

Investigating the Numerical Solution of the Boltzmann Transport Equation in Silicon in Momentum Space Using Computational Systems of Different Dimensions

Mahmood Majed Mahmood^{1*}, Mumtaz M. Hussien²

^{1,2}Department of Physics, College of Education for Pure Sciences, University of Mosul, Mosul, Iraq

E-mail: ^{1*}mahmood.majed.mahmood@gmail.com, ²momtaz_hussien@uomosul.edu.iq

(Received March 24, 2020; Accepted July 22, 2020; Available online December 01, 2020)

DOI: [10.33899/edusj.2020.126828.1057](https://doi.org/10.33899/edusj.2020.126828.1057), © 2020, College of Education for Pure Science, University of Mosul.

This is an open access article under the CC BY 4.0 license (<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>).

Abstract:

The Boltzmann transport equation is the basic equation for solving the transport of charge carrier (electrons, holes) problems in semiconductor devices. The distribution function has been obtained from the solution of this equation. The distribution function is important in calculating semiconductor properties, which can be used to calculate the average electron energy, the charge carrier concentration, and other properties. In this work the semi-classical Boltzmann transport equation in silicon was solved using analytical / numerical methods in steady state case in momentum space. The analytical solution is requires expressing the distribution function using Legendre polynomials expansion the first two terms of the expansion, by taking into account the effect of both acoustic elastic scattering and nonelastic scattering in addition to the effect of non-parabolic energy band structure. In order to obtain the numerical solution of Boltzmann transport equation the finite difference method is used. The differential equation is transformed to linear difference equation which can be represented by matrices. Numerical systems with different dimensions are designed to calculate the distribution function with the least possible time to maintain the accuracy of the solution for different applied electric field which represent the low and high field regions at temperatures $T = (77, 300)$ K. The obtained results showed good agreement with published data that used other calculation methods such as the Monte Carlo simulation method for all the system used in this work.

Keyword: Boltzmann equation in Silicon, numerical solution for Boltzmann transport equation, Legendre polynomial expansion method

استقصاء الحل العددي لمعادلة بولتزمان للانتقال في السليكون في فضاء الزخم باستخدام منظومات حسابية بأبعاد مختلفة.

محمود ماجد محمود^{1*}، ممتاز محمد صالح حسين²

^{1,2}قسم الفيزياء، كلية التربية للعلوم الصرفة، جامعة الموصل، الموصل، العراق

الملخص:

تعد معادلة الانتقال لبولتزمان المعادلة الأساسية المستخدمة لحل مسائل انتقال حامل الشحنة (الإلكترون، الفجوة) في نبائط أشباه الموصلات ويمكن الحصول على دالة التوزيع من خلال حل هذه المعادلة، تعد دالة التوزيع مهمة في حساب خصائص أشباه الموصلات، التي يمكن استخدامها في حساب متوسط طاقة الإلكترون وتركيز حامل الشحنة وغيرها من الخواص. في هذا البحث تم حل معادلة الانتقال شبه الكلاسيكية لبولتزمان في السليكون باستخدام طريقة تحليلية/عددية في حالة الاستقرار في فضاء الزخم. يتطلب الحل التحليلي التعبير عن دالة التوزيع باستخدام متعددات حدود لاجندر وذلك بأخذ الحدين الأول والثاني من امتدادات متعددات لاجندر مع الأخذ بنظر الاعتبار تأثير كل من الاستطارة السمعية المرنة و الاستطارة غير المرنة إضافة الى تأثير تركيب حزمة الطاقة غير المكافئ. وللحصول على الحل العددي لمعادلة بولتزمان نستخدم طريقة الفروق المحددة اذ يتم تحويل المعادلة التفاضلية إلى معادلة الفروق الخطية التي يمكن تمثيلها بالمصفوفات. تم تصميم عدة منظومات عددية بأبعاد مختلفة لحساب دالة التوزيع لكل منظومة، وتمت المقارنة بين هذه المنظومات من حيث الدقة ولمجالات كهربائية مسطحة مختلفة تمتد من منطقة المجالات الواطئة الى منطقة المجالات العالية وعند درجتي الحرارة $T = (77, 300) K$ ، وأظهرت النتائج التي تم الحصول عليها توافقاً جيد مع النتائج المنشورة التي استخدمت طرق أخرى مثل طريقة محاكاة مونت كارلو ولمعظم المنظومات المستخدمة في البحث.

الكلمات الدالة: معادلة بولتزمان في السليكون، الحل العددي لمعادلة الانتقال لبولتزمان، طريقة متعددات حدود لاجندر.

المقدمة

تظهر أهمية دراسة دالة التوزيع في تصميم نبائط أشباه الموصلات وتطبيقاتها الإلكترونية مثل ترانزستور تأثير المجال، اذ تقدم لنا دالة التوزيع احتمالية ايجاد حامل الشحنة (الإلكترونات والفجوات) ضمن متجه موجة معين في فضاء الزخم الإلكتروني [1]. تتوعت طرائق حل معادلة الانتقال لبولتزمان الى طرائق تحليلية اذ تم افتراض ان لدالة التوزيع توزيعاً اسياً او توزيعاً ماكسويلياً [2,3]. اذ الطريقة التحليلية ذات نتائج جيدة الا انها تكون مقتصرة على نماذج فيزيائية محددة ضمن مدى محدود للطاقة [1]. وكذلك لا يمكن استخدامها لبعض اشباه الموصلات مثل ارسنايد الكاليوم GaAs ولا يصح استخدامها لجميع اشباه الموصلات عند المجالات العالية [4]. تم التوجه نتيجة لذلك من قبل الباحثين لاستخدام طرائق عددية لحل معادلة الانتقال لبولتزمان وحساب دالة التوزيع مثل طريقة محاكاة مونت كارلو التي تعتمد على الوقت المستغرق لحساب دالة التوزيع [5,6,7]. تم تقديم طريقة تحليلية-عددية ومن اجل تقليل الوقت يتضمن الجانب التحليلي في هذه الطريقة تمثيل دالة التوزيع كدالة لاجندر التي تضم جزء متناظراً وأخر غير متناظر اما الجانب العددي فيتم استخدام معادلات الفروق لتحويل المعادلات الرياضية الى مصفوفة بعد التعويض عن قيم مختلفة ومدى محدد من الطاقة [8].

مع تطور طرائق تصنيع النبائط الإلكترونية وتصغير حجمها الى الابعاد النانوية تطلب وضع نموذج جديد يتناسب مع القوانين الفيزيائية في عالم النانو، من هذه النماذج هو نموذج الهيدروداينمك الموسع الذي يعتمد على ميكانيك الكم ومعادلة شرودينكر [9]. استخدم هذا النموذج في حساب دالة التوزيع للإلكترون وحساب معاملات الانتقال لحامل الشحنة في اسلاك نانوية من السليكون [10].

في هذا البحث تم تصميم برنامج حاسوبي لحساب دالة التوزيع للإلكترون في السليكون اعتمادا على حل معادلة الانتقال لبولتزمان شبه الكلاسيكية. إذ استطعنا حل معادلة الانتقال لبولتزمان شبه الكلاسيكية باستخدام طريقة تحليلية - عددية وحساب دالة التوزيع للإلكترون في السليكون لدرجتي حرارة K(77-300) مع الأخذ بنظر الاعتبار تأثير كل من الاستطارة السمعية المرنة والاستطارة غير المرنة بنوعيتها السمعية والبصرية وكذلك تأثير تركيب حزمة الطاقة ذات القطع غير المكافئ ولمدى طاقة eV(0-2)، وتمكننا أيضا من التحكم بأبعاد المصفوفة وتقليل الزمن المستغرق في حساب دالة التوزيع.

الجزء النظري:

معادلة الانتقال لبولتزمان شبه الكلاسيكية

تعد معادلة الانتقال لبولتزمان شبه الكلاسيكية معادلة تفاضلية - تكاملية تطبق عليها قوانين نيوتن وقوانين ميكانيك الكم [4]. إذ يمكن إعادة صياغة هذه المعادلة، مع الأخذ بنظر الاعتبار تأثير الاستطارة السمعية المرنة و الإستطارة غير المرنة وكذلك تأثير المجال الكهربائي وتركيب حزمة الطاقة ذات القطع غير المكافئ، من أجل حساب دالة التوزيع للإلكترون في السليكون. يمكن كتابة معادلة الانتقال القياسية عند حالة الاتزان في فضاء الزخم بالصيغة الآتية [4]:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v \cdot \nabla_r f + F \cdot \nabla_p f = \frac{\partial f}{\partial t} |_{coll} + s(r, p, t) \quad (1)$$

حيث تمثل $\nabla_p f$ و $\nabla_r f$ انحدار دالة التوزيع في فضاء الزخم والفضاء الحقيقي الدالة وتمثل $s(r, p, t)$ الجزء الخاص بعمليات التوليد وإعادة الاتحاد ويمثل الحد $\frac{\partial f}{\partial t} |_{coll}$ الجزء الخاص بالاستطارات المختلفة. أما الحد $\frac{\partial f}{\partial t}$ فإنه يمثل مقدار تغير دالة التوزيع مع الزمن، ويسمى الحد $(v \cdot \nabla_r f)$ بحد الانتشار وينشأ عندما يكون هناك اختلاف في تركيز حاملات الشحنة مع الموقع أو هناك انحدار حراري ويمثل الحد الأخير $(F \cdot \nabla_p f)$ حد القوة الذي يصف المجالات الخارجية المسلطة [11]. ويمكن إعادة صياغة المعادلة (1) في حالة الاستقرار وعند عدم وجود عمليات التوليد وإعادة الاتحاد بالشكل الآتي:

$$-\frac{e\vec{E}}{\hbar} \cdot \vec{\nabla}_k f(k) = \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{ac} + \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{iv} \quad (2)$$

إذ أن \vec{E} يمثل المجال الكهربائي الثابت الذي تم أخذه بالاتجاه البلوري [111] لتبسيط الحل إذ يمثل هذا الاتجاه من اتجاهات التناظر العالي، \vec{k} متجه موجة الإلكترون، $f(k)$ دالة التوزيع للإلكترون بدلالة متجه الموجة، $\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{ac}$ حد الإستطارة السمعية المرنة، $\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{iv}$ حد الإستطارة غير المرنة (أي الإستطارة بين منخفضات الطاقة المختلفة).

حل معادلة الانتقال شبه الكلاسيكية لبولتزمان:

يمكن حل معادلة الانتقال لبولتزمان المتجانسة بعدة طرائق منها تحليلية مثل طريقة تقريب زمن الاسترخاء واخرى عددية مثل طريقة مونتي كارلو. ولصعوبة الحل استخدمت طرائق اخرى ناتجة من جمع الطريقة التحليلية مع الطريقة العددية. تم في هذا البحث استخدام طريقة تحليلية لتمثيل دالة التوزيع بدالة متعددة حدود لاجندر وطريقة عددية متمثلة بمعادلات الفروق [8,12].

الحل التحليلي لمعادلة الانتقال لبولتزمان:

لتبسيط حل معادلة الانتقال لبولتزمان باستخدام متعددة حدود لاجندر وجعلها قابلة للحل هناك مجموعة من التقريبات التي يجب القيام بها. التقريب الاول هو تحويل سطوح الطاقة الثابتة البيضوية للسليكون الى سطوح كروية باستخدام تقريب هيرنك - فوجت وبتطبيق هذا التحويل يصبح من الممكن العمل في الفضاء النجمي لمتجه الزخم (الفضاء النجمي لمتجه موجة الالكترون k^* - space [5]. تعطى العلاقة بين متجه الموجة في الفضاء النجمي والفضاء الحقيقي بالمعادلة الاتية:

$$\vec{k}^* = \hat{\alpha}^{1/2} \vec{k} \quad (3)$$

اذ يمثل $\hat{\alpha}^{1/2}$ مصفوفة التحويل عندما تقع القيمة الدنيا لمنخفض الطاقة عند $k=0$ وتساوي:.

$$\hat{\alpha}^{1/2} = \begin{pmatrix} \left(\frac{m_o}{m_x}\right)^{1/2} & 0 & 0 \\ 0 & \left(\frac{m_o}{m_y}\right)^{1/2} & 0 \\ 0 & 0 & \left(\frac{m_o}{m_z}\right)^{1/2} \end{pmatrix} \quad (4)$$

تمثل m_o كتلة الالكترون السكونية و m_x ، m_y ، m_z هي مركبات الكتلة الفعالة للإلكترون في الاتجاهات x ، y ، z على التوالي. اذا كانت سطوح الطاقة ذات شكل بيضوي فان مصفوفة التحويل الى سطوح طاقة ذات شكل كروي لاي منخفض طاقة تعطى بالعلاقة الاتية:

تكون الصيغة الاتية:

$$\hat{\alpha}^{1/2} = \begin{pmatrix} \left(\frac{m_o}{m_t}\right)^{1/2} & 0 & 0 \\ 0 & \left(\frac{m_o}{m_t}\right)^{1/2} & 0 \\ 0 & 0 & \left(\frac{m_o}{m_l}\right)^{1/2} \end{pmatrix} \quad (5)$$

تمثل m_t و m_l الكتلة الفعالة للإلكترون في الاتجاهين الطولي والمستعرض على التوالي. يمكن حساب العلاقة بين متجه الموجة \vec{k} والطاقة ε باستخدام قانون كايين للتفريق [8,9].

$$\gamma(\varepsilon) = \varepsilon(1 + \alpha\varepsilon) = \frac{\hbar^2 k^{*2}}{2m^*} \quad (6)$$

إذ إن α هو معامل التحويل ووحدة قياسه (1/eV) يمكن حسابه من المعادلة.

$$\alpha = \frac{\left(1 - \frac{m^*}{m_0}\right)^2}{\varepsilon_g} \quad (7)$$

إذ تمثل ε_g فجوة الطاقة لشبه الموصل. ويتم تحويل المجال الكهربائي من الفضاء الحقيقي إلى الفضاء النجمي لمتجه موجة الإلكترون باستخدام مصفوفة التحويل:

$$\mathbf{E}^* = \hat{\alpha}^{1/2} \mathbf{E} \quad (8)$$

بعد إجراء التحويل إلى الفضاء النجمي لمتجه الموجة النجمي يمكن كتابة علاقة التفريق معادلة (6) حيث يهمل حد الانتشار في معادلة بولترمان مقارنة مع حد المجال المسلط مع الأخذ بنظر الاعتبار تأثير كل من الإستطارة السمعية المرنة والاستطارة غير المرنة في السليكون. يمكن تمثيل دالة التوزيع كمتعددة حدود لاجندربا عباره مجموعة كاملة ويمكن تمثيل دالة وبلاستفاده من خاصية التعامد بعد اكمال عمليات التقريب بالشكل الآتي [1]:

$$f(\vec{k}^*) = \sum_{l=0}^{\infty} f_l(k^*) P_l(\cos\theta) \quad (9)$$

بأخذ الحدين الأول والثاني من المعادلة (9) إذ يمثل الحد الأول الجزء المتماثل من دالة التوزيع ويمثل الحد الثاني الجزء غير المتماثل إذ يمكن تمثيل دالة موجة الإلكترون في الفضاء النجمي بالمعادلة الآتية:

$$f(\vec{k}^*) = f_0(\varepsilon) + k^* g(\varepsilon) (\cos\theta) \quad (10)$$

الزاوية θ الزاوية بين الإلكترون والمجال المسلط و $f_0(\varepsilon)$ معامل لجندر من المرتبة الصفرية الذي يمثل الجزء المتناظر من دالة التوزيع و $g(\varepsilon)$ معامل لجندر من المرتبة الأولى و $\cos\theta$ هو دالة لاجندر من المرتبة الأولى، بعد تعويض المعادلة (10) في المعادلة (2) نحصل على المعادلة الآتية:

$$-\frac{e\vec{E}}{\hbar} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{k}} [f_0(\varepsilon) + k^* g(\varepsilon) (\cos\theta)] = \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{ac} + \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{iv} \quad (11)$$

تمثل الجهة اليسرى من المعادلة (11) حد المجال الكهربائي والذي يمكن كتابته بالصيغة الآتية:

$$\left[\frac{\partial f(k^*)}{\partial t}\right]_{fld} = -\frac{e}{\hbar} \mathbf{E}^* \cdot \nabla_{\mathbf{k}^*} [f_0(\varepsilon) + k^* g(\varepsilon) (\cos\theta)] \quad (12)$$

يصبح حد المجال الكهربائي بعد مجموعة من العمليات الجبرية بالشكل الآتي:

$$\left[\frac{\partial f(\varepsilon)}{\partial t} \right]_{fld} = -\frac{e^2 E^{*2} \tau_0}{m_0} \left\{ \left[\frac{2}{3\gamma^{1/2}(\varepsilon)\gamma'^2(\varepsilon)} - \frac{4\gamma^{1/2}(\varepsilon)\gamma''(\varepsilon)}{3\gamma'^4(\varepsilon)} \right] \frac{\partial f_0(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} + \frac{2\gamma^{1/2}(\varepsilon)}{3\gamma'^3(\varepsilon)} \frac{\partial^2 f_0(\varepsilon)}{\partial \varepsilon^2} \right\} \quad (13)$$

المعامل τ_0 الذي تحدد قيمته من الجدول (3) حيث له قيمتان تتغير حسب قيمة الطاقة ودرجة الحرارة، أما $\gamma'(\varepsilon)$ و $\gamma''(\varepsilon)$ مشتقة الدالة $\gamma(\varepsilon)$ الأولى والثانية على التوالي ويمكن الحصول عليها من المعادلة (6)، تصبح الجهة اليمنى من المعادلة (11) والتي تمثل حدا الاستطارة اللذان يحسبان باستخدام قانون فيرمي الذهبي بالصيغة الآتية [1]:

$$\begin{aligned} \left[\frac{\partial f_0}{\partial t} \right]_{coll} &= \left[\frac{\partial f_0}{\partial t} \right]_{iv} + \left[\frac{\partial f_0}{\partial t} \right]_{ac} = \sum_{j=1}^{15} \frac{D_{iv}^2 (m_t^2 m_l)^{1/2}}{\sqrt{2\pi} \hbar^3 \rho \omega_j} \left(e^{\frac{\hbar \omega_j}{k\beta T}} - 1 \right)^{-1} \\ &\times \left\{ \gamma^{1/2}(\varepsilon + \hbar \omega_j) \gamma'(\varepsilon + \hbar \omega_j) \times \left[e^{\frac{\hbar \omega_j}{k\beta T}} \times f_0(\varepsilon + \hbar \omega_j) - f_0(\varepsilon) \right] + \gamma^{1/2}(\varepsilon - \hbar \omega_j) \gamma'(\varepsilon - \hbar \omega_j) \times \right. \\ &\left. \left[f_0(\varepsilon - \hbar \omega_j) - e^{\frac{\hbar \omega_j}{k\beta T}} f_0(\varepsilon) \right] \right\} + \frac{4\sqrt{2} D_{ac}^2 m_t^2 m_l^{1/2}}{\pi \hbar^4 \rho} \gamma^{1/2}(\varepsilon) \gamma'^2(\varepsilon) \times \left\{ \left[\frac{\gamma(\varepsilon) k\beta T}{2\gamma'(\varepsilon)} \right] \frac{\partial^2 f_0(\varepsilon)}{\partial \varepsilon^2} + \left[\frac{\gamma(\varepsilon)}{2\gamma'(\varepsilon)} + k\beta T \times \right. \right. \\ &\left. \left. \left(\frac{1 + \gamma(\varepsilon)\gamma''(\varepsilon)}{\gamma'^2(\varepsilon)} \right) \right] \times \frac{\partial f_0(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} + \left[\left(1 + \frac{\gamma(\varepsilon)\gamma''(\varepsilon)}{\gamma'^2(\varepsilon)} \right) \right] \times f_0(\varepsilon) \right\} \quad (14) \end{aligned}$$

تمثل الثوابت D_{iv} ثوابت الارتباط و D_{ac} جهد التشويه الصوتي الإلكتروني و ω_j تردد الفونون، و \hbar ثابت بلانك مقسوم على 2π و $k\beta$ ثابت بولتزمان و ρ الكثافة وتصبح المعادلة النهائية عند مساواة المعادلتين (14,13) بالشكل الآتي:

$$\begin{aligned} -\frac{e^2 \tau_0 E^{*2}}{m_0} \left\{ \left(\frac{2}{3\gamma^{1/2}(\varepsilon)\gamma'^2(\varepsilon)} - \frac{4\gamma^{1/2}(\varepsilon)\gamma''(\varepsilon)}{3\gamma'^4(\varepsilon)} \right) \frac{\partial f_0(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} \right. \\ \left. + \frac{2\gamma^{1/2}(\varepsilon)}{3\gamma'^3(\varepsilon)} \frac{\partial^2 f_0(\varepsilon)}{\partial \varepsilon^2} \right\} = \sum_{j=1}^{15} \frac{D_{iv}^2 (m_t^2 m_l)^{1/2}}{\sqrt{2\pi} \hbar^3 \rho \omega_j} \left(e^{\frac{\hbar \omega_j}{k\beta T}} - 1 \right)^{-1} \times \\ \left\{ \gamma^{1/2}(\varepsilon + \hbar \omega_j) \gamma'(\varepsilon + \hbar \omega_j) \left[e^{\frac{\hbar \omega_j}{k\beta T}} f_0(\varepsilon + \hbar \omega_j) - f_0(\varepsilon) \right] \right. \\ \left. + \gamma^{1/2}(\varepsilon - \hbar \omega_j) \gamma'(\varepsilon - \hbar \omega_j) \times \left[f_0(\varepsilon - \hbar \omega_j) - e^{\frac{\hbar \omega_j}{k\beta T}} f_0(\varepsilon) \right] \right\} \\ + \frac{4\sqrt{2} D_{ac}^2 m_t^2 m_l^{1/2}}{\pi \hbar^4 \rho} \gamma^{1/2}(\varepsilon) \gamma'^2(\varepsilon) \left\{ \left[\frac{\gamma(\varepsilon) k\beta T}{2\gamma'(\varepsilon)} \right] \frac{\partial^2 f_0(\varepsilon)}{\partial \varepsilon^2} + \left[\frac{\gamma(\varepsilon)}{2\gamma'(\varepsilon)} + k\beta T \left(1 + \frac{\gamma(\varepsilon)\gamma''(\varepsilon)}{\gamma'^2(\varepsilon)} \right) \right] \frac{\partial f_0(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} \right. \\ \left. + \left[\left(1 + \frac{\gamma(\varepsilon)\gamma''(\varepsilon)}{\gamma'^2(\varepsilon)} \right) \right] f_0(\varepsilon) \right\} \quad (15) \end{aligned}$$

تمثل المعادلة (15) الجزء المتناظر من دالة التوزيع وهي معادلة تفاضلية من الرتبة الثانية [12].

الحل العددي لمعادلة الانتقال لبولتزمان:

تمثل المعادلة (15) معادلة تفاضلية/ فروق finite difference equation تمثل الجزء المتناظر من دالة التوزيع من الصعوبة حلها بالطرائق التحليلية لوحدها ومن اجل التغلب على هذه الصعوبات تم حل هذه المعادلة عدديا وذلك بتحويلها الى معادلة فروق اذ يمكن حلها باستخدام الطرق التكرارية او بطريقة الحذف لكاوس [13]. اذ يتم تقسيم الحل الى منظومة من مجموعة من النقاط ومن ثم حلها باستخدام طرائق المصفوفات matrix methods. يمكن تبسط المعادلة (15) باستخدام معادلات الفروق:

$$\frac{\partial f_0(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} = \frac{f_{i+1}-f_{i-1}}{2\Delta\varepsilon} \quad (16)$$

$$\frac{\partial^2 f_0(\varepsilon)}{\partial \varepsilon^2} = \frac{f_{i+1}-2f_i+f_{i-1}}{(\Delta\varepsilon)^2} \quad (17)$$

هنا $\Delta\varepsilon$ مقدار الزيادة في الطاقة اما f_i فهي قيم $f_0(\varepsilon)$ عند العقد، تم عزل الحدود المتشابهة في المعادلة (15) وتبسيطها من خلال مجموعة من العمليات الجبرية:

$$A_{i+1}f_{i+1} + A_{i-1}f_{i-1} + A_i f_i + A_{i+n_j}f_{i+n_j} + A_{i-n_j}f_{i-n_j} = 0 \quad (18)$$

تمثل عناصر المصفوفة A_i ، A_{i+1} ، A_{i-1} كميات متجهة تقع على القطر الرئيس و فوق وتحت القطر الرئيسي للمصفوفة A على التوالي ويمكن تمثيلها بالمعادلات الاتية:

$$A_{i+1} = \frac{e^2\tau_0 E^{*2}}{m_0} \left(\frac{2}{3\gamma_i^{1/2}\gamma_i'^2} - \frac{4\gamma_i^{1/2}\gamma_i''}{3\gamma_i'^4} \right) \left(\frac{1}{2\Delta\varepsilon} \right) + \frac{e^2\tau_0 E^{*2}}{m_0} \left(\frac{2\gamma_i^{1/2}}{3\gamma_i'^3} \right) \left(\frac{1}{(\Delta\varepsilon)^2} \right) + \frac{4\sqrt{2}D_{ac}^2 m_t^2 m_l^{1/2}}{\pi\hbar^4 \rho} \gamma_i^{1/2} \gamma_i'^2 \left[\frac{\gamma_i k_{\beta T}}{2\gamma_i'} \right] \left(\frac{1}{(\Delta\varepsilon)^2} \right) + \frac{4\sqrt{2}D_{ac}^2 m_t^2 m_l^{1/2}}{\pi\hbar^4 \rho} \gamma_i^{1/2} \gamma_i'^2 \left[\frac{\gamma_i}{2\gamma_i'} + k_{\beta T} \left(1 + \frac{\gamma_i \gamma_i''}{\gamma_i'^2} \right) \right] \left(\frac{1}{2\Delta\varepsilon} \right) \quad (19)$$

$$A_{i-1} = -\frac{e^2\tau_0 E^{*2}}{m_0} \left(\frac{2}{3\gamma_i^{1/2}\gamma_i'^2} - \frac{4\gamma_i^{1/2}\gamma_i''}{3\gamma_i'^4} \right) \left(\frac{1}{2\Delta\varepsilon} \right) + \frac{e^2\tau_0 E^{*2}}{m_0} \left(\frac{2\gamma_i^{1/2}}{3\gamma_i'^3} \right) \left(\frac{1}{(\Delta\varepsilon)^2} \right) + \frac{4\sqrt{2}D_{ac}^2 m_t^2 m_l^{1/2}}{\pi\hbar^4 \rho} \gamma_i^{1/2} \gamma_i'^2 \left[\frac{\gamma_i k_{\beta T}}{2\gamma_i'} \right] \left(\frac{1}{(\Delta\varepsilon)^2} \right) - \frac{4\sqrt{2}D_{ac}^2 m_t^2 m_l^{1/2}}{\pi\hbar^4 \rho} \gamma_i^{1/2} \gamma_i'^2 \left[\frac{\gamma_i}{2\gamma_i'} + k_{\beta T} \left(1 + \frac{\gamma_i \gamma_i''}{\gamma_i'^2} \right) \right] \left(\frac{1}{2\Delta\varepsilon} \right) \quad (20)$$

$$A_i = -2 \frac{e^2\tau_0 E^{*2}}{m_0} \left(\frac{2\gamma_i^{1/2}}{3\gamma_i'^3} \right) \left(\frac{1}{(\Delta\varepsilon)^2} \right) - 2 \frac{4\sqrt{2}D_{ac}^2 m_t^2 m_l^{1/2}}{\pi\hbar^4 \rho} \gamma_i^{1/2} \gamma_i'^2 \left[\frac{\gamma_i k_{\beta T}}{2\gamma_i'} \right] \left(\frac{1}{(\Delta\varepsilon)^2} \right) + \frac{4\sqrt{2}D_{ac}^2 m_t^2 m_l^{1/2}}{\pi\hbar^4 \rho} \gamma_i^{1/2} \gamma_i'^2 \left(1 + \frac{\gamma_i \gamma_i''}{\gamma_i'^2} \right) - \sum_{j=1}^{15} \frac{D_{iv}^2 (m_t^2 m_l)^{1/2}}{\sqrt{2}\pi\hbar^3 \rho \omega_j} \left(e^{\frac{\hbar\omega_j}{k_{\beta T}}} - 1 \right)^{-1} \left\{ \gamma_{i+n_j}^{1/2} \gamma_{i+n_j}' + \gamma_{i-n_j}^{1/2} \gamma_{i-n_j}' e^{\frac{\hbar\omega_j}{k_{\beta T}}} \right\} \quad (21)$$

اما العناصر A_{i-nj} و A_{i+nj} فإنها تمثل حدود الاستطارة العليا Upper Scattering وحدود الاستطارة الدنيا Lower Scattering على التوالي وقد سميت كذلك لانها تقع اعلى القطر الرئيسي للمصفوفة A او اسفل القطر الرئيسي للمصفوفة A وتحتوي حدود الاستطارة وهي كميات متجه تقع على اقطار اعلى وادنى من الاقطار الرئيسية الثلاثة المصفوفة A ، ويكون عدد هذه الحدود هو 15 لكل طاقة وبسبب خاصية التناظر فان الحدود المتساوية تجمع قيمها مع بعضها فيصبح عددها 6 لكل استطارة كما مبين في المعادلات الاتية:

$$A_{i+nj} = \sum_{j=1}^{15} \frac{D_{iv}^2 (m_t^2 m_l)^{1/2}}{\sqrt{2\pi\hbar^3 \rho \omega_j}} \left(e^{\frac{\hbar\omega_j}{k\beta T}} - 1 \right)^{-1} \left\{ \gamma_{i+nj}^{1/2} \gamma'_{i+nj} e^{\frac{\hbar\omega_j}{k\beta T}} \right\} \quad (22)$$

$$A_{i-nj} = \sum_{j=1}^{15} \frac{D_{iv}^2 (m_t^2 m_l)^{1/2}}{\sqrt{2\pi\hbar^3 \rho \omega_j}} \left(e^{\frac{\hbar\omega_j}{k\beta T}} - 1 \right)^{-1} \left\{ \gamma_{i-nj}^{1/2} \gamma'_{i-nj} \right\} \quad (23)$$

يتم تمثيل المعادلة (18) بدلالة مصفوفات مربعة $n \times n$ اذ يعتمد حجم المصفوفات على اختيار قيمة مقدار التغير في الطاقة $\Delta\varepsilon$ وضمن المدى $(0 - 2)eV$ فعندما تكون $\Delta\varepsilon = 0.001$ ستكون $n = 2000$ كما مبين في المعادلة الاتية:

$$n = \frac{2 eV}{\Delta\varepsilon} \quad (24)$$

وتم تحدد مواقع الحدود الستة للاستطارة للاعلى وللأسفل من اقطار المصفوفة الرئيسية من طاقة الفونون $\hbar\omega_j$ حسب مقدار n_j وفق المعادلة الاتية:

$$n_j = \frac{\hbar\omega_j}{\Delta\varepsilon} \quad (25)$$

تعتمد طاقة الفونون على مقدار التغير في الطاقة $\Delta\varepsilon$ الذي يؤدي الى تغيير في ابعاد المصفوفة A وكذلك الى تغيير في مواقع حدود الاستطارة وبالتالي يؤدي الى تغيير في دقة الحسابات اضافة الى تغير سرعة تنفيذ هذه الحسابات مع تغيير ابعاد المصفوفة A . اذا كان مقدار التغيير $\Delta\varepsilon = 0.001 eV$ فان حدود الاستطارة ستكون في المواقع 61, 58, 47, 19, 18, 12 من المصفوفة المربعة. بعد استخدام الشرط الحدودي $f(\infty) = 0$ وتقسيم مناطق الطاقة الى 2000 نقطة للمنظومة اذ يمكن تمثل كل نقطة معادلة فروق مشابه للمعادلة (15) وحلها باستخدام المعادلة $Af = b$ ، والمعادلة $Af = b$ بعد ترتيب الحدود واعادة تجميعها في المعادلة (18) كما موضح في الشكل (1).

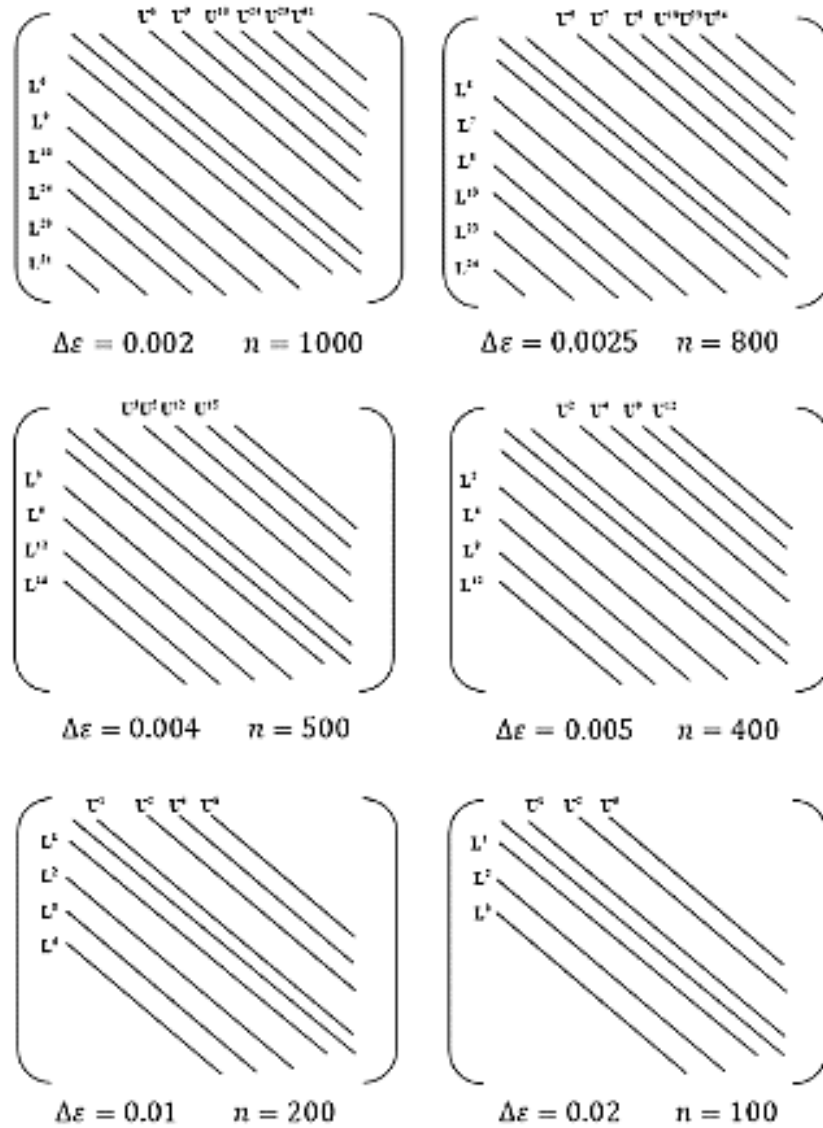
$$\begin{pmatrix}
 & & & & & \\
 & & & & & \\
 & & & & & \\
 & & & & & \\
 & & & & & \\
 & & & & &
 \end{pmatrix}
 \begin{pmatrix}
 f_1 \\
 f_2 \\
 f_3 \\
 \vdots \\
 f_n
 \end{pmatrix}
 =
 \begin{pmatrix}
 b_1 \\
 b_2 \\
 b_3 \\
 \vdots \\
 b_n
 \end{pmatrix}$$

A **f** = **b**

$\Delta \varepsilon = 0.001$
 $n = 2000$

الشكل (1) : المعادلة $Af = b$ بدلالة مصفوفة مربعة $n \times n$ للمنظومة 2000×2000 والتي تضم معاملات متعددة بالنسبة لدالة التوزيع عندما يكون مقدار الزيادة في الطاقة $\Delta \varepsilon = 0.001 \text{ eV}$. موضحة فيها مواقع عناصر المصفوفة القطرية وعناصر المصفوفة فوق القطرية وتحت القطرية بالإضافة الى مواقع الاستطارة الستة العليا والدنيا.

إذا كان مقدار التغيير في الطاقة $\Delta \varepsilon = 0.002 \text{ eV}$ فان مواقع حدود الاستطارة العليا والدنيا ستختلف أو ستقترب من القطر الرئيسي في المصفوفة وتصبح الحدود 6 لكل استطارة 6,9,10,24,29,31 وعند الاستمرار بزيادة $\Delta \varepsilon$ فانه يمكن لبعض حدود الاستطارة ان تشغل نفس الموقع وعليه يمكن جمع قيم عناصر لحدين ونضعهم في الموقع المحدد كما هي الحالة عندما تكون $\Delta \varepsilon = 0.004 \text{ eV}$ اذ تكون مواقع حدود الاستطارة 3,5,12,15 ويمكن ملاحظة أن مواقع حدود الاستطارة أصبحت أربعة مواقع والسبب اندماج عناصر الحد الثاني والثالث مع بعضهم واندماج عناصر الحد الخامس والسادس والشكل (2) يوضح مواقع حدود الاستطارة لقيم مختلفة للتغيير في الطاقة $\Delta \varepsilon$.



الشكل (2) : مواقع حدود الاستطارة في المصفوفة المربعة $n \times n$ تعتمد على مقدار التغيير في الطاقة $\Delta\varepsilon$ في المصفوفة A للمنظومات لقيم مختلفة للتغيير في الطاقة $\Delta\varepsilon$ في المصفوفة A للمنظومات $n = 1000, 800, 500, 400, 200, 100$ على التوالي.

عند حل المصفوفة $Af = b$ عدديا باستخدام طريقة الحذف لكاوس وحساب معامل لاجندر الاول يمكن حساب دالة توزيع الالكترونات $f_0(\varepsilon)$ وضربها بكثافة الحالات $g(\varepsilon)$ ومن ثم حساب معدل طاقة الالكترونات.

$$g(\varepsilon) = \frac{\sqrt{2}}{\pi^2 \hbar^3} (m_x m_y m_z)^{1/2} \gamma^{1/2}(\varepsilon) \gamma'(\varepsilon) \quad (26)$$

يتم معايرة الدالة باستخدام شرط العيارية الاتي:

$$I = \int_0^\infty f_0(\varepsilon) g(\varepsilon) d\varepsilon \quad (27)$$

يبين الجدول (1) قيم مختلفة لعدد عناصر المصفوفة ولمدى متغير من الطاقة $\Delta\varepsilon$ وقيم مواقع حدود الاستطارة العليا والدنيا

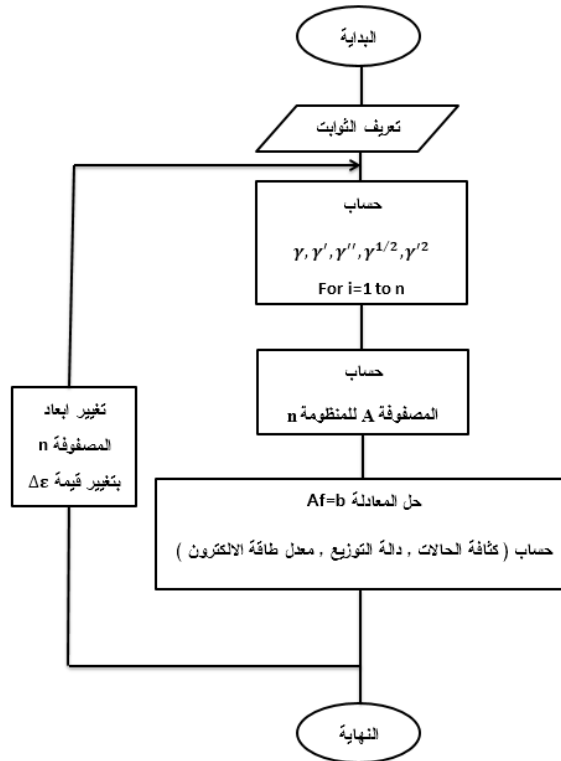
n_j التي تعتمد على طاقة الفونون $\hbar\omega_j$ في المصفوفة. ومن المعادلة نحسب معدل طاقة الالكترونات:

$$\langle \varepsilon \rangle = \int_0^{\infty} g(\varepsilon) \varepsilon f_0(\varepsilon) d\varepsilon \quad (28)$$

تبين الخوارزمية (المخطط الانسيابي) المستخدمة في البحث طريقة حساب كل من كثافة الحالات ودالة التوزيع ومعدل طاقة الالكترون كما موضح في الشكل (3)

جدول (1): مواقع حدود الاستطارة n_j في المصفوفة المربعة A التي تعتمد على طاقة الفونون ولمدى متغير من الطاقة $\Delta\varepsilon$.

| n | $\Delta\varepsilon$ | n_j |
|------|---------------------|-------------------|
| 100 | 0.02 | 1,2,3 |
| 200 | 0.01 | 1,2,5,6 |
| 400 | 0.005 | 2,4,9,12 |
| 500 | 0.004 | 3,5,12,15 |
| 1000 | 0.002 | 6,9,10,24,29,31 |
| 2000 | 0.001 | 12,18,19,47,58,61 |



الشكل (3) مخطط الخوارزمية المستخدمة في البحث

النتائج والمناقشة:

تم في هذا البحث حل المعادلة (18) عددياً باستخدام طريقة المصفوفة وتطبيق المعادلة $Af = b$ وبتعويض قيم الثوابت الموضحة في جدول (2) وجدول (3) لست منظومات مختلفة تعتمد على مقدار التغير بالطاقة ΔE . كما هو مبين في الجدول (1)، تم اعداد برنامج بلغة MATLAB لحل معادلة بولترمان شبه الكلاسيكية في السيلكون اذ يعتمد البرنامج على اختيار حجم المصفوفة A لان الزيادة في حجم المصفوفة A يؤدي الى زيادة في حجم الذاكرة وبالتالي زيادة وقت تنفيذ البرامج والحصول على الدقة في الحسابات. تم في هذا العمل استقصاء الحجم الامثل للمصفوفة التي تعطي دقة في النتائج وتتوافق مع البحوث المنشورة. اذ تم اعتماد عدة قيم لشدة المجال الكهربائي المسلط ولمدى يمتد من المجالات الواطئة الى المجالات العالية $E = (10,20,50,100) \text{ kV/cm}$ وعند درجتي الحرارة $T = (77,300) \text{ K}$ ، اذ تم حساب دالة التوزيع للإلكترون كدالة للطاقة $f_o(\varepsilon)$ وتم معايرة دالة التوزيع بعد ضربها بكثافة الحالات $g(\varepsilon)$. يمكن توضيح آلية حساب دالة التوزيع لبولترمان في الشكل (3) الذي يمثل المخطط الانسيابي لحساب خواص المنظومات المستخدمة في البحث.

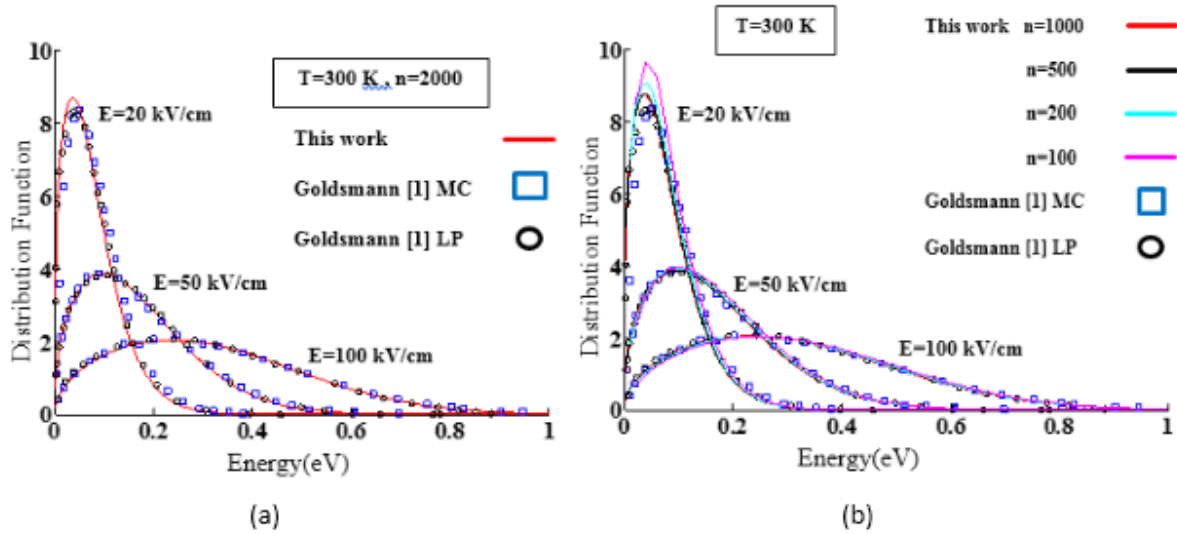
جدول (2): المعاملات الفيزيائية للسليكون [4,5,12].

| Parameter | Symbol | Value | Unit |
|--|----------------------------------|-------------------------------|--------------------|
| Mass density. | ρ | 2329 | Kg/m ³ |
| Non-parabolicity parameter. | α | 0.5 | eV ⁻¹ |
| Electron acoustic deformation Potential. | D_{ac} | 9.5 | eV |
| Free electron mass | m_0 | $9.1093897 \times 10^{-31}$ | Kg |
| Longitudinal effective mass | m_l | $0.98m_0$ | Kg |
| Transverse effective mass | m_t | $0.19m_0$ | Kg |
| Reduced Planck constant | \hbar | $6.582122025 \times 10^{-16}$ | eV.s |
| Boltzmann constant | k_B | 8.61573×10^{-5} | eV.k ⁻¹ |
| $f_1(TA)$: equivalent energy, coupling constant | $\hbar\omega_{f_1}$ D_{f_1} | 0.019 0.3×10^{10} | eV eV/m |
| $f_2(LA)$: equivalent energy, coupling constant | $\hbar\omega_{f_2}$ D_{f_2} | 0.047 2×10^{10} | eV eV/m |
| $f_3(TO)$: equivalent energy, coupling constant | $\hbar\omega_{f_3}$ D_{f_3} | 0.058 2×10^{10} | eV eV/m |
| $g_1(TA)$: equivalent energy, coupling constant | $\hbar\omega_{g_1}$ D_{g_1} | 0.012 0.5×10^{10} | eV eV/m |
| $g_2(LA)$: equivalent energy, coupling constant | $\hbar\omega_{g_2}$ D_{g_2} | 0.018 0.8×10^{10} | eV eV/m |
| $g_3(LO)$: equivalent energy, coupling constant | $\hbar\omega_{g_3}$ D_{g_3} | 0.061 11×10^{10} | eV eV/m |

جدول (3) قيم المعامل τ_o مع مديات الطاقة ودرجة الحرارة $T = 77, 300 \text{ K}$ [12].

| Lattice Temperature K | Electron energy eV | $\tau_o(eV^{1/2}s)$ |
|-----------------------|-------------------------|--------------------------|
| 300 | 4.07×10^{-14} | $0 < \varepsilon < 0.06$ |
| | 2.03×10^{-14} | $0.06 < \varepsilon < 2$ |
| 77 | 19.00×10^{-14} | $0 < \varepsilon < 0.03$ |
| | 3.43×10^{-14} | $0.03 < \varepsilon < 2$ |

يبين الشكل (4) دالة التوزيع كدالة للطاقة عند قيم متعددة للمجال الكهربائي اذ ان لكل قيمة للمجال الكهربائي قيمة عظمى لدالة التوزيع عند طاقة معينة واعلى قيمة لدالة التوزيع كانت عند المجالات الواطئة $10kV/cm$ عند الطاقة $0.024eV$ لدرجة الحرارة $T = 300 K$ وعند الطاقة $0.031eV$ لدرجة الحرارة $T = 77 K$ ، واعلى قيمة لدالة التوزيع عند درجة الحرارة $T = 77 K$ اعلى من قيمة الذروة للتوزيع عند درجة الحرارة $T = 300 K$. يمكن ملاحظة عند زيادة مقدار المجال الكهربائي فان مقدار اعظم قيمة لدالة التوزيع تنخفض وتتسع مع زيادة الطاقة وذلك بسبب زيادة القوة المعجلة للالكترونات بسبب زيادة المجال المسط، اي ان التوزيع يزاح باتجاه الطاقات الاعلى وقمة دالة التوزيع تزاح قليلا باتجاه الطاقات العالية،

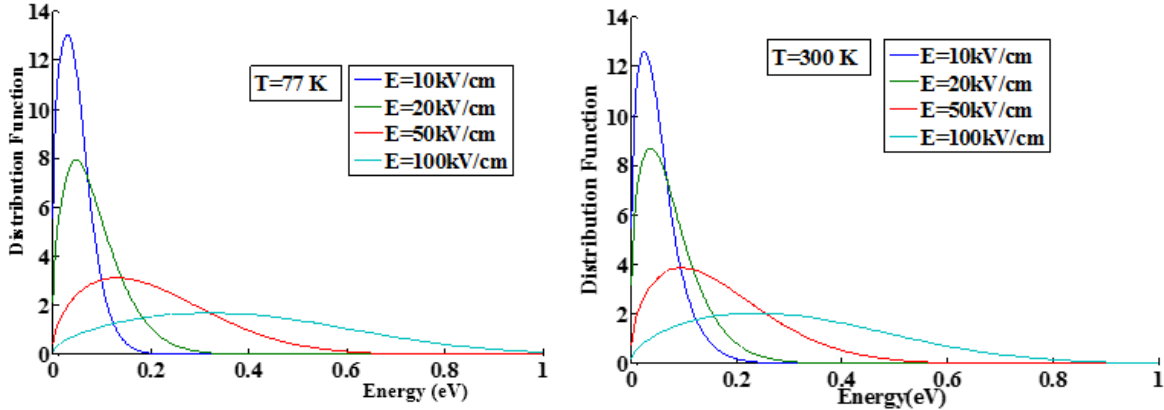


الشكل (4): العلاقة بين الطاقة و دالة توزيع الالكترون في السليكون للمنظومة 2000×2000 ولمدى من المجالات الكهربائية وعند درجتي الحرارة $77K$ و $300K$.

وتكون على مدى واسع من قيم الطاقة وهذا يعني ان طاقة الالكترونات ستكون ضمن مدى اوسع من قيم الطاقة. يمكن ملاحظة ان ذروة دالة التوزيع عند درجة الحرارة $T = 300 K$ تكون عند قيم اعلى مما هي عليه عند درجة الحرارة $T = 77 K$ في حين تزاح دالة التوزيع عند درجة الحرارة $77 K$ اكثر من ازاحة دالة التوزيع عند درجة الحرارة $T = 300 K$ باتجاه الطاقات العالية ولجميع المجالات الكهربائية العالية.

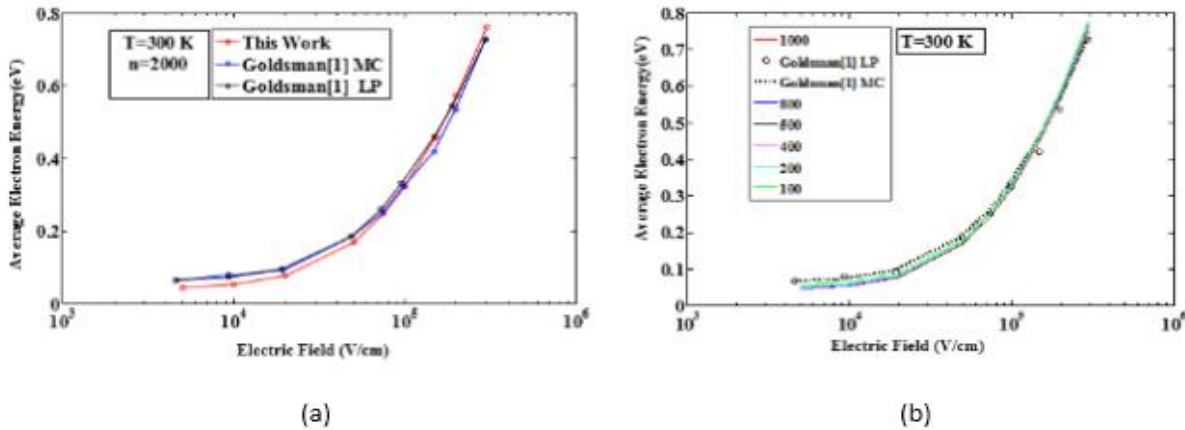
من مقارنة نتائج المنظومات المستخدمة في هذا البحث مع نتائج البحوث المنشورة التي تم حساب دالة التوزيع بطريقتي مونتني كارلو وحسابات معتمدة على توسيع متعددات حدود لاجندر وحسابات باستخدام طرائق تكرارية ولمجالات كهربائية بمديات $20kV/cm$, $50kV/cm$ و $100kV/cm$ [1]. اذ يمكن الحصول على نتائج متطابقة مع النتائج المنشورة كلما زاد عدد نقاط المنظومة كما هو الحال في المنظومة المربعة 2000×2000 عندما يكون مقدار التغيير في الطاقة $\Delta \varepsilon = 0.001$. الشكل (5a). اما في المنظومات التي يقل فيها عدد النقاط مثل فان ذروة دالة التوزيع تكون مزاحة عن النتائج المنشورة كما هو الحال في المنظومات 100×100 و 200×200 . لاحظ الشكل (5b).

تم حساب معدل طاقة الإلكترون كدالة للمجال الكهربائي ولكافة المنظومات المستخدمة عند درجة حرارة $300K$ اذ بينت النتائج تطابقا ولكافة المنظومات في منطقة المجالات العالية وانحراف قليل عند المجالات الكهربائية الواطئة كما مبين في الشكل (6).



الشكل (5): العلاقة بين الطاقة ودالة توزيع الطاقة للإلكترون في السليكون ومقارنتها مع نتائج البحوث عند درجة حرارة $300K$ [1].

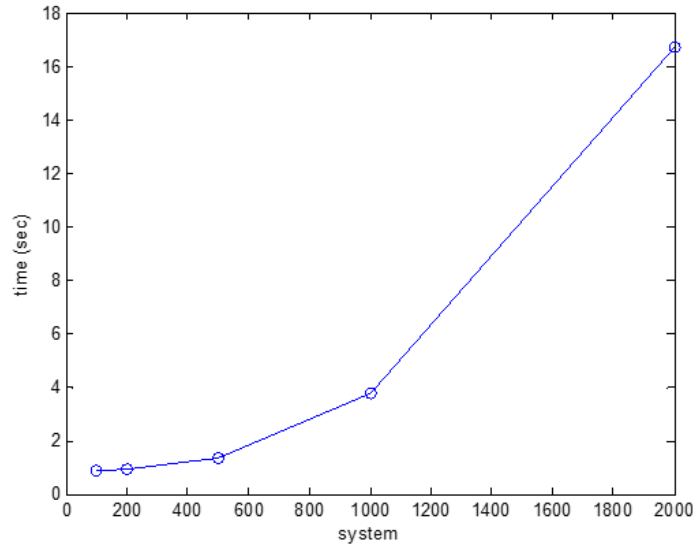
(a): المنظومة المربعة 2000×2000 عندما يكون مقدار التغير في الطاقة $\Delta\varepsilon=0.001$.
 (b): المنظومات المربعة (1000×1000 ، 500×500 ، 200×200 ، 100×100) عندما يكون مقدار التغير في الطاقة $(\Delta\varepsilon = 0.02, 0.01, 0.004, 0.002)$ على التوالي.



الشكل (6): معدل الطاقة للإلكترون كدالة لشدة المجال الكهربائي في السليكون ومقارنتها مع نتائج البحوث عند درجة حرارة $300K$ [1].

(a): المنظومة المربعة 2000×2000 عندما يكون مقدار التغير في الطاقة $\Delta\varepsilon=0.001$.
 (b): المنظومات المربعة (1000×1000 ، 500×500 ، 200×200 ، 100×100) عندما يكون مقدار التغير في الطاقة $(\Delta\varepsilon = 0.02, 0.01, 0.004, 0.002)$ على التوالي.

تم تقييم أداء البرنامج الذي أعد والحسابات للمنظومات المستخدمة عن طريق حساب الزمن المستغرق لتنفيذ حسابات دالة التوزيع مع زيادة أبعاد المنظومة كما هو في الشكل (7) اذ إن الزمن المستغرق في حساب دالة التوزيع يزداد بشكل اسي وخاصة عند المنظومة 2000×2000 التي استغرقت 16 ثانية تقريبا للحساب في حين ينخفض الوقت للمنظومة 1000×1000 الى 4 ثانية تقريبا.



الشكل (7): أبعاد المنظومة $n = 100, 200, 500, 1000, \text{ and } 2000$ على التوالي كدالة للزمن المستغرق في حساب دالة التوزيع.

الاستنتاجات:

تم تصميم عدة منظومات لاختيار الحجم المناسب للمصفوفة في حل معادلة بولتزمان شبه الكلاسيكية في السيلكون والحصول على الدقة المناسبة. اذ بينت النتائج ان الاختيار الامثل لحجم المصفوفة يكون بين $n = 500$ الى $n = 1000$ اذ تعطي نتائج ذات توافق مع النتائج المنشورة عند المجالات العالية والواطئة. اما عند قيم المجالات العالية فلا يشكل حجم المصفوفة تغيرات كبيرة في النتائج التي يتم الحصول عليها. تتعد النتائج عن الدقة لقيم $n < 500$ للمجالات الكريانية التي تقل عن $10kV/cm$. وتتأثر معدل طاقة الالكترونات كثيرا بزيادة المجال المسلط وتتوافق نتائج البحث للمنظومات المختلفة مع النتائج المنشورة، تتأثر دالة التوزيع في المنظومات المختلفة المستخدمة في البحث بدرجة كبيرة بتغير شدة المجال المسلط وتتأثر بدرجة اقل بتغيرات درجة الحرارة، الوقت المستغرق لتنفيذ البرنامج يزداد بشكل ملحوظ عند تجاوز $n > 1000$ في حين لانتاثر دقة الحسابات كثيرا بهذه الزيادة.

شكر و تقدير

يتقدم الباحثان بالشكر والتقدير لعمادة كلية التربية للعلوم الصرفة وقسم الفيزياء على دعم البحث وكذلك جزيل الشكر والعرفان للدكتور على عباس من قسم الفيزياء كلية التربية للعلوم الصرفة جامعة الموصل و الدكتور موفق خليل احمد من قسم الفيزياء كلية التربية للعلوم الصرفة جامعة صلاح الدين/ اربيل للملاحظات القيمة التي اغنت البحث.

المراجع:

- 1-Goldsmn, N., Henrickson, L., and Frey, J., Solid-State Electronics, 34(4), 389-396, (1991).
- 2- Shockley W., Solid State Electronics, 2,35, (1961)
- 3-Frey, J., & Goldsmn, N., IEEE Electron Device Letters, 6(1), 28-30, (1985).

- 4- Lundstrom M. "Fundamentals of Carrier Transport". 2nd Ed, Cambridge (2000).
- 5- Jacoboni, C., & Reggiani, L., Reviews of Modern Physics, 55(3), 645, (1983).
- 6- Fischetti, M. V., & Laux, S. E., Physical Review B, 38(14), 9721, (1988).
- 7- Pop, E., Dutton, R. W., & Goodson, K. E., Journal of Applied Physics, 96(9), 4998-5005, (2004).
- 8- Goldsman, N., Wu, Y. J., & Frey, J., Journal of Applied Physics, 68(3), 1075-1081, (1990).
- 9- Muscato, O., & Di Stefano, V., Journal of Computational Electronics, 11(1), 45-55, (2012).
- 10- Castiglione, T., & Muscato, O., Journal of Computational and Theoretical Transport, 46(3), 186-201, (2017).
- 11- Mohammad Salih, Ali Abbas, PhD. Thesis, College of Science, University of Mosul (in Arabic), (2010).
- 12- Ahmed, Moufaq Jalil, PhD. Thesis, College of Science, University of Salahaddin, (2007).
- 13- Scherer, Philipp OJ. *Computational Physics*. Springer Berlin Heidelberg, (2010).