



WIEN2K

An Augmented Plane Wave Plus Local Orbitals Program
for Calculating Crystal Properties

دراسة الخصائص الضوئية حسب المبدأ الأول لأنصاف النواقل

إشراف الأستاذ:
بوكراع عمار

إعداد الطالب: ساسي حمزة

Email :

hamza1saci@gmail.com

الأستاذ المشرف
المساعد:
داودي باحمد

مقدمة

✓ إن فيزياء المواد لها دور مهم في التطبيقات التكنولوجية الحالية بحيث تطورت في العديد من المجالات وخاصة المواد أنصاف ناقل التي أصبحت ذات أهمية تكنولوجية وتقنية مثل الصمامات الثنائية والترانزستورات والصمامات الثنائية الكهروضوئية وصمامات الليزر و الكواشف وفي الطبقات الرقيقة والخلايا الشمسية. [1]

✓ خلال هذه المذكرة نتناول في الفصل الأول مقدمة عامة حول أنصاف النواقل، والفصل الثاني يتضمن نظرية دالية الكثافة وتقريباتها مع شرح للبرنامج , أما الفصل الثالث حساب الخصائص الضوئية والبنوية ومناقشة النتائج. Wien2k. [2]

المحاكاة العددية (برنامج Wien2K) :

هو برنامج يجري حسابات عددية ، ويتميز بالسرعة و سهولة الاستخدام والتي تستخدم لمعرفة وتميز خصائص بنوية والكترونية وضوئية ويعمل هذا البرنامج تحت نظام تشغيل UNIX . ويمكن من خلاله حساب ما يلي:

- ✓ عصابات الطاقة وكثافة الدوال لسطح فيرمي
- ✓ الكثافة الالكترونية وكثافة السبين وعوامل البنية الالكترونية.
- ✓ الطاقة الإجمالية . القوى النووية وهندسة توازن الذرات في الفضاء.
- ✓ الخصائص البصرية .
- ✓ انبعاث وامتصاص الأشعة السينية .
- ✓ انبعاث وامتصاص الأشعة السينية. [2] [4]

النظرية الدالية للكثافة DFT :

تهدف نظرية الكثافة التابعة لإيجاد الخصائص الحالة الأساسية لنظام مكون من عدد محدد من الالكترونات في حالة تفاعل كولومي مع انويه نقطية وهذا بمساعدة المعلوم الوحيد وهو الكثافة الالكترونية , وتستعمل هذه النظرية دوال موجية أحادية الالكترون . وتستعمل كثافة الالكترون في وصف مميزات النظام وطاقته الدنيا بواسطة الكثافة $\rho(r)$.

[3]

الهدف من الدراسة :

من خلال هذه الدراسة نحاول أن نحقق الأهداف التالية:

- ✓ التوصل إلى النتائج المتوقعة .
- ✓ تحسين من مميزات الخصائص البصرية لأنصاف النواقل.
- ✓ توسيع استعمال الخصائص البصرية.

خطة العمل:

- ✓ مقدمة عامة حول المذكرة.
- ✓ أنصاف النواقل .
- ✓ شرح برنامج Wien2k .
- ✓ الحساب والمناقشة للنتائج المحصل عليها.
- ✓ تحرير وكتابة المذكرة.

المراجع المستعملة

[1] .راضية بن الشيخ مذكرة حساب الخصائص الالكترونية من المبادئ الأولية لعينة VC جامعة قاصدي مرباح ورقلة. 2014 ورقلة.
[2] العالية حامدي ، دراسة نظرية للبنية البلورية والالكترونية لنصف ناقل باستعمال نظرية الكثافة التابعة حالة Ge، مذكرة مستر ، جامعة قاصدي مرباح ، 2012 ورقلة.

[3] Peter Blaha .Karlheinz Schwarz.useras guide WIEN2K 14.2 Vienna .Austria2014

[4] S C otternier Density functional theory and the family of (L)Apw Methods ;a step by step introduction (2004).