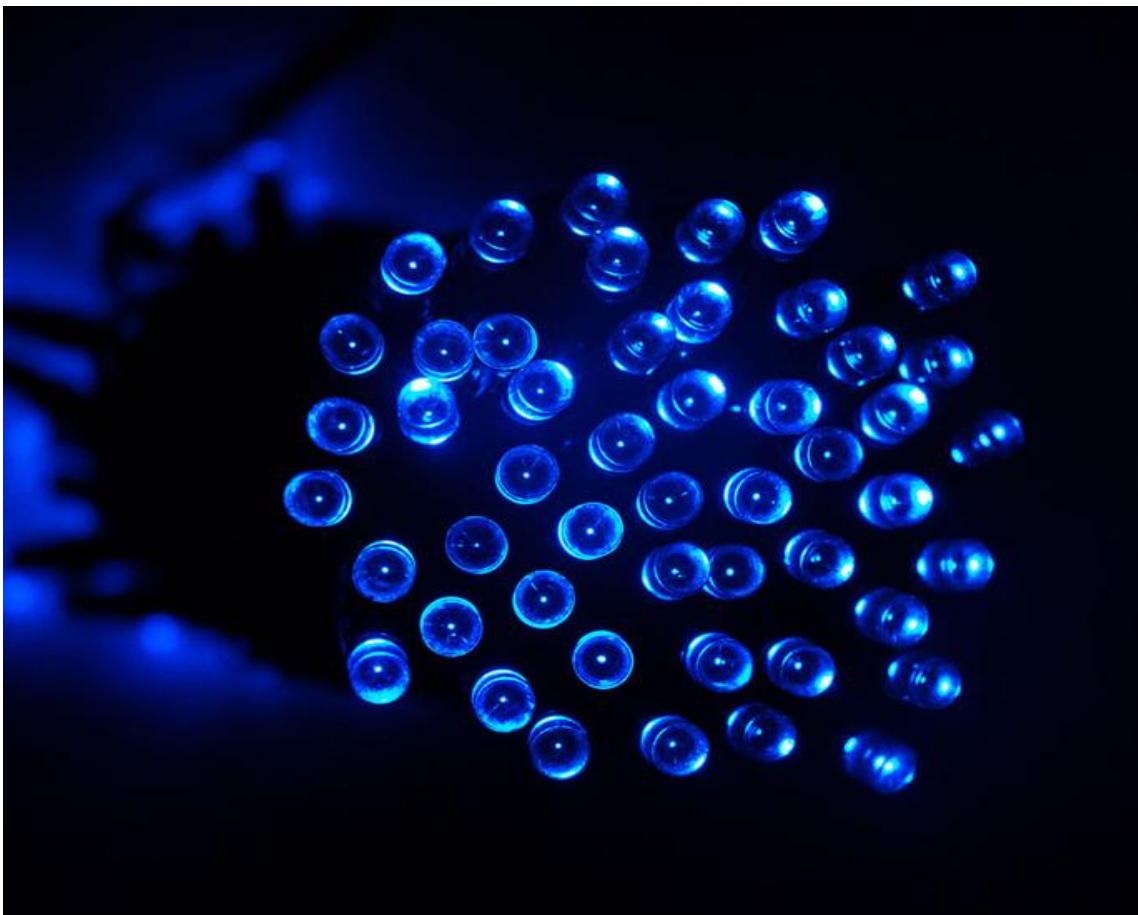


ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΚΟ ΕΚΠΑΙΔΕΥΤΙΚΟ ΙΔΡΥΜΑ ΔΥΤΙΚΗΣ ΕΛΛΑΔΑΣ  
ΣΧΟΛΗ ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΚΩΝ ΕΦΑΡΜΟΓΩΝ  
ΤΜΗΜΑ ΜΗΧΑΝΟΛΟΓΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ Τ.Ε

**ΠΤΥΧΙΑΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ**

**ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗ ΕΛΑΣΤΟΠΛΑΣΤΙΚΗΣ ΣΥΜΠΕΡΙΦΟΡΑΣ  
ΜΟΝΟΣΤΡΩΜΑΤΙΚΟΥ ΦΥΛΛΟΥ ΝΙΤΡΙΔΙΟΥ ΤΟΥ ΓΑΛΛΙΟΥ**



**ΣΠΟΥΔΑΣΤΕΣ: ΓΚΟΥΡΑΣ ΒΑΣΙΛΕΙΟΣ  
ΔΟΥΡΑΛΗ ΙΩΑΝΝΑ-ΑΘΑΝΑΣΙΑ**

**ΕΠΙΒΛΕΠΩΝ ΚΑΘΗΓΗΤΗΣ: Δρ ΓΙΑΝΝΟΠΟΥΛΟΣ Ι. ΓΕΩΡΓΙΟΣ**

**ΠΑΤΡΑ 2015**



## ΠΡΟΛΟΓΟΣ

Η παρούσα πτυχιακή εργασία εκπονήθηκε στο Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών Τ.Ε. της Σχολής Τεχνολογικών Εφαρμογών του Τεχνολογικού Εκπαιδευτικού Ιδρύματος Δυτικής Ελλάδας. Το παρόν κείμενο ασχολείται με την πρόβλεψη της μη – γραμμικής μηχανικής συμπεριφοράς μονοστρωματικού φύλλου νιτριδίου του γαλλίου. Το άχρωμο αζωτούχο γάλλιο(III) ή νιτρίδιο του γαλλίου είναι αγωγός n-τύπου, κρυσταλλώνεται στο εξαγωνικό σύστημα με δομή βουρτσιτή και είναι σταθερό σε κανονική πίεση αλλά και στο κυβικό σύστημα με δομή σφαλερίτη, όταν αναπτύσσεται με μεθόδους επιταξίας σε κυβικό υπόστρωμα. Έχει πυκνότητα  $6,15 \text{ g/cm}^3$  που είναι η μεγαλύτερη από τις ενώσεις του Γαλλίου(Ga) με τα στοιχεία της 15ης ομάδας. Μαζί με το Αρσενιούχο Γάλλιο(GaAs) αντιπροσωπεύουν σχεδόν το 99 % του γαλλίου που καταναλώνεται στις Η.Π.Α. Χρησιμοποιείται για την κατασκευή διόδων λέιζερ και εκπομπής φωτός (LED).

Στο επίπεδο της νανοκλίμακας αποκαλύπτονται διαφορετικές ιδιότητες της ύλης και είναι δυσδιάκριτα τα όρια μεταξύ των επιστημών και τεχνικών κλάδων, επομένως, ο χαρακτήρας της νανοτεχνολογίας είναι διεπιστημονικός. Σήμερα η νανοτεχνολογία αποτελεί έναν ανερχόμενο κλάδο της επιστήμης, με πολλά άγνωστα σημεία, άγνωστα υλικά και ιδιότητες. Η επιστημονική κοινότητα προσδοκά πολλές λύσεις σε παρόντα ζητήματα από τις εφαρμογές που θα προκύψουν από την ανάπτυξη αυτού του κλάδου. Η επί του παρόντος πρόοδος της νανοτεχνολογίας λόγω του ανταγωνισμού σε παγκόσμιο επίπεδο είναι τεράστια. Τα οφέλη αυτής της γνώσης θα μπορέσουν να αξιοποιηθούν με την ανάπτυξη νέων προϊόντων και διεργασιών, όπως τόνισε και ο εκτελών χρέη διευθυντού «Βιομηχανικές Τεχνολογίες» της γενικής διεύθυνσης έρευνας της ευρωπαϊκής επιτροπής.

Η παρούσα εργασία παρουσιάζει, με τη μέθοδο πεπερασμένων στοιχείων τύπου ελατηρίου, την ανάλυση της μηχανικής συμπεριφοράς μονοστρωματικών φύλλων Νιτριδίου του Γαλλίου (GaN). Με την μέθοδο αυτή μοντελοποιήθηκαν μονοστρωματικά φύλλα Νιτριδίου του Γαλλίου συγκεκριμένων διαστάσεων. Η εκπόνηση της εργασίας αυτής έπαιξε σημαντικό ρόλο στην διεύρυνση των γνώσεων των σπουδαστών πάνω στον, άγνωστο ακόμα σε μεγάλο ποσοστό, κόσμο της νανοκλίμακας, πάνω στις μεθόδους αριθμητικής μοντελοποίησης νανοδομημένων υλικών αλλά και στην γνωριμία με την ανερχόμενη τεχνολογία της νανοκλίμακας.

Ευχαριστούμε θερμά τον εισηγητή Δρ. Γιαννόπουλο Ι. Γεώργιο, επιστημονικό συνεργάτη του Τμήματος Μηχανολόγων Μηχανικών Τ.Ε., για την επιμονή του στην παρακολούθηση των εξελίξεων του τομέα, για την προσφορά επιστημονικού έργου πάνω σε ένα σύγχρονο και ενδιαφέρον θέμα, καθώς επίσης για την βοήθεια και καθοδήγηση του καθ' όλη την διάρκεια εκπόνησης της παρούσας πτυχιακής εργασίας.

**Υπεύθυνη Δήλωση Σπουδαστών:** Οι κάτωθι υπογεγραμμένοι σπουδαστές έχουμε επίγνωση των συνεπειών του Νόμου περί λογοκλοπής και δηλώνουμε υπεύθυνα ότι είμαστε συγγραφείς αυτής της Πτυχιακής Εργασίας, αναλαμβάνοντας την ευθύνη επί ολοκλήρου του κειμένου εξ ίσου, έχουμε δε αναφέρει στην Βιβλιογραφία μας όλες τις πηγές τις οποίες χρησιμοποιήσαμε και λάβαμε ιδέες ή δεδομένα. Δηλώνουμε επίσης ότι, οποιοδήποτε στοιχείο ή κείμενο το οποίο έχουμε ενσωματώσει στην εργασία μας προερχόμενο από Βιβλία ή άλλες εργασίες ή το διαδίκτυο, γραμμένο ακριβώς ή παραφρασμένο, το έχουμε πλήρως αναγνωρίσει ως πνευματικό έργο άλλου συγγραφέα και έχουμε αναφέρει ανελλιπώς το όνομά του και την πηγή προέλευσης.

Οι σπουδαστές

(Ονοματεπώνυμο)

(Ονοματεπώνυμο)

.....

.....

(Υπογραφή)

(Υπογραφή)



## ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Η παρούσα Πτυχιακή Εργασία αναφέρεται στην αριθμητική πρόβλεψη των ελαστοπλαστικών μηχανικών ιδιοτήτων μονοστρωματικών φύλλων νιτριδίου του γαλλίου. Για τη μοντελοποίηση των φύλλων νιτριδίου του γαλλίου γίνεται χρήση μιας μεθόδου πεπερασμένων στοιχείων. Οι χημικοί δεσμοί μεταξύ των ατόμων γαλλίου και αζώτου καθώς και όλες οι διατομικές αλληλεπιδράσεις προσομοιώθηκαν κατάλληλα με τη βοήθεια ισχυρά μη γραμμικών καταστατικών εξισώσεων δυναμικής ενέργειας. Για τη μοντελοποίηση του εν λόγω νανοϋλικού λήφθηκε υπόψη η ακριβής θέση των ατόμων αζώτου και γαλλίου στον χώρο. Τα δεδομένα αυτά ελήφθησαν από το πρόγραμμα nanotube modeler.

Στη συνέχεια αναπτύχθηκαν δισδιάστατα μοντέλα πεπερασμένων στοιχείων με τη βοήθεια λογισμικού πακέτου σε πέντε διαφορετικές διαστάσεις της νανοκλίμακας προκειμένου να μελετηθεί η επίδραση που έχει η γεωμετρία στην συμπεριφορά τάσης – παραμόρφωσης και γενικά των μηχανικών ιδιοτήτων του νανοϋλικού. Σκοπός της εργασίας αυτής είναι η αριθμητική πρόβλεψη της μη – γραμμικής μηχανικής συμπεριφοράς μονοστρωματικού φύλλου νιτριδίου του γαλλίου. Τα συμπεράσματα που εξήχθησαν αφορούν το μέτρο ελαστικότητας του υλικού, το όριο διαρροής του, το λόγο Poisson, την αντοχή σε εφελκυσμό, τη διάταση θραύσης και τη δυσθραυστότητα στις δύο διευθύνσεις του επιπέδου x,y.

Η ανάπτυξη του θέματος γίνεται σε έξι κεφάλαια. Στο πρώτο κεφάλαιο εισάγονται οι βασικές έννοιες της νανοτεχνολογίας, όπως ο ορισμός της, η ιστορική της αναδρομή, οι εφαρμογές που βρίσκει και πώς αξιοποιείται. Γίνεται επίσης μία παρουσίαση των νανοδομημένων και των νανοσύνθετων υλικών.

Στο δεύτερο κεφάλαιο ασχοληθήκαμε με τα μονοστρωματικά νανοϋλικά. Αρχικά γίνεται μια γνωριμία με τα μονοστρωματικά νανοϋλικά και περιγράφεται η ιστορική αναδρομή, οι μέθοδοι κατασκευής, οι εφαρμογές και οι ιδιότητες του γραφενίου. Στη συνέχεια περιγράφονται οι μέθοδοι κατασκευής, οι εφαρμογές και οι ιδιότητες των φύλλων νιτριδίου του βορίου. Τέλος το δεύτερο κεφάλαιο ασχολείται με το νιτρίδιο του γαλλίου και συγκεκριμένα παρουσιάζει το χημικό στοιχείο γάλλιο, την εξαγωγή του χημικού στοιχείου γάλλιο από διάφορα υλικά, τις ενώσεις του χημικού στοιχείου γάλλιο και παρουσιάζει συνοπτικά τη χημική ένωση του γαλλίου με το άζωτο.

Το αντικείμενο με το οποίο ασχολείται το τρίτο κεφάλαιο είναι το μονοστρωματικό φύλλο νιτριδίου του γαλλίου. Αναφέρεται αναλυτικά στις εφαρμογές του νιτριδίου του γαλλίου στους διάφορους τομείς και περιγράφεται και ο τρόπος κατασκευής των μονοστρωματικών φύλλων του νιτριδίου του γαλλίου.

Το τέταρτο κεφάλαιο ασχολείται με τα πεπερασμένα στοιχεία. Γίνεται αναφορά στη μέθοδο των πεπερασμένων στοιχείων και στις βασικές έννοιες που τα διέπουν. Στη συνέχεια εξηγείται η μοντελοποίηση του μονοστρωματικού φύλλου νιτριδίου του γαλλίου με τη συγκεκριμένη μέθοδο.

Ακολούθως παρουσιάζονται τα αποτελέσματα που αφορούν τις μηχανικές ιδιότητες του μονοστρωματικού φύλλου του νιτριδίου του γαλλίου, στο πέμπτο κεφάλαιο. Παρουσιάζεται ο τρόπος μοντελοποίησης των φύλλων και τα

αποτελέσματα της επίλυσης των εξισώσεων με τη μορφή των διαγραμμάτων του ορίου διαρροής, του μέτρου ελαστικότητας, της παραμόρφωσης αστοχίας, του λόγου Poisson και της δυσθραυστότητας συναρτήσει της μέσης διάστασης των μοντέλων.

Τέλος, στο ένατο κεφάλαιο αναφέρονται τα συνολικά συμπεράσματα της μελέτης που εκπονήθηκε με τη μορφή της παρούσας πτυχιακής εργασίας. Τα κυριότερα σημεία των συμπερασμάτων είναι ότι τα μονοστρωματικά φύλλα νιτριδίου του γαλλίου έχουν καλύτερες μηχανικές ιδιότητες στα μοντέλα με τις μικρότερες διαστάσεις, καθώς επίσης, παρουσιάζουν καλύτερες μηχανικές ιδιότητες όταν η εφελκυστική μετατόπιση εφαρμόζεται στα zigzag άκρα των μοντέλων.

# ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΑ

ΠΡΟΛΟΓΟΣ.....	iii
ΠΕΡΙΛΗΨΗ.....	vi
ΕΙΣΑΓΩΓΗ.....	1
1 ΕΙΣΑΓΩΓΗ ΣΤΗ ΝΑΝΟΤΕΧΝΟΛΟΓΙΑ.....	3
1.1 ΝΑΝΟΤΕΧΝΟΛΟΓΙΑ.....	3
1.2 Η ΙΣΤΟΡΙΑ ΤΗΣ ΝΑΝΟΤΕΧΝΟΛΟΓΙΑΣ.....	5
1.3 ΕΦΑΡΜΟΓΕΣ ΚΑΙ ΑΞΙΟΠΟΙΗΣΗ ΤΗΣ ΝΑΝΟΤΕΧΝΟΛΟΓΙΑΣ.....	6
1.4 ΝΑΝΟΔΟΜΗΜΕΝΑ ΥΛΙΚΑ.....	7
1.5 ΝΑΝΟΣΥΝΘΕΤΑ ΥΛΙΚΑ.....	8
2 ΜΟΝΟΣΤΡΩΜΑΤΙΚΑ ΝΑΝΟΥΪΛΙΚΑ.....	11
2.1 ΓΝΩΡΙΜΙΑ ΜΕ ΤΑ ΜΟΝΟΣΤΡΩΜΑΤΙΚΑ ΝΑΝΟΥΪΛΙΚΑ.....	11
2.2 ΓΡΑΦΕΝΙΟ.....	11
2.2.1 Ιστορική αναδρομή και μέθοδος κατασκευής γραφενίου.....	11
2.2.2 Εφαρμογές και ιδιότητες γραφενίου.....	13
2.3 ΝΙΤΡΙΔΙΟ ΤΟΥ ΒΟΡΙΟΥ (BN).....	14
2.3.1 Μέθοδος κατασκευής φύλλου νιτριδίου του βορίου.....	14
2.3.2 Εφαρμογές και ιδιότητες νιτριδίου του βορίου.....	17
2.4 ΝΙΤΡΙΔΙΟ ΤΟΥ ΓΑΛΛΙΟΥ (GaN).....	17
2.4.1 Γάλλιο (Ga).....	18
2.4.2 Εξαγωγή Γαλλίου.....	22
2.4.3 Οι ενώσεις του χημικού στοιχείου γάλλιο.....	25
2.4.4 Το νιτρίδιο του γαλλίου.....	27
3 ΜΟΝΟΣΤΡΩΜΑΤΙΚΟ ΦΥΛΛΟ ΝΙΤΡΙΔΙΟΥ ΤΟΥ ΓΑΛΛΙΟΥ.....	29
3.1 ΕΦΑΡΜΟΓΕΣ ΝΙΤΡΙΔΙΟΥ ΤΟΥ ΓΑΛΛΙΟΥ.....	29
3.1.1 Οπτοηλεκτρονική.....	29
3.1.2 Φωτοανιχνευτές.....	30
3.1.3 Ηλιακά κύτταρα.....	31
3.1.4 Κυκλώματα ενισχυτών μικροκυμάτων.....	33
3.1.5 Η τεχνολογία Blu-ray.....	35
3.1.6 Οι δίοδοι εκπομπής λέιζερ.....	36
3.1.7 Δίοδοι εκπομπής φωτός (LED) .....	37
3.2 ΤΡΟΠΟΣ ΚΑΤΑΣΚΕΥΗΣ ΜΟΝΟΣΤΡΩΜΑΤΙΚΟΥ ΦΥΛΛΟΥ GaN .....	40
3.2.1 ΓΕΝΙΚΑ ΓΙΑ ΤΟΥΣ ΤΡΟΠΟΥΣ ΚΑΤΑΣΚΕΥΗΣ .....	40
3.2.2 ΕΠΙΤΑΞΙΑΚΗ ΑΝΑΠΤΥΞΗ ΝΙΤΡΙΔΙΟΥ ΤΟΥ ΓΑΛΛΙΟΥ ΣΕ ΖΑΦΕΙΡΙ KAISiC .....	41



3.2.3	ΑΝΑΠΤΥΞΗ ΝΙΤΡΙΔΙΟΥ ΤΟΥ ΓΑΛΛΙΟΥ ΜΕ ΔΙΗΛΕΚΤΡΙΚΟ ΣΤΡΩΜΑ .....	43
4	ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ ΜΕ ΤΗ ΜΕΘΟΔΟ ΤΩΝ ΠΕΠΕΡΑΣΜΕΝΩΝ ΣΤΟΙΧΕΙΩΝ ...	47
4.1	ΓΕΝΙΚΑ ΓΙΑ ΤΗ ΜΕΘΟΔΟ ΤΩΝ ΠΕΠΕΡΑΣΜΕΝΩΝ ΣΤΟΙΧΕΙΩΝ .....	47
4.2	ΒΑΣΙΚΕΣ ΕΝΝΟΙΕΣ ΜΕΘΟΔΟΥ ΤΩΝ ΠΕΠΕΡΑΣΜΕΝΩΝ ΣΤΟΙΧΕΙΩΝ ....	49
4.3	ΓΕΩΜΕΤΡΙΑ ΜΟΝΟΣΤΡΩΜΑΤΙΚΟΥ ΦΥΛΛΟΥ ΝΙΤΡΙΔΙΟΥ ΤΟΥ ΓΑΛΛΙΟΥ.....	51
4.4	ΣΥΣΧΕΤΙΣΗ ΤΗΣ ΔΥΝΑΜΙΚΗΣ ΤΗΣ ΕΝΕΡΓΕΙΑΣ ΜΕ ΤΟ ΠΕΔΙΟΔΥΝΑΜΕΩΝ .....	52
4.5	ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗ ΤΟΥ ΠΕΔΙΟΥ ΔΥΝΑΜΕΩΝ .....	58
5	ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ .....	63
5.1	ΔΗΜΙΟΥΡΓΙΑ ΜΟΝΟΣΤΡΩΜΑΤΙΚΟΥ ΦΥΛΛΟΥ ΝΙΤΡΙΔΙΟΥ ΤΟΥ ΓΑΛΛΙΟΥ.....	63
5.2	ΥΠΟΛΟΓΙΣΜΟΣ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ ΙΔΙΟΤΗΤΩΝ ΦΥΛΛΩΝ ΝΙΤΡΙΔΙΟΥ ΤΟΥ ΓΑΛΛΙΟΥ .....	72
6	ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ .....	79
	ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ .....	83

## ΕΙΣΑΓΩΓΗ

Το νιτρίδιο του γαλλίου είναι ένα ημιαγωγίμο υλικό το οποίο κατασκευάστηκε το 1986, από τον καθηγητή στο πανεπιστήμιο Nagoya, Isamu Akasaki, μαζί με τον Hiroshi Amano και τους συνεργάτες του, χρησιμοποιώντας την τεχνική MOVPE. Η ανακάλυψη ήταν το αποτέλεσμα μιας μακράς σειράς πειραμάτων και παρατηρήσεων. Είναι ένας άχρωμος αγωγός n-τύπου, κρυσταλλώνεται στο εξαγωνικό σύστημα με δομή βουρτσίτη και είναι σταθερό σε κανονική πίεση αλλά και στο κυβικό σύστημα με δομή σφαλερίτη όταν αναπτύσσεται με μεθόδους επιταξίας σε κυβικό υπόστρωμα. Έχει πυκνότητα  $6,15 \text{ g/cm}^3$ , που είναι η μεγαλύτερη από τις ενώσεις του γαλλίου με τα στοιχεία της 15ης ομάδας. Χρησιμοποιείται για την κατασκευή διόδων λείζερ και εκπομπής φωτός (LED).

Το 1962 έγινε γνωστό ότι υπάρχουν ημιαγωγοί, όπως το αρσενικούχο γάλλιο (GaAs), όπου γίνεται η ανασύνδεση ηλεκτρονίων – οπών χωρίς παγίδες. Στην περίπτωση αυτή όταν ένα ηλεκτρόνιο μεταπίπτει από τη ζώνη αγωγιμότητας στη ζώνη σθένους απελευθερώνεται ενέργεια με τη μορφή ακτινοβολίας. Μια τέτοια δίοδος p-n ονομάζεται δίοδος εκπομπής φωτός (Light Emitting Diode – LED) και οι πρώτες που κατασκευάστηκαν εξέπεμπαν κυρίως υπέρυθρη ακτινοβολία. Τα πρώτα LED εξέπεμπαν υπέρυθρο φως και στη συνέχεια κατασκευάστηκαν LED που εξέπεμπαν κόκκινο φως. Ενώ το φως των πρώτων LED γίνονταν μόλις αντιληπτό από την ανθρώπινη όραση, μέσα σε χρονικό διάστημα 50 χρόνων αυξήθηκε η φωτεινότητά τους. Και ενώ τα LED που παρήγαγαν κόκκινο, κίτρινο και πράσινο φως κατασκευάστηκαν σχετικά εύκολα, το βήμα προς την εκπομπή μπλε φωτός αποδείχθηκε πολύ πιο δύσκολο. Για πάνω από 30 χρόνια (από το 1962 έως το 1994) το γαλάζιο LED αποτελούσε ένα άπιαστο όνειρο. Το υλικό που επέτρεψε την ανάπτυξη των γαλάζιων LEDs ήταν το GaN (νιτρίδιο του γαλλίου). Οι Ιάπωνες Ισάμου Ακασάκι, Χιρόσι Αμάνο και Σούχι Νακαμούρα κατάφεραν να φτιάξουν μπλε LED συνθέτοντας με πρωτοποριακό τρόπο κρυστάλλους νιτρίδιου του γαλλίου και μετά το συνδύασαν με ημιαγωγούς, ώστε να το κάνουν να εκπέμψει μπλε φως, όταν περνάει μέσα του ηλεκτρικό ρεύμα. Για αυτήν τους την ανακάλυψη βραβεύτηκαν με το νόμπελ φυσικής 2014.

Κρύσταλλοι νιτρίδιου του γαλλίου μπορούν να αναπτυχθούν σε τήγμα Na/Ga αφού πρώτα το νιτρίδιο του γαλλίου (GaN) παρασκευαστεί με επίδραση αμμωνίας σε γάλλιο (Ga) ή οξείδιο του γαλλίου ( $\text{Ga}_2\text{O}_3$ ). Το εν λόγω υλικό έχει πολλές εφαρμογές σε οπτοηλεκτρονικές συσκευές και συσκευές υψηλής ισχύος και υψηλής συχνότητας. Η ευαισθησία που παρουσιάζει στην ιονίζουσα ακτινοβολία είναι χαμηλή, καθιστώντας το κατάλληλο για τους ηλιακούς συλλέκτες δορυφόρων. Επιπλέον, το νιτρίδιο του γαλλίου (GaN) αναμένεται να είναι μηχανικά σταθερό και να είναι σε θέση να λειτουργεί σε υψηλές θερμοκρασίες. Λίγα είναι γνωστά για την κινητικότητα και την μετατόπιση των ατόμων του, καθώς και για τις μηχανικές ιδιότητες του GaN, με την εξαίρεση λίγων εκθέσεων.

Η κατασκευή του μονοστρωματικού φύλλου GaN γίνεται με την αποκοπή ενός μονοστρωματικού φύλλου, κάθετο στην διεύθυνση (001) του βουρτσίτη GaN που

είναι εντελώς χαλαρός κατά την διάρκεια της βελτιστοποίησης της γεωμετρίας. Σε αντίθεση με τον κύριο όγκο της δομής του βουρτσιτή όπου κάθε άτομο είναι συγκροτημένο με τέσσερις τρόπους, στο μονοστρωματικό φύλλο του GaN κάθε άτομο είναι συγκροτημένο με τρεις τρόπους όπως είναι και η δομή του γραφενίου. Πολυστρωματικά φύλλα GaN μπορούν να κατασκευαστούν με εναπόθεση δύο ή τριών μονοστρωματικών φύλλων GaN το ένα πάνω στο άλλο. Σε αυτήν την περίπτωση παίζει ρόλο και η αλληλουχία εναπόθεσης στις τελικές ιδιότητες του υλικού καθώς και στην διαστρωματική απόσταση των φύλλων. Τα πολυστρωματικά φύλλα μπορούν να αναδιπλωθούν σχηματίζοντας κρύσταλλο νιτριδίου του γαλλίου, αλλά προτιμάται η επίπεδη διάταξη.

Στην παρούσα εργασία, όπου ασχολείται με τις μηχανικές ιδιότητες μονοστρωματικών φύλλων GaN, το μέτρο ελαστικότητας, το όριο διαρροής, η παραμόρφωση αστοχίας, η δυσθραυστότητα και ο λόγος Poisson μελετήθηκαν αριθμητικά σε διάφορες διαστάσεις της νανοκλίμακας φύλλων νιτριδίου του γαλλίου, όπου πραγματοποιήθηκαν πειράματα εφελκυσμού και εφαρμόστηκε μετατόπιση και στα zigzag άκρα αλλά και στα armchair άκρα, με τη χρήση ατομιστικής προσέγγισης κατάλληλης για την πρόβλεψη της ελαστοπλαστικής συμπεριφοράς των μονοστρωματικών φύλλων νιτριδίου του γαλλίου που περιγράφεται από μη γραμμικές εξισώσεις. Οι παραπάνω ιδιότητες μελετήθηκαν σε διαστάσεις φύλλων νιτριδίου του γαλλίου μέχρι 10nm.

Η χρησιμοποιούμενη μέθοδος αποτελεί τρισδιάστατα, μη-γραμμικά, δίκωμβα πεπερασμένα στοιχεία ελατηρίου, τριών βαθμών ελευθερίας ανά κόμβο. Συγκεκριμένα, χρησιμοποιούνται ελατήρια που έχουν συγκεκριμένη δυσκαμψία κατά μήκος της διεύθυνσης του δεσμού και μηδενική δυσκαμψία στις άλλες διευθύνσεις, για την διασύνδεση των ομοιοπολικά δεσμευμένων ατόμων γαλλίου και αζώτου (Ga-N) ώστε να προσομοιώσουν αποκλειστικά την αλληλεπίδραση του εφελκυσμού των δεσμών. Επιπλέον, ελατήρια συγκεκριμένης δυσκαμψίας και στις τρεις διευθύνσεις υιοθετούνται για την διασύνδεση αντικριστών ατόμων αζώτου και γαλλίου δύο γειτονικών δεσμών (Ga-N-Ga) και (N-Ga-N) με τέτοιο τρόπο ώστε να είναι εφικτή η ταυτόχρονη προσομοίωση της κάμψης και της στρέψης των δεσμών. Ο λόγος που χρησιμοποιήθηκε η συγκεκριμένη μέθοδος είναι ότι τα ελατήρια επιτρέπουν στους δεσμούς να παραμένουν ευθύγραμμοι σύμφωνα με την μοριακή θεωρία. Επίσης, με τη χρήση ελατηρίων για την διασύνδεση αντικριστών ατόμων σε μία Ga-N-Ga ή N-Ga-N νανοδομή φαίνεται ότι επιτρέπονται πιο ρεαλιστικές παραμορφώσεις δεσμών. Τέλος, η χρησιμοποιούμενη μέθοδος έχει μικρότερο υπολογιστικό κόστος καθώς οι περιστροφικοί βαθμοί ελευθερίας είναι απόντες σε κάθε επικόμβια θέση. Η επίλυση των εξισώσεων γίνεται μέσω του λογισμικού πακέτου πεπερασμένων στοιχείων Fea Lusas.

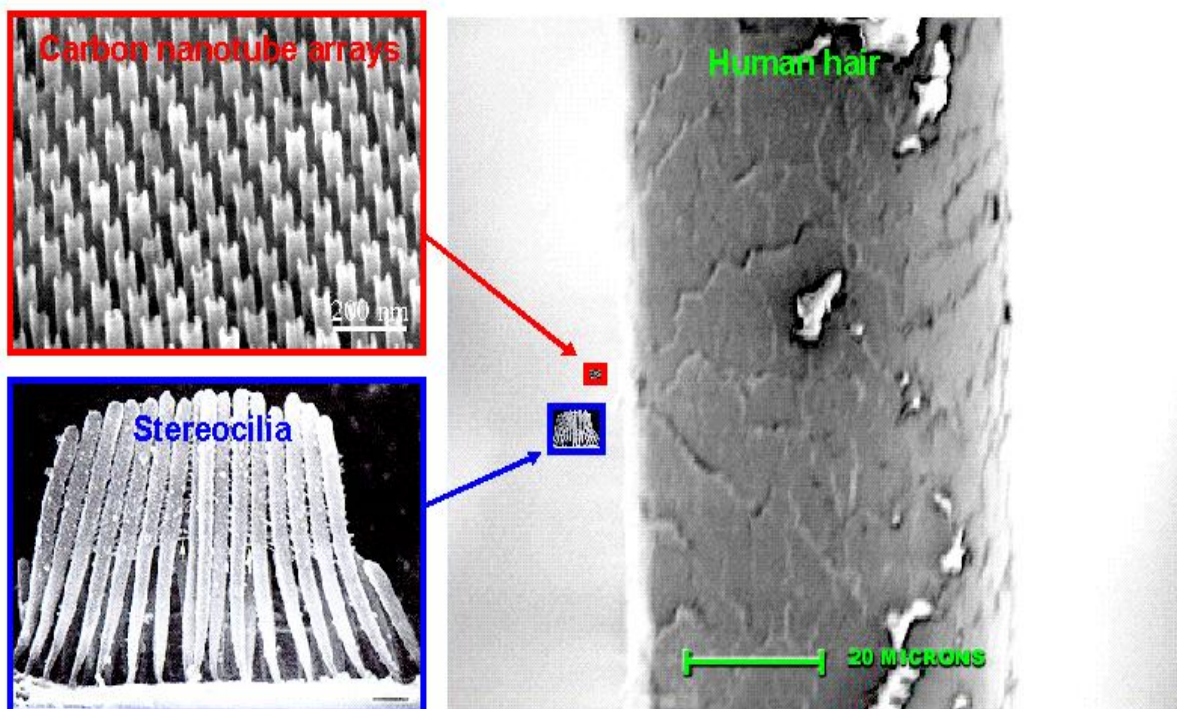
Σκοπός της εν λόγω πτυχιακής εργασίας είναι η αποτύπωση και σύγκριση των αποτελεσμάτων της εφελκυστικής φόρτισης και των μηχανικών ιδιοτήτων μεταξύ των διαφορετικών διαστάσεων των φύλλων του νιτριδίου του γαλλίου (GaN) και της φοράς της φόρτισης, δηλαδή το αν επηρεάζονται τα αποτελέσματα από το γεγονός ότι η μετατόπιση εφαρμόζεται στο zigzag άκρο ή στο armchair άκρο.

# 1 ΕΙΣΑΓΩΓΗ ΣΤΗ ΝΑΝΟΤΕΧΝΟΛΟΓΙΑ

## 1.1 ΝΑΝΟΤΕΧΝΟΛΟΓΙΑ

Η νανοτεχνολογία είναι μία δυναμική καινούργια τεχνολογία που έχει να κάνει με τον τεμαχισμό και την επανασύνθεση των φυσικών στοιχείων σε ατομικό και μοριακό επίπεδο.

Στην επιστήμη και την τεχνολογία, το πρόθεμα «νανο» (από την ελληνική λέξη νάνος) σημαίνει  $10^{-9}\text{m} = 0,000000001\text{m}$ . Ένα νανόμετρο (nm) ισούται με ένα δισεκατομμυριοστό του μέτρου, είναι δηλαδή δεκάδες χιλιάδες φορές μικρότερο από το πάχος μιας ανθρώπινης τρίχας. Στην εικόνα 1.1.1 μπορούμε να δούμε αυτήν τη σύγκριση μεταξύ αυτών των διαστάσεων. Ο όρος νανοτεχνολογία χρησιμοποιείται εδώ ως περιληπτικός όρος, και καλύπτει τους διάφορους κλάδους νανοεπιστημών και νανοτεχνολογιών.



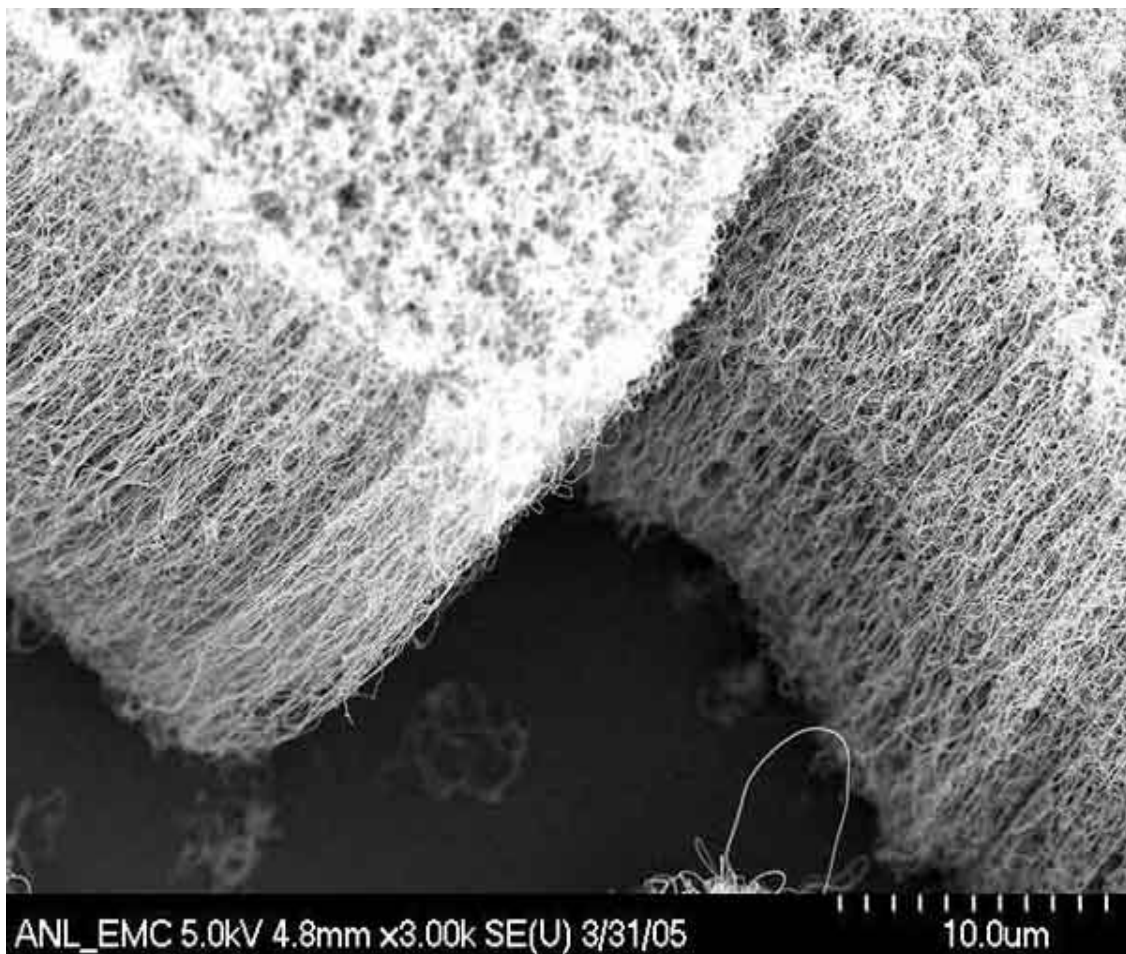
Εικόνα 1.1.1: Οπτικοποίηση της σύγκρισης διαστάσεων

Θεωρητικά, η νανοτεχνολογία αναφέρεται στην επιστήμη και τεχνολογία που αναπτύσσονται σε κλίμακα ατόμων και μορίων (νανοκλίμακα) αναφέρεται επίσης σε επιστημονικές αρχές και νέες ιδιότητες που μπορούν να κατανοηθούν και να γνωριστούν, οι σε βάθος εργαζόμενοι σ' αυτό το πεδίο. Τέτοιες ιδιότητες μπορούν εν

συνεχεία να παρατηρηθούν και να εκμεταλλευθούν σε μικροκλίμακα ή μακροκλίμακα για την ανάπτυξη π.χ. υλικών και εφευρέσεων με νεωτεριστικές λειτουργίες και επιδόσεις.

Η νανοεπιστήμη μπορεί να εισχωρεί σε όλους τους τομείς της τεχνολογίας. Συχνά συμβάλλει στην προσέγγιση διαφόρων πεδίων της επιστήμης και επωφελείται η ίδια από τη διεπιστημονική προσέγγιση, ενώ αναμένεται να οδηγήσει σε καινοτομίες που θα συμβάλουν στην αντιμετώπιση πολλών από τα προβλήματα με τα οποία βρίσκεται σήμερα αντιμέτωπη η κοινωνία.

Οι θεμελιώδεις ιδιότητες των υλικών αλλάζουν στη νανοκλίμακα. Οι ιδιότητες των ατόμων και των μορίων δε διέπονται από τους ίδιους φυσικούς νόμους όπως τα μεγαλύτερα αντικείμενα ή τα μεγαλύτερα σωματίδια, αλλά ελέγχονται από την κβαντική μηχανική. Γι αυτό οι φυσικές και χημικές ιδιότητες των νανოსωματιδίων μπορούν να είναι διαφορετικές από αυτές των μεγαλύτερων σωματιδίων με την ίδια σύσταση. Οι τροποποιημένες ιδιότητες μπορούν να αφορούν στο χρώμα, τη διαλυτότητα, την αντοχή υλικών, την ηλεκτρική αγωγιμότητα, τη μαγνητική συμπεριφορά, την κινητικότητα, τη χημική αντιδραστικότητα, και τη βιολογική δραστηριότητα. Στην εικόνα 1.1.2 μπορούμε να δούμε κάθετα ευθυγραμμισμένους νανოსωλήνες άνθρακα, που και οπτικά, διαφέρουν πολύ από το γνωστό γραφίτη από τον οποίον προέρχονται.



Εικόνα 1.1.2 : Κάθετα ευθυγραμμισμένοι νανοςωλήνες άνθρακα

## 1.2 Η ΙΣΤΟΡΙΑ ΤΗΣ ΝΑΝΟΤΕΧΝΟΛΟΓΙΑΣ

Από την εποχή του Δημόκριτου και του Λεύκιππου (440 π.χ.), οι άνθρωποι, ιδιαίτερα οι επιστήμονες, είχαν σκεφτεί ότι η ύλη μπορούσε να διασπαστεί ως ένα ακατάλυτο σημείο, δηλαδή ως το βασικό συστατικό της ύλης, που σήμερα οι επιστήμονες ονομάζουν «άτομο». Μετά από πολλά πειράματα και δοκιμές, οι επιστήμονες ανακάλυψαν ότι υπάρχουν 108 τύποι ατόμων μαζί με πολλά ισότοπα. Υπάρχουν επίσης πρόσφατες ανακαλύψεις υποδιαιρέσεων της ύλης που είναι ακόμα μικρότερες και από τα άτομα, περιλαμβανομένων των κουώρκ (υποατομικά σωματίδια), των λεπτονίων κλπ.

Αν και η ιδέα ότι όλη η ύλη φτιάχνεται τελικά από πολύ μικρά και αδιαίρετα άτομα, είχε ξεκινήσει από τον αρχαίο φιλόσοφο Δημόκριτο, εντούτοις ο John Dalton ήταν αυτός που έδειξε ότι τα άτομα πρέπει να υπάρχουν, όταν στις 21 Οκτωβρίου του 1803 σε μία συνεδρίαση της Φιλοσοφικής Εταιρίας του Μάντσεστερ, ανακοίνωσε την ατομική του θεωρία ξεκινώντας μία επανάσταση. Ο Dalton με την θεωρία του, υποστήριξε ότι η ύλη φτιάχνεται από άτομα τα οποία είναι όμοια σε κάθε στοιχείο, έχουν ξεχωριστές μάζες και ιδιότητες, είναι αδιαίρετα και ακατάλυτα και συνδυάζονται σε ακέραιους αριθμούς. Ουσιαστικά ο Dalton επέστρεψε όχι μόνο στην θεωρία του Δημόκριτου αλλά χρησιμοποίησε και το ίδιο όνομα με αυτόν για το μικρότερο σωματίδιο της ύλης, «άτομο». Μόνο που η θεωρία του Δημόκριτου βασιζόταν σε υποθέσεις, ενώ ο Dalton βασίστηκε σε 150 χρόνια παρατηρήσεων. Η ύπαρξη του ατόμου αποδείχθηκε 100 χρόνια αργότερα το 1908 από τον Γάλλο φυσικό Jean Perrin.

Η προέλευση και η ανάπτυξη της νανοτεχνολογίας είναι ασαφής. Οι πρώτοι νανοτεχνολόγοι μπορεί και να ήταν τεχνίτες γυαλιού του μεσαίωνα που χρησιμοποιούσαν καμίνια για την επεξεργασία του. Βέβαια οι υαλοτεχνίτες δεν καταλάβαιναν γιατί αυτό που έκαναν στο χρυσό δημιουργούσε τα χρώματα. Η διαδικασία της νανοκατασκευής, ειδικά στην παραγωγή χρυσών νανοκουκκίδων, χρησιμοποιούταν από βικτωριανές και μεσαιωνικές εκκλησίες, που ήταν διάσημες για τα υπέροχα βιτρό στα παράθυρά τους. Το ίδιο ισχύει και για διάφορα σμάλτα που βρέθηκαν σε αρχαία τζάμια. Η μεγαλύτερη παραλλαγή σ' αυτά τα είδη εξαρτάται από το γεγονός ότι τα χαρακτηριστικά της νανοκλίμακας είναι διαφορετικά από τα χαρακτηριστικά της μικροκλίμακας.

Οι Εξελίξεις στη φυσική, τη βιολογία και τη χημεία συνέβαλαν στην διαδικασία κατανόησης της νανοτεχνολογίας. Ο Joseph Proust το 1799 μπορεί να έκανε τη σύνδεση στην ανακάλυψη όταν διαπίστωσε ότι τα χημικά στοιχεία είχαν την τάση να συγχωνεύονται σε τύπους όπως ο τύπος του νερού,  $H_2O$ . Ένα επίτευγμα ορόσημο του 20ου αιώνα ήταν η ανακάλυψη του DNA. Ο James Watson και ο Francis Crick το ανακάλυψαν αρχικά, καθώς το εξέταζαν μέσα από το μικροσκόπιο το 1953. Οι εξελίξεις για την γνώση του DNA, που ήρθαν μαζί με τις εξελίξεις της επιστήμης, επιτέλους έφτασαν κάπου, όταν το DNA αποτέλεσε την κλίμακα νανόμετρου με την οποία κατασκευάζονταν οι επιθυμητές πρωτεΐνες.

Οι επιτεύξεις στη φυσική, τη βιολογία και τη χημεία βοήθησαν να συγκεντρωθούν πληροφορίες σχετικές με τη διαδικασία της κατανόησης της νανοτεχνολογίας. Οι εξελίξεις αυτές αποδείχθηκαν αναγκαίες για τον προσανατολισμό του τομέα της νανοτεχνολογίας.

Η πρώτη επιστημονική αναφορά στη νανοτεχνολογία (χωρίς τη χρήση αυτού του ονόματος) έγινε σε μια ομιλία που έκανε ο Richard Feynman, το 1959, με τίτλο «Υπάρχει Πολύς Χώρος στον Πάτο». Παρά τις επιτεύξεις άλλων, ο Richard P. Feynman είναι εκείνος στον οποίον αποδίδεται περισσότερο το ξεκίνημα του όλου θέματος. Ο Richard P. Feynman, αυτός που θα βραβευόταν στο μέλλον με το βραβείο Νόμπελ Φυσικής, έκανε μια ομιλία κατά τη διάρκεια ενός δείπνου το 1959, στην Αμερικάνικη Φυσική Εταιρεία όπου φαίνεται να έχει χρησιμοποιήσει ή εμφανίζει την ιδέα στο κοινό. Ο Feynman ανέφερε θέματα κλίμακας κατά τη διάρκεια της ομιλίας του και κανείς ως τώρα δεν έχει ανατρέψει αποτελεσματικά το εφικτό αυτής της πρότασης.

Ο όρος Νανοτεχνολογία δημιουργήθηκε από τον καθηγητή του Πανεπιστημίου Επιστημών του Τόκιο Norio Taniguchi το 1974 σε μία διατριβή του με τίτλο «Σχετικά με τη βασική έννοια της “Νανοτεχνολογίας”» για να περιγράψει την ακρίβεια κατασκευής υλικών με ανοχές νανόμετρου.

Κατά την δεκαετία του 1980 ο όρος ξανα εφευρέθηκε και ο προσδιορισμός της έννοιάς του διευρύνθηκε από τον Eric Drexler, ιδιαίτερα στο βιβλίο του «Μηχανές Δημιουργίας: Η επερχόμενη εποχή της Νανοτεχνολογίας», που εκδόθηκε το 1986. Διερεύνησε το θέμα σε μεγαλύτερο τεχνικό βάθος στη διδακτορική διατριβή του, αργότερα διευρύνθηκε σε Νανοσυστήματα: Μοριακή Μηχανική, Κατασκευή και Υπολογισμός. Οι μέθοδοι υπολογισμού παίζουν ένα σημαντικό ρόλο στον τομέα σήμερα, επειδή οι νανοτεχνολόγοι μπορούν να τις χρησιμοποιήσουν για να σχεδιάσουν και να εξομοιώσουν μια μεγάλη γκάμα μοριακών συστημάτων. Ο Eric Drexler ήταν ο οραματιστής με το πρώτο PhD στην νανοτεχνολογία.

### **1.3 ΕΦΑΡΜΟΓΕΣ ΚΑΙ ΑΞΙΟΠΟΙΗΣΗ ΤΗΣ ΝΑΝΟΤΕΧΝΟΛΟΓΙΑΣ**

Ένας τομέας είναι οι ιατρικές εφαρμογές συμπεριλαμβανομένων π.χ. μικροσκοπικών διαγνωστικών μέσων που θα μπορούν να εμφυτεύονται για την έγκαιρη διάγνωση ασθενειών. Επίσης νανοτεχνολογικές επιστρώσεις θα μπορούν να βελτιώνουν τη διαδραστικότητα και βιοσυμβατότητα των εμφυτευμάτων. Παράλληλα τα ικρίωματα που διαθέτουν την ικανότητα αυτοοργάνωσης ανοίγουν τον δρόμο για νέες γενιές υλικών μηχανικής των ιστών και βιομιμητικών υλικών, από τα οποία μακροπρόθεσμα θα μπορούν να κατασκευάζονται τεχνητά όργανα. Τέλος υπό ανάπτυξη βρίσκονται νεωτεριστικά συστήματα για στοχοθετημένη χορήγηση φαρμάκων. Ενώ προσφάτως, νανοσωματίδια διοχετεύθηκαν σε καρκινικά κύτταρα για θεραπευτικούς σκοπούς (θερμική ίαση).

Ένας ακόμη τομέας όπου η νανοτεχνολογία βρίσκει εφαρμογή είναι αυτός των τεχνολογιών της πληροφορίας συμπεριλαμβανομένων μέσων για την αποθήκευση δεδομένων με πολύ μεγάλες πυκνότητες καταγραφής (π.χ. 1 Terabit/inch<sup>2</sup>) και νέων τεχνολογιών απεικόνισης σε πολύ ευέλικτα πλαστικά υλικά. Μακροπρόθεσμα, η επίτευξη μοριακής ή βιομοριακής νανοηλεκτρονικής, σπιντρονικής και κβαντικής τεχνολογίας ηλεκτρονικών υπολογιστών θα μπορούσαν να ανοίξουν νέους δρόμους πέρα από τη σημερινή τεχνολογία των υπολογιστών.

Αναφορά πρέπει να γίνει στην παραγωγή και αποθήκευση ενέργειας, όπως βλέπουμε και στην εικόνα 1.3.1, που μπορούν για παράδειγμα να έχουν οφέλη από τις νέες κυψέλες καυσίμου ή από νανοδομημένα στερεά πολύ μικρού βάρους και υψηλού δυναμικού αποθήκευσης υδρογόνου. Υπό ανάπτυξη βρίσκονται επίσης αποτελεσματικοί και χαμηλού κόστους φωτοβολταϊκοί ηλιακοί συλλέκτες.



Επισπεύδεται η εξοικονόμηση ενέργειας μέσω της ανάπτυξης νανοτεχνολογικών λύσεων που οδηγούν σε βελτίωση των μονώσεων, των μεταφορών και του φωτισμού.



Εικόνα 1.3.1 : Εφαρμογές της νανοτεχνολογίας στην παραγωγή και την αποθήκευση ενέργειας

Η αξιοποίηση της νανοτεχνολογίας στην επιστήμη των υλικών με εφαρμογές μεγάλου εύρους αναμένεται να επηρεάσει ουσιαστικά όλους τους τομείς. Νανοσωματίδια χρησιμοποιούνται ήδη για την ισχυροποίηση υλικών και για μεγαλύτερη αποτελεσματικότητα των καλλυντικών. Με τη βοήθεια της νανοτεχνολογίας μπορούν να τροποποιούνται διάφορες επιφάνειες έτσι ώστε να μην χαράσσονται, να γίνονται αδιάβροχες, καθαρές ή αποστειρωμένες. Η επιλεκτική μεταμόσχευση οργανικών μορίων μέσω νανοδομημένων επιφανειών αναμένεται ότι θα επηρεάσει την παραγωγή βιοισθητήρων και μοριακών ηλεκτρονικών συσκευών. Οι επιδόσεις των υλικών σε ακραίες συνθήκες μπορούν να βελτιωθούν σε σημαντικό βαθμό προς όφελος π.χ. της βιομηχανίας αεροναυτικής και διαστήματος.

Η βιομηχανική παραγωγή σε επίπεδο νανοκλίμακας προαπαιτεί μια νέα διεπιστημονική προσέγγιση σε ό,τι αφορά τόσο την έρευνα όσο και την παραγωγή. Θεωρητικά, δύο είναι οι κύριες προσεγγίσεις: η πρώτη, με αφετηρία τα μικροσυστήματα, καταλήγει στην ελάχιστη δυνατή κλίμακα (κατιούσα προσέγγιση) και η δεύτερη μιμείται τη φύση μέσω της δημιουργίας δομών που εκκινούν από το ατομικό και το μοριακό επίπεδο (ανιούσα πορεία). Η πρώτη μπορεί να συσχετιστεί με συναρμολόγηση, η δεύτερη με σύνθεση. Η ανιούσα προσέγγιση βρίσκεται σε πρώιμο στάδιο, η δυναμική της όμως έχει μεγάλη εμβέλεια έτσι ώστε να μπορεί να επιφέρει ανατροπές στις τρέχουσες διεργασίες παραγωγής.

#### **1.4 ΝΑΝΟΔΟΜΗΜΕΝΑ ΥΛΙΚΑ**

Νανοδομημένα υλικά είναι τα υλικά με χαρακτηριστική μικροδομή μεγέθους νανοκλίμακας. Η μικροδομή αφορά τη χημική σύνθεση, τη διάταξη των ατόμων (ατομική δομή), και το μέγεθος ενός στερεού σε μία, δύο, ή τρεις διαστάσεις. Οι πιθανοί παράγοντες που επηρεάζουν τις ιδιότητες των νανοδομημένων υλικών αφορούν επενέργειες λόγω μεγέθους (όπου η κρίσιμη κλίμακα μεγέθους των φυσικών φαινομένων είναι συγκρίσιμη με το χαρακτηριστικό μέγεθος των δομικών



στοιχείων της μικροδομής), αλλαγές των διαστάσεων του συστήματος, αλλαγές της ατομικής δομής, καθώς και αλλαγές της χημικής σύστασης.

Τα νανουλικά μπορούν να ομαδοποιηθούν σε: (α) νανοσωματίδια (τα δομικά στοιχεία), (β) νανοενδιάμεσα, και (γ) νανوسύνθετα. Μπορούν να βρίσκονται ή να είναι πολύ μακριά από τη θερμοδυναμική ισορροπία. Για παράδειγμα, νανοδομημένα υλικά που αποτελούνται από κρυσταλλίτες μεγέθους νανομέτρων Au ή NaCl με διαφορετικούς κρυσταλλογραφικούς προσανατολισμούς και διαφορετικές χημικές συνθέσεις διαφέρουν σε μεγάλο βαθμό από την θερμοδυναμική ισορροπία τους. Νανουλικά των οποίων η σύνθεση προκύπτει από υπερμοριακή χημεία μπορεί να αποδώσουν νανοσυστήματα τα οποία βρίσκονται σε θερμοδυναμική ισορροπία.

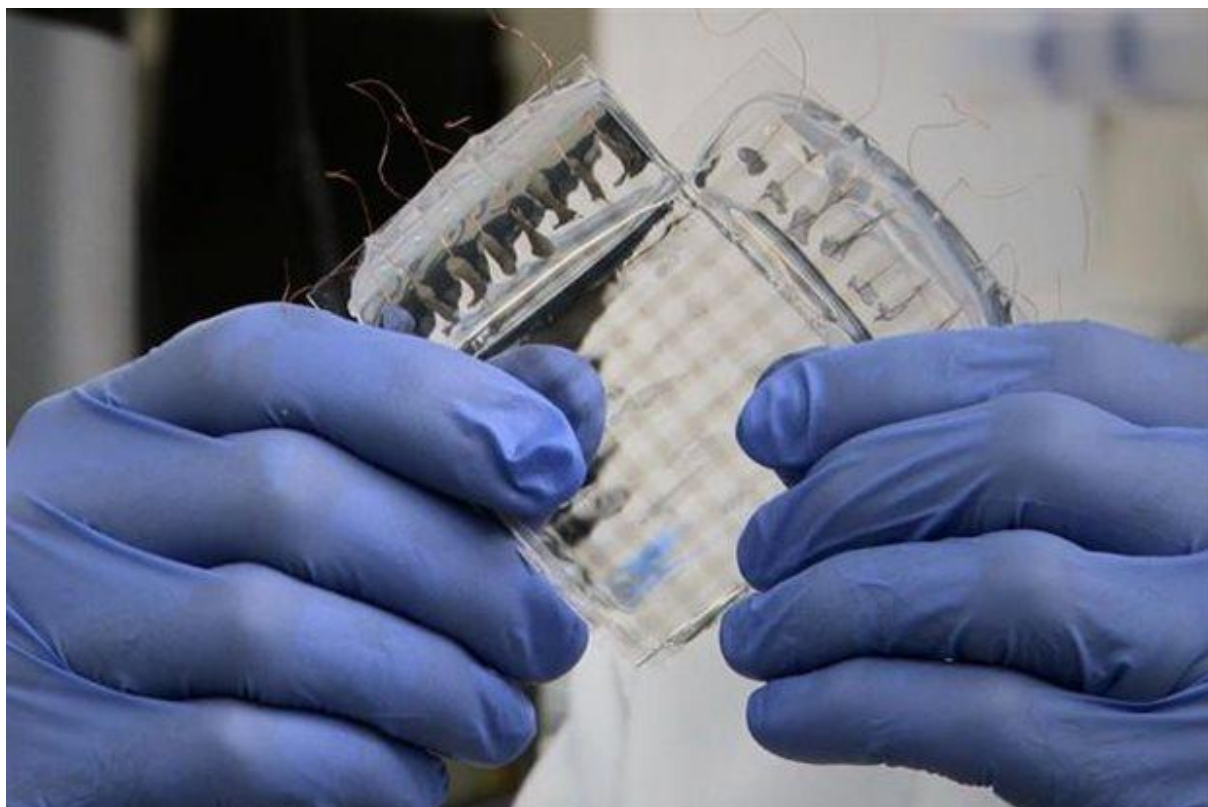
## 1.5 ΝΑΝΟΣΥΝΘΕΤΑ ΥΛΙΚΑ

Αν και οι όροι νανουλικό και νανوسύνθετο αντιπροσωπεύουν νέα πεδία στην επιστήμη των υλικών, στην πραγματικότητα τέτοια υλικά χρησιμοποιούνται εδώ και αιώνες και υπάρχουν γύρω μας στη φύση. Ωστόσο δεν είναι παρά τα τελευταία χρόνια που ο χαρακτηρισμός και ο έλεγχος της ύλης στις νανοδιαστάσεις, διερευνήθηκαν διεξοδικά. Ένα νανوسύνθετο ορίζεται ως ένα σύνθετο υλικό του οποίου κάποιο από τα συστατικά του έχει τουλάχιστον μία διάστασή του στη νανοκλίμακα.

Φυσικά υλικά όπως τα κόκκαλα και τα δόντια, είναι πολύ καλά παραδείγματα της πετυχημένης εφαρμογής αυτής της ιδέας, προσφέροντας άριστες μηχανικές ιδιότητες σε σχέση με αυτές των συστατικών τους. Τέτοια σύνθετα υλικά παρουσιάζουν πολύ καλά οργανωμένες δομές τόσο σε μακροσκοπικό επίπεδο, όσο και στις νανοδιαστάσεις. Οι επιστήμονες αγωνίζονται να κατανοήσουν αυτά τα υλικά, που είναι η φυσική εκδοχή των νανοσυνθέτων. Συνήθως τα υλικά αυτά αποτελούνται από δύο συστατικά: το υλικό της ενίσχυσης, οι διαστάσεις του οποίου είναι στην νανοκλίμακα και τη μήτρα που φιλοξενεί την ενίσχυση, και η οποία είναι ένα μαλακό υλικό, συνήθως πρωτεϊνικής φύσης.

Η ιδέα της ανάπτυξης δομικών και λειτουργικών νανοσυνθέτων υλικών με βελτιωμένη συμπεριφορά βρίσκεται αυτή τη στιγμή στο επίκεντρο του ενδιαφέροντος για μια ευρεία ποικιλία μεταλλικών, κεραμικών και πολυμερικών μητρών, αν και έμφαση έχει δοθεί κυρίως στα πολυμερή υλικά. Τα υλικά ενίσχυσης μπορούν να είναι είτε οργανικά είτε ανόργανα, με πολύ μεγάλη ποικιλία συνδυασμών και δομών. Το σύνθετο που προκύπτει, γενικά παρουσιάζει πλήθος βελτιωμένων ιδιοτήτων, τόσο ώστε να είναι δύσκολο να το διακρίνουμε σε δομικό ή λειτουργικό.

Ένα από τα υλικά που χρησιμοποιούνται ευρέως ως υλικό ενίσχυσης είναι οι νανοσωλήνες άνθρακα, ένα παράδειγμα μπορούμε να δούμε στην εικόνα 1.5.1. Οι νανοσωλήνες άνθρακα έχουν προσελκύσει ιδιαίτερο ενδιαφέρον γιατί προβλέφθηκε αρχικά και στη συνέχεια επαληθεύτηκε πειραματικά ότι έχουν αξιόλογες μηχανικές και φυσικές ιδιότητες. Ο συνδυασμός αυτών των ιδιοτήτων με τη χαμηλή τους πυκνότητα τους καθιστά ιδανικούς για πολυμερικά σύνθετα υλικά υψηλής απόδοσης. Κατά μία έννοια μάλιστα, ίσως να αποτελούν την επόμενη γενιά ινών άνθρακα. Παρόλο που δεκάδες ή και εκατοντάδες κιλά νανοσωλήνων άνθρακα παράγονται αυτή τη στιγμή κάθε μέρα, η ανάπτυξη υψηλής αντοχής και δυσκαμψίας πολυμερικών συνθέτων που να βασίζονται στους νανοσωλήνες καθυστερεί από την έλλειψη διαθεσιμότητας νανοσωλήνων υψηλής καθαρότητας και ποιότητας σε μεγάλες ποσότητες.



**Εικόνα 1.5.1 :** Νανοσύνθετο υλικό με μήτρα από σιλκόνη και ενίσχυση νανοσωλήνων άνθρακα

Το μικρό μέγεθος αυτών των ενισχυτικών υλικών «γεννά» ένα πλήθος προκλήσεων που πρέπει να ξεπεραστούν. Παρόλο που τα τελευταία χρόνια έχουν γίνει μεγάλα βήματα για να ξεπεραστούν οι δυσκολίες στην παραγωγή πολυμερών νανοσυνθέτων, η διαδικασία παραγωγής αποτελεί «κλειδί» για την πλήρη εκμετάλλευση των ιδιοτήτων των νανοϋλικών της ενίσχυσης. Μια πρωταρχική δυσκολία είναι η επίτευξη καλής διασποράς της ενίσχυσης στη μήτρα. Αν δεν επιτευχθεί, τότε τα συσσωματώματα δρουν ως ατέλειες, γεγονός που περιορίζει τη μηχανική συμπεριφορά του συνθέτου. Τα συσσωματώματα αυτά επηρεάζουν τις φυσικές ιδιότητες του συνθέτου, όπως για παράδειγμα την οπτική διαπερατότητα.



## 2 ΜΟΝΟΣΤΡΩΜΑΤΙΚΑ ΝΑΝΟΪΛΙΚΑ

### 2.1 ΓΝΩΡΙΜΙΑ ΜΕ ΤΑ ΜΟΝΟΣΤΡΩΜΑΤΙΚΑ ΝΑΝΟΪΛΙΚΑ

Από τα αρχαία, ακόμα, χρόνια οι επιστήμονες έδειχναν ενδιαφέρον στις ολοένα και μικρότερες κλίμακες της ύλης. Στο νανόκοσμο, όπως έχουμε ήδη αναφερθεί, υπάρχει διαφοροποίηση των ιδιοτήτων των υλικών σε σχέση με τον μακρόκοσμο. Αυτό το όλο και διευρυνόμενο ενδιαφέρον της επιστημονικής κοινότητας οδηγεί σε μελέτη και κατασκευή όλο και μικρότερων δομών. Αξίζει να σημειώσουμε το αντίκρουσμα της ανάπτυξης της τεχνολογίας των λεπτών υμενίων που καθιστά την κατασκευή και μελέτη φύλλων νανοϋλικών εύκολα πραγματοποιήσιμη. Στην ουσία πρόκειται για πολυστρωματικά φύλλα νανοϋλικών πάχους από λίγα νανόμετρα (nm) έως μερικά μικρόμετρα (μm). Τα μονοστρωματικά νανοϋλικά είναι φύλλα ατομικού πάχους. Δηλαδή κρυσταλλικό, συνήθως, πλέγμα ατόμων σε δισδιάστατη διάταξη και είναι η μικρότερη γνωστή κλίμακα στην πορεία για το άτομο. Τα υλικά που μελετώνται σε αυτό το επίπεδο είναι κυρίως το γραφένιο, το νιτρίδιο του βορίου (BN), το νιτρίδιο του γαλλίου (GaN), το νιτρίδιο του ινδίου γαλλίου (InGaN), το αρσενικούχο γάλλιο (GaAs) κ.α

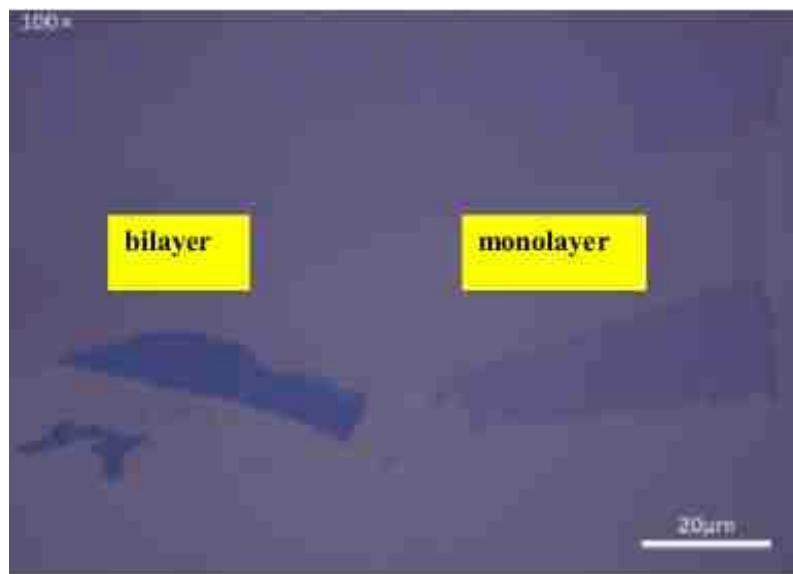
### 2.2 ΓΡΑΦΕΝΙΟ

#### 2.2.1 Ιστορική Αναδρομή και μέθοδοι κατασκευής γραφενίου

Ο όρος γραφένιο πρωτοεμφανίστηκε το 1987, προκειμένου να περιγράψει μονά φύλλα γραφίτη. Οι στρώσεις γραφίτη αρχικά, από τη δεκαετία του 1970, προέρχονταν από κρυσταλλική αύξηση από τα άλλα υλικά. Αυτό το «κρυσταλλικά αυξανόμενο γραφένιο» αποτελείται από ένα μονοατομικού πάχους εξαγωνικό πλέγμα των  $sp^2$  δεσμών των ατόμων άνθρακα, όπως και στο αυτοτελές γραφένιο. Ωστόσο, υπάρχει σημαντική μεταφορά φορτίου από το υπόστρωμα στο κρυσταλλικά αυξανόμενο γραφένιο και σε ορισμένες περιπτώσεις υβριδοποίησης μεταξύ των d τροχιακών των ατόμων υποστρώματος και των τροχιακών του γραφενίου, η οποία μεταβάλλει σημαντικά την ηλεκτρονική δομή του κρυσταλλικά αυξανόμενου γραφενίου. Υπήρξαν επίσης πολλές προσπάθειες για να κατασκευαστούν πολύ λεπτές ταινίες από γραφίτη με μηχανική αποφλοίωση, αλλά κανένα από αυτά που παρήχθησαν δεν ήταν λεπτότερο των 50 με 100 στρωμάτων. Στην εικόνα 2.2.1.1 μπορούμε να κάνουμε μια οπτική σύγκριση μεταξύ του μονού φύλλου γραφενίου και του διπλού φύλλου.

Ένα σημαντικό βήμα προόδου στην επιστήμη του γραφενίου ήρθε όταν ο Andre Geim και ο Kostya Novoselov στο Πανεπιστήμιο του Μάντσεστερ κατάφεραν να εξαγάουν μονοατομικού πάχους κρυσταλλίτες από ακατέργαστο γραφίτη το 2004. Οι ερευνητές έβγαλαν στρώματα γραφενίου από γραφίτη και τα μετέφεραν σε λεπτό

διοξειδίο του πυριτίου πάνω σε δίσκο πυριτίου σε μια διαδικασία που αποκαλεί μικρομηχανική διάσπαση. Το διοξειδίο του πυριτίου απομονωμένο ηλεκτρικά από το γραφένιο αλληλεπίδρασε ασθενώς με το γραφένιο, παρέχοντας στρώματα ουδέτερα φορτισμένα. Το 2004, λοιπόν, οι Ρώσοι ερευνητές πήραν γραφένιο από μηχανική αποφλοιώση του γραφίτη. Χρησιμοποίησαν συνεκτική ταινία για να χωρίσουν επανειλημμένα κρύσταλλους γραφίτη σε όλο και περισσότερο λεπτότερα κομμάτια. Η ταινία με τις επικολλημένες οπτικά διαφανείς νιφάδες διαλύθηκε σε ακετόνη και μετά από μερικά περαιτέρω βήματα, οι νιφάδες συμπεριλαμβανομένων των μονοστρωμάτων είχαν κατακαθίσει σε ένα πλακίδιο πυριτίου. Τα μεμονωμένα ατομικά στρώματα απομονώθηκαν σε ένα οπτικό μικροσκόπιο. Ένα χρόνο αργότερα, οι ερευνητές απλοποίησαν την τεχνική αυτή και άρχισαν την ξηρά απόθεση, αποφεύγοντας το στάδιο που το γραφένιο επιπλέει σε ένα υγρό. Η μέθοδος που χρησιμοποίησαν οι Ρώσοι ερευνητές, αναφέρεται συχνά ως μέθοδος κολλητικών ταινιών ή σχεδιαστική μέθοδος.



Εικόνα 2.2.1.1 : Οπτικοποίηση μονοστρωματικού και διστρωματικού γραφενίου

Ωστόσο, μια άλλη μέθοδος είναι η θέρμανση καρβιδίου του πυριτίου σε υψηλές θερμοκρασίες ( $> 1100$  ° C) για να μειωθεί σε γραφένιο. Η διαδικασία αυτή παράγει ένα δείγμα μεγέθους που εξαρτάται από το μέγεθος του χρησιμοποιούμενου υποστρώματος SiC. Η επιφάνεια του καρβιδίου του πυριτίου χρησιμοποιείται για τη δημιουργία γραφενίου, το πυρίτιο ή ο άνθρακας, επηρεάζουν ιδιαίτερα το πάχος, την κινητικότητα και την πυκνότητα του φορέα γραφενίου.

Πολλές σημαντικές ιδιότητες του γραφενίου έχουν βρεθεί στο γραφένιο που παράγεται με αυτή τη μέθοδο. Για παράδειγμα, ο ηλεκτρονικός δεσμός δομής (αποκαλούμενη δομή κώνου Dirac), έχει απεικονιστεί πρώτα σε αυτό το υλικό. Ασθενής αντι-εντόπιση παρατηρείται σε αυτό το υλικό και όχι κατά την αποφλοιώση του γραφενίου που παράγεται από τη μέθοδο του ίχνους του μολυβιού. Εξαιρετικά μεγάλη κινητικότητα ανεξάρτητη της θερμοκρασίας, παρατηρήθηκε στο επιταξιακό γραφένιο. Την προσεγγίζουν στο αποφλοιωμένο γραφένιο τοποθετημένο σε οξείδιο του πυριτίου, αλλά εξακολουθεί να είναι πολύ χαμηλότερη απ' ό,τι η κινητικότητα στο απομονωμένο γραφένιο που παράγεται με τη σχεδιαστική μέθοδο.

Πλέον υπάρχουν αρκετές μέθοδοι παρασκευής μονοστρωματικού φύλλου του εν λόγω υλικού, όπως η κρυσταλλική ανάπτυξη πάνω σε υποστρώματα μετάλλου. Αυτή

η μέθοδος χρησιμοποιεί την ατομική δομή ενός υποστρώματος μετάλλου για την έναρξη της ανάπτυξης του γραφενίου. Ένας άλλος τρόπος παραγωγής είναι από νανοσωλήνες άνθρακα, όπου είτε κόβονται είτε χαράζονται είτε βρίσκονται ανοιχτοί σε διάλυμα υπερμαγγανικού καλίου ( $\text{KMnO}_4$ ) και θειϊκού οξέος ( $\text{H}_2\text{SO}_4$ ). Άλλη μέθοδος είναι η πυρόλυση του αιθοξειδίου του νατρίου ή η μείωση του οξειδίου του γραφίτη, η οποία ήταν πιθανώς η ιστορικά πρώτη μέθοδος σύνθεσης γραφενίου.

### 2.2.2 Εφαρμογές και ιδιότητες του γραφενίου

Το γραφένιο έχει βρει πολλές εφαρμογές. Κατ' αρχήν χρησιμοποιείται ως ενίσχυση σε νανოსύνθετα υλικά. απλώνοντας ένα μικρό ποσό γραφενίου σε κάποιο πολυμερές, οι ερευνητές έφτιαξαν σκληρά και ελαφρά υλικά. Τα πολυμερή σύνθετα με ενίσχυση γραφενίου είναι ιδανικά για ελαφριές δεξαμενές βενζίνης και πλαστικά δοχεία που διατηρούν τη φρεσκάδα των τροφίμων για εβδομάδες. Θα μπορούσαν επίσης να χρησιμοποιηθούν για να φτιάξουν ελαφρύτερα και με μικρότερη κατανάλωση καυσίμων αεροσκάφη και εξαρτήματα αυτοκινήτων, καθώς και ισχυρότερες ανεμογεννήτριες, ιατρικά εμφυτεύματα, και αθλητικό εξοπλισμό. Επιπλέον, είναι καλοί αγωγοί του ηλεκτρισμού και θα μπορούσαν να χρησιμοποιηθούν για να φτιαχτούν διαφανείς αγωγίμες επιστρώσεις για ηλιακές κυψελίδες και οθόνες.

Η δεύτερη εφαρμογή του έγγυται στο γεγονός ότι το γραφένιο είναι ένα υλικό εξαιρετικά εύκαμπτο και εξαιρετικά καλός αγωγός του ηλεκτρισμού. Επίσης, είναι ένα υλικό πιο σκληρό κι από το διαμάντι. Θα μπορούσε λοιπόν να βρει χρήση σε εύκαμπτες οθόνες του υπολογιστή, σε μοριακά ηλεκτρονικά και σε νέες ασύρματες επικοινωνίες. Τα φύλλα γραφενίου, πάνω σε πολυμερές πλαστικό, έχουν τόσο μικρό πάχος ώστε να παραμένουν διαφανή και να μπορούν να κάμπτονται ή να τεντώνονται, ανάλογα με το πολυμερές που χρησιμοποιήθηκε στην κατασκευή τους. Η νέα τεχνική θα μπορούσε να αξιοποιηθεί αρχικά για την ανάπτυξη ελαστικών οθονών, στις οποίες το γραφένιο θα υποκαθιστά το ακριβό και άκαμπτο οξείδιο τιτανίου-ίνδιου. Αργότερα, όταν θα υπάρχουν τεχνικές για την παραγωγή ποιοτικών φύλλων γραφενίου σε μεγάλες διαστάσεις, ο άνθρακας θα αρχίσει να αντικαθιστά το πυρίτιο σε όλες τις εφαρμογές της ηλεκτρονικής, όπως προβλέπει ο ερευνητής Philip Kim.

Ένας άλλος τομέας όπου θα μπορέσει να βρει εφαρμογή το γραφένιο είναι σε έρευνες Βιολογίας και Επιστήμης Υλικών. Αφού κατέστη δυνατή η κατασκευή του λεπτότερου μπαλονιού του κόσμου. Χρησιμοποιώντας το γραφένιο, ερευνητές του Πανεπιστημίου Cornell των ΗΠΑ δημιούργησαν μια μεμβράνη σαν μπαλόνι που έχει πάχος μόνο ένα άτομο, αλλά είναι αρκετά δυνατή ώστε να αντέχει σε εσωτερικές πιέσεις αρκετών ατμοσφαιρών. Σε αντίθεση με τα λαστιχένια μπαλόνια, τα οποία ο αέρας διαρρέει, έστω και με μικρή ταχύτητα, το μπαλόνι από γραφένιο είναι τόσο αδιαπέραστο ώστε συγκρατεί ακόμα και τα πολύ μικρά άτομα του αερίου ήλιου.

Το γραφένιο θα μπορέσει να λύσει, όπως φαίνεται, το πρόβλημα της μεταφοράς του αερίου υδρογόνου ( $\text{H}_2$ ) το οποίο είναι εκρηκτικό αέριο. Μια ομάδα Ελλήνων ερευνητών σχεδίασε ένα νέο υλικό από φύλλα γραφενίου, με στόχο την αποθήκευση υδρογόνου, ανακάλυψη που μπορεί να επιταχύνει την ανάπτυξη οχημάτων, τα οποία χρησιμοποιούν το υδρογόνο ως εναλλακτική πηγή ενέργειας. Οι Κρητικοί ερευνητές Γιώργος Δημητρακάκης, Εμμανουήλ Τυλλιανάκης και Γιώργος Φρουδάκης χρησιμοποίησαν ηλεκτρονικούς υπολογιστές για να σχεδιάσουν μια μοναδική δομή αποθήκευσης υδρογόνου, που αποτελείται από παράλληλα μονοστρωματικά φύλλα

γραφένιου, τα οποία στη συνέχεια σταθεροποιούνται από κάθετες στήλες νανοσωλήνων άνθρακα. Επίσης, πρόσθεσαν ιόντα λιθίου στο σχεδιασμό του νέου υλικού για να βελτιώσουν την αποθηκευτική του δυνατότητα. Σύμφωνα με τις εκτιμήσεις των τριών επιστημόνων, το νέο υλικό (pillared graphene) μπορεί θεωρητικά να αποθηκεύσει μέχρι 41 γραμμάρια υδρογόνου ανά λίτρο, σχεδόν καλύπτοντας τις αντίστοιχες προδιαγραφές του αμερικανικού υπουργείου Ενέργειας (45 γρ. ανά λίτρο) για εφαρμογές στις μεταφορές.

Όσον αφορά τις μηχανικές του ιδιότητες, είναι το ισχυρότερο υλικό που υπάρχει στη φύση. Το πρώτο πείραμα που το απέδειξε πραγματοποιήθηκε το 2008. Οι μετρήσεις έδειξαν ότι το γραφένιο έχει αντοχή εφελκυσμού 100 φορές μεγαλύτερη από το χάλυβα. Χρησιμοποιώντας ένα μικροσκοπιο ατομικής δύναμης (AFM), μετρήθηκε η σταθερά ελαστικότητας φύλλων γραφενίου. Τα φύλλα γραφενίου, τοποθετήθηκαν σε κυκλικές κοιλοότητες διοξειδίου του πυριτίου και η ακίδα του AFM χρησιμοποιήθηκε για την μέτρηση των μηχανικών ιδιοτήτων του. Η αντοχή στη θραύση μετρήθηκε στα 42 N/m, το μέτρο ελαστικότητας στο 1 TPa και η αντοχή στον εφελκυσμό (στο επίπεδο του κρυστάλλου) στα 130 GPa. Επίσης αξιοσημείωτες είναι και οι οπτικές του ιδιότητες, όπου οι μοναδικές ηλεκτρονικές ιδιότητες του γραφενίου παράγουν μια απροσδόκητα μεγάλη αδιαφάνεια για μία ατομική μονή στρώση.

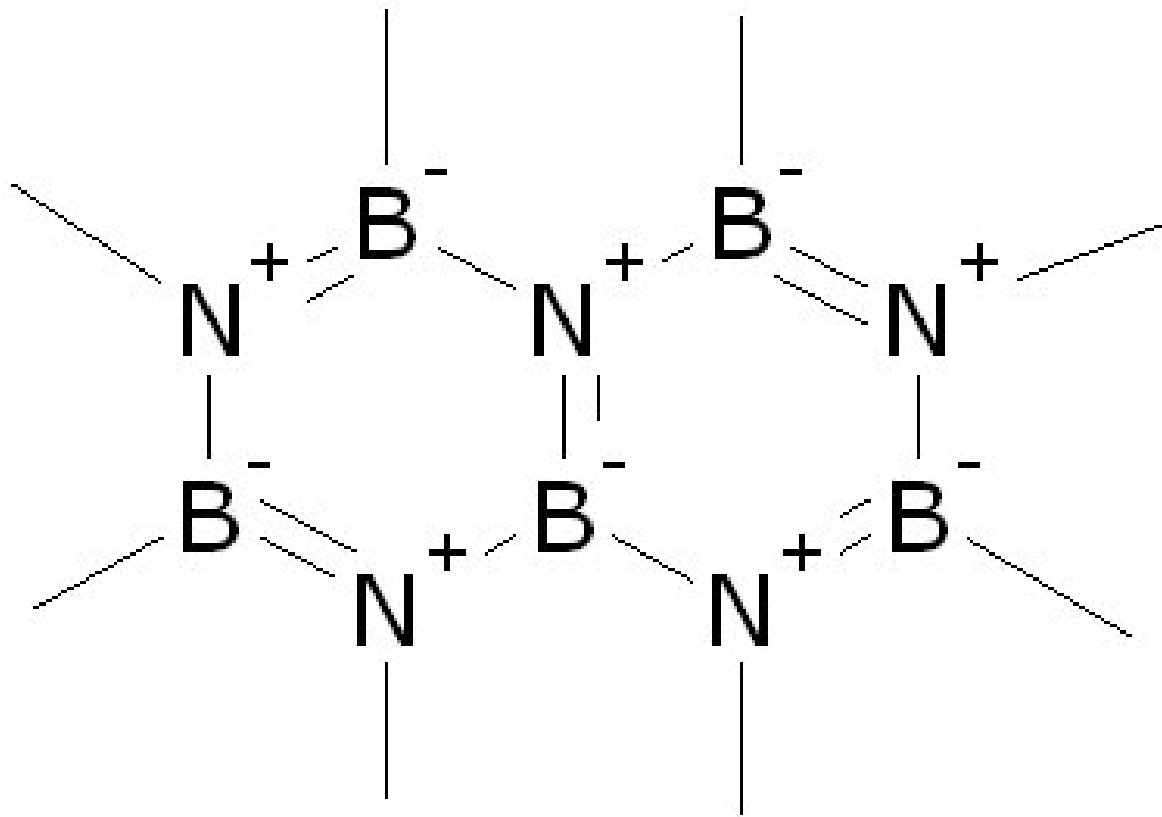
## 2.3 ΝΙΤΡΙΔΙΟ ΤΟΥ ΒΟΡΙΟΥ (BN)

Το βόριο είναι το χημικό στοιχείο με χημικό σύμβολο B και ατομικό αριθμό 5. Είναι το πρώτο μέλος και το μοναδικό μη μέταλλο στοιχείο της 13 (III<sub>A</sub>) ομάδας του περιοδικού πίνακα των στοιχείων. Το βόριο ταξινομείται στα μεταλλοειδή. Το βόριο στη φύση έχει δύο σταθερά ισότοπα, το βόριο-11 που εμφανίζεται με αναλογία ατόμων 80,1% και το βόριο-10 με αναλογία ατόμων 19,9%. Το βόριο έχει ικανότητα αλυσσοποίησης παρόμοια με τον άνθρακα, δηλαδή μπορεί να σχηματίζει σταθερούς ομοιοπολικούς δεσμούς και σύνθετες μοριακές δομές. Η χημική δραστηριότητα του βορίου εξαρτάται σε μεγάλο βαθμό από την καθαρότητα, την κρυσταλλικότητα, αλλά και από την θερμοκρασία. Έτσι, σε θερμοκρασία δωματίου αντιδρά με το φθόριο και προσβάλλεται επιφανειακά από το οξυγόνο, αλλά, κατά τα άλλα, είναι αδρανές. Σε υψηλότερες θερμοκρασίες αντιδρά γρήγορα με όλα τα αμέταλλα στοιχεία εκτός από τα H, Ge, Te και τα ευγενή αέρια. Επίσης, αντιδρά ταχύτατα σχεδόν με όλα τα μέταλλα με εξαίρεση τα βαρύτερα στοιχεία των ομάδων 11 – 15 του περιοδικού πίνακα. Μία από τις ενώσεις που σχηματίζει είναι και το νιτρίδιο του βορίου (BN).

### 2.3.1 Μέθοδοι κατασκευής φύλλων νιτρίδιου του βορίου

Οι ενώσεις B–N έχουν ιδιαίτερη σημασία λόγω της ομοιότητάς τους με τις ενώσεις C–C. Τα τρία αυτά άτομα μοιάζουν τόσο από άποψη μεγέθους όσο και από άποψη ηλεκτραρνητικότητας, με τον άνθρακα να βρίσκεται ανάμεσα στα άλλα δύο. Το νιτρίδιο του βορίου είναι μία πολύ ενδιαφέρουσα ένωση, η οποία σχηματίζεται σαν ένα λευκό κρυσταλλικό στερεό από την αντίδραση του αζώτου με το βόριο με προσφορά θερμότητας. Είναι ένα μεγάλο μόριο με δομή τύπου γραφίτη, όπου τα άτομα του βορίου και του αζώτου εναλλάσσονται στους δακτυλίους δίνοντας δομή εξαγωνικού πλέγματος στο χώρο, όπως μπορούμε να δούμε στην εικόνα 2.3.1.1. Στη δομή και στις ιδιότητες ηλεκτρικών αλληλεπιδράσεων το μονοστρωματικό φύλλο του

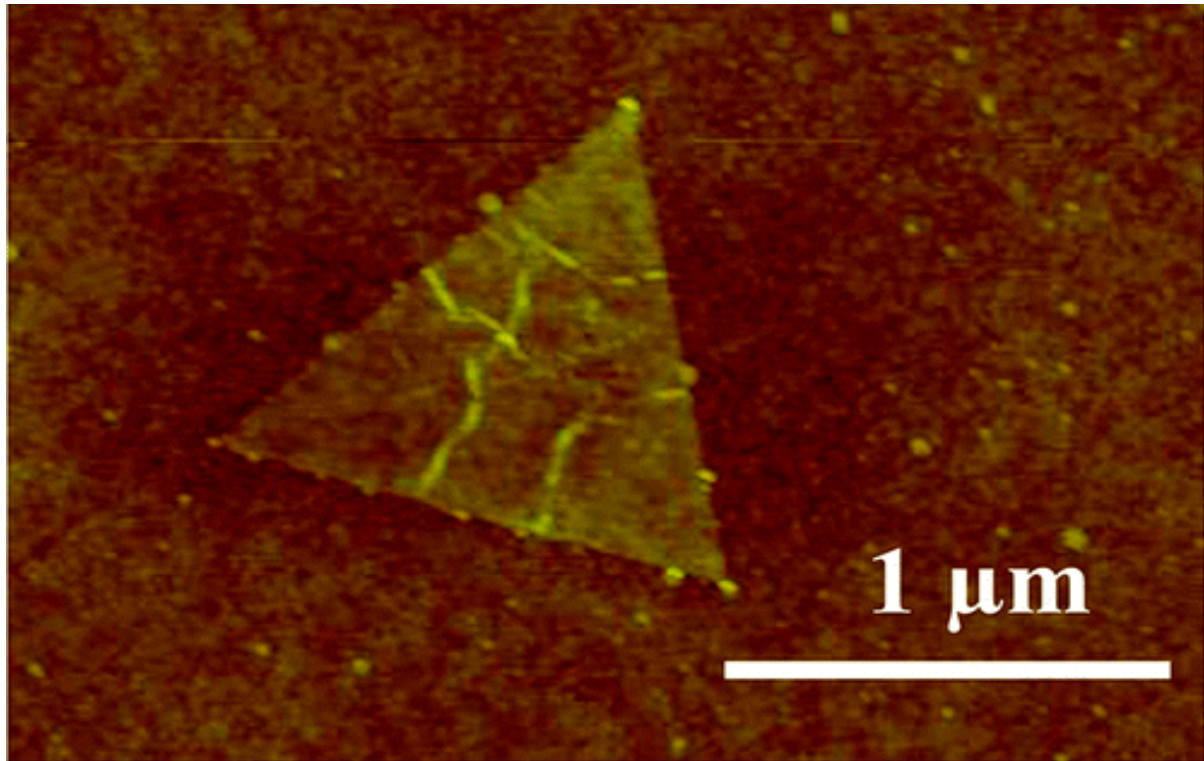
νιτριδίου του βορίου μοιάζει πάρα πολύ με το γραφένιο, ένα άλλο μονοστρωματικό νανοϋλικό.



Εικόνα 2.3.1.1 : Σχηματική απεικόνιση του δεσμού BN στο χώρο

Τα μονοστρωματικά φύλλα νιτριδίου το βορίου κατασκευάζονται με τυποποιημένες διαδικασίες διάσπασης με τη χρήση μονοκρυστάλλου hBN, όπως αυτό που απεικονίζεται στην εικόνα 2.3.1.2. Είναι σημαντικό να σημειωθεί ότι στο παρελθόν η κατασκευή γινόταν με τη χρήση HOPBN (Momentive Performance Materials), αλλά αυτή η μέθοδος μπορούσε να αποδώσει μόνο ισχυρούς κρυστάλλους χωρισμένους σε βαθμίδες και όχι μονοστρωματικά φύλλα. Τα ατομικού πάχους φύλλα εξάγονται από μια σκόνη (Sigma – Aldrich) και δεν υπερβαίνουν σε μέγεθος τα 2μm.





Εικόνα 2.3.1.2 : Μονοστρωματικό φύλλο BN από διάσπαση hBN

Μια άλλη μέθοδος κατασκευής μονοστρωματικών φύλλων νιτριδίου του βορίου είναι η απόσχιση λεπτών φύλλων BN πάχους ενός ατόμου, χρησιμοποιώντας την τεχνική της αντιδραστικής χάραξης ιόντων. Αυτή η τεχνική απόσχισης μπορεί να εφαρμοστεί σε παρόμοια υλικά για να δημιουργηθούν ατομικά λεπτά δισδιάστατα φύλλα σε μεγάλες κλίμακες μεγέθους.

Ακόμα μια μέθοδος παρασκευής είναι γνωστή. Η σύνθεση h-BN σε υπόστρωμα χαλκού (Cu) με χημική εναπόθεση ατμών (CVD), με δύο ζώνες θέρμανσης σε χαμηλή πίεση (LP). Οι συνθέσεις CVD σε συνθήκες ατμοσφαιρικής πίεσης ήταν μόνο σε θέση να αποδώσουν μερικά στρώματα h-BN χωρίς έναν καλό έλεγχο σχετικά με τον αριθμό των στρωμάτων. Σε αντίθεση, κάτω από ανάπτυξη LPCVD, συντέθηκε μονοστρωματικό φύλλο h-BN. Έχει επίσης παρατηρηθεί ότι η μορφολογία της επιφάνειας του χαλκού επηρεάζει τη θέση και την πυκνότητα των πυρήνων του h-BN. Ως πρόδρομος του νιτριδίου του βορίου χρησιμοποιείται η χημική ένωση με χημικό τύπο  $H_3N(BH)_3$  (borazane), η οποία είναι εύκολα προσβάσιμη και είναι πιο σταθερή υπό φυσιολογικές συνθήκες περιβάλλοντος από ότι η χημική ένωση με χημικό τύπο  $(BH)_3(NH)_3$  (borazine). Η ανάπτυξη του ατομικού φύλλου σε αυτή τη μέθοδο λαμβάνει χώρα μέσω μέσης ανάπτυξης επιφάνειας, η οποία είναι παρόμοια με την ανάπτυξη γραφενίου σε χαλκό υπό χαμηλή πίεση.

### 2.3.2 Εφαρμογές και ιδιότητες νιτριδίου του βορίου

Το εξαγωνικό πλέγματος νιτρίδιο του βορίου (h-BN) είναι ένα υλικό πολύ ελκυστικό για πολλές εφαρμογές, κυρίως, ως προστατευτική επίστρωση για να βελτιώσει τις ιδιότητες της επιφάνειας πάνω στην οποία θα τοποθετηθεί, όπως και άλλα νανοϋλικά. Ως διάφανη μεμβράνη επειδή τα άτομά του στο πλέγμα δεν έχουν την ορατή ιδιότητα που έχει το γραφένιο, ή ως μέσο εκπομπής βαθέως υπεριώδους φωτός. Επίσης μπορεί να χρησιμοποιηθεί ως λιπαντικό στρώμα για τη μείωση του συντελεστή τριβής διεπιφανειών και ως μέσο για την πρόληψη της οξείδωσης των μετάλλων διότι είναι σχετικά αδρανές ως προς την αντίδρασή του με το οξυγόνο. Ένα παράδειγμα των καταναλωτικών προϊόντων βάσει των εφαρμογών αυτών, φαίνεται στην εικόνα 2.3.2.1, παρακάτω.

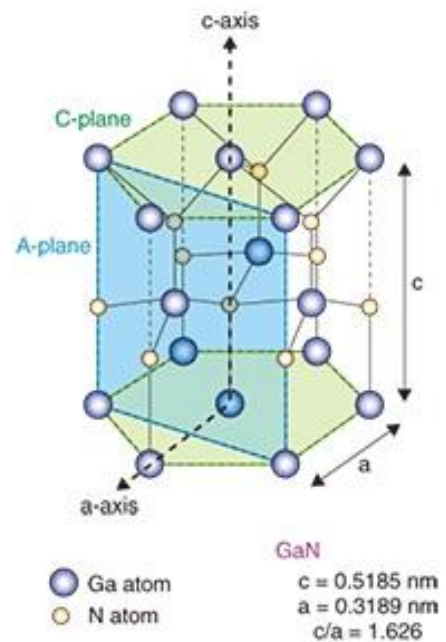
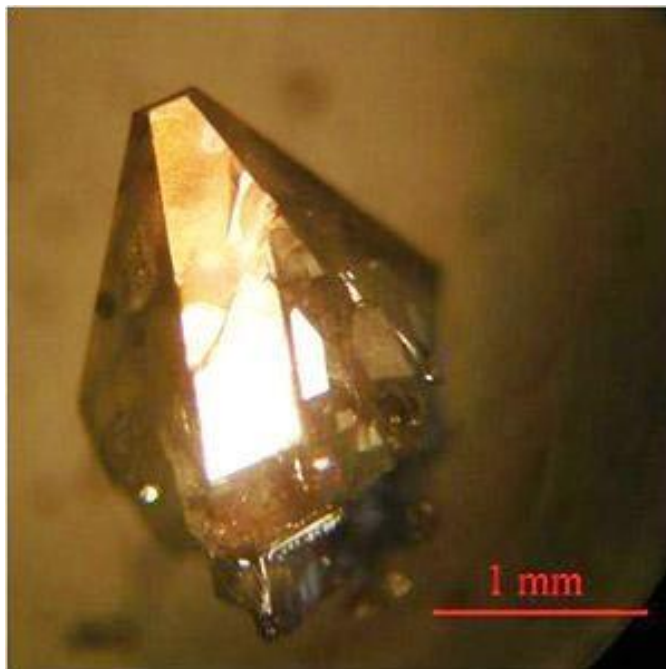


Εικόνα 2.3.2.1 : Καταναλωτικά προϊόντα βάσει του νιτριδίου του βορίου

### 2.4 ΝΙΤΡΙΔΙΟ ΤΟΥ ΓΑΛΛΙΟΥ (GaN)

Το Νιτρίδιο του γαλλίου είναι μια ένωση του χημικού στοιχείου γάλλιο με χημικό σύμβολο Ga που ανήκει στην ομάδα 13 (III<sub>A</sub>, με την παλαιότερη αρίθμηση) του περιοδικού πίνακα, στην περίοδο 4 και στον τομέα p. Είναι άχρωμο και κρυσταλώνεται σε εξαγωνική δομή στο χώρο (βουρτσιτής), όπως σχηματικά

παρουσιάζεται στην εικόνα 2.4.1. Οι εφαρμογές του στη νανοκλίμακα έχουν καθηλώσει το επιστημονικό ενδιαφέρον.

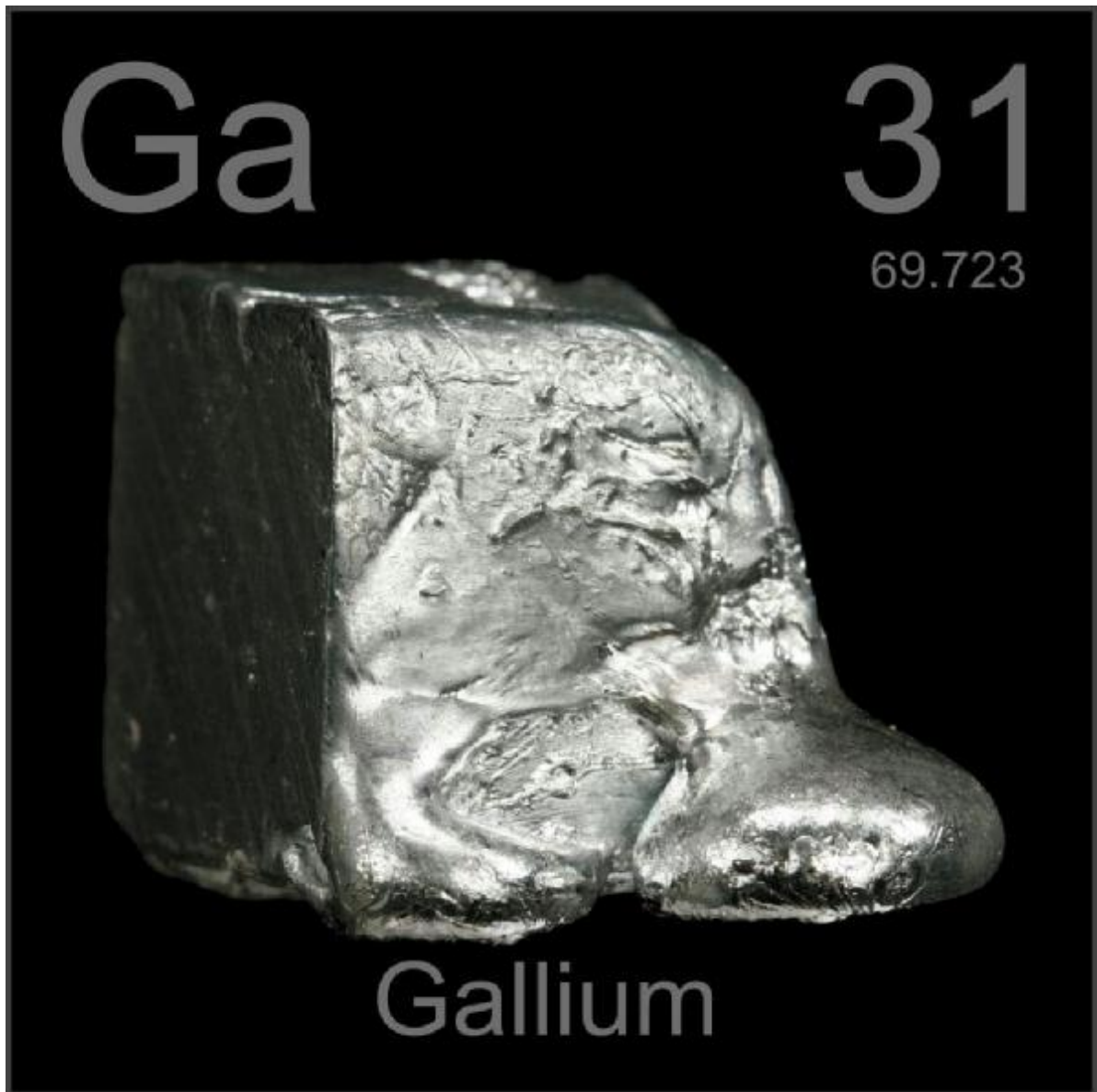


Εικόνα 2.4.1 : Δεξιά: η διάταξη του νιτριδίου του γαλλίου στο χώρο  
Αριστερά: κρύσταλλος νιτριδίου του γαλλίου

## 2.4.1 Γάλλιο (Ga)

Το χημικό στοιχείο γάλλιο, που απεικονίζεται στην εικόνα 2.4.1.1, είναι ένα σπάνιο, μαλακό, εύτηκτο, εύθρυπτο σε χαμηλές θερμοκρασίες, αργυρόλευκο μέταλλο με σιλιπνή μεταλλική λάμψη. Ο ατομικός αριθμός του είναι 31 και η σχετική ατομική μάζα του 69,723. Το χημικό του σύμβολο είναι «Ga» και ανήκει στην ομάδα 13 του περιοδικού πίνακα.

Ανακαλύφθηκε το 1875 από τον Γάλλο χημικό Πολ-Εμίλ Φρανσουά Λε Κοκ ντε Μπουαμποντράν με φασματοσκοπική μελέτη και πήρε το όνομά του από την Gallia, παλιά λατινική ονομασία της Γαλλίας. Ανεπιβεβαίωτες φήμες εκείνης της εποχής λένε ότι το όνομα γάλλιο μπορεί να προέρχεται από το όνομά του "Λε Κοκ" (Le Coq) που στα λατινικά (γκάλιουμ) σημαίνει πετεινός, αρσενική γαλοπούλα, γάλος. Στην ελληνική γλώσσα η ονομασία "Γάλλιον" όπως αποδόθηκε το "Γκάλιουμ", ή "Γκάλιαμ", αναφέρεται από το 1885 από τον Καθηγητή του Πανεπιστημίου Αθηνών Αναστάσιο Δαμβέργη.



Εικόνα 2.4.1.1 : Το χημικό στοιχείο γάλλιο (Ga)

Το γάλλιο δεν υπάρχει σε ελεύθερη μορφή στη φύση. Είναι το 34ο αφθονότερο χημικό στοιχείο στο φλοιό της Γης. Τα λίγα ορυκτά με υψηλή περιεκτικότητα σ' αυτό, όπως ο γαλλίτης, αφενός είναι πολύ σπάνια για να χρησιμεύσουν ως βασική πηγή του στοιχείου ή των ενώσεών του και αφετέρου χωρίς οικονομική σπουδαιότητα. Η περιεκτικότητα του μετάλλου στο στερεό φλοιό της γης κυμαίνεται από 15 ppm (ή 0,0015 %) έως και 19 ppm (ή 0,0019 %).

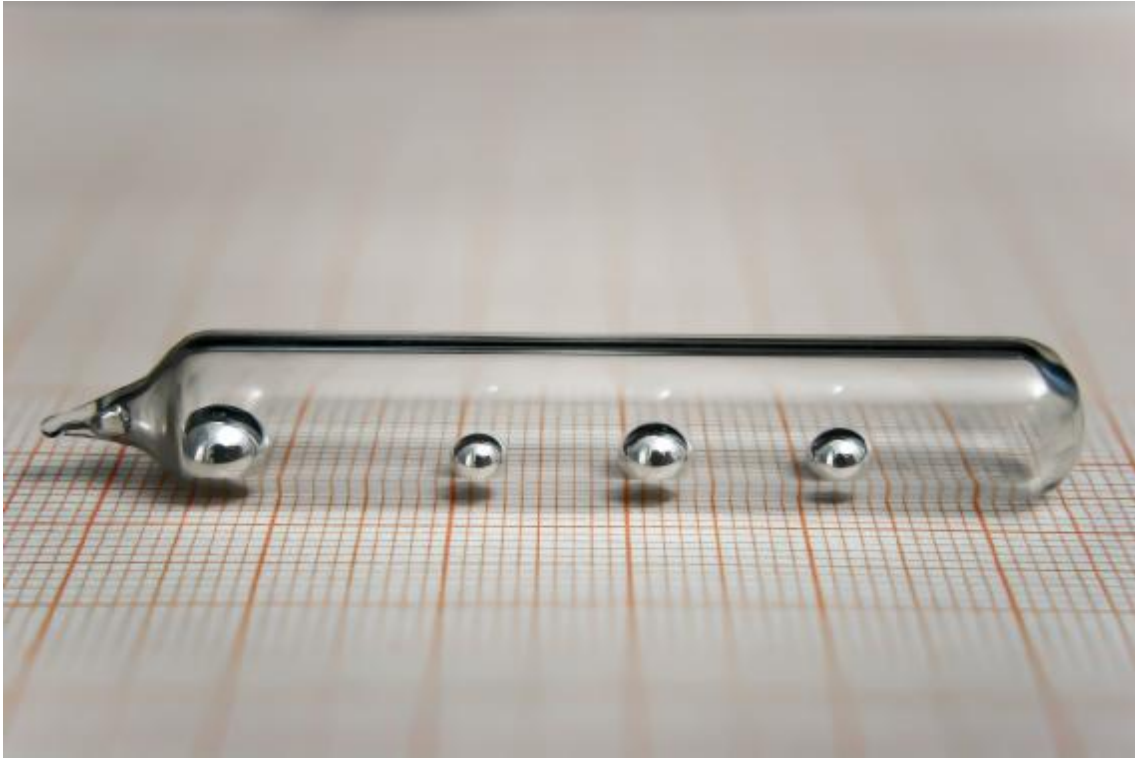
Είναι ένα μέταλλο με παράξενη συμπεριφορά. Το καθαρό γάλλιο δεν αποτελεί επιβλαβή ουσία για τους ανθρώπους κατά την επαφή, αν και αφήνει σημάδι στα χέρια. Πολλές φορές αγγίζεται μόνο και μόνο για την απλή ευχαρίστηση που προκαλεί η παρατήρησή του όταν λιώνει από τη θερμότητα που εκπέμπεται από το ανθρώπινο χέρι, όπως φαίνεται και στην εικόνα 2.4.1.2.





Εικόνα 2.4.1.2 : Το γάλλιο λιώνει σε επαφή με το ανθρώπινο χέρι

Επίσης, επειδή το σημείο ζέσης είναι στους 2.400 βαθμούς Κελσίου περίπου, σε όλη αυτή την περιοχή από 30 ως 2.400 μπορεί να είναι σε υγρή κατάσταση, κάτι που το κάνει κατάλληλο, όπως βλέπουμε στην εικόνα 2.4.1.3 για θερμόμετρα υψηλών θερμοκρασιών. Το γάλλιο έχει πυκνότητα  $5,9 \text{ gr/cm}^3$  στους 29,6 βαθμούς Κελσίου και  $6,09 \text{ gr/cm}^3$  μόλις δύο δέκατα του βαθμού πιο ψηλά, όπου έχει μετατραπεί σε υγρό. Το φυσικό γάλλιο βρίσκεται με τη μορφή δύο σταθερών ισοτόπων, το  $^{69}\text{Ga}$  και το  $^{71}\text{Ga}$ .



**Εικόνα 2.4.1.3 :** Το γάλλιο ιδανικό για θερμομέτρα υψηλών θερμοκρασιών

Το χημικό αυτό στοιχείο υπάρχει στον οργανισμό μας σε πολύ μικρές ποσότητες. Ένας άνθρωπος 70 κιλών έχει στο σώμα του κανονικά μόλις 0,7 mgr. Μόνο σε αφύσικα μεγάλες ποσότητες σε σχέση με την καθημερινή δόση που μπορεί να πάρει ένας άνθρωπος από το περιβάλλον του έχει ως σήμερα αποδειχθεί ότι είναι τοξικό το γάλλιο. Άλλωστε δεν υπάρχει και τόσο πολύ εντελώς ελεύθερο. Πιο πολύ το βρίσκουμε σε μεταλλεύματα του αλουμινίου όπως ο βωξίτης και σε ανθρακικά ορυκτά. Όσο γάλλιο χρειαζόμαστε προκύπτει ως παραπροϊόν της παραγωγής ψευδαργύρου και χαλκού. Το ραδιενεργό ισότοπο γάλλιο-67 με ημιζωή 78 ωρών χρησιμοποιείται για τον εντοπισμό μελανωμάτων διότι έχει την τάση να συγκεντρώνεται εκεί όπου υπάρχουν τέτοιοι κακοήθεις σχηματισμοί, με τον τρόπο που φαίνεται στην εικόνα 2.4.1.4.



Εικόνα 2.4.1.4 : Συγκέντρωση γαλλίου πάνω σε κακόηθες μελάνωμα

Το γάλλιο χρησιμοποιείται, επίσης, σε τεράστιες ποσότητες για την ανίχνευση των τόσο φευγάτων σωματιδίων, ονόματι νετρίνα, που μας στέλνει με εντατικούς ρυθμούς ο ήλιος αλλά δύσκολα παγιδεύονται εδώ στη Γη. Στην Ιταλία, στα Laboratori Nazionali di Gran Sasso, χρησιμοποιήθηκε γάλλιο-71 με τη μορφή διαλύματος χλωριούχου γαλλίου. Διότι, αν ένα νετρίνο τύχει να αντιδράσει με γάλλιο-71, εκπέμπεται τελικά ένα ηλεκτρόνιο και προκύπτει γερμάνιο-71, ένα ραδιενεργό ισότοπο με χρόνο ημιζωής 11,43 ημερών.

## 2.4.2 Εξαγωγή γαλλίου

Επειδή όπως προαναφέρθηκε δεν υπάρχει ελεύθερο στη φύση, είμαστε αναγκασμένοι να το εξάγουμε από άλλες ενώσεις και ορυκτά.

Το ορυκτό γαλλίτης, που φαίνεται στην εικόνα 2.4.2.1, είναι το σημαντικότερο ορυκτό του γαλλίου. Το ορυκτό γερμανίτης συνοδεύεται από 1.000 - 10.000 ppm Ga ή κατ' άλλους 5.000 - 7.000 ppm ενώ γερμανίτης από την περιοχή Τσουμέμπ (Tsumeb) της Ναμίμπια (νοτιοδυτική Αφρική) περιείχε 18.500 ppm Ga. Η περιεκτικότητα του σφαλερίτη σε γάλλιο γενικά κυμαίνεται μεταξύ 1 - 1000 ppm. Αυτό που μπορεί να ανακτηθεί από τα ορυκτά του ψευδαργύρου εκτιμάται σε 6.500 τόνους παγκοσμίως.





Εικόνα 2.4.2.1 : Εξαγωγή γαλλίου από γαλίτη

Ο βωξίτης που απεικονίζεται στην εικόνα 2.4.2.2 όμως, αποτελεί τη σημαντικότερη πηγή γαλλίου. Το μεγαλύτερο μέρος του μετάλλου αυτού, παράγεται σήμερα ως παραπροϊόν κατά την επεξεργασία της αλουμίνας που προέρχεται από το βωξίτη. Οι συγκεντρώσεις Ga σ' αυτόν δεν είναι καθορισμένες και κυμαίνονται μεταξύ 10 ppm και 160 ppm ανάλογα με την περιοχή από την οποία προέρχεται ο βωξίτης. Οι πλουσιότεροι, σε γάλλιο, βωξίτες είναι αυτοί που εξορύσσονται στην Ουγγαρία και περιέχουν πάνω από 130 ppm , οι βωξίτες της Γκάνας με πάνω από 140 ppm γάλλιο και του Βιετνάμ με πάνω από 90 ppm. Τα παγκόσμια αποθέματα γαλλίου που μπορούν να ανακτηθούν από το βωξίτη εκτιμώνται σε 1.600.000 τόνους υπολογισμένα με βάση τα εκτιμώμενα παγκόσμια βοξιτικά αποθέματα και την περιεκτικότητά τους σε γάλλιο.





**Εικόνα 2.4.2.2 :** Εξαγωγή γαλλίου από βωξίτη

Άλλη πηγή γαλλίου είναι τα κοιτάσματα ορυκτών ανθράκων (ανθρακίτης) που μπορούμε να τον δούμε στην εικόνα 2.4.2.3, όπου το εύρος περιεκτικότητας σε γάλλιο είναι 1 - 20 ppm (μέση τιμή ~ 7 ppm) και στην ιπτάμενη τέφρα η μέση περιεκτικότητα είναι περίπου 100 ppm. Σε μερικές περιπτώσεις, η ιπτάμενη τέφρα μπορεί να περιέχει 10 - 500 ppm Ga και κάποιες φορές μέχρι 10.000 ppm Ga.



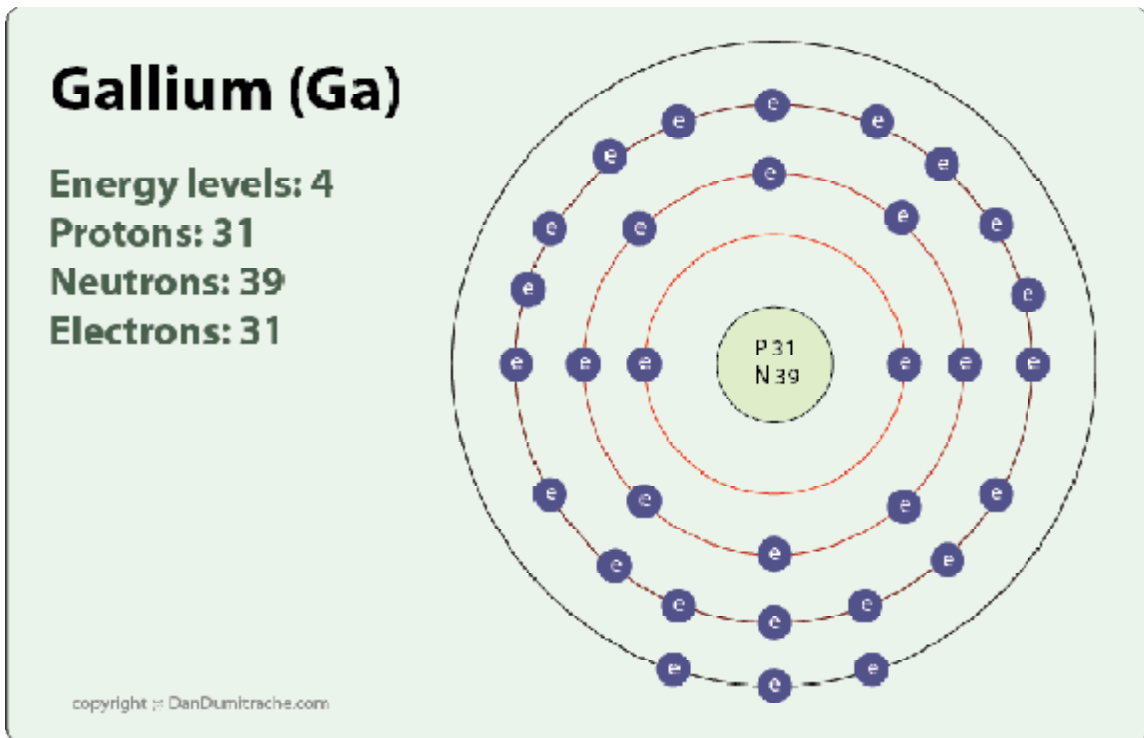
**Εικόνα 2.4.2.3 :** Εξαγωγή γαλλίου από ανθρακίτη

Το γάλλιο μπορεί επίσης να βρεθεί σε ρουμπίνια. Σε κάποιες εναποθέσεις στην Τανζανία και στο Μαλάουι βρέθηκε μεταξύ 10 - 500 ppm. Η μέση περιεκτικότητα του μετάλλου στους βασάλτες βρέθηκε 17 ppm και στους γρανίτες 18,5 ppm, ενώ στα περισσότερα είδη επιφανειακών εδαφών περιέχεται σε μια μέση τιμή περίπου 21,1 ppm. Υπολειμματικοί ψαμμίτες και άλλα ιζηματογενή πετρώματα είναι γενικά φτωχοί σε γάλλιο. Σε ανθρακικά πετρώματα το γάλλιο βρίσκεται σε ίχνη. Σε θειικά, και φθοριούχα ορυκτά δε βρίσκεται σε συγκεντρώσεις μεγαλύτερες από 0,15 ppm ενώ αντιθέτως παρατηρούνται αυξημένες συγκεντρώσεις σε άστριους πηγματιτικής προέλευσης, οι οποίοι είναι και οι βασικοί περιέκτες γαλλίου σε γρανιτικά πετρώματα, και σε μαρμαρυγίες. Αυξημένη περιεκτικότητα σε Ga εμφανίζεται επίσης στις εκβολές των ποταμών στην ισημερινή ζώνη και στον Κόλπο της Βεγγάλης. Αυτό οφείλεται σε τροπικές διεργασίες αποσάθρωσης που παρατηρούνται σ' αυτές τις περιοχές. Επίσης λατεριτικοί σχηματισμοί, όπως στα νησιά της Χαβάης περιέχουν υψηλές συγκεντρώσεις σε Ga. Επιπλέον έχει παρατηρηθεί ύπαρξη γαλλίου στους μετεωρίτες. Στους μετεωρίτες, το γάλλιο βρίσκεται σε συγκέντρωση 7,8 ppb.

Ένα σημαντικό ποσοστό του μετάλλου προκύπτει επίσης από τη δευτερογενή παραγωγή, κυρίως από ανακύκλωση ηλεκτρονικών συσκευών που περιέχουν ενώσεις όπως το αρσενικούχο γάλλιο (GaAs). Τα βασικά κέντρα για τη δευτερογενή αυτή παραγωγή είναι ο Καναδάς, η Ιαπωνία, η Γερμανία, η Μεγάλη Βρετανία και οι Η.Π.Α.

#### **2.4.3 Οι ενώσεις του χημικού στοιχείου γάλλιο**

Το γάλλιο έχει δομή εξωτερικής στιβάδας  $4s^2 4p^1$ , όπως φαίνεται και στην εικόνα 2.4.3.1 και εμφανίζεται στις ενώσεις του με κύριο αριθμό οξειδωσης +3 εφόσον μπορεί να απολέσει και τα 3 ηλεκτρόνια. Υπάρχουν όμως και ενώσεις όπου παρουσιάζεται με αριθμό οξειδωσης +1 αν χάσει μόνο το  $4p^1$  ηλεκτρόνιο εξαιτίας του φαινομένου της συστολής των στοιχείων του τομέα d. Επίσης αναφέρονται και διμερείς διαμαγνητικές ενώσεις που περιέχουν δεσμό Ga – Ga όπου το γάλλιο έχει αριθμό οξειδωσης +2.



**Εικόνα 2.4.3.1 :** Η ηλεκτρονιακή κατανομή του γαλλίου

Οι δυαδικές ενώσεις του γαλλίου με τα στοιχεία της 15<sup>ης</sup> (VA) ομάδας του περιοδικού πίνακα (N, P, As, Sb), έχουν αποκτήσει ιδιαίτερο ενδιαφέρον εξαιτίας της χρήσης τους ως III-V ημιαγωγικά υλικά όμοια με το πυρίτιο και το γερμάνιο .

Το μεταλλικό γάλλιο χρησιμοποιείται ευρέως ως πρόσμιξη σε ημιαγωγούς. Το υπερκαθαρό πυρίτιο αλλά και το γερμάνιο μπορούν να προσμιχθούν με γάλλιο για να χρησιμοποιηθούν σε διάφορα μικρά εξαρτήματα στερεάς κατάστασης, όπως τρανζίστορ. Οι πιο κοινές εφαρμογές του γαλλίου είναι με τη μορφή των ημιαγωγών p-τύπου αρσενικούχου και αζωτούχου γαλλίου(III), GaAs και GaN αντίστοιχα των οποίων η ζήτηση αυξάνεται συνεχώς. Πάνω από το 90 % των εφαρμογών του γαλλίου σε βιομηχανικές χώρες γίνεται μέσω του GaAs.

Οι δύο αυτές ενώσεις χρησιμοποιούνται σε αναλογικά ολοκληρωμένα κυκλώματα, σε ενισχυτές για την καλωδιακή τηλεόραση και ασύρματους σταθμούς βάσης επικοινωνιών, σε οπτοηλεκτρονικές συσκευές, σε διόδους εκπομπής φωτός (LED), σε διόδους laser, σε φωτοανιχνευτές, σε ηλιακά κύτταρα αλλά και σε “smartphones” 3ης και 4ης γενιάς τα οποία χρησιμοποιούν τέσσερις φορές περισσότερο GaAs από παλαιότερα κινητά τηλέφωνα. Ήδη αναπτύσσεται νέα γενιά LED με νιτρίδιο γαλλίου-ινδίου, GaInN. Αυτά τα νέα LED λέγεται ότι θα μπορούν να προσφέρουν εξαιρετική φωτεινότητα σε διάφορα χρώματα του φάσματος.

Το Σεπτέμβριο του 2009, επιστήμονες στο Τεχνολογικό Ινστιτούτο Μασαχουσέτης κατασκεύασαν υβριδικό μικροσίπ με GaN-πυρίτιο που αναμένεται να είναι μικρότερο, πιο γρήγορο και πιο αποδοτικό από τους μικροεπεξεργαστές που βασίζονται μόνο στο πυρίτιο. Η αυξημένη ζήτηση σε GaAs και GaN οφείλεται επίσης σε νέες ασύρματες εφαρμογές επικοινωνιών και tablet PC. Τα ολοκληρωμένα

κυκλώματα που βασίζονται στο GaAs χρησιμοποιούνται σε πολλές στρατιωτικές εφαρμογές λόγω των μοναδικών ιδιοτήτων τους, και δεν υπάρχουν ουσιαστικά υποκατάστατα του υλικού αυτού στις εφαρμογές αυτές.

Δίοδοι λείζερ 405 nm από GaN χρησιμοποιούνται ως πηγές ιώδους φωτός για ανάγνωση δίσκων Blu-ray. Στους δίσκους Blu-Ray πραγματοποιείται η προβολή ενός έργου με εικόνα High Definition (HD), η οποία χρειάζεται ένα «χρωματολόγιο» (εύρος συχνοτήτων ή Bandwidth είναι το σωστό όνομα) πέντε φορές μεγαλύτερο και έναν δίσκο με πολύ μεγαλύτερη χωρητικότητα. Η κάθε μία μικροσκοπική πληροφορία που συγκροτεί τελικά το όλο σώμα οποιασδήποτε ταινίας είναι αποτυπωμένη στον λεπτό δίσκο με τη μορφή μιας μικρής κοιλότητας. Και έρχεται, όταν θέλουμε να αναπαραχθεί αυτή η πληροφορία, η κεφαλή ανάγνωσης να ψηλαφίσει την πίσω πλευρά της κοιλότητας, το εξόγκωμα δηλαδή. Για την ανάγνωση του περιεχομένου των DVD χρησιμοποιείται μια κόκκινη ακτίνα λείζερ. Για τα Blu-Ray η ακτίνα είναι μπλε και έχει μήκος κύματος μικρότερο κατά το ένα τρίτο περίπου ως προς το μήκος κύματος της κόκκινης (650 νανόμετρα η κόκκινη, 405 νανόμετρα η μπλε). Όσο πιο μικρό το μήκος κύματος τόσο πιο μικρή χρειάζεται να είναι και η κάθε κοιλότητα. Έτσι από τα 0,74 εκατομμυριοστά του μέτρου μπόρεσαν να πάνε στα 0,32, άρα στον δίσκο με τεχνολογία Blu-Ray χωρούν τουλάχιστον 25 Gigabytes, περίπου πέντε φορές περισσότερα από ό,τι στα DVD. Αυτή λοιπόν η μπλε ακτίνα οφείλεται στο στοιχείο γάλλιο.

Το γάλλιο αποτελεί, επίσης, συστατικό των νέων φωτοβολταϊκών ενώσεων, όπως τα μονοφασικά κράματα χαλκού – ινδίου – γαλλίου – σεληνίου – θείου,  $Cu(In,Ga)(Se,S)_2$ , που ανακοινώθηκαν από ερευνητές της Νότιας Αφρικής και των Η.Π.Α. για χρήση σε ηλιακούς συλλέκτες ως εναλλακτική λύση του κρυσταλλικού πυριτίου, του οποίου η προμήθεια είναι προς το παρόν μειωμένη. Αρκετοί δορυφόροι αλλά και οχήματα εξερεύνησης της επιφάνειας του πλανήτη Άρη, χρησιμοποιούν τριπλή επίστρωση GaAs σε ηλιακά κύτταρα από γερμάνιο.

Το γάλλιο έγινε γνωστό από το ημιαγωγό υλικό GaAs (αρσενικούχο γάλλιο). Το σκουρόχρωμο αρσενικούχο γάλλιο(III) ή αρσενίδιο του γαλλίου κρυσταλλώνεται στο κυβικό σύστημα, έχει δομή σφαιερίτη και είναι σταθερό σε κανονική πίεση αλλά σε πίεση > 17 GPa αποκτά ορθορομβική δομή. Έχει σκληρότητα 4-5 της κλίμακας Mohs, πυκνότητα  $5,317 \text{ g/cm}^3$  και χρησιμοποιείται για την κατασκευή οπτοηλεκτρονικών συσκευών (δίοδοι λείζερ, LED, φωτοανιχνευτές και ηλιακά κύτταρα) και ολοκληρωμένων κυκλωμάτων. Αποτελεί το σημαντικότερο εμπορικό III-V ημιαγωγό παγκοσμίως, πολυτιμότερο ακόμα και από το πυρίτιο για ηλεκτρονικά κυκλώματα υψηλής ταχύτητας.

#### **2.4.4 Το νιτρίδιο του γαλλίου**

Η ένωση που έχει κινήσει το ενδιαφέρον σήμερα στην επιστημονική κοινότητα είναι το νιτρίδιο του γαλλίου. Η ένωση του γαλλίου με το άζωτο δίνει ένα ημιαγωγό υλικό που έχει αποδειχθεί τεράστιας σημασίας και για τη βιομηχανία σε καιρό ειρήνης αλλά και για την πολεμική βιομηχανία. Χρησιμοποιείται σε κυκλώματα ενισχυτών

μικροκυμάτων και κεραιών για τα ραντάρ διότι σε αρκετά πιο χαμηλές ενέργειες και με λιγότερο θόρυβο λειτουργούν αυτές οι συσκευές έτσι ώστε στην κλίμακα αξιολόγησης του αμερικανικού υπουργείου Άμυνας να φθάνει κοντά στον (υψηλότατο) βαθμό 8.

Η ένωση του γαλλίου με το άζωτο, το GaN, έρχεται δυναμικά στην παραγωγή. Στα μέταλλα η ποσότητα ενέργειας που χρειάζεται να προσλάβει ένα ηλεκτρόνιο για να αποσπαστεί από το συγκεκριμένο άτομό του και να περιφέρεται μέσα στο κρυσταλλικό του πλέγμα είναι πολύ μικρή, λιγότερη από ένα δέκατο της μονάδας eV (ηλεκτρονιοβόλτ). Στους μονωτές είναι αρκετά πιο μεγάλη, 4 eV, γι' αυτό και εκεί δεν κυκλοφορεί ρεύμα, ενώ στους ημιαγωγούς έχει ενδιάμεσο μέγεθος. Στο υλικό GaN η τιμή βρίσκεται στα 3 eV και αυτό ήταν κάτι που ζητούσαν καιρό οι βιομηχανίες διότι πλέον μπορούν να χρησιμοποιούνται ακτίνες μικροκυμάτων με ακόμη μεγαλύτερη ενέργεια και γι' αυτό πέρα από τα Blu-Ray επεκτάθηκαν οι εφαρμογές τους και στα ραντάρ και στα δίκτυα των κινητών τηλεφώνων.

Το νιτρίδιο του γαλλίου είναι ένα ημιαγωγίμο υλικό το οποίο κατασκευάστηκε το 1986, από τον καθηγητή στο πανεπιστήμιο Nagoya, Isamu Akasaki, μαζί με τον Hiroshi Amano και τους συνεργάτες του. Παραπάνω αναφέρθηκαν διάφορες εφαρμογές τις οποίες θα δούμε και αναλυτικότερα παρακάτω. Όλες αυτές οι εφαρμογές αξιοποιούν τις ιδιότητες του νιτρίδιου του γαλλίου στη νανοκλίμακα.

Το 1995 ο καθηγητής του Trustees of Boston University, Θεόδωρος Μουστάκας, κατοχύρωσε στις Ηνωμένες Πολιτείες της Αμερικής την ευρεσιτεχνία της δημιουργίας λεπτού φύλλου (φιλμ) νιτρίδιου του γαλλίου όπου σήμερα χρησιμοποιείται στην κατασκευή των γνωστών mac υπολογιστών, iphone και ipad της γνωστής εταιρείας apple.

Κάπως έτσι «άνοιξε ο δρόμος» για το στόχο της κατασκευής του μονοστρωματικού φύλλου του νιτρίδιου του γαλλίου που υποσχόταν να κάνει πραγματικότητα όλες τις εφαρμογές που προαναφέρθηκαν.

## **3 ΜΟΝΟΣΤΡΩΜΑΤΙΚΟ ΦΥΛΛΟ ΝΙΤΡΙΔΙΟΥ ΤΟΥ ΓΑΛΛΙΟΥ**

### **3.1 ΕΦΑΡΜΟΓΕΣ ΝΙΤΡΙΔΙΟΥ ΤΟΥ ΓΑΛΛΙΟΥ**

Σε αυτήν την παράγραφο θα δούμε αναλυτικά την πληθώρα των εφαρμογών, του ημιαγωγίμου υλικού, του νιτρίδιου του γαλλίου και τη σημασία του σε αυτές τις εφαρμογές. Όπως είδαμε και στο προηγούμενο κεφάλαιο οι περισσότερες εφαρμογές του συγκεντρώνονται στον τομέα της οπτοηλεκτρονικής. Αυτό οφείλεται στο γεγονός ότι το νιτρίδιο του γαλλίου είναι ένα ημιαγωγίμο υλικό.

#### **3.1.1 Οπτοηλεκτρονική**

Η οπτοηλεκτρονική είναι ο κλάδος της φυσικής και της ηλεκτρονικής που ασχολείται με διατάξεις στερεάς κατάστασης για την παραγωγή, διαμόρφωση, εκπομπή και ανίχνευση ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας στο υπεριώδες, υπέρυθρο και ορατό τμήμα του φάσματος. Επομένως, το αντικείμενο της οπτοηλεκτρονικής είναι η μελέτη και η εφαρμογή ηλεκτρονικών διατάξεων και εξαρτημάτων που αλληλεπιδρούν με το φως. Ο όρος "φως", εκτός από το ορατό περιλαμβάνει και τις αόρατες μορφές ακτινοβολίας όπως οι ακτίνες γ, οι ακτίνες Χ, την υπεριώδη και την υπέρυθη.

Οι οπτοηλεκτρονικές διατάξεις είναι ουσιαστικά οπτο-ηλεκτρικοί ή ηλεκτρο-οπτικοί μορφοτροπείς (transducers) που μετατρέπουν την οπτική ακτινοβολία σε ηλεκτρικό σήμα και το αντίστροφο.

Η οπτοηλεκτρονική βασίζεται στην κβαντική μηχανική, και συγκεκριμένα στα φαινόμενα που συνοδεύουν την πρόσπτωση του φωτός πάνω σε ημιαγωγά υλικά, μερικές φορές υπό την επίδραση ηλεκτρικού πεδίου.

Το τμήμα της οπτοηλεκτρονικής που ασχολείται με τη μετάδοση σημάτων μέσω του φωτός, και συγκεκριμένα με τις οπτικές ίνες, διατάξεις λέιζερ, κτλ, είναι γνωστό και ως φωτονική.

Οι κυριότερες διατάξεις είναι οι φωτοανιχνευτές, τα ηλιακά κύτταρα, οι φωτοβολταϊκές ενώσεις, τα κυκλώματα ενισχυτών μικροκυμάτων και κεραίων για ραντάρ, η τεχνολογία Blu-ray, οι δίοδοι laser, τα smartphones και οι δίοδοι εκπομπής φωτός (LED)

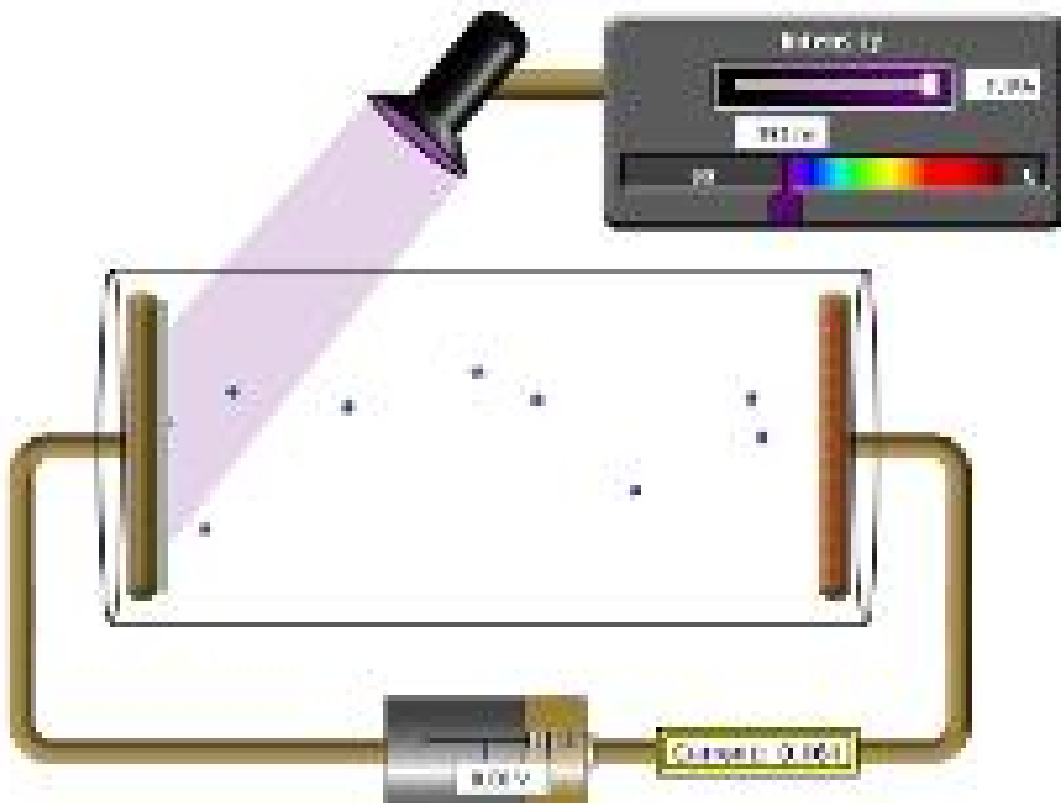
### 3.1.2 Φωτοανιχνευτές

Οι φωτοανιχνευτές βασίζονται στο φωτοηλεκτρικό φαινόμενο, το οποίο απεικονίζεται σχηματικά στην εικόνα 3.1.2.1. Το φωτοηλεκτρικό φαινόμενο ανακαλύφθηκε από τον Heinrich Hertz το 1887, κατά τη διάρκεια πειραμάτων με αντικείμενο την επαλήθευση της θεωρητικής πρόβλεψης του Maxwell (1864), περί παραγωγής ηλεκτρομαγνητικών κυμάτων από περιοδικές μεταβολές του ηλεκτρικού ρεύματος. Κατά το φαινόμενο αυτό, ηλεκτρόνια αποσπώνται από μια μεταλλική επιφάνεια όταν σ' αυτή προσπέσει ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία. Το φωτοηλεκτρικό φαινόμενο απαντάται στην περίπτωση που ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία προσπίπτει σε μεταλλική επιφάνεια και αποσπά ηλεκτρόνια. Τα ηλεκτρόνια σθένους ενός μετάλλου, είναι ελεύθερα να μετακινούνται μέσα στο υλικό αλλά είναι δεσμευμένα σ' αυτό σαν σύνολο. Σε μια απλή περιγραφή του φαινομένου, μπορούμε να πούμε ότι μια ακτίνα φωτός παρέχει σ' ένα ηλεκτρόνιο ποσό ενέργειας ίσο ή μεγαλύτερο από την ενέργεια, που το κρατάει δέσμιο στην επιφάνεια του μετάλλου, επιτρέποντάς του έτσι να διαφύγει.

Ο Α. Einstein εφήρμοσε την κβαντική θεωρία για να εξηγήσει τη φύση της ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας το 1905 και αυτό οδήγησε σε μια ικανοποιητική ερμηνεία του φωτοηλεκτρικού φαινομένου. Σύμφωνα με την κβαντική θεωρία, τα φαινομενικώς συνεχή ηλεκτρομαγνητικά κύματα είναι κβαντισμένα, αποτελούμενα από διακριτές ποσότητες (κβάντα) που καλούνται φωτόνια. Κάθε φωτόνιο έχει ενέργεια  $E$ , που εξαρτάται μόνο από τη συχνότητα (ή από το μήκος κύματος) και δίνεται από τη σχέση:  $E = h \cdot \nu = h(c/\lambda)$

Η σταθερά  $h$ , καλείται σταθερά του Planck, γιατί ήταν ο πρώτος που προσδιόρισε την τιμή της το 1900 κατά την εξήγηση του φαινομένου της ακτινοβολίας μέλανος σώματος.  $h = 6,626 \cdot 10^{-34}$  Joules·sec.

Σύμφωνα με τη θεωρία, μια ακτίνα φωτός συχνότητας  $\nu$ , αποτελείται από φωτόνια, το καθένα με ενέργεια  $h\nu$ . Ένα φωτόνιο μπορεί να αλληλεπιδράσει με ένα μόνο ηλεκτρόνιο της μεταλλικής επιφάνειας και να του προσδώσει όλη του την ενέργεια. Αν αυτή η ενέργεια είναι μεγαλύτερη από την ενέργεια δέσμευσης του ηλεκτρονίου, το επιπλέον ποσό μετατρέπεται σε κινητική ενέργεια του φωτοηλεκτρονίου.



Εικόνα 3.1.2. 1 : Το φωτοηλεκτρικό φαινόμενο

Το φαινόμενο αυτό αναφέρεται στους ημιαγωγούς, ανεξάρτητα αν είναι ενδογενείς ή ημιαγωγοί πρόσμιξης. Όταν ένα ηλεκτρόνιο απορροφήσει ένα φωτόνιο, τότε αυξάνει την ενέργειά του και διεγείρεται σε ανώτερη ενεργειακή στάθμη, αυξάνοντας την αγωγιμότητα του ημιαγωγού.

Η ανίχνευση της οπτικής ακτινοβολίας, πραγματοποιείται συνήθως με την μετατροπή της οπτικής ενέργειας σε ηλεκτρικό σήμα. Οι ανιχνευτές φωτός χωρίζονται σε δυο κατηγορίες:

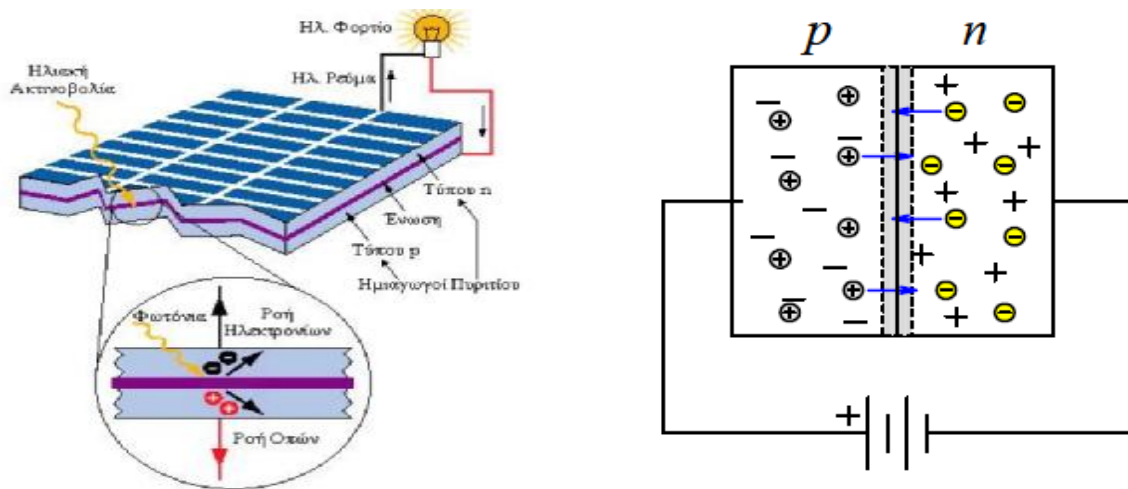
- a) Στους φωτονικούς ανιχνευτές, όπου τα προσπίπτοντα φωτόνια απελευθερώνουν ηλεκτρόνια τα οποία ανιχνεύονται από το εξωτερικό ηλεκτρικό κύκλωμα.
- b) Στους θερμικούς ανιχνευτές, όπου η οπτική ενέργεια μετατρέπεται σε θερμότητα παράγοντας ένα ηλεκτρικό σήμα.

### 3.1.3 Ηλιακά κύτταρα

Το ηλιακό κύτταρο είναι μια συσκευή που μετατρέπει το ηλιακό φως σε ηλεκτρική ενέργεια. Σε αυτήν τη διάταξη δεν υπάρχουν ενδιάμεσα στάδια, γίνεται απευθείας μετατροπή του φωτός σε ηλεκτρισμό. Η λειτουργία του βασίζεται στο φωτοβολταϊκό φαινόμενο, κατά το οποίο εμφανίζεται διαφορά δυναμικού στα άκρα μιας διόδου η οποία ακτινοβολείται με ηλιακή ενέργεια.



Αναλύοντας τον τρόπο λειτουργίας του έχουμε αρχικά μια απορρόφηση φωτονίων με ενέργεια μεγαλύτερη ή ίση από το ενεργειακό διάκενο του ημιαγωγού του ηλιακού κυττάρου. Στην ουσία απορροφάται μόνο ένα μέρος της ενέργειάς τους. Ένα απορροφώμενο φωτόνιο δίνει ένα ηλεκτρόνιο και μια οπή. Όσο διαρκεί η ακτινοβολία δημιουργείται μια περίσσεια φορέων μέσα στο ηλιακό κύτταρο. Οι φορείς δέχονται την επίδραση του ενσωματωμένου ηλεκτροστατικού πεδίου και στη συνέχεια τα ηλεκτρόνια εκτρέπονται στην περιοχή n, ενώ οι οπές εκτρέπονται στην περιοχή p. Έτσι δημιουργείται μια συσσώρευση φορτίων στις δύο περιοχές, η οποία οδηγεί σε ανάπτυξη διαφοράς δυναμικού ανάμεσα στους ακροδέκτες των δύο τμημάτων, όπως σχηματικά μπορούμε να δούμε στην εικόνα 3.1.3.1.



Εικόνα 3.1.3.1 : Σχηματοποίηση της συγκέντρωσης που δημιουργεί τη διαφορά δυναμικού

Τα ηλιακά κύτταρα αποτελούν διόδους ημιαγωγικών ενώσεων τύπου p-n με τη μορφή επίπεδης πλάκας, όπως φαίνεται στην εικόνα 3.1.3.2. Για την κατασκευή τους χρησιμοποιείται πυρίτιο το οποίο έχει αρχίσει να προσμιγνύεται ή και να αντικαθίσταται από άλλα ημιαγωγιμα υλικά όπως το αρσενικούχο γάλλιο και το νιτρίδιο του γαλλίου.



Εικόνα 3.1.3.2 : Ηλιακό κύτταρο

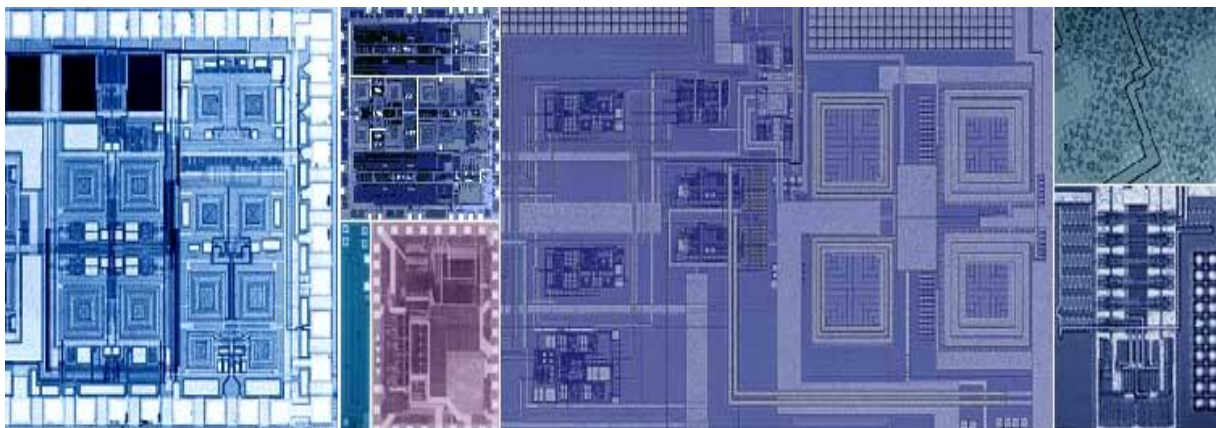
### 3.1.4 Κυκλώματα ενισχυτών μικροκυμάτων

Οι συσκευές που λειτουργούν στη ζώνη των μικροκυμάτων (στις συχνότητες από 300 έως 300.000 MHz), ονομάζονται συσκευές μικροκυμάτων. Συσκευές μικροκυμάτων είναι οι ενισχυτές ισχύος, μείκτες, ανιχνευτές, μικροκυματικές κεραίες, όπως αυτή της εικόνας 3.1.4.2, γραμμές μεταφοράς μικροκυμάτων κλπ.

Από τη σχεδίαση του κυκλώματος, αυτές οι συσκευές μπορούν να συνδυαστούν σε μία ποικιλία ειδικών λειτουργιών των κυκλωμάτων μικροκυμάτων, για παράδειγμα, η διάταξη αυτών των συσκευών αποτελείται, συνήθως, από πομπό, δέκτη, σύστημα κεραίας, οθόνη, κλπ. Και συνήθως χρησιμοποιούνται σε ραντάρ, όπως εκείνο της εικόνας 3.1.4.3, συστήματα ηλεκτρονικού πολέμου, συστήματα επικοινωνιών και ηλεκτρονικού εξοπλισμού.

Οι συσκευές μικροκυμάτων ξεχωρίζουν, ανάλογα με τα υλικά που χρησιμοποιούνται στις εξής κατηγορίες: στις συσκευές κενού μικροκυμάτων, στις συσκευές ημιαγωγών μικροκυμάτων, στις συσκευές ολοκληρωμένων κυκλωμάτων μικροκυμάτων (συσκευές στερεάς κατάστασης) και στις μονάδες ισχύος μικροκυμάτων. Οι συσκευές κενού μικροκυμάτων συμπεριλαμβάνουν τις λυχνίες οδεύοντος κύματος, το μάγνετρον, το BWO, το γυροτρόνιο, τον εικονικό ταλαντωτή καθόδου, κλπ.

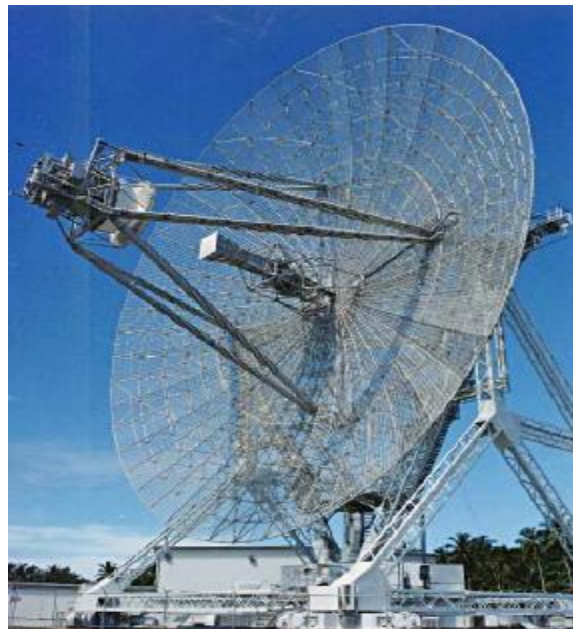
Οι συσκευές ημιαγωγών με μικροκύματα συμπεριλαμβάνουν τρανζίστορ μικροκυμάτων και διόδους μικροκυμάτων, με μικρό μέγεθος, μικρό βάρος και χαμηλή κατανάλωση ενέργειας. Ένα κύκλωμα μικροκυμάτων, όπως αυτό της εικόνας 3.1.4.1, κατασκευάζεται από ημιαγωγούς πλέον, κυρίως από αρσενικούχο γάλλιο ή νιτρίδιο του γαλλίου για να σχηματιστεί ένα λειτουργικό μπλοκ σε στερεά κατάσταση για κανονικά ραντάρ σειράς, για εξοπλισμό ηλεκτρονικού πολέμου, πυραύλους και συστήματα επικοινωνίας μικροκυμάτων και για υπέρ-υψηλής ταχύτητας υπολογιστή.



Εικόνα 3.1.4.1 : Κυκλώματα μικροκυμάτων από ημιαγώγιμα υλικά όπως και το GaN



**Εικόνα 3.1.4.2 :** Κεραία μικροκυμάτων



**Εικόνα 3.1.4.3 :** Ραντάρ μικροκυμάτων



### 3.1.5 Η τεχνολογία Blu-ray

Τα τελευταία χρόνια έχει γίνει μια δυναμική εξέλιξη στον τομέα της αποθήκευσης δεδομένων οπτικοακουστικού υλικού. Ο λόγος για τα Blu-raydiscs. Η εν λόγω τεχνολογία ήρθε να εξελίξει την αποθήκευση δεδομένων οπτικοακουστικού υλικού σε ποιότητα και χώρο. Με την ανάπτυξη της τεχνολογίας υψηλής ευκρίνειας, αποδείχθηκε ότι τα DVD δεν μπορούσαν να ανταπεξέλθουν στις απαιτήσεις του οπτικοακουστικού υλικού υψηλής ευκρίνειας. Αναδείχθηκε η ανάγκη ανάπτυξης μιας διαφορετικής μορφής οπτικού δίσκου. Η προσπάθεια κατασκευής ανάλογων μέσων δεν απέδιδε μέχρι την ανάπτυξη του νιτριδίου του γαλλίου. Όπου μπόρεσε να εκπνευθεί η μπλε ακτίνα που «διαβάζει» τον Blu-rayδίσκο και απεικονίζεται στην εικόνα 3.1.5.1.



Εικόνα 3.1.5.1 : Η κεφαλή εκπομπής μπλε ακτίνας για την ανάγνωση και χάραξη των Blu-ray δίσκων

Ο δίσκος Blu-ray (επίσης γνωστός ως BD) είναι οπτικός δίσκος υψηλής πυκνότητας για την αποθήκευση ψηφιακών πληροφοριών, συμπεριλαμβανομένου υψηλής ευκρίνειας βίντεο. Το όνομα του προέρχεται από το μπλε-ιώδες λέιζερ νιτριδίου του γαλλίου, που χρησιμοποιείται για να διαβάσει και να γράψει αυτόν τον τύπο οπτικού δίσκου.

Λόγω του πιο σύντομου μήκους κύματός του (405 nm), μπορούν να αποθηκευτούν περισσότερα στοιχεία σε έναν δίσκο Blu-ray απ' ό,τι στο πρότυπο του DVD, το οποίο χρησιμοποιεί κόκκινο λέιζερ (650 nm). Ένας μονής στρώσης δίσκος Blu-ray μπορεί να αποθηκεύσει 25 gigabytes, πάνω από πέντε φορές την ικανότητα αποθήκευσης ενός μονής στρώσης DVD που ανέρχεται στα 4,7 GB. Ένας δίσκος

Blu-ray διπλής στρώσης μπορεί να αποθηκεύσει 50 GB, σχεδόν έξι φορές την ικανότητα ενός DVD διπλής στρώσης που ανέρχεται στα 8,5 GB.

Το Blu-ray αναπτύχθηκε από την Ένωση Δίσκου Blu-ray (αγγλικά: Blu-ray Disc Association), μια ομάδα από επιχειρήσεις που αντιπροσωπεύουν τα ηλεκτρονικά είδη ευρείας κατανάλωσης, το υλικό υπολογιστών, και την παραγωγή ταινιών. Τα πρότυπα καλύπτονται από διάφορα διπλώματα ευρεσιτεχνίας που ανήκουν στις διάφορες επιχειρήσεις. Τον Μάρτιο του 2007, δεν είχε οριστικοποιηθεί ακόμα μια κοινή συμφωνία χορήγησης αδειών για όλα τα σχετικά διπλώματα ευρεσιτεχνίας. Μέχρι τις 20 Σεπτεμβρίου 2008, είχαν κυκλοφορήσει στην αγορά των Ηνωμένων Πολιτειών περισσότεροι από 850 τίτλοι ταινιών σε δίσκο Blu-ray και περισσότεροι από 500 τίτλοι στην Ιαπωνική αγορά.

### 3.1.6 Δίοδοι εκπομπής λέιζερ

Μια δίοδος λέιζερ, η οποία φαίνεται στην εικόνα 3.1.6.1, είναι στην ουσία μία ηλεκτρικά p-i-n δίοδος. Η ενεργός περιοχή της δίοδου λέιζερ είναι στην ενδογενή (i) περιοχή και οι φορείς, τα ηλεκτρόνια και οι οπές, εισέρχονται σε αυτήν την περιοχή από τις περιοχές n και p αντίστοιχα. Ενώ η αρχική έρευνα για τις δίοδους λέιζερ διεξήχθη σε απλές p-n δίοδους, όλα τα σύγχρονα λέιζερ χρησιμοποιούν την εφαρμογή διπλής ετεροδομής, όπου οι φορείς και τα φωτόνια περιορίζονται προκειμένου να μεγιστοποιήσουν τις πιθανότητές τους για τον ανά συνδυασμό και την παραγωγή φωτός.

Σε αντίθεση με μια κανονική δίοδο που χρησιμοποιείται στα ηλεκτρονικά, ο στόχος για μια δίοδο λέιζερ είναι ότι όλοι οι φορείς ανά συνδυάζονται στην περιοχή i, και παράγουν φως. Έτσι, οι δίοδοι λέιζερ είναι κατασκευασμένοι άμεσα από ημιαγωγούς “bandgap”. Η επιταξιακή δομή μιας δίοδου λέιζερ αναπτύσσεται χρησιμοποιώντας μία από τις τεχνικές ανάπτυξης κρυστάλλων, συνήθως ξεκινώντας από ένα n προσμιγμένο υπόστρωμα, αναπτύσσοντας το i νοθευμένο ενεργό στρώμα, που ακολουθείται από την p προσμιγμένη επένδυση, και ένα στρώμα επαφής. Το ενεργό στρώμα πιο συχνά αποτελείται από κβαντικά πηγάδια, τα οποία παρέχουν χαμηλότερο κατώφλι ρεύματος και υψηλότερη απόδοση.

Όταν υπάρχουν ένα ηλεκτρόνιο και μια οπή στην ίδια περιοχή, μπορεί να ενώνονται ή να εξουδετερώνονται με αποτέλεσμα να γίνεται αυθόρμητη εκπομπή, δηλαδή, το ηλεκτρόνιο μπορεί να καταλάβει εκ νέου την ενεργειακή κατάσταση της τρύπας, εκπέμποντας ένα φωτόνιο με ενέργεια ίση με τη διαφορά μεταξύ των ηλεκτρονίων και των οπών που συμμετέχουν. Σε μία συμβατική δίοδο ημιαγωγού, η ενέργεια που απελευθερώνεται από τον ανά συνδυασμό των ηλεκτρονίων και οπών εκπέμπονται ως φωνόνια, δηλαδή δονήσεις πλέγματος, παρά ως φωτόνια. Η αυθόρμητη αυτή εκπομπή, δίνει στη δίοδο λέιζερ παρόμοιες ιδιότητες με μια δίοδο εκπομπής φωτός LED.

Η διαφορά μεταξύ της εκπομπής φωτονίων λέιζερ ενός ημιαγωγού και της συμβατικής εκπομπής φωνονίων από διασταύρωση δίοδων ημιαγωγών έγκειται στη χρήση ενός διαφορετικού τύπου ημιαγωγού, ο ένας εκ των οποίων παρέχει τη

δυνατότητα για την εκπομπή φωτονίων εξ' αιτίας της ατομικής του δομής. Αυτοί οι ημιαγωγοί εκπομπής φωτονίων είναι οι λεγόμενοι "bandgap" ημιαγωγοί. Οι ιδιότητες του πυριτίου και του γερμανίου, που είναι ημιαγωγοί μονού στοιχείου, έχουν bandgaps που δεν ευθυγραμμίζονται με τον τρόπο που απαιτείται για να επιτραπεί η εκπομπή φωτονίων και δεν θεωρούνται "άμεσα". Άλλα υλικά, τα λεγόμενα ένωση/διασταύρωση ημιαγωγών, έχουν σχεδόν ταυτόσημες κρυσταλλικές δομές, όπως το πυρίτιο ή το γερμάνιο, αλλά χρησιμοποιούν εναλλασσόμενο καθεστώς δύο διαφορετικών ατομικών ειδών σαν σκακιέρα ως πρότυπο για να σπάσει η συμμετρία.

Η μετάβαση μεταξύ των υλικών στο εναλλασσόμενο σχέδιο δημιουργεί την κρίσιμη «άμεσου διάκενου ζώνης (bandgap)» ιδιότητα. Το αρσενικούχο γάλλιο, το φωσφορούχο ίνδιο, το αντιμονιούχο γάλλιο, και το νιτρίδιο του γαλλίου είναι όλα τα παραδείγματα της ένωσης ημιαγωγών υλικών που μπορούν να χρησιμοποιηθούν για να δημιουργήσουν διόδους που εκπέμπουν ακτίνα laser.



Εικόνα 3.1.6.1 : Δίοδοι εκπομπής λέιζερ

### 3.1.7 Δίοδοι εκπομπής φωτός (LED)

Δίοδος Εκπομπής Φωτός, (LED, Light Emitting Diode), αποκαλείται ένας ημιαγωγός ο οποίος εκπέμπει φωτεινή ακτινοβολία στενού φάσματος όταν του παρέχεται μία ηλεκτρική τάση κατά τη φορά ορθής πόλωσης. Το χρώμα του φωτός που εκπέμπεται εξαρτάται από την χημική σύσταση του ημιαγωγίμου υλικού που

χρησιμοποιείται, και μπορεί να είναι υπεριώδεις, ορατό ή υπέρυθρο. Στην εικόνα 3.1.7.1 μπορούμε να δούμε τις διόδους εκπομπής φωτός του ορατού φάσματος. Το μήκος κύματος του φωτός που εκπέμπεται, και, κατά συνέπεια, το χρώμα του, εξαρτάται από το χάσμα ενέργειας των υλικών, τα οποία χρησιμοποιούνται για την δημιουργία του περάσματος p-n, όπου: p είναι υλικό νοθευμένο με αποδέκτες και n είναι υλικό νοθευμένο με δότες.

Η βασική αρχή των LED είναι μια επαφή p-n η οποία πολώνεται ορθά για να εγχέει ηλεκτρόνια και οπές μέσα στις p- και n- πλευρές αντίστοιχα. Το εγχεόμενο φορτίο μειονότητας επανασυνδέεται με το φορτίο πλειονότητας στην περιοχή απογύμνωσης ή στην ουδέτερη περιοχή. Σε ημιαγωγούς αμέσου διάκενου η επανασύνδεση οδηγεί σε εκπομπή φωτός αφού η ακτινοβόλα επανασύνδεση κυριαρχεί σε υλικά υψηλής ποιότητας. Σε υλικά έμμεσου χάσματος, η απόδοση εκπομπής φωτός είναι αρκετά φτωχή και οι περισσότερες από τις διαδρομές επανασύνδεσης είναι μη ακτινοβόλες με παραγωγή θερμότητας μάλλον παρά φωτός.

Οι εφαρμογές των LED μπορούν να χωριστούν σε τρεις κατηγορίες. Η πρώτη κατηγορία είναι η ορατή απεικόνιση, όπου το φως κατευθύνεται περισσότερο ή λιγότερο στο ανθρώπινο μάτι για να μεταφέρει ένα μήνυμα ή μια έννοια. Δηλαδή στους πίνακες αποτύπωσης και στους σηματοδότες.

Η χαμηλή κατανάλωση ενέργειας, το χαμηλό κόστος συντήρησης και το μικρό μέγεθος των σημερινών LED έχει οδηγήσει στην εφαρμογή τους σε μια πληθώρα εγκαταστάσεων και εξοπλισμού για την ορατή απεικόνιση. Τοποθετούνται σε μεγάλες επιφάνειες για την αποτύπωση δεδομένων και μηνυμάτων στα στάδια, στους σταθμούς των τρένων και των λεωφορείων, στα αεροδρόμια, στα λιμάνια, στους δρόμους ως πινακίδες ή ως σηματοδότες, στις συναυλίες. Εξ' αιτίας της μεγάλης διάρκειας ζωής τους και των μικρών χρόνων απόκτησης, τα LED χρησιμοποιούνται στην αυτοκινητοβιομηχανία ως σηματοδότες φρένων και στροφής (φλας). Έτσι αυξάνεται και ο παράγοντας ασφάλειας που μπορεί να παρέχει ένα όχημα αφού ο οδηγός έχει στην διάθεσή του περισσότερο χρόνο αντίδρασης.

Δεύτερη κατηγορία είναι η φωταγώγηση, όπου το φως από τα LED ανακλάται από αντικείμενα για να μπορούν αυτά να είναι ορατά. Είναι κατάλληλα, δηλαδή, για φωτισμό.

Με την εξέλιξη των LED υψηλής απόδοσης και ισχύος έγινε δυνατή η χρήση τους για φωτισμό και φωταγώγηση. Τα LED χρησιμοποιούνται στα φώτα των δρόμων ή σε αρχιτεκτονικές κατασκευές που απαιτείται φωτισμός με εναλλαγή χρωμάτων. Επίσης χρησιμοποιούνται και ως κύρια φώτα στα αυτοκίνητα, στις μοτοσυκλέτες και στα ποδήλατα.

Επίσης τα LED χρησιμοποιούνται όλο και περισσότερο στον φωτισμό ενυδρείων. Μπορούν να παρέχουν το απαιτούμενο φως με μικρότερη εκπομπή θερμότητας και έτσι βοηθούν στην συντήρηση της βέλτιστης θερμοκρασίας του ενυδρείου. Επειδή μπορούν να παράγουν φως με συγκεκριμένο μήκος κύματος είναι ιδανικά για να παρέχουν ένα συγκεκριμένο χρώμα-φάσμα για τον χρωματισμό των κοραλλιών, των ψαριών, των ανεμώνων κ.α. Τα LED είναι ακόμα ιδανικά για χρήση στις τηλεοράσεις, στους φορητούς υπολογιστές και στους προβολείς (projectors) DLP.

Η Τρίτη κατηγορία είναι η παράγωγή φωτός για μέτρηση και αλληλεπίδραση με διαδικασίες που δεν γίνονται αντιληπτές από το ανθρώπινο μάτι. Για τις μη ορατές εφαρμογές, δηλαδή.

Το φως έχει και άλλες χρήσεις εκτός από την όραση. Τα LED χρησιμοποιούνται για μερικές από αυτές της εφαρμογές. Αυτές χωρίζονται σε τρεις κατηγορίες: i) επικοινωνία ii) αισθητήρες iii) αλληλεπίδραση φωτός με την ύλη.

Το φως των LED μπορεί να τροποποιηθεί πολύ γρήγορα και έτσι χρησιμοποιείται στις οπτικές ίνες και στις οπτικές επικοινωνίες ελεύθερου χώρου. Αυτές περιλαμβάνουν τα τηλεχειριστήρια των τηλεοράσεων και των βίντεο, όπου χρησιμοποιούνται τα LED υπερύθρου. Οι οπτομονωτές χρησιμοποιούν ένα LED και μια φωτοδίοδο ή ένα φωτοτρανζίστορ για να παρέχουν ένα «μονοπάτι» σήματος με ηλεκτρική μόνωση μεταξύ δυο διαδρομών. Αυτοί είναι αρκετά χρήσιμοι στον ιατρικό εξοπλισμό, όπου τα σήματα από τον αισθητήρα χαμηλής τάσης που είναι συνδεδεμένος με τον ανθρώπινο οργανισμό πρέπει να είναι ηλεκτρικά μονωμένα.

Πολλά συστήματα αισθητήρων χρησιμοποιούν το φως ως πηγή σήματος. Τα LED είναι ιδανική πηγή για να αντεπεξέλθει στις απαιτήσεις των αισθητήρων. Χρησιμοποιούνται στους αισθητήρες κίνησης ή στις οθόνες αφής εντοπίζοντας το φως που ανακλάται από το δάχτυλο ή την ακίδα.

Μια άλλη χρήση των LED είναι στις καλλιέργειες φυτών κυρίως γιατί είναι ενεργειακά αποδοτικά, παράγουν θερμότητα που δεν είναι ικανή να τα καταστρέψει γιατί είναι μικρή, και μπορούν να παρέχουν την βέλτιστη οπτική συχνότητα για την ανάπτυξή τους.

Η πλήρης ανάπτυξη των διόδων εκπομπής φωτός έγινε δυνατή με την ανακάλυψη των ιδιοτήτων του νιτριδίου του γαλλίου που οδήγησε στη δημιουργία της μπλε διόδου εκπομπής φωτός.



**Εικόνα 3.1.7.1 :** Δίοδοι εκπομπής ορατού φωτός

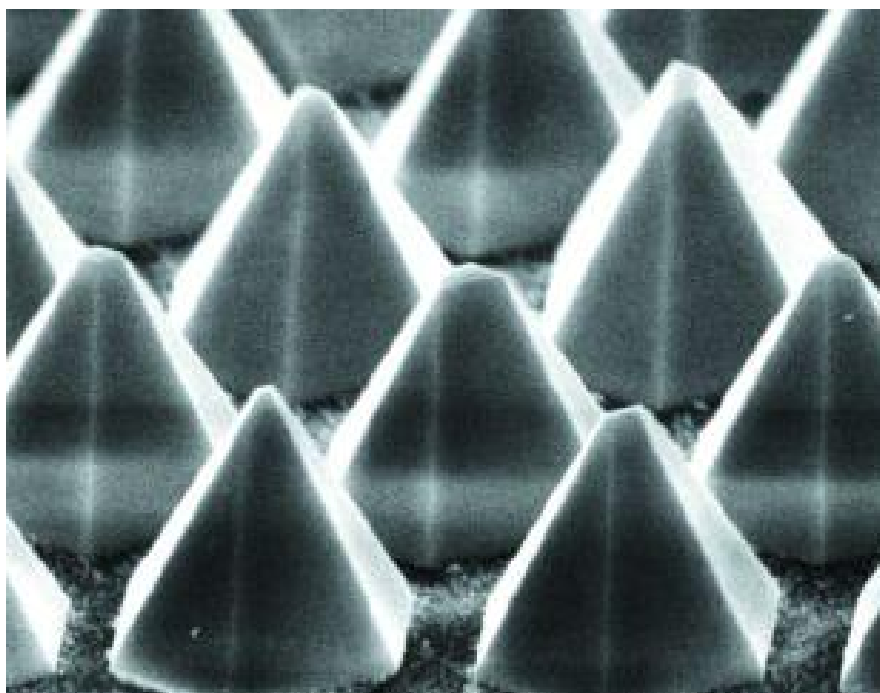


## 3.2 ΤΡΟΠΟΣ ΚΑΤΑΣΚΕΥΗΣ ΜΟΝΟΣΤΡΩΜΑΤΙΚΟΥ ΦΥΛΛΟΥ GaN

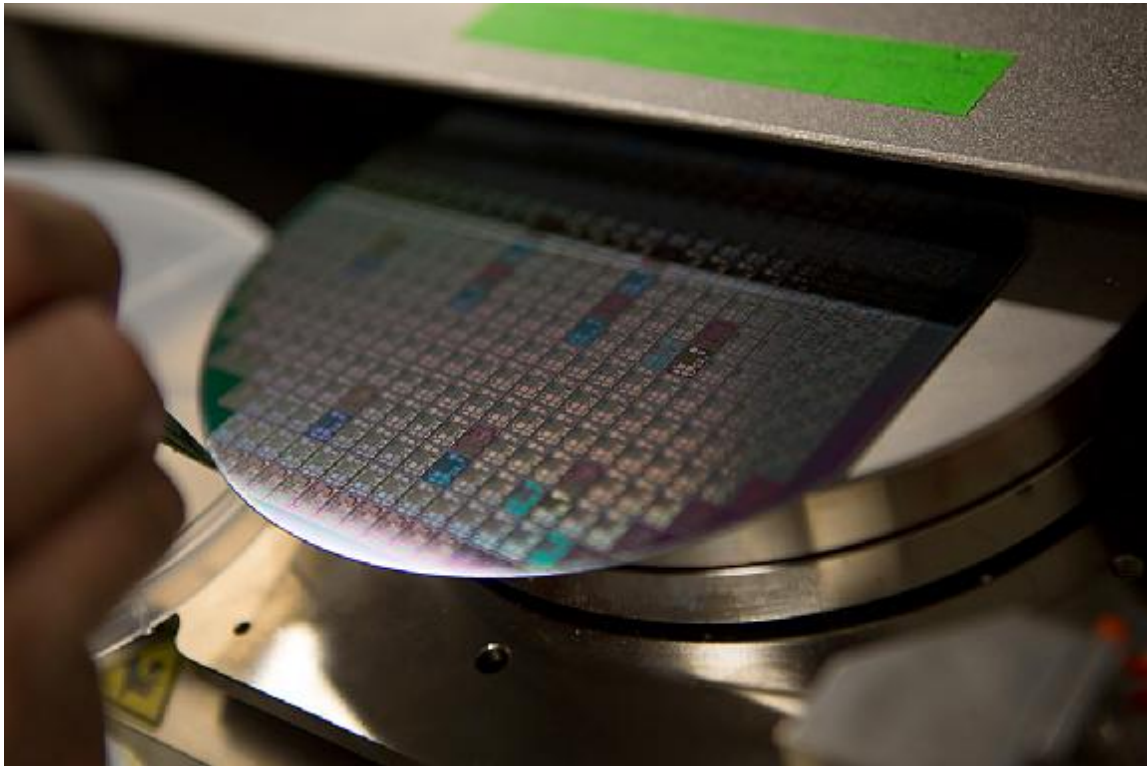
### 3.2.1 ΓΕΝΙΚΑ ΓΙΑ ΤΟΥΣ ΤΡΟΠΟΥΣ ΚΑΤΑΣΚΕΥΗΣ

Μια μέθοδος για την κατασκευή μίας ομάδας νιτριδίου του γαλλίου σύνθετων ημιαγωγών, που περιλαμβάνει τα στάδια της καλλιέργειας της πρώτης ομάδας νιτριδίου του γαλλίου επί ενός υποστρώματος με την ένωση της πρώτης ομάδας με άλλους ημιαγωγούς σε ένα μοτίβο τύπου νησί όπως ένα μοτίβο τελεία, ένα μοτίβο ριγέ, ή ένα μοτίβο πλέγματος έτσι ώστε το υπόστρωμα να είναι εκτεθειμένα τμήματα τα οποία να σχηματίζονται με ένα διασκορπισμένο τρόπο και ανάπτυξη μιας δεύτερης ομάδας νιτριδίου του γαλλίου σύνθετων ημιαγωγών που προκαλεί επιταξιακή ανάπτυξη από ένα νησί ή νησιά της πρώτης ομάδας που χρησιμεύουν ως πυρήνες (σπόροι), αλλά η οποία δεν προκαλεί επιταξιακή αύξηση από τα τμήματα του υποστρώματος που εκτίθενται, έτσι ώστε η δεύτερη ομάδα να σχηματίζεται από την πλευρική ανάπτυξη πάνω από τα εν λόγω τμήματα υποστρώματος. Η εικόνα 3.2.1.1 μας δείχνει ένα στιγμιότυπο από την ανάπτυξη νιτριδίου του γαλλίου.

Για την παρασκευή μιας ένωσης ημιαγωγού νιτριδίου του γαλλίου σύμφωνα με την προηγούμενη παράγραφο, το υπόστρωμα μπορεί να είναι φτιαγμένο από ζαφείρι, πυρίτιο, ή καρβίδιο πυριτίου, όπως μπορούμε να δούμε στην εικόνα 3.2.1.2.



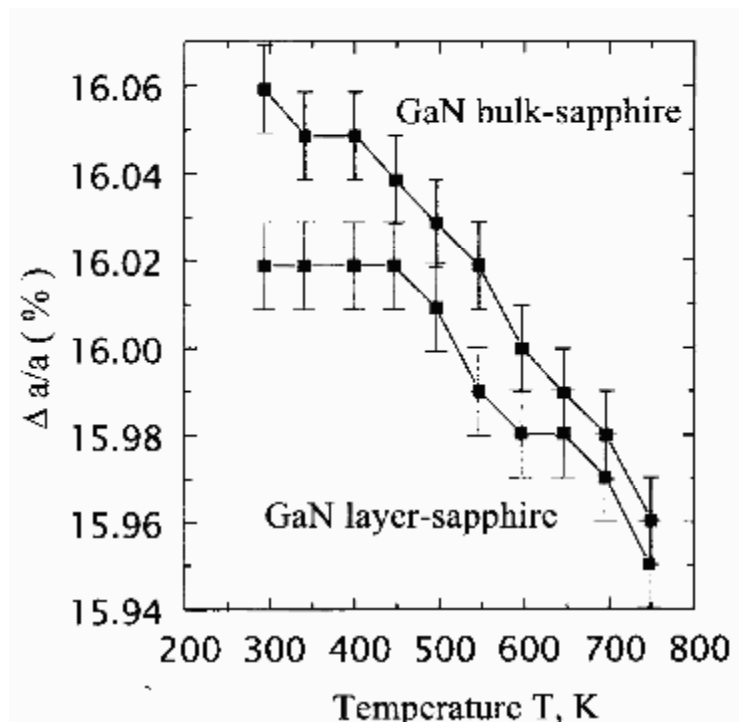
**Εικόνα 3.2.1.1:** Στην αρχή κάθε εξάγωνο είναι ξεχωριστό, αλλά η ανάπτυξη συνεχίζεται και τα εξάγωνα αρχίζουν να συγχωνεύονται δημιουργώντας λάκκους στις βάσεις.



**Εικόνα 3.2.1.2:** Μια πλακέτα με εκατοντάδες από κομμάτια νιτριδίου του γαλλίου.

### **3.2.2 ΕΠΙΤΑΞΙΚΗ ΑΝΑΠΤΥΞΗ ΝΙΤΡΙΔΙΟΥ ΤΟΥ ΓΑΛΛΙΟΥ ΣΕ ΖΑΦΕΙΡΙ ΚΑΙ SiC**

Η ετεροεπιταξιακή ανάπτυξη των λεπτών ταινιών νιτριδίου του γαλλίου από μεταλλοργανική χημική εναπόθεση ατμών σε επιφάνειες από ζαφείρι και υποστρώματα SiC που περιέχουν ένα ενδιάμεσο ρυθμιστικό στρώμα αναθεωρείται. Τα δύο βήματα της διαδικασίας ανάπτυξης του GaN στην επιφάνεια του ζαφειρίου, δηλαδή της νιτριδίωσης, και της απόπτωσης της χαμηλής θερμοκρασίας στρώματος πυρήνα περιγράφονται στο πλαίσιο της επίδρασης τους στην πολικότητα της τελικής επιφάνειας του νιτριδίου του γαλλίου. Οι αρχές της εξάρθρωσης του GaN σε ταινίες που καλλιεργούνται σε ζαφείρια αναφέρονται επίσης. Οι τεχνικές προετοιμασίας της επιφάνειας και στρώματα buffer που επηρεάζουν τους ελαττωματικούς πληθυσμούς των ταινιών GaN που καλλιεργούνται σε SiC είναι επίσης λεπτομερείς. Η επίδραση της επιφάνειας του υποστρώματος και το ρυθμιστικό διάλυμα στρώμα / GaN της μικροδομής εξέλιξη τονίζεται. Μια σύντομη επισκόπηση συνοψίζει την πλευρική υπερανάπτυξη τεχνικές που χρησιμοποιούνται για να επιτευχθεί μειωμένη πυκνότητα αποδιάρθρωσης στο GaN παρουσιάζεται επίσης. Στην εικόνα 3.2.2.1 μπορούμε να δούμε πως η θερμοκρασία εξαρτάται από το παράλληλο πλέγμα σε αναντιστοιχία μεταξύ του στρώματος GaN και του υποστρώματος ζαφειρίου.

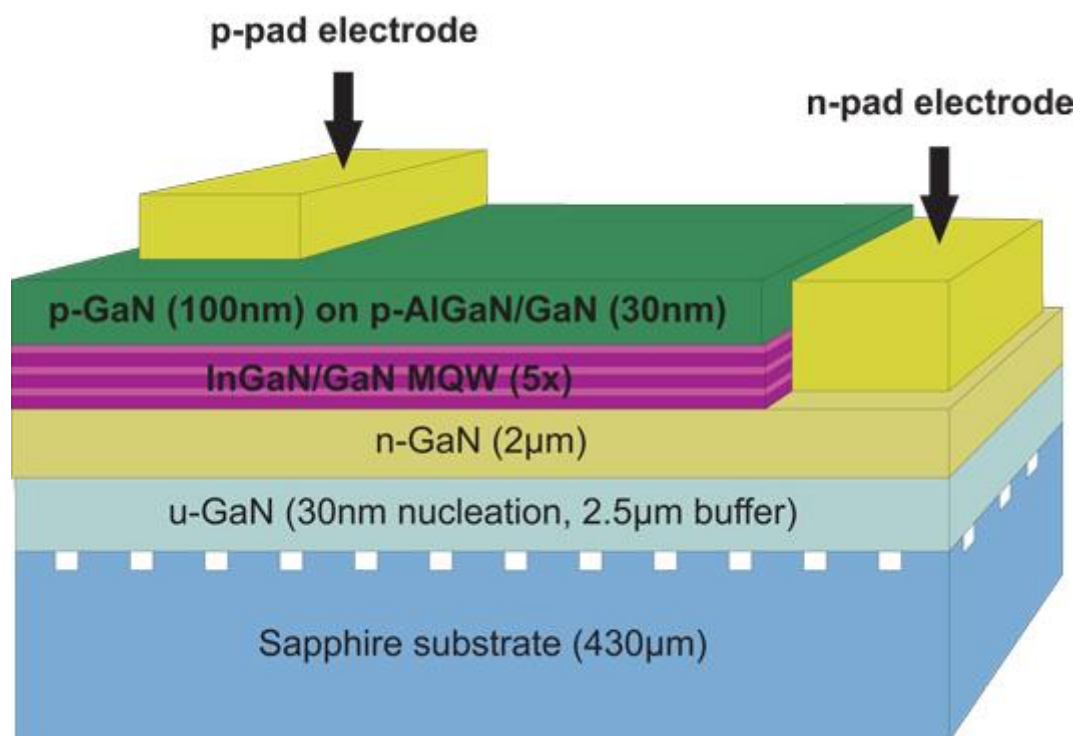


**Εικόνα 3.2.2.1:** Η θερμοκρασία εξαρτάται από το παράλληλο πλέγμα σε αναντιστοιχία μεταξύ του στρώματος GaN και του υποστρώματος ζαφείριου.

Τα υλικά από νιτρίδιο υπόσχονται πολλά για μια ευρεία ποικιλία σε οπτοηλεκτρονικές εφαρμογές μικροηλεκτρονικής. Ωστόσο, ετεροδομές που περιέχουν αυτά τα υλικά κρυσταλλώνονται στη δομή τύπου βουρτσίτη και κατέχουν τόσο μεγάλη τάση που προκαλεί πιεζοηλεκτρική πόλωση μεταξύ υλικών διαφορετικής σύνθεσης και φυσικά εμφανίζονται αυθόρμητες πολώσεις στο εσωτερικό κάθε υλικού. Η συνολική πόλωση παράγει ηλεκτροστατικά πεδία που μειώνουν την αποτελεσματικότητα του ανασυνδυασμού των ηλεκτρονίων-οπών και της ισχύος του ταλαντωτή καθώς και τις εκπομπές φωτός ανάλογων συσκευών. Ένα πρόσθετο εμπόδιο για την περαιτέρω πραγματοποίηση αυτών των υλικών είναι η έλλειψη μη-γηγενών υποστρωμάτων. Ως αποτέλεσμα, λεπτές μεμβράνες νιτρίδιου που αναπτύσσονται με μεταλλοργανική χημική εναπόθεση ατμών (MOCVD) στο ζαφείρι (Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>) ή στο SiC συνήθως περιέχουν παρόμοιες πυκνότητες.

Ετεροεπιταξιακή ανάπτυξη της ποιοτικής συσκευής ταινιών νιτρίδιου του γαλλίου και στα δύο υποστρώματα επιτυγχάνεται μέσω της διαδικασίας MOCVD δύο σταδίων. Όταν χρησιμοποιείται το ζαφείρι ως υπόστρωμα, όπως απεικονίζεται στην εικόνα 3.2.2.2, είναι αρχικά χαραγμένη στο H<sub>2</sub>. Είτε με το AlN είτε με το GaN με τη διαδικασία της πυρήνωσης σχηματίζονται στρώματα τα οποία εναποτίθενται σε χαμηλή θερμοκρασία πριν από την απόπτωση, κρυστάλλωση και η επακόλουθη ανάπτυξη του GaN ταινιών σε υψηλότερες θερμοκρασίες. Η ανάπτυξη του GaN ταινίες στο SiC έχει επίσης διευκολυνθεί από στρώματα που σχηματίζουν πυρήνα χαμηλής θερμοκρασίας, ωστόσο, η συμβατική οδός σε αυτήν την διαδικασία περιλαμβάνει την αρχική απόθεση είτε ενός AlN ή Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N ρυθμιστικό στρώμα σε υψηλές θερμοκρασίες. Μία επιπλέον αντίθεση στην επιταξιακή ανάπτυξη του GaN

προκύπτει από τη διαφορά στην κρυσταλλογραφία του υποστρώματος. Επειδή το ζαφείρι είναι ένα μη-πολικό κρύσταλλο, το GaN μπορεί να αυξηθεί κατά μήκος της κατεύθυνσης από την επιφάνεια αυτού του υποστρώματος. Το τελευταίο αποτέλεσμα το σχηματισμό της αναστροφής περιοχής (IDs) (δηλαδή σε περιοχές της μικτής πόλωση) GaN και επιδεινώνει το προαναφερθέντα προβλήματα που σχετίζονται με την πολικότητα. Αν και οι διαδρομή για την διαδικασία ανάπτυξης του GaN ταινιών με την βοήθεια των ζαφείριων και SiC είναι διαφορετική, η πυκνότητα ονομαστικά είναι  $109-1010 \text{ cm}^{-2}$  και για τα δύο υλικά.



Εικόνα 3.2.2.2:Επιταξιακή δομή στρώματος του νιτριδίου του γαλλίου.

### 3.2.3 ΑΝΑΠΤΥΞΗ ΝΙΤΡΙΔΙΟΥ ΤΟΥ ΓΑΛΛΙΟΥ ΜΕ ΔΙΗΛΕΚΤΡΙΚΟ ΣΤΡΩΜΑ

Οι εφευρέτες έχουν βρει ότι η κατεργασία ενός υποστρώματος με απόθεση ενός κατάλληλου διηλεκτρικού, όπως φαίνεται και στην εικόνα 3.2.3.1, που ακολουθείται από απόθεση νιτριδίου του γαλλίου, η οποία είναι από θερμική ανόπτηση, προκαλεί το σχηματισμό των νησιών νιτριδίου του γαλλίου που είναι ουσιαστικά άνευ ελαττωμάτων.

Η συνένωση αυτών των νησιών που προκαλείται από τα αποτελέσματα θερμικής επεξεργασίας ενός στρώματος νιτριδίου του γαλλίου άριστης ποιότητας. Η εφεύρεση αναφέρεται κατά πρώτον σε μια μέθοδο για την παραγωγή ενός στρώματος νιτριδίου του γαλλίου (GaN), που χαρακτηρίζεται από το ότι περιλαμβάνει

την εναπόθεση ενός υποστρώματος από ένα διηλεκτρικό στρώμα που λειτουργεί ως μάσκα και την εκ νέου ανάπτυξη του νιτριδίου του γαλλίου υπό συνθήκες επιταξιακής απόθεσης έτσι ώστε να προκληθεί η απόθεση χαρακτηριστικών νιτριδίου του γαλλίου και ανισότροπη και πλευρική ανάπτυξη των εν λόγω χαρακτηριστικών, η πλευρική ανάπτυξη συνεχίζεται μέχρι την συνένωση των διαφόρων χαρακτηριστικών. Μπορούν επίσης να χρησιμοποιηθούν ο όρος «νησίδες» αντί για «χαρακτηριστικά». Το υπόστρωμα έχει γενικά ένα πάχος από μερικές εκατοντάδες μικρόμετρα (συγκεκριμένα, περίπου 200 μικρόμετρα) και μπορούν να επιλεγούν από την ομάδα που αποτελείται από ζαφείρι,  $ZnO$ ,  $6H-SiC$ ,  $LiAlO_2$ ,  $LiGaO_2$  και  $MgAl_2O_4$ . Το υπόστρωμα είναι κατά προτίμηση επεξεργασία εκ των προτέρων από την εναζώτωση.

Κατά προτίμηση, το διηλεκτρικό είναι του τύπου  $Si_xNy$ , ειδικά  $Si_3N_4$ .  $SiO_2$  Μπορεί επίσης να αναφερθεί, αλλά θα μπορούσαν να χρησιμοποιηθούν άλλα γνωστά διηλεκτρικά. Η πραγματοποίηση της διαδικασίας με διηλεκτρικό γίνεται σε θάλαμο ανάπτυξης νιτριδίου του γαλλίου από σιλάνιο και αμμωνία. Κατά προτίμηση, το αέριο φορέας είναι ένα μίγμα  $N_2 / H_2$ .

Σύμφωνα με μια πρώτη εκδοχή, το διηλεκτρικό στρώμα είναι μια ατομική μονοστρωματική ή ένα κάλυμμα της τάξης του ατομικού επιπέδου.

Στη συνέχεια, της επιταξιακής ανάπτυξης στο υπόστρωμα συνεχίζεται χρησιμοποιώντας OMVPE. Εξετάζεται σε ένα ηλεκτρονικό μικροσκόπιο υψηλής ανάλυσης που δείχνει ότι η πυκνότητα του GaN εξαρθώνεται στα συνηθισμένα χαρακτηριστικά γνωρίσματα, η οποία έχει ως εκ τούτου καλλιεργηθεί χωρίς ετεροεπιταξιακά στελέχη, είναι πολύ μικρότερη από αυτή που παράγεται από την άμεση απόθεση νιτριδίου του γαλλίου πάνω στο υπόστρωμα. Έτσι, η ανάπτυξη GaN, η οποία λαμβάνει χώρα πλευρικά σε κατεύθυνση σε μια διηλεκτρική επιφάνεια, και ως εκ τούτου χωρίς να υπάρχει επιταξιακή σχέση με το υπόστρωμα ζαφειρίου, που οδηγεί σε πολύ καλύτερη ποιότητα κρυστάλλου GaN από τις συνηθισμένες διεργασίες. Αφού τα χαρακτηριστικά έχουν ληφθεί, η ανάπτυξη μπορεί να συνεχιστεί, είτε χρησιμοποιώντας OMVPE ή HVPE. Η ανάπτυξη γίνεται πλαγίως, μέχρι τη συνένωση των νησιών. Αυτές οι επιφάνειες που προκύπτουν από τη συνένωση των νησιών παρουσιάζουν κρύσταλλο με ποιότητα ανώτερη από τα στρώματα που καλλιεργούνται εποταξιακά σε ζαφείρια.

Η εναπόθεση νιτριδίου του γαλλίου γενικά διεξάγεται σε δύο στάδια. Ένα πρώτο βήμα, σε θερμοκρασία περίπου  $600^\circ C$  για την εναπόθεση ενός ρυθμιστικού στρώματος, από την οποία θα προκύψουν τα χαρακτηριστικά GaN, τότε σε υψηλότερη θερμοκρασία (περίπου  $1000-1100^\circ C$ ) για την ανάπτυξη ενός στρώματος από τα χαρακτηριστικά.

Σύμφωνα με μια δεύτερη εκδοχή, μία διαδικασία που χαρακτηρίζεται από το ότι το διηλεκτρικό στρώμα είναι χαραγμένο, έτσι ώστε να οριστούν ανοίγματα και να εκθέσει τις περιοχές του υποστρώματος και το νιτρίδιο του γαλλίου καλλιεργείται υπό επιταξιακές συνθήκες απόθεσης για το χαραγμένο υπόστρωμα, έτσι ώστε να προκληθεί η εναπόθεση των χαρακτηριστικών νιτριδίου του γαλλίου επί των αντικριστών περιοχών με την ανισότροπη και πλευρική ανάπτυξη των εν λόγω

χαρακτηριστικών. Η πλευρική ανάπτυξη συνεχίζεται μέχρι συνένωση των διαφόρων χαρακτηριστικών.

Σύμφωνα με μία τρίτη εκδοχή, μία διεργασία για την παραγωγή ενός επιταξιακού στρώματος νιτριδίου του γαλλίου (GaN), που περιλαμβάνει την εναπόθεση ενός λεπτού στρώματος νιτριδίου του γαλλίου επί ενός υποστρώματος που χαρακτηρίζεται από το ότι: ένα διηλεκτρικό στρώμα εναποτίθεται επί του εν λόγω λεπτού στρώματος νιτριδίου του γαλλίου και το διηλεκτρικό στρώμα χαράσσεται έτσι ώστε να ορίζει ανοίγματα και να εκθέσει τις περιοχές του στρώματος νιτριδίου του γαλλίου που τις προβάλλει. Το νιτριδίου του γαλλίου καλλιεργείται υπό επιταξιακές συνθήκες απόθεσης, με χαραγμένο υπόστρωμα, έτσι ώστε να προκληθεί η εναπόθεση των χαρακτηριστικών νιτριδίου του γαλλίου επί των αντικριστών περιοχών και την ανισότροπη και πλευρική ανάπτυξη των εν λόγω χαρακτηριστικών. Η διαδικασία είναι αξιοσημείωτη κατά το ότι περιορίζει την πυκνότητα των ελαττωμάτων που παράγονται από την αναντιστοιχία μεταξύ της παραμέτρου GaN και του υποστρώματος χρησιμοποιώντας μια μέθοδο η οποία συνδυάζει εντοπισμένη επιταξία, την ανάπτυξη και την ανισοτροπική πλευρική ανάπτυξη, περιορίζοντας έτσι τα επιταξιακά στελέχη

Σύμφωνα με τη δεύτερη υλοποίηση, ένα διηλεκτρικό λίγα νανόμετρα σε πάχος εναποτίθεται στον θάλαμο ανάπτυξης. Στη συνέχεια, με φωτολιθογραφία, οι οπές ορίζονται στο διηλεκτρικό στρώμα, εκθέτοντας έτσι περιοχές σε διάσταση μικρόμετρου της επιφάνειας του υποστρώματος. Καλλιέργεια για το χαραγμένο υπόστρωμα διεξάγεται χρησιμοποιώντας OMVPE.

Το υπόστρωμα έχει γενικά ένα πάχος από μερικές εκατοντάδες μικρόμετρα (συγκεκριμένα, περίπου 200 μικρόμετρα) και μπορούν να επιλέγονται από την ομάδα που αποτελείται από ζαφείρι,  $ZnO$ ,  $6H-SiC$ ,  $LiAlO_2$ ,  $LiGaO_2$  και  $MgAl_2O_4$ . Κατά προτίμηση, το διηλεκτρικό είναι του τύπου  $SixNy$ , ειδικά  $Si_3N_4$ .  $SiO_2$ . Μπορεί επίσης να αναφερθεί ότι θα μπορούσαν να χρησιμοποιηθούν άλλα γνωστά διηλεκτρικά. Το διηλεκτρικό αποτίθεται στο θάλαμο ανάπτυξης νιτριδίου του γαλλίου από σιλάνιο και αμμωνία απευθείας στο υπόστρωμα, όπως περιγράφεται παραπάνω.

Σύμφωνα με την τρίτη υλοποίηση, το νιτρίδιο του γαλλίου πρώτον καλλιεργείται επιταξιακά επί του υποστρώματος με OMVPE. Η εναπόθεση του διηλεκτρικού λίγα νανόμετρα σε πάχος στη συνέχεια διεξάγεται στο θάλαμο ανάπτυξης. Στη συνέχεια, με φωτολιθογραφία, οι οπές ορίζονται στο διηλεκτρικό στρώμα, εκθέτοντας έτσι μικρομετρικές περιοχές της επιφάνειας νιτριδίου του γαλλίου.

Η ανάπτυξη για το χαραγμένο υπόστρωμα διεξάγεται χρησιμοποιώντας OMVPE. Το υπόστρωμα έχει γενικά ένα πάχος από μερικές εκατοντάδες μικρόμετρα (συγκεκριμένα, περίπου 200 μικρόμετρα) και μπορούν να επιλέγονται από την ομάδα που αποτελείται από ζαφείρι,  $ZnO$ ,  $6H-SiC$ ,  $LiAlO_2$ ,  $LiGaO_2$  και  $MgAl_2O_4$ .

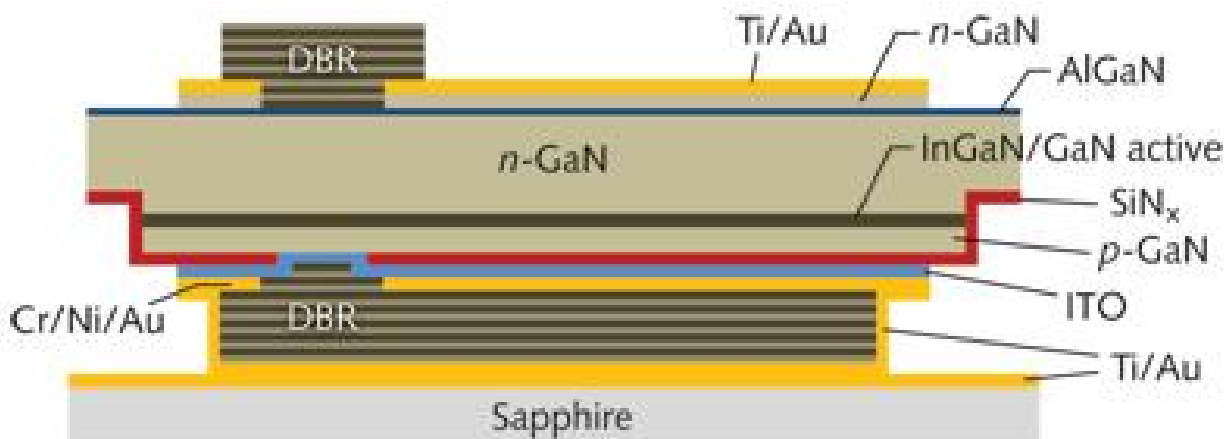
Κατά προτίμηση, το διηλεκτρικό είναι του τύπου  $SixNy$ , ειδικά  $Si_3N_4$ .  $SiO_2$ . Μπορεί επίσης να αναφερθεί, ότι θα μπορούσαν να χρησιμοποιηθούν άλλα γνωστά διηλεκτρικά. Το διηλεκτρικό αποτίθεται στο θάλαμο ανάπτυξης νιτριδίου του γαλλίου

από σιλάνιο και αμμωνία αμέσως μετά την εναπόθεση νιτριδίου του γαλλίου. Η χάραξη του διηλεκτρικού είναι κυρίως πραγματοποιείται με φωτολιθογραφία.

Διακριτά ανοίγματα ή ανοίγματα σε μορφή λωρίδων, ορίζονται στο στρώμα νιτριδίου του πυριτίου, εκθέτοντας έτσι την επιφάνεια νιτριδίου του γαλλίου σε ένα μικρομετρικό χαρακτηριστικό. Τα ανοίγματα είναι κατά προτίμηση κανονικού πολυγώνου, ειδικά αυτά του εξαγωνικού σχήματος. Πλεονεκτικά, τα διακριτά ανοίγματα είναι εγγεγραμμένα σε ένα κύκλο ακτίνας μικρότερης των 10 μικρομέτρων, ενώ τα ανοίγματα σε μορφή λωρίδες έχουν πλάτος μικρότερο από 10 μικρόμετρα, το μήκος των λωρίδων που περιορίζεται μόνο από το μέγεθος του υποστρώματος. Η απόσταση των ανοιγμάτων είναι κανονική και πρέπει να επιτρέπουν την εντόπιση της επίταξης του νιτριδίου του γαλλίου που ακολουθείται από ανισότροπη και πλευρική ανάπτυξη.

Σε γενικές γραμμές, το τμήμα της εκτεθειμένης περιοχής του υποστρώματος ή του νιτριδίου του γαλλίου με τη συνολική επιφάνεια του υποστρώματος είναι μεταξύ 5 και 80%, κατά προτίμηση μεταξύ 5 και 50%. Έχει βρεθεί ότι τα άτομα γαλλίου δεν εναποτίθενται επί του διηλεκτρικού και ότι, με άλλα λόγια, αυτή η χαραγμένη διηλεκτρική επιφάνεια επέτρεψε στα άτομα γαλλίου να επικεντρωθούν στις οπές.

Τέλος, η ανάπτυξη του υποστρώματος πραγματοποιείται χρησιμοποιώντας OMVPE. Εξετάζεται στο μικροσκόπιο υψηλής ανάλυσης ηλεκτρονίων που δείχνει ότι η πυκνότητα GaN εξαρθώνεται στις τακτικές χαρακτηριστικών ή νησιών, η οποία είναι πολύ μικρότερη, στο πρώτο στρώμα GaN. Έτσι, η ανάπτυξη GaN, η οποία λαμβάνει χώρα πλευρικά στις κατευθύνσεις σε μια διηλεκτρική επιφάνεια, και ως εκ τούτου χωρίς να έχει επιταξιακή σχέση με το υπόστρωμα ζαφείρι, οδηγεί σε πολύ καλύτερη ποιότητα κρυστάλλου GaN από τις συνηθισμένες διεργασίες. Μετά την απόκτηση μιας σειράς από συνηθισμένα χαρακτηριστικά γνωρίσματα, η ανάπτυξη μπορεί να συνεχιστεί, είτε από OMVPE ή HVPE. Διεξάγεται πλευρικά, μέχρι συνένωση των νησιών. Αυτές οι επιφάνειες που προκύπτουν από τη συνένωση των νησιών που παρουσιάζουν ανώτερη ποιότητα κρυστάλλων στα στρώματα που καλλιεργούνται ετεροεπιταξιακά σε ζαφείρια.



Εικόνα 3.2.3.1: Ανάπτυξη νιτριδίου του γαλλίου με διπλό διηλεκτρικό



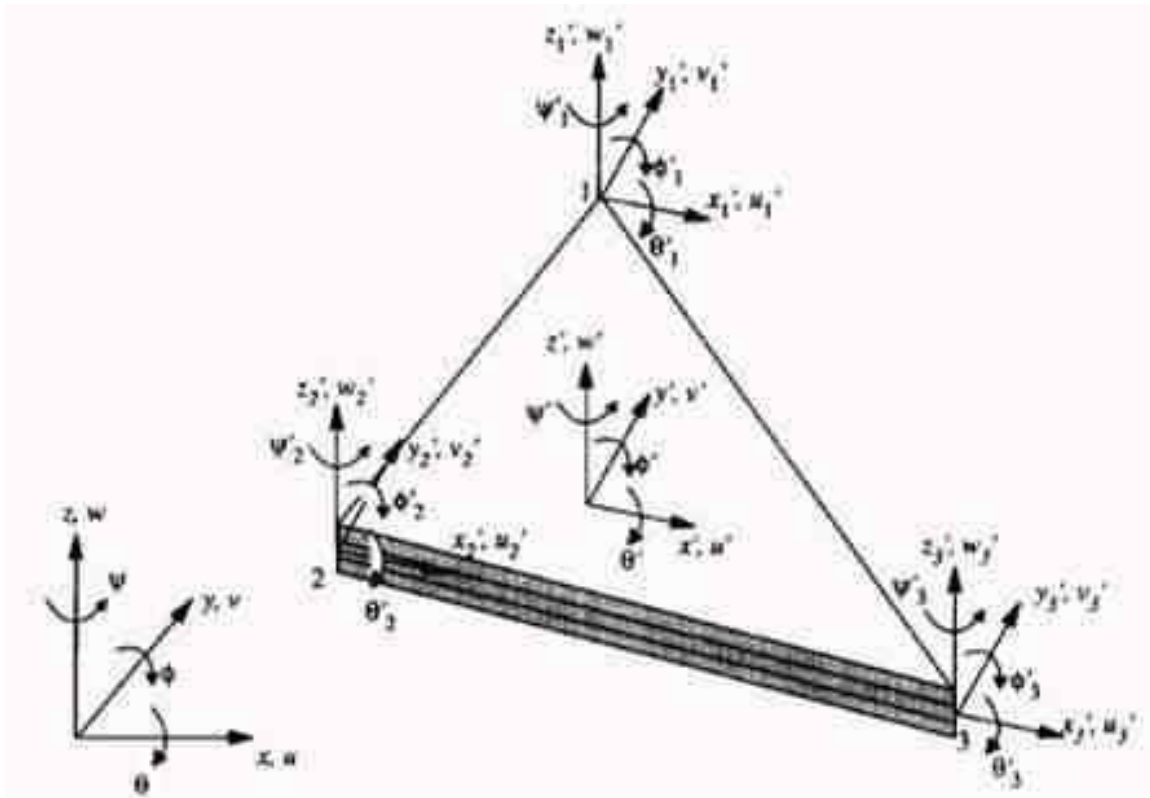
## 4. ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ ΜΕ ΤΗΝ ΜΕΘΟΔΟ ΤΩΝ ΠΕΠΕΡΑΣΜΕΝΩΝ ΣΤΟΙΧΕΙΩΝ

### 4.1 ΓΕΝΙΚΑ ΓΙΑ ΤΗΝ ΜΕΘΟΔΟ ΤΩΝ ΠΕΠΕΡΑΣΜΕΝΩΝ ΣΤΟΙΧΕΙΩΝ

Η μέθοδος των πεπερασμένων στοιχείων (Μ.Π.Σ.) αναπτύχθηκε στη δεκαετία του 50, και η πρώτη επίσημη παρουσία της έγινε από τον καθηγητή Αργύρη το 1960. Η χρησιμότητα της ήταν μεγάλη διότι κατάφερε να πετύχει αριθμητικές λύσεις σε πολύπλοκα προβλήματα στατικής, υδραυλικής κ.α. που δεν επιδεχόντουσαν αναλυτικές λύσεις.

Η μέθοδος πεπερασμένων στοιχείων είναι μια αριθμητική μέθοδος (δηλ. μέθοδος υπολογισμού με χρήση Η/Υ) για τον υπολογισμό προσεγγιστικών λύσεων μερικών διαφορικών εξισώσεων. Η αναλυτική λύση των εξισώσεων με τις οποίες περιγράφονται τα διάφορα τεχνικά προβλήματα είναι δυνατή μόνο σε ειδικές περιπτώσεις, όπου οι καταπονήσεις και τα γεωμετρικά σχήματα είναι πάρα πολύ απλά. Όμως, υπήρχε η ανάγκη να λυθούν και πιο σύνθετα προβλήματα και γι' αυτό το λόγο αναπτύχθηκαν διάφορες προσεγγιστικές μέθοδοι. Μία τέτοια μέθοδος είναι και η μέθοδος των πεπερασμένων στοιχείων. Αυτή η μέθοδος είναι μεν προσεγγιστική, αλλά μπορεί να δώσει αξιόπιστα αποτελέσματα και έχει το πλεονέκτημα ότι μπορεί να εφαρμοστεί σε όλα τα προβλήματα. Το μειονέκτημά της είναι οι αυξημένες απαιτήσεις σε υπολογιστική ισχύ, ιδίως όταν εφαρμόζεται σε σύνθετα μοντέλα. Αυτό όμως το μειονέκτημα ξεπεράστηκε τα τελευταία χρόνια χάρη στη ραγδαία ανάπτυξη των υπολογιστών. Η επιτυχία αυτής της μεθόδου ήταν τόσο μεγάλη, που ακόμα και σήμερα χρησιμοποιείται στην έρευνα και στην βιομηχανία για τον υπολογισμό και τη μελέτη διάφορων κατασκευών.

Το χαρακτηριστικό της μεθόδου των πεπερασμένων στοιχείων είναι η χρήση δισδιάστατων και τρισδιάστατων στοιχείων για την προσομοίωση συνεχών μέσων. Μια από τις πρώτες δημοσιεύσεις στις οποίες παρουσιάστηκε η ιδέα αυτή είναι των Turner, Clough, Martin, και Topp (1956), ορισμένα όμως χαρακτηριστικά της είχαν ήδη περιγραφεί από τους Courant (1943), Hrenikoff (1941), McHenry (1943) και άλλους. Ακολούθησαν πολλές δημοσιεύσεις, συμπεριλαμβανομένων και αυτών του Αργύρη και των συνεργατών του την περίοδο 1954-60. Τα πρώτα πεπερασμένα στοιχεία χρησιμοποιήθηκαν σε προβλήματα επίπεδης εντατικής κατάστασης, αργότερα όμως διατυπώθηκαν στοιχεία και για τρισδιάστατα στερεά, ελάσματα υπό κάμψη, παχιά κελύφη, και άλλες μορφές κατασκευών. Μετά την καθιέρωσή τους στη γραμμική ελαστική περιοχή εφαρμόστηκαν και σε δυσκολότερα προβλήματα όπως η δυναμική συμπεριφορά, ο λυγισμός και η μη-γραμμική απόκριση και συμπεριφορά του υλικού. Για να επιλυθούν δε προβλήματα με μη-γραμμική συμπεριφορά του υλικού απαιτείται επαναληπτική διαδικασία. Στην εικόνα 4.1.1, μπορούμε να δούμε ένα τριγωνικό πεπερασμένο στοιχείο κελύφους TRIC.



Εικόνα 4.1.1 Τριγωνικό πεπερασμένο στοιχείο κελύφους TRIC

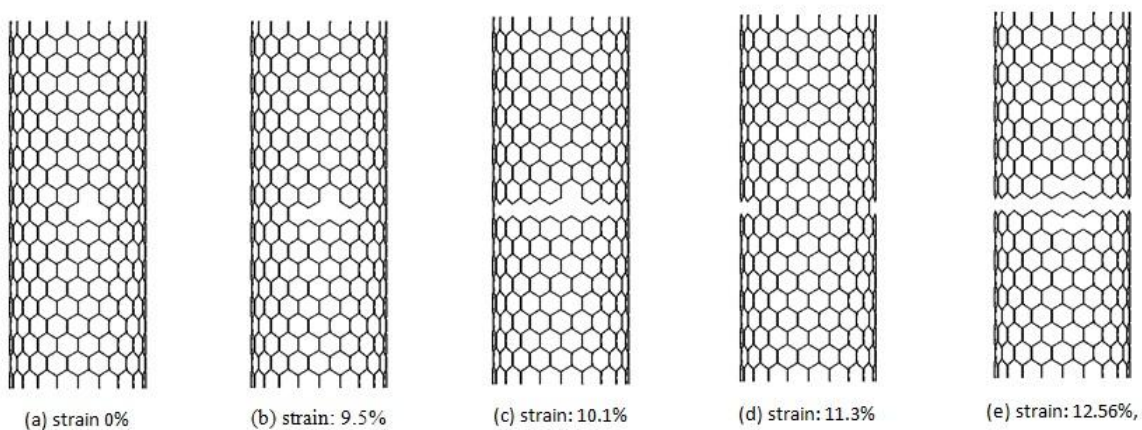
Η μέθοδος των πεπερασμένων στοιχείων σήμερα χρησιμοποιείται ευρέως σε πολλά επιστημονικά προβλήματα. Τα κυριότερα πεδία εφαρμογής αυτής της αριθμητικής μεθόδου είναι γραμμικά ή μη γραμμικά προβλήματα μηχανικής συνεχών μέσων, ρευστοδυναμικής, μετάδοσης θερμότητας και ηλεκτρομαγνητισμό. Η επιτυχία της μεθόδου των πεπερασμένων στοιχείων βασικά εξαρτάται με την ευκολία με την οποία κανείς χρησιμοποιεί τους ηλεκτρονικούς υπολογιστές και είναι γνώστης της εφαρμογής πολλών αριθμητικών μεθόδων για την επίλυση επιστημονικών και πρακτικών προβλημάτων.

Νέα επιστημονικά πεδία ανεπτύχθησαν μέσω τριών χρονικών περιόδων της τεχνολογικής ανάπτυξης. Κατά την διάρκεια της πρώτης περιόδου, η ανάπτυξη προόδευσε μέσω της βιβλιογραφίας και έτσι κατευθυνόμενη μέσω της ύλης των επιστημονικών άρθρων ενώ οι εφαρμογές στην πράξη ήσαν πολύ λίγες. Στη δεύτερη φάση ανάπτυξης εμφανίσθηκαν μονογραφίες και βιβλία τα οποία έδωσαν μια συνοπτική παράσταση του πεδίου των πεπερασμένων στοιχείων όπου είχαν εφαρμογή σε πρακτικά προβλήματα μηχανικών.

Τέλος, βασικοί ορισμοί, βασικές λειτουργίες των στοιχείων διάφορα συστήματα συντεταγμένων που χρησιμοποιούνται στην ανάλυση με πεπερασμένα στοιχεία στην οποία το βασικό στοιχείο είναι η σχέση δύναμης-μετατόπισης, η μελέτη της ενέργειας και έργου, ο μετασχηματισμός των βαθμών ελευθερίας, η γενική πορεία της καθολικής ανάλυσης και η άμεση μέθοδος δυσκαμψίας.

## 4.2 ΒΑΣΙΚΕΣ ΕΝΝΟΙΕΣ ΜΕΘΟΔΟΥ ΤΩΝ ΠΕΠΕΡΑΣΜΕΝΩΝ ΣΤΟΙΧΕΙΩΝ

Η βασική έννοια της μεθόδου των πεπερασμένων στοιχείων είναι, η δυνατότητα προσομοίωσης της πραγματικής κατασκευής με συστατικά στοιχεία τα οποία συνδέονται σε ένα πεπερασμένο αριθμό κόμβων. Η μεθοδολογία αυτή αποτελεί φυσιολογική προσομοίωση των πλαισίων, καθώς αυτά αποτελούνται από δοκούς που είναι συνδεδεμένες στα άκρα τους. Σε μία συνεχή όμως κατασκευή δεν υπάρχουν φυσικοί διαχωρισμοί και συνεπώς απαιτείται να γίνει τεχνητός διαχωρισμός σε στοιχεία, τα οποία να συνδέονται κατά μήκος των άκρων (πλευρών) τους. Τα τεχνητά αυτά στοιχεία, ή πεπερασμένα στοιχεία είναι συνήθως τετράπλευρα ή τριγωνικά και οι κόμβοι συνήθως βρίσκονται στα άκρα. Για να γίνει χρήση αριθμητικών μεθόδων απαιτείται να προσομοιωθεί η συνεχής κατασκευή με ένα πεπερασμένο αριθμό διακριτών μεταβλητών. Οι μεταβλητές αυτές είναι οι μετατοπίσεις των κόμβων και σε ορισμένες περιπτώσεις και οι παράγωγοί τους. Εάν περιλαμβάνονται και οι παράγωγοι γίνεται λόγος για βαθμούς ελευθερίας αντί για μετατοπίσεις κόμβων. Οι μετατοπίσεις στο εσωτερικό των στοιχείων πρέπει να είναι συμβατές με τις μετατοπίσεις των κόμβων και όλες οι αλληλεπιδράσεις των στοιχείων εκφράζονται σε σχέση με τις κομβικές μετατοπίσεις. Με αυτό τον τρόπο οι μόνοι άγνωστοι είναι οι μετατοπίσεις στους κόμβους και το πρόβλημα μετατρέπεται από συνεχές σε διακριτό. Παρ' όλο που μπορεί να υπάρχει μεγάλος αριθμός κομβικών μετατοπίσεων ο αριθμός τους είναι πεπερασμένος. Το πρόβλημα εκφράζεται τότε ως ένα σύνολο (σύστημα) γραμμικών εξισώσεων οι οποίες επιλύονται με αριθμητικές μεθόδους. Με αυτόν τον τρόπο μπορούμε να προβλέψουμε την εξέλιξη της παραμόρφωσης κατά τη φόρτιση και την εξέλιξη της αστοχίας του μοντέλου. Ένα παράδειγμα απεικονίζεται στην εικόνα 4.2.1.



Εικόνα 2.2.1 : Πρόβλεψη εξέλιξης αστοχίας συναρτήσει της εφαρμοζόμενης παραμόρφωσης

Για να επιτευχθεί ακριβής λύση ενός συγκεκριμένου προβλήματος στη διακριτοποιημένη μορφή του, θα πρέπει να ικανοποιούνται οι συνθήκες ισορροπίας και γεωμετρικής συμβιβαστότητας στο εσωτερικό των στοιχείων αλλά και στα σύνορά

τους. Οι απαιτήσεις αυτές ανάγονται στην ικανοποίηση τεσσάρων συνθηκών. Ας θεωρηθεί, για παράδειγμα, η συμβιβαστότητα μεταξύ των στοιχείων. Σε μία συνεχή κατασκευή ισχύει συνέχεια των μετατοπίσεων στα κοινά όρια των στοιχείων. Συνεπώς στο αριθμητικό μοντέλο (πεπερασμένα στοιχεία) δεν επαρκεί να ικανοποιείται η συνθήκη της συνέχειας των μετατοπίσεων στους κόμβους και μόνο. Εάν δηλαδή δεν διατυπωθούν περιορισμοί στις μετατοπίσεις κατά μήκος των ορίων των στοιχείων το θεωρητικό μοντέλο της κατασκευής θα είναι περισσότερο εύκαμπτο επειδή θα δημιουργηθούν κενά. Ένας τρόπος να περιορισθεί το σφάλμα είναι να χρησιμοποιηθούν μικρότερα και περισσότερα στοιχεία διότι έτσι θα δημιουργηθούν περισσότεροι κόμβοι και συνεπώς περισσότερα σημεία στα οποία θα ικανοποιείται η συμβιβαστότητα. Μία διακριτή προσομοίωση δεν μπορεί όμως να αποδώσει με απόλυτη ακρίβεια την συμπεριφορά ενός συνεχούς μέσου, ανεξαρτήτως του αριθμού των διακριτών μεταβλητών που χρησιμοποιούνται. Υπάρχει δηλαδή πάντοτε ένα σφάλμα, το οποίο όμως μπορεί να περιορισθεί και να γίνει αμελητέο και τοπικό. Δεν είναι συνεπώς δυνατόν να ικανοποιηθούν όλες οι προαναφερθείσες συνθήκες με απόλυτη ακρίβεια, έστω και αν γίνει χρήση μεγάλου αριθμού στοιχείων. Είναι όμως δυνατό, με σωστή επιλογή των ιδιοτήτων των στοιχείων και κατάλληλη διακριτοποίηση, να περιορισθεί το αριθμητικό σφάλμα. Ο προσδιορισμός των ιδιοτήτων των στοιχείων αποτελεί ένα από τα βασικότερα στάδια διατύπωσης μιας λύσης. Θα πρέπει τότε να γίνεται αυτό έτσι ώστε να ικανοποιούνται επαρκώς οι συνθήκες συμβιβαστότητας χωρίς να χρειασθεί να γίνει χρήση υπερβολικά μικρών στοιχείων. Η συμπεριφορά των στοιχείων καθορίζεται από συναρτήσεις οι οποίες ορίζουν τον τρόπο μεταβολής των τάσεων ή των μετατοπίσεων στο εσωτερικό τους. Με άλλα λόγια, προκαθορίζεται ο τρόπος συμπεριφοράς των διαφόρων μεταβλητών.

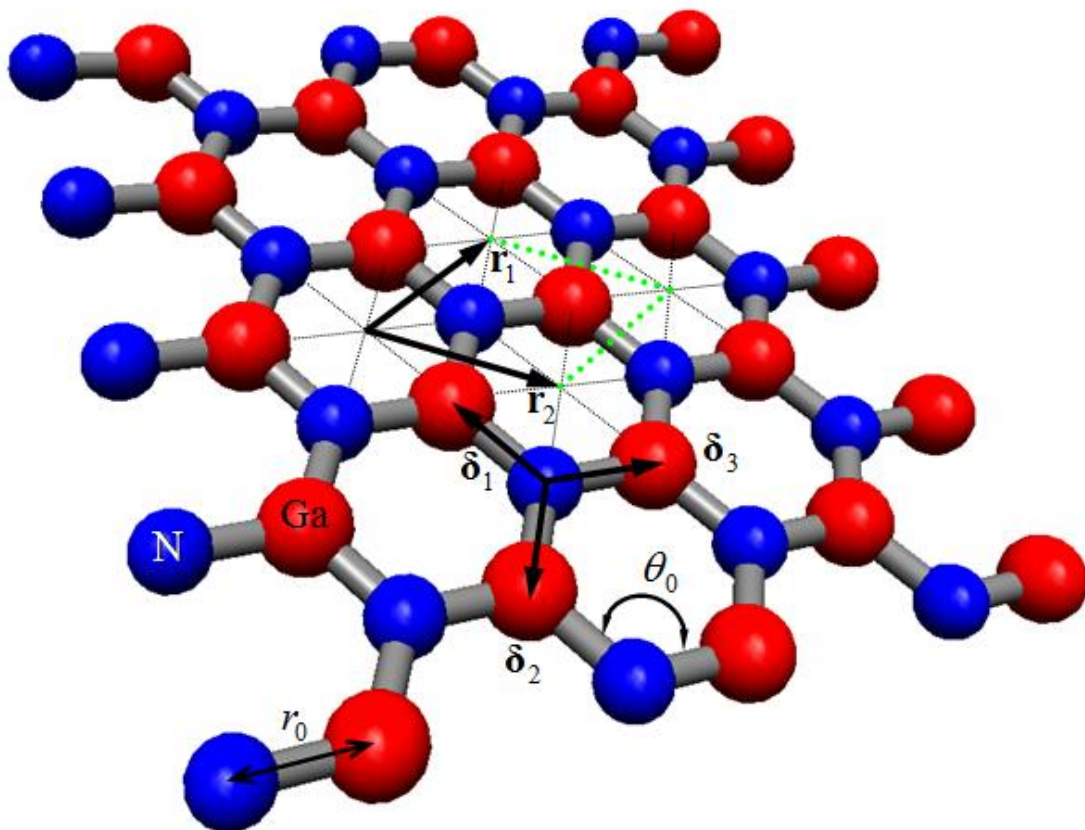
Το αποτέλεσμα είναι ότι, παρ' όλο που οι συνθήκες ισορροπίας και συμβιβαστότητας ικανοποιούνται μόνο στους κόμβους, η προδιαγεγραμμένη συμπεριφορά στο εσωτερικό κάθε στοιχείου εξασφαλίζει ότι η συμβιβαστότητα ικανοποιείται επαρκώς στο εσωτερικό και στα σύνορά τους. Συμπεραίνεται λοιπόν ότι απαιτείται προσοχή κατά την υποδιαίρεση της κατασκευής, καθώς επίσης και κατά την επιλογή της συνάρτησης που περιγράφει τη συμπεριφορά στο εσωτερικό του κάθε στοιχείου. Όπως έχει ήδη αναφερθεί, η ακρίβεια της μεθόδου αυξάνεται όταν αυξάνεται ο αριθμός των στοιχείων, ή καλύτερα, των κόμβων. Όσο αυξάνεται όμως ο αριθμός των στοιχείων, τόσο αυξάνονται ο χρόνος υπολογισμού και το κόστος. Σε πολλές περιπτώσεις η βαθμιαία μεταβολή του μεγέθους των στοιχείων χρησιμοποιείται για να αποκτηθεί ακριβέστερη εικόνα της τοπικής συμπεριφοράς (σε συγκεντρώσεις τάσεων, σε ανοίγματα, κοντά στο σημείο εφαρμογής του εξωτερικού φορτίου, κλπ). Η βαθμιαία μεταβολή του μεγέθους των στοιχείων είναι ένας εφικτός τρόπος ελάττωσης του κόστους χωρίς να μειωθεί ακρίβεια της λύσης του προβλήματος. Λόγω όμως της μεγάλης ποικιλίας κατασκευών και φορτίσεων δεν είναι δυνατό να δοθεί γενικός κανόνας σχετικά με τον αριθμό ή το μέγεθος των στοιχείων ή τον τρόπο διακριτοποίησης που απαιτούνται για επαρκή ακρίβεια. Σε κάθε περίπτωση ο τρόπος διακριτοποίησης πρέπει να βασίζεται στην εμπειρία συμπεριφοράς και μελέτης παρόμοιων κατασκευών. Εάν αυτό δεν είναι εφικτό πρέπει να επιλυθεί σειρά προβλημάτων με διαφορετικές διακριτοποιήσεις και να υπολογισθεί ο βαθμός σύγκλισης στην ακριβή λύση. Στην περίπτωση συγκεντρωμένων φορτίων ο προφανής τρόπος είναι να επιλεγεί κόμβος στο σημείο εφαρμογής του φορτίου. Για κατανεμημένα φορτία πρέπει να επιλεγούν στατικά ισοδύναμα σημειακά φορτία στους αντίστοιχους κόμβους. Τα περισσότερα στοιχεία επίπεδης εντατικής κατάστασης δεν έχουν στρεπτικό βαθμό ελευθερίας και συνεπώς δεν είναι δυνατό να γίνει χρήση αντίστοιχων ροπών στους κόμβους. Αυτό δεν είναι

όμως σοβαρό πρόβλημα διότι οι κόμβοι είναι αρκετά κοντά ο ένας στον άλλο και έτσι οι δυνάμεις στους κόμβους αποτελούν ικανοποιητική προσομοίωση του κατανεμημένου φορτίου.

#### 4.3 ΓΕΩΜΕΤΡΙΑ ΜΟΝΟΣΤΡΩΜΑΤΙΚΟΥ ΦΥΛΛΟΥ ΝΙΤΡΙΔΙΟΥ ΤΟΥ ΓΑΛΛΙΟΥ

Το μονοστρωματικό φύλλο νιτρίδιου του γαλλίου είναι ένα πλέγμα ατομικού πάχους και εξαγωνικής δομής. Μια αντιπροσωπευτική εξιδανικευμένη γεωμετρική δομή του GaN φαίνεται στην εικόνα 4.3.1. Οι χαρακτηριστικές διαστάσεις του είναι το μήκος κατά την διεύθυνση στην οποία υπάρχουν παράλληλες διατάξεις δεσμών τύπου armchair και την αντίστοιχη τύπου zigzag. Τα άτομα του γαλλίου και του αζώτου στοιχειοθετούνται σε εξαγωνικές διατάξεις δεσμών, των οποίων το μήκος είναι  $r_0$  και η γωνία που σχηματίζουν είναι  $120^\circ$ .

Στην παρούσα πτυχιική η γεωμετρία αυτή μοντελοποιήθηκε με την βοήθεια των εμπειρικών δυνατοτήτων των Stillinger-Weber οι οποίες περιγράφουν ρεαλιστικά την ατομική δομή του νιτρίδιου του γαλλίου και μας πληροφορούν για το μήκος των δεσμών, την ατομική ενέργεια, την ενθαλπία σχηματισμού και την τοπική παραμόρφωση. Οι εμπειρικές δυνατότητες των Stillinger-Weber περιλαμβάνουν τις αλληλεπιδράσεις μεταξύ δύο και τριών ατόμων και είναι ικανές να περιγράψουν την συνολική δυναμική ενέργεια δεσμού τέτοιων ημιαγωγών όπως το νιτρίδιο του γαλλίου με τις ανάλογες εξισώσεις οι οποίες αναλύονται στη συνέχεια.



Εικόνα 4.3.1 Ατομική δομή φύλλου νιτρίδιου του γαλλίου

#### 4.4 ΣΥΣΧΕΤΙΣΗ ΤΗΣ ΔΥΝΑΜΙΚΗΣ ΕΝΕΡΓΕΙΑΣ ΜΕ ΤΟ ΠΕΔΙΟΔΥΝΑΜΕΩΝ

Οι διατομικές αλληλεπιδράσεις σε μια νανοδομή νιτριδίου του γαλλίου μπορούν να περιγραφούν με βάση την θεωρία της μοριακής μηχανικής ως ένα πεδίο δυνάμεων, το οποίο διατυπώνεται από μία κατάλληλη έκφραση δυναμικής ενέργειας η οποία στο ελάχιστό της δίνει την ισορροπία της δομής και παράγει αντιδράσεις με την μετακίνηση των ατόμων από τη θέση ισορροπίας τους. Η συνολική δυναμική ενέργεια, λόγω διατομικών αλληλεπιδράσεων εντός ενός μονού φύλλου νιτριδίου του γαλλίου, αγνοώντας τις αμελητέες επιδράσεις των δεσμών Van der Waals, μπορεί να γραφεί σύμφωνα με τους Stillinger – Weber ως το άθροισμα των όρων αλληλεπίδρασης μεταξύ των δύο ατόμων (Ga-N) και των τριών ατόμων (N-Ga-N/Ga-N-Ga), που συμβολίζεται εδώ ως  $U_r$  και  $U_\theta$ , αντίστοιχα ως εξής:

$$U_{\text{tot}} = \sum U_r + \sum U_q \quad 4.4.1$$

Όπου το  $U_r$  αντιπροσωπεύει την ενέργεια λόγω μιας αλλαγής μήκους στο δεσμό  $ij$ , ενώ η  $U_\theta$  είναι η ενέργεια που οφείλεται σε μια αλλαγή της γωνίας μεταξύ δύο γειτονικών δεσμών  $ij$  και  $jk$ . Οι διατομικές δυναμικές ενέργειες  $U_r$  και  $U_\theta$ , αντίστοιχα, μπορούν να εκφραστούν ως:

$$U_r = A \left( B \left( \frac{s}{r_{ij}} \right)^4 - 1 \right) \exp \left( \frac{ds}{r_{ij} - bs} \right) \quad 4.4.2$$

$$U_q = I \exp \left( \frac{gs}{r_{ij} - bs} + \frac{gs}{r_{jk} - bs} \right) (\cos \theta_{ijk} + k)^2 \quad 4.4.3$$

Στις παραπάνω εξισώσεις τα  $A$ ,  $B$ ,  $\sigma$ ,  $\delta$ ,  $b$ ,  $\lambda$ ,  $\gamma$  και  $k$  είναι παράμετροι που δίνονται στο Σχήμα 4.4.1. Ο όρος  $\sigma$  είναι η παράμετρος κλιμάκωσης του μήκους ενώ το  $bs$  αντιπροσωπεύει την αλληλεπίδραση αποκοπής δεσμού το οποίο εξασφαλίζει ότι το δυναμικό είναι μικρής εμβέλειας. Οι μεταβλητές  $r_{ij}$  και  $r_{jk}$  αντιπροσωπεύουν τα μήκη των δεσμών  $ij$  και  $jk$ , αντίστοιχα, ενώ  $\theta_{ijk}$  είναι η γωνία που σχηματίζεται από τους  $ij$  και  $jk$  δεσμούς και ονομάζεται εφεξής γωνία μεταξύ των δεσμών, και περιγράφει την κατευθυντική φύση του δεσμού στη νανοδομή. Τέλος, σημειώνεται ότι η ελάχιστη μηδενική τιμή του  $U_\theta$  παρατηρείται για  $\theta_{ijk} = \cos^{-1}(-k) = \theta_0 = 2\pi / 3$ , η οποία αντιπροσωπεύει την ισορροπία της γωνίας μεταξύ των δεσμών και αντιστοιχεί στην ιδανική δομή. Η εκθετικοί όροι στις σχέσεις (4.4.2) και (4.4.3) εξασφαλίζουν την ομαλή μείωση προς το μηδέν για τις δυνατότητες και τα παράγωγά τους. Το διάγραμμα 4.4.1 απεικονίζει την μεταβολή του διατομικού ενεργειακού δυναμικού  $U_r$  σε σχέση με το μήκος του δεσμού. Η ελάχιστη τιμή της  $U_r$  είναι αρνητική και εμφανίζεται στο μήκος του δεσμού ισορροπίας  $r_{ij} = r_0 = 1,949$  nm. Η συμπεριφορά της  $U_\theta$  σε σχέση με τη γωνία μεταξύ των δεσμών, με την παραδοχή ότι,  $r_{ij} = r_{jk} = r_0$  απεικονίζεται στο διάγραμμα 4.4.2.



	A	B	$\lambda$	$\alpha$	$\gamma$	$\epsilon$ (eV)	$\sigma$ (Å)
Ca-N	7.718	0.694	28.5	1.8	1.2	2.265	1.700
In-N	7.755	0.699	18.5	1.8	1.2	1.993	1.879

$$\phi_2(i,j) = \epsilon f_2(r_{ij}/\sigma),$$

with

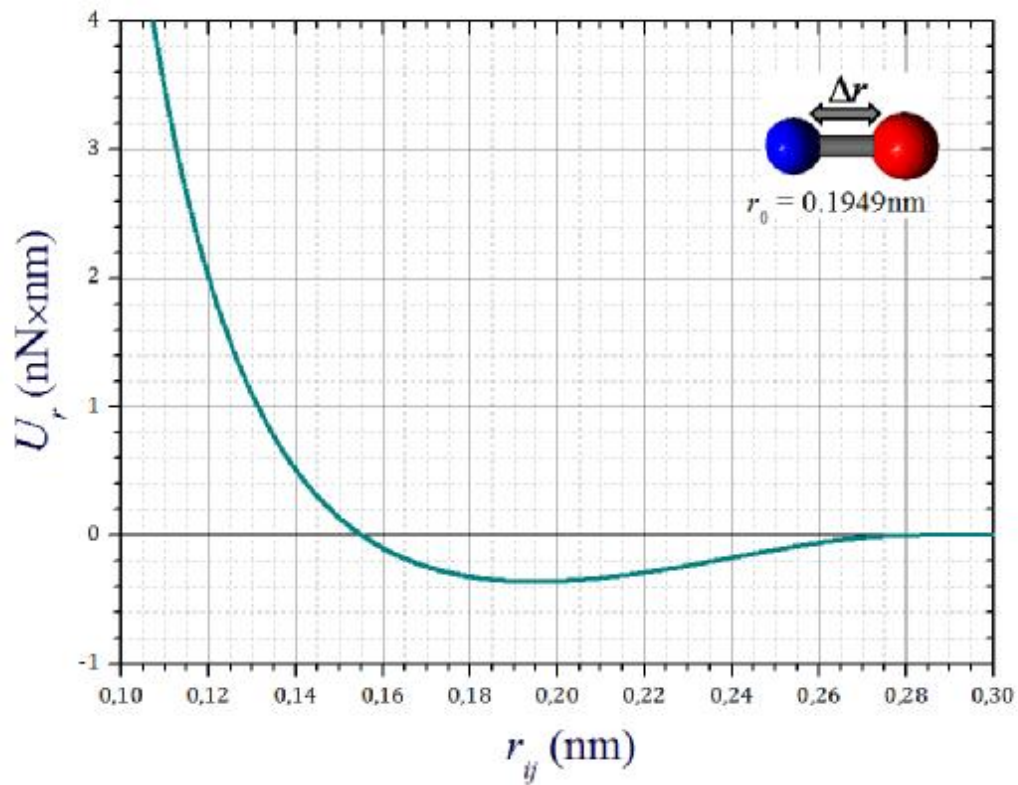
$$f_2(r) = \begin{cases} A(B/r^4 - 1) \exp[1/(r - a)], & r < a, \\ 0, & r > a \end{cases}$$

$$\phi_3(i,j,k) = \epsilon f_3(\bar{r}_i/\sigma, \bar{r}_j/\sigma, \bar{r}_k/\sigma),$$

$$f_3(\bar{r}_i, \bar{r}_j, \bar{r}_k) = h(r_{ij}, r_{jk}, \theta_{ijk}) + h(r_{ji}, r_{ik}, \theta_{jik}) + h(r_{jk}, r_{ki}, \theta_{jki})$$

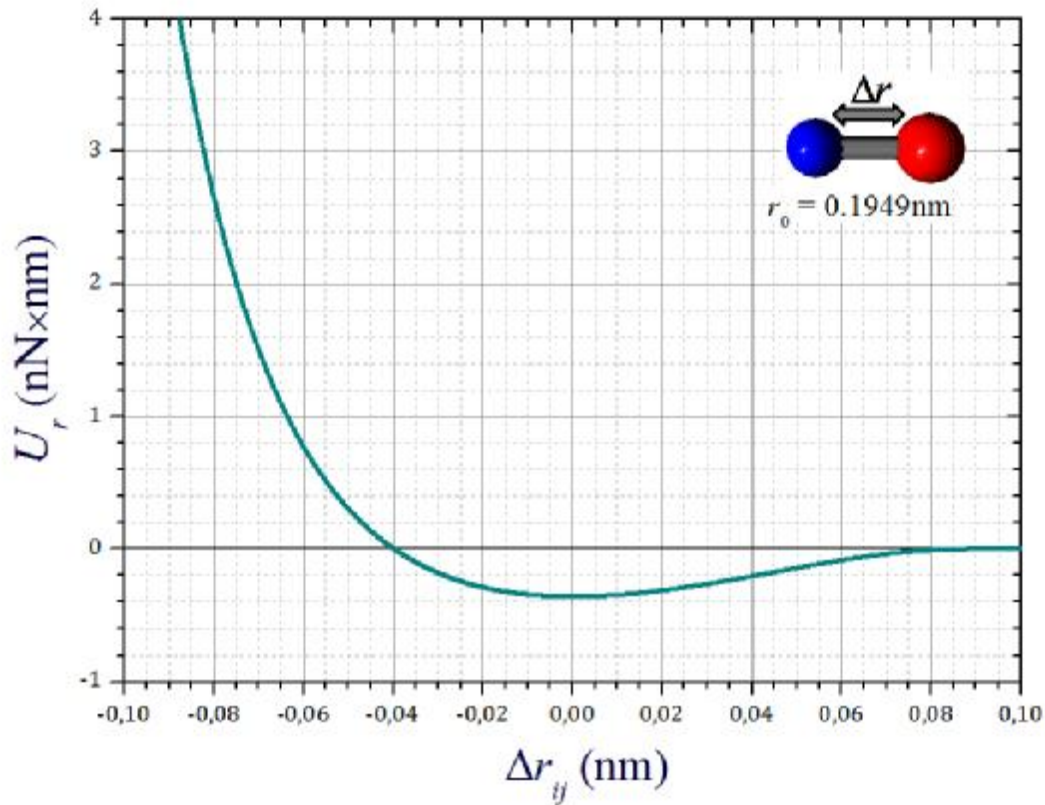
$$h_{ijk}(r_{ij}, r_{jk}, \theta_{ijk}) = \lambda \exp[\gamma/(r_{ij} - a) + \gamma/(r_{jk} - a)] (\cos \theta_{ijk} + 1/3)^2$$

Σχήμα 4.4.1 Πίνακας και σχέσεις Stillinger-Weber



Διάγραμμα 4.4.1 Μεταβολή της  $U_r$  συναρτήσει του  $r$





Διάγραμμα 4.4.2 Μεταβολή της  $U_r$  συναρτήσει του  $\Delta r$

Το μήκος των δεσμών  $r_{ij}$  και της γωνίας μεταξύ των δεσμών  $\theta_{ijk}$  μπορεί να συσχετισθεί με τη θέση ισορροπίας της γεωμετρίας σύμφωνα με τις ακόλουθες σχέσεις:

$$r_{ij} = r_0 + \Delta r \quad 4.4.4$$

$$q_{ij} = q_0 + \Delta q \quad 4.4.5$$

Όπου το  $\Delta r$  και το  $\Delta \theta$  αντιπροσωπεύουν τις αλλαγές στο μήκος δεσμού και στη γωνία μεταξύ δύο δεσμών, αντίστοιχα.

Αντικαθιστώντας τη σχέση (4.4.4) στη σχέση (4.4.2) και ακολούθως παραγωγίζοντας ως προς  $\Delta r$ , προκύπτει η δύναμη που αναπτύσσεται μεταξύ των ατόμων Ga και N στο δεσμό εξ' αιτίας της αλλαγής της μεταξύ τους απόστασης.

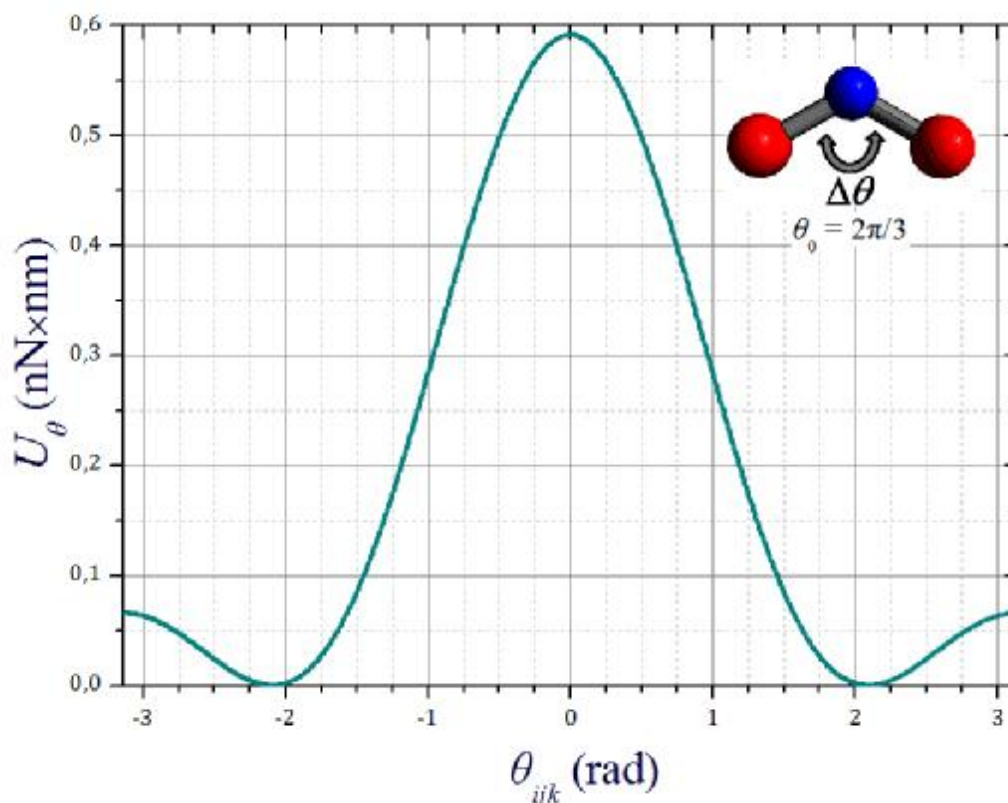
$$F_r = \frac{dU_r}{d\Delta r} = eAs \exp\left(\frac{s}{r_0 + \Delta r - as}\right) \left( \frac{1 - B\left(\frac{s}{r_0 + \Delta r}\right)^4}{(r_0 + \Delta r - as)^2} - \frac{4Bs^3}{(r_0 + \Delta r)^5} \right) \quad 4.4.6$$

Αντίστοιχα, η ροπή κάμψης  $M_\theta = \partial U_\theta / \partial(\Delta\theta)$  προκύπτει λόγω της μεταβολής της γωνίας μεταξύ δύο δεσμών και μπορεί να ληφθεί αντικαθιστώντας τη σχέση (4.4.5) στη σχέση (4.4.3), και στη συνέχεια παραγωγίζοντας ως προς  $\Delta\theta$ :

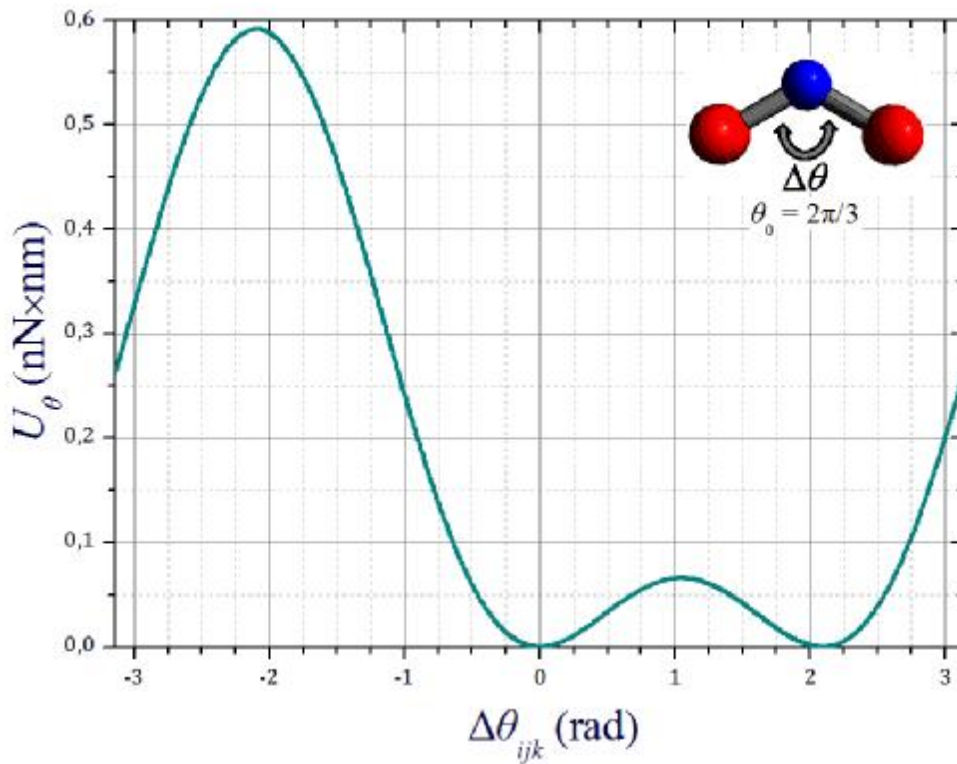
$$M_q = \frac{\partial U_q}{\partial \Delta q} = -2eI \exp\left(\frac{2gs}{r_0 - aS}\right) \sin(q_0 + \Delta q) (\cos(q_0 + \Delta q) + 0.5) \quad 4.4.7$$

Σημειώνεται ότι η ροπή κάμψης δεν εξαρτάται μόνο από την αλλαγή της γωνίας μεταξύ δύο δεσμών  $ij$  και  $jk$  αλλά και από τα μήκη των δεσμών, αυτών, στην παραμορφωμένη κατάσταση. Το γεγονός αυτό αυξάνει γενικά τη μη γραμμική φύση του πεδίου δυνάμεων που εμφανίζεται μέσα σε ένα μονοστρωματικό φύλλο h-GaN κατά τη διάρκεια πιθανών παραμορφώσεων.

Στη συνέχεια παρατίθενται τα διαγράμματα της ενέργειας που οφείλεται στην κάμψη του δεσμού συναρτήσει της γωνίας του δεσμού και της μεταβολής της γωνίας του δεσμού αντίστοιχα.

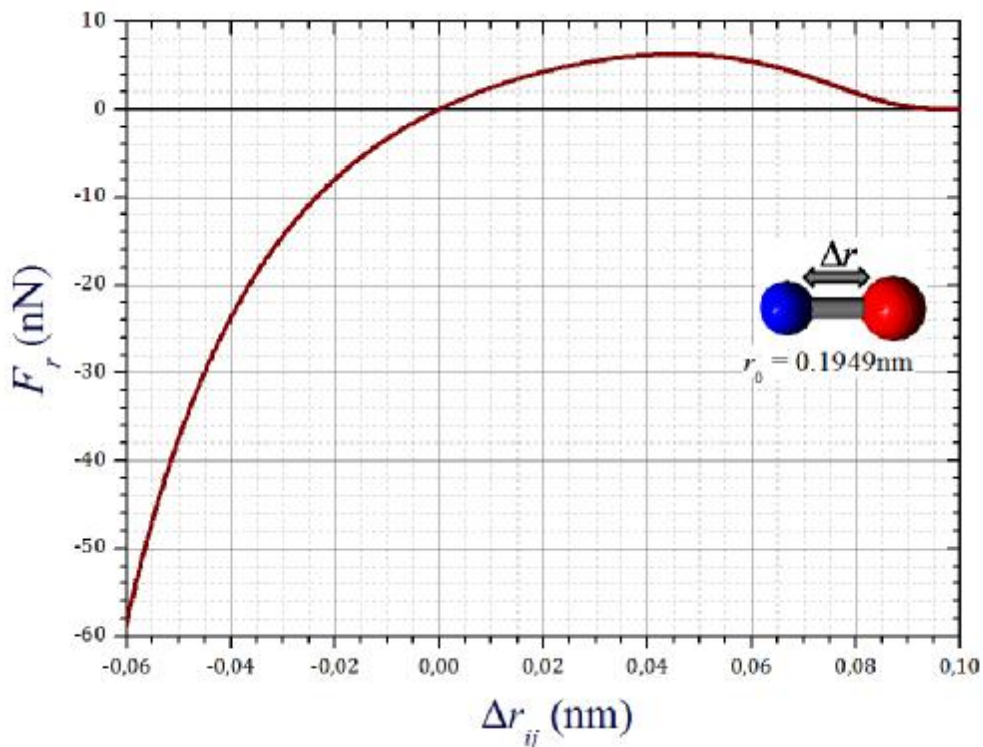


**Διάγραμμα 4.4.3** Μεταβολή της  $U_\theta$  συναρτήσει του  $\theta$ .



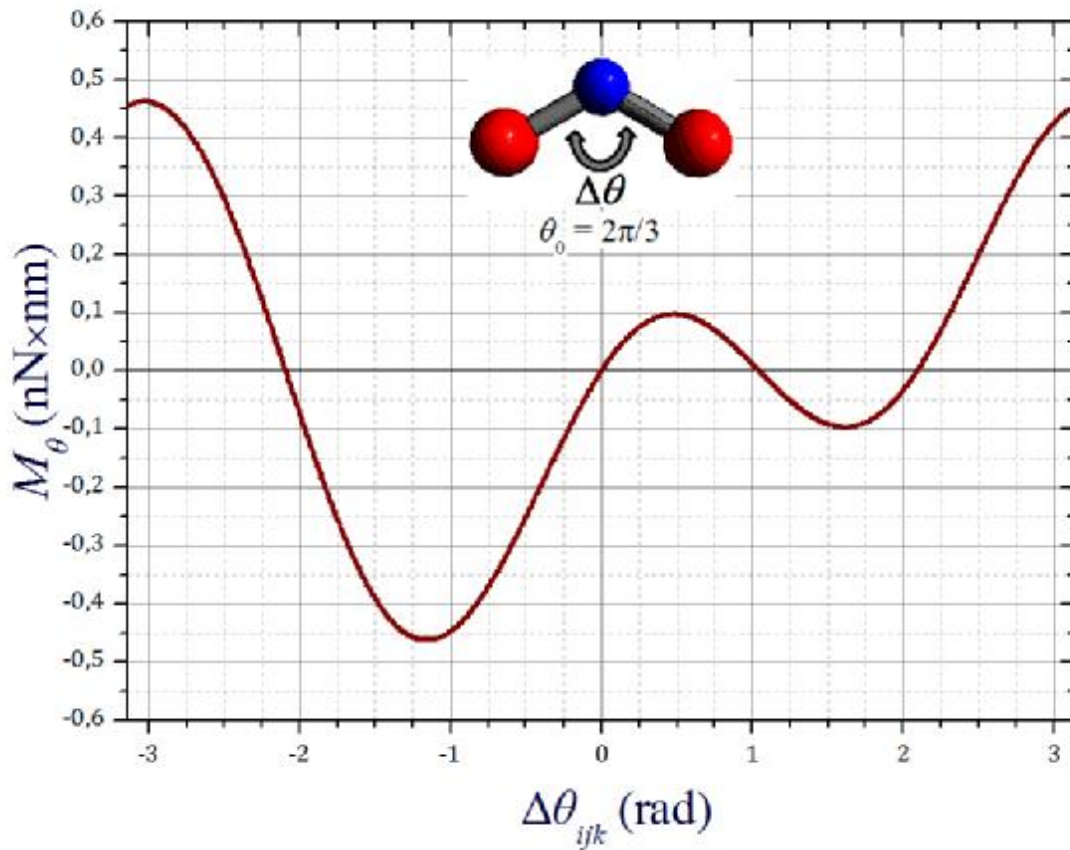
Διάγραμμα 4.4.4 Μεταβολή της  $U_\theta$  συναρτήσει του  $\Delta\theta$ .

Παρακάτω βλέπουμε τη γραφική παράσταση που περιγράφει την μεταβολή της εσωτερικής ενέργειας δεσμού συναρτήσει της μεταβολής της απόστασης του δεσμού



Διάγραμμα 4.4.5 Μεταβολή εσωτερικής δύναμης δεσμού συναρτήσει της μεταβολής της απόστασης δεσμού.

Παρακάτω βλέπουμε τη γραφική παράσταση που περιγράφει την μεταβολή της ροπής συναρτήσει της μεταβολής της γωνίας μεταξύ τριών ατόμων.



**Διάγραμμα 4.4.6** Μεταβολή της ροπής συναρτήσει της μεταβολής της γωνίας

Το εξαγωνικό πλέγμα του h-GaN, το οποίο στην παρούσα ανάλυση έχει πάχος ίσο με  $t = 0,364 \text{ nm}$ , έχει μια κυτταρική μονάδα που ορίζεται στην Εικόνα 2 από τα διανύσματα  $\mathbf{r}_1$  και  $\mathbf{r}_2$  ώστε:

$$|\mathbf{r}_1| = |\mathbf{r}_2| = 2 \sin(q_0 / 2) r_0 \quad 4.4.8$$

Σε αυτήν τη βάση, κάθε διάνυσμα  $\mathbf{r}$ , παρίσταται ως:

$$\mathbf{r} = n\mathbf{a}_1 + m\mathbf{a}_2 \quad 4.4.9$$

όπου  $n, m$  ακέραιοι αριθμοί. Στο Καρτεσιανό σύστημα συντεταγμένων:

$$\mathbf{r}_1 = r_0 [2 \cos(\pi - q_0) \sin(q_0 / 2) \quad \sin(q_0 / 2) \quad 0]^T \quad 4.4.10$$

$$\mathbf{r}_2 = r_0 [2 \cos(\pi - q_0) \sin(q_0 / 2) \quad -\sin(q_0 / 2) \quad 0]^T \quad 4.4.11$$

Τα διανύσματα που συνδέουν κάθε άτομο με το κοντινότερο γειτονικό του είναι:

$$\delta_1 = (\mathbf{r}_1 - 2\mathbf{r}_2) / 3 \quad 4.4.12$$

$$\delta_2 = (\mathbf{r}_2 - 2\mathbf{r}_1) / 3 \quad 4.4.13$$

$$\delta_3 = (\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2) / 3 \quad 4.4.14$$

#### 4.5 ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗ ΠΕΔΙΟΥ ΔΥΝΑΜΕΩΝ

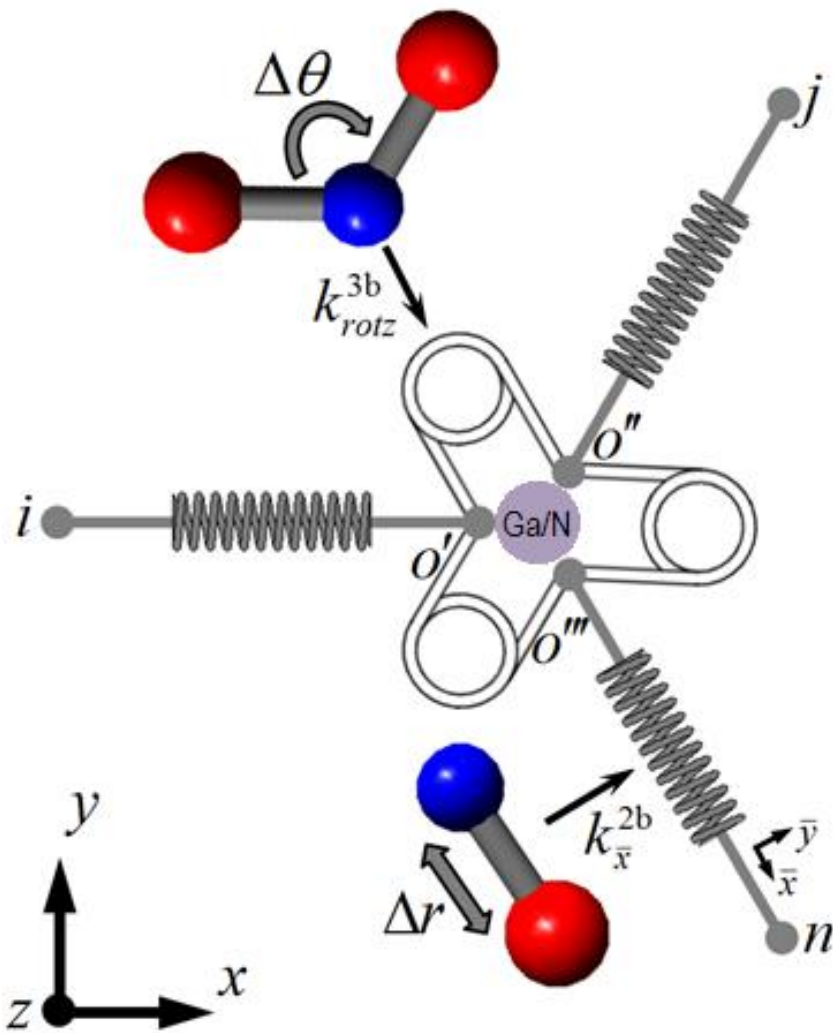
Για να αναπαρασταθεί ολόκληρο το πεδίο των δυνάμεων που εμφανίζονται μέσα σε μια νανοδομή h-GaN, χρησιμοποιούνται δυο τύποι δίκομβων στοιχείων ελατηρίου συγκεκριμένων τοπικών συντεταγμένων, με έξι βαθμούς ελευθερίας ανά κόμβο. Συγκεκριμένα χρησιμοποιούνται τρεις μετατοπίσεις και τρεις στροφές. Πρώτον, στοιχεία ελατηρίου, που θα κατονομάζονται στη συνέχεια ως 2b (μεταξύ δύο ατόμων Ga και N), χρησιμοποιούνται για την προσομοίωση της διακύμανσης δύναμης  $F_r$  λόγω της αλλαγής στο μήκος του δεσμού  $\Delta r$  (Σχέση 4.4.6). Τρία από τα συγκεκριμένα στοιχεία ελατηρίου, που συμβολίζονται από τα ζεύγη κόμβων  $io'$ ,  $jo''$  και  $no'''$ , φαίνονται στο Σχήμα 3. Αυτά τα στοιχεία περιγράφονται σύμφωνα με ένα τρισδιάστατο τοπικό σύστημα συντεταγμένων  $(\bar{x}, \bar{y}, \bar{z})$ . Ο άξονας  $\bar{x}$  του ειδικού τοπικού συστήματος συντεταγμένων συμπίπτει με τη γραμμή που συνδέει τα δύο συνδεδεμένα άτομα Ga και N ενώ ο  $\bar{z}$  άξονας είναι κατακόρυφος προς το επίπεδο h-GaN. Ο πίνακας του μητρώου δυσκαμψίας του εκτοπισμού τους ορίζεται από:

$$\mathbf{K}_{\bar{x}\bar{y}\bar{z}}^{2b} = \begin{bmatrix} \mathbf{k}_{\bar{x}\bar{y}\bar{z}}^{2b} & -\mathbf{k}_{\bar{x}\bar{y}\bar{z}}^{2b} \\ -\mathbf{k}_{\bar{x}\bar{y}\bar{z}}^{2b} & \mathbf{k}_{\bar{x}\bar{y}\bar{z}}^{2b} \end{bmatrix} \quad 4.5.1$$

Όπου:

$$\mathbf{k}_{\bar{x}\bar{y}\bar{z}}^{2b} = \begin{bmatrix} k_{\bar{x}}^{2b} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & k_{\bar{y}}^{2b} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & k_{\bar{z}}^{2b} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & k_{rot\bar{x}}^{2b} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & k_{rot\bar{y}}^{2b} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & k_{rot\bar{z}}^{2b} \end{bmatrix} \Rightarrow \begin{bmatrix} \frac{dF_r}{d(\Delta r)} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \infty & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \infty & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \infty & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \infty \end{bmatrix} \quad 4.5.2-3$$

Όπου το σύμβολο του άπειρου χρησιμοποιείται για να ορίσει μια πολύ υψηλή τιμή δυσκαμψίας, ικανή να οδηγήσει σε μια συμπεριφορά ακαμψίας όσον αφορά τις αντίστοιχες κομβικές μετατοπίσεις και στροφές. Οι υψηλοί συντελεστές ακαμψίας στην Σχέση (4.5.3) απαιτούνται για να συγκρατούν τους δεσμούς Ga-N σε ευθεία κατά τη φόρτιση και έτσι να εμποδίζει την κάμψη τους, η οποία, από μοριακή άποψη, δεν επιτρέπεται.



Εικόνα 4.5.1 Αναπαράσταση των διατομικών αλληλεπιδράσεων του στοιχείου ελατηρίου

Δεύτερον, χρησιμοποιούνται στοιχεία ελατηρίου όπως φαίνεται στην εικόνα 4.5.1, που θα κατονομάζονται στη συνέχεια ως 3b (μεταξύ τριών ατόμων Ga και N, δηλαδή Ga-N-Ga/N-Ga-N), για την προσομοίωση της διακύμανσης της καμπτικής ροπής  $M_\theta$  λόγω της μεταβολής της γωνίας μεταξύ δύο δεσμών  $\Delta\theta$  (Σχέση 4.4.7). Τρία από τα συγκεκριμένα στοιχεία τύπου ελατηρίου, που συμβολίζονται με τα ζεύγη κόμβων ο'ο'', ο''ο''' και ο'''ο', απεικονίζονται στην εικόνα 4.5.1. Θα έπρεπε να αναφερθεί ότι στα πραγματικά μοντέλα, οι κόμβοι συμπίπτουν ο ένας με τον άλλον στις ατομικές θέσεις Ga και N. Ο πίνακας του μητρώου δυσκαμψίας του εκτοπισμού τους εκφράζεται στο παγκόσμιο σύστημα συντεταγμένων (x,y,z) ως:

$$\mathbf{K}_{xyz}^{3b} = \begin{bmatrix} \mathbf{k}_{xyz}^{3b} & -\mathbf{k}_{xyz}^{3b} \\ -\mathbf{k}_{xyz}^{3b} & \mathbf{k}_{xyz}^{3b} \end{bmatrix} \quad 4.5.4$$

Όπου:

$$\mathbf{k}_{xyz}^{3b} = \begin{bmatrix} k_x^{3b} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & k_y^{3b} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & k_z^{3b} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & k_{rotx}^{3b} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & k_{roty}^{3b} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & k_{rotz}^{3b} \end{bmatrix} \Rightarrow \begin{bmatrix} \infty & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \infty & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \infty & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{\partial M_q}{\partial(\Delta q)} \end{bmatrix} \quad 4.5.5-6$$

Εδώ, οι υψηλοί συντελεστές ακαμψίας απαιτούνται για να εξασφαλιστεί ότι οι κόμβοι ο', ο'' και ο''' θα παραμείνουν σταθεροί στις ατομικές τους θέσεις σε όλες τις φάσεις φόρτισης.

Για την αντιμετώπιση της ενδογενής μη γραμμικότητας του προβλήματος, που προκύπτει από τους υψηλής μη γραμμικής δυσκαμψίας όρους  $k_{\bar{x}}^{2b} = dF_r / d(\Delta r)$  και  $k_{rotz}^{3b} = \partial M_q / \partial(\Delta q)$  των σχέσεων 4.5.3 και 4.5.6 αντίστοιχα, υιοθετείται ένα σταδιακό-επαναληπτικό σχήμα. Σύμφωνα με τον χρησιμοποιούμενο αλγόριθμο το φορτίο εφαρμόζεται σε  $IN$  βήματα. Η λύση στο φορτίο του παρόντος βήματος που συμβολίζεται με  $in = 1, 2, \dots, IN$  επιτυγχάνεται χρησιμοποιώντας αρχικά την λύση του προηγούμενου συγκλίνοντος βήματος ( $in - 1$ ). Το σύστημα των εξισώσεων κατασκευάζεται εφαρμόζοντας τις στοιχειακές εξισώσεις δυσκαμψίας για κάθε 2b και 3b στοιχείο και ύστερα μετατρέποντας τα στο παγκόσμιο σύστημα συντεταγμένων. Στην συνέχεια, όλες οι εξισώσεις συγκεντρώνονται σύμφωνα με τις απαιτήσεις της κομβικής ισορροπίας και το ακόλουθο σύστημα εξισώσεων για το βήμα ( $in$ ) σχηματίζεται:

$$\mathbf{K}(\mathbf{U}_{in}) \Delta \mathbf{U}_{in} = \Delta \mathbf{F}_{in} \quad 4.5.7$$

Όπου  $\mathbf{K}(\mathbf{U}_{in})$ ,  $\Delta \mathbf{U}_{in}$  και  $\Delta \mathbf{F}_{in}$  είναι το συγκεντρωτικό μητρώο δυσκαμψίας, σταδιακό διάνυσμα μετατόπισης και το σταδιακό διάνυσμα δύναμης, για το βήμα  $in$ , αντίστοιχα. Η μητρωική σχέση (4.5.7) μπορεί να λυθεί μέσω βασικών αριθμητικών τεχνικών λαμβάνοντας υπόψη τις επιβαλλόμενες συνοριακές συνθήκες. Η γνωστή Newton-Raphson επαναληπτική διαδικασία, εφαρμόζεται για την απόκτηση μιας συγκλίνουσας λύσης για το παρόν βήμα φορτίου. Οι επαναλήψεις, κατά την διάρκεια των οποίων λύνονται με εξισώσεις που μοιάζουν με γραμμικές, συνεχίζονται μέχρι το κριτήριο σύγκλισης. Στην παρούσα μελέτη η σύγκλιση ελέγχεται μέσω του υπολογισμού της Ευκλείδειας νόρμας του διανύσματος εναπομενόντων δυνάμεων. Στο τέλος της επαναληπτικής διαδικασίας η λύση της τρέχουσας αύξησης του φορτίου επιτυγχάνεται και έτσι τα αποτελέσματα μετατόπισης και κατανομής δύναμης λαμβάνονται από τις ακόλουθες εξισώσεις αντίστοιχα:

$$\mathbf{U}_{in} = \mathbf{U}_{in-1} + \Delta \mathbf{U}_{in} \quad 4.5.8$$



$$\mathbf{F}_{in} = \mathbf{F}_{in-1} + \Delta\mathbf{F}_{in} \quad 4.5.9$$

Η διαδικασία συνεχίζεται μέχρις ότου η τελική αύξηση του φορτίου  $I_N$  να λύνεται μέσω της σχέσης (4.5.7) και έτσι οι ποσότητες  $U_{IN}$  και  $F_{IN}$  να βρεθούν από τις δύο τελευταίες σχέσεις.



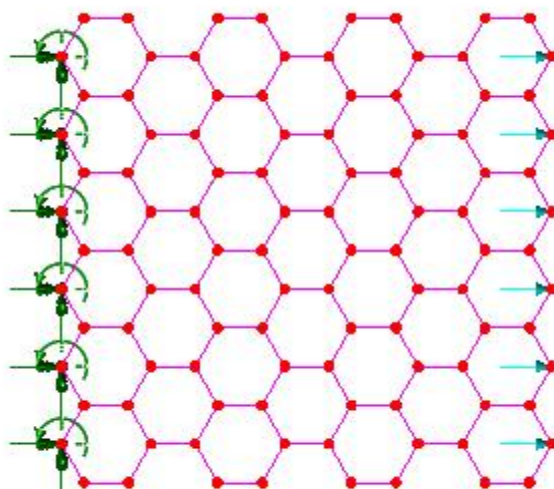
## 5 ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ

### 5.1 ΔΗΜΙΟΥΡΓΙΑ ΜΟΝΟΣΤΡΩΜΑΤΙΚΟΥ ΦΥΛΛΟΥ ΝΙΤΡΙΔΙΟΥ ΤΟΥ ΓΑΛΛΙΟΥ

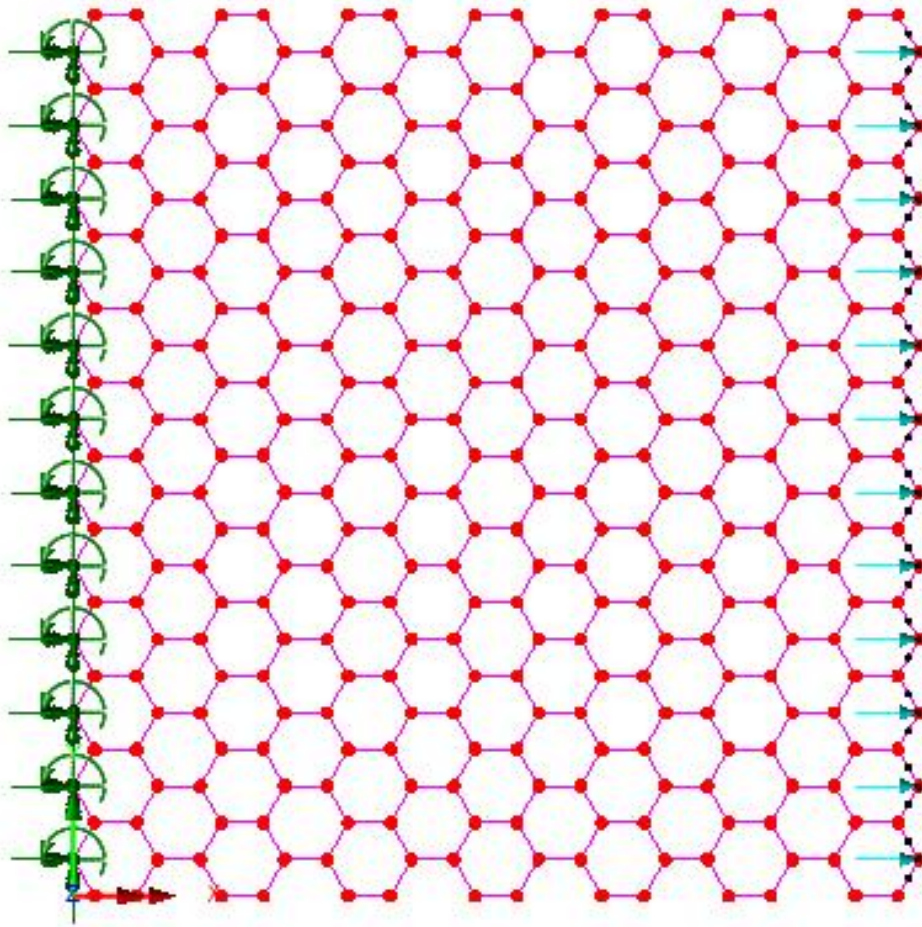
Στον παρών κεφάλαιο παρουσιάζονται τα μοντέλα μονοστρωματικών φύλλων νιτριδίου του γαλλίου διαφορετικών διαστάσεων, με την μέθοδο της δομικής μηχανικής κατά την οποία οι δεσμοί του υλικού παρομοιάζονται με στοιχεία ελατηρίων. Οι εικόνες παρακάτω 5.1.1-10 δείχνουν το μονοστρωματικό υλικό σε δύο διαστάσεις (x,y) και στις εξής διαστάσεις (2x2,4x4,6x6,8x8,10x10). Τα μοντέλα τα διακρίνουμε σε δύο κατηγορίες ανάλογα με την φόρτισή τους είτε στον X άξονα είτε στον Y άξονα.

$l=2.1439\text{nm}$
$l=3.898\text{nm}$
$l=6.2368\text{nm}$
$l=7.9909\text{nm}$
$l=9.745\text{nm}$

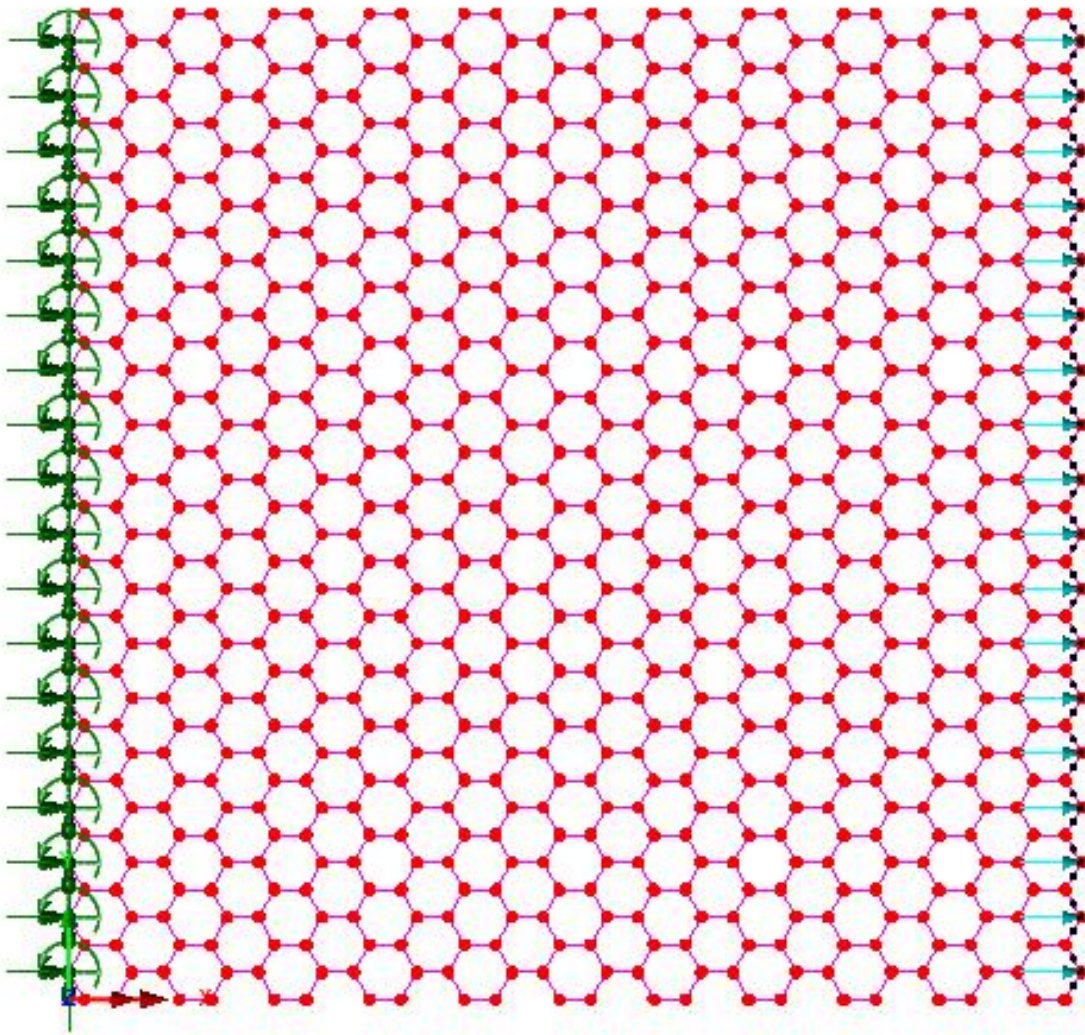
Για τις διαστάσεις στον X άξονα:



Εικόνα 5.1.1 : Απεικόνιση διάστασης 2x2

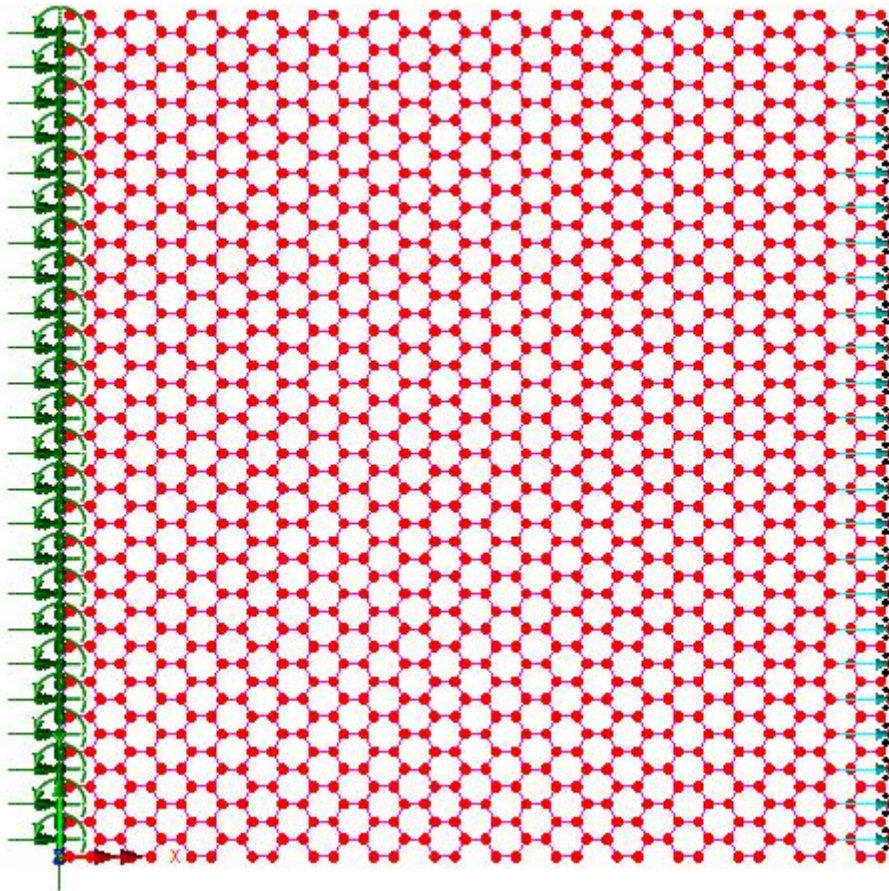


Εικόνα 5.1.2 :Απεικόνιση της διάστασης 4x4

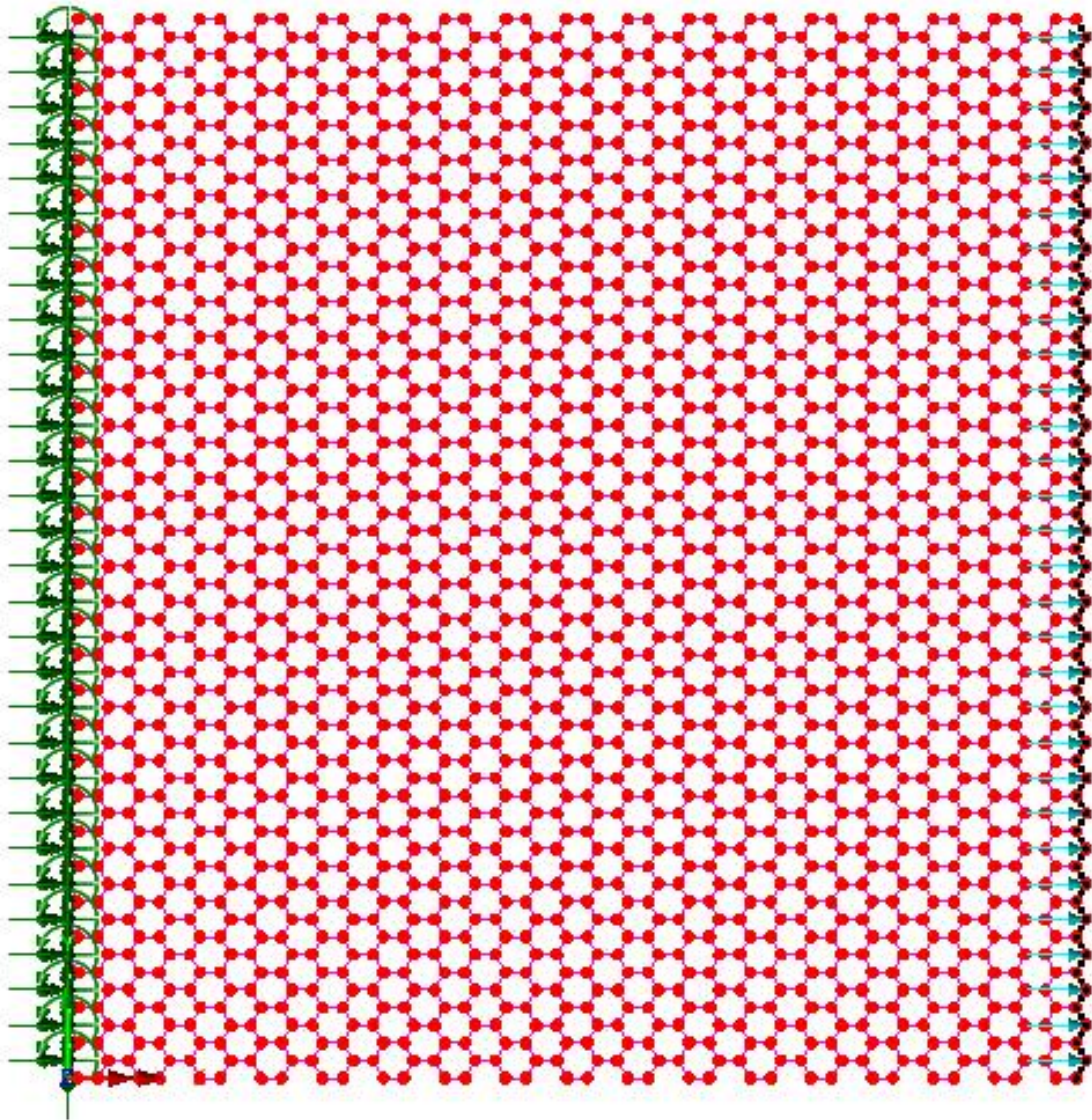


Εικόνα 5.1.3 :Απεικόνιση της διάστασης 6x6





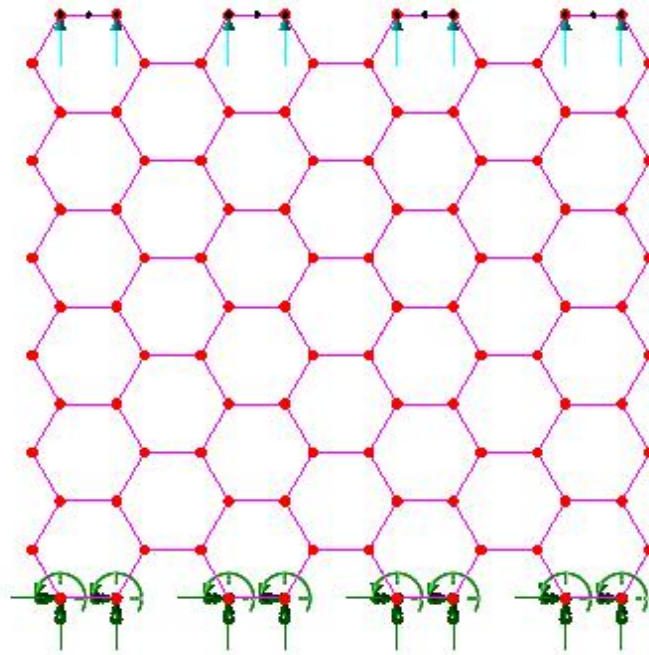
Εικόνα 5.1.4 :Απεικόνιση της διάστασης 8x8



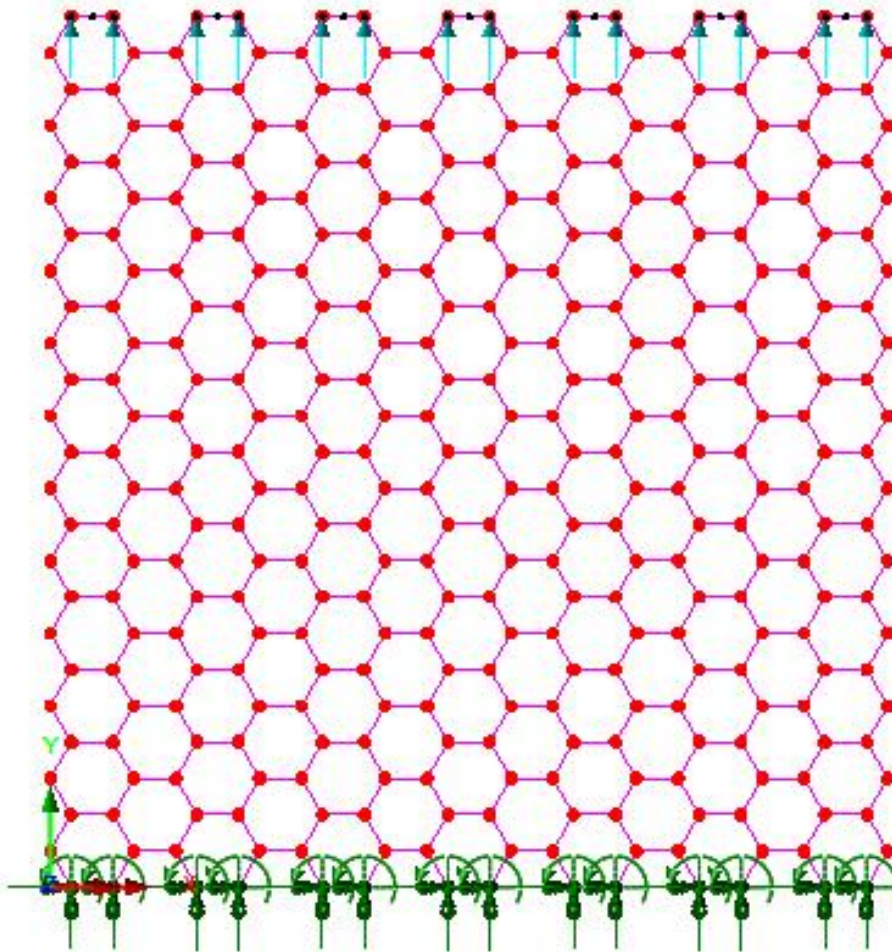
Εικόνα 5.1.5 :Απεικόνιση της διάστασης 10x10

Για τις διαστάσεις στον Y άξονα:

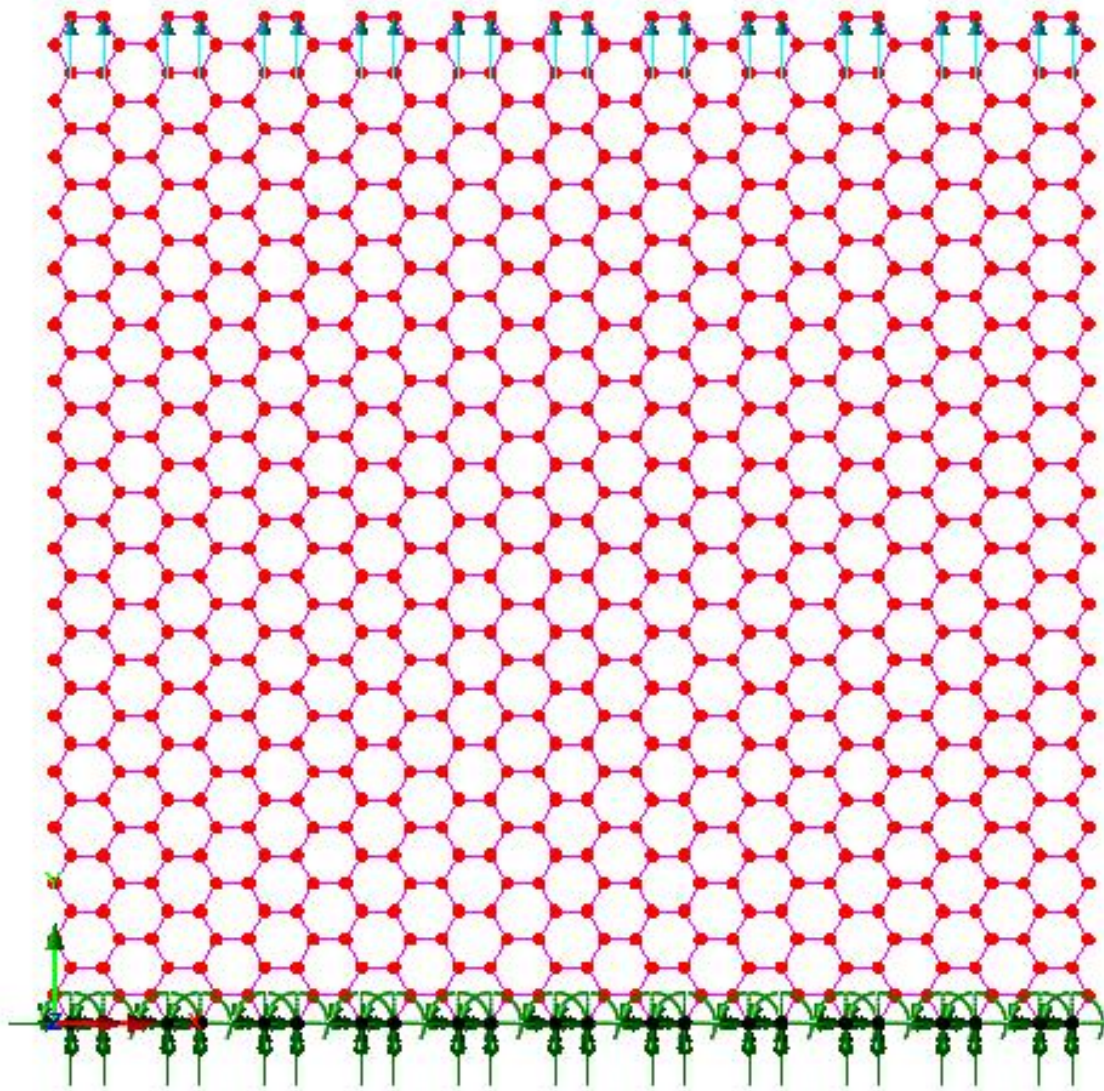




Εικόνα 5.1.6 :Απεικόνιση της διάστασης 2x2

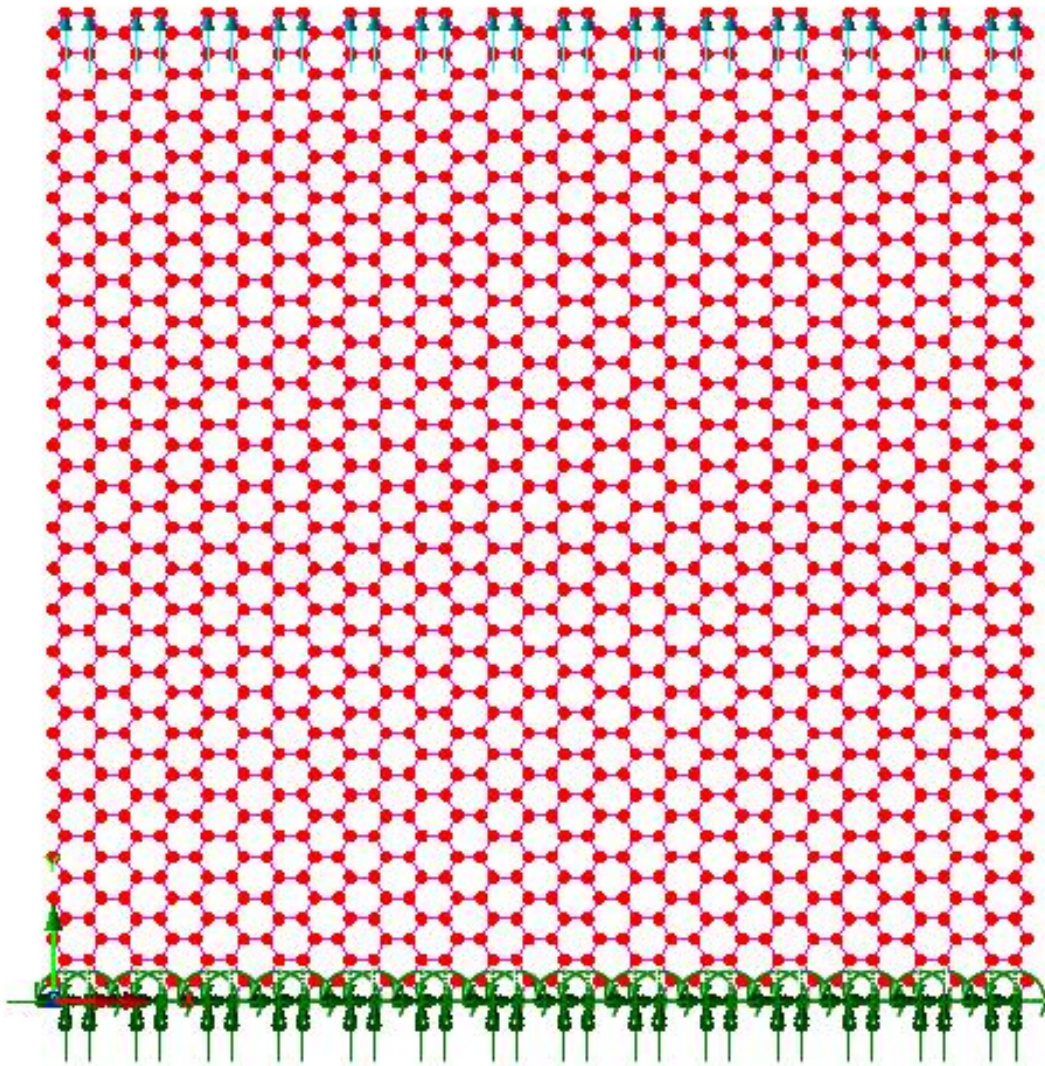


Εικόνα 5.1.7 :Απεικόνιση της διάστασης 4x4

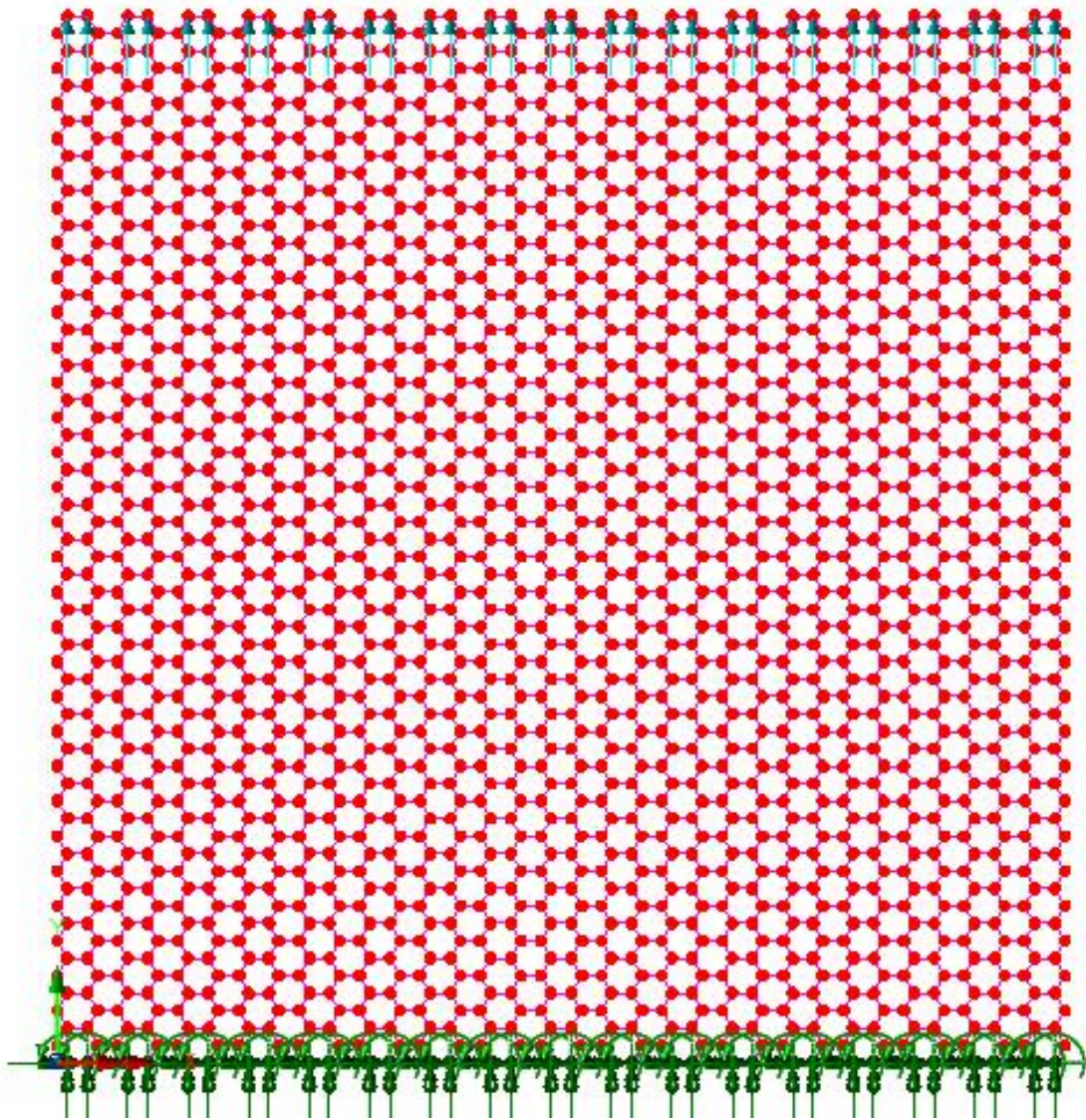


Εικόνα 5.1.8 :Απεικόνιση της διάστασης 6x6





Εικόνα 5.1.9 :Απεικόνιση της διάστασης 8x8



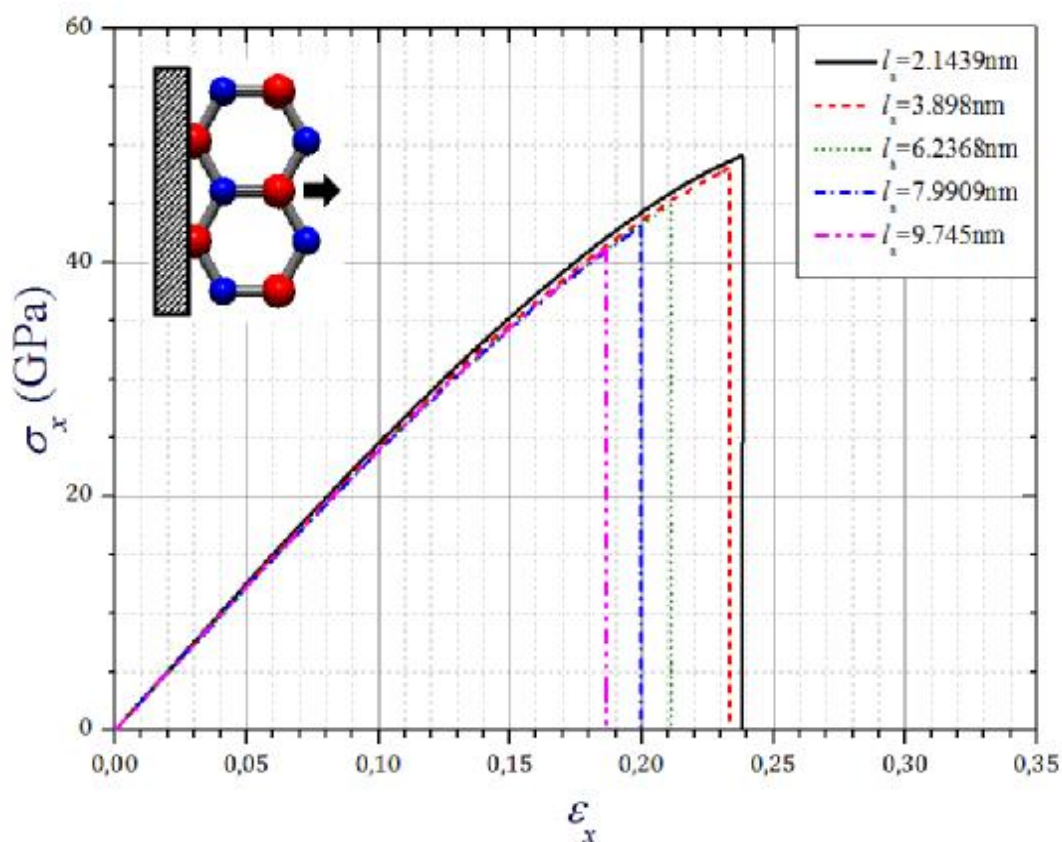
Εικόνα 5.1.10 :Απεικόνιση της διάστασης 10x10

Για τα παραπάνω φύλλα νιτριδίου του γαλλίου υπολογίστηκαν αριθμητικά ιδιότητες όπως το μέτρο ελαστικότητας του υλικού, το όριο διαρροής του, το λόγο Poisson, την αντοχή σε εφελκυσμό, τη διάταση θραύσης και τη δυσθραυστότητα στις δύο διευθύνσεις του επιπέδου  $x,y$ .



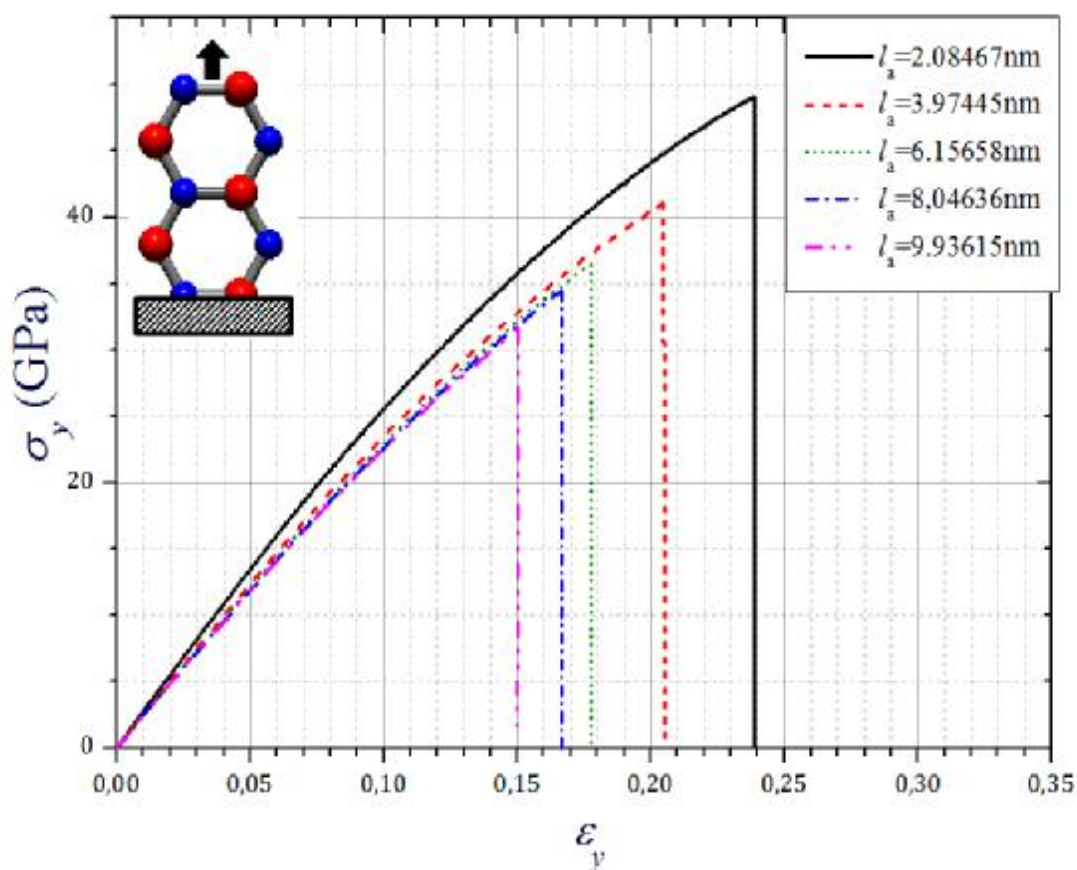
## 5.2 ΥΠΟΛΟΓΙΣΜΟΣ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ ΙΔΙΟΤΗΤΩΝ ΦΥΛΛΩΝ ΝΙΤΡΙΔΙΟΥ ΤΟΥ ΓΑΛΛΙΟΥ

Όλες οι πληροφορίες που χρειάστηκαν για την πραγματοποίηση των διαγραμμάτων μέτρου ελαστικότητας, λόγου Poisson, δυσθραυστότητας, ορίου αντοχής και παραμόρφωσης αστοχίας συλλέχθηκαν από τις καμπύλες τάσης - παραμόρφωσης, οι οποίες με τη σειρά τους κατασκευάστηκαν αξιοποιώντας τα δεδομένα που μας παρείχε το λογισμικό πακέτο πεπερασμένων στοιχείων FEA LUSAS. Συγκεκριμένα, σε όλα τα φύλλα νιτριδίου του γαλλίου μέσω του LUSAS εφαρμόστηκε μία ομοιόμορφη κομβική μετατόπιση  $d_{uy}$  κατά τον άξονα  $y$  σε όλους τους κόμβους του επάνω armchair άκρου, ίση με το αρχικό μήκος  $l_y$ . Στην συνέχεια το πρόγραμμα αυτό υπολογίζει για κάθε τιμή μετατόπισης την αντίστοιχη δύναμη αντίδρασης που αναπτύσσεται στους πάνω κόμβους του φύλλου του νιτριδίου του γαλλίου. Έπειτα υπολογίστηκε η παραμόρφωση,  $\varepsilon_y = d_{uy}/l_y$  όπου  $l_y$  το αρχικό μήκος κατά τον άξονα  $y$ . Επίσης υπολογίστηκε και η τάση  $\sigma_y = F/(l_y \cdot t)$  όπου  $F$  είναι η δύναμη που αναπτύσσεται στα armchair άκρα και  $t$  το πάχος ενός μονού φύλλου νιτριδίου του γαλλίου. Η αντίστοιχη διαδικασία γίνεται εφαρμόζοντας μια ομοιόμορφη κομβική μετατόπιση  $d_{ux}$  κατά τον άξονα  $x$  σε όλους τους κόμβους του δεξιού zigzag άκρου. Έτσι, κατασκευάζονται οι καμπύλες τάσης - παραμόρφωσης, οι οποίες παρουσιάζονται αναλυτικά παρακάτω.



**Διάγραμμα 5.2.1:** Μεταβολή της τάσης  $\sigma_x$  συναρτήσει της παραμόρφωσης  $\varepsilon_x$  για την μετατόπιση  $d_{ux}$  που εφαρμόστηκε στα zigzag άκρα.

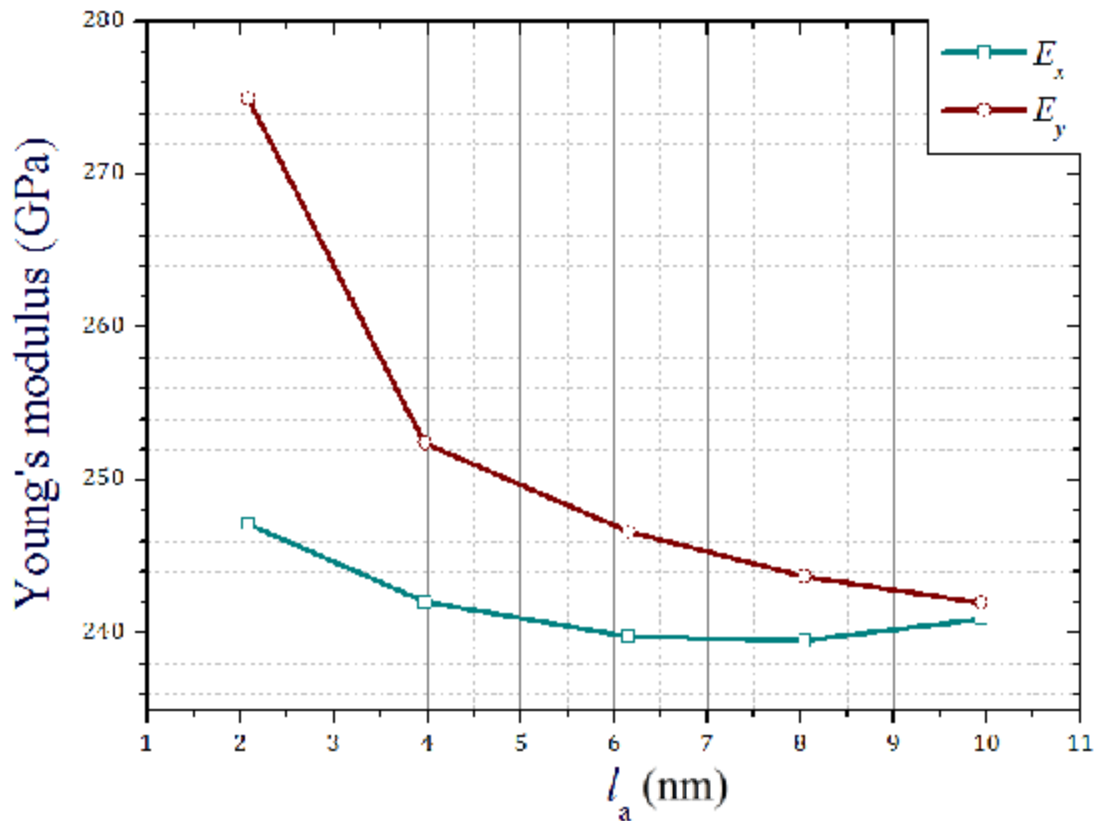
Στο διάγραμμα 5.1 παρουσιάζεται η μεταβολή της τάσης  $\sigma_x$  σε συνάρτηση με την παραμόρφωση  $\epsilon_x$  για την μετατόπιση  $d_{ux}$  που εφαρμόσθηκε στα δεξιά zigzag άκρα των μοντέλων του φύλλου νιτριδίου του γαλλίου. Παρατηρώντας το διάγραμμα φαίνεται ότι όσο αυξάνεται η παραμόρφωση  $\epsilon_x$  των φύλλων νιτριδίου του γαλλίου τόσο αυξάνεται και η τάση  $\sigma_x$ . Επίσης βλέπουμε ότι για όλες τις γεωμετρίες των φύλλων νιτριδίου του γαλλίου η συμπεριφορά των καμπυλών σχεδόν συμπίπτει και η αστοχία ακολουθεί μια αναλογία σε σχέση με τις διαστάσεις των φύλλων. Στο τέλος όλων των καμπυλών βλέπουμε την κατακόρυφη πτώση της τάσης, το οποίο συμβαίνει όταν τα μοντέλα υπόκεινται σε θραύση.



**Διάγραμμα 5.2.2:** Μεταβολή της τάσης  $\sigma_y$  συναρτήσει της παραμόρφωσης  $\epsilon_y$  για την μετατόπιση  $d_{uy}$  που εφαρμόσθηκε στα armchair άκρα.

Στο διάγραμμα 5.2.2 παρουσιάζεται η μεταβολή της τάσης  $\sigma_y$  σε συνάρτηση με την παραμόρφωση  $\epsilon_y$  για την μετατόπιση  $d_{uy}$  που εφαρμόσθηκε στα άνω armchair άκρα των μοντέλων του φύλλου νιτριδίου του γαλλίου. Παρατηρώντας το διάγραμμα φαίνεται ότι όσο αυξάνεται η παραμόρφωση  $\epsilon_y$  των φύλλων νιτριδίου του γαλλίου τόσο αυξάνεται και η τάση  $\sigma_y$ . Επίσης βλέπουμε ότι για όλες τις γεωμετρίες των φύλλων νιτριδίου του γαλλίου, εξαιρουμένου του φύλλου με την μικρότερη διάσταση, η συμπεριφορά των καμπυλών σχεδόν συμπίπτει και η αστοχία ακολουθεί μια αναλογία σε σχέση με τις διαστάσεις των φύλλων. Στο φύλλο με την μικρότερη διάσταση παρατηρούμε ότι και η τάση είναι υψηλότερη και η αστοχία αργεί να επέλθει. Στο τέλος όλων των καμπυλών βλέπουμε την κατακόρυφη πτώση της τάσης, το οποίο συμβαίνει όταν τα μοντέλα υπόκεινται σε θραύση.

Με σκοπό τον υπολογισμό του μέτρου ελαστικότητας των φύλλων νιτριδίου του γαλλίου κατά μήκος του  $y$  άξονα, εφαρμόσθηκε μία ομοιόμορφη κομβική μετατόπιση  $d_{uy}$  κατά τον άξονα  $y$  σε όλους τους κόμβους του επάνω άκρου, δηλαδή εφαρμόσθηκε μετατόπιση στα  $airchair$  άκρα. Έπειτα το μέτρο ελαστικότητας  $E_y$  των φύλλων γραφενίου υπολογίστηκε από την ακόλουθη εξίσωση:  $E = \sigma/\epsilon$  όπου  $\sigma$  η τάση στο πρώτο κόμβο εφελκυσμού και  $\epsilon$  η παραμόρφωση στον πρώτο κόμβο εφελκυσμού. Η συμπεριφορά του παρουσιάζεται στο διάγραμμα 5.2.3.



**Διάγραμμα 5.2.3:** Μεταβολή του μέτρου ελαστικότητας συναρτήσει του μήκους  $l_a$ .

Παρατηρούμε από την καμπύλη ότι όσο μεγαλύτερο το μήκος  $l_a$  του φύλλου νιτριδίου του γαλλίου, τόσο μικρότερο είναι το μέτρο ελαστικότητας. Συγκρίνοντας τις μεταβολές του  $E_x$  και του  $E_y$  παρατηρούμε ότι καθ' όλο το μήκος  $l_a$ , το  $E_y$  έχει μεγαλύτερη τιμή από το  $E_x$ .

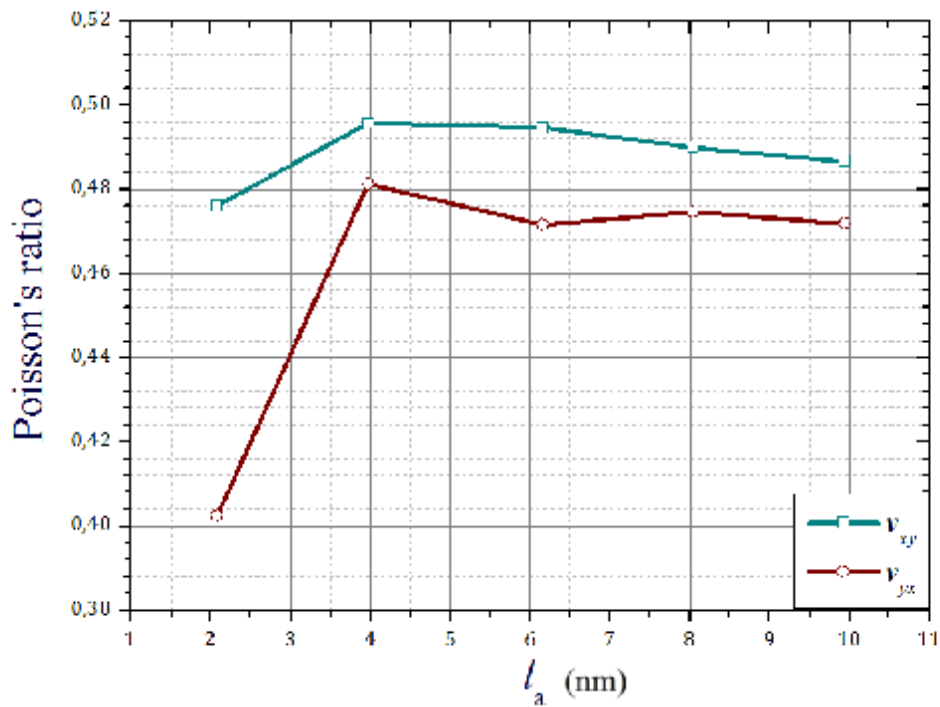
Ο λόγος Poisson  $\nu_{yx}$  υπολογίστηκε χρησιμοποιώντας την παρακάτω εξίσωση:

$$n_{yx} = \frac{e_x}{e_y} = \frac{\frac{\Delta u_x}{l_x}}{\frac{\Delta u_y}{l_y}} \quad 5.2.1$$

και αντίστοιχα ο λόγος Poisson  $\nu_{xy}$  υπολογίστηκε χρησιμοποιώντας την εξίσωση:

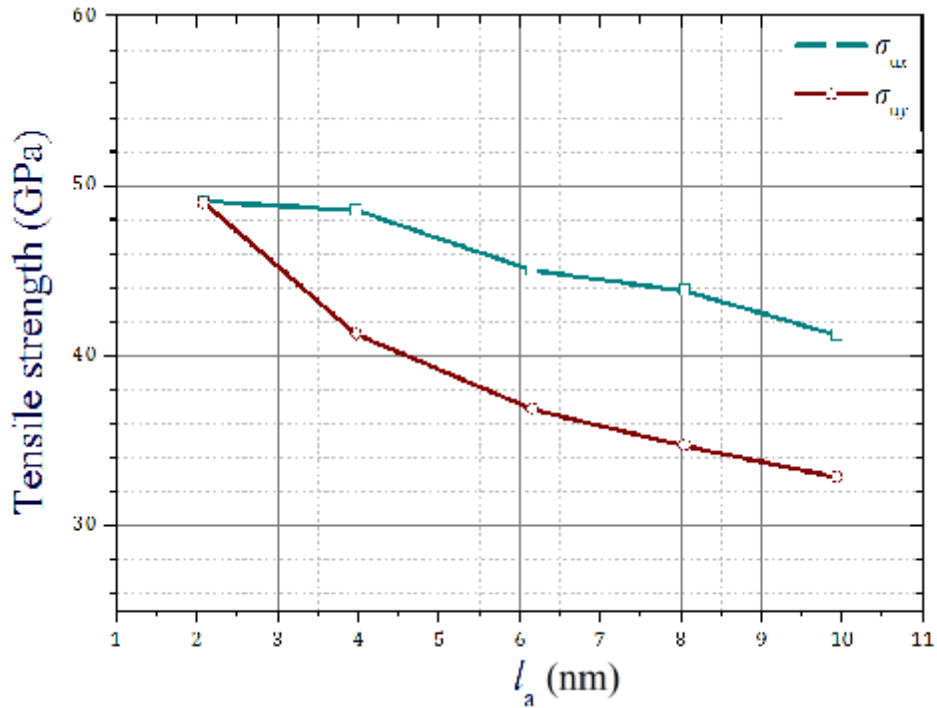


$$n_{xy} = \frac{e_y}{e_x} = \frac{l_y}{l_x} \frac{\Delta u_y}{\Delta u_x} \quad 5.2.2$$



Διάγραμμα 5.2.4: Μεταβολή του λόγου Poisson συναρτήσει του μήκους  $l_a$ .

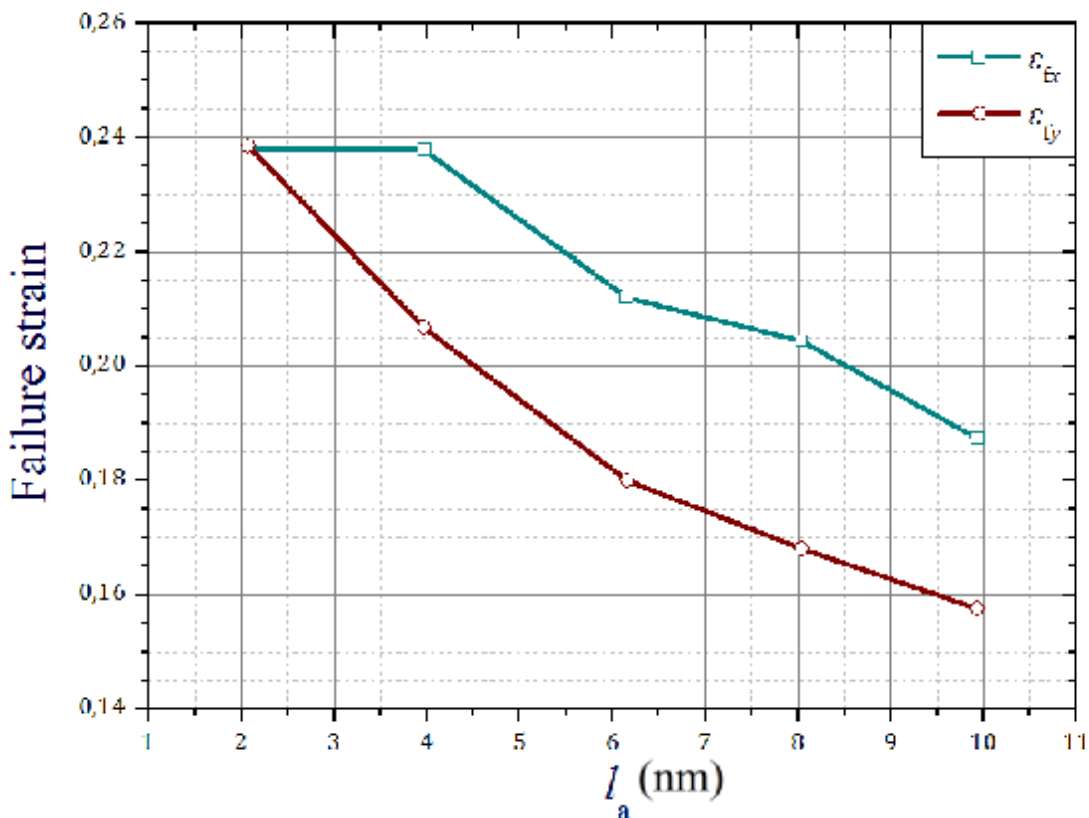
Το παραπάνω διάγραμμα απεικονίζει την μεταβολή του  $v_{yx}$  και  $v_{xy}$  των φύλλων νιτριδίου του γαλλίου σε σχέση με το μήκος  $l_a$ , για την μετατόπιση  $d_{uy}$  που εφαρμόστηκε στα πάνω armchair άκρα και  $d_{ux}$  που εφαρμόστηκε στα δεξιά zigzag άκρα. Οι καμπύλες του σχήματος έχουν παρόμοια συμπεριφορά. Στην συνέχεια παρουσιάζεται το διάγραμμα ορίου διαρροής.



Διάγραμμα 5.2.5: Μεταβολή του ορίου διαρροής συναρτήσει του μήκους  $l_a$

Το παραπάνω διάγραμμα παρουσιάζει την μεταβολή των ορίων διαρροής  $\sigma_{ux}$  και  $\sigma_{uy}$  των φύλλων νιτριδίου του γαλλίου σε συνάρτηση με το μήκος  $l_a$  για τις μετατοπίσεις  $d_{ux}$  και  $d_{uy}$ . Παρατηρούμε ότι το  $\sigma_{uy}$  με την αύξηση του μήκους μειώνεται. Γενικότερα όμως σε κάθε σημείο του άξονα x το  $\sigma_{ux}$  είναι μεγαλύτερο του  $\sigma_{uy}$ .

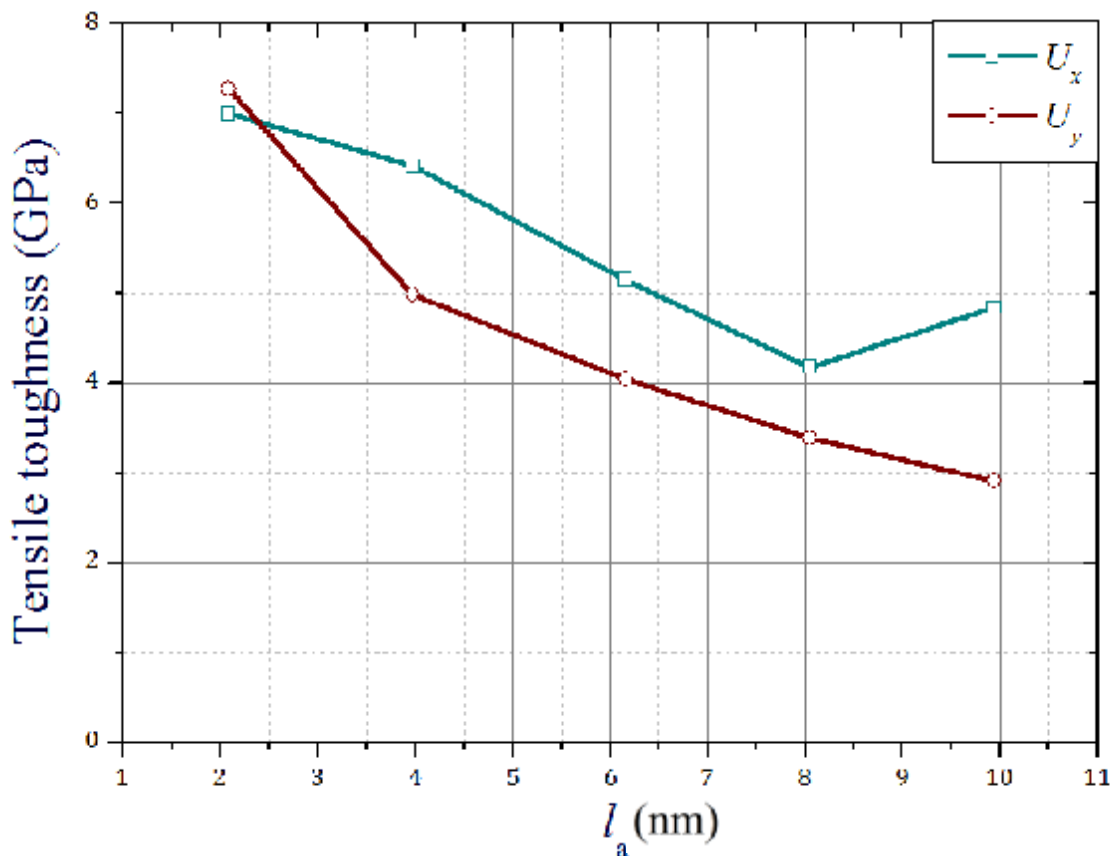
Παρακάτω βρίσκεται το διάγραμμα που δείχνει τη μεταβολή της παραμόρφωσης στην οποία και αστοχούν τα μοντέλα,  $\varepsilon_{fx}$  και  $\varepsilon_{fy}$  (failure strain) των φύλλων νιτριδίου του γαλλίου σε συνάρτηση με τα μήκη  $l_a$ , για την μετατόπιση  $d_{ux}$  που εφαρμόστηκε στα δεξιά zigzag άκρα και  $d_{uy}$  που εφαρμόστηκε στα πάνω armchair άκρα.



**Διάγραμμα 5.2.6:** Μεταβολή της παραμόρφωσης αστοχίας συναρτήσει του μήκους  $l_a$ .

Στο παραπάνω σχήμα παρατηρείται η συμπεριφορά της παραμόρφωσης στην οποία αστοχούν τα φύλλα νιτριδίου του γαλλίου σε σχέση με το μήκος  $l_a$  για κάθε περίπτωση. Η καμπύλη του  $\epsilon_{fx}$  αρχικά μένει σταθερή και στην πορεία μειώνεται, ενώ το  $\epsilon_{ly}$  έχει ραγδαία μείωση με την αύξηση του μήκους. Αξίζει να σημειωθεί ότι για μικρά μήκη οι τιμές της παραμόρφωσης είναι σχετικά κοντά, στο σημείο που έχουν και ένα κοινό σημείο, ύστερα από το οποίο με την αύξηση του μήκους  $l_y$  οι τιμές της παραμόρφωσης απομακρύνονται.

Τέλος ολοκληρώνοντας την καμπύλη τάσης-παραμόρφωσης εξάγαμε δεδομένα για την δυσθραυστότητα του υλικού. Στο παρακάτω διάγραμμα απεικονίζεται η συμπεριφορά της δυσθραυστότητας του φύλλου νιτριδίου του γαλλίου στο σημείο αστοχίας συναρτήσει του μήκους  $l_a$ .



**Διάγραμμα 5.2.7:** Μεταβολή της δυσθραυστότητας συναρτήσει του μήκους  $l_a$ .

Στο παραπάνω διάγραμμα παρατηρούμε ότι η συμπεριφορά και των δύο καμπυλών είναι γενικά φθίνουσα εκτός από το φύλλο του νιτριδίου του γαλλίου με την μεγαλύτερη διάσταση όταν η μετατόπιση εφαρμόζεται στο zigzag άκρο όπου η τιμή της δυσθραυστότητας αυξάνει. Επίσης παρατηρούμε ότι στο μικρότερο σε διάσταση φύλλο όταν η μετατόπιση εφαρμόζεται στο armchair άκρο, η τιμή της δυσθραυστότητας είναι μεγαλύτερη από εκείνη όταν η μετατόπιση εφαρμόζεται στο zigzag άκρο ενώ γενικά συμβαίνει το αντίθετο.

## 6 ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ

Το νιτρίδιο του γαλλίου είναι ένα υλικό που έχει να προσφέρει πολλά στην επιστημονική κοινότητα και στη βιομηχανία. Ήδη από τη στιγμή που ανακαλύφθηκε έχει προάγει πολλές εφαρμογές. Έγινε άλμα σε πολλούς τομείς της βιομηχανίας. Με την ανακάλυψή του κατασκευάστηκαν οι μπλε δίοδοι εκπομπής φωτός (LED) και κατά συνέπεια οι λευκοί δίοδοι εκπομπής φωτός (LED) που είναι ένας συνδυασμός κόκκινου, πράσινου και μπλε φωτός. Κατασκευάστηκαν οι μπλε δίοδοι εκπομπής λέιζερ που έδωσαν την ώθηση για την κατασκευή των Blu-ray δίσκων και εξελίχθηκε η αποθήκευση οπτικοακουστικού υλικού. Εξέλιξε την κατασκευή κυκλωμάτων μικροκυμάτων για αισθητήρια συστήματα, ραντάρ και κεραιές, διότι με την κατασκευή των κυκλωμάτων αυτών από νιτρίδιο του γαλλίου μειώθηκε κι άλλο ο λεγόμενος «θόρυβος» από παρεμβολές λόγω του μήκους κύματος εκπομπής ηλεκτρομαγνητικών κυμάτων. Επίσης με τη χρήση αυτού του υλικού στα ηλιακά κύτταρα αυξήθηκε η απόδοση των ηλιακών συλλεκτών και με τη χρήση νανοφίλμ νιτρίδιου του γαλλίου γίνεται και η κατασκευή, των γνωστών σε όλων μας, smartphones.

Η πληθώρα των εφαρμογών που έχει βρει το συγκεκριμένο υλικό, αποδεικνύει τη σπουδαιότητά του για την ανθρώπινη κοινωνία. Έχει ήδη βελτιώσει τις συνθήκες άνεσης της ζωής του ανθρώπου από τις LED τηλεοράσεις και τα smartphones ως την παραγωγή ηλεκτρικής ενέργειας και ζεστού νερού χρήσης. Αναμένονται κι άλλες εφαρμογές που θα βελτιώσουν την ποιότητα ζωής του ανθρώπου στον τομέα της βιομηχανίας της υγείας και της «βαριάς» βιομηχανίας.

Στην παρούσα πτυχιακή εργασία ασχοληθήκαμε με τη μηχανική συμπεριφορά του νιτρίδιου του γαλλίου κατά την εφέλκυσή του στη μη-γραμμική περιοχή. Χρησιμοποιήσαμε εξισώσεις που περιγράφουν τη συμπεριφορά του στη συγκεκριμένη περιοχή και τις επιλύσαμε χρησιμοποιώντας το λογισμικό πακέτο πεπερασμένων στοιχείων fea LUSAS.

Κατασκευάστηκε η γεωμετρία ενός μονοστρωματικού φύλλου νιτρίδιου του γαλλίου με ατομικό πάχος, σε ένα δισδιάστατο μοντέλο για διαφορετικές διαστάσεις. Δημιουργήθηκε η εξαγωνική δομή μεταξύ των ατόμων γαλλίου και αζώτου και προσομοιώθηκαν οι χημικοί δεσμοί μεταξύ των ατόμων, αυτών, με κατάλληλα πεπερασμένα στοιχεία τύπου ελατηρίου όπου προσδιορίστηκαν τα μέτρα δυσκαμψίας τους με τη βοήθεια του μέτρου ελαστικότητας του υλικού, της διατομής του υλικού και της αξονικής διάστασης. Συμπεραίνουμε ότι η προ επεξεργασία του μοντέλου κατ' αυτόν τον τρόπο είναι σχετικά απλή και κυρίως ότι το υπολογιστικό κόστος αυτής της μεθόδου επίλυσης είναι ιδιαίτερα χαμηλό. Αφού πακτώθηκε το

φύλλο νιτρίδιου του γαλλίου στο ένα του άκρο, υπέστη κατάλληλη φόρτιση και αναλογική για τις διάφορες διαστάσεις αυτών των μονοστρωματικών φύλλων και στις δύο διευθύνσεις, στον άξονα των  $x$  (zigzag άκρο του μοντέλου) και στον άξονα των  $y$  (armchair άκρο του μοντέλου) του καρτεσιανού συστήματος συντεταγμένων.

Η επίλυση των εξισώσεων πραγματοποιήθηκε μέσω του λογισμικού πακέτου πεπερασμένων στοιχείων fea LUSAS με τη μέθοδο Newton – Raphson για όλες τις διαστάσεις και για όλες τις διευθύνσεις φορτίσεων. Εξήχθησαν σημεία και διαγράμματα τάσης – παραμόρφωσης από τα οποία υπολογίσαμε για τις διάφορες διαστάσεις και φορτίσεις, το όριο διαρροής του υλικού στη νανοκλίμακα, την παραμόρφωση αστοχίας του, το μέτρο ελαστικότητάς του, το λόγο Poisson και τη δυσθραυστότητά του.

Εν τέλει συμπεραίνουμε πως τα μοντέλα αστοχούν αναλογικά με μικρότερη παραμόρφωση εκείνου της μεγαλύτερης διάστασης και με μεγαλύτερη παραμόρφωση εκείνου της μικρότερης διάστασης. Αυτό ισχύει είτε η φόρτιση εφαρμόζεται στο zigzag άκρο είτε στο armchair άκρο. Διαπιστώνουμε επίσης πως οι καμπύλες τάσης – παραμόρφωσης μεταξύ των διαφορετικών φύλλων παρουσιάζουν παρόμοια συμπεριφορά μεταξύ τους και εκείνες όπου η μετατόπιση ασκείται στο zigzag άκρο και εκείνες όπου η μετατόπιση ασκείται στο armchair άκρο με μόνη διαφορά τη διάσταση  $2 \times 2$  ημόπου η μετατόπιση εφαρμόζεται στο armchair άκρο, όπου η τάση είναι υψηλότερη των υπόλοιπων διαστάσεων της ίδιας φόρτισης και η παραμόρφωση αστοχίας μεγαλύτερη.

Συμπεραίνουμε πως το μέτρο ελαστικότητας μειώνεται όσο μειώνεται η διάσταση του φύλλου και τα μοντέλα όπου η μετατόπιση ασκείται στο armchair άκρο διατηρούν υψηλότερες τιμές από εκείνα που η μετατόπιση ασκείται στο zigzag άκρο.

Ο λόγος Poisson είναι μικρότερος για το φύλλο με τη μικρότερη διάσταση, στην πορεία αυξάνει και διατηρείται πιο υψηλός με κάποιες διακυμάνσεις και όσον αφορά τη φόρτιση κατά το zigzag άκρο και όσον αφορά τη φόρτιση κατά το armchair άκρο. Οι τιμές του λόγου Poisson είναι υψηλότερες στα μοντέλα όπου η μετατόπιση ασκείται στο zigzag άκρο.

Όσον αφορά το όριο διαρροής, οι τιμές συγκλίνουν για τα μοντέλα της μικρότερης διαστάσεις και όσο αυξάνουν οι διαστάσεις των μοντέλων, το όριο διαρροής μειώνεται με τα μοντέλα που φορτίζονται στο zigzag άκρο να έχουν υψηλότερες τιμές ορίου διαρροής από τα μοντέλα που φορτίζονται κατά το armchair άκρο. Το ίδιο ακριβώς ισχύει και για την παραμόρφωση αστοχίας.

Τέλος, όσον αφορά τη δυσθραυστότητα του υλικού, για τα μοντέλα της μικρότερης διάστασης, η τιμή της δυσθραυστότητας είναι υψηλότερη για το μοντέλο στο οποίο η μετατόπιση ασκείται στο armchair άκρο, ενώ στις υπόλοιπες διαστάσεις υψηλότερη τιμή δυσθραυστότητας διατηρούν τα μοντέλα στα οποία η μετατόπιση εφαρμόζεται στο zigzag άκρο, ενώ και στις δύο περιπτώσεις η τιμή της δυσθραυστότητας φθίνει καθώς αυξάνονται οι διαστάσεις των μοντέλων.

Συνοψίζοντας, παρατηρήσαμε πως καλύτερες μηχανικές ιδιότητες κατέχουν τα μοντέλα με τη μικρότερη διάσταση και μάλιστα όταν φορτίζονται στο zigzag άκρο τους.

Από την εκπόνηση της παρούσας πτυχιακής εργασίας, κερδίσαμε σημαντικές γνώσεις πάνω στον ανερχόμενο τομέα της τεχνολογίας της νανοκλίμακας για τα διάφορα υλικά που έχουν ήδη μελετηθεί και κατανοήσαμε την ανάγκη να μελετηθούν ακόμη περισσότερα. Διευρύναμε τους ορίζοντές μας πέρα από τα όρια του ορατού και κατανοήσαμε τη σημαντικότητα της ανάπτυξης της επιστήμης και της βιομηχανίας προς όφελος του ανθρώπου στον προσοδοφόρο τομέα της νανοτεχνολογίας, διότι μπορεί να επιφέρει πολλά ακόμη ποιοτικά άλματα στην ποιότητα ζωής της ανθρώπινης κοινωνίας.





## ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

1. [http://el.wikipedia.org/wiki/%CE%93%CE%AC%CE%BB%CE%BB%CE%B9%CE%BF#.CE.94.CF.85.CE.B1.CE.B4.CE.B9.CE.BA.CE.AD.CF.82\\_.CE.B5.CE.BD.CF.8E.CF.83.CE.B5.CE.B9.CF.82\\_.CE.BC.CE.B5\\_.CE.9D.2C\\_P.2C\\_As.2C\\_Sb](http://el.wikipedia.org/wiki/%CE%93%CE%AC%CE%BB%CE%BB%CE%B9%CE%BF#.CE.94.CF.85.CE.B1.CE.B4.CE.B9.CE.BA.CE.AD.CF.82_.CE.B5.CE.BD.CF.8E.CF.83.CE.B5.CE.B9.CF.82_.CE.BC.CE.B5_.CE.9D.2C_P.2C_As.2C_Sb)
2. Zhiguo Wang, Xiaotao Zu, Fei Gao, and William J. Weber «Atomistic simulation of brittle to ductile transition in GaN nanotubes», 2006
3. <http://physicsgg.me/2014/10/12/%CE%AC%CE%BE%CE%B9%CE%B6%CE%B5-%CF%84%CE%BF-%CE%BC%CF%80%CE%BB%CE%B5-led-%CE%BD%CE%B1-%CE%B2%CF%81%CE%B1%CE%B2%CE%B5%CF%85%CE%B8%CE%B5%CE%AF-%CE%BC%CE%B5-%CF%84%CE%BF-%CE%BD%CF%8C%CE%BC%CF%80%CE%B5/>
4. Dongwei Xu, Haiying He, Ravindra Pandey, and Shashi P. Karna «Stacking and electric field effects on the electronic properties of the layered GaN», 2013
5. Πασχαλίδης Γιώργος Συνεργάτης Εργαστηρίου Υγιεινής και Προστασίας Περιβάλλοντος Τμήματος Ιατρικής Δημοκρίτειου Πανεπιστημίου Θράκης «Νανοτεχνολογία Πρόκληση ή απειλή;», 2008
6. Επιτροπή των Ευρωπαϊκών κοινοτήτων «Νανοτεχνολογία», 2004
7. [http://www.nano.gr/nanotechnology\\_history.asp](http://www.nano.gr/nanotechnology_history.asp)
8. Τρακάκης Γεώργιος « Μηχανικές ιδιότητες νανοσύνθετων υλικών», 2010
9. <http://el.wikipedia.org/wiki/%CE%93%CF%81%CE%B1%CF%86%CE%AD%CE%BD%CE%B9%CE%BF>
10. [http://el.wikipedia.org/wiki/%CE%92%CF%8C%CF%81%CE%B9%CE%BF#.CE.9F\\_.CE.B2.CE.B9.CE.BF.CE.BB.CE.BF.CE.B3.CE.B9.CE.BA.CF.8C.CF.82\\_.CF.81.CF.8C.CE.BB.CE.BF.CF.82\\_.CF.84.CE.BF.CF.85\\_.CE.B2.CE.BF.CF.81.CE.AF.CE.BF.CF.85](http://el.wikipedia.org/wiki/%CE%92%CF%8C%CF%81%CE%B9%CE%BF#.CE.9F_.CE.B2.CE.B9.CE.BF.CE.BB.CE.BF.CE.B3.CE.B9.CE.BA.CF.8C.CF.82_.CF.81.CF.8C.CE.BB.CE.BF.CF.82_.CF.84.CE.BF.CF.85_.CE.B2.CE.BF.CF.81.CE.AF.CE.BF.CF.85)
11. R. V. Gorbachev, I. Riaz, R. R. Nair, R. Jalil, L. Britnell, B. D. Belle, E. W. Hill, K. S. Novoselov, K. Watanabe, T. Taniguchi, A. K. Geim, P. Blake «Hunting for Monolayer Boron Nitride: Optical and Raman Signatures», 2011

12. Ki Kang Kim, Allen Hsu, XiaotingJia, Soo Min Kim, Yumeng Shi, Mario Hofmann, Daniel Nezich, Joaquin F. Rodriguez-Nieva, Mildred Dresselhaus, Tomas Palacios, and Jing Kong «Synthesis of Monolayer Hexagonal Boron Nitride on Cu Foil Using Chemical Vapor Deposition», 2011
13. Nasim Alem, Rolf Erni, Christian Kisielowski, Marta D. Rossell, Will Gannett and A. Zettl « Atomically thin hexagonal boron nitride probed by ultrahigh-resolution transmission electron microscopy», 2009
14. <http://www.tovima.gr/science/article/?aid=614955>
15. [http://el.wikipedia.org/wiki/%CE%9C%CE%AD%CE%B8%CE%BF%CE%B4%CE%BF%CF%82\\_%CF%80%CE%B5%CF%80%CE%B5%CF%81%CE%B1%CF%83%CE%BC%CE%AD%CE%BD%CF%89%CE%BD\\_%CF%83%CF%84%CE%BF%CE%B9%CF%87%CE%B5%CE%AF%CF%89%CE%BD](http://el.wikipedia.org/wiki/%CE%9C%CE%AD%CE%B8%CE%BF%CE%B4%CE%BF%CF%82_%CF%80%CE%B5%CF%80%CE%B5%CF%81%CE%B1%CF%83%CE%BC%CE%AD%CE%BD%CF%89%CE%BD_%CF%83%CF%84%CE%BF%CE%B9%CF%87%CE%B5%CE%AF%CF%89%CE%BD)
16. <http://el.wikipedia.org/wiki/%CE%9F%CF%80%CF%84%CE%BF%CE%B7%CE%BB%CE%B5%CE%BA%CF%84%CF%81%CE%BF%CE%BD%CE%B9%CE%BA%CE%AE>
17. [http://physics.teiath.gr/physics/opto\\_lab/pdf%20files/photosensors.pdf](http://physics.teiath.gr/physics/opto_lab/pdf%20files/photosensors.pdf)
18. Παπανδρέου Γεωργία «Η ΦΩΤΟΒΟΛΤΑΪΚΗ ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΑ ΣΤΗΝ ΕΛΛΑΔΑ ΣΗΜΕΡΑ»
19. [http://el.swewe.net/word\\_show.htm/?1282125\\_1&%CE%A3%CF%85%CF%83%CE%BA%CE%B5%CF%85%CE%AD%CF%82\\_%CE%BC%CE%B9%CE%BA%CF%81%CE%BF%CE%BA%CF%85%CE%BC%CE%AC%CF%84%CF%89%CE%BD](http://el.swewe.net/word_show.htm/?1282125_1&%CE%A3%CF%85%CF%83%CE%BA%CE%B5%CF%85%CE%AD%CF%82_%CE%BC%CE%B9%CE%BA%CF%81%CE%BF%CE%BA%CF%85%CE%BC%CE%AC%CF%84%CF%89%CE%BD)
20. <http://www.makeuseof.com/tag/technology-explained-blurays-replacement-dvd/>
21. [http://el.wikipedia.org/wiki/%CE%94%CE%AF%CF%83%CE%BA%CE%BF%CF%82\\_Blu-ray](http://el.wikipedia.org/wiki/%CE%94%CE%AF%CF%83%CE%BA%CE%BF%CF%82_Blu-ray)
22. [http://en.wikipedia.org/wiki/Laser\\_diode](http://en.wikipedia.org/wiki/Laser_diode)
23. [http://el.wikipedia.org/wiki/%CE%94%CE%AF%CE%BF%CE%B4%CE%BF%CF%82\\_%CE%95%CE%BA%CF%80%CE%BF%CE%BC%CF%80%CE%AE%CF%82\\_%CE%A6%CF%89%CF%84%CF%8C%CF%82](http://el.wikipedia.org/wiki/%CE%94%CE%AF%CE%BF%CE%B4%CE%BF%CF%82_%CE%95%CE%BA%CF%80%CE%BF%CE%BC%CF%80%CE%AE%CF%82_%CE%A6%CF%89%CF%84%CF%8C%CF%82)
24. Στέφανος Κοζάνης «ΑΝΑΠΤΥΞΗ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑΤΟΣ ΠΕΠΕΡΑΣΜΕΝΩΝ ΣΤΟΙΧΕΙΩΝ ΜΕ ΕΦΑΡΜΟΓΕΣ ΣΕ ΤΡΙΣΔΙΑΣΤΑΤΑ ΠΡΟΒΛΗΜΑΤΑ ΜΗ ΓΡΑΜΜΙΚΗΣ ΣΥΜΠΕΡΙΦΟΡΑΣ», 1996

25. Π.Α.Κακαβάς «Η Μέθοδος των Πεπερασμένων Στοιχείων», 2013
26. <http://users.ntua.gr/caridis/methodoi/keimena/chap%2003/Chapter%2003.pdf>
27. A.K. Rappe, C.J. Casewit, K.S. Colwell, W.A. Goddard, W.M. Skiff, UFF, a full periodic table force-field for molecular mechanics and molecular dynamics simulations, Journal of American Chemical Society 114,10024–10035, 1992.
28. T. Belytschko, S.P. Xiao, G.C. Schatz, R.S. Ruoff, Atomistic simulations of nanotube fracture, Physical Review B, 65, 2002.
29. Norikatsu Koide, Nara-Ken Toyoda Gosei Co., Ltd, Method for manufacturing gallium nitride compound semiconductor, 1999
30. Bernard Beaumont, Pierre Gibart, Jean-Claude Guillaume, Gilles Nataf, Michel Vaille, Soufien Haffouz, CENTRE NATIONAL DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE (CNRS), Method for producing a gallium nitride epitaxial layer, 1998