نموذج رياضي لحساب تأثير الضغط في الخواص الالكترونية لبلورة السليكون

أحمد محمود عبد اللطيف
كلية العلوم/ جامعة بابل

محمود مسافر عبيس
كلية العلوم/ جامعة الكوفة

مضر أحمد عبد الستار
وزارة العلوم والتكنلوجيا

١ ـ المقدمة

- نظراً لما يحتلهُ السليكون من أهمية في المجالات الصناعية والتقنية، فقد قام العديد من الباحثين بدراسة خواصهِ الألكترونية والتركيبية في الحالة الاعتيادية وفي حالة تعرضه للاجهادات وذلك لأمكان تعرض السليكون المستعمل في الأجهزة الالكترونية الحساسة الى اجهادات عالية في تطبيقات دراسة أعماق البحار أو عند التعرض إلى موجات الصدمة أو في اختبارات تحمل الطائرات والسفن للصدمات. ولازال هذا الموضوع هدفا لأبحاث حديثة:

- [Durandurdu and Drabold (2003), Raffy ***et al.*** (2002), Centoni ***et al.*** (2005), Morishita (2004), Daisenberger ***et al.*** (2007)].

- ونظراً لصعوبة دراسة خواص البلورة عند تسليط ضغوط عالية عليها إما من الناحية العملية أو من الناحية الاقتصادية، فقد أجريت العديد من الدراسات النظرية وباستعمال طرائق مختلفة منها (الطريقة العنقودية وطريقة دالة الكثافة الإلكترونية) وحققت الطريقة الاخيرة نتائج جيدة جداً لحساب الخواص الفيزيائية نظرياً. غير أن هذه الطريقة تحتاج إلى برامج متطورة نوعاً ما والى وقت طويل لإجراء الحسابات، لذا لجأنا الى طريقة أخرى وهي طريقة وحدة الخلية الكبيرة لنرى مدى امكانية تطبيقها ودقتها في حساب الخواص الألكترونية، وذلك بعد ادخال التقريب (متوسط الأهمال الجزئي لتداخل المدارات الذرية (INDO)) بدلاً من التقريب (الاهمال الكلي لتداخل المدارات الذرية (CNDO)) وذلك لأنها اكثر دقة في الحسابات عند استعمالها في حساب خواص البلورات والجزيئات التي تكون قشرها الخارجية نصف ممتلئة.

٢- الأساس النظري

عند صياغة معادلة شرودنكر للتركيب البلوري فإننا سنواجه مشكلة وهي العدد اللانهائي للذرات و الإلكترونات، و بذلك تكون عملية حساب التكاملات الثنائية وحل المعادلات الآنية مسألة مستحيلة كون عدديهما غير محددين، لذلك لا بد من استعمال طرائق تقريبية لصياغة المعادلة. ومن هذه الطرائق هي الطريقة العنقودية (Cluster method) [Larkins (1971), Wood (1978)] [حيث يتم إجراء تركيب نظري بلوري مشابه للبلورة قيد الدراسة وبعدد ذرات محدود و بتطبيق هذه الطريقة ظهر نوعان من المشاكل، ألأول العدد الكبير للتكاملات الالكترونية الثنائية والثاني هو وجود أواصر غير مرتبطة (أو أواصر عالقة). وهناك طريقة أخرى هيّ طريقة دالة الكثافة الإلكترونية التي تستعمل بشكل واسع لدراسة خواص البلورات [Mori ***et al.*** (2003), Benzair and Aourag (2002) , Bredow ***et al.*** (2000)]، في هذه الطريقة تعامل جميع الإلكترونات على انها تولد دالة كثافة الكترونية بدلاً من التعامل مع كل الكترون بمفرده كما في هذا البحث.

- و للتخلص من هذه المشكلة تم اقتراح طريقة جديدة لصياغة المعادلة و هي طريقة وحدة الخلية الكبيرة (LUC) [Evarestov. and Lovchikov (1977), Harker and Larkins (1979)]، إذْ يتم اخذ تركيب بلوري معين متناظر إمّا أنْ يكون الخلية الابتدائية وإمّا الخلية البرافيزية أو مضاعفاتها ، و تعدّ الدالة الموجية الكلية ناتجة عن جمع خطي للمدارات الذرية لخلية وحدة واحدة فقط، و تتفاعل مع باقي الدوال الموجية للخلايا المحيطة بالخلية المحددة.
- قبل أنْ نشتق المعادلة التفاضلية لوصف حركة الإلكترون في البلورة باستعمال نظرية مجال التوافق الذاتي فإنّ هناك مجموعة خواص تمتلكها الدالة الكلية للنظام، وهي:

$$\psi_\alpha(k_\lambda, r + R_\mu) = \exp(ik_\lambda, R_\mu)\psi_\alpha(k_\lambda, r + R_\mu)$$

$$\psi_\alpha(k_\lambda, r + N) = \psi_\alpha(k_\lambda, r)$$

$$\psi_\alpha = \sum_{\mu=1}^{Cells} \exp(ik_\lambda, R_\mu) X_\mu(k_\lambda, r - R_\mu)$$

$$X_\alpha(k_\lambda, r - R_\mu) = \sum_{P}^{basis} c_{p\alpha}(k_\lambda)\phi_p(r - R_\mu)$$

$$\psi_\alpha(k_\lambda, r) = \sum_{\mu}^{cells} \sum_{P}^{basis} \exp(i k_\lambda, R_\mu) c_{p\alpha}(k_\lambda) \phi_p(r - R_\mu)$$

$$H = \sum_{\alpha=1}^{N} \left(\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla_{r_i}^2 - \sum_{a=1}^{na} \frac{Z_a e^2}{4\pi \in_0 r_{\alpha a}} \right) + \frac{1}{2} \sum_{\alpha}^{N} \sum_{\beta}^{N} \frac{e^2}{4\pi \in_0 r_{\alpha\beta}} + \frac{1}{2} \sum_{a} \sum_{b} \frac{Z_a Z_b e^2}{4\pi \in_0 R_{ab}}$$

$$\sum_{P} (F_{pq}(k_\lambda) - \varepsilon_\alpha(k_\lambda) S_{pq}(k_\lambda)) c_{p\alpha}(k_\lambda) = 0$$

$$F_{pq}(k_\lambda) = \sum_{\mu} F_{op,\mu q} \exp(i k_\lambda . R_\mu)$$

$$S_{pq}(k_\lambda) = \sum_{\mu} S_{op,\mu q} \exp(ik_\lambda . R_\mu)$$

$$F_{pp}(o) = U_{op,op} - \sum_{B \neq A} \sum Z_B \gamma_{AB}^{ov} + \sum_{v} \beta_A^o (S_{op,vq} - \delta_{ov}) + \sum_{r} \sum_{v} p_{rr}(o) f(x) \gamma_{AB}^{OV}$$

$$- \frac{1}{2} \sum_{v \neq o} P_{pp}(o) \gamma_{AB}^{ov} - \frac{1}{2} \sum_{r \ on \ A} P_{rr}(o) (\phi_p^o \phi_r^o / \phi_p^o \phi_r^o)$$

$$F_{Pq}(0) = \sum_{r} \beta_{AB}^{O} S_{op,vq} - \frac{1}{2} P_{pq}(o) \sum f(x) \gamma_{AB}^{ov}$$

$$\gamma_{AB} = \int \phi_u{}^2(r_1)\phi_v^2(r_2)\frac{e^2}{4\pi \in_0 r_{12}} dv_1\ dv_2$$

$$f(x) = \left(\frac{\sin(x)}{x}\right)$$

$$x = \frac{\pi R_{0\,\nu\,AB}}{a}$$

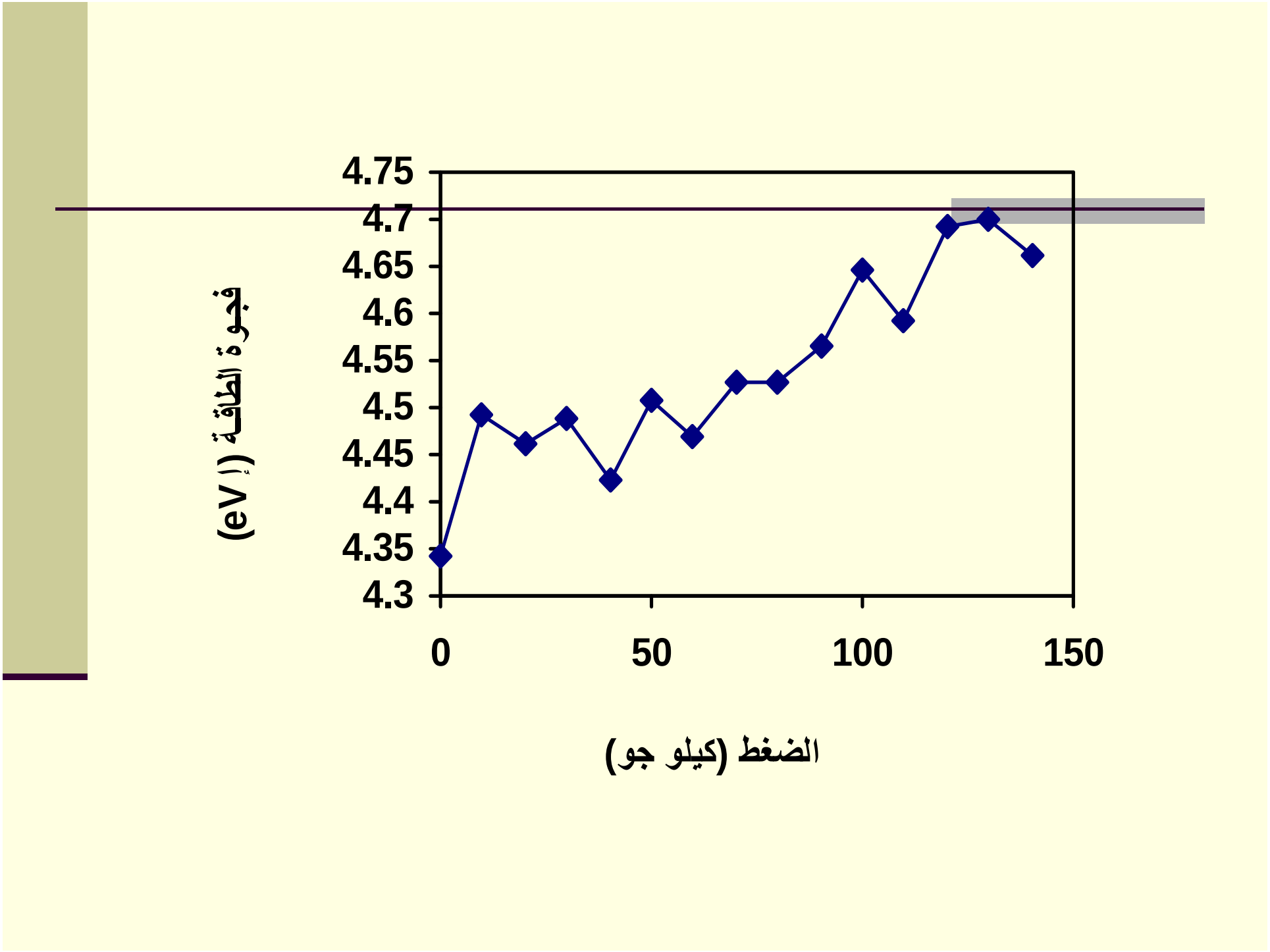
$$P_{pq} = 2\sum_i c_{pi}\, c_{qi}$$

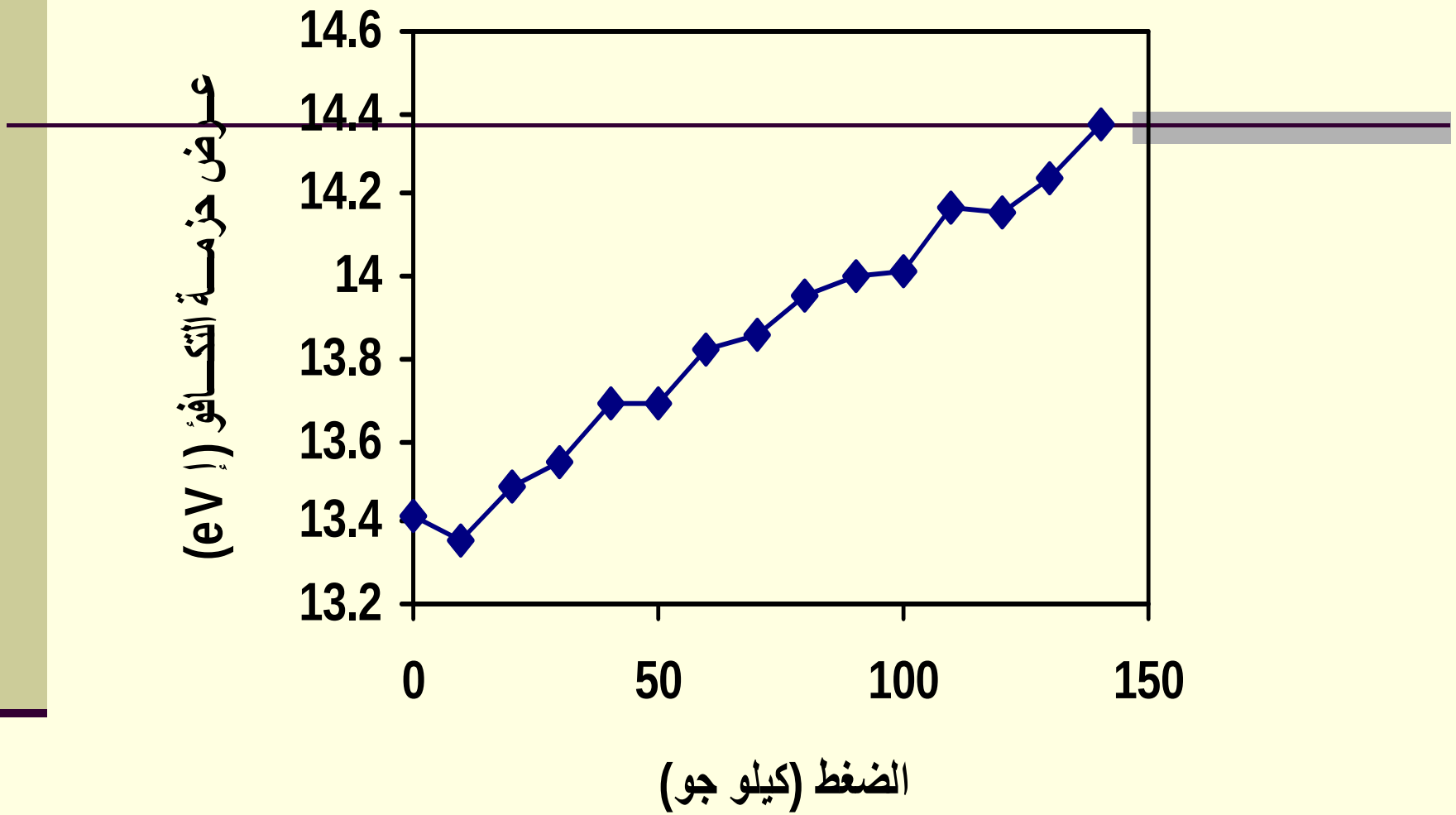
البحث الحالي	CNDO [Yin and Cohen(1982)]	INDO [Abdul-Sattar (1997)]	الثابت
٧.٢٥	٦.٣	٧.٢٥	*1/2(Is+As) (eV)*
٥.٠٠	٤.٥	٤.٩٥	*1/2(Ip+Ap) (eV)*
١٦.٢ –	٦.٤ –	٥.٤٥ –	
١.٥	١.٥٤	١.٦٣٥	

(a.β.) (eV)

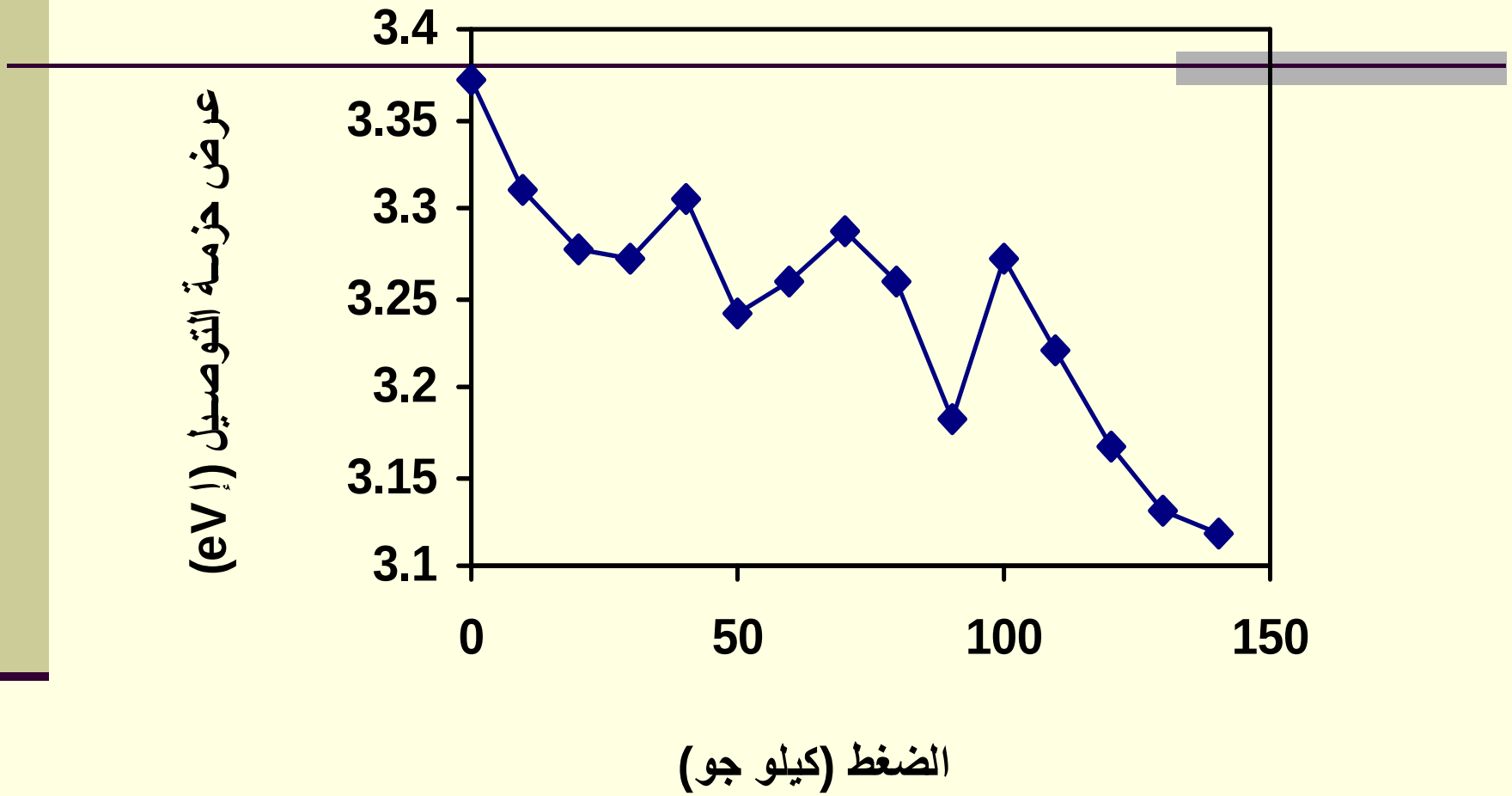
الخاصية	البحث الحالي	[Crain *et al.* (1979)]	العملي [Harker and Larkins (1979)]
فجوة الطاقة (eV)	٤.٣٤٢٢	٧.٠٠	٣.٤٤
حزمة التكافؤ (eV)	١٣.٤١٥٦	١٣,٢	١٢.٤
حزمة التوصيل(eV)	٣.٣٧٢٢	-----	------

الضغط (كيلو جو)	طاقة الربط قبل تصحيحات الترابط (eV)	طاقة الربط بعد تصحيحات الترابط (eV)	طاقة الربط (eV) Harker and Larkins (1979)
١	٤.٠٤٧٩-	٤.٤١٤٤-	٤.٦٣٠٠-
١٠	٤.٠٤٩٦-	٤.٤٣٨٤-	٤.٦٢٩٣-
٢٠	٤.١١٣٢-	٤.٤٦٣٣-	٤.٦٢٧٣-
٣٠	٤.٠٧٠٤-	٤.٤٤٣٦-	٤.٦٢٣٨-
٤٠	٤.٠٩٢٣-	٤.٤٣٩٠-	٤.٦١٨٨-
٥٠	٤.٠٨٠٠-	٤.٤٦١٨-	٤.٦١٢٤-
٦٠	٤.٠١٩٥-	٤.٣٥٠٩-	٤.٦٠٤٥-
٧٠	٤.٠٥٤٠-	٤.٤١٢٠-	٤.٥٩٥٠-
٨٠	٤.٠٧٨٦-	٤.٤٣٦٤-	٤.٥٨٤٠-
٩٠	٤.٠٦٤٠-	٤.٤٠٣١-	٤.٥٧١٣-
١٠	٤.٠١٩٥-	٤.٣٦٩٣-	٤.٥٥٧٠-
١١٠	٤.٠٢٢٠-	٤.٣٨٣٧-	٤.٥٤٠٩-
١٢٠	٤.٠٥٢٣-	٤.٤٣٢٢-	٤.٥٢٣١-
١٣٠	٣.٩٥٩٦-	٤.٣٣٦٩-	٤.٥٠٣٥-
١٤٠	٣.٩٩٩٩-	٤,٣٤١٣-	٤.٤٨٢١-


4.75
4.7
4.65
4.6
4.55
4.5
4.45
4.4
4.35
4.3
فجوة الطاقة (eV إ)
0
50
100
150
الضغط (كيلو جو)



14.6
14.4
14.2
14
13.8
13.6
13.4
13.2
0
50
100
150
عرض حزمة التكافؤ (إ V e)
الضغط (كيلو جو)


3.4
3.35
3.3
3.25
3.2
3.15
3.1
0
50
100
150
عرض حزمة التوصيل (إ eV)
الضغط (كيلو جو)

٤-٤ عامل تشكيل الأشعة السينية (X-ray (Form Factor

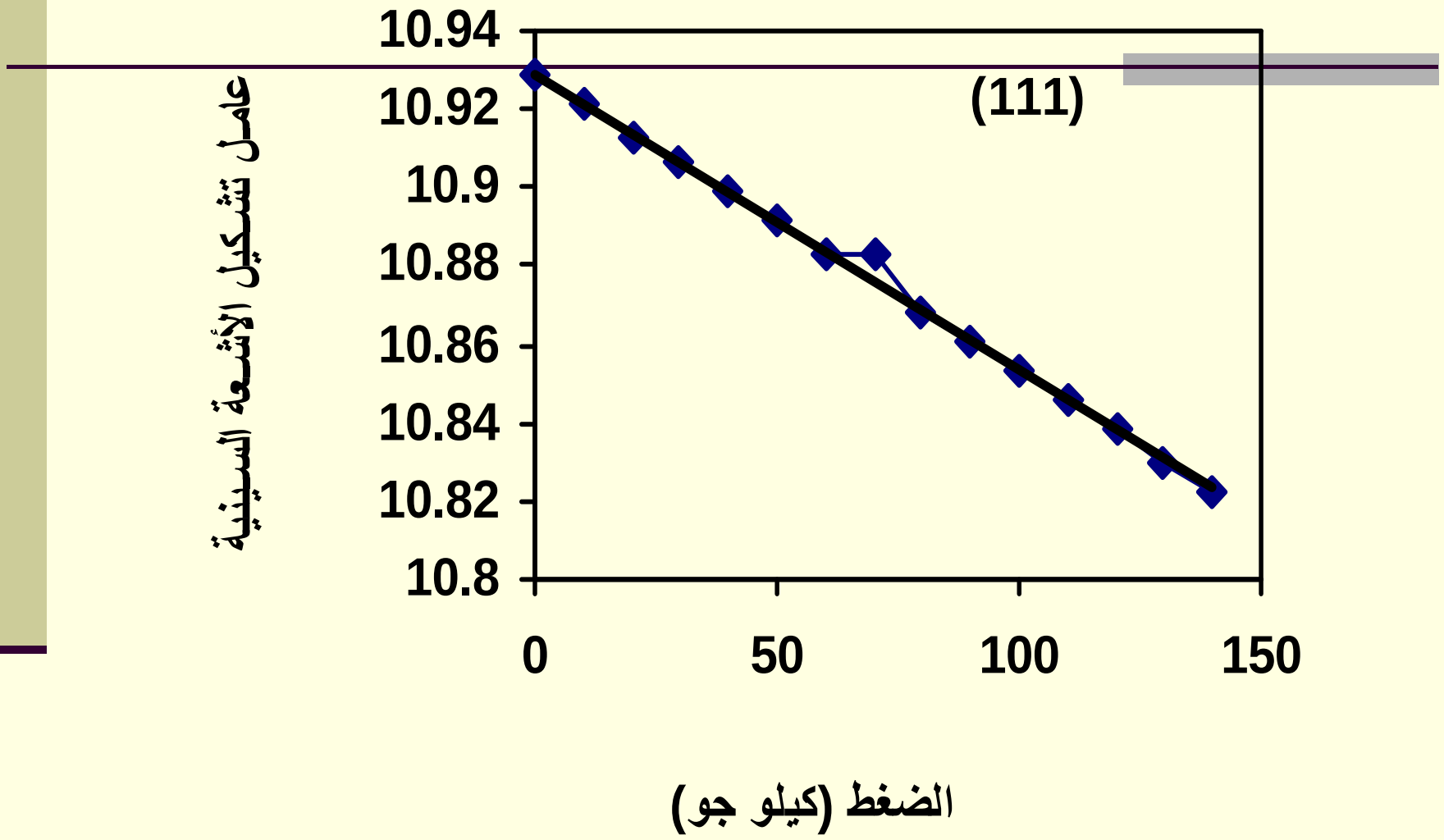
- يتم حساب عامل تشكيل الأشعة السينية من المعادلة الآتية :

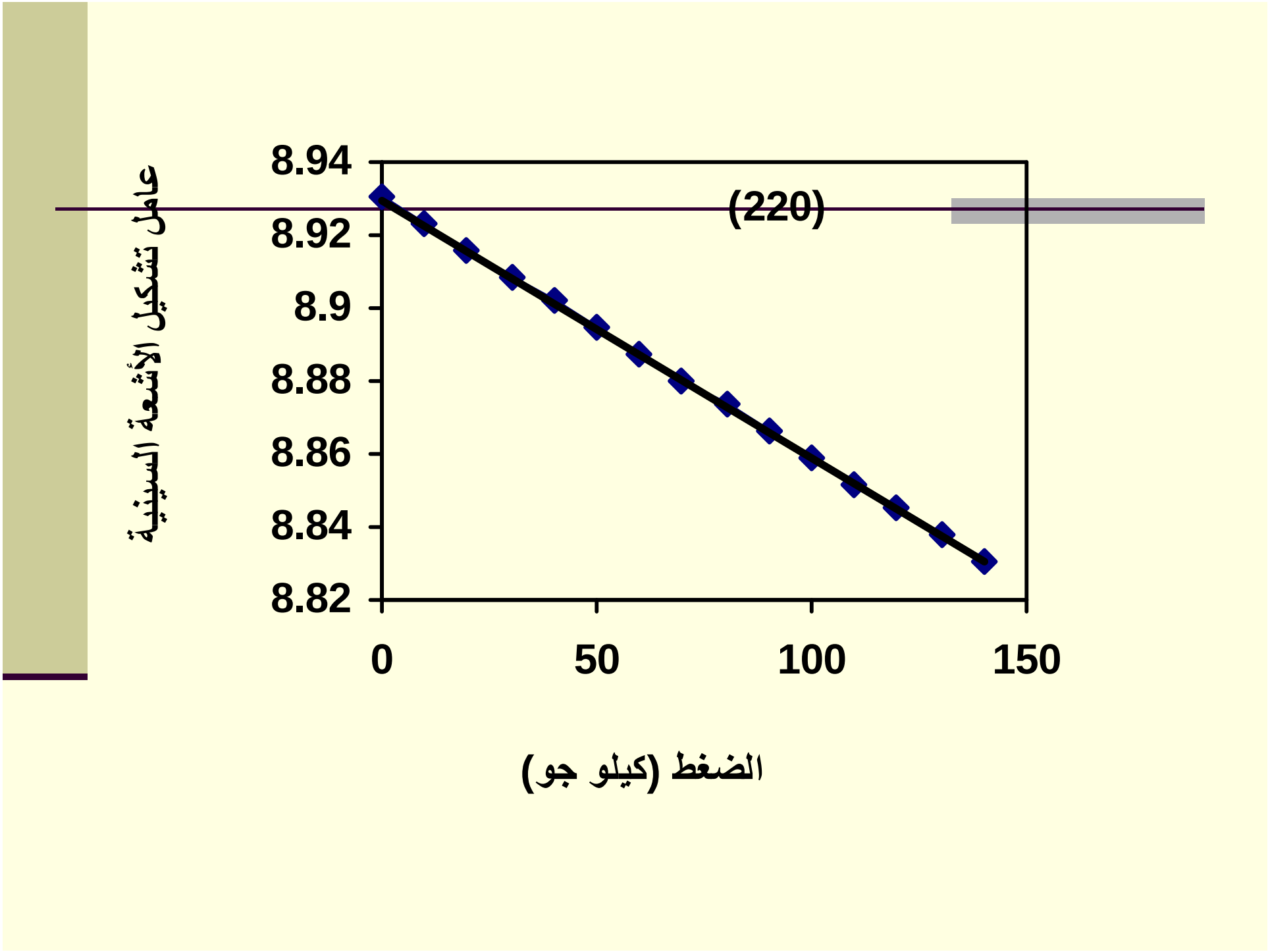
$$s = \sum_{j=1}^{N} \int f\left(r_j\right) e^{-iG\,.\,r_j}$$

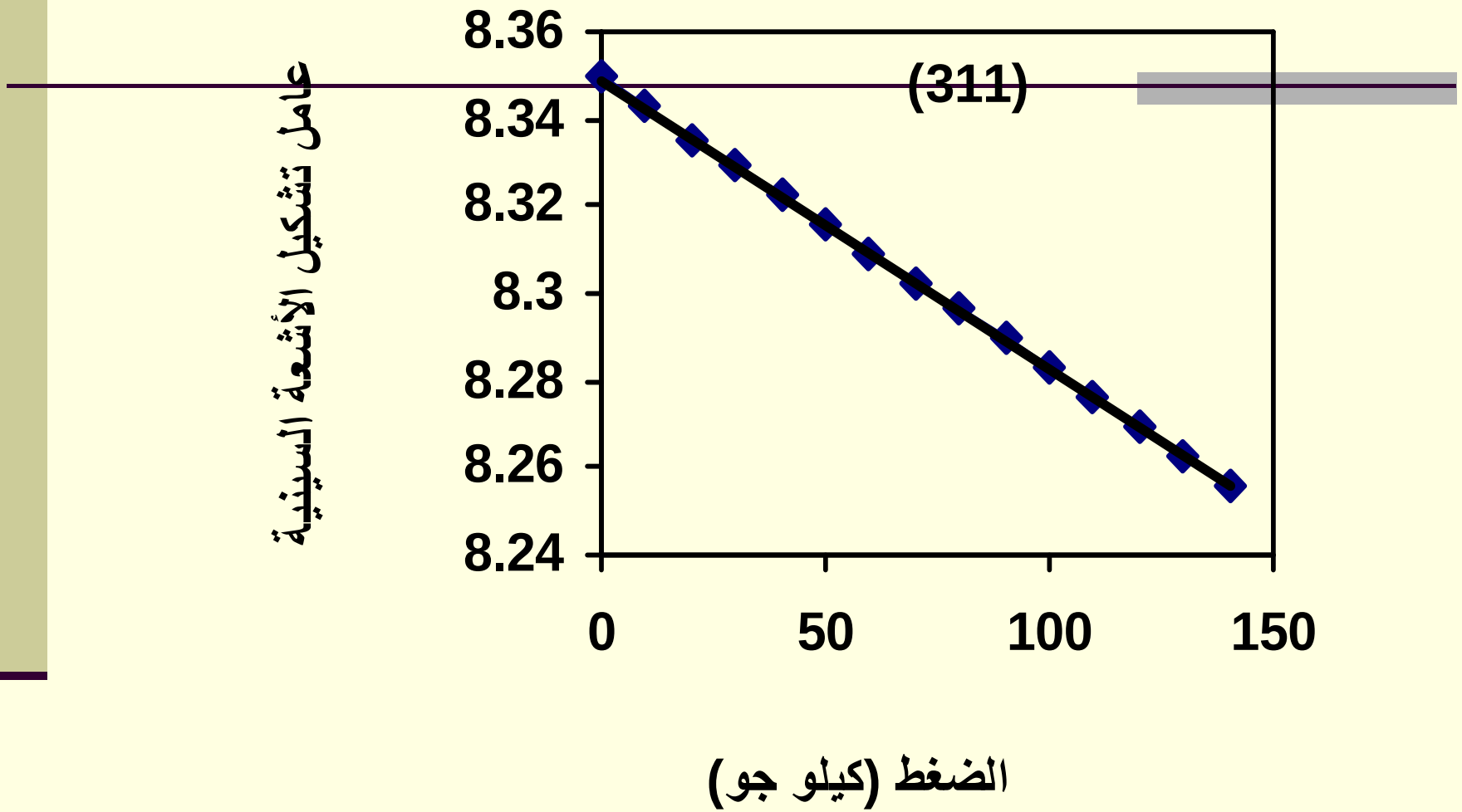
$$f(r) = \int n(r - rj) e^{iG(r-rj)}$$

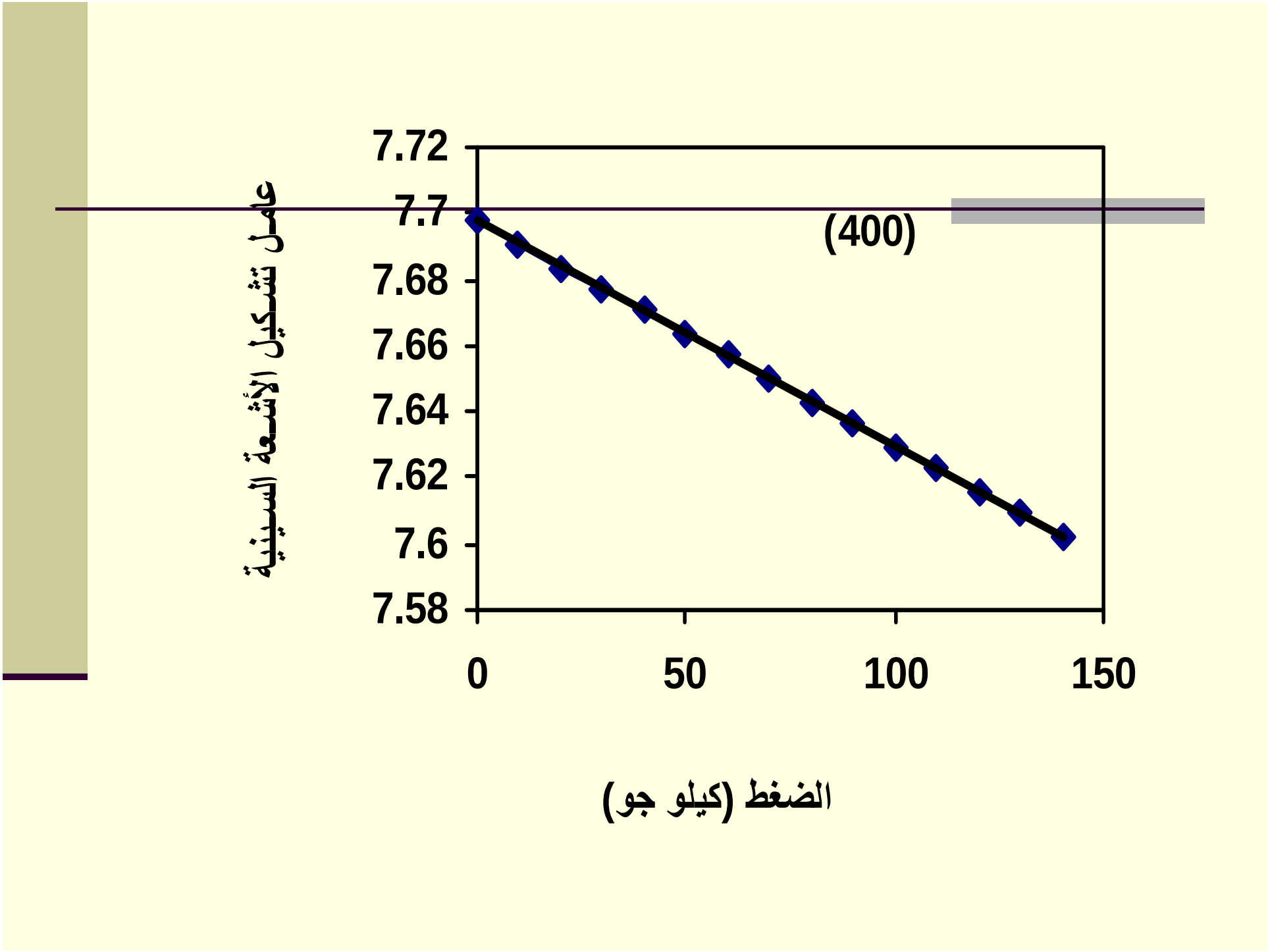
$$n(r - rj) = \sum_{\mu}^{N} \sum_{\nu}^{N} P_{\mu\nu} \psi_{\mu} \psi_{\nu}$$

مستوي الانعكاس (hkl)	عامل تشكيل الأشعة السينية من البحث الحالي	عامل تشكيل الأشعة السينية [Stukeland Euwema (1970)]
(١١١)	١٠.٩٢٩	١١.١٢
(٢٢٠)	٨.٩٣٠	٨.٨٧
(٣١١)	٨.٣٤٩	٨.٠٥
(٤٠٠)	٧.٦٩٧	٧.٤٠
(٣٣١)	٧.٣٧٢	٧.٣٢
(٤٢٢)	٦.٩٠٠	٦.٧٢
(٥١١)	٦.٦٤٦٠	٦.٤٠
(٣٣٣)	٦.٦٣٨٠	٦.٤٣


10.94
10.92
10.9
10.88
10.86
10.84
10.82
10.8
0
50
100
150
(111)
عامل تشكيل الأشعة السينية
الضغط (كيلو جو)


عامل تشكيل الأشعة السينية
8.94
8.92
8.9
8.88
8.86
8.84
8.82
(220)
0
50
100
150
الضغط (كيلو جو)


8.36
8.34
8.32
8.3
8.28
8.26
8.24
(311)
0
50
100
150
عامل تشكيل الأشعة السينية
الضغط (كيلو جو)


7.72
7.7
7.68
7.66
7.64
7.62
7.6
7.58
0
50
100
150
(400)
عامل تشكيل الأشعة السينية
الضغط (كيلو جو)

٦- الأستنتاجات

١- وجود تركيز للإلكترونات في المناطق القريبة من النويات يؤكد أنّ طريقة الجمع الخطي للمدارات ذات كفاءة جيدة، ومما يدعم هذا هو كون القيم المستخرجة لعامل الأشعة السينية هي قريبة من النتائج العملية لذلك فإنّ تركيز الإلكترونات أو دالة التوزيع الإلكتروني قريبة من الدالة الحقيقية ، لذلك فإنّ طريقة الجمع الخطي تعد طريقة جيدة وكفؤة لإجراء الحسابات، واستعمال طرائق التقريب لا تؤثر كثيراً على النتائج النهائية .

٢- ظهور مقدار طاقة الترابط بقيمة قريبة من القيمة العملية عند إضافة تصحيحات الترابط يدل على جودة النموذج المستعمل لاستخراج القيم، وتتنبأ الطريقة أيضاً بنقصان قيمة طاقة الترابط مع زيادة الضغط وهذا يتناسب مع النتائج العملية.

٣- يميل السليكون لان يكون أكثر عزلاً عند زيادة قيمة الضغط عليه ويظهر هذا من زيادة قيمة فجوة الطاقة حيث إن التوصيلية تتناقص أسياً مع زيادة فجوة الطاقة.

٤- بزيادة الضغط يزداد تأثير التكاملات المهملة- مما يحتم وجوب تقييد قيمة الضغط المراد حساب الخواص عندهُ. إذ يظهر ذلك واضحاً عندما يكون الضغط أكثر من ٣٠ كيلو جو.

٥- يمكن التنبؤ بحصول تغير طوري عند قيمة معينة للضغط بصورة غير مباشرة إلا أنهُ لا يمكن تحديد الشكل الطّوري الجديد بصورة صحيحة .