الملخص

استعرضت الدراسة قابلية تطبيق إنموذجا رياضي لحساب التوصيل الحراري الشبيكي و حد التصحيح لعينات من مركبات المجموعتين II-VI (ZnS, ZnTe and ZnSe) لمدى واسع من درجات الحرارة.

لغرض تقييم فعالية كل منها, درست المعاملات المؤثرة على منحنيات التوصيل كمعدلات الاسترخاء للتشتتات الفونونية و درجة حرارة ديباي. قسمت الدراسة إلى ثلاثة أجزاء:-

ركز الجزء الأول من الدراسة على حساب التوصيل الحراري الشبيكي للمركب ZnS ضمن درجة حرارة يتراوح بين 2K و 300K. تمت الدراسة بقيمة ثابتة من درجة حرارة ديباي QUOTE $\theta_D(Const.)$ $\theta_D(Const.)$ و بقيمة متغيرة مع درجة الحرارة QUOTE $\theta_D(T)$ $\theta_D(T)$. قسم الجزء إلى ثلاثة مباحث: استخدم المبحث الأول في حساب التوصيلية باستخدام صيغة التصحيح على علاقة التشتت. أما المبحث الثاني فقد تناول الحسابات من خلال صيغة التصحيح في دالة التوزيع. في حين ركز المبحث الثالث على حساب التوصيلية باستخدام إنموذج SDV لمعدل استرخاء التشتت الفونوني الثلاثي τ_{3ph}^{-1}. أظهرت نتائج هذا الجزء توافقا جيدا بين القيم العملية للتوصيل الحراري الشبيكي مع تلك المحسوبة نظريا. كما أن قيمة التغير المئوي بين القيمة الثابتة و المتغيرة لدرجة حرارة ديباي $\%\delta\theta_D$ تصل إلى QUOTE 43.9% 43.9%, بحيث وصلت قيمة التغير المئوي للتوصيلية $\%\delta K$ إلى 90%. توصلت النتائج إلى أن تأثير درجة حرارة ديباي يكون كبيرا في الفونونات الطولية مما هو عليه في المستعرضة منها.

في الجزء الثاني تم اختبار صيغة التصحيح في علاقة التفريق في حساب التوصيل الحراري الشبيكي للمركب ZnTe في مدى درجات حرارة يتراوح بين 2K و 300K. تمت الدراسة بقيمة ثابتة من درجة حرارة ديباي QUOTE $\theta_D(Const.)$ $\theta_D(Const.)$ و بقيمة متغيرة مع درجة الحرارة QUOTE $\theta_D(T)$ $\theta_D(T)$, حيث وجد تغير ملموس في قيم التوصيلية $\%\delta K$ تصل إلى 58% عندما تكون $\%\delta\theta_D = \%38.28$. كما أن $\%\delta K_T < \%\delta K_I$ نتيجة التغير في درجة حرارة ديباي. وجد تطابقا جيدا بين القيم العملية و النظرية للتوصيل الحراري.

عرض الجزء الثالث نتائج التوصيل الحراري الشبيكي للمركب ZnSe في أطار صيغة التصحيح في دالة التوزيع ضمن مدى درجات الحرارة (2-300) درجة مطلقة, كما تم حساب قيم حد التصحيح ΔK. أجريت الحسابات على مرحلتين: احدهما بثبوت درجة حرارة ديباي QUOTE $\theta_D(const.)$ $\theta_D(const.)$ و الأخرى كمتغير مع درجة الحرارة QUOTE $\theta_D(T)$ $\theta_D(T)$: تضمن هذا الجزء مبحثين: خصص المبحث الأول لتطبيق إنموذجا أقترح لحساب معدل استرخاء التشتت الفونوني الثلاثي, حيث لوحظ نجاحه من خلال المطابقة مع النتائج العملية. كما تمت المقارنة بقيم التوصيلية بين استخدام الصيغة المقترحة و صيغ أخرى. حيث نجد الفارق بينها صغيرا عند استعمال $\theta_D(T)$ $\theta_D(const.)$ و كبيرا عندما $\theta_D(T)$. كما ان التغير المئوي لدرجة حرارة ديباي ($\%\delta\theta_D = \%32.23$) كان مؤثرا على التوصيلية $\%\delta K = \%68$, بحيث $\%\delta K_I$ يكون متغلبا على $\%\delta K_T$. أظهرت الدراسة أن قيم حد التصحيح ΔK و نسبته المئوية في التوصيل الحراري الشبيكي الكلي صغيرة جدا بحيث يمكن إهمالها. عرض المبحث الثاني حسابات المبحث الاول باستخدام الصيغة المقدمة من قبل عواد

لحساب قيم الأس الحراري $m(T)$, بحيث كانت النتائج مشابهة لما ورد في المبحث الأول.

Abstract

The study has presented a bility of Application of the mathematical model in calculating the lattice thermal conductivity and the correction term ΔK for samples of

two groups II- VI) compounds (ZnS, ZnTe and ZnSe) at a wide range of temperature (2-300) K) , in order to Assessment the action of both ,

Effected parameters studied on conductivity curves as phonon scattering relaxation rates and the Debye temperature . The study divided

into three parts :

The first part focused on the study of calculating lattice thermal conductivity for ZnS compound at range of temperature (2-300 K).

The study used constant value the

Debye temperature and variable one with temperature . The part divided into three researches : The first research used the correction formula in dispersion

relation for the calculation of the conductivity . While the second research has been devoted to study the calculations through the correction formula in

distribution function . As the third research focused on the calculation of the conductivity with the use SVD 's model for three phonon scattering relaxation rate

τ_{3ph}^{-1}. The results of this part have appeared a good agreement between the experiential values of lattice thermal conductivity with that theoretical regarded . The percentage variable value between constant and variable value for Debye temperature $\%\delta\Theta_D$ reached to . where the variation in percentage value for conductivity $\%\delta K$ reached to 90% . As the results showed that the effect of the Debye temperature is longitudinal than greater transverse phonons .

The second part studies the correction formula in dispersion relation for the calculation of lattice thermal conductivity for ZnTe

compound at range of temperature (2-300 K (. The study completed by constant value of the Debye temperature and by variable one

, where found the large variation in conductivity

values reach to 58% when be . As result to variance in the Debye temperature . A good agreement has been found between the

theoretical and experimental

values of thermal conductivity .

The third part presented lattice thermal conductivity results for ZnSe compound in the frame of the correction formula of

distribution function at range of temperature (2-300 K) . As the calculation completed for correction term values, where the calculations

was on two stages ; the first with constant Debye temperature and other as variable one : this part include two researches : the first

research assigned for the application of proposed model of the three phonon scattering relaxation rate , where noticed proposed's

model success through the application with experimental results .

As the comparison completed with the conductivity values between used proposed's formula and other formulas . Where we find the small variation among them when use and large values when . The variation in percentage Debye temperature $(\%\delta\theta_D = \%32.23)$ effected was on conductivity $\%\delta K = \%68$, where $\%\delta K_L$ greater of $\%\delta K_T$. The study appear correction term values and correction's term total percentage in the lattice thermal conductivity is very small with where can neglect . The second research presented the calculations of the first research by using presented formula by Awad for calculation the temperature exponent values m(T) , where results similar to results in the first research.