

взаимодействие второго импульса с продуктами конденсации, образующимися в канале после воздействия первого импульса. При увеличении количества импульсов в серии выше определенного уровня (10–20) скорость процессов образования Al III уменьшается примерно в 5 раз, что связано с возможным изменением формы канала. Нанопорошки Al, покрытые слоем оксида алюминия, преимущественно имеют размер 50–60 нм.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЕ ССЫЛКИ

1. Особенности физико-химических свойств нанопорошков и наноматериалов. А.П. Ильин [и др.] - Томск. Изд-во Томского политех. университета, 2012. – 196 с.
2. Гусев, А.И. Наноматериалы, наноструктуры, нанотехнологии / А.И. Гусев –М., 2005. – 416 с.
3. Наночастицы энергетических материалов: способы получения и свойства (обзор). / М. К. Бернер, В. Е. Зарко, М. Б. Талавар // Физика горения и взрыва, – 2013. – Т. 49, № 6. – С. 1–28.
4. Бураков В.С., Боханов А.Ф., Неделько М.И., Тарасенко Н.В. Изменение ионизационного состояния приповерхностной лазерно-индуцированной плазмы алюминия в двухимпульсных режимах абляции. // Квантовая электроника. – 2003. – Т.33, №12. – С.1065–1071.
5. Баззал, Х., Исследование процессов образования нитрида алюминия в плазме в зависимости от угла падения лазерных импульсов на мишень из алюминиевого сплава Д16Т в атмосфере воздуха / Баззал Х., Фадаиян А.Р., Зажогин А.П. //Ж. Белгосуниверситета, физика. – 2017. – №1. – С.34–42.
6. Климентов В.И., Конов Т.В. Кононенко С.В., Даусингер Ф. Особенности плазменной экранировки при абляционном формировании глубоких каналов высокоинтенсивным лазерным излучением. / Гарнов С.М. [и др.] // Квантовая электроника. – 1998. – Т.25, №1. – С.45–48.

ПОТЕНЦИАЛЬНЫЙ БАРЬЕР В ДВУХСЛОЙНЫХ СТРУКТУРАХ НА ОСНОВЕ НАНОПОРОШКОВ ОКСИДА ЦИРКОНИЯ ПРИ НАСЫЩЕНИИ ИХ АДСОРБИРОВАННОЙ ВОДОЙ

Ю. Ю. Бачериков¹, П. М. Литвин¹, С. В. Мамыкин¹, О. Б. Охрименко¹,
В. Ю. Горонескуль¹, С. В. Малюта^{1,3}, И. А. Даниленко², О. А. Горбань², А. В. Гильчук³,
А. Любчик⁴, Я. Байова⁵

¹⁾ *Институт физики полупроводников имени В.Е. Лашкарева НАН Украины, 03028, пр. Науки 41, Киев, Украина, e-mail: Yuyi@isp.kiev.ua*

²⁾ *Донецкий физико-технический институт имени О.О. Галкиной, НАН Украины, 03028, пр. Науки 46, Киев, Украина*

³⁾ *Национальный технический университет Украины "КПИ им. Игоря Сикорского", 03506, пр. Победы 37, Киев, Украина*

⁴⁾ *Lusófona University, IDEGI, Campo Grande, 376 1749-024 Lisboa, Portugal*

⁵⁾ *ООО «Нанотехцентр», Украина, 03680, ул. Кржижановского 3, Киев, Украина*

Исследованы однослойные и двухслойные структуры на основе нанопорошков $ZrO_2+3\text{мол}\%Y_2O_3$ с разными температурами прокаливания (400 ° и 700 °С), сформированные в условиях изостатического прессования. Обнаружен эффект появления потенциального барьера в двухслойной структуре с разным размером частиц ZrO_2 в каждом слое при её насыщении адсорбированной водой. Обсуждаются процессы, протекающие в этих структурах.

Ключевые слова: потенциальный барьер; двухслойная пористая структура; ZrO_2 ; гидратированный слой.

POTENTIAL BARRIER IN TWO-LAYER STRUCTURES BASED ON THE ZIRCONIUM OXIDE NANOPOWDERS WHEN SATURATED WITH ADSORBED WATER

Yu. Yu. Bacherikov¹, P. M. Lytvyn¹, S. V. Mamykin¹, O. B. Okhrimenko¹,
V. Yu. Goroneskul¹, S. V. Malyuta^{1,3}, I. A. Danilenko², O. A. Gorban²,
A. V. Gilchuk³, Y. Baiova⁴, A. Lyubchuk⁵

¹) *V. Lashkaryov Institute of Semiconductor Physics, NAS of Ukraine, 41, prospect Nauky, 03028 Kyiv, Ukraine*

²) *Donetsk Institute for Physics and Engineering named after O.O. Galkin, NAS of Ukraine, 46, prospect Nauky, 03028 Kyiv, Ukraine.*

³) *National Technical University of Ukraine "Igor Sikorsky Kyiv Polytechnic Institute" 37 Peremohy Ave., Kyiv 03506, Ukraine*

⁴) *Lusófona University, IDEGI, Campo Grande, 376 1749-024 Lisboa, Portugal*

⁵) *Nanotechcenter LLC, Krzhizhanovsky str., 3, Kyiv 03680, Ukraine*

Corresponding author: Yu. Yu. Bacherikov (Yuyu@isp.kiev.ua)

Single-layer and two-layer hydroelectronic devices based on $ZrO_2 + 3 \text{ mol \% } Y_2O_3$ nanopowders with different calcination temperatures (400 and 700 °C) were fabricated under isostatic pressing conditions. The effect of the appearance of a potential barrier in a two-layer structure with different particle sizes of ZrO_2 in each layer upon its saturation with adsorbed water was investigated both theoretically and experimentally.

Key words: potential barrier; two-layer porous structure; ZrO_2 ; hydrated layer.

ВВЕДЕНИЕ

Использование современных порошковых технологий для получения целого ряда разнообразнейших изделий находит всё более широкое распространение, в том числе, благодаря широкому использованию порошкообразных материалов в современных аддитивных (послойных) технологиях печати, включая стремительно развивающиеся 3D технологии.

Использование компактированных дисперсных материалов для получения барьерных структур, включающих несколько слоёв, подразумевает наличие в межчастичном пространстве этих структур пустот или пор, объём которых может быть дополнительно заполнен ещё одним материалом. При этом электрофизические свойства материала введённого в межчастичное пространство (МЧП), могут существенно меняться, в зависимости от размеров и геометрической конфигурации пустот (пор), размеров частиц и ряда других факторов, и эти изменения практически не изучены. Ещё менее изучена возможность использовать такие изменения в материале, инкапсулированном в МЧП.

Востребованность в таких структурах очень велика, так как они дают возможность управлять электрохимическими процессами в МЧП структуры, при заполнении этого пространства, например, электролитом.

Поскольку электрофизические свойства дисперсной среды и материала, помещённого в МЧП, взаимосвязаны, то для исследования зависимости свойств непосредственно материала, находящегося в МЧП, от размера частиц, наиболее оптимально в качестве дисперсного материала использовать диэлектрики, имеющие вы-

сокие значения диэлектрической проницаемости, большую ширину запрещенной зоны (E_g), и т.д. Одним из таких диэлектриков является диоксид циркония.

МАТЕРИАЛЫ И МЕТОДЫ

Исследованные в работе структуры были сформированы из нанопорошков диоксида циркония состава $ZrO_2+3\text{мол}\%Y_2O_3$ и представляли собой цилиндрические образцы (таблетки). Порошки состава $ZrO_2+3\text{мол}\%Y_2O_3$ были получены прокаливанием при двух температурах в течение 90 минут. При температуре 400°C был получен порошок (ZrO_2-400), при 700°C порошок (ZrO_2-700). Структуры были изготовлены либо в виде одинарного слоя порошка ZrO_2-400 или ZrO_2-700 , либо из двух слоёв ($ZrO_2-400/700$), где один слой состоял из порошка ZrO_2-400 , второй - из ZrO_2-700 . Общая толщина двухслойных структур составляла $h=1$ мм, каждого отдельного слоя $0,5$ мм. Общая толщина однослойных структур – $h=1$ мм. Порошки состава $ZrO_2 + 3\text{мол}\% Y_2O_3$, синтезированные при температуре 400°C представляли собой тетрагональную модификацию диоксида циркония (ZrO_2-400) со средними размерами частиц $d\sim 8-10$ нм с площадью удельной поверхности – $140\text{ м}^2/\text{г}$, измеренной по методу БЕТ. При температуре 700°C был получен порошок (ZrO_2-700) также тетрагональной модификации, но со средними размерами частиц $d\sim 19-25$ нм и площадью удельной поверхности $50\text{ м}^2/\text{г}$. Удельная поверхность нанопорошков в компактированном (при 200 МПа) состоянии составляла – $122\text{ м}^2/\text{г}$ (ZrO_2-400) и $50\text{ м}^2/\text{г}$ (ZrO_2-700).

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Измерение вольт-амперных характеристик (ВАХ) структур $ZrO_2-400/700$ (рис.1) показало, что обезвоженные вследствие прогрева при $T=150^\circ\text{C}$ структуры ZrO_2 электрический ток не проводят. Таким образом, регистрируемый электрический ток в исследуемых структурах обусловлен физически адсорбированной водой на поверхности частиц ZrO_2 , при этом гидроксильные группы, оставшиеся на поверхности после прогрева ZrO_2 , в токопереносе не участвуют.

Носителями заряда в дистиллированной воде являются, в основном, ионы гидроксила OH^- и протоны H^+ (ионы гидроксония – H_3O^+) [1]. Кроме того, при рассмотрении структур ZrO_2 необходимо учитывать, что присутствующая в структурах вода

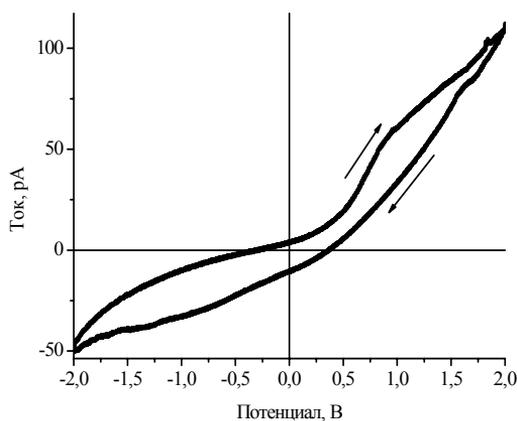


Рисунок – ВАХ структуры $ZrO_2-400/700+H_2O$

определённым образом структурирована. При адсорбции воды на поверхности частиц ZrO_2 образуется двойной электрический слой, состоящий из нескольких областей: слоя Штерна, диффузионного слоя и слоя свободной воды [2–4]. Соответственно полный скачок потенциала на межфазной границе есть сумма падений потенциала в указанных областях.

Сравнение ВАХ исследуемых структур показало, что структуры $ZrO_2-400+H_2O$ име-

ет на порядок меньшие токи по сравнению со структурой $ZrO_2-700+H_2O$. В первую очередь, это связано с разной степенью диссоциации воды в этих структурах. Кроме того, токоперенос в каждой отдельной структуре ($ZrO_2-400+H_2O$ и $ZrO_2-700+H_2O$), в разной степени, определяется ещё рядом факторов. Во-первых, разной величиной суммарного заряда, локализованного на поверхности частиц ZrO_2 в структуре $ZrO_2-400+H_2O$ (с $d \sim 9-11$ нм) и $ZrO_2-700+H_2O$ (с $d \sim 15-25$ нм), а также разной величиной кислотности их поверхностей. Во-вторых, разной концентрацией и подвижностью ионов, что обусловлено отличием структуры гидратированного слоя, покрывающего частицы $ZrO_2-400+H_2O$ и $ZrO_2-700+H_2O$. Кроме того, размеры пор в каждой структуре разные, что также согласно [1] отражается на токопрохождении в них.

В случае объединения этих структур в одну, состоящую из двух слоёв $ZrO_2-400+H_2O$ и $ZrO_2-700+H_2O$, как следует из представленных результатов ВАХ, токопрохождение в результирующей структуре зависит от его направления. В прямом направлении максимальная величина тока соответствует величине тока в однослойной структуре $ZrO_2-400+H_2O$, а обратный ток почти в 1,5–3 раза меньше. Такое поведение ВАХ структуры $ZrO_2-400/700+H_2O$ объясняется появлением на межслоевой границе потенциального барьера.

Каждый отдельный слой в структуре имеет очень близкие геометрические размеры и сформирован из одинакового по весу количества материала. Однако, площади удельной поверхности порошков ZrO_2-700 и ZrO_2-400 отличаются почти в 3 раза, а величины заряда локализованного на поверхности в слое $ZrO_2-700+H_2O$ и $ZrO_2-400+H_2O$, согласно данным Кельвин-зонд микроскопии, отличаются более чем в два раза. При компактировании порошков, удельная площадь поверхности стенок пор в слое $ZrO_2-400+H_2O$ больше почти в 2,5 раза по сравнению со слоем $ZrO_2-700+H_2O$. Это приводит к появлению разности потенциалов между слоями и как следствие, к появлению диффузионного тока в гидратированном слое структуры $ZrO_2-400/700+H_2O$. В тоже время при меньшем количестве протонов H^+ в слое $ZrO_2-700+H_2O$, токопрохождение в нём намного выше, чем в слое $ZrO_2-400+H_2O$, что может быть объяснено более высокой подвижностью H^+ в слое $ZrO_2-700+H_2O$ по сравнению с подвижностью в $ZrO_2-400+H_2O$. Это приводит к появлению противоположно направленных потоков H^+ в области межслоевой границы. Один из них обусловлен разным количеством заряда, локализованном в различных слоях, а другой – отличающимися механизмами токопрохождения в них и как следствие, разной подвижностью в каждом слое.

Отметим, на поверхности наночастиц гидрослой состоит только из слоя Стерна, движение протонов в нём, как правило, реализуется по прыжковому механизму, в случае, когда адсорбированный слой воды включает ещё и диффузионный слой, то протоны из слоя Стерна переходят в него, и их транспорт соответствует обычному дрейфу ионов в электролите с достаточно низкой подвижностью. После наступления равновесия, при неизменных внешних условиях (температуры, влажности, давления), в гидратированном слое возникает область нескомпенсированного заряда в районе межслоевой границы, которая определяет параметры появившегося потенциального барьера в структуре $ZrO_2-400/700+H_2O$.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, показана возможность создания барьерных структур на базе компактированного нанодисперсного диэлектрика, в межчастичное пространство кото-

рого, помещён другой, проводящий материал. Приведенные выше данные показывают, структуры $ZrO_2-400/700+H_2O$ способны накапливать энергию не только ёмкостно (в двойном электрическом слое, сформированном на поверхности частиц ZrO_2 и потенциальном барьере в районе межслоевой границы), но и за счет процессов адсорбции и окислительно-восстановительных реакций в МЧП. Другими словами, структуры $ZrO_2-400/700+H_2O$ по принципу работы объединяют электрохимические аккумуляторы и электростатические конденсаторы. Следует отметить, что эффективность структуры $ZrO_2-400/700+H_2O$ как генератора и накопителя электрического заряда во многом будет зависеть и от выбора материала и параметров токоёмных электродов, однако эта задача представляет самостоятельный интерес, и требует отдельного рассмотрения.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЕ ССЫЛКИ

1. Vibrational Spectroscopy of Water at Liquid/Solid Interfaces: Crossing the Isoelectric Point of a Solid Surface / M.S. Yeganeh, S.M. Dougal, H.S. Pink // Phys. Rev. Lett. -1999- V.83- P. 1179.
2. Electrical phenomena at interfaces and biointerfaces: fundamentals and applications in nano-, bio-, and environmental sciences/ H.Ohshima -John Wiley & Sons – 2012.
3. J.Q.Shang, K.Y., R.M. Quigley/ Quantitative determination of potential distribution in Stern-Gouy double-layer model. // Can. Geotech. J. -1994- V.31- P.624.
4. Determination of surface potential and electrical double-layer structure at the aqueous electrolyte-nanoparticle interface / M.A.Brown [et al.]// Phys. Rev. X – 2016- V.6 -P.011007.

ОПТИМИЗАЦИЯ ПАРАМЕТРОВ ФУНКЦИИ ТРЕХЧАСТИЧНЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ ПОТЕНЦИАЛА EDIP ДЛЯ ГЕРМАНИЯ

В. И. Белько

*Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030 Минск, Беларусь,
e-mail: belko@bsu.by*

Проведена оптимизация эмпирического межатомного потенциала EDIP для германия с целью определения параметров функций двухчастичных и трехчастичных взаимодействий. Для минимизации функционала, соответствующего сумме квадратов отклонений энергий формирования точечных дефектов от их целевых значений, был использован итерационный метод численной оптимизации, предназначенный для нахождения локального минимума нелинейного функционала без ограничений Бройдена-Флетчера-Гольдфарба-Шанно. В результате были найдены параметры эмпирического потенциала в форме EDIP для кристалла германия.

Ключевые слова: германий; межатомный потенциал; молекулярная динамика; точечный дефект.

OPTIMIZATION OF THE PARAMETERS OF THE THREE-BODY PART OF THE EDIP POTENTIAL FOR GERMANIUM

V. I. Belko

*Belarusian State University, Nezavisimosti av. 4, 220030 Minsk, Belarus
Corresponding author: V. I. Belko (belko@bsu.by)*