المستخلص

نقدم في هذه الرسالة دراسة لبعض العيوب النقطية في التركيب الشبيكي البلوري لبعض البلورات وتأثيرها على مختلف الخواص الإلكترونية (طاقة التأين ، الألفة ألالكترونية ، فجوة الطاقة ، والكهروسالبية) ، والخواص التركيبية (طاقة التماسك ، وطاقة تكوين العيب). وقد تم ذلك من خلال أفتراض نموذج بلوري مناسب وملائم لأفتراض العيب النقطي فيه ، و في مواضع مختلفة في الشبيكة البلورية ، ثم نجري حساباتنا على التركيب البلوري بأستخدام الطرائق التقريبية الجزيئية مثل (ab initio , DFT) لحساب الطاقات الكلية والحركية والكولومية للمنظومة البلورية وتحديد الخواص الإلكترونية والتركيبية كدالة للعيب النقطي من حيث موقع العيب ونوع الذرة المكونة له ، ومقارنة التغير الحاصل في تلك الخواص بوجود تلك العيوب مع الحالة المثالية . كما تناولنا التماس الذري للألمنيوم من خلال أفتراض قطبي ألمنيوم بشكل هرمي ودراسة التوصيل الذري لهذه الوصلات من خلال تغيير المسافة بين القطبين بغياب أو بوجود ذرات (H , O , N) الرابطة والموصلة بين الأقطاب . وفي هذا الصدد نقوم بحساب عدة خصائص منها (فجوة الطاقة ، الطاقة الحركية ، الجهد الكيميائي الإلكتروني ، الصلابة الكيميائية) لهذه الوصلات كدالة للمسافة ولنوع الذرات الموصلة بين الأقطاب بأستعمال الطريقة الحسابية لنظرية دالة الكثافة Density Functional Theory(DFT).