

ЕЛЕКТРОННІ ВЛАСТИВОСТІ МЕТАЛІВ З ПОЛІДИСПЕРСНОЮ СИСТЕМОЮ НАНОДЕФЕКТІВ ЗАПОВНЕННЯ ОБ'ЄМУ

В.І. Маренков

*Одеський національний університет імені І.І. Мечникова,
вул. Дворянська, 2, 65026 Одеса, Україна, e-mail: maren0@ukr.net*

Матеріали сучасних нанотехнологій характеризуються використанням елементів з характерним геометричним масштабом в нанометровій області. Інтенсивне застосування нанопористих металів для створення елементів схем наноприладів (зокрема нанодатчиків і високотемпературних сенсорів), нових конструкційних матеріалів на основі металевих пін і композитів [1] – висуває на передній план проблему отримання надійної інформації, щодо ефективних електронних характеристик таких систем у широкій області термодинамічних параметрів діаграми стану речовини. Наявність значної долі коволюму нано-дефектів у металевому зразку має суттєвий вплив на його електронні властивості, і є залежним як від електронних характеристик базового матеріалу, так і від параметрів функції розподілу нанодфектів заповнення об'єму (НДЗО) за розміром. Дисперсність та загальне утримання НДЗО у мікронеоднорідному матеріалі контролюються в технологічному процесі на етапі виготовлення його окремих зразків. В той же час, у готовому матеріалі безпосередній контроль параметрів ансамбля нановключень потребує витратних прецизійних досліджень методами електронної мікроскопії. Розробка нових експрес-методів контролю, заснованих на теорії ефективних електронних властивостей неоднорідних систем з нанодфектами в об'ємі, ще тільки розпочинається.

В роботі запропоновано статистичну модель опису впливу параметрів функції розподілу НДЗО металевого зразка жаротривкого металу за розміром на ефективний рівень електрохімічного потенціалу носіїв в його об'ємі. При високих температурах осереднене значення густини електронного компоненту в НДЗО внаслідок процесів емісії і тунелювання у власний об'єм дефектів є ненульовим, що призводить до виникнення подвійних зарядових шарів на виокремлюючих дефекти поверхнях. Наявність квазівільних колективізованих електронів провідності в матриці базового матеріалу (БМ), які легко

перерозподіляються в об'ємі БМ, забезпечує можливість актуалізації ефектів електростатичного екранування заряджених дефектів у зразку. Причому, значна середня концентрація електронного компоненту в металі лімітує товщини шарів протиіонів, які екранують НДЗО, масштабами порядку довжини Фермі носіїв, що становить для металів $10^{-8} \div 10^{-10}$ м. Таким чином, електростатичне поле, що його утворює система дефектів, виокремлених в однозв'язній матриці металу та екранованих зарядами БМ, характеризується множиною об'ємних електростатичних неоднорідностей, які формуються зарядами індивідуальних НДЗО та електрон-іонної підсистеми БМ. Внески електростатичної взаємодії для окремих НДЗО в функціонал вільної енергії системи є залежними від їх власного геометричного розміру, і реалізуються такими, щоби в рівновазі значення осередненої густини функціоналу було мінімальним. Вказані моменти визначають фізичний механізм реалізації квазінейтральності в областях локальної термодинамічної рівноваги зразків з полідисперсною системою НДЗО. Власне вони і складають підґрунтя статистичної моделі «квазінейтральних чарунок», щодо опису електрон-іонних процесів у мікронеоднорідних матеріалах з нановключеннями «заповнення об'єму». Перехід, у полідисперсному випадку, до статистичного осереднення за ансамблем різнорозмірних чарунок, які в матриці БМ виокремлює багатозв'язна поверхня екстремуму миттєвого електростатичного потенціалу, здійснюється в рамках обчислювального комп'ютерного експерименту у послідовності: 1) визначається залежність ко-реляційної електростатичної енергії вільних зарядів системи як функція рівня Фермі електронного компоненту зразка в осереднених чарунках окремих НДЗО; 2) обчислюється інтегральний електростатичний внесок чарунок одиничного об'єму зразка в густину функціоналу Гельмгольца; 3) з необхідної умови мінімуму функціоналу системи (похідна густини вільної енергії за рівнем електрохімічного потенціалу носіїв обертається до нуля) - кінцево обчислюється рівноважний рівень Фермі електронів зразка з полідисперсними НДЗО. На рис. 1 наведено елемент об'єму зразка металу з регулярною - рис.1.а); нерегулярною - рис.1.б) структурами монодисперсних НДЗО; та наближеним до

реального логнормальним розподілом сферичних НДЗО за розміром в матриці БМ $n(r_p) = \frac{n_0}{\sqrt{2\pi} \cdot \sigma} \cdot \exp\left[-\frac{1}{2} \cdot \left(\frac{\ln r_p - \ln r_0}{\sigma}\right)^2\right]$, нормованим в інтервалі розміру дефектів $r_p \in [5, 10]$ і на їх зліченну концентрацію у зразку $n_0 = 1.25 \cdot 10^{20} \text{ м}^{-3}$ - рис.1. в) . Дисперсія розподілу розміру НДЗО $\sigma = 0.358$.

Розраховані в комп'ютерному експерименті 3D-залежності ефективного рівня Фермі електронів, як функції зліченної концентрації дефектів n_0 та їх модального радіуса r_0 в мікронеоднорідних зразках жаротривких металів при температурах [1000, 3000] К вказують на суттєвий вплив параметрів функції розподілу розмірів НДЗО на ефективні електронні параметри матеріалів.

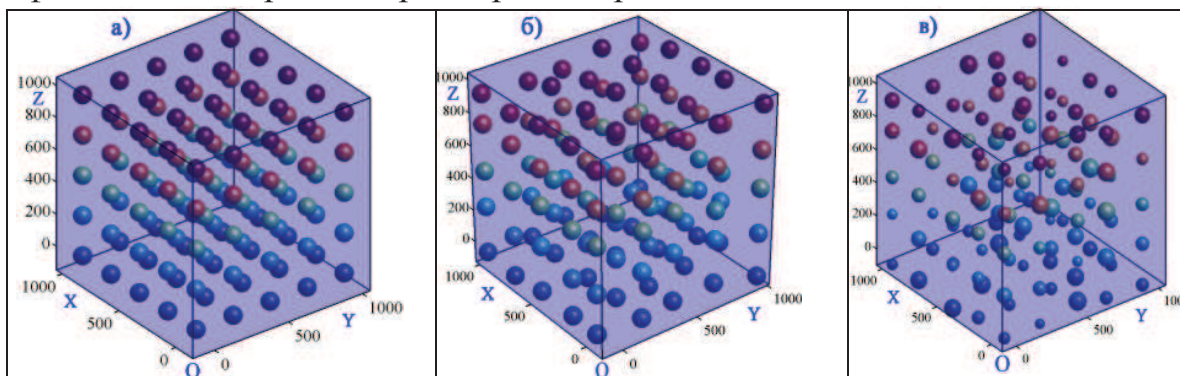


Рис. 1. Елемент матриці базового металу 1000х1000х1000 (нм) з регулярною – а); нерегулярною – б); та в) – нерегулярною структурою різнорозмірних НДЗО.

Загалом, пропонуємий статистичний підхід відкриває нові можливості щодо прогнозу, діагностики та контролю ефективних електронних характеристик мікронеоднорідних металів з НДЗО з полідисперсною функцією розподілу за розміром шляхом модифікації її параметрів.

Література

1. Маренков В.І. Рівень Фермі та структура кулонівських неоднорідностей у металах і напівпровідниках з нанодфектами заповнення об'єму. – СЕМСТ-5.– Україна, Одеса, 4-8 червня 2012.– С. 62 - 63.