جامعة قاصدي مرباح ورقلة
كلية الرياضيات وعلوم المادة
قسم الفيزياء
تخصص فيزياء إشعاعات كاشف وبصريات إلكترونية.

LENREZA

دراسة نظرية مقارنة بين المركبين أكسيد الزنك(ZnO)وأكسيد البريليوم(BeO).

من إعداد الطالبتين: خرفي فاطمة-خرفي مليكة
fof1994023@gmail.com

تحت إشراف الأستاذين: بن طويلة عمر
بن كريمة يمينة

الملخص:

في هذا العمل قمنا بدراسة نظرية لمقارنة بين المركبين أكسيد الزنك (ZnO)و أكسيد البيريليوم(BeO) في إطار نظرية دالية الكثافة DFT باستعمال تقريب التدرج المعمم GGA،مع تحديد الخصائص الضوئية لكل من العنصرين، و للحساب استعملنا برنامج SIESTA.

الكلمات المفتاحية:ZnO،BeO،DFT،الخصائص الضوئية.

المقدمة:

أكسيد الزنكZnO:

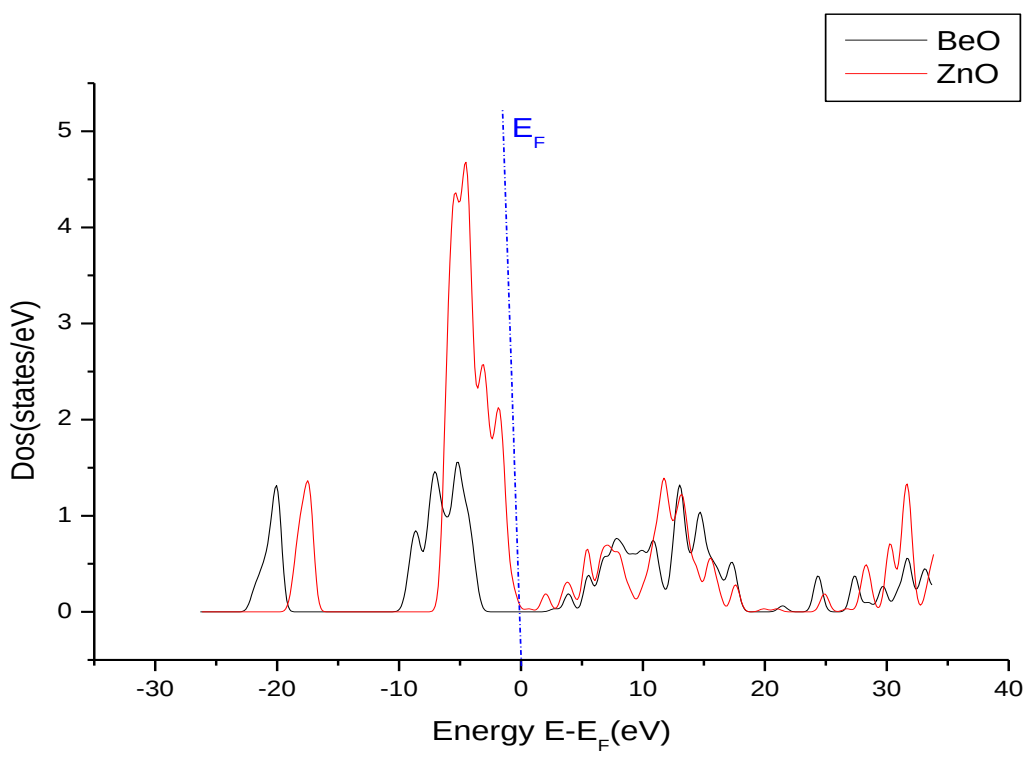
هو أحد مركبات الزنك الكيميائية، وهو مركب صلب أبيض اللون غير سام ،يصنف ضمن أشباه الموصلات ، له استعمال واسع في مجال الالكتروضوئي لامتيازه بفجوة طاقة واسعة واستقرار كيميائي عالي.

أكسيد البيريليومBeO:

هو مركب كيميائي، يكون على شكل بلورات بيضاء، يعد من الاكاسيد المهمة و الفريدة من نوعها لأنها تجمع بين خصائص العزل الكهربائي مع الموصلية الحرارية العالية.

الطريق المستخدمة في الحساب:

من أجل الحساب قمنا بإستعمال برنامج SIESTA المثبت على UNIX ،بإدخال المعطيات (شبه الكمون، برنامج للحساب وملفات الإدخال)في إطار نظرية دالية الكثافةDFT،وتقريب التدرج المعمم GGA.



يمثل الشكل كثافة الحالات الكلية لكل من العنصرين.

جدول يوضح بعض الطاقات للعنصرين بالeV

العنصر	E(total)	E(f)	E(ions)
BeO	-936,4810	-3,69466	1353,389
ZnO	-3883,996	-3,84669	3819,601

المراجع:

[1]Preparation and study of the ZnO-Au, by Qusay A Neama.B.SC Chemistry 2005,University of Al- Mustansiriya.
[2]XO(X= Be, Zn) compounds under high pressure by Omar Mahmood.Isleem 2008.
[3] بن كريمة يمينة. دراسة الخصائص البنيوية و الإلكترونية لعناقيد المعادن النبيلة Agnو Aun (n=2-9)المتوضعة على سطح نصف ناقل ZnO..مذكرة دكتوراه،جامعة قاصدي مرباح ورقلة.(2017).