

Використовуючи метод електронно-променевого випаровування напилено тонкі плівки TiO_2 та $TiO_2:Cr_2O_3$ (вміст Cr_2O_3 – 1 %, 3 % мол.) в універсальній вакуумній установці Leybold – Heraeus L560. Спектри пропускання отримано за допомогою спектрофотометра СФ-2000. За допомогою конвертного методу визначено ширину забороненої зони тонких плівок TiO_2 та $TiO_2:Cr_2O_3$ та спектральні залежності їх оптичних коефіцієнтів

Ключові слова: TiO_2 , Cr_2O_3 , оптичні властивості, легування, конвертний метод, домішка, ширина зони, тонка плівка, коефіцієнт поглинання, показник заломлення

Используя метод электронно-лучевого испарения, напылены тонкие пленки TiO_2 и $TiO_2:Cr_2O_3$ (содержания Cr_2O_3 – 1 %, 3 % мол.) в универсальной вакуумной установке Leybold – Heraeus L560. Спектры пропускания получены с помощью спектрофотометра СФ-2000. С помощью конвертного метода определена ширина запрещенной зоны тонких пленок TiO_2 и $TiO_2:Cr_2O_3$ и спектральные зависимости их оптических коэффициентов

Ключевые слова: TiO_2 , Cr_2O_3 , оптические свойства, легирование, конвертний метод, примесь, ширина зони, тонкая плівка, коефіцієнт поглинання, показатель преломления

ВПЛИВ ДОМІШКИ Cr_2O_3 НА ШИРИНУ ЗАБОРОНЕНОЇ ЗОНИ ТОНКИХ ПЛІВОК TiO_2

А. І. Мостовий

Аспірант*

E-mail: a.mostoviy@chnu.edu.ua

В. В. Брус

Кандидат технічних наук, асистент*

E-mail: victorbrus@mail.ru

П. Д. Мар'янчук

Доктор фізико-математичних наук, професор, завідувач кафедри*

E-mail: p.maryanchuk@chnu.edu.ua

*Кафедра електроніки і енергетики

Чернівецький національний університет

ім. Ю. Федьковича

вул. Коцюбинського 2, Чернівці, Україна, 58012

1. Вступ

В останні роки оксиди металів з напівпровідниковими властивостями, зокрема діоксид титану (TiO_2), досить широко використовуються в різних приладах, особливо в галузі фотоелектричної техніки для різних цілей: прозорі шари (вікна) для сонячних елементів, антивідбиваюче покриття [1 – 3]. Тому дослідження фізичних властивостей чистих та легованих плівок TiO_2 на сьогодні є дуже актуальним.

Легування плівок TiO_2 різними металами та їх оксидами дозволяє змінювати ширину забороненої зони матеріалу, що є актуальним при застосуванні у фотоелектричних приладах [4 – 5].

2. Аналіз літературних даних

На сьогоднішній день тонкоплівкові матеріали широко застосовуються у напівпровідниковому приладобудуванні [6].

Діоксид титану (TiO_2) є одним з найперспективніших матеріалів серед прозорих провідних оксидів. Особливий інтерес представляють дослідження оксиду титану для застосування у фото-декомпозиції органічних молекул [7]. Діоксид титану інтенсивно використовується у тонкоплівкових оптично-інтерференційних покриттях [8].

Проводяться активні пошуки матеріалу з оптимальними діелектричними властивостями для заміни

шарів SiO_2 у напівпровідникових приладах (транзисторах, тиристорах, мікросхемах). Межа мініатюризації, коли процеси тунелювання стають помітними внаслідок зменшення товщини діелектричного прошарку діоксиду кремнію, буде досягнута у близькому майбутньому. Надтонкі плівки оксидів металів можна успішно застосувати як діелектричні матеріали у майбутньому, а TiO_2 з найбільшим значенням діелектричної постійної є оптимальним матеріалом для цього використання [9].

Цікавими є плівки TiO_2 , леговані 3d-елементами як перспективні матеріали для спінтронних приладів. Чистий діоксид титану – немагнітний матеріал, але після легування атомами перехідних елементів, він стає феромагнітним [10]. Тонкі плівки з такого матеріалу оптично прозорі, напівпровідні і феромагнітні при кімнатній температурі, тому можуть підходити для виготовлення спінтронних електричних приладів.

3. Експериментальна частина

У даній роботі тонкі плівки чистого TiO_2 та $TiO_2:Cr_2O_3$ (вміст Cr_2O_3 – 1 %, 3 % мол) напилувалися в універсальній вакуумній установці Leybold – Heraeus L560 за допомогою електронно-променевого випаровування спресованих таблеток з суміші порошку TiO_2 та Cr_2O_3 у відповідних пропорціях.

Напилення плівок діоксиду титану та суміші діоксиду титану з оксидом хрому у заданих співвідно-

шеннях проводилось на попередньо очищені ситалові підкладки та підкладки з покривного скла. Температура підкладок контролювалася системою термопар у вакуумній камері і становила ~ 400 °C.

4. Дослідження оптичних властивостей тонких плівок

На рис. 1, а представлено спектри пропускання чистої плівки TiO₂ та TiO₂:Cr₂O₃ (вміст Cr₂O₃ – 1; 3 % мол). На спектрі пропускання тонких плівок TiO₂ та TiO₂:Cr₂O₃ (вміст Cr₂O₃ – 1; 3 % мол) видно періодичні піки та впадини, які обумовлені інтерференційними явищами. Це свідчить про хорошу однорідність та якість поверхні тонких плівок.

Оптичні коефіцієнти тонких плівок (показник заломлення n(λ), коефіцієнт поглинання α(λ) та екстинції k(λ)) можуть бути визначені із спектрів пропускання з інтерференційними ефектами, використовуючи конвертний метод.

Даний метод можна застосовувати за умови слабого поглинання тонкими плівками та прозорої підкладки, товщина якої набагато більша від товщини плівки. Дані вимоги задовольняються у даній роботі.

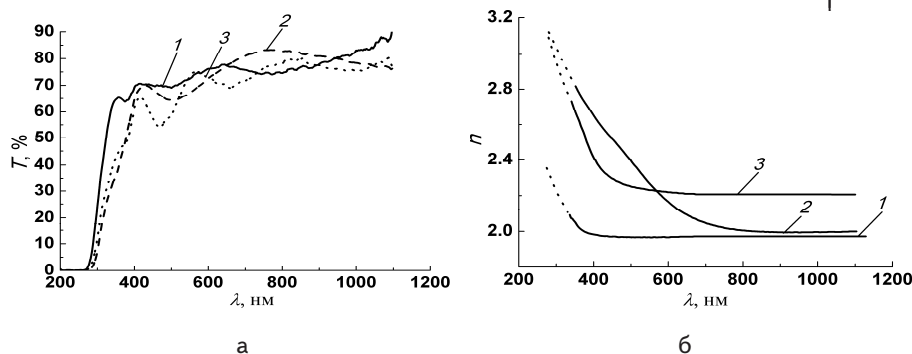


Рис. 1. Графік залежності: а – пропускання T від довжини хвилі λ: 1 – чистої тонкої плівки TiO₂, 2 – тонкої плівки TiO₂:Cr₂O₃ (1 % мол), 3 – тонкої плівки TiO₂:Cr₂O₃ (3 % мол), б – показника заломлення n від довжини хвилі λ для тонких плівок: 1 – чистої тонкої плівки TiO₂, 2 – тонкої плівки TiO₂:Cr₂O₃ (1 % мол), 3 – тонкої плівки TiO₂:Cr₂O₃ (3 % мол)

Отримавши конвертні криві, відповідно до конвертного методу, можна визначити показник заломлення n(λ) тонкої плівки TiO₂ та TiO₂:Cr₂O₃ (вміст Cr₂O₃ – 1 %, 3 % мол), використавши наступне рівняння:

$$n(\lambda) = \left[\left(\frac{2n_s(T_m(\lambda) - T_m(\lambda))}{T_m(\lambda)T_m(\lambda)} + \frac{n_s^2 + 1}{2} \right) + \sqrt{\left(\frac{2n_s(T_m(\lambda) - T_m(\lambda))}{T_m(\lambda)T_m(\lambda)} + \frac{n_s^2 + 1}{2} \right)^2 - n_s^2} \right]^{1/2} \tag{1}$$

де n_s – це показник заломлення підкладки, що визначається за виразом:

$$n_s = \frac{1}{T_s} + \sqrt{\frac{1}{T_s^2} - 1}, \tag{2}$$

де T_s – пропускання підкладки, яке практично постійне в області прозорості.

Для покривного скла, що використане в якості підкладки, T_s = 0.91. Тоді з рівняння (2) отримуємо, що n_s = 1.554.

Значення показника заломлення n(λ) плівок TiO₂ та TiO₂:Cr₂O₃ (вміст Cr₂O₃ – 1 %, 3 % мол), розраховане за рівнянням (1), по мірі збільшення довжини хвилі спадає і стабілізується при довжинах хвиль λ > 600 нм, що добре видно з рис. 1, б.

Так як формулу (1) не можна застосовувати за межами зони інтерференції для визначення показника заломлення в області власного поглинання плівки TiO₂ та TiO₂:Cr₂O₃ (вміст Cr₂O₃: 1; 3% мол) була застосована екстраполяція розрахованих значень n(λ) [11 – 12]. За допомогою рівняння (3) можна обчислити коефіцієнт поглинання α(λ) для тонких плівок:

$$\alpha(\lambda) = \frac{1}{d} \ln \left[\frac{(n(\lambda) - 1)(n(\lambda) - n_s) \left(\left(\frac{T_m(\lambda)}{T_m(\lambda)} \right)^{1/2} + 1 \right)}{(n(\lambda) + 1)(n(\lambda) + n_s) \left(\left(\frac{T_m(\lambda)}{T_m(\lambda)} \right)^{1/2} - 1 \right)} \right] \tag{3}$$

Коефіцієнт поглинання α(λ) як функцію від довжини хвилі зображено на рис. 2, а. Можна бачити різке збільшення коефіцієнта поглинання в короткохвильовій області поблизу краю власного поглинання. З рис. 2, а видно, що домішка Cr₂O₃ збільшує коефіцієнт поглинання.

Використовуючи рівняння $k(\lambda) = \frac{\lambda \alpha(\lambda)}{4\pi}$, визначали коефіцієнт екстинції (рис. 2, б).

Конвертний метод можна застосовувати лише у межах області прозорості тонкої плівки. Тоді як в області власного поглинання виконуються наступні умови: сильне поглинання в тонкій плівці TiO₂ та TiO₂:Cr₂O₃, повністю прозора підкладка та n² >> k² (TiO₂ та TiO₂:Cr₂O₃ є непрямозонними напівпровідниками з малими значеннями показника екстинції).

Таким чином, показник поглинання α(λ) в області власного поглинання тонкої плівки TiO₂ та TiO₂:Cr₂O₃ може бути визначеним з наступного виразу:

$$\alpha(\lambda) = \frac{1}{d} \ln \left[\frac{(1 - R_1(\lambda))(1 - R_2(\lambda))(1 - R_{12}(\lambda))}{T(\lambda)} \right], \tag{4}$$

де T – пропускання; R₁, R₁₂, R₂ – це коефіцієнти відбивання від границь: повітря – плівка, плівка – підкладка, підкладка – повітря. $R_1 = \left(\frac{n(\lambda) - 1}{n(\lambda) + 1} \right)^2$, $R_{12} = \left(\frac{n_s - n(\lambda)}{n_s + n(\lambda)} \right)^2$, $R_2 = \left(\frac{1 - n_s}{1 + n_s} \right)$ [13].

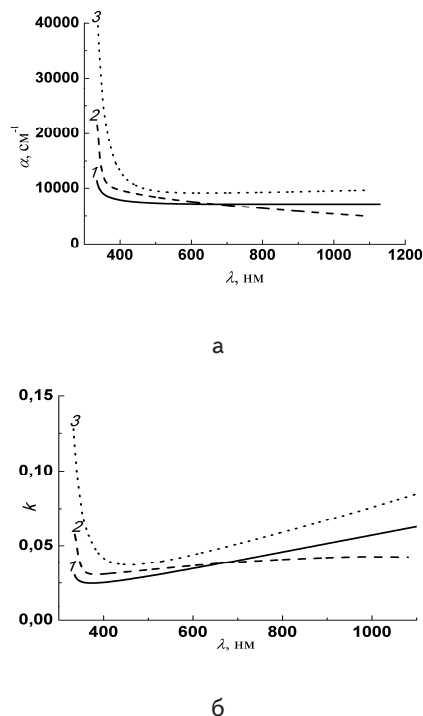


Рис. 2. Графік залежності: а – коефіцієнта поглинання α від довжини хвилі λ : 1 – чистої тонкої плівки TiO_2 , 2 – тонкої плівки $\text{TiO}_2 - \text{Cr}_2\text{O}_3$ (1 % мол), 3 – тонкої плівки $\text{TiO}_2 - \text{Cr}_2\text{O}_3$ (3 % мол), б – коефіцієнта екстинції k від довжини хвилі λ : 1 – чистої тонкої плівки TiO_2 , 2 – тонкої плівки $\text{TiO}_2 - \text{Cr}_2\text{O}_3$ (1 % мол), 3 – тонкої плівки $\text{TiO}_2 - \text{Cr}_2\text{O}_3$ (3 % мол)

Коефіцієнт поглинання для тонких плівок TiO_2 та $\text{TiO}_2:\text{Cr}_2\text{O}_3$ добре узгоджується із наступною залежністю:

$$\alpha h\nu = B(h\nu - E_g)^2, \quad (5)$$

де B – константа.

Визначено ширину забороненої зони TiO_2 ($E_g=3.43$ eВ) та $\text{TiO}_2:\text{Cr}_2\text{O}_3$ (вміст Cr_2O_3 : 1; 3 % мол) $E_g=3.32$ eВ, $E_g=3.15$ eВ, відповідно, шляхом перетину екстрапольованої лінійної ділянки кривої $(\alpha h\nu)^{1/2} = f(h\nu)$ з віссю енергії $h\nu$ (рис. 3).

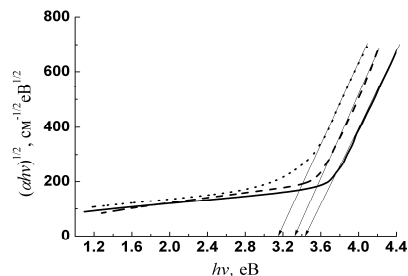


Рис. 3. Залежність $(\alpha h\nu)^{1/2}$ від енергії $h\nu$: 1 – чистої тонкої плівки TiO_2 , 2 – тонкої плівки $\text{TiO}_2 - \text{Cr}_2\text{O}_3$ (1 % мол), 3 – тонкої плівки $\text{TiO}_2 - \text{Cr}_2\text{O}_3$ (3 % мол)

Дані значення ширини забороненої зони відповідають аморфній структурі плівки [14 – 15].

5. Висновки

Виготовлено тонкі плівки TiO_2 та $\text{TiO}_2:\text{Cr}_2\text{O}_3$ (вміст Cr_2O_3 : 1; 3 % мол) методом електронно-променевого випаровування у вакуумі.

Виміряно спектри пропускання щойно напилених та відпалених тонких плівок TiO_2 та $\text{TiO}_2:\text{Cr}_2\text{O}_3$ (вміст Cr_2O_3 : 1; 3 % мол). Застосовано конвертний метод для визначення товщини плівки d та основних оптичних констант, зокрема, показник заломлення $n(\lambda)$, коефіцієнт поглинання $\alpha(\lambda)$ та екстинції $k(\lambda)$ в залежності від довжини хвилі.

Визначено ширину забороненої зони TiO_2 ($E_g=3.43$ eВ) та $\text{TiO}_2:\text{Cr}_2\text{O}_3$ (вміст Cr_2O_3 : 1; 3 % мол) $E_g=3.32$ eВ, $E_g=3.15$ eВ, відповідно.

Література

1. Brus, V. V. Electrical and photoelectrical properties of photosensitive heterojunctions n-TiO₂/p-CdTe [Text] / V. V. Brus, M. I. Ilashchuk, Z. D. Kovalyuk, P. D. Maryanchuk, K. S. Ulyanytsky // Semiconductor Science and Technology. – 2011. – Vol. 26.
2. Barrera, M. Antireflecting-passivating dielectric films on crystalline silicon solar cells for space applications [Text] / M. Barrera, J. Pla, C. Bocchi, A. Migliori // Solar Energy Materials and Solar Cells. – 2008. – Vol. 92, Is. 9. – P. 1115-1122.
3. Brus, V. V. Surface-barrier heterojunctions TiO₂/CdZnTe [Text] / V. V. Brus, M. I. Ilashchuk, Z. D. Kovalyuk, P. D. Maryanchuk, O. A. Parfenyuk. // Semiconductor Science and Technology. – 2013. – Vol. 28.
4. Jantson, T. Nanocrystalline Cr₂O₃-TiO₂ thin films by pulsed laser deposition [Text] / T. Jantson, T. Avarmaa, H. M`andar, T. Uustare, R. Jaaniso // Sensors and Actuators. – 2005. – Vol. 109. – P. 24-31.
5. Солован, М. Н. Электрические и оптические свойства тонких пленок TiO₂ и TiO₂:Fe [Текст] / М. Н. Солован, П. Д. Марьянчук, В. В. Брус, О. А. Парфенюк // Неорганические материалы. – 2012. – Том 48, Вып. 10. – С. 1154 - 1160.
6. Diebold, U. The surface science of titanium dioxide [Text] / U. Diebold // Surface Science Reports. – 2003. – Vol. 43. – P. 53-229.
7. Carp, O. Photoinduced reactivity of titanium dioxide [Text] / O. Carp, C. L. Husiman, A. Reller // Progress in Solid State Chemistry. – 2004. – Vol. 32. – P. 33-177.
8. Jeong, S.-H. Characterization of SiO₂ and TiO₂ films prepared using rf magnetron sputtering and their application to anti-reflection coatings [Text] / S.-H. Jeong, J.-K. Kim, B.-S. Kim, S.-H. Shim, B.-T. Lee // Vacuum. – 2004. – Vol. 76. – P. 507-515.
9. Chong, L. H. The structural and electric properties of thermally grown TiO₂ thin films [Text] / L. H. Chong, K. Mallik, C. H. Groot, R. Kersting // J. Phys: Condens. Matter. – 2006. – Vol. 18. – P. 645-657.
10. Murakami, M. Combinatorial fabrication and characterization of ferromagnetic Ti-Co-O system [Text] / M. Murakami, Y. Matsu-moto, M. Nagno, T. Hasegawa, M. Kawasaki, H. Koinuma // Applied Surface Science. – 2004. – Vol. 223. – P. 245-248.

11. Sanchez-Gonzalez, J. Determination of optical properties in nanostructured thin films using the Swanepoel method [Text] / J. Sanchez-Gonzalez, A. Diaz-Parralejo, A. L. Ortiz // Applied Surface Science. – 2006. – Vol. 252. – P. 6013-6017.
12. Мостовий, А. І. Оптичні властивості TiO_2/Mn до і після термічної обробки [Текст] / А. І. Мостовий, П. Д. Мар'янчук, В. В. Брус // Східно-Європейський журнал передових технологій. – 2012. – Т. 2, № 13 (56). – С. 19–22.
13. Уханов, Ю. И. Оптические свойства полупроводников [Текст] / Ю. И. Уханов – М.: Наука, 1977. – 368 с.
14. Brus, V. V. Comparison of optical properties of TiO_2 thin films prepared by reactive magnetron sputtering and electron-beam evaporation techniques [Text] / V. V. Brus, Z. D. Kovalyuk, O. A. Parfenyuk, N. D. Vakhnyak // Semiconductor physics, quantum electronics and optoelectronics. – 2011. – Vol. 14(4). – P. 27–432.
15. Eiamchai, P. A spectroscopic ellipsometry study of TiO_2 thin films prepared by ion-assisted electron-beam evaporation [Text] / P. Eiamchai, P. Chindaudom, A. Pokaipisit, P. Limsuwan // Current Appl. Phys. – 2009. Vol.9. – P. 707–712.

Запропоновано методику імітаційного тривимірної моделювання поширення забруднюючих домішок в атмосфері з використанням моделей розсіювання Гауса та “хмарних” технологій. Продемонстровано доцільність застосування пакету OpenMP для розпаралелення обчислень. Показана необхідність програмної оптимізації даного класу задач за кількістю паралельних потоків та задіяних процесорних ядер

Ключові слова: “хмарні” обчислення, моделювання, моделі розсіювання Гауса, OpenMP

Предложена методика имитационного трехмерного моделирования распространения загрязняющих примесей в атмосфере с использованием моделей рассеивания Гаусса и “облачных” технологий. Продемонстрирована целесообразность применения пакета OpenMP для распараллеливания вычислений. Показана необходимость программной оптимизации данного класса задач по количеству параллельных потоков и задействованных процессорных ядер

Ключевые слова: “облачные” вычисления, моделирование, модели рассеивания Гаусса, OpenMP

УДК 004.94

МЕТОД РОЗСІЮВАННЯ ГАУСА І ХМАРНІ ОБЧИСЛЕННЯ ДЛЯ 3D АНАЛІЗУ СТАНУ АТМОСФЕРИ

М. І. Скрипський
Асистент*

E-mail: ceo@mgm.cv.ua

Г. І. Воробець

Кандидат фізико-математичних наук, доцент*

E-mail: g.vorobets@chnu.edu.ua

*Кафедра комп'ютерних систем та мереж

Чернівецький національний університет

ім. Юрія Федьковича

вул. Університетська, 28, м. Чернівці,

Україна, 58000

1. Вступ

Процес моделювання поширення домішок в атмосфері потребує значних апаратних ресурсів сучасних комп'ютерів [1]. При цьому, користувач витрачає значно більше часу на підготовку задачі до моделювання та оцінку результатів ніж на сам процес моделювання. Зменшення питомої частки часу завантаження комп'ютера обчислювальними процедурами призводить, відповідно, до зменшення показника ефективної швидкодії обчислювальної системи за визначенням акад. Глушкова. Однак, саме задачі даного класу потребують проведення багатофакторного імітаційного моделювання реальних процесів і можуть ефективно вирішуватись використовуючи методи паралельних обчислень для кластерів, GRID і Cloud систем [2]. Тому

метою даної роботи було підвищення ефективності використання обчислювальних ресурсів за рахунок розробки загального підходу до удосконалення постановки задачі імітаційного моделювання, підготовки даних та створення відповідного програмного забезпечення для розрахунків перерозподілу шкідливих викидів у атмосфері згідно до існуючих державних і галузевих стандартів.

2. Аналіз літературних даних та постановка проблеми

В Україні для розрахунків локального розподілу забруднень атмосфери промисловими викидами застосовується методика ОНД-86, яка ґрунтується на моделях розсіювання Гауса [3]. У простішому випадку