جامـــعة قاصـــدي مربـــاح ورقلـــة

كلية الرياضيات و علوم المادة

قسم الفيزياء


مذكرة ماستر أكاديمي

مجال: علوم المادة

شعبة: فيزياء

تخصص: فيزياء المواد


من إعداد الطالبة: زغابي صفية


العنـــوان:

# دراسة حسابية للخواص البصرية لنيتريد الألمنيوم (AlN) في طوره الأول عند الضغط المعدوم في الحالة متعددة البلورات وعند عدم تماثل المناحي

نوقشت علنا بتاريخ: 10/ 06/ 2026

أمام اللجنة المكونة من الأساتذة:

| | | | |
|---|---|---|---|
| الحاج بالشراير بالغيثار | أستاذ محاضـــر أ | جامعة قاصدي مربـــــــاح ورقلة | رئيسا |
| عبد اللطيف مامانـو | أستاذ محاضـر ب | جامعة قاصدي مربـــــــاح ورقلة | مناقشا |
| صالـــــح تليلي | أستاذ التعليم العالي | جامعة قاصدي مربـــــــاح ورقلة | مشرفا |

2026/2025

# التشكر

الحمد لله رب العالمين، حمدًا الشاكرين على نِعمه الظاهرة والباطنة، والحمد لله الذي وفقنا بفضله وكرمه لتجاوز التحديات وإتمام هذا العمل المتواضع.

ببالغ العرفان والتقدير، أتقدم بجزيل الشكر إلى أستاذي المشرف الفاضل

تليلي صالح، الذي أرشدني بعلمه الواسع، وتوجيهاته القيمة، ومتابعته الدقيقة لكل تفاصيل هذا البحث. لقد كان لدعمه الأكاديمي والإنساني الأثر الأكبر في دفع عجلة هذا العمل إلى الأمام.

ويشرفني أن أتوجه بأسير الشكر لـ لجنة المناقشة الموقرة، مقدراً لهم عناء القراءة والمراجعة، ومنحهم هذا البحث جزءاً من وقتهم الثمين. إن ملاحظاتهم السديدة ونقدهم البنّاء هما المُكمّل الحقيقي والبوصلة التي تُثري هذه الدراسة.

ولا يفوتني أن أعبر عن امتناني العميق لكل من وضع بصمة في هذا الإنجاز؛ من قريب أو بعيد، وكل من قدم يد العون والمشورة، أو وفر معلومة، أو منحني دعماً صادقاً. لكم مني جميعاً كل الود والتقدير، وسأل الله العلي القدير أن يوفقكم ويجزيكم خير الجزاء

# الإهداء

أهدي هذا العمل المتواضع:

*إلى والديّ الغاليين:*

إلى منبع العطاء وملاذي الآمن؛ أمي الغالية، ونبض قلبي، وأبي العزيز، وسندي في هذه الحياة. أهديكم ثمرة هذا الجهد، أنتم يا من كنتم وما زلتم سر نجاحي، وحصني المنيع بدعواتكم الطاهرة التي كانت تحرسني في خطاي، وتحملني فوق مشاق الطريق ومصاعبه. إليكم يا من بذلتم من أعماركم لأرى النور، عسى أن يقر الله أعينكم بهذا الإنجاز.

*إلى إخوتي وأخواتي:*

شركاء الدرب، ورفقاء العمر، وبسمة الأيام. إلى من تقاسمت معهم تفاصيل طفولتي وشبابي، ولم يبخلوا عليّ يوماً بنصيحة صادقة، أو كلمة مشجعة، أو دعم لا ينضب. كنتم لي دائماً الكتف الذي أستند إليه كلما أثقلني التعب.

*إلى عائلتي الكبيرة وأهلي الكرام:*

إلى كل من ينبض قلبه لي بالحب، وإلى كل من حمل اسمي في خلواته ودعا لي بظهر الغيب بالتوفيق والتيسير. أنتم السند والامتداد، وفرحتي اليوم لا تكتمل إلا بوجودكم.

*إلى أصدقائي الأوفياء الأوفياء:*

الذين لم تكن الأيام معهم إلا مواقف صدق نبل. إلى من كانوا معي خطوة بخطوة، يشاركونني قلق البدايات، ويفرحون لنجاحاتي وكأنها نجاحاتهم الخاصة، ويخففون عني بأحاديثهم عناء السهر والجهد

*صفية زغابي*

## قائمة المحتويات:

الصفحة


التشكر

الإهداء

قائمة المحتويات I

قائمة الأشكال و الجداول VI

مقدمة عامة IX

الفصل الأول

# الخواص الضوئية في المواد الصلبة نظريا

I-1 مقدمـــــة 1

I-2 الطيف الكهرومغناطيسي 1

I-2-1 تعريف الطيف الكهرومغناطيسي 1

I-2-2 تصنيف الدقيق للطيف الكهرومغناطيسي 1

I-2-2-1 نطاق الأشعة تحت الحمراء البعيدة و المتوسطة 2

I-2-2-2 نطاق الطيف المرئي و تحت الأحمر القريب 2

I-2-2-3 نطاق الأشعة فوق البنفسجية 3

I-2-2-4 نطاق الأشعة السينية (X-Rays) 3

I-3 التفاعل بين المادة البلورية و الإشعاع الكهرومغناطيسي 3

I-3-1 الآليات الكمومية 4

I-3-1-1 الامتصاص الإلكتروني 4

I-3-1-2 الامتصاص الإكسيتوني 5

I-3-1-3 تشتت الضوء المرن و غير المرن 6

**I-3-2** الآليات الكلاسيكية 7

**I-4 الخصائص الضوئية الأساسية للمواد البلورية** 8

**I-4-1** البنية الحزمية و التحفيز الإلكتروني 8

**I-4-2** فجوة الطاقة الضوئية و عتبة الانتقال 8

**I-4-3** التذبذبات البلازمونية و الترددات الحرجة 9

**I-4-4** التفاعل بين المادة البلورية و الإشعاع 9

**I-4-5** الاستقطابية البنيوية و الروابط الكيميائية 9

**I-5 تأثير البنية البلورية على الخواص البصرية للمواد الصلبة** 10

**I-6 طرق تحديد الخواص الضوئية في المواد الصلبة** 11

**I-6-1** الطرق التجريبية 11

I-6-1-1 مطيافية النفاذية و العاكسية 11

I-6-1-2 الإليبسومتري الطيفي 11

I-6-1-3 مطيافية فوريه للأشعة تحت الحمراء 12

**I-6-2** الطرق الحسابية 12

I-6-2-1 نظرية دالة الكثافة 12

I-6-2-2 تقريب GW و معادلة بيث-سالبيتر 12

I-6-2-3 دالة الكثافة المعتمدة على الزمن 13

**I-7 أهمية دراسة الخواص الضوئية في المواد الصلبة** 13

**I-8 الخواص البصرية كبصمة بلورية** 14


## الفصل الثاني

# مركب نيتريد الألمنيوم و دراسات سابقة

II-1 مقدمـــــة 16

II-2 الدراسات السابقة حول مركب نيتريد الألمنيوم 16

II-3 مركب نيتريد الألمنيوم 19

II-3-1 أهمية مركب نيتريد الألمنيوم 19

II-3-2 التركيب البنائي و الكيميائي 20

II-3-3 الخواص البصرية 21

II-4 الفجوة الدراسية 22

## الفصل الثالث

# دراسة الخواص الضوئية لمركب نيتريد الألمنيوم متعدد البلورات و عند أهم المتجهات

III-1 مقدمـــــة 23

III-2 المنهجية الحاسبية لحساب الخواص البصرية 23

III-3 عرض و مناقشة النتائج 24

III-3-1 دراسة دالة العزل الكهربائي 24

III-3-1-1 دراسة الجزء الحقيقي من دالة العزل الكهربائي 24

III-3-1-2 دراسة الجزء التخيلي من دالة العزل الكهربائي 26

III-3-2 دراسة الإنكسارية المركبة 28

III-3-2-1 دراسة معامل الإنطفاء 29

III-3-2-2 دراسة الإنكسارية 31

III-3-3 دراسة الإنعكاسية الضوئية 33

III-3-4 دراسة معامل الإمتصاص 35

III-3-5 دراسة الناقلية الضوئية 38

III-3-5-1 دراسة الجزء الحقيقي من الناقلية الضوئية 38

III-3-5-2 دراسة الجزء التخيلي من الناقلية الضوئية 40

**III-3-6 دراسة دالة التبدد** 42

## الفصل الرابع

# دراسة الخواص الضوئية لمركب نيتريد الألمنيوم في ثلاث أبعاد

**IV-1 مقدمـــــة** 46

**IV-2 الطريقة الرياضية للتمثيل ثلاثي الأبعاد وتحليل التقاطع البلوري** 46

**IV-2-1 تمثيل الموتر البصري في البلورات السداسية** 46

**IV-2-2 الاعتماد الاتجاهي للمعاملات البصرية** 47

**IV-2-3 بناء السطح ثلاثي الأبعاد** 47

**IV-2-4 الإسقاط على المستويات البلورية** 47

**IV-2-5 حساب منحنيات التقاطع مع المستويات (100)، (110) ، (111)** 47

**IV-2-6 التحويل بين الترميز السداسي و المكعبي** 48

**IV-2-7 التنفيذ العددي و المخرجات** 48

**IV-3 عرض و مناقشة النتائج** 48

**IV-3-1 دراسة دالة العزل الكهربائي** 48

IV-3-1-1 دراسة الجزء الحقيقي من دالة العزل الكهربائي 48

IV-3-1-2 دراسة الجزء التخيلي من دالة العزل الكهربائي 50

**IV-3-2 دراسة الإنكسارية المركبة** 52

IV-3-2-1 دراسة معامل الإنطفاء: 52

IV-3-2-2 دراسة الإنكسارية 54

| | |
|---|---|
| **IV-3-3 دراسة الإنعكاسية الضوئية** | **56** |
| **IV-3-4 دراسة معامل الإمتصاص** | **58** |
| **IV-3-5 دراسة الناقلية الضوئية** | **60** |
| IV-3-5-1 دراسة الجزء الحقيقي من الناقلية الضوئية | **60** |
| IV-3-5-2 دراسة الجزء التخيلي من الناقلية الضوئية | **62** |
| **IV-3-6 دراسة دالة التبدد** | **64** |
| **الخلاصـــــة** | **58** |
| **المراجع البيداغوجية** | **71** |

# قائمة الأشكال و الجداول:

الصفحة

## قائمة الأشكال


| | |
|---|---|
| الشكل(I-1): تفاصيل الطيف الكهرومغناطيسي | 2 |
| الشكل(I-2): الانتقالات بين الحزم في المواد الصلبة | 4 |
| الشكل(I-3): تغير شكل طيف الامتصاص عند إدراج تأثيرات الإكسيتونات | 5 |
| الشكل(I-4): مخطط للجهاز التجريبي المستخدم لقياس أطياف رامان | 6 |
| الشكل(I-5): النموذج الكلاسيكي للإلكترونات المرتبطة في الذرة | 8 |
| الشكل(II-1): البنية البلورية لنتريد الالمنيوم عند الظروف القياسية في البنية السداسية من نوع الورتزايت (Wurtzite) المنتجة باستخدام برنامج Vesta | 20 |
| الشكل(III-1): تغيرات الجزء الحقيقي من دالة العزل الكهربائي لمركب AlN متعدد البلورات و في الإتجاهات [100]، [010] و [001] بتغيرات طاقة الفوتون الساقط بين 0 و 30 eV | 25 |
| الشكل(III-2): تغيرات الجزء التخيلي من دالة العزل الكهربائي لمركب AlN متعدد البلورات و في الإتجاهات [100]، [010] و [001] بتغيرات طاقة الفوتون الساقط بين 0 و 30 eV | 27 |
| الشكل(III-3): تغيرات معامل الإنطفاء للمركب AlN متعدد البلورات و في الإتجاهات [100]، [010] و [001] بتغيرات طاقة الفوتون الساقط بين 0 و 30 eV | 29 |
| الشكل(III-4): تغيرات الإنكسارية لمركب AlN متعدد البلورات و في الإتجاهات [100]، [010] و [001] بتغيرات طاقة الفوتون الساقط بين 0 و 30 eV | 34 |
| الشكل(III-5): تغيرات الإنعكاسية الضوئية لمركب AlN متعدد البلورات و في الإتجاهات [100]، [010] و [001] بتغيرات طاقة الفوتون الساقط بين 0 و 30 eV | 34 |

الشكل(III-6): تغيرات معامل الإمتصاص لمركب AlN متعدد البلورات و في الإتجاهات [100]، [010] و [001] بتغيرات طاقة الفوتون الساقط بين 0 و 30 eV **36**

الشكل(III-7): تغيرات الجزء الحقيقي من الناقلية الضوئية لمركب AlN متعدد البلورات و في الإتجاهات [100]، [010] و [001] بتغيرات طاقة الفوتون الساقط بين 0 و 30 eV **39**

الشكل(III-8): تغيرات الجزء التخيلي من الناقلية الضوئية لمركب AlN متعدد البلورات و في الإتجاهات [100]، [010] و [001] بتغيرات طاقة الفوتون الساقط بين 0 و 30 eV **41**

الشكل(III-9): تغيرات دالة التبدد لمركب AlN متعدد البلورات و في الإتجاهات [100]، [010] و [001] بتغيرات طاقة الفوتون الساقط بين 0 و 30 eV **43**

الشكل(IV-1): تمثيل ثلاثي الأبعاد للجزء الحقيقي من دالة العزل الكهربائي لمركب AlN، و تمثيل مساقطها على أوجه الرباعي، و تمثيل منحنيات تقاطعها على المستويات $(10\bar{1}0)$، $(11\bar{2}0)$، و $(11\bar{2}1)$، **49**

الشكل(IV-2): تمثيل ثلاثي الأبعاد للجزء التخيلي من دالة العزل الكهربائي لمركب AlN، و تمثيل مساقطها على أوجه الرباعي، و تمثيل منحنيات تقاطعها على المستويات $(10\bar{1}0)$، $(11\bar{2}0)$، و $(11\bar{2}1)$، **51**

الشكل(IV-3): تمثيل ثلاثي الأبعاد لمعامل الإنطفاء لمركب AlN، و تمثيل مساقطها على أوجه الرباعي، و تمثيل منحنيات تقاطعها على المستويات $(10\bar{1}0)$، $(11\bar{2}0)$، و $(11\bar{2}1)$، **53**

الشكل(IV-4): تمثيل ثلاثي الأبعاد للإنكسارية لمركب AlN، و تمثيل مساقطها على أوجه الرباعي، و تمثيل منحنيات تقاطعها على المستويات $(10\bar{1}0)$، $(11\bar{2}0)$، و $(11\bar{2}1)$، **55**

الشكل(IV-5): تمثيل ثلاثي الأبعاد للإنعاكسية الضوئية لمركب AlN، و تمثيل مساقطها على أوجه الرباعي، و تمثيل منحنيات تقاطعها على المستويات $(10\bar{1}0)$، $(11\bar{2}0)$، و $(11\bar{2}1)$، **57**

الشكل(IV-6): تمثيل ثلاثي الأبعاد لمعامل الإمتصاص لمركب AlN، و تمثيل مساقطها على أوجه الرباعي، و تمثيل منحنيات تقاطعها على المستويات $(10\bar{1}0)$، $(11\bar{2}0)$، و $(11\bar{2}1)$، **59**

الشكل(IV-7): تمثيل ثلاثي الأبعاد للجزء الحقيقي من الناقلية الضوئية لمركب AlN، و تمثيل مساقطها على أوجه الرباعي، و تمثيل منحنيات تقاطعها على المستويات $(10\bar{1}0)$، $(11\bar{2}0)$، و $(11\bar{2}1)$ **61**

الشكل(IV-8): تمثيل ثلاثي الأبعاد للجزء التخيلي من الناقلية الضوئية لمركب AlN، و تمثيل مساقطها على أوجه الرباعي، و تمثيل منحنيات تقاطعها على الممستويات $(10\bar{1}0)$، $(11\bar{2}0)$، و $(11\bar{2}1)$ **63**

الشكل(IV-9): تمثيل ثلاثي الأبعاد لدالة التبدد لمركب AlN، و تمثيل مساقطها على أوجه الرباعي، و تمثيل منحنيات تقاطعها على الممستويات $(10\bar{1}0)$، $(11\bar{2}0)$، و $(11\bar{2}1)$ **65**

## قائمة الجداول

الجدول(III-1): القيم العظمى لمعاملات الخواص الضوئية في حالة متعدد البلورات و عند الاتجاهات [100]، [010] و [001]. **44**

الجدول(IV-1): يتضمن القيم العظمى و الدنيا للمعاملات الضوئية و مقادير الإتجاهات الموافقة و قرائن ميلر الخاصة بها. **67**

## مقدمـــة عامـــة:

تعد الخصائص البصرية من الركائز الأساسية التي تحكم في تفاعل المواد الصلبة مع الإشعاع الكهرومغناطيسي، حيث تشكل جسرا فيزيائيا مباشرا بين البنية الإلكترونية المجهرية و الاستجابة العيانية القابلة للقياس الطيفي. و في فيزياء أشباه الموصلات و المركبات النيتريدية، لا تقتصر أهمية دراسة الخواص البصرية على فهم امتصاص الضوء و انعكاسه فحسب، بل تمتد إلى كشف طبيعة الفجوات الطاقية، و آليات الانتقال الإلكتروني، و توزيع الكثافة الإلكترونية في نطاقات التكافؤ و التوصيل، مما يجعلها أداة تشخيصية لا غنى عنها في تصميم الأجهزة البصرية الإلكترونية، و الخلايا الشمسية، و مصادر الضوء ذات الكفاءة العالية، و تطبيقات الاستشعار في الأطياف المرئية و فوق البنفسجية.

و تتجلى الخصائص البصرية للمواد البلورية من خلال مجموعة من الدوال و المعاملات الكمية التي تصف استجابة المادة للمجال الكهرومغناطيسي المتناوب، و أبرزها الدالة العازلة المركبة التي تعكس قدرة الشبكة على استقطاب الشحنة تحت تأثير التردد الضوئي، ومعامل الانكسار الذي يحدد سرعة انتشار الموجة في الوسط، و معامل الامتصاص الذي يقيس فقدان الطاقة الضوئية، بالإضافة إلى الانعكاسية و دالة فقدان الطاقة التي تكشف عن إثارات البلازمون الجماعية. و تشتق هذه الكميات البصرية عادة من الحسابات الإلكترونية الدقيقة عبر علاقات كرامرز-كرونيج التي تضمن اتساقا سببيا بين الجزء الحقيقي و التخيلي للاستجابة البصرية، مما يسمح بتمثيل شامل لطيف الاستجابة عبر مدى ترددي واسع.

و ينتج عن التفاعل بين الضوء و المادة ظواهر بصرية ديناميكية مباشرة، أبرزها اعتماد الخصائص البصرية على تردد الفوتون الساقط، حيث تظهر الدالة العازلة و معامل الانكسار تباينا طيفيا غنيا يعكس آليات الانتقال الإلكتروني المسموحة و الممنوعة، و عتبات الامتصاص المرتبطة بالفجوة الطاقية المباشرة و غير المباشرة. و تعد دراسة الاعتماد الترددي لهذه الخصائص مؤشرا حساسا و كاملا للبنية الإلكترونية و كفاءة الاقتران الضوئي-إلكتروني، حيث تعكس مباشرة طبيعة الروابط الكيميائية، و تأثيرات التبادل-الارتباط، و دور الفوتونات في توسيع خطوط الامتصاص. و تكتسب دراسة اعتماد الخصائص البصرية على الضغط و درجة الحرارة أهمية بالغة في تصميم أجهزة تعمل في ظروف متطرفة، و فهم ديناميكا حاملات الشحنة تحت الإجهاد، و تقييم استقرار الأداء البصري للمواد في التطبيقات الفضائية و الصناعية.

و بموازاة الاستجابة الطيفية، تظهر المواد البلورية ذات التماثل غير المكعبي، مثل نيتريد الألمنيوم في طوره السداسي (Wurtzite)، تباينا اتجاهيا في خصائصها البصرية يعكس عدم التماثل في توزيع الشحنة الإلكترونية على طول المحور البلوري الرئيسي مقارنة بالمستوى القاعدي. و يعد هذا التباين البصري مؤشرا هيكليا بالغ الأهمية لقدرة المادة على توجيه الضوء، و استقطاب الإشعاع، و التحكم في مسار الفوتونات ضمن الأجهزة البصرية المتكاملة. و يوفر تحليل تمثيلات الموتر البصري ثلاثية الأبعاد، و إسقاطاته على المستويات البلورية، و منحنيات تقاطعه مع المستويات الرئيسية، معلومات هندسية وكمية حول طبيعة عدم التماثل البصري ، و تحديد الاتجاهات المثلى لانتشار الضوء، و تصميم بلورات فوتونية ذات خصائص موجهة بدقة.

و في هذا الإطار، تهدف الدراسة الحالية إلى تقديم تحليل كمي و منهجي للخصائص البصرية الديناميكية لنيتريد الألمنيوم (AlN) في طوره السداسي الأول تحت تأثير ظروف قياسية، مع التركيز على حساب الدوال البصرية الأساسية في كل من الحالة متعددة البلورات (شبه متماثلة المناحي) و الاتجاهات البلورية الرئيسية. و تعتمد المنهجية على حسابات المبدأ الأول القائمة على نظرية دالة الكثافة ضمن تقريب التدرج المعمم و الدالة الوظيفية المُحسَّنة، باستخدام وحدة CASTEPضمن بيئة Materials Studio، مع تطبيق تصحيح الانزياح الذاتي للفجوة الطاقية لضمان توافق القيم المحسوبة مع القياسات الطيفية المرجعية، مما يضمن استخراجا دقيقا للدالة العازلة و معاملات الامتصاص و الانكسار كتدخلات مباشرة للنمذجة البصرية المتقدمة.

و يؤسس الفصل الأول الإطار النظري و المفهومي الشامل للدراسة، حيث يستعرض الأسس الفيزيائية للتفاعل الضوئي-المادي، و معادلات ماكسويل في الأوساط البلورية، و العلاقة بين الدالة العازلة و ثوابت المرونة الإلكترونية، بالإضافة إلى المفهوم الهندسي لتمثيل الخصائص الاتجاهية عبر الأسطح ثلاثية الأبعاد و الموترات من الرتبة الثانية. كما يقدم الفصل مراجعة موجزة للمنهجيات التجريبية و الحاسوبية المعتمدة في قياس و حساب الخصائص البصرية، مع التركيز على التطور التاريخي لنماذج الانتقال الإلكتروني و تقريبات الاستجابة الخطية التي شكلت الأساس للنمذجة البصرية في فيزياء أشباه الموصلات

بينما ينتقل الفصل الثاني إلى التطبيق المباشر على نظام نيتريد الألمنيوم، مقدما مراجعة نقدية و شاملة للدراسات السابقة التجريبية و الحسابية التي تناولت الخصائص البصرية لـ AlN، مع تسليط الضوء على الفجوات المنهجية التي تسعى هذه الدراسة لسدها. و يتضمن الفصل عرضا تفصيليا للخصائص الهيكلية و الإلكترونية الأولية، مثل ثابت الشبكة، و الفجوة الطاقية، و تركيب النطاقات، و كثافة الحالات، بالإضافة إلى استخراج الدالة العازلة

الأولية عند ترددات منخفضة، مع التحقق المنهجي من استقرار الطور البلوري وفق معايير التقارب الإلكتروني، مما يوفر قاعدة بيانات أولية موحدة و موثوقة للانتقال إلى التحليل البصري الطيفي.

و يشكل الفصل الثالث القلب التحليلي الأول للدراسة، حيث يقدم عرضا كميا مفصلا و منظما للدوال البصرية الأساسية - الدالة العازلة الحقيقية و التخيلية، معامل الانكسار، معامل الانطفاء، معامل الامتصاص، الانعكاسية، و دالة التبدد الطاقة - في حالة نيتريد الألمنيوم متعدد البلورات، مع تحليل الاعتماد الترددي لهذه الخصائص عبر مدى طيفي واسع يغطي الأشعة تحت الحمراء، و المرئية، و فوق البنفسجية. و يناقش الفصل التفسير الفيزيائي العميق للذروات الطيفية، و عتبات الامتصاص، و سلوك التشتت، مما يؤسس لفهم متكامل لاستجابة المادة للإشعاع الكهرومغناطيسي في الظروف العيانية السائدة في التطبيقات العملية.

و يكمل الفصل الرابع الصورة التحليلية من خلال تقديم دراسة هندسية متقدمة للخصائص البصرية الاتجاهية، حيث تعرض تمثيلات ثلاثية الأبعاد للموترات البصرية التسعة الرئيسية - مكونات الدالة العازلة، معامل الانكسار، معامل الإنطفاء، معامل الإنعكاسية، معامل الامتصاص، دالة التبدد و الناقلية الضوئية الحقيقة منها و التخيلية، مع إسقاطات ثنائية الأبعاد على المستويات البلورية، و منحنيات تقاطع تبرز بدقة توزيع التباين البصري حول المحور السداسي. و تهدف هذه الدراسة الهندسية إلى كشف طبيعة عدم التماثل البصري كدالة للتردد، و توضيح كيفية تشوه الأسطح الكروية المثالية إلى أشكال إهليلجية أو معقدة عند ترددات الرنين الإلكتروني، مما يوفر أداة بصرية و كمية قوية لفهم التوجيه المفضل لانتشار الضوء، و تحديد المحاور البلورية الأكثر شفافية أو امتصاصا، و تصميم أجهزة بصرية موجهة بدقة نانوية.

و تختتم الدراسة بخاتمة جامعة تلخص أبرز النتائج الكمية و الاستنتاجات الفيزيائية التي تم التوصل إليها، مؤكدة على متانة المنهجية الحسابية و دقة التوافق بين النمذجة النظرية و القياسات الطيفية المرجعية، مع تقديم توصيات عملية لاستخدام البيانات المُستخلصة في تصميم الأجهزة البصرية الإلكترونية، و تحسين كفاءة الخلايا الشمسية، و معايرة أجهزة الاستشعار الطيفية. كما تفتح الدراسة آفاقا بحثية مستقبلية واضحة، تدعو إلى تمديد نطاق التحليل ليشمل تأثيرات المجالات الكهربائية الخارجية، و دراسة الخصائص البصرية غير الخطية، و استكشاف تأثير التشويب و العيوب البلورية على الاستجابة البصرية، مما يضمن استمرارية الإسهام العلمي في تطوير فيزياء المواد النيتريدية و تطبيقاتها البصرية المتقدمة.

## الفصل الأول:

# الخواص الضوئية في المواد الصلبة نظريا

### I-1 مقدمـــــة:

يتمحور هذا الفصل حول دراسة الاستجابة الضوئية للمواد الصلبة كمدخل أساسي لفهم بنيتها الداخلية,حيث نستعرض فيه كيف يترجم التفاعل بين الإشعاع الكهرومغناطيسي و الشبكة البلورية إلى ظواهر فيزيائية محددة. كما نوضحدور التماثل البلوري في تحديد مدى تباين الخصائص باختلاف الاتجاهات الفراغية، مع استعراض التكامل بين دقة القياسات التجريبية و قوة النمذجة الحسابية . و يهدف هذا الطرح في نهايته إلى صياغة رؤية شاملة تظهر كيف تشكل هذه الخصائص مجتمعة " هوية بصرية مميزة " فريدة تسمح بتوصيف المادة و تحديد خصائصهاالفيزيائية بدقة.

### I-2 الطيف الكهرومغناطيسي:

#### I-2-1 تعريف الطيف الكهرومغناطيسي:

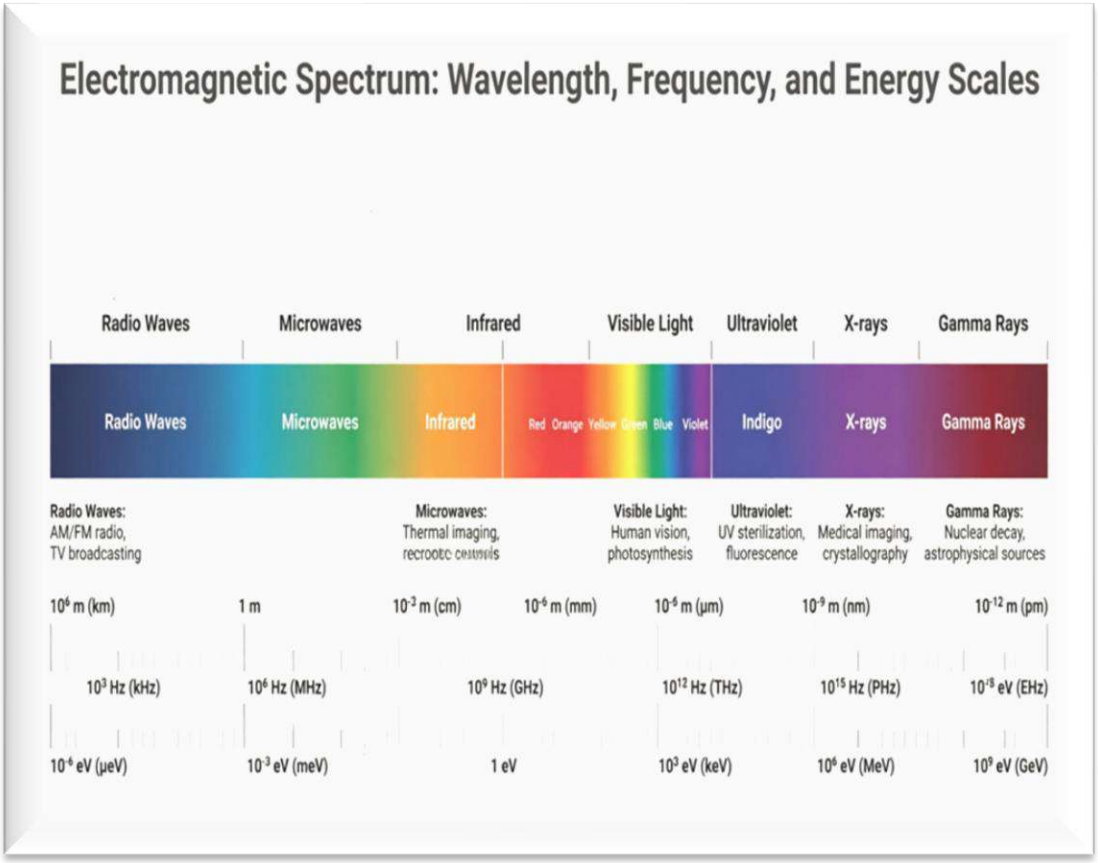
يعرف الطيف الكهرومغناطيسي في المواد الصلبة من خلال ثلاث كميات أساسية هي التردد $\upsilon$، و الطول الموجي $\lambda$، و طاقة الفوتون E. و لا ينحصر التحليل البصري على التردد فقط، بل يعتمد على الترابط الرياضي بين هذه المقادير الفيزيائية وفق العلاقة [01]:

$$E = h\nu = \frac{hc}{\lambda}, \qquad k = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{\omega}{c} \qquad (\mathbf{I-1})$$

حيث يمثل h ثابت بلانك و c سرعة الضوء في الفراغ. كما تستخدم عدة وحدات للتعبير عن الطاقة و التردد مثل الإلكترون-فولت (eV)، و العدد الموجي $cm^{-1}$، و التردد (Hz,THz)، و ذلك لتسهيل الربط بين الخصائص الطيفية و الطاقة الداخلية للمادة.

#### I-2-2 تصنيف الدقيق للطيف الكهرومغناطيسي:

يصنف الطيف الكهرومغناطيسي إلى مجالات طاقوية متداخلة حسب طبيعة التفاعل مع المادة الصلبة.




الشكل(I-1): تفاصيل الطيف الكهرومغناطيسي

I-2-2-1 نطاق الأشعة تحت الحمراء البعيدة و المتوسطة:

تتمثل هذه المنطقة في الأشعة تحت الحمراء البعيدة و المتوسطة، حيث يتراوح طولها الموجي بين 2.5 µm إلى 1000 µm، و ترددها بين 0.3 THz إلى 120 THz، بينما تقع طاقة فوتوناتها تحت 0.5 eV و تعتبر هذه المنطقة أساسية لدراسة الاهتزازات الشبكية "الفونونات" في البلورات الأيونية و أشباه الموصلات [02].

تكون طاقة الفوتون غير كافية لإحداث انتقالات إلكترونية، لذلك تسود الاهتزازات الشبكية (الفونونات) و بلازمونات حاملات الشحنة.

I-2-2-2 نطاق الطيف المرئي و تحت الأحمر القريب:

تشمل هذه المنطقة الطيف المرئي وتحت الأحمر القريب، حيث يتراوح الطول الموجي من 400 nm إلى 2500 nm، و التردد من 120 THz إلى 750 THz، بطاقة فوتونات تتراوح بين 0.5 eV و 3.1 eV. في هذه المنطقة، تحدد

الخصائص البصرية للبلورة من خلال فجوة النطاق Eg و تكوين الإكسيتونات [03]. فتصبح طاقة الفوتون مناسبة لإحداث انتقالات إلكترونية بين النطاقات، مع إمكانية تشكّل الإكسيتونات التي توصف بالعلاقة:

$$E_n = E_g - \frac{E_b}{n^2} \qquad (\mathbf{I-2})$$

I-2-2-3 نطاق الأشعة فوق البنفسجية:

في النطاقات عالية الطاقة، تشمل هذه المنطقة الأشعة فوق البنفسجية بطول موجي 10 nm إلى 400 nm و تردد 750 THz إلى 30 PHz و طاقة تصل إلى 100 eV. من خلال هذا النطاق، يمكن استثارة الإلكترونات الداخلية و العميقة في المادة الصلبة و هي المنطقة التي تسمح بدراسة بنية الشبكة البلورية عبر ظاهرة الحيود[04]. حيث من خلالها يمكن اثارة الإلكترونات الداخلية، بينما في مجال أشعة غاما.

$$E > 124\ \mathbf{keV} \qquad (\mathbf{I-3})$$

I-2-2-4 نطاق الأشعة السينية (X-Rays):

تتبع النطاقات عالية الطاقة، حيث يتراوح طولها الموجي بين 0.01 nm و 10 nm، و ترددها من 30 PHz إلى 30EHz، و طاقتها من 100 eV إلى 100 keV. و هي المنطقة التي تسمح بدراسة بنية الشبكة البلورية عبر ظاهرة الحيود [05]، حيث تمتلك طولا موجيا يقارب المسافات البينية للذرات في الشبكة البلورية.

ترتبط التفاعلات بالظواهر النووية.تجدر الإشارة إلى أن الحدود بين هذه المجالات ليست حادة، بل تمثل انتقالات تدريجية تتداخل فيها آليات التفاعل. لذلك يعتمد على التصنيف الوظيفي الذي يعتمد على مقارنة طاقة الفوتون مع مقاييس الطاقة الداخلية للمادة مثل فجوة النطاق $E_g$، و طاقة الفونون $\hbar\Omega$، و طاقة ربط الإكسيتون $E_g$، و تردد البلازما:

$$\omega_p = \sqrt{\frac{Ne^2}{\varepsilon_0 m^*}} \qquad (\mathbf{I-4})$$

فعلى سبيل المثال، إشعاع بطول موجي 10 µm قد يصنف ضمن تحت الأحمر المتوسط، لكنه قد يمثل رنينا فونونيا في بلورة أيونية، أو انتقالات شوائب في شبه موصل، أو نافذة شفافية في مادة عازلة.

و يجعل هذا التصنيف الطيفي أداة تحليلية تنبؤية تساعد في اختيار النموذج الفيزيائي المناسب لدراسة الخصائص البصرية للمواد المتقدمة.

## I-3 التفاعل بين المادة البلورية و الإشعاع الكهرومغناطيسي:

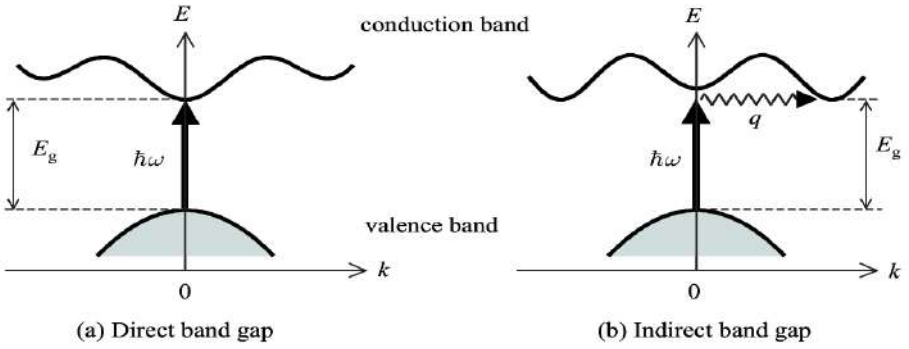
يعد فحص كيفية استجابة المواد البلورية للضوء مدخلا أساسيا لفهم الخصائص الأساسية للمادة و التحكم في تطبيقاتها التقنية. ينشأ هذا التفاعل نتيجة تبادل الطاقة و الزخم بين فوتونات الإشعاع الكهرومغناطيسي و الجسيمات المكونة للبلورة، مثل الإلكترونات و الأنوية. و لفهم هذه الظواهر المعقدة، يتم تقسيم آليات التفاعل إلى مسارين متكاملين : الآليات الكمومية و الآليات الكلاسيكية

### I-3-1 الآليات الكمومية:

#### I-3-1-1 الامتصاص الإلكتروني:

تعد عملية الامتصاص الإلكتروني (Interband Absorption )، من أهم الآليات الكمية التي تصف تفاعل الضوء مع المواد الصلبة. و تحدث هذه الظاهرة عندما يقوم إلكترون موجود في حزمة التكافؤ (Valence Band) بامتصاص فوتون تكون طاقته كافية، أي عندما تتحقق العلاقة $h\nu \geq E_g$، مما يسمح له بالانتقال إلى نطاق التوصيل (Conduction Band)حيث توجد حالات طاقية فارغة. و تخضع هذه العملية لمجموعة من القوانين الفيزيائية الدقيقة، أهمها قانون حفظ الطاقة، إذ يجب أن تكون طاقة الفوتون الممتص مساوية تماما لفارق الطاقة بين الحزمتين. كما أن هذا الانتقال يعتمد بشكل مباشر على بنية المادة الإلكترونية، ما يجعل الامتصاص الإلكتروني أحد المفاتيح الأساسية لفهم الخصائص البصرية للمواد الصلبة. هذه الصورة تجمع بين حالتين تشرحان أساس الامتصاص الإلكتروني [06]:

**أ) الجزء Direct band gap (a):** يوضح كيف يمتص الإلكترون الفوتون و ينتقل بشكل رأسي تماما من حزمة التكافؤ إلى حزمة التوصيل (حفظ الزخم عند (k=0)).




الشكل(II-2): الانتقالات بين الحزم في المواد الصلبة

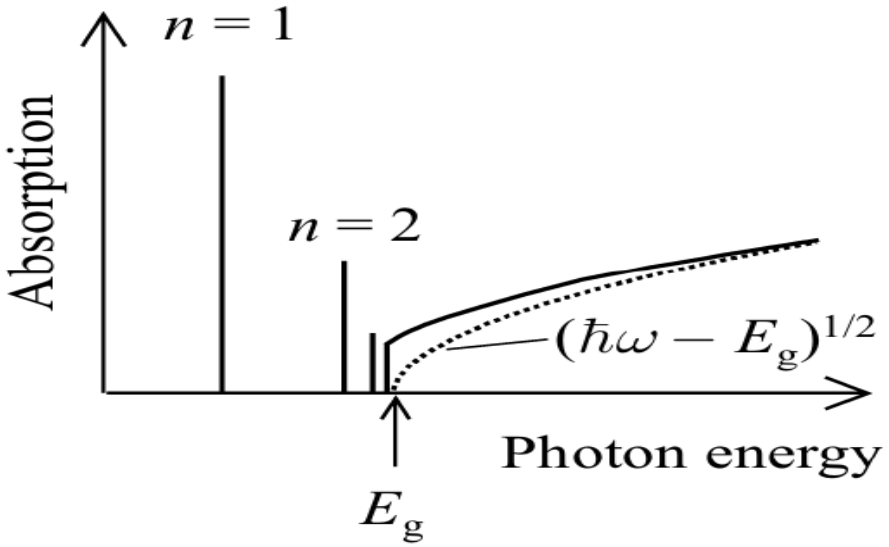
**ب) الجزء Indirect band gap (b):** يوضح الحالة التي يكون فيها قاع حزمة التوصيل مزاحا، مما يتطلب الانتقال مساعدة (أو مشاركة) فونون (السهم المتعرج في الرسم) لإتمام عملية الامتصاص.

I-1-3-2 الامتصاص الإكسيتوني:

يحدث الامتصاص الإكسيتوني عند انتقال الإلكترون من حزمة التكافؤ إلى حزمة التوصيل نتيجة امتصاص فوتون، و لكن مع مراعاة تأثير الجذب الكولومي المتبادل بين الإلكترون (سالب الشحنة) و الثقب (موجب الشحنة). يؤدي هذا التجاذب إلى تشكيل زوج مرتبط من (إلكترون-ثقب) يعرف باسم الإكسيتون (Exciton)، و هو جسيم متعادل يشبه في بنيته نظام ذرة الهيدروجين حيث يدور الإلكترون و الثقب حول بعضهما البعض في مدار مستقر.تظهر آثار هذا الامتصاص بشكل واضح في أشباه الموصلات ذات الفجوة المباشرة مثل (GaAs)، حيث تعد عملية الامتصاص الإلكتروني من أهم الآليات الكمّية التي تصف تفاعل الضوء مع المواد الصلبة. و تحدث هذه الظاهرة عندما يقوم إلكترون موجود في حزمة التكافؤ بامتصاص فوتون تكون طاقته كافية، أي عندما تتحقق العلاقة الرياضية التالية:

$$\mathbf{h\vartheta \leq E_g} \qquad \mathbf{(I-5)}$$

حيث hv هي طاقة الفوتون الساقط، و $E_g$ هي طاقة فجوة النطاق للمادة. مما يسمح له بالانتقال إلى حزمة التوصيل (Conduction Band)، حيث توجد حالات طاقية فارغة.



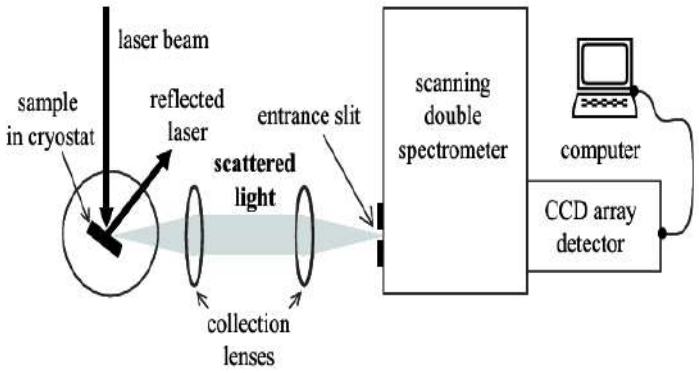

الشكل(I-3): تغير شكل طيف الامتصاص عند إدراج تأثيرات الإكسيتونات

حيث تتكون الإكسيتونات عند طاقة فوتون أقل بقليل من طاقة فجوة النطاق ($E_g$) بمقدار طاقة الترابط الإكسيتوني ($R_X$) و نتيجة لذلك، يظهر طيف الامتصاص على شكل خطوط امتصاص حادة و قوية عند طاقات محددة ($E_n = E_g - R_X /n^2$) تقع مباشرة تحت حافة فجوة النطاق الأساسية. كما يؤدي قوة التجاذب الكهربائي إلى تعزيز معدل الامتصاص الكلي حتى عند طاقات أعلى من فجوة النطاق، بسبب زيادة احتمالية تداخل الدوال الموجية للإلكترون و الثقب [06].

يوضح هذا الرسم البياني كيف يتغير شكل طيف الامتصاص عند إدراج تأثيرات الإكسيتونات؛ حيث تظهر سلسلة من الخطوط الحادة (قمم الامتصاص) عند مستويات الطاقة n=1, 2,..... تحت مستوى فجوة النطاق ($E_g$)، مقارنة بالخط المنقط الذي يمثل الامتصاص في حالة تجاهل وجود الإكسيتونات.

I-3-1-3 تشتت الضوء المرن و غير المرن:

التشتت المرن و غير المرن للضوء هما ظاهرتان تحدثان عندما يصطدم الضوء بمادة، لكن الفرق يكون في كيف يتصرف الضوء أثناء هذه العملية. يعرف **التشتت غير المرن للضوء** بأنه الظاهرة التي تشتت فيها المادة شعاعا ضوئيا ساقطا مع حدوث تغيير في تردده أثناء العملية أما في التشتت المرن، الضوء ينعكس أو ينكسر دون أن يتغير تردده، يعني يبقى كما هو تماما في هذه العملية، يتفاعل الفوتون الساقط (بتردد $w_1$ و زخم $k_1$) مع إثارات المادة (مثل الفونونات، الماغنونات، أو البلازمونات) لينتج فوتونا مشتتا بتردد جديد ($w_2$) و زخم مختلف ($k_1$). أما في التشتت غير المرن، يحدث تبادل للطاقة بين الضوء و المادة، و هو ما يؤدي لتغير التردد.




الشكل(I-4): مخطط للجهاز التجريبي المستخدم لقياس أطياف رامان

ينقسم التشتت غير المرن إلى نوعين رئيسيين بناءا على تبادل الطاقة:

أ)- تشتت ستوكس (Stokes Scattering): و فيه يبعث الضوء فونونا في المادة، مما يؤدي إلى انخفاض تردد الضوء المشتت ($w_2<w_1$).

ب)- تشتت مضاد لستوكس (Anti-Stokes Scattering): و فيه يمتص الضوء فونونا موجودا مسبقا في المادة، مما يؤدي إلى زيادة تردد الضوء المشتت ($w_2>w_1$).

كما يتم تصنيف هذه العمليات حسب نوع الفونونات المشاركة إلى:

- تشتت رامان (Raman Scattering): و هو التشتت الناتج عن الفونونات البصرية (Optical phonons).

- تشتت بريلوين (Brillouin Scattering): و هو التشتت الناتج عن الفونونات الصوتيـــــــــــــة (Acoustic phonons)

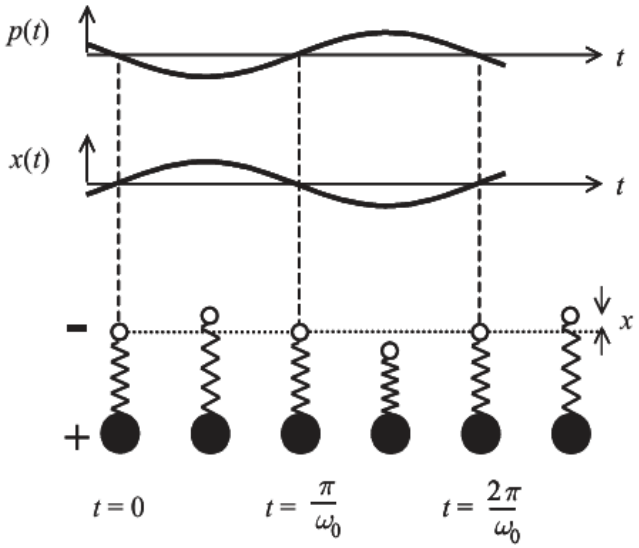
و تكمن الأهمية العلمية لهذه الظاهرة في قدرتها على قياس ترددات الفونونات داخل البلورة، مما يوفر "مؤشرًا" اهتزازية دقيقة للمادة تكمل المعلومات المستمدة من طيف الأشعة تحت الحمراء [06].

### I-2-3 الآليات الكلاسيكية:

تعتمد النظرية الكلاسيكية لانتشار الضوء في الأوساط البصرية على معاملة الضوء كموجات كهرومغناطيسية، و معاملة الذرات أو الجزيئات داخل المادة كمذبذبات ثنائية قطب. يفترض هذا النموذج "نموذج لورنتز للمذبذب (Lorentz Oscillator Model)" أن الإلكترونات مرتبطة بالنواة بواسطة قوى استعادة تشبه "الزنبرك"، مما يجعل لكل ذرة تردد رنين طبيعي ($w_0$) يحدد استجابتها للضوء.

عندما تمر موجة ضوئية عبر المادة، فإن المجال الكهربائي المتردد للموجة يسلط قوى على الإلكترونات، مما يدفعها للاهتزاز. إذا تطابق تردد الضوء ($w_0$) مع تردد رنين الذرة ($w_0$)، تحدث ظاهرة **الرنين**، حيث تمتص الذرة الطاقة من الموجة الضوئية (ظاهرة الامتصاص). أما إذا كان التردد بعيداً عن الرنين، تهتز الإلكترونات بتردد الموجة الساقطة و لكن مع تأخر في الطور، و هذا التأخر هو المسؤول عن تباطؤ سرعة الضوء داخل الوسط، و هو ما نعبر عنه فيزيائياً بمعامل الانكسار.

يسمح لنا هذا النموذج بحساب الاعتماد الترددي لثابت العزل المركب ($\varepsilon_r$)، و منه نستنتج علاقة معامل الانكسار و معامل الامتصاص بالتردد، و هو ما يفسر ظاهرة التشتت (Dispersion)، و هي تغير معامل الانكسار بتغير اللون أو التردد [06].




الشكل(I-5): النموذج الكلاسيكي للإلكترونات المرتبطة في الذرة

## I-4 الخصائص الضوئية الأساسية للمواد البلورية:

### I-4-1 البنية الحزمية و التحفيز الإلكتروني:

البنية الحزمية للبلورة تشكل الأساس لكل الظواهر الضوئية التي تحدث في المواد البلورية. تُقسم مستويات الطاقة داخل المادة إلى حزمة التكافؤ، المليئة بالإلكترونات، و حزمة التوصيل، التي تكون فارغة عادة . و يعد التفاعل بين الفوتونات الساقطة و هذه الحزم العنصر الرئيسي لتفسير الاستجابة الضوئية للمادة؛ حيث تعتمد قدرة المادة على التفاعل مع الإشعاع على ما إذا كانت طاقة الفوتونات كافية لنقل الإلكترونات بين الحزم. الترتيب الدوري للذرات داخل البلورة هو العامل مميزا في تحديد خصائص المادة، مثل كونها شفافة، عاتمة، أو نصف ناقلة، و ذلك وفقا لتوزيع كثافة الحالات الإلكترونية داخل بنيتها البلورية [07].

### I-4-2 فجوة الطاقة الضوئية و عتبة الانتقال:

تمثل فجوة الطاقة الضوئية ($E_g$) الثابت الفيزيائي الأهم الذي يحدد "عتبة الامتصاص" في البلورات. هي تعبر عن الفرق الطاقوي بين أعلى مستوى في حزمة التكافؤ و أدنى مستوى في حزمة التوصيل. في البلورات، تصنف هذه الخاصية إلى فجوة "مباشرة" حيث يكون انتقال الإلكترون ضوئيا بحتا، و فجوة "غير مباشرة" تتطلب تدخل اهتزازات

الشبكة البلورية (الفونونات). هذه الخاصية هي المسؤولة عن تحديد الألوان التي تمتصها المادة و الترددات التي تسمح بمرورها، و هي مستنبطة مباشرة من التماثل البلوري و نوع الروابط الكيميائية [08].

### I-4-3 التذبذبات البلازمونية و الترددات الحرجة:

التذبذبات البلازمونية هي ظاهرة تحدث في المواد مثل المعادن و أنصاف النواقل، حيث تتميز سلوك الإلكترونات الحرة داخل هذه المواد بخصائص ضوئية فريدة. يعرف التردد البلازموني بأنه التردد الذي يحدث عنده اهتزاز جماعي لإلكترونات التوصيل استجابة لمجال كهرومغناطيسي. عند الترددات الأقل من هذا التردد، تسلك البلورة سلوكا عاكسا، مما يعني أنها تعكس الضوء بدلا من السماح له بالمرور، و هذا هو السلوك المعروف عن المعادن. في المقابل، عند الترددات الأعلى من التردد البلازموني، تصبح المادة شفافة، مما يسمح للضوء بالمرور دون أن يتم امتصاصه أو عكسه. تعتمد هذه الظواهر على عدة عوامل، منها كثافة الإلكترونات الحرة، حيث تحدد كيفية استجابة المادة للمجالات الكهرومغناطيسية، و توزيع الإلكترونات داخل الشبكة الفراغية للبلورة، مما يؤثر على خصائص المادة الضوئية [09].

تعتبر التذبذبات البلازمونية و الترددات الحرجة مفاهيم حيوية لفهم سلوك المواد تحت تأثير الإشعاع الكهرومغناطيسي، و لها تطبيقات واسعة في مجالات مثل تصميم المستشعرات، و تطبيقات النانو، و أجهزة الاتصالات، مما يفتح آفاقا جديدة في تطوير تقنيات متقدمة.

### I-4-4 التفاعل بين المادة البلورية و الإشعاع:

يعتمد التفاعل بين المادة البلورية و الإشعاع على التوزيع الدوري للجهد الكهربائي داخل الشبكة البلورية. فكما توضح الباحثة بن عطاء الله نسيبة في إطارها النظري، فإن استجابة البلورة لأي مؤثر خارجي طاقوي تحكمه معادلات شرودنجر و نظرية الكثافة الدالية(Density Functional Theory - DFT)، حيث يتم التعامل مع المادة كمجموعة من الأنوية و الإلكترونات المتفاعلة. هذا التفاعل هو الذي يحدد مدى نفاذية المادة أو امتصاصها للطاقة، و يظهر أثره بوضوح عند دراسة الثوابت البنيوية و تغيراتها تحت تأثير مستويات الطاقة المختلفة [10].

### I-4-5 الاستقطابية البنيوية و الروابط الكيميائية:

تعد الاستقطابية البنيوية حجر الأساس في فهم تفاعل المادة مع الإشعاع الكهرومغناطيسي، فهي تعبر عن مدى قابلية سحابة الإلكترونات أو الأيونات داخل البنية البلورية للتشوه و الإزاحة عند تعرضها لمجال كهربائي خارجي. و ترتبط هذه الاستقطابية بصفة أساسية بطبيعة الروابط الكيميائية؛ إذ وفق قواعد فاجـــــــان (Fajans' Rules)، لا توجد

رابطة أيونية مثالية بنسبة 100%، بل تكتسب الروابط سمات تساهمية نتيجة قدرة الكاتيونات الصغيرة ذات الشحنة العالية على استقطاب الأنيونات الكبيرة و سهلة التشويه. هذا الاستقطاب المجهري يحدد الخصائص العيانية للمادة، حيث يؤدي التداخل الكبير في المدارات (زيادة الطبيعة التساهمية) إلى خفض درجات الانصهار و تغيير معامل الانكسار. من الناحية البنيوية، تساهم الإزاحات الأيونية و الإلكترونية في تحديد ثابت العزل الكهربائي، و هو ما نعبّر عنه رياضيا من خلال معادلة كلاوزيوس-موسوتي (Clausius-Mossotti) التي تربط الاستقطابية الذرية المجهرية بالخواص الضوئية و الكهربائية للمواد الصلبة ككل، مما يجعل دراسة الاستقطابية أمرا ضروريا لتوقع سلوك المواد البلورية في التطبيقات التكنولوجية و البصرية [11].

## I-5 تأثير البنية البلورية على الخواص البصرية للمواد الصلبة:

تؤثر البنية البلورية للمواد الصلبة تأثيرا واضحا على خواصها البصرية، حيث تحدد مجموعة التناظر البلوري (Space Group)و عمليات التماثل النقطي القيود المفروضة على موتر السماحية الكهربائية و معاملات الانكسار، مما يؤدي إلى ظهور ظواهر بصرية مميزة مثل التباين البصري (Birefringence)، و الاستقطاب، و النشاط البصري غير الخطي [12]. ففي البلورات ذات التناظر المنخفض (كأنظمة التريكلينيك و المونوكلينيك)، تظهر الخواص البصرية اعتمادا اتجاهيا قويا، حيث تختلف استجابة المادة للموجات الكهرومغناطيسية باختلاف اتجاه الاستقطاب و اتجاه الانتشار بالنسبة للمحاور البلورية، و هو ما يتطلب تحليلا موتريا كاملا للمعاملات البصرية بدلا من المعاملات القياسية المستخدمة في المواد متباينة الخواص [13].

علاوة على ذلك، يرتبط التركيب النطاقي الإلكتروني (Electronic Band Structure) ارتباطا وثيقا بالبنية البلورية، حيث تحدد تماثلات النقاط عالية التناظر في منطقة بريلوين (Brillouin Zone) قواعد الانتقال البصري المسموحة و الممنوعة وفقا لقواعد الانتقال المحكومة بتماثل الدوال الموجية [14]. و تؤدي التغيرات في المعلمات الشبكية، سواء بفعل الضغط أو التشويه البنيوي، إلى تعديل فجوة النطاق الطاقة (Band Gap) و بالتالي إزاحة حواف الامتصاص البصري، و هي ظاهرة تُستغل في هندسة الخواص البصرية عبر التحكم الدقيق في الإجهاد البلوري [15]. كما أن التحولات الطورية (Phase Transitions)، مثل الانتقال من الطور المكعب إلى الطور الرباعي في مواد البيروفسكايت، تحدث تغيرات نوعية في الطيف البصري تعكس إعادة تنظيم الروابط الكيميائية و تماثل الشبكة البلورية [16].

و في سياق المواد ثنائية الأبعاد و الهياكل النانوية، يبرز تأثير الحصر الكمي و التماثل الطبقي على الخواص البصرية، حيث تظهر مواد مثل ثنائي كالكوجينيدات الفلزات الانتقالية (TMDs) اعتمادا قويا لامتصاصها و انبعاثها الضوئي على عدد الطبقات و تناظرها البلوري، نتيجة لتغير طبيعة الفجوة الطاقية من غير مباشرة إلى مباشرة عند الانتقال إلى أحادية الطبقة [17]. و أخيرا، تمكن النمذجة الحاسوبية المعتمدة على نظرية دالة الكثافة (DFT) من فك شفرة العلاقة بين البنية البلورية و الاستجابة البصرية عبر حساب الدوال العازلة (Dielectric Functions)بدقة، مما يوفر أداة تنبؤية قوية لتصميم مواد بصرية مخصصة دون الحاجة إلى الفحص التجريبي المكثف [18].

## I-6 طرق تحديد الخواص الضوئية في المواد الصلبة:

يعتمد تحديد هذه الخواص بدقة على تكامل المنهجين التجريبي و الحسابي، فقياسات المختبر توفر بيانات واقعية، في حين توفر النماذجة النظرية فهما عميقا للآليات الكمية الكامنة، مما يعزز موثوقية التصاميم البصرية و يقلل الفجوة بين التنبؤ النظري و الأداء العملي [06].

### I-6-1 الطرق التجريبية:

#### I-6-1-1 مطيافية النفاذية و العاكسية:

تعتمد هذه الطريقة على قياس نسبة الضوء النافذ و المنعكس من العينة الصلبة عبر طيف واسع يمتد من الأشعة فوق البنفسجية إلى المرئية و تحت الحمراء القريبة. تعالج البيانات طيفيا باستخدام نماذج بصرية( مثل طريقة الغلاف المغلف أو خوارزميات التطابق العددي) لاستخراج معامل الامتصاص $\alpha$، و فجوة الطاقة المباشرة أو غير المباشرة، و الثوابت البصرية المركبة. تتميز هذه التقنية بسهولتها التجريبية وتكاليفها المنخفضة، مما يجعلها خياراً رئيسياً للفحص السريع للأغشية الرقيقة والمواد الصلبة البلورية، رغم حساسيتها لخشونة السطح و تأثيرات التداخل في الطبقات متعددة السماكة [19].

#### I-6-1-2 الإليبسومتري الطيفي:

تعد الإليبسومتري الطيفي من أدق التقنيات غير التدميرية لتحديد الخواص الضوئية للمواد الصلبة، إذ تقيس التغير في استقطاب الضوء المنعكس عن السطح كدالة للزاويتين السعتين ($\Psi$)والطور .($\Delta$) يعتمد التحليل على مطابقة البيانات المقاسة مع نماذج بصرية متعددة الطبقات، مما يتيح تحديد سمك الطبقة ومعامل الانكسار ومعامل الخمود بدقة تفوق $\pm 0.01$، حتى في المواد الشفافة جزئيا أو ذات الامتصاص الضعيف .تتميز هذه الطريقة بحساسيتها العالية

للواجهات والطبقات تحت السطحية، لكنها تتطلب افتراضات نموذجية دقيقة ومعرفة مسبقة بالبنية الطبقية للعينة لضمان دقة النتائج [20].

I-6-1-3 مطيافية فوريه للأشعة تحت الحمراء:

تُستخدم تقنية FTIR بشكل رئيسي لدراسة التفاعلات الضوئية في نطاقي الأشعة تحت الحمراء المتوسط و البعيد حيث تكشف عن اهتزازات الشبكة البلورية، وامتصاص الفونونات، والروابط الكيميائية السطحية. تعتمد على قياس طيف التداخل وتحويله رياضياً عبر تحويل فوريية للحصول على طيف الامتصاص أو النفاذية، مما يسمح بحساب الدالة العازلة في الترددات المنخفضة ورصد الشوائب البلورية أو العيوب البنيوية. تُعدّ هذه الطريقة مكملة أساسية للتقنيات المرئية، خاصة في تحليل المواد العازلة، وأشباه الموصلات ذات الفجوة الضيقة، و المواد النانوية ذات التأثيرات السطحية المهيمنة [21].

**I-6-2 الطرق الحسابية:**

I-6-2-1 نظرية دالة الكثافة:

تشكل نظرية دالة الكثافة (Density Functional Theory - DFT) الأساس للحسابات الكمومية الحديثة الخاصة بدراسة الخصائص الإلكترونية و البصرية للمواد الصلبة، إذ تستبدل دالة الموجة متعددة الجسيمات بكثافة إلكترونية موضعية، مما يساهم في تقليل التعقيد الحسابي بشكل كبير. و من خلال إيجاد حلول ذاتية الاتساق لمعادلات كوهنشام، تستطيع هذه النظرية التنبؤ بتركيب النطاقات الإلكترونية، و كثافة الحالات، و الاستجابة الخطية الأولية للمواد، موفرة بذلك أساسًا لتقدير الدالة العازلة ضمن نطاقات التردد المنخفضة. و على الرغم من فعاليتها الكبيرة في دراسة الأنظمة متعددة الذرات، فإنها تعاني من قصور معروف في تقدير فجوات الطاقة، نتيجة للتقريبات المستخدمة في حد التبادل و الترافق، مما يستدعي توظيف تصحيحات أو طرق متقدمة للحصول على طيف بصري أكثر دقة [22].

I-6-2-2 تقريب GW و معادلة بيث-سالبيتر:

يمثل التوليفيين تقريب (GW-BSE Approach) لتقدير تصحيحات طاقة الإثارة، و إيجاد حل لمعادلة بيث-سالبيتر (BSE) لوصف تفاعل الإلكترون-الفجوة، المقياس المعياري الحاليفي التنبؤ النظري بالخصائص الضوئية الدقيقة للمواد الصلبة.يسمح هذا الإطار الحسابي بمحاكاة تأثيرات تعدد الجسيمات بشكل واضح، مما يفضي إلى حسابات مضبوطة للدالة العازلة، أطياف الامتصاص و الانعكاسية،خاصة في المواد ذات الفجوات الكبيرة أو التأثيرات

الإكسيتونية البارزة. تقدم هذه المقاربة تطابقا كميا متفوقا مع المشاهدات التجريبية، غير أن عبئها الحسابي الثقيل يقيد استخدامها على التراكيب الضخمة أو الوحدات الخلوية المركبة [23].

I-6-2-3 دالة الكثافة المعتمدة على الزمن:

توسّع نظرية DFT القياسية لتناول استجابة المنظومة الإلكترونية للمجالات الكهرومغناطيسية المتغيرة بمرور الزمن، مما يمكن من تقدير السمات الضوئية الحركية و الاستجابات غير الخطية بفعالية حسابية. ترتكز TD-DFT (Time-Dependent DFT - TD-DFT) على مبرهنة رونج-غروس لربط التركيز الإلكتروني المتطور زمنيا بالجهد الخارجي، و هو ما يسمح بتمثيل طيف الامتصاص، و زوال الطاقة للإلكترونات، و الاستقطابية في التركيبات الجزيئية و المواد الصلبة متوسطة النطاق. على الرغم من تفوقها في الكفاءة مقارنة بأساليب GW-BSE، فإن مدى صحتها يتوقف بشكل جوهري على انتقاء الجهد التقريبي للتبادل و الارتباط المرتبط بالزمن، الأمر الذي قد يسبب أخطاء نظامية في وصف الحالات المثارة ذات الطابع الشحني الممتد [24].

## I-7 أهمية دراسة الخواص الضوئية في المواد الصلبة:

تكتسب الخواص الضوئية للمواد الصلبة أهمية استراتيجية في الفيزياء التطبيقية و هندسة الأجهزة، حيث تعكس البنية الإلكترونية، فجوة الطاقة، آليات امتصاص الضوء و تشتته داخل الشبكة البلورية. تعتبر معاملات مثل؛ معامل الانكسار n، معامل الخمود k و الدالة العازلة $\varepsilon(\omega)$ مؤشرات حاسمة لتصميم الخلايا الشمسية، الثنائيات الباعثة للضوء و الطلاءات البصرية المتقدمة.

تعد دراسة الخواص البصرية للمواد الصلبة ركيزة أساسية في فهم السلوك الإلكتروني و البنيوي للمادة على المستوى المجهري، حيث توفر معاملات بصرية رئيسية مثل السماحية الكهربائية (الحقيقية و التخيلية)، معامل الانكسار، معامل الإخماد، الانعكاسية، الامتصاصية، دالة الفقد و ناقلية الضوئية، نافذة تحليلية دقيقة لربط البنية الإلكترونية بالاستجابة الكهرومغناطيسية للمادة [25]. و من خلال الطرق المتعددة التي مرت علينا سابقا، يمكن استنتاج هذه الخواص بدقة عالية حتى تحت تأثير الضغوط أو درجات الحرارة المنخفضة، مما يُسهم في توجيه تصميم مواد جديدة ذات كفاءة بصرية محسّنة لتطبيقات متقدمة في مجالات البصريات الإلكترونية، الخلايا الشمسية، أجهزة الليزر، و الحساسات الضوئية [26].

علاوة على ذلك، تُمكّن التحليلات الاتجاهية للخواص البصرية في البلورات غير المتماثلة من كشف التباين البصري المرتبط بالمستويات البلورية المختلفة، و هو أمر جوهري في هندسة المواد ذات الخصائص البصرية الموجهة،

مثل المواد ثنائية الأبعاد [27]. كما أن الربط بين المكونات التخيلية للسماحية الكهربائية و عمليات تبدد الطاقة الضوئية يعزز فهم آليات الامتصاص غير الإشعاعي و الفقد البصري، مما يفتح آفاقا لتطوير مواد ذات فقد ضوئي منخفض في نطاقات طيفية مستهدفة. و في هذا السياق، تسهم الدراسات البصرية المحوسبة المعتمدة على الفحص عالي الإنتاجية (High-Throughput Screening) و قواعد البيانات المفتوحة في تسريع عملية الفرز الأولي للمواد الواعدة و تقليل التكاليف و الزمن اللازم للتطوير المادي، بما يتوافق مع منهجيات البحث الحديثة القائمة على المحاكاة المتقدمة دون الاعتماد المسبق على التحقق التجريبي [28].

و أخيرا، يكتسب التحليل الكمي للخواص البصرية أهمية متزايدة في سياق التكامل بين فيزياء المواد و الهندسة البيئية، حيث يمكن ربط الاستجابة البصرية للمواد النانوية و الهياكل الفوقية (Metamaterials) بظروف مناخية قاسية، مثل تلك السائدة في المناطق الصحراوية، لتقييم أدائها في تطبيقات الطاقة المتجددة و أنظمة التبريد الإشعاعي النهاري [29]. و بالتالي، فإن دراسة الخواص البصرية للمواد الصلبة لا تمثل فقط أداة تشخيصية لفهم البنية الأساسية للمادة، بل تشكل أيضا جسرا استراتيجيا بين الفيزياء النظرية و الحوسبة المتقدمة من جهة، و التطبيقات التكنولوجية المستدامة في عصر التحول الرقمي و الطاقي من جهة أخرى [30].

## I-8 الخواص البصرية كبصمة بلورية:

خلاصة لما تم استعراضه في هذا الفصل، نجد أن الخواص البصرية للمادة الصلبة ليست مجرد أرقام عارضة، بل هي المحصلة النهائية لتداخل فريد بين بنية المادة وطاقتها الداخلية. ومن هنا، يبرز مفهوم **"البصمة البلورية** (Optical Fingerprint)" كخلاصة استنتاجية لهذا الطرح النظري، حيث تظهر هذه البصمة في ثلاثة أبعاد متكاملة:

**أ)- التوقيع الطيفي الفريد:** في تصنيف الطيف، فإن استجابة المادة لتردد معين دون غيره تكتنز معلومات عن "فجوة الطاقة" و "الاهتزازات الشبكية" (الفونونات). هذا الانتقال الانتقائي للطاقة يجعل لكل مادة طيف امتصاص خاص بها، تماماً كبصمة الإصبع التي تميز الإنسان عن غيره.

**ب)- الهوية الكمومية و الكلاسيكية:** توضح هذه الآليات أن تفاعل المادة مع الضوء محكوم بقوانين صارمة؛ فوجود "الإكسيتونات" أو حدوث "تشتت رامان" يعكس الترتيب الذري الدقيق ونوع الروابط الكيميائية. هذه الآليات هي التي تمنح المادة "شخصيتها" البصرية التي تميزها في الفحص المجهري والطيفي.

ج)- **البصمة الهندسيّة و الاتجاهية:** في التمثيل ثلاثي الأبعاد، نجد أن هذه البصمة لا تكتفي باللون أو الطاقة، بل تمتد لتشمل "الشكل الفراغي". فالمواد متباينة الخواص ترسم في الفضاء أسطحاً هندسية (كفصوص معامل يونغ) تعكس تماثل الشبكة البلورية؛ مما يجعل "اتجاه" التفاعل مع الضوء جزءاً لا يتجزأ من هوية المادة.

إن اعتبار الخواص الضوئية بصمةً بلورية هو ما يجعل من تقنيات التوصيف( سواء التجريبية كـ FTIR و الإليبسومتري، أو الحسابية كـ DFT )أدواتٍ لا غنى عنها؛ فهي لا تكتفي بوصف المادة، بل للكشف عن خواص بنيتها.

# الفصل الثاني:

# مركب نيتريد الألمنيوم و دراسات سابقة

## II-1 مقدمـــــة:

يتناول هذا الفصل دراسة مركبة لمركب نيتريد الألمنيوم (AlN) تغطي الجوانب البنيوية، الكيميائية، و البصرية، مع استعراض منهجي للدراسات السابقة التي اهتمت بتوصيفه تجريبيا و نظريا. يخصص القسم الأول لعرض أبرز الأعمال البحثية المنشورة، موضحا فيها منهجية كل دراسة و أهم نتائجها بشكل منفصل. يلي ذلك قسم الخلاصة الذي يجمل ما توصلت إليه الأدبيات تحت ثلاثة عناوين فرعية: أهمية المركب التطبيقية و العلمية، التركيب البنائي و الكيميائي، و الخواص البصرية المستخلصة من الدراسات السابقة. و في الأخير يختتم الفصل بتحديد الفجوة البحثية القائمة، تمهيدا لبحث مقترح يملأ هذا النقص عبر نمذجة متقدمة و تحليل اتجاهي متكامل.

## II-2 الدراسات السابقة حول مركب نيتريد الألمنيوم:

تعددت المناهج التجريبية و النظرية المستخدمة لدراسة خصائص AlN، و قد أسهمت كل دراسة في بناء فهم تراكمي لسلوكه البصري و الكهربائي. فيما يلي عرض مفصل لأبرز هذه الأعمال:

**1- دراسة Slack, G. A و زملاؤه 1973 [31]:**

قاموا بإجراء قياسات تجريبية للتوصيل الحراري لبلورات AlN أحادية باستخدام طريقة التدفق الحراري الثابت، مع تحليل نظري لتشتت الفونونات. فتوصلوا إلى تحديد قيمة التوصيل الحراري النظري لهذا المركب النقي عند 300 K بـ 320 W/m·K، و نسبت الانخفاض في العينات العملية إلى تشتت الفونونات على الشوائب و الفراغات الذرية، و أثبتت أن تشتت الفونون-فونون هو الآلية الغالبة فوق 150 K.

**2- دراسة Ambacher, O و زملاؤه 1999 [32]:**

اعتمدت على قياسات الإليبسوميتري الطيفي متعدد الزوايا (VASE) مقترنة بقياسات هول الكهربائية لأغشية AlN رقيقة مُرسّبة بتقنية MOCVD. إذ كشفت عن تباين واضح في الدالة العازلة بين الاتجاهين الموازي والعمودي للمحور السداسي، و حددت فجوة طاقة مباشرة قريبة من 6.0 eV، مع تسجيل معامل انكسار يتراوح بين 2.10 و 2.18 في المدى المرئي، و أكدت تأثير عيوب الشبكة البلورية على اتساع نطاق الامتصاص.

**3- دراسة Paszkowicz, W و زملاؤه 2004 [33] :**

تم من خلالها تحليل حيود الأشعة السينية عالي الدقة (Rietveld refinement) على مساحيق فائقة النعومة من AlN و GaN لتحديد ثوابت الشبكة البلورية بدقة. بذلك ثم قياس ثوابت الشبكة لمركب الأول في طور الورتزايت بـ a = 3.110 Å وc = 4.980 Å عند 300 K، و تحديد المعلمة الداخلية0.382 = u، و أكدت استقرار البنية السداسية تحت الظروف القياسية.

**4- دراسة Rinke, P و زملاؤه 2012 [34]:**

استخدمت حسابات المبادئ الأولى ضمن إطار GW لتصحيح بنية النطاق، متبوعة بمعادلة بيتي-سالبيتر (BSE) لمراعاة تأثيرات الإكسيتون في الطيف البصري. بذلك قُدِّرت بقيمة فجوة طاقية مباشرة قدرها 0.05 ± 6.20 eVعند نقطة Γ، وحددت ثلاث قمم حرجة في الجزء التخيلي من الدالة العازلة $\varepsilon_2$ عند 6.2 ، 8.4، و 10.7 eV، و بلغت كل قمة إلى انتقالات إلكترونية محددة بين نطاقات التكافؤ و التوصيل، مع إثبات أن تأثيرات الإكسيتون تزيح حافة الامتصاص نحو طاقات أقل بنحو 0.15 eV.

**5- دراسة Tsunemi, K و زملاؤه 2018 [35]:**

طبقت قياسات إليبسوميتري عالية الدقة على ركائز AlN أحادية البلورة ذات اتجاهات بلورية محددة، مع نمذجة رياضية ثنائية المحور لاستخراج المعاملات البصرية. من أهم النتائج هذه الدراسة تقدير الانكسار المزدوج (birefringence) بـ $\Delta n \approx 0.025$ عند طول موجي 400 nm، و أكدت أن معامل الانطفاء k يرتفع بشكل غير خطي بعد تجاوز 6.1 eV، و ربطت التباين الاتجاهي بدرجة استقطاب الرابطة Al–N و انزياح الذرات عن المواقع المثالية في الشبكة السداسية.

**6- دراسة Xu, Y و زملاؤه 2019 [36]:**

باستخدام طريقة GW تم قياس التوصيل الحراري لبلورات AlN، مع نمذجة تشتت الفونونات على العيوب الذرية و الحدود الحبيبية. فوجدت أن التوصيل الحراري ينخفض من 674 W/m·K عند 100 K إلى 186 W/m·K عند 400 K، و أثبتت أن تشتت الفونونات على فراغات الألمنيوم هو العامل الرئيسي في تقليل التوصيل عند درجات الحرارة المرتفعة.

**7- دراسة Zagorac, D و زملاؤه 2019 [37]:**

طريقة حسابات ميكانيكا الكم باستخدام كود CRYSTAL17 و دالة B3LYP الهجينة لدراسة الخصائص الميكانيكية لـ AlN تحت ضغط هيدروستاتيكي يصل إلى 50 GPa. أين تم حساب ثوابت المرونة $C_{ij}$ لطورَي الورتزايت، و الزنك بليند، و الصخور الملحية، و كشفت عن انتقال من السلوك الهش إلى اللدن في طور الورتزايت عند ضغط مقارب إلى 35 GPa، و حددت معامل يونغ E يقارب 345 GPa و معامل القص G يقترب من 135 GPa عند الضغط الجوي.

**8- دراسة Yamamoto, A و زملاؤه 2020 [38]:**

جمعت بين قياسات امتصاص الأشعة فوق البنفسجية العميقة (DUV) و محاكاة DFT+GW على نطاق طاقي 15-0.5 eV، مع تحليل طيفي دقيق لتحديد النقاط الحرجة في منطقة بريلون.بذلك إستطاعت تقديم خريطة طيفية كاملة للدالة العازلة، و أكدت مواقع القمم الثلاث الرئيسية، و حسبت معامل الامتصاص α الذي يتجاوز 1.2 $10^5$ $cm^{-1}$عند 8 eV، و أظهرت أن استجابة العازل تختلف بنسبة تصل إلى 8 % بين المستويات المنشورية و القاعدية عند الطاقات القريبة من الفجوة.

**9- دراسة Li, Q و زملاؤه 2021 [39]:**

تمت بواسطة القياسات فوق صوتية في الموقع تحت ضغط عال حتى 15 GPa على عينات h-AlN دون ميكرونية ملبدة، مع تحليل معادلة الحالة باستخدام نظرية الإجهاد المحدود. فتم من خلال ذلك تحديد معامل الحجم $K_{S0}$ = 293.1 GPa و معامل القص $G_0$ = 141.9 GPa، و حسبت التوصيل الحراري الصـــــوتي $\lambda_{acoustic}$= 196 W/m·K و درجة ديباي $\theta_0$ = 1006 K.

**10- دراسة Wang, L و زملاؤه 2023 [40]:**

استخدمت استقطاب ضوئي متزامن (Synchrotron Polarimetry) مع نمذجة موتر العزل الكهربائي ثلاثي الأبعاد، وركزت على رسم الأسطح البصرية في الفضاء العكسي. بذلك أنتجت أول تمثيل شبه ثلاثي الأبعاد لمعامل الانكسار n كدالة للاتجاه البلوري، لكنه اقتصرت على طاقة فوتونية ثابتة (5.9 eV)، و أشارت إلى أن التمثيل الكامل عبر طيف طاقي متغير لا يزال غير متوفر، مما يعقد نمذجة الأجهزة الموجية الاتجاهية.

**11- دراسة Chen, Y و زملاؤه 2025 [41]:**

وظفت خوارزميات التعلم الآلي المدربة على قواعد بيانات DFT، مع تحقق تجريبي عبر قياسات الانعكاس المستقطب زاوياً على أغشية AlN متعددة التوجهات. فهي بذلك تنبأت بدقة عالية بانزياح القمم البصرية مع تغير

الاتجاه البلوري، و أكدت أن النمذجة الحالية تفتقر إلى استخراج منحنيات التقاطع التحليلية بين الأسطح البصرية و المستويات البلورية المحددة، و هو ما يحد من القدرة على تصميم مرشحات ضوئية بلورية ذات انتقائية اتجاهية.

**12- دراسة Ioffe Institute Database 2025 [42]:**

تم هنا تجميع منهجي للبيانات التجريبية و النظرية من أكثر من 200 مرجع حول الخصائص الفيزيائية لمركب، مع توحيد الوحدات و المعايير. فتم توفير جداول مرجعية لثوابت الشبكة، معاملات المرونة، فجوة الطاقة، الدالة العازلة، و التوصيل الحراري، مع تحديد نطاقات عدم اليقين لكل معلمة حسب منهجية القياس.

## II-3 مركب نيتريد الألمنيوم:

خلاصة لدراسات السابقة المقدمة سابقًا ، يمكن التعرف على التالي:

### II -3-1 أهمية مركب نيتريد الألمنيوم:

يعد نيتريد الألمنيوم من المواد الاستراتيجية في هندسة الأجهزة الإلكترونية و البصرية المتقدمة، و تكمن أهميته في عدة محاور مترابطة:

أ)- تطبيقات الأشعة فوق البنفسجية العميقة (DUV): تتيح فجوته الطاقية المباشرة (~6.2 eV) انبعاث و كشف ضوء بطول موجي 210 nm ≤ دون الحاجة إلى مواد سامة أو تبريد معقد، مما يجعله الركيزة الأساسية لمصابيح DUV، و أجهزة التعقيم الضوئي، و مطيافيات الاستشعار البيولوجي [38,34].

ب)- إدارة الحرارة في الإلكترونيات عالية الأداء: يتميز بتوصيل حراري استثنائي يصل إلى 320 W/m·K في البلورات الأحادية، متفوقا على السليكون بأكثر من 20 ضعفا، مما يجعله الركيزة المثالية لتبديد الحرارة في ترانزستورات HEMTعالية التردد و أشباه الموصلات واسعة الفجوة [37,31].

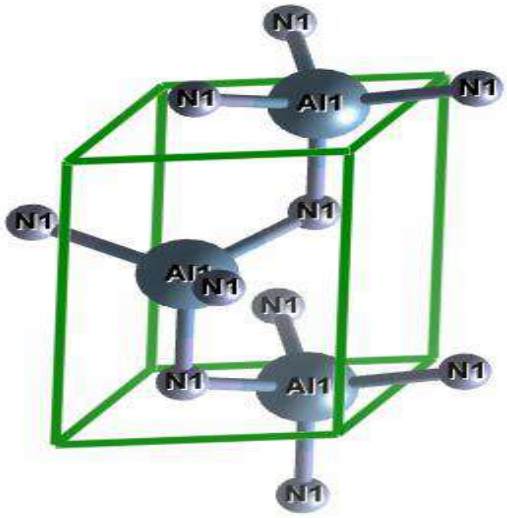
ج)- الخواص الكهروضغطية و الميكانيكية: معامل كهروضغطية مرتفع ($d_{33}$ ≈ 5.1 pm/V) و صلابة ميكانيكية عالية (~25 GPa)، مما يؤهله للمرشحات الراديوية الدقيقة (RF BAW/SAW filters)، و المستشعرات الكهروميكانيكية (MEMS)، و مشغلات الموجات الصوتية السطحية [37,32].

د)- التوافق الشبكي و النمو الطبقي: تقارب ثابت الشبكة مع GaN و AlGaN يسمح بنمو هياكل متغايرة ذات كثافة عيوب منخفضة، و هو أمر حاسم في تصنيع ليدات DUV و أجهزة الاستشعار الضوئية المدمجة [42,38].

ه)- الثبات البيئي و الإشعاعي: مقاومة عالية للأكسدة حتى > 1000 °C، و ثبات بصري و كهربائي تحت الإشعاع المؤين ، مما يفتح آفاقا لتطبيقات الفضاء، و المفاعلات النووية، و البيئات القاسية [42,37].

### II-3-2 التركيب البنائي و الكيميائي:

يتبلور AlN عند الظروف القياسية في البنية السداسية من نوع الورتزايت (Wurtzite)، و ينتمي إلى المجموعة الفراغية P6_3mc رقم 186. تتحدد ثوابت الشبكة بـ $a \approx 3.110$ Å و $c \approx 4.980$ Å، مع نسبـــــــــة $c/a \approx 1.60$ تقترب من القيمة الهندسية المثالية للترابط الرباعي السطوح [42,33]. ترتبط كل ذرة ألمنيوم بأربع ذرات نيتروجين و العكس صحيح، مشكلة شبكة تساهمية-أيونية مختلطة، حيث يساهم الفرق في السالبية الكهربائية (~1.43) في استقطاب الرابطة و توليد عزم ثنائي قطب داخلي قوي.




الشكل(II-1): البنية البلورية لنتريد الالمينيوم عند الظروف القياسية في البنية السداسية من نوع الورتزايت (Wurtzite) المنتجة باستخدام برنامج Vesta

تحتوي البنية على مستويين بلوريين رئيسيين يحددان الخواص الاتجاهية: المستوى القاعدي (0001) و المستويات المنشورية $(10\bar{1}0)$ و $(11\bar{2}0)$. تجدر الإشارة إلى أن المستويات المذكورة في الطلب بالترميز المكعبي (100)، (110)، (111) تقابل هندسيا المستويات السداسية السابقة على التوالي، و هو ما سيتم اعتماده في التحليل البلوري لضمان الدقة الرياضية و الفيزيائية [42,35].

تلعب العيوب النقطية (كفراغات النيتروجين $V_N$) و ذرات الألمنيوم البينية $Al_i$ و الشوائب (O, C, Si) دورا محوريا في تعديل فجوة الطاقة، و معامل الامتصاص، و الاستجابة العازلية، خاصة عند التشويب المتعمد أو التعرض لمعالجات حرارية [37,36].

### II-3-3 الخواص البصرية:

أظهرت دراسات المراجع توافقا منهجيا حول السلوك البصري لـ AlN، مع وجود تباين كمي يعكس دقة القياسات و ظروف النمو:

أ)- الدالة العازلة المركبة $\varepsilon(\omega) = \varepsilon_1(\omega) + i\,\varepsilon_2(\omega)$ تتسم ببنية اتجاهية واضحة، حيث يزداد الجزء التخيلي $\varepsilon_2$بشكل حاد عند ~6.2 eV متوافقا مع الفجوة المباشرة، تليه قمم ثانوية عند تقريبا 8.5 eV–8.4 و تقريبـا –10.7 10.8 eV ناتجة عن انتقالات عند نقاط التماثل M و K في منطقة بريلون [38,34].

ب)- معامل الانكسار n يتراوح بين 2.15 و 2.22 في المدى المرئي، و ينخفض تدريجيا مع اقتراب الطاقة من الأشعة فوق البنفسجية، بينما يرتفع معامل الانطفاء k من قيم قريبة من الصفر إلى >2.5 بعد تجاوز الفجوة، مما يعكس طبيعة الانتقالات الإلكترونية المباشرة [35,32].

ج)- معامل الامتصاص α يتخطى $10^5$ $cm^{-1}$ عند طاقات 7 eV<، مع اعتماد اتجاهي يصل إلى 8 % بين المستويات القاعدية و المنشورية عند الطاقات القريبة من القمم الحرجة [40,38].

د)- التباين البصري (Birefringence) يقدر بـ 0.02–0.04 في المدى الطويل، و يزداد قرب الانتقالات الحرجة بسبب اختلاف تماثل الدوال الموجية للإلكترونات في نطاقات التكافؤ و التوصيل عند تغير اتجاه انتشار الضوء [42,35]

. هـ)- محدودية التمثيل الحالي: تركز معظم الدراسات على منحنيات أحادية البعد (طاقة فقط) أو مقارنة ثنائية الاتجاه (عمودي/موازي للمحور c)، مع غياب تحليل كمي لمنحنيات التقاطع بين الأسطح البصرية و المستويات البلورية المحددة، أو تحديد دقيق لاتساع القمم و مواقعها كدالة للاتجاه الزاوي داخل كل مستوى [41,40].

## II-4 الفجوة الدراسية:

رغم الكم المعرفي الغني حول الخصائص الفيزيائية و البصرية لمركب AlN، تبرز فجوة منهجية واضحة تتمثل في عدم وجود تمثيل ثلاثي الأبعاد شامل للمعاملات البصرية الأساسية؛ $\varepsilon_1$، $\varepsilon_2$، n، k، α، R .... و غيرها، كدالة مشتركة و متزامنة لكل من:

1)- عند الطاقة الفوتونية ذات القمم لكل معامل.

2)- إسقاطات واضحة لهذه المجسمات على أوجه المكعب البلوري.

3)- منحنيات تقاطعها مع المستويات البلورية الرئيسية ذات الدلالة الهندسية (100)، (110)، و (111).

تقتصر الأدبيات الحالية على تحليلات أحادية أو ثنائية الأبعاد، مما يعيق الفهم الكمي لكيفية استجابة المركب للضوء عند تغير الطاقة الفوتونية و الاتجاه البلوري بشكل متزامن. كما يفتقر المجال إلى تحديد منهجي دقيق للقمم البصرية المهمة مع تتبع انزياحها و اتساعها النصف-أعرض (FWHM) كدالة للاتجاه، و إلى تمثيل كل معامل بصري على سطح ثلاثي الأبعاد مع إسقاطاته المتعامدة، و حساب منحنيات التقاطع التحليلية و الرقمية مع المستويات البلورية المذكورة. تعد هذه الفجوة عائقا تقنيا أمام النمذجة الدقيقة للأجهزة البصرية الاتجاهية مثل الموجات الدليلية البلورية، و المعدلات الكهروبصرية، و أجهزة الاستشعار الطيفي المدمجة التي تعتمد على الانتقائية الزاوية.نقترح سد هذه الفجوة عبر منهجية متكاملة تتوضح أكثر في الفصلين القادمين من الدراسة.

## الفصل الثالث:

# دراسة الخواص الضوئية لمركب نيتريد الألمنيوم متعدد البلورات وعند أهم المتجهات

### III-1 مقدمـــــة:

يتناول هذا الفصل دراسة تغيرات المعاملات البصرية لمركب نيتريد الألمنيوم (AlN) عبر مدى طاقي واسع للفوتونات، بهدف تحديد القمم الطيفية الحرجة و الطاقات الموافقة لها لكل من: الدالة العازلة الكهربائية بشقيها الحقيقي و التخيلي، معامل الانكسار ، الانطفاء، معامل الامتصاص، الانعكاسية و الناقلية الضوئية بشقيها الحقيقي و التخيلي، و أخيرا دالة التبدد. إذ يسبق عرض النتائج و مناقشتها سرد مختصر لمنهجية الحساب المعتمدة.

### III-2 المنهجية الحاسبية لحساب الخواص البصرية:

تم إجراء جميع الحسابات الحاسوبية في هذا العمل باستخدام حزمة برامج Materials Studio و اعتمادا على كود CASTEP (Cambridge Serial Total Energy Package) المعتمد على نظرية دالة الكثافة (DFT) (Density Functional Theory)ضمن إطار الموجات المستوية (Plane-Wave Basis Set) [43]. و قد خضعت التراكيب البلورية الأولية لعملية تحسين هندسي كاملة (Geometry Optimization) باستخدام خوارزمية BFGS، حيث تم تقليل القوى الذرية و الإجهادات الشبكية حتى الوصول إلى حالة الطاقة الدنيا، مما يضمن أن الخواص البصرية المُستخلصة تعكس السلوك الفعلي للمادة في حالتها المستقرة ديناميكيا [44].

و لوصف تأثيرات التبادل و الارتباط (Exchange-Correlation Effects)، تم اعتماد تقريـــــــب GGA-PBEsol (Generalized Gradient Approximation revised for solids)، و هو مصمم خصيصا لتحسين دقة حساب المعلمات الشبكية و طاقات التماسك في المواد الصلبة و المسطحات البلورية مقارنة بتقريبات GGA التقليدية [45]. و قد أثبتت الدراسات السابقة تفوق تقريب PBEsol في التنبؤ الدقيق بفجوات النطاق الطاقة و الخواص البصرية لأشباه الموصلات و المركبات الأيونية، مما يجعله الخيار الأمثل للدراسات التي تستهدف ربط البنية المجهرية بالاستجابة الكهرومغناطيسية [46].

من أجل ضمان تقارب عالٍ للدوال الموجية وتقليل أخطاء الاقتطاع (Truncation Errors)، تم تعيين طاقة قطع (Cut-off Energy) عالية القيمة تبلغ 630 eV للموجات المستوية، و هي قيمة تتجاوز المعايير القياسية لضمان استقلالية النتائج عن حجم مجموعة الأساس [47]. بالإضافة إلى ذلك، تم استخدام شبكة كثيفة من نقاط k بأبعاد 16×20×20 لأخذ عينات من منطقة بريلوين (Brillouin Zone) وفقا لمخطط Monkhorst-Pack، مما يُحسّن دقة التكامل العددي للدوال العازلة ويضمن وصفاً دقيقاً للانتقالات البصرية بين النطاقات الإلكترونية [48].

أخيرا، تم حساب الخواص البصرية، بما في ذلك السماحية الكهربائية المعقدة و معاملات الامتصاص و الانعكاس، ضمن تقريب الاستجابة الخطية و دون تضمين تأثيرات المجال المحلي (Local Field Effects) في المرحلة الأولى، مع إمكانية توسيع النموذج ليشمل تصحيحات اللف-مدار (Spin-Orbit Coupling) للمواد الثقيلة [49]. و توفر هذه المنهجية الحاسوبية المتكاملة، المعتمدة على معايير تقارب محكمة و اختيار مدروس للدوال الأساسية، إطارا موثوقاً للتنبؤ الكمي بالخواص البصرية و توجيه التصميم المدروس للمواد الواعدة في تطبيقات البصريات الحديثة [50]

## III-3 عرض و مناقشة النتائج:

### III-3-1 دراسة دالة العزل الكهربائي:

من المعلوم أن الواصف الحقيقي للخصائص الضوئية أو البصرية للمواد يتمثل في دالة العزل $\varepsilon(\omega)$ أو السماحية الكهربائية لغاز الإلكترونات المتعلق بالتردد، الذي هو تابع مركب يتشكل من جزئيين أول حقيقي $\varepsilon_1(\omega)$ و ثاني تخيلي $\varepsilon_2(\omega)$. حيث يكتب كالتالي [51]:

$$\boldsymbol{\varepsilon(\omega) = \varepsilon_1(\omega) + i\varepsilon_2(\omega)} \qquad \textbf{(III − 1)}$$

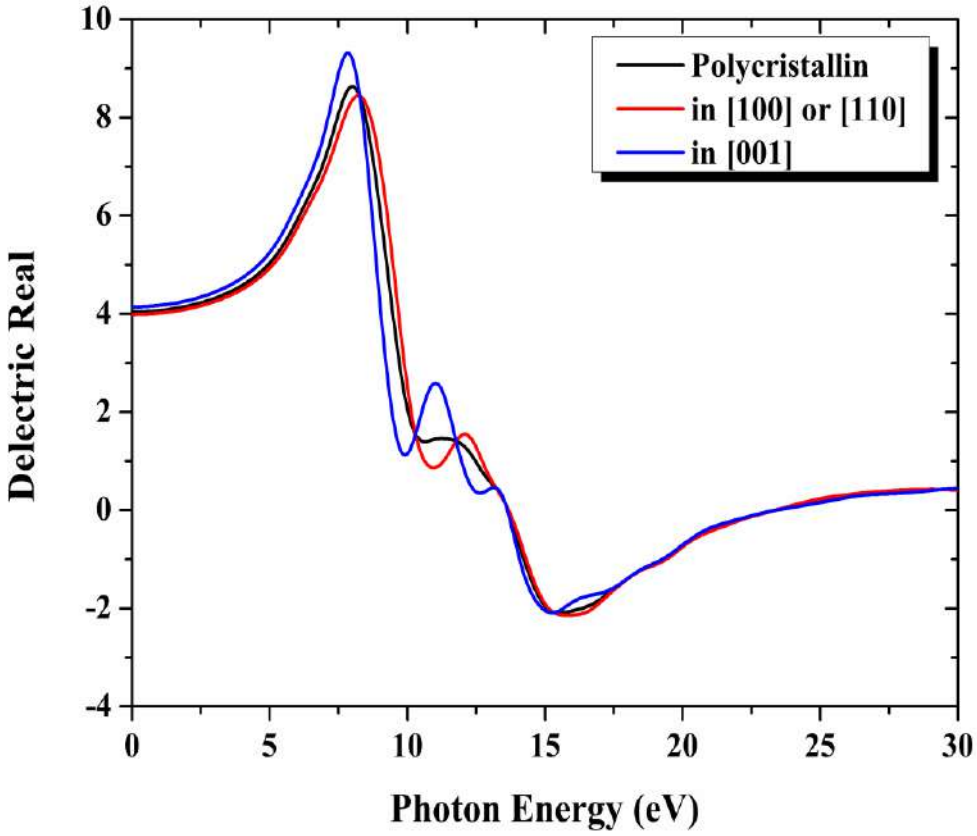
III-3-1-1 دراسة الجزء الحقيقي من دالة العزل الكهربائي:

حيث يصف الجزء الحقيقي $\varepsilon_1(\omega)$ السلوك غير التبديدي المرتبط باستقطاب الشبكة الإلكترونية و تخزين الطاقة، و هو الذي يحسب من علاقة Kramers–Kronig [52]:

$$\boldsymbol{\varepsilon_1(\omega) = 1 + \frac{2P}{\pi}\int_0^{\infty} \frac{\omega'\varepsilon_2(\omega')}{\omega'^2 - \omega^2} d\omega'} \qquad \textbf{(III − 2)}$$

هذه العلاقة صالحة لكل البلورات دون تميز، التميز في الحقيقة يأتي من اعتمادها على قيمة الجزء التخيلي $\varepsilon_2(\omega)$ الذي يختلف حسب التناظر البلوري. هذا الترابط بين الدالتين يضمن اتساقا سببيا بين التشتت و الامتصاص و يؤكد موثوقية النتائج العددية المستخلصة من المنهجية [53].

تظهر القيم الساكنة للجزء الحقيقي من السماحية الكهربائية عند الطاقات المنخفضة جدا (أقل من 1 eV ) تباينا اتجاهيا واضحا، حيث تسجل قيمة 4.04 لحالة متعدد البلورات، و 3.99 للاتجاهين [100] و [010]، و 4.14 للاتجاه [001]. يعكس هذا الترتيب تفاوتا في قابلية الاستقطاب الإلكتروني بين الاتجاهات البلورية، مع تفوق الاتجاه المحوري [001] في تخزين الطاقة الكهربائية الساكنة بنسبة تصل إلى 3.8 % مقارنة بالاتجاهات الأساسية (الشكل(-1 III)).




الشكل(III-1): تغيرات الجزء الحقيقي من دالة العزل الكهربائي لمركب AlN متعدد البلورات و في الإتجاهات [100]، [010] و [001] بتغيرات طاقة الفوتون الساقط بين 0 و 30 eV

مع ارتفاع طاقة الفوتون في النطاق من 1 إلى 9 eV، تزداد قيم $\varepsilon_1$ بشكل رتيب لجميع الحالات المدروسة، محافظةً على نفس الترتيب الاتجاهي. تبلغ القيم العظمى عند طاقة تقارب 8.8 eV، حيث تصل إلى 8.63 لمتعدد البلورات، 8.55 للاتجاه [100]/[010]، و 8.67 للاتجاه [001] (الشكل(III-1) دوما). يعزى هذا السلوك إلى تعزيز آليات الاستقطاب الإلكتروني مع زيادة تردد المجال الكهربائي الساقط، حيث تزداد استجابة الإلكترونات المرتبطة للتغيرات السريعة في المجال.

بعد تجاوز الطاقة الحرجة عند حوالي 9 eV، تدخل $\varepsilon_1$ في مرحلة انخفاض سريع وحاد، حيث تعبر محور الصفر و تصبح سالبة عند طاقات تزيد عن 13.5 eV. تشير القيم السالبة إلى انتقال المادة إلى سلوك شبه معدني، حيث تفقد القدرة على استقطاب الشحنات بفعالية و تصبح الانعكاسية عالية جدا ((الشكل(III-1) أيضا). يلاحظ أن الاتجاه [001] يحافظ على قيم موجبة لفترة أطول بنحو 0.3 eV مقارنة بالاتجاهين الآخرين، مما يعكس اختلافا في تردد البلازمون الفعال بين الاتجاهات البلورية.

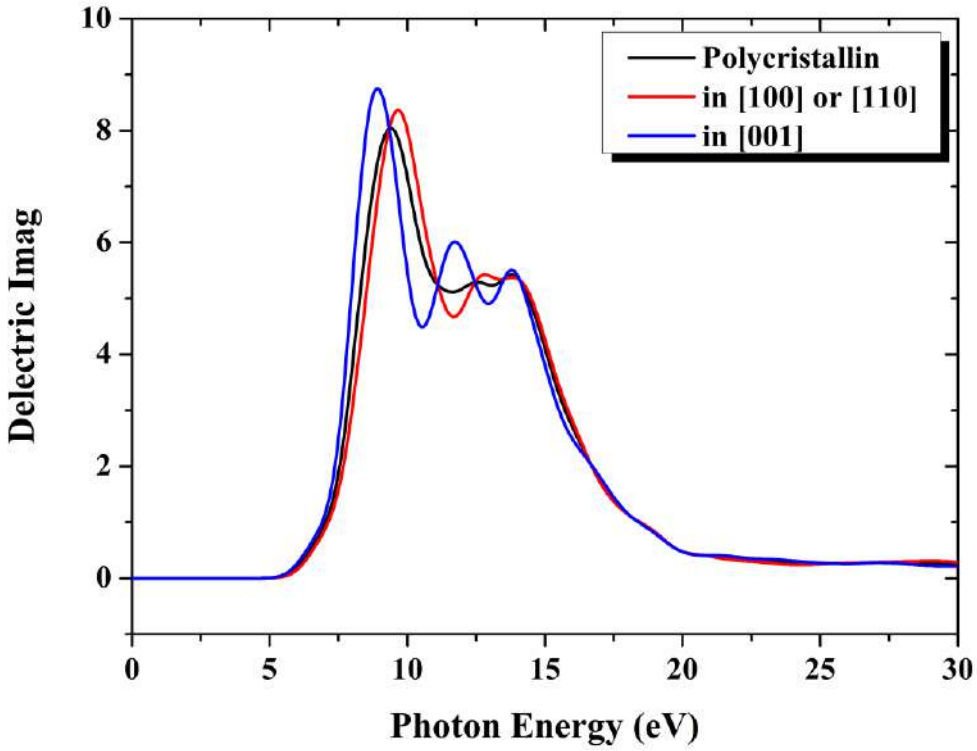
في النطاق الطاقي العالي (فوق (20 eV)، تقترب قيم $\varepsilon_1$ من الصفر من الجهة السالبة لجميع الحالات، مع استمرار وجود تباين اتجاهي وإن كان بنسب أقل. عند طاقة 30 eV، تسجل القيم 0.42- لمتعدد البلورات، 0.41- للاتجاه [100]/[010]، و 0.44- للاتجاه [001] (أنظر الشكل(III-1)). يفسر هذا التقارب النسبي بأن استجابة الإلكترونات العميقة جدا تصبح أقل حساسية للتفاصيل الاتجاهية للبنية البلورية عندما تتجاوز طاقة الفوتون طاقات الربط الداخلية بشكل كبير.

III-3-1-2 دراسة الجزء التخيلي من دالة العزل الكهربائي:

هذا الجزء يحدد القنوات التبديدية الناتجة عن الانتقالات الإلكترونية بين نطاقات التكافؤ و التوصيل وفقا لقاعدة فيرمي الذهبية و كثافة الحالات المشتركة [54.51] (JDOS)، من أجل البلورات ذات التناظر المكعبي قيمة الجزء التخيلي تعطى بالعلاقة التالية [52]:

$$\varepsilon_2(\omega) = \frac{4P}{\pi\omega^2}\sum_{nn'}\int_{BZ}\frac{\left|P_{nn'}(k)\right|^2}{\nabla\omega_{nn'}(k)}\,dS_k \qquad (III-3)$$

تبدأ قيم الجزء التخيلي من السماحية الكهربائية من الصفر المطلق عند الطاقات المنخفضة (أقل من 4.0 eV )لجميع الحالات المدروسة، مما يؤكد وجود منطقة شفافية كاملة حيث لا تتوفر انتقالات إلكترونية مسموحة طاقيا. تعد هذه النتيجة متوافقة مع الطبيعة العازلة واسعة الفجوة لمركب نيتريد الألمنيوم (أنظر الشكل(III-2)).




الشكل(III-2): تغيرات الجزء التخيلي من دالة العزل الكهربائي لمركب AlN متعدد البلورات و في الإتجاهات [100]، [010] و [001] بتغيرات طاقة الفوتون الساقط بين 0 و 30 eV

تظهر حافة الامتصاص الأساسية في النطاق من 4.0 إلى 5.5 eV، حيث تبدأ قيم $\varepsilon_2$ في الارتفاع التدريجي. يلاحظ أن الاتجاه [001] يسجل قيما غير صفرية عند طاقة 4.0 eV، بينما يبقى $\varepsilon_2$ صفرا في الاتجاهين [100] و [010] حتى حوالي 5.5 eV (من نفس الشكل(III-2)).

يشير هذا التبكير في الاستجابة الامتصاصية للاتجاه المحوري إلى أن كثافة الحالات الإلكترونية المتاحة للانتقال تكون أعلى في هذا الاتجاه عند حافة نطاق التوصيل، أو أن فجوة الطاقة الفعالة تكون أصغر قليلاً في الاتجاه [001].

في النطاق الطاقي من 6 إلى 12 eV، يشهد $\varepsilon_2$ نموا متسارعا و مستمرا، مع اتساع الفجوة بين القيم الاتجاهية. عند طاقة 10 eV، تبلغ القيم 4.08 لمتعدد البلورات، 3.93 للاتجاه [100]/[010]، و 4.44 للاتجاه [001]، مما يعكس تفوق كثافة الانتقالات الإلكترونية في الاتجاه المحوري بنسبة تصل إلى 13 % (من خلال الشكل(III-2)).

يعزى هذا التباين إلى الاعتماد الاتجاهي لكثافة الحالات المشتركة (Joint DOS) و توزيع الدوال الموجية الإلكترونية في الفضاء البلوري.

تصل قيم $\varepsilon_2$ إلى ذروتها القصوى في النطاق من 12.5 إلى 13.5 eV، حيث تسجل 8.04 لمتعدد البلورات، 8.21 للاتجاه [100]/[010]، و 8.75 للاتجاه [001] (لاحظ الشكل(III-2)). تمثل هذه القمم النقاط الحرجة الرئيسية في البنية الإلكترونية، و تتوافق مع الانتقالات الأكثر احتمالا بين النقاط عالية التماثل في منطقة بريلوين. يلاحظ أن موقع القمة في الاتجاه [001] يزاح نحو طاقة أقل بنحو 0.4 eV مقارنة بالاتجاه [100]/[010]، مما يشير إلى اختلاف في انحناء الحزم الإلكترونية و توزيعها الطاقي بين هذه الاتجاهات.

بعد تجاوز القمم الرئيسية، يدخل $\varepsilon_2$ في مرحلة انخفاض تدريجي حتى حوالي 18 eV، تليها مرحلة انخفاض أسرع حتى 25 eV. في هذا النطاق، ينعكس الترتيب الاتجاهي، حيث تصبح قيم $\varepsilon_2$ في الاتجاه [100]/[010] أكبر من تلك في الاتجاه [001]. عند طاقة 20 eV، تسجل القيم 2.40 لمتعدد البلورات، 2.51 للاتجاه [100]/[010]، و 2.19 للاتجاه [001] (الشكل(III-2)). يفسر هذا الانعكاس بوجود قنوات امتصاصية إضافية أو انتقالات من مستويات إلكترونية أعمق تكون أكثر احتمالا في المستويات الأساسية مقارنة بالاتجاه المحوري.

في النطاق الطاقي العالي جدا (فوق 25 eV) ، تستمر $\varepsilon_2$ في الانخفاض التدريجي مقتربة من الصفر، مع استمرار التباين الاتجاهي و لكن بنسب متناقصة. عند 30 eV، تسجل القيم 0.26 لمتعدد البلورات، 0.28 للاتجاه [100]/[010]، و 0.21 للاتجاه [001] (حسب الشكل(III-2)).

يعزى هذا التقارب إلى أن الانتقالات من الأغلفة الإلكترونية الداخلية العميقة (مثل مستويات 2s و 2p للألمنيوم و النيتروجين) تصبح سائدة، و هذه المستويات تكون أقل تأثرا بالبيئة البلورية الاتجاهية.

**III-3-2 دراسة الإنكسارية المركبة:**

يمكن لعمليتي التشتت و الإمتصاص و غيرها من العمليات المختلفة تسبب في التقليل من شدة الضوء عند مروره عبر المادة، هذه الظاهرة تسمى الإنطفاء. هذه الميزة تحقق العلاقة التالية [55]:

$$\mathbf{I(x) = I_0 e^{-kx}} \qquad (\mathbf{III-4})$$

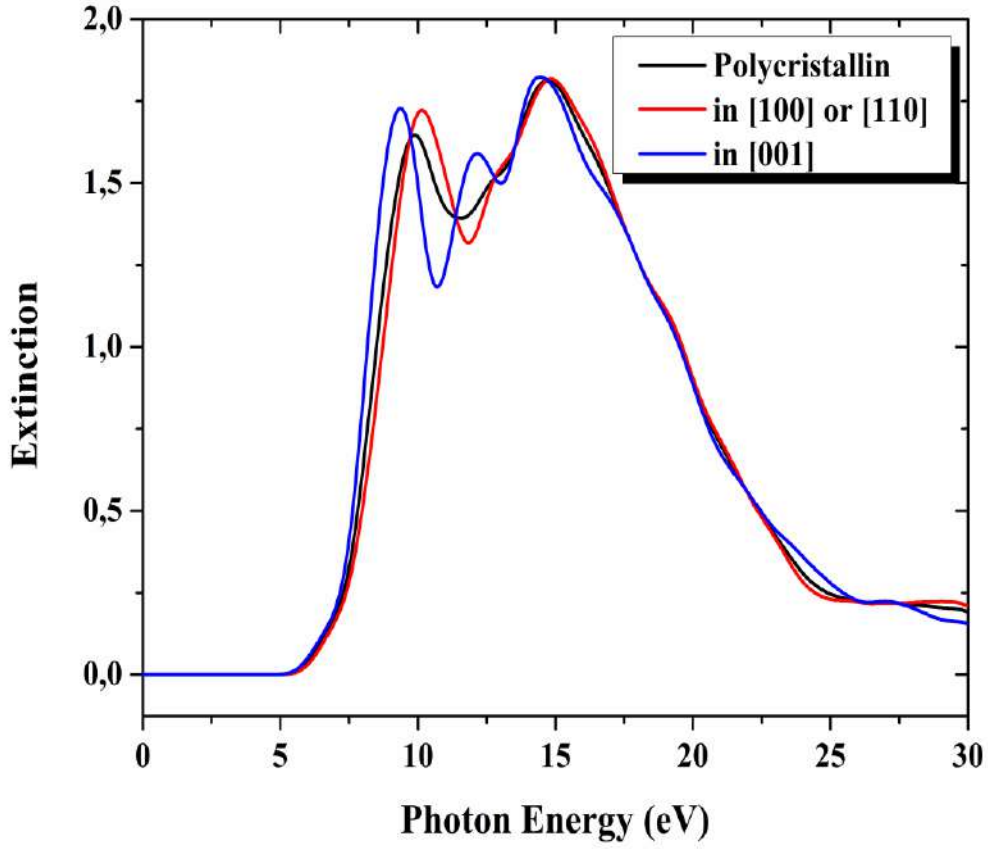
حيث: I(x)، $I_0$ و k هي التوالي: شدة الضوء عند المسافة x داخل المادة، شدة الضوء الساقطة و k معامل الإنطفاء. هذا المعامل هو الجزء التخيلي من معامل الإنكسار المركب، الذي يأخذ العلاقة التالية [55]:

$$\bar{\mathbf{n}} = \mathbf{n(\omega) + ik(\omega)} \qquad (\mathbf{III-5})$$

III-3-2-1 دراسة معامل الإنطفاء:

الجزء التخيلي من العلاقة السابقة يمثل معامل الإنطفاء، حيث يحسب كالتالي [55]:

$$k(\omega) = \sqrt{\frac{-\varepsilon_1 + \sqrt{\varepsilon_1^2 + \varepsilon_2^2}}{2}} \qquad (III-6)$$




الشكل(III-3): تغيرات معامل الإنطفاء للمركب AlN متعدد البلورات و في الإتجاهات [100]، [010] و [001] بتغيرات طاقة الفوتون الساقط بين 0 و 30 eV

يجسد معامل الانطفاء كثافة الامتصاص الضوئي في المادة، و يظهر تباينا اتجاهيا واضحا يعكس البنية الإلكترونية الأنيسوتروبية لمركب نيتريد الألمنيوم. تبدأ قيم معامل الانطفاء من الصفر المطلق عند الطاقات المنخفضة (أقل من 3.9 eV) لجميع الاتجاهات المدروسة، مما يؤكد وجود منطقة شفافية كاملة حيث لا تحدث انتقالات إلكترونية

بين النطاقات، و هو ما يتوافق مع فجوة نطاق واسعة للمادة (لاحظ الشكل(III-3)). تعد هذه النتيجة مؤشرا على جودة العازل الكهربائي و البصري للمادة في النطاق المرئي و الأشعة تحت الحمراء.

تبدأ حافة الامتصاص الأساسية في الظهور عند طاقات تتراوح بين 3.97 و 4.0 eV، حيث تظهر أولى القيم غير الصفرية لمعامل الانطفاء. يلاحظ أن جميع الاتجاهات تبدأ الامتصاص فيها عند طاقات متقاربة جدا، مع تفوق طفيف للاتجاه [001] في تسجيل قيم أكبر بقليل عند نفس الطاقة (من خلال الشكل(III-3)). يشير هذا التبكير الطفيف إلى أن كثافة الحالات الإلكترونية المتاحة للانتقال تكون أعلى قليلا في الاتجاه المحوري [001] عند حافة نطاق التوصيل.

في النطاق الطاقي من 5 إلى 13 eV، يشهد معامل الانطفاء نمواً متسارعا و مستمرا، مع اتساع الفجوة بين القيم الاتجاهية. عند طاقة 10 eV، تسجل القيم 1.65 لمتعدد البلورات، 1.72 للاتجاه [100]/[010]، و 1.60 للاتجاه [001] (أيضا من الشكل(III-3)). يُظهر هذا الترتيب المعاكس (حيث يتفوق الاتجاه [100]/[010] على [001]) أن آليات الامتصاص تختلف عن تلك المسؤولة عن التشتت، حيث تعتمد على احتمالية الانتقالات الإلكترونية و كثافة الحالات المشتركة في نطاقات طاقية محددة.

تصل قيم معامل الانطفاء إلى ذروتها القصوى في النطاق من 13.5 إلى 14.5 eV، حيث تبلغ حوالي 5.43 لمتعدد البلورات، 5.42 للاتجاه [100]/[010]، و 5.51 للاتجاه [001] (أنظر الشكل(III-3)). تمثل هذه القمم النقاط الحرجة الرئيسية في البنية الإلكترونية، و تتوافق مع الانتقالات الإلكترونية الأكثر احتمالا بين النقاط عالية التماثل في منطقة بريلوين. يلاحظ أن موقع القمة الطاقية يختلف قليلاً بين الاتجاهات، حيث تظهر في الاتجاه [001] عند طاقة أعلى بقليل (حوالي 14.0 eV) مقارنة بالاتجاه [100]/[010] (حوالي 13.8 eV)، مما يشير إلى اختلاف في البنية النطاقية بين هذه الاتجاهات.

بعد تجاوز القمم الرئيسية، يدخل معامل الانطفاء في مرحلة انخفاض تدريجي حتى 30 eV، مع استمرار التباين الاتجاهي و لكن بنسب متناقصة. عند طاقة30 eV، تسجل القيم 0.26 لمتعدد البلورات، 0.28 للاتجاه [100]/[010]، و 0.21 للاتجاه [001] (حسب الشكل(III-3)). يعزى هذا الانعكاس في الترتيب (حيث يصبح الاتجاه [100]/[010] أعلى من [001]) إلى وجود قنوات امتصاصية إضافية أو انتقالات من مستويات إلكترونية أعمق تكون أكثر احتمالا في المستويات الأساسية مقارنة بالاتجاه المحوري عند الطاقات العالية. يفسر التقارب النسبي عند الطاقات العالية بأن الانتقالات من الأغلفة الإلكترونية الداخلية العميقة تصبح مهيمنة، و هذه المستويات تكون أقل تأثرا بالبيئة البلورية الاتجاهية.

III-3-2-2 دراسة الإنكسارية:

أما إنحراف الضوء عن مساره عند مروره من وسط نحو أخر بسبب الإختلاف في سرعته من بين الوسطين، فهو يعرف بظاهرة الإنكسار. الأساس يعتمد على قانون سينل، كما يحسب كذلك انطلاقا من معرفة مركبي ثابت العزل بالعلاقة التالية [55]:

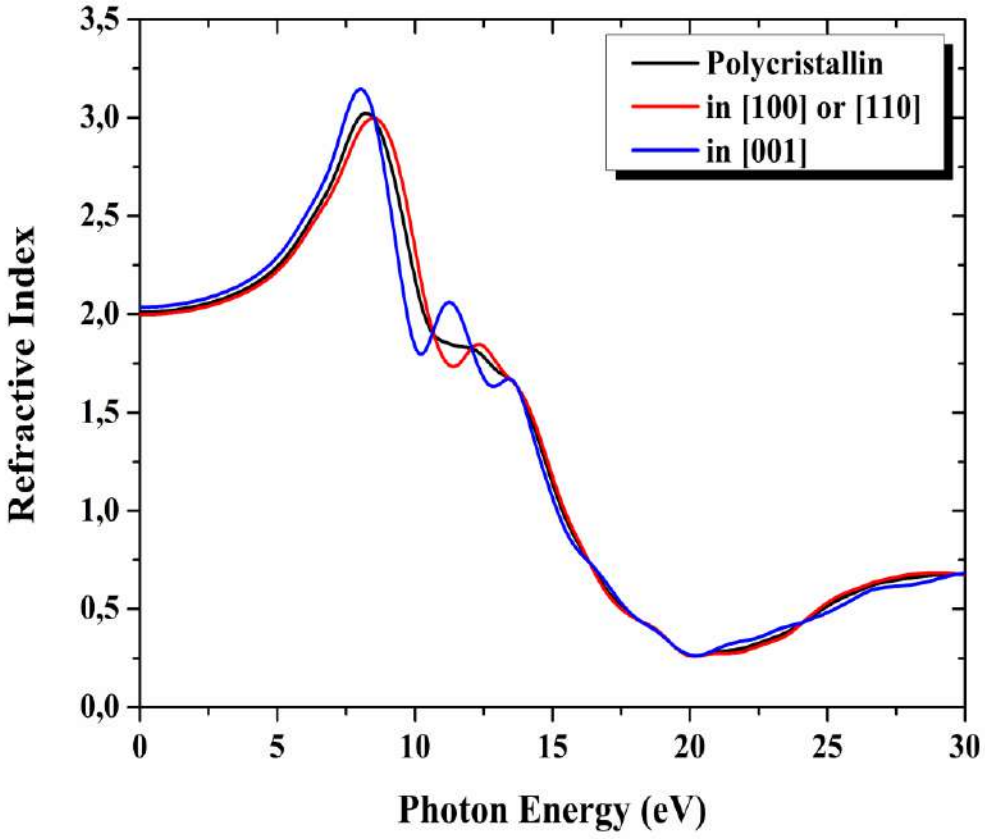
$$\mathbf{n(\omega)} = \sqrt{\frac{\boldsymbol{\varepsilon_1} + \sqrt{\boldsymbol{\varepsilon_1^2} + \boldsymbol{\varepsilon_2^2}}}{\mathbf{2}}} \qquad (\mathbf{III-7})$$

يرتبط معامل الانكسار الساكن n(0) بالدالة العازلة عبر العلاقة [55]:

$$n(0) = \sqrt{\boldsymbol{\varepsilon_1(0)}} \qquad (\mathbf{III-8})$$

يظهر معامل الانكسار سلوكا اتجاهيا واضحا يعكس الطبيعة الأنيسوتروبية لبلورة نيتريد الألمنيوم. في النطاق الطاقي المنخفض جدا (أقل من 3 eV)، تبقى قيم معامل الانكسار شبه ثابتة و مرتفعة، حيث تسجل عند طاقة 0.01 eVقيما تبلغ 2.01 لمتعدد البلورات، 2 للاتجاهين [100] و [010]، و 2.04 للاتجاه [001] (حسب الشكل(III-3)). يعزى هذا الثبات النسبي إلى سيادة مساهمة الإلكترونات المرتبطة في الاستقطاب عند الترددات المنخفضة، حيث لا تحدث انتقالات إلكترونية بين النطاقات. يلاحظ تفوق الاتجاه [001] على الاتجاهات الأساسية بنسبة تصل إلى 1.9 %، مما يعكس توزيعا غير متساوي للكثافة الإلكترونية و قابلية الاستقطاب في الشبكة البلورية.

مع زيادة طاقة الفوتون في النطاق من 4 إلى 8 eV، يشرع معامل الانكسار في الارتفاع التدريجي ثم السريع، محافظا على نفس الترتيب الاتجاهي. تصل القيم إلى ذروتها القصوى في النطاق الطاقي بين 8.0 و 8.6 eV، حيث تبلغ حوالي 8.63 لمتعدد البلورات، 8.44 للاتجاه [100]/[010]، و 9.31 للاتجاه [001] (أنظر الشكل(III-3)). يعزى هذا الارتفاع الحاد إلى ظاهرة التشتت الشاذ (anomalous dispersion) المرتبطة بامتصاص قوي للضوء، حيث تقترب طاقة الفوتون من طاقات الانتقالات الإلكترونية المسموحة بين نطاقات التكافؤ و التوصيل. يلاحظ أن الذروة في الاتجاه [001] تتجاوز نظيرتها في الاتجاهات الأساسية بنسبة تصل إلى 10.3 %، مما يشير إلى كثافة انتقالات إلكترونية أعلى في هذا الاتجاه المحوري.




الشكل(III-4): تغيرات الإنكسارية لمركب AlN متعدد البلورات و في الإتجاهات [100]، [010] و [001] بتغيرات طاقة الفوتون الساقط بين 0 و 30 eV

بعد تجاوز القمم الطيفية، يدخل معامل الانكسار في مرحلة انخفاض سريع و حاد، حيث يعبر الصفر و يصبح سالبا عند طاقات تزيد عن 13.6 eV. تشير القيم السالبة إلى سلوك معدني أو بلازموني للمادة، حيث لا تستطيع الإلكترونات متابعة تغيرات المجال الكهربائي عالي التردد، مما يؤدي إلى انعكاسية عالية جدا (حسب الشكل(III-4)). يلاحظ أن الاتجاه [001] يحافظ على قيم موجبة لفترة أطول بنحو 0.2 eV مقارنة بالاتجاهين الأساسيين، مما يعكس اختلافا في تردد البلازمون الفعال بين الاتجاهات البلورية.

في النطاق الطاقي العالي جدا (فوق 20 eV)، تقترب قيم معامل الانكسار من الصفر من الجهة السالبة لجميع الحالات، مع استمرار وجود تباين اتجاهي و إن كان بنسب متناقصة. عند طاقة 30 eV، تسجل القيم 0.42- لمتعدد البلورات، 0.41- للاتجاه [100]/[010]، و 0.44- للاتجاه [001] (من الشكل(III-4)). يفسر هذا التقارب النسبي بأن

استجابة الإلكترونات العميقة جداً تصبح أقل حساسية للتفاصيل الاتجاهية للبنية البلورية عندما تتجاوز طاقة الفوتون طاقات الربط الداخلية بشكل كبير.

**III-3-3 دراسة الإنعكاسية الضوئية:**

ارتداد الضوء عن سطح المادة دون إختراقه يمثل ظهارة الإنعكاس، بذلك يمكن تعريف معامل لهذه الظاهرة يحدد نسبة الضوء المنعكس $I_r$ إلى شدة الضوء الساقط $I_i$. و هو معامل الإنعكاس R، الذي يعطى بالعلاقة التالية :[56]

$$\mathbf{R = \frac{I_r}{I_i}} \qquad (\mathbf{III - 9})$$

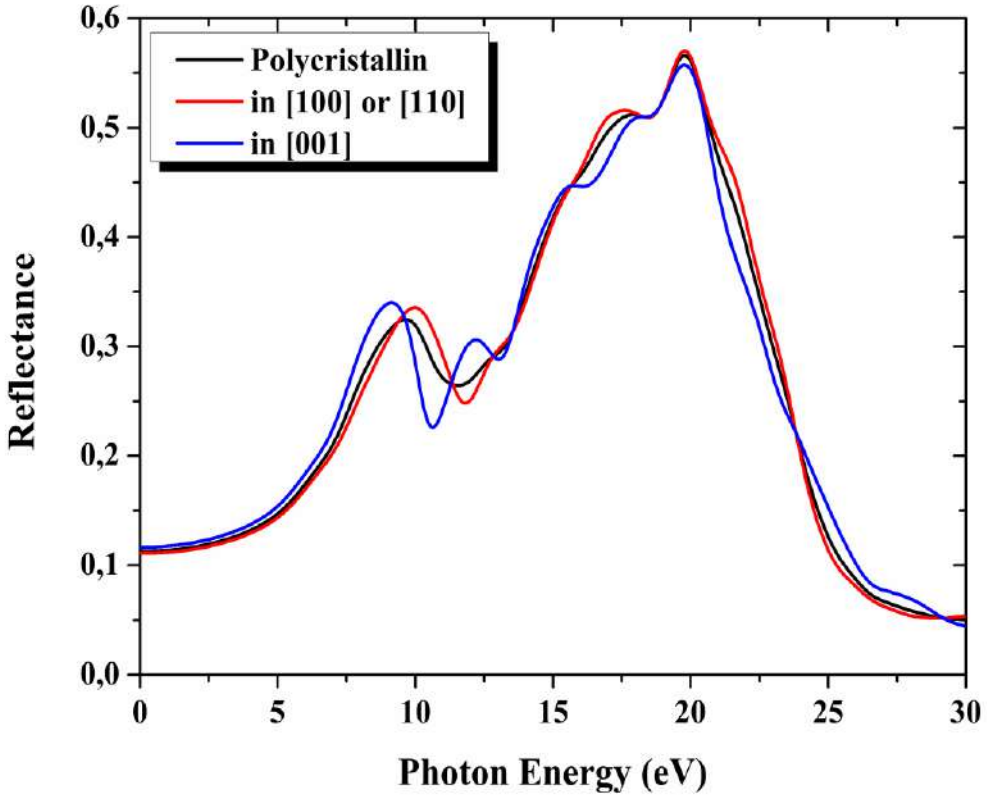
يعتمد كذلك في حسابه على معامل الانكسار المركب، حيث يحسب كالتالي [56]:

$$\mathbf{R(\omega) = \left|\frac{\bar{n} - 1}{\bar{n} + 1}\right|} \qquad (\mathbf{III - 10})$$

من جهة أخر، و بعبارة أبسط يمكن حسابه بالعلاقة [56]:

$$\mathbf{R(\omega) = \left|\frac{(n-1)^2 + k^2}{(n+1)^2 + k^2}\right|} \qquad (\mathbf{III - 11})$$

يظهر معامل الانكسار لمركب نيتريد الألمنيوم سلوكا طاقيا و اتجاهيا مميزا يعكس الاستجابة التشتتية للمادة للإشعاع الكهرومغناطيسي. في النطاق الطاقي المنخفض جدا (أقل من 1 eV) ، تسجل القيم الساكنة لمعامل الانكسار عند طاقة 0.01 eV قيماً تبلغ 2.01 لمتعدد البلورات، و 2 للاتجاهين [100] و [010]، و 2.04 للاتجاه [001]، مما يعكس تفوق الاتجاه المحوري [001] بنسبة تصل إلى 1.9 % مقارنة بالاتجاهات الأساسيـــــــة (من خلال الشكل(-5 III)). يعزى هذا التباين الأولي إلى توزيع غير متساوي للكثافة الإلكترونية و قابلية الاستقطاب في الشبكة البلورية، حيث تكون الروابط الذرية أكثر كثافة و استقطابا في الاتجاه المحوري.




الشكل(III-5): تغيرات الإنعكاسية الضوئية لمركب AlN متعدد البلورات و في الإتجاهات [100]، [010] و [001] بتغيرات طاقة الفوتون الساقط بين 0 و 30 eV

مع زيادة طاقة الفوتون في النطاق من 1 إلى 9 eV، يشرع معامل الانكسار في الارتفاع التدريجي ثم السريع، محافظاً على نفس الترتيب الاتجاهي. تصل القيم إلى ذروتها القصوى في النطاق الطاقي بين 8.0 و 9.0 eV، حيث تبلغ حوالي 3.02 لمتعدد البلورات، 2.99 للاتجاه [100]/[010]، و 3.15 للاتجاه [001] (أنظر الشكل(III-5)).

يعزى هذا الارتفاع الحاد إلى ظاهرة التشتت الشاذ المرتبطة بقرب طاقة الفوتون من طاقات الانتقالات الإلكترونية المسموحة، حيث تزداد استجابة الاستقطاب الإلكتروني بشكل غير خطي مع اقتراب طاقة الفوتون من فجوة النطاق.

بعد تجاوز القمم الطيفية، يدخل معامل الانكسار في مرحلة انخفاض سريع وحاد، حيث يتناقص بشكل رتيب حتى يصل عند طاقة 30 eV إلى قيم تبلغ 0.67515 لمتعدد البلورات، 0.67197 للاتجاه [100]/[010]، و0.68279

للاتجاه [001] (من الشكل(III-5)). تُشير القيم الأقل من الواحد إلى أن سرعة طور الضوء في المادة تتجاوز سرعة الضوء في الفراغ، وهو سلوك طبيعي في نطاقات التردد العالية جداً حيث تصبح استجابة الإلكترونات محدودة بقصورها الذاتي. يلاحظ أن الفروق النسبية بين الاتجاهات تتقلص بشكل ملحوظ في هذا النطاق الطاقي العالي، حيث لا يتجاوز التباين النسبي 1.6 %، مما يشير إلى أن استجابة الإلكترونات العميقة جداً تصبح أقل حساسية للتفاصيل الاتجاهية للبنية البلورية.

من منظور كمي مقارن، تظهر قيم متعدد البلورات سلوكا وسيطا يقع دائما بين القيمتين القصوى و الدنيا للاتجاهات البلورية المفردة، و لكنها لا تمثل متوسطاً حسابياً بسيطاً، بل تعكس وزنا إحصائيا لتوزيع الحبيبات البلورية و توجهاتها العشوائية. عند طاقة 5 eV، تبلغ الفروق النسبية بين الاتجاه [001] و الاتجاه [100]/[010] حوالي 2.3 %، بينما تصل هذه الفجوة إلى ذروتها عند طاقة 8.5 eV لتبلغ حوالي 5.1 %، ثم تتقلص مجددا لتصل إلى 1.6 % عند 30 eV(من الشكل(III-5))، مما يؤكد أن شدة الأنيسوتروبية البصرية تعتمد بصورة أساسية على طاقة الفوتون الساقط وآليات الاستقطاب السائدة في كل نطاق طاقي.

### III-3-4 دراسة معامل الإمتصاص:

يمكن للمادة إمتصاص جزء من الطاقة الضوئية الساقطة عليها، إذ تتحول إلى طاقة حرارية أو تعطي إثارة لإلكترونات المادة. هذه الظاهرة تمثل الإمتصاص، حيث يقيس معاملها α مدى قدرة المادة على إمتصاص الضوء عند طول موجي معين. و هي التي تكتب بعلاقة مماثلة الإنطفاء كالتالي [56]:

$$\mathbf{I(x) = I_0 e^{-\alpha x}} \qquad \mathbf{(III-12)}$$

لذلك فالعلاقة بين المعاملين واضحة و هو ما جاء حسب قانون (Beer) بيرف، الذي يعطى كالتالي [56]:

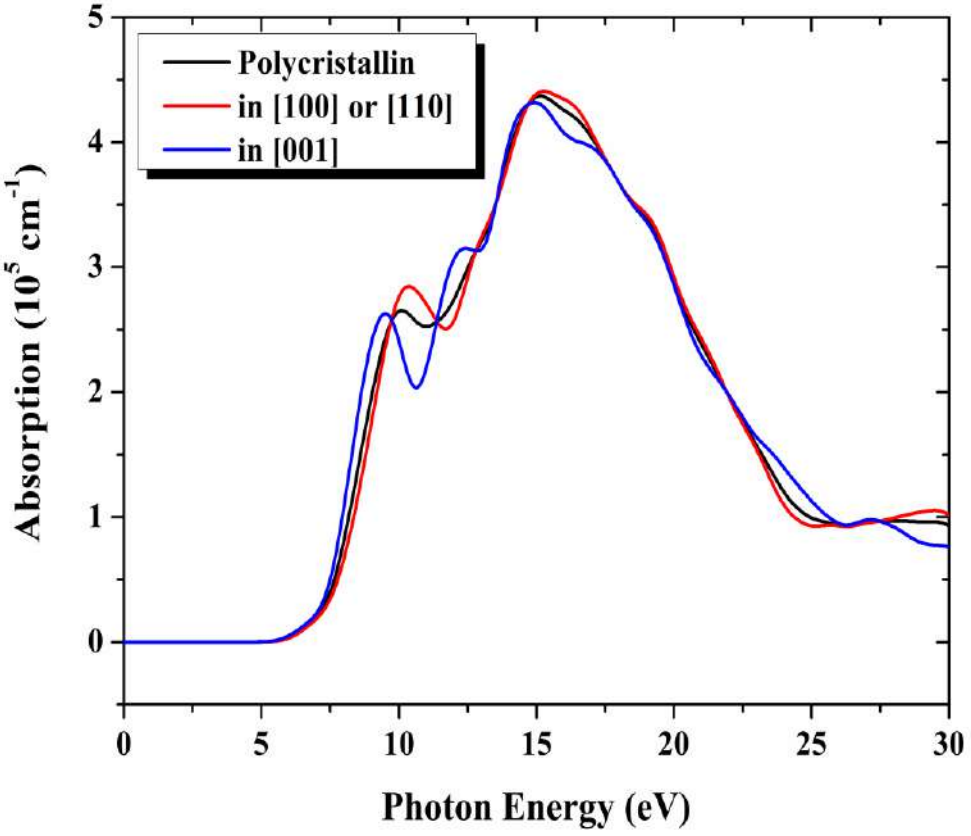
$$\boldsymbol{\alpha = 2\omega k = \frac{4\pi k}{c}} \qquad \mathbf{(III-13)}$$

و بالتالي فإن [56]:

$$\boldsymbol{\alpha(\omega) = \omega\sqrt{2(-\varepsilon_1 + \sqrt{\varepsilon_1^2 + \varepsilon_2^2})}} \qquad \mathbf{(III-14)}$$

يجسد معامل الامتصاص الضوئي قدرة المادة على تبديد طاقة الفوتونات الساقطة عبر آليات الانتقالات الإلكترونية، و من الشكل(III-6) يظهر تباينا اتجاهيا واضحا يعكس البنية الإلكترونية الأنيسوتروبية لمركب نيتريد الألمنيوم. تبدأ قيم معامل الامتصاص من الصفر المطلق عند الطاقات المنخفضة (أقل من 3.9 eV) لجميع الاتجاهات

المدروسة، مما يؤكد وجود منطقة شفافية كاملة حيث لا تتوفر انتقالات إلكترونية مسموحة طاقيا، و هو ما يتوافق مع الطبيعة العازلة واسعة الفجوة للمادة.




الشكل(III-6): تغيرات معامل الإمتصاص لمركب AlN متعدد البلورات و في الإتجاهات [100]، [010] و [001] بتغيرات طاقة الفوتون الساقط بين 0 و 30 eV

تبدأ حافة الامتصاص الأساسية في الظهور عند طاقات تتراوح بين 3.97 و 4.0 eV، حيث تظهر أولى القيم غير الصفرية لمعامل الامتصاص. يلاحظ أن جميع الاتجاهات تبدأ الامتصاص فيها عند طاقات متقاربة جدا، مع تفوق طفيف للاتجاه [001] في تسجيل قيم أكبر بقليل عند نفس الطاقة (من الشكل(III-6)).

يشير هذا التبكير الطفيف إلى أن كثافة الحالات الإلكترونية المتاحة للانتقال تكون أعلى قليلا في الاتجاه المحوري [001] عند حافة نطاق التوصيل، أو أن فجوة الطاقة الفعالة تكون أصغر قليلا في هذا الاتجاه.

في النطاق الطاقي من 6 إلى 13 eV، يشهد معامل الامتصاص نموا متسارعا و مستمرا لجميع الحالات، مع اتساع الفجوة بين القيم الاتجاهية. عند طاقة 10 eV، تسجل القيم $1.02\ 10^5\ cm^{-1}$ لمتعدد البلـــــــــورات، $1.04\ 10^5\ cm^{-1}$ للاتجاه [100]/[010]، و $1.19\ 10^5\ cm^{-1}$للاتجاه [001]، مما يعكس تفوق كثافة الانتقالات الإلكترونية في الاتجاه المحوري بنسبة تصل إلى 14.4 % عند هذه الطاقة (من الشكل(III-6)). يعزى هذا التباين إلى الاعتماد الاتجاهي لكثافة الحالات المشتركة و توزيع الدوال الموجية الإلكترونية في الفضاء البلوري.

تصل قيم معامل الامتصاص إلى ذروتها القصوى في النطاق من 13.5 إلى 14.5 eV، حيث تبلغ حـــوالي $5.43\ 10^5\ cm^{-1}$ لمتعدد البلورات، $5.42\ 10^5\ cm^{-1}$ للاتجاه [100]/[010]، و $5.51\ 10^5\ cm^{-1}$ للاتجاه [001] (حسب الشكل(III-6)). تمثل هذه القمم النقاط الحرجة الرئيسية في البنية الإلكترونية، وتتوافق مع الانتقالات الإلكترونية الأكثر احتمالاً بين النقاط عالية التماثل في منطقة بريلوين. يُلاحظ أن موقع القمة الطاقية يختلف قليلاً بين الاتجاهات، حيث تظهر في الاتجاه [001] عند طاقة أعلى بقليل (حوالي 14.0 eV) مقارنة بالاتجاه [100]/[010] (حوالي 13.8 eV)، مما يشير إلى اختلاف طفيف في انحناء الحزم الإلكترونية و توزيعها الطاقي بين هذه الاتجاهات.

بعد تجاوز القمم الرئيسية، يدخل معامل الامتصاص في مرحلة انخفاض تدريجي حتىeV 30، مع استمرار التباين الاتجاهي ولكن بنسب متناقصة. عند طاقة 30 eV، تسجل القيم $0.19\ 10^5\ cm^{-1}$ لمتعدد البلـــــــــورات، $0.21\ 10^5\ cm^{-1}$ للاتجاه [100]/[010]، و $0.16\ 10^5\ cm^{-1}$ للاتجاه [001] (من خلال الشكل(III-6)).

يعزى هذا الانعكاس في الترتيب (حيث يصبح الاتجاه [100]/[010] أعلى من [001]) إلى وجود قنوات امتصاصية إضافية أو انتقالات من مستويات إلكترونية أعمق تكون أكثر احتمالا في المستويات الأساسية مقارنة بالاتجاه المحوري عند الطاقات العالية.

من منظور كمي مقارن، يظهر التحليل أن نسبة الأنيسوتروبية في معامل الامتصاص تصل إلى قيم قصوى تبلغ حوالي 18 % عند طاقة 10 eV، ثم تتقلص إلى حوالي 14 % عند طاقة الذروة (14 eV) ، و تنخفض مجددا إلى حوالي 27 % عند 30 eV نتيجة الانعكاس في الترتيب الاتجاهي (واضح من الشكل(III-6)).

هذا السلوك غير الرتيب يؤكد أن شدة الأنيسوتروبية البصرية ليست ثابتة، بل تعتمد بشكل ديناميكي على طاقة الفوتون و آليات الامتصاص سائدة في كل نطاق طاقي.

### III-3-5 دراسة الناقلية الضوئية:

ترتبط الناقلية الضوئية بدالة العزل الكهربائية أو السماحية الكهربائية، بالعلاقة التالية [56]:

$$\boldsymbol{\sigma(\omega) = \sigma_1(\omega) + i\sigma_2(\omega) = i\omega\varepsilon_0[\varepsilon(\omega) - 1]} \qquad \boldsymbol{(III-15)}$$

بالتالي هذه الناقلية تنقسم إلى قسمين:

III-3-5-1 دراسة الجزء الحقيقي من الناقلية الضوئية:

أحدهما حقيقي و هو الممثل لمعدل امتصاص الطاقة من المجال الكهرومغناطيسي، الذي يحسب من العلاقة التالية [56]:

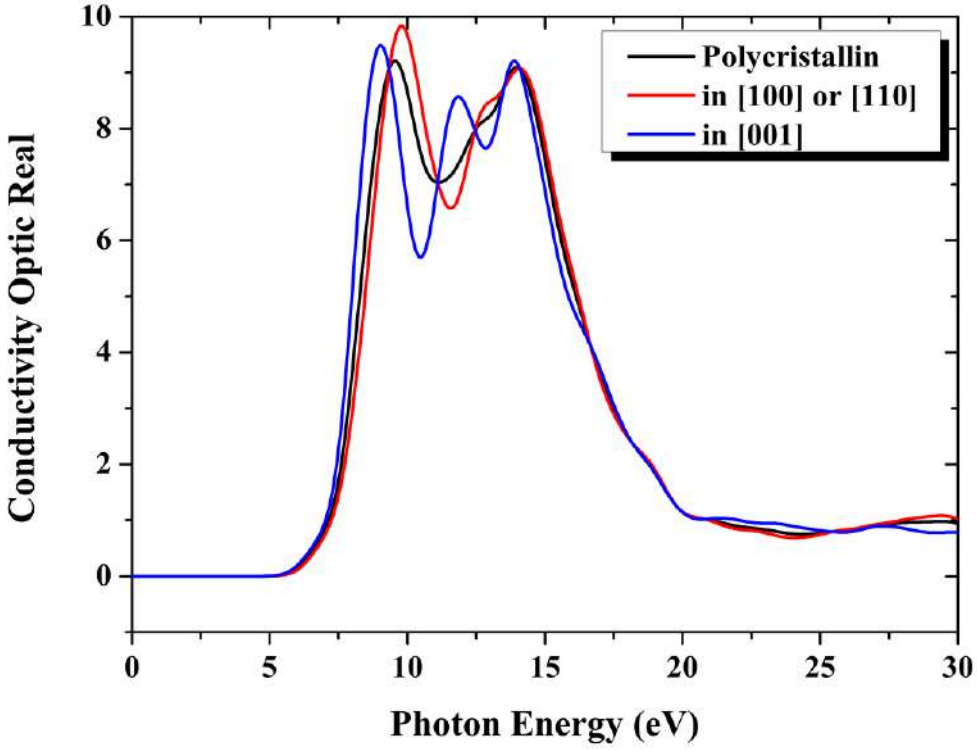
$$\boldsymbol{\sigma_1(\omega) = \omega\varepsilon_0\varepsilon_2(\omega)} \qquad \boldsymbol{(III-16)}$$

يظهر الجزء الحقيقي من الناقلية الضوئية لمركب نيتريد الألمنيوم سلوكا طاقيا مميزا يعكس قدرة المادة على امتصاص الطاقة من المجال الكهرومغناطيسي و تبديدها عبر آليات الانتقالات الإلكترونية. في النطاق الطاقي المنخفض جداً (أقل من 3.9 eV) ، تبقى قيم $\sigma_1$ صفرا تماما لجميع الحالات المدروسة (متعدد البلورات، الاتجاه [100]/[010]، و الاتجاه [001])، مما يؤكد منطقة الشفافية الكاملة حيث لا تتوفر قنوات امتصاص إلكترونية مسموحة، و هو ما يتسق مع الطبيعة العازلة واسعة الفجوة للمادة (أنظر من الشكل(III-7)).

تبدأ حافة التوصيل الضوئي في الظهور عند طاقات تتراوح بين 4.0 و 4.5 eV، حيث تظهر أولى القيم غير الصفرية لـ $\sigma_1$، مع تفوق طفيف للاتجاه [001] في تسجيل قيم أكبر عند نفس الطاقة (هذا من الشكل(III-7)). عند طاقة 10 eV، تبلغ القيم $10_5$ $\Omega^{-1}\cdot cm^{-1}$ 1.02 لمتعدد البلورات، $10^5$ $\Omega^{-1}\cdot cm^{-1}$ 1.04 للاتجاه [100]/[010]، و 1.19 $10^5$ $\Omega^{-1}\cdot cm^{-1}$للاتجاه [001]، مما يعكس تفوق كثافة الانتقالات الإلكترونية المسموحة في الاتجاه المحوري بنسبة تصل إلى 14.4 % مقارنة بالاتجاهات الأساسية.

تصل قيم $\sigma_1$ إلى ذروتها القصوى في النطاق الطاقي بين 13.5 و 14.5 eV، حيث تبلغ $5.43\times10^5$ $\Omega^{-1}\cdot cm^{-1}$ تقريبا لمتعدد البلورات، $10^5$ $\Omega^{-1}\cdot cm^{-1}$ 5.42 للاتجاه [100]/[010]، و $10^5$ $\Omega^{-1}\cdot cm^{-1}$ 5.51 للاتجاه [001] (دوما من الشكل(III-7)). تمثل هذه القمم النقاط الحرجة الرئيسية في البنية الإلكترونية، و تتوافق مع الانتقالات الأكثر احتمالا بين النقاط عالية التماثل في منطقة بريلوين.

يلاحظ أن موقع القمة في الاتجاه [001] ينزاح نحو طاقة أعلى بنحو 0.2 eV مقارنة بالاتجاه [100]/[010]، مما يشير إلى اختلاف طفيف في توزيع كثافة الحالات المشتركة بين هذه الاتجاهات.




الشكل(III-7): تغيرات الجزء الحقيقي من الناقلية الضوئية لمركب AlN متعدد البلورات و في الإتجاهات [100]، [010] و [001] بتغيرات طاقة الفوتون الساقط بين 0 و 30 eV

بعد تجاوز القمم الرئيسية، يدخل $\sigma_1$ في مرحلة انخفاض تدريجي حتى30 eV، مع استمرار التباين الاتجاهي و لكن بنسب متناقصة. عند طاقة 30 eV، تسجل القيم $0.26\ 10^5\ \Omega^{-1}\cdot cm^{-1}$ لمتعدد البلورات، أما للاتجاه [100]/[010] فتقدر بـ $0.28\ 10^5\ \Omega^{-1}\cdot cm^{-1}$، و $0.21\ 10^5\ \Omega^{-1}\cdot cm^{-1}$ للاتجاه [001] (أيضا من الشكل(III-7)).

يعزى هذا الانعكاس في الترتيب الاتجاهي عند الطاقات العالية إلى سائدة الانتقالات من المستويات الإلكترونية الداخلية العميقة التي تكون أقل حساسية للتفاصيل الاتجاهية للبنية البلورية.

من منظور كمي مقارن، تظهر قيم متعدد البلورات سلوكا وسيطا يقع بين القيمتين القصوى و الدنيا للاتجاهات البلورية المفردة، مع نسبة أنيسوتروبية قصوى تبلغ حوالي 18 % عند طاقة 10 eV، تتقلص إلى حوالي 14 % عند طاقة الذروة (14 eV)، و تنخفض مجددا عند الطاقات العالية (كذلك من الشكل(III-7))، مما يؤكد أن شدة الأنيسوتروبية في الاستجابة التبديدية تعتمد بشكل ديناميكي على طاقة الفوتون و آليات الامتصاص المهيمنة في كل نطاق طاقي.

III-3-5-2 دراسة الجزء التخيلي من الناقلية الضوئية:

بالمقابل الجزء التخيلي $\sigma_2(\omega)$، المرتبط بالاستجابة غير التبديدية (Non-dissipative) و الخاص بتخزين الطاقة،فهو الذي يحسب كالتالي [57]:

$$\boldsymbol{\sigma_2(\omega) = \omega\varepsilon_0[\varepsilon_1(\omega) - 1]} \qquad (\mathbf{III-17})$$

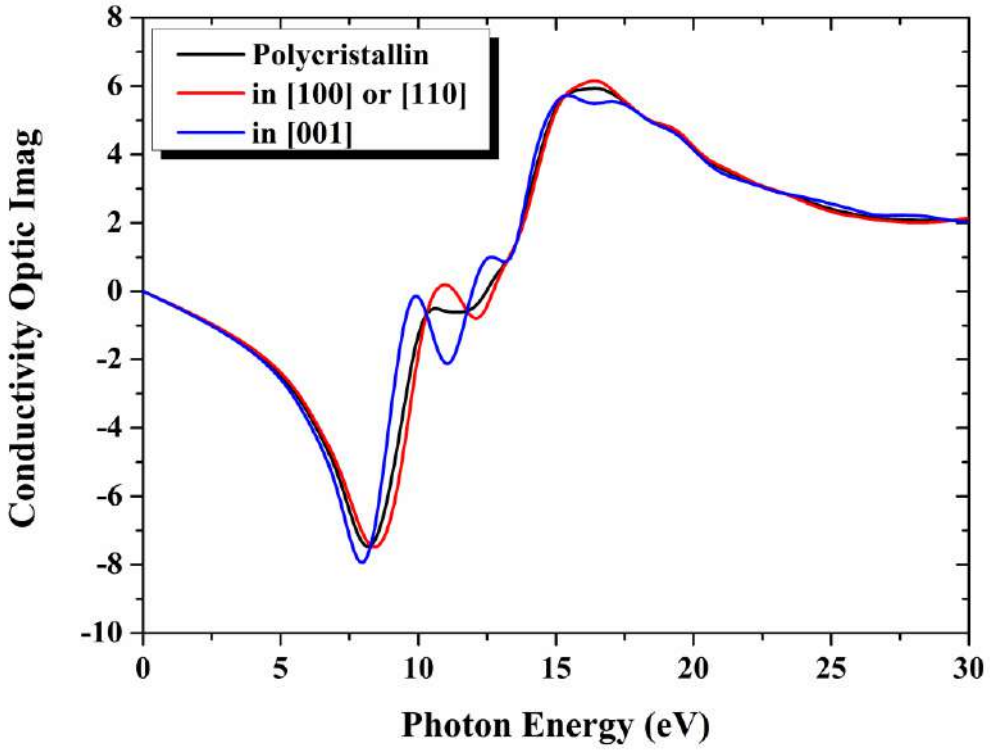
يجسد الجزء التخيلي من الناقلية الضوئية الاستجابة غير التبديدية للمادة المرتبطة بتخزين الطاقة الكهربائية في وسط الاستقطاب الإلكتروني، و يظهر سلوكا اتجاهيا معقدا يعكس الطبيعة المشتتة للاستجابة البصرية في مركب نيتريد الألمنيوم. في النطاق الطاقي المنخفض جدا (أقل من 1 eV)، تسجل قيم $\sigma_2$ قيما سالبة تتراوح بين $10^2$ $\Omega^{-1}\cdot cm^{-1}$ 3.68- لمتعدد البلورات، $10^2$ $\Omega^{-1}\cdot cm^{-1}$ 3.62- للاتجاه [100]/[010]، و $10^2$ $\Omega^{-1}\cdot cm^{-1}$ 3.8- للاتجاه [001] عند طاقة0.01 eV، مما يعكس السلوك المشتت الطبيعي حيث يتقدم الاستقطاب على المجال الكهربائي الساقط (واضح من الشكل(III-8))،

مع زيادة طاقة الفوتون، تزداد القيم السالبة لـ $\sigma_2$ بشكل رتيب في جميع الاتجاهات، محافظة على نفس الترتيب الاتجاهي ([010]/[100] $\sigma_2$ < $\sigma_2$ poly < $\sigma_2$ [001])، حيث يكون الاتجاه [001] أكثر سلبية بنسبة تصل إلى 5 % مقارنة بالاتجاهات الأساسية (مبين في الشكل(III-8)). عند طاقة 10 eV، تبلغ القيم $10^5$ $\Omega^{-1}\cdot cm^{-1}$ 2.65- لمتعدد البلورات، $10^5$ $\Omega^{-1}\cdot cm^{-1}$ 2.82- للاتجاه [100]/[010]، و $10^5$ $\Omega^{-1}\cdot cm^{-1}$ 2.38- للاتجاه [001]، مما يشير إلى أن القدرة على تخزين الطاقة في الاتجاه المحوري تكون أقل مقارنة بالاتجاهات الأساسية في هذا النطاق الطاقي.

تصل قيم $\sigma_2$ إلى قيمها الدنيا (الأكثر سلبية) في النطاق بين 11 و 12 eV، ثم تبدأ في الارتفاع التدريجي نحو القيم الأقل سلبية، لتعبر الصفر و تصبح موجبة عند طاقات تزيد عن 13-14 eV (ملاحظ من الشكل(III-8)). عند طاقة 15 eV، تسجل القيم $10^5$ $\Omega^{-1}\cdot cm^{-1}$ 1.77 لمتعدد البلورات، $10^5$ $\Omega^{-1}\cdot cm^{-1}$ 1.75 للاتجاه [100]/[010]، و $10^5$ $\Omega^{-1}\cdot cm^{-1}$ 1.82 للاتجاه [001]، مما يعكس انتقالا في طبيعة الاستجابة من تشتت طبيعي إلى تشتت شاذ مرتبط بامتصاص قوي.

في النطاق الطاقي العالي فوق (20 eV)، تستمر قيم $\sigma_2$ في الارتفاع التدريجي، مع استمرار وجود تباين اتجاهي و إن كان بنسب متناقصة. عند طاقة 30 eV، تسجل القيم 2.11 لمتعدد البلورات،$10^5$ $\Omega^{-1}\cdot cm^{-1}$ 2.08 للاتجاه [100]/[010]، و $10^5$ $\Omega^{-1}\cdot cm^{-1}$ 2.14 للاتجاه [001] (أنظر الشكل(III-8)). يفسر التقارب النسبي عند الطاقات

العالية بأن استجابة الإلكترونات العميقة جدا تصبح أقل اعتمادا على الاتجاه البلوري عندما تتجاوز طاقة الفوتون طاقات الربط الداخلية بشكل كبير.




الشكل(III-8): تغيرات الجزء التخيلي من الناقلية الضوئية لمركب AlN متعدد البلورات و في الإتجاهات [100]، [010] و [001] بتغيرات طاقة الفوتون الساقط بين 0 و 30 eV

من منظور فيزيائي، يعكس السلوك السالب لـ $\sigma_2$ عند الطاقات المنخفضة القدرة التخزينية للشبكة الإلكترونية، بينما يشير الانتقال إلى القيم الموجبة عند الطاقات العالية إلى سيادة الآلات التبديدية المرتبطة بالانتقالات الإلكترونية العميقة.

يُظهر التحليل الكمي أن نسبة الأنيسوتروبية في $\sigma_2$ تصل إلى قيم قصوى تبلغ حوالي 12 % عند الطاقات المتوسطة (8-12 eV)، ثم تتقلص إلى حوالي 3 % عند الطاقات العالية (30 eV) (أيضا من الشكل(III-8))، مما يؤكد أن الاستجابة غير التبديدية تكون أكثر حساسية للاتجاه البلوري في نطاقات الطاقة القريبة من فجوة النطاق.

### III-3-6 دراسة دالة التبدد:

تعرف دالة فقدان الطاقة (Energy Loss Function - ELF) بأنها الجزء التخيلي لمعكوس دالة العزل الكهربائية المركبة، و تعطى بالعلاقة [58]:

$$L(\omega) = \mathrm{Im}\left(\frac{1}{\varepsilon(\omega)}\right) \qquad (III-18)$$

أو

$$L(\omega) = \frac{\varepsilon_2(\omega)}{\varepsilon_1^2(\omega) + \varepsilon_2^2(\omega)} \qquad (III-19)$$

كما تكشف هذه الدالة عن قمة بلازمون رئيسية عند طاقات عالية.

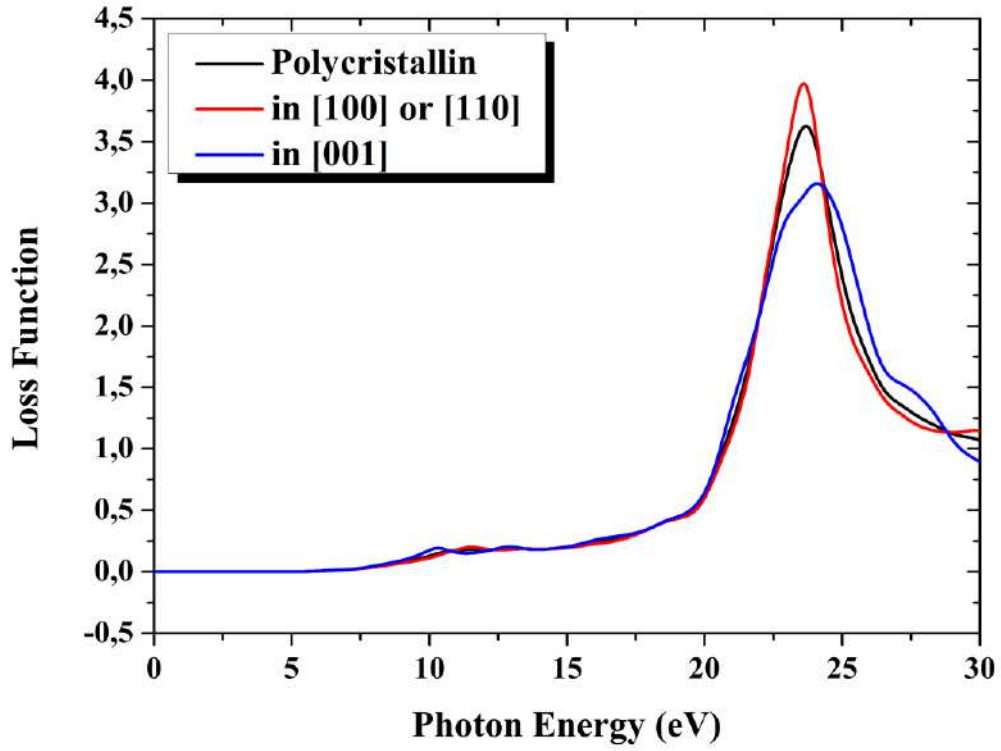
يظهر من الشكل(III-9) أن دالة فقدان الطاقة لمركب نيتريد الألمنيوم سلك سلوكا طاقيا مميزا يعكس استجابة المادة للإشعاع الكهرومغناطيسي عبر آلية فقدان الطاقة بواسطة الإلكترونات. في النطاق الطاقي المنخفض جداً (أقل من 4 eV) ، تبقى قيم الدالة صفرا تماما لجميع الحالات المدروسة (متعدد البلورات و الاتجاهات البلورية)، مما يشير إلى عدم وجود فقدان طاقة يذكر في منطقة الشفافية البصرية حيث تكون الانتقالات الإلكترونية محدودة جدا.

تبدأ القيم غير الصفرية في الظهور تدريجياً ابتداءً من طاقة 4.0 eV تقريبا، حيث تسجل عند طاقة 8.0 eV قيما تبلغ 0.04343 لمتعدد البلورات، 0.04034 للاتجاه [100]/[010]، و 0.04793 للاتجاه [001] (الشكل (III-9)). يظهر هذا الترتيب تفوق الاتجاه [001] بنسبة تصل إلى 10.4 % مقارنة بالاتجاهات الأساسية، مما يشير إلى أن فقدان الطاقة يكون أكبر في الاتجاه المحوري عند هذه الطاقات المتوسطة.

في النطاق الطاقي من 10 إلى 18 eV، تشهد الدالة نموا متسارعا و مستمرا، حيث تصل عند طاقة 15.0 eV إلى قيم تبلغ 0.19903 لمتعدد البلورات، 0.19595 للاتجاه [100]/[010]، و 0.20461 للاتجاه [001] (مبين في الشكل (III-9)). يستمر تفوق الاتجاه [001] بنسبة تصل إلى 4.4 %، مما يعكس زيادة فقدان الطاقة في هذا الاتجاه مع اقتراب الطاقة من منطقة البلازمون.

تصل الدالة إلى قيمها العظمى في النطاق الطاقي بين 19.5 و 20.0 eV، حيث تمثل هذه المنطقة قمة بلازمون الحجم الرئيسية. عند طاقة 19.5 eV، تسجل القيم 0.48714 لمتعدد البلورات، 0.47635 للاتجاه [100]/[010]، و 0.50991 للاتجاه [001]. و عند طاقة 19.6 eV، تبلغ القيم 0.50131 لمتعدد البلورات، 0.48971 للاتجاه [100]/[010]، و 0.52579 للاتجاه [001] (حسب الشكل (III-9)). يلاحظ أن الاتجاه [001] يحافظ على تفوقه بنسبة تصل إلى 7.3 % عند طاقة الذروة، مما يشير إلى أن كثافة الإلكترونات القادرة على التذبذب الجماعي تكون أعلى

في هذا الاتجاه المحوري.بعد تجاوز قمة البلازمون، تدخل الدالة في مرحلة انخفاض تدريجي حتى 30 eV. عند طاقة 25.0 eV، تسجل القيم 2.32083 لمتعدد البلورات، 2.10523 للاتجاه [100]/[010]، و 2.74325 للاتجاه [001].




الشكل(III-9): تغيرات دالة التبدد لمركب AlN متعدد البلورات و في الإتجاهات [100]، [010] و [001] بتغيرات طاقة الفوتون الساقط بين 0 و 30 eV

و عند طاقة30.0 eV ، تبلغ القيم 1.06445 لمتعدد البلورات، 1.14257 للاتجاه [100]/[010]، و 0.88968 للاتجاه [001] (واضح في الشكل (III-9)). يلاحظ في هذا النطاق العالي انعكاس في الترتيب الاتجاهي، حيث يصبح الاتجاه [100]/[010] أعلى من [001] بعد طاقة معينة، مما يشير إلى تغير في آليات فقدان الطاقة عند الطاقات العالية جدا.

الجدول(III-1): القيم العظمى لمعاملات الخواص الضوئية في حالة متعدد البلورات و عند الاتجاهات [100]، [010] و [001].

| المعامل | | متعدد البلورات | في الإتجاه [100] أو [110] | في الإتجاه [001] | طاقة الفوتون (eV) |
|---|---|---|---|---|---|
| الجزء الحقيقي من دالة العزل | القيمة العظمى لمتعدد البلورات | 8,63287 | 8,37293 | 9,15276 | 8,02521 |
| | القيمة العظمى في الإتجاه [100] أو [110] | 8,49989 | 8,44192 | 8,61581 | 8,22167 |
| | القيمة العظمى في الإتجاه [001] | 7,82876 | 8,55155 | 8,17143 | 9,31179 |
| الجزء التخيلي من دالة العزل | القيمة العظمى لمتعدد البلورات | 8,0444 | 8,15375 | 7,8257 | 9,40037 |
| | القيمة العظمى في الإتجاه [100] أو [110] | 7,82929 | 8,36653 | 6,7548 | 9,67541 |
| | القيمة العظمى في الإتجاه [001] | 7,37939 | 6,69358 | 8,751 | 8,8896 |
| الإنكسارية | القيمة العظمى لمتعدد البلورات | 3,02238 | 2,97866 | 3,1216 | 8,22167 |
| | القيمة العظمى في الإتجاه [100] أو [110] | 2,99419 | 2,99738 | 3,01018 | 8,4967 |
| | القيمة العظمى في الإتجاه [001] | 3,00866 | 2,94209 | 3,14592 | 8,02521 |
| دالة الإنطفاء | القيمة العظمى لمتعدد البلورات | 1,8137 | 1,81574 | 1,81115 | 14,74385 |
| | القيمة العظمى في الإتجاه [100] أو [110] | 1,81244 | 1,81721 | 1,80423 | 14,82243 |
| | القيمة العظمى في الإتجاه [001] | 1,80035 | 1,7894 | 1,82402 | 14,42953 |
| الإنعكاسية | القيمة العظمى لمتعدد البلورات | 0,56603 | 0,57025 | 0,55738 | 19,77301 |
| | القيمة العظمى في الإتجاه [100] أو [110] | 0,56603 | 0,57025 | 0,55738 | 19,77301 |
| | القيمة العظمى في الإتجاه [001] | 0,56603 | 0,57025 | 0,55738 | 19,77301 |
| معامل الإمتصاص $cm^{-1}$ | القيمة العظمى لمتعدد البلورات | 436996 | 440340 | 430447 | 15,13675 |
| | القيمة العظمى في الإتجاه [100] أو [110] | 436681 | 440777 | 428551 | 15,25462 |
| | القيمة العظمى في الإتجاه [001] | 435530 | 437562 | 431721 | 14,9403 |
| الناقلية الضوئية الحقيقية $\Omega^{-1}\cdot cm^{-1}$ | القيمة العظمى لمتعدد البلورات | 9,20852 | 9,63107 | 8,36342 | 9,55753 |
| | القيمة العظمى في الإتجاه [100] أو [110] | 9,02911 | 9,83512 | 7,41709 | 9,79328 |
| | القيمة العظمى في الإتجاه [001] | 8,33076 | 7,75392 | 9,48444 | 9,00747 |
| الناقلية الضوئية التخيلية $\Omega^{-1}\cdot cm^{-1}$ | القيمة العظمى لمتعدد البلورات | 5,93316 | 6,15055 | 5,49839 | 16,43333 |
| | القيمة العظمى في الإتجاه [100] أو [110] | 5,93316 | 6,15055 | 5,49839 | 16,43333 |
| | القيمة العظمى في الإتجاه [001] | 5,77215 | 5,79269 | 5,73106 | 15,41179 |
| دالة التبدد | القيمة العظمى لمتعدد البلورات | 3,62636 | 3,95997 | 3,08088 | 23,66274 |
| | القيمة العظمى في الإتجاه [100] أو [110] | 3,61705 | 3,97134 | 3,05755 | 23,58416 |
| | القيمة العظمى في الإتجاه [001] | 3,409 | 3,47216 | 3,15798 | 24,09494 |

من منظور كمي مقارن، تظهر قيم متعدد البلورات سلوكا وسيطا يقع بين القيمتين القصوى و الدنيا للاتجاهات البلورية المفردة، مع نسبة أنيسوتروبية قصوى تبلغ حوالي 7-10 % في منطقة قمة البلازمـــــــــون (19-20 eV) (لاحظ في الشكل (III-9))، مما يؤكد أن فقدان الطاقة عبر التذبذب الجماعي للإلكترونات يعتمد بشكل واضح على الاتجاه البلوري. تتقلص هذه النسبة في النطاقات الطاقية المنخفضة و العالية، مما يشير إلى أن تأثير الأنيسوتروبية يكون أكثر وضوحا في منطقة الرنين البلازموني.

# الفصل الرابع:

# دراسة الخواص الضوئية لمركب نيتريد الألمنيوم في ثلاث أبعاد

## IV-1 مقدمـــــة:

يخصص هذا الفصل للتمثيل الهندسي ثلاثي الأبعاد للمعاملات البصرية التسعة لمركب نيتريد الألمنيوم (AlN) كمجسمات اتجاهية في الفضاء الكروي، مع عرض مساقطها المتعامدة على الأوجه البلورية المكافئة (100)، (010)، و (001)، كما يتم حساب منحنيات التقاطع مع المستويات المكافئة للمستويات (100)، (010)، و (001). يسبق عرض النتائج و مناقشتها تقديم للطريقة الرياضية المعتمدة في بناء الأسطح البصرية، و تحويل الإحداثيات البلورية، و اشتقاق معادلات التقاطع، مع توضيح الخوارزمية العددية المستخدمة في التنفيذ، و ذلك لضمان الدقة الفيزيائية و الرياضية في التمثيل الاتجاهي للخواص البصرية.

## IV-2 الطريقة الرياضية للتمثيل ثلاثي الأبعاد وتحليل التقاطع البلوري:

### IV-2-1 تمثيل الموتر البصري في البلورات السداسية:

عموما موتر السماحية يعطى بالعلاقة التالية [59 ,60]:

$$\boldsymbol{\varepsilon(\omega)} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\varepsilon_1(\omega)} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \boldsymbol{\varepsilon_2(\omega)} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \boldsymbol{\varepsilon_3(\omega)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\varepsilon_{[100]}(\omega)} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \boldsymbol{\varepsilon_{[010]}(\omega)} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \boldsymbol{\varepsilon_{[001]}(\omega)} \end{pmatrix} \quad \mathbf{(IV-1)}$$

أما في البلورات الورتزايت السداسية مثل AlN المجموعة الفراغية $P6_3mc$ يكون موتر السماحية الكهربائية ثنائي المحور و يكتب في النظام الرئيسي للمحاور بالشكل [59 ,60]:

$$\boldsymbol{\varepsilon(\omega)} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\varepsilon_{\perp}(\omega)} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \boldsymbol{\varepsilon_{\perp}(\omega)} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \boldsymbol{\varepsilon_{|}(\omega)} \end{pmatrix} \quad \mathbf{(IV-2)}$$

حيث $\varepsilon_{\perp}$ و $\varepsilon_{|}$ هما مركبتا الدالة العازلة للعمود و الموازي للمحور السداسي c على التوالي.

**IV-2-2 الاعتماد الاتجاهي للمعاملات البصرية:**

لأي اتجاه انتشار معرف بمتجه الوحدة:

$$\dot{\mathbf{n}} = (\mathbf{sin\theta cos\varphi}, \mathbf{sin\theta sin\varphi}, \mathbf{cos\varphi})$$

في الإحداثيات الكروية، تحسب السماحية الفعالة للاستقطاب العادي و الاستثنائي عبر [62, 61]:

$$\frac{\mathbf{1}}{\boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{eff}}(\boldsymbol{\omega}, \boldsymbol{\theta})} = \frac{\mathbf{cos^2\theta}}{\boldsymbol{\varepsilon}_{\perp}(\boldsymbol{\omega})} + \frac{\mathbf{sin^2\theta}}{\boldsymbol{\varepsilon}_{|}(\boldsymbol{\omega})} \qquad (\mathbf{IV-3})$$

و منها تشتق باقي المعاملات (n, k, α, R, $\sigma_1$, $\sigma_2$, L) كدوال في (ω, θ) عبر العلاقات التحليلية القياسية[63].

**IV-2-3 بناء السطح ثلاثي الأبعاد:**

لتمثيل معامل بصري Q كسطح ثلاثي الأبعاد عند طاقة فوتونية ثابتة $\hbar\omega_0$، يعرف نصف القطر الشعاعي في الاتجاه $(\theta,\varphi)$ بالقيمة $Q(\omega_0,\varphi)$، و تحول الإحداثيات الكروية إلى ديكارتية [64]:

$$\mathbf{x = Q(\omega_0, \theta)\, sin\theta\, cos\varphi}\ \ , \mathbf{y = Q(\omega_0, \theta)\, sin\theta\, sin\varphi} \qquad (\mathbf{IV-4})$$

و للتمثيل الشامل عبر مدى طاقي، يبنى موتر رباعي الأبعاد $Q(\omega_0, \theta, \varphi)$ و يعرض كسلسلة من الأسطح أو كحجم لوني مرمز بالطاقة.

**IV-2-4 الإسقاط على المستويات البلورية:**

لإسقاط السطح ثلاثي الأبعاد على مستوى بلوري معرف بمتجه الطبيعي[h, k, l] $= \dot{p}$ (في الأساس المكعبي المكافئ)، تستخدم إسقاطات متعامدة أو مجسمة [65]. في الإسقاط المتعامد، تحذف مركبة المتجه الموازية لـ $\dot{p}$:

$$\mathbf{r_{proj} = r - (r.\dot{p})\dot{p}} \qquad (\boldsymbol{IV-5})$$

حيث r = (x,y,z) نقطة على السطح البصري.

**IV-2-5 حساب منحنيات التقاطع مع المستويات (100)، (110)، (111):**

يعرف المستوى البلوري بالمعادلة $r.\dot{p} = 0$ لحساب منحنى التقاطع مع السطح البصري ($r = Q(\theta,\varphi)$)، نحل نظام المعادلات [67, 66]:

$$\begin{cases} \mathbf{x = Q(\theta, \varphi)\, sin\theta\, cos\varphi} \\ \mathbf{y = \ Q(\theta, \varphi)\, sin\theta\, sin\varphi} \\ \mathbf{z = \ Q(\theta, \varphi)\, cos\theta} \\ \mathbf{hx + ky + lz = 0} \end{cases} \qquad (\mathbf{IV-6})$$

عدديا، ينفذ ذلك عبر:

أ)- إنشاء شبكة دقيقة لـ $(\theta,\varphi)$ على الكرة الوحدة.

ب)- حساب $Q(\theta,\varphi)$ لكل نقطة.

ج)- اختيار النقاط التي تحقق $|hx+ky+lz| < \delta$ (مع $\delta$ عتبة رقمية صغيرة).

د)- ترتيب النقاط المختارة خوارزمياً لتشكيل منحنى مغلق باستخدام خوارزميات تتبع الكنتور [68].

### IV-2-6 التحويل بين الترميز السداسي و المكعبي:

لضمان التوافق مع الطلب، تستخدم مصفوفة تحويل تقريبية لربط المستويات السداسية (hkil) بالمكافئ المكعبي (HKL) لأغراض التمثيل الهندسي فقط ، يمثل الترميز i سالب مجموع كل من الترميزين h و k [69]، مثلا:

$$(\mathbf{100}) \rightarrow (\mathbf{10\bar{1}0}), (\mathbf{010}) \rightarrow (\mathbf{01\bar{1}0}), (\mathbf{001}) \rightarrow (\mathbf{0001}) \qquad (\mathbf{IV-7})$$

و

$$(\mathbf{100}) \rightarrow (\mathbf{10\bar{1}0}), (\mathbf{110}) \rightarrow (\mathbf{11\bar{2}0}), (\mathbf{111}) \rightarrow (\mathbf{11\bar{2}1}) \qquad (\mathbf{IV-8})$$

مع التنويه بأن هذا التحويل هندسي تقريبي و لا يعكس التماثل البلوري الحقيقي، و يستخدم حصرا لتوحيد لغة التمثيل البصري.

### IV-2-7 التنفيذ العددي و المخرجات:

أختيرت بيئة التطوير ماتلاب (MATLAB) لتنفيذ خوارزمية البرنامج، ذلك لأن هذه البيئة تتضمن العديد من الأكواد المعدة و التي تسهل العمل مع مثل هذه التمثيلات. كما يمكنها التعامل مع ملفات أكسل، من حيث إستيراد و تصدير القيم المجدولة. كما تجدر الإشارة أنه يمكن أخراج و حفظ البيانات كملفات رسومية عالية الدقة، مثل (TIFF/PDF).

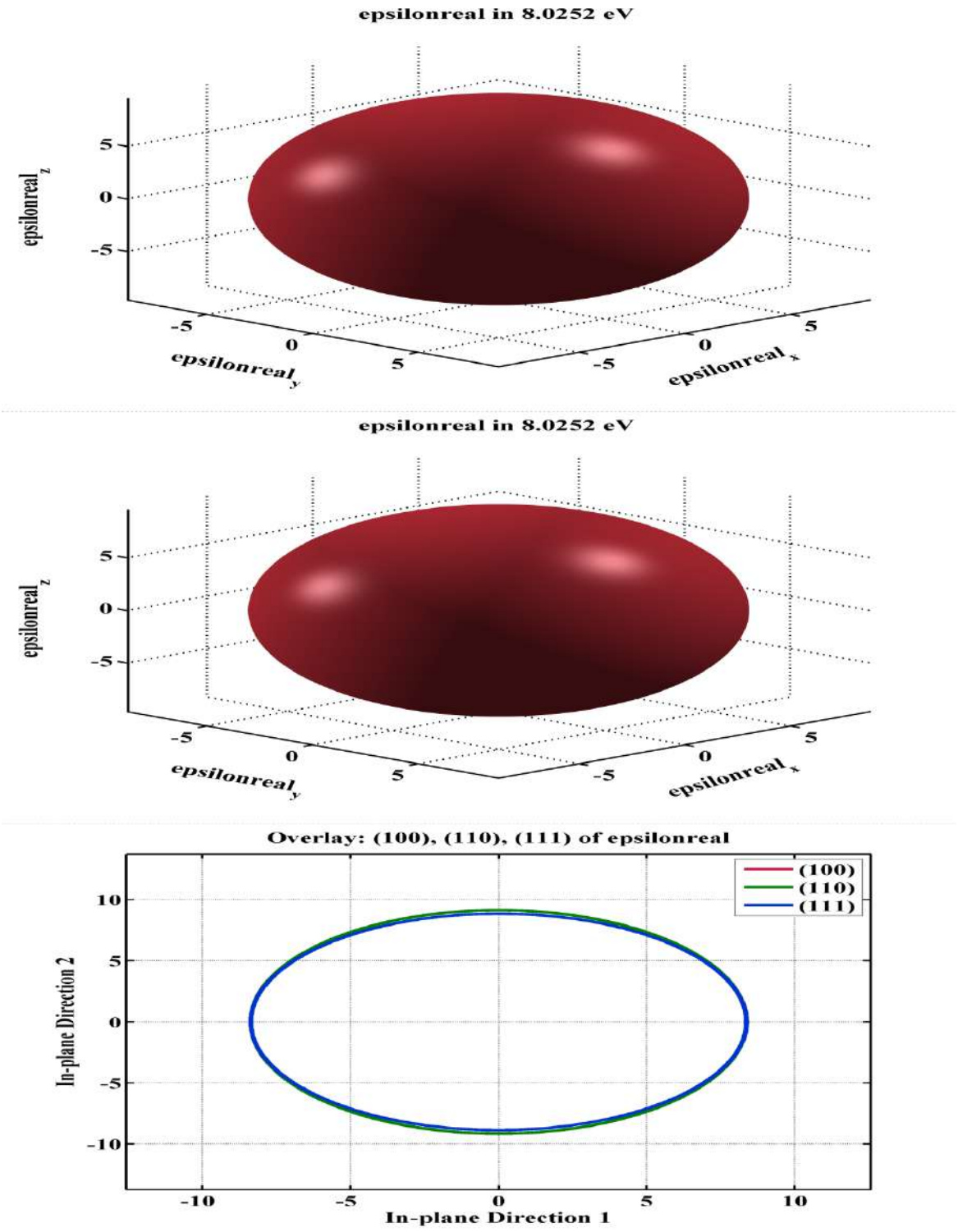
في هذا العمل نستخدم كإنطلاقة تلك القيم المحددة بلون مختلف في الجدول(III-1) من الفصل السابق.

## IV-3 عرض و مناقشة النتائج:

### IV-3-1 دراسة دالة العزل الكهربائي:

#### IV-3-1-1 دراسة الجزء الحقيقي من دالة العزل الكهربائي:

الشكل(IV-1) يكشف التمثيل المجسم للجزء الحقيقي من السماحية الكهربائية $\varepsilon_1$ عن توزع اتجاهي واضح يعكس الطبيعة الأنيسوتروبية للبنية البلورية من نوع "الورتزايت (Wurtzite)"، حيث تتراوح القيم المحسوبة بين حد أدنى قدره 8.37293 وحد أقصى يبلغ 9.15276 (أنظر الجدول(IV-1)).




الشكل(IV-1): تمثيل ثلاثي الأبعاد للجزء الحقيقي من دالة العزل الكهربائي لمركب AlN، و تمثيل مساقطها على أوجه الرباعي، و تمثيل منحنيات تقاطعها على المستويات $(10\bar{1}0)$، $(11\bar{2}0)$، و $(11\bar{2}1)$

ذلك ينتج نسبة أنيسوتروبية تساوي 1.093 (أي نحو 9.3 %)، و هي قيمة تدل على تباين متوسط في الاستجابة الاستقطابية للمادة تبعاً لاتجاه انتشار المجال الكهربائي.

تتحقق القيمة العظمى لـ $\varepsilon_1$ بالاتجاه البلوري [0001] (المحور السيني)، كما يتضح من إحداثيات الاتجاه الأقصى [0.0000, 0.0000, 1.0000]، في حين تتحقق القيمة الدنيا في المستوى الأساسي القريب من الاتجاه [100] بإحداثيات [0.9990, 0.0440, 0.0017]، مما يؤكد تفوق قابلية الاستقطاب الإلكتروني بالاتجاه المحوري العمودي على مستويات الأساس، و يرتبط ذلك بكثافة الروابط الذرية و توزع الشحنة الإلكترونية بهذا الاتجاه.

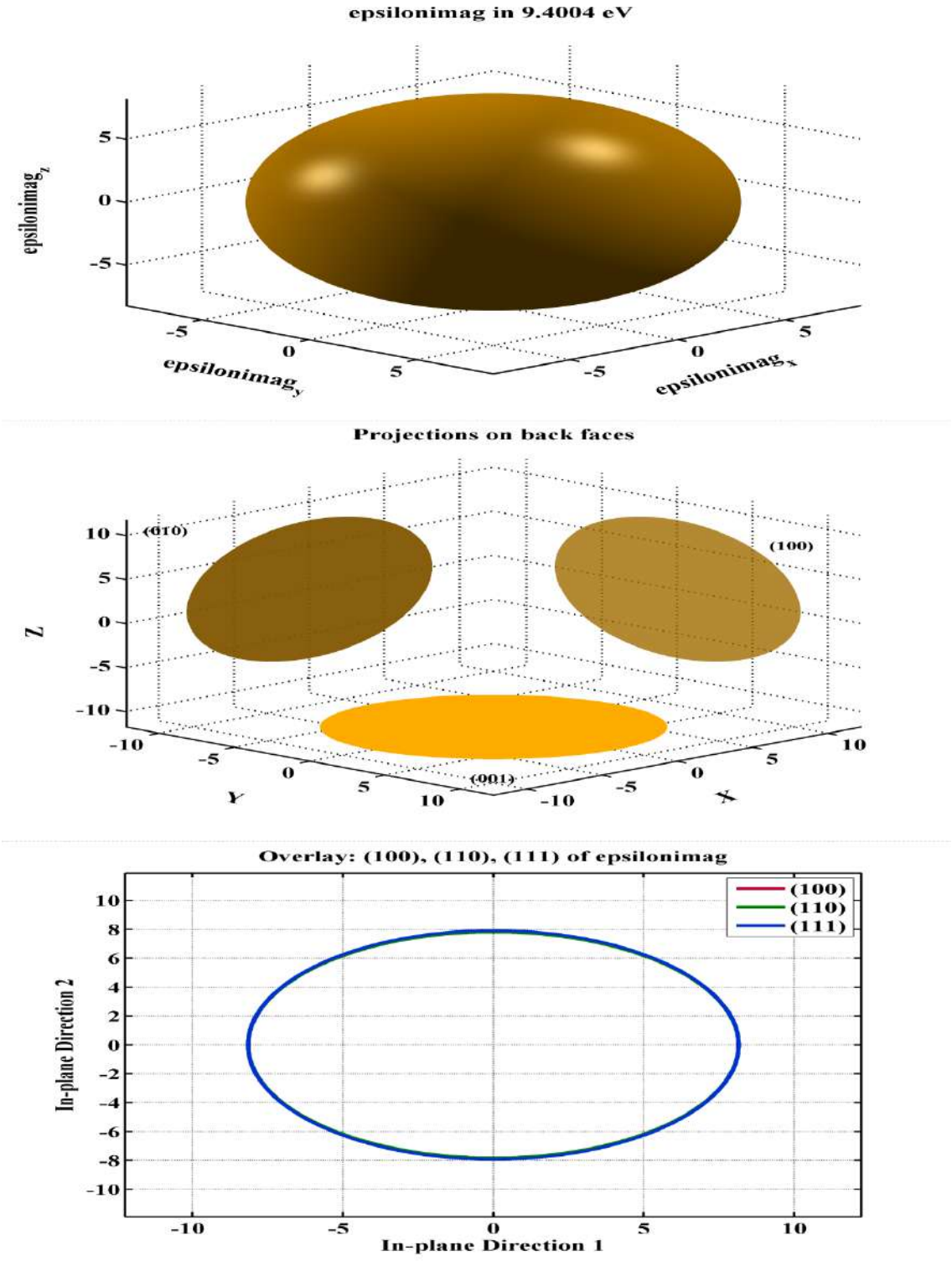
تظهر المساقط على أوجه الخلية البلورية تماثلا شبه دائري في المستوى (001) يعكس التناظر السداسي للبنية، بينما تظهر المساقط على المستويين (100) و (010) تشوها اتجاهيا واضحا يجسد الاختلاف في سرعة استجابة الإلكترونات للمجال الكهربائي حسب اتجاه الانتشار البلوري، و هو ما يتوافق مع الطبيعة غير المكعبية لمركب AlN.

تبرز منحنيات التقاطع مع المستويات البلورية الرئيسية [100]، [110]، و [111] تباينا كميا في قيم $\varepsilon_1$؛ حيث يسجل التقاطع مع المستوى [0001] قيمة شبه ثابتة تعكس التماثل الدوراني حول المحور السيني، بينما يظهر التقاطع مع المستويين [100] و [110] تذبذبا جيبي الشكل يعكس الاعتماد الاتجاهي للاستقطاب الإلكتروني على زاوية الانتشار، ويمكن تفسير ذلك بالاختلاف في كثافة الحالات الإلكترونية المتاحة للاستقطاب بكل اتجاه.

يفسر التفوق الاتجاهي للمحور [0001] في قيم $\varepsilon_1$ بكثافة الروابط التساهمية-الأيونية الأقوى بهذا الاتجاه، و التي تزيد من قابلية تشويه السحابة الإلكترونية تحت تأثير المجال الكهربائي، وهو ما يتسق مع البنية الطبقية AlN حيث تكون الذرات مترابطة بشكل أكثر كثافة على طول المحور السيني، مما يعزز الاستجابة الاستقطابية بهذا الاتجاه.

<u>IV-3-1-2 دراسة الجزء التخيلي من دالة العزل الكهربائي:</u>

حسب الشكل(IV-2) يجسد التمثيل ثلاثي الأبعاد للجزء التخيلي $\varepsilon_2$ توزع قنوات الامتصاص الضوئي الناتجة عن الانتقالات الإلكترونية بين نطاقي التكافؤ والتوصيل، حيث تتراوح القيم بين 7.8257 كحد أدنى و 8.15375 كحد أقصى كما هو واضح في الجدول(IV-1)، بنسبة أنيسوتروبية تبلغ 1.042 (نحو 4.2 %)، و هي أقل من نظيرتها في الجزء الحقيقي، مما يشير إلى أن الامتصاص الضوئي يكون أكثر تجانسا اتجاهيا من الاستقطاب.




الشكل(IV-2): تمثيل ثلاثي الأبعاد للجزء التخيلي من دالة العزل الكهربائي لمركب AlN، و تمثيل مساقطها على أوجه الرباعي، و تمثيل منحنيات تقاطعها على المستويات $(10\bar{1}0)$، $(11\bar{2}0)$، و $(11\bar{2}1)$

على عكس السلوك الملاحظ في $\varepsilon_1$، تتحقق القيمة العظمى لـ $\varepsilon_2$ في المستوى الأساسي بالقرب من الاتجاه [100] بإحداثيات [0.9896, 0.1442, 0.0015]، بينما تتحقق القيمة الدنيا بالاتجاه [0001] بإحداثيات [0.0000, 0.0000, 1.0000]، مما يشير إلى أن كثافة الحالات المشتركة (JDOS) المتاحة للانتقالات الإلكترونية تكون أعلى في المستوى الأساسي مقارنة بالاتجاه المحوري، و هو ما يعكس توزعا غير متماثل لاحتمالات الانتقال الإلكتروني حسب الاتجاه البلوري.

تظهر المساقط على أوجه الخلية البلورية للجزء التخيلي توزعا أكثر تجانسا مقارنة بالجزء الحقيقي، مع وجود تشوهات طفيفة تعكس الاعتماد الاتجاهي لاحتمالية الانتقالات الإلكترونية، و هو ما يتسق مع الطبيعة الموجية للدوال الإلكترونية التي تحدد قواعد الانتقال المسموح بها وفق قاعدة فيرمي الذهبية و كثافة الحالات المشتركة.

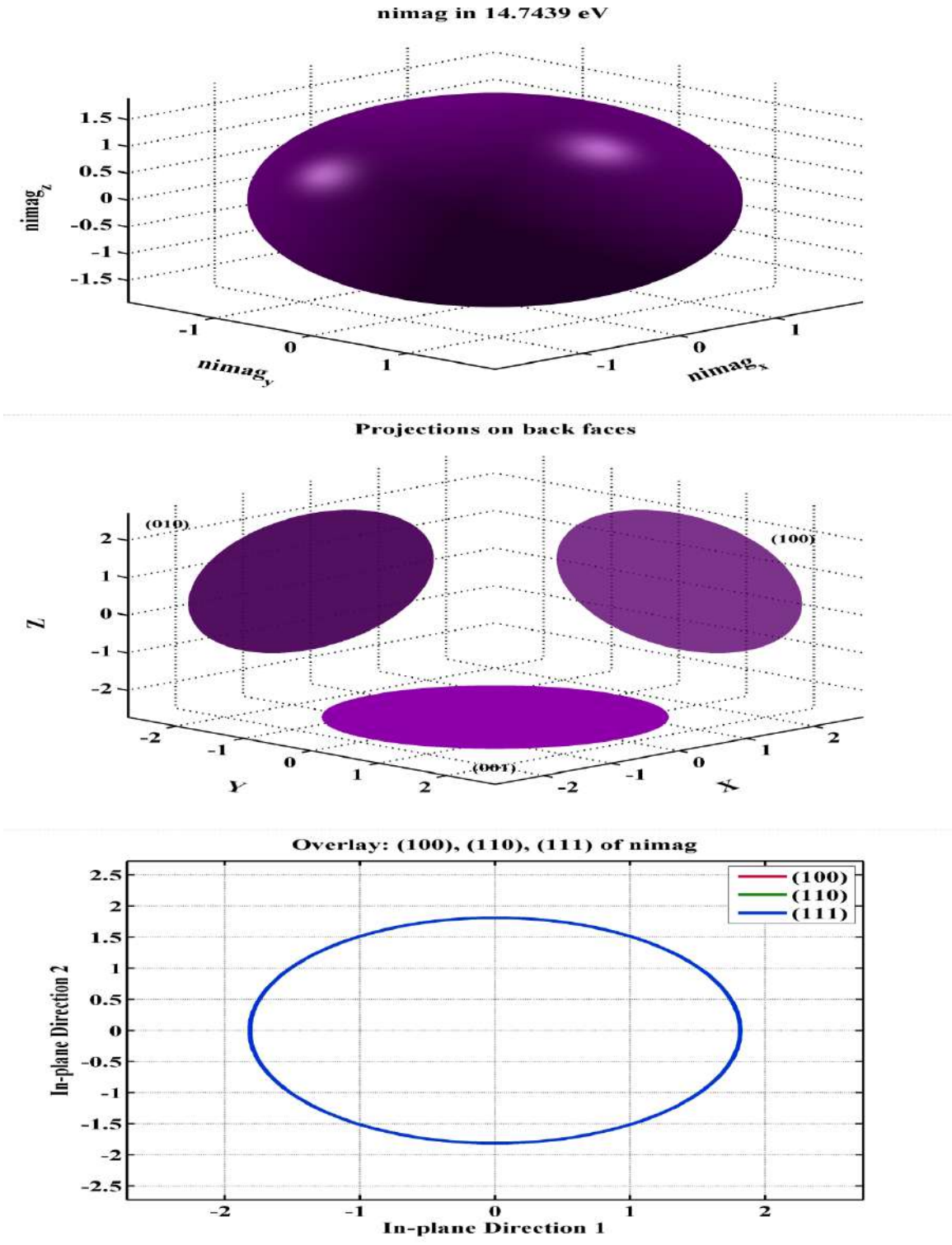
تبرز منحنيات التقاطع مع المستويات البلورية [100]، [110]، و [111] أن الامتصاص الضوئي يكون أعظميا في الاتجاهات الواقعة ضمن المستوى الأساسي، بينما يكون أدنى في الاتجاه الموازي للمحور [0001]، مما يشير إلى أن الانتقالات الإلكترونية المسموحة طاقوية تكون أكثر احتمالا عندما يكون متجه موجة الفوتون موازيا للمستوى الأساسي، و هو ما يرتبط بتناظر الدوال الموجية للإلكترونات في نطاقي التكافؤ و التوصيل.

يعزى الانعكاس في الترتيب الاتجاهي بين $\varepsilon_1$ و $\varepsilon_2$ (حيث يتفوق [0001] في الأول و [100] في الثاني) إلى الطبيعة التبادلية بين التخزين و التبديد للطاقة: فالاتجاهات ذات الاستقطاب الأعلى ($\varepsilon_2$ كبير) تميل إلى أن تكون أقل تبديدا للطاقة ($\varepsilon_2$ صغير)، و العكس صحيح، و هو ما يتسق مع علاقات كرامرز-كرونيج التي تربط السببية بين الجزئين الحقيقي و التخيلي لدالة العزل و تضمن اتساقا فيزيائيا بين التشتت و الامتصاص.

**IV-3-2 دراسة الإنكسارية المركبة:**

IV-3-2-1 دراسة معامل الإنطفاء:

كما يتبين من خلال الشكل(IV-3) يتجسد التمثيل ثلاثي الأبعاد لمعامل الانطفاء لمركب نيتريد الألمنيوم توزع قنوات الامتصاص الضوئي الناتجة عن الانتقالات الإلكترونية، حيث تتراوح القيم بين 1.81115 كحد أدنى و 1.81574 كحد أقصى (هذا واضح في الجدول(IV-1))، بنسبة أنيسوتروبية تبلغ 1.0025 (نحو 0.25 %)، و هي نسبة ضئيلة جدا تشير إلى أن الامتصاص الضوئي يكون متجانسا اتجاهيا بدرجة عالية في نطاق الطاقة المدروس.




الشكل(IV-3): تمثيل ثلاثي الأبعاد لمعامل الإنطفاء لمركب AlN، و تمثيل مساقطها على أوجه الرباعي، و تمثيل منحنيات تقاطعها على المستويات $(10\bar{1}0)$، $(11\bar{2}0)$، و $(11\bar{2}1)$

على عكس السلوك الملاحظ في معامل الانكسار، تتحقق القيمة العظمى لمعامل الانطفاء في المستوى الأساسي بالقرب من الاتجاه [100] بإحداثيات [0.9896, 0.1442, 0.0015]، بينما تتحقق القيمة الدنيا بالاتجاه [0001] بإحداثيات [0.0000, 0.0000, 1.0000]، مما يشير إلى أن كثافة الحالات المشتركة (JDOS) المتاحة للانتقالات الإلكترونية تكون أعلى قليلا في المستوى الأساسي مقارنة بالاتجاه المحوري، و هو ما يعكس توزعا شبه متماثل لاحتمالات الانتقال الإلكتروني حسب الاتجاه البلوري.

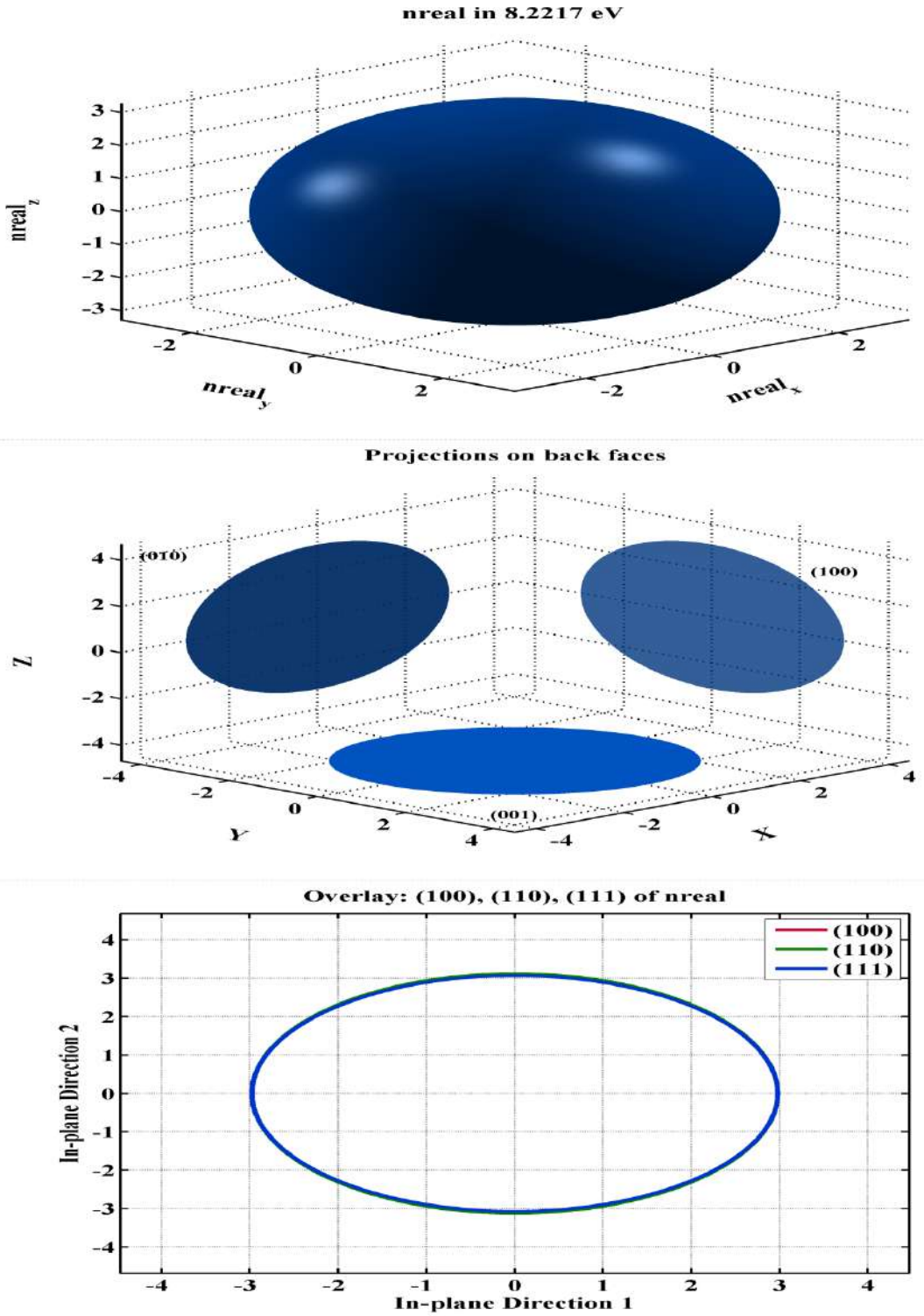
تظهر المساقط على أوجه الخلية البلورية لمعامل الانطفاء توزعا شبه كروي يعكس التجانس الاتجاهي العالي، مع وجود تشوهات طفيفة جدا تعكس الاعتماد الضعيف لاحتمالية الانتقالات الإلكترونية على الاتجاه، و هو ما يتسق مع الطبيعة الموجية للدوال الإلكترونية التي تحدد قواعد الانتقال المسموح بها وفق قاعدة فيرمي الذهبية.

تبرز منحنيات التقاطع مع المستويات البلورية [100]، [110]، و [111] أن الامتصاص الضوئي يكون متشابها في جميع الاتجاهات، مع فروق طفيفة لا تتجاوز 0.25 %، مما يشير إلى أن الانتقالات الإلكترونية المسموحة طاقويا تكون متاحة بنفس الدرجة تقريبا بغض النظر عن اتجاه انتشار الفوتون، و هو ما يرتبط بتناظر الدوال الموجية للإلكترونات في نطاقي التكافؤ و التوصيل لمركب AlN.

يعزى الانعكاس الطفيف في الترتيب الاتجاهي بين معامل الانكسار و معامل الانطفاء (حيث يتفوق [0001] في الأول و [100] في الثاني) إلى الطبيعة التبادلية بين التخزين و التبديد للطاقة: فالاتجاهات ذات الاستقطاب الأعلى (معامل انكسار كبير) تميل إلى أن تكون أقل تبديدا للطاقة (معامل انطفاء صغير)، و العكس صحيح، و هو ما يتسق مع علاقات كرامرز-كرونيج التي تربط السببية بين الجزئين الحقيقي و التخيلي لمعامل الانكسار المركب و تضمن اتساقا فيزيائيا بين التشتت و الامتصاص.

IV-2-2-3 دراسة الإنكسارية:

يظهر في الشكل(IV-4) التمثيل المجسم لمعامل الانكسار الحقيقي لمركب نيتريد الألمنيوم توزعا اتجاهيا يعكس الطبيعة الأنيسوتروبية للبنية البلورية من نوع ورتزايت(Wurtzite)، حيث تتراوح حسب الجدول(IV-1) القيم المحسوبة بين حد أدنى قدره 2.97866 و حد أقصى يبلغ 3.1216، مما ينتج نسبة أنيسوتروبية تساوي 1.048 (نحو 4.8 %)، وهي قيمة تعكس تباينا متوسطا في قدرة المادة على تشتت الضوء حسب اتجاه انتشاره البلوري.




الشكل(IV-4): تمثيل ثلاثي الأبعاد للإنكسارية لمركب AlN، و تمثيل مساقطها على أوجه الرباعي، و تمثيل منحنيات تقاطعها على المستويات $(10\bar{1}0)$، $(11\bar{2}0)$، و $(11\bar{2}1)$

تتحقق القيمة العظمى لمعامل الانكسار بالاتجاه البلوري [0001] (المحور السيني)، كما يتضح من إحداثيات الاتجاه الأقصى [0.0000, 0.0000, 1.0000]، في حين تتحقق القيمة الدنيا في المستوى الأساسي القريب من الاتجاه [100] بإحداثيات [0.9990, 0.0440, 0.0017]، مما يؤكد أن قدرة المادة على تقليل سرعة الضوء تكون أعلى في الاتجاه المحوري العمودي على مستويات الأساس، و يرتبط ذلك بكثافة الروابط الذرية و استقطابية الإلكترونات بهذا الاتجاه.

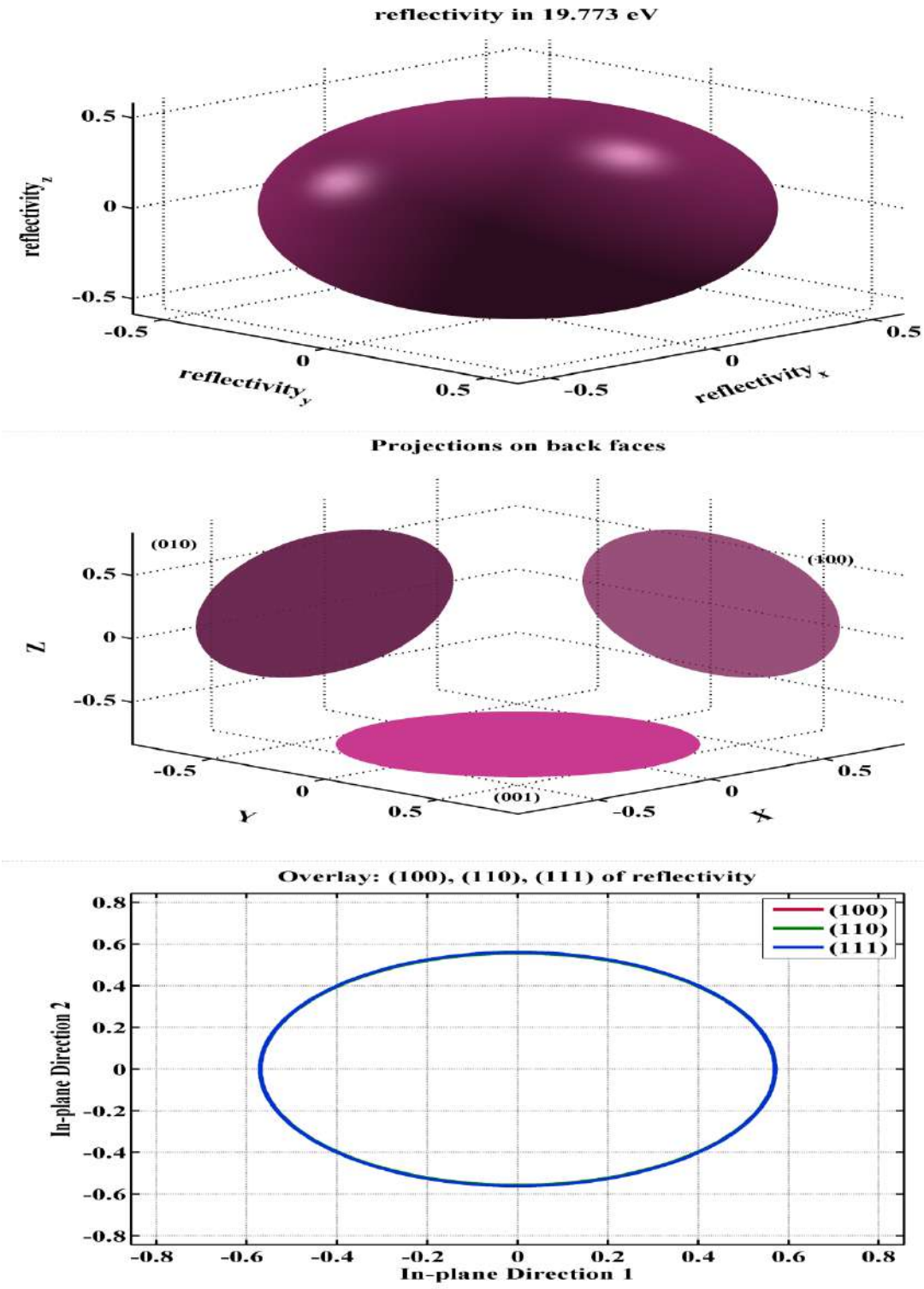
تظهر المساقط على أوجه الخلية البلورية تماثلاً شبه دائري في المستوى (001) يعكس التناظر السداسي للبنية، بينما تظهر المساقط على المستويين (100) و (010) تشوها اتجاهيا واضحا يجسد الاختلاف في سرعة طور الموجة الكهرومغناطيسية حسب اتجاه الانتشار البلوري، و هو ما يتوافق مع الطبيعة غير المكعبية لمركب AlN.

تبرز منحنيات التقاطع مع المستويات البلورية الرئيسية [100]، [110]، و [111] تباينا كميا في قيم معامل الانكسار؛ حيث يسجل التقاطع مع المستوى [0001] قيمة شبه ثابتة تعكس التماثل الدوراني حول المحور السيني، بينما يُظهر التقاطع مع المستويين [100] و [110] تذبذبا جيبي الشكل يعكس الاعتماد الاتجاهي لاستجابة الاستقطاب الإلكتروني على زاوية الانتشار، و يمكن تفسير ذلك بالاختلاف في كثافة الحالات الإلكترونية المتاحة للاستقطاب بكل اتجاه.

يفسر التفوق الاتجاهي للمحور [0001] في قيم معامل الانكسار بكثافة الروابط التساهمية-الأيونية الأقوى بهذا الاتجاه، و التي تزيد من قابلية تشويه السحابة الإلكترونية تحت تأثير المجال الكهربائي للضوء، و هو ما يتسق مع البنية الطاقية لمركب AlN حيث تكون الذرات مترابطة بشكل أكثر كثافة على طول المحور السيني، مما يعزز معامل الانكسار بهذا الاتجاه.

**IV-3-3 دراسة الإنعكاسية الضوئية:**

يظهر التمثيل ثلاثي الأبعاد لمعامل الانعكاسية الضوئية لمركب نيتريد الألمنيوم توزعا اتجاهيا يعكس الطبيعة الأنيسوتروبية المعتدلة للبنية البلورية من نوع وورتزايت(Wurtzite) (أنظر الشكل(IV-5)، حيث و حسب ما هو مدون في الجدول(IV-1) تتراوح القيم المحسوبة بين حد أدنى قدره 0.55738 و حد أقصى يبلغ 0.57025، مما ينتج نسبة أنيسوتروبية تساوي 1.0231 (نحو 2.3 %)، و هي قيمة تعكس تباينا طفيفا في قدرة المادة على عكس الإشعاع الكهرومغناطيسي حسب اتجاه الانتشار البلوري.




الشكل(IV-5): تمثيل ثلاثي الأبعاد للإنعاكسية الضوئية لمركب AlN، و تمثيل مساقطها على أوجه الرباعي، و تمثيل منحنيات تقاطعها على المستويات $(10\bar{1}0)$، $(11\bar{2}0)$، و $(11\bar{2}1)$

تتحقق القيمة العظمى للانعكاسية بالاتجاه البلوري القريب من [100] بإحداثيات [1.0000, 0.0000, 0.0015]، بينما تتحقق القيمة الدنيا بالاتجاه [0001] بإحداثيات [0.0000, 0.0000, 1.0000]، مما يؤكد أن قدرة المادة على ارتداد الضوء تكون أعلى في المستوى الأساسي مقارنة بالاتجاه المحوري، و يرتبط ذلك بالاختلاف في معامل الانكسار المركب و معامل الانطفاء بين هذه الاتجاهات وفق العلاقة(III-11) من الفصل الثالث

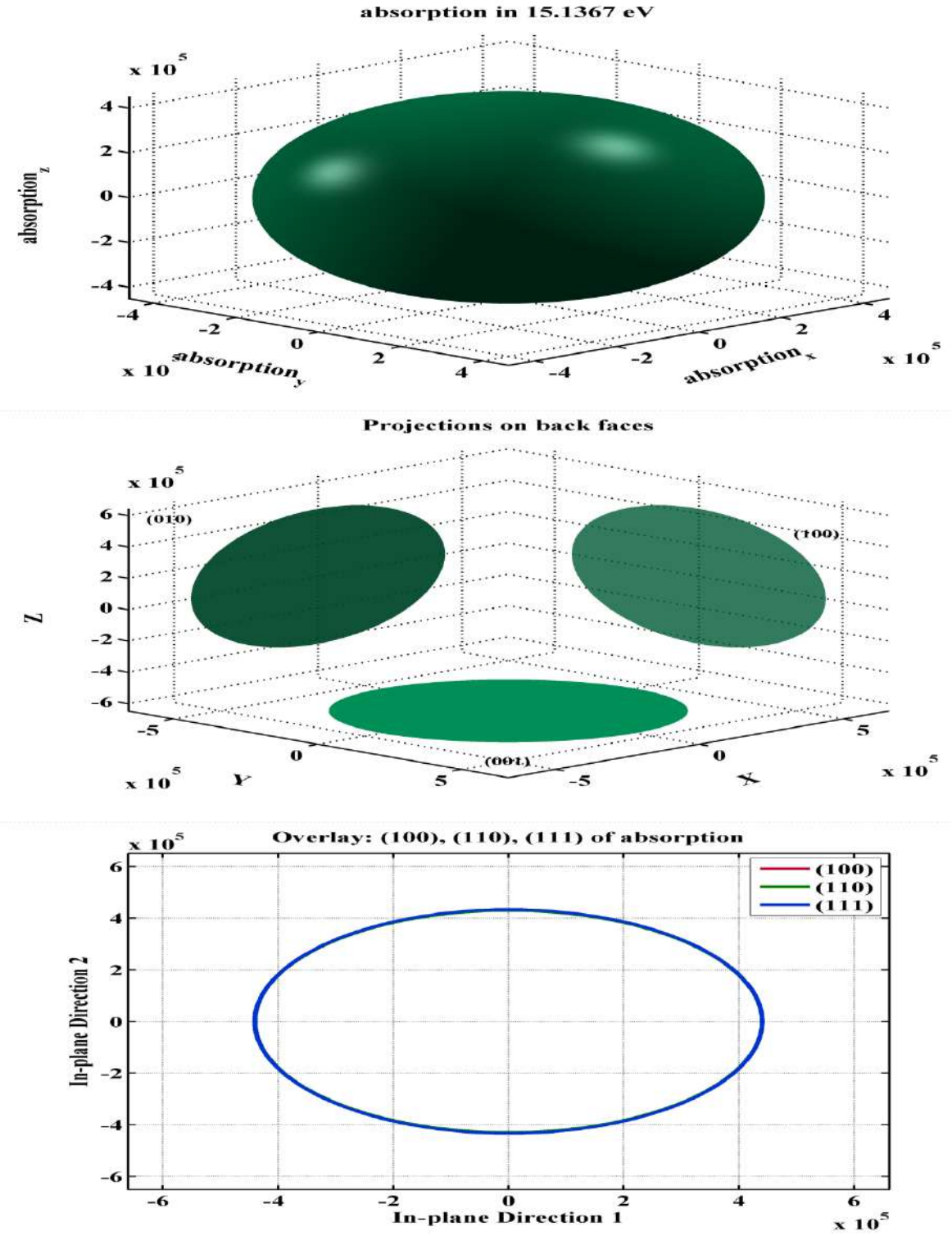
تظهر المساقط على أوجه الخلية البلورية تماثلا شبه دائري في المستوى (001) يعكس التناظر السداسي للبنية، بينما تظهر المساقط على المستويين (100) و (010) تشوها اتجاهيا طفيفا يجسد الاختلاف في الاستجابة البصرية حسب اتجاه سقوط الموجة الكهرومغناطيسية، و هو ما يتوافق مع الطبيعة غير المكعبية لمركب AlN.

تبرز منحنيات التقاطع مع المستويات البلورية الرئيسية [100]، [110]، و [111] تباينا كميا محدودا في قيم الانعكاسية؛ حيث يسجل التقاطع مع المستوى [0001] قيمة دنيا ثابتة نسبياً تعكس التماثل الدوراني حول المحور السيني، بينما يُظهر التقاطع مع المستويين [100] و [110] تذبذبا محدودا يعكس الاعتماد الاتجاهي الضعيف لمعامل الانعكاس على زاوية الانتشار، و يمكن تفسير ذلك بقرب قيم معاملي الانكسار و الانطفاء بين الاتجاهات المختلفة.

يفسر التفوق الاتجاهي للمستوى الأساسي [100] في قيم الانعكاسية بالاختلاف الطفيف في الجزئين الحقيقي و التخيلي من دالة العزل الكهربائي بين الاتجاهات، حيث تكون القيم الأعلى لـ $\varepsilon_2$ في المستوى الأساسي مسؤولة عن زيادة الامتصاص و بالتالي زيادة الانعكاسية وفق علاقات كرامرز-كرونيج التي تربط بين التبديد و التشتت في الاستجابة البصرية.

### IV-3-4 دراسة معامل الإمتصاص:

بنظر للشكل(IV-6) يتجسد من خلال التمثيل ثلاثي الأبعاد لمعامل الامتصاص الضوئي لمركب نيتريد الألمنيوم توزع قنوات الامتصاص الناتجة عن الانتقالات الإلكترونية بين نطاقي التكافؤ و التوصيل، حيث تتراوح القيم بين $cm^{-1}$ 430447.10 كحد أدنى و $cm^{-1}$ 440339.78 كحد أقصى كما هو واضح من الجدول(IV-1)، بنسبة أنيسوتروبية تبلغ $1.0230cm^{-1}$ (نحو 2.3 %)، و هي نسبة متطابقة تقريبا مع نظيرتها في الانعكاسية، مما يشير إلى ارتباط وثيق بين آليتي الامتصاص و الانعكاس في هذا النطاق الطاقي.




الشكل(IV-6): تمثيل ثلاثي الأبعاد لمعامل الإمتصاص لمركب AlN، و تمثيل مساقطها على أوجه الرباعي، و تمثيل منحنيات تقاطعها على المستويات $(10\bar{1}0)$، $(11\bar{2}0)$، و $(11\bar{2}1)$

تتحقق القيمة العظمى لمعامل الامتصاص بالاتجاه القريب من [100] بإحداثيات [1.0000, 0.0063, 0.0015]، بينما تتحقق القيمة الدنيا بالاتجاه [0001] بإحداثيات [0.0000, 0.0000, 1.0000]، مما يشير إلى أن كثافة الحالات المشتركة (JDOS) المتاحة للانتقالات الإلكترونية المسموحة طاقويا تكون أعلى قليلا في المستوى الأساسي مقارنة بالاتجاه المحوري، و هو ما يعكس توزعا غير متماثل تماما لاحتمالات الانتقال الإلكتروني حسب الاتجاه البلوري.

تظهر المساقط على أوجه الخلية البلورية لمعامل الامتصاص توزعا متجانسا إلى حد كبير مع وجود تشوهات طفيفة جدا تعكس الاعتماد الضعيف لاحتمالية الانتقالات الإلكترونية على الاتجاه، و هو ما يتسق مع الطبيعة الموجية للدوال الإلكترونية التي تحدد قواعد الانتقال المسموح بها وفق قاعدة فيرمي الذهبية و كثافة الحالات المشتركة في البلورات ذات التناظر السداسي.

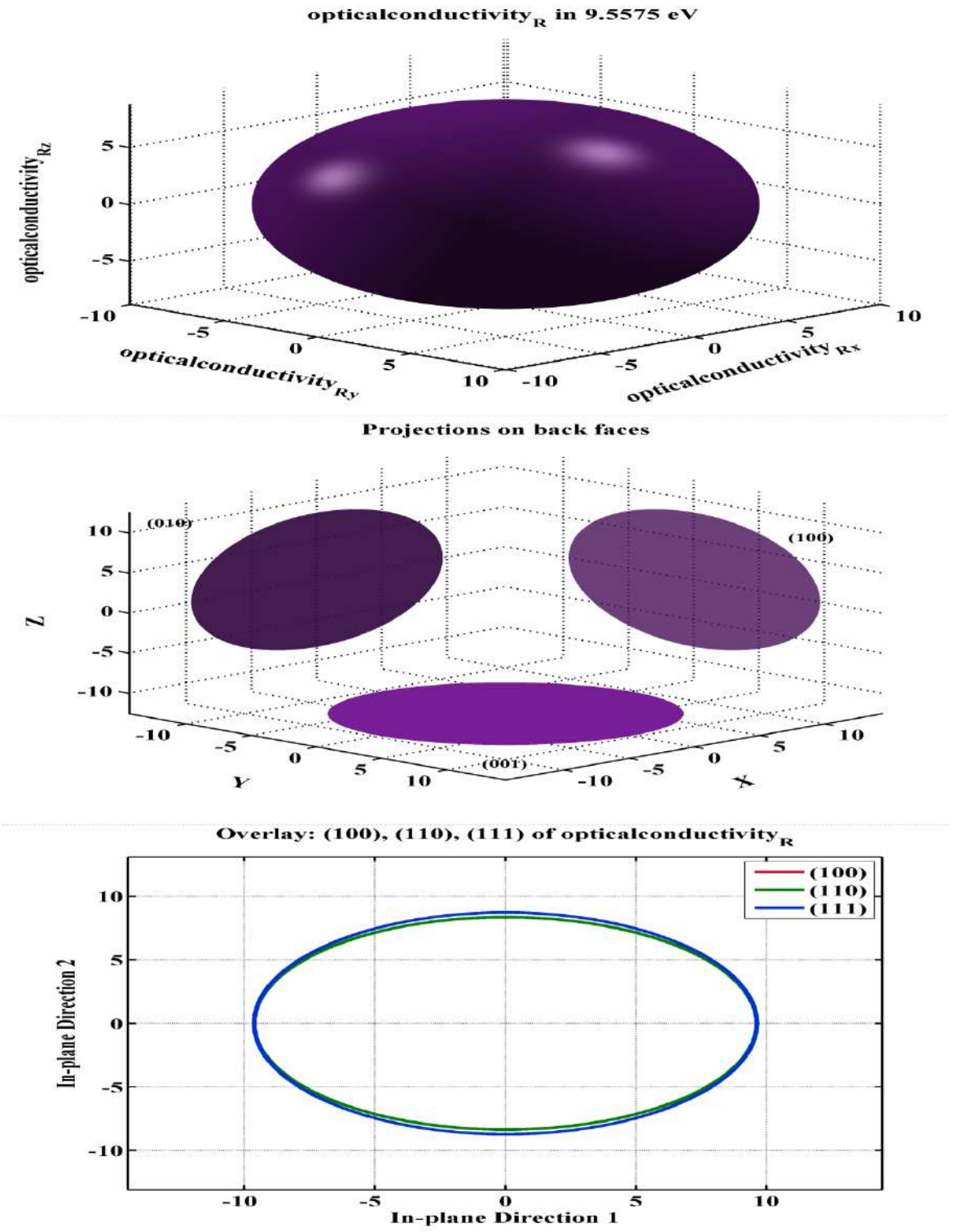
تبرز منحنيات التقاطع مع المستويات البلورية [100]، [110]، و [111] أن الامتصاص الضوئي يكون أعظمياً في الاتجاهات الواقعة ضمن المستوى الأساسي، بينما يكون أدنى في الاتجاه الموازي للمحور [0001]، مما يشير إلى أن الانتقالات الإلكترونية المسموحة طاقويا تكون أكثر احتمالاً عندما يكون متجه موجة الفوتون موازيا للمستوى الأساسي، وهو ما يرتبط بتناظر الدوال الموجية للإلكترونات في نطاقي التكافؤ والتوصيل لمركب AlN.

يعزى التشابه في نسبة الأنيسوتروبية بين معامل الامتصاص والانعكاسية (كلاهما نحو 2.3 %) إلى العلاقة الفيزيائية المباشرة بينهما عبر معامل الانكسار المركب (أرجع للعلاقة(III-5) من الفصل الثالث)، حيث يرتبط معامل الامتصاص بالجزء التخيلي عبر العلاقة(III-13) من الفصل الثالث، و ترتبط الانعكاسية بكل من n و k، مما يجعل التباين الاتجاهي في أحدهما ينعكس بشكل مماثل على الآخر في النطاق الطاقي المدروس.

**IV-3-5 دراسة الناقلية الضوئية:**

IV-3-5-1 دراسة الجزء الحقيقي من الناقلية الضوئية:

من الشكل(IV-7) يظهر التمثيل ثلاثي الأبعاد للجزء الحقيقي من الناقلية الضوئية لمركب نيتريد الألمنيوم توزعا اتجاهيا يعكس الطبيعة الأنيسوتروبية للبنية البلورية من نوع ورتزايت، حيث تتراوح القيم المحسوبة كما هو مصنف في الجدول(IV-1) بين حد أدنى قدره 8.36342 و حد أقصى يبلغ 9.63107، مما يُنتج نسبة أنيسوتروبية تساوي 1.1516 (نحو 15.2 %)، و هي قيمة تعكس تباينا واضحا في قدرة المادة على تبديد الطاقة من المجال الكهرومغناطيسي حسب اتجاه الانتشار البلوري.




الشكل(IV-7): تمثيل ثلاثي الأبعاد للجزء الحقيقي من الناقلية الضوئية لمركب AlN، و تمثيل مساقطها على أوجه الرباعي، و تمثيل منحنيات تقاطعها على المستويات $(10\bar{1}0)$، $(11\bar{2}0)$، و $(11\bar{2}1)$

تتحقق القيمة العظمى للجزء الحقيقي من الناقلية بالاتجاه البلوري القريب من [100] بإحداثيات [1.0000, 0.0000, 0.0014]، بينما تتحقق القيمة الدنيا بالاتجاه [0001] بإحداثيات [0.0000, 0.0000, 1.0000]، مما يؤكد أن قنوات الامتصاص الإلكتروني و التبديد الطاقي تكون أكثر فعالية في المستوى الأساسي مقارنة بالاتجاه المحوري، و يرتبط ذلك بكثافة الحالات المشتركة (JDOS) المتاحة للانتقالات الإلكترونية بهذه الاتجاهات.

تظهر المساقط على أوجه الخلية البلورية تشوها اتجاهيا واضحا في المستوى (100) يعكس التباين في استجابة الإلكترونات للمجال الكهربائي حسب اتجاه الانتشار، بينما تظهر المساقط على المستوى (001) تماثلا نسبيا يعكس التناظر السداسي للبنية البلورية، و هو ما يتوافق مع الطبيعة غير المكعبية لمركب AlN.

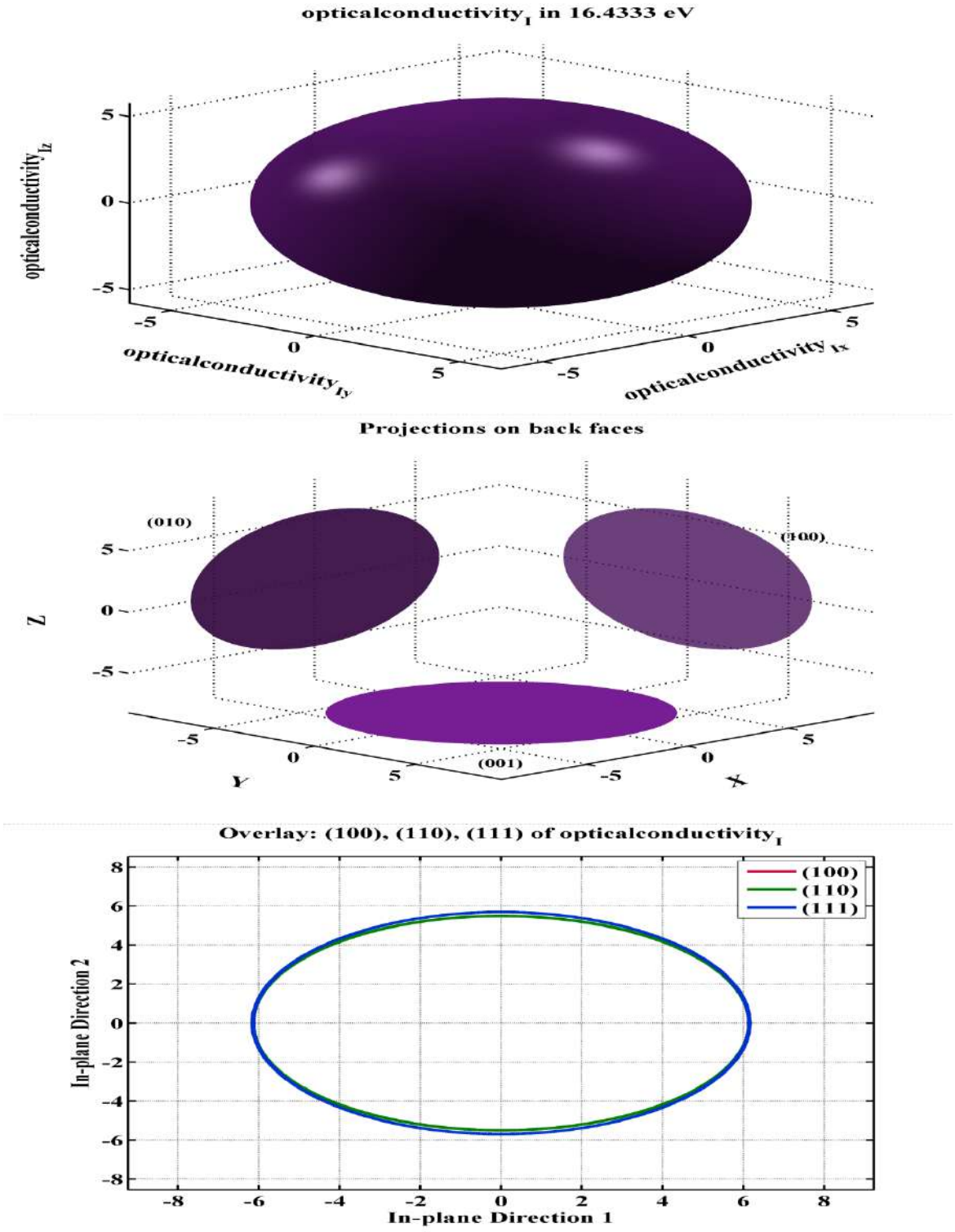
تبرز منحنيات التقاطع مع المستويات البلورية الرئيسية [100]، [110]، و [111] تباينا كميا في قيم $\sigma_1$؛ حيث يسجل التقاطع مع المستوى [0001] قيمة دنيا ثابتة نسبيا تعكس قلة الانتقالات الإلكترونية المسموحة بهذا الاتجاه، بينما يظهر التقاطع مع المستويين [100] و [110] قيما عظمى تعكس كثافة الانتقالات الإلكترونية المتاحة وفق قاعدة فيرمي الذهبية.

يفسر التفوق الاتجاهي للمستوى الأساسي [100] في قيم $\sigma_1$ بالاختلاف في توزع الدوال الموجية للإلكترونات في نطاقي التكافؤ و التوصيل، حيث تكون احتمالية الانتقالات الإلكترونية المسموحة طاقويا أعلى في الاتجاهات الواقعة ضمن المستوى الأساسي، و هو ما يتسق مع البنية الطاقوية لمركب AlN حيث تكون الروابط التساهمية-الأيونية أكثر فعالية في نقل الطاقة في المستوى الأفقي.

IV-3-5-2 دراسة الجزء التخيلي من الناقلية الضوئية:

من خلال الشكل(IV-8) يجسد التمثيل ثلاثي الأبعاد للجزء التخيلي من الناقلية الضوئية الاستجابة غير التبديدية المرتبطة بتخزين الطاقة الكهربائية في وسط الاستقطاب الإلكتروني، أين و يتضح من القيم المدونة في الجدول(IV-1) تتراوح القيم بين 5.49839 كحد أدنى و 6.15055 كحد أقصى، بنسبة أنيسوتروبية تبلغ 1.1186 (نحو 11.9 %)، و هي نسبة أقل قليلا من نظيرتها في الجزء الحقيقي، مما يشير إلى أن الاستجابة التخزينية تكون أقل حساسية للاتجاه البلوري من الاستجابة التبديدية.

تتحقق القيمة العظمى للجزء التخيلي بالاتجاه القريب من [100] بإحداثيات [0.9999, 0.0126, 0.0014]، بينما تتحقق القيمة الدنيا بالاتجاه [0001] بإحداثيات [0.0000, 0.0000, 1.0000].




الشكل(IV-8): تمثيل ثلاثي الأبعاد للجزء التخيلي من الناقلية الضوئية لمركب AlN، و تمثيل مساقطها على أوجه الرباعي، و تمثيل منحنيات تقاطعها على المستويات $(10\bar{1}0)$، $(11\bar{2}0)$، و $(11\bar{2}1)$

ذلك يشير إلى أن قدرة المادة على تخزين الطاقة في مجال الاستقطاب تكون أعلى في المستوى الأساسي مقارنة بالاتجاه المحوري، و هو ما يعكس توزعا غير متماثل لقابلية الاستقطاب الإلكتروني حسب الاتجاه البلوري.

تظهر المساقط على أوجه الخلية البلورية للجزء التخيلي توزعا متجانسا نسبيا مع وجود تشوهات طفيفة تعكس الاعتماد الاتجاهي الضعيف للاستجابة التخزينية على زاوية الانتشار، و هو ما يتسق مع الطبيعة الموجية للدوال الإلكترونية التي تحدد سعة الاستقطاب وفق علاقات كرامرز-كرونيج التي تربط السببية بين الجزئين الحقيقي و التخيلي.

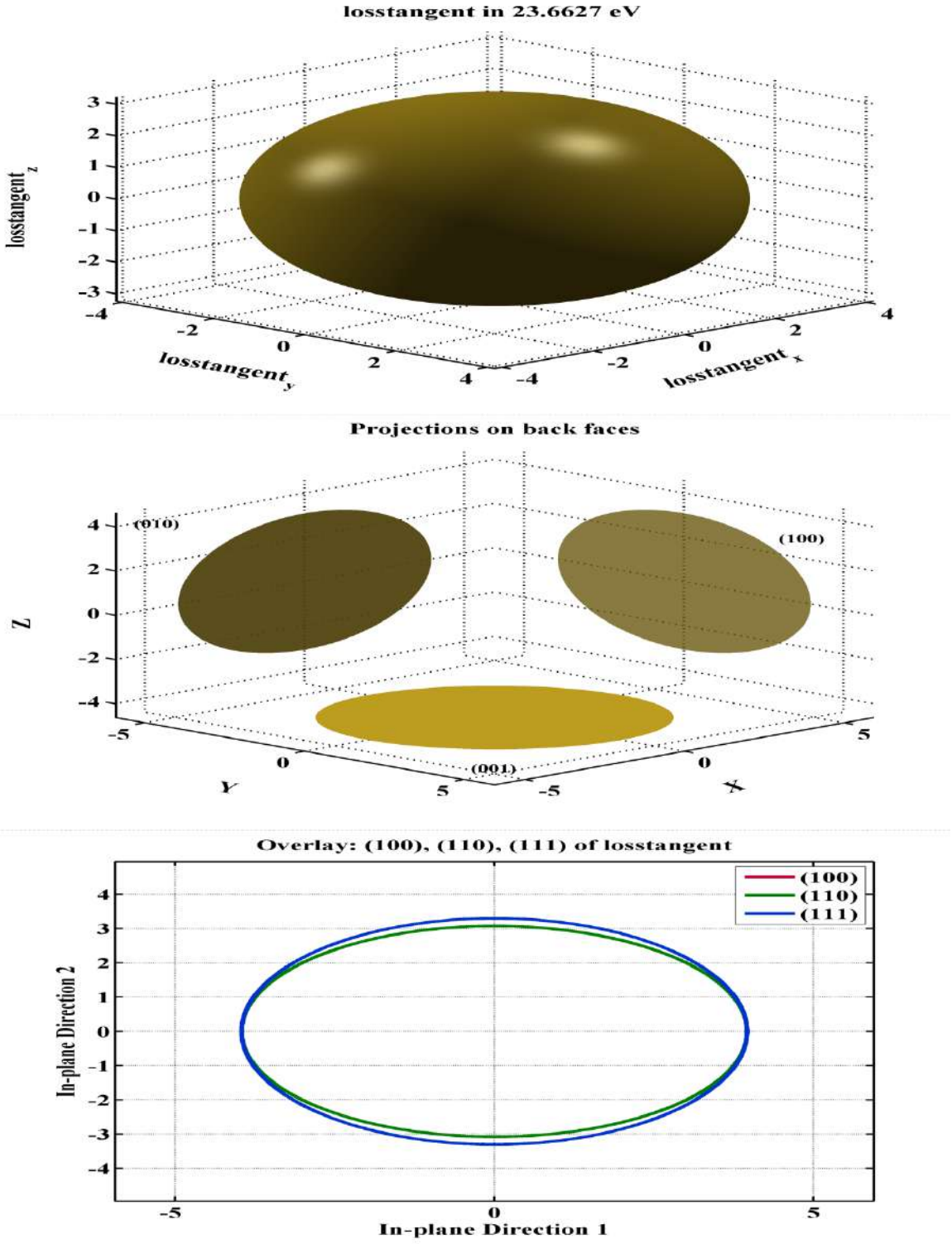
تبرز منحنيات التقاطع مع المستويات البلورية [100]، [110]، و [111] أن القدرة على تخزين الطاقة تكون أعظمية في الاتجاهات الواقعة ضمن المستوى الأساسي، بينما تكون أدنى في الاتجاه الموازي للمحور [0001]، مما يشير إلى أن استجابة الاستقطاب الإلكتروني تكون أكثر كفاءة عندما يكون متجه موجة المجال الكهربائي موازيا للمستوى الأساسي، و هو ما يرتبط بتناظر الدوال الموجية للإلكترونات في نطاق التكافؤ.

يعزى التشابه في الترتيب الاتجاهي بين $\sigma_1$ و $\sigma_2$ (حيث يتفوق [100] في كليهما) إلى الطبيعة المترابطة للاستجابة البصرية: فالاتجاهات ذات الكثافة الأعلى للحالات الإلكترونية المتاحة للانتقالات ($\sigma_2$ كبير) تميل إلى أن تكون ذات قابلية استقطاب أعلى أيضا ($\sigma_2$ كبير)، و هو ما يتسق مع العلاقات السببية التي تضمن اتساقا فيزيائيا بين التبديد و التخزين في الاستجابة الكهرومغناطيسية للمادة.

**IV-3-6 دراسة دالة التبدد:**

في الشكل(IV-9) يظهر التمثيل ثلاثي الأبعاد لدالة التبدد لمركب نيتريد الألمنيوم توزعا اتجاهيا يعكس الطبيعة الأنيسوتروبية الواضحة للبنية البلورية من نوع وورتزايت، حيث يلاحظ من الجدول(IV-1) أن القيم تتراوح المحسوبة بين حد أدنى قدره 3.08088 و حد أقصى يبلغ 3.95997، مما ينتج نسبة أنيسوتروبية تساوي 1.2853 (نحو 28.5 %)، و هي قيمة مرتفعة نسبيا تعكس تباينا ملحوظا في كفاءة تبديد الطاقة حسب اتجاه انتشار المجال الكهرومغناطيسي داخل البلورة.

تتحقق القيمة العظمى لدالة التبدد بالاتجاه البلوري القريب من [100] بإحداثيات [1.0000, 0.0000, 0.0012]، بينما تتحقق القيمة الدنيا بالاتجاه [0001] بإحداثيات [0.0000, 0.0000, 1.0000]، مما يؤكد أن آليات فقدان الطاقة عبر التبدد تكون أكثر فعالية في المستوى الأساسي مقارنة بالاتجاه المحوري، و يرتبط ذلك بكثافة الحالات الإلكترونية المتاحة للانتقالات التبديدية بهذه الاتجاهات وفق العلاقة: $\boldsymbol{tan\delta = \frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_2}}$




الشكل(IV-9): تمثيل ثلاثي الأبعاد لدالة التبدد لمركب AlN، و تمثيل مساقطها على أوجه الرباعي، و تمثيل منحنيات تقاطعها على المستويات $(10\bar{1}0)$، $(11\bar{2}0)$، و $(11\bar{2}1)$

تظهر المساقط على أوجه الخلية البلورية تشوها اتجاهيا واضحا في المستوى (100) يعكس التباين في استجابة المادة للتبديد الطاقي حسب اتجاه الانتشار، بينما تظهر المساقط على المستوى (001) تماثلا نسبيا يعكس التناظر السداسي للبنية البلورية، و هو ما يتوافق مع الطبيعة غير المكعبية لمركب AlN و تأثيرها على توزع قنوات الامتصاص و التبديد.

تبرز منحنيات التقاطع مع المستويات البلورية الرئيسية [100]، [110]، و [111] تباينا كميا في قيم دالة التبدد؛ حيث يسجل التقاطع مع المستوى [0001] قيمة دنيا ثابتة نسبيا تعكس قلة قنوات التبديد المسموحة بهذا الاتجاه، بينما يظهر التقاطع مع المستويين [100] و [110] قيما عظمى تعكس كثافة الانتقالات الإلكترونية التبديدية المتاحة وفق قاعدة فيرمي الذهبية و كثافة الحالات المشتركة.

يفسر التفوق الاتجاهي للمستوى الأساسي [100] في قيم دالة التبدد بالاختلاف في توزع الدوال الموجية للإلكترونات في نطاقي التكافؤ و التوصيل، حيث تكون احتمالية الانتقالات الإلكترونية المسموحة طاقويا و المصحوبة بفقدان طاقي أعلى في الاتجاهات الواقعة ضمن المستوى الأساسي، و هو ما يتسق مع البنية الطاقوية لمركب AlN حيث تكون الروابط التساهمية-الأيونية أكثر فعالية في نقل الطاقة التبديدية في المستوى الأفقي.

ترتبط القيمة المرتفعة لنسبة الأنيسوتروبية في دالة التبدد (28.5 %) بالطبيعة المركبة لهذه الدالة التي تعتمد على نسبة الجزئين التخيلي و الحقيقي من دالة العزل الكهربائي، حيث أن التباين الاتجاهي في كل من $\varepsilon_1$ و $\varepsilon_2$يتضاعف تأثيره في دالة التبدد، مما يجعلها أكثر حساسية للاتجاه البلوري من المعاملات البصرية الفردية.

يعزى الموقع الاتجاهي للقيمة القصوى لدالة التبدد في المستوى الأساسي إلى التوافق بين اتجاهات الاستقطاب الإلكتروني و اتجاهات الانتقالات المسموحة، حيث أن الاتجاهات التي تحقق قيما عالية لـ $\varepsilon_2$ (الامتصاص) و قيما منخفضة لـ $\varepsilon_1$ (التشتت) تميل إلى إنتاج قيم عظمى لدالة التبدد، و هو ما يتجلى بوضوح في الاتجاه [100] لمركب AlN.

تظهر دالة التبدد سلوكا متجانسا نسبيا حول الاتجاه [0001] في المساقط ثلاثية الأبعاد، مما يعكس التماثل الدوراني حول المحور السيني للبنية السداسية، و هو ما يتسق مع التناظر البلوري لمركب AlN و يؤكد أن الخواص التبديدية تحترم قواعد التناظر النقطي للزمرة الفضائية للبلورة.

الجدول(IV-1): يتضمن القيم العظمي و الدنيا للمعاملات الضوئية و مقادير الإتجاهات الموافقة و قرائن ميلر الخاصة بها.

| المعامل | القيمة العظمى | القيمة الدنيا | نسبة عدم التماثل | قرائن ميلير للإتجاه الأعظمي | قرائن ميلير للإتجاه الأدنى | الإتجاه الأعظمي | الإتجاه الأدنى |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| الجزء الحقيقي لدالة العزل | 9,15276 | 8,3730 | 1,0931 | 001 | 100 | [0.0000, 0.0000, 1.0000] | [0.9990, 0.0440, 0.0017] |
| الجزء التخيلي لدالة العزل | 8,1537 | 7,8257 | 1,0420 | 100 | 001 | [0.9896, 0.1442, 0.0015] | [0.0000, 0.0000, 1.0000] |
| معامل الإنطفاء | 1,8157 | 1,8112 | 1,0025 | 540 | 001 | [0.7936, 0.6084, 0.0016] | [0.0000, 0.0000, 1.0000] |
| الإنكسارية | 3,1216 | 2,9787 | 1,0480 | 001 | 100 | [0.0000, 0.0000, 1.0000] | [0.9995, 0.0314, 0.0016] |
| الإنعكاسية | 0,5702 | 0,5574 | 1,0231 | 100 | 001 | [1.0000, 0.0000, 0.0015] | [0.0000, 0.0000, 1.0000] |
| معامل الإمتصاص | 440339,78 | 430447,10 | 1,0230 | 100 | 001 | [1.0000, 0.0063, 0.0015] | [0.0000, 0.0000, 1.0000] |
| الجزء الحقيقي من الناقلية الضوئية | 9,6311 | 8,36342 | 1,1516 | 100 | 001 | [1.0000, 0.0000, 0.0014] | [0.0000, 0.0000, 1.0000] |
| الجزء التخيلي من الناقلية الضوئية | 6,1505 | 5,49839 | 1,1186 | 100 | 001 | [0.9999, 0.0126, 0.0014] | [0.0000, 0.0000, 1.0000] |
| دالة التبدد | 3,9600 | 3,0809 | 1,2853 | 100 | 001 | [1.0000, 0.0000, 0.0012] | [0.0000, 0.0000, 1.0000] |

# الخلاصـــة

تكتسب دراسة الخواص البصرية لمركب نيتريد الألمنيوم (AlN) أهمية استراتيجية نظرا لكونه من أشباه الموصلات واسعة الفجوة (≈6.2 eV) التي تعد حجر أساس في تطبيقات الإلكترونيات الضوئية المتقدمة، خاصة في نطاق الأشعة فوق البنفسجية العميقة. إن الفهم الكمي الدقيق للاستجابة البصرية الاتجاهية (الأنيسوتروبية) لهذا المركب يعتبر ضروريا لتصميم أجهزة فعّالة مثل مصابيح LED فوق البنفسجية، و كواشف الإشعاع، و الأجهزة الكهروضغطية عالية التردد. كما أن التمثيل ثلاثي الأبعاد للخواص البصرية يوفر رؤية شاملة لكيفية تفاعل المادة مع الإشعاع الكهرومغناطيسي في جميع الاتجاهات البلورية، مما يمكن الباحثين و المهندسين من تحسين أداء الأجهزة من خلال الاستفادة المثلى من التباين الاتجاهي في الخواص الفيزيائية.

اعتمدت هذه الدراسة على منهجية حسابية متكاملة تستند إلى نظرية دالة الكثافة (DFT) ضمن إطار الموجات المستوية، باستخدام كود CASTEP في بيئة Materials Studio. و تم اعتماد تقريب التدرج العام المحسن للمواد الصلبة (GGA-PBEsol) لوصف تأثيرات التبادل و الارتباط، مع تعيين طاقة قطع عالية (630 eV) و شبكة كثيفة من نقاط k (16×20×20) لضمان دقة النتائج. حسبت الخواص البصرية ضمن تقريب الاستجابة الخطية، شاملة الدالة العازلة الكهربائية المركبة، معامل الانكسار، الانطفاء، الامتصاص، الانعكاسية، الناقلية الضوئية و دالة فقدان الطاقة، و ذلك عبر مدى طاقي واسع (0-30 eV) و لحالات متعدد البلورات و الاتجاهات البلورية الرئيسية [100]، [010]، و [001]، مع تمثيل ثلاثي الأبعاد شامل للتوزيع الاتجاهي لهذه الخواص.

تم الحصول على الكثير من النتائج، التي من أهمها:

1)- أظهر الجزء الحقيقي ($\varepsilon_1$) تباينا اتجاهيا واضحا عند الطاقات المنخفضة، حيث سجل 4.14 للاتجاه [001] مقابل 3.99 للاتجاهين الأساسيين، مما يعكس تفوقا في قابلية الاستقطاب الإلكتروني بالمحور السيني بنسبة3.8 %.

2)- بلغ الجزء التخيلي ($\varepsilon_2$) ذروته في النطاق 12.5-13.5 eV، مع تفوق الاتجاه [001] بنسبة تصـل إلى 13 % عند 10 eV، مما يشير إلى كثافة أعلى للحالات الإلكترونية المتاحة للانتقال في هذا الاتجاه.

3)- سجل معامل الانكسار الساكن قيماً تتراوح بين 2 و 2.04، مع تفوق الاتجاه [001] بنسبة 1.9 %.

4)- ظهرت ظاهرة التشتت الشاذ في النطاق 8.0-8.6 eV، حيث بلغت قيم الانكسار ذروتها تقترب من 9.31 في الاتجاه [001]، مرتبطة بامتصاص قوي قرب فجوة النطاق.

5)- بدأت حافة الامتصاص الأساسية عند تقريبا 4.0 eV، مع وصول معامل الامتصاص إلى ذروته القريبة من $5.51.\ 10^5\ cm^{-1}$ في النطاق 13.5-14.5 eV.

6)-أظهرت الانعكاسية تبايناً اتجاهياً طفيفا مقترب من 2.3 %، مع قيم قصوى قريبة من الاتجاه [100].

7)- بلغ الجزء الحقيقي من الناقلية الضوئية ذروته تقريبا $5.51\ 10^5\ \Omega^{-1}\cdot cm^{-1}$ في نفس نطاق الامتصاص الأقصى.

8)- ظهرت قمة بلازمون الحجم الرئيسية في دالة فقدان الطاقة عند 19.5-20.0 eV، مع تفوق الاتجاه [001] بنسبة 7.3 %، مما يعكس كثافة إلكترونية أعلى للتذبذب الجماعي في هذا الاتجاه.

كذلك كشف التمثيل ثلاثي الأبعاد عن أنيسوتروبية واضحة تعكس البنية البلورية من نوع Wurtzite، مع تفاوت في شدة هذا التباين بين المعاملات المختلفة.

1)- أظهرت دالة التبدد أعلى حساسية للاتجاه البلوري (28.5 %) نظرا لاعتمادها على نسبة $\varepsilon_1/\varepsilon_2$، مما يضاعف تأثير التباين الاتجاهي.

2)- ظهر انعكاس في الترتيب الاتجاهي بين $\varepsilon_1$ و $\varepsilon_2$ و كذلك بين n و k، مما يتسق مع علاقات كرامرز-كرونيج التي تربط بين التخزين و التبديد للطاقة.

3)- أظهرت المساقط على المستوى (0001) تماثلا شبه دائري يعكس التناظر السداسي للبنية، بينما ظهرت تشوهات واضحة في المستويات (1000) و (0100).

لهذه النتائج تطبيقات شتى محتملة، نجد من أهمها:

1)- أجهزة البصريات فوق البنفسجية: الاستفادة من الشفافية العالية و الفجوة الواسعة في تصميم كواشف و مصابيح UV-C للتطبيقات الطبية و التعقيمية.

2)- الأجهزة الكهروضغطية عالية التردد: استخدام الأنيسوتروبية البصرية-المرنة في تحسين أداء المرشحات الصوتية السطحية (SAW) و المذبذبات.

3)- الإلكترونيات عالية القدرة: الاستفادة من الثبات الحراري و الخواص العازلة في تصميم ترانزستورات HEMT لأجهزة الطاقة و الاتصالات.

4)- الطلاءات البصرية و الموجات الضوئية: تصميم طبقات عاكسة/نافذة انتقائية بناء على التباين الاتجاهي في الانعكاسية و الامتصاص.

5)- تطبيقات البلازمونات في نطاق UV: الاستفادة من قمة فقدان الطاقة عند 19-20 eV في تطوير أجهزة استشعار نانوية و بصريات فائقة الدقة.

6)- الحماية من الإشعاع: استخدام الخصائص الامتصاصية العالية في نطاقات طاقة محددة لحماية المكونات الإلكترونية الحساسة.

تفتح هذه الدراسة آفاق بحثية كثيرة يمكن إقتراحها، و منها:

1)- دراسة تأثير التشويب و العيب البلوري: تحليل تأثير الشوائب (مثل؛ Mg, Si) و العيوب النقطية على الخواص البصرية الاتجاهية لتحسين تصميم الأجهزة.

2)- دمج تأثيرات الجسم المتعدد: تطبيق تصحيحات GW و تقريب Bethe-Salpeter لدراسة التأثيرات الإكسيتونية على حافة الامتصاص و فجوة النطاق البصرية.

3)- دراسة الخواص تحت تأثير الإجهاد: تحليل تغير الأنيسوتروبية البصرية تحت إجهادات ميكانيكية مختلفة لدعم تطبيقات الأجهزة القابلة للانحناء و المرنة.

4)- محاكاة الطبقات الرقيقة و الهياكل النانوية: دراسة تأثير الحصر الكمي و الأبعاد النانوية على الخواص البصرية الاتجاهية لتصميم أجهزة نانوية فائقة الكفاءة.

5)- التحقق التجريبي المتعدد الاتجاهات: اقتراح بروتوكولات قياس بصرية زاوية-محلول (angle-resolved spectroscopy )للتحقق من التنبؤات النظرية في اتجاهات بلورية محددة.

6)- دراسة الخواص تحت درجات حرارة متغيرة: تحليل اعتماد الأنيسوتروبية البصرية على درجة الحرارة لدعم تطبيقات الأجهزة العاملة في ظروف قاسية.

7)- نمذجة الوصلات غير المتجانسة: دراسة الخواص البصرية لواجهات AlN/GaN و AlN/AlGaN لفهم انتقال الشحنات و الفوتونات في الهياكل متعددة الطبقات.

8)- دمج الخواص البصرية-الحرارية: تطوير نماذج متعددة الفيزياء تربط بين الامتصاص الضوئي و التوصيل الحراري الاتجاهي لتحسين إدارة الحرارة في الأجهزة عالية الكثافة.

# المراجع البيداغوجية:


[01] Y. B. Band, *Light and matter: electromagnetism, optics, spectroscopy and lasers*, vol. 1. John Wiley & Sons, 2006.

[02] C. Kittel, *Elementary statistical physics*. Courier Corporation, 2004.

[03] N. W. Ashcroft and N. D. Mermin, "Solid State Physics (Saunders College Publishing, Forth Worth," 1976.

[04] R. J. D. Tilley, *Crystals and crystal structures*. John Wiley & Sons, 2020.

[05] B. D. Cullity and S. R. Stock, "Elements of X-ray Diffraction, Prentice Hall Inc," *New York*, 2001.

[06] M. Fox, *Optical properties of solids*, vol. 3. Oxford university press, 2010.

[07] علالي جمال (X= Mg, Zn, Cd) SnX 2o" ,مساهمة في دراسة الخواص البنيوية، الالكترونية، الضوئية، المرونة و الترموديناميكية للمواد السبينالية," 2018.

[08] ل. الطاهر, "نوان : دراسة الخواص لتوية، و المُرونية الإلكترونية لبعض ثنائيات البورايد Ti1-xZrxB والمحلول الصلب 2 (X= Sc, Ti, V,Y, Zr, Nb) يأخذ التراكيز:) 1 تطبيق نظرية الدّالية ,2020–2019 .pp ,2013 .vol ," 2018.

[09] خ. ا. عبير, "دراسة تغيرات الخصائص البنيوية، المرونية و التيرموديناميكية لأكسيد المغنيزيوم عند ضغوط النموذجPREM في حدود النواة الأرضية," 2024.

[10] سيبـــــة and ب. عطاءالله, "المساهمة في دراسة الخصائص البنيوية، المرونية و التيرموديناميكية لأكسيدي المنغنيزيوم (MgO) و الكالسيوم (CaO) عند ضغوط النموذجPREM حتى الضغط140 "GPa.,*جامعة قاصدي مرباح ورقلة*.

[11] F. Rules, "Polarizability," pp. 1–9, 1923.

[12] Dresselhaus, M. S., Dresselhaus, G., & Jorio, A. (2008). Group Theory: Application to the Physics of Condensed Matter. Springer.

[13] Yu, P. Y., & Cardona, M. (2010). Fundamentals of Semiconductors: Physics and Materials Properties (4th ed.). Springer.

[14] Aversa, C., & Sipe, J. E. (1995). Nonlinear optical susceptibilities of semiconductors: Results with a length-gauge analysis. Physical Review B, 52(20), 14636–14652.

[15] Bernardini, F., Fiorentini, V., & Vanderbilt, D. (1997). Spontaneous polarization and piezoelectric constants of III-V nitrides. Physical Review B, 56(16), R10024–R10027.

[16] Even, J., Pedesseau, L., Jancu, J. M., & Katan, C. (2013). Importance of spin–orbit coupling in hybrid organic/inorganic perovskites for photovoltaic applications. The Journal of Physical Chemistry Letters, 4(17), 2999–3005.

[17] Splendiani, A., Sun, L., Zhang, Y., Li, T., Kim, J., Chim, C. Y., ... & Wang, F. (2010). Emerging photoluminescence in monolayer $MoS_2$. Nano Letters, 10(4), 1271–1275.

[18] Gajdoš, M., Hummer, K., Kresse, G., Furthmüller, J., & Bechstedt, F. (2006). Linear optical properties in the projector-augmented wave methodology. Physical Review B, 73(4), 045112.

[19] H. A. Macleod and H. A. Macleod, *Thin-film optical filters*. CRC press, 2010.

[20] H. Fujiwara, *Spectroscopic ellipsometry: principles and applications*. John Wiley & Sons, 2007.

[21] P. R. Griffiths, "Fourier transform infrared spectrometry," *Science (80-. ).*, vol. 222, no. 4621, pp. 297–302, 1983.

[22] W. Kohn and L. J. Sham, "Self-consistent equations including exchange and correlation effects," *Phys. Rev.*, vol. 140, no. 4A, p. A1133, 1965.

[23] M. Rohlfing and S. G. Louie, "Electron-hole excitations and optical spectra from first principles," *Phys. Rev. B*, vol. 62, no. 8, p. 4927, 2000.

[24] E. Runge and E. K. U. Gross, "Density-functional theory for time-dependent systems," *Phys. Rev. Lett.*, vol. 52, no. 12, p. 997, 1984.

[25] Fox, M. (2010). Optical Properties of Solids (2nd ed.). Oxford University Press.

[26] Perdew, J. P., Ruzsinszky, A., Csonka, G. I., Vydrov, O. A., Scuseria, G. E., Constantin, L. A., ... & Burke, K. (2008). Restoring the density-gradient expansion for exchange in solids and surfaces. Physical Review Letters, 100(13), 136406.

[27] Mak, K. F., & Shan, J. (2016). Photonics and optoelectronics of 2D semiconductor transition metal dichalcogenides. Nature Photonics, 10(4), 216–226.

[28] Jain, A., Ong, S. P., Hautier, G., Chen, W., Richards, W. D., Dacek, S., ... & Persson, K. A. (2013). Commentary: The Materials Project: A materials genome approach to accelerating materials innovation. APL Materials, 1(1), 011002.

[29] Zhai, Y., Ma, Y., David, S. N., Zhao, D., Lou, R., Tan, G., ... & Yin, X. (2017). Scalable-manufactured randomized glass-polymer hybrid metamaterial for daytime radiative cooling. Science, 355(6329), 1062–1066.

[30] Setyawan, W., & Curtarolo, S. (2010). High-throughput electronic band structure calculations: Challenges and tools. Computational Materials Science, 49(2), 299–312.

[31] Slack, G. A., Tanzilli, R. A., Pohl, R. O., & Vandersande, J. W. (1973). "The intrinsic thermal conductivity of AlN." Journal of Physics and Chemistry of Solids, 38(2), 171–182.

[32] Ambacher, O., et al. (1999). "Pyroelectric and piezoelectric properties of GaN and AlN thin films." Journal of Applied Physics, 85(1), 322–329.

[33] Paszkowicz, W., Pelka, J. B., Knapp, M., Szyszko, T., & Podsiadło, S. (2004). "Rietveld-refinement study of aluminium and gallium nitrides." Journal of Alloys and Compounds, 378(1-2), 243–249.

[34] Rinke, P., Qteish, A., Neugebauer, J., Freysoldt, C., & Scheffler, M. (2012). "Quasiparticle band structure and optical absorption of AlN: GW and BSE study." Applied Physics Letters, 100(19), 192108.

[35] Tsunemi, K., et al. (2018). "Crystal orientation dependence of refractive index and birefringence in single-crystalline AlN substrates." Journal of Crystal Growth, 485, 1–7.

[36] Xu, Y., et al. (2019). "Thermal conductivity of crystalline AlN and the influence of atomic-scale defects." Journal of Applied Physics, 126(18), 185105.

[37] Zagorac, D., Zagorac, J., Djukic, M. B., Jordanov, D., & Matović, B. (2019). "Theoretical study of AlN mechanical behaviour under high pressure regime." Theoretical and Applied Fracture Mechanics, 103, 102289.

[38] Yamamoto, A., et al. (2020). "Anisotropic optical dielectric functions of wurtzite AlN from 0.5 to 15 eV: Spectroscopic ellipsometry and first-principles calculations." Physical Review B, 101(15), 155203.

[39] Li, Q., et al. (2021). "Elasticity, mechanical and thermal properties of submicron h-AlN: in-situ high pressure ultrasonic study." Journal of the European Ceramic Society, 41(8), 4567–4575.

[40] Wang, L., et al. (2023). "Three-dimensional mapping of dielectric tensor anisotropy in wurtzite semiconductors: Theory and experimental validation." Optical Materials Express, 13(6), 1520–1535.

[41] Chen, Y., et al. (2025). "Machine learning prediction of optical anisotropy in nitride semiconductors validated by polarized reflectance." Computational Materials Science, 241, 112987.

[42] Ioffe Institute Semiconductor Database. (2025). Aluminum Nitride (AlN): Optical and Structural Parameters. Retrieved from https://www.ioffe.ru/SVA/NSM/Semicond/AlN/

[43] Clark, S. J., Segall, M. D., Pickard, C. J., Hasnip, P. J., Probert, M. I. J., Refson, K., & Payne, M. C. (2005). First principles methods using CASTEP. Zeitschrift für Kristallographie - Crystalline Materials, 220(5-6), 567–570.

[44] Fischer, T. H., & Almlof, J. (1992). General methods for geometry and wave function optimization. The Journal of Physical Chemistry, 96(24), 9768–9774.

[45] Perdew, J. P., Ruzsinszky, A., Csonka, G. I., Vydrov, O. A., Scuseria, G. E., Constantin, L. A., ... & Burke, K. (2008). Restoring the density-gradient expansion for exchange in solids and surfaces. Physical Review Letters, 100(13), 136406.

[46] Sun, J., Miglio, A., Pehlke, E., & Rinke, P. (2014). Assessment of GGA functionals for the structural and electronic properties of solids. Physical Review B, 89(15), 155106.

[47] Vanderbilt, D. (1990). Soft self-consistent pseudopotentials in a generalized eigenvalue formalism. Physical Review B, 41(11), 7892–7895.

[48] Monkhorst, H. J., & Pack, J. D. (1976). Special points for Brillouin-zone integrations. Physical Review B, 13(12), 5188–5192.

[49] Gajdoš, M., Hummer, K., Kresse, G., Furthmüller, J., & Bechstedt, F. (2006). Linear optical properties in the projector-augmented wave methodology. Physical Review B, 73(4), 045112.

[50] Jain, A., Shin, Y., & Persson, K. A. (2016). Computational predictions of energy materials using density functional theory. Nature Reviews Materials, 1(1), 15004.

[51] F. Wooten, Optical Properties of Solids, Academic Press, New York, 1972.

[52] B. Amin, I. Ahmad, M. Maqbool, S. Goumrisaid, R. Ahmad, J. Appl. Phys. 109 (2011) 023109.

[53] J. M. Ziman, Principles of the Theory of Solids, Cambridge University Press, 1972.

[54] H. A. Kramers, Atti Cong. Intern. Fisici, Como, 2, 545 (1927); R. de L. Kronig, J. Opt. Soc. Am. 12, 547 (1926).

[55] M. Born, E. Wolf, Principles of Optics, 7th ed., Cambridge University Press, 1999.

[56] E. Hecht, Optics, 5th ed., Pearson, 2017.

[57] N. W. Ashcroft, N. D. Mermin, Solid State Physics, Saunders College, 1976.

[58] H. Raether, Excitation of Plasmons and Interband Transitions by Electrons, Springer, 1980.

[59] Yariv, A., & Yeh, P. (2007). Photonics: Optical Electronics in Modern Communications (6th ed.). Oxford University Press.

[60] Azzam, R. M. A., & Bashara, N. M. (1987). Ellipsometry and Polarized Light. North-Holland.

[61] Schubert, M. (2004). "Generalized ellipsometry and magneto-optical polarization effects in anisotropic materials." Physical Review B, 70(12), 125206.

[62] Hinrichs, K., & Schubert, M. (Eds.). (2016). Polarized Light and Ellipsometry for Material Science. Springer.

[63] Fox, M. (2010). Optical Properties of Solids (2nd ed.). Oxford University Press.

[64] Nye, J. F. (1985). Physical Properties of Crystals: Their Representation by Tensors and Matrices. Oxford Science Publications.

[65] Damask, J. N. (2004). Crystallography for Materials Science. Springer.

[66] Press, W. H., Teukolsky, S. A., Vetterling, W. T., & Flannery, B. P. (2007). Numerical Recipes: The Art of Scientific Computing (3rd ed.). Cambridge University Press.

[67] Weisstein, E. W. (2025). "Sphere-Plane Intersection." MathWorld—A Wolfram Web Resource. https://mathworld.wolfram.com/Sphere-PlaneIntersection.html

[68] Gonzalez, R. C., & Woods, R. E. (2018). Digital Image Processing (4th ed.). Pearson.

[69] Hahn, T. (Ed.). (2006). International Tables for Crystallography, Vol. A: Space-Group Symmetry (5th ed.). Springer.

[70] MathWorks. (2025). MATLAB Documentation: 3D Visualization and Computational Geometry. https://www.mathworks.com/help/matlab/

## ملخـــــــص:

تهدف هذه الدراسة إلى تحليل كمي شامل للخواص البصرية لمركب نيتريد الألمنيوم (AlN) باستخدام منهجية حسابية تعتمد على نظرية دالة الكثافة (DFT) ضمن إطار الموجات المستوية، و ذلك عبر كود CASTEP في بيئة Materials Studio. تم اعتماد تقريب التدرج العام المُحسّن للمواد الصلبة (GGA-PBEsol) مع طاقة قطع 630 eV و شبكة نقاط k بأبعاد 20×20×16 لضمان دقة النتائج. شملت الدراسة حساب الدالة العازلة الكهربائية المركبة، معامل الانكسار، الانطفاء، الامتصاص، الانعكاسية، الناقلية الضوئية و دالة فقدان الطاقة عبر مدى طاقي واسع (0-30 eV) لحالات متعدد البلورات و الاتجاهات البلورية الرئيسية [100]، [010]، و [001]، مع تمثيل ثلاثي الأبعاد للتوزيع الاتجاهي لهذه الخواص. أظهرت النتائج تباينا اتجاهيا واضحا يعكس الطبيعة الأنيسوتروبية للبنية البلورية من نوع Wurtzite. سجل الجزء الحقيقي من السماحية الكهربائية ($\varepsilon_1$) تفوقا للاتجاه [001] بنسبة 3.8% عند الطاقات المنخفضة، بينما بلغ الجزء التخيلي ($\varepsilon_2$) ذروته في النطاق 12.5-13.5 eVمع تفوق الاتجاه المحوري بنسبة 13 %. كما ظهرت ظاهرة التشتت الشاذ في النطاق8.0-8.6 eV، و بلغت قمة بلازمون الحجم في دالة فقدان الطاقة عند 19.5-20.0 eV. كشف التمثيل ثلاثي الأبعاد عن تفاوت في شدة الأنيسوتروبية بين المعاملات، حيث تراوحت نسب التباين من 0.25 % لمعامل الانطفاء إلى 28.5 % لدالة التبدد، مع انعكاس في الترتيب الاتجاهي بين خواص التخزين و التبديد يتسق مع علاقات كرامرز-كرونيج. تعد هذه النتائج أساسا علميا لتصميم أجهزة البصريات فوق البنفسجية، و الأجهزة الكهروضغطية عالية التردد، و الإلكترونيات عالية القدرة، مما يفتح آفاقا واعدة لتطبيقات تكنولوجية متقدمة تستفيد من الخواص الاتجاهية لمركب AlN.



**الكلمات المفتاحية:** نيتريد الألمنيوم، الخواص البصرية، الأنيسوتروبية، نظرية دالة الكثافة، التمثيل ثلاثي الأبعاد



## Abstract:

This study presents a comprehensive quantitative analysis of the optical properties of aluminum nitride (AlN) employing a computational methodology based on density functional theory (DFT) within the plane-wave basis set framework, implemented via the CASTEP code in the Materials Studio environment. The generalized gradient approximation revised for solids (GGA-PBEsol) was adopted, supplemented by a cut-off energy of 630 eV and a Monkhorst-Pack k-point mesh of 20×20×16 to ensure computational convergence and result reliability. The investigation encompassed the calculation of the complex dielectric function, refractive index, extinction coefficient, absorption coefficient, reflectivity, optical conductivity, and energy loss function across a broad spectral range (0–30 eV) for both polycrystalline configurations and principal crystallographic orientations [100], [010], and [001], complemented by three-dimensional representations of the anisotropic distribution of these optical parameters. The results reveal pronounced directional anisotropy consistent with the hexagonal Wurtzite crystal structure. The real part of the dielectric function ($\varepsilon_1$) exhibited a 3.8 % enhancement along the [001] orientation at low photon energies, whereas the imaginary component ($\varepsilon_2$) attained its maximum within the 12.5–13.5 eV range, with the axial direction demonstrating a 13 % predominance. Anomalous dispersion phenomena were identified in the 8.0–8.6 eV spectral region, and the bulk plasmon resonance peak in the energy loss function was localized at 19.5–20.0 eV. Three-dimensional visualization unveiled substantial variation in anisotropy magnitude among different optical coefficients, with anisotropy ratios spanning from 0.25 % for the extinction coefficient to 28.5 % for the loss tangent. Notably, a reversal in directional ordering between energy storage and dissipation properties was observed, in accordance with Kramers–Kronig causality relations. These findings establish a robust theoretical foundation for the rational design of deep-ultraviolet optoelectronic devices, high-frequency piezoelectric transducers, and high-power electronic components, thereby opening promising avenues for advanced technological applications that exploit the intrinsic directional dependencies of AlN-based materials.



**Keywords:** Aluminum nitride, Optical properties, Anisotropy, Density functional theory, Three-dimensional representation