

14. Бесов А.В., Морозов В.В. Возможности застосування плазмової технології в медицині // Металознавство та обробка металів.– 2002.– №3.– с.62–66.
15. Hu M.S., Evans A.G. The cracking and decohesion of thin films on ductile substrates // Acta Metall.– 1989. –v.37, No 3.– p.917–925.
16. Долгов Н.А. Метод определения модуля упругости газотермических покрытий // Порошковая металлургия. – 2004. – №7/8. – с.110–115.
17. Clyne T.W. Residual stresses in surface coatings and their effects on interfacial debonding //Key Engineering Materials. –1996.– v.116. с.117–330.

Надійшла 21.10.2009

УДК 621.354.34

АМОΡФНИЙ CdP_2 - ПЕРСПЕКТИВНИЙ МАТЕРІАЛ ДЛЯ ЕЛЕКТРОННОЇ ТЕХНІКИ

В.Ф. ЛАПШИН, В.К. МАКСИМОВ, А.А. ПОТАПОВ

Київський національний університет технологій та дизайну

Стаття присвячена проблемам матеріалознавства. Запропоновано новий напівпровідниковий аморфний матеріал – CdP_2 , досліджено його електропровідність та вплив на неї питомої густини енергетичних рівнів для електронів і ступеня їх компенсації. Запропонований матеріал може бути використано для виготовлення активних елементів електронної техніки

При виготовленні кристалічних напівпровідників виникають труднощі економічного характеру – висока собівартість проведення технологічних робіт, що пов'язана з потребою досягнення високого ступеню хімічної та структурної чистоти. Обмеження також пов'язані з функціональними можливостями – відносно низькою електропровідністю (концентрація домішків на 3 - 6 порядків менше від кількості атомів речовини) та чутливістю до радіації, яка викликає появу дефектів кристалічної ґратки.

Об'єкти та методи дослідження

Аморфні матеріали вільні від цих недоліків, ці матеріали нечутливі до домішок, не потребують високого ступеню очистки, стійкі до дії радіаційного опромінювання й мають значно вищу електропровідність.

Постановка завдання

Стаття присвячена дослідженню механізмів електропереносу носіїв заряду в аморфній речовині та розробці методів керування ними. На сьогоднішній день розробка аморфного матеріалу на основі дифосфиду кадмія (CdP_2) досягла такого рівня, що дає можливість целеспрямовано керувати його властивостями й утворювати електронні елементи, р-п переходи, перетворювачі сонячного світла в електричну енергію та прогнозувати їх поведінку в конкретних умовах експлуатації.

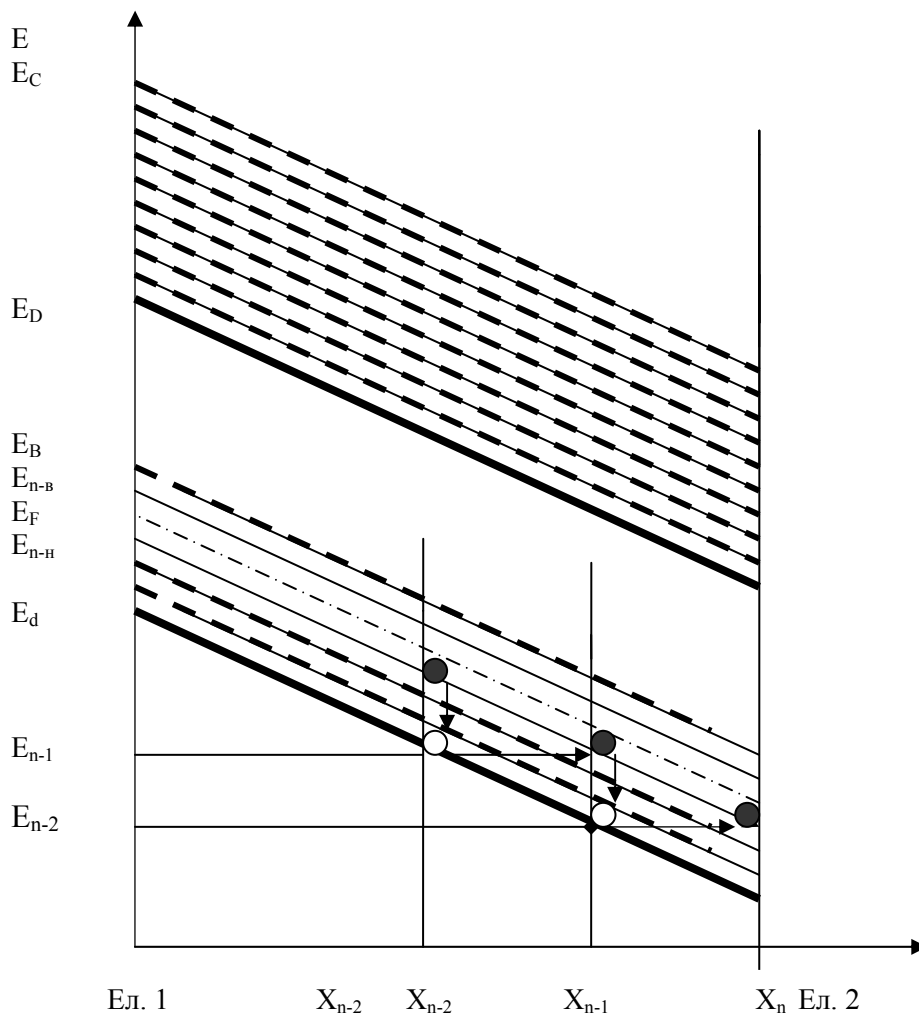
Результати та їх обговорення

Енергетичний спектр електронів в аморфному дифосфіді кадмію, до якого прикладено напругу, зображено на рисунку. Рівень E_C відображає дно зони провідності. Зона $E_{CD} = E_C - E_D$ та $E_{Bd} = E_B - E_d$ складаються відповідно з одно- та двозарядних енергетичних рівнів дефектних центрів, утворених

надлишковим кадмієм. Дно кожної із зон утворюють дельта смуги δE_D і δE_d шириною $10^{-3} - 10^{-5}$ еВ. На малюнку через невелику ширину, вони відображаються жирними лініями E_D і E_d (значення енергетичних рівнів дефектів кадмію у кристалі) [1, 2].

Енергетичні стани дельта смуг делокалізовані як за енергією так і за напрямом руху (квазіімпульсу), а дельти зон $\Delta_{CD} = E_{CD} - \delta E_D$ та $\Delta_{Bd} = E_{Bd} - \delta E_d$ мають рівні делокалізовані за енергією та локалізовані за напрямом квазіімпульсу. Ці рівні зображаються тонкою суцільною лінією, на яку накладаються більш товсті пунктирні лінії. Рівень Фермі E_F зображається штрих-пунктирною лінією.

Дельта зони Δ_{CD} та Δ_{Bd} виникають внаслідок втрати дальнього порядку кристалічної ґраткою. Енергетичні рівні в них, зберігаючи квазінеперервність за енергією, набувають якісних змін. Вони пов'язані з тим, що при аморфізації речовина утворюється зі структурних одиниць, в межах яких майже зберігається ближній порядок, подібний до кристалу. В результаті в межах структурної одиниці електрони мають такі ж властивості енергетичних рівнів, що й у кристали (вільно рухаються по енергетичному рівні у довільному напрямку). На межі структурних одиниць ці властивості зберігаються тільки для рівнів, енергії яких близькі до енергії дефектів кадмію у кристалі (E_D і E_d). На інших рівнях, енергія, яких більша за E_D , E_d , внаслідок втрати трансляційного порядку, зберігається не лише делокалізація за енергією, але виникає й локалізація за напрямом квазіімпульсу. Це не уможливорює вільний рух електронів через речовину по цим енергетичним рівням.



Розглянемо випадок, коли рівень Фермі знаходиться у зоні E_{Bd} при температурах близьких до нуля градусів Кельвіна. За енергетичною структурою, це метал. Виходячи з особливостей енергетичних рівнів зони, будемо називати речовину «аморфним металом». У металі всі стани нижче енергії Фермі E_F (при $T=0$) заповнені електронами, а всі стани з більшою енергією – повністю вільні. При підвищенні температури електрони виходять за межі поверхні Фермі, заповнюючи частково енергетично більш високі квантові стани. Внаслідок цього з обох боків поверхні Фермі утворюється тонкий шар частково заповнений електронами. Такий тонкий шар утворюється й при нагріванні «аморфного металу», але процес протікає по-іншому. На нашу думку, переходи між рівнями локалізованими за напрямом квазіімпульсу (зона Δ_{Bd}) відбуваються найбільш вірогідним шляхом, через посередника – делокалізовані рівні (смуги δE_d). У такому разі, утворення тонкого шару ($E_{nR}-E_{nI}$, виділеного на малюнку тонкими лініями) біля поверхні Фермі відбувається шляхом термічного збудження електронів зі смуги δE_d на рівні вище E_F та заповненням дірок, які у цьому процесі виникають у δE_d , електронами з рівнів в околі E_F . При накладанні зовнішнього електричного поля відбувається нахил усіх енергетичних рівнів зони. Під дією електричного поля електрон із тонкого шару переходить в електрод (точка x_n). На дірку, яка залишилась після електрона, під дією електричного поля, не змінюючи значення повної енергії, електрон стрибком переходить із точки x_{n-1} дельта смуги δE_d . На утворену при цьому у x_{n-1} дірку повертається електрон із рівнів околу E_F у точці x_{n-1} . Цей процес буде продовжуватися до тих пір, доки не буде досягнуто другого електроду, та електрон із нього не перейде на рівні δE_d . На малюнку рух носіїв заряду (чорні кружочки–електрони, білі–дірки) по локалізованим станам Δ_{Bd} зони зображено для електронів стрелочками. В результаті цього процесу, електрони переміщуються по енергетичним рівням тонкого шару супротив напрямку електричного поля з енергією активації $w_1 = E_F - E_d$. У таких зразках ефект Холла, відсутній а їх електропровідність σ_B добре визначається за формулою Мотта, а саме [2]:

$$\ln \sigma_B = A - B \cdot T^{-\frac{1}{4}}, \quad (1)$$

де B – деяка стала, пропорційна енергії міжцентрової активації носіїв.

При нагріванні зразка частина електронів збуджується з зони двохзарядних рівнів у зону однозарядних рівнів. У результаті такого процесу виникає пара носіїв заряду та стає можливою електропровідність по рівням обох дельта зон. Електропровідність по зоні двохзарядних рівнів із нагріванням суттєво не змінюється й описується рівнянням (1). Розглянемо механізм електропереносу через зону E_{CD} , що розташована вище енергії E_F і складається з однозарядних рівнів, на яких знаходяться термічно збуджені електрони. Існування ефекту Холла для таких зразків $a - CdP_2$ вказує на те, що електроперенос заряду здійснюється по делокалізованим рівням смуги δE_D . Таким чином, електропровідність σ_D , та рухомість μ в даному випадку, що були запропоновані у роботі [2] з врахуванням ступеню компенсації локальних рівнів, описується такими виразами:

$$\sigma_D = \sigma_{0D} \cdot \exp\left[-\frac{E_D - E_d + g \cdot W}{kT}\right], \quad \mu = \mu_D \cdot \exp\left(-\frac{W}{kT}\right) \quad (2)$$

де σ_{0D} питома електропровідність, μ_D – рухливість по делокалізованим станам δE_D ; W – енергія активації електронів при переході із станів дельта-смуги в локалізовані стани області ΔE_D .

У виразі (2) величина g враховує ступінь компенсації локальних рівнів: $g = 1$ або $g = \frac{1}{2}$ для частково компенсованих та некомпенсованих станів локальних рівнів, відповідно.

Повна провідність аморфного напівпровідника описується таким виразом:

$$\sigma = \sigma_D + \sigma_B, \quad (3)$$

А. Випадок низької питомої густини енергетичних рівнів.

Концентрація носіїв заряду у обох складових однакова. Компонента σ_D буде набагато більша ніж σ_B , яка характеризується стрибковим механізмом електропереносу. Тому електропровідність описується виразом (2). В аморфному дифосфіді кадмію при низьких та високих температурах $g = 1$, а при середніх – $1/2$. Тому на графіку температурної залежності логарифму електропровідності від оберненої температури ми маємо три лінійні ділянки з енергіями активації $E_1 = E_3 = E_D - E_d + 0,5 W$ та

$E_2 = E_D - E_d + W$. Зі зниженням густини енергетичних рівнів E_2 прямує до енергії $E_C - E_d = 0,6$ еВ.

Б. Випадок значної питомої густини енергетичних рівнів.

1. Низький рівень компенсації. При збільшенні питомої густини енергетичних рівнів, E_F знаходиться у зоні Δ_{Bd} . Частина рівнів, що лежать вище E_F , будуть вільними, за рахунок компенсації. Враховуючи те, що концентрація носіїв заряду у дельта зоні Δ_{Bd} буде набагато більшою за концентрацію електронів збуджених термічно у дельта зону Δ_{CD} , провідністю σ_D можна знехтувати. Тому згідно (3) повна провідність $\sigma = \sigma_B$ й буде описуватися таким виразом (1).

2. У сильно компенсованому аморфному напівпровіднику термічно збуджені електрони лише частково заповнюють рівні δE_D . Для цього випадку у формулі (1) енергія активації W дорівнює нулеві, рухомість $\mu = \mu_D$ а електропровідність описується виразом:

$$\sigma = \sigma = \sigma_{0D} \cdot \exp\left[-\frac{E_D - E_d}{kT}\right]$$

Під час руху електрона по речовині, під дією електричного поля, змінюється як енергія так і квазіімпульс. Для CdP_2 при такому механізмі електропереносу, відбувається збільшення рухомості носіїв до 10^2 раз порівняно із її значенням у кристалі, що обумовлено розташуванням дефектної зони відносно зони провідності та її незначною шириною.

Висновки

Запропонована модель енергетичного спектру електронів в аморфному дифосфіді кадмію дає можливість виготовляти напівпровідник із заданими електропровідністю, типом провідності та механізмами електропереносу.

Перспективою подальших досліджень у цьому напрямі є створення р-n переходів та сонячних батарей на основі структур з аморфних плівок дифосфіді кадмію.

ЛІТЕРАТУРА

1. Завалин И.В., Потыкевич И.В., Максимов В.К., Лапшин В.Ф. Технология выращивания аморфных гетероконденсатов CdP_2 // «Химические технологии», –1978.– № 2. – с. 59 – 62.
2. Максимов В.К., Клименко А.П., Лапшин В.Ф., Авдонін К.В. Електронні явища переносу в шарі ультрадисперсного дифосфіду кадмія// Матеріали ХХІІ наукової конференції країн СНД «Дисперсні системи», Одеса, 2006. – с.32 – 40.

Надійшла 01.12.2009

УДК 621.3

ПРОГНОЗУВАННЯ ЕФЕКТИВНОЇ ТЕПЛОПРОВІДНОСТІ ПУСТОТІЛИХ БУДІВЕЛЬНИХ БЛОКІВ

О.О. КУЗНЕЦОВА

Київський національний університет технологій та дизайну

Наведено результати чисельного експерименту з визначення ефективного коефіцієнта теплопровідності пустотілих будівельних блоків в залежності від розмірів та кількості порожнин, заповнених повітрям. Отримані результати свідчать, що ефективний коефіцієнт теплопровідності в значній мірі залежить від розмірів отворів у будівельних блоках

Нові тенденції в будівництві пов'язані зі зниженням енерговитрат під час експлуатації будівель. Зниженню втрат теплоти завдяки конструкції сприяє застосування будівельних матеріалів з низьким коефіцієнтом теплопровідності, наприклад, пустотілої цегли, каменів тощо. Тому актуальним питанням є визначення ефективної теплопровідності нових будівельних матеріалів з неоднорідною структурою (порами, повітряними прошарками).

Об'єкти та методи дослідження

Підвищенню енергоефективності будівель сприяє застосування пустотілих будівельних блоків (цеглин, каменів) в огорожувальних конструкціях (зовнішніх стінах). У спеціальній літературі [1, 2, 3] наведені значення ефективних коефіцієнтів теплопровідності для існуючих неоднорідних будівельних матеріалів. Але сучасні більш жорсткі вимоги щодо економії енергоресурсів вимагають впровадження нових будівельних матеріалів з підвищеними теплозахисними властивостями. Для визначення теплозахисних властивостей неоднорідних будівельних матеріалів доцільно застосовувати метод математичного моделювання, бо він у стислий термін дозволяє визначити конструктивні параметри виробу та прогнозувати щодо очікувані теплотехнічні якості.

Постановка завдання

Метою даної роботи є визначення ефективного коефіцієнта теплопровідності пустотілих будівельних блоків у залежності від матеріалу остову блока та розмірів і кількості порожнин, заповнених повітрям. Для розв'язання цієї задачі був застосований чисельний метод контрольних об'ємів [4]. Систему отриманих рівнянь в кінцевих різницях розв'язували за допомогою комп'ютерного математичного пакету MathCad.