

## بهبود بازده تبدیل انرژی حالت جامد با استفاده از نانوساختارهای ترموالکتریک

میثم محمدی<sup>۱\*</sup>، مظفرعلی مهربیان<sup>۲</sup>، افراسیاب رئیسی<sup>۳</sup>

<sup>۱</sup> دانشجوی دکتری مهندسی مکانیک دانشکده فنی و مهندسی، دانشگاه شهید باهنر کرمان، کرمان، ایران

mohamadi.meysam@eng.uk.ac.ir

<sup>۲</sup> استاد گروه مهندسی مکانیک دانشکده فنی و مهندسی، دانشگاه شهید باهنر کرمان، کرمان، ایران

ma\_mehrabian@uk.ac.ir

<sup>۳</sup> دانشیار گروه مهندسی مکانیک دانشکده فنی و مهندسی، دانشگاه شهرکرد، شهرکرد، ایران

raisi@eng.sku.ac.ir

**چکیده:** فناوری‌های تبدیل انرژی حالت جامد مانند سرماسازی و تولید توان ترموالکتریک، نیازمند موادی است که دارای رسانایی حرارتی پایین و در عین حال رسانایی الکتریکی و ضریب سیبک بالا باشند. با اینکه نیمه‌رساناها بهترین مواد ترموالکتریک هستند، ولی در نیمه‌رساناهای معمولی به ندرت این ویژگی‌ها یافت می‌شود. نانوساختارها از قبیل ابرشبکه‌ها، تارهای کوانتومی و نقطه‌های کوانتومی روش‌های جدیدی را برای بهبود بازده تبدیل انرژی حالت جامد از طریق مهندسی انتقال الکترون و فونون فراهم می‌کنند. در این تحقیق، یک ابر شبکه نیمه‌رسانا متشکل از نانولایه‌های متناوب سیلیکون و ژرمانیوم بررسی شده است. انتقال حرارت رسانایی در این نانوساختار با توجه به اثرات مقیاس نانو، از قانون فوریه پیروی نمی‌کند. معادله انتقال تشعشی فونون‌ها به صورت عددی حل شده است و در نهایت کاهش ضریب رسانایی حرارتی نسبت به ساختار مشابه با ابعاد معمولی نشان داده شده است. نتایج نشان می‌دهد که با ثابت نگه داشتن نسبت ضخامت لایه‌ها، هرچه ضخامت لایه‌ها در ابرشبکه کوچک‌تر شود، پرش دما در فصول مشترک بیشتر شده و در نتیجه ضریب رسانایی حرارتی مؤثر کاهش بیشتری می‌یابد که در نهایت به بهبود خواص ترموالکتریک می‌انجامد. نتایج نشان می‌دهد که ضریب رسانایی حرارتی مؤثر تابعی از دانسیته مرزهای مشترک بر واحد طول ابرشبکه است.

**واژه‌های کلیدی:** تبدیل انرژی حالت جامد، انتقال حرارت، نانوساختارها، ترموالکتریک، ابرشبکه‌ها، معادله انتقال تشعشی فونون‌ها.

شایستگی در بین مواد نیمه‌رسانا یافت می‌شود [۳]. در نیمه‌رساناها، ضریب رسانایی حرارتی فونونی ( $k_p$ ) به مراتب بیشتر از ضریب رسانایی حرارتی الکترونی ( $k_e$ ) است و ضریب رسانایی حرارتی فونونی می‌تواند کاهش یابد، درحالی‌که ضریب رسانایی الکترونی اندکی کم شود. برای مثال یک روش ثابت شده برای کاهش ضریب رسانایی حرارتی فونونی، آلیاژسازی است [۴]. پراکندگی اختلاف جرم در یک آلیاژ، رسانایی حرارتی فونونی را به‌طور قابل ملاحظه‌ای کاهش می‌دهد بدون اینکه رسانایی الکترونی را به مقدار زیادی کاهش دهد. مواد متعارف جهت سرماسازی، آلیاژ  $Bi_2Te_3$  با  $Sb_2Te_3$  (مانند  $Bi_{0.5}Sb_{1.5}Te_3$  نوع p) و همچنین آلیاژ  $Bi_2Te_3$  با  $Bi_2Se_3$  (مانند  $Bi_2Te_{2.7}Se_{0.3}$  نوع n) می‌باشند که در دمای اتاق،  $ZT$  برای آن‌ها تقریباً برابر با یک است [۵]. آلیاژ سیلیکون-ژرمانیوم یک ماده متعارف برای تولید توان است که در دمای  $700^\circ C$ ،  $ZT$  برای آن در حدود  $0.6$  می‌باشد. موادی با  $ZT$  نزدیک به یک قابل رقابت با مولدها و خنک‌کن‌های متداول با پایه سیال نیستند، ولی اگر بتوانیم این مقدار را به عدد سه یا بزرگ‌تر از آن برسانیم، خنک‌کن‌های حالت جامد از نظر اقتصادی با آن‌ها قابل رقابت خواهند بود [۶].

خوشبختانه پیشرفت‌های مهمی در زمینه افزایش عدد شایستگی بر پایه مهندسی انتقال الکترون و فونون صورت گرفته است. برای نمونه با به‌کارگیری نانوساختارهای نیمه‌رسانا می‌توان هم‌زمان با ثابت نگه داشتن عملکرد انتقال الکترون و با کم کردن ضریب رسانایی حرارتی فونونی، به اعداد شایستگی بالاتری دست یافت [۷].

از دیرباز تاکنون، انتقال حرارت در مقیاس‌های کوچک و بررسی خواص حرارتی در ریزساختارها، مورد توجه بسیاری از محققان و دانشمندان بوده است. کاسی‌میر [۸]، در سال ۱۹۳۸ اثرات اندازه را بر انتقال فونون‌ها در دماهای پایین نشان داد. هولند [۹] در سال ۱۹۶۴ با استفاده از مطالعه ضریب رسانایی حرارتی، پراکنده شدن فونون‌ها را در نیمه‌رساناها بررسی کرد. پل و استریتزکر [۱۰] در سال ۱۹۸۲ پراکنده شدن فونون‌ها بر روی سطوح بلورها را مورد مطالعه قرار دادند. در این تحقیق، با اندازه‌گیری‌هایی که بر روی ضریب رسانایی حرارتی بلورهای عایق در دماهای خیلی کم ( $2-0.06 K$ ) انجام شد، علت پراکندگی پخشی<sup>۹</sup> فونون‌ها به وسیله سطوح بلورها بررسی گردید. کلیتسنر و همکاران [۱۱] در سال ۱۹۸۸ پراکنده شدن سطحی و انتقال حرارت تشعشعی فونون‌ها را بررسی کردند. آن‌ها بلورهایی را مورد مطالعه قرار دادند که سطحشان از کیفیت آینه‌ای بالایی برخوردار بوده به طوری که احتمال پراکنده شدن فونون‌ها به صورت پخشی، کم

تبدیل انرژی در حالت جامد با استفاده از خاصیت ترموالکتریک، یکی از روش‌های مستقیم تبدیل انرژی است و از این ویژگی هم برای تولید توان الکترونیکی و هم برای سرماسازی می‌توان استفاده کرد. مولدهای ترموالکتریک بر مبنای اثر سبیک کار می‌کنند که مبنای عملکرد ترموکوپل‌ها نیز هست، درحالی‌که سرماسازهای ترموالکتریک بر مبنای اثر پلتیر<sup>۱</sup> عمل می‌کنند. برای مثال، مولدهای رادیویزوتوپ ترموالکتریک<sup>۲</sup>، در فضاپیماها به منظور کاوش در اعماق فضا مورد استفاده قرار می‌گیرند. این مولدها به‌طور مستقیم حرارت به دست آمده از سوخت رادیویزوتوپ را به برق تبدیل می‌کنند. برای مثال مولدهای به‌کاررفته در فضاپیماهای گالیله<sup>۳</sup>، اولیس<sup>۴</sup> و کاسینی<sup>۵</sup> بدین صورت طراحی شده است که حرارت مورد نیاز به وسیله سوخت دی‌اکسید پلوتونیم  $238$  تأمین می‌گردد که جمعاً حرارتی معادل  $4400$  وات را برای مولد تولید می‌کند. این مولد ترموالکتریک از  $572$  عدد مدول ترموالکتریک Si-Ge تشکیل شده است که در مجموع  $300$  وات توان الکترونیکی تولید می‌نماید. دمای اتصال گرم ترموالکتریک  $1000^\circ C$  و دمای اتصال سرد  $300^\circ C$  می‌باشد [۱]. همان‌طور که ملاحظه می‌شود، بازده این مولدها بسیار پایین است (کمتر از  $10\%$ ). حال پرسش این است که چگونه می‌توان کارایی این مولدها را افزایش داد؟ پاسخ این است که باید مواد ترموالکتریک را که غالباً نیمه‌رسانا هستند، از نظر خواص مؤثر در انتقال انرژی ارتقا بخشید. عدد شایستگی<sup>۶</sup> معرف بازده و چگالی انرژی مواد ترموالکتریک است و طبق رابطه (۱) به شکل بی‌بعد تعریف می‌گردد:

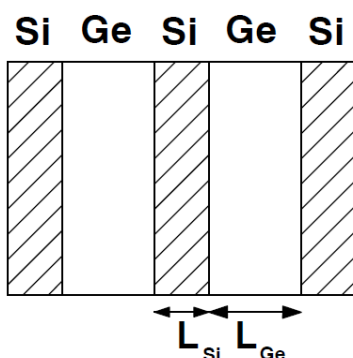
$$ZT = S^2 \sigma T / k \quad (1)$$

در این رابطه،  $S$  ضریب سبیک<sup>۷</sup>،  $\sigma$  ضریب رسانایی الکترونیکی و  $k$  ضریب رسانایی حرارتی است [۲]. انتقال حرارت رسانایی در جامدات توسط الکترون‌ها و فونون‌ها که حامل‌های انرژی هستند، صورت می‌پذیرد. فونون، کوانتوم انرژی ارتعاشات شبکه‌ای ماده جامد است. مواد عایق، رسانایی الکترونیکی کمی دارند و فلزات ضریب سبیک نسبتاً پایینی دارند. به‌علاوه رسانایی حرارتی فلزات که بیشتر توسط الکترون‌ها کنترل می‌شود، طبق قانون وایدمن-فرانز [۳] با رسانایی الکترونیکی متناسب است. بنابراین بعید است که بتوان در فلزات اعداد شایستگی بالایی پیدا کرد و در واقع بالاترین اعداد

1. Peltier Effect
2. Radioisotope Thermoelectric Generator (RTG)
3. Galileo
4. Ulysses
5. Cassini
6. Merit Number
7. Seebeck Coefficient

بتواند یک مدل مزوسکوپی ساده برای تخمین ضریب رسانایی حرارتی مؤثر در یک ابرشبکه نقطه کوانتومی به دست آورد. این ابرشبکه از ذرات کوچک ژرمانیوم به شکل بیضی گون در بستری از سیلیکون، تشکیل یافته بود. هوا و کائو [۲۱] در سال ۲۰۱۶ انتقال حرارت رسانایی را در نانو ساختارها به صورت پرتابه‌ای و پخشی مطالعه کردند. آن‌ها با استفاده از معادله انتقال فونون بولتزمن، مدلی برای ضریب رسانایی حرارتی در برخی از نانو ساختارهای مقید به دست آوردند. آن‌ها دریافتند که نتایج این مدل برای نانولایه‌ها و نانوسیم‌های سیلیکونی با نتایج حاصل از مدل‌سازی مونت کارلو و داده‌های آزمایشگاهی، تطابق خوبی دارد.

تحقیق پیش رو در راستای مطالعاتی است که در زمینه مدل کردن ضریب رسانایی حرارتی مؤثر در نانو ساختارها و به‌ویژه ابرشبکه‌ها صورت گرفته است. در اینجا یک ابرشبکه نیمه‌رسانا متشکل از لایه‌های بسیار نازک و متناوب سیلیکون و ژرمانیوم، مطابق شکل (۱) بررسی شده است. هدف آن است که با ثابت نگه داشتن افت دما در عرض ابرشبکه، انتقال حرارت دائمی در جهت عمود بر لایه‌های ابرشبکه بررسی گردد. به دست آوردن ضریب رسانایی حرارتی مؤثر در ابرشبکه در حالت‌های متعدد، مقایسه آن با ساختار مشابه با ابعاد ماکرو، بررسی وابستگی ضریب رسانایی حرارتی به ضخامت لایه‌ها و نسبت بین آن‌ها و بررسی تغییرات دما در عرض ابرشبکه، از اهداف این مقاله است. معرفی دانسیته فصل مشترک بر واحد طول ابرشبکه، به‌عنوان یک پارامتر کلیدی و بررسی تغییرات ضریب رسانایی حرارتی مؤثر ابرشبکه بر حسب آنکه در کارهای گذشته به آن پرداخته نشده، دیگر هدف مهم این مقاله است. در نهایت، تأثیر استفاده از ابرشبکه‌ها در بهبود عدد شایستگی بررسی شده است.



شکل (۱): ابرشبکه نیمه‌رسانا متشکل از لایه‌های سیلیکون و ژرمانیوم

## ۲. معادلات حاکم

روابط فیزیکی متداول (مانند معادلات ناویر-استوکس برای جریان سیال و معادله فوریه در انتقال حرارت رسانایی) که در مورد محیط‌های

بوده است. جوشی و ماجامدر [۱۲] در سال ۱۹۹۳، انتقال حرارت گذرای پرتابه‌ای و پخشی فونون‌ها را در لایه‌های نازک مطالعه کردند. چن [۱۳] در سال ۱۹۹۷، اثرات اندازه و فصل مشترک بر روی رسانایی حرارتی ابرشبکه‌ها را در جهت موازی با لایه‌ها بررسی کرد. به ساختارهایی متشکل از لایه‌های بسیار نازک مواد که به تناوب در کنار هم قرار گرفته‌اند، ابرشبکه می‌گویند. رئیسی و رستمی [۱۴] در سال ۲۰۰۲، انتقال حرارت غیردائمی را در یک ابرشبکه شامل لایه‌های متناوب GaAs/AlAs در جهت عرضی بررسی کردند. یانگ و چن [۱۵] در سال ۲۰۰۴، ضریب رسانایی حرارتی مؤثر را در یک نانوکامپوزیت دوئعدی متناوب مدل کردند. این نانوکامپوزیت شامل نانوسیم‌های سیلیکونی با مقطع مربعی است که در بستری از ژرمانیوم قرار دارند. آن‌ها از معادله‌های انتقال بولتزمن و انتقال تشعشعی فونون‌ها استفاده کرده‌اند و مقدار ضریب رسانایی حرارتی را در جهت جریان حرارت که عمود بر محور نانوسیم‌ها می‌باشد، به دست آورده‌اند. لوکز و تی‌ین [۱۶] در سال ۲۰۰۴ از روش دینامیک مولکولی برای مدل‌سازی ضریب رسانایی حرارتی استفاده کردند. آن‌ها یک لایه نازک متخلخل، با حفره‌هایی در ابعاد نانو را بررسی و نحوه تأثیرگذاری محل حفره‌ها را بر روی خواص ترموفیزیکی و به‌ویژه ضریب رسانایی حرارتی مطالعه کردند. یانگ و همکاران [۷] در سال ۲۰۰۵، ضریب رسانایی حرارتی طولی را در یک نانوکامپوزیت شامل نانوسیم‌های دایره‌ای سیلیکون در بستری از ژرمانیوم به دست آوردند. نبوتی و همکاران [۱۷] در سال ۲۰۱۱، به بررسی روش شبکه بولتزمن<sup>۱</sup> در انتقال فونون پرداختند. آن‌ها شیوه به‌کارگیری این روش را در موادی با ساختار بلوری بررسی کردند. آن‌ها نشان دادند که استفاده از روش D2Q9 برای مدل‌سازی پرتابه‌ای و غیردائمی انتقال فونون خطای نسبتاً زیادی دارد و به‌جای آن باید از روش D2Q7 برای مدل‌سازی دوبعدی استفاده کرد. گارگ و چن [۱۸] در سال ۲۰۱۳ ضریب رسانایی حرارتی ابرشبکه Si-Ge را با استفاده از نظریه چگالی اغتشاشات وابسته محاسبه کردند. آن‌ها اثرات ناهمسازی و زبری فصل مشترک را در زمان‌های آسودگی در نظر گرفتند. تیان و همکاران [۱۹] در سال ۲۰۱۴، برای محاسبه انتقال فونون در عرض ابرشبکه Si-Ge، از روش تابع گرین استفاده کردند. آن‌ها نشان داده‌اند که در نتیجه رقابت همدوسی فونون‌های فرکانس پایین با ناهمدوسی فونون‌های فرکانس بالا در اثر پراکندگی فصل مشترک، هنگامی که ناهم‌انگهی<sup>۲</sup> ناچیز باشد، یک طول بهینه وجود خواهد داشت. سلیتو [۲۰] در سال ۲۰۱۵، از یک رویکرد هیدرودینامیکی برای فونون‌ها استفاده کرد تا

1. Lattice Boltzmann Method (LBM)  
2. Anharmonicity

$$I_i = \frac{1}{4\pi} \sum_m \int_0^{\omega_{\max}} |v_{mi}| f \hbar \omega D_{mi}(\omega) d\omega \quad (4)$$

در این معادله، زیرنویس  $i$  مشخص‌کننده نوع ماده است که  $i=1$  مربوط به ژرمانیوم و  $i=2$  مربوط به سیلیکون است.  $D(\omega)$  چگالی حالات فونون بر واحد حجم،  $f$  تابع توزیع فونون و  $\hbar$  ثابت پلانک است.  $|v_{mi}|$  اندازه سرعت گروهی فونون‌ها،  $\omega$  بسامد فونون،  $\omega_{\max}$  حداکثر بسامد هر پلاریزاسیون می‌باشد و زیرنویس  $m$  هم برای جمع بر روی هر سه پلاریزاسیون فونونها استفاده می‌شود.

در حالت دائمی می‌توان معادله (۳) را بر حسب شدت فونون کلی به صورت معادله (۵) نوشت:

$$v_x \frac{\partial I}{\partial x} + v_y \frac{\partial I}{\partial y} + v_z \frac{\partial I}{\partial z} = \frac{I_0 - I}{\tau_r} \quad (5)$$

$$\begin{cases} v_x = v \cos \theta \\ v_y = v \sin \theta \cos \phi \\ v_z = v \sin \theta \sin \phi \end{cases}$$

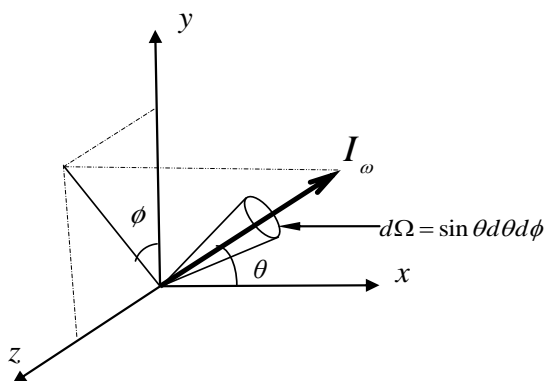
پس از جای‌گذاری و ساده‌سازی، معادله انتقال تشعشی فونون‌ها به شکل معادله (۶) به دست می‌آید:

$$\cos \theta_i \frac{\partial I_i}{\partial x} + \sin \theta_i \cos \phi_i \frac{\partial I_i}{\partial y} + \sin \theta_i \sin \phi_i \frac{\partial I_i}{\partial z} = \frac{I_{0i} - I_i}{\Lambda_i} \quad (6)$$

که در آن،  $L_i$  مسیر آزاد میانگین فونون در هر ماده است که از حاصلضرب زمان آسودگی در سرعت گروهی به دست می‌آید و  $I_{0i}$  که شدت فونون تعادلی است، از رابطه (۷) به دست می‌آید [۱۲]:

$$I_{0i}(x, y, z) = \frac{1}{4\pi} \int_{4\pi} I_i(r, \Omega) d\Omega = \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^\pi I_i(x, y, z, \theta, \phi) \sin \theta d\theta d\phi \quad (7)$$

همان‌طور که در شکل (۲) دیده می‌شود،  $\theta$  زاویه قطبی و  $\phi$  زاویه سمت می‌باشد.



شکل (۲): محورهای مختصات و انتخاب زاویه‌های قطبی و سمت

پیوسته صادق هستند، بیانگر رفتار ساختار توده‌ای مواد می‌باشند و در مقیاس‌های میکروسکوپی<sup>۱</sup> اعتبار ندارند [۲۲]. وقتی که ابعاد و مقیاس‌های مورد نظر ماکروسکوپی باشد، ضریب رسانایی حرارتی با استفاده از نظریه جنبشی گازها از رابطه (۲) به دست می‌آید [۲۳]:

$$k = (1/3) C v \Lambda \quad (2)$$

در این رابطه،  $C$  گرمای ویژه حجمی و  $v$  سرعت گروهی فونون‌ها و  $\Lambda$  مسیر آزاد میانگین فونون‌هاست. اما هنگامی که طول مشخصه، هم‌مرتبه با  $\Lambda$  یا از آن کوچک‌تر باشد، به‌علت طبیعت پرتابه‌ای فونون‌ها، این رابطه اعتبار خود را از دست می‌دهد و قانون فوریه هم معتبر نخواهد بود. عدم برقراری قانون فوریه در ضریب رسانایی نانوساختارها منعکس می‌شود. به بیان دقیق‌تر، وقتی یک اختلاف دمای موضعی داشته باشیم که قانون فوریه برای آن قابل استفاده نباشد، مفهوم ضریب رسانایی حرارتی بی‌معنی خواهد بود [۸]. اما به هر حال این ضریب هنوز پارامتر مناسبی است و برای اندازه‌گیری اثرات اندازه<sup>۲</sup> در نانوساختارها به کار می‌رود. بدین ترتیب ضریب رسانایی حرارتی دیگر یک خاصیت ذاتی نخواهد بود، بلکه یک خاصیت ساختاری<sup>۳</sup> می‌باشد.

با توجه به اینکه طول مشخصه در این پژوهش به اندازه کافی از طول همدوسی<sup>۴</sup> فونون‌ها بزرگ‌تر است، می‌توان از خاصیت موجی آن‌ها صرف‌نظر کرد و فونون‌ها را به صورت ذره‌ای در نظر گرفت. بنابراین از معادله انتقال بولتزمن<sup>۵</sup> به‌عنوان مبنا استفاده شده است. به‌دلیل اینکه طول مشخصه مسئله هم‌مرتبه یا کوچک‌تر از مسیر آزاد میانگین فونون‌هاست، فونون‌ها خاصیت پرتابه‌ای دارند و نه خاصیت نفوذی. به همین دلیل با استفاده از ایده شدت تشعشی فونون‌ها در نهایت به حل معادله انتقال تشعشی فونون‌ها<sup>۶</sup> که یک معادله دیفرانسیلی-انتگرالی است، پرداخته می‌شود.

معادله انتقال بولتزمن با فرض یک زمان آسودگی (فرض BGK [۲۴]) و در نبود نیروی خارجی به صورت معادله (۳) می‌باشد:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v \cdot \nabla f = \left( \frac{\partial f}{\partial t} \right)_{scat.} = \frac{f^0 - f}{\tau_r} \quad (3)$$

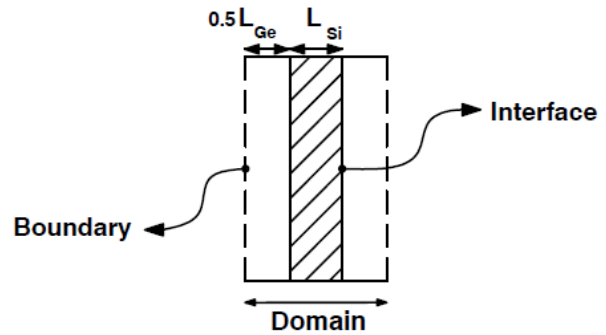
در این رابطه،  $f$  تابع توزیع فونون،  $\tau_r$  زمان آسودگی و  $v$  سرعت گروهی فونون‌هاست [۲۵]. شدت فونون کلی<sup>۷</sup> را برای قرار دادن به جای تابع توزیع فونون، می‌توان به صورت معادله (۴) بیان کرد [۲۶ و ۲۷]:

1. Sub Continuum Scales
2. Size Effects
3. Structural Property
4. Coherence Length
5. Boltzmann Transport Equation (BTE)
6. Equation of Phonon Radiative Transfer (EPRT)
7. Total Phonon Intensity

### ۳. دامنه حل مسئله

مطابق شکل (۳) دامنه حل عبارت است از یک لایه سیلیکون که در وسط دو نیم لایه ژرمانیوم قرار گرفته است و یک واحد کامل ابرشبکه را تشکیل می دهد. حال به دو سمت دامنه حل، اختلاف دمای مشخصی - در این مسئله یک کلوین در نظر گرفته شده - اعمال می گردد و به صورت دائمی حل می شود. پس از حل میدان دما و مدل سازی مقاومت حرارتی، می توان به چگونگی کاهش ضریب رسانایی حرارتی مؤثر پی برد.

سه نوع نقطه در دامنه حل وجود دارد. نوع اول نقاط عادی هستند که در هریک از محیط های سیلیکون و یا ژرمانیوم قرار دارند. نوع دوم نقاط مرزی و نوع سوم نقاطی هستند که بر روی فصل مشترک قرار گرفته اند. در هر نوع از نقاط باید از معادلات خاص خود برای به دست آوردن  $I(x, \theta)$  و  $I_0(x)$  استفاده کرد تا در نهایت میدان دما در کل دامنه به دست آید.



شکل (۳): دامنه حل شامل یک لایه سیلیکون و دو نیم لایه ژرمانیوم

### ۱.۳. حل نقاط عادی

برای نقاط نوع اول، معادله های (۶) و (۷) در حالت یک بعدی ساده می شوند و در نهایت معادله (۸) به دست می آید:

$$\cos \theta_i \frac{\partial I_i}{\partial x} = \frac{I_{0i} - I_i}{\Lambda_i}$$

$$I_{0i}(x) = \frac{1}{4\pi} \int_{4\pi} I_i(r, \Omega) d\Omega = \frac{1}{2} \int_0^\pi I_i(x, \theta) \sin \theta d\theta \quad (۸)$$

### ۲.۳. حل نقاط مرزی

از نظر ریاضی، ساختار معادله انتقال بولتزمن به گونه ای است که تنها روی قسمتی از مرزها که مشخصه ها وارد دامنه حل عددی می شوند، نیازمند معلوم بودن شرایط مرزی است. بنابراین در مورد مرز سمت چپ در شکل (۳)، شدت فونون هایی که در جهت مثبت محور  $x$  هستند و در مورد مرز سمت راست، شدت فونون هایی که در جهت منفی محور  $x$  هستند، باید به عنوان شرط مرزی معلوم شوند.

بدین منظور در مرزهای  $(x=0)$  و  $(x=L_{Ge}+L_{Si})$  از شرطی استفاده می شود که مبنای آن بقای انرژی در جهت  $x$  می باشد و به آن شرط مرزی تناوبی گفته می شود. در حالت تعادل، شدت فونون ها ایزوتروپیک و مستقل از جهت است. اما اگر جریان حرارت وجود داشته باشد - که خود بیانگر عدم تعادل دمایی است - شدت فونون ها دچار تغییر شکل<sup>۱</sup> می شود [۱۵]. از نظر فیزیکی، شرط مرزی تناوبی در جهت  $x$  بدین معناست که تغییر شکل شدت فونون ها در هر جهت در مرز  $(x=0)$ ، مشابه تغییر شکل در همان جهت در مرز  $(x=L_{Ge}+L_{Si})$  می باشد. بدین ترتیب این شرط به صورت معادله (۹) قابل بیان است [۱۵]:

$$I(0, \theta) - I_0(0) = I(L_{Ge} + L_{Si}, \theta) - I_0(L_{Ge} + L_{Si}) \quad (۹)$$

با استفاده از این شرط، شار حرارتی کل در جهت  $x$  ثابت خواهد بود و تأثیر متقابل سلول های محاسباتی نیز روی هم در نظر گرفته خواهد شد.

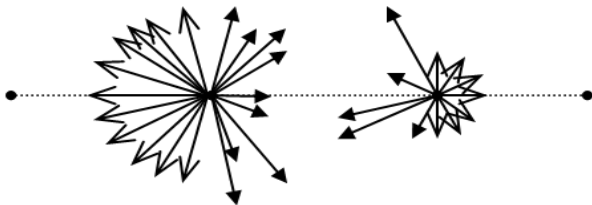
### ۳.۳. حل نقاط فصل مشترک

پراکندگی تشعشعی را روی فصل های مشترک به صورت پخششی در نظر می گیریم. ضرایب عبور  $T$  و انعکاس  $R$  بر روی فصل مشترک با استفاده از روش DMM<sup>۲</sup>، از روابط (۱۰) به دست می آیند [۱۵]:

$$T_{21} = R_{12} \quad R_{12} + T_{12} = 1$$

$$T_{12} = \frac{C_2 v_2}{C_1 v_1 + C_2 v_2} \quad (۱۰)$$

روش DMM بر این اصل استوار است که فونون ها بر روی مرزها به صورت کاملاً پخششی پراکنده می شوند. در این روش، فرض بر این است که فونون هایی که به فصل مشترک می رسند، معلوم نیست از کدام سمت آمده اند. بنابراین به طور مجازی می شود این طور تصور کرد که یک فونون بر روی فصل مشترک توقف کرده است و جهت حرکت آن، به داخل ماده ۱ یا به داخل ماده ۲، قابل پیش بینی نیست. به طور کیفی، توزیع شدت فونون در فصل مشترک مطابق شکل (۴) می باشد.



شکل (۴): شدت فونون دیفیوز در نقاط فصل مشترک

مقادیر ثابت مورد نیاز هم در جدول (۱) آورده شده‌اند [۱۵].

جدول (۱): خواص ژرمانیوم و سیلیکون در دمای اتاق [۱۵]

	$C (J / m^3 k)$	$v (m / sec)$	$k (W / mK)$
Si	۹۳۰۰۰۰	۱۸۰۴	۱۵۰
Ge	۸۷۰۰۰۰	۱۰۴۲	۶۰
	$M (kg / kmol)$	$a (nm)$	$\rho (kg / m^3)$
Si	۲۸/۰۸۵	۰/۵۴۳۱	۲۳۳۰
Ge	۷۲/۶۱۰	۰/۵۶۵۸	۵۳۲۳

با استفاده از رابطه (۲) برای مسیر آزاد میانگین سیلیکون و

$$\Lambda_{Si} = 268nm, \quad \Lambda_{Ge} = 198nm$$

### ۵. مدل‌سازی حرارتی

پس از اینکه شدت فونون کلی در کل دامنه حل به دست آمد، برای یافتن میدان دما و مدل کردن ضریب رسانایی حرارتی مؤثر در جهت  $x$  (جهت انتقال حرارت) مراحل دیگری طی خواهد شد.

علی‌رغم اینکه در مقیاس نانو، دما نمی‌تواند به‌عنوان معیاری از تعادل گرمایی موضعی<sup>۴</sup> تعریف شود، اما با داشتن  $I_0(x)$  در هر صفحه از ابرشبهه، دما را می‌توان به‌عنوان چگالی انرژی موضعی<sup>۵</sup> در آن صفحه به‌صورت رابطه (۱۴) تعریف کرد [۷، ۲۳ و ۲۷]:

$$T(x) = 4\pi I_0(x) / C |v| \quad (14)$$

سپس با انتگرال‌گیری از معادله شدت فونون روی زاویه فضایی، نرخ انتقال حرارت را می‌توان در جهت عرضی مطابق رابطه (۱۵) به دست آورد [۱۵].

$$Q_x = \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} I(x, \theta) \cos \theta (\sin \theta d\theta d\phi) \quad (15)$$

در نهایت، ضریب رسانایی حرارتی مؤثر با استفاده از قانون فوریه، مطابق رابطه (۱۶) مدل‌سازی می‌گردد.

$$k = \frac{Q_x (L_{Ge} + L_{Si})}{(T(0) - T(L_{Ge} + L_{Si}))} \quad (16)$$

### ۱.۵. محاسبه ضریب رسانایی در ماکروساختار

برای محاسبه ضریب رسانایی حرارتی در ماکروساختار متناوب سیلیکون-ژرمانیوم، می‌توان از قانون رسانایی حرارتی فوریه و نتایج آن در مورد مقاومت‌های حرارتی استفاده کرد. بدین منظور با استفاده از معادلات کلاسیک انتقال حرارت و با فرض نبودن مقاومت تماسی<sup>۶</sup> بین لایه‌ها، می‌توان ضریب رسانایی حرارتی مؤثر را برای دامنه حل

برای مثال، شدت فونون کلی پخش برای فصل مشترک اول دامنه

حل از معادله (۱۱) به دست می‌آید [۱۳]:

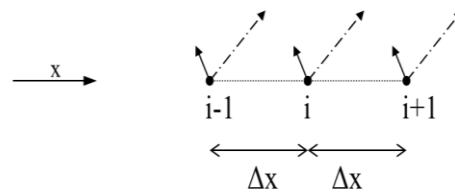
$$I(L_{Ge}/2, \theta) = -\frac{R_{21}}{\pi} \int_0^{2\pi} \int_{\frac{\pi}{2}}^{\pi} I_2(L_{Ge}/2, \theta) \cos \theta \sin \theta d\theta d\phi + \frac{T_{12}}{\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^{\frac{\pi}{2}} I_1\left(\frac{L_{Ge}}{2}, \theta\right) \cos \theta \sin \theta d\theta d\phi \quad (11)$$

### ۴. روش حل عددی

روش حل عددی معادله (۸)، مشابه روش راستاهای مجزا<sup>۱</sup> در انتقال حرارت تشعشعی می‌باشد. تفاضل محدود جمله دیفرانسیلی در معادله (۸) طبق شکل (۵) با توجه به مثبت یا منفی بودن جهت انتقال فونون، به‌ترتیب باید پیشرو یا پسرو باشد (معادله ۱۲).

$$\cos \theta_i \frac{\partial I_i^+}{\partial x} = \cos \theta_i \frac{I_i^+ - I_{i-1}^+}{\Delta x}$$

$$\cos \theta_i \frac{\partial I_i^-}{\partial x} = \cos \theta_i \frac{I_i^- - I_{i+1}^-}{\Delta x} \quad (12)$$



شکل (۵): تفاضل محدود پیشرو و پسرو با توجه به جهت انتقال فونون

برای حل عددی معادلات حاکم، ابتدا برای کمیت‌های  $I(x, \theta)$  و  $I_0(x)$  به‌ترتیب دو ماتریس دوبعدی و یک‌بعدی تعریف می‌شود و سپس همه معادلات گسسته‌سازی می‌شوند. برای مثال، معادله دیفرانسیلی انتگرالی (۸) را می‌توان به فرم تفاضل محدود پیشرو و پسرو به‌صورت مجموعه روابط (۱۳) نوشت:

$$\left(1 + \frac{\Lambda_i}{\Delta x} \mu(m)\right) I(n_x, m) - \frac{\Lambda_i}{\Delta x} \mu(m) I(n_x - 1, m) = I_0(n_x)$$

$$\left(1 - \frac{\Lambda_i}{\Delta x} \mu(m)\right) I(n_x, m) + \frac{\Lambda_i}{\Delta x} \mu(m) I(n_x + 1, m) = I_0(n_x)$$

$$I_0(n_x) = (1/n_4) \sum_{m=1}^{n_4} I(n_x, m) \quad (13)$$

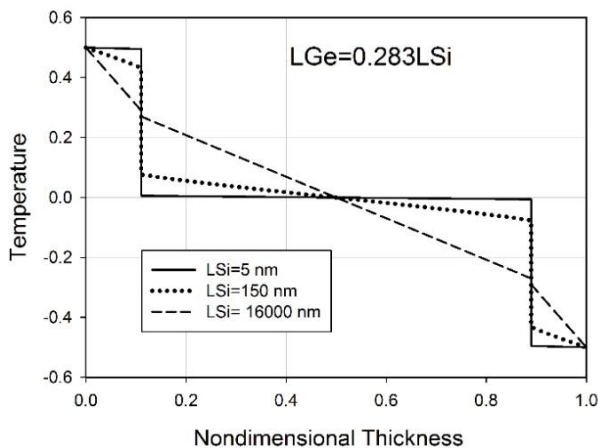
برای مدل‌سازی کامپیوتری معادلات از کدنویسی کامپیوتری به زبان فرترن<sup>۲</sup> استفاده شده و معادلات به روش تکراری<sup>۳</sup> حل شده‌اند.

3. Iterative Method  
4. Local Thermal Equilibrium  
5. Local Energy Density  
6. Contact Resistance

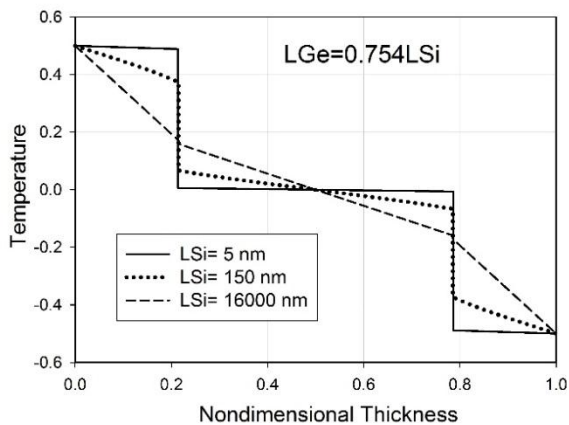
1. Discrete Ordinate Method (DOM)  
2. Compaq Visual Fortran (V6.5)

۲.۶. تأثیر ضخامت لایه‌ها بر تغییرات دما

در شکل‌های (۶) تا (۱۰) پروفایل دما در عرض یک واحد تکرارشونده از ابرشبهه برای افت دمایی معادل یک کلون نشان داده شده است. در هریک از این شکل‌ها سه مقدار مختلف ( $L_{Si} = 5, 150, 16000 \text{ nm}$ ) برای ضخامت لایه سیلیکون در نظر گرفته شده است. با توجه به درصد اتمی ژرمانیوم که در هر شکل مقدار مشخصی است، ضخامت لایه ژرمانیوم نیز در هر شکل، سه مقدار مختلف به خود اختصاص می‌دهد. با توجه به اینکه مسیر آزاد میانگین سیلیکون و ژرمانیوم به ترتیب برابر ۱۹۸ و ۲۶۸ نانومتر است، هنگامی که  $L_{Si} = 16000 \text{ nm}$  است، ضخامت‌های هر دو لایه سیلیکون و ژرمانیوم خیلی بزرگ‌تر از مسیر آزاد میانگین هستند و بنابراین اثرات پرتابه‌ای انتقال حرارت رسانایی از بین می‌روند و مکانیزم پخش کاملاً بر انتقال حرارت رسانایی حاکم است. در این حالت با استفاده از قانون فوریه، انتقال حرارت رسانایی مدل می‌شود. از این رو در شکل‌های (۶) تا (۱۰) دیده می‌شود که به‌ازای  $L_{Si} = 16000 \text{ nm}$  پرش دمایی روی مرزها رخ نمی‌دهد.



شکل (۶): پروفایل دما در عرض ابرشبهه (درصد اتمی ژرمانیوم ۲۰٪)



شکل (۷): پروفایل دما در عرض ابرشبهه (درصد اتمی ژرمانیوم ۴۰٪)

ماکروساختار، شامل یک لایه سیلیکون و یک لایه ژرمانیوم، بر اساس رابطه مقاومت‌های مرکب طبق روابط (۱۷) و (۱۸) نوشت:

$$q = \frac{\Delta T}{R} \quad R = \frac{L_1}{k_1} + \frac{L_2}{k_2} \quad (17)$$

$$q = k_{eq} \frac{\Delta T}{(L_1 + L_2)} \quad k_{eq} = \frac{(L_1 + L_2)k_1k_2}{L_1k_2 + L_2k_1} \quad (18)$$

۶. ارائه نتایج

در این تحقیق، مقادیر مختلف درصد اتمی ژرمانیوم به‌دلخواه و به‌گونه‌ای در نظر گرفته شده تا تغییرات خواص حرارتی ابرشبهه، در گستره نسبتاً وسیعی از درصد اتمی سیلیکون و ژرمانیوم بررسی گردد. بدین دلیل مقادیر درصد اتمی ژرمانیوم مطابق جدول (۲) در نظر گرفته شده است و متناظر با هر مورد، نسبت ضخامت لایه ژرمانیوم به ضخامت لایه سیلیکون، از رابطه (۲۰) در پیوست محاسبه شده و در جدول (۲) آمده است.

جدول (۲): مقادیر درصد اتمی ژرمانیوم استفاده شده در حل عددی

درصد اتمی ژرمانیوم	٪۲۰	٪۴۰	٪۵۰	٪۶۰	٪۸۰
نسبت ضخامت لایه ژرمانیوم به لایه سیلیکون	۰/۲۸۳	۰/۷۵۴	۱/۱۳۱	۱/۶۹۷	۴/۵۲۴

نتایج این تحقیق در قالب تأثیر ضخامت لایه‌های ژرمانیوم و سیلیکون بر تغییرات درجه حرارت در عرض لایه‌ها و همچنین بر ضریب رسانایی حرارتی مؤثر لایه‌ها ارائه شده است.

۱.۶. اعتبارسنجی نتایج

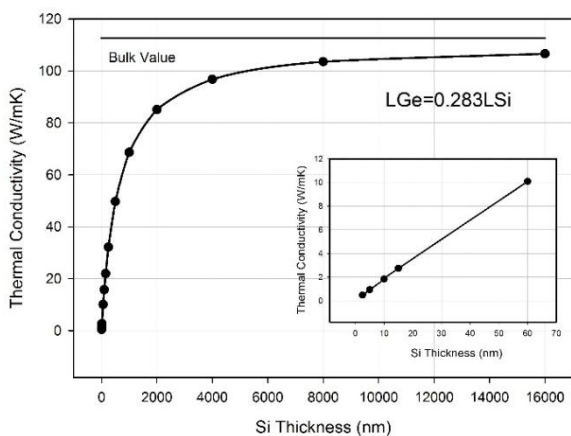
در این تحقیق نیز مشابه بسیاری از مطالعات صورت گرفته در مقیاس نانو، برای اعتبارسنجی نتایج مدل‌سازی کامپیوتری، جواب‌های به‌دست‌آمده از مدل‌سازی نانو در ابعاد بزرگ با جواب‌های به‌دست‌آمده از معادلات رایج، مقایسه شده‌اند. بنابراین در شکل‌های (۱۱) تا (۱۵) که تغییرات ضریب رسانایی سلول محاسباتی را بر حسب ضخامت سیلیکون به‌ازای مقادیر مختلف درصد اتمی ژرمانیوم نشان می‌دهند، مقدار ضریب رسانایی حرارتی ماکروساختار که از رابطه (۱۸) به دست آمده، نیز نشان داده شده است. ملاحظه می‌گردد در هر شکل، با افزایش چشمگیر ضخامت لایه‌ها، مقدار ضریب رسانایی حرارتی مؤثر ابرشبهه به مقدار ضریب رسانایی حرارتی ماکروساختار میل می‌کند که این خود دلیلی بر درستی مدل‌سازی عددی می‌باشد.

پرتابه‌ای کاهش می‌یابد و پرش‌های دمایی روی فصول مشترک کوچک‌تر می‌شوند.

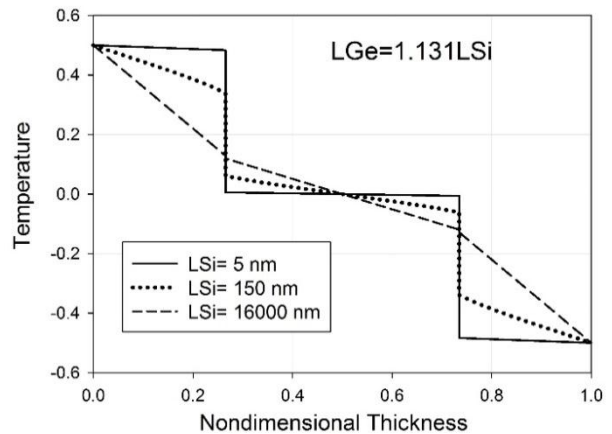
در آخر به‌ازای  $L_{Si} = 5nm$ ، که ضخامت هر دو لایه به‌مراتب کوچک‌تر از مسیر آزاد میانگین مربوطه هستند، مکانیزم پرتابه‌ای کاملاً بر انتقال حرارت رسانایی حاکم است و گرادیان دما در عرض لایه، صفر یا بسیار ناچیز می‌باشد. در واقع در این حالت، فونون‌ها در عرض لایه‌ها تعداد برخورد کمی با یکدیگر دارند و برخورد فونون‌ها با مرزها سبب ایجاد پرش دمایی بزرگ روی سطوح مشترک می‌شود.

### ۳.۶. تأثیر ضخامت لایه‌ها بر شار حرارتی و ضریب رسانایی حرارتی مؤثر

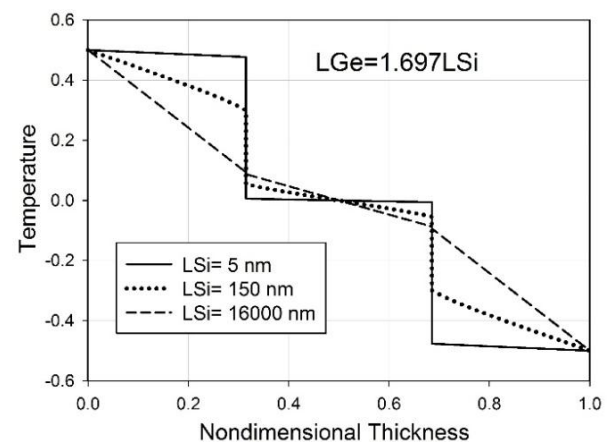
شکل‌های (۱۱) تا (۱۵) تغییرات ضریب رسانایی حرارتی مؤثر را به‌ازای مقادیر مختلف درصد اتمی ژرمانیوم نشان می‌دهند. در هر شکل، نسبت ضخامت لایه‌ها ثابت است و چگونگی تغییرات ضریب رسانایی حرارتی مؤثر با افزایش ضخامت لایه‌ها نشان داده شده است. با توجه به شکل‌های (۱۱) تا (۱۵) پیداست که ضریب رسانایی حرارتی مؤثر تابعی از ضخامت لایه‌هاست و هرچه ضخامت لایه‌ها کمتر شود، ضریب رسانایی نیز کاهش می‌یابد. در واقع هرچه ضخامت لایه‌ها کمتر شود، تأثیر مقاومت حرارتی مرزی<sup>۱</sup> بیشتر می‌شود و مقاومت حرارتی کل نیز افزایش می‌یابد و در نتیجه شار حرارتی عبوری کاهش می‌یابد. بنابراین با توجه به رابطه (۱۶) کاهش شار حرارتی، کاهش ضریب رسانایی حرارتی مؤثر را نیز در پی خواهد داشت. در مقابل با افزایش چشمگیر ضخامت لایه‌ها، مقدار ضریب رسانایی حرارتی مؤثر در هر شکل به مقدار ماکروساختار که از رابطه (۱۸) محاسبه می‌گردد، نزدیک می‌شود.



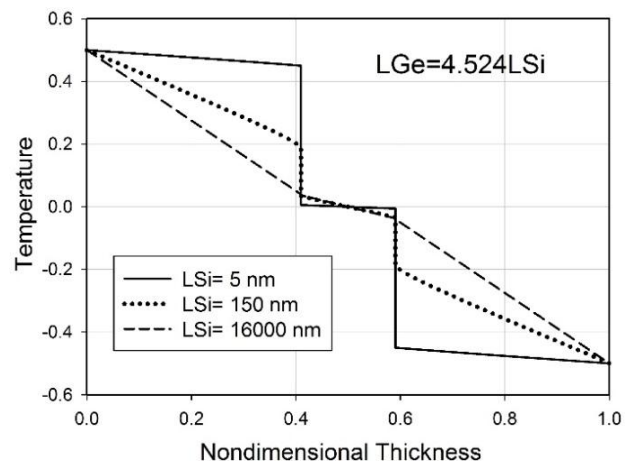
شکل (۱۱): تغییرات ضریب رسانایی (درصد اتمی ژرمانیوم ۲۰٪)



شکل (۸): پروفایل دما در عرض ابرشبهه (درصد اتمی ژرمانیوم ۵۰٪)



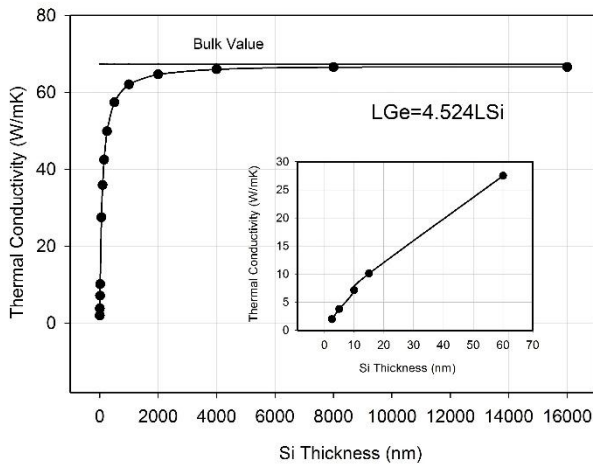
شکل (۹): پروفایل دما در عرض ابرشبهه (درصد اتمی ژرمانیوم ۶۰٪)



شکل (۱۰): پروفایل دما در عرض ابرشبهه (درصد اتمی ژرمانیوم ۸۰٪)

به‌ازای  $L_{Si} = 150nm$ ، با توجه به درصد اتمی ژرمانیوم، هر دو مکانیزم پرتابه‌ای و پخششی در انتقال حرارت رسانایی تأثیرگذارند. بنابراین هم گرادیان دما در عرض لایه‌ها دیده می‌شود و هم پرش دمایی روی مرزها اتفاق می‌افتد. با توجه به شکل‌های (۶) تا (۱۰) دیده می‌شود که با افزایش ضخامت لایه ژرمانیوم از





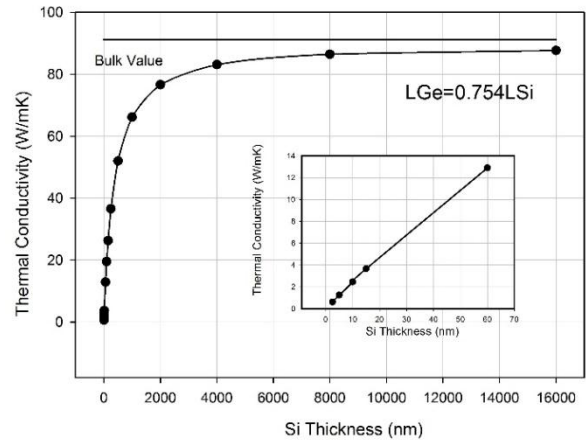
شکل (۱۵): تغییرات ضریب رسانایی (درصد اتمی ژرمانیوم ۸۰٪)

جدول (۳): مقادیر منتخب ضریب رسانایی حرارتی مؤثر ( $Wm^{-1}K^{-1}$ )

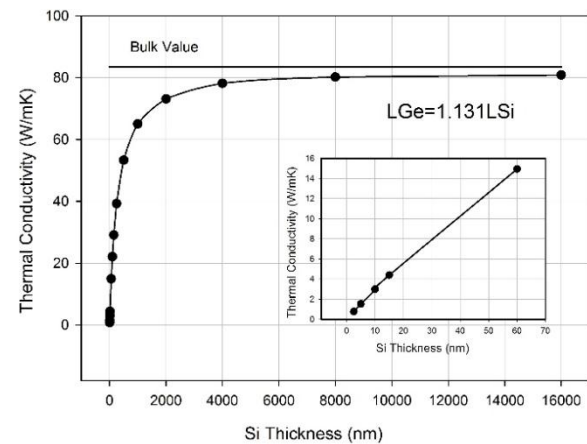
	درصد اتمی ژرمانیوم در ابرشبهه				
	٪۲۰	٪۴۰	٪۵۰	٪۶۰	٪۸۰
$L_{Si}=2.5nm$	۰/۴۶۸	۰/۶۳۴	۰/۷۷۲	۰/۹۷۴	۱/۹۵۵
$L_{Si}=5nm$	۰/۹۳۱	۱/۲۵۸	۱/۵۲۷	۱/۹۱۸	۳/۷۸۲
$L_{Si}=10nm$	۱/۸۴۳	۲/۴۸۶	۲/۹۸۹	۳/۷۲۶	۷/۱۱۳
ماکروساختار	۱۱۲/۷	۹۱/۲	۸۳/۵	۷۷/۲	۶۷/۳

نکته جالب توجه مستخرج از نمودارها، این است که در ابرشبهه با ضخامت‌های نانو، با ثابت بودن ضخامت یکی از لایه‌ها و افزایش یافتن ضخامت لایه دیگر، ضریب رسانایی حرارتی مؤثر افزایش می‌یابد. اما در ماکروساختار این رفتار متفاوت است. بدین صورت که اگر ضخامت لایه سیلیکون ثابت بماند و ضخامت لایه ژرمانیوم افزایش یابد، ضریب رسانایی حرارتی مؤثر کاهش می‌یابد و برعکس اگر ضخامت لایه ژرمانیوم ثابت بماند و ضخامت لایه سیلیکون افزایش یابد، ضریب رسانایی حرارتی مؤثر افزایش می‌یابد. علت این است که در مقیاس نانو، انتقال حرارت رسانایی توسط فونون‌ها به صورت پرتابه‌ای صورت می‌گیرد و خواص حرارتی ژرمانیوم و سیلیکون نقشی در ضریب رسانایی حرارتی مؤثر ابرشبهه ندارد. اما در مقیاس ماکرو، انتقال حرارت رسانایی توسط فونون‌ها به صورت پخش‌ی صورت می‌گیرد و چون ضریب رسانایی حرارتی ژرمانیوم کمتر از سیلیکون است، رفتارهای متفاوتی در کاهش یا افزایش ضریب رسانایی حرارتی مؤثر مشاهده می‌شود.

برای نمونه در شکل (۱۶) برای ضخامت ۱۰۰ نانومتری سیلیکون، ضخامت‌های مختلفی از ژرمانیوم در نظر گرفته شده و روند افزایش ضریب رسانایی حرارتی مؤثر با افزایش ضخامت ژرمانیوم دیده

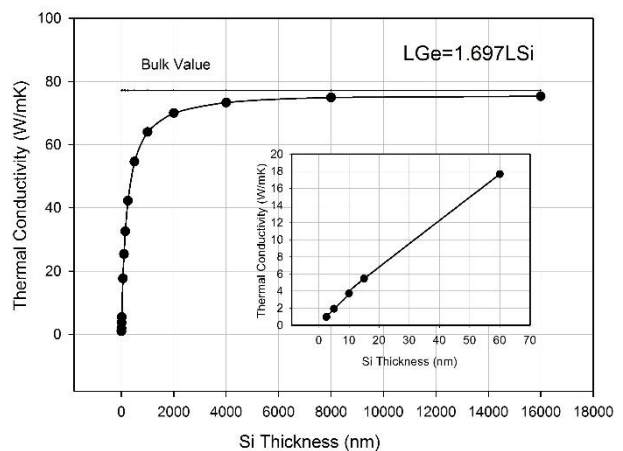


شکل (۱۲): تغییرات ضریب رسانایی (درصد اتمی ژرمانیوم ۴۰٪)



شکل (۱۳): تغییرات ضریب رسانایی (درصد اتمی ژرمانیوم ۵۰٪)

در جدول (۳)، چند مقدار منتخب از ضریب رسانایی حرارتی مؤثر مربوط به شکل‌های (۱۱) تا (۱۵) و همچنین مقدار ضریب رسانایی حرارتی مؤثر ماکروساختار متناظر با هر حالت آورده شده است.



شکل (۱۴): تغییرات ضریب رسانایی (درصد اتمی ژرمانیوم ۶۰٪)

### ۵.۶. بهبود عدد شایستگی

نانوکامپوزیت‌ها و ابرشبکه‌ها می‌توانند از طریق کاهش ضریب رسانایی حرارتی به اعداد شایستگی بالا دست‌یابند، حال آنکه عملکرد انتقال الکترون را ثابت نگه می‌دارند [۷]. پس همزمان با نازک‌تر شدن لایه‌ها ضریب رسانایی حرارتی کاهش می‌یابد، ولی ضریب قدرت  $(S^2s)$  تغییر چندانی نخواهد داشت. بنابراین در دمای یکسان در رابطه (۱) صورت کسر تقریباً ثابت می‌ماند، ولی مخرج کسر کاهش می‌یابد که در نهایت باعث افزایش عدد شایستگی خواهد شد.

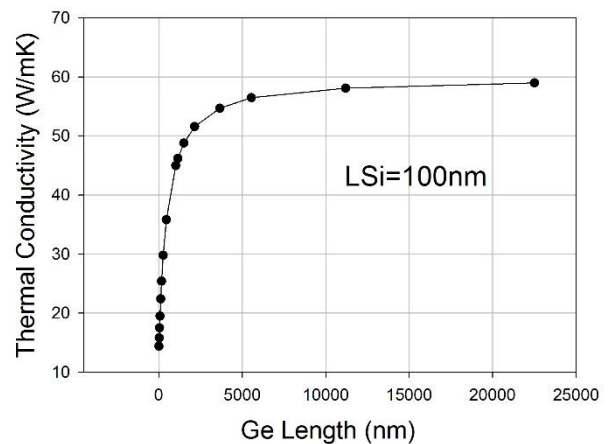
همان‌طور که قبلاً اشاره شد، یکی از راه‌های کاهش ضریب رسانایی حرارتی آلیاژسازی است. پراکندگی ناشی از اختلاف جرم باعث کاهش رسانایی حرارتی شبکه‌ای در یک آلیاژ می‌شود بدون آنکه باعث تنزل مهمی در رسانایی الکتریکی گردد [۴]. در آلیاژ سیلیکون-ژرمانیوم ضریب رسانایی حرارتی حدود  $9 W/mK$  در آلیاژی با ۲۰٪ اتمی ژرمانیوم گزارش شده است [۲۸]. حتی اگر با محافظه‌کاری، ردیف سوم جدول (۳) به دلیل مطمئن بودن از درستی فرضیات مسئله در نظر گرفته شود، با فرض ثابت ماندن ضریب قدرت می‌توان به پنج برابر عدد شایستگی حد آلیاژی دست یافت.

### ۷. نتیجه‌گیری و جمع‌بندی

انتقال حرارت رسانایی در ابرشبکه نیمه‌رسانای Si-Ge عمدتاً توسط فونون‌ها و به‌صورت پرتابه‌ای انجام می‌پذیرد و بدین دلیل برخلاف ماکروساختار مشابه، ضریب رسانایی حرارتی توده‌ای سیلیکون و ژرمانیوم نقشی در انتقال حرارت ندارند، بلکه تراکم فصل مشترک بر واحد طول است که با افزایش پراکندگی فونون‌ها سبب کاهش شار حرارتی و در نتیجه کاهش ضریب رسانایی حرارتی مؤثر ابرشبکه می‌شود. به عبارتی دیگر، در مقیاس نانو، ضریب رسانایی حرارتی یک خاصیت ذاتی نبوده و یک خاصیت ساختاری است که با تغییر ابعاد می‌تواند تغییر کند.

در مقیاس نانو بدون توجه به جنس لایه‌ها، با ثابت ماندن ضخامت هریک از آن‌ها و کاهش ضخامت لایه دیگر، ضریب رسانایی حرارتی مؤثر کاهش می‌یابد در صورتی که این رفتار در مقیاس ماکرو بسته به ضریب رسانایی حرارتی توده‌ای هریک از لایه‌ها متفاوت است. نتیجه دیگر اینکه تنها نازک بودن یکی از لایه‌ها تأثیر چندانی در کاهش ضریب رسانایی حرارتی مؤثر نخواهد داشت و در این حالت ضریب رسانایی حرارتی ابرشبکه با ضریب رسانایی حرارتی توده‌ای

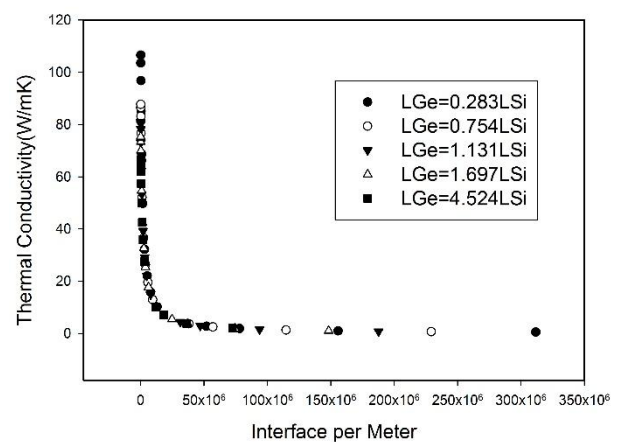
می‌شود. نکته قابل توجه اینکه با افزایش چشمگیر ضخامت ژرمانیوم، ضریب رسانایی حرارتی به مقدار توده‌ای ضریب رسانایی حرارتی ژرمانیوم،  $60 W/mK$ ، نزدیک می‌گردد.



شکل (۱۶): تغییرات ضریب رسانایی با ثابت بودن ضخامت لایه Si

### ۴.۶. اهمیت دانسیته فصل مشترک بر واحد طول

در شکل (۱۷)، تغییرات ضریب رسانایی حرارتی مؤثر بر حسب پارامتر جدیدی به نام دانسیته فصل مشترک بر واحد طول ابرشبکه، ارائه شده است. از شکل پیداست که با افزایش دانسیته فصل مشترک، ضریب رسانایی حرارتی مؤثر کاهش می‌یابد. همان‌طور که در شکل دیده می‌شود، با توجه به پراکنده شدن نقاط مختلف با درصدهای اتمی متفاوت در لایه‌های یکدیگر، می‌شود به این نتیجه رسید که دانسیته فصل مشترک بر واحد طول را می‌توان به‌عنوان تنها پارامتر فراگیر مؤثر در مقدار ضریب رسانایی حرارتی مؤثر ابرشبکه معرفی کرد. به‌نحوی که تنها با داشتن این پارامتر و با استفاده از منحنی شکل (۱۷)، می‌توان مقدار ضریب رسانایی حرارتی مؤثر را به دست آورد.



شکل (۱۷): ضریب رسانایی حرارتی بر حسب دانسیته فصل مشترک

$\theta$	زاویه سمت (rad)
$\nu$	سرعت گروهی فونون‌ها ( $\text{m}\cdot\text{sec}^{-1}$ )
$\omega$	بسامد زاویه‌ای فونون‌ها (Hz)
$\hbar$	ثابت پلانک (J.sec)
$\tau_r$	زمان آسودگی (sec)
$\sigma$	ضریب رسانایی الکتریکی ( $\text{W}^{-1}\cdot\text{m}^{-1}$ )

#### زیرنویس‌ها

$i$	مربوط به جنس ماده (ژرمانیوم یا سیلیکون)
$Ge$	مربوط به ژرمانیوم
$Si$	مربوط به سیلیکون
$m$	پلاریزاسیون‌های مختلف فونون‌ها
0	حالت تعادل

#### بالا نویس‌ها

*	کمیت بدون بعد
0	حالت تعادل
+	جهت مثبت
-	جهت منفی

#### پیوست

درصد اتمی ژرمانیوم، تعیین‌کننده نسبت هندسی  $L_{Ge}/L_{Si}$  می‌باشد و با درصد جرمی یا حجمی متفاوت است. اگر درصد اتمی ژرمانیوم را با  $x$  نشان دهیم، درصد اتمی سیلیکون  $(1-x)$  خواهد بود. درصد اتمی ژرمانیوم در واقع نسبت مولی ژرمانیوم به سیلیکون است که طبق رابطه (۱۹) نوشته می‌شود.

$$x = n_{Ge} / (n_{Si} + n_{Ge}) ; m_i = \rho_i V_i ; m_i = n_i M_i \quad (19)$$

$$M (\text{kg}/\text{kmol}) ; V (\text{m}^3) ; n (\text{kmol}) ; \rho (\text{kg}/\text{m}^3)$$

با انجام محاسباتی ساده و استفاده از مقادیر جدول (۱)، رابطه بین درصد اتمی و نسبت ضخامت ژرمانیوم به سیلیکون، مطابق رابطه (۲۰) به دست می‌آید:

$$\left( \frac{x}{1-x} \right) = 0.88412 \times \frac{V_{Ge}}{V_{Si}} = 0.88412 \times \frac{L_{Ge}}{L_{Si}} \quad (20)$$

لایه ضخیم برابر خواهد بود.

از نظر تغییرات دما با کاهش ضخامت لایه‌ها، شاهد افزایش پرش دما در فصل مشترک لایه‌ها خواهیم بود که در واقع همین افت دما در ابرشبکه، عامل افزایش مقاومت حرارتی و در نتیجه کاهش ضریب رسانایی مؤثر خواهد بود.

پارامتر کلیدی در تعیین ضریب رسانایی حرارتی مؤثر ابرشبکه، دانسیته یا تراکم فصل مشترک بر واحد طول ابرشبکه است که تنها با محاسبه آن و بدون توجه به ضخامت و جنس لایه‌ها می‌توان ضریب رسانایی حرارتی مؤثر را از نمودار مربوطه به دست آورد.

در نهایت می‌توان گفت که استفاده از ابرشبکه‌ها با کاهش ضریب رسانایی حرارتی و عدم تغییر محسوس ضریب رسانایی الکتریکی و ضریب قدرت، باعث افزایش عدد شایستگی در مواد ترموالکتریک می‌شوند که این افزایش در ابرشبکه Si-Ge می‌تواند حدود پنج برابر ماکزیمم عدد شایستگی در آلیاژ سیلیکون و ژرمانیوم باشد.

#### فهرست علائم

$C$	گرمای ویژه حجمی ( $\text{J}\cdot\text{m}^{-3}\cdot\text{K}^{-1}$ )، درجه‌ی سلسیوس
$D$	چگالی حالات بر واحد حجم ( $\text{m}^{-3}$ )
$f$	تابع توزیع فونون
$I$	شدت فونون کلی ( $\text{W}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{sr}^{-1}$ )
$I_0$	شدت فونون کلی تعادلی ( $\text{W}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{sr}^{-1}$ )
$k$	ضریب رسانایی حرارتی ( $\text{W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$ )
$R$	ضریب انعکاس
$r$	بردار مکان
$S$	ضریب سیبک ( $\text{V}\cdot\text{K}^{-1}$ )
$T$	ضریب عبور و دما (K)
$Z$	عدد شایستگی ( $\text{K}^{-1}$ )

#### علائم یونانی

$L$	مسیر آزاد میانگین فونون‌ها (m)
$\Omega$	زاویه فضایی (sr)
$\phi$	زاویه قطبی (rad)

#### مراجع

[1] Furlong, R. R., Wahlquist, E. J., "US Space Missions Using Radioisotope Power Systems", Nuclear news, Vol. 42, pp. 26-35, 1999.

[2] Goldsmid, H., "Thermoelectric Refrigeration, The International Cryogenics Monograph Series", ed: Plenum Press, New York, 1964.

- [3] Chen, G., Shakouri, A., "Heat Transfer In Nanostructures for Solid-State Energy Conversion", Transactions-American Society of Mechanical Engineers Journal of Heat Transfer, Vol. 124, No. 2, pp. 242-252, 2002.
- [4] Ioffe, A. F., "Semiconductor Thermoelements and Thermoelectric Cooling. Infosearch Limited", ed: London, 1957.
- [5] Rowe, D. M., CRC Handbook of Thermoelectrics. CRC press, 1995.
- [6] Casian, A., Dashevsky, Z., Kantser, V., Scherrer, H., Sur, I., "Thermoelectric Figure of Merit of n-type PbTe/Pb1-xEuxTe Quantum Wells", Moldavian Journal of the Physical Sciences, Vol. 1, No. 1, pp. 100-105, 2002.
- [7] Yang, R., Chen, G., Dresselhaus, M. S., "Thermal Conductivity of Simple and Tubular Nanowire Composites in the Longitudinal Direction", Physical Review B, Vol. 72, No. 12, pp. 125418, 2005.
- [8] Casimir, H., "Note on the Conduction of Heat in Crystals", Physica, Vol. 5, No. 6, pp. 495-500, 1938.
- [9] Holland, M., "Phonon Scattering in Semiconductors from Thermal Conductivity Studies", Physical Review, Vol. 134, No. 2A, pp. A471, 1964.
- [10] Pohl, R., Stritzker, B., "Phonon Scattering at Crystal Surfaces", Physical Review B, Vol. 25, No. 6, pp. 3608, 1982.
- [11] Klitsner, T., VanCleve, J., Fischer, H. E., Pohl, R., "Phonon Radiative Heat Transfer and Surface Scattering", Physical Review B, Vol. 38, No. 11, pp. 7576, 1988.
- [12] Joshi, A., Majumdar, A., "Transient Ballistic and Diffusive Phonon Heat Transport in Thin Films", Journal of Applied Physics, Vol. 74, No. 1, pp. 31-39, 1993.
- [13] Chen, G., "Size and Interface Effects on Thermal Conductivity of Superlattices and Periodic Thin-Film Structures", Transactions-American Society of Mechanical Engineers Journal of Heat Transfer, Vol. 119, pp. 220-229, 1997.
- [14] Raisi, A., Rostami, A. A., "Unsteady Heat Transport in Direction Perpendicular to a Double-Layer Thin-Film Structure", Numerical Heat Transfer: Part A: Applications, Vol. 41, No. 4, pp. 373-390, 2002.
- [15] Yang, R., Chen, G., "Thermal Conductivity Modeling of Periodic Two-Dimensional Nanocomposites", Physical Review B, Vol. 69, No. 19, pp. 195316, 2004.
- [16] Lukes, J. R., Tien, C., "Molecular Dynamics Simulation of Thermal Conduction in Nanoporous Thin Films", Microscale Thermophysical Engineering, Vol. 8, No. 4, pp. 341-359, 2004.
- [17] Nabovati, A., Sellan, D. P., Amon, C. H., "On the Lattice Boltzmann Method for Phonon Transport", Journal of Computational Physics, Vol. 230, No. 15, pp. 5864-5876, 2011.
- [18] Garg, J., Chen, G., "Minimum Thermal Conductivity in Superlattices: A First-principles Formalism", Physical Review B, Vol. 87, No. 14, pp. 140302, 2013.
- [19] Tian, Z., Esfarjani, K., Chen, G., "Green's Function Studies of Phonon Transport Across Si/Ge Superlattices", Physical Review B, Vol. 89, No. 23, pp. 235307, 2014.
- [20] Sellitto, A., "A Phonon-hydrodynamic Approach to Thermal Conductivity of Si-Ge Quantum Dot Superlattices", Applied Mathematical Modelling, Vol. 39, No. 16, pp. 4687-4698, 2015.
- [21] Hua, Y.-C., Cao, B.-Y., "Ballistic-diffusive Heat Conduction in Multiply-constrained Nanostructures", International Journal of Thermal Sciences, Vol. 101, pp. 126-132, 2016.
- [22] Chen, G., Nanoscale Energy Transport and Conversion: A Parallel Treatment of Electrons, Molecules, Phonons, and Photons. Oxford University Press, 2005.
- [23] Ziman, J. M., Electrons and Phonons: The Theory of Transport Phenomena in Solids. Oxford university press, 1960.
- [24] Bhatnagar, P. L., Gross, E. P., Krook, M., "A Model for Collision Processes in Gases. I. Small Amplitude Processes in Charged and Neutral One-component Systems", Physical review, Vol. 94, No. 3, pp. 511, 1954.
- [25] Succi, S., The Lattice Boltzmann Equation: For Fluid Dynamics and Beyond. Oxford university press, 2001.
- [26] Majumdar, A., "Microscale Heat Conduction in Dielectric Thin Films", Journal of Heat Transfer, Vol. 115, No. 1, pp. 7-16, 1993.
- [27] Chen, G., Tien, C., "Thermal Conductivities of Quantum Well Structures", Journal of Thermophysics and Heat Transfer, Vol. 7, No. 2, pp. 311-318, 1993.
- [28] Perez-Taborda, J. A., Rojo, M. M., Maiz, J., Neophytou, N., Martin-Gonzalez, M., "Ultra-low Thermal Conductivities in Large-area Si-Ge Nanomeshes for Thermoelectric Applications", Scientific reports, Vol. 6, pp. 32778, 2016.