تتشرف كلية الدراسات العليا وكلية العلوم بدعوتكم لحضور

مناقشة أطروحة الدكتوراه

العنوان

دراسة نظرية لسبائك ثنائي شالكوجينيد المعادن الانتقالية وتطبيقاتها في مجالات الأجهزة الكهروضوئية، استشعار الغازات، تخزين المعلومات، وتخزين الطاقة

للطالبة

وضحى خليفة سالم الفلاسي

المشرف

د. نصير تيت، قسم الفيزياء

كلية العلوم

المكان والزمان

10:00 صباحا

الجمعة، 10 نوفمبر 2023

المبنى: F3 – قاعة: 040

الملخص

هذه الأطروحة تركز على طبقات المعادن ثنائية الأبعاد المعروفة بمواد الشالكوجينيد المعادن الإنتقالية (TMDs)، التي جذبت اهتمام الباحثين بسبب خصائصها المميزة التي تؤهلها لتكون مرشحًا ممتازًا للعديد من التطبيقات المستقبلية. في هذه الدراسة، استخدمت برامج المحاكاة VASP و ATK لدراسة هذه المواد بدقة. يركز VASP على نظرية دالة الكثافة الوظيفية (DFT) ويستخدم لحساب الخصائص الإلكترونية والمغناطيسية، في حين يُستخدم ATK لحساب الخصائص الناقلية الكهربائية للمواد. تركز الأطروحة بشكل رئيسي على TMDs وكذلك المكسين (MXene) في استخدامات متعددة.

1. في مجال **التكنولوجيا الكهروضوئية**، يمكن استخدام الأجهزة الكهربائية للكشف عن الخصائص والتحكم في الضوء. وتعتبر هندسة فجوة الطاقة الأساسية أمرًا حاسمًا لتحسين أداء هذه الأجهزة. في هذه الدراسة، تم فحص سبائك الأنيون المشترك ($Mo_xW_{1-x}S_2$)وسبائك الكاتيون المشترك ($MoS_{2(1-x)}Se_{2x}$) لفهم تأثير فجوة الطاقة، أظهرت نتائجنا أن فجوة الطاقة شديدة الحساسية و تعتمد على نسبة Mo/W في حالة سبائك الأنيون المشترك.
2. في مجال **Spintronics** (تخزين المعلومات باستخدام العزم المغزلي للإلكترون)، قمنا بدراسة الخصائص الإلكترونية والمغناطيسية لسبائك TMDs (MoX_2, X= S,Se) عند وجود شوائب في بنيتها. أظهرت النتائج أن حالة وجود V_{Mo} في $MoSe_2$أعطت هيكلًا نصف معدنيًا بعزم مغناطيسي عال . ثانيا، في الفصل 4، قمنا بدراسة MoX_2, X= S,Se منضبة بذرة معدن ممغنط مثل (Sc-Zn). أظهرت دراستنا نتائج إيجابية في التوصل الى هيكل نص معدني (Half metallic)في MoS_2 ML عند تنضيبه بذرة من (Mn,Fe, and Ni) كما توصلنا إلى هيكل نصف معدني في $MoSe_2$ ML عند إضافة ذرة من عناصر (V,Mn,Fe, and Ni). أكدت نتائجنا بشكل إضافي أن حصول النصف ناقلية يتم بواسطة التفاعل بين العزوم المغناطيسية للشوائب.
3. في مجال **تخزين الطاقة**، قمنا بدراسة ستة عشر نوعًا مختلفًا من القواعد المعتمدة على السبائك الثنائية الأبعاد لمادة $MoSe_2$ (ML) الشائبة والمنضبة بذرة معدن ممغنط مثل (Mn,Ni, and Cu) لتخزين الهيدروجين كمصدر للطاقة. أظهرت نتائجنا أن إضافة ذرة من Mn أو Ni أ و Cuعلى موقع Se قد تعطي قدرة عالية لامتصاص الهيدروجين. كما وجدنا أنه بزيادة عدد الذرات المضافة يمكن زيادة سعة تخزين جزيئات الهيدروجين إلى ثلاث أضعاف.
4. من منظور **استشعار الغازات السامة**، تمت دراسة إمكانية استشعار الغازات السامة التي تحتوي على النيتروجين مثل (NO and NO_2)باستخدام شريحة ثنائية الأبعاد من ثاني كبيريت الموليبدينوم المنضبة بذرات معادن ممغنطة. أظهرت نتائج الخصائص الكهربائية أن إضافة الكوبالت والنيكل يمكن أن تنتج استجابة مثلى للجهاز من حيث زيادة كل من حساسية الاستشعار و الانتقائية.
5. في سياق **التشخيص المبكر للسرطان الرئوي**، تمت دراسة استخدام شريحة ثنائية الأبعاد من ثاني كبيريتيد الموليبدينوم MoS_2 المنضبة بذرات معادن ممغنطة (الفصل السابع) وشرائح المكسين $Ti_3C_2T_X$ MXenes المشبعة بمجموعاتها الوظيفية O، F، S، و T_x = OH (الفصل الثامن)، لاكتشاف مؤشرات سرطان الرئة. أظهرت النتائج على MoS_2 مع إضافة ذرات معدن في موقع ذرة الكبيريت (S) يزيد من حساسيته تجاه مؤشرات سرطان الرئة حيث أظهرت إضافة ذرة من الحديد Fe أفضل استجابة من حيث حساسية الاستشعار و الانتقائية. أما في الباب الثامن المتعلق بشرائح المكسين $Ti_3C_2T_X$ وجدت ثلاثة وظائف (O، F، و T_x =S) واعدة للكشف الانتقائي عن المركبات العضوية المستخدمة كمؤشر للسرطان الرئوي.

كلمات البحث الرئيسية: : ثاني كبريت الموليبديوم، نظرية الدالة الوظيفية، الخصائص الإلكترونية، استشعار الغازات، الخصائص العزم المغزلي للالكترونات، الخصائص الكهروضوئية، تخزين المعلومات، تخزين الطاقة.