وزارة التـــــــعليم العـــــالي و البـــــــحث العلـــــــمي

المركز الجـــــامعي تيـــــسمسيـــــلت

معـــــهد العـــــلوم والتكنولوجيـــــــا

قـــــسم عـــــلوم المـــــواد

مذكرة تخرج

قـــدمت لنيل شهادة

ماســـتر في الفيزيـــــاء

تخصص نانو فيزياء

من طرف

شايب بصو جمال

مناد عبد الإله

بعنوان

المساهمة في دراسة الخصائص البنيوية و الإلكترونية للخليط $Zn_{1-x}Be_xSe$ بطريقة "FP-LMTOab-anitio"

نوقشت يوم 18/10/ 2020 أمام لجنة التحكيم المؤلفة من:

الرئيس	السيد طيب الزروقي	(MAA) المركز الجامعي تيسمسيلت
المشرف	السيد بلفضل عبد المنعم	(MCB) جامعة ابن خلدون تيارت
مناقش	الأنسة بودية كلتومة	(MCA) المركز الجامعي تيسمسيلت

السنة الدراسية 2019-2020

ملخص

في بحثنا هذا تم استخدام طريقة الحساب (ab-initio) لدراسة الخصائص البنيوية و الإلكترونية للمركب الثلاثي $Zn_{1-x}Be_xSe$ لهذا استعملنا طريقة FP-LMTO التي تعتمد على نظرية كثافة الدالة DFT. قمنا بحساب الخصائص البنيوية والإلكترونية باستعمال تقريب LDA. حيث وجدنا أن تأثير تركيز العنصر Be في المركب على علاقة عكسية مع ثابت الشبكية a_0 وعلى علاقة طردية مع طاقة الفجوة ومعامل الإنضغاطية للمركب.

كلمات مفتاحيه:

FP-LMTO, الخصائص البنيوية, الخصائص الإلكترونية, $Zn_{x-1}Be_xSe$, LDA

Abstract

In our research, the calculation method (ab-initio) was used to study the structural and electronic properties of the triple compound Zn_{1-x} Be_x Se. Therefore, we used the FP-LMTO method which is based on the density functional theory DFT. We calculated the structural and electronic properties using LDA approximation. We found that the effect of the concentration of the element Be in the compound has an inverse relationship with the lattice constant a_0 and has a direct relationship with the gap energy and the compressibility factor of the compound.

Key words:

FP-LMTO,propriétés structurales, propriétés électroniques, $Zn_{1-x}Be_x$ Se, LDA.

Résumé

Dans notre travail, nous avons utilisé la méthodede calcul (ab-initio) FP-LMTO qui est basée sur la théorie de la densité fonctionnel DFT, pour étudier les propriétés structurelles et électroniques du composé ternaire Zn_{1-x} Be_x Se. Nous avons calculé les propriétés structurales et électroniques en utilisant l'approximation LDA. Nous avons constaté que l'effet de la concentration de l'élément Be dans le composé a une relation inverse avec la paramètre de maille a_0 et a une relation directe avec l'énergie de gap et le facteur de compressibilité du composé.

Mots clés:

FP-LMTO,propriétés structurales, propriétésélectroniques, $Zn_{1-x}Be_x$ Se, LDA.

شـكـر وعـرفـــا ن

الحمد لله رب العالمين والصلاة على سيد الأولين والآخرين نبينا محمد وعلى آله وصحبه أجمعين...أما بعد:

فنحمد الله ونشكره على توفيقه وفضله الذي منّ علينا بإتمام هذه المذكرة.

يسرنا ويسعدنا أن نتقدم بوافر الشكر وعظيم الامتنان لكل من ساهم من قريب أو بعيد في إتمام هذا العمل، ونخص بالشكر جميع أساتذتنا الفضلاء بالمركز الجامعي بتيسمسيلت كما نتقدم بالشكر لأستاذنا الفاضل الدكتور عبد المنعم بلفضل، وذلك لتفضله بالإشراف على هذه الدراسة، ولصبره علينا ولما بذله من وقت و جهد، فجزاه الله خيرا.

كما نتقدم بالشكر لزميلنا الطالب حميد نهمار، لما وجدناه منه من تعاون واحترام.

و الشكر موصول إلى كل من اقتطع من وقته الثمين في سبيل إتمام هذه المذكرة.

وصلى الله على نبينا محمد وعلى آله وصحبه أجمعين.

الطالبان

إهداء

أهدي هذا العمل المتواضع

إلى روح والدتي طيب الله ثراها...

إلى من نذر عمره في أداء رسالة

صنعها من أوراق الصبر... وطرزها في ظلام الدهر

على سراج الأمل... بلا فتور أو كلل

رسالة تعلم العطاء كيف يكون العطاء... وتعلم الوفاء كيف يكون الوفاء

إليك أبي أهدي هذه الرسالة... وشتان بين رسالة ورسالة

جزاك الله خيراً... وأمد في عمرك بالصالحات

فأنت زهرة الحياة ونورها

وأهدي هذا العمل إلى عمي اعمر الذي يعجز اللسان عن التعبير على كل

ما قدمه لي أطال الله عمره في طاعة الرحمان

وإلى كل أفراد اسرتي وعائلتي

و بكل الحب...إلى أستاذتي الغالية

إلى من سارت معي نحو الحلم...خطوة بخطوة

بذرناه معاً...وحصدناه معاً

اليك استاذتي لعطب فطيمة

• مناد عبد الإله

ا لإ هـد ا ء

أهدي هذا العمل إلـــــى أبــــــي و

أمـــــــــي وأهلـــــــــي

وأصدقائـــــــي وجميع المسلمين.

جمال شايب بصو

فهرس الأشكال

الشكل 1.1. معامل التوصيل الكهربائي للعوازل ، أشباه الموصلات والموصلات.....16

الشكل 2.1. طاقة الفجوة لمختلف المواد (عوازل, موصلات و أشباه موصلات).....18

شكل 3.1.الانتقالات الإلكترونية المباشرة وغير مباشرة.....21
الشكل 4.1. بنية كبريت الزنك.....22
الشكل 5.1. البنية NaCl.....23
الشكل 6.1.بنية المركب ZnSe.....24

الشكل 7.1.بنية المركب BeSe.....24

الشكل.1.2. الطاقة الكلية بدلالة الحجم للمركب ZnSe في البنيات الثلاث B_1 و B_2 و B_3.....33

الشكل 2.2. الطاقة الكلية بدلالة الحجم للمركب ZnSe في البنيات الثلاث B_1 وB_2 و B_3.....34

الشكل3.2.عصابات الطاقة للمركبين ZnSe و BeSe في البنية B_3.....36

الشكل 4.2. الطاقة الكلية بدلالة الحجم للمركب الثلاثي $Zn_{1-x}Be_xSe$في البنية ZB من أجل x = 0.25.....37

الشكل 5.2. الطاقة الكلية بدلالة الحجم للمركب الثلاثي $Zn_{1-x}Be_xSe$في البنية ZB من أجل x = 0.5.....38

الشكل 6.2.الطاقة الكلية بدلالة الحجم للمركب الثلاثي $Zn_{1-x}Be_xSe$في البنية ZB من أجل x = 0.75.....38

الشكل 7.2. ثابت الشبكية بدلالة التركيز للمركب الثلاثي $Zn_{1-x}\ Be_x\ Se$.....40

الشكل 8.2. عصابة الطاقة للمركب الثلاثي $Zn_{1-x}Be_xSe$ بحيث الوثيقة (A)من أجل تركيز x = 0.25 و الوثيقة (B) من أجل تركيز X = 0.5 والوثيقة (C)من أجل تركيز x =0.75..... 41

الشكل 9.2. طاقة الفجوة للمركب الثلاثي $Zn_{1-x}Be_xSe$ بدلالة التركيز حيث المنحنى A يخص الفجوة الغير مباشرة و المنحنى B يخص طاقة الفجوة المباشرة.....42

فهرس الجداول

الجدول 1.1.أشباه الموصلات الأحادية والمركبة.....19

الجدول 2.1. أهم الخواص الفيزيائية لمركبات المجموعة II-VI من الجدول الدوري.....20

الجدول 1.2.معامل الشبكية و معامل الانضغاطية للمركبين ZnSe و BeSe.....35

الجدول 2.2. طاقة الفجوة للمركبين ZnSe و BeSe في البنية B……36

الجدول 3.2.الطاقة الكلية الصغرى E_0 بدلالة التركيز x للمركب الثلاثي $Zn_{1-x}Be_xSe$.....39

الجدول 4.2. ثابت الشبكية a_0 و ثابت الإنضغاطيةB_0 للمركب الثلاثي $Zn_{1-x}Be_xSe$ في البنية ZB من أجل x = 0.25, 0.5, 0.75…….39

الجدول 5.2. طاقة الفجوة لمركب الثلاثي $Zn_{1-x}Be_xSe$من أجل x = 0.25, 0.5, 0.75.....42

فهرس المحتويات

الملخص

شكر و عرفان

إهداء

فهرس الأشكال

فهرس الجداول

فهرس المحتويات

مقدمة عامة 13

الفصل الأول: مقدمة حول أشباه الموصلات

1.1 مقدمة 16

2.1. أصناف المواد الصلبة (classification of Solidsmaterials) 17

1.2.1.العوازل (Insulators) 17

2.2.1.أشباه الموصلات (Semi-conductors) 17

3.2.1.الموصلات (Conductors) 17

3.1.مركبات المجموعة (II-VI) 19

4.1.الانتقالات الإلكترونية 20

1.4.1. الانتقالات الإلكترونية المباشرة (Direct gap) 20

2.4.1. الانتقالات الإلكترونية غير المباشرة (indirect Gap) 20

5.1.البنية البلورية 21

1.5.1. بنية كبريت الزنك (Zinc bland) 21

2.5.1.البنية NaCl 22

3.5.1. البنية البلورية للمركبين ZnSe, BeSe
(Crystal structure of the ZnSe and BeSe) 23
6.1. الخلائط (Alloys) 25
7.1. فجوة الطاقة (gap Energy) 26
1.7.1. معامل الامتصاص (Absorption coefficient) 26
2.7.1. معامل الخمود (Influence coefficient) 27
المراجع 28

الفصل الثاني: نتائج و مناقشة

1.2. مقدمة 32
2.2. خصائص المركبين الثنائيين 32
1.2.2.دراسة الخصائص البنيوية للمركبين ZnSe وBeSe 32
2.2.2.دراسة الخصائص الالكترونية للمركبين ZnSe وBeSe 35
3.2. خصائص المركب الثلاثي Zn_{1-x} Be_x Se 37
1.3.2. الخصائص البنيوية للمركب الثلاثي Zn_{1-x} Be_x Se 37
2.3.2. الخصائص الالكترونية للمركب الثلاثي Zn_{1-x} Be_x Se 40
المراجع 43
خاتمة عامة 44

مقدمة عامة

علم المواد هو أحد فروع العلوم التطبيقية الذي يهتم بدراسة وتقويم وفهم العلاقة بين التركيب الكيميائي البنائي للمواد وخواصها بهدف تحسين هذه الخواص لجعلها أكثر ملائمة للتطبيقات المختلفة، ويركز علم المواد أيضا على إمكانية التوصل إلى مواد جديدة ذات صفات متميزة تتلاءم والاستخدامات المتعددة للمواد.ويحتوي هذا العلم على عدد كبير من المجالات المهمة بما في ذلك البوليمرات والمواد المركبة وأشباه الموصلات.

ولا يخفى على أحد التقدم الهائل الذي حصل في مجالات الاتصالات والحاسبات والإلكترونيات الدقيقة ومعالجة المعلومات يعود في أساسه إلى النتائج الباهرة التي تم الحصول عليها من خلال أبحاث العلماء في مجال فيزياء أشباه الموصلات وتراكيبها المتنوعة خلال السنوات الأخيرة. وتعد أشباه الموصلات الثنائية من أهم المركبات التي نالت اهتمام الباحثين منذ اكتشافها، وذلك لامتلاك معظمها فجوات طاقية مباشرة تمتد من المنطقة فوق البنفسجية لتصل إلى المنطقة تحت الحمراء. ومن أهم أشباه الموصلات الثنائية (II- VI) من الجدول الدوري. والتي تتكون من معادن المجموعة II ومجموعة الكالكوجينات (Chalcogene) وهي المجموعة VI من الجدول الدوري، ومن بين هذه المركبات: ZnSe، ZnS،CdTe، .....حيث جذبت الكثير من المهتمين بتطبيقات الخلايا الشمسية، الثنائيات الباعثة للضوء، ليزر أشباه الموصلات، وأجهزة الاستشعار البصرية وغيرها من التطبيقات الإلكتروضوئية .

تصنف كالكوجينات البريليوم (Be – VI)ضمن أشباه الموصلات الثنائية مثل BeS،BeSe،BeTe، ....، وتعد جانبا مثيرا للاهتمام بالنسبة للباحثين لأن لها خصائص فيزيائية و كميائية تميزها عن غيرها. هذه المركبات مهمة ومواتية للتطبيقات تكنولوجيا كأجهزة الإنارة والخلايا الكهروضوئية.

يعتبر $Zn_{1-x}Be_xSe$ مركبا شبه موصل ذا أهمية بالغة لتطبيقات الليزر والتطبيقات الإلكتروضوئية ذات الموجة القصيرة، وتشمل هذه التطبيقات التحكم في المحركات وأجهزة استشعار اللهب والبلازما وغيرها.

ومما يدل كذلك على أهمية علم المواد عامة وفيزياء أشباه الموصلات خاصة أن الكثير من الباحثين من علماء الفيزياء يعملون في دراسة خصائص بعض المواد، ويزداد هذا المدى من الموضوعات اتساعا مع مرور الوقت. ويعد ميكانيكا الكم أفضل تصور لدراسة الخصائص الفيزيائية للمواد الصلبة من خلال معادلة شرودينغر وحلولها في حالة عدد محدد من الذرات، أما

الأنظمة المعقدة فيلجأ لمجموعة من التقريبات للحصول على معلومات تكون أكثر دقة، ومن أبرزها نظرية الكثافة التابعية DFT وتقريباتها.

ويكمن الغرض من هذا العمل المساهمة في دراسة الخصائص التركيبية والإلكترونية لمركب $Zn_{1-x}Be_xSe$ بطريقة FP-LMTO ، حيث تحتوي هذه المذكرة على فصلين محتواهما كالآتي:

1. **الفصل الأول**: تقديم و عرض المواد المدروسة.
2. **الفصل الثاني**: عرض النتائج المتحصل عليها ومناقشتها المتمثلة في الخصائص البنيوية والإلكترونية.

وفي الأخير نقدم خلاصة عامة للنتائج المتحصل عليها.

الفصل الأول : تقديم المواد المدروسة

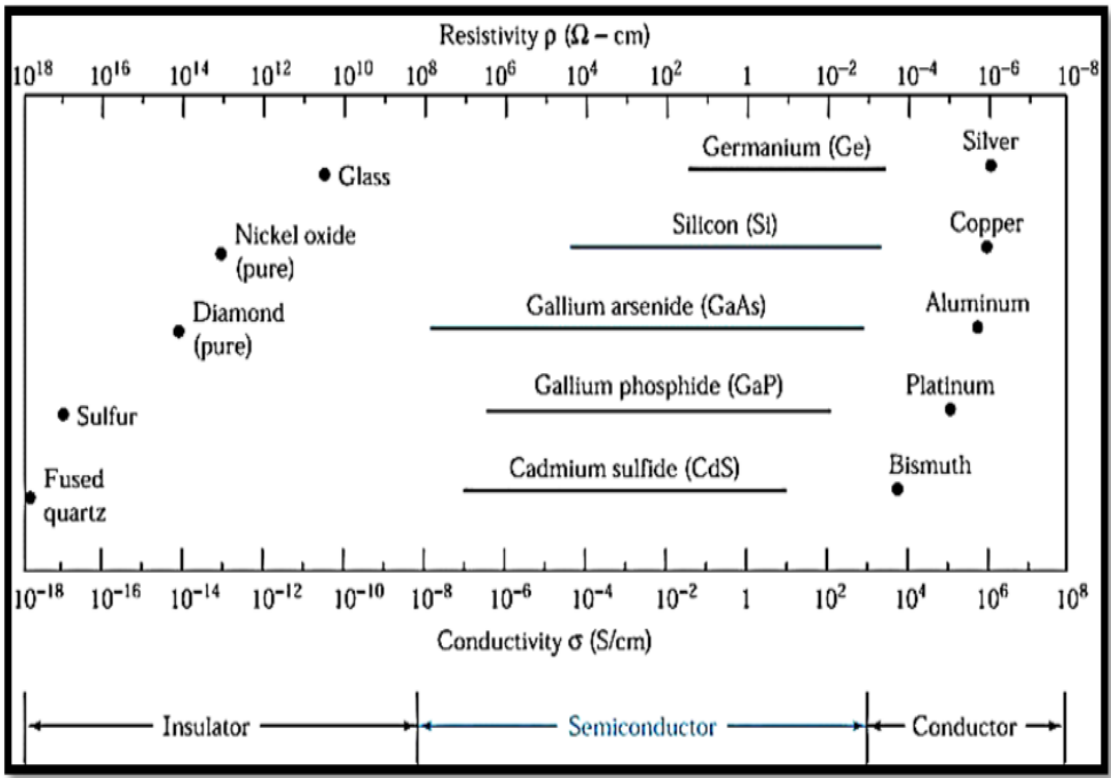
1.1 مقدمة

من خلال الجمع بين أشباه الموصلات الثنائية (المجموعة II-VI)، نحصل على سبائك جديدة تسمح بتنويع الخصائص الفيزيائية مثل فجوة الطاقة وثابت الشبكية وثابت العزل الكهربائي ; من أجل تلبية الحاجة إلى تطبيقات أجهزة الجيل الجديد في مجال البصريات غير خطية والإلكترونيات.

بحيث قمنا في هذا الفصل بتصنيف المواد الصلبة (عوازل، أشباه الموصلات و الموصلات) كما تطرقنا إلى الخصائص البنيوية والإلكترونية لأشباه الموصلات الثنائية (المجموعة II-VI).

2.1. أصناف المواد الصلبة (classification of Solidsmaterials)

تصنف المواد الصلبة تبعا إلى ترتُّب عصابات الطاقة، أو حسب خصائصها الكهربائِّية إلى ثلاثأنواع من المواد و هي العوازل، أشباه الموصلات والموصلات[2] كما في شكل (1.1).



الشكل 1.1. معامل التوصيل الكهربائي للعوازل، أشباه الموصلات والموصلات [1].

1.2.1. العوازل (Insulators)

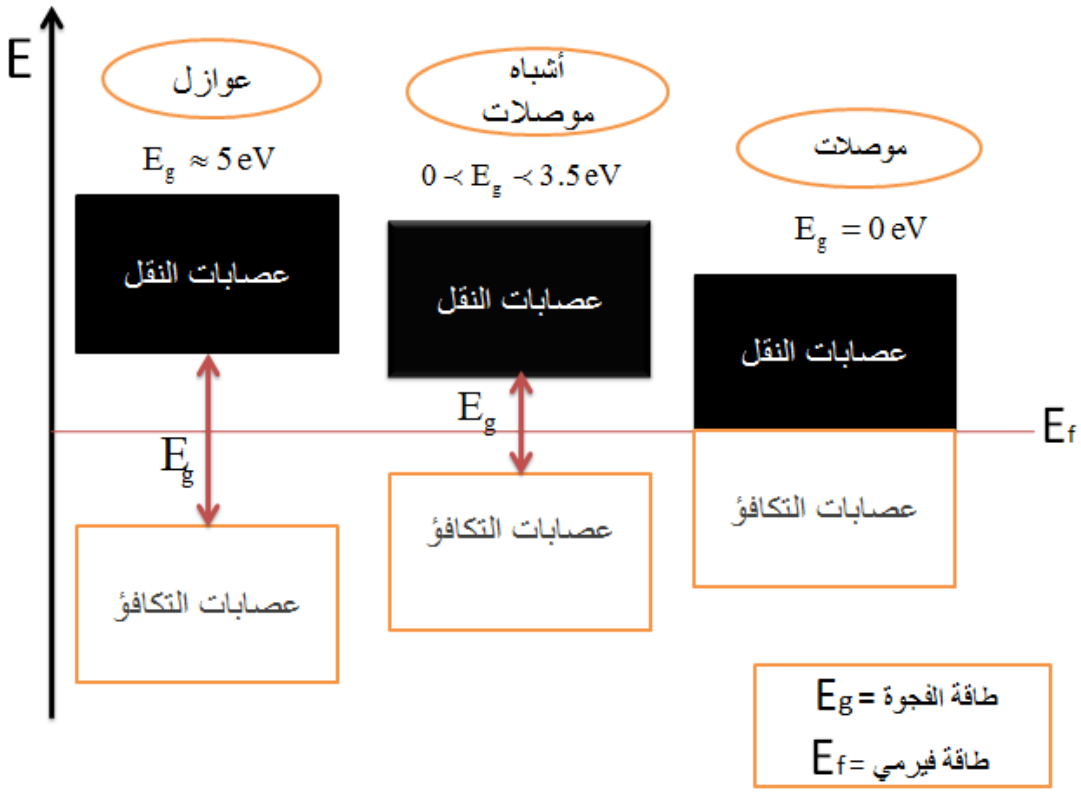
هي المواد التي تكون فيها فجوة الطاقة كبيرة جدا وبحدود (5eV)، و تفصل تماما كل مستويات عصابات التوصيل الفارغة عن عصابات التكافؤ المملوء، إذ يكون عرض عصابات التوصيل وعرض عصابات التكافؤ صغيرا مقارنة بفجوة الطاقة بين الحزمتين [3]. وتشكل إلكترونات التكافؤ أواصر قوية ما بين الذرات المتجاورة، ويصعب كسر هذه الآصرة إلابالطاقات العالٌية، وعلٌيه فإنه ينعدم وجود إلكترونات التوصيل فًي عصابات التوصيل، ولا يوجد غاز إلكترونًي فًي هذه المواد، لهذا لا يمكن للمجال الكهربائًي المسلط ولا للطاقة الحرارية العاديين أنيهيجا الإلكترونات فًي أعلى عصابات التكافؤ إلى عصابات التوصيل، وبذلك لا يمكن للتيار أن يسري بسهولة وبذلك تصبح الناقلية الكهربائية واطئة جدا فًي مدى $[(\Omega.cm)^{-1}$ $(10^{-18} - 10^{-8})]$ [2].

2.2.1. أشباه الموصلات (Semi-conductors)

هي المواد التي تكون خصائصها الكهربائية واقعة بين العوازل والموصلات، وذلك بسبب ترتيبها الخاص بين الإلكترونات في مستويات الطاقة [4]، هذه الخواص المتوسطة تحدد كل من تركيب البلورة و عصابات الطاقة وميزة الآصرة [5].تمتاز أشباه الموصلات بوجود فجوة طاقة صغيرة نسبيا بين قمة عصابات التكافؤ وقعر عصابات التوصيل تتراوح بين ($0 < E_g < 3.5$ eV)، لذلك يمكن لبعض إلكترونات التكافؤ عبور فجوة الطاقة المحظورة إلى عصابات التوصيل ، تاركة ثقوب في عصابات التكافؤ، وبفعل المجال الكهربائي المسلطتكتسب الإلكترونات في عصابات التوصيل وكذلك الثقوب في حزمة التكافؤ طاقة حركٌية تساهم فيالتوصيل الكهربائي وبذلك فإن الناقلية الكهربائية في أشباه الموصلات هيأصغر من الموصلات ولكنها أكبر من العوازل في مدى $(\Omega.cm)^{-1}\left(10^{-8} - 10^{3}\right)$ [6].

3.2.1. الموصلات (Conductors)

تمتلك المعادن ما يسمى الغاز الإلكتروني الحر (Free Electron Gas)، وهو عبارة عن غيمة من الإلكترونات السالبة التي توجد في كل أجزاء المعدن [7]، إذ تكون عصابات التوصيل مملوءة بهذه الإلكترونات، وتتحرك تحت تأثٌير المجال المغناطٌيسي أو الكهربائي الاعتيادي المسلط والمسبب للتداخل الحاصل بين عصابات التكافؤ والتوصيل لذلك فإن جزءا من الإلكترونات في عصابات التكافؤ تسهم في عملٌية التوصيل وتجعل المعدن بأعلى ناقلية كهربائية في مدى $(\Omega.cm)^{-1}(10^{3} - 10^{8})$ [8].



الشكل 2.1. طاقة الفجوة لمختلف المواد (عوازل, موصلات و أشباه موصلات).

و يجدر الإشارة هنا أن المواد النصف ناقلة تنقسم إلى نوعين: بسيطة ومركبة. المواد البسيطة هي عبارة عن عناصر العمود الرابع (IV) من الجدول الدوري وهي موضحة في الجدول (1.1)،أما أنصاف النواقل المركبة فهي ناتجة عن إدماج عناصر من مجموعات مختلفة، مثلا عناصر من العمود II مع عناصر العمود VI لينتج بذلك مركب ثنائي II-VI وهناك مركبات ثنائية أخرى نذكر منها III-V، V-VI وهنالك أيضا مركبات ثلاثية وحتى رباعية [9] والجدول (1.1) يوضح بعضا منها.

الجدول 1.1.أشباه الموصلات الأحادية والمركبة [11].

أشباه الموصلاتنقية **(IV)**	أشباه الموصلاتثنائية				أشباه الموصلاتثلاثية	أشباه الموصلاتر باعية
	IV-IV	**III-V**	**II-VI**	**V-VI**		
C **Si** **Ge** **Sn** **Pb**	**SiC** **GeSi**	**AlP** **GaN** **AlAs** **GaP** **AlSb** **GaAs**	**ZnO** **ZnS** **ZnSe** **ZnTe** **CdO** **CdS**	**PbS** **PbTe**	$Al_xGa_{1-x}As$ $GaAs_yP_{1-y}$ $Cd_xHg_{1-x}Te$	$Al_xGa_{1-x}As_ySb_{1-y}$

3.1. مركبات المجموعة ((II-VI)(Group compounds (II-VI)

تعد أشباه الموصلات الثنائية من أهم المركبات التي نالت اهتمام الباحثين منذ اكتشافها، وذلك لامتلاك معظمها فجوات طاقية مباشرة تمتد من المنطقة الفوق البنفسجية لتصل إلى المنطقة الحمراء [12]. ومن أهم أنصاف النواقل الثنائية مركبات المجموعةII-VI من الجدول الدوري [10]. والتي تتكون من معادن المجموعة II وهي الزنك (Zn)، الكادميوم (Cd)، والزئبق (Hg)، ومجموعة الكالكوجينات (chalcogens) وهي المجموعة من الجدول الدوري وتشمل : الأكسجين(O)، الكبريت(S)، السيلينيوم (Se)، والتيليريد (Te) نذكر من هذه المركبات: CdTe،CdSe ،CdS،CdO، ZnTe،ZnSe، ZnS، ZnO[13].

حيث تتميز هذه المواد بفجوة طاقة عريضة ومباشرة تتراوح ما بين eV (3.7-1.5)[14].

و يجدر الإشارة إلى أن لهذه المركبات تركيبتين بلوريتين أساسيين وهما : إما سداسي (Hexagonal) من نوع (Wurtzite) أو مكعب (Cubic) من نوع مشبك الزنك (Zinc blende)[13،15]. وبفضل امتلاك مواد هذه المجموعة لخواص مهمة أدى لاستخدامها وبشكل كبير في التطبيقات الإلكترونية. كما يوضح الجدول (2.1) أهم الخواص الفيزيائية لهذه المواد.

الجدول 2.1. أهم الخواص الفيزيائية لمركبات المجموعة II-VI من الجدول الدوري [16] .

مركبات المجموعة II-VI	d_{hkl} ($\mathring{A}$)	الفجوة الطاقة (eV)	درجة الانصهار (C°)
ZnS	2.36	3.75	1830
ZnSe	2.45	2.72	1515
ZnTe	2.64	2.27	1295
CdS	2.52	2.42	1750
CdSe	2.62	1.75	1258
CdTe	2.79	1.51	1098

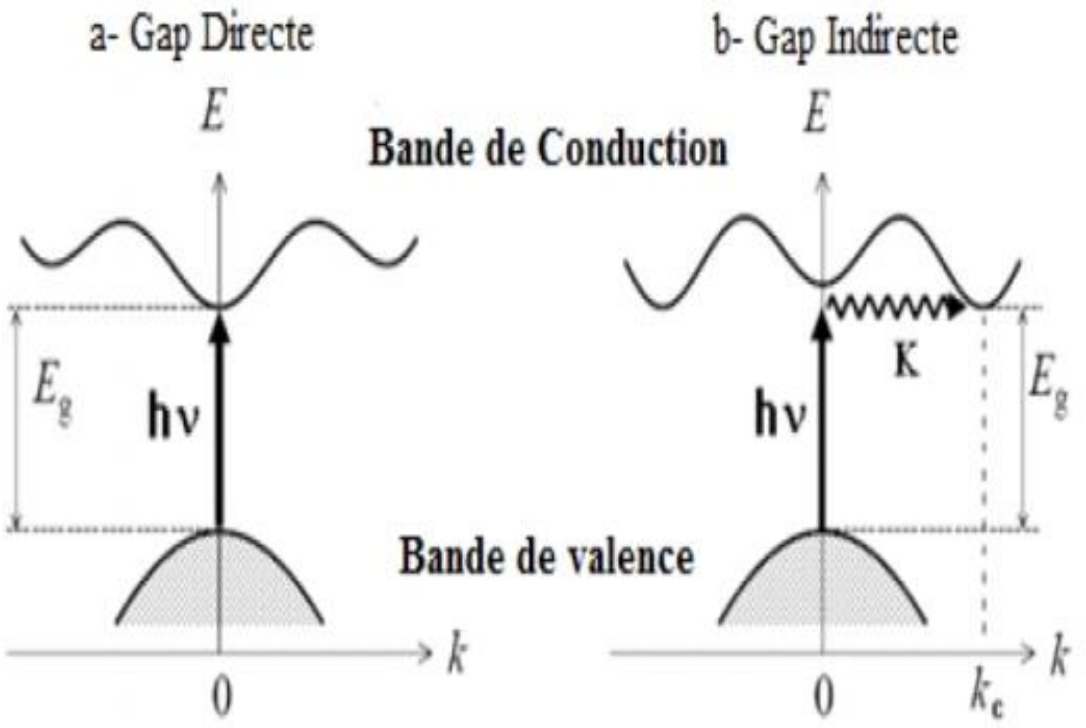
4.1.الانتقالات الإلكترونية

1.4.1. الانتقالات الإلكترونية المباشرة (Direct gap)

عند انتقال الإلكترون من قمة عصابات التكافؤ إلى قعر عصابات التوصيل عند النقطة عالية التناظر نفسها بصورة عمودية، يسمى هذا الانتقال بالانتقال المباشر.

2.4.1. الانتقالات الإلكترونية غير المباشرة (indirect Gap)

عند انتقال الإلكترون بين أعلى نقطة في عصابات التكافؤ وأوطأ نقطة في عصابات التوصيل بصورة غير عمودية ، يسمى هذا الانتقال بالانتقال غير المباشر [21].



شكل 3.1. الانتقالات الإلكترونية المباشرة وغير مباشرة.

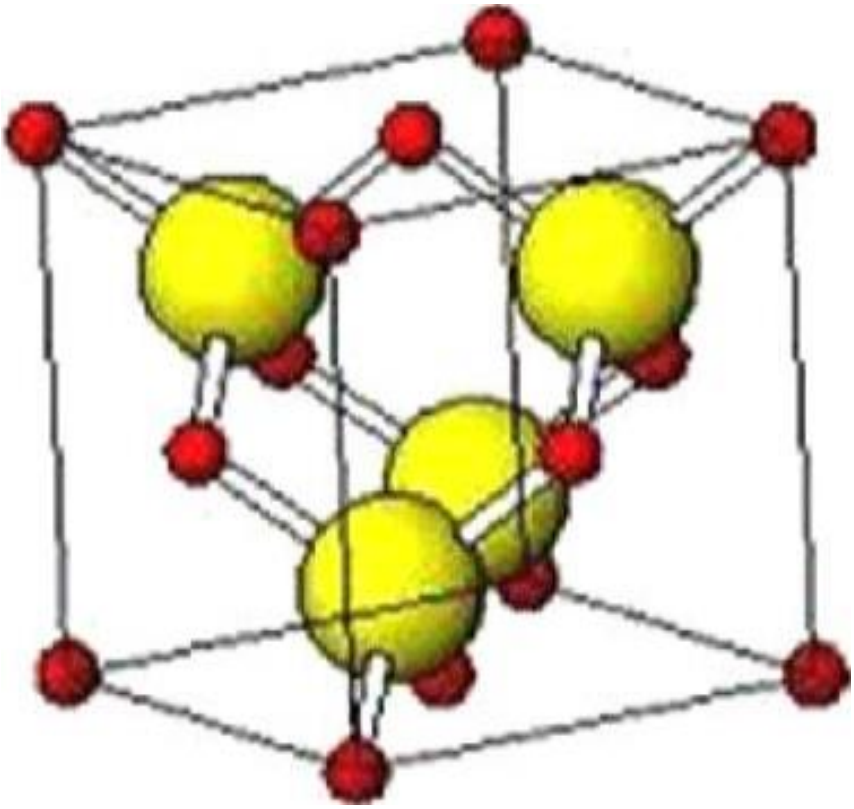
5.1.البنية البلورية

البنية البلورية هي عبارة عن تجمع عدد لا نهائي من الوحدات الذرية المتماثلة تتكرر بشكل دوري ومنتظم (إذا كانت مثالية) في جميع اتجاهات الفضاء. تتميز البنى البلورية باستقرارها غالبا وامتلاكها لكثافة أصغرية وهذا التميز يحقق المعالم التالية :

- تحافظ على الاعتدال الكهربائي في البلورة .
- .تكون جميع الروابط بين الذرات محددة.
- .تبقى شدة التدافع الناجمة عن (أيون – أيون) أصغرية.
- .تجتمع الذرات معا لتحتل حجما أصغريا.

1.5.1. بنية كبريت الزنك (Zinc bland)

إن بنية بلورة كبريت الزنك تشبه تماما بنية بلورة الماس إلا أنها تختلف عنها في أنها تتكون من نوعين من الذرات تشغل الأولى (الزنك Zn) المواقع (0.0.0) والثانية الكبريت (S) المواقع (1/4 .1/4. 1/4) [22].



الشكل 4.1. بنية كبريت الزنك .

2.5.1. البنية NaCl

✓ الوصف:

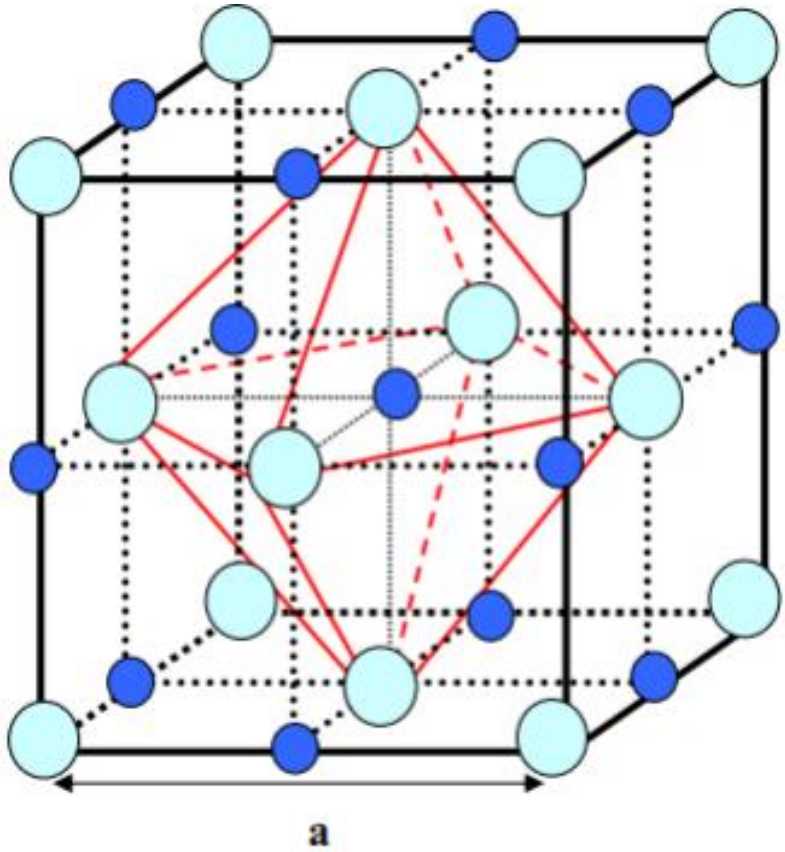
ذرة الكلور تشغل البنية cfc .

ذرة الصوديوم تشغل المواقع الثمانية .

✓ التناسق:

بالنسبة لذرة الصوديوم تمتلك 6 ذرات كلور كأقرب جوار في نصف حرف الخلية .

وبالنسبة لذرة الكلور فتمتلك 6 ذرات صوديوم كأقرب جوار كذلك في نصف الحرف .

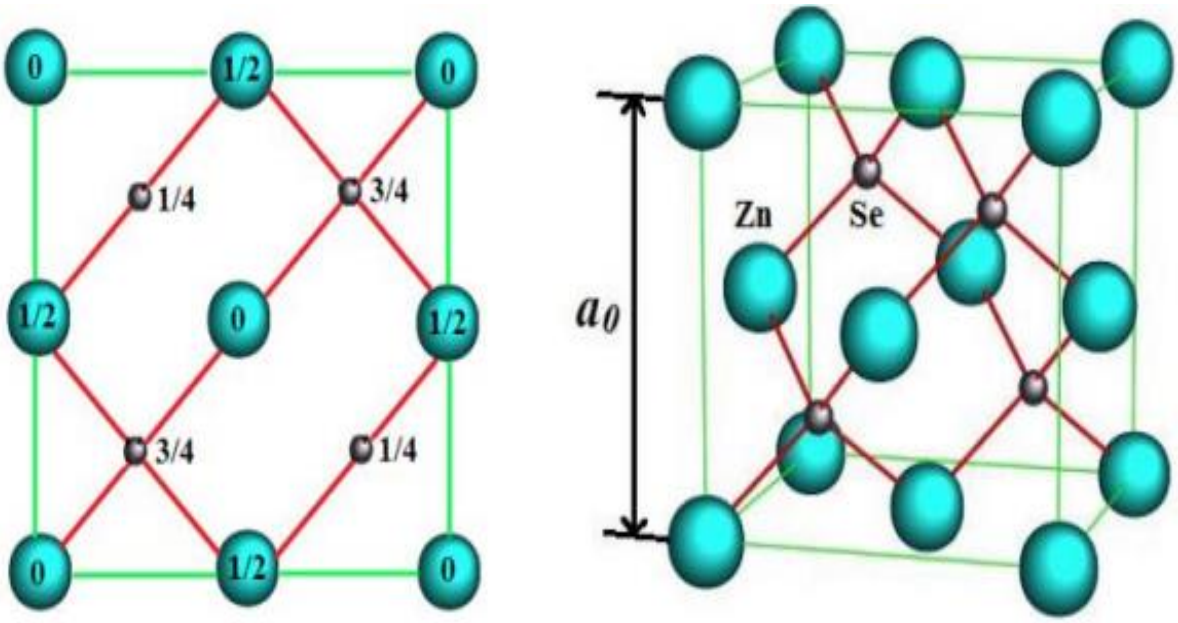


الشكل 5.1. البنية NaCl.

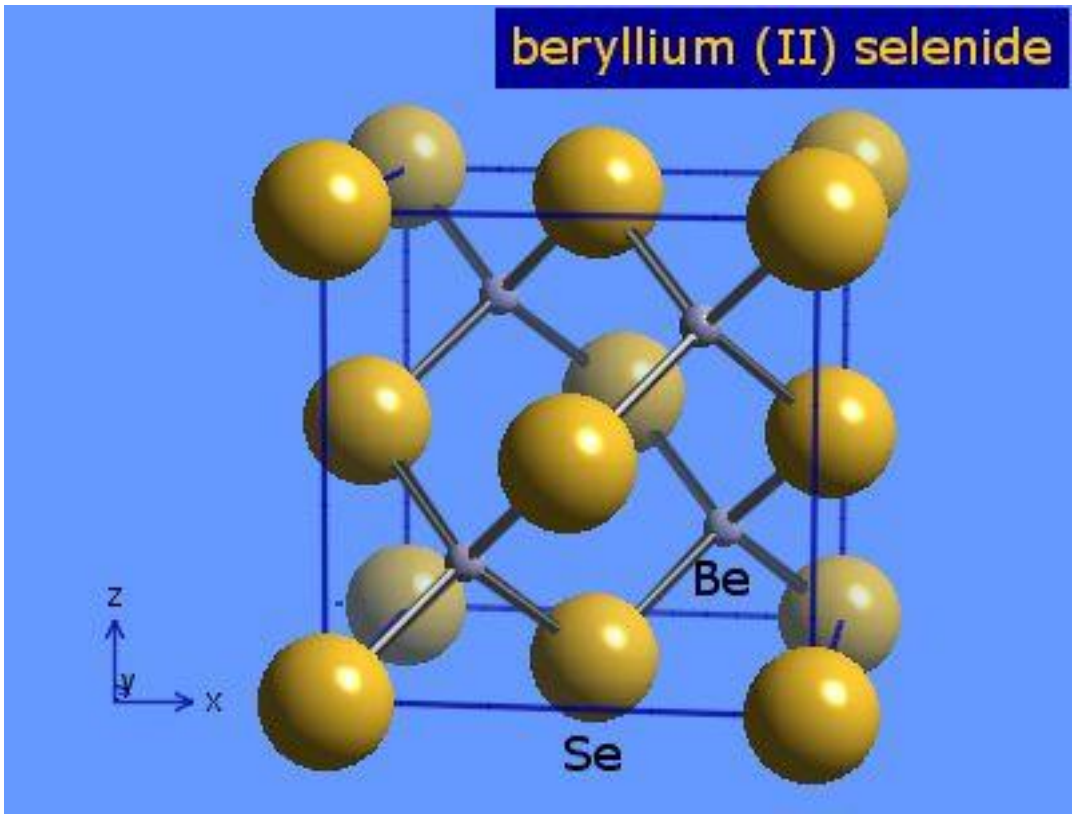
3.5.1.البنية البلورية للمركبين ZnSe, BeSe

(Crystal structure of theZnSe andBeSe)

المركب المدروس في هذا العمل يتشكل من مركبين ثنائيين ZnSe, BeSe كل من المركبين يمتلك خصائص مميزة نذكر منها البنية البلورية. يتبلورالمركبين من أشباه الموصلات الثنائية ZnSe و BeSe في بنية كبريت الزنك ZnS ةمعبيئة رباعية السطوح ونفس تهجين sp^3. بنية كبريت الزنك (ZnS)هي بنية من أصل مكعب ينتمي إلى المجموعة الفضائية (Td) F4 3m. تتطابق وحدة الخلية في هذه البنية تقريبًا مع تلك الموجودة في الماس مع الاختلاف الوحيد في أن كل ذرة من عنصر معين محاطة ،في بيئة رباعية السطوح، بأربع ذرات من العنصر الثاني. لذلك، فإن هذين المركبين عبارة عن بلورات بسيطة تفتقر إلى مركز التناظر، وبالتالي فهي قادرة على إحداث تأثيرات كهرضغطية بالإضافة إلى تأثيرات أخرى تعتمد على التناظر القطبي. و يلاحظ أن بنية كبريت الزنك لديها درجة من الترابط تصل إلى 0.34 (هذه هي درجة الملء). لذلك تعتبر بنية مفتوحة.



الشكل 6.1. بنية المركب ZnSe.



الشكل 7.1. بنية المركب BeSe.

6.1.الخلائط (Alloys)

قديما، الخليط هو مزيج من عنصرين أو أكثر شرط أن يكون احدهما على الأقل معدنا [24]. أما حديثا، يحدد الخليط على أنه مزيج من الذرات أو الأيونات أو الجزيئات لتشكيل مادة تختلف خصائصها عن خصائص المكونات. لقد سمح التطور السريع لتقنيات النمو البلوري والاهتمام العملي بأشباه الموصلات بتحقيق العديد من الخلائط الثنائية والثلاثية والرباعية. و نظرا لإمكانية تعديل العديد من خصائصها الفيزيائية يمكن تطبيقها في المجال الالكتروني البصري.

يتم تصنيف الخلائط في أشباه الموصلات على النحو التالي:

- ✓ خلائط ثنائية : تتكون من عنصرين A و B على الشكل AB.
- ✓ خلائط ثلاثية : يتكون هذا النوع من الخلائط من عنصرين ثنائيين AB و AC.

يمكن أن تكون الخليط المكون إما:

- خليط ثلاثي أنيوني : AB_xC_{1-x}
- خليط ثلاثي كتيوني : $A_xB_{1-x}C$

تتميز هذه الخلائط بالمعامل الستوكيوميتري x. تجعل هذه المعلمة من الممكن تغيير خصائص المادة باستمرار، لا سيما فجوة ومعلمة البلورية التي تميز أبعاد الخلية الأولية للشبكة البلورية.

- ✓ سبيكة الرباعية: من الممكن أيضًا إنتاج مركبات رباعية تتكون من أربعة عناصر ثنائية. يمكن أن تكون هذه السبائك إما:
  - محلول رباعي من الشكل: $A_{1-x}B_xC_yD_{1-y}$
  - محلول ثلاثي ويمكن تقسيمه إلى فئتين:

- محاليل أنيونية بحتة : $AB_xC_yD_{1-x-y}$

- محاليل الكاتيونية البحتة : $A_xB_yC_{1-x-y}D$

تكمن ميزة الخلائط الرباعية على الخلائط الثنائية والثلاثية في إمكانية تعديل معاملها الشبكي وطاقة فجوة النطاق بشكل مستقل تقريبًا عن طريق تغيير المعاملين x و y. لذلك من السهل نظريًا الحصول على طاقة الفجوة المطلوبة مع الحفاظ على إتفاق الشبكة مع الركيزة.

7.1. فجوة الطاقة (gapEnergy)

تعرف فجوة الطاقة بأنها الطاقة اللازمة لإثارة (نقل) الإلكترونات من قمة عصابات التكافؤ إلى قعر عصابات التوصيل, أو هي فسحة الطاقة الموجودة بين العصابات التكافؤ والتوصيل, وقد سميت بالمحظورة أو الممنوعة لأنها مكان خالي تقريبا من المستويات ولا تستقر فيها الإلكترونات في أشباه الموصلات النقية وإنما تتواجد فيها لفترة زمنية قصيرة جدا في أشباه الموصلات المشوبة وهذه الفجوة تحدد نوع المادة الصلبة [17].حيث تعد واحدة من أهم الثوابت البصرية التي يعتمد عليها في فيزياء أشباه الموصلات لتصنيع العديد منالأجهزة الإلكترونية مثل الخلايا الشمسية و الكواشف والثنائيات الضوئية وغيرها. ويتم اختيار مواد شبه موصلة حيث تكون طاقة فجوتها الممنوعة تقارن بطاقة الفوتونات ضمن الجزء المرئي وUV و IR من الطيف الكهرومغناطيسي, وذلك للتعرف على مقدار ما ينفذ أو يمتص أو ينعكس من الفوتونات المؤثرة على الغشاء[18]. تم حساب فجوة الطاقة الممنوعة للانتقال المباشر المسموح من العلاقات الاتية [19].

$$\alpha h\nu = A(h\nu - E_g)^r \qquad (1.1)$$

حيث إن α : معامل الامتصاص-v تردد الشعاع الساقط -h ثابت بلانك -A ثابت - E_g فجوة الطاقة وبتبسيط المعادلة للانتقال المباشر نحصل على

$$(\alpha h\nu)^2 = A^2(h\nu - E_g) \qquad (2.1)$$

r : معامل أسي يعتمد على نوع الانتقال . إذا كان r =1/2 انتقال مباشر مسموح. أو r =3/2 إنتقال مباشر ممنوع أماإذا كان r =2 انتقال غير مباشر مسموح أو r =3 انتقال غير مباشر ممنوع حيث إن قيمة r هنا هي 1/2.

1.7.1. معامل الامتصاص (Absorption coefficient)

يعرف معامل الامتصاص (a) بأنه نسبة النقصان في فيض طاقة الإشعاع بالنسبة لوحدة المسافة باتجاه انتشار الموجة داخل الوسط، ويعتمد على طاقة الفوتونات الساقطة، الطول ألموجي، طبيعة سطح الغشاء و فجوة الطاقة لشبه الموصل ونوع الانتقالات الإلكترونية التي تحدث بين حزم الطاقة [23] تم استخدام المعادلة الأتية لحساب معامل امتصاص للغشاء المستخدم في البحث [20].

$$\alpha = 2.303A / t\ \alpha \qquad (3.1)$$

الامتصاصية : $A(Cm^{-1})$: معامل الامتصاص مادة الغشاء $\alpha(1100A°)$: سمك الغشاء الرقيق.

2.7.1. معامل الخمود (Influence coefficient)

يعرف معامل الخمود الحاصل للموجة الكهرومغناطيسية داخل المادة بأنه كمية ما تمتصه إلكترونات المادة من طاقة الفوتونات الساقطة. تم حساب معامل الخمود و قيم الامتصاص المحسوبة من طيف الامتصاصية للغشاء المستخدم و حسب المعادلة الآتية [19].

$$K = \alpha \lambda / 4\pi \qquad (4.1)$$

حيث أن K: معامل الخمود .

λ: الطول ألموجي لإشعاع الساقط(nm).

المراجع

[1] اس. ام. زي " نبائط أشباه الموصلات فيزياء و تقنية "، ترجمة د. فهد غالب و د. حسين علي أحمد ، جامعة الموصل ، (1990) .

[2] A. S. Grove , "Physics and Technology of Semiconductors Devices", University of California, Berkeley, (1967) .

[3] S. M. Sze, "Semiconductor Devices Physics and Technology", (1990) . Printce- Hall of India Private Limited (1985).

[4] J. C. Philips, " Bonds and Bands in Semiconductors " , Academic Press, New York & London, (1973) .

[5] B. G. Streetman, "Solid State Electronic Devices", University of Texas At Austin, Dep. Of Electrical & Computer Engineering, Printce.Hall of India, New Delhi, (1997).

[6] V. A. Bruk,V.V. Garshcnin& A. I. K. Wroov,"Semiconductor Technology", Translated from Russia by A. Ulaynove, Mir Pullishers, Moscow, (1969).

[7] J. S. Blakmore , "Solid State Physics" , 2nd ed, W. B. Saunders Company, U.S.A, (1974).

[8] B. Sapoval and C. Hermann, "Physics of Semiconductors", Springer. Verlag, New York ,Inc (1995)

[9] H. T. GRAHN, "Introduction to semiconductor physics", World scietific publishing, London, P.1-10, (2001).

[10] I. BERGER, "Semiconductor Materials", CRC Press, New York, P. 15-35 (1997).

[11] A. TRIBBLE, "Electrical engineering material and devices", University of Lowa, Lowa, (2002).

[12]ف. ح. خليل، و. أ. طه وس. ج. قاسم، تحضير ودراسة الخواص التركيبية للأغشية الرقيقة CdS و CdTe، مجلة البصرة للعلوم، المجلد 26 ،العدد 1،ص. 28-37(2012).

[13] S. ADACHI, "Properties of Group-IV, III–V and II–VI Semiconductors", John Wiley & Sons Ltd, Chichester- England, P. 6-20 (2005).

[14] H. M. KHALLAF, "Chemical bath deposition of group ii-vi semiconductor thin films for solar cells applications", Doctoral thesis, University of Central Florida, USA, P. 14-57 (2009).

[15] S. IGMATOWICZ and A. KOBENDZA, "Semiconducting thin films A II B VI compounds", John Wiley & Sons, New Work, (1981).

[16] N. KH. ABRIKOSOV, V. F. BANKINA, L. V. PORETSHAYA, L. E. SHELIMOVA and E. V. SHUDNOVA, "Semiconducting II-IV, IV-VI and V-VI compounds", plenum press, New York, (1969).

[17] T. Nasrallah.Ben, M. Amlouk, J. C. Bemede, S. Belgacem (2004), "Physica status Solidi", Vol.201, Iss14, pp. (3070-3076).

[18] نيران فاضل عبد الجبار, (2002) " دراسةالخوام البصرية والتركيبية لأغشية أوكسيد الكادميوم النقية والمشوبة قبل وبعد التلدين ", رسالة ماجستير,.كلية التربية جامعة تكريت.م65.

[19] J . S. Blakmore, (1986),“ Solid State Physics”, Gambridge Press .2nd .ed. (45)p.

[20] R. S Longhrst,(1967). "Geometrical And Physical Optics" Longman Group LTD,Londoun- 2nd ed, (112)p .

[21] Fahrenbruch A. L. and Bube R. H. Led "Fundamentals of SolarCells", Academic, New York, (1993).

[22] علم البلورات الأشعة السينية، أ.د نعيمة عبد القادر أحمد وأ.د محمد أمني سليمان، دار الفكر العريب .الطبعة الأولى2005 .

[23] j. Lonkhande, C. D. Yermune,V.S.Pawar (1988), "Materials Chemistry and Physics", Vol.(20), N.(3), pp.(283-292).

[24]علم المواد, مجلة العلوم و التقنية, العدد 47, 1419 ه, 1998.

الفصل الثاني: نتائج و مناقشة

1.2. مقدمة

في هذا الفصل تم تحديد الخصائص البنيوية و الالكترونية للمركب الثلاثي $Zn_{1-x}Be_xSe$ انطلاقا من دراسة الخصائص البنيوية و الالكترونية للمركبين الثنائيين ZnSe و BeSe المركبان له. و لدراسة هذه الخصائص استخدمنا طريقة FP-LMTO و المدرج في برنامج MindLap, و تم إجراء هذه الحسابات في إطار نظرية دالة الكثافة الإلكترونية, حيث انه لحساب كمون تبادل - إرتباط استخدمنا التقريب LDA.

2.2.خصائص المركبين الثنائيين

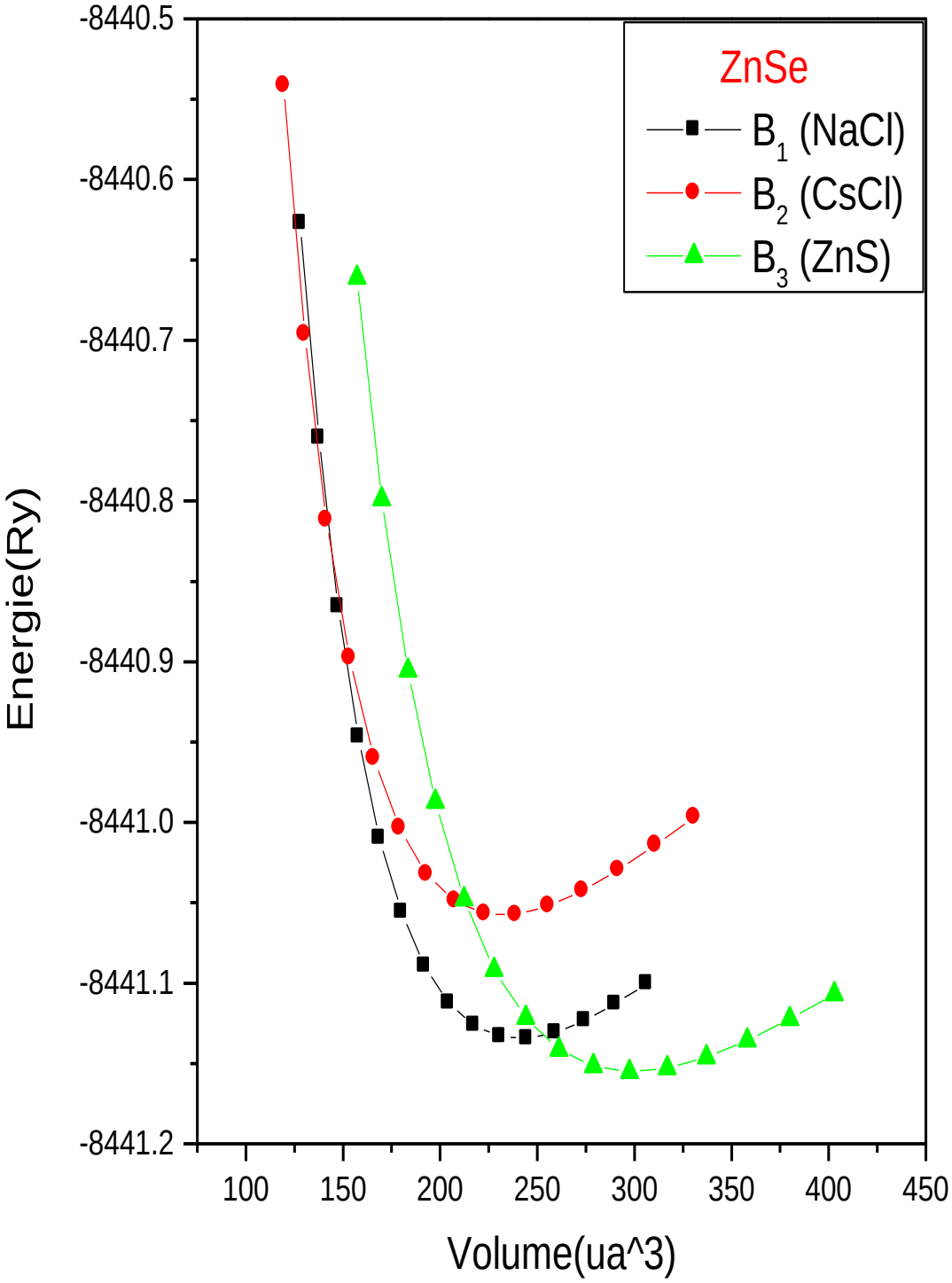
1.2.2. دراسة الخصائص البنيوية للمركبين ZnSe وBeSe

لغرض معرفة البنية البلورية للمركب الثلاثي $Zn_{1-x}Be_xSe$ سننطلق من معرفة البنية البلورية للمركبين الثنائيين ZnSe وBeSe اللذان يركبانه و ذلك بتجريب حساب الطاقة الكلية بدلالة الحجم في ثلاث بنيات هي CsCl (B1)، NaCl (B2), ZnS(B3). ثم رسم المنحنى (الشكل 1.2 و 2.2) الذي تم الحصول عليه بواسطة معادلة مورناغان (l'équation de Murnaghan)[1].

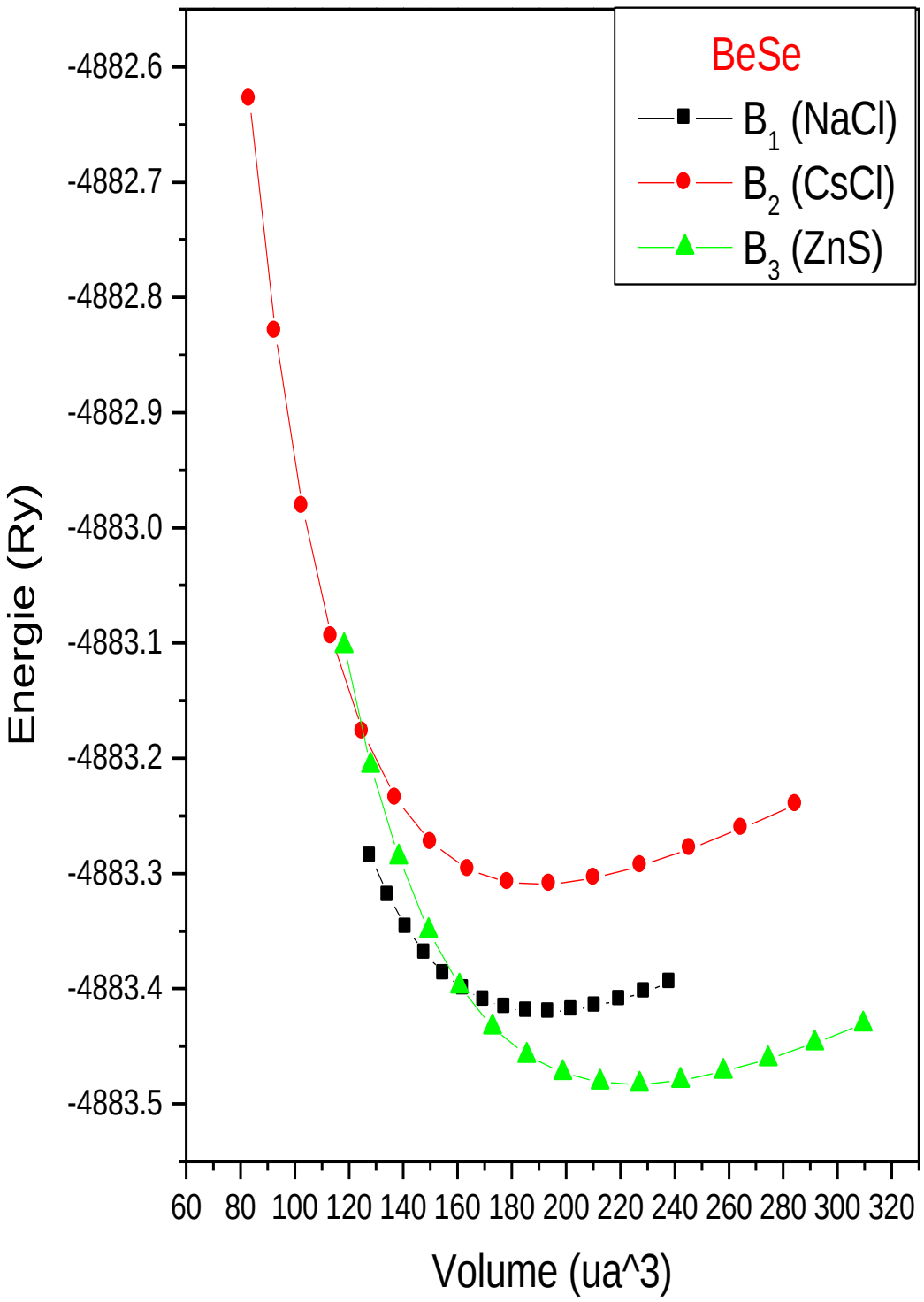
$$E(V) = E_0 + \frac{B}{B'(B'-1)}\left[V\left(\frac{V_0}{V}\right)^{B'} - V_0\right] + \frac{B}{B'}(V - V_0) \qquad (2.01)$$

حيث E_0 و V_0 و B وهي على التوالي : الطاقة الإجمالية والحجم عند التوازن ومعامل الانضغاط ومشتقته. يُعطى معامل الانضغاط من خلال :

$$B = V\frac{\partial^2 E}{\partial V^2} \qquad (2.02)$$



الشكل 1.2. الطاقة الكلية بدلالة الحجم للمركب ZnSe في البنيات الثلاث B_1 و B_2 و B_3.



الشكل 2.2. الطاقة الكلية بدلالة الحجم للمركب ZnSe في البنيات الثلاث B_1 وB_2 و B_3.

انطلاقا من الشكلين (1.2 و 2.2), نستطيع ان نقول ان البنية البلورية للمركبين ZnSe و BeSe هي بنية ZnS, و ذلك من خلال النظر للطاقة الكلية بدلالة الحجم للمركبين و التي تكون اقل قيمة لها في البنية B_3 وهي بنية ZnS. و يمثل الجدول (1.2) كُلاً من معامل الشبكية و معامل الإنضغاطية في المركبين المدروسين و بعض النتائج التجريبية و النظرية للمقارنة.

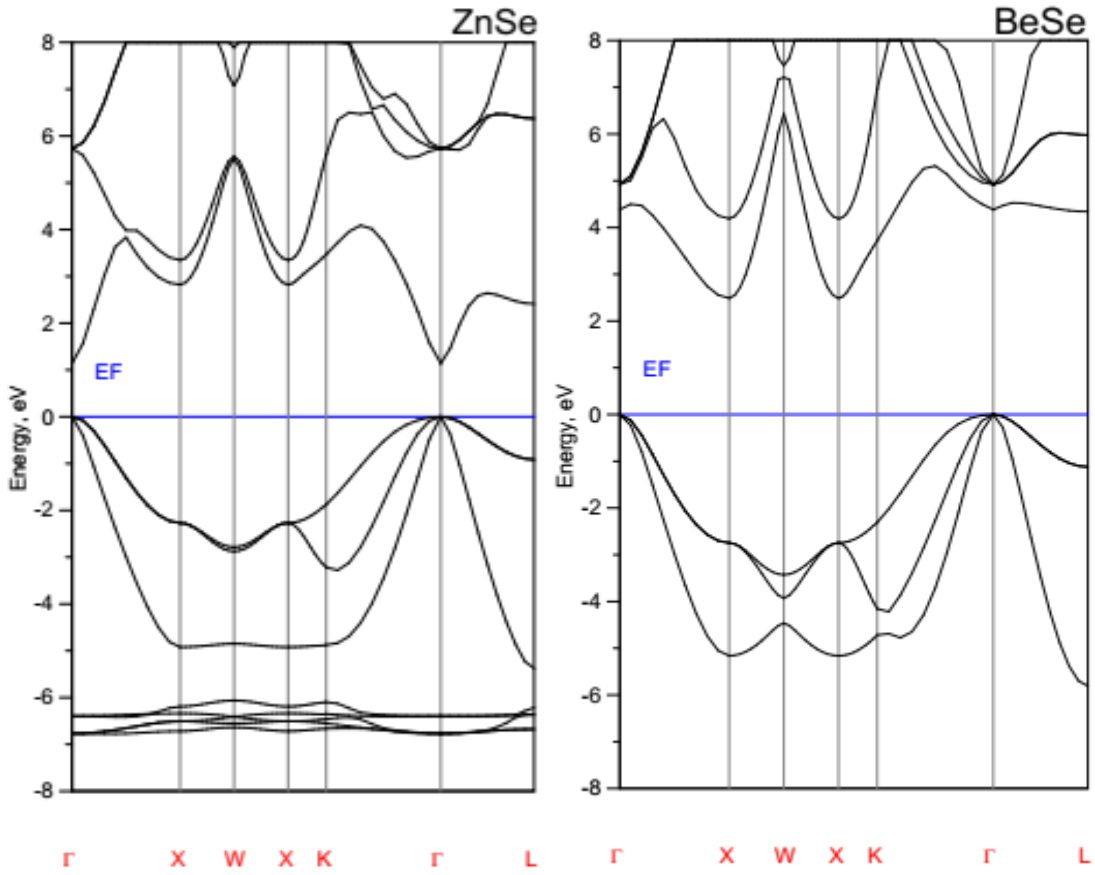
الجدول 1.2.معامل الشبكية و معامل الإنضغاطية للمركبين ZnSe و BeSe.

مركب	ثابت الشبكية a_0(Å)			ثابت الانضغاطة B_0 (GPa)		
	المحسوبة	التجريبية	حسابات سابقة	المحسوبة	التجريبية	حسابات سابقة
ZnSe	5.618	[2]5.668	[2]5.635 [3]5.666	68.6267	[4]64.7	[3]67.32 [4]63.9
BeSe	5.1036	[5]5.137	[6]5.14 [7]5.037 [8]5.178	83.513	[5]92	[7]80 [8]75 [6]79.53

حيث نرى أن النتائج المحصل عليها متقاربة جدا مع النتائج التجريبية و كذا النتائج النظرية المتحصل عليها في حسابات سابقة.

2.2.2. دراسة الخصائص الالكترونية للمركبين ZnSe وBeSe

في هذا الجزء سنحدد الطبيعة الإلكترونية للمركبين الثنائيين من خلال عصابات الطاقة المبينة في الشكل (3.2) و ذلك بدراسة مساهمة كل من المدارات الالكترونية لذرات المركبين في المجال الطاقي المحصور بين eV 8.0- وeV 8.0.



الشكل3.2.عصابات الطاقة للمركبين ZnSe و BeSe في البنية B_3.

يبين الشكل (3.2) عصابات الطاقة للمركبين ZnSe و BeSe في البنية B_3 ل spin up. و تظهر الوثيقتين أن كلا المركبين من فئة أشباه الموصلات. في حين أن الجدول (2.2) يمثل قيم فجوة الطاقة للمركبين و نوعها.

الجدول 2.2. طاقة الفجوة للمركبين ZnSe و BeSe في البنية B_3.

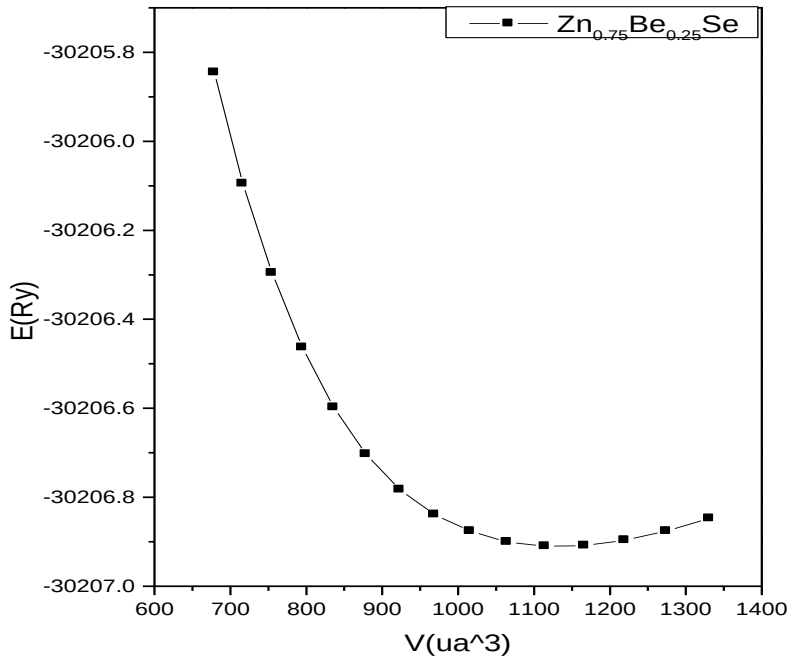
E_g (eV)			
	المحسوبة	التجريبية	حسابات أخرى
ZnSe ($\Gamma-\Gamma$)	1.140	[9]2.68	[12] 1.848[11],1.863 [13]2.50
BeSe ($X-\Gamma$)	2.490	[14]4.5	[15]3.61[10],3.64 [6]2.43

من خلال حساباتنا وجدنا أن المركب ZnSe لديه فجوة طاقة مباشرة في النقطة عالية التناظر Γو تقدر ب 1.140 eV و التي تمثل 0.4253 من القيمة التجريبية و 0.61 من اقل قيمة نظرية و هذا الفارق الكبير يرجع إلى التقريبات المستعملة في هذا العمل. في حين أن فجوة الطاقة غير المباشرة للمركب BeSe تقدر ب 2.490 eV و تمثل 0.55 من القيمة التجريبية و تتناسب مع بعض القيم النظرية و ذلك يعود للأسباب نفسها.

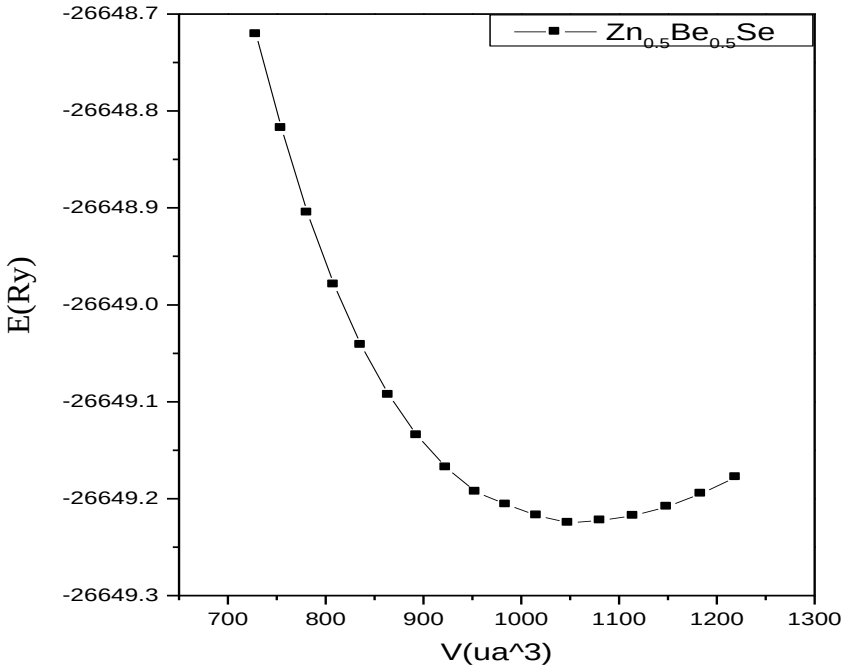
3.2. خصائص المركب الثلاثي $Zn_{1-x}Be_xSe$

1.3.2. الخصائص البنيوية للمركب الثلاثي $Zn_{1-x}\ Be_x\ Se$

عرفنا في الجزء السابق أن بنية المركبين ZnSe و BeSe هي بنية ZnS المشهورة. مما يدل على أن المركب الثلاثي مستقرا أيضا في البنية نفسها. في هذا الجزء سنغير تركيز العنصر Be في المركب الثلاثي من 0.25 إلى 0.5 وصولا إلى 0.75 و نرى كيف يؤثر ذلك على الطاقة الكلية الصغرى E_0 و ثابت الشبكية a_0 و ثابت الانضغاطية B_0. حيث تمثل الأشكال (4.2, 5.2 و 6.2) الطاقة الكلية بدلالة الحجم للمركب الثلاثي $Zn_{1-x}Be_xSe$ في البنية ZnS من أجل$x = 0.25$ و $x = 0.5$ و $x = 0.75$ على الترتيب.

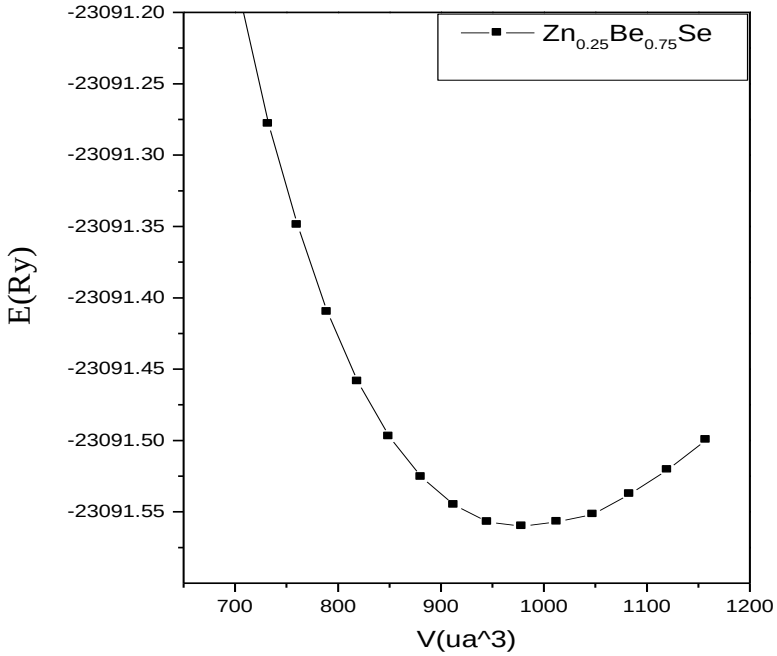


الشكل 4.2. الطاقة الكلية بدلالة الحجم للمركب الثلاثي $Zn_{1-x}Be_xSe$ في البنية ZB من أجل $x = 0.25$



الشكل 5.2.الطاقة الكلية بدلالة الحجم للمركب الثلاثي $Zn_{1-x}Be_xSe$ فيالبنية ZBمن أجل

$x = 0.5$



الشكل 6.2.الطاقة الكلية بدلالة الحجم للمركب الثلاثي $Zn_{1-x}Be_xSe$ في البنية ZBمن أجل

$.x = 0.75$

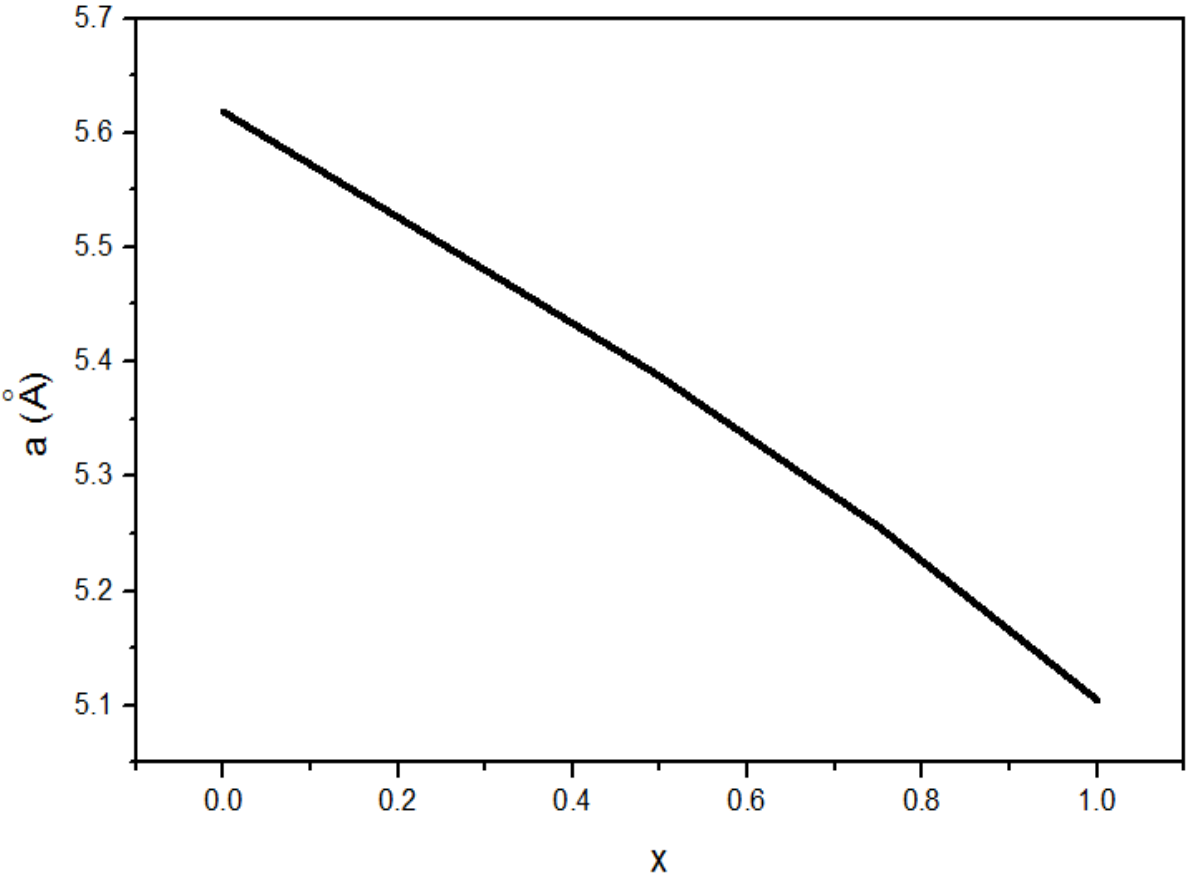
الجدول 3.2.الطاقة الكلية الصغرى E_0 بدلالة التركيز x للمركب الثلاثي $Zn_{1-x}Be_xSe$.

المركب	التركيز x	الطاقة الكلية الصغرى E_0 (Ry)
$Zn_{1-x}Be_xSe$	0.25	-30206.91256
	0.5	-26649.22454
	0.75	-23091.56079

و من الجدول (3.2) الذي يمثل التغير في الطاقة الكلية الصغرى بدلالة التغير في التركيز x نرى أنه كلما زاد تركيز العنصر Be في المركب أصبح المركب أقل استقراراً و ذلك بارتفاع طاقته الكلية الصغرى. في حين أن الجدول (4.2) يبن لنا تناسبا عكسيا بين ثابت الشبكية a_0 و تركيز العنصر Be في المركب. و يظهر أيضا تناسبا طرديا بين التركيز x و ثابت الانضغاطية B_0. كما كانت نتائج ثابت الشبكية المحصل عليها متقاربة مع النتائج النظرية الأخرى على عكس ما نراه في نتائج ثابت الانضغاطية التي نرى فيها تباينا بين النتائج المحصل عليها و النتائج النظرية الأخرى.

الجدول 4.2. ثابت الشبكية a_0 و ثابت الانضغاطيةB_0 للمركب الثلاثي $Zn_{1-x}Be_xSe$ في البنية ZB من أجل x = 0.25, 0.5, 0.75.

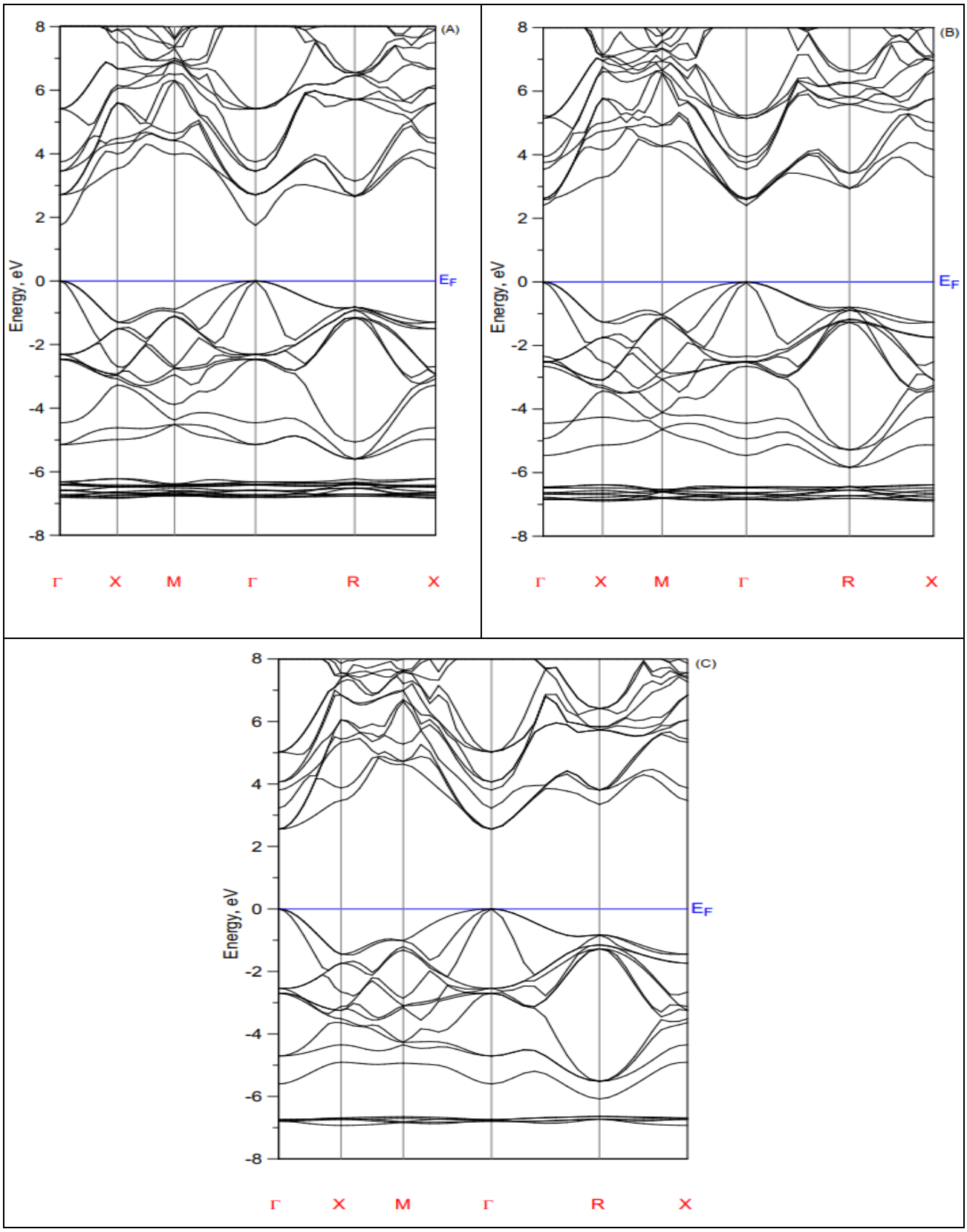
المركب	التركيز	ثابت الشبكية a_0 (Å)			ثابت الانضغاطةB_0 (GPa)		
	X	المحسوبة	التجريبية	حسابات أخرى	المحسوبة	التجريبية	حسابات أخرى
$Zn_{1-x}Be_xSe$	0.25	5.503		5.632[10] 5.642[10]	73.688		60.810[10] 61.71[10]
	0.5	5.387		5.505[10] 5.514[10]	76.069		65.407[10] 65.94[10]
	0.75	5.256		5.359[10] 5.367[10]	79.642		70.136[10] 70.49[10]



الشكل 7.2. تغير ثابت الشبكية بدلالة التركيز للمركب الثلاثي $Zn_{1-x}\ Be_x\ Se$.

2.3.2. الخصائص الالكترونية للمركب الثلاثي $Zn_{1-x}\ Be_x\ Se$

في هذا الجزء سندرس الخصائص الالكترونية للمركب الثلاثي $Zn_{1-x}\ Be_x\ Se$ عن طريق عصابات الطاقة الموضحة في الشكل (7.2) و نرى كيف يوثر تركيز العنصر Be في المركب على طاقة الفجوة المباشرة على نقطة عالية التناظر Γ. من خلال الجدول (5.2) نلاحظ أن الحسابات المتحصل عليها تتوافق و الحسابات النظرية الأخرى. كما نلاحظ أيضا انه كلما زاد تركيز العنصر Be في المركب أصبحت طاقة الفجوة أكبر.

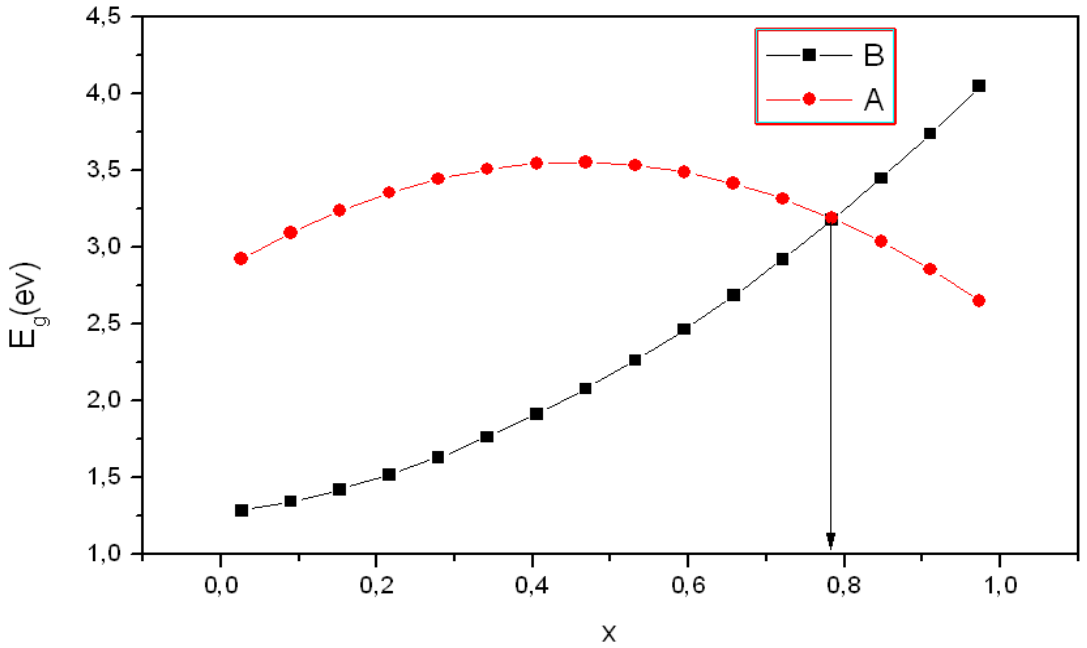


الشكل 8.2. عصابة الطاقة للمركب الثلاثي $Zn_{1-x}Be_xSe$ بحيث الوثيقة (A) من أجل تركيز x= 0.25 والوثيقة (B) من أجل تركيز x = 0.5 والوثيقة (C)من أجل تركيز x =0.75.

الجدول 5.2. طاقة الفجوة لمركب الثلاثي $Zn_{1-x}Be_xSe$ من أجل x = 0.25, 0.5, 0.75.

المركب	التركيز	طاقة الفجوة E_g(eV)		
		المحسوبة	تجريبية	حسابات أخرى
$Zn_{1-x}Be_xSe$	0.25	1.745		[10]1.67 [10]1.804 [10]2.24
	0.5	2.402		[10]2.248 [10]2.408 [10]3.09
	0.75	2.553		[10]2.673 [10]2.544 [10]3.68

يمثل الشكل (**9.2**) تغير طاقة الفجوة بدلالة التركيز (x) ، ويظهرلنا بوضوح أن المركب الثلاثي $Zn_{1-x}Be_xSe$ به طاقة فجوة مباشرة من اجل تركيز يتراوح من 0 إلى 0.78. بعد هذا التركيز (0.78) تصبح طاقة الفجوة غيرمباشرة.



الشكل 9.2. طاقة الفجوة للمركب الثلاثي $Zn_{1-x}Be_xSe$ بدلالة التركيز حيث المنحنى A يخص الفجوة غير المباشرة و المنحنىB يخص طاقة الفجوة المباشرة

المراجع

[1] F.D.Murnaghan, Proc. Natl. Acad. Sci. USA30, 5390 (1944).

[2] H. Okuyama, Y. Kishita, and A. Ishibashi, Phys. Rev. B 57, (1998) 2257.

[3] R. Gangadharan, V. Jayalakshmi, J. Kalaiselvi, S. Mohan, R. Murugan, B. Palanivel, J. Alloy. Compd. 5 (2003) 22.

[4] B.H. Lee, J. Appl. Phys. 41 (1970) 2988.

[5] H. Luo, K. Ghandehair, R. G. Geene, A. L. Ruoff, S. S. Trail, and F. J. DiSalvo, Phys. Rev. B 52, (1995) 7058.

[6] S.M. Alay-e-Abbas, Kin Mun Wong, N.A. Noor, A. Shaukat, Yong Lei. Solid State Sciences 14 (2012) 1525-1535.

[7] M. González-Diáz, P. Rodríguez-Hermández, and A. Muňoz, Phys.(1997) Rev. B 55, 14043.

[8] C.M.I. Okoye, Eur. Phys. J. B 39 (2004) 5.

[9] O. Madelung (ed.), Londolt-Börnstein New Series III, Springer, Berlin, (1987), Vol. 22.

[10] H. Baaziz, Z. Charifi, F. El Haj Hassan, S. J. Hashemifar, and H. Akbarzadeh, phys. (2006) stat. sol. (b) 243, 1296.

[11] El Haj Hassan F, Amrani B and Bahsoun F (2007) Physica B 391-365.

[12] K. Hacini, H. Meradji, S. Ghemid and F. El Haj Hassan (2012) Chin. Phys. B Vol. 21, No. 3. 036102.

[13] A. M. Saitta, S. de Gironcoli, and S. Baroni, Appl. Phys. Lett. 75, 2746 (1999).

[14] W. M. Yim, J. P. Dismukes, E. J. Stofko, and R. J. Poff, J. Phys. (1972) Chem. Solids 33, 501.

[15] F.E. Haj Hassan, H. Akbarzadeh. Computational Materials Science 35 (2006) 423–431.

خاتمة عامة

في هذا العمل ، و باستخدام طريقة FP-LMTO، قمنا بدراسة الخصائص البنيوية والإلكترونية للمركب $Zn_{1-x}Be_xSe$.

عملنا هذا مقسم إلى جزأين. يتعلق الجزء الأول بدراسة تفصيلية للخصائص البنيوية والإلكترونية للمركبين الثنائية BeSe و ZnSe. في حين ان الجزء الثاني من هذا العمل متعلق بدراسة نفس الخصائص للمركب الثلاثي $Zn_{1-x}Be_xSe$.

الجزء الأول من هذا العمل هو دراسة هذه الخصائص للمركبات الثنائية BeSe و ZnSe. حيث تتفق نتائج الخصائص البنيوية التي تم الحصول عليها بشكل جيد مع البيانات النظرية والتجريبية المتوفرة. في حين أن نتائج الخصائص الإلكترونية تختلف عن النتائج التجريبية المتوفرة.

الجزء الثاني مخصص لدراسة المركب الثلاثي $Zn_{1-x}Be_xSe$. ركزت دراستنا على اختلاف المعاملات البنيوية، أي معامل الشبكة a_0 ومعامل الانضغاطية B_0 بالإضافة إلى فجوة الطاقة E_g مع التركيز x.

تتغير ثابت الشبكية a_0بشكل عكسي بدلالة التركيز حيث كلما زاد التركيز أصبح معامل الشبكية اصغر على عكس ما يحدث مع معامل الانضغاطية B_0 و طاقة الفجوة E_g اللذان كلما كبر التركيز كلما أصبحا اكبر. حيث تتوافق النتائج المحصل عليها تقريبيا مع النتائج النظرية المتوفرة.