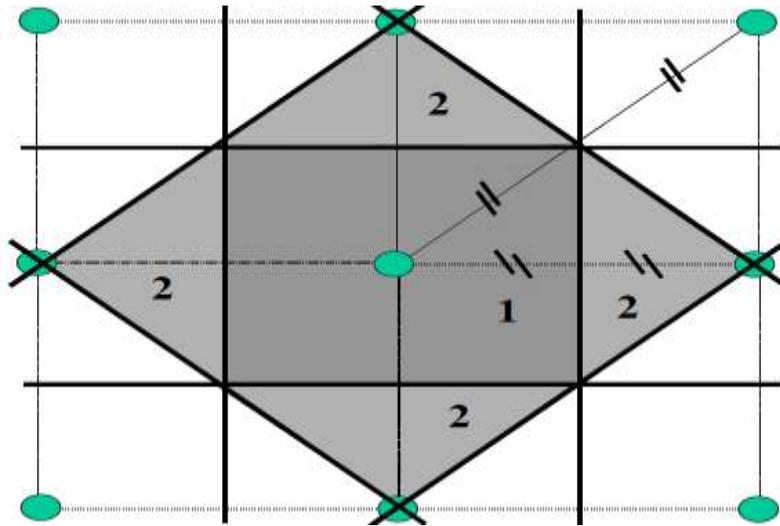
الشكل I, 2.5. ج الحاملات الاغلبية والحاملات الاقلية

8.I مناطق بريلوا: مناطق بريلوا هي المناطق الممنوعة من الطاقة في الشبكة

البلورية أو في البلورات الحقيقية ,

عند ملء الشبكة البلورية بالإلكترونات أولاً بالمنسوب الأول الذي يتم شغله

بالإلكترونين ثم المنسوب الثاني ثم الثالث وهكذا , كما موضح في الشكل:



الشكل يوضح مناطق بريلوا

المناطق التي لا توجد فيها الالكترونات و لا يسمح لها بالوجود فيها هي المناطق الممنوعة على الطاقة وهي مناطق بريلوا ويختلف شكل منطقة بريلوا باختلاف الشبكة البلورية.

الفصل II : طرق الحساب النظرية

عندما نريد حساب جميع الخصائص لمجموعة من الذرات والجزيئات من قوانين ميكانيك الكم وذلك باستخدام معادلة شرودينغر المتعلقة بالزمن [14, 15]:

$$\hat{H}\Psi(\{R_i\}; \{r_i\}; t) = i \frac{\partial \Psi}{\partial t}(\{R_i\}; \{r_i\}) \quad (1-1)$$

النظام عبارة عن دالة موجية للعديد من الجسيمات .

R_i : يمثل المجموعة المتغيرات الناجمة عن الايونات.

r_i : يمثل مجموعة المتغيرات الناجمة عن الالكترونات .

تؤخذ جميع التفاعلات في الحساب الواقعة بين الالكترونات وبين الانوية و الالكترونات .

نجد حلول تحليلية لهذه المعادلة من أجل بعض الأنظمة البسيطة جدا وحلول عددية دقيقة من أجل عدد محدد للغاية من الذرات والجزيئات .

بينما في معظم الحالات نستعين بعدد معين من التقريبات عند الضرورة القصوى من أجل الحصول على معلومات مفيدة حول كل هذه النظم .

والقيام بعدة اختلالات هامة أولا الحالة الاساسية للنظام ونستخدم في ذلك معادلة شرودينغر الغير متعلقة بالزمن

$$\hat{H}\Psi(\{R_i\}; \{r_i\}) = E\Psi(\{R_i\}, \{r_i\}) \quad (2-1)$$

لاندخل درجات الحرية الداخلية للانوية (نعتبر النواة وكأنها نقطة)، حيث تعتبر الانوية ساكنة لان سرعتها أقل بكثير من سرعة الالكترون لذلك نستبعد حدود الهاملتونيا للانوية .

تقريبات هارترى للالكترونات غير مستقلة لكل مدار . والدالة الموجية الكلية كمنتج للدوال الموجية لكل الكترونات على شكل مصفوفة قطرية [16, 17] .

نستبدل الدالة الموجية بالكثافة الإلكترونية وأفعال التبادل الترابط عبارتها غير معروفة .

1. تاريخ بداية نظرية الكثافة الوظيفية (DFT)

أول الطرق لحساب البنية الإلكترونية عرفت من خلال هارترى-فوك أولا هارترى-أعتبر الإلكترونات مستقلة ثم فوك الذي يولى المبدأ الاستبعاد لباولي الذي يدخل الدوال الموجية ضمن شكل محدد سلاتر [18] , 20].

ثم بعد ذلك فكرة توماس وفيرمي سنة 1927 [23] الذي استعمل كثافة الإلكترون كاتغير أساسي حيث تعتبر كثافة الإلكترون ثابتة [19] , وبعد ذلك هوهين بيرج وكوهين 1964 أولا الحالة الأساسية للنظام [21] ثم كوهين-شام من أجل حساب الكثافة [22].

II.2. تقريب remiahneppO:

هذا التقريب يعتمد على فصل حركة الإلكترونات عن الأنوية والذي يأخذ بعين الاعتبار الاختلاف الكبير بين كتلة الإلكترونات وكتل الأنوية، بحيث أن كتلة الإلكترون أقل بكثير من كتلة النواة في حين أن سرعة الإلكترونات أكبر بكثير من سرعة النواة [24].

معناه إهمال الطاقة الحركية للنواة بحيث تعتبر ساكنة أمام الإلكترونات ويوحذ حد تفاعل الأنوية فيما بينها ثابت

$$\mathbf{T}_{NN}=0V_{NN}=cte \quad (1-2)$$

أي يصبح الهاملتونيا الكلي للجملة مؤلف من هاملتونيان الإلكتروني وهاملتونيان نووي على الشكل .

$$H= V_{NN}+H_e \quad (2-2)$$

$$H_e=T_e+V_{ee}+V_{eN} \quad (3-2)$$

H_e يسمى بالهاملتونيا للإلكترونات.

اذن معادلة شرودينغر للإلكترونات هي :

$$H_e \Psi_e(\mathbf{r},\mathbf{R})=[T_e + V_{ee}+ V_{eN}] \Psi_e(\mathbf{r},\mathbf{R}) \quad (4-2)$$

هذه المسألة الأخيرة لا يمكن حلها بالطرق الرياضية المعروفة لذلك نستخدم تقريبا آخر يسمى هارترى فوك .

3.II تقريب هارترى - فوك :

1.3.II تقريب هارترى : يعتمد تقريب هارترى على نموذج الإلكترون المستقل في البداية وذلك بإهمال حد التفاعل إلكترون-إلكترون أي تكتب الدالة الموجية الكلية للجملة كجداء دوال الحالة لكل إلكترون على الشكل [25] :

$$\Psi(r_1, r_2, \dots) = \prod_{i=1}^N \Psi_i(r_i) \quad (1-1-3)$$

والطاقة الكلية كمجموع الطاقات الموافقة لكل حالة إلكترونية كالتالي :

$$E = \sum E_i \quad (2-1-3)$$

اذن معادلة شرودينغر للإلكترون تصبح :

$$H\Psi_i(r, R) = E\Psi_i(r, R) \quad (3-1-3)$$

وبمأن الإلكترونات في حالة تفاعل دائم وبإدخال حد التفاعل إلكترون-إلكترون يصبح الهاملتونيان على الشكل:

$$H_e = - \sum \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{ij} - \frac{Z_e e^2}{|r_i - R_j|} + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{2} \sum_{i,i \neq j} \frac{e^2}{|r_i - r_j|} \quad (4-1-3)$$

$$H_e = H_i + H_{ij} \quad (5-1-3)$$

$$H_e |\Psi_n^e\rangle = E_n^e |\Psi_n^e\rangle \quad (6-1-3)$$

وتعطى الطاقة الكلية للجملة ب:

$$E_n = \frac{\langle \Psi_n^e | H_e | \Psi_n^e \rangle}{\langle \Psi_n^e | \Psi_n^e \rangle} \quad (7-1-3)$$

بعد إدخال حد التعامد نجد:

$$E_n = \sum_i \langle \Psi_i | H_i | \Psi_i \rangle + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{2} \sum \left\langle \Psi_i \Psi_j \left| \frac{1}{|r_i - r_j|} \right| \Psi_i \Psi_j \right\rangle \quad (8-1-3)$$

هذه الحلول تمثل القيمة المتوسطة للطاقة لاختيار كفي ل Ψ_i حسب مبدأ التغيرات.

ملاحظه: مبدأ التغيرات هو أحسن إختيار Ψ_i والتي تجعل من قيمة E أصغرية . اذن في معادلة شرودينغر (معادلة هارترى) يصبح الإلكترون في الموضع r_j يخضع لكمون الشبكة U_j , زائد الكمون الكولومبي والدالة الموجية للنظام .

$$\Psi(r_1 \cdot r_2 \cdot \dots \cdot r_j \cdot r_k \dots) = -\Psi(r_1 \cdot r_2 \cdot \dots \cdot r_k \cdot r_j \dots) \quad (9-1-3)$$

3.2.II تقريب هارترى -فوك: حسن فوك تقريب هارترى وذلك بادخال مبدأ سبين لنظام الإلكترونات بحيث توجد N_i احتمال لوضع N الكترون على N موضع [26].

$$r_1 \vec{r}_2 \dots \cdot r_N \quad (1-2-3)$$

مثلا أول امكانية هي:

$$\Psi_{1(r_1)} \Psi_{2(r_2)} \Psi_{3(r_3)} \dots \Psi_{N(r_N)} \quad (2-2-3)$$

ثاني إمكانية :

$$\Psi_{1(r_1)} \Psi_{3(r_2)} \Psi_{2(r_3)} \dots \Psi_{N(r_N)} \quad (3-2-3)$$

عند تطبيق كل التبديلات نحصل على N_i حد لنفس النوع . دالة الموجة هي مجموع كل الحدود مع الأخذ بعين الاعتبار الاشارتين (-) و (+) لتصبح بشكل محدد يدعى محدد سلاتر .

$$\Psi(r_1 \cdot r_2 \cdot \dots \cdot r_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \Psi_{1(r_1)} & \dots & \Psi_{N(r_1)} \\ \Psi_{1(r_2)} & \dots & \Psi_{N(r_2)} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \Psi_{1(r_N)} & \dots & \Psi_{N(r_N)} \end{vmatrix} \quad (4-2-3)$$

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

4.II نظرية توماس -فيرمي: في 1927 توماس -فيرمي صاغوا الطاقة الكلية لغاز الإلكترونات للامتجانسة كدالة لكثافة الإلكترونات لغاز متجانس وذلك بإجراء عدة تقسيمات عنصرية على منطقة

بريليون حيث عند آخر تقسيم تعتبر الكثافة الالكترونية ثابتة في كل منطقة من المناطق المقسمة اذن تكتب الطاقة الكلية لنظام [28] .

$$E = \int \epsilon_i [\rho(r)] dr \quad (1 - 4)$$

نظرية توماس وفيرمي هي تقريب موضعي لكثافة الالكترونات لا يأخذ بعين الاعتبار ارتباط الالكترونات في تقريب توماس-فيرمي نأخذ الشكل التالي:

$$E_{TF} = \frac{3}{2} \frac{h^2}{2m_e} (3\pi^2)^{\frac{3}{2}} \int \rho^{\frac{5}{3}} dr + \int V(r) \rho(r) dr + \frac{1}{2} \int \frac{\rho(r)\rho(r')}{|r-r'|} dr dr' \quad (2 - 4)$$

كما أجريت تحسينات لهذه النظرية :

أولا فعل التبادل المقترح من طرف ديراك .

$$E_{TFD} = E_{TF} - C_X \int \rho^{\frac{4}{3}} dr \quad (3 - 4)$$

ثانيا فعل الارتباط المقترح من طرف فينغر:

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

5.II. نظرية هوهينبارغ-كوهين: عمل هذان العالمان على أخذ الطاقة الكلية للنظام الإلكترونيات [29]

المتفاعلة في الكمون الخارجي (كمون الانوية) هو دالة وحيدة لكثافة الالكترونات $\rho(r)$ حيث:

$$E = E(\rho) \quad (1 - 5)$$

حيث قاما بالبرهان على أن الكثافة التي تعطى الحد الأدنى هي لكثافة الحالة الأساسية للجسيمات . وكل خصائص الحالة الأساسية هي دالة لكثافة الإلكترونيات التي بالشكل التالي :

$$E(\rho_0) = \text{MiN } E(\rho) \quad (2 - 5)$$

حيث يعبر عن دالة الطاقة :

$$E(\rho) = \langle \Psi | H | \Psi \rangle$$

$$=F_{HK}(\rho)+\int V_{\text{ext}}(\mathbf{r}) \rho(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad (3 - 5)$$

بحيث:

$$F_{HK}(\rho)=\langle\Psi|T + U|\Psi\rangle \quad (4 - 5)$$

U, T كمون الطاقة الحركية وكمون التفاعل للإلكترونات على الترتيب . باستخدام تقريب هارترى :

$$F_{HK}(\rho)=\frac{1}{2} \iint 2 \cdot \frac{\rho(\mathbf{r})\rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} d\mathbf{r}d\mathbf{r}'+G(\rho) \quad (5 - 5)$$

$G(\rho)$ تمثل الطاقة الحركية للإلكترونات زائد الفرق بين طاقة التفاعل الحقيقية وطاقة تفاعل هارترى .

كما اثبت هوهنبارغ - كوهن أن كثافة الحالة الأساسية هي كثافة الحد الأدنى F_{HK} .

6.II معادلة كوهن - شام: في سنة 1965 عمل كوهن - شام على تغيير لنظام له إلكترونات غير

متجانسة لنظام له الإلكترونات متجانسة مع البقاء على نفس الكثافة للنظامين للحصول على طاقة الحالة

الأساسية للنظام حيث تعطى كثافة احتمال تواجد الشحنة ب [30, 31] :

$$\rho(\mathbf{r})= \sum \Psi_i^*(\mathbf{r})\Psi_i(\mathbf{r}) \quad (1 - 6)$$

الطاقة الكلية للإلكترونات $E(\rho)$ و $E_{HK}(\rho)$ وطاقة هارترى - فوك تعطى ب:

$$E_e=T+V \quad (2 - 6)$$

$$E_{HOF}=T_{0+}(V_H+V_x) \quad (3 - 6)$$

حيث T الطاقة الحركية للجسيمات في حالة التفاعل .

V كمون التفاعل إلكترون - إلكترون.

V_H كمون هارترى.

T_0 الطاقة الحركية للإلكترونات الحرة.

V_x كمون التبادل الإلكتروني والذي معرف كالتالي :

$$V_x = V - V_H \quad (4 - 6)$$

V_c كمون الترابط والمعرف كالتالي :

$$V_c = T - T_0 \quad (5 - 6)$$

اذن الدالة F_{HK} هي :

$$\begin{aligned} F_{HK} &= V + T + T_0 - T \\ &= T_0 + V_H + (V_x + V_c) \end{aligned} \quad (6 - 6)$$

$V_{xc} = V_x + V_c$ هو كمون التبادل - الترابط وبالتالي دالة الطاقة الكلية هي :

$$E(\rho) = T_0(\rho) + V_H + V_{xc} + V_{ext}(\rho) \quad (7 - 6)$$

ومعادلة كوهين - شام:

$$[T + V_{ei}(r) + V_H(r) + V_{xc}(r)]\Phi_i(r) = \mathcal{E}_i \Phi_i(r) \quad (8 - 6)$$

7.II طاقة التبادل الترابط:

عدد كبير من الطرق استعملت لتحسين طريقة هار تري - فوك التي تقترح بأن للالكترونين لهما احتمال الوجود نفسه في الفضاء, وهذا الاقتراح خاطئ , لذلك عند استعمال مقدار واسع من عناصر القاعدة سنصل الى مقدار الطاقة يسمى بحد هار تري - فوك وهو مقدار الطاقة الاقرب الى القيمة التجريبية ولا يمكن تجاوزه . في الواقع أن الالكترونين في المدار الجزئي يتحركان بطريقة تحافظ على أكبر مسافة تفصلهما عن بعض ولا يفضلان الاقتراب من بعضهما , يدعى هذا التأثير بتأثير الارتباط , وان فرق الطاقة بين القيمة التجريبية وقيمة الطاقة حد هار تري - فوك هي طاقة الارتباط [36 , 37].

$$E_{(correlation)} = E_{exact} + E_{H.F.L} \quad (1 - 7)$$

8.II نظرية دالية الكثافة DFT : تتضمن طريقة دالية الكثافة تقريب في الترتيب الإلكتروني للذرات والجزئيات التي شهدت اهتماما كبيرا منذ أواخر الثمانينات القرن الماضي وحتى وقتنا الحاضر ومن المهم الاطلاع الى التشابه والاختلاف بين نظرية دالية الكثافة DFT ونظرية هارترى - فوك , فهذا الأخير يعبر عن الدالة متعددة الإلكترونات على شكل محدد سلاتر التي تتكون من مجموعة دوال موجية أحادية الإلكترون بعدد (N) , وكذلك بالنسبة لنظرية دالية الكثافة DFT التي تستعمل دوال موجية أحادية الإلكترون , أن الفرق هو ان نظرية دالية الكثافة DFT تستعمل كثافة الإلكترون في وصف مميزات النظام بدلا من الدوال الموجية المستعملة في نظرية هارترى - فوك وتوصف طاقة النظام الدنيا لكثافة بوصفها دالية الكثافة $\rho(r)$ كما يأتي [32 , 33] .

$$E_{[\rho(r)]} = \sum_{i=1}^N \int \Psi(r) \left(-\frac{\nabla^2}{2} \right) \Psi(r) dr - \sum_{A=1}^M \int \frac{Z_A}{|r - R_A|} \rho(r) dr + \frac{1}{2} \iint \frac{\rho(r_1)\rho(r_2)}{|r_1 - r_2|} dr_1 dr_2 + E_{xc} [\rho(r)] \quad (1 - 8)$$

الحد الأول يمثل الطاقة الحركية للإلكترونات

الحد الثاني يمثل تأثيرات التجاذب بين الكتلون - نواة

الحد الثالث يمثل طاقة التنافر الإلكترونية

الحد الرابع يمثل دالة لطاقتي التبادل - الترابط والمعرفة من العالمين كوهين - شام

9.II تقريب كثافة الموضع LDA: تقريب الكثافة المحلي هو تقريب موضعي لنظام الإلكترونات للامتجانس باعتباره موضعيا متجانس بحيث تعطى طاقة التبادل - الترابط [34] .

$$E_{xc}^{LDA}(\rho) = \int \rho(r) \mathcal{E}_{xc}(\rho(r)) dr \quad (1 - 9)$$

وباستخدام مبدأ مدار سبين تكتب طاقة التبادل - الترابط ب:

$$E_{xc}^{LDA}(\rho \uparrow \rho \downarrow) = \int \rho(r) \mathcal{E}_{xc}(\rho \uparrow(r), \rho \downarrow(r)) dr^3 \quad (2 - 9)$$

مع العلم أن طاقة التبادل - الترابط تقسم الى قسمين

$$\mathcal{E}_{xc}(\rho) = \mathcal{E}_x(\rho) + \mathcal{E}_c(\rho) \quad (3 - 9)$$

ولحساب كثافة الإلكترونات يتم الجمع على كل المدارات المشغولة أي:

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum \psi_r^*(\mathbf{r})\psi_i(\mathbf{r}) \quad (4 - 9)$$

10.II تقريب التدرج المعمم: تصحيحات LDA المستخدم حاليا أخذت بعين الاعتبار تغير كثافة [35]

الإلكترونات $\rho(\mathbf{r})$ عبر التدرج $\nabla\rho(\mathbf{r})$ أي أن النتيجة المحصل عليها في تقريب كثافة الموضع نعيد

ترجمتها كسلسلة لمنشور تايلور في تقريب التدرج المعمم . اذن طاقة التبادل - الترابط تكتب من الشكل:

$$E_{xc}^{GGA} = (\rho \uparrow(\mathbf{r}), \rho \downarrow(\mathbf{r})) = \int \int (\rho \uparrow, \rho \downarrow, \nabla\rho \uparrow, \nabla\rho \downarrow) d\mathbf{r}^3 \quad (1 - 10)$$

1.1.II الكمون الكاذب : قدمت الطريقة من طرف فرمي في 1934 أثناء دراسته للحالة الذرية الرقيقة

, بعد ذلك بسنوات استخدم هيلمان الطريقة في حساب مستويات الطاقة للألكانات و في سنة 1950

خواص أنصاف النواقل, إن طريقة الكمون الكاذب تعطي الدالة Ψ_K كمجموع دوال ال موجة للحالات الذرية المشغولة قليبا [27].

$$\Psi_K = \Phi_K^v + \sum_c b_c \Phi_K^c \quad (1 - 11)$$

دالة الموجة ϕ يمكن ان تكون معامدة مع كل الحالات القليبية Φ_K^c .

$$\langle \Phi_K^v | \Psi_K \rangle = 0 \quad (2 - 12)$$

$$\Rightarrow \Psi_K = \phi_K^v - \sum_c \langle \Phi_K^c | \Phi_K^v \rangle \Phi_K^c \quad (3 - 11)$$

حيث Ψ_K تحقق معادلة شرودينغر

$$H\Psi_K = E_K\Psi_K \quad (4 - 11)$$

بتعويض (2-10) (3-10) نحصل

$$H\phi_K^v - H\sum_c \langle \Phi_K^c | \Phi_K^v \rangle \Phi_K^c = E_K\Psi_K \quad (5 - 11)$$

أيضا نعرف

$$H\Phi_K^c = E_K^c \Phi_K^c \quad (6 - 11)$$

إذن :

$$H\Phi_K^v - E_K^c \sum_c \langle \Phi_K^c | \Phi_K^v \rangle \Phi_K^c = E_K \Psi_K = E_K [\Phi_K^v + \sum_c - \langle \Phi_K^c | \Phi_K^v \rangle \Phi_K^c] \quad (7 - 11)$$

$$H\Phi_K^v + \sum_c (E_K - E_K^c) \langle \Phi_K^c | \Phi_K^v \rangle \Phi_K^c = E_K \Phi_K^v \quad (8 - 11)$$

مع أن :

$$V_R \Phi_K^v = \sum_c (E_K - E_K^c) \langle \Phi_K^c | \Phi_K^v \rangle \Phi_K^c \quad (9 - 11)$$

إذن نكتب المعادلة (7-11) بشكل مختصر كالتالي :

$$(H + V_R) \Phi_K^c = E_K \Phi_K^c \quad (10 - 11)$$

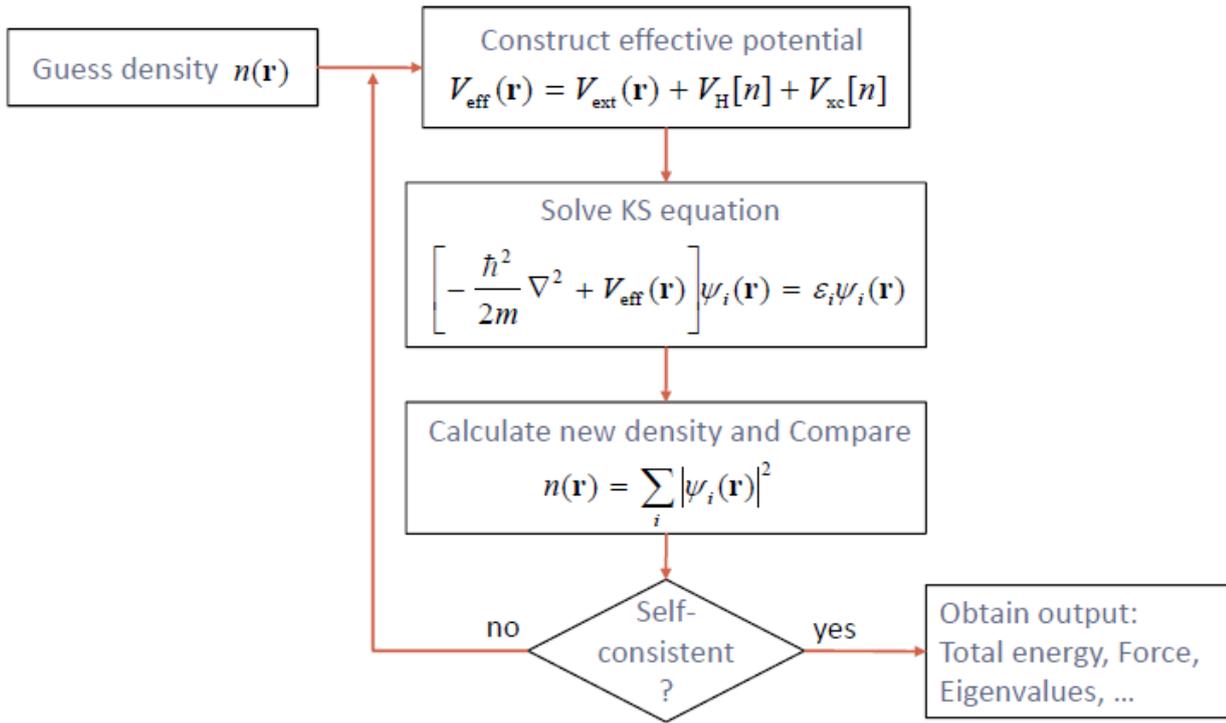
$$\left(\frac{p^2}{2m} + V_e + V_R \right) \Phi_K^v = E_K \Phi_K^v \quad (11 - 11)$$

$$V_P = V_c + V_R \quad (12 - 11)$$

V_c كمون جذب القلب السالب

V_R كمون التدافع الموجب

الشكل التالي يوضح مخطط لنظرية دالية الكثافة:



III الفصل

طريقة الحساب و المناقشة

1.III مفهوم المحاكاة:

يمكن تحديد بالتعرف على معناها على المستويين اللغوي و الإصطلاحي , وفي هذا الإطار فإن الأصل اللغوي لكلمة "محاكاة" هو الفعل "حكى" , فيقال "حكى الشيء" - حكاية : أتى بمثله و شابهه , و حاكاه أي شابهه في القول و الفعل أو غيرهما و يمكن تعريف المحاكاة عموماً بأنها "المشابهة" أو "المماثلة" .

و تزرخ المراجع العربية بالعديد من التعريفات الخاصة بفهوم المحكاة بصفة عامة , و المحكاة التعليمية بصفة خاصة , ومن هذه التعريفات مايلي :

بأنها "نظام بديل يستعمل لتعليم أنشطة معينة , لكي تجعل المواد و التدريبات المستخدمة أقرب ما تكون إلى الوضع الطبيعي الذي تمارس فيه هذه العلميات" .

و تستخدم المحكاة بالحاسب لدراسة المعلومات و الموافق التي يصعب دراستها و التعرف على خصائصها الواقعية في طبيعتها , فيتم محاكاتها بإستخدام برامج الحاسب لدراستها دون التعرض للأخطار المرتبطةبالعالم الواقعي لها , وبأنها تقليد محكم لظاهرة أو نظام يتيح الفرصة للمتعلم أن يتدرب دون مخاطرة أو تكاليف عالية[38]

وتعرف أن المحكاة "عبارة عن برامج حاسوبية تتصف بالدينامكية و التفاعلية مع مستخدميها , و يتم تصميمها لتكون نموذجاً مماثلاً لأصل المعلومات و التجارب التعليمية ليدرسها المتعلم من خلال المشاركة و إكتساب الجوانب المعلوماتية" [39] .

وتعرف أيضا بأنها نموذج لنظام أو مشكلة موجودة في الواقع , حيث يبرمج هذا الواقع داخل الحاسب الآلي على شكل معادلات تمثل بدقة العلاقات المتبادلة بين مكوناتها المختلفة , و بالتالي يصبح الحاسب مختبراً له القدرة الفائقة على التنويع في مجال التعليم المبني على التجريب" [40] .

و تتفق أغلب التعاريف السابقة بأن المحكاة عملية تقريب محكم لظاهرة أو موقف من الحياة الواقعية , يتم تبسيطه ونقله عن طريق الحاسب الآلي , و ذلك لفهم و تفسير النظام الحقيقي دون التعرض لخطر المشاركة الفعلية , إضافة إلى توضيح الأشياء الدقيقة التي لا يمكن رؤيتها بالعين المجردة

إن نظرية الكثافة الوظيفية استعملتها العديد من البرامج ومن بين هذه البرامج PWSCF وهو البرنامج المستعمل في الحسابات المستعملة في هذا الجزء التطبيقي

2.III الخصائص البنيوية (optimisation) :

1.2.II حساب euctcwf: وتعرف على انها طاقة القطع كما تعرف فيزيائيا بانها الطاقة الحركية بحيث

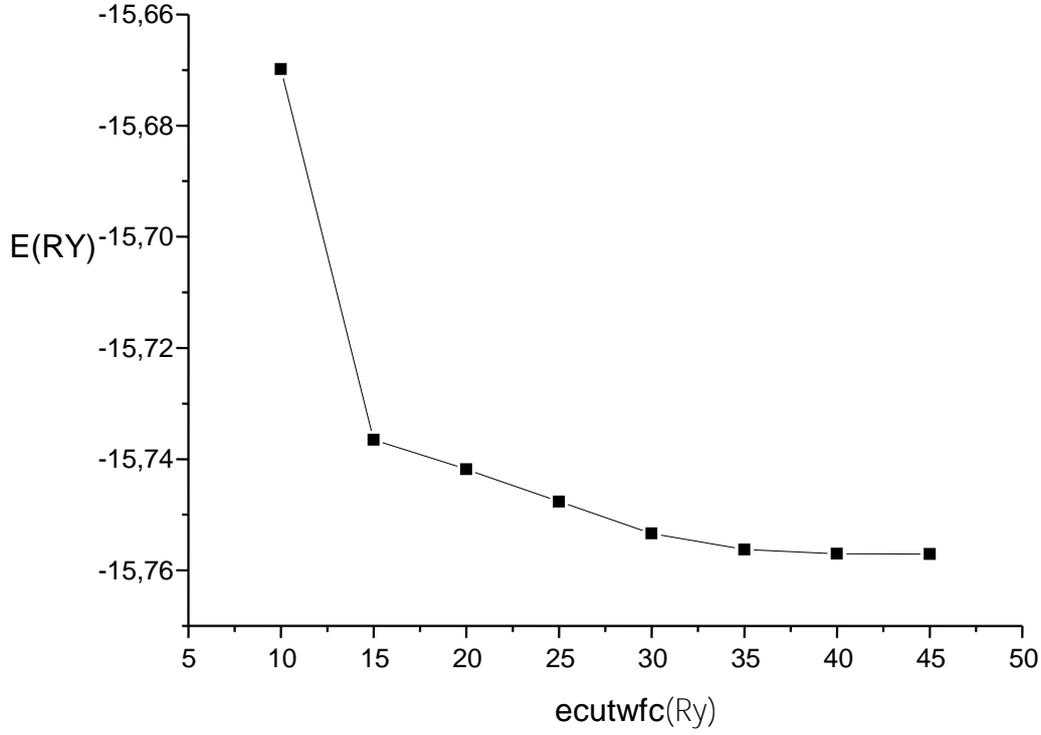
تأخذ أقل قيمة دقيقة. ولحساب ecutwfc نغير ecutwfc ونبقي على K.points وثابت الشبكة ثابتين كما هو موضح في ملف الإدخال :

```
&system
  ibrav= 2, celldm(1) =10.691, nat=2 , ntyp= 1,
  ecutwfc =25.0,
  occupations='smearing', smearing='methfessel-paxton',
  degauss=0.05,
  /
  &electrons
    conv_thr = 1.0d-8
    mixing_beta = 0.7
  /
ATOMIC_SPECIES
  Ge 72.61 Ge.pbe-paw_kj.UPF.
ATOMIC_POSITIONS
Ge 0.250000 0.250000 0.25000000
Ge 0.000000 0.000000 0.00000000
K_POINTS {automatic}
  8 8 8 0 0 0
```

والنتائج المتحصل عليها موضحة في الجدول التالي :

E(Ry)	ecutwfc
-15.66986684	10
-15.73651463	15
-15.74167988	20
-15.74765862	25
-15.75626110	30
-15.75702428	35
-15.75707641	40

نتائج الجدول ممثلة في المنحنى الذي يمثل الطاقة بدلالة $ecutwfc$



المنحنى يمثل تغيرات الطاقة بدلالة $ecutwfc$

وبملاحظة المنحنى نلاحظ أن $ecutwfc = 30Ry$.

2.2.III حساب k.point : وتعرف على أنها عدد النقاط في منطقة بريلوا منطقة الفضاء المعكوس

والتي تمثل k.point غير k.point ونبقي على ثابت الشبكة وثابت الشبكة كما هو موضح في البلورة. ولحساب

ملف الإدخال:

```

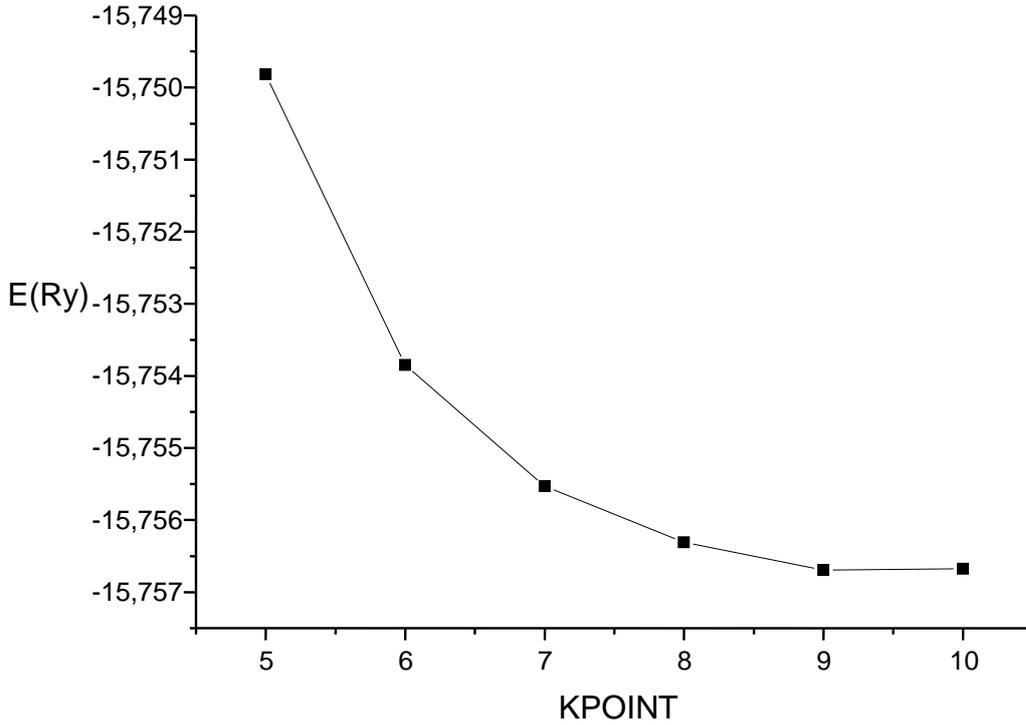
/
/
ATOMIC_SPECIES
Ge 72.61 Ge.pz-bhs.UPF
ATOMIC_POSITIONS {crystal}
Ge 0.250000 0.250000 0.25000000
Ge 0.000000 0.000000 0.00000000
K_POINTS {automatic}
    
```

8 8 8 0 0 0

والنتائج موضحة في الجدول التالي:

E(Ry)	K.POint
-15.74982032	5
-15.75385017	6
-15.75553271	7
-15.75630718	8
-15.75669232	9
-15.75667883	10

وننتج الجدول موضحة في المنحنى التالي:



المنحنى يمثل تغيرات الطاقة بدلالة kpoint

وبملاحظة المنحنى نلاحظ أن Kpoint=8

III.3.2 حساب ثابت الشبكة: ويمثل المسافة بين كل ذرتين في البلورة ولحساب ثابت الشبكة نغير هذا

الأخير

ونبقي على kpoint و ecutwfc ثابتين كما هو موضح في ملف الدخال.

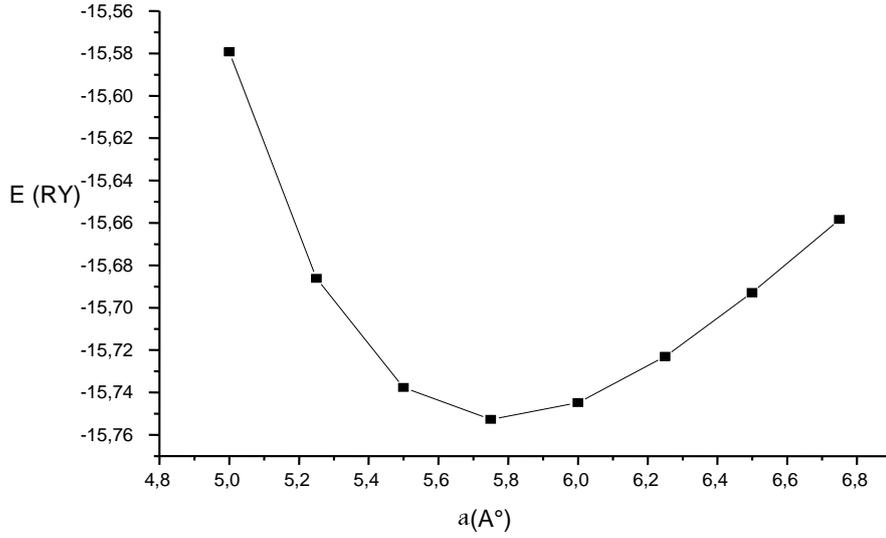
```

/
&system
 ibrav= 2,
cellldm(1) =10.691
, nat=2 , ntyp= 1,
  ecutwfc =25.0,
  occupations='smearing', smearing='methfessel-paxton', degauss=0.05,
    
```

والنتائج موضحة في الجدول التالي:

E(Ry)	ثابت الشبكة (A°)
-15.57927950	5
-15.68620422	5,25
-15.68620422	5,5
-15.75270958	5,75
-15.74487284	6
-15.72295491	6,25
-15.69287003	6,57

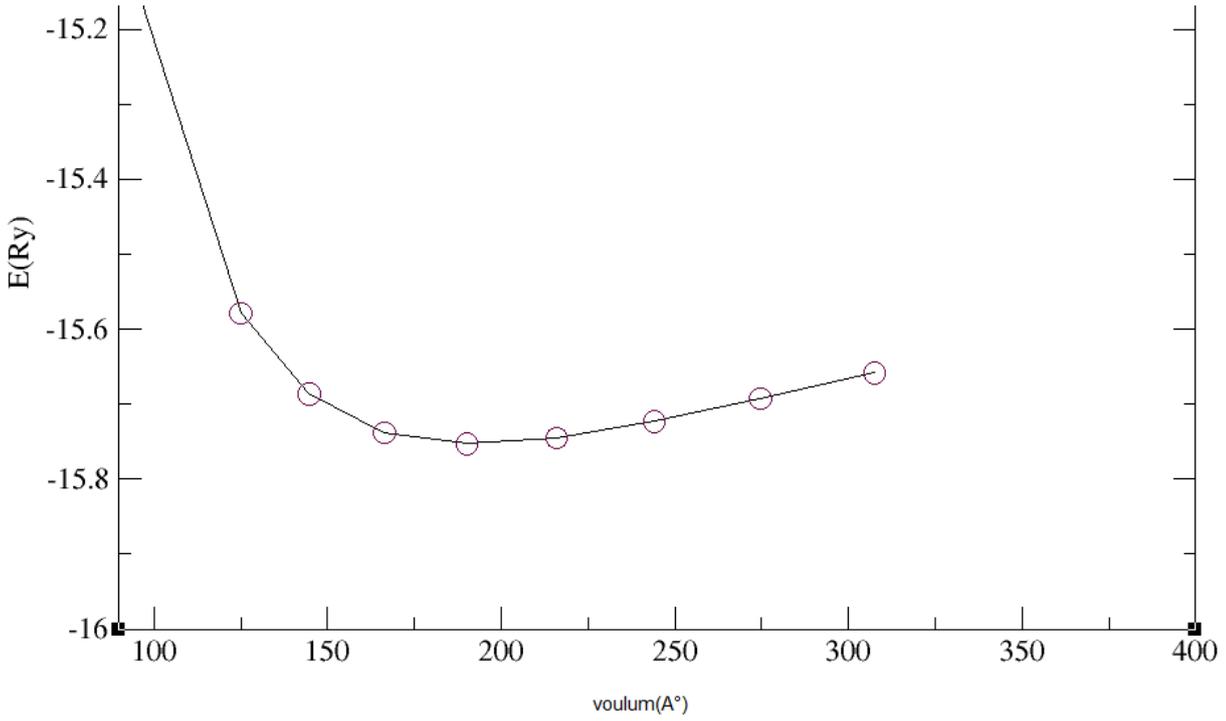
وننتج الجدول ممثلة في المنحنى التالي :



المنحنى يمثل تغيرات الطاقة بدلالة ثابت الشبكة

III.3 حساب الطاقة بدلالة الحجم: بتكعيب ثابت الشبكة والجدول التالي يمثل قيم الحجم و ثابت الشبكة

الحجم	E(Ry)
125	-15.57927950
144 .7031325	-15.68620422
166.375	-15.68620422
190.1099375	-15.75270958
216	-15.74487284
244.140625	-15.72295491
307.546875	-15.69287003

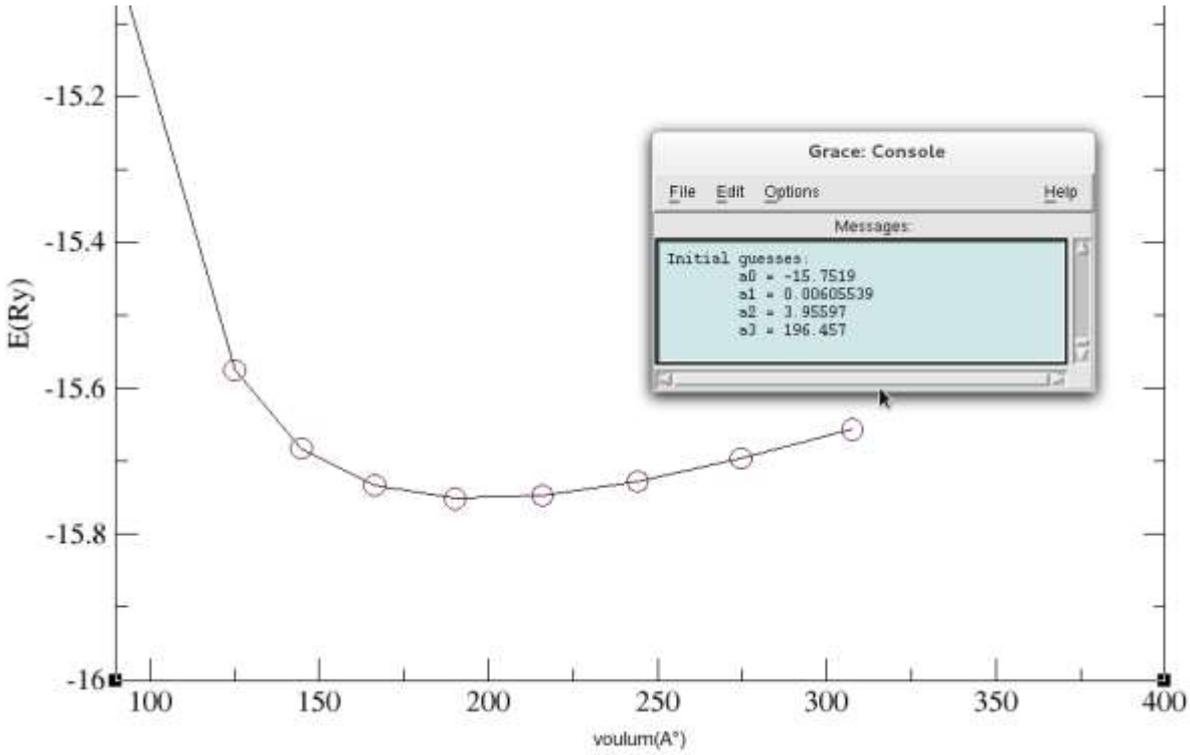


المنحنى يمثل تغيرات الطاقة بدلالة الحجم

وباستعمال معادلة

$$E(V) = E_0 + \frac{B_0}{B'_0} V \left[\frac{\left(\frac{V_0}{V}\right)^{B'_0}}{B'_0 - 1} + 1 \right] - \frac{V_0 B_0}{B_0 - 1} \quad [36]$$

لأيجاد ثوابت المنحنى نستعمل المعادلة كما هو موضح في الشكل ومطابقة النتائج النظرية مع التطبيقية



نجد قيم الثوابت حيث:

a_0 يمثل الطاقة E_0 .

a_1 يمثل B_0 وهو ثابت الصلابة للمادة.

a_2 يمثل B'_0 ,

a_3 يمثل الحجم وبالتالي هو الذي يمثل ثابت الشبكة البلورية حيث

$$a_0 = -15.7519$$

$$a_1 = 0.0539$$

$$a_2 = 3.95597$$

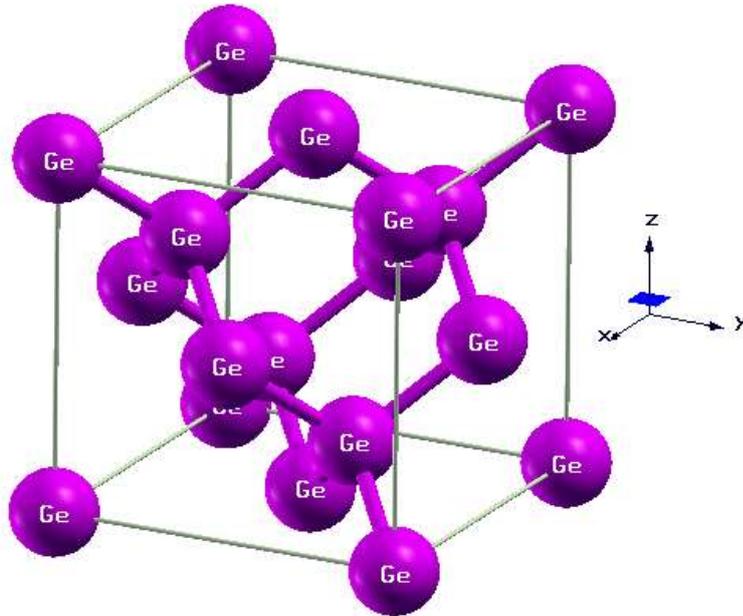
$$a_3 = 196.4577$$

ومنه يصبح ملف الإدخال كالتالي:

```

&system
 ibrav= 2, celldm(1) = 10.9684784, nat=2 , ntyp= 1,
ecutwfc =30.0,
occupations='smearing', smearing='methfessel-paxton', degauss=0.05,
/
&electrons
conv_thr = 1.0d-8
mixing_beta = 0.7
/
ATOMIC_SPECIES
Ge 72.61 Ge.pz-bhs.UPF
ATOMIC_POSITIONS {crystal}
Ge 0.250000 0.250000 0.2500000
Ge 0.000000 0.000000 0.0000000
K_POINTS {automatic}
8 8 8 0 0 0
    
```

وبالتالي البلورة هذه الخصائص كما هو موضح في الشكل :



البنية البلورية للجرمانيوم المتحصل عليها بالخصائص البنوية المحسوبة

III.4 حساب طاقة الترابط: يمكن حساب هذه الطاقة باستعمال ذرة واحدة والتي تشمل الذرة التي

احدثتها (0.0.0) كما هو موضح في ملف الادخال.

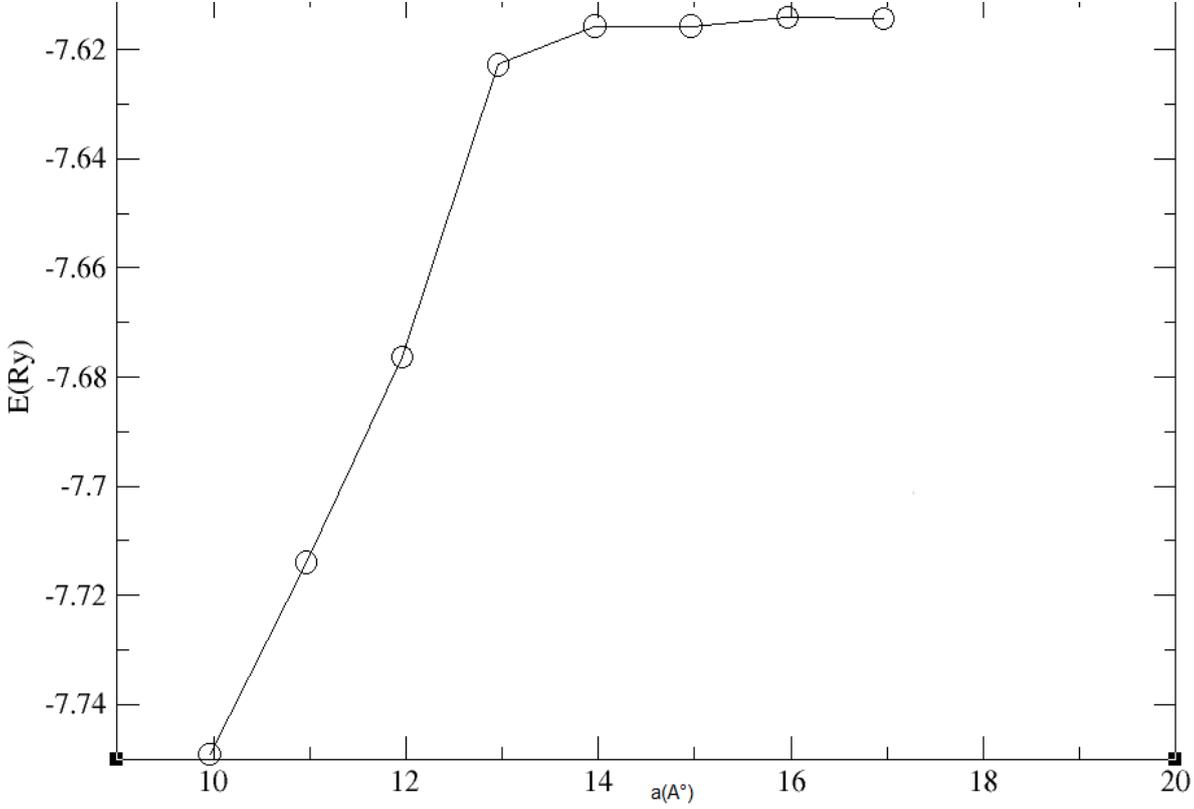
```

&system
 ibrav= 2, celldm(1) = 10.9684784, nat=1 , ntyp= 1,
ecutwfc =30.0,
occupations='smearing', smearing='methfessel-paxton', degauss=0.05,
/
&electrons
conv_thr = 1.0d-8
mixing_beta = 0.7
/
ATOMIC_SPECIES
Ge 72.61 Ge.pz-bhs.UPF
ATOMIC_POSITIONS {crystal}
Ge 0.000000 0.000000 0.00000000
K_POINTS {automatic}
8 8 8 0 0 0
    
```

و النتائج في الجدول التالي:

E(Ry)	a(A°)
-7.74904961	9.96
-7.7139520	10.96
-7.67628932	11.96
-7.62274665	12.96
-7.61567171	13.96
-7.61570712	14.96
-7.64108976	15.96
-7.614248	16.96

والمحنى التالي يمثل نتائج الجدول:



الشكل يمثل تغيرات الطاقة بدلالة a

وتحسب الطاقة حسب العلاقة التالية:

$$E_{\text{COH}} = \frac{E_{\text{TOT}}}{N_{\text{at}}} - E_{\text{at}}$$

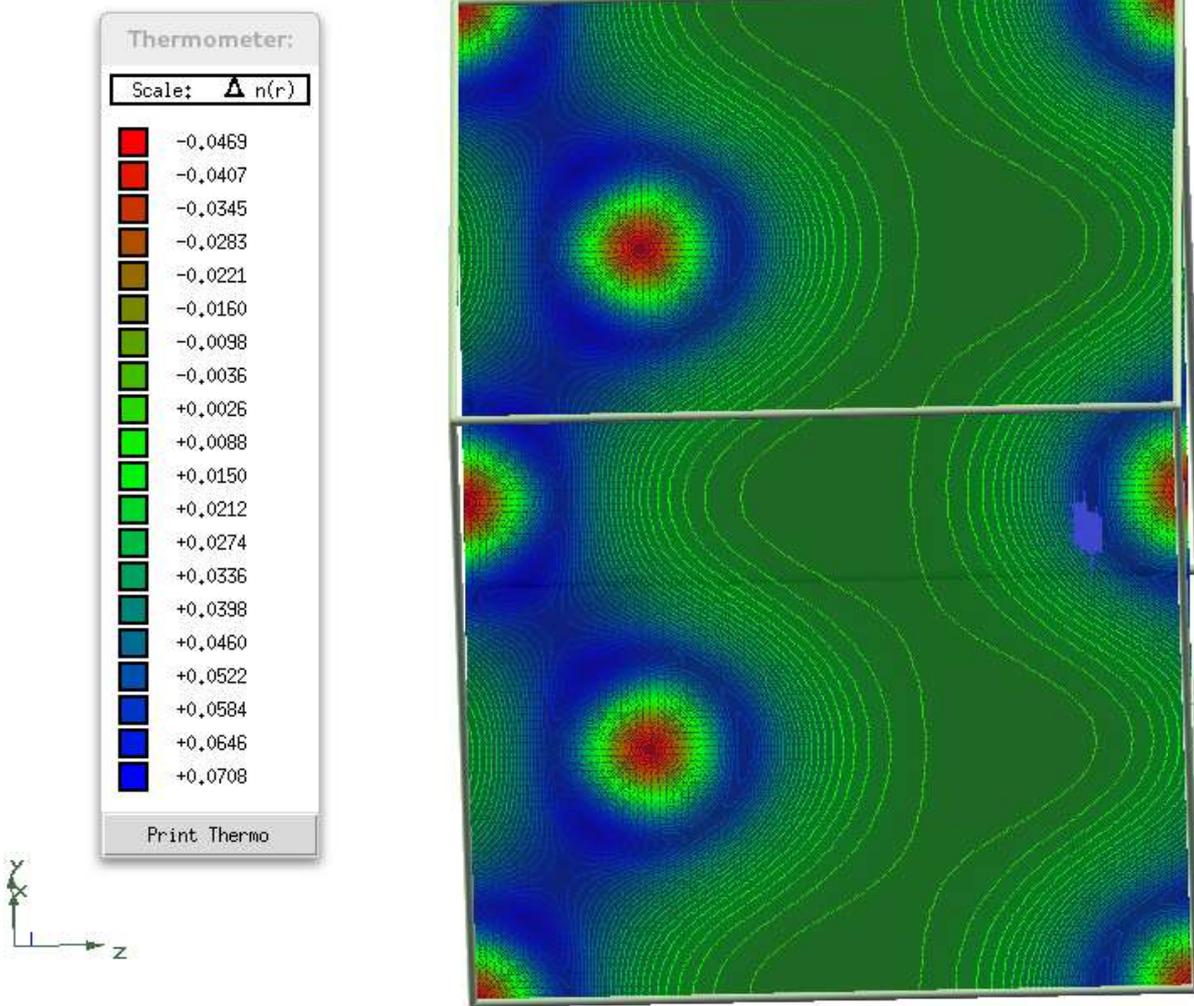
$E_{\text{at}} = -7.614248144 \text{ Ry}$ تؤخذ من المنحنى وهي أقصى قيمة في المنحنى و حيث E_{TOT} هي E_0

ومنه :

$$E_{\text{COH}} = -15.7519 / 8 + 7.61424814 = 5.64526 \text{ Ry}$$

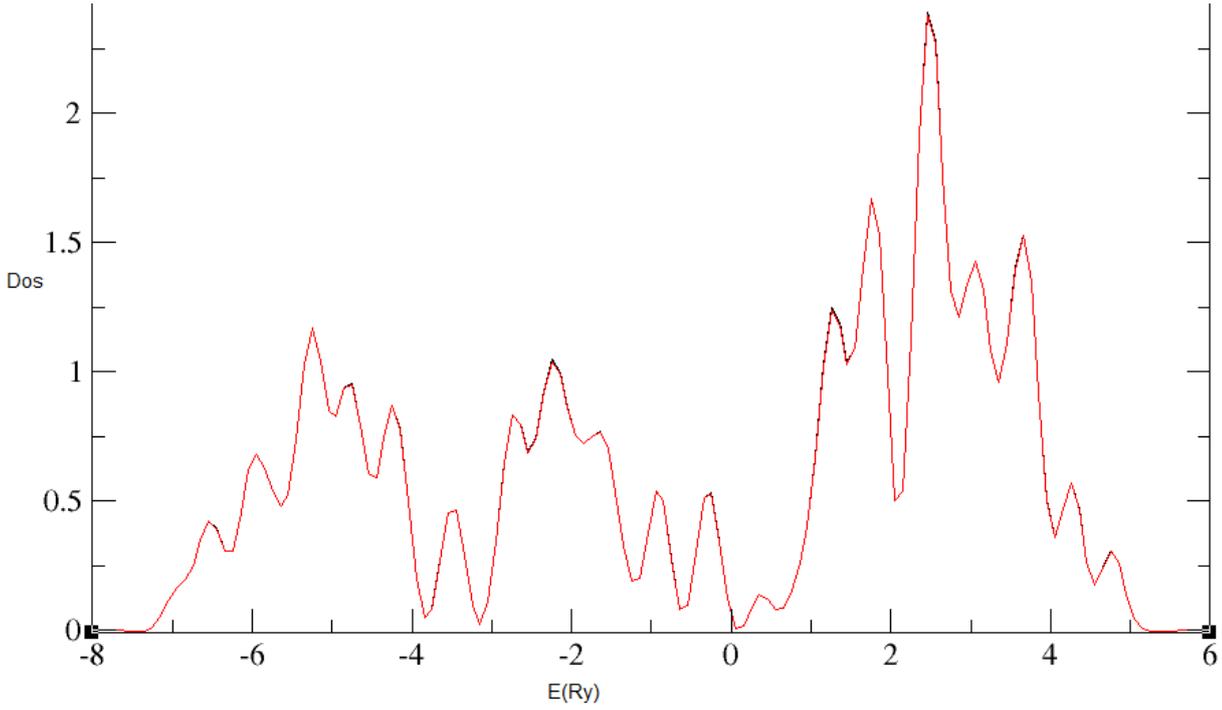
5.III الخصائص الالكترونية :

III.1.5 كثافة الشحنة: وهي التي من خلالها يمكن معرفة الروابط بحيث نأخذ المستوي الذي يشمل الذرة التي احديتها (0,0,0) و (0,25, 0,25, 0,25) والمحدد بالشعاعين (1.1.0) و (0.0.1)



من خلال الشكل يتبين بان الروابط تكافؤية

III.2.5 كثافة الحالات: استعملنا تقريب التدرج المعمم في حساب كثافة الحالات ويتم من خلالها معرفة توزيع الالكترونات, والشكل التالي يمثل كثافة الحالات لبلورة الجرمانيوم.

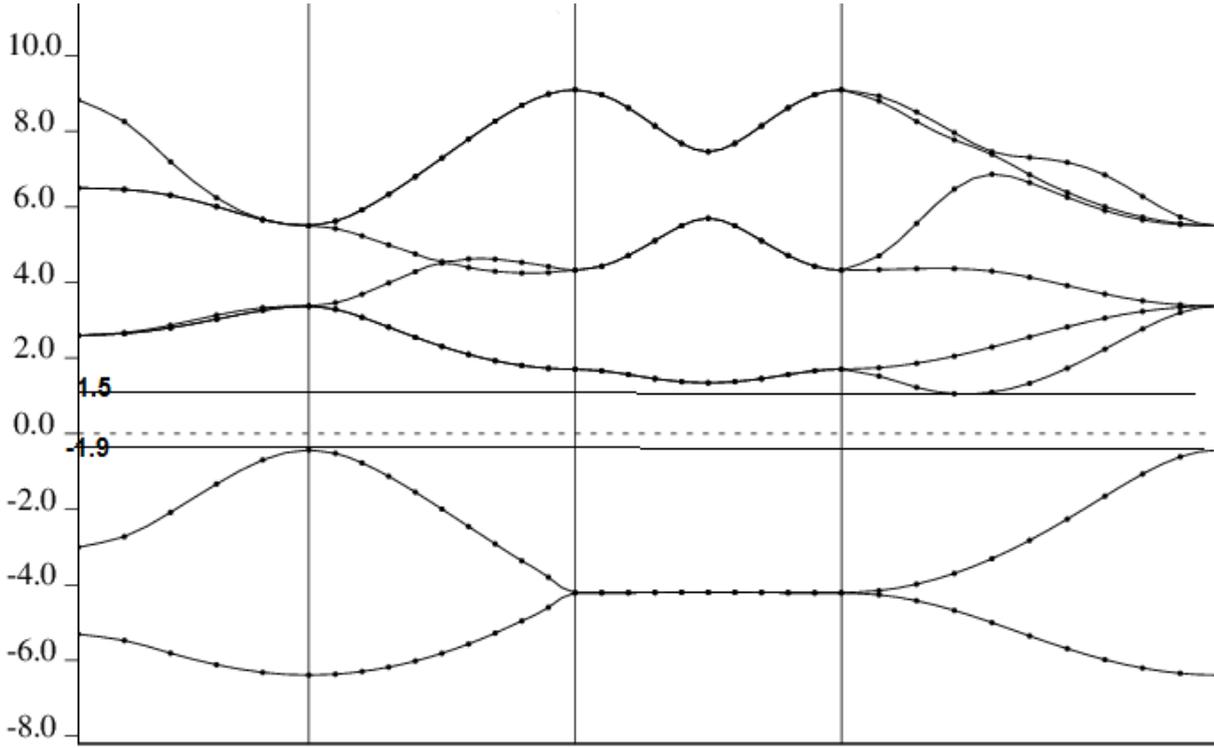


الشكل يمثل كثافة الحالات للجرمانيوم

$$E_{\text{Gap}} = 0.8 - 0.4 = 0.4 \text{ eV}$$

3.5.111 عصابات الطاقة: تم حساب الطاقة تقريبا التدرج المعمم حيث توجد ثلاث عصابات ,

عصابة التكافؤ وعصابة التوصيل وعصابة فجوة الجرمانيوم قيمة فجوة الطاقة مساوية لـ $E = 66.0 \text{ eV}$ وتمثل القيمة النظرية والقيمة التجريبية من خلال المنحنى مساوية لـ $E = 4.0 \text{ eV}$. كما هو موضح في الشكل التالي.



الشكل يوضح العصابات الطاقوية لبلورة الجرمانيوم

4.5.III مناقشة النتائج :

القيمة المأخوذة من المرجع	القيمة المحسوبة	القيمة النظرية	
10.6754717bor	10.9684784bor	10.948bor	a0
207.087GPa	8.62GPa	/	B0
0.74ev	0.4ev	0.66ev	Gap

III 5.5 حساب طاقة الفوتون:

$$\nabla E = h\nu ; \nu = \frac{\Delta E}{h} = \frac{0.4}{6.625 \cdot 10^{-34}} = 6.03 \cdot 10^{-36} \cdot 13.6 = 82.008 \cdot 10^{-36} \text{ HZ}$$

III.6. دمج الإنديوم و الفسفور:

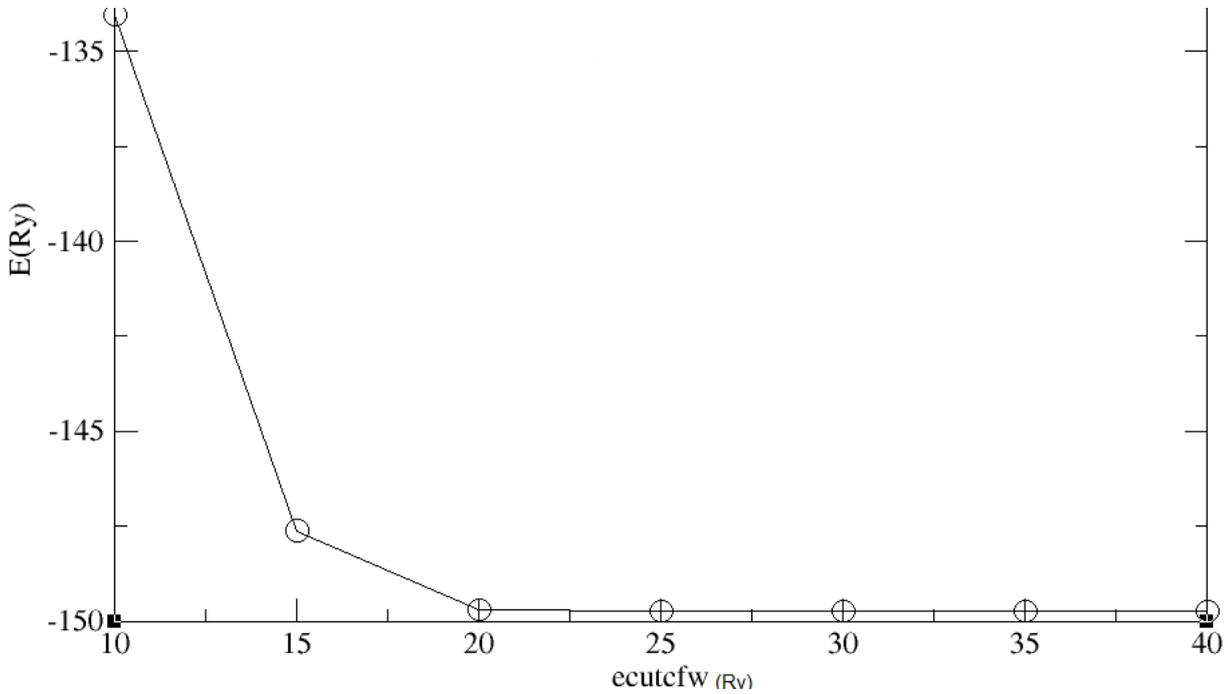
III.6.1 الخصائص البنيوية (optimisation) :

III.6.1.1 حساب euctcfw:

النتائج المتحصل عليها موضحة في الجدول التالي :

E(Ry)	euctcfw
- 134.05594	10
-147.620973	15
-149.7044168	20
-149.72215427	25
-149.72262525	30
-149.72262525	35
-149.7254259	40

ونتائج الجدول ممثلة في المنحنى التالي :



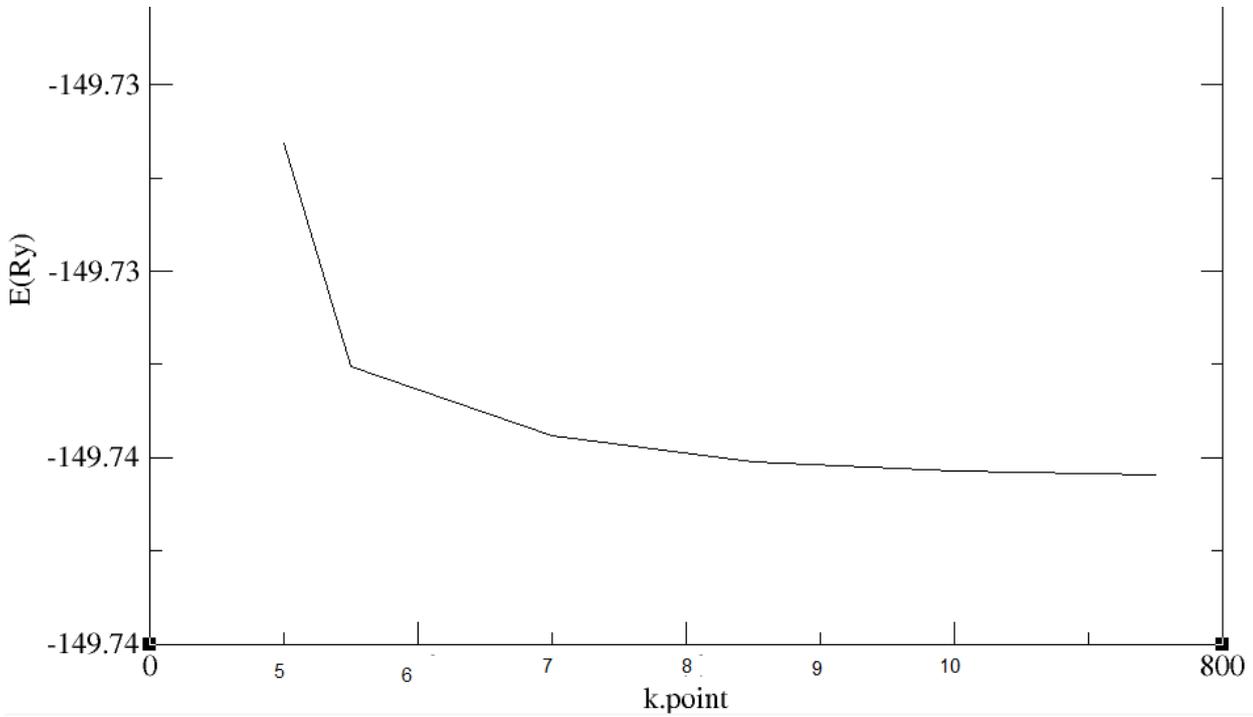
المنحنى يمثل تغيرات الطاقة بدلالة ecutwfc

وبملاحظة المنحنى نلاحظ أن $ecutwfc_{25} = Ry$.

III.2.1.6 حساب k.point

E(Ry)	K.POint
-149.726567	5
-149.7325525	6
-149.73441599	7
-149.73509543	8
-149.73555	9
-149.73547924	10

وننتج الجدول ممثلة في المنحنى التالي :



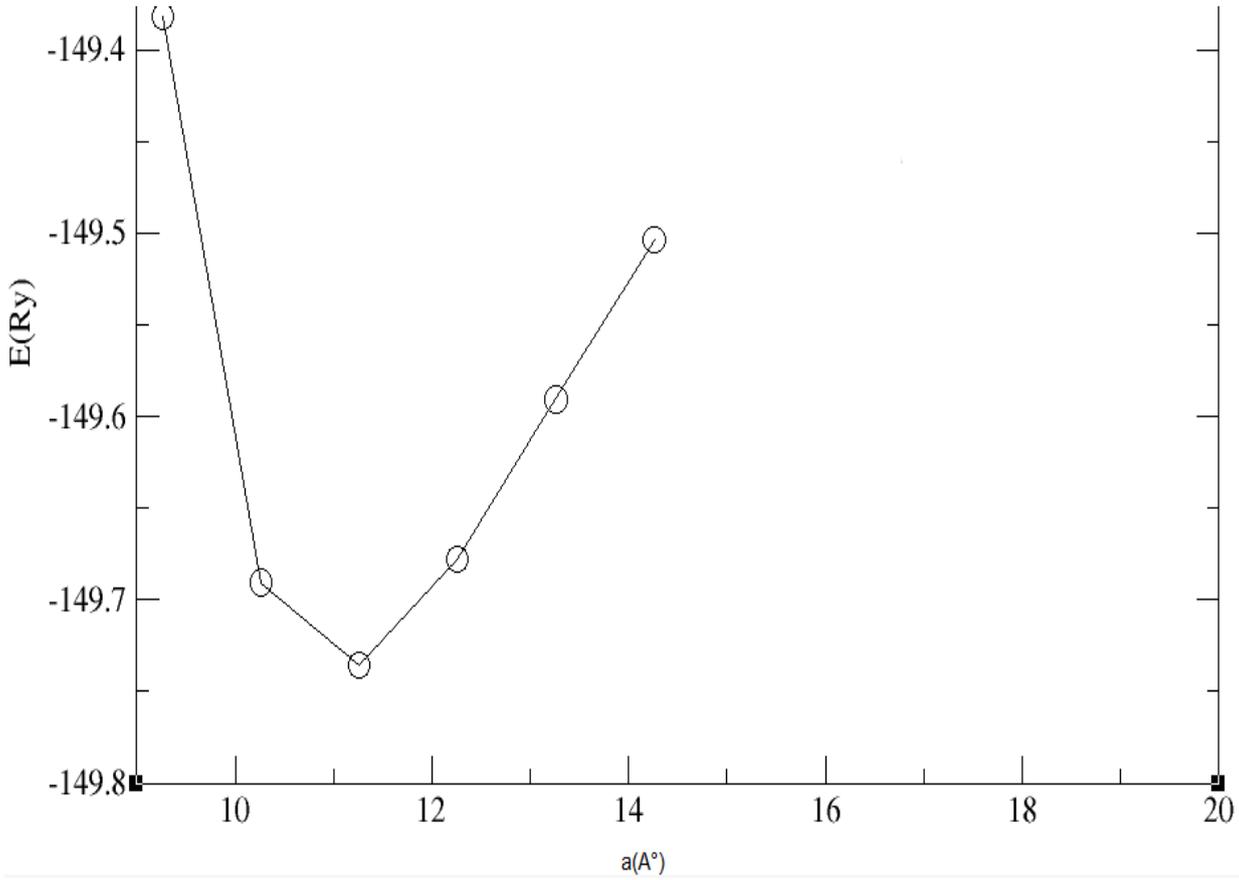
المنحنى يمثل تغيرات الطاقة بدلالة kpoint

وبملاحظة المنحنى نلاحظ أن Kpoint=8

III.3.1.6 حساب ثابت الشبكة:

ثابت الشبكة	E(Ry)
9.26	-149.3817344
10.26	-149.690500
11.26	-149.735488
12.26	-149.6780012
13.26	-149.59060
14.26	-149.503477

وننتائج الجدول ممثلة في المنحنى التالي :



المنحنى يمثل تغيرات الطاقة بدلالة ثابت الشبكة

2.6.III حساب الطاقة بدلالة الحجم:

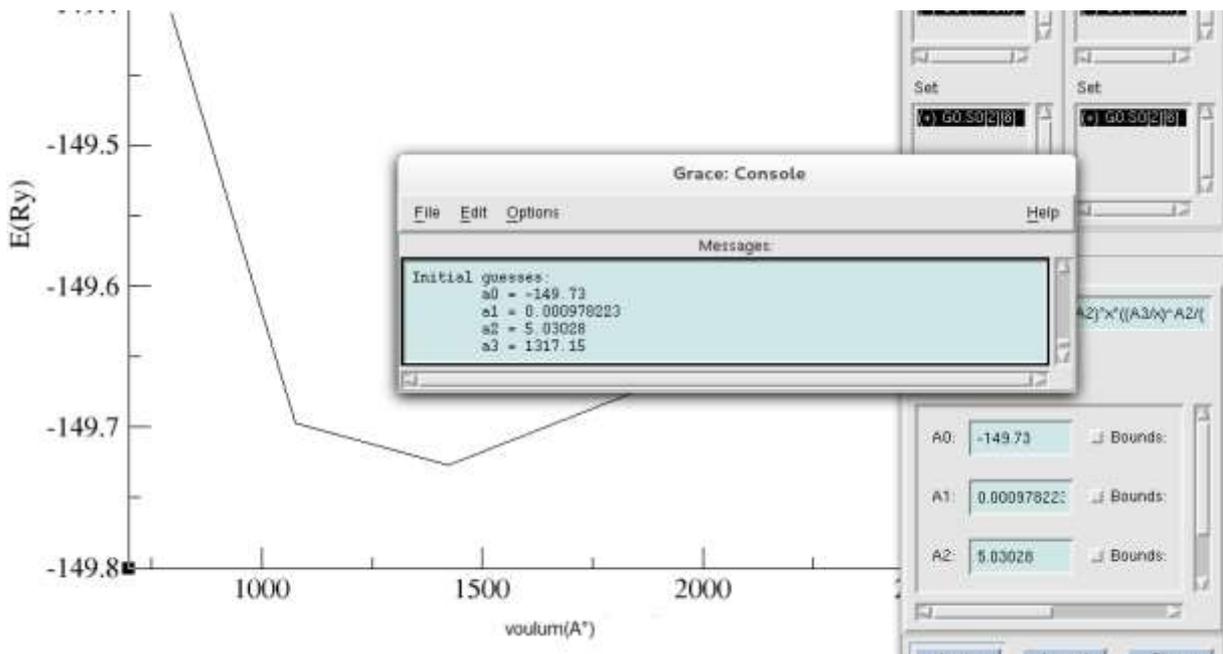
الحجم	E(Ry)
794.02	-149.3817344
1076.890625	-149.690500
1838.265625	-149.735488
2326.203125	-149.6780012
2893.640625	-149.59060

ونتائج الجدول ممثلة في المنحنى أدناه:

وباستعمال معادلة

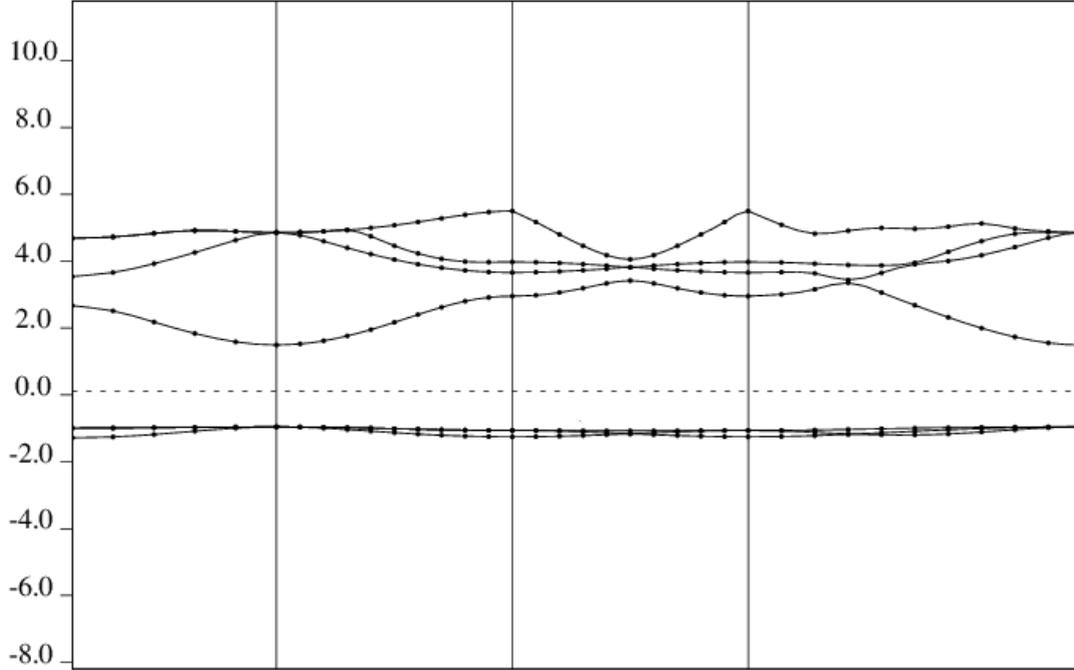
$$E(V) = E_0 + \frac{B_0}{B'_0} V \left[\left(\frac{V_0}{V} \right)^{B'_0} + 1 \right] - \frac{V_0 B_0}{B_0 - 1} \quad [36]$$

لأيجاد ثوابت المنحنى نستعمل المعادلة كما هو موضح في الشكل ومطابقة النتائج النظرية مع التطبيقية



المنحنى يمثل تغيرات الطاقة بدلالة الحجم

3.6. III عصابات الطاقة: الشكل التالي يوضح عصابة الطاقة لدمج الإندسيوم والفسفور



- [1] Thyagaran and A . kGhatak “Laser theory and Applications , “ plenum press , New york ,1981.
- [2] J.wilson and J.F.B. Hawckes ,Laser principles and Applications,1st ed ,perentic Hall Europe ,1981.
- [3] christopherc ,Davis “Laser and Elect ro –optics fundamental and Engineering “1stcambridge university perss, 1996.
- [4] James J.Brophy ,“ Basic Electronics for scientists “5thed,MCGrow- Hill,Inc,1990.
- [5] H.Mathieu, pgysique des semi – conducteur et des compsant s èlectroniques , Massaon , paris,1996.ISBIV: 2-225-85124-7.
- [6] <http://ipn2.epfl.ch/LNS/Lecturs/solid/cours/Appendice A.pdf>.
- [7] A.chovet.p.Masson physique Des semi – conducteurs universitaire de Marseille (2004 - 2005).
- [8] Alain chovet,Pascal Masson cours de physique des semi – conducteues universitaire de Marseille.
- [9] walid balid 81 gmail.com Electronic Elements.
- [10] malvino transistor circuit approximation.
- [11] BRGM- service des Ressources Minèrales 3, avenue chaude Guillemin – BP36009- 45060 orlèans cedexe,FRANCE.
- [12] washio , k(2003).“ SiGe HBT and BiCMOS technologies for optical transmission , transmission Electron Devices “ and wireless communication systems “.
- [13] IM. Zuo, M. Kim, M. O'Keefe, IC.H. Spence. Nature 401 (1999) 49-52.
- [14] [2] D.R Hartree, Proc. Cambridge Philos. Soc. 24(1928) 89-110.
- [15] V.A. Fock. Z. Phys. 61 (1930)126-148 .
- [16] J.C. Slater, Phys. Rey. 35, (1930) 210-211.
- [17] V.FOCK.Naherungsmethod zur losung des quanten – mechanischen mehrorperprobleme Z . phys.,61: 126, 1930.
- [18] E.Fermi. Un methodo statistico per la determinazione di alcune priorieta dell atom . Rend . Accad . Naz .lincei , 6 : , 1927.
- [19] D.R. Hartree. The wave mechanics of an atom with non – coulombic central field : parts i,ii,iii. Proc . Cambridge Phil . soc , 24 : 89 , 111, 426, 1928.

- [20] P . Hohenberg and W. Kohen . Inhomogeneous electron gas . Phys .Rev.,136(3B) : B864-B871, Nov 1964. Doi :10.1103/PhysRev . 136.B864.
- [21] W. Kohn and L. J . Sham. Slf –consistent equations including exchange and correlation effects . Phys. Rev.,140(4A) : A1133-A1138 , Nov 1965.doi :10.1103/Phys Rev .140.A1133.
- [22] L.H.Thomas .The calculation of atomic fields . Pror .C ambridge Phil .Roy .soc ,23:542,1927.
- [23] M.Born . J. R. Oppenheimer , Anne. Phys. 87 ,457(1927).
- [24] D. R. Hartree , Proc . combridge philos. Soc . 24,89(1928).
- [25] V.Fock , Z.Phys .61,126(1930),62,795(1930).
- [26] N.W.Ashcroft , and N.d . Mermin . solid state Phys . Ed .Holt,Rene hartand winston PhiladelPhia,1976.
- [27] Hubert ,Thèse de Doctrat , viversite,de Poiniers , France , (2006).
- [28] Density Functional Theory . S. cottenier. August 6 , (2004).
- [29] J.C.slater , Phys .Rev. 51, 846(1937).
- [30] Engel E, voskosH.Phys Rev B, 47: 13164.(1993).
- [31] C.W. Bauschlicher and H.Partidge, J.Chem .Phys .,103, 1788(1995).
- [32] J.W.Andzelm ,and Ed . J.K. Labanowski,“Density Functional MeThods in Chemsistry “ ,Springer – Verlag , New york(1991)
- [33] D.M. Ceperley and B.J.Alder. Ground state of the electron gaz by a stochastic method .Phys.Rev .Lett.,45(7): 566- 569, Aug 1980 .doi :10.1103/Phys Rev Lett.45.566.
- [34] John P.Perdew, kieron Burk , and Mattias Ernzerhof .Generalized gradient approxi- mation made simple . Phys.Rev.Lett,77(18):3868, oct 1996. doi : 10.1103/Phys-RevLett.77. 3865.
- [35] K. Burke, lP. Perdew and M. Levy, Phys. Rey. A 53 (1996) 2915-2917.
- [36] M.C. Holthausen and W. Koch, A *Chemist's Guide to Density Functional Theory*. Wiley-VCH, Weinheim (Allemagne) (2000).
- [36] S.B.Mirmingham ,ROC.Nac.acad.Sci.USA.30.244.1994
- [37] Etude des propètès structurals electroniques H.berkok

[38] الصوفي (1997) معجم التقنيات التربوية .عمان

[39] اسماعيل (2001) الموسوعة العربية لمصطلحات التربية و تكنولوجيا التعليم .الرياض

[40] زيتون , أساليب تدريس العلوم.عمان (2001)

المخلص

قمنا في هذه المذكرة بدراسة الخصائص البنيوية و الإلكترونية لبلورة النصف الناقل الجرمانيوم و الهدف من هذا العمل هو التحقق من الوسائط الفيزيائية كثافة الشحنة و كثافة الحالات و بنية عصابات الطاقة و الطريقة المستخدمة في هذا العمل برنامج Pwscf وذلك في إطار نظرية الكثافة الوظيفية

Résume

Dans ce la Mémoire Nous avons present un étude sur les propriétés structurantes et électronique la cristal semi – conducteur Germanium le but ce travail est l’investigation des paramètres physiques ;la densité de charge ;la densité d’état ;la structure de bande électronique ;la méthode de calcul utilise c’est PWSCF damas le carde général de la théorie de la fonctionnelle