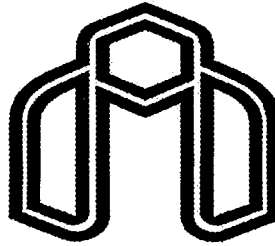


به نام خدا



دانشگاه صنعتی شاهرود

دانشکده فیزیک

گزارش طرح پژوهشی

عنوان طرح:

رسانندگی گرمایی در GaN

کد ۲۴۰۸

مجری طرح: حسین عشقی

دی ماه ۱۳۸۳

این طرح با استفاده از اعتبارات پژوهشی دانشگاه صنعتی شاهرود انجام شده است و تاریخ تصویب و خاتمه آن به ترتیب ۸۳/۷/۱۸ و ۸۳/۱۰/۲۷ می باشد.

چکیده

در این طرح پژوهشی رسانندگی گرمایی نیمرسانای *GaN* بر حسب تابعی از دما مورد بررسی قرار گرفته است. این نیمرسانای با گاف انرژی پهن، که در یک دهه اخیر بسیار مورد توجه واقع شده، از تراکم ناخالصی و دررفتگی بالایی برخوردار می باشد و دانشمندان زیادی در سرتاسر جهان برای رفع این مشکل به دنبال روشی بهینه برای رشد این ماده هستند. برای شناخت کیفیت نمونه رشد یافته روشهای گوناگونی، نظیر اندازه گیریهای اپتیکی و الکتریکی، به کار گرفته می شوند که اندازه گیری رسانندگی گرمایی ماده نیز یکی دیگر از این روشهاست. این طرح صرفاً نظری بوده و داده های مربوط به چند نمونه، که در شرایط و با زیر لایه های متفاوت رشد داده شده اند، از مقالات معتبر علمی استخراج شده اند. در تحلیل داده ها از نظریه های وابسته به رسانندگی گرمایی جامدات با کمک گیری از روش انطباق پارامترهای قابل تغییر بر پایه کمینه سازی مجموع مربعات مقادیر تجربی و نظری استفاده شده است. با این کار علاوه بر تعیین بزرگی دمای دبای ماده، میزان نسبی تراکم ناخالصیها و دررفتگیهای بلوری نمونه ها با یکدیگر مقایسه شده اند.

کلمات کلیدی: رسانندگی گرمایی، *GaN*، پراکندگی فونونها، گرمای ویژه، دمای دبای.

تقدیم به همسر و پسر

قدردانی

بر خود لازم می دانم از پیشنهادات ارزنده علمی همکار ارجمندم جناب آقای دکتر حمید هراتی زاده، به عنوان همکار ناظر، و دیگر دست اندرکاران در دانشکده فیزیک و نیز امور پژوهش دانشگاه صنعتی شاهرود که در به انجام رسیدن این طرح همکاری صمیمانه داشته اند کمال تشکر و قدردانی خود را ابراز نمایم.

فهرست مطالب

فصل اول: آشنایی با نظریه رسانش گرمایی جامدات

۱-۱ مقدمه	۱
۲-۱ رسانندگی گرمایی شبکه بلوری	۲
۳-۱ نظریه گرمای ویژه دبای	۳
۴-۱ مسافت آزاد میانگین	۶
(الف) برهم کنش فونونها با یکدیگر (فرایند واگرد)	۷
(ب) پراکندگی از ناراستیهای نقطه ای	۹
(ج) پراکندگی از مرزهای نمونه	۱۰
(د) پراکندگی از دررفتگی ها	۱۰
فصل دوم: تحلیل داده ها	۱۱
نتیجه گیری	۲۱
مراجع	۲۲

لیست علائم و اختصارات

C_v	گرمای ویژه در واحد حجم
$\langle E_{th} \rangle$	انرژی گرمایی میانگین
$f_{B.E.}$	تابع توزیع بوز - اینشتین
$g(\omega)$	چگالی حالتها
k_B	ثابت بولتزمن
L	ابعاد نمونه
$\langle l \rangle$	مسافت آزاد میانگین
N_A	عدد آووگادرو
Q	آهنگ انتقال انرژی گرمایی
T	دما
v	سرعت
κ	رسانندگی گرمایی
w	مقاومت گرمایی
$\langle \tau \rangle$	زمان آزاد میانگین
Θ_D	دمای دبای
ω_{max}	بسامد بیشینه طیف فونونی
ω	بسامد فونون

فصل اول

آشنایی با نظریه رسانش گرمایی جامدات

۱-۱ مقدمه

ارزش این موضوع از هنگامی آغاز شد که بشر دریافت در یک دمای بخصوص وقتی اجسام مختلف را لمس می کنیم بعضی ، نظیر فلزات احساس سردی و بعضی دیگر ، نظیر چوب ، احساس گرمتری به ما می دهد. دلیل این موضوع آن است که فلزات در مقایسه با چوب گرما را سریعتر از بدن ما دور می کنند . این موضوع در پوشاک انسانها به ویژه در نواحی سردسیر تأثیر زیادی برجا گذاشته است که لباسهایی از جنس پشم با رسانندگی گرمایی پائین از جمله آنهاست. از کاربردهای دیگر در این مورد استفاده از مصالح مناسب در ساختمانها و نیز سفینه های فضایی است. در کلیه این موارد نیاز به موادی با رسانندگی پائین حائز اهمیت است .

موارد دیگری نیز وجود دارد که نیازمند موادی با رسانندگی گرمایی بالا هستیم. برای مثال در قطعات الکترونیکی و اپتوالکترونیکی به منظور حفاظت از قطعات نیمرسانا از گرمایش بیش از حد غالباً آنها را بر روی پایه ای از جنس الماس قرار می دهند [۱]. این به دلیل آن است که الماس در دمای اتاق از هر فلزی رسانندگی گرمایی بالاتری دارد [۲]. علاوه بر این، مواردی نیز وجود دارد که بازدهی مناسب نیازمند انتقال گرما با کمینه تغییرات دمایی است. بدین ترتیب گاهی ما به رسانندگی گرمایی بالا و گاهی به رسانندگی پائین نیازمندیم.

واضح است که وجود یک مجموعه داده درمورد رسانندگی گرمایی برای حل مشکلات تکنولوژی کافی نیست. چیزی که لازم است درک نظری است که ما را در پیش بینی رسانندگی مواد جدید یاری می دهد تا نیازهای جدیدی را برطرف سازیم.

قصد ما در این طرح، بررسی داده های مربوط به نیمرسانای GaN و شناخت مکانیزمهای مؤثر در کنترل رسانندگی گرمایی آن در گستره دمایی نسبتاً وسیع K ۳۰۰ - ۵ است. برای این منظور در زیر بخشهای آتی نخست به بررسی و شناخت پدیده های مختلف در ارتباط با نظریه های رسانندگی گرمایی در جامدات و پارامترهای مؤثر در کنترل رسانندگی گرمایی پرداخته و سپس در فصل دوم به تحلیل داده های گزارش شده، بر مبنای این نظریه ها، می پردازیم.

۱-۲ رسانندگی گرمایی شبکه بلوری

انتقال گرما هنگامی رخ می دهد که در یک پهنای dx از نمونه تفاوت دمایی به مقدار dT وجود داشته باشد. این به معنای آن است که در نمونه مورد نظر یک گرادیان دما $\vec{\nabla T}$ وجود داشته باشد. نتایج تجربی نشان داده است که در شرایط پایا آهنگ انرژی گرمایی انتقال یافته از واحد سطح Q با گرادیان دما متناسب است، یعنی:

$$Q = -\kappa \frac{dT}{dx} \quad (1-1)$$

ضریب تنا سب در این رابطه، κ ، به رسانندگی گرمایی موسوم است. معلوم شده است که می توانیم نظریه جنبشی کلاسیکی رسانندگی گرمایی گازها را در مورد مسئله ترابردی گرما توسط شبه ذره های فونونی به کار ببریم. نتیجه محاسبات نشان می دهد [۲]:

$$\kappa = \frac{1}{3} C_v \langle l \rangle v \quad (2-1)$$

که در آن C_v گرمای ویژه جامد در واحد حجم، $\langle l \rangle$ مسافت آزاد می‌انگین فونونها و v سرعت آنهاست (سرعت صوت) که تقریباً ثابت است. اکنون برای پیش بینی بستگی دمایی K لازم است بستگی دمایی C_v و $\langle l \rangle$ را بررسی نمائیم.

۱-۳ نظریه گرمای ویژه دبای^[۱]

به منظور محاسبه گرمای ویژه لازم است از طیف بسامد ارتعاشهای اتمی $g(\omega)$ آگاه باشیم. با در نظر گرفتن اینکه نوسانگرهای اتمی امواج سینوسی ساده ای را در سرتاسر بلور ایجاد کنند، می‌توان انتظار داشت برهم نهش این امواج نقش پیچیده ارتعاشهای واقعی اتمی را ایجاد نمایند. در این قبیل موارد می‌توان از مفاهیم امواج ایستاده و پیشرونده، بسته به موضوع مورد بررسی، استفاده نمود. در خصوص محاسبه گرمای ویژه مناسب است امواج ایجاد شده را در شرایط تعادل گرمایی به صورت امواج ایستاده در نظر گیریم. در این صورت طول موجهای مجاز عبارت خواهند بود از (با فرض: ابعاد نمونه: $L_x = L_y = L_z = L$):

$$\lambda_x = 2L/n_x, \quad \lambda_y = 2L/n_y, \quad \lambda_z = 2L/n_z$$

که n_x ، n_y و n_z مقادیر صحیح و مثبت اند؛ و یا برحسب بردارهای موج داریم:

$$k_x = \frac{n_x \pi}{L}, \quad k_y = \frac{n_y \pi}{L}, \quad k_z = \frac{n_z \pi}{L}$$

به کمک این نتایج می‌توان بردار موج برابند را به صورت زیر به دست آورد:

$$\begin{aligned} k^2 &= k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 \\ &= \pi^2 (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) / L^2 \\ &= \pi^2 n^2 / L^2 \end{aligned} \quad (3-1)$$

که نقاطی مجزا را در $\frac{1}{8}$ فضای $\mathbf{k}$ تشکیل می‌دهند. تعداد این نقاط (نوسانگرها) در بازه بردار موج صفر تا

k عبارت خواهد بود از:

$$G(k) = \frac{1}{8} \left(\frac{4}{3} \pi n^3 \right) = \frac{\pi}{6} n^3$$

$$= V k^3 / (6\pi^2)$$

که V نشانگر حجم نمونه است. تعداد نوسانگرها در واحد گستره k (dG/dk) عبارت خواهد بود از:

$$g(k) = V k^2 / (6\pi^2) \quad (۴-۱)$$

با فرض $k = \omega/v$ که در آن v سرعت موج است، چگالی حالتها در واحد بازه بسامد زاویه ای ($d\omega = 1$) برابر خواهد شد با:

$$g(\omega) = V \omega^2 / (2\pi^2 v^3) \quad (۵-۱)$$

اکنون با اطلاع از چگالی حالتها، انرژی گرمایی میانگین را می توان با جایگذاری $g(\omega)$ در عبارت زیر محاسبه نمود:

$$\langle E_{th} \rangle = \int \hbar \omega g(\omega) d\omega f_{B.E.} \quad (۶-۱)$$

به طوری که:

$$f_{B.E.} = \{\exp(E/k_B T) - 1\}^{-1} \quad (۷-۱)$$

تابع توزیع انرژی بوز-اینشتین برای ذرات غیر قابل تشخیص است. علت به کارگیری این آمار ذره ای در مورد ارتعاشات شبکه اتمی آن است که به دلیل جفت شدگی ارتعاشات شبکه به یکدیگر، منطقی خواهد بود مدهای مختلف ارتعاش را برای یک تک سیستم ارتعاشی در نظر بگیریم. با کمک گیری از قواعد مکانیک کوانتومی انرژی سیستم تنها می تواند به صورت پله ای با کوانتومهای $\hbar\omega$ (موسوم به فونونها) تغییر نماید. بدین ترتیب:

$$\langle E_{th} \rangle = \frac{3V}{2\pi^2 v^3} \int_0^{\omega_{max}} \frac{\hbar \omega^3}{\exp(\hbar \omega / k_B T) - 1} d\omega$$

ضریب ۳ در معادله فوق ناشی از در نظر گرفتن قطبش (ارتعاشات طولی و عرضی) است و $\omega_{\max}$ نشانگر حد بالایی فرکانسی است که با در نظر گرفتن آن تعداد کل نوسانگر برابر $3N$ می شود:

$$3N = V \omega_{\max}^3 / (2\pi^2 v^3)$$

بنابراین:

$$\langle E_{th} \rangle = \frac{9N}{\omega_{\max}^3} \int_0^{\omega_{\max}} \frac{\hbar \omega^3}{\exp(\hbar \omega / k_B T) - 1} d\omega \quad (8-1)$$

با معرفی دمای دبی Θ_D به صورت:

$$k_B \Theta_D = \hbar \omega_{\max} \quad (8-1)$$

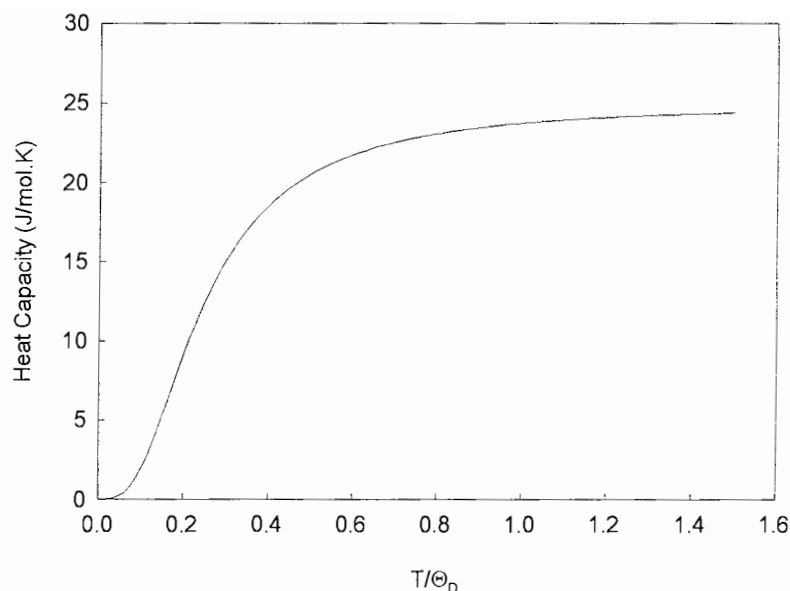
و تغییر متغیر $x = \frac{\hbar \omega}{k_B T}$ ، $x_{\max} = \frac{\Theta_D}{T}$ ؛ به ازای یک مول (عدد آووگادرو $N = N_A$) داریم:

$$\langle E_{th} \rangle = (9 N_A k_B T^4 / \Theta_D^3) \int_0^{x_{\max}} \frac{x^3}{e^x - 1} dx$$

با در نظر گرفتن گرمای ویژه به صورت $C = d\langle E_{th} \rangle / dT$ خواهیم داشت:

$$C = 9R(T/\Theta_D)^3 \int_0^{x_{\max}} \frac{e^x x^4}{(e^x - 1)^2} dx \quad (9-1)$$

که در آن $R = N_A k_B = 8.314 \text{ J/mol.K}$. نمودار تغییرات C بر حسب کمیت بدون بعد T/Θ_D در شکل (۱) نشان داده شده است. در ناحیه دمایی بالا، $(T \geq \Theta_D)$ ، طبق قانون دولون و پتی انتظار می رود، ثابت $C \approx 3R$ ، و در ناحیه دمایی پایین، $(T \approx \Theta_D / 10)$ ، گرمای ویژه به مقدار $(T/\Theta_D)^3$ ۱۹۴۱ میل می کند که مؤید تغییرات دمایی گرمای ویژه به صورت T^3 است.



شکل ۱: گرمای ویژه مولی مواد، مبتنی بر نظریه دبای.

۱-۴ مسافت آزاد میانگین $\langle l \rangle$

دومین پارامتر مؤثر در رسانندگی گرمای ویژه مسافت آزاد میانگین حاملهای انرژی گرمایی، فونونها، است. با در نظر گرفتن $\langle l \rangle = v \langle \tau \rangle$ که v سرعت صوت و $\langle \tau \rangle$ زمان آزاد میانگین فونونها در برخوردهای متوالی است. عوامل متعددی در مقدار $\langle \tau \rangle$ ، و در نتیجه $\langle l \rangle$ ، مؤثرند. این عوامل به ساز و کارهای پراکندگی (*Scattering*) موسوم اند. برخی از مهمترین آنها عبارتند از:

الف: برهم کنش فونونها بایکدیگر (فرایند واگرد)،

ب: پراکندگی از نارساییهای نقطه ای،

ج: پراکندگی از مرزهای نمونه،

د: پراکندگی از دررفتگیها،

به هر کدام از این ساز و کارها یک زمان آزاد میانگین τ_i وابسته است. با فرض مستقل بودن ساز و کارهای گوناگون از یکدیگر می توان فرکانس میانگین برخوردها را از رابطه زیر به دست آورد:

$$\langle \tau \rangle^{-1} = \sum_i (\tau_i)^{-1} \quad (۱-۱۰)$$

با تعریف مقاومت گرمایی به صورت: $w = 1/\kappa$ انتظار می رود:

$$w = \sum_i w_i \quad (11-1)$$

۱-۵ مکانیزمهای پراکندگی فونونها^[۳]

(الف) برهم کنش فونونها با یکدیگر (فرایند واگرد)

تابع انرژی پتانسیل، که برهم کنش بین اتمها را توصیف می کند، برحسب جابجائیهایشان دقیقاً به صورت توان دو نیستند، بلکه جملات ناهماهنگ نیز دارند. به طور کلاسیکی جابجائیهای اتمی به صورت امواج پیشرونده با دامنه های تابع زمان نشان داده می شوند. به هنگام انتشار، انرژی بین مدهای عادی هماهنگ دست به دست می شود، یا به زبان مکانیک کوانتومی، پراکندگی فونون - فونون رخ می دهد. در یک برهم کنش فونون - فونون، دو فونون ناپدید و فونون دیگری ظاهر می شود. در این برهم کنش لازم است پایستگی انرژی و تکانه های بلوری برقرار بماند:

$$\begin{aligned} \hbar\omega_1 + \hbar\omega_2 &= \hbar\omega_3 \\ \hbar\vec{q}_1 + \hbar\vec{q}_2 &= \hbar\vec{q}_3 + \hbar\vec{G} \end{aligned} \quad (12-1)$$

که در آن شاخصهای ۱ و ۲ متناظر با فونونهای اولیه و شاخص ۳ متناظر با فونون خلق شده است. بردار $\vec{G}$ نماینده یک بردار شبکه وارون می باشد. این بردار به گونه ای اختیار می شود که بردارهای $\vec{q}_1$ ، $\vec{q}_2$ ، $\vec{q}_3$ همگی در منطقه اول بریلوئن قرارداشته باشند.

در صورتی که $\vec{q}_1$ ، $\vec{q}_2$ در نزدیکی مرکز منطقه اول بریلوئن باشند، مجموع آنها نیز درون منطقه اول بوده و $\vec{G} = 0$ خواهد بود. این قبیل فرایندها به پراکندگی عادی، n ، ($normal$) موسوم اند. شکل ۲-الف. اما اگر $\vec{q}_1$ ، $\vec{q}_2$ وابسته به طول موجهای کوتاه باشند، مجموع برداری آنها ممکن است بیرون از منطقه اول قرار گرفته و یک بردار شبکه وارون لازم خواهد بود تا آن را به داخل منطقه اول بازگرداند. این

در دماهای بالاتر به ازای $T \geq \Theta_D$ اکثر فونونها از انرژی کافی برای ایجاد فرایند u برخوردارند. در نتیجه احتمال وقوع این فرایند:

$$n = (\exp(E/k_B T) - 1)^{-1} \approx \left(1 + \frac{E}{k_B T} - 1\right)^{-1} \\ = (const.)T \equiv \tau_u^{-1}$$

که به طور خطی با دما تغییر می کند. در نتیجه:

$$\kappa_u \propto (const.)T^{-1}$$

(ب) پراکندگی از ناراستیهای نقطه ای

ناراستیهای نقطه ای همچون موانعی در سر راه فونونها عمل می کنند که پراکندگی آنها به اندازه آنها بستگی دارد. هر چه ابعاد مانع در مقایسه با طول موج متناسب به فونون کوچکتر باشد پراکندگی هم کمتر خواهد بود. علت آن است که در این شرایط موج می تواند آن را دور بزند. از آنجا که ابعاد ناراستیهای نقطه ای در حدود ابعاد اتمی هستند انتظار می رود در دماهای پایین که طول موج غالب فونونها $(\lambda \approx (\Theta_D/T)a)$ خیلی بزرگتر از ابعاد ناراستی است بتوان از نظریه ای مشابه با نظریه پراکندگی نور از ذرات بسیار ریز (پراکندگی ریلی) استفاده کرد. بر اساس این نظریه:

$$\text{احتمال پراکندگی} \propto \frac{1}{\lambda^4} \approx (T/\Theta_D a)^4$$

در دماهای بالا که طول موج فونونها در حدود یا بزرگتر از ابعاد ناراستی است، $\lambda \geq a$ ، پراکندگی فونونها بسیار ناچیز بوده و مستقل از دما خواهد بود.

با توجه به نکات فوق می توان پیش بینی کرد که مسافت آزاد میانگین در دماهای پایین با T^{-4} متناسب بوده و در دماهای بالا مستقل از دما باشد. بدین ترتیب، انتظار می رود تغییرات دمایی رسانندگی گرمایی تحت تاثیر فرایند پراکندگی از ناراستی های نقطه ای با در نظر گرفتن بستگی دمایی گرمایی ویژه در دماهای پایین و بالا به صورت زیر باشد :

$$\begin{aligned} \kappa_{imp} &\propto T^{-1} & T < \Theta_D \\ \kappa_{imp} &\propto const. & T \geq \Theta_D \end{aligned} \quad (۱۴-۱)$$

(ج) پراکندگی از مرزهای نمونه

هنگامی که دما کاهش می یابد از آنجا که احتمال وقوع پراکندگیهای واگرد و نیز ناراستیهای نقطه ای (W_{imp}, W_u) کاهش پیدا می کنند ، مسافت آزاد میانگین فونونها رو به افزایش می گذارد. بنابراین در شرایطی این مقدار به ابعاد خود نمونه (d) خواهد رسید. در این وضعیت ، مسافت آزاد میانگین دیگر تغییر نکرده و ثابت می ماند. در این حال ابعاد نمونه سبب پراکندگی فونونها می شود. بدیهی است هر چه ابعاد نمونه بزرگتر باشد، احتمال پراکندگی وابسته به مرزها نیز کوچکتر باشد.

بدین ترتیب در دماهای به اندازه کافی پایین که: $\langle l \rangle \approx d \approx const.$ و $C_v \propto T^3$ رسانندگی گرمایی تحت تاثیر پراکندگی از مرزها به صورت تابع دمایی به صورت زیر باشد:

$$\kappa_{bound} \propto T^3 d \quad (15-1)$$

(د) پراکندگی از دررفتگی ها

وجود دررفتگی ها در بلور می تواند به حضور مجموعه ای از میدانهای کرنشی ساکن منجر شود. این بر هم خوردگی در هماهنگی نظم بلوری سبب پراکندگی فونونها در ماده می شود. این ساز و کار پراکندگی بسیار پیچیده بوده و نظریه ای که بتواند آن را به طور کامل و رضایت بخش توضیح دهد تاکنون ارائه نشده است. بدیهی است احتمال پراکندگی با تراکم دررفتگیها N_{dis} در واحد سطح به طور مستقیم متناسب باشد. بستگی دمایی این ساز و کار با دما برای دررفتگیهای منزوی به صورت T^{-1} [۴] و در حالت دررفتگیهای توسعه یافته به صورت T^{-2} [۳ و ۵] گزارش شده است

بدین ترتیب برای نمونه های با تراکم دررفتگیهای پایین: $w_{dis} \propto const./T$ ، و یا:

$$\kappa_{dis} \propto b.T \quad (16-1)$$

و برای نمونه های با تراکم دررفتگیهای بالا: $w_{dis} \propto const./T^2$ ، و یا:

$$\kappa_{dis} \propto b'.T^2 \quad (17-1)$$

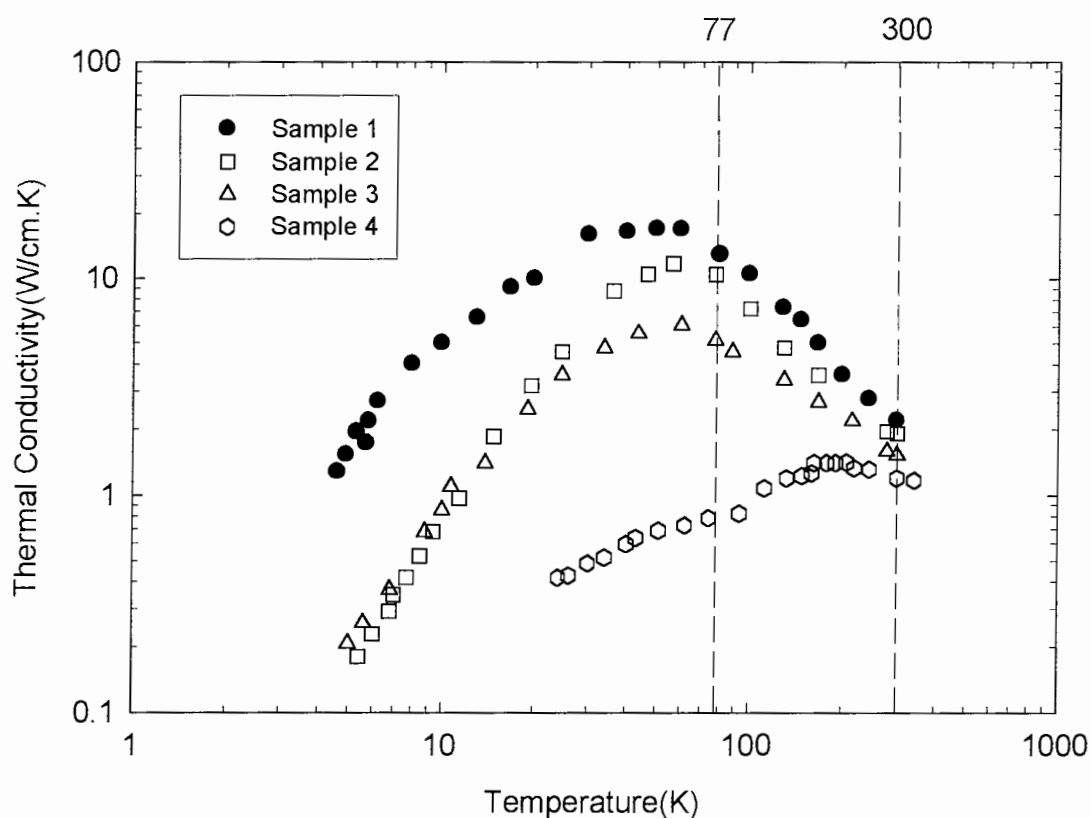
که در آن b و b' کمیت هایی متناظر با تراکم دررفتگی ها (N_{dis}) هستند.

فصل دوم

تحلیل داده ها

شکل ۳ داده های چهار نمونه GaN گزارش شده توسط Jezowski, et.al. [۵] (نمونه های ۱، ۲ و ۳) و Sichel, et.al. [۶] (نمونه ۴) را نشان می دهد، که هدف ما بررسی تحلیلی آنهاست. این نمونه ها بر روی زیر لایه های متفاوت ($Sapphire, GaN$) و در شرایط متفاوت با یکدیگر رشد داده شده اند، و به همین دلیل دارای ویژگیهای متفاوتی هستند. اگر چه آنها به طور خواسته آلودگی نشده اند، لکن به علت حضور برخی ناخالصیها، چنانچه در مورد سه نمونه اول [۵] گمان می رود وجود اتمهای بخشنده اکسیژن، اثر هال تراکم الکترونی در حدود 10^{19} cm^{-3} را نشان داده است. همچنین در گزارش اعلام شده است که این سه نمونه از تراکم دررفتگی پایینی در حدود 10^2 cm^{-2} برخوردارند.

همانگونه که پیداست نمونه ها در دماهای بالا رفتاری شبیه به یکدیگر دارند، لکن در دماهای پائینتر در موقعیت دمای قله (T^*)، بزرگی قله رسانندگی ($\kappa_{\max}$) و نحوه تغییرات دمایی در دماهای کوچکتر از T^* با هم متفاوت اند. جدول ۱ برخی از مقادیر مربوط به رسانندگی گرمایی، همراه با دماهای وابسته به آنها را برای نمونه ها به دست می دهد.



شکل ۳: چند نمونه از داده های مربوط به نیمرسانای GaN [۵ و ۶].

جدول ۱: برخی مقادیر مربوط به رسانندگی گرمایی در دمای اتاق، دمای نیتروژن مایع، قله رسانندگی و دمای مربوط به آن در

نمونه های شکل ۱.

نمونه	K_{300} ($W.cm^{-1}.K^{-1}$)	K_{77} ($W.cm^{-1}.K^{-1}$)	K_{max} ($W.cm^{-1}.K^{-1}$)	T^* (K)
۱	۲/۲	۱۳	۱۷/۲	۴۵
۲	۱/۹۳	۱۰/۵	۱۱/۸	۵۶
۳	۱/۵۳	۵/۲	۶/۱	۶۰
۴	۱/۲	۰/۸	۱/۴	۲۰۰

با توجه به بحث نظریه های مرتبط با رسانندگی گرمایی که در بخش اول به آنها اشاره شد، می توان آنها را به دو دسته پراکندگیهای ذاتی و غیرذاتی تقسیم بندی کرد: برهم کنش فونونها با یکدیگر (فرایند

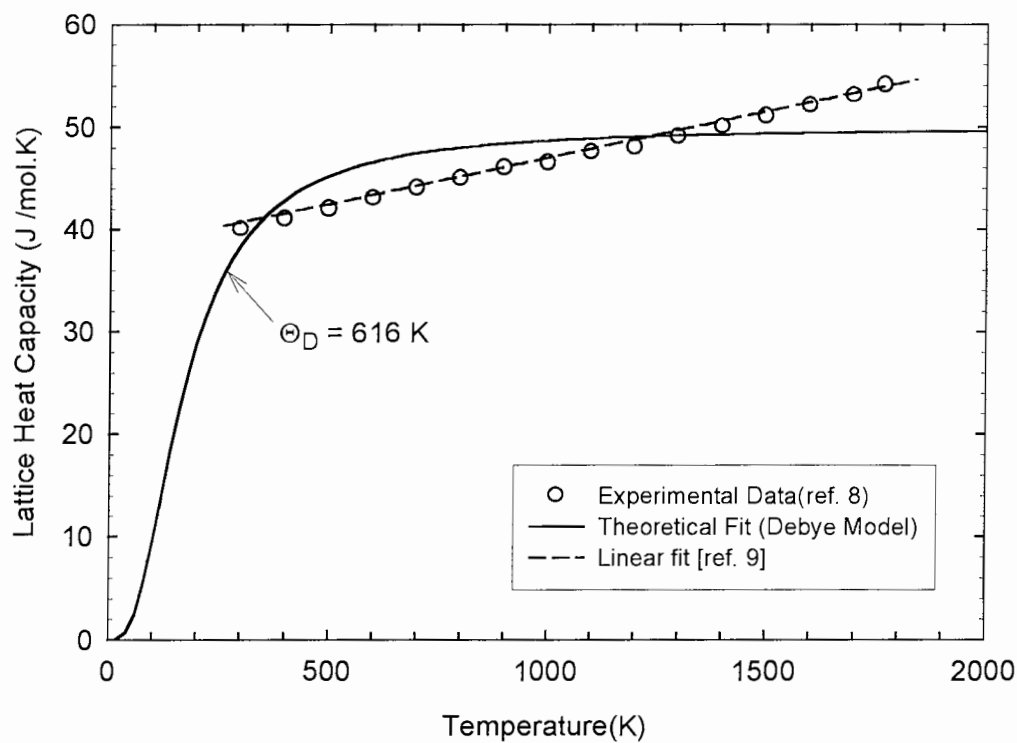
واگرد (u) (مؤثر در ناحیه دمایی بال) و پراکندگی از مرزهای نمونه (مؤثر در ناحیه دمایی پایین) را در زمره پراکندگیهای ذاتی، و فرایندهای وابسته به پراکندگی از دررفتگیها و ناراستیهای نقطه ای (ناخالصیها) را در گروه پراکندگی های غیرذاتی در نظر گرفت.

همان گونه که در بحث مربوط به پراکندگی واگرد آمد، احتمال وقوع این فرایند به دمای دبای (Θ_D) ماده بستگی دارد. برای تعیین این کمیت از داده های تجربی که در محدوده دمایی بالا برای گرمای ویژه مولی شبکه GaN گزارش شده استفاده می کنیم (شکل ۴). با به کارگیری نظریه گرمای ویژه مولی دبای، معادله (۹-۱)، و در نظر گرفتن Θ_D به عنوان پارامتر متغیر جهت انطباق هرچه بهتر به روش کمینه سازی مجموع مربعات (least – square – fit)، مناسبترین مقدار برای دمای دبای برابر 616 K به دست می آید. این مقدار قابل مقایسه با مقادیر گزارش شده توسط دیگر محققین $[\text{Slack}] \Theta_D \approx 600\text{ K}$ و $[\text{Nipko, et.al}] \Theta_D = 570\text{ K}$ [۷] می باشد.

اگر چه در محدوده دمایی بالا گرمای ویژه باید به مقدار ثابتی میل کند، که در مورد سایر مواد چنین است، برای این ماده به نظر می رسد در محدوده $1700 - 300\text{ K}$ تغییرات خطی دارد و $[\text{Basin, et.al}]$ [۹] از این داده ها استفاده کرده و آن را با رابطه

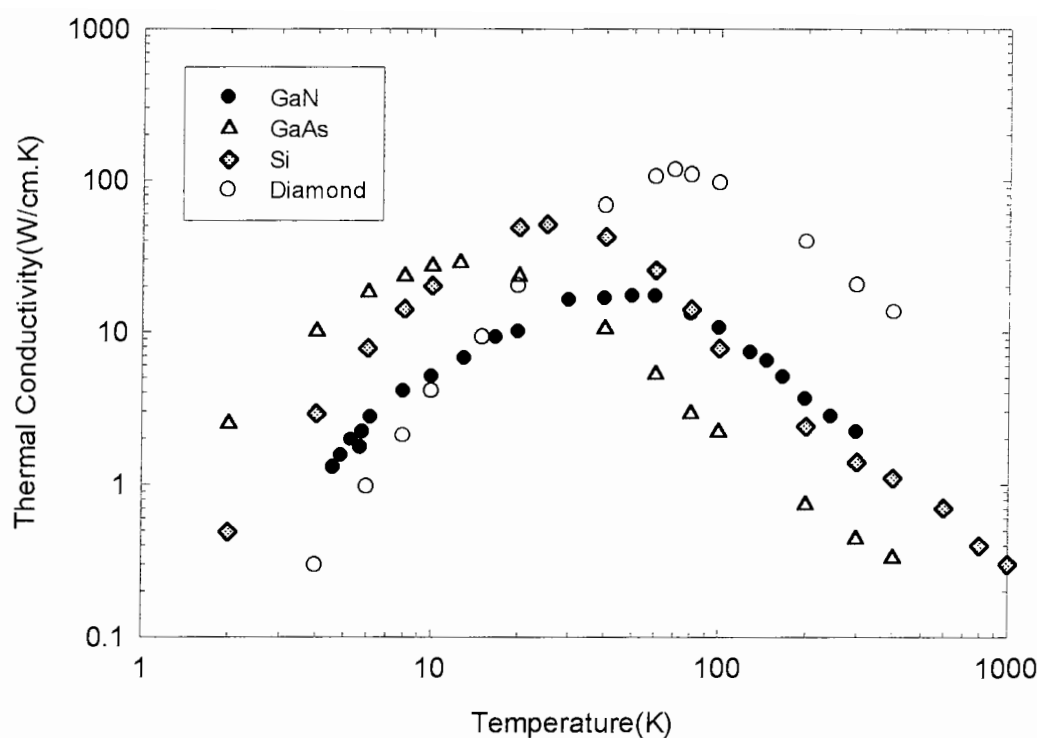
$$C = 9.1 + (2.15 \times 10^{-3} T) \quad [\text{cal.mol}^{-1} . \text{K}^{-1}]$$

مدل کرده است، که به صورت خط چین در این شکل دیده می شود. این نحوه تغییرات برای گرمای ویژه برای یک جامد نیمرسانا غیرعادی بوده و علت آن تا جایی که در مورد آن تحقیق نموده ام توجیه نشده است و می تواند موضوع جالبی برای تحقیقات آینده برای شناخت بیشتر این ماده باشد.



شکل ۴: انطباق نظریه دبای (خط پر) بر مقادیر اندازه گیری شده گرمای ویژه شبکه *GaN*. رفتار خطی گرمای ویژه، که با خط چین نشان داده شده است.

همان گونه که در ادامه مطالب آمده است، موقعیت دمایی قله رسانندگی (T^*) و به ویژه بزرگی آن ($\kappa_{\max}$) تا حد زیادی تحت تأثیر عوامل غیرذاتی ناخواسته بلوری است. با توجه به سابقه و توانایی در رشد با کیفیت بالای نیمرساناهایی همچون *Si* و *GaAs* موقعیت نسبی آنها برای مقایسه با نمونه ۱ که، با توجه به داده های آن و نیز مقادیر جدول ۱، دارای بیشترین رسانندگی گرمایی در مقایسه با دیگر نمونه هاست در شکل ۵ نشان داده شده است. در این شکل موقعیت الماس نیز نشان داده شده است.



شکل ۵: موقعیت رسانندگی گرمایی GaN (نمونه ۱) [۵]، در بین نیمرساناهای Si و $GaAs$ و الماس [۱۰].

به منظور تحلیل داه ها نخست از نمونه ۱ که دارای بالاترین رسانندگی گرمایی است، آغاز می کنیم.

با توجه به معادله $\left[\kappa_{tot}^{-1} = \sum_i (\kappa_i)^{-1} \right]$ لازم است بستگی دمایی مکانیزمهای مختلف پراکندگی فونونها را

بیابیم. با استفاده از نظریه های مربوطه در فصل اول ۱، معادلات (۱۳-۱)، (۱۴-۱)، (۱۵-۱) و (۱۶-۱)،

داریم:

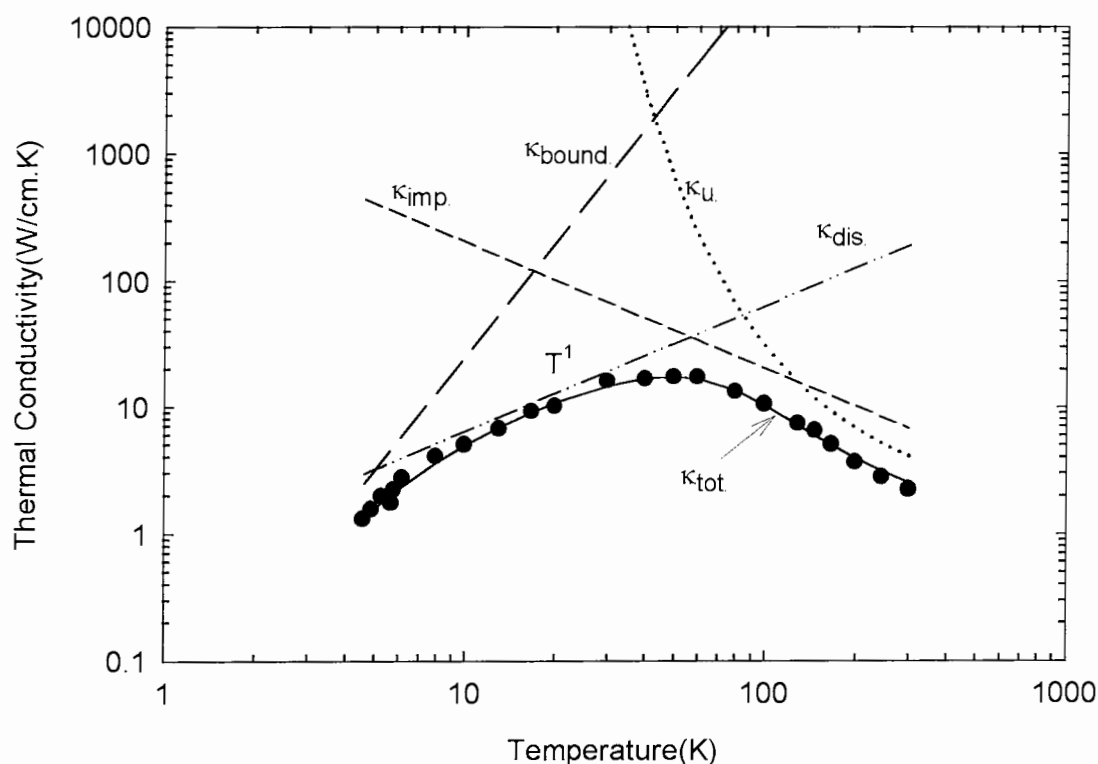
$$\begin{aligned} \frac{1}{\kappa_{tot}} &= \frac{1}{\kappa_{bound.}} + \frac{1}{\kappa_{dis.}} + \frac{1}{\kappa_{imp.}} + \frac{1}{\kappa_u.} \\ &= \frac{1}{a.T^3} + \frac{1}{b.T} + \frac{1}{c.T^{-1}} + \frac{1}{d.\exp(\Theta_D/m.k_B T)} \end{aligned}$$

دراین روابط a با ابعاد نمونه و معکوس مقادیر b و c بترتیب با تراکم در رفتگیها و تراکم ناراستیهای نقطه ای (ناخالصیها) متناسب است.

اکنون لازم است ضرایب a ، b ، c ، d و m را به گونه ای بیابیم که ترکیب آنها با داده های تجربی منطبق باشد. برای این منظور همچون گذشته از روش انطباق داده ها استفاده می کنیم. محاسبات نشان می دهند (به ازای دمای دبای $K = 616$)، کمینه مجموع مربعات:

$$S = \sum (\kappa_{\text{exp},i} - \kappa_{\text{th},i})^2$$

که در آن $\kappa_{\text{exp},i}$ مقادیر رسانندگی گرمایی تجربی و $\kappa_{\text{th},i}$ مقادیر رسانندگی گرمایی نظری است، به ازای $a = 0.026$ ، $b = 0.1644$ ، $c = 21.3 \times 10^3$ ، $d = 1/488$ و $m = 21.4$ حاصل می شود. شکل ۶ نتیجه عمل انطباق را در گستره دمایی $5 - 300 \text{ K}$ به ازای این مقادیر نشان می دهد.

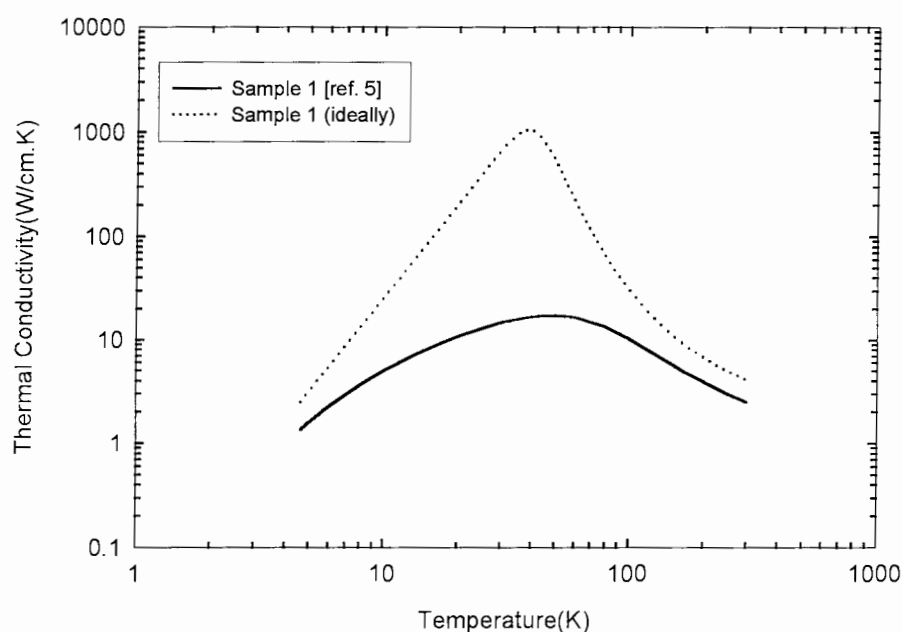


شکل ۶: جزئیات انطباق ساز و کارهای مختلف پراکندگی فونونها که رسانندگی گرمایی GaN (نمونه ۱) را بر حسب تابعی از دما کنترل می کنند. خط پر، اثر کلی همه مولفه ها را که بر داده های تجربی منطبق شده اند، نشان می دهد.

در این شکل میزان مشارکت مستقل هر کدام از ساز و کارهای مختلف پراکندگی به خوبی پیداست. کاملاً آشکار است که فرایندهای پراکندگی ذاتی (پراکندگی واگرد و پراکندگی ازمرزها) دو عامل محدودکننده κ به ترتیب در دماهای بالا (150 K) و پایین (8 K) هستند. پراکندگی وابسته به ناراستیهای نقطه ای

(ناخالصیها) بیشتر در ناحیه دمایی متوسط ($150-60\text{ K}$)، و پراکندگی مربوط به دررفتگیها در نواحی دمایی پائینتر ($30-10\text{ K}$) مؤثرند. با شناخت محدوده تاثیر هر یک از ساز و کارهای پراکندگی و با مراجعه به شکل ۳ به راحتی می توان دریافت که نمونه های مختلف با وجود تراکم ناخالصی و دررفتگی متفاوت رفتار نسبتاً یکسانی در ناحیه دمایی بالا دارند (تحلیل مربوط به دیگر نمونه ها در ادامه آمده است).

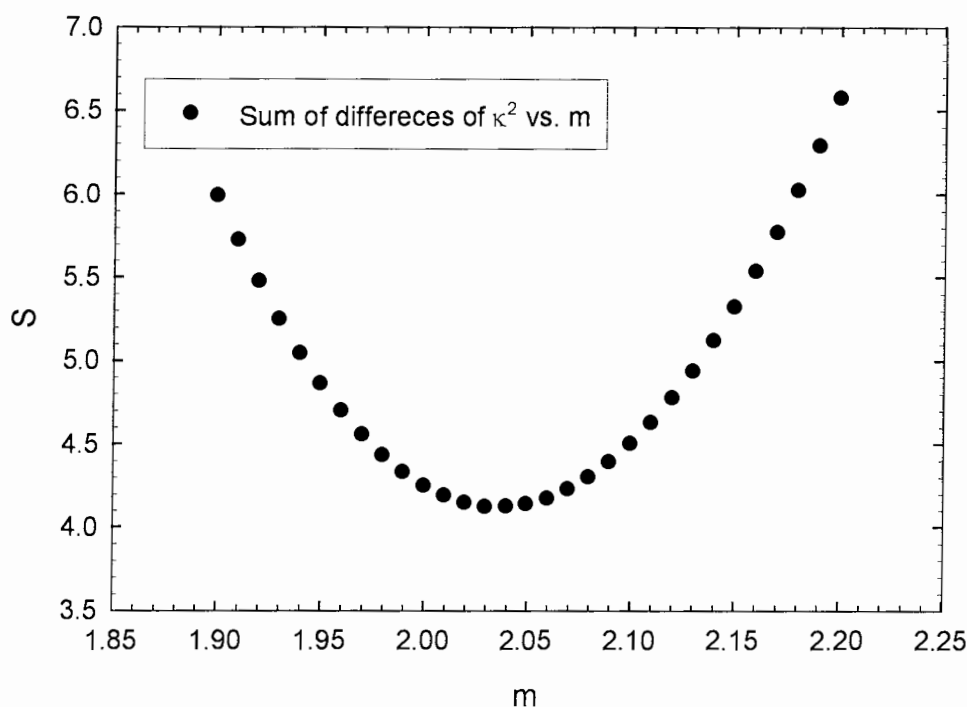
در صورت نبود پراکندگیهای غیر ذاتی انتظار می رفت تغییرات K برحسب دما به صورت K_{ideal} باشد که در شکل ۷ نشان داده شده است. در این صورت علاوه بر تغییر در شیب رسانندگی در دو سوی قله، بزرگی K_{max} در مقایسه با این نمونه نسبتاً خوب رشد داده شده در حدود ۱۰۰ بار افزایش می یافت. بنابراین وجود ناکاملیهای بلوری بر رسانندگی ماده تأثیر زیادی داشته و ضمن تغییر رفتار بستگی دمایی به تقلیل کلی آن می انجامد. بدیهی است وجود تراکم بالای ناخالصیها و دررفتگیها می تواند رفتار انتظاری مربوط به هر یک از ساز و کارهای پراکندگی را کاملاً زایل نماید. این موضوعی است که تا حدودی در نمونه های ۲، ۳ و به ویژه نمونه ۴ در شکل ۳ دیده می شود.



شکل ۷: رسانندگی گرمایی بر حسب تابعی از دما برای نمونه ۱ در شرایط واقعی (خط پر) و ایده آل (خط چین).

یکی از نکات جالب توجه در انطباق انجام گرفته برای نمونه ۱، مقدار ضریب $m = (2/4)$ است. این مقدار، با توجه به بحث پراکندگی واگرد، انتظار می رفت در حدود ۲ باشد. شکل ۸ تغییرات S (کمینه

مجموع مربعات) را برحسب مقدار m نشان می دهد. در محاسبات مربوط به این نتایج فرض شده است که دیگر پارامترها ثابت باشند.



شکل ۸: کمینه مجموع مربعات، S ، بر حسب تابعی از m .

در مورد دیگر نمونه ها (۲، ۳ و ۴) با توجه به پایین بودن رسانندگی گرمایی محتمل ترین پارامتر بالا بودن تراکم ناخالصی و دررفتگی در آنها می باشد. از آنجا که در شرایط تراکم دررفتگی بالا تغییرات دمایی این ساز و کار دیگر به صورت T^{-1} نبوده، معادله (۱-۱۶)، و نظریه ها آن را به صورت T^{-2} ، معادله (۱-۱۶)، پیش بینی می کنند، به منظور انطباق نظریه پراکندگی فونونی با داده های تجربی در پراکندگی وابسته به دررفتگیها ضرایب b' و توان n ، مربوط به بستگی دمایی (T^n) ، و در پراکندگی ناشی از ناخالصیها ضریب c به عنوان پارامترهای انطباق در نظر گرفته شدند. تحلیل به عمل آمده در این مرحله بر مبنای همان ضرایب a ، d ، m و Θ_D مربوط به نمونه ۱ انجام شده است. نتایج به دست آمده در جدول ۲ و نمودار انطباق نهایی، همراه با مولفه های مختلف پراکندگی، در شکل ۹ نشان داده شده است.

جدول ۲: مقادیر مربوط به پارامترهای انطباق برای نمونه های ۲، ۳ و ۴.

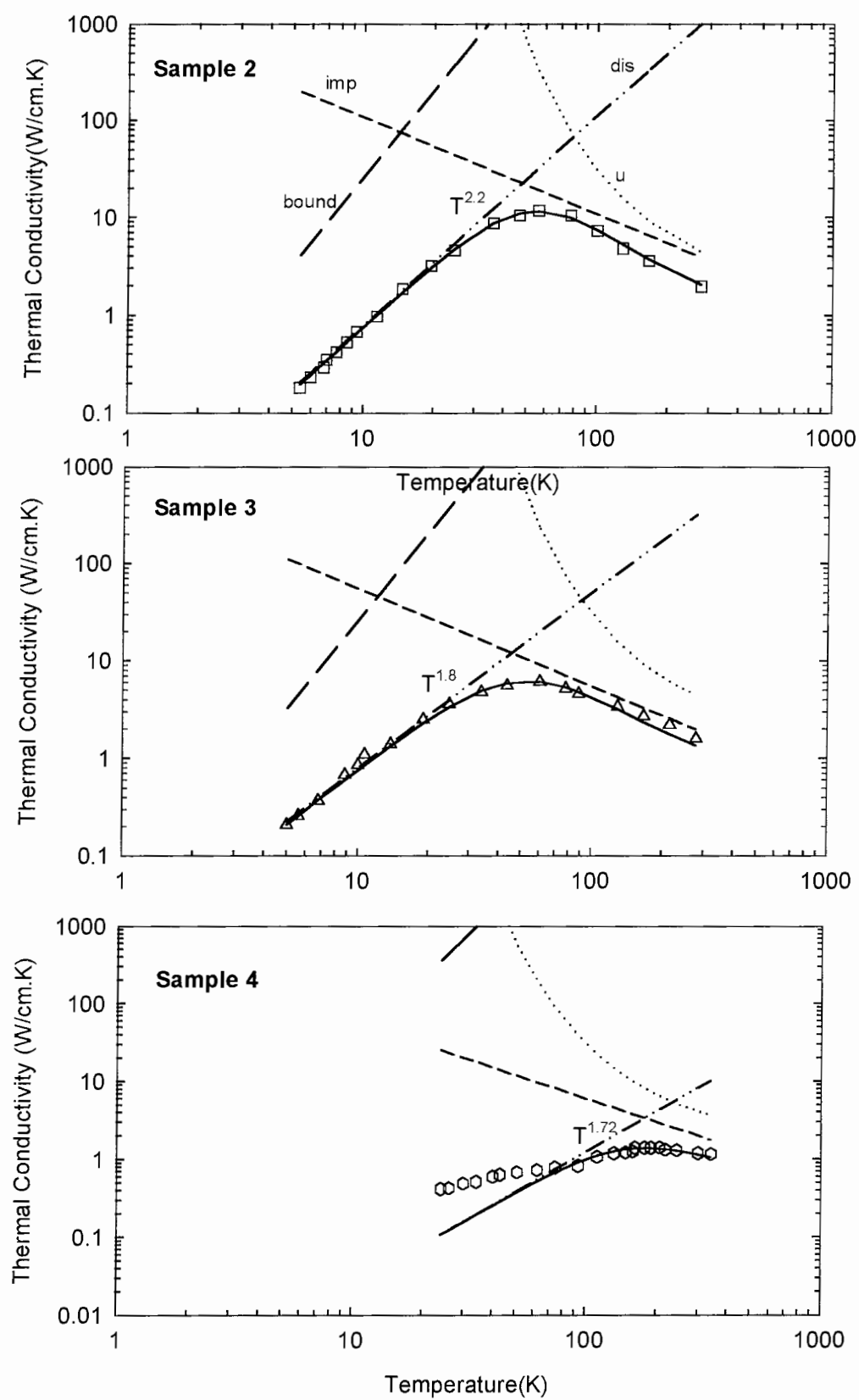
نمونه	b'	n	c
۲	۰/۰۰۵	۲/۲	۱۰۷۳
۳	۰/۰۱۲	۱/۸	۵۴۶
۴	$۴/۵ \times ۱۰^{-۴}$	۱/۷۲	۶۰۰

از نکات جالب توجه در این مرحله می توان به نکات ذیل اشاره کرد:

(الف) برای نمونه های ۲ و ۳ و ۴ مقدار n با تقریب خوبی ($\pm ۰/۳ \approx$) با مقدار پیش بینی شده نظری، یعنی $n = ۲$ ، نزدیک است. همان گونه که در نمونه ۴ دیده می شود این نظریه می تواند تا دمای حدود K ۸۰ تغییرات دمایی رسانندگی گرمایی ماده را پیش بینی نماید و در دماهای پایین تر تغییرات داده های نمونه از پیش بینی نظری فاصله می گیرد. این می تواند ناشی از بر هم کنش زیاد دررفتگها با یکدیگر و یا حضور ساز و کارهای پراکندگی دیگر در نمونه های با کیفیت بلوری پایین، نظیر این نمونه، باشد.

(ب) از مقایسه معکوس مقادیر b' در نمونه های ۲ و ۳ می توان دریافت که میزان تراکم دررفتگیها در این نمونه ها به ترتیب به نسبت های ۱ و ۲/۴ تغییر کرده است.

(ج) از آنجا که در هر سه نمونه در محدوده دمایی پراکندگی مربوط به ناخالصیها، دیگر ساز و کارها تاثیر چندانی ندارند (شکل ۹)، می توان با استفاده از معکوس c (که با تراکم ناخالصی موجود در نمونه متناسب است) مقادیر نسبی آرایش ناخالصی را در آنها مقایسه نمود. این نسبت برای نمونه های ۲، ۳ و ۴ به ترتیب عبارتند از: ۱، ۲ و ۱/۸.



شکل ۹: انطباق ساز و کارهای مختلف پراکندگیهای فونونی برای نمونه های ۲، ۳ و ۴. بستگی دمایی دررفتگیها در هر نمونه مشخص شده است.

نتیجه گیری

در این طرح به تحلیل رسانندگی گرمایی چهار نمونه نیمرسانای GaN (که در شرایط رشد و زیر لایه متفاوت اند) بر حسب تابعی از دما پرداختیم که داده های تجربی آنها در مقالات معتبر گزارش شده اند. در این راه از تاثیر ساز و کارهای موثر مختلف پراکندگی فونونها شامل پراکندگیهای: واگرد، ناخالصیها، دررفتگیها و مرزهای نمونه در حالت مستقل از هم استفاده شده است. این روش علاوه بر سنجش میزان صحت نظریه های مختلف پراکندگی فونونی در جامدات، ما را به شناخت نسبی عوامل غیر ذاتی در شبکه بلوری شامل تراکم ناخالصیها و دررفتگیها هدایت می کند. دریافتیم: (۱) در محدوده دما های بالا ($300 K$ $T \geq$) نمونه های با تراکمهای ناخالصی و دررفتگی مختلف، به دلیل غالب شدن فرایند ذاتی پراکندگی واگرد به نظر می رسد از رفتار نسبتاً یکسانی برخوردار شوند. (۲) با کاستن از تراکم ناخالصیها انتظار می رود مقدار رسانندگی گرمایی نمونه حتی در دمای اتاق بیشتر شود. این موضوع با توجه به شکل ۵ می تواند GaN را به عنوان رقیبی برای الماس، که از رشد پر هزینه ای برخوردار است، در صنایع الکترونیک به عنوان گرماگیر (heatsink) مطرح سازد. (۳) ملاحظه شد که با اندازه گیری رسانندگی گرمایی و تحلیل داده های مربوط به نمونه های مختلف می توان نمونه های با تراکم دررفتگی پایین (با بستگی دمایی T^1) را از نمونه های با تراکم دررفتگی بالا (با بستگی دمایی T^2) تشخیص داد.

- ١ *The solid State Physics*, H. M. Rosenberg, 3rd ed. Oxford University Press, 1988, Ch 5,6.
- ٢ *Thermal Conductivity of Solids*, J. E. Parrott, A. D. Stuckes, Pion Limited, 1975.
- ٣ *Fundamentals of Solid State Physics*, J. R. Christman, John Wiley & Sons, 1988.Ch. 9.
- ٤ *Thermal Conduction in Solids*, R. Berman, Clarendon, Oxford, 1976.
- ٥ A. Jezowski, P. Stachowiak, T.Suski, et al., *Physica B* 153 1 (2003).
- ٦ E.K. Sichel, J.I. Pankove, *J. Phys. Chem. Solids* **38**, 330 (1977).
- ٧ G.A. Slack, *J. Phys. Chem. Solids* **34**, 321 (1973).
- ٨ J.C. Nipko, C.K. Loong, C.M. Balkas, R.F. Davis, *Appl. Phys. Lett.* **73**, 34 (1998).
- ٩ I. Basin, Ol Knacke, O. Kubaschewski: *Thermochemical Properties of Inorganic Substances* (Springer, Berlin, Heidelberg 1977).
- ١٠ *Physics of Semiconductor Devices*, 2nd ed., S.M. Sze, John Wiley & Sons, 1981. P. 43.