بسم الله الرحمن الرحيم
الحمد لله رب العالمين الرحمن الرحيم مالك يوم الدين
اياك نعبد واياك نستعين اهدنا الصراط المستقيم
صراط الذين انعمت عليهم غير المغضوب عليهم
ولا الضالين

١٠٢١٣٤

دانشگاه شهرکرد

دانشکده فنی و مهندسی

انتقال حرارت در نانوکامپوزیتهای نیمه‌هادی

پایان نامه کارشناسی ارشد مهندسی مکانیک

گرایش تبدیل انرژی

میثم محمدی

۱۳۸۷/۹/۲۳

استاد راهنما

دکتر افراسیاب رئیسی

۱۳۸۷

۱۰۲۱۳۴

دانشکده فنی و مهندسی

پایان نامه کارشناسی ارشد مهندسی مکانیک آقای میثم محمدی

تحت عنوان

انتقال حرارت در نانوکامپوزیتهای نیمه‌هادی

درتاریخ ۸۷/۳/۴ توسط کمیته تخصصی زیر مورد بررسی و تصویب نهایی قرار گرفت.

۱ . استاد راهنمای پایان نامه دکتر.....

۲. استاد مشاور پایان نامه دکتر.....

۳. استاد داور دکتر.....

۴. استاد داور دکتر.....

رئیس تحصیلات تکمیلی دانشکده دکتر.....

کلیه حقوق مادی مترتب بر نتایج مطالعات،
ابتکارات و نوآوریهای ناشی از تحقیق موضوع
این پایان‌نامه متعلق به دانشگاه شهرکرد است.

تقدیم به:

ساحت مقدس حضرت بقیه الله‌الاعظم (عج)،

همسر عزیزم و

پدر و مادر خوبم

تشکر و قدردانی

الحمدلله رب العالمین

حمد و سپاس خداوند متعال را که هر چه دارم از اوست، پروردگاری که مرا غرق در دریای نعمتهای بی کران خویش نمود وپدر و مادری مهربان و دلسوز وهمسری عزیز و فداکار به من عطا کرد. خداوند مهربانی که بر من منت نهاد و بزرگترین نعمت را که اسلام عزیز است به من عطا نمود و مرا از دوستداران اهل بیت پیامبر(ص) قرار داد. او را شکر می گویم که به من توفیق داد تا در فضای پاک جمهوری اسلامی که میراث گرانقدر امام راحل و شهداست، حیات خویش را آغاز کنم.

از درگاه با عظمتش تعجیل در فرج آقا امام زمان (عج) و سلامتی و توفیق رهبر معظم انقلاب را خواستارم.

از صمیم قلب متشکرم :

از پدرخوب و مادر مهربانم که همه‌ی زندگیم را مدیون زحمات آنها هستم و برای تحصیل و پیشرفت مادی و معنوی من از هیچ کوششی فروگذار نکردند. از همسر *عزیزو فداکارم* که در ابتدای زندگی مشکلات تحصیلی مرا صبورانه تحمل کرد و دلسوزانه مشوق و همراه من بود وصمیمانه مرا در تایپ پایان نامه یاری کرد، و از پدر و مادر مهربانش و برادرخوبش طاها جان. همچنین از برادران خوبم، خصوصاً برادر بزرگترم که در بسیاری زمینه های علمی و اخلاقی راهنمای من بود.

همچنین متشکرم :

از اساتید دانشگاه شیراز و دانشگاه شهرکرد که در علم آموزی و پیشرفت من تأثیر فراوان داشتند. خصوصاً از استاد عزیز جناب آقای **دکتر افراسیاب رئیسی**، استاد راهنمای پایان نامه‌ام، که مرا مجذوب اخلاق نیکوی خویش کردند وگنجینه‌ی پر بهای وقت خود را بی دریغ در اختیار من گذاشتند و مرا مدیون محبتهای خویش کردند. از جناب آقای دکتر بهزاد قاسمی که زحمت مشاوره و مطالعه‌ی پایان نامه را بر عهده داشتند و جناب آقای دکتر شاطری که علاوه بر زحمت مطالعه‌ی پایان نامه در برخی از موارد پاسخگوی سؤالات من بودند و همچنین جناب آقای دکتر صابونچی که زحمت مطالعه‌ی پایان نامه را کشیدند.

در پایان از همه‌ی دوستان و اقوام که مرا به نحوی یاری کردند واز همه کسانی که در حقم دعا نمودند- خصوصاً *مادر جون*- کمال تشکر را دارم.

چکیده

در این تحقیق انتقال حرارت رسانایی دائمی در نانوکامپوزیتهای نیمه هادی بررسی شده است. این نانو کامپوزیتها از فیلرهای سیلیکونی تشکیل شده اند که در بستری از ژرمانیوم قرار دارند. بطور مشخص در این پایان نامه، ضریب هدایت حرارتی مؤثر برای دو حالت از فیلرهای سیلیکونی مدل شده است: ۱- نانو میله های مربعی ۲- نانو ذرات مکعبی.

وقتی که طول مشخصه‌ی ساختار مورد مطالعه با مسیر آزاد میانگین حامل های انرژی هم مرتبه باشد یا زمان مورد نظر در مسئله با زمان آسودگی حاملهای انرژی هم مرتبه باشد، دیگر نمی توان از معادلات معمولی انتقال حرارت استفاده کرد. به همین دلیل در این جا به جای معادله‌ی هدایت حرارتی فوریه، معادله‌ی انتقال تشعشعی فونونها ($EPRT$) از معادله ی انتقال بولتزمن (BTE) بدست آمده و با کد نویسی کامپیوتری به طور عددی حل شده است.

نتایج بدست آمده نشان می دهد که پروفیل های دما در نانو کامپوزیتها در مقایسه با کامپوزیتهای معمولی بسیار متفاوت هستند. در این جا به علت اثرات پرتابه ای فونون ها شاهد پرش دما در مرزهای مشترک دو ماده هستیم و این موضوع باعث کم شدن ضریب هدایت حرارتی مؤثر می گردد.

نتایج نشان می دهد که ضریب هدایت حرارتی مؤثر به ابعاد فیلرها و درصد اتمی ژرمانیوم وابسته است. با درصد اتمی ثابت، با کم شدن طول مشخصه‌ی فیلرها ی سیلیکونی، ضریب هدایت حرارتی مؤثر کاهش می یابد و با ثابت نگه داشتن طول مشخصه فیلرهای سیلیکونی، هرچه درصد اتمی ژرمانیوم کمتر باشد، ضریب هدایت حرارتی مؤثر نیز کاهش می یابد. همچنین با ثابت بودن طول مشخصه سیلیکون و درصد اتمی ژرمانیوم، نانوکامپوزیتهای ذره ای دارای ضریب هدایت حرارتی کمتری نسبت به نانو کامپوزیت های میله ای هستند.

لازم به ذکر است که کاهش ضریب هدایت حرارتی، راهی مؤثر برای بهبود مواد ترمو الکتریک می باشد.

فهرست مطالب

عنوان **صفحه**

فهرست مطالب ..... شش

چکیده فارسی ۱

فصل اول: مقدمه

۱-۱- نانو کامپوزیت‌ها ۲

۱-۲- انگیزه و موضوع پایان نامه ۳

۱-۳- پیشینه‌ی تحقیق و بررسی منابع ۵

فصل دوم: انتقال حرارت در مقیاس نانو

۲-۱- ارتعاشات بلورها و فونون‌ها ۹

۲-۱-۱- انتشار امواج در بلورها ۱۰

۲-۱-۲- فونون‌ها ۱۴

۲-۱-۳- پراکندگی فونون‌ها ۲۰

۲-۲- تئوری‌های انتقال ذره ۲۳

۲-۲-۱- مقیاس‌های طولی وزمانی ۲۴

۲-۲-۲- تئوری جنبشی ۲۶

۲-۲-۳- تئوری انتقال بولتزمن ۲۸

فصل سوم: معرفی مسئله و فرمول‌بندی

۳-۱- معرفی مسئله در حالت سه بعدی ۳۴

۳-۱-۱- هندسه‌ی مسئله ی سه بعدی ۳۴

۳-۱-۲- معادلات حاکم و فرضیات مدلسازی در حالت سه بعدی ۳۵

۳-۱-۳- معرفی دامنه‌ی حل مسئله‌ی سه بعدی ۳۷

۳-۱-۴- شرایط مرزی در حالت سه بعدی ۳۷

۳-۱-۵- میدان دما ومدل سازی ضریب هدایت حرارتی در حالت سه بعدی ۴۰

۳-۲- معرفی مسئله در حالت دو بعدی ۴۱
۳-۲-۱- هندسه‌ی مسئله‌ی دو بعدی ۴۱
۳-۲-۲- معادلات حاکم و شرایط مرزی در حالت دو بعدی ۴۲
۳-۲-۳- میدان دما و ضریب هدایت در حالت دو بعدی ۴۲

فصل چهارم: روش حل عددی

۴-۱- بررسی عددی مسئله در حالت سه بعدی ۴۴
۴-۱-۱- شبکه بندی و ناحیه بندی دامنه‌ی حل مسئله ۴۴
۴-۱-۲- جبری سازی معادلات حاکم ۴۸
۴-۱-۳- بررسی عددی شرایط مرزی ۴۹
۴-۱-۴- بررسی عددی شرایط در مرز مشترک دو ماده ۵۲
۴-۲- الگوریتم حل مسئله در حالت سه بعدی ۵۵
۴-۳- بررسی عددی مسئله در حالت دو بعدی ۵۵

فصل پنجم: ارائه و بررسی نتایج

۵-۱- مطالعه‌ی شبکه و ارزیابی صحت کد ۵۷
۵-۱-۱- مطالعه‌ی شبکه ۵۷
۵-۱-۲- ارزیابی صحت کد ۵۸
۵-۲- ارائه‌ی نتایج ۶۰
۵-۲-۱- مقدمه‌ی ارائه‌ی نتایج ۶۰
۵-۲-۲- نتایج دو بعدی ۶۱
۵-۲-۳- نتایج حالت سه بعدی ۷۳
۵-۳- ضریب هدایت حرارتی مؤثر ۸۴
۵-۴- نتیجه گیری کلی ۸۸
۵-۵- پیشنهاد برای کارهای آینده ۸۸
پیوست الف ۸۹

مراجع ۹۳
چکیده انگلیسی ۹۶

فهرست جداول

عنوان **صفحه**

جدول ۳-۱- خواص مختلفی از ژرمانیوم و سیلیکون ۳۷
جدول ۴-۱- مشخصاتی از شبکه بندی مسئله ۴۴
جدول ۴-۲- مشخص کردن نواحی هشت گانه ۴۷
جدول ۴-۳- ضریب های عبور و انعکاس ۵۲
جدول ۴-۴- مشخص کردن نواحی چهارگانه ۵۶
جدول ۵-۱- شبکه بندی دامنه‌ی حل در دو حالت ۵۸
جدول ۵-۲- توضیح ساختار هندسی نانوکامپوزیتهایی که نمودارهای آنها رسم شده است ۶۱
جدول الف-۱- انواع مختلف روش انتگرال گیری گاوس ۹۰
جدول الف-۲- گره‌ها و ضرایب روشهای ۲ تا ۵ نقطه‌ای گاوس- لژاندر ۹۱

فهرست اشکال

عنوان **صفحه**

شکل ۱-۱- نمونه هایی از مواد کامپوزیت ۳
شکل ۲-۱- نمودار انرژی- مسافت برای یک نمونهٔ پیوند شیمیایی ۱۰
شکل ۲-۲- یک آرایش یک بعدی سیستم جرم وفنر ۱۱
شکل ۲-۳- نمایش رابطه‌ی انتشار برای ارتعاشات بلور ۱۱
شکل ۲-۴- کوانتیزاسیون انرژی ارتعاشات در بلور ۱۴
شکل ۲-۵- مقایسه‌ی داده‌های تجربی و پیش‌بینی‌های تئوری گرمای ویژه‌ی الماس ۱۹
شکل ۲-۶- نمایش برداری پراکندگی از نوع فونون- فونون ۲۲
شکل ۲-۷- نمودار شماتیک نشان دهنده‌ی شار انرژی در عرض یک صفحه‌ی z ، که در تئوری جنبشی مورداستفاده قرار گرفته است ۲۶
شکل ۳-۱- هندسه‌ی مسئله‌ی سه بعدی و محورهای مختصات ۳۴
شکل ۳-۲- محورهای مختصات و انتخاب زوایای قطبی و سمت ۳۶
شکل ۳-۳- الف- یک سلول واحد از مسئله‌ی سه بعدی ۳۹
شکل ۳-۳- ب- نماهای مختلف از سلول واحد ۳۹
شکل ۳-۴- هندسه و سلول واحد در مسئله‌ی دو بعدی ۴۳
شکل ۴-۱- تبیین دیفرانسیل کردن مکانی ۴۶
شکل ۴-۲- یک بازتاب دهنده‌ی آینه‌ای ۵۱
شکل ۴-۳- توزیع زاویه‌ای گاوس- لژاندر در دو حالت مختلف ۵۱
شکل ۴-۴- بررسی مرز مشترک دو ماده ۵۲
شکل ۴-۵- قسمتی از کد برنامه نویسی که معادل رابطه‌ی (۴-۱۱) است ۵۴

شکل ۵-۱- الف- نمودار تغییرات ضریب هدایت حرارتی بر حسب شبکه‌بندی‌های مختلف دامنه‌ی حل ۵۹
شکل ۵-۱- ب- نمودار تغییرات ضریب هدایت حرارتی بر حسب درصد اتمی ژرمانیوم در نانوکامپوزیت دوبعدی و مقایسه با نتایج کار انجام شده توسط یانگ وچن [۲] ۵۹
شکل ۵-۲- الف- نمودار دما بر حسب x^* در صفحات y^* ثابت، در نانوکامپوزیت دو بعدی با $L_{Si}=10nm$ ۶۳
شکل ۵-۲- ب- نمودار دما بر حسب y^* در صفحات x^* ثابت، در نانوکامپوزیت دو بعدی با $L_{Si}=10nm$ ۶۳
شکل ۵-۲- پ- کانتورهای دما در نانوکامپوزیت دو بعدی با $L_{Si}=10nm$ ۶۴
شکل ۵-۲- ت- کانتورهای شارحرارتی بدون بعد (q_x^*) در نانوکامپوزیت دو بعدی با $L_{Si}=10nm$ ۶۴
شکل ۵-۳- الف- نمودار دما بر حسب x^* در صفحات y^* ثابت، در نانوکامپوزیت دوبعدی با $L_{Si}=270nm$ ۶۵
شکل ۵-۳- ب- نمودار دما بر حسب y^* در صفحات x^* ثابت، در نانوکامپوزیت دو بعدی با $L_{Si}=270nm$ ۶۵
شکل ۵-۳- پ- کانتورهای دما در نانوکامپوزیت دو بعدی با $L_{Si}=270nm$ ۶۶
شکل ۵-۳- ت- کانتورهای شارحرارتی (q_x^*) در نانوکامپوزیت دو بعدی با $L_{Si}=270nm$ ۶۶
شکل ۵-۴- الف- نمودار دما بر حسب x^* در صفحات y^* ثابت، در نانوکامپوزیت دوبعدی با $L_{Si}=837nm$ ۶۷
شکل ۵-۴- ب- نمودار دما بر حسب y^* در صفحات x^* ثابت، در نانوکامپوزیت دو بعدی با $L_{Si}=837nm$ ۶۷
شکل ۵-۴- پ- کانتورهای دما در نانوکامپوزیت دو بعدی با $L_{Si}=837nm$ ۶۸
شکل ۵-۴- ت- کانتورهای شارحرارتی (q_x^*) در نانوکامپوزیت دو بعدی با $L_{Si}=837nm$ ۶۸
شکل ۵-۵- الف- نمودار دما بر حسب x^* در صفحات y^* ثابت، در نانوکامپوزیت دوبعدی با $L_{Si}=2625nm$ ۶۹
شکل ۵-۵- ب- نمودار دما بر حسب y^* در صفحات x^* ثابت، در نانوکامپوزیت دو بعدی با $L_{Si}=2625nm$ ۶۹
شکل ۵-۵- پ- کانتورهای دما در نانوکامپوزیت دو بعدی با $L_{Si}=2625nm$ ۷۰
شکل ۵-۵- ت- کانتورهای شارحرارتی (q_x^*) در نانوکامپوزیت دو بعدی با $L_{Si}=2625nm$ ۷۰
شکل ۵-۶- الف- نمودار دمای میانگین بر حسب x^* ، در نانوکامپوزیتهای دوبعدی با $L_{Si}=10\ ,270\ nm$ ۷۱
شکل ۵-۶- ب- نمودار دمای میانگین بر حسب x^* ، در نانوکامپوزیتهای دوبعدی با $L_{Si}=837\ ,2625\ nm$ ۷۱
شکل ۵-۶- پ- بردارهای شار حرارتی در نانو کامپوزیت دوبعدی با $L_{Si}=10nm$ ۷۲
شکل ۵-۶- ت- بردارهای شار حرارتی در نانو کامپوزیت دوبعدی با $L_{Si}=837nm$ ۷۲
شکل ۵-۷- الف- نمودار دما بر حسب x^* ، در نانوکامپوزیت سه بعدی با $L_{Si}=10.5\ nm$ ۷۴
شکل ۵-۷- ب- کانتورهای (q_x^*) در نانوکامپوزیت سه بعدی با $L_{Si}=10.5nm$ ، درصفحه‌ی $z^*=0.5$ ۷۴
شکل ۵-۸- الف- کانتورهای دما در نانوکامپوزیت سه بعدی با $L_{Si}=10.5nm$ ، در صفحه‌ی $z^*=0.5$ ۷۵
شکل ۵-۸- ب- کانتورهای دما در نانوکامپوزیت سه بعدی با $L_{Si}=10.5nm$ ، در صفحه‌ی $z^*=0.75$ ۷۵
شکل ۵-۸- پ- کانتورهای دما در نانوکامپوزیت سه بعدی با $L_{Si}=10.5nm$ ، در صفحه‌ی $z^*=0.91$ ۷۶
شکل ۵-۹- الف- کانتورهای دما در نانوکامپوزیت سه بعدی با $L_{Si}=10.5nm$ ، در صفحه‌ی $x^*=0.5$ ۷۶
شکل ۵-۹- ب- کانتورهای دما در نانوکامپوزیت سه بعدی با $L_{Si}=10.5nm$ ، در صفحه‌ی $x^*=0.75$ ۷۷
شکل ۵-۹- پ- کانتورهای دما در نانوکامپوزیت سه بعدی با $L_{Si}=10.5nm$ ، در صفحه‌ی $x^*=0.91$ ۷۷
شکل ۵-۱۰- نمودار دما بر حسب x^* ، در نانوکامپوزیت سه بعدی با $L_{Si}=280\ nm$ ۷۸
شکل ۵-۱۱- الف- نمودار دما بر حسب x^* ، در نانوکامپوزیت سه بعدی با $L_{Si}=831\ nm$ ۷۸
شکل ۵-۱۱- ب- کانتورهای (q_x^*) در نانوکامپوزیت سه بعدی با $L_{Si}=831nm$ ، در صفحه‌ی $z^*=0.5$ ۷۹
شکل ۵-۱۲- الف- کانتورهای دما در نانوکامپوزیت سه بعدی با $L_{Si}=831nm$ ، در صفحه‌ی $z^*=0.5$ ۷۹
شکل ۵-۱۲- ب- کانتورهای دما در نانوکامپوزیت سه بعدی با $L_{Si}=831nm$ ، در صفحه‌ی $z^*=0.75$ ۸۰

شکل ۵-۱۲- پ- کانتورهای دما در نانوکامپوزیت سه بعدی با $L_{Si} = 831nm$، در صفحه‌ی $z^* = 0.91$ ۸۰
شکل ۵-۱۳- الف- کانتورهای دما در نانوکامپوزیت سه بعدی با $L_{Si} = 831nm$، در صفحه‌ی $y^* = 0.5$ ۸۱
شکل ۵-۱۳- ب- کانتورهای دما در نانوکامپوزیت سه بعدی با $L_{Si} = 831nm$، در صفحه‌ی $y^* = 0.75$ ۸۱
شکل ۵-۱۳- پ- کانتورهای دما در نانوکامپوزیت سه بعدی با $L_{Si} = 831nm$، در صفحه‌ی $y^* = 0.91$ ۸۲
شکل۵-۱۴- الف- کانتورهای دما در نانوکامپوزیت سه بعدی با $L_{Si} = 831nm$، در صفحه‌ی $x^* = 0.5$ ۸۲
شکل ۵-۱۴- ب- کانتورهای دما در نانوکامپوزیت سه بعدی با $L_{Si} = 831nm$، در صفحه‌ی $x^* = 0.75$ ۸۳
شکل۵-۱۴- پ- کانتورهای دما در نانوکامپوزیت سه بعدی با $L_{Si} = 831nm$، در صفحه‌ی $x^* = 0.91$ ۸۳
شکل ۵-۱۵- نمودار دمای میانگین بر حسب x^* ، در نانوکامپوزیتهای سه بعدی $L_{Si} = 10.5\ ,280\ ,831\ nm$ ۸۴
شکل ۵-۱۶- مقایسه‌ی نمودارهای ضریب هدایت حرارتی مؤثر بر حسب درصد اتمی ژرمانیوم با L_{Si} ثابت ۸۶
شکل ۵-۱۷- مقایسه‌ی نمودارهای ضریب هدایت حرارتی مؤثر بر حسب L_{Si} با درصد اتمی تقریباً ثابت ژرمانیوم ۸۶
شکل ۵-۱۸- مقایسه‌ی بین روش انجام شده در این پایان نامه $(EPRT)$ و روش (MC) مونت-کارلو [۱۲] با بررسی نمودارهای ضریب هدایت حرارتی مؤثر ۸۷
شکل ۵-۱۹- نمودار ضریب هدایت حرارتی مؤثر بر حسب چگالی سطح مشترک، برای نانوکامپوزیت های دو و سه بعدی ۸۷
شکل ۵-۲۰- آرایش جابجاشده برای ماده‌ی پرکن در نانوکامپوزیت ۸۸
شکل الف-۱- زیر روال نوشته شده برای بدست آوردن گره‌ها و ضرایب روش گاوس- لژاندر ۹۲

فهرست علائم و نمادها

f	تابع توزیع حالت
τ_r	زمان آسودگی
v	سرعت گروهی فونونها
I	شدت فونون (کلی)
I^{+++}	شدت فونونی که در جهت مثبت محورهاست
I_0	شدت فونون تعادلی
ω	بسامد فونون
θ	زاویه‌ی قطبی
ϕ	زاویه‌ی سمت
Ω	زاویه‌ی فضایی
Λ	مسیر آزاد میانگین حاملهای حرارت
D	چگالی حالات (m^{-3})
h	ثابت پلانک
$\hbar$	ثابت پلانک بخش بر 2π
k	ضریب هدایت حرارتی (W/mK)

k_B	ثابت بولتزمن $\left(J/K\right)$
λ	طول موج حامل حرارت
T_{12}	ضریب عبور از محیط ۱ به ۲
R_{12}	ضریب انعکاس از محیط ۱ به ۲
Q	نرخ انتقال حرارت (W)
q	شار حرارتی $\left(W/m^2\right)$
$\overline{T}$	دمای میانگین
L_{Ge}	اندازه‌ی ضلع مربع یا مکعب ژرمانیوم در سلول واحد
L_{Si}	اندازه‌ی ضلع مربع یا مکعب سیلیکون در سلول واحد
L_z	طول نانومیله‌ی سیلیکون در نانوکامپوزیت دو بعدی
w'_m	تابع وزن انتگرال‌گیری در جهت θ
w_n	تابع وزن انتگرال‌گیری در جهت ϕ
α	ضریب رهایی
$\left(x^*, y^*, z^*\right)$	مختصات بدون بعد
q^*	شار حرارتی بدون بعد
z_1^* ، y_1^* ، x_1^*	مختصات بدون بعد اولین مرز مشترک در جهت x ، y یا z
z_2^* ، y_2^* ، x_2^*	مختصات بدون بعد دومین مرز مشترک در جهت x ، y یا z

فصل اول
مقدمه

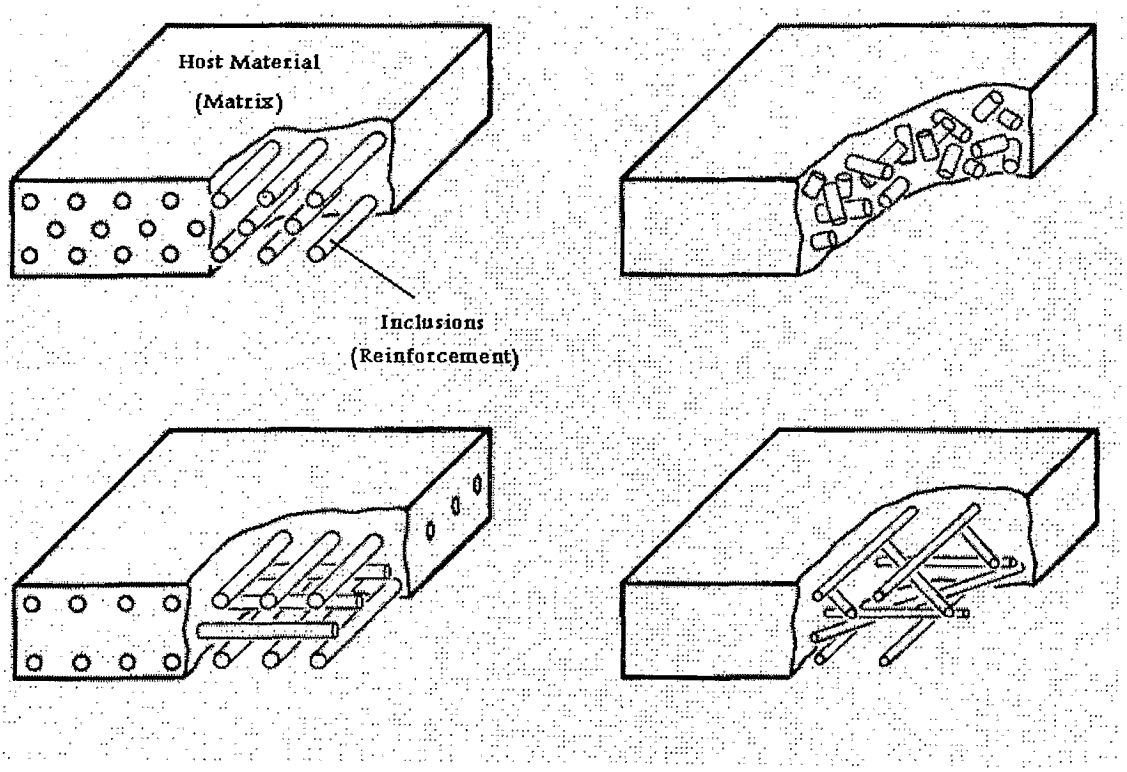
امروزه فناوری نانو به عنوان یکی از شاخه های پیشرو علم در عرصه‌ی تحقیق و پژوهش مطرح می باشد و بررسی مسائل و پدیده ها در ابعاد خیلی کوچک و زمانهای بسیار کوتاه مورد علاقه ی بسیاری از رشته های علمی است. یکی از مباحثی که در این زمینه مطرح می باشد، بررسی پدیده‌ی انتقال انرژی در مقیاسهای خیلی کوچک[1] است و از این منظر، این بررسی ها متناسب با گرایش تبدیل انرژی و مباحث انتقال حرارت است. در این پایان نامه انتقال حرارت در نانوکامپوزیت‌های نیمه هادی مورد بررسی قرار می گیرد.

۱-۱ نانو کامپوزیت‌ها

وقتی که دو یا چند ماده که از لحاظ خواص فیزیکی و شیمیایی با یکدیگر متفاوت هستند، به نحوی مخلوط شوند که سطح مشترک بین آنها مشخص باشد و ماده‌ی مرکب حاصل نیز دارای خواص متفاوتی باشد، یک ماده‌ی کامپوزیت ایجاد می گردد. هدف از این کار بهبود خاصیتی از ماده از قبیل خواص مکانیکی، الکتریکی، ترمو فیزیکی و... می باشد.
بسیاری از کامپوزیتها از دو ماده تشکیل شده‌اند که ماده‌ی اصلی را ماده‌ی میزبان[2] و دیگری را پر کن[3] یا تقویت کن[4] می گویند. نمونه ای از کامپوزیتها در شکل(۱-۱) مشاهده می شوند.
وقتی یک نانوکامپوزیت خواهیم داشت که حداقل یکی از ابعاد ماده‌ی پرکن از چند ده نانومتر تجاوز نکند.

---

[1] Microscale energy transport
[2] Host material
[3] Filler
[4] Reinforcement



شکل(۱-۱) نمونه هایی از مواد کامپوزیت

۱-۲ انگیزه و موضوع پایان نامه

یکی از مصارف نانوکامپوزیتها بهبود خواص نیمه هادیها[1] و مواد ترموالکتریک[2] است و علاقه‌ی ما به بررسی رسانایی حرارتی نانوکامپوزیتها به دلیل کاربردهای بالقوه‌ی آنها در مواد ترموالکتریک پر بازده است. عدد بدون بعد مریت [3] معرف بازدهی و چگالی انرژی مواد ترموالکتریک است و به صورت زیر تعریف می گردد :

$$ZT = S^2 \sigma T / k \qquad (۱-۱)$$

[1] Semiconductors
[2] Thermoelectric materials
[3] Dimensionless figure of merit

که در این رابطه S ضریب سیبک[1]، k ضریب رسانایی حرارتی و σ ضریب رسانایی الکتریکی است. علیرغم همه ی تلاشهای صورت گرفته مقادیر بزرگ ZT در دمای اتاق حدود یک است و این در حالی است که اگر بتوانیم این مقدار را به عدد سه و یا بزرگتر از آن برسانیم، خنک کنهای حالت جامد یا خنک کنهای پلتیر[2]، از نظر اقتصادی قابل رقابت با خنک کنهای کمپرسور دار خواهند شد [۱].

خوشبختانه پیشرفتهای مهمی درزمینه‌ی افزایش ZT بر پایه‌ی مهندسی انتقال الکترون و فونون صورت گرفته است. با استفاده از نانوکامپوزیتها می توان با ثابت نگه داشتن عملکرد انتقال الکترون و با کم کردن رسانایی حرارتی به اعداد مریت بالا دست یافت[۲].

انتقال حرارت رسانایی در جامدات توسط الکترون[3] و فونون[4] که حاملهای انرژی هستند، صورت می پذیرد. فونون، کوانتوم انرژی ارتعاشات شبکه ای ماده‌ی جامد است و انتقال حرارت در نیمه هادیها عمدتاً توسط فونونها صورت می پذیرد. وقتی که ابعاد و مقیاسهای مورد نظر ماکروسکوپیک باشد، ضریب رسانایی حرارتی با استفاده از تئوری جنبشی گازها از رابطه ی $k=\frac{1}{3}Cv\Lambda$ بدست می آید، که در این رابطه C ضریب گرمای ویژه‌ی حجمی و v سرعت گروهی فونونها و Λ مسیر آزاد میانگین فونونها است. اما هنگامی که طول مشخصه، هم مرتبه با Λ یا از آن کوچکتر باشد، به علت طبیعت پرتابه‌ای فونونها، این رابطه اعتبار خود را از دست می دهد و قانون فوریه هم دیگر معتبر نخواهد بود.

برای مثال مسیر آزاد میانگین برای سیلیکون در دمای اتاق درحدود ۳۰۰-۲۵۰ نانومتر می باشد و در صورتی که طول مشخصه ی مسئله ی مورد نظر از این مقادیر کمتر باشد، دیگر شرایط کاملاً متفاوت از بررسیهای ماکروسکوپیک خواهد بود. عدم برقراری قانون فوریه در ضریب رسانایی نانوساختارها منعکس می گردد. به بیان دقیق تر وقتی یک گرادیان دمای موضعی داشته باشیم که قانون فوریه برای آن قابل استفاده نباشد، مفهوم ضریب رسانایی حرارتی بی معنی خواهد بود،[۳] اما به هر حال این ضریب هنوز پارامتر مناسبی است و برای اندازه گیری اثرات اندازه[5] در نانوساختارها بکار می رود. پس ضریب رسانایی حرارتی دیگر یک خاصیت ذاتی نخواهد بود، بلکه یک خاصیت سازه ای[6] می باشد و می تواند به چگونگی اعمال منبع حرارتی بستگی داشته باشد. به همین دلیل صحبت از مدل کردن ضریب رسانایی حرارتی به میان می آید.

در این پایان نامه به مدل کردن ضریب رسانایی حرارتی مؤثردر نانوکامپوزیتهای نیمه هادی خواهیم پرداخت. این نانو کامپوزیتها از پرکن های سیلیکونی که بطور منظم در بستری از ژرمانیوم قرار دارند، تشکیل شده است. به طور مشخص به بررسی و مقایسه‌ی دو حالت خواهیم پرداخت. در حالت اول یک نانوکامپوزیت دو بعدی داریم که پرکن های سیلیکونی به صورت نانومیله هایی با مقطع مربع در بستری از ژرمانیوم قرار دارند و در حالت دیگر یک نانوکامپوزیت سه بعدی داریم که در آن ذرات مکعبی سیلیکون به طور منظم در

---

[1] Seebeck coefficient
[2] Peltier
[3] Electrons
[4] Phonons
[5] Size effects
[6] Structural property

بستری از ژرمانیوم قراردارند و به آن نانوکامپوزیت ذره‌ای[1] می گوییم. فرض این است که حرارت تنها در یک جهت جریان خواهد داشت واهداف پایان نامه به شرح زیر است:

۱. بررسی انتقال حرارت در نانوکامپوزیتها

۲. بررسی مقدار کمی ضریب هدایت حرارتی در نانوکامپوزیتها

۳. بررسی اثرات اندازه[2]، برروی ضریب هدایت حرارتی مؤثر

۱-۳ پیشینه‌ی تحقیق و بررسی منابع:

در این بخش تحقیقاتی که تا کنون بر روی موضوع انتقال حرارت در مقیاس‌های کوچک ومسائل مرتبط با آن و بویژه در مورد نانو کامپوزیتها انجام گرفته بطور خلاصه مرور می‌شود.

هولند[3] [۴]، در سال ۱۹۶۴ با استفاده از مطالعه‌ی ضریب هدایت حرارتی پراکنده شدن[4] فونون‌ها را در نیمه‌هادی‌ها بررسی کرده است. وی برای مطالعه‌ی پراکنده شدن فونون‌ها، ضریب هدایت حرارتی شبکه تعدادی از نیمه‌هادی‌ها را در محدوده ی دمایی ۱/۷ تا ۳۰۰ کلوین مورد بررسی قرار داده است. در این مقاله ابتدا ضریب هدایت حرارتی چند نوع نیمه هادی با استفاده از روشهای تجربی بدست آمده است وسپس مقادیر بدست آمده با استفاده از تئوری کالاوی[5] تجزیه وتحلیل شده است. تئوری کالاوی رابطه‌ای بدست می‌دهد که ارتباط بین ضریب هدایت حرارتی و زمان آسودگی را برقرار می‌کند، که زمان آسودگی به مکانیزم‌های پراکنده شدن فونون‌ها بستگی دارد.

رن[6] و داو[7] [۵]، در سال ۱۹۸۲ ضریب هدایت حرارتی ابرشبکه‌ها را بررسی کرده‌اند. ابرشبکه‌ها شامل لایه‌های بسیار نازک متناوب می‌باشند که اغلب برای اصلاح ابزارآلات مرسوم و گسترش ابزارهای جدید مورد استفاده قرار می‌گیرند. آنها برای مدل کردن ضریب هدایت حرارتی از ترکیب روش معادله‌ی انتقال بولتزمن که توسط کالاوی ارائه شده است با یک رفتار مکانیک کوانتومی برای نرخ پراکنده شدن فونون‌ها استفاده کرده و به این نتیجه رسیده‌اند که ضریب هدایت حرارتی ابرشبکه‌ها کمتر از مقدار متناظرشان برای توده‌ی ماده است وکاهش ضریب هدایت حرارتی برای نمونه‌های با تعداد لایه‌های متناوب کم، بسیار قابل ملاحظه است.

پل[8] و استریتزکر[9] [۶]، در سال ۱۹۸۲ پراکنده شدن فونون‌ها بر روی سطوح بلورها را مورد مطالعه قرار داده‌اند. در این تحقیق با اندازه‌گیری‌هایی که بر روی ضریب هدایت حرارتی بلورهای عایق در دماهای خیلی کم (k ۲-۰/۰۶) انجام شده است، علت پراکندگی پخشی[10] فونون‌ها بوسیله ی سطوح بلورها بررسی شده

---

[1] Nanoparticle composite
[2] Size effects
[3] Holland
[4] Scattering
[5] Callaway
[6] Ren
[7] Dow
[8] Pohl
[9] Stritzker
[10] Diffusive

است. این تحقیق بطور وسیع‌تری پراکنده شدن فونون‌ها بوسیله ی عیوب در نزدیکی سطوح بلورها را بررسی کرده است و موضوعات بیشتری از اثرات عیوب شبکه‌ای در داخل بلورها تا نزدیکی سطح ویا روی سطح بر روی ضریب هدایت حرارتی ارائه کرده است و نشان داده شده که عیوب سطحی خیلی شدیدتر از عیوب حجمی فونون‌ها را پراکنده می‌سازند.

تام[1] و همکارانش[۷]، در سال ۱۹۸۸ پراکنده شدن سطحی وانتقال حرارت تشعشعی فونون‌ها را بررسی کرده‌اند. آنها بلورهایی را مورد مطالعه قرار داده‌اند که سطحشان از کیفیت آینه‌ای بالایی برخوردار بوده بطوری که احتمال پراکنده شدن فونون‌ها به‌صورت پخشی، مقدارکمی بوده است. ابتدا نتایج مربوط به ضریب هدایت حرارتی تک بلورهای صیقلی شده‌ی سیلکون ارائه شده است و سپس این نتایج با استفاده از تشعشع فونون جسم سیاه تجزیه وتحلیل شده است. هدف کلی در این تحقیق درک صحیح انتقال حرارت در این بلورهای صیقلی شده وبدست آوردن احتمال پراکنده شدن پخشی با استفاده از مقدار اندازه‌گیری شده‌ی ضریب هدایت حرارتی بوده است. همچنین نشان داده شده است که اندازه‌گیری ضریب هدایت حرارتی می‌تواند به عنوان یک ابزار دقیق برای مطالعه ی عیوب وجذب سطحی در محدوده ی دمایی ۰/۰۵ تا ۱ کلوین که مربوط به محدوده ی فرکانس GHZ ۱۰۰-۵ برای فونون‌هاست، مورد استفاده قرار گیرد.

جوشی[2] و ماجامدر[3] [۸]، در سال ۱۹۹۳ انتقال حرارت گذرای پرتابه‌ای و پخشی فونون‌ها را در لایه‌های نازک مطالعه کرده‌اند. انتقال حرارت به‌صورت پخشی وپرتابه‌ای[4] در مقیاس‌های کوچک طولی و زمانی در وسایل قطع و وصل سریع الکترونیکی و فرآیندهایی که توسط پالس‌های لیزر بر روی مواد انجام می‌گیرد از اهمیت زیادی برخوردار است. و با توجه به اینکه قانون فوریه که سرعت نامحدودی برای امواج حرارتی بدست می‌دهد فقط انتقال پخشی خالص را در بر می‌گیرد و معادله ی هذلولوی حرارت هم اگرچه برای موج حرارت یک سرعت محدودی را شامل می‌شود اما در ابعاد کوچک نمی‌تواند انتقال پرتابه‌ای خالص را توصیف کند. بنا براین در این مقاله نیز معادله‌ی انتقال تشعشع فونون که رفتار صحیحی برای حالات حدی انتقال پخشی و پرتابه‌ای خالص از خود نشان می‌دهد، مورد توجه قرار گرفته است. در این تحقیق انتقال حرارت گذرا در لایه‌های نازک الماس با ضخامت‌های متفاوت در دمای اولیه ی ۳۰۰ k با استفاده از قانون فوریه، معادله ی هذلولوی حرارت و معادله ی انتقال تشعشعی فونون برای حالتی که دمای یک مرز به طور ناگهانی به اندازه ی $\Delta T = ۰/۱$ افزایش یابد، بررسی شده است. و نتایج مربوط به قانون فوریه، معادله‌ی هذلولوی حرارت و معادله‌ی انتقال تشعشعی فونون با هم مقایسه شده‌اند.

چن[5] [۹]، در سال ۱۹۹۷ اثرات اندازه وسطح مشترک بر روی هدایت حرارتی ابرشبکه‌ها و ساختارهایی با لایه‌های نازک متناوب را در جهت موازی با لایه‌ها بررسی کرده است. سطوح مشترک در این سازه‌ها خواص فیزیکی را تحت تأثیر قرار می‌دهند. در این مقاله شرایط مختلف برای سطوح مشترک از نظر انعکاس و پراکندگی فونون‌ها شامل سطوح آینه‌ای، سطوح پخشی وسطوح آینه‌ای وپخشی توأم در نظر گرفته شده

---

[1] Tom
[2] Joshi
[3] Majumdar
[4] Ballistic
[5] Chen

است و بر اساس معادله‌ی انتقال بولتزمن مدل‌هایی برای ضریب هدایت حرارتی مؤثر صفحه‌های نازک متناوب ارائه شده است. نتایج تجربی روی مواد مختلف نشان می‌دهد که ضریب هدایت حرارتی لایه‌های نازک کمتر از مقدار متناظرشان برای توده‌ی ماده می‌باشد. علت این کاهش به ساختمان میکروسکپی لایه‌های نازک و توده ی ماده و اثرات مرز وسطوح مشترک بر می گردد. معادله ی انتقال بولتزمن اغلب نقطه‌ی شروعی برای شبیه سازی هدایت حرارتی لایه‌های نازک است و همین روش بطور گسترده‌ای برای شبیه سازی اثرات اندازه بر روی هدایت الکتریکی لایه‌های نازک نیز اعمال می‌شود. نتایج این مقاله برای انعکاس آینه‌ای وپخشی توأم مطابقت خوبی با ضریب هدایت حرارتی اندازه‌گیری شده برای GaAs/AlAsدارند. و همچنین نشان داده شده است سطح مشترک بسته به مکانیزم پراکندگی در آن، به‌صورت متفاوتی میتواند ضریب هدایت حرارتی را تحت تأثیر قرار دهد. بطوری که سطح مشترک آینه‌ای اثر زیادی بر روی ضریب هدایت حرارتی ندارد، در حالیکه سطح مشترک پخشی ضریب هدایت حرارتی را بطور قابل ملاحظه‌ای کاهش می‌دهد. همچنین نتایج این تحقیق نشان می‌دهد که زبری سطح مشترک که در اندازه‌های اتمی قرار دارند علت اصلی کاهش قابل ملاحظه‌ی ضریب هدایت حرارتی که در نتایج تجربی دیده می‌شود، می‌باشد.

رئیسی و رستمی[۱۰]، در سال ۲۰۰۲ انتقال حرارت غیر دائمی را در یک ابر شبکه شامل لایه های متناوب GaAs/AlAs در جهت عرضی بررسی کردند. آنها از معادله ی EPRT[1] استفاده کرده و با روش عددی به حل مسئله پرداخته اند و توزیع دمای گذرا و میزان انتقال حرارت را در عرض لایه ها ارائه کرده‌اند.

یانگ[2] و چن[۲]، در سال ۲۰۰۴ ضریب رسانایی حرارتی مؤثر را در یک نانوکامپوزیت دو بعدی متناوب مدل کرده اند. این نانو کامپوزیت شامل نانوسیمهای سیلیکونی با مقطع مربعی است که در بستری از ژرمانیوم قرار دارند. آنها از حل عددی معادله های BTE[3] وEPRT استفاده کردند. در این مسئله ی دو بعدی، فرض شده که حرارت تنها در یک جهت امکان جریان داردو به همین دلیل از شرط تناوبی در جهت انتقال حرارت بهره برده‌اند. در واقع مقدار ضریب رسانایی حرارتی را در جهت جریان حرارت، که عمود بر محور نانوسیمها می باشد بدست آورده اند. آنها وابستگی ضریب رسانایی حرارتی را به سایز نانو سیمها و کسر حجمی مواد تشکیل دهنده بررسی کرده و نشان دادند که با داشتن کسر حجمی ثابت، هر چه قطر سیمها کوچکتر باشد، رسانایی حرارتی هم کمتر خواهد بود. در ضمن با ثابت نگه داشتن قطر میله های سیلیکون، هرچه درصد اتمی ژرمانیوم کمتر باشد، ضریب هدایت رسانایی نانو کامپوزیت هم کمتر خواهد بود.

در کار دیگری که یانگ و چن در سال ۲۰۰۵ با کمک درسلهاوس[4] انجام دادند[۱۱]، ضریب رسانایی حرارتی طولی را در یک نانوکامپوزیت شامل نانو میله های دایره ای سیلیکون در بستری از ژرمانیوم بدست آورده اند. نانو میله های سیلیکون می توانند تو خالی هم باشند و بدین ترتیب توانسته اند در یک حالت با در نظر نگرفتن ضخامتی برای نانو لوله های سیلیکونی، مسئله را برای محیط متخلخل ژرمانیوم، نانو پروس، حل

---

[1] Equation of Phonon Radiative Transfer
[2] Yang
[3] Boltzmann Transport Equation
[4] Dresselhaus

کنند. آنها نتیجه گرفتند که برای یک کسر حجمی مشخص، هر چه که قطر میله یا روزنه کوچکتر باشد، ضریب رسانایی حرارتی هم کمتر خواهد بود. و کامپوزیتهایی که نانو میله های لوله ای دارند، نسبت به آنهایی که نانو میله های تو پر دارند، دارای رسانایی حرارتی کمتری هستند. دلیل این امر پراکندگی اضافی سطحی در روزنه های نانو میله های لوله ای است.

این دو محقق، نانوکامپوزیت ذره‌ای را هم با مدلسازی مونت-کارلو[1] بررسی کرده‌اند. البته با بیان این موضوع که روش محاسباتی *EPRT* برای سه بعد مشکل و طولانی است این کار را به دیگران محول کرده‌اند[۱۲].

در بررسی روشهای مختلف از روش دینامیک مولکولی هم استفاده می گردد.

لوکز[2] و تی ین[3] در سال ۲۰۰۴ از این روش برای مدلسازی ضریب رسانایی حرارتی استفاده کرده اند[۱۳]. آنها یک فیلم نازک متخلخل ، با روزنه هایی در ابعاد نانو را بررسی کرده اند و نحوه ی تأثیر گذاری محل روزنه ها را در خواص ترمو فیزیکی و خصوصاً ضریب رسانایی حرارتی بررسی کرده اند.

در واقع طرحی که ما در این پایان نامه دنبال کرده‌ایم ادامه ی کارهایی است که در زمینه مدل کردن ضریب رسانایی حرارتی صورت گرفته است. بطور ویژه کاری که توسط یانگ و چن [۲]، صورت گرفته است را ادامه خواهیم داد و علاوه بر این که نانوکامپوزیت دو بعدی متناوب را دوباره مورد مطالعه قرار می دهیم، به بررسی نانوکامپوزیت ذره ای با استفاده از معادلات *BTE* و *EPRT* به روش محاسباتی[4] خواهیم پرداخت که قبلاً انجام نشده است.

---

[1] Monte-Carlo simulation
[2] Lukes
[3] Tien
[4] Deterministic