

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΑΘΗΝΩΝ
ΤΟΜΕΑΣ ΦΥΣΙΚΗΣ ΣΤΕΡΕΑΣ
ΚΑΤΑΣΤΑΣΗΣ
ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟΥΠΟΛΗ, 157 84 ΑΘΗΝΑ

ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ
ΤΜΗΜΑ ΕΦΑΡΜΟΣΜΕΝΩΝ
ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΩΝ
ΚΑΙ ΦΥΣΙΚΩΝ ΕΠΙΣΤΗΜΩΝ
ΤΟΜΕΑΣ ΦΥΣΙΚΗΣ
ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟΥΠΟΛΗ, 157 80 ΑΘΗΝΑ

ΣΕΜΙΝΑΡΙΑ ΦΥΣΙΚΗΣ ΣΥΜΠΥΚΝΩΜΕΝΗΣ ΥΛΗΣ

Παρασκευή 6-5-2011 14:30

Αίθουσα 027, Ισόγειο Κτιρίου Φυσικής, Πολυτεχνειούπολη Ζωγράφου

Διάχυση σε υλικά για μικροηλεκτρονικές και ενεργειακές εφαρμογές

Αλέξανδρος Χροναίος

*Department of Materials Science and Metallurgy, University of Cambridge, Cambridge
CB2 3QZ, United Kingdom*

Η διάχυση στην στερεά κατάσταση αποτελεί ένα περίπλοκο φαινόμενο, ο έλεγχος του οποίου είναι αναγκαίος για τη βελτιστοποίηση των ιδιοτήτων των υλικών για ηλεκτρονικές και ενεργειακές εφαρμογές. Στο πρώτο μέρος της ομιλίας θα αναφερθώ σε υλικά με μικροηλεκτρονικές εφαρμογές, εστιάζοντας στο γερμάνιο (Ge) για το οποία είναι απαραίτητος ο περιορισμός της διάχυσης των ατόμων του αρσενικού (As), καθώς και ο περιορισμός των πλεγματικών διάκενων (V). Για την επίτευξη αυτού του στόχου αναπτύχθηκαν στρατηγικές, όπως η εισαγωγή ατόμων φθορίου (F).

Οι υπολογισμοί της ηλεκτρονικής δομής και τα πειράματα διάχυσης αποδεικνύουν ότι σχηματίζονται συμπλέγματα F_nV_m που ουσιαστικά μειώνουν την συγκέντρωση των ελευθέρων V στο γερμάνιο [1]. Έτσι, σαν συνέπεια της εισαγωγής F και As στο γερμάνιο, έχουμε τη μείωση της συγκεντρώσεως των ζευγών AsV. Η μείωση αυτή οδηγεί στον περιορισμό της διάχυσης του As, καθώς και στη μείωση της συγκέντρωσης των συμπλεγμάτων As_nV , τα οποία είναι υπεύθυνα για τη μείωση της ενεργοποίησης του As στο γερμάνιο [1]. Τα αποτελέσματα έχουν σημαντική τεχνολογική σημασία, καθώς υποδεικνύουν μία μεθοδολογία για την αύξηση της ενεργοποίησης του As, με την παράλληλη μείωση στη διάχυσή του.

Το δεύτερο μέρος της ομιλίας αφορά στα οξειδία για κυψέλες καυσίμων, στα οποία είναι απαραίτητη η αύξηση της διάχυσης των ιόντων οξυγόνου. Πιο συγκεκριμένα, για τη μελέτη της διάχυσης των ιόντων οξυγόνου στα $La_2NiO_{4+\delta}$ και $GdBaCo_2O_{5+\delta}$ εφαρμόστηκαν τεχνικές μοριακής δυναμικής σε συνδυασμό με καθιερωμένα δυναμικά, τα οποία βασίζονται στο μοντέλο του Born. Υπολογίσαμε ότι η ενέργεια ενεργοποίησης για τη διάχυση του οξυγόνου στο $La_2NiO_{4+\delta}$ είναι 0.51 eV, ενώ η υπερίσχυση της διάχυσης του οξυγόνου στο επίπεδο a-b ερμηνεύει την σημαντική ανισοτροπία διάχυσης του οξυγόνου στο $La_2NiO_{4+\delta}$, η οποία είχε παρατηρηθεί στις πειραματικές μετρήσεις [2]. Στο $GdBaCo_2O_{5+\delta}$ η εκτεταμένη αταξία των κατιόντων επηρεάζει σημαντικά τη διάχυση των ιόντων οξυγόνου [3].

[1] A. Chroneos, R. W. Grimes, and H. Bracht, "Fluorine Codoping in Germanium to Suppress Donor Diffusion and Deactivation," *J. Appl. Phys.* **106**, 063707 (2009).

[2] A. Chroneos, D. Parfitt, J. A. Kilner, and R. W. Grimes, “Anisotropic Oxygen Diffusion in Tetragonal $\text{La}_2\text{NiO}_{4+\delta}$: Molecular Dynamics Calculations,” *J. Mater. Chem.* **20**, 266 (2010).

[3] D. Parfitt, A. Chroneos, A. Tarancon, and J. A. Kilner, “Oxygen Ion Diffusion in Cation Ordered/Disordered $\text{GdBaCo}_2\text{O}_{5+\delta}$,” *J. Mater. Chem.* **21**, 2183 (2011).

Υπεύθυνοι Οργάνωσης Σεμιναρίων:

Σ. Γλένης

Πανεπιστήμιο Αθηνών,

τηλ. 2107276811

sglenis@phys.uoa.gr

Λ. Τσέτσερης

Ε. Μ. Π.

τηλ. 2107723046

leont@mail.ntua.gr