------مجلة علوم الرافدين، المجلد 23، العدد 4، ص158-171، 2012------

خوارزمية جديدة لحساب الصور الفونونية لبلورات المعين القائم

ممتاز محمد صالح حسين
قسم الفيزياء
كلية التربية
جامعة الموصل

منال علي خليل
قسم علوم الحاسوب
كلية علوم الحاسوب والرياضيات
جامعة الموصل

(تاريخ الاستلام 21/ 2 /2012 ؛ تاريخ القبول 30 /4 / 2012)

الملخص

في هذا البحث تم تطبيق خوارزمية جديدة لحساب الصور الفونونية لبلورات المعين القائم، تعتمد هذه الطريقة على محاولة حساب الصور الفونونية من سرعة الطور وسطح التوهين فقط دون حساب سرعة المجموعة تفصيلا وذلك عن طريق تحديد متجهات سرعة المجموعة من سطح التوهين. واستخدمنا طريقة مونتي كارلو لتوليد متجهات متجه الموجة في المنطقة المختزلة ثم تحويل هذه المتجهات إلى فضاء سطح التوهين وتحديد متجهات الوحدة لسرعة المجموعة. تمت مقارنة نتائج هذه الطريقة الجديدة مع الطريقة التقليدية في حساب الصور الفونونية في بلورات المعين القائم وقد أظهرت النتائج تقاربا كبيرا بين الطريقة الجديدة والطريقة التقليدية.

الكلمات الدالة: حساب الصور الفونونية، مونتي كارلو، التمركز الفونوني.

A New Algorithem for Calculating the Phonon Imaging for Orthorhombic Crystals

Mumtaz M. Hussien
Department of Physics
College of Education
University of Mosul

Manal A. Khalil
Department of Computer Science
College of Computer Science and Mathmatics
University of Mosul

ABSTRACT

In this research a new algorithem has been applied to calculate the phonon images for orthohombic crystals, this method depend on the calculation of the phonon imaging from the phase velocity and slowness surface only without the detail calculation the group velocity, this has been done by determining the directions of the group velocity from the slowness surface. The Monte Carlo method has been used to generate the wave vectors in reduced Brilluon zone, then transformed these vectors to slowness surface space and the unit vectors of group velocity are determind. A comparision between the new and classical algorithem results has been done for the calculation of the phonon images for orthohombic crystals, the results shows a good agrement between the new and the classical algorithem.

Keyword: Calculation of Phonon Imaging, Monte Carlo, Phonon Focusing.

المقدمـــــة

استخدمت تقنيات عديدة لدراسة انتشار الفونونات داخل بلورات المواد الصلبة ودراسة ترددات هذه الاهتزازات (Marder, 2000)، وهناك نمو وتطور مهم في الدراسات النظرية والعملية لانتشار طيف الفونون في المواد الصلبة (Tanaka *et al*., 1998; Imamura *et al*., 2002b; Taylor *et al*., 1971, 1969). عند درجات الحرارة الواطئة تنتشر الموجات المرنة (الفونونات) ذات التردد العالي داخل البلورات الصلبة قذيفيا (Northrop and Wolfe, 1980)، هذا وان انتشار الفونون المقذوف ذاتيا داخل البلورات يتأثر بشكل كبير بقيمة تباين خواص تلك البلورات. ان فيض طاقة الفونونات المنبعثة من مصدر صغير والذي ينتقل بواسطة سرعة المجموعة سوف يظهر تباينا كبيرا في التوزيع إذ ان هذه الفونونات سوف تتمركز باتجاه معين في حين انها لا تتمركز باتجاه آخر هذه الظاهرة تدعى بظاهرة التمركز الفونوني المنتشرة قذيفيا (Holt, 2000; Von Gutfeld and Nethercot, 1961; Hurly and Wolfe, 1985). لقد درست هذه الظاهرة عمليا ونظريا من قبل العديد من الباحثين وفي العديد من انظمة البلورة.
(Northrop and Wolfe, 1980; Every, 1980, 1988; Wintermheimer and McCurdy, 1978)

يحتاج تمثيل صور التمركز الفونوني نظريا الى احتساب سطح التوهين وسطح سرعة المجموعة اللذين لهما علاقة بتوزيع تدفق الطاقة (Wolfe, 1998; Imamura *et al*., 2002a; Aono and Tamura, 1998) في الفضاء الحقيقي. تعد طريقة مونتي كارلو من الطرائق العددية المهمة التي تأخذ تطبيقات واسعة في العديد من مجالات الفيزياء وتستخدم في إجراء محاكاة لعديد من الظواهر(Every, 1980; Northrop and Wolfe, 1980). تطلق 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. لتحديد اتجاهات سير وانتقال الطاقة داخل البلورة عند تسليط نبضة حرارية على سطح البلورة، فان الاضطرابات تبدأ بالانتشار في كافة اتجاهات البلورة، والموجات المرنة تسلك نفس السلوك في البلورة إذ تنتقل الموجات بشكل انتشاري وبدون استطارة او تشتت عندما تكون البلورة في درجات حرارة واطئة (Wolfe and Hauser, 1995). من بين ما يميز البلورات عن سواها انها أوساط تعتمد خصائصها على الاتجاه، لذا فان سرعة الطور تختلف من اتجاه إلى آخر (Wolfe, 1998; 1995) وعرفت هذه الظاهرة منذ عقود في تجارب النبضة الحرارية حيث تتحرك (Von Gutfeld and Nethercot, 1961; Taylor *et al*., 1971) الأنماط المختلفة للموجة المرنة داخل البلورة بسرعات مختلفة وتتغير هذه السرعات بتغير الاتجاه علما ان سرعة الطور تتغير بشكل مختلف عن سرعة المجموعة من حيث المقدار والاتجاه.

استخدمت طريقة مونتي كارلو لتكوين الصور الفونونية نظريا في كثير من البحوث السابقة (Every, 1980; 1988) حيث تم احتساب هذه الصور لبلورات ذات التناظر العالي (البلورات المكعبة) وأخرى ذات التناظر الواطئ (بلورات المعين القائم) باستخدام الخوارزمية التقليدية (khaleel and Hussien, 2010).

يتطلب احتساب تشكيلة الصور الفونونية إلى تجميع عدد كبير من النقاط في فضاء متجه الموجة. في هذا البحث تم استخدام الخوارزمية التقليدية لتجميع النقاط اللازمة في تشكيل الصور الفونونية لبلورة من بلورات المعين القائم حيث ان هذه النقاط يتم اختيارها عشوائيا في منطقة برليون المختزلة والتي تمثل $\frac{1}{8}$ من منطقة برليون الكلية وبعد ايجاد سرعة المجموعة في هذه المنطقة ومن ثم ايجاد الصور الفونونية من متجهات سرعة المجموعة وباستخدام العمليات التناظرية يمكن إيجاد سرعة المجموعة في منطقة برليون الكاملة.

في هذا البحث تم تقديم واستخدام خوارزمية جديدة لاحتساب الصور الفونونية حيث امكن تكوين النقاط اللازمة لتشكيل الصور في منطقة برليون المختزلة ثم احتساب الصور الفونونية في هذه المنطقة باستخدام الطريقة المقترحة والتي تعتمد على احتساب الصور الفونونية من سطح التوهين فقط. تم اجراء العمليات

التناظرية على هذا الجزء من الفضاء للحصول على الصور النهائية. ولغرض التاكد من صحة هذه الخوارزمية الجديدة تم تطبيق الخوارزمية التقليدية التي تعتمد على احتساب سرعة المجموعة على نفس البلورة. وقد اخترنـا بلورة Barium Sulphate ($BaSO_4$) كمثال لبلورات المعين القائم.

الجزء النظري

رياضيا يمكن إيجاد سرعة الطور بحل معادلة كرستوفل في اتجاه معين $\vec{k}(k_x, k_y, k_z)$ حيث نحصل من حل معادلة كرستوفل على سرعة الطور وللأنماط الثلاثة الطولية والمستعرضة الأولى والثانية، ونحصل أيضا على الحل بالصيغة التحليلية في الاتجاهات الخاصة فقط. أما الاتجاهات العامة فيمكن إيجادها حسابيا من حل معادلة كرستوفل (Every, 1981; Kim, 1993; Wolfe, 1998; Lau and McCurdy, 1998).

$$|\Gamma_{ik} - \rho v^2 \delta_{ik}| = 0 \qquad (1)$$

حيث ان Γ_{ik} كمية ممتدة وتساوي

$$\Gamma_{ik} = C_{ijkl} n_j n_l \qquad (2)$$

حيث ان C_{ijkl} ممتدة المرونة من المرتبة الرابعة و n_j وn_l هما الوحدة الاتجاهية لمتجه الموجة في الاتجاه j وl على التوالي ويمكن الربط بين الوحدة الاتجاهية ومتجه الموجة

$$\hat{n}_l = \frac{\vec{k}_l}{|\vec{k}|} \qquad (3)$$

في نظام المعين القائم يمكن تمييز تسعة ثوابت مستقلة للمرونة هي C_{11}، C_{12}، C_{13}، C_{22}،C_{23} ، C_{33} ، C_{44}، C_{55}،C_{66} (Philip and Viswanathan, 1978 ; Auld, 1973).

حيث أن:

$$C_{ij} = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{22} & C_{23} & 0 & 0 & 0 \\ C_{13} & C_{23} & C_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{55} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{66} \end{pmatrix} \qquad (4)$$

يمكن تطبيق المعادلة (1) على بلورات المعين القائم يتم تحديد عناصر ممتدة كرستوفل Γ_{ik} والتي تساوي.

$$\Gamma_{11} = C_{11} n_1^2 + C_{66} n_2^2 + C_{55} n_3^2 \qquad (5a)$$

$$\Gamma_{22} = C_{66} n_1^2 + C_{22} n_2^2 + C_{44} n_3^2 \qquad (5b)$$

$$\Gamma_{33} = C_{55}{n_1}^2 + C_{44}{n_2}^2 + C_{33}{n_3}^2 \quad (5c)$$
$$\Gamma_{12} = \Gamma_{21} = (C_{12} + C_{66})n_1 n_2 \quad (5d)$$
$$\Gamma_{13} = \Gamma_{31} = (C_{13} + C_{55})n_1 n_3 \quad (5e)$$
$$\Gamma_{23} = \Gamma_{32} = (C_{23} + C_{44})n_2 n_3 \quad (5f)$$

بفتح المحدد للمعادلة (1) يمكن الحصول على معادلة مثلثيه لـ ρv^2 يعطي سرعة الطور وللأنماط الثلاثة، أما الحصول على سرعة المجموعة فأننا نستخدم الاشتقاق الضمني لمفكوك المعادلة (1) للحصول على صيغة سرعة المجموعة (Northrop and Wolfe, 1980 ; Wolfe, 1998).

$$\Omega(\omega,k) = -(\rho v^2)^3 + (\rho v^2)^2[\Gamma_{11} + \Gamma_{22} + \Gamma_{33}] - \rho v^2[\Gamma_{11}\Gamma_{22} + \Gamma_{22}\Gamma_{33} + \Gamma_{11}\Gamma_{33} - {\Gamma_{12}}^2 - {\Gamma_{23}}^2 - {\Gamma_{13}}^2] + [\Gamma_{11}\Gamma_{22}\Gamma_{33} + 2\Gamma_{12}\Gamma_{23}\Gamma_{13} - {\Gamma_{12}}^2\Gamma_{33} - {\Gamma_{23}}^2\Gamma_{11} - {\Gamma_{13}}^2\Gamma_{22}] \quad (6)$$

المركبة j لسرعة المجموعة هي:

$$v_{gj} = \frac{\partial\omega}{\partial k_j} = -\frac{\nabla_{k_j}\Omega}{\frac{\partial\Omega}{\partial\omega}} \quad (7)$$

للحصول على الصور الفونونية لابد من حل معادلة كرستوفل لإيجاد سرعة الطور من حل معادلة رقم (1) ومن ثم سرعة المجموعة من المعادلتين (6) و (7) وإجراء هذه الحسابات بهذه الطريقة تتطلب جهد رياضي كبير.

خوارزمية حساب الصور الفونونية

الخوارزمية الحسابية التقليدية لإيجاد الصور الفونونية هي إيجاد أعداد كبيرة من النقاط في فضاء متجه الموجة بطريقة مونتي كارلو $\{\vec{k}\}$ ثم إيجاد سرعة الطور $\{\vec{v}_p\}$ و سرعة المجموعة المقابلة $\{\vec{v}_g\}$ ومن ثم إيجاد مسـاقط مركـبات سـرعة المجموعة في اتجاه معين يمكن اختياره ويتم ذلك لكافة النقاط التي تم تكوينها بطريقة مونتي كارلو، إن إيـجاد مركبات سـرعة المجموعة تتطلب إجراء الحسابـات التفصيلـية من معادلـة كرستوفـل. حاولنا فـي هذا البحث إيـجاد خوارزمية حسابية مختصرة للحصول على الصور الفونونـية من احتساب سرعـة الطور وسطح التوهين دون إجراء الحسابـات التفصيلية المطولـة للإيجـاد سرعة المجموعة $\{\vec{v}_g\}$ وذلك بتقديم طريقة تعتمد على احتساب سرعة الطور ومن ثم إيجاد سطح التوهين والذي يساوي مقلوب سرعة الطور $\{\vec{v}_p\}$ (Calleja, 2003; Zamkova *et al.*, 2003) :

$$\vec{S}(k_x,k_y,k_z) = \frac{1}{\vec{v}_p(k_x,k_y,k_z)} \quad (8)$$

اتجاه العمود على هذا السطح يعطي اتجاه سرعة المجموعة في تلك النقطة (k_x, k_y, k_z). يمكن تحديد العمود من إيجاد نقطتين قريبتين من النقطة الأساس وإيجاد العمود على سطح التوهين في تلك النقطة ويمثل هذا العمود اتجاه سرعة المجموعة.

إن أهم ما يميز البلورات خصائص اللاتناظر إذ تعتمد خصائص البلورة على الاتجاه ، ففي اتجاه معين لمتجه الموجة لا يكون بالضرورة اتجاه سرعة الطور متطابقاً مع اتجاه سرعة المجموعة ويحدث تطابق الاتجاه في اتجاهات خاصة أما بصورة عامة فان اتجاه سرعة الطور لا يتطابق مع سرعة المجموعة. كما أن البلورات تمتلك خصائص تناظرية يمكن الاستفادة منها في تقليص زمن الحسابات، ففي البلورات المكعبة تمتلك أعلى تناظر من بين الأنظمة البلورية الأخرى ويمكن تحديد منطقة في الفضاء وهي منطقة برليون المختزلة وبإجراء العمليات التناظرية المناسبة لكل نظام بلوري يمكن الحصول على الفضاء الكامل. والاستفادة من الخصائص التناظرية مهم جدا في أي خوارزمية حسابية لأنها تقلص وقت تنفيذ الحسابات. في نظام المعين القائم يمكن تحديد منطقة برليون المختزلة والتي تساوي $\frac{1}{8}$ الفضاء الكلي.

الخوارزمية الجديدة

تم تقديم خوارزمية جديدة لحساب الصور الفونونية في بلورات المعين القائم، تعتمد الخوارزمية على تكوين أعداد كبيرة من النقاط في فضاء متجه الموجة $\{\vec{k}\}$ في منطقة برليون المختزلة والتي تساوي $\frac{1}{8}$ الفضاء الكلي. نكون مع هذه المجموعة مجموعتين من النقاط القريبة منها $\{\vec{k}_1\}$ و$\{\vec{k}_2\}$ حيث لكل نقطة من المجموعة $\{\vec{k}\}$ هنالك نقطتان مجاورتان لها للاستفادة منها في تحديد سرعة المجموعة المقابلة لكل نقطة من $\{\vec{k}\}$. حيث يتم حساب $\{\vec{k}_1\}$ و$\{\vec{k}_2\}$ من إجراء التحويلات المناسبة على $\{\vec{k}\}$.

ولتوضيح هذه النقطة نختار احد النقاط من المجموعة $\{\vec{k}\}$ ولتكن $\{\vec{k}_j\}$ ولنبين كيفية الحصول على $\{\vec{k}_{1j}\}$ و $\{\vec{k}_{2j}\}$، نكون $\{\vec{k}_j\}$ عشوائيا حيث لها مركبات(k_{xj}, k_{yj}, k_{zj}) والتي تمثل متجهاً من نقطة الأصل إلى النقطة (k_{xj}, k_{yj}, k_{zj}) لإيجاد نقطتين مجاورتين لهذا المتجه $\vec{k}_j$ وهما أيضا متجهان من نقطة الأصل $\vec{k}_{1j}$ و $\vec{k}_{2j}$ ، الشكل (1)، وذلك من خلال تحويل الإمالة للمتجه $\vec{k}_j$ إلى الاتجاه k_z باستخدام التحويل التالي

$$A_v(\alpha, \beta) = R_x(\alpha) R_y(-\beta) \qquad (9)$$

اذ أن α وβ قيم زوايا وهي تعطى بدلالة مركبات $\vec{k}_j$ وكما يلي

$$\alpha = tan^{-1}\left(\frac{k_{yj}}{k_{xj}}\right),\ \beta = tan^{-1}\left(\frac{k_{zj}}{\sqrt{{k_{yj}}^2 + {k_{zj}}^2}}\right) \qquad (10)$$

و R_x و R_y هما مصفوفتا التدوير حول المحور k_x و k_y على التوالي.

$$R_x(\alpha)=\begin{pmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & cos(\alpha) & sin(\alpha)\\ 0 & -sin(\alpha) & cos(\alpha)\end{pmatrix}; R_y(\beta)=\begin{pmatrix}cos(\beta) & 0 & -sin(\beta)\\ 0 & 1 & 0\\ sin(\beta) & 0 & cos(\beta)\end{pmatrix} \quad (11)$$

للحصول على المتجهات $\vec{k}_{1j}$ و $\vec{k}_{2j}$ من مصفوفة الإمالة $A_v(\alpha,\beta)$ والتي تتبع بالتدوير حول k_x و k_y بزاوية $\delta\varphi$ على التوالي وتتبع بالتحويل $A_v^{-1}(\alpha,\beta)$ ليكون التحويل النهائي كما يأتي:

$$\vec{k}_{1j}=\vec{k}_j\left(A_v(\alpha,\beta)R_x(\delta\varphi)A_v^{-1}(\alpha,\beta)\right) \quad (12)$$

$$\vec{k}_{2j}=\vec{k}_j\left(A_v(\alpha,\beta)R_y(\delta\varphi)A_v^{-1}(\alpha,\beta)\right) \quad (13)$$

بعد الحصول على المجموعات $\{\vec{k}\}$ و $\{\vec{k}_1\}$ و $\{\vec{k}_2\}$ نجد سرعة الطور وسطح التوهين لكل نقطة من النقاط في المجاميع الثلاثة ثم يحدد اتجاه سرعة المجموعة بطريقة هندسية من تحديد المتجهات

$$\vec{r}_1=\vec{S}_1(\vec{k}_1)-\vec{S}_0(\vec{k}) \quad (14)$$

$$\vec{r}_2=\vec{S}_2(\vec{k}_2)-\vec{S}_0(\vec{k}) \quad (15)$$

$$\hat{v}_g=\vec{r}_1\times\vec{r}_2 \quad (16)$$

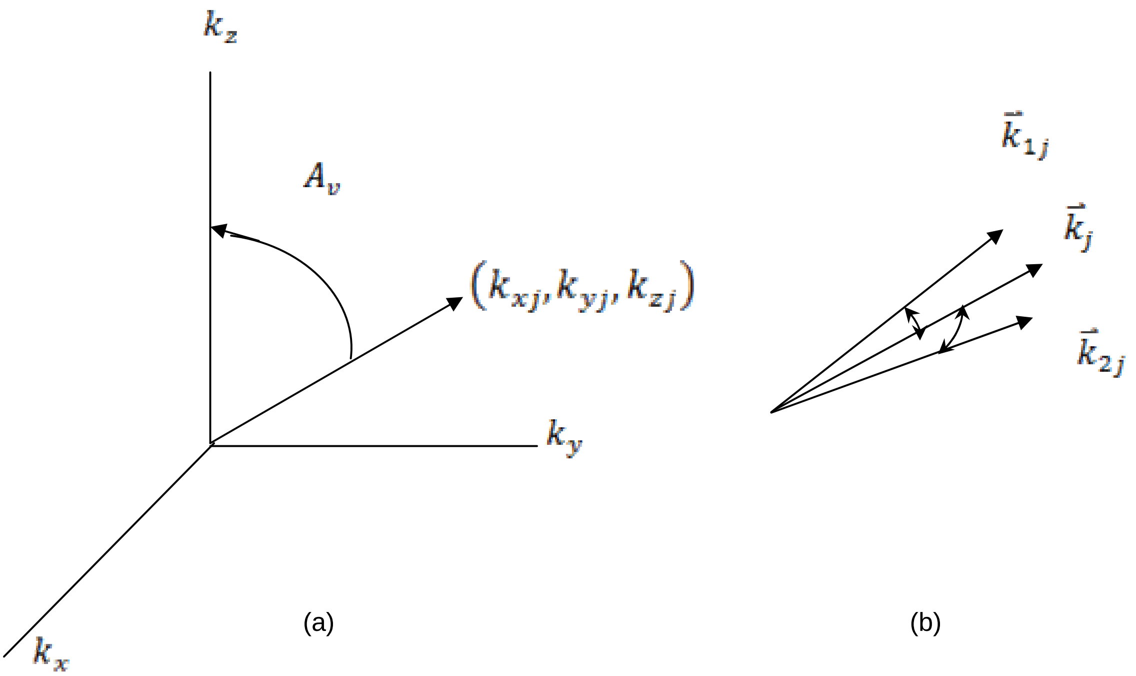
هنا $\vec{S}_0$ و $\vec{S}_1$و$\vec{S}_2$ هي متجهات سطح التوهين عند النقاط $\vec{k}$ و $\vec{k}_1$ و$\vec{k}_2$ على التوالي، $\vec{r}_1$ و $\vec{r}_2$ هما متجهان يقعان على سطح التوهين من النقطة المعرفة بالمتجه $\vec{k}$. يمكن الحصول على مجموعة الاتجاهات لسرعة المجموعة ولكافة نقاط المجموعة $\{\vec{k}\}$ ومن ثم يتم تحديد اتجاه الإسقاط والحصول على الصور الفونونية بذلك الاتجاه.

العمليات التناظـــرية

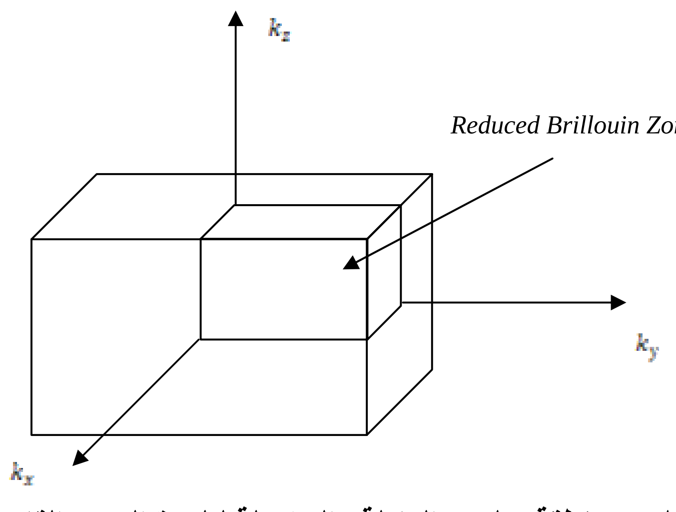
في البلورات تعد وحدة الخلية اصغر جزء في البلورة والتي يمكن من خلالهـا تكـوين البلـورة بـاجراء العمليات التناظرية باستخدام متجه الانتقال المناسب والذي يمكن من خلال ملئ الفراغ بـدون تـداخل اوتـرك فراغات لتشكيل البلورة الكاملة.

والبلورات كما هو معروف لها سبعة انظمة بلورية تختلف الواحدة عن الاخرى بالثوابت **a, b, c** التي تمثل متجهات الانتقال الاساسية وبالزوايا α, β, γ وهي الزوايا بين المتجهات الاساسية. يتميز كل نظام بوحدة الخلية ومتجهات الانتقال وخصائصه التناظرية. في بلورات المعين القائم والذي يتميز بان اضلاعه الثلاثة متعامـدة ومختلفة الطول وزواياه الثلاثة قائمة $|a|\neq|b|\neq|c|$ و $\alpha=\beta=\gamma=90°$، وتشكل متجهات الانتقـال فـي الفضاء المقلوب ايضا معيناً قائماً ومنطقة برليون المختزلة هي عبارة عن $\frac{1}{8}$ الفضاء المقلـوب (فـضاء متجـه الموجة) وكما موضح في الشكل (2).

من متطلبات اجراء المحاكاة للصور الفونونية في البلورات تكوين عدد كبير من النقاط بشكل متجانس في فضاء متجه الموجة، حسبت هذه النقاط في منطقة برليون المختزلة، في هذه المنطقة نجد اتجاه سرعة المجموعة والتي سوف تحسب من سطح التوهين في تلك المنطقة ثم باجراء العمليات التناظرية المبينة بالجدول (1) يتم الحصول على اتجاهات سرعة المجموعة في الفضاء الكلي.



الشكل 1: (a) تحويل الإمالة للمتجه $\vec{k}_j$ إلى الاتجاه k_z ، (b) المتجهات $\vec{k}_{1j}$ و $\vec{k}_{2j}$ التي يتم الحصول عليها من التحويل المركب على المتجه $\vec{k}_j$.



الشكل 2: منطقة برليون الكاملة والمختزلة لبلورة المعين القائم.

الجدول 1: العمليات التناظرية في بلورات المعين القائم.

X	Y	Z
-X	Y	Z
X	-Y	Z
X	Y	-Z
-X	-Y	Z
-X	Y	-Z
X	-Y	-Z
-X	-Y	-Z

تطبيق الخوارزمية التقليدية والحديثة على بلورات المعين القائم

تتميز بلورات المعين القائم بان خصائصها التناظرية مختلفة حيث ان الاتجاه <100> مختلف تماما عن الاتجاه <010> والاتجاه <001> ، لذا فانها تعد بلورات ذات تناظر واطئ على خلاف البلورات المكعبة التي يعد الاتجاه <100> مناظرا للاتجاه <010> والاتجاه <001> لذا من المناسب ايجاد خصائص هذه الاتجاهات لبلوات المعين القائم.

في هذا البحث تمت دراسة تشكيلة تمركز الفونونات للبلورة المختارة ة للانماط الصوتية (TA1,TA2). لمقارنة نتائج تطبيق الخوارزمية الجديدة مع نتائج الخوارزمية التقليدية تم بناء برنامج بلغة Matlab لاجراء الحسابات وبالطريقتين ولنفس البلورة، بعد إدخال البيانات الضرورية واللازمة، أظهرت النتائج تطابقا كبيرا. يقوم البرنامج بتجميع عدد كبير من النقاط في $\frac{1}{8}$ الفضاء والتي تمثل متجهات الموجة في منطقة برليون المختزلة ومن ثم تم احتساب سرعة المجموعة لهذه المنطقة وبعد اجراء العمليات التناظرية التي ذكرت في الفقرة السابقة للحصول على اتجاهات سرعة المجموعة في كل الفضاء يتم الحصول على الصور الفونونية للفضاء الكامل. للحصول على صورة للبلورة تم اسقاط متجهات سرعة المجموعة الناتجة باتجاه معين. لتكوين الصورة يتم خزن النتائج في مصفوفة 256x256 ثم ترسم بيانات هذه المصفوفة وتعرض على الشاشة، وقد تم اعداد البرنامج الخاص الذي يقوم برسم الصورة وعرضها.

النتائج

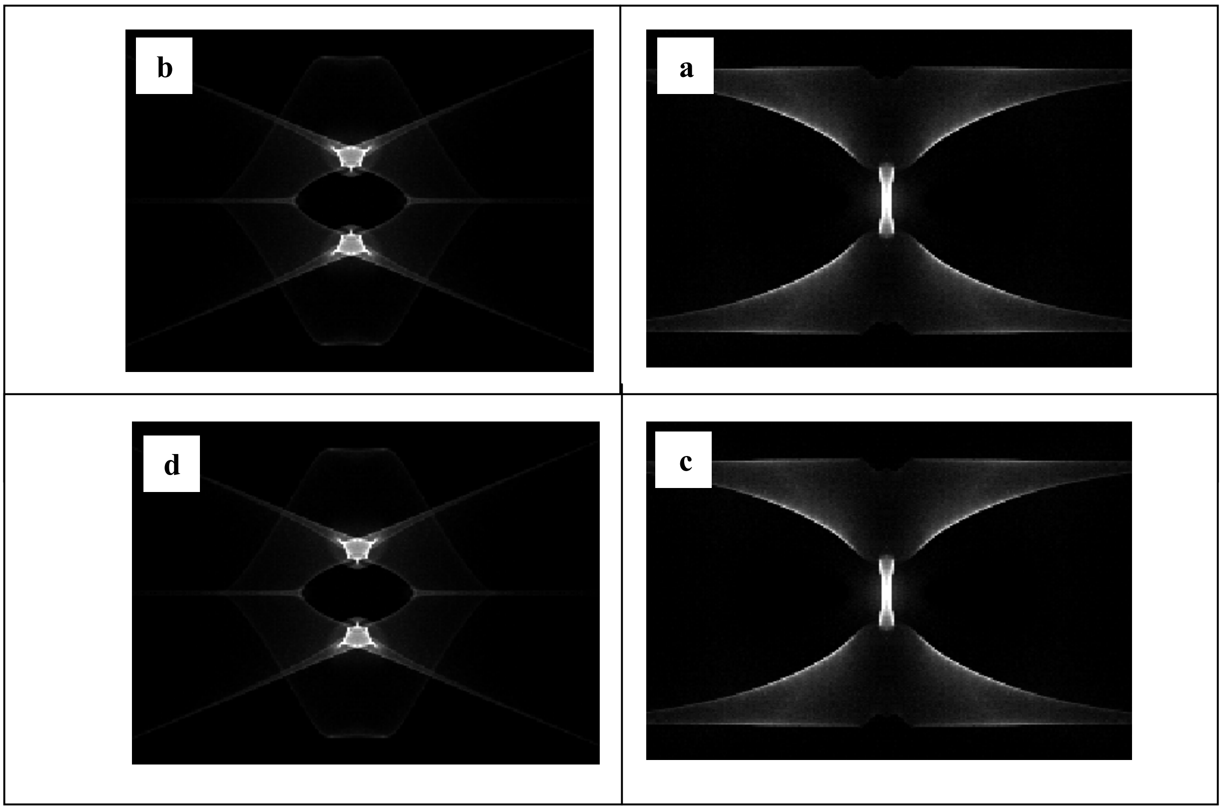
يمثل الشكلين(3) و (4) الصور الفونونية لبلورة Barium Sulphate للنمطين المستعرضين TA2,TA1، بعد تشكيل الصور ورسمها وعرضها على الشاشة، كل نقطة مضيئة (بيضاء اللون) في تشكيلة التمركز تشير الى شدة عالية في حين ان المنطقة المعتمة تمثل منطقة عدم التمركز للفونونات.

حسبت ورسمت صور التمركز الفونوني للبلورة باستخدام الخوارزمية التقليدية والخوارزمية الجديدة وعرضت هذه الصور بالتعاقب للمقارنة بينهما. يعرض الشكل (3)a وb صور البلورة للنمطين TA2 و TA1 من الاتجاه <010> باستخدام الخوارزمية التقليدية على التوالي، في حين يعرض الشكل (3) c وd صور نفس البلورة لكن باستخدام الخوارزمية الجديدة، اما الشكل (4)a وb يبين صور البلورة للنمطين TA2 و TA1 من الاتجاه <100> باستخدام الخوارزمية التقليدية على التوالي، في حين يبين الشكل (4) c وd صور نفس البلورة لكن باستخدام الخوارزمية الجديدة. من مقارنة كل صورة مع نظيرتها يمكن ملاحظة ان هنالك تطابقاً كبيراً بين نتيجة الخوارزمية التقليدية المستخدمة في بحوث سابقة والخوارزمية الجديدة المستحدثة في هذا البحث. للتاكد من تطابق نتائج الخوارزمية التقليدية مع الخوارزمية الجديدة تم رسم صورة التمركز الفونوني على شكل خطوط كنتورية. يبين الشكل (5)a وb صورة كنتورية للبلورة المختارة بالاتجاه <101> وللنمط المستعرض TA2 باستخدام الخوارزمية التقليدية والخوارزمية الجديدة على التوالي، ويمكن أيضا ملاحظة مدى التطابق بين نتائج الخوارزميتين.

الاستنتاجات

اظهرت النتائج التي تم الحصول عليها في هذا البحث امكانية تطبيق الخوارزمية الجديدة المقترحة على بلورات المعين القائم. إذ بينت النتائج تطابق هذه الطريقة المقترحة مع احتساب الصور الفونونية باستخدام خوارزمية تعتمد على الطريقة التقليدية، حيث بينت الصور الفونونية تطابقا جيدا بين الطريقتين للنمطين المستعرضين TA2، TA1 وللاتجاهين <010> و<100>.

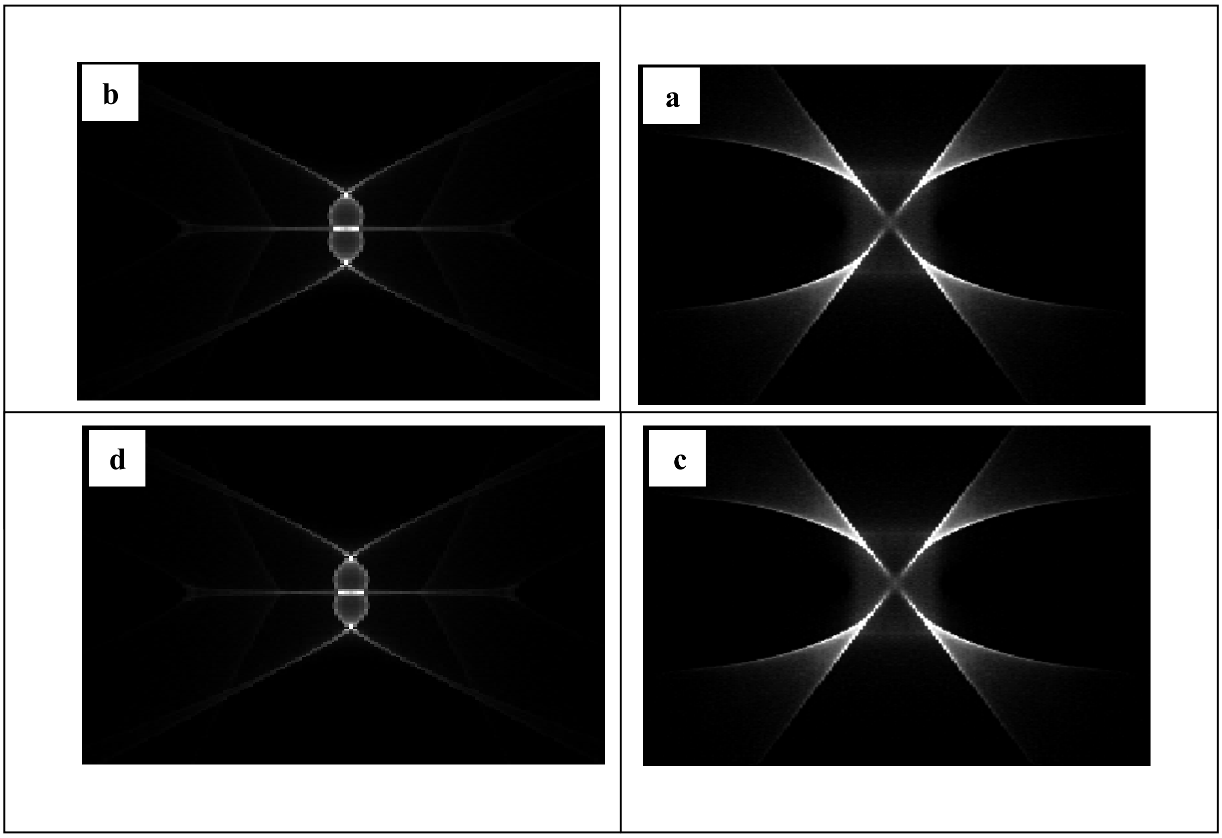
الطريقة الحسابية المقترحة يمكنها ان تختزل الكثير من الحسابات في احتساب سرعة المجموعة لبلورات المعين القائم وتوفر الوقت في حساب الصور الفونونية من خلال اختزال الاحتساب التقليدي لسرعة المجموعة ومن خلال الاستفادة من العمليات التناظرية والتي بدورها تقلل من الحساب الى $\frac{1}{8}$ الوقت الكلي. وعليه يمكن عد الخوارزمية الحديثة صحيحة ويمكن اعتمادها في ايجاد صور التمركز الفونوني لانظمة بلورية اخرى غير نظام المعين القائم.



الشكل 3: الصور الفونونية لبلورة (Barium Sulphate) للخوارزميتين التقليدية والجديدة وللنمطين المستعرضين TA1,TA2 :

(a): الخوارزمية التقليدية في الاتجاه <010> وللنمط TA2، (b) : الخوارزمية التقليدية في الاتجاه <010> وللنمط TA1

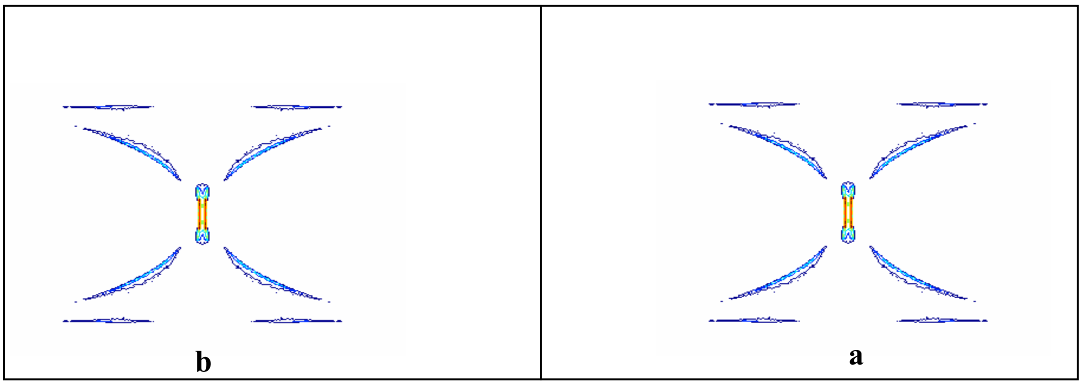
(c): الخوارزمية الجديدة في الاتجاه <010> وللنمط TA2، (d) : الخوارزمية الجديدة في الاتجاه <010> وللنمط TA1



الشكل 4: الصور الفونونية لبلورة (Barium Sulphate) للخوارزميتين التقليدية والجديدة وللنمطين المستعرضين TA1,TA2 :

(a) : الخوارزمية التقليدية في الاتجاه <100> وللنمط TA2 ، (b) : الخوارزمية التقليدية في الاتجاه <100> وللنمط TA1

(c) : الخوارزمية الجديدة في الاتجاه <100> وللنمط TA2 ، (d) : الخوارزمية الجديدة في الاتجاه <100> وللنمط TA1



الشكل 5 : المنحنيات الكنتورية لبلورة (Barium Sulphate) في الاتجاه <010> وللنمط المستعرض TA2 :

(a): باستخدام الخوارزمية التقليدية، (b) : باستخدام الخوارزمية الجديدة

المصادر الاجنبية

Aono, T.; Tamura, S. (1998). Surface and pseudosurface acoustic waves in superlattices. *Phys. Rev. B* **58**(8)**,** 4838-4845**.**

Auld, B. A. (1973). "Acoustic Fields and Waves in Solids". Stanford University, Vol. 1, John Wiley and Sons, Inc.

Calleja, E. M. ; Qi, S. (2003). High-resolution phase velocity mesurments in an acoustic cavity. www.phys.ufl.edu/REU.

Every, A. G. (1980). General closed form expression for acoustic waves in anisotropic solids. *Phys. Rev. B* **22**(4), 1746-1760 .

Every, A. G. (1981). Ballistic Phonons and the shape of the ray surface in cubic crystals. *Phys. Rev. B* **24**(6), 3456-3467.

Every, A. G. (1988). Classification of the phonon focusing patterns of tetragonal crystals. *Phys. Rev. B* **37**(17), 9964-9977.

Holt, M. (2000). Ballistic phonon propagation in BCS superconductors. http://www.lot-oriel.com.

Hurly, D. C. ; Wolfe, J. P. (1985). Phonon focusing in cubic crystals. *Phys. Rev. B,* **32**(4), 2568- .

Imamura, K.; Tanaka, Y. ; Tamura, S. (2002)a. Anomalously enhanced group velocities of phonons in finite superlattices. *Physica B* **. 316-317,** 234-236**.**

Imamura, K.; Tanaka, Y.; Tamura, S. (2002)b. Group velocities of phonons in superlattices. *Phys. Rev. B*, **65**(17), 174301-174310.

Khaleel, A. Z.; Hussien, M. M. S. (2010). Using Monte Carlo Method for calculating phonon images. *J. Raf. Sci.*, **21**(1), 73-89.

Kim, K.Y. (1993). Analytic relations between the elastic constants and group velocity in an arbitrary direction of symmetry planes of media with ortorhombic or higer symmetry. *Phys. Rev. B* **49**(6), 3713- 3724.

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

Marder, M. P. (2000). "Condensed Matter Physics". John Wily and Sons, Inc. New York.

Northrop, G. A. ; Wolfe, J. P. (1980). Ballistic phonon imaging in germanium. *Phys. Rev. B,* **22**(12), 6196-6212.

Philip, J. ; Viswanathan, K. S. (1978). Phonon magnification in cubic crystals. *Phys. Rev. B* **17**(12), 4969-4978.

Tanaka, Y.; Narita, M.; Tamura, S. (1998). Phonon foucusing in superlattices. *J. Phys. C,* **10**, 8787-8798.

Taylor, B.; Maris, H. J.; Elbaum, C. (1969). Phonon Focusing in Solids. *Phys. Rev. Letters,* **23**(8), 416-419.

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, J. R. J. ; Nethercot, A. H. (1961). Heat pulses in quartz and sapphire at low temperatures. *Phys. Rev. Letters,* **12**(23), 641-644.

Wintermheimer, 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), 44-48.

Wolfe, J. P. (1995). Acoustic wavefronts in crystalline solids. *Phys. Today*, **48**(9), 34-40.

Wolfe, J. P.; Hauser, M. R. (1995). Acoustic wavefront imaging . *Ann. Phys.* **4**, 99-126.

Wolfe, J. P. (1998). "Imaging Phonons. Acoustic Wave Propagation In Solids." Cambridge University Press.

Zamkova, N. G.; Zinenko, V. I.; Ivanov, O. V.; Makasimov, F. G.; Sofronova, S. N. (2003). Lattice dynamics calculation of the ionic crystals with ion dipole and quadrupole deformations: pervskite structure oxides. *Feroelectrics* **283**, 49-60.