

Міністерство освіти та науки України
Національний університет “Києво-Могилянська академія”
Факультет природничих наук
Кафедра фізико-математичних наук

Кваліфікаційна робота
освітній ступень - бакалавр

на тему: «МОДЕЛЮВАННЯ ПЕРЕНОСУ ТЕПЛА В МУЛЬТИШАРОВІЙ
СТРУКТУРІ НА ОСНОВІ ОКСИДІВ МЕТАЛІВ»

Виконав студент 4 року навчання
спеціальності 104 Фізика та астрономія
Дембіцький Владіслав Олексійович

Керівник Савкіна Р. К.
доктор фізико-математичних наук,
професор

Рецензент Малий Є.В.

Кваліфікаційна робота захищена
з оцінкою _____
Секретар ЕК

« 03 » _____ червня 20 25 __ р.

Київ — 2025

ЗМІСТ

ВСТУП

РОЗДІЛ 1 ТЕОРЕТИЧНІ ТА ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНІ ВІДОМОСТІ

1.1 Явище теплопровідності, механізми теплопровідності, температуропровідність

1.2 Фотопровідність і її залежність від модуляцій освітлення

1.2.1 Методи вимірювання фотопровідності з постійним і модульованим освітленням

1.2.2 Обчислення фотопровідності з даних дослідів

1.3 Термостимульована фотопровідність

1.4 Фотовольтаїчний ефект в багат шаровій структурі на основі оксидів перехідних металів

1.4.1 Підготовка зразків $(Cr_{3-x}O_{3-y}/Fe_2O_{3-x})Si$

1.4.2 Спектри поверхневої фото-е.р.с. мультишарових структур

РОЗДІЛ 2 МЕТОДИКА МАТЕМАТИЧНОГО ЕКСПЕРИМЕНТУ, ЗАСТОСОВАНА В РОБОТІ

2.1 Загальна характеристика пакета FlexPde

2.2 Схема розрахунку по методу кінцевих елементів

РОЗДІЛ 3 МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСІВ ДИФУЗІЇ ТЕПЛА В РІЗНИХ СИСТЕМАХ

3.1 Застосування пакета FlexPde для розрахунку розподілу температури в неоднорідній за тепловими властивостями системі при наявності джерела тепла

3.1.1 Система з теплоізолятором №1

3.1.2 Система з теплоізолятором №2

3.1.3 Система з теплоізолятором №3

ВИСНОВКИ

СПИСОК ПОСИЛАНЬ

ВСТУП

Сучасні пристрої мікро- та наноелектроніки здебільшого базуються на багат шарових системах, в яких реалізуються складні взаємопов'язані процеси переносу енергії та маси. Особливу роль у таких системах відіграють оксидні матеріали, які завдяки своїм унікальним фізико-хімічним властивостям широко застосовуються як функціональні, діелектричні або бар'єрні шари. Одним із ключових аспектів для забезпечення стабільної роботи, довговічності та високої енергоефективності таких пристроїв є ефективне керування тепловим переносом в межах цих багатокомпонентних систем.

Надлишкове виділення теплової енергії в електронних пристроях може мати різну природу і зазвичай є паразитним ефектом, який заважає їх нормальній роботі. Це може бути джоуліве тепло, або залишкова енергія в системах фотогенерації. Якщо мова йде про напівпровідникові перетворювачі сонячної енергії, їх ефективність обмежена фундаментальною умовою Шоклі – Квайссера [1] і не перевищує ~30%. Втрати зумовлено спектральним розподілом сонячної радіації, де значна частина фотонів має енергію більшу за необхідну для фотогенерації носіїв заряду і залишкова енергія перетворюється на кінетичну енергію, тобто на тепло (~70 %). Розігрів же систем перетворення сонячної енергії в електричну зменшує їх ефективність.

Разом з тим, розробка та застосування гібридних фото/термоелектричних елементів, які можуть використовувати як світлову, так і теплову енергію сонячного випромінювання, дозволяють покращити продуктивність системи перетворення сонячної енергії [2]. При цьому, моделювання процесу переносу тепла стає важливим інструментом для покращення продуктивності систем перетворення сонячної енергії та інших

технологій, що потребують високої енергоефективності. Варто зазначити, що пряме перетворення світла в тепло (фототермічне перетворення) інтенсивно досліджується, як нова стратегія підвищення ефективності випаровування та каталізу [3].

Отже, вище сказане підкреслює значущість обраної теми в контексті сучасних наукових досліджень і промислових застосувань. Актуальність теми дослідження впливає з необхідності забезпечення ефективності та стабільності сучасних мікро- та наноелектронних пристроїв. Розуміння процесів теплового переносу стає критично важливим для підвищення енергоефективності та довговічності цих систем, а отримані результати можуть мати практичне значення для вдосконалення дизайну елементів мікроелектроніки, фотодетекторів та теплових сенсорів..

Відтак, *мета* роботи полягає у вивченні процесу переносу тепла в багат шарових структурах оксидів перехідних металів, нанесених на кремнієву підкладку, які продемонстрували фотовольтаїчний ефект в області видимого світла та його залежність від умов теплоізоляції досліджуваної структури. *Об'єктом* дослідження є структури шарів хрому та заліза на кремнієвій підкладці $(Cr_{3-x}O_{3-y}/Fe_2O_{3-x})Si$. *Предметом* дослідження є теплові властивості та процес переносу тепла в таких структурах.

РОЗДІЛ 1 ТЕОРЕТИЧНІ ТА ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНІ ВІДОМОСТІ

1.1 Явище теплопровідності, механізми теплопровідності, температуропровідність

Згідно 2-го закону термодинаміки, ентропія в ізольованій системі буде завжди зростати. Оскільки теплота є формою енергії, очевидно що при наявності більш гарячої області, тепла енергія звідти буде передаватись ділянкам з нижчими рівнями енергії, поки не буде встановлена тепла рівновага. Характеризують явище переносу тепла, а саме його інтенсивність, за допомогою такої величини, як теплопровідність. Закон Фур'є описує процеси теплопровідності й записується так:

$$dQ = -\lambda \frac{dT}{dn} dS dt \quad (1)$$

де Q – це кількість теплоти, яка за певний час dt переноситься крізь ділянку площиною ds вектором нормальним до поверхні цієї площини, в напрямку від області високої температури до області низької, $\frac{dT}{dn}$ - градієнт температури, S – площа, t – час. Q пропорційна градієнту температури δT (але протилежна за напрямком до градієнту температури, що спричиняє наявність мінуса в формулі). Інший спосіб записати закон Фур'є більш коротко виглядає так[4]:

$$q = -\lambda \delta T \quad (2)$$

де q – вектор щільності теплового потоку, λ – коефіцієнт теплопровідності, δT – градієнт температури.

Таким чином, говорячи про перенос тепла, мають значення дві величини – теплопровідність λ та тепловий опір $W = 1/\lambda$.

Отже, теплопровідність речовини чисельно дорівнює кількості теплоти, яка проходить крізь однорідну ділянку одиничної площі та довжини, за одиницю часу при різниці температур в одну одиницю. Таким чином в системі СІ теплопровідність вимірюється в $\text{Вт}/\text{м} \cdot \text{К}$.

У випадку, коли тіло яке розглядається – анізотропне в своїх теплових властивостях, то зовсім не обов'язково що напрямок потоку буде збігатися з нормаллю до поверхні. В такому разі закон Фур'є розписується з використанням тензорів другого рангу як коефіцієнтів теплопровідності [4]:

$$q_i = - \lambda_{ij} \frac{\partial T}{\partial x_j} \quad (3)$$

де q_i – компонента вектора щільності теплового потоку, λ_{ij} – коефіцієнти тензора другого рангу, $\frac{\partial T}{\partial x_j}$ – частинна похідна температури по координаті.

У випадку більш практичному, наприклад при описі кристалічної речовини, ми будемо мати 3 осі координат – x , y , z , по яких зазвичай і описують теплопровідну анізотропію тіл. Тоді, рівняння набуває вигляд:

$$q_1 = - \lambda_1 \left(\frac{\partial T}{\partial x_1} \right); \quad q_2 = - \lambda_2 \left(\frac{\partial T}{\partial x_2} \right); \quad q_3 = - \lambda_3 \left(\frac{\partial T}{\partial x_3} \right) \quad (4)$$

При нестационарному перенесенні тепла, теплопровідність описується диференціальним законом Фур'є [5]:

$$Cd\left(\frac{\partial T}{\partial t}\right) = \delta(\lambda \delta T) + q_v, \quad (5)$$

де C , d і λ – питома теплоємність, щільність та коефіцієнт теплопровідності відповідно, q_v - об'ємна щільність потоку, T -температура, t - час.

Рівняння можна переписати таким чином у разі незалежності констант від температури:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = a \cdot \delta T + \frac{q_v}{Cd}, \quad (6)$$

де $a = \lambda / Cd$ - коефіцієнт температуропровідності, відповідальний за опис швидкості з якою тепло поширюється в даному тілі.

У твердих тілах тепло передається двома основними способами: через коливання атомів (це так звана граткова теплопровідність, позначається як λ_p) і за рахунок руху вільних електронів (електронна теплопровідність, λ_e). Якщо згадати будову металів — а це решітка з атомів, між якими вільно переміщуються електрони — стає зрозуміло, що саме електронна теплопровідність у них переважає. Натомість у діелектриках, де вільних електронів майже немає, тепло здебільшого передається через коливання атомів, тобто переважає граткова теплопровідність. Але у випадку напівпровідників в нас кожний з механізмів теплопередачі робить важливий внесок. Також не можна забувати і про роль домішок, які здатні радикально змінити теплопровідні якості напівпровідників. Інший фактор

який має вплив в напівпровідниках – це процес перенесення екситонів [4]. Екситон – це квантове електронне збудження, яке вільно мігрує по кристалу і переносить енергію, але не пов'язане з перенесенням заряду чи маси.

1.2 Фотопровідність та її залежність від модуляції освітлення

При вивченні фотопровідності виникає задача вимірювання як величин стаціонарної фотопровідності, так і параметрів, що її характеризують (наприклад, у найпростішому випадку τ , β та інші). У першу чергу розглянемо основні методи вимірювання стаціонарної фотопровідності $\sigma_{ст}$.

1.2.1 Методи вимірювання фотопровідності з постійним і модульованим освітленням

Для випадку $\Delta\sigma_{ст} \gg \sigma_0^2$ вимірювання $\Delta\sigma_{ст}$ може здійснюватися за допомогою найпростішої схеми з послідовним з'єднанням джерела напруги, зразка і вимірювального приладу[6] (наприклад, гальванометра (рис. 1)).

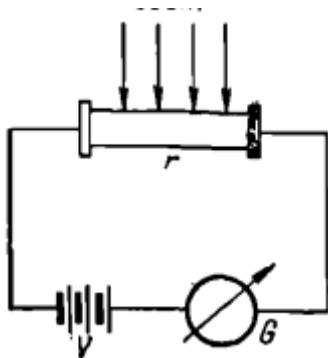
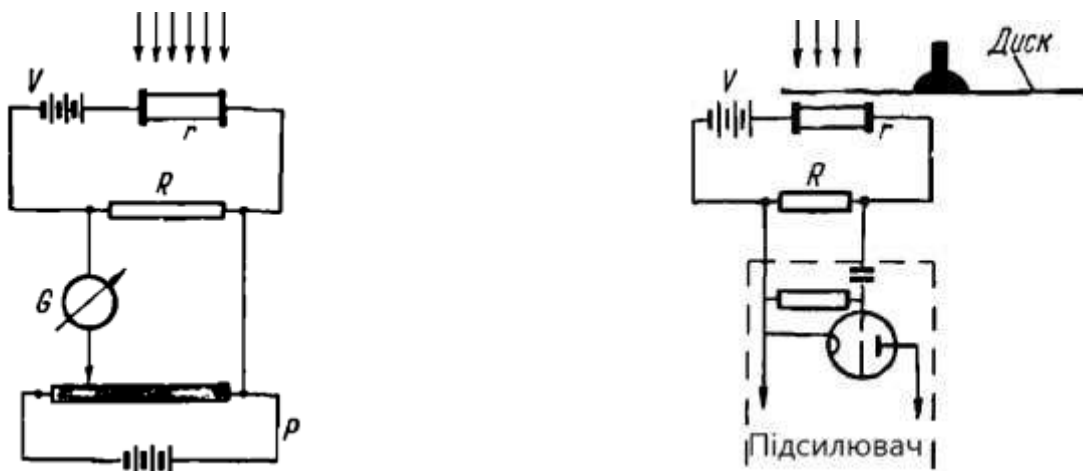


Рис.1. Проста схема вимірювання $\Delta\sigma_{ст}$, де: r - зразок, V - джерело струму, O - гальванометр

У цій схемі добавка струму при освітленні вимірюється на "фоні" темного струму. У зв'язку з цим при виконанні умови $\Delta\sigma_{ст} \ll \sigma_o$, що має місце зазвичай для напівпровідників з високою провідністю, використовують інші схеми, в яких тим чи іншим способом виключається безпосереднє проявлення темного струму. Як правило, цього досягають одним з двох наступних способів:

а) використовують звичайну компенсаційну схему, зображену на рис. 2, у якій спочатку за допомогою потенціометра P досягається компенсація падіння напруги на навантаженні R у темряві, а потім вимірюється зміна цієї напруги (а відповідно, і струму через зразок) при освітленні;

б) використовують переривчасте (або взагалі модульоване за інтенсивністю) освітлення, тобто темновий і фотострум розділяють «за частотою» (рис.3).



Дійсно, якщо використовується схема, зображена на рис. 3, з джерелом постійного струму, то темновий струм має частоту $f = 0$, а фотострум змінюється з частотою модуляції світла (модуляція здійснюється, наприклад, за рахунок пропускання світла через отвори в обертовому диску). Якщо при цьому для реєстрації сигналу використовується підсилювач змінного струму з електронним вольтметром на виході, чутливий до частоти модуляції світла, то, очевидно, що змінна складова сигналу виявляється пов'язаною лише з величиною фотоструму.

Метод модуляційного освітлення при вимірюванні $\Delta\sigma_{ст}$ має низку практичних переваг. Крім того, він може бути використаний, як це буде видно далі, не тільки для вимірювання $\Delta\sigma_{ст}$, але й для визначення τ і β . У зв'язку з цим він широко застосовується. Нижче розгляд питання про чутливість і визначення $\Delta\sigma_{ст}$ з результатів досліду ми проведемо для цього методу.

1.2.2 Обчислення фотопровідності з даних досліду

Принципова схема установки з переривчастим освітленням наведена на рис. 4. Світло, перериване обертовим диском з отворами, падає на зразок, опір якого в темряві r_0 . Послідовно зі зразком вмикаються джерело

з напругою V і навантажувальний опір R . При наявності диска, що перериває світло, опір зразка через фотоефект змінюється, і на зразку з'являється фотострум, який змінюється з частотою переривання. В результаті, в колі з'являється постійна і змінна складові. Напруга на опорі R (точніше, її змінна складова v) підсилюється підсилювачем, на вихід якого вмикається прилад реєстрації.

Знаючи співвідношення між змінною напругою на вході підсилювача, зміною провідності $\Delta\sigma_{ст}$, що викликана дією світла, і розмірами зразка:

якщо Δr — зміна опорів зразка при освітленні, I_0 струм в темряві, то

$$v = (i_t \cdot \Delta r) \cdot R \quad (7)$$

але $i_t = V/r_0$, $\Delta r = r_0 - \frac{V}{(V+v) \cdot r_0}$, спростивши отримуємо:

$$v = \frac{V \cdot R \cdot \Delta\sigma}{(R \cdot \frac{1}{\sigma}) \cdot (R + \frac{1}{\sigma + \Delta\sigma})} \quad (8)$$

Звідси:
$$\Delta r = \frac{v(R+r_0)^2}{VR + v(R+r_0)} \quad (9)$$

Знайдемо співвідношення між Δr і $\Delta\sigma$: $\Delta\sigma = \sigma_c - \sigma_0 = \frac{1}{r_0 - \Delta r} - \frac{1}{r_0} =$

$$\frac{\Delta r}{r_0(r_0 - \Delta r)}, \text{ тоді: } \Delta r = \frac{r_0^2 \Delta\sigma}{1 + r_0 \Delta\sigma} \text{ та } \Delta\sigma = \frac{v(R+r_0)^2}{r_0^2 VR - vr_0 R(r_0 + R)} \quad (10)$$

1.3 Термостимульована фотопровідність

Крім оптичного можливе і термічне збудження захоплених носіїв, яке призводить до «індукованої термопровідності». Для спостереження

подібного явища мають відбутися подібні фізичні явища: спочатку рівні захоплення заповнюються носіями заряду внаслідок опромінення власним світлом за дуже низької температури, коли теплові переходи з цих рівнів у зону практично відсутні. Потім зразок швидко («миттєво») нагрівається до певної температури, і спостерігається зростання провідності («індукована термопровідність»), кінетика якої повинна повністю відповідати кінетиці індукованої фотопровідності, тобто на початковій стадії мати характер «спалаху».

Але найчастіше, через важкість виконання подібного швидкого нагріву, розглядають так звані «термостимульовані струми». В цьому методі зразок нагрівають не швидко, а повільно, через що захоплені на певних рівнях носії починають, чим гарячіше, тим більш інтенсивно потрапляти в дозволену зону, що спричиняє ріст провідності, який залежить від часу та температури. Хоча, не можна не зазначити, що подібний ефект має тимчасову природу, адже заселеність рівнів зменшується з часом, й ефект термостимульованої провідності починає зникати. Після деякого часу його вплив дійде до нуля, але це значить що графік буде мати максимум, що дозволяє краще дослідити речовину. А саме – характеристики її рівнів захоплення. Також подібний метод дозволяє порівняно простим експериментальним шляхом досліджувати складні спектри з кількома типами рівнів різної (в тому числі й дуже малої) глибини.

Очевидно, що при повільному нагріванні від низьких температур спочатку вивільнятиметься найдрібніший рівень, потім глибший і т. д. Таким чином, крива термостимульованого струму повинна мати кілька максимумів, кожен з яких відповідає своєму рівню. Хоча і варто зазначити що таке можливо лише для рівнів, достатньо сильно розділених по енергіям. Наприклад, на рис. 4 та рис. 5 можна побачити експериментальні дані подібних досліджень для SdS і Sb_2Se_3 .

Якісні міркування, що дозволяють за положенням максимуму термостимульованої провідності приблизно визначати глибину відповідного енергетичного рівня, зводяться до наступного. Якщо нагрівання відбувається досить повільно, то можна вважати, що в кожний

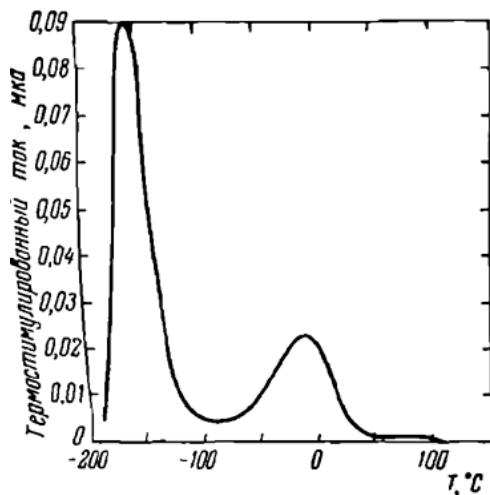


Рис. 4. Залежність термостимульованого струму від температури для зразків CdS [7]. Швидкість нагрівання — 0,77 град/сек.

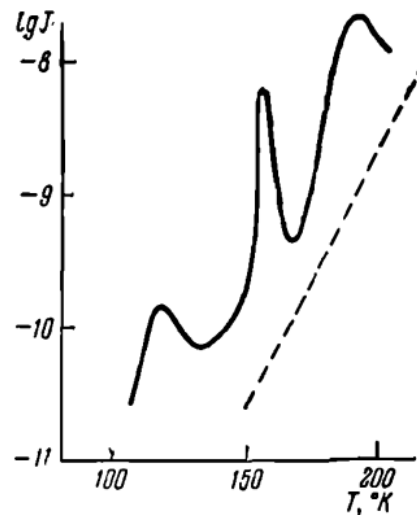


Рис. 5. Крива термостимульованого струму в Sb_2Se_3 [8].

Швидкість нагрівання — 0,1 град/сек

момент часу між рівнем і зоною існує квазірівновага, тобто концентрації носіїв у зоні та на рівні можуть бути охарактеризовані одним квазірівнем Фермі. На самому початку процесу нагрівання рівні заповнені електронами (для визначеності розглядаємо захоплення електронів), і, відповідно, квазірівень Фермі розташований між ними та зоною провідності.

При підвищенні температури, у міру спорожнення рівнів, квазірівень Фермі зміщується вниз, наближаючись до рівня захоплення. У момент збігу цих рівнів заповнення рівня захоплення дорівнює половині. У міру подальшого спорожнення квазірівень Фермі опускається ще нижче.

1.3 Фотовольтаїчний ефект в багат шаровій структурі на основі оксидів перехідних металів.

В попередньому пункті були описані особливості виникнення та реєстрації електричного струму при освітленні зразка, включеного в режимі фотоструму (короткого замикання). Далі буде розглянуто режим фото-е.р.с., тобто режим розімкнутого зовнішнього ланцюга.

Як відомо, виникнення в напівпровіднику фото-е.р.с. є наслідком просторового поділу оптично збуджених носіїв заряду протилежного знаку, що може відбуватися у випадку неоднорідного освітлення напівпровідника (освітлення частини зразка або поглинання в приповерхневому шарі) або неоднорідності самої напівпровідникової структури (роль неоднорідності

може відігравати поверхня) за умови, що коефіцієнти дифузії нерівноважних дірок та електронів відрізняються. Очевидно, що досліджувані в роботі структури (шари оксидів перехідних металів на кремнієвій підкладці) є неоднорідними за будовою, а отже і за фізичними властивостями. Тут варто пригадати ефект некомутативного зсуву зони в структурі $\text{Cr}_2\text{O}_3/\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$, який призводить до виникнення градієнта потенціалу та розділення електронно-діркових пар, що проявляється збільшенням фотоструму [9].

Поверхнева фотоелектрична напруга визначається як різниця між поверхневим потенційним бар'єром у світлі та темряві. Ненульова е.р.с. вказує на перерозподіл фотогенерованих вільних зарядів. Оскільки в нашому експерименті використовувалося модульоване освітлення, значення поверхневої фото-е.р.с. можна виразити як [10]:

$$V_{PV}(\omega) = J_{PC}(\omega) \cdot Z_{eff}(\omega), \quad (11)$$

де J_{PC} – густина фотоструму, ефективний імпеданс - Z_{eff} складається з паралельних компонентів опору (R_j) і ємності (C_j), що відповідають внескам різних факторів, що впливають на фотоелектричну напругу, таких як транспорт неосновних і основних носіїв, шари збіднення та інверсії, стан поверхні тощо.

1.4.1 Підготовка зразків ($\text{Cr}_{3-x}\text{O}_{3-y}/\text{Fe}_2\text{O}_{3-x}$)Si

Фотовольтаїчний ефект дбув досліджений для структур шарів хрому та заліза на кремнієвій підкладинці ($\text{Cr}_{3-x}\text{O}_{3-y}/\text{Fe}_2\text{O}_{3-x}$)Si (див. рис. 6). Для приготування шарів оксиду заліза та хрому застосовано метод реактивного імпульсного лазерного осадження. Плівки на основі оксидів перехідних металів зі змінною комбінацією шарів, товщиною, стехіометрією та електричними властивостями були вирощені у вакуумному реакторі з

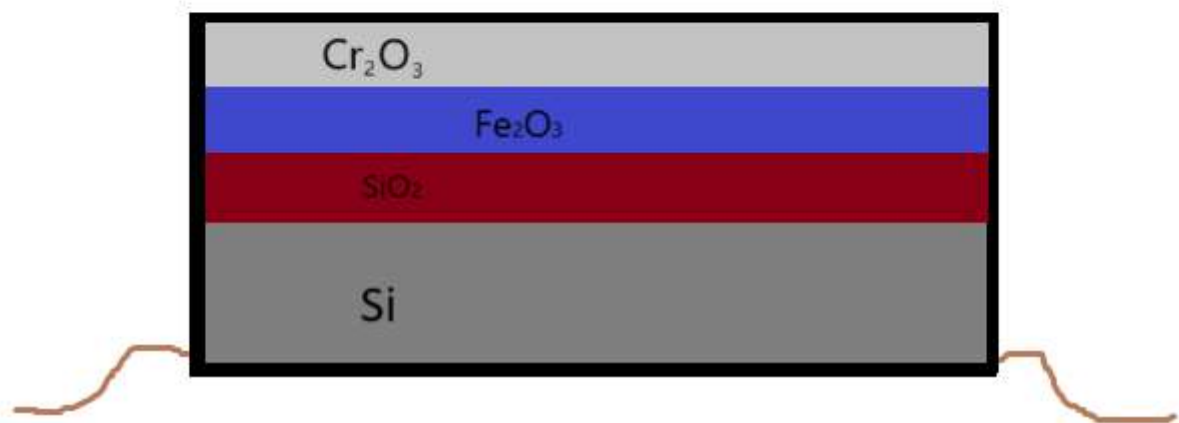


Рис. 6. Схематичне зображення досліджуваного зразка

нержавіючої сталі на легованих бором (100)-орієнтованих пластинах кремнію р-типу. Чисту (99,5 %) Fe та/або Cr мішень піддавалась впливу імпульсного ексимерного лазера KrF ($\lambda = 248$ нм; $\tau_{\text{imp}} = 20$ нс), сфокусованого на мішень, щоб отримати флюенс $4,0$ Дж/см² при 10 Гц. Осадження проводили в потоці чистого кисню (99,999%) з парціальним тиском (P) в діапазоні 10^{-3} мбар $< P < 10^{-2}$ мбар на підкладки при температурах $T_s = 293^\circ\text{K}$, 500°K , 800°K . Перед кожним осадженням реактор відкачували до залишкового тиску $\sim 4,5 \times 10^{-7}$ мбар, щоб уникнути забруднення. Кількість лазерних імпульсів змінювалася від $N = 500$ до 6000 . Мішень оберталася з частотою ~ 3 Гц для отримання плавної процедури абляції. Перед кожним осадженням поверхню мішені очищали за допомогою 3000 лазерних імпульсів із затвором, що екранує підкладку. Товщину плівок (d) контролювали профілометром «Tensor Instruments» моделі «Alpha-step 100» з точністю 5% .

1.4.2 Спектри поверхневої фото-е.р.с. мультишарових структур

Усі зразки були охарактеризовані шляхом вимірювання спектрів поверхневої фотоелектричної напруги. Ці вимірювання проводили при 300 К на спектрометрі СПМ-2 з призмою G-60 за схемою синхронного детектування з модуляцією 200 Гц при низькому рівні однорідного збудження монохроматичним світлом в діапазоні довжин хвиль $400 \div 1200$

нм. Джерелом світла була кварцова галогенна лампа JCD (950 лм; 50 Вт). Виникнення фотоелектричної напруги було зареєстровано без електричного зміщення за допомогою нановольтметра. Щільність потужності світла становила близько 1 Вт см^{-2} , 25°C .

Спектр кремнієвої підкладки у вихідному стані (не показано) демонструє селективний пік зі спектральним положенням «червоної» межі, близької до забороненої зони кремнію при кімнатній температурі ($E_g = 1,12 \text{ eV}$). Нанесення нанометричної плівки оксиду хрому практично не змінює спектрального розподілу поверхневої фотоелектричної напруги, яка має селективний пік з максимумом, що відповідає ширині забороненої зони кремнію E_g при 300 K (див. рис. 7а).

Типовий спектр нанометричної плівки оксиду заліза на кремнієвій підкладці показаний на рис. 7б. Відбувається зміщення спектра в область коротших довжин хвиль і з'являється незначна світлочутливість в спектральному діапазоні від 0,6 до 1 мкм, яку можна пов'язати з $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$. За даними спектрів оптичного поглинання та відбиття $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ в діапазоні 250–900 нм [11] край смуги нанорозмірного гематиту розташований в діапазоні 580–620 нм. Головною особливістю спектра є значне зниження абсолютного значення поверхневої фото-е.р.с. ($\sim 4 \text{ мкВ}$ в максимумі) порівняно з фото-е.р.с. кремнієвої підкладки ($\sim 1100 \text{ мкВ}$ в максимумі).

Відомо, що оксид заліза ($\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$) є одним з перспективних матеріалів для фотоелектричних пристроїв, а також є привабливим фотокаталізатором завдяки своїй ширині забороненої зони ($\sim 2,2$ eV), що використовує 40% сонячної енергії, яка досягає поверхні Землі [12]. Головним обмежувальним фактором, що впливає на його застосування як енергетичного матеріалу, є швидка електронно-діркова рекомбінація, якій частково сприяє повільна кінетика транспорту носіїв. Для подолання цього обмеження застосовують легування для підвищення електропровідності, створення гетеропереходів для ефективного розділення носіїв заряду та подвійного поглинача як в композитних (наприклад $\text{TiO}_2/\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$, $\text{Fe}_2\text{O}_3/\text{WO}_3$), так і в гібридних неорганічно-органічних структурах (СТАВ- Fe_2O_3). Одним із варіантів є поєднання оксиду заліза із оксидом хрому. Так, некомутативний зсув зони на надґратках $\text{Cr}_2\text{O}_3/\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ (0001) призводить до виникнення градієнта потенціалу та розділення електронно-діркових пар, що проявляється збільшенням фотоструму [9].

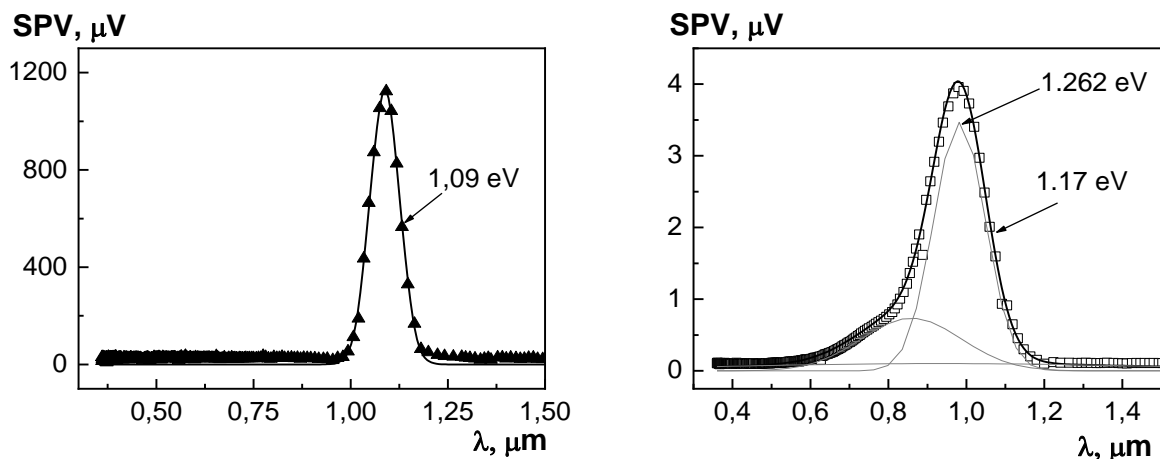


Рис. 7. Спектри поверхневої фотоелектричної напруги структури нанометричного шару, нанесеного на кремнієву підкладку, скориговані на спектральний відгук установки: (a) – $\text{Cr}_{3-x}\text{O}_{3-y}/\text{Si}$, (b) – $\text{Fe}_2\text{O}_{3-x}/\text{Si}$

Типові спектри поверхневої фото-е.р.с. для мультишарових структур показані на рис.8. Встановлено кореляцію з товщиною шарів оксидів металів та кількістю шарів, а також залежність підсилення фотоелектричної напруги від способу фіксації зразка (Рис.9). Дослідження мультишарових структур різної товщини показали, що двошарова структура демонструє набагато вищі значення фото-е.р.с. ніж чотиришарова (див. Рис.8). Двошарові зразки, які були зафіксовані в підвішеному стані, продемонстрували максимальну інтегральну чутливість (див. Рис. 9). Крім того, всі зразки продемонстрували покращення поверхневої фото-е.р.с. за рахунок оптимізації частоти модуляції падаючого світла.

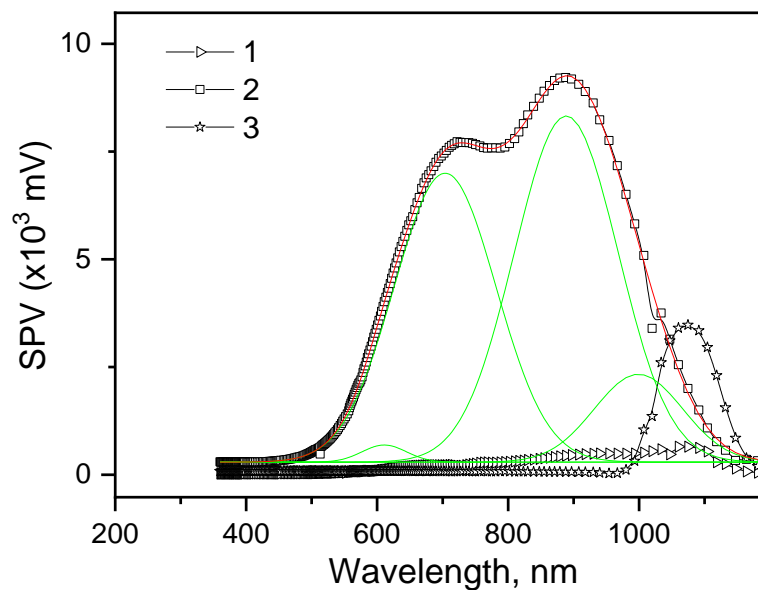


Рис. 8. Типовий розподіл спектральної чутливості зразків 1 - 4-шарова структура, $N=(2500+2000) \times 2$; 2 – 2-шарова структура, $N=(3000+3000)$; 3 – 4-шарова структура $N=(500+500) \times 2$.

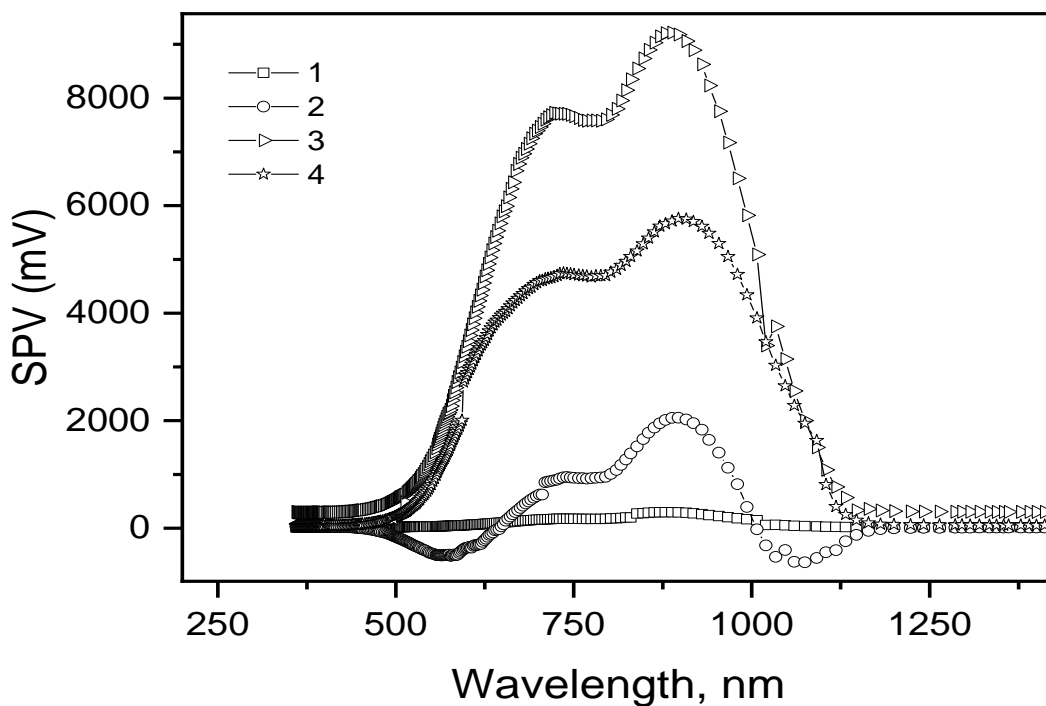


Рис. 9. Спектральний розподіл фото-е.р.с. для найбільш чутливого зразка (2-шарова структура з рис.8): 1 – зафіксований в пінополістеролі, 2 –

зафіксований на масивній металевій підкладці, 3 – на підвісі, частота модуляції світла 130 Гц, 4 - на підвісі, частота модуляції світла 170 Гц

Отримані результати дозволяють зробити деякі попередні висновки. А саме:

- результати, отримані для зразків, зафіксованих в різних умовах, однозначно вказують на вплив температури та навколишнього теплового оточення на величину та спектральний розподіл фотоелектричного сигналу.

Можна припустити появу додаткової е.р.с., термоелектричної природи, яка конкурує з фотоелектричною е.р.с. Фактично мова може йти про конкуренцію внесків нерівноважних та рівноважних носіїв заряду;

- мінімальна фото-е.р.с. (< 0.2 В в максимумі спектрального розподілу) спостерігається для зразка, який знаходиться в умовах об'ємного стаціонарного розігріву, що корелює із відомим ефектом погіршення ефективності фотоелектричного перетворення при нагріванні сонячного елемента;

- зразок, який зафіксований на масивній металевій підкладці з високим коефіцієнтом теплопровідності (>200 Вт м⁻¹ К⁻¹), тобто в умовах, коли все надлишкове тепло забирається «холодильником» з температурою оточуючого середовища, демонструє подвійну зміну знаку фото-е.р.с. в діапазоні 1000-1100 нм та 500-600 нм, що вказує на утворення *p-n* переходу в досліджуваній структурі;

- нарешті зразок, зафіксований на підвісі, тобто в умовах конвекційного теплообміну, демонструє максимальні значення фото-е.р.с., які також залежать від частоти модуляції світлового потоку – інтегральна фоточутливість при 130 Гц майже в 2 рази більша ніж при 170 Гц.

РОЗДІЛ 2 МЕТОДИКА МАТЕМАТИЧНОГО ЕКСПЕРИМЕНТУ, ЗАСТОСОВАНА В РОБОТІ

2.1 Загальна характеристика пакета FlexPde

FlexPDE — це програмний комплекс, який може стати ефективним інструментом для розв'язання широкого кола наукових і технічних задач, адже більшість із них можна описати диференціальними рівняннями в часткових похідних[13]. Система дозволяє моделювати як стаціонарні процеси (наприклад, у галузях електротехніки, механіки чи теплотехніки), так і нестаціонарні, тобто такі, що змінюються з часом (у хімії, біології, оптиці, акустиці, механіці, теплотехніці, електротехніці тощо).

FlexPDE особливо ефективний у розв'язанні задач математичної фізики, що формулюються у вигляді диференціальних рівнянь з частковими похідними. Для таких задач рекомендується використання методу скінченних елементів, який реалізований у цьому програмному середовищі. Кінцево-різницеві підходи, зокрема метод скінченних елементів, добре вивчені та якісно реалізовані в FlexPDE.

Усі подібні задачі можна класифікувати на три основні типи рівнянь: еліптичні, параболічні та гіперболічні. У випадку задач дифузії розглядаються рівняння параболічного типу з відповідними граничними умовами: умовами Діріхле, Неймана або змішаного типу.

Приклад параболічного рівняння:

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} - \frac{\partial \Phi}{\partial t} = 0$$

Для виконання розрахунків використовували рівняння теплопровідності [14]

$$\frac{\partial T}{\partial t} - a^2 \Delta T = Q(\mathbf{r}, t)$$

FlexPDE — це гнучкий програмний комплекс, що надає користувачеві повну свободу у формулюванні задач. Типи диференціальних рівнянь із частковими похідними, які використовуються для моделювання, визначаються не заздалегідь встановленим шаблоном, а виключно самим користувачем.

Завдяки зрозумілому й наближеному до звичайної математичної нотації сценарному синтаксису, можливо з легкістю описати як саму систему рівнянь, так і область, у межах якої відбувається розв'язання. Це надає кілька ключових переваг [13]:

- На відміну від типових програм із жорстко заданим набором задач, у FlexPDE кожне рівняння чітко задається у тексті сценарію, що повністю виключає невизначеність щодо того, яка саме модель розв'язується.
- Структура сценарію дає змогу без труднощів додавати нові змінні, рівняння та граничні умови в будь-який момент, без необхідності перебудови всієї моделі.

- Програма дозволяє опрацьовувати кілька задач одночасно за один запуск, що значно економить час і зусилля.
- FlexPDE здатний обробляти як рівняння першого, так і другого порядку.
- Підтримуються моделі, що враховують часову динаміку, а також стаціонарні процеси.
- Можливе розв'язання задач на знаходження власних значень.
- Система дозволяє паралельне опрацювання як стаціонарних, так і нестаціонарних рівнянь — їхня кількість визначається лише ресурсами комп'ютера.
- Підтримується робота з як лінійними, так і з нелінійними системами. Для останніх використовується метод Ньютона—Рафсона.
- У програмі можна створювати складні геометричні області з різними фізичними властивостями, що особливо корисно для моделювання середовищ із анізотропією.

Для реалізації всіх етапів моделювання FlexPDE має низку спеціалізованих модулів:

- Редактор сценаріїв, який забезпечує зручне введення моделі та надає візуальне представлення результатів.
- Інтерпретатор рівнянь, що аналізує задані формули, знижує порядок інтегрування та генерує відповідну матрицю Якобі.

- Генератор числової сітки, який створює трикутні або тетраедричні елементи у 2D чи 3D-просторі, дозволяючи моделювати багат шарові структури.
- Блок чисельного розв'язання, що обирає алгоритми залежно від типу задачі — чи то стаціонарна, чи така, що змінюється з часом.
- Система оцінки похибки, яка ітеративно змінює параметри сітки для досягнення заданої точності розрахунків.
- Графічний модуль, що виводить результати у вигляді контурних ліній, поверхонь або векторних полів.
- Модуль експорту результатів, який дозволяє зберігати розв'язки у зручних форматах: текстовому, табличному або сумісному з такими пакетами, як CDF чи TecPlot.

2.2 Схема розрахунку по методу кінцевих елементів

У цьому підході початкова диференціальна задача замінюється дискретною моделлю з обмеженим числом вимірів. Метод скінченних елементів, по суті, комбінує елементи різницевих схем з інтерполяцією на основі поліномів по частинах. Розв'язок у даному методі шукається як сума базисних функцій, які зазвичай є кусочно-лінійними (або більш загальними – кусочно-поліноміальними) і мають ненульові значення лише в обмежених, малих підобластях.

Щоб знайти коефіцієнти в цьому розкладі, будується система лінійних алгебраїчних рівнянь, що має розріджену матричну структуру специфічного вигляду. Ці рівняння є результатом апроксимації вихідної задачі, і мають форму різницевих схем.

Опишемо узагальнено метод кінцевих елементів. Початкове завдання розглядається як операторне рівняння типу [13]:

$$Lu = \frac{\partial}{\partial x} \left(k(x) \frac{\partial u}{\partial x} \right) = f \text{ в межах певної області } \Omega.$$

Всередині цієї області виділяють підобласті — так звані скінченні елементи Ω_i , розміри яких суттєво менші, ніж розміри всієї області Ω , хоча й залишаються скінченними. У найпростішому варіанті ці елементи мають форму трикутників у двовимірному просторі або тетраєдрів у тривимірному, що підходить для моделювання площинних і просторових процесів.

Область Ω розбивається на сукупність таких елементів без накладання чи перетину. Кожен елемент описується числом геометричних вузлів та обраним порядком апроксимації функції всередині нього (див. рис. 10). Інтерполяція може бути як прямолінійною, так і криволінійною, а порядок апроксимації зазвичай варіюється в межах від 1 до 6.

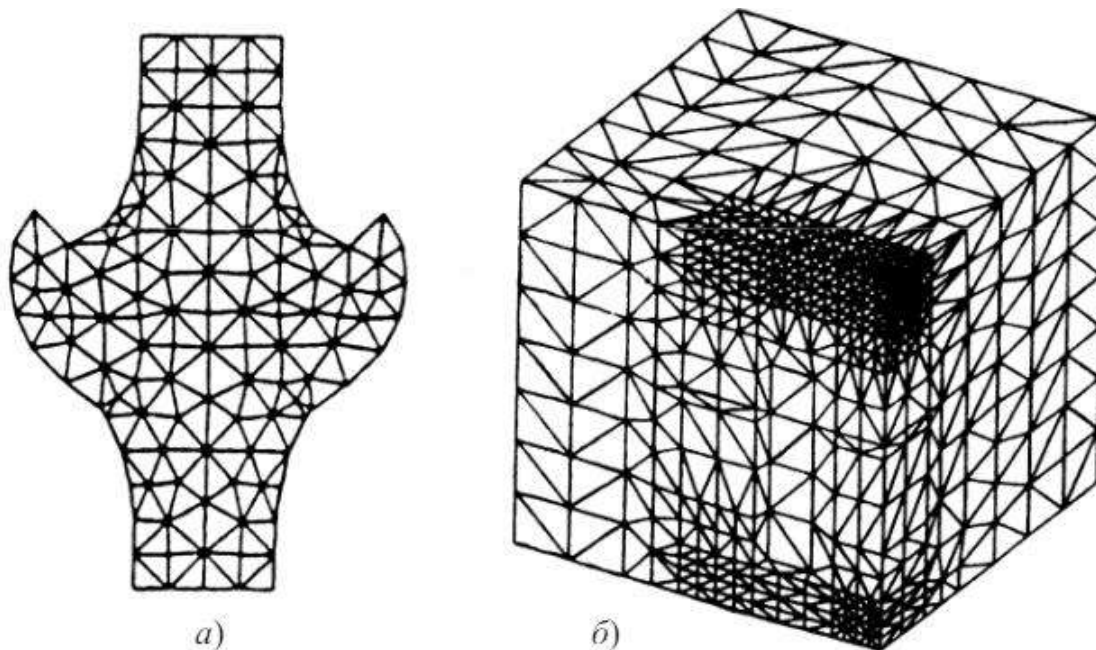


Рис. 10. (а) Демонстрація розбиття областей у двовимірній задачі. (б) Приклад для тривимірної задачі

Наближене розв'язання початкової задачі, яке будемо позначати як u_N , шукатимемо у формі розкладу за базисними функціями скінченновимірного підпростору $\Omega_N \subset \Omega$, що має розмірність N . Інакше кажучи, після розв'язання задачі невідома функція буде описана через свої значення у вузлах розбитої області. Блок-схема роботи методу кінцевих елементів продемонстрована на Рис. 11:



Рис. 11. Алгоритм розрахунку методом кінцевих елементів

Для розв'язання систем сіткових рівнянь можуть застосовуватись різноманітні чисельні методи, серед яких — методи Якобі, Гауса-Зейделя, надрелаксації, явні ітераційні схеми, поперемінно-трикутні ітераційні підходи, метод змінних напрямків, алгоритм Ньютона—Рафсона, метод матричної прогонки тощо.

У програмному середовищі FlexPDE реалізовано саме метод Ньютона—Рафсона. Його суть полягає у побудові послідовності наближень $x^{(1)}, x^{(2)}, \dots, x^{(N)}$, що генерується починаючи з деякого початкового значення $x^{(0)}$ шляхом багаторазового повторення ітераційної процедури. При цьому

враховується як значення функції $\phi_i^{(x)}$, так і її похідна, що дозволяє наближатися до точного розв'язку з високою швидкістю збіжності.

Нехай початкове значення ряду – це $x^{(0)}$. Тоді назвемо $\Delta x^{(0)}$ приростом величини x_0 так, щоб $x^{(1)} = x^{(0)} + \Delta x^{(0)}$. Аналогічно і для наступних елементів. Тоді виходячи лише з початкових умов можна виводити ряд до тих пір, поки точність не стане задовільною.

Отже, цей метод ідеально підходить для опису еволюції систем, виходячи лише з початкових умов, а завдяки збіжності ряду, дуже легко досягнути потрібної точності за невеликий час.

РОЗДІЛ 3 МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСУ ДИФУЗІЇ ТЕПЛА В БАГАТОШАРОВІЙ СИСТЕМІ

3.1 Застосування пакета FlexPde для розрахунку розподілу температури в неоднорідній за тепловими властивостями системі при наявності джерела тепла

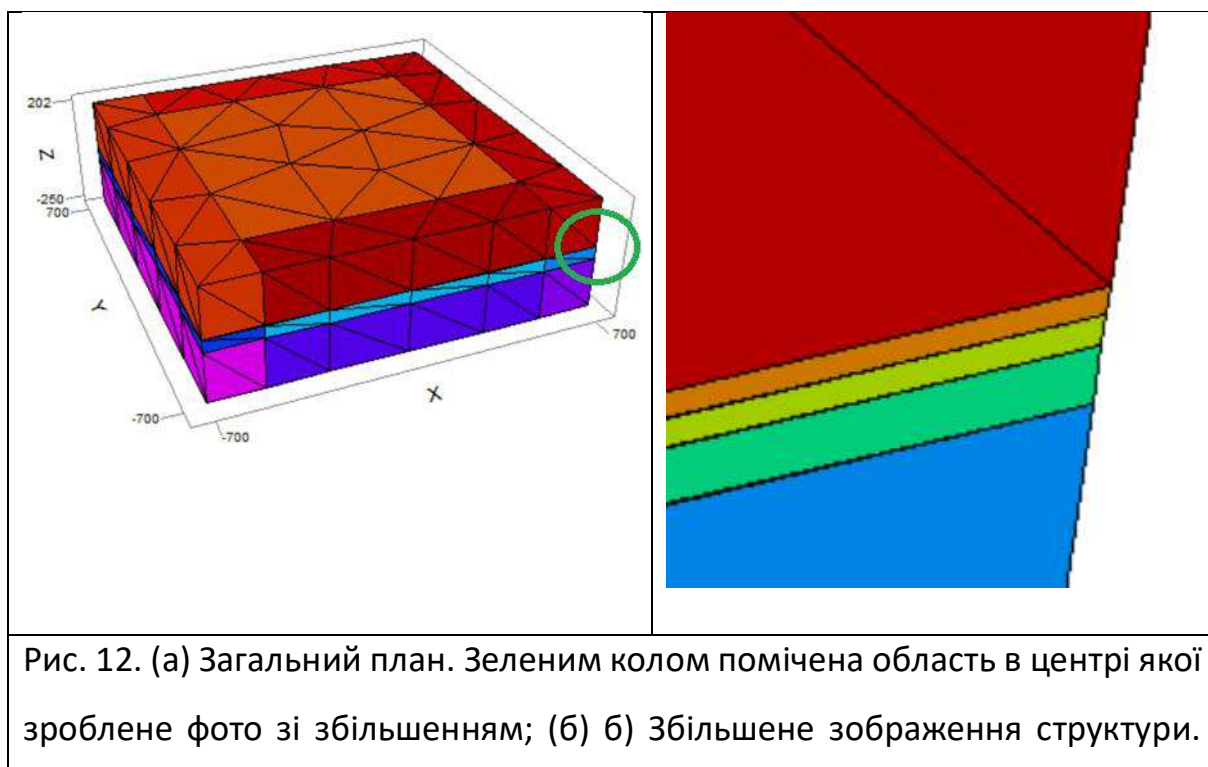
За допомогою програми FlexPDE було досліджено розподіл тепла в структурі з неоднорідними теплопровідними властивостями. Було розглянуто декілька конфігурацій (2 та 4 шари). Завдяки цьому можна проаналізувати розподіл тепла та побачити закономірності розвитку системи з часом. Для виконання симуляції були описані граничні межі системи, проведено розбиття на шари та задані параметри теплопровідності для кожного шару симульованої структури.

Але, при симуляції об'єкта аналогічного зразку досліджуваному в практичних експериментах було недостатньо розглянути саме тіло незалежно від навколишнього середовища, тому були відтворені і зовнішні умови окрім внутрішньої структури оригіналу. Тобто, кремнієву підкладку, шар оксиду кремнію, шари металевих оксидів, та (в залежності від конфігурації) металевий радіатор знизу та повітря з боків та згори, пінополістеролову підкладку з боків та знизу з доступом повітря згори й повітря з усіх боків. Для усіх речовин були взяті їх фізичні характеристики, див табл. 1.

Температура на нижній границі структури була зафіксована на рівні 15°C (для симуляції масивного поглинача). Джерело розігріву зафіксовано на верхній границі структури. В Таблиці 1 приведені фізичні властивості шарів. Приклад модульованої структури можна побачити на рис. 12

Таблиця 1. Фізичні властивості складових симульованої структури.

Матеріал	Теплопровідність, Вт м ⁻¹ ·К ⁻¹	Густина, кг м ⁻³	Теплоємність, Дж моль ⁻¹ К ⁻¹
Cr ₂ O ₃	5,17	5220	124
α-Fe ₂ O ₃	6	5250	103,9
SiO ₂	1,4	2650	44,77
Si	150	2330	20,16



Можна побачити шари згори до низу: повітря, Cr_2O_3 , Fe_2O_3 , SiO_2 , Si (червоний, померанчевий, жовтий, зелений та синій відповідно).

Були взяті наступні розміри та граничні умови: шар кремнію товщиною 50 одиниць (від -50 до 0), шар SiO_2 товщиною в 1 одиницю (від 0 до 1), $\text{Fe}_2\text{O}_3 - 0.5$ (від 1 до 1.5), $\text{Cr}_2\text{O}_3 - 0.5$ (від 1.5 до 2). Товщина середовища згори та знизу 200 одиниць. Ширина мультишарової структури була 1000 (від -500 до 500), а навколишнього середовища з боків – по 200 од. (від -700 до -500 та від 500 до 700 по x та y координатам).

Нижче наведена сама програма для випадку двох шарів:

title 'Multi-Layered Structure heatflow'

select

regrid=off
ngrid=4

coordinates

cartesian3

variables

T_p (threshold=0.01) { temperature with accuracy }

definitions { at 0 coordinate there is a boundry between silicon and oxides }

long = 1 { coordinate where SiO_2 ends }

long2 = 1.5 { coordinate where Fe_2O_3 ends }

long3 = 2 { coordinate where Cr_2O_3 ends }

base = -50 { coordinate where bottom of structure is }

gap = 200 { how big the layers above and below the structure }

wide = 500 { how wide structure is }

wide2 = 700 { how wide structure + side space are }

K { variable of thermal conductivity -- values supplied later }

Q = IF (x>-wide AND x<wide AND y>-wide AND y<wide) THEN 2*exp(-ABS(z-long2)) ELSE 0 {thermal source with boundries}

tmax = 20 { used for plots }

Si = 150

SiO = 1.4

Fe = 6

Cr = 5.17

Sides = 3

Top = 3

Bot = 236

initial values

Tp = 15. {starting temperature}

equations

Tp : div(k*grad(Tp)) + Q = dt(Tp) { the heat equation }

extrusion

SURFACE "Below" z=base-gap

LAYER "0"

SURFACE "Bottom" z=base

LAYER "1"

SURFACE "Si Top" z=0

LAYER "2"

SURFACE "SiO2 Top" z=long

LAYER "3"

SURFACE "Fe2O3 Top" z=long2

LAYER "4"

SURFACE "Cr2O3 Top" z=long3

LAYER "8"

SURFACE "Above" z=long3+gap

boundaries

Surface 1 value(Tp)=15 {fix bottom surface temp }

Surface 7 value(Tp)=15 {fix top surface temp }

Region 0 { Main Structure }

layer "0" k = Bot
layer "1" k = Si { thermal conductivities }
layer "2" k = SiO
layer "3" k = Fe
layer "4" k = Cr
layer "8" k = Top

start(-wide,-wide) {Dimensions}
line to (wide,-wide)
to (wide,wide)
to (-wide,wide)
to close

Region 1 { outer regions }
layer "0" k = Bot { thermal conductivities }
layer "1" k = Sides
layer "2" k = Sides
layer "3" k = Sides
layer "4" k = Sides
layer "8" k = Top

start(-wide2,-wide2) {Dimensions}
line to (-wide,-wide2)
to (-wide,wide2)
to (-wide2,wide2)
to close

Region 2
layer "0" k = Bot { thermal conductivities }
layer "1" k = Sides
layer "2" k = Sides
layer "3" k = Sides
layer "4" k = Sides
layer "8" k = Top

start(-wide, wide) {Dimensions}
line to (wide,wide)
to (wide,wide2)
to (-wide,wide2)
to close

Region 3

```
layer "0" k = Bot    { thermal conductivities }
layer "1" k = Sides
layer "2" k = Sides
layer "3" k = Sides
layer "4" k = Sides
layer "8" k = Top
```

```
start(wide,-wide2)      {Dimensions}
  line to (wide2,-wide2)
  to (wide2,wide2)
  to (wide,wide2)
to close
```

Region 4

```
layer "0" k = Bot    { thermal conductivities }
layer "1" k = Sides
layer "2" k = Sides
layer "3" k = Sides
layer "4" k = Sides
layer "8" k = Top
```

```
start(-wide,-wide2)    {Dimensions}
  line to (wide,-wide2)
  to (wide,-wide)
  to (-wide,-wide)
to close
```

```
time 0 to 300 by 0.01 { establish time range and initial timestep }
```

monitors

```
for cycle=1
```

```
  contour(Tp) on z=0 as "XY Temp" range=(14,tmax)
```

```
  contour(Tp) on x=0 as "YZ Temp" range=(14,tmax)
```

```
  elevation(Tp) from (-wide,0,0) to (wide,0,0) as "X-Axis Temp" range=(14,tmax)
```

```
  elevation(Tp) from (0,0,-5) to (0,0,5) as "Zzoomed-Axis Temp"
```

```
range=(23,tmax)
```

```
  elevation(Tp) from (0,0,base-gap) to (0,0,long3+gap) as "Z-Axis Temp"
```

```
range=(14,tmax)
```

plots

```
for t = endtime
```

```
  contour(Tp) on z=0 as "XY Temp" range=(14,tmax)
```

```
contour(Tp) on x=0 as "YZ Temp" range=(14,tmax)
```

```
histories
```

```
history(Tp) at    (0,0, 1.7)  
                 (0,0,1.2)  
                 (0,0,0.5)  
                 (0,0, -20)  
range=(14,tmax)
```

```
end
```

Розглянемо далі результати обчислень даної програми, а саме 6 її варіантів, де кожен з двох зразків був зафіксований на металевому холодильнику (теплоізолятор №1), зафіксований в пінополістеролі (теплоізолятор №2) та підвішений в повітрі (теплоізолятор №3).

3.1.1 Система з теплоізолятором №1

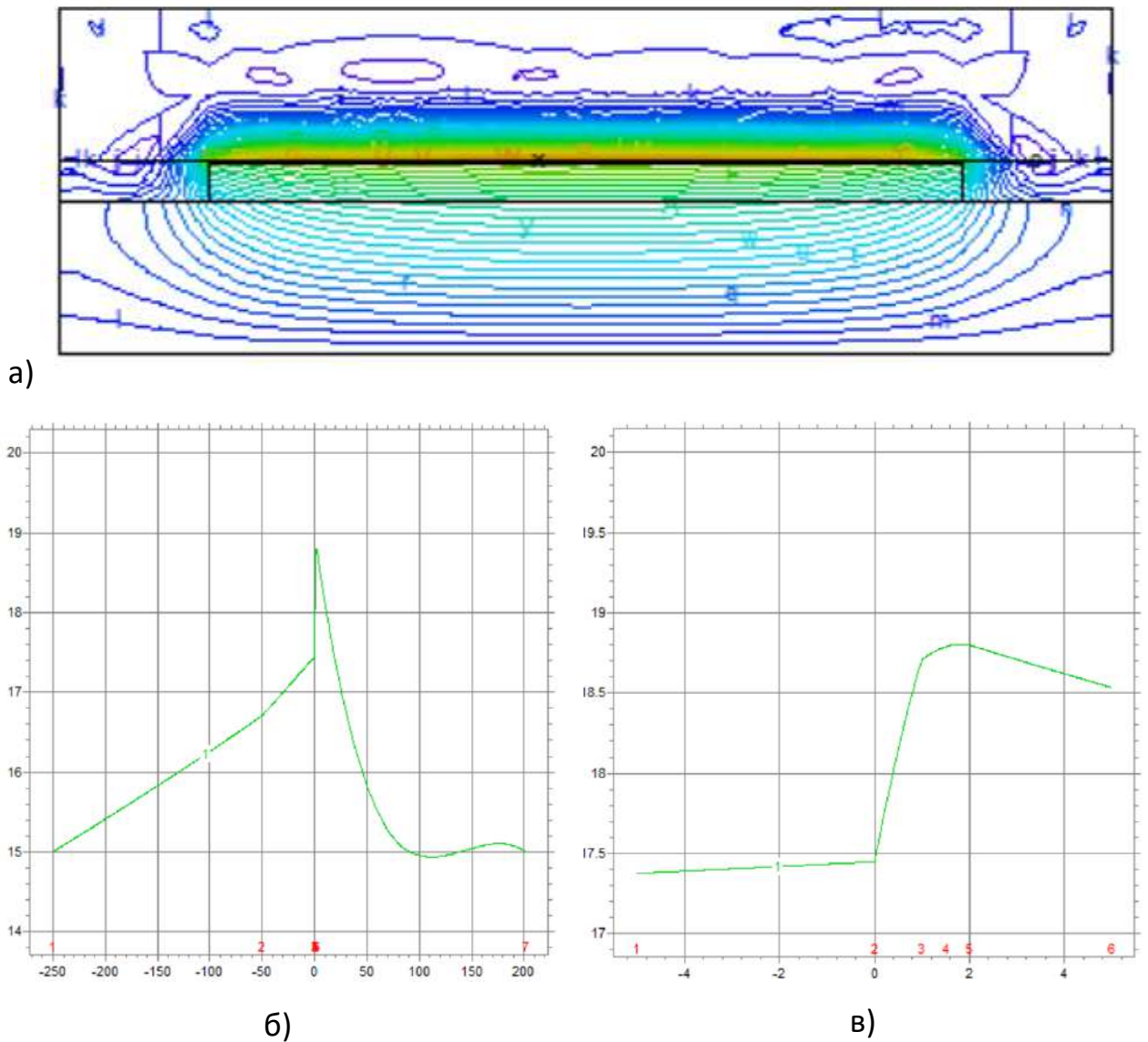
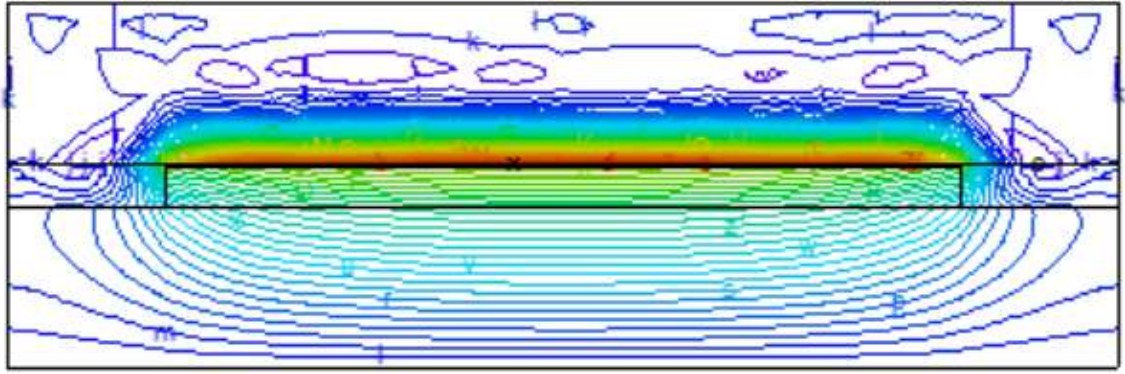
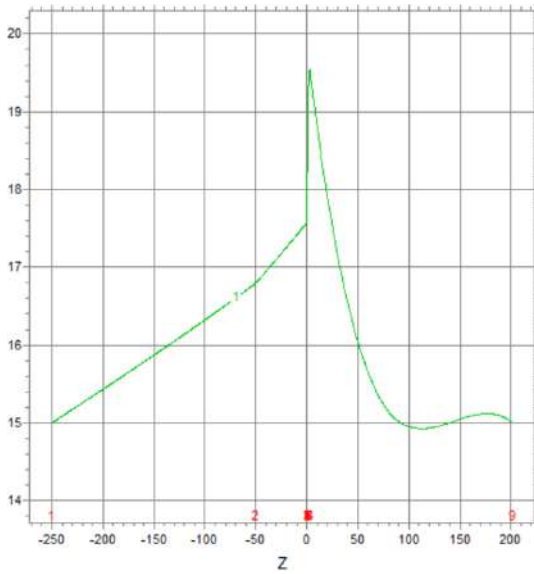


Рис. 13. Результати симуляції двошарової структури після $t=300$

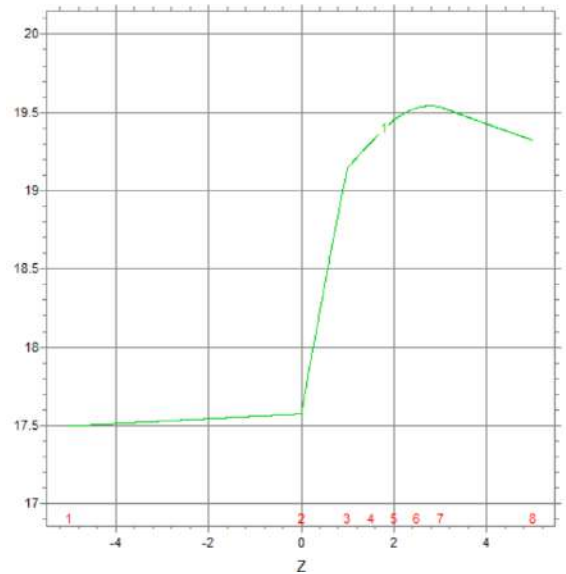
а) Розподіл тепла в системі; б) Загальний графік температури $T(z)$ по всій висоті симульованого середовища; в) Збільшений графік розподілу температури в зоні шарів, де зона 1-2 це кремній, 2-3 це SiO_2 , 3-4 це Fe_2O_3 , 4-5 це Cr_2O_3 , 5-6 це повітря



a)



b)



c)

Рис. 14. Результати симуляції чотиришарової структури після $t=300$

a) Розподіл тепла в системі. b) Загальний графік температури $T(z)$ по всій висоті симульованого середовища. c) Збільшений графік розподілу температури в зоні шарів, де зона 1-2 це кремній, 2-3 це SiO_2 , 3-4 це Fe_2O_3 , 4-5 це Cr_2O_3 , 5-6 це Fe_2O_3 , 6-7 це Cr_2O_3 , 7-8 це повітря

3.1.2 Система з теплоізолятором №2

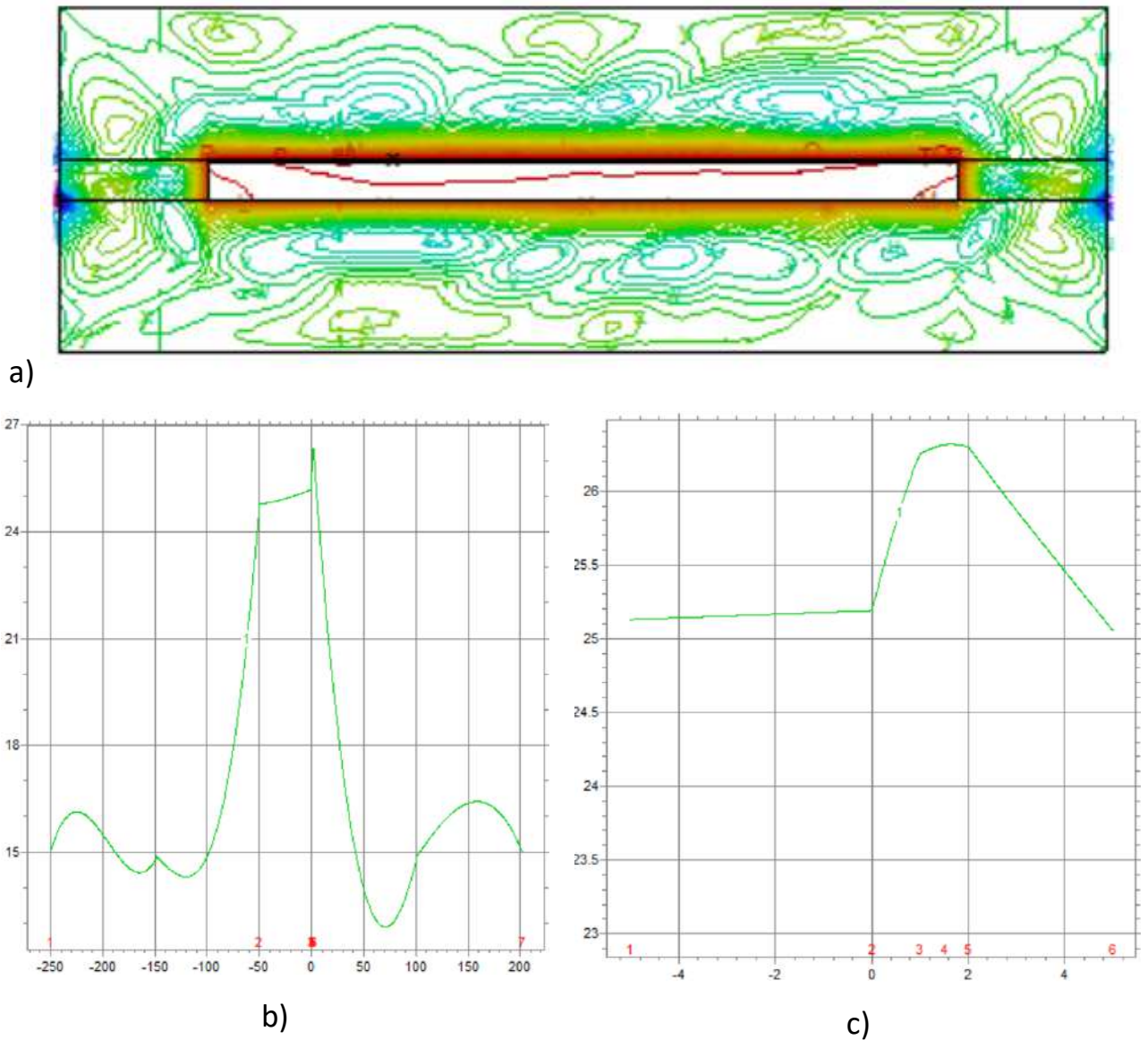
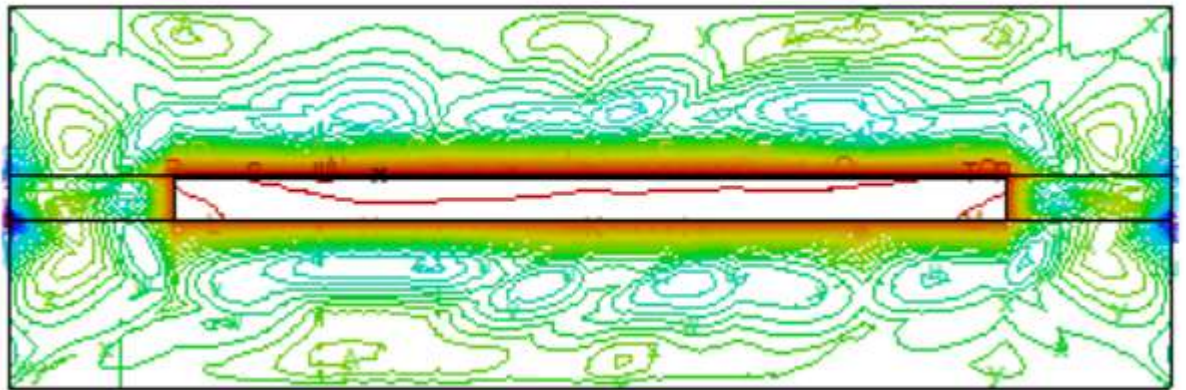
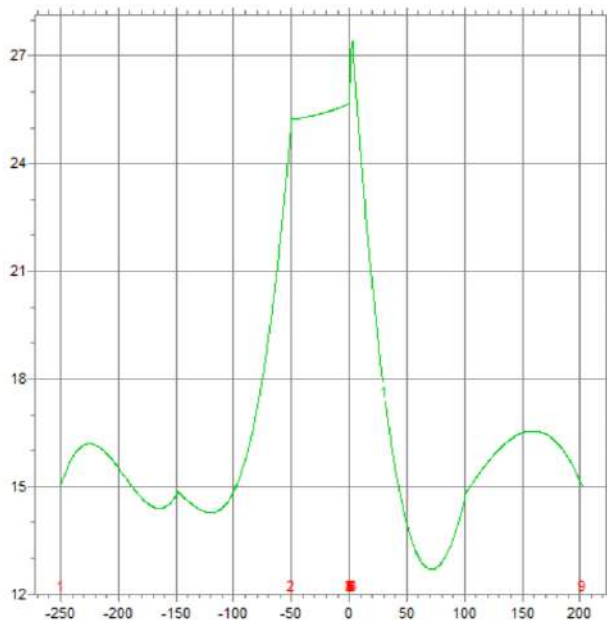


Рис. 15. Результати симуляції двошарової структури після $t=300$

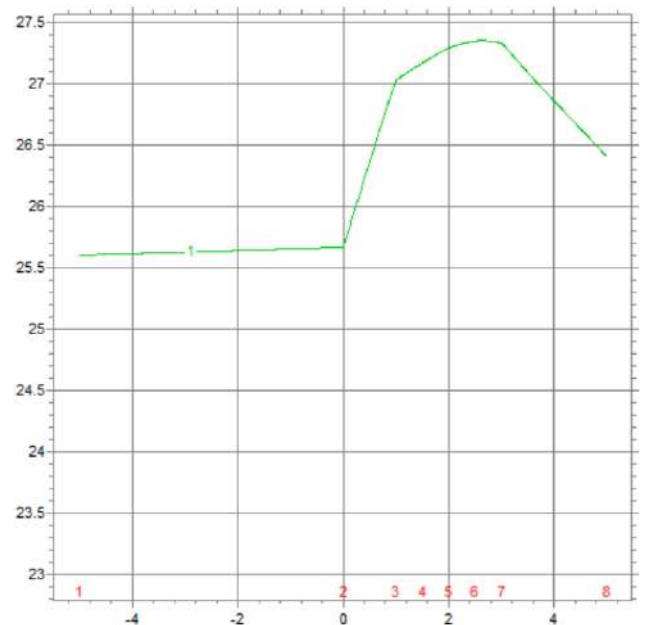
а) Розподіл тепла в системі. б) Загальний графік температури $T(z)$ по всій висоті симульованого середовища. в) Збільшений графік розподілу температури в зоні шарів, де зона 1-2 це кремній, 2-3 це SiO_2 , 3-4 це Fe_2O_3 , 4-5 це Cr_2O_3 , 5-6 це повітря



a)



b)



c)

Рис. 16. Результати симуляції чотиришарової структури після $t=300$

a) Розподіл тепла в системі. b) Загальний графік температури $T(z)$ по всій висоті симульованого середовища. c) Збільшений графік розподілу температури в зоні шарів, де зона 1-2 це кремній, 2-3 це SiO_2 , 3-4 це Fe_2O_3 , 4-5 це Cr_2O_3 , 5-6 це Fe_2O_3 , 6-7 це Cr_2O_3 , 7-8 це повітря

3.1.1 Система з теплоізолятором №3

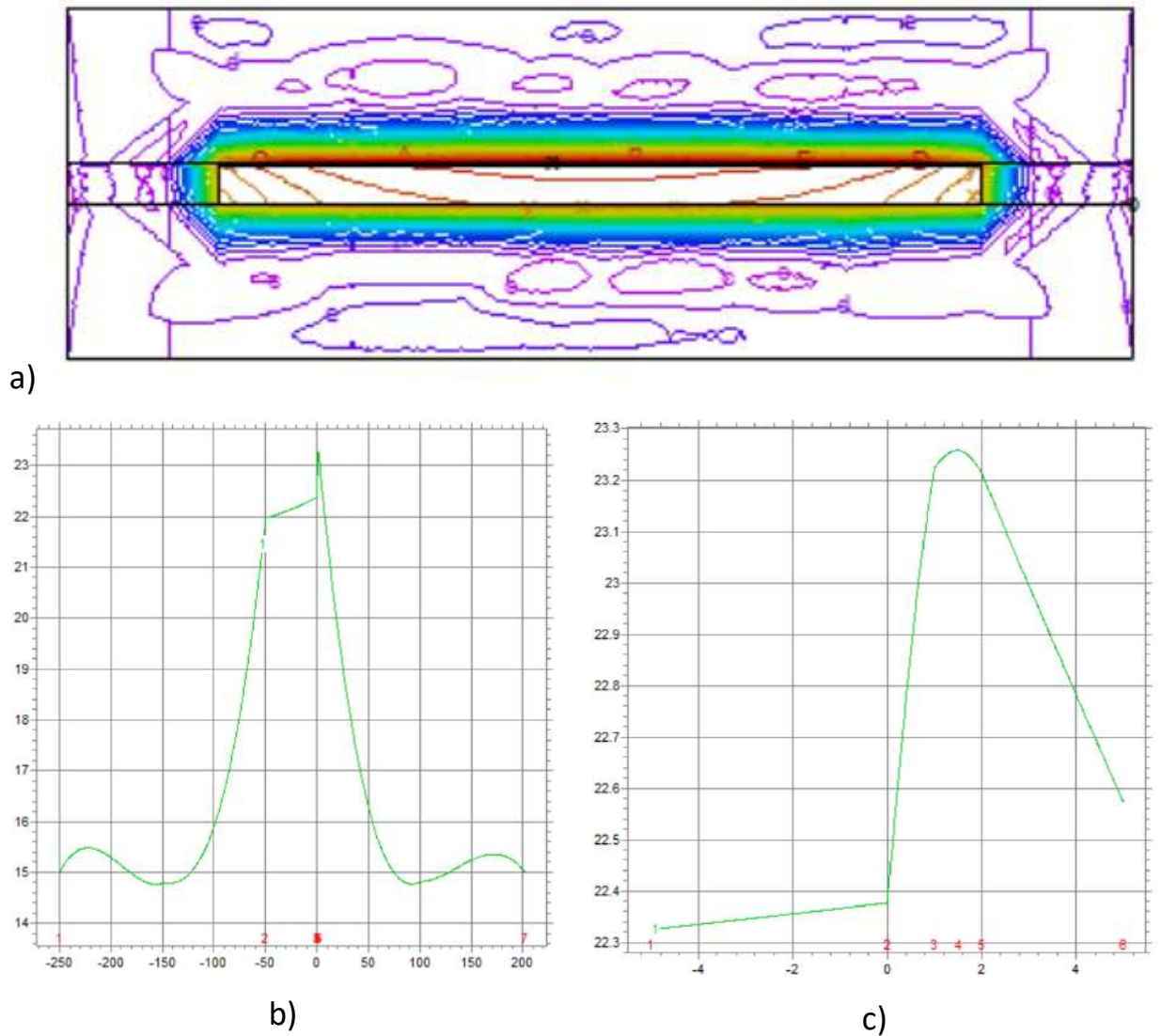
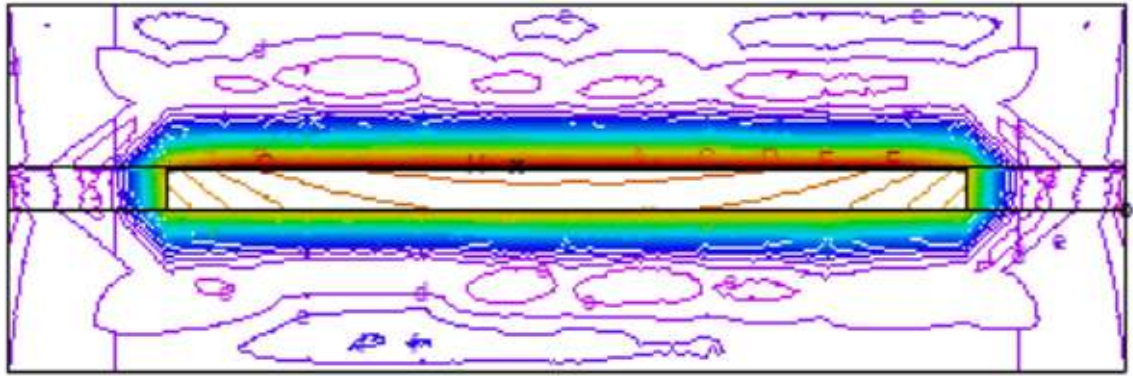
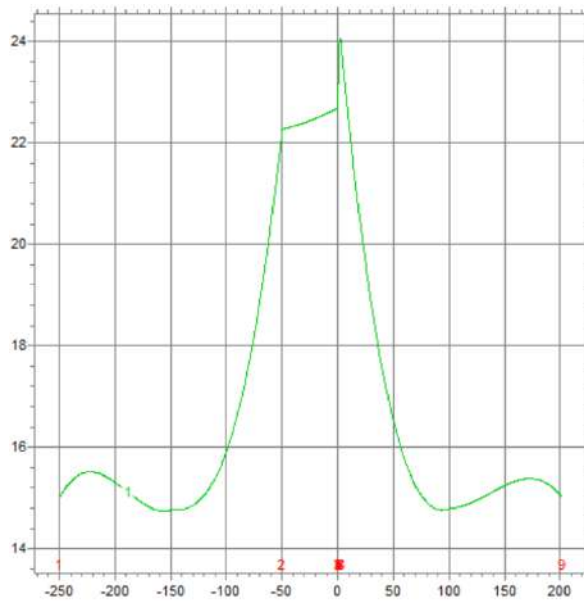


Рис. 17. Результати симуляції двошарової структури після $t=300$

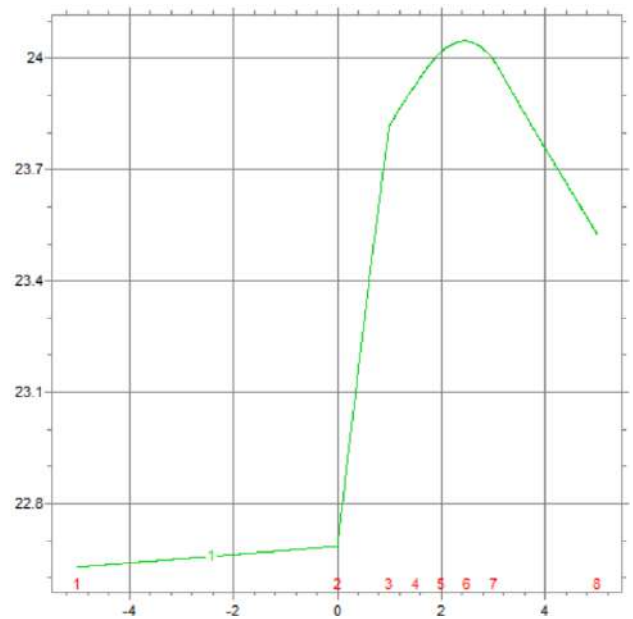
а) Розподіл тепла в системі. б) Загальний графік температури $T(z)$ по всій висоті симульованого середовища. в) Збільшений графік розподілу температури в зоні шарів, де зона 1-2 це кремній, 2-3 це SiO_2 , 3-4 це Fe_2O_3 , 4-5 це Cr_2O_3 , 5-6 це повітря



a)



b)



c)

Рис. 18. Результати симуляції чотиришарової структури після $t=300$

a) Розподіл тепла в системі. b) Загальний графік температури $T(z)$ по всій висоті симульованого середовища. c) Збільшений графік розподілу температури в зоні шарів, де зона 1-2 це кремній, 2-3 це SiO_2 , 3-4 це Fe_2O_3 , 4-5 це Cr_2O_3 , 5-6 це Fe_2O_3 , 6-7 це Cr_2O_3 , 7-8 це повітря

Висновки

В роботі вивчався процес переносу тепла в багат шарових структурах оксидів перехідних металів, нанесених на кремнієву підкладку методом лазерного напилення, які демонструють фотовольтаїчний ефект в діапазоні (500-1100 нм). Дослідження проведено методом чисельного моделювання фізичних процесів в досліджуваних структурах в середовищі FlexPDE, яке дозволяє розв'язувати диференціальні рівняння в частинних похідних методом скінченних елементів. Була побудована модель, яка відтворювала архітектуру досліджуваних зразків, стан оточуючого середовища та термодинамічні умови на їх границі.

Досліджувані структури $(Cr_{3-x}O_{3-y}/Fe_2O_{3-x})Si$ продемонстрували фотовольтаїчний ефект в області видимого світла, величина якого залежала від теплових умов, які створювалися на їх границях. Шляхом різної фіксації досліджуваних структур продемонстровано конвекційний та теплопровідний механізми передачі тепла в системі, та, відповідно, вплив термодинамічних умов на фотоелектричний відгук зразка. Для моделювання відповідних термодинамічних умов на границях зразка та процесу переносу тепла в ньому був створений FlexPDE скрипт.

Дослідження мультишарових структур різної товщини дозволили встановити, що двошарова структура демонструє набагато вищі значення фото-е.р.с. ніж чотиришарова, що корелює із результатами моделювання

теплого розігріву в зазначених структурах – чотиришарова структура розігрівається сильніше ніж двошарова. Показано, що застосування охолодження (масивна металева підставка, теплопровідний механізм передачі тепла) оптимізує умови для демонстрації досліджуваною структурою фотовольтаїчного ефекту.

Список використаної літератури

1. Shockley, W. & Queisser, H. J. Detailed Balance Limit of Efficiency of p-n Junction Solar Cells. *Journal of Applied Physics* 32, 510-519 (1961)
2. Huen, P., & Daoud, W. A. (2017). Advances in hybrid solar photovoltaic and thermoelectric generators. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 72, 1295-1302
3. Zhu, L., Gao, M., Peh, C. K. N., & Ho, G. W. (2018). Solar-driven photothermal nanostructured materials designs and prerequisites for evaporation and catalysis applications. *Materials Horizons*, 5(3), 323-343.
4. https://intmax.com.ua/zastosuvannya/heat_conductivity_hard.html
5. Юшко С.В., Борщ О.Є., Юшко М.А. Стационарна теплопровідність : навч. посіб. / Харків. Національний технічний університет "Харківський політехнічний інститут". Харків, 2011 – 6-10 с.
6. С. М. Ривкін, Фооелектричні явища в напівпровідниках. Москва 1963
7. А. А. Трофименко і Г. А. Федорус, Дослідження термічно стимульованого току в монокристалах CdS, *Укр. Фіз. Журн.* 3, №4, 1958 рік
8. Е. Н. Аркадьєва і С. М. Ривкін, Дослідження рівнів захоплення в Sb_2Se_3 методом термостимульованого струму, *ФТТ* 1, с. 1460, 1959 рік
9. T. C. Kaspar, D. K. Schreiber, S. R. Spurgeon, M. E. Mc Briarty, G. M. Carroll, D. R. Gamelin, and S. A. Chambers, *Adv. Mater.* 28(8) (2016) 1616-1622
10. Kronik, L., & Shapira, Y. (1999). Surface photovoltage phenomena: theory, experiment, and applications. *Surface science reports*, 37(1-5), 1-206.
11. He, Y. P., Miao, Y. M., Li, C. R., Wang, S. Q., Cao, L., Xie, S. S., ... & Burda, C. (2005). Size and structure effect on optical transitions of iron oxide nanocrystals. *Physical Review B—Condensed Matter and Materials Physics*, 71(12), 125411.
12. S. Shen, *Journal of Materials Research*, 29(1) (2014) 29-46.
13. Дворецкий С. И., Єрмаков А. А., Іванов О. О. Акулін Е. И. Комп'ютерне моделювання процесів і апаратів харчової, біо- та хімічної технології в середовищі FlexPDE: навч. посіб. / Тамбов: Видавництво Тамб. Гос. Тех ун-та, 2006 – 3-9 с.
14. FlexPDE 8 user manual. Spokane: PDE Solutions Inc., 2023 – 74-78.