بسم الله الرحمن الرحيم

تعهدنامه‌ی اصالت اثر و رعایت حقوق دانشگاه

تمامی حقوق مادّی و معنوی مترتب بر نتایج، ابتکارات، اختراعات و نوآوری‌هایِ ناشی از انجام این پژوهش، متعلق به **دانشگاه محقق اردبیلی** می‌باشد. نقل مطلب از این اثر، با رعایت مقرّرات مربوطه و با ذکر نام دانشگاه محقق اردبیلی، نام استاد راهنما و دانشجو بلامانع است.

اینجانب مینا بابایی دانش‌آموخته‌ی مقطع کارشناسی ارشد رشته‌ی فیزیک گرایش بنیادی دانشکده‌ی علوم دانشگاه محقق اردبیلی به شماره‌ی دانشجویی ۹۰۲۲۳۵۳۱۰۱ که در تاریخ ۹۲/۱۲/۱۸
از پایان‌نامه‌ی تحصیلی خود تحت عنوان محاسبه فرکانس‌های فونونی در بلور سیلیکون بر اساس شبیه‌سازی دینامیک مولکولی دفاع نموده‌ام، متعهد می‌شوم که:

۱) این پایان‌نامه را قبلاً برای دریافت هیچ‌گونه مدرک تحصیلی یا به عنوان هرگونه فعالیت پژوهشی در سایر دانشگاه‌ها و مؤسسات آموزشی و پژوهشی داخل و خارج از کشور ارائه ننموده‌ام.

۲) مسئولیت صحّت و سقم تمامی مندرجات پایان‌نامه‌ی تحصیلی خود را بر عهده می‌گیرم.

۳) این پایان‌نامه، حاصل پژوهش انجام شده توسط اینجانب می‌باشد.

۴) در مواردی که از دستاوردهای علمی و پژوهشی دیگران استفاده نموده‌ام، مطابق ضوابط و مقرّرات مربوطه و با رعایت اصل امانتداری علمی، نام منبع مورد استفاده و سایر مشخصات آن را در متن و فهرست منابع و مآخذ ذکر نموده‌ام.

۵) چنانچه بعد از فراغت از تحصیل، قصد استفاده یا هر گونه بهره‌برداری اعم از نشر کتاب، ثبت اختراع و ... از این پایان‌نامه را داشته باشم، از حوزه‌ی معاونت پژوهشی و فنّاوری دانشگاه محقق اردبیلی، مجوزهای لازم را اخذ نمایم.

۶) در صورت ارائه‌ی مقاله‌ی مستخرج از این پایان‌نامه در همایش‌ها، کنفرانس‌ها، سمینارها، گردهمایی‌ها و انواع مجلات، نام دانشگاه محقق اردبیلی را در کنار نام نویسندگان (دانشجو و اساتید راهنما و مشاور) ذکر نمایم.

۷) چنانچه در هر مقطع زمانی، خلاف موارد فوق ثابت شود، عواقب ناشی از آن (منجمله ابطال مدرک تحصیلی، طرح شکایت توسط دانشگاه و ...) را می‌پذیرم و دانشگاه محقق اردبیلی را مجاز می‌دانم با اینجانب مطابق ضوابط و مقرّرات مربوطه رفتار نماید.

نام و نام خانوادگی دانشجو: مینا بابایی

امضا

تاریخ

دانشکده‌ی علوم

گروه آموزشی فیزیک

پایان‌نامه برای دریافت درجه‌ی کارشناسی ارشد
در رشته‌ی فیزیک گرایش بنیادی

عنوان:
محاسبه‌ی فرکانس‌های فونونی در بلور سیلیکون بر اساس شبیه‌سازی دینامیک مولکولی

استاد راهنما:
دکتر علی توانا

پژوهشگر:
مینا بابایی

زمستان ۱۳۹۲

پیشکش به:

اسطوره ی احساس حضرت ابو لفضل العباس (علیه السلام)

و تمامی شهدای گرانقدر

و با ادب به ساحت مقدس وجودی که خواهد آمد.

السلام علیک یا اباصالح المهدی (عج)

تقدیر و تشکر

صدها فرشته بوسه بر آن دست می زنند کز کار خلق یک گره بسته وا کند.

به نام یگانه بی همتا، او که از ازل هم آغاز است و هم پایان، سپاس و ستایش مر خدای را جل و جلاله که آثار قدرت او بر چهره ی روز روشن، تابان است و انوار حکمت او در دل شب تار، درفشان. آفریدگاری که خویشتن را به ما شناساند و درهای علم را بر ما گشود و عمری و فرصتی عطا فرمود تا بدان، بنده ضعیف خویش را در طریق علم و معرفت بیازماید.

با سپاس از سه وجود مقدس:

آنان که ناتوان شدند تا ما به توانایی برسیم،

موهایشان سپید شد تا ما روسفید شویم،

و عاشقانه سوختند تا گرما بخش وجود ما و روشنگر راهمان باشند...

پدرانمان

مادرانمان

استادانمان.

جناب آقای دکتر علی توانا شمار و شنایی بخش تاریکی جان، هستی و ظلمت اندیشه را نور می بخشی. چگونه سپاس گویم مهربانی و لطفتان را که سرشار از عشق و یقین است. چگونه سپاس گویم تأثیر علم آموزیتان را که چراغ روشن هدایت را بر کلبه ی محقر وجودم فروزان ساخته است. آری در مقابل این همه عظمت و شکوهتان، زحمت های بی شائبه و تلاش های بی وقفه تان مرا نه توان سپاس است و نه کلام وصف. باد اکه در مسیر زندگیتان لطف بی انتهای الهی همواره یاری گرتان باشد.

از داوران محترم جناب آقای دکتر مرتضی نطاق نجفی و دکتر امیر ناصر شمخالی که زحمت باز خوانی و اصلاح این پایان نامه را بر عهده داشتند سپاسگزارم.

از حضور استاد گرامی آقای دکتر جعفر برهانیان به عنوان نماینده ی تحصیلات تکمیلی متشکرم.

از آقای محسن قلی پور که یاری گر بنده در آزمایشگاه حالت جامد بودند سپاس فراوان دارم.

از زحمات فراوان خانواده ی عزیز و مهربانم، دوستان گرامی ام و همه ی کسانی که تاکنون مرا در راه رسیدن به این هدف یاری نموده اند صمیمانه تشکر می کنم.

در پایان از تمام اساتید محترم گروه فیزیک دانشگاه محقق، که در طول دوره کارشناسی ارشد راهنمای اینجانب در مسیر کسب علم و دانش بودند، تشکر می کنم و سعادت و سلامت ایشان را از درگاه خداوند متعال مسئلت دارم.

مینا بابایی

اسفند ۱۳۹۲

نام خانوادگی دانشجو: بابایی نام: مینا

عنوان پایان‌نامه: محاسبه‌ی فرکانس‌های فونونی در بلور سیلیکون بر اساس شبیه‌سازی دینامیک مولکولی

استاد راهنما: دکتر علی توانا

استاد (اساتید) مشاور:

مقطع تحصیلی: **کارشناسی ارشد** رشته: فیزیک

گرایش: بنیادی دانشگاه: **محقق اردبیلی**

دانشکده: فیزیک تاریخ دفاع: ۱۳۹۲/۱۲/۱۸ تعداد صفحات: ۱۲۴

چکیده:

در این پایان نامه، بر اساس شبیه‌سازی دینامیک مولکولی ابتدا به ساکن، بسامد مدهای فونونی در جامد بلوری سیلیکون، مورد محاسبه قرار گرفته‌اند. این رهیافت مبتنی بر تحلیل آماری کمیت‌های سینماتیکی محاسبه شده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی به روش کار- پارینلو است. بسامدهای فونونی در مرکز منطقه بریلوییین، نقطه‌ی Γ، و برخی نقاط پرتقارن مانند X و L و همچنین چگالی حالات فونونی مورد محاسبه قرار گرفته‌اند. اثر ابعاد ابر سلول انتخابی، تقارن بلوری، فشار و دما بر روی محاسبات انجام شده به طور موردی مورد بررسی قرار گرفته است. نتایج نشان می‌دهند که چگالی حالات فونونی به دست آمده با موفقیت توانسته است تا نتایج تجربی یا محاسباتی به دیگر روش‌ها را با دقت نوعی محاسبات فونونی ابتدا به ساکن باز تولید نماید.

در حد خطای محاسبات انجام گرفته فشار و دما تأثیری بر مقادیر به دست آمده نمی‌گذارند، اما ابعاد ابر سلول و چگونگی در نظر گرفتن تقارن بلوری بسیار اهمیت دارند.

کلید واژه‌ها: ۱- بسامدهای فونونی ۲- دینامیک مولکولی ۳- بلور سیلیکون

فهرست مطالب

شماره و عنوان مطالب **صفحه**

پیشگفتار..... ح

فصل اول: کلیات پژوهش

۱-۱- مفهوم فونون ۲

۱-۲- کوانتش امواج کشسان ۳

۱-۳- انواع ارتعاشهای بلوری ۴

۱-۳-۱-ارتعاشهای بلوری با پایه ی تک اتمی ۴

۱-۳-۲- P اتم در سلول واحد ۵

۱-۴- ماتریس دینامیکی ۷

۱-۵- روشهای استخراج پاشندگی فونونی در بلورها ۹

۱-۵-۱- روشهای تجربی محاسبه‌ی پاشندگی فونونی ۱۰

۱-۵-۱-۱ پراکندگی باریکه‌ی نوترونی توسط بلور ۱۰

۱-۵-۱-۱-۱- مزیت‌ها و معایب پراکندگی نوترونی ۱۴

۱-۵-۱-۲- پراکندگی الکترومغناطیسی توسط بلور ۱۵

۱-۵-۱-۲-۱- اندازه گیری‌های طیف فونونی توسط پرتو x ۱۵

۱-۵-۱-۲-۲- اندازه گیری‌های اپتیکی طیف‌های فونونی ۱۶

۱-۵-۱-۲-۳- مزیت‌ها و معایب طیف سنجی ۱۷

۱-۵-۲- روشهای نظری پاشندگی فونونی ۱۹

۱-۵-۲-۱- روش فونون یخ زده ۱۹

۱-۵-۲-۲- روش نظریه تابعی اختلالی چگالی (نظریه پاسخ خطی) ۲۰

فصل دوم: مبانی کلی شبیه‌سازی دینامیک مولکولی

۲-۱- آشنایی با علوم محاسباتی ۲۴

۲-۲- سیستمهای بس ذره‌ای ۲۵
۲-۲-۱- تقریب بورن- اپن هایمر ۲۶
۲-۲-۲- تقریب الکترون مستقل ۲۸
۲-۳- نظریه تابعی چگالی ۲۹
۲-۳-۱- مزایای نظریه تابعی چگالی ۳۰
۲-۳-۲- قضایای هوهنبرگ- کوهن ۳۱
۲-۳-۳- رهیافت کوهن- شم ۳۱
۲-۳-۴- روش حل خودسازگار نظریه‌ی تابعی چگالی ۳۳
۲-۴- پتانسیل تبادلی- همبستگی ۳۳
۲-۵- تقریب چگالی موضعی ۳۴
۲-۶- روشهای محاسبه‌ی ساختار نواری ۳۶
۲-۶-۱- روش موج تخت (PW) ۳۸
۲-۶-۲- روش امواج تخت عمود بر هم (opw) ۳۸
۲-۶-۳- تقریب شبه پتانسیل ۴۰
۲-۶-۳-۱- روشهای تولید شبه پتانسیل ۴۳
۲-۶-۳-۲- شبه پتانسیل ثابت بهنجار ۴۴
۲-۶-۳-۳- شبه پتانسیلهای فرانرم ۴۵
۲-۷- معرفی انواع روش شبیه سازی ۴۷
۲-۷-۱- مبانی کلی شبیه سازی دینامیک مولکولی ۴۷
۲-۷-۱-۱- روش دینامیک مولکولی (MD) در عمل ۴۸
۲-۷-۱-۲- انتگرال‌گیری از معادله‌ی حرکت ۵۱
۲-۷-۱-۳- الگوریتم نوز- هوور ۵۲
۲-۷-۱-۴- پتانسیل بین مولکولی ۵۳
۲-۷-۱-۵- جایگاه اولیه اتم‌ها ۵۴
۲-۷-۱-۶- خطا در شبیه سازی ۵۴
۲-۷-۱-۷- سایز نمونه‌ها و گامهای زمانی ۵۶
۲-۷-۲- آشنایی با دینامیک مولکولی ابتدا به ساکن ۵۶

۲-۷-۲-۱- روش کار- پارینلو ۵۹
۲-۸- اطلاعات دینامیکی (توابع بستگی ذره تنها) ۶۱
۲-۹- فونون‌ها و ارتعاشات جمعی ۶۲
۲-۱۰- دینامیک مولکولی فونونها بر اساس مطالعه امواج منتشره ۶۵
۲-۱۱- محاسبه‌ی چگالی حالات فونونی ۶۶
۲-۱۲- ویژگیهای بلور سیلسیم ۶۸
۲-۱۲-۱- ویژگیهای ساختاری سیلیکون ۷۰

فصل سوم : نتایج و بحث

۳-۱- معرفی کد محاسباتی ۷۶
۳-۱-۱- بسته‌ی نرم‌افزاری کوانتوم اسپرسو ۷۶
۳-۲- ساختار یک شبیه سازی ۷۷
۳-۲-۱- فایل ورودی سیستم مورد محاسبه ۷۸
۳-۲-۲- محاسبه‌ی ثابت شبکه‌ی تعادلی ۸۶
۳-۳- محاسبه ی ساختار نواری الکترونی ۸۷
۳-۳-۱- روش محاسبه ی ساختار الکترونی سیلیکون ۸۸
۳-۴- محاسبه ی بسامد فونونی از طریق انرژی جنبشی ۸۹
۳-۵- محاسبه ی بسامد فونونی از طریق تبدیل فوریه ۹۰
۳-۶- محاسبات برای بلور سیلیکون در ابر سلول دو برابر سلول واحد اولیه ۹۴
۳-۶-۱- بررسی بسامدهای فونونی در دماهای مختلف در بلور FCC ۹۵
۳-۶-۲- بررسی اثر تغییر جرم مؤثر الکترون در بسامدهای فونونی..... ۱۰۲
۳-۷- محاسبات ابر سلول تشکیل شده از ۶۴ اتم سیلیکون ۱۰۵
۳-۷-۱- بررسی اثر دما و فشار در بسامدهای فونونی ۱۰۶
۳-۷-۲- بررسی بسامدهای فونونی ۶۴ اتم سیلیکون در بلور Sc ۱۱۱
۳-۸- محاسبات ابر سلول تشکیل شده از ۲۱۶ اتم سیلیکون ۱۱۵
چشم‌اندازی به آینده ۱۲۱
منابع و مآخذ ۱۲۲

فهرست جدول‌ها

شماره و عنوان جدول **صفحه**

جدول ۱ – ۱: خلاصه‌ی نقاط و جهات پرتقارن در منطقه‌ی بریلوییِن ۷۲

جدول ۳ – ۱: مقادیر انرژی کل به‌دست آمده به ازای انرژی قطع توابع موج در واحد ریدبرگ ۸۳

جدول ۳ – ۲: ویژه بسامدهای فونونی در نقطه‌ی Γ در مقایسه با تجربه ۱۱۹

جدول ۳ – ۳: ویژه بسامدهای فونونی در نقطه‌ی X در مقایسه با تجربه ۱۱۹

جدول ۳ – ۴: ویژه بسامدهای فونونی در نقطه‌ی $\mathbf{L}$ در مقایسه با تجربه ۱۱۹

فهرست شکل‌ها

شماره و عنوان شکل **صفحه**

شکل ۲ – ۱: روش‌های محاسبه ساختار الکترونی..... ۳۰

شکل ۲ – ۲: شمای تقریب چگالی موضعی، که بستگی به چگالی الکترونی هر نقطه از فضا را نشان می‌دهد..... ۳۵

شکل ۲ – ۳: تقریب تابع موج و پتانسیل با شبه تابع موج و شبه پتانسیل در ناحیه‌ی درون مغزه..... ۴۳

شکل ۲ – ۴: مراحل دینامیک مولکولی ابتدا به ساکن..... ۵۸

شکل ۲ – ۵: ساختار شبکه‌ی بلوری مرکز سطحی سیلیکون و سلول واحد قراردادی، سلول واحد اولیه و بردارهای پایه‌ی بلور سیلیکون و سلول واحد کاهش ناپذیر فضای وارون به همراه نقاط و مسیرهای پرتقارن ۷۰

شکل ۲ – ۶: مدهای نرمال سیلیکون. منحنی‌های پاشندگی تجربی ω بر حسب k برای سیلیکون..... ۷۳

شکل ۲ – ۷: چگالی حالت‌های فونونی بلور سیلیکون و نانوذراتی با اندازه‌های متفاوت..... ۷۴

شکل ۲ – ۸: چگالی حالت‌های فونونی بلور سیلیکون نتیجه شده به روش دینامیک مولکولی..... ۷۴

شکل ۳ – ۱: مقادیر انرژی کل به‌دست آمده به ازای انرژی قطع توابع موج در واحد ریدبرگ..... ۸۴

شکل ۳ – ۲: تغییرات انرژی بر حسب حجم..... ۸۷

شکل ۳ – ۳: نمودار ساختار نواری سیلیکون. انرژی بر حسب نقاط k..... ۸۹

شکل ۳ – ۴: شمای ساختار ورودی ابرسلول ساخته‌شده از ۸ اتم سیلیکون..... ۹۴

شکل ۳ – ۵: نمودار انرژی جنبشی بر حسب زمان برای ابر سلول تشکیل شده از دو سلول واحد اولیه سیلیکون و بدون وجود ترموستات نوز هاور..... ۹۵

شکل ۳ – ۶: نمودار انرژی جنبشی بر حسب زمان برای ابر سلول تشکیل شده از دو سلول واحد اولیه سیلیکون در دمای ۵ کلوین..... ۹۶

شکل ۳ – ۷: نمودار انرژی جنبشی بر حسب زمان برای ابر سلول تشکیل شده از دو سلول واحد اولیه سیلیکون در دمای ۲۰ کلوین..... ۹۶

شکل ۳ – ۸: نمودار انرژی جنبشی بر حسب زمان برای ابر سلول تشکیل شده از دو سلول واحد اولیه سیلیکون در دمای ۵۰ کلوین..... ۹۷

شکل ۳ – ۹: نمودار انرژی جنبشی بر حسب زمان برای ابر سلول تشکیل شده از دو سلول واحد اولیه سیلیکون در دمای ۸۰ کلوین.....۹۷
شکل ۳ – ۱۰: نمودار انرژی جنبشی بر حسب زمان برای ابر سلول تشکیل شده از دو سلول واحد اولیه سیلیکون در دمای ۱۰۰ کلوین.....۹۸
شکل ۳ – ۱۱: نمودار انرژی جنبشی بر حسب زمان برای ابر سلول تشکیل شده از دو سلول واحد اولیه سیلیکون در دمای ۱۲۰ کلوین.....۹۸
شکل ۳ – ۱۲: نمودار انرژی جنبشی بر حسب زمان برای ابر سلول تشکیل شده از دو سلول واحد اولیه سیلیکون در دمای ۱۳۰ کلوین.....۹۹
شکل ۳ – ۱۳: نمودار انرژی جنبشی بر حسب زمان برای ابر سلول تشکیل شده از دو سلول واحد اولیه سیلیکون در دمای ۱۵۰ کلوین.....۹۹
شکل ۳ – ۱۴: نمودار چگالی حالات فونونی بر حسب فرکانس فونونی برای ابر سلول تشکیل شده از دو سلول واحد اولیه سیلیکون و بدون وجود ترموستات نوز هاور در نقطه‌ی Γ.....۱۰۰
شکل ۳ – ۱۵: نمودار چگالی حالات فونونی بر حسب فرکانس فونونی برای ابر سلول تشکیل شده از دو سلول واحد اولیه سیلیکون با وجود ترموستات نوز هاور و در دمای ۵، ۲۰، ۵۰، ۸۰، ۱۰۰، ۱۲۰، ۱۳۰ و ۱۵۰کلوین.....۱۰۰
شکل ۳ – ۱۶: نمودار انرژی جنبشی بر حسب زمان برای دو اتم در سلول واحد سیلیکون با جرم مؤثر ۴۰۰ واحد اتمی.....۱۰۲
شکل ۳ – ۱۷: نمودار انرژی جنبشی بر حسب زمان برای سلول واحد قراردادی سیلیکون با جرم مؤثر ۲۰۰ واحد اتمی.....۱۰۳
شکل ۳ – ۱۸: نمودار انرژی جنبشی بر حسب زمان برای سلول واحد قراردادی سیلیکون با جرم مؤثر ۱۰۰ واحد اتمی.....۱۰۳
شکل ۳ – ۱۹: نمودار چگالی حالات فونونی بر حسب فرکانس فونونی برای سلول واحد قراردادی سیلیکون برای جرم مؤثر الکترونی ۱۰۰ و ۲۰۰ و۴۰۰ واحد اتمی.....۱۰۴
شکل ۳ – ۲۰: شکل ساختار ورودی ابرسلول ساخته‌شده از ۶۴ اتم سیلیکون.....۱۰۵
شکل ۳ – ۲۱: نمودار انرژی جنبشی بر حسب زمان برای شبکه تری کلینیک ۶۴ اتم سیلیکون با تعداد ۱۰۰۰ گام و گام زمانی $dt = ۲/۴۱۸۹ \times ۱۰^{-۱۶}$ ثانیه.....۱۰۶

شکل ۳ – ۲۲: نمودار چگالی حالات فونونی بر حسب فرکانس فونونی برای شبکه تری کلینیک ۶۴ اتم سیلیکون با تعداد ۱۰۰۰ گام و گام زمانی $۲/۴۱۸۹ \times ۱۰^{-۱۶}$ =dt ثانیه.....۱۰۷
شکل ۳ – ۲۳: نمودار انرژی جنبشی بر حسب زمان برای ۶۴ اتم سیلیکون برای تعداد ۴۰۹۶ گام در دمای ۱۰۰ کلوین و فشار صفر گیگاپاسکال.....۱۰۸
شکل ۳ – ۲۴: نمودار تبدیل فوریه‌ی تابع خود همبستگی برای نقاط gama، L و X متناظر با چگالی حالات فونونی در آن نقطه برای ۶۴ اتم سیلیکون با تعداد ۴۰۹۶ گام در دمای ۱۰۰ کلوین و فشار صفر گیگاپاسکال....۱۰۹
شکل ۳ – ۲۵: نمودار انرژی جنبشی بر حسب زمان برای ۶۴ اتم سیلیکون با تعداد ۴۵۰۰ گام در دمای ۱ کلوین و فشار۱ گیگاپاسکال.....۱۱۰
شکل ۳ – ۲۶: نمودار تبدیل فوریه‌ی تابع خود همبستگی برای نقطه‌ی gama، L و X متناظر با چگالی حالات فونونی در آن نقطه برای ۶۴ اتم سیلیکون با تعداد ۴۵۰۰ گام در دمای ۱ کلوین و فشار۱ گیگاپاسکال.....۱۱۰
شکل ۳ – ۲۷: نمودار انرژی جنبشی بر حسب زمان برای شبکه ساده مکعبی ۶۴ اتم سیلیکون با تعداد ۱۰۰۰ گام و گام زمانی $۲/۴۱۸۹ \times ۱۰^{-۱۶}$ =dt ثانیه.....۱۱۲
شکل ۳ – ۲۸: نمودار چگالی حالات فونونی بر حسب فرکانس فونونی برای ۶۴ اتم سیلیکون با تعداد ۱۰۰۰ گام و گام زمانی $۲/۴۱۸۹ \times ۱۰^{-۱۶}$ =dt ثانیه.....۱۱۲
شکل ۳ – ۲۹: نمودار چگالی حالات فونونی بر حسب فرکانس فونونی برای ۶۴ اتم سیلیکون با تعداد ۲۹۸۰ گام و گام زمانی $۲/۴۱۸۹ \times ۱۰^{-۱۵}$ =dt ثانیه.....۱۱۴
شکل ۳ – ۳۰: شمای ساختار ورودی ابرسلول ساخته‌شده از ۲۱۶ اتم سیلیکون.....۱۱۵
شکل ۳ – ۳۱: تبدیل فوریه‌ی توابع خود همبستگی برای نقطه‌ی gama ، متناظر با چگالی حالات فونونی در آن نقطه برای ۲۱۶ اتم سیلیکون.....۱۱۶
شکل ۳ – ۳۲: تبدیل فوریه‌ی توابع خود همبستگی برای نقطه‌ی X متناظر با چگالی حالات فونونی در آن نقطه برای ۲۱۶ اتم سیلیکون.....۱۱۷
شکل ۳ – ۳۳: تبدیل فوریه‌ی توابع خود همبستگی برای نقطه‌ی L ، متناظر با چگالی حالات فونونی در آن نقطه برای ۲۱۶ اتم سیلیکون.....۱۱۷

پیشگفتار

فونون‌ها یکی از انواع مهم برانگیختگی‌ها در جامدات بلورین هستند که در نتیجه تقلیل تقارن کامل فضایی به تقارن تناوبی حاصل می‌شوند. این برانگیختگی‌ها سهم عمده‌ای درخواص مختلف بلورها مانند گرمای ویژه، انتقال الکترون‌ها و از همه جالب‌تر، درشکل‌گیری پدیده ابررسانایی متعارف دارند. نقش برهمکنش الکترون- فونون، فونون- فونون و فونون‌ها با دیگر برانگیختگی‌های ممکن درجامدات بلوری، در بروز ابررسانایی نامتعارف، خواص مالتی فروییک ودیگرخواص بدیع در جامدات به شدت در حال بررسی است. با دانستن فرکانس مدهای فونونی می‌توان کمیت‌های ترمودینامیکی مختلفی از جمله انرژی آزاد هلمهولتز، گرمای ویژه و انرژی درونی بلورهای هارمونیک را محاسبه کرد. در عمل برای آشکارسازی ویژه بسامدهای فونونی تکنیک‌هایی مانند پراکندگی رامان یا مادون قرمز، یا پراکندگی غیرالاستیک نوترون یا پرتو-X به کار می‌رود. از دیدگاه نظری، محاسبه‌ی ویژه فرکانس‌های فونونی تاحدودی چالش برانگیز است. برخی از این چالش‌ها به دشواری تعیین ساختار الکترونی مواد با همبستگی‌های الکترونی شدید، و گاه به بالا بودن هزینه‌ی محاسباتی از این دست بر می‌گردد.

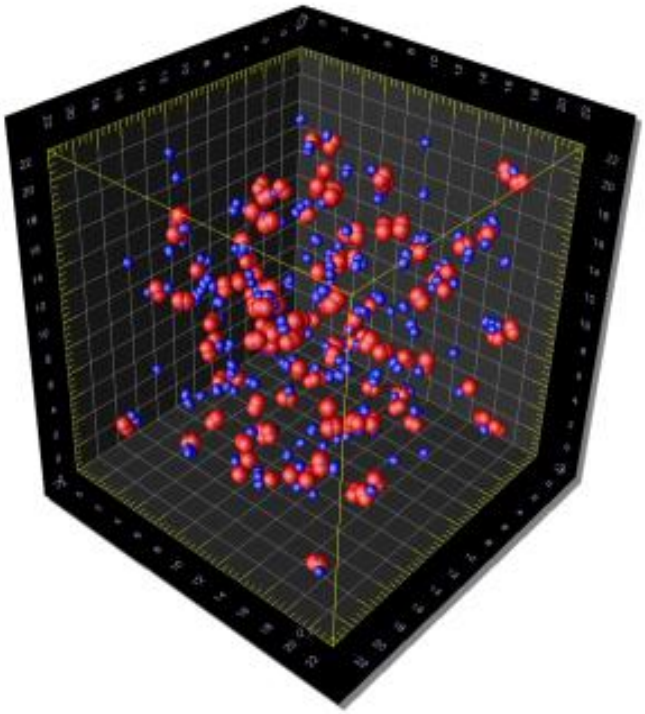
به طور معمول دو رهیافت محاسباتی ابتدا به ساکن متداول در تعیین بسامدهای فونونی به کار گرفته می‌شوند: رهیافت فونون یخ زده و نظریه پاسخ خطی. هر دوی این روش‌ها بر مبنای یک روش محاسبه‌ی ساختار الکترونی که در اکثر مواقع نظریه‌ی تابعی چگالی است، پیاده سازی می‌شوند. رهیافت اول برای محاسبه‌ی فونون‌هایی با عدد موج غیر از مرکز منطقه بریلوییِن یا نقاط بسیار پرتقارن آن بسیار زمان‌بر و غیر عملی است. روش دوم نیز دارای کاستی‌هایی در مواجهه با جامدات با ساختارهای بلوری ناپایدار است، ضمن آن‌که باز هم می‌تواند بسیار هزینه‌بر باشد.

روش دیگری برای محاسبه‌ی فونون‌ها وجود دارد که مبتنی بر تحلیل داده‌های آماری به دست آمده از شبیه‌سازی‌های دینامیک ملکولی است که معمولاً به دلیل ماهیت آن روشی غیر ابتدا به ساکن و به دلیل تقریب موجود درمیدان‌های نیروی به‌کار رفته، غیر دقیق بوده‌است. با توجه به توسعه‌ی انواع روش‌های محاسبات دینامیک ملکولی ابتدا به ساکن کوانتمی که عموماً تحت عنوان رهیافت کار-پارینلو طبقه بندی می‌شوند، در این پایان‌نامه با شبیه‌سازی ابتدا به ساکن دینامیک ملکولی جامد بلوری سیلیکون، بسامدهای فونونی را استخراج و با تجربه و محاسبات به روش‌های دیگر مقایسه می‌نماییم.

این نوشته شامل فصول زیر است: فصل اول شامل بیان مفهوم فونون و روشهای تجربی و نظری محاسبه‌ی فرکانس‌های فونونی، فصل دوم به مبانی کلی شبیه‌سازی دینامیک مولکولی و مدل‌های برهم-کنشی ذرات و سرانجام فصل سوم به معرفی کد محاسباتی و مواد پژوهش و شرح نتایج و بحث اختصاص داده شده است.

فصل اول:

کلیات پژوهش



۱ مقدمه و مفاهیم

۱-۱ مفهوم فونون

در بلورها در یک دمای متناهی اتمها در مکانهای تعادلی‌شان ساکن نیستند و حول این مکانها ارتعاش می‌کنند. می‌توان این ارتعاشات را اتم به اتم توصیف کرد، اما انجام این کار برای سیستم‌های بزرگ دشوار خواهد بود. در این حالت یک نظریه‌ی منسجم برای سیستم‌های نامحدود متناوب مطرح شده که عبارت است از نظریه‌ی بلوخ[1]، که اجازه می‌دهد این ارتعاشات را به صورت امواج جمعی بررسی کنیم. این امواج به عنوان نوعی از ذرات (شبه ذرات) تلقی می‌شوند و فونون[2] نامیده می‌شوند. این شبه ذرات پاشندگی معینی بسته به نوع ماده دارند که رابطه‌ی پاشندگی فونونی نامیده می‌شود(Born& Huang, 1956). یک فونون به عنوان یک کوانتوم از انرژی ارتعاشی درون یک ساختار بلوری است. فونون‌ها به عنوان شبه ذره با بردار موج q و فرکانس زاویه‌ای ω_s برای قطبش ارتعاشی اتم s بررسی می‌شوند. انرژی یک مد فونونی برابر $\hbar\omega_s$ و تکانه آن $\hbar q$ است و دینامیک شبکه مطالعه ارتباط این دو کمیت یعنی $\omega = \omega_s(q)$ است. برای حل این مسأله، باید دو فرض زیر را برای یک ساختار بلوری و اندرکنش‌هایش در نظر بگیریم(Ashcroft& Mermin, 1976) :

- اتم‌ها رفتار هارمونیکی دارند، به عبارت دیگر آنها در تقریب هارمونیک عمل می‌کنند و انرژی پایسته است.

1-Bloch theorem
2-Phonon

- فونون‌ها با همدیگر و با دیگر برانگیختگی‌های درون بلور، برهمکنش نمی‌کنند.

در واقع فونون یک تعریف مکانیک کوانتومی از نوع ویژه‌ای از حرکت ارتعاشی دسته جمعی را گویند، در فیزیک کلاسیک این ارتعاشات به عنوان مدهای نرمال[1] شناخته می‌شوند. فونون‌ها با سرعت صوت حرکت می‌کنند، زیرا امواج صوتی دارای ماهیت کشسان هستند،همان گونه که فوتونها بوسیله‌ی اتم‌های جسم سیاه نشر یا جذب می‌شوند، فونون‌ها نیز بوسیله ی نوسانگرهای شبکه‌ای کوانتومی با تغییر دادن حالت‌های کوانتومی آنها، نشر یا جذب می‌شوند. فونون‌ها نقش مهمی دربسیاری از خواص فیزیکی جامدات ازجمله رسانندگی حرارتی و الکتریکی مواد ایفا می‌کنند. مطالعه‌ی فونون‌ها بخش مهمی از فیزیک حالت جامد می‌باشد (Dove,1993).

مفهوم فونون در سال ۱۹۳۲ توسط ایگور تام[2] معرفی شد. نام فونون ازواژه‌ای یونانی به معنای صوت گرفته شده است، زیرافونون‌های با طول موج بلند ایجاد صوت می‌کنند.

۱-۲ کوانتش امواج کشسان

انرژی ارتعاشات شبکه، کوانتومی است. انرژی مد کشسان با بسامد زاویه‌ای ω هنگامی که این مد تا عدد کوانتومی n برانگیخته شود، یعنی وقتی با n فونون اشغال شود، برابر است با (کیتل، ۱۳۵۰):

$$\epsilon=(n+\frac{1}{2})\hbar\omega_s(k) \qquad (۱-۱)$$

جمله‌ی $\frac{1}{2}\hbar\omega$ انرژی نقطه‌ی صفر این مد است. این انرژی هم درمورد فونون‌ها و هم درمورد فوتون‌ها رخ می‌دهد، و این امر به دلیل معادل بودن آنها با یک نوسانگر هماهنگ کوانتومی با بسامد ω

1- Normal Mode
2- Igor Tomm

است.

فونون‌ها بوزون هستند واز آمار بوز انیشتین پیروی می‌کنند. بنابراین در هر کدام ازحالت‌ها از صفر تا بینهایت فونون می‌تواند وجود داشته باشد. تعداد فونون‌های موجود در هر دما و هر مد ارتعاشی یعنی $n_s(\omega)$ را آمار بوز انیشتین تعیین می‌کند.

$$n_s(\omega) = \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{k_B T}} - 1} \qquad (۲-۱)$$

که در این رابطه ħ ثابت پلانک، k_B ثابت بولتزمن، T دما و ω بسامد می‌باشد.

۱-۳ انواع ارتعاشهای بلوری

۱-۳-۱ ارتعاشهای بلوری با پایه ی تک اتمی

وقتی موجی در یکی از جهت‌های لبه‌ی مکعب، قطر وجوه، وقطر مکعب منتشر می‌شود، همه‌ی صفحات اتمی به طور همفاز موازی با جهت بردار موج یا عمود بر آن جابه‌جا می‌شوند. جابه‌جایی صفحه‌ی s از مکان تعادلش را می‌توان با تک مختصه‌ی u_s توصیف کرد. در این صورت با یک مسأله‌ی یک بعدی روبه‌روییم. برای هر بردار موج سه مد، یکی با قطبش طولی و دو تا با قطبش عرضی وجود دارد. اگر نیروی وارد بر صفحه‌ی S ناشی از جابه‌جایی صفحه‌ی s+p، با تفاضل جابه‌جاییهای این دو صفحه، یعنی u_{s+p} -u_s ، متناسب باشد، نیروی کل وارد بر s ناشی ازصفحات s±1 برابر است با(کیتل، ۱۳۵۰):

$$F_s = C(u_{s+1} - u_s) + (u_{s-1} - u_s) \qquad (۳-۱)$$

این عبارت بر حسب جابه‌جاییها خطی و به شکل قانون هوک است. کمیت C، ثابت نیرو بین