مجلة التربية والعلم - المجلد (23)، العدد (1)، لسنة ٢٠١٠

حساب الصور الفونونية للبلورات الايونية الفائقة

منال علي خليل
كلية علوم الحاسبات
جامعة الموصل

ممتاز محمد صالح حسين
كلية التربية
جامعة الموصل

خليل إبراهيم السيف
كلية علوم الحاسبات
جامعة الموصل

الاستلام
٠٤ / ٠٩ / 2008

القبول
١٦ / ٠٢ / ٢٠٠٩

Abstract

A theoretical study has been presented for the calculation of phonon focusing for the ballistic phonons in multi layer superlattice. The calculated image has been discussed on the base of the slowness and group velocity surfaces. The phonon group velocity is calculated from the dispersion relation. The shell model and Sangster and Atwood potential which prove its success with alkali hailed crystals had been used to calculate the dispersion relation for the crystals in this study. The zone folding has been observed, which occurs as a result of the periodic structure of the superlattice crystal. in the present study it appear in one choices of the unit cell. An efficient algorithm has been used for the calculation of the slowness and group velocity surfaces, which is the fast and more precise in accumulated necessary points to draw the surfaces and phonon images. This algorithm depends on an iterative calculations for finding the position of the given point of the wave vector on the slowness surface. To calculate the phonon images in the dispersion region for the superlattice crystal, an algorithm for the branch separation has been modified depending on the continuity properties of the eigen values and eigen vectors. To present the images of the phonon focusing inside the crystal without any losses of any information and give a full description of gray level of the image, code has been constructed based on the histogram equalization algorithm has been written for process and enhancement the images.

الملخص

تم تقديم دراسة نظرية لحساب صور التمركز الفونوني للفونونات المنتشرة قذيفيا على طول خط نمو البلورات الفائقة المتعددة الطبقات. نوقشت الصور المحسوبة في ضوء سطوح

التوهين وسطوح سرعة المجموعة، وحسبت سرعة المجموعة من علاقة التشتت. تم استخدام نموذج الغلاف وجهد Sangster & Atwood لحساب علاقة التشتت للبلورات التي تم دراستها في البحث. لوحظت ظاهرة الطية التي ظهرت هنا في حالة معينة عند اعتماد نمط معين لوحدة الخلية. استخدمت خوارزمية كفوءة في حساب سطوح التوهين وسطوح سرعة المجموعة وهي دقيقة وسريعة في تجميع النقاط اللازمة لحساب الصور الفونونية، تعتمد على حسابات تكرارية منظمة للبحث عن موقع النقطة المعطاة التي تحدد باتجاه متجه الموجة على سطح التوهين. لحساب الصور الفونونية ضمن منطقة التشتت للبلورات الفائقة تم تطوير الخوارزمية الخاصة بفصل الانماط بالاعتماد على خاصية الاستمرارية للقيم الذاتية والمتجهات الذاتية. لعرض صور توضح واقع التمركز الفونوني داخل البلورة من دون أي فقدان للمعلومات واعطاء وصف اجمالي للمستوى الرمادي في الصورة، تم في هذا البحث بناء برنامج يعتمد خوارزمية تسوية التدرج التكراري لمعالجة هذه الصور وعرضها بعد تحسينها.

المقدمـ ـ ـة

في النظرية الحديثة يعبر عن انماط الاهتزاز في المواد الصلبة بوصفها جسيمات يطلق عليها بالفونونات، على اعتبار انها موجة مرنة منتقلة [3-1]. يدخل الفونون مبدئياً في تفسير صفات المواد الصلبة مثل الحرارة النوعية والتوصيل الحراري والصفات البصرية والضوئية[4]. ان دراسة الفونونات هي دراسة انماط اهتزاز البلورات الصلبة ودراسة ترددات هذه الاهتزازات والقوى الميكانيكية والكهروحرارية وقوى اخرى تابعة لهذه الاهتزازات[5]. استخدمت تقنيات عديدة لدراسة انتشار الفونونات داخل بلورات المواد الصلبة وهنالك نمو وتطور مهم في الدراسات النظرية والعملية لانتشار طيف الفونون في المواد الصلبة [9-6].

عند درجات الحرارة الواطئة تنتشر الموجات المرنة (الفونونات) ذات التردد العالي في داخل البلورات الصلبة قذيفيا[10]. هذا وان انتشار الفونون المقذوف ذاتيا داخل البلورات الصلبة يتاثر بشكل كبير بقيمة تباين خواص تلك البلورات. ان فيض طاقة الفونونات المنبعثة من مصدر صغير والذي ينتقل بواسطة سرعة المجموعة سوف يظهر تبايناً كبيراً في التوزيع، هذا التباين يدعى بمناطق التمركز ومناطق عدم التمركز للفونونات المنتشرة قذيفيا [12,11]. اثبتت ظاهرة التمركز الفونوني أولاً بواسطة تجارب النبضة الحرارية في جامعة Brown عام 1969، وكان الباحث Taylor وآخرين معه يعدون من اوائل من لاحظ هذه الظاهرة، بعد ذلك درست ظاهرة التمركز الفونوني باستخدام تقنية الضوء الليزري من الباحثين Northrop و Wolfe [14,13].

استخدمت تقنية النبضة الحرارية لدراسة الايصالية الحرارية في البلورات ثم استخدمت في دراسة ظاهرة التمركز الفونوني وبرهنها عدد من الباحثين[11]. تستخدم التجارب العملية للتمركز الفونوني فونونات ذات ترددات عالية وان تاثير طول موجة الفونون تم درسه للمرة الاولى من قبل الباحث Maris، بعد ذلك اجريت دراسات واسعة حول الموضوع نفسه من عدة مجاميع منهم Wolf و Weaver و Hauser [13].

في العقود الثلاثة السابقة كانت هنالك دراسات واسعة حول الصفات الاهتزازية في بلورات الشبيكة الفائقة (Superlattice)، حيث ان انتشار الفونونات الصوتية في نظام متعدد الطبقات مهم من الناحية النظرية والتطبيقية، فخصائص انتشار الفونونات في بلورات الشبيكة الفائقة قد جلبت انتباه كثير من الباحثين ودرست بعناية نظرياً وعملياً [17-14] فقد قام الباحثان Wichard و Dietche بدراسة هذه الخصائص عملياً في حين ان الباحث Every قد درس ظاهرة التمركز في البلورات الاحادية والفائقة نظرياً [18].

طورت واستخدمت بعض من النماذج النظرية في دراسة حركية الشبيكة الفائقة حيث اعطت النتائج النظرية تطابقا كبيرا مع النتائج العملية [15، 22-19].

نتيجة النسق التكراري في البلورات الفائقة وكونها بلورات متعددة الطبقات فعند حساب علاقة التشتت يمكن ملاحظة ان الموجة المنتقلة داخل البلورة تصل الى نقطة وسطية من منطقة برليون ثم ترتد بالاتجاه المعاكس محققه شروط براك للانعكاس وهذا مايدعى بظاهرة طيـة النطاق (Zone Folding). ان اول من وثق ظاهرة الطيـة للفونونات الصوتية في البلورة الفائقة شبه الموصل المصنعة عمليا كان الباحث Narayanamuri في عام 1979، في حين الباحث Kelly فقد نشر نظرية حول تاثير ظاهرة الطية على علاقة التشتت في عام 1985 اما اول من لاحظ ظاهرة الطية بوضوح في البلورات الفائقة شبه الموصل المصنعة عمليا كان الباحث Colvard في عام 1980 [24,23].

من السهل تمثيل تباين الانتشار القذيفي للفونونات الصوتية داخل البلورة وذلك باستخدام تقنية التصوير الفونوني[25] حيث ان هذه التقنية تظهر بوضوح كيف ان الطاقة المنبعثة من مصدر نقطي تنتشر في داخل البلورة. النجاح الاول لتجارب التصوير الفونوني قد جذب انتباه الكثير من الباحثين لاستخدام هذه التقنية نظرياً وعملياً [26].

يحتاج تمثيل صور التمركز الفونوني نظريا الى حساب سطح التوهين (Slowness Surface) ونظيره سطح سرعة المجموعة (Group Velocity Surface) اللذين لهما علاقة بتوزيع تدفق الطاقة في الفضاء الحقيقي (فضاء سرعة المجموعة)[29-27]. ان أي تغير في سطح التوهين و سطح سرعة المجموعة له تاثير واضح على تشكيلة الصور الفونونية.

يتطلب حساب تشكيلة الصور الفونونية للبلورة الاعتيادية والفائقة تجميع 10^5 نقطة في فضاء متجه الموجة. ان تجميع مثل هذا العدد من النقاط باستخدام الخوارزميات القديمة والتي تعتمد على ايجاد النقاط عشوائياً يحتاج إلى وقت طويل على الرغم من التطور الذي حدث في اجهزة وبرمجيات الحاسوب. في هذه البحث تم بناء واستخدام خوارزمية جديدة لتجميع النقاط اللازمة في تشكيل الصور الفونونية حيث ان هذه النقاط يتم اختيارها وفق نظام معين ويستفاد من خاصية التكرارية وبذلك يقل وقت الحصول على هذا العدد من النقاط. نظرا للتماثل الموجود في البلورات المكعبة وباستخدام العمليات التناظرية يمكن اجراء الحسابات الخاصة لايجاد القيم والمتجهات الذاتية التي تدخل في حساب علاقة التشتت في منطقة برليون المختزلة التي تمثل $\frac{1}{48}$ من منطقة برليون الكلية وهذا بدوره يقلل من وقت الحصول على النقاط المطلوبة في حساب سطح التوهين وتشكيل الصور الفونونية إلى $\frac{1}{48}$ من الوقت الكلي.

لغرض التاكد من صحة اداء الخوارزميات والبرامج التي بنيت واستخدمت في هذه الدراسة، تم تطبيق هذه البرامج على البلورات الاعتيادية وقورنت النتائج مع نتائج الدراسات السابقة للبلورات الاعتيادية المشابهة واظهرت النتائج المستحصلة تطابقاً كبيراً وهذا يدعم النتائج الخاصة بالبلورات الفائقة.

أجريت هذه الدراسة على بلورات الهاليدات القلوية وذلك لان البلورات الفائقة التي تستخدم في معظم الدراسات كانت من نوع البلورات التساهمية مثل بلورة GaAs وبلورة GaAlAs وبعض الدراسات على بلورة Si وبلورة Ge في حين لاتوجد دراسات على البلورات الهاليدات القلوية الفائقة وخاصة عند الترددات العالية وتم اختيار ثلاث بلورات من مجموعة الهاليدات القلوية بالاعتماد على قيمة تباين خواص هذه البلورات.

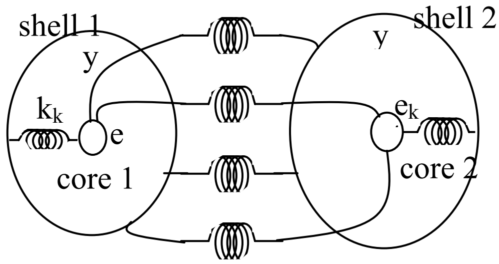
الخوارزمية التي وجدت في دراسة سابقة واستخدمت في تميز انماط اهتزاز ذرات البلورات الاعتيادية وفصلها عند الترددات العالية قد طورت في هذا البحث لتكون بمثابة الخطوة الاولى في حل مشكلة الغموض في تمييز الانماط الصوتية للبلورات الفائقة التي اعتمدت على صفات الاستمرارية للمتجهات الذاتية وتردداتها الذاتية ومشتقاتها.

ان الصور المعروضة في هذا البحث قد تم معالجتها صورياً باستخدام البرامج التي بنيت من الاساس بالاعتماد على خوارزميات تحسين الصور الرقمية كما ان برنامج تسوية التدرج التكراري قد طبق على كافة صور البلورات الفائقة.

١) نمـوذج الغـلاف Shell Model (SM)

اقترح هذا النموذج للمرة الاولى الباحثان Dick و Overhause في عام 1959 وقد أثبت نجاحه مما أدى إلى استخدامه الواسع في حساب العديد من صفات المواد الصلبة. يفترض هذا النموذج إن الأيون يتكون من قلب ايوني صلد يرتبط بنابض توافقي مع

إلكترونات التكافؤ الموزعة على أغلفة دائرية ليس لها كتلة تحيط بالقلب، تتفاعل القلوب والأغلفة للأيونات المختلفة مع بعضها حسب تفاعلات كولوم[30]. طور هذا النموذج للتعامل مع بلورات الهاليدات القلوية[31] ومن بين معظم التطبيقات الناجحة والمهمة لهذا النموذج هو استخدامه في حساب علاقة التشتت لاهتزاز الشبيكة $\omega(q)$ والتي حسبت للمرة الأولى على البلورات الايونية (NaI) لدى الباحث Woods[33-32]. لهذا الغرض وضع الباحث Cochran صيغة عامة لهذا النموذج ولكن استخدم التطوير الحاصل على النموذج مع الهاليدات القلوية كما طبقت هذه الصيغة على البلورات الايونية والتساهمية لدى الباحث نفسه[34]. أظهرت الصيغة العامة وجود تفاعلات إضافية بين قلوب الأيونات وبين اغلفة الايونات وكذلك بين قلب أيون مع غلاف أيون آخر[35]، كما موضح في الشكل (١).



الشكل (1): نموذج الغلاف العام[36]

٢) الجهـــد The Potential

ان نجاح الحسابات الخاصة بحركية الشبيكة يعتمد بصورة مباشرة على الجهد بين الذرات (Interatomic Potential). استخدم في هذه الدراسة جهد Sangster & Atwood في حساب حركية الشبيكة للبلورات الاعتيادية والفائقة من مجموعة الهاليدات القلوية. بني هذا الجهد على نموذج الغلاف والذي حقق نجاحاً واسعاً في الحسابات الواسعة المدى للصفات الحركية والمستقرة لمجموعة الهاليدات القلوية [32-31]. ان اختيار نموذج الغلاف في هذه الدراسة بدلا من كثير من النماذج النظرية التي عمل عليها الباحثون هو نجاحه في حساب علاقة التشتت والتمركز الفونوني لبلورات الهاليدات القلوية [39-37].

في بداية العمل مع البلورات الايونية، وصفت الأيونات على إنها عبارة عن كرة صلدة تتفاعل مع الأيونات الأخرى بجهود طويلة وقصيرة المدى[40]. الجهد الطويل المـدى الـذي يعرف بجهد كولوم يتولد من الجهد المستقر ويكون ذا فعالية عالية بين الأيونات في البلورة، في حين ان جهد التنافر القصير المدى له تأثير عال بين الأيونات المتجاورة القليلة فقط [41].

الجهد بين الايونين i^{th} و j^{th} المفصولين بمسافة مقدارها r هو:-

$$\varphi_{ij}(r)=\varphi_{ij}^{c}(r)+\varphi_{ij}^{SR}(r) \qquad (1)$$

وضع الباحثان Born و Miller صيغة للجهد القصير المدى في معالجتهم للبلـورة الايونية. هذا الجهد يعتمد على عاملين:

$$\varphi^{SR}(r)=Be^{-\alpha r} \qquad (2)$$

حيث يحسب هذان العاملان α و B من بيانات اتزان البلورة. يظهر هذا الجهد نتيجة التداخل بين الأغلفة المتقاربة للأيونات المتجاورة [48]. ثم وسع كل من Fumi و Tosi الجهد الذي اقترحه Born و Miller وذلك بإضافة حدود جديدة هي حدود فاندر والز (Van der Waals) لتصحيح حدود الطاقة المختارة لعناصر الهاليدات القلوية التي ظهرت أكبر من قيم القياسات العملية[41]. لذا فان :-

$$\varphi_{ij}^{SR}(r)=\beta_{ij}\, b \exp\left[\alpha(r_i+r_j+r)\right]-\frac{C_{ij}}{r^6}-\frac{D_{ij}}{r^8} \qquad (3)$$

هذا التعديل لم يحقق الأداء الحقيقي للجهد ليعطي تطابقاً ملائماً مع نتائج القياسات العملية لكثير من الصفات الصلبة[42] حيث اظهرت الحسابات ان القيم الناتجة هي اكبر من القيم العملية المعروفة. لذا اقترح Dick وOverhause نموذج الغلاف لإجراء بعض الحسابات مثل حساب علاقة التشتت، وقد أثبت نجاحه في إعطاء نتائج ذات تقريبات جيدة مع نتائج القياسات العملية[33]. على ضوء هذا النموذج اقترح Sangster & Atwood [43] تعديلا على الجهد القصير المدى الخاص بالهاليدات القلوية الذي له صيغة مختلفة عن الصيغة التي اقترحها الباحثان Tosi و Fumi

$$\varphi_{ij}^{SR}(r)=\beta_{ij}\, b_{ij} \exp\left[\alpha_{ij}(r_i+r_j+r)\right]-\frac{C_{ij}}{r^6}-\frac{D_{ij}}{r^8} \qquad (4)$$

حيث تم استخدام هذه الصيغة في هذه البحث وحققت نجاحاً واسعاً في الحسابات الواسعة المدى للصفات الحركية والمستقرة لمجموعة الهاليدات القلوية. كل المقادير اللازمة في حسابات تفاعلات الجهود والتي حسبت من قبل Sangster موجودة في الجدولين التاليين (الجدول (١) و (٢))[43,45] .

الجدول (١): عوامل الايون غير المعتمدة والمعطاة من Sangster & Atwood

ions	$\alpha_i(A^3)$	y_i	$B_i 10^6 erg^{1/2}$	r_i (A)	$S_i (A^{1/2})$
Li^+	0.0290	-0.6025	3.7661	0.2226	4.0700
Na^+	0.2495	-2.2510	0.6545	0.8531	2.8421
K^+	1.0571	-5.9659	0.3963	1.2804	2.3243
Rb^+	1.5600	-4.9147	0.3245	1.4627	2.3668
F^-	0.9743	-1.6810	1.4849	1.1370	-0.2240
Cl^-	3.2350	-2.6532	0.3414	1.7393	0.0064
Br^-	4.5330	-2.7370	0.2031	1.9451	0.0111
I^-	6.7629	-3.0332	0.1200	2.1842	0.0268

Globle parameters Z=0.97, b=0.29373x 10^{-12} erg, t=9.75986

الجدول (٢): عوامل جهد Sangster &Atwood

Crystal	r^-(A)	r^+(A)	A(A^{-1})	B(10^{-12} erg)
LiF	0.60	1.38	4.878	0.226
NaF	0.95	1.38	4.175	0.245
NaCl	0.95	1.81	3.510	0.229
NaBr	0.95	1.95	3.277	0.246
NaI	0.95	2.16	2.980	0.246
KF	1.33	1.36	3.547	0.249
KCl	1.33	1.81	3.188	0.224
KBr	1.33	1.95	2.919	0.261
KI	1.33	2.16	2.701	0.276
RbF	1.48	1.36	3.257	0.276
RbCl	1.48	1.81	2.953	0.269
RbBr	1.48	1.95	2.766	0.285
RbI	1.48	2.16	2.570	0.299

٣) نظرية حركـية الشبيكة Theory Of Lattice Dynamics

قدمت الصيغة العامة لنظرية حركية الشبيكة والمعتمدة على نموذج الغلاف مـن قبـل Cochran[46]. والمعادلة المميزة المستخدمة في ايجـاد القـيم الذاتيـة والمتجهـات الذاتيـة للمصفوفة الحركية D(q) هي[37]:

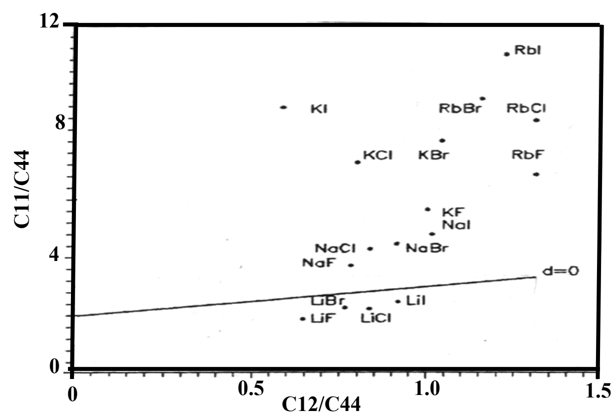
$$\left| D_{\alpha\beta}(q) - \omega^2(q)\,\delta_{\alpha\beta}\,\delta_{kk'} \right| = 0 \qquad (5)$$

٤) بلورات الهاليدات القلوية.

في بلورات الهاليدات القلوية هنالك توزيع واسع لتباين الخواص(Anisotropy). معظم الهاليدات القلوية عدا مجموعة الليثيوم تقع اعلى خط تباين الخواص (d=0) وتدعى بالبلورات ذات تباين الخواص الموجب، في حين ان مجموعة الليثيوم تكون ذات تباين خواص سالب[47].

من الملائم التعامل مع البلورات ذات تباين الخواص الموجب كمجموعتين منفصلتين، بلورات ذات تباين خواص موجب معتدل وهي بلورات: *KF*، *NaI*، *NaBr*، *NaCl*، *NaF* في حين ان بقية البلورات تكون ذات تباين خواص موجب عال. يبين الشكل (2) توزيع بلورات الهاليدات القلوية على خط التباين.

بلورات الهاليدات القلوية ذات تركيب مكعب متمركز الاوجه (*FCC*)، ولها تركيبة بلورة *NaCl* نفسها[48]. بغية دراسة مجموعة الهاليدات القلوية كاملة، تم اختياربلورة *NaCl* مثالاً عن البلورات ذات التباين الخواص المعتدل، وبلورة *KCl* ذات تباين الخواص الموجب العالي.



الشكل (2): توزيع بلورات الهاليدات القلوية على خط التباين

٥) حساب علاقـة التـشتت.

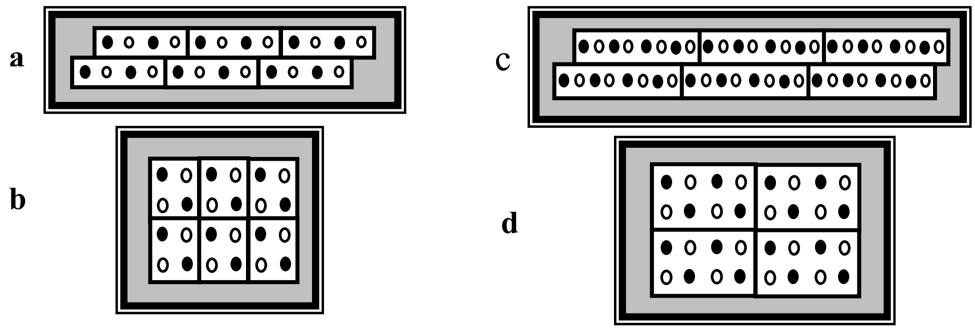
معظم الحسابات الخاصة بسطوح التوهين وسطوح سرعة المجموعة وكذلك دراسة تمركز الفونونات تعتمد بصورة مباشرة على حساب علاقة التشتت، لذا ونظرا لاهمية هذه العلاقة قمنا اولا بحساب ودراسة علاقة التشتت للبلورات المختارة.

لاجل حساب علاقة التشتت تم استخدام برنامج خاص لحسابها من حساب القيم الذاتية والمتجهات الذاتية، حيث يحسب البرنامج مصفوفة الجهد القصير المدى التي تعتمد على البيانات الماخوذة من نموذج جهد Saugster & Atwood ومصفوفة جهد كولوم، هذه المصفوفات تدخل في اعداد المصفوفة الحركية. تم ربط مكتبة برامجيات IMSL مع البرنامج الرئيس والحاوية على برامج فرعية عديدة، يقوم احد برامج هذه المكتبة بحساب القيم الذاتية والمتجهات الذاتية من حل المصفوفة الحركية التي يجب ان تمتلك صفة المصفوفة الهيرميتية لذا فان معالجات رياضية وبرمجية عديدة تجرى على المصفوفة الحركية لجعلها تمتلك هذه الصفة قبل استخدامها في البرنامج الفرعي الخاص بايجاد تلك القيم.

لغرض ايجاد علاقة التشتت لبلورات مجموعة الهاليدات القلوية، فان البلورة المختارة اذا كانت بلورة اعتيادية، فانها تحتوي على ذرتين في كل وحدة خلية، اما في حالة بلورات الشبيكة الفائقة SL المتعددة الطبقات فانها تحتوي على اكثر من ذرتين في كل وحدة خلية.

في البرنامج الذي تم اعداده يتم بناء البلورات الاعتيادية وبلورات الشبيكة الفائقة بثلاثة ابعاد (z, y, x) وهذا يتطلب عمليات انتقالية لنقل وحدة الخلية لملء الفضاء الثلاثي بحيث يحدث تراص وتناوب بين الايونات الموجبة والسالبة وبالاعتماد على المتجهات الانتقالية (Translation Vectors) التي تحدد اتجاه حركة او انتقال وحدة الخلية اثناء عملية بناء البلورة بحيث لايحدث فراغات او تداخلات في المواقع بين وحدات الخلية، وكل نوع منها له متجه انتقال خاص بها. عملية بناء البلورة مهمة جدا وذلك لاجراء التفاعلات بين الذرة في وحدة الخلية مع الذرات الاخرى في وحدة الخلية نفسها او في الخلايا الاخرى المجاورة وبالاعتماد على مسافة القطع، ونتيجة حساب هذه التفاعلات يتم حساب علاقة التشتت للبلورات قيد الدراسة.

في هذه البحث تم تحديد عدد من انواع وحدة الخلية للشبيكة الفائقة المستخدمة من بلورات مجموعة الهاليدات القلوية المختارة وهي: خلية بـ ٤ ذرات و خلية بـ ٨ ذرات. في البلورات ذات ٤ ذرات يمكن جعل وحدة الخلية باحد نمطين النمط الاول: تكون الذرات الأربع على استقامة واحدة كما في الشكل (a: 3)، اما النمط الثاني: ترتب الذرات بهيئة مصفوفة 2x2 كما في الشكل (b:3)، وكذلك الحال بالنسبة للبلورة ذات ٨ ذرات/خلية حيث ان النمط الاول 1x8 أما النمط الثاني فيكون بالهيئة 2x4 كما هو في الشكل (c:3) والشكل (d:3) على التوالي.



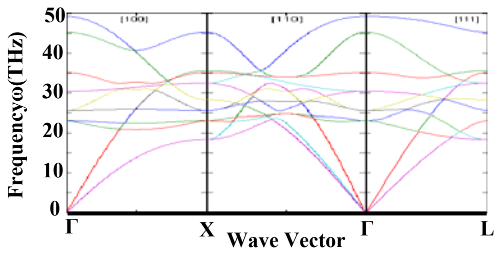
الشكل (3): أنماط ترتيب الذرات في وحدة خلية الشبيكة الفائقة

من المعلوم ان منحني التشتت للبلورات يتكون من نوعين من الانماط هما: الانماط الصوتية (LA, TA2, TA1) والانماط البصرية (LO, TO2, TO1).

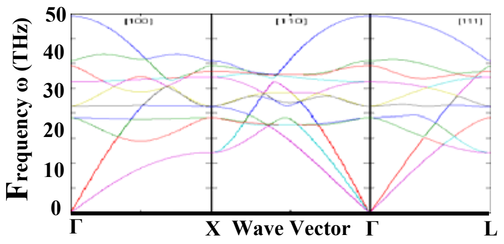
منحنيات التشتت للبلورات الفائقة المحسوبة نظرياً في هذا البحث رسمت في الاشكال من (4) الى (8) وكما يلي: يبين الشكل (4) والشكل (5) نتائج حسابات علاقة التشتت للبلورتين المختارتين في هذه البحث وباربعة ذرات لكل وحدة خلية والمرتبة حسب النمط الاول. ان عدد الانماط للفرعين الصوتي والبصري يعتمد على عدد الذرات في وحدة الخلية، لذا ان منحني التشتت هنا له ١٢ نمطاً الثلاثة الأولى عند الترددات الواطئة هي الانماط الصوتية، في حين ان الانماط المتبقية هي البصرية، وبزيادة عدد الذرات يزداد التداخل بين الانماط الصوتية والبصرية. عند الترددات الواطئة يكون التداخل بين الانماط قليل وتميز الانماط يكون اسهل لان المنحنيات منفصولة بصورة واضحة، وهذا يعني ان الموجات النافذة والمنعكسة في كل طبقة من طبقات الشبيكة الفائقة تشبه الموجات النافذة والمنعكسة في الشبيكة الاعتيادية حيث يكون التداخل بين الانماط قليلاً.

رسمت منحنيات التشتت (الاشكال **(4-7)**) للبلورات الفائقة المختارة ذات ٤ ذرات لكل وحدة خلية والمرتبة حسب النمط الثاني (الذرات الاربعة على هيئة مربع)، من الملاحظ عند مقارنة منحنيات البلورات المرتبة بالنمط الاول مع المنحنيات للبلورات نفسها والمرتبة بالنمط الثاني ان هنالك اختلافا بين منحنيات الانماط وخاصة عند الترددات العالية، اما عند الترددات الواطئة حيث الانماط الصوتية يمكن تميزها بصورة اسهل عن الانماط البصرية يكون الفرق بين منحنيات التشتت للبلورات المرتبة بالنمط الاول ومنحنيات التشتت للبلورات المرتبة بالنمط الثاني قليلاً جداً ولكن بزيادة التردد يصبح الاختلاف اكثر وضوحاً. ان الاختلاف في منحنيات التشتت يكون نتيجة الاختلاف بين القوى الرابطة بين الذرات والتفاعلات التي تحدث بينها.

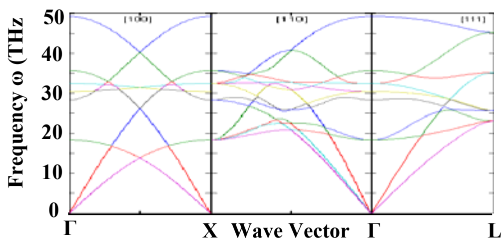
الظاهرة المهمة التي يمكن ملاحظتها في منحنيات التشتت للبلـورات المرتبـة حـسب النمط الثاني هي ان الانماط تطوى عند النقاط الوسطية وان هذه الطيات تظهر فـي الاتجـاه <100> وللبلورتين أي ظهور ظاهرة طية النطاق. تحدث الطية نتيجـة النـسق التكـراري للبلورة الفائقة على طول خط نمو البلورة، وبزيادة التردد فان النمط يصل الى حدود منطقـة برليون ثم يطوى الى داخل المنطقة حسب شروط براك، وتبين الاشكال (8) هذه الظاهرة.



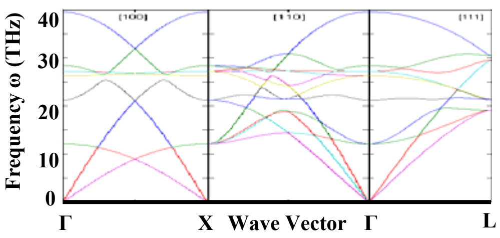
الشكل (4) : علاقة تشتت الفونون في الاتجاهات
التناظرية الثلاثة لبلورة NaCl (4 ذرات / وحدة خلية)



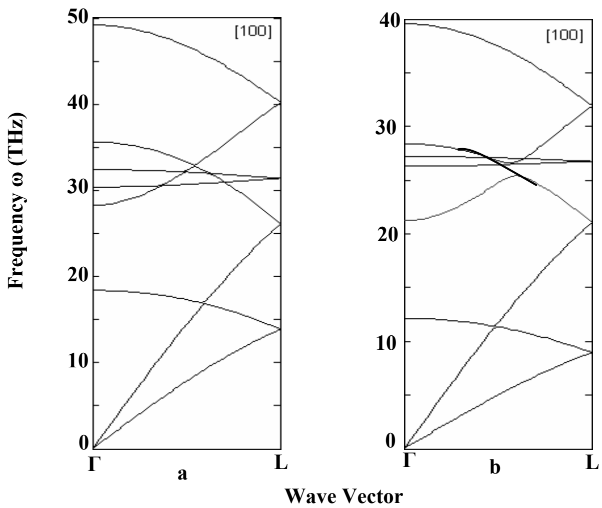
الشكل(5) : علاقة تشتت الفونون في الاتجاهات التناظرية
الثلاثة لبلورة KCl (4 ذرات / وحدة خلية)



الشكل (6) : علاقة تشتت الفونون في الاتجاهات التناظرية
الثلاثة لبلورة NaCl ((4 ذرات/ وحدة خلية) النمط الثاني)



الشكل (7) : علاقة تشتت الفونون في الاتجاهات التناظرية
الثلاثة لبلورة KCl ((4 ذرات/ وحدة خلية) النمط الثاني)



الشكل (8): ظاهرة طية النطاق للفونونات في الاتجاه <100> للبلورتين
((4 ذرات / وحدة خلية) النمط الثاني) (a) بلورة NaCl، (b) بلورة KCl

٦) سطـح التـوهين.

ان فهم تشكيلة التمركز الفونوني في البلورة في فضاء متجه الموجة يكون عن طريـق تشكيل سطح التوهين لكل من الانماط الصوتية الثلاثة في تلك المادة (نمط طولي واحد واثنان مستعرضان) [32,10] .

تحتـاج حـسابات سـطح التـوهين او مـا يـسمى بـسطح التـردد الثابـت (Constant Frequency surface) في المنطقة المختزلة الى معيار مميز لفـصل الـنمط

المطلوب عن بقية الانماط الاهتزازية الاخرى، حيث ان في منطقة التشتت ذات التردد العالي يكون من الصعب التمييز بين الانماط والفروع المختلفة، فالفرع البصري يمكن ان يتحول الى فرع صوتي او ان النمط المستعرض يصبح نمطا طوليا عند تغير متجه الموجة وذلك بـسبب التداخل بين الانماط والفروع.

يبنى سطح التوهين من حساب مقلوب سرعة الطور لكل الزوايا في فضاء متجه الموجة q.

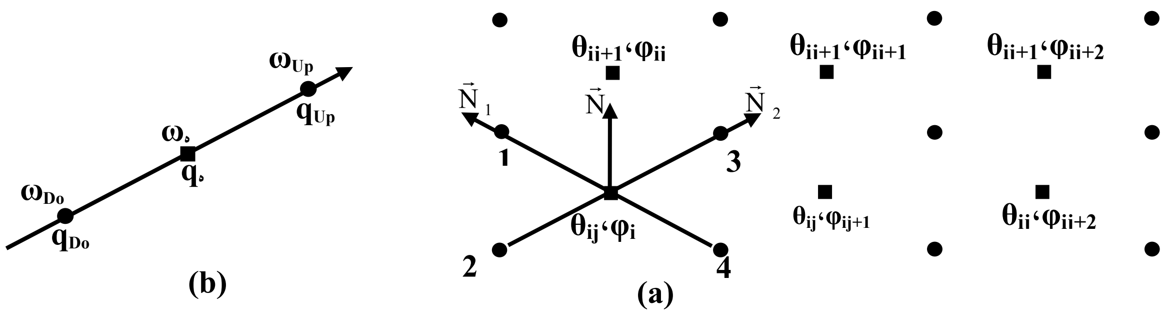
لغرض حساب سطح التوهين وسطح سرعة المجموعة يتم الاعتماد على علاقة التشتت لذا اعتبر برنامج علاقة التشتت برنامجاً فرعياً مع برامج فرعية اخرى عديدة ضمن البرنامج الرئيسي للقيام بتلك الحسابات.

في هذه البحث تم دراسة الفرع الـصوتي بانماطـه الثلاثـة الطوليـة والمـستعرضة (LA, TA2, TA1)، وذلك لان الفونونات الصوتية تشترك في دراسـة حركـة الموجـات المرنة وعملية التوصيل الحراري داخل البلورة. ان حركية الموجات المرنة داخـل البلـورة تجعل الذرات تتحرك على نسق النمط الصوتى ولان النبضة الحرارية المتولدة فـي البلـورة تعمل على ازاحة الذرات وتحريكها ذهاباً وإياباً بشكل تذبذب النمط الصوتي[49] اما في عملية التوصيل الحراري تكون مساهمة الفونونات البصرية قليلـة جـداً مقارنـة مـع الفونونـات الصوتية[50]، وقد تم اجراء الحسابات الخاصة بالبلورات المختارة عند الترددات العالية فقد تم اختيار قيمـة التـردد 1THz. تحتـاج الطرائـق النظريـة التـي استعرضـها الباحثـان Wolf و Hubber إلى تجميع عدد كبير من البيانات المتولدة عشوائياً فـي فـضاء متجـه الموجة، حيث يتطلب تجميع اكثر من 5×10^5 نقطة لتشكيل سطح تـوهين نـاعم وتـشكيلة تمركز الفونون. هذه البيانات تستخدم كادخالات الى البرنامج لحساب ترددات القيم الذاتية فـي حين ان سطح التوهين المطلوب قد تم اختياره. تحتاج هذه الطرائق الى وقت تنفيذ طويل والى ذاكرة كبيرة للبيانات لكي تعالج على الرغم من التطور الحاصل في مجال الحاسـبات ولهـذا فانها من الطرائق غير العملية. في هذه البحث بنيت واستخدمت خوارزمية جديـدة الـسمة الاساسية لها هي ان قيم متجه الموجة لم تحدد عشوائياً وإنما تم اختيارهـا بالاعتمـاد علـى تقنيات رياضية وباستخدام طرائق الامثلية. حسب الخوارزمية الجديدة مايقرب من 10^5 نقطـة ضرورية سوف تجمع لتشكيل سطح سرعة المجموعة في منطقة برليـون المختزلـة RBZ واستخدم برنامج حاسوبي لرسم سرعة المجموعة وصور التمركز الفونـوني. الخوارزميـة المستخدمة تقلل من وقت تنفيذ البرنامج وكذلك من حجم الـذاكرة المـستخدمة مقارنـة مـع الطرائق الاخرى، وذلك نظرا للصفات التناظرية واستخدام نظرية الزمر (Group Theory) وبأختيار المنطقة المختزلة يتم تقليل زمن تنفيذ البرنامج الى $\frac{1}{48}$ من الوقت الاصلي.

٧) سطح سرعة المجموعة.

التركيب الأخر الذي يساعد في فهم تشكيلة تمركز الفونون هو سطح سرعة المجموعة او مايسمى بسطح الموجة (وتعرف سرعة المجموعة على انها محصلة سرعة انتـشار عـدد غير محدد من الموجات ذات الترددات المختلفة وتمثل شكل جبهة الموجة)[52,51].

ولإيجاد سرعة المجموعة Vg عند نقطة معينة يتم اختيار اربع نقاط مجاورة وقريبـة من النقطة الأساس (الشكل (a:9)) وبإيجاد المتجهين $\vec{N}_1$ و $\vec{N}_2$ اللذين يمثلان المتجه بـين النقطتين 4 و١ والمتجه بين النقطتين ٢ و٣ على التوالي والواقعين على سطح التوهين بطريقة هندسية بين النقاط الاربعة، يمكن ايجاد وحدة المتجه $\hat{u}_g$ باتجاه $\vec{N}$ والذي يكون عمودي على السطح ثم يلي ذلك حساب Vg وذلك بايجاد المشتقة الثانية باتجاه العمود $\vec{N}$ ويتم ذلـك عـن طريق اخذ نقتطين قبل وبعد النقطة الاساس.



الشكل (9): a: مخطط يوضح النقاط الاساس على سطح التوهين مع النقاط الاربعة المجاورة لها والمستخدمة لحساب اتجاه Vg.. b: النقاط المستخدمة في حساب قيمة Vg

يمكن الاستفادة من خاصية التعامد وخاصية الاستمرارية في ايجاد اكبر عدد من النقاط الخاصة في حساب سرعة المجموعة وسطح التوهين وصور التمركز الفونوني، ولكن زيـادة عدد النقاط قد يؤدي الى ظهور مشاكل جديدة منها زيادة حجم الذاكرة المستخدمة وكذلك زمن تنفيذ البرنامج يصبح اطول. ولغرض تقليل زمن الحسابات للنقاط المجاورة الاخرى، تخـزن النقطتان 3 و4 (من الشكل (a:9)) في المرحلة الحالية ليمثلان النقطتان 1 و2 في المرحلـة اللاحقة، والسطر الاعلى من النقاط يخزن لمرحلة لاحقة.

لحساب تمركز الفونون يمكن الاستفادة من الخصائص التناظرية للبلورة في اجراء هذه الحسابات. هنالك (48) عملية تناظرية في البلورة، هذه العمليات تقسم الى (8) عمليات بسيطة متضمنة مجموعة النقطة (point group) وتحدث نتيجة تبادل الاحـداثيات و (6) عمليـات اخرى ويمكن الحصول على الـ (48) عملية من حاصل ضرب الـ (8) عمليـات الاولـى بالعمليات الـ (6) الاخرى. الجدول (3) يوضح العمليات التناظرية الاولى والثانية[53].

الجدول (3): العمليات التناظرية

العمليات الـ (6) الثانية

X	Y	Z
X	Z	Y
Y	X	Z
Y	Z	X
Z	X	Y
Z	Y	Z

العمليات الـ (8) الأولى

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

منطقة برليون التي تعرف بالمنطقة التامة (Full Zone) تقسم الى (48) مقطعاً نتيجة الـ (48) عملية تناظرية التي تقلل الحسابات الى قطاع منطقة صغيرة (Small Zone Sector)، المقطع الواحد يتكون من الـ (48) مقطعاً يعرف بمنطقة برليون المختزلة (RBZ). يمكن تشكيل شبكة منتظمة من النقاط باستخدام الاحداثيات القطبية داخل المنطقة المختزلة لبرليون وتشكل هذه المنطقة من المستويات بين الاتجاهات التناظرية الثلاث (<100>, <110>, <111>) وباستخدام هذه الشبكة يمكن حساب سطوح التوهين في هذه المنطقة. وباجراء العمليات التناظرية يمكن تقليل وقت تنفذ الحسابات بشكل كبير جداً، ففي الحالة قيد الدراسة يتم اختصار الوقت الى $\frac{1}{48}$ من الوقت الاصلي.

البلورات المستخدمة في هذه الدراسة هي من نوع بلورة مكعبة متمركزة الوجـه FCC وهذه البلورات تعود الى O_n مجموعة النقطة، تفاصيل اكثر عـن مجموعـة نقطـة البلـورة والمنطقة المختزلة يمكن الاطلاع عليها من المصادر [54,53]. البلورات التي من نـوع FCC تمثل بمتجه انتقالي (Translation Vector) يعطى بـ

$$\begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

يوضح الشكل (a:10) منطقة برليون الاولى لبلورة مكعبة من نوع FCC فـي حـين يوضح الشكل (b:10) مقطع المنطقة المختزلة من المنطقة الكلية والذي يعيد تكوين المنطقـة التامة بواسطة العمليات التناظرية المناسبة المذكورة اعلاه.

a b

الشكل (10): a: منطقة برليون الاولى ، b : منطقة برليون المختزلة

٨) التمركـز الفونونـي والصـور الفونونيـة

تسهم تقنية التصوير الفونونية العملية جوهرياً في فهم تاثير تمركز الفونون في البلورات الصلبة[19]. توضح طريقة التصوير الفونوني كيفية توزيع الطاقة الصوتية المنبعثة من مصدر نقطي داخل شبيكة البلورة[56,55,8,4].

في هذه البحث تم دراسة تشكيلة تمركز الفونونات للبلورات المختارة ولكافة الحالات الخاصة بالبلورة الفائقة وللانماط الصوتية الثلاثة (TA1, TA2, LA)، واجريت الحسابات عند التردد 1THz، واختير هذا التردد وذلك لوجود الانماط الصوتية في هذا المدى وكذلك قلة الدراسات النظرية والعملية في مدى الترددات العالية هذه. لاجراء الحسابات اللازمة استخدم البرنامج (Phonflux.for) للقيام بهذه الحسابات بعد ادخال البيانات الضرورية الازمة في برنامج علاقة التشتت فضلاً عن تحديد النمط، وحددت قيمة الزاوية θ و φ داخل منطقة برليون المختزلة والتي تحدد بالاتجاهات <110> و<010> و<111>، ثم تقسم هذه المنطقة بنقاط بشكل شبكة وبزيادة $\Delta\theta=\Delta\varphi=0.1$ deg. واختيرت المسافة الفاصلة بين كل نقطة والنقطة التي تليها في فضاء متجه الموجة صغيرة لجعل خوارزمية فصل النمط SBRANCH كفوءة أكثر في تميز النمط المطلوب وكذلك للحصول على تمثيل ناعم لصورة تمركز الفونون بحيث انه بتصغير المسافة الفاصلة يزداد عدد النقاط وبذلك تكون الصورة أدق. يقوم هذا البرنامج بتجميع عدد كبير من النقاط ما يقارب 100000 نقطة موزعة بصورة منتظمة ومتجانسة في فضاء متجه الموجة في منطقة برليون المختزلة. للحصول على منطقة برليون الكاملة يتم إجراء العمليات التناظرية المناسبة وللحصول على صورة للبلورة يتم إسقاط متجهات سرعة المجموعة الناتجة باتجاه معين وقد تم اختيار الاتجاه <100> لتكوين الصورة وتخزن النتائج في مصفوفة 256x256، ثم ترسم بيانات هذه المصفوفة وتعرض الصورة على الشاشة، تشكل هذه الصورة ما يقرب من 105 نقطة. تم إعداد البرنامج (Imageplot.m) ليقوم برسم الصور وعرضها.

في البرنامج الخاص برسم الصور الذي تم إعداده في هذا البحث بلغة MATLAB يتم عرض الصور الناتجة بالاعتماد على دوال جاهزة ضمن اللغة، حيث تم استخدام الدالة الخارجية image(I) والتي تولد صورة رسومية ملونة لقيم عناصر المصفوفة I، حيث إن كل عنصر من عناصر المصفوفة يمثل كوسم على الخريطة الملونة للصورة أو مباشرة قيما لل ـ RGB (Red, Green, Blue) معتمداً على البيانات التي تمثلها حيث إن قيمة الوسم لذلك العنصر من المصفوفة تمثل الموقع وقيمته تمثل شدة الإضاءة لتلك النقطة.

٩) معالجـة صـور التمركـز الفونونـي

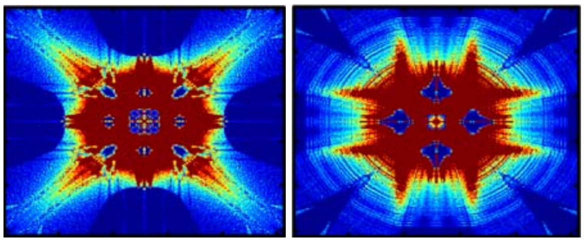
صور التمركز الفونوني التي شكلت وعرضت في هذه الدراسة هي صور ذات طبيعـة رقمية قريبة للثنائية خزنت بياناتها في ملفات على هيئة مصفوفات واجريت عليها العمليـات اللازمة قبل عرضها لغرض تقريب تلك الصور من الواقع أي للحصول على صـور تقـرب الواقع الحقيقي لانتشار الموجة الصوتية داخل البلورة واظهار مناطق التمركز ومناطق عـدم تمركز الفونونات وعليه فان عملية التنعيم تظهر حقائق عن قيم متوقع فقدانها نتيجـة كـون الصور رقمية وتقلل ايضا من الحافات الحادة (sharp) الموجـودة فـي الـصورة وكـذلك استخدمت خوارزمية تسوية التدرج التكراري، وعليه تم معالجة تلك الصور من خلال برنامج خاص كتب بلغة MATLAB يعتمد على الخوارزمية المذكورة اعلاه ونفذت على صـور البلورات المختارة.

١٠) النتائـــــج

١٠-١ نتائـج حسابات صـور التمركـز الفونونـي لبلـورة $NaCl$

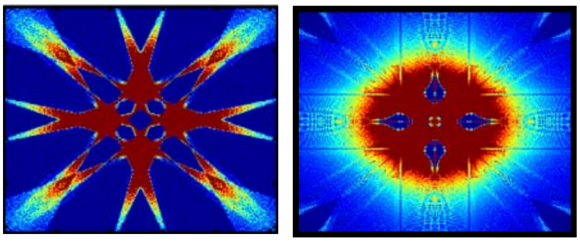
تعرض الأشكال (11-14) صور لبلورة $NaCl$ للـنمط المـستعرض TA1 والـنمط TA2، بعد تشكيل الصور ورسمها وعرضها على الشاشة تطبع على الـورق، كـل نقطـة مضيئة (بيضاء اللون على الورقة) تمثل انبعاث الفونونات من المصدر النقطي الموجود فـي الطرف الثاني للبلورة. المنطقة المضيئة في تشكيلة التمركز تشير الى شدة عالية وان المنطقة المعتمة تمثل منطقة عدم تمركز للفونونات. في الصور الملونة فان الاختلاف في التـدرجات اللونية يشير الى اختلاف في شدة التمركز الفونوني.

حسبت ورسمت صور التمركز الفونـوني للبلـورة ذات ٤ ذرات و٨ ذرات ولنمطـي الترتيب المذكورة سابقاً وعرضت صور هذين النمطين بالتعاقب للمقارنة بينهما، ومن مقارنة صورة نمط مستعرض معين بالترتيب الاول مع صورة نفس النمط لنفس البلـورة بالترتيـب الثاني يتبين ان هنالك فرقاً بين تشكيلة الصورتين حتى وان كان هذا الفـرق بـسيطاً، وهـذه النتيجة بديهية وذلك لان سطوح التوهين وسطوح سرعة المجموعة وكذلك منحنيات التـشتت كانت مختلفة للحالتين.



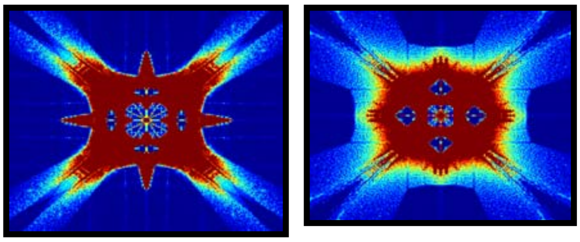
a b

الشكل(١١): صور التمركز الفونوني لبلورة $NaCl$ (4 ذرات / وحدة خلية) من الاتجاه <100> a: للنمط TA1 ، b: للنمط TA2



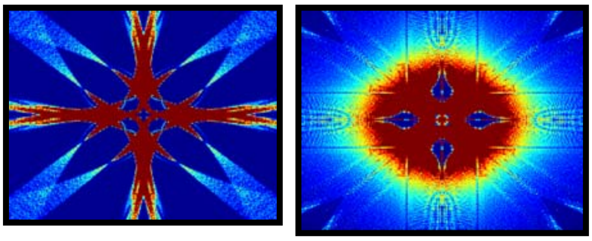
a b

الشكل(١٢): صور التمركز الفونوني لبلورة $NaCl$ (٨ ذرات / وحدة خلية) من الاتجاه <100> a: للنمط TA1 ، b: للنمط TA2



a b

الشكل(١٣): صور التمركز الفونوني لبلورة NaCl (4 ذرات/وحدة خلية)
a: للنمط TA1 (نمط الترتيب الثاني) ، b: للنمط TA2 (نمط الترتيب الثاني)

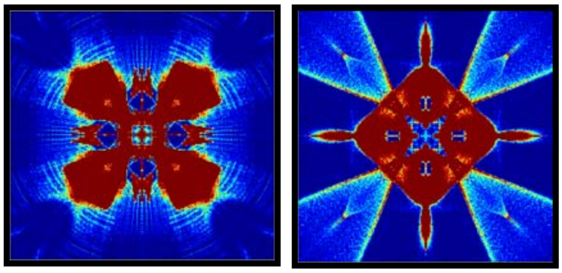


a b

الشكل(١٤): صور التمركز الفونوني لبلورة NaCl (٨ ذرات/وحدة خلية)
a: للنمط TA1 (نمط الترتيب الثاني) ، b: للنمط TA2 (نمط الترتيب الثاني)

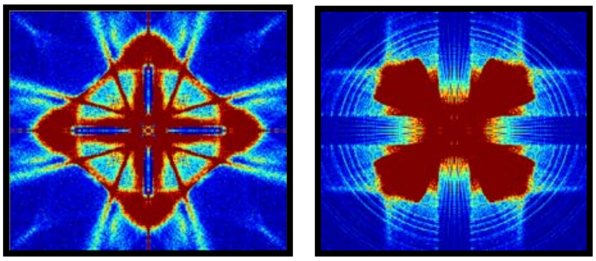
١٠-٢ نتائـج حسابات صـور التمركـز الفونونـي لبلـورة KCl

يعرض الشكل (15) صور التمركز الفونوني لبلـورة KCl ذات ٤ ذرات و ٨ ذرات للنمط TA1 والنمط TA2، ولمعرفة تأثير ترتيب الذرات في وحدة الخلية على صور التمركز الفونوني لهذه البلورة تم تشكيل وعرض صورة كل نمط مستعرض بالترتيبين الاول والثـاني وفي الاشكال (16-18).



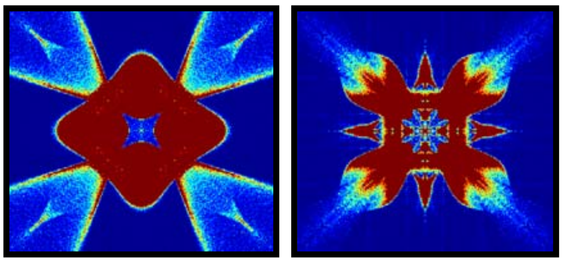
a b

الشكل(١٥): صور التمركز الفونوني لبلورة KCl (4 ذرات/وحدة خلية) من الاتجاه <100> a: للنمط TA1 ، b: للنمط TA2



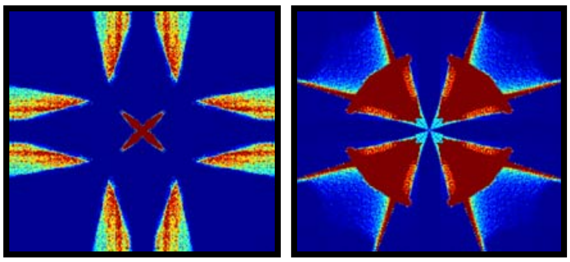
a b

الشكل(١٦): صور التمركز الفونوني لبلورة KCl (8 ذرات/وحدة خلية) من الاتجاه <100> a: للنمط TA1 ، b: للنمط TA2



a b

الشكل(١٧): صور التمركز الفونوني لبلورة KCl (4 ذرات/ وحدة خلية(نمط الترتيب الثاني)) a: للنمط TA1 b: TA2



a b

الشكل(١٨): صور التمركز الفونوني لبلورة KCl (8 ذرات/ وحدة خلية (نمط الترتيب الثاني)) a: للنمط TA1 b: TA2

١١) الاســـتنتاجات

من الحسابات التي اجريت والنتائج التي تم الحصول عليها عند تطبيق الخوارزميات المعتمدة في هذا البحث تبين ان قيمة تباين خواص البلورات الفائقة المختارة لها تاثير على نتائج الحسابات التي اجريت وعرضت، وان زيادة عدد الذرات في وحدة الخلية ادى الى زيادة عدد الانماط الاهتزازية وبالتالي يزداد التداخل بين هذه الانماط لذا فان عملية فصل النمط المحدد تكون اكثر تعقيداً. ان تغير نمط ترتيب الذرات في وحدة الخلية اثر بصورة واضحة على نتائج الحسابات التي اجريت وهذا ناتج عن اختلاف القوى والتفاعلات التي تربط الذرة مع جاراتها، وظهرت ظاهرة طية النطاق عند اختيار عدد ذرات مختلف وانماط ترتيب مختلفة لوحدة الخلية. أي تغير في سطح التوهين وسطح سرعة المجموعة لبلورة معينة يؤثر على تشكيلة صورة التمركز لتلك البلورة، فبزيادة عدد الذرات واختلاف نمط ترتيب هذه الذرات في وحدة الخلية سيكون هنالك تغير في سطوح التوهين وسطوح سرعة المجموعة وهذا التغير سوف ينعكس على الصور الفونونية. بسبب التماثل للبلورات المختارة فقد اجريت الحسابات في $\frac{1}{48}$ من منطقة برليون الكلية وهذا بدوره يقلل زمن التنفيذ الى $\frac{1}{48}$ من الوقت الاصلي.

المصادر

1) **M. Holt, (2000)**, “Ballistic phonon propagation in BCS superconductors”, http://www.lot-oriel.com.
2) **J. Geurts, A. Waag, (2000)**, “Raman scattering by phonons in wide gap II-VI compounds, heterostructures, and interfaces”, Eigereicht am.
3) **C. Andersson, (2001)**, “Lattice Dynamic simulations of NaCl”, Thesis Uppsala University.
4) **G P Srivastava, (1990)**, “The Physics of Phonons”, Adam Hilger Bristol, Philadelphia and New York.
5) **M. P. Marder, (2000)**, “Condensed Matter Physics”, JOHN WILY & SONS, INC. New York.
6) **Y. Tanaka, M. Narita, S. Tamura, (1998)**, “Phonon foucusing in superlattices”, J. Phys. :C 10, pp. 8787-8798.
7) **K. Imamura, Y. Tanaka, and S. Tamura, (2002)**, “Group velocities of phonons in superlattices”, Phys. Rev. B, 65, pp. 174301.
8) **B. Taylor, H. J. Maris, and C. Elbaum, (1969)**, “Phonon Focusing in Solids”, Phys. Rev. Letters, 23(8), pp. 416419.

9) **B. Taylor, H. J. Maris, and C. Elbaum, (1971)**, "Focusing of phonons in crystalline solids due to elastic anisotropy", Phys. Rev. B, 3(4), pp. 1462.
10) **G. A. Northrop and J. P. Wolfe, (1980)**, "Ballistic phonon imaging in germanium", Phys. Rev. B, 22(12), pp.6196.
11) **J. R. J. von Gutfeld and A. H. Nethercot, (1961)**, "Heat pulses in quartz and sapphire at low temperatures", Phys. Rev. Letters, 12(23), pp. 641.
12) **D. C. Hurly and J. P. Wolfe, (1985)**, "Phonon focusing in cubic crystals", Phys. Rev. B, 32(4), pp. 2568.
13) **J. P. Wolfe, (1980)**, "Ballistic heat pulses in crystals", Phys. Today, 33(12), pp. 44.
14) **S. Tamura and M. Yagi, (1994)**, "Finite-wavelength effect on the ballistic propagation of surface Acoustic waves", Phys. Rev. B 49(24), pp. 17 378.
15) **Al. A. Kolomenskii and A. A. Maznev, (1993)**, "Phonon-focusing effect with laser-generated ultrasonic surface waves", Phys. Rev. B 48(19), pp. 14 502.
16) **Shang-Fen Ren, Hanyou Chu, and Yia-Chung Chang, (1988)**, "Anisotropy of optical phonons and interface modes in GaAs-AlAs superlattices", Phys. Rev. B 37(15), pp. 8899.
17) **Takashi Aono, Yukihiro Tanaka, Shin-ichiro Tamura, (1999)**, "Surface phonons in one-dimensional periodic superlattices", Physica B 263-264, pp. 98-101.
18) **A. G. Every, (1981)**, "Ballistic Phonons and the shape of the ray surface in cubic crystals", Phys. Rev. B 24(6), pp. 3456.
19) **Hiroshi Obata, Yukihiro Tanaka, and Shin-ichiro Tamura, (2001)**, "Symmetry of phonon transmission and reflection images in (111)-oriented cubic crystals", Phys. Rev. B 64, pp. 115430-1.
20) **B. Yang and G. Chen, (2003)**, "Partially coherent phonon heat conduction in superlattices", Phys. Rev. B 67, pp. 195311-1.
21) **C. Colvard, T. A. Gant, and M. V. Klein, (1985)**, "Folded Acoustic and guantized optic phonons in (GaAl)as superlattice", Phys. Rev. B 31(4), pp. 2080.
22) **Y. Chung Chang, S. F. Ren, and H. Chu, (1991)**, "Phonons in semiconductio superlattices", Superlattices and Microstructures, 9(3), pp. 383.
23) **Hanyou Chu, Shang-Fen Ren, and Yia-Chung Chang, (1988)**, "Long-wavelength optical phonons in polar superlattices", Phys. Rev. B 37(18), pp. 10 746.
24) **M. V. Klein, (1986)**, "Phonons in semiconductor superlattices", IEEE Jornal of Quantum Electronice, QE22(9), pp. 1760.

25) **S. Tamura and Y. Tanaka, (1999)**, "Phonon group velocity and thermal conduction in superlattice", Phys. Rev. B 60(4), pp. 2627.
26) **M. Msall, W. Dietsche, K.-J. Friedland and Q.-Y. Tong, (2000)**, "Images of the phonon propagation across twist-bonded crystals", Phys. Rev. Letters, 85(3), pp. 598.
27) **J. P. Wolfe, (1998)**, "Image Phonon Acoustic Wave Propagation in Solid", Cambridge University, Australia.
28) **K. Imamura, Y. Tanaka, S. Tamura, (2002)**, "Anomalously enhanced group velocities of phonons in finite superlsttices", Phys. B 316-317, pp. 234-236.
29) **T. Aono and S. Tamura, (1998)**, "Surface and pseudosurface acoustic waves in superlattices", Phys. Rev. B 58(8), pp. 4838.
30) **H. Obata, Y. Tanaka, S. Tamura, (2002)**, "Images of phonons transmitted across twist-bonded (111)-oriented cubic crystals: symmetry doubling in the ballistic intensity", Physica B 316-317, pp. 122-124.
31) **M. M. Hussain, (1998)**, "Theoretical investigations in calculating dispersive phonon imaging in alkali halides crystals", Thesis, University of Mousl.
32) **M. Sepliarsky, (2000)**, "Atomic-level simulation of ferroelectricity in perovskite solid solutions", App. Phys. Letters, 76(26), pp. 3986.
33) **M. Sepliarsky, (2000)**, "Atomic-level simulation of ferroelectricity in perovskite solid solutions", App. Phys. Letters, 76(26), pp. 3986.
34) **B. G. Dick, (1963)**, "Shell and exchange charge models of interatomic interactions in solids", Proceedings of the International Conference held at Copenhagen, Denmark, pp. 159.
35) **R. K. Singh, (1982)**, "Many body interactions in binary ionic solids", Phys. Reports, 85(5), pp. 260.
36) **A. D. R. Woods, W. Cochran, B. N. Brockhouse, (1960)**, "Lattice Dynamics of alkali halide crystals", Phys. Rev. 119(3) pp. 980.
37) **M. J. P. Musgrave, (1970)**, "Crystal Acoustics", HOLDEN-DAY, London.
38) **N. W. Grimes and R. W. Grimes, (1998)**, "The shell model for alkali halide crystals: do the equations adequately describe their dieisctric behaviour?", J. Phys.: C 10, pp. 5433-5437.
39) **S. Tamura, T. Harada, (1985)**, "Focusing of large-wave-vector phonons in GaAs", Phys. Rev. B 32(8), pp. 5245.
40) **S. E. Hebboul and J. P. Wolfe, (1986)**, "Imaging of Large- K phonons in InSb", Phys. Rev. B 34(6), pp. 3948.
41) **G. A. Northrop, S. E. Hebboul, and J. P. Wolfe, (1985)**, "Lattice Dynamics from phonon imaging", Phys. Rev. 55(1), pp. 95.

42) **D. K. Fisler, J. D. Gale and R. T. Cygan, (2000)**, "A shell model for the simulation of rhombohedral carbonat minerals and their point defects", American Mineralogist, 85, pp. 217-224.

43) **C. R. A. Catlowt, K. M. Diller and M. J. Norgett, (1976)**, "Interionic potentials for alkali halides", J. Phys. C: Solid state phys., 10, pp. 1395.

44) **M. Tosi, (1966)**, "External vibrations in complex crystals", Solid State Physics 16, pp. 1.

45) **M. J. L. Sangster and R. M. Atwood, (1978)**, "Interionic potentials for alkali halides: II compeletly crystal independent specification of Born-Mayer potentials", J. Phys C 11, pp.1541.

46) **J. K. Jain, J. Shanker and D. P. Khandelwal, (1979)**, "Lattice dynamics and elasticity of stressed crystals", Phys. Rev. B 13, pp. 2692.

47) **J. E. Mayer and J. Chem, (1933)**, "Symmetry methods for lattice defect calculations", Phys. 1, pp. 270.

48) **W. Cocheran, (1971)**, "Interperetation of phonon dispersion curves", Crit. Rev. Solid state Sci., 2, pp. 1.

49) **Ian M. Torrens, (1972)**, "Interatomic Potentials", Academic Prees, New York.

٥٠) الجمال، (٢٠٠٠)، "فيزياء الحالة الصلبة"، الطبعة الثانية، دار الكتب للطباعة والنـشر- الموصل.

51) **C. Kittel, (1986)**, "Introduction to Solid State Physics", Sixth Edution, JOHN WILEY & SONS, Inc., New York.

52) **W. E. Bies, R. J. Radtke and H. Ehrenreich, (2003)**, "Phonon dispersion effects and the thermal conductivity reduction in GaAs/AlAs superlattice", arXiov: C 0005028 v1.

53) **B. Yang and G. Chen, (2001)**, "Lattice Dynamics study of anisotropic heat conduction in superlattices", www.electracool.com/NEXTGEN.

54) **J. P. Wolf amd M. R. Hauser, (1995)**, "Acoustic wave front imaging", Ann. Physik 4, pp. 99.

55) **M. Narita, Y. Tanaka and S. Tamura, (2002)**, "Ultrasound focusing images in superlattices", J. Phys.:C 14, pp. 1709-1722.

56) **M. Lax, (1974)**, "Symmetry Principles in Solid state and Molecular Physics", JOHN WILEY & SONS, Inc., New York.