جامعة الموصل

كلية العلوم

دراسة الخصائص الثرموداينميكية لمركب شبه الموصل GaN وحساب تركيب حزم الطاقة تحت الضغط العالي

سالار علي مولود حسين

أطروحة دكتوراه

في

فيزياء الحالة الصلبة

بإشراف

الأستاذ المساعد

الدكتور عدنان محمد الشيخ حسين

الأستاذ المساعد

الدكتور ممتاز محمد صالح حسين

١٤٣٦هـ

٢٠١٥م

الملخص

تم في هذه الأطروحة تقديم دراسة نظرية لتأثير الضغط العالي في مركب نتريد الكاليوم (GaN)، حيث شملت هذه الدراسة تأثير الضغط في عدد من الخصائص الثرموداينميكية للمركب شبه الموصل (GaN) مثل الانضغاطية ومعامل المرونة الحجمي باستخدام اربع معادلات حالة مختلفة (معادلة حالة برخ – مرنكهان، معادلة حالة باردين، معادلة حالة ليبي – ليبي، و معادلة حالة بورن–ماي). ومن حساب تغير معامل المرونة الحجمي مع الضغط احتسبت قيم جديدة لضغط السبينودال من خلال استكمال بيانات تغير معامل المرونة الحجمي مع الضغط وبالاعتماد على تعريف ضغط السبينودال. اظهرت النتائج التي حصلنا عليها في هذه الدراسة توافقا جيدا مع النتائج النظرية والتجريبية المنشورة. ولحساب تغير فجوة الطاقة تحت تأثير الضغط العالي ودرجة الحرارة استخدمت صيغتين مختلفتين، الاول هو استخدام صيغة Levinshtein والثاني استخدام صيغة Bouarissa من خلال تغير ثابت الشبيكة ومع معادلات الحالة المختلفة. واستخدمت ثلاثة نماذج نظرية مختلفة (Moss, Ravindra *et al*., Herve & Vandamme)، في دراسة تغير معامل الانكسار مع الضغط لـ ZB-GaN وباستخدام معادلات الحالة المختلفة.

كما تم احتساب تركيب حزمة الطاقة لـ ZB-GaN بأستخدام طريقة الربط المحكم sp^3s^* ولحد تفاعل الجيران الاقرب مع وبدون تأثير الضغط العالي، وقمنا باحتساب عدد من الخصائص الالكترونية المهمة مثل فجوات الطاقة ومتعدد القطب Hetropolar ومعامل الايونية f_i فضلاً عن معامل الانكسار n، كذلك قمنا بحساب كثافة الحالات الالكترونية لـ ZB-GaN واستقصاء تأثير الضغط فيها لحدود تحول الطور phase transition. اظهرت نتائج حسابات حزمة الطاقة لـ ZB-GaN توافقاً جيداً مع نتائج البحوث المنشورة ومع نتائج الحسابات التي تعتمد على معادلات الحالة.

University of Mosul
College of Science

Study of Thermodynamic Properties for Semiconductor Compound GaN and Calculation of Energy Bands structure Under High Pressure

Salar Ali Mawlood Hussien

Ph. D./ Thesis
of
Solid State Physics

Supervised By

Assistant Professor **Assistant Professor**

Dr. Adnan M. Al-Sheikh Hussien **Dr. Mumtaz M. S. Hussien**

2015 A.D **1436 A.H**

Abstract

In this thesis, the effect of high pressure on GaN compound has been presented theoretically, which included the effect of pressure on some thermodynamic properties of the GaN such as compressibility and bulk modulus has been studied using four different equation of states, i.e (Birch-Murnaghan, Bardeen, Libby- Libby, and Born-Mie). From the variation of bulk modulus with pressure a new value of spinodal pressure has been calculated from extrapolating the data of the bulk modulus with pressure depending on the definition of spinodal pressure. The results obtained from this calculation is a good agreement with the other published results.

Two approaches has been used to calculate the change of energy gap with pressure and temperature. The first is using Levinshtein formula and the second is the use of Bouarissa formula through the change of lattice constant within different equations of state. Three theoretical models i.e (Moss, Ravindra *et al.*, Herve & Vandamme) relations, has been used to study the effect of pressure on refractive index of ZB-GaN using different equations of state.

The band structure of ZB-GaN has been calculated by using nearest neighbor sp3s* tight-binding method with and without applying high pressure. Some electronic properties has been calculated such as direct energy gap $E_{\Gamma\Gamma}$, hetropolar E_h, ionicity parameter f_i as well as refractive index n, the density of states and their pressure effect has been investigated up to phase transition point, our energy band results for ZB-GaN shows good agreement with other published papers as well as the results that depends on the equation s of state calculations.