

جامعة قاصدي مرباح ورقلة  
كلية الرياضيات وعلوم المادة

قسم علوم المادة



مذكرة: ماستر أكاديمي

المجال: علوم المادة

فرع: فيزياء

تخصص: فيزياء المواد

إعداد الطالبة: بن عيدة مريم

الموضوع:

دراسة نظرية لبنية السيليسيوم بلورية وعضودية  $Si_n$

( $n = 2, 3, 4$ ).

نوقشت يوم: ..../..../2015

أمام لجنة المناقشة المكونة من:

رئيسا	أ.تعليم عالي بجامعة قاصدي مرباح ورقلة	د. بوكراع عمار
ممتحنا	أ.مساعد بجامعة قاصدي مرباح ورقلة	أ.بن طويبة عمر
ممتحنا	أ.مساعد بجامعة قاصدي مرباح ورقلة	أ.عياط زهية
مقررا	أ.تعليم عالي بجامعة قاصدي مرباح ورقلة	د. عيادي كمل الدين

السنة الجامعية: 2014م/2015م

# أبي وأمي

إلى من تعاهداني بالتربية منذ الصغر... من تجرعا الكأس فارغا ليسقياني قطرة حب... من كلت أناملهما ليقدما لي لحظة السعادة و حصدا الأشواك عن دربي ليمهدا لي طريق العلم... إلى بلسم قلبي ورياحين حياتي أبي و أمي. حفظكما الله.

إلى من أرى التفاؤل بعينها..... توأم روحي ورفيقة دربي...صاحبة القلب الطيب والنوايا الصادقة أمي قبل أن تكون أختي مباركة. أسأل الله أن يوفقك إلى كل ما يحب ويرضى.

إلى من بهم اكبر وعليهم اعتمد...وأمدوني بالعون... وحفزوني للتقدم إلى إخوتي وأخواتي رعاكم الله ذخرا لي. إلى ملاكي وبسمتي في حياتي...من شملني بالحب والعطف...إلى من حنانه بلسم جراحي ونور ظلمتي إلى ابن أختي الغالي عبد الجليل طرمون. حفظك الله.

إلى الوجوه البريئة... والقلوب الصافية... ومن بضحكاتهم أحيا إلى أبناء وبنات إخوتي وأخواتي صانكم الله من كل بلاء.

إلى من كان دعائهم واهتمامهم سر نجاحي إلى أزواج وزوجاتي إخوتي. أدام الله جمعكم.

إلى الأخوات اللاتي لم تلدهن أمي... و من تحلو بالإخاء وتميزوا بالوفاء سعدت برفقتهم في دروب الحياة..إلى من عرفت كيف أجدهم وعلموني أن لا أضيعهم. صديقاتي أدامكم الله رونقا لحياتي.

إلى كل من صادفت و عرفت وتعلقت... من هم معي ومن قد فقدتهم اسأل الله لهم الرحمة والمغفرة...

إلى هؤلاء جميعا اهدي هذا العمل.

# شكراً وافتخاراً

الحمد لله رب العالمين والصلاة والسلام على قبلة القلوب سيدنا ومولانا محمد وعلى اله وصحبه الغر

الميامين ومن سار على نهجه واقتفى أثره إلى يوم الدين وبعد :

ومن حق النعمة الذكر، وأقل جزاء للمعروف الشكر... فبعد شكر المولى عز وجل المتفضل بجليل النعم

وعظيم الجزاء ...

يجدر بي أن أتقدم ببالغ الامتنان، وجزيل العرفان إلى كل من وجهني، وعلمني، وأخذ بيدي في سبيل إنجاز

هذا العمل .. وأخص بذلك مشرفي الأستاذ الفاضل الدكتور: عيادي كمال الدين الذي قوم، تابع، وصوب بحسن إرشاده لي في كل مراحل العمل، والذي وجدت في توجيهاته حرص المعلم التي تؤتي ثمارها الطيبة بإذن الله

كما أتقدم بخالص الشكر والتقدير إلى الأستاذ الفاضل الدكتور : بوكراع عمار لقبوله تقييم هذا العمل

ولرئاسة اللجنة، وله مني خالص الثناء والتقدير على كل ما قدمه لنا في مراحل دراستنا، وفقه الله ...

كما أتقدم بجزيل الشكر إلى كل من عضوي لجنة المناقشة، الأستاذ الكريم : بن طويلة عمر والأستاذة

الكريمة: عياط زهية لقبولهما مناقشة عملي وتصويبه، وفقهما الله وأدام تألقهما...

كما أحمل الشكر والعرفان إلى كل من أمدني بالعلم والمعرفة، وأسدى لي النصيح والتوجيه في جميع مراحل

تعليمي، وإلى ذلك الصرح العلمي الشامخ متمثلاً في جامعة قاصدي مرباح بورقلة وأخص بالذكر كلية الرياضيات

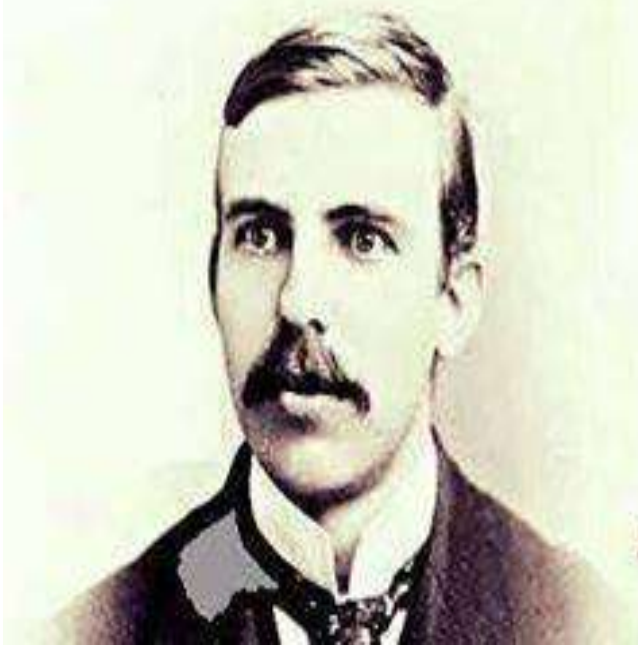
وعلوم المادة قسم الفيزياء، وكل القائمين عليها ...

كما أتوجه بالشكر إلى كل من ساندني بدعواته الصادقة، وتمنياته المخلصة ...

أشكركم جميعاً فجزاكم الله عني خير الجزاء ... وأتمنى من الله عز وجل أن يجعل ذلك في موازين حسناتكم.

العلم الحقيقي هو الفيزياء  
وما عداها جمع طوابع

ارنست ريندرفورد



# خطة العمل

## مقدمة عامة

### القسم الأول: الجزء النظري

الفصل الأول: السيليسيوم

الفصل الثاني: نظرية الكثافة التابعية DFT وطرق الحساب

### القسم الثاني: الجزء التجريبي

الفصل الثالث: نمذجة السيليسيوم ومحاكاته

الفصل الرابع: نتائج المحاكاة ومناقشتها

## الختام

ملخص عام

## قائمة المحتويات:

مقدمة

1..... عامة

### الفصل الأول: السيليسيوم

3..... 1.I. مقدمة

3..... 2.I. اكتشاف السيليسيوم وتواجده في الطبيعة

4..... 3. I. أهم الخصائص الفيزيائية للسيليسيوم

5..... 1.3. I. البنية البلورية

5..... 2.3.I. الفاصل الطاقي

7..... 3.3.I. تركيز حاملات الشحنة

8..... 4.I. تكنولوجيا النانو

8..... 5.I. عناقيد السيليسيوم

9..... 6.I. أهم تطبيقات السيليسيوم

10..... الخلاصة

المراجع

### الفصل الثاني: نظرية الكثافة

11..... 1.II. مقدمة

11..... 2.II. معادلة شرودينغر للجسم الصلب

13..... 3.II. تقريب بورن-او بن هايمر

13..... 4.II. تقريب هار تري-فوك

14..... 5.II. نظرية الكثافة التابعية

15..... 1.5.II. نظريتا هوهانبرغ و كوهان

15..... 2.5.II. معادلة كوهان - شام

16.....	3.5.II. حلول معادلات كوهان- شام.
18.....	6.II. مختلف التقريبات.....
18.....	1.6.II. تقريب الكثافة المحلية.....
19.....	2.6.II. تقريب التدرج المعمم.....
19.....	7.II. أقسام طرق الحساب.....
19.....	1.7.II. طريقة الكمون الكاذب.....
20.....	2.7.II. طريقة كمون كل الالكترونات.....
20.....	8.II. طرق الحساب المعتمدة في برنامج الحساب « WIEN2k ».....
20.....	1.8.II. الأساس APW.....
23.....	2.8.II. مبدأ الأساس LAPW.....
23.....	3.8.II. مبدأ الأساس FP-LAPW.....
24.....	9.II. وصف عام لبرنامج WIEN2k.....
24.....	10.II. استخدامات ومميزات برنامج WIEN2k.....
25.....	11.II. طريقة الحساب باستخدام برنامج WIEN2k.....
28.....	الخلاصة.....
	المراجع.

### الفصل الثالث: نمذجة السيليسيوم

29.....	1.III. مقدمة.....
29.....	2.III. حساب الخصائص البنيوية والالكترونية للسيليسيوم ذو البنية البلورية Si.....
29.....	1.2.III. التعريف بالسيليسيوم Si.....
30.....	2.2.III. إنشاء الملف Si.struct.....
32.....	3.2.III. التهيئة الاولية Initialisation.....
32.....	4.2.III. تهيئة معاملات الحساب Optimisation.....
33.....	1.4.2.III. تهيئة العامل $R_{MT_{MIN}} \times K_{MAX}$ .....
35.....	2.4.2.III. تهيئة العامل k-points.....
37.....	5.2.III. حساب الخصائص البنيوية.....

38.....6.2.III حساب الخصائص الالكترونية.

38.....1.6.2.III حساب بنية عصابة الطاقة.

39.....2.6.2.III حساب كثافة الحالات.

40.....3.III حساب الخصائص البنيوية لعناقيد السيليسيوم  $Si_n$  من اجل  $n=1$  إلى  $n=4$

40.....1.3.III إنشاء الملف  $Si_n.struct$ .

42.....2.3.III التهيئة الأولية Initialisation.

43.....3.3.III تشغيل حلقة SCF.

43.....الخلاصة.

المراجع.

### الفصل الرابع: نتائج المحاكاة و مناقشتها

44.....1.VI مقدمة.

44.....2.VI تفاصيل الحساب لدراسة السيليسيوم بنية بلورية.

44.....1.2.VI الخصائص البنيوية.

47.....2.2.VI الخصائص الالكترونية.

48.....1.2.2.VI بنية العصابة الطاقية.

50.....2.2.2.VI كثافة الحالات.

40.....3.VI الخصائص البنيوية لعناقيد السيليسيوم  $Si_n$  من اجل  $n=1$  إلى  $n=4$

56.....الخلاصة.

المراجع.

57.....الخاتمة.

ملخص عام.



## قائمة الأشكال:

### الفصل الأول: السيليسيوم

- الشكل (1.I): مسحوق السيليسيوم.....3
- الشكل (2.I): سبائك السيليسيوم أحادي البلورة.....4
- الشكل (3.I): البنية البلورية للسيليسيوم.....5
- الشكل (4.I): مخطط عصابات الطاقة لشبه ناقل.....5
- الشكل (5.I): العصابة الممنوعة المباشرة وغير المباشرة.....6
- الشكل (6.I): تغيرات عرض العصابة الممنوعة بدلالة تغير درجة الحرارة لسيليسيوم.....6
- الشكل (7.I): مخطط عصابات الطاقة لسيليسيوم.....7
- الشكل (8.I): تغير تركيز حاملات الشحنة الذاتية بدلالة درجة الحرارة لسيليسيوم.....7

### الفصل الثاني: نظرية الكثافة التابعية DFT وطرق الحساب

- الشكل (1.II): مخطط حلول معادلات كوهان-شام.....17
- الشكل (2.II): شكل كمون MT.....21
- الشكل (3.II): مخطط يوضح خوارزمية برامج التهيئة وحلقة SCF.....28

### الفصل الثالث: نمذجة السيليسيوم ومحاكاته

- الشكل (1.III): البنية البلورية للسيليسيوم باستخدام برنامج XCRYSDEN.....29
- الشكل (2.III): واجهة إدخال بيانات السيليسيوم انطلاقاً من « w2web ».....31
- الشكل (3.III): واجهة حفظ بيانات السيليسيوم انطلاقاً من « w2web ».....31
- الشكل (4.III): نافذة تهيئة الحساب في البرنامج WIEN2k.....32
- الشكل (5.III): نافذة مدخلات حساب حلقة SCF.....34
- الشكل (6.III): منحنى تغيرات الطاقة الكلية E بدلالة الجداء  $R_{MT_{MIN}} \times K_{MAX}$ .....35
- الشكل (7.III): منحنى تغيرات الطاقة الكلية E بدلالة العامل k-points.....36

الشكل (8.III) : نفاذ "optimize volume" .....37

الشكل (9.III) : بواسطة برنامج  $Si_n$  بنية العناقيد XCRYSDEN .....42

الفصل الرابع: نتائج المحاكاة و مناقشتها

الشكل (1.VI) : تغيرات الطاقة الكلية بالنسبة للحجم للسيليسيوم بتقريب GGA .....45

الشكل (2.VI) : تغيرات الطاقة الكلية بالنسبة للحجم للسيليسيوم بتقريب LDA .....45

الشكل (3.VI) : نتائج التحسين للخصائص البنوية للسيليسيوم حسب معادلة مورناغان وبتقريب GGA .....46

الشكل (4.VI) : نتائج التحسين للخصائص البنوية للسيليسيوم حسب معادلة مورناغان وبتقريب LDA .....46

الشكل (5.VI) : منطقة بريلوان الأولى للسيليسيوم .....48

الشكل (6.VI) : عصابة الطاقة للسيليسيوم بتقريب GGA .....49

الشكل (7.VI) : عصابة الطاقة للسيليسيوم بتقريب LDA .....49

الشكل (8.VI) : كثافة الحالات للسيليسيوم بتقريب GGA .....51

الشكل (9.VI) : كثافة الحالات للسيليسيوم بتقريب LDA .....51

الشكل (10.VI) : كثافة الحالات الكلية والجزئية للسيليسيوم بتقريب LDA .....51

الشكل (11.VI) : البنية الهيكلية لعناقيد السيليسيوم  $Si_n$  المتحصل عليها بواسطة برنامج XCRYSDEN .....53

الشكل (12.VI) : ذرة سيليسيوم المتحصل عليها بواسطة برنامج XCRYSDEN .....54

قائمة الجداول:

الفصل الأول: السيليسيوم

الجدول (1.I): أهم الخصائص الكهربائية للسيليسيوم عند 300K.....8

الفصل الثاني: نظرية الكثافة التابعية DFT وطرق الحساب

الجدول (1.II): تطورات نظرية الكثافة التابعية DFT.....14

الفصل الثالث: نمذجة السيليسيوم ومحاكاته

الجدول (1.III): المدخلات الأولية لإنشاء الملف Si.struct.....30

الجدول (2.III): المعاملات الثابتة المأخوذة لتحسين  $R_{MTMIN} \times K_{MAX}$ .....33

الجدول (3.III): تغيرات الطاقة الكلية  $E(Ry)$  بدلالة تغير الجداء  $R_{MTMIN} \times K_{MAX}$ .....34

الجدول (4.III): المعاملات الثابتة المأخوذة لتحسين عامل k-points.....35

الجدول (5.III): تغيرات الطاقة الكلية  $E(Ry)$  بدلالة تغير العامل ل k-points.....36

الجدول (6.III): قيم الطاقة لمستوي فرمي  $E_f$  حسب التقريبين LDA و GGA.....39

الجدول (7.III): طول الرابطة  $R_{Si-Si}$  التجريبي.....40

الجدول (8.III): المدخلات الأولية لإنشاء الملف  $Si_n$ .struct.....41

الجدول (9.III): المعاملات المأخوذة للحساب.....42

الفصل الرابع: نتائج المحاكاة و مناقشتها

الجدول (1.VI): نتائج اختبارات التقارب المعتمدة في الحساب.....44

الجدول (2.VI): ثابت الشبكة البلورية, معامل الانضغاطية و مشتقه الأول بالنسبة للسيليسيوم.....47

الجدول (3.VI): قيم فجوة الطاقة للسيليسيوم النظرية و التجريبية حسب التقريبين LDA و GGA.....50

الجدول (4.VI): طاقة عناقيد السيليسيوم حسب تقريب LDA.....53

الجدول (5.VI): طاقة ذرة سيليسيوم معزولة حسب تقريب LDA.....54

الجدول (6.VI): النتائج المتحصل عليها بالنسبة لعناقيد السيليسيوم النظرية و التجريبية حسب تقريب LDA.....55

## مقدمة عامة

تلعب فيزياء المواد دورا مهما في التطبيقات التكنولوجية. و قد طور هذا الدور في كثير من المجالات. وتعتبر أشباه النواقل من

بين أهم المواد في التطبيقات التكنولوجية والتقنية, لما تتمتع به من خصائص ومميزات تجعل منها أساس لصناعة المركبات الضوئية والالكترونية. و من أهمها مادة السيليسيوم.

يعد السيليسيوم احد العناصر الشائعة الوجود كمكون رئيسي للتراب والأحجار. تعددت وتوعدت مجالات استخداماته إذ يدخل بشكل كبير في المجالات التقنية. و يتزايد الاهتمام بهذه المادة كل يوم لكونها العصب الرئيسي في تكنولوجيا الميكرو المستخدمة في الأنظمة التكنولوجية كرقائق السيليسيوم التي تدخل في جل المركبات الضوئية, و قد تزايد هذا الاهتمام بشكل اكبر عند ظهور ما يسمى بتكنولوجيا النانو التي تقوم على استخدام عناقيد السيليسيوم في التقنيات الحديثة.

من خلال هذا العمل نسعى لدراسة نظرية للسيليسيوم ذو البنية البلورية وعناقيدته  $Si_n$  من اجل  $n=1$  إلى  $n=4$ . وهذا باستخدام برنامج المحاكاة **WIEN2k** الذي يعتبر من بين أهم برامج المحاكاة المستخدمة في فيزياء الجسم الصلب والكيمياء الكمية. والذي نهدف من خلاله إلى تحديد ودراسة مختلف الخصائص الفيزيائية للسيليسيوم وعناقيدته. لذا ارتأينا أن تكون خطة دراستنا التي سنعمدها تتضمن مقدمة عامة لتقديم العمل والخطة الموضوعية للدراسة وما نهدف إلى تحقيقه وأربعة فصول لنختتمها بخاتمة بمثابة خلاصة نبين من خلالها مختلف النتائج المتوصل إليها:

في الفصل الأول الذي عنوانه ب: **السيليسيوم** استعرضنا فيه وصف للسيليسيوم وخصائصه الفيزيائية التي جعلت منه الأساس في المركبات الضوئية و الالكترونية. و كذلك إلى تكنولوجيا النانو التي تعمل على تطوير المركبات الضوئية من خلال استخدام عناقيد السيليسيوم وفي آخر الفصل قدمنا أهم تطبيقات السيليسيوم في مختلف الصناعات وأفاق هذه الصناعات المستقبلية إذا ما استخدمنا عناقيد السيليسيوم.

تضمن الفصل الثاني وصف لنظرية الكثافة التابعية **DFT** وتطورها التاريخي. والتعريف بمختلف طرق الحساب المستخدمة في برامج المحاكاة وكذلك إلى وصف عام للبرنامج المستخدم. والذي كان بعنوان: **نظرية الكثافة التابعية DFT وطرق الحساب.**

الفصل الثالث الذي كان بعنوان: **نمذجة السيليسيوم ومحاكاته** وتطرقنا فيه إلى ذكر ووصف لمختلف مراحل وطرق الحساب لمختلف الخصائص ولكل من السيليسيوم ببنية بلورية و في الحالة العنقودية.

الفصل الرابع الذي عنون ب: **نتائج المحاكاة لمناقشتها**. عرضنا فيه ما تحصلنا عليه من نتائج وقارناه مع القيم التجريبية والدراسات النظرية السابقة من اجل مناقشة النتائج وتفسيرها. وختمنا الدراسة بخاتمة لكل النتائج المتحصل عليها.

## الفصل الأول 1

# السياسيوم

**1.1. مقدمة:**

يتزايد الاهتمام بمادة السيليسيوم لكونها الأساس في تكنولوجيا الميكرو المستخدمة في الأنظمة التكنولوجية كرقائق السيليسيوم التي تدخل في حل المركبات الضوئية و الالكترونية, و قد تزايد هذا الاهتمام بشكل اكبر عند ظهور تكنولوجيا النانو التي تقوم على استخدام عناقيد السيليسيوم في التقنيات الحديثة. [T1]

من خلال هذا الفصل سنتطرق إلى التعريف بالسيليسيوم و أهم خصائصه الفيزيائية التي تؤهله لان يكون العصب الرئيسي في الصناعات التكنولوجية الحديثة, والى استخدامات عناقيد في مجال تكنولوجيا النانو. كما استعرضنا في الأخير أهم تطبيقاته الصناعية.

**2.1. اكتشاف السيليسيوم وتواجده في الطبيعة:**

اكتشف السيليسيوم في سنة 1824م من قبل J. J. Berzelius في ستوكهولم بالسويد. ويعتبر مكون رئيسي للتراب والأحجار فهو يتواجد بوفرة على كوكب الأرض يأتي في المرتبة الثانية بعد الأوكسجين بنسبة 28%. ونجده بشكل اوكسيد  $SiO_2$ , الصوان أو بشكل المسحوق الشكل (1.1). [T2] يقع السيليسيوم في العمود الرابع من الجدول الدوري للعناصر إذ تتسم عناصر هذا العمود بخاصية فريدة في هياكلها الالكترونية وهي احتوائها على أربع الكترونات في طبقتها الخارجية. [L1]



الشكل (1.1): مسحوق السيليسيوم.

مثل العديد من العناصر الأخرى يمكن للسيليسيوم في درجة حرارة الغرفة أن يتواجد في هياكل مختلفة، قد يكون في بنية

غير متبلورة أو بنية بلورية (أحادية أو متعدد البلورة): [T3] [T4]



➤ السيليسيوم أحادي البلورة:

يتم الحصول على السيليسيوم أحادي البلورة باستخدام طريقة السحب في البوتقة أو طريقة منطقة الذوبان بحيث يمكننا الطريقتان من الحصول على سبائك أحادية البلورة وعالية النقاوة. لها أهمية بالغة في مجال الصناعة خصوصا في الخلايا الفوتوفولطية.



الشكل (2.I): سبائك السيليسيوم أحادي البلورة. [T4]

➤ السيليسيوم متعدد البلورة: [T3]

السيليسيوم متعدد البلورة عبارة عن سبيكة بما عدد هائل من البلورات الكبيرة, مفصولة بحبيبات بينية. هذه السبيكة اقل تجانسا من السيليسيوم أحادي البلورة هذا ما يجعل مردوده الطاقوي اقل لكن تصنيعه أسهل من تصنيع بقية الأنواع الأخرى.

➤ السيليسيوم اللا بلوري (الامورفي):

السيليسيوم اللا بلوري يتميز ببنية عشوائية. و ما يميز هذا النوع هو امتلاكه معامل امتصاص ضوئي اكبر بألف مرة من السيليسيوم البلوري فسمك طبقة 0.3µm كافية لامتناس اغلب الطيف المرئي.

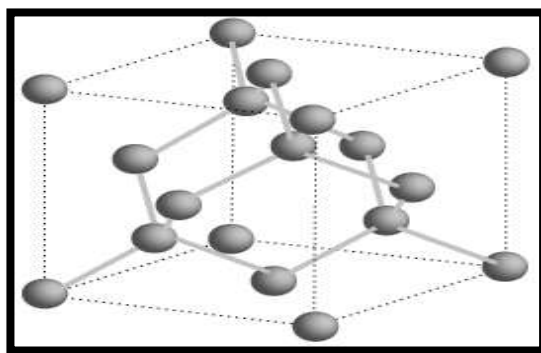
### 3.I. أهم الخصائص الفيزيائية للسيليسيوم:

يعتبر السيليسيوم احد أهم أشباه النواقل في صناعة العناصر الالكترونية والضوئية. وذلك لما يتميز به من خصائص فيزيائية تؤهله لذلك وتميزه عن بقية المواد من أبرزها:

### 1.3.I. البنية البلورية:

تنظم ذرات السيليسيوم في شبكة بلورية من نوع الألماس بحيث تتكون الشبكة البلورية للألماس من شبكتي برفيه مكعبتين مركزتي الوجوه CFC ومتداخلتين كل منهما مزاحة في اتجاه قطر الخلية المكعبة بمقدار ربع طول القطر الرئيسي. ويمكن اعتبارها شبكة مكعبة ممركرة الأوجه ولها قاعدتان، إحداهما عند نقطة الأصل، والأخرى عند  $(\frac{a}{4}, \frac{a}{4}, \frac{a}{4})$  ورقم التناسق (أي عدد أقرب الجيران من ذرة ما) هو أربعة. ترتبط الذرات مع بعضها بروابط تساهمية كما في الشكل (3.I). [T3]

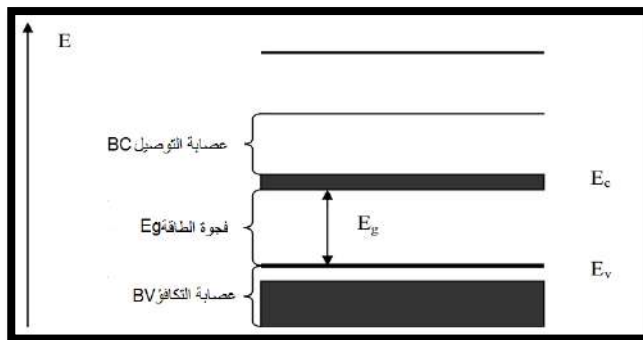
[L2]



الشكل (3.I): البنية البلورية للسيليسيوم. [L3]

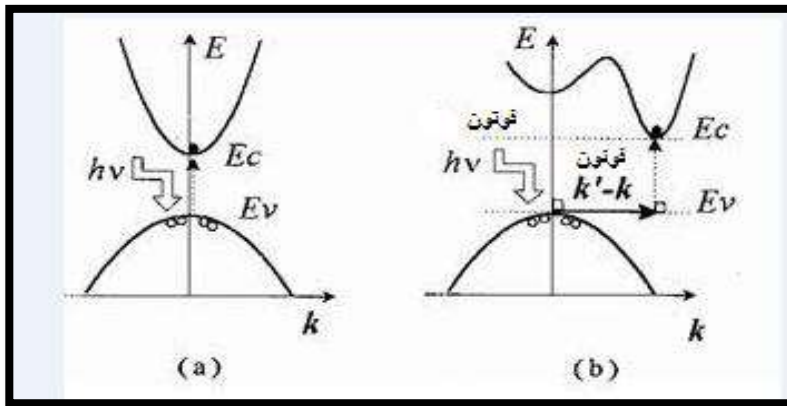
### 2.3.I. الفاصل الطاقى:

أشباه النواقل هي مواد تتميز بصغر نسبي للفاصل الطاقى (فجوة الطاقة) الشكل (4.I) بحيث تتمكن الطاقة الحرارية من إثارة الكترولونات عصابة التكافؤ لنقلها إلى عصابة التوصيل وتصبح بذلك ناقلة عند  $T > 0 K$ ، تسمى شبه ناقلة لان ناقليتها اقل بكثير مما هي عليه في النواقل، لكنها تزداد بزيادة درجة الحرارة، على عكس النواقل. [L4]



الشكل (4.I): مخطط عصابات الطاقة لشبه ناقل. [T4]

وتنقسم أشباه النواقل إلى نوعين على حسب تموضع كل من عصابة التكافؤ و عصابة التوصيل، فإذا تم انتقال الإلكترون الحر من عصابة التكافؤ إلى عصابة التوصيل أو العكس دون تغيير كمية حركته تسمى أشباه النواقل في هذه الحالة بأشباه النواقل ذات عصابة ممنوعة مباشرة (a)، في حين إذا تم الانتقال عن طريق حالات طاقة منتشرة داخل الفجوة بحيث يكون الانتقال مصحوب بتغير في كمية الحركة يكون شبه الناقل في هذه الحالة ذو عصابة ممنوعة غير مباشرة (b). الشكل (5.I). [L3]



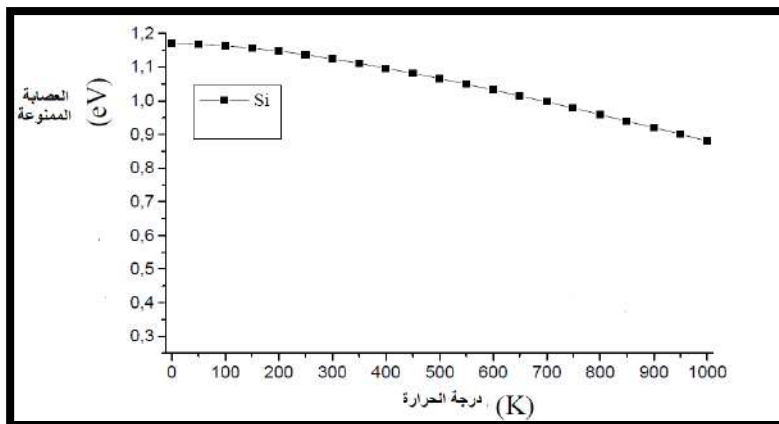
الشكل (5.I): العصابة الممنوعة المباشرة وغير المباشرة. [L3]

وباعتبار السيليسيوم شبه ناقل كما اسلفنا الذكر فانه يتميز بفاصل طاقي  $E_g$  يتغير تبعا لدرجة الحرارة الشكل (6.I) وفق

العلاقة التالية:

$$E_g(\text{eV}) = 1.17 - 4.73 \cdot 10^{-4} \frac{T^2}{T + 663} \quad (1. I)$$

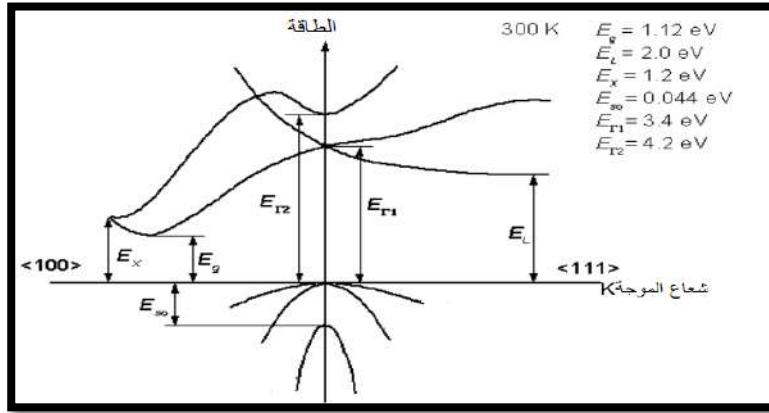
حيث  $T$  تمثل درجة الحرارة المطلقة بالكلفن K.



الشكل (6.I): تغيرات عرض العصابة الممنوعة بدلالة تغير درجة الحرارة لسيليسيوم. [T2]

الشكل (7.I) يمثل المخطط التجريبي لعصابات الطاقة المميزة للسيليسيوم وهذا عند درجة حرارة 300K بحيث يظهر أن

عرض العصابة المنوعة ( فجوة الطاقة) يساوي 1.12eV [T4]



الشكل(7.I): مخطط عصابات الطاقة لسيليسيوم. [T4]

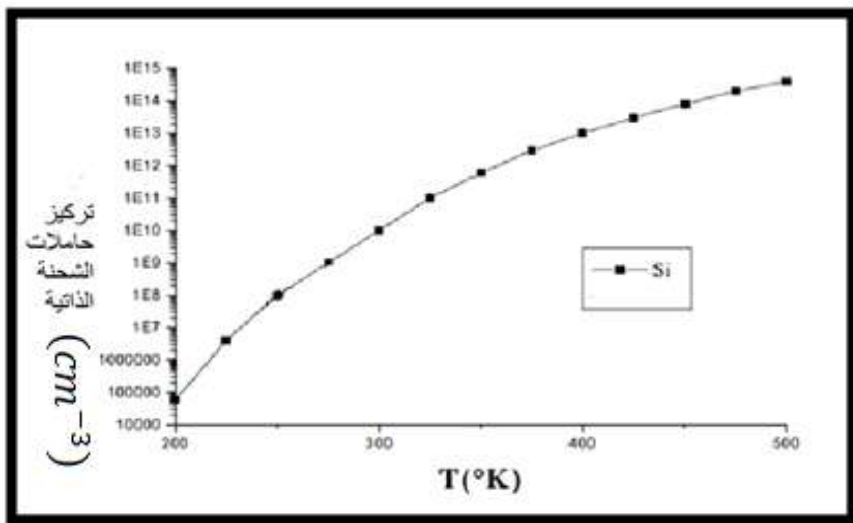
### 3.3.I. تركيز حاملات الشحنة:

يتميز السيليسيوم بحاملات ذاتية للشحنة والمتمثلة في الثقوب في عصابة التكافؤ والالكترونات في عصابة التوصيل وتتغير

كثافة حاملات الشحنة الذاتية  $n_i$  تبعا لدرجة الحرارة بالنسبة للسيليسيوم الشكل(8.I) وفق العلاقة التالية : [T2]

$$n_i(cm^{-3}) = \sqrt{1.5 \cdot 10^{33} \cdot T^3 \exp\left(-\frac{1.21}{K \cdot T}\right)} \quad (2.I)$$

K: ثابت بولتزمان. و T: درجة الحرارة بالكلفن.



الشكل(8.I):تغير تركيز حاملات الشحنة الذاتية بدلالة درجة الحرارة لسيليسيوم. [T2]

الجدول (1.I) يبين أهم خصائص السيليسيوم الكهربائية عند 300K.

الجدول (1.I): أهم الخصائص الكهربائية للسيليسيوم عند 300K. [T2]

الخصائص الكهربائية عند 300 K		Si
عرض العصابة الممنوعة $E_g$ (eV)		1.12
تركيز الذرات ( $atom/cm^3$ )		$5.10^{22}$
التركيز الذاتي لحاملات الشحنة ( $atom/cm^3$ )		$1.45.10^{22}$
حركية حاملات الشحنة ( $cm^3/V.S$ )	$\mu_e$	1350
	$\mu_p$	480

لقد استغل السيليسيوم بشكل كبير وواسع في تكنولوجيا الميكرو المستخدمة في الانظمة التكنولوجية خصوصا في المركبات الضوئية والالكترونية، لما يتميز به من خصائص مهمة. الا انه وجد ان هذه الخصائص تتغير وبشكل كبير اذا ما تغير حجم السيليسيوم على سلم صغير جدا أي في حالة وجوده بشكل عنقايد. اين يدخل في الاستخدام في تكنولوجيا النانو التي حلت محل الميكرو. [T1]

#### 4.I. تكنولوجيا النانو:

تعتبر تكنولوجيا النانو بديلا عن تكنولوجيا الميكرو حيث تمكننا من صناعة الأجهزة الكهروميكانيكية و الالكترونية بحجم اصغر بمقدار ألف مرة من حجم أجهزة الميكرو، مما يؤدي إلى تغيير أداء تلك الأجهزة للأفضل. [T1]

#### 5.I. عنقايد السيليسيوم:

تعرف عنقايد السيليسيوم على أنها تجمعات صغيرة من ذرات السيليسيوم تتميز بخصائص فيزيائية وكيميائية مختلفة تماما عن السيليسيوم الصلب إذ تتغير هذه الخصائص بتغير حجم العنقود. وتلعب هذه العنقايد دور مهم في العديد من التطبيقات الصناعية و قد طورت تقنيات متقدمة جدا في السنوات الأخيرة لإنتاج وتحليل العنقايد لدراسة خصائصها البنيوية والالكترونية والمغناطيسية. [T1]

**6.I. أهم تطبيقات السيليسيوم:**

نظرا للخاصية الكهربائية المميزة للسيليسيوم وهي كونه عازل في درجات الحرارة المنخفضة وشبه ناقل في درجات الحرارة العادية وتزداد ناقليته بزيادة درجة الحرارة وكذلك عند اضافة كميات ضئيلة من عناصر اخرى أي تطعيمه بشوائب. هذه الخاصية تجعل منه الاساس في صناعة الرقائق الالكترونية الصغيرة التي يقل تاثرها بعوامل الرطوبة، الاهتزازات و الصدمات. و من بين اهم تطبيقات السيليسيوم هي: [L4]

- ✓ يستخدم في صناعة الخلايا الشمسية.
- ✓ يستخدم في نطاق واسع في الاجهزة الالكترونية الدوائر الكهربائية بما في ذلك رقائق الكمبيوتر و المعالجات, اجهزة التلفاز LCD وكذلك شاشات الكمبيوتر المشكلة من شرائط رقيقة من السيليسيوم غير المتبلور .
- ✓ الديود الباعث للضوء LED. الذي يستخدم في شاشات العرض و في أجهزة كثيرة مثل: أجهزة التلفاز وأجهزة الراديو والهواتف والآلات الحاسبة والساعات. وبعض أنواع الليزر الأخرى.
- ✓ الترانزستورات الضوئية التي تصنع بشكل دوائر متكاملة صغيرة الحجم وذلك لرفع الحساسية, حيث تستخدم عندما تكون قدرة الضوء منخفضة. تتوفر بعدة أنواع. [L5]
- ✓ أجهزة التحكم وأنظمة الإنذار.

كل هاته التطبيقات المذكورة للسيليسيوم على سبيل المثال لا الحصر مهمة جدا وقد أحدثت نقلة نوعية في مجال التكنولوجيا إلا انه يمكننا التطوير فيها أكثر وبشكل مذهل إذا ما استخدمنا هذه التطبيقات في تكنولوجيا النانو التي تستند إلى التصنيع انطلاقا من عنقيد السيليسيوم. فتطبيقاتها في عالم الالكترونيات والليزر ينتج لنا أجهزة ذات سرعة عالية في نقل البيانات, جودة في الأداء وذات أحجام صغيرة فالشرائح التي تنتجها لها القدرة على حفظ المعلومات أكثر بآلاف المرات من الذاكرة الموجودة حاليا. [T1]

## ✓ الخلاصة:

من خلال ما تطرقنا إليه في هذا الفصل نجد أن السيليسيوم يتميز بمجموعة من الخصائص الفيزيائية أهمها وجود فاصل طاقي يفصل بين قمة عصابة التكافؤ وأدى عصابة التوصيل يدعى بالعصابة الممنوعة وهي غير مباشرة في حالة السيليسيوم. كما انه يتميز بحاملات ذاتية للشحنة متمثلة في الثقوب في عصابة التكافؤ والالكترونات في عصابة التوصيل بتركيز متساوي لكل منهما. وتزداد موصليته بزيادة درجة الحرارة أو عن طريق عملية التطعيم أين يكون التوصيل في هذه الحالة غير ذاتي. وان نوع العصابة الممنوعة للسيليسيوم وإمكانيتها في التحكم في موصليته يجعل منه عنصر جد مهم في الصناعات الضوئية والالكترونية خاصة في صناعة الكواشف الضوئية. ومن اجل الحصول على مركبات ضوئية والكترونية بخصائص مذهلة تواكب تطورات تكنولوجيا النانو يمكننا استغلال عناقيد السيليسيوم لذلك. وهذا ما دفعنا إلى نمذجة ومحاكاة السيليسيوم وعناقيه  $Si_n$  من اجل  $n=1$  إلى  $n=4$  والتي سنتناولها في الفصول القادمة.

المراجع

الفصل 1



➤ الكتب: Livres

[L1] Yu. Petery et Maneul cardona ‘ Fundamentals of semiconductors ‘ New York ‘ 2010.

[L2] عزيز داخل، مقدمة في فيزياء الجسم الصلب، الجزء الثاني، ديوان المطبوعات الجامعية، الجزائر. 1988.

[L3] د . موسى المبروك الذويب، أساسيات نبائط المواد شبه الموصلة.

[L4] د . فاروق كامل تقلا، مقدمة في فيزياء أشباه الموصلات ديوان المطبوعات الجامعية ، بن عكنون، الجزائر.

[L5] د . يوسف مولود حسن و د. صالح مصطفى الأثروشي تقنيات الليزر و إستخداماته، دار دجلة عمان، 2008.

➤ أطروحات تخرج: Thèses

[T1] S.MAHTOUT ،Théorie et calcul des propriétés physiques des clusters , Université de Bejaia , 2007.

[T2] ع. سويقات، نمذجة و محاكاة انتشار المطعمات في السيليسيوم و الميرمانيوم أحادي البلورة ، جامعة ورقلة, 2012 .

[T3] ر . رحيم ، دراسة نظرية للبنية البلورية و الإلكترونية لنصف ناقل بإستعمال نظرية الكثافة التابعة، جامعة ورقلة, 2013 .

[T4] M . N . Benhamed Benabdallah ‘ propriétés physiques des semi – conducteurs ( Si monocustallin et Ge ) et simulation des cellules solaires à base de si et SiGe , Université ‘ de Telemcen , 2006.

## الفصل الثاني 2

نظرية الكثافة التابعية **DFT** وطرق الحساب

## 1.II. مقدمة:

تعرف المحاكاة على أنها نموذج لنظام أو مشكلة موجودة في الواقع، بحيث يرمج هذا الواقع داخل الحاسب الآلي على شكل معادلات تمثل بدقة العلاقات المتبادلة بين مكوناتها المختلفة، وبالتالي يصبح الحاسب مختبراً له القدرة الفائقة على التنوع في مجال التعليم المبني على التجريب. وتقوم برامج المحاكاة على مجموعة من نظريات وطرق الحساب بغرض تبسيط وتسهيل دراسة أي نظام. ومن خلال هذا الفصل نستعرض في البداية وصف لنظرية الكثافة التابعة DFT - التي تعتبر واحدة من بين أهم نظريات الحساب المعتمدة - ولمختلف التقريبات وكذلك أهم طرق الحساب المدججة في برامج المحاكاة. كما نتطرق أيضاً في الأخير إلى وصف عام لبرنامج المحاكاة WIEN2k الذي تستند عليه دراستنا والتعرف على كيفية استخدامه لحساب مختلف الخصائص الفيزيائية.

## 2.II. معادلة شرودينغر للجسم الصلب:

تشكل المواد الصلبة من مزيج من الجسيمات الأولية انوية موجبة الشحنة والكثرونات سالبة الشحنة تتفاعل كهربائياً فيما بينها (تفاعل نواة-نواة، تفاعل إلكترون-نواة، تفاعل إلكترون-إلكترون). ولتحديد وإيجاد الخصائص الفيزيائية والكيميائية للأنظمة البلورية ومعرفة البنية الإلكترونية لها، تكون الميكانيكا الكلاسيكية في هذه الحالة غير قادرة وغير كافية لذلك ويكون من الضروري استخدام ميكانيكا الكم التي تركز على إيجاد حلول لمعادلة شرودينغر. هذه الأخيرة التي تصف البنية الإلكترونية لنظام متعدد الانوية والالكثرونات وضعها العالم Erwin Schrödinger (1887م-1961م). [T1] نكتب بالشكل:

$$H\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) = E\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) \quad (1. II)$$

أين:

$\psi$ : تابع الموجة وفقاً لإحداثيات الانوية والالكثرونات يضم جميع معلومات النظام.

$E$ : الطاقة الكلية للنظام للحالات المستقرة المكون من  $N$  نواة و  $n$  إلكترون.

$H$ : المؤثر الهاملتوني يعبر عنه بمجموع خمس حدود لطاقة النظام المؤلف من الطاقة الحركية لكل الجسيمات وطاقة التفاعل فيما

بينما عند غياب حقل خارجي يكتب على النحو التالي:

$$H_{\text{total}} = T_e + T_n + V_{n-e} + V_{e-e} + V_{n-n} \quad (2. II)$$

أو بالشكل المفصل:

$$\hat{H} = -\sum_i^n \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 - \sum_\alpha^N \frac{\hbar^2}{2M} \nabla_\alpha^2 - \sum_{i,\alpha} \frac{Z_\alpha e^2}{|r_i - R_\alpha|} + \frac{1}{2} \sum_{i,j \neq i} \frac{e^2}{|r_i - r_j|} + \frac{1}{2} \sum_{\alpha,\beta \neq i} \frac{Z_\alpha Z_\beta}{|R_\alpha - R_\beta|} \quad (3. II)$$

أين:  $T_e = -\sum_i^n \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2$  : الطاقة الحركية للإلكترونات.

$T_n = -\sum_\alpha^N \frac{\hbar^2}{2M} \nabla_\alpha^2$  : الطاقة الحركية للأنوية.

$V_{n-e} = -\sum_{i,\alpha} \frac{Z_\alpha e^2}{|r_i - R_\alpha|}$  : الطاقة الكامنة لتفاعل إلكترون نواة.

$V_{e-e} = \frac{1}{2} \sum_{i,j \neq i} \frac{e^2}{|r_i - r_j|}$  : الطاقة الكامنة للتفاعل بين الإلكترونات.

$V_{n-n} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha,\beta \neq i} \frac{Z_\alpha Z_\beta}{|R_\alpha - R_\beta|}$  : الطاقة الكامنة للتفاعل بين الأنوية.

المعاملات  $i$  و  $j$  خاصة بالإلكترونات. و المعاملات  $\alpha$  و  $\beta$  خاصة بالأنوية.

$M$  و  $m$  كتل الأنوية والإلكترونات على الترتيب. و  $Z$  العدد الشحني للأنوية.

$|r_i - R_\alpha|$  : المسافة بين الإلكترون  $i$  والنواة  $\alpha$ .

$|r_i - r_j|$  : المسافة بين الإلكترونين  $i$  و  $j$ .

$|R_\alpha - R_\beta|$  : المسافة بين النواتين  $\alpha$  و  $\beta$ .

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

المعادلة (3. II) معقدة بشكل كبير بحيث من اجل  $N$  ذرة تحوي المعادلة  $3(Z+1)N$  متغير، مثلا عندما  $Z=14$  في

$1 \text{ cm}^3$  يصبح لدينا  $[T2] 2.10^{24}$  مجهولا تقريبا وفي هذه الحالة معادلة شرودينغر تكون مستحيلة الحل لهذا اقترحت

عدة نظريات. من النظريات المستعملة على نطاق واسع: نظرية الكثافة التابعة DFT, ونظرية Hartree-Fock لتبسيط المعادلة ومعالجتها تحليليا. وكل من هما تعتمد على تقريبين أساسيين هما:

➤ تقريب الانوية الثابتة Born-Oppenheimer.

➤ تقريب الالكترونات الحرة Hartree-Fock (HF).

### 3.II. تقريب بورن-اوبن هايمر.: Born-Oppenheimer:

يعتمد هذا التقريب والذي يدعى أيضا بتقريب الاديباتيكلي (الكظوم) على فصل حركة الالكترونات عن الانوية, باعتبار الانوية ثقيلة مقارنة بالالكترونات فسرعة الالكترونات اكبر بكثير من الانوية وهذه الأخيرة تعتبر ساكنة وبالتالي فان الطاقة الحركية لهذه الانوية تكون معدومة ( $T_n = 0$ ) وقيمة الطاقة الكامنة للتفاعل بين الانوية ثابتة ( $V_{n-n} = \text{cste}$ )  $E_{\alpha\alpha}$ . ويأخذ الهاملتون الشكل التالي: [T3] [T4]

$$\hat{H} = - \sum_i^n \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 - \sum_{i,\alpha} \frac{Z \cdot e^2}{|r_i - R_\alpha|} + \frac{1}{2} \sum_{i,j \neq i} \frac{e^2}{|r_i - r_j|} + E_{\alpha\alpha} \quad (4. II)$$

هذه المعادلة لا يمكن حلها بالطرق الرياضية المعروفة لذلك نستخدم تقريب آخر يدعى تقريب هارترى-فوك.

### 4.II. تقريب هارترى-فوك: Hartree-Fock(HF)

على الرغم من التقريب الذي وضع من قبل بورن-اوبن هايمر إلا أن شكل المعادلة (4. II) يبقى غير قابل للحل الرياضي إلا من اجل ذرة الهيدروجين وأشبه الهيدروجين. لذلك اقترحت عدة تقريبات لتعويضه أهمها تقريب هارترى-فوك و الذي يعتمد على نموذج الالكترونات الحرة أي أن كل إلكترون يتحرك منفرد في الحقل المتوسط المتولد عن الانوية وباقي الالكترونات الأخرى, أي يتغير المشكل لدينا من عدد كبير من الالكترونات إلى إلكترون وحيد [T5]. يستخدم هذا التقريب على نطاق واسع في كيمياء الكم لدراسة الذرات والجزيئات إلا أنه اقل دقة في فيزياء الجسم الصلب. حيث يتطلب تحديد الخصائص الالكترونية لنظام مكون من N جسيم معرفة تابع الموجة متعدد الالكترونات ( $\psi(r_1, r_2 \dots r_N)$ ) التي تعرف تابع الموجة الكلي للنظام:

$$\psi(r_1, r_2, \dots, r_N) = \psi(r_1) \cdot \psi(r_2) \dots \psi(r_N) \quad (5. II)$$

## 5.II. نظرية الكثافة التابعة:

تعطى نظرية الكثافة التابعة بهدف إيجاد خصائص الحالة الأساسية لنظام مكون من عدد محدد من الإلكترونات في حالة تفاعل كولومبي مع انوية نقطية، وهذا بمساعدة المعلوم الوحيد وهو الكثافة الإلكترونية. تعتمد على نظريتين أساسيتين وضعتا من قبل العالمين هوهنبرغ و كوهان. [T6] وشهدت هذه النظرية عدة تطورات عبر التاريخ اختصرت في الجدول (1. II).

الجدول (1. II): تطورات نظرية الكثافة التابعة DFT. [L1] [T6].

التطور في نظرية DFT	العلماء (الباحثون)	السنة
صاغ كل من توماس-فرمي الطاقة الكلية لغاز الإلكترونات اللامتجانسة كتابع لكثافة الإلكترونات المعروفة لغاز متجانس وذلك بإجراء عدة تقسيمات على منطقة بريلمان وهو تقريب موضعي لكثافة الإلكترونات لا يأخذ بعين الاعتبار ارتباط الإلكترونات.	توماس وفرمي Thomas et Fermi	1927م
انطلق من نموذج الغاز الإلكتروني الحر، ديراك أضاف تابع التبادل للتحسين في نظرية توماس-فرمي. والمشكلة الرئيسية في هذا النموذج هي عدم قدرته على إعادة تكرار البنية الإلكترونية لطبقة من الذرات.	ديراك Dirac	بعض السنوات التي تلت 1930م
كانت البداية الحقيقية للنظرية من قبل الباحثين مع نظرياتهم الأساسية، والتي تجد العلاقة تابعة بين الطاقة والحالة الأساسية وكثافة إلكتروناتها.	هونبارغ و كوهان Hohenberg et Kohn	1946م
اقترحوا تقريب لتبسيط معادلة شرودينغر. هذا التقريب يعتبر مواضع الانوية ثابتة وبالتالي يمكن إهمال طاقتها الحركية وحد التفاعل بين الانوية يكون ثابت.	ماكس بورن- روبرت اوبن هايمر Max Born et Robert Oppenheimer	1882م- 1970م) 1904م- 1967م)
معادلة كوهان والشام يجب أن تحل بطريقة ذاتيا لتحديد كثافة الحالة (مبدأ التغيرات النظرية 2) وطاقة الارتباط.	كوهان وشام Kohen et Sham	1965م

## 1.5.II. نظريتا هوهانبرغ و كوهان: Hohenberg et Kohn

نظرية الكثافة التابعة DFT تعتمد على النظريتين المطروحتين من طرف هوهانبرغ و كوهان. [T7] [L 2]

➤ النظرية الأولى:

الطاقة الكلية لغاز الكترولونات في وجود كمون خارجي ( متفاعلة في كمون الانوية) هي تابع وحيد للكثافة الالكترونية

$\rho(r)$  بحيث:

$$E = E[\rho(r)] \quad (6. II)$$

➤ النظرية الثانية:

اظهر كل من هوهانبرغ و كوهان أن الكثافة التي تعطي القيمة الدنيا هي كثافة الحالة الأساسية للجسيمات بالتحديد، وكل

خصائص الحالة الأساسية هي تابع لكثافة الالكترولونات :

$$E(\rho_0) = \min E[\rho(r)] \quad (7. II)$$

$\rho_0$  : كثافة الحالة الأساسية.

مع ذلك فان نظريات هوهانبرغ و كوهان لا تعطي إمكانية لإيجاد الطاقة  $E_0$  و  $\rho_0$ .

## 2.5.II. معادلة كوهان - شام: Kohan-Sham

وضع كل من كوهان-شام في عام 1965م كثافة الالكترولونات كمجموع كثافة الجسيمات مع استخدام مبدأ التغير

للحصول على طاقة الحالة الأساسية. بحيث تعطي كثافة احتمال تواجد الشحنة ب: [T4] [L3]

$$\rho(r) = \sum \psi_i^*(r) \psi_i(r) \quad (8. II)$$

تابع الطاقة الكلية للالكترولونات  $E_e(\rho)$  و  $E_{H,F}(\rho)$  طاقة هرتري- فوك تعطي ب:

$$E_e = T + V \quad (9. II)$$

$$E_{H,F} = T_0 + (V_H + V_x) \quad (10. II)$$

$T$  : الطاقة الحركية للجسيمات في حالة تفاعل. و  $V$ : كمون التفاعل إلكترون- إلكترون.

$V_H$ : كمون هرتري فوك. و  $T_0$ : الطاقة الحركية للإلكترونات الحرة.

$V_x$ : كمون تبادل الإلكترونات والذي يعرف ب:

$$V_x = V - V_H \quad (11. II)$$

$V_c$ : كمون ارتباط الإلكترونات والذي يعرف ب:

$$V_c = T - T_0 \quad (12. II)$$

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

$$F_{H.K} = T_0 + V_H + (V_x + V_c) \quad (13. II)$$

$V_{xc} = V_x + V_c$  هو كمون تبادل-ارتباط.

أي تابع الطاقة الكلية هو:

$$E(\rho) = T_0(\rho) + V_H + V_{xc} + V_{ext}(\rho) \quad (14. II)$$

إذن معادلة كوهان-شام هي:

$$(T + V_{ei}(r) + V_H(r) + V_{xc}(r))\varphi_i(r) = \varepsilon_i\varphi_i(r) \quad (15. II)$$

### 3.5.II. حلول معادلات كوهان-شام:

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

كوهان-شام. طريقة الموجة المستوية المتزايدة خطياً FP-LAPW تعتمد على مدارات كوهان-شام وبالتالي دالة الموجة

الأساسية هي: [L3]

$$\psi_i(r) = \sum C_{i\alpha} \varphi_\alpha(r) \quad (16. II)$$

بحيث أن  $C_{i\alpha}$  هي معاملات النشر لدالة الموجة.



عمليا لحساب المعاملات  $C_{i\alpha}$  يجب حل المعادلات الأساسية بطريقة الدورات التكرارية بحيث تؤخذ طاقة النظام اصغرية .

حلول معادلات كوهان-شام هي:

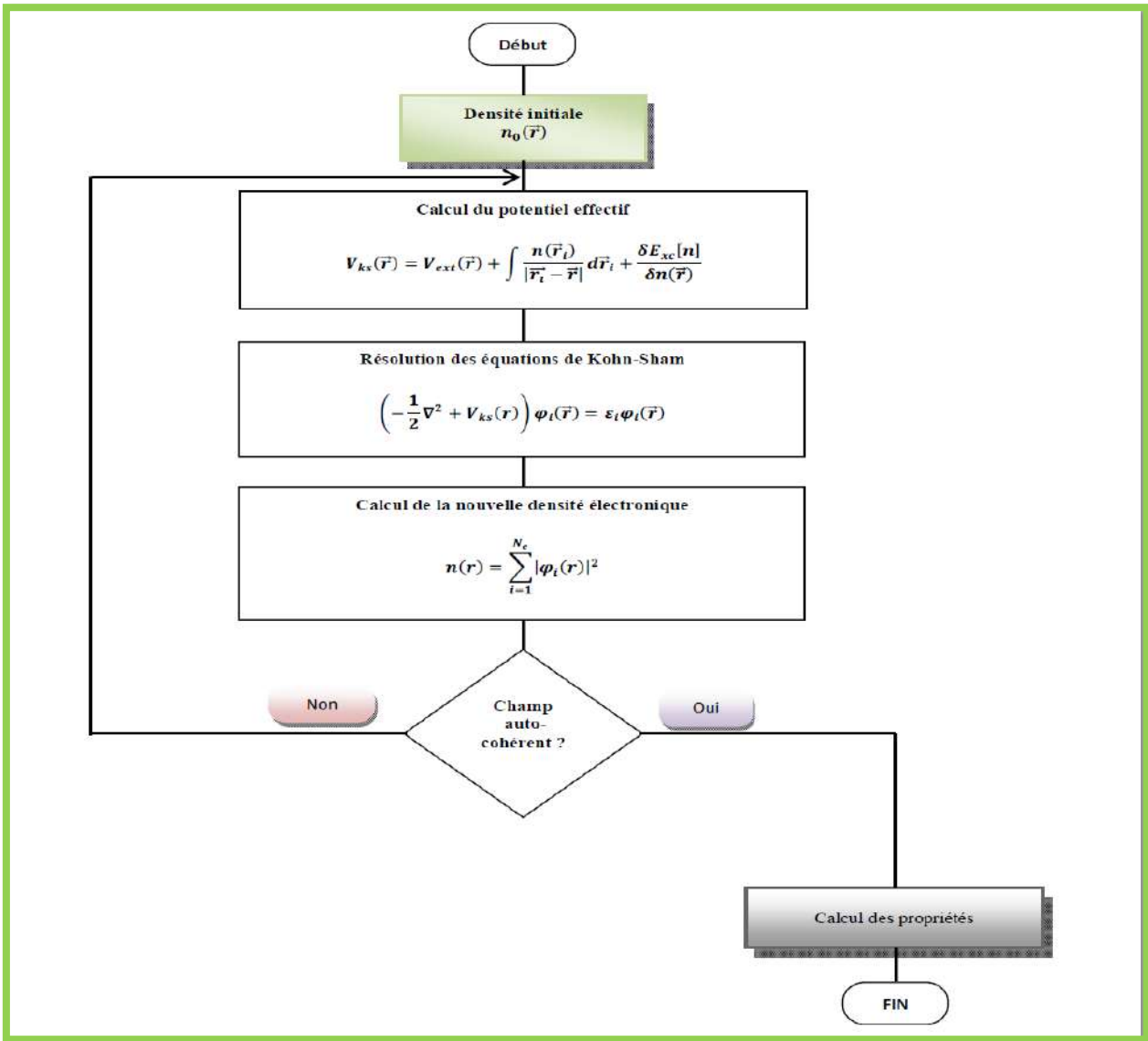
$$(H - \varepsilon_i O)C_i = 0 \quad (17. II)$$

أين:  $H$  هاميلتونيا كوهان-شام. و  $O$  : مصفوفة التغطية.

حل معادلات كوهان-شام يسمح لنا بإيجاد الكثافة الالكترونية بدقة, شريطة أن تكون طاقة التبادل-الارتباط

$E_{xc}[\rho(r)]$  محددة بدقة, حل هذه المعادلات هو تكراري وفقا لعملية SCF ويؤدي إلى معرفة الطاقة الالكترونية الإجمالية

للنظام كما هو موضح في مخطط الشكل (1. II). [T4].



الشكل (1. II): مخطط حلول معادلات كوهان-شام. [T5]

لتفعيل الحساب نحن بحاجة إلى تقريب من اجل عبارة طاقة التبادل-الارتباط التي تمثل العبارة الأخيرة التي لا نعلم عبارة كثافة الحالة أو المدارات وبالتالي استخدام التقريبات يكون ضروري في الحسابات العددية من اجل تطبيق نظرية الكثافة التابعة.

## 6.II. مختلف التقريبات:

المشكلة الأساسية في نظرية الكثافة التابعة DFT هي أن توابع من اجل طاقة الارتباط-التبادل غير محددة إلا من اجل غاز الإلكترونات الحرة، لذلك توجد تقريبات التي تسمح بحساب بعض المقادير الفيزيائية أهمها تقريب الكثافة المحلية LDA وتقريب التدرج المعمم GGA [T3].

### 1.6.II. تقريب الكثافة المحلية:

يعتمد تقريب الكثافة المحلية LDA فقط على الكثافة المحلية المقترحة من قبل كوهان وشام بالتوازي في عام 1965م وإنشاء المعادلة الخاصة بهم (15.II). والفكرة الأساسية هي انه يمكن تقدير طاقة تبادل-الارتباط لنظام الكترولونات غير متجانس باعتباره موضعيا متجانس. نتائج كثافة غاز الكترولونات متجانس تساوي إلى الكثافة المحلية لنظام حقيقي [T7]. مجموع كل المساهمات النقطية توفر طاقة تبادل-ارتباط وفقا للمعادلة التالية والتي تمثل طاقة تبادل-ارتباط في هذا التقريب:

$$E_{xc}^{LDA} = \int \rho(r) \varepsilon_{xc}(\rho(r)) d^3r \quad (18.II)$$

$\varepsilon_{xc}$ : يمثل طاقة تبادل-الارتباط لغاز إلكترون موحد.

LDA تفرض أن الطاقة محلية بحتة. و تنقسم طاقة التبادل-ارتباط إلى قسمين على النحو التالي:

$$\varepsilon_{xc}(\rho) = \varepsilon_x(\rho) + \varepsilon_c(\rho) \quad (19.II)$$

أين :

$\varepsilon_x(\rho)$ : تمثل طاقة التبادل و  $\varepsilon_c(\rho)$ : تمثل طاقة الارتباط.

التابع  $\varepsilon_{xc}$  يمكن أن يكون ثابت.

من اجل الأنظمة المغناطيسية تقريب الكثافة المحلية LDA يجب أن يمتد إلى تقريب الكثافة المحلية للسبين LSDA [T3].

أين طاقة التبادل-الارتباط هي تابع إلى كل من كثافتي السبين الأعلى والأسفل وتكون عبارتها من الشكل باستخدام مبدأ السبين:

$$E_{xc}^{LSDA}(\rho^\uparrow, \rho^\downarrow) = \int \rho(r) \varepsilon_{xc}(\rho^\uparrow(r), \rho^\downarrow(r)) d^3r \quad (20. II)$$

## 2.6.II. تقريب التدرج المعمم:

يستخدم تقريب التدرج المعمم GGA للتخفيف من القصور الموجود في تقريب الكثافة المحلية LDA. و يقوم هذا التقريب على التوضيح بشكل أفضل التجانس في الكثافة عن طريق إدخال المشتق الأول  $\nabla\rho$  في عبارة طاقة التبادل-الارتباط بشكل عام. إذ تعتبر أن طاقة التبادل-الارتباط لا تتعلق فقط بالكثافة في كل نقطة ولكن أيضا بالتدرج فيها. أي أن تقريب التدرج المعمم اخذ بعين الاعتبار تغير كثافة الالكترونات عبر التدرج. بمعنى النتيجة المتحصل عليها في تقريب الكثافة المحلية LDA نعيد ترجمتها كسلسلة لمنشور تايلور في تقريب التدرج المعمم GGA [T3]. طاقة التبادل-الارتباط تعرف في تقريب GGA بالشكل:

$$E_{xc}^{GGA}(\rho) = \int \varepsilon_{xc}(\rho(\vec{r}) \nabla\rho(\vec{r})) d^3\vec{r} \quad (21. II)$$

## 7.II. أقسام طرق الحساب:

لحل معادلات كوهان شام توجد عدة طرق يمكننا تصنيفها إلى فئتين وهذا وفقا للتقريب المعتمد لدراسة الكترونات البلور إما بشكل كامل أو جزئي. حيث يوجد أسلوب الكمون الكاذب « pseudopotentiel » وأسلوب الكمون الكامل « tous électrons ». [L2]

### 1.7.II. طريقة الكمون الكاذب: « pseudo-potential »

من المعلوم في فيزياء الجوامد أن معظم الخصائص الفيزيائية والكيميائية للمواد تتعلق بشكل كبير بالكترونات التكافؤ أكثر منها من الكترونات القلب. ومن جهة أخرى الكترونات القلب لا تشارك بشكل مباشر في الروابط الكيميائية ولا تتأثر بالتغيرات في الوسط الذري. من هذا المنطلق تأسست الفكرة الأساسية لطريقة الكمون الكاذب والتي تتمثل في الحصول على حالات

التكافؤ لنظام ذرة، جزيء، بلور دون الحاجة لحساب حالات القلب التي تعتبر ليست ضرورية من اجل وصف الخصائص الفيزيائية. أي الفصل بين الالكترونات إلى الكترونات التكافؤ والكترونات القلب في حد الدالة الموجية. ومن بين أهم البرامج التي تستند إلى تقريب الكمون الزائف نذكر: [T3]

- ABINIT
- VASP
- SIESTA

## II.7.2. طريقة كمون كل الالكترونات: « tous-électrons »

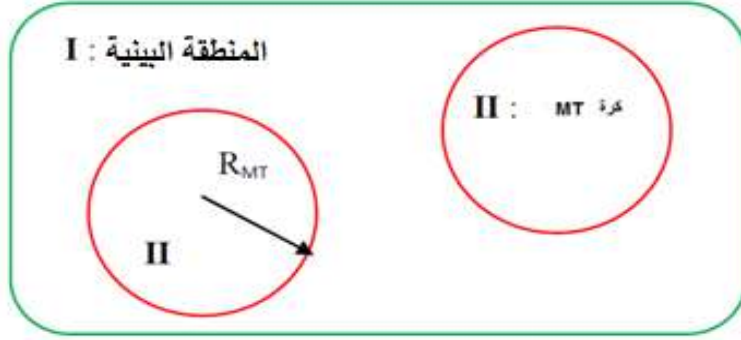
على خلاف طريقة الكمون الزائف فان طريقة الكمون الكامل تأخذ بعين الاعتبار كل الالكترونات. ويرر هذا بالحاجة إلى المعلومات المحتواة حول منطقة النواة كالمعلومات المتعلقة ب: الحقول فائقة الدقة hyperfins و إثارة مستويات القلب. وهناك عدة أنواع من الكمون الكلي الالكترونات نذكر منها: [T2]

- الجمع الخطي للمدارات الذرية LCAO وتنفذ هذه الطريقة في برنامج الحساب « CRYSTAL ».
- الأمواج المستوية المتزايدة وتنفذ هذه الطريقة في برنامج الحساب « WIEN2k ».
- في عملنا هذا سنعمد على الطريقة المنفذة في برنامج الحساب « WIEN2k ».

## II.8. أساسيات الحساب المعتمدة في برنامج « WIEN2k »:

### II.8.1. الأساس APW:

قام سلتر في عام 1937 م بنشر أساس طريقة الموجة المستوية المتزايدة APW. بحيث اخذ سلتر شكل تابع الالكترونات الخاصة بكمون M T أو ما يسمى كمون خلية النحل لكتابة تابع الموجة للالكترونات بحيث يقسم الفضاء المحيط بالذرات إلى منطقتين الشكل (II.2). [T2]



الشكل (II.2): شكل كمون MT.

المنطقة الأولى (I) هي المنطقة البينية تحيط بالكرات وتشمل الإلكترونات ضعيفة الارتباط بالانوية.

المنطقة الثانية (II) داخل كرة MT تشمل كل من الانوية والإلكترونات شديدة الارتباط بها.

$R_{MT}$ : نصف قطر كرة .

والذي يعطى من العلاقة :

$$\varphi(R) = \begin{cases} \frac{1}{\Omega^{\frac{1}{2}}} \sum_G C_G e^{i(G+k)R} & R > R_{MT} \\ \sum_{lm} A_{lm} U_l(R) Y_{lm}(R) & R < R_{MT} \end{cases} \quad \text{المعادلة (22. II)}$$

مع :  $k_n = G + k$

$\Omega$ : يمثل حجم الخلية الموحدة. و  $C_G$  و  $A_{lm}$ : معاملات النشر.

$Y_{lm}$ : الدالة الهرمونية ( التوافقية) الكروية.

$U_l$ : الحل العددي للجزء الشعاعي من معادلة شرودينغر مع الطاقة  $E_l$ .

$k$ : شعاع الموجة في منطقة بريلمان غير القابلة للاختزال (IBZ).  $R$ : موضع الإحداثيات القطبية داخل المجال.

$k_n$ : أشعة الفضاء العكسي.

وحلول معادلة شرودينغر تكون بشكل:

➤ أولاً : حلول شعاعية داخل كرة MT.

➤ ثانياً: موجة مستوية داخل المنطقة البينية.

في حين أن  $U_1(R)$  هي الحلول المنتظمة لمعادلة شرودينغر للجزء الشعاعي الذي يكتب:

$$\left\{ -\frac{d^2}{dR^2} + \frac{l(l+1)}{R^2} + V(R) - E_1 \right\} RU_1(R) = 0 \quad \text{المعادلة (23. II)}$$

$V(R)$ : الجزء الخاص بالكمون الكروي.

$E_1$ : تمثل الطاقة الخطية. في حين أن الدالة الشعاعية المعرفة في العلاقة السابقة تكون معامدة لكل الحالات الذاتية القلبية، تنتهي

شروط التعامد عند حدود كرة MT من اجل الدوال الشعاعية  $U_1$  و  $U_2$  الموافقة للقيم الذاتية  $E_1$  و  $E_2$  تصبح معادلة شرودينغر كالتالي:

$$(E_1 - E_2)RU_1U_2 = U_2 \frac{d^2U_1}{d^2R} - U_1 \frac{d^2U_2}{d^2R} \quad \text{المعادلة (24. II)}$$

ولضمان استمرارية الدالة  $\varphi(R)$  على سطح الكرة MT تنشر المعاملات  $A_{lm}$  بدلالة المعاملات  $C_G$  الخاصة

بالأمواج المستوية في المنطقة البينية، المعاملات الطاقوية  $E_l$  تسمى بمعاملات التباير في الأساس APW بعد الحسابات الجبرية نتحصل على:

$$A_{lm} = \frac{4\pi i}{\Omega^2 U_l(R_l)} \sum_G C_G J_l(|K + g|R_{MT}) Y_{lm}^*(K + G) \quad \text{المعادلة (25. II)}$$

الدوال الذاتية المعرفة بG تصبح متوافقة مع الدوال الشعاعية في كرة MT وبالتالي نتحصل على التابع الأساسي  $APW_S$ .

التوابع  $APW_S$  هي حلول معادلة شرودينغر في كرة MT الموافقة لطاقة  $E_1$ . أي نتحصل على عصابة الطاقة الموافقة للمعامل G.

في الأساس APW توجد مجموعة من الصعوبات خاصة في التوابع  $U_1(R_{MT})$  وذلك لان في حالة نقصان المعاملات

$A_{lm}$  قيم  $U_1(R_{MT})$  تكون معدومة على سطح الكرة MT وبالتالي التوابع الشعاعية تكون منفصلة عن توابع الموجة

المستوية في المنطقة البينية. ولحل هذا المشكل ادخل كولينغ وأندرسون مجموعة من التغيرات على طريقة الأمواج المستوية المتزايدة APW تركز أساسا على تمثيل الدالة الشعاعية  $\varphi(R)$  خارج كرة MT بترتيبات خطية  $U_1(R)$  مع امتلاكها

مشتقات بالنسبة للطاقة  $\dot{U}_1(R_{MT})$ . سميت هذه الطريقة بطريقة الأمواج المتزايدة خطيا FP-LAPW [T2].

## 2.8.II. مبدأ الأساس LAPW: [T3]

الأساس LAPW قدم من طرف العالم أندرسون من اجل التغلب على مشكلة غير الخطية في الأساس APW وتحسينها.

في هذه الطريقة التابع الشعاعي ينشر عن طريق نشر تايلور حول قيمة  $E_1$ .

## 3.8.II. مبدأ الأساس FP-LAPW: [T2] [T3]

في الأمواج المستوية المتزايدة خطيا FP-LAPW الدالة الأساسية داخل كرة MT تكون على شكل ترتيبات

خطية للدالة الشعاعية  $U_1(R)Y_{lm}(R)$  وتمتاز باشتقاق  $\dot{U}_1(R)Y_{lm}(R)$  بالنسبة للطاقة. الدالة  $U_1$  تعرف مثل دالة

الطريقة APW في المعادلة (23. II). في حين الدالة  $\dot{U}_1(R)Y_{lm}(R)$  تخضع للشرط التالي:

$$\left\{ -\frac{d^2}{dR^2} + \frac{l(l+1)}{R^2} + V(R) - E_1 \right\} R\dot{U}_1(R) = RU_1(R) \quad \text{المعادلة (26. II)}$$

في الحالة اللانسيبية الدوال  $U_1$  و  $\dot{U}_1$  مضمونة الاستمرارية على سطح كرة MT أي استمرارية هذه الدوال مع الموجة

المستوية في المنطقة البينية (خارج كرة MT) إذن دالة الموجة المستوية المتزايدة  $LAPW_S$  تصبح دالة أساسية للطريقة

FP-LAPW

$$\varphi(R) = \begin{cases} \frac{1}{\Omega^{\frac{1}{2}}} \sum_G C_G e^{i(G+k)R} & R > R_{MT} \\ \sum_{lm} \{A_{lm} U_1(R) + B_{lm} \dot{U}_1(R)\} Y_{lm}(R) & R < R_{MT} \end{cases} \quad \text{المعادلة (27. II)}$$

بحيث المعاملات  $lm$  الموافقة للدالة  $\dot{U}_1(R)$  لها نفس طبيعة المعاملات  $A_{lm}$ .

الدوال  $LAPW_S$  تكون الموجة المستوية الوحيدة في المنطقة البينية مثل حالة الطريقة APW داخل كرة MT. الدوال

$LAPW_S$  افضل من الدوال  $APW_S$  باختلاف  $E_1$  قليلا عن عصابة الطاقة E الترتيبات الخطية تنتج أحسن دالة شعاعية

APW<sub>S</sub> والدالة U<sub>1</sub> يمكن أن تنشر على الدالة المشتقة والطاقة E<sub>1</sub> بالشكل:

$$U_l(E; R) = U_1(E; R) + (E - E_l)\dot{U}_1(E; R) + 0((E - E_l)^2) \quad \text{المعادلة (28. II)}$$

حيث:  $0((E - E_l)^2)$ : يمثل الخطأ الرباعي الطاقوي.

إن طريقة الأمواج المستوية المتزايدة خطيا FP-LAPW تضمن استمرارية تابع الموجة على سطح كرة MT.

## 9.II. وصف عام لبرنامج WIEN2k:

تم تأسيس وتطوير برنامج WIEN2k بالجامعة التقنية " مواد الكيمياء " بفينا من طرف كل من :

P.Balah ,K.Schwarz ,P.Sorintin و S.Tricky , نشر في الحواسيب في سنة 1990م. وأجريت عليه عدة

تحديثات في السنوات التي تلت, وسميت كل نسخة بسنة نشرها ومن بين الإصدارات الأولية لبرنامج WIEN نذكر

WIEN93 /WIEN95/WIEN97. في حين شهد إصدار WIEN2k لسنة 2000 م استخداما على نطاق

واسع للتحديثات والتحسينات الكبيرة من حيث السرعة وسهولة الاستعمال, ويعمل هذا البرنامج تحت نظام التشغيل

UNIX أو LINUX. [T1]

برنامج WIEN2k يعتمد على أساليب الموجات المنتشرة المستوية المتزايدة خطيا ضمن نظرية الكثافة التابعة

DFT, وهو يتكون من قسمين: [T3]

➤ برامج مستقلة مكتوبة ب FORTRAN 90.

➤ مخطوطات توفر الصلة بين برامج FORTRAN.

## 10.II. استخدامات ومميزات برنامج WIEN2k: [T3]

يستخدم برنامج WIEN2k بشكل واسع في فيزياء المواد الصلبة والكيمياء الكمية, يتم من خلاله تحديد وحساب

خصائص المواد اعتمادا على نظرية الكثافة التابعة DFT و أهم هذه الخصائص :

✓ الخصائص الالكترونية: بنية عصابات الطاقة, كثافة الحالات والكثافة الالكترونية.



✓ الخصائص المغناطيسية: ( العزم المغناطيسي). استقطاب السبين وتزواج السبين- مدار... الخ.

✓ تدرج الحقل الكهربائي و الحقول فائقة الدقة les champs hyperfins.

✓ طيف انبعاث وامتصاص الأشعة السينية RX.

✓ الخصائص الضوئية: (قرينة الانكسار, قرينة الانعكاس... الخ).

✓ الطاقة الإجمالية: القوى النووية. هندسة توازن الذرات في الفضاء (التحسينات البنيوية)

✓ الخصائص الترموديناميكية (الانتالي... الخ)

يمكن إضافة برامج مرفقة لل WIEN2k كبرنامج XCRYSDEN الذي يتيح لنا مشاهدة ثلاثية الأبعاد لبنية

المادة والكثافة الالكترونية وغيرها. كما يمكننا من رسم بعض المنحنيات تلقائيا مع وضع البيانات اللازمة لذلك واستنتاج بعض

المعاملات الفيزيائية تلقائيا بفضل قاعدة بياناته التي تحوي معلومات حول عناصر الجدول الدوري. [T1]

## 11.II. طريقة الحساب باستخدام برنامج WIEN2k:

قبل تطرقنا لحساب مختلف خصائص المواد يلزمنا حساب الكميات الأساسية مثل الكثافة الالكترونية, الكمون, التوابع

الذاتية والقيم الذاتية للطاقة, ويقسم هذا الحساب الأولي إلى ثلاث مراحل أساسية: [T1] [T3]

### ✓ المرحلة الأولى: تحضير ملف البنية case.struct

ملف البنية case.struct يحضر انطلاقا من المعطيات الأولية (التمهيدية) ab-initio:

➤ معاملات الشبكة البلورية.

➤ المواقع الذرية.

➤ عدد الذرات غير المتكافئة.

### ✓ المرحلة الثانية: التهيئة Initialisation

من خلال هذه يتم تشغيل سلسلة صغيرة من البرامج المساعدة والتي من شأنها إنتاج مدخلات لبرامج رئيسية الشكل

(3.II). وفيما يلي ذكر لمختلف برامج التهيئة:

- NN (أبعاد الجوار الأقرب): يستعمل هذا البرنامج الفرعي ملف case.struct والذي تكون فيه المواقع الذرية في خلية الوحدة محددة. من اجل حساب أبعاد الجوار الأقرب لكل الذرات (يعرف بعامل المسافة F الذي في العادة يؤخذ يساوي 2), فهو يساعد على حساب نصف القطر الذري ويسيطر على تداخلات المجالات الذرية. إذا كان هناك تجاوز فان رسالة تظهر على شاشة الخطأ, ملف الإخراج يسمى case.outputnn.
- SGROUP: يحدد فضاء المجموعات باستخدام معلومات الملف case.struct وكذلك الفضاءات النقطية ذات المواقع اللاتناظرية باستخدام الشحنات النووية لإنتاج الاختلافات للذرات الاستثنائية وإيجاد اصغر خلية وحدة (ويسمى ملف مخرجات case.struct.sgroup).
- SYMMETRY: يقوم بحساب عمليات التناظر للمجموع الفضائي, لان أهم ما يميز الشبكة البلورية هي عمليات التناظر التي بإجرائها يعود البناء البلوري لوضعه الأصلي (عملية الانقلاب, الانعكاس, الدوران حول محور.... الخ) بالاعتماد على الملف case.struct. كما يمكن أن نحدد من خلاله المواقع النووية المختلفة و يولد التوسع LM التوافقيات الكروية (في ملف case.in2.st) ومصنفات التناوب المحلية (في ملف case.struct.st).
- LSTART: ينتج الكثافة الالكترونية للذرات الحرة ويحدد كيفية التعامل مع المدارات المختلفة في حساب عصابة الطاقة كحالات العصابة (حالات التكافؤ, حالات شبه قلبية أو قلبية, مع أو بدون مدارات محلية...). بالإضافة لذلك هذا البرنامج الفرعي يطلب تحديد كمون التبادل- الارتباط LDSA أو GGA وطاقة القطع (cut-off) التي تفصل بين الحالات القلبية وحالات التكافؤ (عادة يتم أخذها  $6 R_y$  -).
- KGEN: برنامج ينتج شبكة نقاط ل k في منطقة بريلوان الأولى غير قابلة للاختزال (IBZ). وعلينا تحديد عدد النقاط في جميع مناطق بريلوان (BZ).
- DSTART: يولد الكثافة الابتدائية من اجل حلقة auto-coherent SCF (حقل ذاتي ثابت) انطلاقا من تراكم الكثافات الذرية الناتجة من البرنامج الفرعي LSTART.

### ✓ المرحلة الثالثة: تشغيل حلقة SCF Exécution du cycle SCF

بعد إنشاء كافة ملفات المدخلات اللازمة ننتقل لعملية حسابات SCF, والتي تتمثل في تقارب كثافة الطاقة و الكمون.

حلقة ال SCF تستخدم البرامج الفرعية التالية:

➤ LAPW0 (الكمون):

ينتج الكمون انطلاقا من الكثافة. بملف المخرجات case.scf0.

➤ LAPW1 (العصابات):

يحسب عصابات التكافؤ. ويتم ذلك من خلال حساب القيم الذاتية للطاقة والمتجهات الذاتية وهذا باستخدام طريقة

diagonalisation للمصفوفة. وتخزن النتائج بملف case.vector وتنتج أيضا ملف case.scf1. وهو أكثر برنامج

فرعي يستهلك الوقت.

➤ LAPW2 (RHO):

يحسب كثافات التكافؤ انطلاقا من المتجهات الذاتية وطاقة فرمي. ينتج ملفات case.scf2.

➤ LCORE:

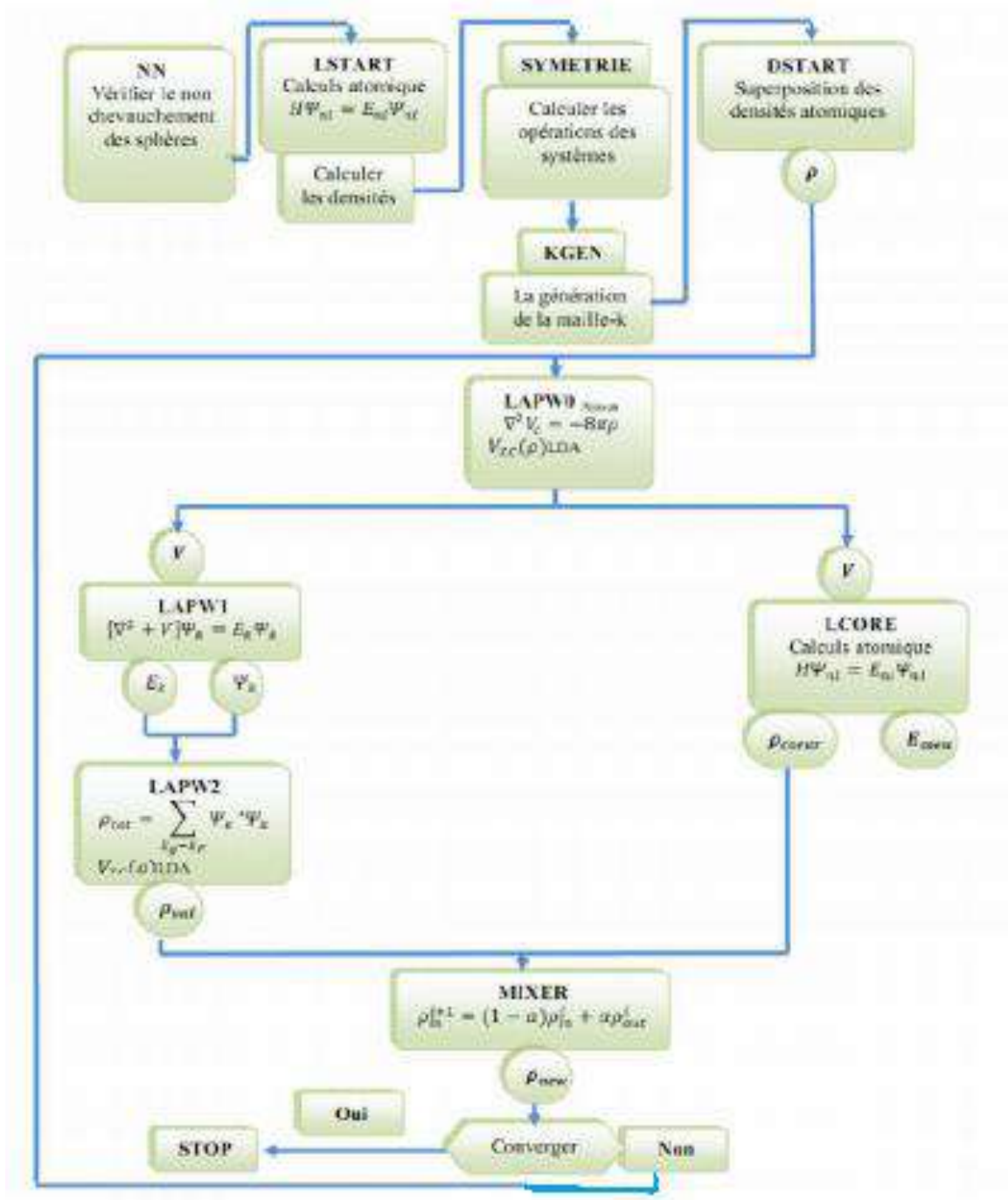
يحدد الطاقة والحالات القلبية. ينتج ملف case.scfc.

➤ MIXER:

يضيف الكثافة الابتدائية والكثافة النهائية من اجل استخدام الكثافة النهائية ككثافة أولية للتكرار التالي. ينتج ملف

case.scfm. بعد الانتهاء من التكرار الأول والحساب للتكرار الثاني لحلقة SCF. يتم إنشاء ملف case.scf والذي

يحتوي على المعلومات الأساسية مثل : الطاقة الكلية, الحجم, الكثافة... الخ.



الشكل (3.II): مخطط يوضح خوارزمية برامج التهيئة وحلقة SCF. [T3]

### ✓ خلاصة:

من خلال ما تطرقنا إليه في هذا الفصل نجد انه لمعالجة أي نظام نحن بحاجة لاستخدام نظريات وتقريبات لتسهيل وتبسيط طريقة الدراسة. وبرامج المحاكاة المعتمدة تستند لهذه النظريات ومن ابرز واهم برامج المحاكاة المستخدمة في مجال الجسم الصلب والكيمياء الكمية برنامج **WIEN2k**. والذي سنعمل على استخدامه في نمذجة ومحاكاة السيليسيوم في الفصل الثالث.

المراجع

الفصل 2

➤ كتب : Livres

- [L1] K.Schwarz, Density functional theory (DFT) and the concepts of the augmented plane-wave plus local orbital (L)APW+lo method, Institute for Material Chemistry, 2010.
- [L2] S.Cottenier, Density Functional Theory and the family of (L)APW-methods: a step-by-step introduction, 6 August 2004.
- [L3] J.A.Pope et al , Kohn-Sham density-functional theory within a finite basis set, 14 September 1992.

➤ أطروحات تخرج : Thèses

- [T1] Z.AYAT, Calcul des propriétés électroniques de quelques dihydrures de terres déterminées par le code de simulation WIEN2k, Université de Ouargla, 2006.
- ب. السعدي، مساهمة في دراسة الخصائص الفيزيائية لـ (X = Au ، Ag ، cu) X<sub>2</sub> Gd In ، جامعة سطيف
- [T2] ، 2013 ،
- [T3] A. REGGAD , Etude calcul Abinito des propriétés structurales et optoélectroniques de Bismuthinite Bi<sub>2</sub> S<sub>3</sub>, Université Ibn Khaldoun Tiaret ,2013.
- [T4] W.TIDJEDIT, Propriétés structurales, électroniques, magnéto-optiques et stabilité. structurale des semi-métaux magnétiques, Université de Tlemcen, 2012.
- [T5] F.GIMBERT, Structure électronique et propriétés magnétiques et nanostructures et superéseaux Co/Ni (111), Université de Toulouse, 2012.
- [T6] F.SOLTANI, Investigation théorique des propriétés structurales et électroniques des systèmes binaires CeX, LaX, EuX (X=S, Se, Te), Université de Batna, 2012.
- [T7] N.BOUDALIA, Etude Ab-initio des propriétés structurales et électroniques des chalcogénures de béryllium BeX (X=S, Se, Te), Université de Tlemcen, 2012.

## الفصل الثالث 3

نمذجة السيلسيوم ومحاكاته

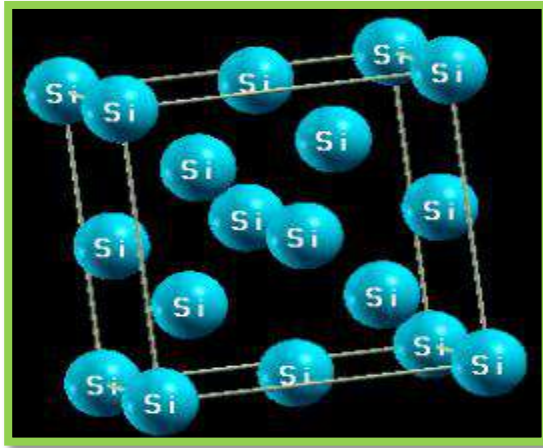
### 1.III. مقدمة:

من خلال هذا الفصل سنتطرق إلى محاكاة السيليسيوم ذو بنية بلورية و عنقودية  $Si_n$  من اجل  $n=1$  إلى  $n=4$ . باستخدام برنامج المحاكاة **WIEN2k** إصدار 2014 من اجل تحديد وحساب الخصائص البنيوية والالكترونية. أين وقد سبق لنا وصفه بشكل عام و شرح طريقة استخدامه في الفصل السابق.

### 2.III. حساب الخصائص البنيوية والالكترونية للسيليسيوم ذو البنية البلورية Si:

#### 1.2.III. التعريف بالسيليسيوم Si:

يتبلور السيليسيوم وفق بنية الألماس بزمرة تناظر فضائية  $Fd-3m$  رقم 227, قيمة ثابت الشبكة والمواقع الذرية للخلية الأولية موضحة في الجدول (1.III), والبنية البلورية لمادة السيليسيوم موضحة في الشكل (1.III), والتي تم التحصل عليها بمساعدة برنامج المشاهدة XCRYSDEN المستخدم في برنامج الحساب **WIEN2k** وهذا بعد إنشاء الملف `Si.struct`.



الشكل (1.III): البنية البلورية للسيليسيوم باستخدام برنامج XCRYSDEN.

التوزيع الالكتروني للسيليسيوم:  $Si : [Ne] 3s^2 3p^2$ , بحيث نتعامل مع الحالتين  $3s^2$  و  $3p^2$  كحالات تكافؤ.



### 2.2.III. إنشاء الملف Si.struct :

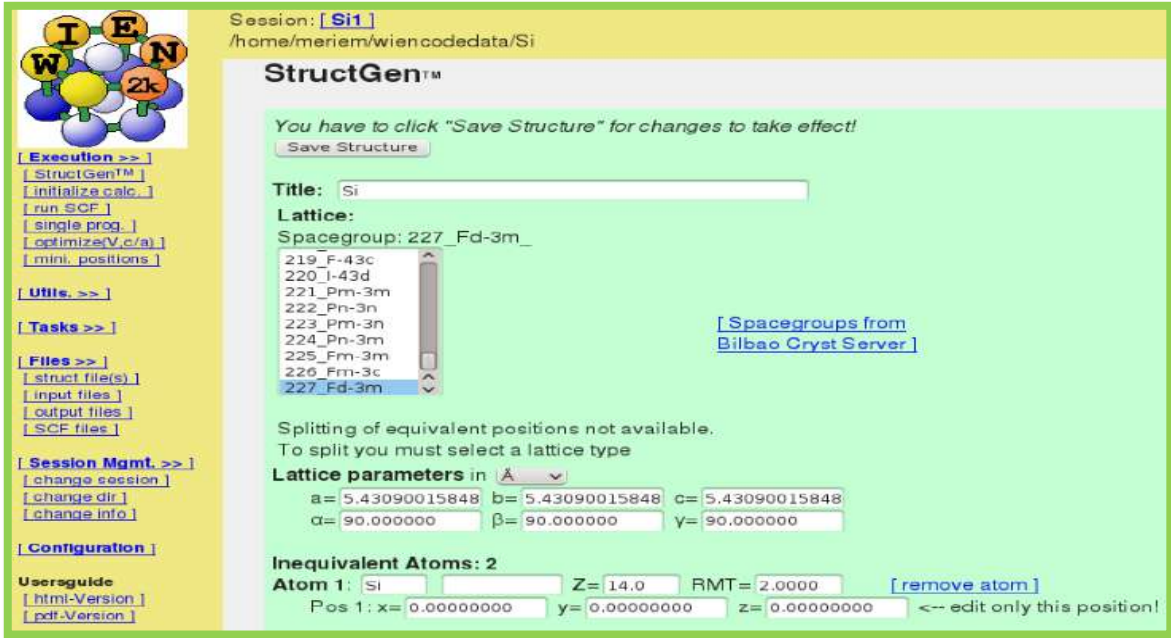
الخطوة الأولى هي إنشاء ملف Si.struct باستخدام الواجهة الرسومية « w2web », وهذا بعدما تم إنشاء المجلد case-directory باسم «Si». ويتم تنفيذ إنشاء بنية المادة بمساعدة «StructGen<sup>TM</sup>» انطلاقاً من واجهة المستخدم الرسومية بحيث المدخلات الأولية اللازمة لذلك موضحة في الجدول (1.III).

الجدول (1.III): المدخلات الأولية لإنشاء الملف Si.struct.

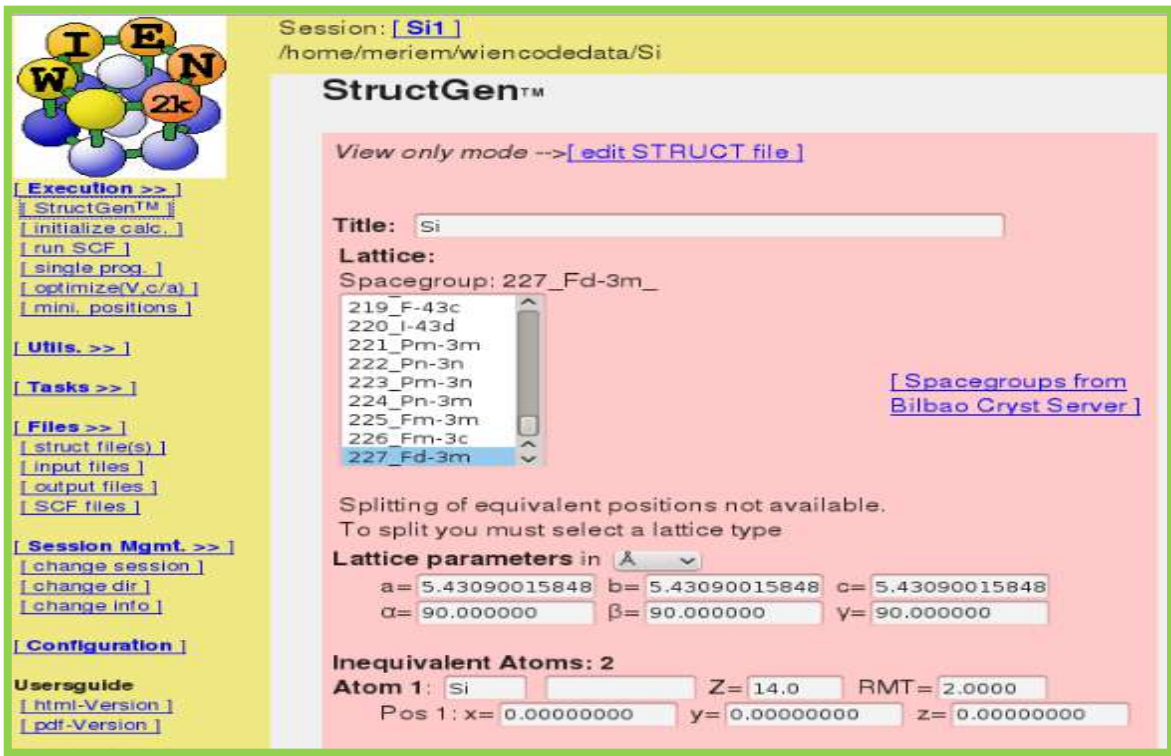
العنصر الكيميائي	Si			
زمرة التناظر الفضائية	227 Fd-3m[L1] رقم			
$R_{MT}$	2.00			
الثوابت البلورية [L1] ( $A^\circ$ )	a	5.43		
	b	5.43		
	c	5.43		
الزوايا البلورية [L1]	$\alpha$	$90^\circ$		
	$\beta$	$90^\circ$		
	$\gamma$	$90^\circ$		
المواقع الذرية [L1]	الذرة	X	Y	Z
	$Si_1$	0.00	0.00	0.00
	$Si_2$	0.25	0.25	0.25

نتيجة العملية أي إنشاء الملف **Si.struct** موضحة في الشكل (2.III). وبالضغط على **save structure**

يتم حفظ البيانات بحيث يبقى نفس العرض يتغير لون الخلفية فقط وفق الشكل (3.III).



الشكل (2.III): واجهة إدخال بيانات السيليسيوم انطلاقاً من « w2web ».

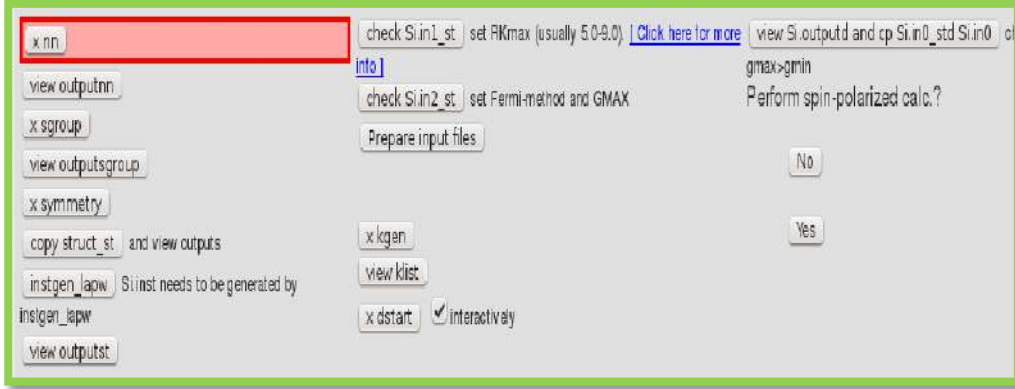


الشكل (3.III): واجهة حفظ بيانات السيليسيوم انطلاقاً من « w2web ».

### 3.2.III. التهيئة الأولية Initialisation

بعد إنشاء الملف Si.struct ننتقل إلى تهيئة الحساب ابتداء بالبرنامج الفرعي x nn إلى غاية x dstart على الترتيب

كما هو موضح في الشكل (4.III).



الشكل (4.III): نافذة تهيئة الحساب في البرنامج WIEN2k.

مع الأخذ بالاعتبار التغييرات التالية:

- اختيار NO عند تنفيذ برنامج *symmetry*.
- حالة عدم استقطاب السبين no spin-polarization عند تنفيذ برنامج *instgen\_lapw*.
- نوع التقريب المستخدم لحساب كمون تبادل-ارتباط في حالتنا استخدمنا كل من PBE-GGA و ال LDA .. و طاقة فصل بقيمة Ry -6 عند تنفيذ برنامج *x lstart*.
- اختيار قيمة كل من  $R_{MTMIN} \times K_{MAX}$  و عدد النقاط k-points عند تنفيذ البرنامج *xkgen* وهذا بعد عملية التهيئة.

### 4.2.III. تهيئة معاملات الحساب:

تمكننا هذه المرحلة من الحصول على دقة جيدة وفي اقصر وقت و تدعى في الغالب باختبارات التقارب « les tests de convergence » لأنها تهدف إلى ضمان تقارب المقدار الأساسي وهو الطاقة الكلية وفقا إلى معيار معين يتم اختياره اعتمادا على الدقة المطلوبة للحساب. [T1] ومعيار التقارب المأخوذ في حالة السيليسيوم في عملنا هذا هو:  $ec = 0.00001 Ry$  والمعاملات الأساسية التي سنتطرق لتهيئتها هي:

- تهيئة العامل  $MT_{MIN} \times K_{MAX}$
- تهيئة العامل k-points.

### 1.4.2.III. تهيئة العامل $R_{MT_{MIN}} \times K_{MAX}$ :

نقوم بالمرحلة المذكورة سابقا ( أي إنشاء الملف والقيام بالتهيئة) وهذا بتثبيت قيم المعاملات كما هو موضح في الجدول (2.III). ونبدأ بتغيير قيمة الجداء  $R_{MT_{MIN}} \times K_{MAX}$  من 5 إلى غاية 9.5 بخطوة 0.5. ومن اجل كل قيمة للجداء  $R_{MT_{MIN}} \times K_{MAX}$  نقوم بالحساب لحلقة " run SCF ". معيار تقارب للطاقة يساوي إلى  $ec=0.00001 Ry$  الشكل (5.III), نختار قيمة الجداء المناسبة عند أول ثبوت للطاقة بتقريب  $0.0001 Ry$ .

الجدول (2.III): المعاملات الثابتة المأخوذة لتهيئة  $R_{MT_{MIN}} \times K_{MAX}$ .

k-points	$G_{MAX}$	$R_{MT}$
400	12	2

حيث:

$K_{MAX}$ : القيمة القصوى لشعاع الموجة في انتشار الموجات المستوية الموافقة لأقل قيمة للطاقة.

$R_{MT}$ : اصغر نصف قطر ذري لدوائر muffin-tin.

k-points: عدد النقاط في منطقة بريلوان الأولى.

$G_{MAX}$ : اكبر طول موجة في كرة MT. [T1] [T2]



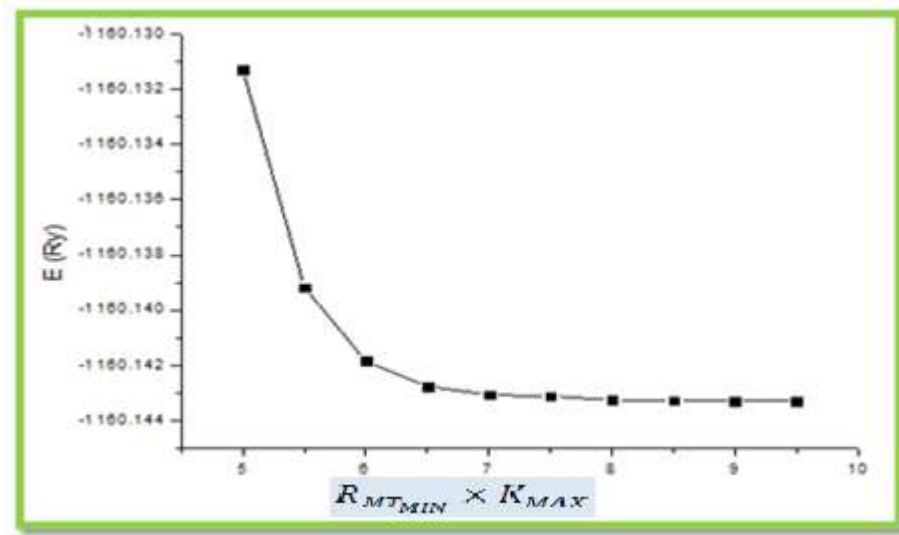
الشكل (5.III): نافذة مدخلات حساب حلقة الـ SCF.

الطاقة الكلية من اجل كل قيمة للجداء  $R_{MT_{MIN}} \times K_{MAX}$  تسجل في نهاية تشغيل حلقة SCF من الملف Si.scf والنتائج موضحة في الجدول (3.III).

الجدول (3.III): تغيرات الطاقة الكلية  $E(Ry)$  بدلالة تغير الجداء  $R_{MT_{MIN}} \times K_{MAX}$ .

$R_{MT_{MIN}} \times K_{MAX}$	$E(Ry)$	$R_{MT_{MIN}} \times K_{MAX}$	$E(Ry)$
5	-1160.13127810	7.5	-1160.14311779
5.5	-1160.13917926	8	-1160.14327231
6	-1160.14184837	8.5	-1160.14328481
6.5	-1160.14276638	9	-1160.14328874
7	-1160.14307797	9.5	-1160.14329252

تمثل قيم الجدول في المنحنى البياني في الشكل (6.III) باستخدام برنامج Origin8.



الشكل (6.III): منحنى تغيرات الطاقة الكلية E بدلالة الجداء  $R_{MT_{MIN}} \times K_{MAX}$ .

نختار قيمة  $MT_{MIN} \times K_{MAX} = 8$  التي توافق أول ثبوت للطاقة الكلية E بالتقريب المأخوذ (0.0001 Ry). وهي القيمة التي نستخدمها في حساباتنا القادمة.

### 2.4.2.III. تهيئة العامل k-points:

نقوم بحساب الطاقة الكلية كدالة تتغير وفقا للعامل k-points . وهذا بتثبيت المعاملات الأخرى حسب الجدول (4.III) نغير قيم k-points من 50 إلى غاية 1250 ومن اجل كل قيمة ل k-points نقوم بالحساب ل SCF بمعيار تقارب للطاقة يساوي إلى  $ec=0.00001$  Ry , نختار قيمة الجداء المناسبة عند أول ثبوت للطاقة الكلية.

الجدول (4.III): المعاملات الثابتة المأخوذة لتهيئة العامل k-points.

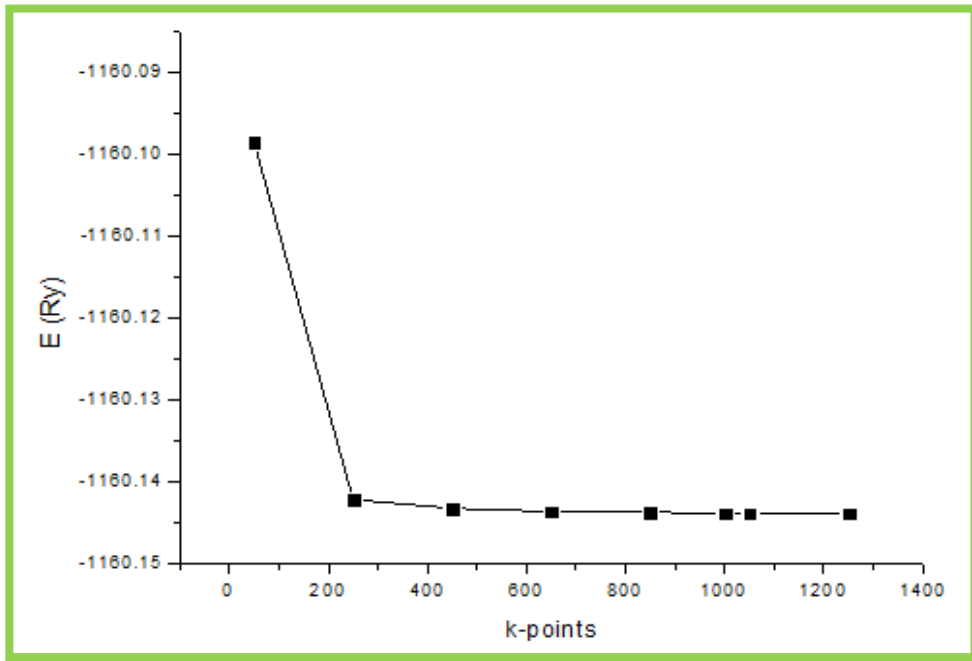
$R_{MT_{MIN}} \times K_{MAX}$	$G_{MAX}$	$R_{MT}$
8	12	2

الطاقة الكلية من اجل كل قيمة ل k-points تسجل في نهاية تشغيل حلقة SCF من الملف Si.scf والنتائج موضحة في الجدول (5.III).

الجدول (5.III): تغيرات الطاقة الكلية  $E(Ry)$  بدلالة تغير العامل ل k-points .

k-points	$E(Ry)$	k-points	$E(Ry)$
50	-1160.09855338	850	-1160.14374359
250	-1160.14220541	1000	-1160.14391235
450	-1160.14327231	1050	-1160.14391235
650	-1160.14368010	1250	-1160.14391235

تمثل قيم الجدول في المنحنى البياني في الشكل (7.III) باستخدام برنامج Origin8 .



الشكل (7.III): منحنى تغيرات الطاقة الكلية  $E$  بدلالة العامل k-points .

نختار قيمة  $k\text{-points} = 1000$  التي توافق أول ثبوت للطاقة الكلية  $E$  . وهي القيمة التي نعتمدها في الحسابات القادمة.

### III.5.2. حساب الخصائص البنيوية:

يتبلور السيليسيوم وفق بنية الألماس لذلك الحساب الذي سنقوم به يهدف إلى تحديد حجم الخلية عند التوازن الموافق للحد الأدنى من الطاقة  $E$ .

التعليمات المستخدمة لتحسين الحجم في الواجهة الرسومية w2web نختار النافذة «Optimize volume» الشكل (III.8). نقوم بتنفيذ جميع برامج هذه النافذة مع التغير في حجم الخلية عند تنفيذ "x optimize" من 12%- إلى غاية 12% بخطوة تساوي 2. من خلال هذه المرحلة يتم تحسين الحجم وكذا حساب معامل الانضغاطية ومشتقه الأول والنتائج المتحصل عليها هي استنادا لمعادلة مورناغان Murnagham [T1].

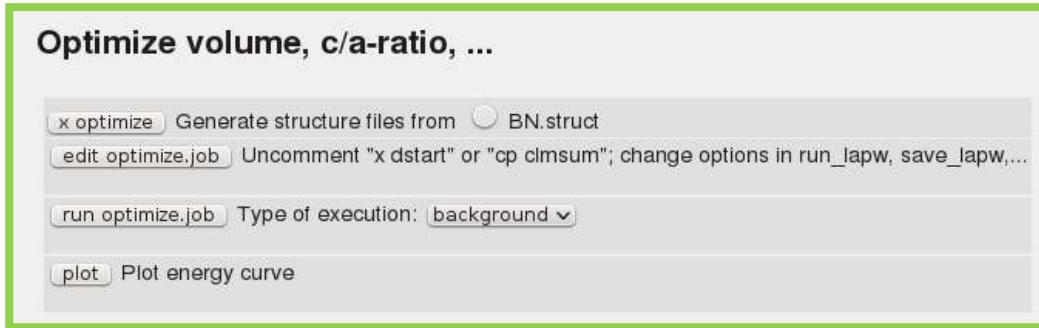
$$E(V) = E_0 + \frac{B}{\bar{B}(\bar{B}+1)} \left[ V \left( \frac{V_0}{V} \right)^{\bar{B}} - V_0 \right] + \frac{B}{\bar{B}} (V - V_0) \quad \text{المعادلة (1. III)}$$

أين:

$E_0$  و  $V_0$ : الطاقة والحجم عند حالة الاستقرار (التوازن) على الترتيب.

$B$  معامل الانضغاطية وهو احد خصائص المادة في علم المرونة. يصف كمية الضغط التي يلزم تطبيقها على جسم من جميع نواحيه للحصول على تغير معلوم في حجمه.

$\bar{B}$ : مشتقه الأول بالنسبة للضغط.



الشكل (III.8): نافذة "optimize volume".

النتائج المتحصل عليها معامل الشبكة البلورية وكل من معامل الانضغاطية ومشتقه الأول تقدم وتناقش في الفصل الرابع.



### III.6.2. حساب الخصائص الإلكترونية:

حساب الخصائص الإلكترونية يتضمن حساب بنية عصابة الطاقة و كثافة الحالات. التي نتحصل عليها في برنامج **WIEN2k** بالضغط على **Tasks**. وأي حساب ل **Tasks** يسبقه حساب حلقة **SCF** أين نستخدم قيم المعاملات المثلى أي القيم التي تحصلنا عليها بعد التهيئة. ومع أن كل خاصية الكترونية تحسب بشكل مختلف ومستقل عن خاصية الكترونية أخرى إلا انه يمكننا استخدام نفس حساب **SCF**. [T3]

### III.1.6.2. حساب بنية عصابة الطاقة: la structure de bande

لحساب بنية عصابة الطاقة نقوم بما يلي: [T1] [L2]

- تعديل ملف البنية "Si. struct" بإدخال قيمة ثابت الشبكة عند التوازن المتحصل عليه في مرحلة "optimize volume" من معادلة مورناغان Murnaghan .
  - تهيئة أنظمة الحسابات الأولية "initialize calculation" بأخذ قيم نتائج المرحلة حسابات الحد الأدنى للطاقة ( $R_{MT_{MIN}} \times K_{MAX} = 8$  و  $k - points = 1000$ ).
  - نحسب ال **SCF** بالمعاملات المثلى من اجل الحصول على تقارب للكُمون, الطاقة وكثافة الشحنة.
  - نأخذ الملف **fcc.klist** من المجلد **SRC.template** من **WIEN2k** ونضعه في ملف العمل ونعيد تسميته **Si.klist**.
  - نأخذ الملف **case.insp** من المجلد **SRC.template** من **WIEN2k** ونضعه في ملف العمل ونعيد تسميته **Si.insp**.
  - نضغط على **Tasks** من الواجهة الرسومية "w2web" ونختار التعليمة « Bandstructure » ونضغط على الأزرار واحد تلو والأخر.
  - نقوم بإدخال طاقة فرمي  $E_f$  في خطوة "edit.insp" والتي تكون قد سجلت من ملف المخرجات **Si.scf**.
2. في حالتنا قيم الطاقة لمستوي فرمي موضحة في الجدول (III.6).

➤ نحسب Bandstructure بواسطة « x spaghetti ».

➤ نمثل Bandstructure بواسطة « plot bandstructure ».

الجدول (6.III): قيم الطاقة لمستوي فرمي  $E_f$  حسب التقريبين LDA و GGA.

	GGA	LDA
طاقة مستوي فرمي $E_f$ (eV)	0.3970859150	0.3079638627

### 2.6.2.III. حساب كثافة الحالات: la densité des états

لحساب كثافة الحالات DOS تتبع ما يلي: [L1] [T1]

➤ نحسب ال SCF بالمعاملات المثلى أي بعد التحسين من اجل الحصول على تقارب للكمون, الطاقة وكثافة الشحنة.

➤ نختار « DOS » من القائمة Tasks من الواجهة الرسومية w2web. ونضغط على الأزرار الواحد تلو

والآخر:

✓ حساب الشحنات الجزئية (x lapw2 -qt1).

✓ إنشاء الملف Si.int على الشكل التالي: ( بتقريب ال GGA)

```
Si GGA
-0.50 0.002 1.500 0.003 #Emin, DE, Emax, Gauss-Broad
1 N 0.000 #Number of DOS-cases,G/L/B broadening (Ry)
0 1 total-DOS
1 2 s-Si
1 3 p-Si
1 4 d-Si
1 5 d-eg-Si
1 6 d-t2g-Si
1 7 f-Si
SUM: 0 2 # NUMBER OF SUMMATIONS, max-nr-of summands
2 5 # this sums dos-cases 2+5 from the input above
```

✓ حسابات كثافات الحالات الجزئية وكثافة الحالات الكلية بواسطة “tetra”.

✓ تمثيل كثافات الحالات بيانيا بواسطة « dosplot ».

نتائج الحساب للخصائص الالكترونية المتحصل عليها تعطى في الفصل الرابع للمناقشة.

### 3.III. حساب الخصائص البنوية لعناقيد السيليسيوم $Si_n$ من اجل $n=1$ إلى $n=4$ :

تعرف التجمعات الصغيرة للذرات السيليسيوم باسم العناقيد Les clusters. هذه الأخيرة التي تلعب دور كبير في مجال تقنية تكنولوجيا النانو لما لها من خصائص فيزيائية وكيميائية مهمة تتغير وفقا لتغير حجم العنقود. [T4] و بهدف دراسة الخصائص البنوية لعناقيد السيليسيوم باستخدام برنامج الحساب WIEN2k اعتمدنا على الأبعاد التجريبية المدروسة كمدخلات أولية لتشكيل البنية الجدول (7.III). لأنه و من المعلوم أن العناقيد المشكلة من عدد ذرات اقل من 9 تم تحديد هندستها بشكل جيد تجريبيا. [T4]

الجدول (7.III): طول الرابطة  $R_{Si-Si}$  التجريبي. [A1]

العناقيد $Si_n$	$R_{Si-Si}$ ( $A^\circ$ )
$Si_2$	2.066
$Si_3$	2.185
$Si_4$	2.325

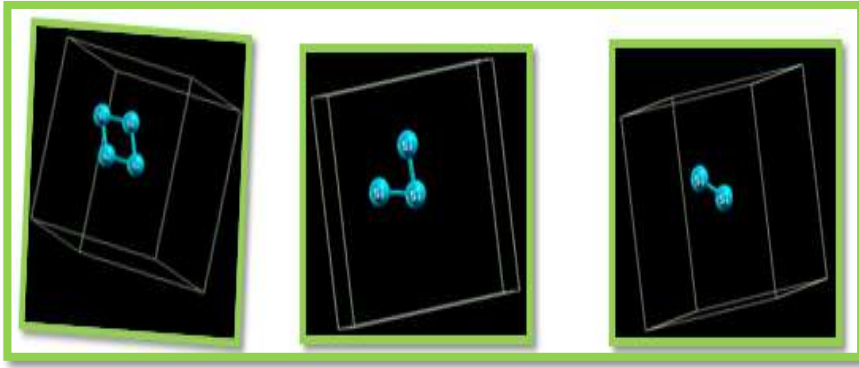
#### 1.3.III. إنشاء الملف $Si_n.struct$ :

الخطوة الأولى هي إنشاء ملف  $Si_n.struct$  باستخدام الواجهة الرسومية « w2web », وهذا بعدما تم إنشاء الدليل case-directory باسم «  $Si_n$  ». ويتم تنفيذ إنشاء بنية المادة بمساعدة « StructGen<sup>TM</sup> » انطلاقا من واجهة المستخدم الرسومية بحيث المدخلات الأولية اللازمة لذلك موضحة في الجدول (8.III). مبدأ العمل في هذه المرحلة وضع العنقود  $Si_n$  بمركز مكعب طول حرفه  $10 A^\circ$  الشكل (9.III). وكل ما زادت أبعاد المكعب كان التقريب أدق والوقت المستغرق للحساب أطول, و الهدف من زيادة أبعاد المكعب هو منع التفاعل بين العناقيد (حجب الالكترونات).

الجدول (8.III): المدخلات الأولية لإنشاء الملف  $.Si_n.struct$ .

العناقيد	$Si_n$			
زمرة التناظر الفضائية	P			
الثوابت البلورية ( $A^\circ$ )	a	10		
	b	10		
	c	10		
الزوايا البلورية	$\alpha$	$90^\circ$		
	$\beta$	$90^\circ$		
	$\gamma$	$90^\circ$		
المواضع الذرية	الإحداثيات	X	Y	Z
	Si <sub>2</sub>	0.50000	0.50000	0.50000
		0.61900	0.61900	0.61900
	Si <sub>3</sub>	0.50000	0.50000	0.50000
		0.51510	0.71735	0.51510
		0.71360	0.54360	0.51360
	Si <sub>4</sub>	0.50000	0.50000	0.50000
		0.50000	0.73300	0.50000
		0.71000	0.60000	0.50000
		0.70000	0.83000	0.50000

يتم الحفظ بنفس الطريقة المستخدمة في السيليسيوم البلوري السابقة الذكر.



الشكل (9.III): بواسطة برنامج  $Si_n$  بنية العناقيد XCRYSDEN.

### 2.3.III. التهيئة الأولية Initialisation:

بعد إنشاء الملف  $Si_n.struct$  نتقل إلى تهيئة الحساب ابتداء بالبرنامج الفرعي  $x nn$  إلى غاية  $x dstart$  على

الترتيب. بنفس الخطوات السابقة المستخدمة في السيليسيوم البلوري. مع الأخذ بعين الاعتبار التغيير في:

- اختيار NO عند تنفيذ برنامج **symmetry**.
- حالة عدم استقطاب السبين no spin-polarization عند تنفيذ برنامج **instgen\_lapw**.
- نوع التقريب المستخدم لحساب كمون تبادل-ارتباط في حالتنا استخدمنا تقريب LDA. و طاقة فصل بقيمة  $-6 Ry$  عند تنفيذ برنامج **x lstart**.
- اختيار قيمة معاملات الحساب الموضحة في الجدول (9.III). والتي اختيرت بشكل يسمح لنا بالحساب في اقل وقت و بدقة اقل.

الجدول (9.III): المعاملات المأخوذة للحساب.

التقريب	k-points	$R_{MT_{MIN}} \times K_{MAX}$	$G_{MAX}$
LDA	200	7	12

### 3.3.III. تشغيل حلقة SCF : Exécution du cycle SCF

بعد إنشاء ملف المدخلات اللازم والقيام بالتهيئة تنتقل لعملية حسابات SCF, نقوم بالحساب لحلقة "run SCF" بمعيار تقارب للطاقة يساوي إلى  $0.0001 \text{ Ry} = \text{ec}$ . الطاقة الكلية تسجل في نهاية تشغيل حلقة SCF من الملف  $Si_n.scf$  وقيمة فجوة الطاقة من ملف المخرجات  $2.Si_n.scf$ . النتائج تقدم وتناقش في الفصل الرابع.

#### ✓ خلاصة:

من خلال ما تطرقنا إليه في هذا الفصل وهو عبارة عن نمذجة السيليسيوم ومحاكاته وجدنا من اختبارات التقارب التي قمنا بها لتهيئة معاملات الحساب من اجل السيليسيوم البلوري أن القيمة المثلى لكل من  $R_{MTMIN} \times K_{MAX}$  و  $k$ -points هي 8 و 1000 على الترتيب. وهي القيم التي اعتمدنا عليها لحساب مختلف الخصائص في حالة السيليسيوم البلور بكل من التقريبيين GGA وال LDA. أما في حالة العناقيد فقد اخترنا  $R_{MTMIN} \times K_{MAX}$  و  $k$ -points بقيم 7 و 200 على الترتيب و قمنا بالحساب بتقريب ال LDA. وقد استعرضنا خلال هذا الفصل كيفية ومراحل الحساب لمختلف الخصائص الفيزيائية بالتفصيل على أن يتم عرض نتائج المحاكات لمناقشتها في الفصل الرابع.

المراجع

الفصل 3

➤ كتب : Livres

داخل ، مقدمة في فيزياء الجسم الصلب ، الجزء الثاني ، ديوان المطبوعات الجامعية الجزائر 1988

[L1]

[L2] P.Blaha et al , User's Guide, WIEN2k\_14.1, Vienna University of Technolgy.

➤ أطروحات تخرج : Thèses

[T1] A. REGGAD , Etude calcul Abinito des propriétés structurale etoptoélectroniques de Bismuthinite Bi<sub>2</sub> S<sub>3</sub>, Université Ibn Khaldoum Tiaret ,2013.

ب. السعدي، مساهمة في دراسة الخصائص الفيزيائية لـ (X = Au,Ag ,cu ) X<sub>2</sub>Gd In ، جامعة سطيف1، 2013

[T2]

[T3] Z.AYAT, Calcul des propriétés électroniques de quelques dihydrures de terres

déterminées par le code de simulation WIEN2k, Université de Ouargla, 2006.

[T4] S.MAHTOUT, Théorie et calcul des propriétés physiques des clusters, Université de Bejaia , 2007.

➤ مقالات علمية : Articles

[A1] A Kodlaa, Quantum-Chemical Study of Phosphorus Effect on Properties of Small Silicon Clusters, May 28, 2009.



## الفصل الرابع 4

نتائج المحاكاة ومناقشتها

## 1.VI. مقدمة:

الهدف من دراستنا هو نمذجة و محاكاة السيليسيوم ذو البنية البلورية وعناقيه  $Si_n$  من اجل  $n=1$  إلى  $n=4$ . لأجل تحديد الخصائص البنيوية والالكترونية. قمنا في الفصل السابق بشرح مراحل وكيفية الحساب بالتفصيل باستخدام برنامج المحاكاة **WIEN2k**. و من خلال هذا الفصل سنقوم بتقديم النتائج المتحصل عليها لمناقشتها وتفسيرها.

## 2.VI. تفاصيل الحساب لدراسة السيليسيوم ببنية بلورية:

اعتمدنا في حسابنا على برنامج **WIEN2k** واستخدمنا طريقة **LAPW** التي تركز على تقريب الكمون الكامل (FP) كأساس لحل معادلات كوهان-شام ضمن نظرية الكثافة التابعة **DFT**. معتمدين تقريب التدرج المعمم **GGA** وكذلك تقريب الكثافة المحلية **LDA** لمعالجة كمون التبادل-ارتباط و بأخذ طاقة القطع التي تمثل الفصل بين الحالات القلبية وحالات التكافؤ بقيمة  $(-6Ry)$ . وقد تحصلنا من اختبارات التقارب (من اجل التهيئة) على القيم الموضحة في الجدول (1.VI) وهي القيم التي اعتمدنا عليها في حساباتنا.

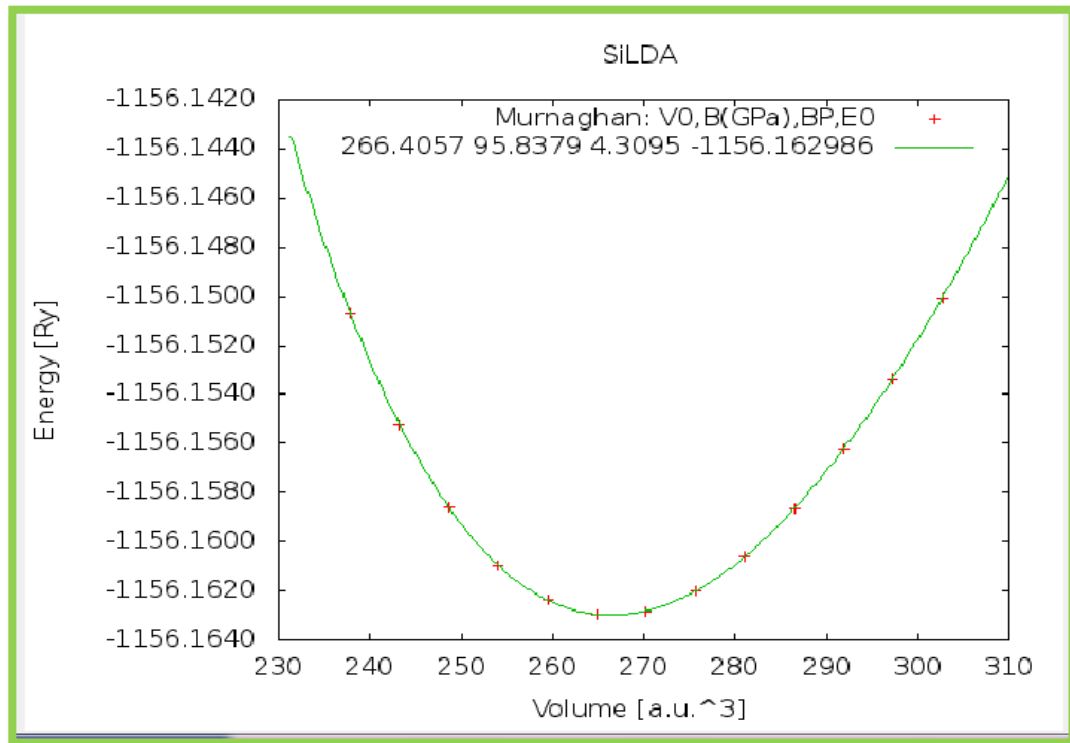
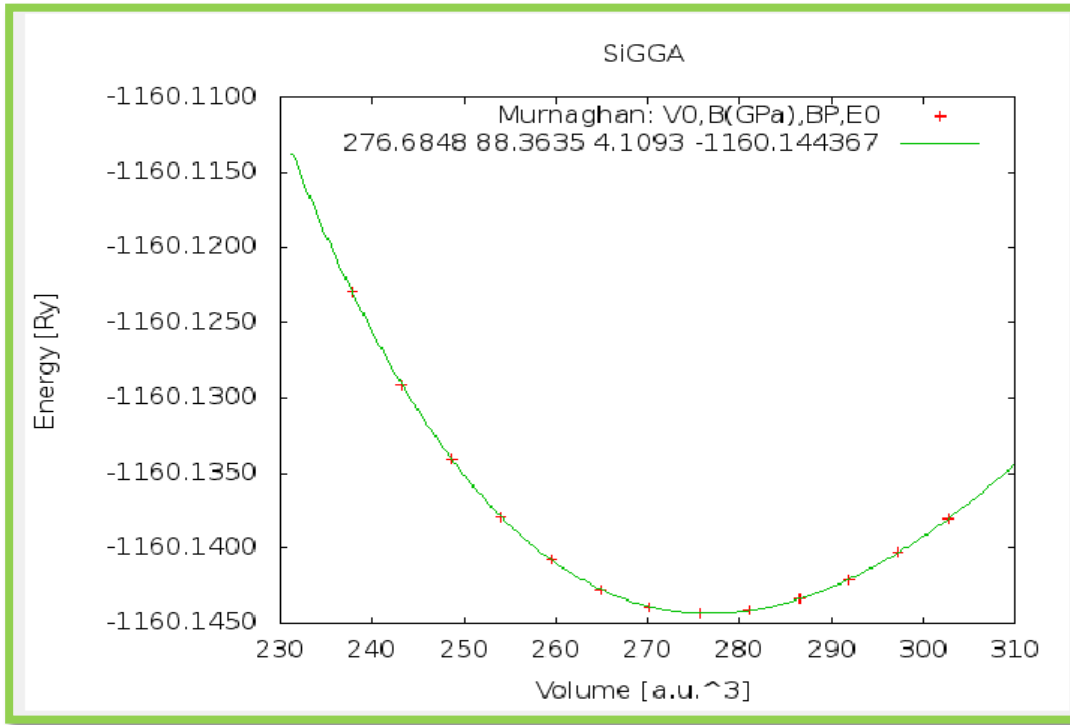
الجدول (1.VI): نتائج اختبارات التقارب المعتمدة في الحساب.

التقريب	k-point	$R_{MT_{MIN}} \times K_{MAX}$	$G_{MAX}$	$R_{MT}$
GGA	1000	8	12	2
LDA	1000	8	12	2

## 1.2.VI. الخصائص البنيوية:

تحديد الخصائص البنيوية للمادة أمر بالغ الأهمية في الحساب من المعطيات الأولية. لأنها تتيح لنا استخدام النتائج المتحصل عليها عند حالة الاستقرار(حالة التوازن) لتحديد الخصائص الفيزيائية الأخرى. في دراستنا السيليسيوم يتبلور وفق بنية الألماس. إذن الحساب يكون لتحسين: الحجم  $V$  (ثابت الشبكة البلورية) أي إيجاد قيمة الحجم عند اقل طاقة. [T1] وقد تحصلنا على تغيرات الطاقة الكلية كدالة في الحجم بالنسبة لتقريب التدرج المعمم **GGA** الموضحة في الشكل (1.VI). و في حالة استخدام تقريب الكثافة المحلية **LDA** موضحة في الشكل (2.VI).

الشكل (1.VI): تغيرات الطاقة الكلية بالنسبة للحجم للسليسيوم بتقريب GGA.



الشكل (2.VI): تغيرات الطاقة الكلية بالنسبة للحجم للسليسيوم بتقريب LDA.

تحسين الحجم  $V$  يمكننا من تحديد القيمة المثلى لثابت الشبكة البلورية, معامل الانضغاطية وكذا مشتقه الأول بالنسبة للضغط. وهذا اعتمادا على معادلة مورناغان Murnaghan كما هو موضح في الشكل (3.VI) بالنسبة لتقريب التدرج المعمم GGA والشكل (4.VI) لتقريب الكثافة المحلية LDA.

```
Equation of state: Murnaghan          info      7
E=E0+[B*V/BP*(1/(BP-1)*(V0/V)**BP +1)-B*V0/(BP-1)]/14703.6
Pressure=B/BP*((V0/V)**BP -1)
V0,B(GPa),BP,E0      276.6848      88.3635      4.1093      -1160.144367
cubic lattice parameter:  10.3438 bohr =  5.4737 Ang
```

الشكل (3.VI): نتائج التحسين للخصائص البنيوية للسليسيوم حسب معادلة مورناغان بتقريب GGA.

```
Equation of state: Murnaghan          info      7
E=E0+[B*V/BP*(1/(BP-1)*(V0/V)**BP +1)-B*V0/(BP-1)]/14703.6
Pressure=B/BP*((V0/V)**BP -1)
V0,B(GPa),BP,E0      266.4057      95.8379      4.3095      -1156.162986
cubic lattice parameter:  10.2141 bohr =  5.4051 Ang
```

الشكل (4.VI): نتائج التحسين للخصائص البنيوية للسليسيوم حسب معادلة مورناغان بتقريب LDA.

ونلخص كل النتائج المتحصل عليها حسب كل من التقريبن GGA و LDA في الجدول (2.VI). ونقارنها بالقيم

التجريبية والنظرية لدراسات سابقة تمت ببرنامج الحساب WIEN2k .

الجدول (2.VI): ثابت الشبكة البلورية, معامل الانضغاطية و مشتقه الأول بالنسبة للسيليسيوم.

Si	النتائج المتحصل عليها باستخدام التقريبان		النتائج المأخوذة للمقارنة		
	GGA	LDA	نظريا		تجريبي [A1]
			[A1]GGA	[A1]LDA	
$a(A^\circ)$	5.4737	5.4051	5.4738	5.4073	5.4310
$B(Gpa)$	88.36	95.83	87.71	92.96	97.82
$\beta$	4.10	4.30	4.23	4.35	4.09
$E_{min}(Ry)$	-1160.144367	-1156.162986	-	-	-

من خلال النتائج المتحصل عليها نلاحظ أنهما متوافقة لحد ما مع القيم التجريبية والدراسات النظرية و نرجع الاختلاف البسيط بينها إلى تقريبات نظرية الكثافة التابعية. و يمكننا أن نلاحظ كذلك أن قيمة ثابت الشبكة البلورية المتحصل عليها في حسابنا هي أكبر من القيمة التجريبية بالنسبة لتقريب ال GGA بفارق 0.0427 و اقل من التجريبية بالنسبة لتقريب ال LDA بفارق يقدر ب 0.0259. وهي متوافقة لحد كبير مع الدراسات النظرية السابقة.

يمكننا أن نشير إلى الفائدة من إظهار قيمة معامل الانضغاطية و مشتقه الأول في نتائجنا -والتي تؤكد أن السيليسيوم مادة مرنة-. لوجود بعض التطبيقات العملية المهمة التي يستخدم فيها السيليسيوم على حسب هذه الخاصية.

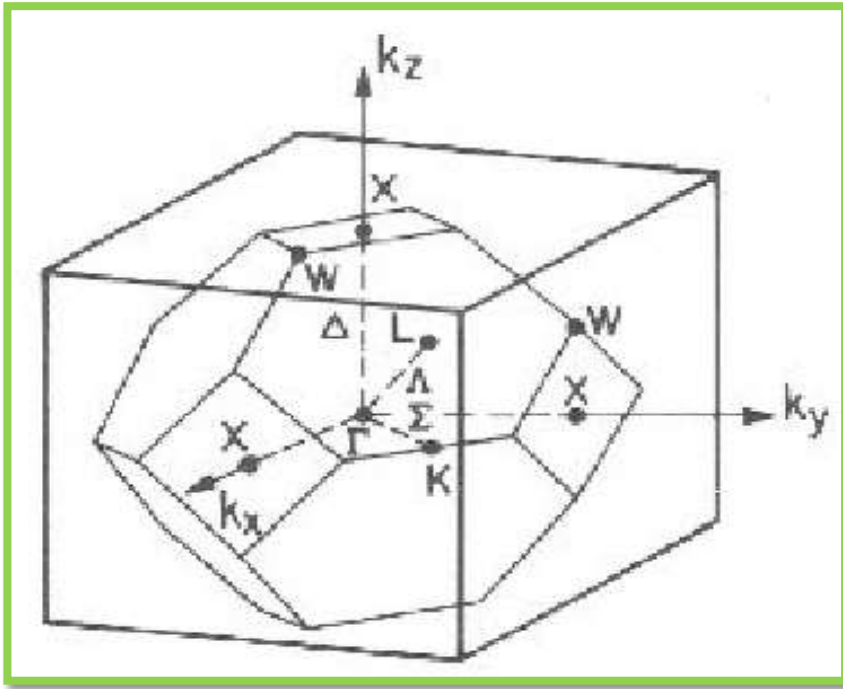
## 2.2.VI. الخصائص الالكترونية:

إن حساب الخصائص الالكترونية مهم جدا من اجل تحديد وتفسير الخصائص الفيزيائية الأخرى للمواد. كمثل عند حساب كثافة الحالات DOS فإنها تستخدم في تحديد الخصائص الضوئية, المغناطيسية والكيميائية للمواد. وحساب كثافة الشحنة مهمة جدا لتحديد الخصائص الكيميائية (نوع الرابطة الكيميائية). [T1]

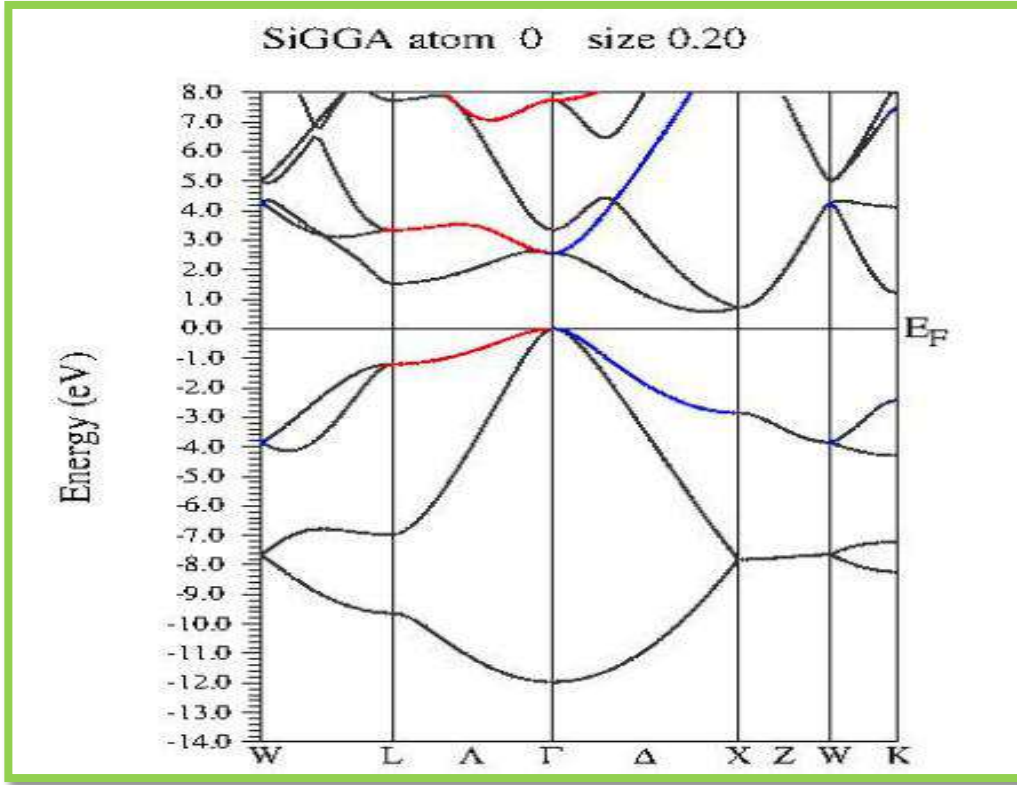
## 1.2.2.VI. بنية العصابة الطاقية: La structure de bande

بمجموعة المنحنيات  $E_n(k)$  تمثل منحنيات تشتت الإلكترونات في البلور وتدعى أيضا ببنية العصابة. [L1] والتي تمثل كل حالات الطاقة المتاحة للإلكترونات، فمن خلال ملء الحالات بالإلكترونات البلور نجد عند الصفر مطلق: حالات عصابة التوصيل ليست مملوءة ( شاغرة) على عكس عصابة التكافؤ التي تكون مملوءة بالإلكترونات. إذن عصابات الطاقة تعطي الطاقات الممكنة للإلكترونات كتابع لشعاع الموجة وتمثل في الفضاء العكسي ولكن للتبسيط يتم التعامل فقط مع المتجهات ذات التناظر العالي في منطقة بريلوان الأولى. [L2] الشكل (5.VI) يمثل منطقة بريلوان الأولى للسيليسيوم.

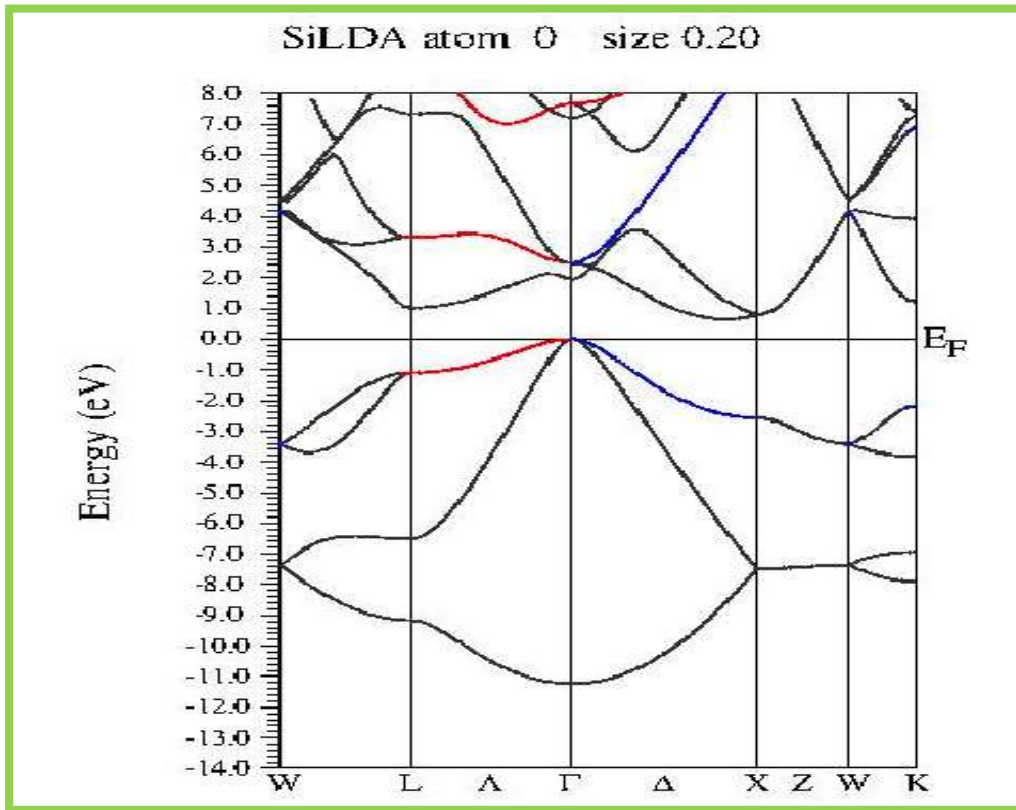
يفصل بين عصابات التوصيل وعصابات التكافؤ بعصابة ممنوعة من الطاقة تسمى بفجوة الطاقة gap، والتي تعرف على أنها الفرق بين أقصى عصابة التكافؤ MAXBV واقل عصابة التوصيل MINBC. [L3] وبنية عصابة التوصيل للسيليسيوم المتحصل عليها في برنامج الحساب المعتمد موضحة في الشكل (6.VI) والشكل (7.VI) وفق كل من التقريبيين GGA و LDA على الترتيب. وقيمة فجوة الطاقة في الجدول (3.VI) والتي تم تسجيلها من ملف المخرجات Si.scf2.



الشكل(5. VI) : منطقة بريلوان الأولى للسيليسيوم. [L4]



الشكل (6.VI): عصابة الطاقة للسيليسيوم بتقريب GGA.



الشكل (7.VI): عصابة الطاقة للسيليسيوم بتقريب LDA.

الجدول (3.VI): قيم فجوة الطاقة للسيليسيوم النظرية و التجريبية حسب التقريبن LDA و GGA.

قيمة فجوة الطاقة (eV)gap	النتائج المتحصل عليها		نتائج مأخوذة للمقارنة			
	GGA	LDA	الدراسة النظرية			تجريبيا [A1]
			GGA[A1]	LDA [A]	mBJ-LDA [A1]	
	0.583	0.648	0.590	0.650	1.130	1.120

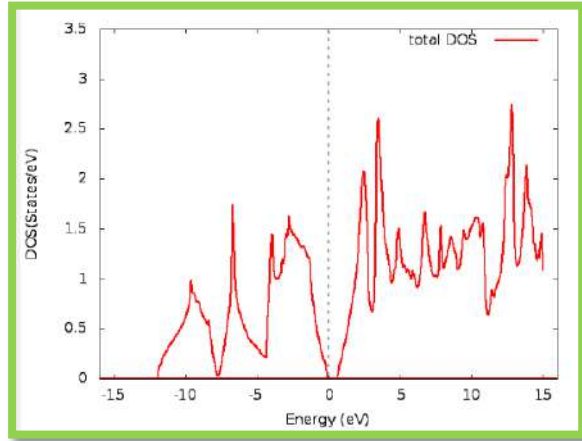
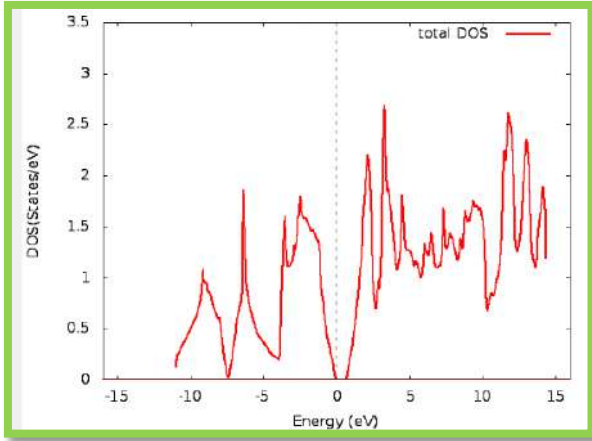
من خلال النتائج المتحصل عليها يمكننا استنتاج أن:

- السيليسيوم عبارة عن شبه ناقل لوجود قيمة صغيرة للفواصل الطاقية ونوع العصابة الممنوعة غير مباشرة لأن أعلى قيمة لعصابة التكافؤ و اقل قيمة لعصابة التوصيل ليستا متعامدتين بالاعتماد على شكل بنية العصابة حسب التقريبن. وهذا يوافق الجانب التجريبي.
- قيمة فجوة الطاقة للسيليسيوم المتحصل عليها تختلف عن القيمة التجريبية وهذا راجع إلى تقريبات الكثافة التابعة. كما يمكننا ملاحظة أن تقريب mBJ -LDA يعطي نتائج أحسن من تقريب ال GGA الذي يعرف انه ينقص قيمة الفجوة بنسبة 50% تقريبا. [T1]

### 2.2.2.VI. كثافة الحالات: La densité des états

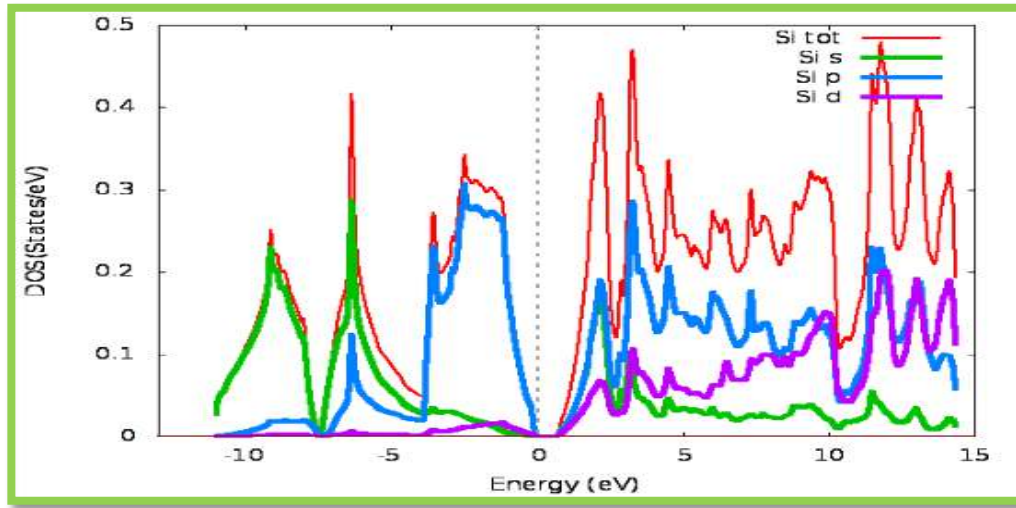
تمثل كثافة الحالات الالكترونية عدد الحالات الالكترونية المتاحة في وحدة الطاقة. [L1] وهي تابع يعتمد فقط على الطاقة. ومعيار جد مهم لحساب و تحديد مختلف الخصائص الفيزيائية كالخصائص الالكترونية, الضوئية, المغناطيسية والكيميائية للمواد. [T2] الشكل (8.VI) والشكل (9.VI) يمثل كثافة الحالات للسيليسيوم وفق التقريبن على الترتيب.





الشكل (9.VI): كثافة الحالات للسيليسيوم بتقريب LDA.

الشكل (8.VI): كثافة الحالات للسيليسيوم بتقريب GGA.



الشكل (10.VI): كثافة الحالات الكلية والجزئية للسيليسيوم بتقريب LDA.

من خلال الشكل (9.VI) و مقارنته بالشكل (10.VI) يمكننا أن نلاحظ: مناقشة كثافة الحالات بالنسبة

لتقريب ال (LDA)

- كثافة حالات صغيرة في مجال طاقي عريض  $eV [-11.5, -7.5]$  تقريبا تساهم فيه الكثرونات المحط الطاقى s بشكل كبير.
- تداخل بين محطى الطاقة s و p نتج عنه كثافة حالات عالية في المجال الطاقى  $eV [-11.5, 0]$  تقريبا.
- عدم وجود كثافة حالات على مستوى سطح فرمى, وفي المجال الطاقى الضيق  $eV [0, 1]$  تقريبا.

• كثافة حالات عالية في المجال الطاقى  $eV [1,4]$  تقريبا ناتجة من تداخل محط الطاقة  $p$  و  $d$  الشاغرین بشكل كبير.

• كثافة حالات معتبرة في مجال طاقي عريض  $eV [4,10]$  تقريبا ناتجة من تداخل محط الطاقة  $p$  و  $d$  الشاغرین.

• كثافة حالات كبيرة في مجال طاقي عريض  $eV [10,14]$  تقريبا ناتجة من تداخل محط الطاقة  $p$  و  $d$  الشاغرین.

من خلال كل هذا يمكننا استنتاج أن :

✓ السيليسيوم شبه ناقل لانعدام كثافة الحالات على كل من مستوي سطح فرمي و وجود فاصل طاقي ضيق.

✓ أن محطات الطاقة في عصابة التكافؤ وعصابة التوصيل تتحكم بما سويات الطاقة الجزئية الموضحة في الشكل ( 10.

(VI

يمكننا أن نلاحظ أيضا انه يمكننا تحديد قيمة فجوة الطاقة انطلاقا من كثافة الحالات لكن القيمة تكون اقل من

تلك المتحصل عليها من بنية العصابة الشكل (VI 9). هذا لان حساب كثافة الحالات لا يؤخذ بعين الاعتبار

تشنت العصابات. [L4] [T1]

من خلال هذه الدراسة النظرية للخصائص البنيوية والالكترونية للسيليسيوم البلوري نجد توافقا كبيرا مع الجانب

التجريبي ودراسات سابقة مع بعض الاختلاف البسيط الذي نرجعه إلى اختلاف درجة التحسينات المستعملة لكن عموما فان

النتائج متوافقة إلى حد ما. وعليه يمكن القول أن السيليسيوم مادة أساسية و مهمة جدا -لما يحمله من خصائص فيزيائية- في

الصناعة الالكترونية و المركبات الضوئية وبشكل خاص في صناعة الكواشف الضوئية لامتلاكه عصابة ممنوعة غير مباشرة.

### 3.VI. الخصائص البنيوية لعناقيد السيليسيوم $Si_n$ من اجل $n=1$ إلى $n=4$ :

في دراستنا للبنية الهيكلية لعناقيد السيليسيوم  $Si_n$  من اجل  $n=1$  إلى  $n=4$  اعتمدنا على الأبعاد التجريبية في المدخلات الأولى وهيكلتها الموضحة في الشكل (11. VI). كما أسلفنا القول في الفصل الثالث. وقيم الطاقة المتحصل عليها للعناقيد بعد حساب حلقة ال SCF موضحة في الجدول (4. VI). والتقريب المستخدم في الحساب هو تقريب ال LDA.



الشكل (11. VI): البنية الهيكلية لعناقيد السيليسيوم  $Si_n$  المتحصل عليها بواسطة برنامج

.XCRYSDEN

الجدول (4. VI): طاقة عناقيد السيليسيوم حسب تقريب LDA.

العناقيد $Si_n$	$E_{tot}(eV)$
$Si_2$	-15723.45155600
$Si_3$	-23588.65868000
$Si_4$	-31453.78358000

لمناقشة النتائج المتحصل عليها أي الطاقة المحسوبة من حلقة SCF نكون بحاجة إلى حساب طاقة الربط (طاقة

التماسك) للعناقيد والتي تعطينا مدلولاً مدى تماسك العنقود.

➤ تعريف طاقة الربط  $coh$  :

تعرف طاقة الربط فيزيائياً على أنها الفرق بين متوسط طاقة الذرات الصلبة  $E_{tot}$  (لا سيما للبلورة) وطاقة

الذرات الحرة  $E_{at}$ . وتحسب بالعلاقة التالية:

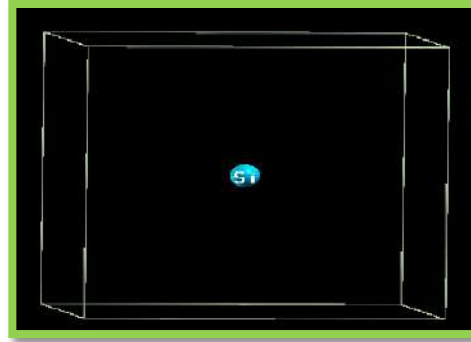
$$E_{coh}(Si_n) = E_{tot}(Si_n) - nE_{at} \quad (1.VI)$$

حيث  $n$  عدد الذرات المكونة للعنقود. [T3]

لحساب طاقة ذرة معزولة عن النظام ببرنامج **WIEN2k** نضع ذرة واحدة من السيليسيوم في مركز مكعب طول

حرفه  $10\text{\AA}$  الشكل (12.VI) ونحسب الطاقة من حلقة ال SCF بنفس الخطوات ومعاملات الحساب المستخدمة في

حالة العناقيد الجدول (8.III). [T4]



الشكل (12.VI): ذرة سيليسيوم المتحصل عليها بواسطة برنامج XCRYSDEN.

نسجل قيمة طاقة ذرة معزولة الجدول (4.VI) عند نهاية حلقة ال SCF من ملف المخرجات  $Si_0.scf$ .

الجدول (5.VI): طاقة ذرة سيليسيوم معزولة حسب تقريب LDA.

الطاقة $E_{at}$	$a = 10 (\text{\AA})$
Ry) ( $E_{at}$ )	-577.64453822
eV) ( $E_{at}$ )	-7859.2571730

وننتج حساب طاقة الربط لعناقيد السيليسيوم موضحة في الجدول (6.VI).

الجدول (6. VI): النتائج المتحصل عليها بالنسبة لعناقيد السيليسيوم النظرية والتجريبية حسب تقريب LDA.

العناقيد	النتائج المتحصل عليها من الحساب		نتائج مأخوذة للمقارنة			
			النتائج النظرية		النتائج التجريبية [A2]	
$Si_n$	$E_{coh}$	$E_g$	$E_{coh}$ [T3]	$E_g$	$E_{coh}$	$E_g$
Si <sub>2</sub>	-2.468602000	-	3.56	0.71	-1.66	-
Si <sub>3</sub>	-3.629053667	0.562	7.60	2.320	-2.44	-
Si <sub>4</sub>	-4.188722000	0.830	2.92[A4]	2.838	-2.99	-

$E_{coh}$  : طاقة الربط بوحدة (eV/atom).

$E_g$  : قيمة العصابة الممنوعة (فجوة الطاقة) بوحدة (eV).

من خلال النتائج المتحصل عليها لعناقيد السيليسيوم يمكننا استنتاج أن :

✓ طاقة الربط تتزايد قيمتها والتي تعطي لنا مدلول حول تماسك واستقرار العنقود. إذ يمكننا القول من خلال هذه

النتائج أن العنقود Si<sub>4</sub> أكثر استقرار مقارنة بكل من العنقودين Si<sub>2</sub> و Si<sub>3</sub> والذي بدوره أكثر استقرار من Si<sub>2</sub>.

✓ تتغير قيمة العصابة الممنوعة بشكل ملحوظ للعناقيد. والتي من خلالها نستدل أن الخصائص الفيزيائية للعناقيد تتغير

بشكل كبير وفقا لتغير حجمها. وتختلف خصائصه عن السيليسيوم الصلب.

✓ إذا ما قارنا هاته النتائج المتحصل عليها بكل من النتائج التجريبية والنظرية. نجد أنها متوافقة معها من ناحية المدلول

الفيزيائي. مع وجود اختلاف في القيم والتي نرجعها إلى اختلاف في التقريبات و كذا برنامج المحاكاة المستخدم.

إضافة لكوننا استخدمنا معاملات الحساب بدون تهيئة ( غير مثلى).

## ✓ خلاصة:

في هذا الفصل استعرضنا النتائج المتحصل عليها لكل من السيليسيوم ذو البنية البلورية و العنقودية وتوصلنا إلى أن السيليسيوم البلوري يمكن الاستفادة منه في المركبات الضوئية والالكترونية بشكل عام وفي الكواشف بشكل خاص لامتلاكه عصابة ممنوعة غير مباشرة. وان خصائصه الفيزيائية تتغير بشكل كبير في حالة العناقيد. التي تتميز بتغير خصائصها مع تغير حجم العنقود وهذا ما يجعلها مهمة في الاستخدامات المحتملة في مجال الالكترونيات والليزر على مستوى سلم النانو. النتائج التي تم التحصل عليها متوافقة لحد ما مع النتائج التجريبية والدراسات السابقة. و منه يمكننا القول أن هذا العمل هو عبارة عن أساس لعمل اكبر من خلال دراسة عناقيد بحجم اكبر.

المراجع

الفصل 4

➤ الكتب: Livres

- [L1] عزيز داخل، مقدمة في فيزياء الجسم الصلب ، الجزء الثاني ، ديوان المطبوعات الجامعية الجزائر 1988.
- [L2] د . موسى المبروك الذويب ، أساسيات نائط المواد شبه الموصلة.
- [L3] Yu. Petery et Maneul cardona , Fundamentals of semiconductors , New York , 2010.
- [L4] د . فاروق كامل تقلا ، مقدمة في فيزياء أشباه الموصلات ديوان المطبوعات الجامعية ، بن عكنون ، الجزائر.

➤ أطروحات التخرج: Thèses

- [T1] A. REGGAD , Etude calcul Abinito des propriétés structurales et optoélectroniques de Bismuthinite  $Bi_2 S_3$ , Université Ibn Khaldoum Tiaret ,2013.
- [T2] M . GUEZLANE Etablissement Theorique des courbes de Solutions Metaliques pour les systemes Binaires  $MgX$  (  $X = Ge , Si , Sn$  ) , Université de Batna , 2011.
- [T3] S.MAHTOUT , Théorie et calcul des propriétés physiques des clusters , Université de Bejaia , 2007.
- ر . رحيم ، دراسة نظرية للبنية البلورية و الإلكترونية لنصف ناقل بإستعمال نظرية الكثافة التابعية ، جامعة ورقلة ,2013.
- [T4]

➤ مقالات علمية: Articles

- [A1] J. A. Camargo-Mart´inez et R. Baquero, Detailed analysis of the performance of the modified Becke–Johnson potential, September 10, 2013.
- [A2] A. Kodlaa, Quantum–Chemical Study of Phosphorus Effect on Properties of Small Silicon Clusters, May 28, 2009.
- [A3] J.Z hu Ye et B–Xing Li, First–principles study on mixed  $Si_mN_n$ ( $m+n= 2-9$ ) clusters, 11 May 2012.



الخاتمة

من خلال هذا العمل قمنا بدراسة نظرية للسيليسيوم ببنية بلورية وعنقودية  $Si_n$  من اجل  $n=1$  إلى  $n=4$ . لتحديد الخصائص البنيوية والالكترونية. اعتمدنا في حسابنا على برنامج **WIEN2k** واستخدمنا طريقة **LAPW** التي تركز على تقريب الكمون الكامل (FP) كأساس لحل معادلات كوهان-شام ضمن نظرية الكثافة التابعية **DFT**. معتمدين تقريب التدرج المعمم **GGA** وكذلك تقريب الكثافة المحلية **LDA** من اجل دراسة السيليسيوم في الحالة البلورية أما في حالة العناقيد فقد استخدمنا تقريب **LDA**. وقد تحصلنا في نهاية حساباتنا على:

- ✓ أولاً بالنسبة للسيليسيوم ذو البنية البلورية:
- ✓ النتائج المتحصل عليها بالنسبة للخصائص البنيوية متوافقة لحد ما مع القيم التجريبية والدراسات النظرية. وهذا حسب كل من التقريبيين.
- ✓ بالنسبة للخصائص الالكترونية وجدنا أن السيليسيوم شبه ناقل بعصابة ممنوعة غير مباشرة. وقيمة هذه الفجوة تختلف عن القيمة التجريبية. و أن تقريب **mBJ-LDA** يعطي نتائج أحسن من تقريب ال **GGA** الذي يعرف انه ينقص قيمة الفجوة بنسبة 50% تقريبا.
- ✓ يمكننا استنتاج أيضا أن تقريب ال **GGA** يعطي نتائج أفضل في حالة حساب الخصائص البنيوية على عكس تقريب **LDA**. وان القيمة التجريبية لثابت الشبكة البلورية تكون في الوسط بين قيمتين المتحصل عليهما في كل من التقريبيين في غالب الأحيان. أما في حالة حساب الخصائص الالكترونية فان تقريب ال **LDA** يكون أفضل مقارنة بتقريب ال **GGA**.
- ✓ وكتيجة هامة تحصلنا عليها والتي تعتبر الأساس في الدراسة هي أن السيليسيوم يتمتع بجملة من الخصائص تؤهله أن يكون مادة أساسية في الصناعة الالكترونية و المركبات الضوئية وبشكل خاص في صناعة الكواشف الضوئية لامتلاكه عصابة ممنوعة غير مباشرة. وهذا كله يتوافق لأبعد حد مع النتائج التجريبية.

➤ ثانياً بالنسبة لعناقيد السيليسيوم فقد تحصلنا على:

- ✓ طاقة الربط تتزايد قيمتها والتي تعطي لنا مدلول حول تماسك واستقرار العنقود. إذ يمكننا القول من خلال هذه النتائج أن العنقود  $Si_4$  أكثر استقراراً مقارنة بكل من العنقودين  $Si_2$  و  $Si_3$  والذي بدوره أكثر استقراراً من  $Si_2$ .
- ✓ تتغير قيمة العصابة الممنوعة بشكل ملحوظ للعناقيد. والتي من خلالها نستدل أن الخصائص الفيزيائية للعناقيد تتغير بشكل كبير وفقاً لتغير حجمها. وتختلف خصائصه عن السيليسيوم الصلب.
- ✓ إذا ما قارنا هاتاه النتائج المتحصل عليها بكل من النتائج التجريبية والنظرية. نجد أنها متوافقة معها من ناحية المدلول الفيزيائي. مع وجود اختلاف في القيم والتي نرجعها إلى اختلاف في التقريبات و كذا برنامج المحاكاة المستخدم. إضافة لكوننا استخدمنا معاملات الحساب بدون تهيئة (غير مثلى).

## ملخص عام

**ملخص:** الهدف من عملنا هو استخدام المحاكاة العددية -وهي العملية التي تكمل التجربة- لحساب الخصائص البنوية والالكترونية للسيليسيوم وعناقيده  $Si_n$  من اجل  $n=1$  إلى  $n=4$  لما لها من تطبيق واستخدام واسع النطاق في مجال الكترونيات والليزر. يتم تنفيذ المحاكاة برنامج **WIEN2k** باستخدام طريقة LAPW التي تركز على تقريب الكمون الكامل (FP) كأساس لحل معادلات كوهان-شام ضمن نظرية الكثافة التابعة DFT. معتمدين تقريب التدرج المعمم GGA وكذلك تقريب الكثافة المحلية LDA. والنتائج المتحصل عليها متوافقة مع النتائج التجريبية والنظرية لحد ما. الكلمات المفتاحية: عناقيده السيليسيوم  $Si_n$ , برنامج **WIEN2k**, تقريب GGA, تقريب LDA.

**Résumé :** L'objectif de notre travail consiste à utiliser la simulation numérique, un procédé qui complète l'expérimentation, pour calculer les propriétés structurales et électroniques du silicium et clusters  $Si_n$  pour  $n = 1$  à  $n = 4$ . En raison de leur application et l'utilisation de la large bande dans le domaine de l'électronique et laser Est effectuée en utilisant le programme de simulation en utilisant **WIEN2k** En utilisant la méthode LAPW qui est basée sur le rapprochement de la pleine latence (FP) comme base pour résoudre les équations Cohan-Sham dans Fonctionnelle de la Densité théorie DFT. Se fondant sur le rapprochement gradient généralisé GGA et rapprochement LDA. Les résultats obtenus sont compatibles avec les résultats expérimentaux et théoriques dans une certaine mesure.

Mots clés: clusters de silicium, programme **WIEN2k**, rapprochement GGA rapprochement LDA.

**Abstract:** The aim of our work is to use numerical simulation, a method which complements the experiment to calculate the structural and electronic properties of silicon and clusters  $Si_n$  for  $n = 1$  to  $n = 4$  due to their application and use of the wide strip in the field of electronics and laser is performed using the simulation program using **WIEN2k** LAPW using the method that is based on the approximation of the full latency (FP) as a basis for solving equations in Cohan-Sham density Functional theory DFT. Based on the generalized gradient approximation GGA and reconciliation LDA. The results obtained are consistent with the experimental and theoretical results to some extent.

Keywords: silicon clusters, **WIEN2k** program approximation GGA approximation LDA.