

Р.І. Никируй

Параметри газодинамічного потоку пари халькогенідів кадмію і свинцю за умови геометричної дії

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

На основі теоретичної моделі газодинамічного потоку розраховано параметри пари халькогенідів кадмію і свинцю (нормовані значення густини (ρ/ρ_1) і тиску (p/p_1), температури (T/T_1) і швидкості потоку (u/u_1) та числа Маха (M) для конічної камери змінного перерізу. Визначено вплив технологічних факторів (температура випаровування (T_c), градієнт температури вздовж стінок камери (dT_c/dx), геометричні розміри камери (L , ϕ , F)) на зміну умов формування конденсату.

Ключові слова: газодинамічний потік, термодинамічні параметри, халькогеніди кадмію і свинцю, пара.

Стаття поступила до редакції 15.06.2008; прийнята до друку 10.12.2008.

Вступ

Халькогеніди металів другої і четвертої підгруп Періодичної таблиці – перспективні матеріали для оптоелектроніки, інфрачервоної техніки та термоелектрики. Це, в першу чергу, детектори іонізуючого випромінювання, люмінофори, перетворювачі сонячної і теплової енергії, джерела когерентного електромагнітного випромінювання [1]. В останній час вони привертають увагу дослідників у тонкоплівковому стані та як квантоворозмірні об'єкти [2, 3]. Це пов'язано із порівняно доброю технологічністю, малими затратами енергії для функціонування пристроїв на їх основі, а також особливими властивостями, відмінними від масивних зразків [4]. Широке практичне використання гальмується недосконалим рівнем технологічних розробок, які б забезпечували наперед задані характеристики, що необхідні для конкретних використань.

На даний час має місце інтенсивний пошук як нових технологій, так і вдосконалення вже відомих, які себе оправдали на практиці. Серед них перспективними вважаються методи молекулярно-променевої епітаксії, газової епітаксії із металоорганічних сполук, які знайшли своє використання для отримання наноструктурованих систем [5]. Авторами [2] виконуються роботи, пов'язані із можливостями використання парофазових методів – відкрите випаровування у вакуумі, квазізамкнуті технології типу “гарячої стінки”, – для отримання гранульованих плівок і нанорозмірних кристалів. Перспективним у цьому сенсі є метод осадження пари із газодинамічного

потоку [2]. У роботах [6-8] детально розглянуто профілі параметрів газодинамічного потоку пари халькогенідів кадмію і свинцю у циліндричній камері при витратній дії, а також їх вплив на процеси росту та формування як окремих нанокристалічних структур, так і суцільного тонкоплівкового конденсату.

Метою цієї роботи є розрахунок параметрів газодинамічного потоку пари для халькогенідів кадмію і свинцю при ізольованій геометричній дії, а також аналіз впливу сукупної геометричної і витратної дії на їх профілі.

I. Елементи теорії та результати розрахунків

При ізольованій геометричній дії, незалежною змінною, що визначає поведінку газу, є площа перерізу камери F_x . Такий випадок реалізується, коли камера змінного перерізу (конічна) знаходиться при температурі, що перевищує критичну температуру конденсації, тобто коли результуюча конденсація на стінках камери відсутня. В цих, умовах розподіл параметрів пари як функція від координати визначатиметься тільки геометричною дією.

Всі газодинамічні змінні (швидкість потоку u_x , густину ρ_x , тиск p_x і температуру T_x пари) можна однозначно виразити через число Маха M_x , яке визначається як відношення швидкості потоку газу у довільному перерізі (x) до швидкості звуку в цьому перерізі.

Дійсно, беручи до уваги закони збереження потоків маси, імпульсу та енергії і рівняння стану

ідеального газу, можна показати, що зв'язок між всіма параметрами визначається наступними співвідношеннями [8]:

$$(M_x^2 - 1) \frac{du_x}{u_x} = \frac{dF_x}{F_x}; \quad (1,а)$$

$$(M_x^2 - 1) \frac{dp_x}{p_x} = -\gamma M_x^2 \frac{dF_x}{F_x}; \quad (1,б)$$

$$(M_x^2 - 1) \frac{d\rho_x}{\rho_x} = -M_x^2 \frac{dF_x}{F_x}; \quad (1,в)$$

$$(M_x^2 - 1) \frac{dT_x}{T_x} = -(\gamma - 1) M_x^2 \frac{dF_x}{F_x}; \quad (1,г)$$

$$(M_x^2 - 1) \frac{dM_x^2}{M_x^2} = 2 \left(1 + \frac{\gamma - 1}{2} M_x^2 \right) \frac{dF_x}{F_x}. \quad (1,д)$$

Тут $\gamma = \frac{\tilde{N}_0}{\tilde{N}_v}$ і для одноатомної пари чисельно

$$\text{рівна } \gamma = \frac{5}{3}, \text{ для двоатомної } - \gamma = \frac{7}{5}.$$

Рівняння (1) є математичним виразом так званого закону обігу дій, який показує як повинен змінюватися знак дії (в даному випадку знак dF_x), щоб під час переходу через критичний переріз ($M = 1$) швидкість руху газу продовжувала збільшуватися. Дійсно, при $M_x < 1$ в рівнянні (1,а) швидкість газу збільшується ($du_x > 0$), якщо переріз камери зменшується ($dF_x < 0$), а при $M_x > 1$ переріз повинен збільшуватися ($dF_x > 0$) для того, щоб швидкість продовжувала рости ($du_x > 0$). Розв'язуючи спільно систему рівнянь (1,а) - (1,д) для нормованих параметрів пари отримаємо:

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

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

$$\frac{\rho_2}{\rho_1} = \frac{1 + \frac{\gamma - 1}{2} M_1^2}{1 + \frac{\gamma - 1}{2} M_2^2}; \quad (2,в)$$

$$\frac{T_2}{T_1} = \frac{1 + \frac{\gamma - 1}{2} M_1^2}{1 + \frac{\gamma - 1}{2} M_2^2}; \quad (2,г)$$

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

$$\frac{j_2}{j_1} = \frac{M_2}{M_1} \left(\frac{1 + \frac{\gamma - 1}{2} M_2^2}{1 + \frac{\gamma - 1}{2} M_1^2} \right)^{\frac{\gamma + 1}{2(\gamma - 1)}}. \quad (2,е)$$

Де j – питомий потік пари. Індeksi 1 і 2 визначають параметри пари двох довільних перерізів. Якщо один з перерізів (наприклад, 1) є критичним, то можна виразити параметри в будь-якому іншому перерізі через число Маха M_x і параметри пари в критичному перерізі: $u_{кр}$, $p_{кр}$, $\rho_{кр}$, $T_{кр}$, $F_{кр}$, $j_{кр}$. 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: $d_x = d_0 - 2x \text{ctg}\varphi$, де φ – кут між твірною конуса і поверхнею випаровування (дном камери). Тоді $\frac{dF_x}{F_x} = -\frac{4 \text{ctg}\varphi}{d_0 - 2x \text{ctg}\varphi} dx$, а

рівняння (1,д) перетвориться на наступне:

$$(M_x^2 - 1) \frac{dM_x^2}{M_x^2} = -2 \left(1 + \frac{\gamma - 1}{2} M_x^2 \right) \frac{4 \text{ctg}\varphi}{d_0 - 2x \text{ctg}\varphi},$$

$$\text{або } \frac{M_x^2 - 1}{M_x \left(1 + \frac{\gamma - 1}{2} M_x^2 \right)} dM_x = \frac{2}{\frac{d_0}{2 \text{ctg}\varphi} - x} dx. \quad (3)$$

Якщо вважати, що початковий газодинамічний переріз геометрично співпадає з поверхнею випаровування і, що $\xi = \frac{x}{L}$, $\delta = \frac{d_0}{2L \text{ctg}\varphi}$ (*) у безрозмірному вигляді співвідношення (3) запишеться як

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

Тут d_0 – діаметр дна камери (основи конуса).

Після розв'язання отриманого диференціального рівняння (3,а) для числа Маха отримаємо вираз:

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

а безрозмірна координата визначається як ξ :

$$\xi = \delta - \frac{\delta - 1}{\sqrt{M}} \left(\frac{2}{\gamma + 1} + \frac{\gamma - 1}{\gamma + 1} M^2 \right)^{\frac{\gamma + 1}{4(\gamma - 1)}}. \quad (5)$$

Тоді для одноатомної пари:

$$\xi = \delta - \frac{\delta - 1}{4\sqrt{M}} (3 + M^2), \quad (5,а)$$

а для двоатомної пари:

$$\xi = \delta - \frac{\delta - 1}{14,7} \sqrt{\frac{5 + M^2}{M}}. \quad (5,б)$$

З врахуванням (5,а) і (5,б) для одноатомної і двоатомної пари, відповідно, залежності $M_1 = M_1(\delta)$ приймають наступний вигляд:

$$M_1 \approx 0,56 \left(\frac{\delta - 1}{\delta} \right)^2, \quad (4.a)$$

$$M_2 \approx 0,58 \left(\frac{\delta - 1}{\delta} \right)^2. \quad (4.б)$$

Результати проведених розрахунків основних параметрів газодинамічного потоку пари для телуридів кадмію і свинцю від безрозмірної координати ($\xi - a$) і геометричного фактору ($\delta - б$) представлені на рис. 1 і рис. 2, відповідно. Видно, що для області від поверхні вирощування ($x = 0,0$) до критичного перерізу конденсації ($x = x_{кр}$) $0,0 < x < x_{кр}$ має місце зростання числа Маха (рис. 1,а; 2,а – криві 1), швидкості потоку пари (рис. 1,а; 2,а – криві 2) і зменшення тиску (рис. 1,а; 2,а – криві 3), густини (рис. 1,а; 2,а – криві 4) і температури (рис. 1,а; 2,а – криві 5). Для області $x_{кр} < x < L$, за умови, коли крім ізольованої геометричної дії є ще і витратна, характер зміни цих параметрів стає більш повільніший (рис. 1,а; 2,а). Це пов'язано із тим, що ці два процеси діють у протилежних напрямках.

Що стосується впливу геометричного фактору (δ) на параметри пари, який визначається кутом нахилу

(φ) твірної конуса до поверхні випаровування згідно (*), то слід відзначити наступне. При зменшенні кута нахилу φ , тобто, зростанні δ має місце різке падіння швидкості потоку пари (рис. 1,б; 2,б – криві 2), що і обумовлює таку ж зміну відносного значення числа Маха (рис. 1,б; 2,б – криві 1). Така зміна у цих параметрах пов'язана із характером поведінки числа Маха (M_1) у початковому перерізі – зростання при збільшенні δ (рис. 3 – крива 1), – і незначній зміні у його довільному перерізі (M) (рис. 3 – крива 2). Інші параметри пари при цьому зростають (рис. 1,б; 2,б – криві 3, 4, 5).

II. Аналіз умов осадження пари газодинамічного потоку

Залежно від конкретних умов препарування, температури стінок камери (T_c), температури поверхні випаровування (T_b), кута нахилу твірної конуса до її основи (φ), градієнта температури вздовж стінок камери (dT_x/dx) і т.д. можуть бути реалізовані наступні випадки:

1. Температура стінок камери вища за критичну

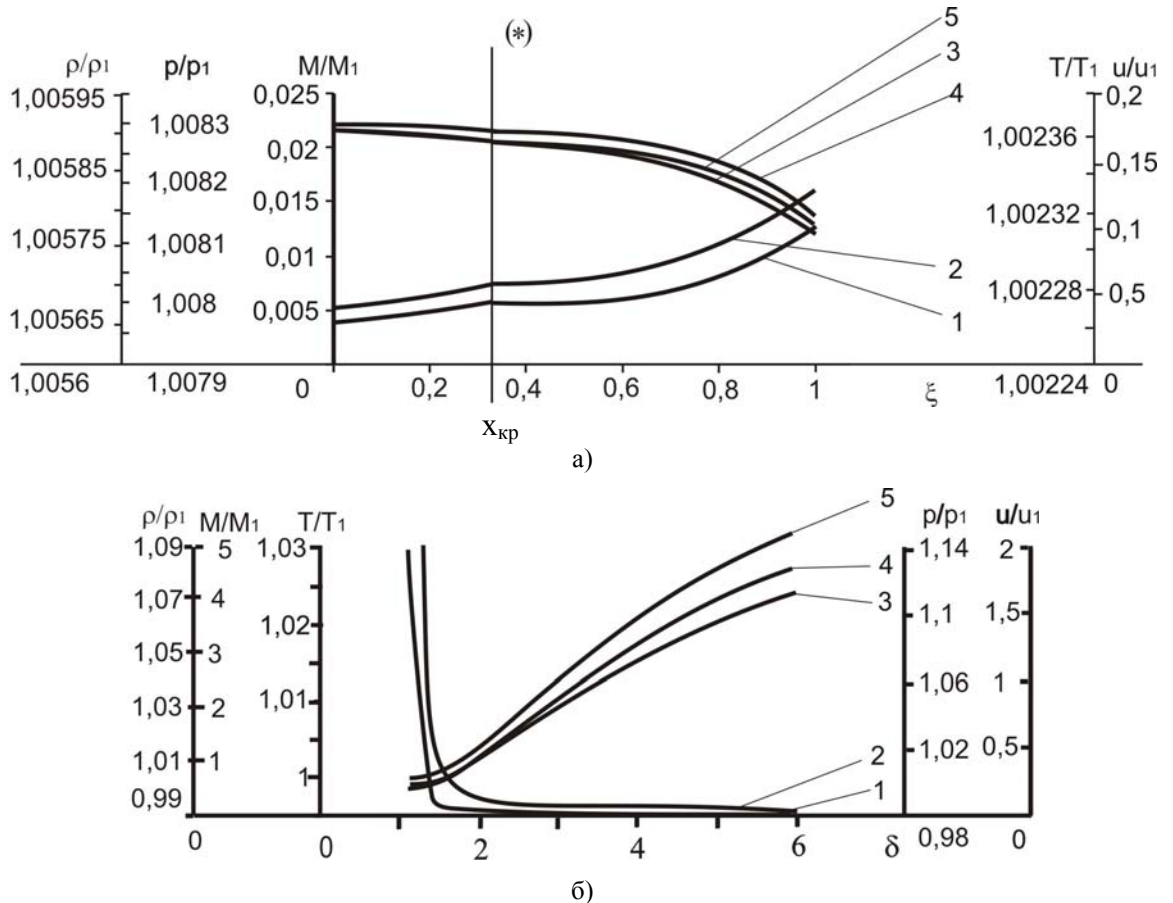


Рис. 1. Залежності нормованих значень числа Маха ($M/M_1 - 1$), швидкості ($u/u_1 - 2$), тиску ($p/p_1 - 3$), густини ($\rho/\rho_1 - 4$), температури ($T/T_1 - 5$) пари телуриду кадмію від безрозмірної координати (а) і геометричного фактору (б) для ізольованої геометричної дії ($L = 0,08$ м, $d_0 = 0,05$ м, $\varphi = 80^\circ$ (а), $dT/dx = -3 \cdot 10^3$ К/м).

* а – враховує дію геометричного фактору в інтервалі $x < x_{кр}$ та взаємний вплив геометричного фактору і витратної дії при $x > x_{кр}$; б – відповідає дії геометричного фактору для всіх значень δ . Критичний переріз при витратній дії становить $x_{кр} = 0,026$ м, $\xi = 0,333$.

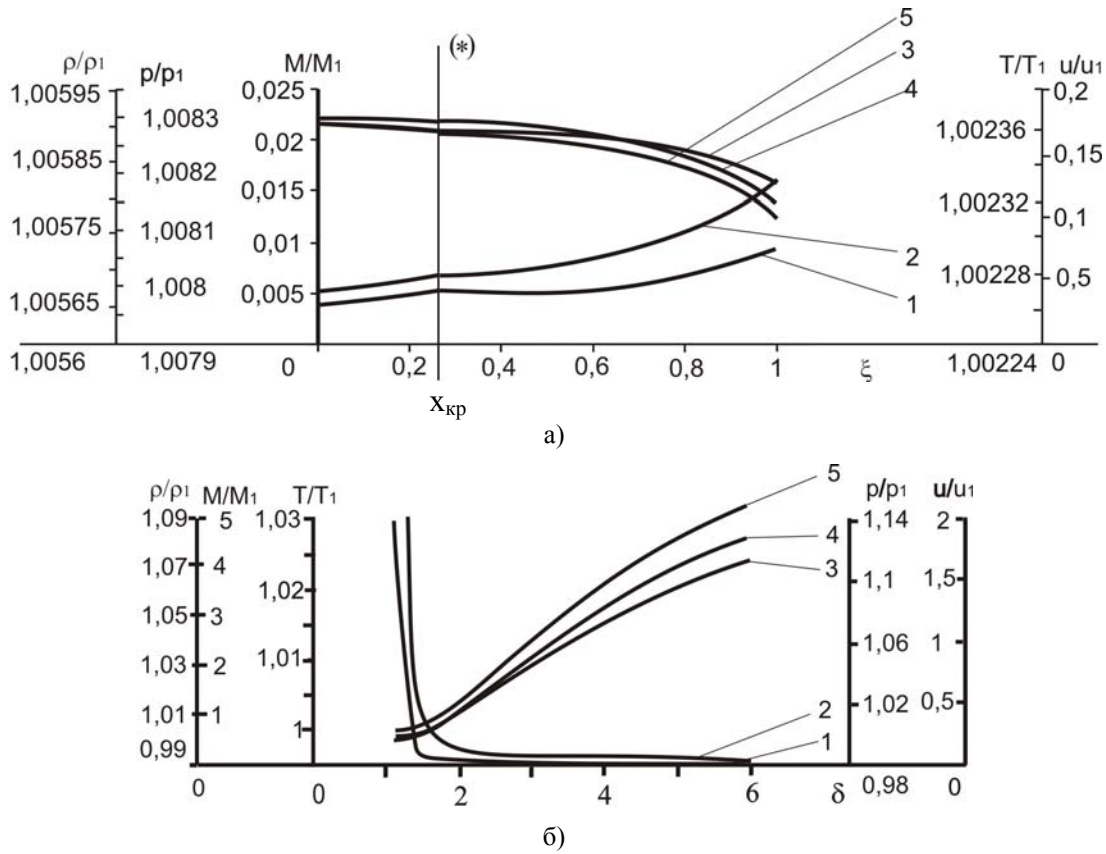


Рис. 2. Залежність нормованих значень числа Маха ($M/M_1 - 1$), швидкості ($u/u_1 - 2$), тиску ($p/p_1 - 3$), густини ($\rho/\rho_1 - 4$), температури ($T/T_1 - 5$) пари телуриду свинцю від безрозмірної координати (а) і геометричного фактору (б) для ізолюваної геометричної дії ($L = 0,08$ м, $d_0 = 0,05$ м, $\varphi = 80^\circ$ (а), $dT/dx = -3 \cdot 10^3$ К/м).
 * а – враховує дію геометричного фактору в інтервалі $x < x_{кр}$ та взаємний вплив геометричного фактору і витратної дії при $x > x_{кр}$. б – відповідає дії геометричного фактору для всіх значень δ . Критичний переріз при витратній дії становить: $x_{кр} = 0,023$ м, $\xi = 0,277$.

температуру конденсації по всій довжині камери ($T_c > T_{кр}$). Тоді критичний газодинамічний переріз знаходиться у найменшому діаметрі камери ($x_{кр} = x_L$) і потік на всій довжині камери є дозвуковим. Поведінка параметрів пари в такій камері визначається тільки геометричною дією (рис. 1,а; 2,а).

2. Камера з малим градієнтом температури (dT_x/dx). Розподіл температури стінок камери такий, що критична температура конденсації ($T_{кр}$) лежить в інтервалі δ_0, δ_L . Проте геометрична дія переважає витратну по всій довжині камери. Як і у попередньому випадку, критичним газодинамічним перерізом є переріз камери $x_{\delta\delta}$ і потік пари в камері при $x < x_{\delta\delta}$ має дозвукову швидкість. Профілі газодинамічних змінних до перерізу $\delta = \delta_{\delta\delta}$ співпадають з профілями відповідних параметрів попереднього випадку. При $\delta > \delta_{\delta\delta}$ починається конденсація, вплив якої на параметри рухомої пари протилежний геометричній дії (рис. 1,а; 2,а – праві криві).

3. Камера з градієнтом температури, за умови якого має місце значна конденсація пари на її стінки. Тоді розхідна дія переважає над геометричною у

деякому певному інтервалі ($\delta_1 - \delta_L$). При цьому критичний переріз $x_{\delta\delta}$ міститься всередині цього інтервалу ($x_1 < x_{\delta\delta} < \delta_L$) і вздовж всієї довжини камери густина, тиск і температура монотонно зменшуються. При цьому вище $x_{\delta\delta}$ зміна параметрів пари менш різка, як для випадку ізолюваної геометричної ($\delta \leq \delta_{\delta\delta}$) і розхідної ($\delta > \delta_{\delta\delta}$) дії. Це і

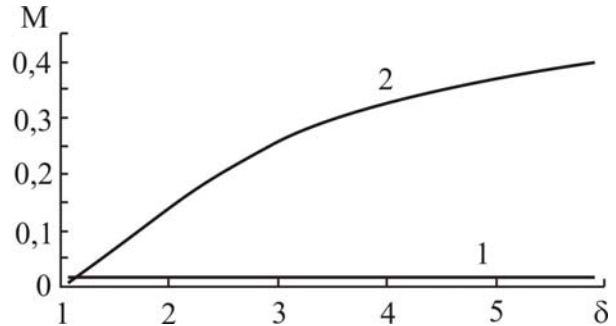


Рис. 3. Залежність числа Маха M_1 (крива 2) у початковому перерізі і у будь-якому перерізі M (крива 1) для телуридів кадмію і свинцю від геометричного фактору за умови ізолюваної геометричної дії ($L = 0,08$ м, $d_0 = 0,05$ м, $dT/dx = -3 \cdot 10^3$ К/м).

зрозуміло, оскільки на проміжку ($\delta_1 - \delta_L$) вплив на параметри пари геометричної і розхідної дії протилежні. При рівних умовах (температура випаровування, градієнт температури) значення параметрів пари вище критичного перерізу ($\delta > \delta_{\text{кр}}$) будуть більшими, ніж для циліндричної камери. Останнє є важливим технологічним фактором при отриманні конденсату напівпровідникових сполук.

Таким чином, участь у процесі масопереносу пари одночасно геометричної і витратної дій дозволяє в більш широких межах змінювати параметри пари в замкнутому 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. Крім того, окремим додатковим нагрівником можна реалізувати випадок, коли температура підкладки більша за температуру стінки камери ($T_n > T_c$). Тоді $x_{\text{кр}}$ буде не на кришці конічної камери, а в межах $0 < x < L$. У випадку $T_n > T_c$ підкладка діє як джерело температури і характеристики термодинамічних параметрів на інтервалі $x_{\text{кр}} - L$ протилежні до характеристик для випадку $T_n < T_c$ на цьому ж інтервалі (відбувається обернений процес). В результаті накладання цих процесів отримуємо апроксимуючу характеристику

пари газодинамічного потоку.

Висновки

1. Наведено елементи теорії розрахунку параметрів газодинамічного потоку пари за умови ізольованої геометричної дії.
2. Виконано аналіз сумісного впливу геометричної та витратної дії на параметри пари для випадку її руху у конічній камері.
3. Розраховано профілі параметрів газодинамічного потоку пари для телуридів кадмію і свинцю від безрозмірної координати та геометричного фактора у випадку його руху у конічній камері.
4. Зроблено аналіз процесів конденсації пари для різних технологічних умов її формування.

Автор висловлює вдячність проф. Фреїку 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).

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

- [1] Ю.И. Равич, Б.А. Ефимова, И.А. Смирнов. Методы исследования полупроводников в применении к халькогенидам свинца PbSe, PbSe, PbS. Наука. М. 384 с. (1968).
- [2] Д.М. Фреик, М.А. Галушак, Л.И. Межиловская. *Физика и технология полупроводниковых пленок*. Вища школа. Львів. 152 с. (1988).
- [3] J.N. Zemel, J.D. Jensen, R.B. Schoolar. Electrical and Optical Properties of Epitaxial Films of PbS, PbSe, PbTe and SnTe // *Phys. Rev.*, **140**(12), pp. A330-A343 (1965).
- [4] В.Н. Белявский. Физические основы полупроводниковой нанотехнологии // *Соросовский образовательный журнал. Физика*, **10**, сс. 92-98 (1998).
- [5] Н. Кобаяси. *Введение в нанотехнологию*. Пер. с япон. 2-е изд. БИНОМ. Лаборатория знаний. М. 134 с. (2008).
- [6] М.А. Лоп'янку, Р.І. Никируй, І.В. Калитчук. Параметри газодинамічного потоку пари кадмій телуриду // *Фізика і хімія твердого тіла*, **7**(2), сс. 235-240 (2006).
- [7] М.А. Лоп'янку, Р.І. Никируй. Оптимізація параметрів газодинамічного потоку пари для CdS, CdSe, CdTe // *Фізика і хімія твердого тіла*, **8**(1), сс. 75-80 (2007).
- [8] 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. Nykyruy

Gas-Dynamical Steam of Stream of the Lead and Cadmium Telluride Parameters at the Geometry Factor Influence

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

There are calculated the lead and cadmium telluride gas-dynamical stream of steam parameters (normalized value of density (ρ/ρ_1), pressure (p/p_1), temperature (T/T_1), and velocity of stream (u/u_1), and Makh's number (M)) for the conical chamber with variable cross-section on the base of theoretical model. The influence of the technology factors (temperature of evaporation (T_c), temperature gradient along chamber walls (dT_x/dx), geometrical sizes of chamber (L, ϕ, F)) on change of condensate condition formation are set.