متوفرة على الموقع:http://www.basra-sciencejournal.org

ISSN –1817 –2695

تاثير درجة حرارة ديباي في التوصيل الحراري الشبيكي للمركب ZnS

بشرى حسين محمد و عادل عواد حسن

قسم الفيزياء / كلية التربية / جامعة البصرة / البصرة – العراق

الاستلام 26–2–2012، القبول 14–5–2012

المستخلص:

تم حساب التوصيل الحراري الشبيكي للمركب (ZnS) في مدى درجات الحرارة(2-300) درجة مطلقة, وذلك باستخدام انموذج عواد. تمت الدراسة بقيمة ثابتة من درجة حرارة ديباي $\theta_D(Const.)$ و قيم متغيرة مع درجة الحرارة $\theta_D(T)$. حيث توصلت إلى تطابق جيد بين القيم التجريبية و النظرية للتوصيل الحراري الشبيكي. لقد أخذت الدراسة بنظر الاعتبار التشتتات الفونونية بحدود البلورة والعيوب النقطية و التشتت الفونوني الثلاثي. أظهرت النتائج تأثيراً واضحاً لدرجة حرارة ديباي θ_D في حسابات التوصيل الحراري الشبيكي للمركب ZnS.

الكلمات المفتاحيه : التوصيل الحراري الشبيكي , درجة حرارة ديباي , ZnS , الفونونات الطولية , الفونونات المستعرضة , زمن الاسترخاء .

المقدمــة

لما كانت دراسة التوصيل الحراري الشبيكي تمثل مجالا مهما في فيزياء الحالة الصلبة , كان لابد من التوصل لمعالجة رياضية لآلية التوصيل, وذلك بحل معادلة بولتزمان بإحدى الطرق النظرية, ومنها نظرية زمن الاسترخاء, و التي تتعامل مع عمليات التشتت الفونوني بدلالة زمن الاسترخاء أو معدل المسار الحر. و الذي يعتمد بصورة أساسية على كل من التردد W و درجة الحرارة T. تفترض هذه النظرية أن عمليات التشتت تؤثر بصورة مستقلة في منحني التوصيلية[1] . من أوائل الدراسات التي توصلت إلى صيغة رياضية لحساب التوصيل الحراري الشبيكي هي دراسة كالاوى Callaway [2], حيث وضع أول أنموذج رياضي لحساب التوصيلية في المواد شبه الموصلة. افترض كلاوي العديد من التقريبات, منها استخدام دالة التوزيع المتزن و عدم التفريق بين التوصيلية بالفونونات الطولية و المستعرضة و استخدم تقريب ديباي لعلاقة التفريق (Debye Dispersion relation). استخدم الأنموذج لحساب التوصيل الحراري الشبيكي لعدد من أشباه الموصلات, حيث لوحظ وجود توافقاً جيد بين النتائج النظرية والعملية عند درجات الحرارة الواطئة . في حين تشذ عند درجات الحرارة العالية [3], وعلى الرغم من ذلك لازال هذا النموذج يستخدم بشكل واسع[4 – 6].

أجرى Holland [7] تعديلا على انموذج كالاوى من خلال نظرية التوصيل الثنائي النمط

(Two mode conduction), حيث تم فصل بين إسهام الفونونات الطولية عن المستعرضة. استخدم هذا الأنموذج في حساب التوصيل الحراري الشبيكي لعينات من Si,Ge, حيث حصل على توافق جيد مع القيم التجريبية .

أعاد Awad [8] صياغة علاقات التوصيل الحراري للشبيكة البلورية بنوعيها الأحادية الذرة والثنائية , حيث اخذ بنظر الاعتبار تأثير علاقة التشتت الفونوني ودالة التوزيع غير المتزن. توصل الباحث إلى نتائج جيدة عند دراسة التوصيل الحراري الشبيكي لGe وGaAs. كما استخدمه بنجاح عدد من الباحثين [13-9] .

تكمن أهمية درجة حرارة ديباي في حساب التوصيل الحراري الشبيكي للمواد الصلبة من خلال دورها الرئيسي في قيمة معدل الاسترخاء للعمليات الاومكلابية. معظم الدراسات التي تروم حساب التوصيل الحراري الشبيكي لم تستخدم درجة حرارة ديباي كدالة لدرجة الحرارة $(\theta_D(T))$ بسبب التعقيد في العمليات الحسابية, وعليه كانت تفرضها قيمة ثابتة . من أوائل الذين بينوا أهمية تأثير درجة حرارة ديباي في عملية حساب التوصيل الحراري الشبيكي هما الباحثان Wilkinson and Wilks [14]. كما درست درجة حرارة ديباي كدالة لدرجة الحرارة، حيث وجد أنها قيمة ثابتة في درجات الحرارة الواطئة (5-7K), حيث التشتت الفونوني بحدود البلورة هو المسيطر على عمليات التشتت الأخرى[15]. لقد عزا Serizawa et al. [16] سبب انخفاض قيمة درجة حرارة ديباي مع درجة الحرارة في أوكسيد الأكتينايد(Actinide oxide) إلى عمليات أللاتوافق في التذبذب الشبيكي.

في دراسة للباحثين Dubey & Verma [17] وجدا أن التوصيل الحراري الشبيكي لعنصر Si يكون متناسبا مع θ_D^{-2}. باستخدام نموذج (SDV) [18], وجد Mohammad et al. [19] عند درجات الحرارة الواطئة, أن تغير درجة حرارة ديباي يؤثر في قيم التوصيل الحراري الشبيكي للجرمانيوم بنسبة تصل إلى 86 %. باستخدام نفس الأنموذج, درس Awad and Shargi [20] تأثير $(\theta_D(T))$ في توصيلية السيليكون, حيث لاحظا أن التأثير يكون واطئاً عند درجات الحرارة العالية و يصل إلى 75% عند درجة حرارة 40K. درس Awad [8] مستخدما نموذج دوبي [21] تأثير $(\theta_D(T))$ في كل من $(\tau^{-1}_{3ph,T})$ و $(\tau^{-1}_{3ph,L})$ و في التوصيل الحراري الشبيكي لعينة من Ge, حيث أشار إلى أن التغييرالمئوي في قيمة التوصيلية تصل إلى 67.39% عند درجة حرارة 20K، وتقل هذه النسبة عند 100K لتصل إلى 0.5% ً.

حديثا تم حساب من قبل Mohammad [9] قيما للتوصيل الحراري الشبيكي لعنصر Si (1350-1.7 درجة مطلقة) أكثر دقة عند استخدام $\theta_D(T)$ متغيرة مما هو عليه عندما تكون ثابتة. أما Lifta [12] فقد درس التغير في التوصيل الحراري الشبيكي للمركب LiF عندما تكون درجة حرارة ديباي ثابتة أو دالة لدرجة لحرارة , ليجد أن الفروق المئوية بين الحالتين تصل إلى 15% عند درجة الحرارة 40K.

يهدف البحث إلى إمكانية تطبيق نموذج Awad في حساب التوصيل الحراري الشبيكي للمركب ZnS (2- 300K), ودراسة تأثير درجة حرارة ديباي المتغيرة $\theta_D(T)$ في عملية الحساب. الجدير بالذكر أن سبب اختيار المركب (ZnS) كعينة لدراسة هو ان مقدار التغير في درجة حرارة ديباي $\theta_D(T)$ عالية جداً عن قيمتها ثابتة (90%)(كما سنجده في نتائج البحث) . كما تمت دراسة سلوك التشتتات الفونونية كدالة لدرجة T والتردد الفونوني w .

النظريـة

لحساب التوصيل الحراري الشبيكي, استخدم عواد علاقة التشتت لشبيكة ثنائية الذرة ببعد واحد وثابت الشبيكة a بدلا من علاقة التشتت لديباي ليصل إلى العلاقة التالية:

$$K_i = \frac{MK_B^3\theta^2}{6\pi^2 a\hbar^2(M+m)} \int_0^{\theta_i/T} \tau \frac{\sqrt{J_0(1-J_0)}(\sin^{-1}\sqrt{J_0})^2}{(1-2J/M_0)} \frac{xe^x}{(e^x-1)^2} dx \quad \text{.....(1)}$$

حيث أن M تمثل كتلة الذرة الأولى و m كتلة الذرة الثانية ,

$$J = T^2x^2/M\theta^2,$$
$$J_0 = J(M+m)(1-J/M_0) \ ,$$
$$M_\circ = (M+m)/mM$$

تؤثر عمليات التشتت الفونوني في نتائج التوصيل الحراري الشبيكي في البلورة حيث تختلف مساهمتها في الإعاقة الحرارية باختلاف العناصر والمركبات وكذلك باختلاف مدى درجات الحرارة , ومن هذه العمليات: التشتت بحدود البلورة (τ_B^{-1}) [22] والتشتت بالعيوب النقطية (τ_{pt}^{-1}) [23] والتشتت الفونوني الثلاثي (τ_{3ph}^{-1}) [21], بحيث تؤثر هذه العمليات في التوصيلية الحرارية بصورة مستقلة بعضها عن البعض. وعليه فقد عبر عن معدلات زمن الاسترخاء لكل منها كما يلي:

$$\tau_B^{-1} = \frac{\nu}{L} \qquad (2)$$
$$\tau_{pt}^{-1} = A\omega^4 \qquad (3)$$

حيث أن

ν : متوسط سرعة الفونونات، L : الطول المميز للبلورة, A: قوة التشتت الفونوني بالعيب النقطي.

تصنف عمليات التشتت الفونوني الثلاثي إلى صنفين[24] هما I و II , حيث يتلاشى الفونون في الأول نتيجة اندماجه مع فونون آخر , و يتلاشى في الصنف الثاني عن طريق انقسامه إلى فونونين . تشترك الفونونات الطولية في عمليات كلا الصنفين, أما المستعرضة فتشترك في عمليات الصنف I فقط . و عليه فقد اقترح Dubey[21] معادلة للتشتت الفونوني الثلاثي, حيث استخدم فيها كلا العمليتين الاعتيادية منها و الاومكلابية، و عليه فان معدل الاسترخاء للتشتت الفون

وني الثلاثي للفونونات المستعرضة والطولية تأخذ الصيغة الاتية:

$$\tau_{3ph,T}^{-1} = (B_{TN,I} + B_{TU,I}e^{-\theta/\alpha T})\omega T^{m_{T,I}(T)} \quad \text{for } 0 < \omega < \omega_2 \quad (4)$$

$$\tau_{3ph,L}^{-1} = (B_{LN,I} + B_{LU,I}e^{-\theta/\alpha T})\omega^2 T^{m_{L,I}(T)} + (B_{LN,II} + B_{LU,II}e^{-\theta/\alpha T})\omega^2 T^{m_{L,II}(T)} \quad \text{for } 0 < \omega < \omega_4 \quad (5)$$

Tتشير للفونونات المستعرضة و L للفونونات الطولية.

$m(T)$ تمثل الأس الحراري(دالة مستمرة الحرارة) بحيث لا تزيد قيمته للفونونات المستعرضة من الصنف I عن 4 وعن 3 للفونونات الطولية. لكي تكون قيمة الأس الحراري أكثر دقة و مرونة مع تغير درجات الحرارة, اقترح دوبي [21]Dubey العلاقة التالية لكلا الصنفين (I) و(II):

$$[m(T)]_I = x_{\max}(e^{x_{\max}} - 1)^{-1} + 0.5x_{\max} \quad (6)$$

$$[m(T)]_{II} = 0.5x_{\max}(e^{x_{\max}} - 1)^{-1} e^{0.5x_{\max}} + 0.5 \quad (7)$$

حيث أن : $x_{\max} = \hbar\omega_{\max} / K_B T$

$\omega_{\max}$: تردد الفونون عند حدود الحيز البريليوني الأول.

و عليه يتخذ معدل استرخاء التشتت الفونوني الكلي (τ_c^{-1}) الصيغة التالية:

$$\tau_C^{-1} = \tau_B^{-1} + \tau_{pt}^{-1} + \tau_{3ph}^{-1} \quad (8)$$

النتائج والمناقشة

تمت الاستعانة بالثوابت الآتية :

$$\theta_D = 415K \quad , [25]\ \alpha = 1.5,\ a = 5.41\mathring{A}\ , \theta_L = 288K \quad , \theta_T = 144K$$

$m_{(Zn)} = 4.981x10^{-23}\ mg$,

$m_{(S)} = 2.656x10^{-23}\ mg$ [1], و العلاقات (1,4-7) في عمليات حساب التوصيل الحراري الشبيكي للمركب ZnS ضمن درجات الحرارة (2-300K). كانت عملية الحساب على قسمين: الأول عندما تكون درجة حرارة ديباي ثابتة $\theta_{D(const.)}$ و الثاني عندما تكون دالة لدرجة الحرارة $\theta_D(T)$.

باستخدام قوى التشتت المدرجة في الجدول (1), تم بثبوت درجة حرارة ديباي حساب التوصيل الحراري الشبيكي الكلي و الإسهام المئوي للفونونات المستعرضة و الطولية فيه, و النتائج مبينه في الشكلين (1) و(2)على التوالي.

جدول(1): قوى التشتت المستخدمة في حساب التوصيل الحراري الشبيكي للمركب ZnS .

العامـــل	$\theta_D(const.)$	$\theta_D(T)$
	القيمـــة	القيمـــة
τ_{BT}^{-1} (s^{-1})	$1.2\ 10^6$	$7.0\ 10^5$
τ_{BL}^{-1} (s^{-1})	$3.5\ 10^5$	$5.0\ 10^5$
$A_T\ (s^3)$	$2.7\ 10^{-44}$	$3.0\ 10^{-44}$
$A_L(s^3)$	$1.0\ 10^{-46}$	$1.9\ 10^{-46}$
B_{TN} deg^{-m}	$2.5\ 10^{-10}$	$2.5\ 10^{-10}$
B_{TU} deg^{-m}	$2.0\ 10^{-6}$	$2.0\ 10^{-6}$
$B_{LN,I}$ $s.deg^{-m}$	$3.8\ 10^{-24}$	$1.0\ 10^{-24}$
$B_{LU,I}$ $s.deg^{-m}$	$8.0\ 10^{-22}$	$6.0\ 10^{-23}$
$B_{LN,II}$ $s.deg^{-m}$	$3.0\ 10^{-21}$	$2.8\ 10^{-21}$
$B_{LU,II}$ $s.deg^{-m}$	$1.8\ 10^{-16}$	$3.9\ 10^{-18}$

كما تمت دراسة تأثير درجة حرارة ديباي $\theta_D(T)$ في التوصيل الحراري الشبيكي للمركب ZnS وذلك باستخدام قوى التشتت المبينة في الجدول (1), والنتائج رسمت في الشكل(3) . كما تم حساب التوصيلية لكل من الفونونات الطولية والمستعرضة، بحيث أن إسهامهما المئوي ($\%K_T$ و $\%K_L$) في التوصيلية الكلية موضحة في الشكل(4).

لبيان مدى التوافق مع النتائج العملية عند استخدام عمليات التصحيح المختلفة, تم إيجاد مقدار التغير المئوي

(13)

$K_{theo.}$ و K_{exp} تمثلان القيم النظرية و العملية للتوصيل الحراري الشبيكي على التوالي .

نلاحظ في الجداول(2) توافقاً أكبر عند حساب التوصيل الحراري باستخدام درجة حرارة ديباي كدالة لدرجة الحرارة $\theta_D(T)$, عند مناطق تحكم التشتتات الفونونية الثلاثية , وذلك يعود الى تاثيرالعلمليات الاومكلابية ($e^{\theta_D/\alpha T}$).

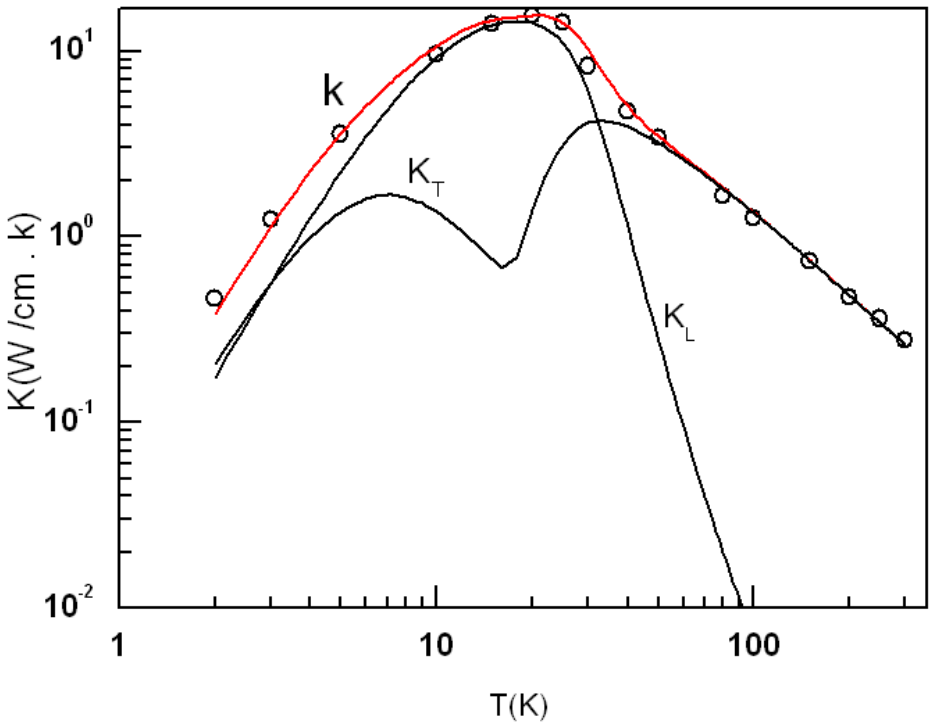
حيث تشير الأشكال(1,3) إلى توافق جيد بين القيم العملية للتوصيل الحراري الشبيكي وتلك التي تم حسابها نظريا، كما تظهر الأشكال مدى التطابق الجيد عند قمة منحنى التوصيلية, حيث تحكم التشتت الفونوني بالعيوب النقطية في الإعاقة الحرارية [9,11,12].

في قيم التوصيل الحراري (الجداول 2) باستخدام العلاقة الآتية:

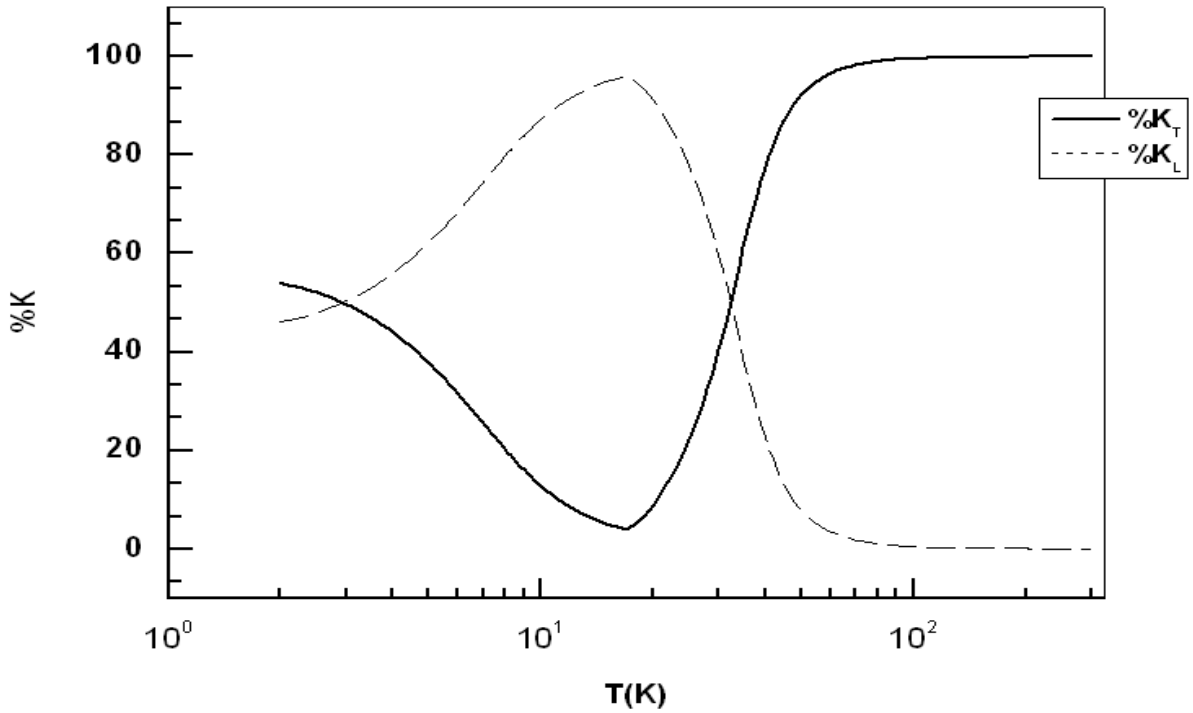
$$\%\delta\ K^{''} = \frac{K_{theo.} - K_{exp}}{K_{exp}} \times 100\%$$

تبين الإشكال(2,4) سيادة الفونونات المستعرضة في عملية التوصيل الحراري الشبيكي، حيث تصل إلى 100% تقريبا عند درجات الحرارة العالية. والعكس صحيح عند الإسهام الفونونات الطولية، مما يتفق مع ما توصل إليه عدد من الباحثين [3,18,20,27]. يعود ذلك إلى مساهمة نمطين من الفونونات المستعرضة في قيم التوصيل الحراري مقابل نمط واحد من الفونونات الطولية. في منطقة محصورة لا تتجاوز 100K و لا تقل عن 3K, نلاحظ حالة معكوسة لإسهام الفونونات.إذ يتغلب

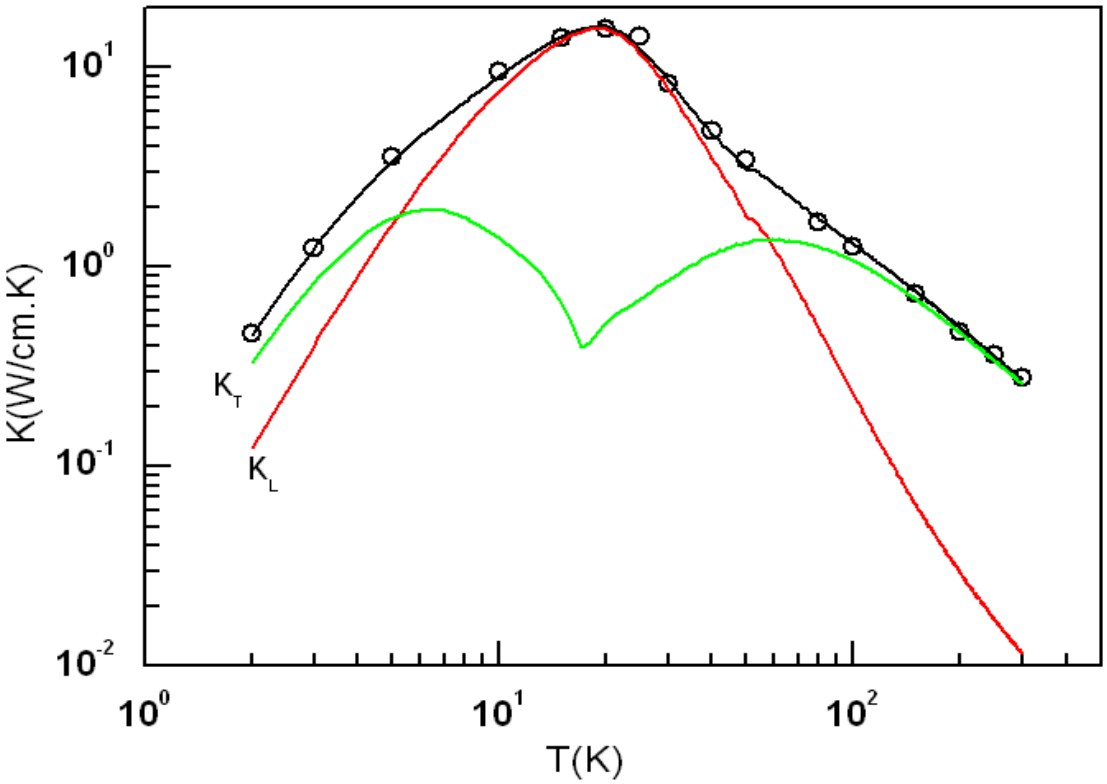
إسهام الفونونات الطولية على المستعرضة. هذا يتفق مع العديد من الباحثين[8,21,27,28,29].



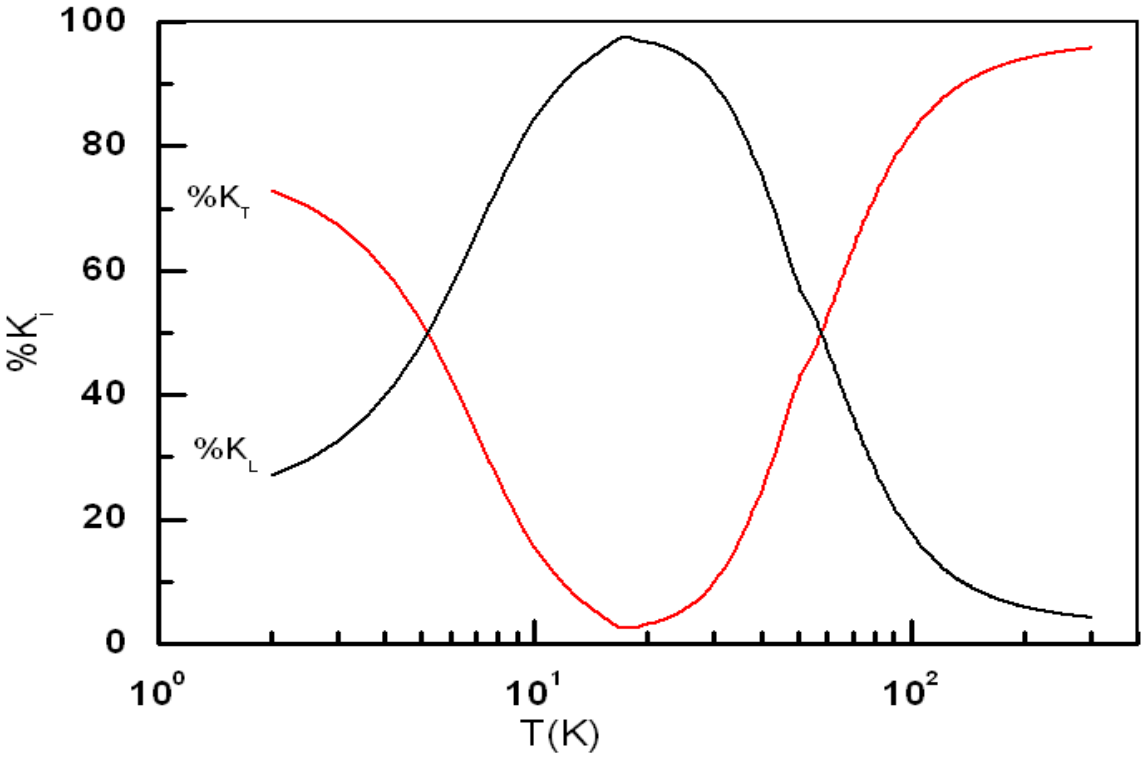
الشكل(1): التوصيل الحراري الشبيكي الكلي للمركب ZnS .



الشكل(2): الإسهام المئوي للفونونات المستعرضة و الطولية في التوصيل الحراري الشبيكي الكلي للمركب ZnS.



الشكل(3): التوصيل الحراري الشبيكي للمركب ZnS.

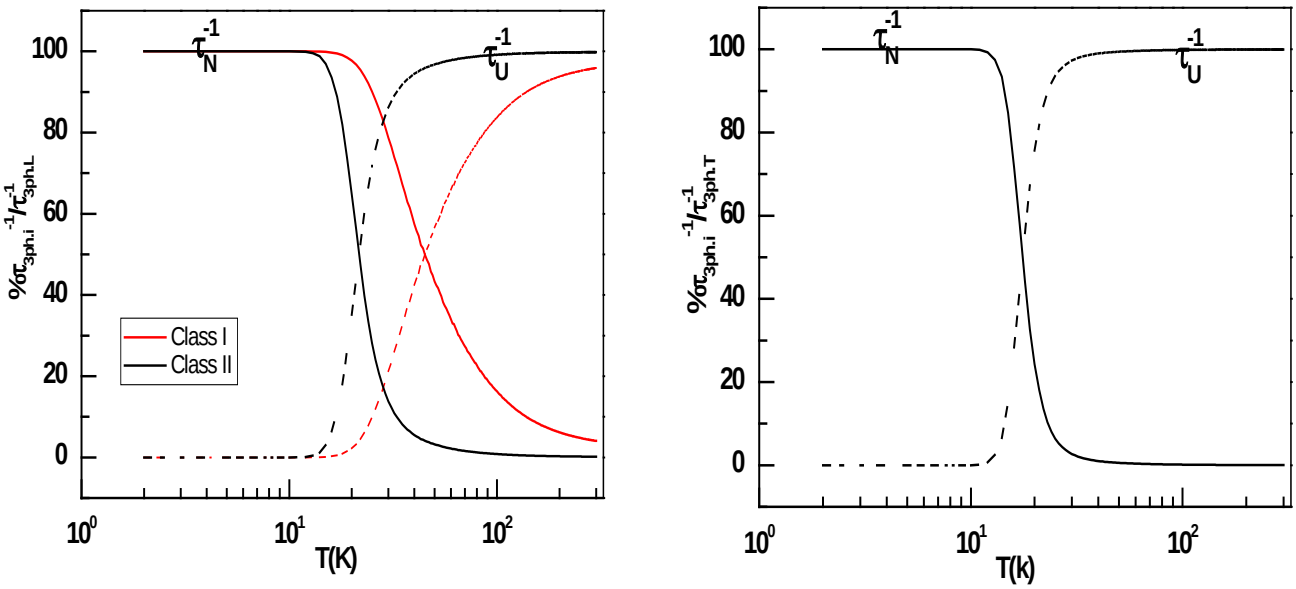


الشكل(4): الإسهام المئوي للفونونات المستعرضة و الطولية في التوصيلية الكليةللمركب ZnS

الجدول(2): التغير المئوي لقيم التوصيل الحراري الشبيكي في المركب ZnS

$T(K)$	δK	
	$(\theta_{D(Cons)})$	$(\theta_D(T))$
2.0	18.23	2.38
3.0	9.27	0.21
5.0	0.99	1.57
10	10.94	6.16
15	5.59	2.69
20	3.87	3.24
26	13.05	3.18
31	16.02	0.91
41	6.54	5.21
52	3.80	3.01
81	11.72	5.67
103	8.68	8.02
142	17.14	7.22
206	6.49	5.29
257	8.82	5.65
300	5.37	1.77

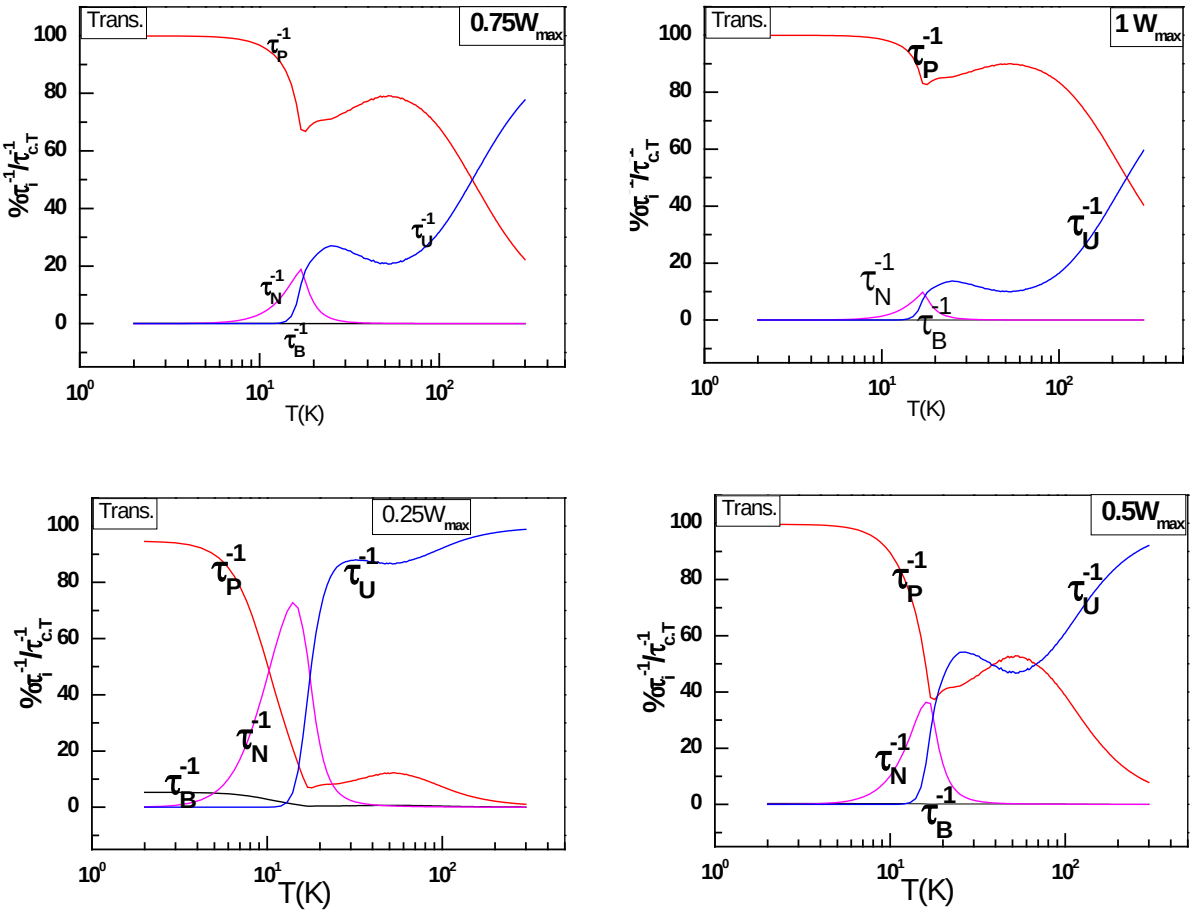
يوضح الشكل (5) الإسهام المئوي لمعدل استرخاء العمليات الاعتيادية و الاومكلابية في معدل استرخاء التشتت الفونوني الثلاثي τ_{3ph}^{-1}, نلاحظ عند فحص منحنيات هذا الشكل ، أن التشتت الفونوني الثلاثي في درجات الحرارة الواطئة ($T < 50K$) يتمثل بالعمليات الاعتيادية. أما في درجات الحرارة العالية فنلاحظ الهيمنة الواضحة للعمليات الاومكلابية, وهذا يتفق مع ما توصل إليه Awad [8] للمركب GaAs و Mohammed و[9] Lifta [12].لابد من الإشارة إلى أن منتصف النسبة المئوية (50%) للإسهام تحدث عندما $10 \le T \le 20K$ في الفونونات المستعرضة و الطولية (Class I) في حين نجدها في المدى $40 \le T \le 60K$ للفونونات الطولية(Class II).



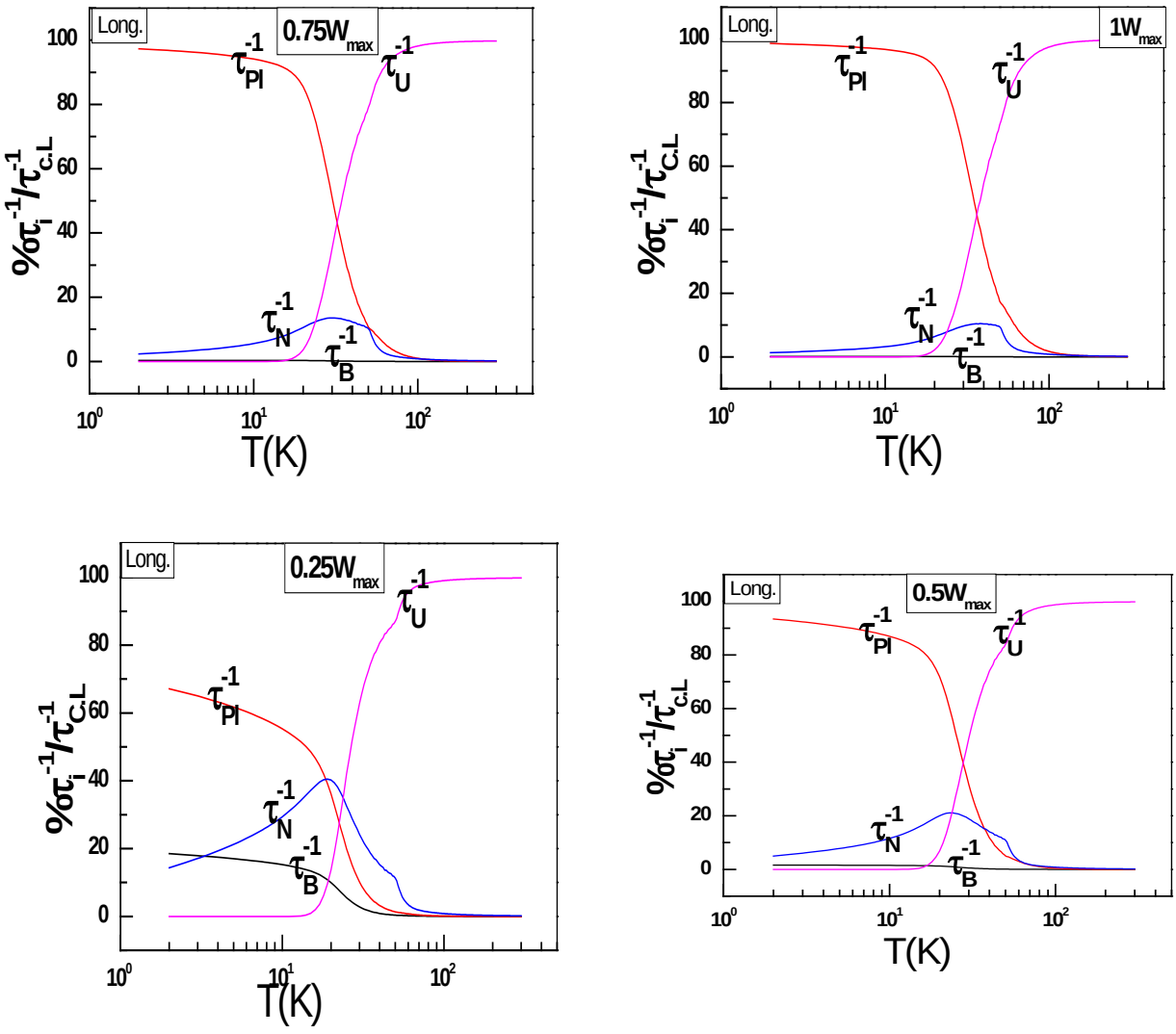
الشكل (5): الإسهام المئوي لمعدلات استرخاء التشتتات الثلاثية إلى معدل استرخاء التشتت الثلاثي الكلي للفونونات المستعرضة والطولية .

عند دراسة طبيعة التغير المئوي لمعدلات زمن الاسترخاء بالنسبة إلى المعدل الكلي كدالة لدرجة الحرارة عند قيم محددة من التردد, نجد في الفونونات المستعرضة أما العمليات الاعتيادية فنجدها مؤثرة في التشتت الكلي عند مدى الحرارة $7K \le T \le 20K$. يتناقص هذا المدى المؤثر كلما ارتفعت قيم ω حتى تكون الغلبة كاملة للتشتت بالعيوب النقطية عندما $\omega = \omega_{\max.}$. في الفونونات الطولية(الشكل 7) لا (الشكل6) سيطرة واضحة للتشتت بالعيوب النقطية عند درجات الحرارة الواطئة, في حين يتغلب التشتت الفونوني الثلاثي الاومكلابي عند درجات الحرارة العالية من الدراسة.

تختلف الحالة عما هو واضح في الفونونات المستعرضة , ما عدا المدى الواسع لتأثير العمليات الاعتيادية و الذي يصل في بعض الحالات الى $2K \le T \le 30K$. هذه المديات المؤثرة تدلل بشكل لا لبس فيه على مواقع فعالية التشتتات الفونونية المختلفة.

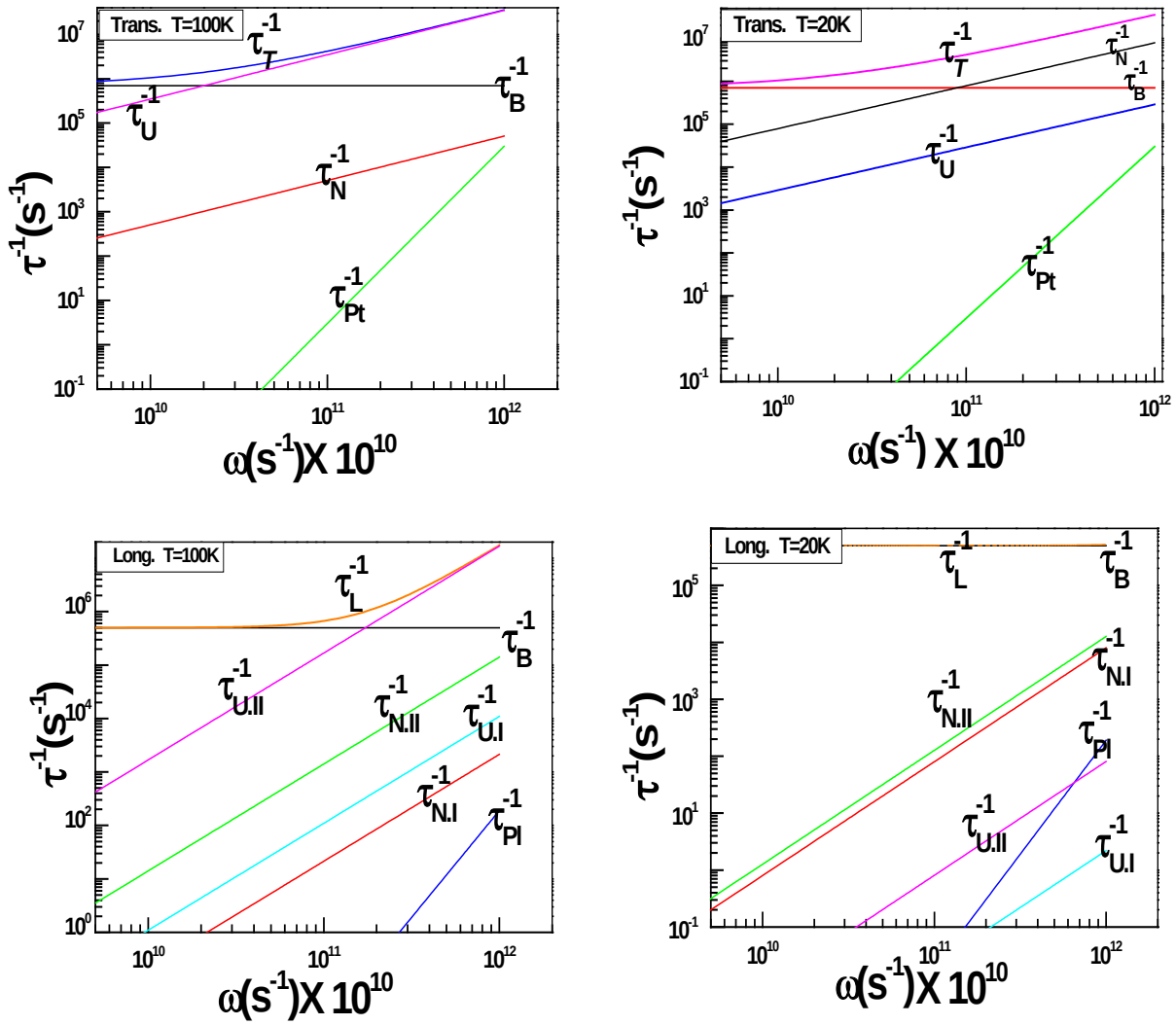


الشكل (6): الاسهام المنوي لمعدل استرخاء التشتتات الفونونية بالنسبةالى معدل استرخاء التشتت المشترك للفونونات المستعرضة $\tau_{C,T}^{-1}$ لقيم ثابتة من التردد.



الشكل (7): الإسهام المئوي لمعدل استرخاء التشتتات الفونونية بالنسبة الى معدل استرخاء التشتت المشترك للفونونات الطولية $\tau_{C,L}^{-1}$ عند قيم ثابتة من التردد.

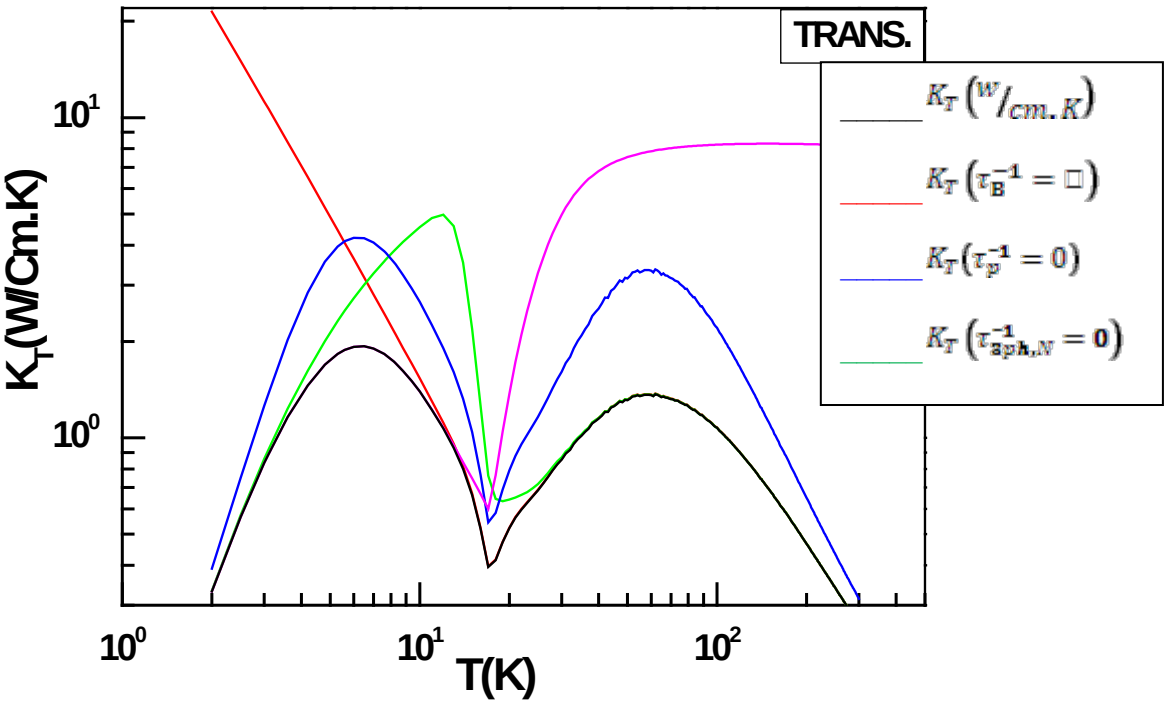
بثبوت درجة الحرارة يعرض الشكل (8) طبيعة تغير معدلات استرخاء التشتتات الفونونية مع التردد و لكلا النمطين الطولي والمستعرض. حيث ضمن مدى الترددات عند الترددات العالية للفونونات المستعرضة $(T = 20K,100K)$ و الطولية $(T = 100K)$ تظهر سيادة τ_U^{-1} على بقية معدلات الاسترخاء, في حين ضمن نفس المدى من ترددات الفونونات الطولية تظهر الواطئة, نلاحظ من خلال هذا الشكل سيادة τ_B^{-1} على بقية التشتتات الأخرى لكلا النمطين الطولي والمستعرض ولكلا درجتي الحرارة (20K) و(100K). سيادة $\tau_{N,U}^{-1}$ على بقية التشتتات الاخرى عند $T = 20K$. هذا يتفق مع ما توصل عدد من الباحثين [8,9,11,12,27,28,29].



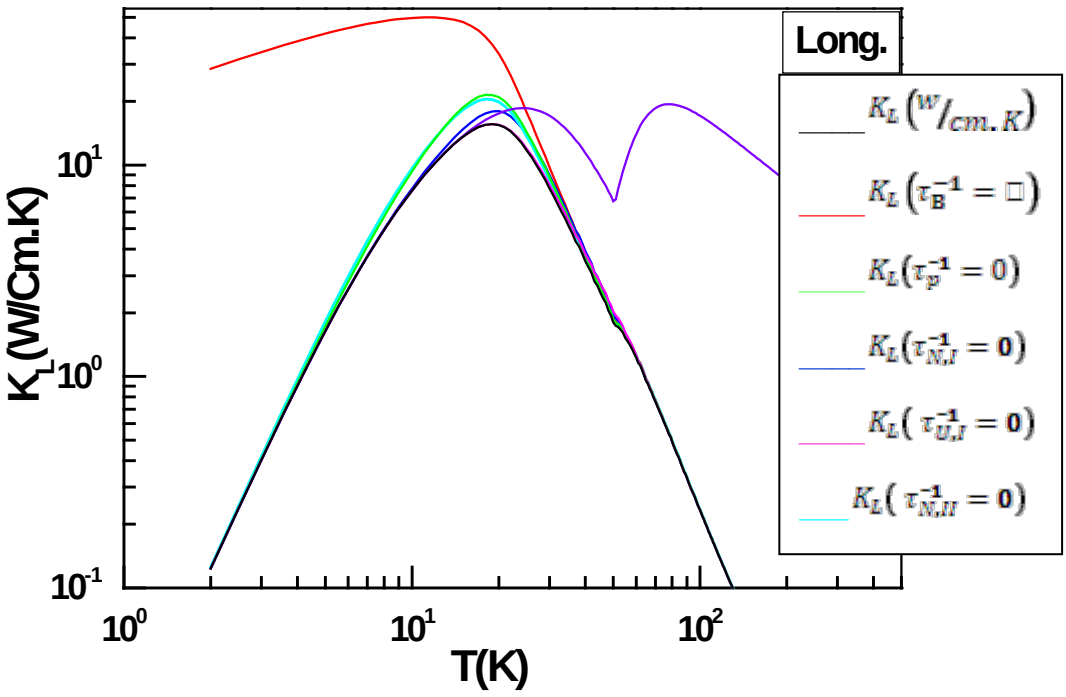
الشكل(8): معدلات استرخاء التشتتات الفونونية المختلفة كدالة للتردد في الفونونات المستعرضة و الطولية بثبوت درجة الحرارة .

الشكلان (9,10) تمثلان منحنيات التوصيل للفونونات المستعرضة K_T و الطولية K_L عند إهمال أحد معدلات الاسترخاء للتشتت الفونوني $(\tau_i^{-1} = 0)$, كما توضح موقع فعالية التشتتات الفونونية المستخدمة في حساب التوصيلية. نلاحظ عند إهمال التشتت بحدود البلورة τ_B^{-1} زيادة في منحنى التوصيلية عند $T \le 10K$ للفونونات المستعرضة و $T \le 30K$ للطولية. هذا يعني ان التشتت بحدود البلورة يقتصر تاثيره على التوصيل الحراري الشبيكي عند درجات الحرارة الواطئة فقط .عندما $\tau_{pt}^{-1} = 0$ لكلا النمطين, نجد ان التشتت الفونوني بالعيوب النقطية يكون مؤثرا عند قمتي منحنى التوصيلية للفونونات المستعرضة و كذلك الطولية, بحيث يكون أعلى في الفونونات المستعرضة عنه في الطولية. يشاركه في نفس المنطقة تأثير التشتت الفونوني الثلاثي للعمليات الاعتيادية, بحيث نجده عند القمة الأولى في منحنى التوصيلية للفونونات المستعرضة. أما في الطولية منها فنجدها بقيمة اقل و لكلا الصنفين. كما يلاحظ فعالية العمليات الاومكلابية عند المنطقة التي تلي قمة منحني التوصيلية. هذا يعني أن تأثير العمليات الاعتيادية في التوصيل الحراري يقتصر على درجات الحرارة الواطئة

بينما تسيطر العمليات الاومكلابية على التوصيل الحراري الشبيكي عند درجات الحرارة العالية .



الشكل (9): تأثير معاملات استرخاء التشتت الفونوني في توصيلية الفونونات المستعرضة في المركب ZnS.



الشكل (10): تأثير معاملات استرخاء التشتت الفونوني في توصيلية الفونونات الطولية في المركب ZnS.

لمعرفة تأثير درجة حرارة ديباي في التوصيلية الحرارية, تمت دراسة التغير المئوي للتوصيل الحراري الشبيكي و

(9)

$K(\theta_D(T))$: تمثل التوصيل الحراري عندما تكون درجة حرارة ديباي دالة لدرجة الحرارة, و حسبت باستخدام قوى التشتت المدرجة في الجدول (1) لـ $\theta_D(const.)$ بقيم متغيرة من $(\theta_D(T))$ [26].

(10)

عند دراسة منحني هذا الشكل , يلاحظ وجود اختلاف واضح بين قيمة درجة حرارة ديباي كدالة لدرجة الحرارة $\theta_D(T)$ و قيمتها الثابتة .

حيث تصل قيمة التغير المئوي $\%\delta\theta_D$ إلى 43.9% عند درجة حرارة $21K$. و كما هو مبين في الشكل ان قيم $\%\delta K$ تتناسب مع $\%\delta\theta_D$ ، وان طبيعة هذا التغير لكلا النمطين سواء كان طوليا او مستعرضا من الفونونات يكون متشابها . كما لا نجد أي تغير عند درجات الحرارة الواطئة,(T < 10K)، حيث السيادة للتشتت الفونوني بحدود البلورة و العيوب النقطية على بقية التشتتات. عند قمة منحني

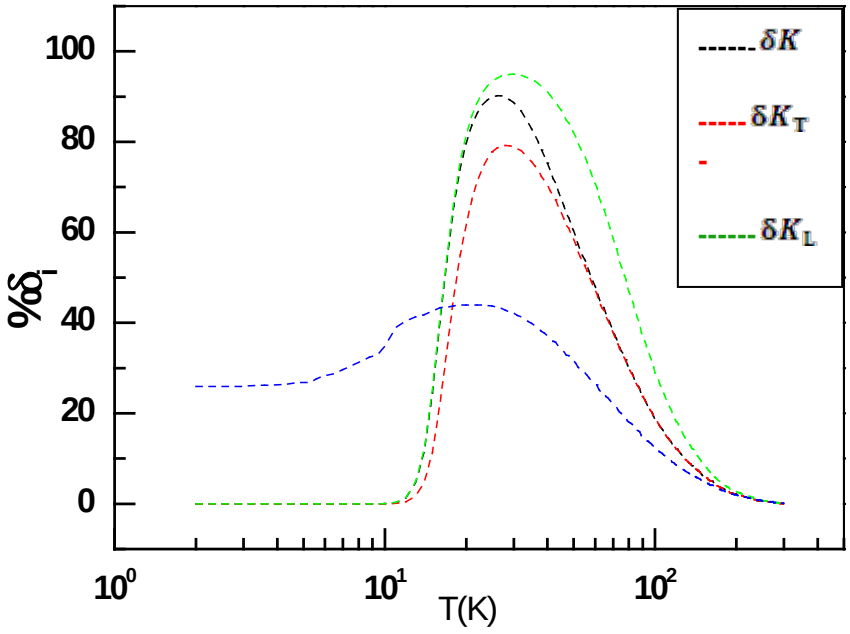
درجة حرارة ديباي كدالة لدرجة الحرارة و لكلا النمطين(الشكل 11)،باستخدام العلاقة الآتية:

$$\%\delta K = \frac{K(\theta_D(cons.)) - K(\theta_D(T))}{K(\theta_D(cons.))} \times 100\%$$

$K(\theta_D(cons.))$:تشير إلى التوصيل الحراري عندما تكون درجة حرارة ديباي قيمة ثابتة. يعرض الشكل أيضا مقدارالتغير المئوي لدرجة حرارة ديباي, مستخدما العلاقة الآتية:

$$\%\delta\theta_D = \frac{\theta_D(cons.) - \theta_D(T)}{\theta_D(cons.)} \times 100\%$$

التغير, نلاحظ $\%\delta K_I$ يكون متغلبا على $\%\delta K_T$, و يصح العكس عند المنطقة التي تسبق القمة. يعزى هذا التصرف إلى وجود العمليات الاومكلابية في كلا الصنفين (I و II) من عمليات التشتت الفونوني الثلاثي. تتفق هذه النتائج مع ما توصل إليه كل من [8,9,11,20,29]. كما يلاحظ أن أقصى قيمة يصل إليها $\%\delta K$ هي 90% عند درجة حرارة 26K



الشكل (11): التغير المئوي للتوصيل الحراري الشبيكي و درجة حرارة ديباي كدالة لدرجة الحرارة .

الاستنتاجات

نستنتج مما تقدم:

1 – نجاح صيغة عواد في حساب التوصيل الحراري الشبيكي للمركب ZnS ضمن مدى درجات حرارة يتراوح (2-300) درجة مطلقة.

2– الإسهام المئوي ل لفونونات المستعرضة K_T في التوصيل الحراري الشبيكي يكون اكبر منه للفونونات الطولية K_L .

3– تلعب عمليات التشتت الفونوني بالحدود البلورية والعيوب النقطية دورا مهما عند الترددات الواطئة، في حين تهيمن عمليات التشتت الفونوني الثلاثي على بقية التشتتات في مديات التردد العالي.

4–انتقال الحرارة يكون محكوما بإسهام الفونونات المحفوظة الزخم في العمليات الاعتيادية(Normal Processes). بينما تسيطر العمليات الفونونية غير محفوظة الزخم (Umklapp Processes) على الإعاقة الحرارية عند درجات الحرارة العالية.

5– عند درجات الحرارة الواطئة، يمكن ملاحظة سيادة تشتت الفونون بالعيوب النقطية لكلا النمطين الطولي والمستعرض. أما عند العالية منها فتكون للتشتت الفونوني الثلاثي للعمليات الاومكلابية ولكلا النمطين.

درجة حرارة ديباي θ_D قيمة مؤثرة في حساب التوصيل الحراري الشبيكي للمركبZnS, بحيث نحصل عند استخدامها كدالة لدرجة الحرارة $\theta_D(T)$ ، على قيم أكثر دقة مما كانت عليه عند استخدام $\theta_D(const.)$. كما يتبين لنا نجاح صيغة عواد في استخدام $\theta_D(T)$.

المصادر

1. S. L. Shinde and J. S. Goela," High Thermal Conductivity Materials", Springer Science and Business Media (2006) .
2. J. Callaway, Phys. Rev. 113, 1046 (1959) .
3. M.G. Holland, Phys. Rev. 134, A471 (1964).
4. M.S. Omar and H.T. Taha, Indian Academy of Scien. 35(2), 177 (2010).
5. M.D. Kamatagi , R.G. Vaidya , N.S. Sankeshwar and B.G. Mulimani, Intern. J. of Heat and Mass Transfer 52 , 2885 (2009).
6. S. Bhattacharya, R. Amalraj, and S. Mahapatra , IEEE Electron Device letters , 32(2), 345(2011).
7. M.G. Holland, Phys. Rev. 132, 2461 (1963) .
8. A.H. Awad, Ph.D. Thesis, Basrah University, Basrah (Iraq) (2003).
9. A.J. Mohammed, M. Sc. Thesis, Basrah University,_Basrah , Iraq(2007).
10. A. S. Mahdi, M. Sc. Thesis, Basrah University, Basrah, Iraq(2007).
11. D. B. Habesh, M. Sc. Thesis, Basrah University, Basrah, Iraq(2008).
12. A. Lifta, M.Sc. Thesis, Basrah University, Basrah, Iraq(2010).
13. H.A.Hasan, M.Sc. Thesis, Basrah University, Basrah, Iraq(2011).
14. K.R. Wilkinson and J.Wilks, Proc. Roy. Soc. (London) A64,89(1951).
15. A.D. Zdetsis and C.S. Wang, Phys. Rev. B19, 2999 (1979) .
16. H. Serizawa, Y. Arai, M. Takano and Y. Suzuki, J. of Alloys and Compounds 282, 17 (1999).
17. K.S. Dubey and G.S. Verma, Phys. Rev. B7, 2879 (1973).
18. P.C. Sharma, K.S. Dubey and G.S. Verma, Phys. Rev. B4, 1306 (1971) .
19. E.J. Mohamed, R.H. Misho and K.S. Dubey, Indian J. of Pure and Appl. Physics 15, 442 (1977).
20. A.H. Awad and S.N. Shargi, J. of Thermal Analysis 37, 277 (1991).
21. K.S. Dubey, J. Thermal Analysis 19, 263 (1980) .
22. H.B.G. Casimir, Physica 5, 595 (1938).
23. P.G. Klemens, Solid State Physics 7, edited by F. Seitz and D. Turnbull, Academic Press, New York, 1 (1958).
24. G.L. Guthrie, Phys. Rev. B3, 3373 (1971).
25. R.D. Bijalwan, P.N. Rami and M.D. Tiwarii, J. Phys. C: Solid State Phys., 16, 2537(1983).
26. D.N.Talwar, M. Vandevyver, K. Kunc and M. Zigone , Phys. Rev. B24 , 2 (1981).
27. A.H. Awad and K.S. Dubey, J. of Thermal Analysis 24, 233(1982).
28. A.H. Awad, J. of Thermal Analysis and Calorimetry 63,597 (2001).
29. A.H. Awad, M.Sc. Thesis, Basrah University, Basrah (Iraq) (1982).