

М.А. Лоп'янко, Р.І. Никируй, І.В. Калитчук

Параметри газодинамічного потоку пари кадмій телуриду

*Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника,
вул. Шевченка, 57, Івано-Франківськ, 76025, Україна, E-mail: freik@pu.if.ua*

Наведено вирази для термодинамічних параметрів пари газодинамічного потоку при лінійному градієнті температури вздовж циліндричного каналу. Розраховано залежність числа Маха, коефіцієнта і результуючої швидкості конденсації, густини потоку пари, тиску пари, температури, витратної дії та ступеня пересичення пари кадмій телуриду від геометричних факторів, отримано розміри інтервалу каналу вакуумної камери для одержання найбільш досконалої структури.

Ключові слова: кадмій телурид, нанокристали, газодинамічний потік пари.

Стаття постуила до редакції 18.12.2005; прийнята до друку 15.02.2006.

Вступ

Серед бінарних напівпровідникових матеріалів типу $A^{II}B^{VI}$, найбільша увага приділяється ZnTe, ZnSe, CdSe, CdS та CdTe через їх широке використання у приладових структурах сучасної електроніки [1-5]. Поряд із дослідженням монокристалів і тонких плівок в останні роки інтенсивно вивчаються і наноматеріали.

Напівпровідникові наноструктури або квантові точки проявляють властивості, пов'язані із особливостями густини станів та покращеними лінійними та нелінійними оптичними відгуками [6,7]. Значна кількість досліджень, проведеними на даний час із квантовими ямами та квантовими дротинами фактично реконструювали сучасну фізику напівпровідникових приладів.

Напівпровідникові нанокристаліти значно відрізняються від інших низькорозмірних структур, оскільки складаються із $10^3 \pm 10^6$ атомів і значна доля цих атомів знаходиться на поверхні. Однак на сьогодні ще не зрозуміло є взаємодія електронних станів цих квантових точок із найближчим оточенням. Оптичні властивості квантових точок вказують на фіолетове зміщення, яке збільшується із зменшенням розмірності кристалітів [8,9]. Така властивість наноматеріалу, яка є наслідком модифікації зонної структури призводить у свою чергу до цікавих фізичних властивостей, які мають місце в оптичних пристроях типу лазерів чи фотодатчиків [10,11].

Не дивлячись на зростання теоретичних досліджень у розумінні процесів у нанокристалічних напівпровідниках типу кадмій телуриду, ще немає на

сьогодні завершених розроблених методик одержання таких нанокристалів, які б забезпечили добре відтворення, високу ступінь керування властивостями у процесі вирощування.

Метою цієї роботи є вивчення можливостей одержання нанокристалів напівпровідникових сполук CdTe осадженням пари із газодинамічного потоку в умовах близьких до насичення, дослідження профілів параметрів потоку пари залежно від геометричних розмірів камери.

І. Елементи теорії газодинамічного потоку пари

Профілі газодинамічних змінних розраховуються в безрозмірному вигляді в функції від безрозмірної координати $\xi = (x - x_{кр}) / (L - x_{кр})$, де L – довжина камери, $x_{кр}$ – критичний переріз конденсації. Нормування параметрів пари проводиться по їх значенням в початковому газодинамічному перерізі або, що те ж саме, за їх значеннями в критичному перерізі конденсації. В інтервалі $x_0 \leq x \leq x_{кр}$ параметри пари, яка рухається в циліндрі не змінюється.

Всі газодинамічні змінні однозначно виражаються через число Маха (M). Тому спочатку слід знайти залежність числа Маха в функції від ξ . Рівняння $M = M(\xi)$ має різний вигляд для двох областей:

1) $0 \leq \xi \leq 0,5$ – із врахуванням ревіпаровування пари зі стінок камери (нідокладки):

$$\frac{dM}{d\xi} = \frac{aQ}{M^2 - 1} \left[1 - Q^3 \exp\left(-\frac{b\xi}{1 - c\xi}\right) \right]; \quad (1)$$

2) $0,5 \leq \xi \leq 1$ – без врахування ревіпаровування.

Розв'язок рівняння $M = M(\xi)$ для 1-ї області

записується у вигляді ряду Маклорена:

$$M(\xi) = M(0) + M'(0)\xi + \frac{1}{2!}M''(0)\xi^2 + \frac{1}{3!}M'''(0)\xi^3 + \dots$$

де $M(0) = 1$. Позначимо $\left. \frac{dM}{d\xi} \right|_{\xi=0} = M' = m_1$,

$M''(0) = m_2$, $M'''(0) = m_3$. Тоді

$$M(\xi) = 1 + m_1\xi + \frac{1}{2}m_2\xi^2 + \frac{1}{6}m_3\xi^3 + \dots, \quad (2)$$

де коефіцієнти m_1, m_2, m_3 визначені у [12]:

$$m_1 = -\frac{a}{4} \left(1 - \sqrt{1 + \frac{8b}{a}} \right),$$

$$m_2 = a \frac{-\frac{m_1}{3} + \frac{b}{2m_1} \left(c - \frac{b}{2} \right) + \frac{5}{12}b}{1 + ab/4m_1^2},$$

$$m_3 = \left\{ -\frac{a}{12} \left(\frac{b^3}{9}m_1^2 + 4m_2 \right) + ab \left[\frac{(m_1 + c)(4m_1/3 + c) + 4(m_1^2 + m_2)/3 + c(m_1/3 + c)}{2m_1} + \frac{-2(4m_1/3 + c)(bm_1 + m_1^2 + m^2) + 2b(b/3 - c)m_1 + b(m_1^2 + m_2) - 2m_1m_2}{4m_1^2} + \frac{(m_1^2 + m_2)^2}{4m_1^3} \right] \right\} \frac{6m_1^2}{6m_1^2 + ab}.$$

Тут параметри a, b, c :

$$a = \frac{\gamma + 1}{2} \sqrt{\frac{2}{\pi\gamma}} \frac{L - x_{\text{ед}}}{d} = 1,73$$

$$b = \frac{\eta E_s (L - x_{\text{ед}})}{RT_{\text{ед}}^2} \frac{dT_c}{dx} = 4,47 \quad (3)$$

$$c = \frac{(L - x_{\text{ед}})}{T_{\text{ед}}} \frac{dT_c}{dx} = 0,18,$$

де $\gamma = C_p/C_v$, E_s – енергія випаровування CdTe, η – відношення енергій випаровування тонкої плівки і масивного матеріалу, $T_{\text{кр}}$ – температура у критичній області, $\frac{dT_N}{dx}$ – градієнт температури вздовж стінок камери, $R = 8,31$ Дж·моль⁻¹·град⁻¹ – універсальна газова стала.

У нашому випадку $m_1 = 1,9$; $m_2 = -2,4$; $m_3 = 8,6$. Тоді

$$M(\xi) = 1 + 1,91\xi - 1,325\xi^2 + 1,48\xi^3 + \dots \quad (4)$$

Задаючи різні значення ξ (від 0 до 1), можна обчислити відповідні їм значення числа Маха.

Обчислення коефіцієнта конденсації α , нормованих значень густини (ρ/ρ_1), температури (T/T_1), витрати (G/G_1), швидкості потоку (u/u_1) пари, швидкості результуючої конденсації ($\omega^* = \omega/\omega_1$), ступеня пересичення парової фази (ψ) проведено за наступними виразами:

$$\alpha = 1 - \left(\frac{1 + 0,2\xi}{1,2} \right)^3 \exp \left(-\frac{6,88\xi}{1 - 0,242\xi} \right); \quad (5)$$

$$\frac{\rho}{\rho_1} = \left(\frac{1,2}{1 + 0,2M^2} \right)^{2,5}; \quad (6)$$

$$\frac{p}{p_1} = \left(\frac{1,2}{1 + 0,2M^2} \right)^{3,5}; \quad (7)$$

$$\frac{T}{T_1} = \frac{1,2}{1 + 0,2M^2}; \quad (8)$$

$$\frac{G}{G_1} = M \left(\frac{1,2}{1 + 0,2M^2} \right)^3; \quad (9)$$

$$\frac{u}{u_1} = M \sqrt{\frac{1,2}{1 + 0,2M^2}}; \quad (10)$$

$$\omega^* = \frac{\omega}{\omega_1} = 1,6 \left[\left(\frac{1,2}{1 + 0,2M^2} \right) - \exp \left(-\frac{6,68}{1 - 0,242\xi} \right) \right]; \quad (11)$$

$$\psi = \frac{\rho(T)}{\rho_H(T_C)}, \quad (12)$$

тут індекс „1” вказує на значення відповідного параметру у початковому перерізі ρ_H – густина насиченої пари при температурі стінки камери в цьому ж перерізі.

Нормуючий параметр ω_1 являє собою потік частинок пари, що падає на стінку в початковому газодинамічному перерізі:

$$\omega_1 = \frac{u_1 \rho_1 d}{4\rho_{\text{га}}(L - x_{\text{ед}})} = 9,5 \cdot 10^{-4} i \cdot \tilde{n}^{-1},$$

де $\rho_{\text{тв}}$ – густина масивного матеріалу для телуриду кадмію.

Для 2-ї області розв'язок рівняння безрозмірна координата ξ та число Маха зв'язані співвідношенням

$$\xi = 3,13M - 8,38 \arctg(0,447M) + 0,406. \quad (13)$$

Залежність (13) є неявною відносно M , але задаючи різні M , можна розрахувати значення

$M = M(\xi)$. У виразі швидкості результуючої конденсації для цієї області відсутній експоненційний член, пов'язаний із ревіпаровуванням частинок зі стінки камери:

$$\frac{\omega}{\omega_1} = \frac{a}{1,2} \left(\frac{1,2}{1+0,2M^2} \right)^3.$$

II. Розрахунок параметрів газодинамічного потоку пари кадмій телуриду та їх аналіз

Для визначення оптимальних умов препарування конденсату визначають зведені параметри процесу препарування (геометричні розміри камери, температура випаровування і градієнт температури вздовж стінок камери) та знаходять профілі газодинамічних змінних вздовж камери. На основі їх аналізу можна визначити ділянку камери, у якій властивості конденсату найбільш повно задовольняють представлених до них вимогам [13].

Досліджуваний у роботі телурид кадмію осаджували із газодинамічного потоку пари у камері циліндричної форми діаметром $d = 0,05$ м та довжиною $L = 0,08$ м; температурні режими: температура випаровування $T_s = 923$ К, градієнт температури вздовж стінок камери $dT_c/dx = -3 \cdot 10^3$ град·м⁻¹.

Для двоатомної пари телуриду кадмію ($\gamma = 7/5$): $T_1 = 0,7 T_s = 646,1$ К, $\rho_1 = 0,33 \rho_H(T_s)$. Густина насиченої пари знайдено з рівняння стану ідеального газу:

$$\rho_H(T) = m p_H(T_s) / RT_s. \quad (14)$$

$$\ln p_H = -A/T + B, \quad (15)$$

де A і B – відомі коефіцієнти, наведені, наприклад, у [14]: $A = -8920$ град, $B = 8,18$. При температурі випаровування $T_s = 923$ К $p_H = 0,01$ Па. Підставляючи ці значення в (1) отримаємо $\rho_H = 6,5 \cdot 10^{-5}$ кг·м⁻³. $m = 0,144$ кг·моль⁻¹ – молекулярна маса. Густина пари в початковому газодинамічному перерізі: $\rho_1 = 2,1 \cdot 10^{-5}$ кг·м⁻³.

Значення тиску (p_1), витрати пари (G_1) і швидкості потоку (u_1) в початковому газодинамічному перерізі:

$$p_1 = \rho_1 (RT_1 / m) = 0,76 \text{ І } \text{а},$$

$$u_1 \sqrt{\gamma RT_1 / m} = 2,35 \cdot 10^2 \text{ і } \cdot \text{н}^{-1},$$

$$G_1 = \rho_1 u_1 (\pi D^2 / 4) = 5,9 \cdot 10^{-6} \text{ єа } \cdot \text{н}^{-1}.$$

При лінійній зміні температури вздовж камери положення критичного перерізу конденсації для двоатомної пари визначається із виразу

$$x_{\text{крит}} \approx [T_s(1-\eta) + (1,3RT_s^2 / E_s)] / (dT_c / dx). \quad (16)$$

Якщо врахувати числові значення наведених у (16) параметрів для кадмій телуриду ($E_s = 182 \cdot 10^3$ Дж·моль⁻¹, $\eta = 0,968$), то $x_{\text{крит}} = 0,018$ м.

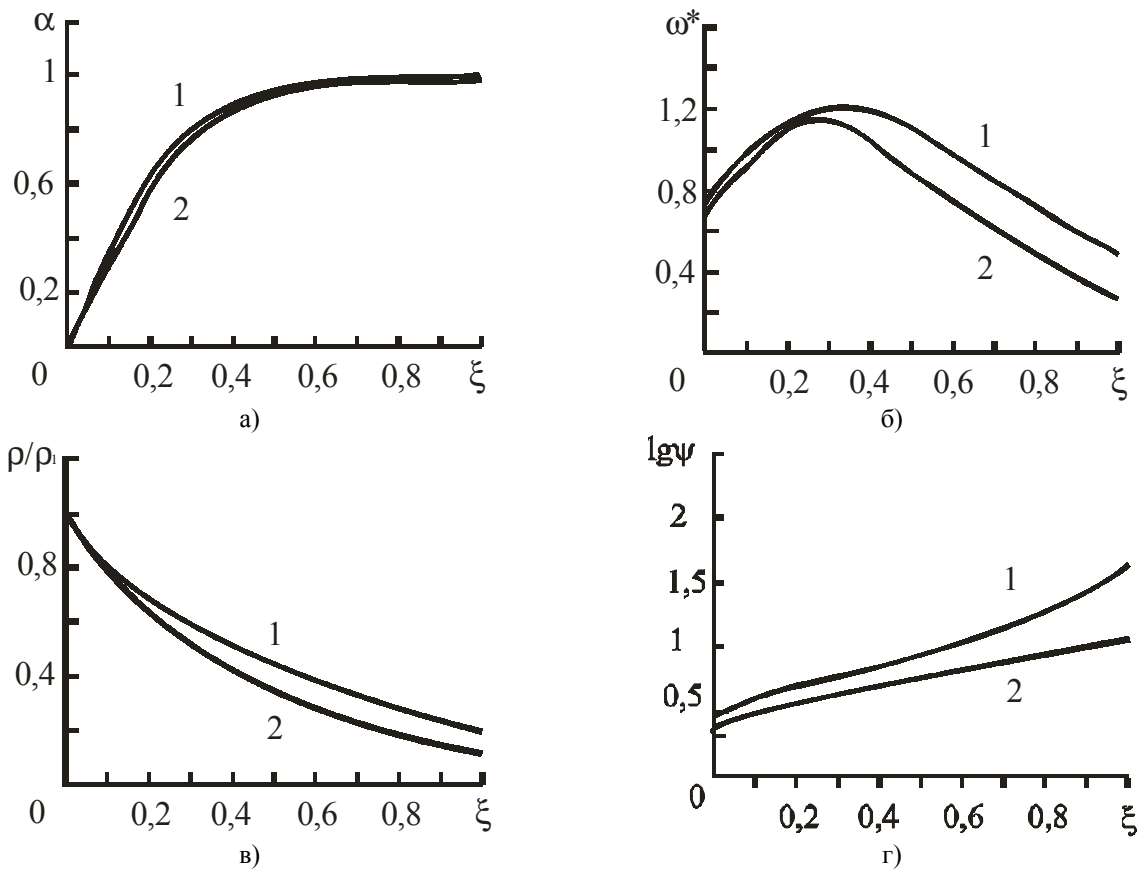


Рис. 1. Залежності коефіцієнта конденсації α (а), швидкості результуючої конденсації ω^* (б), нормованих значень густини потоку пари ρ/ρ_1 (в) і ступеня пересичення парової фази $\ln \psi$ (г) від безрозмірної координати ξ для двох значень температури випаровування T_s : 923 К (1), 823 К (2).

Параметри газодинамічного потоку пари кадмій телуриду

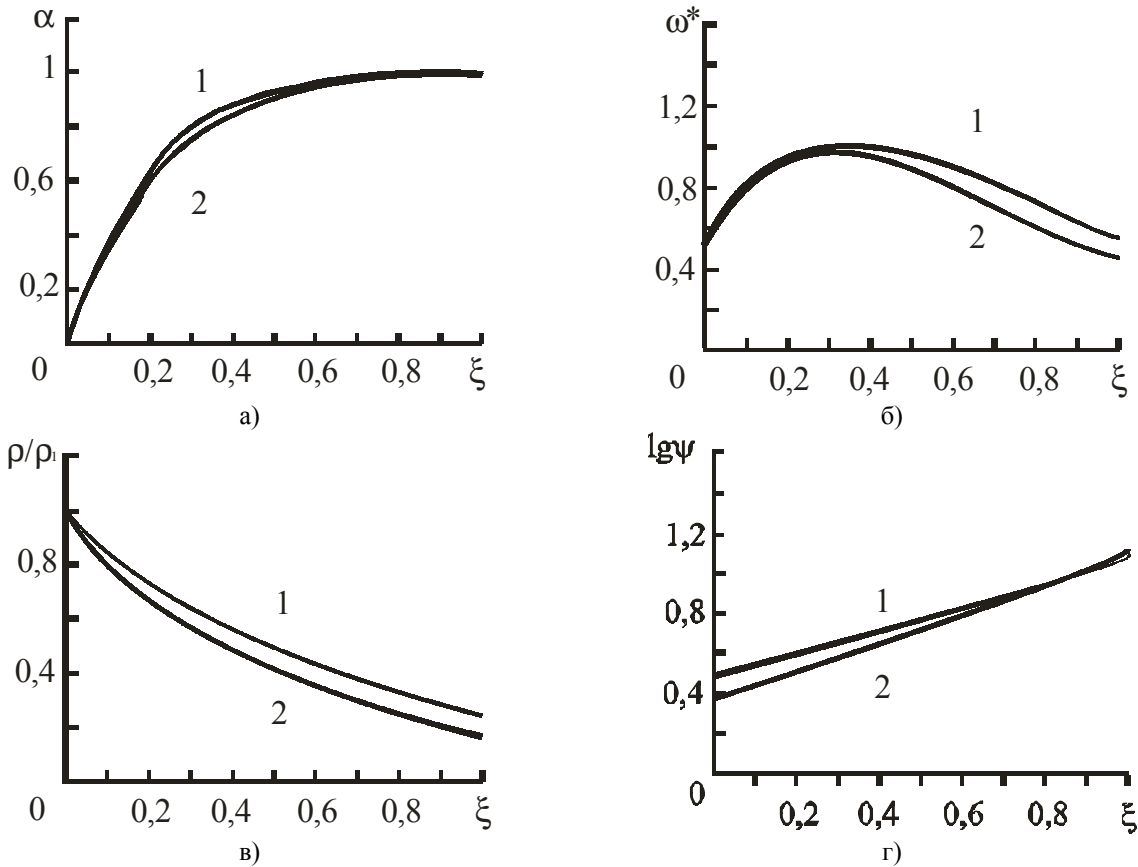


Рис. 2. Залежності коефіцієнта конденсації α (а), швидкості результуючої конденсації ω^* (б), нормованих значень густини потоку пари ρ/ρ_1 (в) і ступеня пересичення парової фази $\ln \psi$ (г) від безрозмірної координати ξ для двох значень градієнта температури вздовж стінок камери $\frac{dT_c}{dx}$, $\cdot 10^3 \text{ } \hat{E} / i$: -2 (1), -3 (2).

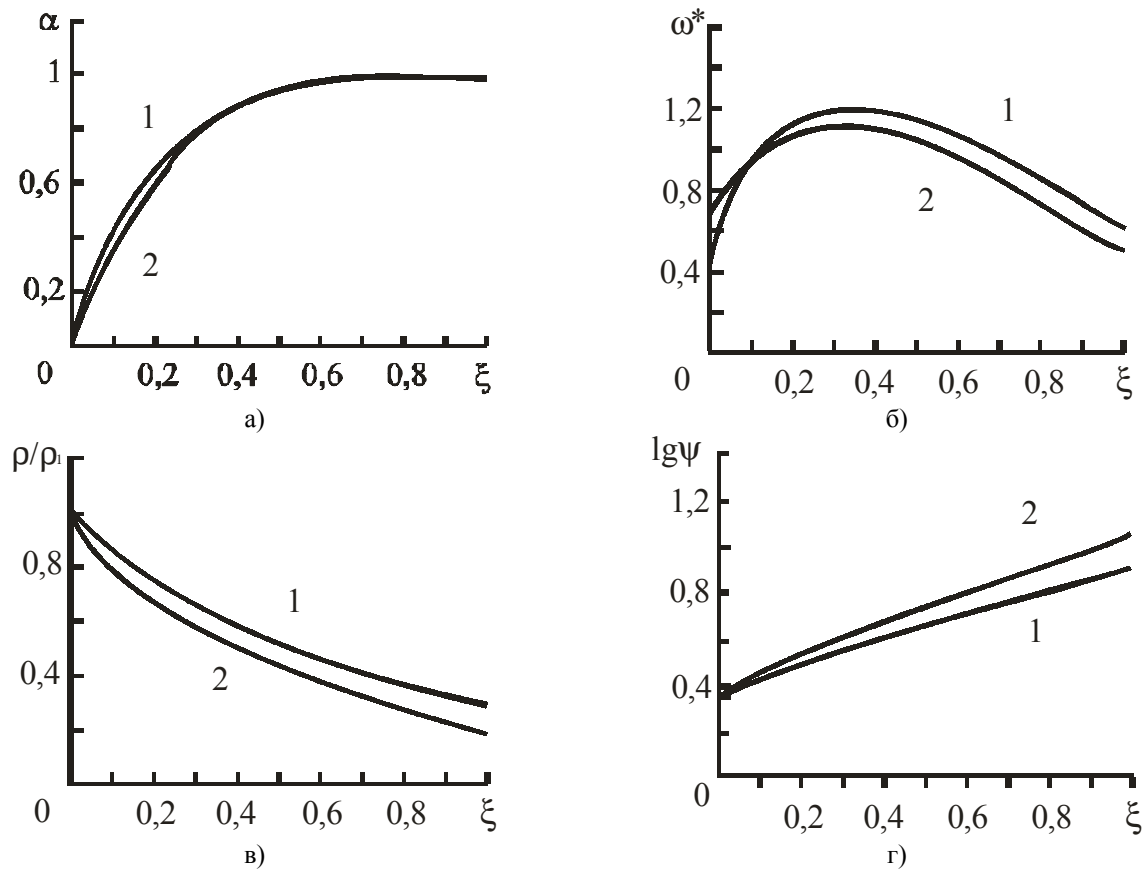


Рис. 3. Залежності коефіцієнта конденсації α (а), швидкості результуючої конденсації ω^* (б), нормованих значень густини потоку пари ρ/ρ_1 (в) і ступеня пересичення парової фази $\ln \psi$ (г) від безрозмірної координати ξ для камер з $L=8,0 \cdot 10^{-2} i$ і різного діаметру d , $\cdot 10^{-2} i$: 8 (1) і 5,2 (2).

Теоретичні розрахунки параметрів пари були проведені для двох областей (вирази (1), (2)). Виявилось, що при $0,5 \leq \xi \leq 0,7$ значення числа Маха приблизно однакові для цих областей і плавно переходять одна в іншу. Із врахуванням цього, на рис. 1-4 побудовано сумарні криві, які до значення $\xi \leq 0,6$ враховують процеси реви парування і не враховують їх для вищих значень безрозмірної координати.

Із рис. 1 слідує, що при постійному градієнті температури вздовж стінок камери ступінь пересичення зростає із зростанням ξ та із спаданням T_s .

Дослідження впливу градієнта температури на зростання конденсації пари проводилося експериментально при фіксованій температурі випаровування $T_s = 923$ К. Для різних температурних режимів побудована розрахункова залежність параметрів пари, звідки видно, що зменшення $\frac{dT_c}{dx}$ зміщує криві $\alpha(\xi)$ в область великих значень ξ (рис. 2), що також знайшло віддзеркалення в якісному критерії. Це призводить до відповідного зсуву ξ_{max} і зменшення величини ω^*_{max} . Таким чином зменшення $\frac{dT_c}{dx}$ діє на параметри подібно збільшенню T_s .

Дослідження впливу геометричних розмірів камери (L і d) на параметри рухомої пари проводилися при фіксованому температурному режимі препарування: $T_s = 923$ К, $\frac{dT_c}{dx} = -3 \cdot 10^3 \frac{K}{i}$.

Як показали проведені дослідження, із збільшенням діаметру камери положення максимуму швидкості конденсації зміщується в бік великих значень координати ξ , а величина ω^* зменшується (рис. 3). Збільшення діаметра камери не позначається на швидкості реви парування, збіднення ж потоку за рахунок конденсації при цьому зменшується, оскільки рухомий потік пари зростає пропорційно d^2 , а поглинання пари стінками – пропорційно збільшенню поверхні стінок, тобто пропорційно d .

Зменшення довжини камери, як показують вирази (1) і (11), чинить на параметри пари схожу дію. За відсутності реви парування вплив геометричного чинника визначається тільки відношенням L/d . Проте врахування реви парування показує, що зміна довжини камери при фіксованих T_s , $\frac{dT_c}{dx}$ створює на параметри пари більш сильну дію, ніж зміна діаметру, оскільки L входить також і в експоненціальний множник (через ξ в (1)). Тобто, при зменшенні довжини камери, для забезпечення постійності градієнта температури

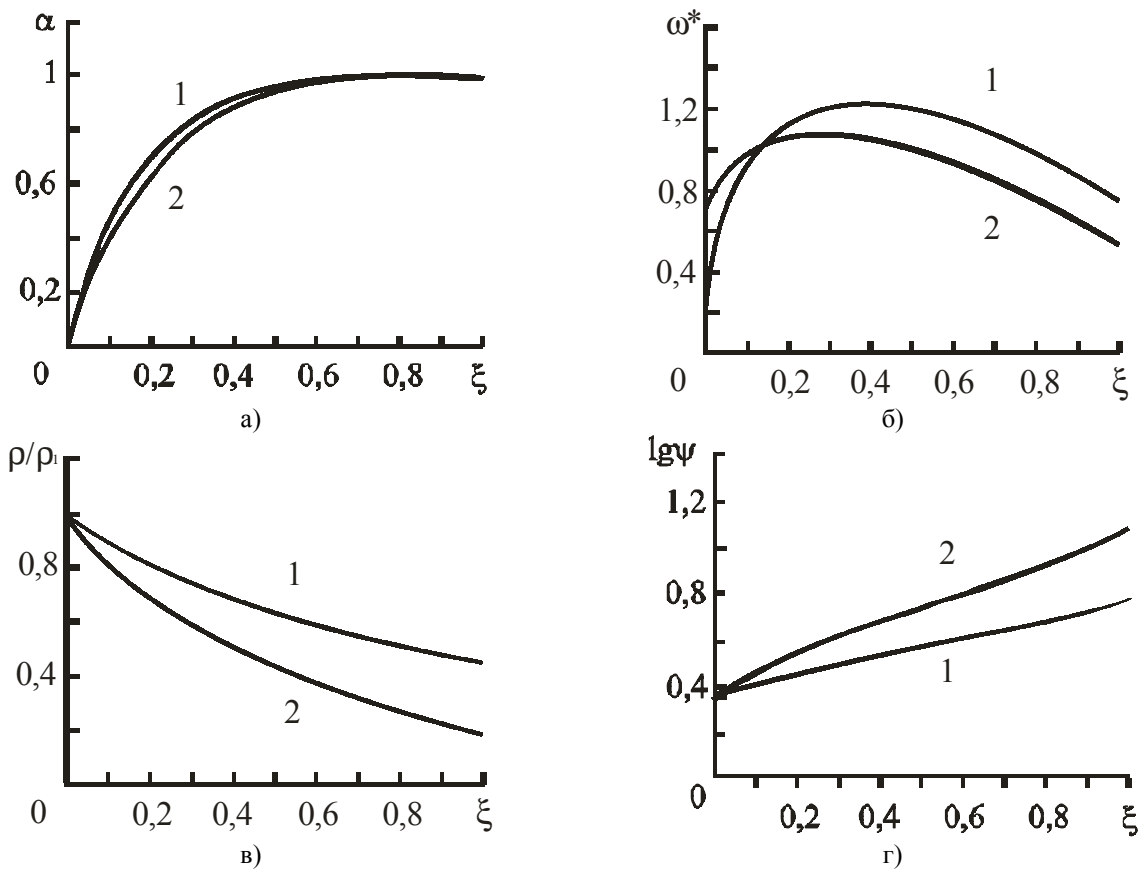


Рис. 4. Залежності коефіцієнта конденсації α (а), швидкості результуючої конденсації ω^* (б), нормованих значень густини потоку пари ρ/ρ_1 (в) і ступеня пересичення парової фази $\ln \psi$ (г) від безрозмірної координати ξ для камер різної довжини L , $\cdot 10^{-2}$ і : 4 (1) і 8 (2).

$\frac{dT_c}{dx}$, доводиться збільшувати температуру кришки камери (рис. 4). Оскільки розгляд процесу проводиться залежно від безрозмірної координати ξ , це призводить до розширення зони ефективного реєпарування (рис. 4). В експерименті використовувалися камери діаметром $5,2 \cdot 10^{-2}$ і довжиною $8 \cdot 10^{-2}$ і $4 \cdot 10^{-2}$. Відстань від поверхні випарування до критичного перетину конденсації для обох камер однакова [$\delta_{\text{сб}} = 2 \cdot 10^{-2}$ м]. Тоді відстані від $x_{\text{кр}}(\xi = 0)$ до кришки камери ($\xi = 1$) для них складають, відповідно, $6 \cdot 10^{-2}$ і $2 \cdot 10^{-2}$.

Приведені на рис. 4 розрахункові залежності швидкості конденсації показують, що зсув положення максимуму у бік кришки камери при її зменшенні сильніший, ніж при зміні інших факторів ($T_s, \frac{dT_c}{dx}, d$).

Висновки

1. Для отримання конденсатів CdTe більш

досконалої структури і, відповідно, наявних найбільш високих значень рухливості носіїв заряду, підкладку доцільно поміщати в таку зону камери, де ступінь пересичення парової фази низька, швидкість конденсації (товщина конденсату) велика і конденсація проходить в умовах інтенсивного реєпарування. Таким вимогам найкраще задовольняє інтервал зміни безрозмірної координати $0,5 \leq \xi \leq 0,7$.

2. Показано, що кінцеві розміри інтервалу найбільш досконалої структури визначаються виходячи з таких умов, як розмір конденсуючих підкладок, вимоги до рівномірності товщини конденсату, тощо.

3. Досліджено залежності параметрів газодинамічного потоку пари від безрозмірної координати для кристалів кадмій телуриду.

Лоп'янка М.А. – кандидат фізико-математичних наук, докторант кафедри фізики і хімії твердого тіла;
Никируй Р.І. – аспірант кафедри фізики і хімії твердого тіла;
Калитчук І.В. – кандидат фізико-математичних наук.

- [1] C. Ricolleau, L. Audinet, M. Gandais, T. Gacoin, J.P. Boilot. 3D morphology of II-VI semiconductor nanocrystals grown in inverted micelles // *Journal of Crystal Growth*, **203**, pp. 486-499 (1999).
- [2] S.K. Mandal, S. Chaudhuri, A.K. Pal. Nanocrystalline CdTe films deposited by high-pressure sputtering: carrier transport at low temperature // *Thin Solid Films*, **357**, pp. 102-110 (1999).
- [3] L. Esaki, R. Tsu // *IBM J. Res. Dev.*, **14**, p. 61 (1970).
- [4] U. Woggon, S.V. Gaponenko. // *Phys. Stat. Sol. (b)*, **189**, pp. 285 (1995).
- [5] A.D. Yoffe. // *Adv. Phys.*, **42**, pp. 173 (1993).
- [6] R. Pal, D. Bhattacharyya, A.B. Maity, S. Chaudhuri, A.K. Pal, *Nanostruct. Mater.*, **4**, p. 329 (1994).
- [7] S. Banerjee, R. Pal, A.B. Maity, S. Chaudhuri, A.K. Pal, *Nanostruct. Mater.*, **8**, p. 301 (1997).
- [8] W.T. Tsang, in: R.K. Willardson, A.C. Beer (Eds.) // *Semiconductors and Semimetals*, Academic Press, New York, **24**, pp. 397 (1990).
- [9] S. Schmitt-Rink, D.S. Chamia, D.A.B. Miller // *Adv. Phys.*, **39**, pp. 89 (1989).
- [10] G. Reuscher, M. Keim, F. Fischer, A. Wang, G. Landwehr // *Phys. Rev.*, **53**, pp. 16414 (1996).
- [11] U. Lunz, M. Leim, G. Reuscher, F. Fischer, K. Schill, A. Wang, G. Landwehr // *J. Appl. Phys.*, **80**, pp. 6329 (1996).
- [12] Фрейк Д.М., Галушак М.А., Межиловская Л.И. *Фізика і технологія напівпровідникових плінок*. Выща школа, Львов 152 с. (1988).
- [13] Д.М. Фрейк, М.А. Лоп'янка, А.К. Школьний, Р.І. Никируй. Нанокристали сполук IV-VI, осаджені із газодинамічного потоку пари // *Фізика і хімія твердого тіла*, **6(1)**, сс. 28-33 (2005).
- [14] *Термодинамические свойства неорганических веществ. Справочник*. Энергия, М. (1967).

М.А. Lopjanko, R.I. Nykyruy, I.V. Kalytchuk

The Gas-dynamical Steam of Stream Parameters of the Cadmium Telluride

*Physical-Chemical Institute at the Vasyl Stefanyk Precarpathian National University,
 57, Shevchenko Str., Ivano-Frankivsk, 76000, Ukraine, E-mail: freik@pu.if.ua*

There are shown dependence of the thermal-dynamical parameters of the gas-dynamical steam of stream at the linear temperature gradient along cylinder channel of chamber. The dependence of the Makh number, efficient, and the result velocity of condensation, density of the steam of stream, steam pressure, temperature, expend actions, range of satiety of the cadmium telluride from the geometrical factors are calculated. Was receiving the interval of vacuum chamber size to the best structure receive.