



برنامج محاكاة كمبيوتر للترتيب الموضعي في الطور المكثف (الصلب والسائل) للسليكون

Computer simulation of local order in condensed phases of silicon

Frank H. Stillinger and Thomas A. Weber

افتراض نموذج يحتوي على دالة الطاقة – الجهد على كلا من مشاركات ذرتين وثلاثة ذرات لوصف التفاعلات في الأشكال الصلبة والسائلة من Si. من ثم تم استكشاف الآثار المترتبة عن تضمين هذا الجهد بواسطة برنامج محاكاة الديناميكا الجزيئية، باستخدام 216 ذرة مع شروط الحدود الدورية. بالبدء بالتركيب البلوري الماسي عند درجة حرارة منخفضة، والتسخين المتسبب للتقوي التلقائي والانصهار. التركيب السائل الناتج يشبه انصهار Si الحقيقي. بإجراء تخطيط steepest-descent لأشكال النظام على أدنى قيمة للطاقة – الجهد، ظهر لدينا استنتاجين: (1) درجة حرارة مستقلة تركز على تركيب طور السائل، تماما مثل السوائل البسيطة مع زوج من التفاعلات فقط، (2) معيار انصهار Lindemann للبلورة يمكن ان يستكمل بمعيار التجمد للسائل، حيث ان كلاهما يتضمن قيم حرجة تحدد بشكل مناسب متوسط الازاحات عن الجهد الأدنى.



1. مقدمة Introduction

بالمقارنة مع معظم العناصر الأخرى، فإن اشباه الموصلات رباعية السطوح (tetrahedral) كالسليكون والجرمانيوم تنكمش عندما تنصهر [1]. الأشكال البلورية لهذه المواد تمتلك تركيب ماسي مفتوح مع كل ذرة مرتبطة بأربعة ذرات أخرى في نسق رباعي الاسطح. تبين تجارب الحيود [4-2] ان الانصهار يتسبب في انهيار جزئي للتركيب في حين يزداد عدد التساهمي 4 في البلورة بشكل كبير لقيمة متوسطة تزيد عن 6. الخواص الكهربائية تتأثر بشدة بهذا التغير في التركيب: تقفز الموصلية بمقدار 20 مرة في السليكون و 11 مرة في الجرمانيوم [1].

التفاصيل المتوقعة للتغيرات في الترتيب الموضعي لاشباه الموصلات رباعية الاسطح عند انصهارها تشكل تحدي لا يقاوم للنظرية. لاهم جزء تطورات نظرية حديثة في فهم السوائل الكلاسيكية وعملية الانصهار ركزت على انظمة النماذج البسيطة نسبيا، بالأخص تلك التي تحتوي على تفاعلات زوجية اضافية [7-5]. تسهيل الغازات النبيلة (Ar, Kr, Xe) تمثل هذه الانظمة، بحيث ان تفاعل لينارد جونز (Lennard-Jones) الشهير ((LJ))

$$v_{LJ}(r) = -4\epsilon[(\sigma/r)^{12} - (\sigma/r)^6] \quad (1.1)$$

تحتوي على مثال هام.

من الواضح تمام، ان اشباه الموصلات الرباعية الاسطح تقع في فئة مختلفة كثيرا. لا يوجد سبب لزوج الجهد بان يعمل على استقرار التركيب الماسي، مثل v_{LJ} يعمل على استقرار البلورات المكعبة بشكل متقارب المميز للغازات النبيلة. انه ليس من الواضح لأي جهد لا يعتمد على درجة الحرارة والكثافة يمكن ان يصف بنجاح اشباه الموصلات السائلة، لأنها ليست عوازل جزيئية لكنها تحتوي على الكترولونات موصلة. مع ذلك فان وجود مثل هذا الجهد (او أي عائلة من الجهد) هو موضوع هام وهذا ما يختص به هذا البحث.

في الجزء 2 قمنا بتقديم جهد غير اضافي تفاعلي خاص للأطوار المكعبة (الصلبة والسائلة) للسليكون، وموضح ايضا كيف اختيرت. استخدمت تقنية محاكاة الديناميكا الجزيئية لاستنتاج الترتيب الموضعي والخواص الاخرى للأطوار المكعبة المترتبة على هذا الجهد والموضحة في الجزء 3. هذا العرض يحتوي ايضا على مناقشة لطريقة التخطيط التشكيلي للترتيب الموضعي في الأطوار المكعبة [10 - 8]. في الجزء



4 قمنا بعرض بعض خواص الديناميكا الحرارية بواسطة برنامج محاكاة الخاص بنا لـ 216 ذرة، بينما الجزء 5 قدمنا عرض للنتائج المتعلقة بالترتيب الموضعي. في الجزء 6 اعتبرنا النتائج التي حصلنا عليها من التخطيط على القيم الدينا للجهد. ركزنا في الجزء 7 بشكل مختصر على معيار انصهار Lindermann [11]، وشرنا لإمكانية تشكل المعيار الجديد معكوس Lindemann لتجمد السوائل. في الجزء 8 قمنا بتقييم صحة النموذج الحالي، ومحاولة تحديد اتجاهات التطويرات والتطبيقات المستقبلية.

2 الجهد غير الاضافي Nonadditive potential

أي دالة طاقة - جهد Φ تصف التفاعلات بين N من الجسيمات المتماثلة يمكن ان تحلل بشكل عام إلى مشاركات جسم واحد وجسمين وثلاثة اجسام الخ على النحو التالي:

$$\Phi(1, \dots, N) = \sum_i v_1(i) + \sum_{\substack{i,j \\ i < j}} v_2(i,j) + \sum_{\substack{i,j,k \\ i < j < k}} v_3(i,j,k) + \dots + v_N(1, \dots, N). \quad (2.1)$$

لكي يكون هذا التمثيل مفيد في الانواع المعتادة للنموذج النظرية، فانه من الضروري ان مركبات الدوال v_n تتقارب بسرعة إلى صفر مع زيادة n .

يصف جهد الجسيم المفرد v_1 عادة الجدار والقوى الخارجية التي يتعرض لها النظام. هذه تكون غائبة للحالة التي سنستعرضها ادناه، بذلك فان المفكوك (expansion) (2.1)، بشكل اساسي سنبدأ بحدود تفاعل الزوج.

في ضوء حقيقة ان بلورة السليكون تحتوي على ذرات مثبتة في الفراغ بقوة وروابط موجه، فانه يبدو من المناسب للوهلة الاولى ان الدالة المقابلة Φ يمكن ان تقرب بدمج جهد الزوج والجهد الثلاثي v_2 و v_3 . هذه هي وجهة نظرنا في ما يلي. في نفس السياق كما في المعادلة (1.1)، سوف نقدم اولاً وحدات الطاقة والطول ε و σ ومن ثم نكتب



$$v_2(r_{ij}) = \varepsilon f_2(r_{ij}/\sigma), \quad (2.2)$$

$$v_3(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j, \mathbf{r}_k) = \varepsilon f_3(\mathbf{r}_i/\sigma, \mathbf{r}_j/\sigma, \mathbf{r}_k/\sigma),$$

حيث اختيرت ε لتعطي f_2 بعمق 1- واختيرت σ لتجعل $f_2(2^{1/6})$ تنعدم. هذا يعني ان f_2 يجب ان تكون دالة فقط في المسافة القياسية، بالمثل، f_3 يكون لها انتقال كامل ودوران متماثل.

في هذا السياق، اختيار للفاعلات بين ذرات السليكون تكون مهمة مطلوبة اكثر من مواجهتها عندما نحاول فقط وصف ازاحات صغيرة من الشكل الهندسي الرباعي الاسطح. ويكفي الاخير لوصف الخواص المرنة وطيف الفونون للمادة البلورية. في مثل هذا النظام المقيد فانه من المناسب استخدام جهد من النوع Keating [12]. الان، على كل حال، يكون الزامي ان نغطي كامل الفراغ لكي نحصل على وصف مرضي لترتيب المدى القصير في طور السائل، والحركة الانتشارية للتبادل الذري الذي يحدث بشكل مستمر في طور السائل.

تم اختيار جهد الزوج المختزل المستخدم في دراستنا من عائلة المعاملات الخمسة التالية:

$$f_2(r) = \begin{cases} A(Br^{-p} - r^{-q})\exp[(r-a)^{-1}], & r < a \\ 0, & r \geq a \end{cases} \quad (2.3)$$

حيث A و B و p و a تكون موجبة. هذا الشكل العام ينقطع بشكل اوتوماتيكي عند $r = a$ بدون انفصال في أي من مشتقات r ، وهذه ميزة فريدة في أي تطبيق محاكاة ديناميكا جزيئية.

نفس ميزة القطع يمكن ان تمتد لتفاعلات الثلاثة اجسام f_3 . بشكل خاص قمنا بتخصيص الشكل

$$f_3(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j, \mathbf{r}_k) = h(r_{ij}, r_{ik}, \theta_{jik}) + h(r_{ji}, r_{jk}, \theta_{ijk}) + h(r_{ki}, r_{kj}, \theta_{ikj}), \quad (2.4)$$

حيث θ_{jik} هي الزاوية بين r_j و r_k تقابل القمة (vertex) i الخ. الدالة تخص الدالة h عائلة المعاملين $(\lambda, \gamma > 0)$. بالإضافة إلى ان كلا من r_{ik} و r_{ij} هي اقل من القطع a الذي قدم سابقا، وله الشكل التالي:



$$h(r_{ij}, r_{ik}, \theta_{jik}) = \lambda \exp[\gamma(r_{ij} - a)^{-1} + \gamma(r_{ik} - a)^{-1}] \times (\cos\theta_{jik} + \frac{1}{3})^2 ; \quad (2.5)$$

والا فان h تنعدم بالمثل. زاوية الرباعي الاسطح المثالية θ_t هي على النحو التالي:

$$\cos\theta_t = -\frac{1}{3} , \quad (2.6)$$

لذلك فان الجزء المثلثي في الصيغة (2.5) تميز بوضوح ازواج الروابط المنطلقة من القمة i vortex بالشكل الهندسي المفضل.

لقد قمنا ببحث محدود على سبعة معاملات $\gamma, \lambda, a, q, p, B, A$ لتحديد خيار مناسب لـ f_2 و f_3 . مركبة هامة لهذا البحث هي تقييم مجاميع الشبكة البلورية لضمان ان التركيب الماسي هو في الحقيقة الترتيب الدوري الاكثر استقرارا للجسيمات عند ضغط منخفض، على الاقل بين البدائل البسيطة. على أي حال، بعد تحقق معيار مجموع الشبكة البلورية، لازال من الضروري ان تكون نقطة الانصهار والتركيب السائل المستنتج للتفاعل التجريبي بواسطة محاكاة الديناميكا الجزيئية متطابقة مع التجربة العملية. يخدم هذا المعيار الاخير بالمساهمة في رفضنا للعديد من الخيارات الابتدائية لمجموعة المعاملات.

في المجمل فان معظم مجموعة المعاملات المرضية المكتشفة حتى الان هي على النحو التالي:

$$A = 7.049\ 556\ 277 , \quad B = 0.602\ 224\ 558\ 4 , \\ p = 4 , \quad q = 0 , \quad a = 1.80 , \quad (2.7) \\ \lambda = 21.0 , \quad \gamma = 1.20 .$$

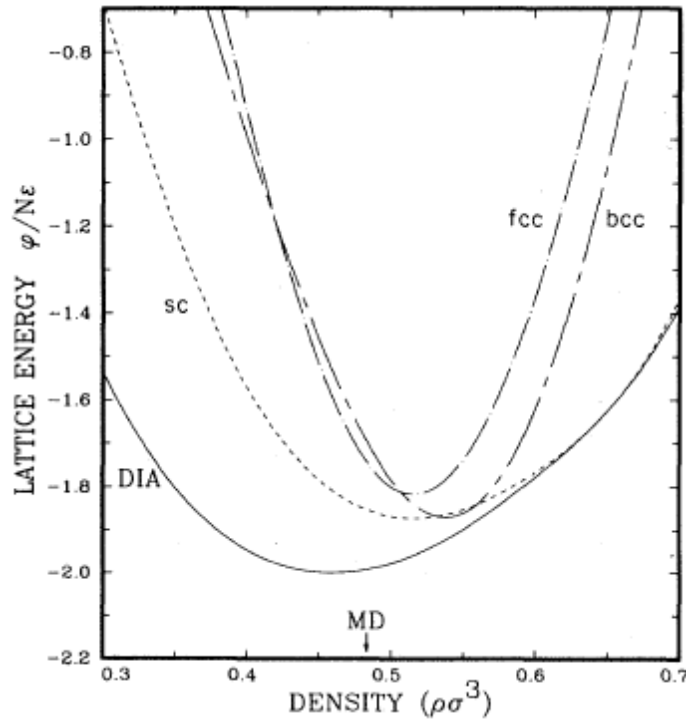
هذا الخيار الذي بنيت عليه كل النتائج المدرجة في هذه الورقة العلمية.

يبين الشكل 1 طاقة الربط لكل ذرة Φ/N (بوحدة مختزلة) مقابل الكثافة العديدة ρ (ايضا بوحدة مختزلة) للعديد من الشبكات البلورية البسيطة. مع انه عند ضغط صفر يكون التركيب الماسي هو المفضل ((DIA) diamond)، الحالات الاخرى مثل المكعب البسيط (sc) والمكعب مركزي الجسم (bcc) والمكعب مركزي الوجه (fcc) تكون قريبة بشكل مقبول. نحن نعتقد ان هذا التقارب مهم لضمان الانصهار

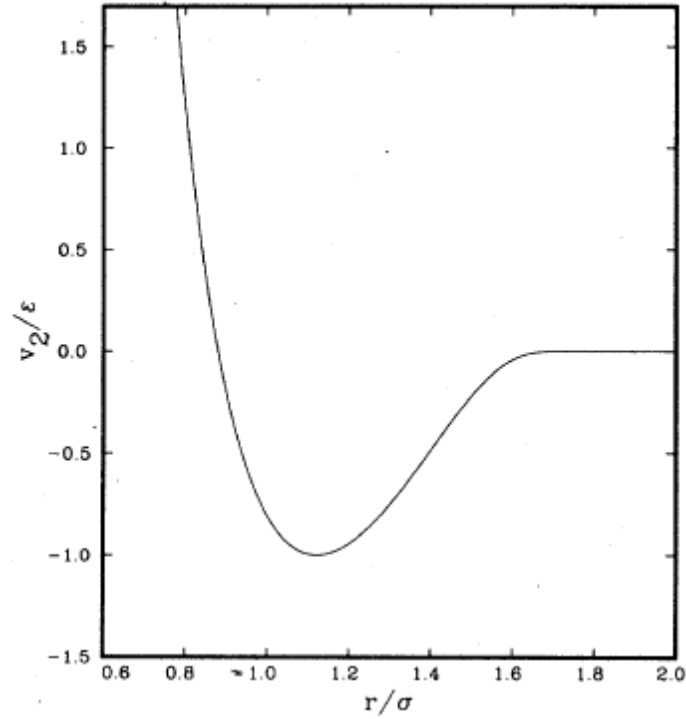
الثيرموديناميكي ليصبح انهيار تركيب السائل ممكنا عند درجة حرارة معقولة. مجموع تفاعلات الثلاثة اجسام ينعدم للتركيب الماسي. مع ان هذا المجموع يعمل على عدم استقرار الشبكات البلورية الاخرى، الا ان هذه التراكيب البديلة تعوض من خلال ازواج روابط استقرار اكثر من ما هو في الشبكة البلورية الماسية. بشكل واضح، من المهم الحصول على توازن مناسب بين هذه التأثيرات المنافسة لكي نمذج السليكون بشكل ناجح.

عند ادنى قيمة في منحنى التركيب الماسي في الشكل 1،

$$\rho = 0.460\sigma^{-3}, \quad \Phi/N = -1.999993\epsilon. \quad (2.8)$$



الشكل 1. طاقة الشبكة البلورية (لكل ذرة) مقابل الكثافة لجهد السليكون الغير اضافي. تزود المعادلة (2.7) مجموعة المعاملات المستخدمة للتفاعلات. تحدد الاسهم الكثافة التي تم عندها حسابات الديناميكا الجزيئية.



الشكل 2. جهد الزوج المختزل مقابل المسافة. هذه الدالة تنعدم بالمثل بعد $r = 1.80$.

لكي تكون هذه متوافقة مع فراغ الشبكة البلورية وطاقة بلورة السليكون الذرية عند درجة حرارة 0K، فإنه من الضروري اختيار

$$\begin{aligned} \sigma &= 0.20951 \text{ nm} , \\ \epsilon &= 50 \text{ kcal/mol} \\ &= 3.4723 \times 10^{-12} \text{ erg/at. pair} . \end{aligned} \quad (2.9)$$

يبين الشكل 2 جهد الزوج المختزل f_2 كدالة في المسافة المختزلة.



3. محاكاة الديناميكا الجزيئية Molecular-dynamics simulation

برنامجنا للمحاكاة استخدم $N = 216$ ذرة في خلية مكعبة مع حجم ثابت. تم تطبيق شروط حدود دورية على كل الاوجه الستة للخلية. لان اهتمامنا الاساسي في طور السائل، فقد اخترنا الحفاظ على كثافة الكتلة مساوية للسائل الحقيقي عند نقطة انصهارها، 1410°C ، وهي 2.53 g/cm^3 [1]. الكتلة لنظير ^{28}Si المستقر هي

$$m = 4.6457 \times 10^{-23} \text{ g/at.} , \quad (3.1)$$

بحيث ان طول حافة خلية المكعب تعطى بالقيمة

$$L = 7.646 \text{ nm} = 1.605 \text{ nm} . \quad (3.2)$$

عدد الكثافة المقابل لعدد 216 ذرة،

$$\rho = 0.4832 \sigma^{-3} , \quad (3.3)$$

تفوق تلك الموضحة في المعادلة (2.8) لضغط بلورة صفر ودرجة حرارة صفر. العدد الصحيح $N = 216$ له شكل مناسب ليسمح للذرات بان تترتب في شبكة بلورية خالية من الشوائب، وتترتب على جوانب الخلية المكعبة، في حين تترابط بشكل تام عبر اوجها. مجموع الشبكة البلورية للبلورة المنضغطة تكون

$$\Phi / N = -1.992 \text{ eV} . \quad (3.4)$$

دراسة ديناميكا الجزيئية للنموذج بدأت بعدد 216 ذرة في ترتيب البلورة المنضغطة، مع مجموعة عشوائية من العزوم الصغيرة جدا. الجهود المعطاة للجسمين والثلاثة اجسام في Φ تؤدي لصيغ قوة واضحة لكل جسم يدخل معدلات نيوتن للحركة. تم اجراء التكامل للاخير باستخدام لوغاريثم Gear من الرتبة الخامسة [13]، مع فترات زمنية $\tau = 5 \times 10^{-3} \Delta t$ ، حيث وحدة الزمن الاساسية هي

$$\tau = \sigma(m / \epsilon)^{1/2} = 7.6634 \times 10^{-14} \text{ s} . \quad (3.5)$$

تحت مثل هذه الظروف فان الطاقة الكلية سوف تبقى ثابتة لسبعة خانات على الاقل خلال التشغيل لعدة الاف فترات زمنية Δt . تم ضبط درجة الحرارة باستخدام الطريقة المعتادة بتحجيم كل العزوم بمعامل مشترك.



خلال بعض تشغيلات الديناميكا الجزيئية ل يتم مناقشتها ادناه، كان الترتيب الذري اللحظي $r_1(t), \dots, r_N(t)$ خطط بشكل دوري على الترتيب r_{1q}, \dots, r_{Nq} للقيمة Φ الدنيا المجاورة. هذا الترتيب لم يشوه نظام ديناميكا نيوتن، وقد اجري الحساب على التوازي. انجز التخطيط باستخدام طريقة نيوتن لإيجاد الحل الحدي ($s \rightarrow \infty$) لمعادلات 'steepest-descent'

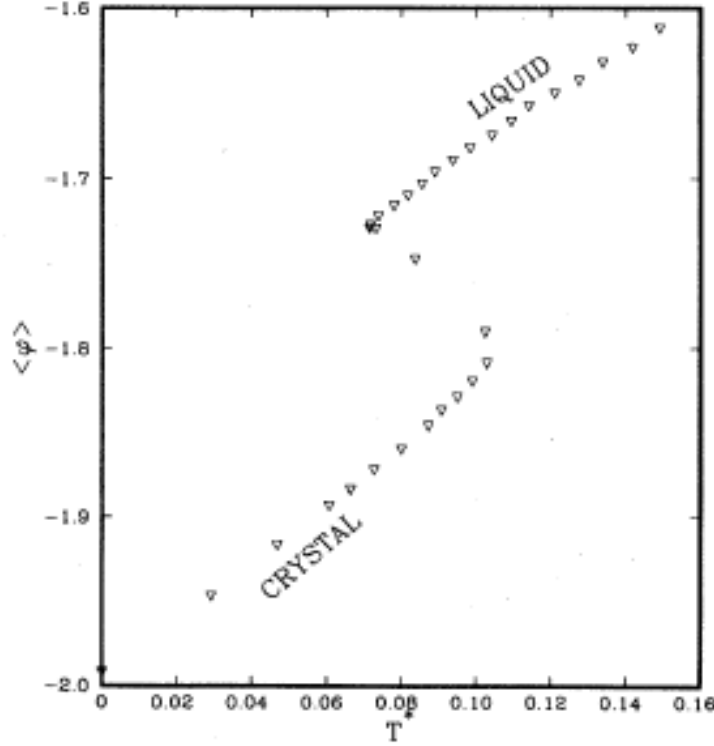
$$\frac{d \mathbf{r}_j}{ds} = -\nabla_j \Phi , \quad (3.6)$$

حيث يزود الترتيب الديناميكي الشرط الابتدائي. بشكل اساسي، أي مجموعة لحظية لمواضع الذرات يمكن الاشارة لها بشكل فريد بتركيب مستقر ميكانيكيا. تحديد القيم الدنيا لـ Φ المتوفرة لنموذج Si، وكيفية تجزئتها (sampled) بشكل متسلسل عند درجات حرارة مختلفة، تعتبر واحدة من اهم الاهداف لهذا المشروع.



4 الخواص الديناميكية الحرارية Thermodynamic properties

يعرض الشكل 3 بعض بيانات الديناميكا الجزيئية الخاصة بنا لمتوسط طاقة جهد لكل جسيم،



الشكل 3. متوسط طاقة الجهد لكل جسيم مقابل درجة الحرارة لنموذج السليكون. تعرض النقاط تتابعات لتشغيل الديناميكا الجزيئية التي خلالها كانت طاقة النظام الكلية تزداد بشكل منهجي من حالة الى اخرى (مع اجراء التوازن equilibration).

$$\langle \varphi \rangle = \langle \Phi \rangle / N\varepsilon , \quad (4.1)$$

مقابل درجة الحرارة المختزلة،

$$T^* \equiv k_B T / \varepsilon . \quad (4.2)$$



نقاط درجة الحرارة الموجبة الموضحة في الشكل تظهر من تشغيل متسلسل للديناميكا الجزيئية (كل واحد ينتج تشغيل الاتزان الخاص به)، بين الأزواج التي ازدادت فيها الطاقة الكلية بشكل رتيب. تزود البلورة المثالية عند الصفر المطلق نقطة البداية. تم التشغيل المتسلسل بعد ذلك بإعطاء الذرات عزوم عشوائية صغيرة جدا، ومن ثم زيادة العزم بين التشغيلات بمقدار مناسب أكبر من الوحدة. يعط كل زيادة ان فترة التوازن سمحت بتشغيل 500 مرة بشكل خطوات تبعها بعد ذلك فترات متوسطة بمقدار 1500 مرة، في حين ان النظام لازال في طور التبلور (الفرع الاقل في الشكل 3). لباقي التسلسل التي شملت الانصهار والتسخين للسائل الناتج، كان الاتزان (equilibration) وومتوسط الفترات (averaging periods) 1000 و3000 خطوة على التوالي.

السلوك التفهيري الموضح في الشكل 3 هو خاصية لتغير الطور من الرتبة الأولى. وجود حرارة كامنة موجبة يعني ان درجة الحرارة سوف تنخفض عندما يحدث الانصهار عند طاقة كلية ثابتة، او كما في الحالة الحالية حتى عندما تكون الطاقة الكلية تزداد ببطء.

فرع السائل لمنحنى $\langle \rho \rangle$ مقابل T^* قد تم اعادة انتاجه خلال خطوات التقليل في نظام الطاقة الكلية، ولهذا السبب فإننا نعتقد ان النتائج الموضحة في الشكل 3 تعكس بشكل صحيح للاتزان الحراري في نظامنا الصغير. فرع البلورة هو من مناسب ايضا لأنه يتفق بشكل دقيق عند اقل من منطقة الانصهار مع نتائج الاتزان المتوقعة لأنماط الاهتزاز العادية. لم نحاول اعادة نتائج فرع البلورة بتبريد السائل حتى يتجمد تلقائيا.

بدون شك الحد الاعلى لاستقرار البلورة موضح في الشكل 3 عند $T^* \approx 0.103$ تمثل حد فعال للتسخين الفائق. البلورة لم تحتوي على اسطح او ادخل فيها مواقع عيوب حيث يبدأ الانصهار عندها بسهولة. لهذا فان درجة حرارة الانصهار التيرموديناميكية يجب ان تكون اقل بعض الشيء. لقد قدرناها على ان تكون

$$T_m^* \cong 0.080 . \quad (4.3)$$

عند درجة الحرارة هذه فان الفرق في $\langle \rho \rangle$ بين فرعي السائل والبلورة هو

$$\langle \varphi \rangle_l - \langle \varphi \rangle_c = 0.295 . \quad (4.4)$$

نتيجة لذلك فان تغير الانتروبي الذي يكون مصاحبا للتحويل العكوس للنظام من بلورة الى سائل هو

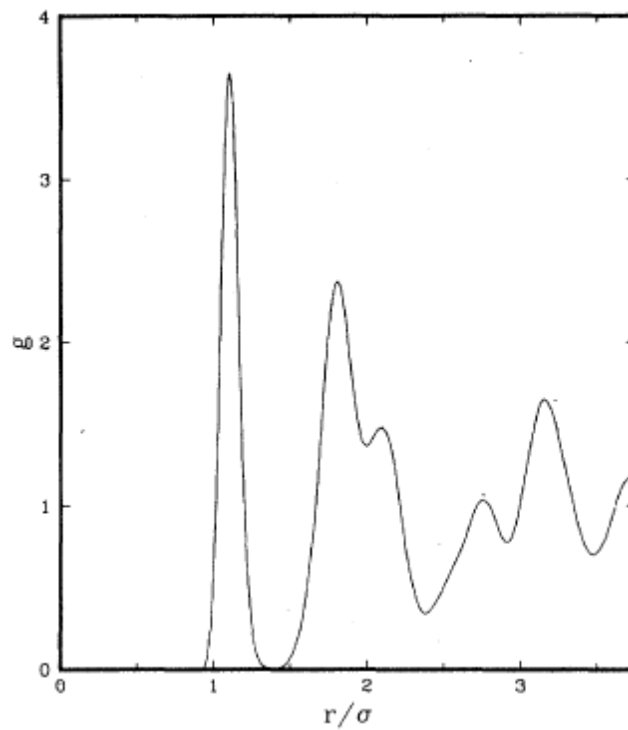


$$\Delta S / Nk_B \cong 3.7 . \quad (4.5)$$

نتيجة هذا الحجم الثابت ودرجة الحرارة الثابتة يمكن ان تقارن مع تجربة الضغط الثابت لقيمة الانصهار عند 1 atm [14]:

$$\Delta S(\text{expt}) / k_B = 3.25 . \quad (4.6)$$

بمقارنة هذه الارقام فانه من المهم ان نتذكر ان بلورة الديناميكا الجزيئية تتعرض لضغط كبير.



الشكل 4. دالة الترابط - الزوج لنموذج السليكون في طور البلورة عند $T^*=0.0800$.

قيمة التوزيع المتساوي (equipartition) $\epsilon \equiv C_v / Nk_B$ ، والسعة الحرارية المختزلة عند حجم ثابت ذات صلة مع البلورة عند درجة حرارة منخفضة، وتساوي

$$C_v^* = \frac{3}{2} . \quad (4.7)$$



عند T_m^* لوحظ انها تزداد إلى

$$C_v^*(T_m^*, \text{cryst}) \cong 2.0 \quad (4.8)$$

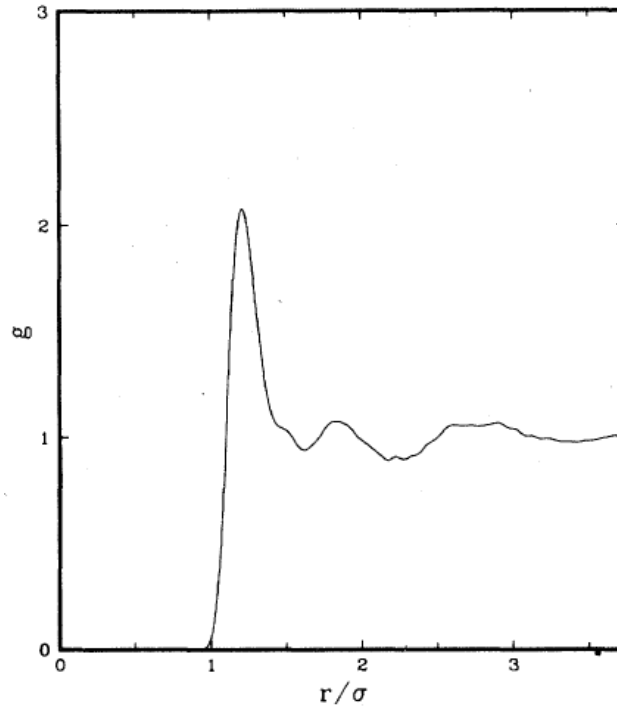
ونتيجة لذلك يحدث عدم تجانس في البلورة. والنتيجة المطابقة للسائل عند T_m^* وجدت بانها تساوي

$$C_v^*(T_m^*, \text{liq}) \cong 1.6 ; \quad (4.9)$$

علاوة على ان هذه الكمية في السائل تؤول النقصان مع زيادة T^* .

5. الترتيب الموضعي Local order

تقدم دالة الترابط - الزوج $g(r)$ طريقة مناسبة لملاحظة وتحليل الترتيب الموضعي في حدود الانظمة المكذسة (الصلبة والسائلة) [5 - 7].



الشكل 5. دالة الترابط - الزوج لنموذج السليكون في طور السائلة عند $T^* = 0.0817$.



تعرف هذه الدالة لتكون متناسبة للعدد المتوسط لأزواج الذرات مع متجه الفصل بين الذرات r ، اخذ كمتوسط على جميع اتجاهات r ، مع normalization للوحدة للتوزيع العشوائي للذرات.

يبين كلا من الشكلين 4 و 5 على التوالي $g(r)$ مستخلصة من البلورة - وتشغيل ديناميكا الجزيئية لطور السائل بالقرب من T_m^* . أول هذه يكون له تركيب قوي ويكشف تنظيم الذرات في قشور محددة بشكل جيد. العدد التساهمي قيد التشغيل $n(r)$ يمكن ان نحصل عليه من $g(r)$ على النحو التالي:

$$n(r) = 4\pi\rho \int_0^r s^2 g(s) ds, \quad (5.1)$$

وكما هو متوقع ينتج عن هذا اربعة اقرب جوار عندما يتم تقديره عند اعلى قيمة دنيا في الشكل 4 خلف القمة الاولى المكتشفة بشكل كامل. مع ان قشور الاحداثيات ذات الرتبة الثانية والرتب الاعلى في الشكل 4 تشغل بعضها البعض، مواضعها ومقاديرها هي بالتمام كما هو متوقع للشبكة البلورية الماسية المهتزة ولكن ذات تركيب مثالي. نتائج g المطابقة للبلورة عند درجة حرارة اقل تعطي احداثي قشرة بدقة تحليلية أعلى.

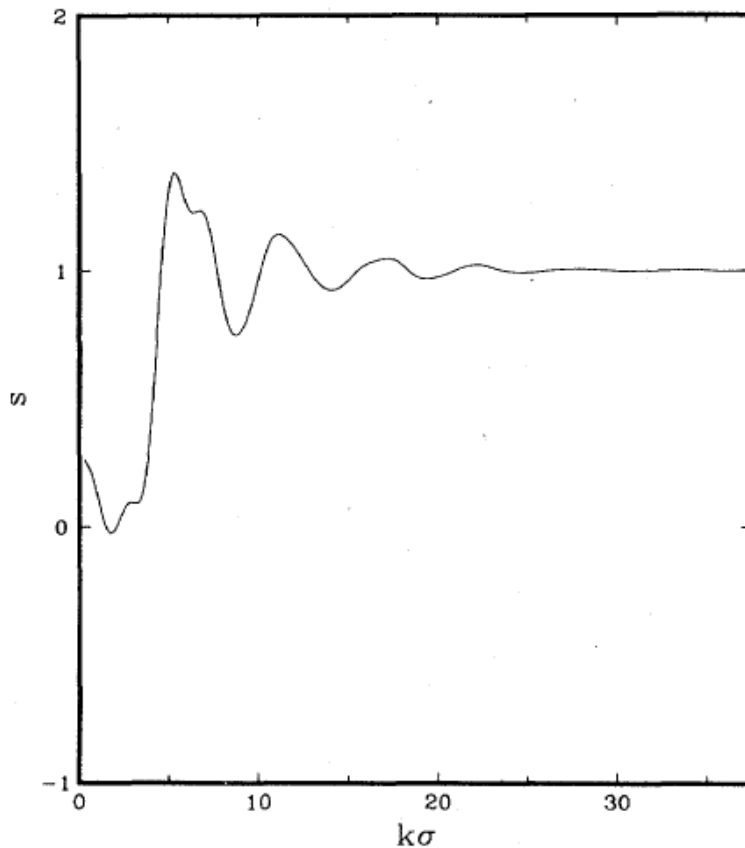
بمقارنة طور السائل g مع طور البلورة يعطي شهادة قوية لتحلل وانهيار البنية التركيبية التي تحدث عند الانصهار. مع استثناء القمة الاولى ذات الاتساع الاكبر والقمة الاقل، و تركيب القشرة، اصبح غير مميز. بشكل خاص، الفجوة التي تظهر في الشكل 4 بين القشورتين الاولى والثانية تختفي في البلورة. قيمة عظمى ثانية واسعة وضعيفة توجد في طور السائل g وتمتد على المدى بين 1.35 و 1.80 مضروبة في المسافة للقمة الاولى، وهذا متفق مع البعض القليل من الروابط الرباعية في السائل. العدد التساهمي الفعال $n(r)$ يساوي لـ 8.07 عند $r/\sigma = 1.625$ ، وهو موضع اول قيمة دنيا ضحلة في الشكل 5.

من المفيد ان نختبر معامل البنية التركيبية $S(k)$ المقابلة لـ $g(r)$ ، باحتساب علاقتها لتجارب الحيود وتذبذبات الكثافة في الوسط عند متجه موجة k . لدينا للسائل،

$$\begin{aligned} S(k) &= N^{-1} \sum_{j,l=1}^N \langle \exp[i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}_l - \mathbf{r}_j)] \rangle \\ &= 1 + \rho \int \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) [g(r) - 1] d\mathbf{r}. \end{aligned} \quad (5.2)$$

يبين الشكل 6 $S(k)$ لنفس حالة السائل عند $T^* = 0.0817$. باحتساب اخطاء التقطع في النظام المحدود، يتبين ان المنحنى غير دقيق لـ $k\sigma < 2.5$ ، على أي حال، باقي المنحنى له اهمية. الميزة الاكثر وضوحا هي القيمة العظمى الاولى عند $k\sigma = 5.3$ مع كتف واضح عند $k\sigma = 6.8$. هذا الشكل النمطي يظهر عادة عندما يكون السائل بالقرب من T_m^* . القيم العظمى التالي موضحة في الشكل 6 مع نقصان في السعات تحدث عند $k\sigma = 11.2, 17.1, 22.2$.

عندما تقارن النتائج الحالية مع نتائج تجارب الحيود [2, 3] على السليكون المذاب، تبدو النتيجة ان نموذجنا ناجح بشكل نوعي في وصف الترتيب الموضعي في السائل، بالرغم من ظهور بعض الاختلافات الطفيفة. بشكل خاص، القمة الاولى ذات الاكتاف في $S(k)$ هي ميزة واضحة في النتائج العملية، تتبعها قمم بدون تركيب مع نقصان في سعاتها.



الشكل 6. عامل البنية التركيبية لنموذج السليكون السائل عند $T^* = 0.0817$.



علاوة على ان الشكل النمطي $S(k)$ والعملي لوحظ فقط للسليكون المذاب والجرمانيوم من بين العناصر. باستخدام قيمة σ في المعادلة (2.9) للتعبير عن نتائج الديناميكا الجزيئية في وحدات اكثر استخداما، فانه يمكن التحقق ان مواضع القمة والكتف تتوافق بشكل مرضي مع التجربة. المقارنة موضحة في الجدول 1.

ليس من المدهش ان مقارنة الفراغ – الاتجاه لدوال الترابط – الزوج هي ايضا مرضية. دالة الديناميكا الجزيئية (MD) والموضحة في الشكل 5 تمتلك اول اعلى قيمة عند $r_1 = 0.256 \text{ nm}$

$$g(r_1) = 2.06 \text{ (MD)} ; \quad (5.3)$$

وعمليا [3]، $r_1 = 0.250 \text{ nm}$

$$g(r_1) = 2.23 \text{ (expt)} \quad (5.4)$$

عند درجة حرارة 1430°C . بالإضافة الى ان السلوك المستوي (ليس في صورة منحنى) نسبيا الملاحظ لـ $g(r)$ في الحسابات الحالية بعد القمة الاولى تظهر ايضا في النتائج العملية. لمزيد من المعلومات يرجى الاطلاع على الاشكال في المرجعين [2] و [3].

العدد المتوسط لاقرب جوار في السليكون السائل وجد عمليا انه يساوي 6.4 بواسطة كلا من Waseda و Suzuki [2] وبواسطة Gabathuler و Steeb [3]. على أي حال لم يوجد في أي من المرجعين تعريف دقيق للكمية المعطاة ولا لحدود الشك المذكورة.

الجدول 1. مقارنة لمواقع المعامل – التركيب في فراغ k (الوحدات لـ k هي \AA^{-1}).

Feature ^a	Molecular dynamics ^b	Experiment ^c
First peak	2.53	2.80
Shoulder	3.25	3.25
Second peak	5.35	5.75
Third peak	8.16	8.50
Fourth peak	10.60	11.20

a تعود إلى الشكل 6

b $T^* = 0.0817$ لـ

c من Waseda و Suzuki، المرجع 2 و الشكل 1 للسليكون السائل عند درجة حرارة 1460°C .



ونتيجة لذلك، فإنه ليس من الواضح تماما اذا كانت نتائجنا لـ $n(r)$ عند اول ادنى قيمة $g(r)$ والتي هي 8.07 في الحقيقة كبيرة جدا. على أي حال فان كلا من التجربة ومحاكاة الديناميكا الجزيئية تتفق مع متوسط العدد لأقرب الجوار في السليكون السائل وهو اقل بكثير من العناصر الاخرى السائلة (وعادة تكون بين 10 – 12).

6. تخطيط ادنى جهد Mapping to potential minima

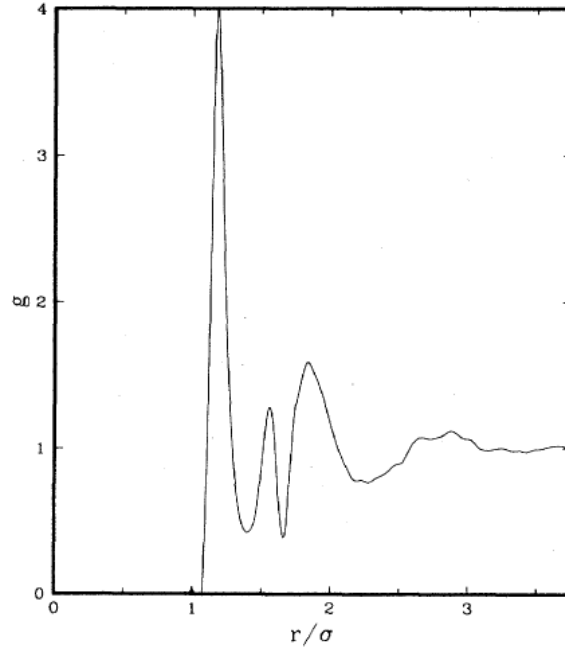
بينت التطبيقات السابقة [9 – 8] ان تخطيط اشكال النظام بالقرب من ادنى طاقة – جهد يوضح طبيعة ترتيب قصير المدى الموجود في الاطوار المكثفة (طوري الصلب والسائل). علاوة على ان هذه التقنية مفيدة في اقتراح الشكل الذي يجب ان يستخدم بواسطة النظرية التحليلية لتحويل السائل – الصلب [15, 16].

الحل العددي لمعادلة steepest-descent (3.6) لتحديد موقع القيم الدنيا لاي ترتيب ابتدائي معطى هو مهمة مطلوبة لنظام الـ 216 ذرة تحت الدراسة. مع اننا قمنا بمثل هذه الحسابات لحالات قليلة مختارة ويبدو ان هذا لتبرير الجهد المبذول.

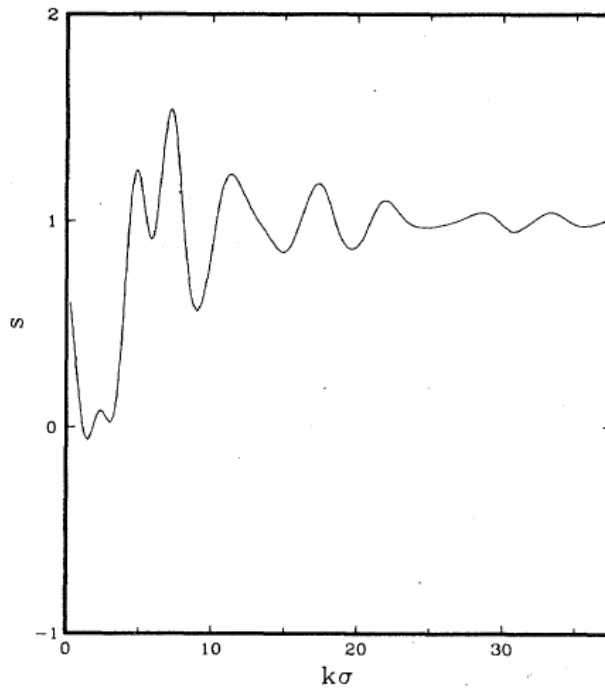
من النتائج الاساسية التي ظهرت من دراسات التخطيط الاولية هو ان التركيب الغير معتمد ظاهريا على درجة الحرارة يعود إلى الحالة السائلة. بينما في الحقيقة ان دوال الترابط – الزوج المتأصلة $g(r, T)$ هي في الاساس وبوضوح تعتمد على درجة الحرارة (عند ثبوت الكثافة)، وتقييم الدوال المقابلة g_q

(r) لمجموعات الاشكال المخططة من كل حالة ليست معتمدة على درجة الحرارة. هذا يعني انه لوحظ الاعتماد على درجة الحرارة لترابط الزوج في تلك السوائل البسيطة والتي تم فحصها حتى الان تحتوي بالكامل على تغير في الازاحة الاهتزازية بعيدا عن ادنى قيمة للجهد، وليست ازاحات تعدادية كبيرة بين المناطق التي تخص مجموعات مختلفة من القيم الدنيا. انه من المهم الان ان نوضح اذا ما كانت العملية الغير اضافية القوية في النموذج الحالي للسليكون تؤثر على هذه الظاهرة.

يوضح الشكل 7 دالة الترابط – الزوج المتأصلة $g_q(r)$ التي تم الحصول عليها من تشغيل الديناميكا الجزيئية على مذاب السليكون الفائق التبريد عند $T^* = 0.0677$.



الشكل 7 دالة الترابط – الزوج المتأصلة لسائل السليكون. درجة الحرارة في المذاب الفائق التبريد من مشاركة 31 جهد ادنى كانت $T^* = 0.0677$.

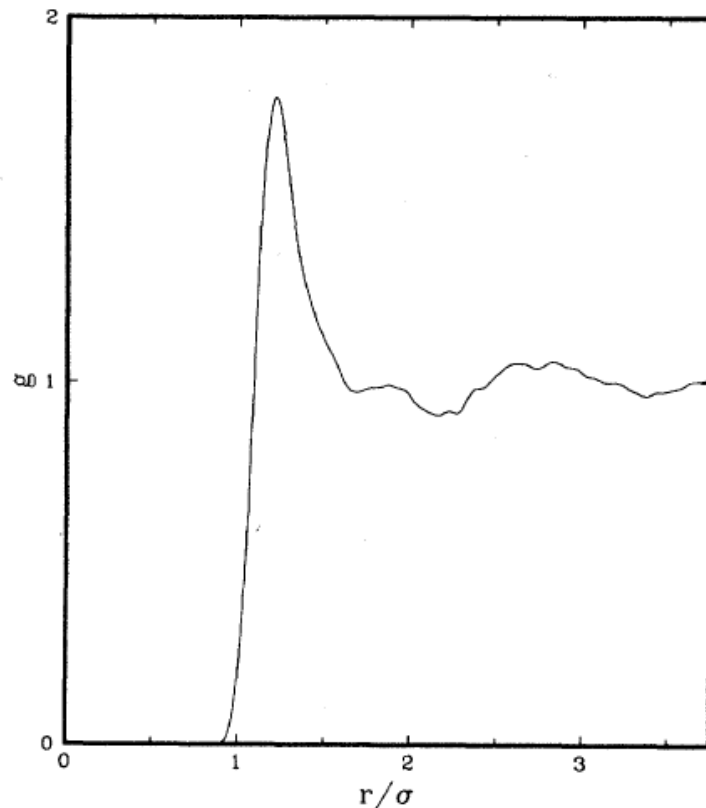


الشكل 8. معامل البنية التركيبية المقابلة لدالة الترابط – الزوج المتأصلة للشكل 7. يحتوي النظام $k\sigma < 2.5$ على خطأ تقطع واضح ويجب اهماله.

يقدم الشكل 8 معامل البنية التركيبية المقابلة. تعتمد هذه النتائج على الترتيب الذري لعدد 31 قيمة دنيا للطاقة – الجهد والتي تم الحصول عليها من اشكال الديناميكا الجزيئية بفواصل زمني قدره $100\Delta t$. يبدو ان توزيع قيم Φ عند هذه القيم الدنيا غير منتظم ليقتصر حدوث نمذجة (sampling) شاملة وممثلة لفراغ الشكل الترتيبي (configuration-space).

دالة الترابط – الزوج التقليدية $g(r)$ لهذا السائل فائق التبريد يشبه ذلك الموضح في الشكل 5. على أي حال التخطيط على القيم الدنيا انتج تعزيز كبير في البنية التركيبية، وهذا كما هو كان متوقعا. مع ان المزايا الحادة التي ظهرت من خلال $g_q(r)$ هي ليست للمواد الصلبة المتبلورة مع المقارنة مع الشكل 4.

يوضح الشكل 9 دالة الترابط – الزوج التقليدية $g(r)$ للمائع الساخن جدا عند $T^* = 0.1492$. هذا ليس مستغربا فهذه الدالة تمتلك رتبة مدى اقصر بكثير من مدى السائل البارد (عند $T^* = 0.0817$) في الشكل 5.



الشكل 9. دالة الترابط – الزوج التقليدية لمذاب السليكون الساخن عند $T^*=0.1492$.



يوضح الشكل 10 دالة الترابط - الزوج المتأصلة المقابلة $g_q(r)$. تمثل الاخير المتوسط لـ 30 ترتيب عند القيم الدنيا لـ Φ ، حيث الترتيب الاصلي مع المسار الديناميكي كان منفصلا بمقدار $100\Delta t$ كما من قبل.

الدالتين g_q في الشكل 7 والشكل 10 يجب اعتبارهما متماثلتين. الفروقات بين المنحنيات صغيرة جدا في كل مكان وفي أي حالة هي في حدود الخطأ الاحصائي المرتبط مع النمذجة (sampling) المقيدة. نستنتج مرة اخرى ان تغيرات درجة الحرارة التي تم ملاحظتها لـ $g(r, T)$ عند ثبوت الكثافة تظهر من اهتزاز السعة للحركة الاهتزازية داخل المناطق المحيطة بالمناطق الدنيا وليست من ازاحة الاتزان بين مثل هذه المناطق.

تشغيل اعداد التساهم n_q يمكن ان تحسب من g_q باستخدام المعادلة (5.1). على هذه الاساس وجدنا لدوال g_q المتماثلة تقريبا في الشكل 7 والشكل 10 ان n_q تكون 4.80 عند اول قيمة دنيا بعد القمة الاولى الحادة لـ g_q ، وتزداد إلى 7.95 عند القيمة الدنيا الثانية. هذه الزيادة في ثلاثة ذرات فقط تحدث عن مسافة اصغر من ثاني مجاور في الشبكة البلورية، ويبدو انها ترتبط مع مسافات بين نهايات الترتيبات المتعامدة للذرات الثلاثية.

مع ان ترتيب الذرات مستقر ميكانيكيا وهذا يعود إلى كون $g_q(r)$ عبارة عن ترسيبات سلكيون امورفس، ويجب ان نتجنب اغراء تعريفهم بالسليكون الامورفس الحقيقي المتشكل بطرق متعددة في المختبر. هذه المواد بدون شك تختلف خواصها مع طريقة التحضير.

القيمة الدنيا الاولى العميقة عند $r/\sigma = 1.40$ في دالة g_q الشائعة تقترح استخدام هذه المسافة كمعيار قطع لفحص احصائيات الرابطة. لهذا فان أي زوج من الذرات في حزمة مستقرة ميكانيكيا (ادنى Φ) والتي يكون الانفصال فيها اثل من هذا القطع سوف تعتبر كرابطة، بينما الزوج بمسافة كبيرة لا تعتبر رابطة. بوضوح، التعريفات البديلة تكون ممكنة بشكل خاص باستخدام قوى التفاعل بين الذرات في أي حدث، فان معيارنا الهندسي البسيط يتفق مع البنية التركيبية المعروفة للشبكة البلورية الماسية، مع كل اقرب جوار يحتسب كرابطة وليس الاخرين.



الجدول 2. اجزاء من ذرات السليكون بأعداد روابط مختلفة في مجموعات الجهد الأدنى والذي يحدد البنية التركيبية المتأصلة لطور السائل.

Number of bonds ^a	Fraction of atoms
2	0.000
3	0.000
4	0.201
5	0.568
6	0.205
7	0.024
8	0.001
9	0.000

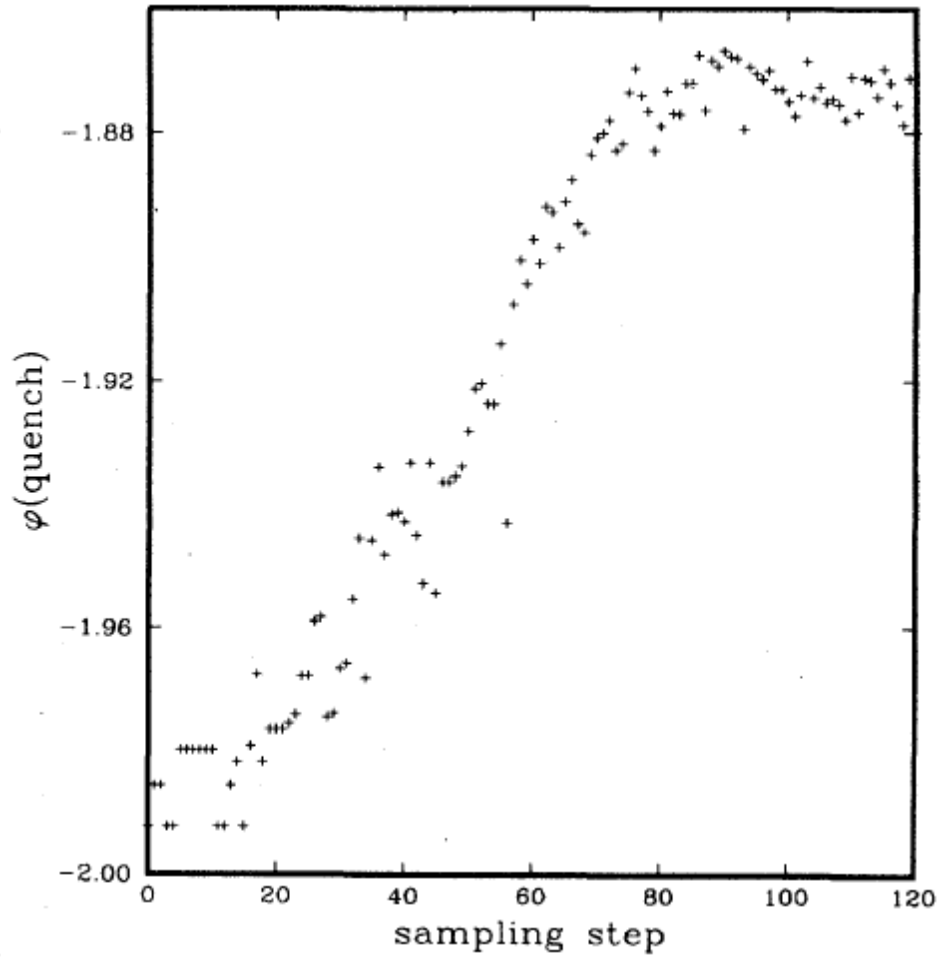
a استخدم عدد الرابطة $r/\sigma = 1.40$ كمعيار قطع علوي.

نعرض في الجدول 2 اجزاء من ذرات السليكون التي وجدت مع معيار القطع هذا، لينخرط مع الاعداد المتنوعة للروابط في مجموعة Φ الدنيا التي تحدد البنية التركيبية المتأصلة للسائل. اربعة ذرات احداثية لا تزال موجودة ولكنها تحت تحكم خمسة ذرات احداثية، وعدد التساهمي الاعلى يظهر بصورة مستمرة ايضا. لاحظ على أي حال ان تفاعلات الثلاثة اجسام المعتمدة على الزاوية تمنع أي حدوث لعدد التساهمي بالقرب من 12 وهذا يشير إلى تكس موضعي قريب.

7. معيار الانصهار والتجمد Melting and freezing criteria

تشير خبرة سابقة لمقدار اهمية تخطيط ترتيبات المسار الديناميكي على قيم الطاقة - الجهد الدنيا كأداة لدراسة الانصهار والتجمد [16]. نتيجة لذلك قمنا بتطبيق هذه التقنية على التابع الديناميكي خلال عملية التنوي (nucleation) والانصهار التلقائي لبلورة سليكون فانقة التسخين لإنتاج سائل متجانس.

عرضنا في الشكل 11 قيم Φ/N عند القيم الدنيا والتي تم الحصول عليها بواسطة تخطيط -steepest descent. كما من قبل فان الوقت المنقضي بين التخطيطات المتعاقبة كان $100\Delta t$. عند خطوة النمذجة الاولى (مشار لها ب 0 في الشكل 11) فان الـ steepest descent قد احضرت النظام إلى قيمة دنيا مطلقة تقابل الشبكة البلورية الماسية ذات البنية التركيبية المثالية.



الشكل 11. قيم طاقة الجهد لكل جسيم عند ادنى قيمة تم الحصول عليها بالتخطيط الدوري خلال الانصهار.

عند هذه والـ 15 مخطط التي تلتها، فان النظام كان في حالة بلورية، مع درجة حرارة $T^* \approx 0.102$. هذه القيمة الدنيا المطلقة لم نواجهها كل مرة خلال هذا الغير مذاب (المرحلة الأولى) مما يعكس الخاصية الغير



توافقية anharmonic للبلورة فائقة التسخين: تتسبب الاهتزازات الحرارية في عيوب موضعية تلقائية تتشكل وتتلاشى.

بعد هذه المرحلة الأولى، يحدث تنوي للسائل، وتتحرف القيمة الدنيا للطاقة – الجهد الناتج عن التخطيط إلى الأعلى، كما هو موضح في الشكل 11. الحكم بواسطة دوال الترابط – الزوج وتوزيعات الروابط السليمة كما تم تعريفها من قبل، يتواجد كلا من السائل والبلورة خلال هذه المرحلة مع زيادة السائل على حساب البلورة.

تتوقف المرحلة الثانية، الانصهار، عند خطوة التخطيط 80. وعليه فان اعماق ادنى جهد لا تظهر انحراف للأعلى ولكن تتذبذب حول قيمة متوسطة

$$\langle \Phi_q \rangle / N \cong -1.873 . \quad (7.1)$$

في المرحلة الثالثة يكون النظام سائل متجانس عند $T^* \approx 0.0677$ ، ولهذا يكون باردا بعض الشيء. توزيع القيم الدنيا للجهد – الطاقة تم نمذجتها بواسطة هذا السائل البارد نسبيا وهذا التوزيع هو نفسه مثل الذي تم نمذجته بسوائل اكثر سخونة عند نفس الكثافة، وهذه الحقيقة تشير إلى وجود التركيب المتأصل الغير معتمد على درجة الحرارة.

تحرك عملية التخطيط كل الذرات بشكل منهجي حتى يصبحوا جميعا وفي نفس الوقت لا يتعرضوا لأي قوى. لا ترتيب ديناميكي r_1, \dots, r_N وتخطيطها r_{1q}, \dots, r_{Nq} يمكننا على سبيل المثال تقييم،

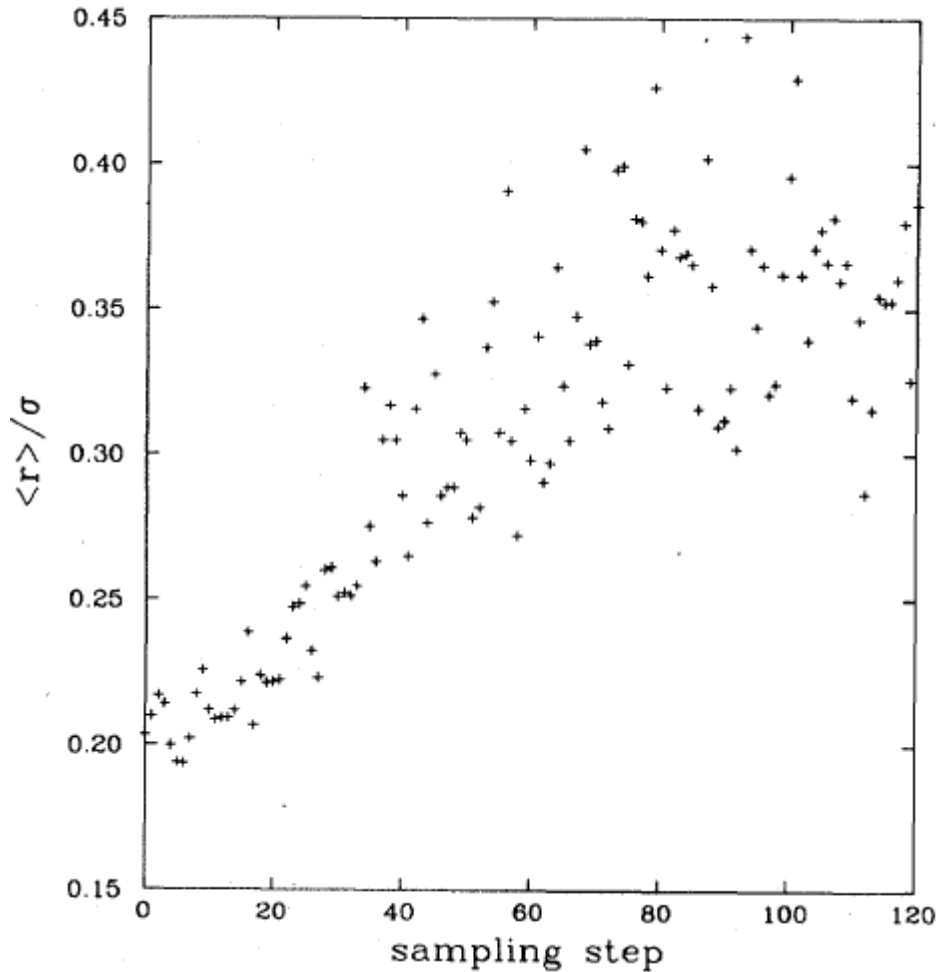
$$\langle r \rangle = N^{-1} \sum_{j=1}^N |r_j - r_{jq}| . \quad (7.2)$$

يوضح الشكل 12 متوسط الازاحات القياسية للعودة إلى ادنى جهد لكل من الـ 121 مخطط الذي اعتمد عليه الشكل 11. هذا لا يوضح فقط السلوك في البلورة فائقة التسخين، لكن التأثير الدراماتيكي للانصهار.

يمكن تحديد متوسط مسافة التخطيط في بلورات عند درجات حرارة منخفضة من خلال سعة حركات الفونون التوافقية، وكلاسيكيا فانها يجب ان تقاس على اساس $(T^*)^{1/2}$. مع ازدياد درجة الحرارة باتجاه نقطة الانصهار، نتوقع ان العمليات الغير توافقية تعمل على زيادة متوسط المسافة قليلا، ولكنها لا تزال تتصرف كنظام توافقي. يحدد معيار انصهار Lindemann [11] ان الانصهار يحدث عند تصل متوسط ازاحة

الذرات لجزء حرج من مسافات الشبكة البلورية، وهو في العادة يكون $7/1$ [17, 18]. في المستوى الحالي من الدقة فانه ليس من الضروري تمييز متوسطات rms عن المتوسط المعرف في المعادلة (7.2) اعلاه. متوسط مسافات المرحلة 1 الموضحة في الشكل 12 متوسط يعادل 0.19 مرة تقريبا المسافة الفاصلة في الشبكة البلورية في البلورة الاستاتيكية، وباعتبار حقيقة ان الصلب هو فائق السخونة وهذا متفق مع توقعات قانون Lindemann.

بعد الانصهار، فان متوسط مسافات التخطيط الموضحة في المرحلة 3 من الشكل 12 تكون 0.29 مرة تقريبا مسافة اقرب مجاور (والتي عرفت في السائل على انها المسافة لأول قيمة عظمة من g ، حوالي 10% اكبر من المسافة الفاصلة في الشبكة البلورية).



الشكل 12. متوسط المسافات لإزاحة اثناء التخطيط المستخدم في الشكل 11.



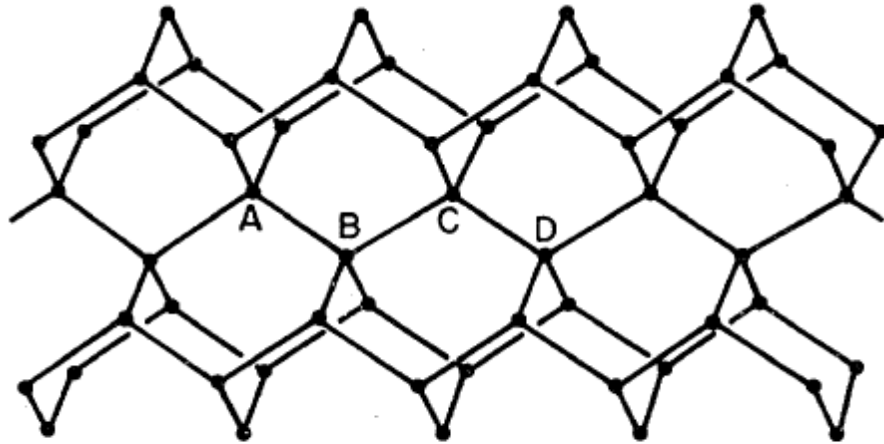
علاوة على ان متوسط مسافات التخطيط من حالة إلى الحالة التالية تعطي تشتت كبير نسبيا من تلك التي في المرحلة 1 للمادة الصلبة التي لم تتعرض للانصهار. هذه المسافات الاكبر والنشنتات قد توفر معلومات هندسية قيمة حول مناطق التخطيط المتعددة الابعاد التي تواجه طور السائل.

تماما مثل حالة البلورة، زيادة درجة الحرارة في السائل يتسبب في زيادة مسافات متوسط التخطيط للذرات. عند $T^* = 0.1492$ تزداد إلى 0.39 مرة عن المسافة الفاصلة لأقرب مجاور.

تولد هذه الملاحظات فضول يتعلق بتواجد معيار التجمد للسوائل نظريا كمتعم لمعيار انصهار Lindemann للمواد الصلبة. يبدو ان الدليل المتوفر يقترح انه عند تبريد السائل فانه يتسبب انخفاض مسافة متوسط المخطط الذري لما يقارب ثلاثة اعشار المسافة الفاصلة بين المجاورين، ويحدث التجمد. ادخال عملية التخطيط steepest-descent، والممكن تطبيقها على أي طور من المادة هي المفتاح الذي نحتاجه لتوسعة معيار Lindemann البسيط على السوائل، حيث انه من ناحية المبدأ اعتقد ان ذلك لا يمكن.

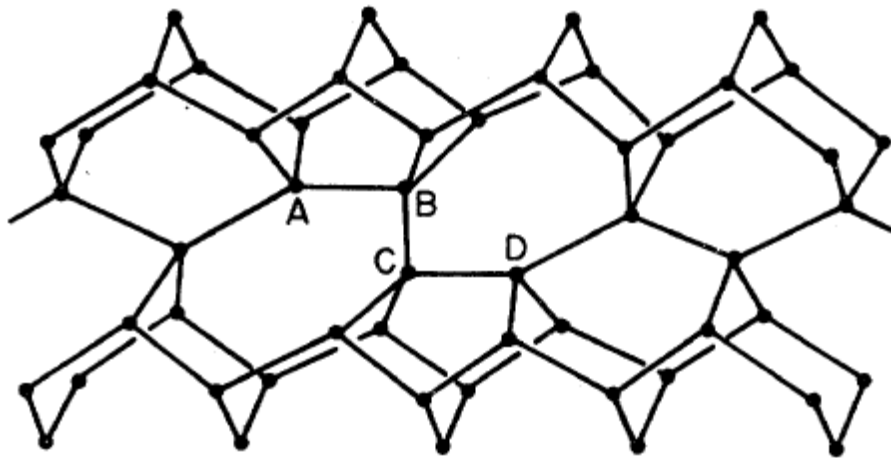
يبدو ظاهريا ان عملية التتوي للانصهار تتطلب تكاثر وتكتل للعيوب في الوسط البلوري الغير توافقي، ويعتبر التخطيط على ادنى قيم للجهد والطاقة اداة قيمة لدراسة كيف يحدث هذا [16]. من احد الاسئلة الاساسية يتعلق بطبيعة بالعيوب المنفصلة التي تتشكل تلقائيا تحت تأثير الاثارة الحرارية في المادة الصلبة. بفحص التراكم والطاقات لتلك القيم الدنيا التي تقع فوق القيمة الدنيا المطلقة فانه يجب ان يكون من الممكن الاجابة على هذا السؤال.

ادنى قيمة تقع فوق القيمة الادنى المطلقة والتي ظهرت خلال مرحلة النمذجة 1 في الشكل 11 والشكل 12 تظهر عند خطوة النمذجة 13. بنيئها التركيبية وطاقة اثارها بالنسبة لبلورة المثالية فان القيمة الدنيا وجدت انها تساوي 1.44581ε . لأي تعريف هندسي للرابطة مع القطع في المدى



(a) PERFECT CRYSTAL

(a) بلورة مثالية



(b) BONDING DEFECT

(b) عيب الرابطة

الشكل 13. مخطط اعادة الربط في تشكيل العيب الطبولوجي المتموضع في بلورة السليكون.



$$1.15 \leq r_c / \sigma \leq 1.45 \quad (7.3)$$

(والتي تشتمل على الخيار المستخدم سابقا)، كل واحدة من الـ 216 ذرة سليكون تشارك في اربعة روابط في هذا التركيب المحتوي على العيب. وعليه فان العيب يجب ان يستحوز على نوع من اعادة الربط الطبولوجي للروابط في البلورة.

في بلورة السليكون الخالية من العيوب فان الروابط تترتب بحيث ان كل المسارات المغلقة على امتداد الروابط المتعاقبة تكون مضلعات polygons مع اعداد زوجية على الجوانب (6، 8، 10،). فحوصنا لصور الاستيريو لترتيب العيوب تبين وجود مضلعات فردية عند العيوب، بالأخص مضلع خماسي pentagons ومضلع سباعي heptagons. مخطط اعادة الربط موضح في الشكلين (a)13 و (b)13. هذا التوزيع لذرات السليكون متكلف لكنه مستقر ميكانيكيا. نحن في هذه المرحلة غير قادرين على ان نقول ان مثل هذا العيب الطبولوجي سوف يكون مهم في السليكون الحقيقي لكن المزيد من الدراسة لهذه الامكانيات سوف تكون ضرورية.

8 المناقشة Discussion

يبدو ان نموذج السليكون الذي تم اختباره في هذا البحث ناجحا في تمثيل الاطوار المكثفة للمادة، لكن من الواضح ايضا ان له بعض القصور. لان دالة الجهد والطاقة له تعتمد على بحوث محدودة جدا، فان هناك سبب جيد لان نعتقد ان تحسينات كبيرة ممكنة.

واحدة من المشاكل النوعية التي ظهرت في هذه النسخة هي مقياس الطاقة. لكي تكون درجة حرارة التحول في المعادلة (3.4) متطابقة مع درجة حرارة تجمد السليكون السائل (1410oC) فانه من الضروري لمعامل الطاقة الاساسي ان يكون له القيمة

$$\varepsilon \cong 42 \text{ kcal/mol} , \quad (8.1)$$

وهي اقل بكثير من 50kcal/mol اللازمة لتزويد البلورة بطاقة التماسك الصحيحة، المعادلة (9.2). بالرغم من ان التغيرات في v_2 و v_3 يمكن ان تجعل T_m^* منخفضة كثيرا للتخلص من الاختلاف فانه يوجد خيار



اخر. يتضمن هذا الخيار زيادة الجهد مع حدود الجسيم المفرد v_1 الذي لا يعتمد على الموقع. للحالة التي تم اعتبارها هنا يكون لدينا

$$v_1 \cong -16 \text{ kcal/mol} \quad (8.2)$$

لشرح طاقة تماسك البلورة. نتوقع v_1 ان تمتلك بعض التغير في الكثافة، ولهذا فإنها تؤثر على الانضغاطية. في أي حالة فان اضافة حدود v_1 إلى الجهد يؤثر فقط على مقياس درجة الحرارة لكن لا تأثير له على التركيب الموضعي الذي تم الحصول عليه عند درجة حرارة مخفضة.

الكثير من نفس الاعتبارات التي ترتبط مع اختيار جهد نموذج السليكون تنطبق ايضا على الجرمانيوم. درجات حرارة الانصهار المختلفة لها تتطلب طاقة مختلفة ومعاملات مقياس درجة حرارة مختلفة، لكن اختلافات اكثر حدة يجب ان تلاحظ. تبين دوال الترابط – الزوج المقاسة للسوائل عند درجات حرارة مقابلة اختلافات صغيرة لكنها مهمة [2, 3]. سوف يكون مهم في النهائية ان نرى اذا ما كان النوع العام لنمذجة الديناميكا الجزيئية هنا يمكنها ان تعيد انتاج تلك الاختلافات.

تمت الترجمة في المركز العلمي للترجمة

www.trgma.com

23-6-2012