تتشرف كلية الدراسات العليا و كلية العلوم بدعوتكم لحضور

مناقشة أطروحة الدكتوراه

العنوان

تعزيز الخصائص الكهربائية والخصائص الإلكترونية البصرية والخصائص الميكانيكيةوالخصائص الكهروحرارية لمواد سيلينيد

للطالبة

نجوى قاسم حسين البوزيه

المشرف

د. نور الدين عمران، قسم الفيزياء
كلية العلوم

المكان والزمان

وقت المناقشة: 13:30 – 10:30
9 نوفمبر 2023، الخميس
قاعه 134 ، المبنى F3

الملخص

ترتكز هذه الأطروحة على توصيف متقدم لمواد سيلينيد القصدير(SnSe) باستخدام نظرية الكثافة الوظيفية (DFT)، وتقوم بفحص تأثيرات طرق الإشابة المتنوعة على خصائصها الكهربائية والبصرية والميكانيكية والخصائص الكهروحرارية. الهدف الرئيسي هو توضيح تأثير بعض الشوائب مثل الهافنيوم (Hf) والزنك (Zn) والبزموت (Bi) والجرمانيوم (Ge) الصوديوم (Na) واليود (I) والسيليكون (Si) على سيلينيد القصدير (SnSe) باستخدام نظرية الكثافة الوظيفية (DFT). عند إشابة سيلينيد القصدير بصوره المتعددة ثنائيّة الأبعاد بالهافنيوم، تحسنت خصائصها الكهروضوئيّة، مما يشير إلى ملاءمتها لأجهزة مثل الخلايا الشمسية وأجهزة الصمام الثنائي الباعث للضوء (LEDs). في دراساتنا المرتكزة حول (α-SnSe) ، تم الكشف عن خصائص شبه موصلة عند الإشابة بالزنك (Zn)، والتي تعتبر أساسية لتطبيقات الأشعة فوق البنفسجية العميقة والمكثفات الكهربائيّة, خاصة بسبب انخفاض في ثابت العزل (dielectric constant) عند البنيات ثنائيّة الأبعاد. عند دراسة تأثير إشابة (α-SnSe) بالسيليكون (Si) ، تم تسجيل انخفاض على قيم الموصليّة الحراريّة بينما ارتفعت قيم الموصليّة الكهربائيّة بشكل ملحوظ. تتضمن هذه الأطروحة دراسة آثار الإشابة المشتركة (co-doping) على خواص سيلينيد القصدير(SnSe)، مثل دمج عناصر مثل البزموت والزنك (Bi/Zn co-doping) ، والجرمانيوم والزنك (Ge/Zn co-doping)، بالإضافة إلى الصوديوم واليود-co (Na/I doping) في عمليات الإشابة المشتركة. عندما تمت الإشابة بالبزموت والزنك ، تم ملاحظة تحسينات في الموصليّة الكهربائيّة و وظهرت متانة ميكانيكية أكبر، مما يشير إلى تطبيقاتها الكهروحراريّة المحتملة. بينما في حالة الإشابة المشتركة بالجرمانيوم والزنك ، تم الكشف عن هياكل مستقرة لها خواص كهروحرارية عالية. أظهرت نتائج الإشابة المشتركة بعنصريّ الصوديوم واليود، امكانية استخدام هذا المركب بشكل كبير لمجموعة واسعة من التطبيقات، تتراوح من البصريات الإلكترونية إلى المكثفات وحتى أجهزة الاستشعار. حيث أشارت الخصائص الكهروحراريّة للبُنية المشابة إلى تحسين كفائتها الحراريّة ، خاصة بسبب تقليل قيم الموصليّة الحراريّة عند درجة حرارة الغرفة ومضاعفة قيم معامل سيبيك ، بالإضافة لإمكانيات استخدامها في المكثفات الكهربائيّة والخلايا الشمسية، نظرًا لقيم ثابت العزل العاليّة. من النتائج الهامة أيضا تم العثور على أن المادة مستقرة ميكانيكيّاً ، كما أشارت خواصها إلى إمكانية استخدامها كمستشعر اوكستيك (auxetic sensor). وأخيرًا، تم استكشاف خصائص π-SnSe ، التي تميزت ببُنية مستقرة لها العديد من الخصائص المميّزة التي تشير إلى إمكانيّة استخدامها في التطبيقات الكهروضوئية والحرارية الكهربائية المتنوعة عند درجات الحرارة المختلفة.

كلمات البحث الرئيسية:: سيلينيد القصدير؛ مادة كهروحرارية؛ نظرية الكثافة الوظيفية؛ الخصائص الإلكترونية؛ الخصائص الإلكترونيّة وبصرية؛ الخصائص الميكانيكية؛ مواد ثنائية الأبعاد.