Faculty of Science

الخواص الالكترونية للجرافين المطعم ومشتقاته باستخدام نظرية الكثافة الوظيفية

مقدمة من

ريم عبد القادر ابراهيم

قسم الفيزياء - كلية العلوم - جامعة الفيوم

لجنة الاشراف العلمي

أ.د/ عرفه صبرى جمعه حسن

أستاذ علوم المواد - قسم الفيزياء - كلية العلوم جامعة الفيوم

نائب رئيس جامعة الفيوم للدراسات العليا والبحوث

التوقيع : .....

د. أحمد معروف

أستاذ مساعد بقسم الفيزياء – الجامعة الألمانية بالقاهره

التوقيع : .....

أ.د. محمد مصطفي فضل الله

أستاذ بقسم الفيزياء - كلية العلوم - جامعة بنها

التوقيع : .....

قسم الفيزياء

كلية العلوم – جامعة الفيوم

2025

ملخص الرسالة

تناولت هذه الدراسة استخدام حسابات نظرية الكثافة الوظيفية (DFT) للتحقيق في إنشاء الخصائص المغناطيسية في أنظمه الجرافين النانوية من خلال إضافة ذرات معادن انتقالية من المجموعة 3d بشكل تبديلي (M = Sc,Ti,V,Mn,Co,Ni,Cu,Zn). وقد ركزت الدراسة على ثلاثة أنظمة مخمدة: N-GNM، H-GNM، وO-GNM. كما ركزت أيضا على ثلاثة أنظمة مستبدلة: النظام المستبدل بالهيدروجين (H-GNM)، النظام المستبدل بالنيتروجين (N-GNM)، والنظام المستبدل بالأكسجين (O-GNM).

أظهرت النتائج أن التطعيم الاستبدالي في H-GNM استطاع الحفاظ على الهندسة المستوية للورقة الجرافينية الأصلية، في حين أن التطعيم في أنظمة TM-N-GNM وTM-O-GNM أدى إلى بروز ذرات المعدن من مستوى الشبكة النانوية، مما يشير إلى تفاعل أكبر بين ذرات التطعيم و ورقة الجرافين. كشفت الدراسة أيضا أن أنظمة TM-N-GNM وTM-O-GNM كانت أكثر استقراراً من أنظمة TM-H-GNM، وأظهرت كل من الكوبلت (Co) في H-GNM والتيتانيوم (Ti) في N-GNM وO-GNM الانظمة الأكثر استقرارًا، بينما أظهرت الزنك (Zn) أعلى طاقة تكوينية في جميع الانظمه المستبدله الثلاثة، مما يشير إلى أنه أقل ملاءمة للتطعيم في الشبكات النانوية من الجرافين.

أدى التطعيم إلى تغييرات كبيرة في الهيكل الإلكتروني للشبكات النانوية، مما أدى إلى إنشاء مستويات جديدة حول طاقة فيرمي وتقليل الفجوات الطاقية في جميع الأنظمة مقارنة بالنظم الأصلية، وتحولت بعض الأنظمة المطعمه من أشباه الموصلات إلى أشباه الموصلات من النوع P أو أشباه الموصلات المغناطيسية من النوع (DMSCs)، مما يفتح إمكانيات تطبيقية في الإلكترونيات الدورانية والأجهزة الإلكترونية.

كان لموقع ذرة المعدن داخل خلية الشبكة النانوية تأثير كبير على الخصائص الإلكترونية والمغناطيسية للمادة، ففي عدة حالات، تغيرت قيم المغنطة والفجوة الطاقية اعتمادًا على موقع الذرة المعدن، وأكدت الحسابات على القدرة على تخصيص كل من الفجوة الطاقية والسلوك المغناطيسي للشبكات النانوية من خلال تعديل نوع التطعيم وموقع ذرة المعدن، مما يعد قيمة لتصميم الأجهزة شبه الموصلة المتقدمة التي تستخدم مواد الجرافين. تظهر هذه الدراسة أنه من خلال الاختيار الدقيق لذرات التطعيم ومواقعها داخل الشبكات النانوية، يمكن هندسة مواد ذات خصائص إلكترونية ومغناطيسية مرغوبة لتطبيقات تكنولوجية محددة، وتقدم النتائج مسارًا لتطوير مواد الجرافين المخصصة بوظائف مخصصة لالستخدام في الإلكترونيات الدورانية والأجهزة الإلكترونية الأخرى.