

الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية  
وزارة التعليم العالي و البحث العلمي  
جامعة احمد دراية ادرار

القسم: علوم المادة

كلية: العلوم التكنولوجية

تخصص : فيزياء طاقوية والطاقات المتجددة



مذكرة لنيل شهادة ماستر أكاديمي:  
تحت عنوان :

فحص الخواص الالكترونية والمغناطيسية والاداء  
نصف المعدني لـ InSb مطعم بـ Fe

تحت إشراف الأستاذ:

أ. لعروسي عبد الحق

من اعداد:

أبختي وفاء

لجنة المناقشة :

جامعة أدرار

رئيسا

1- د. ساخر الفاهم

جامعة أدرار

مشرفا ومقررا

2- أ. لعروسي عبد الحق

جامعة أدرار

مناقشا

3- بزة عبد الفتاح

السنة الدراسية: 2021/2020



## شهادة الترخيص بالإيداع

انا الأستاذ(ة): أحمد وسي عبد الحق

المشرف مذكرة الماستر.

الموسومة بـ: وقصص الخواص الالكترونية، المختلجية والاداء

رصف المحمدني ل INSb وحدر ب Fe

من إنجاز الطالب(ة): أ دختي و فاء

و الطالب(ة):

كلية: العلوم والتكنولوجيا

القسم: علوم الحارة

التخصص: قيرياء الطاقات المتجددة

تاريخ تقييم / مناقشة: أشهر جوان 2021

أشهد ان الطلبة قد قاموا بالتعديلات والتصحيحات المطلوبة من طرف لجنة التقييم / المناقشة، وان المطابقة بين النسخة الورقية والإلكترونية استوفت جميع شروطها. وإمكانهم إيداع النسخ الورقية (02) والالكترونية (PDF).

= امضاء المشرف:

06 جويلية 2021

ادرار في

مساعد رئيس القسم:

قاسم  
مساعد رئيس قسم علوم المادة مكلف بالتدريس والتعليم في التدرج





# إهداء

اهدي مجهودي وعملي هذا الى :

من قال فيهما رب العزة : " فلا تقل لهما أف ولا تنهرهما و قل لهما قولا كريما "

الى فيض الحنان و الصبر في حياتي .....أمي الغالية

الى مرشدي في طريق العلم والتعلم والطموح .....أبي الحبيب

الى من شاركوني بحر ذكريات وأيام طفولتي و شبابي..... أخواتي وإخوتي

إلى كل من مهد لي طريق العلم لأنير به دربي

إلى.....أساتذتي

الى من سلكن معي طريق العلم والتعلم في هاته الحياةالى.....

صديقاتي الغاليات على قلبي

الى كل فرد من أفراد العائلة الأفاضل أبختي .

الى كل مسلم شهد ..... انه لا اله الا الله

ومحمدا رسول الله .



ابختي وفاء



حمداً و شكراً لله على توفيقه لنا لنعمتي المعرفة والعلم وصلى الله وسلم على من

أدى الأمانة ويبلغ الرسالة محمد صلى الله عليه وسلم :

اتقدم بشكر وعرفان الى كل من ساندني في انجاز هذا العمل من قريب أو بعيد

وبالأخص أستاذي المشرف : لعروسي عبد الحق والى اللجنة المناقشة التي

ستصوب هفواتي إن شاء الله، واتقدم بعبارات الشكر والتقدير لمن كانوا سبب

لوجودي وسندني في هاته الحياة والدأي حفظهم الله ، وشكر موصول لمن

شاركني حياتي بحلوها ومرها إخوتي وإلى من شاركونا أيام التعلم والتعليم في

حياتي صديقاتي الغاليات وإلى من مرت معهم سنتين في طريق العلم زملائي

في الدراسة و الى من زرعوا التفاؤل في درينا وقدموا لنا المساعدات

والتسهيلات والمعلومات أساتذة الفيزياء طاقات المتجددة والى جميع الطاقم

الإداري والبيداغوجي وفي الأخير اتوجه بشكر خاص لكل أفراد عائلة أبختي.



# الفهرس

الإهداء

الشكر

الفهرس

أ..... المقدمة العامة

الفصل الأول : نظرة عامة عن أشباه النواقل III-V

3..... 1.1 المقدمة

3..... 2-1- تعريف أشباه الموصلات

3..... 3-1- أنواع أشباه الموصلات

3..... 3-1-1 أشباه الموصلات النقية

4..... 3-2-1 أشباه الموصلات غير النقية

4..... 3-2-1-1 الموصلات من النوع السالب N-Type

5..... 3-2-2-1 الموصلات من النوع الموجب P-Type

6..... 4-1 - الروابط في أشباه الموصلات النقية

7..... 5-1 - التطعيم

8..... 6-1- الوصلة الثنائية PN

8..... 7-1- منطقة الاستنزاف

9..... 8-1- الوصلة PN في حالة الاتزان الحراري

9..... 9-1- الاستقطاب في الوصلة PN

10..... 9-1-2- الاستقطاب العكسي للوصلة PN

11..... 9-1-1- الاستقطاب المباشر

12..... 10-1- انثيمون

12..... 10-1-1- تعريفه

13..... 10-2- خصائصه

13..... 11-1- الإنديوم

13..... 11-1-1- تعريفه

14..... 11-1-2- خصائصه

15..... 12-1- انتيمونيد الانديوم

15..... 12-1-1- تعريفه

15..... 12-1-2- تاريخه

16..... 12-1-3- خصائصه

16..... 12-1-3-1- خصائص فيزيائية

16..... 12-1-3-2- خصائصه الالكترونية

17..... قائمة المصادر

الفصل الثاني : نظرية DFT وطريقة FP-LAPW والكمون الكامل

19..... 11-1- المقدمة

19..... 11-2- معادلة شرودنجر للبلورة

21..... 11-2-1- تقريب بورن\_اوينهايمر (Born-Oppenheimer)

22..... 11-2-2- تقريب هارترتي فوك

25..... 11-3- نظرية دالية الكثافة

25..... 11-3-1- مبدأ نظرية DFT

26..... 11-3-1-1- نظرية هوهنبارغ- كوهن

26..... أ- النظرية الأولى

27..... ب- النظرية الثانية

27..... 11-3-1-2- معادلة كوهن- شام (Kohn-Sham)

28..... 11-3-1-3- حل معادلة كوهن - شام

30..... 11-4-1- التقريبات

30..... 11-4-1- تقريب كثافة الموضع LDA ( The Local Density Approximation )

- 31.....(Generalised Gradient Approximation) GGA تقريب التدرج المعمم 2-4-II
- 31.....FP-LAPW الكامل والكمون خطيا والمتزايدة المستوى المتزايدة خطيا والكمون الكامل FP-LAPW 5-II
- 32..... (APW) المتزايدة المستوى المتزايدة (APW) 1-5-II
- 35 .....FP-LAPW مبدأ طريقة FP-LAPW 2-5-II
- 36..... دور الطاقات الخطية. 3-5-II
- 37..... برنامج Wien2K 4-5-II

### الفصل الثالث: النتائج والمناقشة

- 43..... المقدمة 1-III
- 44..... الخصائص البنيوية 2-III
- 45..... الخصائص الالكترونية 3-III
- 46..... عصابات الطاقة 1-3-III
- 47..... كثافة الحالات الكلية (DOS) والجزئية (TDOS) 2-3-III
- 53..... الخصائص المغناطيسية 4-III
- 55..... خلاصة عامة
- 57..... قائمة المصادر والمراجع

الملخص

## فهرس الاشكال :

- 4..... الشكل [ 1- 1 ] : شبه موصل نقي
- 5..... الشكل [ 2- 1 ] : الحاملات الاغلبية والاقلية في الشبه الموصل نوع N
- 6..... الشكل [ 3- 1 ] - الحاملات الاغلبية والاقلية في الشبه الناقل نوع p
- 7..... الشكل [ 4- 1 ] : التركيب البنائي لبلورة الشبه الموصل النقي (السليسيوم)
- 7..... الشكل [ 5- 1 ] تطعيم شبه الموصل بذرة الانتيمون
- 9..... الشكل [ 6- 1 ] : الوصلة p/n عند الاتزان
- 10..... الشكل [ 7- 1 ] الوصلة P/N عند الاستقطاب المباشر
- 10..... الشكل [ 8- 1 ] دائرة ثنائي يشتغل في حالة الاستقطاب المباشر
- 11..... الشكل [ 9- 1 ] : الوصلة P/N في حالة الستقطاب العكسي
- 11..... الشكل [ 10- 1 ] دائرة ثنائي يشتغل في حالة الاستقطاب العكسي
- 12..... الشكل [ 11- 1 ] - معدن الانتيمون
- 15..... الشكل [ 12- 1 ] - انتميونيد أنديوم
- 30..... الشكل [ 1- 11 ] - خوارزمية حل معادلة كوهن-شام
- 32..... الشكل [ 2- 11 ] - شكل كمون M.
- 35..... الشكل [ 11- 1 ] - الكمون بلوري لشبكة مربعة ثنائية الأبعاد
- 39..... الشكل [ 4- 11 ] - بنية برنامج Wien2.
- 44..... الشكل (1-11) : البنية البلورية للمركب  $Sb_{0.5}Fe_{0.5}In$



الشكل (III-2) : تغيرات الطاقة الكلية للمركبين  $\text{InSb}$  و  $\text{In}$  و  $\text{Sb}_{0.5}\text{Fe}_{0.5}$  بدلالة الحجم.....45

الشكل (III-3) : منطقة بريلوين الاولى مرفقة بنقاط عالية التناظر للمركب  $\text{Sb}_{0.5}\text{Fe}_{0.5}\text{In}$ .....46

الشكل (III-4) : بنية عصابات الطاقة لسبين اعلى للمركب  $\text{Sb}_{0.5}\text{Fe}_{0.5}\text{In}$  و  $\text{InSb}$ .....47

الشكل (III-5) : كثافة الحالة الكلية للمركب  $\text{InSb}$ .....48

الشكل (III-6) : كثافة الحالة الكلية للمركب والجزئية لذرة  $\text{InSb1}$  و  $\text{Sb}_{0.5}\text{Fe}_{0.5}$ .....48

الشكل (III-7) : كثافة الحالة الكلية للمركب والجزئية لذرة  $\text{InIn1}$  و  $\text{Sb}_{0.5}\text{Fe}_{0.5}$ .....49

الشكل (III.8) : كثافة الحالة الكلية للمركب والجزئية لذرة  $\text{InIn2}$  و  $\text{Sb}_{0.5}\text{Fe}_{0.5}$ .....49

الشكل (III-9) : كثافة الحالة الكلية للمركب والجزئية لذرة  $\text{Fe1}$  و  $\text{Fe2}$  و  $\text{Sb1}$  و  $\text{Sb}_{0.5}\text{Fe}_{0.5}$ .....50

الشكل (III-10) : كثافة الحالة الكلية للمركب والجزئية لذرة  $\text{Fe1}$  و  $\text{Fe2}$  و  $\text{In2}$  و  $\text{Sb}_{0.5}\text{Fe}_{0.5}$ .....50

الشكل (III-11) : كثافة الحالة الكلية للمركب والجزئية لذرة  $\text{Fe1}$  و  $\text{Fe2}$  و  $\text{In1}$  و  $\text{Sb}_{0.5}\text{Fe}_{0.5}$ .....51

الشكل (III-12) : كثافة الحالة الجزئية لذرة  $\text{Fe2}$  في المدارين  $p$  و  $s$  للمركب  $\text{InSb}_{0.5}\text{Fe}_{0.5}$ .....52

الشكل (III-13) : كثافة الحالة الجزئية لذرة  $\text{Fe2}$  في المستويين الذريين  $d-eg$  و  $d-t2g$  للمركب

52..... $\text{Sb}_{0.5}\text{Fe}_{0.5}\text{In}$

الشكل (III-14): كثافة الحالة الجزئية لذرة  $\text{Fe1}$  في المستويين الذريين  $d-eg$  و  $d-t2g$  للمركب

53..... $\text{Sb}_{0.5}\text{Fe}_{0.5}\text{In}$

## فهرس الجدول

الجدول 1-10-2 - جدول خصائص انتيمون ..... 13

الجدول 1-11-2- جدول خصائص الانديوم ..... 14

الجدول (1-111): جدول قيم كل من ثابت الشبكة البلورية  $a(\text{Å})$  ومعامل الانضغاطية B والمشتقة

الاولى لمعامل الانضغاطية B' للمركبين  $\text{InSb}$  و  $\text{Sb}_{0.5}\text{Fe}_{0.5}\text{In}$  ..... 45

الجدول (2-111) : قيم العزم المغناطيسي الكلي والجزئي للمركبين  $\text{InSb}$  و  $\text{Sb}_{0.5}\text{Fe}_{0.5}\text{In}$  ..... 53

جدول الاختصارات

الصفحة	الاسم بالعربية	الاسم باللغة الاجنبية	الاختصار
3	النوع السالب	Négatif Type	N-Type
4	النوع الموجب	Positif Type	P-Type
8	الوصلة الثنائية	Semi-conducteur négatif et Semi-conducteur positif	PN
12	انتيمون	Antimoine	Sb
13	الانديوم	Indium	In
15	دالية الكثافة	Density Functional Theory	DFT
30	تقريب كثافة الموضع	The local Density Approximation	LDA
31	تقريب التدرج المعمم	Generalised Gradient Approximation	GGA
31	طريقة الامواج المستوية المتزايدة خطيا و الكمون الكامل	Full Potential-Linearized Augmented Plane Wave	FP-LAPW
32	طريقة الامواج المستوية المتزايدة خطيا	Augmented Plane Wave	APW
47	كثافة الحالات الكلية	Densité globale de cas	DOS
47	كثافة الحالات الجزئية	Densité d' états partiels	TDOS

# المقدمة العامة:

### المقدمة العامة :

تعتبر فيزياء الجسم الصلب من أهم المجالات التي تختص في دراسة الأجسام وتحديد طبيعتها سواء كانت ناقلية، نصف ناقلية أو معدنية أو غير ذلك، وترتبط دراسة المواد ووصفها وتحديد خصائصها بالتطور التكنولوجي وذلك لاهتمام الباحثين بنوع المادة وأهميتها قبل إدراجها في تكنولوجيا معينة، حيث أن كل خاصية أو ميزة لمركب معين تمتلك أهمية في مجال ما عن غيرها ففي هذا العمل قمنا بفحص الخواص الالكترونية والمغناطيسية والأداء نصف المعدني لـ  $\text{InSb}$  مخدر بـ  $(\text{Fe})$  فتطرقنا خلال هذه الدراسة الى ثلاثة فصول: ففي الفصل الاول تكلمنا فيه عن عومويات اشباه الموصلات من النوع III-V التي ينتمي اليها  $\text{InSb}$  وفي الفصل الثاني تحدثنا عن نظريات والدول المستخدمة في دراستنا نظرية شروبيدينغر ودالية الكثافة DFT وطريقة الامواج المستوية المتزايدة خطيا-FP LAPW والفصل الثالث درسنا الخصائص البنيوية لعينية أنتيمونيد الإنديوم  $\text{InSb}$  منشطة بالحديد  $\text{In}_{1-x}\text{Fe}_x\text{Sb}$  حيث يتم تحديد أبعاد البلورة لهذا المركب (فضاء الخلية, قسوة المادة, طاقة الربط.... الخ , ) والخصائص الالكترونية ( بنية العصابات, كثافة الحالات).

# الفصل الأول

III-V نظرة عامة عن أشباه النواقل

1.1 المقدمة:

عرف الإنسان منذ القدم المواد بمختلف أشكالها وأنواعها فقام بتصنيفها الى مواد عازلة وناقلة تستعمل كل منها في مجالها الخاص، وبعد ذلك أكتشف أنه هناك مواد أخرى تكون ناقلة في ظروف معينة وعازلة في ظروف أخرى سميت " أشباه النواقل" أو أشباه الموصلات أي مواد نصف ناقلة تتمتع هذه المواد بمجموعة من الخواص تجعلها ذات أهمية للعديد من التطبيقات في مجال الصناعات الإلكترونية وتوليد الطاقة الكهربائية

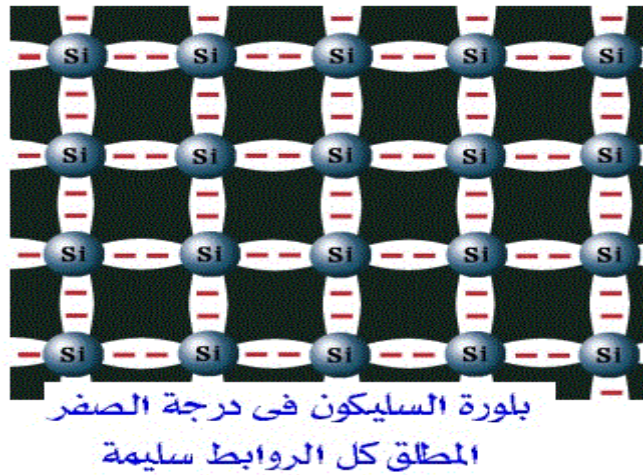
1-2- تعريف أشباه الموصلات:

هي مواد غير موصلة لتيار أو ضعيفة التوصيل في الظروف العادية ومن أشهر المواد شبه الموصلة السيلكون والجرمانيوم حيث يحتوي مستوى الطاقة الأخير لها على أربع الكترونات فترتبط كل ذرة مع أربع ذرات مجاورة لها لتكوين روابط تساهمية بين كل ذرتين للوصول الى حالة التركيب الثماني ونلاحظ انه عند خفض درجة حرارتها يجعله غير موصلة للتيار وذلك بسبب أن الألكترونات تصبح أكثر ارتباطا بالنواة، وعند درجة الصفر المطلق يكون ارتباط الألكترونات أكبر ما يمكن وعند زيادة درجة الحرارة تحصل بعض الالكترونات على طاقة تكفي لتغلب على طاقة الارتباط ويؤدي تحرر الالكترون الى تحركه حرا داخل الذرة تاركا وراءه فراغ يسمى "فجوة" [1]

1-3- أنواع أشباه الموصلات: هناك نوعين من أشباه الموصلات نقية وغير نقية

1-3-1 أشباه الموصلات النقية: هي مجموعة المواد النقية التي تحتوي كمية ضئيلة جدا من الشوائب، تكون عازلة تماما عند درجة 0 كلفن لشدة ارتباط الألكترونات بذراتها، عند رفع درجة حرارتها تصبح الطاقة الحرارية كافية لكسر بعض الروابط بين الذرات فتتحرر بعض الالكترونات تاركة مكانها

فجوة " ثقب " فتصبح البلورة موصلة للكهرباء عن طريق الفجوات التي تتحرك عكس الإلكترونات، تكمن أهمية الفجوة باعتبارها ناقلة للتيار الكهربائي مثل الاكترون، ولإيضاح ذلك فإننا نتخيل ما يحدث وهو أن إلكتروننا في ذرة مجاورة يمكن أن يتحرك ليملى تلك الفجوة مخلفا وراءه فجوة أخرى ليتحرك إلكترون في ذرة مجاورة أخرى أيضا لملأ تلك الفجوة، الفجوة تمثل شحنة موجبة مقدارها يساوي شحنة الاكترون ومعاكس له في اتجاه حركته والعوامل المؤثرة في توصيل أشباه الموصلات النقية هي درجة الحرارة والتطعيم. [2]



الشكل [ 1 - 1 ] : شبه موصل نقي [11]

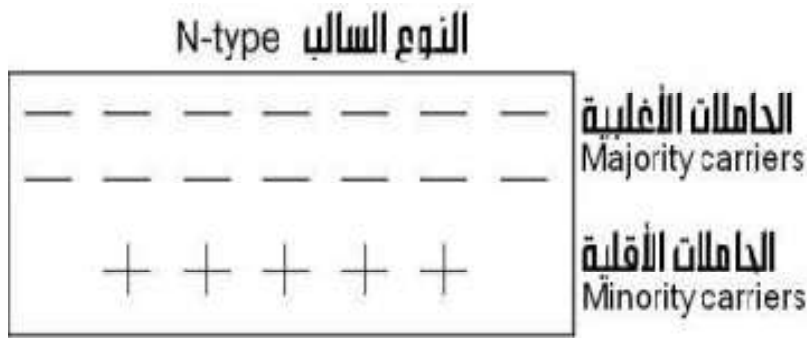
### 1-3-2- أشباه الموصلات غير النقية:

### 1-3-2-1- الموصلات من النوع السالب N-Type:

عبارة عن بلورة شبه موصل نقي مخلوطة ببعض ذرات الشوائب خماسية التكافؤ مثل الزرنيخ تحتوي في مستوى الطاقة الأخير على خمس الكترونات وليكن الزرنيخ مرتبطة بأربع ذرات سليكون عن طريق أربع روابط تتشارك فيهم ذرة الزرنيخ بأربع الكترونات ويبقى الإلكترون الخامس لذرة الزرنيخ



ضعيف الارتباط بها الاكترون حر، وكلما زاد عدد ذرات الشائبة يزداد عدد الالكترونات الحرة وبالتالي تزداد قدرة البلورة على توصيل التيار الكهربائي بها ناتجة عن حركة الالكترونات السالبة، ويسمى هذا النوع من ذرات الشوائب بالذرات المانحة، البلورة السالبة تكون متعادلة كهربائيا وذلك لأنها تتكون من ذرة متعادلة كهربائيا. [1]

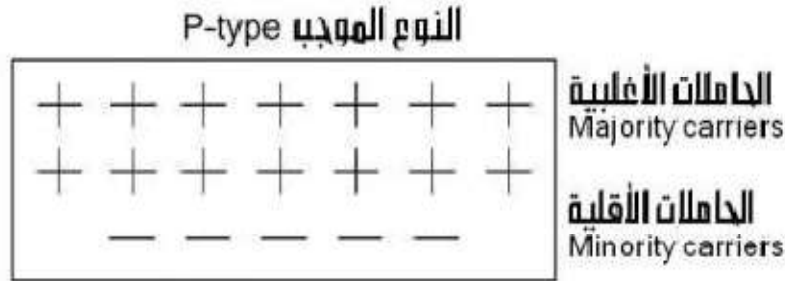


الشكل [ 1 - 2 ]: الحاملات الأغلبيية والأقلية في الشبه الموصل نوع N [4]

### 1-3-2-2 الموصلات من النوع الموجب P-Type:

عند إضافة عنصر ثلاثي التكافؤ مثل (Al ، In ، Ga) لبلورة السيلكون فان هذا العنصر سيحتل محل إحدى ذرات السيلكون وعندها ستكون الالكترونات التكافؤ الثلاثة لتساهم في الرابطة التساهمية بينما ستبقى رابطة تساهمية شاغرة وتكون فجوة موجبة ويسمى هذا النوع من أشباه الموصلات بالنوع الموجب وعندما تقوم إحدى الالكترونات التكافؤ بالقفز لهذه الفجوة من ذرة مجاورة فتنتشا فجوة أخرى في هذه المنطقة ليقفز إليها إلكترون آخر من ذرة مجاورة وهكذا تستمر عملية انتقال الالكترونات وتولد الفجوات حيث تبدو الفجوة كأنها تتحرك في حالة إضافة ذرات المجموعة الثالثة لشبه الموصل فان مستويات الشوائب تحتل مواقع فوق نطاق التكافؤ مباشرة ووجود هذه الشوائب في بلورة يؤدي الى تغير خواصها الكهربائية وتعتمد

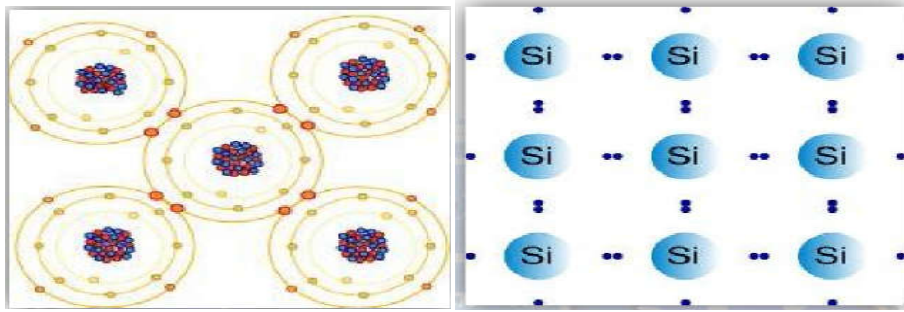
هذه الخواص على مقدار ذرات الشوائب على التأين وعلى كثافة الإلكترونات في نطاق التوصيل أو الثغوب في نطاق التكافؤ. [ 2 ]



الشكل [ 1 - 3 ] - الحاملات الأغلبيية والأقلبيية في الشبه الناقل نوع p. [4]

#### 1- 4 - الروابط في أشباه الموصلات النقية:

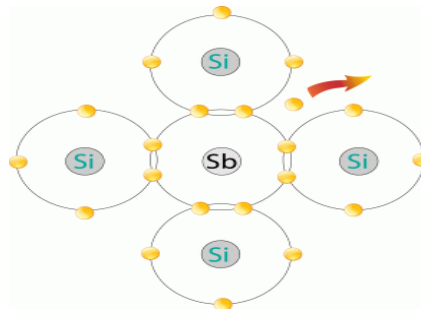
تعد العناصر النقية من المجموعة الرابعة في الجدول الدوري كالجرمانيوم والسيلكون أشباه موصلات نقية تمتلك بلوراتها تركيب الماس الذي تكون فيه الكترونات التكافؤ أربعة وتشكل أربع من أزواج الروابط الاكترون التساهمية بين الذرات وبالتسخين يتهيج إلكترون من حزمة التكافؤ الى حزمة التوصيل وفيزيائيا معناه إزالة إلكترون من رابطة تساهمية بسبب الهيجان الحراري لشبيكة ويسلك هذا الاكترون سلوك إلكترون حر خارج مخطط رابطة الشبيكة التساهمية ويمكنه العمل كناقل تيار خلال البلورة. [ 3 ]



الشكل [ 1 - 4 ]: التركيب البنائي لبلورة الشبه الموصل النقي (السيليسيوم) [1]

### 1-5 - التطعيم:

الإلكترونات الحرة والفجوات تنتج بواسطة طاقة حرارية أثناء تأثيرها في شبه موصل نقي، فنتج هاته الطاقة عدد قليل من الإلكترونات الحرة والفجوات ولكي نزيد عدد الإلكترونات والفجوات نقوم بعملية إضافة الشوائب الى شبه الموصل (التطعيم Doping) وهي إضافة شوائب ذرية الى بلورة الشبه الناقل السيلكون مثلاً وتتم هاته العملية عن طريق تحطيم البنية التركيبية للبلورة بصهرها ثم إضافة كمية من مادة شائبة تحتوي على خمسة الكترونات في غلافها الخارجي مثل الأنثيمون لزيادة الالكترونات كما يتم إضافة بلورة من البورون أو الألمنيوم أو الكالسيوم لزيادة عدد الفجوات وبإضافة كمية صغيرة من الزرنيخ فانه سينتشر في كافة أنحاء السيلكون المنصهر وأثناء بروده تتشكل بلورة صلبة ونجد كل ذرة داخل التركيب البلوري تحيط بها 4 ذرات متجاورة تتشارك معا في إلكترونات الغلاف الخارجي. [ 2 ]



الشكل [ 1 - 5 ] تطعيم شبه الموصل بذرة الانثيمون [12]

1-6- الوصلة الثنائية PN:

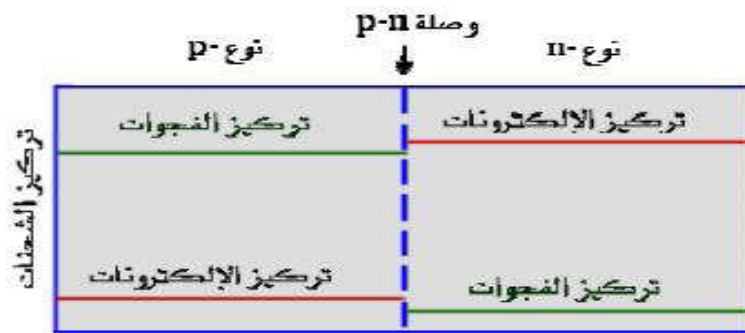
تعتبر الوصلة PN حجر الأساس الذي تعتمد عليه أشباه الموصلات، وهي عبارة عن بلورة واحدة من شبه موصل يكون جزء منها من مادة نوع P وهي موجبة والجزء الثاني من مادة نوع N وهي سالبة وتتشكل بإضافة ذرات مانحة Donors الى النصف الأول من البلورة وذرات مستقبلة Acceptor الى النصف الثاني من البلورة كما تحتوي الوصلة PN على حاجز Barrier يكون موجود بين سطحي الالتصاق للبلورة نوع N مع البلورة نوع P إذن فان حاملات التيار في النوع N هي الألكترونات إما في النوع P هي الفجوات، فعند التصاق البلورتين تنتقل الالكترونات القريبة من سطح الالتصاق من البلورة نوع N لتملأ الفجوات الالكترونية في البلورة نوع P.[5]

1-7- منطقة الاستنزاف:

أصل هذه التسمية كون المنطقة خالية الى حد ما من حاملات الشحنة الحرة بسبب التطعيم فانه يوجد انحدرًا في تركيز الالكترونات  $\frac{dn}{dx}$  في المنطقة السالبة وانحدرًا في تركيز الثقوب  $\frac{dp}{dx}$  إن وجود هذا النوع من الانحدر يؤدي الى انتقال بعض الألكترونات الى المنطقة الموجبة وكذلك بعض الثقوب الى المنطقة السالبة ويمكن تفسير هاته العملية بأنه عند دخول الألكترونات الى المنطقة P فانه يسقط في الفجوة ويصبح الإلكترون الحر إلكترونًا تكافئياً وكذلك بالنسبة للفجوات فعند دخولها الى المنطقة N تقتنص إلكترونًا حراً من بين الأعداد الكبيرة المحيطة بها أن كل إلكترون يعبر من المنطقة N الى P يترك وراءه ايونا موجبا يمثل هذا الايون الموجب شحنة ثابتة موقعا على حافة جانب N من الوصلة وكل فجوة تترك منطقة P وتنتشر عبر الوصلة N سوف تخلف وراءها ايونا سالبا على جانب P من الوصلة وبذلك سوف تظهر شحنتان مختلفتا الإشارة على جانبي الحد الفاصل في الوصلة PN. [5]

1-8- الوصلة PN في حالة الاتزان الحراري:

بدون وضع أي قوة خارجية ( كهرباء أو جهد ) تنتقل بعض الإلكترونات الزائدة في المنطقة N إلى المنطقة ذات الفجوات P وتتشكل منطقة الاستنزاف أو منطقة النضوب وتصبح هذه المنطقة عازلة بعد ذلك تتوقف عملية الانتشار فتكون الوصلة PN في حالة اتزان حراري ولكن عند ازدياد درجة الحرارة تزداد هذه المنطقة وبالتالي ازدياد الحقل الكهربائي حيث يكون جهد العتبة في هذه المنطقة حوالي 0.7 V في المواد المصنوعة من السيلكون و 0.3 v في الجرمانيوم. ويبين الشكل ( II . 5) التالي تركيز الإلكترونات والفجوات في الوصلة عند الاتزان [6]



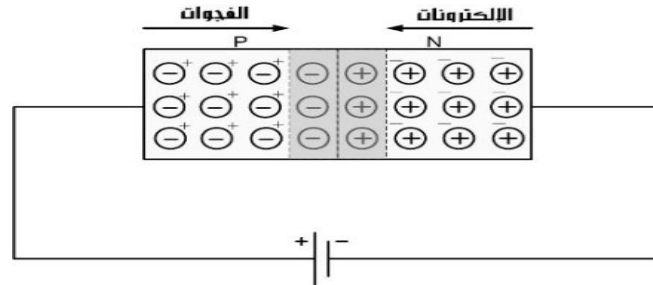
الشكل [ 1- 6]: الوصلة p/n عند الاتزان. [6]

1-9- الاستقطاب في الوصلة PN:

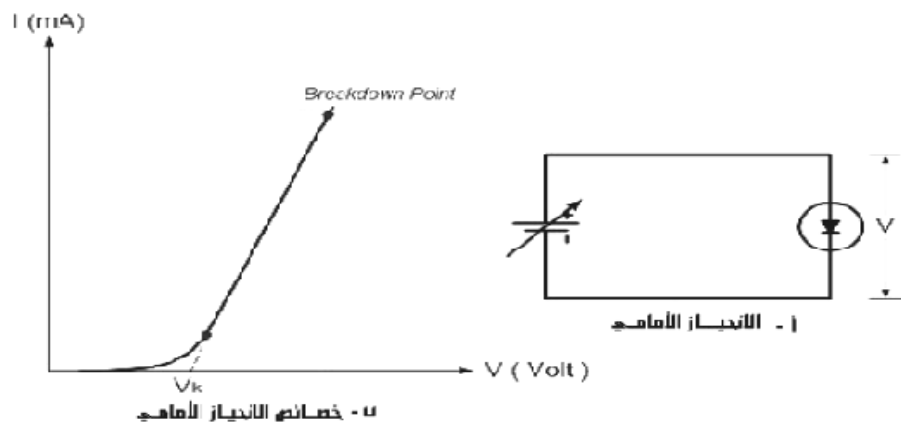
1-9-1- الاستقطاب المباشر: عند ربط مصدر جهد على طرفي وصلة PN فإن الفجوات التي

تمثل حاملات الشحنات الأكثرية في الطبقة P سوف تتحرك مبتعدة عن الطرف الموجب، كذلك الإلكترونات الحرة التي تمثل حاملات الشحنات الأكثرية سوف تتحرك مبتعدة عن الطرف السالب لمصدر الجهد مما يعني أن الفجوات والإلكترونات الحرة سوف تتحرك باتجاه الحاجز الكموني، وفي حالة تسليط

جهد (V) أكبر من جهد الإعاقة فإن هذا يعني أن الالكترونات سوف تعبر الحاجز نتيجة تغلبها على جهد الإعاقة وينتج عن ذلك مرور تيار كهربائي تعتمد قيمته على قيمة جهد الوصلة. [4]



الشكل [ 1-7] الوصلة P/N عند الاستقطاب المباشر

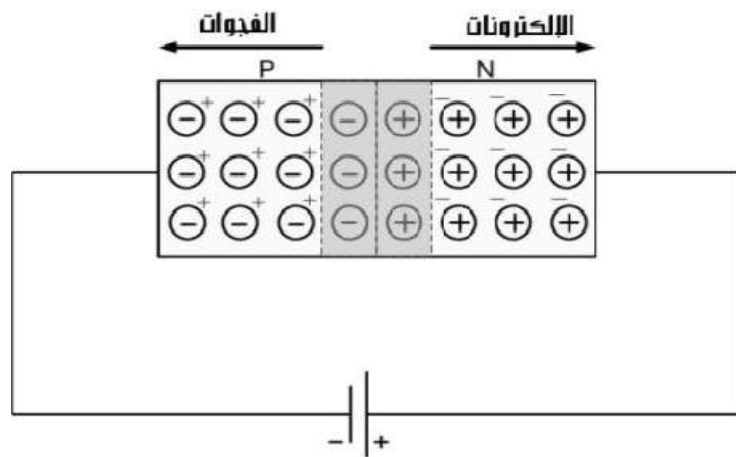


الشكل [ 1-8] دائرة ثنائي يشتغل في حالة الاستقطاب المباشر

### 1-9-2- الاستقطاب العكسي للوصلة PN:

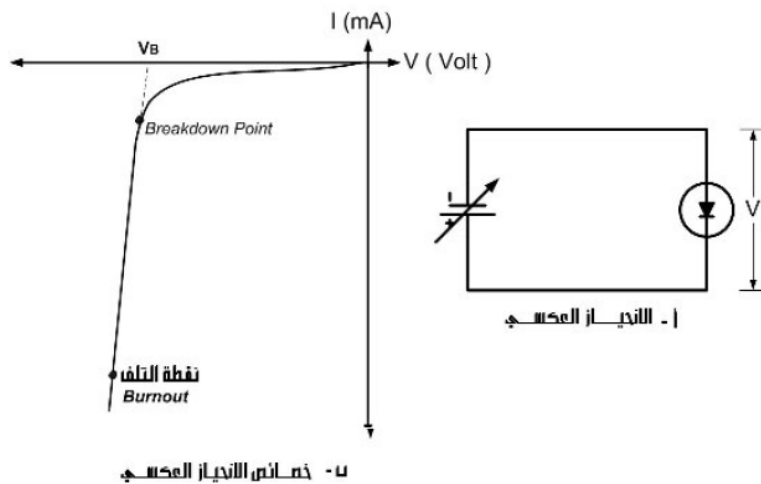
تقوم بربط الجهد بطرفي الوصلة PN فتربط P مع القطب السالب للمولد و N مع القطب الموجب و تسمى حالة لانحياز العكسي فتكون حاملات الشحنات الأكثرية في طبقة p هي الفجوات التي سوف تتحرك باتجاه الطرف السالب للمصدر ( أي مبتعدة عن الحاجز كذلك فإن حاملات شحنات الأكثرية في الطبقة n وهي الالكترونات سوف تتحرك باتجاه الطرف الموجب للمصدر أي مبتعدة عن الحاجز" هذا

يعني أن حاملات الشحنات سواءاً كانت فجوات او الكترولونات لن تعبر الحاجز ينتج عن ذلك عدم مرور تيار كهربائي بسبب وجود حاملات الشحنة الأقلية والتي تمثل الإلكترونات في الطبقة والفجوات في، فان هذه الشحنات الأقلية سوف تتحرك باتجاه الحاجز وينتج عن عبورها الحاجز مرور تيار كهربائي صغير جدا يسمى بتيار الانحياز ( الاستقطاب العكسي ). [ 4 ]



التيار المار في الثنائي ( الانحياز العكسي )

الشكل [ 1 - 9 ]: الوصلة P/N في حالة الاستقطاب العكسي [4]



u - خصائص الانحياز العكسي

الشكل [ 1 - 10 ] دائرة ثنائي يشتغل في حالة الاستقطاب العكسي [4]

1-10- انتيمون:

1-10-1- تعريفه:

هو شبه فلز (semi-metal) يرمز له بـ Sb عدده الذري 51 ذو لون رمادي ضارب الى الفضي يتوجد على شكل بلورات وكتل فضية صغيرة صفائحية الشكل على الكوارتز فيتوجد بندرة كعنصر طليق وفي العادة في عروق حرارية مائية، اسمه مشتق من الكلمتين اليونانيتين **monos** و **lanti** تعنيان " ليس وحده " فهو يتحد بسهولة مع معادن اخرى كالكبريت، ذو سمية معتدلة يجب التعامل معه بحرص. [7]



شكل [ 1-11 ] - معدن الانتيمون [7]



1-10-2- خصائصه:

121.760 g/mol	الكتلة الذرية
2.05 مقياس باولنج	الكهروسالبية
145 pm	نصف القطر الذري
138 pm	نصف القطر التساهمي
$4d^{10} 5s^2 5p^3$ [kr]	التوزيع الإلكتروني
834 kJ/mol	طاقة التأين 1
1594.9 kJ/mol	طاقة التأين 2
2440 kJ/mol	طاقة التأين 3
8-903.7(K) 630.63 (م°)	درجة الانصهار
1860 (K) / 1587 (م°)	درجة الغليان
مغناطيسية معاكسة	المغناطيسية
3	صلابة موس
نظام بلوري ثلاثي	البنية البلورية

الجدول 1-10-2- جدول خصائص انتيمون [ 8 ]

1-11-1- الإنديوم:

1-11-1- تعريفه:

الإنديوم عنصر فلزيّ كيميائي نادر، وناعم إلى أبعد حد، ولونه أبيض فضي ولا يوجد هذا العنصر مستقلاً بذاته. يُستخرج معظم الإنديوم من خامات معينة من معدن الزنك. يُستخدم الإنديوم لطلاء محامل الآلات ذات السرعة الفائقة. ينتشر الزيت فوق الإنديوم بطبقة متساوية السمك، ويجعل المحامل

تدور بسلاسة. يزيد عنصر الأنديموم سريان الكهرباء داخل عنصر الجرمانيوم. وتُضاف كميات قليلة جداً من عنصر الأنديموم إلى عنصر الجرمانيوم لصنع الترانزستورات التي تُستخدم في أجهزة الراديو والأجهزة الإلكترونية. [ 8 ]

1-11-2- خصائصه:

الكهروسالبية	1.78 (مقياس باولنج)
نصف القطر الذري	155 pm
التوزيع الإلكتروني	$4d^{10}5s^25p^1$
طاقة التأين 1	558,3 kJ / mol
طاقة التأين 2	1820,7 kJ / mol
طاقة التأين 3	2704 kJ / mol
درجة الانصهار	429,7485 (K°) 156,598 (°C)
درجة الغليان	2072 (°C) / 2345 (K)
مغناطيسية	$\chi_m = -5,1 \cdot 10^{-5}$ (مغناطيسي)
حجم المولي	$15,76 \cdot 10^{-6} \text{ m}^3/\text{mol}$

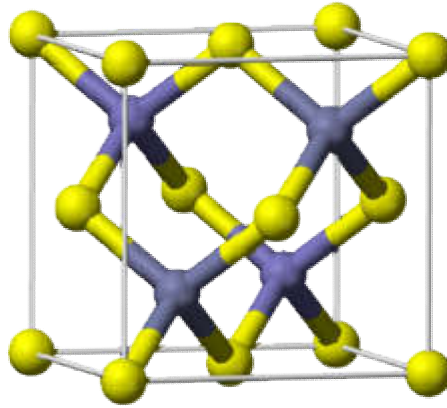
الجدول 1-11-2- جدول خصائص الانديوم [9]

1-12- انتيمونيد الانديوم:

1-12-1 - تعريفه:

هو مركب بلوري له مظهر قطع معدنية فضية رمادية داكنة مصنوع من العنصرين (In) الانديوم والانتيمون (Sb) له فجوة ضيقة فجوة أشباه الموصلات ينتمي للمجموعة III-V المستخدمة في أنظمة توجيه الأشعة تحت الحمراء، أجهزة كشف انتيمونيد الانديوم حساسة بين 1-5 ميكرومتر من الأطوال

الموجبة [10]



شكل [ 12- 1 ] - انتيمونيد انديوم [13]

1-12-2 - تاريخه:

تم الإبلاغ عن المركب المعدني اول مرة في عام 1951 بواسطة العالمان LIU و PERETTI الذي أعطيا نطاق التجانس ونوع الهيكل وثابت الشبكة، وفي عام 1952 تم تحضير سبائك In Sb متعددة البلورات من طرف العالم Heinrich Welker رغم انها لم تكن نقية جدا وفقا لمعايير أشباه الموصلات الحالية، كان ويلكر مهتما بدراسة خصائص شبه الموصلات بشكل منهجي، ولاحظ كيف يبدو أن للمركبات III-V فجوة نطاق صغيرة مباشرة وحركة الكترونية In Sb عالية جدا [10]

12-1-3- خصائصه:

12-1-3-1- خصائص فيزيائية:

In Sb له مظهر قطع فضية رمادية داكنة او مسحوق مع بريق زجاجي، عند تعرضه لدرجات

حرارة تزيد عن 500 درجة مئوية يذوب الانتيمون ويتحلل ويحرر أكسيد الانتيمون مع أبخرة تركيبه

البلوري عبارة عن نظام كريستالي مكعب (ZINCBLLENDE)

12-1-3-2- خصائصه الالكترونية:

❖ In Sb عبارة عم اشباه موصلات ذات فجوة ضيقة فجوة نطاق طاقته تبلغ 0.17 الكترون فولت

عند درجة حرارة (k) 300 كلفن و 0.23 الكترون فولت عند (k) 80.

❖ يمكن ان تعمل طبقة من طبقات انتيمويند الأنديوم المحشورة بين طبقات من انتيمويند الأنديوم

الألمنيوم كبنر كمي.

❖ أشباه الموصلات من أنديوم انتيمويند قادرة على العمل بجهد اقل من 0.5 فولت مما يقلل من

متطلبات الطاقة الخاصة بها [10]

قائمة المصادر:

- [1] إحسان ضياء البيرماني.(2012-2013).محاضرة رقم 1 في أشباه الموصلات.جامعة بابل.العراق.
- [2] مبارك درار عبد الله.(2014).محاضرة 5 الطاقة الشمسية.جامعة السودان للعلوم والتكنولوجيا الخرطوم
- [3] غازي ياسين القيسي.(2010).فيزياء الحالة الصلبة. عمان الأردن.دار المسيرة للنشر والتوزيع.
- [4] مالفينو.تقريبات دوائر الترانزيستور. (أسامة عمر مسعود العشي، مترجم مقالة في أشباه الموصلات.مكتبة أسامة العشي.
- [5] إحسان ضياء البيرماني.(2012/2013) محاضرة رقم 5 الثنائي البلوري.جامعة بابل . العراق.
- [6] ميموني إيمان. (2016).مساهمة في دراسة الطبقات الرقيقة للخلايا الشمسية a-Si و a-Si:H المرسبة بتقنية PECVD. مذكرة ماستر. جامعة قاصدي مرياح ورقلة.
- [7] الموسوعة العلمية للصخورو المعادن 2009 KFAS
- [8]-<http://m.marefa.org/>
- [9]-<https://ar.institut-seltene-erden.de/seltene-erden-und-metalle/strategische-/metalle-2/indium>
- [10]-<https://ar.esc.wiki/wiki/Indium-antiomonide>.
- [11]-[easyphysicsway.blogspot.com](http://easyphysicsway.blogspot.com)

[12]–<http://electrau.net>

[13]–<http://ar.Wikipedla.com/wiki/indium–antimonide>.

# الفصل الثاني:

نظرية DFT وطريقة FP-LAPW والكمون الكامل

II-1-المقدمة :

لدراسة خصائص الفيزيائية للمواد الصلبة في الفيزياء الكمية علينا دراسة النظام المتعلق بسلوك الإلكترونات حيث تتفاعل فيما بينها ومع الأنوية (تفاعل نواة\_نواة، الكترون\_نواة، الكترون -الكترون) ،وفي هذا الفصل سنستعمل دالية الكثافة (DFT) التي تعتمد على مجموعة من التقريبات من بينها تقريب هوهنبارغ وكوهن (Hohenberg-Khon) والتي سيتم استخدامها كجانب نظري في هذا العمل

II-2- معادلة شرودنجر للبلورة :

تعتبر معادلة شرودنجر هي منطلق كل الدراسات الكمية للنظام الكوانتي للبلورات ،حيث يوصف نظام الجسيمات المتفاعلة من أيونات وإلكترونات بالمعادلة التالية. [1]

$$H \psi(\vec{r}_i, \vec{R}_\alpha) = E \psi\{\vec{r}_i, \vec{R}_\alpha\} \quad (1.1)$$

حيث H : يمثل المؤثر الهاملتوني

$\Psi$  : دالة الموجة

E : طاقة النظام

الهاملتوني الكلي للجملة مؤلف من الطاقة الحركية لكل الجسيمات وطاقة التفاعل فيما بينها وعند الاقتضاء طاقة التفاعل مع الوسط الخارجي، عند غياب الحقل الخارجي يكتب الهاملتوني بالشكل التالي :

$$H = T_e + T_n + V_{e-e} + V_{n-n} + V_{e-n} \quad (1.2)$$

الحدين الأولين (Te, Tn) هما مؤثرا الطاقة الحركية للإلكترونات والانوية على الترتيب، أما الحدود



الثلاثة الأخيرة هي مؤثرات الطاقة الكامنة لتفاعل إلكترون- إلكترون (Ve-e) و نواة - نواة (Vn-n) و إلكترون- نواة (Ve-n)

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{-\hbar^2}{2m_e} \Delta_i + \sum_{i=1}^n \frac{-\hbar^2}{2M_n} \Delta_i + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} + \frac{1}{2} \sum_{\alpha \neq \beta} \frac{Z_\alpha Z_\beta e^2}{|\vec{R}_\alpha - \vec{R}_\beta|} - \sum_{i, \alpha} \frac{Z_\alpha e^2}{|\vec{r}_i - \vec{R}_\alpha|} \quad (1.3)$$

المعاملات  $i$  وز خاصة بالإلكترونات، المعاملات  $\beta$  و  $\alpha$  خاصة بالانوية (الذرات) .  
 $M$  ،  $m$  كتل الالكترونات و الانوية على الترتيب،  $Z_\alpha e$  شحنة الانوية.

$|\vec{R}_\alpha - \vec{R}_\beta|$  المسافة بين النواتين  $\alpha$  و  $\beta$ .

$|\vec{r}_i - \vec{R}_\alpha|$  المسافة بين النواة  $\alpha$  والإلكترون.

$|\vec{r}_i - \vec{r}_j|$  المسافة بين الالكترونين  $i$  و  $j$ .

في حالة السكون معادلة شرودينغر تكون مستقلة عن الزمن

$$(T_e + T_n + V_{e-e} + V_{n-n} + V_{e-n}) \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{R}_1, \vec{R}_2, \dots) = \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{R}_1, \vec{R}_2, \dots) \quad (1.4)$$

بحيث  $\Psi$  تمثل دالة الموجة وتتعلق بكل إحداثيات الجسيمات ( الكترونات + أنوية ) ،  $E$  القيم الذاتية الموافقة.

معادلة شرودينغر ل  $N$  ذرة تحتوي  $N (Z+1) 3$  متغيرات، أي أن معادلة شرودينغر بهذه الكيفية مستحيلة الحل، لذلك وضعت عدة تقريبات لتبسيط هذه المعادلة نذكر منها:

II-2-1 - تقريب بورن\_اوبنهايمر (Born-Oppenheimer) :

من اجل تبسيط الحل للمعادلة السابقة نستعمل تقريب بورن\_اوبنهايمر، حيث يفترض هذا التقريب أن النواة ساكنة بالنسبة للإلكترون وذلك نظرا لحركة الالكترونات السريعة جدا بالنسبة لحركة الانوية، أي أن الطاقة الحركية للانوية معدومة أمام حركة الالكترونات  $T_n \cong 0$  وطاقة التفاعل بين الانوية ثابتة  $V_{NN}=cte$  . [2]

يصبح الهاملتوني الكلي بالصيغة التالية:

$$H_e = T_e + V_{e-e} + V_{e-n} \quad (1.5)$$

ويسمى He بهاملتوني الالكترونات:

$$H_e = \sum_{i=1}^N \frac{-\hbar^2}{2m_e} \Delta_i + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} - \sum_{i,\alpha} \frac{Z_\alpha e^2}{|\vec{r}_i - \vec{R}_\alpha|} \quad (1.6)$$

ومنه معادلة شرودينغر للالكترونات هي:

$$H_e \psi_e = E_e \psi_e \quad (1.7)$$

هذا التقريب لا يمكن حلها بالطرق الرياضية المعروفة لذلك نستخدم تقريب آخر يسمى تقريب هارترى فوك، المستخدم بكثرة في الكيمياء الكمية لدراسة الجزيئات والذرات، بينما في الجسم الصلب فتستعمل عدة طرق حديثة وأكثر دقة وفعالية مثل نظرية دالية الكثافة المعتمد عليها في دراستنا

II - 2 - 2- تقريب هارترى فوك :

يعتمد هذا التقريب على نموذج الإلكترون المستقل، حيث افترض هارترى أن كل إلكترون يتحرك منفرد في الحقل المتوسط المتولد عن الأنوية وباقي الإلكترونات الأخرى (نموذج الإلكترونات الحرة)، وبالتالي يصبح المشكل لدينا يتغير من عدد كبير من الإلكترونات إلى إلكترون وحيد، و يكتب الهاملتوني للجلمة بـ [3] و [4]

$$H = \sum_{i=1}^N H_i \quad (1.8)$$

حيث :

$$H_i = \frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U_i(\vec{r}_i) + V_i(\vec{r}_i)$$

يمثل  $H_i$  هاميلتونيان الإلكترون  $i$

$$\left[ \frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U_i(\vec{r}_i) + V_i(\vec{r}_i) \right] \psi_i(\vec{r}) = E \psi_i(\vec{r}) \quad (1.10)$$

ومنه المعادلة التالية :

$$U_i(\vec{r}_i) = - \sum_k \frac{Z_k e^2}{|r_i - R_k^0|}$$

تمثل الطاقة الكامنة للإلكترون  $i$  في حقل الانوية  $k$  حيث :  $R_k^0$  يمثل موضع الانوية  $k$

$$V_i(\vec{r}_i) = V_H(\vec{r}_i) = - \int d\vec{r}' \rho(\vec{r}') \frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{r}'|}$$

ونكتب المعادلة (1.9)

$$H_i = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_i + V_{eff}(r_i) \quad (1.11)$$

يمكن التعبير على الكمون الفعال على انه مجموع لهذه التوزيعات بالعلاقة:

$$V_{eff}(r) = V_H(r_i) + V_{ext}(r_i) \quad (1.12)$$

إذن بإضافة الكمون الفعال لمعادلة شرودينغر للإلكترونات نجد

$$\left[ \frac{-\hbar^2}{2m} \Delta_i + V_{eff}(r) \right] \Psi_i(r) = \varepsilon_i \Psi_i(r) \quad (1.13)$$

حيث:  $\Psi_i(r)$  دالة الموجة للإلكترون المستقل.

تكتب دالة الموجة الكلية للجملة كجاء دوال الحالة لكل الإلكترونات على الشكل :

$$\Psi(r_1, r_2, \dots) = \prod_{i=1}^N \Psi_i(r_i) \quad (1.14)$$

وتكتب الطاقة الكلية للجملة كمجموع الطاقات الموافقة لكل حالة الكترونية :

$$E = \sum E_i \quad (1.15)$$

في عام 1930 بين فوك أن الدالة الموجية لهارترتي لا تحترم مبدأ استبعاد باولي، فقام بتحسين نموذج هارترتي وذلك بإدخال مبدأ السبين لنظام الالكترونات بحيث توجد  $N!$  احتمال لوضع  $N$  إلكترون على  $N$  موضع [5]

$$\vec{r}_1, \vec{r}_2 \dots \dots \dots \vec{r}_N$$

مثلا أول إمكانية هي :

$$\Psi_1(r_1)\Psi_2(r_2)\Psi_3(r_3) \dots \dots \dots \Psi_N(r_N) \quad (1.16)$$

وثاني إمكانية هي :

$$\Psi_1(r_1)\Psi_2(r_3)\Psi_3(r_2) \dots \dots \dots \Psi_N(r_N) \quad (1.17)$$

عند تطبيق كل التبادلات نحصل على  $N!$  لنفس النوع. دالة الموجة هي مجموع كل الحدود مع الأخذ بعين الاعتبار الإشارتين (+) و (-) لتصبح بشكل محدد يدعى محدد سلانتر

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_n) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_1(\vec{r}_1)\psi_1(\vec{r}_2)\dots\psi_1(\vec{r}_n) \\ \psi_2(\vec{r}_1)\psi_2(\vec{r}_2)\dots\psi_2(\vec{r}_n) \\ \vdots \quad \quad \quad \ddots \quad \quad \quad \vdots \\ \psi_n(\vec{r}_1)\psi_n(\vec{r}_2)\dots\psi_n(\vec{r}_n) \end{vmatrix} \quad (1.18)$$

والمعامل  $\frac{1}{\sqrt{N!}}$  هو معامل التقنين و يسمى ايضا ثابت التعامد.

ومن بين الصعوبات التي تصادف حساب بنية عصابات الطاقة هو تحديد الكمون داخل البلورة.

معادلة شرودينغر بعد تصحيح فوك فنكتب معادلة هارترتي فوك بالعلاقة التالية :

$$\begin{aligned} & \frac{-\nabla^2}{2m} \psi_i(\vec{r}) + V_i(\vec{r})\psi_i(\vec{r}) + V_H(\vec{r})\psi(\vec{r}) - \sum_j \int \frac{d\vec{r}'}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \psi_j^*(\vec{r}')\psi_i(\vec{r}')\psi_j(\vec{r}) \\ & = E_i\psi_i(\vec{r}) \end{aligned} \quad (1.19)$$

الحد الذي أحدث الفرق بين تقريب اوبنهايمر وتقريب هارترتي فوك هو كمون التبادل الذي يعطى

بالعلاقة:

$$V_x = - \sum_j \int \frac{d\vec{r}'}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \psi_j^*(\vec{r}')\psi_i(\vec{r}')\psi_j(\vec{r}) \quad (1.20)$$

### II - 3 - نظرية دالية الكثافة :

المفهوم الأساسي لنظرية الكثافة الوظيفية هو انه يمكن التعبير عن طاقة نظام الكهروني بدلالة كثافته.

$$E = E(\rho) \quad (1.21)$$

### II - 3 - 1 - مبدأ نظرية DFT :

هو إعادة صياغة المسألة الكمومية وتحويلها من مسألة نظام متعدد الجسيمات إلى مسألة أحادية الجسيمة

عن طريق التخلي عن التعامل مع دالة الموجة والاستعانة بدالية الكثافة الالكترونية التي يمكن قياسها

مخبريا ذات 3 متغيرات فقط وجعلها كقاعدة للحساب، والدافع وراء هذا هو تقليل عددا لمتغيرات التي

تدخل في الحساب والهدف الرئيسي لنظرية دالية الكثافة هو التنبؤ بطاقات الارتباط الموجودة بين الذرات بالاعتماد على مبادئ ميكانيكا الكم [6]

ظهرت الفكرة الأساسية لهذه النظرية عام 1927 على يد العالمان (توماس- فيرمي) ، حيث تعتمد طريقة توماس فيرمي على نموذج إحصائي لتقريب التوزيع الالكتروني حول الذرات، هذا النموذج أعطى صورة عن إمكانية الاعتماد على الكثافة الالكترونية لحساب الطاقة الحركية، لكن هذا النموذج أعطى نتائج ضعيفة لأنهما أهملتا الارتباط بين الالكترونات. [7]

في عام 1964 قام كل من العالمان هوهنبارغ (Hohenberg) وكوهن (Kohn) بوضع القاعدة الأساسية للنظرية من خلال نظريتهما التي أثبتت إمكانية استغلال الكثافة في حساب خصائص النظام، لكنها بقيت من غير تطبيق إلى أن أكمل العالم كوهن ما بدا به ووجد تطبيقا لها.

### II - 3-1-1 - نظرية هوهنبارغ- كوهن:

نظرية هوهنبارغ- كوهن قابلة للتطبيق على أي نظام من الجسيمات المتفاعلة و تتلخص في نظريتين هما:

أ- النظرية الأولى : تعتمد على اخذ الطاقة الكلية لنظام الالكترونات المتفاعلة في كمون خارجي

$V_{ext}$  كمون الانوية هو دالية وحيدة لكثافة الالكترونات  $\rho(r)$  ومنه :

$$E(\rho) = F[(\rho)] + \int \rho(r) V_{ext}(r) dr \quad (1.22)$$

$\int \rho(r) V_{ext}(r) dr$  : يمثل تفاعل إلكترون- نواة

$F[(\rho)]$  هي دالة هوهنبرغ-كوهن وتعرف على انها دالة وحيدة من اجل اي نظام متعدد الالكترونات ويمكن كتابتها على الشكل :

$$F[(\rho)] = T[(\rho)] + V_{e-e}[(\rho)] \quad (1.23)$$

$T[(\rho)]$  الطاقة الحركية للنظام الالكتروني،  $V_{e-e}[(\rho)]$  طاقة التفاعل الكترون-الكترون، لكن لم تعرف هذه النظرية العبارة التحليلية لهذين المقدارين.

**ب - النظرية الثانية :** تنص على أن الكثافة الالكترونية للحالة الأساسية توافق اقل قيمة للطاقة، وكل خصائص الحالة الأساسية هي دالية لكثافة الإلكترونات كالتالي:

$$E(\rho_0) = \text{Min}E(\rho) \quad (1.24)$$

$\rho_0$  كثافة الحالة الاساسية

تحديد دالة هوهنبرغ-كوهن يمكننا من تحديد الطاقة الكلية وكثافة الشحنة للحالة الأساسية من اجل كمون خارجي معطى لكن للأسف هذا ما عجزت عنه النظرية

### II - 3-1-2 - معادلة كوهن - شام (Kohn-Sham) :

قام كل من (كوهن وشام) بتطوير نظرية (DFT) من خلال وضع معادلات محاكية لمعادلة شرودينغر بهدف تحديد الدوال الموجية التي توافق اقل قيمة للطاقة الكلية. حيث تلخصت فكرتهما بتحويل جملة الالكترونات المتفاعلة ضمن الكمون الحقيقي إلى جملة افتراضية غير متفاعلة تتحرك الالكترونات فيها ضمن كمون (Kohn-Sham) الناشئ عن جميع الانوية والالكترونات الأخرى ( $V_{eff}$ ) ولها نفس الكثافة  $\rho(r)$  والتي يتم إيجادها عن طريق حل متسق ذاتيا لمجموعة من معادلات شرودينغر للجسيم. [6]



ولخصنا هذا في المعادلة (1. 22).

$$H_{ks}\psi_i = E_i\psi_i \quad (1.25)$$

بالتالي :

$$\left[ \frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{ion}(\vec{r}) + V_H(\vec{r}) + V_{XC}(\vec{r}) \right] \psi_i(\vec{r}) = \epsilon_i \psi_i(\vec{r}) \quad (1.26)$$

$\Psi_i(r)$  : دالة الموجة للإلكترون  $i$

$V_{ion}(r)$  : كمون الانوية

$V_H(r)$  : كمون هارتي يعطى بالعلاقة :

II -3-1 -3- حل معادلة كوهون - شام

$$V_H(\vec{r}) = \int \frac{\rho(\vec{r}_1)\rho(\vec{r}_2)}{|\vec{r}_1-\vec{r}_2|} d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \quad (1.27)$$

النظام الفعال للاكترونات الغير متفاعلة في كمون فعال الذي هو كمون النظام الحقيقي يكون

$$V_{eff} = V_H + V_{XC} + V_{ext} \quad (1.28)$$

$V_H$  : كمون هارتي يعطى بالعلاقة التالية

$$dr' \int \frac{\rho(r')}{|r-r'|}$$

$V_{ion}$  و  $V_{ext}$  : كمون الانوية

$V_{xc}$ : كمون التبادل والترابط يعطى بـ

$$V_{XC} = V_C + V_X \quad (1.29)$$

ومنه :

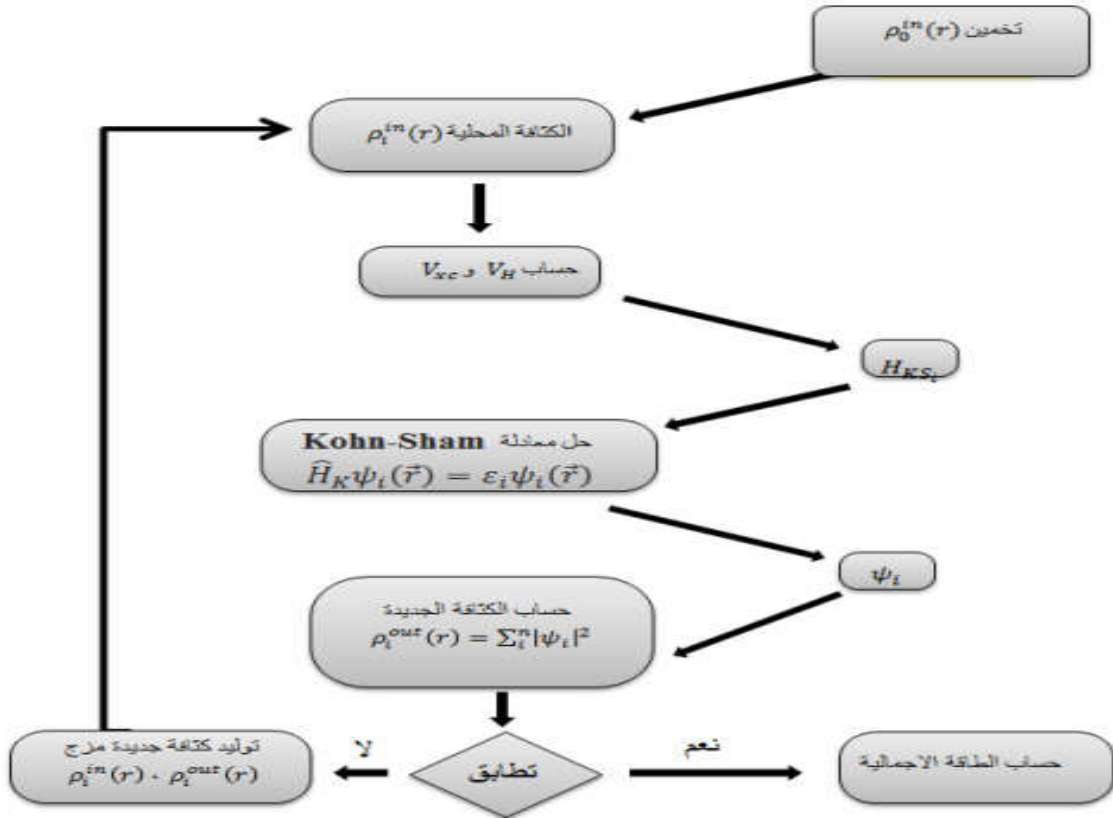
$$V_{XC}(\vec{r}) = \frac{\partial E_{XC}[\rho(\vec{r})]}{\partial \rho(\vec{r})} \quad (1.30)$$

فيمكن كتابة معادلة كوهن شان كالتالي:

$$H\psi_i(\vec{r}) = \left[ \frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{\text{eff}}(\vec{r}) \right] \psi_i(\vec{r}) = \varepsilon_i \psi_i(\vec{r}) \quad (1.31)$$

حيث :

$$V_{\text{eff}}(\vec{r}) = V_{\text{ext}}(\vec{r}) + \int \frac{1}{|\vec{r}_i + \vec{r}_j|} \rho(\vec{r}_j) d\vec{r}_j + V_{XC}(\vec{r}) \quad (1.32)$$



الشكل [ II - 1 ] - خوارزمية حل معادلة كوهن-شام [7]

II - 4 - 1 - التقريبات:

II - 4 - 1 - تقريب كثافة الموضع LDA (The Local Density Approximation)

طرح هذا التقريب من طرف كوهن وشام في ، 1965 وقد اعتبرا نظام الالكترونات اللامتجانس كنظام

متجانس محليا وتكتب طاقة تبادُل\_ارتباط بالمعادلة التالية: [ 8 ]

$$E_{xc}^{LDA}(\rho) = \int \rho(\mathbf{r}) \epsilon_{xc}^{LDA}(\rho(\vec{r})) d\mathbf{r}^3 \quad (1.33)$$

مع العلم أن طاقة تبادُل\_ارتباط تقسم إلى قسمين كما هو موضح في المعادلة (1.34)

$$\epsilon_{xc}^{LDA}(\rho) = \epsilon_x^{LDA}(\rho) + \epsilon_c^{LDA}(\rho) \quad (1.34)$$

II-4-2- تقريب التدرج المعمم GGA (Generalised Gradient Approximation):

هذا التقريب هو تصحيح لتقريب كثافة الموضع حيث يتجاوزه في الدقة ويضيف في اعتباراته تغيرات كثافة الالكترونات  $\rho(r)$  عبر تدرج الكثافة الالكترونية  $\nabla \rho(r)$  تكتب عبارة الطاقة على الشكل التالي: [9]

$$E_{xc}^{GGA}(\rho \uparrow(r), \rho \downarrow(r)) = \int f_{xc}^{GGA}(\rho(\vec{r}), \vec{\nabla}\rho(\vec{r})) dr^3 \quad (1.35)$$

$\vec{\nabla}\rho(\vec{r})$  يعبر عن تدرج الكثافة الالكترونية.  
 $f_{xc}^{GGA}$  يعتمد أساسا على GGA المستعملة.

II-5- طريقة الأمواج المستوية المتزايدة خطيا والكمون الكامل FP-LAPW :

في عام 1937م طور سلاتر طريقة الموجة المستوية APW وبعد العديد من التعديلات التي أجراها اندرسون [10] ، أصبحت تسمى بطريقة الأمواج المستوية المتزايدة خطيا والكمون الكامل FP-LAPW من أجل كتابة الكمون البلوري قدم سلاتر تقريب لهذا الكمون Muffin-tin المسمى كمون خلية النحل والممثل في المعادلتين (1.36) و(1-37) حسب هذا التقريب يكون الكمون متناظر كرويا داخل الكرات التي قطرها  $r_s[U(r)]$  ، ويكون ثابت بالخارج  $[U(r)=U_0]$  . [10] و [11]

ولتبسيطها يمكن اختيار الطاقة المحسوبة بحيث تكون  $U_0$  تساوي الصفر ومنه يكتب  $[U_0=0]$

الكمون على الشكل التالي:

$$U(r) = \begin{cases} u(r) & r \leq r_0 \\ 0 & r > r_0 \end{cases} \quad (1-36)$$

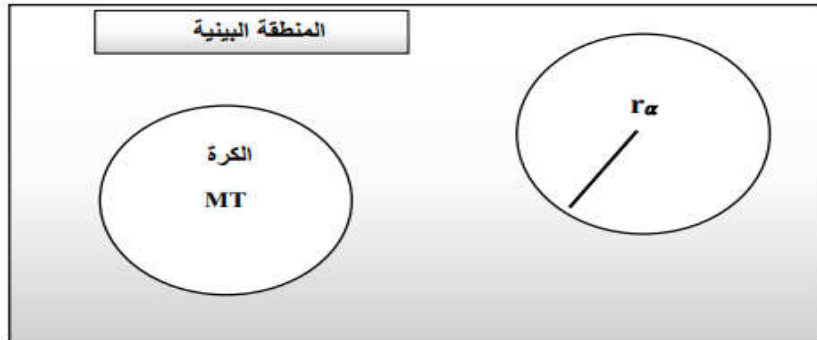
قبل البدء في طريقة LAPW التي هي أساسا تحسين لطريقة APW التي وضعها سلاتر. نتطرق أولا الى طريقة APW .

### II-5-1- طريقة الأمواج المستوية المتزايدة ( APW ) :

نشر سلاتر في 1937م طريقة الموجة المستوية المتزايدة، APW وذلك لإيجاد حلول لمعادلة الإلكترونات التي تكافئ الآن معادلة كوهن-شام في مخطط APW، ولكتابة دالة الموجة للإلكترونات أخذ سلاتر شكل دالة الإلكترونات الخاصة بكمون M.T أو ما يسمى كمون (خلية النحل)، والذي يقسم الفضاء المحيط بالذرات الى منطقتين الشكل (1-37) :

**المنطقة الأولى:** داخل M.T، تشمل كل من الأنوية والإلكترونات شديدة الارتباط بها.

**المنطقة الثانية:** المنطقة الإقحامية تحيط بالكرات، وتشمل الإلكترونات ضعيفة الارتباط بالأنوية [12]



الشكل [ II - 2 ] - شكل كمون M.T [12]

حيث  $\Gamma\alpha$  يمثل نصف قطر M.T

والذي يعطى بالعلاقة:

$$\phi(r) = \begin{cases} \frac{1}{\Omega^{1/2}} \sum_G C_G e^{i(G+K)r} & r > r_\alpha \\ \sum_{lm} A_{lm}(r) Y_{lm}(r) & r < r_\alpha \end{cases} \quad (1-37)$$

حيث :  $\Omega$  : تمثل حجم الخلية الموحدة.

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

$C_G$  : معاملات النشر

وحلول معادلة شرودينغر تكون:

- أولاً: حلول شعاعية داخل الكرة  $M$ .

- ثانياً: موجة مستوية في المنطقة الإقحامية.

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

$$\left\{ -\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} + V(r) - E_l \right\} r U_l(r) = 0 \quad (1-38)$$

$V(r)$  يمثل الجزء الخاص بالكمون الكروي و  $E_l$  تمثل الطاقة الخطية، في حين أن الدالة الشعاعية

المعرفة في العلاقة (1-38) تكون معامدة لكل الحالات الذاتية القلبية تنتهي شروط التعامد عند حدود

الكرة  $M.T$  من أجل الدوال الشعاعية  $U_1$  و  $U_2$  لموافقة للقيم الذاتية  $E_1$  و  $E_2$  وتصبح معادلة شرودينغر

كالتالي :

$$(E_1 - E_2)rU_1U_2 = U_2 \frac{d^2rU_1}{d^2r} - U_1 \frac{d^2rU_2}{d^2r} \quad (1-39)$$

ولضمان استمرارية الدالة  $\phi(r)$  على سطح الكرة تنتشر المعاملات على سطح الكرة تنتشر المعاملات  $A_{lm}$  بدلالة المعاملات الخاصة  $C_G$  بالأمواج المستوية في المنطقة الإقحامية المعاملات الطاقوية  $E_L$  تسمى معاملات التباير في الطريقة APW بعد الحسابات الجبرية نحصل على :

$$A_{lm} = \frac{4\pi i^l}{\Omega^2 U_l(R_l)} \sum_G C_G j_l(|K+g|R_\alpha) Y_l^*(K+G) \quad (1-40)$$

❖ الدوال الذاتية المعرفة ب: G تصبح متوافقة مع الدوال الشعاعية في كرة M.T وبالتالي نتحصل

على دالة أساسية APWS.

❖ الدوال APWS هي حلول لمعادلة شرودينغر داخل كرة T.M الموافقة للطاقة  $E_L$  اي نتحصل

على عصابة الطاقة الموافقة للمعامل G .

❖ في الطريقة APW ظهرت مجموعة من الصعوبات خاصة في الدوال  $U_L(r)$  وذلك لأن في

هذه

الحالة نقصان المعاملات  $A_{lm}$  قيم  $U_\alpha(r_\alpha)$  تكون معدومة على سطح كرة M.T وبالتالي الدوال

الشعاعية تكون منفصلة عن الدوال الموجة المستوية في المنطقة البيئية، ولحل هذا المشكل أدخل

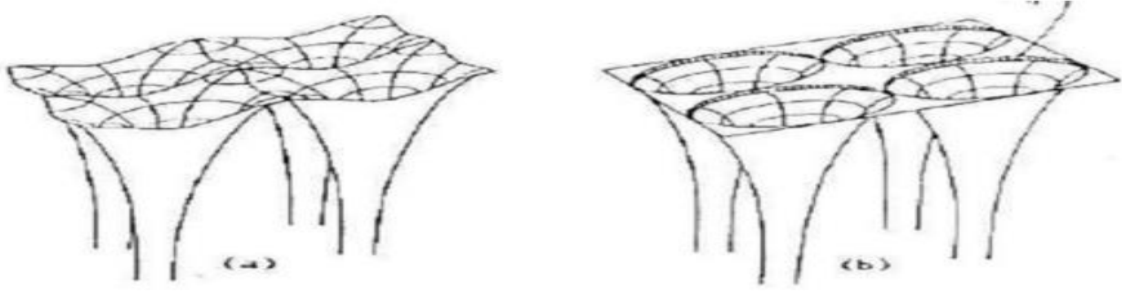
كولينغ

وأندرسون [5] مجموعة من التغييرات على طريقة الأمواج المستوية المتزايدة APW تركز أساسا

على تمثيل الدالة الشعاعية  $\phi(r)$  خارج كرة M.T بترتيبات خطية  $U_L(r)$  مع امتلاكها مشتقات

بالنسبة للطاقة  $\dot{U}_L(r)$  سميت بطريقة الأمواج المستوية المتزايدة خطيا FP-LAPW .

[13] و [14]



الشكل [ II -3 ] كمون بلوري لشبكة مربعة ثنائية الأبعاد [14]

(b) كمون muffin-ti

(a) كمون كلي

### II-5-2- مبدأ طريقة FP-LAPW :

في طريقة الأمواج المستوية المتزايدة خطيا FP-LAPW الدالة الأساسية داخل كرة M.T تكون على شكل ترتيبات خطية للدالة الشعاعية  $U_L(r) Y_{lm}(r)$  وتمتاز باشتقاق  $\dot{U}_L(r) Y_{lm}(r)$  بالنسبة للطاقة، الدالة تعرف مثل دالة الطريقة APW (II-3) والدالة تخضع لشرط التالي:

$$\left\{ -\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} + V(r) - E_l \right\} r\dot{U}_l(r) = rU_l(r) \quad (1-41)$$

في حالة اللانسيبية الدوال  $U_L$  و  $\dot{U}_L$  مضمونة الاستمرارية على سطح كرة M.T أي استمرارية هذه الدوال مع الموجة المستوية في المنطقة البينية (خارج كرة M.T) إذن دالة الموجة المستوية المتزايدة (LAPW<sub>S</sub>) تصبح دالة أساسية للطريقة FP-LAP:



$$\phi(r) = \begin{cases} \frac{1}{\Omega^{1/2}} \sum_G C_G e^{i(G+K)r}, & r < 0 \\ \sum_{lm} \{A_{lm} U_l(r) + B_{lm} \dot{U}_l(r)\} Y_{lm}(r), & r \geq 0 \end{cases} \quad (1-42)$$

أي المعاملات  $B_{LM}$  الموافقة للدالة  $\dot{U}_L$  لها نفس طبيعة المعاملات  $A_{lm}$

الدوال  $LAPW_S$  تكون الموجة المستوية الوحيدة في المنطقة الإقحامية مثل حالة الطريقة  $APW$ ، داخل كرة  $M.T$  الدوال  $LAPWS$  أفضل من الدوال  $APW_S$  باختلاف  $E_L$  قليلا عن عصابة الطاقة  $E$  الترتيبات الخطية تنتج أحسن دالة شعاعية  $APWS$  والدالة  $E$  يمكن أن تنشر على الدالة المشتقة والطاقة  $E_L$  بالشكل:

$$U_l(E, r) = U_l(E_L, r) + (E - E_L)U_l(E, r) + 0((E - E_L)^2) \quad (1-43)$$

أي  $(E - E_L)^2$  0 يمثل الخطأ الرباعي الطاقوي

طريقة الأمواج المستوية المتزايدة خطيا  $FP-LAPW$  تضمن استمرارية دالة الموجة على سطح كرة  $M.T$ .

### II-5-3- دور الطاقات الخطية

الدوال الشعاعية  $U_L$  و  $\dot{U}_L$  متعامدان مع الحالات القلبية بدقة متناهية على سطح كرة  $M.T$  ولكن هذه الشروط ليست كافية عندما تكون الحالات القلبية موافقة لنفس القيمة  $l$ ، ومن جهة أخرى نأخذ خطر

الخط بين الحالات نصف القلبية مع حالة التكافؤ فهو غير معالج في الطريقة APW إذن الدوال الغير معامدة لأي حالة من الحالات القلبية في طريقة FP-LAPW يلزم اختيار دقيق للطاقة  $E_L$  ، في هذه الحالة من غير الممكن إجراء الحسابات دون تغيير  $E_L$  أحسن حل يكون باستخدام النشر على مدارات الموضع فقط ويختار أكبر نصف قطر ممكن لكرة M.T ، مع العلم أن هذه الخاصية غير واردة في كل البرامج، الى أنه يجب الملاحظة أن مختلف الطاقات الخطية  $E_L$  ، يجب أن تعرف على أنها مستقلة عن بعضها البعض.

لإجراء حساب دقيق جدا للبنية الإلكترونية،  $E_L$  يمكن أن تختار عصابة الطاقة الموافقة لنفس العصابة 1.

## II-4-5- برنامج Wien2K :

في دراستنا استخدمنا طريقة الموجة المستوية خطيا المدمجة في برنامج Wien2K، البرنامج يشمل مجموعة من البرامج الفرعية المنفصلة الشكل (II-4) :

**NN** : يحدد هذا البرنامج المسافة بين كل ذرة وجوارها الأقرب كما يساعد في تحديد أقطار الذرات.

**LSTART** : يولد هذا البرنامج الكثافة الذرية ويحسب الفرق في طاقة المدارات وبالتالي يحسب بنية عصابات الطاقة.

**SYMMETRY** : يولد عمليات التناظر في الجملة ويحسب المجموعة النقطية لمواقع الخاصة بالذرات يولد المعامل الأساسي لهرمونية الشبكة وحساب مصفوفة الدوران الموضعي.

**KGEN** : يولد المكعبات K في منطقة بريلوين.

**DSTART** : يولد الكثافة الأولية لبداية دورات الحساب الذاتي SCF المنتجة من الكثافة الذرية والمولدة من LSTART.

في حين أن دورات الحساب الذاتي SCF محددة في النقاط التالية:

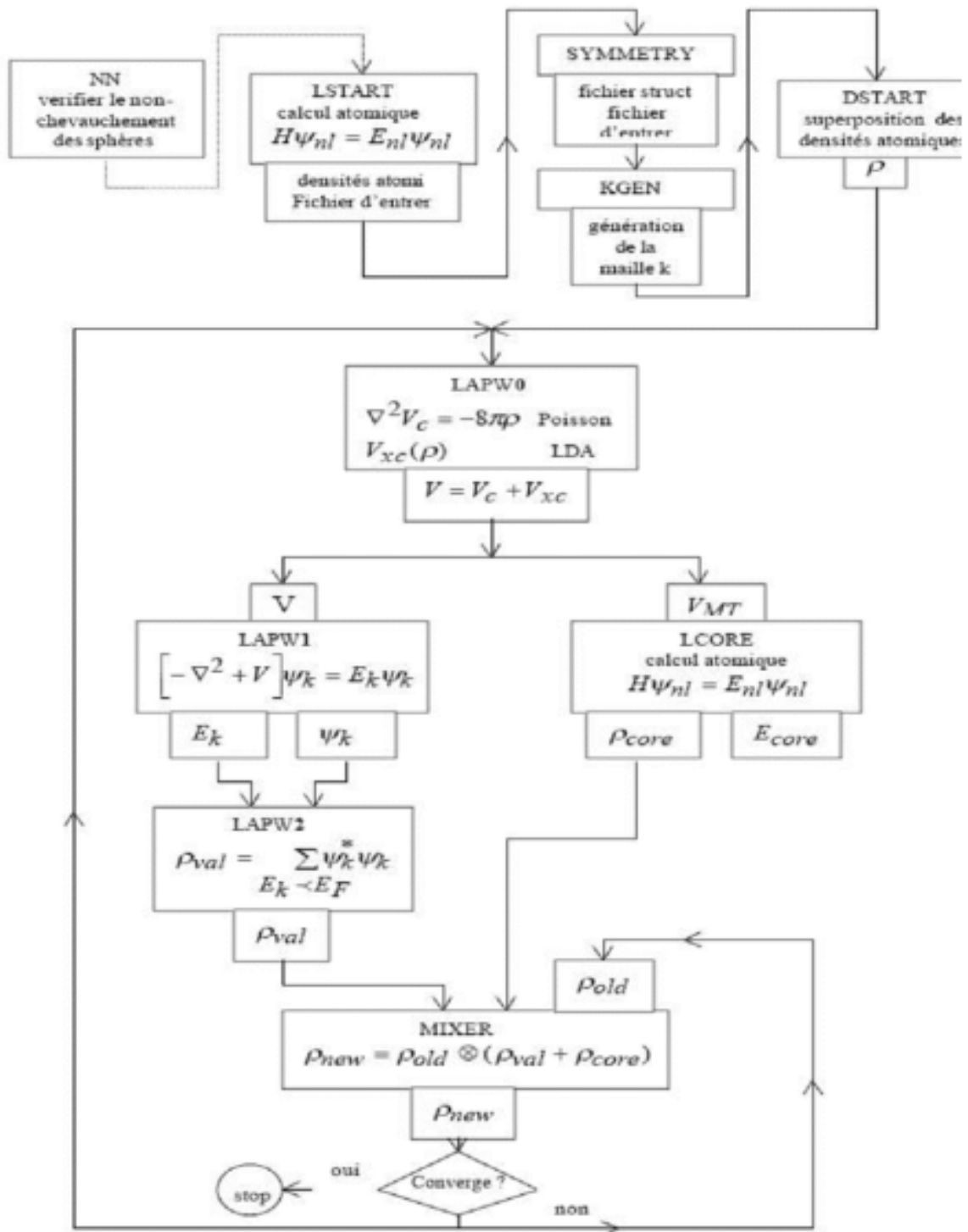
**LAPW0**: يولد الكمون انطلاقاً من الكثافة.

**LAPW1**: حساب عصابات التكافؤ القيم الذاتية والأشعة الذاتية.

**LAPW2**: حساب كثافة التكافؤ من الأشعة الذاتية.

**LCORE**: حساب الحالات القلبية والكثافة.

**MIXER**: يخلط الكثافة الداخلة والخارجة. [15]



الشكل [ II -4] - بنية برنامج Wien2. [15]

## قائمة المصادر:

- [1]- بري السعدي. أطروحة شهادة الدكتوراة في العلوم. جامعة سطيف (2013).
- [2]-J.P.Perdew,J.A. Chevary, S.H.Vosko, K.A. Jackson, M.R. Pederson,D.J.Singh, and C. Fiolhais, phys.Rev.B46, 6671 (1992).
- [3] : عميرات مسعودة. دراسة الخصائص المغناطيسية بواسطة المبادئ الاولية. جامعة ورقلة .
- [4] D.R .Hartree,Proc.Cambridge philos.Soc.24(1928)89
- [5] V.Fock,Z.Phys.61,126(1930)795
- [6]-M.H.Cohen,D.Frydel,K.BrukeandE.Engel,J.Chem.Phys.Vol.113, (2000) p.2990.
- [7]-عميرات مسعودة. دراسة الخصائص المغناطيسية بواسطة المبادئ الاولية. جامعة ورقلة 2015 ,
- [8]- P.Blaha,K.Schwarz,P.Sorantin,S.B.Tricky,Chem.Phys.Lett.399(1990)
- [9]- Pedrew,J.P.,Burke,K.andErnzenhot,M.Phys.Rev.lett.77385.(1996)
- [10]- G.L. Schimek, W.T. Pennington, P.T. Wood, Joseph W. Kolis, Supercritical ammonia synthesis and characterization of four new alkali metal silver antimony sulfides : MAg<sub>2</sub>SbS<sub>4</sub> (2000) p.2990 and M<sub>2</sub>AgSbS<sub>4</sub> (M<sup>1/4</sup>K, Rb), J. Solid State Chem.
- [11-] F.D. Murnaghan, Proc. Natl. Acad. Sci. USA 30 (1944) 244

[12]– J.C. Slater, Phys. Rev. 51, (1937) 846.

[13]– S.M. Azar, A. Hamad, J.M. Khalifeh, J. Magn. Mater. 324 (2012) 1776.

[14] –G. Ökhan, G. Ökoğlu, Physica B 405 (2010) 2162. .

[15]– Y. Kurtulus, R. Dronskowski, Phys. Rev. B 71 (2005) 014425.

# الفصل الثالث:

النتائج والمناقشة

III-1- المقدمة:

اهتم الكثير من الباحثين في السنوات الأخيرة بدراسة الخصائص الفيزيائية والكيميائية لأشباه النواقل لأنها تدخل في كثير من التطبيقات التكنولوجية ولتحسين أداء هذه الأجهزة يجب تنشيط أشباه النواقل التي تدخل في تركيبها بذرات خارجية تعطيها تطور في تطبيقاتها بالتعديل في خصائصها الفيزيائية والكيميائية والضوئية والكهربائية.

في هذا العمل، استخدمنا النهج الحسابي للمبدأ الأول القائم على نظرية الكثافة الوظيفية المستقطبة تدورًا وتوقعنا السلوك شبه المعدني لسبائك  $(\text{In}_{1-x}\text{M}_x\text{Sb})$  ( $\text{M} = \text{Fe}$ ,  $x=0.5$ ) باستخدام برنامج **wien2k**، من أجل التراكيب المختلفة  $x$ . تتم دراسة الخواص الهيكلية والإلكترونية والمغناطيسية لهذه البلورات المكعبة الثلاثية، قمنا في هذا الفصل بدراسة الخصائص البنيوية لعينية أنتيمونيد الإنديوم  $\text{InSb}$  منشطه بالحديد  $\text{In}_{1-x}\text{Fe}_x\text{Sb}$  حيث يتم تحديد أبعاد البلورة لهذا المركب (فضاء الخلية، قسوة المادة، طاقة الربط.... الخ،) والخصائص الإلكترونية (بنية العصابات، كثافة الحالات).

نبدأ الحساب وتنفيذ في شكل حلقة متماسكة بشكل دقيق باستعمال برنامج WIEN2K

لدراسة الخصائص البنيوية، الإلكترونية، المغناطيسية وخصائص المرونة استخدمنا طريقة الموجة المستوية المتزايدة خطيًا والكمون الكامل (FP-LAPW)، وتم إجراء هذه الحسابات في إطار نظرية دالية الكثافة (DFT) الإلكترونية والمدمجة في برنامج Wien2k

( $U=6 \text{ eV}$ ) حيث أنه لحساب كمون تبادل ارتباط استخدمنا التقريب (GGA-WC) مع أخذنا لحد

هيبارد كما أخذ التقريب النسبي، لدالة الموجة داخل الكرة واختيارنا قيمة العزم الزاوي  $L_{\text{max}}=10 \text{ MT}$

وتم اختيار أنصاف أقطار كرة M.T : لكل ذرة في التقريب هو  $2.5(u.a)$  للعناصر Fe, In, Sb

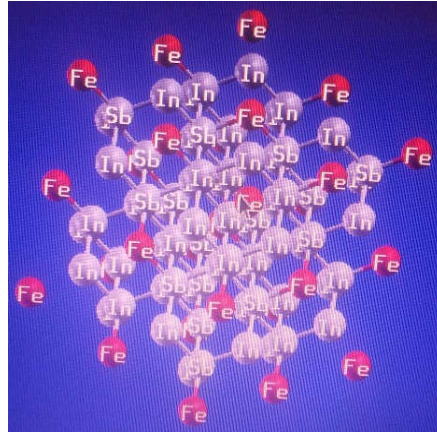


### III-2- الخصائص البنيوية:

حساب الخصائص البنيوية مهم جدا لدراسة اي مادة لانها تتيح لنا استخدام النتائج المتحصل عليها في تحديد الخصائص الفيزيائية الاخرى.

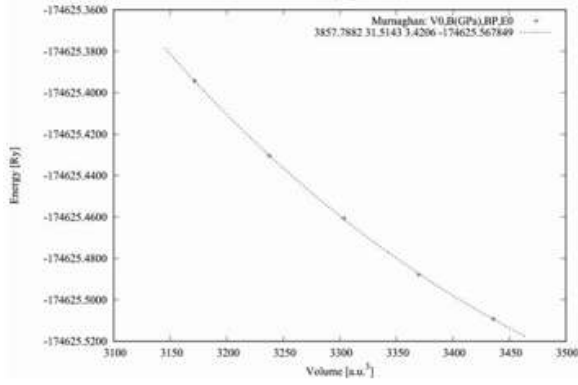
هذا الحساب يهدف الى تحديد حجم الخلية عند التوازن الموافق للحد الاثني من الطاقة E وكذا حساب معامل الانضغاطية B ومشتقه الاول بالنسبة للضغط.

الشكل (3-1) التالي يبين البنية البلورية لمركب InSb منشط بذرات Fe من اجل  $X=0.50$

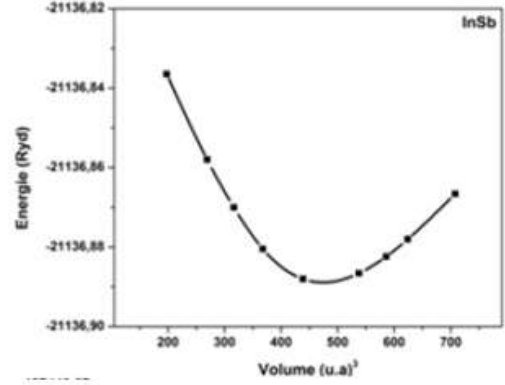


الشكل (3-1): البنية البلورية للمركب  $\text{In}_{0.5}\text{Fe}_{0.5}\text{Sb}$ . [1]

لقد تم حساب طاقات الحالة الاساسية كدالة لثابت الشبكة البلورية  $a(\text{Å})$  للمركبين InSb و  $\text{In}_{1-x}\text{Fe}_x\text{Sb}$  الفيرومغناطيسية (FM) في تقريب GGA المبينة في الشكل (3-2) اما النتائج المتحصل عليها لثابت الشبكة البلورية  $a(\text{Å})$  ومعامل الانضغاطية B والمشتقة الاولى لمعامل الانضغاطية B' مدونة في الجدول (3-1)



$In_{0.5}Fe_{0.5}Sb$



$InSb$

الشكل (3-2): تغيرات الطاقة الكلية للمركبين  $InSb$  و  $In_{0.5}Fe_{0.5}Sb$  بدلالة الحجم. [2]

المركب	a(Å)	B	B'	الطريقة
$InSb$	6.5555, 6.464a, 6.36a, 6.479b, 6.629c	42.4612, 37.368c	4.0525, 4.452c	GGA- WC
$Sb_{0.5}Fe_{0.5}In$	23.953131	31.5143	3.4206	GGA- WC

الجدول (3-1): قيم كل من ثابت الشبكة البلورية  $a$ (Å) ومعامل الانضغاطية B والمشتقة الاولى

لمعامل الانضغاطية B' للمركبين  $InSb$  و  $In_{0.5}Fe_{0.5}Sb$ .

يتم تحديد الاستقرار الديناميكي الحراري لتخليق السبائك بواسطة طاقة التشكل من العلاقة التالية

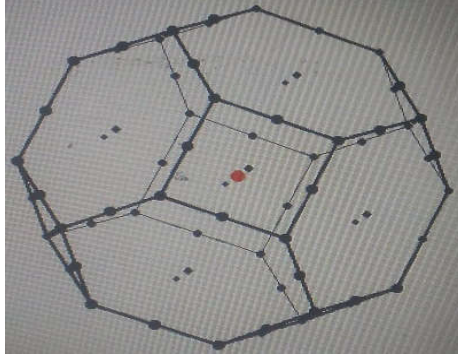
$$E_f = E_{In_{0.5}Fe_{0.5}Sb}^{total} - [E_{Sb}^{Bulk} + 0.5E_{Fe}^{Bulk} + (0.5)E_{In}^{Bulk}] = -1.74625eV$$

III-3- الخواص الإلكترونية:

في هذا الجزء سنقوم بعرض ومناقشة عصابات الطاقة وكثافة الحالة الكلية والجزئية للمركب مع تحديد الطبيعة الإلكترونية لهذه المادة ولدراسة الطبيعة الإلكترونية لهذا المركب.

سنقوم بتحديد مساهمة كل المدارات الإلكترونية للذرات المشكلة لهذا المركب في المجال الطاقوي المحصور بين  $-8\text{eV}$  الى  $8\text{eV}$  تحصلنا على عصابات الطاقة في النقاط عالية FP-LAPW باستخدام طريقة الامواج المستوية المتزايدة خطيا والكمون الكامل

في تقريب GGA المعرفة في فضاء الشبكة المعكوسة والمميزة  $\text{In}_{0.5}\text{Fe}_{0.5}\text{Sb}$  التناظر في منطقة بريلويون الاولى للمركب بنقاط عالية التناظر موضحة في الشكل (3-3)

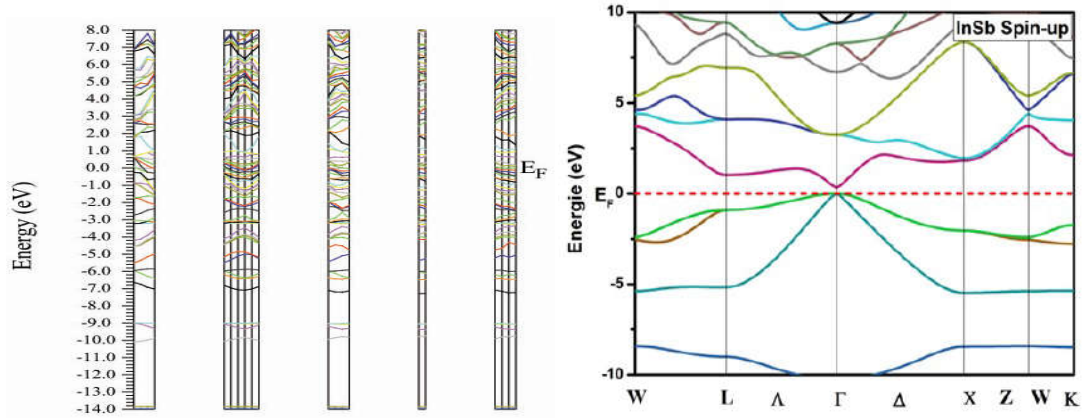


الشكل (3-3): منطقة بريلويون الاولى مرفقة بنقاط عالية التناظر للمركب  $\text{In}_{0.5}\text{Fe}_{0.5}\text{Sb}$ . [3]

III-3-1- عصابات الطاقة: في هذا الجزء نعرض النتائج المتحصل عليها لعصابات الطاقة لسبين

اعلى لكل من المركبين  $\text{In}_{0.5}\text{Fe}_{0.5}\text{Sb}$  و  $\text{InSb}$  مع وضع عنصر الحديد Fe في المركب  $\text{InSb}$  نلاحظ تغير في وضع عصابات الطاقة واختفاء فجوه الطاقه  $E_g$ . وهذا مايؤثر على الخواص الفيزيائية للمركب حيث تغيره طبيعته واصبح يسلك سلوك معدن بدلا من شبه موصل بالنسبة لسبين اعلى كما هو

موضح في الشكل (4.3)



ب/ سبين اعلى للمركب  $\text{In}_{0.5}\text{Fe}_{0.5}\text{Sb}$

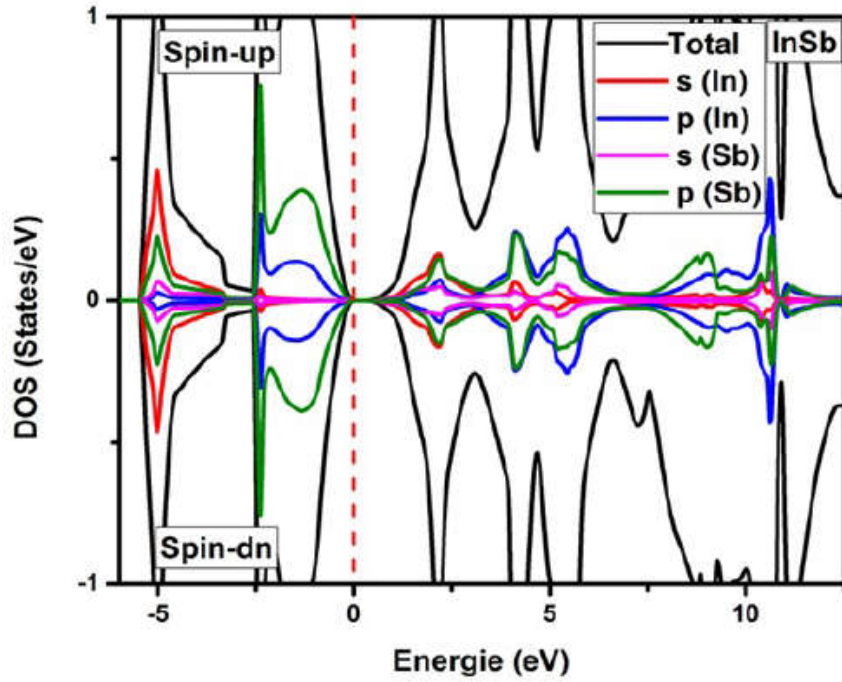
ا/ سبين اعلى للمركب  $\text{InSb}$

الشكل (4.3): بنية عصابات الطاقة لسبين اعلى للمركب  $\text{InSb}$  و  $\text{In}_{0.5}\text{Fe}_{0.5}\text{Sb}$

### III-3-2 - كثافة الحالات الكلية (DOS) والجزئية (TDOS):

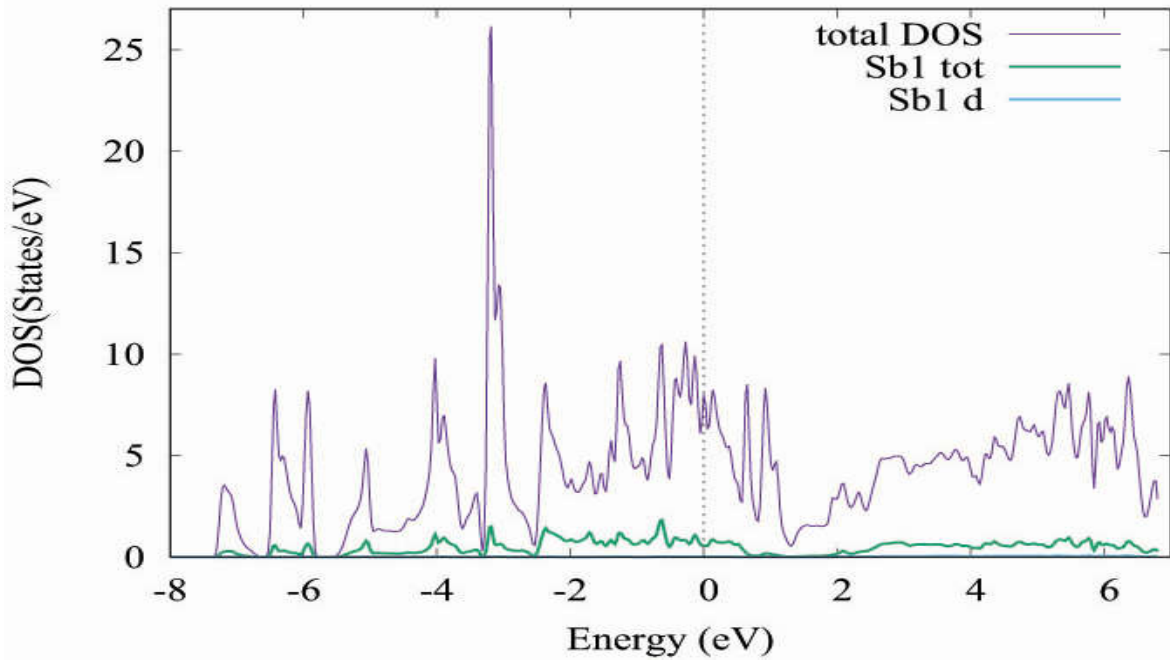
كثافة الحالات الكلية والجزئية هو مقدار فيزيائي مهم بواسطته نفهم الحالات الالكترونية في المادة وتأثيرها على الخصائص. تسمح لنا كثافة الحالات في التعرف على اغلب خصائص خصائص النقل الالكتروني ويمكن من خلالها معرفة طبيعة الروابط الالكترونية في المادة وانتقال الشحنة عبر المدارات. في تقريب GGA تم حساب كثافة الحالات الكلية (DOS) والجزئية (TDOS) للمركبين  $\text{InSb}$  و  $\text{In}_{0.5}\text{Fe}_{0.5}\text{Sb}$  بالنسبة لسبين اعلى وسبين اسفل.

- يمثل المنحنى التالي كثافة الحالة الكلية (DOS) للمركب  $\text{InSb}$

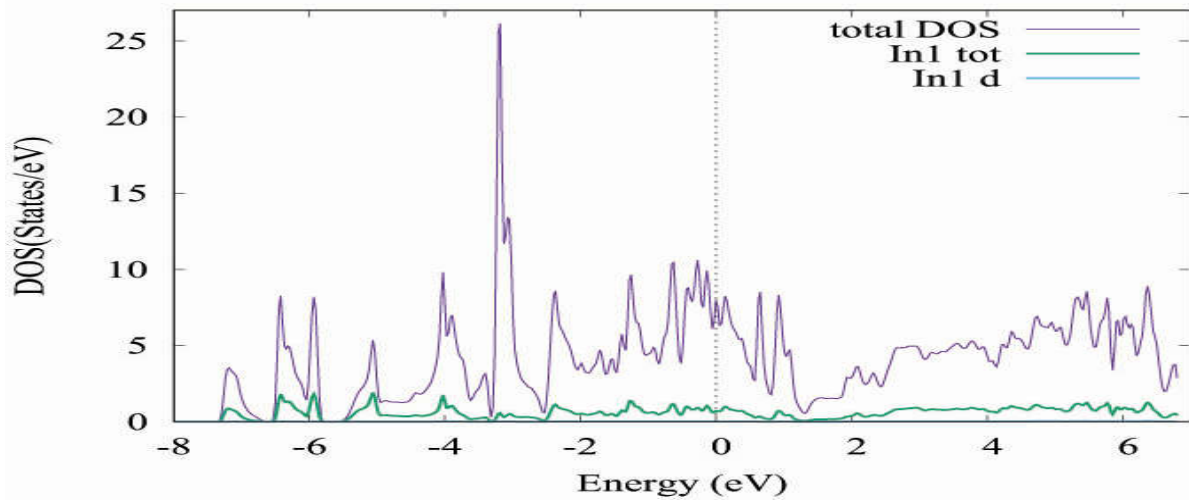


الشكل (5.3): كثافة الحالة الكلية للمركب InSb

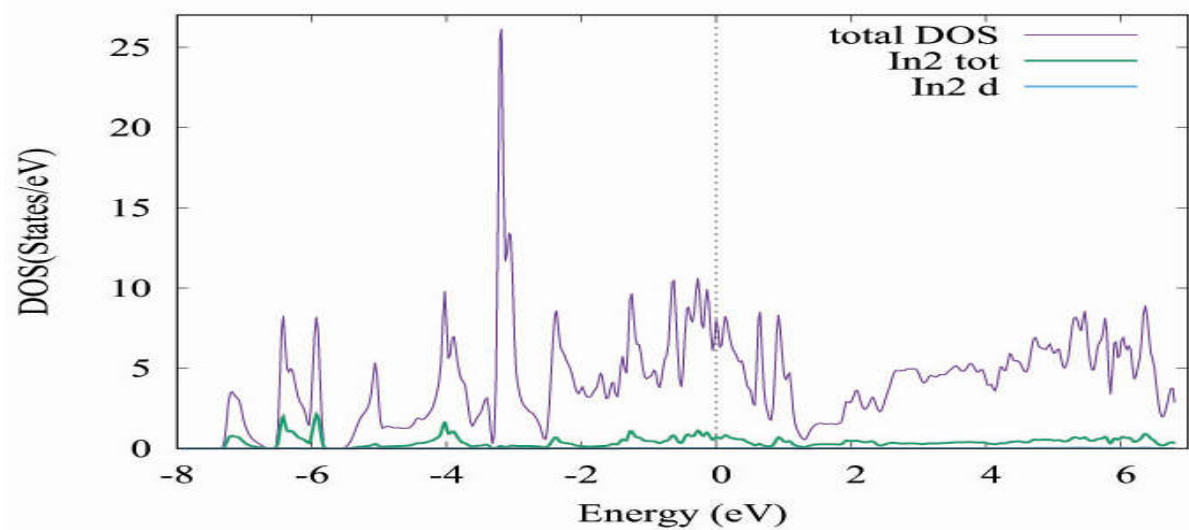
بتنشيط مركب InSb بذرة الحديد Fe تتغير كثافة الحالة الكلية والجزئية في المركب كما هو مبين في المخططات التالية :



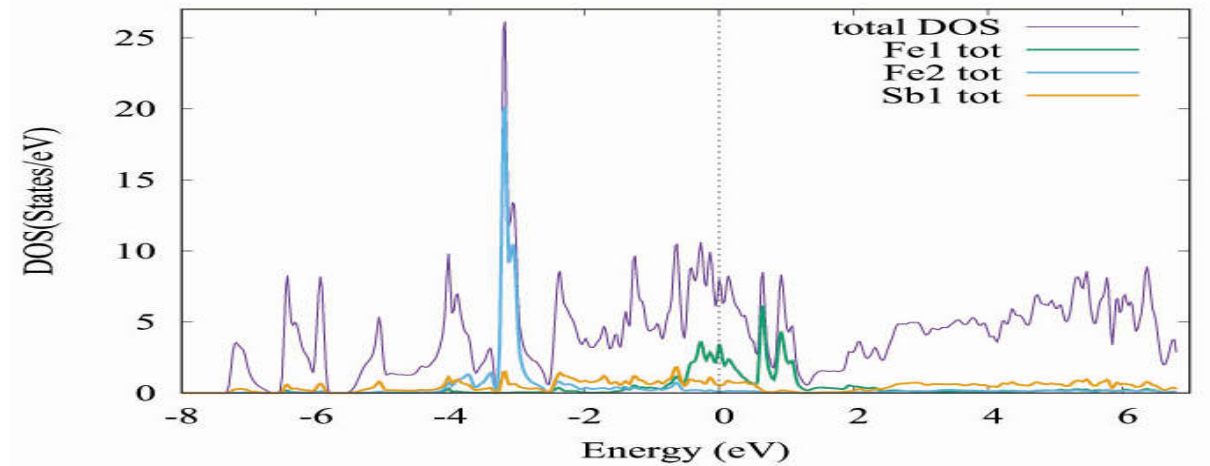
الشكل (6.3): كثافة الحالة الكلية للمركب والجزئية لذرة 1Sb In<sub>0.5</sub> Fe<sub>0.5</sub> Sb



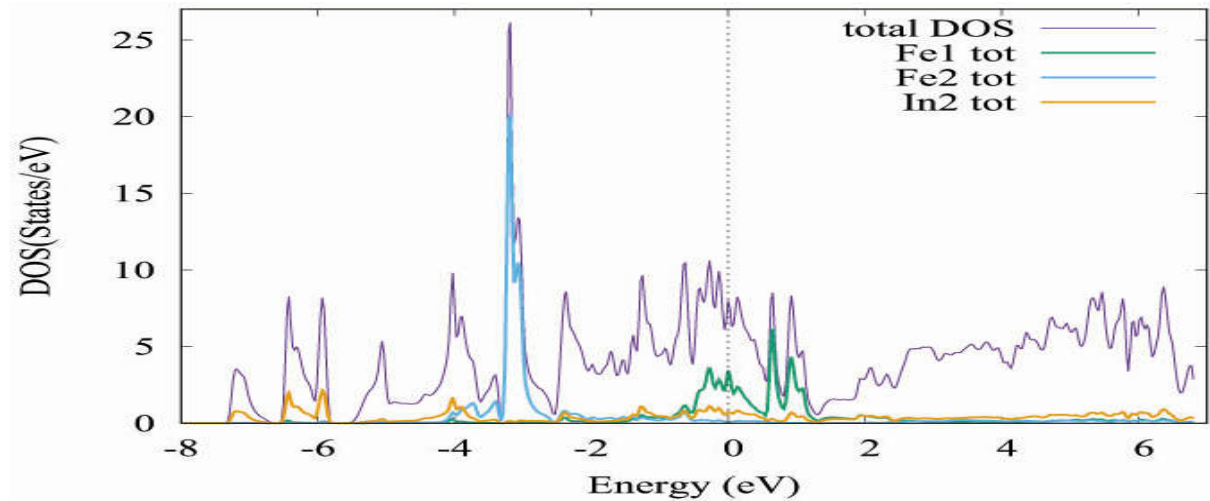
الشكل (7.3): كثافة الحالة الكلية للمركب والجزئية لذرة  $1\text{In In}_{0.5}\text{Fe}_{0.5}\text{Sb}$



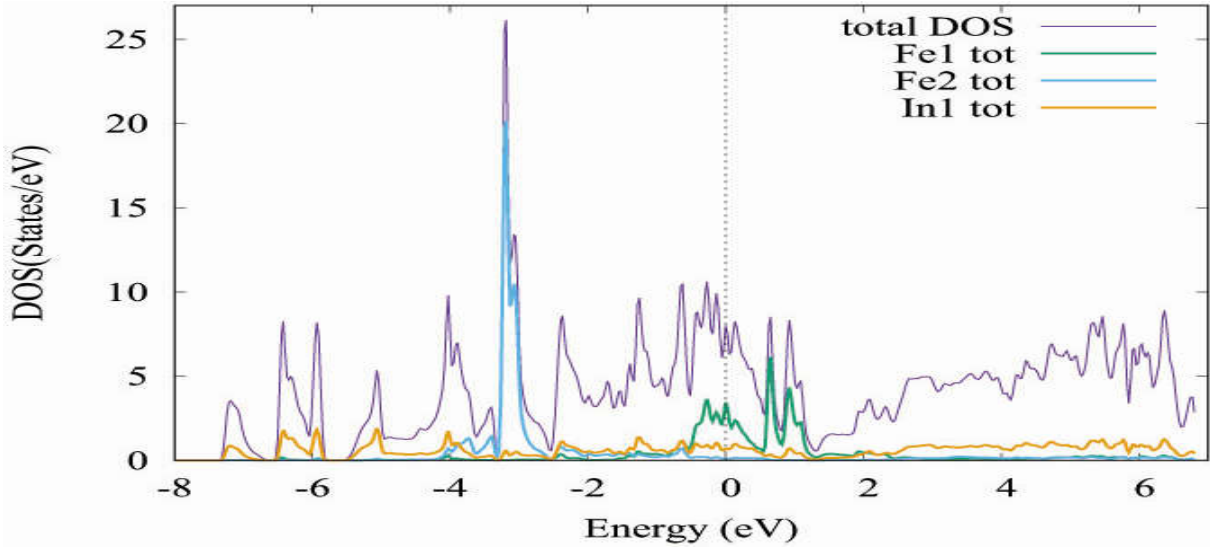
الشكل (8.3): كثافة الحالة الكلية للمركب والجزئية لذرة  $2\text{In In}_{0.5}\text{Fe}_{0.5}\text{Sb}$



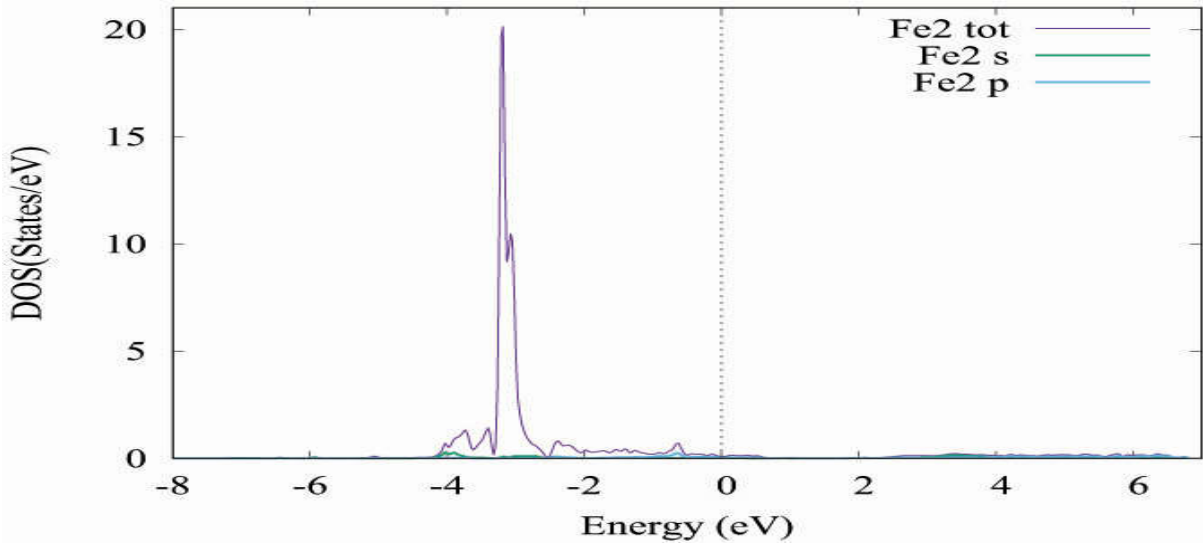
الشكل (9.3): كثافة الحالة الكلية للمركب  $\text{In}_{0.5}\text{Fe}_{0.5}\text{Sb}$  والجزئية لذرة  $1\text{Sb}$  و  $1\text{Fe}$  و  $2\text{Fe}$



الشكل (10.3): كثافة الحالة الكلية للمركب  $\text{In}_{0.5}\text{Fe}_{0.5}\text{Sb}_2$  والجزئية لذرة  $1\text{Fe}$  و  $2\text{Fe}$  و  $2\text{In}$

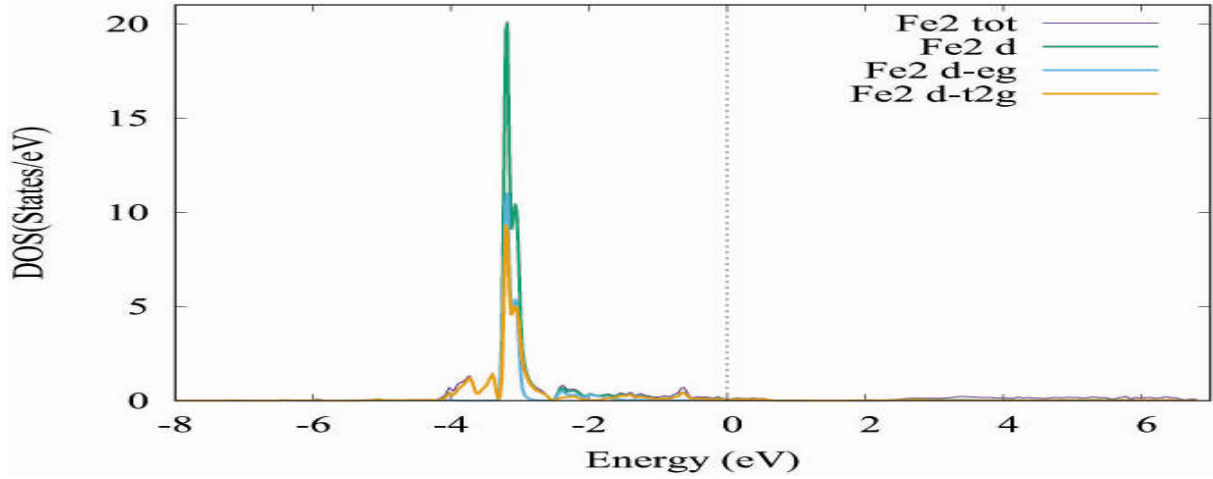


الشكل (11.3): كثافة الحالة الكلية للمركب  $\text{In}_{0.5}\text{Fe}_{0.5}\text{Sb}$  والجزئية لذرة  $1\text{Fe}$  و  $2\text{Fe}$  و  $1\text{In}$

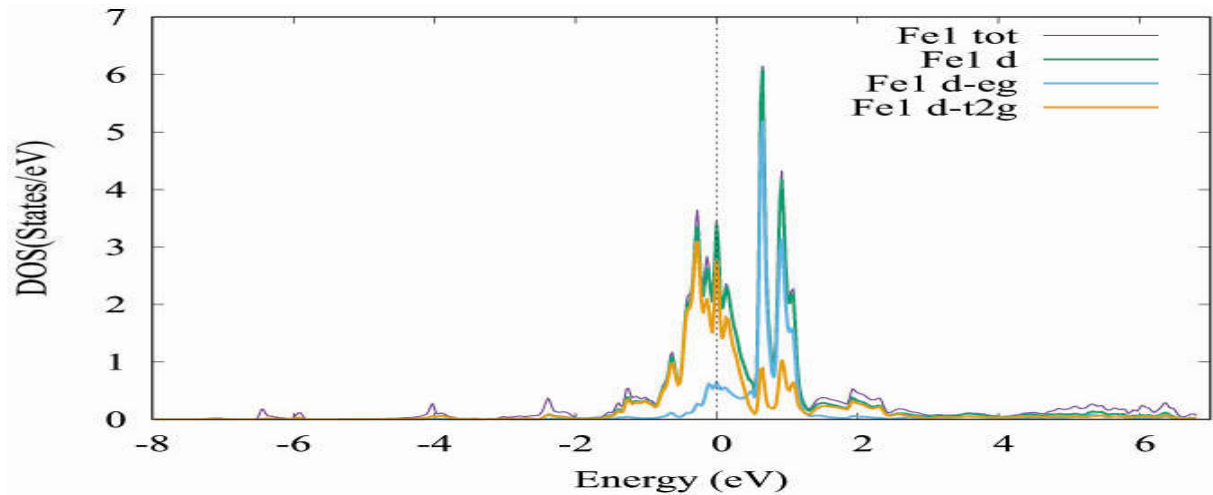


الشكل (12.3): كثافة الحالة الجزئية لذرة  $2\text{Fe}$  في المدارين  $s$  و  $p$  للمركب  $\text{In}_{0.5}\text{Fe}_{0.5}\text{Sb}$





الشكل (13.3): كثافة الحالة الجزيئية لذرة 2Fe في المستويين الذريين d-eg و d-t2g للمركب



الشكل (14.3): كثافة الحالة الجزيئية لذرة 1Fe في المستويين الذريين d-eg و d-t2g للمركب



من خلال ملاحظة منحنيات الكثافة الإلكترونية الكلية أو الجزيئية للمركب ككل أو لكل ذرة تدخل في تركيب هذا الجزيء، فإننا نستنتج تنشيط مركب أنتيمونيد الإنديوم InSb بذرة الحديد Fe يزيد في الكثافة

الإلكترونية لعصابات التكافؤ مما يؤثر على خصائصها الفيزيائية بالتغيير من طبيعته المركب من مادة شبه ناقله الى مادة نصف معدنية

### III-4- الخصائص المغناطيسية:

في عملنا هذا تم دراسة الحالة المغناطيسية (FM) حيث تم حساب العزم المغناطيسي الكلي (Total) والجزئي في السبين اعلى في حالة دالة الموجة النسبية باستخدام التقريب GGA المبينة في الجدول التالي

للمركب  $\text{In}_{0.5}\text{Fe}_{0.5}\text{Sb}$ .

المركب	العزم المغناطيسي الكلي	$(\mu\text{B})m_{\text{Fe}}$	$m_{\text{In}} (\mu\text{B})$	$m_{\text{Sb}} (\mu\text{B})$	الطريقة
InSb	0	- -	0	0	GGA
$\text{In}_{0.5}\text{Fe}_{0.5}\text{Sb}$	-27.56592	-2.93437	-0.45636	-1.34669	GGA

الجدول (2-3): قيم العزم المغناطيسي الكلي والجزئي للمركبين  $\text{In}_{0.5}\text{Fe}_{0.5}\text{Sb}$  و InSb

انطلاقاً من الجدول لاحظنا مساهمة كبيرة للعزم المغناطيسي لذرات الحديد (Fe) في المركب

$\text{In}_{0.5}\text{Fe}_{0.5}\text{Sb}$  وهذا يعود الى الكثرونات التكافؤ في ذرة الحديد

المراجع:

[1]– j. Bamas,A.Fert,phys.Rev.Lett.80,1058(1998).1.

[2]– M.Berber,B.Doumi,A.Mokaddem,Y.Mogulkoc,A.Sayede,A.Tadger,Electron.  
Mater. 47, 49(2018).

[3]–P.Chevalier «Propriétés des matériaux III-V», chp .B,Université de  
Lille(1999).

### خلاصة عامة:

في هذا العمل قمنا بدراسة الخصائص البنيوية والالكترونية والمغناطيسية للمركب  $\text{InSb}$  مخدر بعنصر الحديد  $\text{Fe}$  معتمدين على طريقة الامواج المستوية المتزايدة خطيا والكمون الكامل المدمجة في برنامج WIEN2K في الاطار العام لنظرية الكثافة وذلك في التقريب GGA.

النتائج المبدئية لعملنا هذا مبينه كما يلي

المركب  $\text{InSb}$  هو مركب شبه موصل له عزم مغناطيسي معدوم بتخديره بعنصر الحديد  $\text{Fe}$  يصبح مركب صيغته هو  $\text{In}_{0.5}\text{Fe}_{0.5}\text{Sb}$  ويتحول من شبه موصل الى نصف معدن عزمه المغناطيسي بالنسبه لسبين اعلى هو  $27.56592(\mu\text{B})$  - الكيميائية يمتاز ببنية بلورية وزمرة تناظر فضائية من نوع  $F(-43m)$ .

النتائج المتحصل عليها لمعامل الانضغاطية B ومشتقته الاولى B' للمركب  $\text{In}_{0.5}\text{Fe}_{0.5}\text{Sb}$  كانت مختلفة مع المركب  $\text{InSb}$  حيث وجدنا انه بتخدير المركب الاخير بعنصر الحديد  $\text{Fe}$  نتحصل على مركب اقل صلابة لانه يتحول الى عنصر نصف معدني يمكن استعماله في الكثير من الصناعات التكنولوجية لما له من كثافة الكترونية في عصابة التكافؤ بالإضافة أن له عزم مغناطيسي. كما حساب قيمة طاقة التشكل ووجدنا ان المركب  $\text{In}_{0.5}\text{Fe}_{0.5}\text{Sb}$  مستقر طاويا. ونظرا لغياب النتائج التجريبية والحسابات النظرية ممكن اعتماد هذه النتائج كمرجع للدراسة

- اما الخصائص الالكترونية فوجدنا ان المركب  $\text{In}_{0.5}\text{Fe}_{0.5}\text{Sb}$  يسلك سلوك نصف معدن في الحالة الاساسية في السبين الاعلى وقيمة الفجوة  $E_g$  معدومة لتداخل عصابات طاقة التكافؤ والنقل في جميع النقاط.

- بالنسبة للخصائص المغناطيسية تم تحديد العزم الكلي والجزئي للمركبين **InSb** و **Sb**  $\text{In}_{0.5}\text{Fe}_{0.5}$  في التقريب GGA فوجدنا ان المركب الاخير يمكن استعماله في مجال السبين الالكتروني والالكترونات المغناطيسية (spintronics/magnetoelectronics).

## قائمة المصادر والمراجع

### أولاً: المراجع بالعربية:

- (1) إحسان ضياء البيروماني.(2013/2012) محاضرة رقم 5 الثنائي البلوري.جامعة بابل . العراق.
- (2) إحسان ضياء البيروماني.(2013-2012).محاضرة رقم 1 في أشباه الموصلات.جامعة بابل.العراق.
- (3) بري السعدي. أطروحة شهادة الدكتوراة في العلوم. جامعة سطييف (2013).
- (4) عميرات مسعودة. دراسة الخصائص المغناطيسية بواسطة المبادئ الاولية. جامعة ورقلة 2015.
- (5) غازي ياسين القيسي.(2010).فيزياء الحالة الصلبة. عمان الأردن.دار المسيرة للنشر والتوزيع.
- (6) مالفينو.تقريبات دوائر الترانزيستور. (أسامة عمر مسعود العشي، مترجم مقالة في أشباه الموصلات.مكتبة أسامة العشي.
- (7) مبارك درار عبد الله.(2014).محاضرة 5 الطاقة الشمسية.جامعة السودان للعلوم والتكنولوجيا الخرطوم.
- (8) الموسوعة العلمية للصخور والمعادن KFAS (2009)
- (9) ميموني إيمان. (2016).مساهمة في دراسة الطبقات الرقيقة للخلايا الشمسية a-Si و a-Si:H المرسية بتقنية PECVD. مذكرة ماستر. جامعة قاصدي مرباح ورقلة.

### ثانياً: المراجع بالأجنبية:

- 1) D.R .Hartree,Proc.Cambridge philos.Soc.24(1928)89
- 2) F.D. Murnaghan, Proc. Natl. Acad. Sci. USA 30 (1944) 244
- 3) G. Ökhan, G. Ökoğlu, Physica B 405 (2010) 2162. . -[14]

- 4) G.L. Schimek, W.T. Pennington, P.T. Wood, Joseph W. Kolis, Supercritical ammonia synthesis and characterization of four new alkali metal silver antimony sulfides :  $M\text{Ag}_2\text{SbS}_4$  (2000) p.2990 and  $M_2\text{AgSbS}_4$  ( $M^{1/4}\text{K}$ , Rb), J. Solid State Chem.
- 5) j. Bamas,A.Fert,phys.Rev.Lett.80,1058(1998).1.1[
- 6) J.C. Slater, Phys. Rev. 51, (1937) 846.
- 7) J.P.Perdew,J.A. Chevary, S.H.Vosko, K.A. Jackson, M.R. Pederson,D.J.Singh, and C. Fiolhais, phys.Rev.B46, 6671 (1992).
- 8) M.Berber, B.Doumi, A.Mokaddem, Y.Mogulkoc, A.Sayede, A.Tadjer, Electron, Mater, 47, 49(2018).
- 9) M.H.Cohen, D.Frydel, K.Bruke and E.Engel, J.Chem. Phys. Vol.113, (2000) ,p.2990.
- 10) P.Blaha,K.Schwarz,P.Sorantin,S.B.Tricky,Chem.Phys.Lett.399(1990)
- 11) P.Chevalier «Propriétés des matériaux III–V», chp .B, Université de Lille, (1999).
- 12) Pedrew,J.P.,Burke,K.andErnzenhot,M.Phys.Rev.lett.77385.(1996)
- 13) S.M. Azar, A. Hamad, J.M. Khalifeh, J. Magn. Magn. Mater. 324 (2012) 1776.
- 14) V.Fock,Z.Phys.61,126(1930)795
- 15) Y. Kurtulus, R. Dronskowski, Phys. Rev. B 71 (2005) 014425.

ثالثًا: المواقع:

- 1) [http://ar.Wikipedla.com/wiki/indium-antimonide.](http://ar.Wikipedla.com/wiki/indium-antimonide)
- 2) <http://electrau.net>
- 3) <http://m.marefa.org/>
- 4) [https://ar.esc.wiki/wiki/Indium-antiomonide.](https://ar.esc.wiki/wiki/Indium-antiomonide)
- 5) <https://ar.institut-seltene-erden.de/seltene-erden-und-metalle/strategische-metalle-2/indium/>
- 6) <https://easyphysicsway.blogspot.com>



## المخلص :

في هذا العمل تطرقنا الى جزئين أساسين جزء نظري: شمل عموميات عن أشباه النواقل III-V بالإضافة الى دالية الكثافة والأمواج المستوية المتزايدة خطيا، و جزء تطبيقي استخدمنا فيه النهج الحسابي للمبدأ الأول القائم على نظرية الكثافة الوظيفية المستقطبة وتوقعنا السلوك شبه المعدني لسبائك (M=Fe)  $In_{1-x}M_xSb$  باستخدام برنامج wien2k، من أجل التركيب المختلفة  $x=0.5$  تتم دراسة الخواص الهيكلية والإلكترونية والمغناطيسية لهذه البلورات المكعبة الثلاثية والحصول على النتائج ومناقشتها.

## الكلمات المفتاحية:

أشباه النواقل - دالية الكثافة - دالية الأمواج المستوية المتزايدة خطيا - سلوك شبه المعدني لسبائك (M =Fe ,  $x=0.5$ ) - wien2k.

## Résumé :

Dans ce travail, nous avons touché deux parties principales, une partie théorique : inclure des généralisations sur les semi-conducteurs III-V En plus de la fonction de densité et des ondes planes augmente linéaire, et partie pratique prédit le comportement semi-métallique des alliages  $(In_{1-x}M_x Sb (M =Fe))$  applique programme WIEN2K, pour compositions  $x=0,5$  .

Les propriétés structurales, électroniques et magnétiques de ces cristaux cubiques ternaires.

## les mots clés:

Semi-conducteurs - Fonctions de densité - Fonctions d'onde planes à croissance linéaire - Comportement semi-métallique des alliages  $((In_{1-x}M_xSb (M = Fe, x = 0,5) - wien2k)$ .