------مجلة علوم الرافدين، المجلد 25، العدد 2، ص132-140، 2014------

حساب تركيب الحزم الالكترونية للسليكون تحت تأثير الضغط العالي

ممتاز محمد صالح **عدنان محمد الشيخ** **سهام جاسم عبد ا**

قسم الفيزياء قسم الفيزياء

كلية التربية كلية العلوم

جامعة الموصل جامعة الموصل

(أستلم 13/ 5 / 2013 ؛ قُبل 4 / 8 / 2013)

الملخص

تم في هذا البحث دراسة تأثير الضغط على تركيب الحزم الالكترونية في السليكون، وقد استخدمت طريقة الربط المحكم في حساب تركيب الحزم للسليكون. حيث تم حساب عناصر المصفوفة باستخدام الطريقة التي اتبعها كوهين. وقمنا بحساب تأثير الضغط على حزم الطاقة للسليكون من خلال حساب عناصر المصفوفة تحت ضغوط مختلفة وبينت النتائج اتساع في فجوة الطاقة وزحزحة للحزم نحو الأعلى بزيادة الضغط.

الكلمات الدالة: حساب تركيب الحزم، طريقة الربط المحكم، تأثير الضغط على تركيب الحزم للسليكون.

Calculating Silicon Band Structure Under High Pressure

Mumtaz M. Hussien **Adnan M. Al-Sheikh** **Seham J. Abdullah**

Department of Physics *Department of Physics*

College of Education *College of Science*

University of Mosul *University of Mosul*

ABSTRACT

In this research, the effect of high pressure on silicon band structure has been studied, the tight binding method has been used to calculate the silicon band structure. Following the method used by Cohen to find the matrix elements. The effect of pressure has been introduced to find the matrix element of silicon under different pressure. The results show widening the energy gap and relegating the band up as the pressure increased.

Keywords: Calculation of band structure, tight binding method, effect of pressure on silicon band structure.

المقدمة

تكمن أهمية نظريات حزم الطاقة للمواد الصلبة البلورية بان العديد من الخصائص البصرية والفيزيائية المهمة لهذه المواد يمكن توضيحها وتفسيرها باستخدام تركيب حزم الطاقة لها. ويتم تحديد حزم الطاقة في المادة الصلبة عن طريق حل معادلة شرودينكر باستخدام تقريب الإلكترون المنفرد، وفي المواد الصلبة البلورية هنالك العديد من التفاعلات بين الالكترونات و الذرات (Sheng, 2006). وتستخدم طرائق عديدة لحساب تركيب الحزم الالكترونية ويمكن تصنيف هذه الطرائق إلى صنفين رئيسيين. الصنف الأول يشمل الطرائق التي تعتمد المبادئ الأولية في حساب تركيب الحزمة (ab initio) وتشمل هذه الفئة نظرية دالة الكثافة (density function theory, DFT) ونظرية (Hartree-Fock) التي يتم فيها حساب تركيب الحزمة من المبادئ الأولية و بدون الحاجة إلى معاملات ملائمة تجريبية. أما الصنف الثاني فيشمل الطرائق التجريبية مثل طريقة الموجة المستوية المتعامدة (Orthognalized Plane wave OPW)، وطريقة الربط المحكم والتي تسمى الجمع الخطي للمدارات الذرية (LCAO) أو طريقة بلوخ، وطريقة k.p، وطريقة الجهد الكاذب التجريبي المحلي وغير المحلي (EPM). في هذه الطرائق يحسب التركيب الالكتروني بواسطة حل معادلة شرودينكر للإلكترون المنفرد (SWE). والطرائق التجريبية من الفئة الثانية هي اقل كلفة من طرق الفئة الأولى والتي تعتمد الحسابات من المبادئ الأولية إضافة إلى سهولتها لتوليد تركيب الحزمة الالكترونية في المادة الصلبة (Yu and Cardona, 1999). في هذا البحث تم تطبيق طريقة الربط المحكم لإيجاد تأثير الضغط على حزم الطاقة في السليكون.

في طريقة الربط المحكم تكون الالكترونات مرتبطة بقوة مع الذرات التي تنتمي إليها وبذلك تقتصر التفاعلات مع الحالات والجهود على الذرات المحيطة بها. ويمكن حساب الدوال الموجية للذرات المعزولة المتموضعة عند كل فئة ذرية باستخدام مبدأ التراكب ويمكن من خلال هذه الحسابات التوصل إلى شكل حزمة الطاقة للمادة الصلبة (Behnaz and Sina, 2011). وتحدد طبيعة الحزمة من نوع التفاعل وطبيعة الآصرة بين الذرات. وتعطي الحلول الناتجة طبيعة التماثل في البلورة من خلال الحسابات داخل منطقة برليون وهذه الطريقة رغم كونها طريقة استكمالية إلا إنها تعطي نتائج أفضل من الطرائق الأخرى مثل طريقة الجهد الكاذب والتي تكون صعبة إلا عند نقاط التماثل العالية (Slater and Koster, 1954).

التفاصيل النظرية

تعد طريقة الربط المحكم من الطرائق القياسية لحساب الجهـد الدوري في البلورات وقـد وضـع (Slater and Koster, 1954) المبادئ الأساسية لهذه الطريقة بعد تطوير الطريقة الأصلية التي اقترحها Bloch. ومن مميزات هذه الطريقة إن تركيب الحزم يعرف في حدود عدد محدود لمعاملات التشابك (Overlap parameters) (Yu and Cardona, 2005). لذا تعتبر هذه الطريقة عملية جدا عندما تكون بعض

التفاعلات الالكترونية هي السائدة. وقد وجد كوهين إن هذه الطريقة تعطي نتائج دقيقة لحساب حزم الطاقة في البلورات ذات تركيب الماس وكبريتيد الخارصين وتحديدا فإنها تعطي نتائج دقيقة لحزم التكافؤ لكنها غير دقيقة لحزم التوصيل (Chadi and Cohen, 1975).

يبدأ عمل طريقة الربط المحكم بافتراض فئة أساسية تتكون من المدارات شبه ذرية لكل ذرة في النظام، ومؤثر الطاقة (Hamiltonian) هي في حدود للتفاعلات عالية التماثل مختلفة بين هذه المدارات. في أشباه الموصلات ذات الأواصر الرباعية مثل السليكون، الفئة الأساسية المستخدمة هي للمدارات (s وp). فعند فرض موقع الذرة في الخلية الابتدائية هو

$$r_{jl} = R_j + r_l \qquad (1)$$

إذ أن R_j : هو موقع الخلية الابتدائية (j-th) و r_l : هو موقع الذرة ضمن الخلية الابتدائية.

وان مؤثر الطاقة للذرة المعزولة (h_l) يعرف بالعلاقة التالية

$$h_l \Phi_{ml}(r - r_{jl}) = E_{ml}\, \Phi_{ml}(r - r_{jl}) \qquad (2)$$

إذ إن E_{ml}, Φ_{ml}: هي الدوال الذاتية (Eigen functions) والقيم الذاتية (Eigen values) للحالة الموسومة بالرمز (m). والاوربتالات الذرية Φ_{ml} تدعى مدارات Lowdin (Lowdin, 1951)، التي تختلف عن الدوال الموجية المتمركزة عند الفئات الذرية المختلفة بكونها متعامدة. ولذلك فان مؤثر الطاقة الكلي للنظام يعطى بالصيغة التالية

$$\mathcal{H}_o = \Sigma_{j,l}\, h_l(r - r_{jl}) \qquad (3)$$

إذ إن المجموع فوق (l) يشير إلى المجموع ضمن الذرات المختلفة في الأساس، و (l) تأخذ القيم (1,2) للبلورات ذات تركيب الماس وكبرتييد الخارصين. وان دوال بلوخ تأخذ الصيغة التالية

$$\Phi_{mlk} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j e^{i r_{jl} \cdot k} \Phi_{ml}(r - r_{jl}) \qquad (4)$$

إن الجمع الخطي لدوال بلوخ يمثل القيم الذاتية لمؤثر الطاقة الكلي للنظام ($\mathcal{H} = \mathcal{H}_o + \mathcal{H}_{int}$)، إذ إن ($\mathcal{H}_{int}$) يمثل الجزء المتفاعل لمؤثر الطاقة، يعطى بالعلاقة

$$\Psi_k = \sum_{ml} C_{ml} \Phi_{mlk} \qquad (5)$$

ويمكن التوصل الى المعادلة الأساسية التي يمكن منها إيجاد تركيب الحزم وذلك بأخذ تأثير $\mathcal{H}$ على الدوال Ψ_k، وباستخدام خاصية التعامد للدوال الموجية الذرية، يتم الحصول على المعادلة.

$$\sum_{ml} \left| \mathcal{H}_{m'l',ml} - E_k \delta_{mm'} \delta_{ll'} \right| C_{ml} = 0 \qquad (6)$$

وان عنصر المصفوفة (matrix element) الذي يظهر في المعادلة (6) يعبر عنه بالعلاقة (Goringe *et al.*, 1997)

$$\mathcal{H}_{m'l',ml}(k)=\sum_j e^{i(R_j+r_l-r_{l'}).k}\langle\Phi_{mlk}(r-r_{jl})|H|\Phi_{mlk}(r-r_{jl})\rangle \quad (7)$$

إذ إن الوسم m يمثل الحالات (s و p) للالكترونات البعيدة و (l): يمثل عدد الالكترونات المميزة في الأساس.

لأشباه الموصلات ذات التنسيق رباعي الأواصر (tetrahedrally coordinated)، إذ أن مواقع الجيران الأقرب من المرتبة الأولى هي (Harresion, 1989).

$$\left.\begin{aligned} d_o &= (1,1,1)(^{a_o}/_4)\\ d_1 &= (1,-1,-1)(^{a_o}/_4)\\ d_2 &= (-1,1,-1)(^{a_o}/_4)\\ d_3 &= (-1,-1,1)(^{a_o}/_4)\end{aligned}\right\} \quad (8)$$

ان المسألة الأساسية في طريقة الربط المحكم تتركز في حساب عناصر مصفوفة مؤثر الطاقة بين مستويات القواعد المختلفة، والتي ترتبط مع معاملات التشابك بالعلاقات التالية (Yu and Cardona, 2005)

$$V_{ss}=4V_{ss\sigma} \quad (9)$$

$$V_{sp}=4V_{sp\sigma}/\sqrt{3} \quad (10)$$

$$V_{xx}=(4V_{pp\sigma}/3)+(8V_{pp\pi}/3) \quad (11)$$

$$V_{xy}=(4V_{pp\sigma}/3)-(4V_{pp\pi}/3) \quad (12)$$

$$E_p-E_s=(3\pi^2/4)(\hbar^2/md^2) \quad (13)$$

على سبيل المثال، عنصر المصفوفة بين حالتي (s) يعبر عنها بالصيغة

$$\mathcal{H}_{s_1s_2}=\left[\cos\pi\frac{k_1}{2}\cos\pi\frac{k_2}{2}\cos\pi\frac{k_3}{2}-i\sin\pi\frac{k_1}{2}\sin\pi\frac{k_2}{2}\sin\pi\frac{k_3}{2}\right]\left\langle s_1\middle|\mathcal{H}_{int}\middle|s_2\right\rangle$$
$$=g_o(k)V_{ss\sigma} \quad (14)$$

وإن مجاميع بلوخ المختلفة الأربعة (g_3, g_2, g_1, g_o) تعطى بالشكل التالي (Chadi and Cohen, 1975).

$$g_o(k)=\cos\pi\frac{k_1}{2}\cos\pi\frac{k_2}{2}\cos\pi\frac{k_3}{2}-i\sin\pi\frac{k_1}{2}\sin\pi\frac{k_2}{2}\sin\pi\frac{k_3}{2}$$

$$g_1(k)=-\cos\pi\frac{k_1}{2}\sin\pi\frac{k_2}{2}\sin\pi\frac{k_3}{2}+i\sin\pi\frac{k_1}{2}\cos\pi\frac{k_2}{2}\cos\pi\frac{k_3}{2}$$

$$g_2(k)=-\sin\pi\frac{k_1}{2}\cos\pi\frac{k_2}{2}\sin\pi\frac{k_3}{2}+i\cos\pi\frac{k_1}{2}\sin\pi\frac{k_2}{2}\cos\pi\frac{k_3}{2}$$

$$g_3(k)=-\sin\pi\frac{k_1}{2}\sin\pi\frac{k_2}{2}\cos\pi\frac{k_3}{2}+i\cos\pi\frac{k_1}{2}\cos\pi\frac{k_2}{2}\sin\pi\frac{k_3}{2}$$

ومتجه الموجة $\vec{k}$ يعطى بدلالة المركبات الثلاثة (k_1,k_2,k_3)

$$k=(^{2\pi}/_a)(k_1,k_2,k_3,) \quad (15)$$

الحسابات و النتائج

لحساب تركيب حزم الطاقة للسليكون تم أولا حساب معاملات التشابك (Overlap parameters) وفق العلاقة (Harrison, 1989)

$$V_{ll'm} = \eta_{ll'm} \frac{\hbar^2}{md^2} \qquad (16)$$

إذ أن d: طول الآصرة بين الذرات، $\hbar$: ثابت بلانك مقسوم على (2π)، m: كتلة الإلكترون و$\eta_{ll'm}$: عامل هندسي.

ومن حساب عناصر المصفوفة وفق العلاقات المبينة في المعادلات (9- 13) وتعويضها في المحدد العام، المعادلة (19). تم الحصول على النتائج الموضحة في الشكل (1) مقارنة مع النتائج التي عرضها (Chadi and Cohen, 1975).

لحساب تأثير الضغط على حزم الطاقة للسليكون تمت بالاستعانة بمعادلات الحالة التي تبين تغير ثابت الشبيكة تحت تأثير الضغط العالي (Radi, *et al.*, 2007).

$$a_p = a_o\left(1+\frac{PB'}{B_s}\right)^{\frac{-1}{3B'}} \qquad (17)$$

ومن تغير ثابت الشبيكة مع الضغط نحسب قيم طول الاصرة تحت تأثير الضغط باستخدام المعادلة الاتية.

$$d_p = d_o\left(\frac{a_p}{a_o}\right) \qquad (18)$$

يوضح الجدول (1) نتائج تغير قيم ثابت الشبيكة (a) وطول الآصرة (d) مع الضغط التي تم الحصول عليها من تطبيق المعادلة (17 و18). وبأخذ القيم المدرجة في الجدول (1) في حساب معاملات التشابك باستخدام المعادلة (16) تحت تأثير الضغط الذي بدوره يؤثر على عناصر المصفوفة المستخدمة في حساب شكل حزم الطاقة. ويبين الجدول (2) النتائج لقيم عناصر المصفوفة مع الأخذ بنظر الاعتبار تأثير الضغط.

الجدول 1: قيم ثابت الشبيكة (a_p) وطول الآصرة (d_p)عند ضغوط مختلفة

P(kbar)	d_p(Å)	a_p(Å)
0	2.3500	5.4300
20	2.0899	4.8290
40	1.8754	4.3334
60	1.6959	3.9187

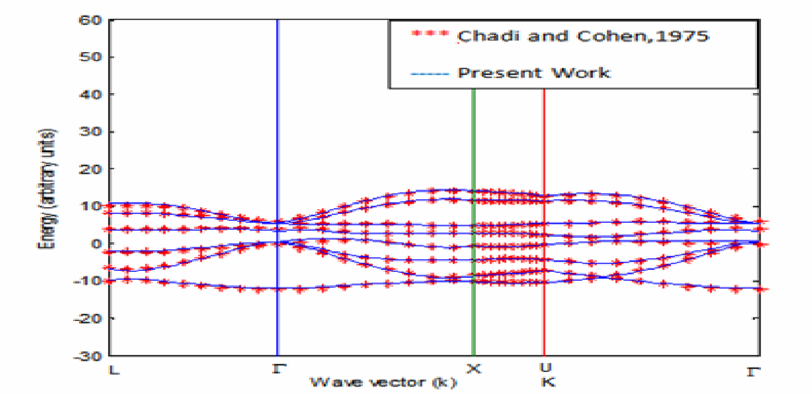
الجدول 2: قيم عناصر المصفوفة عند ضغوط مختلفة.

P(kbar)	V_{ss}	V_{sp}	V_{xx}	V_{xy}	E_p-E_s
0	-7.6717	5.9907	2.5389	7.6717	7.2136
20	-9.7000	7.5745	3.2101	9.7000	9.9139
40	-12.0459	9.4064	3.9864	12.0459	13.0371
60	-14.7303	11.5025	4.8748	14.7303	16.6109

وبعد حساب عناصر المصفوفة يتم إيجاد المحدد العام (Secular determinant)، لكل التفاعلات الممكنة بين مدارات الربط المحكم (s) و(p) للذرات المتجاورة المتمركزة على كل ذرة في البلورة. وهذا المحدد يعبر عنه بالصيغة (Yu and Cardona, 2005; Harrison, 1989; Chadi and Cohen, 1975).

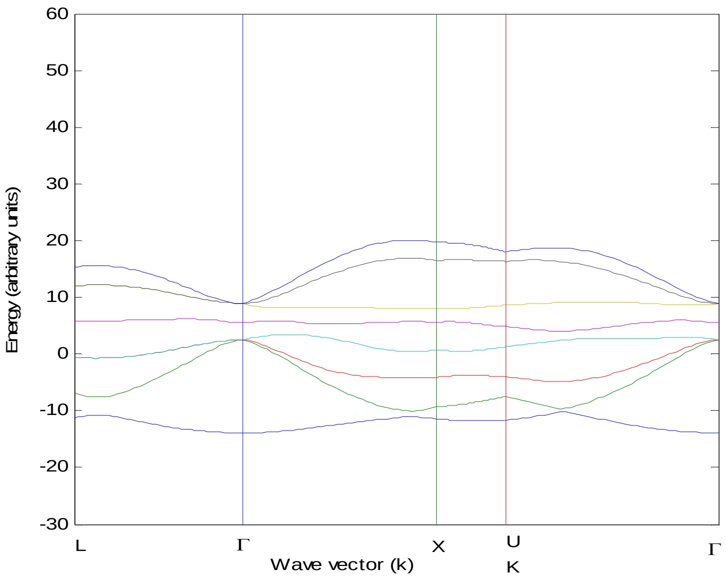
$$\begin{vmatrix} E_{s0}-E(k) & V_{ss}g_0 & 0 & 0 & 0 & V_{sp}g_1 & V_{sp}g_2 & V_{sp}g_3 \\ V_{ss}g_0^* & E_{s1}-E(k) & -V_{sp}g_1^* & -V_{sp}g_2^* & -V_{sp}g_3^* & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -V_{sp}g_1 & E_{p0}-E(k) & 0 & 0 & V_{xx}g_0 & V_{xy}g_3 & V_{xy}g_2 \\ 0 & -V_{sp}g_2 & 0 & E_{p0}-E(k) & 0 & V_{xy}g_3 & V_{xx}g_0 & V_{xy}g_1 \\ 0 & -V_{sp}g_3 & 0 & 0 & E_{p0}-E(k) & V_{xy}g_1 & V_{xy}g_2 & V_{xx}g_0 \\ V_{sp}g_1^* & 0 & V_{xx}g_0^* & V_{xy}g_3^* & V_{xy}g_2^* & E_{p1}-E(k) & 0 & 0 \\ V_{sp}g_2^* & 0 & V_{xy}g_3^* & V_{xx}g_0^* & V_{xy}g_1^* & 0 & E_{p1}-E(k) & 0 \\ V_{sp}g_3^* & 0 & V_{xy}g_2^* & V_{xy}g_1^* & V_{xx}g_0^* & 0 & 0 & E_{p1}-E(k) \end{vmatrix} = 0 \quad (19)$$

قمنا بحساب حزم الطاقة عند النقاط عالية التماثل في منطقة برليون الاولى وذلك من خلال برنامج حاسوبي تم إعداده من قبلنا. ويوضح الشكل (1) شكل حزم الطاقة المحسوبة من قبل (Chadi and Cohen, 1975) التي سوف يتم مقارنتها مع النتائج التي حصلنا عليها في هذا البحث عند الضغط الجوي وبالاتجاهات الخاصة $(L \rightarrow \Gamma, \Gamma \rightarrow X, (U,K) \rightarrow \Gamma)$ داخل منطقة برليون الاولى. وقد اظهرت المقارنة هناك توافق جيد بين النتائج التي حصلنا عليها في هذا البحث مع النتائج المنشورة من قبل (Chadi and Cohen, 1975).

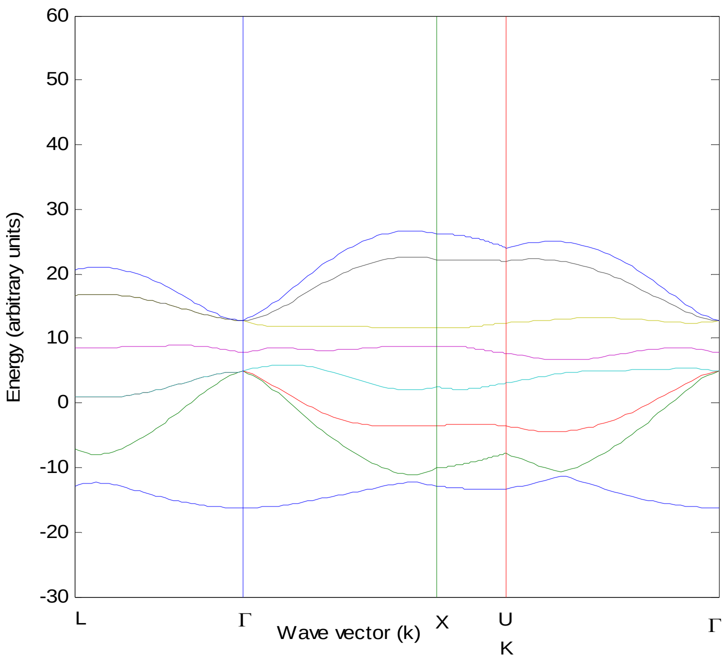


الشكل 1: تركيب حزم الطاقة للسليكون مقارنة بنتائج حسابات (Chadi and Cohen, 1975)

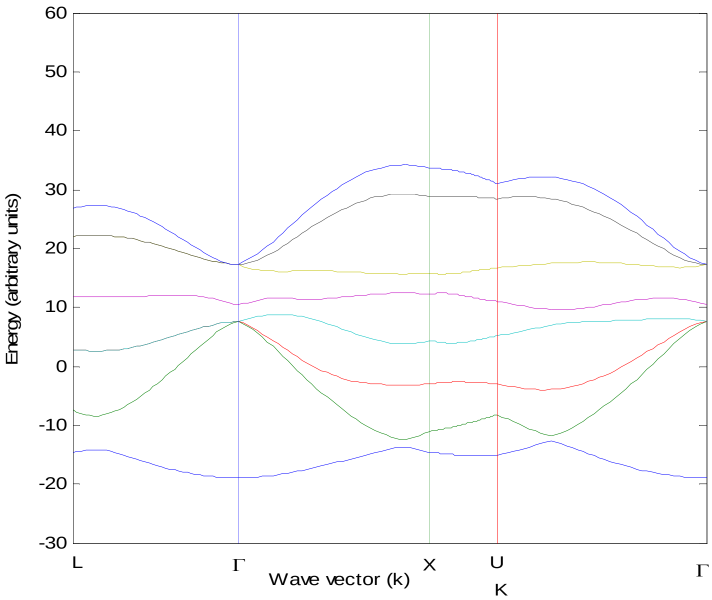
ولغرض توضيح تأثير الضغط على شكل تركيب حزم الطاقة للسليكون قمنا باستخدام قيم عناصر المصفوفة تحت تأثير الضغط المدرجة في الجدول (2). وتم الحصول على النتائج الموضحة في الإشكال (2, 3, 4) عند ضغوط مختلفة.



الشكل 2: تركيب حزم الطاقة للسليكون عند الضغط (20 kbar)



الشكل 3: تركيب حزم الطاقة للسليكون عند الضغط (40 kbar)



الشكل 4: تركيب حزم الطاقة للسليكون عند الضغط (60 kbar)

المناقشة والاستنتاجات

لقد وجدنا تطابقاً جيداً جداً بين النتائج التي حصلنا عليها في هذا البحث لتركيب الحزم الالكترونية عند مقارنتها مع البيانات المحصلة من قبل (Chadi and Cohen) بدون تسليط ضغط خارجي. أيضا تبين الإشكال السابقة إن هناك زحزحة في حزم التكافؤ نحو الأسفل في حين أن حزم التوصيل تظهر بشكل واضح زحزحة نحو الأعلى وظهور اتساع في فجوة الطاقة مع زيادة الضغط وهذه النتائج التي تم الحصول عليها في هذا البحث مطابقة لما وجده (Bouhafs *et al.*, 1998; Elabsy *et al.*, 2010). كذلك وجد إن أعظم اتساع يظهر نتيجة تأثير الضغط عند نقطة التماثل Γ مقارنة بنقاط التماثل الأخرى.

المصادر

Behnaz, G.; Sina, K. (2011). An overview of Tight -Binding method for two-Dimensional Carbon Structures. In Graphene: Properties, Synthesis and Applications. ISBN 978-1-61470-949-7. pp. 1-36.

Bouhafs, B.; Aourag, H.; Ferhat, M.; Certier, M. (1998). Pressure dependence of electronic properties in Zinc-Blende-Like SiGe compound. *J. Phys. Chem. Solids*, **59**(5), 759-768.

Chadi, D.J.; Cohen M.L. (1975). Tight-Binding calculations of the valence bands of diamond and zincblende crystals. *Phys. Stat. Sol. (b)*, **68**, 405-419.

Elabsy, A.M.; Degheidy, A.R.; Abdelwahed, H.G.; Elkenany, E.B. (2010). Pressure response to electronic structures of bulk semiconductors at room temperature. *Physica B* **405**, 3709–3713.

Goringe, C.M.; Bowler, D.R.; Hernanez, E. (1997). Tight-binding modelling of materials. *Rep. Prog. Phys.*, **60**, 1447–1512.

Harrison, W.A. (1989). "Electronic Structure and the Properties of Solid". Dover publications, INC., New York.

Lowdin, P.O. (1951). A Note on the Quantum-Mechanical Perturbation Theory. *J. Chem. Phys*., **19**, 1396.

Radi, I.O.; Abdulsatter, M.A.; Abdul-lettif, M. (2007). Semiempirical LUC-INDO calculations on the effect of pressure on the electronic structure of diamond. *Phys. Stat. Sol.(b)*, **244**(4),1304-1317.

Sheng, S.Li. (2006). "Semiconductor Physical Electronics". 2nd ed. Springer Science and Business Media, LLC.

Slater, J.C.; Koster, G.F. (1954). Simplified LCAO method for the periodic potential problem. *Phys. Rev.*, **94**(6), 1498-1524.

Yu, P.Y.; Cardona, M. (2005). "Fundamentals of Semiconductors". 3rd ed. Springer Berlin Heidelberg , New York.

Yu, P.Y.; Cardona, M. (1999). "Fundamentals of Semiconductors". Springer- Verlag, Berlin.