

ЛОКАЛЬНЕ ЕЛЕКТРОСТАТИЧНЕ ПОЛЕ В ОКОЛІ СФЕРИЧНИХ ДЕФЕКТІВ ЗАПОВНЕННЯ ОБ'ЄМУ МІКРОНЕОДНОРІДНОГО МАТЕРІАЛУ

В.І. Маренков, О.Ю. Зубков

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

Нагальним імперативом досліджень у сучасних впровадженнях мікро-неоднорідних дисперсних систем, таких як метали, напівпровідники і композити з дисперсними включеннями (ДВ) нанота мезоскопічних масштабів, є проблема розбудови теоретичного базису визначення їх ефективних електронних властивостей. Зокрема, при створенні високочутливих нанодатчиків температури і тиску, важливим контролюємими параметрами є напруженість локального електростатичного поля та тензор механічних деформацій в околі (ДВ) [1]. Методики створення нових матеріалів на основі базового, шляхом утворення в об'ємі дисперсних структур у виді множини пор, шпарин та іншого виду неоднорідностей, добре відпрацьовані та знайшли широке застосування у сучасних нанотехнологіях. Але прогноз, діагностика і керування властивостями створюваних структур наштовхуються на невирішену проблему визначення впливу електричних мікрополів ДВ на осереднені за об'ємом локальні електрофізичні характеристики мікронеоднорідних матеріалів (ММ) у залежності від визначальних параметрів (електронних, діелектричних, геометричних) множини ДВ у матриці базового матеріалу (БМ).

Існуючі моделі визначення локальної густини ймовірностей носіїв у власному об'ємі ДВ, що їх засновано на квантово-механічних розрахунках з великим числом підгоночних параметрів (моделі квантових точок, ниток, тощо) зазвичай використовують, як базове, значення рівня Фермі електронів у матеріалі з неоднорідностями. В той же час, рівень електрохімічного потенціалу F гетерогенного матеріалу є попередньо невідомим, та повинен бути визначеним за набором вихідних визначальних параметрів ММ, зокрема характеристиками ансамбля ДВ та БМ.

Запропонований у роботі статистичний підхід, щодо аналізу структури мікрополів в околі ДВ у виді сферичних воїдів – дефектів

заповнення об'єму ММ, ґрунтуючись на осередненні локальних полів за ансамблем миттєвих чарунок електронейтральності ММ, у які попадає окрім ДВ у послідовні моменти часу. Як результат – проблема зводиться до вирішення двох спряжених електростатичних задач в обмеженій просторовій області – осередненій чарунці електронейтральності ММ. Для структур, утворених множиною сферичних ДВ в БМ, одержано аналітичні формули, що визначають локальне електростатичне поле в околі ДВ та загальне трансцендентне рівняння, щодо визначення рівня електрохімічного потенціалу носіїв ММ. Отримані у рамках модельного комп'ютерного експерименту значення напруженості мікрополів у сферичних дефектах в оксиді алюмінію, добре узгоджуються з натурними вимірами електрофізичних параметрів ММ, зокрема рівня Фермі носіїв.

Література

1. Nguyen L. D., Warner D. H. Improbability of Void Growth in Aluminum via Dislocation Nucleation under Typical Laboratory Conditions// Phys. Rev. Lett. 108, 035501(2012) .