



المحاكاة بواسطة مونت كارلو لمحاكاة بعض الظواهر العشوائية باستخدام أعداد عشوائية والمحاكاة ظاهرة فيزيائية.

* نادية اسماعيل البرقلي¹، الطاهر الشريف²
¹القسم العام - كلية تقنية المعلومات - جامعة مصراتة.
²قسم الفيزياء - كلية العلوم - جامعة طرابلس.

الملخص

نستخدم الاعداد عشوائية (random numbers)، في المحاكاة بواسطة مونت كارلو وهي عبارة عن نموذج نظري يتكون من معادلات رياضية تستخدم لدراسة ظاهرة فيزيائية، ويتم دراسة حركة الإلكترون في أشباه الموصلات وعمليات التشتت التي يتعرض لها وكذلك الزمن الذي يستغرقه الإلكترون ما بين عمليتي تشتت دون تصادم ودالة احتمالية، وبعد انتهاء الفترة الزمنية التي يستغرقها الإلكترون دون تصادم من الضروري تحديد عملية التشتت التي يتعرض لها الإلكترون بعد نهاية هذا الزمن. ذلك بإيجاد مدخلات ومخرجات الظاهرة ومقارنتها بالنتائج العملية. الكلمات المفتاحية: أشباه الموصلات، المحاكاة مونت كارلو، حركة الإلكترون، عمليات التشتت، دالة احتمالية، زمن الطيران

Simulation using Monte Carlo to simulate some random phenomena using random numbers. Simulation is a physical phenomenon

* Nadia Ismail Al-Barqaly¹ and Al-Taher Al-Sharif²

¹.General Department - Faculty of Information Technology - Misurata University¹

Department of Physics - Faculty of Science - University of Tripoli²

Summary

We use random numbers in the Monte Carlo simulation, which is a theoretical model consisting of mathematical equations used to study a physical phenomenon. The movement of the electron in semiconductors and the scattering processes to which it is exposed are studied, as well as the time it takes for the electron to pass between two scattering processes without a collision. And a probability function. After the end of the time period that the electron takes without collision, it is necessary to determine the



scattering process that the electron is subjected to after the end of this time. This is done by finding the inputs and outputs of the phenomenon and comparing them with the practical results.

Keywords: semiconductors, Monte Carlo simulation, electron movement, scattering processes, probability function, time of flight

المقدمة

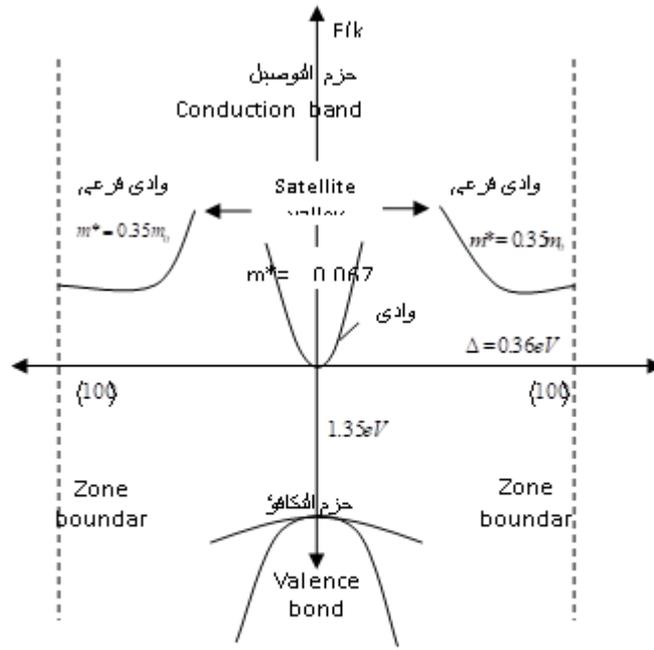
نستخدم المحاكاة بواسطة مونت كارلو لمحاكاة بعض الظواهر العشوائية وذلك باستخدام أعداد عشوائية (random numbers)، والمحاكاة عبارة عن نموذج نظري عادةً ما يتكون من معادلات رياضية تستخدم لدراسة ظاهرة فيزيائية وذلك بإيجاد مدخلات ومخرجات الظاهرة ومقارنتها بالنتائج العملية.

كما تستخدم في العمليات الحسابية لإيجاد بعض التكاملات وإيجاد المساحات والحجوم لبعض الأشكال الهندسية، والأعداد العشوائية المستخدمة في طريقة مونت كارلو ليست أعداداً ناتجة من عمليات عشوائية، بل هي أعداداً تنتج من استخدام عمليات حسابية محددة، وفي أغلب تطبيقات مونت كارلو تستخدم أعداداً عشوائية موزعة بانتظام (uniform random numbers) في النطاق [0,1]، سنوضح كيفية استخدام مونت كارلو لمحاكاة ظاهرة انتقال حاملات الشحنة (charge carriers) (الإلكترونات والفجوات) في أشباه الموصلات (semiconductor) للحصول على دالة احتمالية التوزيع $f(\vec{r}, \vec{v}, t)$ ، التي تعد حلاً لمعادلة بولتزمان ومنها نستطيع حساب العديد من الكميات الفيزيائية، وقبل التطرق لهذه الطريقة نعطي لمحة سريعة عن أشباه الموصلات .

أشباه الموصلات semiconductors

المواد الصلبة تنقسم إلى ثلاثة أنواع من حيث توصيلها للتيار الكهربائي عازلة، وموصلة، وشبه موصلة، نظراً لاختلاف المقاومة النوعية (resistivities) ρ ، والموصلية الكهربائية (conductivities) σ لهذه المواد . فالمقاومة النوعية لمواد أشباه الموصلات تكون في المدى $(10^{-2} - 10^8 \Omega \cdot cm)$ ، والموصلية الكهربائية في المدى $(10^{-8} - 10^4 \Omega^{-1} cm^{-1})$ ، وتقع بعض أشباه الموصلات المتكونة من عنصر واحد كالسليكون (silicon) والجرمانيوم (Germanium) في المجموعة الرابعة (IV) من الجدول الدوري، وهناك عدد كبير من مواد أشباه الموصلات متكونة من عنصرين أو أكثر، مثال ذلك عنصر أرسنيد الكاليوم (Gallium arsenide) (Ga-As)، حيث نجد أن الكاليوم (Gallium) (Ga) يقع في المجموعة الثالثة III و أرسنيد (Arsenide) (As) يقع في المجموعة الخامسة V، ويعرف شبه الموصل في هذه الحالة بالنوع المركب (III-V)، وتتأثر الموصلية الكهربائية لمواد أشباه الموصلات بالحرارة والضوء والمجال الكهربائي والمغناطيسي. كما تمتاز المواد الصلبة في العموم بوجود حزم

الطاقة (Energy bands) التي يمكن بها تقسيم المواد الصلبة إلى مواد موصلة وأشباه موصلة وعازلة والشكل (1) يوضح حزم الطاقة لأرسنيد الكاليوم.



شكل (1)

(As حزم الطاقة في أرسنيد الكاليوم)

تظهر مستويات طاقة دنيا (energy minima) عند المركز وفي أطراف حزمة التوصيل تسمى وديان (Valleys) حيث يوجد وادي رئيسي عند المركز (Central Valley) وكتلة الإلكترون الفعالة (effective mass) في هذا الوادي تساوي $0.067m_e$ حيث كتلة الإلكترون الحر m_e . كذلك يوجد وديان فرعيان (satellite valley) عند الحافتين المتكافئتين $(1,1,0)$ ، ويوجد أيضاً وديان فرعيان عند الحافتين المتكافئتين $(0,1,0)$ وكذلك $(0,0,1)$. وكتلة الإلكترون الفعالة في هذه الوديان الفرعية تساوي $0.35m_e$. في البند القادم نتطرق لحركة الإلكترونات وعمليات التشتت التي يتعرض لها في مواد أشباه الموصلات .



1- حركة الإلكترون في أشباه الموصلات وعمليات التشتت التي يتعرض لها

Motion of the electron in semiconductors and the scattering process

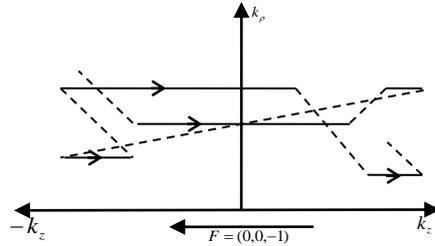
تعامل الإلكترونات في مواد أشباه الموصلات على أنها جسيمات حرة (free particle) ذات كتلة فعالة (effective mass) m^* وطاقة E (Energy) تعطى بالعلاقة :

$$E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \quad (1)$$

حيث $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ مقدار ثابت يسمى ثابت بلانك (blank's constant) و $\hbar k$ كمية الحركة للإلكترون (momentum) التي تعطى بالعلاقة :

$$p = \hbar k \quad (2)$$

ويمكن وصف حركة الإلكترون في أشباه الموصلات بأنها سلسلة من التشتتات العشوائية نتيجة لتصادمها مع ذرات الشبكة (Lattice atoms) و ذرات الشوائب (impurity) ومراكز التشتت الأخرى نتيجة لتأثره بالمجالات الخارجية . مثال ذلك المجال الكهربائي (Electric Field) .



شكل (2)

حركة الإلكترون في فضاء k تحت تأثير مجال كهربائي

الشكل (2) يوضح حركة الإلكترون في الفضاء \vec{K} (فضاء كمية الحركة) نتيجة لتأثره بالمجال الكهربائي المنتظم $\vec{F} = (0,0,-F)$ وبما أن المجال الكهربائي يؤثر في الاتجاه السالب للمحور K_z فإن الإلكترون سيتحرك عكس اتجاه المجال الكهربائي أي في الاتجاه الموجب للمحور K_z والمعادلة التي تصف حركة الإلكترون في هذه الحالة هي :

$$K_{zf} = K_{zi} + \frac{eF}{\hbar} t \quad (3)$$



حيث K_{zi} هو الموضع الابتدائي للإلكترون (initial position)، K_{zf} هو الموضع النهائي للإلكترون (Final Position)، e شحنة الإلكترون (electron charge) و t زمن الطيران الحر (free flight time). ونتيجة تأثير هذا المجال فإن الإلكترون سيتحرك بمعدل ثابت ما بين التصادمات المختلفة ويتغير موضعه عشوائياً من نقطة إلى أخرى. وتعتمد هذه الحركة على معدل الانتقال (Transition rate) $S_n(k, k')$ في الفضاء K وبالتالي فإن المعدل الكلي للتشتت (Total scattering rate) $\lambda_n(k)$ لعملية التشتت التي يتعرض لها الإلكترون عند انتقاله من الموضع \vec{k} إلى الموضع \vec{k}' يمكن إيجادها على النحو:

$$\lambda_n(k) = \int S_n(k, k') dk' \quad (4)$$

حيث n تأخذ قيم عددية حقيقية ($n=1,2,\dots,N$) و N هو عدد الكلي لعمليات التشتت التي من الممكن أن يتعرض لها الإلكترون. ومعدل التشتت الكلي $\lambda(k)$ لعمليات التشتت المحتملة التي يمكن أن يتعرض لها الإلكترون تعطى بالعلاقة التالية:

$$\lambda(k) = \sum_{n=1}^N \lambda_n(k) \quad (5)$$

كما ذكرنا سابقاً فإن حركة الإلكترون في أشباه الموصلات تحت تأثير المجال الكهربائي \vec{F} هي سلسلة من التشتتات العشوائية وبالتالي فإن الزمن الذي يستغرقه الإلكترون ما بين عمليتي تشتت متتاليتين ونوع التشتت الذي يتعرض له الإلكترون بعد نهاية هذا الزمن و الموضع النهائي للإلكترون بعد التشتت هي كميات عشوائية وبما أننا نتعامل مع عمليات عشوائية فإننا نحتاج لوصف هذه العمليات بدوال احتمالية التوزيع الموالية:-

أولاً : دالة احتمالية زمن الطيران الحر

هو الزمن الذي يستغرقه الإلكترون ما بين عمليتي تشتت دون تصادم ودالة احتمالية (Probability function) $p(t)$ يمكن التعبير عنها بالاحتمالية $p(t)$ وكذلك احتمالية بقاء الإلكترون فترة زمنية $t + dt$ دون تصادم نعبر عنها بدالة الاحتمالية $p(t+dt)$ وبالتالي فإن احتمالية تصادم الإلكترون في الفترة الزمنية بين t و $t+dt$ نعبر عنها بـ $\lambda(k) dt$. ومنها يمكن التعبير عن احتمالية عدم تصادم الإلكترون في الفترة الزمنية بين t و $t+dt$ بالكمية $(1 - \lambda(k) dt)$. من الاحتمالات السابقة يمكن التعبير عن احتمالية بقاء الإلكترون فترة زمنية $t + dt$ دون حدوث تصادم بالعلاقة التالية:



$$P(t + dt) = P(t)(1 - \lambda(k) dt) \quad (6)$$

المعادلة (6) يمكن كتابتها على الصورة

$$P(t) + \frac{dP(t)}{dt} = P(t) - \lambda(k) P(t) dt \quad (7)$$

يمكن اختصار المعادلة (7) لتصبح على الشكل:

$$\frac{dP(t)}{P(t)} = -\lambda(k) dt \quad (8)$$

و المعادلة (8) معادلة تفاضلية عادية من الرتبة الأولى والدرجة الأولى بالنسبة للزمن ويمكن إيجاد حلها بسهولة على النحو:

(9)

حيث C هو ثابت التكامل وباستخدام الشرط $p(0)=1$ نجد أن $C=1$ وبالتالي فإن المعادلة (9) تصبح على الصورة:

$$P(t) = e^{-\lambda(k) t} \quad (10)$$

المعادلة (10) تمثل احتمالية بقاء الإلكترون فترة زمنية t دون تصادم ، وبالتالي فإن احتمالية بقاء الإلكترون فترة زمنية t دون تصادم ثم حدوث التصادم في الفترة الزمنية ما بين t و t+dt تعطى بالعلاقة:

(11)

بعد الحصول على دالة احتمالية زمن $P(t) dt = \lambda(k) e^{-\lambda(k) t} dt$ الطيران الحر نحاول إيجاد دالة احتمالية نوع التشتت .

ثانياً : دالة احتمالية نوع التشتت

بعد انتهاء الفترة الزمنية t التي يستغرقها الإلكترون دون تصادم من الضروري تحديد عملية التشتت التي يتعرض لها الإلكترون بعد نهاية هذا الزمن.

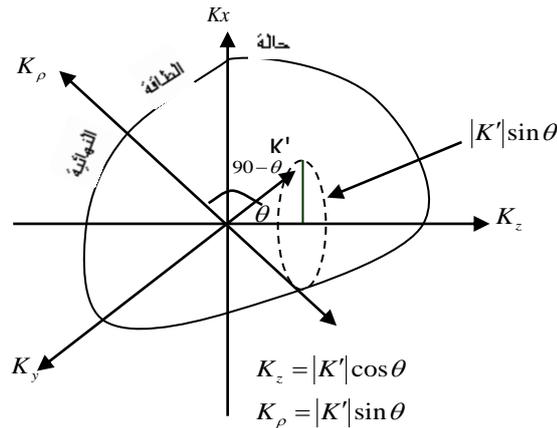
احتمالية تشتت الإلكترون بإحدى عمليات التشتت ولتكن q تتناسب مع المعدل الكلي للتشتت $\lambda_q(k)$ لهذه العملية ويمكن التعبير عن ذلك على النحو التالي :

$$P(q) = \frac{\lambda_q(k)}{\sum_{i=1}^N \lambda_i(k)} e^{-\lambda(k)t} \quad (12)$$

المعادلة (12) تعبر عن دالة احتمالية نوع التشتت الممكنة أن يتعرض له الإلكترون. نسعى الآن للحصول على دالة احتمالية موضع الإلكترون بعد عملية التصادم .

ثالثاً : دالة احتمالية موضع الإلكترون النهائية

بعد نهاية كل عملية تشتت حقيقية ينتقل الإلكترون عشوائياً في الفضاء \vec{k} من الموضع الابتدائي \vec{k} إلى الموضع النهائي \vec{k}' وحيث نرى أن جميع المواضع النهائية \vec{k}' موزعة عشوائياً وبما أن عمليات تشتت الإلكترون تعتمد على احتمالية معدل الانتقال $S_n(k, k')$ من الموضع \vec{k} إلى الموضع \vec{k}' فإن أبسط أنواع التشتت هي تلك التي لا تعتمد فيها احتمالية الانتقال على الزاوية ما بين المتجهين \vec{k} و \vec{k}' كما هو موضح بالشكل (3) .



شكل (3)

هذه الزاوية θ ما بين K' و K في التشتتات المتماثلة



تسمى هذه التشتتات بالمتماثلة (isotropic) أي أن الإلكترون المتشتت له نفس الاحتمالية في جميع الاتجاهات .

بالتالي فإن دالة كثافة احتمالية التوزيع $P(\theta)$ ما بين \vec{k}' واتجاه المجال الكهربائي \vec{F} تتناسب مع عدد المواضع

المتاحة على محيط دائرة نصف قطرها $|k'| \sin \theta$ حيث $|k'| = \left(\frac{2m^* E'}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{2}}$ ويمكن التعبير عن ذلك

بالعلاقة التالية :

$$P(\theta) = A \sin \theta \quad (13)$$

حيث A ثابت المعايرة ويمكن إيجاد قيمة A على النحو :

$$\int_0^{\pi} P(\theta) d\theta = 1 \quad (14)$$

بالتعويض من المعادلة (13) في المعادلة (14) نحصل على العلاقة :

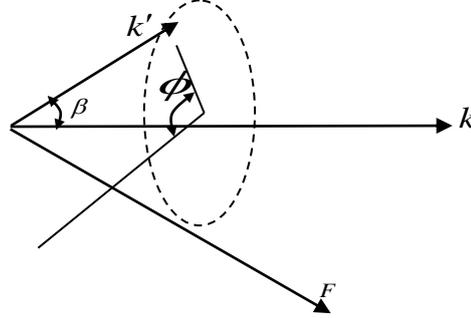
$$A \int_0^{\pi} \sin \theta d\theta = 1 \quad (15)$$

وبإجراء التكامل في المعادلة (15) نجد أن $A = \frac{1}{2}$ وبالتالي فإن المعادلة (13) تصبح على الصورة :

$$P(\theta) = \frac{1}{2} \sin \theta \quad (16)$$

حالة عمليات التشتت التي يعتمد فيها معدل احتمالية التشتت $S_n(k', k)$ على الزاوية ما

بين المتجهين \vec{k} و \vec{k}' كما هي موضحة بالشكل (4) .



شكل (4)

الزاوية β ما بين F, K' في التشتتات غير المتماثلة

هذا النوع من التشتتات غير متماثل، وبالتالي فإن دالة كثافة احتمالية الزاوية $P(\beta)$ للزاوية β ما بين \vec{k} و \vec{k}' تتناسب مع $\sin\beta$ ويمكن التعبير عن ذلك بالعلاقة التالية :

$$P(\beta) = \frac{A \sin \beta}{|k - k'|^2} \quad (17)$$

احتمالات التوزيع السابقة التي تصف حركة الإلكترون في أشباه الموصلات هي احتمالات معقدة ، وسوف يتم معالجة هذه الصعوبة في البند القادم .

2 - محاكاة حركة الإلكترون في أشباه الموصلات بواسطة مونت كارلو

تستخدم طريقة مونت كارلو لمحاكاة حركة الإلكترون في الفضاء \vec{k} (space) الأعداد العشوائية وذلك لدراسة الطبيعة العشوائية لحركة الإلكترون في أشباه الموصلات . أوجدنا في البند السابق احتمالات التوزيع التي تصف حركة الإلكترون في أشباه الموصلات وكما ذكرنا فهي احتمالات معقدة ولمعالجة الصعوبة في هذه الاحتمالات يتم مقارنتها باحتمالية توزيع عشوائية موزعة بانتظام، وذلك على النحو التالي :

$$\int_0^{\phi} P(\phi') d\phi' = \int_0^r P(r) dr \quad (18)$$

$P(\phi')$ تمثل احتمالية التوزيع الحقيقية و $P(r)$ تمثل احتمالية التوزيع العشوائية، وبما أن احتمالية التوزيع العشوائية موزعة بانتظام فإن :

$$P(r) = 1 \quad (19)$$



باستخدام المعادلتين (18) و (19) نحصل على العلاقة التالية :

$$r = \int_0^{\phi} P(\phi) d\phi \quad (20)$$

المعادلة (20) تستخدم لمحاكاة احتمالات التوزيع الحقيقية المعقدة وذلك باستخدام الأعداد العشوائية r ، وكما ذكرنا سابقاً فإن الأعداد العشوائية المستخدمة في طريقة مونتني كارلو تكون موزعة بانتظام في النطاق $[0,1]$ ، ويمكن استخدام المعادلة (20) لمحاكاة حركة الإلكترون في أشباه الموصلات وذلك كما يلي :

أولاً : محاكاة دالة احتمالية زمن الطيران

باستخدام المعادلتين (20) و (11) نحصل على العلاقة التالية :

$$r = \int_0^{\phi} \lambda(k) e^{-\lambda(k) t} d \quad (21)$$

التكامل في المعادلة (21) لا يمكن إيجاده تحليلياً حيث إن معدل التشتت الكلي $\lambda(k)$ دالة معقدة في $k(t)$ كما جاء في المعادلة (3) وللتغلب على هذه الصعوبة تتم إضافة عملية تشتت افتراضية (virtual scattering) واحتمالية معدل الانتقال $S_v(k',k)$ لهذه العملية تعطي بالعلاقة التالية :

$$S_v(k',k) = \lambda_v(k) \delta(k - k') \quad (22)$$

عملية التشتت الافتراضية ليس لها أي تأثير على الموضع النهائي k' للإلكترون المتشتت وبالتالي فإن معدل التشتت الكلي والذي يتضمن عملية التشتت الافتراضية يصبح على الصورة :

$$\lambda(k) + \lambda_v(k) = \Gamma \quad (23)$$

Γ هو مقدار ثابت ويكون أكبر ما يمكن للتقليل من احتمالية حدوث عمليات التشتت الافتراضية ، باستخدام المعادلة (23) يمكن إعادة كتابة المعادلة (21) لتصبح على الصورة:

$$r = \int_0^t \Gamma e^{-\Gamma t'} dt' \quad (24)$$



بإجراء التكامل في المعادلة (24) نحصل على:

$$r = 1 - e^{-\Gamma t} \quad (25)$$

يمكن كتابة المعادلة (25) على الصورة :

$$t = \frac{-1}{\Gamma} \ln(1-r) = \frac{-1}{\Gamma} \ln(r) \quad (26)$$

حيث t هو زمن الطيران الحر الذي يستغرقه الإلكترون ما بين عملية تشتت وأخرى ويمكن إيجاده من المعادلة (26) وذلك باستخدام الأعداد العشوائية الموزعة بانتظام في النطاق $[0,1]$.

ثانياً : محاكاة دالة احتمالية نوع التشتت (آلية التشتت)

باستخدام المعادلتين (12) و (20) نحصل على المتباينة التالية :

$$r \leq \sum_{n=0}^N \frac{\lambda_n(k)}{\Gamma(E)} \quad (27)$$

من المتباينة (27) وباستخدام أعداد عشوائية في النطاق $[0-1]$ يمكن تحديد آلية التشتت التي يتعرض لها الإلكترون في نهاية زمن الطيران الحر t ، ففي حالة تحقيق المتباينة عند $n=0$ فإن عملية التشتت الافتراضية هي التي تحدث، أما في حالة تحقيقها عند $n=1$ فإن عملية التشتت الأولى هي التي تحدث وهكذا، والجدول (3-1) يوضح آليات التشتت المختلفة التي من الممكن أن يتعرض لها الإلكترون في مواد أشباه الموصلات .

بعد تحديد آلية التشتت التي تعرض لها الإلكترون بعد نهاية زمن الطيران t نستطيع إيجاد الموضع النهائي

للإلكترون \vec{k}' وذلك بتحديد زاوية التشتت .

ثالثاً : محاكاة دالة احتمالية موقع الإلكترون بعد عملية التشتت

في حالة التشتتات المتماثلة والتي لا تعتمد على الزاوية ما بين المتجهين \vec{k} و \vec{k}' وباستخدام المعادلتين (16) و (20) نحصل على العلاقة :

$$r = \frac{1}{2} \int_0^\theta \sin \theta d\theta \quad (28)$$



بعد التكامل تأخذ المعادلة (28) الشكل :

$$r = \frac{1}{2}(1 - \cos \theta) \quad (29)$$

المعادلة (29) يمكن كتابتها على الصورة :

$$\cos \theta = 1 - 2r \quad (30)$$

من المعادلة (30) وباستخدام الأعداد العشوائية الموزعة في النطاق [0-1] يمكن إيجاد الزاوية θ والتي نستطيع منها تحديد الموضع النهائي للإلكترون المتشتت وذلك على النحو :

$$k'_\rho = |k'| \cos \theta, k'_\phi = |k'| \sin \theta \quad (31)$$

أما في حالة التشتتات غير المتماثلة والتي تعتمد على الزاوية β ما بين المتجهين \vec{k} و \vec{k}' فإنه يمكن إعادة كتابة المعادلة (17) على الصورة التالية :

$$P(\beta) = \frac{A \sin \beta}{(E + E' - 2(EE')^{\frac{1}{2}} \cos \beta)} \quad (32)$$

حيث استخدمنا العلاقة:

$$|k - k'|^2 = \frac{2m^*}{\hbar^2} (E + E' - 2(EE')^{\frac{1}{2}} \cos \beta) \quad (33)$$

مع اختزال $\frac{2m^*}{\hbar^2}$ في A .

وبما أن $(E^{\frac{1}{2}} - E'^{\frac{1}{2}})^2$ يمكن وضعه على الصورة :

$$(E^{\frac{1}{2}} - E'^{\frac{1}{2}})^2 = (E + E' - 2(EE')^{\frac{1}{2}}) \quad (34)$$



وباستخدام المعادلة (34) فإن المعادلة (32) تأخذ الشكل :

$$(35)$$

$$P(\beta) = \frac{A \sin \beta}{[(E^{\frac{1}{2}} - E'^{\frac{1}{2}})^2 + 2(EE')^{\frac{1}{2}} - 2(EE')^{\frac{1}{2}} \cos \beta]}$$

و يمكن كتابة المعادلة (35) على الصورة :

$$P(\beta) = \frac{A \sin \beta}{[1 + f - f \cos \beta]} \quad (36)$$

حيث $f = \frac{2(EE')^{\frac{1}{2}}}{(E^{\frac{1}{2}} - E'^{\frac{1}{2}})^2}$ وكذلك تم اختزال A باستخدام المعادلتين (14) و (20) يمكن إعادة صياغة المعادلة (36) على الصورة :

$$r = \frac{\int_0^{\beta} \frac{A \sin \beta d\beta}{[1 + f - f \cos \beta]}}{\int_0^{\pi} \frac{A \sin \beta d\beta}{[1 + f - f \cos \beta]}} \quad (37)$$

بوضع $x = \cos \beta$ نجد أن $dx = -\sin \beta d\beta$ وبالتالي فإن المعادلة (38) تصبح على الصورة :

$$r = \frac{\int_{\cos \beta}^1 \frac{dx}{[1 + f - fx]}}{\int_{-1}^1 \frac{dx}{[1 + f - fx]}} \quad (38)$$

بإجراء التكامل في المعادلة (38) نحصل على العلاقة :

$$r = \frac{\ln(1 + f - f \cos \beta)}{\ln(1 + 2f)} \quad (39)$$

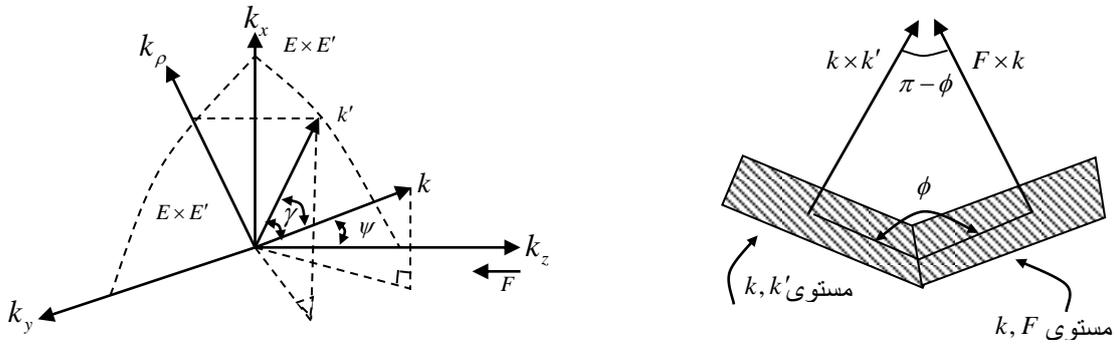
المعادلة (39) يمكن كتابتها على الشكل :

$$\cos \beta = \left[(1 + f - (1 + 2f)^r) \right] / f \quad (40)$$

ومن الشكل (5) نلاحظ أن كل المواضع النهائية للإلكترون المشتت تكون على محيط قاعدة المخروط الدائرية، ويرسم خط مستقيم على هذه القاعدة نجد أنه يعمل زاوية φ مع نصف قطر هذه القاعدة الدائرية عند المواضع المختلفة \vec{k}' . ودالة احتمالية هذه الزاوية $P(\varphi)$ حيث φ هي زاوية عشوائية موزعة بانتظام في النطاق $[2\pi - 0]$. يمكننا إيجاد هذه الزاوية φ باستخدام الأعداد العشوائية الموزعة في النطاق $[1-0]$ وذلك على النحو :

$$\varphi = 2\pi r \quad (41)$$

الشكل (5) يبين المتجهات المختلفة للإلكترون المشتت وعلاقتها بالزوايا المختلفة .



شكل (5)

المتجهات والزوايا المختلفة للإلكترون المشتت

من الشكل (5) يمكن إيجاد العلاقة التالية :

$$(k' \times k) \cdot (k \times F) = (k' \cdot k)(k \cdot F) - (k' \cdot F)(k \cdot k) \quad (42)$$



ويمكن كتابة المعادلة (42) على الصورة :

$$-\sin \beta \sin \psi \cos \phi = \cos \beta \cos \psi - \cos \gamma \quad (43)$$

المعادلة (43) يمكن إعادة كتابتها لتصبح على الصورة التالية :

$$\cos \gamma = \cos \beta \cos \psi - \sin \beta \sin \psi \cos \phi \quad (44)$$

حيث ψ هي الزاوية ما بين \vec{k} والمجال الكهربائي \vec{F} ويمكن إيجاد جيب وجيب تمام الزاوية ψ على النحو التالي :

$$\left. \begin{aligned} \cos \psi &= \frac{k_z}{|k|} \\ \sin \psi &= \frac{k_p}{|k|} \end{aligned} \right\} \quad (45)$$

بعد إيجاد قيمة الزاوية γ يمكن إيجاد الموضع النهائي للإلكترون المتشتت وذلك على النحو التالي :

$$k'_p = |k'| \sin \gamma, \quad k'_z = |k'| \cos \gamma \quad (46)$$

ونوه هنا بأن الموضع النهائي للإلكترون المتشتت الذي تم الحصول عليه في المعادلتين (31) و (46) هو موضع ابتدائي لعملية طيران جديدة وهكذا ، وبنفس الطريقة يمكن محاكاة حركة الإلكترون في الفضاء k باستخدام طريقة مونت كارلو لعدد من عمليات التشتت، وبالتالي فإن الزمن الذي يستغرقه الإلكترون في نقاط مختلفة متجاورة في الفضاء \vec{k} يمثل دالة احتمالية التوزيع $f(\vec{r}, \vec{v}, t)$ والتي نستطيع من خلالها إيجاد بعض الكميات مثل متوسط السرعة والطاقة ... إلخ ، وبالتالي فإن طريقة المحاكاة لمونت كارلو تكافئ حل معادلة بولتزمان بدون التعرض للمعادلة

2- وصف حركة الإلكترون في أرسنيد الكاليوم (Ga-As)

ذكرنا في البند السابق إن مادة أرسنيد الكاليوم (Ga - As) تحتوي على حزم الطاقة المعقدة لهذا العنصر حيث تظهر مناطق طاقة مختلفة تسمى بالوديان، حيث يوجد وادي مركزي (central valley) ووديان فرعية (satellite valleys) متماثلة، وتختلف كتلة الإلكترون الفعالة في هذه الوديان .

في حالة عدم وجود مجال كهربائي ($F = 0$) يكون الإلكترون في حالة اتزان مع ذرات الشبكة المهتزة (vibration of lattice) التي لها طاقة ($k_B T$) حيث T هي درجة الحرارة المطلقة (Absolute Temperature) للمادة شبه الموصلية و k_B ثابت بولتزمان (Boltzmann Constant)، وعند درجة حرارة ($T = 300k$) تكون متوسط طاقة الإلكترون حوالي (0.03 eV)، وعند تأثير المجال يفقد الإلكترون توازنه مع الذرات المهتزة وتزداد طاقته ويتحول



إلى إلكترون ساخن (hot electron)، وينتقل إلى مناطق عليا (Upper regions) في الوادي المركزي، وبزيادة تأثير المجال الكهربائي ينتقل الإلكترون من الوادي المركزي إلى الوادي الفرعية، ويتحول من إلكترون خفيف (light electron) إلى إلكترون ثقيل (heavy electron)، ويحدث تشتت للإلكترون عند انتقاله نتيجة لتفاعله مع الفونونات (phonons)، التي لها طاقة تساوي $(\hbar\omega)$ حيث ω هي تردد الشبكة المهتزة (frequency of lattice vibration)، وقد يحدث انتقال للإلكترون من الوادي الفرعي إلى الوادي المركزي، أو ما بين الوادي الفرعية المتكافئة، وتسمى عمليات التشتت التي تحدث للإلكترون عند انتقاله في نفس الوادي بعمليات التشتت المتكافئة (Equivalent intravalley scattering)، أما عمليات التشتت التي تحدث للإلكترون عند انتقاله من وادي إلى آخر فتسمى بعمليات التشتت غير المتكافئة (non Equivalent intervalley scattering)، ولقد أوضحنا توضيح آليات التشتت المختلفة التي يتعرض لها الإلكترون في الجدول (1) في البند السابق، في البند القادم سوف نقوم باستخدام برنامج المحاكاة بواسطة مونت كارلو لحركة الإلكترون في أرسنيد الكاليوم .

2.2- أهم المعادلات التي تصف حركة الإلكترون

Equations which describe the motion of the electron

قبل التطرق إلى استخدام طريقة المحاكاة بواسطة مونت كارلو لحركة الإلكترون في مادة شبه موصلة أرسنيد الكاليوم (Ga - As) سنعيد كتابة بعض المعادلات التي تم اشتقاقها في الفصل السابق و التي سيتم استخدامها عند تصميم برنامج المحاكاة، وهذه المعادلات هي :

1. معادلة الحركة للإلكترون التي يمكن إعادة كتابتها على النحو التالي :

$$k_{zi} = k_{zf} + \frac{eF}{\hbar}t \quad (50)$$

حيث t هو زمن الطيران الذي سوف يتم حسابه بواسطة المحاكاة أيضاً و \vec{F} المجال الكهربائي الذي سيكون أحد مدخلات البرنامج و k_{zi} هو موقع الإلكترون الابتدائي في الفضاء k ، وبهذه المعلومات يمكن حساب الموقع النهائي للإلكترون k_{zf} .

2. معادلة محاكاة زمن الطيران، التي تأخذ الشكل التالي :

$$t = \frac{1}{\Gamma} \ln\left(\frac{1}{r}\right) \quad (51)$$

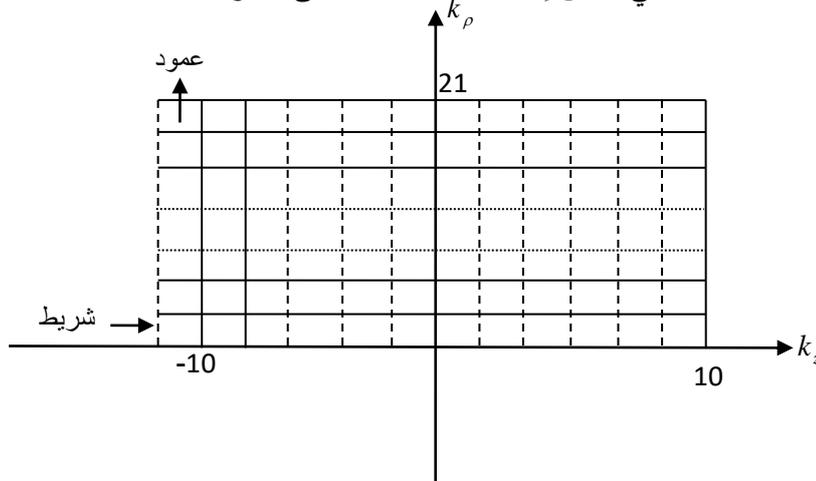
r هو عدد عشوائي له دالة احتمالية توزيع منتظمة $P(r)$ ، و Γ هو معدل التشتت الكلي، وانطلاقاً من المعادلة السابقة يمكن حساب زمن الطيران .

3. معادلة محاكاة (آليات التشتت) التي يتعرض لها الإلكترون التي توضع على الشكل:

$$r = \sum_{n=0}^N \frac{\lambda_n(E)}{\Gamma(E_{\max})} \quad (51)$$

حيث r هو عدد عشوائي أيضاً و $\lambda_n(E)$ هو معدل التشتت لآليات التشتت المختلفة، و Γ معدل التشتت الكلي عند الطاقة العظمى (E_{\max}) .

4. معادلات محاكاة زوايا التشتت، التي يمكن إعادة كتابتها على النحو:



$$\cos \gamma = \cos \beta \cos \psi - \sin \beta \sin \psi \cos \phi \quad \text{و شكل (6)} \quad \cos \beta = \frac{(1+f - (1+2f^r))}{f} \quad \text{حيث } \cos \theta = 1 - 2r \quad \text{والزاوية}$$

حيث تم تعريف كل الزوايا في البنية في الفضاء \vec{k} إلى خلايا لإيجاد دالة احتمالية التوزيع $f(\vec{k})$

5. معادلة إيجاد الموضع النهائي للإلكترون المتشتت، ويمكن كتابة هذه المعادلة في حالة التشتتات المتماثلة على النحو:

$$\vec{k}' = (|\vec{k}'| \cos \theta, |\vec{k}'| \sin \theta) \quad (52)$$

أما في حالة التشتتات غير المتماثلة فإنه يمكن كتابتها على النحو:



$$k' = (|\vec{k}'| \cos \gamma, |\vec{k}'| \sin \gamma) \quad (53)$$

حيث تعطى قيمة $|\vec{k}'|$ بالعلاقة التالية :

$$|\vec{k}'| = \left(\frac{2m * E'}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (54)$$

6. دالة احتمالية التوزيع $f(\vec{k})$ التي تمثل الركيزة الأساسية في هذا البحث، ويمكن إيجادها في الفضاء \vec{k} من البرنامج على النحو :

يقسم الفضاء $\vec{k}(k_\rho, k_z)$ إلى شبكة أو خلايا متساوية meshes كما هو مبين في الشكل رقم (6)

تم يتم حساب زمن الطيران الكلي وذلك لكل قيمة ثابتة من k_ρ ثم بحسب موقع الإلكترون النهائي في كل شريط وتسجل نقطة في كل خلية يمر بها الإلكترون و تعاد العملية بأخذ قيمة أخرى ثابتة من k_ρ وبتكرار هذه العملية لكل قيم k_ρ التي يصل عددها إلى 21 قيمة، تجمع النقاط في كل عمود في الفضاء \vec{k} وهذا ما يعرف بالمخطط التكراري (histogram) ثم نرسم العلاقة بين k_z في مركز كل خلية ومع مجموع نقاط زيارة الإلكترون في كل عمود نحصل على المنحنى الذي يمثل دالة احتمالية التوزيع المطلوب إيجادها .

حيث بدأنا بدرجة الحرارة (T=77 ko) لإيجاد دالة احتمالية التوزيع، ولقد تم عرض النتائج في الجدول (1) الذي يبين عدد مرات زيارة الإلكترون لكل خلية مع تغير شدة المجال الكهربائي (kv/cm) وذلك في حالة الوادي المركزي (central valley) ، وتم رسم علاقة دالة احتمالية التوزيع لهذه الحالة في الشكل (7) .

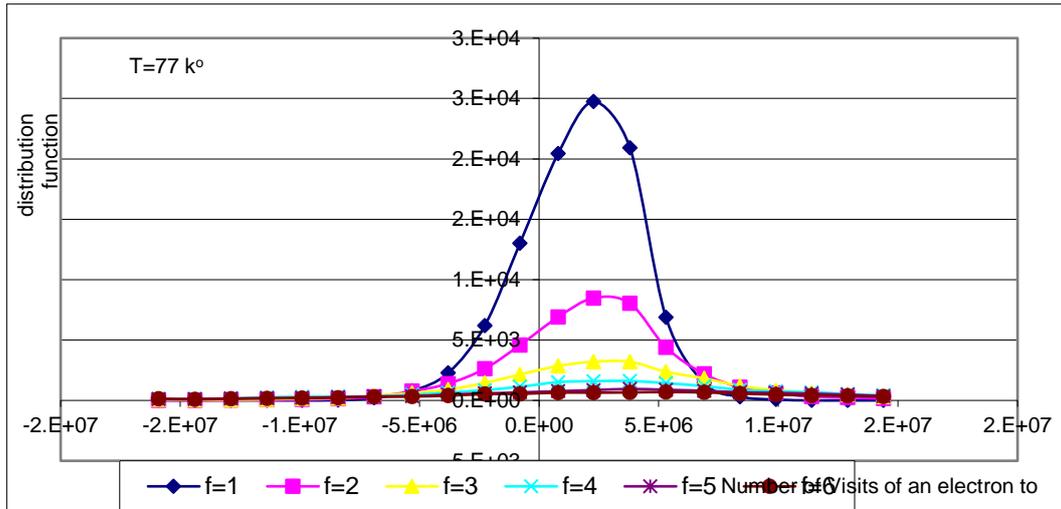
k_z في مركز الخلية	عدد مرات زيارة الإلكترون لكل خلية					
	f=1 (kv/cm)	f=2 (kv/cm)	f=3 (kv/cm)	f=4 (kv/cm)	f=5 (kv/cm)	f=6 (kv/cm)
-6.298802 E+6	0	4	72	100	104	142
-5.635770 E+6	0	7	56	119	114	88
-4.972738 E+6	0	22	64	151	161	142
-4.309706 E+6	0	50	82	252	181	174

-3.646674 E+6	0	72	153	295	213	191
-2.983643 E+6	16	145	191	318	269	229
-2.320611 E+6	199	297	390	328	336	303
-1.657579 E+6	795	762	608	471	351	326
-9.94547 E+5	2506	1392	894	638	488	392
-3.31515 E+5	6802	2620	1450	860	577	528
3.31515 E+5	13577	4581	2146	1132	665	540
9.94547 E+5	20920	6910	2850	1515	763	651
1.657579 E+6	24219	8475	3205	1594	855	643
2.320611 E+6	20354	8030	3197	1608	951	663
2.983643 E+6	6956	4402	2375	1429	876	697
3.646674 E+6	1228	2188	1826	1185	802	660
4.309706 E+6	274	1095	1201	879	672	572
4.972738 E+6	22	602	835	740	624	484
5.635770 E+6	0	313	637	674	557	413
6.298802 E+6	0	233	478	527	476	374
6.961834 E+6	0	155	321	419	355	314

جدول (1)

دالة احتمالية التوزيع في الوادي المركزي (central valley) لشبه الموصل

(Ga-As) في درجة حرارة (T=77ko) لعدة مجالات كهربية مختلفة (kv/cm)



شكل (7)

يبين دالة احتمالية التوزيع في الوادي المركزي (central valley) لشبه الموصل (Ga-As)

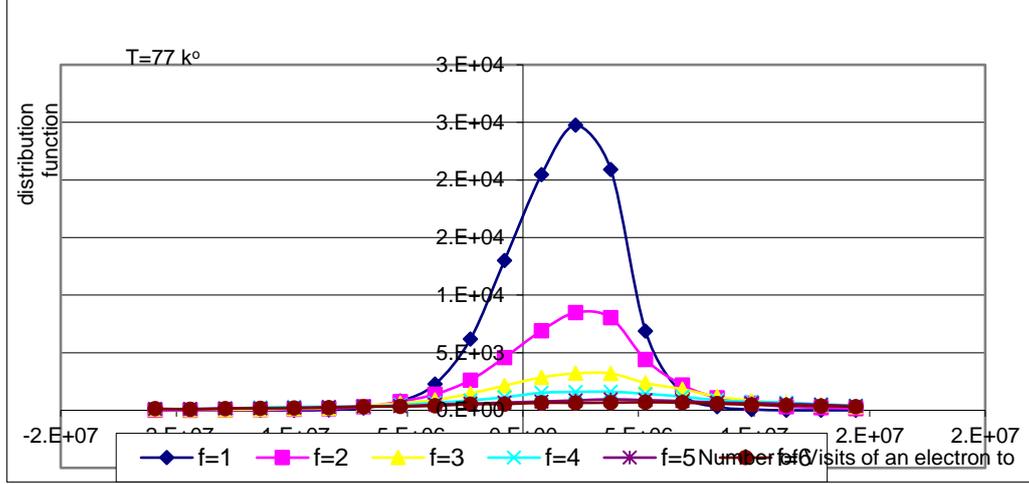


في درجة حرارة (T=77K) لعدد من المجالات الكهربائية المختلفة

والجدول (2) يبين دالة احتمالية التوزيع في حالة الوادي الفرعي (satellite valley) عند درجة الحرارة (T=77ko) بينما يبين الشكل رقم (8) هذه العلاقة.

k_z في مركز الخلية	عدد مرات زيارة الإلكترون لكل خلية					
	f=1 (kv/cm)	f=2 (kv/cm)	f=3 (kv/cm)	f=4 (kv/cm)	f=5 (kv/cm)	f=6 (kv/cm)
-1.59118351E+007	0	0	102	95	112	122
-1.43964220E+007	0	3	88	87	102	119
-1.28810E+007	0	7	103	144	113	132
-1.136559E+007	0	17	148	195	190	143
-9.850183 E+006	0	31	205	253	214	169
-8.334770 E+006	25	128	336	364	237	217
-6.819357 E+006	208	276	377	458	312	226
-5.303945 E+006	793	616	634	468	401	267
-3.788532 E+006	2273	1470	1000	660	430	352
-2.273119 E+006	6188	2827	1479	861	563	418
-7.57706 E+006	13011	4913	1936	1088	656	450
7.57706 E+006	20452	7171	2557	1368	794	554
2.273119 E+006	24744	8966	3070	1576	838	600
3.788532 E+006	20905	8337	2952	1505	854	640
5.303945 E+006	6891	5038	2273	1422	826	619
6.819357 E+006	1440	2396	1676	1252	696	529
8.334770 E+006	302	1002	1217	1013	638	491
9.850183 E+006	71	464	985	801	657	458
1.136559E+006	2	150	710	694	491	407
1.28810090E+007	0	44	557	513	437	325
1.43964220E+007	0	67	400	441	363	299
1.59118351E+007	0	0	102	95	112	122

جدول (2)



شكل (8)

يبين دالة احتمالية التوزيع في الوادي الفرعي (satellite valley)

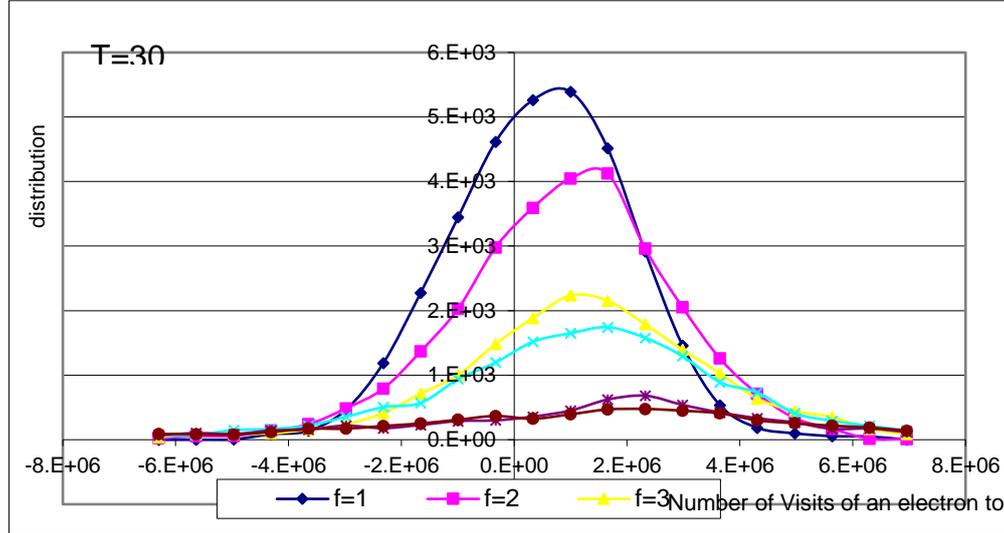
لشبه الموصل (Ga-As) في درجة حرارة (T=77K) لعدد من المجالات الكهربائية المختلفة

نقوم بعدئذ بتغيير درجة الحرارة (T=300 ko) لإيجاد دالة احتمالية التوزيع و لقد توصلنا إلي النتائج المبينة الجدول (3) والذي يبين عدد مرات زيارة الإلكترون لكل خلية مع تغير شدة المجال الكهربائي (kv/cm) f وذلك في حالة الوادي المركزي (centra valley) كما تم رسم علاقة دالة احتمالية التوزيع لهذه الحالة في الشكل (9) .

k_z في مركز الخلية	عدد مرات زيارة الإلكترون لكل خلية					
	f=1 (kv/cm)	f=2 (kv/cm)	f=3 (kv/cm)	f=4 (kv/cm)	f=5 (kv/cm)	f=6 (kv/cm)
-6.298802 E+6	0	23	41	65	70	91
-5.635770 E+6	0	56	97	73	102	83
-4.972738 E+6	6	59	94	149	87	81
-4.309706 E+6	86	142	98	166	142	120
-3.646674 E+6	137	240	158	218	158	171
-2.983643 E+6	464	485	240	356	218	171
-2.320611 E+6	1187	791	414	505	179	213
-1.657579 E+6	2277	1370	715	571	229	252
-9.94547 E+5	3448	2030	1001	939	289	310
-3.31515 E+5	4614	2979	1482	1196	300	368
3.31515 E+5	5264	3593	1886	1518	358	325
9.94547 E+5	5392	4047	2236	1650	452	394

1.657579 E+6	4515	4123	2152	1743	622	469
2.320611 E+6	2918	2961	1789	1578	682	477
2.983643 E+6	1461	2053	1395	1295	540	450
3.646674 E+6	536	1259	1031	891	422	409
4.309706 E+6	185	713	636	731	333	301
4.972738 E+6	99	334	446	408	266	255
5.635770 E+6	56	170	351	293	168	217
6.298802 E+6	49	13	167	215	173	189
6.961834 E+6	0	10	89	142	118	140

جدول (3)



شكل (9)

يبين دالة احتمالية التوزيع في الوادي المركزي (central valley) لشبه الموصل (Ga-As)

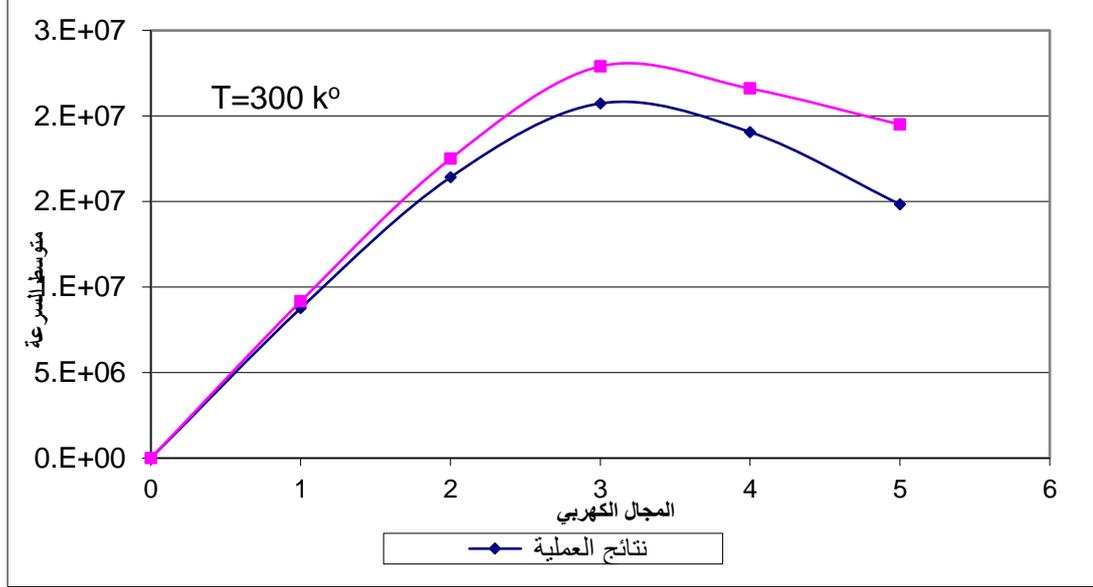
في درجة حرارة (T=300K) لعدد من المجالات الكهربائية المختلفة

والجدول (4) والشكل (10) يوضحان مقارنة بين النتائج العملية والنتائج التي تم التحصل عليها باستخدام طريقة مونت كارلو

وذلك في الوادي المركزي عند درجة حرارة (T=300ko)

المقارنة بين النتائج العملية والنتائج المتحصل عليها من طريقة مونت كارلو في الوادي المركزي

(central valley) لشبه الموصل (Ga-As) عند درجة حرارة (T=300ko)



شكل (10)

يوضح المقارنة بين النتائج العملية ونتائج مونت كارلو في الوادي المركزي (central valley)

لشبه الموصل (Ga-As) في درجة حرارة (T=300K)

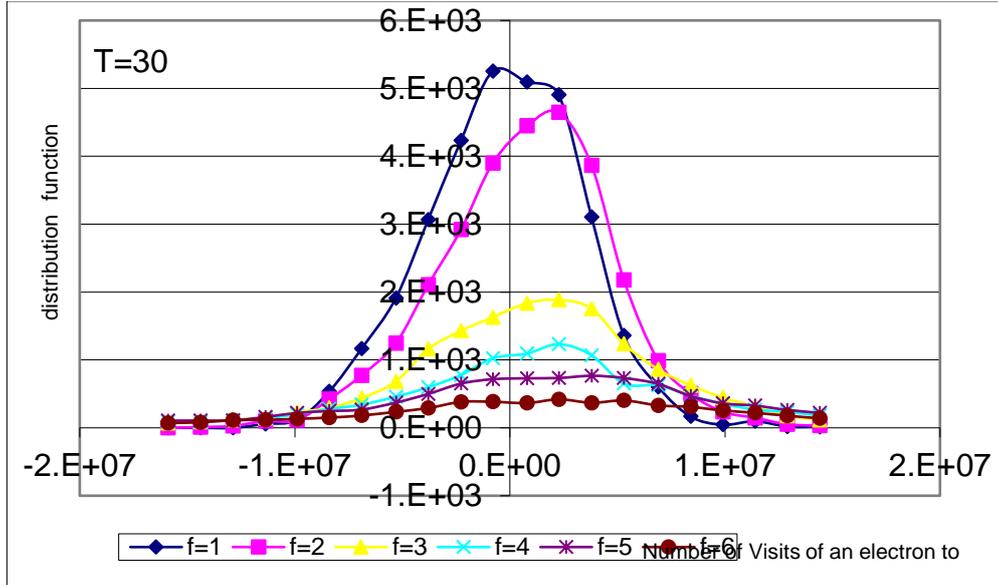
وأما الجدول (4) فإنه يبين دالة احتمالية التوزيع في حالة الوادي الفرعي (satellite valley) عند درجة الحرارة

(T=300 ko) والشكل رقم (11) يبين هذه العلاقة بيانياً .

k_z في مركز الخلية	عدد مرات زيارة الإلكترون لكل خلية					
	f=1 (kv/cm)	f=2 (kv/cm)	f=3 (kv/cm)	f=4 (kv/cm)	f=5 (kv/cm)	f=6 (kv/cm)
-1.59118351E+007	0	0	70	89	106	71
-1.43964220E+007	0	11	89	84	107	82
-1.28810E+007	0	28	117	115	108	112
-1.136559E+007	58	100	148	144	160	118
-9.850183 E+006.	115	113	231	200	219	132
-8.334770 E+006.	535	422	292	278	247	151
-6.819357 E+006.	1165	772	437	341	268	181
-5.303945 E+006	1910	1245	682	458	371	236

-3.788532 E+006	3065	2105	1160	597	499	291
-2.273119 E+006	4233	2921	1430	778	652	382
-7.57706 E+006	5250	3896	1629	1024	716	384
7.57706 E+006	5091	4446	1836	1094	730	365
2.273119 E+006	4904	4644	1885	1231	734	420
3.788532 E+006	3105	3864	1756	1069	767	369
5.303945 E+006	1361	2176	1236	652	734	403
6.819357 E+006	604	987	860	624	647	331
8.334770 E+006	167	503	627	474	468	308
9.850183 E+006	46	237	446	356	361	256
1.136559E+006	97	148	314	268	327	221
1.28810090E+007	19	52	178	234	264	178
1.43964220E+007	14	31	119	184	220	141

جدول (4)



شكل (11)

يبين دالة احتمالية التوزيع في الوادي الفرعي (satellite valley) لشبه الموصل (Ga-As)

في درجة حرارة (T=300K) لعدد من المجالات الكهربائية المختلفة



مجلة جامعة فزان العلمية
Fezzan University scientific Journal

Journal homepage: [wwwhttps://fezzanu.edu.ly/](https://fezzanu.edu.ly/)



الاستنتاجات Conclusions

نستخلص من النتائج والأشكال التي أوردناها و دالة التوزيع في الوادي المركزي (Central valley) أن المنحنى الذي يمثل دالة التوزيع يقل بزيادة شدة المجال الكهربائي وذلك لأن زيادة المجال الكهربائي يعمل على تعجيل الإلكترونات وبذلك تزداد طاقة حركتها وتنتقل من الوادي المركزي إلى الوادي الفرعية .

بينما نلاحظ أن المنحنى الذي يمثل دالة التوزيع في الوادي الفرعي

(Satellite valley) يزداد بزيادة شدة المجال الكهربائي، وتحدث إزاحة للمنحنى في كلتي الحالتين ناحية اليمين . كما نلاحظ أن المنحنى الذي يمثل دالة التوزيع في حالة الوادي الرئيسي والوادي الفرعية يقل بزيادة درجة الحرارة.

لقد ذكرنا في الفصل الثاني أن حل معادلة بولتزمان بالطرق التقريبية صعب ولكن لقد وجدنا أن طريقة مونتي كارلو سهلة في محاكاتها للحصول على دالة احتمالية التوزيع .

ومن النتائج التي تحصلنا عليها نرى أن تلك الدالة تتفق مع خصائص دوال التوزيع المتعارف عليها في الفيزياء الإحصائية مثل دالة توزيع بولتزمان أو جاوس.

المراجع

- 1-مبادئ الجبر الخطي أ.د.أنور اللحام , منشورات جامعة دمشق 1987 م.
- 2-كتاب لرياضيات الجبر الثاني ,أحمد حمزة الشيخة ,منشورات جامعة سبها 1996 م.
- 3-الحسبان ومبادئ التفاضل , د.احمد محمد عبد المتعال منشورات جامعة السابع من أكتوبر بمصراتة.
- 4-حساب التفاضل و التكامل والهندسة التحليلية (الجزء الثاني) توماس منشورات جامعة الفاتح .
- 5-التفاضل والتكامل المتقدم ,سلسلة شوم ,موري ريشبيجل منشورات الدار الدولية والتوزيع ,القاهرة1993م.

Brief Calculus , Michael Sullivan , Chicago State university – 6

Calculus I ,Paul Dawkins , USA , Lamar university– 7

Calculus , Gilbert strange ,Massachusetts Institute of Technology – 8