



تشرف كلية الدراسات العليا وكلية العلوم بدعوتكم لحضور

مناقشة رسالة الماجستير

العنوان

حسابات المبادئ الأولى للهيكل الإلكتروني والخصائص الميكانيكية والاهتزازية والحرارية لتنريد
Ca₃BiN antiperovskite

للطالبة

ريم ماهر محمد

المشرف

نور الدين عمران، قسم الفيزياء

كلية العلوم

المكان والزمان

مبنى F3- غرفة 025

11:30 صباحاً

الخميس، 23 فبراير 2023

الملخص

تعتبر مجموعة مركبات الأنتيبيروفسكايت نظيراً لمركبات البيروفسكايت حيث أنهما يتشابهان بالهيكل لكن يختلفان بالتركيب الإلكتروني. حظيت مجموعة الأنتيبيروفسكايت بشهرة واسعة في مجال البحث العلمي بسبب خصائصها التي تميزها عن باقي المركبات وتجعلها مناسبة للتطبيقات الكهروحرارية والإلكتروضوئية. إن أحد أشهر مركبات البيروفسكايت، هي تلك التي تتركب من الفلزات القلوية الترابية حيث أنها تمتلك فجوة طاقة ضئيلة تجعلها تصنف من أشباه الموصلات. صغر سعة فجوة الطاقة هذه المركبات يؤهلها لتعتمد في التطبيقات الكهروحرارية والإلكتروضوئية. في هذا البحث، سنسلط الضوء على المركب Ca_3BiN بسبب امتلاكه لفجوة طاقة ضئيلة، قد يكون هذا المركب مؤهلاً لجمع الطاقة الحرارية المبددة وتحويلها إلى كهرباء. لدراسة فعالية هذا المركب في التطبيقات الكهروحرارية، سنقوم بدراسة خصائص هذا المركب والتي تشمل: الخصائص الديناميات الهيكلية، الخصائص الهيكلية، الخصائص المرنة، الخصائص الديناميكية الحرارية، الخصائص الإلكترونية، الخصائص الكهروحرارية، والخصائص البصرية. عن طريق تطبيق نظرية الدالة الوظيفية للكثافة حاسوبياً، تم دراسة خصائص المركب. تم استخدام ثلاثة برمجيات لدراسة هذه الخصائص والتي هي $Wien2k$, $VASP$ و $Phonopy$. من خلال هذه الدراسة، تم التوصل إلى أن تركيب بلورة Ca_3BiN يعتبر مستقراً. كما وأن المركب الصلب يعتبر هشاً لكن مقاوماً لتشوّه البلاستيك. تم حساب فجوة الطاقة عن طريق استخدام دالة $HSE06$ وهي تساوي 0.61 eV والتي تكشف أيضاً عن كون هذا المركب شبه موصل p -type. بالإضافة إلى ذلك، تم ملاحظة أن المركب يتمتع بتوصيل حراري ضئيل بينما يمتلك توصيل كهربائي عالي والذي يرجح أن هذا المركب يمتلك كفاءة عالية $Figure\ of\ merit$. أيضاً، تم حساب كفاءة المركب والتي تبين أنها تزيد عندما يزيد تركيز حاملات الشحنات إلى تقريباً 20^{10} cm^{-3} وتزيد درجة الحرارة إلى 1000 K . تم أيضاً دراسة الخصائص البصرية للمركب والتي تكشف عن أن المركب نشط في بين الضوء المرئي وفوق البنفسجي.

كلمات البحث الرئيسية: الأنتيبيروفسكايت، أشباه موصلات، فجوة الطاقة، نظرية الدالة الوظيفية للكثافة.