---- مجلة علوم الرافدين، المجلد 21، العدد 1، ص73-89، 2010----

استخدام طريقة مونتي كارلو في حساب الصور الفونونية

أسماء زكي خليل **ممتاز محمد صالح حسين**

قسم الفيزياء

كلية التربية

جامعة الموصل

(تاريخ الاستلام 20/ 4 / 2009 ؛ تاريخ القبول 5 /10 / 2009)

الملخص

تم في هذا البحث استخدام طريقة مونتي كارلو لحساب الصور الفونونية لعدد من بلورات أشباه الموصلات المكعبة من المجموعة الثالثة-الخامسة والمجموعة الثانية-السادسة التي تملك تناظر عالي وبلورات من نظام المعين القائم ذات التناظر الواطئ, كما تم إعداد خوارزميات وإعداد برامج بلغة الـMATLAB لحساب سرع الطور وسطوح التوهين وسرع المجموعة ثم تكوين الصور الفونونية وذلك بتكوين عدد كبير من النقاط في منطقة بريليون المختزلة وتحويل هذه النقاط إلى فضاء سرعة المجموعة بحل معادلة كريستوفل لكل نقطة من هذه النقاط, ثم إجراء عمليات الإسقاط في اتجاه معين يتم تحديده وتحويل النبضات الساقطة إلى سويات رمادية للحصول على الصورة النهائية. وقد أجرينا مقارنة بين طريقة مونتي كارلو والطريقة النظامية لحساب الصور الفونونية في هذه البلورات.

Using Monte Carlo Method for Calculating Phonon Images

Asma'a Z. Khalel **Momtaz M. Hussien**

Department of Physics
College of Education
Mosul University

ABSTRACT

In this paper a Monte Carlo method has been used to calculate the phonon images of a number of semiconductor cubic crystals from III-V and II-VI groups (higher symmetry) and orthorhombic crystals (lower symmetry). An algorithms a MATLAB codes has been prepared for the calculation of phase velocities, slowness surfaces and group velocities and the formation of the phonon images which required a large number of points in the reduced Brillion zone, these points has been transformed to the group velocity space by solving the Christoffel equation for each of these points, a projection in a given direction is obtained, each incident pluses is transformed to gray level to form the final image. A comparison between the Monte Carlo and systematic methods has been done for the calculated images.

المقدمة

تعد طريقة مونتي كارلو من الطرق العددية المهمة التي تأخذ تطبيقات واسعة في العديد من المجالات في الفيزياء وتستخدم في إجراء المحاكاة لعديد من الظواهر، وتطلق هذه التسمية على أي طريقة عددية تستخدم الأعداد العشوائية. وحركة الموجات في البلورات هي إحدى المجالات التي تتطلب استخدام طريقة مونتي كارلو لحل معادلة الموجة في اتجاهات كثيرة. ولتحديد اتجاهات سير وانتقال الطاقة داخل البلورة عند تسليط نبضة حرارية على سطح البلورة، فان الاضطرابات تبدأ بالانتشار في كافة الاتجاهات في البلورة. والموجات المرنة تسلك نفس السلوك في البلورة حيث تنتقل الموجات بشكل انتشاري وبدون استطارة أو تشتت عندما تكون البلورة في درجات حرارة واطئة، في هذه الحالة ينعدم تأثير الاهتزازات البلورية على الموجة المنتقلة داخل البلورة، وعمليا يمكن للتأثير الحراري أو لشعاع الليزر المسلط على بلورة في درجة حرارة واطئة من تكوين موجات مرنة تنتشر في البلورة وبترددات عالية جدا(Wolfe and Hauser, 1995 و Wolfe, 1998). ومن ما يميز البلورات عن غيرها أنها أوساط تعتمد على الاتجاه في خواصها، لذا فان سرعة الموجة تختلف من اتجاه إلى أخر(Wolfe, 1980 و Wolfe, 1995). وعرفت هذه الظاهرة منذ عقود في تجارب النبضات الحرارية (Von Gutfeld and Nethercot, 1964 و Taylor *et al.*, 1971) حيث تتحرك الأنماط المختلفة للموجة المرنة داخل البلورة بسرعات مختلفة وتتغير هذه السرعات بتغير الاتجاه. ولابد من التفريق هنا بين سرعة الطور وسرعة المجموعة حيث أن كل منهما يتغير بشكل مختلف عن الأخر من حيث المقدار والاتجاه. اهتم الباحثون كثيرا بسرعة المجموعة وذلك لأنها تمثل اتجاه انتقال الطاقة داخل البلورة حيث تتمركز في اتجاهات معينة وتقل باتجاهات أخرى وتدعى هذه الظاهرة بالتمركز الفونوني، ودرس التمركز الفونوني عمليا ونظريا(Northrop and Wolfe, 1980 و Every, 1980 و Hurley, Wolfe, 1985) في العديد من الأنظمة البلورية(Winternheimer and McCurdy, 1978 و Every, 1987). قام (Northrop and Wolfe, 1980) بتقديم طريقة عملية في تكوين التمركز الفونوني باستخدام شعاع الليزر لتكوين التمركز الفونوني في البلورات المكعبة. كما درست بشكل نظري من قبل (Every, 1980). واستخدمت طريقة مونتي كارلو لتكوين الصور الفونونية بشكل نظري (Hurley and Wolfe 1985). في هذا البحث سوف نستخدم طريقة مونتي كارلو لحساب الصور الفونونية ومقارنتها مع الطريقة النظامية ولبلورات ذات تناظر عالي (مكعبة) وأخرى ذات تناظر واطئ (معيني قائم). وسوف نطبق هذه الطريقة على بعض بلورات أشباه الموصلات من المجموعة (الثالثة–الخامسة) ومن المجموعة (الثانية–السادسة) المختارة.

الجزء النظري

لغرض إجراء الدراسة النظرية وحساب الصور في البلورات لابد من حل معادلة الموجة، وهذه المعادلة تأخذ الشكل التالي :

$$\rho \ddot{u}_i = \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} = C_{ijlm} \frac{\partial^2 u_l}{\partial x_j \partial x_m} \qquad \text{...} \quad (1)$$

حيث أن ρ تمثل كثافة البلورة، u_i تمثل الإزاحة بالاتجاه i عن موضع الاستقرار، و x_m تمثل الإزاحة بالاتجاه m ، و σ_{ij} ممتدة الإجهاد (Stress tensor) و C_{ijlm} هي الرتبة الرابعة لممتدة المرونة في البلورة وترتبط مع ممتدة المطاوعة e_{lm} (Strain tensor) من خلال قانون هوك:

$$\sigma_{ij} = C_{ijlm} e_{lm} \qquad \text{...} \quad (2)$$

بتطبيق حل معادلة الموجة المستوية على المعادلة (1) ينتج معادلة القيمة الذاتية :

$$(C_{ijlm} \vec{k}_j \vec{k}_m - \rho \omega^2 \delta_{ij}) \varepsilon_l = 0 \text{ ....} \quad (3)$$

وتعطي متجهات $\vec{k}$ الثلاثة ثلاث حلول للقيم الذاتية $\omega_\alpha(\vec{k})$ للمعادلات أعلاه. حيث أن $\alpha = 0,1,2$ وهي تكون مماثلة لأنماط المرونة الثلاث وهي نمط الفونونات الطولية (LA) و نمط الفونونات المستعرضة السريعة (FTA) ونمط الفونونات المستعرضة البطيئة (STA) على التوالي. وللحصول على حل للمعادلة (3) فان المحدد $(C_{ijlm} \vec{k}_j \vec{k}_m - \rho \omega^2 \delta_{ij})$ يجب أن يساوي صفر وتعرف المعادلة الناتجة بمعادلة كريستوفل، وهي علاقة تربط بين سرعة الطور و ثوابت المرونة للبلورة ويمكن وضع معادلة كريستوفل بالصيغة التالية :

$$\left| (\Gamma_{ij} - \rho v^2 \delta_{ij}) \right| = 0 \text{ ....} \quad (4)$$

حيث أن Γ_{ij} هي كمية ممتدة وتساوي $\Gamma_{ij} = C_{ijlm} n_j n_m$. n_j و n_m هما الوحدة الاتجاهية لمتجه الموجة في الاتجاه j و m على التوالي ، يمكن إيجاد سرعة الطور وللأنماط الثلاثة بحل معادلة كريستوفل باعتبارها القيم الذاتية للمعادلة (3)، أو من خلال فتح المحدد معادلة (4) والحصول على معادلة مثلثية لـ ρv^2 والتي يمكن حلها للحصول على سرعة الطور وللأنماط الثلاث الطولية والمستعرضة السريعة والبطيئة. وللحصول على سرعة المجموعة يمكن الرجوع إلى معادلة كريستوفل التي يمكن منها الحصول على علاقة $\Omega(\omega, k) = 0$ تربط بين التردد الزاوي ω ومتجه الموجة k ومن هذه العلاقة نجد سرعة المجموعة بإجراء الاشتقاق الضمني للحصول على صيغة لسرعة المجموعة v_g

$$v_g = \frac{\partial \omega}{\partial k} = -\frac{\bar{\nabla}_k \Omega}{\frac{\partial \Omega}{\partial \omega}} \quad \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \quad (5)$$

وبالاستفادة من معادلة كريستوفل (4) والتي يمكن تطبيقها على أي نظام بلوري، حيث أن

$$\begin{aligned}\Omega(\omega,k) = &-(\rho v^2)^3 + (\rho v^2)^2\left[\Gamma_{11}+\Gamma_{22}+\Gamma_{33}\right] \\ &-(\rho v^2)\left[\Gamma_{11}\Gamma_{22}+\Gamma_{22}\Gamma_{33}+\Gamma_{11}\Gamma_{33}-\Gamma_{12}^2-\Gamma_{23}^2-\Gamma_{13}^2\right] \quad \ldots\ldots\ldots \quad (6) \\ &+\left[\Gamma_{11}\Gamma_{22}\Gamma_{33}+2\Gamma_{12}\Gamma_{23}\Gamma_{13}-\Gamma_{12}^2\Gamma_{33}-\Gamma_{23}^2\Gamma_{11}-\Gamma_{13}^2\Gamma_{22}\right]=0\end{aligned}$$

للبلورات المكعبة (ذات تناظر عالي) لدينا الثوابت Γ_{ij} التي تساوي

$$\Gamma_{11} = (C_{12}+C_{44})n_1^2 + C_{44}(n_1^2+n_2^2+n_3^2) \quad \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \quad (7a)$$

$$\Gamma_{22} = (C_{12}+C_{44})n_2^2 + C_{44}(n_1^2+n_2^2+n_3^2) \quad \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \quad (7b)$$

$$\Gamma_{33} = (C_{12}+C_{44})n_3^2 + C_{44}(n_1^2+n_2^2+n_3^2) \quad \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \quad (7c)$$

$$\Gamma_{12} = (C_{11}-C_{44})n_1n_2 \quad \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \quad (7d)$$

$$\Gamma_{13} = (C_{11}-C_{44})n_1n_3 \quad \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \quad (7e)$$

$$\Gamma_{23} = (C_{11}-C_{44})n_2n_3 \quad \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \quad (7f)$$

بتعويض المعادلة (7) في (6) وبتطبيق المعادلة (5) يمكن الحصول على صيغة لمركبات سرعة المجموعة الثلاث للبلورات المكعبة بدلالة سرعة الطور والوحدات الاتجاهية لمتجه الموجة. أما بالنسبة لبلورات المعين القائم (ذات تناظر واطئ) فان الثوابت Γ_{ij} تساوي

$$\Gamma_{11} = C_{11}n_1^{\,2} + C_{66}n_2^{\,2} + C_{55}n_3^{\,2}) \quad \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \quad (8a)$$

$$\Gamma_{22} = C_{66}n_1^{\,2} + C_{22}n_2^{\,2} + C_{44}n_3^{\,2} \quad \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \quad (8b)$$

$$\Gamma_{33} = C_{55}n_1^{\,2} + C_{44}n_2^{\,2} + C_{33}n_3^{\,2} \quad \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \quad (8c)$$

$$\Gamma_{12} = (C_{12}-C_{66})n_1n_2 \quad \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \quad (8d)$$

$$\Gamma_{13} = (C_{13}-C_{55})n_1n_3 \quad \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \quad (8e)$$

$$\Gamma_{23} = (C_{23}-C_{44})n_2n_3 \quad \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \quad (8f)$$

وكما في حالة البلورات المكعبة بوضع المعادلة (8) في المعادلة (6) بتطبيق المعادلة (5) يمكن الحصول على صيغة لمركبات سرعة المجموعة الثلاث للبلورات المعين القائم نضع الصيغة النهائية بدلالة سرعة الطور والوحدات الاتجاهية لمتجه الموجة .

خوارزمية حساب الصور الفونونية

حسابيا للحصول على الصور الفونونية في أي نظام بلوري لا بد من حل معادلة كريستوفل في ذلك النظام البلوري، ويتم ذلك بتحديد متجه الموجة حيث نجد الحل بذلك الاتجاه، وكما هو معلوم أن خصائص البلورات تعتمد على الاتجاه، وفي اتجاه معين لمتجه الموجة فأن اتجاه سرعة الطور وسرعة المجموعة لا تتطابق بالضرورة في جميع الاتجاهات. ونتيجة لذلك الاختلاف في اتجاه سرعة المجموعة التي تعتبر اتجاه

انتشار الطاقة داخل البلورة عن اتجاه سرعة الطور يؤدي إلى الحصول على صور التمركز الفونوني. ولغرض الحصول على الصور الفونونية باتجاه معين في البلورة لا بد من حساب سرعة المجموعة لأعداد كبيرة جدا من النقاط، وهذه النقاط التي يتم تكوينها تمثل متجهات متجه الموجة $\{k_i\}$ ثم يتم تحويل جميع هذه النقاط إلى سرع للمجموعة $\{v_{gi}\}$ ويحول كل متجه من سرع المجموعة إلى مسقط بالاتجاه المطلوب وتجمع هذه المساقط لتكوين مصفوفة الصورة النهائية وهذه المصفوفة تحوي كافة المعلومات عن الصورة. بتحديد اتجاه الإسقاط والنافذة المطلوبة لدينا نوعين من النقاط التي يتم إسقاطها، النوع الأول يقع ضمن النافذة المحددة وتسجل هذه النقاط بشكل نبضات في الصورة النهائية، أما النوع الثاني من النقاط التي تقع خارج نطاق النافذة المطلوبة فينم إهمالها من الحسابات. وبعد إجراء ذلك لكافة النقاط نحصل على مصفوفة ذات بعدين، وسوف نختار هذه المصفوفة لتكون بشكل (256×256) نقطة، كل نقطة في المصفوفة تمثل بالوسم ij ويمثلان موضع تلك النقطة في الصورة في حين أن قيمة العنصر تمثل الشدة لتلك النقطة، تحول هذه الارتفاعات إلى سويات رمادية وترسم الصورة النهائية.

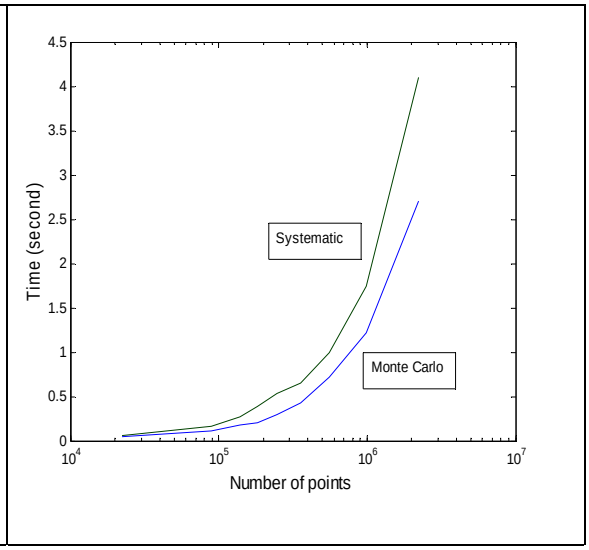
في البلورات ذات التناظر العالي (البلورات المكعبة)، توظف الخصائص التناظرية لهذه البلورات في أجراء الحسابات، في هذا البحث كونت النقاط المطلوبة كمتجهات متجه الموجة في منطقة برليون المختزلة تحسب سرعة المجموعة لكل نقطة وبإجراء العمليات التناظرية نحصل على الحل النهائي الذي يحاكي انتقال الطاقة في جميع الاتجاهات من الفضاء. وتقلل هذه العمليات التناظرية زمن تنفيذ البرنامج إلى $\frac{1}{48}$ من الزمن الكلي. في البلورات ذات التناظر الواطئ وهنا هي بلورات المعين القائم، نقاط متجه الموجة في المنطقة المختزلة وهي تمثل $\frac{1}{8}$ الفضاء الكلي تحسب سرع المجموعة لهذه النقاط للحصول على الصورة النهائية، في هذه البلورات يختزل زمن التنفيذ إلى $\frac{1}{8}$ الزمن الكلي من خلال العمليات التناظرية.

في هذا البحث كونا النقاط في المنطقة المختزلة بطريقتين: الطريقة النظامية والطريقة العشوائية (طريقة مونتي كارلو)، وللحصول على تجانس عالي يتطلب ذلك تكوين نقاط كثيرة جدا في المنطقة المختزلة. الطريقة النظامية وهي التي تكون نقاط موزعة بشكل متساوي تقريبا في الفضاء باستخدام الزوايا في الإحداثيات الكروية القطبية $\{\theta_i, \varphi_j\}$ وهذه الطريقة تستغرق وقت أطول من طريقة مونتي كارلو والتي تكون نقاط عشوائية داخل المنطقة المختزلة وخاصة أننا نعلم أن تكوين الصورة تحتاج نقاط كثيرة جدا، يبين الشكل (1) الوقت المستغرق لتكوين نقاط في المنطقة المختزلة باستخدام الطريقتين، والنقاط المكونة بطريقة مونتي كارلو يجب أن تكون كثيرة للحصول على تجانس عالي وكثافة نقاط متساوية في جميع الاتجاهات وهذه النقطة مهمة جدا في إجراء المحاكاة للصور الفونونية في البلورات. بين الشكل (2) منطقة برليون الكاملة والمختزلة للبلورات المكعبة، ويمكن تكوين نقاط داخل هذه المنطقة بشكل متجهات الوحدة يمكن ملاحظة ذلك في الشكل (3).

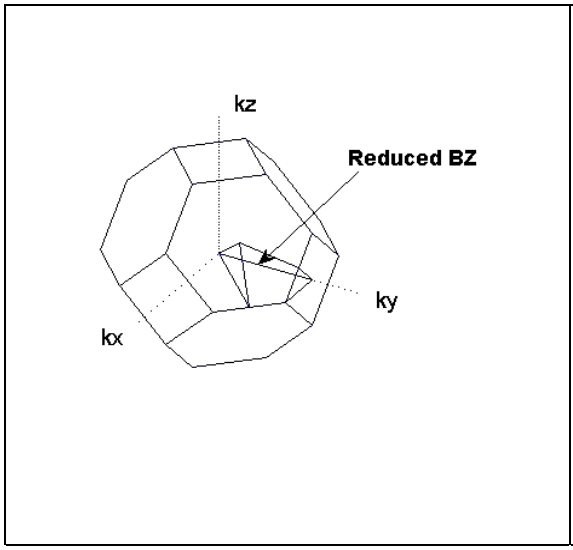
تطبيق طريقة مونتي كارلو على بعض البلورات المكعبة :

في البلورات المكعبة يمكن تعريف فضاء اللاتماثل من خلال قيم ثوابت المرونة الثلاث (C_{11}, C_{12}, C_{44}) وكما يلي $a = \frac{C_{11}}{C_{44}} \& b = \frac{C_{12}}{C_{44}}$ هذان المعاملان يشكلان فضاء اللاتماثل للبلورات المكعبة. ويمكن تحديد موقع كل بلورة في هذا الفضاء، تحدد قيم $(a \& b)$ اللاتماثل في سرع الطور في حين أن قيم $(C_{ij} \& \rho)$ تحدد القيم المطلقة لسرعة الطور لهذه البلورات. يمكن حساب المعامل (Δ) من المعادلة $(\Delta = a - b - 2)$، عندما تكون $(\Delta = 0)$ في هذا الفضاء هذا يعني ان البلورة التي تقع على هذا الخط تمتاز بالتماثل التام، أي أن قيم سرعة الطور متماثلة ولا تعتمد على الاتجاه وبذلك تكون سطوح سرعة الطور والتوهين كروية وخصائص البلورة في هذه الحالة لا تعتمد على الاتجاه. وسرعة المجموعة تساوي سرعة الطور في كافة الاتجاهات.

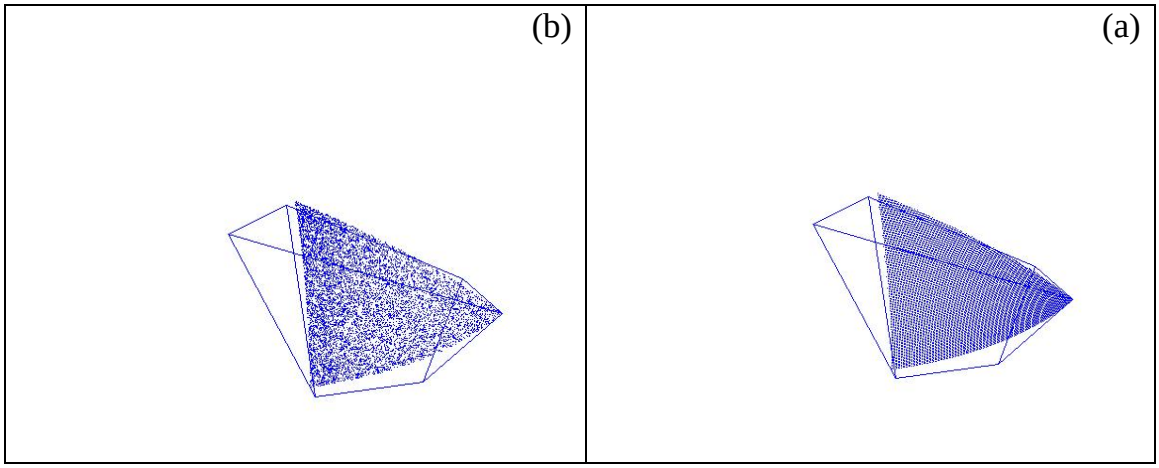
يقسم خط التماثل $(\Delta = 0)$ فضاء اللاتماثل إلى منطقتين الأولى يكون فيها المعامل $(\Delta > 0)$ وهذه المنطقة هي منطقة اللاتماثل الموجب وتقع أعلى الخط $(\Delta = 0)$ في حين أن المنطقة $(\Delta < 0)$ هي منطقة اللاتماثل السالب والتي تقع أسفل الخط $(\Delta = 0)$. في هذا البحث تم اختيار بلورات من المجموعة الثالثة –الخامسة وهي GaSb و InAs و المجموعة الثانية– السادسة ZnSe كأمثلة على البلورات المكعبة شبه الموصلة. وقد اعتمدنا في هذه الدراسة على ثوابت المرونة للبلورات المكعبة المختارة من المصدر Derby 2007. يبين الجدول (1) قيم a و b و Δ للبلورات GaSb و InAs و ZnSe . يبين الشكل (4) الصور الفونونية للبلورات GaSb و InAs و ZnSe وللنمطين المستعرضين T1 و T2 وكونت هذه الصور بطريقة مونتي كارلو من فضاء متجه الموجة عدد نقاطه 2.5×10^5 نقطة في منطقة برليون المختزلة، حولت هذه النقاط إلى فضاء سرعة المجموعة ثم أجريت عليها العمليات التناظرية للحصول على متجهات سرعة المجموعة في كل الفضاء. تم إسقاط هذه المجموعة من المتجهات بالاتجاه <100> وضمن نافذة محددة بالزوايا القطبية بعرض 25^o من منتصف الصورة نحو الأعلى والأسفل ونحو اليمين واليسار. من النقاط الـ 2.5×10^5 نقطة في المنطقة المختزلة نحصل على 12×10^6 نقطة في الفضاء الكامل نتيجة العمليات التناظرية ومن إسقاط هذه النقاط وضمن النافذة المحددة نحصل بحدود 2×10^6 نقطة لتكون الصورة الواحدة وذلك حسب النمط والبلورة المختارة، ويستغرق البرنامج الذي تم إعداده في هذه البحث لحساب الصور هو 3.8 دقيقة وقد يتفاوت هذا الوقت قليلا حسب نوع البلورة والنمط المستخدم والنافذة التي تحدد الصورة. تم إجراء بعض المعالجات البسيطة على الصور المحسوبة في هذا البحث باستخدام برنامج جاهز هو (Adobe Photoshop) وذلك لمعالجة مسالة الإضاءة والتباين للصورة المحسوبة لكي نتمكن من عرض الصور وبيان ملامح هذه الصور. يتميز النمط المستعرض T1 من الاتجاه <100> بالمنطقة الوسطية الناتجة عن الطية في فضاء سرعة المجموعة وهي تأخذ شكل المعين المستدير الزوايا ورؤوس المعين تمثل الشدة الأعلى. من الشكل (4) إن الزيادة السالبة لعامل اللاتماثل (Δ) للبلورات المكعبة الثلاث المختارة يؤدي إلى اتساع الطية للنمط المستعرض T1 و T2 لاحظ الشكل 4(b) و 4(d) و 4(f).



الشكل 1: مقارنة بين الطريقة النظاميـة وطريقة مونتي كارلو في تكوين عدد من النقـاط فـي المنطقـة المختزلة.



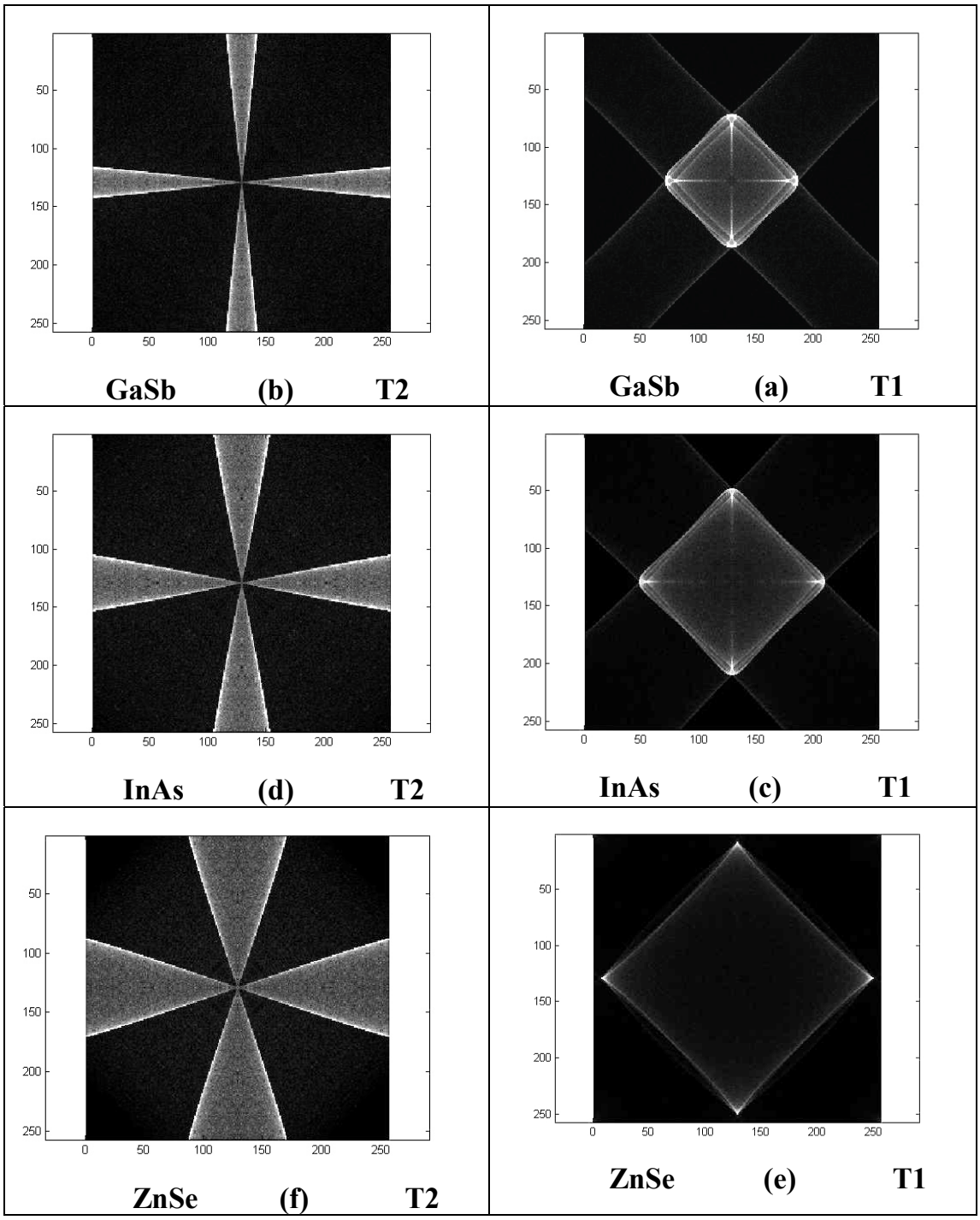
الشكل 2: منطقة برليون ومنطقة برليون المختزلة .



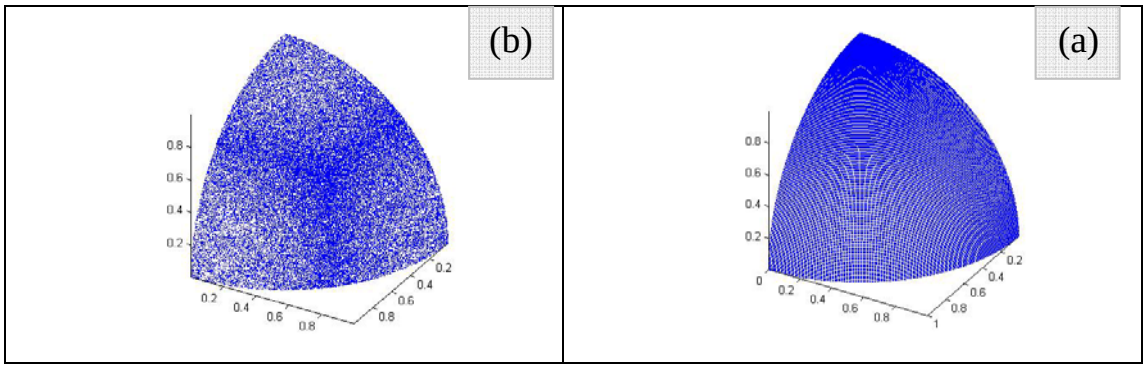
الشكل 3: (a) نقاط مكونة بطريقة نظامية (b) نقاط مكونة بطريقة مونتي كارلو في المنطقة المختزلة.

الجدول 1: قيم المتغيرات a و b و عامل اللاتماثل (Δ) للبلورات المكعبة

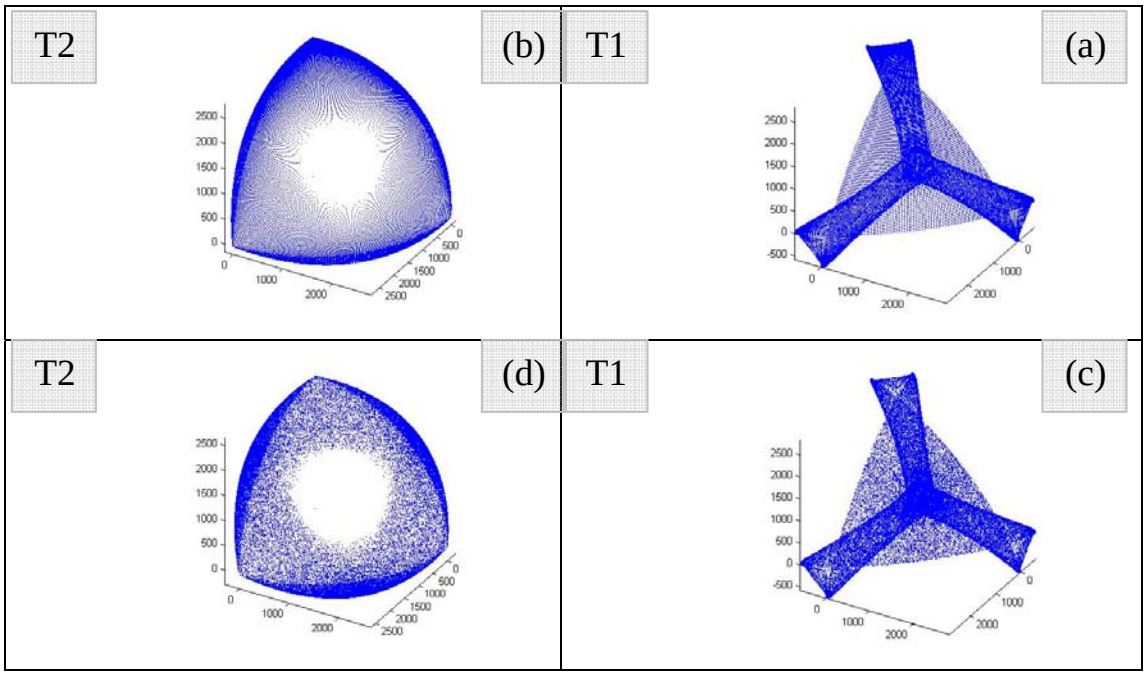
اسم البلورة	a	b	(Δ)
GaSb	2.0440	0.9306	- 0.8866
InAs	2.1035	1.1439	-1.0404
ZnSe	1.8284	1.0858	- 1.2573



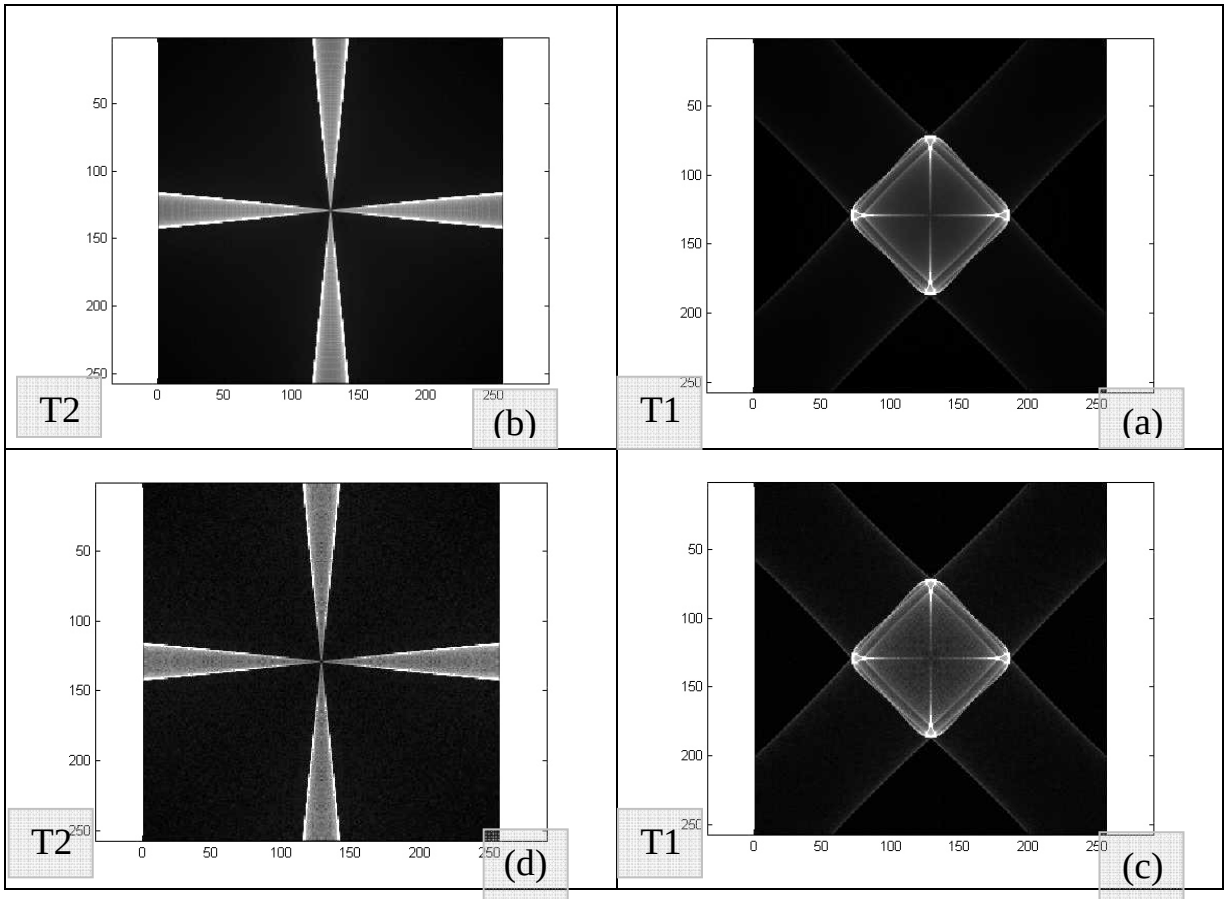
الشكل 4: الصور الفونونية لبلورات GaSb و InAs و ZnSe بطريقة مونتي كارلو للنمطين المستعرضين من الاتجاه <100>



الشكل 5: نقاط متجه الموجه في $\frac{1}{8}$ الفضاء (a) بطريقة نظامية (b) بطريقة مونتي كارلو



الشكل 6: مقارنة بين سطوح سرعة المجموعة للبلورة GaSb لنمطين المستعرضين، (a) و (b) باستخدام الطريقة النظامية (c) و (d) باستخدام طريقة مونتي كارلو.



الشكل 7: مقارنة بين الصور الفونونية للبلورة GaSb (a) و (b) باستخدام الطريقة النظامية (c) و (d) باستخدام طريقة مونتي كارلو

تمت المقارنة بين طريقة مونتي كارلو والطريقة النظامية من خلال حساب سطح سرعة المجموعة بالطريقتين لبلورة GaSb، يبين الشكل a(5) نقاط متجه الموجه في $\frac{1}{8}$ الفضاء بطريقة نظامية حيث استخدمت الإحداثيات القطبية لتكوين 6×10^4 نقطة ، هذه التوزيع كما نلاحظ من الشكل لا يعتبر متجانس تماما حيث هنالك كثافة نقاط في الاتجاه <001> أكثر من الاتجاه <100> وهو الاتجاه مناظر له. في حين أن النقاط بطريقة مونتي كارلو الشكل (b)5 فيها تجانس أكثر رغم ظهور منطقة في الوسط أكثر كثافة من الأطراف لكن هذه بسبب قلة عدد النقاط التي أخذت هنا، ونحصل على التجانس عند زيادة عدد النقاط في حين لا نحصل على التجانس التام باستخدام الطريقة النظامية. ونتيجة ذلك نحصل على سطح سرعة المجموعة حيث يلاحظ اختلاف واضح في الاتجاه <001>. للنمطين المستعرضين باستخدام الطريقتين النظامية و مونتي كارلو، الشكل (6). والشكل (7) يبين المقارنة بين الطريقتين حيث أن الاختلاف الذي ذكر الآن يظهر بشكل اختلاف في الشدة في الصورة في منطقة معينة من الصورة حول الاتجاه <100> ومن ملاحظة الشكل تبدو هذه النقطة في النمط T2 أكثر منها من النمط T1.

تطبيق طريقة مونتي كارلو على بلورات المعين القائم

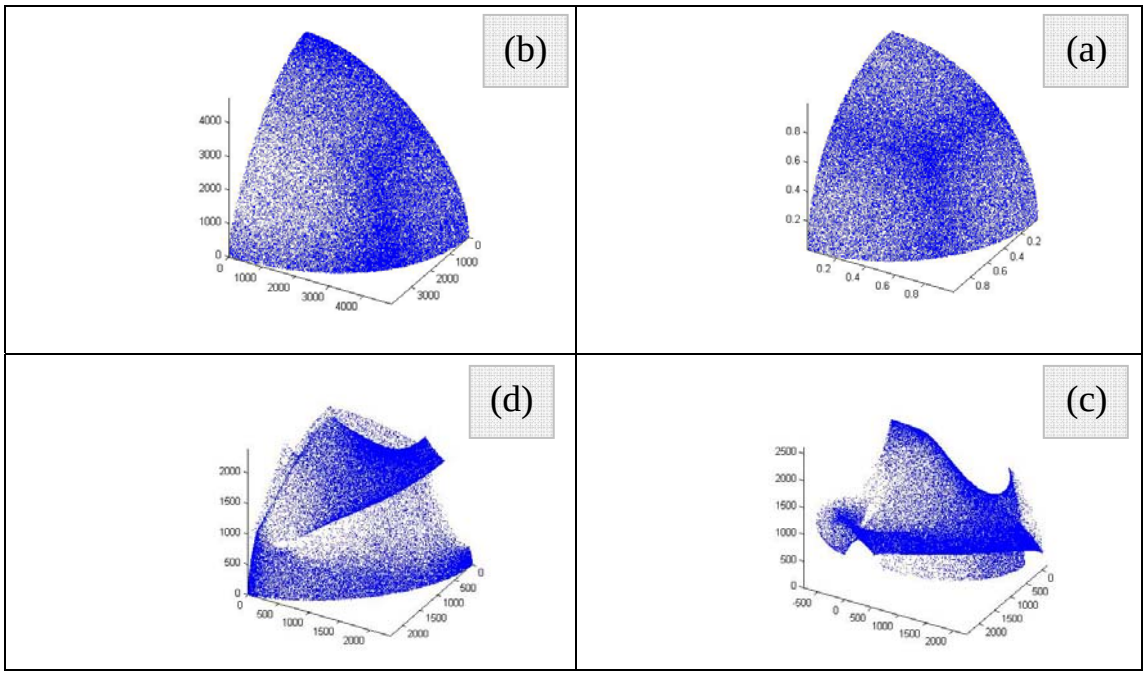
تتميز بلورات المعين القائم بان خصائصها التناظرية مختلفة عن البلورات المكعبة، وهنالك دراسات قليلة عليها من حيث الصور الفونونية (Winternheimer and McCurdy, 1978 و Lau and McCurdy, 1998). ففي البلورات المكعبة يعتبر الاتجاه <100> مناظر تماما للاتجاه <010> أو الاتجاه <001> وبقية الاتجاهات الأخرى المناظرة له، في حين أن بلورات المعين القائم يعتبر الاتجاه <100> مختلف تماما عن الاتجاه <010> أو الاتجاه <001>، وبذلك فهي بلورات ذات تناظر واطئ، حيث أن المنطقة المختزلة لهذه البلورات هي ستة أضعاف المنطقة المختزلة في البلورات المكعبة وهي تشكل $\frac{1}{8}$ الفضاء، لذلك من المناسب أيجاد خصائص هذه الاتجاهات لبلورة المعين القائم. من ضمن مجموعة من بلورات المعين القائم تم اختيار بلورة ملح روشيل $NaKC_4H_4O_64H_2O$ لتكون مثال على بلورات المعين القائم في هذا البحث أخذت ثوابت بلورة ملح روشيل من المصدر (Kim, 1994، Winternheimer and McCurdy, 1978 و Lau and McCurdy, 1998) حيث تملك هذه البلورة طيات في سطوح سرعة المجموعة مما يجعلها مناسبة لتطبيق الخوارزميات الخاصة بحساب الصور الفونونية.

في البداية نطبق طريقة مونتي كارلو على بلورة ملح روشيل، حيث تكون 6×10^4 نقطة في $\frac{1}{8}$ الفضاء تمثل متجهات متجه الموجة، الشكل 8(a) يتم تحويل هذه النقاط إلى فضاء سرعة المجموعة ويمثل سرعة المجموعة بشكل نقاط ترسم في $\frac{1}{8}$ الفضاء وللأنماط الثلاثة الطولية والمستعرضة، الشكل 8(b) و 8(c) و 8(d). الطيات في النمطين المستعرضين تتفاوت في العرض كما ذكرنا ذلك سابقا وهي هنا واضحة لرسمها في الأبعاد الثلاثة، كما أنها تظهر نتيجة التقعر في سطح التوهين وكذلك في مقابل مناطق التقاطع بين النمطين المستعرضين.

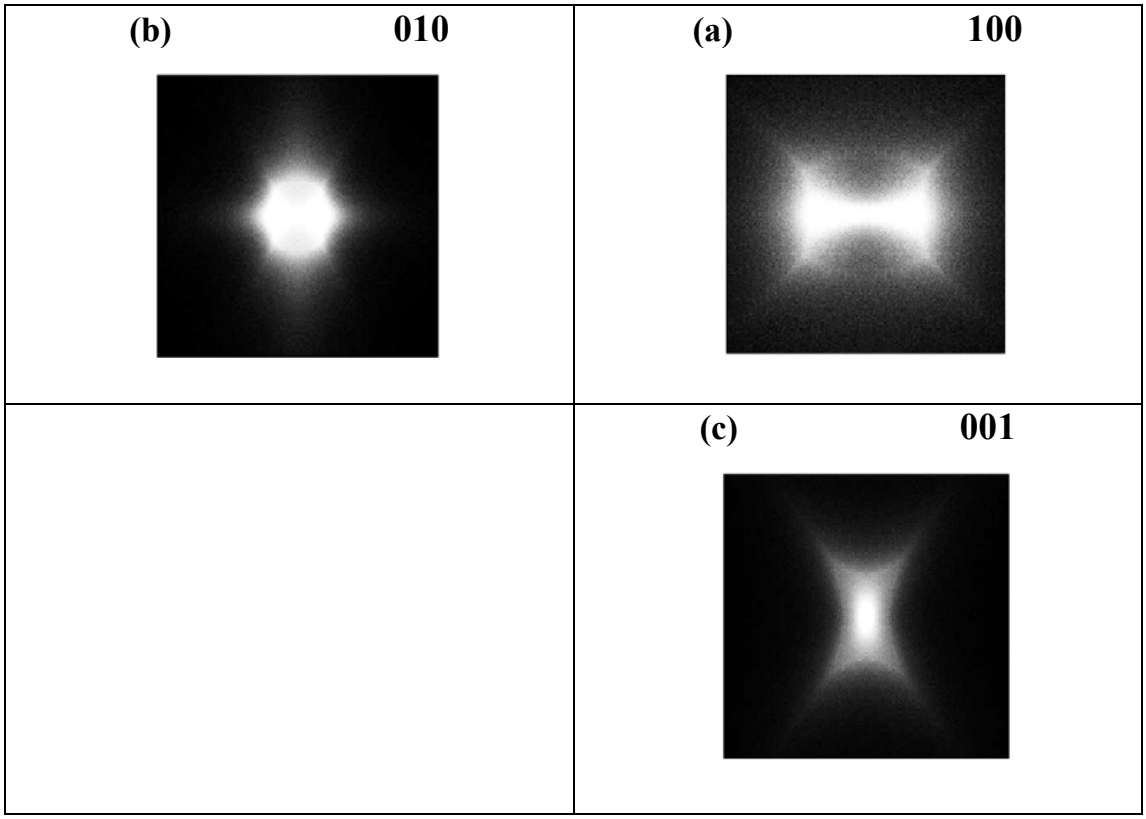
عند زيادة عدد النقاط في فضاء متجه الموجة للحصول على صورة واضحة المعالم تتطلب عرض الصورة بطريقة مختلفة وذلك بوضع المعلومات بشكل مصفوفة تحول إلى السويات الرمادية تمثل هذه الصور وتعرض كما عرضت الصور في حالة البلورات المكعبة. اعد برنامج لحساب الصورة لنظام المعين القائم نكون 5×10^5نقطة أو أكثر (10^6نقطة) في المنطقة المختزلة تحول إلى فضاء سرعة المجموعة ويتم إسقاط هذه النقاط على الاتجاه المطلوب، هنا في حالة بلورات المعين القائم، كما ذكرنا سابقا، ثلاثة اتجاهات مهمة لأنها مختلفة في الخصائص هي <100> و <010> و <001>. النمط الطولي غير متماثل في هذه الاتجاهات، الشكل 9(a,b,c) يبين صورة النمط الطولي من الاتجاهات <100> و <010> و <001> على التوالي عدد النقاط 10^6 نقطة، عدد النقاط الكلية هي 8×10^6 نقطة يشترك بحدود 5.5×10^6 نقطة في تشكيل الصورة النهائية والفرق بين عدد النقاط هو نتيجة تحديد النافذة حيث أن تلك النقاط تقع خارج النافذة. وقد

تزيد هذه النقاط أو تقل حسب الحالة وجهة الإسقاط. ويستغرق البرنامج بحدود 8 دقـائق للحـصول علـى الصورة النهائية. تحديد هذا العدد من النقاط للحصول على صورة ذات كفاءة عالية واضحة المعالم. صـورة النبضة تبدو مختلفة من الاتجاهات المختلفة وهذا نتيجة عدم التماثل بين هذه الاتجاهات.

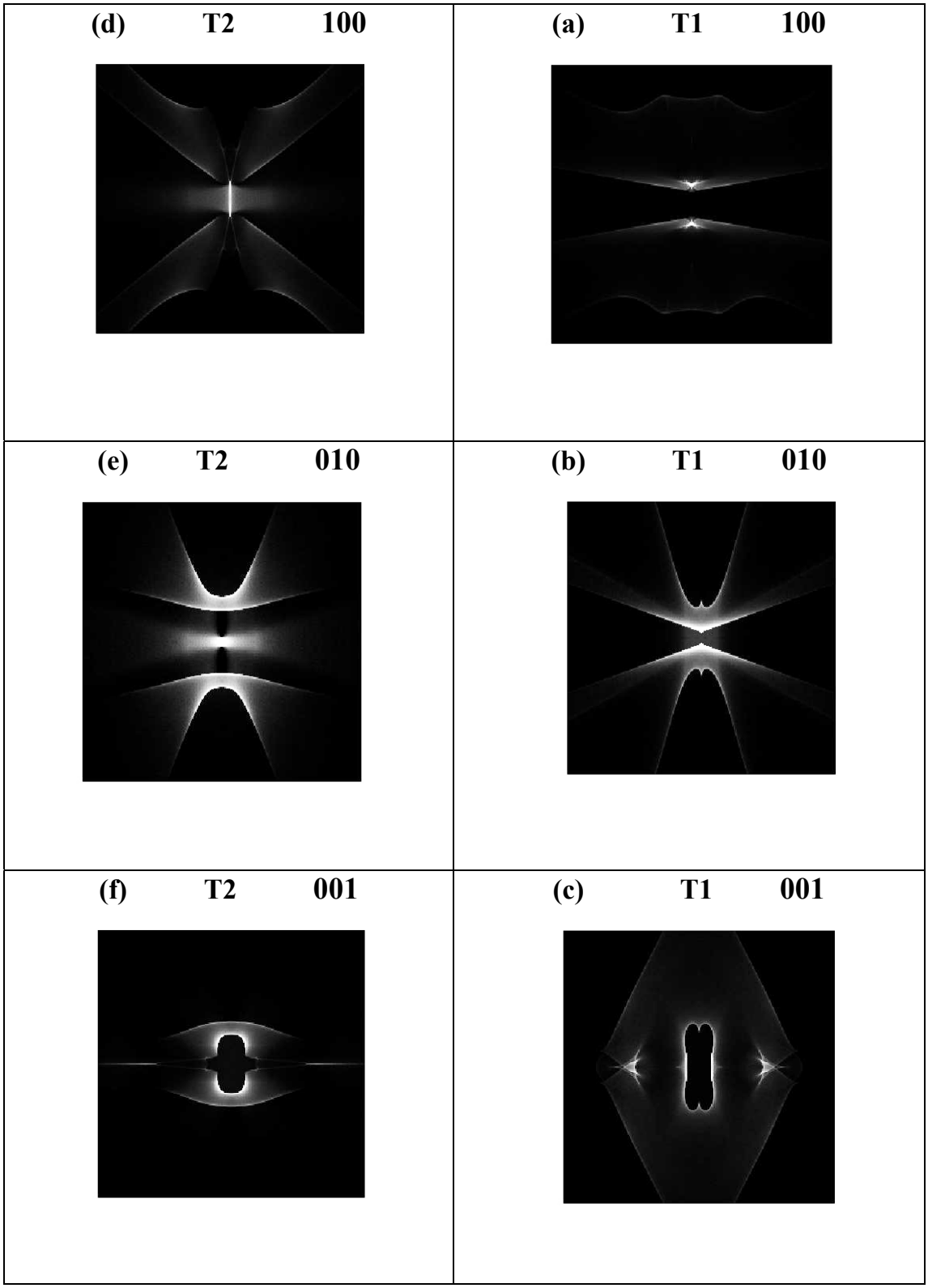
أما النمطين المستعرضين فالصورة التي تم الحصول عليـ ـها موضحة فـي الشكل 10(a,b,c) تمثل النمط المستعرض T1 في حين أن الشكل 10(d,e,f) يمثل النمط المستعرض T2 ومن الاتجاهـات <100>, <010>, <001> على التوالي. حيث تظهر الطيات بشكل نقاط ذات شدة عالية وكذلك تظهر نقاط الانقـلاب بشكل نقاط ذات شدة عالية, وكافة هذه الصور شكلت من 10^6 نقطة في فضاء متجه الموجـة فـي المنطقـة المختزلة وحسبت سرع المجموعة لها ثم حصلنا على الصورة وهي بحدود 6.3×10^6 إلى 7.3×10^6 نقطـة لنكون هذه الصور. وحسب نوع النمط والاتجاه. الشكل (11) يبين المقارنة بين الطريقة النظامية (a,b,c) وما يقابلها من طريقة مونتي كارلو (d,e,f) ولـ 10^6 نقطة من المنطقة المختزلة. نتيجة استخدام هذا العـدد مـن النقاط نتوقع تجانس النقاط في المنطقة المختزلة في فضاء متجه الموجة وهذا يعطي صـورة أكثـر واقعيـة للصورة المحسوبة وهذه الحالة تصح على طريقة مونتي كارلو أكثر من الطريقة النظامية والتي تكون كثافـة النقاط أكثر من الاتجاه <001> من الاتجاهات الأخرى <100> و <010> وهذا ينعكس على شدة الـصورة من هذا الاتجاه لاحظ T1 في كل من 10(b) و 10(e) حيث أن الصورة في طريقة مونتي كـارلو واضـحة أكثر من نظيرتها في الطريقة النظامية والتي تبدو الشدة عالية حول وسط الـصورة والمحيطـة بالاتجـاه <001> .



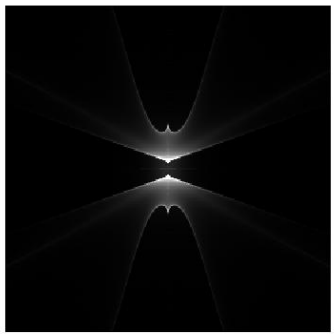
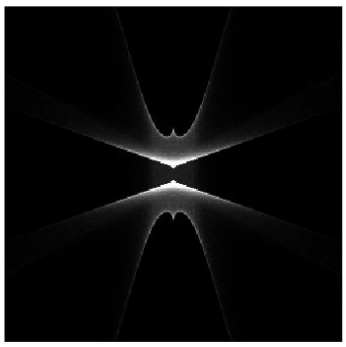
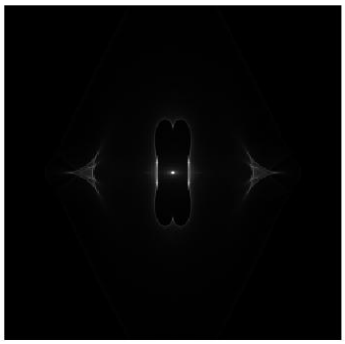
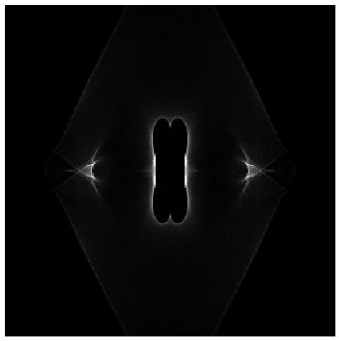
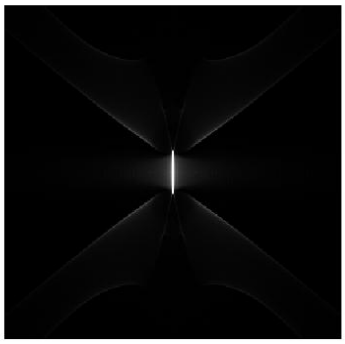
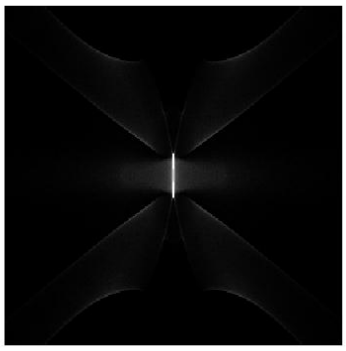
الشكل 8: سطوح سرعة المجموعة لبلورة ملح روشيل بطريقة مونتي كارلو، (a) نقاط متجه الموجه في $\frac{1}{8}$ الفضاء، (b) النمط الطولي، (c) النمط المستعرض T1، (d) النمط المستعرض T2.



الشكل 9: الصور الفونونية لبلورة ملح روشيل بطريقة مونتي كارلو النمط الطولي، عدد النقاط 10^6 من الاتجاهات (a) <100> و (b) <010> و(c) <001>



الشكل 10: الصور الفونونية لبلورة ملح روشيل بطريقة مونتي كارلو النمطين المستعرضين T1، T2 عدد النقاط 10^6 من الاتجاهات (a) <100> و (b) <010> و(c) <001>، للنمط T1 و (d) <100> و (e) <010> و (f) <001> للنمط T2

010 T1 (a) نظامية	010 T1 (d) مونتي كارلو
	
001 T1 (b)	001 T1 (e)
	
100 T2 (c)	100 T2 (f)
	

الشكل 11: الصور الفونونية لبلورة ملح روشيل للنمطين المستعرضين T1، T2، عدد النقاط 10^6، (a) ، (b) ، (c) بالطريقة النظامية، (d) ، (e) ، (f) بطريقة مونتي كارلو

الاستنتاجات

من النتائج التي حصلنا عليها في هذا البحث، تبين لنا أهمية طريقة مونتي كارلو والتي تعطي نتائج أفضل من غيرها من الطرق الأخرى (الطريقة النظامية) في حساب التمركز الفونوني في البلورات ذات الأنظمة البلورية المختلفة، من البلورات المكعبة (ذات التناظر العالي) إلى بلورات المعين القائم (ذات التناظر الواطئ) حيث تم تقديم خوارزمية تعتمد على الحل المباشر لمعادلة كريستوفل والتي منها يمكن تحديد سرع الطور وسطوح التوهين وسرع المجموعة للبلورات المختارة وفي أي اتجاه والتي منها تم تحديد الصور الفونونية لهذه البلورات. كما إن زيادة عدد النقاط لمتجه الموجة في المنطقة المختزلة ضروري جدا للحصول على صور واقعية للبلورات المختارة تحاكي الواقع الحقيقي، وهذه الزيادة تتطلب خوارزمية كفوءة في إجراء الحل السريع لهذه المجموعة الكبيرة من النقاط. وطريقة مونتي كارلو تعطي تجانس عالي بزيادة عدد النقاط في حين أن الطريقة النظامية لا تعطي ذلك التجانس بزيادة عدد النقاط وخاصة في الاتجاه <001> بسبب طبيعة الإحداثيات الكروية القطبية. وكما أن للعمليات التناظرية أهمية في اختزال وقت تنفيذ البرنامج الخاص في حساب الصور الفونونية، حيث تم تقليص زمن التنفيذ إلى $(\frac{1}{48})$ من الزمن الكلي للبلورات المكعبة في حين تقلص زمن التنفيذ إلى $(\frac{1}{8})$ من الزمن الكلي لبلورات المعين القائم. وهذا يتطلب تحديد المنطقة المختزلة للبلورة وتكوين نقاط موزعة بصورة متجانسة داخل هذه المنطقة. إضافة إلى أن زمن تكوين النقاط في المنطقة المختزلة يتفاوت بين استخدام طريقة مونتي كارلو والطريقة النظامية، حيث أن طريقة مونتي كارلو هي الأسرع في تكوين النقاط في المنطقة المختزلة من الطريقة النظامية.

المصادر الأجنبية

Derby, B. (2007). Corrections for single crystal elastic constants of compound semiconductor and their representation in isomechanical groups. *Phys. Rev*. **B 76,** 54126.

Every, A. G. (1980). General closed form expressions for acoustic waves in elastically anisotropic solids. *Phys. Rev*. **B 22,** 1746.

Every, A.G. (1987). Classification of the phonon focusing patterns of tetragonal crystals. *Phys. Rev*. **B 37 (**17), 9964.

Hurley, D.C. ; Wolfe, J.P. (1985). Phonon focusing in Cubic crystals. *Phys. Rev.* **B 32,** 2568.

Kim, K. Y. (1994) . Analytic relation between the elastic constants and the group velocity in an arbitrary direction of symmetry planes of media with orthorhombic or higher symmetry. *Phys. Rev*. **B49 (** 6), 3713.

Lau, K. ; McCurdy, A. K. (1998). Elastic anisotropy factor for orthorhombic, tetragonal and hexagonal crystals. *Phys. Rev.* **B 58** (14) , 8980-8984**.**

Northrop, G. A. ; Wolfe, J. P. (1980). Ballistic phonon imaging in Germanium. *Phys. Rev.* **B 22,** 6196.

Taylor, B.; Maris, H. J.; Elbaum, C. (1971). Focusing of Phonons in Crystalline Solids due to Elastic Anisotropy. *Phys. Rev.* **B 3** (4), 1462-1472.

Von Gutfeld, R. J. ; Nethercot, A.. H. (1964). Heat pulses in Quartz and sapphire at low temperature. *Phys. Rev. Lett.* **12 (33),** 641-644.

Winternheimer, C. G. ; McCurdy, A.K.(1978). Phonon focusing and phonon conduction in orthorhombic and tetragonal crystals in boundary-scattering regime II. *Phys. Rev*. **B 18** (12), 6576-6605.

Wolfe, J. P. (1980) . Ballistic heat pulses in crystals . *Phys. Today*, **33**(12), 44-50.

Wolfe, J. P. ; Hauser, M.R. (1995). Acoustic wave front imaging. *Ann. Physics* , **4 ,** 99.

Wolfe, J. P. (1995) . Acoustic wavefronts in crystalline solids. *Phys. Today*, **48**(9), 34-50.

Wolfe, J.P. (1998). "Imaging Phonons, Acoustic Wave Propagation in Solid". Cambridge University Press. pp.21-121.