جامعة الإمارات العربية المتحدة
United Arab Emirates University

UAEU

تتشرف كلية الدراسات العليا وكلية العلوم بدعوتكم لحضور

مناقشة رسالة الماجستير

العنوان

دراسة أثر الضغط ووجود الشوائب على الخصائص الالكترونية لثاني كبريتيد الموليبدينيوم

للطالبة

وضحة خليفة الفلاسي

المشرف

أ. نور الدين عمران، قسم الفيزياء
كلية العلوم

المكان والزمان

11:30 صباحا
الأحد، 30 أبريل 2017
قاعة121- مبنى F3

الملخص

يعد ثاني كبريتيد الموليبدينوم (MoS_2) من أكثر المواد استقطابا لاهتمام العلماء لأنه يشارك الجرافين بعض خصائصه ولكن يختلف عنه لوجود فجوة بين مستويات طاقة الالكترون في الذرة. الهدف من هذه الأطروحة هو دراسة الخصائص الالكترونية لثاني كبيريتيد الموليبدينوم. سيتم استخدام نظرية الدالة الوظيفية للكثافة (Density functional theory DFT) لفهم ودراسة البنية والخصائص الالكترونية التي تعتبر كثافة الالكترونات هي الأساس لدراسة خصائص المجموعة. بالاستعانة بتقريب الانحدار المعمم (approximation GGA Generalized gradient) و تقريب بيك – جونسون المعدل (Modified Becke- Johnson) , (Hybrid Functional) سيتم حساب جهد التبادل – الارتباط الكامن بين الالكترونات. باستخدام التقريبات السابقة الذكر سيتم حساب فجوة الطاقة بين الاكترونات و كثافة المستويات (Density of states)، بالإضافة إلى دراسة تأثير الضغط على الخصائص الالكترونية ، بالإضافى إلى دراسة التغييرات التي قد تحصل على ثاني كبريتيد الموليبدينوم عند وضعه مع تنجستن ثنائي السيلينيوم WSe_2 أو عند إضافة شوائب.

أظهرت الدراسة أن الفجوة الالكترونية تزيد مع تقليص عدد طبقات المادة المدروسة كما أن الفجوة تتحول من كونها مباشرة (Direct band gap) إلى كونها غير مباشرة (Indirect band gap) عند الانتقال من عدة طبقات (Bulk) إلى طبقة واحدة فقط (Monolayer MoS_2). أوضحت دراسة تأثير الضغط تغيير في الخصائص الاكترونية للمادة حيث أنها تبدي خصائص مائلة إلى الموصلات عند زيادة الضغط عليها.

كلمات البحث الرئيسية: ثاني كبريتيد الموليبدينوم ، نظرية الدالة الوظيفية ، الخصائص الالكترونية.