



جامعة الموصل
كلية التربية للعلوم الصرفة

حساب تركيب الحزمة لبعض بلورات أشباه الموصلات III-V بطريقة الربط المحكم

اسماعيل ثمين طليح يحيى الصفار

رسالة ماجستير
الفيزياء

بإشراف
الأستاذ المساعد
الدكتور ممتاز محمد صالح حسين

المخلص

تم في هذه الرسالة حساب تركيب حزم الطاقة في مواد أشباه الموصلات المركبة III-V لبلورات مجموعة الكاليوم GaAs، GaSb و GaP ذات تركيب المشبك الخارصيني بأستخدام طريقة الربط المحكم شبه التجريبية للجيران الأقرب في منطقة برليون الأولى، حيث تم حساب تركيب حزم الطاقة بأستخدام النموذجين sp^3 الذي يمتلك 9 معلمات و sp^3s^* والذي يمتلك 13 من المعلمات التي تستخدم في حساب الخصائص الالكترونية لحزم التوصيل والتكافؤ. تم تحديد عناصر المصفوفة بأستخدام الطريقة التي اتبعها كل من Chadi و Vogl، بواسطة تحديد نقاط في فضاء متجه الموجة داخل منطقة برليون المختزلة بين نقاط التماثل العالية وحساب القيم الذاتية لكل هذه النقاط من خلال بناء برنامج حاسوبي بلغة MATLAB لحساب حزمة الطاقة. إذ تم إجراء مقارنة للنتائج التي حصلنا عليها بأستخدام النموذجين sp^3 و sp^3s^* . إذ تمت المقارنة بين قيم الطاقات عند نقاط التماثل العالية Γ و X التي تم الحصول عليها من الدراسة الحالية مع نتائج البحوث المنشورة. كذلك تم دراسة تأثير درجة الحرارة على حزم الطاقة لهذه البلورات من خلال تغير قيم ثابت الشبكة وطول الأصرة مع درجة الحرارة والتي تؤثر بدورها في معلمات عناصر المصفوفة التي تستخدم في حساب تركيب حزم الطاقة، حيث تم حساب بعض الخصائص الالكترونية المهمة مثل فجوات الطاقة عند نقاط التماثل العالية ومعامل الانكسار، أظهرت نتائج حسابات حزم الطاقة للبلورات GaAs، GaSb و GaP توافقاً جيداً مع نتائج البحوث المنشورة، وبينت النتائج أن النموذجين sp^3 و sp^3s^* يعطيان نتائج جيدة بالنسبة لحزمة التكافؤ، في حين لا يعطي النموذج sp^3 نتائج جيدة لحزمة التوصيل، وظهر فرق في فجوة الطاقة وتوافق في طاقات تركيب الحزمة في نقاط التماثل العالية بين هذين النموذجين والدراسات السابقة.

Abstract

In this thesis, the computation of the energy band in the III-V composite semiconductor materials for GaAs, GaSb and GaP crystals with a zinc blende structure was calculated using the semi-empirical tight binding method for the nearest neighbors in the first Brillouin zone where energy band structure was calculated using the two models sp^3 having 9 Parameters and sp^3s^* which possesses 13 parameters which are used in calculating the electronic properties of conduction and valence band. The matrix elements were determined using the method followed by Chadi and Vogl, by determining points in the wave vector space within the reduced Brillouin zone between the high symmetry points and calculating the eigenvalues of all these points by building a computer program in MATLAB to calculate energy band structure. As a comparison was made of the results we obtained by using both models sp^3 and sp^3s^* . The values of the energies at high symmetry points Γ and X obtained from the current study were compared with the results of the published researches. As well as the effect of temperature on the energy bands of these crystals was also studied by changing the values of the lattice constant and the length of the bond with temperature which in turn affected the parameters of the matrix elements that are used in the calculation of the energy band structure. Where calculated some important electronic properties such as energy gaps at high symmetry points and refractive index. The results of the energy band calculations for GaAs, GaSb and GaP crystals showed good agreement with the results of the published researches and the results showed that both sp^3 and sp^3s^* models give good results with respect to the valence band while the sp^3 model does not give good results for the conduction band as it showed a difference in the energy gap and compatibility in the energies of the band structure at high points of symmetry between these two models and previous studies.

**University Of Mosul
College Of Education
For Pure Science**



Calculation of the Band Structure of Some Semiconductor Crystals III-V by Tight Binding

Ismail Thameen Tlayea Yahya Alsafar

M.Sc. Thesis
Physics

Supervised by
Assist. Prof.

Dr. Mumtaz Mohammad Salih Hussien

2021 A.D.

1443 A.H.