

## МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСІВ ТА ЯВИЩ

УДК 519.6: 537: 538.9

### ОЦІНЮВАННЯ ПОВЕРХНЕВИХ ХАРАКТЕРИСТИК ТВЕРДИХ ТІЛ З ВИКОРИСТАННЯМ ІМІТАЦІЙНОГО МОДЕЛЮВАННЯ

Б. Коман

*Львівський національний університет імені Івана Франка  
вул. Драгоманова, 50 79005 Львів, Україна  
[sonce\\_28@ukr.net](mailto:sonce_28@ukr.net)*

Запропоновано алгоритмічний підхід до оцінки поверхневих характеристик твердих тіл, що входять у рівняння стану. За основу запропонованого макроскопічного підходу взято співвідношення нерівноважної термодинаміки та фізики поверхні твердого тіла, що виражено в системі рівнянь імітаційного моделювання для визначення фізичних  $\xi$ ,  $k$ ,  $\beta$ ,  $C_\phi$ ,  $\Phi_0$  і геометричної  $h$  характеристик поверхневого шару. Відповідний алгоритм для такої задачі апробовано на прикладах кремнію (Si), свинцю (Pb), кварцу ( $\text{SiO}_2$ ), гафнію (Hf) і графену (Cg).

*Ключові слова:* енергетичні параметри, імітаційне моделювання, алгоритм, поверхневий шар.

Під час дослідження поверхневих ефектів у твердих тілах необхідно знати методику визначення вірогідних значень фізичних характеристик матеріалів, що входять у рівняння стану. Для визначення адекватних значень такого типу характеристик потрібно, щоб вони відповідали енергетичним характеристикам поверхневих шарів – поверхнево-му натягу  $\sigma_h$ , поверхневій енергії (ПЕ)  $\gamma$  [1]. Для досягнення цієї мети використаємо алгоритмічний підхід імітаційного моделювання.

У фізиці поверхневих явищ алгоритм оперування інформаційними потоками традиційно такий. Оцінюють мікроскопічними методами фізики твердого тіла велику частину фізичних характеристик матеріалів (металів, напівпровідників, діелектриків) у рівняннях стану. Деякі характеристики беруть з довідникових таблиць, зокрема, модуль Юнга, коефіцієнт Пуассона, роботу виходу електрона тощо. Набори характеристик представляють у вирази для поверхневого натягу  $\sigma_h$ , поверхневої енергії  $\gamma$  і перевіряють результат [2]. У випадку відхилень повертаються до вихідних позицій, уточнюють математичну модель, змінюють початкові значення і повторюють процедуру. Тобто застосовують метод імітаційного моделювання, унаслідок якого через певну кількість кроків на підставі обчислювального експерименту отримують задане мінімальне відхилення. Недолік такого підходу в тому, що отримані оцінки можуть бути неоднозначні й мати фізично невиправдані відхилення, тоді як кінцеві результати ( $\sigma_h$ ,  $\gamma$ ) будуть вірогідні.

Використаємо підхід, формально розв'язавши задачу визначення енергетичних характеристик  $\sigma_h, \gamma$ . Як об'єкт досліджень виберемо кулю радіусом  $R$ , оскільки для неї не потрібно формулювати умови механічного закріплення [3]. Крім того, співвідношення для моделювання перерозподілу механічних напружень і електричних зарядів (вільних для металів і зв'язаних для напівпровідника) формулюють одновимірні (за координатою  $r$  – радіуса -вектора).

### 1. Рівняння імітаційного моделювання для поверхневого шару.

В основі досліджень системи метал–напівпровідник (чи діелектрик) використаємо макроскопічний підхід, якому відповідають співвідношення нерівноважної термодинаміки та фізики поверхні твердого тіла. Розглянемо систему рівнянь і граничних умов для опису змін енергетичних параметрів ( $\sigma_h, \gamma$ ), що характеризують термодинамічний стан системи [1]. Співвідношення термодинамічної моделі поверхневого шару в області металу ( $x > 0$ ) (квазістатична ситуація) представимо в декартових координатах  $x, y, z$  ( $x$  – перпендикулярна до поверхні; а також у сферичних  $r, \theta, \zeta$ ) у такому вигляді [1]:

$$\operatorname{div} \hat{\sigma} + \rho \cdot \omega \cdot \vec{E} = 0, \quad \Delta \phi = \rho \cdot C_\phi \cdot \phi / \varepsilon_0, \quad (1)$$

$$\phi = -\Phi_0; \quad \phi + \psi = \text{const}; \quad \sigma_x = -\frac{\varepsilon_0}{2} \cdot \left( \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right)^2 \quad \text{при } x = 0. \quad (2)$$

$$\sigma_{ij} = \left( \left( K - \frac{2}{3} G \right) e - \alpha_t K \cdot \Delta T - K(\beta\phi + \beta_c c) \right) \delta_{ij} + 2G e_{ij}, \quad (3)$$

$$\omega_V = \rho \omega = \rho C_\phi (\phi - \gamma_t \cdot \Delta T) + \beta K e - \rho \eta_c c. \quad (4)$$

$$\mu_c = d_c c + d_t \cdot \Delta T + \beta_c K \frac{e}{\rho} - \eta_c \phi, \quad \Delta T = T - T_0, \quad (5)$$

$$\sigma_h = \int_0^h \sigma_y dx, \quad \sigma_y = \sigma_z, \quad \gamma = \gamma_1 + \xi \gamma_2, \quad (6)$$

$$\frac{\partial \gamma}{\partial k} = \frac{\partial (\gamma_1 + \xi \gamma_2)}{\partial k} = 0, \quad k = \sqrt{\frac{\rho C_\phi}{\varepsilon_0}} \quad (7)$$

$$\sigma_y + p = 0 \quad (\text{для } x = h) \quad (p = 100 \text{ кПа} - \text{атмосферний тиск}). \quad (8)$$

де  $\gamma_1 = \int_0^h w_1 dx$  – електрична складова ПЕ;  $\gamma_2 = \int_0^h w_2 dx$  – механічна складова ПЕ;

$w_1 = \frac{\varepsilon_0}{2} \left( \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right)^2$  і  $w_2 = \frac{\sigma_x (\sigma_x - 4\nu \sigma_y)}{2E} + \frac{(1-\nu)\sigma_y^2}{E}$  – густини електричної та механічної складових ПЕ;  $h$  – ефективна товщина поверхневого шару;  $\sigma_{ij}, e_{ij}$  – компоненти тензорів на-

пружень  $\hat{\sigma}$  і деформацій  $\hat{e}$  ( $i, j = 1, 2, 3$ );  $\sigma_{11} = \sigma_{xx} \equiv \sigma_x$ ;  $\sigma_{22} = \sigma_{yy} \equiv \sigma_y$ ;  $\mu_c, c$  – хімічний потенціал і концентрація домішки;  $\delta_{ij}$  – символи Кронекера;  $e$  – перший інваріант тензора деформацій;  $\rho$  – питома густина матеріалу;  $\omega_v, \omega$  – просторова і масова густини електричного заряду, відповідно;  $\phi = \Phi - \Phi_0$  – відхилення модифікованого хімічного потенціалу  $\Phi$  електричних зарядів від його рівноважного значення  $\Phi_0$  в об'ємі тіла далеко від поверхні;  $\Psi$  – скалярний потенціал напруженості електричного поля;  $\psi = \Psi - \Psi_0$  – відхилення потенціалу  $\Psi$  від його рівноважного значення  $\Psi_0$ ;  $\vec{E} = \nabla\Psi = \text{grad}\Psi$  – напруженість електричного поля;  $\epsilon_0 = 8,85 \cdot 10^{-12}$  Ф/м – електрична стала;  $\Delta T = T - T_0$  – зміна температури;  $K, G$  – коефіцієнти всебічного стиску і зсуву;  $E, \nu$  – модуль Юнга і коефіцієнт Пуассона;  $C_\phi$  – питома електроємність;  $\xi, k, \alpha_t, \beta, \beta_c, \gamma_t, \eta_c, d_c, d_t$  – фізичні характеристики матеріалу, що входять у рівняння стану [1].

Для більшої адекватності моделі (1)–(8) необхідно враховувати зміщення  $Z_b$  подвійного електричного шару в глибину металу. Для зміщення  $Z_b$  використовуємо відому формулу [3]:

$$Z_b = (3/(4k_f)) \times (E_f/2 + (E_f/E_V - 1) \times \text{arctg}(E_V/E_f)^{1/2} - (E_f/E_V)^{1/2}), \quad (9)$$

де  $Z_b$  – ширина подвійного електричного шару на поверхні металу (аналітичний вираз для  $Z_b$  отримав А. Sugiyama, 1961 р.);  $E_f$  – енергія Фермі;  $E_V$  – робота виходу електрона з металу;  $k_f$  – хвильовий вектор Фермі. Числові значення  $E_f, E_V, k_f, Z_b$  для заліза (Fe), золота (Au), срібла (Ag), алюмінію (Al) наведено в додатках монографії [3].

Співвідношення (1)–(9) становлять систему рівнянь імітаційного моделювання для визначення фізичних  $\xi, k, \beta, C_\phi, \Phi_0$  і геометричної  $h$  характеристик поверхневого шару.

## 2. Основні етапи імітаційного моделювання. Результати розрахунків.

В алгоритмі імітаційного моделювання виділимо чотири основні етапи. На першому етапі, використовуючи рівняння рівноваги для  $\hat{\sigma}$  (1) і співвідношення для  $\Delta\phi$  (1), яке впливає з рівнянь Максвелла, рівняння стану (3)–(5), а також граничну умову (2), на основі методу розкладу  $\phi$  і переміщень у ряди за малим параметром  $b_m = \beta\Phi_0$  знайдено формально три наближення (нульове, перше, друге) розподілу заряду  $\omega$  і нормальних механічних напружень  $\sigma_{rr}, \sigma_{\theta\theta}$  від координати  $r$  і параметра  $k$  за методикою праці [3].

На другому етапі алгоритму спрямовуємо радіус  $R$  до безмежності й отримуємо формальні формули для  $\omega, \sigma_x, \sigma_y$  залежно від координати  $x$  і параметра  $k$ , не конкретизуючи числових констант для матеріалу.

На третьому етапі вирази для  $\omega, \sigma_x, \sigma_y$  підставляємо в співвідношення (6)–(8) (для поверхневого натягу (6), ПЕ (6), в умову рівноваги поверхневого шару (7), в умову оцінювання товщини поверхневого шару  $h$  (8)). Для системи (6)–(8) потрібно задати тільки два числові значення  $\sigma_h, \gamma$  (крім відомих  $E, \nu, E_V$  тощо), які відомі з експерименту і вірогідних результатів моделювання ( $\sigma_h$  – визначають на основі експерименту, для  $\gamma$  відомі часткові результати експериментальних досліджень і значний багаж теоретичних моделей (огляд основних моделей є в монографії [3])).

Отже, на третьому етапі внаслідок обчислювального експерименту (імітаційного моделювання) отримуємо чотири важливі фізичні характеристики матеріалу (металу, діелектрика чи напівпровідника) –  $\xi, k, \beta, h$ . На підставі цих характеристик можна ви-

значити і  $\Phi_0$ , за допомогою якого формулюють граничну умову (2) для модифікованого хімічного потенціалу електронів провідності (чи потенціалу зв'язаних зарядів) [3]:

$$\Phi_0 = -1,6 \times 10^{-19} \times W_v \times (2 - \exp(-k \times Z_b)) / (2 \times \epsilon_0 \times k^2). \quad (10)$$

Тут  $W_v$  – кількість електронів провідності в одиниці об'єму для металу (кількість атомів в одиниці об'єму для напівпровідника чи діелектрика) [3].

На четвертому етапі оцінюємо наближення, які використано внаслідок реалізації процедури методу розкладу за малим параметром. Як тестові приклади беремо до уваги часткові результати числових розрахунків для заліза (Fe), золота (Au), срібла (Ag), алюмінію (Al) [3].

Ці чотири етапи характеризують обернену задачу фізики поверхневих явищ, угаданий кою можна отримати низку фізичних характеристик  $\xi$ ,  $k$ ,  $\beta$ ,  $h$  для металів, напівпровідників, діелектриків.

Відповідний алгоритм для оберненої задачі реалізовано для кремнію (Si; напівпровідника), свинцю (Pb; металу), кварцу (SiO<sub>2</sub>; діелектрика), графену (Cg) та гафнію (Hf). Отримані в підсумку імітаційного моделювання дані відповідають бездомішковим матеріалам за температури 20 °C і атмосферного тиску 100 кПа:

1)  $E = 138$  ГПа;  $\nu = 0,27$ ;  $W_v = 5,0 \times 10^{28}$  1/м<sup>3</sup>;  $\sigma_h = 1,328$  Н/м;  $\gamma = 1,182$  Дж/м<sup>2</sup>;  $k = 1,416 \times 10^{10}$  1/м;  $\beta = 0,0742$  1/В;  $\xi = 2,556$ ;  $\Phi_0 = 2,577$  В (**Si**);

2)  $E = 16$  ГПа;  $\nu = 0,44$ ;  $W_v = 3,3 \times 10^{28}$  1/м<sup>3</sup>;  $\sigma_h = 0,624$  Н/м;  $\gamma = 0,576$  Дж/м<sup>2</sup>;  $k = 1,298 \times 10^{10}$  1/м;  $\beta = 0,229$  1/В;  $\xi = 0,559$ ;  $\Phi_0 = 2,565$  В,  $Z_b = 0,00459$  нм (**Pb**);

3)  $E = 78$  ГПа;  $\nu = 0,17$ ;  $W_v = 7,96 \times 10^{28}$  1/м<sup>3</sup>;  $\sigma_h = 1,154$  Н/м;  $\gamma = 1,071$  Дж/м<sup>2</sup>;  $k = 1,899 \times 10^{10}$  1/м;  $\beta = 0,217$  1/В;  $\xi = 0,982$ ;  $\Phi_0 = 2,372$  В (**SiO<sub>2</sub>**).

4)  $E_+ = 1100$  ГПа;  $\nu_+ = 0,37$ ;  $W_v = 2,646 \cdot 10^{28}$  м<sup>-3</sup>;  $\sigma_{h+} = 0,0467$  Н/м,  $\gamma_+ = 0,0543$  Дж/м<sup>2</sup>;  $k = 1,699 \times 10^{10}$  1/м;  $\beta = 0,227$  1/В;  $\xi = 0,862$ ;  $\Phi_0 = 2,262$  В (**графен Cg**);

5)  $E_- = 78$  ГПа;  $\nu_- = 0,37$ ;  $W_v = 4,46 \cdot 10^{28}$  м<sup>-3</sup>;  $\sigma_{h-} = 2,617$  Н/м,  $\gamma_- = 2,439$  Дж/м<sup>2</sup>;  $k = 1,576 \times 10^{10}$  1/м;  $\beta = 0,241$  1/В;  $\xi = 0,876$ ;  $\Phi_0 = 3,124$  В (**Hf**).

#### СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

1. Коман Б. П. Внутренние механические напряжения, термодинамические и адгезионные параметры в системе металлический конденсат–монокристаллический кремний / Б. П. Коман, В. Н. Юзевич // Физика тв. тела. – 2012. – Т. 54, вып. 7. – С. 1335–1341.
2. Кобелева Р. М. К теории электронной составляющей силы взаимодействия металлических тел / Р. М. Кобелева, О. М. Розенталь, А. В. Кобелев // Коллоид. журн. – 1977. – Т. 39, № 2. – С. 295–301.
3. Юзевич В. М. Діагностика матеріалів і середовищ. Енергетичні характеристики поверхневих шарів / В. М. Юзевич, П. М. Сопрунок. – Львів : ФМІ ім. Г. В. Карпенка НАН України, СПОЛОМ, 2005. – 292 с.

Стаття: надійшла до редакції 16.05.2016,  
доопрацьована 23.05.2016,  
прийнята до друку 24.05.2016.

---

**ASSESSMENT OF SURFACE CHARACTERISTIC  
OF SOLIDS USING SIMULATION MODELING**

B. Koman

*Ivan Franko National University of Lviv  
50 Dragomanova st. UA – 79005 Lviv, Ukraine  
[sonce\\_28@ukr.net](mailto:sonce_28@ukr.net)*

An algorithmic approach to evaluation of surface characteristics of solids within the equation of state. The basis of the approach proposed macroscopic value assigned non-equilibrium thermodynamics and physics of solid surface that is expressed in the system of equations simulation modeling to determine the parameters  $\xi$ ,  $k$ ,  $\beta$ ,  $C\varphi$ ,  $\Phi_0$  and geometric characteristics of the surface layer. The corresponding algorithm for this problem tested such as silicon (Si), lead (Pb), quartz (SiO<sub>2</sub>), hafnium (Hf) and graphene (Sg).

*Key words:* energy parameters, simulation algorithm, the surface layer.