

جمهورية العراق
وزارة التعليم العالي والبحث العلمي
جامعة بابل
كلية العلوم

**معالجة نظرية للتركيب الحزمي لبلورة
الجرمانيوم باستخدام طريقة الإهمال المتوسط
للتداخل التفاضلي**

رسالة مقدمة
إلى مجلس كلية العلوم في جامعة بابل
وهي جزء من متطلبات نيل درجة الماجستير في علوم الفيزياء

من قبل

بشائر صالح مهدي بيحي

بكالوريوس تربية فيزياء – جامعة بابل

1997

أب 2003 م

جمادى الثاني 1424 هـ

REPUBLIC OF IRAQ
MINISTRY OF HIGHER EDUCATION
AND SCIENTIFIC RESEARCH
UNIVERSITY OF BABYLON
COLLEGE OF SCIENCE

THEORETICAL PROCESS TO STUDY THE BAND STRUCTURE OF GERMANIUM CRYSTAL BY USE INTERMEDIATE NEGLECT OF DIFFERENTIAL OVERLAP METHOD

ATHESIS SUBMITTED
TO THE COUNCIL OF COLLEGE
OF SCIENCE IN BABYLON UNIVERSITY
IN PARTIAL FULFILLMENT OF REQUIRMENT FOR
THE DEGREE OF MASTER OF SCIENCE IN PHYSICS

By

Bashaer Salih Mahdi Bayee

B.Ed.physics - BABYLON UNIVERSITY
1997

JUNE - 2003

سورة النور

﴿اللَّهُ نُورُ السَّمَوَاتِ وَالْأَرْضِ مَثَلُ نُورِهِ كَمَشْكَاةٍ فِيهَا
مِصْبَاحٌ الْمِصْبَاحُ فِي زُجَاجَةٍ الزُّجَاجَةُ كَأَنَّهَا كَوْكَبٌ
دُرِّيٌّ يُوقَدُ مِنْ شَجَرَةٍ مُبَارَكَةٍ زَيْتُونَةٍ لَا شَرْقِيَّةٍ وَلَا
غَرْبِيَّةٍ يَكَادُ زَيْتُهَا يُضِيءُ وَلَوْ لَمْ تَمْسَسْهُ نَارٌ نُورٌ
عَلَى نُورٍ يَهْدِي اللَّهُ لِنُورِهِ مَنْ يَشَاءُ وَيَضْرِبُ اللَّهُ
الْأَمْثَالَ لِلنَّاسِ وَاللَّهُ بِكُلِّ شَيْءٍ عَلِيمٌ﴾

سورة النور

(سورة النور : 35)

إقرار المشرفين

نقر بأن إعداد هذه الرسالة قد جرى تحت إشرافنا في قسم الفيزياء / كلية العلوم / جامعة بابل كجزء من متطلبات نيل درجة الماجستير في تخصص الفيزياء.

التوقيع:	التوقيع:
اسم المشرف: د.مضر أحمد عبد الستار	اسم المشرف: د.غالب عبد الوهاب الدهش
المرتبة العلمية: باحث علمي أقدم	المرتبة العلمية: مدرس
العنوان: شركة الراية العامة	العنوان: جامعة بابل/كلية العلوم
التاريخ: / / 2003	التاريخ: / / 2003

توصية رئيس قسم الفيزياء

استادا إلى التوصية المقدمة من قبل الأستاذين المشرفين الدكتور غالب عبد الوهاب الدهش والدكتور مضر أحمد عبد الستار أحيل هذه الرسالة إلى لجنة المناقشة لدراستها وبيان الرأي فيها.

التوقيع
الاسم: د. طالب هادي قدوري
المرتبة العلمية: أستاذ مساعد
العنوان: جامعة بابل/كلية العلوم
التاريخ: / / 2003

قرار لجنة المناقشة

نحن رئيس وأعضاء لجنة المناقشة نشهد أننا اطلعنا على هذه الرسالة وقد ناقشنا الطالبة "بشائر صالح مهدي" في محتوياتها وفيما له علاقة بها وذلك بتاريخ 2 / 8 / 2003 فوجدنا أنها جديرة بالقبول لنيل درجة ماجستير علوم في الفيزياء وبتقدير (**امتياز**) وعليه نوصي بقبول هذه الرسالة.

رئيس اللجنة: د. أحمد محمود عبد اللطيف
التوقيع:

المرتبة العلمية: أستاذ مساعد

العنوان: جامعة بابل / كلية العلوم

التاريخ: / / 2003

عضو اللجنة: د.فاضل عبد رسن

عضو اللجنة: د.سيونج نور الدين

التوقيع:

التوقيع:

المرتبة العلمية: باحث علمي أقدم

المرتبة العلمية: أستاذ مساعد

العنوان: شركة الراية العامة

العنوان: الجامعة التكنولوجية/ قسم العلوم التطبيقية

التاريخ: / / 2003

التاريخ: / / 2003

عضو اللجنة (المشرف): د.غالب عبد الوهاب الدهش عضو اللجنة (المشرف): د.مضر أحمد عبد الستار

التوقيع:

التوقيع:

المرتبة العلمية: باحث علمي أقدم

المرتبة العلمية: مدرس

العنوان: شركة الراية العامة

العنوان: جامعة بابل/ كلية العلوم

التاريخ: / / 2003

التاريخ: / / 2003

مصادقة عمادة كلية العلوم

التوقيع

أ.م.د. عودة مزعل ياسر

عميد كلية العلوم

التاريخ: / / 2003

شكر وتقدير

إلى كل يد امتدت بعونٍ لإنجاز هذا البحث أتقدم بالشكر والعرفان.....
إلى أساتذتي ومشرفي رسالتي الدكتور مضر أحمد عبد الستار والدكتور غالب عبد الوهاب
الدهش لأشرفهم وتوجيهاتهم القيمة وآرائهم السديدة ومتابعتهم الجادة من أجل إنجاز الرسالة.
إلى عماده كلية العلوم في جامعة بابل لما قدموه من دعم وتسهيلات لطلبة الدراسات العليا
وإلى الدكتور طالب هادي قدوري رئيس قسم الفيزياء الذي كان لإرشاده وتوجيهه كامل الأثر في
إنجاز البحث وإلى الدكتور أحمد محمود عبد اللطيف مقرر الدراسات العليا في قسم الفيزياء
لتشجيعه المستمر طيلة مدة بحثي.

إلى جميع منتسبي قسم الفيزياء في كلية العلوم – جامعة بابل وإلى طلبة الدراسات العليا
على ما أبدوه من مساعدة وتعاون مستمر.
إلى عائلتي ، أبي وأمي واخوتي (اسعد – آمال – علي) التي أمدتني بالعون والتشجيع.
مع فائق شكري وتقديري إلى مكتب النسيم للحاسبات وإلى جميع العاملين به وأخص
بالذكر الأستاذ محمد زكي لحرصه الشديد على إخراج الرسالة بمظهرها اللائق.
وإلى كل من عبر عن تشجيعه بكلمة أو نصيحة ومنحني الثقة والأمل. ومن الله التوفيق.

بشائر

الخلاصة

إنَّ العمل المنجز في هذه الرسالة قد تم في جامعة بابل للمدة من تشرين الأول 2001 وإلى كانون الثاني 2003 بإشراف الدكتور مضر أحمد عبد الستار من شركة الراية والدكتور غالب عبد الوهاب الدهش من جامعة بابل . وباستثناء ما مشار إليه بمصدر معين فإنَّ المعلومات الموجودة هي من نتائج الباحث وإنها لم تقدم لنيل درجة علمية أخرى سابقاً.

تضمن البحث دراسة التركيب الحزمي لبلورة الجرمانيوم شبه الموصلة التساهمية بوساطة استعمال طريقة تقريبية ذات توافق ذاتي تعتمد على طريقة الإهمال المتوسط للتداخل التفاضلي (INDO) وبالاعتماد على أسلوب خلية الوحدة لمادة شبه موصلة لها تركيب ماسي والتي تحتوي على ثمان ذرات لخلية الوحدة الكبيرة لغرض محاكاة التركيب البلوري والمتمثل بثابت الشبيكة، طاقة الترابط، فجوة الطاقة المباشرة، عرض حزمة التكافؤ والمدارات المهجنة للبلورة، كما وتضمن البحث دراسة للخواص الفيزيائية للبلورة مثل معامل المرونة الحجمي وعامل تشتيت الأشعة السينية وعلاقة الإجهاد بالمطووعة مع إجراء دراسة لتأثير تغيير العوامل التجريبية على الخواص التركيبية للبلورة ودراسة تأثير الإجهاد لحالتي الكبس و السحب على كل من حزمة التكافؤ والتوصيل والفجوة وحالة التهجين للمدارات الإلكترونية نوع S وعلى أوطاً مستوي مشغول Γ_1 وأوطاً مستوي غير مشغول Γ_2 وأعلى مستوي غير مشغول Γ_{15} وبصوره منفردة على كل من المستويات المذكورة سابقاً وعلى عامل تشتيت الأشعة السينية ومعامل المرونة الحجمي وكثافة المراتب، مع رسم الأشكال الخاصة بدالة الموجة وكثافة الاحتمالية لأوطاً مستوي مشغول Γ_1 وأعلى مستوي مشغول Γ_{25} وأعلى مستوي غير مشغول Γ_{15} وللاتجاهين [100] و [110] ، وقد تمت إضافة تصحيحات الترابط والتصحيحات النسبية وتأثير طاقة نقطة الصفر على طاقة الترابط مع إجراء موازنة للنتائج التي تم الحصول عليها مع القيم العملية إن وجدت، إنَّ موازنة العدد القليل للعوامل التجريبية المستعملة في حساباتنا مع كمية المعلومات الغزيرة التي حصلنا عليها من هذه الطريقة قادنا إلى الاعتقاد بأنَّ اختيارنا للطرق شبه - التجريبية لغرض دراسة التركيب الحزمي للبلورة المعنية قد كان موفقاً.

المحتويات

الصفحة	الموضوع	
	الفصل الأول	
	المقدمة	
1	المقدمة العامة	1-1
3	2-1
5	بلورة الجرمانيوم التساهمية	3-1
8	4-1
	التقريبات الأساسية	5-1
10	

13	طريقة المجال المتوافق ذاتياً لهار تري – فوك	6-1
13	طريقة المزيج الخطي للمدارات الذرية للأنظمة المغلقة القشور	1-6-1
14	الذرية	2-6-1
15	7-1
18	تمثيل الدوال الأساسية	8-1
	
	المدارات السليترية النوع	
	
	المدارات الكاوسية النوع	
	
	الدراسات السابقة	
	
	هدف من البحث	
	
	الفصل الثاني	
	المفاهيم النظرية	
19	الطرق شبيهة – التجريبية	1-2
20	2-2
24	طريقة الإهمال التام للتداخل التفاضلي	3-2
25	طريقة الإهمال المتوسط للتداخل التفاضلي	4-2
	طريقة خلية الوحدة الكبيرة	5-2
27	
28	طريقة الإهمال المتوسط للتداخل التفاضلي لخلية الوحدة الكبيرة	6-2
	للمواد الصلبة	
	
	البرامج الحاسوبية المستخدمة	
	
	الفصل الثالث	
	النتائج والمناقشة	
36	دراسة الخواص التركيبية لبلورة	1-3
45	الجرمانيوم	2-3
45	دراسة الخواص الفيزيائية للبلورة	1-2-3
46	2-2-3
49	معامل المرونة الحجمي	3-2-3
	3-3
53	عامل تشتيت الأشعة السينية	
57	4-3
57	علاقة الإجهاد –	1-4-3
68	بالمطابقة	2-4-3
71	دراسة تأثير تغيير العوامل التجريبية على الخواص التركيبية	3-4-3
73	للبلورة	5-3
76	6-3
	دراسة تأثير إجهاد الكبس والسحب في خواص البلورة	
	تأثير إجهاد الكبس والسحب في الخواص التركيبية للبلورة ..	
	تأثير إجهاد الكبس في عامل تشتيت الأشعة السينية	

المشتقة إلى معامل المرونة الحجمي bulk modulus derivative	B
متجه الانتقال الأساسي لمنطقة برليون الناتجة من خلية الوحدة الكبيرة basic lattice vector for brillouin zone predicted from large unit cell	\bar{b}_i
متجه الانتقال الأساسي لمنطقة برليون الناتجة من خلية الوحدة الابتدائية basic lattice vector for brillouin zone predicted from primitive unit cell	\bar{B}_i
المعامل الخطي لدالة الموجة الأولى combination coefficients for first wave function	c_1
المعامل الخطي لدالة الموجة الثانية combination coefficients for second wave function	c_2
المعامل الخطي لدالة موجة المدار الذري λ combination coefficients for λ atomic orbital wave function	$c_{\lambda i}$
المعامل الخطي لدالة موجة المدار الذري σ combination coefficients for σ atomic orbital wave function	$c_{\sigma i}$
المعامل الخطي لدالة موجة المدار الذري v combination coefficients for v atomic orbital wave function	$c_{v i}$
سرعة الضوء light speed	c
المسافة البينية بين المستويات البلورية space between crystal planes	d
عنصر الحجم الأول first volume element	$d_{\tau 1}$
عنصر الحجم الثاني second volume element	$d_{\tau 2}$
التغير في الجهد variation of potential	dv_p
الطاقة الكلية للنظام total energy of system	E^T
الطاقة الإلكترونية للنظام electronic energy of system	E^e
طاقة هارتري - فوك المضبوطة exact Hartree-Fock energy	E_{exact}
الطاقة الترابطية correlation energy	E_{corr}
طاقة هارتري - فوك Hartree-Fock energy	E_{HF}
طاقة نقطة الصفر zero-point energy	E_0

cohesive energy	طاقة الربط	E_{coh}
free atoms energy	الطاقة الحرة للذرة	E_{free}
Fock hamiltonian between orbital μ and ν orbital	هاملتونية فوك بين المدار μ والمدار ν	$F_{\mu\nu}$
basic lattice vector in the reciprocal lattice	متجه الانتقال الأساسي في الشبكة المقلوبة	G
total hamiltonian vector of the system	المؤثر الهاملتوني الكلي للنظام	H^T
total hamiltonian vector of the system with consideration of Born-Oppenheimer approximation	المؤثر الهاملتوني للنظام مع الأخذ بنظر الاعتبار تقريب بورن – اوبنهايمر	H
core hamiltonian vector	المؤثر الهاملتوني الكلي للإلكترون واحد	H^{core}
ionization potential for μ orbital	جهد تأين المدار μ	I_{μ}
ionization potential for S orbital	جهد تأين المدار S	I_s
ionization potential for P orbital	جهد تأين المدار P	I_p
electronegativity for s orbital	الكهروسالبية للمدار S	$-1/2(I_s + A_s)$
electronegativity for P orbital	الكهروسالبية للمدار P	$-1/2(I_p + A_p)$
two electron integral	تكامل التنافر الكولومي	J_{ij}
exchange integrals	تكامل التبادل	K_{ij}
angular momentum operators	مؤثر الزخم الزاوي	L
momentum quantum number	العدد الكمي المداري	l
mass of nucleus	كتلة النواة	M_A
magnetic quantum number	العدد الكمي المغناطيسي	m
	كتلة الإلكترون	m_e

mass of electron		
number of nuclei	عدد النويات	N
normalization constant	ثابت المعايرة	N_n
total number of large unit cell in the crystal	العدد الكلي لوحداث الخلية في البلورة الصلبة	N_T
number of electrons	عدد الإلكترونات	$2n$
density matrix between μ orbital and ν orbital	مصفوفة الكثافة بين المدار μ والمدار ν	$P_{\mu\nu}$
density matrix between λ orbital and σ orbital	مصفوفة الكثافة بين المدار λ والمدار σ	$P_{\lambda\sigma}$
legendre polynomials	متعدد حدود لايجندر	$P_l(w)$
density matrix for B atoms	مصفوفة الكثافة للذرة B	P_{BB}
density matrix for A atoms	مصفوفة الكثافة للذرة A	P_{AA}
angular momentum	الزخم الزاوي	P
applied pressure on the crystal	الضغط المسلط على البلورة	p
number of atomic orbitals	عدد الأوربتالات الذرية	q
distance between A nucleus and B nucleus	المسافة بين النواة A والنواة B	R_{AB}
distance between A nucleus and j electron	المسافة بين النواة A والإلكترون j	r_{Aj}
distance between j electron and k electron	المسافة بين الإلكترون j والإلكترون k	r_{jk}
radial part of the wave function	الجزء القطري لدالة الموجة	$R_n(r)$
overlap matrix between μ orbital and ν orbital	مصفوفة التداخل بين المدار μ والمدار ν	$S_{\mu\nu}$
angular spin operator	مؤثر البرم الزاوي	S
kinetic energy for nuclei	الطاقة الحركية للنويات	T_L
kinetic energy for electrons	الطاقة الحركية للإلكترونات	T_e
position vector	متجه الموضع	T_ν
	مصفوفة القلب الموضعية	$U_{\mu\mu}$

local core matrix element	
جهد التفاعل الناتج بين إلكترون وإلكترون the interaction potential between two electron	V_{ee}
جهد التفاعل الناتج بين إلكترون و نواة the interaction potential between electron with nucleus	V_{eL}
جهد التفاعل الناتج بين نواة ونواة the interaction potential between nuclei	V_{LL}
جهد التفاعل بين إلكترونات التكافؤ على الذرة A مع قلب الذرة B the interaction potential between valence electron on atom A with the core of atom B	V_{AB}
الجهد الكلي للبلورة total potential of the crystal	$V_{(r)}$
جهد تفاعل الإلكترونات مع القلوب الأيونية الموجبة the interaction potential between electron with positive core ions	$V_{i(r)}$
جهد التفاعل بين الإلكترونات الموجودة في البلورة the interaction potential between electron in the crystal	$V_{e(r)}$
التصحیحات النسبية إلى الطاقة الحركية relativistic correction to the kinetic energy	W_1
التصحیحات النسبية للانقسام البرمي – المداري relativistic correction for spin-orbit splitting	W_2
تصحیحات دارون Darwin correction	W_3
دالة الموجة للمدارات الجزيئية wave function for molecular orbitls	$X(k,r-T_v)$
نقاط التناظر في فضاء متجه الموجة high symmetry point in k space	X
شحنة النواة A charge of A nucleus	Z_A
شحنة النواة B charge of B nucleus	Z_B
مؤثر لابلاس للنواة A laplacian operator for A nucleus	∇^2_A
مؤثر لابلاس للإلكترون j laplacian operator for j electron	∇^2_j
دالة الموجة الناتجة من حاصل ضرب دوال موجية أحادية الإلكترون wave function result from by predicted of single – electron wave function	$\psi(r_1,r_2,\dots,r_n)$
دالة الموجة للإلكترون الأول wave function for first electron	$\phi_1(r_1)$
دالة الموجة للإلكترون الثاني wave function for second electron	$\phi_2(r_2)$

دالة الموجة للإلكترون ذي التسلسل n wave function for n electron	$\phi_n(r_n)$
دالة الموجة للمدار μ wave function for μ orbital	ϕ_μ
دالة الموجة المرافقة للمدار μ wave function conjuncated with μ orbital	ϕ_μ^*
دالة الموجة للإلكترون i wave function for i electron	ψ_i
القيمة الذاتية لهاملتونية فوك eigenvalues of Fock hamiltonian	ϵ_{ij}
دالة الموجة للإلكترون j wave function for j electron	ψ_j
هاملتونية فوك Fock hamiltonian	f
مؤثر الاستبدال permutation operator	\mathfrak{R}
مصفوفة الكثافة density matrix	$\rho_{\lambda\sigma}$
الدالة الموجية الكلية المعتمدة على أعداد الكم الأساس total wave function depending on the quantum number	$\psi_{n,m}(r,\theta,\phi)$
الجزء الزاوي لدالة الموجة angular part wave function	$Y_{lm}(\theta,\phi)$
الأس المداري orbital exponent	ξ
دلتا كرونكر بين المدار μ والمدار ν kroneckor delta between μ orbital and ν orbital	$\delta_{\mu\nu}$
دلتا كرونكر بين المدار λ والمدار σ kroneckor delta between λ orbital and σ orbital	$\delta_{\lambda\sigma}$
التكامل الثنائي للإلكترون بين الذرة A والذرة B two –electron integral between atom A and atom B	γ_{AB}
التكامل الثنائي للإلكترون للذرة A two –electron integral of atom A	γ_{AA}
عامل الربط بين الذرة A والذرة B bonding parameter depending on atom A and atom B	β_{AB}^o
عامل الربط المعتمد على الذرة A bonding parameter depending on atom A	β_A^o
عامل الربط المعتمد على الذرة B bonding parameter depending on atom B	β_B^o
حجم الخلية size cell	τ
القيمة العملية للانقسام البرمي – المداري للمدار p experimental spin-orbit splitting of p orbital	Δ_o
التردد الزاوي	ν

angular frequency		
two-electron integral	التكامل الثنائي الإلكترون	$(\mu\nu / \lambda\sigma)$
X-ray scattering factor	عامل تشتيت الأشعة السينية	f_j
atomic charge density	كثافة الشحنة الذرية	$\rho_c(r)$
lowest occupied state	أوطى مستوي مشغول	Γ_1
lowest unoccupied state	أوطى مستوي غير مشغول	Γ_2
highest unoccupied state	أعلى مستوي غير مشغول	Γ_{15}

المختصرات

CNDO	Complete Neglect of Differential Overlap الإهمال التام للتداخل التفاضلي
INDO	Intermediate Neglect of Differential Overlap الإهمال المتوسط للتداخل التفاضلي
FCC	Face – Centered Cubic Lattice المشبك المكعب المتمركز الأوجه
GTO	Gaussian Type Orbitals المدارات الكاوسية النوع
LCAO	Linear Combination of Atomic Orbitals الاتحاد الخطي للمدارات الذرية
LUC	Large Unit Cell خلية الوحدة الكبيرة
NDDO	Neglect of Diatomic Differential Overlap الإهمال الثنائي الذرة للتداخل التفاضلي

PUC	Primitive Unit Cell خلية الوحدة الابتدائية
STO	Slater Type Orbitals المدارات السليترية النوع

الأشكال

الصفحة	عنوانه	الشكل
3	بنية المشبك الماسي	(1-1)
30	المخطط الانسيابي للبرنامج الحاسوبي	(1-2)
34	مستويات الطاقة لمتذبذب توافق بسيط بحسب النظرية الكمية	(2-2)
37	علاقة الطاقة الكلية مع ثابت الشبكة	(1-3)
45	علاقة تغير الطاقة الكلية للبلورة مع الحجم	(2-3)
48	علاقة عامل التشتيت الذري للبلورة مع المقدار $\lambda / \sin\theta$	(3-3)
50	علاقة إجهاد الكبس بالمطاوعة	(4-3)
51	علاقة إجهاد السحب بالمطاوعة	(5-3)
53	علاقة تأثير تغيير العامل التجريبي ϵ في طاقة الترابط	(6-3)
54	علاقة تأثير تغيير عامل الأس المداري ϵ في معامل المرونة الحجمي	(7-3)
55	علاقة تأثير تغيير عامل الربط β° في عرض حزمة التكافؤ	(8-3)
56	علاقة تأثير تغيير الكهروسالبية $1/2(I_s + A_s)$ في عرض حزمة التكافؤ	(9-3)
57	علاقة تأثير إجهاد الكبس في عرض حزمة التكافؤ	(10-3)
58	علاقة تأثير إجهاد الكبس في عرض حزمة التوصيل	(11-3)
58	علاقة تأثير إجهاد الكبس في فجوة الطاقة	(12-3)
60	علاقة تأثير إجهاد الكبس مع حالة التهجين للمدارات الإلكترونية نوع s	(13-3)
61	علاقة تأثير إجهاد السحب في عرض حزمة التكافؤ	(14-3)
62	علاقة تأثير إجهاد السحب في عرض حزمة التوصيل	(15-3)
62	علاقة تأثير إجهاد السحب في فجوة الطاقة	(16-3)
63	علاقة تأثير إجهاد السحب في حالة التهجين للمدارات الإلكترونية نوع s	(17-3)
64	علاقة تأثير إجهاد الكبس في أوطأ مستوي مشغول Γ_1	(18-3)
64	علاقة تأثير إجهاد الكبس في أوطأ مستوي غير مشغول Γ_2	(19-3)
65	علاقة تأثير إجهاد الكبس في أعلى مستوي غير مشغول Γ_{15}	(20-3)
66	علاقة تأثير إجهاد السحب في أوطأ مستوي مشغول Γ_1	(21-3)

الصفحة	عنوانه	الشكل
66	علاقة تأثير إجهاد السحب في أوطاً مستوي غير مشغول Γ_2	(22-3)
67	علاقة تأثير إجهاد السحب في أعلى مستوي غير مشغول Γ_{15}	(23-3)
68	علاقة تأثير إجهاد الكبس في عامل التشثيت الذري f لمستوي بالاتجاه [111]	(24-3)
69	علاقة تأثير إجهاد الكبس في عامل التشثيت الذري f لمستوي بالاتجاه [220]	(25-3)
69	علاقة تأثير إجهاد الكبس في عامل التشثيت الذري f لمستوي بالاتجاه [422]	(26-3)
70	علاقة تأثير إجهاد الكبس في عامل التشثيت الذري f لمستوي بالاتجاه [333]	(27-3)
71	علاقة تأثير إجهاد الكبس في معامل المرونة الحجمي	(28-3)
73	علاقة كثافة المراتب (Density of States) لحالة الاتزان للبلورة	(29-3)
75	علاقة كثافة الحالة للبلورة عند تسليط إجهاد مقداره (0.47) ميكابار على البلورة	(30-3)
77	علاقة تغير دالة الموجة على المحور x لأوطاً مستوي مشغول Γ_1 بالاتجاه [100]	(31-3)
77	علاقة تغير كثافة الاحتمالية مع المحور x لأوطاً مستوي مشغول Γ_1 بالاتجاه [100]	(32-3)
78	علاقة تغير دالة الموجة على المحور x لأعلى مستوي مشغول Γ_{25} بالاتجاه [100]	(33-3)
78	علاقة تغير كثافة الاحتمالية على المحور x لأعلى مستوي مشغول Γ_{25} بالاتجاه [100]	(34-3)
79	علاقة تغير دالة الموجة على المحور x لأعلى مستوي غير مشغول Γ_{15} بالاتجاه [100]	(35-3)
79	علاقة تغير كثافة الاحتمالية على المحور x لأعلى مستوي مشغول Γ_{15} بالاتجاه [100]	(36-3)
81	علاقة تغير دالة الموجة على المحور x لأوطاً مستوي مشغول Γ_1 بالاتجاه [110]	(37-3)
81	علاقة تغير كثافة الاحتمالية على المحور x لأوطاً مستوي مشغول Γ_1 بالاتجاه [110]	(38-3)
الصفحة	عنوانه	الشكل
82	علاقة تغير دالة الموجة على المحور x لأعلى مستوي مشغول Γ_{25} بالاتجاه [110]	(39-3)
82	علاقة تغير كثافة الاحتمالية على المحور x لأعلى مستوي مشغول Γ_{25} بالاتجاه [110]	(40-3)
83	علاقة تغير دالة الموجة على المحور x لأعلى مستوي غير مشغول Γ_{15} بالاتجاه [110]	(41-3)

83	علاقة تغير كثافة الاحتمالية على المحور x لأعلى مستوي غير مشغول Γ_{15} بالاتجاه [110]	(42-3)
----	---	--------

الجدول

الصفحة	عنوانه	الجدول
31	الطاقة الكلية لكل دورة عند حالة الاتزان للبلورة	(1-2)
36	الخواص التركيبية والإلكترونية لبلورة الجرمانيوم	(1-3)
39	الخواص التركيبية والإلكترونية لبلورة الجرمانيوم باستخدام طريقة الإهمال التام للتداخل التفاضلي وطريقة الإهمال المتوسط للتداخل التفاضلي و(طريقة الإهمال المتوسط للتداخل التفاضلي + تصحيحات الترابط) ومقارنتها مع القيم العملية أن وجدت	(2-3)
42	نقاط التناظر الموجودة في منطقة برليون الأولى في فضاء متجه الموجة	(3-3)
43	العوامل التجريبية المستخدمة في هذا العمل مع إجراء مقارنة لها مع العوامل التجريبية لـ (Harker & Larkins)	(4-3)
47	عامل التشثيت الذري لمستويات ميلر المختلفة مع إجراء مقارنة مع نتائج هارترى - فوك ومع النتائج العملية	(5-3)
63	الخواص الإلكترونية والتركيبية للبلورة عند القيمة العظمى إلى إجهاد الكبس والسحب	(6-3)

الفصل الأول

المقدمة Introduction

1-1: مقدمة عامة General Introduction

إنَّ الخوض في مجال الخواص التركيبية والإلكترونية للأنظمة التساهمية من المواضيع الأكثر أهمية في مجال الفيزياء الأساسية والتطبيقية. وهناك الكثير من البحوث التي تضمنت إلقاء الضوء على المواد شبه الموصلة بشكل عام والجرمانيوم بشكل خاص على هيئة بلورات نقية أو بلورات مركبة [1،2،3]، لما لهذه المادة من أهمية في التطبيقات التكنولوجية والأجهزة الإلكترونية، فمنذ عام 1933 تقدم كلُّ من (Wigner & Seitz) بأول نوع من هذه الحسابات بواسطة استعمالهم للحاسبة اليدوية.

تُعَدُّ حسابات التركيب الإلكتروني لحزم الطاقة في المواد الصلبة البلورية إحدى معضلات فيزياء الحالة الصلبة التي تحتاج إلى تدخل من الميكانيك الكمي والعديد من التقريبات الأساسية، ولاسيما عندما تكون الذرات المكونة للمواد الصلبة ذات عدد ذري كبير. وعلى الرغم من التطور الكبير والسريع في القابليات الحاسوبية المستعملة لتطوير الطرق النظرية بالاعتماد على ميكانيك الكم خلال السنوات الماضية، إلا أن هذه البرامج بقيت مقتصرة على الأنظمة التي لها حجم معين والتي لها عدد محدد من الذرات المكونة لجزيئات المادة.

حيث تُعَدُّ طريقة الحسابات الأولية لهارتري- فوك (Ab-initio Hartree-Fock Method) لإيجاد المؤثر الهاملتوني بصورة دقيقة ومضبوطة للمواد الصلبة وبدون إدخال أي تقريب خارج نطاق قدرة الحاسبات الحالية، مما دعت الحاجة إلى إدخال بعض المفاهيم شبه- التجريبية [4،5] التي تم استعمالها في حسابات هذا العمل الذي تضمن الفصل الأول منه ذكر الخواص الأساسية لبلورة الجرمانيوم بشكل خاص والبلورات التساهمية بشكل عام ضمن الفقرة (1-2)، والتقريبات الأساسية التي استعملت تضمنتها الفقرة (1-3) مع ذكر المبادئ الأساسية لطريقة هارتري – فوك في الفقرة (1-4) وقد استعملنا طريقة الاتحاد الخطي للمدارات الذرية (LCAO) للتعبير عن المدارات الجزيئية التي تمت مناقشتها في الفقرة (1-5) مع إعطاء نبذة عن نوعي الدوال الأساس التي تستعمل عادة في وصف هذه المدارات تضمنتها الفقرة (1-6) أما الفقرة (1-7) فقد احتوت على أهم نتائج الباحثين في السنوات السابقة ووصولاً إلى وقتنا الحاضر وكانت آخر فقرة في هذا الفصل (1-8) هي لبيان الهدف الذي يرمي إليه هذا البحث.

أما الفصل الثاني من هذا العمل فقد تضمن المفاهيم النظرية التي اعتمدت عليها طريقه هارتري – فوك لغرض تسهيل الحسابات الخاصة بالتركيب الحزمي للمواد الصلبة التي تمثلت بالطرائق شبه - التجريبية كما هو موضح في الفقرة (1-2) مع إعطاء وصف لهذه الطرائق

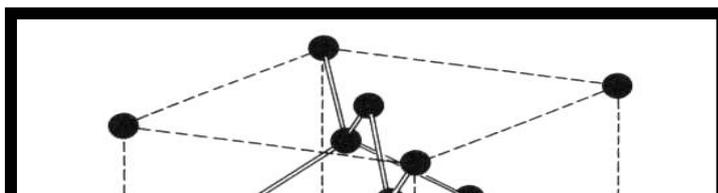
المستعملة في الفقرة (2-2) والفقرة (3-2)، أما الفقرة رقم (4-2) فبينت أهمية استعمال طريقة خلية الوحدة الكبيرة للتعبير عن المواد الصلبة وبعد إدخال أسلوب خلية الوحدة الكبيرة مع طريقة الإهمال المتوسط للتداخل التفاضلي تم الحصول على القوانين الخاصة بالمواد الصلبة وكما هو مبين في الفقرة رقم (5-2)، أما البرنامج الحاسوبي المستعمل مع ذكر للخطوات الأساسية و المخطط الانسيابي للبرنامج فقد أحتوى في الفقرة رقم (6-2).

تم تنفيذ البرامج الحاسوبية على كومبيوتر نوع (3- Pentium) باستعمال لغة الفورتران-90 وبوساطة استعمال عدد كبير من البرامج لغرض إيجاد حسابات التركيب الحزمي للبلورة المستعملة، وتضمن الفصل الثالث عرض التفاصيل الخاصة بالنتائج التي تم الحصول عليها وبالاعتماد على طريقة الإهمال المتوسط للتداخل التفاضلي للموديل الدوري المستعمل مع إجراء موازنة للنتائج مع القيم العملية إن وجدت، وذكر للاستنتاجات التي ظهرت من استعمال هذا الأسلوب التكراري و إعطاء بعض المقترحات المستقبلية.

2-1: بلورة الجرمانيوم التساهمية Covalent Germanium Crystal

تعدُّ بلورة الجرمانيوم التساهمية التي تسمى أحيانا (بالبلورات التكافؤية، Valence Crystal) واحدة من الأمثلة القليلة لهذا النوع من البلورات وفيها تشترك الذرات المجاورة بالكتروناتها في تشكيل أواصر قوية تسمى بالأواصر التساهمية حيث إنّ الأصرة التساهمية هي رابطة لزوج من الإلكترونات التي تشترك بها ذرتان متجاورتان وتسهم كل ذرة بالإلكترون واحد شرط أن يكون برم أو تدويم (spin) الإلكترونين متضادين غير متوازيين (antiparallel) ويكون الإلكترون مشترك بين الذرتين، بدلا من أن يعود أي من الإلكترونات لإحدى الذرتين كما هو الحال في التآصر الأيوني [6].

ولبلورة الجرمانيوم تركيب المشبك الماسي الذي يتكون من شبكتين من نوع متمركزة الأوجه (Face-Centered Cubic Lattice) تحتويان على نوع واحد من الذرات، حيث إنّ الشبكتين مزاحة أحدهما عن الأخرى باتجاه الخط الذي يربط الركنين المتقابلين في المكعب بمقدار $\frac{1}{4}$ قطر المكعب، وبذلك تحوي الخلية المكعبة والاعتيادية الواحدة ثماني ذرات موزعة واحدة في أحد أركان الخلية وثلاث في مراكز اوجه الخلية وأربع ذرات داخل الخلية اثنتان قريبتان من قاعدتها السفلى واثنتان قريبتان من قاعدتها العليا وكما هو مبين في الشكل (1-1) [4].



الشكل (1-1) بنية المشبك الماسي [4]

إنّ تفسير الأصرة التساهمية يصبح أكثر تعقيداً كلما زادت عدد الأواصر التي تسهم فيها ذرة ما. فمثلاً في ذرة الكربون C ($1s^2$ ، $2s^2$ ، $2p^2$) يحوي المدار الخارجي أربعة إلكترونات ويحتاج إلى أربع إلكترونات أخرى لإشباعه ولذلك يكون لذرة الكربون القابلية على الارتباط بأربع ذرات أخرى وتكوين أربع أواصر تساهمية وكما هو الحال في بلورة الماس. ويمكن توضيح كيفية تكون هذه الأواصر بالاعتماد على الميكانيك الكمي حيث تمتلك ذرة الكربون مثلاً في غلافها الخارجي عند أوطأ مستوي لطاقتها (ground state) إلكترونين غير مزدوجين من نوع (2p) مما يصعب تفسير كثير من مركبات الكربون وعند حالات الإثارة الأولى للكربون سوف تمتلك الكترونات واحداً من نوع (2s) وثلاثة إلكترونات غير مزدوجة في المدار نوع (2p) ولكن الإلكترون من نوع (2s) وبسبب افتقاره إلى الاتجاهية فسوف لا يولد أصرة قوية مما يصعب تفسير الترابط في بعض الجزيئات مثل الميثان (CH_4)، ولقد وجد أنه يمكن التغلب على ذلك باستعمال تقنية تهجين الدالات الموجة (hybridization of wave function) لتوليد دالات موجية ذرية جديدة توجة بالاتجاهات المطلوبة و تربط خطي مناسب بين الدالات الأربع يمكن الحصول على دالات موجية جديدة هجينة متشابهة الطاقة ولها قيمة عظمى بالاتجاه المطلوب ويرمز لهذا النوع من تهجين الدالات الموجية بالرمز (sp^3) وتكون هذه الدالات الموجية مسؤولة عن تكوين التركيب البلوري الماسي لبلورة الجرمانيوم [6].

وبسبب صلابة التوزيع الإلكتروني تمتلك المواد الصلبة التساهمية خواص أساسية مشتركة فهي صلبة (hard) صعبة الانفصام والتشويه بسبب الحرارة أو الضغط وتقل هذه الخواص مع زيادة العدد الذري لتلك المواد ابتداءً من العنصر الأول للزمرة الرابعة (IV) من الجدول الدوري والمتمثل بالكربون ووصولاً إلى آخر عنصر وهو القصدير Sn [7].

3-1: التقريبات الأساسية Basic Approximations

تتكون البلورة من عدد كبير من الذرات المكونة للمادة الصلبة وحتى نتمكن من دراسة مستويات الطاقة والدوال الموجية للنظام لابد من إدخال بعض التقريبات الأساسية التي تسهم بشكل فعال وكبير في تسهيل الحصول على الحلول الدقيقة. حيث إنّ المؤثر الهاملتوني الكلي للنظام يكتب بالشكل الآتي [5]:-

$$H^T = T_L + T_e + V_{ee} + V_{eL} + V_{LL} \dots (1-1)$$

T_e, T_L تمثل الطاقة الحركية للنويات والإلكترونات على التوالي، V_{eL}, V_{eL}, V_{ee}

تمثل التفاعل بين الكترون والكترون ونواة ونواة ونواة على التوالي.

ويمكن كتابه المؤثر الهاملتوني بدلالة الوحدات الذرية لنظام يحتوي على عدد N من

الذرات وعدد $2n$ من الإلكترونات على الشكل الآتي [5]:-

$$H^T = -\frac{1}{2} \sum_A^N \frac{1}{M_A} \nabla_A^2 - \frac{1}{2} \sum_j^{2n} \nabla_j^2 + \sum_{j<k}^{2n} r_{jk}^{-1} - \sum_A^N \sum_j^{2n} Z_A r_{Aj}^{-1} + \sum_{A<B}^N Z_A Z_B R_{AB}^{-1} \quad \dots(2-1)$$

حيث إن

Z_A, Z_B : شحنة النواة للذرة A, B على التوالي.

M_A : كتلة النواة.

إنّ أول تقريب سوف يتم التعامل معه تقدم به العالمان (بورن- أوبنهايمر) بافترضهم

أنّ النوى ثابتة نسبياً لا تتحرك مع أخذهم بنظر الاعتبار أنّ حركة الإلكترونات تكون منفصلة

وبذلك فإنّ المؤثر الهاملتوني يصبح بالشكل [5،8]:-

$$H = -\frac{1}{2} \sum_j^{2n} \nabla_j^2 - \sum_A^N \sum_j^{2n} Z_A r_{Aj}^{-1} + \sum_{j<k}^{2n} r_{jk}^{-1} \quad \dots(3-1)$$

حيث يمكننا اعتبار التفاعل الناتج بين النوى كحد كلاسيكي يضاف في نهاية الحسابات

:- [8]

$$E^T = E^e + \sum_{A<B}^N Z_A Z_B R_{AB}^{-1} \quad \dots(4-1)$$

حيث إنّ :-

E^T : هي الطاقة الكلية للنظام .

E^e : تمثل الطاقة الالكترونية للنظام.

وعند كتابه معادلة شرودنكر غير النسبية بصوره عامه تصبح بالشكل الآتي:-

$$H \psi = E^T \psi \quad \dots (5-1)$$

ψ : هي دالة الموجة التي تصف حركة الإلكترونات في حقل النوى.

يتبع هذه الحسابات استعمال أسلوب آخر من التقريبات يعرف بتقريب الإلكترون

الواحد الذي افترضه هارترى باعتباره دالة الموجة لنظام متعدد الإلكترونات هي حاصل ضرب دوال موجية أحادية الإلكترون وكما يأتي [9،10] :-

$$\psi (r_1, r_2, r_3, \dots, r_n) = \phi_1(r_1) \phi_2(r_2) \phi_3(r_3) \dots \phi_n(r_n) \quad \dots(6-1)$$

ولكن الافتراض المذكور آنفاً لا يحقق مبدأ باولي للاستبعاد ولا يعطي صفة اللاتناظر لدالة الموجة مما دعى كل من فوك وسليتر إلى تطوير هذه الطريقة مع الأخذ بنظر الاعتبار تلافى الإخفاقات التي تضمنتها الطريقة السابقة بواسطة استعمال محدد سليتر لتمثيل الدالة الموجية للنظام وكما يأتي [11] :-

$$\psi = 1/\sqrt{N_n} \begin{vmatrix} \phi_1(x_1) & \phi_1(x_2) & \phi_1(x_N) \\ \phi_2(x_1) & \phi_2(x_2) & \phi_2(x_N) \\ \phi_N(x_1) & \phi_N(x_2) & \phi_N(x_N) \end{vmatrix} \quad \dots(7-1)$$

حيث إن N_n هو ثابت المعايرة.

إن هذا النوع من الدوال يعرف بالدوال المحددية (determinantal wave functions) وهي مفيدة جداً وتظهر صفة اللاتناظر ومبدأ باولي للاستثناء بصورة تلقائية من قواعد المحددات [11]، كما ويمكن التعبير عن دالة الموجة ψ بصورة اعم بواسطة المزيج الخطي لجمع الحالات الممكنة والناجمة من استبدال أي زوج من الإحداثيات الإلكترونية بالقانون :-

$$\psi = \sum_{\mathfrak{R}} (-1)^{\mathfrak{R}} \phi_1(x_1) \phi_2(x_2) \dots \phi_N(x_N) \quad \dots(8-1)$$

حيث إن \mathfrak{R} هو مؤثر الاستبدال، وإن ترتيب الاستبدال إما أن يكون فردياً ويؤدي إلى ظهور إشارة سالبة أو زوجياً ويؤدي إلى ظهور إشارة موجبة [12].

4-1: طريقة المجال المتوافق ذاتياً لهارترى-فوك

The Hartree-Fock Self-Consistent field Method

تُعدُّ معادلة شرودنكر الموجية المحور الأساسي الذي تستند إليه جميع الدراسات الكمية للانظمة الذرية والجزئية والصلبه حيث إنّ حل هذه المعادلة يمكننا من الحصول على الدوال الموجيه والطاقات المقابلة ولأي مستوى طاقه ولكن الحلول التحليلية والتامة لهذه المعادلة متوافرة فقط لذرة الهيدروجين ولذرة الهليوم و بالاعتماد على طريقة التغيرات التي اعتبرت فيما بعد طريقا ساذجا لمعالجة مسألة تداخلات الإلكترون-الإلكترون [9،11] حيث إنّ المسألة سوف تتعقد في حالة التعامل مع الأنظمة الذرية المتعددة الإلكترونات وكذلك عند التعامل مع الجزيئات والمواد الصلبة، ولغرض دراسة هذه التداخلات بإسهاب اكثر تقدم كل من هارتري- فوك بطريقة للتعامل مع هذه الأنظمة بوساطة استعمال عدد من معادلات شرودنكر الإلكترونية التي تعرف بصوره عامه بمعادلات هارتري-فوك أو معادلات المجال المتوافق ذاتيا والتي يمكننا كتابتها بالشكل الآتي [12] :-

$$[H^{\text{core}} + \sum_j (2j_j - K_j)]\psi_i = \sum_j \epsilon_{ij} \psi_j \quad i=1,2,3,\dots,q \quad \dots(9-1)$$

H^{core} : المؤثر الهاملتوني لإلكترون واحد يتحرك في مجال النواة.

J_j : تكامل التنافر الكولومي الناتج من التنافر بين الإلكترونات.

K_j : تكامل التبادل الذي ينتج من تأثير استبدال الإلكترونات.

q : تمثل عدد الدوال الأساس التكافؤيه المكونة للذرات.

ويعرف الطرف الأيسر من المعادلة (9-1) بهاملتونية فوك، ويمكن كتابة المعادلة المذكورة آنفاً بصيغه أكثر عمومية و شمولاً وكما يأتي [12] :-

$$f\psi_i = \sum_j \epsilon_{ij} \psi_j \quad i=1,2,3,\dots,q \quad \dots(10-1)$$

وحتى نتمكن من حل مجموعة معادلات هارترى - فوك لا بد لنا من أتباع أسلوب ما يعرف بالتقريبات المتتالية إذ إنّ الحسابات سوف تبدأ باقتراح مجموعه تخمينية لعدد n من الدالات ثم ايجاد قيم جديده لهذه الدالات بوساطة استعمال طريقه تكرارية (iterative method) متعاقبة وتعاد هذه الطريقة عدة مرات إلى أن تكون القيم المتتالية للدالتين متطابقة تقريبا (وبحسب الدقة المرغوب بها) ولهذا السبب عرفت هذه الطريقة بالمجال المتوافق ذاتياً (Self-Consistent field Method) ومن الملاحظ أنّ سرعة الوصول إلى الحل المتوافق ذاتياً يعتمد على الاختيار الدقيق للدالة الابتدائية فإذا كان اختيارنا موفقاً فإنّ التوافق سوف يحدث بصورة سريعة وربما بعد

مرور دورتين أو ثلاث دورات فقط [9، 11].

إنّ طريقة هارتري – فوك لها تطبيقات واسعة المدى لمعرفة الكثير من المعلومات وكما هو مبين في الفصل الثالث، وعلى الرغم من أنّ الطاقة الكلية التي حصلنا عليها في طريقة هارتري – فوك هي أفضل من الطاقة الكلية في طريقة هارتري التي أهملت تماماً أي نوع من أنواع الترابط حيث إنّ الترابط الموجود في حالة البرم المتعكس للمدارات المغلقة لا يزال مهماً في الطريقتين مما يؤدي إلى زيادة نسبة الخطأ عند موازنة القيم المحسوبة نظرياً مع القيم التجريبية المقاسة [11].

5-1: طريقة المزيج الخطي للمدارات الذرية للأنظمة المغلقة القشور الذرية

Linear Combination of Atomic Orbitals for Closed Shell System (LCAO)

إنّ مبدأ جمع الحالات هو واحد من المبادئ الطبيعية والرئيسية التي تخضع لها النظم الفيزيائية في هذا الكون وقد اعتمد الميكانيك الكمي عليها بافتراضه أنه إذا كان لدينا حالتان أو أكثر من الحالات المحتملة لنظام ما، فإنّ هنالك علاقة بين هذه الحالات بحيث إننا لو استطعنا وصف هذه الحالات رياضياً، فإنّ الجمع الخطي لها يعطي حالة جديدة محتملة لنفس النظام وتخضع لنفس القوانين المقيدة للنظام ومع استعمال أسلوب تشابه المدارات الجزيئية قرب النواة بالمدارات الذرية أي بالإمكان تركيب مدارات جزيئية تقريبية من جمع المدارات الذرية المتمركزة قرب النويات المختلفة عن طريق الجمع الخطي للأوربتالات الذرية (LCAO) وذلك باستعمال معاملات جمع مناسبة، ولأنّ الإلكترونات هي جسيمات غير قابلة للتمايز ولذلك فإنّ المعادلة (1-6) لا تمثل الترتيب الوحيد للإلكترونات و سيتم صياغة دالة الموجة للنظام كاتحاد خطي لهذه الدوال وكما يأتي [11] :-

$$\psi = c_1\phi_1 + c_2\phi_2 + c_3\phi_3 + \dots + c_\mu\phi_\mu \quad \dots(11-1)$$

أو

$$\psi = \sum_{\mu=1}^{q=\mu} c_\mu\phi_\mu \quad \dots(12-1)$$

إذ إنّ ϕ_μ تمثل الأوربتالات الذرية المستخدمة و q هي عدد الأوربتالات الذرية أو ما

يسمى بالدوال الأساس (basis functions) في حين تمثل c_{μ} معاملات الأوربتالات الذرية وبذلك نستطيع أن نستعمل ψ كدالة متغيرة أو دالة تخمينية لإيجاد أوطاً قيمة للطاقة من خلال تغيير قيمة هذه المعاملات [13].

إن دقة نتائج الطرائق الخاصة بدراسة التركيب الإلكتروني تعتمد وبشكل أساسي على عدد الدوال الأساس التي تتضمنها عملية الجمع الخطي غير أن هذه الطرائق تتفاوت أيضاً في عدد الدوال الأساس أو الأوربتالات الذرية المستعملة ويمكن تقسيمها على ثلاث مجاميع أساسية وكما يأتي [12]:

1. مجموعة الدوال الأساس المصغرة: وتشمل كل المدارات الذرية المكونة للذرات وبضمنها المدارات الذرية التكافؤية لكل ذرة في النظام.
2. مجموعة الدوال الأساس الممتدة: وتشمل كل المدارات الذرية المكونة للذرات بالإضافة إلى أي عدد ممكن للدوال الذرية والممتدة خارج المدارات الذرية للإلكترونات التكافؤ.
3. مجموعة الدوال الأساس التكافؤية: وتشمل فقط المدارات الذرية المتضمنة إلكترونات التكافؤ في كل ذرة للنظام.

وبعد إدخال صيغة الاتحاد الخطي للأوربتالات الذرية على حدود معادلات هارترى-فوك والمتمثلة بالرقم (9-1) سوف نتمكن من صياغة معادلة الطاقة الإلكترونية للنظام كما في الشكل الآتي [5]:

$$E_e = \sum_{\mu\nu} p_{\mu\nu} H_{\mu\nu}^{core} + \frac{1}{2} \sum_{\mu\nu\lambda\sigma} p_{\mu\nu} p_{\lambda\sigma} [(\mu\nu/\lambda\sigma) - \frac{1}{2}(\mu\lambda/\nu\sigma)] \quad \dots(13-1)$$

ومع تغيير قيم معاملات الجمع لغرض الحصول على أوطاً قيمة للطاقة سوف تخضع المعادلة المذكورة آنفاً (13-1) إلى نظرية التغيرات الذي عند تطبيقه يعطي مجموعة من المعادلات الأينية التي تعرف الآن بمعادلات روثان-هال (Roothaan Hall-equation) والتي تعد الأساس لأغلب الحسابات النظرية التي تعتمد على طرق المجال القائم لذاته للأوربتالات الجزيئية المكونة بالاتحاد الخطي للأوربتالات الذرية ويمكن كتابتها على الشكل الآتي [10،12]:

$$\sum_{\nu} (F_{\mu\nu} - \varepsilon_i S_{\mu\nu}) c_{\nu} = 0 \quad \dots(14-1)$$

حيث إن $S_{\mu\nu}$ يمثل تكامل التداخل الذي يمكننا تعريفه بالشكل:-

$$S_{\mu\nu} = \int \phi_{\mu}^* \phi_{\nu} d\tau \quad \dots(15-1)$$

حيث أن:-

$$d\tau = r^2 \sin\theta d\theta d\phi dr$$

و $F_{\mu\nu}$ هي عناصر مصفوفة فوك التي تعرف كالاتي [10،12]:

$$F_{\mu\nu} = H^{core} + \sum_{\lambda} \sum_{\sigma} \rho_{\lambda\sigma} [(\mu\nu / \lambda\sigma) - 1/2(\mu\lambda / \nu\sigma)] \quad \dots (16-1)$$

H^{core} هي مصفوفة العناصر لهاملتونية الإلكترون الواحد وتمثل كما يأتي:-

$$H^{core} = -\frac{1}{2} \nabla_j^2 - \sum_A \frac{Z_A}{r_{Aj}} \quad \dots(17-1)$$

وتمثل الكمية بين القوسين $(\mu\nu | \lambda\sigma)$ في المعادلة (16-1) تكاملات التنافر الإلكتروني

التي تعتمد على إحداثيات إلكترونين وبذلك تسمى التكاملات الثنائية الإلكترون وتعطى بالشكل [8،10]:-

$$(\mu\nu / \lambda\sigma) = \iint \phi_{\mu}^*(1)\phi_{\nu}(1)\left(\frac{1}{r_{12}}\right)\phi_{\lambda}^*(2)\phi_{\sigma}(2)d\tau_1d\tau_2 \quad \dots(18-1)$$

وفي المعادلة (16-1) التكاملات الثنائية الإلكترون مضروبه بالمقدار $\rho_{\lambda\sigma}$ الذي يعرف بمصفوفة الكثافة وتعطى بالعلاقة [8،10]:-

$$\rho_{\lambda\sigma} = 2 \sum_i^{occ} c_{\lambda i} * c_{\sigma i} \quad \dots(19-1)$$

إنّ الحاصل الجمعي (Σ) يشمل فقط المدارات المملوءة والعامل 2 في المعادلة السابقة

يشير إلى أن هنالك إلكترونين في كل مدار للأنظمة المغلقة القشور.

6-1: تمثيل الدوال الأساس Basis Functions Representation

إنّ طريقة هارترى – فوك توفر دوالاً موجية عددية تكتب على هيئة جداول عددية مما

يجعلها غير مناسبة للعديد من التطبيقات البسيطة ولهذا السبب ظهرت الحاجة إلى استعمال دوال

موجيه لها صيغ تحليلية وتكون مفيدة لأغلب التطبيقات النظرية [5] حيث يمكننا تقسيم الدوال

الأساس التي تستعمل بصورة واسعة وبشكل أساسي في حسابات الجزيئات أو المواد الصلبة إلى

نوعين [12،14]:-

1-6-1: المدارات السليترية النوع Slater – Type Orbitals(STO)

يمتلك هذا النوع من الدوال صيغة عامة تتكون من جزء قطري متمثل بالصيغة

$\exp(-\xi r)$ ومضروبة بالقوة x, y, z أو r وكما هو الحال مع ذرة الهيدروجين مع الضرب بثابت

معايرة مناسب وجزء زاوي لتصبح لها صيغه عامه كما في الشكل الآتي:-

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \phi) = R_n(r) Y_{lm}(\theta, \phi) \quad \dots(20-1)$$

حيث إنّ m, l, n هي أعداد الكم الأساسية.

ويمكننا كتابة المعادلة أعلاه بصيغة أكثر تفصيلاً بالشكل [12،14]:

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \phi) = N_n r^{n-1} \exp(-\xi r) Y_{lm}(\theta, \phi) \quad \dots(21-1)$$

حيث إن N_n هو ثابت المعايرة ويعطى بالصيغة [14] :-

$$N_n = \frac{(2\xi)^{n+\frac{1}{2}}}{\sqrt{(2n)!}} \quad \dots(22-1)$$

أما الجزء الزاوي فيمثل بالعلاقة [15] :-

$$Y_{lm}(\theta, \phi) = (-1)^m \left[\frac{(2l+1)(l-m)!}{4\pi(l+m)!} \right]^{\frac{1}{2}} P_l^m(\cos\theta) e^{im\phi} \quad \dots(23-1)$$

$$m > 0$$

$$P_l^m(w) = (1-w^2)^{m/2} \frac{d^m}{dw^m} P_l(w) \quad m = 0, 1, 2, \dots \quad \dots(24-1)$$

$$P_l(w) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{dw^l} (w^2 - 1)^l \quad \dots(25-1)$$

حيث إن $w = \cos \theta$

2-6-1: المدارات الكاوسية Gaussian –Type Orbitals (GTO)

يمثل هذا النوع من الدوال الاختيار الثاني لوصف الدوال الأساس ويختلف هذا النوع عن المدارات السليترية النوع في صيغة الجزء القطري الذي يتمثل بالشكل $\exp(-\alpha r^2)$ وعلى الرغم من أن هذه الدوال أبعد عن الحقيقة من المدارات السليترية في تمثيل المدارات الذرية إلا إنها تمتاز بسهولة مكاملتها في الحسابات الجزيئية أو حسابات المواد الصلبة، وقد تم كتابة برامج متطورة تستعمل مثل هذا النوع من الدوال وبالاعتماد على طريقة الحسابات الأولية لغرض دراسة بعض الجزيئات البسيطة [5،16].

7-1: الدراسات السابقة The Previous Studies

في عام 1953 تمكن (R.Pariser and R.G.Parr) [17] من دراسة عدد كبير من الخواص الفيزيائية الأساسية للجزيئات الحلقية للإلكترونات نوع π بواسطة استعمال أسلوب الاتحاد الخطي للمدارات الذرية (LCAO) المعتمد على طريقة المجال القائم لذاته مع إدخال بعض التقريبات شبه التجريبية، حيث عُدَّت هذه الطريقة كحل وسط بين طريقة الحسابات الأولية للإلكترونات من نوع π ، وطريقة هيكل التي لا تتعامل مع أي نوع من أنواع التفاعل بين الإلكترونات.

وفي عام 1965 طور (J.A.Pople and G.A.Segal) [18] الدراسات الخاصة بالتركيب الإلكتروني باستعمالهم أسلوب التقريبات شبه التجريبية بالاعتماد على طريقة الإهمال التام للتداخل التفاضلي لطريقة الاتحاد الخطي للمدارات الذرية للمجال القائم لذاته لهارتري – فوك (CNDO-LCAO-SCF) لبعض الجزيئات الثنائية الذرة أو المتعددة الذرات ومع إجراء موازنة للنتائج مع القيم المحسوبة لنفس الجزيئات بطريقة الحسابات الأولية وجداً أنّ هذه الطريقة تعطي نتائجاً مناسبة تقريباً أما في حالة تطبيق هذه النظرية على بعض الجزيئات مثل الميثان CH_4 أو الإيثان C_2H_6 فإنّ النتائج تكون غير متوافقة مع القيم العملية.

وفي عام 1967 تقدم الباحث (J.A.Pople) مع مجموعة أخرى من الباحثين (D.L.Beveridge & P.A.Dobosh) [19] بأسلوب جديد للمفاهيم شبه التجريبية بالاعتماد على طريقة الإهمال المتوسط للتداخل التفاضلي (INDO) لدراسة عزم ثنائي القطب وطول الأصرة لبعض الجزيئات مثل الأمونيا NH_3 وجزيئة الاثيل CH_3 وثلاثي أكسيد النتروجين NO_3 وعلى الرغم من أن تأثير المركز الواحد كان قليلاً على بعض الحسابات إلا أنّ هذه الطريقة تقدمت بوصف مهم لطاقت الحالات الثلاثية أو الحالات المنفردة لبعض الجزيئات الصغيرة.

وفي عام 1977 تقدم (R.A.Evarestov and V.A.Lovchikov) [20] ولأول مرة بدراسة التركيب الحزمي للمواد الصلبة والمتمثلة ببلورة فلوريد الليثيوم وبلورة الماس بواسطة استعمال أسلوب الإهمال التام للتداخل التفاضلي (CNDO) لخلية الوحدة الكبيرة (LUC) وبالاعتماد على طريقة المجال القائم لذاته لهارتري – فوك وتضمن البحث إجراء موازنة للقيم الذاتية التي تم الحصول عليها بواسطة استعمال بعض القيم التجريبية المتقدم بها (J.A. Pople) أثناء دراسته للجزيئات بالاعتماد على أسلوب (CNDO) والقيم التجريبية الخاصة بالجزيئات بالاعتماد على طريقة الحسابات الأولية، وقد كانت النتائج شبه مقنعة لكل من بلورتي الماس وفلوريد الليثيوم وكانا يعتقدان أنّ السبب في عدم دقة النتائج يعود إلى أهمية إجراء تحويل للعوامل التجريبية المستعملة للجزيئات أو الذرات في حالة دراسة المواد الصلبة.

وفي عام 1987 كان (A.Svane) [21] أول من ألقى الضوء على دراسة التركيب الحزمي للمواد التي لها عدد ذري كبير باستعمال طريقة هارترى – فوك عند دراسته لبلورة السيلكون والجرمانيوم والقصدير مع أخذه بنظر الاعتبار تقريب اللب المتجمد والتأثيرات النسبية عند التعامل مع المؤثر الهاملتوني وقد جاءت النتائج مقارنة إلى بعض الطرائق النظرية الأخرى أما عند موازنته للنتائج التي حصل عليها مع القيم التجريبية كانت النتائج أكبر بمقدار 1.5 من النتائج التجريبية وأعزى السبب في ذلك إلى تصحيحات الترابط التي يجب أن تؤخذ بنظر الاعتبار بالنسبة إلى المواد الصلبة.

وفي عام 1990 تمكن (X.H.Chen, W.Ranke and E.Schroder-Bergen) [22] من إكمال صورة التركيب الحزمي بدراسة عملية لبلورة من الجرمانيوم أسطوانية الشكل بواسطة تسليط إشعاع فوتوني بطاقة تتراوح بين (10-106 إلكترون-فولت) وبواسطة استعمالهم لمخطط طيف الانبعاث تمكنوا من حساب بعض من نقاط التناظر في فضاء متجه الموجة وقد جاءت النتائج مطابقة لبعض القيم المحسوبة بطرق نظرية وعملية مختلفة، ومن الجدير بالذكر أن استعمال طريقه الأشعة السينية لمعرفة التركيب الحزمي لأنواع كثيرة من البلورات قد استعمل بكثرة لهذا الغرض [23،24،25،26].

وفي عام 1993 درس (C.Cunha, S.Canuto and A.Fazzio) [27] التركيب الحزمي لبعض المواد شبه الموصلة نوع (IV) والمتمثلة بالجرمانيوم والسليكون والماس وبعد تشويها بالنتروجين تم استعمال طريقة الحسابات الأولية لهارترى – فوك وبالاعتماد على طريقة الاتحاد الخطي للمدارات الذرية لدوال كاوسية النوع (GTO) لعدد من الجزيئات تضمنها الموديل العنقودي (clusters model) NX_4H_{12} (X=c, Si, Ge) وفي حالة استعمال N_2 يصبح التركيب $N_2X_6H_{18}$ (X=c, Si, Ge) وامتازت الطريقة بسرعة الحصول على التوافق الذاتي وبناتج جيدة ومتطابقة مع النتائج التي تقدم بها (S.A.Kajihar & Ahtonelli) عند دراستهما لتأثير إضافة الشوائب نوع N إلى المواد شبه الموصلة وعند تطبيقهما لنفس الطريقة ولكن لخلية الوحدة الكبيرة التي تحتوي على 64 ذرة.

وفي عام 2002 تقدم (C.Nirmala Louis and K.Iyakutti) [28] بدراسة مفصلة عن تأثير الضغط على بعض الخواص الفيزيائية المتمثلة بتوزيع الشحنة الإلكترونية لكل من بلورتي أيوديد الربيديوم وأيوديد البوتاسيوم مع دراسة لتأثير الضغط على كثافة الحالة في حالة الاتزان وفي حالة زيادة الضغط بمقدار 1.228 ، 1.157 (Mbar) للبلورتين على التوالي بالإضافة إلى دراستهما للطاقة الكلية للنظام من خلال إجراء الرسوم البيانية بين الطاقة كدالة للحجم وصولاً إلى حالة الاتزان وقد جاءت نتائج هذا البحث مطابقة للقيم العملية التي تمت المقارنة معها ومن الجدير بالذكر أن البحوث المنصرفة لدراسة تأثيرات الضغط على الخواص التركيبية للبلورات قد

نالت اهتمام العديد من الباحثين في وقتنا الحاضر [29،30،31،32].

8-1: الهدف من البحث Objective of Study

يهدف البحث إلى تطبيق طريقة المجال المتوافق ذاتياً (SCF) بالاعتماد على الطرائق شبه التجريبية والمتمثلة بطريقة الإهمال المتوسط للتداخل التفاضلي (INDO) بدلاً من طريقة الإهمال التام للتداخل التفاضلي (CNDO) لغرض دراسة التركيب الحزمي لبلورة الجرمانيوم ومعرفة الطريقة التي يتم فيها توزيع الإلكترونات على هذه الحزم الذي يحدد بدرجة كبيرة خصائص المواد الصلبة بالإضافة إلى دراسة بعض الخواص المجهرية (Microscopic) للبلورة والاستفادة من إمكانية تحويلها لمعرفة الخواص العيانية (Macroscopic) لها، كما ويهدف إلى دراسة مدى تأثير الخواص الفيزيائية للبلورة بالإجهاد المسلط عليها ولحالتها الكبس والسحب لما يمتلكه هذا المجال من أهمية كبيرة في التطبيقات الصناعية، مثل استخدام هذا النوع من البلورات شبة الموصلية كمجسات للضغوط العالية، بالإضافة إلى أهمية معرفة تأثير الانفجارات أو موجات الصدمة على اغلب الأجهزة الإلكترونية [19] والتي تدخل المواد شبة الموصلية في تصنيعها.

الفصل الثاني

Theoretical Aspects المفاهيم النظرية

1-2: الطرائق شبه التجريبية Semiempirical Methods

تتضمن هذه الطرائق استعمال مفاهيم نظرية مشابهة إلى المضامين التي تعمل بها الطرائق الأولية (Ab – initio Methods) مع إدخال بعض التقريبات الأساسية لغرض استعمال هذه الطرائق في التعامل مع الأنظمة المعقدة والكبيرة [الجزئيات العضوية والملاعضوية المعقدة، البلورات التي تحتوي على عيوب نقطية (point defect) أو التي لها شبائك سوبر (superlattices)] للحصول على نتائج بأقل جهد وخطأ ممكن [33].

تستند هذه الطرائق في بعض مراحلها إلى النتائج العملية أو المعلومات المأخوذة من الدراسات النظرية عالية المستوى التي توفر الحلول لكثير من المشاكل الحاسوبية لإيجاد قيم بعض التكاملات مع إهمال بعض من تكاملات التنافر ذات القيم الواطئة لتسهيل الحسابات النظرية وبالاعتماد على طريقة الاتحاد الخطي للمدارات الذرية مع اقل عدد ممكن من الدوال الأساس المكونة للإلكترونات التكافؤ وجعلها قابلة للتطبيق مع الأنظمة المعقدة، حيث تعتمد اغلب هذه الطرائق على فكرة إهمال التداخل بين الأوربتالات الذرية أو ما يسمى بتقريب ZDO (Zero Differential Overlap) والذي تقدم بها (Pople) ومجموعته وهي تُستعمل الآن بصورة روتينية لدراسة العديد من الأنظمة ولإستخلاص الخواص الفيزيائية والكيميائية للنظام وفي حسابات المواد الصلبة وبالاعتماد على الموديل الدوري (periodic models) الذي يُعدُّ النموذج الأكثر استعمالاً لوصف المواد الصلبة [5،12،33] ومن ابرز هذه الطرائق المستعملة لهذه الأغراض هي :-

طريقة الإهمال التام للتداخل التفاضلي Complet neglect of differential overlap (CNDO) ، طريقة الإهمال المتوسط للتداخل التفاضلي Intermediate neglect of differential overlap (INDO) ، طريقة الإهمال الثنائي الذرة للتداخل التفاضلي Neglect of Diatomic differential overlap (NDDO) [10،12].

2-2: طريقة الإهمال التام للتداخل التفاضلي

Complete Neglect of Differential Overlap (CNDO)

تتضمن طريقة هارترى – فوك المعتمدة على أسلوب الاتحاد الخطي للمدارات الذرية عدداً كبيراً من تكاملات التناظر الإلكتروني التي تمتاز بصغر قيمتها واقتربها من الصفر والتي كانت تمثل العائق الأساسي لأغلب الطرائق المستعملة في دراسة التركيب الإلكتروني مما دعى عدداً من الباحثين إلى تقديم العديد من المقترحات لتطوير المفاهيم الأساسية التي تتضمنها طريقة هارترى – فوك وبلاستفادة من فكرة إهمال التداخل بين الاوربتالات الذرية لبعض من قيم هذه التكاملات التي تم التعبير عنها بوساطة استعمال الطرائق شبه_التجريبية وكما يأتي [10،12]:-

$$(\mu\nu | \lambda\sigma) = \delta_{\mu\nu} \delta_{\lambda\sigma} (\mu\mu | \lambda\lambda) \quad \dots(1-2)$$

حيث إن δ_{ij} هي دلتا كرونكر (Kronecker delta)

أما بالنسبة إلى تكاملات التداخل التي عبرنا عنها بالمعادلة (1-15) فتصبح بالشكل :-

$$S_{\mu\nu} = \delta_{\mu\nu} \quad \dots(2-2)$$

وتبعاً إلى هذه التقريبات فإنّ معادلات روثان – هال ستصبح:-

$$\sum_v F_{\mu\nu} c_{\nu i} = \epsilon_i c_{\mu i} \quad \dots(3-2)$$

حيث يظهر من مجموعة المعادلات أن مصفوفة الوحدة قد استعملت بدلاً من مصفوفة التداخل.

أما بالنسبة إلى مصفوفة هارترى – فوك التي تمثل بالشكل [12]:-

$$F_{\mu\nu} = H_{\mu\nu} + \sum_{\lambda} \sum_{\sigma} \rho_{\lambda\sigma} [(\mu\nu | \lambda\sigma) - \frac{1}{2} (\mu\lambda | \nu\sigma)] \quad \dots(4-2)$$

وبعد إدخال التقريبات السابقة فإنها سوف تصبح بالشكل:-

$$F_{\mu\mu} = H_{\mu\mu} + \sum_{\lambda} \rho_{\lambda\lambda} (\mu\mu | \lambda\lambda) - \frac{1}{2} \rho_{\mu\mu} (\mu\mu | \mu\mu) \quad \dots(5-2)$$

حيث إن μ على الذرة A

λ على الذرة B

$$F_{\mu\nu} = H_{\mu\nu} - \frac{1}{2} \rho_{\mu\nu} (\mu\mu | \nu\nu) \quad \dots(6-2)$$

حيث إن $\mu \neq \nu$

إنّ هذه الطريقة اعتمدت أسلوب التعامل مع إلكترونات التكافؤ فقط واعتبرت أنّ

القشور الداخلية للذرات هي جزء من القلب الصلب لغرض تسهيل الحسابات المستعملة وبشكل

كبير، وقد جاءت الفرضية الأولى لطريقة (CNDO) لغرض تمثيل معدل التناثر بين إلكترونين أحدهما على الذرة A والثاني على الذرة B وكما يأتي [12]:-

$$(\mu\mu | \lambda\lambda) = \gamma_{AB} \quad \dots(7-2)$$

حيث إن μ على الذرة A

λ على الذرة B

ووفقاً إلى هذا التقريب فإن المعادلة لمصفوفة فوك سوف تصبح [12]:-

$$F_{\mu\mu} = H_{\mu\mu} + \sum_B \rho_{BB} \gamma_{AB} - \frac{1}{2} \rho_{\mu\mu} \gamma_{AA} \quad \dots(8-2)$$

$$\rho_{BB} = \sum \rho_{\lambda\lambda} \quad \dots(9-2)$$

حيث إن ρ_{BB} تمثل الكثافة الكلية للإلكترونات على الذرة B

$$F_{\mu\nu} = H_{\mu\nu} - \frac{1}{2} \rho_{\mu\nu} \gamma_{AB} \quad \dots(10-2)$$

حيث أن μ على الذرة A

ν على الذرة B

وعند التعبير عن $H_{\mu\mu}$ في المعادلة (8-2) بدلالة تأثير المركز الواحد (one – center) والمركزيين (two – center) فإن المعادلة سوف تعطى بالصيغة [12]:-

$$H_{\mu\mu} = U_{\mu\mu} - \sum_{A \neq B} V_{AB} \quad \dots(11-2)$$

حيث إن

μ على الذرة A

V_{AB} هو الجهد الناتج من التفاعل بين إلكترونات التكافؤ في الذرة A مع قلب

الذرة B.

ولأهمية معرفة مقدار التداخل بين الأوربتالات الذرية بين الذرات المختلفة التي تُعدُّ المقياس الأساسي لمقدار الترابط بين الذرات أو الجزيئات المكونة للمادة الصلبة تقدمت هذه النظرية بافتراضها أن قابلية الترابط بين الذرات تزداد مع زيادة مقدار التداخل بين الأوربتالات وعبرت عنها بما يأتي:-

$$H_{\mu\nu} = \beta_{AB}^o \quad S_{\mu\nu} \quad \dots(12-2)$$

$$\beta_{AB}^o = \frac{1}{2}(\beta_A^o + \beta_B^o) \quad \dots(13-2)$$

وبعد تعويض في المعادلة (8-2) بالمعادلة (11-2) وفي المعادلة (10-2) بالمعادلة (2-12) ينتج [34]:-

$$F_{\mu\mu} = U_{\mu\mu} + (P_{AA} - \frac{1}{2}P_{\mu\mu})\gamma_{AA} + \sum_{A \neq B} (P_{BB}\gamma_{AB} - V_{AB}) \quad \dots(14-2)$$

$$F_{\mu\nu} = \beta_{AB}^o S_{\mu\nu} - \frac{1}{2}P_{\mu\nu}\gamma_{AB} \quad \dots(15-2)$$

حيث أن $\mu \neq \nu$

وعند التعبير عن قيمة $U_{\mu\mu}$ بدلالة جهد التأين والألفة الإلكترونية تنتج المعادلة [12،34]:-

$$-\frac{1}{2}(I_{\mu} + A_{\mu}) = U_{\mu\mu} + (Z_A - \frac{1}{2})\gamma_{AA} \quad \dots(16-2)$$

فتصبح المعادلة (14-2) و (15-2) بالشكل [34]:-

$$F_{\mu\mu} = -\frac{1}{2}(I_{\mu} + A_{\mu}) + [(P_{AA} - Z_A) - \frac{1}{2}(P_{\mu\mu} - 1)]\gamma_{AA} + \sum_{A \neq B} (P_{BB} - Z_B)\gamma_{AB} \quad \dots(17-2)$$

$$F_{\mu\nu} = \beta_{AB}^o S_{\mu\nu} - \frac{1}{2}P_{\mu\nu}\gamma_{AB} \quad \dots(18-2)$$

حيث أن :-

$$V_{AB} = Z_B\gamma_{AB}$$

مع ملاحظة أن الطرائق شبه-التجريبية تتميز عن الطرائق الخاصة بدراسة التركيب الإلكتروني بإمكانية إضافة التصحيحات النسبية إلي الحسابات بواسطة استعمال القيم النسبية للعوامل التجريبية والمتمثلة بـ β_{AB}^o ، $\frac{1}{2}(I_{\mu} + A_{\mu})$ وبدون إجراء أي تغيير للمعادلات الأصلية، حيث إن هذه الإمكانية تظهر الاختلاف بين الحسابات النسبية وغير النسبية لمصفوفة القلب ومصفوفة فوك من خلال العوامل التجريبية المستعملة في حسابها [35]

2-3: طريقة الإهمال المتوسط للتداخل التفاضلي

Intermediate Neglect of Differential Overlap (INDO)

إن طريقة الإهمال التام للتداخل التفاضلي لم تأخذ بنظر الاعتبار أي نوع من التداخل الأوربتالي على الذرة الواحدة ولعل هذا هو السبب الأساسي لعدم تمكن هذه الطريقة من التمييز أو

الفصل بين الحالات الإلكترونية التي لها نفس الهيئة الإلكترونية.

وعند الأخذ بنظر الاعتبار تأثير الفرضيات التي تقدمت بها هذه الطريقة على مصفوفة

فوك فإن المعادلة رقم (2-4) سوف تصبح بالشكل [19]:-

$$F_{\mu\mu} = U_{\mu\mu} + \sum_{\lambda} [P_{\lambda\lambda} ((\mu\mu | \lambda\lambda) - 0.5(\mu\lambda | \mu\lambda))] + \sum_{A \neq B} (P_{BB} - Z_B) \gamma_{AB} \quad \dots(19-2)$$

$$F_{\mu\nu} = P_{\mu\nu} [1.5(\mu\nu | \mu\nu) - 0.5(\mu\mu | \nu\nu)] \quad \dots(20-2)$$

حيث إن μ ، ν على الذرة A

$$F_{\mu\nu} = \frac{1}{2} (\beta_A^o + \beta_B^o) S_{\mu\nu} - \frac{1}{2} P_{\mu\nu} \gamma_{AB} \quad \dots(21-2)$$

حيث إن: μ على الذرة A

ν على الذرة B

إن تأثير المركز الواحد أعطى لطريقة الإهمال المتوسط للتداخل التفاضلي (INDO) القابلية على التمييز بين الطاقات التي تصل إلى بضع وحدات إلكترون - فولت التي تنتج من اختلاف الحالات الإلكترونية والتي تقود إلى ترتيب إلكتروني واحد كما هو الحال بالنسبة إلى الحالات الإلكترونية s^1 ، D^1 ، p^3 والتي تمثل الحالات المختلفة الترتيب لذرة الكربون وبحسب قاعدة هوند [12،35].

4-2: طريقة خلية الوحدة الكبيرة Large Unit Cell (LUC) Method

تعتمد حسابات التركيب الحزمي للمواد الصلبة على عدد من النقاط الموجودة في فضاء متجه الموجه (k^-) وتعرف النقاط الأكثر أهمية في هذا الفضاء بالنقاط عالية التناظر التي يمكن الاستفادة منها لتحديد الخواص الأساسية للبلورة وبوساطة استعمال أسلوب خلية الوحدة الكبيرة وبالاعتماد على فكرة متجهة الانتقال الأساسي لتكوين البلورة الكبيرة التي تمتاز بتكوين منطقة برليون المصغرة (Reduced Brillouin Zone) [33،36] مع إعطاء تمثيل للبلورات التامة وجعلها تمتلك حجم بمقدار (V مرة) من حجم البلورات التي لها حجم وحدة الخلية الابتدائية (Primitive Unit Cell (PUC)) والتي تكون منطقة برليون لها أكبر بمقدار (V مرة) من منطقة برليون لخلية الوحدة الكبيرة (LUC) وهذا يعني أن استعمال أسلوب خلية الوحدة الكبيرة لتمثيل البلورات التامة قادر على توفير معلومات لمنطقة برليون أكبر بمقدار (V مرة) من المعلومات التي تنتجها منطقة برليون لخلية الوحدة الابتدائية (PUC).

ولنفرض أن متجه الانتقال الأساسي لخلية الوحدة الابتدائية يعبر عنه بالمتجه \bar{A}_i

($i = 1, 2, 3$) وليكن المتجه الذي يعرف منطقة برليون نسبة إلى خلية الوحدة الابتدائية التي لها

متجه الانتقال A_i هو B_i للمواد الصلبة البلورية غير المتناهية.

وعند التعبير عن العلاقة بين المتجه الخاص بخلية الوحدة الصغيرة والمتجه الذي تنتج

عنه خلية الوحدة الكبيرة a_i بوساطة التحويل الخطي فإن العلاقة سوف تعطى بالشكل [33]:-

$$\overline{a_i} = \overline{\tau} \overline{A_i} \quad i = 1,2,3 \quad \dots(22-2)$$

حيث إن

$$V = \overline{\tau}$$

وعند تعريف منطقة برليون لخلية الوحدة الكبيرة بوساطة المتجه $\overline{b_i}$ في الشبكة

المقلوبة ، فإن علاقة التحويل سوف تعطى بالشكل:-

$$\overline{b_i} = (\overline{\tau})^{-1} \overline{B_i} \quad \dots(23-2)$$

إن استعال أسلوب خليه الوحدة الكبيرة (LUC) والذي يضمن امتلاك البلورة ثابت

شبكة كبير بما فيه الكفاية يجعل عدد كبير من نقاط التناظر في منطقة برليون الأولى بالقرب من

نقطة الأصل لهذه المنطقة ، حيث إن هذا التقريب يعرف بتقريب ($k = 0$) وهو يستعمل بكثرة في

فيزياء الحالة الصلبة لأعطائها تسهيلات كبيرة لطريقة المجال المتوافق ذاتياً [37].

LUC – INDO methods for the solid

عند تطبيق طريقة المجال المتوافق ذاتياً على المواد الصلبة وعند الأخذ بنظر الاعتبار تأثير الجهد الدوري الذي تتحرك فيه الإلكترونات فإن الجهد الكلي للبلورة والذي تمكن العالم بلوخ من حسابه يمكننا تمثيله بالمعادلة الآتية [38]:-

$$V(r) = V_i(r) + V_e(r) \quad \dots(24-2)$$

حيث أن:

$V_i(r)$ هو الجهد الناتج من تفاعل الإلكترونات مع القلوب الأيونية الموجبة.

$V_e(r)$ هو الجهد الناتج من التفاعل بين الإلكترونات الموجودة في البلورة.

ولغرض تطبيق أسلوب الاتحاد الخطي للمدارات الذرية المكونة للمواد الصلبة سيتم اعتماد تقريبين أساسيين للاتحاد الخطي حيث يتضمن التقريب الأول لدالة موجة البلورة أسلوب الاتحاد الخطي للمدارات الجزيئية $X(k, r - T_v)$ ولكل خلية الوحدة الكبيرة ويمكننا التعبير عنها بالشكل [35]:-

$$\varphi(k, r) = N_T \sum_v a_{vk} X(k, r - T_v) \quad \dots(25-2)$$

وعند استخدام نظرية بلوخ لوصف دالة الموجة المرافقة للإلكترونات تحت تأثير الجهد الدوري فإن المعادلة رقم (25-2) سوف تصبح بالصيغة [39]:-

$$\Psi(k, r) = N_T \sum_v \exp(ik.T_v) X(k, r - T_v) \quad \dots(26-2)$$

ويتضمن التقريب الثاني أسلوب الاتحاد الخطي للمدارات الذرية (LCAO) لذرات خلية الوحدة الكبيرة والذي يعطى بالشكل:-

$$X(k, r - T_v) = \sum_q C_{qk} \phi_q(r - T_v) \quad \dots(27-2)$$

وعند تعويض المعادلة (27-2) في المعادلة (26-2) سوف نحصل على الشكل النهائي لدالة الموجة للبلورة [8،39]:-

$$\varphi(k, r) = N_T \sum_v \sum_q C_{qk} \phi_q(r - T_v) \exp(ik.T_v) \quad \dots(28-2)$$

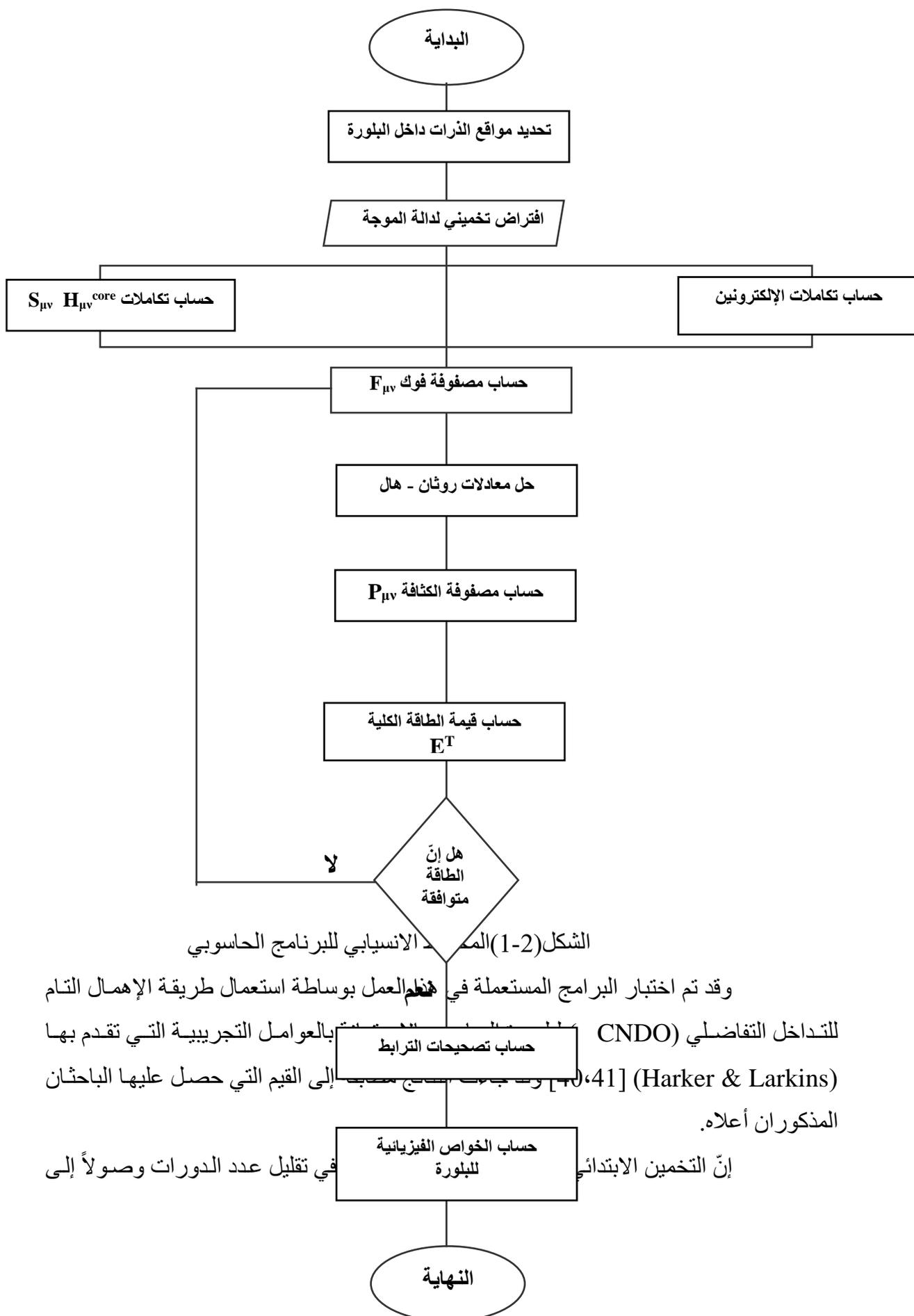
6-2: البرنامج الحاسوبي المستخدم The Used Computer Program

إنَّ تطبيق طرائق الميكانيك الكمي تحتاج إلى تفاصيل رياضية أو برامج حاسوبية لتحويل الأشكال الرياضية إلى خطوات مناسبة للقيامات الحاسوبية المستعملة التي تمثل الجهود المبذولة لعدد من الباحثين منذ مطلع القرن العشرين، حيث إنَّ الهدف الأساسي لهذه الفقرة هو لإيضاح الخطوات الأساسية المستعملة مع أسلوب خلية الوحدة الكبيرة التي تحتوي على (8) ذرات لتكوين المشبك الماسي الذي تتميز به المواد شبه الموصلة وبالاعتماد على طريقة الإهمال المتوسط للتداخل التفاضلي التي تضمنت استعمال إلكترونات التكافؤ لكل ذرة.

إنَّ الشكل (1-2) يُظهر المخطط الانسيابي للبرنامج الذي تم استعماله في هذا العمل وبحسب الخطوات الآتية:-

- 1- تعيين موقع الذرات داخل البلورة.
- 2- إعطاء صيغة تخمينية لدالة موجية تُستعمل لحساب تكاملات التداخل $S_{\mu\nu}$ وقيم تكاملات $H_{\mu\nu}$ وتكاملات التنافر الإلكتروني التي تمثل العناصر الأساسية لحساب عناصر مصفوفة فوك $F_{\mu\nu}$
- 3- إعطاء تخمين أولي للمعاملات $C_{\mu i}$ واستعمالها لإيجاد عناصر مصفوفة فوك $F_{\mu\nu}$, وبعد إيجاد عناصر مصفوفة فوك $F_{\mu\nu}$ و تعويضها في مجموعة المعادلات الأنه ل-(روثان-هال) نتوصل إلى قيم جديد للمعاملات $C_{\mu i}$ وقيم طاقة الأوربتالات ε_i ومن ثم نستعمل القيم الجديدة للمعاملات $C_{\mu i}$ للحصول على قيم جديد أخرى لعناصر مصفوفة فوك $F_{\mu\nu}$ ومن ثم حل معادلة (روثان-هال) مره أخرى للحصول على قيم جديد أخرى للمعاملات $C_{\mu i}$ والطاقات ε_i وهكذا يتم تكرار هذه العملية حتى نتوصل إلى قيم ثابتة للمعاملات والطاقات الإلكترونية المحسوبة .
- 4- إدخال تصحيحات الترابط لغرض تصحيح دالة الموجة التي تم الحصول عليها.
- 5- دراسة الخواص الفيزيائية لهذه البلورة.

وقد تمت كتابة البرامج الحاسوبية المستخدمة في هذا العمل من قبل د. مضر أحمد عبد الستار ، ومن الجدير بالذكر أن هذا العمل قد تضمن إكمال هذه البرامج مع استمرار تغيير العوامل التجريبية والى حد المرتبة السادسة إلى أن تم الحصول على أفضل قيم للخواص التركيبية والإلكترونية للبلورة المعنية.



التوافق الذاتي، حيث إن زيادة عدد الدورات ينتج عنه أخطاء حاسوبية في حسابات المصفوفة، وقد تم اعتماد الفارق بين المراتب الحاسوبية للدورات المختلفة وعدّها حالة للتوافق الذاتي إلى حد $(4-10 \times 5)$ وحدة ذرية أو (0,0136) إلكترون – فولت وكما مبين في الجدول رقم (1-2) حيث يظهر منه أن الفرق بين الدورة رقم (4) والدورة رقم (5) هو (0,0028) إلكترون – فولت أي أقل من (0,0136) إلكترون – فولت.

جدول رقم (1-2) الطاقة الكلية لكل دورة عند حالة الاتزان للبلورة

رقم التكرار	الطاقة الكلية لبلورة الجرمانيوم (فولت – إلكترون)
1	856.3419
2	857.5456
3	857.7106
4	857.7321
5	857.7349

إنّ هذه الطريقة (LUC-INDO) تُعدُّ كحل وسط بين طريقة الحسابات الأولية التي لا تستعمل أي عوامل تجريبية [21،42،43،44] وبين الطرائق التي تستعين بعدد كبير جداً من العوامل في حساباتها [45] حيث إنّ طريقة (LUC-INDO) تتضمن استعمال ثلاثة عوامل في حساباتها والمتمثلة بعامل الربط (β°) والكهروسالبية للغلاف s ، p $(I_s + A_s)$ $1/2$ ، التي تم تغييرها بصورة مستمرة إلى أن حصلنا على القيم المناسبة لثابت الشبكة وطاقة الربط وعرض حزمة التكافؤ والتوصيل وغيرها من النتائج.

إنّ هذا العمل تضمن إضافة تصحيحات الترابط (Correlation Corrections) وذلك لأنّ الدوال الموجية المضادة للتماثل لا تأخذ بنظر الاعتبار الترابط الكلي بين حركات الإلكترونات أي أنّ الدالة تفترض بأنّ حركة كل إلكترون لدرجة ما لا تعتمد على مواقع الإلكترونات الأخرى ولا يسمح للإلكترونات ذوات البرم المتشابه أن تظهر في نفس المكان عند نفس الوقت ولكن لا يمكن لهذه الدالة أن تمنع الإلكترونات المتعاكسة البرم من الظهور في منطقة واحدة من الفراغ فعندما تتقارب الإلكترونات فسوف يظهر تأثير تنافري قوي وبهذا يمكننا أن نتوقع أنّ طاقة هارترى – فوك (E_{HF}) ستسفر عن خطأ نتيجة المساهمة الموجية الناتجة من الافتقار في الترابط الإلكتروني الصحيح وعندئذ تعرف الطاقة الترابطية E_{corr} لحالة نظام كما يأتي [46،47]:-

$$E_{exact} = E_{corr} + E_{HF} \quad \dots(29-2)$$

كما وتضمن البحث الأخذ بنظر الاعتبار التصحيحات النسبية لفجوة الطاقة وذلك بسبب امتلاك الجرمانيوم عدد ذري كبير ($Z=32$)، حيث إنّ المؤثرات الهاملتونية اللانسبية تسهم بالمشاركة في الفرق الطاقى بين الطاقات العملية المضبوطة وطاقة هارترى – فوك وذلك لأنّ

الطاقة العملية تحتوي على إسهامات نسبية [46]:-

حيث يتضمن المؤثر الهاملتوني النسبي الصيغة الآتية:-

$$H = H_0 + W_1 + W_2 + W_3 \quad \dots(30-2)$$

إذ إن H_0 هو المؤثر الهاملتوني لمعادلة شرودنكر غير النسبية الذي يشمل على

الطاقة الحركية والطاقة الكامنة

أما الحدود W_1 , W_2 , W_3 فتعطى بالمعادلات التالية [15]:-

$$W_1 = -\frac{P^4}{8m_e^3 c^2} \quad \dots(31-2)$$

$$W_2 = -\frac{1}{2m_e^2 c^2} \frac{dv_p}{dr} \quad \text{L.S} \quad \dots(32-2)$$

$$W_3 = -\frac{\hbar^2}{8m_e^2 c^2} \nabla^2 V_{(r)} \quad \dots(33-2)$$

إن إدخال الحد الأول والثالث ضمن حسابات المؤثر الهاملتوني تكون أكثر بساطة في حالة تضمنه الحد الناتج من الانقسام المتولد من تفاعل الزخم الزاوي والبرمي وذلك بسبب زيادة عدد المستويات المتولدة من الانقسام التي تحتاج إلى إمكانيات حاسوبية لها سرعة وذاكرة كبيرة جداً ولعل هذا هو السبب الأساسي الذي يجعل أغلب البحوث المهمة بدراسة المواد الصلبة تتضمن التصحيحات النسبية للحد الأول والثالث فقط [2،21،48] التي تعرف بالتصحيحات العددية (Scalar Relativistic Corrections) ، أكثر من البحوث التي تأخذ بنظر الاعتبار تأثيرات الانقسام البرمي –المداري [49]. ومن الجدير بالذكر أن التصحيحات النسبية التي أضيفت على طريقة الإهمال التام للتداخل التفاضلي (CNDO) قد تمت إضافتها بصورة مباشرة إلى طريقة الإهمال المتوسط للتداخل التفاضلي (INDO) وذلك لأن الطريقتين قد استعملت نفس القيم للعوامل التجريبية والمتمثلة بـ (β_{AB}^0) و $(I_{\mu} + A_{\mu})/2$ ، وقد تضمن العمل إدخال تصحيحات الانقسام بواسطة الاستعانة بالقيم العملية للانقسام البرمي –المداري (Δ_0) للمدار p في قمة حزمة التكافؤ لتركيب المشبك الماسي التي تعطى بالمقدار (0,29) إلكترون – فولت بالنسبة إلي الجرمانيوم [50] ، حيث يمكننا التعبير عن الانقسام الحادث بأعلى مستوي مشغول Γ_{25} بالشكل [51]:-

$$E(\Gamma_8^+) = E(\Gamma_{25}) + \lambda \quad \dots(34-2)$$

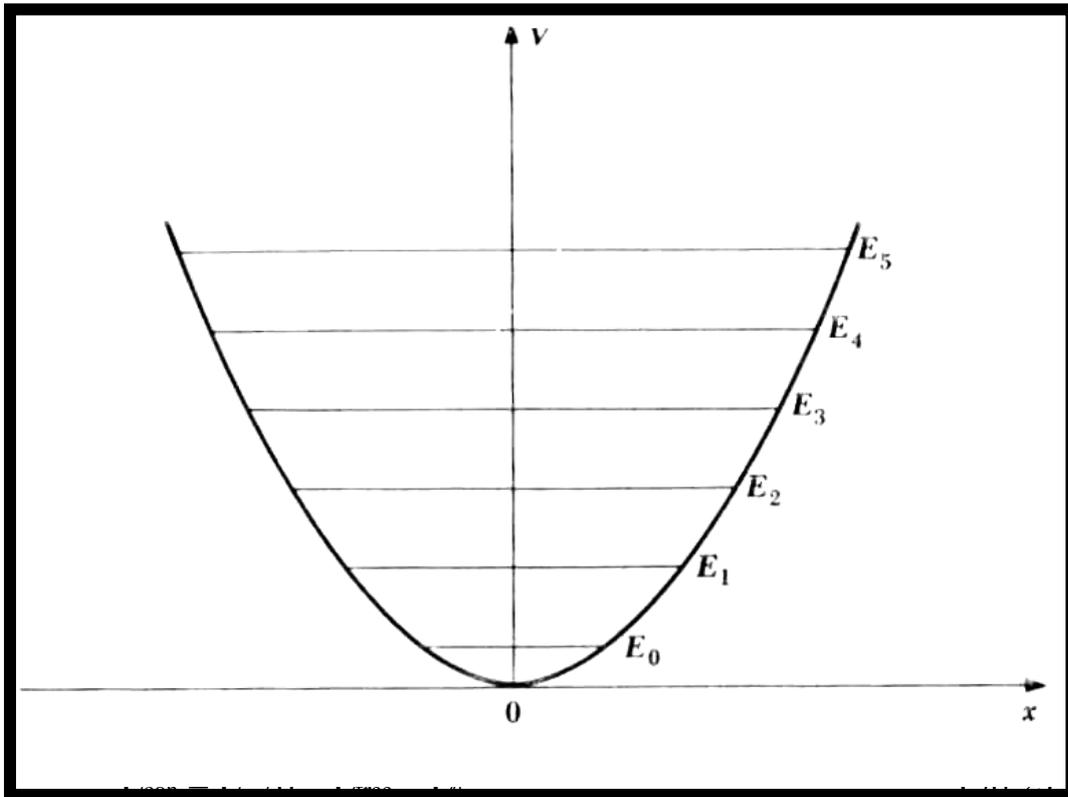
$$E(\Gamma_7^+) = E(\Gamma_{25}) - 2\lambda \quad \dots(35-2)$$

حيث إن:

$$\lambda = \frac{\Delta_o}{3} \quad \dots(36-2)$$

مع الأخذ بنظر الاعتبار تصحيحات طاقة نقطة الصفر على طاقة الترابط التي تعد أحد المفاهيم الأساسية التي تقدم بها الميكانيك الكمي وتعد من أهم الفروقات بين الميكانيك الكلاسيكي والكمي حيث يظهر من الشكل (2-2) بأن الطاقة الدنيا لاتساوي صفر بل لها قيمة معينة E_n ووفقا للمعادلة الآتية [7،9]:-

$$E_n = (n + \frac{1}{2})h\nu \quad n= 0,1,2,3\dots \quad \dots(37-2)$$



حيث إن:

$$103,763 = E_{\text{free}} \text{ إلكترون - فولت [35]}$$

$$0,040 = E_0 \text{ إلكترون - فولت [52]}$$

الفصل الثالث

النتائج والمناقشة Results and Discussion

1-3: دراسة الخواص التركيبية لبلورة الجرمانيوم

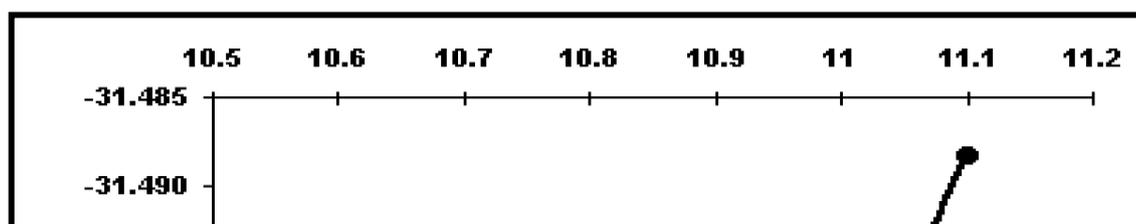
Study of The Structure Properties of Germanium Crystal

تم استعمال البرنامج الحاسوبي المبين في الفقرة (2-6) حيث أعطانا بعض من الخواص التركيبية والإلكترونية لبلورة الجرمانيوم وكما هو مبين في الجدول (1-3) وقد تمت الموازنة لنتائج العمل مع كل من نتائج هارترى - فوك [21،53] ومع النتائج العملية [53،4،54،55،56].

جدول (1-3) الخواص التركيبية والإلكترونية لبلورة الجرمانيوم.

القيم العملية	نتائج البحث	القيم النظرية لهارترى-فوك	الخواص التركيبية لبلورة الجرمانيوم
[53]5.65	5.65	[53]5.62	ثابت الشبكة (بالانكستروم)
[4]3.85	3.83	[21]1.20	طاقة الترابط (إلكترون-فولت)
[54]12.60 [55]12.90	12.52	[21]18.90	عرض حزمة التكافؤ (إلكترون-فولت)
[56]0.99	1.58	[21]4.30	فجوة الطاقة المباشرة (إلكترون- فولت)
-	^{1.49} S ^{2.51} p	-	حالة التهجين للمدارات الإلكترونية

إن قيمة ثابت الشبكة المثبت في الجدول (1-3) قد تم الحصول عليه من خلال رسم العلاقة العامة بين الطاقة الكلية للنظام (E) وثابت الشبكة وكما هو مبين بالشكل (1-3)، حيث يتبين من هذا الشكل أن قوة التجاذب هي المتغلبة عند المسافات الكبيرة التي تمثل القوة الأكثر أهمية، ومع زيادة اقتراب الذرات فإن طاقة النظام سوف تتناقص وتستمر في التناقص إلى أن يكون اقتراب الذرات على درجة بحيث يصبح التنافر ذا شأن مما يسبب ازدياد الطاقة فتصبح قوة التنافر هي المتغلبة عند المسافات الصغيرة وتتعاقد هاتان القوتان عند مسافة التوازن (Equilibrium Separation) حيث تمثل قيمة الطاقة عند هذه النقطة أدنى قيمة لها وتمثل القيمة المقابلة لهذا المقدار من الطاقة ثابت الشبكة الخاص بالبلورة.



شكل (1-3) علاقة الطاقة الكلية مع ثابت الشبكة

ويمكننا القول من خلال ملاحظة الشكل (1-3) إنَّ طبيعة القوى المسؤولة عن ترابط الذرات تنشأ من التجاذب والتنافر الكهروستاتيكي بين الإلكترونات ونوى ذرات البلورة، وإنَّ استقرارية البلورة تعتمد على توازن تلك القوى، حيث إنَّ اختلاف قوة ونوع الترابط البلوري يعزى إلى التركيب الإلكتروني للذرات المترابطة أي إلى الطريقة التي تتوزع فيها الإلكترونات الخارجية للذرات المترابطة في الفضاء أمَّا القوى المغناطيسية فلها تأثير ضعيف في ترابط الذرات وكذلك قوى الجاذبية فهي صغيرة جداً قياساً بالقوى الكهروستاتيكية ولذلك يمكن إهمالها لهذا الغرض.

ويمثل الجدول (2-3) موازنة بين النتائج التي حصلنا عليها من طريقة الإهمال التام للتداخل التفاضلي وطريقة الإهمال المتوسط للتداخل التفاضلي والنتائج التي حصلنا عليها من إضافة تصحيحات الترابط إلى طريقة الإهمال المتوسط للتداخل التفاضلي (تصحيحات الترابط (INDO + (Correlation Corrections) مع إجراء موازنة للنتائج النهائية مع القيم العملية المتوافرة لدينا.

جدول (2-3) الخواص التركيبية والإلكترونية لبلورة الجرمانيوم باستعمال طريقة الإهمال التام للتداخل التفاضلي وطريقة الإهمال المتوسط للتداخل التفاضلي و (طريقة الإهمال المتوسط للتداخل التفاضلي + تصحيحات الترابط) وموازنتها مع القيم العملية.

القيم العملية	طريقة الإهمال المتوسط للتداخل التفاضلي + (تصحيحات الترابط)	طريقة الإهمال المتوسط للتداخل التفاضلي	طريقة الإهمال التام للتداخل التفاضلي	الخواص التركيبية للبلورة
[53]5.65	5.65	5.65	5.65	ثابت الشبكة (بالانكستروم)
[4]3.85	3.83	3.45	10.63	طاقة الترابط (إلكترون-فولت)
[54]12.60 [55]12.90	12.52	12.78	11.97	عرض حزمة التكافؤ (إلكترون-فولت)
[56] 0.99	1.58	0.62	1.42	فجوة الطاقة المباشرة (إلكترون-فولت)
-	1.49 _s 2.51 _p	1.43 _s 2.57 _p	1.39 _s 2.61 _p	حالة التهجين للمدارات الإلكترونية

من الجدول (2-3) يمكن ملاحظة أنّ النتائج التي حصلنا عليها سواء أكانت من طريقة الإهمال المتوسط للتداخل التفاضلي أم من (طريقة الإهمال المتوسط للتداخل التفاضلي + تصحيحات الترابط) كانت اقرب إلى القيم العملية المستعملة أكثر من القيم التي حصل عليها هاتري – فوك [53,21] التي لم تكن تتضمن الأخذ بنظر الاعتبار التقريبات الكثيرة التي تم إدخالها عند التعامل مع الطرق الشبه – تجريبية ، كما ويتبين من الجدول أنّ قيم ثابت الشبكة قد كانت واحدة ولكل الطرق المستعملة لأنها تمثل حالة الإتزان للنظام وبغض النظر عن نوع الطريقة المستعملة في دراسة التركيب الحزمي ، أما تأثير إضافة تكاملات المركز الواحد على طاقة الترابط فقد كان كبيراً جداً وبمقدار (7.18) إلكترون – فولت كما وكان تأثير إدخال تصحيحات الترابط اقل وضوحاً من تأثير إضافة تكاملات التبادل (Exchange Integrals) وكانت بمقدار (0.38) إلكترون – فولت.

كما وتضمن الجدول (2-3) قيمة لفجوة الطاقة المباشرة وعند موازنة هذه القيمة مع القيم العملية نجد بأن لها قيمة أكبر بكثير من القيم العملية إلا أن هذه النتيجة كانت متوقعة ومتوافقة مع أغلب النتائج التي يتم الحصول عليها من استعمال طريقة هارترى - فوك [21،33] وبسبب استعمالنا لعدد كبير من التقريبات مع طريقة هارترى - فوك نفسها أو مع طريقة الإهمال المتوسط للتداخل التفاضلي بالاعتماد على أسلوب خلية الوحدة الكبيرة (LUC - INDO) الذي يمكن تلخيصها بما يأتي:-

1- الاعتماد على صيغة المدارات الذرية التكافؤية وإهمال تأثير القلب وخاصةً عندما يكون العدد الذري للعنصر المستعمل كبيراً مثل الجرمانيوم ($Z = 32$) فإن تأثير حجم القلب المهمل سوف يزداد.

2- استعمال قيمة واحدة للعوامل التجريبية β^0 ، لكل من المدارات الذرية نوع s أو نوع p، حيث وجد أن نسبة الخطأ في قيمة β^0 بين المدارات s و p بمقدار 15.7 % [35]، أما بالنسبة إلى العامل التجريبي β^0 فهو المحدد لمقدار الاختلاف في الطاقة بين الحالات المتأصرة والحالات ضديدة التاصر الذي يسيطر بشكل أساسي على قيمة المؤثر الهاملتوني $H_{\mu\nu}$ المبين في المعادلة (12-2).

كما ويظهر الجدول (2-3) أن حالات التهجين للمدارات الإلكترونية في طريقة الإهمال المتوسط للتداخل التفاضلي أو (طريقة الإهمال المتوسط للتداخل التفاضلي + تصحيحات الترابط) قد زادت من قيمة التهجين للمدار الذي هو من نوع s وقللت من قيمة التهجين للمدار نوع p، ومن الجدير بالذكر استمرار زيادة نسبة تهجين المدار نوع s على حساب المدار نوع p مع زيادة العدد الذري [33،35] ولعل السبب في ذلك يعود إلى ميل المادة الصلبة إلى الرجوع إلى الوضع الطبيعي والهيئة الإلكترونية للذرات والمتمثلة بالشكل ($s^2 p^2$) والابتعاد عن الافتراض المتقدم به للمدارات المهجنة والمتمثل بالشكل ($s p^3$).

وبسبب استعمالنا للمدارات الذرية التكافؤية فقط للتعبير عن الدوال الأساس فقد جاءت نتائج عرض حزمة التكافؤ متوافقة وبصورة جيدة مع القيم العملية المستعملة وهذا ما تمت ملاحظته أيضاً مع القيم الذاتية المكونة لحزمة التكافؤ واستمرار تزايد نسبة الخطأ كلما اقتربنا من طاقات القيم الذاتية المكونة لحزمة التوصيل، ولعل هذا هو السبب الأساسي لعدم إعطاء هذا البحث تفاصيل كثيرة عن حزمة التوصيل التي يجب أن تأخذ بنظر الاعتبار على الأقل الحالات المتهيجة الأولى.

ويظهر الجدول (3-3) حزم الطاقة لبلورة الجرمانيوم التي يمكن تمثيلها بواسطة القيم

الذاتية لنقاط التناظر.

جدول رقم (3-3) يظهر نقاط التناظر الموجودة في منطقة برليون الأولى في فضاء متجه

الموجه.

نقاط التناظر	النتائج النظرية لهارترتي -فوك [21]	نتائج البحث	النتائج العملية
Γ_1	18.90-	12.52-	12.60- [54] 12.90- [55]
X_{1v}	13.00-	7.58-	9.30- [55]
X_{4v}	4.20-	2.58-	3.15- [55]
Γ_{25}	صفر	صفر	صفر
Γ_2	4.30	1.58	0.99 [56]
X_{1c}	5.40	4.26	1.3 [54]
X_{4c}	7.90	5.46	3.00 [56]
Γ_{15}	19.20	7.00	-

وكما قد تم ذكره في الفصل الثاني حول استعمال طريقة هارترتي – فوك وبالاعتماد على طريقة الإهمال المتوسط للتداخل التفاضلي لعدد من العوامل التجريبية في بعض المراحل من حساباتها فقد تم الافتراض التخميني لقيمة هذه العوامل التجريبية في هذا العمل أول مرة عن طريق إجراء موازنة مع نتائج (Harker & Larkins) [40،41] عند استعمالهم لطريقة الإهمال التام للتداخل التفاضلي وبالاعتماد على أسلوب خلية الوحدة الكبيرة لكل من بلورتي الماس والسليكون وكما هو مبين في الجدول (4-3) لغرض إعطائنا فكرة أولية عن قيم هذه العوامل.

جدول (4-3) العوامل التجريبية المستعملة في هذا العمل مع إجراء موازنة لها مع العوامل

لتجريبية لـ (Harker & Larkins)

رمز العامل التجريبي	العوامل التجريبية	العوامل التجريبية لبلورة	العوامل التجريبية
---------------------	-------------------	--------------------------	-------------------

المستخدمة في هذا العمل	السيكون [41]	لبلورة الماس [41]	
1.980023	1.54	1.76	ع (وحدة ذرية) ¹⁻
5.352700-	6.40-	10.20-	β^0 (إلكترون-فولت)
9.357100	6.30	7.00	$-1/2 (I_s + A_s)$ (إلكترون-فولت)
5.40400	4.50	5.50	$-1/2(I_p + A_p)$ (إلكترون-فولت)

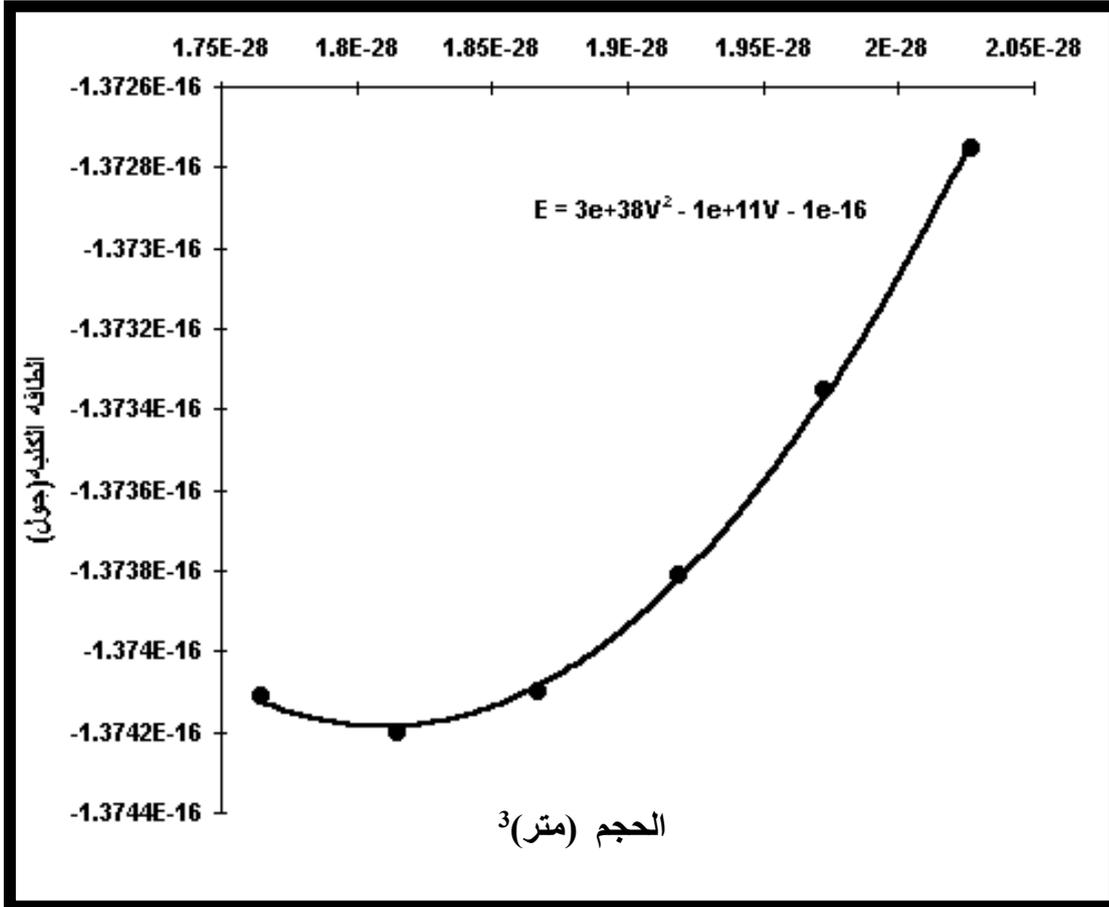
ومع استمرار تغيير هذه العوامل وبصورة مستمرة سوف نحصل على أفضل قيم للخواص التركيبية الفيزيائية والمتمثلة بثابت الشبكة، طاقة الترابط، عرض حزمة التكافؤ، عرض حزمة التوصيل، فجوة الطاقة، قيم نقاط التناظر .. وغيرها من الخواص الفيزيائية، ومن الجدير بالذكر أن ملائمة هذه العوامل مع الطريقة المستعملة لدراسة التركيب الحزمي وإعطائها لقيم فيزيائية مناسبة ليست بالضرورة أن تبدي نتائج حسنة مع طريقة شبه تجريبية أخرى، كما وأن قيم هذه العوامل سوف تكون مختلفة أيضاً عند التعامل مع الذرات أو الجزيئات فعند موازنة قيمة الأس المداري ع الذي يمثل مقياس لتوزيع الشحنة الإلكترونية حول نويات المادة الصلبة مع قيمة ع المستعملة من قبل (Clementi) للذرات [57] نجد أن قيمة ع للمواد الصلبة والمستعملة في هذا العمل تكون أكبر من قيمتها بالنسبة إلى الذرات، وقد جاءت هذه الحالة معاكسة مع قيمة عامل الربط β^0 المستعملة مع المواد الصلبة فهي دائماً أقل من القيم التي تقدم بها (Pople) [12] حيث يمكننا ملاحظة أن عدد الأواصر في المواد الصلبة تكون كثيرة وبالتالي زيادة توزيع الطاقة على هذه الأواصر، أما بالنسبة إلى العامل التجريبي $1/2 (I_s + A_s)$ والمستعمل مع المواد الصلبة فإن قيمته تكون دائماً أقل من قيمتها بالنسبة إلى الذرات [12]، ولهذا السبب كانت للموازنة والتجربة المستمرة أهمية خاصة مع مثل هذا النوع من الطرائق، وأصبح الاختيار الدقيق لهذه العوامل يمثل مفتاحاً لنجاح هذه الطرائق وكما سيتم توضيحه وبشكل تفصيلي في الفقرة (3-3).

2-3: دراسة الخواص الفيزيائية للبلورة

Study of the physical properties of crystal

1-2-3: معامل المرونة الحجمي Bulk Modulus

إنّ علاقة تغير الطاقة الكلية للبلورة كدالة إلى الحجم يظهرها الشكل (2-3)



وبوساطة استعمال القانون الخاص بمعامل المرونة الحجمي الذي يعبر عنه بالمعادلة:-

$$B = V \times \left(\frac{d^2 E}{dV^2} \right) \quad \dots(3-3)$$

هو الحجم حيث أن:-

V الكلي للبلورة

$$B = 1.03 \times 10^{11} \text{ N/m}^2$$

وقد جاءت النتيجة مقارنة إلى القيمة العملية [4،52]:

$$B = 0.77 \times 10^{11} \text{ N/m}^2$$

2-2-3: عامل تشتيت الأشعة السينية X - ray scattering factor

الجدول (5-3) يظهر حسابات عامل التشتيت (Scattering factor) للمستويات المختلفة الذي يمكن تعريفه بالقانون الآتي [58]:-

$$F_j = \int \rho_c(r) \exp(-i \cdot G \cdot r) dv \quad \dots(4-3)$$

حيث إن :

$\rho_c(r)$: كثافة الشحنة الذرية

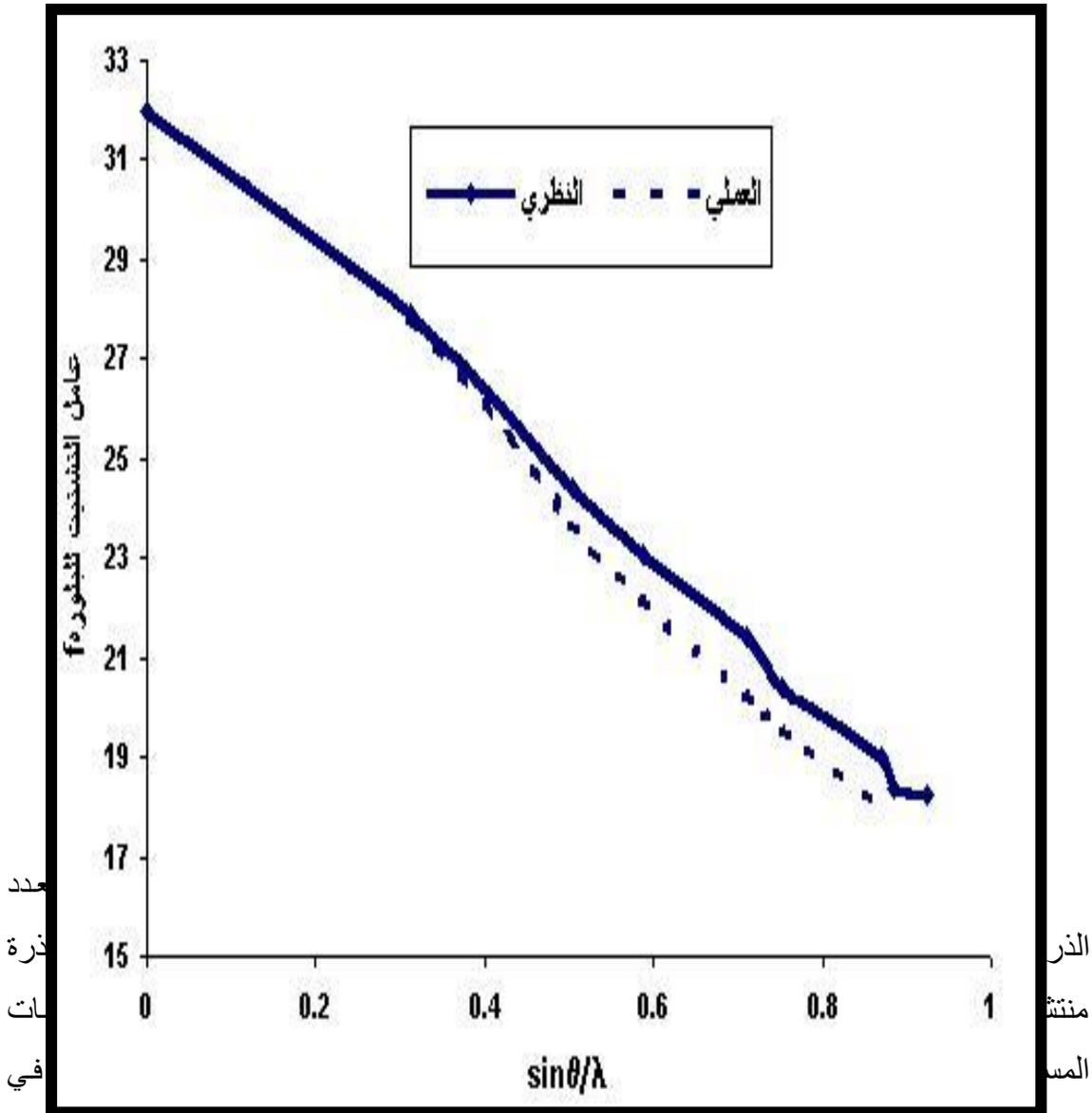
G: متجه الانتقال الأساسي في الشبكة المقلوبة

مع إجراء موازنة مع نتائج هارترتي – فوك لموديل يمثل في نموذج لبلورة مشكلة من رص ذرات حرة تمتلك مواقع نموذجية [59] ومع النتائج العملية المتوافرة [60].
جدول (5-3) يظهر عامل التشتيت الذري لمستويات ميلر المختلفة مع إجراء موازنة مع نتائج هارترتي – فوك ومع النتائج العملية.

معاملات ميلر [hkl]	القيم النظرية لهارترتي-فوك [59]	نتائج البحث	النتائج العملية [60]
[000]	-	32.00	32.00
[111]	27.50	27.93	27.87
[220]	23.76	24.45	23.72
[311]	-	23.11	22.18
[400]	20.95	21.41	20.25
[331]	-	20.42	19.60
[422]	-	19.03	18.05
[511]	-	18.34	-
[333]	17.50	18.26	17.32

ولأن مقياس قدرة الذرة على التشتيت يعتمد وبشكل أساسي على عدد وتوزيع إلكترونات الذرة وعلى الطول الموجي λ للإشعاع الساقط وعلى زاوية تشتت الإشعاع (2θ)

لغرض الحصول على تداخل التقوية بين الموجات المستطيرة عندما يتحقق شرط معادلة (براك) فالشكل (3-3) يمثل تغير عامل التشثيت الذري f مع العاملين $\sin(\theta)$ و λ لكل من القيم النظرية والعملية وكما هو موضح بالشكل فقد جاءت النتائج التي حصلنا عليها مطابقة وبشكل جيد مع القيم العملية [60].

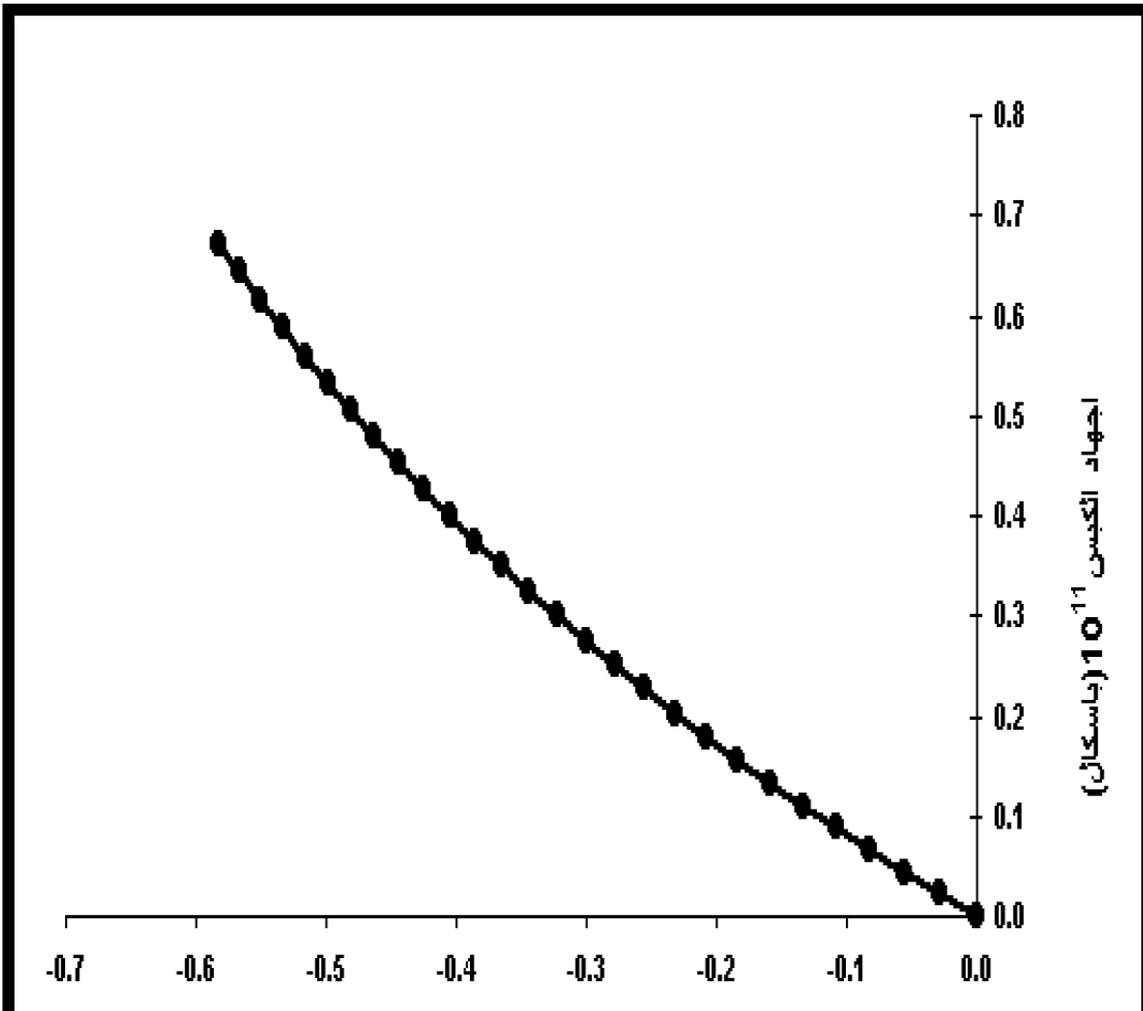


ذرة ذات عدد ذري Z تشثت Z من المرات أقوى مما يشثته إلكترون واحد، أما بالنسبة إلى التشثيت باتجاهات أخرى ($2\theta \neq 0$) فسوف يكون هنالك فروق في أطوال المسارات للموجات المستطيرة عن الإلكترونات المختلفة للذرة نتيجة تباين مواقع تلك الإلكترونات بالنسبة للنواة مما يسبب تداخلاً أتلافياً جزئياً ونقصاناً في السعة الكلية للموجة المستطيرة عن الذرة ويزداد هذا النقصان بازدياد زاوية الاستطارة (2θ) إذ إن الموجات المشتتة من قبل الإلكترونات تصبح غير متطابقة في أطوارها، ومن الجدير بالذكر أن سلوك العلاقة المبينة بالشكل (3-3) قد جاءت متوافقة مع شكل علاقة تغير عامل التشثيت الذري f مع المقدار $\sin \theta / \lambda$ لعدد آخر من العناصر والأيونات مثل

اليورانيوم (U)، الرصاص (Pb)، الأوكسجين (O)، النحاس (Cu).. وغيرها من العناصر والأيونات مثل O^{-} ، Mg^{+2} ، Si^{+4} [6,61].

3-2-3: علاقة الإجهاد – بالمطواعة Relationship Between the stress and Strain

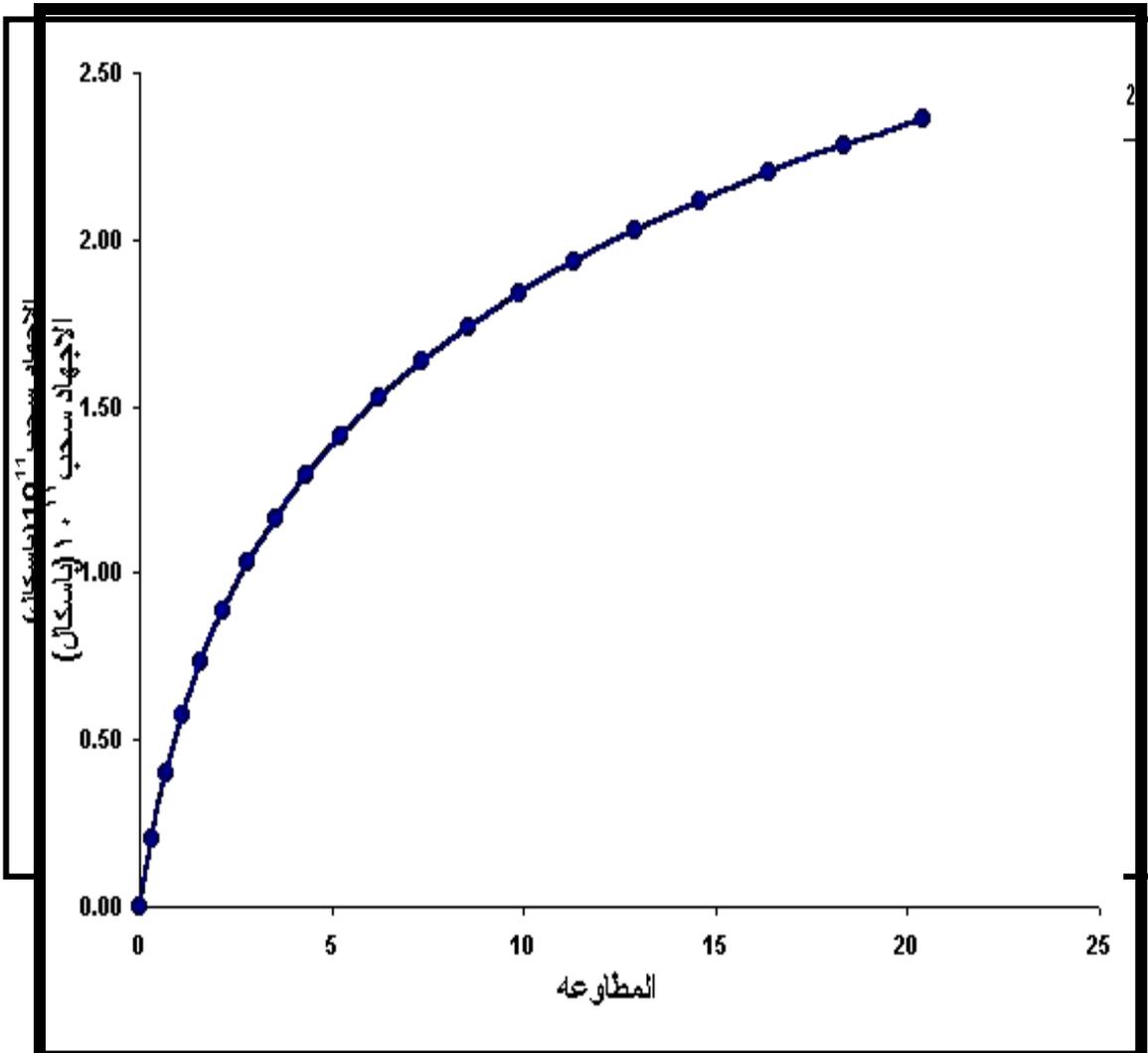
يمثل الشكل (4-3) العلاقة بين الإجهاد والمطواعة للبلورة المستعملة تحت تأثير إجهاد (كبس) (Compressive Stress) حيث نلاحظ أنّ النسبة بين الإجهاد والمطواعة تبقى ثابتة على طول المستقيم وضمن مدى الإجهاد (كبس) الممكن دراسته في هذا العمل ولحالة كبس البلورة حيث إنّ زيادة إجهاد الكبس المسلط وبشكل كبير على البلورة سوف يتسبب في زيادة نسبة الخطأ في النتائج التي يتم الحصول عليها.



شكل (3-4) علاقة الإجهاد (كبس) بالمطواعة

كما يظهر من الشكل أعلاه أنّ هذا الخط المستقيم سوف يحقق قانون هوك حيث يكون الإجهاد ضمن حدود المرونة وعند هذا الحد لو أخذ الإجهاد بالنقصان وبصورة تدريجية فإنّ المطواعة تقل أيضا وبذلك يعيد المنحني نفسه ويمثل ميل الخط المستقيم معامل المرونة الحجمي للبلورة.

أمّا الشكل رقم (3-5) فيمثل العلاقة بين الإجهاد والمطواعة للبلورة المستعملة ولكن تحت تأثير إجهاد (السحب) (Tensile Stress) حيث نلاحظ من الشكل أن البلورة تبقى خاضعة لقانون هوك إلى حد (0.7×10^{11}) باسكال أي أن الانفعال ضمن هذه المنطقة يبقى مرنا، وبعدها تصبح زيادة الانفعال غير خطية مع زيادة الإجهاد ونتيجة إلى الإزاحة الدائمية للذرات داخل المادة يصبح الانفعال غير عكسي ومع التناقص المستمر للإجهاد فإنّ المطواعة سوف تقل أيضا بحيث لا يرجع الجسم إلى وضعة الأصلي .



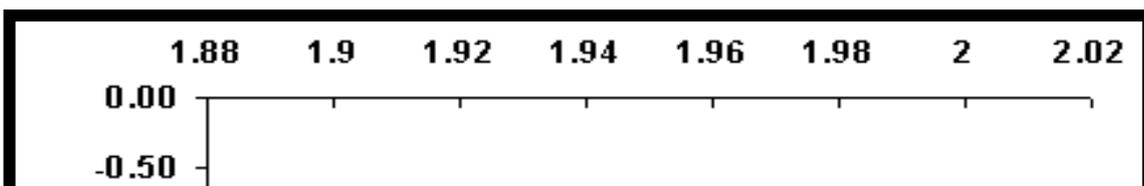
ومن الجدير بالذكر أن الدراسات الخاصة بمنحني الإجهاد والمطاوعة (Stress-Strain curve) قد نالت اهتماماً كبيراً في أغلب كتب علم المواد ولأنواع مختلفة من المواد، لكل واحدة منها مقدار مختلف من الانفعال المرن فالبعض منها لا يحدث لها تشوهات لدنة قبل تمزقها مثل المواد القصيفة (Brittle) وفي أنواع أخرى من المواد التي تعرف بالمواد المطيلية (Ductile material) كأنواع الفولاذ اللين تكون المقاومة محددة بنقطة خضوع واضحة وفي مواد أخرى لا يكون لها حد مرونة واضح ولانقطة خضوع واضحة [62] ويظهر الشكل (3-5) خضوعها إلى النوع الأخير من هذه المواد حيث يتم تحديد نقاط الخضوع للمواد بطرائق عملية.

3-3: دراسة تأثير تغيير العوامل التجريبية في حساب الخواص التركيبية للبلورة

Study of the Effect of Varying Empirical Parameters on the Structure Properties of Crystal

تهدف هذه الفقرة إلى بيان أهمية الاختيار الدقيق للعوامل التجريبية المستعملة مع الطرائق الشبه - تجريبية حيث يظهر من الأشكال (3-6)، (3-7)، (3-8)، (3-9)، مدى الحساسية الكبيرة للخواص الفيزيائية المستعملة في هذا العمل بمجرد التغير البسيط لهذه القيم التجريبية ولذلك كانت دقة اختيار هذه العوامل تمثل المفتاح الأساسي لنجاح مثل هذه الطرائق.

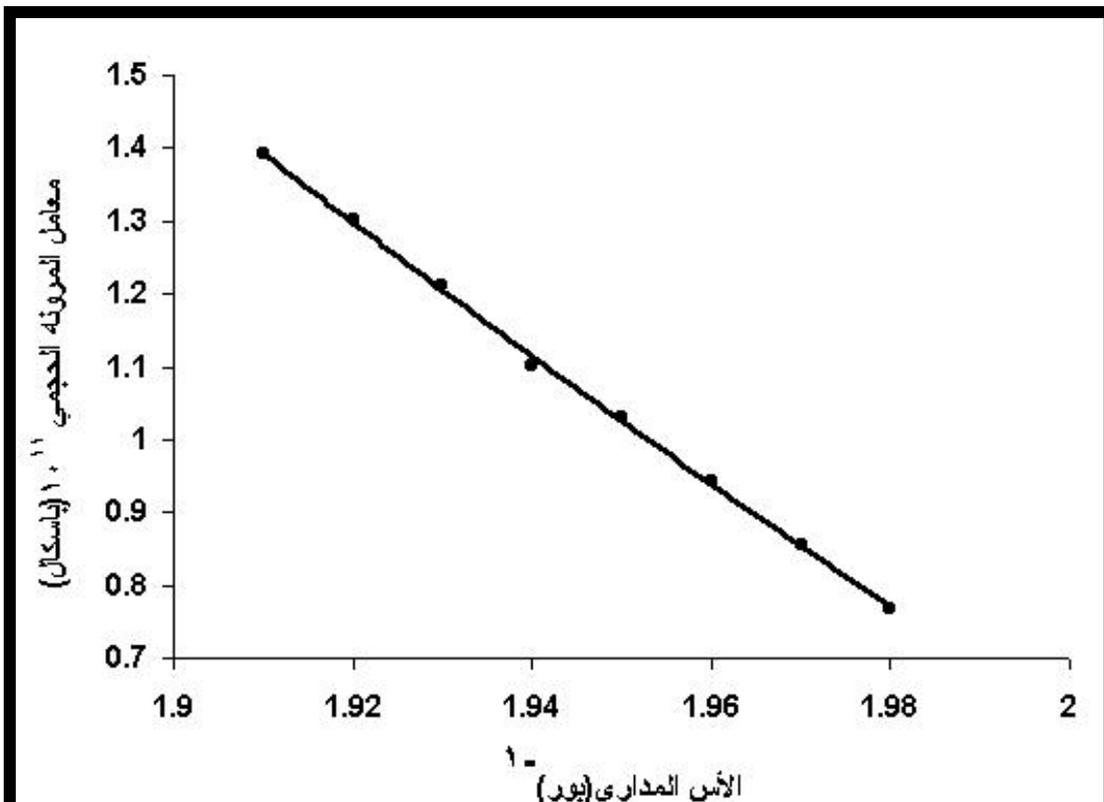
يظهر الشكل (3-6) تأثير تغيير قيمة الأس المداري γ في طاقة الترابط



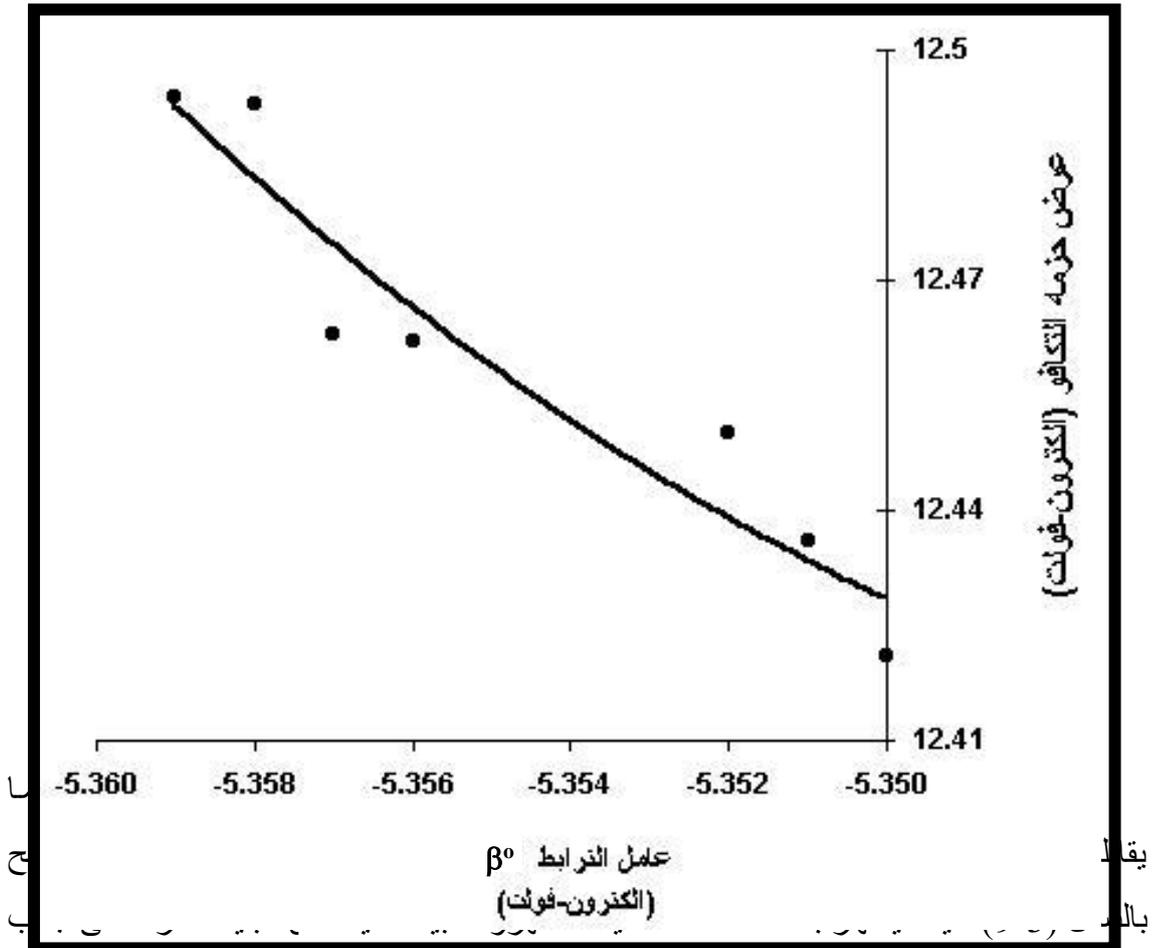
شكل (6-3) علاقة تأثير تغيير العامل التجريبي ξ في طاقة الترابط

حيث يظهر من الشكل (6-3) بأنه كلما كانت قيمة الأس المداري كبيرة أي أن مقدار ما تحجبه الإلكترونات الداخلية من شحنة النواة عن الإلكترونات الخارجية يكون مقدار صغير وبالتالي زيادة نسبة الإلكترونات المشتركة في التأصر.

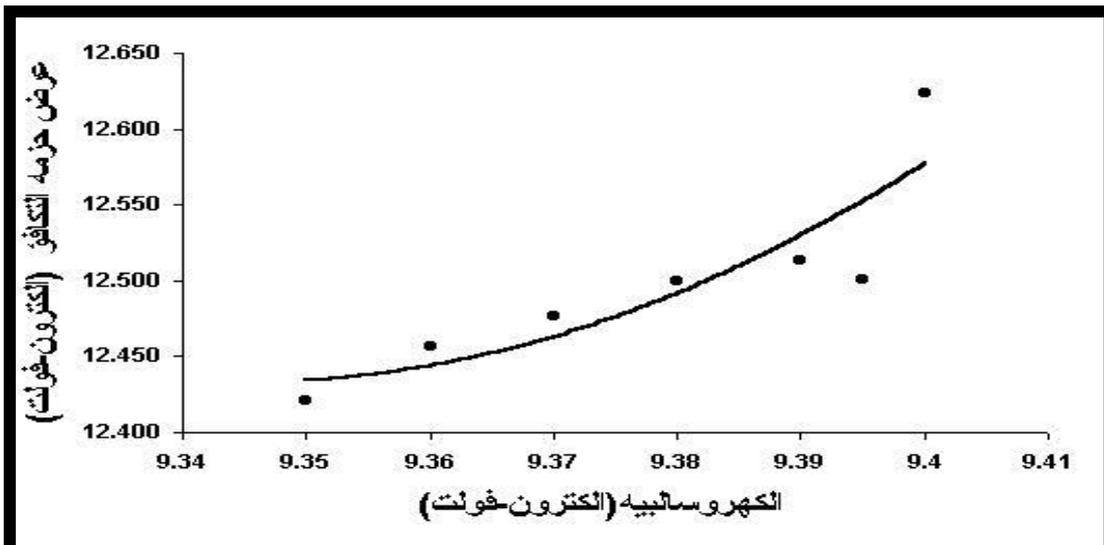
أما الشكل (7-3) فيمثل علاقة الأس المداري ξ مع معامل المرونة الحجمي حيث يظهر من هذا الشكل أن العلاقة بين الأس المداري ξ مع معامل المرونة الحجمي قد كانت عكسية أي أن زيادة مقدار هذا العامل التجريبي سوف يقلل من المشتقة الثانية للطاقة نسبة إلى الحجم وبالتالي نقل قابلية البلورة على استرجاع شكلها الأصلي عند تسليط إجهاد عليها .



أما الشكل (3-8) فيمثل علاقة تغير عامل الارتباط β^0 مع عرض حزمة التكافؤ حيث يظهر من الشكل أن مدى تأثير قيمة عرض حزمة التكافؤ كان كبيراً وغير نظامي مع هذا العامل كما ويظهر بأن احتمالية تقارب ذرات المواد الصلبة من بعضها البعض سوف يزداد مع نقصان مقدار عامل الربط بين الذرات لما ينتج عنه من زيادة في حدوث الانقسام في المستويات الذرية عندما تقترب الذرات من بعضها البعض.



الإلكترونات نحوها (واكتساب طاقة إضافية ناتجة مع إضافة الإلكترونات للذرة) مما ينتج عنه زيادة في عرض حزمة التكافؤ وكما هو مبين في الشكل.



شكل (9-3) علاقة تأثير تغيير الكهروسالبية ($I_s + A_s$) في عرض حزمة التكافؤ

وقد جاءت النتائج التي حصلنا عليها مطابقة وبشكل جيد مع ما تقدم به (Harker & Larkine) [40،41] عند دراستهم لمدى تأثر بعض من الخواص الفيزيائية مع تغير قيم العوامل التجريبية التي كانت متمثلة بـ β° ، ϵ ، و $1/2(I_s + A_s)$ ولكل من بلورتي الماس والسيلكون وبوساطة استعمالهم طريقة الإهمال التام للتداخل التفاضلي وبالاعتماد على أسلوب خلية الوحدة الكبيرة أيضا.

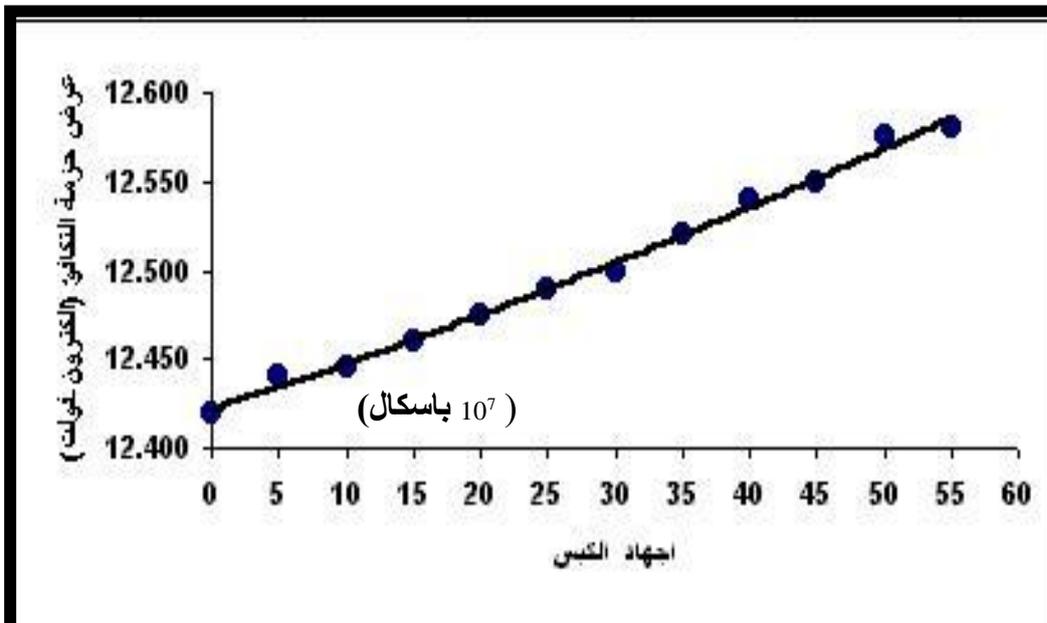
4-3: دراسة تأثير إجهاد الكبس و السحب في خواص البلورة

Study of the Effect of Compressive, Tensile Stress on the Crystal properties

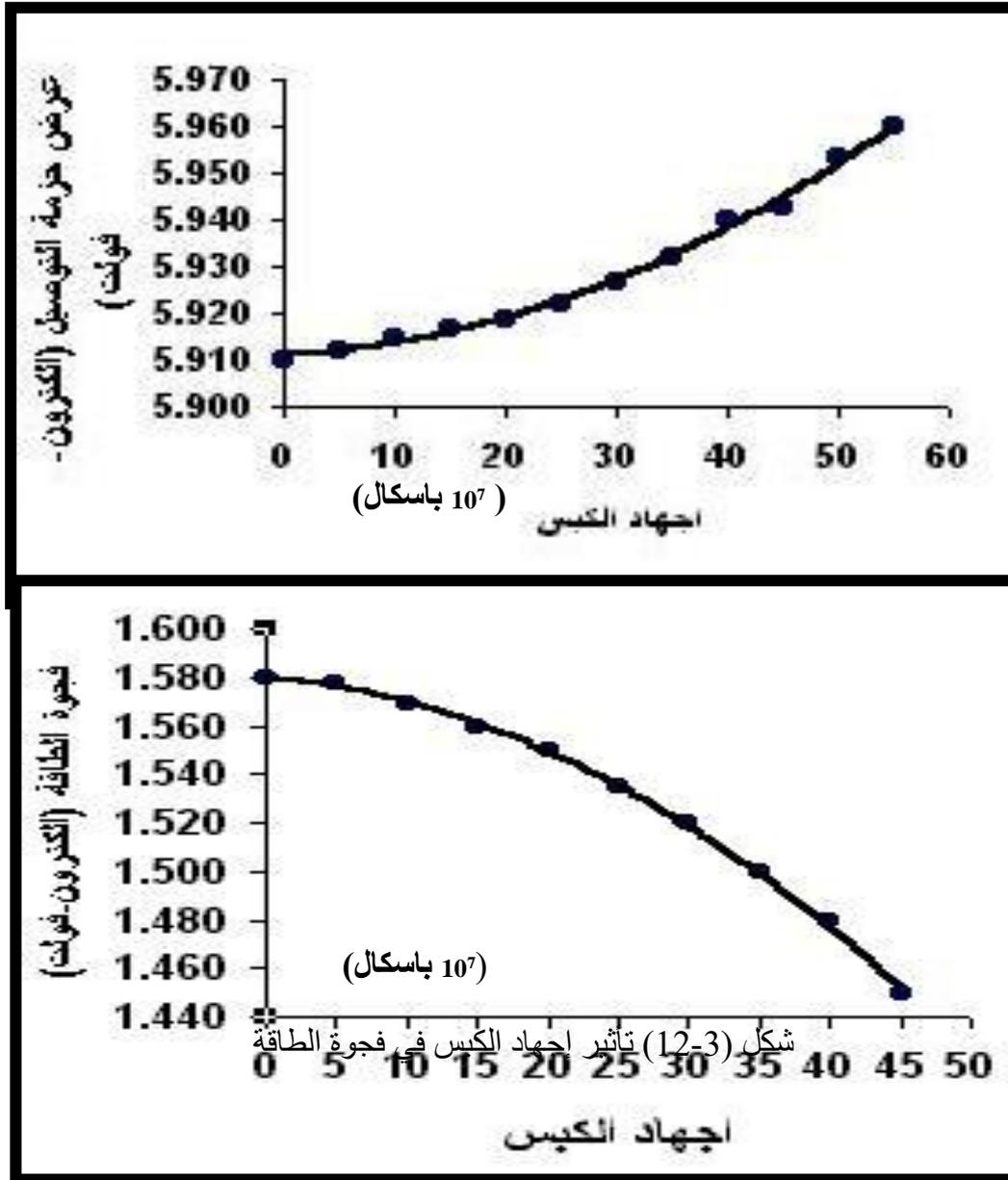
1-4-3: تأثير إجهاد الكبس والسحب في الخواص التركيبية للبلورة

Effect of Stress (Compressive), (Tensile) on The Structure Properties of Crystal

تظهر الأشكال (10-3)، (11-3)، (12-3) تأثير الإجهاد لحالة الكبس على كل من عرض حزمة التكافؤ والتوصيل وفجوة الطاقة على التوالي.



شكل (3-10) تأثير إجهاد الكبس في عرض حزمة التكافؤ

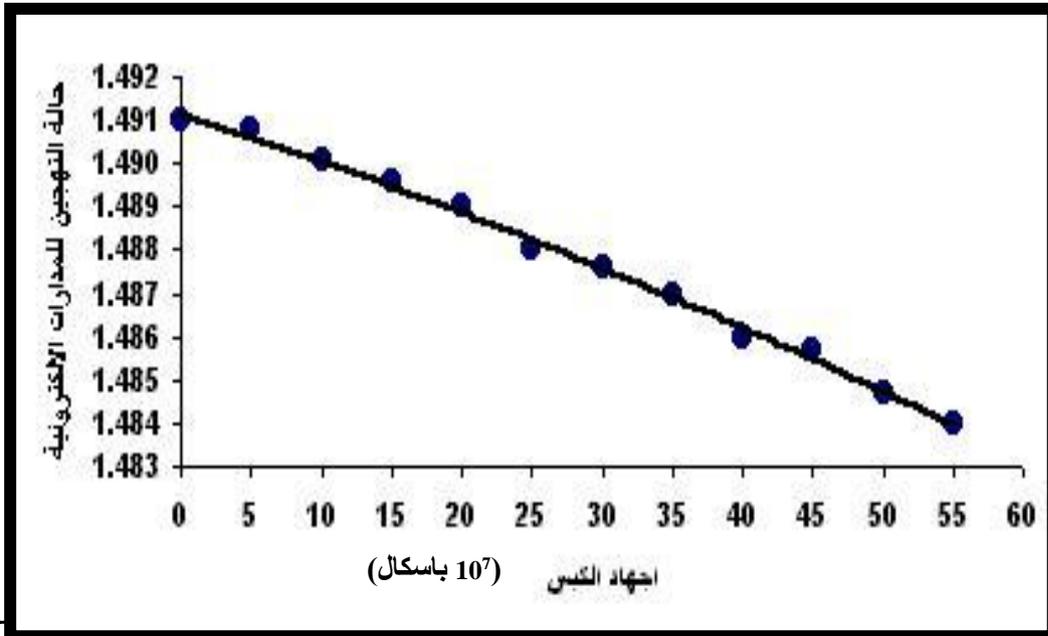


حيث يظهر من الأشكال السابقة أنّ زيادة قيمة إجهاد الكبس على البلورة سوف يولد نقصاناً في المسافة بين الذرات مما يؤدي إلى اقتراب الذرات من بعضها البعض وبالتالي فإنّ كل مستوي طاقة من مستويات الذرات المتقاربة سوف ينشطر ليكون حزمة من المستويات ومع ازدياد التقارب بين الذرات . يزداد التداخل ولذلك فإنّ حزمة المستويات (حزمة الطاقة) يجب أن تتوسع حتى تتضمن كل المستويات المنقسمة التي حدثت نتيجة الاقتراب بين الذرات ومن ثمّ فإنّ عرض

حزمة التكافؤ والتوصيل سوف تزداد مع نقصان ثابت الشبيكة وزيادة قيمة إجهاد الكبس على حساب فجوة الطاقة الواقعة ما بين الحزمتين مع حدوث اقتراب في الحزم ينتج عنه نقصان في قيمة فجوة الطاقة. وقد جاءت النتائج مطابقة إلى ما تقدم به (Bernal) [63] بأن زيادة الضغط على المادة الصلبة يقلل الفاصل الشبيكي وهذا سيزيد من عرض الحزم على حساب الفجوة، ويتوقع من جميع المواد الصلبة الخاضعة لضغوط كافية أن تظهر ايصالية فلزية لأنه حتى المواد التي تعد عازلة تحت الظروف الاعتيادية سيحصل فيها (عند ضغوط عالية) تشابك بين الحزمة الممتلئة.

وقد درس (Y.Mori et al) باستعمال أشعة X-ray تأثير الضغط المسلط في بلورة (β -FeSi) وبمقادير تتراوح بين (5 – 60.7) كيكا باسكال وبوساطة استعمال بلورة الماس ذات السطوح الكبيرة بأبعاد مساوية إلى (0.15، 0.6، 0.4) ملم كمولد للضغوط العالية تمكنوا من دراسة تأثير تلك الضغوط على الخواص التركيبية للبلورة وقد أوضحت النتائج زيادة قيمة حزمة التكافؤ والتوصيل مع تزايد قيمة ضغط الكبس المسلط على البلورة وقد أعزى السبب في ذلك إلى امتلاك البلورة جهد تشوه (deformation Potential) ذي قيمة سالبة [64].

أما الشكل (3-13) فيظهر تأثير تغير إجهاد الكبس في حالة التهجين الإلكترونية نوع s.

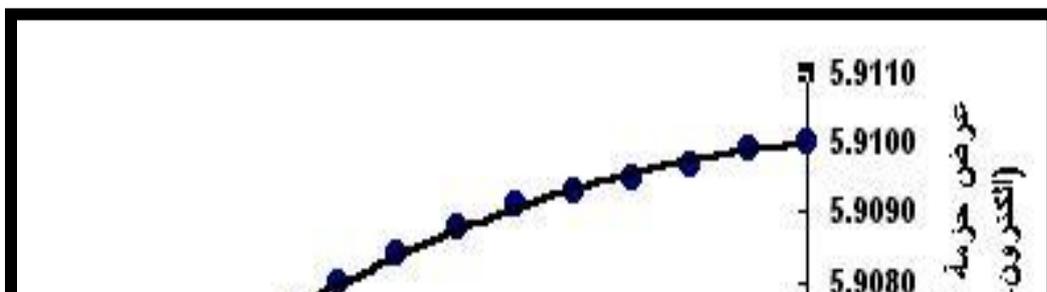
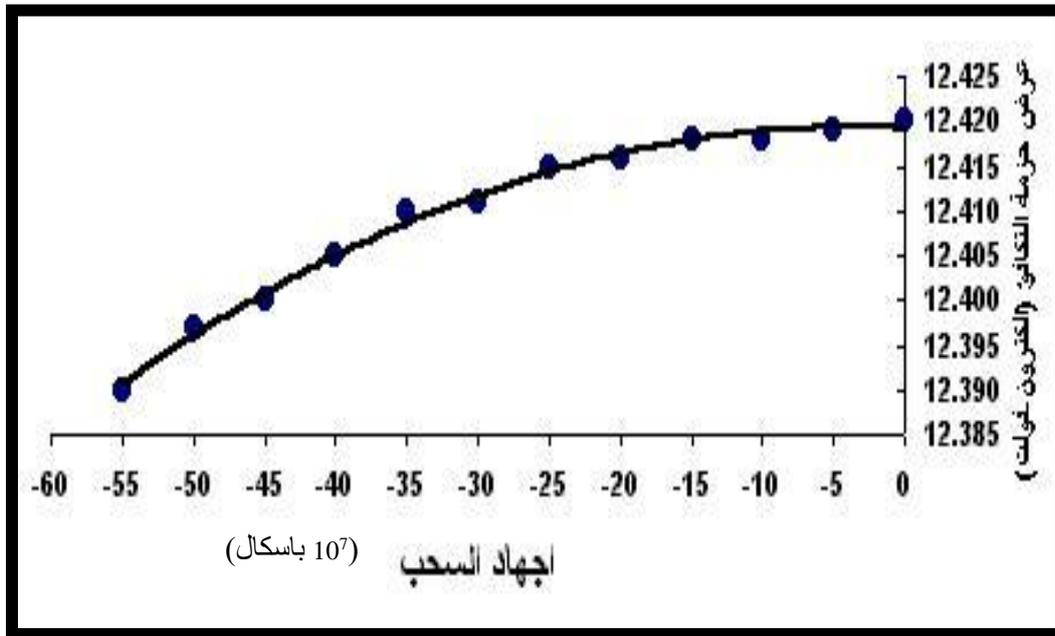


بالية

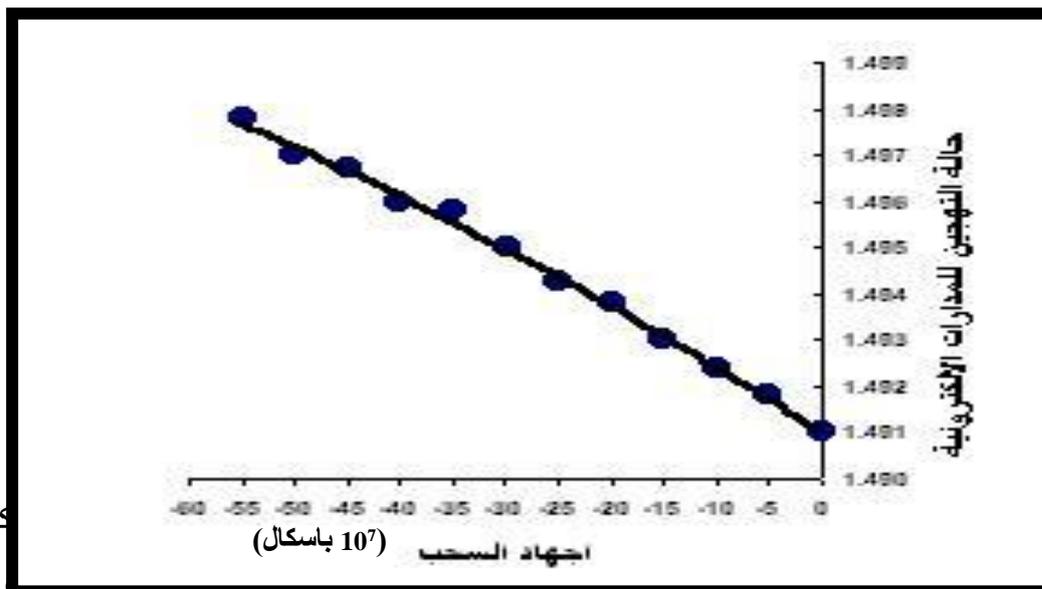
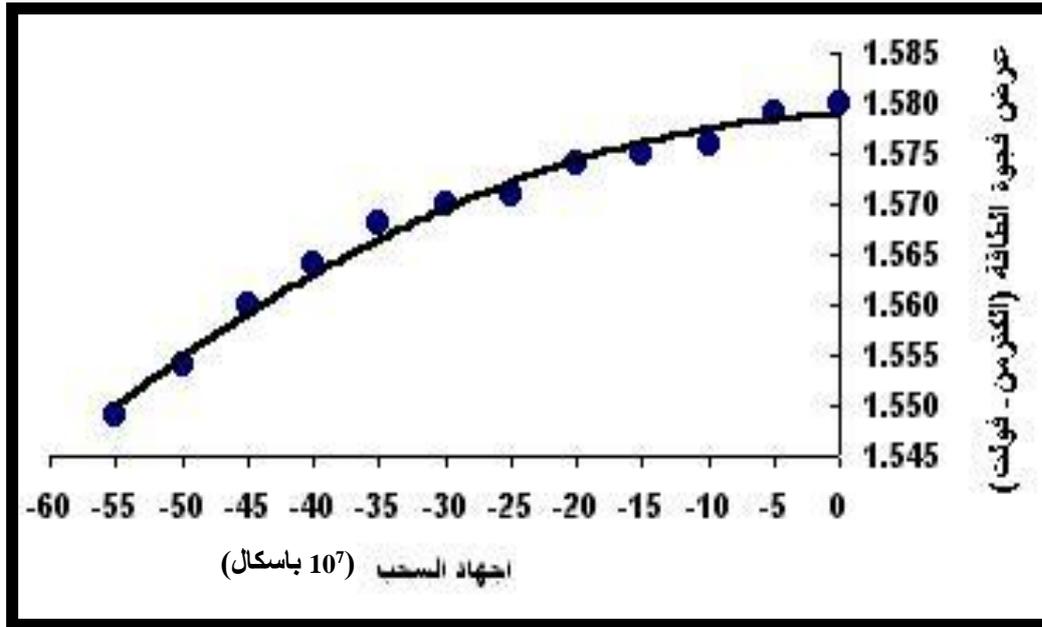
وجود الإلكترونات في المدارات الإلكترونية نوع p ويقلل من احتمالية وجودها في الإلكترونات نوع s وهذا يتوافق مع ما تقدم به (K.syassen and K.Takemura) في عام (1983)

[65] عند دراستهما للمواد القلوية بأنه عند الضغوط العالية فإنّ الإلكترونات سوف تغادر المدارات الواطئة المستوى (المدار s) لتحتل المدارات عالية المستوى (المدار p).

أما الأشكال (14-3)، (15-3)، (16-3)، (17-3)، فتظهر تأثير إجهاد السحب في كل من عرض حزمة التكافؤ، وحزمة التوصيل، فجوة الطاقة، حالة التهجين للمدارات الإلكترونية نوع s.



شكل (3-15) تأثير إجهاد السحب في عرض حزمة التوصيل



كافؤ

في

والتو

الذرات ومن ثم رجوع المستويات كلها إلى مستوي واحد وهو المستوي الذري لذرة الجرمانيوم الحرة.

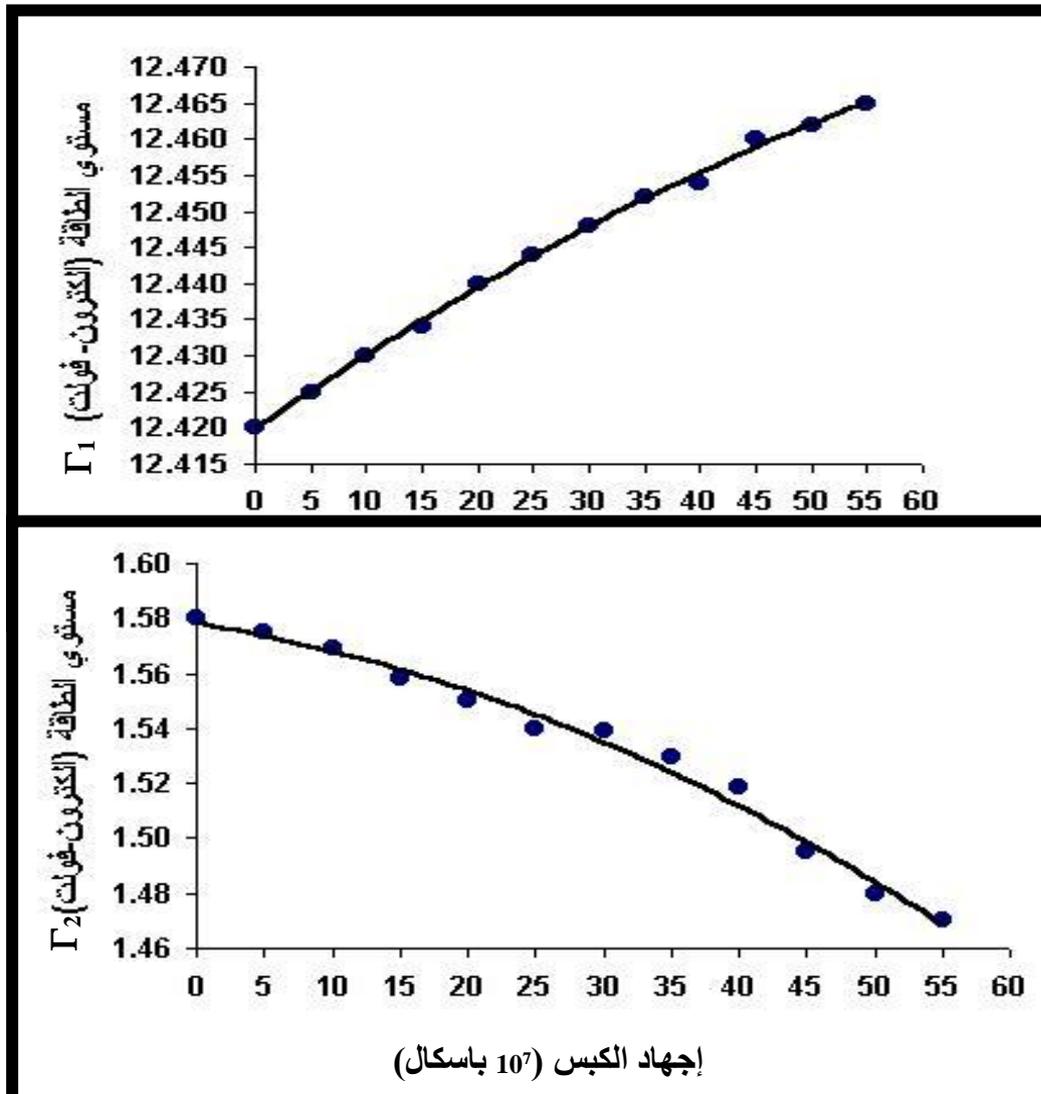
يظهر الجدول رقم (3-6) الخواص التركيبية والإلكترونية للبلورة المستخدمة في حالة الكبس العظمى وحالة السحب العظمى

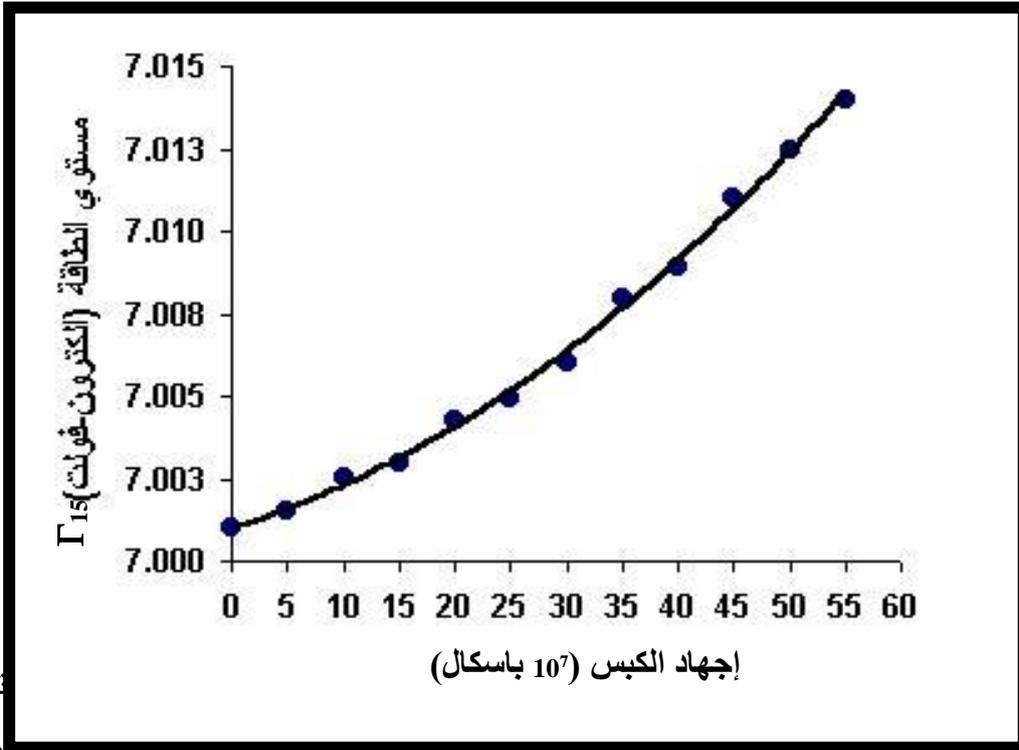
جدول (3-6) الخواص التركيبية والإلكترونية للبلورة عند القيمة العظمى الى اجهاد الكبس والسحب

حالة التهجين للمدارات الإلكترونية نوع S	فجوة الطاقة	عرض حزمة التوصيل	عرض حزمة التكافؤ	الخواص التركيبية لبلورة الجرمانيوم
1.482	1.46	5.96	12.59	أقصى قيمة للإجهاد (كبس)
1.497	1.54	5.90	12.38	أقصى قيمة للإجهاد (سحب)

أمّا الأشكال (3-18)، (3-19)، (3-20) فتظهر تأثير إجهاد الكبس وبصورة منفردة

في أوطاً مستوي مشغول Γ_1 وفي أوطاً مستوي غير مشغول Γ_2 وأعلى مستوي غير مشغول Γ_{15}



شكل (3-19) تأثير إجهاد الكبس في أوطاً مستوي غير مشغول Γ_2 

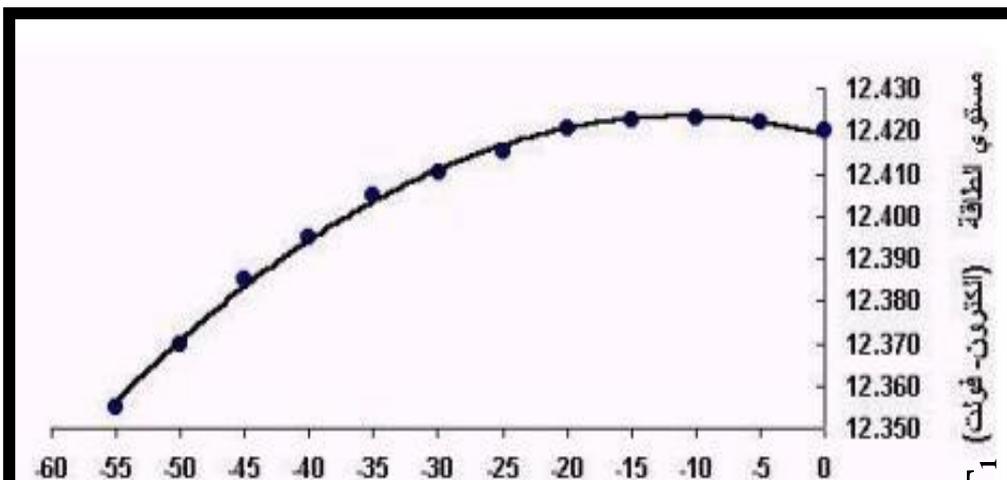
توي

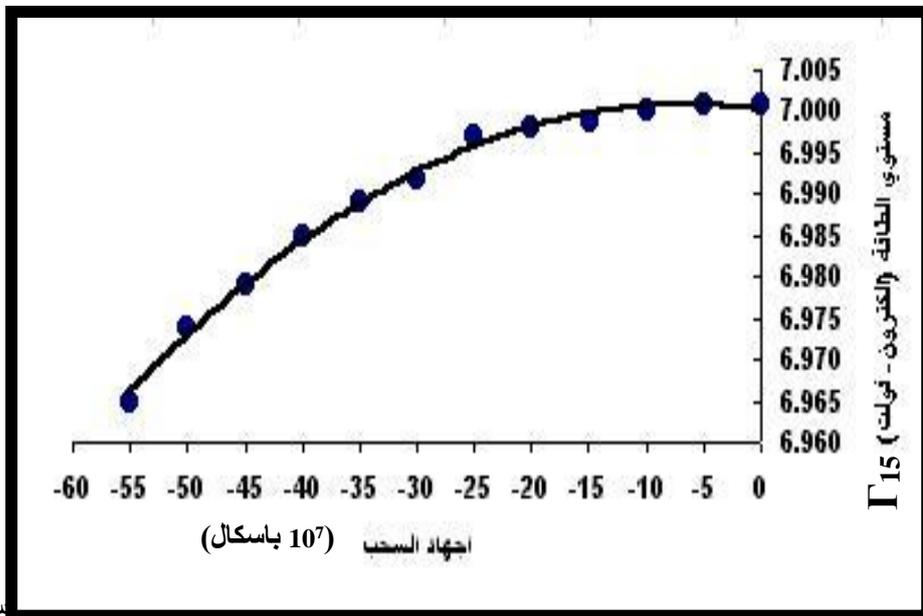
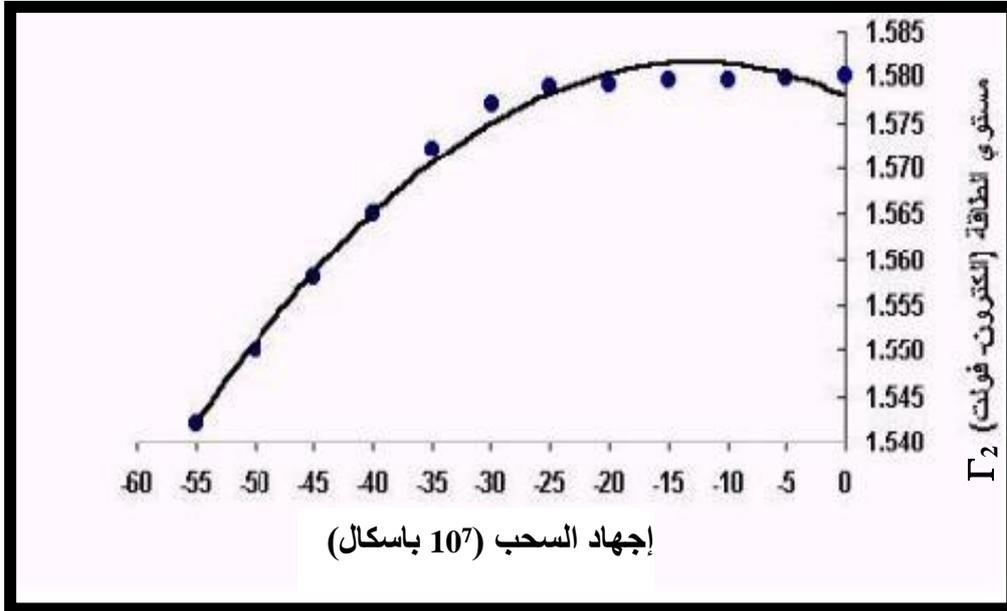
منفردة من مستويك الجوزة بسبب تأثير إجهاد الكبس في أوطاً مستوي غير مشغول Γ_2 الذي يظهر انخفاض

التكافؤ والتوصيل على حساب فجوة الطاقة وكما هو مبين في الشكل (3-19) الذي يظهر انخفاض

قيمة المستوي المتحكم بقيمة الفجوة Γ_2 مع ازدياد إجهاد الكبس المسلط.

أما الأشكال (3-21)، (3-22)، (3-23) فيمثل تأثير إجهاد السحب وبصورة منفردة في أوطاً

مستوي مشغول Γ_1 وأوطاً مستوي غير مشغول Γ_2 وأعلى مستوي غير مشغول Γ_{15} .

شكل (3-21) تأثير إجهاد السحب في أوطأ مستوي مشغول Γ_1 

سحب لكل

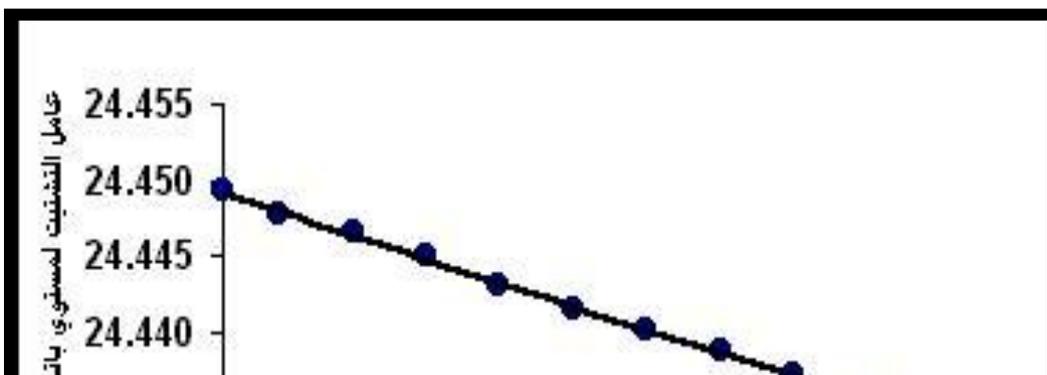
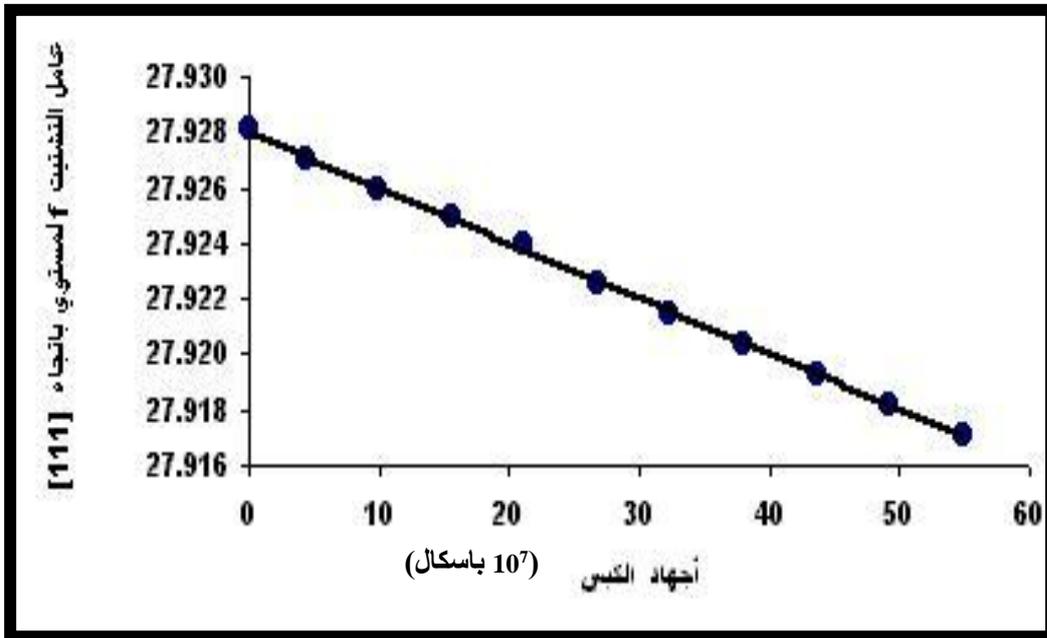
مستوي من مستويات حزمة التكافؤ والتوصيل للبلورة حيث إنّ النقصان في طاقة كل مستوي من مستويات البلورة سوف يقلل من عرض حزمة التكافؤ والتوصيل أمّا الشكل (3-22) يؤكد النقصان الحادث في مستوي الطاقة المتحكم بعرض الفجوة مع تزايد الإجهاد (سحب) المسلط عليه.

وقد تقدم (M.J.Herrera-Cabrera et al) [66] بدراسة نظرية للتركيب الحزمي لأحد مركبات البورون (BAs) التي لها تركيب مشبك كبريتد الخارصين (ZnS) مع إجراء دراسة لمدى تأثير نقاط التناظر في منطقة برليون الأولى $[\Gamma_{15}, \Gamma_{1c}, X_{3c}, X_{1c}, L_{1c}, \Delta_{min}]$ بالضغوط المسلطة على هذه البلورة، وحساب قيمة معاملات المشتقة للضغط المسلط على كل مستوي من تلك المستويات بواسطة استعمال طريقة المربعات الصغرى وكانت قيم هذه المعاملات هي $[1.25 \cdot 10^{-2}, 9.77 \cdot 10^{-2}, -9.53 \cdot 10^{-3}, 7.22 \cdot 10^{-3}, 4.37 \cdot 10^{-2}, 7.85 \cdot 10^{-3}]$ وعلى التوالي لكل مستوي من المستويات المذكورة مسبقاً .

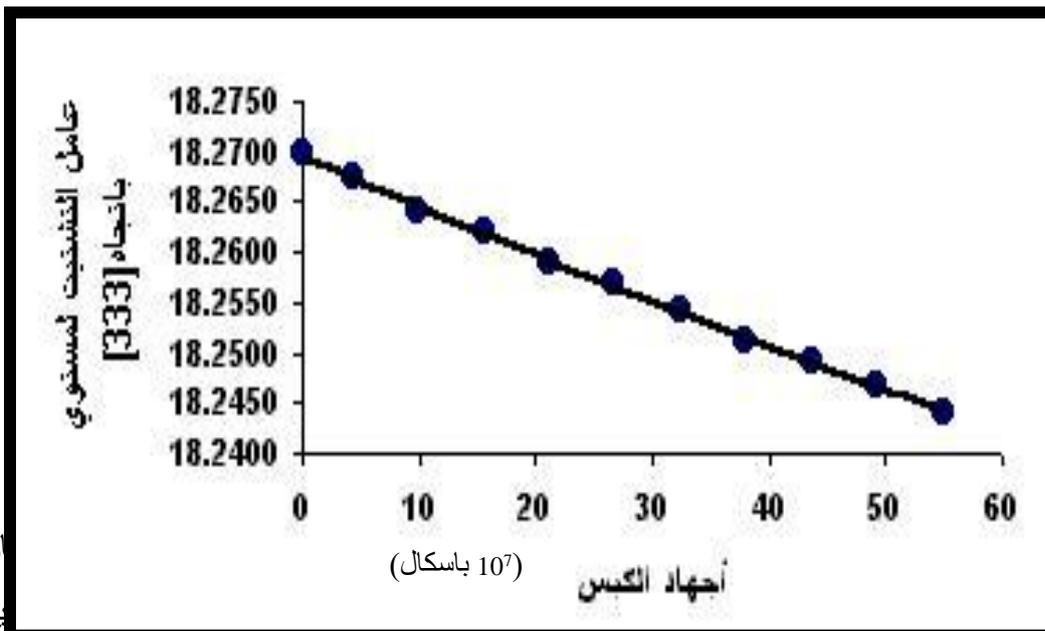
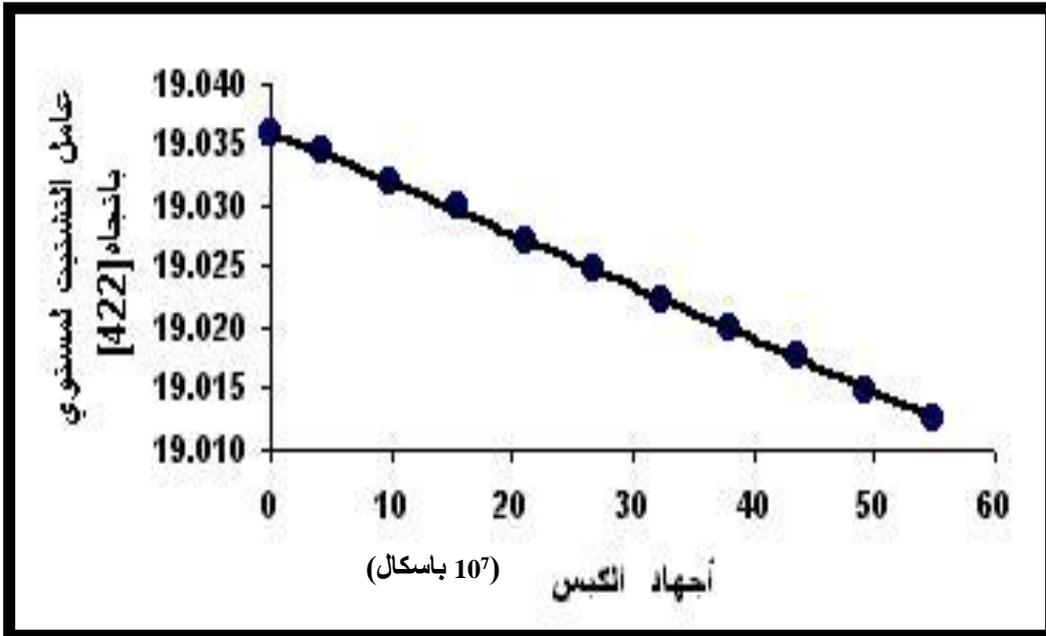
2-4-3: تأثير إجهاد الكبس في عامل تشتيت الأشعة السينية

Effect of compressive stress on the x-ray scattering factor

الأشكال (24-3)، (25-3)، (26-3)، (27-3) تمثل تأثير إجهاد الكبس على عامل التشتيت الذري f للمستويات بالاتجاه $[111]$ ، $[220]$ ، $[422]$ ، $[333]$ على التوالي.



شكل (3-25) تأثير إجهاد الكبس في عامل التشنيت الذري f لمستوي بالاتجاه [220]



امل
يات

التش

البلورية المتوازية التي لها نفس قيمة معاملات ميلر (hkl) مع زيادة قيمة إجهاد الكبس وبالتالي زيادة زاوية الحيود وحسب قانون براك

$$\theta = \text{Sin}^{-1} \frac{\lambda}{2d} \quad \dots(5-3)$$

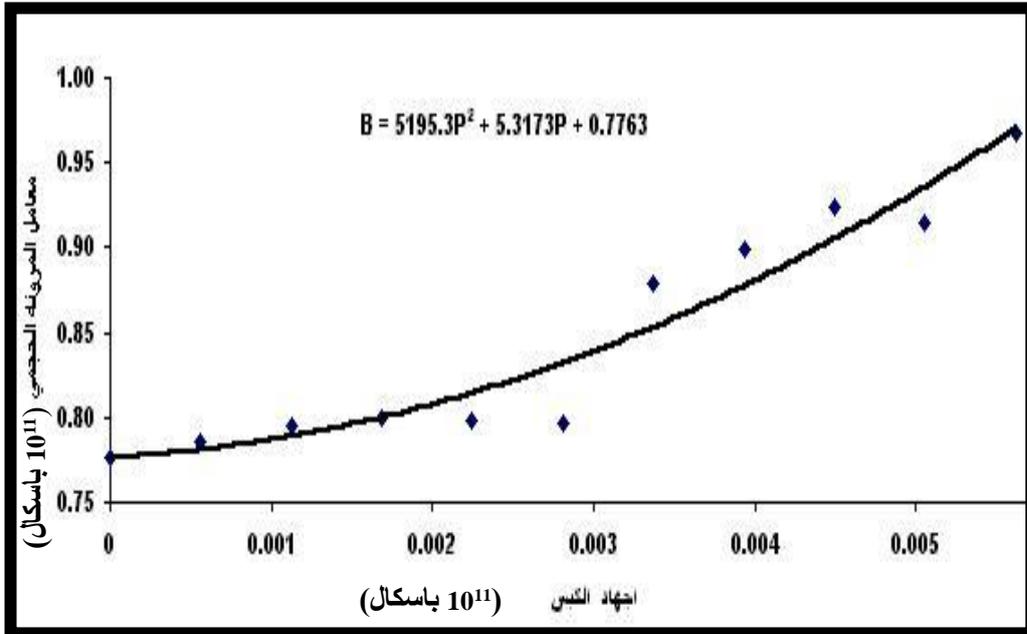
حيث إنَّ زيادة الزاوية سوف ينشأ عنه فرق في أطوال المسارات للموجات المستطيرة من الإلكترونات المختلفة للذرة بسبب تباين مواقع تلك الإلكترونات بالنسبة للنواة مما يسبب تداخلاً جزئياً ونقصاناً في السعة الكلية للموجة المستطيرة من الذرة .

مع ملاحظة أن سبب حدوث الفرق البسيط بين الجداول رقم (1-3) ، (3-3) ، (5-3) مع المحنات الخاصة بدراسة تأثير الإجهاد وفي حالتي الكبس والسحب عند النقطة الخاصة بحالة الاتزان للبلورة هو اعتماد ستة مراتب بعد الفارزة للعوامل التجريبية المستخدمة في هذا البحث والمتمثلة بقيمة (ϵ) ، β^0 ، $(\frac{1}{2} (I_s + A_s))$ بينما يتم أخذ مرتبتين فقط عند تسليط الضغوط المختلفة وحالتي الكبس والسحب ويعود السبب في هذا التصرف إلى نوع الطريقة التي تم استخدامها في حساب التركيب الحزمي للبلورة والمتمثلة بطريقة الإهمال المتوسط للتفاضل التداخلي والتي تزيد من نسبة الخطأ وبالتالي حدوث توقف بالبرامج مع تزايد الإجهاد المسلط على البلورة.

3-4-3 : تأثير إجهاد الكبس في معامل المرونة الحجمي

Effect of Compressive Stress on the Bulk Modulus

الشكل (28-3) يمثل تأثير ضغط الكبس في معامل المرونة الحجمي حيث يظهر من الشكل العلاقة الطردية الناتجة من الزيادة الحاصلة في الضغط التي تزيد من إمكانية حصول البلورة على الطاقة اللازمة لاسترجاع شكلها الأصلي ومن ثمَّ زيادة معامل مرونة البلورة.



وبعد تطبيق المعادلة الخاصة بالمنحني (3-28) بطريقة المربعات الصغرى وجد أنه لحالة الاتزان تكون قيمة:-

$$B' = \left(\frac{dB}{dP} \right) \quad \dots(6-3)$$

$$B' = 5.31 \text{ N/m}^2$$

وقد جاءت النتيجة مساوية تقريباً إلى القيمة العملية [53]:-

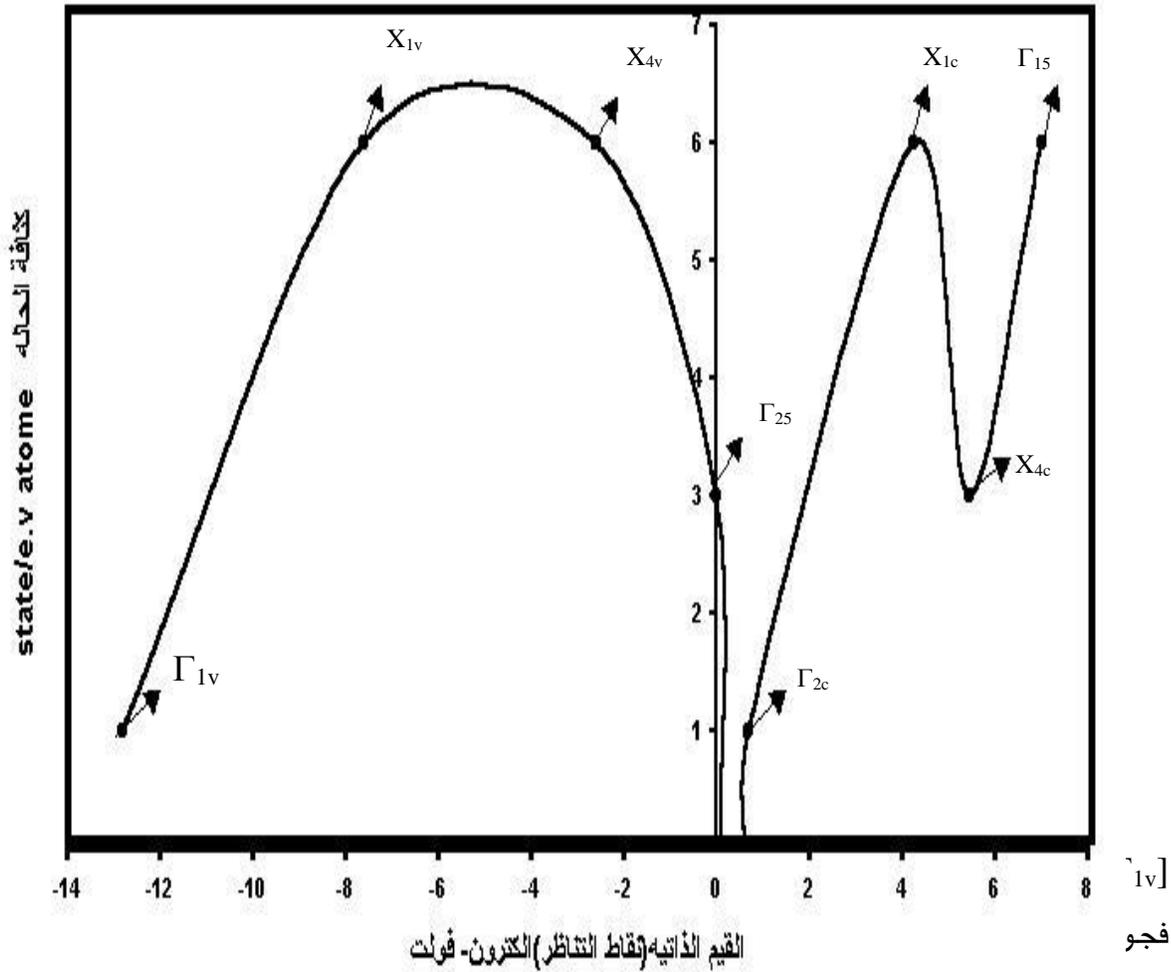
$$B' = 4.55 \text{ N/m}^2$$

والى ما تقدم به [Muraghan] ، [Birch] كانت قيمة B' [3.85 ، 4.31] على التوالي [53] حيث يتبين من المقارنة أن النتائج مقاربة مع ما تقدم به المصدر [53] .

5-3: دراسة تأثير إجهاد الكبس في كثافة الحالة للبلورة

Study of the Effect of Compressive Stress on the Density of States of the Crystal

يبين الشكل (3-29) كثافة الحالات (Density of States) لحالة الاتزان $p=0$ للبلورة لكل من حزمة التكافؤ والتوصيل وفجوة الطاقة وبعتماد قيمة الطاقة مساوية للصفر عند قمة حزمة التكافؤ.



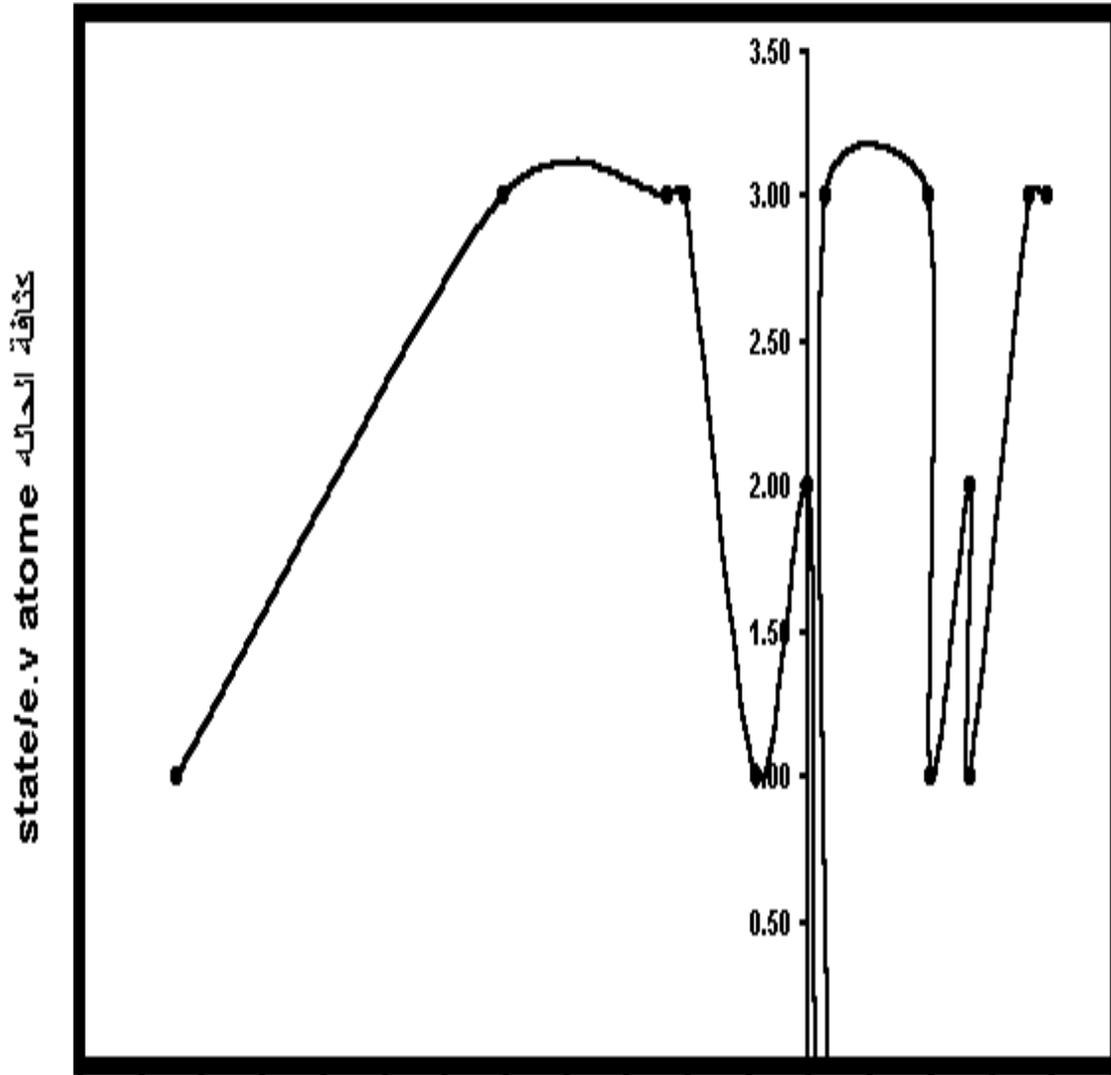
العملية لفجوة الطاقة لبلورة الجرمانيوم [56] ، اما النقاط $[\Gamma_{15} , X_{4c} , X_{1c} , \Gamma_{2c}]$ فإنها سوف تمثل كثافة الحالات لحزمة التوصيل.

وقد جاءت نتائج هذا العمل مقارنة وبشكل كبير إلى النتائج النظرية والعملية التي تقدم بها (Michihide -Kitamura) [67] في عام (1994) عن دراسته لكثافة الحالات لبلورة الجرمانيوم

باستخدام طريقة (orthogonalized-plane-wave) وبالاعتماد على طريقة المجال المتوافق ذاتيا اكثر من النتائج التي تقدم بها (Yin & Marivih.Cohen) [68] في عام (1982) عند دراستهم لكثافة الحالات لكل من حزمة التكافؤ والتوصيل وفجوة الطاقة باستخدام طريقة (local –density – functional) ولنفس النوع من البلورة المدروسة في هذا البحث.

أما الشكل (30-3) فيظهر كثافة الحالة للبلورة عند تسليط إجهاد مقداره $(10^{11} \times 0.47)$

باسكال على البلورة لينتج عنه تغير في الحجم (V / V_0) بما يعادل 0.5



الشكل (30-3) علاقة كثافة الحالة للبلورة عند تسليط إجهاد مقداره (0.47) ميكابار

على البلورة

حيث يظهر الشكل السابق زيادة انحلال المستويات مع زيادة إجهاد الكبس المسلط ومن ثم حدوث نقصان في كثافة المراتب (مع ملاحظة عدم توفر أي نتائج عملية يظهر معها تأثير الضغط على كثافة الحالة لحزمة التكافؤ والتوصيل وفجوة الطاقة الخاصة ببلورة الجرمانيوم) ولكن هذه النتائج قد جاءت متوافقة مع ما تقدم (C.Nirmaia & k.Iyakutti) [28] عام 2002 عند دراستهم لتأثير الضغط على كثافة الحالات لكل من بلورتي RbI ،KI ولكل من حالتي الاتزان والضغط وعندما يكون مقدار التغير في الحجم في حالة الاتزان ($v/v_0 = 0$) وعند تسليطهم لمقدار معين من الضغط الذي تسبب في تغير قيمة (v/v_0) بمقدار (0.43)، (0.40) وبالمقارنة مع مقدار التغير الذي حصلنا عليه والذي كان بمقدار 0,5 وعلى التوالي لكل من البلورتين.

6-3: دالة الموجة وكثافة الاحتمالية

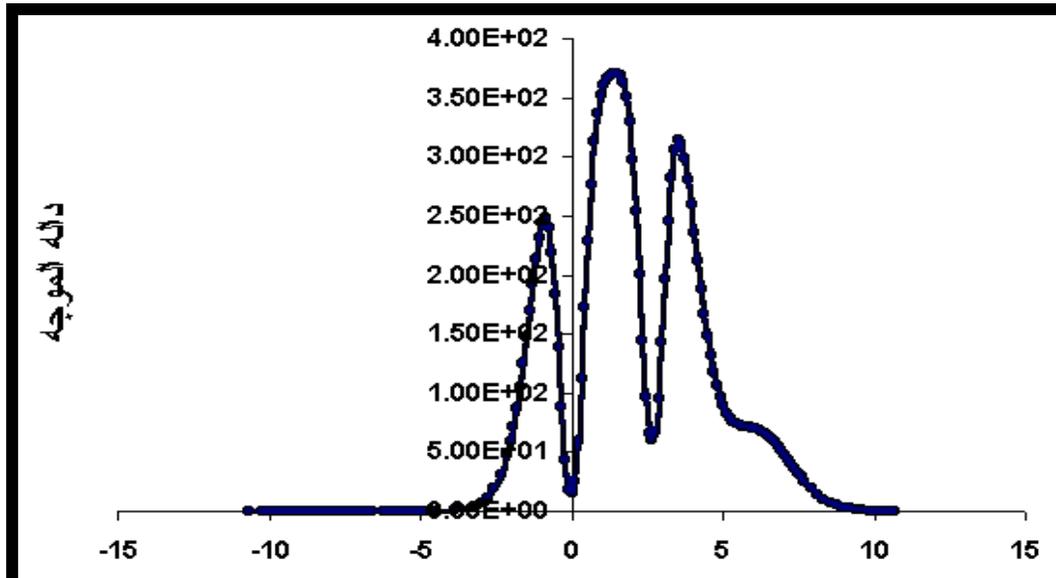
Wave Function and Probability Density

الأشكال (31-3)، (33-3)، (35-3) تمثل دالة الموجة على المحور X بالاتجاه [100] لأوطأ

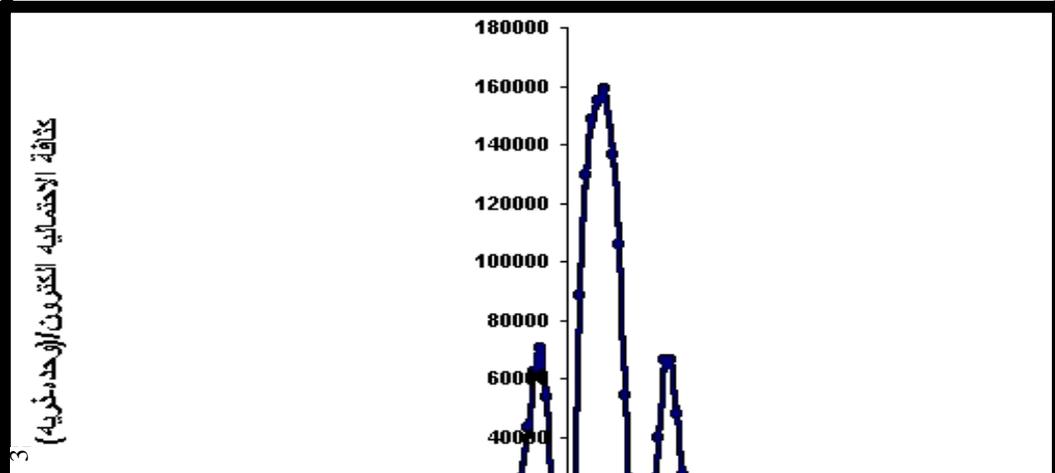
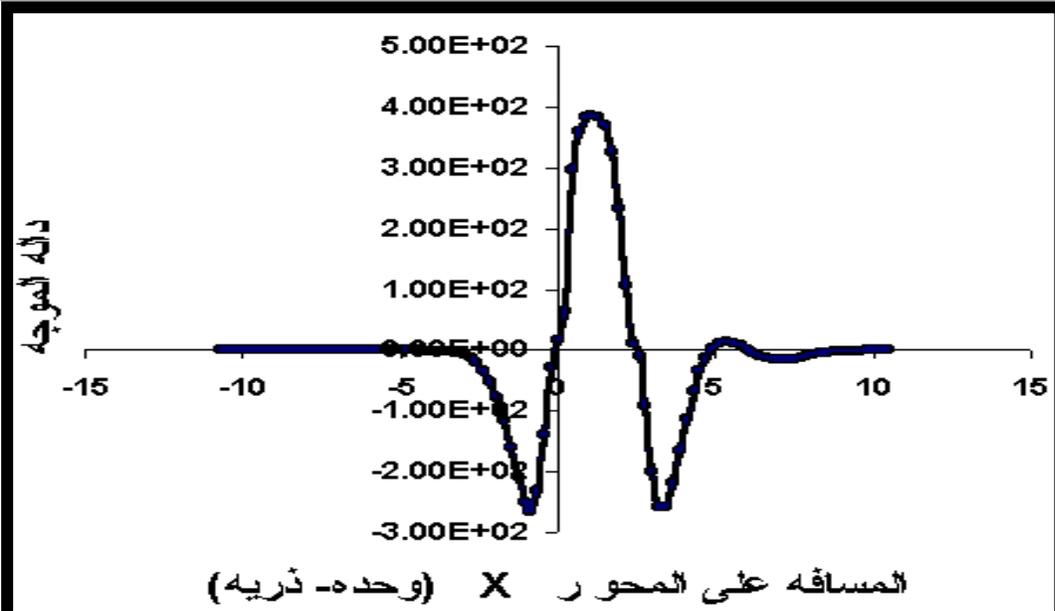
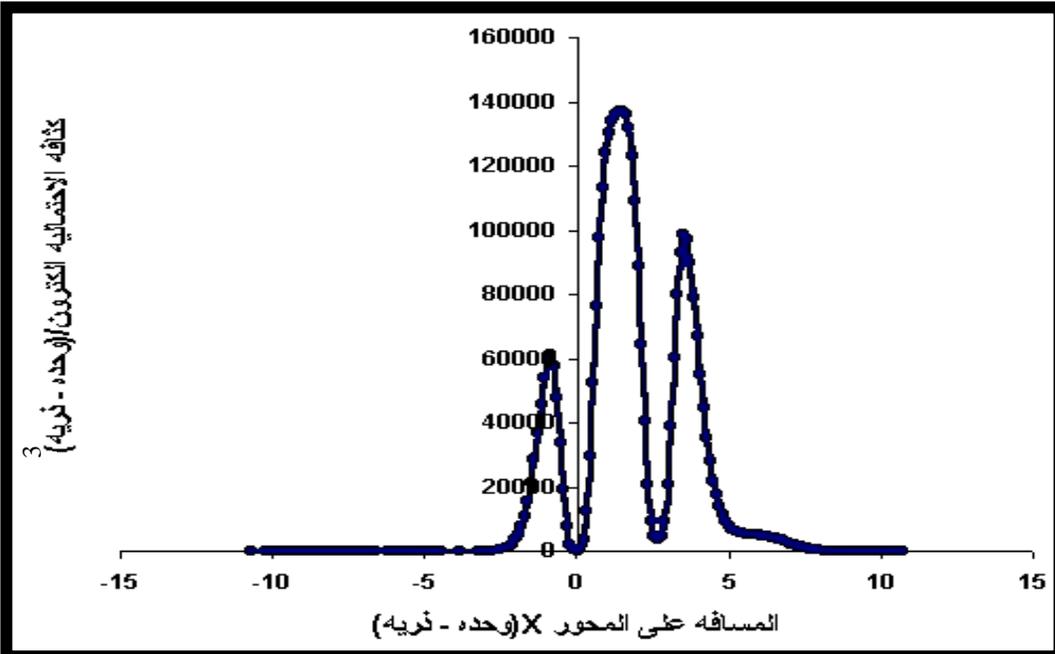
مستوي مشغول Γ_1 وأعلى مستوي مشغول Γ_{25} وأعلى مستوي غير مشغول Γ_{15} وعلى التوالي.

أما الأشكال (32-3)، (34-3)، (36-3) فتمثل كثافة الاحتمالية لأوطأ مستوي مشغول Γ_1

وأعلى مستوي مشغول Γ_{25} وأعلى مستوي غير مشغول Γ_{15} على التوالي.

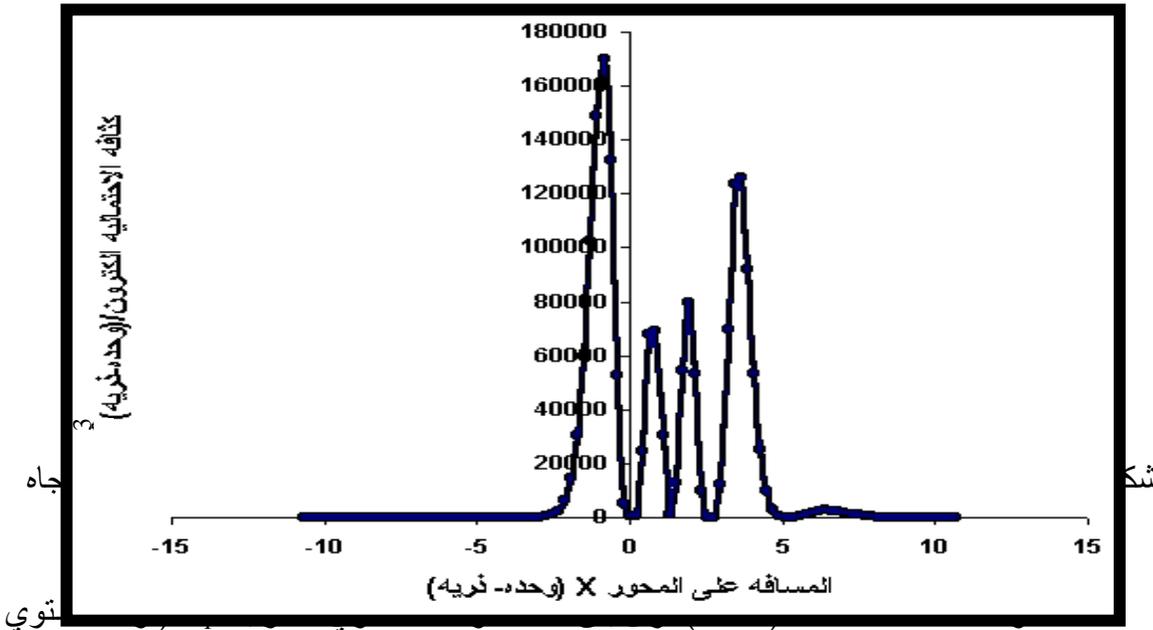
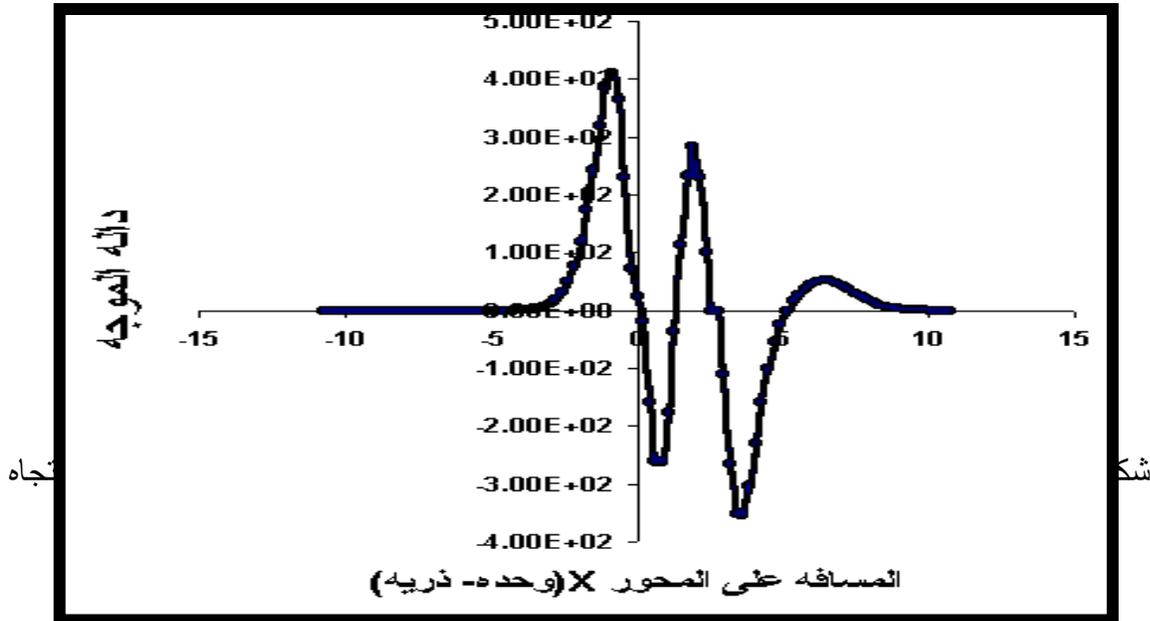


شكل (31-3) علاقة تغير دالة الموجة على المحور X لأوطاً مستوي مشغول Γ_1
بالاتجاه [100]



شكل (34-3) علاقة تغير كثافة الاحتمالية على المحور X لأعلى مستوى مشغول Γ_{25} بالاتجاه

[100]

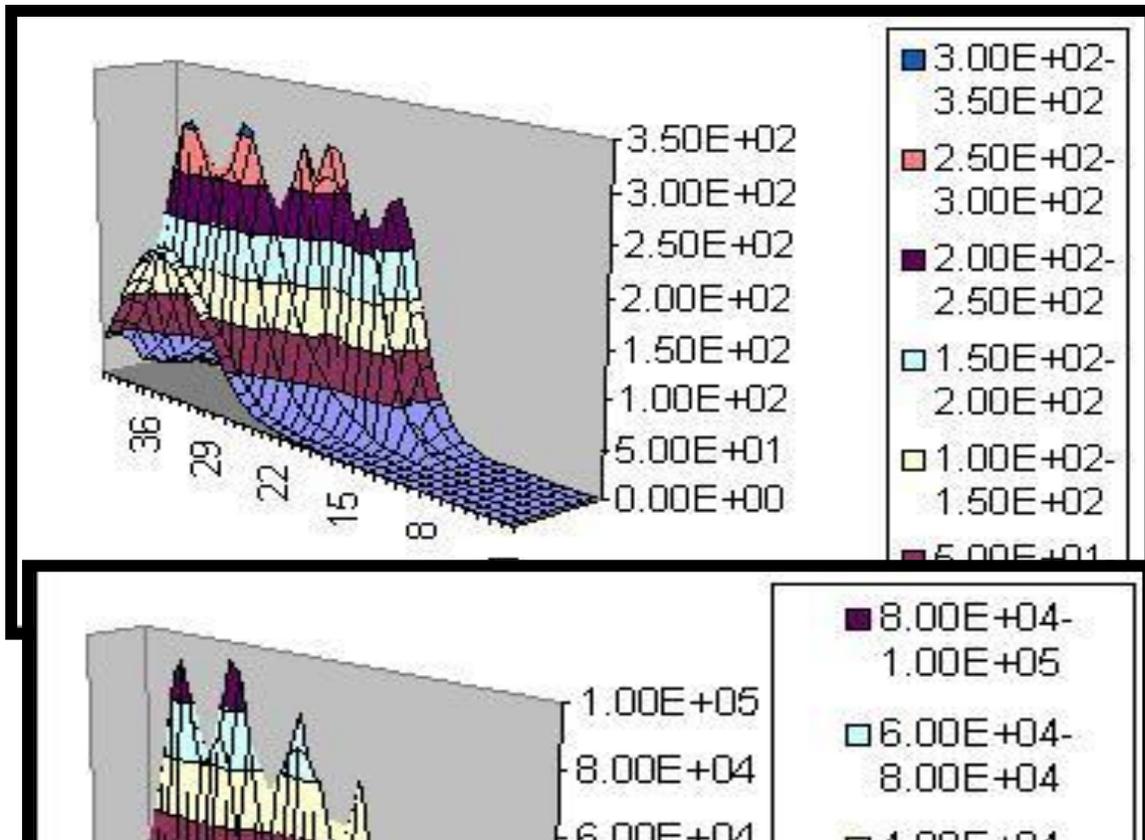


مشغول) هو ناتج من الاتحاد الخطي لمدارين ذريين ولكن من نوع (S) أي $(S_1 + S_2)$ الذي ينتج عنه تركيز للكثافة الإلكترونية بين النواتين بسبب الاتحاد الحادث بين الموجتين، أمّا الشكل (33-3) فيظهر

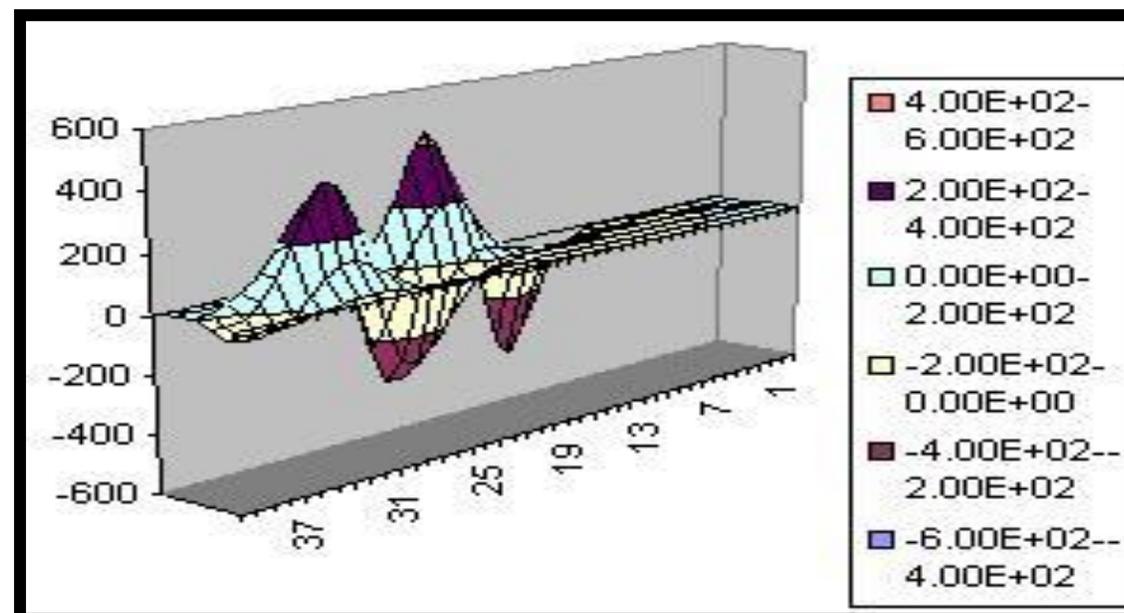
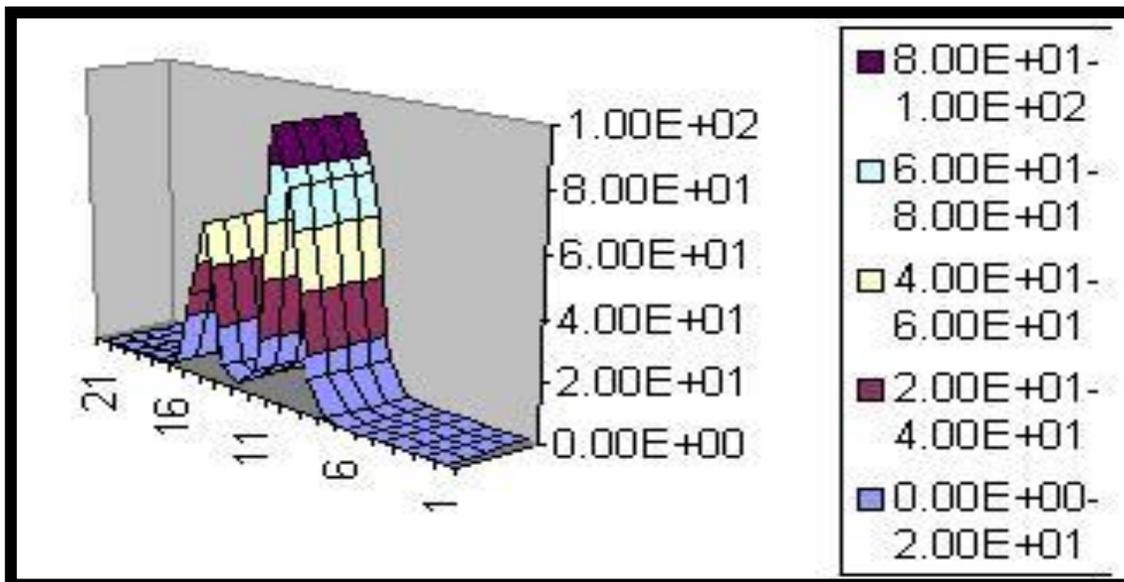
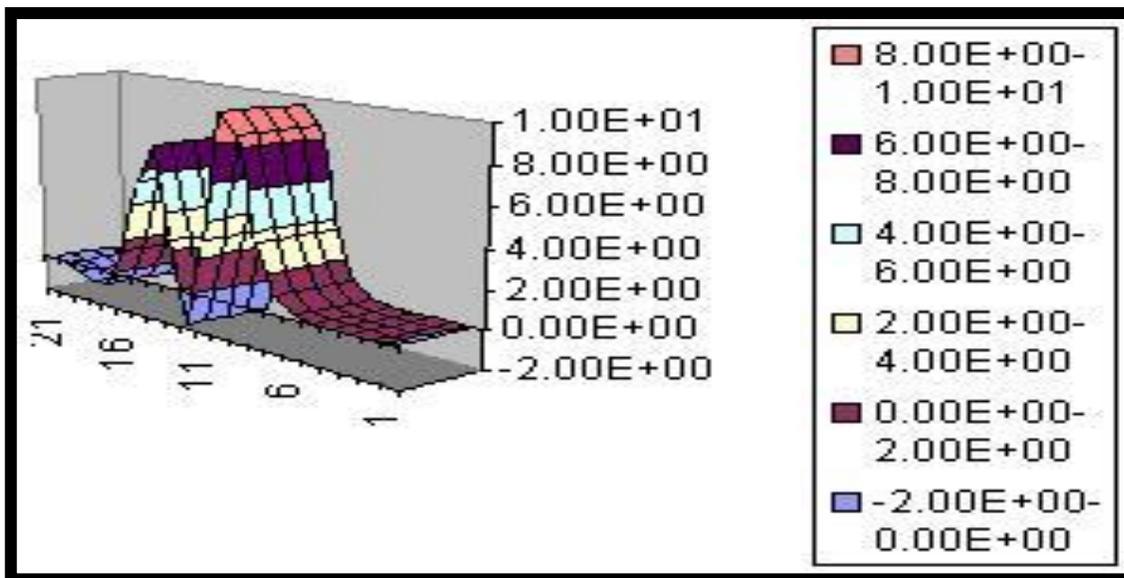
الترباط المتأصر للمستوي Γ_{25} (أعلى مستوي مشغول) والناتج من الاتحاد الخطي لمدارين من نوع P ولكن للاتجاه الموجب للمدارين ولذلك فإن المدار الناتج سوف يؤدي أيضا إلى زيادة الكثافة الإلكترونية بين النواتين، والشكل (3-35) يمثل الترباط غير المتأصر للمستوي Γ_{15} (أعلى مستوي غير مشغول) الذي ينتج من الطرح الخطي لمدارين من نوع p أي (p_1-p_2) والذي يؤدي إلى مدار ذي طاقة أعلى نسبيا لاحتوائها على عقد تخلو من احتمالية إيجاد الإلكترون فيه ومن ثم زيادة التنافر بين النواتين أي ارتفاع مستوي الطاقة للمدار.

أما بالنسبة إلى الأشكال (3-32)، (3-34)، (3-36) فهي تمثل مربع قيمة دالة الموجة المبينة بالأشكال (3-31)، (3-33)، (3-35) وتصف احتمالية وجود الجسم في نقطة معينة من الفضاء.

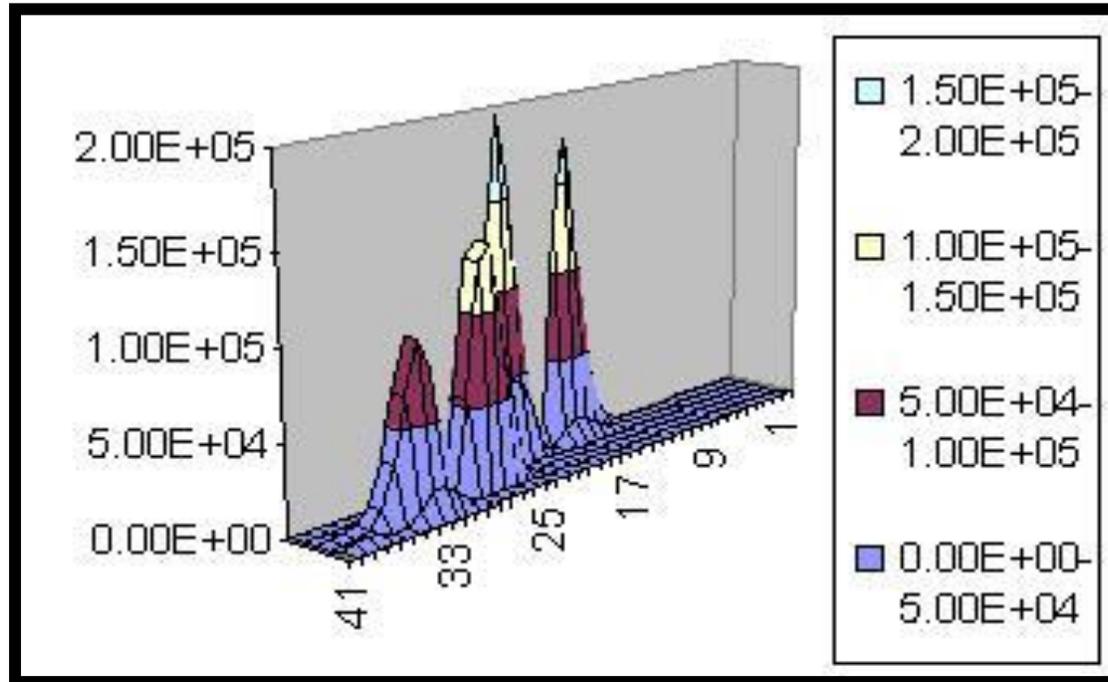
وتمثل الأشكال (3-37)، (3-39)، (3-41) دالة الموجة لأوطأ مستوي مشغول Γ_1 ، وأعلى مستوي مشغول Γ_{25} ، و أعلى مستوي غير مشغول Γ_{15} ولكن بالاتجاه [110] التي يتبين من خلالها بأنه أوطأ مستوي مشغول Γ_1 هو أيضا ناتج من الاتحاد المتأصر لمدارين من نوع S وأما أعلى مستوي مشغول Γ_{25} فهو ناتج من الاتحاد المتأصر لمدارين من نوع P حيث يظهر الشكل (3-39) أنّ المدارين المتأصرين اللذين هما من نوع P ناتجين من الاتحاد المتأصر ولكن باتجاه الفص السالب للمدارين على حين يمثل الشكل (3-41) الاتحاد غير المتأصر لمدارين من نوع P. وتظهر الأشكال (3-38)، (3-40)، (3-42) مربع قيمة دالة الموجة لأوطأ مستوي مشغول Γ_1 وأعلى مستوي مشغول Γ_{25} وأعلى مستوي غير مشغول Γ_{15} على التوالي.



شكل (38-3) علاقة تغير كثافة الاحتمالية مع المحور X لأوطأ مستوي مشغول Γ_1 بالاتجاه [110]



بالاتجاه [110]



الفصل الرابع

الاستنتاجات والبحوث المستقبلية

Conclusions and Future Researches

1-4: الاستنتاجات

1- إن استعمال الطرائق شبه – التجريبية مع نموذج خلية الوحدة الكبيرة (LUC-INDO) قد أعطت نتائج للخواص التركيبية للبلورة مقارنة وبشكل جيد من القيم العملية، وعند استعمالنا لعدد من العوامل التجريبية في حساباتنا كانت قيمة طاقة الترابط مقارنة إلى القيم العملية ولاسيما بعد إضافة تصحيحات المركز الواحد وتصحيحات الترابط (Correlation Corrections) إلى حسابات طريقة الإهمال المتوسط للتداخل التفاضلي (INDO) أعطت الطريقة تمثيلاً مناسباً لعرض حزمة التكافؤ عند قياسها بالقيم العملية على حين أخفقت الطريقة في الحصول على قيمة مناسبة لفجوة الطاقة المباشرة بسبب إهمال تأثير القلب واعتماد قيمة واحدة بالنسبة إلى كل من العاملين التجريبيين β^0 و β^1 للمدار s و p، وأما بالنسبة إلى حالة التهجين للمدارات الإلكترونية فنلاحظ زيادة حالة التهجين للمدار نوع s على حساب تهجين المدار نوع p عند موازنته مع الافتراض المتقدم به للمدارات المهجنة والمتمثلة بالصيغة (sp^3) وذلك بسبب ميل الذرة إلى الرجوع إلى وضعها الأصلي أي زيادة احتمالية وجود الغيمة الإلكترونية حول النواة أكثر من احتمالية وجودها بين الذرتين، وأصبحت هذه الطريقة تمثل الحل الوسط بين طريقة الحسابات الأولية والطرائق التي تستعمل عدداً كبيراً من العوامل التجريبية.

2- إن استعمال إلكترونات التكافؤ وإهمال تأثير القلب لم يؤد إلى حرف النتائج النظرية بشكل كبير عن القيم العملية حيث إن هذا التقريب يوفر تسهيلات كبيرة ومفيدة جداً وخاصةً للمواد الصلبة التي تمتاز بكثرة عدد ذراتها وعدد الدوال الأساس المكونة للذرات.

3- تبقى البلورة خاضعة لقانون هوك ضمن مدى الضغوط الممكن دراستها لحالة إجهاد الكبس، وإلى حد ($0.7 * 10^{11}$) باسكال لحالة إجهاد السحب مما يعكس هذا السلوك صلابة ومقاومة هذا النوع من البلورات إلى أي محاولة للتغيير أو الالتواء

4- إن دراسة نتائج البرنامج المستخدم لمنحني الإجهاد – والمطاوعة في حالة سحب البلورة يظهر عدم امتلاك مثل هذا النوع من المواد نقطة خضوع واضحة.

5- إن مقدار تغير كل من طاقة الترابط ومعامل المرونة الحجمي قد كان نظامياً وغير حساس بشكل كبير عند تغيير قيمة العامل التجريبي ξ المستعمل في الحسابات ولعل السبب في ذلك هو كبر كتلة النواة نسبة إلى كتلة الإلكترون مما يجعل من قيمة ثابت الحجب مقداراً صغيراً وقليل التأثير على الخواص التركيبية والفيزيائية للبلورة الذي يُعد المتحكم الأساسي بقيمة الأس المداري ξ ، على حين نلاحظ أن تأثير تغيير كل من عامل الربط β^0 والعامل التجريبي $(I_s + A_s)^{1/2}$ على عرض حزمة التكافؤ قد كان غير نظامي ولم يخضع إلى اتجاه محدد في تغييره.

6- إن زيادة إجهاد الكبس على البلورة قد زاد من عرض كل من حزمة التكافؤ والتوصيل على حساب فجوة الطاقة نتيجة لزيادة حدوث الانقسامات الحادثة في مستويات الطاقة لكل من حزمة التكافؤ والتوصيل ونقصان قيمة فجوة الطاقة التي تتوسط الحزمتين.

7- إن زيادة إجهاد الكبس على البلورة قد قلل من احتمالية وجود الإلكترون في المدارات الإلكترونية نوع S وزاد من احتمالية وجودها في المدارات الذرية الأعلى مستوى منها.

8- إن تأثير إجهاد السحب على البلورة قد قلل من عرض حزمة التكافؤ والتوصيل وفجوة الطاقة وذلك بسبب زيادة المسافة بين الذرات مع زيادة تأثير السحب على الذرات وبالتالي رجوع الذرة إلى وضعها الطبيعي .

9- إن تأثير إجهاد الكبس على البلورة قد قلل من عامل التشتيت الذري f سواءً أكان كل من قيم (hkl) عدداً فردياً أم عدداً زوجياً .

10- إن استعمال الطرائق شبه – التجريبية وبالاعتماد على أسلوب خلية الوحدة الكبيرة (LUC-INDO) لدراسة كثافة المراتب (Density of States) لحالة الاتزان للبلورة قد أعطت نتائج متطابقة تماماً مع القيم العملية المتوافرة لدينا، وقد كان لتأثير زيادة إجهاد الكبس على كثافة المراتب هو حدوث نقصان في كثافة المراتب .

11- إن استعمال هذه الطريقة لدراسة مستويات الطاقة المكونة لكل من حزمة التكافؤ والتوصيل والفجوة قد أعطانا فكرة عن نوع الترابط الكيميائي الناشئ من اتحاد مدارين ذريين ولذرتين متجاورتين سواءً أكان الاتحاد تآصري الذي ينشأ عنه تركيز في الكثافة الإلكترونية بين النواتين أم اتحاد نقيض للتآصر الذي يؤدي إلى مدار ذي طاقة أعلى نسبياً ويكون له مستوى عقدي يخلو من احتمالية إيجاد الإلكترون فيه، إذ تجبر الكثافة الإلكترونية على التكون خارج منطقة التآصر بالنسبة إلى المستوي الذي هو بالاتجاه [100] و بالاتجاه [110] .

2-4: البحوث المستقبلية

- 1- استعمال طريقة الإهمال المتوسط للتداخل التفاضلي (INDO) مع نموذج وحدة الخلية الكبيرة (LUC) التي تحتوي على 16، 64، 128 ذرة لدراسة التركيب الإلكتروني للبلورة حيث إنَّ زيادة حجم وحدة الخلية سوف يؤدي إلى اكتمال صورة التركيب الإلكتروني بزيادة عدد نقاط التناظر في فضاء متجه الموجة على الرغم من أن هذه الطريقة تواجه صعوبات تنفيذية كبيرة بسبب احتياجها إلى حاسبات أسرع وذاكرات أكبر.
- 2- استعمال هذا الأسلوب من الحسابات مع أشباه الموصلات التي لها تركيب كبريتيد الخارصين ZnS حيث إنَّ هذه المواد لها تركيب قريب من تركيب الماس، ولا توجد أي دراسات مسبقة تستعمل طريقة الإهمال المتوسط للتداخل التفاضلي مع إمكانية إضافة تصحيحات الترابط مع مثل هذا النوع من المواد.
- 3- دراسة التحولات الطورية لبلورة الجرمانيوم والناجمة من تسليط ضغوط عالية وتحت ظروف خاصة.

المصادر

1. A.Laref, B.Bouhafs, A.Zaoui, M.Certier, and H.Aourag, J. Phys. Stat. Sol. (b), 217, 911 , (2000).
2. R.Asokamani and R.Rita, J. phys. Stat. Sol. (b), 226, 375 , (2001).
3. D.B.Migas,L.Miglio,V.L.Shaposhnikov, and V.E.Borisenko, J. Phys. Stat. Sol. (b), 231 , 171,(2002).
4. C.Kittel, "Introduction to solid state physics", John Wiley and Sons, (1996).
5. قيس عبد الكريم ابراهيم، "كيمياء الكم والمطيافية الجزيئية"، جامعة البصرة، 1988.
6. مؤيد جبرائيل يوسف، "فيزياء الحالة الصلبة"، الجزء الأول، جامعة بغداد، 1987.
7. آرثر بايزر، "مفاهيم في الفيزياء الحديثة"، ترجمة: منعم مشكور و شاکر جابر شاکر، جامعة الموصل ، (1980).
8. R.Dovesi, R.Orlando, C.Roetti,C.Pisani, and V.R.Saunders, J.Phys. Stat. Sol. (b), 217, 63 , (2000).
9. علي عبد الحسين سعيد، "أسس كيمياء الكم النظرية والتطبيقية"، جامعة بغداد، (2000).
10. P.W.Atkins and R.S.Friedman, "Molecular Quantum Mechanic", Oxford University Press (1997).

11. هاشم عبود قاسم وضياء احمد حسين المختار، "مقدمة في الميكانيك الكمي"، جامعة البصرة (1985).
12. J.Pople and D.Beveridge ,“Approximate molecular orbital theory”, Mc Graw-Hill, (1970).
13. خالد عبد الله جاسم وعصام احمد محمود، "الفيزياء الجزيئية"، جامعة الموصل (1992).
14. W.Hehre, L.Radom, P.Schileyer, and J.Pople, “Abinitio molecular orbital theory”, John Wiley and Sons (1986).
15. B.Bransden and C.Joachain,“Physics of atoms and molecules”, Lohgmang (1984).
16. Peter Deak, Thomas Frauenheim,and Mark R.Pederson “Computer simulation of materials at atomic level”, Wiley – Vch Verlag Berlin Gmbh (2000).
17. R.Pariser and R.G.Parr, J.Chem.Phy. , 21, 466 ,(1953).
18. J.A.Pople and G.A.Segal, J.Chem. Phy. ,43 ,S 136 ,(1965).
19. J.A.Pople , D.L.Beveridge ,and P.A .Dobosh, J.Chem. Phy. , 47, 2026, (1967).
20. R.A.Evarestov and V.A.Lovchikov, J. Phy. Stat. Sol. (b), 79 ,743 ,(1977).

21. A.Svane, J. Phys. Rev.B , , 35 ,5496 ,(1987).
22. X.H.Chen, W.Ranke , and E.Schroder-Bergen, J. Phys. Rev.B, , 42, 7429, (1990).
23. M.Grundmann and A. Krost, J. Phys. Stat. Sol. (b), 218, 417 ,(2000).
24. W.Szuskiewicz, E.Dynowska,P.Dluzewski ,W.Paszkowicz, A.Szczepanska, and B.Witkowska ,J. Phys. Stat. Sol. (b), 229 , 73 ,(2002).
25. V.V.Ilyasov , T.P.Zhdanova,I.Y.A.Nikiforov, and A.V.I lyasov, J. Phys. Stat. Sol. (b), 229, 1187 ,(2002).
26. Y.Mori, T.Ikai, and K.Takarabe, J. Phys. Stat. Sol. (b), 235, 317, (2003).
27. C.Cunha, S.Canuto,and A.Fazzio, J. The American Physical Society, 48 , 17806 , (1993).
28. C.Nirmala Louis, and K.Iyakutti, J. Phy. Stat. Sol. (b), 233, 339, (2002).
29. Atsushi Nishikawa and Koichi Shindo, J. Phy. Stat. Sol. (b), 235, 514 ,(2003).
30. M.I.Daunov, I.K.Kamilov,S.F.Gabibov,and A.B.Magomedov, J. Phy. Stat. Sol. (b), 235, 297 ,(2003).

31. J.Lopez Solano, A.Mujica, P.Rodriguez-Hernandez and A.Munoz, J. Phy. Stat. Sol. (b), 235,452 , (2003).
32. A.Segura, F.J.Manjon, D.Errandonea, J.Pellicer-Porres, V.Munoz, G.Tobias, P.Ordejon, E.Canadell, A.San Miguel and D.Sanchez-Portal, J. Phy. Stat. Sol. (b), 235, 267, (2003).
33. I.Z.A.Hassan, “Semiempirical Self-Consistent Field Calculations of III-V Zinc – blende Semiconductors”, Ph.D. thesis, University of Saddam (2001).
34. J. Pople and G.A.Segal, J.Chemical physics, 44, 3289 , (1966).
35. M.A.Abdul Sattar, “Self-Consistent Field Calculation to Covalent Semiconductors”, Ph.D.thesis, University of Baghdad (1997).
36. R.A.Evarestov and V.P.Smirxov, J. Phys. Stat. Sol. (b), 113, 9 ,(1983).
37. B.I.Cralg and P.V.Smith, J. Phys. Stat. Sol. (b), 140, 491, (1987).
38. يحيى نوري الجمال، فيزياء الحالة الصلبة، جامعة الموصل، (2000)
39. M.Alonso and E.Finn, “Fundamental University Physics”, Wesley Pub. Co. (1972).
40. A.Harker and F.Larkins, J. Phys.C , 12 , 2487, (1979).

41. A. Harker and F.Larkins, J. Phys. C, 12 , 2497, (1979).
42. Liqing , Meichun Huang, Shuping ,and zizhong zhu, J. Eur. Phys. B , 12 , 493 , (1999).
43. M.E.Gonzalez-Mendez and N.Takeuchi J. Phys. Stat. Sol.(b), 220 , 79 ,(2000).
44. A.H.Romero, M.Kiwi and R.Ramirez, J. Phys. Stat. Sol. (b), 230, 391, (2002).
45. K.New man and J.Dow, J. Phys. Rev. B, 30, 1929 , (1984).
46. مسلم عبد محمد، "ميكانيك الكم في الكيمياء"، جامعة الموصل (1985).
47. J.S.Binkley, and J.A.Pople, J. Quantum Chemistry, IX, 229 , (1975).
48. A.Benzair and H.Aourag, J. Phys. Stat. Sol. (b), 231, 411 , (2002).
49. D.Olguin, A.Cantarero,C.Ulrich, and K.Syassen, J. Phys. Stat. Sol. (b), 235 , 456 , (2003).
50. D. Chadi, J. Phys. Rev.B, 16, 790 ,(1977).
51. F.Bassani, G.Parravicini and R.Ballinger, "Electronic and Optical Transitions in Solids", Pergamon Press (1975).

52. Walter, R.L.Lambrech, and O.K.Andersen, J. Phys. Rev.B, 34, 2439 , (1986).
53. P.E.Van Camp , V.E.Vandoren and J.Devreese , J. Phys. Rev.B, 38 12675 , (1988).
54. M.Rohlfing, J. Phys Rev.B, 48, 17791 , (1993).
55. A.Wachs, T.Miller, T.Hsieh, A.shapiro and T.Chiang, Phys. Rev.B, 32, 2326 , (1985).
56. D.Aspnes, J. Phys. Rev.B, 12, 2297 ,(1975).
57. E.Clementi and C.Rotti, “Atomic and Nuclear Data Tables”, 14 (1974).
58. B.D.Cullity, “Elements of X-ray Diffraction”, Wesley Pub. Co. (1978).
59. J.Demarc and R.Weiss, J. Phys. Rev.B, 137, 1869 , (1965).
60. M.Yin and M.Cohn, J. Phys. Rev.B, 26, 566 , (1989).
61. نجاح صادق جميل ، أسس علم البلورات، جامعة الموصل، 1990.
62. Van Vlack, “Elements of Materials Science”, Wesley Pub. Co. (1964).

63. ج. ن. ميريل، ترجمة مهدي ناجي زكوم، "الاصرة الكيميائية"، جامعة الموصل (1983).
64. Y.Mori, T.Ikai, R.Teranishi, and K.Takarabe, J.Phy.Stat.Sol. (b) 235, 302 , (2003).
65. K.Takemura and K. Syassen J. Phys. Rev.B, 28 ,1193 ,(1983).
66. M.J.Herrera-Cabrera, P.Rodriguez-Hernandez, and A.Munoz, J. Phys. Stat. Sol. (b) 235 , 446 , (2003).
67. Michihide Kitamvra, J. Phys. Rev.B, 50, 18007 , (1994).
68. M.T.Yin , Marivih, and L.Cohen, J. Phys. Rev.B , 26 , 5668 , (1982).

Abstract

The work described in this thesis was undertaken at Babylon University in the period between October 2001 - Jan. 2003 under the supervision of Dr. Mudar Ahmed Abdulsattar from Al-Raia company and Dr. Galib Abd Al-Wahab Al-Dahash from Babylon University. Except what was mentioned in certain references, the information present is the searcher's products were not presented to gain a scientific degree previously.

The search include studying the band structure of Germanium a semiconductive covalent crystal by using an approximate method of self-consistency depending on the method of the intermediate neglect of differential overlap (INDO) and depending on large unit cell to a semiconductive material of diamond structure which contain 8 atoms in the large unit cell. The simulation includes the crystal structure which is represented by the lattice constant, cohesive energy, direct band gap, valance band width and the hybridized orbitals of the crystal. And also includes a study of the physical properties of the crystal such as bulk modulus, X-ray scattering factor, the stress-strain relationship and the effect of changing the empirical parameters on the structural properties of the crystal. The search also includes the study of the effect of the stress of both state (compression) and (tensile) on both of valance band, conductive band, direct band gap and hybridized electronic orbitals and on the lowest occupied level Γ_1 , the lowest unoccupied level Γ_2 and the highest occupied level Γ_{25} , the scattering factor of X-ray, bulk modulus, the density of state. Drawings are also given for the wave function, the probability density for the lowest occupied level Γ_1 , the highest occupied level Γ_{25} , the highest unoccupied level Γ_{15} , in both directions [100],[110] with the addition of the correlation corrections, relativistic corrections and the effect of the zero point energy on the cohesive energy. The obtained results were compared with the available experimental data. Comparing the few number of the empirical parameters used in our calculations with the huge information which had been obtained, leads to think that our choice of the semi-empirical methods for studying the band structure of the crystal was successful.