

Р.І. Никируй

## Газодинамічний потік пари сполук АІВВІ та АІVВVІ за умови розхідної і геометричної дій

*Фізико-хімічний інститут Прикарпатського національного університету імені Василя Стефаника,  
вул. Шевченка, 57, Івано-Франківськ, 76025, Україна, E-mail: freik@pu.if.ua*

Розраховано основні параметри газодинамічного потоку пари (коефіцієнт конденсації ( $\alpha$ ), результуюча швидкість конденсації ( $\omega^*$ ) і пересичення ( $\psi$ )) для телуридів кадмію і свинцю у конічній камері при одночасній реалізації як розхідної, так і геометричної дій. Зроблено аналіз залежностей цих параметрів від градієнта температури вздовж стінок камери ( $dT/dx$ ), температури випаровування ( $T_v$ ) та геометричних розмірів камери ( $L, D, \varphi$ ).

**Ключові слова:** газодинамічний потік, параметри пари, халькогеніди кадмію і свинцю, розхідна дія, геометрична дія.

*Стаття поступила до редакції 10.10.2008; прийнята до друку 15.03.2009.*

### Вступ

Отримання напівпровідникових наноструктур заданих розмірів, топології, орієнтації та фізичних властивостей є актуальною проблемою [1]. Слід відзначити, що на даний час є визнанням метод молекулярно-променевої епітаксії (МПЕ) [2] на основі якого вже отримані досконалі квантово розмірні структури та квантові кристали халькогенідів свинцю [3,4]. Цей метод ґрунтується на вирощуванні структур на монокристалічних підкладках у надвисокому вакуумі із пари атомів чи молекул, які є компонентами напівпровідникової сполуки.

Маючи на увазі той факт, що технології МПЕ є достатньо складними як у виготовленні технологічної оснастки, так і експлуатації, нами запропоновано метод газодинамічного потоку пари, який є різновидністю методики “гарячої стінки” за умови створення градієнта температури ( $dT/dx$ ) вздовж стінок камери [5-10]. Цей метод характеризується широкими технологічними можливостями впливу на потік пари, і таким чином, на умови формування та росту наноструктур. Так, зокрема, за рахунок зміни величини пересичення та швидкості конденсації на підкладках, розміщених вздовж цього потоку, в одному технологічному циклі можна отримати як систему окремо розташованих квантових точок, так і їх конгломерати та суцільні мілко дисперсні структури [10].

У роботах [11-14] представлено розрахунки параметрів газодинамічного потоку пари халькогенідів свинцю і кадмію для циліндричної

камери при розхідній дії [11-13], а також для конічної камери за умови тільки геометричної дії [14].

Метою цієї роботи є розрахунок і аналіз параметрів пари телуридів кадмію і свинцю при її русі у конічній камері і реалізації одночасно як геометричної, так і розхідної дій.

### І. Елементи теорії

Згідно загального опису руху газодинамічного потоку [15], а також даних наших робіт [13-14] профілі газодинамічних змінних розраховуються у вигляді функцій від числа Маха ( $M(\xi)$ ), як величини, що визначаються відношенням  $M(\xi)$  швидкості потоку пари газу у довільному перерізі ( $x$ ) до швидкості звуку у цьому перерізі. Тут  $\xi$  – деяка безрозмірна координата.

**Циліндрична камера і розхідна дія.** Для циліндричної камери довжиною  $L$  і діаметром  $D$   $\xi = (x - x_{кр}) / (L - x_{кр})$  нормування параметрів проводиться по їх значенням у початковому газодинамічному перерізі або, що те ж саме, за їх значенням в критичному перерізі конденсації ( $x = x_{кр}$ ). При цьому в інтервалі  $0 \leq \xi \leq x_{кр}$  необхідно врахувати випаровування пари зі стінок камери (підкладки). Для значень  $x_{кр} \leq \xi \leq L$  ревіпаровування відсутнє. Коефіцієнт конденсації ( $\alpha$ ), нормовані значення густини ( $\rho/\rho_1$ ), температури ( $T/T_1$ ), витрати ( $G/G_1$ ), швидкості потоку ( $u/u_1$ ) пари, результуючої швидкості конденсації ( $\omega^* = \omega/\omega_1$ ),

ступеня пересичення парової фази ( $\psi$ ) визначаються як:

$$\alpha = 1 - \left( \frac{1 + 0,2M^2}{1,2} \right)^3 \exp \left( - \frac{6,88\xi}{1 - 0,242\xi} \right);$$

$$\frac{\rho}{\rho_1} = \left( \frac{1,2}{1 + 0,2M^2} \right)^{2,5};$$

$$\frac{p}{p_1} = \left( \frac{1,2}{1 + 0,2M^2} \right)^{3,5};$$

$$\frac{T}{T_1} = \frac{1,2}{1 + 0,2M^2}; \quad (1)$$

$$\frac{G}{G_1} = M \left( \frac{1,2}{1 + 0,2M^2} \right)^3;$$

$$\frac{u}{u_1} = M \sqrt{\frac{1,2}{1 + 0,2M^2}};$$

$$\omega^* = \frac{\omega}{\omega_1} = 1,6 \left[ \left( \frac{1,2}{1 + 0,2M^2} \right) - \exp \left( - \frac{6,68}{1 - 0,242\xi} \right) \right];$$

$$\psi = \frac{\rho(T)}{\rho_H(T_C)}.$$

Тут індекс „1” вказує на значення відповідного параметру у початковому перерізі,  $\rho_H$  – густина

насиченої пари при температурі стінки камери в цьому ж перерізі. Нормуючий параметр  $\omega_1$  визначається потоком частинок пари у початковому газодинамічному перерізі. Значення тиску ( $p_1$ ), витрати пари ( $G_1$ ) і швидкості потоку ( $u_1$ ) в початковому газодинамічному перерізі чисельно рівні:

$$p_1 = \rho(RT_1 / m),$$

$$u_1 \sqrt{\gamma RT_1 / m},$$

$$G_1 = \rho_1 u_1 (\pi D^2 / 4).$$

При лінійній зміні температури вздовж стінок камери положення критичного перерізу конденсації  $x_{кр}$  для двоатомної пари визначається із виразу

$$x_{\text{крит}} \approx [T_S(I - \eta) + (I,3RT_S^2 / E_S) / (dT_C / dx)] / J.$$

Тут  $E_S$  – енергія випаровування сполуки, параметр  $\eta$  являє собою відношення енергій випаровування тонкої плівки і масивного матеріалу.

**Конічна камера і геометрична дія.** У нашому випадку нормовані параметри пари визначаються співвідношеннями:

Таблиця

Основні характеристики сполук пари і технологічних факторів.

Характеристика	Сполука	CdTe	PbTe
Енергія випаровування сполуки 1-го моля речовини при 0 К $E_s$ , Дж·моль <sup>-1</sup>		182700	234000
Молекулярна маса речовини $m$ , кг		0,239	0,3348
Густина речовини $\rho$ , кг/м <sup>3</sup>		5850	8160
Відношення енергії випаровування плівки до масивного матеріалу, $\eta$		0,968	0,968
Температура пари в початковому перерізі $T_1$ , К		646,1	646,1
Тиск насиченої пари $p_H$ , Па		1,33	1,33
Густина насиченої пари $\rho_H$ , кг/м <sup>3</sup>		$4,1 \cdot 10^{-4}$	$5,81 \cdot 10^{-5}$
Густина пари в початковому перерізі $\rho_1$ , кг/м <sup>3</sup>		$3,039 \cdot 10^{-4}$	$1,92 \cdot 10^{-5}$
Тиск пари в початковому перерізі $p_1$ , Па		3,039	0,307
Швидкість пари $u_1$ , м/с		177,34	149,83
Витратна дія в початковому перерізі $G_1$ , кг/с		$4,71 \cdot 10^{-5}$	$5,63 \cdot 10^{-6}$
Критичний переріз $x_{кр}$ м.	при $dT/dx \cdot 10^3$ м К <sup>-1</sup>		
	1	0,08	0,07
	2	0,04	0,03
	3	0,03	0,02
	4	0,004	0,02

$$\frac{u_2}{u_1} = \frac{M_2}{M_1} \sqrt{\frac{1 + \frac{\gamma-1}{2} M_1^2}{1 + \frac{\gamma-1}{2} M_2^2}}, \quad \frac{p_2}{p_1} = \left( \frac{1 + \frac{\gamma-1}{2} M_1^2}{1 + \frac{\gamma-1}{2} M_2^2} \right)^{\frac{\gamma}{\gamma-1}};$$

$$\frac{\rho_2}{\rho_1} = \frac{1 + \frac{\gamma-1}{2} M_1^2}{1 + \frac{\gamma-1}{2} M_2^2};$$

$$\frac{T_2}{T_1} = \frac{1 + \frac{\gamma-1}{2} M_1^2}{1 + \frac{\gamma-1}{2} M_2^2}, \quad \frac{F_2}{F_1} = \frac{M_1}{M_2} \left( \frac{1 + \frac{\gamma-1}{2} M_2^2}{1 + \frac{\gamma-1}{2} M_1^2} \right)^{\frac{\gamma+1}{2(\gamma-1)}}.$$

Для камери, що має форму зрізаного збіжного конуса, з перерізами  $F_0$  і  $F_L$  ( $F_0 > F_L$ ) довільний діаметр камери в інтервалі  $(0, L)$  буде:  $D_x = D_0 - 2x \operatorname{ctg} \varphi$ , де  $\varphi$  – кут між твірною конуса і поверхнею випаровування (дном камери). Якщо

вважати, що початковий газодинамічний переріз геометрично співпадає з поверхнею випаровування і, що  $\xi = \frac{x}{L}$ ,  $\delta = \frac{D_0}{2L \operatorname{ctg} \varphi}$  (\*) у безрозмірному вигляді,

то число Маха визначається співвідношенням:

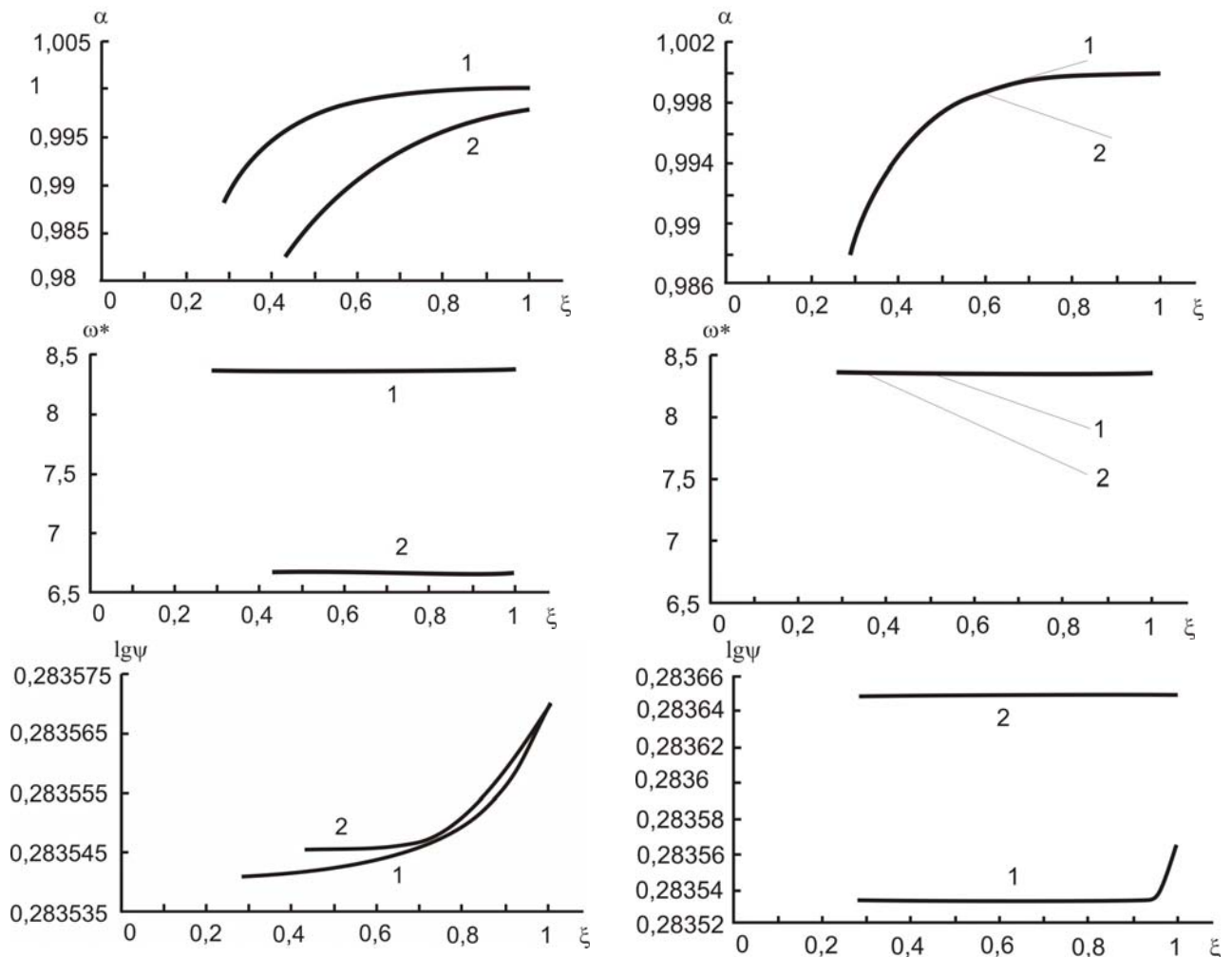
$$\frac{1}{M} \left( \frac{2}{\delta-1} + M \right)^{\frac{\gamma+1}{2(\lambda-1)}} = \frac{\left( \frac{1+\gamma}{1-\gamma} \right)^{\frac{\gamma+1}{2(\lambda-1)}}}{(\delta-1)^2} (\delta-\xi)^2, \quad (3)$$

а безрозмірна координата визначається як  $\xi$ :

$$\xi = \delta - \frac{\delta-1}{\sqrt{M}} \left( \frac{2}{\gamma+1} + \frac{\gamma-1}{\gamma+1} M^2 \right)^{\frac{\gamma+1}{4(\gamma-1)}}. \quad (4)$$

## II. Результати розрахунків

Участь у процесі масопереносу одночасно геометричної і витратної дій дозволяє в більш



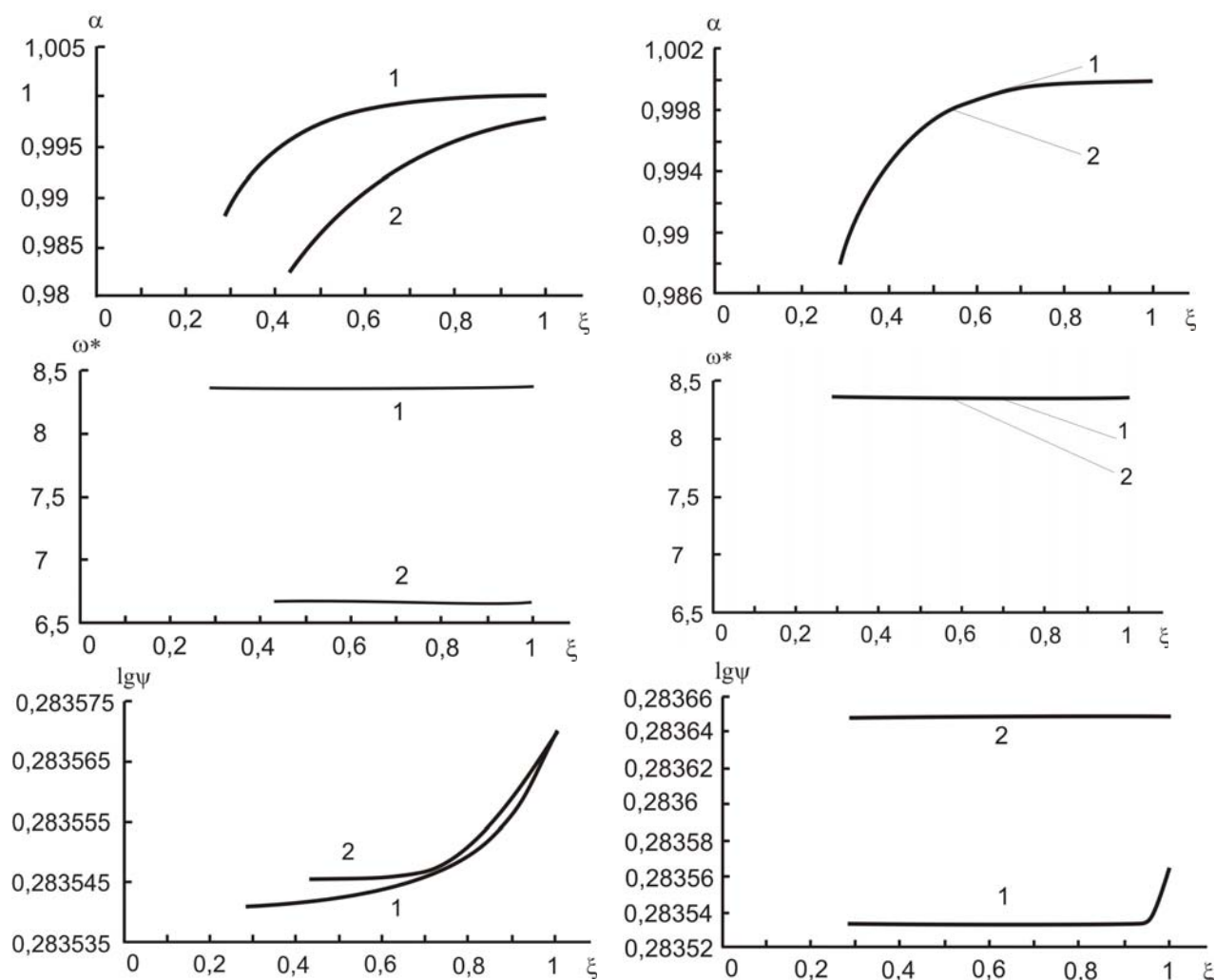
**Рис. 1.** Залежність коефіцієнта конденсації ( $\alpha$ ), результуючої швидкості конденсації ( $\omega^*$ ) та величини пересичення ( $\psi$ ) газодинамічного потоку пари телуриду свинцю від безрозмірної координати ( $\xi$ ) для конічної камери ( $L = 0,08$  м;  $D_0 = 0,05$  м) за умови одночасної геометричної і розхідної дій при а:  $dT/dx$ ,  $K \text{ м}^{-1}$ :  $1 \cdot 3 \cdot 10^3$ ,  $2 \cdot 2 \cdot 10^3$ ,  $\varphi = 80^\circ$ ; б:  $\varphi$ :  $1 \cdot 80$ ,  $2 \cdot 90$  і  $dT/dx = 10^3 \text{ K м}^{-1}$ . Температура випаровування  $T_v = 923 \text{ K}$ .

широких межах змінювати параметри пари в об'ємі. Технологічно реалізувати різні механізми осадження пари газодинамічного потоку в камері можна за рахунок градієнта температури ( $dT_x/dx$ ). Градієнт є технологічним параметром, який ми задаємо конкретним значенням для кожного експерименту. Іншими важливими технологічними факторами є температура випаровування ( $T_v$ ) та геометричні розміри камери – довжина ( $L$ ), діаметр основи ( $D_0$ ), та кут  $\phi$ .

Результати проведених розрахунків основних параметрів газодинамічного потоку пари для телуридів кадмію і свинцю від безрозмірної координати для різних значень градієнта температури, температури випаровування та геометричного фактора  $\delta$  представлені на рис. 1-4 відповідно. Основні характеристики матеріалів, їх пари, а також значення технологічних факторів, наведено у таблиці. Видно, що для області від

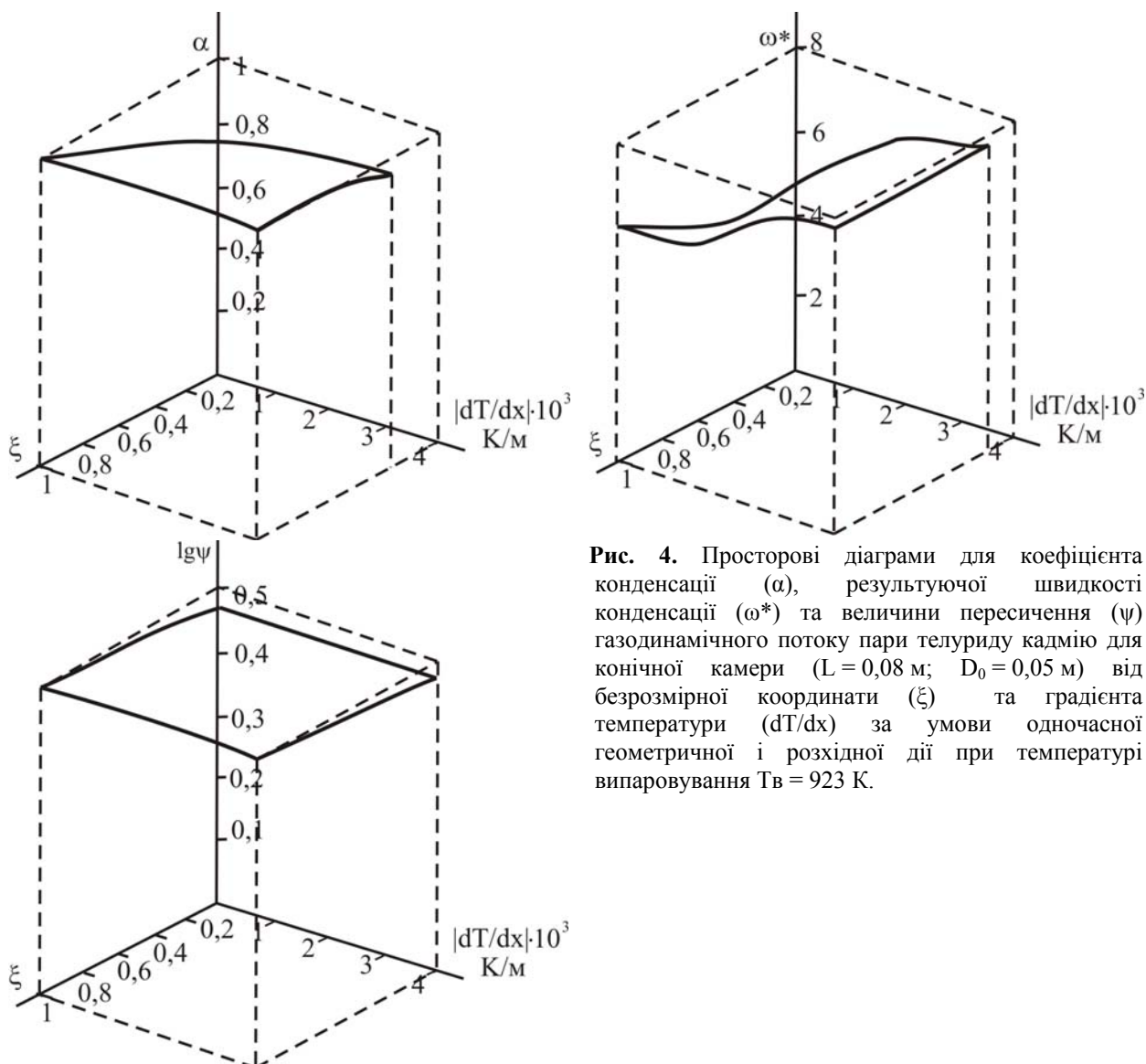
поверхні вирошування ( $x = 0,0$ ) до критичного перерізу конденсації ( $x = x_{кр}$ )  $0,0 < x < x_{кр}$  коефіцієнт конденсації ( $\alpha$ ), результуюча швидкість конденсації ( $\omega^*$ ) мають нульові значення (рис. 1, 2 – а). Для області  $x_{кр} < x < L$ , за умови, коли крім ізольованої геометричної дії є ще і витратна, ці параметри різко зростають (рис. 1, 2 – а).

Що стосується впливу геометричного фактора ( $\delta$ ) на параметри пари, який визначається кутом нахилу ( $\phi$ ) твірної конуса до поверхні випаровування, то слід відзначити наступне. При зменшенні кута нахилу  $\phi$ , тобто, зростанні  $\delta$  коефіцієнт конденсації ( $\alpha$ ), результуюча швидкість конденсації ( $\omega^*$ ) за величиною спадають (рис. 1, 2 – б). Це особливо характерно для пари телуриду кадмію. Що стосується впливу градієнта температури. То він більш суттєво впливає на ці характеристики (рис. 1, 2 – а). Так, зокрема зростання  $dT/dx$  обумовлює збільшення як  $\alpha$ , так і  $\omega^*$  при  $x_{кр} < x < L$



**Рис. 2.** Залежність коефіцієнта конденсації ( $\alpha$ ), результуючої швидкості конденсації ( $\omega^*$ ) та величини пересичення ( $\psi$ ) газодинамічного потоку пари телуриду кадмію від безрозмірної координати ( $\xi$ ) для конічної камери ( $L = 0,08$  м;  $D_0 = 0,05$  м) за умови одночасної геометричної і розхідної дії при а:  $dT/dx$ ,  $K \text{ м}^{-1}$ :  $1-3 \cdot 10^3$ ,  $2-2 \cdot 10^3$ ,  $\phi=80^\circ$ ; б:  $\phi=0^\circ$ : 1-80, 2-90 і  $dT/dx = 10^3 K \text{ м}^{-1}$ . Температура випаровування  $T_v = 923 K$ .





**Рис. 4.** Просторові діаграми для коефіцієнта конденсації ( $\alpha$ ), результуючої швидкості конденсації ( $\omega^*$ ) та величини пересичення ( $\psi$ ) газодинамічного потоку пари телуриду кадмію для кінчної камери ( $L = 0,08$  м;  $D_0 = 0,05$  м) від безрозмірної координати ( $\xi$ ) та градієнта температури ( $dT/dx$ ) за умови одночасної геометричної і розхідної дії при температурі випаровування  $T_v = 923$  К.

Автор висловлює вдячність проф. Фрейку Д.М. та доц. Лоп'янку М.А. за постановку задачі дослідження та обговорення їх результатів.

Робота частково фінансується МОН України (державний реєстраційний номер 0109U001414) та

ДФФД МОН України (державний реєстраційний номер 0109U004505).

**Никируй Р.І.** – аспірант кафедри фізики і хімії твердого тіла.

- [1] Р.А. Андриевский. Наноматериалы: коцепция и современные проблемы // *Рос. хим. ж.*, **XLV**(5), сс. 50-56 (2002).
- [2] В.Н. Белявский. Физические основы полупроводниковой нанотехнологии // *Соросовский образовательный журнал. Физика*. **10**, сс. 92-98 (1998).
- [3] A. Roab, R.T. Lecher, G. Springholz. Growth temperature and coverage dependence of vertical and lateral ordering in self-assembled PbSe quantum-dot superlattices // *Physical Review*, **B67**, pp. 165321-1-165321-7 (2003).
- [4] G. Springholz, M. Pinczolit, P. Mayer, V. Holy, G. Baur, H.H. Kang, L. Salamanca-Riba. Tuning of vertical and lateral correlations in self-organized PbSe/ Pb1-xEpxTe quantum dot superlattices // *Physical Review Letters*. **84**(20). pp. 4669-4672.
- [5] Д.М. Фреик, Л.И. Межиловская, А.Д. Фреик, Л.И. Никируй. Нанотехнологии полупроводниковых материалов и наноэлектроника. // *IV Международная научная конференция «Химия твердого тела и современные микро- и нанотехнологии»*. Кисловодск, Россия. (2006).

- [6] Фреик Д.М., Лопянка М.А., Никируй Р.И., Гриджук М.Я. Рост и структура нанокристаллов соединений АІВВІ и АІВВІ, осажденных из газодинамического потока пара // *III Международная конференция по физике кристаллов КРИСТАЛЛОФИЗИКА XXI века*. Черноголовка, Россия. (2006).
- [7] М.А. Лопянка, Р.И. Никируй, М.Я. Гриджук. Получение полупроводниковых наноматериалов АІВВІ и АІВВІ осаждением газодинамического течения пара // *Международная конференция по химии твердого тела*. Кисловодск, Россия (2006).
- [8] Д.М. Фреїк, М.А. Лоп'янка, А.К. Школьній, Р.І. Никируй. Нанокристали сполук IV-VI, осажені із газодинамічного потоку пари // *Фізика і хімія твердого тіла*, **6**(1), сс. 28-33 (2005).
- [9] М.А. Лоп'янка, Р.І. Никируй, І.В. Калитчук. Параметри газодинамічного потоку пари кадмій телуриду // *Фізика і хімія твердого тіла*, **7**(2), сс. 235-240 (2006).
- [10] Д.М. Фреїк, М.А. Лоп'янка, А.К. Школьній, Р.І. Никируй. Нанокристали сполук IV-VI, осажені із газодинамічного потоку пари // *Фізика і хімія твердого тіла*, **8**(3), сс. 451-456 (2007).
- [11] М.А. Лоп'янка, Р.І. Никируй. Оптимізація параметрів газодинамічного потоку пари для CdS, CdSe, CdTe // *Фізика і хімія твердого тіла*, **8**(1), сс. 75-80 (2007).
- [12] Д.М. Фреїк, Р.І. Никируй, М.А. Лоп'янка, М.Я. Гриджук. Параметри газодинамічного потоку пари халькогенідів свинцю у циліндричному каналі // *Фізика і хімія твердого тіла*, **9**(2), сс. 261-269 (2009).
- [13] Р.І. Никируй. Параметри газодинамічного потоку пари халькогенідів кадмію і свинцю за умови геометричної жії // *Фізика і хімія твердого тіла*. **10**(1), сс. 101-105 (2009).
- [14] Ю.З. Бубнов, М.С. Лур'є, Ф.Г. Старос, Г.А. Филаретов. *Вакуумное нанесение пленок в квазизамкнутом объеме*. Энергия. Л. 161 с. (1975).

R.I. Nykuryu

## Gas-Dynamical Stream of Steam of II-VI and IV-VI Compounds at the Expense and Geometrical Action

Vasyl Stefanyk PreCarpathian National University,  
57, Shevchenko Str., Ivano-Frankivsk, 76025, Ukraine, E-mail: [freik@pu.if.ua](mailto:freik@pu.if.ua)

The parameters of gas-dynamical stream of steam (condensation efficient  $\alpha$ , result velocity of condensation  $\omega^*$  and supersaturation  $\psi$ ) are calculated for both of Cadmium and Lead Tellurides in conic chamber at the expense and geometrical action. Was provide analysis of these parameters due temperature gradient along of chamber walls ( $dT/dx$ ), evaporation temperature ( $T_b$ ), and geometrical sizes of chamber ( $L$ ,  $D$ ,  $\varphi$ ).