# حساب مستويات الطاقة لشبه الموصل GaAs المطعم بالفاناديوم $V^{2+}$ باستخدام النموذج النظري ذي المطاوعة متعامدة المحاور

د.عدنان محمد الشيخ ابتسام يحيى عبدالله
جامعة الموصل/كلية العلوم/قسم الفيزياء

تاريخ الاستلام 2005/4/5 تاريخ القبول 2005/6/6


## ABSTRACT

To evaluate the energy level for Vanadium ion in GaAs:$V^{2+}$ the ground term has been determined ($^4F$). Using the concepts of isomorphism on orbital states for the ground term of GaAs:$V^{2+}$ where the states are described by fictitious orbits of $L'=0, T=\frac{1}{2}$ & $L'=1$, the matrix elements for spin Hamiltonion and effective Hamiltonion are calculated and comparing $|J,M_J\rangle$ and $|M_l,M_S\rangle$ for $J=\frac{5}{2}, L'=1$ & $S=\frac{3}{2}$. Our results shows that $V^{2+}$ displacement affected by $e$ and $t_2$ vibrational modes with $T\otimes e$ and $T\otimes t_2$ Jahn Teller effect rather than $T\otimes(t_2+e)$ Jahn Teller effect .

## الملخص

لغرض حساب مستويات الطاقة لأيون الفاناديوم في GaAs:$V^{2+}$ . حددت الحالة الدركية بأنها $^4F$ . ثم احتسبت عناصر مصفوفة مؤثر طاقة البرم وعناصر مصفوفة مؤثر الطاقة الفعال وعقدت مقارنة بين حالات $|J,M_J\rangle,|M_l,M_s\rangle$ عندما $J=\frac{5}{2}, L'=1$ & $S=\frac{3}{2}$ معتمدين بذلك مفهوم التشاكل لاوربيتالات الحالة الدركية لايون GaAs:$V^2$ . إذ أن الحالات الاوربيتالية توصف بالاوربيتالات المفترضة $L'=0, T=\frac{1}{2}$ & $L'=1$ . أظهرت حساباتنا أن إزاحة الايون $V^{2+}$ تتأثر بالنمطين الاهتزازيين $t_2$ & $e$ لتكون تأثيرات جان – تيلر من نوع $T\otimes t_2$ & $T\otimes e$ وليس فقط من نوع $T\otimes(t_2+e)$ .

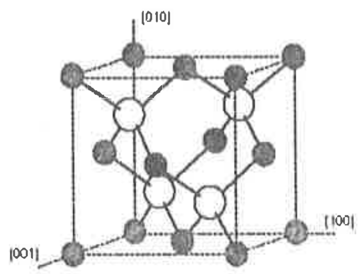
## 1. المقدمة Introduction

تشكل عناصر الزمرتين III-V مركبات شبه موصلة ذات توصيلية أقل مما للجرمانيوم والسليكون وتمتاز هذه المركبات بأن لها فجوات طاقة اكبر مما للجرمانيوم والسليكون (Adochi , 1992)

GaAs $1.52eV$ , GaP $2.32eV$ , InP $1.42eV$

لذا تمتاز هذه المركبات بأستقرارية حرارية اكبر من الجرمانيوم والسليكون .

تتكون بلورة GaAs من شبيكتين ثانويتين كل منهما ذات نظام مكعبي متمركز الأوجه وتتوازن مع بعضها عند منتصف قطر المكعب متمركز الأوجه , شكل (1) (Kayali, 2004).




شكل (1): وحدة الخلية المكعبة لبلورة GaAs

وطبقا لقوانين ميكانيك الكم, فإن الكترونات الذرات الطليقة يمكن لها أن تمتلك مستويات طاقة منفصلة, وعندما تجتمع هذه الذرات الطليقة ضمن نظام بلوري, فإن طاقات الالكترونات لا تعد محصورة بمستوي طاقة منفرد إنما تتجمع ضمن حزم طاقات تعرف بحزم التكافؤ وحزم التوصيل التي تفصل بينهما فجوة طاقة والتي تعد من الخصائص المهمة للمواد شبه الموصلة.

إن الترتيب الالكتروني لمركب GaAs يمكن أن يفهم بالصيغة الآتية:

$Ga^{31}$ $1s^2\,2s^2\,2p^6\,3s^2\,3p^6 3d^{10}\,4s^2\,4p$

$As^{33}$ $1s^2\,2s^2\,2p^6\,3s^2\,3p^6 3d^{10}\,4s^2\,4p^3$

يحصل الكاليوم على إلكترون من الزرنيخ ويعيد ترتيب الغلاف الخارجي بالصيغة:

GaAs $4s\,4p^3$

من هذا نلاحظ أن الغلاف الخارجي لهذا المركب أتخذ صيغة مرادفة للمواد شبه الموصلة مثل الجرمانيوم أو السليكون .

## 2. النظرية Theory

عام 1984 وجد (Kutt et al., 1984) ان من السهل تطعيم GaAs بالفاناديوم , ولن لهذا التطعيم له فائدة في إعطاء خصائص شبه عازل (Semi-insulating) إلى GaAs، إلا أن هذه النتائج الواعدة ظلت في ذلك الوقت تواجه حقيقة أن دور وسلوكيات الفانـــاديوم فـــي GaAs غير واضحة ولم تستكمل دراستها . وقد طرحت نماذج نظرية للفاناديوم في مركبات اشباه الموصـــلات (Katayama and Zunerg , 1986) ، (Badran , 1997) ، (Chen and Du , 2002) (AL-Sheikh ,2005) الذي قدم نموذجاً نظرياً $GaAs:V^{2+}$ عرض فيه صيغة لمؤثر البرم ومؤثر الطاقة الفعال مراعياً فيه وجـــود تـــأثيرات الحـــالات الاهتزازيـــة (Vibrational states) لليكاند في مستويات الطاقـــة الالكترونيـــة (Electronic states) لايون العنصر الانتقالي بما يجعل الحالات تتحور الى حالات الكترو-اهتزازية (Vibronic states) استناداً إلى تأثيرات جان – تيلر(Jahn-Teller effects) ولتكون صيغة مؤثر البرم ومؤثر الطاقة الفعال كما يأتي (AL-Sheikh,2005):

$$\mathcal{H}_{\text{spin}} = D\{3S_z'^2 - S'(S'+1) \pm E(S_x'S_y' + S_y'S_x') + A\{S_x'^4 + S_y'^4 + S_z'^4 - \frac{1}{5}S'(S'+1)(3S'^2 + 3S' - 1)\} + g\beta B.S' \quad \ldots(1)$$

$$\mathcal{H}_{\text{eff}} = al'.S + \lambda b(l'.S)^2 + \lambda c(E_\theta E_\theta^S + E_\varepsilon E_\varepsilon^S) + \alpha l_z'^2 \pm \beta(l_x'l_y' + l_y'l_x') + g\beta B.S \quad \ldots(2)$$

ونقوم في هذا البحث بحساب عناصر مصفوفة هذه المؤثرات , وثم احتساب القيم الذاتية لهذه المؤثرات ومستويات الطاقة لهذا النموذج .

إن رمز الحالة المستقرة للفاناديوم$V^{2+}$ $(3d^3)$ هو $^4F$ (Howald , 2001) (Web Sit 2004) , التي يمكن حسابها تفصيلياً لذرة تحتوي على عدد من الالكترونات المتكافئـــة (لهـــا نفس العددان الكميان أنفسهما $n$ و $l$), بعد الأخذ بنظر الاعتبار مبدأ باولي للاستبعاد (Pauli exclusion principle) يمكن استعمال طريقة تعتمد على معرفة قيم $m_S$ & $m_l$ لكـــل إلكترون على وفق منهج رسل-سوندرز (Russell – Saunders)

$$M_L = \sum_i (m_l)_i \quad ; \quad M_L = L, L-1, \ldots\ldots, -L \quad \ldots(3)$$

$$M_S = \sum_i (m_s)_i \quad ; \quad M_S = S, S-1, \ldots\ldots, -S \quad \ldots(4)$$

يعبر عن مضاعف البـــرم (spin multiplicity) بأنـــه $r = 2S+1$ , لأيـــون $V^{2+}$ الغلاف الثانوي هو $(3d^3)$, لما كان $l=2$ لكل إلكترون فإن

$$L = \sum_i l_i = 6 \qquad \therefore M_L = 6,5,4,3,2,1,0,-1,-2.-3,-4,-5,-6$$

$$S = \sum_i s_i = \frac{3}{2} \qquad \therefore M_S = \frac{3}{2},\frac{1}{2},-\frac{1}{2},-\frac{3}{2}$$

ويمكن حساب الاتجادات المسموح بها (حسب مبدأ باولي للاستبعاد) لقيم $m_l$ & $m_S$ التي تدعى بالحالات المجهرية "microstate" . وفق المعادلتين (3) , (4) فإن عدد الحالات المجهرية في حالة $d^3$ هو 120 حالة حسبت على وفق العلاقة (Howald ,2001):

$$\frac{10!}{n!\times(10-n)!} \qquad ...(5)$$

إذ أن $n$ هو عدد الالكترونات في الاوربيتال $d$ المملوء جزئياً.

يحدد رمز الحالة الدركية $({}^{r}L_{J})$ استناداً إلى قواعد هوند (Hund's rules) التي تمكننا من تحديد أي من حالات الطاقة هي الحالة الأكثر استقراراً أو الحالة الدركية (ground term) . وتتلخص قواعد هوند بما يأتي:

1- يمتلك رمز الحالة المستقرة دوماً أعلى مضاعف برم , لذا فعند إدراج الحالات المجهرية لأيونات $3d^3$ نجد أن الرموز $({}^4P\&{}^4F)$ تملك أعلى مضاعف برم.

2- عند المقارنة حالتين لهما مضاعف البرم نفسه , تعد الحالة ذات القيمة الأعلى لـ $L$ هي الحالة الأكثر استقراراً أو الاوطأ طاقة. لذا فإن ${}^4F$ هي الحالة الأكثر استقراراً وتكون هي الحالة الدركية .

3- تعد القيمة الدنيا لـ $J$ هي الأكثر استقراراً عند قيم معينة لـ $L,S$, إذا ما كان الغلاف الثانوي اقل من نصف مشبع , وتعد القيمة الأعلى لـ $J$ هي الأكثر استقراراً إذا ما إذا كان الغلاف الثانوي أكثر من نصف مشبع .

إن الحالات الاوربيتالية لايونات $(3d^n)$ في المجال البلوري المكعب, إما أن تكون مفردة , او ثنائية أو ثلاثية . ولغرض التعامل مع هذه الحالات , يعتمد التشاكل (Isomorphism) , إذ غالبا ما يتم وصف كل حالة بالمؤثرات المفترضة $L' = 1, T = \frac{1}{2}, L' = 0$ على التوالي . إذ يقال عن مجموعتين $G_1$ و $G_2$ أنهما متشاكلتان إن كان هنالك تطابق بين عناصرهما. بمعنى آخر أن للمجموعتين جدول الضرب نفسه.

استخدمت فكرة التشاكل لأول مرة عام 1951 من قبل Abragam , ثم استخدمها باحثون آخرون (Bates et al., 1971), إذ أعطوا جدولاً يبين الترادف بين الحالات الاوربيتالية الحقيقية والمفترضة لأيونات $(3d^n)$ باستعمال المحاور رباعية التماثل وثلاثية التماثل $(Y \equiv (\bar{1}10), Z \equiv (111))$ بوصفها محاور مكممة.

إن الأهمية التطبيقية للتشاكل تكمن في تقليل عدد المجموعات التي تلزم دراستها إلى اقل عدد، في حين أن أهميته النظرية تكمن في تأكيد أن نظرية المجموعات تعنى بتركيب جدول الضرب فقط (Hall, 1971).

## 3. الحسابات والنتائج Calculation and Results

حسبت عناصر مصفوفة مؤثر طاقة البرم (معادلة 1) والمدونة في الجدول (1) ، من خلال حساب عناصر مصفوفة مؤثر الطاقة الفعال باستخدام صيغة المؤثر المتمثل بالمعادلة (2) والمدونة في الجدول (2).

عند عقد المقارنة بين مصفوفة مؤثر طاقة البرم $\hat{\mathcal{H}}_{spin}$ (6x6) الجدول (1)، ومصفوفة مؤثر الطاقة الفعال $\hat{\mathcal{H}}_{eff}$ الجدول (2) إذ أن $\vec{J} = \vec{L}' + \vec{S}$ وباستخدام التشاكل $L' = 1, S = \frac{3}{2}, J = \frac{5}{2}$، فإن العلاقة بين $|J, M_J\rangle$ و $|M_l, M_S\rangle$ يعبر عنها كما في الجدول (3) لنحصل على عناصر مصفوفة مؤثر طاقة البرم $\hat{\mathcal{H}}_{spin}$ (6x6) في حالة $(J = \frac{5}{2})$ ومصفوفة مؤثر الطاقة الفعال $\hat{\mathcal{H}}_{eff}$ (12x12) والمدونة في الجدول (4).

**الجدول (1): عناصر مصفوفة $\hat{\mathcal{H}}_{spin}$ (6x6)**

| $\hat{\mathcal{H}}_{spin}$ | \|5/2> | \|3/2> | \|1/2> | \|-1/2> | \|-3/2> | \|-5/2> |
|---|---|---|---|---|---|---|
| \|5/2> | $10D+3A+\frac{5}{2}g_{//}\beta B_z$ | $\frac{\sqrt{5}}{2}g_{\perp}\beta(B_x-iB_y)$ | $-i\sqrt{10}E$ | $0$ | $3\sqrt{5}A$ | $0$ |
| \|3/2> | $\frac{\sqrt{5}}{2}g_{\perp}\beta(B_x+iB_y)$ | $-2D-9A+\frac{3}{2}g_{//}\beta B_z$ | $\sqrt{2}g_{\perp}\beta(B_x-iB_y)$ | $-i3\sqrt{2}E$ | $0$ | $3\sqrt{5}A$ |
| \|1/2> | $i\sqrt{10}E$ | $\sqrt{2}g_{\perp}\beta(B_x+iB_y)$ | $-8D+6A+\frac{3}{2}g_{//}\beta B_z$ | $\frac{3}{2}g_{\perp}\beta(B_x-iB_y)$ | $-i3\sqrt{2}E$ | $0$ |
| \|-1/2> | $0$ | $i3\sqrt{2}E$ | $\frac{3}{2}g_{\perp}\beta(B_x+iB_y)$ | $-8D+6A-\frac{1}{2}g_{//}\beta B_z$ | $\sqrt{2}g_{\perp}\beta(B_x-iB_y)$ | $-i\sqrt{10}E$ |
| \|-3/2> | $3\sqrt{5}A$ | $0$ | $i3\sqrt{2}E$ | $\sqrt{2}g_{\perp}\beta(B_x+iB_y)$ | $-2D-9A-\frac{3}{2}g_{//}\beta B_z$ | $\frac{\sqrt{5}}{2}g_{\perp}\beta(B_x-iB_y)$ |
| \|-5/2> | $0$ | $3\sqrt{5}A$ | $0$ | $i\sqrt{10}E$ | $\frac{\sqrt{5}}{2}g_{\perp}\beta(B_x+iB_y)$ | $10D+3A-\frac{5}{2}g_{//}\beta B_z$ |

باحتساب آثر المصفوفة (Zero trace matrix) ) (6x6) $(J=\frac{5}{2})$ ، ومقارنتها مـــع الجدول (1) التي تمثل كل منهما ثلاثة من مستويات كرامر المزدوجة الاوطأ -Three low) lying Kramers doublets) ، فإن معاملات مؤثر طاقة البرم ترتبط بمعاملات مؤثر الطاقة الفعال مباشرة بالعلاقات

$$\alpha = 30D, \beta = 10E, \lambda c = \frac{20}{3}A \quad \ldots(6)$$

ولما كانت قيم المعاملات تساوي (Rampton et al., 1986)

$$A = -0.66GHz, D = -0.29GHz, E = -0.96GHz, g = 1.60 \quad \ldots(7)$$

فإن مستويات الطاقة وكما حصلنا عليها باستخدام النموذج في هذا العمل الجـــدول (1) وباستعمال قيم المعاملات المدونة في المعادلة (7) موضحة في الشكل (2) ، مقارنة بما حصل عليه Rampton 1986 .

الجدول 2 (الجزء الأول): مصفوفة $\mathcal{H}_{eff}$ (12x12)

| $\mathcal{H}_{eff}$ | \|1,3/2> | \|1,1/2> | \|1,-1/2> | \|1,-3/2> | \|0,3/2> | \|0,1/2> |
|---|---|---|---|---|---|---|
| \|1,3/2> | $\frac{3a}{2}+\frac{9\lambda b}{4}+\frac{3\lambda c}{4}+\alpha+\frac{3}{2}g_{\parallel}\beta B_z$ | $\frac{\sqrt{3}}{2}g_{\perp}\beta(B_x-iB_y)$ | 0 | 0 | 0 | 0 |
| \|1,1/2> | $\frac{\sqrt{3}}{2}g_{\perp}\beta(B_x+iB_y)$ | $\frac{a}{2}+\frac{7\lambda b}{4}-\frac{3\lambda c}{4}+\alpha+\frac{1}{2}g_{\parallel}\beta B_z$ | $g_{\perp}\beta(B_x-iB_y)$ | 0 | $\sqrt{\frac{3}{2}}a+\frac{1}{2}\lambda b$ | 0 |
| \|1,-1/2> | 0 | $g_{\perp}\beta(B_x+iB_y)$ | $-\frac{a}{2}+\frac{9\lambda b}{4}-\frac{3\lambda c}{4}+\alpha-\frac{1}{2}g_{\parallel}\beta B_z$ | $\frac{\sqrt{3}}{2}g_{\perp}\beta(B_x-iB_y)$ | 0 | $\sqrt{2}a-\frac{1}{\sqrt{2}}\lambda b$ |
| \|1,-3/2> | 0 | 0 | $\frac{\sqrt{3}}{2}g_{\perp}\beta(B_x+iB_y)$ | $-\frac{3a}{2}+\frac{15\lambda b}{4}+\frac{3\lambda c}{4}+\alpha-\frac{3}{2}g_{\parallel}\beta B_z$ | 0 | 0 |
| \|0,3/2> | 0 | $\sqrt{\frac{3}{2}}a+\frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{2}}\lambda b$ | 0 | 0 | $\frac{3\lambda b}{2}-\frac{3\lambda b}{2}+\frac{3}{2}g_{\parallel}\beta B_z$ | $\frac{\sqrt{3}}{2}g_{\perp}\beta(B_x-iB_y)$ |
| \|0,1/2> | 0 | 0 | $\sqrt{2}a-\frac{1}{\sqrt{2}}\lambda b$ | 0 | $\frac{\sqrt{3}}{2}g_{\perp}\beta(B_x+iB_y)$ | $\frac{7\lambda b}{2}+\frac{3\lambda c}{2}+\frac{1}{2}g_{\parallel}\beta B_z$ |
| \|0,-1/2> | 0 | 0 | 0 | $\sqrt{\frac{3}{2}}a-\frac{3}{2}\sqrt{\frac{3}{2}}\lambda b$ | 0 | $g_{\perp}\beta(B_x+iB_y)$ |
| \|0,-3/2> | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| \|-1,3/2> | $i\beta$ | 0 | $\sqrt{3}\lambda b+\frac{3\sqrt{3}}{4}\lambda c$ | 0 | 0 | $\sqrt{\frac{3}{2}}a-\frac{3}{2}\sqrt{\frac{3}{2}}\lambda b$ |
| \|-1,1/2> | 0 | $i\beta$ | 0 | $\sqrt{3}\lambda b+\frac{3\sqrt{3}}{4}\lambda c$ | 0 | 0 |
| \|-1,-1/2> | $\frac{3\sqrt{3}}{4}\lambda c$ | 0 | $i\beta$ | 0 | 0 | 0 |
| \|-1,-3/2> | 0 | $\frac{3\sqrt{3}}{4}\lambda c$ | 0 | $i\beta$ | 0 | 0 |

الجدول 2 (الجزء الثاني): مصفوفة $\mathcal{H}_{\text{eff}}$ (12x12)

| $\vert 0,-1/2\rangle$ | $\vert 0,-3/2\rangle$ | $\vert -1,3/2\rangle$ | $\vert -1,1/2\rangle$ | $\vert -1,-1/2\rangle$ | $\vert -1,--3/2\rangle$ |
|---|---|---|---|---|---|
| 0 | 0 | $-i\beta$ | 0 | $\frac{3\sqrt{3}}{4}\lambda c$ | 0 |
| 0 | 0 | 0 | $-i\beta$ | 0 | $\frac{3\sqrt{3}}{4}\lambda c$ |
| 0 | 0 | $\sqrt{3}\lambda b+\frac{3\sqrt{3}}{4}\lambda c$ | 0 | $-i\beta$ | 0 |
| $\sqrt{\frac{3}{2}}a-\frac{3}{2}\sqrt{\frac{3}{2}}\lambda b$ | 0 | 0 | $\sqrt{3}\lambda b+\frac{3\sqrt{3}}{4}\lambda c$ | 0 | $-i\beta$ |
| 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| $g_{\perp}\beta(B_x-iB_y)$ | 0 | $\sqrt{\frac{3}{2}}a-\frac{3}{2}\sqrt{\frac{3}{2}}\lambda b$ | 0 | 0 | 0 |
| $\frac{7\lambda b}{2}+\frac{3\lambda c}{2}-\frac{1}{2}g_{//}\beta B_z$ | $\frac{\sqrt{3}}{2}g_{\perp}\beta(B_x-iB_y)$ | 0 | $\sqrt{2}a-\frac{1}{\sqrt{2}}\lambda b$ | 0 | 0 |
| $\frac{\sqrt{3}}{2}g_{\perp}\beta(B_x+iB_y)$ | $\frac{3\lambda b}{2}-\frac{3\lambda c}{2}-\frac{3}{2}g_{//}\beta B_z$ | 0 | 0 | $\sqrt{\frac{3}{2}}a+\frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{2}}\lambda b$ | 0 |
| 0 | 0 | $-\frac{3a}{2}+\frac{15\lambda b}{4}+\frac{3\lambda c}{4}+\alpha+\frac{3}{2}g_{//}\beta B_z$ | $\frac{\sqrt{3}}{2}g_{\perp}\beta(B_x-iB_y)$ | 0 | 0 |
| $\sqrt{2}a-\frac{1}{\sqrt{2}}\lambda b$ | 0 | $\frac{\sqrt{3}}{2}g_{\perp}\beta(B_x-iB_y)$ | $-\frac{a}{2}+\frac{9\lambda b}{4}-\frac{3\lambda c}{4}+\alpha+\frac{1}{2}g_{//}\beta B_z$ | $g_{\perp}\beta(B_x-iB_y)$ | 0 |
| 0 | $\sqrt{\frac{3}{2}}a+\frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{2}}\lambda b$ | 0 | $g_{\perp}\beta(B_x+iB_y)$ | $\frac{a}{2}+\frac{7\lambda b}{4}-\frac{3\lambda c}{4}+\alpha-\frac{1}{2}g_{//}\beta B_z$ | $\frac{\sqrt{3}}{2}g_{\perp}\beta(B_x-iB_y)$ |
| 0 | 0 | 0 | 0 | $\frac{\sqrt{3}}{2}g_{\perp}\beta(B_x+iB_y)$ | $\frac{3a}{2}+\frac{9\lambda b}{4}+\frac{3\lambda c}{4}+\alpha-\frac{3}{2}g_{//}\beta B_z$ |

الجدول 3 : العلاقات بين $|m_l, m_S\rangle \& |J, M_J\rangle$ بالنسبة $J=\frac{5}{2}$

إذ أن $S=\frac{3}{2}, L'=1$ (Bates et al., 1971)

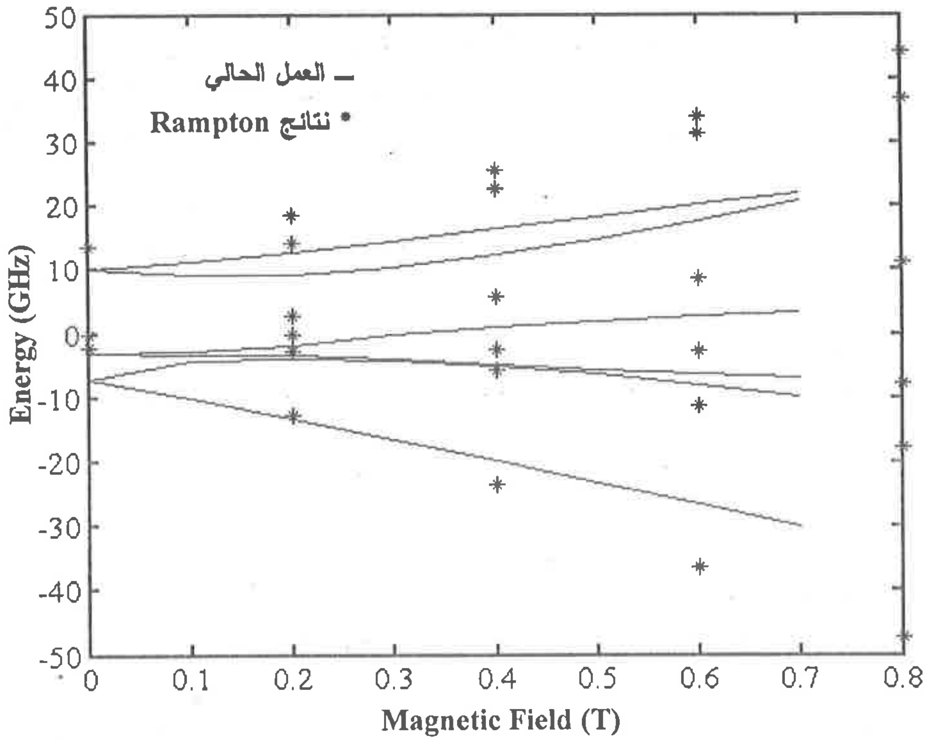
| |
|---|
| $J=\frac{5}{2}$ |
| $\lvert\frac{5}{2},\frac{5}{2}> = \lvert 1,\frac{3}{2}>$ |
| $\lvert\frac{5}{2},\frac{3}{2}> = \sqrt{\frac{2}{5}}\lvert 0,\frac{3}{2}> + \sqrt{\frac{3}{5}}\lvert 1,\frac{1}{2}>$ |
| $\lvert\frac{5}{2},\frac{1}{2}> = \sqrt{\frac{1}{10}}\lvert -1,\frac{3}{2}> + \sqrt{\frac{3}{5}}\lvert 0,\frac{1}{2}> + \sqrt{\frac{3}{10}}\lvert 1,-\frac{1}{2}>$ |
| $\lvert\frac{5}{2},-\frac{1}{2}> = \sqrt{\frac{3}{10}}\lvert -1,\frac{1}{2}> + \sqrt{\frac{3}{5}}\lvert 0,-\frac{1}{2}> + \sqrt{\frac{1}{10}}\lvert 1,-\frac{3}{2}>$ |
| $\lvert\frac{5}{2},-\frac{3}{2}> = \sqrt{\frac{3}{5}}\lvert -1,-\frac{1}{2}> + \sqrt{\frac{2}{5}}\lvert 0,-\frac{3}{2}>$ |
| $\lvert\frac{5}{2},-\frac{5}{2}> = \lvert -1,-\frac{3}{2}>$ |
| $J=\frac{3}{2}$ |
| $\lvert\frac{3}{2},\frac{3}{2}> = \sqrt{\frac{3}{5}}\lvert 0,\frac{3}{2}> - \sqrt{\frac{2}{5}}\lvert 1,\frac{1}{2}>$ |
| $\lvert\frac{3}{2},\frac{1}{2}> = \sqrt{\frac{2}{5}}\lvert -1,\frac{3}{2}> + \sqrt{\frac{1}{15}}\lvert 0,\frac{1}{2}> - 2\sqrt{\frac{2}{15}}\lvert 1,-\frac{1}{2}>$ |
| $\lvert\frac{3}{2},-\frac{1}{2}> = -2\sqrt{\frac{2}{15}}\lvert -1,\frac{1}{2}> + \sqrt{\frac{1}{15}}\lvert 0,-\frac{1}{2}> + \sqrt{\frac{2}{5}}\lvert 1,-\frac{3}{2}>$ |
| $\lvert\frac{3}{2},-\frac{3}{2}> = -\sqrt{\frac{2}{5}}\lvert -1,-\frac{1}{2}> + \sqrt{\frac{3}{5}}\lvert 0,-\frac{3}{2}>$ |
| $J=\frac{1}{2}$ |
| $\lvert\frac{1}{2},\frac{1}{2}> = \sqrt{\frac{1}{2}}\lvert -1,\frac{3}{2}> - \sqrt{\frac{1}{3}}\lvert 0,\frac{1}{2}> + \sqrt{\frac{1}{6}}\lvert 1,-\frac{1}{2}>$ |
| $\lvert\frac{1}{2},-\frac{1}{2}> = \sqrt{\frac{1}{6}}\lvert -1,\frac{1}{2}> - \sqrt{\frac{1}{3}}\lvert 0,-\frac{1}{2}> + \sqrt{\frac{1}{2}}\lvert 1,-\frac{3}{2}>$ |

### الجدول 4 (الجزء الأول): مصفوفة $J=\frac{5}{2}$ (12x12)

| $\mathcal{H}_{eff}$ | $\|5/2,5/2>$ | $\|5/2,3/2>$ | $\|5/2,1/2>$ | $\|5/2,-1/2>$ | $\|5/2,-3/2>$ | $\|5/2,-5/2>$ |
|---|---|---|---|---|---|---|
| $\|5/2,5/2>$ | $\frac{3a}{2}+\frac{9\lambda b}{4}+\frac{3\lambda c}{4}+\alpha$ | 0 | $-i\frac{1}{\sqrt{10}}\beta$ | 0 | $\frac{9}{4\sqrt{5}}\lambda c$ | 0 |
| $\|5/2,3/2>$ | 0 | $\frac{3a}{2}+\frac{9\lambda b}{4}-\frac{21\lambda c}{20}+\frac{3\alpha}{5}$ | 0 | $-i\frac{3}{5\sqrt{2}}\beta$ | 0 | $\frac{9}{4\sqrt{5}}\lambda c$ |
| $\|5/2,1/2>$ | $i\frac{1}{\sqrt{10}}\beta$ | 0 | $\frac{3a}{2}+\frac{9\lambda b}{4}+\frac{6\lambda c}{5}+\frac{2\alpha}{5}$ | 0 | $-i\frac{3}{5\sqrt{2}}\beta$ | 0 |
| $\|5/2,-1/2>$ | 0 | $i\frac{3}{5\sqrt{2}}\beta$ | 0 | $\frac{3a}{2}+\frac{9\lambda b}{4}+\frac{6\lambda c}{5}+\frac{2\alpha}{5}$ | 0 | $-i\frac{1}{\sqrt{10}}\beta$ |
| $\|5/2,-3/2>$ | $\frac{9}{4\sqrt{5}}\lambda c$ | 0 | $i\frac{3}{5\sqrt{2}}\beta$ | 0 | $\frac{3a}{2}+\frac{9\lambda b}{4}-\frac{21\lambda c}{20}+\frac{3\alpha}{5}$ | 0 |
| $\|5/2,-5/2>$ | 0 | $\frac{9}{4\sqrt{5}}\lambda c$ | 0 | $i\frac{1}{\sqrt{10}}\beta$ | 0 | $\frac{3a}{2}+\frac{9\lambda b}{4}+\frac{3\lambda c}{4}+\alpha$ |
| $\|3/2,3/2>$ | 0 | $-\frac{3}{10}\sqrt{\frac{3}{2}}\lambda c-\frac{\sqrt{6}}{5}\alpha$ | 0 | $i\frac{\sqrt{3}}{5}\beta$ | 0 | $-\frac{3}{4}\sqrt{\frac{6}{5}}\lambda c$ |
| $\|3/2,1/2>$ | $i\sqrt{\frac{2}{5}}\beta$ | 0 | $\frac{9}{10}\lambda c-\frac{\alpha}{5}$ | 0 | $i\frac{2\sqrt{2}}{5}\beta$ | 0 |
| $\|3/2,-1/2>$ | 0 | $-i\frac{2\sqrt{2}}{5}\beta$ | 0 | $\frac{9}{10}\lambda c-\frac{\alpha}{5}$ | 0 | $-i\sqrt{\frac{2}{5}}\beta$ |
| $\|3/2,-3/2>$ | $-\frac{3}{4}\sqrt{\frac{6}{5}}\lambda c$ | 0 | $-i\frac{\sqrt{3}}{5}\beta$ | 0 | $-\frac{3}{10}\sqrt{\frac{3}{2}}\lambda c-\frac{\sqrt{6}}{5}\alpha$ | 0 |
| $\|1/2,1/2>$ | $i\frac{1}{\sqrt{2}}\beta$ | 0 | $\frac{\alpha}{\sqrt{5}}$ | 0 | $-i\frac{1}{\sqrt{10}}\beta$ | 0 |
| $\|1/2,-1/2>$ | 0 | $i\frac{1}{\sqrt{10}}\beta$ | 0 | $\frac{\alpha}{\sqrt{5}}$ | 0 | $-i\frac{1}{\sqrt{2}}\beta$ |

**الجدول 4 (الجزء الثاني): مصفوفة $J=\frac{5}{2}$ (12x12)**

| \|3/2,3/2> | \|3/2,1/2> | \|3/2,-1/2> | \|3/2,-3/2> | \|1/2,1/2> | \|1/2,-1/2> |
|---|---|---|---|---|---|
| 0 | $-i\sqrt{\frac{2}{5}}\beta$ | 0 | $-\frac{3}{4}\sqrt{\frac{6}{5}}\lambda c$ | $-i\frac{1}{\sqrt{2}}\beta$ | 0 |
| $-\frac{3}{10}\sqrt{\frac{3}{2}}\lambda c-\frac{\sqrt{6}}{5}\alpha$ | 0 | $i\frac{2\sqrt{2}}{5}\beta$ | 0 | 0 | $-i\frac{1}{\sqrt{10}}\beta$ |
| 0 | $\frac{9}{10}\lambda c-\frac{\alpha}{5}$ | 0 | $i\frac{\sqrt{3}}{5}\beta$ | $\frac{\alpha}{\sqrt{5}}$ | 0 |
| $-i\frac{\sqrt{3}}{5}\beta$ | 0 | $\frac{9}{10}\lambda c-\frac{\alpha}{5}$ | 0 | 0 | $\frac{\alpha}{\sqrt{5}}$ |
| 0 | $-i\frac{2\sqrt{2}}{5}\beta$ | 0 | $-\frac{3}{10}\sqrt{\frac{3}{2}}\lambda c-\frac{\sqrt{6}}{5}\alpha$ | $i\frac{1}{\sqrt{10}}\beta$ | 0 |
| $-\frac{3}{4}\sqrt{\frac{6}{5}}\lambda c$ | 0 | $i\sqrt{\frac{2}{5}}\beta$ | 0 | 0 | $i\frac{1}{\sqrt{2}}\beta$ |
| $-a+\lambda b-\frac{6\lambda c}{5}+\frac{2\alpha}{5}$ | 0 | $-i\frac{4}{5\sqrt{3}}\beta$ | 0 | 0 | $i\frac{1}{\sqrt{15}}\beta$ |
| 0 | $-a+\lambda b-\frac{6\lambda c}{5}+\frac{2\alpha}{15}$ | 0 | $-i\frac{4}{5\sqrt{3}}\beta$ | $\frac{\alpha}{3\sqrt{5}}$ | 0 |
| $i\frac{4}{5\sqrt{3}}\beta$ | 0 | $-a+\lambda b-\frac{6\lambda c}{5}+\frac{14\alpha}{15}$ | 0 | 0 | $\frac{\alpha}{3\sqrt{5}}$ |
| 0 | $i\frac{4}{5\sqrt{3}}\beta$ | 0 | $-a+\lambda b-\frac{6\lambda c}{5}+\frac{14\alpha}{5}$ | $-i\frac{1}{\sqrt{15}}\beta$ | 0 |
| 0 | $\frac{\alpha}{3\sqrt{5}}$ | 0 | $i\frac{1}{\sqrt{15}}\beta$ | $-\frac{5a}{2}+\frac{25\lambda b}{4}+\frac{3\lambda c}{2}+\frac{2\alpha}{3}$ | 0 |
| $-i\frac{1}{\sqrt{15}}\beta$ | 0 | $\frac{\alpha}{3\sqrt{5}}$ | 0 | 0 | $-\frac{5a}{2}+\frac{25\lambda b}{4}+\frac{3\lambda c}{2}+\frac{2\alpha}{3}$ |




الشكل 2: مخطط مستويات الطاقة باستخدام معادلة (5) B//[001]

### 4. المناقشة والاستنتاجات Discussion and Conclusions

باستخدام نموذج المطاوعة متعامدة المحاور على العينة $GaAs:V^{2+}$ احتسبت عناصر مصفوفة مؤثر طاقة البرم $\mathcal{H}_{spin}$ الذي أشتمل على حدود المرتبة الرابعة للمطاوعة متعامدة المحاور . مع الأخذ بنظر الاعتبار أن تأثيرات جان – تيلر ليست من النمط $T\otimes(e+t_2)$ فحسب وإنما يمكن الافتراض أن تأثيرات جان – تيلر تأخذ تأثيرات الطاقة من النمط $(T\otimes e)$ وان إزاحة الايون $V^{2+}$ يتأثر بكلا النمطين الاهتزازيين $(t_2\,\&\,e)$ مما يجعل النسبة $\frac{D}{E}$ ليست محددة . وهذا ما أوجد التفاوت بين نتائج نموذج هذا العمل ونموذج Rampton .

إن الحصول على نتائج تجريبية للعينة $GaAs:V^{2+}$ يتيح إمكـان ضـبط معـاملات النمـوذج المـستخدم فـي هـذا العمـل وتحديـد مقـدار معامـل التحويـل . فـضلا عمـا أثـاره (Ropka and Radwanski, 1999) من أن نظرية جان– تيلـر قـد تناولـت حتـى الآن , تـأثر الاوربيتالات حسب بالأنماط الاهتزازية في حـين تـرى دراسـة (Ropka and Radwanski, 1999) إمكان احتساب تأثر البرم فضلا عن الاوربيتالات بتأثيرات جان – تيلر .

وإذا كانت الدراسات الحديثة (Levinshtein et al. , 2001) تشير إلى مركبات شبه موصـلة أكثر تطوراً من مركبات III-V تلك هي مركبات GaN, InN , SiC "على سبيل المثال" والتي لهـا

استخدامات فيما صار يعرف نانو الكترونكس . فإن الجهد النظري لصياغة مؤثرات الطاقة ومؤثرات البرم ودراسة الفيزياء النظرية لهذه المركبات يشكل تواصلاً لهذا الجهد.

## 5. المصادر References


- Abragam A. and Pryce M.H.L., Theory of the Nuclear Hyperfine Structure of Paramagnetic Resonance Spectra in Crystals , *Proc. Rov. Soc. A,* 205, 135 (1951).
- Adachi S., Physical Properties of III-V Semiconductor Compounds , John Willey & Sons , Inc., New York1 (1992).
- AL-Sheikh A.M., Theoretical Model for Vanadium Doped Gallium Arsenide, Rar. J. Sc. , Vol.16 , Phys. Special issue , No. 1 (2005).
- Badran R.I.,A Theoretical Study for the Excited $^3T_2$ Vibronic State of the $V^{3+}$Ion in GaP:V:S Under Uniaxial Stresses, Mu' tah Journal For Research and Studies Vol.12, No. 3 (1997) .
- Bates C.A., Chandler P.E. and Stevens K.W., Isomorphism and the Spin-Phonon Interaction for $(3d^n)$ Ions , J. Phys. C: Solid State Physics, Vol.4, 2017-2023 (1971) .
- Chen J.J. and Du M.L., Z.,Theoretical Investigation of the Optical Spectrum and the Gyromagnetic *g* Factor of CdS:$V^{3+}$ , Z. Naturforsch. **57a,** 745–748 (2002) .
- Hall G.G., Applied Group Theory , Longman Group Limited , London (1971) .
- Howald R. A., Calculation of Tanabe-Sugano Diagrams by Matrix Diagonalization , Chem. Educator , 6 ,78-85 (2001) .
- Katayama-Yoshida and Zunger A. , Prediction of a Low-Spin Ground State in the GaAs:$V^{2+}$Impurity System , Phys. Rev. B, 33, 2961-4 (1986) .
- Kayali S., GaAs Material Properties, Web Sit www.jpl.nasa.gov/mmic/3-1.PDF (2004) .
- Kutt W., Bimberg D., Maier M., Krautle H., Kohl F. and Bauser E., Heat Treatment Induced Redistribution of Vanaduium in Semi-insulating GaAs:V , Appl. Phys. Lett. 44 , 1078-80 (1984) .
- Levinshtein M.E.,Rumyantsev S.L. and Shur M.S., Properties of Advanced Semiconductor Materials GaN, AlN, InN, BN, SiC, SiGe, John Willey & Sons , Inc., New York (2001) .
- Rampton V.W., Saker M.K. and Ulrici W. , Acoustic Paramagnetic Resonance of Vanadium in Semi-insulating GaAs , J.Phys. C: Solid State Physics, 19 , 1037-1043 (1986) .
- Ropka Z. and Radwanski R.J., The Jahn-Teller theorem for the 3d magnetic ion, Phys. Rev. Lett. : 16.02 . Web Sit www.arXiv:cond-mat/0006231 V1 14 Jun 2000 (1999) .
- Web Sit, www.luc.edu/faculty/spavko1/c340/lect/Lect-13 PDF (2004) .