جامعة الموصل
كلية التربية للعلوم الصرفة

تطبيق طريقة الربط المحكم لحساب شكل الحزمة وتأثير الضغط على المركبات II-VI البلورية شبه الموصلة

حسين علي حسين سلطان الحيالي

رسالة ماجستير
الفيزياء

بإشراف
الاستاذ المساعد
الدكتور ممتاز محمد صالح حسين

1442هـ 2021 م

الملخص:

في هذه الرسالة تم تطبيق نظرية الربط المحكم لحساب شكل الحزمة وتأثير الضغط على بلورة (ZnSe) للنموذجين sp^3 وsp^3s^* والبلورات (ZnTe, ZnS) للأنموذج sp^3s^*، حسبت عناصر المصفوفة باستخدام الطريقة التي اتبعها فوكل و كوهين وتم تصميم برنامج حاسوبي بلغة MATLAB لحساب شكل الحزمة لهذه البلورات، وذلك بتكوين نقاط في فضاء متجه الموجة داخل منطقة برليون الاولى (المنطقة المختزلة) وعلى طول المسارات بين نقاط العالية التناظر $(\boldsymbol{L} \rightarrow \boldsymbol{\Gamma}, \boldsymbol{\Gamma} \rightarrow \boldsymbol{X} \rightarrow (\boldsymbol{U}, \boldsymbol{K}) \rightarrow \boldsymbol{\Gamma})$ وحساب القيم الذاتية للطاقة عند النقاط عالية التناظر على طول المسار في المنطقة المختزلة. اظهرت النتائج التي حصلنا عليها من حساباتنا عند مقارنتها مع نتائج حسابات كل من Vogl وCohen و Lannoo تقارب جيدا. تمت المقارنة بين أنموذج sp^3 وأنموذج sp^3s^* من حيث حساب قيم فجوة الطاقة عند النقاط عالية التناظر داخل منطقة برليون المختزلة. كذلك تمت المقارنة بين قيم Egap للبلورات ZnS, ZnTe, ZnSe مع بعض النتائج المنشورة وحصلنا على تقارب جيد للنتائج. وكذلك تم حساب تأثير الضغط على حزم الطاقة لـ (ZnS, ZnTe, ZnSe) في المدى Gpa(40−10) من خلال حساب عناصر المصفوفة تحت ضغوط مختلفة للأنموذج sp^3s^* لـ (ZnS, ZnTe, ZnSe) و (ZnSe) للأنموذج sp^3 بينت النتائج مع زيادة الضغط اتساع في فجوة الطاقة، وزحزحة في حزمة التوصيل نحو الاعلى، وزحزحة نحو الاسفل في حزمة التكافؤ. تم تحديد قيم فجوة الطاقة Egap للنقاط عالية التناظر مع تغيير الضغط ومقارنتها مع الحسابات النظرية. تم مؤامة النتائج التي حصلنا عليها لفجوة الطاقة مع الضغط باستخدام معادلة من الدرجة الثانية بطريقة المربعات الصغرى، وحصلنا على قيم المعاملات لكل من الانضغاطية، ودرجة الحرارة وقيمة Egap عند درجة حرارة الغرفة.

Abstract

In this thesis tight-binding method has been applied to calculate the band structure and the Effect of Pressure in ZnSe crystal for the two models sp^3 and sp^3s^*, and the crystals (ZnTe, ZnS) for the model sp^3s^*, the matrix elements of have been calculated using the method used by Vogl and Cohen. A computer program has been designed in MATLAB language to calculate the band structure for these crystals, a sample of points has been formed in the first Brillouin zone (reduced zone) between the high symmetry points $(L \rightarrow \Gamma, \Gamma \rightarrow X \rightarrow (U, K) \rightarrow \Gamma)$. The energy eigen values are calculated along the high symmetry paths, the obtained results have been compared with previous works of Vogl and Cohen and Lannoo which shows good agreements. A comparison between the ZnSe band structure based on sp^3 and sp^3s^* models has been done and the energy gap between the conduction and valence bands at the high symmetry points is calculated for the sp^3s^*. The effect of pressure on the (ZnSe, ZnTe, ZnS) band structure is calculated in the range (10-40) Gpa by calculating the matrix element under different pressure for model sp^3s^* for (ZnS, ZnTe, ZnSe) and ZnSe for model sp^3, the results show broadening in band gap due to applied pressure, the conduction band is shifted toward the high energy while the valence band is shifted toward the lower energy. The band gaps are calculated values for high symmetric points were determined with pressure change and compared with theoretical calculations**.** the energy gap values of ZnSe, ZnTe, ZnS crystals were also compared with some of the published results and we obtained good agreements with published results. The results obtained for the energy gap were fitted with pressure using a quadratic equation by the least square method and we obtained the coefficients values for both compressibility, temperature, and the value of Egap at room temperature.

University of Mosul
College of Education
for Pure Science

Application of Tight-binding Method to Calculate the Band Structure and the Effect of Pressure on II-VI Semiconductor Crystalline Compounds

Hussein Ali Hussein Sultan Al-Hayali

M.Sc.Thesis
Physics

Supervised by
Assist.Prof
Dr. Mumtaz M. Hussien

2021 A.D. 1442 A.H.