

حسابات هارترتي - فوك لدراسة تأثير درجة الحرارة في خواص بلورة

الماس

أبتسام عمران راضي
جامعة بابل - كلية العلوم

مضر أحمد عبد الستار
وزارة العلوم والتكنولوجيا

أحمد محمود عبد اللطيف
جامعة بابل - كلية العلوم

الخلاصة

في هذا البحث تم تطبيق ميكانيك الكم واستعمال تقريب خلية الوحدة الكبيرة (LUC) لطريقة الإهمال المتوسط للتداخل التفاضلي (INDO)، وبالاعتماد على المجال القائم لذاته لهارترتي- فوك، من أجل حساب بعض خواص بلورة الماس. تم حساب كل من الطاقة الكلية وطاقة الترابط و عرض حزمة التكافؤ و عرض حزمة التوصيل و فجوة الطاقة المباشرة و تهجين المدارات للبلورة و عامل تشكيل الأشعة السينية. كما تضمن البحث حساب تأثير درجة الحرارة و لمدى (0 - 1000 K) في تلك الخواص. ولقد أظهرت الدراسة الحالية بان نتائج طريقة (LUC-INDO) تتفق بشكل جيد مع النتائج العملية فيما يخص طاقة الترابط و عرض حزمة التكافؤ و ثابت الشبكة و عامل تشكيل الأشعة السينية، وتتفق بشكل مقبول بالنسبة لفجوة الطاقة، أما بالنسبة ل عرض حزمة التوصيل فقد كان الاتفاق ضعيفاً مع القيم العملية، وهو ما يتفق مع الدراسات السابقة باستعمال هذه الطريقة. وقد وجد ان زيادة درجة الحرارة تؤدي الى زيادة الطاقة الكلية و نقصان عرض حزمي التكافؤ و التوصيل و فجوة الطاقة المحظورة و زيادة احتمالية الأشغال الالكتروني للمدار (s) مع نقصان تلك الاحتمالية للمدارات (p). كما لوحظ تزايد عامل تشكيل الأشعة السينية بزيادة درجة الحرارة.

Abstract

In this work, the quantum mechanics in conjunction with the large unit cell (LUC) approximation for the intermediate neglect of differential overlap (INDO), based on the self-consistent field of Hartree-Fock, has been used to study some properties of diamond crystal. The total energy, cohesive energy, valence bandwidth, conduction bandwidth, direct band gap, hybridization of orbitals, and the x-ray form factors are calculated. The effect of temperature (in the range 0-1000 K) on the aforementioned properties is investigated. The present work shows that the results of (LUC-INDO) method are in good agreement with the experimental data concerning the cohesive energy, valence bandwidth, lattice constant, and x-ray form factor. Whereas, the agreement is fair for the energy gap. While, the agreement is poor between the calculated value and the experimental value of the conduction bandwidth, that agrees with the previous studies using the same method.

It is found that the increase of temperature causes an increase of the total energy, a decrease of the valence and conduction bandwidths, a decrease of the forbidden energy gap, an increase of the occupation probability for s level with a decrease of this probability for p level. Also, it is noted that the x-ray form factor increases with the increase of temperature.

المقدمة

نظراً لأهمية بلورة الماس في المجالات الصناعية والعلمية فقد قام عدد من الباحثين بدراسة خواصها بطرائق عملية ونظرية متعددة [Harker and Larkins 1979, Fahy et al. 1990, Furthmuller et al. 2002, Ocelli et al. 2003, Radi et al. 2007]. وفي البحث الحالي تم استعمال طريقة الإهمال المتوسط للتداخل التفاضلي لخلية الوحدة الكبيرة (LUC-INDO) لحساب بعض الخواص الفيزيائية وخاصة الالكترونية لبلورة الماس، إذ تتميز هذه الطريقة بسرعة إنجاز العمليات الحسابية، كما إنها أكثر دقة من طريقة الإهمال التام للتداخل التفاضلي (CNDO). ومن ثم تمت دراسة تأثير درجة الحرارة في تلك الخواص، لما يمثله هذا المجال من أهمية في مجال صناعة الأجهزة الالكترونية المعرضة الى تغيرات كبيرة في درجة الحرارة.

تستند الطريقة المستعملة في البحث الحالي على مبادئ النظرية الكمية، وقد تم وضعها و تطويرها من قبل علماء وباحثين كثيرين. ففي عام ١٩٢٨ تمكن العالم الإنكليزي هارترتي (Hartree) من وضع أول نموذج كمي لوصف الذرة متعددة الالكترونات. وفي عام ١٩٣٠ تقدم فوك (Fock) بتطوير نموذج هارترتي ليشمل

البرم الالكتروني. وفي عام ١٩٥٤ تقدم كل من روثنان و هول (Roothan and Hall) بوضع أول نظرية تقريبية لوصف الجزئيات باستعمال تقريب الجمع الخطي للمدارات الذرية، و تضمنت هذه الطريقة حساب عدد كبير جداً من التكاملات وخصوصاً تكاملات التناثر الالكتروني، مما جعل هذه الطريقة بالغة التعقيد عند تطبيقها لدراسة الجزئيات المعقدة. ان صعوبة تطبيق الطريقة الأنفة الذكر لدراسة التركيب الالكتروني للجزئيات المعقدة أدى الى ابتكار طرائق تقريبية تستند في بعض مراحلها على النتائج العملية لتسهيل الحسابات النظرية سميت بالطرائق شبة التجريبية. فقد وضع بوبل وسيجال (Pople and Segal 1965) بعض هذه الطرائق وهي تستعمل الآن لدراسة العديد من الجزئيات العضوية و اللاعضوية المعقدة لاستخراج الخواص الكيميائية والفيزيائية المختلفة. وفي عام ١٩٧٩ طور كل من هاركر و لاركنس (Harker & Larkins 1979) ونموذج خلية الوحدة الكبيرة واستعملها لدراسة التركيب الالكتروني لبعض البلورات. وأستمر العمل على تطوير واستعمال هذه الطريقة من قبل باحثين آخرين [Evarestov and Smirnov 1983, Segal 1990, Radi et al. 2007].

الأسس النظرية

يمكن كتابة المؤثر الهاملتوني الكلي لنظام مؤلف من N من النوى و $2n$ من الالكترونات باستخدام الوحدات الذرية بالصيغة الآتية [Chelikowsky and Saad ٢٠٠٤]:

$$H^T = -\frac{1}{2} \sum_K \frac{1}{M_K} \nabla_K^2 - \frac{1}{2} \sum_P \nabla_P^2 + \sum_{p<q} r_{pq}^{-1} - \sum_k \sum_p^{2n} Z_K r_{kP}^{-1} + \sum_{K<L}^N Z_K Z_L R_{KL}^{-1} \quad (1)$$

حيث ان الحد الأول يمثل الطاقة الحركية للنواة ويمكن اهماله حسب تقريب (بورن - اوينهايمر)، أما الحد الثاني فيمثل الطاقة الحركية للالكترونات، في حين يمثل الحد الثالث والحد الرابع والحد الخامس طاقة تفاعل إلكترون- إلكترون و إلكترون- نواة و نواة- نواة على التوالي.

بتطبيق نظرية المجال المتوافق ذاتيا على المادة الصلبة مع الأخذ بنظر الاعتبار تأثير الجهد الدوري وتطبيق تقريب الجمع الخطي للمدارات الذرية، فان الدالة الموجية تكون على الصيغة الآتية:

$$\psi_\alpha(k, r) = \sum_u \sum_p^{\text{cells basis}} \exp(ik \cdot R_u) C_{p\alpha}(k) \phi_p(r - R_u) \quad (2)$$

حيث $C_{p\alpha}$ هي معاملات المدارات الذرية، و R_u هو المتجه الانتقالي للشبيكة البلورية.

وفي الحالة المستقرة فان معادلة روثنان- هول تصبح بالصيغة الآتية [Harker and Larkins 1979]:

$$\sum_p (F_{pq}(k) - \epsilon_\alpha(k) S_{pq}(k)) C_{p\alpha}(k) = 0 \quad (3)$$

ان F_{pq} تمثل عناصر مصفوفة فوك، و S_{pq} يمثل تكامل التداخل ويأخذ الصيغة الآتية:

$$S_{pq}(k) = \sum_u \langle \phi_p(r - R_0) | \phi_q(r - R_u) \rangle \exp(ik \cdot R_u) \quad (4)$$

ان عناصر مصفوفة فوك يمكن كتابتها على النحو الآتي:

$$F_{op,uq} = \left\langle \phi_p^o(1) \left| -\frac{1}{2} \nabla_1^2 - \sum_a Z_a r_{1a}^{-1} \right| \phi_q^u(1) \right\rangle + \sum_{v,\lambda} \sum_{rs} P_{rs}^{v\lambda} \left((\phi_p^o \phi_q^u | \phi_r^v \phi_s^\lambda) - \frac{1}{2} (\phi_p^o \phi_r^v | \phi_s^\lambda \phi_q^u) \right) \quad (5)$$

حيث $P_{rs}^{v\lambda}$ هنا تمثل عنصر مصفوفة الكثافة وتعطى بالعلاقة:

$$P_{rs}^{v\lambda} = 2 \sum_k \sum_{\alpha}^{occ} C_{r\alpha}^*(k') C_{s\alpha}(k') \exp[ik' \cdot (R_\lambda - R_\nu)] \quad (6)$$

وبتعويض ($k=0$) في المعادلة (٣) نحصل على:

$$\sum (F_{pq}(0) - \epsilon_\alpha(0) S_{pq}(0)) C_{p\alpha}(0) = 0 \quad (7)$$

ان عناصر مصفوفة فوك بصيغتها النهائية [Larsson 2003] تكون على الشكل الآتي:

$$F_{pp}(0) = U_{op,op} - \sum_{B \neq A} \sum_v Z_B \gamma_{AB}^{ov} + \sum_v \beta_A^o (S_{op,vp} - \delta_{ov}) + \sum_r \sum_v P_{rv}(0) \gamma_{AB}^{ov} \\ - \frac{1}{2} \sum_{v \neq o} P_{pp}(0) f(x) \gamma_{AA}^{ov} - \frac{1}{2} \sum_{r \text{ on } A} P_{rv}(0) (\phi_p^o \phi_r^o / \phi_p^o \phi_r^o) \quad (8)$$

$$F_{pq}(0) = \sum_v \beta_{AB}^o S_{op,vq} - \frac{1}{2} P_{pq}(0) \sum_v f(x) \gamma_{AB}^{ov} \quad (9)$$

عندما تكون p و q على ذرات مختلفة، وفي حالة كون p و q على نفس الذرة فإن عناصر مصفوفة فوك تكون على النحو الآتي:

$$F_{pq}(0) = \sum_{v \neq 0} \beta_A^o S_{op,vq} - \frac{1}{2} P_{pq}(0) \sum_{v \neq 0} f(x) \gamma_{AA}^{ov} + \frac{1}{2} P_{pq}(0) [3(\phi_p^o \phi_q^o / \phi_p^o \phi_q^o) - (\phi_p^o \phi_p^o / \phi_q^o \phi_q^o)] \quad (10)$$

ان الرمز (β) يشير الى طاقة الترابط والتي تتناسب مع مقدار التداخل بين المدارات، والرمز (γ) يمثل طاقة التناثر بين أي الكترون للذرة (A) وأي الكترون للذرة (B) والتي تحسب من المعادلة الآتية:

$$\gamma_{AB} = \iint \phi_p(1) \phi_q(1) \frac{1}{r_{12}} \phi_p(2) \phi_q(2) d\tau_1 d\tau_2 \quad (11)$$

اما (U) فتمثل عنصر مصفوفة اللب (core matrix element) وتعطى بالعلاقة:

$$U_{pp} = -\frac{1}{2} (I_p + A_p) - (Z_A - \frac{1}{2}) \gamma_{AA} \quad (12)$$

حيث I يمثل طاقة التأيين، و A_p فيمثل الألفة الأكترونية. أما f(x) فهي دالة التضمين وتعطى بالعلاقة

[Evarestov and Smirnov 1983]

$$f(x) = \left(\frac{\sin(x)}{x} \right)^2 \quad (13)$$

وان (x) لخلية بنمان ذرات تعطى بالعلاقة:

$$x = \frac{\pi R_{AB}^{ov}}{a} \quad (14)$$

النتائج والمناقشة

تم حساب خواص بلورة الماس من خلال تنفيذ برامج حاسوبية معدة لهذا الغرض. أما خطوات إنجاز

هذه البرامج فهي كالآتي:

- ١- تعيين مواقع الذرات داخل البلورة.
- ٢- إدخال ثابت الشبكة.
- ٣- إعطاء دالة تخمينية لحساب تكامل هاملتون (H) وتكامل التداخل (S) وتكاملات التناظر الالكتروني وخرزنها.

٤- حساب مصفوفة فوك (F) من الدالة التخمينية.

٥- إعطاء تخمين أولي لمعاملات (C).

٦- حساب مصفوفة (F) ومصفوفة الكثافة (P).

٧- استعمال مصفوفة (F) في معادلات روثان - هول للحصول على قيم جديدة لمعاملات (C) وقيم طاقة

الاوربتالات (\mathcal{E}_i).

٨- استعمال القيم الجديدة (C) ومن ثم إعادة حسابات الخطوات (٦ و ٧).

٩- تكرر الخطوات (٦ و ٧ و ٨) حتى نتوصل الى قيم ثابتة للمعاملات (C) والطاقة الالكترونية المحسوبة.

١٠- إضافة تصحيحات الترابط.

١١- حساب الخواص الفيزيائية لبلورة الماس تحت الظروف الاعتيادية.

١٢- حساب تأثير درجة الحرارة في الخواص الفيزيائية لبلورة الماس.

اختيار الثوابت

تتضمن طريقة (LUC-INDO) استعمال عوامل تجريبية متمثلة بالأس المداري (ξ) وعامل الربط

(β) والكهروسالبية للمدارين s, p ($1/2(I_p+A_p)$, $1/2(I_s+A_s)$)، وبالتغيير المستمر لهذه العوامل تم

الحصول على قيم جيدة للخواص المتمثلة بثابت الشبكة وطاقة الترابط وعرض حزمة التكافؤ وفجوة الطاقة

وغيرها. والجدول (1) يظهر العوامل التجريبية المستعملة في هذا البحث مع إجراء مقارنة مع العوامل التجريبية لباحثين آخرين.

جدول (1): العوامل التجريبية المستعملة في البحث الحالي مع مقارنتها مع العوامل التجريبية المستعملة من قبل باحثين آخرين.

رمز العامل التجريبي	قيمة العامل التجريبي [Abdulsattar 1997]	قيمة العامل التجريبي Harker and Larkins] [1979	قيمة العامل التجريبي المستعملة في البحث الحالي
ξ	1.83 (a.u)^{-1}	1.765 (a.u)^{-1}	$1.8203 \text{ (a.u)}^{-1}$
B	-10 (eV)	-10.2 (eV)	-10.24 (eV)
$-1/2(I_S+A_S)$	5.57 (eV)	7 (eV)	6.22056 (eV)
$-1/2(I_P+A_P)$	4.39 (eV)	5.5 (eV)	4.35216 (eV)

دراسة خواص بلورة الماس

بعد تثبيت قيم العوامل التجريبية وتنفيذ البرامج الحاسوبية لبلورة الماس تم الحصول على بعض خواص البلورة وكما يأتي:

الخواص التركيبية و الالكترونية لبلورة الماس

يبين الجدول (2) الخواص التركيبية و الالكترونية لبلورة الماس عند ضغط صفر جو ودرجة حرارة صفر كلفن، مع مقارنة نتائج البحث الحالي مع نتائج [Harker and Larkins 1979] والنتائج العملية. الجدول(2): الخواص التركيبية و الالكترونية لبلورة الماس مع مقارنتها مع نتائج نظرية وعملية.

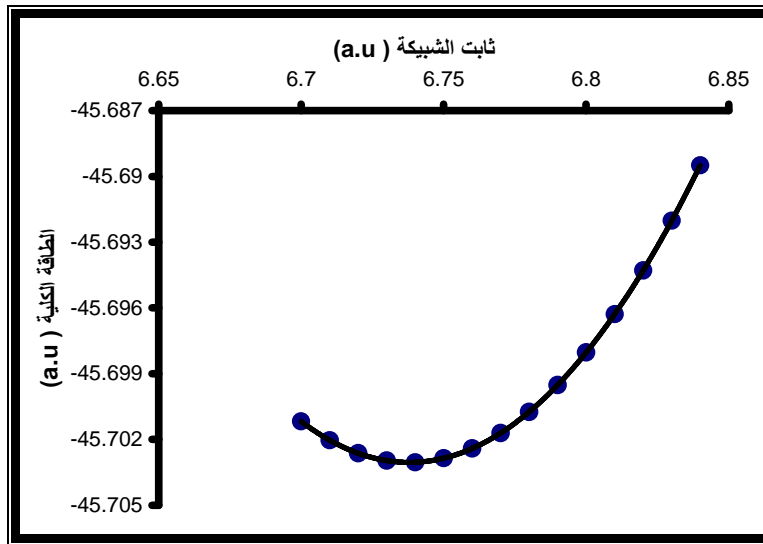
الخاصية	[Harker and Larkins 1979]	نتائج البحث الحالي	النتائج العملية
ثابت الشبكة (a.u)	6.73	6.73	6.73 [Mattesini and Mater 2001]
طاقة الترابط (eV)	-7.68	-7.36	-7.37 [Towler 2004]
عرض حزمة التكافؤ (eV)	22.40	22.19	24.20 ± 1.21 [Furthmuller et al. 2002]
عرض حزمة التوصيل (eV)	4.70	2.63	8.00 [Harker and Larkins 1979]

7.30 [Furthmuller <i>et al.</i> 2002]	7.94	9.40	فجوة الطاقة المباشرة (eV)
----	S ^{0.954} P ^{3.046}	S ^{0.6} P ^{3.4}	حالة التهجين المدارات الإلكترونية

يتبين من الجدول (2) أن النتائج التي حصلنا عليها باستعمال طريقة (LUC-INDO) قريبة من القيم العملية باستثناء قيمة عرض حزمة التوصيل، كما أنها أفضل من النتائج التي حصل عليها (Harker and Larkins 1979) باستعمال طريقة (LUC-CNDO).

الطاقة الكلية للبلورة

الشكل (١) يوضح العلاقة العامة بين الطاقة الكلية وثابت الشبكة، إذ يظهر ان القوى الأكثر أهمية أثناء اقتراب الذرات من بعضها هي قوة التجاذب بين الإلكترونات ونوى الذرات. ومع زيادة اقتراب الذرات من بعضها سوف تتناقص طاقة النظام، وتستمر بالنقصان إلى أن يكون اقتراب الذرات على درجة بحيث يصبح التناظر النووي ذا شأن مما يسبب زيادة طاقة النظام. وتتوازن هاتان القوتان عند نقطة الاتزان ($a = a_0$)، بحيث تكون طاقة النظام عند تلك النقطة في حدها الأدنى وتمثل القيمة المقابلة لهذا المقدار من الطاقة ثابت الشبكة للبلورة (a_0).



شكل (1): العلاقة العامة بين الطاقة الكلية وثابت الشبكة لبلورة الماس.

عامل تشكيل الأشعة السينية

يمكن تعريف عامل تشكيل الأشعة السينية بالعلاقة الآتية:

$$f_j = \int \rho_e(r) \exp(-iG \cdot r) dV \quad (15)$$

حيث G : متجه الانتقال الأساسي في الشبكة المقلوبة، و r : متجه الموضع، و $\rho_e(r)$: كثافة الشحنة الذرية:

$$\rho_e(r) = \sum_{\mu} \sum_{\nu} P_{\mu\nu} \psi_{\mu}(r) \psi_{\nu}(r) \quad (16)$$

والجدول (3) يبين حساب عامل تشكيل الأشعة السينية لمستويات ميلر (Miller) المختلفة عند ضغط صفر جو ودرجة حرارة صفر كلفن مع إجراء مقارنة مع نتائج سفان [Svane 1987] ومع القيم العملية.

جدول (3): عامل تشكيل الأشعة السينية لمستويات ميلر المختلفة مع مقارنتها مع نتائج آخرين.

معاملات ميلر (hkl)	نتائج [Svane 1987]	نتائج البحث الحالي	القيم العملية [Svane 1987]
(111)	3.29	3.49	3.32
(220)	1.93	2.15	1.98
(311)	1.69	1.86	1.66
(400)	1.57	1.62	1.48
(331)	1.55	1.54	1.58
(422)	1.42	1.43	1.42
(511)	--	1.38	1.42
(333)	--	1.37	1.42

يبين الجدول (3) إن القيم المحسوبة لعامل تشكيل الأشعة السينية كانت قريبة من القيم العملية، وهذا يؤكد جودة الطريقة المستعملة لحساب هذا العامل.

تأثير درجة الحرارة في قيمة ثابت الشبكة

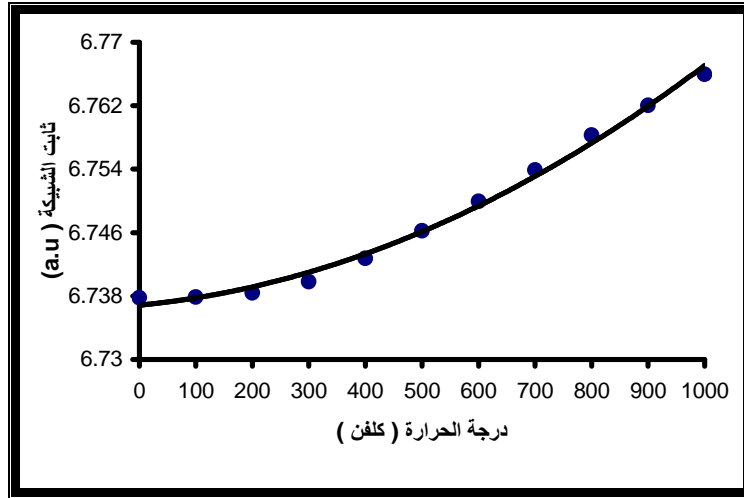
تم حساب تأثير درجة الحرارة في بعض خواص البلورة باستعمال القيم العملية لمعاملات التمدد الحراري لبلورة الماس، وبتطبيق القانون الخاص بمعاملات التمدد الحراري والمتمثل بالعلاقة (١٧) تم إيجاد قيم ثابت الشبكة عند درجة الحرارة (T):

$$\alpha = \frac{a - a_0}{a_0 \Delta T} \quad (17)$$

$$a = a_0 \alpha (T - T_0) + a_0 \quad (18)$$

حيث ان (α) هو معامل التمدد الحراري و (a_0) هو ثابت الشبكة لنقطة الاستقرار و (T_0) هي درجة حرارة البلورة عند نقطة استقرار البلورة وتساوي صفر كلفن، و (T) هي درجة الحرارة المسلطة على البلورة، و (a) هو

ثابت الشبكة للبلورة عند درجة حرارة (T). ويبين الشكل (٢) علاقة ثابت الشبكة مع درجة الحرارة لبلورة الماس.

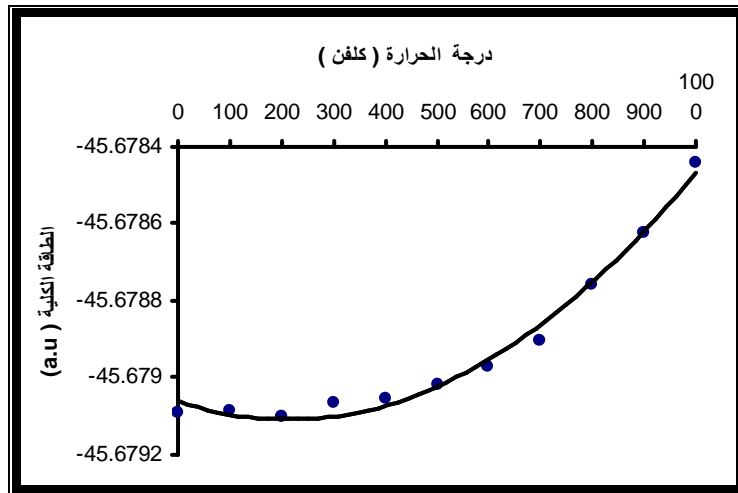


شكل (٢): علاقة ثابت الشبكة مع درجة الحرارة لبلورة الماس.

تأثير درجة الحرارة في بعض خواص بلورة الماس

تأثير درجة الحرارة في الطاقة الكلية للبلورة

يبين الشكل (٣) تأثير درجة الحرارة في الطاقة الكلية لبلورة الماس.

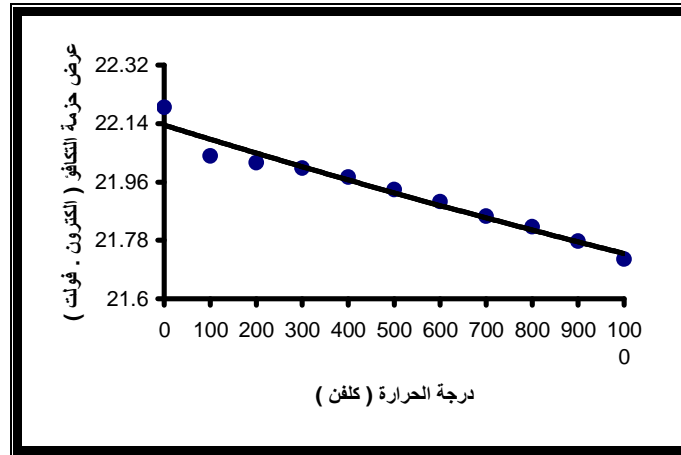


شكل (3): تأثير درجة الحرارة في الطاقة الكلية لبلورة الماس.

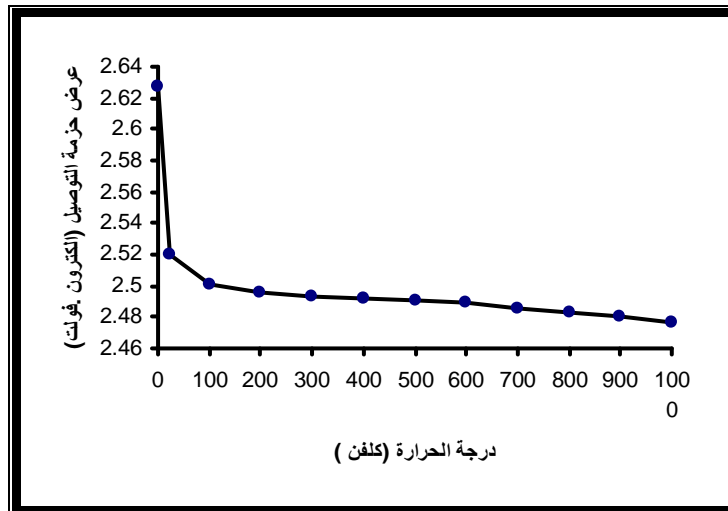
إذ بزيادة درجة حرارة البلورة سوف تزداد الطاقة الداخلية للبلورة وينتج عن ذلك زيادة المسافة بين الذرات للبلورة. وإن أوطأ قيمة للطاقة هي طاقة اتزان البلورة التي تتساوى عندها كل من قوة التجاذب والتنافر الالكتروستاتيكي، وبزيادة درجة حرارة البلورة سوف تزداد المسافة بين الذرات فيسبب ذلك نقصان تأثير قوى التنافر بين نوى الذرات مع بعضها و تنافر الالكترونات فيما بينها وزيادة تأثير قوى التجاذب بين نوى الذرات والكتروناتها فينتج عن ذلك زيادة الطاقة الكلية، وباستمرار زيادة درجة الحرارة ستزداد الطاقة.

تأثير درجة الحرارة في حزم الطاقة

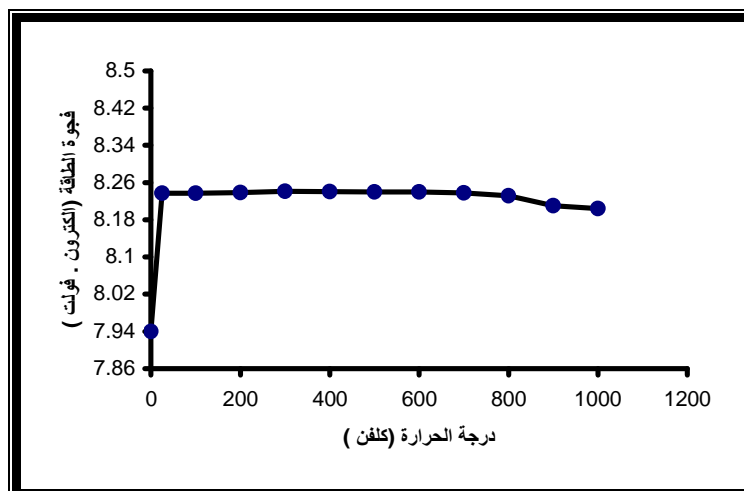
تبين الأشكال (٤) و (٥) و (٦) تأثير الحرارة في كل من عرض حزمة التكافؤ وحزمة التوصيل وفجوة الطاقة المباشرة على التوالي.



شكل (٤): تأثير درجة الحرارة في عرض حزمة التكافؤ لبلورة الماس.



شكل (٥): تأثير درجة الحرارة في عرض حزمة التوصيل لبلورة الماس.

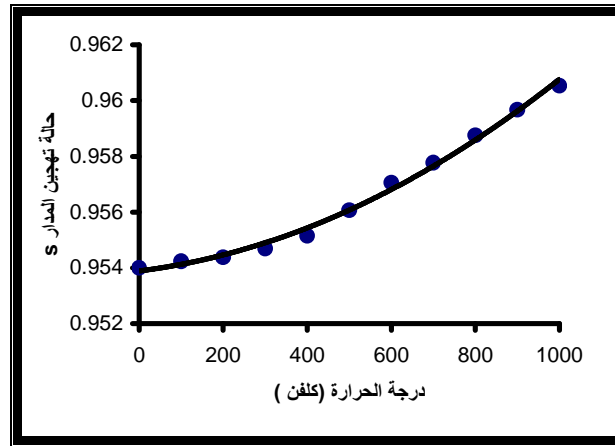


شكل (٦): تأثير درجة الحرارة في فجوة الطاقة المباشرة لبلورة الماس.

يمكن تفسير الإشكال (٤) و (٥) و (٦) كالأتي، انه بزيادة درجة الحرارة سوف تزداد طاقة البلورة وينتج عن ذلك زيادة المسافة بين الذرات فيقل تداخل المدارات الذرية، وبذلك ستميل هذه المستويات للعودة الى حالتها المنفردة، فيقل تاثير قوة تنافر نوى الذرات مع بعضها والالكترونات فيما بينها وتزداد قوة التجاذب بين النوى والكتروناتها وبذلك يقل عرض الحزم وفجوة الطاقة. وان نقصان فجوة الطاقة مع زيادة درجة الحرارة لبلورة الماس يتفق مع ماتم التوصل إليه من تصريف مماثل بالنسبة لبلورة (Si) وبلورة (GaAs) [Sze and Kwok] .[2007].

تأثير درجة الحرارة في حالة تهجين المدار (s)

الشكل (٧) يبين تأثير درجة الحرارة في حالة تهجين المدار (s) لبلورة الماس.



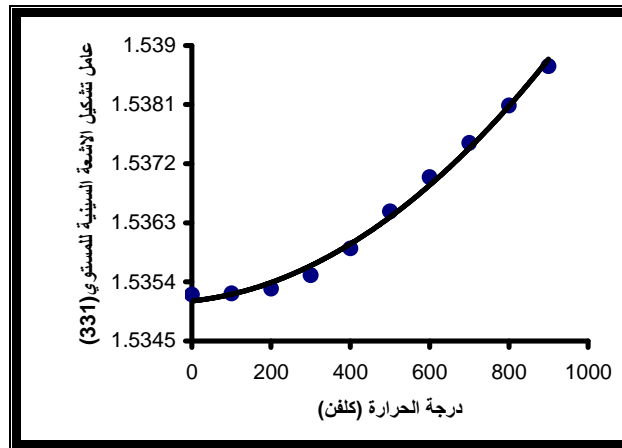
شكل (٧): تأثير درجة الحرارة في حالة التهجين المدار (s) لبلورة الماس.

يتبين من الشكل (٧) انه بزيادة درجة الحرارة ستزداد احتمالية انتقال الالكترونات من المدار الالكتروني (p) الى المدار الالكتروني (s) أي أن المدارات تميل للعودة الى حالة (s^2p^2).

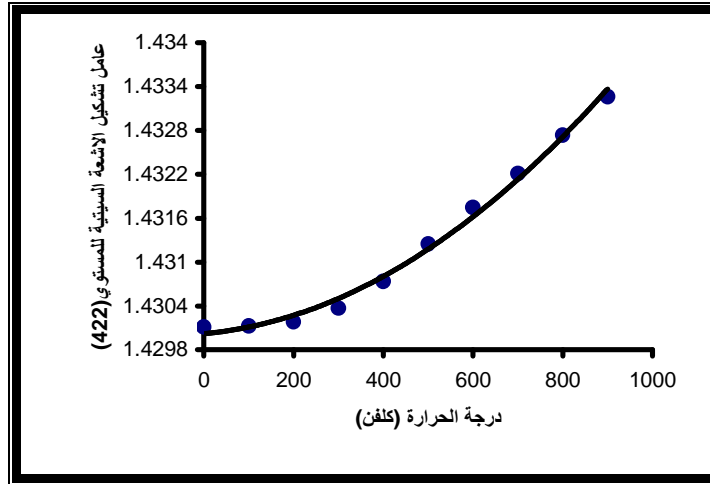
تأثير درجة الحرارة في عامل تشكيل الأشعة السينية

تبين الأشكال (٨) و (٩) و (١٠) تأثير درجة الحرارة في عامل تشكيل الأشعة السينية للمستويات (331)

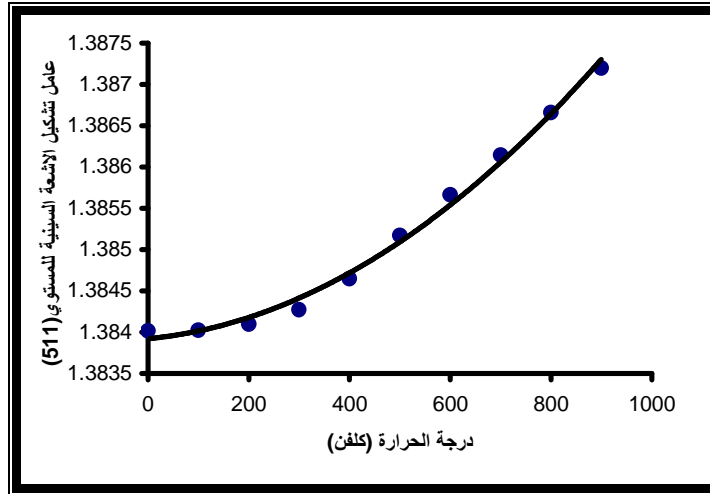
و (422) و (511) على التوالي.



شكل (٨): تأثير درجة الحرارة في عامل التشكيل (f) للمستوي (331) لبلورة الماس



شكل (9): تأثير درجة الحرارة في عامل التشكيل (f) للمستوي (422) لبلورة الماس.



شكل (١٠): تأثير درجة الحرارة في عامل التشكيل (f) للمستوي (511) لبلورة الماس.

يمكن تفسير الأشكال (٨) و (٩) و (١٠) كالآتي، بزيادة درجة الحرارة تزداد المسافة البينية بين المستويات الذرية (d_{hkl}) لكل مستوي من مستويات ميلر وبالتالي تقل زاوية الاستطارة (2θ)، لان زاوية الاستطارة تتناسب عكسيا مع المسافة (d_{hkl}) حسب قانون براك. ولما كانت قيمة عامل التشكيل (f) تتناسب عكسيا مع ($\frac{\sin \theta}{\lambda}$) او طرديا مع (d_{hkl}) لذلك السطح لذلك نتوقع ارتفاع في قيمة شدة الموجة المستطيرة من الكترونات المادة الصلبة كلما قلت الزاوية (2θ) وهذا يعني حدوث تداخل تقوية بين الموجات المستطيرة وتحقق قانون براك هذا بسبب زيادة قيمة عامل التشكيل.

الاستنتاجات

١. أن استعمال نموذج خلية الوحدة الكبيرة لطريقة الإهمال المتوسط للتداخل التفاضلي (LUC-INDO) يعطي قيماً للخواص المحسوبة قريبة من القيم العملية. كما أن إضافة تصحيحات الترابط إلى هذه الطريقة جعل قيمة طاقة الترابط تقترب من القيمة العملية مما يدل على جودة النموذج المستعمل لاستخراج القيم.

٢. أن استعمال طرائق التقريب لا تؤثر كثيراً على النتائج المحسوبة، إذ أن إهمال تأثير القلب واعتماد مدارات التكافؤ فقط لا تؤدي إلى حرف النتائج النظرية بشكل كبير عن القيم العملية.
٣. إن وجود تركيز للالكترونات في المناطق القريبة من النويات يؤكد كفاءة طريقة الجمع الخطي للمدارات الذرية لإجراء الحسابات. و يدعم ذلك كون القيم المستخرجة لعامل التشكيل (f) قريبة من القيم العملية، إذ أن عامل التشكيل يعتمد على توزيع كثافة الشحنة الإلكترونية وأن إلكترونات القلب تتجه نحو منتصف المسافة بين الذرتين المتجاورتين ولذلك فإن دالة التوزيع الإلكتروني قريبة من الدالة الحقيقية.
٤. تم حساب تأثير الحرارة بالاعتماد على القيم العملية لمعاملات التمدد الحراري، أي أخذنا تأثير تباعد الذرات لحساب تغير الخواص بتأثير الحرارة. وكانت النتائج التي تم الحصول عليها متباينة الدقة، ولعل سبب ذلك هو عدم الأخذ بنظر الاعتبار تأثير الحركة الاهتزازية للذرات.
٥. إن زيادة درجة الحرارة تقلل عرض كل من حزمة التكافؤ وحزمة التوصيل وفجوة الطاقة، لتباعد الذرات من بعضها مما يؤدي إلى ميل المستويات الإلكترونية للرجوع إلى حالة الانفراد.
٦. إن زيادة درجة الحرارة تزيد من احتمالية الأشغال الإلكترونية للمدار (s) ونقصان حالة الأشغال الإلكترونية للمدار (p) ومحاولة المدارات الذرية للعودة إلى حالة (s^2p^2).
٧. إن زيادة درجة الحرارة تزيد من قيمة عامل التشكيل (f) نتيجة لزيادة المسافة بين المستويات البلورية (d) ونقصان زاوية الاستطارة (θ)، إذ أن عامل التشكيل يتناسب طردياً مع (d) وعكسياً مع (θ).

المصادر

- Abdulsattar M. A. (1997) " Self-Consistent Field Calculations of Covalent Semiconductors", Ph. D. Thesis, University of Baghdad.
- Chelikowsky R. and Saad Y. (2004) "Electronic Structure of Clusters and Nanocrystals", University of Minnesota.
- Evarestov R. and Smirnov V. (1983) Phys. Stat. Sol. (b), **119**, 9
- Fahy S. , Wang X. W. , and Louie S. G. (1990) Phys. Rev. Lett., **65**, 1478.
- Furthmuller J., Cappellini G., Weissker H-Ch., and Bechstedt F. (2002) Phys. Rev. B, **66**, 45110.
- Harker A. H. and Larkins F. P. (1979) Sol. Stat. Phys. **12**, 2487.
- Harker A. H. and Larkins F.P. (1979) Sol. Stat. Phys., **12**, 2497.
- Larsson P. E. (2003) "Modelling Chemical Reactions: Theoretical Investigations of Organic Rearrangement Reactions", Acta Universitatis Upsaliensis Uppsala, Sweden.
- Mattesini M. and Matar S. F. (2001) Computational Materials Science, **20**, 107.
- Pople J. and Segal G. A. (1965) J. Chem. Phys. , **43**, 136.
- Radi I. O., Abdulsattar M. A. and Abdul-Lettif A. M. (2007) Phys. Stat. Sol. (b) **244**, 1304.
- Segal G. (1990) J. Chem. Phys. **94**, 5436. Svane, A. (1987) Phys. Rev. B, **35**, 5496.
- Sze S. M. and Kwok K. Ng (2007) " Physics of Semiconductor Devices " ,Third
- Towler M. (2004) "Solid-State Applications " , University of Cambridge.

