متوفرة على الموقع: http://www.basra-science-journal.org

ISSN –1817 –2695

التوصيل الحراري الشبيكي وحد التصحيح للمركب (GaN)

اسراء محمد علي

قسم الفيزياء – كلية التربية - جامعة البصرة

البصرة – العراق

الاستلام 24-8-2011، القبول 1-12-2011

الملخص:

استعرضت الدراسة إمكانية تطبيق علاقة التفريق للشبيكة ثنائية الذرة المقدمة من قبل (Awad) بأستخدام دالة التوزيع غير المتزن في حساب التوصيل الحراري الشبيكي (K) وحد التصحيح (ΔK) لمركب نتريد الكاليوم (Gallium Nitride) (GaN) ضمن مدى درجات الحرارة (400-5) درجة مطلقة.

توصلت الدراسة الى تطابق جيد مع القيم العملية للتوصيل الحراري الشبيكي ولاسيما عند قمة منحني التوصيلية ، وكذلك الى قيم صغيرة جداً لحد التصحيح وإسهامه المئوي بحيث يمكن اهماله عند مدى درجات حرارة الدراسة. تمت دراسة تأثير دالة Awad للأس الحراري m(T) على التوصيل الحراري وحد التصحيح ، اذ أظهرت النتائج قدرة هذه الدالة على معالجة التوصيل الحراري الشبيكي عند درجات الحرارة العالية.

إهتم البحث بدراسة تأثير التغير في معدلات إسترخاء التشتت الفونوني بالحدود البلورية والعيوب النقطية والتشتت الفونوني الثلاثي والرباعي على التوصيل الحراري الشبيكي ولكلا الفونونات المستعرضة والطولية ، اذ لوحظ ان التشتتات الفونونية تؤثر بشكل واضح على منحنيات التوصيلية ، وتختلف بالقيم المؤثرة . كما عينت الدراسة مدى درجات الحرارة لفعالية التشتتات الفونونية المؤثرة .

الكلمات المفتاحية : التوصيل الحراري ، حد التصحيح ، معدل إسترخاء التشتت الفونوني

المقدمة:

في السنوات الأخيرة ، وجه الإنتباه والإهتمام نحو دراسة التوصيل الحراري الشبيكي لشبه الموصل نتريد الكاليوم (GaN) ، اذ وجد انه يستخدم في الطاقات العالية والترددات العالية وكذا درجات الحرارة العالية ، التي لها تطبيقات هائلة في مجال الصناعة ، مثل صناعة الدايودات الليزرية وكمصادر للطاقة المايكروويفية ، وصناعة الترانزستورات ، مما فرض متطلبات ومقاييس عالية للنقاوة البلورية ، لذا اصبح من الأهمية دراسة وتحسين الصفات الحرارية لهذا المركب [1] .

بعض الدراسات التي تناولت حساب التوصيل الحراري الشبيكي للمركب GaN [1-5] ضمن مدى درجات حرارة يتراوح بين $(20 < T < 400K)$ و $(60 - 300K)$ نسبت القيم الواطئة (العالية) للتوصيلية الحرارية الى تأثير الشوائب والعيوب الشبيكية وكذلك تأثير النظائر (Isotopes).

تعد دراسة Callaway [6] من أولى الدراسات في حساب منحني التوصيلية عند درجات الحرارة الواطئة إذ استطاع أن يضع أول أنموذج رياضي لحساب التوصيل الحراري الشبيكي (Lattice Thermal Conductivity) للمواد العازلة وشبه الموصلة.

تتكون صيغة Callaway من حدين، يمثل الحد الأول التوصيل الحراري الناتج عن مجموع معدلات الإسترخاء للتشتتات الفونونية المشتركة (Combined Phonon scattering relaxation rate)، في حين يمثل الثاني الإسهام الناتج عن معدل إسترخاء العمليات الاعتيادية(Normal processes relaxation rate) ، ويعرف بحد التصحيح (ΔK) (Correction Term) ، اذ لاحظ إسهاماً مؤثراً لها في قيمة التوصيل الحراري على الرغم من عدم تسببها بأي إعاقة حرارية مباشرة لكونها عمليات ذات زخم محفوظ. يتركز دور هذه العمليات في محاولة إعادة التوزيع الاعتباطي للفونونات الى دالة التوزيع المزاحة(Displaced distribution function)

لقد أُجريت العديد من الدراسات لحساب مساهمة حد التصحيح (ΔK) ضمن إطار تكامل Callaway (Callaway Integral) وتكامل Callaway المعمم (Generalized Callaway Integral) ، اذ بينت ان قيمة (ΔK) صغيرة جداً بالمقارنة مع التوصيل الحراري مما يؤدي الى إهمالها ، بإستثناء بعض المواد والمركبات التي تكون فيها قيمة ΔK مؤثرة على نتائج التوصيل الحراري الكلي [7] .

عمل عدد من الباحثين السابقين [7-9] على اقتراح علاقات للتوصيل الحراري وذلك بإستخدام علاقات تفريق أكثر تطوراً من تلك المستعملة من قبل Callaway [6]، الا ان تلك الدراسات لم تخرج عن إطار التقريبات. عمدت هذه الدراسات الى اقتراح صيغ لعلاقة التفريق للفونونات الطولية (Longitudinal phonons) تختلف عن تلك المستعملة للفونونات المستعرضة (Transverse phonons). وقد وجد ان نسبة الخطأ في أغلب الدراسات التي استعملت أنموذج Callaway لحساب التوصيل الحراري الشبيكي المعتمد على علاقة التفريق لـــ Debye والتي تصح للترددات الواطئة فقط ، تتجاوز نسبة 40% ، كما وجد ان فرضية Debye تمثل تقريبا 60% من العلاقة الحقيقية لعلاقة التفريق للفونونات الصوتية [10] .

لذلك سعى Awad [11] للتوصل الى أنموذج رياضي لحساب التوصيل الحراري الشبيكي وحد التصحيح ، استعمل فيه علاقات التفريق للشبيكة الأحادية والثنائية الذرة ، من خلال إستخدام تأثير كل من علاقة التفريق للفونونات الصوتية ودالة التوزيع غير المتزن (Non-equilibrium distribution function) الناتجة عن التفاعل مع الذرات القريبة الجوار وعن تلك الناتجة عن التفاعل مع جميع الذرات. وقد بينت الدراسات الحديثة قدرة هذه العلاقات على تفسير النتائج التجريبية لمنحنيات التوصيل الحراري للعناصر والمركبات شبه الموصلة [12-15].

ان هدف الدراسة الحاليه يتمثل بحساب التوصيل الحراري الشبيكي للمركب (GaN) بإستخدام علاقات Awad للشبيكة ثنائية الذرة، وتأثير دالة التوزيع غير المتزن ، مع عمل مقارنة لدراسة حديثة أمستخدمت أنموذج Callaway [16]. كما تم فحص أهمية إسهام كل نمط من أنماط التوصيل بتقدير النسبة المئوية لإسهامها في التوصيل الحراري الكلي . لغرض التعامل مع النتائج العملية للتوصيل الحراري الشبيكي لهذا المركب على نحو واسع ، قمنا بالتحقق من تأثير معدل الإسترخاء للعمليات الفونونية الاعتيادية ، أي حساب قيم حد التصحيح (ΔK) وإسهامه المئوي في التوصيل الحراري الكلي ، كما تمت مناقشة دور تشتت الفونون بحدود البلورة في حساب التوصيل الحراري.

المعالجة النظرية:

عندما يكون الحيز البريليوني متناظراً كروياً ، أي ان للفونونات ثلاث حالات إستقطاب ، اثنتان منها مستعرضة وواحدة طولية ، وبفرض ان كلاً منها تسهم بشكل مستقل في التوصيل الحراري الشبيكي الكلي [5] ، فأن علاقة التوصيل الحراري تتخذ الصيغة الاتية :

$$K = K_L + 2K_T \qquad ....(1)$$

حيث ان K_L و K_T تمثلان التوصيل الحراري الشبيكي للفونونات الطولية والمستعرضة على التوالي

لمعالجة مقدار الإنحراف عن دالة التوزيع المتزن وتصحيح معادلة التوصيل الحراري الشبيكي ، ولغرض التوصل الى نتائج اكثر دقة في حساب قيم K و ΔK ، إستخدمت الدراسة الحاليه علاقات Awad [11] لشبيكة ثنائية الذرة ببعد واحد ، وبإستخدام دالة التوزيع غير المتزن ، فكانت صيغة التوصيل الحراري الشبيكي للفونونات الطولية والمستعرضة على التوالي كما يلي :

$$k_L = c_2 \frac{\theta_L^2}{C_{\upsilon L}} \int_0^{\theta_L/T} \left[\tau_C^L \frac{x^2 e^x}{(e^x-1)^2} \frac{\sqrt{J_0(1-J_0)}(\sin^{-1}\sqrt{J_0})^2}{(1-2J/M_0)} \right] \mathrm{dx} \qquad .....(2)$$

$$k_T = c_2 \frac{\theta_T^2}{C_{\upsilon T}} \int_0^{\theta_T/T} \left[\tau_C^T \frac{x^2 e^x}{(e^x-1)^2} \frac{\sqrt{J_0(1-J_0)}(\sin^{-1}\sqrt{J_0})^2}{(1-2J/M_0)} \right] \mathrm{dx} \qquad .....(3)$$

حيث ان

$$c_2 = \frac{MK_B^4}{6\pi^2 a\hbar^2 (M+m)} \quad .....(4)$$

a ثابت الشبيكة ، M كتلة الذرة الاولى ، m كتلة الذرة الثانية بحيث $M > m$ ، $\hbar$ ثابت بلانك مقسوماً على 2π ، K_B ثابت بولتزمان ، Tدرجة الحرارة ، w تردد الفونون ، اما الكميتان θ_L و θ_T تمثلان درجة حرارة ديباي للفونونات الطولية والمستعرضة على التوالي . كما ان

$$J = T^2 x^2 / \mathrm{M}\theta^2 \quad .....(5)$$

$$J_0 = J(M+m)(1 - J/M_0) \quad .....(6)$$

$$M_0 = (M+m)/Mm \quad .....(7)$$

$$x = \hbar\, w / K_B T \quad .....(8)$$

$$\tau_C^{-1} = \tau_N^{-1} + \tau_R^{-1} \quad .....(9)$$

τ_N^{-1} تمثل معدل إسترخاء التشتت الفونوني الثلاثي للعمليات الاعتيادية ، τ_R^{-1} تمثل مجموع معدلات إسترخاء التشتتات الفونونية الاخرى .

اما حد التصحيح في حالة إستخدام دالة التوزيع غير المتزن فيعطى بالعلاقة الاتية :

$$\Delta K_{L(T)} = c_2 \frac{\theta_{L(T)}^2}{C_{\upsilon L(T)}} \left[I_1 I_2 / I_3 \right] \quad .....(10)$$

حيث ان

$$I_1 = \int_0^{\theta_{L(T)}/T} \left[\frac{\tau_C^{L(T)}}{\tau_N^{L(T)}} \frac{x e^x}{(e^x - 1)^2} (\sin^{-1}\sqrt{J_0})^3 \right] \mathrm{dx} \quad .....(11)$$

$$I_2 = \int_0^{\theta_{L(T)}/T} \left[\frac{\tau_C^{L(T)}}{\tau_N^{L(T)}} \frac{e^x}{(e^x - 1)^2} \frac{J_0(1-J_0)(\sin^{-1}\sqrt{J_0})^3}{(1 - 2J/M_0)^2} \right] \mathrm{dx} \quad .....(12)$$

$$I_3 = \int_0^{\theta_{L(T)}/T} \frac{1}{\tau_N^{L(T)}} \left(1 - \frac{\tau_C^{L(T)}}{\tau_N^{L(T)}}\right) \frac{e^x}{x(e^x - 1)^2} \frac{\sqrt{J_0(1-J_0)}(\sin^{-1}\sqrt{J_0})^4}{(1 - 2J/M_0)} \mathrm{dx} \quad .....(13)$$

والسعة الحرارية النوعية تعطى بالعلاقة التالية :

$$C_{\upsilon L(T)} = \frac{V(M+m)\hbar T}{2\pi^2 a^3 M \theta_{L(T)}^2} \int_0^{\theta_{L(T)}/T} \frac{x^3 e^x}{(e^x - 1)^2} \frac{(\sin^{-1}\sqrt{J_0})^2 (1 - 2J/M_0)}{\sqrt{J_0(1-J_0)}} \mathrm{dx} \quad .....(14)$$

في دراستنا للتوصيل الحراري الشبيكي للمركب GaN وضمن مدى درجات الحرارة (400-5) درجة مطلقة فأن عمليات التشتت الفونوني المستخدمة تتمثل بعمليات التشتت الفونوني بحدود البلورة والعيوب النقطية ، وعمليات التشتت الفونوني الثلاثي والرباعي . بين Casimir [17] ان معدل إسترخاء التشتت الفونوني بحدود البلورة τ_B^{-1} لا يعتمد على حجم البلورة ولا على تردد الفونون ، ويتخذ الصيغة التالية:

$$\tau_B^{-1} = \frac{\upsilon}{FL} \quad ....(15)$$

حيث ان υ متوسط سرعة الفونون، L طول كازمير (Casimir length)، F معامل التصحيح Correction factor، والذي يرتبط بالقيمة f بالعلاقة التالية: $F = \frac{2-f}{f}$ حيث تمثل f القيمة الكسرية لعدد الفونونات التي تعاني من عملية التشتت بحدود البلورة، وهذا يعني ان

$$F = \frac{\tau_B^{-1}(\text{exp.})}{\tau_B^{-1}(theor.)} \quad .....(16)$$

حيث ان $\tau_B^{-1}(theor.)$ و $\tau_B^{-1}(\text{exp.})$ تمثلان القيمة النظرية والعملية للتشتت الفونوني بحدود البلورة على التوالي.

استخدمت الصيغ الرياضية المقدمة من قبل Klemens [18] و Pomeranchuk [19] لحساب كلاً من ، وعلى التوالي ، معدل إسترخاء التشتت الفونوني بالعيوب النقطية τ_{pt}^{-1} ومعدل إسترخاء التشتت الفونوني الرباعي τ_{4ph}^{-1} وكالاتي:-

$$\tau_{pt}^{-1} = Aw^4 = w^4 . \frac{V}{4\pi v^3} \sum_i n_i (1 - m_i / \overline{m})^2 \quad .....(17)$$

$$\tau_{4ph}^{-1} = B_H w^2 T^2 \quad .....(18)$$

حيث ان V حجم البلورة ، n_i التركيز الجزئي لذرات الشوائب i ، m_i كتلة الذرة الشائبة i ، $\overline{m}$ معدل كتلة الذرة في الشبيكة ، B_H قوة التشتت للفونونات الرباعية ، A تمثل قوة التشتت الفونوني بالعيوب النقطية ، والتي يتضح من العلاقة رقم (17) انه بالإمكان إستخدام قيمتها نفسها لكلا نمطي التوصيل ، نظراً لإعتمادها على طبيعة النمط كونه طولياً او مستعرضاً وصغر إسهام الفونونات الطولية في التوصيل الحراري.

بإستخدام تصنيف Guthrie [20] للعمليات الفونونية الثلاثية ، استطاع Dubey [7] تضمين صيغة معدل إسترخاء التشتت الفونوني الثلاثي كلا العمليتين الاعتيادية $\tau_{3ph,N}^{-1}$ والاومكلابية $\tau_{3ph,U}^{-1}$، وعليه فإن معدل الإسترخاء للتشتت الفونوني المشترك للفونونات المستعرضة $(\tau_C^T)^{-1}$ يأخذ الصيغة التالية:

$$(\tau_{3ph}^T)^{-1} = \left(B_{TN,I} + B_{TU,I}\ e^{-\theta_D/3T}\right) w T^{m_{T,I}(T)} \quad \text{for} \quad 0 - q_{max} \quad .....(19)$$

ويكون للفونونات الطولية على الشكل التالي :

$$(\tau_{3ph}^{L})^{-1} = \left(B_{LN,I} + B_{LU,I}\ e^{-\theta_D/3T}\right) w^2 T^{m_{L,I}(T)} + \left(B_{LN,II} + B_{LU,II}\ e^{-\theta_D/3T}\right) w^2 T^{m_{L,II}(T)} \quad \text{for} \quad 0 - q_{max} \quad \ldots\ldots (20)$$

حيث ان

B_N و B_U يمثلان قوتي التشتت للعمليات الفونونية الاعتيادية والاومكلابية على التوالي ، θ_D درجة حرارة ديباي $m\ (T)$ يمثل الأس الحراري .

استخدمنا صيغة Awad التالية في التعبير عن دالة الأس الحراري $m\ (T)$ [11]:

$$m\ (T) = xe^{x}/(e^{x} - 1) \quad \ldots.(21)$$

استناداً لما تقدم ، يمكن كتابة معدل الإسترخاء الكلي τ_c^{-1} كمجموع لمعدلات الإسترخاء لعمليات التشتت الفونوني الموضحة أعلاه ، بالشكل الاتي:

$$(\tau_c^i)^{-1} = (\tau_B^i)^{-1} + (\tau_{pt}^i)^{-1} + (\tau_{3ph}^i)^{-1} + (\tau_{4ph}^i)^{-1} \quad \ldots\ldots(22)$$

حيث i تشير لكل من T او L للموجات المستعرضة او الطولية.

النتائج والمناقشة:

بالإستعانة بعلاقات عواد (المعادلات 14-2)، تم حساب التوصيل الحراري الشبيكي وحد التصحيح للمركب GaN ضمن مدى درجة حرارة (5-400) درجة مطلقة. كما إستخدمت صيغة Dubey الخاصة بمعدل إسترخاء التشتت الفونوني الثلاثي τ_{3ph}^{-1} (المعادلات 19،20) ومعادلة Awad لدالة الأس الحراري (معادلة 21) كما إستخدمت المعادلات (22 و 15-20) لحساب معدل الإسترخاء الكلي للتشتتات الفونونية. و النتائج موضحة في الاشكال (1) و (2) و (3).

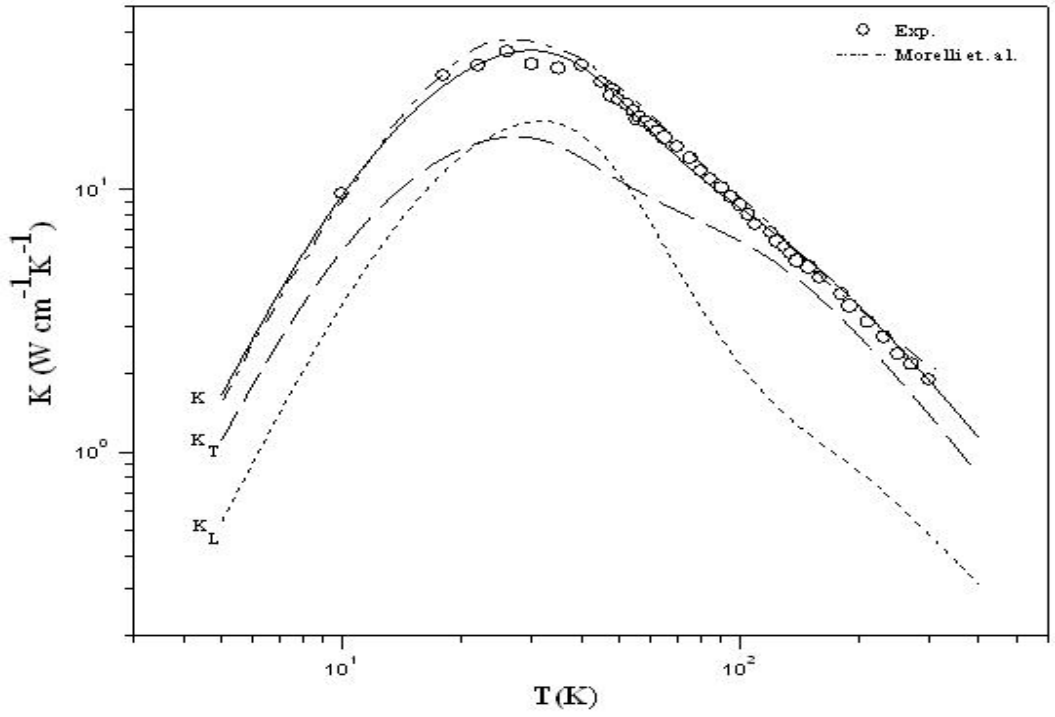
إستخدمت الدراسة قيم الثوابت 3.1896 = $A^o a$ والكتل $M(Ga) = 1.158 \times 10^{-22}$ gm و $m(N) = 0.232 \times 10^{-22}$ gm [21]. اما θ_D ، θ_T و θ_L فقد عوضت بالقيم (650 K) ، (301 K) و (434 K) على التوالي [16] .

يمثل الجدول (1) قيم قوى التشتت المستحصلة نتيجة لعملية التطابق بين القيم العملية [16] والنظرية للتوصيل الحراري الشبيكي للمركب (GaN) .

جدول (1): قيم قوى التشتت المستخدمة في حساب "توصيل الحراري الشبيكي للمركب (GaN)

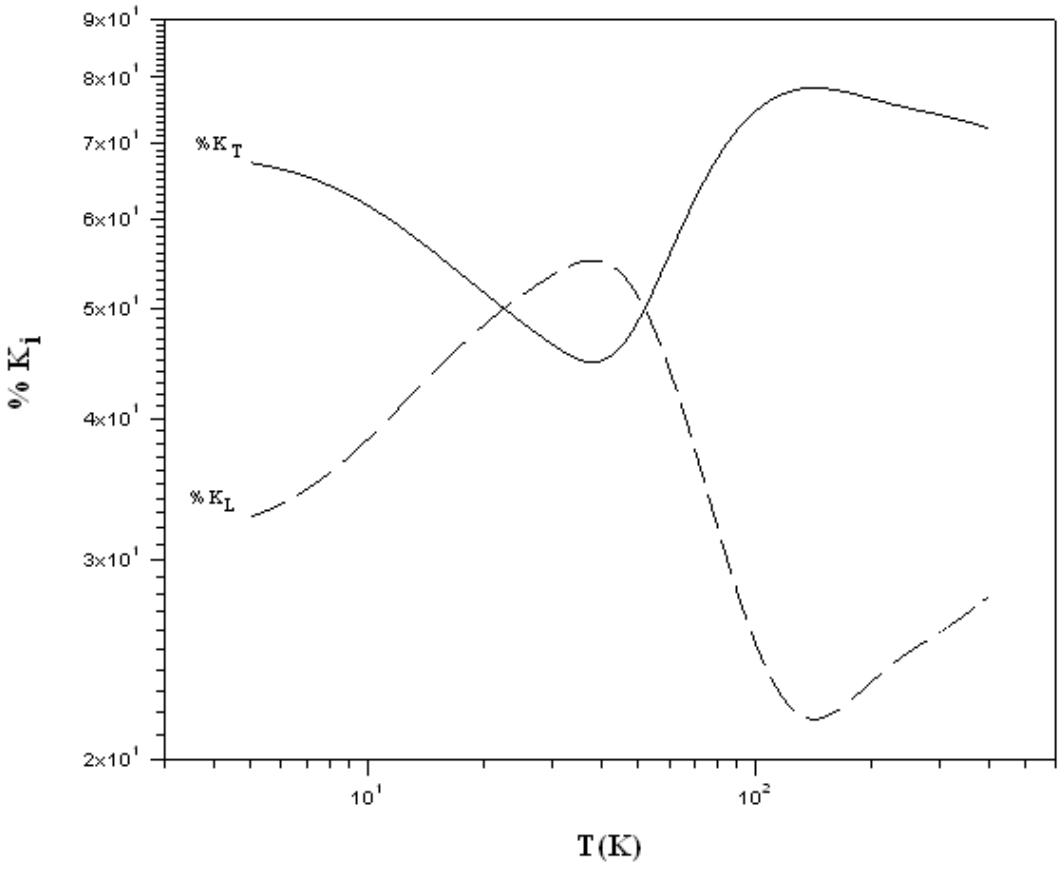
Parameter العامل	Value القيمة
τ_{BT}^{-1} (s^{-1})	$1.80x10^{6}$
τ_{BL}^{-1} (s^{-1})	$2.70x10^{6}$
A (s^{3})	$3.0x10^{-46}$
B_{TN}(deg^{-m})	$1.0x10^{-13}$
B_{TU}(deg^{-m})	$5.0x10^{-10}$
$B_{LN,I}$($s.deg^{-m}$)	$3.5x10^{-25}$
$B_{LU,I}$($s.deg^{-m}$)	$7.0x10^{-23}$
$B_{LN,II}$($s.deg^{-m}$)	$8.0X10^{-23}$
$B_{LU,II}$($s.deg^{-m}$)	$4.0x10^{-20}$
B_{HT}($s.deg^{-2}$)	$2.4x10^{-23}$
B_{HL}($s.deg^{-2}$)	$5.0x10^{-24}$
f_T	2.87
f_L	3.69

يوضح الشكل (1) مدى التطابق بين القيم العملية والنظرية للتوصيل الحراري الشبيكي للمركب موضع الدراسة، كما يبين إسهام الفونونات الطولية K_L والمستعرضة K_T في التوصيلية الكلية. للمقارنة إستخدمت القيم العملية والنظرية للتوصيل الحراري الشبيكي التي توصل اليها Morelli et.al. [16]، اذ نجد عند قمة منحنى التوصيلية ان التطابق غير تام مع نتائج Morelli et.al. [16] المعتمدة على نموذج Callaway .هذا ناتج عن مجموعة التقريبات المستخدمة في النموذج والتي تم معالجتها في أنموذج Awad ، حيث كانت القيم النظرية اكثر توافقاً مع القيم العملية ، كما يظهر الشكل مدى فعالية التوصيل الحراري الشبيكي للجزء الفونوني المستعرض K_T والطولي K_L .



الشكل (1): التوصيل الحراري الشبيكي للمركب (GaN) وإسهام الفونونات المستعرضة والطولية ضمن المدى (5 – 400 K) .

اما الإسهام المئوي لكل من الفونونات الطولية K_L % والمستعرضة K_T % في التوصيل الحراري الكلي فيوضحها الشكل (2)، اذ يلاحظ عند القيمة القصوى لمنحني التوصيلية ($\approx$ 25 درجة مطلقة) تناقصاً في إسهام الفونونات المستعرضة ، ومن ثم يعاود بالتزايد عند حدود ($\approx$ 50 درجة مطلقة) ، في حين يظهر العكس في إسهام الفونونات الطولية . هذا التصرف يعزى الى زيادة تأثير إسهام تشتت الفونونات بالعيوب النقطية في قيم الإعاقة الحرارية عند هذا المدى من درجات الحرارة. يتفق هذا التصرف مع ما وجده عدد من الباحثين[11,22]. بصورة عامة يلاحظ ان إسهام K_T في التوصيل الحراري الكلي يكون متغلباً على إسهام K_L وعلى مدى درجات حرارة الدراسة، اذ يعود هذا التصرف الى وجود نمطين للفونونات المستعرضة و نمط واحد للفونونات الطولية [14,23] .

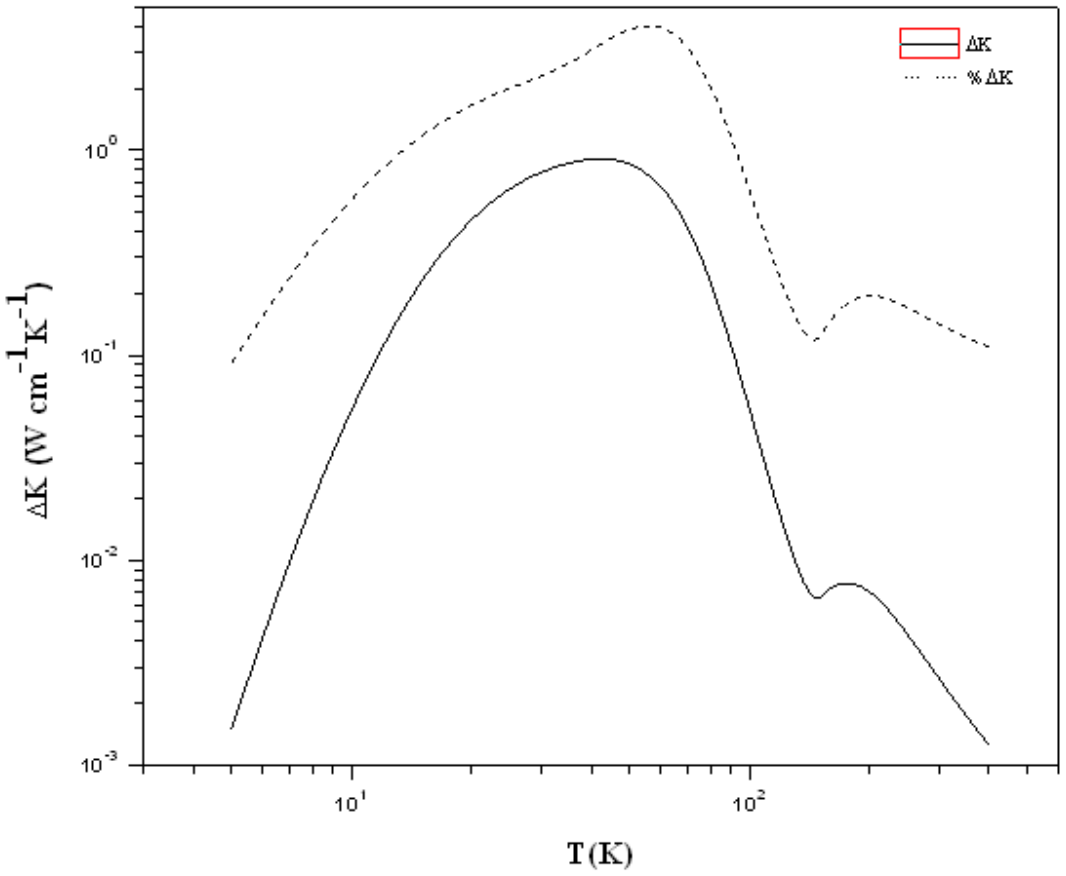


الشكل (2) :الإسهام المئوي لنمطي التوصيل في التوصيل الحراري الشبيكي للمركب (GaN).

إستخدمت المعادلات (10، 3، 2) والعلاقة التالية لحساب حد التصحيح ΔK والنسبة المئوية لإسهامه في التوصيل الحراري الكلي عند نفس المدى من درجات الحرارة

$$\% \Delta K = \frac{\Delta K}{K} \text{ x } \%100$$

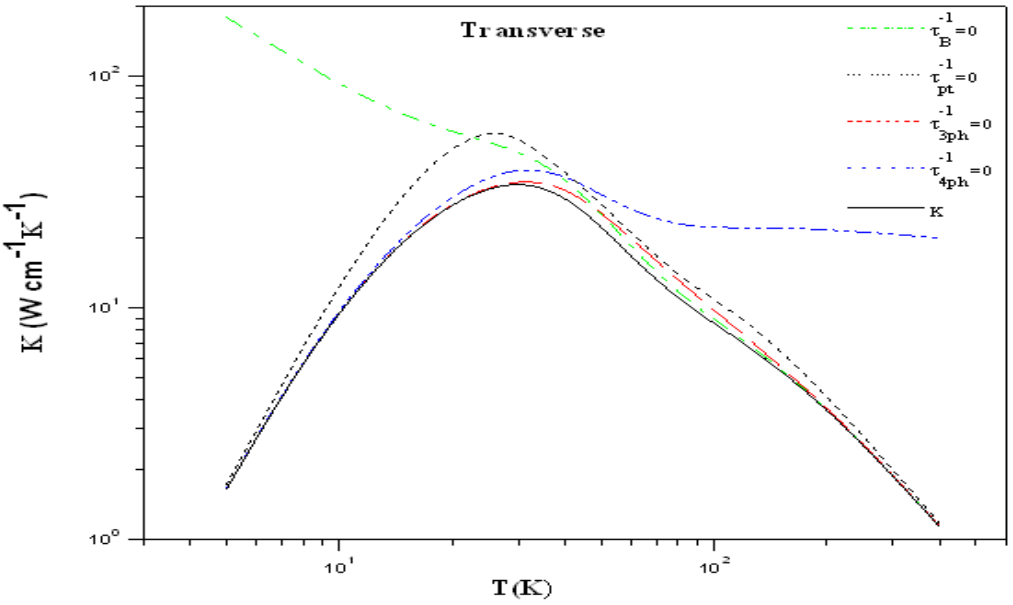
والشكل (3) يبين النتائج المستحصلة ، اذ يوضح قيماً صغيرة جداً لحد التصحيح وإسهامه المئوي في التوصيل الحراري الشبيكي الكلي ، بحيث يمكن إهماله دائماً عند جميع مدى درجات حرارة الدراسة . وهذا يتفق تماماً مع ما توصل اليه الباحثون [5,15].



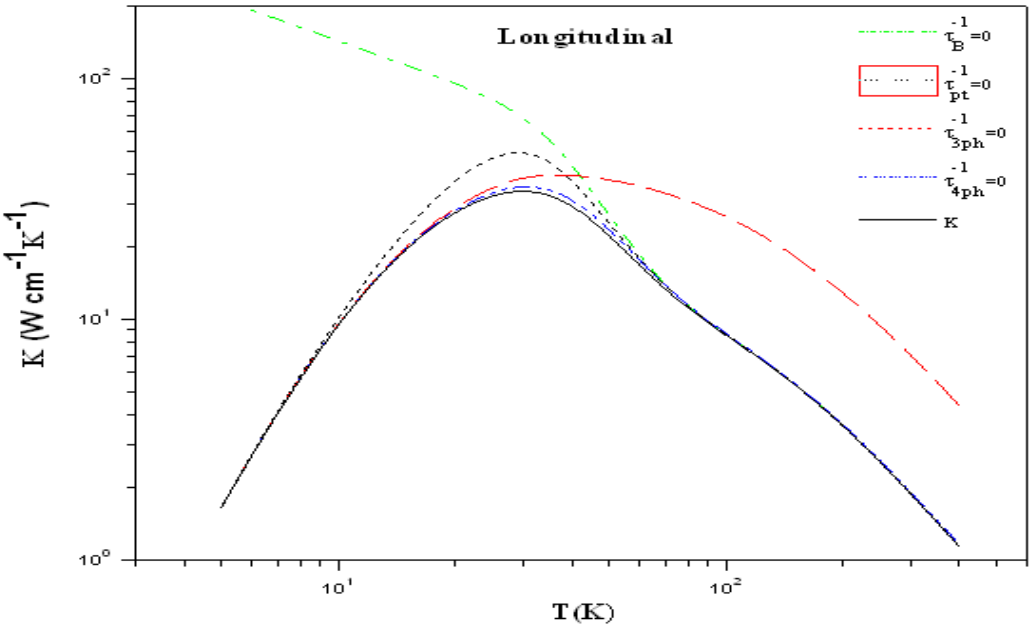
الشكل (3) : حد التصحيح وإسهامه المئوي في التوصيل الحراري الشبيكي للمركب (GaN).

اما الشكلان (4) و(5) فيمثلان الدور الذي تلعبه التشتتات الفونونية المستخدمة في الدراسة عند حساب التوصيل الحراري الشبيكي ولكلا النمطين من الفونونات ، اذ نلاحظ أن منحنيات التوصيلية تأخذ تصرفاً متماثلاً عند درجات الحرارة الواطئة تقريبا عند $(T \le 10\,K)$ ، اذ تكون السيطرة واضحة للتشتت الفونوني بحدود البلورة τ_B^{-1} على بقية آليات التشتت ، في حين عند قمة منحني التوصيلية تقريباً عند $(T \le 30\,K)$ نلاحظ سيطرة τ_{pt}^{-1} على معدلات الإسترخاء.

على مدى درجات الحرارة العالية ، يظهر بشكل واضح في المناطق التي تقع بعد قمة منحني التوصيلية سيادة τ_{3ph}^{-1} للفونونات الطولية وسيادة τ_{4ph}^{-1} للفونونات المستعرضة. لقد اشار للتصرف نفسه كلاً من Kamatagi et. al. [1] و Lifta [14] في دراستهم لعناصر ومركبات مختلفة.



شكل رقم (4) تأثير معدلات إسترخاء التشتتات الفونونية المختلفة في قيم التوصيل الحراري الشبيكي للفونونات المستعرضة.

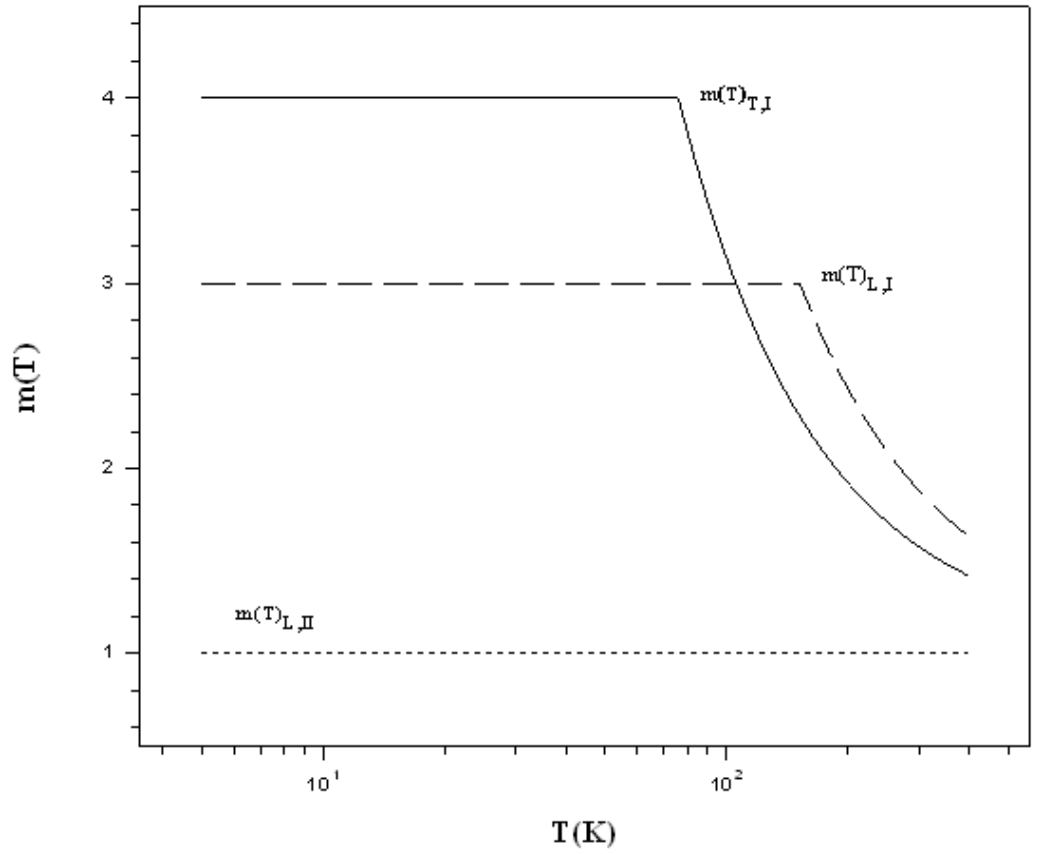


شكل رقم (5) تأثير معدلات إسترخاء التشتتات الفونونية المختلفة في قيم التوصيل الحراري الشبيكي للفونونات الطولية.

بشكل عام يعطي الشكلان (5 و 4) انطباعاً عن طبيعة تغير كل تشتت من التشتتات المستخدمة ، وتوضح مدى درجات الحرارة لفعاليتها المؤثرة ، كما نلاحظ ان تغير التشتت الفونوني الثلاثي والتشتت الرباعي يؤثر بشكل واضح على قيمة وموقع قمة منحني التوصيلية .

الشكل (6) يوضح تأثير دالة الأس الحراري m(T) على التوصيل الحراري الشبيكي ، اذ يبدو واضحاً عند درجات الحرارة الواطئة ان قيمة الأس الحراري للصنف (I) مساوية الى (4) للفونونات المستعرضة و (3) للفونونات الطولية .

في درجات الحرارة الواطئة يكون العامل $(e^{-\theta/3T})$ مقداراً صغيراً جداً ، مما يؤدي الى التناسب $(\tau_{3ph}^{-1} \propto wT^4)$ للفونونات المستعرضة والى التناسب $(\tau_{3ph}^{-1} \propto w^2T^3)$ للفونونات الطولية ، اما في درجات الحرارة العالية فأن قيم m(T) والعامل $(e^{-\theta/3T})$يكون مساوياً الى واحد ، وعليه فان τ_{3ph}^{-1} يكون متناسبا مع (T^{-1}) في كلا النمطين . وهذا يتفق مع الدراسات الحديثة [13,23] .اما عمليات التشتت الفونوني الثلاثي من الصنف (II) في الفونونات الطولية فأن قيم m(T) تكون مساوية الى واحد على طول مدى درجات الحرارة .



الشكل (6): الأس الحراري كدالة لدرجة الحرارة للفونونات المستعرضة والطولية .

كما اوضحنا سابقا ، ان التشتت الفونوني بحدود البلورة يمثل النسبة بين سرعة الفونونات υ والطول المميز للعينة L [17] ، بحيث يرتبط طول كازمير بمساحة المقطع العرضي (S) للعينة بالعلاقة التالية:

$$L = 2\sqrt{S/\pi}$$

تتخذ f قيمة مساوية الى 1.0 عندما تتشتت الفونونات كليا ، واكبر من 1.0 عندما تتشتت بعض تلك الفونونات بحدود البلورة، تم الإشارة الى دور العامل f في قيم التوصيل الحراري الشبيكي في درجات الحرارة الواطئة، اذ تتحكم بتعيين موقع قمة منحني التوصيلية للعناصر والمركبات [1] .

لاتتفق القيم النظرية للطول المميز L كلياً مع القيمة التجريبية ، وعليه كان من الضروري إستخدامها كعوامل ضبط (Adjustable parameter) ، بحيث يكون مقدار التصحيح بالقيمة بمقدار f (الجدول 1) . يسجل الجدول قيم $f > 1$ ، مما يعني وجود حدود داخلية في العينة.هذا يتفق مع ما وجده Morelli et.al. [16] في نفس العينة.وعليه نجد الفرق الواضح بين طول البلورة (0.8×10^{-3}m) وطول كازمير (2.29×10^{-3}m).

الأستنتاجات:

ان الاختلاف الحاصل عند قمة منحني التوصيلية بين نتائج الانموذج المقدم من قبل Awad ونتائج إنموذج Callaway عند المدى نفسه من درجات الحرارة، يشير الى مدى نجاح صيغ Awad في حساب التوصيل الحراري الشبيكي وحد التصحيح للمركب GaN.

لاحظنا استجابه واضحة لمعادلات الاس الحراري المقدمة من قبل Awad في حساب معادلات الاسترخاء للتشتتات الفونونية الثلاثية (إنموذج Dubey).

ان قيم حد التصحيح ΔK تكون محكومة بقيم معدل إسترخاء التشتت الفونوني الثلاثي للعمليات الاعتيادية، وضمن اطار صيغ Awad لدالة التوزيع غير المتزن، نلاحظ امكانية اهمال حد التصحيح بسبب صغر قيمته وإسهامه المئوي في المركب GaN وعند جميع مدى درجات حرارة الدراسة عند حساب التوصيل الحراري الكلي.

يبقى الإسهام المئوي للفونونات المستعرضة K_Tفي التوصيل الحراري الشبيكي مسيطراً على الإسهام المئوي للفونونات الطولية. كما نلاحظ تأثيراً واضحاً لمعدلات إسترخاء التشتتات الفونونية على التوصيل الحراري الشبيكي وبقيم مؤثرة ضمن مدى درجات الحرارة، اذ تكون السيطرة واضحه للتشتت الفونوني بحدود البلورة τ_B^{-1} وبالعيوب النقطية τ_{pt}^{-1} ضمن درجات الحرارة الواطئة، في حين عند درجات الحرارة العالية، تؤدي كلاً من τ_{3ph}^{-1} و τ_{4ph}^{-1} دوراً بارزاً في تحديد قيمة وموقع قمة منحني التوصيلية. كما لابد من الاشارة الى الفرق الواضح بين الطول الحقيقي للبلورة والطول المميز لها.

References:

[1] M.D . Kamatagi, N .S. Sankeshwar, B . G . Mulimani , **Diamond and Related Materials.16**, 98(2007).

[2] C.Luo,D.R.Clarke,J.R.Dryden**,J.Electron. Meter.30**,138(2001).

[3] J.Zou,D.Kotchetkov, A.A.Balandin,D.Florescu, FredH.Pollak, **J.Appl.Phys.92**,2534 (2002).

[4] A.Jezowski, B.A.Danilchenko, M.Bockowski, I.Grzegory, S.Krukoswki, T.Suski, T.Paszkiewicz,**Solid.State.Commun.128**,69(2003).

[5] W.Liu,A.A.Balandin,**J.Appl. Phys.97**,073710(2005).

[6] J.Callaway, **Phys.Rev.113**,1046(1959).

[7] K.S.Dubey, **J.of Thermal Analysis** 18, 447(1980).

[8] Y.P.Joshi and G.S.Verma,**Phys.Rev.Bl,**750(1970).

[9] P.C.Sharma,K.S.Dubey, and G.S.Verma, **Phys.Rev.B3**,1985(1971).

[10] H.M.Tutuncu and G.P.Srivastava, **Phys.Rev.B62,**5028(2000).

[11] A.H.Awad,**PH.D.Thesis**, Basrah University, Basrah (Iraq)(2003).

[12] H.A.Hasan, **M.Sc.Thesis**, Basrah University, Basrah (Iraq) (2011).

[13] I.M.Ali,**Collage of Education, Al-Mustancerai University**,Baghdad (Iraq)(2011) ,to be published.

[14] A.A.Lifta, **M.Sc.Thesis**, Basrah University, Basrah (Iraq) (2009).

[15] A.N.Jarad, **M.Sc.Thesis**, Basrah University, Basrah (Iraq) (2010).

[16] D.T.Morelli, J.P.Heremans and G.A.Slack, **Phys.Rev.B66**, 195304(2002).

[20] H.B.Casimir, **Physica5**,595(1938).

[21] P.G.Klemens , **Solid State Physics 7**, edited by F.Seitz and D.Turnbull, Academic press, New York, 1(1958).

[22] I.Pomeranchuk,**J. Phys.**U.S.S.R5,237(1942).

[23] G.L.Guthrie,**Phys.Rev.B3**,3537(1971).

[24] S.Adachi,**Properties of Group-IV,III-V and II-VI Semiconductors**,ed.Jone Wiley & Sons,Ltd, England (2005).

[25] J.D.Chung,A.J.H.Mc Gaughey,M.Kaviany,**J.Heat Transfer.126**,376(2004).

[26] A.J.Mohammed, **M.Sc.Thesis**, Basrah University, Basrah (Iraq) (2007).

Lattice Thermal Conductivity and Correction Term of (GaN) compound

Isra'a M.Ali
Department of Physics - Collage of Education
University of Basrah
Basrah –Iraq
Email: israa.ali6974@yahoo.com

Abstract:

The study surveys the ability of applying the dispersion relation of diatomic lattice provided by Awad, using the Nonequilibrium distribution function, to calculate the lattice thermal conductivity and correction term ΔK for (GaN) compound at temperature range between (5-400K).

The study approaches to a good agreement with the experimental values of the lattice thermal conductivity, especially in the maximum point of the conductivity curve. Also the present work shows very small values for the correction term and its percentage contribution, which could be neglected at wide range of temperature.

We studied the effect of the Awad's temperature exponent m(T) on the lattice thermal conductivity and the correction term. The results showed the possibility of this function to deal with the high temperature lattice thermal conductivity of GaN.

The paper studies the impact of the change in the relaxation rates of phonon scattering by the boundaries, point defects, three phonon and four phonon on the lattice thermal conductivity for both transverse and longitudinal phonons, where a significant impact on the conductivity curves, and difference in effectual values have been noted. The study appoints the temperature range of the activity of the phonon scattering .

Keywords : Thermal conductivity, Correction term, Phonon scattering relaxation rate.